

RĪGAS TEHNISKĀ UNIVERSITĀTE
Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte

59. STUDENTU ZINĀTNISKĀS UN TEHNISKĀS KONFERENCES TĒZES

Dizaina tehnoloģiju sekcija
Materiālzinātnes un polimēru materiālu tehnoloģijas sekcija
Organisko savienojumu ķīmijas un tehnoloģijas sekcija
Silikātu, augsttemperatūras un neorganisko nanomateriālu tehnoloģijas sekcija
Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas un biomateriālu ķīmijas un tehnoloģijas sekcija

Rīga – 2018

SATURS

DIZAINA TEHNOLOĢIJU SEKCIJA

Trīsdimensiju austi spiedes sensori <i>Ilze Balgale</i>	8
Miksto mēbeļu komplekts “Latvijas Finiera” interviju telpai <i>Kristaps Butāns</i>	9
Ballistiskās aizsardzības žaketes konstruktīvie risinājumi <i>Aija Muižniece</i>	10
Sensoru sistēma apģērba lielumatbilstības novērtējumam <i>Liene Siliņa</i>	11
Modulāra bērnu mājiņa <i>Gustavs Šķērstiņš</i>	12
Latvijā audzētu aitu vilna, tās pārstrādes problēmas un iespējamie risinājumi <i>Inese Šmite</i>	13
Garšaugu audzēšana dzīvojamā platībā <i>Laura Vikmane</i>	14

MATERIĀLZINĀTNES UN POLIMĒRU MATERIĀLU TEHNOLOĢIJAS SEKCIJA

Hibrīdu pildvielu saturoši slāņaini polimēru kompozīti <i>Anda Barkāne</i>	16
Uz nolietotu riepu un polimēra saistvielas bāzes veidotu kompozītmateriālu īpašību saistība ar gumijas granulu izmēriem <i>Agnija Cirvele</i>	17
Superkondensatoriem piemērotu hidrogēla elektrolītu izstrāde <i>Imants Cīrulis</i>	18
Graudu augšana cietajos šķīdumos uz $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$ bāzes <i>Laura Eglīte</i>	19
Polibutilēna sukcināta un celulozes kompozītmateriāli <i>Nika Ijudina</i>	20
Grafitiskais oglekļa nitrīds (g-C₃N₄), tā izgatavošana, modifikācija un pielietojums <i>Jorens Jasevičs</i>	21
Etilēna-oktēna kopolimēra kompozītu ar oglekļa nano-caurulītēm mehāniskās, termiskās un elektriskās īpašības <i>Dinārs Krauss</i>	22
Magnētisku pildvielu saturoša termoplastiskā elastomēra kompozīta iegūšana un īpašības <i>Intars Arvils Lasmanis</i>	23
Ārēja elektriskā lauka inducētas oglekļa kvēpu/silikonēļas suspensijas elektrisko īpašību un struktūras izmaiņas <i>Sabīne Ščegoļeva</i>	24

Celulozes šķiedru saturošu polipropilēna kompozītu iegūšana un raksturošana spiedlietu izstrādājumu iegūšanai	25
<i>Madara Varkale</i>	

ORGANISKO SAVIENOJUMU ĶĪMIJAS UN TEHNOLOĢIJAS SEKCIJA

2-Stirilaizvietotu 6-terc-butil-4H-pirān-4-ilidēnfragmentu saturošu molekulāro stiklu sintēze gaismu pastiprinošo sistēmu pētījumiem	27
<i>Deivs Alksnis</i>	
Rapšu eļļas interesterifikācija ar etilformiātu <i>t-BuOK/t-BuOH</i> klātbūtnē	28
<i>Alīna Ārenta</i>	
Kālija, nātrijs un litija <i>terc-butilātu</i> katalītiskā aktivitāte rapšu eļļas interesterifikācijas reakcijās ar metilacetātu	29
<i>Sabīne Blaua</i>	
Rapšu eļļas interesterifikācijas reakcijas ar metilacetātu kinētika	30
<i>Reinis Graviņš</i>	
Dikofeinildiselenīda sintēze un pārvērtības	31
<i>Anna Ivanova</i>	
6-Azido-2-ariltiopurīna atvasinājumu sintēze	32
<i>Andris Jeminejs</i>	
Amorfizējošas grupas un pieclocekļu heterociklus saturošu purīnu hibrīdu sintēze un fotofizikālās īpašības	33
<i>Zigfrīds Kapilinskis</i>	
Fluorēto aminoskābju inkorporēšana amiloīda-beta peptīdos	34
<i>Kristīne Kitoka</i>	
Diglicerīdu-arilmelmeldrumskābju konjugātu stratēģisko būvbloku sintēze	35
<i>Klīnta Krasauska</i>	
Dekahidrohinolīna cikla sintēze	36
<i>Sindija Lapčinska</i>	
Karbēnija jonu reakcijas šķidrā sēra dioksīdā	37
<i>Kristaps Leškovskis</i>	
Ciklopropānu protonolīzē ģenerētu karbkatjonu aminēšana Ritera reakcijas apstākļos	38
<i>Lūkass Tomass Lukašēvics</i>	
3β,28-Diazidolup-20(29)-ēns un tā triazolatvasinājumu sintēze	39
<i>Andis Melderis</i>	
Silildiēnu un sililindēnu sintēze no propargilsilāniem	40
<i>Mikus Puriņš</i>	
Amorfu purīnu-azolu konjugātu sintēze un fotofizikālās īpašības	41
<i>Armands Sebris</i>	
Arilmelmeldrumskābju-taukskābju atvasinājumu ar 1,2,3-triazola tiltiņu konjugātu sintēze	42
<i>Dārta Zelma Skrastiņa</i>	
Plazmepsīnu inhibitoru sintēze	43
<i>Georgijs Stakanovs</i>	

Eļļas augu spraukumu antioksidantu un UV filtru īpašības <i>Alīna Tumiloviča</i>	44
Sleitera orbitāļu izmantošana vienkāršota molekulāro svārstību modeļa izstrādē <i>Ingvars Vitenburgs, Antons Miščenko</i>	45
1,2-Propāndiols oksidēšana ar molekulāro skābekli cēlmetālu katalizatoru klātbūtnē <i>Jevgēnija Vladiko</i>	46
Arilmethylmelndrumskābju un klasisko antioksidantu mijiedarbības pētījumi <i>Vija Vovka</i>	47
Sulfonilgrupas dancis azidopurīnu atvasinājumu sintēzē <i>Jānis Miķelis Zaķis</i>	48
Arilmethylmelndrumskābju dendrimērie antioksidanti <i>Elīna Zoltnere</i>	49
Oktacianometilēnaizvietota s-indacēna-1,3,5,7(2H,6H)-tetraona akceptoru fragmentu saturošu hromoforu sintēze un to optiskās īpašības <i>Arnis Žagata</i>	50

SILIKĀTU, AUGSTTEMPERATŪRAS UN NEORGANISKO NANOMATERIĀLU TEHNOLOĢIJAS SEKCIJA

Liepas māli kompozīta materiāla iegūšanai <i>Alise Bētiņa</i>	52
Zemtemperatūras ZnO un Cu_xO-ZnO heterostruktūru sintēze stiklveida un auduma virsmu modifikācijai <i>Raivis Eglītis</i>	53
Alumīnija oksīda keramika ar divējādiem poru veidotājiem <i>Armands Maļeckis</i>	54
Koksnes un degakmens pelnu izmantošana kaļķi saturošos sausajos maisījumos <i>Anna Aiga Pudule</i>	55
Pašizlīdzinošas grīdas uz cementu bāzes <i>Vineta Vaišļa</i>	56

VISPĀRĪGĀS ĶĪMIJAS TEHNOLOĢIJAS UN BIOMATERIĀLU ĶĪMIJAS UN TEHNOLOĢIJAS SEKCIJA

Kalcija fosfātu granulu formēšanas tehnoloģijas parametru ietekme uz granulu izmēru sadalījumu <i>Arta Annija Āboliņa</i>	58
Maisīšanas tehnoloģisko parametru izpēte ar COMSOL Multiphysics® atbalstu <i>Armands Bušs</i>	59
Bioadhezīvu biomateriālu izveide uz zīda un hialuronskābes bāzes <i>Karīna Egle</i>	60
Hidroizolācijas masas homogenizācija un ūdens necaurlaidības īpašību uzlabošana <i>Edgars Kakarāns</i>	61
Žāvēšanas temperatūras ietekme uz amorfā kalcija fosfāta struktūru <i>Kintija Katkovska</i>	62
Porainas kalcija fosfātu-TiO₂ kompozītceramikas izstrāde un raksturojums medicīniskam pielietojumam <i>Adelīna Kondratjeva</i>	63
Ceolīta 4A dažādas sintēzes metodes <i>Rita Kravceviča</i>	64

Modificētu zīda-HAp pamatņu izstrāde	65
<i>Anta Krūmiņa</i>	
Kalcija jonu piegādes sistēmas uz hialuronskābes/kalcija fosfātu hidrogēlu bāzes	66
<i>Marta Lapiņa</i>	
Mikroaļģu kultivēšanas perspektīvas Latvijas apstākļos	67
<i>Beāte Lācīte</i>	
Sterilizācijas procesa ietekme uz kalcija fosfātu/hialuronskābes hidrogēlu īpašībām	68
<i>Anna Makņa</i>	
Augsti poraina titāna dioksīda keramika un tās fotokatalītiskās īpašības	69
<i>Marika Mosina</i>	
Fosfororganisko liesmu slāpētāju noteikšana mājas putekļos izmantojot gāzu hromatogrāfiju-tandēma masspektrometriju	70
<i>Elīna Pasečnaja</i>	
Selektīva levoglizenona ieguve no atjaunojamā bioresursa – bērza koksnes katalītiskās ātrās pirolīzes procesā	72
<i>Ralfs Pomilovskis</i>	
Rekombinanto citokīnu zīdītāju šūnu biotehnoloģija	73
<i>Alīna Reķēna</i>	
Ar sudrabu un fluoru dopēta hidroksilapatīta sintēzes metožu salīdzinājums	74
<i>Jolanta Rimša</i>	
Liposomu izstrāde un raksturošana kontrolētai zāļu piegādei	76
<i>Mārīte Skrinda</i>	
Uz polisaharīdu bāzes veidotu hirālo sorbentu izmantošana flurbiprofēna, ibuprofēna un ketoprofēna enantiomēru sadalīšanā apgrieztās fāzes AEŠH apstākļos	77
<i>Egija Stepiņa</i>	
Magnētiskā maisītāja pielietojuma izpēte viskozām vidēm	78
<i>Artūrs Šuleiko</i>	

DIZAINA TEHNOLOĢIJU SEKCIJA

Trīsdimensiju austi spiedes sensori

Ilze Balgale (4. kursa Apģērbu un tekstila tehnoloģijas bakalaura programmas studente)

Dr. sc. ing. Ilze Baltiņa (zinātniskā vadītāja)

Dizaina tehnoloģiju institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte

Rīgas Tehniskā universitāte

e-pasts: ilze.balgale@inbox.lv

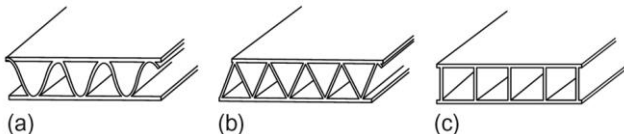
Bakalaura darba mērķis ir izpētīt elektrovadošu pavedienu integrēšanas iespējas trīsdimensiju tekstiliju dobajā starpslānī, izstrādāt austus spiedes sensorus un novērtēt to darbību.

Darbā tiek izvērtēta iespēja izstrādāt tekstiliju (trīsdimensiju vairākslāņu audumu ar dobu struktūru), kur elektrovadošās pavedienu joslas ir ieaustas apakšējā slānī un vidējā starpslānī. Joslas ir ieaustas tā, lai spiediena rezultātā tās saskartos (mehāniskais spiedes sensors). Spiediens darbojas kā elektriskais slēdzis, kura ieslēgšanas rezultātā tiek iedarbināts kāds mehānisms (gaisma, skaņa u.c.).

Pielietojuma piemērs: spiedienjutīgs auster paklājs, kura viss laukums vai tā daļa darbojas kā spiedes sensors.

Tika uzstādīts jautājums - vai ir iespējams izgatavot interaktīvu izstrādājumu viena procesa laikā, t.i. no stellēm ņemt gatavu izstrādājumu, kuram pēc tam tikai atliek pievienot atbilstošas elektronikas komponentes?

Trīsdimensiju tekstilijas ir telpiskas tekstilijas ar trim parametriem: platums, garums un augstums jeb biezums. Austas trīsdimensiju tekstilijas var būt gan vienslāņa, gan daudzslāņu. Daudzslāņu audumos slāņi var būt savā starpā cieši sasaistīti (veidojas vienlaidus struktūra) vai ar dobu vidu (slāņi ir sasaistīti vietām). Trīsdimensiju dobie audumi var būt ar nelīdzenu augšējo un apakšējo virsmu vai ar līdzenām virsmām. Audumos ar līdzenām virsmām dobie tuneli veidojas audu virzienā.



1. att. Dobā auduma šķērsriezuma veidi: trapeces (a), trīsstūra (b), taisnstūra (c)

Elektrovadošie pavedieni tiek izmantoti kā elektrisko signālu vadītāji. Dobajos audumos slāņi ir izolēti viens no otra ar gaisu, kas darbojas kā izolācija. Pareizi izvēloties auduma struktūru un materiālus, ir iespējams radīt elastīgu slēdzi.

Nepieciešamās auduma īpašības:

- 1) audums miera stāvoklī notur vajadzīgo formu (miera stāvoklī elektrovadošās joslas nesaskaras);
- 2) spiediena rezultātā slēdzis ieslēdzas, t.i. elektrovadošās joslas netraucēti saskaras;
- 3) pēc slodzes noņemšanas audums atgriežas sākotnējā stāvoklī.

Izvēlētie parauga materiāli katram slānim ir atšķirīgi, jo ir atšķirīgas funkcijas. Šķēri visiem slāņiem - poliamīda multifilamentārie pavedieni; audi - vilnas dzija, poliamīda pavedieni, kokvilnas-poliamīda dzija. Elektrovadošie pavedieni - nerūsējošā tērauda multifilamentārie pavedieni.

Auduma struktūra (skat.2.att.) izvēlēta tāda, kas nodrošina gan virsējā un apakšējā slāņa noturēšanu atstatus vienam no otra, gan arī netraucētu to saskaršanos noteiktās vietās. Elektrovadošie pavedieni vidējā un apakšējā slānī veido joslas gan šķēru, gan audu virzienā.



2. att. Izvēlēta auduma šķērsriezuma forma



3. att. Auduma paraugs šķērsriezumā

Pirmie paraugu testi apliecina, ka, izvēloties pareizu tehnoloģiju, ir iespējams izgatavot gatavus interaktīvos izstrādājumus viena procesa laikā. Taču, lai izstrādājums būtu gan vizuāli pievilcīgs, gan pildītu savas funkcijas, ir nepieciešami papildus mēģinājumi.

Woven three-dimensional pressure sensors. In this project are shown that a three-dimensional weaving technique enables the development of interactive home textiles in one process. This was demonstrated by realizing a pressure sensor.

Mīksto mēbeļu komplekts “Latvijas Finiera” interviju telpai

Kristaps Butāns (4. kursa bakalaura programmas students)

Mg. sc. ing. Jānis Kalniņš (zinātniskais vadītājs)

Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,

Rīgas Tehniskā universitāte

e-pasts: kristaps.butans@gmail.com

Bakalaura darba ietvaros ir izstrādāta mīksto mēbeļu kolekcija, kas būtu piemērota izmantošanai gan privātās, gan publiskās telpās, ērti lietojama, ekonomiski izdevīga, kā arī nekaitīga videi un cilvēka veselībai. Mēbeles ir paredzētas “Latvijas Finiera” rūpnīcas “Furniers” interviju telpai - Rīgā, Bauskas ielā 60.

Darba uzdevumi ir popularizēt saplāksni kā mēbeļu materiālu, pētīt tā mehāniskās un dekoratīvās īpašības, kā arī virsmas pārklājumus, lai atklātu vislabākos veidus, kā šo materiālu izmantot mēbeļu ražošanā.

Darba gaitā tiek pētīti visi galvenie mēbeles tēlu veidojošie elementi (materiāli, ergonomika, furnitūra, vizuālais tēls), veidoti mēbeļu maketi, pārbaudītas to vizuālās īpašības, ergonomika, kā arī ieceres atbilstība uzņēmuma izvirzītajām prasībām.

Kolekcijā izmanto divu veidu savienojumus. Izjaucamos stūra savienojumus “Festool” KV D8/50 kas ir ļoti izturīgi un tos laika gaitā iespējams pievilkt, gadījumā ja tie kļuvuši vaļīgi. Neizjaucamajās mēbeļu daļās plānots izmantot “Lamello P14” savienojumu kombinācijā ar “Domino” plakanajiem tapu ieliktniem. Šādā veidā iespējams paātrināt līmēšanas procesu, jo savienotās detaļas nav jāspiež - savienojumi tās notur pareizā pozīcijā līmēšanas laikā.

No AS “Latvijas Finieris” ražotās produkcijas tika izvēlēts saplāksnis “Riga Laser”. Tam nav ne ārēju, ne iekšēju defektu, kas nodrošina izcilu virsmas un maliņu kvalitāti. Šis saplāksnis tiek līmēts ar gaišas krāsas karbamīda formaldehīda līmi, kas neveido tik lielu kontrastu ar koku, kā tradicionāli lietotā tumšā fenola formaldehīda līme.

Virsmas pārklājumam tika izvēlēts puscaurspīdīgs lamināta pārklājums “Opal White”, kas ir jaunums tirgū. Tas atstāj redzamu esošo koksnes tekstūru, ir gan mehāniski, gan ķīmiski izturīgāks par laku, kā arī lētāks, un ar ilgāku kalpošanas laiku. Maliņas lako ar ūdens bāzes laku “Synteko”.

Segaudumam tiek izmantots dabīgo šķiedru (viskozes, lina un kokvilnas) audums, ar palielinātu

mehānisko izturību, kas ir piemērots publisko telpu mēbelēm.

Darba gaitā ir sasniegti visi izvirzītie mērķi. Ir izveidota ergonomiska un ērti lietojama mēbeļu kolekcija, kas atbilst uzņēmuma izvirzītajiem kritērijiem.

Pie iespējamiem uzlabojumiem jāmin materiālu ekonomiska izmantošana, jo ražošanas procesā rodas daži nestandarta formas atgriezumi.



1. att. Mīksto mēbeļu kolekcija “Riga Soft”.

Collection of soft furniture for company “Latvijas Finieris”. The aim of the project is to design a collection of soft furniture for the company “Latvijas Finieris”, which is suitable for use in both private and public areas, comfortable, reliable as well as friendly for environment and human health. The main tasks are to promote plywood as a furniture material, to study its mechanical and decorative qualities, as well as surface coatings, to reveal the best ways to use this material for the furniture industry.

Main goals achieved during the project were:

- Optimized gluing process by using self-clamping connectors
- Improved lifespan of furniture with adjustable joints.
- Upgraded surface finishing process and improved visual look by using laminated plywood in combination with water-based products for plywood edges.
- Improved ergonomics using natural fiber materials and design that matches human body posture while sitting.

As the result, finished collection of furniture meets all the requirements to be used in public area, as well as fits the company needs.

Ballistiskās aizsardzības žaketes konstruktīvie risinājumi

Aija Muižniece (1.kursa Apģērbu un tekstila tehnoloģija maģistra programmas studente)

Dr. sc. ing. Inese Ziemele (zinātniskā vadītāja)

Dizaina tehnoloģiju institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,

Rīgas Tehniskā universitāte

e-pasts: aija.muizniece1@gmail.com

Šobrīd tirgū pieejamajiem ballistiskās aizsardzības apģērbiem ir nepilnības: produkti pārsvarā ir smagi, masīvi un cieti, tāpēc tie var ierobežot lietotāja kustību amplitūdu un komforta līmeni [2]. Projektējot šo aizsargapģērbu civilajai lietošanai, lietotāja komforta prasību apmierināšanai ir otrā svarīgākā vieta tūlīt aiz ballistiskās aizsargfunkcijas.

Jaunākajos pētījumos ir pierādīts, ka grafiens pēc savas struktūras un īpašībām ir piemērots pārklājumu veidošanai uz tekstilijām, tādā veidā piešķirot papildus funkcionalitāti - stingrumu, izturību, virsmas cietību, kā arī padara materiālu par labu elektrības un siltuma vadītāju, būtiski nepalielinot drānas masu [3].

Darba mērķis ir izstrādāt konstruktīvos risinājumus individuālās ballistiskās aizsardzības žaketei no šobrīd tirgū pieejamām funkcionālajām drānām. Mērķa sasniegšanai tiks veikti analītiski un praktiski pētījumi saskaņā ar 2.attēlā redzamo shēmu:

- pētījumi par tirgū pieejamiem individuālās ballistiskās aizsardzības augšģērbiem civilajam lietojumam (1.att.), precizējot to lietotāju grupas;
- literatūras analītisks pētījums par ballistisko aizsargspēju piešķiršanas iespējām tekstilijām un drānu slāņojumam;

tiks apzinātas un grupētas aizsargžaketes kvalitātes prasības, reizē nosakot tām atbilstošos tehniski mērāmos, fizikāli mehāniskos un kvalitatīvos rādītājus, kā rezultātā taps projektrisinjuma kvalimetriskais pārskats;

- tiks veikta izejmateriālu atlase projektrisinjumam, pārbaudot to slāņojuma ballistisko aizsardzību;

- gala rezultātā tiks uzprojektēta ballistiskās aizsardzības žaketes modeļkonstrukcija tipfigūrai; Pētījuma rezultātā izstrādātā ballistiskā aizsargapģērba modeļa paraugs tiks kvalimetriski novērtēts.

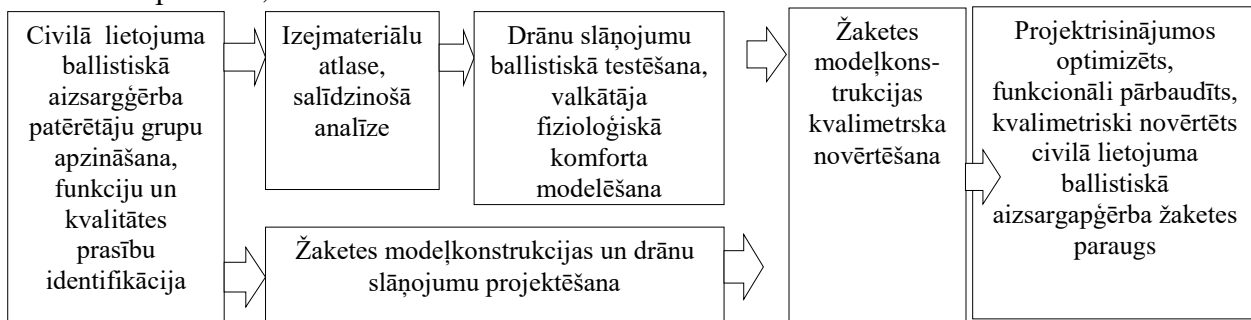


1.att. Individuālās ballistiskās aizsardzības žaketes analogmodelis [1]

LITERATŪRA

- [1] Ballistic Suit Level IIIA/ <https://www.aspetto.com/index.php?page=productdetail&productid=21>, skatīts: 20.04.2018
- [2] B.J.Agrawal. High performance textiles for ballistic protection. Defense Science Research Conference and Expo (DSR). 2011.
- [3] FUNCTIONALIZED GRAPHENE NANOPATELETS [/http://www.goodfellow.com/datasheets/functionalisied-graphene-nanoplatelets-en-us.pdf](http://www.goodfellow.com/datasheets/functionalisied-graphene-nanoplatelets-en-us.pdf), skatīts:20.04.18

Design solutions for ballistic protection jacket. Identified user for ballistic protection jackets are prominent civilians. Offered benefit and result after this research would be optimized, functional, comfortable and tested protective garment, that is comfortable and easy to use in ordinary workday.



2.att. Pētījumu gaita

Sensoru sistēma apģērba lielumatbilstības novērtējumam

Liene Silīna (1.kursa RWGV0 maģistra programmas studente)

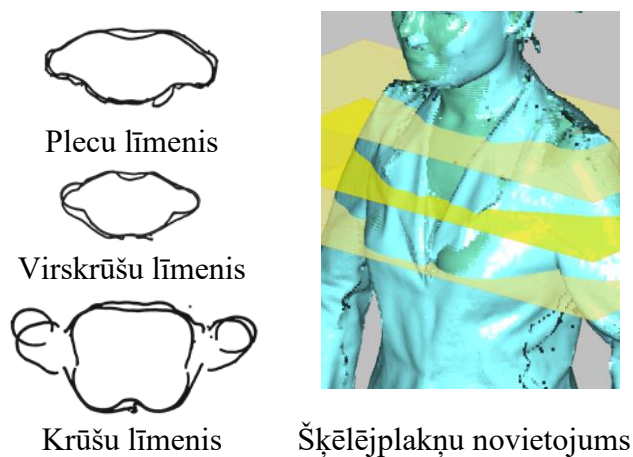
Dr. sc. ing. Inga Dāboliņa (zinātniskā vadītāja)

Apģērbu un tekstila tehnoloģiju katedra, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,

Rīgas Tehniskā universitāte

e-pasts: liene.silina@rtu.lv

Lai tekstilizstrādājums būtu atbilstošs tam uzstādītajām funkcionālajām un komforta prasībām, viens no būtiskākajiem un noteicošākajiem faktoriem ir cilvēka figūrai un konkrētā izstrādājuma specifikai atbilstoša konstrukcija. Apģērbi tiek ražoti atbilstoši tipfigūrām (ņemot vērā vadmērus – ķermeņa augstumu, krūšu, vidukļa un vēdergūžu horizontālo apkārtmēru) [1]. Tipizācijas un tipfigūras indifferences intervālu galvenais nosacījums ir apkalpot pēc iespējas lielāku mērķauditoriju - tā, lai pēc iespējas lielāka populācijas daļa iekļautos kādā no izmēriem. Taču katra indivīda figūra ir ļoti atšķirīga un, kaut arī ir statistiski apkopojama, tomēr grūti pakļaujas klasifikācijai dažādo proporciju (kraujuma tipa) dēļ, kuras reti tiek ņemtas vērā konstruējot apģērbus plašražošanai.



1. att. Gaisa starpslāņa noteikšana plecu/krūšu balstvirsmas zonā.

Apģērbi, kas paredzēti kādai specifiskai funkcijai, piemēram, ziemas sporta apģērbi (aizsardzība no vēja, mitruma, aukstuma, patīkams mikroklimats u.tml.) [2, 3] zaudē funkcionalitāti, ja konstrukcija neatbilst valkātāja auguma specifikai - starp izstrādājuma virskārtu un odiri esošais siltinājums tiek nospiegots, zaudējot gaisa starpslāni, līdz ar to izstrādājuma sildītspēja krietni samazinās, diskomfortu rada arī ierobežotais kustību ērtums

[4]. Lai pārbaudītu gaisa starpslāni, tiek veikta 3D skenēšana un transversālo plakņu izgūšana. Tā kā apģērbs pašvara ietekmē piekļaujas ķermenim dažādās zonās atšķirīgi, tad primāri ir pārbaudīt galvenās balstvirsmas – plecu/krūšu zona plecgērbiem un vidukļa/vēdergūžu zona gurngērbiem. 1.attēlā salīdzināts gaisa starpslānis vienkāršam bāzes konstrukcijas maketam plecu/krūšu balstvirsmas zonā.

Šādu problēmu risināšanai, tiks izveidots tīklveida sensoru sistēmas prototips, ar kura palīdzību varētu eksperimentāli noteikt, cik lielā mērā izstrādājums piekļaujas valkātājam, kā apģērba konstrukcija (izstrādājuma atbilstība valkātāja auguma specifikai) ietekmē valkātāja komfortu un nodrošina izstrādājuma atbilstību funkcionālajām prasībām.

LITERATŪRA

- [1] Gupta, D., Zakaria, N. *Anthropometry, Apparel Sizing and Design*. Cambridge: Elsevier Science & Technology, **2014**. 368 p. ISBN 978-0-85-709681-4
- [2] Williams, J.T. *Textiles for Cold Weather Apparel*. Cambridge: Elsevier Science & Technology, **2009**. 432 p. ISBN 978-1-84569-411-1
- [3] Miao, M., Xin, J.H. *Engineering of High-Performance Textiles*. Cambridge: Elsevier Science & Technology, **2017**. 527 p. ISBN 978-0-08-101273-4
- [4] Das, A. & Alagirusamy, R. *Science in Clothing Comfort* Woodhead Publishing India PVT LTD, **2010**, ISBN13: 978-81-908001-5-0

Sensor system for evaluation of clothing fit. In order to meet all the determined functional and comfort requirements for clothing, patternmaking is one of the most significant steps. Pattern should be suitable for users' body type and its specifics, as well as for the specifics of the garment itself. Ill fitting functional clothing such as winter sportswear for example (that provides protection from wind, rain and cold and creates pleasant and comfortable microclimate) can reduce and/or lose ones' functionality – the insulation between the top and the lining of the garment is tightened/flattened losing the air interlayer, thus the product's heating ability is significantly reduced, discomfort could be also caused by the limited movement ability. A potential solution to the problem – to create a prototype for a sensor system to experimentally determine the extent to which clothing clings to the wearer's body.

Modulāra bērnu mājiņa

Gustavs Šķērstiņš (4. kursa bakalaura programmas students)

Mg. sc. ing. Jānis Kalniņš (zinātniskais vadītājs)

Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,

Rīgas Tehniskā universitāte

e-pasts: gustavs.skerstins@gmail.com

Šī bakalaura mērķis paredz radīt produktu- “spēļu māju” bērniem no modulāriem blokiem, kurus būtu iespējams komplektēt “neskaitāmās variācijās”- kas dotu iespēju bērnam apmierināt šo dabiskā attīstības procesa noteikto nepieciešamību pēc personīgās telpas, vienlaikus nodrošinot pilnvērtīgu bērna attīstību, veicinot bērna domāšanu, radošumu, sociālās spējas un pastāvīgumu. Bērni ir ļoti radoši un tiklīdz viņi ir atstāti vieni, viņi izveidos savu slēpni/mājiņu un izdomā savas spēles: sega virs dīvēna un krēsla dzīvojamā istabā kļūst par lietainas dienas svētnīcu; vecās durvis, kas atstutētas pret koku dārzā, kļūst par slepeno būdu un tā tālāk.

Videi bērna attīstībā ir ļoti nozīmīga loma. Psihologi uzskata, ka rotaļu namiņi ir nozīmīgi soļi ceļā uz pastāvīga cilvēka izaudzināšanu. Rotaļu namiņš nodrošina telpu, kas pieder vienīgi bērnam, un tādēļ bērns vai bērni var brīvi paust sevi, vienlaikus mācoties kā līdzināties citiem.

Lai sasniegtu mērķi, ir izvirzīti sekojoši uzdevumi: veikt aptauju, lai noskaidrotu izstrādājumu nepieciešamību; veikt potenciālo tirgus pētījumu; analizētu esošo tirgus situāciju; kompozīcijas elementu izvēli; materiālu un apdares materiālu izvēli; izstrādāt konstrukcijas risinājumus; izstrādājuma rasējumu un specifikācijas izveidi; veiktu tehnoloģisko plānošanu; ražotnes un biroja projekta izstrādi; produkta cenošanas pētījumu; produkta preču zīmes un mājas lapas izveidi; izplānot izstrādājuma reklāmas kampaņu; produkta izplatīšanas kanālu plānošana; prototipa izveide.

Produkta izveidē ir izmantotas masīvkoka brūsiņas, kuras ir lietotas mājiņas konstrukciju izveidei ar ”sherpa wts1” savienojumiem. Savienojumi sastāv no divām alumīniju daļām, kas izveido efektīvu, drošu un izjaucamu savienojumu trīs dimensijās. Mitrumizturīgais saplākšis modulāro bloku izveidei ir komplektēts ar “Lamello P-18 divario” furnitūru. Savienojums sastāv no 2 daļām un tiek iefrēzēts brūsiņās un saplākšņa bloku malās, lai izveidotu tīrus, ciešus savienojumus.

Saspiešanas darbība notiek tikai dažos punktos, nevis visā ievietošanas garumā, padarot komponentus vieglāk komplektējamus.

Virsmas pārklājumam ir izvēlēta beice un krāsa āra apstākļiem, kura pilnībā neaizsedz apakšā esošo koka tekstūru. Apdarei ir gan mehāniska, gan ķīmiski izturīga pret apkārtējiem vides faktoriem. Ir piedāvātas dažādas krāsas, lai klientiem būtu iespēja izvēlēties starp sev tīkamāko variantu.

Darba gaitā ir izdevies atrisināt gandrīz visas problēmas. Produkts pēc izstrādes tiks testēts un reklamēts bērnu zinātnes centrā “Zinoo”, kur tiks veikti novērojumi un izdarīti secinājumi, lai uzlabotu produkta tehniskās un vizuālās īpašības.



1. att. Bērnu mājiņas pamat komplekts potenciālajā lietošanas vidē

Children's Modular Playhouse. The aim of the project is to create educational playset of playhouse that provide hours of creative entertainment for boys and girls of all ages. The main task is to design product which is fun, safe, transformable, educational, durable to pass it from generation to generation. Large scale and versatility contribute to independent thinking and teamwork. Main goals during the project is make friendly, interesting and appealing playhouse for children. Where children can express themselves freely, while learning how to resemble others. In the result, finished product meets all requirements to be used by children.

Latvijā audzētu aitu vilna, tās pārstrādes problēmas un iespējamie risinājumi

Inese Šmite (4. kursa Apģērbu un tekstila tehnoloģijabakalaura programmas studente)

Dr. sc. ing. Ilze Baltiņa (zinātniskā vadītāja)

Apģērbu un tekstila tehnoloģiju katedra, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,

Rīgas Tehniskā universitāte

e-pasts: ermelindasmite94@gmail.com

Jau sen Latvijā tiek audzētas aitas, taču, ekonomisko un politisko iemeslu dēļ, audzēšanas mērķis ir būtiski mainījies.

Mūsdienās nozīmīgākais aitu audzēšanas virziens ir gaļas ieguve, Pieprasījuma trūkuma dēļ, vilna tiek uzskatīta par blakus produktu.

2017. gada septembrī Latvijā bija aptuveni 102000 aitas.

Lielākoties audzētas aitu šķirnes, kas paredzētas vilnas/gaļas ieguvei, kas nedod kvalitatīvu smalkvilnu. Gadā no vienas aitas iegūst ap 4kg vilnas.

Latvijā kopā ir 4 uzņēmumi, kas pārstrādā Latvijā audzētu aitu vilnu. To kopējā Latvijas vilnas pārstrādes kapacitāte ir ap 40 tonnām gadā.

Pēc ražotāju izteikumiem, galvenās Latvijas vilnas pārstrādes problēmas ir tās lielais augu valsts un citu veidu nefīrumu piejaukumus, kā arī aitkopju intereses trūkums uzlabot vilnas kvalitāti.

Salīdzinot ar Jaunzēlandes smalkvilnas aitu vilnu, Latvijas vilna ir rupjāka un ar retāku zvīņojumu uz šķiedras virsmas, kas nodrošina to, ka salīdzinoši mazāk tā pakļaujas velšanas procesam.

Ja uzlabotu vilnas kvalitāti un tīrību, to var pārstrādāt labā aparātdzijā, taču, pie esošās situācijas, to labāk būtu izmantot neausto materiālu ražošanā.

Šāda veida materiālu izgatavošanai ir iespējams izmantot izejmateriālus ar ļoti plašu kvalitātes diapazonu, viss atkarīgs no galā iegūstamā materiāla tālākās izmantošanas.

Neaustiem vilnas materiāliem ir vairākas pielietojuma funkcijas, kas būtiski palielina iespējamo patērētāju loku.

Neaustos vilnas izstrādājumus bieži pielieto skaņas izolēšanai, termo izolācijai, interjerā un citur.

Šāda veida materiālus var izgatavot vairākos veidos, piemēram, ar mitro velšanas procesu vai cauradatojot.

Tā kā Latvijas vilna sliktāk pakļaujas velšanas procesam, šāda veida materiāla izgatavošanai labāka būtu cauradatošanas metode.

Ja Latvijā būtu uzņēmums, kas par saprātīgu cenu būtu gatavi iepirkt vairumā vilnu, iespējams, ka arī aitkopji būtu gatavi uzlabot tās kvalitāti.

Production problems and possible solutions of sheep wool produced in Latvia. The biggest drawback in processing of Latvian sheep wool is it's low quality, low prices and low demand of wool yarn and home textiles. Small companies can't devlope and process all available wool. Possible solution is to process wool in non-woven textiles. There are more than 500 non-woven wool applications which expands wide range of consumers.

Garšaugu audzēšana dzīvojamā platībā

Laura Vikmane (4.kursa Materiālu tehnoloģijas un dizaina bakalaura programmas studente)

Mg. sc. ing. Ilze Gūtmane (zinātniskā vadītāja)

Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,

Rīgas Tehniskā universitāte

e-pasts: lvikmane@gmail.com

Bakalaura darba mērķis ir radīt produktu kolekciju, kas sniedz iespēju audzēt garšaugus telpā visās sezonās. Produktu paredzēts aprīkot ar papildus gaismas avotu, lai to varētu lietot telpās ar nepietiekošu dabīgo apgaismojumu. Darbu iecerēts veidot lakoniskās formās ar iespēju to komplektēt un savietot gan horizontāli, gan vertikāli.

Darba uzdevumi ir izpētīt biežāk audzētos garšaugus, to prasības pret gaismu, augšanas apjomus, piemērotus apgaismojuma veidus, atbilstošākos materiālus produkta realizācijai, kā arī pētīt potenciālo lietotāju paradumus, veikt aptauju, lai gūtu potenciālo klientu viedokli par produktu, izmantojot tajā attieksmes, klasifikācijas u.c. jautājumus.

Cilvēku interese audzēt augus dzīvojamā vidē ir liela, ko pierāda dažādi trauki uz palodzēm pavasaros, kad dienas paliek garākas. Piemērotākā vieta audzēšanai ir tā, kura nodrošina augiem nepieciešamo gaismas daudzumu – pie loga, un laika periods, Latvijas ģeogrāfiskā novietojuma dēļ, ir ierobežots.

Darba gaitā apstiprinājās cilvēku interese un tēmas aktualitāte pēc šāda tipa produkta nepieciešamības, kuru iegādes motīvi būtu – nodrošināt papildus vitamīnu avotu, neveidot liekus atkritumus, kā arī vēlme ietaupīt, to īstenot estētiski pievilcīgā veidā. Galvenā mērķauditorija - cilvēki, kas ikdienā aizdomājas par veselības un vides jautājumiem. Šāda tipa produkts nav plaši izplatīts vietējā tirgū un biežāk sastopami ir aizvietotājprodukti, kā statīvi vai apgaismojuma veidi. Šobrīd Latvijas tirgū vienīgais šāda tipa produkts ir Igaunijas uzņēmuma CLICK&GROW. Konstrūcijai izvēlēta cietie lapu koki – ozols. Apgaismojuma nodrošināšanai izvēlēta LED lentas ar maināmu gaismas intensitāti, kas nodrošina pilnu gaismas spektru. Augu kastītēm paredzēta cinkota metāla kaste. Darba gaitā ir sasniegti visi izvirzītie mērķi. Izveidots lakoniskas formas produkts ar iespēju komplektēt, kas aprīkots ar papildus

apgaismojumu. Gala produktam iespējami pārisuzlabojumi, kas atvieglotu ražošanas procesu.



1. att. Darba gala piedāvājuma varianta vizualizācija

Herb cultivation in a residential area. The aim of the Bachelor's thesis is to create a product collection that allows to grow the herbs in all seasons indoors. The product is intended to be equipped with an additional light source for use in rooms with insufficient natural light. The work is intended to create in laconic shapes with the ability to join them both horizontally and vertically. The tasks are to study the most frequently grown herbs, their requirements on light, growth volumes, suitable lighting types, the most appropriate material for realization of the product, as well as to study the habits of potential users, to conduct a survey in order to obtain the views of potential customers about the product, using, including attitudes, classifications etc. questions. The interest of people in cultivating plants in the living environment is large, as evidenced by the different containers on the windowsill in the spring, when the days stay longer. The most suitable place for cultivation is the one that provides the necessary amount of light for plants - in the window, and the time period due to the geographical position of Latvia is limited. In the course of the work, all the goals have been achieved. A laconic form product with the option of completing with additional lighting has been created. The final product may have some improvements that would facilitate the production process.

**MATERIĀLZINĀTNES UN POLIMĒRU MATERIĀLU
TEHNOLOĢIJAS SEKCIJA**

Hibrīdu pildvielu saturoši slāņaini polimēru kompozīti

Anda Barkāne (3. kursa bakalaura programmas studente)

Dr. sc. ing. Sergejs Gaidukovs (zinātniskais vadītājs)

Polimērmateriālu institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte

Šobrīd pastiprinās pētījumi hibrīdu pildvielu kompozītu materiālu laukā, jo šādas pildvielas nodrošina materiālus ar labākām mehāniskajām, termiskajām un elektrovadošajām īpašībām [1]. Eksistē pētījumi elektromagnētisko viļņu traucējumu (EMI) aizsargājošo materiālu jomā. Salīdzinājumā ar metāliem un metāla kompozītiem, polimēru kompozītmateriāli ir kļuvuši par jaunajiem kandidātiem aizsargāšanai no EMI, pateicoties to vieglumam, zemajām izmaksām, izturībai pret koroziju, elastīgumam un labajai apstrādājamībai [2].

Darba mērķis ir 1) izveidot slāņainus polimēru nanokompozītmateriālus, lai uzlabotu materiāla elektrovadītspēju un aizsardzību pret EMI; 2) atrast šo kompozītmateriālu efektīvāko kvalitatīvo un kvantitatīvo sastāvu; 3) izvērtēt šo kompozītu elektrovadītspēju, siltumvadītspēju un potenciālu pasargāt no EMI.

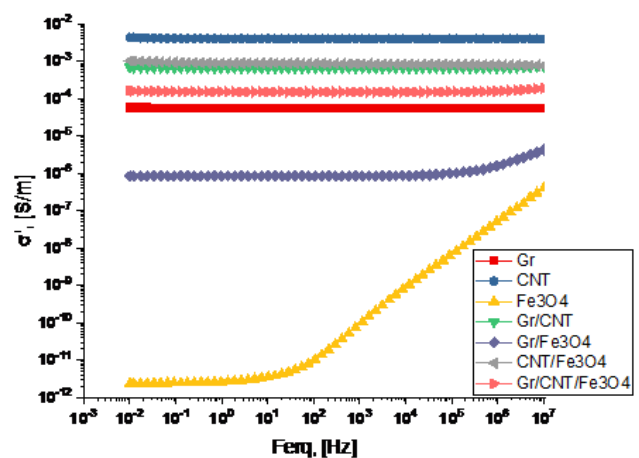
Izmantotie materiāli: 1) Etilēna-vinilacetāts (EVA), ar vinilacetāta saturu 9.0 m%, $\rho=0.930$ g/cm³; 2) Grafēna nanoplāksnītes (Gr), $\rho=2.0$ g/cm³, $d=1-20$ nm; 3) daudzslāņu oglekļa nano caurulītes (MWCN), $\rho=2.0$ g/cm³, $d=9.5 \cdot 10^{-9}$ m, tīrība 90% ogleklis, virsmas laukums 250-300 m²/g; 4) Dzelzs (III) oksīds (Fe₃O₄), $\rho=4.9-5.1$ g/cm³, $d=20-30$ nm. Materiālu kompozīcijas iegūtas, izmantojot *Brabender* maisītāju *Mixer 50EHT 32*, 100 °C temperatūrā. Paraugi elektrovadītspējas un siltumvadītspējas pārbaudei iegūti, izmantojot presi 110 °C, 3 metrisko tonnu spiedienā.

Elektrovadītspēja noteikta izmantojot *Broadband Dielectric Spectrometer BDS 50* (frekvences diapazons 10⁻² līdz 10⁷ Hz). Siltumvadītspēja noteikta ar *Laser Flash Apparatus (LFA) for Thermal Diffusivity and Conductivity* (temperatūrās 20, 40, 50 un 60 °C).

Izpētot paraugu elektrovadītspēju noteikts, ka ievadot polimēra matricā nanopildvielas uzlabojas tā elektrovadītspēja un siltumvadītspēja. Izveidojot

slāņainu kompozītmateriālu panākti vēl labāki rezultāti kā vienkārši pildītiem polimēru paraugiem.

No slāņainajiem kompozītu paraugiem efektīvākais sastāvs elektrovadītspējā ir ar pildvielu CNT, kam seko CNT un Fe₃O₄ kombinācija, kā redzams 1.att.



1. att. Paraugu īpatnējās elektrovadītspējas (σ') atkarība no frekvences.

LITERATŪRA

- [1] N. Raman, S. Sudharsan, K. Pothiraj. Synthesis and structural reactivity of inorganic-organic hybrid nanocomposites - A review. *J. Saudi Chem. Soc.*, **2012**, *16*, 339-352.
- [2] J. Li-Chuan, Y. Ding-Xiang, C. Cheng-Hua. Unique Double Percolated Polymer Composite for Highly Efficient Electromagnetic Interference Shielding. *Macromol. Mater. Eng.* **2016**, *301*, 1232-1241.

Layered polymer composites containing hybrid fillers. Preparation of layered polymer composites with hybrid nanofillers (CNT, Gr, Fe₃O₄/polymer) faces challenges. Mainly issues are regarding limited control of nanofillers dispersion, because of their agglomeration. Layered composite materials were prepared to achieve material with EMI shielding properties. Samples thermal and electrical properties are investigated.

Uz nolietotu riepu un polimēra saistvielas bāzes veidotu kompozītmateriālu īpašību saistība ar gumijas granulālu izmēriem

Agnija Cirvele (3. kursa Materiālzinātņu bakalaura programmas studente)

Dr. chem. Laimonis Mālers (zinātniskais vadītājs)

Polimērmateriālu institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte
e-pasts: agnijacirvele@gmail.com

Viens no nolietotu riepu izraisīto vides problēmu risinājumiem ir to otrreizējā pārstrāde kompozītmateriālā (rieļu sasmalcina un pievieno saistvielu). Ļoti svarīgas ir šī materiāla raksturojošās īpašības un to optimizēšanas iespējas, kuras jau līdz šim ir pētītas no tādiem aspektiem kā kompozītmateriāla sastāvs, formēšanas vides mitrums un spiediens, gumijas smalknes modificēšana u.c. Tomēr nozīmīgi būtu arī izpētīt šāda materiāla granulometriskā sastāva ietekmi uz tā īpašībām [1].

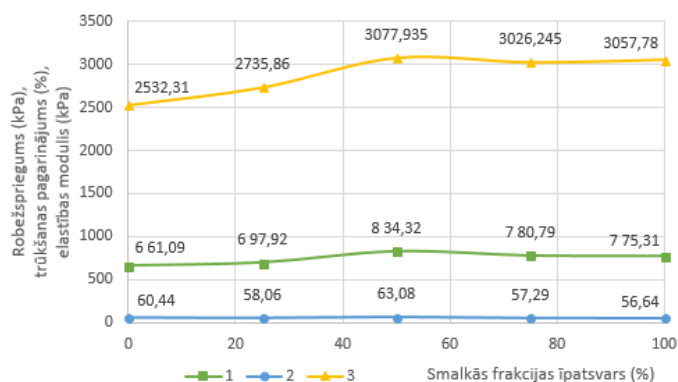
Šī iemesla dēļ tika izmantots kāda Latvijas uzņēmuma sarāžotais gumijas granulāts un kompozītmateriāls, kas veidots no nemainīga poliuretāna saistvielas daudzuma (8,5%) un granulāta divu frakciju – smalkās (0,5-3 mm) un rupjās (2-10 mm) – maisījuma, smalkajai frakcijai pieaugot no 0 līdz 100% ar soli 25%. Pētījumā tika noteikti: granulāta daļiņu izmēri (ar «sieta metodi»), kompozītmateriāla tilpummasa (ģeometrisko un masas mērījumu aprēķina ceļā), cietība (pēc Šora C), elastības modulis, trūkšanas pagarinājums un robežspriegums stiepē, kā arī spriegums pie 10% deformācijas spiedē, izmantojot dinamometru Zwick/Roell BDO FB 020TN.

Eksperimentu gaitā tika noskaidrots, ka ražotāja kompozītmateriālā izmantotās gumijas granulāta smalkās frakcijas dominējošie granulālu izmēri ir 1-2 mm, bet rupjās frakcijas – 5-7 mm.

Kopumā, pieaugot kompozītmateriāla gumijas granulāta smalkās frakcijas procentuālajam īpatsvaram, tā tilpummasa, cietība un stiprība spiedē un stiepē pieaug. Tomēr tilpummasa pieaug līdz sastāvam, kurā ir 75% smalkās frakcijas, pie 100% smalkās frakcijas, tilpummasa nedaudz samazinās. Cietība kompozītmateriālam pieaug, sākot no 25% smalkās frakcijas. Materiālā, kurā ir tikai rupjās gumijas daļiņas, iespējams, dominē nevis kompozītmateriāla bet gumijas cietība kas ir augstāka par kompozītmateriāla cietību. Pieaugot

smalkās frakcijas daudzumam, stiprība spiedē pie 10% deformācijas pieauga vienmērīgi, bet stiepē (lai gan kopumā tika novērots stiprības pieaugums) par vizitūrīgāko materiālu atzīstams kompozītmateriāls ar smalkās:rupjās frakciju sadalījumu 50:50. Tur novērojamas visaugstākās robežsprieguma un trūkšanas pagarinājuma vērtības stiepē (1. att.).

Pētījuma rezultātā secināms, ka atkarībā no materiāla pielietojuma veida, tā sloģošanas veida un citām prasībām, ir iespējams pielāgot nepieciešamās īpašības ar gumijas granulāta granulometriskā sastāva izmaiņām.



1. att. Stiepes testa rezultātu atkarība no gumijas granulāta smalkās frakcijas īpatsvara kompozītmateriālā; 1 - robežspriegums, 2 - trūkšanas pagarinājums, 3 - elastības modulis.

LITERATŪRA

- [1] R.Plesuma, L.Malers. Functional properties of composite material from recycled tires and polyurethane binder in water medium. In *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, Sigulda, Latvia; 2016, 111

The correlation between some material properties and the size of granules of composite material based on scrap tires and polymer binder. In this work we investigated the influence of the size of rubber granules in composite materials by changing the proportions between a fine and a coarse granulate, but the same amount of polyurethane binder. Mainly with the growth of the amount of the fine rubber granulate the volumetric weight, hardness, compression and tensile strength increases. The size of the rubber granules has a significant influence on the properties of a composite material.

Superkondensatoriem piemērotu hidrogēla elektrolītu izstrāde

Imants Cīrulis (3.kursa Materiālzinātnes bakalaura programmas students)

Mg.sc.ing. Linards Lapčinskis, *Dr. habil. phys.* Māris Knite

Tehniskās fizikas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,

Rīgas Tehniskā universitāte

e-pasts: imants.cirulis1@gmail.com

Pasaulē arvien aug pieprasījums pēc enerģijas resursiem un ir paredzēts, ka nākotnē šis pieprasījums var dubultoties. Enerģiju uzkrājošas ierīces kā elektroķīmiskie kondensatori un degvielas šūnas ir atpazīstamas ar elektriskās enerģijas uzglabāšanu un pārveidošanu. Tieši šīs ierīces var dot lielu ieguldījumu atjaunojamai enerģijai nākotnē. Elektroķīmiskie kondensatori ir arī pazīstami kā superkondensatori, kas ir lieliski piemēroti īslaicīgai enerģijas uzglabāšanai (0,1 – 100 s) [1].

Šī darba mērķis ir izstrādāt hidrogēla elektrolītus, kas palielinātu superkondensatoru darba elektriskā sprieguma diapazonu.

Hidrogēli tika veidoti no polivinilspirta (PVS) (Sigma Aldrich, M_n 130000, 99+ % hidrolizēts). Superkondensatora ierīcei sagatavoti šādi PVS hidrogēlu paraugi – PVS/ Na_2SO_4 , PVS/ K_2SO_4 , PVS/ H_3PO_4 un PVS/ KOH . Paraugi sagatavoti ar sasaldēšanas un atsaldēšanas (*Freeze-thaw*) metodi.

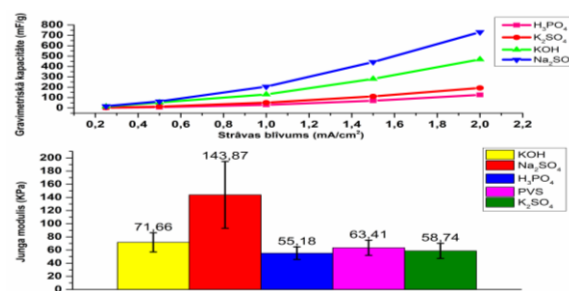
Elektroķīmiskās īpašības hidrogēlu elektrolītiem tika pētītas ar cikliskās voltampēmetrijas (CV), hronopotenciometrijas (HP), parauga izlādes un elektroķīmiskās impedances spektroskopijas (EIS) metodēm. Paraugi tika pētīti ar grafitā elektrodiem Swagelok tipa sistēmā. Tika pētītas arī hidrogēlu elektrolītu mehāniskās īpašības spiedē (Zwick/Roell universālā materiālu testēšanas ierīce).

No visiem PVS hidrogēliem vislielākais Junga modulis tika noteikts PVS/ Na_2SO_4 elektrolītam ($E = 143,87$ KPa). PVS/ Na_2SO_4 uzrādīja arī augstākās gravimetriskās kapacitātes vērtības pie dažādiem strāvas blīvumiem hronopotenciometrijas mērījumos (1. att.).

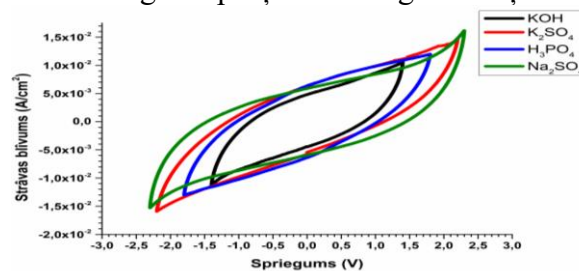
Iegūtajos datos no CV līknēm par PVS hidrogēlu elektrolītiem, ir redzami to maksimālie sprieguma apgabali (2. att.). Visplašākie sprieguma apgabali ir PVS/ Na_2SO_4 hidrogēla elektrolītam, sasniedzot 4,6 V un PVS/ K_2SO_4 hidrogēla elektrolītam 4,4 V.

PVS/ Na_2SO_4 un PVA/ K_2SO_4 superkondensatora šūna ar hidrogēlu elektrolītu spēj darboties lielākā

sprieguma apgabalā kā pārējie elektrolīti, turklāt PVS/ Na_2SO_4 gadījumā ir novērojama arī mehānisko īpašību uzlabošanās. PVS/ Na_2SO_4 īpatnējās kapacitātes vērtība, kura ir iegūta no CV datiem, ir salīdzinoši zema ar iepriekšminēto PVS hidrogēlu elektrolītu iegūtajām vērtībām. Turpretim gravimetriskā kapacitāte ir augsta salīdzinājumā ar citiem PVS elektrolītiem.



1.att. Gravimetriskā kapacitāte superkondensatoru šūnai ar dažādiem hidrogēlu elektrolītiem atkarībā no strāvas blīvuma un PVS hidrogēlu aprēķinātie Junga moduļi.



2.att. Superkondensatora darba sprieguma apgabali izmantojot dažādus PVS elektrolītus.

LITERATŪRA

[1] M.Mirzaeian, Q.Abbas, A.Ogwu. Electrode and electrolyte materials for electrochemical capacitors, *Int. J. Hydrogen Energy*, **2017**, 42(40), 25565–25587.

Development of hydrogel electrolytes suitable for use in supercapacitors. Elaboration of advanced polyvinyl alcohol (PVA) hydrogel electrolytes with higher working voltage range for supercapacitor applications is reported.

Graudu augšana cietajos šķīdumos uz $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$ bāzes

Laura Eglīte (2. kursa Materiālzinātnes maģistra programmas studente)

Dr. phys. Ēriks Birks, *Dr. habil. phys.* Māris Knite (zinātniskie vadītāji)

Segnetoelektrisko materiālu laboratorija, Cietvielu fizikas institūts,

Latvijas Universitāte

e-pasts: laura.eglite@outlook.lv

Cieto šķīdumu uz $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$ bāzes pieprasījums pieaug sakarā ar nepieciešamību aizvietot tādus svīnu saturošus segnetoelektriskos materiālus kā $\text{Pb}(\text{Zr}_{1-x}\text{Ti}_x)\text{O}_3$, kas ir toksiski, izraisa svīna saindēšanos un piesārņo apkārtējo vidi [1]. Keramisko cieto šķīdumu saķepšanas procesa laikā, bieži notiek strauja graudu augšana un to sadalījuma paplašināšanās, veidojoties anomāli lieliem graudiem. Šo graudu dēļ samazinās tādas materiāla īpašības kā cietība un iegūto mikrostruktūru ir grūti atdarināt.

Pētījuma mērķis ir ar piedevu un nestehiometrijas palīdzību iegūt tādu $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$ keramiku, kam raksturīgs unimodāls, šaurs graudu izmēru sadalījums bez anomālu graudu klātbūtnes, ar uzlabotām fizikālajām īpašībām.

$\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$ keramika tika iegūta ar tradicionālo un divpakāpju saķepšanas metodi, kā arī karsto presēšanu no augstas tīrības pakāpes (99-99.9 %) oksīdu un karbonātu pulveriem. Iegūtie paraugi tika griezti, slīpēti un pulēti, kam sekoja termiskā kodināšana augsttemperatūras krāsnī. Paraugu mikrostruktūra tika analizēta ar SEM un kvantitatīvi noteikti to graudu izmēri un graudu izmēru sadalījumi. Ar RLC impedances analizatoru noteiktas keramikas dielektriskās īpašības, ķīmisko elementu sadalījuma noteikšanai paraugos izmantota EDS metode.

$\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$ cietos šķīdumos iegūstot ar tradicionālo saķepšanas metodi, keramikas

mikrostruktūrai raksturīgs bimodāls graudu izmēru sadalījums un anomāli lielu graudu klātbūtne, ko var efektīvi novērst ar divpakāpju saķepšanas metodes palīdzību. $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$ mazos daudzumos (0.5 – 1 at.%) stehiometriski pievienojot dažādu lantanīdu piedevas (Ce, Yb), var sekmēt graudu augšanu, taču ar virsstehiometriju graudu augšana tiek ierobežota. Ar Yb stehiometriski leģētos NBT paraugos ir augstākas T_d vērtības, nekā nestehiometriskos paraugos, ko var izskaidrot ar ievērojami lielākiem graudu izmēriem stehiometrisku sastāvu gadījumā, kas nodrošina lielāku un stabilāku domēnu veidošanos.

LITERATŪRA

[1] Shih, D. P. C., Aguadero, A., Skinner, S. J., "Improvement of ionic conductivity in A-site lithium doped sodium bismuth titanate," *Solid State Ionics*, vol. 317, 2017, pp. 32-38, 2018.

Grain growth in $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$ based solid solutions. In this work effects of sintering technique and parameters, nonstoichiometry and dopant addition on microstructure and physical properties in $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$ are studied. It is found that conventional sintering of $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$ leads to abnormal grain growth, causing bimodal and broad grain size distribution, which can be effectively eliminated by two-step sintering. Stoichiometric doping of $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$ with Yb leads to increase of depolarization temperature as opposed to nonstoichiometric, which can be attributed to larger grain size in stoichiometric compositions and formation of larger, more stable domains.

Polibutilēna sukcināta un celulozes kompozītmateriāli

Nika Ijudina (3.kursa bakalaura studente)

Dr. sc. ing. Sergejs Gaidukovs, Mg. sci. ing. Oskars Platnieks (zinātniskie vadītāji)

Polimērmateriālu institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,

Rīgas Tehniskā universitāte

e-pasts: blyesky1996@gmail.com

Ar katru gadu pasaulē samazinās neatjaunojamo resursu daudzums, tāpēc aktuāli aizvietot naftas pārstrādes produktus, kuru ražošanas laikā veidojas kaitīgs piesārņojums gan dabai, gan cilvēkam. Mūsdienu pasaulē ir aktuāla domāšana par ekoloģiski tīriem materiāliem, kurus var viegli pārstrādāt, nekaitējot apkārtējai videi[1].

Darba mērķis: Iegūt biokompozītus no atjaunojamajām izejvielām – polibutilēna sukcināta un rūpnieciski pārstrādātas tetrapakas (reciklēta celuloze). Izpētīt iegūto kompozītu termiskās un īpašības un kristalizāciju.

Darbā materiāli:

-Polibutilēna sukcināta (PBS) granulas, ražotāja produkts,

-Reciklētā celuloze no tetrapakas, ražotāja produkts.

Paraugu izgatavošana:

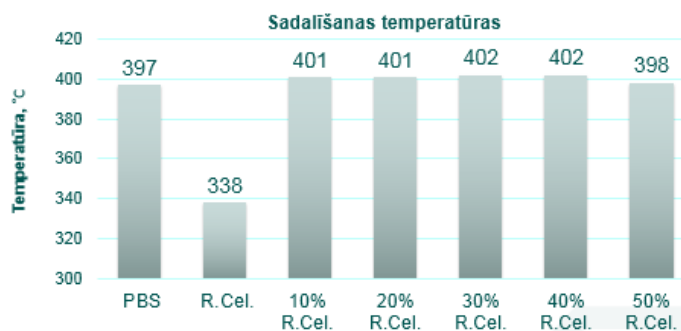
Ar dvīņu skrūvju maisītāju *Brabender* izejvielas maisītas 6 minūtes 130°C temperatūrā ar ātruma 30 agr/min. Tika izveidotas piecas kompozīcijas ar reciklētas celulozes masas daļām: 10%, 20%, 30%, 40%, 50% un viens tīrs polibutilēna sukcināta paraugs. Kopā seši paraugi.

Izveidotās kompozīcijas tika pētītas ar diferenciāli skēnējošo kalometriju (DSC) un termogravimētisko analīzi (TGA).

DSC kompozīti tika testēti no 30° līdz 150°C slāpekļa atmosfērā. TGA visi mērījumi veikti temperatūras intervālā no 25° līdz 600°C gaisa atmosfērā.

No DSC rezultātiem secināts, ka pildviela traucē kristalizācijas procesiem, jo gan pie sildīšanas gan pie dzesēšanas bija novērots, ka kristalizācijas pakāpe samazinās palielinoties reciklētas celulozes saturam kompozītā.

TGA rezultāti apkopoti 1. attēlā.



1. att. Kompozītu un izejvielu sadalīšanas temperatūras

Secināts, ka destrukcijas temperatūra palielinās kompozītiem par aptuveni 4° grādiem, tas iespējams, jo maisīšanas procesā var nebūt pilnīgi homogenizēts maisījums, kā arī maisīšanas laikā veidojas gaisa ieslēgumi un atšķirīga silumta vadītspēja kompozītiem un PBS.

Ievērojami atšķiras reciklētas celulozes destrukcijas temperatūra, aptuveni 60°, no PBS un kompozītu destrukcijas temperatūras. Celulozes destrukcija notiek gaisa vidē, bet kompozītmateriālos reciklētas celulozes šķiedras ir ieslēgtas PBS matricā, tādējādi pasargājot celulozi no gaisa iedarbības.

LITERATŪRA

- [1] S.V.Joshi, L.T.Drzal, A.K.Monhanti. Are natural fiber composites environmentally superior to glass fiber reinforced composites?. *Composites*, **2004**, 35, 371-376.

In the present investigation, we propose the preparation of bio-based polymer composites using PBS as a matrix and recycled cellulose. Tetrapak® manufacturing industry was used as sources for recycled cellulose. Composites are processed by melt blending of PBS with 10, 20, 30, 40 and 50 % of r.cel.. Thermal degradation and crystallization were investigated.

Grafītiskais oglekļa nitrīds ($g\text{-C}_3\text{N}_4$), tā izgatavošana, modifikācija un pielietojums

Jorens Jasevičs (3.kursa bakalaura students)

Dr. sc. ing. Sergejs Gaidukovs (zinātniskais vadītājs)

*Polimērmateriālu institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte*

Mūsdienu cilvēku pieprasījums pēc jauniem, lētiem un, galvenais, zaļiem enerģijas avotiem ir daudzkārt audzis salīdzinoši ar pagājušajām desmitgadēm. Tas ir spiedis attīstīties zinātnes nozarēm un meklēt alternatīvas jaunu materiālu izstrādei, radīšanai un uzlabošanai. Viens no šādiem modernajiem materiāliem ir grafītiskais oglekļa nitrīds jeb vienkāršāk $g\text{-C}_3\text{N}_4$. Pēdējo gadu griezumā daudzi pētījumi ir koncentrēti nemetālu fotokatalītiska polimēra izpētei. Šī materiāla aizliegtās zonas platums ir 2,7 eV, kas padara to par piemērotu kandidātu redzamās gaismas izmantošanai ūdeņraža ražošanai un organiskā piesārņojuma fotodegradācijai [1].

$g\text{-C}_3\text{N}_4$ ir multifunkcionāls materiāls. Tam ir 2D laminārā polimēra struktūra nodrošina augstu termisko un ķīmisko stabilitāti, kas iegūta, paplašinot π -konjugētās struktūras, kas saistītas ar oglekļa un slāpekļa sp^2 hibridizāciju. Lai gan $g\text{-C}_3\text{N}_4$ ir ļoti plašs pielietojuma spektrs un potenciāls enerģijas pārveidē, tam ir vērā ņemami ierobežojumi saules spektra absorbcijai zem 460 nm, salīdzinoši mazs virsmas laukums, kas spējīgs piedalīties fotokatalīzes procesos, un salīdzinoši mazs aktīvais virsmas laukums, kas paredzēts fotoinducētu elektronu un caurumu pāru sadalīšanai. Šo ierobežojumu pārvarēšanai tiek veikti izpētes darbi ar $g\text{-C}_3\text{N}_4$ aizliegtās zonas modifikēšanu, tā nanostruktūras dizainu un ģeometriju, heterostruktūru izveidi un krāsu jutīgu pārklājumu uznešanu [1].

Darba mērķis ir 1) Izveidot grafītiskā oglekļa nitrīdu kalcinējot melamīnu. 2) Saprast pusvadītāju un foto katalizatoru īpašību kompleksu, modifikācijas ietekmi uz materiāla gala īpašību kompleksu atkarībā no materiāla apstrādes īpašībām vai leģējuma veida. 3) Izveidot modificētus grafītiskā oglekļa nitrīda materiālus un salīdzināt to savstarpējās īpašības ar praksē izmantoto foto

katalizatoru rādītājiem. 4) Noskaidrot reālo materiāla potenciālu komerciāliem mērķiem.

Izmantotie materiāli: 1) Melamīns, 2) komerciālais grafēns, 3) komerciālās oglekļa nano caurulītes, 4) grafēna oksīds, 5) komerciālie kvēpi (Xe-2), 6) sālsskābe, 7) sērskābe, 8) slāpekļskābe, 9) dzelzs (III) hlorīds, 10) vara (I) hlorīds. Grafītiskā oglekļa ieguvei izmantota elektriskā krāsns melamīna pirolīzei. Kā arī izmantota ultra sonifikācija kā materiāla modificēšanas un leģēšanas veicinātājs. Materiāla novērtēšanai izmantota: 1) UV/VIS difūzās atstarošanas spektroskopija, 2) FTIR, 3) SEM, 4) metilēnzilā un rodāmīna B foto degradācijas tests UV gaismas iedarbībā.

Iegūtā materiāla un tā modificēto paraugu dati lielā mērā sakrīt ar citu analoģu pētījumu datiem. Analizējošās spektroskopiju dati atbilst materiāla atbilstošajām funkcionālajām grupām un raksturojošajiem lielumiem. Tika pierādīta rodāmīna B foto destrukcija, savukārt metilēnzilā piesārņojumu materiāls absorbē, līdz ar to nebija iespējams pierādīt $g\text{-C}_3\text{N}_4$ un ta modifikāciju foto katalītisko ietekmi uz metilēnzilā organiskā piesārņojuma degradāciju. Nepieciešams veikt papildus pētījumus, lai spētu noteikt un secināt materiāla sintēzes un modifikācijas ietekmi uz tā īpašībām.

LITERATŪRA

- [1] J.Chen, Z.Hong, Y.Chen, B.Lin, B.Gao. One-step synthesis of sulfur-doped and nitrogen-deficient $g\text{-C}_3\text{N}_4$ photocatalyst for enhanced hydrogen evolution under visible light. *Mater. Lett.*, **2015**, 145, 129–132.

Preparation, modification and investigation of graphitic carbon nitride ($g\text{-C}_3\text{N}_4$) photocatalyst. Preparation of organic semi-conductor is a challenging task due to its complex synthesis requirements. A bulk graphitic carbon nitride and its modifications were created by $g\text{-C}_3\text{N}_4$ calcination, protonation and doping with metal and carbon allotropes. Material investigation and further studies are carried out.

Etilēna-oktēna kopolimēra kompozītu ar oglekļa nanocaurulītēm mehāniskās, termiskās un elektriskās īpašības

Dinārs Krauss (3. kursa Materiālzinātņu bakalaura programmas students)

Dr. sc. ing. Remo Merijs Meri (zinātniskais vadītājs)

Struktūrvienība, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,

Rīgas Tehniskā universitātē

e-pasts: Dinarsx@inbox.lv

Termoplastiskie elastomēri pieder pie īpašas polimēru klases, kurai piemīt termoplastisku polimēru pārstrādājamība un elastomēru izcilās superelastīgās īpašības. Šo materiālu uzlaboto veiktspēju nodrošina labā kontrole pār polimēra struktūru sintēzes procesā, kas ļauj nodrošināt optimālu molekulasmasas sadalījumu un vienmērīgu ko-monomēru sadalījumu [1].

Dažādas nanoizmēra pildvielas tiek izmantotas, lai uzlabotu termoplastisko elastomēru termiskās, elektriskās, mehāniskās u.c. īpašības [2].

Pēdējā gadu desmitā oglekļa nanocaurulītes tiek uzskatītas par daudzsoļām nanoizmēra pildvielām, pateicoties to unikālajām īpašībām, augstajam formas faktoram un lielajai īpatnējajai virsmai [3].

Darba mērķis ir iegūt un raksturot dažādas kristāliskuma pakāpes etilēna-oktēna (EOC) matricas polimēru kompozītus ar atšķirīga formas faktora oglekļa nanocaurulītēm (ONC).

Pētījumā izmantotie polimērmateriāli: 1) etilēna-oktēna bloku kopolimēri ar atšķirīgu 1-oktēna komonomēra saturu (EOC17 un EOC30, kur skaitlis norāda uz 1-oktēna komonomēra saturu); 2) daudzsienu oglekļa nanocaurulītes (1. Times Nano ONC, 2. Baytubes ONC).

Kompozīcijas iegūtas, izmantojot valčus, pie temperatūras 130/145 °C un frikcijas 1,25 (valču rotācijas ātrumi 20/25 apgr./min.). Paraugi siltumvadītspējas, dielektrisko un mehānisko īpašību pārbaudēm iegūti, izmantojot presi 145 °C temperatūrā.

Siltumvadītspējas noteikšanai istabas temperatūrā tika izmantota zibspuldzes iekārta Netzsch FA 447 Nanoflash. Termiskā analīze tika veikta ar termogravimetriskās analīzes metodi (TGA) (paraugu iesvars: ~ 10 - 15 mg; temperatūras diapazons - no istabas temperatūras līdz 800 °C; sildīšanas ātrums - 10 °C/min.). Dielektriskās īpašības noteiktas, izmantojot dielektrisko

spektrometru (Novocontrol Concept 50). Elastiskās īpašības plašā temperatūru diapazonā pie 1 Hz svārstību frekvences noteiktas izmantojot dinamiski mehāniskās termiskās analīzes (DMTA) iekārtu (Mettler Toledo DMA/SDTA861e).

Izpētot ar oglekļa nanocaurulītēm pildītu (1, 5, 15 m. %) EOC nanokompozītu īpašības, tika konstatēts, ka oglekļa nanopildvielas ievadīšana polimērmatricā uzlabo materiāla elastiskās, termiskās, siltumvadāmības, kā arī elektriskās īpašības. Gan nanocaurulīšu formas faktors, gan EOC veids atšķirīgi ietekmē kompozītmateriālu īpašības.

ONC piemīt augsts potenciāls polimēru matricu īpašību uzlabošanai. Galvenie šķēršļi šo īpašību sasniegšanai ir ONC tīrība, defekti, dispersija, orientācija, kā arī adhēzija starp ONC un polimērmatricu starpfāžu robežvirsmā.

LITERATŪRA

1. Svoboda, P.; Vilcakova, J.; Poongavalappil, S.; Slobodian, P.; Svobodova, D.; Theravalappil, R. *Mater. Des.* **2014**, *60*, 458-467.
2. Armstrong, G. *Eur. J. Phys.* **2015**, *36*(6), 1-34.
3. Gorshkov, N.; Ilinykh, I.; Muratov, D.; Kolesnikov, E.; Yakovlev, E.; Mazov, I.; Issi, J.-P.; Kusnezov, D.; Burmistrov, I. *Compos. Sci. Technol.* **2017**, *147*, 71-77.

Mechanical, thermal and electrical properties of ethylene-octene copolymer composites with carbon nanotubes.

Exceptional performance of thermoplastic elastomers is ascribed to the good control over polymer structure, molecular weight distribution, uniform co-monomer composition and rheology [1]. Various nanofillers have been introduced into thermoplastic elastomers to enhance their thermal, electrical and mechanical properties [2]. Investigating the properties of the nanocomposites, filled with carbon nanotubes (1, 5, 15 wt. %), it has been found that addition of the carbon nanofillers into the polymer matrix improves elastic, electrical, thermal transport and thermogravimetric properties of the material. Both the shape of the nanoparticles and the type of EOC differently influence the properties of the composites.

Magnētisku pildvielu saturoša termoplastiskā elastomēra kompozīta iegūšana un īpašības

Intars Arvils Lasmanis (3. kursa Materiālzinātnes bakalaura programmas students)

Dr. sc. ing. Remo Merijs Meri (zinātniskais vadītājs)

Polimērmateriālu institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,

Rīgas Tehniskā universitāte

e-pasts: lasmanis1@inbox.lv

Ar oglekļa nanocaurulītēm (CNT) modificētiem elastomēru kompozītiem tiek pievērsta pastiprināta uzmanība, sakarā ar to spēju nodrošināt patstāvīgu vai mainīgu elektrovadošu kanālu tīklu, kad tie tiek stiepti, liekti, locīti vai savīti, kas nodrošina lielisku pielietojuma potenciālu dažādās jomās, kā sensoros, elastīgā elektronikā, vadītspējīgos adhezīvos un citur [1, 2].

Pieaugošu interesi rada arī CNT/Fe₃O₄ un elastomēru hibrīdkompozītu izveide, kuriem piemistu unikālas magnētiskās un elektriskās īpašības, un kas varētu tikt pielietoti elektroniskās ierīcēs, aizargpārklājumos, biosensoros un citur [3].

Pētījuma mērķis ir izveidot etilēna-oktēna kopolimēra un MWCNT/Fe₃O₄ hibrīdkompozītus un noskaidrot to elektriskās, magnētiskās un siltumvadīšanas īpašības.

Pētījumā kā polimēra matrica tika izmantots etilēna-oktēna kopolimērs ar 30% 1-oktēna komonomēra saturu (EOC30), kā pildviela - daudzsienu oglekļa nanocaurulītes (MWCNT), dzelzs oksīds (Fe₃O₄) un hibrīdpildviela (MWCNT/Fe₃O₄). Polimēru matrica ar pildvielu tika samaisīta, izmantojot valcēšanas metodi (135-145°C temperatūra, 5 min), bet paraugu izgatavošana tika veikta ar presi (145°C temperatūra).

Kompozītu elektriskās īpašības tika pētītas, izmantojot dielektrisko spektrometru (Novocontrol Concept 50), magnētisko īpašību noteikšanai tika izmantots vibrējošais paraugu magnetometrs (Lake Shore Cryotronics 7404), siltumvadītspējas noteikšanai - zibspuldzes iekārta Netzsch FA 447 Nanoflash.

Konstatēts, ka, ievadot EOC30 elastomēra matricā pat nelielu daudzumu pildvielas, ievērojami uzlabojas siltumvadīšanas īpašības. Ir novērojams arī elektrovadītspējas pieaugums, izmantojot jebkura veida pildvielu. Pildvielas, it īpaši Fe₃O₄, ievadīšana ļauj piešķirt kompozītiem magnētiskās īpašības.

LITERATŪRA

- [1] T.Li, L.F.Ma, R.Y.Bao, G.Q.Qi, W.Yang, B.H.Xie, M.B.Yang. A new approach to construct segregated structures in thermoplastic polyolefin elastomers towards improved conductive and mechanical properties. *J. Mater. Chem. A.*, **2015**, 3, 5482–5490.
- [2] R.Theravalappil, P.Svoboda, J.Vilcakova, S.Poongavalappil, P.Slobodian, D.Svobodova. A comparative study on the electrical, thermal and mechanical properties of ethylene–octene copolymer based composites with carbon fillers. *Mater. Des.*, **2014**, 60, 458–467.
- [3] X.Yan, J.Gu, G.Zheng, J.Gua, A.M.Galaska, J.Yu, M.A.Khan, L.Sun, D.P.Young, Q.Zhang, S.Weil, Z.Guo. Lowly loaded carbon nanotubes induced high electrical conductivity and giant magnetoresistance in ethylene/1-octene copolymers. *Polym.*, **2016**, 103, 315–327.

Manufacturing and properties of magnetic filler containing thermoplastic elastomer composite. Elastomeric conductive composites, containing carbon nanotubes (CNT), recently have received increasing attention due to the development of persistent conductive pathways when stretched, bended, twisted or folded. Magnetic CNT hybrid materials attract great attention owing to their promising application in electronic devices, coatings, biosensors and more [1-3]. It has been found that the addition of small amount of magnetic and electrically conductive nanofiller to the EOC30 elastomer matrix significantly improves thermal transport, electrical, magnetic and mechanical properties of the composite.

Ārēja elektriskā lauka inducētas oglekļa kvēpu/silikonēļas suspensijas elektrisko īpašību un struktūras izmaiņas

Sabīne Šcegoļeva (3. kursa materiālzinātnes bakalaura programmas studente)

Mg. sc. ing. Kaspars Ozols, Dr. habil. phys. Māris Knite (zinātniskie vadītāji)

Tehniskās fizikas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,

Rīgas Tehniskā universitātē

e-pasts: sscegoleva@gmail.com

Pēdējos gados tiek aktīvi strādāts pie polimēru materiālu elektrisko īpašību uzlabošanas, pievienojot tiem nelielu daudzumu nanodaļiņu. Oglekļa kvēpiem (OK) piemīt pastiprināta tendence veidot elektrovadošo tīklu agregātu struktūras dēļ. Šis fenomens ir ticis izmantots sensoru materiālu izveidei, toties OK primāro daļiņu sfēriskās formas dēļ nepieciešama samērā liela OK koncentrācija, lai sasniegtu elektrovadāmību, kas noved pie mehānisko īpašību pasliktināšanās, tādēļ ir aktuāla teorētiska un eksperimentāla elektriskā perkolācijas sliekšņa izpēte [1]. Zināms, ka elektrisko perkolācijas sliekšni iespējams samazināt, orientējot pildvielas ar ārēju elektrisko lauku [2].

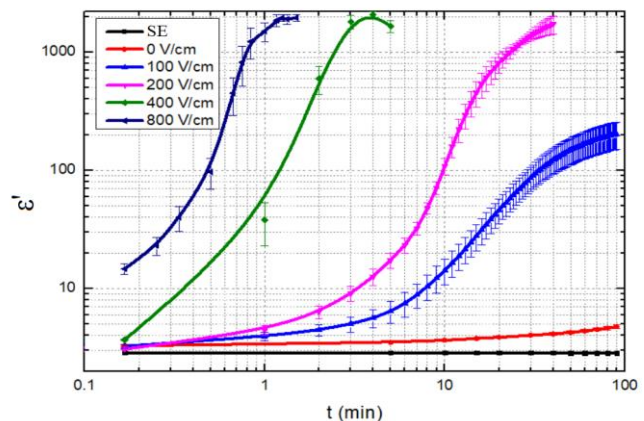
Lai pērtu ārēja elektriskā lauka ietekmi uz elektrovadošu daļiņu/polimēra kompozītu, kas atrodas viskozā stadijā, izmantota Wacker AK1000 silikonēļas (SE) un Degussa Printex XE-2 īpaši elektrovadošo OK suspensija. Tika pieņemts, ka izmantotās SE viskozitāte (1000 mPa·s) ir samērojama ar polimēra kausējuma viskozitāti. Augstās viskozitātes dēļ, OK disperģēšanai izmantota tikai granulu malšana un suspensijas maisīšana ar piestu.

Dielektriskā caurlaidība noteikta, izmērot parauga kapacitāti ar *Agilent E4980A* LCR-metru un no tās aprēķinot dielektrisko caurlaidību. Paralēli veikti arī līdzstrāvas vadāmības mērījumi. Mēršūnai pieslēgts dažādas intensitātes elektrostatiskais lauks, izmantojot LCR-metrā iebūvēto līdzstrāvas sprieguma avota funkciju. Izmantots ar digitālo kameru aprīkots *Nikon Eclipse LV150* optiskais mikroskops, lai novērotu struktūras izmaiņas orientēšanas laikā.

Konstatēts dielektriskās caurlaidības pieaugums OK/SE suspensijās, palielinot gan elektriskā lauka intensitāti, gan pieslēgšanas ilgumu (skat. 1. att.). Uzņemtajos optiskās mikroskopijas attēlos redzams, ka elektriskā lauka ietekmē OK/SE suspensijā sākotnēji haotiski izvietotie OK aglomerāti un

agregāti formējas garās, sazarotās virknēs, galvenokārt, paralēli elektriskā lauka līnijām.

Secināts, ka, ar elektrisko lauku orientējot OK/SE suspensiju, iespējams paaugstināt tās dielektrisko caurlaidību, kas norāda uz nano- un mikrokondensatoru sazarota tīklveida slēguma veidošanos suspensijas tipumā. Netiek izslēgta iespēja izmantot orientēšanu ar elektrisko lauku arī cita veida elektrovadošu daļiņu/polimēru kompozītu dielektriskās caurlaidības palielināšanai.



1. att. Tīras SE un 0,2 masas % OK/SE dielektriskā caurlaidība (1 kHz) atkarībā no laika pie dažādām elektriskā lauka intensitātēm.

LITERATŪRA

- [1] M.T.T.Huynh, H.B.Cho, T.Suzuki, H.Suematsu, S.T.Nguyen, K.Niihara, T.Nakayama. *Compos. Sci. Technol.*, **2018**, *154*, 165-174.
- [2] M.Knite, A.Linarts, K.Ozols, V.Tupureina, I.Stalte, L.Lapčinskis. *Colloids Surf., A*, **2017**, *526*, 8-13.

Changes of electrical properties and structure of carbon black/silicone oil suspension induced by external electric field. DC electric field induced electroconductive network formation of extra conductive carbon black (CB) in insulating matrix (silicone oil) is studied in this work. Suspensions with various CB contents were prepared and their relative dielectric permittivities were determined. Filler content, applied electric field strength and alignment time were defined as parameters, that determine relative dielectric permittivity of CB/silicone oil composites. Optical microscope was used to observe the structural changes, whilst applying electric field.

Celulozes šķiedru saturošu polipropilēna kompozītu iegūšana un raksturošana spiedlietu izstrādājumu iegūšanai

Madara Varkale (3.kursa bakalaura programmas studente)

Dr. sc. ing. Remo Merijs Meri (zinātniskais vadītājs)

Polimērmateriālu institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,

Rīgas Tehniskā universitāte

e-pasts: madara.varkale@gmail.com

Mūsdienās interese pievērsta dabas šķiedru biomasas izmantošanai polimēru kompozītu izstrādē, kas ļauj iegūt materiālus ar uzlabotām īpašībām. Dabas šķiedru izmantošana polimērkompozītos dod iespēju samazināt arī pašizmaksu un fosīlo resursu patēriņu. Šie kompozīti ir ar zemu blīvumu, pretkorozijas izturību un augstu stiprību. Tomēr dabas šķiedras ir polāras, bet vairums termoplastisko polimēru, tostarp, polipropilēns, nepolāri. Izmantojot maleīnskābes anhidrīdu saturošu kompatibilizatoru var paaugstināt savietojamību starp polāro šķiedru un nepolāro matricu, tādējādi uzlabojot kompozīta mehāniskās īpašības un samazinot hidrofilitāti.

Pētījumā izmantotie materiāli: 1) AS "Rīgas Dzirnāvieks" auzu sēnālas (AuSe); 2) polipropilēna homopolimērs HP400R (Bassel-Orlen, Poland) ar blīvumu - 1,04 g/cm³ un kušanas temperatūru – 162 °C; 3) polipropilēnam piepotēts maleīnskābes anhidrīds Licocene PP MA 6452 (Clariant). Polipropilēna kompozīcijas ar 40 masas % AuSe (KOM) iegūtas, izmantojot divgliemežu ekstrūderi pie temperatūru profila 175-180-185-190°C un ātruma 40 apgr./min. Paraugi termisko, kalorimetrisko un mehānisko īpašību pārbaudēm iegūti, izmantojot spiedliešanas tehnoloģiju pie temperatūru profila 165-190-200 °C. Paraugu termiskā analīze veikta, izmantojot diferenciāli skenējošo kalorimetru (DSK) (temperatūras diapazons no 25 °C līdz 200 °C; sildīšanas ātrums – 10 °C/min; vide – inerta; parauga masa ~ 10 mg) un termogravimetru (TGA) (paraugu iesvars ~ 10-15 mg; temperatūras diapazons - no istabas temperatūras līdz 800 °C; sildīšanas ātrums - 10 °C/min; vide – oksidatīva). AuSe kompozītu mehāniskās īpašības liecē noteiktas izmantojot materiālu universālo pārbaudzi iekārtu (attālums starp atbalstiem – 64 mm; deformācijas ātrums – 1 mm/min.). Konstatēts, ka pirms AuSe ievadīšanas kompozītā, tās nepieciešams žāvēt vismaz 19 h, lai

atbrīvotos no absorbētā mitruma (aptuveni 5,94 m. %). AuSe (smalcinātas pie 700; 1000; 1500; 2000; 2500; 3000 apgr./min) ievadīšana polipropilēna matricas kompozītā uzlabo tā mehāniskās īpašības (palielinās elastības modulis un maksimālais sagraušanas spriegums liecē), it īpaši kompatibilizatora klātbūtnē, kas uzlabo polāras dabas šķiedras un nepolāra polipropilēna savstarpējo savietojamību. AuSe smalcināšanas režīms būtiski neietekmē KOM termiskās, mehāniskās un kalorimetriskās īpašības. Salīdzinoši neliela ir arī AuSe ietekme uz polipropilēna matricas kušanas temperatūru un kristāliskuma pakāpi. KOM kristāliskuma pakāpe nedaudz palielinās izmantojot savietojamības aģentu.

LITERATŪRA

- [1] Bledzki, A. K.; Mamun, A. A.; Bonnia, N. N.; Ahmad, S. *Industrial Crops and Products* 2012, 37 (1), 427–434. Sova, M. *Mini Rev. Med. Chem.* **2012**, 12(8), 749-767.
- [2] Bledzki, A. K.; Mamun, A. A.; Volk, J. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing* 2010, 41 (4), 480–488.
- [3] Sobczak, L.; Lang, R. W.; Haider, A. *Composites Science and Technology* 2012, 72 (5), 550–557.

Manufacturing and characterization of cellulose fiber containing polypropylene composites for injection molding. Environmentally sound compositions, based on polypropylene homopolymer matrix and oat husks (AuSe) have been investigated. It has been found that prior to introduction of AuSe in a composite, it is necessary to dry them for at least 19 h in order to get rid of absorbed moisture (about 5,94 m. %). The introduction of AuSe (chopped at 700; 1000; 1500; 2000; 2500; 3000 rpm) into the polypropylene matrix composite improves its mechanical properties (increases the modulus of elasticity and flexural strength at break), particularly, in the presence of a maleic anhydride groups containing compatibilizer, that improves interaction between the polar natural fibers and nonpolar polypropylene matrix. The AuSe shredding mode does not significantly affect the thermal, mechanical and calorimetric properties of the composite. The effect of AuSe on the melting temperature and crystallinity degree of the polypropylene matrix is also relatively small. The degree of crystallinity of composite increases slightly with the use of the coupling agent.

**ORGANISKO SAVIENOJUMU ĶĪMIJAS UN
TEHNOLOĢIJAS SEKCIJA**

2-Stirilaizvietotu 6-*tert*-butil-4*H*-pirān-4-ilidēnfragmentu saturošu molekulāro stiklu sintēze gaismu pastipriņošo sistēmu pētījumiem

Deins Alksnis (3. kursa Ķīmijas tehnoloģijas bakalaura programmas students)

Dr. chem. Elmārs Zariņš, *Dr. chem.* Valdis Kokars (zinātniskie vadītāji)

Lietišķās ķīmijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte Rīgas Tehniskā universitāte
e-pasts: deins.alksnis@edu.rtu.lv

Zināms, ka dažiem mazmolekulārajiem organiskiem stikliem, kas satur 4*H*-pirān-4-ilidēn fragmentu [1], piemīt pastiprinātās spontānās emisijas īpašības. Ar šādām īpašībām apveltīti savienojumi tiek intensīvi pētīti pielietojumam organisko lāzeru sistēmās.

Sintezēti darbam [1] līdzīgas struktūras 2-stirilaizvietoti 6-*tert*-butil-4*H*-pirān-4-ilidēnfragmentu saturoši organiskie stikli **1a-d** un **2a-d**, kas satur savā molekulā dažādus elektronakceptorus (A) un donorus (D) aizvietotājus (skat. 1.att.).

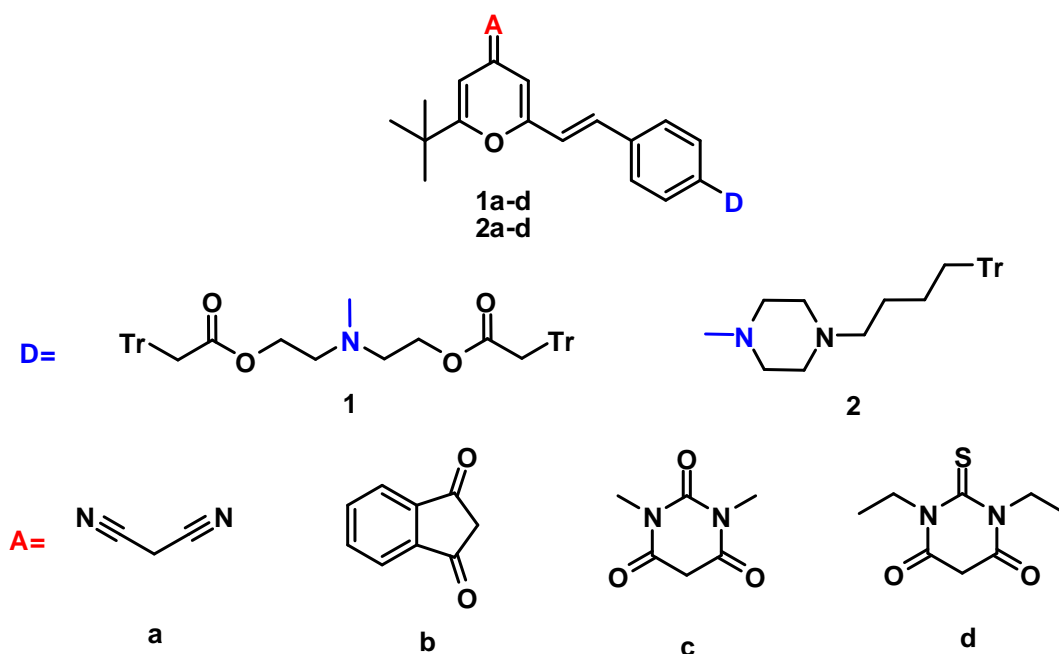
Sintezēto savienojumu struktūru apstiprina ¹H-KMR spektri. To termiskā stabilitāte ir virs 250°C, tie raksturojas ar platām gaismas absorbcijas (350-500 nm) un gaismas emisijas (500-700 nm) joslām. No viegli gaistošiem nepolāriem šķīdinātājiem tie

veido plānas amorfas kārtiņas. Sintezēto savienojumu pastiprinātās emisijas pētījumi tiek veikti sadarbībā ar Cietvielu fizikas institūtu (CFI).

LITERATŪRA

[1] Zarins, E., Vembris, A., Misina, E., Narels, M., Grzibovskis, R., Kokars, V. *Opt. Mater.* **2015**, *49*, 129–137.

Synthesis of 2-styryl-substituted-6-*tert*-butyl-4*H*-pyran-4-ylidene fragment containing molecular glasses for light-amplification systems. The thermal stability of obtained glassy dyes **1 a-d**, **2a-d**, is above 250°C with light absorption in range from 350 nm to 500 nm and light emission in range from 500 nm to 700 nm. Amplified spontaneous emission property studies are currently carried out in close collaboration with the Institute of Solid State Physics.



1. att. Sintezētie 2-stirilaizvietoti-6-*tert*-butil-4*H*-pirān-4-ilidēn fragmentu saturošie savienojumi

Rapšu eļļas interesterifikācija ar etilformiātu *t*-BuOK/*t*-BuOH klātbūtnē

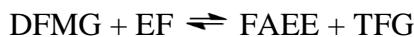
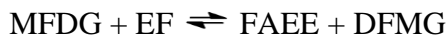
Alīna Ārenta (1.kursa Lietišķās ķīmijas maģistra programmas studente)

Dr. habil. chem. Valdis Kampars, *Dr. chem.* Zane Šustere (zinātniskie vadītāji)

Lietišķās ķīmijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte, Rīgas Tehniskā universitāte

e-pasts: alina.arenta@rtu.lv

Alternatīva degviela fosilai degvielai ir biodīzeļdegviela. To rūpnieciski iegūst triglicerīdu transesterifikācijā ar metanolu, bet to iespējams iegūt arī interesterifikācijas procesā ar etilformiātu bez blakusprodukta glicerīna. Rapšu eļļas interesterifikācijā katalizatora klātbūtnē no triglicerīdiem TG iespējams iegūt taukskābju alkilesterus un triformīnu. Interesterifikācija ar etilformiātu EF notiek trīs secīgās reakcijās (skat.1.shēmu).



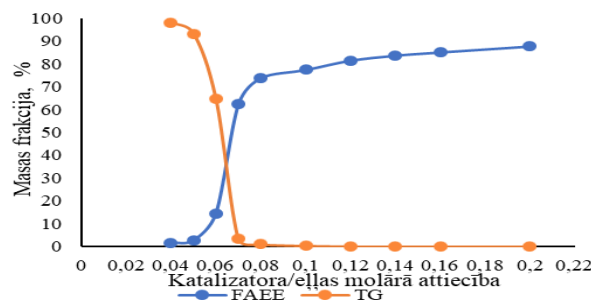
1.shēma. TG interesterifikācija ar etilformiātu.

Darba mērķis ir izpētīt rapšu eļļas interesterifikācijas procesu ar etilformiātu *t*-BuOK/*t*-BuOH katalizatora klātbūtnē, iegūstot augstu taukskābju etilesteru (FAEE) daudzumu.

Trīskaklu apaļkolbā ar termometru, atceces dzesinātāju un magnētisko maisītāju sajauc rapšu eļļu un etilformiātu un uzsilda līdz 50 °C temperatūrai. Pievieno *t*-BuOK/*t*-BuOH katalizatora šķīdumu un turpina maisīšanu 60 minūtes, uzturot 50 °C temperatūru. Reakcija tiek apstādināta, pievienojot stehiometriskā attiecībā fosforskābi, lai pH būtu 5. Paraugi tiek filtrēti, lai atdalītu neorganiskās vielas, tad destilēti, izmantojot rotācijas ietvaicētāju, lai atdalītu etilacetāta pārākumu, tad tiek veikta formīnu slāņa (faktiski G, TFG, DFG, MFG slāņa) atdalīšana no FAEE slāņa.

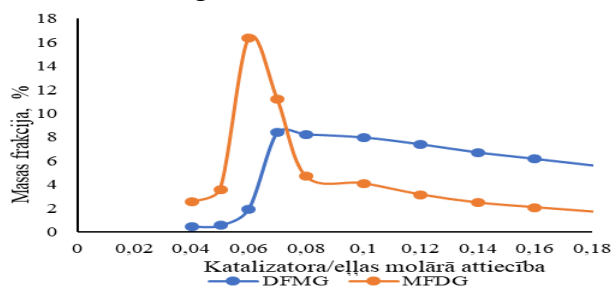
Atdalīto slāņu sastāvu analizē ar gāzu hormatoģrāfu Agilent Technologies 7890A, izmantojot modificētu 14105 standartmetodi kā pētījumā [1].

Palielinot katalizatora/eļļas molāro attiecību (COMR), palielinās FAEE saturs. Optimālais katalizatora daudzums, pie kura ir izreaģējusi visa eļļa, ir 0,12. Visaugstākais FAEE saturs (87,7%) tika iegūts pie katalizatora/eļļas molārās attiecības (COMR) 0,2.



1.att. Esteru saturs un TG izmaiņas pie dažādiem COMR

Pieaugot pievienotā katalizatora daudzumam, interesterifikācijas starpproduktu diformilmonoglicerīda (DFMG) un monoformildiglicerīga (MFDG) daudzums samazinās attiecīgi līdz 5,08 un 1,34%.



2.att. DFMG, MFDG izmaiņas pie dažādiem COMR

Pieaugot katalizatora daudzumam, formīnu slānī samazinās DFG un TFG daudzums, jo katalizators sagrauj tos un attiecīgi pieaug glicerīna un MFG daudzums.

LITERATŪRA

[1] Z. Sustere, R. Kampare, E. Liepins, V. Kampars, The composition of commercial acetylated glycerol samples determined by ¹³C and ¹H NMR. The comparison with gas chromatography, *J. Anal. Chem.* 69 (8) (2014) 763–768.

Chemical interesterification of rapeseed oil with ethyl formate using *t*-BuOK/*t*-BuOH as catalyst. Two layers are obtained during chemical interesterification of rapeseed oil with ethyl formate – FAEE and formine layers. The highest FAEE content (87.7%) was obtained with COMR of 0.2.

Kālija, nātrija un litija *tert*-butilātu katalītiskā aktivitātē rapšu eļļas interesterifikācijas reakcijās ar metilacetātu

Sabīne Blaua (4.kursa Ķīmijas tehnoloģijas bakalaura programmas studente)

Dr. habil. chem. Valdis Kampars, Dr. chem. Zane Šustere (zinātniskie vadītāji)

Lietišķās ķīmijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte, Rīgas Tehniskā universitāte
e-pasts: sabineblaua@gmail.com

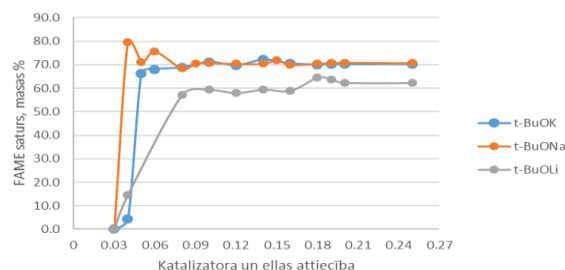
Biodīzeļdegvielas un triacetīna iegūšana no augu eļļas (triglicerīdiem) un metilacetāta ir pazīstama kā interesterifikācijas reakcija. Līdz šim interesterifikācija tika galvenokārt pētīta fermentu klātbūtnē vai superkritiskos apstākļos, bet tā nav plaši pētīta, izmantojot ķīmiskos katalizatorus [1].

Atšķirībā no transesterifikācijas reakcijas, interesterifikācijas reakcijas laikā viens esteri apmaina savu spirta atlikuma grupu ar citu esterī. Nozīmīgi, ka atšķirībā no transesterifikācijas reakcijas, glicerīna vietā veidojas triacetīns, ko var uzskatīt par vērtīgu piedevu un nav jāizdala no reakcijas maisījuma [2].

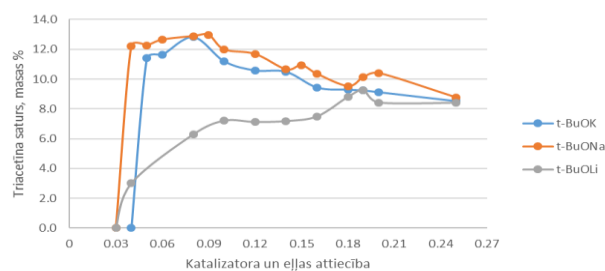
Šī darba mērķis ir noskaidrot katalizatora aktivitāti jeb optimālo katalizatora daudzumu, pie kura taukskābju metilesteru (FAME) un triacetīna saturs ir visaugstākais, kā arī salīdzināt kālija, nātrija un litija *tert*-butilātu aktivitāti interesterifikācijas reakcijās.

Reakcija tika veikta trīskaklu apaļkolbā, eļļas un metilacetāta molārā attiecība 1:18, 55 °C grādu temperatūrā vienu stundu. Pētīti trīs katalizatori: kālija, nātrija un litija *tert*-butilātu 1M šķīdumi tetrahidrofurānā (*t*-BuOK, *t*-BuONa un *t*-BuOLi). Pēc stundas reakcijas maisījums tiek neutralizēts ar fosforskābi, filtrēts un destilēts, izmantojot rotācijas ietvaicētāju. FAME, triacetīna un reakcijā radušos blakusproduktu saturs tiek noteikts ar gāzu hromatogrāfu Agilent Technologies 7890A, izmantojot modificētu 14105 standartmetodi kā iepriekšējos pētījumos [3].

1. attēlā redzams, ka *t*-BuOK uzrāda līdzīgu aktivitāti kā *t*-BuONa, bet *t*-BuOLi aktivitāte ir ievērojami zemāka. Būtiski pieminēt, ka *t*-BuOK un *t*-BuONa izmantošana ļauj sasniegt vienus un tos pašus rezultātus (FAME – 70,8 %, triacetīns – 12,8%).



1. att. Katalizatora/eļļas molārās attiecības ietekme uz FAME saturu



2.att. Katalizatora/eļļas molārās attiecības ietekme uz triacetīna saturu

Atšķirībā no FAME, triacetīnam piemīt tendence strauji sasniegt maksimālo satura daudzumu un mēreni samazināties, palielinot katalizatora daudzumu (skat. 2. attēlu).

LITERATŪRA

- [1] Casas, A.; Ramos, M. J.; Pérez, Á. *Chem. Eng. J.* **2011**, 171 (3), 1324.
- [2] Casas, A.; Ramos, M. J.; Pérez, Á. *Biomass Bioenergy* **2011**, 35 (5), 1702.
- [3] Sustere, Z.; Kampare, R.; Liepins, E.; Kampars, V. *J. Anal. Chem.* **2014**, 69 (8) 763.

Catalytic activity of potassium, sodium and lithium *tert*-butylates in the interesterification reactions of rapeseed oil with methyl acetate. This paper describes results of investigation of catalytic activity of the *tert*-butylates: BuONa, BuOLi and BuOK in interesterification reaction of rapeseed oil with methyl acetate. The BuONa and BuOK are more active than BuOLi.

Rapšu eļļas interesterifikācijas reakcijas ar metilacetātu kinētika

Reinis, Graviņš (1.kursa Lietišķās ķīmijas maģistra programmas students)

Dr. habil. chem. Valdis Kampars, Mg. chem. Kristīne Lazdoviča (zinātniskie vadītāji)

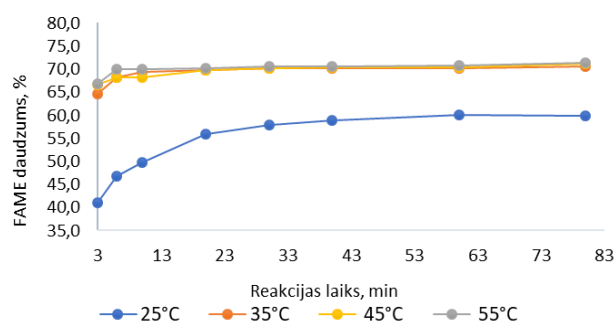
Lietišķās ķīmijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte, Rīgas Tehniskā universitāte
e-pasts: Reinis.Gravins@rtu.lv

Rūpniecībā biodīzeļdegvielu iegūst transesterifikācijas reakcijā, augu eļļai (TG) reaģējot ar spirtu katalizatora klātbūtnē. Reakcijas rezultātā veidojas taukskābju esteri (FAME) un glicerīns. Iespējamu alternatīvu transesterifikācijai piedāvā interesterifikācijas reakcija ar metilacetātu, iegūstot triacetīnu (TA) kā blakusproduktu, kuru var iekļaut biodīzeļdegvielas sastāvā [1].

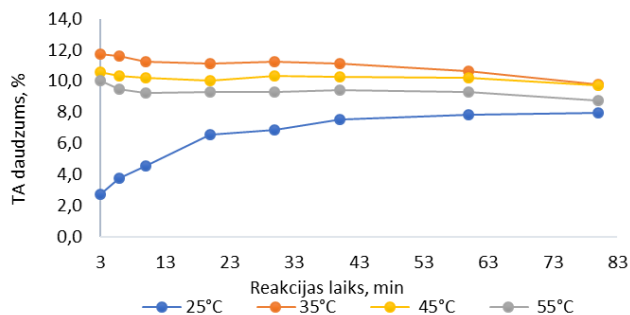
Darba mērķis ir atrast optimālo reakcijas laiku un temperatūru TA un FAME maksimālā daudzuma iegūšanai, veicot rapšu eļļas interesterifikācijas reakciju ar metilacetātu katalizatora *t*-BuOK/*t*-BuOH klātbūtnē.

Rapšu eļļa un metilacetāts tiek sajaukti trīskaklu apaļkolbā ar atteces dzesinātāju un termometru, molārā attiecībā 1:18. Maisījumu uzsilda līdz attiecīgajai temperatūrai (25°C, 35°C, 45°C un 55°C) un, uzturot nemainīgu temperatūru, pievieno katalizatoru (*t*-BuOK/*t*-BuOH), ievērojot katalizatora/eļļas molāro attiecību (COMR) 0,08. Pēc noteikta laika (3, 6, 10, 20, 30, 40, 60 un 80 min) noņem 10ml paraugu, neitralizē ar fosforskābi, nofiltrē, ar rotācijas ietvaicētāju atdestilē metilacetāta pārākumu un veic iegūtā parauga hromatogrāfisko analīzi.

FAME, triacetīna un reakcijā radušos blakusproduktu saturs tiek noteikts ar gāzu hromatogrāfu Agilent Technologies 7890A, izmantojot modificētu 14105 standartmetodi kā iepriekšējos pētījumos [2].



1. att. FAME daudzums reakcijas galaproduktos.



2. att. TA daudzums reakcijas galaproduktos.

LITERATŪRA

- (1) Casas, A. *Chem. Eng. J.* **2011**, *171* (3), 1324–1332.
- (2) Sustere, Z.; Kampare, R.; Liepins, E.; Kampars, V. *J. Anal. Chem.* **2014**, *69* (8), 763–768.

Kinetics of interesterification reaction of rapseed oil with methyl acetate. The maximum of the main products of interesterification were obtained at 35°C after 30 min – 11,3% TA and 70,1% FAME.

Dikofeinildiselenīda sintēze un pārvērtības

Anna Ivanova^{a,b} (4.kursa Ķīmijas bakalaura programmas studente)

Dr. chem. Pāvels Arsenjans^b (zinātniskais vadītājs)

^aMateriālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte, Rīgas Tehniskā universitāte

^bLatvijas Organiskās sintēzes institūts

e-pasts: anna.ivanova@osi.lv

Organiskie diselenīdi ir vērtīgas izejvielas selēnorganiskajā ķīmijā, tos plaši pielieto selēnu saturošu funkcionālu grupu ieviešanai organiskās struktūrās. Diselenīdiem ir plašs pielietojuma potenciāls, jo Se–Se saiti var izmantot daudzās sintēzēs, pārvēršot diselenīdus gan par elektrofilu, gan par nukleofilu, gan par radikāliem. Šajā darbā tiek izmantotas diselenīdu elektrofilas īpašības indolizīnija sāļu tipa savienojumu iegūšanai. Indolizīnija fragments ir vairāku alkaloidu struktūras pamatā (faskaplisīns, fikuseptīns, juliprosīns u.c.) Jaunu sintēzes metožu izstrāde ir aktuāla, jo indolizīnija sistēmas potenciāli var pielietot kā zāļvielas, biomarkērus, kā arī kā intermediātus organiskajā sintēzē [1].

Darbs tika uzsākts ar dikofeinil diselenīda sintēzi no kofeīna un tā norisinājās divās stadijās. 8-Bromkofeīns izdalīts ar 50% iznākumu bromējot kofeīnu ar *N*-bromsukcīnimīdu dihlorometāns – ūdens vidē. Tālāk 8-bromkofeīnu karsēja ar *in situ*

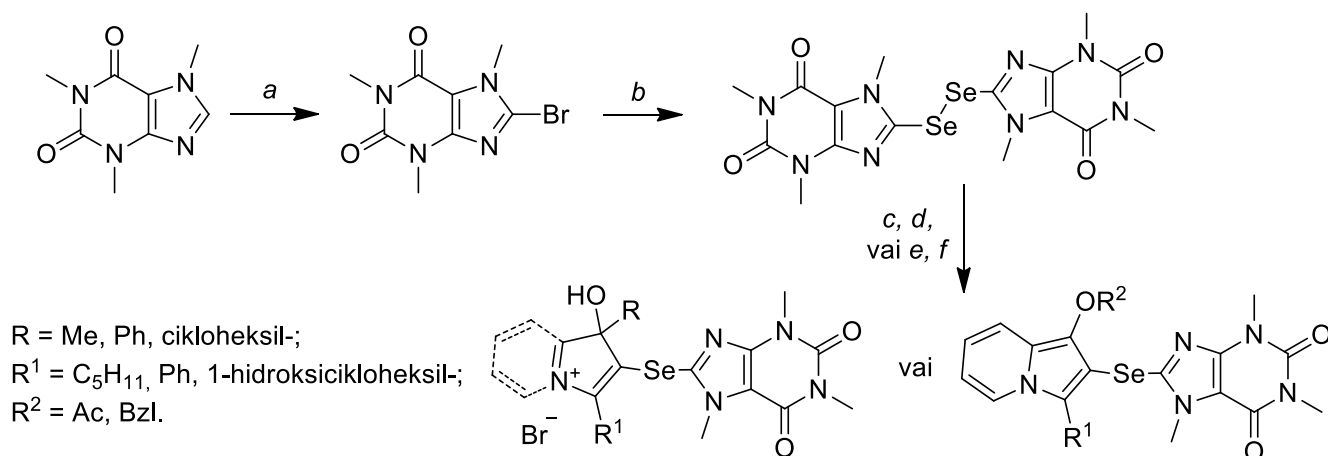
pagatavotu nātrija diselenīdu dimetilformamīdā iegūstot dikofeinil diselenīdu ar 60% iznākumu.

Pēc tam tika pētītas dikofeinil diselenīda elektrofilas īpašības, pēc 5-endo-*dig* ciklizācijas mehānisma veidojot indolizīnija tipa savienojumus. Selēna elektrofilis tika ģenerēts apstrādājot diselenīdu ar bromu vai vara(II) bromīda klātienē. (1.shēma, apstākļi). Rezultātā iegūti indolizīnija, pirolimidazolija un piroltiazolija sāļi un indolizīna heterocikli.

LITERATŪRA

- [1] Ivanova, A; Arsenyan, P. *Chem. Heterocycl. Compd.* **2017**, *53*, 313-315.

Synthesis and transformations of dicaffeinyl diselenide. This work is dedicated to investigation of dicaffeinyl diselenide's electrophilic properties by 5-endo-*dig* cyclisation. As a result indolizinium, pirolthiazolium, pirolimidazolium and indolizine fragments were obtained.



11 piemēri, iznākumi līdz 99%

1.shēma. Kofeinilselanilindolizīnija, pirolimidazolija un piroltiazolija sāļu un indolizīnu sintēze.

a: NBS, DCM/H₂O, ist.t., 5 d; b: Se, NH₂NH₂·H₂O, NaOH, DMF, 120 °C, 48 st; c: 2-Propargil-*N*-heterocikls, Br₂, DCM, ist. t., 4 st; d: 2-Propargil spirts *N*-heterocikls, CuBr₂, DCM, ist. t. 24 st; e: Benziloksi-2-propargil-piridīns, Br₂, DCM, ist. t., 4 st; f: Benziloksi-2-propargil-piridīns, CuI, Na₂CO₃, DMSO, 60 °C, 24 st

6-Azido-2-ariltiopurīna atvasinājumu sintēze

Andris Jeminejs (3. kursa Ķīmijas tehnoloģijas bakalaura programmas students)

Dr. chem. Ērika Bizdēna (zinātniskā vadītāja)

Organiskās ķīmijas tehnoloģijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,

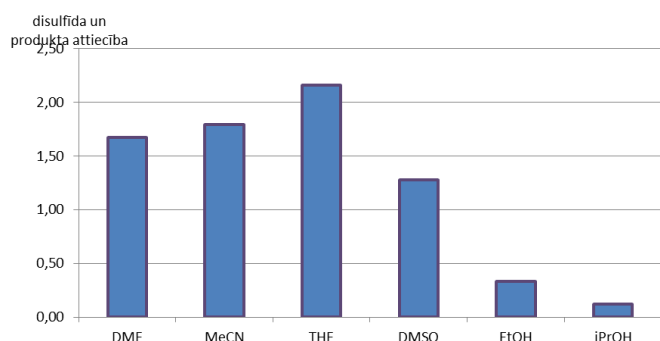
Rīgas Tehniskā universitāte

e-pasts: jeminejs.a@gmail.com

Purīna, tajā skaitā tiopurīna, atvasinājumi tiek plaši pētīti, pateicoties to bioloģiskai aktivitātei un pielietojumam medicīnā. Iepriekš RTU ir sintezēti 6-azido-2-alkiltiopurīna atvasinājumi, taču 2-azido-6-ariltiopurīna atvasinājumi vēl nav iegūti, un literatūrā to iegūšanas metodes nav aprakstītas [1].

Darba mērķis ir sintezēt jaunus 6-azido-2-ariltiopurīna atvasinājumus, veicot alkilēta 2,6-diazidopurīna **1** nukleofilās aizvietošanas reakciju ar feniltioliem (skat.1.shēmu).

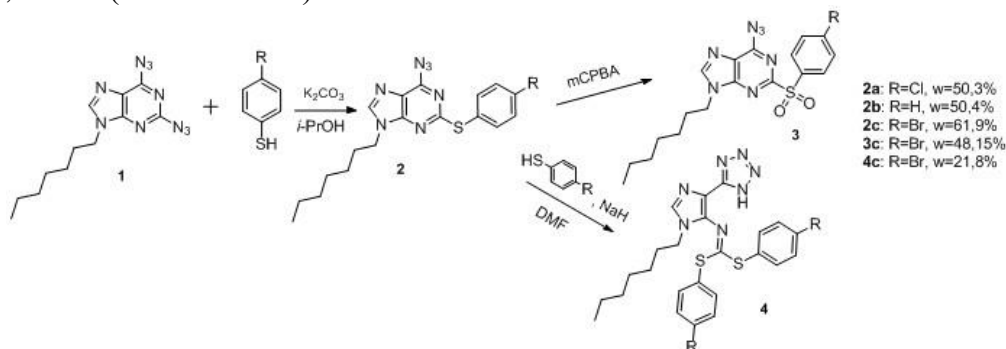
Reakcijas norisi aprūstina feniltioliu tieksme oksidēties bāziskā vidē par disulfīdiem. Pirmkārt, tika pielāgoti reakcijas apstākļi, salīdzinot disulfīda un produkta attiecību dažādos šķīdinātājos pēc 1 stundas (skat.1.att.).



1. att. Disulfīda daudzuma atkarība no šķīdinātāja.

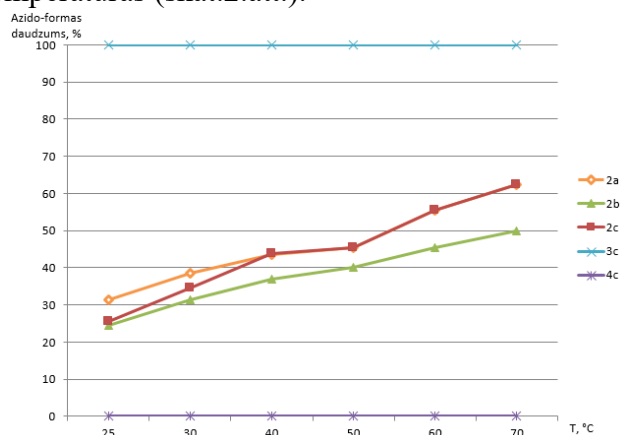
Tika novērots, ka polāros šķīdinātājos etanolā un izopropanolā reakcija norit visefektīvāk, un temperatūras izmaiņa maz ietekmē šo attiecību.

Tika iegūti vairāki 6-azido-2-ariltiopurīna atvasinājumi **2**, **3** un **4** (skat. 1. shēmu).



1.shēma. Mērķa produktu iegūšana.

Daļā iegūto produktu eksistē azīda-tetrazola tautomērais līdzsvars, kas ir atkarīgs no temperatūras (skat.2.att.).



2. att. Azīda-tetrazola līdzsvara atkarība no temperatūras (DMSO, ¹H KMR).

Rezultātā tika pielāgota metode 6-azido-2-ariltiopurīna atvasinājumu sintēzei, izmantojot dažādus feniltioli atvasinājumus, kā arī novērots azīda-tetrazola līdzsvars iegūtajos produktos.

LITERATŪRA

[1] Ozols, K. Study on nucleophilic heteroaromatic substitution in purine cycle, Master's Thesis, Riga Technical University, Latvia, 2017.

Synthesis of 6-azido-2-arylthiopurine derivatives. The aim was to develop a synthesis of 6-azido-2-arylthiopurine derivatives based on the method of synthesis of 6-azido-2-alkylthiopurine derivatives. After adjusting the solvent, target products were obtained from 2,6-diazidopurine derivative and the azide-tetrazole equilibrium was observed.

Amorfizējošas grupas un pieclocekļu heterociklus saturošu purīnu hibrīdu sintēze un fotofizikālās īpašības

Zigfrīds Kapilinskis (2.kursa maģistra programmas students)

Dr. chem. Māris Turks, Dr. chem. Irina Novosjolova (zinātniskie vadītāji)

Organiskās ķīmijas tehnoloģijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte
e-pasts: z.kapilinskis@gmail.com

Balstoties uz iepriekš publicētu fluorescējošo 6-amino-2-triazolilpurīna nukleozīdu sintēzi [1], ir izstrādāta 6-triazolilpurīna atvasinājumu sintēze ar amorfām grupām N (9) pozīcijā. Purīna struktūrā ievadot dažādas elektronu donoru un elektronu akceptoru grupas, tiek iegūtas paaugstinātas fluorescējošās īpašības, bet tritilgrupa palielina savienojumu amorfās īpašības [2].

Savienojuma **1** alkilēšana ar dažādiem spirtiem izmantojot Mitsunobu reakciju, deva 9-alkilētus purīnus **2**. Reakcijā ar nātrija azīdu tika iegūti diazidopurīni **3**. Nukleofilā aromātiskā aizvietošana tika veikta ar diazīdiem **3** ar piperidīnu, iegūstot savienojumus **4**. Azīdiem **4** tika veikta vara katalizēta 1,3-dipolārā ciklopievienošanās reakcija ar dažādiem terminālajiem alkīniem, iegūstot savienojumus **5a-b**. Esterifikācija tika veikta ar neaizsargātiem savienojumiem **5**, iegūstot produktus **6**.

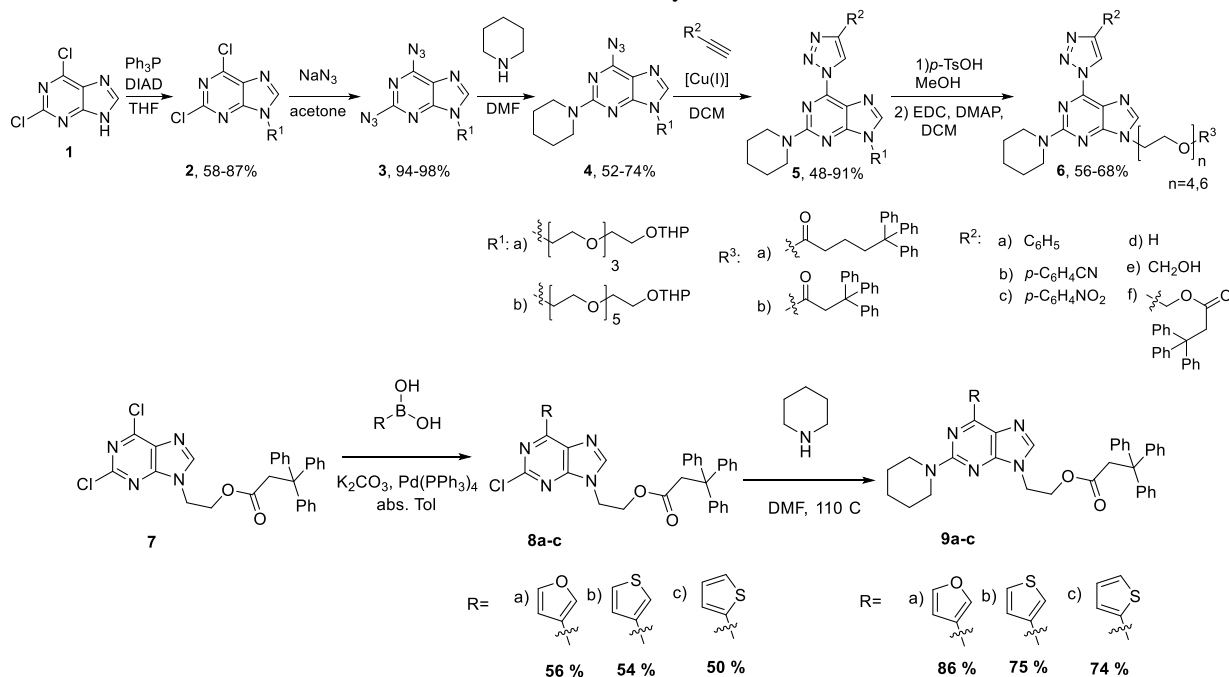
Suzuki-Mijauras sametināšanas reakcijā no izejvielas **7** iegūst 6-aizvietotus produktus **8a-c**, no kuriem pēc nukleofilās aromātiskās aizvietošanas iegūst savienojumus **9a-c**. Visiem galaproduktiem tika reģistrēti emisijas spektri. Kvantu iznākumi šķīdumos sasniedz 89 % un amorfā materiāla planajās kārtās 55 %.

LITERATŪRA

[1] Kovaļovs, A.; Novosjolova, I.; Bizdēna, Ē.; Bižāne, I.; Skardziute, L.; Kazlauskas, K.; Jursenas, S.; Turks, M. *Tetrahedron Lett.* **2013**, *54*, 850.

[2] Traskovskis, K., Kokars, V., Tokmakovs, A., Mihailovs, I., Nitišs, E., Petrova, M., Beļakovs, S., Rutkis, M. *Journal of Materials Chemistry C*, 2016, Iss.4, 5019.-5030.lpp.

Synthesis and photophysical properties of purine hybrids containing five-membered heterocycles and amorphous groups. Novel fluorescent purine derivatives were prepared using 1-3 dipolar cycloaddition and Suzuki-Miyaura reaction.



1.shēma. Fluorescentu purīnu sintēze.

Fluorēto aminoskābju inkorporēšana amiloīda-beta peptīdos

Kristīne Kitoka^{a,b} (4. kursa Ķīmijas tehnoloģijas bakalaura programmas studente)

Dr. chem. Kristaps Jaudzems^b (zinātniskais vadītājs)

^aMateriālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte, Rīgas Tehniskā universitāte

^bLatvijas Organiskās sintēzes institūts

e-pasts: k.p.kitoka@gmail.com

Alcheimera slimība ir progresējoša neurodeģeneratīva slimība, tai ir raksturīga kognitīvo funkciju zaudēšana. Slimība ietekmē miljoniem cilvēku visā pasaulē, un slimnieku skaits strauji pieaug ar katru gadu.

Alcheimera slimības attīstībā galveno lomu spēlē amiloīda-beta (Aβ) peptīdi, veidojot agregātus centrālajā nervu sistēmā. Aβ peptīdi ir amiloīda prekursora proteīna (APP) proteolītiskās šķelšanās produkti. Šķēloties APP, rodas vairākas peptīdu izoformas, no kurām Aβ42 ir dominējošā izoforma, kura atrodama slimnieku galvas smadzenēs. Aβ42 ir 42 aminoskābes garš un 4.5 kDa liels peptīds.

Slimības attīstības mehānisma izpēti ierobežo grūtības veikt strukturālos pētījumus šķīstošajiem monomēriem un oligomēriem, kas ir iekšēji nesakārtoti peptīdi un spontāni veido agregātus. Piemērotākā šo peptīdu pētīšanas metode ir šķīdumu KMR. Taču KMR pētījumiem ir jāizmanto relatīvi lieli apjomi peptīda (vairāki mg), kā arī vēlams peptīdus iegūt ar magnētiski aktīvu kodolu iezīmēm.

Darba mērķi ir iegūt saplūdināto proteīnu NT**Aβ42, kas sastāv no Aβ42 un zirnekļa zīda proteīna, inkorporēt NT**Aβ42 proteīnos dabā nesastopamas fluorētas aminoskābes – fenilalanīna un tirozīna analogus, izmantojot *in vivo* inkorporēšanas metodi, pētīt šo proteīnu agregāciju izmantojot ¹⁹F KMR.

Pētījuma ietvaros tika izstrādāta metode monomēra NT**Aβ42 proteīna iegūšanai. Darba gaitā tika veikta proteīna ekspresija *Escherichia Coli* baktēriju šūnās izmantojot lizogēnā buljona (lysogeny broth, LB) un M9

barotnes. Iegūtais proteīns tika attīrīts, izmantojot preparatīvo proteīnu šķīduma hromatogrāfiju (FPLC) ar niķeļa afinitātes¹ un gēlfiltrācijas kolonnām. Attīrīšanās efektivitāte tika noteikta izmantojot nātrija dodecilsulfāta (sodium dodecyl sulfate, SDS) gēla elektroforēzi. Izmantojot dialīzi tika noteikti buferšķīduma apstākļi, kas nodrošina proteīna stabilitāti vairāku dienu garumā. Tika veikti ekspresijas testi, proteīnā inkorporējot dažādas fluorētas aminoskābes. Tika veikta proteīna, kurā inkorporēts 4-fluorofenilalanīns, ekspresija un attīrīšana. Iegūto proteīnu koncentrācijas tika mērītas izmantojot UV/Vis spektroskopiju. Iegūtajiem proteīniem tika uzņemti ¹H, 2D [¹⁵N-¹H]-HSQC vai ¹⁹F KMR spektri. Tālāk tie tika sašķelti, izmantojot tabakas kodināšanas vīrusa (tobacco etch virus, TEV) proteāzi, atbrīvojot brīvu Aβ42 peptīdu. Proteīnu šķelšanas laikā tika uzņemti 2D [¹⁵N-¹H]-HSQC vai ¹⁹F KMR spektri.

LITERATŪRA

[1] Liao, Y. *Protein Expr. Purif.* **2015**, *113*, 63-71.

Incorporation of fluorinated amino acids into Alzheimer amyloid-beta peptides. Alzheimer's disease is a progressive neurodegenerative disease characterized by the progressive loss of cognitive functions. Aβ42 is the predominant isoform of amyloid-beta peptides that is found in the brains of Alzheimer patients. In our study we present a method for high yield expression and purification of the NT**Aβ42 fusion protein and its fluorinated analogues, in which the Aβ42 peptide is fused with a solubility enhancing tag derived from a spider silk protein. Obtained proteins were studied by NMR using 2D [¹⁵N-¹H]-HSQC, ¹H, and ¹⁹F experiments.

Diglicerīdu-arilmethylmeldrumskābju konjugātu stratēģisko būvbloku sintēze

Klinta Krasauska (4. kursa Ķīmijas tehnoloģijas bakalaura programmas studente)

Dr. chem. Inese Mieriņa (zinātniskā vadītāja)

Organiskās ķīmijas tehnoloģijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte
e-pasts: klintakrasauska@gmail.com

Veicot klīniskos pētījumus, ir pierādīts, ka salīdzinājumā ar brīvām aktīvo zāļu vielu molekulām, to konjugātiem ar diglicerīdiem ir uzlabotas farmakoloģiskās īpašības, tostarp orālā biopieejamība, molekulas stabilitāte, aktīvās vielas efektivitāte un samazināta toksicitāte [1]. Bez tam literatūrā [2] arilmethylmeldrumskābes aprakstītas kā labi antioksidanti. Tāpēc nolēmām pievērsties arī arilmethylmeldrumskābju-diglicerīdu konjugātu sintēzei. Šajā darbā uzmanību veltīsim mērķsavienojumu **7** un **11** stratēģisko būvbloku sintēzei.

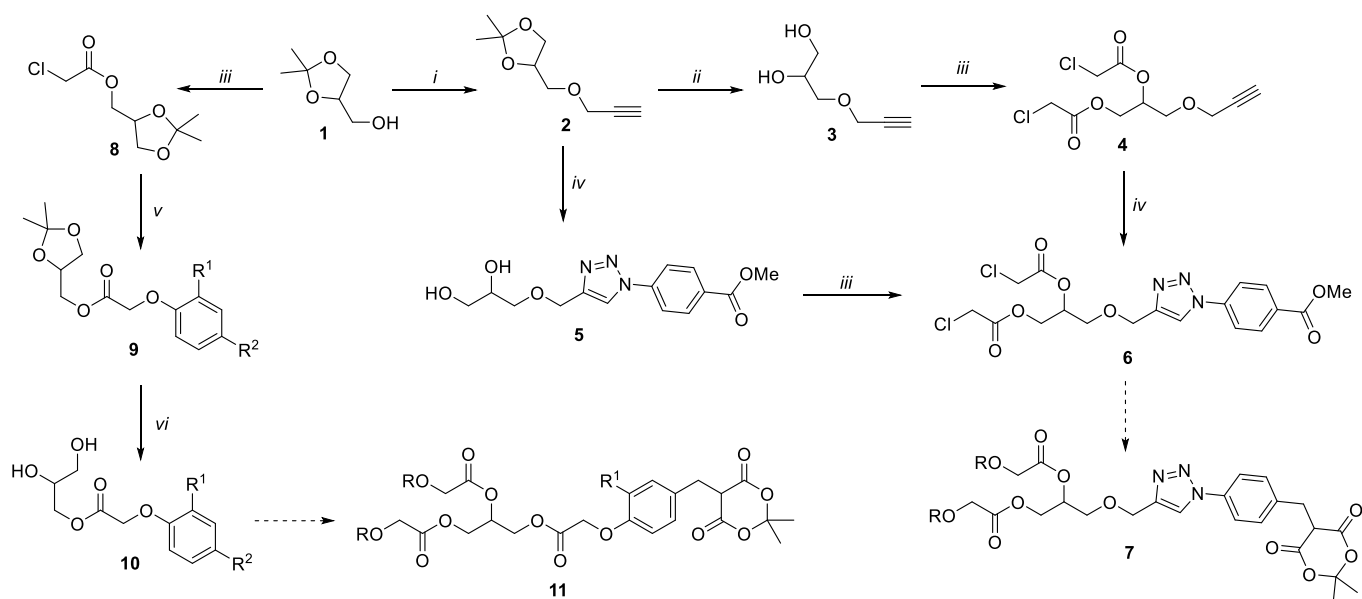
Mērķsavienojumu sintēzes pirmais solis ir solketāla (**1**) modificēšana (1. shēma). Viens no ceļiem paredz 1,2,3-triazola tiltiņu starp diglicerīda atlikumu un arilmethylmeldrumskābi. Šajā gadījumā sākām ar solketāla (**1**) propargilēšanu. Tālāk iegūto savienojumu **2** pārvērtām par glicerīna atvasinājumiem **3** vai **5**, kurus tālāk var izmantot savienojuma **7** sintēzei. Otrajā gadījumā

arilmethylmeldrumskābe ar diglicerīdu saistīta caur estera saiti. Šajā gadījumā būvblokus iegūstam acilējot solketālu (**1**) un ar iegūto produktu **8** alkilējot spirtus un fenolus. Tālāk savienojumu **9** var izmantot mērķsavienojuma **11** sintēzei. Nākotnē plānots pētīt gala produktu **7** un **11** antiradikālu aktivitāti.

LITERATŪRA

- [1] Irby, D.; Du, Chengan, L., F. *Mol. Pharmaceutics* **2017**, *14*, 1325-1338.
[2] Mierina, I.; Jure, M.; Zeberga, S.; Makareviciene, V.; Zicane, D.; Teteris, Z.; Ravina, I. *Eur. J. Lipid Sci. Technol.* **2017**, *119* (11), article no. 1700172.

Synthesis of strategic building blocks for diglyceride-arylmethyl Meldrum's acids conjugates. Several synthesis paths have been studied in order to obtain diglyceride-arylmethyl Meldrum's acids conjugates. As a starting substance in all paths was selected solketal (**1**).



1. shēma. Diglicerīdu-arilmethylmeldrumskābju konjugātu sintēze

Reaģenti un apstākļi: i: propargilbromīds, NaH, Toluols, 0...20° C, 24 h; ii: 10 mol% TFA, MeOH, RT, 24 h; iii: hloracetilhlorsīds, EtOAc, Et₃N, -10...0° C, 4h; iv: N₃C₆H₄COOMe, CuSO₄·H₂O, NaAsk, *t*-BuOH, H₂O, 60° C, 48 h; v: ROH, K₂CO₃, KI, DMF, 60° C, 24 h; vi: 20 mol% TFA, MeOH, RT, 36 h.

Dekahidrohinolīna cikla sintēze

Sindija Lapčinska^{a,b} (2.kursa Ķīmijas tehnoloģijas maģistra programmas studente)

Dr. chem. Andrejs Pelšs^b (zinātniskais vadītājs)

^aMateriālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte, Rīgas Tehniskā universitāte

^bLatvijas Organiskās sintēzes institūts

e-pasts: Sindija.Lapcinska@gmail.com

Dekahidrohinolīna ciklu saturoši alkaloidi ir samērā reti sastopami dabā [1]. Viena no šādām dekahidrohinolīnu alkaloidu klasēm ir lepadīni. Šobrīd ir zināmi astoņi šīs klases pārstāvji, kas atkarībā no aizvietotāju stereokīmiskā novietojuma tiek iedalīti trīs grupās [2]. Lepadīni satur *cis*-dekahidrohinolīna gredzenu, metilgrupu C-2 pozīcijā, hidroksi- vai aciloksi- grupu C-3 pozīcijā un astoņu oglekļu garu sānu ķēdi C-5 pozīcijā.

Tie ir bioloģiski aktīvi savienojumi ar antiplazmodiālām, antitripanosomālām un neiroloģiskām īpašībām [1]. Farmakoloģisko aktivitāšu padziļinātu izpēti ierobežo niecīgie lepadīnu daudzumi, ko iespējams iegūt no to dabīgajiem avotiem.

Literatūrā ir zināmas vairākas visu astoņu lepadīnu sintēzes, bet tās ir samērā garas (18-40 stadijas). Mūsu izstrādātajā ceļā (1.shēma) lepadīna B (1) ieguvei var definēt piecus galvenos posmus: 1) piemērota epoksīda sintēze; 2) epoksīda un cikloheksēna atvasinājuma sametināšana; 3) oktahidrohinolīna cikla sintēze; 4) oktahidrohinolīna hidroborēšana; 5) sānu ķēdes pievienošana.

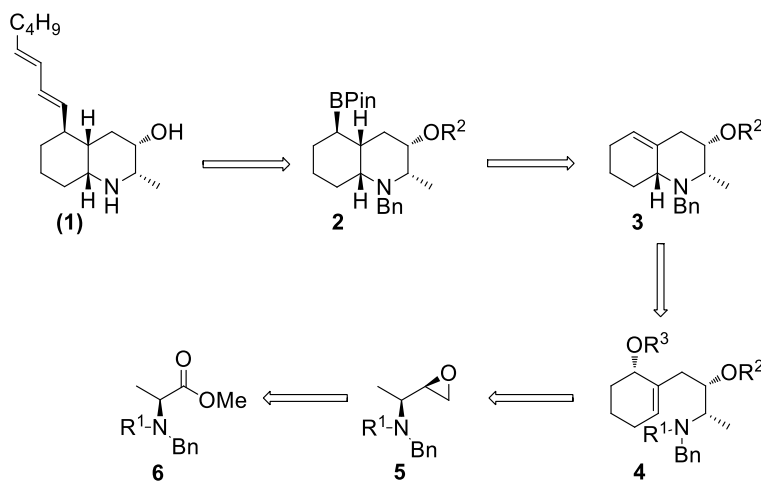
Veicot epoksīda ieguvei no alanīna metilestera un izmēģinot dažādas aizsarggrupas slāpekļa atomam, secinājām, ka ar labākajiem iznākumiem iespējams

sintezēt Bn un Boc aizsargātu *sin* epoksīdu. Tas tika sametināts ar cikloheksēna atvasinājumu, un tad, veicot ketogrupas reducēšanu un hidroksigrupas aizsargāšanu, tika iegūts ciklizācijas reakcijas prekursors. Pēc Boc grupas nošķelšanas ar TFA, iegūtais amīns tika izmantots tālākā sintēzē kā TFA sāls, jo no iepriekšējiem pētījumiem bija zināms, ka brīvā veidā šis amīns ir nestabils. Pd katalizatora un *dppe* liganda klātienē tika veikta oktahidrohinolīna cikla sintēze ar 70% iznākumu. Veicot šī savienojuma hidroborēšanu ar dažādiem borāniem, iespējams iegūt *cis* dekahidrohinolīnu.

LITERATŪRA

- [1] Wright, A. D.; Goclik, E.; Konig, G. M.; Kaminsky, R. *J. Med. Chem.* **2002**, *12*, 3067.
 [2] Amat, M.; Pinto, A.; Griera, R.; Bosch, J. *Chem. Eur. J.* **2015**, *21*, 12804.

Synthesis of decahydroquinoline ring. Lepadīns are a small class of decahydroquinoline alkaloids isolated from several marine organisms. These compounds exhibit biological activity: antiplasmodial, antitrypanosomal un neurological properties. Previous syntheses require many steps (18-40) and our goal was development of shorter synthetic route towards these alkaloids. The main stages of our synthesis are: epoxide preparation from alanine, epoxide coupling with cyclohexene derivative and Pd catalyzed cyclization reaction.



1.shēma. Lepadīna B retrosintētiskā analīze

Karbēnija jonu reakcijas šķidrā sēra dioksīdā

Kristaps Leškovskis (4. kursa Ķīmijas tehnoloģijas bakalaura programmas students)

Dr. chem. Jevgeņija Lugiņina, Dr. chem. Māris Turks (zinātniskie vadītāji)

Organisko savienojumu ķīmijas tehnoloģijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte

e-pasts: kristaps.leskovskis@gmail.com

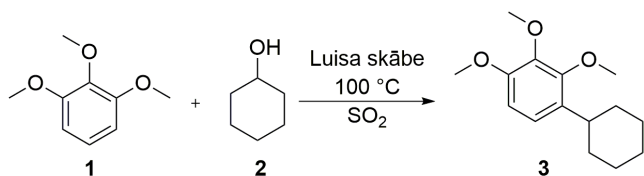
Frīdela-Kraftsa alkilēšana ir viena no galvenajām metodēm, kuru izmanto aromātisku sistēmu alkilēšanai. Reakcijā tiek izmantoti halogēnalkāni, stehiometriski katalizatora daudzumi un augstas temperatūras, kas padara šo reakciju videi nedraudzīgu. Spirtu un katalītiska daudzuma Luisa skābju izmantošana, radītu ūdeni kā vienīgo reakcijas blakusproduktu[1].

Rupes pārgrupēšanās reakcijas un spirtu pievienošana terminālajiem alkīniem ir atomekonomiskas reakcijas, jo nerada blakusproduktus un reakcijā tiek izmantoti reģenerējami katalizatori, bet to iznākumi ir visai zemi[2,3].

Sēra dioksīds pateicoties tā Luisa skābes īpašībām ir piemērots šķīdinātājs šādām reakcijām, jo tā pielietojums potenciāli samazina nepieciešamo katalizatora daudzumu[4].

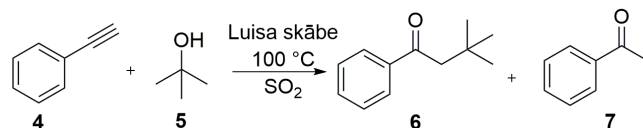
Rezultāti un to analīze.

Par Frīdela-Kraftsa alkilēšanas modeļsubstrātu tika izvēlēts trimetoksibenzols (**1**) un tā reakcija ar cikloheksanolu (**2**) (1. shēma). Reakcija veikta dažādu Luisa skābju klātienē un izejvielas konversija nepārsniedza 25%. Augstāka izejvielas konversija tika sasniegta kā spirtu lietojot 1-adamantanolu veicot pārvērtību $\text{In}(\text{OTf})_3$ katalizatora klātienē.



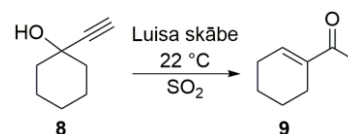
1.shēma. 1,2,3-Trimetoksibenzola alkilēšana

Spirta pievienošana terminālajiem alkīniem (2. shēma) tika veikta ar fenilacetilēna modeļsubstrātu (**4**), tam pievienojot *t*-butanolu (**5**). Pārvērtības rezultātā izejvielas konversijas pakāpe ir augsta, bet reakcijas zemās kemoslektivitātes dēļ produkta daudzums reakcijas maisījumā ir zems. Izmantojot FeCl_3 katalizatoru, tika iegūta līdz 80% augsta produkta (**6**) selektivitāte.



2.shēma. Spirta pievienošana alkīnam

Rupes pārgrupēšanās reakcijā par modeļsavienojumu izvēlēts 1-etinilcikloheksan-1-ols (**8**). Dažādu Luisa skābju katalizatoru izpētes rezultātā visaugstāko iznākumu sasniedzām veicot pārvērtību $\text{Cu}(\text{OTf})_2$ klātienē. Rupes pārgrupēšanās reakcija izcili notiek jau istabas temperatūrā. Reakcijas maisījuma sildīšana noved pie dažādu blakusproduktu veidošanās, tādējādi samazinot vēlamā produkta iznākumu.



3.shēma. Rupes pārgrupēšanās reakcija

Secinājumi. Sēra dioksīda izmantošana ļauj veikt Frīdela-Kraftsa un Rupes reakcijas kā arī spirtu pievienošanu alkīniem ar mazākiem katalizatora daudzumiem un arī zemākās reakcijas temperatūrās.

LITERATŪRA

- [1] Rueping, M.; Nachtsheim, B. J. *Beilstein J. Org. Chem.* **2010**, *6*, 1–24.
- [2] Swaminathan, S.; Narayanan, K.V. *Chem. Rev.* **1971**, *71*, 429-438
- [3] Jana, U.; Biswas, S.; Maiti, S. *Eur. J. Org. Chem.* **2008**, 5798-5804
- [4] Ashar, N.G. *Advances in sulphonation techniques liquid sulphur dioxide as a solvent of sulphur trioxide.*; Springer : Amernath, 2016.

Reactions of carbenium ion in liquid sulphur dioxide. Reactions with carbenium ion intermediates are usually carried out at high temperatures and with stoichiometric amounts of catalyst. These reaction conditions are neither environmentally nor economically friendly. Sulphur dioxide as a Lewis acid helps to ionize alcohols and as a polar solvent stabilizes formed carbenium ions. In this way reactions like Friedel-Crafts alkylation, Rupe rearrangement and alcohol addition to terminal alkynes are possible at lower reaction temperatures and with smaller catalyst loading.

Ciklopropānu protonolīzē ģenerētu karbkatjonu aminēšana

Ritera reakcijas apstākļos

Lūkass Tomass Lukaševics^{a,b} (1. kursa Ķīmijas tehnoloģijas maģistra programmas students)

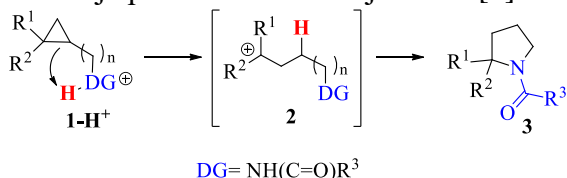
Dr. chem. Aigars Jirgenšons^{a,b}, Mg. sc. ing. Marija Skvorcova^b (zinātniskie vadītāji)

^aMateriālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte, Rīgas Tehniskā universitāte

^bLatvijas Organiskās sintēzes institūts

e-pasts: lukass.lukasevics@gmail.com

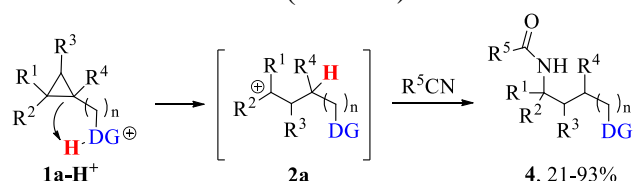
Pēdējo gadu laikā C-C saišu funkcionalizēšanas reakcijām tiek pievērsta liela uzmanība, jo tās dod iespēju iegūt nozīmīgus produktus no vienkāršām, viegli pieejamām izejvielām [1]. Tomēr relatīvi nereaģētspējīgās C-C sigma saišu dēļ metožu izstrāde šādām pārvērtībām ir samērā apgrūtināts uzdevums. Cikla sprieguma dēļ, relatīvi vājā C-C saite ciklopropānā pakļaujas šķelšanai ar elektrofilu, veidojot funkcionalizētus savienojumus [2]. Ciklopropānu uzšķelšanas galvenā problēma ir panākt reģioselektīvu elektrofila uzbrukumu. Nesen mūsu grupā tika demonstrēta selektīva ciklopropānu *anti*-Markovņikova uzšķelšana, izmantojot protonētu amīdu **1-H⁺** kā iekšmolekulāru protona donoru. (1.shēma). Šajā pārvērtībā veidojās karbkatjons **2**, kas iekšmolekulārā reakcijā ar amīdgrupas slāpekļa atomu veidoja pirolidīnu atvasinājumus **3** [3].



1.shēma. Iekšmolekulāri virzīta ciklopropānu uzšķelšana.

Ar mērķi paplašināt karbkatjonu **2** funkcionalizēšanas iespējas, šī pētījuma ietvaros tika veikta starpmolekulāra karbkatjona **2** aminēšanas reakcijas izpēte Ritera reakcijas apstākļos. Lai izslēgtu ciklizēšanās reakcijas iespējamību, tika bloķēta amīdfunkcijas slāpekļa atoma nukleofilitāte, reakcijās izmantojot Nalkilvai *N*-aril- aizvietotus ciklopropānus **1a-H⁺** (2.shēma). Ritera reakcijas apstākļos selektīvi ģenerētais karbkatjons **2a** tika atvasināts ar

dažādiem nitriliem iegūstot amīdus **4** ar zemiem un ļoti labiem iznākumiem (21-93%).



DG = -N(alk)CO₂Et; -N(H)COCCl₃; -CO₂Et; -COMe;
-NPh; -N(Me)CON(Me)Ph

R^{1,2} = Alk, Ar; R^{3,4} = Me; R⁵ = Alk, Ar

2.shēma. Ciklopropānu uzšķelšana Ritera reakcijas apstākļos.

Pētījumā tika nodemonstrēts, ka dažādas virzošās grupas (karbamāts, amīds, diesteris, ketons, urīnviela, ftalimīds) ir spējīgas selektīvi virzīt ciklopropānu C-C saišu protonolīzi, ļaujot iegūt 1,4-diamīna, ε-aminoketonu un ε-aminokarboksilatvainsājumus.

LITERATŪRA

- [1] Y. Xia, G. Lu, P. Liu and G. Dong, *Nature*, 2016, **539**, 546.
[2] H. N. C. Wong, et al., *Chem. Rev.* 1989, **89**, 165.
[3] M. Skvorcova, A. Jirgenšons, *Org. Lett.*, 2017, **19**, 2478.

Ritter-type Amination of Carbenium Ions Generated by Directed Protonolysis of Cyclopropane. A directed intramolecular protonolysis of cyclopropane C-C bond is demonstrated as a strategy to generate carbenium ion for the amination with nitriles under Ritter reaction conditions. Directing groups such as carbamate, carboxamide, urea, ester and ketone were found efficient for regioselective cleavage of cyclopropane. Depending on the directing group, the Ritter-type amination provided orthogonally protected 1,4-diamine, ε-amino carboxylic, and ε-amino ketone derivatives.

3β,28-Diazidolup-20(29)-ēns un tā triazolatvasinājumu sintēze

Andis Melderis (4. kursa Ķīmijas tehnoloģija bakalaura programmas students)

Dr. chem. Māris Turks (zinātniskais vadītājs)

Organiskās ķīmijas tehnoloģijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte
e-pasts: andis.melderis@gmail.com

Ir zināmi vairāki betulīna atvasinājumi, kuriem piemīt bioloģiskā aktivitāte. Viens no tiem ir betulīnskābe, kura uzrāda pretvēža aktivitāti [1]. Šīs skābes atvasinājumam, bevirimatom, piemīt anti-HIV iedarbība [2]. Arī triazolu atvasinājumiem piemīt dažādas bioloģiskās aktivitātes, piemēram, sulfanilamīdu atvasinājumiem novērojamas antibakteriālās īpašības [3], bet ogļhidrātu triazolatvasinājumiem anti-HIV-1 aktivitāte [4].

Darba mērķis ir iegūt 3β,28-diazidolup-20(29)-ēnu un no tā sintezēt triazolatvasinājumus.

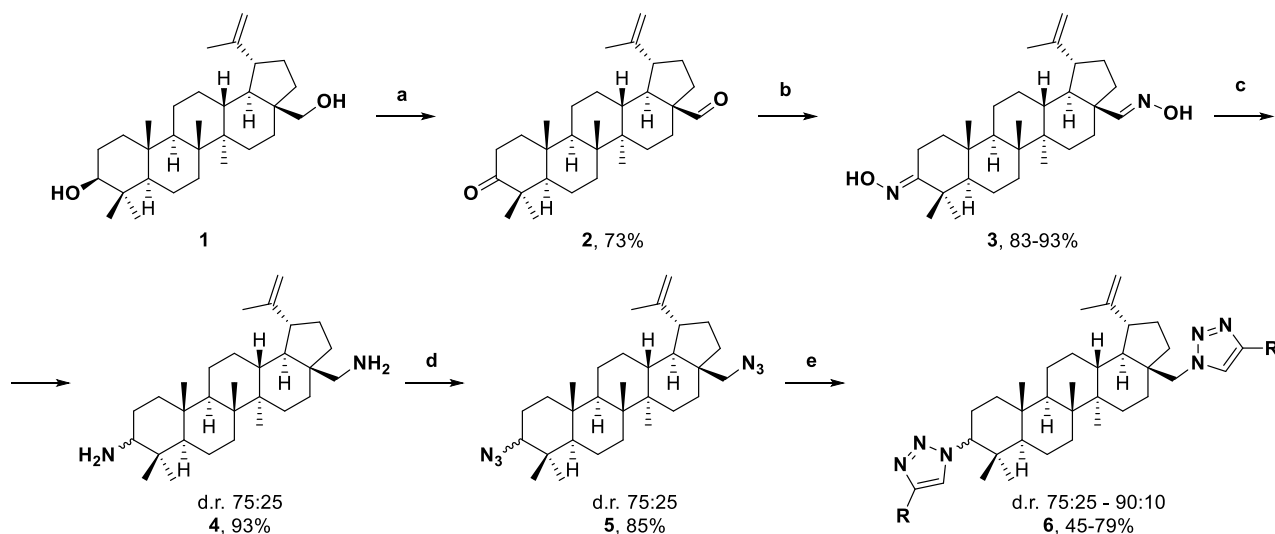
Pirmajā solī betulīns (**1**) tiek oksidēts līdz betulonaldehīdam (**2**) ar iznākumu 73%. Tam seko dioksīma **3** sintēze. Iznākums sasniedz 83-93%. Pēc reducēšanas ar NaBH₃CN, tiek iegūts diamīns **4** ar diastereomēru attiecību 75:25 un iznākumu līdz 93%. Diazopārneses reakcijā kā diazopārneses reaģentu izmantojot trifluormetānsulfonilazīdu, tiek iegūts mērķsavienojums **5** ar iepriekš minēto diastereomēru attiecību un iznākumu pēc attīrīšanas

85%. No šī diazīda 1,3-dipolārās ciklopievienošanās reakcijā ir uzsynetēti dažādi 1,2,3-triazolsavienojumi ar iznākumiem 45 - 79% un diastereomēru attiecību 75:15 - 90:10.

LITERATŪRA

- [1] Tan, Y.-M.; Yu, R.; Pezzuto, J. M. *Clin. Cancer Res.* **2003**, 9(7), 2866.
- [2] Sun, I.-C.; Wang, H.-K.; Kashiwada, Y.; Shen, J.-K.; Cosentino, L. M.; Chen, C.-H.; Yang, L.-M.; Lee, K.-H. *J. Med. Chem.* **1998**, 41(23), 4648.
- [3] Wang, X.-L.; Wan, K.; Zhou, C.-H. *Eur. J. Med. Chem.* **2010**, 45(10), 4631.
- [4] San-Félix, A.; Alvarez, R.; Velázquez, S.; De Clercq, E.; Balzarini, J.; Camarasa, M. J. *Nucleosides, Nucleotides Nucleic Acids* **1995**, 14(3-5), 595.

Synthesis of 3β,28-diazidolup-20(29)-ene and its triazole derivatives. 3β,28-Diazidolup-20(29)-ene was obtained in 4 step synthesis from betulin with overall yield of 51% and diastereomeric ratio 75:25. 1,2,3-Triazole derivatives were obtained via Cu(I) catalyzed 1,3-dipolar cycloaddition between diazide and various alkynes.



- (a) DMSO, (COCl)₂, Et₃N, DCM, -15 °C; (b) NH₂OH·HCl, KOH, MeOH; (c) NaBH₃CN, TiCl₃, AcONH₄, MeOH;
(d) TfN₃, NaHCO₃, CuSO₄·5H₂O, H₂O, Toluols, MeOH; (e) Alkīns, CuI, Et₃N, THF, 70-90 °C

1.shēma. Mērķsavienojumu **5** un **6** sintēze.

Silildiēnu un sililindēnu sintēze no propargilsilāniem

Mikus Puriņš (1. kursa Ķīmijas tehnoloģijas maģistra programmas students)

Dr. chem. Māris Turks (zinātniskais vadītājs)

Organiskās ķīmijas tehnoloģijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte
e-pasts: mikus.purins@rtu.lv

Propargilsilāniem reaģējot ar elektrofilu, rodas β -sililvinilkarbēnija joni. Tajos pēc Hosomi-Sakurai tipa mehānisma var notikt desililēšanās, rodoties homoallenilpievienošanās produktiem. Tomēr, ja sililgrupa ir stēriski traucēta, iespējama 1,2-sililgrupas migrācija [1]. Šāda tipa pārvērtības parasti noslēdzas ar iekšmolekulāru nukleofilu uzbrukumu, veidojoties [3+2] anelētiem produktiem.

Silildiēni ir vērtīgi būvbloki, jo tie satur gan vinilsilāna, gan diēna funkciju. Tas paver iespējas silildiēnus izmantot gan kā nukleofilus elektrofilās aizvietošanās reakcijās un palādija katalizētās sametināšanas reakcijās, gan kā diēnus ciklopievienošanās reakcijās [2].

Savukārt indēna atvasinājumi tiek pielietoti kā ligandi pārejas metālu kompleksos. Tie bieži uzrāda paaugstinātu reaģētspēju, salīdzinot ar radniecīgajiem no ciklopentadiēna atvasinātiem ligandiem [3].

Mūsu grupā ir izstrādāta metode propargilsilānu 1 trīskāršās saites protonēšanai, izmantojot tādas stipras Brensteda (*Brønsted*) skābes kā TfOH un Tf₂NH. Rezultējošajā β -sililvinilkarbēnija jonā 2 notiek 1,2-sililgrupas migrācija, rodoties stabilākam β -sililalilkarbēnija jonam 3. Ja reakcijā izmantots terminālais alkīns, alilkarbēnija jona 4 dzīves cikls beidzas ar protona elimināšanu, rodoties silildiēniem 5. 1-Arilaizvietotiem propargilsilāniem tiek novērota konkurējoša iekšmolekulāra Frīdela-Kraftsa (*Friedel-Crafts*) alkilēšana intermediātā 6,

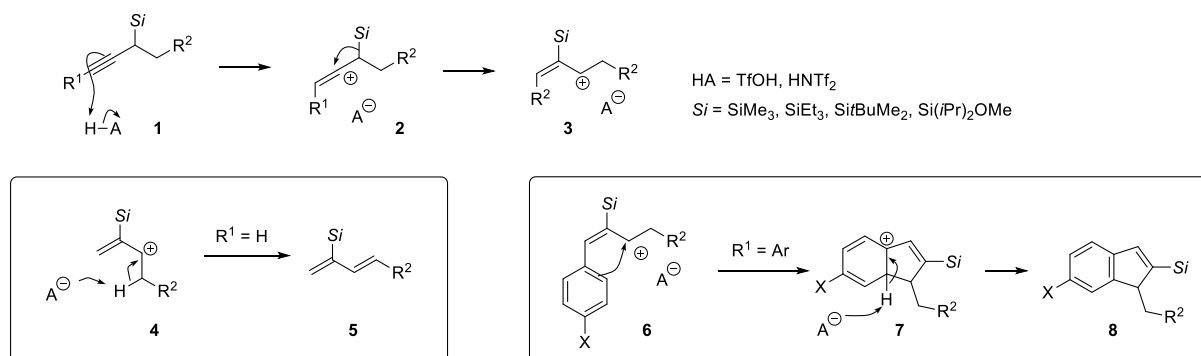
veidojoties sililindēniem 8. Reakcijas apstākļu optimizēšanas laikā tika atklāts, ka produktu attiecību nosaka gan substrāta elektroniskās īpašības, gan reakcijas vide, gan katalizators. Polārāki šķīdinātāji, mazāk koordinējoši skābes anjoni un mazāk elektronus atvelkošas grupas aromātiskajā gredzenā ir labvēlīgāki apstākļi sililindēnu rašanās procesiem.

Mēs demonstrējam iegūto produktu izmantošanu gan Dīlsa-Aldera (*Diels-Alder*) ciklopievienošanās reakcijā, gan Hijamas-Denmarka (*Hiyama-Denmark*) šķērssametināšanas reakcijā.

LITERATŪRA

- [1] Danheiser, R. L.; Dixon, B. R.; Gleason, R. W. *J. Org. Chem.* **1992**, 57(23), 6094–6097.
[2] Choudhury, P.; Welker, M. *Molecules* **2015**, 20(9), 16892–16907.
[3] Calhorda, M. J., Romão, C. C. and Veiros, L. F. *Chem. Eur. J.* **2002**, 8(4), 868–875.

Synthesis of Silyl Dienes and Silyl Indenes from Propargyl Silanes. Here we report the use of strong Brønsted acids such as triflic acid to protonate the triple bond in propargyl silanes 1. Resulting β -silyl vinyl carbenium ion 2 undergoes 1,2-silyl shift to give more stable β -silyl allyl carbenium ion 3. Allyl carbenium ions 4 generated from terminal propargyl silanes undergo deprotonation to give silyl dienes 5. For 1-aryl propargyl silanes a competing intramolecular Friedel-Crafts alkylation in the intermediate carbenium ion 6 is observed. Careful investigation of reaction conditions revealed that more polar solvents and less coordinating acid anion favor silyl indene 8 formation.



1. shēma. Propargilsilānu pārgrupēšanās reakcijas.

Amorfu purīnu-azolu konjugātu sintēze un fotofizikālās īpašības

Armands Sebris (2. kursa Ķīmijas tehnoloģijas maģistra programmas students)

Dr. chem. Māris Turks, Dr. chem. Irina Novosjolova (zinātniskie vadītāji)

Organiskās ķīmijas tehnoloģijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitātē
e-pasts: armands.sebris_1@rtu.lv

Mūsu grupa iepriekš aprakstīja fluorescentu purīnu nukleozīdu sintēzi [1]. Ir zināms, ka tritilgrupas ievadīšana aromātiskajos savienojumos uzlabo to amorfās īpašības [2]. Šajā darbā ir aprakstīta aizvietotu purīnu-azolu konjugātu sintēze ar amorfu īpašību veicinošiem aizvietotājiem purīna *N*(9) pozīcijā un tika pētīta purīna gredzenā ievadīto elektronu donoru un akceptoru grupu ietekme uz savienojumu fluorescentajām īpašībām.

C(6) un *C*(2) triazolaizvietoti purīna atvasinājumi **5** un **9** ar amorfām grupām tika iegūti no 2,6-dihlorpurīna (**1**), veicot Mitsunobu reakciju, halogēnu aizvietošanu ar azīdiem un nukleofīlo aromātisko aizvietošanu dažādā secībā. Kā pēdējā stadija tika veikta vara katalizēta 1,3-dipolārā ciklopievienošana ar dažādiem terminālajiem alkīniem, un iegūti savienojumi **5** un **9** (1. shēma). Purīna *C*(2) pozīcijā tika ievadīti arī imidazola, 1,2,4-triazola un tetrazola cikli. Iegūtie mērķa savienojumi **5** un **9** šķīdumos fluorescēja ar kvantu iznākumiem līdz 91%. Purīnu-azolu konjugātiem ar labiem kvantu iznākumiem šķīdumos tika izmērītas

fotofizikālās īpašības arī plānajās kārtiņās, un kvantu iznākumi sastādīja pat 58%.

Secinām, ka ir izstrādātas sintēzes metodes *C*(6) un *C*(2) purīnu-azolu konjugātu iegūšanai. Iegūtajiem mērķa savienojumiem tika pārbaudītas fotofizikālās īpašības šķīdumos un plānajās kārtiņās.

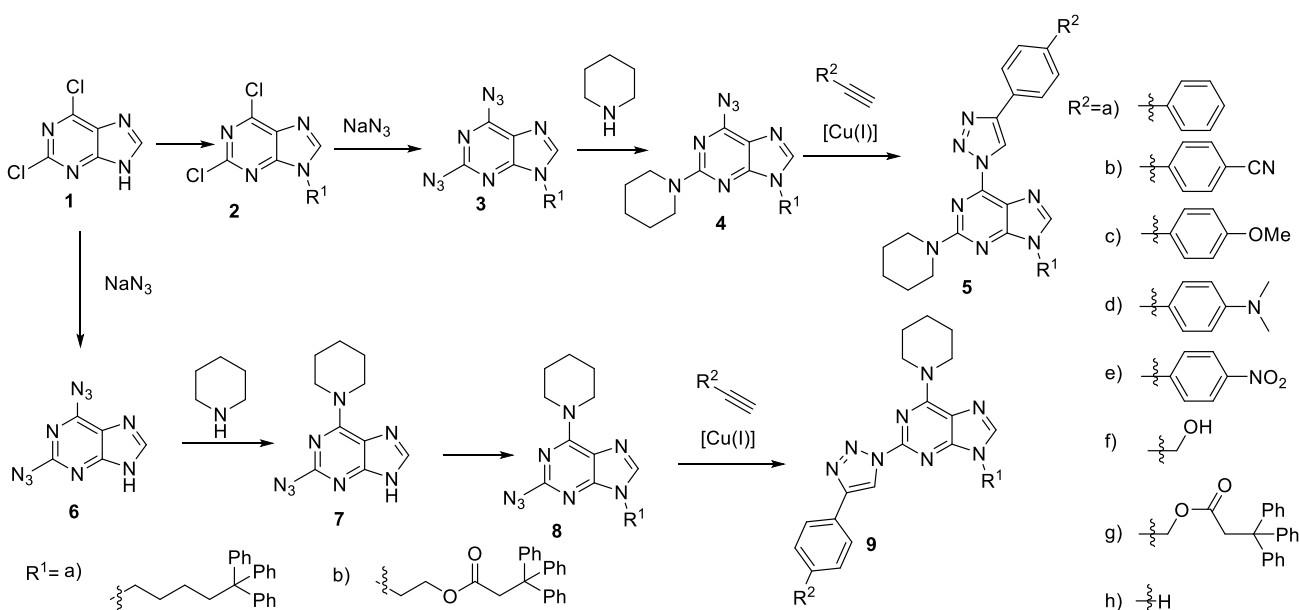
PATEICĪBAS

Šis darbs ir veikts ar ERAF projekta Nr. 1.1.1.1/16/A/131 atbalstu. Izsakām pateicību Dr. Traskovskim un Dr. Vembrim par fotofizikālajiem aprēķiniem un mērījumiem.

LITERATŪRA

- [1] Kovaļovs, A.; Novosjolova, I.; Bizdēna, Ē.; Bižāne, I.; Skardziute, L.; Kazlauskas, K.; Jursenas, S.; Turks, M. *Tetrahedron Lett.* **2013**, *54*, 850.
- [2] Traskovskis, K.; Mihailovs, I.; Tokmakovs, A.; Kokars, V.; Rutkis, M. *Proceedings of SPIE*, **2012**, *8434*: Nonlinear Optics and Applications VI, 1.

Synthesis and photophysical properties of amorphous purine-azole conjugates. Synthesis of substituted purine-azole conjugates with amorphousing groups at *N*(9) position is described. The title compounds exhibit fluorescence with quantum yields up to 91% in solution and up to 58% in films.



1. shēma. Aizvietotu triazolilpurīnu sintēze.

Arilmetilmeldrumskābju-taukskābju atvasinājumu ar 1,2,3-triazola tiltiņu konjugātu sintēze

Dārta Zelma Skrastiņa (4.kursa Ķīmijas tehnoloģijas bakalaura programmas studente)

Dr. chem. Inese Mieriņa (zinātniskā vadītāja)

Organiskās ķīmijas tehnoloģijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte
e-pasts: darta.skrastina@gmail.com

Daudzi arilmetilmeldrumskābju atvasinājumi uzrāda lieliskas antioksidantu īpašības [1], savukārt antioksidanti var rast pielietojumu dažādu neurodeģeneratīvu slimību, piemēram, Alzheimerā, Parkinsona slimības ārstēšanā. Diemžēl to izmantošana ir ierobežota, jo vairumam to ir ierobežota spēja izkļūt cauri hematoencefaliskajai barjerai. Taču antioksidantu spēju uzsūkties var uzlabot, to struktūru modificējot ar taukskābēm/to atvasinājumiem [2, 3]. Arī triazols kā aromātisks, slāpekli saturošs heterocikls ir izraisījis īpašu interesi, jo konstatēts, ka triazola atvasinājumiem piemīt izcilas farmokokinētiskās īpašības, tiem ir labs drošības profils, kā arī latentā spēja veidot ūdeņraža saites ar citām aktīvām molekulām [4]. Tāpēc darba ietvaros ir sintezēti dažādi arilmetilmeldrumskābju taukskābju konjugāti ar 1,2,3-triazola tiltiņu.

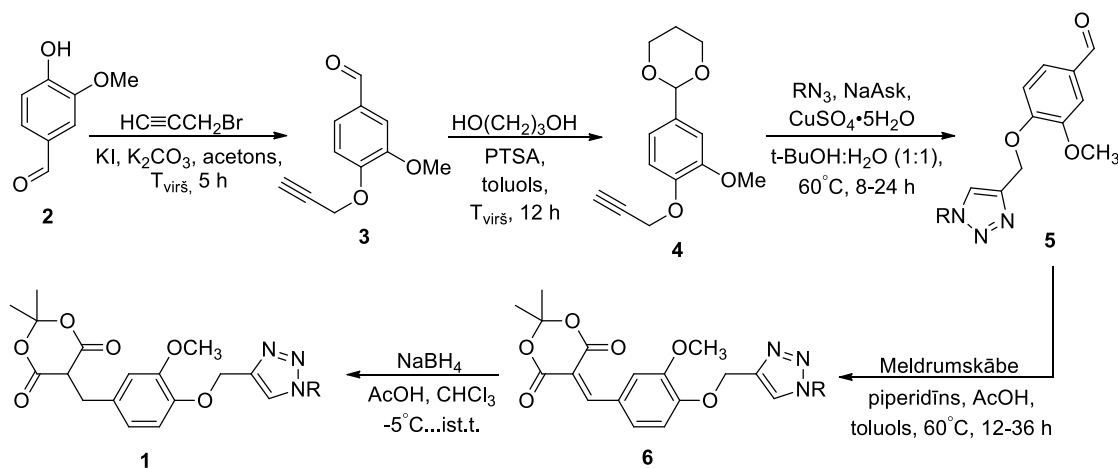
Arilmetilmeldrumskābju atvasinājumu **1** sintēzi izmantojām sekojošu shēmu (1.shēma): vispirms propargilējām vanilīnu **2**, iegūstot savienojumu **3**, kurā aizsargājām aldehīda grupu, iegūstot acetālu **4**, kas tālāk alkīna un azīda 1,3-bipolārā ciklopievienošanās reakcijā veidoja savienojumu **5**. No tā savukārt Knēvenāģļa kondensācijas ceļā ar

meldrumskābi tika iegūta arilidēnmeldrumskābe **6**, kuru reducējot, tika iegūti arilmetilmeldrumskābes-taukskābju atvasinājumi ar 1,2,3-triazola tiltiņu **1**. Lai noskaidrotu iegūto arilmetilmeldrumskābju atvasinājumu **1** brīvo radikāļu slāpēšanas spēju, tiks veikti DPPH un GO testi.

LITERATŪRA

- [1] Mierina, I.; Jure, M.; Zeberga, S.; Makarevičiene, V.; Zicane, D.; Tetere, Z.; Raviņa, I. *Eur. J. Lipid Sci. Technol.* **2017**, *119* (11), article no. 1700172.
- [2] Gilgun-Sherki, Y.; Melamed, E.; Offen, D. *Neuropharmacology* **2001**, *40* (8), 959.
- [3] Wang, J.; Xiao N.; Zhang, Y.; Zhao, C.; Guo, X.; Lu, L. *Pharmacol. Res.* **2016**, *104*, 124.
- [4] Shi, Y.; Zhou, C. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2011**, *21*, 956.

Synthesis of arylmethyl Meldrum's acid-fatty acid conjugates with 1,2,3-triazole linker. In order to obtain new type of arylmethyl Meldrum's acid-fatty acid conjugates with 1,2,3-triazole linker **7** a reaction sequence involving propargylation of vanillin **2**, protection of aldehyde **3**, 1,3-dipolar cycloaddition between alkyne **4** and azide, Knoevenagel condensation between Meldrum's acid and compound **6**, followed with reduction was elaborated. Antiradical activity of all synthesized compounds **1** will be discussed.



1.shēma. Arilmetilmeldrumskābju-taukskābju atvasinājumu ar 1,2,3-triazola tiltiņu konjugātu sintēze

Plazmepsīnu inhibitoru sintēze

Georgijs Stakanovs^a (4. kursa Ķīmijas tehnoloģijas bakalaura programmas students)

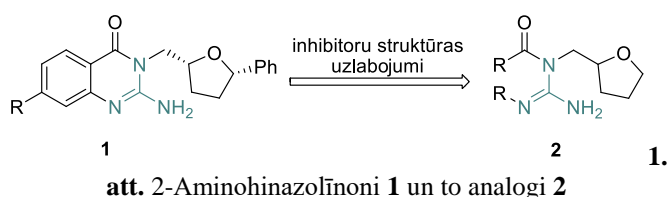
Dr. chem. Dace Rasiņa^b (zinātniskā vadītāja)

^aMateriālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte, Rīgas Tehniskā universitāte

^bLatvijas Organiskās sintēzes institūts

e-pasts: st_george@inbox.lv

Malārija ir potenciāli nāvējoša infekcijas slimība, kuru izraisa četras moskītu pārnēsātas *Plasmodium* parazītu sugas [1]. Lai arī ir pieejami vairāki antimalārijas medikamenti, arvien tiek novērota rezistentās malārijas izplatīšanās [2]. Līdz ar to, lai cīņa pret malāriju būtu efektīvāka, tiek meklēti jaunas struktūras inhibitori uz jauniem bioloģiskajiem mērķiem, uz kuru pamata varētu izstrādāt inovatīvus pretmalārijas līdzekļus. Iepriekš veiktie pētījumi mūsu grupā parāda, ka dažādiem 2-aminohinazolīn-4(3H)-oniem **1** ir augstas malārijas aspartilproteināžu – gremošanas plazmepsīnu un zemas cilvēka aspartilproteināzes katēpsīna D inhibīcijas spējas, padarot šo savienojumu klāstu par perspektīviem zālvielu kandidātiem [3]. Izmantojot molekulāro modelēšanu, tika prognozēts, ka triaizvietotiem 2-aminohinazolīnioniem un citām līdzīgām struktūrām **2** būs analogiskas īpašības, galvenokārt pateicoties guanidīna tipa fragmentam (1. att.), kas saistās ar plazmepsīnu katalītisko funkciju pildošajām asparagīnskābes sānu ķēdēm [4].



Pētījuma mērķis ir, izmantojot zināmās 2-aminohinazolīnonu īpašības, veikt struktūras uzlabojumus un iegūt jaunus savienojumus, kas selektīvi inhibē plazmepsīnus attiecībā pret katēpsīnu D.

Rezultātā ir iegūti vairāki selektīvi inhibitori, kuru skaitā efektīvākie savienojumi ir ar nanomolāru inhibitoro aktivitāti enzimatiskajos testos (IC₅₀ līdz pat 27 nM).

LITERATŪRA

- [1] World malaria report 2017. Geneva: World Health Organization; 2017.
- [2] a) Hyde, J. E. *FEBS J.*, **2007**, 274 (18), 4688; b) Noedl, H. et al. *N. Engl. J. Med.*, **2008**, 359 (24), 2619.
- [3] a) Rasiņa, D. et al. *J. Med. Chem.*, **2016**, 59 (1), 374; b) Rasiņa, D. et al. *Bioorg. Med. Chem.*, **2018**, doi: 10.1016/j.bmc.2018.04.012

Synthesis of Plasmepsin inhibitors. Malaria is one of the most widespread and life threatening diseases caused by *Plasmodium* parasites [1]. The spread of drug-resistant malaria [2] has lead to necessity of new anti-malaria drug development. Recently, we reported [3] that 2-aminoquinazolin-4(3H)-ones **1** possess high inhibitory potential against digestive Plasmepsins selectively *versus* human aspartic protease Cathepsin D. Using molecular modeling and structural improvements of quinazolinone fragment we obtained new active structures **2** with IC₅₀ up to 27 nM with improved selectivity to Cat.

Eļļas augu spraukumu antioksidantu un UV filtru īpašības

Alīna Tumiloviča (4.kursa Ķīmijas tehnoloģijas bakalaura programmas studente)

Dr. chem. Inese Mieriņa (zinātniskā vadītāja)

*Organiskās ķīmijas tehnoloģijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte
e-pasts: altumil@inbox.lv*

Mūsdienās vadošie kosmētikas ražotāji izstrādā videi draudzīgos un hipoalerģiskus kosmētiskos produktus uz ārstniecisko augu materiālu ekstraktu bāzes. Viens no iemesliem ir augsts antioksidantu saturs augu materiālos. Antioksidantiem ir novērota pretvēža darbība un papildus daži citi imunitāti stiprinošie efekti, samazinot radikāļu koncentrāciju [1]. Turklāt, augu ekstraktu pielietošana kosmētiskajos līdzekļos pasargā cilvēka ādu no bīstama saules starojuma iedarbības, atstarojot vai absorbējot UV starus [2]. Šajā darbā pētītas eļļas augu spraukumu ekstraktu antioksidantu un UV filtru īpašības.

Darbā izmantoti idras, linu un čia sēklu spraukumi (SIA Duo AG). Ekstraktu iegūšanai izmantojām divas metodes: vārot 2 stundas šķīdinātāja viršanas temperatūrā un maisot 24 stundas uz orbitālā kratītāja istabas temperatūrā. Ekstrakcijai izmantoti dažādu attiecību ūdens-spirta maisījumi: 96, 70, 50 un 30% EtOH un H₂O. Iegūtajiem ekstraktiem noteicām kopējo polifenolu saturu (KPS) pēc Folina-Denisa metodes. KPS izteicām gallusskābes ekvivalentos uz 100 g spraukumu. Antiradikāļu aktivitāti noteicām pēc 1,1-difenil-2-pikrilhirdazila (DPPH) un galvīnskābes (GO) testa. Antiradikāļu aktivitāti izteicām kā koncentrāciju IC₅₀, pēc kuras samazinas brīvā radikāļa koncentrācija par 50%. Ekstraktu UV īpašību noteikšanai pagatavojām 5 dažādu koncentrāciju ekstraktu šķīdumus un mērījām absorbciju 290-320 nm intervālā ik pēc 5 nm. Saules aizsardzības faktoru (SPF) aprēķinājām pēc Mansura vienādojuma [3].

Salīdzinot iegūto ekstraktu KPS, tika novērots, ka 70 un 50% EtOH ekstraktiem KPS ir lielāki, nekā 96 un 30% EtOH un H₂O ekstraktiem. Vismazākās IC₅₀ vērtības tika novērotas 70, 50 un 30% EtOH ekstraktiem DPPH testā un 70% EtOH ekstraktam GO testā. Lielākās KPS vērtības tika novērotas idras

sēklu spraukumu ekstraktiem, taču labāka antioksidantu aktivitāte – čia ekstraktiem.

Jo lielāks ir SPF, jo labāka ir aizsardzība pret UV-B stariem. Salīdzinot ekstraktu UV filtru īpašības, vismazākās SPF vērtības tika novērotas ūdens ekstraktiem, bet vislielākās – 70, 50 un 30% EtOH ekstraktiem. Iegūtajiem eļļas augu spraukumu ekstraktiem tika novērota laba aizsardzība pret UV-B starojumu, salīdzinot ar sintētisko UV filtru benzofenonu-3, kuru izmanto kosmētiskajā rūpniecībā saulēšanas līdzekļu izgatavošanai. Taču ekstraktu UV filtru īpašības ir daudz zemākas par etilheksilsalicilātu un etilheksilmetoksicinnamātu.

Darbā ir novērota sakarība starp KPS, SPF un antiradikāļu aktivitāti. Lielākas KPS un SPF vērtības, kā arī antioksidantu aktivitātes tika novērotas visu augu 70% EtOH ekstraktiem, bet mazākas – H₂O ekstraktiem; 50 un 30% EtOH ekstrakti uzrāda labākus rezultātus, nekā 96% EtOH ekstrakti.

LITERATŪRA

- [1] Rosa, E.; Amaral, Q. D. F.; Duarte J. A.; Limberger, J. T.; Chaves, P. E. E.; Zuravski, L.; Oliveira, L. F. S.; Machado, M. M. *J. Funct. Foods* **2017**, *38*, 505.
- [2] Mbanga, L.; Mulenga, M.; Mpiana, P. T.; Bokolo, K.; Mumbwa, M.; Mvingu, K. *Int. J. Adv. Res. Chem. Sci.* **2014**, *1*(8), 7.
- [3] Marto, J.; Gouveia, L. F.; Chiari, B. G.; Paiva, A.; Isaac, V.; Pinto, P.; Simoes, P.; Almeida, A. J.; Ribeiro, H. M. *Ind. Crops Prod.* **2016**, *80*, 93.

Antioxidant and UV filter properties of oil plant meal. In this work three extracts of oilseed meals were obtained. 96, 70, 50, 30% EtOH and water was used as extrahent. TPC of extracts was detected by Folin-Denis method. Antioxidant activity was investigated using DPPH and GO radical inhibition method. The protective ability of plant extracts against UV-B radiation was demonstrated as SPF. From the obtained data it is seen that the best polyphenolic content, the highest antiradical activity and SPF values was determined in 30, 50 and 70% EtOH extracts.

Sleitera orbitāļu izmantošana vienkāršota molekulāro svārstību modeļa izstrādē

Ingvars Vitenburgs, Antons Miščenko (Rīgas Valsts 1. ģimnāzijas 11. klases skolēni)

Dr. chem. Māris Turks (zinātniskais vadītājs)

Rīgas Valsts 1. ģimnāzija

e-pasts: ingvarsvitenburgs@gmail.com, antons.michenko@gmail.com

Molekulārās svārstības mēdz simulēt interpretējot molekulas kā masu un atsperu sistēmas. Masas atomiem ir precīzi izrēķinātas, bet atsperu konstantes ir pieejamas tikai dažām populārākajām saitēm. Mēs izveidojām vienkāršotu modeli, kas ļauj izrēķināt šīs konstantes saitēm starp atomiem ar kārtas skaitli līdz 86. Šis modelis palīdzētu izprast gāzveida multiatomāras molekulas, kuras vēl nav sintezētas, piemēram, simulēt to FT-IR spektrus.

Lai raksturotu elektronu izkārtojumu ap atomiem, tika izmantotas Sleitera viļņa funkcijas^[1], jo tās ir vienkāršas, vienlaikus saglabājot precizitāti. To izmantojot var izvest elektrona lādiņa blīvumu ap atomu, tuvināti ņemot vērā tikai ārējo čaulu

$$\rho(x) = \frac{dQ}{dV} = -e_0 N^2 x^{2n-2} e^{-2\xi x}, \quad (1)$$

kur N ir normalizācijas konstante, n ir atoma ārējās čaulas kvantu skaitlis un ξ ir ārējās čaulas aizsargkonstante^[2]. Izmantojot kulona likumu var izvest mijiedarbības spēku starp atomiem

$$F(d) = k \frac{e^2}{d^2} + k \frac{e}{d^2} \int_0^d 4\pi r^2 \left[\rho_1\left(\frac{r}{r_0}\right) + \rho_2\left(\frac{r}{r_0}\right) \right] dr + 4\pi^2 k \int_0^{\pi} \left[\int_0^{\pi} r^2 \rho_2\left(\frac{l}{r_0}\right) dl \right] \left[\int_0^{\pi} \rho_1\left(\frac{\sqrt{r^2 + d^2 - 2rd \cos \alpha}}{r_0}\right) \sin 2\alpha d\alpha \right] dr, \quad (2)$$

kur ρ_1 un ρ_2 ir attiecīgo atomu lādiņa blīvumi un r_0 ir Bora rādiuss. Atsperu konstanti var izrēķināt iegūstot funkcijas atvasinājuma vērtību līdzsvara attālumā. Gadījumā, ja saite ir, piemēram, trīskārša, tad attiecīgi trīs reizes atsperes saslēdz paralēli. Mēs aprēķiniem izmantojām *Wolfram Mathematica 11.0* datorprogrammu. Piemērs vielai HCl ir dots darba pielikumā.

Lai salīdzinātu modeļa rezultātus ar eksperimentālajiem datiem, mēs sintezējām 9 gāzveida vielas un nomērījām to svārstību frekvences izmantojot FT-IR spektroskopijas metodi, un tad salīdzinājām ar tām, ko var aprēķināt ar modeli. 1. tabulā ir attēlotas modeļa aprēķinātas

frekvences un to novirzes no eksperimentāli iegūtajām, un 2. tabulā ir dažas jaunas atsperu konstantes

1. tabula. Aprēķinātās svārstību frekvences sintezētajām vielām

Vielā	Efektīvā atsperes konstante, N/m	Aprēķinātais viļņa numurs, cm^{-1}	Relatīvā novirze
HCl	573	3150	9%
HBr	447	2761	8%
HI	307	2283	2%
HF	1303	4807	21%
CO	1996	2222	4%
NO	1411	1791	5%
BrCl	495	585	33%
ICl	355	466	24%

2. tabula. Jauni aprēķinātās atsperu konstantes

Vielā	Efektīvā atsperes konstante, N/m	Aprēķinātais viļņa numurs, cm^{-1}
AtF	286	528
BrF	662	479
IF	392	635
SO	1386	1485

LITERATŪRA

[1] Slater, J. C. *Phys. Rev.* **1930**, *36*, 57.

[2] Clementi, E.; Raimondi, D. L. *J. Chem. Phys.* **1963**, *38*, 2686.

Creation of a molecular vibration model using slaters orbitals. A simplified model for calculating the spring constants for bonds using Slaters wavefunction is created. The error is 2% HI to 33% for BrCl, when comparing vibrational wavenumbers, obtained by FT-IR spectroscopy.

1,2-Propāndiola oksidēšana ar molekulāro skābekli cēlmetālu katalizatoru klātbūtnē

Jevgēnija Vladiko (4.kursa Ķīmijas bakalaura programmas studente)

Dr.chem. Svetlana Čornaja, *Dr.chem.* Svetlana Žižkuna (zinātniskās vadītājas)

Ķīmijas katedra, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte, Rīgas Tehniskā universitāte
e-pasts: jevgenija.vladiko@edu.rtu.lv

Vēl nesen pienskābi izmantoja salīdzinoši nelielā daudzumā. To izmantoja kosmētikā, krāsu izgatavošanai, tekstilrūpniecībā, pārtikas rūpniecībā utt. Pienskābes pieprasījums strauji pieaug pateicoties tam, ka no pienskābes iegūst polipienskābi, kura ir bioloģiski noārdāms polimērs. Kā viens no labai draudzīgākajiem 1,2-propāndiola (1,2-PDO) pārstrādes veidiem tiek pētīta selektīva 1,2-PDO oksidēšana ar molekulāro skābekli heterogēnu katalizatoru klātienē. Kā katalizatorus izmantoja zeltu, platīnu un pallādiiju saturošus uznestus katalizatorus.

Darba mērķis bija pētīt katalizatoru dabas un sastāva kā arī oksidēšanas apstākļu ietekmi uz 1,2-PDO konversiju un produktu selektivitāti. Pētījumos tika izmantoti slēgta tipa periodiskās darbības un autoklāva tipa reaktori.

Eksperimentāli noteikts, ka zeltu saturošie katalizatori ir katalītiski aktīvākie 1,2-PDO oksidēšanas ar molekulāro skābekli procesā. Visos gadījumos kā pamatprodukts tika iegūta pienskābe, bet kā blakusprodukti – etiķskābe un skudrskābe. Oksidēšanas apstākļi ietekmes pētījumos izmantoja divus visaktīvākos 4.8wt% Au/TiO₂ un 4.8wt% Au/Al₂O₃ katalizatorus. Eksperimentos variēja 1,2-PDO un zelta daudzumu attiecību $n(1,2-PDO)/n(Au)$, sākotnēju 1,2-PDO koncentrāciju, skābekļa spiedienu, sākotnēju NaOH koncentrāciju un temperatūru. Noskaidrots, ka minēti parametri, izņemot sākotnēju 1,2-PDO koncentrāciju būtiski ietekme 1,2-PDO konversiju.

Attiecības $n(1,2-PDO)/n(Au)$ palielināšana ievērojami samazina 1,2-PDO konversiju (no 92 % pie $n(1,2-PDO)/n(Au) = 2000$ līdz 21 % pie $n(1,2-PDO)/n(Au) = 6000$ 4.8wt% Au/TiO₂ katalizatora klātbūtnē). Pie tam selektivitāte pēc pienskābes būtiski nemainās atkarībā $n(1,2-PDO)/n(Au)$ un svārstās robežās 75 – 95 % atkarībā no 1,2-PDO konversijas pakāpes. Līdzīga atkarība tika novērota arī 4.8wt% Au/Al₂O₃ katalizatora.

Noteikts, ka skābekļa spiediena paaugstināšana no 2 līdz 6 atm ievērojami uzlabo 1,2-PDO konversiju (piem. 4.8wt% Au/TiO₂ katalizatora klātbūtnē no 55 līdz 81 %, pie $n(1,2-PDO)/n(Au) = 4000$, $c_0(1,2-PDO) = 0.3$ mol/L, $c_0(NaOH) = 1.5$ mol/L, $t = 60$ °C). Pienskābes selektivitāte nemainās atkarība no $p(O_2)$ un nedaudz svārstās diapazonā 82 – 93 %.

Nātrija hidroksīda sākuma koncentrācijas palielināšana no 0.5 līdz 2.0 mol/L ievērojami uzlabo katalizatoru aktivitāti un 1,2-PDO konversija pieaug attiecīgi no 9 līdz 98 % (4.8wt% Au/TiO₂ katalizatora klātbūtnē). Bet selektivitāte pēc pienskābes svārstās robežās 81 – 93 %. Vislielākā pienskābes selektivitāte bija pie $c_0(NaOH) = 1.5$ mol/L.

Pētot temperatūras ietekmi uz 1,2-PDO konversiju tika noteikta reakcija aktivācijas enerģija 90 ± 10 kJ/mol.

Noteikti optimāli apstākļi 1,2-PDO oksidēšanas $n(1,2-PDO)/n(Au) = 4000$ mol/L, $(1,2-PDO) = 0.3$ mol/L, $c_0(NaOH) = 2$ mol/L, $p(O_2) = 6$ atm, $t = 60$ °C).

1,2-Propanediol oxidation with molecular oxygen in presence of novel heterogeneous catalysts. 1,2-Propanediol selective oxidation with molecular oxygen in presence of heterogeneous catalyst is one of the most nature-friendly 1,2-propanediol conversion methods. This work demonstrates novel metal-containing catalysts' activity and selectivity in a 1,2-propanediol oxidation process. The main product of 1,2-propanediol catalytic oxidation was lactic acid, by-products were acetic and formic acids. It was found that Au-based catalysts are best for 1,2-propanediol oxidation in alkaline water solutions. It was shown that the activity of the catalysts depends on 1,2-propanediol/Au molar ratio ($n(1,2-propanediol)/n(Au)$), oxygen pressure, NaOH initial concentration and temperature. The best result was achieved using the 4.8wt% Au/TiO₂ catalyst: selectivity by lactic acid was 89 % with 1,2-propanediol conversion 98 % ($c_0(1,2-propanediol) = 0.3$ mol/L, $p(O_2) = 6$ atm, $n(1,2-propanediol)/n(Au) = 4000$, $t = 60$ °C, $c_0(NaOH) = 2$ mol/L).

Arilmetilmeldrumskābju un klasisko antioksidantu mijiedarbības pētījumi

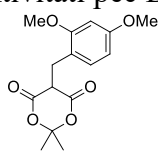
Vija Vovka (2. kursa Ķīmijas tehnoloģijas maģistra programmas studente)

Dr. chem. Inese Mierīņa (zinātniskā vadītāja)

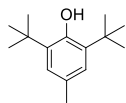
Organiskās ķīmijas tehnoloģijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte
e-pasts: mnimum@gmail.com

Arilmetilmeldrumskābes ir jauna antioksidantu klase, kas parādījusi labu antiradikālu aktivitāti DPPH un GO testos [1]. Ņemot vērā ka arilmetilmeldrumskābes ir maz pētītas, ir interesanti salīdzināt šos savienojumus ar zināmiem antioksidantiem (AO) un atrast kādas mijiedarbības, tos lietojot vienlaicīgi.

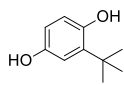
Šim nolūkam izvēlējamies klasiskos antioksidantus – fenola atvasinājumus (BHT, TBHQ, α -tokoferolu (TOC), kvercētīnu (QUERC)) un polialkēnus (β -karotīnu (CAR)). Katram no šiem savienojumiem veicām atsevišķi testus uz antiradikālu aktivitāti izmantojot DPPH un GO brīvos radikālus un saražējam savienojumus pēc to aktivitātes. Antioksidantu inhibīcijas spēja DPPH testā samazinās sekojošā secībā: TBHQ > TOC > QUERC > MS > BHT > CAR un līdzīgi arī GO testā: QUERC > TBHQ > TOC > BHT > MS > CAR. Lai pētītu arilmetilmeldrumskābju un klasisko antioksidantu mijiedarbību, pētījām to maisījumu antiradikālu aktivitāti pēc DPPH un GO testa.



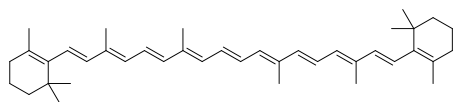
MS



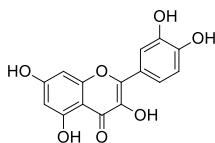
BHT



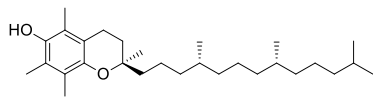
TBHQ



CAR



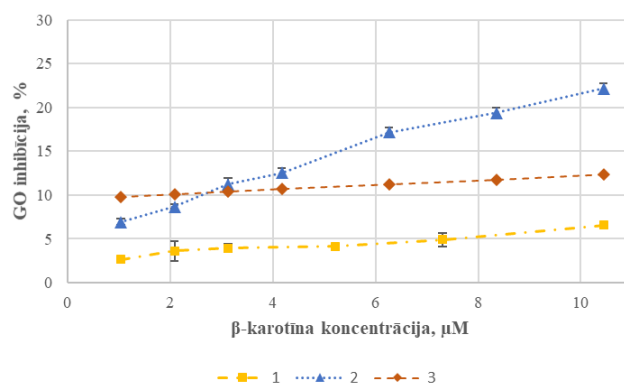
QUERC



TOC

Ar spēcīgākajiem antioksidantiem (TBHQ, TOC, QUERC) maisījuma aktivitāte bija nedaudz augstāka nekā arilmetilmeldrumskābei, ja klasiskā antioksidanta koncentrācija bija mazāka nekā tā IC₅₀ vērtība. Ar vājākiem antioksidantiem (BHT) maisījumā noteicoša ir arilmetilmeldrumskābes aktivitāte. GO testā visos gadījumos, izņemot MS+CAR, maisījuma antiradikālu aktivitāte izpaužas kā atsevišķa spēcīgākā antioksidanta aktivitāte.

Sinergisku mijiedarbību izdevās novērot tikai maisījumā arilmetilmeldrumskābe+ β -karotīns gan DPPH, gan GO testos.



1. att. Sinerģijas piemērs maisījumam arilmetilmeldrumskābe+ β -karotīns salīdzinot ar atsevišķo komponentu inhibīciju GO testā, kur 1 – β -karotīna inhibīcija, 2 – maisījuma eksperimentālā inhibīcija, 3 – maisījuma teorētiskā inhibīcija

LITERATŪRA

- [1] Mierina, I.; Jure, M.; *Eur. J. Lipid Sci. Technol.* **2017**, *119*, article no. 1700172

The studies on interaction of arylmethyl Meldrum's acids with classic antioxidants. In this work we investigated the activity of arylmethyl Meldrum's acid (MS) and several antioxidants by DPPH and GO assays. After categorizing antioxidants by their inhibition power we examined their interactions with Meldrum's acid derivative. In case of arylmethyl Meldrum's acid with β -carotene we observed synergy both in DPPH and GO assays.

Sulfonilgrupas dancis azidopurīnu atvasinājumu sintēzē

Jānis Miķelis Zaķis (4. kursa Ķīmijas tehnoloģijas bakalaura programmas students)

Dr.chem. Māris Turks, *Dr.chem.* Irina Novosjolova (zinātniskie vadītāji)

OĶTI, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,

Rīgas Tehniskā universitāte

e-pasts: janismikzakis@gmail.com

Tiopurīnu atvasinājumiem ir liela loma medicīnā [1]. Tos plaši izmanto vēža un autoimūno saslimšanu ārstēšanai, kā piemēru var minēt tādus preparātus kā merkaptopurīns un tioguanīns [1].

Pētījuma mērķis ir metodes optimizācija sulfonilgrupas pārgrupēšanas reakcijai, kas iepriekš tika atklāta mūsu grupā [2]. Mērķa savienojumi **6** tika iegūti četrpakāpju sintēzē sākot no 2,6-dihlor-9H-purīna **1**. Savienojums **2** tika iegūts Mitsunobu reakcijā starp 2,6-dihlor-9H-purīnu **1** un *n*-heptanolu un tālāk izmantots S_NAr reakcijās ar dažādiem tioliem, veidojot produktus **3**, kuri tika oksidēti līdz sulfoniem **4**. Oksidēšanai sākotnēji tika izmantots H₂O₂ ūdens šķīdumu un TFA, bet metodes optimizācijas rezultātā TFA aizvietošana ar TFAA deva labākus rezultātus. Savienojuma **6** sintēzes optimizēšanai tika izmēģināti dažādi šķīdinātāji, temperatūras un reaģentu attiecības, un vislabākie rezultāti tika sasniegti izmantojot 1.05 ekv. NaN₃ un DMSO kā šķīdinātāju.

No iegūtajiem rezultātiem tika secināts, ka sulfonilgrupas danci iespējams veikt, izmantojot dažādus sulfonilaizvietotājus, kas dod metodei plašu pielietojumu purīna sulfonilatvasinājumu sintēzē.

Aplūkojot visus izmantotos substrātus, vislabākie iznākumi tika iegūti arilsulfonu gadījumā.

1.tabula. Sulfonilatvasinājumu sintēžu rezultāti

R	Izdalītais iznākums, %		
	2→3	3→4	4→6
cikloheksil-	86	76*	47**
dodecil-	94	84	72
oktil-	57	87	52
fenil-	75	82	77
2-feniletil-	94	83	39
<i>p</i> -hlorfenil-	92	78	83
<i>p</i> -bromfenil-	95	85	80
<i>i</i> -propil-	79	89	70

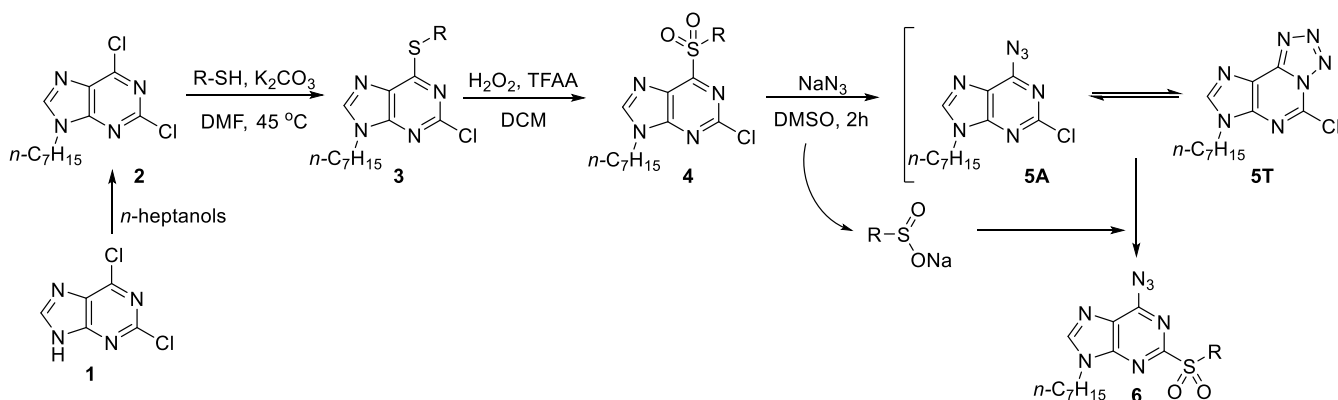
* TFA + H₂O₂

** konversija ~80%

LITERATŪRA

- [1] Sahasranaman, S., Howard D., Roy S. *Eur. J. Clin. Pharmacol* **2008**, *64*, 753–767.
- [2] Ozols, K., Study on nucleophilic heteroaromatic substitution in purine cycle. Maģistra darbs, Rīgas Tehniskā universitāte, Rīga, 2017.

Sulfonyl group dance in synthesis of azidopurine derivatives. A new method for synthesis of 6-azido-2-sulfonylpurine derivatives was developed, by 6-sulfonylpurine derivative rearrangement via sulfonyl group dance using NaN₃ and DMSO at r.t, providing yields 39-83%.



1.shēma. Sulfonilgrupas dancis azidopurīnu atvasinājumu sintēzē.

Arilmetilmeldrumskābju dendrimērie antioksidanti

Elīna Zoltnere (4.kursa Ķīmijas tehnoloģijas bakalaura programmas studente)

Dr. chem. Inese Mieriņa (zinātniskā vadītāja)

Organiskās ķīmijas tehnoloģijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,

Rīgas Tehniskā universitāte

e-pasts: elina.zoltnere@gmail.com

Literatūrā ir zināms, ka arilmetilmeldrumskābju atvasinājumi ir spēcīgi antioksidanti un brīvo radikāļu uztvērēji [1]. Savukārt, dendrimēri ir lielisks veids kā vienā molekulā ieviest vairākus fragmentus ar antiradikāļu un antioksidantu aktivitāti. Piemēram, šādu stratēģiju izmantoja, lai vienā molekulā piesaistītu vairākus 2,6-dimetoksifenola [2] un karbazola [3] fragmentus. Ņemot to par piemēru, šeit mēs prezentējam pirmos dendrimēros antioksidantus ar meldrumskābes atlikumiem kā virsmas grupām.

Lai iegūtu jaunus dendrimēros antioksidantus, kas satur vairākus arilmetilmeldrumskābju fragmentus tika izmantota 1.shēmā dotā reakciju sekvence. Mērķsavienojumu **1** sintēzi uzsākām ar vanilīna (**2**) alkilēšanu, tālāk dažādu (poli)hidroksibenzolu **3** alkilēšanu ar bromīdu **4**. Iegūtos savienojumus **5** reakcijā ar meldrumskābi (**6**) pārvērtām par arilidēnmeldrumskābēm **7**, kuras reducējām par arilmetilmeldrumskābēm **1**.

Arilmetilmeldrumskābju atvasinājumu brīvo radikāļu slāpēšanas spējas noteikšanai izmantojām DPPH un GO metodi. Savienojumu antioksidantu aktivitāti izteicām AA un IC₅₀ vērtībās. Sintezētie savienojumi uzrāda augstu antiradikāļu aktivitāti,

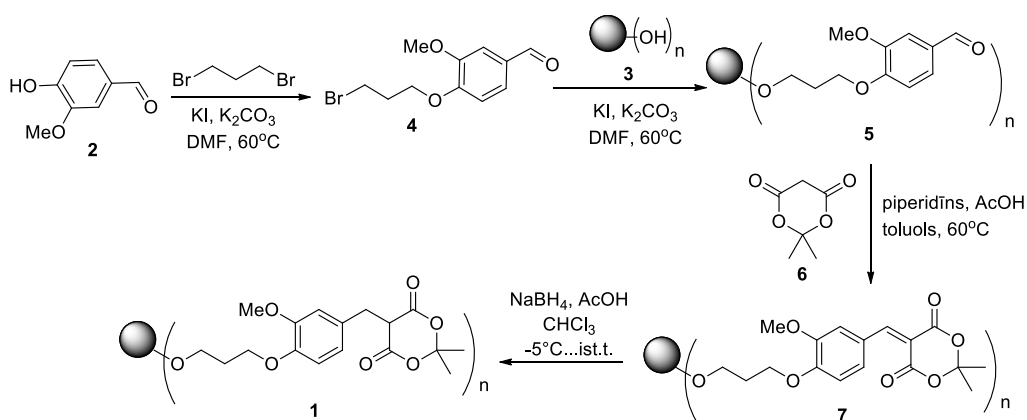
savienojumi uzrāda 2-3 reizes augstāku antiradikāļu aktivitāti nekā komerciāli pieejamais antioksidants BHT. Salīdzinot ar monoaižvietotām meldrumskābēm sintezētie savienojumi uzrāda līdzvērtīgu un augstāku antiradikāļu aktivitāti.

LITERATŪRA

- [1] Mierina, I.; Jure, M.; Zeberga, S.; Makareviciene, V.; Zicane, D.; Tetere, Z.; Ravina, I. *Eur. J. Lipid Sci. Technol.* **2017**, *119*(11).
- [2] Lee, C. Y.; Sharma, A.; Uzarski, R. L.; Cheong, J. E.; Xu, H.; Held, R. A.; Upadhaya, S. K.; Nelson, J. L. *Free Radic. Biol. Med.* **2011**, *50*, 918.
- [3] Lee, C. Y.; Nanah, C.; Held, R.; Clark, A.; Huynh, U.; Pressnall, M.; Uzarski, R. L.; McCracken, J.; Sharma, A. *Biochimie.* **2015**, *111*, 125.
- [4] Rajakumar, P.; Venkatesan, N.; Sekar, K.; Nagaraj, S.; Rengasamy, R. *Eur. J. Med. Chem.* **2010**, *45*, 1220.

Dendrimeric antioxidants of arylmethyl Meldrum's acids.

In order to obtain new dendrimeric antioxidants containing several moieties of arylmethyl Meldrum's acid a reaction sequence involving alkylation of (poly)ol **3**, with aldehyde moiety containing reagent **4**, Knoevenagel condensation between compounds **5** and **6**, followed with reduction was elaborated. Antiradical activity of the obtained dendrimeric derivatives of Meldrum's acid was determined according to DPPH and GO tests.



1.shēma. Arilmetilmeldrumskābju **1** sintēzes shēma

Oktacianometilēnaizvietota *s*-indacēna-1,3,5,7(2*H*,6*H*)-tetraona akceptoru fragmentu saturošu hromoforu sintēze un to optiskās īpašības

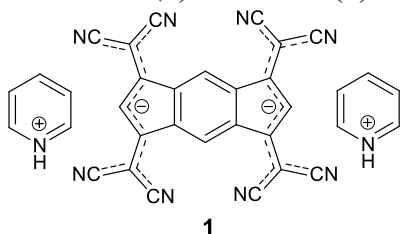
Arnis Žagata (2. kursa ķīmijas tehnoloģijas bakalaura programmas students)

Dr. chem. Kaspars Traskovskis, Dr. chem. Valdis Kokars (zinātniskie vadītāji)

Lietišķās ķīmijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte, Rīgas Tehniskā universitāte
e-pasts: arniszagata@inbox.lv

Balstoties uz to, ka *s*-indacēna-1,3,5,7(2*H*,6*H*)-tetraona ("Janus diona") akceptoru saturošiem D- π -A hromoforiem piemīt trešās kārtas nelineāri optiskie efekti [1], tika izvirzīts mērķis- sintezēt līdzīgas struktūras elektronu akceptoru fragmentu ar spēcīgāku akceptoru spēju, uz tā bāzes veikt hromoforu sintēzi un sākt to optisko īpašību mērījumus.

Šis mērķis tika realizēts, aizstājot "Janus diona" karbonilgrupas ar dicianometilēn grupām. Iegūtais akceptors dipiridīnija sāls formā (**1**) (1. att.) analogiski "Janus dionam" tika pielietots tālākās kondensācijas reakcijās, kuru rezultātā tika iegūti D- π -A hromofori (2. att.) ar donorajiem fragmentiem uz indola (**2**) un anilīna (**3**) bāzes.

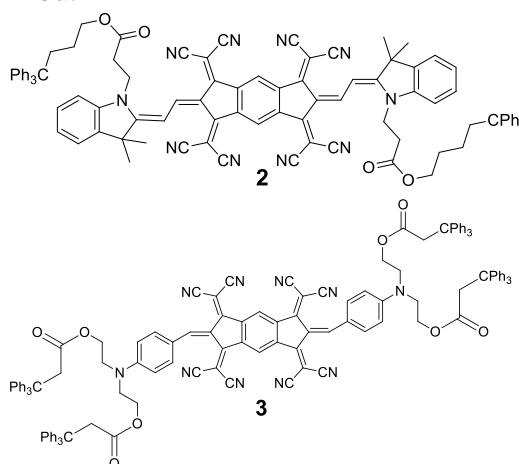


1

1.att. Oktacianometilēnaizvietota 'janus diona' dipiridīnija sāls.

Optiskās īpašības tika pētītas izmantojot UV-Vis spektroskopiju. Iegūtie rezultāti CHCl₃ šķīdumā: "Janus diona" akceptora hromoforam ar donoru uz anilīna bāzes $\lambda_{\max}=546$ nm, $\epsilon=200054$ M⁻¹cm⁻¹, **2** hromoforam $\lambda_{\max}=638$ nm, $\epsilon=130386$ M⁻¹cm⁻¹, **3** hromoforam $\lambda_{\max}=704$ nm, $\epsilon=76206$ M⁻¹cm⁻¹. Izteikta batohromā absorbcijas maksimumu nobīde apstiprina, ka jauniegūtais elektronu akceptors ir spēcīgāks par "Janus dionu". Pēc veiktajiem kvantu ķīmiskajiem aprēķiniem tika secināts, ka, palielinot π tiltiņa garumu starp indacēna un elektrondonorā fragmenta cikliem (salīdzinot struktūras **3** un **2**), ir iespējams samazināt stērisko atgrūšanās efektu

izsaukto akceptorā fragmenta deformāciju, tādējādi palielinot hromofora absorbcijas koeficienta vērtību.



2. att. Sintezētie D- π -A hromofori.

LITERATŪRA

- [1] R. D. Breukers, A. P. Middleton et al., *Proc. of SPIE* **2013** Vol. 8827 88270N-1.

Synthesis and optical properties of chromophores containing octacyanomethylene substituted *s*-indacene-1,3,5,7(2*H*,6*H*)-tetraone electron acceptor fragment. D- π -A chromophores with octacyanomethylene substituted *s*-indacene-1,3,5,7 (2*H*, 6*H*) -tetraone electron acceptor were synthesized in condensation reactions with indole and aniline based electron donor groups. The initial optical properties were investigated using UV-Vis spectroscopy. The obtained results in CHCl₃ solution are following: for the indole donor based chromophore $\lambda_{\max}=638$ nm, $\epsilon=130386$ M⁻¹cm⁻¹ and for aniline donor based chromophore: $\lambda_{\max}=704$ nm, $\epsilon=76206$ M⁻¹cm⁻¹. The results of quantum chemical calculations revealed that an increase of the length of the π bridge between indacene and electron donor rings reduces the structural deformation of the acceptor moiety, thereby increasing the value of the chromophore absorption coefficient.

**SILIKĀTU, AUGSTTEMPERATŪRAS UN
NEORGANISKO NANOMATERIĀLU TEHNOLOĢIJAS
SEKCIJA**

Liepas māli kompozīta materiāla iegūšanai

Alise Bētiņa (2. kursa bakalaurante)

Dr. sc. ing. Ruta Švinka (zinātniskā vadītāja)

*Silikātu materiālu institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte*

Latvijas mālu sastāva dažādība dod iespēju piemēklēt atbilstošākos tāda kompozīta materiāla iegūšanai, kas sastāv no keramikas un aktīvās ogles ar iespējami labākām adsorbenta īpašībām. Kompozītu iegūšanas tehnoloģija ietekmē produkta fizikāli ķīmiskos raksturlielumus.

Mērķis. Iegūt kompozītu, kas sastāv no dehidrosilētiem māliem un aktīvās ogles ar labām adsorbenta īpašībām. Aktivēto ogli iegūst koksnes pirolīzes procesā, bet tās aktivācija notiek paša materiāla iegūšanas procesa laikā.

I. Kompozīta materiāla paraugu iegūšanai izmanto Liepas pelēkos un sarkanos devona mālus (71%), koksnes skaidas (29%), karboksimetilcelulozi, destilētu ūdeni. Sajauc komponentes, ar rokām veido bumbiņas, žāvē. Apdedzināšana notiek jau uzkarstētā krāsnī 800, 900 un 1000°C temperatūrās 5 minūtes. Kompozīta materiāla paraugu kristālisko fāžu sastāvu nosaka ar rentgenstaru pulvera difrakcijas metodi izmantojot Rigaku Ultima + difraktometru. Iegūtajām granulām nosaka ūdens uzsūci, poru tilpumu un īpatnējo virsmas laukumu ar slāpekļa adsorbcijas (BET) metodi. Adsorbcijas spēju attiecībā uz jodu nosaka, izmantojot 0,01 N I₂ šķīdumu un titrējot ar nātrija tiosulfātu cietes kā indikatora klātbūtnē. Zeta potenciālu, kas raksturo virsmas lādiņu, mēra ar Malvern Zetasizer N

iekārtu, metilēnzilā adsorbciju granulas ievietojot 0,01 % šķīdumā.

Ar skenējošo elektronu mikroskopu Hitachi TM3000 iespējams vizuāli analizēt kompozīta materiāla struktūras dažādību, kas palīdz analizēt iegūtos rezultātus.

II. Pēc iegūtajiem rezultātiem - kompozīta materiāla adsorbcijas īpašības ir atkarīgas no izmantotajiem māliem un apdedzināšanas temperatūras.

Apdedzinot 1000°C temperatūrā mālu minerāls illīts ir pilnīgi sadalījies, 800°C koksnes pirolīzes procesā ir izveidojies čaolīts – oglekļa kristāliskā modifikācija, bet 1000°C čaolīts pāriet grafitā - notiek oglekļa polimorfo modifikāciju maiņa. Ar to arī izskaidrojama 1000°C apdedzinātā materiāla mazākā adsorbcijas spēja, jo grafitam ir cita kristāliskā struktūra ar samērā mazu sorbcijas spēju.

Obtaining of a composite materials from clay of deposit Liepa. Composite material obtained from clay Liepa and wooden sawdust was fired at the temperatures 800, 900, 1000°C for 5 min. Composite material of activated carbon and dehydroxylated clay in pyrolysis process of wooden sawdust together with clay was obtained. This material has good adsorption properties and these properties depends on the thermal treatment temperature which causes change in the crystal structure of activated carbon. Illite after thermal treatment at temperature above 900°C was fully decomposed.

Zemtemperatūras ZnO un Cu_xO-ZnO heterostruktūru sintēze stiklveida un auduma virsmu modifikācijai

Raivis Eglītis (2. kursa maģistrants)

Dr. sc. habil. ing. Gundars Mežinskis (zinātniskais vadītājs)

*Silikātu materiālu institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte*

ZnO ir pusvadītājs ar plašām pielietošanas iespējām. No visiem ZnO nanostruktūru veidiem visplašāk pētītākais ir tieši nanostienīši. Viena no populārākajām ZnO stienīšu sintēzes metodēm ir hidrotermālā sintēze, taču salīdzinoši maz pielietota ir *ķīmiskā audzēšanas metodeūdenī (aquatic chemical growth - ACG)*, kas sevī ietver vēl zemākas temperatūras par hidrotermālo sintēzi. ACG metodē nav nepieciešami speciāli augstspiediena autoklāvi, kas to padara ekonomiski izdevīgu.

Darba mērķis: Pētīt ZnO nano un mikro struktūru iegūšanas iespējas, izmantojot ACG tehnoloģiju. Pētīt Cu_xO-ZnO heterostruktūru iegūšanas iespējas ar šo pašu metodi uz stikla un auduma virsmām.

Darbā tika sintezētas ZnO un Cu_xO-ZnO nano un mikro struktūras gan uz stikla, gan auduma substrātiem. Sintēzēs tika izmantots cinka acetāta dihidrāts Zn(Ac)₂•2H₂O kā arī vara acetāta hidrāts Cu(Ac)₂•H₂O un heksametilēntetramīns HMTA. Iegūtie pārklājumi un stienīši tika pētīti izmantojot skenējošo elektronu mikroskopiju, rentgenstaru difrakciju, Ramaņa spektroskopiju, kā arī UV/Vis absorbciju. Tika noteikta arī fotokatalītiskā aktivitāte.

Darbā ir atrastas sakarība starp vara un cinka acetātu koncentrāciju attiecības ietekmi uz reakcijas ātrumu un pārklājumu augšanas ātrumu, kā arī

iegūstamo morfoloģiju. Noskaidrota prekursora ietekme uz rezultējošo struktūru izmēriem un formu, kā arī pēcapdedzināšanas temperatūras ietekme uz ZnO mikrostruktūrām. Darbā tika novērots, ka struktūras ir stabilas līdz apmēram 500 °C. Pie augstākām temperatūrām sāk notikt deformācijas kristāliskajā režģī, kā arī samazinās skābekļa daudzums struktūrās, veidojot nestehiometriskus savienojumus. Tika iegūti ZnO mikrostienīši ar Cu₂O piejaukumu kā arī Cu₂O mikrolodītes ar ZnO piejaukumu.

Low-temperature synthesis of ZnO and Cu_xO-ZnO heterostructures on glass and fabric substrates. In this work ZnO nano and microstructures with different Cu_xO content were synthesized on both glass and cotton substrates by using a low-temperature aquatic chemical growth method. The influence of post-synthesis heat treatment was also evaluated. All the samples were studied using scanning electron microscopy, X-ray diffraction, Raman spectroscopy as well as UV/Vis absorbance. The photocatalytic activity of a majority of the samples was also evaluated under UV light by using methyl-orange as a colorant. It was determined that the structures are thermally stable up to 500 °C. Deformation of crystalline lattice begun to happen as well as the amount of oxygen in the structures decreased creating non-stoichiometric compounds at higher temperatures. ZnO microrods doped with Cu₂O as well as Cu₂O microspheres doped with ZnO were obtained.

Alumīnija oksīda keramika ar divējādiem poru veidotājiem

Armands Maļeckis (3. kursa bakalaurants)

Dr. sc. ing. R. Švinka; Dr. habil. sc. ing. V. Švinka (zinātniskie vadītāji)

*Silikātu materiālu institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte*

Augsti porainu alumīnija oksīda (Al_2O_3) keramiku plaši izmanto siltumizolācijai ķīmiskās stabilitātes un mazas siltuma vadīšanas dēļ, tāpēc pēdējos gados tiek veikti vairāki pētījumi materiāla īpašību, tādu kā porainība un spiedes stiprība, uzlabošanai. Viens no iespējamajiem veidiem Al_2O_3 keramikas porainības palielināšanai ir apdedzināšanas laikā izdegošu materiālu pievienošana.

Mērķis. Noskaidrot, kā mikrokristāliskās celulozes sfēras ietekmē porainā Al_2O_3 keramiskā materiāla īpašības (ūdens uzsūci, porainību, tilpuma masu, spiedes stiprību).

Darbā tika pētīti paraugi, kas iegūti, izmantojot gāzbetona tehnoloģiju. Izejvielas (γ - Al_2O_3 (d50 = 80 μm , Nabalox NO 201, Nabaltec AG, Germany); α - Al_2O_3 (d50 = 3 μm , Nabalox NO 725, Nabaltec AG, Germany); ķīmiski tīrs amorfs SiO_2 (d50 = 3.7 μm , Reachim, Russia); kaolīns MEKA) sākumā sajauc sausā veidā, tad pievieno ūdeni un sajauc slapjā veidā. Pēc homogēna maisījuma iegūšanas pievieno alumīnija (Al) pastu (d50 = 12 μm , Aquapor-9008, Schlenk Metallic Pigments GmbH, Germany), mikrokristāliskās celulozes sfēras (d = 300 μm , J. Rettenmaier & Sohne GmbH+Co, Germany) un turpina sajaukšanu. Maisījumu ielej formā, un stundas laikā, alumīnijam reaģējot ar ūdeni izdalās ūdeņradis; rodas poraina struktūra, kuru 24 stundas žāvē un tad apdedzina (paraugus ar un bez mikrokristāliskās celulozes sfērām apdedzina trīs dažādās temperatūrās – 1500, 1600 un 1700 °C). Ūdens uzsūces un porainības aprēķināšanai paraugi tika vārīti ūdenī 4 stundas. Tilpuma masa tika atrasta, izmantojot hidrostatisko

svēršanu. Fāžu analīzei tika iegūtas difraktogrammas, pielietojot rentgenstaru pulverdifrakcijas metodi (XRD; Rigaku Ultima +, Japan).

Iegūtie rezultāti liecina, ka, pievienojot mikrokristāliskās celulozes sfēras, Al_2O_3 keramikas ūdens uzsūce un porainība samazinās. Tajā pat laikā, mikrokristāliskās celulozes sfēras neietekmē spiedes stiprību. Mikrokristāliskās celulozes sfēras palielina materiāla tilpuma masu, kas varētu būt izskaidrojams ar papildus siltuma izdalīšanos izdegšanas laikā, kas intensificē saķepšanu. Palielinot apdedzināšanas temperatūru, ūdens uzsūce un porainība samazinās, bet tilpuma masa palielinās, kas atbilst saķepšanas teorijai. Spiedes stiprība savukārt ir vienāda, apdedzinot paraugus 1500 un 1600 °C, bet palielinās gandrīz divās reizēs, apdedzinot tos 1700 °C temperatūrā.

Alumina ceramics with two kinds of pore-forming agents.

The aim of this study was to investigate effects of microcrystalline cellulose spheres (pore-forming agent) on alumina ceramics by addition to an initial mixture. Firstly, using aerated concrete technology highly porous alumina ceramics were obtained by slurry casting method (sintering at three different temperatures – 1500, 1600 and 1700 °C) and then water absorption, porosity, bulk density using hydrostatic weighing and compressive strength of samples with and without spheres was measured and for identification of phases XRD diffractograms were used. Results show that water absorption and porosity is lowered and bulk density is increased by adding microcrystalline cellulose spheres. Increase of sintering temperature lowers water absorption and porosity, but at the same time increases bulk density. Compressive strength is approximately the same after sintering at 1500 and 1600 °C, but it increases after sintering at 1700 °C.

Koksnes un degakmens pelnu izmantošana kaļķi saturošos sausajos maisījumos

Aiga Anna Pudule (4. kursa bakalaurante)

Dr. sc. ing. Inna Juhņeviča (zinātniskā vadītāja)

*Silikātu materiālu institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte*

Viens no atkritumu pārstrādes mērķiem ir pārstrādāt bīstamus, kaitīgus materiālus un radīt stabilas struktūras. Igaunijā gada laikā tiek saražoti 5-6 milj. tonnu degakmens pelnu. Tikai 5% šo pelnu tiek atkārtoti izmantoti. SIA "Fortum Latvia" Jelgavas koģenerācijas stacijās gada laikā tiek saražoti ap 4000 tonnu vieglo pelnu. Pelni darbojas kā hidrauliska saistviela līdzīgi kā kaļķis un cements. Turklāt atšķirībā no šiem materiāliem pelni ir pieejami bez maksas. Šobrīd no biokurināmā stacijām tie pārsvarā nonāk izgāztuvēs, par ko uzņēmumiem vēl jāpiemaksā, tādēļ svarīgi atrast pelniem lietderīgu pielietojumu, lai vienlaicīgi samazinātu blakusproduktu, atkritumvielu daudzumu un iegūtu, iespējams, labākas īpašības konkrētam materiālam. Mērķis:

Atrast pielietojumu koksnes un degakmens pelniem, izmantojot tos kā piedevu kaļķi saturošos sausajos maisījumos to salīdzinoši lielā CaO dēļ. Pētījumā izmantotas šādas izejvielas: smiltis (0-1 mm), kaļķhidrāts no Lietuvas (EN 459-1 CL 90-S), kaļķakmens milti 001 (LVS EN 12620:2002+A1:2008) no SIA "Sātiņi-LM, Saldus novads, Latvija, polipropilēna šķiedra (6 mm), MAP-MR, degakmens pelni no Esti Energia Narva Elektrijs AS, Igaunijas (EVS 927:2015), koksnes pelni no SIA "Fortum Latvia" Jelgavas. Izmantotās metodes: svaigas javas izplūde (LVS EN 1015-2:2002), svaigas javas blīvums (LVS EN 1015-6:2002), svaigas javas gaisa saturs (LVS EN 1015-7:2002), ķīmiskā analīze, rentgenstaru difrakcijas analīze (Rigaku X-Ray Ultima+), skenējošā elektronu mikroskopija (Hitachi Tabletop SEM TM3000), diferenciāli termiskā analīze (SETSYS Evolution GA-DTA/TMA SETARAM), spiedes stiprība (LVS EN 196-1:2016), lieces stiprība (LVS EN 196-1:2016), ūdens uzsūce (GOST 7025-78), salizturība (EN 12370:2001; GOST 7025-78), noturība pret šķīstošajiem sāļiem (LVS EN 12370:2001). Salīdzinot SIA "Sakret" izstrādāto sausā maisījuma receptūras parauga HML-1 rezultātus ar paraugiem, kuri satur pelnus, var

secināt, ka koksnes un degakmens pelnus var izmantot materiālu stiprības uzlabošanai sausajos maisījumos. Pelnu klātbūtne sausajos maisījumos palielina ūdens uzsūces spēju, līdz ar to šādus maisījumus nav ieteicams izmantot materiāliem, kurus paredzēts ekspluatēt mitrā vidē. Degakmens pelni materiālam, kas gatavots no sausā maisījuma, piešķir lielāku stiprību nekā koksnes pelni.

LITERATŪRA

- L. Krage, I. Barbane, I. Rozenstrauha, and I. Sidraba, "Latvijas karbonātiežu izmantošanas iespējas kaļķu saistvielu ražošanai," pp. 1–3, 2012.
- J. Setina, V. Akishins, A. Gabrene, and I. Ose, "Latvijas atradņu kvarca smiltis kā pucolāna piedeva betonam," *Mater. Sci. Appl. Chem.*, vol. 29, no. 29, p. 69, 2014.
- M. A. Rashid and M. A. Mansur, "Considerations in producing high strength concrete," *J. Civ. Eng.*, vol. 37, no. 1, pp. 53–63, 2009.
- M. Uysal and V. Akyuncu, "Durability performance of concrete incorporating Class F and Class C fly ashes," *Constr. Build. Mater.*, vol. 34, pp. 170–178, 2012.
- J. D. Bapat, *Mineral Admixtures in Cement and Concrete*. New York: CRC Press, 2012.
- J. M. Teutonico, "A laboratory manual for architectural conservators," ICCROM, pp. 35–36, 1988.
- LVS EN 196-1:2005, *Methods of testing cement-Part 1: Determination of strength*.
- A. R. J. Ločs, J. Ozoliņš, L. Bērziņa-Cimdiņa, K. Morozova, D. Jakoljevs, "Paraugu sagatavošana SEM dažādu materiālu virsmas pētījumiem," *Mater. un lietišķā ķīmija*, vol. 18, pp. 163–170, 2008.

The Use of Wood and Shale Ash in Lime-containing Dry Mixtures. Study investigates usage of wood and shale ash in lime-containing dry mixtures. One of the waste recycling aim is to recycle hazardous, harmful materials and create solid structures. In Estonia, there are produces 5-6 mln. tons of shale ash every year. Only 5 % of that amount is reused. In the "Fortum Latvia" Ltd. (Jelgava, Latvia) cogeneration stations there are produces around 4000 tons of fly ash every year. As the ash acts as a hydraulic binder similar to lime and cement, it could be used to replace several amount of CaO as it contains relatively high amount of it. In addition, unlike lime and cement, ash is available at no cost (free of charge). At present, ash from biofuel stations mostly goes to landfills (companies have to pay for that), is important to find useful applications for ashes to simultaneously reduce the amount of by-products, waste materials and create possibly better properties for a particular material.

Pašizlīdzinošās grīdas uz cementu bāzes

Vineta Vaišļa (4. kursa bakalaurante)

Dr. sc. ing. Inna Juhņeviča (zinātniskā vadītāja)

*Silikātu materiālu institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte*

Pašizlīdzinošās grīdas uz cementu bāzes ir mūsdienīgs un ekonomiski izdevīgs risinājums grīdas segumu izveidei un uzlabošanai kā dzīvojamās, tā arī industriālajās zonās. Sausā maisījuma un ūdens attiecības zemā viskozitāte sniedz labu plūstamību un ļauj materiālam veidot savu līmeni pirms saistīšanās sākuma. Iegūstama gluda grīdas virsma ar augstu spiedes izturību.

Pētījuma mērķis ir sadarbībā ar uzņēmumu SIA Sakret pagatavot pašizlīdzinošo grīdu maisījumu uz portlandcimenta un aluminātcimenta bāzes, kā paraugu izmantojot ķīmisko vielu ražošanas uzņēmuma BASF izstrādātu receptūru, lai iegūtu produktu ar labām mehāniskajām un ķīmiskajām īpašībām, ko realizēt rūpnieciskā apjomā.

Pētījumā kā bāzes izejvielas izmantotas portlandcements CEM I 42,5 R un aluminātcements ar 40 % Al₂O₃. Maisījumu sastāvā izmantotas kvarca smiltis no Bāles atradnes ar graudu izmēru līdz 0,3 mm, kaļķakmens milti, kalcija sulfāta sintētiskais anhidrīds, kalcija sulfāta α -pushidrāts un dažādas ķīmiskās piedevas, kas veic maisījuma īpašību uzlabošanu. Izejvielu raksturošanai izmantota rentgenstaru pulverdifrakcijas analīze (Rigaku X-Ray Ultima+) un diferenciāli termiskā analīze (SETSYS Evolution TGA-DTA/TMA SETARAM). Pašizlīdzinošo grīdu maisījumu pagatavošana veikta izejvielas sverot un maisot kopā ar nepieciešamo ūdens daudzumu. Svaigai javai noteikta plūstamība (manuālais plūstamības galdiņš, atbilstošs EN 1015-3, veidne – cilindrs). Pēc ieliešanas veidnēs, gatavi, sacietējuši paraugi iegūti pēc 4 stundām tos izņemot un veicot cietēšanu 28 dienas. Sacietējušiem paraugiem noteiktas mehāniskās īpašības ar spiedes un lieces pārbaudēm (LVS EN 196-1:2016). Veikta salizturības pārbaude (LVS EN 12371:2010) un noturība pret šķīstošiem sāļiem (LVS EN 12370:2000), kā arī skenējošā elektronu

mikroskopijas analīze (Hitachi Tabletop SEM TM3000) un rentgenstaru pulverdifrakcijas analīze (Rigaku X-Ray Ultima+).

Rentgenstaru pulverdifrakcijas rezultāti liecina, ka paraugi satur etringīta, jafeīta, kalcīta, larnīta un kvarca minerālus. Iegūti paraugi ar augstu spiedes stiprību, kas balstoties uz Eiropas standartu (EN 13892-1:2002) atbilst C40 un C50 klasēm. Augstāki spiedes stiprības rezultāti sasniegti grīdām, kurās lielāks bija aluminātcimenta sastāvs, jo tā ir hidrauliska piedeva, kas spēj paaugstināt materiāla izturību. Augstāki lieces stiprības rezultāti sasniegti grīdām, kurās lielāks ir portlandcimenta sastāvs, jo zemāka aluminātcimenta sastāva dēļ tie ir elastīgāki un ne tik trausli pret lieci.

LITERATŪRA

1. J.Bizzozero. Hydration and dimensional stability of calcium aluminate cement based systems. Doctor dissertation (Dr. sc. ing.), Suisse, 2014.
2. J.Kighelman, R.Zurbriggen, K.Scrivener. Kinetics, shrinkage, microstructures and material properties of self-leveling flooring compounds: A comparison of Portland cement and calcium aluminate cement dominated mixed binders. In Proceedings of the idmmc one. Drymix Mortar Yearbook. Nürnberg, Germany, 2007, 68-75.
3. K.Zeus. Rules for screed materials according to european standards. Otto-Graf-Journal, 12, 2001, 115-126.

Cement-based self-leveling underlayments. Cement-based self-leveling underlayment compounds are studied in the research. Portland cement CEM I 42,5 R and aluminate cement (40 % Al₂O₃) have been used in this study. Obtained results of X-Ray powder diffraction show that samples contain minerals of ettringite, jaffeite, calcite, larnite and quartz. Higher results of compression strength are achieved with samples of greater aluminate cement composition. These results are based on European standard (EN 13892-1:2002) and correspond to classes C40 and C50. Higher results of flexural strength are obtained in underlayments which have greater composition of Portland cement as it is more flexible and not so fragile in bending process.

**VISPĀRĪGĀS ĶĪMIJAS TEHNOLOĢIJAS UN
BIOMATERIĀLU ĶĪMIJAS UN TEHNOLOĢIJAS
SEKCIJA**

Kalcija fosfātu granulu formēšanas tehnoloģijas parametru ietekme uz granulu izmēru sadalījumu

Arta Annija Āboliņa (4. kursa Ķīmijas tehnoloģijas bakalaura programmas studente)

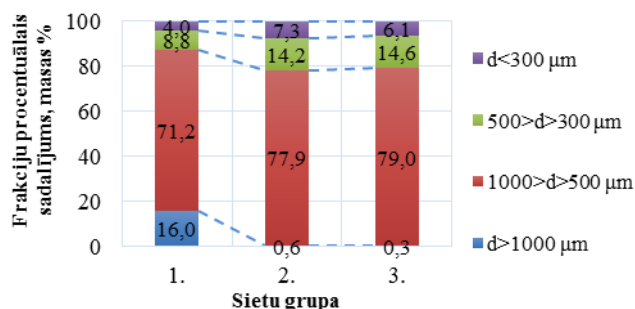
Mg. sc. ing. Marina Sokolova, Mg. sc. ing. Jana Vecstaudža (zinātniskās vadītājas)

Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte
e-pasts: artaannija@gmail.com

Kalcija fosfātu (CaP) granulas ir populāri implantmateriāli, ko plaši izmanto kaulaudu defektu labošanai slodzi nenesošās vietās. CaP uzrāda labu biosaderību un ķīmiskā sastāva līdzību ar kaulaudiem, tādējādi nodrošinot labu kaula un implanta sasaisti [1]. Darbā apskatīta CaP granulu formēšanas procesa parametru (CaP masas mitruma saturs un ekstrudēšanā izmantoto sietu acs izmēri) ietekme uz iegūto granulu izmēru sadalījumu.

Izmantots RTU RBIAC izstrādāts granulēšanas process, kurš sastāv no CaP masas mitruma satursamazināšanas, CaP masas ekstrudēšanas caur sietu, žāvēšanas, atkārtotas ekstrudēšanas, atsiju ($d < 300 \mu\text{m}$) atdalīšanas sijājot ar vibrējošo sietu iekārtu "FRITSCH analysette 3" un augsttemperatūras apstrādes (1150°C , 2h).

Sākotnējais CaP masas mitruma saturs no 76-85 masas% tiek samazināts līdz 60, 65 vai 70 masas%. Ekstrudēšanai izmantoto sietu acs izmēri tiek iedalīti trīs grupās: 1) pirmajā ekstrudēšanā 1,4 mm, otrajā - 1,4 mm; 2) pirmajā - 1,4 mm, otrajā - 1,25 mm; 3) pirmajā - 1,25 mm, otrajā - 1,25 mm.



1. att. Vidējā granulu frakciju sadalījuma atkarība no ekstrudēšanai izmantotās sietu grupas CaP masai ar mitruma saturu 65 masas%.

Pēc termiskās apstrādes granulas tiek iedalītas 4 frakcijās ($d < 300 \mu\text{m}$, $500 > d > 300 \mu\text{m}$, $1000 > d > 500 \mu\text{m}$ un $d > 1000 \mu\text{m}$) un praksē pieprasītāko granulu frakcijām ($500 > d > 300 \mu\text{m}$ un $1000 > d > 500 \mu\text{m}$) noteikts beramais blīvums.

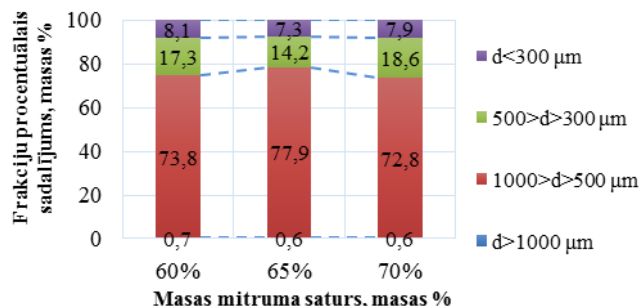
Iegūto granulu beramais blīvums ir atkarīgs gan no granulu frakcijas, gan sietu acs izmēriem.

Izmantojot mazākus sietu acs izmērus iegūst lielākas beramā blīvuma vērtības (skat. 1.tabulu).

1.tabula. Masas mitrumu un sietu acs izmēru ietekme uz CaP granulu beramo blīvumu vērtībām frakcijai $1000 > d > 500 \mu\text{m}$

Sietu grupa	Mitruma saturs, masas%		
	60%	65%	70%
1.	1,14	1,19	1,20
2.	1,24	1,23	1,21
3.	1,25	1,23	1,29

Darbā secināts, ka frakcijas $1000 > d > 500 \mu\text{m}$ iegūšanai efektīvākās sietu acs izmēru kombinācijas ir 2. un 3. (skat. 1.att.) un CaP masas mitruma saturs ir 65% (skat. 2.att.). Tas skaidrojams ar to, ka pēc pirmās ekstrudēšanas un žāvēšanas ekstrudāti saglabā piešķirto formu (neveido pulveri vai monolītus blokus).



2. att. Otrās sietu grupas granulu frakciju sadalījuma atkarība no CaP masas mitruma saturs.

LITERATŪRA

- [1] Canillas, M.; Pena, P.; De Aza, A. H.; Rodríguez, M. A. *Bol. la Soc. Esp. Ceram. y Vidr.* **2017**, 56 (3), 91–112.

Impact of calcium phosphate granule forming technology parameters on granule size distribution. Calcium phosphate granules are used in different medical fields. To optimize the granulation process, which is performed by wet mass extrusion through sieves, of one specific granule size, the process was performed with three different CaP wet mass moisture contents and sieve mesh sizes. The granules were characterized by their fraction distribution and bulk density.

Maisīšanas tehnoloģisko parametru izpēte ar COMSOL Multiphysics® atbalstu

Armands Bušs (2.kursa Ķīmijas tehnoloģijas maģistra programmas students)

Dr. sc. ing. Kristīne Ruģele (zinātniskā vadītāja)

Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte
e-pasts: armands.buss@rtu.lv

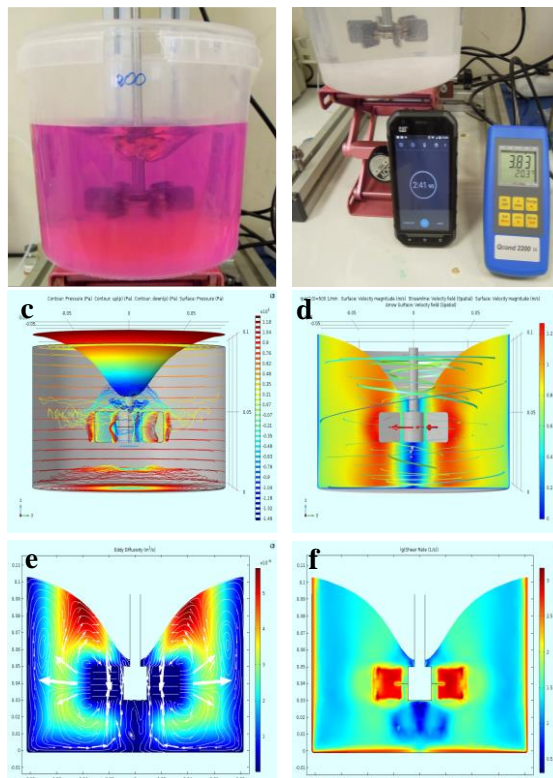
Skaitļojamā fluīdu dinamika jeb skaitļošanas hidrodinamika (angl. CFD) ir uz datora aprēķiniem balstīts

matemātiskās modelēšanas rīks, ko var uzskatīt par teorijas un eksperimentu sasaistes līdzekli fluīdu plūsmas un/vai siltuma pārvades virzienā. [1]. Procesa vizualizācija tiek nodrošināta ar COMSOL Multiphysics programmatūras atbalstu. Iegūtie rezultāti tika salīdzināti ar eksperimentālajiem mērījumiem un izdarītas uz aprēķiniem balstītas prognozes par lielāka izmēra iekārtu funkcionalitāti.

Darba mērķis ir iegūt laboratorijas tvertnes tehnoloģiskos parametrus (t.i., griezes moments, jauda, samaisīšanās laiks, vadītspēja), izveidot eksperimentālās tvertnes matemātisku modeli, noteikt šī modeļa adekvātumu, salīdzinot modelētos rezultātus ar eksperimentālajiem, un veikt laboratorijas iekārtas mērogošanu uz pilota ražošanas iekārtu.

Kā maisāmā tvertne tika izmantots caurspīdīgs polipropilēna trauks. Izmantotais šķīdums - ar sāļu un bāzisku vidi (ūdens, jonu apmaiņas sveķi, NaOH, pH=12±0.5, fenoltaleīna indikators). Maisīšanas procesā nelielā pārkumā tiek pievienota 1M HCl, kas neitralizē bāzisko vidi un atkrāso šķīdumu. Atkrāsošanās ātrums ir atkarīgs no rotora apgriezienu skaita minūtē N . Lai noteiktu patērēto jaudu, tika mērīts griezes moments no 50-500 apgr./min ar soli 50.

Tika iegūti samaisīšanās laika, griezes momenta un jaudas rezultāti, COMSOL diagrammas (**1.att.**). Pēc diagrammu krāsas intensitātes var novērtēt interesējošos fizikālos parametrus. Sarkanās zonas liecina par paaugstinātu turbulenci, spiedienu vai bīdes ātrumu. Pieaugot apgriezienu skaitam, pieaug patērētā jauda un attiecīgi samazinās samaisīšanās laiks. Jaudas pieaugumu un samaisīšanās laika samazinājumu atkarībā no N var vispārīgi aprakstīt ar kubisko funkciju $f(N)=aN^3+c$, kur a , b , c – empīriskas konstantes. Jo lielāks būs tvertnes izmērs, jo mazāk intensīvi tā ir jāmaisā, lai panāktu to pašu maisīšanas efektivitāti (homogenizāciju), nekā mazākās tvertnēs. Maisāmās tvertnēs eksistē arī “klusās zonas”, kur samaisīšanās notiek stipri lēnāk.



1.att. Maisāma tvertne: a) fenoltaleīna metode; b) NaCl šķīduma metode; c) spiediena kontūrs; d) plūsmas ātrums; e) difusivitāte; f) bīdes ātrums.

LITERATŪRA

[4] Malalasekera, W.; Versteeg, H.K.; *An Introduction to Computational Fluid Dynamics - The Finite Volume Method*; John Wiley and Sons: New York, 1995; pp 1–8.

Study of the technological parameters of mixing with the support of COMSOL Multiphysics. The mixing time, torque power, pressure, velocity, diffusivity and shear rate diagrams were obtained. The color intensity denotes numerical values for the physical parameters of interest. Red zones indicate increased turbulence, pressure, or shear rate. As the revolutions per minute are increased, the power drawn increases in non-linear fashion, the mixing time decreases accordingly. The larger the tank size, the less intense it has to be mixed to achieve the same mixing level or homogenization.

Bioadhezīvu biomateriālu izveide uz zīda un hialuronskābes bāzes

Karina Egle (4.kursa Ķīmijas tehnoloģijas bakalaura programmas studente)

Dr. sc. ing. Arita Dubņika (zinātniskā vadītāja)

Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte
e-pasts: karina.egle@inbox.lv

Polimēru hidrogēli var būt bioadhezīvi, kas pēc šķērssaistīšanas var pielipt pie audiem, un būtiski ietekmēt medicīnisko operāciju gaitu [1]. Hidrogēlus plaši izmanto biomedicīniskam pielietojumam, piemēram, kā nesējus zāļu piegādei, iekapsulēšanas materiālus šūnu terapijā, brūču pārsienamos materiālos un audu inženierijas pamatnēs [2].

Darbā izmantoto šķīdumu sagatavošana

Darba gaitā kā pamatizejvielas izmantoti zīda fibroīna (SF) un hialuronskābes (HA) šķīdumi. Par šķērssaistīšanas aģentiem izmantoti nātrijs tripolifosfāts (TPP) un glutaraldehīds (GTA).

A. SF un HA šķīdumu pagatavošana

SF šķīdumu iegūst, 3g zīda šķiedru/kokonus vārot 110 °C 0.02M Na₂CO₃ šķīdumā ar maisīšanas ātrumu 170 apgr./min. Šķiedru/kokonus žāvē un šķīdina CaCl₂:H₂O:C₂H₅OH (1:8:2) šķīdumā. Iegūto sāls/zīda šķīdumu dializē ūdenī celulozes membrānā (MWCO 14 kDa) un filtrē. SF koncentrācijas noteikšanai izmantota Furjē transformācijas infrasarkanā spektroskopija (FT-IR).

1% HA šķīdumu iegūst pievienojot 0,2g HA 20mL H₂O un rūpīgi maisot.

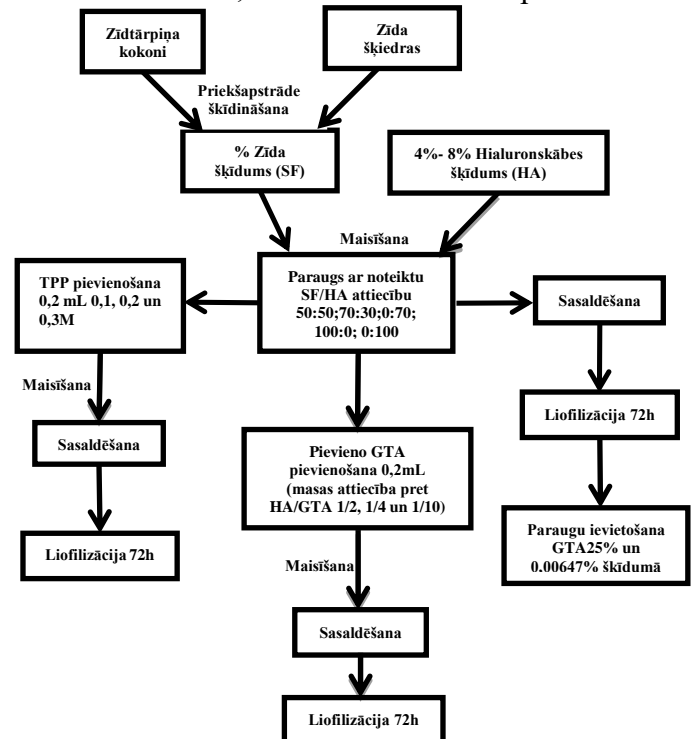
B. Hidrogēlu sintēze

Paraugu sagatavošana veikta atbilstoši 1.shēmai.

Sintezēto paraugu raksturošanai izmantota stereomikroskopija, FT-IR, SEM un ūdens uzsūce.

Veicot SF šķērssaistīšanu ar TPP, ātrāk reakcija novērota pie 60 °C nekā 37 °C temperatūras. Savukārt GTA gadījumā, šķērssaistīšana pie 60 °C un 37 °C novērota netika, paraugi šķērssaistījās tikai 25 °C. Balstoties uz rezultātiem, var secināt, ka GTA ir noteikta temperatūra, pie kuras paraugi šķērssaistās. 25 °C temperatūrā SF šķērssaistīšana GTA klātbūtnē tika novērota jau 3 dienā, bet zīda kokoniem – 21 dienā. 37 °C temperatūrā šķiedru šķērssaistīšanās TPP klātbūtnē tika novērota sākot ar 5.dienu, bet kokonu gadījumā ar 14.dienu. 60 °C temperatūrā šķiedru šķērssaistīšana ar TPP novērota no 1 dienas pēc pagatavošanas, kokoniem –

šķērssaistīšanās netika novērota. Šķērssaistīšana ātrāk notiek, izmantojot zīda šķiedras. Novērots, ka 37 °C temperatūrā zīda paraugi pagatavotie no zīda kokoniem, kam pievienots šķērssaistīšanās aģents TPP maina krāsu. Iespējams dotā temperatūra ir visatbilstošāka, lai notiktu blakus reakcijas, kas noved pie krāsas maiņas. Kā vēl viens ietekmējošs faktors mināms tas, ka zīda kokoni ir neapstrādāti.



1.shēma. SF/HA hidrogēlu sintēze.

LITERATŪRA

- [1] Pinkas, O. *Acta Biomater.* **2017**, *51*, 125-137.
[2] Kundu, J. *Acta Biomater.* **2012**, *8*(5), 1720-1729.

Development of bioadhesive biomaterials based on silk and hyaluronic acid. The aim of the study was to develop hydrogels based on silk fibroin (SF) and hyaluronic acid (HA) using chemical cross-linkers sodium tripolyphosphate and glutaraldehyde. Samples were prepared with a different ratio of 10%-12% SF and 4%-8% HA. In the case of both TPP and GTA, gelling is faster using silk fibroin prepared from silk fibers instead of cocoons. Using TPP, gelling occurs faster at 60°C, but in the case of GTA, the optimum gelling temperature is 25°C.

Hidroizolācijas masas homogenizācija un ūdens necaurlaidības īpašību uzlabošana

Edgars Kakarāns (2.kursa Ķīmijas tehnoloģijas maģistra programmas students)

Dr. sc. ing. Agnese Stunda-Zujeva (zinātniskā vadītāja)

Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte
e-pasts: edgars.kakarans@inbox.lv

Hidroizolācijas pārklājumi tiek izmantoti jumtu, pamatu u.c. betona konstrukciju aizsardzībai pret ūdens un apkārtējās vides iedarbību. Lai hidroizolācija spētu pildīt savas funkcijas, tai ir jābūt noturīgai pret ūdens iedarbību, tomēr, ja aizsargpārklājums satur strukturālus defektus, tas nespēs pilnībā pasargāt materiālu. Šie defekti var rasties aizsargpārklājuma uzklāšanas brīdī nepareizas uzklāšanas tehnikas izvēles vai nehomogēnas hidroizolācijas masas dēļ.

Darbā aplūkota polimēru-ūdens suspensijas bāzes hidroizolācija, masas nehomogenitātes rašanās un izzušanas cēloņi ražošanas procesā, to ietekme uz ūdens necaurlaidības īpašībām.

Hidroizolācijas masas ražošanas procesā izejmateriāli tiek sajaukti kopā iegūstot viskozu masu. Nehomogenitātes rašanās cēloņus hidroizolācijas masai var izdalīt:

- cēloņi, kas saistīti ar maisīšanas procesu,
 - pildvielas daļiņu nosēšanās tvirtnē,
 - piedevu nepilnīga suspendēšana,
- cēloņi, kas saistīti ar izejvielām un to pievienošanu.

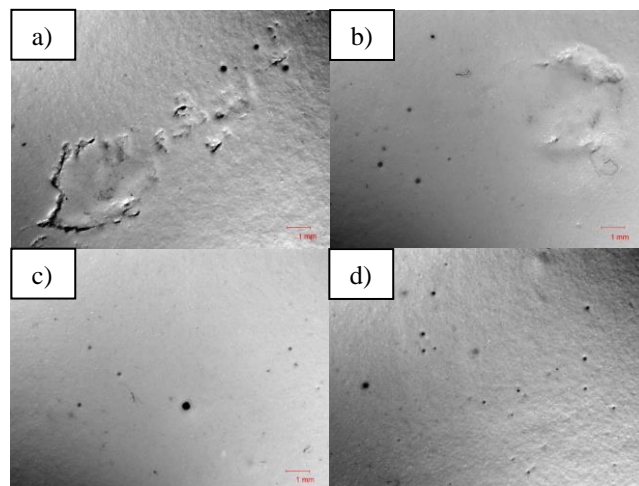
Lai pildvielas nenosēstos, ir nepieciešams sasniegt noteiktu maisītāja griešanās ātrumu. Pārāk liels griešanās ātrums iejauc masā gaisu un lieki patērē elektroenerģiju. Optimālais maisīšanas diapazons tika noteikts teorētiski. Eksperimentāli maisīšanas kvalitāte jeb iegūtās suspensijas homogenitāte šajā maisītāja griešanās diapazonā noteikta pēc pildvielas koncentrācijas, veicot parauga sausā atlikuma analīzi, kā arī veicot masas klājuma mikroskopisku pārbaudi.

Piedevu vienmērīgas suspendēšanas stāvokļa raksturošanai darbā izmantota minimālās pievadītās jaudas vērtība maisāmajai videi, ko nosaka veicot eksperimentus un vizuāli novērojot masas homogenizāciju pie noteikta maisītāja griešanās ātruma (1.att. a) un b). No tā aprēķina minimālās pievadāmās jaudas vērtība šķīdumam, lai suspendētu piedevas vienmērīgi.

Nehomogenitātes rašanās cēloņus, kas saistīti ar izejvielām un to pievienošanu, ir gaisa ieslēgumu rašanās, hidroizolācijas masai pievienojot pildvielu. Šo ieslēgumu daudzums un izmērs noteikts ar optiskā stereomikroskopu (1.att. c) un d) un attēlu apstrādes programmu ImagePro. Kā optimāls risinājums ir atrasts pretputošanas aģenta pievienošana

Kopējā produkta ūdens necaurlaidības īpašību novērtēšana veikta nosakot ūdens tvaika caurlaidību.

Balstoties uz iegūtajiem rezultātiem, pilnveidots hidroizolācijas ražošanas process produkta masas homogenitātes palielināšanai, kā rezultātā uzlabota produkta ūdens necaurlaidība



1. att. Hidroizolācijas pārklājuma defekti: a un b - nesuspendētas piedevas; c) un d) gaisa ieslēgumu radītie pārklājuma defekti.

Hydroinsulation mass homogenization and improvement of waterproofing characteristics. The aim of this study is to improve manufacturing process of polymer-water dispersion hydroinsulation. The main problem is mass inhomogeneity. Study reviews causes of hydroinsulation mass defects (indispersed solid material and gas inclusions), their formation process, impact on waterproofing properties and how to reduce them.

Žāvēšanas temperatūras ietekme uz amorfā kalcija fosfāta struktūru

Kintija Katkovska (2.kursa Ķīmijas tehnoloģija bakalaura programmas studente)

Mg. sc. ing. Jana Vecstaudža (zinātniskā vadītāja)

Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,

Rīgas Tehniskā universitāte

e-pasts: Kintija.Katkovska@gmail.com

Gandrīz 60% no mūsdienu kaulu aizvietotāj-materiāliem sastāv no kalcija fosfātiem, bioaktīvā stikla vai kalcija sulfāta [1]. Amorfajam kalcija fosfātam (AKF) ir ķīmiska līdzība ar zīdītāju kaulu un zobu neorganiskām sastāvdaļām. Tas aktivizē veselo kaulaudu reģenerācijas procesu, nav toksisks, kā arī uzrāda bioaktivitāti un integrējas dzīvajos audos [2]. Darba mērķis ir pētīt žāvēšanas temperatūras ietekmi uz AKF struktūru.

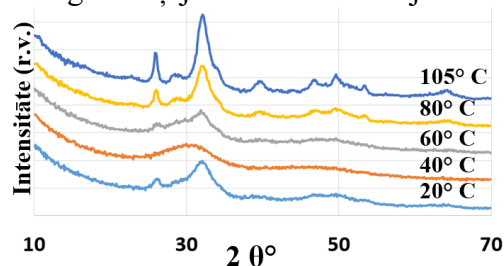
Darbā tiek izmantota RTU RBIAC izstrādāta AKF sintēzes metode [3]. Metode balstīta uz AKF nogulsnešanu, ko ierosina strauja sintēzes vides pH maiņa. Sākotnēji pagatavo kristāliska kalcija fosfāta (CaP), šajā gadījumā hidroksilapatīta (HAp), suspensiju ūdenī (5 g HAp uz 300 mL H₂O). Suspensiju maisa 30 minūtes ar ātrumu 350-380 apgr./min. Pēc tam pievieno 37,5 ml 3M HCl ar ātrumu 5 mL/min. Iegūto šķīdumu turpina maisīt 20 minūtes un pēc tam strauji pievieno 2M NaOH. Izveidojas AKF nogulsnes. Iegūto suspensiju centrifugē (3600 apgr./min, 1 min) un nogulsnes skalo ar dejonizētu ūdeni 4 reizes. AKF tika žāvēts 5 dažādās temperatūrās – 105 °C (1h), 80 °C (1h 10 min), 60 °C (1h 30 min), 40 °C (2h 20 min) un istabas (22 °C) (vismaz 72h). Katrs žāvēšanas eksperiments veikts trīs reizes.

Iegūtajiem materiāliem raksturots fāžu sastāvs ar rentgenstaru difrakcijas analīzes (RDA) metodi, kā arī tos veidojošās ķīmiskās grupas ar Furjē transformāciju infrasarkanā spektrometriju (FT-IS).

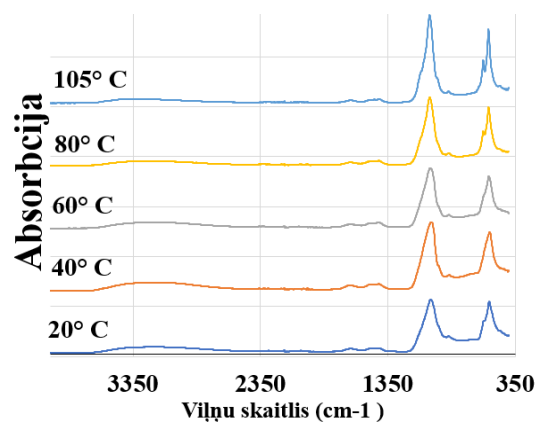
Konstatēts, ka AKF kristalizējas par daļēji kristālisku CaP žāvējot temperatūrā 60 °C– 105 °C. Kā arī istabas temperatūrā, jo produkts ir bijis pārāk ilgā saskarē ar ūdeni. RDA aina pierāda to, ka optimālā žāvēšanas temperatūra ir 40 °C (skat. 1.att.). Savukārt (FT-IS) spektri papildina un apstiprina ar RDA iegūtos rezultātus (skat. 2.att.). Sintēzes vides temperatūra un pH vērtība visu veikto sintēžu laikā ir bijusi līdzīga – sintēzes sākumā pH 7,8 (±0,3) un T=20,3 °(±0,4) C, sintēzes

beigu pH – 11,6 (± 0,1), kas liecina par labu procesa atkārtotamību.

Darbā tiek secināts, ka AKF struktūru var saglabāt, žāvējot 40 °C, savukārt žāvējot 60-105 °C un 20 °C iegūst daļēji kristālisku kalcija fosfātu.



1. att. Dažādās temperatūrās žāvētu kalcija fosfātu RDA ainas.



2. att. Dažādās temperatūrās žāvētu kalcija fosfāta FT-IS spektri.

LITERATŪRA

- [1] Best, S.M., Porter A.E., Thian E.S., *et. al.* // *J. Eur. Ceram. Soc.* **2008**, Vol.28, 1319.-1327.
- [2] Dorozhkin S.V. // *Materials.* **2009**, Vol.2, 399 –498.
- [3] Vecstaudža J. Locs J., // *Journal of Alloys and Compounds*, **2017**, Vol.700, 2015-222.

Drying temperature effect on structure of amorphous calcium phosphate. Calcium phosphate bioceramics is an important bone replacing material. By drying of amorphous calcium phosphate precipitates at different temperatures it is possible to obtain both amorphous and partially crystalline calcium phosphates.

Porainas kalcija fosfātu-TiO₂ kompozītceramikas izstrāde un raksturojums medicīniskam pielietojumam

Adelīna Kondratjeva (4. kursa Ķīmijas tehnoloģijas bakalaura programmas studente)

Dr. sc. ing. Līga Stīpniece (zinātniskā vadītāja)

Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte
e-pasts: adelina.kondratjeva@gmail.com

Mūsdienās viens no zinātnieku mērķiem ir izstrādāt implantmateriālus ar maksimāli augstu mehānisko izturību, tai pat laikā nodrošinot jeb saglabājot nepieciešamo funkcionalitāti cieto audu patoloģiju profilaksei, ārstēšanai un reģenerācijai. Tā kā kalcija fosfātu implantmateriālus drīkst izmantot tikai slodzi nenesošās vietās, tad ir nepieciešams izmantot piedevas, kas uzlabotu to mehānisko izturību. Līdz ar to, pētījums ir vērsts uz porainu CaP biokeramikas pamatņu izstrādi ar uzlabotām mehāniskām īpašībām, pievienojot biosaderīgu piedevu (TiO₂), kas ir stabila fizioloģiskajā vidē [1].

CaP/TiO₂ keramikas pamatnes tika izgatavotas, izmantojot modificētu poliuretāna (PU) putu replikācijas metodi [2] un variējot:

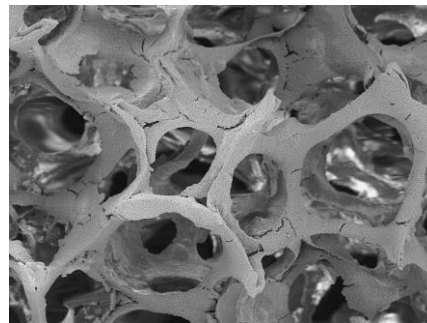
- 1) CaP/TiO₂ procentuālo attiecību – 100/0, 70/30, 50/50, 30/70 un 0/100;
- 2) TiO₂ anatāza pulvera daļiņu izmērus – 15 nm (n-TiO₂) un 180 nm (m-TiO₂);
- 3) CaP pulveru Ca/P molāro attiecību – 1,67 hidroksilapatīta (HAp) gadījumā un 1,50 apatītiskā trikalcija fosfāta (ap-TCP) gadījumā.

Pamatņu saķepināšanas temperatūra, 1300 °C, tika izvēlēta pamatojoties uz iepriekš veiktajiem pētījumiem un ATM datiem. Izgatavotajām pamatnēm tika analizēts molekulārais un fāžu sastāvs, izmantojot FT-IR un XRD, kā arī mikrostruktūra, izmantojot SEM. Tika veiktas *in vitro* pārbaudes, t.i., Ca²⁺ jonu izdalīšanās un apatītiskā slāņa veidošanās simulētajā ķermeņa šķīdumā (SKŠ).

Tika iegūtas CaP/TiO₂ porainas pamatnes, kam raksturīgas caurejošas poras (skat. 1.att.) un relatīvā porainība robežās no 71% līdz 91%. Gan n-TiO₂, gan m-TiO₂ gadījumā novērota neliela porainības palielināšanās līdz ar TiO₂ satura paaugstināšanu.

XRD dati liecina, ka pēc augsttemperatūras apstrādes (1300 °C) neatkarīgi no TiO₂ daļiņu izmēra un Ca/P molārās attiecības, iegūtās pamatnes

satur divas galvenās kristāliskās fāzes, proti, β-TCP un rutilu. Tas norāda, ka gan HAp, gan ap-TCP ir pilnībā transformējušies par β-TCP, un anatāza fāze par rutilu. Keramikas, kuras izgatavošanā izmantota HAp fāze, gadījumā detektēti XRD maksimumi, kas atbilst CaTiO₃ fāzei, kas norāda, ka starp HAp un TiO₂ fāzi notikusi reakcija. Turklāt novērots, ka palielinot HAp daudzumu paraugos, CaTiO₃ fāzes



daudzums palielinās.

1.att. Porainās pamatnes SEM mikrofotogrāfija.

Šķīdības pētījumi liecina, ka izdalītais Ca²⁺ jonu daudzums keramikai, kas pagatavota no β-TCP/TiO₂ ir lielāks nekā keramikai no HAp/TiO₂.

LITERATŪRA

- [1] A. Nouri, P. D., and C. We, Biomimetic Porous Titanium Scaffolds for Orthopedic and Dental Applications. *Biomimetics Learn. from Nat.*, 2010, 415–450.
- [2] I. Narkevica. Biomateriāli uz titāna dioksīda keramikas bāzes un to īpašību pētījumi. Promocijas darbs. - Rīga:RTU, 2016.-162 lpp.

Fabrication and characterization of porous calcium phosphate/TiO₂ scaffolds for medical applications.

CaP/TiO₂ ceramic scaffolds were prepared by modified polymer replica method sintered at 1300 °C. The effect of various CaP/TiO₂ ratios, particle size of the used commercial anatase (TiO₂) powders, *i.e.*, 15 nm and 180nm, as well as the Ca/P molar ratio of the synthesized CaP powders, namely – Hap (Ca/P=1,67) and ap-TCP (Ca/P=1,50) on microstructure, molecular and phase composition were examined by SEM, FT-IR and XRD. *In vitro* bioactivity of the obtained scaffolds was assessed by immersing them in simulated body fluid for 28 days and Ca²⁺ ion release by immersing in TRIS-HCl buffer solution for 28 days.

Ceolīta 4A dažādas sintēzes metodes

Rita Kravceviča (4.kursa Ķīmijas tehnoloģijas bakalaura programmas studente)

Dr. sc. ing. Kristīne Ruģele (zinātniskā vadītāja)

Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte
e-pasts: rita.kravcevica@gmail.com

CO₂ emisiju pieaugums ir viena no lielākajām vides problēmām. Atjaunojamiem enerģijas avotiem ir liels potenciāls klimata pārmaiņu mazināšanā, jo tas ir saistīts ar CO₂ emisiju samazināšanu.

Biogāze un biometāns ir ieguvuši lielu interesi kā iespējamie dabasgāzes aizstājēji. Lai biogāzi varētu ievadīt dabasgāzes tīklā, tā vispirms jābagātina līdz 90-97% CH₄, samazinot CO₂ koncentrāciju. Adsorbēcija ar spiediena maiņu ir viena no biežāk izmantotajām biogāzes bagātināšanas metodēm. Kā adsorbenti tiek izmantoti aktivētā ogle, metāla organiskās struktūras un ceolīti [1].

Šī darba ietvaros tika pētītas dažādas ceolīta 4A sintēzes metodes.

Ceolīts 4A tika iegūts izmantojot 3 sintēzes metodes:

1. metode. *Ceolīta 4A sintēze mikrosfēru veidā.* Sintēze sastāv no trim posmiem, kur pirmajā posmā iegūst SiO₂ un hitozāna maisījumu, ko caur šļirci pilina nātrija alumīnāta sārma šķīdumā un iegūst mikrosfēras. Otrajā posmā tiek veikta iegūto mikrosfēru hidrotermālā sintēze un trešajā posmā iegūtās mikrosfēras tiek kalcinētas.

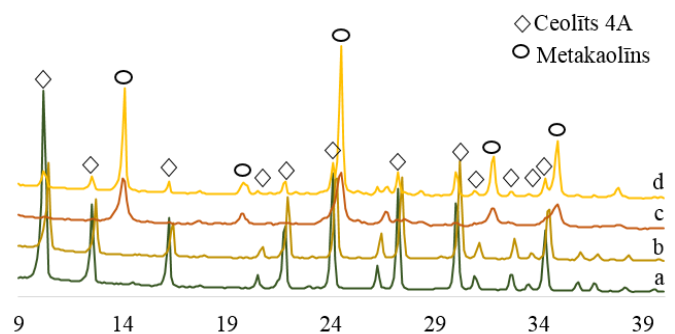
2. metode. *Ceolīta 4A iegūšana no kaolīna.* Sintēze sastāv no trim posmiem. Pirmajā posmā kaolīns tiek apdedzināts 650 °C temperatūrā, kā rezultāta tiek iegūts metakaolīns. Otrajā posmā tiek iegūts metakaolīna un 4M NaOH šķīdums attiecībā 1:25 kas tiek pakļauts hidrotermālai sintēzei, un visbeidzot trešajā posmā tiek žāvēts iegūtais produkts.

3. metode baltās uz 2. metodi, kas tika izmainīta reakcijas paātrināšanai, pamatojoties uz ideju, ka augstāka NaOH koncentrācija paātrina jonu apmaiņas procesu. Tādējādi tika mainīts tikai otrais

sintēzes posms, kur tiek iegūts metakaolīta un 8M NaOH šķīdums attiecībā 1:5, kas tika pakļauts hidrotermālai sintēzei.

Iegūtie produkti tika raksturoti, izmantojot XRD, SEM, EDX, FT-IR un BET.

Visu iegūto produktu Furjē transformāciju infrasarkanās spektroskopijas spektros ir novērojamas raksturīgās ceolīta 4A absorbcijas joslas. Rentgenstaru difrakcijas analīzes ainās (skat. 1.att.) redzams, ka sintezētie ceolīta produkti satur ceolīta 4A fāzes, bet ar otro un trešo metodi iegūtie produkti satur arī metakaolīna fāzes.



1.att. Sintēžu produktu difrakcijas ainās: a) komerciālais ceolīts 4A, b) 1. metodes paraugam, c) 2. metodes paraugam, d) 3. metodes paraugam.

LITERATŪRA

- [1] R.Augelletti, M.Conti un citi, *J. Clean. Prod.* **2017**, 140 (3), 1390-1398.

Zeolite 4A different synthesis methods. The aim of this work is research different synthesis methods of zeolite 4A. Zeolite 4A were synthesized by three methods. Obtained synthesized products were characterised by their chemical and phase composition and specific surface.

Modificētu zīda-HAp pamatņu izstrāde

Anta Krūmiņa (4.kursa Ķīmijas tehnoloģija bakalaura programmas studente)

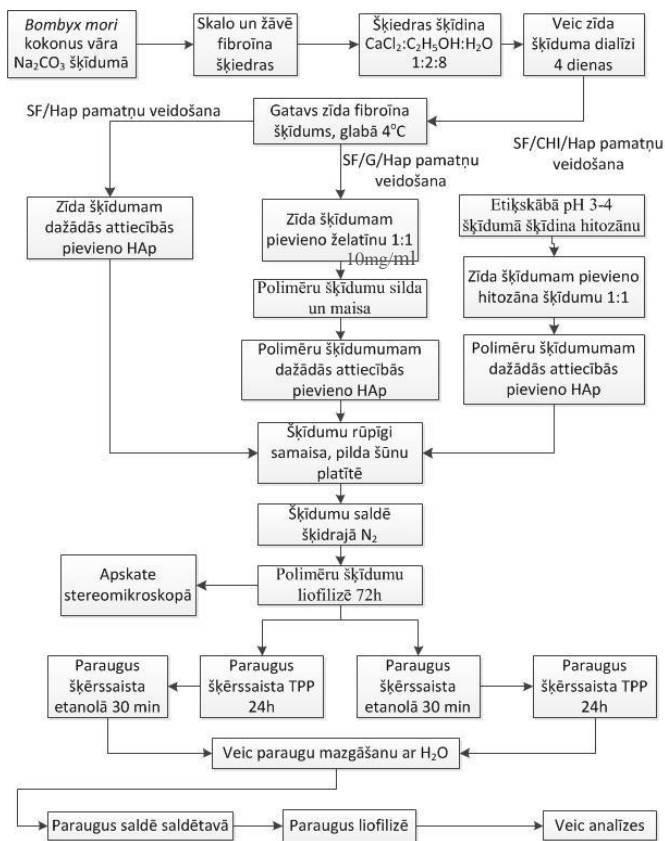
Dr. sc. ing. Arita Dubņika (zinātniskā vadītāja)

Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
 Rīgas Tehniskā universitāte
 e-pasts: antakrumina@gmail.com

Zīda proteīnu kā biomateriālu pamatņu izstrādei izmanto tā biosaderības, noārdīšanās, zemas iekaisuma reakcijas uzrādīšanas, elastības dēļ. Lai uzlabotu pamatņu mehānisko izturību, veido modificētas pamatnes, kur kombinē dabīgos polimērus ar sintētiskiem polimēriem vai biokeramiku, piemēram, hidroksilapatītu, tā un kaula minerālās fāzes ķīmiskās līdzības dēļ [1].

iekļaujot šķērssaistīšanu ar nātrija tripolifosfātu (TPP) un etanolu, kā arī nepieciešamās analītiskās metodes paraugu novērtēšanai. Iegūtajām pamatnēm veic analīzes izmantojot optisko mikroskopiju un skenējošo elektronu mikroskopiju daļiņu morfoloģijas un izmēru noteikšanai, Furjē transformācijas infrasarkano spektroskopiju izmanto funkcionālo grupu identificēšanai, rentgendifraktometriju - struktūras, kompozīcijas un fizikālo īpašību noteikšanai, porainības un ūdens uzsūces testus.

Izstrādātas zīda un hidroksilapatīta (SF/HAp), zīda/želatīna un hidroksilapatīta (SF/G/HAp), zīda/hitozāna un hidroksilapatīta (SF/CHI/HAp) pamatnes ar 100, 70, 50 un 30 masas% polimēra. Vislabāk formu saglabā SF/CHI/HAp pamatnes, mazāks blīvums novērojams SF/G/HAp pamatnēm. SF/HAp pamatnes šķīst vai ļoti stipri šķērssaistās ievērojami saraujoties. Šķērssaistīšanu veicot vispirms ar TPP, paraugi veido blīvāku struktūru, salīdzinot ar paraugiem, kas sākumā šķērssaistīti ar etanolu. Atkarībā no izejvielu sastāva - HAp, želatīna, hitozāna klātbūtnes - pamatnes uzrāda struktūras atšķirības.



1. shēma. Pamatņu veidošanas process no kokonu apstrādes līdz pamatņu analīzēm.

1.shēmā uzskatāmi parādīta zīda fibroīna iegūšana, trīs dažādu pamatņu veidošanas process

LITERATŪRA

[1] Huh, J. *Int. J. Biol. Macromol.* **2018**, 110, 488-496.

Modified silk-HAp scaffold preparation. Silk-fibroin is a fibrous protein that offers biocompatibility, biodegradability, low inflammatory response and is used as biomaterial in scaffold preparation. To increase scaffold's properties, hybrid scaffolds with combined natural polymer and bioceramics are made. Structural differences of scaffolds are indicated depending on the composition of the raw materials and cross-linking sequence. Scaffolds were cross-linked using TPP and ethanol.

Kalcija jonu piegādes sistēmas uz hialuronskābes/kalcija fosfātu hidrogēlu bāzes

Marta Lapina (2.kursa Materiālu nanotehnoloģiju maģistra programmas studente)

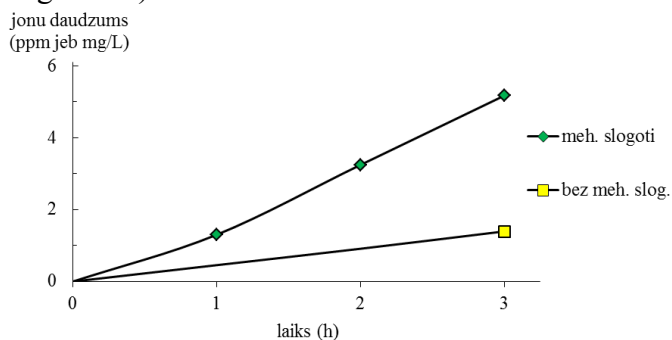
Dr. sc. ing. Jānis Ločs, Mg. sc. ing. Marina Sokolova (zinātniskie vadītāji)

Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte
e-pasts: lapina.marta@gmail.com

Saskaņā ar Volfa likumu (*Wolff's law*) vesela cilvēka kauli pielāgojas uz tiem gulstošai slodzei un laika gaitā pārveidojas, izmainot attiecīgā kaula īpašības (kā blīvumu) [1]. Ņemot vērā, ka kauli pārvērš saņemto mehānisko signālu bioķīmiskā reakcijā, izstrādāts kompozītmateriāls, kas mehāniskās ietekmes rezultātā izdala kalcija (Ca^{2+}) jonus, kas iesaistās minētajā remodelēšanas procesā.

Darba mērķis ir izstrādāt hialuronskābes (HS) un kalcija fosfāta (CaP) nanokompozītmateriālus (HS/CaP) uz hidrogēlu bāzes un apkatīt to potenciālo pielietojumu kā kalcija jonu piegādes sistēmas. CaP tika sintezēts 2% HS polimēra šķīdumā, izmantojot šķīduma ķīmiskās nogulsnešanas metodi, kurā par izejvielām izmantots $\text{Ca}(\text{OH})_2$ un 0,2 M H_3PO_4 . HS/CaP kompozītmateriāli liofilizēti jeb izžāvēti sasaldējot un sekojoši ķīmiski šķērssaistīti bāziskā vidē (0,25 M NaOH), izmantojot 1,4-butāndiola diglicidilēteri (BDDE). Hidrogēli neutralizēti, izmantojot 0,9% NaCl šķīdumu. Hidrogēlu mehāniska cikliska slogošana īstenota multifunkcionālā polimērmateriālu deformatīvo īpašību analīzes iekārtā *Tinius Olsen 25ST*, kurā neutralizēti un uzbriedinātie hidrogēli tika saspīesti 7500 reižu 3 stundu laikā. Paralēli tam īstenots eksperiments, kurā noteikts jonu izdalīšanās daudzumu tādos pašos apstākļos bez mehāniskās iedarbības (jonu izdalīšanās difūzijas ceļā). Testēšanas šķīdumā izdalījušos kalcija jonu koncentrācija noteikta, izmantojot kompleksonometrisku titrēšanu ar 0,001 M EDTA jeb kompleksonu III. Titrēšana veikta ar automātisko titrēšanas iekārtu *Mettler Toledo T90*, kas aprīkota ar Ca^{2+} jonu selektīvo elektrodu *DX240 Ca-ISE*. No hidrogēliem (HS/CaP fāžu attiecība 40/60 masas%) izdalījušos jonu daudzuma atkarībā no laika ir attēlota 1. attēlā. Ir redzams, ka 3 stundu laikā no parauga, kas mehāniski slogots, izdalījās 3,7 reizes vairāk jonu nekā no parauga,

kurā tas notika tikai difūzijas ceļā (bez mehāniskas slogošanas).



1. att. Kalcija jonu izdalīšanās daudzums atkarībā no laika (paraugos ar un bez mehāniskas ietekmes).

Salīdzinot jonu izdalīšanos no hidrogēliem ar atšķirīgu organiskās/neorganiskās fāzes attiecību pēc 3 stundām (skat. 1. tabulu) un veicot statistisko analīzi, secināts, ka ar 95% ticamību (ANOVA: *Single factor*, $F = 17,86$, $F_{crit} = 4,06$) HS un CaP attiecība hidrogēlos ietekmē mehāniskas slogošanas rezultātā izdalījušos jonu daudzumu.

1.tabula. Mehāniskas slogošanas laikā izdalīto Ca^{2+} jonu daudzums 3 stundu laikā

HS/CaP attiecība	Izdalīto jonu daudzums (ppm)		
	1 h	2 h	3 h
40/60	0,94±0,37	2,01±0,59	2,92±0,88
50/50	2,06±0,15	4,09±0,50	6,32±1,64
60/40	1,45±0,25	3,26±0,09	5,07±0,20
70/30	0,97±0,25	2,15±0,53	3,32±0,79

LITERATŪRA

- [1] A. D. Pria Bankoff, "Biomechanical Characteristics of the Bone," in *Human Musculoskeletal Biomechanics*, T. Goswami, Ed. InTech, 2012, pp. 61–86.

Calcium ion delivery systems based on hyaluronic acid/calcium phosphates hydrogels. According to Wolff's law the bone responds and adapts to the loads under which it is placed. The current research focuses on developing hyaluronic acid and calcium phosphate hydrogels that may be used as calcium ion delivery systems. The obtained result shows that mechanically induced calcium ion release is 3,7 times greater than ion release by diffusion. It is also determined that samples with different organic/inorganic phase composition display statistically significant difference in the amount of released ions.

Mikroaļģu kultivēšanas perspektīvas Latvijas apstākļos

Beāte Lācīte (4.kursa Ķīmijas tehnoloģijas bakalaura programmas studente)

Dr. sc. ing. Kristīne Ruģele (zinātniskā vadītāja)

Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte
e-pasts: beate.lacite@gmail.com

Mikroaļģes ir fotosintezējošs organisms, kas no saules iegūto gaismas enerģiju pārvērš ķīmiskajā enerģijā. Visvairāk apskatītā mikroaļģu suga ir *Spirulina platensis*. *Spirulina* (zili-zaļās mikroaļģes) ir daudzšūnu, visvecākais uz Zemes dzīvojošais organisms, apmēram 3.6 miljardus gadus vecs. Ievērojamu popularitāti dēļ pilnvērtīgā sastāva *Spirulina* guvusi pārtikas rūpniecībā, kā arī veselības, akvakultūras un citās nozarēs. *Spirulina platensis* sastāvā ir liels daudzums proteīnu 60 - 70%, ogļhidrātu 8 - 16%, lipīdu 4 - 9%, kā arī vitamīnu, piemēram, C, B1, B2, B3, B6, B9, B12, un minerālvielu: dzelzs, kalcijs, hroms, varš, magnijs, mangāns, fosfors, kālijs, nātrijs un cinks. *Spirulina* satur arī linolēnu, γ -linolēnskābi, omega - 3 un omega - 6 polinepiesātinātās taukskābes, kā arī *Spirulina* ir dabisks dokozaheksaēnskābes avots, kas veido 9.1% no kopēja taukskābju daudzuma. *Spirulina* satur tādus pigmentus kā hlorofils, fikocianīns un arī karotinoīdus [1, 2].

Kultivēšanas sistēmas var būt dažādas: atvērta tipa (baseina) sistēmas un fotobioreaktori (skatīt 1.att.).



1. att. Kultivēšanas sistēmas.

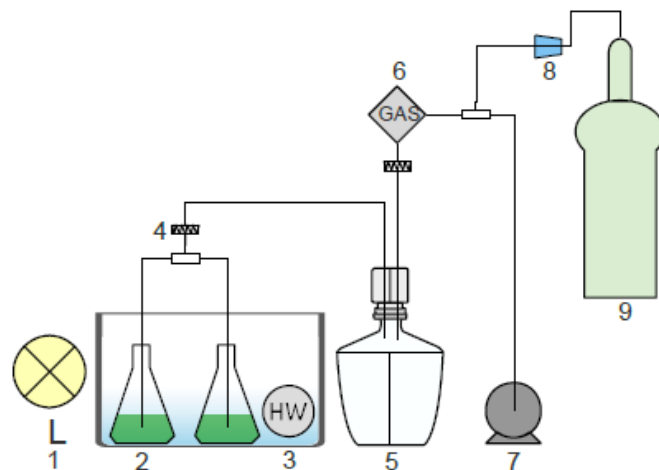
Viena no vispopulārākajām *Spirulina platensis* kultivēšanas sistēmām ir atvērta tipa, jo šī suga ir nākusi no tropu un subtropa reģioniem. Tā kā Latvija atrodas mērenā klimatā, tad vienīgā optimālā kultivēšanas sistēma ir fotobioreaktori.

Spirulina kultivēšanas apstākļus var apskatīt 1. tabulā [1, 2].

1.tabula. *S.Platensis* kultivēšanas apstākļi [1]

Gaisma ($\mu\text{mol fotonu m}^{-2} \text{s}^{-1}$)	Temp. ($^{\circ}\text{C}$)	pH	Barotne	Oglekļa avots
300	30 ± 2	9.5 - 10.5	Zarrouk's	1% CO_2

Eksperimentālajā daļā tika izveidota *S.platensis* kultivēšanas sistēma, kuru var apskatīt 2.attēlā.



- 1 - Lampa
- 2 - Ūdens vanna ar kolbām
- 3 - Ūdens sildītājs
- 4 - Gaisa filtrs
- 5 - Sajaukšanās tvertne
- 6 - Gāzes analizators
- 7 - Gaisa kompresors
- 8 - Gāzes reduktors
- 9 - CO_2 gāzes balons

2. att. *S.Platensis* kultivēšanas sistēma.

LITERATŪRA

- [1] Soni, R.A. *Trends Food Sci. Technol.* **2017**, 69, 157-171.
- [2] Mobin, S. *Energy Procedia.* **2017**, 110, 510-517.

Microalgae cultivation perspectives in Latvian conditions.

In this work author reviewed *Spirulina platensis* microalgae species, their wholesome composition, author also analyzed necessary conditions for cultivation in Latvian conditions. In the work the author describes her created technology for cultivation system.

Sterilizācijas procesa ietekme uz kalcija fosfātu/hialuronskābes hidrogēlu īpašībām

Anna Makņa (3.kursa Materiālzinātnes bakalaura programmas studente)

Dr. sc. ing. Dagnija Loča, Mg. sc. ing. Marina Sokolova (zinātniskās vadītājas)

Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte
e-pasts: anna.makna@edu.rtu.lv

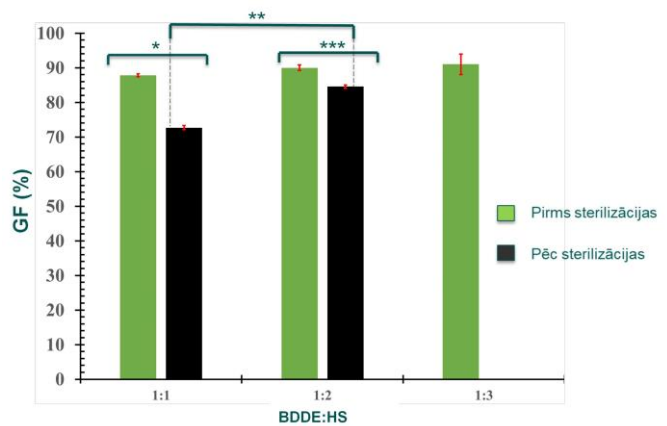
Hialuronskābe (HS) ir dabiskas izcelsmes polisaharīds, kura hidrogēli tiek izmantoti audu inženierijā, jo ir biosaderīgi, bionoārdāmi un nav toksiski [1]. HS hidrogēlu mehāniskās īpašības un bioaktivitāti var uzlabot, veidojot HS un neorganisko daļiņu kompozītmateriālus, kā neorganisko fāzi izmantojot kalcija fosfātus (CaP). Viens no galvenajiem biomateriālu izmantošanas priekšnosacījumiem ir to sterilizējamība, līdz ar to dotā pētījuma mērķis bija pētīt sterilizācijas procesa ietekmi un hialuronskābes/kalcija fosfātu (HS/CaP) kompozītu hidrogēlu īpašībām.

HS/CaP kompozītu hidrogēlus iegūst ar ķīmiskās šķērssaistīšanas metodi, kā šķērssaistīšanās aģentu izmantojot 1,4-butāndiola diglicidilēteri (BDDE). HS/CaP hidrogēlus sintezē ar mainīgu HS un BDDE attiecību (1:1, 1:2, 1:3). Kā izejvielas hidrogēlu sintēzei izmantoti HS/CaP kompozītmateriāli ar organiskās/neorganiskās fāzes attiecību 30:70wt%, 0,25M NaOH un BDDE. Šķērssaistīšanās reakcija tiek realizēta 22 stundas 45 °C, ar tai sekojošu paraugu neitralizēšanu, izmantojot 0,25M HCl. Iegūtos hidrogēlus saldē un pēc tam liofilizē. Sintezēto materiālu molekulārās struktūras raksturošanai izmantota Furjē transformāciju infrasarkanā spektroskopija (FT-IR). Iegūtos hidrogēlu paraugus sterilizē 40 min. pie 120 °C, izmantojot tvaika sterilizācijas metodi. Pēta hidrogēlu uzbriešanas pakāpi un gēla frakciju sterilizētiem un nesterilizētiem paraugiem.

Apkopojot iegūtos rezultātus, secināts, ka tvaika sterilizācijas process neietekmē HS/CaP kompozītu hidrogēlu uzbriešanas pakāpi.

Novērots, ka pirms hidrogēlu paraugu sterilizācijas, GF pie visām izmantotajām HS:BDDE attiecībām statistiski neatšķiras un ir vienāda ar $89.7 \pm 1.7\%$. Analizējot sterilizācijas procesa ietekmi uz HS/CaP kompozītmateriālu hidrogēlu gēla frakciju (GF), secināts, ka GF

ietekmē ne tikai HS:BDDE attiecība, kas izmantota hidrogēlu pagatavošanas procesā, bet arī pats sterilizācijas process (skat. 1. att.).



1. att. HS/CaP kompozītmateriālu hidrogēlu gēla frakcijas (GF) noteikšana pirms un pēc sterilizācijas procesa.

LITERATŪRA

- [1] C. Manuele *et al.*, "Hyaluronic acid and upper airwayinflammation in pediatric population: A systematic review," *Int. J. Pediatr. Otorhinolaryngol.*, vol. 85, pp. 22–26, 2016.

Influence of sterilization process on calcium phosphate/hyaluronic acid hydrogel characteristics. It has been reported that hyaluronic acid have unstable molecular structure, and is sensitive to increased temperatures, that can damage the bonds between the chains, resulting in loss of some intrinsic hyaluronic acid characteristics. Thus, the main objective of this work was to study the influence of sterilization process on the calcium phosphate/ hyaluronic acid hydrogel swelling properties and gel fraction.

Hyaluronic acid/calcium phosphate (HA/CaP) composite hydrogels (ratio of organic to inorganic phase 30:70wt%) were prepared. During the research the impact of crosslinking agent BDDE ratio to HA (1:1, 1:2 and 1:3) was evaluated towards the resulting composite hydrogel swelling properties and gel fraction. Obtained results indicated that the sterilization process have no significant impact on the hydrogel swelling ratio. However, significant impact of sterilization process was observed on the hyaluronic acid/calcium phosphate composite hydrogel gel fraction (see Figure 1).

Augsti poraina titāna dioksīda keramika un tās fotokatalītiskās īpašības

Marika Mosina (4.kursa Ķīmijas tehnoloģijas bakalaura programmas studente)

Dr. sc. ing. J. Ozoliņš, Dr. sc. ing. I. Narkevica (zinātniskie vadītāji)

Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte
e-pasts: marika.mosina@gmail.com

Mūsdienās aktuāla problēma ir ūdens piesārņojums un tā attīrīšanai tiek pievērsta pastiprināta uzmanība. Viena no ūdens attīrīšanas metodēm ir fotokatalīze, kurā kā katalizators visbiežāk tiek izmantots titāna dioksīds (TiO_2), pateicoties tā unikālajām īpašībām [1].

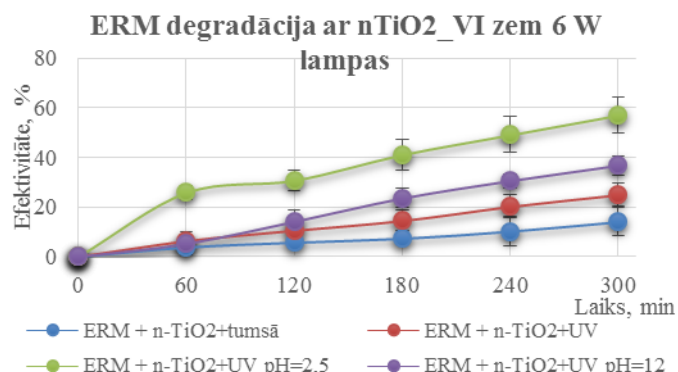
Darba mērķis bija pētīt porainas TiO_2 keramikas un ar nanoizmēra TiO_2 pārklātu pamatņu fotokatalītiskās īpašības – krāsvielu metilenzilā (MZ) un eriohrommelnā (ERM) noārdīšanos, kā arī dažādu faktoru ietekmi uz fotokatalīzes procesu.

Porainas TiO_2 pamatnes iegūtas ar replikas metodi, kā prekursoru izmantojot PU putas ar poru izmēru 80 ppi. 65 masas% TiO_2 šlikera pagatavošanai izmantots: TiO_2 pulveris anatāza formā ar vidējo daļiņu izmēru 180 nm (mTiO_2), destilēt ūdens, saistviela – 5% PVA šķīdums, disperģents – etilēnglikols, 25% NH_3 šķīdums. Iegūtās TiO_2 pamatnes pēc žāvēšanas un polimēra izdedzināšanas tiek apdedzinātas 1500 °C 10h.

Porainās pamatnes tiek pārklātas (imobilizētas) ar nanoizmēra TiO_2 (nTiO_2 , vidējais daļiņu izmērs 15 nm) izmantojot vakuum infiltrācijas (VI) un elektroforētiskas izgulsnēšanas (EPD) metodes. VI metodē izmatota 20 masas% nTiO_2 suspensija. EPD metodē nTiO_2 suspensijai, kā izejvielas izmanto nTiO_2 pulveri, šķīdinātāju – izopropanolu, kā arī dispersantu – trietanolamīnu. EPD veikta pie 20 V sprieguma 20 min. Paraugi pēc nTiO_2 pārklāšanas apdedzināti 700 °C 1h. Paraugi raksturoti izmantojot SEM, XRD un N_2 adsorbcijas porozimetriju. Krāsvielu degradācija pētīta, izmantojot trīs dažādas pamatnes - TiO_2 , nTiO_2 _VI, nTiO_2 _EPD atkarībā no degradācijas laika, šķīduma pH un UV gaismas intensitātes. MZ un ERM koncentrācija šķīdumā noteikta izmantojot adsorbcijas mērījumus ar UV

spektrofotometriju. Sākuma šķīduma koncentrācija 20 ppm.

Rezultāti liecina, ka ERM degradācija vislabāk norit ar nTiO_2 _VI pie pH 2,5 (skat 1.att.). ERM degradēšanas efektivitāte ar nTiO_2 _VI pēc 5 h apstarošanas ar 6 W UV lampu sasniedza 25% ± 5%, MZ – 45% ± 4%, savukārt ar mTiO_2 ERM – 7% ± 3% un MZ – 0%. Degradēšanas efektivitāti ietekmēja starojuma avota intensitāte - izmantojot 100 W UV lampu degradēšanas laiks samazinājās 10 reizes, un efektivitāte sasniedza > 95%. Krāsvielu degradāciju ietekmē arī šķīduma pH - MZ degradēšana labāk notiek pie pH=12 un ERM pie pH=2,5.



1.att. ERM degradācijas efektivitāte ar nTiO_2 _VI.

LITERATŪRA

Zangeneh, H., Zinatizdeh, A.A.L. un citi, *Ind. Eng.*
[1] *Chem. Res.* **2015**, 26, 1-36.

Highly porous titanium dioxide ceramic and its photocatalytic properties. The aim of the work was to compare photocatalytic activity of different TiO_2 ceramic materials on methylenblue and eriohromblack degradation.

Porous TiO_2 ceramic scaffolds were prepared using PU foam replica method. Scaffolds were immobilized with nanosized nTiO_2 using vacuum infiltration and electrophoretic deposition methods.

Effect of used material, degradation time (5 h), light source (dark, UV) and solution pH (pH 2-12) on photocatalytic process was investigated.

Fosfororganisko liesmu slāpētāju noteikšana mājas putekļos izmantojot gāzu hromatogrāfiju-tandēma masspektrometriju

Elīna Pasečnaja (4. kursa Ķīmijas tehnoloģijas bakalaura programmas studente)

Mg. chem., ZI "BIOR" pētnieks Ingus Pērkons (zinātniskais vadītājs)

Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte, Rīgas Tehniskā universitāte

e-pasts: elina.pasecnaja@gmail.com

Liesmas slāpētājus plaši lieto kā piedevas dažādu ikdienā lietojamu materiālu ražošanā, lai nodrošināt produktu atbilstību ugunsdrošības standartiem. Kā vieni no visplašāk lietotajiem liesmas slāpētājiem ir fosfororganiskie liesmas slāpētāji (FOLS), kas ir sintētisku fosforskābes atvasinājumi, kuros hidroksilgrupu ūdeņraža atomi ir aizvietoti ar ogļūdeņražu atlikumiem (1. att.). Līdztekus pozitīvajiem ieguvumiem, šie savienojumi slikti degradējas apkārtējā vidē, tādējādi tos var klasificēt noturīgo organisko piesārņotāju (NOP) grupā.

Darba mērķis ir izpētīt un salīdzināt FOLS saturu mājas putekļos dažādās ēkās Latvijas teritorijā.

Paraugu sagatavošanas procedūra iekļāva 3 posmus – fracionēšanu, ekstrakciju un attīrīšanu. Eksperimentos tika izmantotas putekļu frakcijas ar daļiņu izmēru $\leq 1000 \mu\text{m}$. Ekstrakciju veica ar acetona un n-heksāna maisījumu, kuru optimālais daudzums un tilpumu attiecība tika noteikti eksperimentāli. Attīrīšanas procedūru veica kolonnās ar aktivēto magnija silikātu (Florisil®), eluēšanai kā šķīdinātāju izmantoja etilacetātu.

Kvantificēšanas mērījumi tika veikti izmantojot gāzu hromatogrāfu apvienojumā ar tandēma masspektrometru (GC-MS/MS). Savienojumi tika atdalīti uz DB-5 kapilārās kolonnas ($15\text{m} \times 0,25\text{mm} \times 0,1\mu\text{m}$). Darbā izstrādāta instrumentālā metode deviņu savienojumu noteikšanai pēc izotopu atšķaidīšanas metodes, izmantojot sešas deiterētas FOLS standartvielas. Instrumentālās metodes izstrāde un optimizācija sevī iekļāva piecus posmus – izdalīšanās laika (IL) noteikšanu, piemēroto skenēšanas pāreju izvēli, kolīzijas enerģijas optimizāciju, linearitātes un

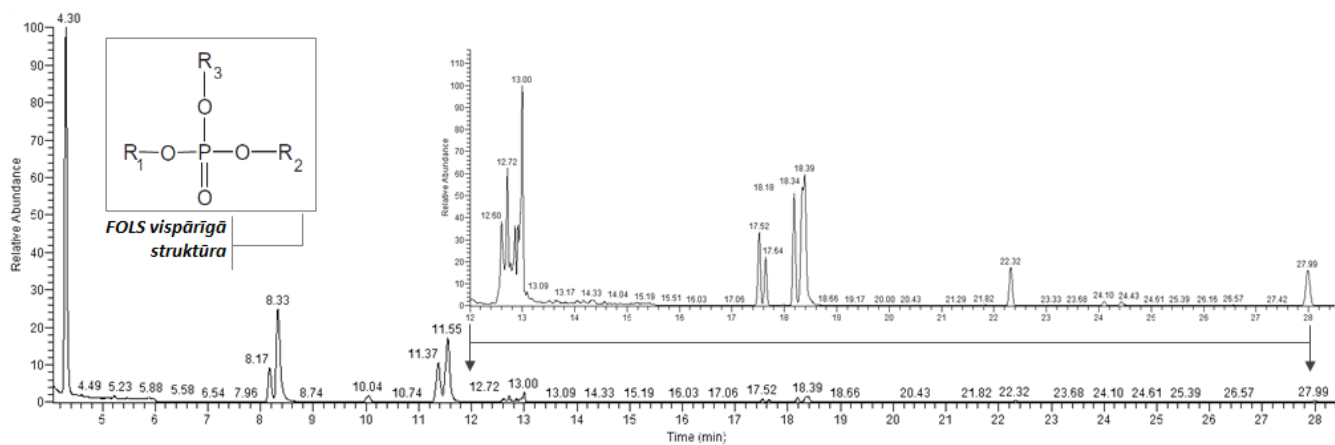
kvantitatīvās robežas (KNR) noteikšanu (skat. 1. tabula un 1. att.).

Darba fināla etapā paredzēta putekļu paraugu analīze izmantojot izstrādāto metodi un iegūto rezultātu apkopojums par FOLS sastopamību putekļos no dažāda tipa ēkām Latvijā.

1.tabula. FOLS kvantificēšanas parametri

Nosaukums (saīsinājums)	IL (min)	KNR (pg/ μL)
Tripropilfosfāts (TPP)	8.3	50
Tributilfosfāts (TBP)	11.4	5
Trifenilfosfāts (TPhP)	18.0	25
Tri(2-hlorisopropil)fosfāts (TCPP)	12.80	5
Tri(2-hloretil)fosfāts (TCEP)	12.5	50
Tri(1,2-dihlorpropil)fosfāts (TDCPP)	17.5	5
Tri(tribromneopentil)fosfāts (TTBNPP)	27.7	100
Tri(2,3-dibrompropil)fosfāts (TDBPP)	22.2	100

Quantification of organophosphorus flame retardants in household dust using gas chromatography-tandem mass spectrometry. Organophosphorus flame retardants are associated to numerous adverse health effects and can be persistent in environment. Recently, dust has been identified as a major human exposure route for these compounds. Therefore, the aim of this study is to quantify OPFRs in household dust samples from different houses in Latvia. Instrumental analysis was carried out with gas chromatography-tandem mass spectrometry using isotope dilution approach. Sample preparation involved sieving, extraction and additional clean-up on activated magnesium silicate.



1. att. FOLS vispārīgā struktūra un iegūtā FOLS hromatogramma uz DB-5 kapilārās kolonnas.

Selektīva levoglikozenona ieguve no atjaunojamā bioresursa – bērza koksnes katalītiskās ātrās pirolīzes procesā

Ralfs Pomilovskis (4. kursa ķīmijas tehnoloģijas bakalaura programmas students)

Dr. sc. ing. Aivars Žūriņš (zinātniskais vadītājs)

Lietišķās ķīmijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,

Rīgas Tehniskā universitātē

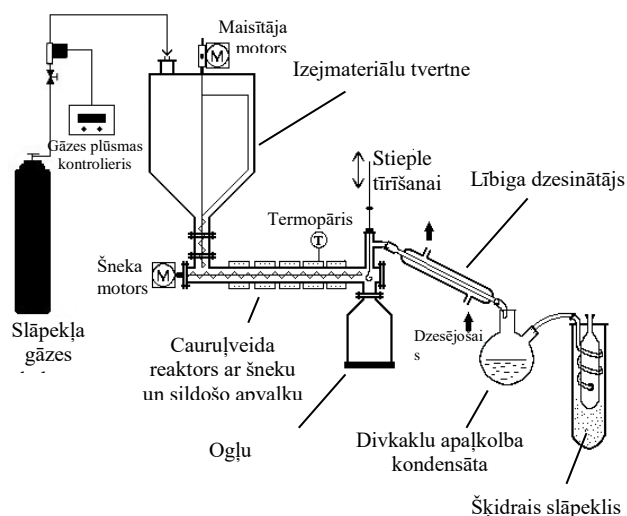
e-pasts: ralfs.pomilovskis@gmail.com

Levoglikozenons (LGO) ir optiski aktīvs savienojums, kas tiek uzskatīts par daudzsoļošu izejvielu mūsdienu organiskajā, it īpaši hirālajā sintēzē un farmaceitiskajā rūpniecībā. LGO dabā nav sastopams, un tā iegūšana no monosaharīdiem ir sarežģīta un ekonomiski neizdevīga. LGO veidojas, notiekot celulozes depolimerizācijas un dehidratācijas reakcijām selektīvās katalītiskās pirolīzes procesā [1], tāpēc koksni, kas ir atjaunojams bioresurss un satur ievērojamu daudzumu celulozes, var izmantot kā izejvielu.

Darba mērķis – noteikt optimālos apstākļus LGO ieguvei no bērza koksnes selektīvās katalītiskās pirolīzes procesā, kā katalizatoru izmantojot H_3PO_4 .

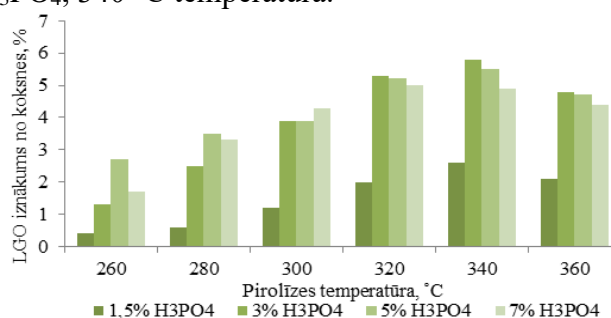
Pētījumā kā izejviela tika izmantoti bērza finiera atgriezumi, kuri vispirms tika sasmalcināti un sijāti, iegūstot 0,4-0,63 mm frakciju. Tālāk koksne tika impregnēta ar H_3PO_4 (1,5%; 3%; 5% un 7% koncentrācijās no sausas koksnes) un žāvēta 103 °C temperatūrā.

Katram pirolīzes eksperimentam tika izmantoti 80 g sagatavotā izejmateriāla. Pirolīze tika veikta temperatūru diapazonā no 260°C līdz 360 °C. Iekārtas shematiskais attēlojums parādīts 1.att.



1.att. Pirolīzes iekārtas shēma

Pirolīzes eksperimentu rezultāti parādīti 2.att. Izvērtējot rezultātus, tika secināts, ka maksimālais LGO iznākums (5,8 % no sausas koksnes masas) sasniegts, koksnes materiāla pirolīzē, kas satur 3 % H_3PO_4 , 340 °C temperatūrā.



2.att. LGO iznākumi no 103 °C temperatūrā žāvētas bērza koksnes atkarībā no H_3PO_4 koncentrācijas un pirolīzes temperatūras.

Ievērojami zemākie rezultāti, kas iegūti iegūti 1,5% H_3PO_4 materiāla pirolīzē, izskaidrojami ar to, ka ievērojama daļa no tā jau mazā H_3PO_4 daudzuma izreaģē ar koksni esošajiem sāļiem (pelniem), līdz ar to brīvās H_3PO_4 saturs, kas katalizē LGO veidošanos, šādi sagatavotā koksnes materiālā ir ļoti zems.

Darbs tika veikts ERAF projekta Nr.1.1.1.1/16/A/010 "Inovātīvas levoglikozenona ieguves tehnoloģijas no lignocelulozes izstrāde" ietvaros

LITERATŪRA

[1] Zhang, Z., Lu, Q., et al. Selective production of levoglucosenone from catalytic fast pyrolysis of biomass mechanically mixed with solid phosphoric acid catalysts. *Bioenergy Res.* **2015**,8,1263–74.

Selective production of levoglucosenone (LGO) from catalytic fast pyrolysis process of renewable bioresource – birch wood. The aim of the study was to determine the optimal conditions of catalytic fast pyrolysis (catalyzed by phosphoric acid) to selectively produce LGO from birch wood. The raw material was prepared by impregnation method. An aqueous solution of phosphoric acid (different concentrations) was mixed with wood particles and then the impregnated material was dried at 103 °C. The maximal LGO yields of 5,8 wt % were obtained from dry birch wood (acid concentration 3,0 wt%) at 320 °C

Rekombinanto citokīnu zīdītāju šūnu biotehnoloģija

Alīna Reķēna (3. kursa Ķīmijas tehnoloģijas bakalaura programmas studente)

Dr. sc. ing. Kristīne Ruģele (zinātniskā vadītāja)

Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte
e-pasts: rekena.a@gmail.com

Citokīni ir imūnsistēmas šūnu izdalīta ķīmisko vielu grupa, kas lielākoties darbojas kā signālmolekulas starp iedzimto un adaptīvo imūno sistēmu [1]. Citokīnu pielietojums medicīnā ir plašs, tos izmanto vēža, imūnsistēmas traucējumu, infekciju, reto slimību ārstēšanā u.c. Tāpat citokīnus daudz izmanto pētniecībā un diagnostikā [2].

Pieprasījumam augot, attīstās arī to ražošanas tehnoloģijas. Šīs šūnas tiek kultivētas līdz 20 000 litru tilpumā. Apsekojot komerciāli pieejamos rekombinanto citokīnu piedāvājumus, redzams, ka to ekspresijai bieži tiek izmantotas nevis zīdītāju šūnu kultūras, bet baktērijas un raugi.

Zīdītāju šūnu rekombinanto proteīnu ražošana sastāv no vairākiem posmiem. Atšķirībā no citām biotehnoloģijas nozarēm, šeit tehnoloģiskais process sākas ilgi pirms kultivēšanas procesa uzsākšanas.

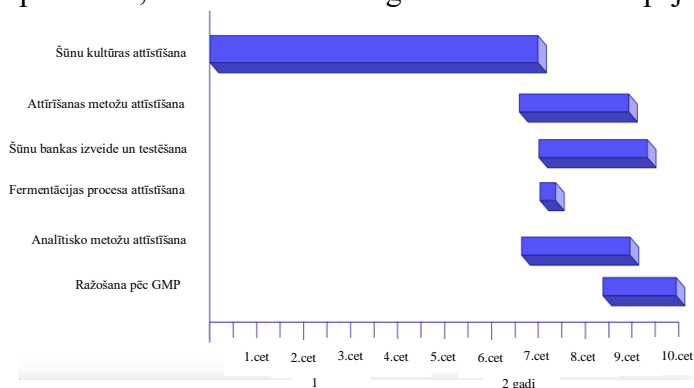
Pirmais posms ir šūnu kultūras attīstīšana. Šis posms ietver mērķa proteīna gēnu sekvenču izdalīšanu, ekspresijas vektora sagatavošanu, saimniekšūnu transformēšanu, pozitīvo klonu atlasīšanu un to pavairošanu. Process ir salīdzinoši ļoti laikietilpīgs (1. att.) [3]. Zīdītāju šūnām kā saimniekorganismam ir zināmas priekšrocības pār citām mikroorganismu sistēmām, jo to proteīniem ir cilvēkam atbilstošākās pēctranslācijas modifikācijas.

Tālāk seko fermentācija. Šūnām jānodrošina augsti sterila vide, 37 °C temperatūra, noteikts pH līmenis, aminoskābes, skābeklis un CO₂ 5-8% koncentrācijā. Tās ir ļoti jutīgas attiecībā pret maisīšanas bīdes spēkiem un pret plīstošiem gaisa burbuļiem. Taču liela tilpuma fermentācijas iekārtā nepietiekama maisīšana var novest pie nepietiekamas barības vielu uzņemšanas, atkritumproduktu uzkrāšanās un klasteru veidošanās [4]. Liela apjoma reaktora CO₂ uzkrāšanās rada nevēlamas pH izmaiņas.

Noslēdzošais etaps ir mērķa proteīna attīrīšana (*downstream processing*). Pielieto atšķirīgas metodes atkarībā no tā, vai produkts ir iekššūnas vai

sekretējama proteīns. Šajā posmā ir svarīga proteīna šķīdība. Ja proteīns ir uzkrājies ieslēguma ķermeņos un ir nešķīstošs, to izdalīt nevarēs. Zīdītāju šūnās proteīni ir labāk šķīstoši, bet ar zemākiem iznākumiem nekā baktēriju kultūrās.

Nemot vērā zīdītāju šūnu specifiskās prasības, to ekspluatācija ir sarežģītāka salīdzinājumā ar citām pieejamajām ekspresijas sistēmām, turklāt arī dārgāka. Tāpēc rekombinantie citokīni retāk tiek ekspresēti zīdītāju šūnās. Tajā pašā laikā zīdītāju šūnas spēj producēt augstas kvalitātes komplikētus proteīnus, kurus citi mikroorganismi sintezēt nespēj.



1. att. Rekombinanto proteīnu ražošanas posmi [3].

LITERATŪRA

- [1] Ballantyne, S. *The Paleo Approach: Reverse Autoimmune Disease and Heal Your Body*; Victory Belt Publishing: Las Vegas, NV, 2013; p 30.
- [2] Unver, N.; McAllister, F. IL-6 Family Cytokines: Key inflammatory mediators as biomarkers and potential therapeutic targets. *Cytokine Growth Factor Rev.* [Tiešsaistes agrīnā piekļuve]. DOI: 10.1016/j.cytogfr. 2018.04.004. Publicēts tiešsaistē: Apr 18, 2018. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359610118300455> (piekļūts Apr 20, 2018).
- [3] Birch, J. Challenges and Opportunities in the Large-Scale Production of Therapeutic Proteins, 2005. Semantic Scholar. <https://pdfs.semanticscholar.org/presentation/7e14/794e9dcb67f7eedd17bbc9cc9cb222dc39da.pdf> (piekļūts Apr 20, 2018).
- [4] Marks, D. M. *Cytotechnology* **2003**, *42*, 21-33.

Mammalian cell biotechnology of recombinant cytokines. Mammalian cells are not widely used for recombinant cytokine expression. This might be associated with comparably high exploitation costs coupled with low product titers.

Ar sudrabu un fluoru dopēta hidroksilapatīta sintēzes metožu salīdzinājums

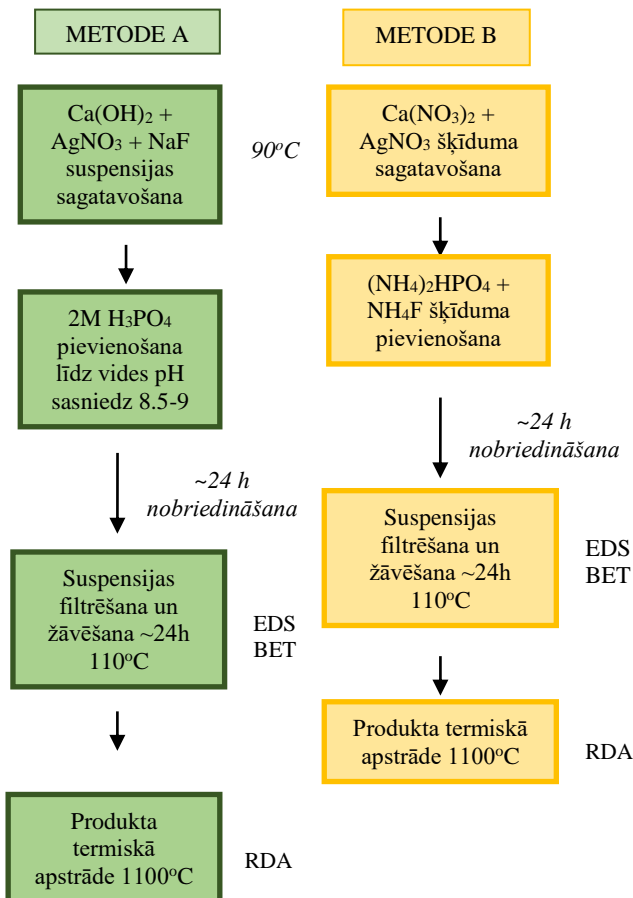
Jolanta Rimša (2.kursa Ķīmijas tehnoloģijas maģistra programmas studente)
 Dr.sc.ing Kristīne Šalma-Ancāne (zinātniskā vadītāja)

Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
 Rīgas Tehniskā universitāte
 e-pasts: jolanta.rimsa_1@rtu.lv

Periodontīts ir mutes dobuma iekaisuma slimība, kas skar zoba periodontu [1] un ir sestā izplatītākā slimība pasaulē [2]. Periodontīta izplatītākie simptomi ir smaganu asiņošana, smaganu kabatu veidošanās, alveolārā kaula rezorbija un zobu jutīgums, ko izraisa atsegtie dentīna kanāli. Praksē pacientiem iesaka lietot tādus mutes dobuma kopšanas līdzekļus, kas samazina zobu jutīgumu vai ir antibakteriāli, taču neatjauno zoba emalju un dentīnu. Darba mērķi ir iegūt ar sudrabu (Ag) un fluoru (F) dopētu hidroksilapatītu (AgFHAp), kurš varētu tikt izmantots kā sastāvdaļa ikdienas kopšanas līdzekļos periodontīta pacientiem, arī izpētīt abu iekļauto elementu savstarpējo sinerģiju.

kuras savstarpēji atšķiras ar teorētisko iekļauto elementu saturu: 4% Ag un 1% F; 3% Ag un 2% F, kā arī 1% Ag un 4% F.

Kā redzams, izmantoto reaģentu kombinācija un Ag pievienošana paraugiem neietekmē F saturu AgFHAp. Visos paraugos identificēta FAp (fluorapatīta) fāze. A met. gadījumā paraugos identificē arī Ag un CaO fāzi, bet visos B met. paraugos – Ag. Ar A met. iegūto paraugu virsmas laukums ir lielāks salīdzinot ar B met. paraugiem. Uz Ag iekļaušanos HAp stuktūrā netieši norāda īpatn.virsmas laukuma samazināšanās. Lai to apstiprinātu, nepieciešams noteikt Ag saturu paraugos.



1.tabula. Sintezēto savienojumu raksturojums

Teor. Ag un F saturs, %.	Sintēzes metode	Īpatnējais virsmas laukums, m ² /g	Fāžu sastāvs	Reālais F saturs, %
4% Ag, 1% F	A	61,8±1,1	98,05% FAp, 1,95% Ag	1,1±0,1
4% Ag, 1% F	B	42,9±2,2	97,84% FAp, 2,16% Ag	1,0±0,1
3% Ag, 2% F	A	48,6±0,1	98,60% FAp, 0,9% Ag, 0,5% CaO	1,7±0,3
3% Ag, 2% F	B	46,7±1,2	97,90% FAp, 2,10% Ag	1,8±0,1
1% Ag, 4% F	A	54,3±2,8	98,16% FAp, 1,22% CaO, 0,62% Ag	4,2±0,8
1% Ag, 4% F	B	28,7±1,8	99,57% FAp, 0,43% Ag	3,6±0,1

LITERATŪRA

- [1] S. V. Kellesarian, V. R. Malignaggi, T. Abduljabbar, F. Vohra, H. Malmstrom, G. E. Romanos, and F. Javed, "Efficiency of scaling and root planing with and without adjunct antimicrobial photodynamic therapy on the expression of cytokines in the gingival crevicular fluid of patients with periodontitis: A systematic review," *Photodiagnosis Photodyn. Ther.*, vol. 16, pp. 76–84, 2016.
- [2] M. S. Tonetti, S. Jepsen, J. Lijian, and J. Otomo-Corgel, "Periodontitis & human health and wellbeing," *J. Clin. Periodontol.*, vol. 44, no. 5, pp. 456–462, 2017.

Ar katru no metodēm ir sintezētas 3 dažādas paraugu sērijas (katrā sērijā 3 paralēlie paraugi),

Comparative study on synthesis methods of silver and fluorine co-doped hydroxylapatite. Periodontitis is an inflammatory disease that compromises the supporting and protective connective tissues of teeth. The aim of this research is to develop a perspective material – Ag and F doped hydroxyapatite - as a everyday hygiene product for patients of this disease and to study the methods of synthesis of this product.

The obtained results show that products synthesised with A method has larger specific surface area compared to B method. All of products content FAp, products of method A has also traces of CaO and Ag, but method B – only Ag. Neither the used method neither Ag content influence the content of F in sample.

Liposomu izstrāde un raksturošana kontrolētai zāļu piegādei

Mārīte Skrinda (3.kursa Materiālzinātnes bakalaura programmas studente)

Dr. sc. ing. Arita Dubņika (zinātniskā vadītāja)

Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte
e-pasts: mariteskrinda@inbox.lv

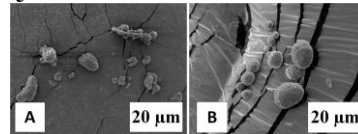
Vairumā gadījumu iekaisumu un bakteriālo infekciju ārstēšanai vankomicīna hidrogēnhlorīdu (VANKA) cilvēka organismā ievada sistemātiski, bez noteikta nesēja, taču šādi ievadīti medikamenti atstāj nevēlamu iespaidu uz organismu. Liposomas (LIP) ir sfēriskas formas, amfifilu molekulu veidoti zāļu piegādes sistēmas nesēji, ar kuru palīdzību tiek samazināta aktīvās vielas koncentrācija aknās un citos orgānos, kas ir lielākais medikamentu blakusparādību izraisošais iemesls [1].

LIP sintezētas, izmantojot plānās plēvītes hidratācijas metodi un 3 dehidratācijas-rehidratācijas (d-r) ciklus. LIP dubultslāņa struktūru veido 1,2-distearoil-sn-glicero-3-fosfokholīns (DSPC) un holesterīns daudzumu (n/n) attiecībās 2 : 1; 3 : 1 un 4 : 1. Lipīdi šķīdināti hloroformā, kas iztvaicēts, izmantojot N₂ gāzes plūsmu un vakuumžāvēšanu. Sausā lipīdu plēvīte hidratēta 5 ml dejonizēta ūdens vai VANKA šķīduma (c=250 µg/ml). LIP morfoloģijas, daļiņu izmēru, ķīmiskā sastāva un VANKA iekapsulēšanās efektivitātes noteikšanai izmantotas sekojošas metodes: gaismas mikroskops (GM), skenējošais elektronu mikroskops (SEM), lāzera granulometrija metode, Furjē transformācijas infrasarkanās spektroskopijas (FTIR) metode un šķīdumu hromatogrāfijas metode (UPLC).

Hloroforma piemaisījumi gatavās LIP nav vēlami, jo tie ietekmē LIP kvalitāti. Pēc FTIR analīzes datiem secināts, ka LIP sastāvā nav hloroforma palieku, jo hloroforma raksturīgās saites C-Cl svārstības netika novērotas. VANKA saturošo LIP FTIR analīzē novērojamas VANKA raksturīgo saišu (O-H, N-H₂ un aromātisko gredzenu) svārstības.

Analizējot GM un SEM attēlus, kā arī lāzera granulometrijas datus, novērots, ka neatkarīgi no LIP sastāva un d-r ciklu skaita, iegūto LIP forma ir apaļa, un izmēru sadalījumam ir pozitīva asimetrija, kā redzams 1. attēlā. LIP vidējais izmērs pēc 2. d-r cikla ir $2,13 \pm 1,59$ µm un pēc izmēru sadalījuma

līknes ~70 % LIP izmēri ir 1 - 2 µm robežās. Pēc d-r cikliem vērojama LIP izmēru samazināšanās.



1. att. SEM mikrofotogrāfijas: A – (n/n) 2 : 1, B – (n/n) 2 : 1 hidratēts VANKA šķīduma.

Novērota LIP aglomerēšanās mazo izmēru dēļ, ko ietekmē sistēmas brīvās jeb Gipsa enerģijas tendence samazināties, ieņemot termodinamiski stabilāku stāvokli. LIP pēc liofilizēšanas salīp un saplūst neregulāras formas veidojumos. Pulvera daļiņu salīšanas iemesls ir statistiskie lādiņi, ko apstrādes laikā berzes rezultātā iegūst daļiņas, bet saplūšanu veicina zemā stabilitāte, ko izraisa holesterīna molekulu atdalīšanās no dubultslāņa, fāzu pārejas temperatūras paaugstināšanās dēļ, veidojot lipīgus neregulāras formas veidojumus, kas saista brīvās LIP pulvera daļiņas.

VANKA iekapsulēšanas efektivitāte (EE) pēc 1. d-r cikla ir $20,20 \pm 2,49\%$.

LITERATŪRA

[1] Liu J. *Asian J. Pharm. Sci.* **2015**, *10*, 212-222.

Development and characterization of liposomes for controlled drug delivery. LIP are spherical form drug delivery system carriers which reduce the side effects of VANKA in the treatment of inflammations and bacterial infections. The LIP are synthesized using a thin film hydration method and 3 dehydration-rehydration (d-r) cycles. The LIP double-layer structure consists of DSPC and cholesterol. The lipids were dissolved in chloroform which was evaporated using N₂ gas flow and vacuum drying. The dry lipid film was hydrated in 5 ml of deionized water or VANKA solution (c = 250 µg / ml). Based on the data from the FTIR analysis, it is concluded that the LIP contains no chloroform residue. Analyzing microscopy images and laser granulometry data, it is observed that the resulting LIP form is round and the size distribution is skewed. After lyophilization LIP stick and fuse together due to static charges and cholesterol molecules separation. VANKA EE after 1. d-r cycle is $20,20 \pm 2,49\%$.

Uz polisaharīdu bāzes veidotu hirālo sorbentu izmantošana flurbiprofēna, ibuprofēna un ketoprofēna enantiomēru sadalīšanā apgrieztās fāzes AEŠH apstākļos

Egija Stepina (4. kursa Ķīmijas tehnoloģijas bakalaura programmas studente)

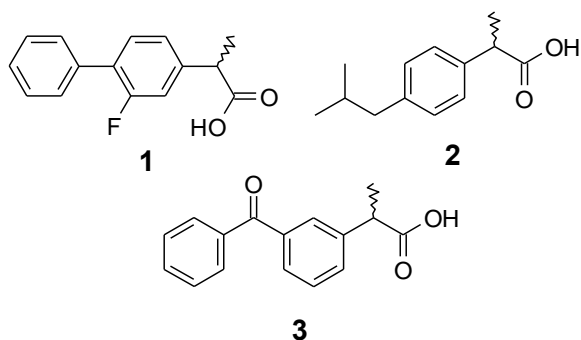
Dr. chem. Helēna Kažoka (zinātniskā vadītāja)

Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte
e-pasts: egija.stepina@gmail.com

Pēdējos gados racemisko zāļu vielu skaits strauji samazinās un palielinās zāļu vielu skaits, kuras sastāv tikai no viena enantiomēra, jo parasti tikai viens enantiomērs ir atbildīgs par bioloģisko aktivitāti. Tāpēc nepieciešamība pēc efektīvām zāļu vielu optiskās tīrības noteikšanas metodēm ir aktuāla [1].

Visbiežāk enantiomēru sadale tiek veikta, izmantojot augsti efektīvo šķidrums hromatogrāfiju (AEŠH) ar hirālām kolonnām. Komerciāli ir pieejamas dažādas hirālās kolonnas, bet pārsvarā tiek lietotas polisaharīdu hirālās kolonnas (PHK) [2]. Enantiomēru sadale uz PHK parasti tiek veikta tiešās fāzes apstākļos, tomēr apgrieztās fāzes apstākļiem ir vairākas priekšrocības: labāka savietojamība ar bioloģiskiem paraugiem (asins plazma vai serums), ūdens vidē ir iespējams izšķīdināt paraugus, kas ir sāls formā [3].

Flurbiprofēns (**1**), ibuprofēns (**2**) un ketoprofēns (**3**) (skat. 1. att.) ir racemiski savienojumi, kuri tiek izmantoti kā nesteroidie pretiekaisuma līdzekļi.



1. att. Flurbiprofēna (**1**), ibuprofēna (**2**) un ketoprofēna (**3**) struktūras.

Lai izpētītu, kā dažādu apgrieztās fāzes hromatogrāfisko apstākļu maiņa ietekmē enantiomēru sadali, savienojumu **1-3** racemātu analīze tika veikta uz trīs dažādām PHK: *Lux Amylose-2* (*LA2*), *Chiralpak IA* (*IA*) un *Chiralpak*

IC (*IC*) ar acetonitrilu (MeCN) vai metanolu (MeOH) saturošām mobilajām fāzēm (MF). Lai izvairītos no savienojuma jonizēšanās, eksperimenti tiek veikti ar MF, kuru ūdens daļas pH vērtība nepārsniedz 2,1 (ir ieregulēta ar trifluoretiķskābi (TFA) un dietilamīnu).

Enantiomēru sadale ar 0,1 % TFA saturošu MF līdz bāzes līnijai ir novērojama flurbiprofēnam uz kolonnām *LA2* un *IA* gan MeCN, gan MeOH klātbūtnē, bet ibuprofēnam tikai uz kolonnas *IA* ar MeOH. Savukārt ketoprofēnu nav izdevies sadalīt līdz bāzes līnijai. Kolonnai *IC* tika novērota visvājākā enantiosadale savienojumiem **1-3**. Dietilamīna pievienošana MF būtiski neietekmē enantiosadali.

Apgrieztās fāzes apstākļos enantiosadali nosaka ne tikai PHK hirālais selektors, bet arī mobilās fāzes sastāvs. Lai gan savienojumu **1-3** struktūras ir līdzīgas, enantiomēru sadale ir atšķirīga.

LITERATŪRA

- [1] Sekhon, B. S. *Int. J. PharmTech Res.* **2010**, 2, 1584–1594.
- [2] Chen, X.; Yamamoto, C.; Okamoto, Y. *Pure Appl. Chem.* **2007**, 79, 1561–1573.
- [3] Tachibana, K.; Ohnishi, A. *J. Chromatogr. A* **2001**, 906, 127–154.

Application of polysaccharide-based chiral sorbents for enantioseparation of flurbiprofen, ibuprofen and ketoprofen under reversed phase HPLC conditions. The separation of enantiomers is of great interest since in many cases only one of the enantiomers shows biological activity. Liquid chromatography with polysaccharide-based chiral stationary phases is the most commonly used technique for enantiomer separation. Polysaccharide-based sorbents have been mostly studied under normal phase mode, but reversed phase conditions have other advantages. For investigation of how different chromatographic conditions can impact the enantioseparation, racemic compounds (flurbiprofen, ibuprofen and ketoprofen) were analyzed on three chiral sorbents under different reversed phase conditions. It was established that separation of enantiomers depends both on chiral selector and mobile phase used.

Magnētiskā maisītāja pielietojuma izpēte viskozām vidēm

Artūrs Šuleiko (2. kursa Ķīmijas tehnoloģijas maģistra programmas students)

Dr. sc. ing. Juris Vanags (zinātniskais vadītājs)

Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte
e-pasts: arturs.suleiko.00@rpg.lv

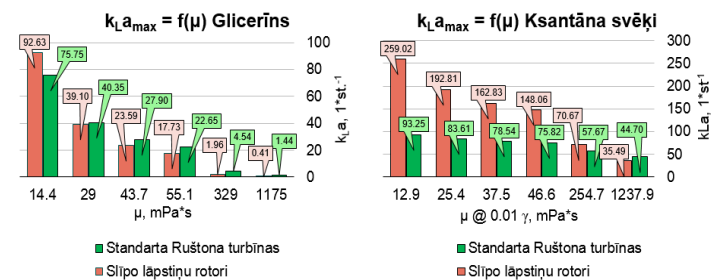
Magnētiskā piedziņa mūsdienās spēj nodrošināt augstāku aseptiskuma līmeni bioreaktoros ar maisītāju salīdzinājumā ar mehāniskiem blīvējumiem [1]. Tomēr ņemot vērā, ka magnētiskais sajūgs pārraida motora radīto jaudu uz maisītāja rotoriem tikai ar magnētiskā spēka palīdzību, pastāv ierobežojumi maksimālai ievadāmajai jaudai, kuru var nodrošināt konkrēta piedziņa [2]. Minētais fakts rada jautājumu par iespējamām pielietojuma robežām viskozā fermentācijas vidē jaunajai magnētiskā maisītāja konstrukcijai, kuru izstrādāja AS „Biotehniskais centrs”.

Pētniecības darba eksperimentālajā daļā tika veikti kritiskā spēka momenta (T_{krit}) mērījumi bioreaktoru maisītājiem ar magnētisko piedziņu pie kura notiek rotoru izslīdēšana. Kā arī tika noteikts spēka moments, kurš veidojas uz maisītāja ass šķidrums ar dažādu viskozitāšu (Ņūtona un pseidoplastisko NeŅūtona) maisīšanas laikā, pielietojot divas dažādas rotoru konfigurācijas: divas Standarta Ruštona turbīnas un divus Slīpo lāpstiņu rotorus. Augstāk minētie mērījumi tika veikti laboratorijas bioreaktora (5 dm^3) magnētiskam maisītājam, izmantojot elektronisko deformācijas mēriekārtu (*FUTEK Torque sensor, TRS600*). Kā arī, laboratorijas reaktorā tika noteiktas tilpuma skābekļa masas pārnese koeficienta (k_{La}) vērtības pie dažādiem maisīšanas ātrumiem, viskozitātēm un maisītāja konfigurācijām, izmantojot statisko skābekļa atgaisošanas metodi.

Veicot eksperimentus pie paaugstinātas maisāmas vides viskozitātes tika novērots, ka Standarta Ruštona turbīnas veic ievadāmās gāzes burbuļu disperģēšanu efektīvāk, salīdzinot ar Slīpo lāpstiņu rotoriem (1.att.). Minētais fakts labi korelē ar k_{La} datiem, kas iegūti ar empīriskiem vienādojumiem.

Samazinoties viskozitātei, efektīvāku vides samaisīšanas spēju uzrāda Slīpo lāpstiņu rotorī, jo salīdzinājumā ar Standarta Ruštona turbīnām, tie spēj ievadīt maisāmajā vidē lielāku jaudu (1.att.).

Novērtējot magnētiskā maisītāja iespējamās pielietojuma robežas viskozām fermentācijas vidēm, var izdarīt secinājumu, ka pētītā maisītāja konstrukcija spēs nodrošināt pietiekamu masas pārnesei aplūkotajiem mikroorganismu veidiem.



1. att. Skābekļa tilpuma masas pārnese koeficienta atkarības no maisāma šķidruma viskozitātes un pielietotā rotoru veida.

LITERATŪRA

- [1] Junker, B. *Journal of Bioscience and Bioengineering* **2004**, 97, 347-364.
[2] Reichert, T.; Nussbaumer, T.; Kolar, J. *IEEE Transactions on Industrial Electronics* **2012**, 59, 1376-1388.

Research on the application of magnetic mixers for viscous media. The following research focuses on the influence of Newtonian and shear thinning non-Newtonian liquid viscosity on mixing in biotechnological processes. Correlations for the specific power input, volumetric oxygen mass transfer coefficient and fermentation broth viscosity were determined as a part of the current research. After determining the application limits of the proposed magnetic mixers design for viscous fermentation broths, it can be concluded that the examined magnetic mixer design is able to provide sufficient oxygen mass transfer for growth of microorganism strains being examined.