

RĪGAS TEHNISKĀ UNIVERSITĀTE
Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte

56.STUDENTU ZINĀTNISKĀS UN TEHNISKĀS STUDENTU
KONFERENCES TĒZES

Organisko savienojumu ķīmijas un tehnoloģijas apakšsekcija

Polimēru materiālu tehnoloģijas apakšsekcija

Silikātu un augsttemperatūras materiālu tehnoloģijas apakšsekcija

Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas un biomateriālu ķīmijas un tehnoloģijas sekcija

Rīga – 2015

SATURS

Organisko savienojumu ķīmijas un tehnoloģijas apakšsekcija

<i>Sigita Birzniece, Māris Turks</i> Lupānu rindas triterpēnu-azolu konjugātu sintēze.....	5
<i>Dace Cīrule, Ērika Bizdēna, Irina Novošjolova</i> Purīna dezoksiribonukleozīda bistriazolilatvasinājumu sintēze un reakcijas.....	6
<i>Anastasija Ivanova, Igors Kaulačs, Modris Roze</i> Planāro heteropāreju perovskīta ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$) saules elementa galveno elektrisko parametru spektrālās atkarības.....	7
<i>Artūrs Janičevs, Dmitrijs Stepanovs, Anatolijs Mišņovs</i> Propranolola molekulāro sāļu izstrāde, to struktūra un īpašības.....	8
<i>Atis Jēkabsons, Kristaps Jaudzems</i> Ogļskābes anhidrāžu inhibīcijas mehānisma ar sulfokumarīniem pētījumi, izmantojot KMR spektroskopiju.....	9
<i>Zigfrīds Kapilinskis, Ērika Bizdēna</i> Jaunu aciklisko nukleozīdu fosfonātu sintēze.....	10
<i>Jānis Kunakovs, Svetlana Čornaja, Konstantīns Dubencovs</i> Glicerīna oksidēšana ar molekulāro skābekli platīnu saturošu katalizatoru klātienē.....	11
<i>Mārtiņš Otiņš, Kristaps Jaudzems</i> Zirnekļa zīda veidošanās mehānisma izpēte.....	12
<i>Kristers Ozols, Ērika Bizdēna</i> Fluorescenta trinukleotīda sintēze.....	13
<i>Daniels Posevins, Māris Turks</i> Ritera reakcija šķidrā sēra dioksīdā.....	14
<i>Armands Rudušs, Valdis Kokars, Kārlis Balodis</i> Grafiņa oksīda funkcionalizēšana ar pirmējiem amīniem.....	15
<i>Sanita Rudzāja, Valdis Kampars</i> Triglicerīdu interesterifikācija ar ftalskābes dimetilesteri nātrija metoksīda klātbūtnē.....	16
<i>Andrejs Solops, Māris Turks</i> Azetidīnu-triazolu konjugātu sintēze.....	17
<i>Diāna Stamberga, Māris Turks</i> Cu(I) katalizēta 1,4-diaizvietotu 1,2,3-triazolu-aziridīnu konjugātu sintēze.....	18
<i>Agnese Stikute, Māris Turks</i> Alilsulfoksīdu sintēze no alilsilāniem.....	19
<i>Krista Suta, Māris Turks</i> Aziridīni ar 1,5-diaizvietotu 1,2,3-triazolu sānu ķēdē.....	20
<i>Andrejs Šišuļins, Ērika Bizdēna</i> Jaunu fluorescentu 9-alkil-2-triazolilpurīnu atvasinājumu sintēze.....	21
<i>Liene Vasariņa, Valdis Kampars, Kristīne Lazdoviča</i> Griķu salmu katalītiskā pirolīze izmantojot TG-FTIR metodi.....	22
<i>Diāna Zeļencova, Edvards Liepiņš</i> ϵ -Trimetillizīna hidroksilāzes inhibītoru meklējumi.....	23
<i>Laimdota Žižmāre, Māris Utināns</i> Pirazola betaīnu sintēžu ceļi.....	24

Polimēru materiālu tehnoloģijas apakšsekcija

<i>Sergejs Beļuns, Sergejs Gaidukovs</i> Polietilēna oksīda gēla elektrolīta pagatavošana un izpēte.....	25
<i>Evita Danenbergā, Anna Borisova</i> Speciālas nozīmes apģērbu materiālu apdares pētījumi.....	26

<i>Sandra Guzlēna, Gita Šakale</i> Inovātīvi silikongumijas/nanografīta kompozīti gaistošo organiskosavienojumu detektēšanai.....	27
<i>Marija Jegorova, Sergejs Gaidukovs</i> Polietilēna oksīda kristalizācijas pētījumi plānās kārtiņās.....	28
<i>Ilze Kalniņa, Kaspars Kalniņš</i> Oglekļa šķiedras un iepriekš impregnēta epoksīda kompozīta cilindru prototipēšana un eksperimentālā validācija.....	29
<i>Arvis Kokins, Ivans Bočkovs</i> Etilēna-oktēna kopolimēra un cinka oksīda ietekme uz reciklēta polipropilēna īpašībām....	30
<i>Arsenijs Kolbins, Jānis Kajaks</i> Saplākšņa slīpēšanas putekļu izmantošanas iespēju pētījumi termoplastisko polimēru koksnes kompozītu materiālu iegūšanai.....	31
<i>Edgars Kuka, Jānis Kajaks</i> Hidrotermiski modificētas koksnes atlikumu izmantošana koksnes polimēru kompozītu iegūšanai.....	32
<i>Pēteris Lesničenoks, Jānis Kleperis, Remo Merijs Meri</i> Mezoporainu lielas virsmas materiālu izmantošanas iespēju pētījumi ūdeņraža uzglabāšanas pielietojumam autoindustrijā.....	33
<i>Arita Mičule, Skaidrīte Reihmane</i> Kokvilnas auduma ugunsizturības uzlabošana.....	34
<i>Klāvs Stankevics, Sergejs Gaidukovs</i> Epoksīda hibrīdkompozītu pagatavošana un izpēte.....	35
<i>Romāns Vaivodišs, Sergejs Gaidukovs, Aiga Pabērza</i> Poliuretāna pēdu stimulācijas celiņa izstrāde.....	36
<i>Laima Tukāne, Anna Borisova</i> Celulozi saturošu tekstiliju multifunkcionāla apdare.....	37

Silikātu un augsttemperatūras materiālu tehnoloģijas apakšsekcija

<i>Liene Gulbe, Inta Vītiņa</i> Cementa ietekme uz kaļķu javas īpašībām.....	38
<i>Lidija Isajeva, Gaida Maruta Sedmale</i> Silīcija nitrīda ietekme uz augsttemperatūras mullīta-ZrO ₂ keramikas fāžu veidošanos un īpašībām.....	39
<i>Līga Paušus, Janīna Sētiņa</i> Aktīvās alumosilikātu piedevas betonam.....	40
<i>Jūlija Petrova, Janīna Sētiņa</i> Cementa pastas un cenosfēru mijiedarbības izpēte.....	41
<i>Mārtiņš Randers, Gaida Maruta Sedmale</i> Diferencēti apstrādātu illītu struktūra un īpašība.....	42
<i>Inga Raubiška, Gaida Maruta Sedmale</i> Illītu mālu ietekme uz mullīta-ZrO ₂ keramikas veidošanos un īpašībām.....	43

Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas un biomateriālu ķīmijas un tehnoloģijas sekcija

<i>Svetlana Azareviča, Kristīne Šalma-Ancāne, Līga Stīpniece</i> Ar magniju un stronciju aizvietotu nanokristālisku apatītu sintēze un raksturojums.....	44
<i>Marta Branka, Dagnija Loča, Marina Sokolova</i> Kalcijs fosfātu/polivinilspirta nanokompozītu sintēze un raksturojums.....	45

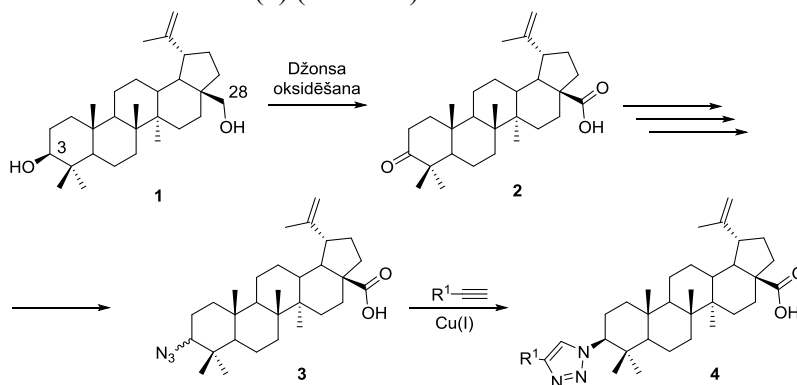
<i>Anete Brizga, Agnese Stunda-Zujeva</i> Pulverveida materiālu žūšanas kinētikas pētījumi konvekcijas žāvētavā.....	46
<i>Krista Gercāne, Līga Stīpniece, Kristīne Šalma-Ancāne</i> Magniju saturošas divfāžu kalcija fosfātu biokeramikas šķīdības pētījumi.....	47
<i>Sintija Grīvane, Daina Kalniņa</i> Silīcija minerālmateriālu raksturlīknes un to praktiskā izmantošana.....	48
<i>Liene Kienkas, Olita Medne, Imants Kreicbergs</i> Divkārsti vārtās un polimerizētās lineļļas fizikālo parametru simulācijas.....	49
<i>Zane Kivleniece, Jurijs Ozoliņš, Aleksandrs Volperts</i> Aktivētās ogles demineralizācija pēc ķīmiskās aktivācijas ar NaOH.....	50
<i>Jūlija Kozela, Jānis Ločs, Vita Zālīte</i> Kalcija fosfātu izmantošana zobu emaljas remineralizācijai.....	51
<i>Guna Kriekle, A. Šarakovskis, Līga. Bērziņa-Cimdiņa</i> Erbija jonu luminiscence oksifluorīdu stiklā un stikla keramikā ar β -NaYF ₄	52
<i>Madara Liepiņa, Kristīne Ruģele</i> Anaerobo pārstrādes procesu izpēte.....	53
<i>Austris Ļaksa, J. Ozoliņš, A. Šiškins</i> Latvijas mālu dobu sfēru veidošana un to īpašības.....	54
<i>Aleksejs Ļovins, K. Šalma-Ancāne, L. Stīpniece</i> Hidroksilapatīta biokeramikas iegūšana no biogēna kalcija karbonāta hidrotermiskos apstākļos.....	55
<i>Jeļena Mironova, Jānis Ločs</i> Fāžu atdalīšanās ietekme uz Ti _{1-x} Sn _x O ₂ keramikas īpašībām.....	56
<i>Sintija Pastare, L. Stīpniece, K. Šalma-Ancāne</i> Ar stronciju aizvietota hidroksilapatīta iegūšana, izmantojot ķīmiskās nogulsnešanas metodes.....	57
<i>Arvis Pastars, Jānis Ločs</i> Niķeļa-silīcija karbīda kompozītpārklājumi uz metālu virsmām.....	58
<i>Julīte Peculeviča, Jurijs Ozoliņš, Ivanda Bībere</i> Rūgtvielu (izo-alfa skābju) koncentrācijas dinamika dažādos alus brūvēšanas posmos.....	59
<i>Anastasija Smirnova, Daina Kalniņa</i> Biosorbentu izmantošana ar biogēniem savienojumiem piesārņotu ūdeņu attīrīšanai.....	60
<i>Anita Trubača, K. Kuprevičs, D. Loča</i> Eksperimentu plānošanas pielietojums daļiņu izmēru sadalījuma noteikšanas optimizācijā.....	61
<i>Anna Vojevodova, Kristīne Šalma-Ancāne</i> Biomimētiskā hidroksilapatīta sintēze polimēra vidē.....	62

LUPĀNU RINDAS TRITERPĒNU-AZOLU KONJUGĀTU SINTĒZE

Sigita Birzniece, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Organiskās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 4.studiju gada bakalaurante
Zinātniskais vadītājs: Dr. chem. Māris Turks, profesors

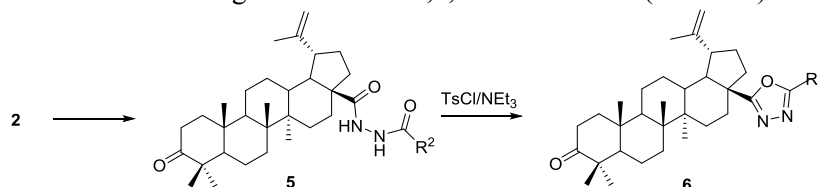
Betulīns ir triterpēnu grupas savienojums, kas dabā atrodams bērza tāsī. Tā kā bērzs (*Betula pendula*, Roth) ir Latvijā plaši izplatīta koku suga un betulīns (**1**) – vienkārši izdalāms, tad mūsu pētnieciskā grupa ir uzsākusi darbu tā atvasinājumu sintēzē un sekojošā to bioloģiskās aktivitātes izpētē. Jau zināms, ka betulīnam piemīt pretvēža un antivirālas īpašības.¹ Triazola cikli kā fragmenti mērķsavienojumu molekulās izvēlēti, jo tie pazīstami kā labi farmakofori, pateicoties to spējai nekovalenti saistīties ar dažādiem receptoriem un enzīmiem.

Darba mērķis ir izstrādāt sintēzes metodi un iegūt betulīna konjugātus ar azolu cikliem C-3 un C-28 pozīcijās. Pirmajā darba virzienā – 1,2,3-triazola cikla pievienošana betulīnam C-3 pozīcijā – kā galvenā reakcija tika izvēlēta Cu(I) katalizēta 1,3-dipolāra ciklopievienošana starp 3-dezoksi-3-azidobetulīnskābi (**3**) un dažādiem termināliem alkīniem. Kā sintēzes ceļa galvenā izejviela tika izmantots betulīns, kas iegūstams ekstrakcijas procesā no bērza tās. Sintēzes shēma iekļāva betulīna oksidēšanu pēc Džonsa metodes un sekojošu iegūtās betulonskābes (**2**) reducējošu aminēšanu, izdalot 3-dezoksi-3-aminobetulīnskābes diastereomēru maisījumu, kas netika attīrīts nepietiekamas šķīdības dēļ. Galaproduktu prekursors tika iegūts diazopārneses reakcijā ar 3-dezoksi-3-aminobetulīnskābi, izdalot 3-dezoksi-3-azidobetulīnskābi (**3**) (1. shēma).



1. shēma. Betulonskābes 1,2,3-triazolu konjugātu **4** iegūšanas vispārējā shēma.

Kā galvenie starpprodukti otrā darba virzienā, kas vērsts uz 1,3,4-oksadiazolu ciklu pievienošana betulīnam C-28 pozīcijā, tika sintezēti betulonskābes hidrazīdu atvasinājumi **5**. Tie tika iegūti reakcijā starp betulonskābi un dažādiem aromātisko karbonskābju hidrazīdiem. Pēc iegūto produktu **5** apstrādes ar TsCl tika iegūti atbilstošie 1,3,4-oksadiazoli **6** (2. shēma).



2. shēma. Betulonskābes hidrazīda atvasinājumu iegūšana un sekojoša ciklizācija par 1,3,4-oksadiazoliem.

Literatūra.

1. Alakurtti, S.; Mäkelä, T.; Koskimies, S.; Yli-Kauhaluoma, J. *Eur. J. Pharm. Sci.* **2006**, *29*, 1–13.

Summary. Synthesis of azole conjugates with triterpenes of lupane series. Betulin is a naturally occurring triterpene found in the outer layer of birch bark. Since some biological activities of its derivative betulonic acid have already been discovered, it is a promising material for a further research. Thus the aim of our work was to synthesize a library of betulonic acid derivatives by introducing substituted azole rings in positions C-3 or C-28.

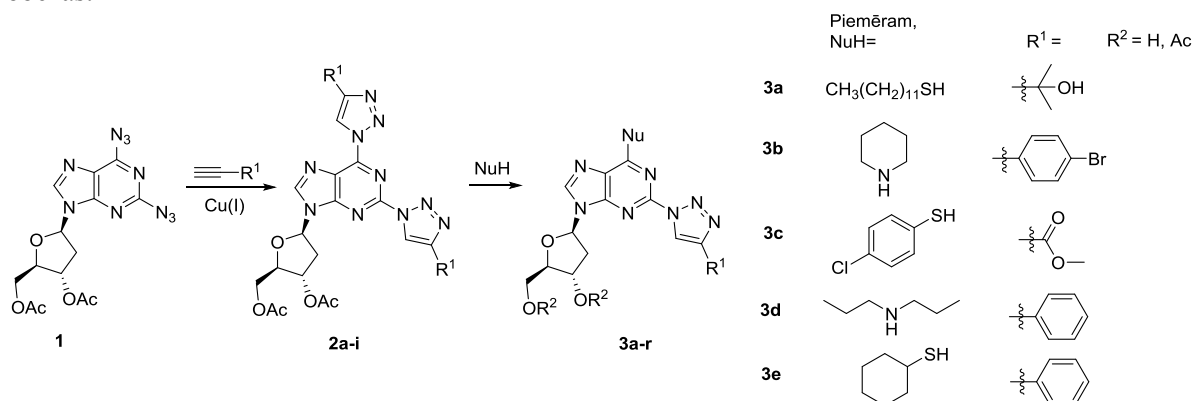
PURĪNA DEZOKSIRIBONUKLEOZĪDA BISTRIAZOLILATVASINĀJUMU SINTĒZE UN REAKCIJAS

Dace Cīrule, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Organiskās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 4.studiju gada bakalaurante
Zinātniskā vadītāja: Dr. chem. Ērika Bizdēna, profesore

Vairākiem 1,2,3-triazola ciklu saturošiem purīna nukleozīdiem piemīt pretvīrusu un pretvēža iedarbība, kā arī fluorescence.¹ Mūsu grupa ir ziņojusi par metodi 2,6-bistriazolilpurīna *ribo*- un arabinonukleozīdu iegūšanai, kā arī par šo savienojumu S_NAr reakcijām ar *S*- un *N*-nukleofīliem.² Turpinot iesākto darbu, esam veikuši *dezoksiribo*- analoģu sintēzi (sk. 1. shēmu).

Diazīda **1** un terminālo alkīnu 1,3-dipolārās ciklopievienošanās reakcijās iegūti savienojumi **2a-i**. Reakcijas tika veiktas *t*-BuOH/AcOH/H₂O šķīdumā 30-40 °C. Kā katalizators tika izmantots *in situ* ģenerēts Cu(I). Pēc hromatogrāfiskās attīrīšanas savienojumi **2a-i** tika iegūti ar iznākumiem 58–78%.

Lai sintezētu **3a-r**, realizējām bistriazolilatvasinājumu reakcijas ar *N*- vai *S*-nukleofīliem. Reakcijas tika veiktas THF/H₂O, DMF vai DMSO šķīdumos 20-40 °C. Šajos apstākļos izejvielu pilnīga konversija tika sasniegta 15 min (*S*-nukleofīli) līdz 24 h (stēriski traucēti *N*-nukleofīli) laikā. Lietojot aktīvus *N*-nukleofīlus, novērojām cukura fragmenta pilnīgu vai daļēju deacilēšanos. Pēc hromatogrāfiskās attīrīšanas vai kristalizācijas savinojumu **3a-r** iznākumi pēc izdalīšanas ir 78–92% robežās.



1.shēma. Ķīmiskās pārvērtības purīna mono- un bistriazolilatvasinājumu iegūšanai.

Pētījumu rezultātā izstrādāta metode bistriazolilpurīna dezoksiribonukleozīdu sintēzei un to reakcijām ar *S*- un *N*-nukleofīliem.

Literatūra

1. Amblard, F.; Cho, J. H.; Schinazi, R. F. *Chem. Rev.* **2009**, *109*, 4207 un rakstā citētā literatūra.
2. a) Kovaļovs, A.; Novosjolova, I.; Bizdēna, Ē.; Bižāne, I.; Skardziute, L.; Kazlauskas, K., Jursenas, S.; Turks, M. *Tetrahedron Lett.* **2013**, *54*, 850. b) Novosjolova, I.; Bizdēna, Ē.; Turks, M. *Tetrahedron Lett.* **2013**, *54*, 6557-6561.

Summary. Synthesis and reactions of bistriazolyl purine deoxyribonucleosides. CuAAC reactions of 2,6-diazidopurine deoxyribonucleoside **1** were performed. The obtained 2,6-bis(1,2,3-triazolyl)purine deoxyribonucleosides **2a-i** were reacted with different *N*- and *S*-nucleophiles to give substitution products, for example, **3a-e**.

PLANĀRO HETEROPĀREJU PEROVSKĪTA SAULES ELEMENTU GALVENO ELEKTRISKO PARAMETRU SPEKTRĀLĀS ATKARĪBAS

Anastasija Ivanova, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte, Organiskās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 2.studiju gada maģistrante

Zinātniskie vadītāji: Dr. phys. Igors Kaulačs, vad. pētnieks (Fizikālās Enerģētikas institūts),

Dr. chem. Modris Roze, vad. pētnieks

Divi ievērojamie zinātniskie žurnāli *Science*¹ un *Nature*² nosauca perovskīta saules elementus par vienu no lielākajiem 2013. gada atklājumiem. Jaudas konversijas efektivitāte (PCE) perovskīta saules elementos mazāk kā pēdējos piecos gados ir krasi pieaugusi no 3,9% līdz 20,1%³. Augstās efektivitātes svina jodīta perovskītos var novērot to augsto lādiņa nesēju kustīguma dēļ: $8 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ un $11 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$, kā arī tiem ir nelieli lādiņa nesēju rekombinācijas ātrumi monomolekulārajās un bimolekulārajās rekombinācijās. Līdz ar ko varētu secināt, ka jaukto halogenīdu perovskīti ir daudzsoļāki augstefektīviem saules elementiem. Lai vienkāršot un padarīt lētāku saules elementu ražošanu mēs izmantojam plānārās heteropārejas šūnas modeli, kurā nav nepieciešamas augstās temperatūras.

Saules elements ar aktīvo laukumu 7 mm^2 izveidots uz ITO pārklāta stikla paliktņa, kā caurumu transporta un elektronus un eksitonus bloķējošo slāni izmantojot PEDOT:PSS 30-40 nm biezu kārtiņu, kurai pēc izkarsēšanas 145°C temperatūrā argona atmosfērā uzņests perovskīts slānis, izmantojot divas metode: 1. metode - perovskīta slānis tiek veidots no PbCl_2 un metilamonija jodīda (MAI) šķīduma DMF; 2. metode jeb interdifūzijas - ar rotācijas metodi tiek uzņests PbI_2 un PbCl_2 sajaukums no DMF un DMSO šķīdumiem pie 65°C ar rotācija ātrumu 6000 apgr/min; kārtiņai pēc žāvēšanas 70°C argona atmosfērā uzklāta MAI kārtiņa no 2-propanola šķīduma (40 mg/mL) ar rotācijas metodi uz 65°C karsta paliktņa. Lai padziļinātu slāņu savstarpējo difūziju, slāņi karsēti pie 107°C 1 h gaisā un tad 1 h argona atmosfērā. Uz iegūtā perovskīta slāņa uzņests elektronus vadošais un caurumus bloķējošais PCBM slānis ar rotācijas metodi no DCB šķīduma. Pēc žāvēšanas 105°C argonā, paraugs ievietots vakuumā, kur uznesti 50 nm biezs C_{60} un 60 nm Ag slāņi ar termisko sublimāciju vakuumā. Saules elementa īsslēguma fotostrāvas ārējas kvantu efektivitātes (EQE) spektrālās atkarības 370-1000 nm intervālā, kā arī EQE atkarības no gaismas intensitātes un voltampēru atkarības samērītas šajā pat vakuumiekārtā pie vakuuma $5\cdot 10^{-7}$ mbar, nepārvietojot paraugu.

Ar interdifūzijas metodi izgatavoti paraugi uzrāda augstākas R_{shunt} , V_{oc} un FF vērtības nekā tie, kuri tiek izgatavoti ar metodi 1. Pirmreiz perovskītu pētījumos tiek pētīta FF un V_{oc} atkarības no krītošās gaismas kvantu enerģijas; tika atklāts, ka pieaugot fotonu enerģijai, FF vērtības pieaug līdz pat 0,87 (pie 400 nm), kas ir augstākā FF vērtība līdz šim publicētajos darbos, ka arī palielinās V_{oc} vērtība, palielinoties fotonu enerģijai.

Literatūra

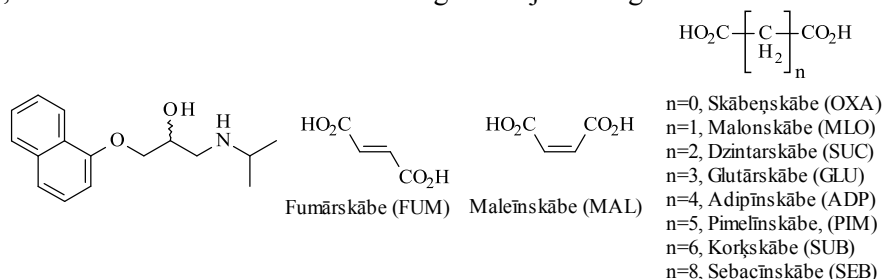
1. <http://news.sciencemag.org/breakthrough-of-the-year-2013>.
2. <http://www.nature.com/news/365-days-nature-s-10-1.14367>.
3. Zhou, H.; Chen, Q.; Li, S.; Luo, S.; Song, T.; Duan, H. S.; You, J.; Liu, Y.; Yang, Y. Interface engineering of highly efficient perovskite solar cells. *Science* **2014**, *345*(6196), 542-546.
4. Wehrenfennig, C.; Eperon, G. E.; Johnston, B.; Snaith, H. J.; Herz, L. M. High charge carrier mobilities and lifetimes in organolead trihalide perovskites. *Adv. Mater.* **2014**, *26*, 1584-1589.

Summary. Spectral dependencies of major electrical parameters in planar heterojunction perovskite solar cells. Mixed halide perovskite planar heterojunction solar cell was made by method 1 and by interdiffusion method. All photoelectric measurements have been made in the same homemade vacuum cryostat where electrode was deposited at $p\sim 5\cdot 10^{-7}$ mbar without breaking the vacuum and moving the cell. For the first time in published articles it was discovered that increasing exciting light quantum energy fill factor increases up to 0,87 at 400 nm what is the highest value ever published for mixed halide perovskite solar cells.

PROPRANOLOLA MOLEKULĀRO SĀĻU IZSTRĀDE, TO KRISTĀLISKĀ STRUKTŪRA UN FIZIKĀLKĪMISKĀS ĪPAŠĪBAS

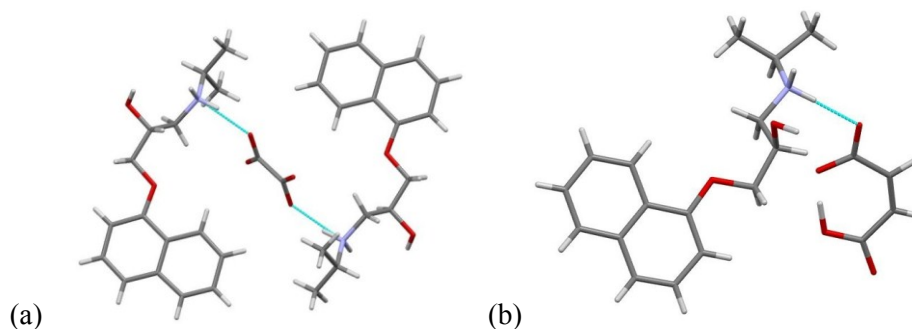
Arturs Janičevs, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Organiskās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 1.studiju gada maģistrants
Zinātniskie vadītāji: Dr. phys. Anatolijs Mišņovs, LOSI vad. pētnieks;
Mg. sc. ing. Dmitrijs Stepanovs, LOSI asistents

Propranolols (1.att.), (*R,S*)-1-(1-metiletilamino)-3-(1-naftiloksi)propan-2-ols, C₁₆H₂₁NO₂, ir simpatoģenisks neselektīvais beta blokators ar plašu izmantošanas spektru. To izmanto paaugstināta asinsspiediena, sirds aritmijas, ar tireotoksikozi saistītos trīces u.c. gadījumos. Tas ir pirmais efektīvais beta blokators, un tas atrodas Pasaules veselības organizācijas svarīgāko medikamentu sarakstā.



1. att. Propranolola bāzes un izmantoto dikarbonskābju molekulārā struktūra.

Darba mērķis ir modificēt aktīvās farmaceitiskās vielas fizikālkīmiskās īpašības. Mērķa sasniegšanai veikts propranolola un dikarbonskābju molekulāro sāļu veidošanās skrīnings ar mērķi izstrādāt jaunas propranolola kristāliskās formas. Propranolola molekulārie sāļi sintezēti, izmantojot alifātiskas dikarbonskābes ar oglekļa atomu skaitu no 2 līdz 10 (1.att.), ar sabēršanas un lēnas šķīdinātāja iztvaikošanas metodi. Rezultātā iegūti propranolola molekulārie sāļi ar skābeņskābi (1:1 un 2:1 (2.att. a)), fumariskābi (1:1 un 2:1), maleīnskābi (2.att. b) (1:1), dzintarskābi (2:1) un korķskābi (2:1). Molekulāro sāļu veidošanās noteikta, izmantojot KMR ¹H un pulvera rentgendifrakcijas metodes. Propranolola oksalātam (1:1 un 2:1), fumarātam (1:1 un 2:1), maleātam (1:1) iegūti monokristāli, un to kristāliskā un molekulārā struktūra pētīta ar monokristāla rentgendifrakcijas metodi.



2. att. Propranolola oksalāta (2:1) (a) un maleāta (1:1) (b) kristāliskā struktūra ar ūdeņrāža saitēm.

Molekulāro sāļu struktūru veido propranolola katjons un dikarbonskābes anjons. Kristālisko struktūru asimetriskās vienības veido pie slāpekļa atoma protonētie propranolola katjoni un deprotonētas (vai daļēji) dikarbonskābes anjoni. Šķīdības pētījumi veikti dejonizētā ūdens vidē ar ultravioleto/redzamās (UV/Vis) gaismas spektroskopiju. No septiņām binārām sistēmām, propranolola sukcināts un suberāts parādīja 100 reizes labāku šķīdību (13,09±0,24 un 12,17±0,21 mg/ml, attiecīgi), salīdzinot ar propranolola bāzi (0,13±0,06 mg/ml).

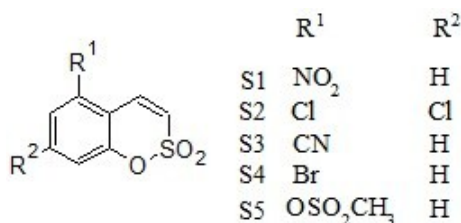
Summary. Propranolol molecular salts: preparation, crystal structure and physicochemical properties. Seven new molecular salts of beta blocker propranolol with aliphatic dicarboxylic acids were obtained and characterized by single crystal and powder XRD, NMR and UV/Vis techniques. Molecular salts have shown up to 100 fold increase in the solubility of propranolol.

OGĻSKĀBES ANHIDRĀŽU INHIBĪCIJAS MEHĀNISMA AR SULFOKUMARĪNIEM PĒTĪJUMI, IZMANTOJOT KMR SPEKTROSKOPIJU

Atis Jēkabsons, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Latvijas Organiskās sintēzes institūts, 4. studiju gada bakalaurants
Zinātniskais vadītājs: Dr. chem. Kristaps Jaudzems, LOSI vad. pētnieks

Ogļskābes anhidrāzes (CA) ir cinku vai citu metāla jonu saturoši enzīmi, kas katalizē atgriezenisko oglekļa dioksīda hidratēšanas reakciju, veidojot bikarbonāta anjonu un protonu. Cilvēka organismā ir 15 CA izoformas, kas visas pieder α -CA klasei. Pētījumi rāda, ka pārāk liela CA IX un XII izoformu aktivitāte organismā veicina dažādu slimību attīstību. Taču CA I un II aktivitāte ir svarīga normālai organisma funkcionēšanai, tāpēc svarīgi ir atrast savienojumus, kas inhibē tikai konkrētās izoformas, kā arī izprast inhibīcijas mehānismu.

Veicot potenciālo inhibitoru meklējumus, Latvijas Organiskās sintēzes institūtā, Dr. R. Žalubovska grupā tika sintezēti savienojumi S1-S5 (1.att.), kuri tika izmantoti inhibīcijas mehānisma pētījumos.



1.att. Pētāmie CA inhibitori.

Pētījumu veikšanai tika pagatavotas divas CA izoformas: izoforma I (CA I) un izoformas II mutants A65SQ67N (izoformas IX aktīvā saita mimētiķis).

Inhibīcijas mehānisma pētījumos tika izmantoti sekojoši eksperimenti: 1) kodolmagnētiskās rezonances T₁ρ relaksācijas eksperiments; 2) WaterLOGSY - magnetizācijas pārnese eksperiments no ūdens molekulām uz enzīmu caur kodolu Overhauzera efektu; 3) STD - piesātinājuma pārnese starpības eksperiments; 4) enzimatiskās reakcijas monitorings ar ¹H KMR spektroskopija.

Eksperimentu gaitā iegūtie dati liecina, ka CA katalizē sulfokumarīnu cikla uzšķelšanās reakciju, veidojot 4- un 6-vietā aizvietotas 2-hidroksifenil- ω -etilēnsulfonskābes. Noskaidrots, ka pie CA vispirms piesaistās *cis* koformācijā esošais uzšķelšanās reakcijas produkts. Uzšķelšanās reakcijas ātrums atkarīgs no 4- un 6-vietās esošo aizvietotāju elektronakceptorajām īpašībām. Dati apkopoti 1. tabulā. Sulfokumarīnu cikla uzšķelšana CA klātbūtnē ir pseido-pirmās kārtas reakcija, kuras ātruma vienādojums ir sekojošs: $v = k \cdot c_{\text{lig}}$.

1. tabula. Sulfokumarīnu uzšķelšanās reakcijas ātrumā konstantes CA klātienē.

Savienojums	CA I		CA IXm2	
	k, h ⁻¹	R ²	k, h ⁻¹	R ²
S1	2,606	0,980	0,972	0,959
S2	1,744	0,966	0,497	0,963
S3	1,215	0,961	0,856	0,979
S4	0,058	0,964	-	-
S5	0,042	0,911	0,0009	0,887

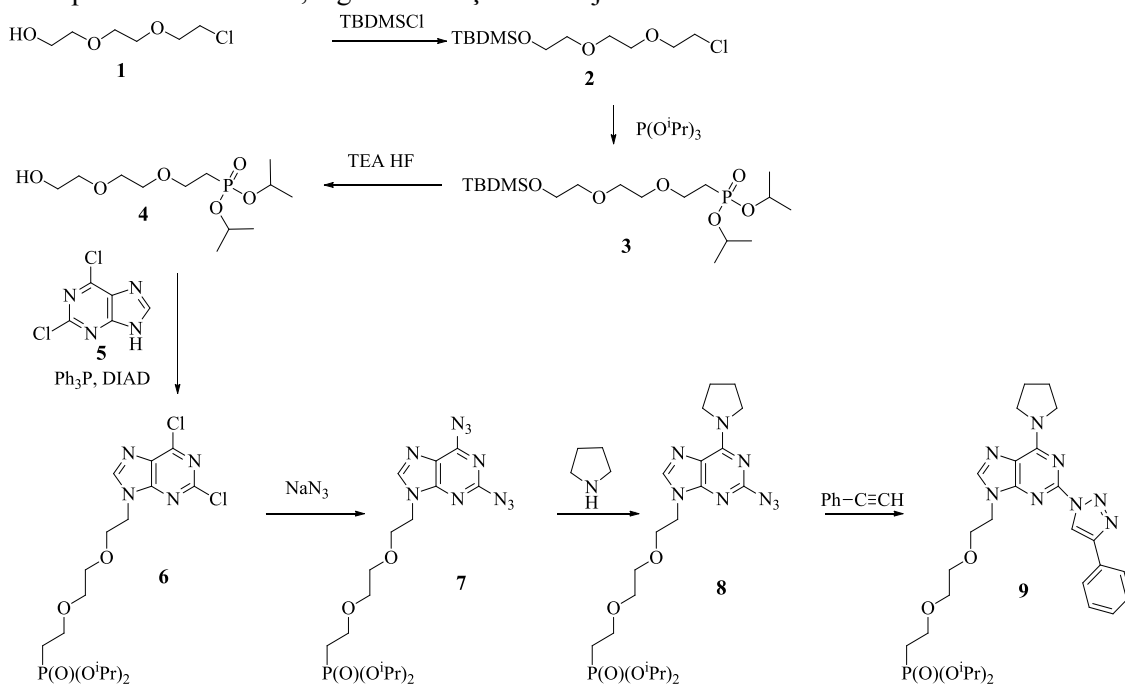
Summary. Mechanistic studies of carbonic anhydrase inhibition by sulfocoumarins using NMR spectroscopy. Carbonic anhydrases are metal containing enzymes which catalyze the reversible hydration of carbon dioxide to bicarbonate ion and proton. CAs are involved in numerous physiological and pathological processes, for example, CA IX and CA XII are tumor-associated CA isoforms. Sulfocoumarins were recently reported to act as efficient inhibitors of the zinc containing carbonic anhydrase. We used NMR spectroscopy to study the mechanism of carbonic anhydrase inhibition by these compounds.

JAUNU ACIKLISKO NUKLEOZĪDU FOSFONĀTU SINTĒZE

Zigfrīds Kapilinskis, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Organiskās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 3.studiju gada bakalaurants
Zinātniskā vadītāja: Dr. chem. Ērika Bizdēna, profesore

Acikliskie nukleozīdu fosfonāti ir reversās transkriptāzes inhibitori, kas tiek izmantoti pret HIV, CMV, HBV un citiem vīrusiem.¹ Fosfonātu esteri, atšķirībā no fosfātu esteriem, spēj izturēt esterāžu un katabolisku enzīmu iedarbību. Zināms, ka N(6) aizvietoti 2-triazolilpurīna atvasinājumi uzrāda fluorescenci². Pētījuma mērķis ir izstrādāt metodi jaunu fluorescentu N(6) aizvietotu 2-triazolilpurīnu aciklisko nukleozīdu C-fosfonātu sintēzei.

Mērķa savienojuma sintēzi, kas parādīta 1.shēmā, sākām ar 1-hlortrietilēnglikola **1** hidroksilgrupas aizsargāšanu izmantojot *tert*-butildimetilsililhlorīdu (TBDMS-Cl), ieguvām savienojumu **2** ar augstu iznākumu (93%). Tam seko alkilfosfonāta **3** iegūšana Arbuzova reakcijā (184°C, 12 h) un aizsarggrupas atšķelšana, izmantojot trietilamonija hidrogēnfluorīdu (TEA·HF). Iegūto hidroksialkilfosfonātu **4**, izmantojot Mitsunobu reakciju,³ pievieno 2,6-dihlor-9*H*-purīnam **5**. Reakcija notiek apmēram 1 h laikā THF 70 °C temperatūrā ar 68% iznākumu. Savienojums **6** tiek azidēts ar NaN₃, iegūstot 9-alkil-2,6-diazidopurīnu **7**. Savienojuma **7** C(6) azidogrupas nukleofilās aizvietošanas reakcijā ar pīrolidīnu rodas C(6) aizvietots 9-alkil-2-azidopurīns **8** ar 52% iznākumu. No savienojuma **8** Cu(I) katalizētā ciklopievienošanas reakcijā (CuAAC) ar fenilacetilēnu, karsējot DMF šķīdumā pie 65 °C 5 stundas, ieguvām mērķa savienojumu **9** ar 35% iznākumu.



1. shēma. 9-Alkil-6-amino-2-(1,2,3-triazol-1-il)purīna acikliskā nukleozīdu fosfonāta sintēze.

Literatūra

1. De Clercq, E. *Antiviral Res.* **2007**, 75, 1–13.
2. Kovaļovs, A.; Novosjolova, I.; Bizdēna, Ē.; Bižāne, I.; Skardziute, L.; Kazlauskas, K.; Jursenas, S.; Turks, M. *Tetrahedron Lett.* **2013**, 54, 850–853.
3. Mitsunobu, O. *Synthesis* **1981**, 1, 1-28.

Summary. Synthesis of new acyclic nucleoside phosphonates. The aim was to develop a synthesis of 9-alkyl-6-amino-2-(1,2,3-triazolyl)purine acyclic nucleoside phosphonates with fluorescent properties. In seven step synthesis, using Arbuzov reaction, Mitsunobu coupling and CuAAC reaction, the target compound with alkyl phosphonate moiety was obtained.

GLICERĪNA OKSIDĒŠANA AR MOLEKULĀRO SKĀBEKLI PLATĪNU SATUROŠU KATALIZATORU KLĀTIENĒ

*Jānis Kunakovs, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Lietišķās ķīmijas institūts, 4.studiju gada bakalaurants
Zinātniskā vadītāja: Dr. chem. Svetlana Čornaja, profesore;
Mg. sc. ing. Konstantīns Dubencovs, pētnieks*

Glicerīnu lielos apjomos iegūst kā blakusproduktu biodīzeļa ražošanā, un tiek meklēti veidi, kā to pārstrādāt citās derīgās izejvielās. Viens no dabai draudzīgākajiem glicerīna pārstrādes veidiem ir selektīva glicerīna oksidēšana ar molekulāro skābekli heterogēnu katalizatoru klātienē.

Pētījuma mērķi ir pētīt jauno platīnu saturošo katalizatoru aktivitāti un selektivitāti glicerīna oksidēšanas procesā, mainot gan katalizatora sastāvu, gan oksidēšanas apstākļus, kā arī atrast katalizatorus un apstākļus selektīvai glikolskābes un glicerīnaldehīda iegūšanai.

Pētot jauno platīnu saturošo katalizatoru aktivitāti glicerīna oksidēšanas procesā tika izmantots autoklāva tipa reaktors. Lai noteiktu optimālos apstākļus selektīvai glicerīna oksidēšanās produktu iegūšanai, tika mainīta glicerīna un katalizatora daudzumu attiecība n_{gly}/n_{Pt} , skābekļa spiediens un sākotnējā sārma koncentrācija.

Pārbaudot jauno 5,8 wt% Pt/Fe katalizatoru, kā pamatproduktu izdevās iegūt glikolskābi. Noskaidrojām, ka attiecības n_{gly}/n_{Pt} palielināšana uzlabo procesa selektivitāti pēc glikolskābes, tai sasniedzot pat 81%. Pētot spiediena ietekmi noskaidrojās, ka palielinot skābekļa spiedienu no 3 līdz 10 atmosfērām, glicerīna konversija ievērojami pieaug, bet selektivitāte pēc oksidēšanās procesa produktiem nemainās. Mainot sārma sākotnējo koncentrāciju no 1,5 mol/L līdz 0,6 mol/L, glicerīna konversija samazinājās no 26% līdz 9%. Produktu selektivitāte šādās sārma koncentrācijas diapazonā nemainās. Pētot jaunus 4,8 wt% Pt/TiO₂ katalizatorus, kas uznesti uz dažādiem pēc struktūras TiO₂ nesējiem – nanošķiedrām vai anatāza nanodaļiņām, noskaidrojās, ka sārmainā vidē abi katalizatori ir ļoti aktīvi, 4 stundu laikā sasniedzot 95-100% glicerīna konversiju un kā pamatproduktu iegūstot glicerīnskābi ar selektivitāti 63-68%. Pārbaudot platīna katalizatoru, kas uznešs uz nanošķiedrām, neitrālā vidē noskaidrots, ka tā aktivitāte krietni samazinās, glicerīna konversijai sasniedzot vien 9%, bet tiek iegūts glicerīnaldehīds kā pamatprodukts ar 74% selektivitāti.

Darba rezultātā tika noteikti optimāli apstākļi glikolskābes iegūšanai glicerīna oksidēšanas procesā, izmantojot 5,8 wt% Pt/Fe katalizatoru. Pārbaudījām, ka Pt katalizatori, kas uznesti uz dažādiem pēc struktūras TiO₂ nesējiem, ir aktīvi glicerīna oksidēšanas procesā, tomēr nav novērojama nesēja struktūras ietekme uz katalizatora aktivitāti. Mainot vides pH ir iespējams iegūt dažādus glicerīna oksidēšanas pamatproduktus.

Summary. Glycerol oxidation with molecular oxygen in presence of platinum based catalysts.

Glycerol large volumes are obtained as a bio-diesel manufacturing by-product, therefore there are methods searching is performed to make possible its conversion to another valuable products. Glycerol selective oxidation with molecular oxygen in presence of heterogeneous catalyst is one of the most nature friendly glycerol conversion methods. This work demonstrates novel platinum containing catalysts activity and selectivity in a glycerol oxidation process. Catalysts and glycerol oxidation conditions for glycolic acid and glyceraldehyde synthesis are identified.

ZIRNEKĻA ZĪDA VEIDOŠANĀS MEHĀNISMA IZPĒTE

Mārtiņš Otikovs, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte, 2.studiju gada maģistrants
Zinātniskais vadītājs: Dr. chem. Kristaps Jaudzems, LOSI vad. pētnieks

Zirnekļa zīda proteīni – spidroīni – no kuriem veidots zirnekļa zīds, sastāv no trīs domēniem: diviem terminālajiem N- un C-gala domēniem (NGD un CGD) un centrālā repetitīvā domēna. Par zīda pavedienu mehāniskajām īpašībām galvenokārt ir atbildīgs repetitīvais domēns, kamēr NGD un CGD ir iesaistīti zīda pavediena veidošanās procesā. Līdz šim detalizēts mehānisms kā NGD kontrolē zīda veidošanos ir izpētīts tikai *Euprosthēnops australis* (Ea) sugas zirnekļu *major ampullate* (Ma) zīdam.¹ pazeminoties pH EaMa NGD notiek secīga triju glutamīnskābju (E79, E84 un E119) protonēšanās, tādējādi nodrošinot NGD dimerizācijas atkarību no pH. Lai noskaidrotu, vai šis mehānisms saglabājas arī citu zirnekļa sugu un zīdu ietvaros, noteikts *Araneus ventricosus* (Av) sugas zirnekļu *minor ampullate* (Mi) zīda NGD dimerizācijas mehānisms.

Darba ietvaros ar KMR spektroskopijas palīdzību noteiktas struktūras AvMi NGD

1) pie šķīduma apstākļiem, kas atbilst apstākļiem dziedzerī, kurā spidroīni tiek uzglabāti koncentrēta šķīduma veidā, bet pavedienus neveido, un

2) pie šķīduma apstākļiem, kas atbilst apstākļiem zīda izvades kanālā, kad spidroīni jau ir izveidojuši pavedienu.

Lai arī noteiktās struktūras ir ļoti līdzīgas EaMa NGD struktūrām pie analogiem šķīduma apstākļiem,^{1,2} AvMi NGD esot 1) monomērā un 2) dimērā stāvoklī (attiecīgās RMSD vērtības salīdzinot ar EaMa monomēra un dimēra KMR struktūrām ir 1.69 un 2.29 Å), AvMi NGD trūkst izostēra aminoskābe vienam no trim glutamīnskābes atlikumiem (E84), kas kontrolē EaMa NGD dimerizāciju. Tajā pašā laikā, izmantojot proteīna stabilitātes mērījumus urīnvielas klātienē un triptofāna fluorescences datus, parādīts, ka dimerizējoties AvMi NGD, tāpat kā EaMa NGD gadījumā, protonējas trīs aminoskābes. Pētot vairāku AvMi NGD mutantu stabilitāti un dimerizāciju kā funkciju no pH, noskaidrots, ka AvMi NGD zīda pavediena veidošanos kontrolē izmantojot E76 un E115, kas atbilst E79 un E119 EaMa NGD, kamēr trešās EaMa NGD dimerizācijas kontrolē iesaistītās aminoskābes E84 funkciju pilda E73, kas daudzos no spidroīniem nav klātesošs.

Līdz ar to darbā parādīts, ka, neskatoties uz spidroīnu NGD dimerizācijas procesā iesaistīto aminoskābju variācijām dažādu sugu un zīda veidu ietvaros, mehānisms, kādā NGD kontrolē zīda veidošanos, tiek saglabāts.

Literatūra

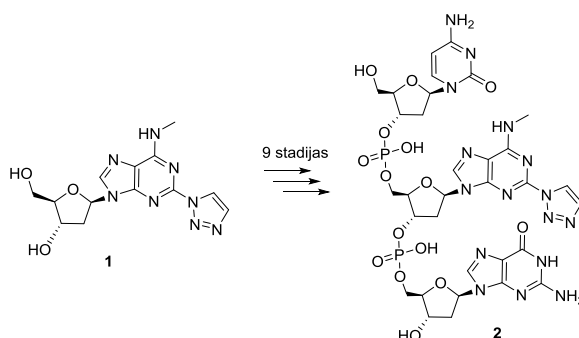
1. Kronqvist, N.; Otikovs, M.; Chmyrov, V.; Chen, G.; Andersson, M.; Nordling, K.; *et al.* Sequential pH-driven dimerization and stabilization of the N-terminal domain enables rapid spider silk formation. *Nat. Commun.* **2014**, *5*, 3254.
2. Jaudzems, K.; Askarieh, G.; Landreh, M.; Nordling, K.; Hedhammar, M.; Jornvall, H.; *et al.* pH-dependent dimerization of spider silk N-terminal domain requires relocation of a wedged tryptophan side chain. *J. Mol. Biol.* **2012**, *422*, 477–487.

Summary. Studies of spider silk formation mechanism. Conversion of spider silk proteins from a soluble dope to insoluble fibers involves pH dependent dimerization of the N-terminal domain (NTD). Three glutamic acid residues was shown to mediate this process in the NTD from *Euprosthēnops australis* major ampullate spidroin and are well conserved among spidroins. However, NTDs of minor ampullate spidroins from several species, including *Araneus ventricosus* (AvMi NTD), lack one of the glutamic acids. Here we investigate the pH dependent structural changes of AvMi NTD revealing that it uses the same mechanism, but involves a non-conserved glutamic acid residue instead.

FLUORESCENTA TRINUKLEOTĪDA SINTĒZE

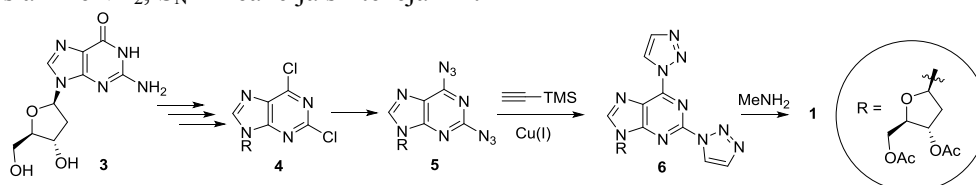
Kristers Ozols, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Organiskās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 4. studiju gada bakalaurants
Zinātniskā vadītāja: Dr. chem. Ērika Bizdēna, profesore

Viens no nukleozīdu analoģu sintēzes mērķiem ir fluorescentu savienojumu iegūšana, lai pētītu molekulārās mijiedarbības dzīvās šūnās, kuru rezultātā analogam ir jādod specifisks analītisks signāls – izmaiņa fluorescences intensitātē vai viļņa garumā. Mūsu grupas pētījumu rezultātā ir izstrādāta metode 2,6-bistriazolilpurīna nukleozīdu reakcijām ar *N*- un *S*-nukleofiliem; esam novērojuši, ka reakcijās ar *N*-nukleofiliem veidojas fluorescenti aizvietošanās produkti. Šī darba mērķis ir sintezēt dezoksiribonukleozīdu **1**, noteikt tā fotofizikālās īpašības un iegūt trimēra sekvenci **2** fluorescences pētījumiem (1. shēma).



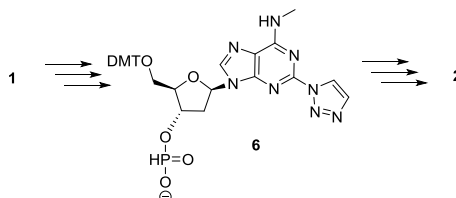
1. shēma. Fluorescentais nukleozīds un to saturošā trimēra sekvence.

Nukleozīds **1** tika iegūts 6 stadiju sintēzē no dezoksiguanozīna **3** (2. shēma). Pēc literatūrā aprakstītas metodes tika sintezēts dihloratvasinājums **4**, no kura var ērti un kvantitatīvi iegūt diazidopurīna nukleozīdu **5**. Cu(I) katalizētā reakcijā starp **5** un TMS-acetilēnu ieguvām **6**, uz kuru iedarbojoties ar MeNH₂, S_NAr reakcijā sintezējām **1**.



2. shēma. Fluorescentā nukleozīda sintēze.

Trimēru **2** ieguvām 9 stadiju sintēzē no savienojuma **1** (3. shēma). Saskaņā ar izmantoto *H*-fosfonātu metodi, tika lietoti P(III) saturoši būvbloki, piemēram, **6**. Iegūto savienojumu **1** un **2** fotofizikālās īpašības tiek izpētītas.



3. shēma. Fluorescentā nukleozīda iekļaušana trimērā 2.

Summary. Synthesis of fluorescent trinucleotide. Synthesis of a novel fluorescent purine deoxyribonucleoside **1** from 2,6-bistriazolyl nucleoside **6** in S_NAr reaction with methylamine is reported. The fluorescent nucleobase has been incorporated in a trimer sequence for the investigation of photophysical properties.

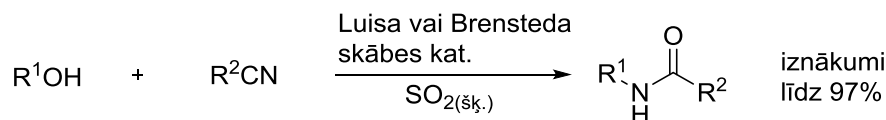
RITERA REAKCIJA ŠĶIDRĀ SĒRA DIOKSĪDĀ

Daniels Posevins, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Organiskās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 2.studiju gada maģistrants
Zinātniskais vadītājs: Dr. chem. Māris Turks, profesors

Ritera reakcija ir viena reaktora process amīda saites veidošanai, kurā kā izejvielas izmanto nitrilus un savienojumus, kas stipri jonizējošos apstākļos var veidot relatīvi stabilizētu karbkatjonu (visbiežāk spirti vai alkēni).¹ Klasiski Ritera reakcijas veicināšanai izmanto vismaz ekvimolāru Brensteda skābes (visbiežāk sērskābes) daudzumu, kas ierobežo Ritera reakcijas izmantošanu skābes labilu substrātu gadījumā.² Pēdējo divdesmit gadu laikā sevišķa uzmanība tika pievērsta jaunu Rittera reakcijas katalizatoru izstrādei, kas ļautu izvairīties no ekvimolāras korozīvo Brensteda skābju lietošanas.³ Tomēr uz doto brīdi zināmie Ritera reakcijas katalizatori neizceļas ar plašu substrātu klāstu, kā arī vēlamie amīdi atsevišķos gadījumos tiek iegūti ar relatīvi zemiem iznākumiem.

Sēra dioksīds organiskajā sintēzē var kalpot ne vien kā daudzpusīgs reaģents, bet arī kā šķīdinātājs dažādu ķīmisko transformāciju veikšanai.⁴ Literatūrā ir atrodami pētījumi saistībā ar šķidrā sēra dioksīda (SO_{2(sķ.)}) izmantošanu karbkatjonu stabilitātes pētījumiem.⁵ Ir pierādīts, ka SO_{2(sķ.)} kā šķīdinātājs var veicināt karbkatjonu veidošanos.⁶

Ņemot vērā augstākminētos apsvērumus mēs pievēršamies Rittera reakcijas pētījumiem SO_{2(sķ.)} (1. shēma). Veicām vairāku Brensteda un Luisa skābju skrīningu ar mērķi salīdzināt to katalītisko aktivitāti Rittera reakcijā SO_{2(sķ.)} kā šķīdinātājā. Kā visefektīvākais katalizators tika noteikts In(OTf)₃. Tālāk noteicām dažāda veida spirtu reaģētspēju mūsu izstrādātajos katalītiskajos apstākļos. Vēlamie amīdi tika iegūti ar labiem iznākumiem.



1. shēma. Rittera reakcija šķidrā sēra dioksīdā.

Minēto transformāciju veikšanai izmantojām relatīvi mazus katalizatora daudzumus. Jaunie katalītiskie apstākļi piemērojami arī amīdu iegūšanai no relatīvi mazāk aktivētajiem otrējiem spirtiem. Mūsu pētījumi apstiprina iepriekš veiktos novērojumus, ka SO_{2(sķ.)} var sekmēt tādu ķīmisko pārvērtību norisi, kurās kā intermediāti veidojas karbkatjoni.

Literatūra

1. Krimen, L. I.; Cota, D. J. *Org. React.* **1969**, *17*, 213
2. (a) Ritter, J. J.; Minieri, P. P. *J. Am. Chem. Soc.* **1948**, *70*, 4045; (b) Ritter, J. J.; Kalish, J. J. *Am. Chem. Soc.* **1948**, *70*, 4048.
3. (a) Guérinot, A.; Reymond, S.; Cossy, J. *Eur. J. Org. Chem.* **2012**, *19*; (b) Jiang, D.; He, T.; Ma, L.; Wang, Z. *RSC Adv.* **2014**, *4*, 64936.
4. (a) Luginina, J. *Synlett* **2014**, *25*, 2962.; (b) Deeming, A.; Emmett, E.; Richards-Taylor, C.; Willis, M. *Synthesis* **2014**, *46*, 2701.
5. (a) Walden, P. *Chem. Ber.* **1902**, *35*, 2018; (b) Olah, G. A. *Angew. Chem. Int. Ed.* **1995**, *34*, 1393.
6. (a) Feigel, M.; Kessler, H.; Leibfritz, D.; Walter, A. *J. Am. Chem. Soc.* **1979**, *101*, 1943; (b) Mayr, H.; Gorath, G.; Bauer, B. *Angew. Chem., Int. Ed.* **1994**, *33*, 788.

Summary. Ritter reaction in liquid sulfur dioxide. We report the possible application of SO_{2(liq.)} as a reaction medium for Lewis acid catalyzed Ritter reaction. Various Lewis and Brønsted acids were tested for their ability to promote this transformation in SO_{2(liq.)}. Best results were obtained using inorganic triflates and indium (III) triflate in particular proved to be the best choice in terms of shorter reaction times and lower catalyst loading. Reactivity of various alcohols towards Ritter reaction in our newly developed reaction conditions was also evaluated. The expected *N*-protected primary amides were obtained in good yields.

GRAFĪTA OKSĪDA FUNKCIONALIZĒŠANA AR PIRMĒJIEM AMĪNIEM

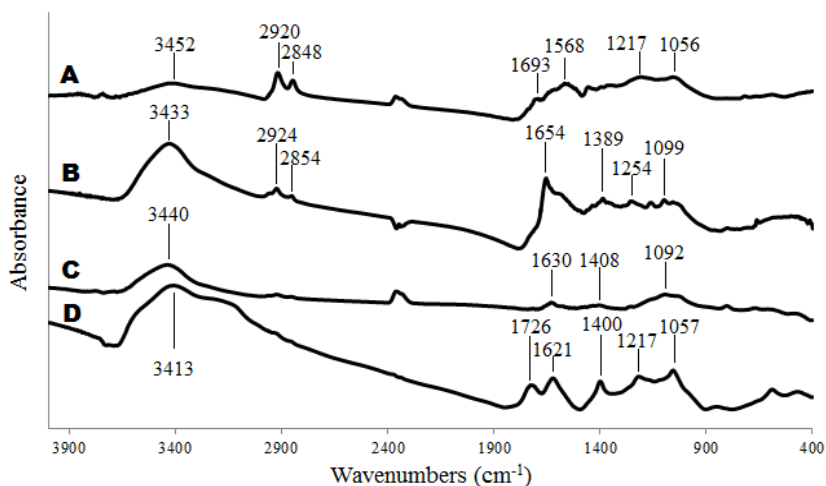
Armands Rudišs, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Lietišķās ķīmijas institūts, 4.studiju gada bakalaurants
Zinātniskie vadītāji: Dr. chem. Valdis Kokars, profesors; Dr. chem. Kārlis Balodis, pētnieks

Grafēna tipa materiāli, kuri tika pirmoreiz iegūti 2004. gadā, izraisa lielu zinātnieku interesi to izcilo elektrovadītspējas, mehānisko un optisko īpašību dēļ. Grafīta oksīds (GO), kas pieder grafēna materiālu grupai, ir viegli sintezējams lielos daudzumos no grafīta, izmantojot KMnO_4 , NaNO_3 un H_2SO_4 oksidējošo maisījumu (Hummera metode). Iegūtais GO satur dažādas skābekļa funkcionālās grupas (pārsvarā hidroksil-, epoksi- un karboksilgrupas).

Darba mērķis bija funkcionalizēt GO ar sekojošiem pirmējiem amīniem: etilēndiamīns, *N*-*boc*-1,6-heksāndiamīns, dodecilamīns. Lai veiktu funkcionalizēšanu, tika pielietoti peptīdu ķīmijā plaši izmantoti karboksilgrupas aktivējošie reaģenti - *N*-hidroksisukcinimīds (NHS) un dicikloheksilkarbodiimīds (DCC). Šādos apstākļos iespējama reakcija starp pirmējiem amīniem un GO karboksilgrupām un amīdsaites veidošanās.

Vispirms GO sintezēts no grafīta pēc modificētas Hummera metodes. GO tika disperģēts DMF, izmantojot zondes tipa ultraskaņas sonifikatoru. Šādā veidā iegūts monoslāņu eksfoliēts GO. Šai GO dispersijai tika pievienoti aktivējošie reaģenti DCC un NHS. Pēc tam tika pievienots pirmējais amīns un veikta maisījuma sildīšana. Iegūto produktu - modificēto GO izdala ar centrifugēšanu, bet attīrīšanā no neizreagējušajiem amīniem tika pielietota ekstrakcijas metode ar etanolu, izmantojot Soksleta aparātu.

GO funkcionalizēšana ar pirmējiem amīniem tika pierādīta izmantojot FTIR spektroskopiju. GO novērojama karboksilgrupas C=O svārstību absorbcijas josla pie 1726 cm^{-1} . Funkcionalizētajiem materiāliem novērojama šīs absorbcijas joslas nobīde uz $1693\text{...}1630\text{ cm}^{-1}$, kas novērojama amīdgrupas C=O svārstībām. Ar dodecilamīnu un *N*-*boc*-1,6-heksāndiamīnu funkcionalizētajiem GO novērojamas intensīvas C-H svārstību absorbcijas joslas pie 2920 cm^{-1} un 2850 cm^{-1} (1.att.). Elementu analīzes dati parāda, ka produktos slāpekļa saturs ir aptuveni 4,9...8,8%. Ar dodecilamīnu funkcionalizētais GO uzrādīja labāku disperģējamību tādos mazpolāros organiskajos šķīdinātājos kā metilēnhlorīds un ksilols.



1.att. GO materiālu FTIR spektroskopijas attēli. A - GO modificēts ar dodecilamīnu, B - GO modificēts ar *N*-*boc*-1,6-heksāndiamīnu, C - GO modificēts ar etilēndiamīnu, D - tīrs GO.

Izmantotā metode ir piemērota GO funkcionalizēšanai ar pirmējiem amīniem. Pielietojot FTIR spektroskopiju ir iespējams pierādīt amīdsaišu veidošanos, reaģējot GO ar amīniem. Garas alkilķēdes saturoša amīna ievadīšana palielina GO disperģējamību mazpolāros organiskajos šķīdinātājos.

Summary. Functionalization of graphite oxide with primary amines. Graphite oxide was functionalised with primary amines using DCC and NHS as activating agents. Functionalization was confirmed using FTIR spectroscopy and element analysis.

TRIGLICERĪDU INTERESTERIFIKĀCIJA AR FTALSKĀBES DIMETILESTERI NĀTRIJA METOKSĪDA KLĀTBŪTNĒ

Sanita Rudzāja, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Lietišķās ķīmijas institūts, 4.studiju gada bakalaurante

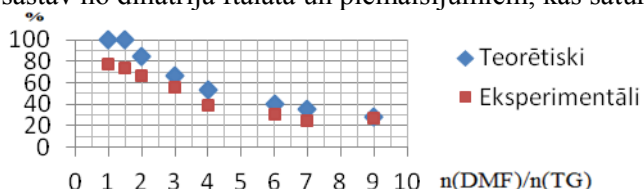
Zinātniskais vadītājs: Dr. habil. chem., Valdis Kampars, profesors

Triglicerīdu maisījumi veido dabiskos taukus un eļļas. Tie ir atjaunojamie dabas resursi, tāpēc pieaug pētījumi to izmantošanai biodīzeļdegvielas (FAME) iegūšanā. Šobrīd FAME rūpnieciski iegūst triglicerīdu reakcijā ar metanolu, kurā kā blakusprodukts rodas zemas tīrības glicerīns. Kā alternatīva šim procesam tiek pētīta triglicerīdu reakcija ar metilacetātu, kurā kā blakus produkts rodas, jau augstākas vērtības produkts - triacetīns. Bet līdz šim nav pētītas triglicerīdu reakcijas ar diesteriem, kur arī rodas FAME, bet kā blakus produkti varētu rasties ftalskābes un glicerīna oligomēri.

Šī pētījuma mērķis ir veikt rapšu eļļas katalītiskas interesterifikācijas reakcijas ar ftalskābes dimetilesteri (FDME), lai izpētītu FAME saturu (mol%) šķidrā produktā un blakus produktus atkarībā no pievienotā FDME un katalizatora daudzuma.

Eksperimenta gaitā 50 ml rapšu eļļas uzsilda un pievieno FDME. Visu reakcijas laiku tiek turēta temperatūra 40°C. Eļļas - FDME molārā attiecība tiek mainīta - 1:1, 1:1,5, 1:2, 1:3, 1:4, 1:6, 1:7 un 1:9. Kad izveidojas viendabīgs maisījums, pievieno 28,5 w% nātrija metoksīda šķīdumu metanolā. Pie izejvielu molārās attiecības 1:2 tiek mainīts pieliktā katalizatora daudzums - 0,5, 1,0, 2,0 un 5,0 % no eļļas masas. Pēc 30 minūtēm maisījumu atdzesē, katalizatoru neitralizē ar fosforskābi, filtrē. Šķidro produktu analizē izmantojot KMR, bet cieto produktu attīra un analizē, izmantojot IS un TG.

Eksperimentu rezultātā iegūta sakarība - palielinot FDME daudzumu, palielinās šķidrā produkta daudzums, bet cietā produkta daudzums mainās neregulāri. Šķidrā produkta sastāvā no FAME un neizreaģējušā FDME, kā piemaisījumi iespējami ftalskābes un glicerīna esteri. Jo lielāks ir FDME pārkums, jo mazāks ir FAME saturs (mol%) maisījumā. Eksperimentālais un teorētiskais aprēķinātais FAME saturs, salīdzināti 1.attēlā. Eksperimentālie punkti novietojas zem teorētiskajiem, kas norāda, ka reakcija ir apgriezeniska, nenotiek līdz galam un veidojas starpprodukti. Palielinot katalizatora daudzumu no 0,5 līdz 5,0 %, palielinās cietā produkta daudzums, līdz noteiktai robežai palielinās FAME iznākums, bet pārāk lieli katalizatora daudzumi izraisa blakus reakcijas. Cietais produkts sastāv no dinātrija ftalāta un piemaisījumiem, kas satur ftalskābes un glicerīna fragmentus.



1. att. Grafiks teorētiski un eksperimentāli iegūtajam FAME iznākumam.

Veicot rapšu eļļas interesterifikācijas reakcijas ar FDME katalizatora nātrija metoksīda klātbūtnē, rodas šķidrā reakcijas produkta, kas sastāv no FAME un FDME, un cietā produkta, kas galvenokārt sastāv no ftalskābes dinātrija sāls, kas norāda, ka katalizators reakcijas gaitā iet bojā. Pieaugot eļļa/FDME molārai attiecībai no 1:1 līdz 1:9, FAME iznākums tuvojas teorētiskajam iznākumam. Vispilnīgāk triglicerīdu interesterifikācija notiek pie eļļa/FDME molārās attiecības 1:9, kur teorētiskais FAME saturs maisījumā attiecībā pret FDME ir 28%, praktiskais - 27%. Palielinot pievienotā katalizatora daudzumu pie nemainīga FDME pārkuma no 0,5 līdz 5,0% no eļļas masas, palielinās cietā produkta daudzums. Katalizatora optimālais daudzums FAME iegūšanai ir 1-2%.

Summary. Interesterification of triglycerides with dimethyl ester of phthalic acid in the presence of sodium methoxide. In this interesterification reaction between rapeseed oil and FDME two types of products are formed – FAME in liquid form with unreacted FDME and byproduct in solid form which mainly consists of phthalic acid disodium salt. Rising the oil/FDME molar ratio from 1:1 to 1:9, FAME content into the mixture approaches to the theoretical one. Full triglyceride conversion was obtained at molar ratio 1:9. Rising of catalyst content from 0,5 to 5,0 % of oil mass by keeping constant FDME/oil molar ratio, rises solid byproduct yield. The optimal amount of catalyst for FAME formation is 1-2% of the oil mass.

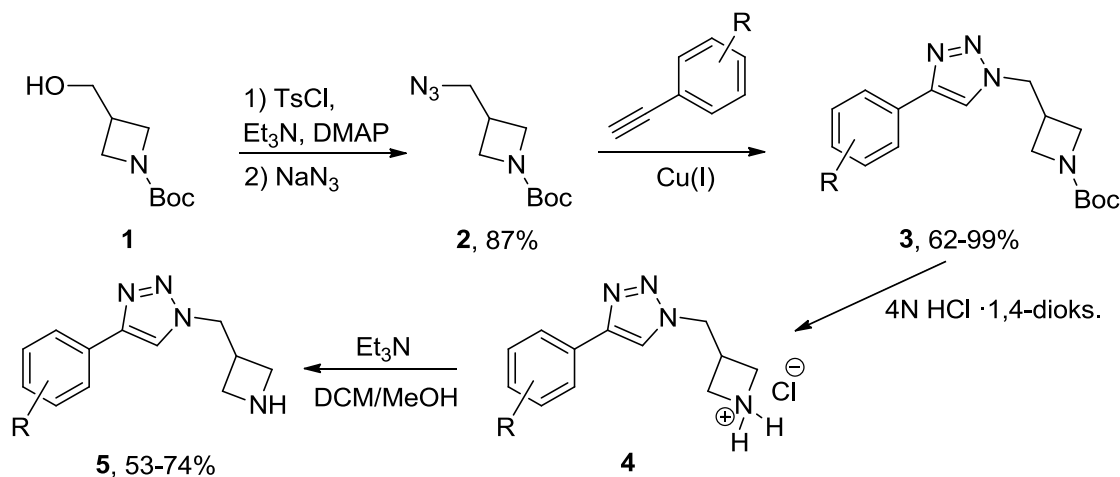
AZETIDĪNU-TRIAZOLU KONJUGĀTU SINTĒZE

Andrejs Solops, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Organiskās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 4.studiju gada bakalaurants
Zinātniskais vadītājs: Dr. chem. Māris Turks, profesors

Azetidīni ir slāpekli saturoši četrlocekļu heterocikliski savienojumi, kam ir svarīga loma bioloģiski aktīvo savienojumu ieguvei.

Mūsu mērķis ir sintezēt dažādus C(3)-aizvietotus azetidīnus **5** ar 4-aryl-1,2,3-triazolil-metilaizvietotājiem sānu ķēdē, par pamatu izmantojot Cu(I) katalizētu 1,3-dipolāro ciklopievienošanu starp azīdiem un alkīniem, kā arī noskaidrot, vai azetidīna-1,2,3,-triazola konjugāti ar lipofīlu aizvietotāju sānu ķēdē var darboties kā selektīvi matricas metālproteināzes-2 (MMP-2) inhibitori.

Tozīlējot komerciāli pieejamo *N-terc*-butoksikarbonil-azetidīn-3-il-metanolu (**1**) un tālāk tozīlgrupu aizvietojot ar azidogrupu, ieguvām izejvielu - azīdu **2**. Triazola-azetidīna atvasinājumi **3** tika iegūti, izmantojot Huisgena sintēzes metodi, kuras pamatā ir Cu(I) katalizēta alkīnu-azīdu 1,3-dipolārā ciklopievienošanās reakcija.¹ Iepriekš iegūtie savienojumi **3** tika apstrādāti ar 4 M hlorūdeņradi 1,4-dioksānā, iegūstot starpproduktus **4**, kuri pēc tam DCM/MeOH maisījumā tika apstrādāti ar trietilamīnu un hromatogrāfiski attīrīti, dodot plānotos savienojumus **5** (1.shēma).



1.shēma. Mērķsavienojumu **5** sintēzes shēma.

Darba rezultātā iegūti 11 jauni azetidīna-triazola konjugāti ar arilaizvietotāju sānu ķēdē. Visi 11 savienojumi ir nosūtīti uz bioloģiskās aktivitātes pētījumiem.

Literatūra

1. Hein, J. E.; Fokin, V. V. Copper-catalyzed azide-alkyne cycloaddition (CuAAC) and beyond: new reactivity of copper(I) acetylides. *Chem. Soc. Rev.*, **2010**, 39, 1302–1315.

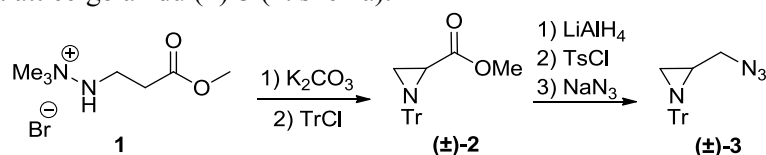
Summary. Synthesis of azetidine-triazole conjugates. Novel azetidine-triazole conjugates with aryl substituent in the side chain have been synthesized and submitted for biological activity tests as potential MMP-2 inhibitors.

Cu(I) KATALIZĒTA 1,4-DIAIZVIETOTU 1,2,3-TRIAZOLU-AZIRIDĪNU KONJUGĀTU SINTĒZE

Diāna Stamberga, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Organiskās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 4. studiju gada bakalaurante
Zinātniskais vadītājs: Dr. chem. Māris Turks, profesors

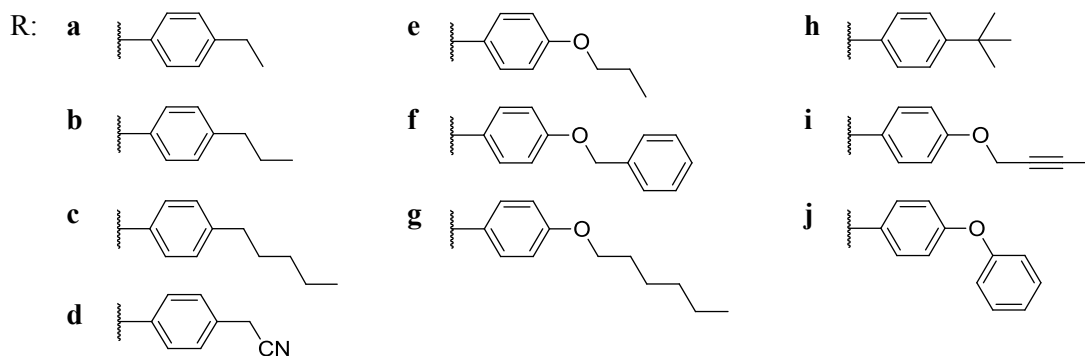
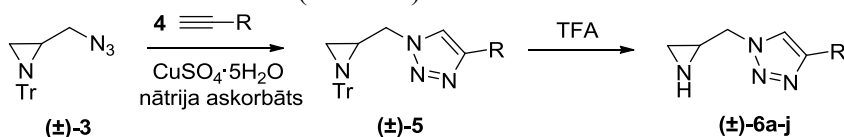
Mūsdienās lielu interesi izraisa jaunu aziridīnu-triazolu konjugātu sintēze un to bioloģiskās aktivitātes pētniecība, pateicoties spējai darboties kā matricas metaloproteāzes inhibitoriem (MMP), tādējādi radot jaunu platformu potenciālu pretvēža preparātu izstrādē.

Sintēzes izejviela ir komerciāli pieejamais hidrazīnija sāls **1**, kura iekšmolekulārās ciklizācijas un aizsarggrupas ievadīšanas reakcijā iegūst tritil-aizsargāta aziridīna esterī (\pm)-**2**. Sekojošā trīs pakāpju reakcijā iegūst attiecīgo azīdu (\pm)-**3** (1. shēma).



1. shēma. 2-Azidometilaziridīna (\pm)-**3** sintēze.

Izmantojot komerciāli pieejamos, kā arī sintezētos terminālos alkīnus **4**, realizējām Cu(I) katalizētu 1,3-dipolāro ciklopievienošanās reakciju un ieguvām 1,4-diaizvietotu 1,2,3-aziridīnu-triazolu konjugātus (\pm)-**5** ar iznākumiem 61–88%. Aizsarggrupu šķēlām ar TFA, iegūstot detritilētus produktus (\pm)-**6a-j** ar iznākumiem 64 - 85% (2. shēma).



2. shēma. 1,4-Diaizvietotu 1,2,3-triazolu-aziridīnu konjugātu sintēze.

Summary. Cu(I) catalyzed synthesis of 1,4-disubstituted 1,2,3-triazole-aziridine conjugates. We report synthesis of ten new 1,4-disubstituted triazole-aziridine conjugates as potential MMP inhibitors. As a starting material for aziridine cycle we used hydrazinium salt which on five steps gave us 2-azidomethylaziridine. In the second stage of the process *N*-tritylaziridine-triazole conjugates were obtained by Cu(I) catalyzed 1,3-dipolar cycloaddition reaction between (\pm)-**3** and various alkynes **4**. Protecting group was removed by reaction with TFA. The yields of isolated products varied between 64–85%.

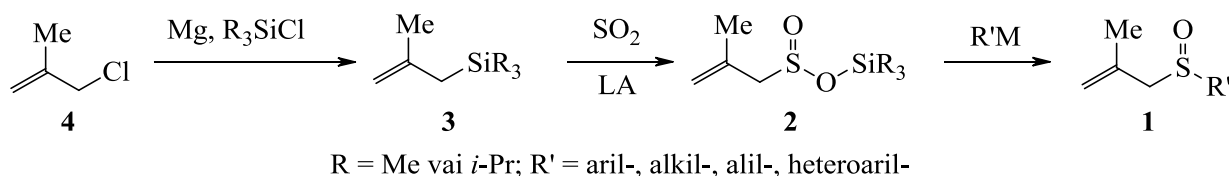
ALILSULFOKSĪDU SINTĒZE NO ALILSILĀNIEM

Agnese Stikute, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Organiskās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 1.studiju gada maģistrante
Zinātniskais vadītājs: Dr. chem. Māris Turks, profesors

Sulfoksīdiem piemīt plaša spektra bioloģiskā aktivitāte un tos izmanto medicīnā, kā piemēru var minēt Omeprazolu – pirmo preparātu, ko veiksmīgi izmantoja, lai kavētu kuņģa skābes izdalīšanos, inhibējot H^+ , K^+ -ATPāzi kuņģa gļotādā.¹ Hirālus sulfoksīdus plaši izmanto kā ligandus pārejas metālu katalizētās asimetriskās pārvērtībās, piemēram, Dīlsa-Aldera ciklopievienošanas un 1,4-pievienošanas reakcijās, C-H saišu aktivēšanā,¹ un polipropionātu antibiotiku totālajā sintēzē.²

Visbiežāk sulfoksīdus iegūst, oksidējot sulfīdus vai pievienojot nukleofilu sulfīnskābes atvasinājumiem.¹ Pētījumu mērķis ietver sulfoksīdu **1** sintēzi, izmantojot literatūrā iepriekš neaprstātu sintēzes paņēmieni: organometālisko savienojumu pievienošanu sililsulfīnātiem **2** (1. shēma).

Sililsulfīnātus **2** iegūst sila-ēnu reakcijā starp trialkilalilsilāniem **3** un sēra dioksīdu Luisa skābes klātbūtnē (LA). Nepieciešamos metalilsilānus **3** sila-ēnu reakcijai iegūst Barbjē reakcijas apstākļos no metalilhlorīda **4**, magnija un trialkilsililhlorīda.



1.shēma. Alilsulfoksīdu sintēzes stratēģija.

Lai optimizētu sulfoksīdu **1** sintēzi, izmēģinājām dažādus organometāliskos reaģentus un variējām ar šķīdinātājiem, reakcijas temperatūru un Luisa skābēm. Visveiksmīgāk sulfoksīdu **1** sintēzi izdevās realizēt, izmantojot kā nukleofilus Grinjāra reaģentus. Izmantojot citus organometāliskos savienojumus – vara un cērija atvasinājumus – novērojām zemu reaģētspēju. Izmantojot tādas Luisa skābes kā TMSOTf, TBSOTf, $BF_3 \cdot OEt_2$, LiCl un $ZnCl_2$, novērojām uzlabojumu sulfoksīdu **1** iznākumā, salīdzinot ar eksperimentu, kurā nepievienojām piedevu. Visefektīvākās Luisa skābes sililsulfīnātu **2** aktivēšanai izrādījās LiCl un $ZnCl_2$. Būtisku sulfoksīdu **1** iznākuma pieaugumu novēro, nomainot tetrahidrofurānu, kas darbojas kā Luisa bāze, uz nepolāro toluolu. Metodes pielietojamību esam demonstrējuši sililsulfīnāta **2** reakcijā ar dažādiem aril-, alkil-, alil- un heteroarilmagnija halogenīdiem.

Literatūra

1. Wojaczynska, E.; Wojaczynski, J. Enantioselective Synthesis of Sulfoxides: 2000–2009. *Chem. Rev.*, **2010**, *110*(7), 4303-4356.
2. Turks, M.; Laclef, S.; Vogel, P. Construction of polypropionate fragments in natural product synthesis. *Stereoselective Synthesis of Drugs and Natural Products*, 1st ed.; John Wiley & Sons, Inc.: Hoboken, 2013; Vol. 2, pp 271-318.

Summary. Allylsulfoxide synthesis from allylsilanes. Herein we report a synthetic method towards variously substituted allylsulfoxides. General approach includes addition of organometallic reagent to trialkylsilyl methallylsulfonates. We have showed that the presence of LiCl or $ZnCl_2$ in the reaction mixture promotes Grignard reagent addition to the *S*-center of silyl sulfinate. The scope of the method has been demonstrated with the successful use of aryl-, alkyl-, allyl- and heterocyclic Grignard reagents.

AZIRIDĪNI AR 1,5-DIAIZVIETOTU TRIAZOLU SĀNU ĶĒDĒ

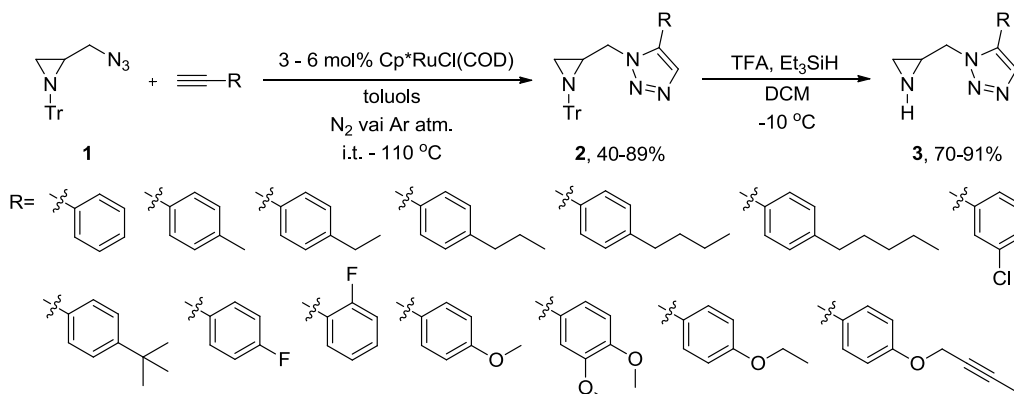
Krista Suta, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Organiskās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 4.studiju gada bakalaurante
Zinātniskais vadītājs: Dr. chem. Māris Turks, profesors

Matricas metālu proteināzes (MMP) ir Zn^{2+} atkarīgi enzīmi, kuri ir atbildīgi par ekstracelulārās matricas komponentu noārdīšanas procesiem. MMP aktivitātes līmenis ir augsts dažādu slimību un pataloģiju, tai skaitā arī vēža, attīstībā. Jaunu MMP, īpaši MMP-1, MMP-2 un MMP-7, inhibitoru izstrāde ir nozīmīga pretvēža terapijā.¹

Mūsdienu medicīnas ķīmijā viena no visplašāk pielietotajām sintēzes metodēm ir „klik” ķīmija. Pie tās pieder Huisgena (*Huisgen*) 1,3-dipolārā ciklopievienošanās reakcija starp organiskajiem azīdiem un alkīniem, kas ļauj ātrā un vienkāršā ceļā saistīt azīda un alkīna funkcionalitātes saturošas molekulas caur 1,2,3-triazola linkeriem.

Atsaucoties uz mūsu grupā iepriekš iegūtajiem rezultātiem par potenciāliem MMP inhibitoriem aziridīna un 1,4-diazivietotu 1,2,3-triazolu konjugātu vidū,² par darba mērķi izvirzīta analoģiska aziridīna atvasinājumu ar 1,5-diaizvietotu 1,2,3-triazolu sānu ķēdē sintēze un to bioloģiskās aktivitātes noteikšana.

Kā izejvielas mērķa savienojumu sintēzei izmantoti dažādus aizvietotājus saturoši fenilacetilēna atvasinājumi un 2-(azidometil)-1-tritilaziridīns (**1**), kas iegūts piecu pakāpju sintēzē no komerciāli pieejamā 3-(2,2,2-trimetilhidrazīnija)metilpropionāta bromīda (sk. 1. shēmu).² 1,5-Diaizvietotu 1,2,3-triazolu **2** sintēze realizēta Ru(II) katalizētā azīda-alkīna ciklopievienošanās (RuAAC) reakcijā ar 40–89% iznākumu. Aizsarggrupas nošķelšanai izmantota trifluoretiķskābe (TFA) trietilsilāna klātbūtnē. Gala produkti **3** iegūti ar 80–89% iznākumu. Var secināt, ka, izmantojot RuAAC reakciju, iespējams ar augstu reģioselektivitāti un labiem iznākumiem iegūt virkni aziridīnu ar 1,5-diaizvietotu 1,2,3-triazolu sānu ķēdē. Šobrīd tiek veikta iegūto savienojumu bioloģiskās aktivitātes pārbaude.



1. shēma. Mērķa savienojumu sintēze.

Literatūra

1. Zitka, O.; Kukacka, J.; Krizkova, S.; Huska, D.; Adam, V.; Masarik, M.; Prusa, R.; Kizek, R. *Curr. Med. Chem.* **2010**, *17*, 3751-3768.
2. Kreituss, I.; Rozenberga, E.; Zemitis, J.; Trapencieris, P.; Romanchikova, N.; Turks, M. *Chem. Heterocycl. Compd.* **2013**, *49*, 1108-1117.

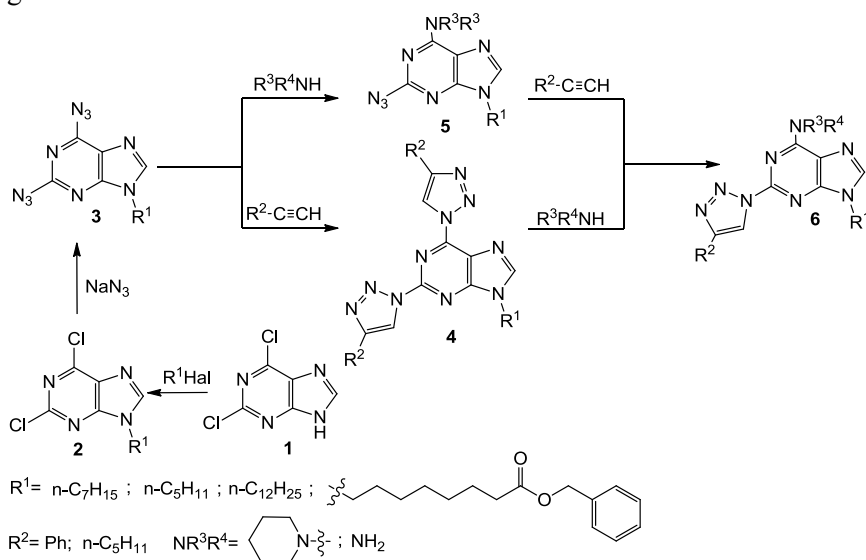
Summary. Aziridines with 1,5-disubstituted 1,2,3-triazole in the side chain. A series of novel aziridines containing 1,5-disubstituted 1,2,3-triazole in the side chain has been obtained. Regioselective synthesis of 1,5-disubstituted 1,2,3-triazoles was realized by Ru(II) catalyzed azide-alkyne cycloaddition reaction. Biological activity of target compounds as potential MMPs inhibitors will be discussed.

JAUNU FLUORESCENTU 9-ALKIL-2-TRIAZOLILPURĪNU ATVASINĀJUMU SINTĒZE

Andrejs Šišuļins, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Organiskās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 3.studiju gada bakalaurants
Zinātniskā vadītāja: Dr.chem. Ērika Bizdēna, profesore

Purīnu atvasinājumi tiek plaši pētīti, pateicoties to daudzveidīgajai bioloģiskajai, galvenokārt, pretvēža un pretvīrusu, aktivitātei. Mūsu pētījuma mērķis ir fluorescentu 9-alkil-6-amino-2-(1,2,3-triazolil)purīnu atvasinājumu sintēze, par izejvielu izmantojot 2,6-dihlor-9H-purīnu (**1**).

Mērķa savienojumus ieguvām četrpakāpju sintēzē no 2,6-dihlor-9H-purīna **1** divos dažādos ceļos (1.shēma). Savienojuma **1** reakcijā ar alkilhalogenīdu iegūst 9-alkil-2,6-dihlorpurīnus **2**, tad šos savienojumus azidē, iegūstot 9-alkil-2,6-diazidopurīnu **3**. Reaģējot savienojumam **3** pie C(2) un C(6) azidogrupām ar alkīniem Cu (I) katalizētā dipolārā azīda-alkīna 1,3-ciklopievienošanās reakcijā (CuAAC), ieguvām 9-alkil-2,6-di(1,2,3-triazolil)purīna atvasinājumus **4**. Tālāk C(6) 1,2,3-triazolilgrupa tika apmainīta pret aminogrupu, kā rezultātā iegūts **6**. Reaģējot **3** pie C(6) ar amīniem, ieguvām 6-amino-2-azidopurīnus **5**, kur tālāk šiem savienojumiem, reaģējot ar alkīniem CuAAC reakcijā tika iegūts **6**.



1. shēma. 9-Alkil-6-amino-2-(1,2,3-triazolil)purīnu atvasinājumu sintēze.

Ar NaH deprotonējot 2,6-dihlorpurīna N(9) vietā esošo NH grupu, elektrofilās aizvietošanas ceļā ar alkilhalogenīdiem 0-5°C temperatūrā DMF šķīdumā ieguvām savienojumus **2**, bet tiem reaģējot ar nātrija azīdu, tika iegūti 9-alkil-2,6-diazidopurīni **3**, iznākumi ir ap 60%. Diazīdu **3** reakcijas ar alkīniem veicām CuSO₄·5H₂O un nātrija askorbāta kā katalītiskās sistēmas klātbūtnē DMF un DMF/H₂O, temperatūru intervālā no 50°C līdz 80°C. Reakcijas laiks mainījās no 12 līdz 36 stundām. Izdalīto 2,6-di(1,2,3-triazol-1-il)purīnu **4** tālāk, apmainot C(6) 1,2,3-triazolil grupu pret aminogrupu paaugstinātā temperatūrā DMF, ieguvām 6-amino-2-(1,2,3-triazolil)purīnu **6**. Iznākumi ir 39-70%. Reakcija starp **3** un stipriem nukleofilajiem aģentiem (amīniem) norisinājās paaugstinātā temperatūrā DMF, iegūstot **5**, tālāk reakcijā ar alkīniem CuAAC reakcijā, ieguvām **6**, iznākumi 30-65%.

Mērķa savienojumiem **6** piemīt stipra emisija (fluorescence) pie ~430 nm, ierosinot tos pie ~250 nm (C=1·10⁻⁵ mol/L, MeOH), kā arī tika konstatēti labi kvantu iznākumi, proti, ~ 50% attiecībā pret hinīna sulfātu 0.1 M H₂SO₄.

Summary. Synthesis of new fluorescent 9-alkyl-2-triazolylpurines. Purine derivatives are attractive as sensors and reporters in biological applications. Target products were obtained in four step synthesis from 2,6-dichloro-9H-purine. Two synthetic routs towards were developed. Aim products exhibit bright blue fluorescence with emission maxima at 417-457 nm and relative quantum around 50%.

KATALĪTISKA GRIĶU SALMU PIROLĪZE, IZMANTOJOT TG-FTIR METODI

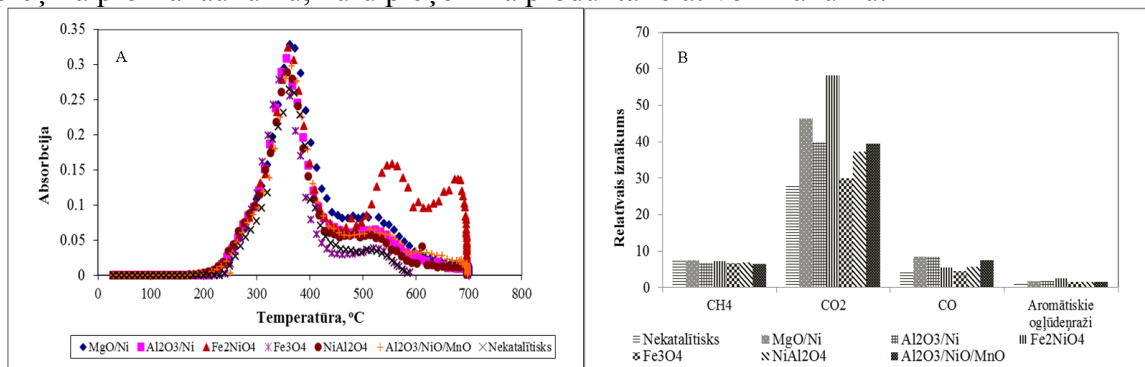
*Liene Vasariņa, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Lietišķās ķīmijas institūts, 4.studiju gada bakalaurante*

Zinātniskie vadītāji: Dr. habil. chem. Valdis Kampars, prof.; Mg. chem. Kristīne Lazdoviča, pētn.

Pieaugot enerģijas patēriņam, nepieciešami arvien jauni enerģijas avoti un lauksaimniecības kultūraugi ir perspektīvas lignocelulozes biomasas jeb otrās paaudzes bioenerģētiskie resursi. Savukārt viens no perspektīvākajiem lignocelulozes biomasas termiskās pārstrādes veidiem energoņesēju ieguvei ir pirolīze. Pirolīzes rezultātā no biomasas iegūst biodeģvielas cietā (kokogle), šķidrā (pirolītisko eļļu jeb bioeļļu) un gāzveida (CO , CO_2 , CH_4) formās, ko tālāk var izmantot siltuma un enerģijas ģenerēšanā, kā arī ķīmiskajā rūpniecībā. Iegūtās bioeļļas īpašības atšķiras no fosilajiem šķidrājiem kurināmajiem – tā uzrāda zemāku siltumspēju (bioeļļai 16-21MJ/kg, šķidrājam naftas kurināmajam ~45MJ/kg), ir neviendabīga, nestabila un korozīva (pH~2,5-3,8). Būtiska loma plašākai un efektīvākai bioeļļas pielietošanai ir tās uzlabošanas un modifīcēšanas metodēm. Bioeļļas sastāvu var modifīcēt jau pirolīzes procesā, izmantojot katalizatorus.

Katalītiskajā griķu salmu pirolīzē kā katalizatori pirmoreiz izmantoti seši dažādi metālu oksīdu nanopulveri – Ni/MgO, Ni/Al₂O₃, Fe₂NiO₄, Fe₃O₄, NiAl₂O₄ un MnO/NiO/Al₂O₃. Eksperimenti veikti, izmantojot TG-FTIR (*Perkin Elmer STA 6000 – Spectrum100*) analīzes metodi un biomasas un katalizatora masas attiecība 1:1. Uzsākot pirolīzi, vispirms biomasu tika žāvēta 80°C 2 minūtes, tad ar karsēšanas ātrumu 100°C/min uzkarseta līdz 700°C un šajā temperatūrā noturēta 10 minūtes. Pirolīze notiek inertā slāpekļa (N₂) atmosfērā ar plūsmas ātrumu 20 ml/min.

Griķu salmu pirolīzes eksperimentos identificētajiem gaistošajiem savienojumiem (gāzēm un kondensējamajiem savienojumiem), izmantojot FTIR spektrus, iegūst izdalīšanās profilus (1. att.), aprēķina profila laukumu, kuru pieņem kā produkta relatīvo iznākumu.



1. att. CO₂ izdalīšanās profils temperatūrā (A) un katalizatoru selektīvā ietekme (B).

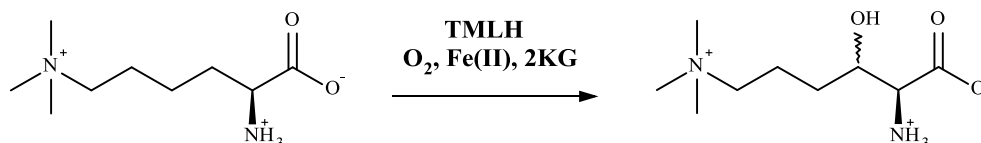
Temperatūru diapazonā no 200 līdz 600°C novēro CO₂ izdalīšanos. Atšķirībā no citiem potenciālajiem katalizatoriem, Fe₂NiO₄ gadījumā izdalīšanas profilā novēro divus maksimumus pie 350°C un 550°C, pie kam CO₂ relatīvais iznākums pieaug 2 reizes. Arī aromātisko savienojumu relatīvais iznākums šī katalizatora klātbūtnē pieaug 2.6 reizes. Salīdzinot relatīvos iznākumus nekatalītiskam procesam un katalītiskajiem procesiem var novērot, ka visi katalizatori ietekmē produktu sastāvu, bet Fe₂NiO₄ gadījumā mainās arī produktu izdalīšanās profils.

Summary. Catalytic pyrolysis of buckwheat straw by using TG-FTIR method. Bio-oil is a complex mixture of acids, ketones, aldehydes, phenols, hydrocarbons and water. Their direct use presents some difficulties due to their high viscosity, poor heating value, corrosiveness, and instability. One of the ways to decrease amount of oxygen content in the bio-oil is pyrolysis in presence of catalysts. In this study, the influences of Ni/MgO, Ni/Al₂O₃, Fe₂NiO₄, Fe₃O₄, NiAl₂O₄ and MnO/NiO/Al₂O₃ nanopowders on the pyrolysis of buckwheat straw were studied. Pyrolysis has been investigated using TGA-FTIR method and obtained results show that the most active catalyst is Fe₂NiO₄ nanopowder.

ε-TRIMETILLIZĪNA HIDROKSILĀZES INHIBITORU MEKLĒJUMI

Diāna Zeļencova, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte, Organiskās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 2.studiju gada maģistrante
Zinātniskais vadītājs: Dr. habil. chem. Edvards Liepiņš, LOSI vad. pētnieks

ε-Trimetillizīna hidroksilāze (TMLH) ir viens no svarīgiem enzīmiem, kas katalizē pirmo stadiju *L*-karnitīna biosintēzes procesā. Rezultātā notiek ε-trimetil-*L*-lizīna (TML) stereospecifiska oksidēšanās līdz β-hidroksi-ε-trimetil-*L*-lizīnam (HTML) (1.att.), kas tālāk trijās secīgās enzimatiskās reakcijās pārvēršas par *L*-karnitīnu. Tas ir mazizpētīts membrānas proteīns, kas lokalizēts mitohondrijas matricā. Tā katalītiskai aktivitātei nepieciešami kofaktori Fe(II) jons un 2-ketoglutarāts (2KG).



1. att. ε-Trimetil-*L*-lizīna (TML) enzimatiskā pārvēršana par β-hidroksi-ε-trimetil-*L*-lizīnu (HTML).

Latvijā izgudrotais preparāts mildronāts ([3-(2,2,2-trimetilhidrazīnija)propionāts) spēj regulēt *L*-karnitīna veidošanos organismā, saistoties pie γ-butirotbetaīna hidroksilāzes, kas katalizē ceturto *L*-karnitīna biosintēzes stadiju. Rezultātā ietekmējas enerģētiski procesi: notiek ATF sintēzes līdzsvara nobīde no taukskābju β-oksidēšanās uz glikolīzes metabolismu. Šāda regulācija spēj pasargāt miokardu išēmijas apstākļos, kad sirdij ir nepieciešams vairāk skābekļa, nekā to piegādā asinis, jo glikolīze patērē aptuveni trīs reizes mazāk skābekļa nekā β-oksidēšanās process.

Mūsdienu pasaulē pieaug pieprasījums pēc jauna tipa augsti efektīviem kardioprotektīviem preparātiem. Latvijas Organiskās sintēzes institūtā (LOSI) uzsākti jauni pētījumi, kuru mērķis ir atrast inhibitorus, kas darbotos līdzīgi mildronātam, šoreiz kā mērķenzīmu pētījumos izmantojot TMLH.

Pētījumus stipri apgrūtina tas, ka TMLH ir nestabils un dabiskā formā nešķīstošs enzīms, kuru aktivitāte strauji krītas pat vienas nedēļas laikā. Līdz šim ir pazīstamas šī enzīma astoņas izoformas, bet joprojām nav datu par tas telpisko struktūru.

Darba gaitā veikta TMLH enzīma ekspresija *Escherichia Coli* baktēriju šūnās un attīrīšana uz afinitātes un gēlfiltrācijas kolonnām.¹ Iegūtais enzīms izmantots enzimatiskās reakcijas pārbaudēs, KMR saistības pētījumos (T1ρ un WaterLOGSY), kā arī izotermālās titrēšanas kalorimetrijas (ITC) eksperimentos. Paraleli veiktas vairākas datormodelēšanas sērijas, ar mērķi uzkonstruēt ticamu TMLH telpisko struktūru un veikt potenciālo inhibitoru skrīningu *in silico*.

LOSI uzsynetēta neliela savienojumu datubāze, kas satur savienojumus, kuri strukturāli līdzīgi dabiskam substrātam (TML) vai modificētam reakcijas produktam (HTML). Analizējot KMR spektru datus un enzimatiskās reakcijas produktus, novērots, ka savienojumi, kas farmakoloģiskos pētījumos uzrāda IC₅₀ aktivitāti, līdzīgi kā TML, stājas enzimatiskajā reakcijā, veidojot atbilstošus hidroksilētus produktus. ITC eksperimenti apstiprina sintetēto savienojumu kompleksāciju ar TMLH.

Literatūra

1. Expression and Purification of Active Stabilized Trimethyllysine Hydroxylase. *PROTEIN Expr. Purif.* **2014**, *104*, 1–6.

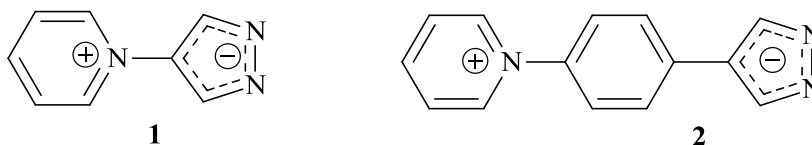
Summary. The search for ε-Trimethyllysine Hydroxylase inhibitors. ε-Trimethyllysine Hydroxylase (TMLH) is an essential enzyme that catalyzes the stereospecific oxidation of ε-trimethyl-*L*-lysine (TML) to β-hydroxy-ε-trimethyl-*L*-lysine (HTML). Synthesized in Latvian Institute of Organic Synthesis, TML and its analogues were tested by Nuclear Magnetic Resonance (NMR) and Isothermal Titration Calorimetry (ITC). Computer modelling has been used to work out TMLH spatial model for high throughput screening and molecular docking calculations.

PIRAZOLA BETAĪNU SINTĒZES CEĻI

Laimdota Žižmāre, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Lietišķās ķīmijas institūts, 3.studiju gada bakalaurante
Zinātniskais vadītājs: Dr. chem. Māris Utināns, asoc. profesors

Joprojām aktuāli ir meklējumi pēc jauniem materiāliem ar nelineārām optiskām īpašībām (NLO), pielietojamiem mikroelektronikā un optikā. Viena no pieejām tādu materiālu iegūšanai ir sintezēt jaunus hromoforus ar NLO īpašībām, tādus, kas uzrāda efektīvu otrējās harmonikas ģenerāciju (SHG). Šādus savienojumus mēs izvēlējamies meklēt pirazola - piridīnija betaīnu rindā.

Tāda tipa pirazola betaīni līdz šim gandrīz nemaz nav pētīti un literatūrā izdevās atrast vien dažus piemērus. Lai gan kvantu ķīmiskie parēķini šādām struktūrām **1** un **2** tika veikti jau pirms kāda laika,¹ paši savienojumi līdz šim nebija sintezēti.



Kvantu ķīmiskie aprēķini parāda, ka savienojumiem piemīt nepieciešamie priekšnoteikumi, lai tie uzrādītu efektīvu SHG. Tiem ir lielas dipola momentu izmaiņas, pārejot no pamata stāvokļa uz ierosināto stāvokli, augstākās aizņemtās un zemākās neaizņemtās molekulāro orbitāļu izteikta lokalizācija, šo orbitāļu neliela pārklāšanās, kā arī ievērojama hiperpolarizējamība, kas arī ir galvenais iemesls, kādēļ pievēršamies šo savienojumu sintēžu ceļu pētīšanai.

Sākotnēji mēs sintezējām 4-nitropirazolu, 3,5-dimetil-4-nitropirazolu un 4-(4-nitrofenil)pirazolu. Savienojumu nitrogrupas reducēšana par aminogrupu, tika veikta ar cinku etiķskābē, taču produktu iznākumi nebija visai augsti. Reducējot ar ūdeņradi palādija katalizatora klātienē aminoprodukti tika iegūti ar gandrīz kvantitatīvu iznākumu. Aminopirazolu reakcijās ar 2,4,6-trifenilpirilija perhlorātu tika iegūti attiecīgi 2,4,6-trifenil-1-(pirazol-4-il)-piridīnija, 2,4,6-trifenil-1-(3,5-dimetilpirazol-4-il)-piridīnija un 2,4,6-trifenil-1-(pirazol-4-il(1,4-fenilēn))-piridīnija perhlorāti, no kuriem tālāk ieguvām attiecīgos betaīnus. Lai iegūtu pie piridīnija cikla neaizvietotus betaīnus, veicām aminopirazolu reakcijas ar 2,4-dinitrofenilpiridīnija bromīdu un ieguvām pirazol-4-il-piridīnija, 1-(3,5-dimetilpirazol-4-il)-piridīnija un 1-(pirazol-4-il(1,4-fenilēn))-piridīnija bromīdus, no kuriem tālāk ieguvām attiecīgos betaīnus. Iegūtajiem savienojumiem uzņemti arī kodolu magnētiskās rezonanses protonu un ¹³C spektri, kas apstiprina struktūras.

Izstrādātas metodes un sintezēti pirazola betaīni, kas molekulā satur fenilaizvietotājus, vai arī bez tiem, kā arī ar vai bez fenilēntiltiņa starp molekulas elektrondonoro un akceptoru daļu.

Literatūra

1. Utinans, M.; Neilands, O. Quantum Chemical Calculations, Synthesis and Properties of Novel Organic Molecules with Photo Induced Intramolecular Electron Transfer and Large Change in Electric Dipole Moment in the Excited State. *Adv. Mater. Opt. Electron.* **1999**, *9*, 19-25.

Summary. The methods of pyrazole betaines synthesis. The new nonlinear optical chromophores – pyrazole based pyridinium betaines are synthesized. Pyrazoles can be directly attached to pyridinium ring or attached through phenylene bridge. The influence of substituents and bridge in these betaines are under investigation.

POLIETILĒNA OKSĪDA GĒLA ELEKTROLĪTA PAGATAVOŠANA UN IZPĒTE

*Sergejs Beļuns, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Polimērmateriālu institūts, 4. studiju gada bakalaurants
Zinātniskais vadītājs: Dr. sc. ing. Sergejs Gaidukovs, docents*

Ievads. Šķērssaistīti polimēru gēli ir materiāli, kam ir svarīgs pielietojums dažādās jomās. Polimēra gēliem piemīt unikāla īpašība nešķīst šķīdinātājos, bet gan uzņemt jeb absorbēt tos. Polietilēna oksīda gēlu pielietojums var būt ļoti plašs, vislielākā uzmanība tiek veltīta medicīnas jomā kā zāļu atbrīvošanas sistēma, un elektriskās enerģijas uzglabāšanas jomā kā polimēra elektrolīts. Polietilēna oksīdā labi šķīst litija sāļi, līdz ar to, iespējams iegūt sistēmu, kur polietilēna oksīda gēls ir piesūcināts ar litija sāli un šķīdinātāju. Šādai sistēmai piemīt laba elektrovadītspēja un tai ir liels potenciāls, lai to izmantotu akumulatoros kā polimēra elektrolītu.

Mērķis. Izmantojot ķīmiskās šķērssaistīšanas metodes, izgatavot PEO gēlus un gēla elektrolītu ar grafēna un litija triflāta piedevām. Pētīt peroksīda satura, grafēna un litija triflāta ietekmi uz gēlu iznākumu, uzbriešanas pakāpi, difūzijas īpašībām, dielektriskām īpašībām un vadītspēju.

Materiāli un metodes. Kā ķīmiskais šķērssaistīšanas aģents tiek izmantots peroksīds Luperox 101 (2,5-Bis(tert-butilperoksi)-2,5-dimetilheksāns), kas tiek sajaukts ar acetonu trīs dažādās koncentrācijas (3%, 10%, 30%). Gatavais maisījums tiek sajaukts kopā ar polietilēna oksīdu un ievietots velkmē, liekā acetona iztvaicēšanai. Iegūtais sausais pulveris tiek iebērts presformā un ievietots presēšanas iekārtā 160^oC temperatūrā uz 15 minūtēm. Lai pagatavotu elektrolītu, polietilēna oksīds tika izšķīdināts dimetilformamīdā, iegūtajam šķīdumam pievieno grafēnu un litija triflātu. Šķīdumu liek žāvēties žāvkapī, lai iztvaicētu DMF. Gēla iegūšanā tika izmantota presēšanas metode. Nosakot polimēra gēlu uzbriešanas pakāpi, tiek sagatavoti 1cm² lieli paraugi, kuri tiek skaloti destilētā ūdenī. Paraugus sver pēc noteiktiem intervāliem, līdz iestājas masas līdzsvars un pēc tam žāvē līdz konstantam svaram. No iegūtajiem datiem tiek aprēķināts difūzijas koeficients, kā arī šķērssaišu blīvums gēlu paraugos. Tika veikti elektrovadītspējas mērījumi.

Rezultāti. Palielinoties šķērssaistīšanas aģenta koncentrācijai, samazinās gēla uzbriešanas pakāpe. Mainot šķērssaistīšanas aģenta koncentrāciju, kā arī pievienojot piedevas, mainās PEO gēlu difūzijas koeficients. Palielinoties peroksīda koncentrācijai, pieaug šķērssaišu blīvums un gēla frakcija. Vadītspēja ievērojami pieaug, ja elektrolīta sistēmā tiek izmantots šķīdinātājs un paraugs ir uzbriedinātā stāvoklī.

Literatūra

1. E. H. Shahriar. *Polyethylene oxide (PEO) hydrogels*; 2002. 176 pp.
2. A. Manuel Stephan. *Review on gel polymer electrolytes for lithium batteries*; 2006, pp 21-42.

Summary. Polyethylene oxide gel electrolyte preparation and investigation. Cross-linked polymer gels are materials that are important and have specific role in various fields. Polymer gels have a unique feature to be insoluble in solvents and absorb it. Polyethylene oxide gel applications can be very wide, the greatest attention is paid to the field of medicine as a drug delivery and release system, and secondary battery field as polymer electrolyte. Polyethylene oxide dissolves lithium salts thus possible to obtain a system in which polyethylene oxide gel is impregnated with a lithium salt and solvent. Such a system has a good electrical conductivity and has great potential to be used as a polymer electrolyte in secondary batteries.

SPECIĀLAS NOZĪMES APĢĒRBU MATERIĀLU APDARES PĒTĪJUMI

*Evita Danenberga, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Polimērmateriālu institūts, 3.studiju gada bakalaurante
Zinātniskā vadītāja: Dr. sc. ing. Anna. Borisova, docente*

Mūsdienās darba apģērbu tirgū ir pieejami dažādšķiedru audumi, starp kuriem populārākais ir kokvilnas/poliestera audums, kurš raksturojas ar lieliskām īpašībām (ūdens sorbcija, zema auduma elektrizēšanās un pilingošanās, nodilumizturība, izmēru stabilitāte). Pastāv arī cita alternatīva - liocela/poliestera audums, kas pēc īpašībām ir labāks audums, tam piemīt nanofibrillārā struktūra, augstāka absorbcijas spēja, lielāka izturība pret mikroorganismiem.

Darba mērķis ir celulozi saturošu tekstiliju hidrofobizācijas efekta iegūšanas un praktiskā pielietojuma izpēte, iepazīšanās ar apdares efektivitātes novērtēšanas metodēm. Pētījumā ir salīdzināti divi dažāda sastāva audumi, katram veicot hidrofobizācijas apdari ar fluorsaturošu preparātu.

Pētījumā ir izmantoti tencela/poliestera (50/50) (tālāk - CLY/PES) un kokvilnas/poliestera (35/65) (tālāk - CO/PES) audumi, un fluorsaturošais preparāts Tubiguard 44N ar attiecīgām tekstilpalīgvielu piedevām. Pirms apdares ir veikta audumu sagatavošana. Darbā ir pētīta tehnoloģiskā faktora (koncentrācijas) ietekme uz auduma īpašībām, izmantojot preparātu Tubiguard 44N koncentrācijās 5, 25 un 50 g/l. Apdares efektivitātes novērtēšanai ir izmantotas sekojošās pārbaudes: slapšana leņķa noteikšana ar Attension Theta Lite Optical Tensiometer TL100, baltuma pakāpes noteikšana ar NOVO-SHADE DUO™ 45⁰/0 Opacity/Shade Meter un gaisa caurlaidības noteikšana.

Darba gaitā konstatēts, ka slapššanas leņķis ievērojami samazinās visiem paraugiem pēc mazgāšanas, it sevišķi CLY/PES paraugiem (samazinājums par 21°) pie Tubiguard 44N koncentrācijas 50 g/l, bet CO/PES paraugiem pie šīs preparāta koncentrācijas ir vismazākā θ leņķa samazināšanās (par 4°). Pēc audumu apretēšanas baltuma pakāpe pieaug no 84,8 līdz 85,6% CLY/PES paraugiem, bet šis rādītājs nedaudz samazinās no 82,6 līdz 82% CO/PES paraugiem. Sākotnējā gaiscaurlaidības vērtība gan CLY/PES, gan CO/PES paraugiem ir vienāda (83,8 mm/s). Pēc apstrādes, CLY/PES paraugiem gaisa caurlaidība ievērojami pieaug, sākot jau ar preparāta Tubiguard 44N koncentrāciju 5 g/l (107,5 mm/s), bet CO/PES paraugiem tā samazinās (74,8 mm/s).

Tālākajiem pētījumiem ir izvēlēta preparāta Tubiguard 44N koncentrācija 50 g/l, apdares šķīdumam pievienojot fiksatora piedevu slapššanas leņķa vērtību iespējamai uzlabošanai, it sevišķi pēc atkārtotas mazgāšanas. Darbā ir jāizstrādā optimālā preparāta Tubiguard 44N uznešanas tehnoloģija dažādšķiedru tekstilmateriāliem, kā arī rekomendācijas iespējamai rūpnieciskai testēšanai.

Literatūra

1. F.Wendler, L.N.Todi, F.Meister. Thermostability of imidazolium ionic liquids as direct solvents for cellulose. *Thermochim. Acta*, 2012, 528, 76-84.
2. Y.Yin, C.Wang. Water-repellent functional coatings through hybrid SiO₂/HTEOS/CPTS sol on the surfaces of cellulose fibers. *Colloids Surf., A*, 2013, 417, 120-125.

Summary. Investigation of special-purpose apparel fabrics finishing. In this study, the efficiency of water-repellency finish with fluorocarbon agent Tubiguard 44N (concentration of 5, 25 and 50 g/L) was examined for two different fabric compositions: lyocell/polyester (50/50) and cotton/polyester (35/65). Contact angle, whiteness ratio and air permeability measurements were made for all samples. For further experiments, the addition of fixing agent is chosen for contact angle values' possible improvement. Determination of optimal water-repellency finishing technology for blended fabrics is the aim of the work.

INOVATĪVI SILIKONGUMIJAS/NANOGRAFĪTA KOMPOZĪTI GAISTOŠO ORGANISKOSAVIENOJUMU DETEKTĒŠANAI

Sandra Guzlēna, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte, 3.studiju gada bakalaurante
Zinātniskā vadītāja: Dr. sc. ing. Gita Šakale, pētniece

Ievads. Mūsdienās dažādās rūpnīcās, piemēram, laku, krāsu un līmju ražotnēs, degvielu uzkrāšanas un transportēšanas vietās, to darbiniekiem ik dienu jāsasaskaras ar gaistošajiem organiskajiem savienojumiem (GOS). Lai novērstu to nelabvēlīgo ietekmi uz veselību, ir nepieciešami pietiekami lēti, ilgtspējīgi un jutīgi sensormateriāli GOS detektēšanai un monitoringam.

Mērķis un uzdevumi. Darba mērķis: noskaidrot, vulkanizācijas apstākļu ietekmi uz silikongumijas nanokompozītu (Si-NK) gāzu sensorefektu. Darba uzdevumi: 1. Sagatavot Si-NK paraugus, izmantojot oglekļa nanodaļiņas (CB) un daudzsienu oglekļa nanocaurulītes (MWCNT); 2. Si-NK vulkanizēšana dažādos apstākļos (spiediens, temperatūra, atmosfēra); 3. Noskaidrot vulkanizēšanas apstākļu ietekmi uz šķērssaišu veidošanos izmantojot Furjē transmisijas infrasarkanā spektroskopiju (FTIR); 4. Noteikt Si-NK relatīvo elektriskās pretestības izmaiņu pie dažādām toluola koncentrācijām.

Darba gaita vai metodoloģija. Salīdzinot ar dabisko gumiju, polidimetilsiloksāns (PDMS) ir polimērs ar labāku termisko noturību, gāzu caurlaidību un ķīmisko stabilitāti. Šo īpašību dēļ PDMS ir potenciāli labs materiāls ilgtspējīgu un stabilu ķīmisko sensoru izveidei. Kā elektrovadoša pildviela tika izmantoti augsti strukturētas oglekļa nanodaļiņas (CB) un īsās daudzsienu oglekļa nanocaurulītes (MWCNT). Matricas papildināšana ar dažādām nanodaļiņām dod iespēju uzlabot izmantotās matricas vadāmību un sensorefekta noteikšanu. Par paraugu pamatni tika izmantots sitāls uz kura uzputināti alumīnija elektrodi. Kompozīta sagatavošanai tika izšķīdināta silikona jēlgumija un disperģēta pildviela, pēc tam abas komponentes tika sajauktas kopā un maisītas 24 h. Sagatavotais maisījums tika uzņemts ar iemērkšanas metodi un žāvēts 24 h. Paraugi tika vulkanizēti slāpekļa atmosfērā, 180°C, izmantojot dažādus spiedienus no 0-10 atm. Pēc vulkanizācijas tika veikta paraugu pēcapstrāde 200°C 4 h.

Rezultāti. Paraugiem vulkanizācijas laikā tika mērīta elektriskās pretestības izmaiņa. Kompozīta elektriskā pretestība strauji krītas, kad tiek pacelta temperatūra (~ 100°C) un pielikts spiediens. Pēc vulkanizācijas paraugiem uzņēma FTIR spektrus. Pievienojot spiedienu dažādu ķīmisko saišu absorbcija samazinās, kas varētu liecināt par šķērssaistīšanās reakcijas beigām, piemēram, CH=CH₂ (1410 cm⁻¹) saišu svārstības ievērojami samazinās. Vulkanizācijas laikā izmantotā slāpekļa atmosfēra ietekmē ķīmisko šķērssaišu veidošanos. Nosakot sensorefektu tika novērots, ka relatīvās elektriskās pretestības izmaiņa palielinās, jeb uzlabojas sensorefekts palielinot vulkanizācijas spiedienu. SiCB kompozīta, kurš vulkanizēts pie 10 atm, relatīvās elektriskās izmaiņa ir konstatēta 80 ppm toluola koncentrācijā. Tas nozīmē, ka sensors spēj detektēt pēc NIOSH REL un OSHA PEL standartā noteiktās toluola koncentrācijas. SMWCNT kompozītiem relatīva elektriskās pretestības izmaiņa ir divreiz lielāka nekā SiCB kompozītiem.

Literatūra

1. S.Sharma, S.Hussain, S.Singh, S.S.Islam. MWCNT-conducting polymer composite based ammonia sensors: A new approach for complete recovery process. Sens. Actuators, B, 2014, 194, 213-219.
2. S.C.Shit, P.Shah. A Review on Silicone Rubber. Natl. Acad. Sci. Lett. 2013, 36, 355-365.

Summary. Innovative silicon rubber/nanostructured carbon composites for detection of volatile organic compounds.

There is a need for simple, sensitive and stable electronic sensors suited for Volatile organic compound (VOC) detection in a wide spectrum of applications. Silicone rubber has better heat resistance, gas permeability and chemical stability comparing to ordinary organic rubbers. These are properties why silicon rubber is promising matrix material for VOC sensors. Samples from homogeneous composite mixture of nanofiller (CB or MWCNT) and silicone rubber was cross-linked in different conditions by, changing pressure, temperature and atmosphere. During crosslinking the composite electrical resistance was measured as indicator of composite system electric network formation. After curing the Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR) was used to evaluate crosslinking efficiency. Relative electrical resistance change of silicon rubber composites was measured, when the composite samples were exposed to different concentrations of non-polar toluene vapours.

POLIETILĒNA OKSĪDA KRISTALIZĀCIJAS PĒTĪJUMI PLĀNĀS KĀRTIŅĀS

Marija Jegorova, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Polimērmateriālu institūts, 3.studiju gada bakalaurante
Zinātniskais vadītājs: Dr. sc. ing. Sergejs Gaidukovs, docents

Ievads. Mūsdienās aizvien vairāk tiek pieprasīti polimēru materiāli, kurus izmanto kā plānās kārtiņas elektrotehnikā, elektronikā un fotonikā. Tā kļūvusi par vienu no perspektīvākajām nozarēm mūsdienu zinātnē sakarā ar straujo elektronisko ierīču attīstību. Izmantojot litogrāfiju un citus paņēmienus, ir iespējams iegūt ļoti plānus materiālus, kas dod iespēju konstruēt iekārtas vai izgatavot produktus, kuri aizņems mazāk vietas telpā un kam būs arī jaunas funkcijas. Potenciālās pielietošanas sfēras ir biomedicīna, elektrotehnika, enerģētika un optika.

Mērķis un uzdevumi. Darba mērķis: izpētīt PEO kristalizāciju plānā slānī uz silīcija substrāta. Darba uzdevumi: izveidot PEO plānās plēves uz silīcija substrāta ar rotācijas metodi; izmantot dažādas polimēra šķīduma koncentrācijas; izmantot pildvielas: LiTf, grafēnu; kristalizēt polimēru elektriskajā laukā, vakuumā un šķidra slāpekļa atmosfērā; izpētīt iegūtas plēves ar fizikālajām pētīšanas metodēm; izpētīt pārklājuma īpašību maiņu atkarībā no substrāta virsmas īpašībām; salīdzināšanai izveidot paraugu ar lielāku biezumu.

Darba gaita vai metodoloģija. 1. Si plāksnītes attīrīšana ar Piranjas šķīdumu un HF un slapināšanas leņķa noteikšana ar optisko tenziometru. 2. Polimēra šķīdumu sagatavošana. PEO 0.4%; PEO 0.8%; PEO 0.4%+LiTf 5%+Graphene 0.1%. 3. Pārklājuma uznesšana. Ar rotēšanas iekārtu pie 2000 rpm un 1500 rpm. Polimēra šķīduma pilienu uznesšana uz Si plāksnīti. 4. Plēvju žāvēšana. 5. Plēvju kristalizācija (vakuumā, elektriskajā laukā, šķidra slāpekļa atmosfērā). 6. Plēvju pētīšana (optiskā mikroskopija, atomspēku mikroskopija, infrasarkanā spektroskopija).

Rezultāti. Uz pulētas Si plāksnes virsmas veidojas monolīta polimēra plēve un pulēšanas virzienam nav nozīmes, savukārt nepulēta virsma slikti slapinās ar polimēra šķīdumu – rezultātā veidojas plēves defekti. Vislielāko slapināšanas leņķi Si plāksnītēm izdevās iegūt, ja attīrīšanas procesu veica ar 48% HF. Plēves biezumu var regulēt mainot rotācijas ātrumu un polimēra koncentrāciju. Dzesēšanas apstākļi būtiski ietekmē polimēru kārtiņas morfoloģiju. Tīrā polimēra šķīdumu kārtiņās ir izveidojušās galvenokārt augšup vērsto lamellu morfoloģijas, bet kārtiņās ar pildvielu – plakano lamellu morfoloģijas.

Literatūra

M. Kalniņš, Ē. Neimanis. Lielmolekulārie savienojumi; Zvaigzne: Rīga, 1981.

H.W.Chen, F.C.Chang. The novel polymer electrolyte nanocomposite composed of poly(ethyleneoxide), lithium triflate and mineral clay. Polymer 42, 2001, 9763-9769. G.Zhang, Y.Cao, L.Jin, P.Zheng, R.M.Van Horn, B.Lotz, S.Z.D.Cheng, W.Wang. Crystal growth pattern changes in low molecular weight poly(ethylene oxide) ultrathin films. Polymer 52, 2011, 1133-1140.

V. Oskars, E. Nitiss, M. Rutkis. Device and method for polarization of thin polymer layers in restricted surface area. Pat. LV14755 (B) (20.01.2014).

Summary. Polyethylene oxide thin film crystallization investigations. The Bachelor thesis's literature review contains information about polymer crystallization in thin films – production methods, crystal pattern. In the experimental part of the thesis were made polyethylene oxide thin films on silicon wafer, obtained with spin-coating and drop-coating methods. Were used different polymer concentrations and additives such as lithium triflate salt and graphene. Also were changed rotation speed and polymer crystallization conditions (slow vacuum cooling, rapid cooling in liquid nitrogen atmosphere, placing the samples in electric field). Acquired polyethylene oxide thin films were studied with optical microscopy, atomic force microscopy, infrared spectroscopy.

OGLEKĻA ŠĶIEDRAS UN IEPRIEKŠ IMPREGNĒTA EPOKSĪDA KOMPOZĪTA CILINDRU PROTOTIPĒŠANA UN EKSPERIMENTĀLĀ VALIDĀCIJA

*Ilze Kalniņa, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte, 3. studiju gads
Zinātniskais vadītājs: Dr. sc. ing. Kaspars Kalniņš, vadošais pētnieks*

Ievads. Apmēram pusi no visām saražotajām oglekļa šķiedrām izmanto **iepriekš impregnēta epoksīda kompozītu jeb prepreg** veidošanā. Audumi ir ērti lietošanai, jo šķiedras jau atrodas matricā, kas vēl ir nesacietējušā stāvoklī, padarot to viegli veidojamu. Matrica parasti ir neatgriezeniski cietējošs oligomers, piem., epoksīda sveķi, kopā ar piedevām, kas nodrošina cietēšanu augstās temperatūrās. Prepreg ieklāj formā un ievieto autoklāvā vai krāsnī, kur tas sacietē. Kvalitātes kontrolei izmanto nesagraujošās metodes.

Mērķis. Izveidot cilindrus no oglekļa šķiedras **prepreg**, variējot slāņu skaitu un šķiedru orientāciju. Ar materiālu nesagraujošām metodēm, izpētīt iegūto cilindru kvalitāti un secināt, kurš ir robustākais slāņu skaits un šķiedru orientācijas veids.

Materiāli un metodes. Cilindru prototipēšana ir sadalīta 8 soļos. Solis nr. 1 - mandreles noklāšana ar antiadhezīvo aģentu, 2 - pirmā slāņa **prepreg** uzklāšana, 3 - otrā un līdzīgi arī pārējo **prepreg** slāņu uzklāšana, 4 - termoizturīgās perforētās plēves uzklāšana, 5 - lieko sveķu uzsūcošā auduma uzklāšana, 6 - otra kārtā ar perforēto plēvi, 7 - vakuumbaissa izveidošana, 8 - cilindra ievietošana krāsnī termiskai apstrādei 180°C temp. 6 stundas. Spiediens -0.9 atm. Iegūtos cilindrus pārbauda ar ultraskaņas testu un fotogrametrijas metodi.

Rezultāti. Prototipēšanas laikā iegūtie paraugi: 2 slāņu cilindri ar šķiedru orientāciju [0/45], trīs slāņu cilindri ar šķiedru orientācijām [0/60/-60], [0/45/-45] un četru slāņu cilindri ar šķiedru orientāciju [24/-24/41/-41]. Ar ultraskaņas testu ieguva datus par reljefa un biezuma viendabīgumu, kas divu slāņu cilindram neatbilda standartam, bet trīs un četru slāņu cilindriem bija tuvs ražotāja noteiktajiem datiem. Fotogrametrija noteica virsmas viendabīgumu un šķiedru orientācijas nobīdi no sākotnējā leņķa. Novērojama virsmas neviendabība pēc termiskās apstrādes.

Secinājumi. Pirmo reizi Latvijā ir aprobēta šāda tipa oglekļa šķiedras cilindru prototipēšanas tehnoloģija. 2 slāņu cilindrus ražošana ir mazražīga. Optimālais ir 3 un vairāk slāņu skaits. Slāņu biezums ir tuvs „Hexcel” ražotāja noteiktajam biezumam.

Literatūra

1. B. Bilyeu, W. Brostow and K. P. Menard. "Epoxy thermosets and their applications I: chemical structures and applications". *Journal of Materials Education*, vol. 21, pp. 281-286, 1999.
2. "HexPly® prepreg technology." Internet: www.hexcel.com/Resources/DataSheets/Brochure-Data-Sheets/Prepreg_Technology.pdf, Jan., 2013 [Apr. 26, 2015].

Summary. Prototyping and experimental validation of carbon fibre reinforced epoxy composite cylinders. The thermoset resin cures at elevated temperature, undergoing a chemical reaction that transforms the prepreg into a solid structural material that is highly durable, temperature resistant, exceptionally stiff and extremely lightweight. In a result of new prototyping technology we obtained carbon fibre reinforced epoxy composite cylinders with a different number of layers and fibre orientation. Ultrasonic non-destructive test showed layer thickness and various defects that might be incurred in a heat treatment process. Photogrammetry technique was used to examine surface flatness and fibre orientation shift from primary angle. Experimental validation made it possible to compare test results with a manufacturer definite data.

ETILĒNA-OKTĒNA KOPOLIMĒRA UN CINKA OKSĪDA IETEKME UZ RECIKLĒTA POLIPROPILĒNA ĪPAŠĪBĀM

Arvis Kokins, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte, 2.studiju gada maģistrants
Zinātniskais vadītājs: Mg. sc. ing. Ivans Bočkovs, pētnieks

Ievads. Pētījuma ietvaros tika veikta reciklēta polipropilēna īpašību modifikācija izmantojot etilēna-oktēna kopolimēru un cinka oksīdu.

Mērķis un uzdevumi. Pašlaik lielākā daļa no polimēru atkritumiem nonāk poligonos un netiek atkārtoti izmantoti. Galvenā problēma polimēru otrreizējā mehāniskajā pārstrādē ir atgriezt reciklēto materiālu aprītē, nesamazinot tā īpašības. Darba mērķis ir izgatavot reciklētos polipropilēna (RPP) nanokompozītus un izpētīt kā etilēna-oktēna kopolimērs (EOK) un ZnO ietekmē kompozītu īpašības salīdzinājumā ar polipropilēnu (PP), kurš nav izgājis materiāla dzīves ciklu.

Darba gaita vai metodoloģija. Lai iegūtu kompozīcijas, uz laboratorijas valčiem (190 °C) tika savalcēti reciklēts polipropilēns, etilēna-oktēna kopolimērs un ZnO. Valcējumi tika sasmalcināti, lai varētu izgatavot paraugus, triecienizturības un lieces stienīšus, kuri tika izgatavoti ar spiedliešanas iekārtu (170 -180 -190 °C). No valcējumiem tika nopresētas arī plāksnītes (190 °C), lai izgatavotu dubultlāpstiņas tipa paraugus (Zwick Roell)stiepes testam. Iegūtās kompozīcijas (RPP, RPP+1%ZnO un RPP80%/EOK%20 un RPP80%/EOK20% +1%ZnO) tika ievietotas UV kamerā uz 2 nedēļām un vienu mēnesi, lai spētu novērtēt kāda ir reciklētā polipropilēna kompozīciju izturība pret novecošanos EOK un ZnO klātbūtnē. Tika veikta kompozīciju sastāvu termogravimetriskā analīze (Mettler Toledo TGA/DSC) gaisa vidē. Tika noteikts arī kompozīciju blīvums un uz masu attiecinātais kausēšanas indekss.

Rezultāti. Izvērtējot kompozīciju praktisko pielietojamību, tika pētīti RPP/EOK un PP/EOK kompozītu stiprības-deformācijas rādītāji lieces un stiepes režīmos. Salīdzinot RPP/EOK un PP/EOK kompozīciju lieces un stiepes īpašības (elastības moduli EL, maksimālo lieces spriegumu σ_L , deformāciju pie maksimālā lieces sprieguma ϵ_L , stiepes moduli ES, tecēšanas spriegumu σ_T , tecēšanas deformāciju e_T , sagraušanas spriegumu s_S , sagraušanas deformāciju e_S), kā arī triecienizturību ar iegriezumu 23+/-2°C (A) secināms, ka nav būtisku atšķirību starp EL, ES, σ_L , σ_T vērtībām, kamēr pirmējo kompozītu ϵ_L , e_T , s_S , e_S un A vērtības ir augstākas. Palielinot EOK saturu kompozīcijā, EL, ES, σ_L , σ_T un s_S vērtības samazinās, savukārt e_S , ϵ_L un A vērtības pieaug. Īpaši liels ir RPP kompozīciju triecienizturības pieaugums: palielinot EOK saturu līdz 30%, A pieaug gandrīz 6 reizes (no 7,1 kJ/m² līdz 39,3 kJ/m²). ZnO ievadīšana pozitīvi ietekmē arī PP/EOK un RPP/EOK kompozītu ES vērtību pieaugumu, kamēr ZnO ietekme uz pārējiem stiprības-deformācijas rādītājiem vērtējama neviennozīmīgi. UV starojuma ietekmē notiek RPP kompozīciju stiprības-deformācijas rādītāju pasliktināšanās un ZnO modifīcējošā ietekme ir lielā mērā atkarīga no kompozīciju sastāva.

Literatūra

1. M.Kalniņš, Ē.Neimanis. Lielmolekulārie savienojumi; Zvaigzne: Rīga, 1981.
2. A.Batool, F.Kanwal, M.Imran, T.Jamil. Synthesis of polypyrrole/zinc oxide composites and study of their structural, thermal and electrical properties. Synth. Met., 2012, 161, 2753–2758.
3. W.Q.Wang, M.Kontopoulou. Effect of Molecular Structure on the Rotational Molding Characteristics of Ultra-Low-Density Ethylene- α -Olefin Copolymers. Polym. Eng. Sci., 2004, 44, 496–508.
4. D.Kim, K.Jeon, Y.Lee, H.Han. Preparation and characterization of UV-cured polyurethane acrylate/ZnO nanocomposite films based on surface modified ZnO. Prog. Org. Coat., 2012, 74, 435–442.

Summary. Ethylene-octane copolymer and zinc oxide influence on the properties of recycled polypropylene. Research is performed on modification of recycled polypropylene by ethylene octane copolymer and ZnO. Currently, most of polymer waste is landfilled and are not re-used. The main problem in mechanical recycling of polymers is recovery of the material without reducing its properties. The aim of the current research is manufacturing of recycled polypropylene (RPP) nanocomposites and exploration of the influence of ethylene-octane copolymer (EOC) and ZnO on the properties of the composite materials compared to virgin polypropylene (PP). The compositions, consisting from recycled polypropylene, ethylene-octane copolymer and ZnO, were obtained by using two-roll mills (190 °C). Specimens for impact and flexural tests in the form of rectangular bars have been made by using injection molding machine (170 -180 -190 °C). Specimens for tensile tests in the form of dog-bones have been obtained by cutting from the compression molded plates. Tensile, flexural and impact properties as well as density and melt mass flow rate have been determined before and after weathering for 2 weeks and a month in an accelerated weathering chamber. It has been determined that modulus of elasticity, as well as tensile strength and flexural strength of the investigated compositions decrease while relative elongations in bending and tension, as well as impact strength increase along with rising EOC content. Most prominent is increment (almost 6 fold) in impact resistance of RPP composites along with rising the EOC content up to 30 wt.%. Positive effect of ZnO addition is the greatest on the increment of the modulus of elasticity. Under the influence of UV irradiation properties of RPP compositions decrease and the effect of ZnO depends much on the composition of the investigated composites.

SAPLĀKŠŅA SLĪPĒŠANAS PUTEKĻU IZMANTOŠANAS IESPĒJU PĒTĪJUMI TERMOPLASTISKO POLIMĒRU KOKSNES KOMPOZĪTU MATERIĀLU IEGŪŠANAI

*Arsenijs Kolbins, RTU Materiālzinātnes un lietišķas ķīmijas fakultāte,
Polimērmateriālu institūts, 2. studiju gada maģistrants.
Zinātniskais vadītājs: Dr. sc. ing. Jānis Kajaks, asoc. profesors*

Mūsdienas koksnes - polimēru kompozīti (KPK) ir plaši izmantotie materiāli. Koksnes pildvielas (šķiedras, milti u.c.) izmantošana samazina polimēra patēriņu un arī labvēlīgi ietekmē to ekoloģiskumu, kas ir svarīgs aspekts 21. gadsimtā jaunu materiālu ražošanā. Koksnes apstrādes rūpniecībā veidojas liels daudzums blakusproduktu (skaidas, slīpēšanas putekļi u.c.). Izpētot vietējā koksnes apstrādes un pārstrādes uzņēmuma a/s „Latvijas finieris”, saplākšņa ražošanas radīto blakusproduktu – slīpēšanas putekļus, izrādījās, ka to granulometriskajā sastāvā dominē frakcija, kura parasti tiek izmantota speciāli KPK ražošanai. Līdz ar to ir vērts izpētīt tādu blakusproduktu izmantošanas iespēju KPK izgatavošanā, kas varētu samazināt to cenu.

Darba mērķis ir aprobežot saplākšņa slīpēšanas putekļu izmantošanas iespējas kā pildvielu augsta blīvuma polietilēnam, kā arī izpētīt dažādu starpfāžu modifikatoru ietekmi uz KPK matricas un pildvielas mijiedarbību, kompozīta īpašībām. Sākotnēji tika izpētīta divu komponentu sistēma: augsta blīvuma polietilēns (ABPE) kā polimēra matrica un saplākšņa slīpēšanas putekļi (SSP) kā pildviela. Tālāk komponentu labākai savietošanai izmantoti saistīšanas aģenti: maleinezēts polipropilēns (MAPP) un polivinilbutirāls (PVB). Pildviela un saistīšanās aģenti tika pievienoti dažādās koncentrācijās. Kompozīciju iegūšanai izmantojām laboratorijas tipa valčus.

No kompozīcijām izgatavotajiem paraugiem pārbaudītas fizikāli – mehāniskas īpašības: lieces stiprība, cietība, triecienizturība, kā arī noteikts kausējuma indekss. Izpētot saplākšņa slīpēšanas putekļu koncentrācijas ietekmi uz kompozīta fizikāli – mehāniskām īpašībām, ir konstatēts, ka optimāls SSP saturs varētu būt 50 mas. %. Pievienojot optimālajai kompozīcijai MAPP un palielinot tā koncentrāciju, pieaug kompozīcijas elastības moduļu vērtības liecē. Optimālais MAPP saturs kompozīcijā varētu būt 3 mas.%, pie kuras ir novērojams lielākais lieces stiprības pieaugums. PVB izmantošana arī dod elastības moduļa vērtību pieaugumu, kas varētu liecināt par adhezīvās mijiedarbības uzlabošanas starp matricu un pildvielu. MAPP izmantošana dod arī nelielu triecienizturības pieaugumu. Mikrociētības pārbaudēs novēro ievērojamu mikrociētības pieaugumu pie 3 mas.% MAPP satura kompozītā, kas liecina par vienmērīgāku SSP daļiņu disperģēšanos-izkliedi ABPE matricā, kas sekmē kompozīta īpašību uzlabošanu. MAPP un PVB izmantošana palielina arī kausējuma indeksa skaitliskās vērtības, tas ir uzlabojas kompozītu kausējumu tecētspēja un līdz ar to arī pārstrādes iespējas. Darba rezultātā ir parādīts, ka SSP var sekmīgi izmantot KPK materiālu ieguvei uz ABPE bāzes.

Summary. Investigation of utilization possibilities of plywood sanding dust for development of thermoplastic polymer wood composites. In this work we have studied the possible of using plywood sanding dust (PSD) as a filler for wood plastic composites (WPC). As coupling agents were used maleic anhydride grafted polypropylene (MAPP) and polyvinyl butyral (PVB). It was determined that optimal concentration of PSD in composites is 50 wt. %. Usage of coupling agents gave considerable an enhancement of the physical and mechanical properties.

HIDROTERMISKI MODIFICĒTAS KOKSNES ATLIKUMU IZMANTOŠANA KOKSNES POLIMĒRU KOMPOZĪTU IEGŪŠANAI

*Edgars Kuka, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Polimērmateriālu institūts, 4. studiju gada bakalaura
Zinātniskais vadītājs: Dr. sc. ing. Jānis Kajaks, asoc. profesors*

Koksnes polimēru kompozīti (KPK) pēdējo gadu laikā ir ieņēmuši būtisku lomu celtniecības materiālu tirgū. Tos visbiežāk izmanto terases dēļu, apdares materiālu, dārza mēbeļu un citu materiālu ražošanā. KPK materiālos izmanto dabas šķiedru atlikuma produktus (skaidas, kaņepes, linus u. c.) kā rezultātā materiāla izmaksas ir pietiekoši mazas. Arī termiski modificētas koksnes ražošanas apjomi intensīvi palielinās, kas arī attiecīgi noved pie atlikumu (modificētu skaidu) apjoma pieauguma. Termiski modificējot koksni mainās tās ķīmiskais sastāvs, respektīvi, samazinās hemiceluložu daudzums, samazinās amorfās celulozes daudzums un palielinās lignīna daudzums (tas ir saistīts ar jaunu ķīmisko saišu veidošanos un uz hemiceluložu un celulozes samazinājuma rēķina). Kā vienu no variantiem, kur šāda veida atlikuma produktus varētu efektīvi izmantot, ir KPK materiālu ražošanā. Turklāt šāda veida atlikuma produktiem vajadzētu būt vairāk piemērotiem šo materiālu ražošanā, jo tiem ir samazināts higroskopisko komponentu daudzums. Līdz ar to termiski modificētām koksnes skaidām vajadzētu labāk sadarboties ar nepolāro polimēra matricu.

Darba mērķis bija izpētīt termiski modificētas koksnes atlikumu izmantošanas iespējas koksnes polimēru kompozītos. Pārbaudīt iegūto kompozītu mehāniskās un fizikālās īpašības, un salīdzināt tās ar nemodificētas koksnes KPK. Kā arī noskaidrot vai modifikācijas režīms ietekmē kompozītu īpašības.

Tika hidrotermiski modificēti bērza dēļi (3 režīmi: 160°C/1h, 170°C/1h, 170°C/3h), un tie attiecīgi sasmalcināti, lai iegūtu atlikumiem līdzīgus produktus. No tiem tika izgatavoti KPK materiāli ar sastāvu: 50 mas.% skaidas (nemodificētas un termiski modificētas) un 50 mas.% PP.

Iegūtajiem kompozītiem tika noteikts kausējuma indekss pie 5 kg slodzes 230°C temperatūrā. Pārbaudītas mehāniskās īpašības: triecienizturība, liece, mikrociētība. Kompozītiem tika noteikta arī ūdens absorbcija un dimensionālā stabilitāte pēc 150 dienām ūdenī 23° C temperatūrā. Pēc 150 dienām tika sasniegts līdzsvara stāvoklis.

Pētījuma rezultāti parādīja, ka termiski modificētas koksnes atlikumi ir izmantojami koksnes polimēru kompozītos. Turklāt KPK materiāli ar termiski modificētas koksnes atlikumiem ir konkurētspējīgi ar līdz šim ražotajiem KPK, jo tie uzrādīja labāku kausējuma indeksu, lieces stiprību, lieces moduli, mikrociētību, ūdens izturību un dimensionālo stabilitāti. No pārbaudītajām īpašībām vienīgi pasliktinājās triecienizturība. Termiskās modifikācijas režīms ietekmē KPK materiālu īpašības.

Literatūra

1. M.N.Ichazo, C.Albano, J.Gonzalez, R.Perera, M.V.Candal. Polypropylene/wood flour composites: treatments and properties. *Compos. Struct.*, 2001, 54, 207-214.
2. K.Srinivas, K.K.Pandey. Photodegradation of thermally modified wood. *J. Photochem. Photobiol.*, B, 2012, 117, 140-145.
3. P.Niemz, T.Hofmann, T.Retfalv. Investigation of chemical changes in the structure of thermally modified wood. *Maderas Ciencia Y Tecnologia*, 2010, 12(2), 69-78.

Summary. Hydrothermally modified wood residue usage in wood plastic composites. In this research some mechanical and physical properties are determined for wood plastic composites (WPC) with unmodified and hydrothermally modified wood residues. From tested results the possible uses for WPC with thermally modified wood are evaluated.

MEZOPORAINU LIELAS VIRSMAS MATERIĀLU IZMANTOŠANAS IESPĒJU PĒTĪJUMI ŪDEŅRAŽA UZGLABĀŠANAS PIELIETOJUMAM AUTOINDUSTRIJĀ

*Pēteris Lesničenoks, RTU Materiālzinātnes un lietišķas ķīmijas fakultāte, 2. studiju gada maģistrants
Zinātniskie vadītāji: Dr. phys. J. Kleperis, CFI vad. pētnieks; Dr. sc. ing. Remo Merijs Meri, prof.*

Ievads. Pētījums izstrādāts ūdeņraža enerģētikas pētījumu nozarē, lai padziļinātu izpratni par materiālu fizikālās sorbcijas ierobežojumiem un to ietekmējošajiem procesiem. Pētījuma laikā iegūti vairāki ūdeņraža uzglabāšanai paredzēti materiāli - dažu slāņu grafēns (FLG) un sintētiskie amorfie alumosilikāti. Pētījumu laikā uzlabota FLG elektroķīmiskās sintēzes metode smalki malta-presēta un plākšņveida monolīta grafīta eksfoliācijai, kā arī apskatīta šīs metodes izmaiņu ietekme uz ūdeņraža sorbciju. Pētījuma laikā uzbūvēta iekārta ūdeņraža absorbcijas/desorbcijas mērījumu veikšanai ar Sīverta metodi. Veikts strukturālo īpašību un ķīmiskā sastāva raksturojums iegūtajiem materiāliem, kā arī tie savā starpā salīdzināti, lai noskaidrotu ūdeņraža sorbcijas spēju. Atrasts, ka vislielāko ūdeņraža absorbcijas spēju uzrāda attīrīts dabīgais ceolīts - 0,84 masas % pie temperatūras -157 °C. No sintezētajiem FLG materiāliem nereducēts FLHQG (dažu slāņu grafēns, kurš iegūts no ultratīra magnetronu grafīta tīģeļa) uzrāda vislielāko ūdeņraža absorbcijas spēju - 0,41 masas % pie temperatūras -175 °C. Efektīvākais uzpildes sistēmu risinājums ūdeņraža uzglabāšanai, balstoties uz mūsu pētītajiem materiāliem, ir kārtidža tipa degvielas tvertnes transportlīdzekļiem un stacionārie maināmie konteineri uzpildes stacijām.

Mērķis un uzdevumi. Pētījums izstrādāts, lai precizētu mehānismus ūdeņraža saistīšanai grafēnos un ceolītos un noskaidrotu šo materiālu sorbcijas spēju. Modificēti ceolīti un FLG materiāli interkalēti ar Mg, lai noskaidrotu modifikāciju ietekmi uz materiāla sorbcijas īpašībām.

Darba gaita vai metodoloģija. Izmantota FLG elektroķīmiskās eksfoliācijas metode, starp grafīta elektrodu un pretelektrodu nodrošinot oscilējošu spriegumu ar amplitūdu +/- 10V un frekvenci 5:3 sekundes attiecīgajam spriegumam. Strāvas stiprums ierobežots pie 5A. Sintēzes rezultātā iegūto FLG pulveri nepieciešams mazgāt, un iespējama tā reducēšana. Ceolītu paraugi mazgāti skudrskābē, lai atbrīvotos no liekā dzelzs un kalcija karbonāta piemaisījumiem. Materiālu ūdeņraža sorbcijas spēja noteikta izmantojot Sīverta tipa iekārtu no šķidrā slāpekļa līdz +200 °C temperatūrai. Paraugi pētīti ar SEM mikroskopu, lai noteiktu FLG pulverveida materiāla kvalitāti un atvērto struktūru klātbūtni.

Rezultāti. 1. Izstrādāts tehnoloģiskais aprīkojums un metodika sintētisko ceolītu iegūšanai ar hidrotermālās sintēzes metodi. 2. Iegūti sintētiskie ceolīti ar neizteiktām vai slēgtām porām, par ko liecina XRD difraktogrammas, BET analīze un SEM/TEM pētījumi. 3. Izstrādāts tehnoloģiskais aprīkojums un metodika dažu slāņu grafēna iegūšanai ar elektroķīmiskās eksfoliācijas metodi, kā arī iegūta izejas materiāla attīrīšanai un sasmalcināšanai. 4. Atrasts, ka iegūto dažu slāņu grafēna materiālu nepieciešams apstrādāt ultraskaņas vannā, lai sadalītu aglomerātus mazākās daļiņās un palielinātu pulvera virsmas laukumu, Tas secināts no BET analīzes un ζ - potenciāla mērījumiem, kā arī no skenējošās elektronu mikroskopijas attēliem. Sastāva un masspektrometriskie pētījumi liecina, ka dažu slāņu grafēna materiāls satur sintēzes laikā piesaistītas SO_x grupas (SO₂ veidā atbrīvojas no materiāla pie 225°C), kā arī izejas materiālā klātesošos metālu piejaukumus. 5. Parādīts, ka pēc reducēšanas Ar/H₂ atmosfērā pie 600 °C dažu slāņu grafēna materiāla apstrāde ultraskaņas vannā nedod virsmas un poru tilpuma pieaugumu (BET analīžu rezultāti), bet tikai aplauzta grafēna plākšņu malas, kuras varētu būt atdalāmas ar nanofiltrāciju vai suspensiju centrifugēšanas un dekantācijas paņēmieniem, iegūstot smalkas grafēna plākšņu daļiņas kā atsevišķus objektus, ja izdodas nostabilizēt to agregāciju. 6. Izstrādāts tehnoloģiskais aprīkojums un izveidota metodika absorbētā un desorbētā ūdeņraža daudzuma noteikšanai pulverveida paraugos ar tilpuma (Sīverta) metodi temperatūru intervālā +200 līdz -200 °C; izveidots algoritms nelineāru spiediena un temperatūras laika grafiku pārreķināšanai linearizētā spiediena-temperatūras līknē. 7. Sintētisko ceolītu jomā izdevies sintezēt amorfu materiālu, kura H₂ sorbcijas spēja pēc apmaiņas ar NH₃ joniem sasniedz 0,20 masas procentus pie -175 °C, bet neviens no mērītajiem materiāliem nepārsniedz attīrītu dabīgo ceolītu, kura sorbcijas spēja ir 0,84 masas % pie -157 °C. 8. FLG pulveros novērojamas sekojošas ūdeņraža saistīšanās vērtības: 0,35 masas % reducēta FLHQG pulverim pie -175 °C; 0,41 masas % FLHQG nereducētam pulverim pie -137 °C; 0,28 masas % Mg FLG nereducētam pulverim pie -175 °C. 8. Pt FLG sorbcijas spējas pieaugums (no 0,084 masas % uz 0,096 masas %) ir samērā nenozīmīgs, par spīti BET metodē uzrādītajām teorētiskajām vērtībām, kuras tas pārsniedz visdrīzāk uz poru rēķina jeb dēļ efektīvo temperatūru diapazona dēļ, kuru neizdevās konstatēt BET sorbcijas mērījumā. Iespējams, ka reducējot augstākā temperatūrā veidojas neatgriezeniski saistīts ūdeņradis un veidojas grafāns. Tas novērojams arī FTIR ATR spektros -C-H saišu absorbcijas reģionā. 9. Noskaidrots, ka FLG interkalācija ar metālu atomiem dod būtisku pienesumu ūdeņraža sorbcijai. Tāpat precizēts, ka FLG pulveru reducēšana ļauj celt sorbcijas maksimuma temperatūru. Efektīvākais uzpildes sistēmu risinājums ūdeņraža uzglabāšanai, ko var piedāvāt autoindustrijai, balstoties uz mūsu pētītajiem materiāliem, ir kārtidža tipa degvielas tvertnes un stacionārie konteineri uzpildes stacijām.

KOKVILNAS AUDUMA UGUNSIKTURĪBAS UZLABOŠANA

Arita Mičule. RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Polimērmateriālu institūts, 2. studiju gada maģistrante
Zinātniskā vadītāja: Dr. sc. ing. Skaidrīte Reihmane, profesore

Mūsdienās joprojām liela problēma ir tekstiliju degamība. Tās samazināšana ir aktuāla kā ikdienā lietojamiem, tā tehniskajiem un speciālas nozīmes izstrādājumiem. Vairums tekstilizstrādājumi ir viegli uzliesmojoši, tai skaitā kokvilna, tāpēc tās apstrādei ar antipirēnu ir ļoti liela nozīme cilvēku aizsardzības nodrošināšanai ļoti daudzos gadījumos. Materiālu degamības rādītājus, kuros izmantotas tekstilijas, nosaka pamattekstilmateriāla izvēle un to apdares paņēmieni.

Darba mērķis ir iepazīties ar literatūru un iepriekš veiktajiem pētījumiem, salīdzināt tos ar eksperimenta rezultātiem. Eksperimentā kokvilnas drānas degamības samazināšanai lietot kombinētu piesūcināšana/pārklājums apdari, pētīt un salīdzināt 3 dažādu rūpniecisku apdrukas pastu izmantošanu.

Eksperimentam izmantota iepriekš sagatavota kokvilnas audekla pinuma drāna (masa 93.3 g/m²). Auduma piesūcināts ar preparātu ITOFLAM PES ar dažādu šķīdumu un piedevu koncentrācijām. Noteikts optimālais piesūcināšanas sastāvs: 140g/L ITOFLAM PES ūdens šķīdums, kuram papildus pievienots sārmainu vidi nodrošinošs aģents 25% NH₄OH ūdens šķīdums 60g/L. Apstrādātā tekstilija izmantota pārklājuma uznešanai, izmantojot sietu šablonu metodi ar 3 dažādām pretaizdegšanās pastām: Printperfect LAC 60, Tubiscreen EX-TS un Printperfect EX-AR (ražotājs CHT BEZEMA), ar diantimona trioksīda piedevu. Pārklājums fiksēts žāvējot un pēc tam termiski apstrādājot (skat. paraugus attēlā).



Att. Kokvilnas auduma apdrukātie paraugi.

Sagatavotajiem tekstiliju paraugiem noteikta degamība ar horizontālo paņēmienu 3 cm attālumā no liesmas gala 30 s, pamatojoties uz standartu /LVS EN ISO 15025:2003/. Iepriekš piesūcinātiem un pārklātiem kokvilnas paraugiem noteikta audumu stingrība liecē, izmantojot Shirley testeru un iekārtas metodiku. Veikts drānu nodilumizturības tests ar Taber rotējošās platformas abrazīvo testeru, kā arī noteiktas fiziko - mehāniskās īpašības (stiepes stiprība/pagarinājums) ar Zwick/Roell iekārtu. ITOFLAM PES preparāts samazina kokvilnas degamību un veicina liesmas nodzišanu. Degamības rādītājus tālāk uzlabo pārklājuma uznešana, reizē palielinot noberzes izturību un stingrību liecē. Pirms datu atkārtotas pārbaudes labākie rezultāti iegūti, izmantojot pastu Printperfect LAC 60.

Literatūra

1. A.Borisova, S.Reihmane, Flame retardant cellulosic textiles, *Tekstilna industrija*, 2012, 5-12.
2. F. Selcen Kilinc, *Handbook of fire resistant textiles*, Woodhead Publishing Limited, 2013,177-179

Summary. The improving of fire resistance of cotton fabric. Research of textile's fire resistance properties will always be topical due to its wide application. Cotton is one of the most flammable fibers. The use of ITOFLAM PES reduces cotton's reaction to fire and contributes to flame extinction. Fire performance of fabric is further enhanced by coating. The increase of the abrasion resistance and stiffness of samples is observed. Before the data is retested, the best results were obtained by application of paste Printperfect LAC 60.

EPOKSĪDA HIBRĪDKOMPOZĪTU PAGATAVOŠANA UN IZPĒTE

*Klāvs Stankevičs, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Polimērmateriālu institūts, 3. studiju gada bakalaurants
Zinātniskais vadītājs: Dr. sc. ing. Sergejs Gaidukovs, docents*

Ievads. Epoksīda polimēri ir svarīga polimēru klase. Epoksīdi raksturojas ar spēcīgo adhēziju un lieliskām mehāniskajām īpašībām (augsta izturība un stingums, laba ķīmiskā un termiskā stabilitāte, laba šķīdē un šķīdinātāju pretestība). Šīs izcilās īpašības, kopā ar labu apstrādājamību un saprātīgu cenu, ir ļāvušas epoksīda sveķus izmantot dažādiem tehnoloģiskiem lietojumiem. Gaidāms, ka veidojot epoksīda hibrīdkompozītu, var būtiski uzlabot epoksīda materiāla īpašības, kā arī piešķirt papildu funkcionalitāti, piemēram, elektrisko un siltumvadītspēju, lietojumiem, kur nepieciešams mazs svars, augsta izturība un laba vadītspēja.

Mērķis. Izveidot epoksīdu hibrīdnanokompozītus ar dažādām piedevu koncentrācijām, pārbaudīt un salīdzināt to īpašības.

Materiāli un metodes. Par matricu izmantots „Peran STC” divkomponentu epoksīds, par pildvielām – oglekļa nanocaurulītes un grafēna nanoplāksnītes. Ar bīdes maisītāju tiek ieviestas pildvielas epoksīda matricā, maisījums tiek atliets dubultlāpstiņu formās un stobros. Iegūtās dubultlāpstiņas izmanto stiepes testiem, bet no stobriem izžāgē stienīšus un veic attiecīgos testus.

Rezultāti. Tika pagatavoti epoksīdu hibrīdnanokompozīti ar dažādām piedevu koncentrācijām. Vislielākais elastības modulis un robežspriegums tika konstatēts hibrīdkompozītam ar 0,25% oglekļa nanocaurulītēm un 0,25% grafēnu daudzumiem. Sagraušanas deformācija samazinās pievienojot kompozītam oglekļa nanocaurulītes. Triecienizturības testos tika konstatēts, ka nepildītam epoksīdam ir vislielākā triecienizturība.

Secinājumi. Visaugstākās mehāniskās īpašības (elastības modulis, robežstiprība) konstatētas hibrīdnanokompozītiem, kuri satur gan oglekļa nanocaurulītes, gan grafēnu. Nanokompozītu triecienizturība samazinās salīdzinājumā ar nepildītu epoksīdu materiālu.

Literatūra

3. J. P. Pascault and R. J. J. Williams. *Epoxy Polymers: New Materials and Innovations*; 2010, 387 pp.
4. P. Mukhopadhyay and R. K. Gupta. *Graphite, Graphene, and Their Polymer Nanocomposites*; 2013, 609 pp.

Summary. Preparation and investigation of epoxide hybrid composites. Epoxy resins are an important class of polymers due to their strong adhesion and excellent overall mechanical properties (high strength and stiffness, high chemical and thermal stability, and good creep and solvent resistance). These impressive performance characteristics, together with their good processability and reasonable cost, have enabled epoxy resins to be used in a variety of engineering applications. Forming epoxy hybrid composites is expected to further enhance the already high performance of epoxy and epoxy composites, and also bring additional functionalities, such as electrical and thermal conductivity, for applications where low weight, high strength, and high conductivity are of primary concern.

POLIURETĀNA PĒDU STIMULĀCIJAS CELIŅA IZSTRĀDE

*Romāns Vaivodišs, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
3. studiju gada bakalaurants*

*Zinātniskie vadītāji: Dr. sc. ing. Sergejs Gaidukovs, docents;
Mg. sc. ing., Aiga Pabērza, Koksnes ķīmijas institūta vadošā pētniece*

Ievads. Mūsdienās ļoti aktuāla tēma ir cilvēku veselība. Gandrīz katrs otrais cilvēks cieš sāpēs mugurā, ceļos vai pēdās. Ar šīm sekām lielā vairumā nākas sastapties fizioterapeitiem, kuri strādā pie tā, lai cilvēki varētu stimulēt, tās muskuļu grupas, kur muskuļu funkcionalitāte ir salīdzinoši maza. Pēdu stimulācijas celiņš, kas veidots no PU, varētu palīdzēt fizioterapeitiem strādāt ar cilvēkiem, kuriem ir kustības traucējumi un sāpes pēdu daļās.

Mērķis un uzdevumi. Iegūt poliuretāna materiālu no kā varētu pagatavot pēdu stimulācijas celiņu ar dažādiem ieslēgumiem (oļi, koka, ķiršu kauliņi). Izpētīt poliuretāna īpašības – mehāniskās, reoloģiskās, termiskās, sorbciju dažādos šķīdinātājos, novecošanu klimatiskajā kamerā (UV starojums, mitrums, temperatūra).

Darba gaita vai metodoloģija. Izmantoti divi komerciāli divkomponentu poliuretāni: 1) Alchemie PU ražotājs, 2) Axson PU ražotājs. Sākumā, poliols (A komponente) un diizocianāts (B komponente) sajaukti disolverī līdz iegūts pilnīgi homogēns maisījums, tam sekoja maisījuma atliešana ar silikonu iesmērētos petrī trauciņos un paraugu žāvēšana pie 24°C. Iegūtajiem PU pārbaudīja Šora A citību, DSC, TGA, sorbciju H₂O un etanolā, UV starojuma ietekmi un mehāniskās īpašības.

Rezultāti. Alchemie PU raksturojas ar augstākajām mehāniskām īpašībām, mazāko ūdens un spirta sorbciju. Attiecīgi, pēc TGA, tas satur arī mazāk neorganiskās piedevas. Axson PU ir elastīgāks un UV starojuma ietekmē nenotiek strauja krāsu izmaiņa, taču uz virsmas izdalās baltas nogulsnes.

Literatūra

1. C. Hepburn. Polyurethane elastomers; Applied Science; London, 1982.
2. "Axson® technologies."Internet: <http://www.axsontechnologies.com/sites/default/files/ur5803-ur58300-gb.pdf>, Nov., 2014 [Apr. 28, 2015].

Summary. Design of polyurethane foot stimulation roadway. Polyurethanes have a large variety of applications due to their unique properties, such as high strength, high hardness, high modulus, and high elongation at break. They can be used in a wide range of properties, from hard rubbers to soft engineering thermoplastics as they are elastic and melt-processable. In this point polyurethane properties are varied to create a foot stimulation roadway.

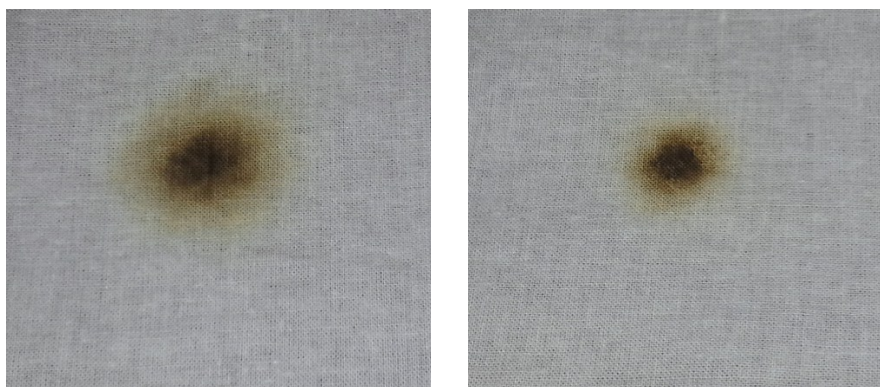
CELULOZI SATUROŠU TEKSTILIJU MULTIFUNKCIONĀLA APDARE

*Laima Tukāne, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Polimērmateriālu institūts, 2.studiju gada maģistrante
Zinātniskā vadītāja: Dr. sc. ing. Anna Borisova, docente*

Celulozes šķiedras – kokvilna, visvieglāk uzliesmo, deg un arī samirkst ūdenī, tāpēc visvairāk hidrofobizācijas un pretuguns apdare nepieciešama tieši celulozes šķiedru audumiem, kurus plaši lieto kā dekoratīvos materiālus, tā arī darba tērpiem. Tehniskajiem un īpaša uzdevuma audumiem šīs specifiskās īpašības panāk audumus apstrādājot ar hidrofobizējošām apretēm un antipirēniem. Šādi pētījumi ir aktuāli arī tekstilnozares Latvijā.

Darba mērķis ir kokvilnas auduma hidrofobizācijas un liesmu slāpējošā kombinētā apdare, izmantojot fluorsaturošu un fosforsaturošu preparātu, un apdares efekta novērtēšana.

Darbā kokvilnas auduma hidrofobizācijas un liesmu slāpējošās kombinētās apdares efekta pētīšanai izmantots fluorsaturošais preparāts Tubiguard 27 un fosforsaturošais preparāts Itoflam PES. Sākotnēji tika uzņemts hidrofobizators koncentrācijā 30 g/l ar 10 g/l hidrofobizācijas fiksatora piedevu (optimālā uznesšanas tehnoloģija izvēlēta, pamatojoties uz iepriekšējiem pētījumiem). Savukārt, antipirēns uzņemts 3 dažādās koncentrācijās (60, 100 un 140 g/l), ar 60 g/l atsevišķi pievienotām antipirēna piedevām (20 % Na_2HPO_4 un 20 % Na_2CO_3 šķīdums), mainot vides pH ar etiķskābes piedevu. Apdares tika uzņemtas ar piesūcināšanas-termofiksācijas paņēmienu. Noskaidrota tehnoloģisko faktoru (koncentrācija, vides pH un piedevas) ietekme uz slapēšanas leņķi, gaisa caurlaidību, masas pieaugumu, stingrību liecē un baltuma pakāpi.



Itoflam PES 100 g/l ar 20% Na_2CO_3 (pH 8-10) Itoflam PES 140 g/l ar 20% Na_2CO_3 (pH 8-10)

1.att. Hidrofobizatora Tubiguard 27, antipirēna Itoflam PES un koncentrācijas ietekme uz kokvilnas auduma degamību (vizuālais novērtējums).

Darbā veikta auduma degamības novērtēšana pirms/pēc apstrādes ar vizuālo (1.att.) un instrumentālo paņēmienu. Pētījuma laikā noskaidrots, ka pētītais fosforsaturošais preparāts Itoflam PES nodrošina liesmu slāpējošo efektu, vienlaicīgi saglabājot hidrofobizācijas efektu. Palielinot antipirēna koncentrāciju, gaisa caurlaidības koeficients samazinās, stingrības liecē un paraugu masas vērtības pieaug. Paraugiem, apstrādātiem ar Na_2HPO_4 un Na_2CO_3 atšķiras baltuma pakāpes rādītāji.

Summary. Multifunctional finishing of cellulose-containing textiles. The study is devoted to cellulose-containing textiles water-repellent and flame retardant combined finish by variation of technological factors (concentration, pH and addition of auxiliaries). The efficiency of finishing effect is studied in its practical application, using flame retardant effect evaluation method, weight loss, contact angle, whiteness ratio, air permeability and stiffness measurements of samples.

CEMENTA IETEKME UZ KAĻĶU JAVAS ĪPAŠĪBĀM

*Liene Gulbe, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Silikātu materiālu institūts, 2. kursa maģistrante
Zinātniskā vadītāja: Dr. sc. ing. Inta Vītiņa, vad. pētniece*

Ievads. Galvenais noteikums vēsturisku ēku ilgmūžības nodrošināšanai ir to restaurācijā izmantot piemērotus, saderīgus materiālus. Porainība un poru struktūra ir viena no galvenajām īpašībām, kas nozīmīgi ietekmē javas ūdens un tvaika caurlaidību, tāpēc tas ir ļoti svarīgs kritērijs saderības novērtēšanai. Pagājušā gadsimta 30. gados restaurācijā bieži tika izmantotas cementa javas, kuras bija nesaderīgas ar vēsturiskajiem materiāliem, jo bija blīvas un neelpojošas. Savukārt, izmantojot kā saistvielu tīrus gaisa kaļķus arī samazinās materiālu saderība ar vēsturiskajām javām. Tāpēc kaļķu javām nepieciešams pievienot pucolāna piedevas vai cementu.

Mērķis un uzdevumi. Pārbaudīt un izvērtēt cementa ietekmi uz kaļķu javas īpašībām, un novērtēt, vai cementu var izmantot kā piedevu pie kaļķu javām, lai uzlabotu to saderību ar vēsturiskajām javām.

Darba gaita vai metodoloģija. Paraugiem tika noteikta pildvielu granulometrija, svaigas javas īpašības, noteiktas kristāliskās fāzes ar rentgenstaru difraktometru, veikta pilna ķīmiskā analīze un termiskā analīze, pārbaudītas fizikālās un mehāniskās īpašības, kā arī testēta noturība pret šķīstošajiem sāļiem un salu.

Rezultāti. Palielinoties cementa daudzumam javā, ir nepieciešams lielāks ūdens daudzums, lai iegūtu vajadzīgo izplūdi, palielinās svaigas javas blīvums un samazinās gaisa saturs javā. Javā izmantotas smiltis ar daļiņu izmāru no 0 līdz 4 mm, apmēram 65% no pildvielas ir ar daļiņu izmēru 1-2mm. Rentgendifraktometrija 2 mēnešus cietējošiem paraugiem parādīja, ka maisījumu galvenās kristāliskās fāzes ir kalcīts, kvarcs, portlandīts un dolomīts, kā arī ar cementa piedevu 4% parādās larnīts Ca_2SiO_4 . Pēc ķīmiskās analīzes varēja redzēt, ka palielinoties cementa daudzumam, palielinās šķīstošā, aktīvā SiO_2 un Al_2O_3 daudzums, kas nodrošina baltkaļķu javās mitruma izturību un palielina mehānisko stiprību, līdz ar to samazinās arī hidrauliskuma modulis. To apstiprina arī termiskā analīze, ka, palielinoties cementa daudzumam palielinās kalcija alumīnātu un kalcija silikātu daudzums, kas ir galvenais faktors hidrauliskuma nodrošināšanai restaurācijas javās. Pievienojot kaļķu javai cementu līdz 10% maz mainās materiālu ūdens uzsūce un žūšana. Cementa piedevas būtiski palielina javas mehānisko stiprību un materiāla adhēziju ar pamatni. Cementa pievienošana kaļķu javai uzlabo materiāla noturību pret šķīstošajiem sāļiem un salu.

Gaisa kaļķu saistvielas ar portlandcimenta piedevu javās var lietot kā piemērotu materiālu restaurācijas vajadzībām, jo tīros baltkaļķos trūkst aktīvais SiO_2 un Al_2O_3 , kas nodrošina hidraulisku minerālu veidošanos un līdz ar to javas hidrauliskumu.

Literatūra

1. M.Arandigoyen, J.I.Alvarez.Pore structure and mechanical properties of cement-lime mortars. Cement. Concr. Res., 2007, 37, (5), 767-775.
2. M.Avots, J.Eiduks, O.Maksimova, E.Neimanis, U.Upenieks, Vispārīgā silikātu tehnoloģija; Rīga, 1968, 427 lpp.
3. V. S. Ramachandran, James J. Beaudoin. Handbook of analytical techniques in concrete science and technology; Principles, Techniques, and Applications. Canada, 1999.
4. A.Moropoulou, A.Bakolas, P.Moundoulas, E.Aggelakopoulou, SANagnostopoulou. Strenghth development and lime reaction in mortars for repairing historic masonries. Cement. Concr. Compos., 2005, 27, (2), 289-294.

Summary. Cement influence on lime mortar properties. Principal factor of the sustainability of historic monuments is usage of compatible materials. Restoration materials are recommended to be with hydraulic components (associated with soluble Al_2O_3 and SiO_2). Matching composition and properties can be achieved by using lime-cement mixtures. A row of aerial lime - white cement binders was synthesized with growing cement content (up to 10%) with further determination of composition.

SILĪCIJA NITRĪDA IETEKME UZ AUGSTTEMPERATŪRAS MULLĪTA-ZrO₂ KERAMIKAS FĀŽU VEIDOŠANOS UN ĪPAŠĪBĀM

Lidija Isajeva, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Silikātu materiālu institūts, 2. kursa maģistrante
Zinātniskā vadītāja: Dr. habil. chem. Gaida Maruta Sedmale, profesore

Ievads. Mūsdienās pieaug prasības pēc augsttemperatūras augstas stiprības keramikas materiāliem, pielietošanai paaugstinātas (> 600 °C) temperatūras apstākļos. Kā atrisinājums var būt mullīta-ZrO₂ keramikas izmantošana. Pievienojot kā piedevu Si₃N₄ kopējās mullīta-ZrO₂ īpašības var uzlaboties un pieaugt.

Mērķis un uzdevumi. Izmantojot bezskābekļa nanoizmēra Si₃N₄ savienojumu, pētīt tā ietekmi uz augsttemperatūras mullīta-ZrO₂ keramikas izstrādi, pielietojot un salīdzinot tradicionālo saķepināšanu un netradicionālu saķepināšanas paņēmienu - SPS, lai iegūtu augsttemperatūras mehāniski un ķīmiski izturīgu modificētu ar Si₃N₄ mullīta - ZrO₂ keramiku.

Darba gaita vai metodoloģija. Darbā pētītas 6 sastāvu grupas, kurās komponentu attiecības izveidotās tā, lai keramikas saķepināšanas procesā tās nodrošinātu mullīta 3Al₂O₃·2SiO₂ stehiometriju. Iegūto keramikas pulveru un paraugu pētīšana: daļiņu morfoloģija un izmēri ir noteikti ar skenējošo elektronu mikroskopu (Hitachi CM 3000); pulveru analīze temperatūru 20 - 1400 °C intervālā pētīta ar diferenciāli termisko analīzi (DTA) pielietojot SETARAM SETSYS - Evolution 1750 derivatogrāfu; saķepināto keramikas paraugu fāžu pārvērtības ir noteiktas ar Bruker firmas Rentgena difraktometru, mikrostruktūra - pielietojot skenējošo elektronu mikroskopu Nova Nano SEM (Nīderlande, FEI); Paraugu sarukums ir noteikts pēc lineāro izmēru izmaiņām pirms un pēc paraugu apdedzināšanas. Šķietamais blīvums ir noteikts ar hidrostatisko svēršanas metodi; vaļējā porainība - noteikta pēc parauga svēršanas metodes; spiedes izturība - ar preses iekārtu Toni Technik.

Rezultāti. Ir parādīts, ka pievienojot Si₃N₄ dominējošās fāzes- mullīta kristalizācija notiek pie temperatūrām >1400 °C. Saķepinātās 1400 °C un 1500 °C temperatūrās keramikas dominējošās kristāliskās fāzes ir mullīts, ZrO₂ tetr./cub, korunds αAl₂O₃ un ZrSiO₄. Salīdzinot tradicionāli un ar SPS metodi saķepinātos paraugus, var secināt, ka ar SPS saķepinātie paraugi raksturojami ar augstu sablīvēšanās pakāpi, nav novērojamas iekšējās poras. Keramiskās īpašības paraugiem, kuri saķepināti SPS ir 1,5-2 reizes augstākas par līdzīgiem rādītājiem keramikai, kas saķepināta tradicionāli, bet spiedes stiprība palielinās 5-kārt.

Literatūra

- 1.I. Šperberga, U. Sedmalis, G. Sedmale. Silikātu un grūti kūstošu nemetālisku materiālu fizikālā ķīmija. RTU Izdevniecība: Rīga, 2010, 169 lpp.
- 2.M. Avots, J. Eiduks, O. Maksimova, E. Neimanis, U. Upenieks. Vispārīgā silikātu tehnoloģija. Zvaigzne: Rīga, 1968, 428 lpp.

Summary. The impact of silicium nitride on high-temperature mullite-zirconia ceramics phase composition and properties. It is shown that by using two methods for sintering mullite - zirconia ceramics with Si₃N₄ additive is achieved results which differs especially for density and compressive strength of sintered ceramics. Ceramic properties of SPS sintered samples if compare with traditionally sintered samples are by aprox. 30% higher, but compressive strength - for ~5 times.

This work has been supported by the European Regional Development Fund within the Project „Effect of the non-oxygen compounds on mullite-zirconia ceramics development using non-traditional sintering methods” No.2DP/2.1.1.1./14/APIA/VIAA/036

AKTĪVĀS ALUMOSILIKĀTU PIEDEVAS BETONAM

Līga Paušus, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Silikātu materiālu institūts, 3. kursa bakalaurante
Zinātniskā vadītāja: Dr. sc. ing. Janīna Sētiņa, vadošā pētniece

Ievads. Samazinot cementa daudzumu betonā, to daļēji aizstājot ar citām aktīvām piedevām, piem., pucolāna piedevām, iespējams uzlabot betona īpašības un samazināt CO₂ izmešu daudzumu, kas rodas cementa ražošanas laikā (5-10% no kopējā daudzuma).

Mērķis un uzdevumi. Noteikt pucolānu piedevu ķīmisko sastāvu, aktivitāti, ietekmi uz cementa pastas hidratācijas procesu. Noteikt alumosilikātu piedevu ietekmi uz betona sulfātziturbu.

Darba gaita vai metodoloģija. Pētījumā izmantots stikla pulveris ar Al₂O₃ piedevu (MK1) un metakaolīns (MK2). Noteikts ķīmiskais sastāvs, pucolānu aktivitāte (adaptēta Massazza [1] metode), kapilārās ūdens uzsūces tests, izturēšana sulfātu šķīdumos. Izmantotas RTG un SEM pētīšanas metodes.

Rezultāti. MK2 uzrāda augstāku aktivitāti un pēc 14 dienu apstrādes ar Ca(OH)₂ konstatē tobermorītu, pēc 28 dienām – CASH. Pētot cementa hidratācijas procesu, ar 15% MK1 piedevu pēc 14 dienām konstatēts portlandīts, pēc 28 dienām – portlandīts, larnīts, savukārt ar 15% MK2 piedevu – portlandīts. SEM analīzē konstatēts, ka MK2 veido cementa pastu ar blīvāku, amorfāku struktūru. MK2 uzlabo sulfātziturbu – ģipsis pārsvarā koncentrējas uz paraugu virsmas.

Literatūra

1. M.F. Massazza, U. Costa. Aspects of the pozzolanic activity and properties of pozzolanic cements. *II Cemento*, 1976, 76, 3-18.

Summary. Active aluminosilicate additives for concrete. The influence of aluminosilicate pozzolanic additives (glass powder with Al₂O₃ (MK1), metakaolin (MK2)) on a cement paste hydration process, concrete sulphate resistance was researched by test of pozzolanic activity, X-ray, SEM. MK2 showed higher pozzolan activity. SEM analysis showed that MK2 forms a denser structure with large amorphous part. This process improves the corrosion resistance of concrete – gypsum places near the surface of concrete.

CEMENTA PASTAS UN CENOSFĒRU MIJIEDARBĪBAS IZPĒTE

Jūlija Petrova, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Silikātu materiālu institūts, 2. kursa maģistrante
Zinātniskā vadītāja: Dr. sc. ing. Janīna Sētiņa, vadošā pētniece

Ievads. Viegļie pelni (cenosfēras) pārsvarā ir elektroenerģijas iegūšanas blakusprodukts, kam ir nepieciešama utilizācija. Apmēram 50% no tiem izmanto betona ražošanā, līdz ar ko var samazināt pieprasījumu pēc portlandcements (ekonomiskais faktors) un samazināt CO₂ emisijas gaisā (vides faktors).

Mērķis un uzdevumi. Izpētīt cenosfēru ķīmiskā sastāva un dispersitātes ietekmi uz cementa pastas, betona struktūru un īpašībām.

Darba gaita vai metodoloģija. Pētītas: divu veida cenosfēras: mullītu saturošās un kvarcu saturošās, ar atšķirīgu smalkuma pakāpi no 0,3 līdz 100 μm. Pelnu pucolāna aktivitāte tika noteikta pēc adaptētās ķīmiskās metodes (Massazza). Pelnu un cementa pastas hidratācijas procesa pētīšanai izmantotas RTG, SEM un FTIR metodes.

Rezultāti. Noteikts, ka abu veidu pelniem, samazinoties daļiņu izmēriem līdz 0,3 μm, pucolāna aktivitāte pieaug. Pētot kvarcu saturošo pelnu pucolāna aktivitāti, konstatēts ka visā apstrādes laikā ar Ca(OH)₂ šķīdumu (28 dienas) saglabājas kristālais kvarcs, jaunas kristāliskās fāzes nav konstatētas. Mullīta cenosfēras (1,0-80 μm) pēc 14 dienu mijiedarbības ar Ca(OH)₂ uzrāda strauju aktivitātes palielināšanos, ko var izskaidrot ar mullīta struktūras sabrukšanu, konstatēti kalcija alumohidrāti.

Darbā pētīts cementa pastas hidratācijas process (no 3 līdz 28 dienām), ar cenosfēru piedevām līdz 30%. Konstatēts, ka hidratācijas procesā kristālisko fāžu sastāvs praktiski nemainās, saglabājas cementa minerāli (portlandīts un larnīts) un atbilstoši kvarcs/mullīts.

Darbā iegūtie rezultāti parādīja, ka kvarcu saturošās cenosfēras var izmantot kā pildvielu betonam, bet mullītu saturošās cenosfēras – kā pucolāna piedevu.

Literatūra

K.Wesche. Fly ash in concrete. Properties and performance; New York, 1991, 284 pp.

Summary. The study of cement paste interaction with cenospheres. The influence of cenosphere with different chemical composition and dispersion on the cement paste, concrete structure and properties has been investigated. The investigation was carried out by pozzolanic activity test, SEM, X-ray diffraction, FTIR spectroscopy. The results showed that the quartz containing cenospheres can be used in lightweight concrete production as an aggregate, but mullite containing cenospheres as a pozzolanic additive.

DIFERENCĒTI APSTRĀDĀTU ILLĪTU STRUKTŪRA UN ĪPAŠĪBAS

Mārtiņš Randers, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Silikātu materiālu institūts, 3. kursa bakalaurants
Zinātniskā vadītāja: Dr. habil. chem. Gaida Maruta Sedmale, profesore

Ievads. Māli kā izejmateriāls tiek izmantoti daudzās rūpniecības nozarēs, un to pielietojums ir cieši saistīts ar mālu minerālu struktūras uzbūvi un ķīmisko sastāvu. Mūsdienās izpratne par mālu minerāliem ļauj veikt to struktūras un īpašību modifikāciju, piešķirot tiem jaunas īpašības, kas ļauj radīt jaunus materiālus un atrast inovatīvus pielietojumus. Latvijā dominējošais mālu minerāls ir illīts [1], tādēļ šajā pētījumā tiek aplūkotas illīta mālu modifīcēšanas iespējas.

Mērķis un uzdevumi. Darba mērķis ir izpētīt ķīmiskas, termiskas un mehāniskas apstrādes ietekmi uz illīta mālu struktūras un fāžu izmaiņām, kā arī ietekmi uz keramikas produkta sastāvu un īpašībām.

Darba gaita vai metodoloģija. Darbā ir izmantoti kvartāra māli no Apriķu atradnes. Attīrīšana no piejaukumiem ir veikta, pielietojot sedimenācijas un ķīmisko metodi [2]. Neapstrādātu un apstrādātu paraugu raksturošanai pielietota rentgenstaru pulverdifrakcijas analīze (XRD-model 62. Rigaku), infrasarkanā spektroskopija (spectrophotometer IR prestige 21FTIR-59. 8400S) un diferenciāli termiskā analīze (Setaram, SETSYS Evolution-1750). Keramikas paraugu spiedes izturība noteikta ar Toni Technik spiedes iekārtu.

Attīrītie māli apstrādāti dažādos veidos: malti 24 stundas planetārajās dzirnavās pie 280 apgr./min, apstrādāti ar 3 M un 6 M NaOH, karsēti 580°C temperatūrā. Tika pagatavoti keramiskie pulveri ar sastāvu illīts/Al(OH)₃ daudzumu attiecībās 80/20%, 60/40% un 50/50%, un tādās pašās attiecībās ar satāvu illīts/Mg(OH)₂. Pulveri apdedzināti pie 800°C, 900°C, 1000°C, 1050°C un 1100°C, iegūstot dažādas blīvuma pakāpes keramiku.

Rezultāti. Iegūtie rezultāti liecina par hidroksilgrupu izdalīšanos no mālu minerāliem pie 580°C. Mehāniski apstrādātos illītos būtiskas izmaiņas nav novērojamas. Ar NaOH apstrādātos paraugos notiek nātrija alumosilikāta (Na(AlSiO₄)₆·H₂O) adatveida kristālu veidošanās. Apdedzinātajai keramikai temperatūru intervālā 900 – 1050°C ir ievērojams sarukums – līdz 31%, pie 1100°C temperatūras visiem paraugiem pieaug gāzveida fāzes izdalīšanās. Pie apdedzināšanas temperatūrām 800°C un 900°C paraugu saķepšana ir ļoti vāja vai tās vispār nav. Saķepšana nenotiek arī paraugos ar sastāvu illīts/Mg(OH)₂ 60/40% un 50/50%. Laba saķepšana un ievērojama spiedes izturība (~150 -160N/mm²) ir paraugiem ar sastāvu illīts/Al(OH)₃ 60/40%.

Noteikts, ka pielietojot termisku u ķīmisku illītu apstrādi ir iespējams izmainīt illīta struktūru, tomēr tā netiek pilnīgi amorfizēta. Šādā veidā illīti tiek ievērojami aktivizēti, kam varētu būt potenciāls pielietojums jaunu keramikas materiālu izstrādē. Būtiskākās izmaiņas notiek, apstrādājot illītu ar ķīmiskām un termiskām metodēm.

Augsta spiedes izturība ir sasniegta keramikas materiālam no kompozīcijas sastāva - termiski apstrādāts illīts/Al(OH)₃ 60/40%. Ssavukārt kompozīcijās ar Mg(OH)₂ saķepšana ir vāja.

Literatūra

1. Sidraba, I.; Šperberga, I.; Vītiņa I., V.; Hodireva, V., et. al. Latvijas mālu un dolomīta resursu atbilstības novērtējums zemtemperatūras kompozītmateriālu izstrādei. Materiālzinātne un lietišķā ķīmija. 2013, 27. sēj., 35.–42. lpp.
2. Kostjukovs, J.; Trubaca-Boginska, A.; Actins, J.; Method for separation of submicron particles of illite mineral from illite clay. EP 2840063 A1. February 25, 2015.

Summary. Structure and properties of differentially treated illite. Purified illite was treated with 3 M and 6 M NaOH, heated at 580°C and milled to achieve changes in illite structure. Ceramic compositions were made from illite with addition of Al(OH)₃ and Mg(OH)₂ and sintered at 800 – 1100°C.

ILLĪTU MĀLU IETEKME UZ MULLĪTA-ZrO₂ KERAMIKAS VEIDOŠANOS UN ĪPAŠĪBĀM

*Inga Raubiška, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Silikātu materiālu institūts, 4. kursa bakalaurante
Zinātniskā vadītāja: Dr. habil. chem. Gaida Maruta Sedmale, profesore*

Ievads. Mūsdienās pieaugot pieprasījumam pēc materiāliem, kuru ekspluatāciju veic ekstrēmos apstākļos, ir nepieciešamība pēc materiāliem, kuriem piemīt izcilas fizikālās, ķīmiskās, kā arī mehāniskās īpašības. Pie šādiem materiāliem var pieskaitīt mullīta keramiku, kuras īpašības ievērojami uzlabo ZrO₂ pievienošana. Mullīta-ZrO₂ keramikas pievilcība slēpjas tieši paaugstinātās mehāniskajās īpašībās – spiedes, kā arī lieces izturībā, t.sk., pie paaugstinātām temperatūrām.

Mērķis un uzdevumi. Mērķis: izpētīt illītu mālu ietekmi uz mullīta-ZrO₂ keramikas veidošanos un īpašībām. Uzdevumi: izveidot mullīta-ZrO₂ keramikas paraugus; izmantot dažādas illītu mālu koncentrācijas, pievienošanai pamatsastāvam; vienā no paraugu sērijām izmantot piedevu Y₂O₃; saķepināt divas paraugu sērijas pie divām dažādām temperatūrām; noteikt iegūto paraugu keramiskās un mehāniskās īpašības; salīdzināt iegūtos rezultātus atkarībā no illītu mālu satura un apdedzināšanas temperatūras.

Darba gaita vai metodoloģija. Prespulveru sagatavošana planetārajās dzirnavās ar 0%, 5%, 10% un 15 % illītu mālu piedevu. Prespulveru daļiņu aptuveno izmēru noteikšana un morfoloģijas pētījumi ar SEM. Paraugu presēšana presformās. Paraugu apdedzināšana 1400°C un 1500°C temperatūrās. Paraugu spiedes izturības pārbaude un keramisko īpašību noteikšana. Iegūto paraugu kristālisko fāžu sastāva noteikšana ar Rentgena fāžu analīzes metodi.

Rezultāti. Illītu mālu ietekmē pieaug mullīta-ZrO₂ keramikas sablīvēšanās pakāpe un attiecīgi arī spiedes izturība. Illītu mālu piedeva veicina ZrO₂ kristālisko modifikāciju maiņu no monoklīnās uz tetragonālo, Y₂O₃ klātbūtnē pat uz kubisko. Sastāviem ar 15% illītu un 4,5 % Y₂O₃ piedevu, kuri tika apdedzināti 1500 grādu temperatūrā, tika novērota uzpūšanās, jeb tā sauktais „mālu efekts”.

Literatūra

G.Sedmale, I.Sperberga, A.Hmelov, I.Steins. Characterisation of mullite- ZrO₂ ceramics prepared by various methods. IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering, Vol. 18, 2011.

H.Schneider, J.Scheurer, B.Hildman. Structure and Properties of Mullite – a Review. J.Eur.Ceram.Soc. Vol. 28 (2), 329-344, 2008.

Summary. Effect of illite clay additive on sintering, phases composition and properties of mullite- ZrO₂ ceramics. This study focuses on the influence of the illite clay on the sintering process and consolidation of mullite – ZrO₂ ceramics with and without of Y₂O₃ additive, as well on the ZrO₂ modifications changes. It was found that the mullite– ZrO₂ ceramics both with 4.5% Y₂O₃ and without it additive by presence of illite clay tend to increase densification and pressure strength. It is shown that illite clay promote changes of ZrO₂ monoclinic to tetragonal and by presence of Y₂O₃ to cubic.

Darbs izpildīts saistībā ar Valsts pētījumu programmu ZEME, 5. apakšprojekts, RTU ID 1898

This work has been supported by the European Regional Development Fund within the Project „Effect of the non-oxygen compounds on mullite-zirconia ceramics development using non-traditional sintering methods” No.2DP/2.1.1.1./14/APIA/VIAA/036

AR MAGNIJU UN STRONCIJU AIZVIETOTU NANOKRISTĀLISKU APATĪTU SINTĒZE UN RAKSTUROJUMS

Svetlana Azareviča, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 2.studiju gada maģistrante
Zinātniskās vadītājas: Dr. sc. ing. Kristīne Šalma-Ancāne, vadošā pētniece,
Mg. sc. ing. Līga Stīpniece, pētniece

Potenciālam biomateriālam vajadzētu līdzināties pēc iespējas ciešāk kaulaudos sastopamam bioloģiskam apatītam, kuru raksturo mazi izmēri nano mērogā, zema kristāliskuma pakāpe un nestehiometrija (citu jonu klātbūtne). Ņemot vērā sintētiski iegūtā apatīta ķīmisko un struktūras līdzību ar bioloģisko apatītu, līdz ar to izcilu biosaderību un bioaktivitāti, apatītu plaši izmanto zobārstniecībā kā zobu pildvielu, ortopēdijā kā aizvietotājmateriālu kaulu defektu labošanai.

Ir zināms, ka bioloģiskā apatīta sastāvā iekļauti dažādi mikroelementi, kuriem ir būtiska loma bioloģiskās reakcijās, kas saistītas ar kaulu metabolismu. Ir pierādīts, ka stroncijs var uzlabot kaulu stiprību, ir efektīvs osteoporozes ārstēšanā, savukārt, magnijam ir neatņemama loma kaulu metabolismā – sekmē kaulaudu veidošanas procesu, veicinot osteoblastu un osteoklastu aktivitāti.

Darba mērķis ir veikt sistemātisku pētījumu par magnija un stroncija aizvietotu nanokristālisku apatītu sintēzi. Turklāt, ir svarīgi izpētīt Mg^{2+} un Sr^{2+} jonu koncentrācijas ietekmi uz sintēzes produkta sastāvu un struktūru.

Šajā darbā nanokristāliskie apatīti tika iegūti ķīmiskās nogulsnešanas ceļā starp H_3PO_4 šķīdumu un $Ca(OH)_2$ suspensiju, pievienojot 1 mol% un 15 mol% Mg^{2+} un Sr^{2+} jonus. Tika izvēlēti sintēzes apstākļi, kas ietekmē kristāliskuma pakāpes samazināšanos – zemā sintēzes temperatūra – 0 °C, bez iegūtā sintēzes produkta nobriedināšanas „mātes šķīdumā”, kavējot kristalītu nukleācijas un augšanas procesu, kā arī izveidotā apatīta kristalītu aglomerācijas ierobežošanu, sasaldējot un liofilizējot. Iegūto sintēzes produktu fāžu sastāvs pie dažādām Mg^{2+} un Sr^{2+} jonu koncentrācijām tika izpētīts ar rentgenstaru difraktometrijas metodi (XRD).

No XRD datiem secināts, ka tīra apatīta kristāliskuma pakāpe palielinās, pievienojot Sr^{2+} jonus ar 1mol% koncentrāciju, savukārt, palielinot Sr^{2+} jonu daudzumu līdz 15mol% koncentrācijai, iegūst rentgenamorfū apatīta fāzi. Līdz ar Mg^{2+} jonu koncentrācijas palielināšanu sintēzes vidē, samazinās iegūtās apatīta fāzes kristāliskuma pakāpe līdz pat rentgenamorfai struktūrai.

Zemtemperatūras nogulsnešana metode bez sintēzes produkta nobriedināšanas, ar strauju sasaldēšanu un liofilizēšanu ir potenciāla nanokristāliskā apatīta iegūšanai. Pievienotā Mg^{2+} un Sr^{2+} jonu koncentrācija ietekmē apatīta kristāliskuma pakāpi – palielināts Mg un Sr saturs veicina rentgenamorfās apatīta fāzes izveidošanos.

Literatūra

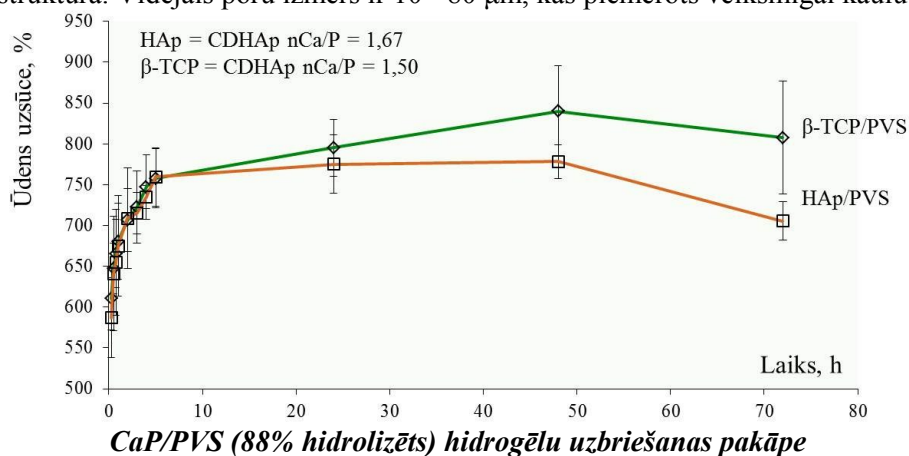
1. E.Boanini, M.Gazzano, A.Bigi. Ionic substitutions in calcium phosphate synthesized at low temperature. Acta Biomater., 2010, 6(6), 1882-1894.
2. S.V.Dorozhkin. Nanodimensional and nanocrystalline apatites and other calcium orthophosphates in biomedical engineering, biology and medicine. Materials, 2009, 2, 1975-2045.
3. D.Eichet, C.Drouet, H.Sfihia. Nanocrystalline apatite-based biomaterials; Nova Science Publishers, In; 2011, 88 lpp.
4. Z.Y.Li, W.M.Lam, C.Yang, B.Xu, G.X.Ni, S.A.Abbah, K.M.Cheung, K.D.Luk, W.W.Lu. Chemical composition, crystal size and lattice structural changes after incorporation of strontium into biomimetic apatite. Biomaterials, 2006, 24(7), 1452-1460.
5. M.Nabiyouni, Y.Ren, S.B.Bhaduri. Magnesium substitution in the structure of orthopedic nanoparticles: A comparison between amorphous magnesium phosphates, calcium magnesium phosphates, and hydroxyapatites. Mater. Sci. Eng., C, 2015, 52, 11-17.

Summary. The potential method of preparation nanocrystalline apatites is the low-temperature synthesis of apatite through the precipitation method with a short maturation time and specific conditions. Added Mg^{2+} and Sr^{2+} ions concentration affects the degree of crystallinity apatite – increased Mg and Sr content promotes amorphous phase with a low degree of crystallinity.

KALCIJA FOSFĀTU/POLIVINILSPIRTA NANOKOMPOZĪTU SINTĒZE UN RAKSTUROJUMS

Marta Branka, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 4.studiju gada bakalaurante
Zinātniskie vadītāji: Dr. sc. ing. Dagnija Loča, vadošā pētniece;
Mg. sc. ing. Marina Sokolova, pētniece

Nepieciešamība pēc locītavu un skrimšļu aizvietošanas operācijām pasaulē strauji pieaug. Skrimšļa bojājums rada locītavu sāpes un ierobežo kustības. Tā kā locītavu skrimslis ir organismā dabīgi veidojies hidroģēls, kas sastāv no proteoglikāniem, kolagēna un apmēram 75% ūdens, tad mīksto kaulaudu potenciāli aizvietotājmateriāli ir HAp/PVS hidroģēli, kas saistās ar mīksto audu virsmu un veicina osteoblastu adhēziju. Darba mērķis ir izveidot kalcija fosfātu (CaP)/polivinilspirta (PVS) kompozītmateriālu, kas apvieno kalcija fosfātu bioloģiskās īpašības un polimērmateriālu augsto elastību. Darba uzdevumi ietver kontrolēta CaP fāžu sastāva sintēzi PVS šķīdumā, CaP/PVS hidroģēlu iegūvi, izmantojot saldēšanas/atkausēšanas metodi un iegūto CaP kompozītmateriālu raksturošanu. CaP *in situ* sintēzi veic, izmantojot slapjo ķīmiskās nogulsnešanas metodi 5% polivinilspirta ūdens šķīdumā (CaP/PVS masas attiecība 50:50). Vēlamās CaP fāzes iegūšanai maina sintēzes temperatūru, pH, polimēra hidrolīzes pakāpi un Ca/P molāro stehiometrisko attiecību. Iegūtā produkta īpašību raksturošanai izmanto skenējošo elektronu mikroskopiju (SEM), Furjē transformācijas infrasarkanā spektroskopiju (FT-IR) un rentgenstaru difraktometriju (XRD). Hidroģelus iegūst, veicot secīgus CaP/PVS suspensijas saldēšanas/atkausēšanas ciklus. Saldēšana noris -20 °C, atkausēšana – 21 °C, kopējais 1 cikla laiks – 24 h. Ciklēšanas rezultātā iegūtajiem CaP/PVS hidroģēliem nosaka uzbriešanas pakāpi. Izmantojot izstrādāto sintēzes metodi, atkarībā no sintēzes apstākļiem iespējams iegūt HAp un β -TCP/HAp maisījumu ar CaP/PVS masas attiecību 50:50. Secināts, ka iegūto kompozītu organiskā (PVS) un neorganiskā (CaP) fāze ir savstarpēji savietojama. CaP/PVS hidroģēlu iegūšanai nepieciešams veikt vismaz 5 atkārtotus saldēšanas/atkausēšanas ciklus. PVS hidrolīzes pakāpe ietekmē gēla veidošanās ātrumu un stabilitāti. Secināts, ka hidroģēliem, kas iegūti, sintezējot CaP 98% hidrolizētā PVS, stabila šķērssaistīta struktūra veidojas ātrāk. CaP/PVS (88% hidrolizēts) hidroģēliem raksturīga augsta ūdens uzsūkšanas spēja, kas sasniedz ~800% β -TCP/PVS hidroģēliem un ~760% HAp/PVS hidroģēliem (skat. att.). Analizējot liofilizētu CaP/PVS SEM mikrostruktūras attēlus, secināts, ka HAp daļiņas ir izkliedētas PVS matricā un iegūtajiem paraugiem ir raksturīga poraina struktūra. Vidējais poru izmērs ir 10 - 80 μ m, kas piemērots veiksmīgai kaulu šūnu ieaugšanai¹.



Literatūra

1.S.A.Poursaman, M.Azami, M.Mozafari. Controllable synthesis and characterization of porous polyvinyl alcohol/hydroxyapatite nanocomposite scaffolds via an *in situ* colloidal technique. *Colloids Surf., B.*, **2011**, 84(2), 310-316.
2.M. I.Baker, S.P.Walsh, Z.Schwartz, B.D.Boyan. A review of polyvinyl alcohol and its uses in cartilage and orthopedic applications. *J. Biomed. Mater. Res. B.* **2012**, 100(5), 1451-1457.

Summary. Among biodegradable and biocompatible polymers, polyvinyl alcohol (PVA) has attracted attention for the cartilage and orthopaedic applications. To improve the adhesion between host tissues and prosthesis, the PVA hydrogels are combined with hydroxyapatite particles. The aim of the current study was to combine biological properties of hydroxyapatite with high plasticity of polyvinyl alcohol and in-situ develop mineralization method that leads to high integration of HAp particles inside the PVA hydrogel. HAp/PVA hydrogels with Ca/P molar ratio of 1,67 and 1,50 were obtained and characterized. To obtain CaP/PVS hydrogels, samples were frozen at -20 °C for 12 h and then thawed at room temperature for 12 h. Obtained results showed that it was possible to synthesize PVA/HAp composites and to vary the Ca/P molar ratio from 1,67 to 1,50 in the final nanocomposite. It was also found that the number of freeze-thaw cycles for the hydrogel preparation depends on the PVA hydrolysis degree.

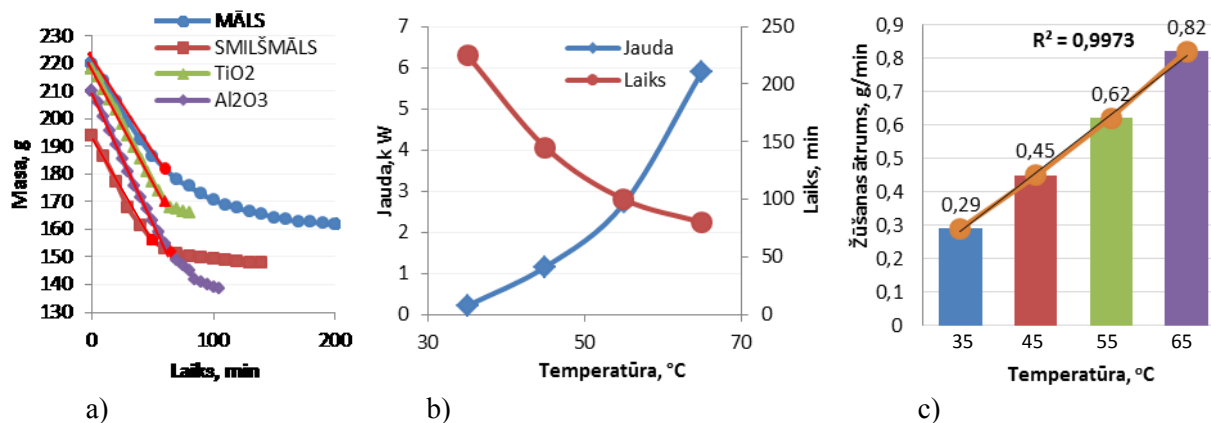
PULVERVEIDA MATERIĀLU ŽŪŠANAS KINĒTIKAS PĒTĪJUMI KONVEKCIJAS ŽĀVĒTAVĀ

Anete Brizga, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 4.studiju gada bakalaurante
Zinātniskais vadītājs: Dr. sc. ing. Agnese Stunda-Zujeva, docente

Žāvēšana ir komplekss process, kurā vienlaicīgi notiek gan masas apmaiņa, gan siltuma pārnese. Procesa laikā mitrums no materiāla iekšējiem slāņiem pārvietojas uz virsmu un iztvaiko. Mitruma pārnese iekšējos slāņos ir tiešā mērā atkarīga no materiāla īpašībām, mitruma daudzuma, temperatūras un mitra tvaika parciālā spiediena. Iztvaikošanas procesu galvenokārt ietekmē ārējie faktori: gaisa temperatūra, mitrums un ātrums, kā arī spiediens. Šādas izpētes rezultātā iespējams samērot atbilstošākos žūšanas parametrus, tādējādi iegūstot efektīvu žāvēšanas procesu.

Darba mērķis ir salīdzināt dažādu pulverveida materiālu žūšanas kinētiku un izvērtēt žāvēšanas parametru ietekmi, rezultātā izstrādājot ieteikumus ķīmijas tehnoloģijas laboratorijas darbu variantiem.

Tika pētīti četru materiālu paraugi – smilšmāls (frakcija < 1,4 mm); māls (frakcija < 63 μm); Al₂O₃ pulveris; TiO₂ pulveris. Materiāliem tika pievienots ūdens un masa formēta veidnē ar diametru 16 cm un biezumu 0,55 cm.



Attēls. a) Materiālu žūšanas kinētikas salīdzinājums (65⁰C; 0,9 m/s); b) sildelementa patērētās jaudas, kopējā žūšanas laika un temperatūras sakarība (TiO₂; 0,9 m/s); c) konstantā žūšanas ātruma atkarība no temperatūras (TiO₂; 0,9 m/s).

Attēlā a) redzams, ka dažādu materiālu žūšanas kinētika atšķiras gan pēc kopējā patērētā laika, gan žūšanas periodu ilguma; TiO₂ pulveris žūst visātrāk un tā kinētiskā līkne visuzskatāmāk atbilst teorijai par žūšanas periodiem, turklāt līdzsvara mitrums iestājas relatīvi strauji. Savukārt, attēlā b) novērojams, ka samazinot temperatūru no 45⁰C uz 35⁰C, laiks pieaug par 80 min, savukārt palielinot temperatūru no 55⁰C uz 65⁰C jauda palielinās par 3,2 kW, tādējādi var spriest, ka optimālākās temperatūras ir 45⁰C – 55⁰C. Attēlā c) redzams, ka pieaugot temperatūrai, pēc lineāras sakarības pieaug arī konstants žūšanas ātrums. Tika konstatēts, ka žūšanas procesa kinētiku galvenokārt ietekmē temperatūras izvēle, nevis gaisa plūsmas ātrums.

Salīdzinot dažādus materiālus, TiO₂ pulveri var ieteikt izmantot mācību laboratorijas darbos, kā uzskatāmu žūšanas kinētikas izpētes modeļa materiālu.

Literatūra

1. Barati, E.; Esfahani, J. A. Mathematical modeling of convective drying: Lumped temperature and spatially distributed moisture in slab. *Energy (Oxford, U. K.)*. **2011**, 36, 2294-2301.
2. Ateeque, Md; Udayraj; Mishra, R. K.; Chandramohan, V. P.; Talukdar, P. Numerical modeling of convective drying of food with spatially dependent transfer coefficient in a turbulent flow field. *Int. J. Therm. Sci.* **2014**, 78, 145-157.

Summary. Drying kinetic of powder in convection dryer. The paper describes drying kinetics of different powders in various conditions. The aim of the study was to develop recommendations for chemical engineering laboratory experiments. In present study four kind of powder materials was used - loam (fraction < 1,4 mm); clay (fraction < 63 μm); Al₂O₃ powder; TiO₂ powder. As the most appropriate powder for drying kinetics studies in laboratory experiments TiO₂ is recommended due to the best fit of drying kinetic curve to theoretical curve and fast equilibrium moisture of material was achieved.

MAGNIJU SATUROŠAS DIVFĀŽU KALCIJA FOSFĀTU BIOKERAMIKAS ŠĶĪDĪBAS PĒTĪJUMI

Krista Gercāne, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 4.studiju gada bakalaurante
Zinātniskās vadītājas: Mg. sc. ing. Līga Stīpniece, pētniece,
Dr. sc. ing. Kristīne Šalma-Ancāne, vadošā pētniece

Līdz ar vidējā mūža ilguma palielināšanos, pieaugot nepieciešamībai pēc medicīnas implantu izmantošanas, norit nepārtraukta jaunu sintētisku kaulu aizvietotājmateriālu, t.sk. biokeramikas, izgatavošana un pētīšana. Ideālai biokeramikai izvirzītās prasības nosaka saistīšanās spēju ar dabīgo kaulu, stimulējot jaunu kaulaudu veidošanos, kombinācijā ar relatīvi augstu šķīdību, tādējādi līdzsvarojot jaunā kaula veidošanās kinētiku un implantmateriāla biodegradāciju [1]. Tādi kalcijs fosfātu (CaP) sāļi kā hidroksilapatīts (HAp) un β -trikalcijs fosfāts (β -TCP), pateicoties to līdzībai ar kaula minerālo komponenti - bioloģisko apatītu, uzrāda lielisku biosaderību un ir plaši izmatoti biokeramikas materiāli. HAp fizioloģiskos apstākļos ir stabils, savukārt, β -TCP uzrāda relatīvi augstu šķīdību. Ar mērķi kontrolēt biokeramikas šķīdību, tiek pētīti divfāžu CaP, variējot HAp un β -TCP fāžu attiecības [2]. Gan fāžu sastāva, gan ķīmiskā sastāva modificēšana, t.i., (Ca^{2+}), (PO_4^{3-}) vai (OH^-) jonu aizvietošana ar dažādiem dabīgajā kaulā sastopamiem katjoniem (Na^+), (Mg^{2+}), (Zn^{2+}) u.c.) vai anjoniem (F^-), (CO_3^{2-}) u.c.), var ietekmēt CaP biokeramikas fizikālķīmiskās īpašības. Prognozēts, ka Mg saturoši CaP produkti spētu nodrošināt ātrāku un efektīvāku bojātā kaula atveseļošanu, pateicoties materiāla biodegradācijai un pakāpeniskai Mg, kam ir pozitīva ietekme uz kaulu matricas un kaulu minerālu **metabolismu**, atbrīvošanai [3]. Šī darba mērķis ir detalizēti izpētīt Mg saturošas divfāžu CaP biokeramikas šķīdības procesus.

Uniaksiāli presējot ($p=10$ kN) un termiski apstrādājot 1100 °C, no Ca deficītajiem HAp pulveriem pagatavoti cilindriskas formas biokeramikas paraugi. Pagatavotie biokeramikas paraugi ar dažādām HAp/ β -TCP fāžu attiecībām (60/40, 70/30, 80/20) un Mg saturu (līdz 0.8 masas%) tika ievietoti TRIS-HCl buferšķīdumā (pH 7.4) uz 7, 14, 21 un 28 dienām. Pēc izturēšanas TRIS-HCl buferšķīdumā, paraugi tika izņemti no šķīduma, noskaloti ar destilētu ūdeni un izžāvēti. Biokeramikas paraugiem noteikta masu izmaiņa un veikta ķīmiskā sastāva analīze ar enerģijas dispersīvo rentgenstaru spektroskopiju un fāžu sastāva analīze ar rentgendiraktometriju. Ca jonu izdalīšanās no biokeramikas paraugiem noteikta, kompleksimetriski (ar EDTA) titrējot eksperimentālos TRIS-HCl šķīdumus.

Analīžu rezultāti liecina, ka divfāžu CaP biokeramikas paraugiem ar augstāku β -TCP fāzes saturu novērojama intensīvāka (Ca^{2+}) jonu izdalīšanās TRIS-HCl buferšķīdumā, kas liecina par augstāku materiāla šķīdību. Ķīmiskā sastāva analīzē iegūtie Ca/P molāro attiecību mērījumi liecina, ka pat neliela (Mg^{2+}) jonu iekļaušana divfāžu CaP biokeramikas paraugos ietekmē biokeramikas šķīdību.

Literatūra

1. T. Kokubo. *Bioceramics and their Clinical Applications*; CRC Press: Cambridge, 2008, 760 pp.
2. O. Brown, M. McAfee, S. Clarke, F. Buchanan. Resorption of Biphasic Calcium Phosphate Ceramics. *Bioceram. Dev. Appl.*, **2010**.
3. D. H. Yassuda-Mattos, N. M. de Freitas Costa, D. dos Santos Tavares, G. V. O. Fernandes, A. Alves, J. M. Granjeiro, G. D. de Almeida Soares. Study of Bone Repair in Rat Dental Socket after Implantation of Porous Granules of Beta-Tricalcium Phosphate (β -TCP) and Magnesium-Substituted Beta-Tricalcium Phosphate (β -TCMP). *Key Engineering Materials*, **2011**, 493-494, 263–268.

Summary. *Investigations of dissolution behaviour of magnesium containing biphasic calcium phosphate bioceramics.* Ca ions release in TRIS-HCl buffer solution was higher for bioceramics with higher β -tricalcium phosphate content. Thus, experimental results confirmed that solubility of the biphasic calcium phosphate bioceramics increased with increasing β -tricalcium phosphate content. Moreover, it was evident that incorporation of small amounts of Mg into the biphasic calcium phosphate significantly affects dissolution behavior of the bioceramics.

SILĪCIJA MINERĀLMATERIĀLU RAKSTURLĪKNES UN TO PRAKTISKĀ IZMANTOŠANA

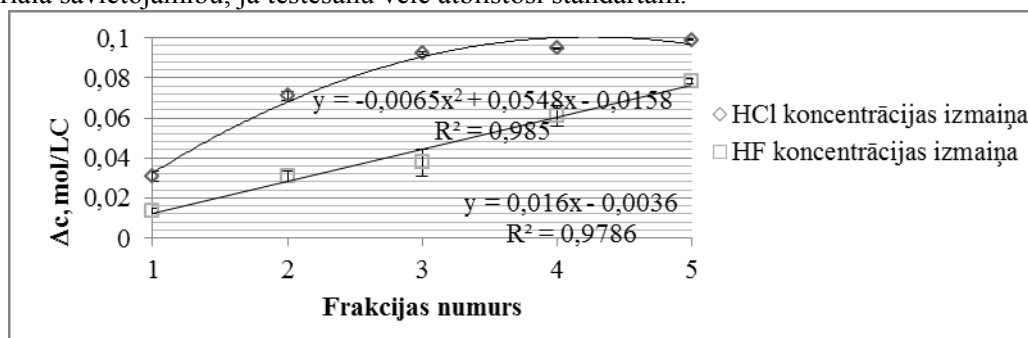
Sintija Grīvane, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 4.studiju gada bakalaurante
Zinātniskā vadītāja: Dr. chem. Daina Kalniņa, asociētā profesore

Aktuāla problēma asfaltētiem ceļa segumiem – bojājumi ārējo apstākļu ietekmē. Viens no iemesliem ir adhēzijas samazināšanās starp maisījuma komponentēm asfaltbetonā gan slodzes, gan gadalaiku ietekmes dēļ.

Darba mērķis - izpētīt un raksturot nestandarta silīcija minerālmateriālus, uzņemt to raksturlīknes.

Pētīti nestandarta frakciju skābie minerālmateriāli (ar augstu silīcija saturu). Tā kā projektējot asfalta maisījumu tajā paredz izmantot ne tikai lielās frakcijas (> 5mm), bet arī smalkās, ir svarīgi noskaidrot, kā minerālmateriāla nestandarta frakcijās esošās daļiņas var ietekmēt maisījuma saķeri. Minerālmateriālu granītu pakļāva skābju iedarbībai noteiktu laiku un noteiktos apstākļos, lai noteiktu kā minerālmateriālā esošie savienojumi spēj reaģēt ar šīm skābēm. Silīcija savienojumu noteikšanai izmantota fluorūdeņražskābe, kalcija savienojumiem – sālsskābe.

Iegūtas materiāla raksturlīknes (skatīt attēlu), tajās redzama skābju koncentrāciju maiņa atkarībā no frakciju daļiņu izmēriem (frakciju apzīmējumi – frakcija ar lielākajiem daļiņu izmēriem - 1, vismazākā frakcija – ar 5). Šīs raksturlīknes iespējams izmantot ceļu būvē, nosakot bitumena un minerālmateriāla savietojamību, ja testēšanu veic atbilstoši standartam.



Skābju koncentrācijas maiņa atkarībā no minerālmateriāla frakcijas izmēriem

Minerālmateriāla ķīmiskais sastāvs un granulometrija jeb daļiņu lielums ietekmē maisījuma sastāvdaļu saķeri. Dažādām frakcijām ir dažāds patērētās skābes daudzums - samazinoties frakciju izmēriem patērētās skābes koncentrācijas maiņa palielinās.

Literatūra

1. V.Segliņš. Minerāli un ieži. 2.daļa Ieži. RaKa, 2007, 126 lpp.
- 2.A.R.Pasandin, I.Perez. The influence of the mineral filler on the adhesion between aggregates and bitumen. *Int. J. Adhes. Adhes.* **2015**, 58, 53-58

Summary. Characteristic curves for siliceous mineral materials and its practical use. Adhesion between bitumen and mineral material in asphalt road pavements is very important. Although in testing the affinity between aggregate and bitumen usually use fractions above 5 mm, it is important to test small fractions too. Tests have been made with hydrofluoric acid and hydrochloric acid. Characteristic curves showed that small fractions use more acid, but big fractions less. These characteristic curves can be used in road pavement industry.

DIVKĀRŠI VĀRĪTĀS UN POLIMERIZĒTĀS LINEĻĻAS FIZIKĀLO PARAMETRU SIMULĀCIJAS

Liene Kienkas, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 4.studiju gada bakalaurante
Zinātniskie vadītāji: Dr. sc. ing. Olita Medne, doc.; Mg. sc. ing. Imants Kreicbergs, zin. asist.

Lineļļa ir augu eļļa, kurai piemīt spēja polimerizēties skābekļa klātbūtnē un veidot cietu pārklājumu. Šīs īpašības dēļ tā tiek izmantota koksnes apstrādei, krāsu un citu pārklājumu industrijās. Priekš-polimerizējot lineļļu augstā temperatūrā skābekļa klātbūtnē, pievienojot sikatīvus, iegūst divkārši vārīto eļļu (DVE) ar mazu (0.067 Pa·s) viskozitāti, priekš-polimerizējot bez sikatīviem, inertā atmosfērā – polimerizēto eļļu (PE), kurai raksturīga liela (2 Pa·s) viskozitāte.

Darba mērķis ir iegūt DVE un PE maisījumu fizikālo parametru funkcionālās sakarības, kuras ir atkarīgas no eļļu maisījuma procentuālā sastāva. Iegūtos rezultātus apraksta ar matemātiskajiem modeļiem, uz kuru pamata izveidot datorsimulācijas.

Tika noteiktas eļļu maisījumu dinamiskās viskozitātes istabas temperatūrā ar rotācijas viskozimetru *Anton Paar* pie ātruma 10 apgr./min. Iegūtajām viskozitāšu rezultātiem no zinātniskajām publikācijām tika piemeklēti matemātiskie apraksti, no kuriem neviens neatbilda reālajiem datiem. Līdz ar to tika izveidots empīrisks viskozitāšu matemātiskais modelis (1), kas precīzi apraksta eksperimentālos datus.

$$\eta_{\text{maisījums}} = \eta_{DVE} + 7.6942 \cdot w_{PE}^4 - 9.8758 \cdot w_{PE}^3 + 4.1016 \cdot w_{PE}^2 - 0.0017 \cdot w_{PE} \quad (1)$$

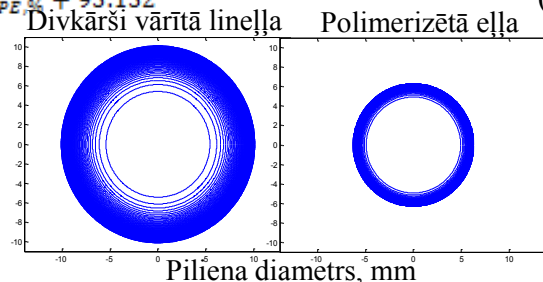
Eļļu maisījumiem uzņemtas žūšanas kinētikas līknes. Kinētikas līknes uzņemtas uzklājot eļļu maisījumus uz 2x9 cm polimēra materiāla plāksnītēm un sverot plāksnītes 3 reizes dienā 14 dienas, tad 3 reizes nedēļā 30 dienas. Kinētikas līknēm, velkot pieskares masas pieauguma posmā un atvasinot pieskares vienādojumus laikā, iegūti skābekļa piesaistes ātrumi dažādiem eļļu maisījumiem.

Izžuvuša eļļas pārklājuma krāsas indekss tika noteikts ar spektrometru *NCS COLOUR SCAN 2.0*. Eļļu pārklājuma baltuma indekss (BI) tiek aprēķināts no RGB skalas dotajiem datiem. Iegūta matemātiska sakarība (2), kas raksturo pārklājuma baltuma indeksu atkarībā no PE eļļas daudzuma maisījumā.

$$BI = 0.7449 w_{PE}^{0.8} + 93.132 \quad (2)$$

Maisījumiem tika veikti izplūšanas eksperimenti uz horizontālas un vertikālas stikla virsmas. Datorprogrammā *MATLAB* izveidotas izplūšanas kartes (skat.att.) un izplūšanas simulācija animācijas veidā.

Palielinot PE masas daļu eļļu maisījumā no 0 līdz 1, maisījuma viskozitāte palielinās kā 3. pakāpes polinomiāla sakarība, skābekļa uzņemšanas ātrums samazinās 12 reizes, pārklājuma baltuma indekss pieaug lineāri. Datorsimulācijas vizuāli atspoguļo viskozitātes ietekmi uz eļļu izplūšanu.



Literatūra

1. C.Stenberg. Influence of the fatty acid pattern on the drying of linseed oils. *University dissertation*, Sweden, 2004.
2. G.Centeno, G.Sanchez-Reyna, J.Ancheyta, J.A.D.Munoz, N.Cardona. Testing various mixing rules for calculation of viscosity of petroleum blends. *Fuel*, **2011**, *90*, 3561-3570.
3. C.S.Tumosa, M.F.Mecklenburg. Oil paints: the chemistry of drying oils and the potential for solvent disruption. *SISP: Smithsonian Contrib. Mus. Conserv.*, **2013**, *3*, 51-58.
4. M.Lazzari, O.Chiantore. Drying and oxidative degradation of linseed oil. *Polym. Degrad.Stab.*, **1999**, *65*, 303-313.

Summary. Simulations of physical parameters of double boiled linseed oil (DBO) and stand oil. DBO is used as wood finish for centuries. DBO and stand oil (SO) mixtures are used to improve wood finish properties. Functional relationships and simulations of mixtures have been obtained on the basis of the experimental data. SO weight fraction increase from 0 to 1 causes 3rd degree polynomial viscosity increase, linear coating whiteness index increase and decrease in oxygen uptake rate by 12 times.

AKTIVĒTĀS OGLES DEMINERALIZĀCIJA PĒC ĶĪMISKĀS AKTIVĀCIJAS AR NAOH

Zane Kivleniece, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 4.studiju gada bakalaurante
Zinātniskie vadītāji: Dr.sc.ing. Jurijs Ozoliņš, profesors;
KĶI pētnieks, RTU 3.k. doktorants Aleksandrs Volperts

Mūsdienās dažādu aktivēto oglekļa materiālu struktūras izpēte arvien pieaug. Aktivētā ogle ir plaši izmantota, galvenokārt sorbentu veidā daudzās ķīmijas tehnoloģijās. Jauni pētījumu virzieni saistīti ar aktivētās ogles izmantošanu nanotehnoloģijās, piemēram, elektronikas un enerģētikas nozarēs (1). Tādā gadījumā oglei jābūt augstai īpatnējai virsmai un attīstītai porainai struktūrai. To var panākt koksni aktivējot.

Darba mērķis ir izpētīt demineralizācijas procesu pēc ķīmiskās aktivācijas ar sārmu, izmantojot divas skābes - sālsskābi un sērskābi. Mainot skābju koncentrāciju un izturēšanas laiku, nepieciešams atrast optimālos apstākļus apstrādei.

Demineralizācija ir nepieciešama, jo materiālu poras, kas veidojas aktivācijas procesā, aizpildas ar nātrija sāļiem un neizreaģējušo sārmu. Demineralizācijas laikā nātrija karbonāts (un arī citi sāļi) pēc reakcijas ar skābi ar ūdeni tiek izskaloti, veidojot hlorīdus vai sulfātus. Tādējādi iegūstot mikroporainu aktivēto ogli ar attīstītu poraino struktūru (2). Iegūto ogli pēc žāvēšanas analizē, nosakot tās strukturālās īpašības pēc N_2 sorbcijas. Aprēķinot izoterma nosaka ogles kopējo virsmas laukumu, kopējo poru ietilpību un mikroporu ietilpību. Ogli pārpelno, lai noteiktu pelnu saturu. Pelnos, izmantojot spektrofotometru, nosaka dzelzs daudzumu, kas negatīvi ietekmē ogles īpašības, ja to izmanto, piemēram, par elektrodu superkondensatoros. Dzelzs daudzumu nosaka arī paraugos pēc vārīšanas un skalošanas ar ūdeni. Kā arī šiem paraugiem nosaka skābes koncentrāciju, lai pārlicinātos, ka skābe demineralizācijas procesam ir ņemta pārākumā. Darba laikā tiek analizēta skābes koncentrācijas un apstrādes laika ietekme uz iegūtās aktivētās ogles īpašībām.

Rezultāti liecina, ka iegūtai aktivētai oglei ir augsti attīstīta poraina struktūra. Kopējais virsmas laukums pārsniedz $2500 \text{ m}^2/\text{g}$ un mikroporu ietilpība vairāk par $500 \text{ mm}^3/\text{g}$. Pelnu saturs visos paraugos ir zem 1%. Dzelzs daudzums paraugos ar lielākas koncentrācijas skābi un ilgāku apstrādi nepārsniedz normu (50 ppm).

Literatūra

1. Dobeļe, G., et.al. Production of nanoporous carbons from wood processing wastes and their use in supercapacitors and CO_2 capture. *Biomass and Bioenergy*, 2012, vol. 46, pp. 145-154.
2. Ismailova, M.G., Makhkamov, Kh.M., Ismailova, P.L. High-efficiency carbonaceous medical sobent made from cotton lignin. *Pharmaceutical Chemistry Journal*, 2000, vol. 34, no. 12, pp. 38-40.

Summary. Process of activated carbon demineralization after chemical activation is required to remove sodium salts from the pores and to obtain microporous material with highly developed structural characteristics. Hydrochloric and sulfuric acid were used as demineralization process agents. The obtained product was analyzed using N_2 sorption to characterize total and micropores specific surface area and volume. Ash and iron content were determined in the product as well. The resulting activated carbon has developed porous structure and promising potential applications.

KALCIJA FOSFĀTU IZMANTOŠANA ZOBU EMALJAS REMINERALIZĀCIJAI

Jūlija Kozela, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 2.studiju gada maģistrante.
Zinātniskie vadītāji: Dr. sc. ing. Jānis Ločs, asoc. profesors; Mg. sc. ing. Vita Zālīte, pētniece

Zobu emalja tiek uzskatīta par cietākajiem audiem cilvēka organismā, jo tai piemīt augsts minerālu saturs. Bojājumu zobu virsmā var izraisīt minerālvielu zaudēšana. Cilvēka zobi katru dienu ir pakļauti vairākiem procesiem un faktoriem, kas veicina bojāšanos (novecošanās, berzes un skābās vides iedarbība, zobu traumas, virsmas demineralizāšanās). Visi šie faktori noved pie zobu slimībām (paaugstināta jutība, krāsas izmaiņa, plaisas, kariess). Lielāka daļa pasaules attīstīto valstu ir guvušas ievērojamus rezultātus kariesa un parodontozes izplatības samazināšanā, izmantojot profilakses stratēģiju. Izmantojot hidroksilapatītu (HAp) saturošas pastas ir iespējams remineralizēt bojāto emalju [1-4].

Darba mērķis ir novērtēt HAp potenciālo pielietojumu emaljas remineralizācijas procesā. Lai to panāktu ir nepieciešams sagatavot pastas kas satur HAp daļiņas, kā arī liellopa zobu emaljas paraugus *in vitro* eksperimentiem un novērtēt izveidoto pastu remineralizācijas efektivitāti.

Zobu emaljas paraugi tika sagatavoti saskaņā ar ISO 11609:2010. Pastas bāze tiek sagatavota pēc literatūrā pieejamajās informācijas un atbilstoši ISO 11609 prasībām. Pastas sastāv no dažāda veida HAp (pastveida HAp, HAp pulveris sagatavots ar izsmidzināšanas žāvētavu, liofili žāvētas HAp nogulsnes) ar dažādu procentuālo daudzumu (5%,10% un 20%), glicerīna, ūdens un 2-hidroksimetilcelulozes. HAp daļiņu morfoloģiskās atšķirības pētītas ar skenējošo elektronu mikroskopiju (SEM), bet fāžu sastāvs analizēts, izmantojot rentgenstaru difraktometriju (XRD).

Neapstrādātam HAp pulverim XRD difraktogramma parāda, ka tam ir apatīta fāzei raksturīgie maksimumi apgabalā no 31-34 ° 2 teta, kā arī maksimumu zemā intensitāte liecina, ka materiāls ir ar zemu kristāliskuma pakāpi. Iegūtajai pastai noteikta viskozitāte. Tā ir apmēram 2,5 reizes lielāka (57 Pa*s) nekā komerciālai pastai (BioRepair) - 21,9 Pa*s, kas nozīmē, ka ir nepieciešams mainīt pastas sastāvu, lai samazinātu tās viskozitāti. Uzņemtie SEM attēli liecina, ka dažādi apstrādāti HAp pulveri sastāv no aglomerātiem, kurus veido adatveida kristalīti. Savukārt pastveida hidroksilapatītam raksturīgi atsevišķi kristalīti. Visos gadījumos kristalītu gareniskais izmērs ir mazāks par 1µm.

Turpmākie uzdevumi ir veikt *in vitro* eksperimentus ar dažādiem pastas sastāviem 3 nedēļu laikā un novērtēt izveidoto pastu efektivitāti zobu emaljas remineralizācijas veicināšanai.

Literatūra

1. A.Dālmane. *Histoloģija*; LU akadēmiskais apgāds: Rīga, 2004, 97-106.lpp
2. S.V.Dorozhkin. Calcium orthophosphates. *J. Mater. Sci.*, **2007**, 42(4), 1061-1095.
3. Viswanath, B.; Ravishankar, N. Controlled synthesis of plate-shaped hydroxyapatite and implications for the morphology of the apatite phase in bone. *Biomaterials*. **2008**, 29 (36), 4855-4863.
4. А.Г. Вересов, В.И. Путляев, Ю.Д. Третьяков. Химия неорганических биоматериалов на основе фосфатов кальция. *Рос. хим. ж.*, **2004**, 48(4).

Summary. In this study 3 different toothpastes with HAp particles(5 wt%, 10wt% and 20wt%) for evaluation the effects of HAp on remineralization of bovine enamel lesions were prepared. Enamel specimens were prepared according to ISO 11609 standard. XRD analysis of unsintered HAp powder shows peaks in range from 31-32° 2 theta which characterise apatite phase. Obtained HAp paste viscosity is 57 Pa*s, while commercial paste (BioRepair) - 21.9 Pa * s, it is necessary to change paste composition to reduce its viscosity. Different processed HAp materials have needle-like crystallites with longitudinal dimension less than 1 µm. HAp powder consists of agglomerates.

ERBIJA JONU LUMINISCENCE OKSIFLUORĪDU STIKLĀ UN STIKLA KERAMIKĀ AR β -NaYF₄

Guna Kriekle, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 2.studiju gada maģistrante
Zinātniskie vadītāji: Dr. phys., A. Šarakovskis, vadošais pētnieks;
Dr. sc. ing., Līga Bērziņa-Cimdiņa, profesore

Oksifluorīdu stikla keramikas apvieno silikātu stiklu ķīmiskās un mehāniskās īpašības ar fluorīdu kristālu optiskajām īpašībām. Nodrošinot nanoizmēra kristālu veidošanos, iespējams iegūt oksifluorīdu stikla keramikas, kas neizkļiedē gaismu. Šādus ar retzemju joniem aktivētus materiālus var izmantot gan kā sensorus, gan kā luminiscentus pārklājumus starojuma pārveidošanai. No fluorīdiem β -NaYF₄ tiek uzskatīts par efektīvāko retzemju jonu matricu, taču stikla keramikā šis savienojums līdz šim nav iegūts.

Darba mērķis ir iegūt un pētīt dažāda sastāva Er³⁺ aktivētus oksifluorīdu stiklus un stikla keramikas ar β -NaYF₄ nanokristāliem. Darbā raksturotas stiklu termiskās īpašības, stikla keramiku kristāliskās fāzes un mikrostruktūra, stiklu un stikla keramiku gaismas absorbcija, augšūpārveidotā luminiscence, Er³⁺ jonu koncentrācijas ietekme uz augšūpārveidoto luminiscenci, kā arī noteikta Er³⁺ jonu koncentrācija β -NaYF₄ nanokristālos.

Augsttemperatūras sintēzēs 1500°C iegūti Na₂O-NaF-YF₃-Al₂O₃-SiO₂ sistēmas stikli, kas aktivēti ar ErF₃ (0,1 - 3,0 mol%) Materiālu termiskās īpašības raksturotas, izmantojot diferenciāli termisko analīzi, kristāliskās fāzes identificētas, izmantojot rentgenstaru difraktometu, stikla keramiku mikrostruktūra pētīta, izmantojot transmisijas elektronu mikroskopu, augšūpārveidotā luminiscence ierosināta ar 980 nm starojumu. Lai novērtētu erbijs jonu koncentrāciju β -NaYF₄ nanokristālos, hidrotermiskos apstākļos sintezēti polikristāliki β -NaYF₄ pulveri ar zināmu Er³⁺ koncentrāciju. Šo materiālu ⁴S_{3/2}→⁴I_{15/2} un ⁴F_{9/2}→⁴I_{15/2} luminiscences joslu integrālo intensitāšu attiecības izmantotas erbijs jonu koncentrācijas aprēķināšanai.

Darbā iegūtas ar Er³⁺ joniem aktivētas caurspīdīgas stikla keramikas, kas satur homogēni izkļiedētus β -NaYF₄ nanokristālus ar vidējo izmēru 63±1 nm. Er³⁺ jonu koncentrācijas izmaiņas stiklos neietekmē β -NaYF₄ kristalizācijas temperatūru un kristalizācijas ātrumu.

Salīdzinot stikla un stikla keramikas augšūpārveidotās luminiscences intensitāti, tā stikla keramikā ir aptuveni 200 reizes lielāka. Tas norāda, ka erbijs joni atrodas vidē ar zemu fononu enerģiju – β -NaYF₄ kristālrežģī. Maksimālā augšūpārveidotās luminiscences intensitāte intensīvākajām luminiscences joslām, kas atbilst pārejām ²H_{11/2}→⁴I_{15/2}, ⁴S_{3/2}→⁴I_{15/2} un ⁴F_{9/2}→⁴I_{15/2}, sasniegta stikla keramikā ar 2 mol% ErF₃. Palielinot ErF₃ koncentrāciju stiklos un stikla keramikās, palielinās erbijs jonu savstarpējā mijiedarbība, kas veicina ⁴G_{11/2}, ²H_{9/2}, ⁴F_{3/2} un ⁴F_{9/2} līmeņu apdzīvotību. ²H_{11/2}, ⁴S_{3/2} un ⁴F_{9/2} līmeņu apdzīvotību nodrošina divi infrasarkanā starojuma fotoni, bet ⁴G_{11/2}, ²H_{9/2} un ⁴F_{3/2} – trīs fotoni. Spriežot pēc ⁴S_{3/2}→⁴I_{15/2} un ⁴F_{9/2}→⁴I_{15/2} luminiscences joslu integrālo intensitāšu attiecībām, palielinot erbijs jonu koncentrāciju stiklos, pieaug arī erbijs jonu koncentrācija β -NaYF₄ nanokristālos, turklāt aptuveni puse no stiklā esošajiem erbijs joniem pēc kristalizācijas atrodas β -NaYF₄ kristālrežģī.

Literatūra

1. P.P.Fedorov, A.A.Luginina, A.I.Popov. Transparent oxyfluoride glass ceramics. J. Fluor. Chem. 2015, 172, 22-50.
2. C.Renero-Lecuna, R.Martin-Rodríguez, R.Valiente, J.González, F.Rodríguez, K.W.Krämer, H.U.Güdel. Origin of the high upconversion green luminescence efficiency in β -NaYF₄:2%Er³⁺,20%Yb³⁺. Chem. Mater. 2011, 23, 3442-3448.
3. A.Shalav, B.S.Richards, M.A.Green. Luminescent layers for enhanced silicon solar cell performance: Up-conversion. Sol. Energy Mater. Sol. Cells, 2007,91,829-842.

Summary. Luminescence of erbium ions in oxyfluoride glass and glass ceramic with β -NaYF₄. Transparent glass ceramics containing β -NaYF₄ nanocrystals were prepared by melt-quenching and subsequent heat treatment of glass with a composition of Na₂O-NaF-YF₃-ErF₃-Al₂O₃-SiO₂. Differential thermal analysis, X-ray diffractometry and transmission electron microscopy were used to investigate the thermal properties, crystalline phases and microstructure of these materials. Results indicate that β -NaYF₄ nanocrystals with the average size of 63±1 nm were homogeneously precipitated in an aluminosilicate glass matrix. Upconversion luminescence spectra with 980 nm excitation were studied in glass ceramics with various Er³⁺ concentration. The intensity of upconversion luminescence of glass ceramics were enhanced by a factor of ~200 compared to glasses, indicating the incorporation of erbium ions in a low phonon environment – β -NaYF₄ nanocrystals. The mechanism of upconversion in glass ceramics were discussed. The concentration of Er³⁺ ions in nanocrystals was determined by comparing the upconversion spectra with polycrystalline β -NaYF₄ samples synthesized under hydrothermal conditions.

ANAEROBO PĀRSTRĀDES PROCESU IZPĒTE

Madara Liepiņa, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte, 4. studiju gads
Zinātniskā vadītāja: Dr. sc. ing. Kristīne Ruģele, pētniece

Ievads. Mūsdienās pieaug pieprasījums pēc atjaunojamās enerģijas resursiem, kā arī nepieciešamība pārstrādāt pārtikas rūpniecības atkritumus. Tādēļ iespējams efektīvi pielietot anaerobās pārstrādes procesu, kura laikā noārdās biomasa un veidojās biogāze. 2010. gadā Latvijā no 458 368 tonnām piena saražoja 90 000 tonnas skābo piena sūkalu. Neskatoties uz atkritumu pārstrādes un enerģijas ieguves potenciālu, anaerobās pārstrādes process netiek plaši pielietots piena pārstrādes rūpniecībā. Galvenās grūtības sagādā procesa vājā stabilitāte. To iespējams uzlabot, izmantojot sārmaini aktivēto materiālu (AAM – alkali-activated material), ar kura palīdzību var radīt alternatīvu pH regulācijas metodi. Anaerobi pārstrādājot skābās siera sūkalas varētu samazināt vides piesārņojumu un iegūto enerģiju izmantot rūpnīcas darbības optimizācijai.

Mērķis un uzdevumi. Darba mērķis ir pētītkābo siera sūkalu anaerobās pārstrādes procesu un izveidot alternatīvu pH regulēšanas sistēmu, izmantojot AAM. Svarīgi ir noteikt, kurš AAM veids vislabāk piemērots pH regulācijai, lai izveidotu nepārtrauktas maisīšanas reaktora (CSTR – continuous stirred-tank reactor) pH regulācijas sistēmu. Nepieciešams analizēt organisko vielu noārdīšanās ātrumu un izdalīto biogāzes daudzumu.

Darba gaita vai metodoloģija. Izmantojot Batch metodi, pētīja divu veidu AAM, kurus pievienoja noteiktas koncentrācijas skābo siera sūkalu šķīdumiem. Fermentācijas procesā izmantoja granulētu anaerobo baktēriju ieraugu, jo tas ir rezistentāks pret vides pH izmaiņām, un kultivēja 37°C temperatūrā anaerobos apstākļos. Substrāta noārdīšanās ātrumu pētīja, izmantojot gravimetrisko sausnes noteikšanas metodi un FOS/TAC analīzi. Biogāzes sastāvu noteica, izmantojot infrasarkanu „BlueSense” gāzu analizatoru. AAM un granulēto ieraugu morfoloģiju pētīja, izmantot SEM analīzi.

Rezultāti. Izmantojot AAM, var izveidot efektīvu pH regulācijas sistēmu anaerobo pārstrādes procesu kontrolei, kas uzlabo procesa stabilitāti.

Literatūra

1. Rugele, K., Bumanis, G., Bajare, D., Mezule, L., Pitk, P. Effect of glass additive in alkaline granules in anaerobic treatment of whey. Proceedings: 5th International Symposium on Energy from Biomass and Waste. 2014, 1-9.
2. S. Asplund. The Biogas Production Plant at Umeå Dairy Evaluation of Design and Start-up, Linköpings universitet. Inst. för Tema, 2005, 13–42.
3. J. Wu, J. Zhang, S. Poncin, H.Z. Li, J. Jiang, Z.U. Rehman. Effects of rising biogas bubbles on the hydrodynamic shear conditions around anaerobic granule. Chem. Eng. Soc., J. 2015, 273, 111-119.
4. J. Gelegenis, D. Georgakakis, I. Angelidaki, V. Mavris. Optimization of biogas production by co-digesting whey with diluted poultry manure. J. Renewable Energy, 2007, 32, 2147–2160.

Summary. Research of anaerobic treatment processes. Nowadays an increasing demand for renewable energy resources and the need for degradation of food waste, constitute necessary for new anaerobic treatment process technology. Research of anaerobic degradation technology was developed for whey degradation using alkali-activate material (AAM) to establish an alternative pH controlling system, which could influence biogas production yield. Investigation of substrate organic degradation rate was performed with gravimetric method and FOS/TAC analysis. Biogas composition was determined by using an infrared "BlueSense" gas chromatograph. Investigation of AAM and anaerobic granule morphology was managed by SEM analysis. It's possible to improve pH control of anaerobic digestion process which results of increase of biogas production stability.

LATVIJAS MĀLU DOBU SFĒRU VEIDOŠANA UN TO ĪPAŠĪBAS

Austris Ļaksa, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 4. studiju gada bakalaurants
Zinātniskie vadītāji: Dr. sc. ing. Jurijs Ozoliņš, profesors; Mg. sc. ing. Andrejs Šiškins, pētnieks

Keramiskiem materiāliem piemīt izcila ķīmiskā, termiskā un mehāniskā stabilitāte, augsta selektivitāte. Tuvākajā nākotnē jauna tipa keramikas materiālu izgatavošanai būs liela nozīme, pieaugot prasībām pret dzeramā ūdens kvalitāti, videi draudzīgiem materiāliem, pieaugot zaļās enerģijas nozīmei. Latvijas daba ir bagāta ar mālu atradnēm, kas savas labās īpašības jau ir pierādījušas dažādās nozarēs, piemēram, dažādu būvmateriālu ražošanā. Šobrīd ir aktuāls jautājums par jaunu Latvijā atrodamo mālu pielietojumu meklēšanu. Latvijas mālu izmantošana dobo keramisko granulu izgatavošanai pavērtu iespējas dažādu multifunkcionālu sorbentu, ūdens uzturēšanas aģentu, vieglo būvmateriālu, šūnainas keramikas ražošanai. Tas dotu jūtamu ieguldījumu Latvijas ekonomikas attīstībā, jo pašreiz dažādus keramiskos sorbentus, tai skaitā, ūdens uzturēšanas aģentus Latvijā importē galvenokārt no Skandināvijas valstīm un Krievijas.

Darba mērķis bija izstrādāt tehnoloģiju un izgatavot keramiskas dobas sfēras, izmantojot Latvijas mālus un izpētīt to īpašības. Pamatojoties uz literatūras datu analīzi tika izstrādāta tehnoloģija un izveidota eksperimentālā iekārta dobo keramisko granulu iegūšanai. Iegūtajām granulām noteica mehāniskās, ūdens uzturēšanas īpašības, pētīta to struktūra, porainība un virsmas morfoloģija.

Darbā rotācijas tipa eksperimentālā granulātorā, izmantojot putu polistirola (PPS) lodītes, iepriekš izžāvētu un samaltu Liepas atradnes mālu pulveri, par saistvielu izmantojot noteiktas koncentrācijas polivinilacetāta ūdens šķīdumu, ieguva granulas, kuras pēc žāvēšanas apdedzināja pie piecām dažādām temperatūrām, iegūstot keramiskas dobas sfēras ar vidējiem izmēriem no 5 līdz 7 mm.

Pirms granulu apdedzināšanas noteica optimālos paraugu žāvēšanas parametrus, uzņemot to žūšanas kinētiskās sakarības pie trīs dažādām temperatūrām. Pieaugot žāvēšanas temperatūrai, pieaug materiālu žūšanas ātrums un samazinās žāvēšanai nepieciešamais laiks. Paraugu apdedzināšanas temperatūra pietiekami būtiski ietekmē iegūto dobo keramisko granulu īpašības. Veicot granulu mehāniskās stiprības testu noteikts, ka pieaugot apdedzināšanas temperatūrai, granulu mehāniskā stiprība pieaug, kas ir skaidrojams ar keramiskās masas intensīvāku saķepšanu. Vienlaicīgi ar mehānisko īpašību uzlabošanos, iegūto dobo granulu īpatnējais virsmas laukums pieaug, bet porainība samazinās, tas, savukārt, izsauc arī ūdens uzturēšanas spējas samazināšanos. Paraugiem, kas ir apdedzināti pie 1000 un 1050 °C ūdens uzturēšanas spēja nerasniedz līdzīgas nozīmes produktu, piemēram, perlīta ūdens uzturēšanas spēju. Pētot keramisko dobo granulu struktūru un virsmas morfoloģiju konstatēts, ka neatkarīgi no apdedzināšanas temperatūras, visiem paraugiem ir sfēriska forma, uz kuras virsmas ar pietiekami izteikti izvirzījumi, kas radušies granulēšanas procesā, uz virsmas nevienmērīgi nogulsņējoties māla pulverim. Granulas dobumam praktiski ir regulāras lodes forma, vidējais sienas biezums atrodas robežās no 0,7 līdz 1,5 mm.

Literatūra

1. R. Švinka and V. Švinka, *Silikātu materiālu ķīmija un tehnoloģija*. Rīga: Saknes SIA, 1997, p. 192.
2. I. Thijs, J. Luyten, and S. Mullens. Producing Ceramic Foams with Hollow Spheres. *Ceram. Int.*, 2003, 72, 2002–2004.
3. J. K. Cochran. Ceramic hollow spheres and their applications. *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.*, 1998, 3, 474–479.

Summary. Fabrication and properties of ceramic hollow spheres from Latvian clays. Ceramic hollow spheres from Liepas clays at five different temperatures were obtained by using sacrificial template method where expanded polystyrene (EPS) was used as template. The prepared spheres had a maximum external diameter of about 7 mm and average wall thickness of about 1,1 mm. Spheres which were obtained at higher temperatures showed better mechanical strenght properties, larger specific surface area, but lower porosity.

HIDROKSILAPATĪTA BIOKERAMIKAS IEGŪŠANA NO BIOGĒNA KALCIJA KARBONĀTA HIDROTERMISKOS APSTĀKĻOS

*Aleksejs Ļovins, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 4.studiju gada bakalaurants
Zinātniskās vadītājas: Dr. sc. ing. Kristīne Šalma-Ancāne, vadošā pētniece;
Mg. sc. ing. Līga Stīpniece, pētniece*

Hidroksilapatīts ir galvenā cilvēku un dzīvnieku kaulu minerālā sastāvdaļa, tāpēc, kad runa ir par kaulu un zobu defektu ārstēšanu, hidroksiapatītam ir priekšrocības salīdzinājumā ar citiem materiāliem. Tomēr tīra, augstas kvalitātes hidroksilapatīta ražošana ir saistīta gan ar finanšu resursu, gan laika resursu patēriņu. Šī darba mērķis ir iegūt hidroksilapatītu no biogēna kalcija karbonāta avota, izmantojot hidrotermiskos apstākļus, tādējādi samazinot sintēzi izmaksas. Par biogēno izejvielu izvēlētas olu čaumalas.

Hidroksilapatīts tiek sintezēts, izmantojot trīs metodes:

Olu čaumalas tiek sasmalcinātas un attīrītas no organiskās fāzes, izmantojot ķīmisku apstrādi ar 10M, 6M un 2M NaOH ūdens šķīdumu. Iegūtās sintēzes suspensijas tiek mazgātas, lai atdalītu neorganisko daļu no izreaģējušās organiskās daļas. Iegūtie sintēzes maisījumi, kuriem pievienota 2M H₃PO₄ līdz stehiometriskam Ca un P saturošo reaģentu Ca/P molārajam daudzumam 1.67. Sintēzes maisījums tiek ievietots autoklāvā 134 oC, 2.1 bar, 90, 180 vai 270 minūtes.

Olu čaumalas tiek sasmalcinātas, neorganiskā fāze tiek izšķīdināta, izmantojot ķīmisko reakciju ar 9% CH₃COOH. Iegūtās sintēzes suspensijas tiek filtrētas, lai atbrīvotos no nevēlamās organiskās fāzes. Pēc filtrēšanas no neizreaģējušām izejvielām ar NaOH šķīdumu nogulsnē Ca(OH)₂. Pie Ca(OH)₂ pievieno 2M H₃PO₄ līdz stehiometriskam Ca un P saturošo reaģentu Ca/P molārajam daudzumam 1.67. Sintēzes maisījums tiek ievietots autoklāvā 134 °C, 2.1 bar, 90, 180 vai 270 minūtes.

Olu čaumalas tiek sasmalcinātas, neorganiskā fāze tiek izšķīdināta, izmantojot ķīmisko reakciju ar 1M H₃PO₄ līdz stehiometriskam Ca un P saturošo reaģentu Ca/P molārajam daudzumam 1.67, lai atbrīvotos no nevēlamās organiskās fāzes. Pēc filtrēšanas no neizreaģējušām izejvielām ar NaOH šķīdumu nogulsnē Ca(OH)₂. Sintēzes maisījums tiek ievietots autoklāvā 134 °C, 2.1 bar, 90, 180 vai 270 minūtes.

Pēc hidrotermiskās apstrādes iegūtās nogulsnes tika mazgātas, filtrētas, žāvētas (105 °C) un sasmalcinātas pulverī. Sintēžu produkti pirms un pēc termiskās apstrādes 1100 °C tika analizēti, pielietojot Furjē transformācijas infrasarkanā spektroskopiju, rentgenstaru difraktometriju, Brunauera - Emeta-Tellera metodi un skenējošo elektronu mikroskopiju.

Rezultāti parādīja, ka 1.metodei ir potenciāls ne tikai hidroksilapatīta, bet arī citu kalcija fosfātu fāžu iegūšanai, izmantojot speciālu iekārtu. 2., 3.metodi var izmanto, lai iegūtu ne tikai hidroksilapatītu, bet arī citas kalcija fosfātu fāzes, tomēr, iegūtais produkts ir ļoti jutīgs pret sintēzes apstākļiem – sintēzes vides pH.

Summary. Hydrothermal conversion of biogenic calcium carbonate to produce hydroxyapatite bioceramics. The results showed that the first path via hydrothermal synthesis has a great potential for the production not only of hydroxyapatite but also other calcium phosphates using specialized hardware, however, the usage of this method in the laboratory is not effective. The second synthetic route can be used in laboratories to produce not only the hydroxyapatite but also other calcium phosphates; however, the resulting product is very sensitive to the conditions of synthesis: even a small deviation can activate the formation of other calcium phosphate. The third synthesis route is the fastest and most profitable of all used.

FĀŽU ATDALĪŠANĀS IETEKME UZ $Ti_{1-x}Sn_xO_2$ KERAMIKAS ĪPAŠĪBĀM

*Jeļena Mironova, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 2.studiju gada maģistrante
Zinātniskais vadītājs: Dr. sc. ing. Jānis Ločs, asoc. profesors*

Titāna dioksīds (TiO_2) un alvas dioksīds (SnO_2) ir plaši pētīti pārejas metālu oksīdi. Tos pielieto gāzes sensoros, elektro-optiskajās ierīcēs, fotokatalīzes šūnās, elektronikā u.c. Pateicoties Sn^{4+} un Ti^{4+} jonu rādus nelielai starpībai (attiecīgi 0,071 un 0,068 nm), Sn^{4+} var viegli aizvietot Ti^{4+} TiO_2 kristālrežģī un otrādi (Ti^{4+} aizvietošana ar Sn^{4+} TiO_2 kristālrežģī), augstās temperatūrās veidojot cieto šķīdumu ($T > 1430$ °C). Atkarībā no dzēsēšanas ātruma un Ti:Sn attiecības kompozītā, sistēmā iespējams inducēt TiO_2 un SnO_2 fāžu atdalīšanos, kas var ietekmēt dažādas materiāla īpašības.

Darba mērķis: noskaidrot, kā fāžu atdalīšanās ietekmē $Ti_{1-x}Sn_xO_2$ siltuma vadītspēju un dielektriskās īpašības atkarībā no Ti un Sn attiecības kompozītā.

Ar sola-gēla metodi iegūtas dažāda sastāva $Ti_{1-x}Sn_xO_2$ kompozīcijas ($x = 0,2; 0,4; 0,6; 0,8$). No sintezētajiem $Ti_{1-x}Sn_xO_2$ pulverveida materiāliem izgatavoti tablešu formas paraugi, kuri saķepināti 1550 °C temperatūrā un pēc tam 48 h atkvēlināti 1100 °C temperatūrā ar mērķi inducēt TiO_2 un SnO_2 fāžu atdalīšanos. Iegūto paraugu morfoloģija pētīta ar skenējošo elektronu mikroskopu, paraugu kristāliskās struktūras raksturošanai izmantota rentganstaru difrakcijas metode. Termiski apstrādātajiem tablešu formas paraugiem noteikta siltuma vadītspēja istabas temperatūrā, kā arī pētītas dielektriskās īpašības (dielektriskā konstante ϵ un dielektrisko zudumu leņķa tangenss $\tan \delta$).

Atšķirībā no saķepinātajiem paraugiem, atkvēlināto $Ti_{1-x}Sn_xO_2$ paraugu rentgendifraktogrammās novērojami izteikti TiO_2 un SnO_2 rutila fāzēm raksturīgie maksimumi, kas liecina par fāžu atdalīšanos paraugu atkvēlināšanas laikā. Sn^{4+} aizvietošana ar Ti^{4+} SnO_2 kristālrežģī un otrādi būtiski samazina pamata fāžu (TiO_2 un SnO_2) siltuma vadītspēju. Fāžu atdalīšanās ietekme uz $Ti_{1-x}Sn_xO_2$ siltuma vadītspēju ir atkarīga no Ti un Sn attiecības kompozītā. $Ti_{0,8}Sn_{0,2}O_2$ un $Ti_{0,2}Sn_{0,8}O_2$ gadījumā būtiskas izmaiņas pēc paraugu atkvēlināšanas nav novērojamas, savukārt $Ti_{0,6}Sn_{0,4}O_2$ un $Ti_{0,4}Sn_{0,6}O_2$ kompozīciju gadījumā atkvēlināto paraugu siltuma vadītspēja palielinās. Neliela fāžu šķelšanās ietekme novērojama arī $Ti_{1-x}Sn_xO_2$ kompozīta dielektrisko īpašību gadījumā.

Literatūra

1. J.Takahashi, M.Kuwayama, H.Kamiya, M.Takatsu, T.Oota, I.Yamai. Decomposition behaviours of dopant-free and doped solid solutions in the TiO_2 - SnO_2 system. *J. Mater. Sci.*, **1988**, 23(1), 337-342.
2. W.Chaisan, R.Yimnirun, S.Ananta, D.P.Cann. The effects of the spinodal microstructure on the electrical properties of TiO_2 - SnO_2 ceramics. *J. Solid State Chem.*, **2005**, 178(3), 613-620.
3. P.R.Bueno, J.A.Varela. Electronic ceramics based on polycrystalline SnO_2 , TiO_2 and $(Sn_xTi_{1-x})O_2$ solid solution. *Materials Research*, **2006**, 9(3), 293-300.
4. W.Zeng, B.Miao, Z.Gou, L.Lin. Effect of Ti on the gas sensing characteristics of $(Ti_{0,5}Sn_{0,5})O_2$ solid solutions. *Physica E*, **2012**, 44, 2143-2151.

Summary. Influence of phase separation on the properties of $ti_{1-x}sn_xo_2$ ceramic. In the current study we investigated the effect of phase separation on thermal conductivity and dielectric properties of $Ti_{1-x}Sn_xO_2$ ceramic with different Ti/Sn ratios. $Ti_{1-x}Sn_xO_2$ compositions ($x=0; 0,2; 0,4; 0,6; 0,8$) were obtained by sol-gel method. The obtained materials were pressed into pellets, sintered at 1550 °C and afterwards annealed at 1100 °C for 48 h. It was observed that annealing enhances TiO_2 and SnO_2 phase separation in $Ti_{1-x}Sn_xO_2$ composite. Phase separation and Ti/Sn ratio in the samples affect their thermal conductivity and dielectric properties.

AR STRONCIJU AIZVIETOTA HIDROKSILAPATĪTA IEGŪŠANA, IZMANTOJOT ĶĪMISKĀS NOGULSNĒŠANAS METODES

*Sintija Pastare, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 4.studiju gada bakalaurante
Zinātniskās vadītājas: Mg. sc. ing. Līga Stīpniece, pētniece;
Dr.sc.ing. Kristīne Šalma-Ancāne, vadošā pētniece*

Sintētiskā hidroksilapatīta (HAp), kas ir perspektīvs implantmateriāls, struktūru veido (Ca^{2+}), (PO_4^{3-}) un (OH^-) pamatjoni [1 - 3]. Viena no sintētiskā HAp galvenajām īpašībām ir spēja iekļaut pamatjonu vietās dažādus izomorfus aizvietotājus, saglabājot savu heksagonālo struktūru [1]. Ir eksperimentāli pierādīts, ka stroncijam ir farmakoloģiska ietekme uz kaulu metabolismu un (Sr^{2+}) joniem ir liela nozīme osteoporozes, kam raksturīga samazināta kaulu masa un kaulu trauslums, ārstēšanā un kaulu mineralizācijas uzlabošanā [2]. Šī darba mērķis ir izpētīt ķīmiskās nogulsnešanas metodē izmantoto izejvielu ietekmi uz ar/bez Sr aizvietota HAp produktu īpašībām.

Ar/bez Sr aizvietots HAp tika sintezēts, izmantojot trīs dažādas ķīmiskās nogulsnešanas metodes, kas, galvenokārt, atšķiras ar izmantotajiem reaģentiem, t.i., „Sr”, „Ca” un „P” prekursoriem:

1. metode - $\text{Sr}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ un $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$;
2. metode - SrCl_2 , $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ un $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$
3. metode - $\text{Sr}(\text{OH})_2$, $\text{Ca}(\text{OH})_2$, H_3PO_4).

(Ca+Sr)/P molārā attiecība izejas suspensijā saglabāta nemainīga visās sintēžu sērijās. Iegūtās nogulsnes tika stabilizētas (~1 h), mazgātas, filtrētas, žāvētas (105 °C, ~24 h) un sasmalcināta pulverī. Sintēžu produkti pirms un pēc termiskās apstrādes 1100 °C tika analizēti, pielietojot Brunauera - Emeta-Tellera metodi, Furjē transformācijas infrasarkanā spektroskopiju, rentgenstaru difraktometriju un skenējošo elektronu mikroskopiju.

Rezultāti liecina, ka nogulsnešanas metodē lietotie reaģenti, kā arī sintēzes vidē pievienotā “Sr” prekursora daudzums ar/bez Sr aizvietota HAp iegūšanai, būtiski ietekmē sintēžu produktu stehiometriju, kristāliskumu un morfoloģiju.

Literatūra

1. J. Terra, E. R. Dourado, J. G. Eon, D. E. Ellis, G. Gonzalez, and A. M. Rossi, “The structure of strontium - doped hydroxyapatite: an experimental and theoretical study”, Phys. Chem. Chem. Phys., vol. 11, no. 3, pp. 568–77, Jan. 2009.
2. D. Gopi, S. Nithiya, L. Kavitha, and J. M. F. Ferreira, “Amino acid - assisted synthesis of strontium hydroxyapatite bone cement”, Bull. Mater. Sci., vol. 35, no. 7, pp. 1195–1199, 2012.
3. B. H. Matthew, D. C. Theodore, J. M. Justin, and M. D. Marissa, “Stontium - doped calcium phosphate bone graft materials”, 2011.

Summary. Synthesis of strontium substituted hydroxyapatite through different chemical precipitation routes. Experimental results confirmed that the reagents used in the precipitation method and the amount of added Sr precursor into the synthesis media of pure and Sr substituted HAp significantly affect stoichiometry, crystallinity and morphology of the synthesis products.

NIĶEĻA–SILĪCIJA KARBĪDA KOMPOZĪTPĀRKLĀJUMI UZ METĀLU VIRSMĀM

*Arvis Pastars, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 4.studiju gada bakalaurants
Zinātniskais vadītājs: Dr. sc. ing. Jānis Ločs, asoc. profesors*

Aizvien vairāk modernās tehnoloģijās ir vajadzīgi inovatīvi materiālu pārklājumi ar konkrētām īpašībām. Salīdzinoši populārs pārklājums ir niķelis, kas tiek izmantots ne tikai dekoratīvos virsmu pārklājumos, bet arī kā antikorozijas un pretnodiluma materiāls. Atsevišķos gadījumos tīra niķeļa pārklājumi neuzrāda pietiekami labas īpašības, līdz ar to rodas nepieciešamība tos pilnveidot. Pēdējos gados izteikta ir niķeļa kompozītu izstrāde un izpēte, jo tos plaši izmanto elektrotehnikā, iekšdedzes dzinējos, un metalurģijā.

Darba mērķis ir izpētīt kā mainās niķeļa – silīcija karbīda kompozīta īpašības atkarībā no cietās fāzes koncentrācijas elektrolītā, un kā elektrolīzes laikā pielietotā ultraskaņa ietekmē pārklājuma triboloģiskās īpašības.

Darbā tika praktiski noskaidroti optimālie apstākļi elektrolīzes procesa nodrošināšanai un izveidoti vairāki pārklājumi uz tērauda un vara substrātiem. Cietās silīcija karbīda daļiņas pievieno elektrolītam dažādās koncentrācijās gan paraugiem, kuri sagatavoti procesā pielietojot ultraskaņu, gan tiem, kuri sagatavoti bez ultraskaņas izmantošanas.

Iegūto pārklājumu virsmas 2D raupjuma pētījumi veic ar Taylor Hobson Surtronic 25 pirms un pēc apstrādes tādejādi iegūstot informāciju par pētāmās virsmas izvēlētā šķēluma faktisko negludumu raksturu, kurš sevī iekļauj tādas komponentes kā formas novirzi, viļņainību un raupjumu. Ar CSM Instruments tribometru veic slīdes berzes eksperimentus nosakot, berzes koeficientu pēc shēmas lode pret plakni (ball-on-disc), kur plakni pārstāv pētāmais paraugs, kurš atrodas rotācijas kustībā, bet lode ir nekustīgs tribometra elements.

Literatūra

1. M.Lekka, A.Lanzutti, A.Casagrande, C.de Leitenburg, P.L.Bonora, L.Fedrizzzi. Room and high temperature wear behaviour of Ni matrix micro- and nano-SiC composite electrodeposits. Surf. Coatings Technol., 2012, 206(17), 3658–3665.
2. P.Wang, Y.Cheng, Z.Zhang. A study on the electrocodeposition processes and properties of Ni–SiC nanocomposite coatings. J. Coatings Technol. Res., 2010, 8(3), 409–417.
3. L.Burzyńska, E.Rudnik, J.Koza, L.Błaz. Electrodeposition and heat treatment of nickel/silicon carbide composites. Surf. Coatings Technol., 2008, 202(12), 2545–2556.
4. G.Heidari, H.Tavakoli, S.M.Mousavi Khoie. Nano SiC-nickel composite coatings from a sulfamat bath using direct current and pulsed direct current. J. Mater. Eng. Perform., 2010, 19(8), 1183–1188.

Summary. Pure and composite nickel deposits have been produced from additive free Watts type plating bath containing micro-sized silicon carbide particles. The composite coatings were tested and compared to pure nickel deposits. The effects of the ultrasound treatment on both pure Ni and Ni/SiC composite codeposition was investigated by means of coatings roughness and tribological study.

RŪGTVIELU (IZO-ALFA SKĀBJU) KONCENTRĀCIJAS DINAMIKA DAŽĀDOS ALUS BRŪVĒŠANAS POSMOS

*Julīte Peculeviča, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 4.studiju gada bakalaurante
Zinātniskais vadītājs: Dr. sc. ing. Jurijs Ozoliņš profesors;
Mg. sc. ing. Ivanda Bībere, kvalitātes un procesu attīstības vadītāja A/S „Aldaris”*

Apiņu īpašības ir saistītas ar to, ka tie ir bagāti ar rūgtvielām, kuras piešķir rūgtumu alum. Apiņi tiek pievienoti misai, kas ir pārcukurota iesala ekstrakta šķīdums. Alfa skābes vārīšanas procesā izomerizējas par izo-alfa skābēm, kas arī nosaka rūgtumu gatavajā produktā. Izomerizēto alfa skābju koncentrāciju ietekmē daudzi faktori.

Šis pētījums tika veikts, lai noskaidrotu rūgtvielu dinamiku un tehnoloģisko procesu ietekmi uz rūgtvielu saturu un produkta kvalitāti dažādos alus darīšanas posmos, jaunajā AS „Aldaris” ražotnē.

Darba mērķis ir noteikt rūgtvielu koncentrācijas dinamiku dažādos alus brūvēšanas posmos, kā arī izvērtēt dažādu parametru ietekmi uz rūgtvielu saturu alū.

Ekspierimentāli tika noteikts, ka alus brūvēšanas procesā rūgtvielu saturs strauji krīt. Šo kritumu ietekmē brūvēšanas procesā pievienotie raugi. Sasniedzot vajadzīgo norūguma pakāpi, alus tiek atdzesēts, nofiltrēts un padots uz pildīšanu. Pildītam filtrētam alum rūgtvielu saturs ir samazinājies, turklāt pildītam nefiltrētam rūgtvielu saturs ir palielinājies.

Rūgšanas procesā pievienotajiem raugiem tika konstatēta raugu ģenerācija. Tas nozīmē, ka raugi ir aktīvi, ka tos var izmantot atkārtoti. Mērot rūgtvielu saturu pie dažādām raugu ģenerācijām (2, 3, 4), rezultāti apliecina, ka izmantojot raugus ar trešo ģenerāciju, izomerizējošo alfa skābju daudzums ir vislielāks.

Ekspierimentāli tika noteikts, ka vārot misu pie temperatūras 80 °C, izomerizējošo alfa skābju daudzums ir mazāks nekā vārot pie 100 °C. Mainot misas vārīšanas laiku 15, 45 un 60 minūtes, tika konstatēts, ka 60 minūtes ir pietiekošs vārīšanas laiks, lai alfa skābes izomerizētos.

Tika secināts, ka alfa skābju izomerizācija palielinās, palielinot misas vārīšanas laiku un misas vārīšanas temperatūru. Ekspierimentālie rezultāti apliecina, ka rūgtvielu utilizācija ir lielāka izmantojot raugus ar trešo ģenerāciju.

Literatūra

1. W.Kunze. Technology Brewing and Malting. VLB Berlin: Germany, 2010.
2. S. Kappler, M. Krahl, C. Geissinger, T. Becker, M. Krottenthaler. Degradation of Iso- α -Acids During Wort Boiling. J. Inst. Brew. , 2010, 116(4), 332–338.

Summary. Concentration dynamics of bitter compounds (iso-alpha acids) in various beer brewing phases. Iso-alpha acids are isomerized form of alpha-acids by the application of heat in wort. Hop utilization is the percentage of alpha acids that is isomerized and remains in the finished beer. Utilization was investigated as a function of time (15, 45 and 60 min), temperature (80 and 100 °C) and generation of yeast (2, 3 and 4).

BIOSORBENTU IZMANTOŠANA AR BIOĢĒNIEM SAVIENOJUMIEM PIESĀRNOTU ŪDEŅU ATTĪRĪŠANAI

Anastasija Smirnova, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 4.studiju gada bakalaurante
Zinātniskais vadītājs: Dr. sc. ing. Daina Kalniņa, asoc. profesore

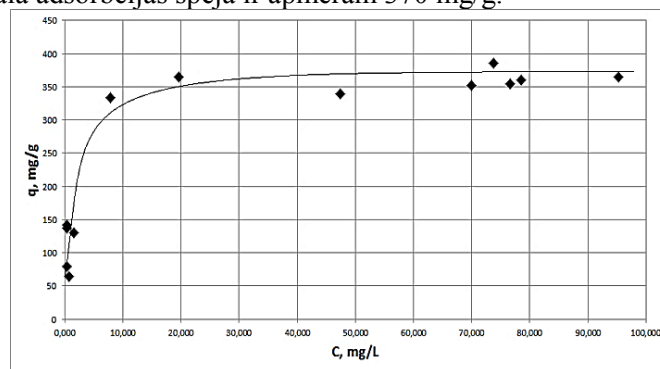
Olu čaumalas ir viens no izplatītākajiem māsasaimniecības blakusproduktiem. Deponējot tās lielos daudzumos, var rasties apdraudējums videi. Izdevumi, kas ir saistīti ar to utilizāciju ir ievērojami. Tas nozīmē, ka produktu ar pievienoto vērtību rādīšana var samazināt utilizācijas problēmas.

Darba mērķis ir izpētīt apstrādātu olu čaumalu izmantošanas iespēju ar fosfātiem piesārņota ūdens attīrīšanai, to izmantojot kā adsorbentu.

Olu čaumalas tika mazgātas, sasmalcinātas, izsijātas, lai iegūtu 0,25 – 0,5 mm frakciju, un tad izkarsētas 4 stundas pie 800°C. Iegūto materiālu izmantoja adsorbcijas eksperimentiem. Kā adsorbātu lietoja zināmas koncentrācijas fosfātjonu šķīdumu ūdenī. Fosfātu koncentrāciju ūdenī noteica spektrofotometriski pēc vanadāta-molibdāta metodes.

Eksperimentos tika pētīta kalcinētu olu čaumalu adsorbcijas spēja. Adsorbcijas vērtība ir atkarīga no fosfātjonu šķīduma sākuma koncentrācijas, kā arī no pievienotā adsorbenta daudzuma. Mainot fosfātu šķīdumu sākuma koncentrācijas un kalcinētu olu čaumalu daudzumu, tika iegūta adsorbcijas izoterma, kas raksturo adsorbcijas līdzsvaru uz adsorbenta virsmas.

Iegūtie rezultāti parāda, ka kalcinētas olu čaumalas uzrāda augstu attīrīšanas pakāpi attiecībā uz fosfātiem. To maksimāla adsorbcijas spēja ir apmēram 370 mg/g.



Adsorbcijas izoterma fosfāta jonu sorbcijai ar izkarsētām olu čaumalām.

Literatūra

1. N.Yeddou Mezener, A. Bensmaili. Kinetics and thermodynamic study of phosphate adsorption on iron hydroxide-eggshell waste. *Chem. Eng. J.*, **2009**, 147(2-3), 87-96.
2. T. Ennil Kose, Betul Kivanc. Adsorption of phosphate from aqueous solutions using calcined waste eggshell. *Chem. Eng. J.*, **2011**, 178, 34-39.
3. Grigori Zelmanov, Raphael Semiat. Phosphate removal from aqueous solution by an adsorption ultrafiltration system. *Sep. Purif. Technol.*, **2014**, 132, 487-495.

Summary. Application of biosorbents for removal of biogenic pollutants from water. Eggshells are one of the most common household waste products. The aim of this work is to investigate the adsorption capacity of calcined eggshells for the removal of phosphates from aqueous solutions. The adsorption isotherm was obtained by varying phosphate initial concentration and the quantity of the adsorbent. The study shows that calcined eggshells are effective for the removal of phosphates from aqueous solutions.

EKSPERIMENTU PLĀNOŠANAS PIELIETOJUMS DAĻIŅU IZMĒRU SADALĪJUMA NOTEIKŠANAS OPTIMIZĀCIJĀ

Anita Trubača, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Vispārīgās ķīmijas tehnoloģijas institūts, 2.studiju gada maģistrante

Zinātniskie vadītāji: Dr. sc. ing. Inga Dušenkova, pētniece;

A/S „Grindeks” KKL vadītājs K. Kuprevičs. Konsultante: Dr.sc.ing. D. Loča

Farmācijā aktīvo farmaceitisko vielu un palīgvielu (piemēram, pildvielu, irdinātāju) daļiņu izmēru sadalījums ietekmē ne tikai vairākus zāļu ražošanas posmus, piemēram, izejvielu sajaukšanu, maisīšanu, granulēšanu, filtrēšanu, žāvēšanu, iekapsulēšanu, tablešu saspiešanu, pārklāšanu, bet arī galaprodukta vizuālo izskatu, biosaderību, sairšanu, šķīšanu, dozēšanas viendabīgumu, kvantitatīvo saturu un stabilitāti. Viena no klasiskajām farmaceitisko substanču granulometriskā sastāva noteikšanas metodēm ir lāzerdifrakcija. Daļiņu izmēru noteikšanai ar lāzerdifraktometru nepieciešama efektīva analīzes metodes parametru (parauga padeves ātruma jeb vibrāciju (v), spiediena (p), mērījuma laika (t), parauga padeves paplātes atveres platuma (L) un refrakcijas indeksa (RI)) optimizācija.

Darba mērķis ir optimizēt Ursodeoksiholskābes (UDCA), Pimobendāna un Mildronāta daļiņu izmēru sadalījuma analīzes parametrus, izmantojot eksperimentu plānošanas metodi DOE, kur par optimizējošo kritēriju izraudzīts daļiņu izmēru sadalījums pie 10 %, 50 % un 90 %.

Darbā noteikti refrakcijas indeksi pulverveida substancēm: UDCA – 1,52 (*lit. 1,54*), Pimobendānam – 1,69 (*lit. 1,69*), Mildronātam – 1,47 (*lit. 1,49*). Pirms eksperimentu plānošanas „sistēmas iepazīšanas” eksperimentos konstatēta minimāla mērījumu izkliede, variējot ar parauga padeves paplātes atveres platumu, un vismazākā RSD vērtība starp paralēliem mērījumiem konstatēta UDCA – 9 mm, Pimobendānam – 7 mm, Mildronātam – 5 mm. Izvēlēto būtiskāko faktoru vērtību diapazonos ($v = 30 - 60\%$, $p = 1 - 3$ bar, $t = 2 - 6$ s) pēc trīs līmeņu PFE (pilnā faktoru eksperimenta) plāna 3 faktoriem gradienta virziens nosaka, ka pie augstākām spiediena skaitliskām vērtībām daļiņu izmēri samazinās, bet vibrāciju intensitātei un mērījumu laikam ir minimāla ietekme uz daļiņu izmēru sadalījumu. Optimālā apgabala gradienta virzienā faktoru vērtību diapazonā iegūti analīžu metodes optimālie punkti: UDCA pie $v = 45\%$, $p = 2,0$ bar, $t = 6$ s, $L = 9$ mm, Pimobendānam pie $v = 45\%$, $p = 2,1$ bar, $t = 2$ s, $L = 7$ mm, Mildronātam pie $v = 45\%$, $p = 2,2$ bar, $t = 3$ s, $L = 5$ mm. Darba gaitā aprēķinātie regresijas vienādojumi ļauj prognozēt UDCA, Pimobendāna un Mildronāta daļiņu izmēru sadalījumu pie noteiktām v , p un t vērtībām. Starp teorētiski prognozētām un eksperimentāli iegūtām daļiņu izmēru vērtībām RSD vērtības nepārsniedz UDCA 3 %, Pimobendānam 10 % un Mildronātam 5 %. Pēc optimizācijas sekoja izstrādātās un optimizētās daļiņu izmēru sadalījuma analīzes metodes validācija, kas apliecina, ka metodes ir atkārtojamas, precīzas, pareizas, reproducējamās un robustas: UDCA pie $p = 1,5 - 2,5$ bar, $v = 40 - 65\%$, Pimobendānam pie $p = 1,6 - 2,3$ bar, $v = 35 - 55\%$ un Mildronātam pie $p = 1,7 - 2,2$ bar, $v = 35 - 55\%$.

Literatūra

1. B.Y. Shekunov, P. Chattopadhyay and H.H.Y. Tong. Particle Size analysis in Pharmaceutics: Principles, Methods and Applications. Pharmaceutical Research, 2006, 24(2), 203-227.
2. L.Eriksson, E.Johansson, N.Kettaneh-Wold, C.Wirkstrom, S.Wold. Design of Experiments. Principles and Applications; Umetrics: Sweden, 2008, 459 pp.

Summary. Application of experimental design in the optimization of particle size distribution analysis. The obtained optimum conditions for the particle size distribution analysis method are as follows: for Ursodeoxycholic acid - vibration 45 %, pressure 2,0 bar, measurement time 6 s and sample input tray hole width 9 mm; for Pimobendan - vibration 45 %, pressure 2,1 bar, measurement time 2 s and sample input tray hole width 7 mm; for Mildronate vibration 45 %, pressure 2,2 bar, measurement time 3 s and sample input tray hole width 5 mm. All methods are repeatable, precise, accurate, reproducible, and robust for UDCA after changing vibration from 40 per cent to 65 per cent and decreasing pressure from 2,5 bar to 1,5 bar, for Pimobendan after changing pressure from 1,6 to 2,3 bar and vibration from 35 to 55 %, for Mildronate after decreasing pressure from 2,2 to 1,7 bar and changing vibration from 35 to 55 %.

BIOMIMĒTISKĀ HIDROKSILAPATĪTA SINTĒZE POLIMĒRA VIDĒ

Anna Vojevodova, RTU Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte, 4. studiju gads
Zinātniskā vadītāja: Dr. sc. ing. Kristīne Šalma-Ancāne, vadošā pētniece

Mūsdienās joprojām nav radīts biomateriāls, kas pilnībā atbilstu visām kaulaudu inženierijas prasībām. Apvienojot hidroksilapatīta (HAp) bioaktivitāti ar polimēra plastiskumu un Sr spēju nomākt patoloģisku osteoklastu aktivitāti un veicināt kaulaudu veidošanos, ir iespējams iegūt materiālu ar atbilstošām ķīmiskām un mehāniskām īpašībām kaulaudu aizvietošanai.

Darba mērķis ir izstrādāt nanostrukturētus kompozītmateriālus uz hidroksilapatīta (HAp) un polivinilspirta (PVS) bāzes, kas pēc ķīmiskā sastāva un struktūras līdzinātos dabīgajam kaulu kompozītmateriālam un veicinātu tā reģenerācijas procesus.

HAp un Sr aizvietots HAp ir iegūts ar šķīduma ķīmiskās nogulsnešanas metodi. Lai atdarinātu bioloģiskās mineralizācijas procesu, HAp kristalīti tiek sintezēti PVS ūdens šķīdumā. Līdzīgi kā tas notiek bioloģiskajās sistēmās, polimēra matrica kalpo kā pamatne neorganisko kristalītu nukleācijai un augšanai c-ass virzienā. PVS hidroksilgrupu jonizācijas rezultātā veidojas negatīvi lādēta virsma, kas mijiedarbojas ar ūdenī esošiem Ca^{2+} joniem, bet tālāka pakāpeniska stehiometriskā H_3PO_4 daudzuma pievienošana iniciē HAp veidošanos. Lai iegūtu ar Sr aizvietotu HAp, sintēzes videi tiek pievienots Sr^{2+} jonus saturošs reaģents. Abās sintēzes ir veiktas paaugstinātā temperatūrā (45°C), lai sekmētu HAp kristalītu augšanu. Iegūtās HAp/PVA suspensijas apstrādātas izsmidzināšanas žāvēšanas procesā, tādējādi iegūstot pulverveida kompozītmateriālu ar kontrolētu morfoloģiju. Mainot izmantoto reaģentu daudzumu, ir izstrādāti kompozītmateriāli ar dažādu neorganiskās/organiskās fāzes attiecību: 50/50, 70/30 un 90/10.

Kompozītmateriāla veidošanās un neorganiskās fāzes ķīmiskā tīrība ir konstatēta ar XRD un FTIR analīzēm. Savukārt paraugu morfoloģija ir identificēta ar SEM analīzi.

Pētījumu rezultātā ir noteikts, ka izstrādātie kompozītmateriāli nesatur neizreaģējošas izejvielas, to neorganiskā fāze ir ķīmiski tīra, kā arī ir konstatēta PVS un HAp ķīmiska mijiedarbība molekulārā līmenī. HAp nanodaļiņas ar adatveida morfoloģiju ir vienmērīgi izkliedētas PVS vidē.

Literatūra

1. S. Mollazadeh, J. Javadpour, A. Khavandi, „In situ synthesis and characterization of nano-size hydroxyapatite in poly(vinyl alcohol) matrix”, *Ceramics International*, vol. 33, no. 8, pp. 1579-1583, 2007.
2. A. Boyd, L. Rutledge, L. Randolph, B. Meenan, “Strontium-substituted hydroxyapatite coatings deposited via a co-deposition sputter technique”, *Materials Science and Engineering: C*, vol. 46, pp. 290-300, 2015.
3. A. Sinha, T. Mishra, N. Ravishankar, „Polymer assisted hydroxyapatite microspheres suitable for biomedical application”, *J Mater Sci: Mater Med*, vol. 19, no. 5, pp. 2009-2013, 2007.
4. S. Dorozhkin, „Calcium orthophosphate-based biocomposites and hybrid biomaterials”, *Journal of Materials Science*, vol. 44, no. 9, pp. 2343-2387, 2009.

Summary. Biomimetic synthesis of hydroxyapatite in polymer matrix. In this work nanocrystalline hydroxyapatite (HAp) and Sr-doped HAp were synthesized via wet chemical precipitation method in the presence of polyvinyl alcohol (PVA). A polymer acts as a template for nucleation and growth of HAp crystallites. Sr promotes a bone formation and has the ability to inhibit pathological osteoclast activity *in vivo*. Moreover, biomimetic synthesis was supplemented with spray-drying technique in order to form HAp/PVA composite powders with controlled morphology. Thus, it is considered that obtained composites of HAp/PVA or Sr-HAp/PVA are suitable for tissue engineering due to their advantageous physico-chemical properties. XRD and FTIR results indicated the formation of nanostructured composites with chemically pure HAp phase embedded in polymer matrix. SEM microphotographs were shown that HAp/PVA spherical granules with nanosized needle-shaped HAp crystallites were obtained.