



LIETUVOS MOKSLŲ AKADEMIJA
MATEMATIKOS, FIZIKOS IR CHEMIJOS
MOKSLŲ SKYRIUS
TECHNIKOS MOKSLŲ SKYRIUS

10-oji JAUNŲJŲ MOKSLININKŲ KONFERENCIJA

Fizinių ir technologijos mokslų tarpdalykiniai tyrimai

Pranešimų santraukos*

* Pranešimų santraukų kalba netaisyta

Konferencijos rėmėjai:

UAB *INFOBALT* (prezidentas Giedrius Markevičius),

VšĮ *VISORIŲ INFORMACINIŲ TECHNOLOGIJŲ PARKAS* (direktorius Saulius Arelis),

UAB *VTEX* (prezidentas dr. Rimas Maliukevičius),

UAB *BALTIC AMADEUS* (direktorius Andžej Šuškevič),

UAB *BIOTECHPHARMA* (valdybos pirmininkas Vladas Algirdas Bumelis),

UAB *VILTECHMEDA* (direktorius Mindaugas Liutkauskas),

UAD *BOD GROUP* (vadovas Vidmantas Janulevičius),

UTIB *INVL Technology* (vadovaujantis partneris Kazimieras Tonkūnas),

UAB *THERMO FISHER SCIENTIFIC* (generalinis direktorius Algimantas Markauskas).

KONFERENCIJOS ORGANIZACINIS KOMITETAS

akad. Leonas VALKŪNAS – pirmininkas

akad. Vidmantas GULBINAS

akad. Feliksas IVANAUSKAS

akad. Ričardas MAKUŠKA

akad. Gintautas DZEMYDA

akad. Rimantas KAČIANAUSKAS

akad. Adolfas Laimutis TELKSNYS

akad. Algirdas Vaclovas VALIULIS

akad. Gintautas ŽINTELIS

Leidinį sudarė Silva Aukštinaitytė ir Bronius Jaskelevičius,

apipavidalino Miglė Datkūnaitė

Pratarmė

LMA Matematikos, fizikos ir chemijos mokslų skyrius (MFChMS) kartu su Technikos mokslų skyriumi (TMS) jau dešimtąjį kartą rengia LMA jaunųjų mokslininkų konferenciją FIZINIŲ IR TECHNOLOGIJOS MOKSLŲ TARPDALYKINIAI TYRIMAI (toliau – konferencija).

2011 m. akad. Felikso Ivanausko iniciatyvos dėka atsiradusi konferencijos idėja ir jo pastangomis rasta rėmėjų pagalba, toliaregiškai apmąstyta renginio pobūdis bei planuota dalyvių sudėtis iškart suteikė konferencijai gana aukštą mokslinį lygį. Sumanymą kartu su TMS rengti konferenciją lėmė abiejų skyrių kuruojamos mokslinės tematikos (mokslo sričių) sąsajos.

Konferencijos tikslas – inicijuoti taikomąją mokslinę veiklą, skatinti jaunųjų mokslininkų susidomėjimą ir aktyvumą, stiprinti Lietuvos mokslo, studijų bei verslo bendruomenių bendradarbiavimą, keistis informacija apie vykdomus tyrimus ir jų sklaidą, sekti rinkos poreikius, derinti LMA mokslų skyrių tarpusavio veiklą, siekti spartinti mokslinių rezultatų praktinį naudojimą. Konferencijos rėmėjų tikslas – įtraukti jaunuosius mokslininkus į verslo organizacijų veiklą.

Pranešimų tezės pateiktos pagal konferencijos sekcijas, autorių pavardžių abėcėlės tvarka.

Konferencijos dalyviai – magistrantai, doktorantai ir daktarai – varžysis dėl įsteigtų INFOBALT vardinių stipendijų. Pagal nuostatus kiekviena stipendija turi savo paskirtį: viena skiriama už geriausiai informacinių ir ryšių technologijų (IRT) srities mokslinius tiriamuosius darbus, kita – už geriausiai tarpdalykinius mokslinius tiriamuosius darbus taikant IRT. Rėmėjai, vertindami darbų svarbą Lietuvai, pramonei, verslui, komercializacijos galimybes, naujų informacinių technologijų naudojimą moksliniuose tyrimuose, išrinko geriauosius ir skirs stipendijas.

Nuoširdžiai dėkojame konferencijos rėmėjams, partneriams, dalyviams ir visiems prisidėjusiems prie šios konferencijos organizavimo.



NAUJI SKYLES PERNESANTYS TRIFENILAMINO DARINIAI EFEKTYVIEMS RAUDONĄ ŠVIESĄ SKLEIDŽIANTIEMS ORGANINIAMS ŠVIESTUKAMS

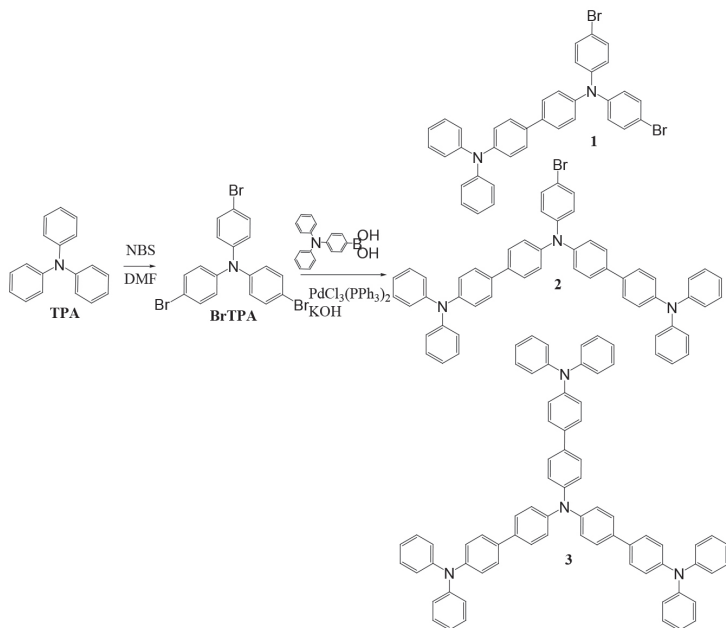
Dovydas Blaževičius¹, Gintarė Kručaitė¹, Daiva Tavgenienė¹,
Saulius Grigalevičius¹, Chun-Han Lin², Chang-Min Shao², Chih-Hao Chang²

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

²Elektros inžinerijos katedra, Yuan Ze universitetas, Chung-Li, Taivanas

e. paštas dovydas.blazevicius@ktu.lt

Fosforescuojantys organiniai šviestukai susilaukė dėmesio dėl jų gebėjimo šviesos emisijai panaudoti tiek singletinius, tiek tripletinius eksitonus. Dėl šios savybės tokiuose šviestukuose įmanoma pasiekti 100 % vidinį kvantinį efektyvumą. Didelis dėmesys turėtų būti skiriamas naujiems efektyviems raudonos šviesos fosforescuojantiems šviestukams, nes dabartinės medžiagos, turinčios mažesnę energetinį skirtumą tarp HOMO ir LUMO lygmenų, paprastai pasižymi nesubalansuota krūvininkų pernaša. Dėl šios priežasties norima sukurti naujas teigiamą krūvį pernešančias medžiagas, gebančias įveikti šiuo metu esančias problemas. Šio darbo metu buvo susintetintas trifenilamino tetrameras ir panašūs junginiai, turintys bromo atomų.



Tikslinės medžiagos išbandytos organinių šviestukų skylių injekcijos ir pernašos sluoksniuose. Trisluoksnė raudoną šviesą sklaidžiančių OLED prietaisų struktūra buvo paruošta naudojant *N*-(1-difenilamino[4,4'-bifenil])-*N,N*-di(4-bromfenil)aminą (**1**) ar *N,N*-bis (1-difenilamino[4,4'-bifenil])-*N*-(4-bromfenil)aminą (**2**) kaip skyles transportuojančias medžiagas ir tri(1-difenilamino[4,4'-bifenil])aminą (**3**) kaip skyles injektuojančią medžiagą, kuri buvo naudojama kartu su junginiais **1** ir **2**, siekiant sukurti pakopinę skylių pernašą šviestuke. Našiausio prietaiso didžiausias išorinis kvantinis, srovės ir energinis efektyvumai atitinkamai siekė 12,5 %, 18,6 cd/A ir 13,1 lm/W. Gautų duomenų analizė patvirtino, kad prietaisuose panaudojus naujas susintetintas medžiagas trifenilamino pagrindu buvo pasiekti labai geri efektyvumai esant aukštam skaičiui. Minėtos naujos skylių pernašos/injekcijos medžiagos turi daug potencialo būti pritaikytos organiniuose šviestukuose.

Padėkos. Darbas parengtas Lietuvos mokslo tarybos finansuojamo projekto metu, granto numeris S-MIP-17-64.

ALAVO SULFIDŲ SLUOKSNIŲ CHARAKTERIZAVIMAS

Asta Bronušienė¹, Anton Popov², Ingrida Ancutienė¹

¹*Kauno technologijos universitetas, fizikinės ir neorganinės chemijos katedra,*

Radvilėnų pl. 19, LT-50254, Kaunas

²*Vilniaus universitetas, nanotechnologijų ir medžiagotyros centras, Naugarduko g. 24, LT-03225, Vilnius*
e. paštas assta09@gmail.com

SnS – p-tipo puslaidininkis, pasižymintis puikiais optinėmis savybėmis ir gali būti naudojamas netoksiškuose, neturinčiuose švino ir jodo fotoelektros prietaisuose. Tam tikslui būtinas kuo grynesnis, neturintis priemaišų, tolygus alavo(II) sulfido sluoksnis. Šio darbo tikslas buvo pagaminti efektyvius, gebančius puikiai absorbuoti saulės šviesą sluoksnius, ištirti juos Rentgeno spindulių difrakcinės analizės ir Ramano spektroskopijos metodais.

Darbe SnS sintetintas SILAR metodu katijoniniu prekursoriumi naudojant 40 °C 0,1 M SnCl₂ tirpalą be ar su trietanolamino priedu, o anijoniniu – 40 °C 0,1 M Na₂S tirpalą, ir atliekant 40 SILAR ciklą. Rentgeno difrakcinės analizės rezultatai parodė, kad alavo sulfidų sluoksnyje, gautame nenaudojant TEA, intensyviausios smailės priskirtinos ortorombinės struktūros SnS persidengia su stiklo paviršiuje esančio SnO₂ smailėmis, o naudojant TEA, intensyviausia SnS smailė visiškai nesutampa su SnO₂ smaile. Šioje difraktogramoje yra daugiau smailių, priskirtinų SnS, kurių nebuvo sluoksnyje, gautame nenaudojant TEA. Abiem atvejais stebima nepageidaujamo n-tipo puslaidininkio Sn₂S₃ smailė, kuri naudojant TEA yra intensyvesnė.

Iš Ramano spektroskopijos rezultatų matyti, kad naudojant TEA alavo sulfidų smailės spektruose yra intensyvesnės, labiau išreikštos struktūros. Smailė ties 308 cm⁻¹ rodo, kad sluoksnis yra nehomogeniškas, turi Sn₂S₃ priemaišų. Pagrindinės smailės, parodančios, jog susidarė ortorombinės struktūros SnS yra ties 84 ir 224 cm⁻¹. Spektuose matyti ir dvi SnO₂, kuris yra stiklo paviršiuje, smailės.

Apibendrinant gautus rezultatus galima teigti, kad pavyko gauti alavo sulfidų sluoksnius nesudėtingomis ir aplinkai draugiškomis sąlygomis. Tačiau sluoksnis nebuvo vienalytis, turėjo n-tipo puslaidininkio Sn₂S₃ priemaišų. Norint sluoksnį pritaikyti saulės celės gamybai, reikėtų jį gauti kuo grynesnį ir neturintį priemaišų. Šiuo atveju gautas p-tipo (SnS) ir n-tipo (Sn₂S₃) puslaidininkių mišinys, tad pasiekti aukštą saulės celės efektyvumą būtų neįmanoma.

NAUJŲ ZONDŲ SINTEZĖ IR JŲ PRITAIKYMAS MERKAPTOAMINORŪGŠČIŲ ATPAŽINIMUI

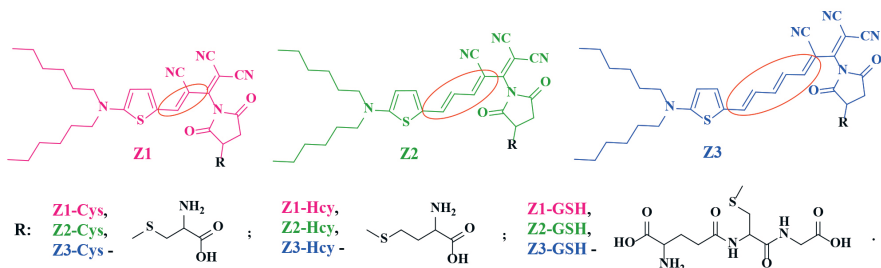
Šarūnė Daškevičiūtė, Vytautas Getautis

Cheminės technologijos fakultetas, Kauno technologijos universitetas

e. paštas sarune.daskeviciute@ktu.lt

Trys panašios struktūros merkaptobiomolekulės – cisteinas, homocisteinas ir glutationas – atlieka esminius vaidmenis palaikant biosistemas. Dažnai daugelis sunkių ligų yra susijusios su biotilių koncentracijų pakitimu laštelėse, todėl selektyvus jų identifikavimas organizme yra labai svarbus. Tam tikslui naudojamas plačiai paplitęs fluorescencinis Michaelio merkaptaminorūgščių nustatymo metodas – maleimido fragmentą naudojant kaip biotilių receptorių [1].

Moksliniame darbe susintetinti nauji maleimido fragmentą turintys cianininiai dažikliai (Z1-Z3) su skirtingu dvigubų jungčių skaičiumi konjuguotoje grandinėje, jungiančioje elektron-donorinę bei elektronakceptorinę dažiklio dalį [2]. Jų pagrindu buvo sukurti fluorescuojantys cisteino (Cys), homocisteino (Hcy) ir glutationo (GSH) zondai (žr. 1 schemą).



1 schema. Fluorescuojantys cisteino, homocisteino ir glutationo zondai

Atlikus fluorescencijos tyrimus iš emisijos maksimumo poslinkių buvo nustatyta, kad mažiausią dvigubų jungčių skaičių turintis zondas **Z1** metanolyje gali selektyviai atskirti visus tris biotilius. Zondai **Z2** ir **Z3** su ilgesnėmis konjuguotomis dvigubų jungčių grandinėmis absorbcijos maksimumą paslinko į pačią patrauklią merkaptaminorūgščių identifikavimui 650–900 nm elektromagnetinės spinduliuotės sritį ir dimetilsulfoksido tirpiklyje gali būti naudojami selektyviam biotilių atskyrimui. Taip pat susidaręs fluorescuojantis zondas su cisteinu **Z3-Cys** parodė geriausias fluorescencijos intensyvumo rezultatus – ji išaugo net 12,5 karto pradinio žymeklio atžvilgiu.

Akivaizdu, jog susintetinti nauji zondai sėkmingai gali būti naudojami merkaptaminorūgščių identifikavimui biologiniuose mėginiuose.

Šio darbo aktualumą ir inovatyvumą patvirtina tarptautinėje ir nacionalinėje konferencijose laimėti laureato apdovanojimai.

Literatūros šaltiniai:

[1] B. H. Northrop, S. H. Frayne, U. Choudhary, Thiol – maleimide „click“ chemistry: evaluating the influence of solvent, initiator, and thiol on the reaction mechanism, kinetics, and selectivity, *Polymer Chemistry* **6**, 3415–3430 (2015).

[2] V. Parthasarathy, R. Pandey, M. Stolte, et al., Combination of cyanine behaviour and giant hyperpolarizability in novel merocyanine dyes: beyond the bond length alternation (BLA) paradigm, *Chemistry a European Journal* **21**, 14211–14217 (2015).

ORGANINIAI AMBIPOLINIAI PUSLAIDININKIAI ORGANINIAMS ŠVIESTUKAMS

Dalius Gudeika^{1,2}

¹Kauno technologijos universitetas, Cheminės technologijos fakultetas,

Polimerų chemijos ir technologijos katedra

²Latvijos universitetas, Kietojo kūno fizikos institutas

e. paštas gudeika.dalius@gmail.com

Pranešime bus pristatomi organiniai bipoliniai puslaidininkiai, susintetinti Kauno technologijos universitete Cheminės technologijos fakultete, Polimerų chemijos ir technologijos katedroje. Junginiai charakterizuoti branduolių magnetinio rezonanso, infraraudonosios spektroskopijos bei masių spektrometrijos metodais. Atlikti junginių teoriniai skaičiavimai naudojant Gaussian programą. Ištirtinėtos susintetintų darinių terminės, optinės bei fotofizinės, elektrocheminės, fotoelektrinės savybės. Kartu su kolegomis atlikti jonizacijos potencialo ir krūvininkų judrio tyrimai. Gauti junginiai pritaikyti fluorescencijos, fosforescencijos organininiuose šviesos dioduose (OLED) bei termiškai aktyvuotąja uždelstą fluorescenciją pagrįstuose (TADF) OLED.

Reikšminiai žodžiai: bipoliniai puslaidininkiai, fluorescencijos, fosforescencijos, TADF organiniai šviesos diodai.

Padėka. Dėkoju **Europos regioninės plėtros fondo projektui** (ERDF, sutarties Nr. 1.1.1.2./VIAA/1/16/177). Taip pat dėkoju prof. habil. dr. J. V. Gražulevičiaus „Organinių puslaidininkių sintezės tyrimo“ mokslo grupei už paramą ir pagalbą tyrimuose.

FLUORENO KLASĖS PUSLAIDININKIAI EFEKTYVIAMS HIBRIDINIAMS SAULĖS ELEMENTAMS

Aistė Ilčiukaitė¹, Marytė Daškevičienė¹, Egidijus Kamaraukas²,

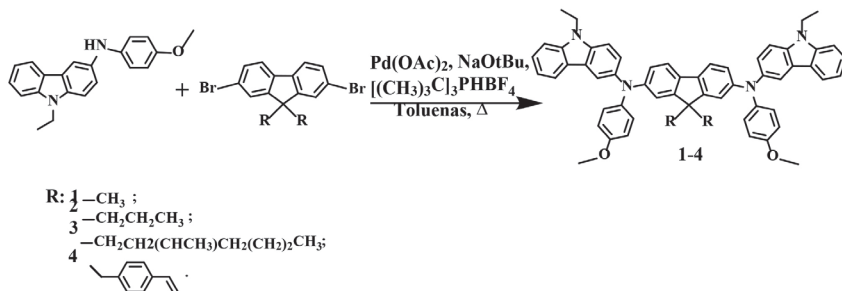
Vyginas Jankauskas², Vytautas Getautis¹

¹Organinės chemijos katedra, Kauno technologijos universitetas, Lietuva

²Cheminės fizikos institutas, Vilniaus universitetas, Lietuva

e. paštas aiste.ilciukaite@ktu.edu

Šiuo metu plačiausiai naudojami neorganinių pagrindu pagaminti Saulės elementai (SE), tačiau jų sudėtyje yra silicio, kurio ištekliai kasmet senka [1]. Vis plačiau yra nagrinėjami hibridiniai Saulės kolektoriai. Viena hibridinių SE rūšių – perovskitiniai. Jų efektyvumas viršija 26 % [2], tačiau vis dar ieškoma būdų kaip juos patobulinti. Vienas iš jų – keisti teigiamus krūvininkus transportuojančių (TKT) junginių savybes. Skyles transportuojančio sluoksnio formavimui dėl gerų terminių bei fotoelektrinių savybių vis plačiau naudojami fluoreno klasės junginiai. Dažniausiai kaip TKT medžiaga yra naudojamas spiro-OMeTAD, kuris labai veiksmingas perovskitiniuose SE. Tačiau šis junginys turi trūkumų: pirma, neoptimalus krūvininkų transportas [3], antra, didelė spiro-OMeTAD kaina [4]. Pigesnė TKT medžiagų alternatyva galėtų būti mažos molekulinės masės fluoreno klasės junginiai, kurie pasižymi tinkamomis elektrinėmis ir terminėmis savybėmis. Šio darbo tikslas yra susintetinti ir ištirti fluoreno klasės darinius ir iš gautų duomenų išsiaiškinti ar šios medžiagos bus tinkamos naudoti SE.



1 pav. Fluoreno klasės junginių sintezė

Darbo metu buvo susintetinti nauji fluoreno dariniai **1–4**. Visos medžiagos yra amorfinės ir pasižymi geru terminiu stabilumu (virš 400 °C). Darbe taip pat stebima alkilinės grandinės ilgio įtaka – ilgėjant alkiliniams pakaitui terminio patvarumo ir stiklėjimo temperatūros žemėja. Jonizacijos potencialo ir dreifinio judrio vertės yra palankios panaudoti medžiagas perovskitiniuose SE.

Literatūros šaltiniai:

1. KUMAR, Ankush. Predicting efficiency of solar cells based on transparent conducting electrodes. Journal of Applied Physics. 2017, 121, 8 p. Prieiga per doi: 10.1063/1.4973117.

2. B. Chen, Z. J. Yu ir kt. Blade-Coated Perovskites on Textured Silicon for 26%-Efficient Monolithic Perovskite/Silicon Tandem Solar Cells. *Joule*. 2020, 4, 1–15 p. Prieiga per doi: 10.1016/j.joule.2020.01.008.
3. GRATIA, P. ir kt. A Methoxydiphenylamine-Substituted Carbazole Twin Derivative: An Efficient Hole-Transporting Material for Perovskite Solar Cells. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2015, 54, 11409–11413 p. Prieiga per doi: 10.1002/anie.201504666.
4. SALIBA, M. ir kt. A molecularly engineered hole-transporting material for efficient perovskite solar cells. *Nature Energy*. 2016, 1, 15017 p. [žiūrėta 2019-08-26]. Prieiga per doi: 10.1038/nenergy.2015.17.

ATŠILDYTO KIAUŠIDĖS AUDINIO KOKYBĖS ĮVERTINIMO METODAI PO KRIOKONSERVAVIMO

Monika Grubliauskaitė^{1,2}, Živilė Gudlevičienė¹, Gabrielis Kundrotas¹

¹*Biobankas, Nacionalinis vėžio institutas*

²*Gyvybės mokslų centras, Vilniaus universitetas*

e. paštas monika.grubliauskaite@gmc.vu.lt

Dėl gerėjančių vėžinių susirgimų diagnostikos ir gydymo metodų, pastaraisiais dešimtmečiais moterų išgyvenamumo rodiklis gerėja, ypač jauno amžiaus pacienčių, tačiau, dėl agresyvaus gydymo mažėja sėkmingos reprodukcijos galimybės. Perspektyvi, bet dar vis eksperimentinė technologija moterų vaisingumo išsaugojimui – kiaušidžių audinio kriokonservavimas. Šio tyrimo tikslas buvo įvertinti atšildytų kiaušidės audinių kokybę, gyvybingumą ir kontaminaciją navikinėmis ląstelėmis. 2015–2018 m. Nacionaliniame vėžio institute buvo užšaldyti jaunų moterų (< 40 metų) kiaušidžių audinio gabalėliai. Tyrimui gautas Vilniaus regioninio Biomedicininų tyrimų etikos komiteto leidimas. Audiniai užšaldyti naudojant lėto šaldymo technologiją. Audinių kokybei įvertinti buvo atliktas bendrosios RNR išgryninimas bei mikroRNR raiškos tyrimas. Papildomi gabalėliai panaudoti ksenotransplantacijai į moteriškos lyties NOD SCID peles (n = 13). Struktūrų vientisumas ir ląstelių proliferacija įvertinti atliekant, atitinkamai, histologinį hematoksilino eozino bei imunohistocheminį Ki-67 dažymus transplantatui bei tik atšildytam audiniui. Išgryninta bendroji RNR iš atšildyto buvo tinkamos kokybės molekuliniam tyrimams atlikti: A260/A280 buvo 1.96–2.04, RIN 6.6–7.6. Aptiktos 74-ios iš 84-ių miRNR raiškos. Didžiausia raiška nustatyta *hsa-miR-1280*. Ksenotransplantacijos, histologijos ir imunohistochemijos analizės įrodė audinio gyvybingumą ir navikinių ląstelių nebuvimą. Molekuliniai metodai kartu su morfologine ir imunohistochemine analize galėtų būti naudojami audinio kokybės įvertinimui po atšildymo ir pakeisti standartinį bei ilgai trunkantį ksenotransplantacijos metodą.

BIOREAKTORIAUS VALDYMO MODELIAVIMAS TAIKANT KONVEKCIJOS-REAKCIJOS-DIFUZIJOS LYGČIŲ SISTEMĄ SU NELOKALIA SĄLYGA

Anatolij Nečiporenko

Vilniaus universiteto Informatikos institutas

e. paštas anatolij.neciporenko@mif.vu.lt

Nagrinėjama dviejų netiesinių konvekcijos-reakcijos-difuzijos lygčių sistema su nelokalia sąlyga. Nelokali sąlyga susieja lygčių konvekcijos funkcijos reikšmę su produkto lygties integralo reikšme nuo sprendinio reikšmių srities viduje. Ši sąlyga yra taikoma bioreaktoriui valdyti naudojant PID valdymo algoritmą [1].

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \mathcal{D}_S(t) \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \alpha(t) \frac{\partial S}{\partial x} - \frac{V_{max}(t)S}{K_M + S},$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \mathcal{D}_P(t) \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \alpha(t) \frac{\partial P}{\partial x} - \frac{V_{max}(t)S}{K_M + S},$$

$$(x, t) \in D = \{0 < x < d, 0 < t \leq T\},$$

$$e(t) = Q(t) - \frac{2\mathcal{D}_P}{m^2 - n^2} \int_n^m P(x, t) dx, \quad 0 < m, n < d,$$

$$\alpha(t) = \mathcal{K}_p e(t) + \mathcal{K}_i \int_0^t e(\tau) d\tau + \mathcal{K}_d \frac{de(t)}{dt}, \quad 0 < t \leq T.$$

Reaktorius vaisto pirmąją (substratą) konvertuoja į aktyvią formą (produktą). Kartais aktyvaus vaisto prie išvesties negalima tinkamai aptikti instrumentais, nes vaistas yra iškart suvartojamas arba difunduoja. Kai kuriais atvejais įmanoma valdyti fermentinį procesą bioreaktoriuje. Taigi yra būtina sukurti analitinę sistemą biocheminiame reaktoriuje [2].

Modeliuojamam bioreaktoriui valdyti buvo taikomas substrato padavimo srauto keitimas. Vienas iš pavyzdžių yra produkto srauto valdymas taikant skirtingus gydymo protokolus, kuriuos naudojant nustatoma reikalaujama produkto srauto reikšmė, kintanti laike [1].

Atliktas modeliavimas bioreaktoriuje vykstančiam procesui taikant konvekcijos-reakcijos-difuzijos netiesinių diferencialinių lygčių sistemą su nelokalia sąlyga. Atlikti skaitiniai tyrimai sistemoje, kurioje vyksta nuolatinis medžiagos (produkto) srauto arba kiekio matavimas srities intervale. Matavimo rezultatai panaudoti bioreaktoriuje vykstančiam procesui kontroliuoti, keičiant substrato padavimo srautą. Valdymo mechanizmas aprašomas nelokalia sąlyga [1].

Pasiūlyta dviejų netiesinių konvekcijos-reakcijos-difuzijos lygčių sistema su naujo tipo nelokalia sąlyga, išsiskiriančia nelokalumu pagal erdvę ir laiką. Nelokali sąlyga sujungia sprendinio komponentes ir yra taikoma bioreaktoriui valdyti naudojant PID valdymo algoritmą [1].

Literatūros šaltiniai:

[1] V. Laurinavičius, F. Ivanauskas and A. Nečiporenko, "Drug delivery mathematical modeling for pressure controlled bioreactor", *Journal of Mathematical Chemistry*, p. 1973–1982, 2019.

- [2] F. Ivanauskas, V. Laurinavičius, M. Sapagovas ir A. Nečiporenko, "Reaction-diffusion equation with nonlocal boundary condition subject to PID-controlled bioreactor", *Nonlinear Analysis: Modelling and Control*, t. 22, pp. 261–272, 2017.
- [3] R. Baronas, F. Ivanauskas ir J. Kulys, *Mathematical modeling of biosensors: an introduction for chemists and mathematicians*, 2012.

PLAZMONŲ RELAKSACIJOS DINAMIKA METALŲ NANODALELIŲ KOLOIDINIUIOSE TIRPALUOSE

Domantas Peckus¹, Joel Henzie², Gerda Klimaitė¹, Mantas Mikalkevičius¹,
Tomas Tamulevičius¹, Asta Tamulevičienė¹, Šarūnas Meškiniš¹, Sigitas Tamulevičius¹

¹*Kauno technologijos universitetas, Medžiagų mokslo institutas, K. Baršausko g. 59, LT-51423 Kaunas*

²*Tarptautinis medžiagų nanoarchitektonikos centras (MANA), Nacionalinis medžiagų mokslo institutas (NIMS), 1-1 Namiki, Tsukuba, Ibaraki 305-0044, Japonija*

e. paštas domantas.peckus@ktu.lt

Šiuo metu plazmoninių metalų nanodalelių tyrimai sulaukia didelio susidomėjimo dėl galimo jų pritaikymo įvairiuose elektrooptiniuose prietaisuose: saulės energetikoje, šviestukuose, netiesinėje optikoje, jutikliuose, fotokatalizėje, medicinoje ir kitose srityse. Šie pritaikymai yra galimi dėl nanodalelės būdingo lokalizuoto paviršiaus plazmonų rezonanso (LPPR) reiškinio: t. y. kolektyvinių laidumo juostos elektronų osciliacijų struktūrose, kurių matmenys mažesni negu žadinančios bangos ilgis. LPPR yra sudėtingas procesas, kurio eigoje galima išskirti keletą etapų: sužadinimo (10 fs), elektronų-elektronų sklaidos (~100 fs), elektrono-fonono sąveikos (~1 ps), fonono-fonono sklaidos (~100 ps). Fonono-fonono sklaidos metu taip stebimas procesas vadinamas nanodalelių optomechaninėmis osciliacijomis. Šių procesų trukmės ir efektyvumas lemia nanodalelių panaudojimo galimybes įvairiuose elektrooptiniuose prietaisuose. Šių procesų tyrimams naudojome skirtuminės sugerties spektrometrą (angl. transient absorption spectrometer (TAS)). Pasinaudojant šiuo spektrometru buvo tirtos Au, Ag ir Al nanodalelės, paruoštos koloidų chemijos metodais. Tirtos plazmoninių metalų nanodalelės buvo pakankamai monodispersinės, tad TAS spektrometru buvo galima stebėti nanodalelių ansamblio optomechanines osciliacijas. Nustatytos nanodalelių LPPR relaksacijos trukmės bei nanodalelių dydžių ir formų įtaka šiems procesams. Gauti rezultatai rodo, kad LPPR relaksacijos, bei optomechaninių osciliacijų tyrimai gali būti naudingas įrankis įvertinant nanodalelių monodispersiškumą, dydį, defektiškumą ir jų aplinką.

NEABELINIAI GEOMETRINIAI POTENCIALAI BEI SUKINIO IR ORBITOS SĄVEIKA PERIODIŠKAI TRIKDOMOMS SISTEMOMS

Povilas Račkauskas, Viktor Novičenko, Han Pu, Gediminas Juzeliūnas

Vilniaus universiteto Fizikos fakultetas

e. paštas povilas.rackauskas@ff.stud.vu.lt

Darbe analiziniais ir skaitmeniniais metodais tirti neabeliniai geometriniai potencialai bei trimatė sukinio ir orbitos sąveika. Tokia sąveika yra sukuriama dalelę veikiant periodiniu trikdžiu, kuris matematiškai gali būti išreikštas kaip nuo padėties priklausančio ermitinio operatoriaus ir greitai osciliuojančios periodinės funkcijos sandauga.

Išnagrinėtas atvejis, kai minėtas ermitinis operatorius priklauso nuo dalelės vidinių laisvės laipsnių (sukinio ar kvazi-sukinio) ir todėl nebūtinai komutuoja su savimi skirtinguose erdvinėse taškuose. Tokiu atveju adiabatinė sistemos evoliucija vienoje Floquent juostoje yra lydima neabelinio geometrinio potencialo, taigi ir sukinio ir orbitos sąveikos.

Bendras formalizmas iliustruotas konkrečiu tokios sistemos pavyzdžiu, nagrinėjant sukinį turinčio atomo judėjimą nevienalyčiame osciliuojančiame magnetiniame lauke pasitelkus skaitmeninius bei analizinius metodus. Ištirtas pusinio sukinio dalelės elgesys cilindriškai simetriškame magnetiniame lauke. Monopolinio efektinio magnetinio lauko atveju sukinio ir orbitos sąveika yra panaši į smulkiosios struktūros sąveiką, tačiau turi žymią įtaką ne tik žemiausios energijos būsenoms, bet ir aukštesnės energijos. Parodyta, jog būsenos, kurių suminio judesio kiekio kvantinis skaičiai sutampa yra beveik išsigimusios. Tinkamai parinkus išorinį potencialą, būsena, kurios orbitinis kvantinis skaičius nėra nulinis, gali turėti mažiausią energiją. Toks elgesys yra neįprastas sistemoms pasižyminčioms sukinio ir orbitos sąveika.

ŽMOGAUS-ROBOTO HUMANOIDO SĄSAJŲ VALDYMAS LIETUVIŲ KALBA

Linas Aidokas

Vilniaus universiteto Duomenų mokslo ir skaitmeninių technologijų institutas

e. paštas aidokas.linas@gmail.com

Visuomenė sensta ir vis labiau trūksta darbo jėgos, patarnaujančių. Ateityje dėl šių priežasčių, sušvelninti situacijai, reikės panaudoti robotus humanoidus. Robotai humanoidai bus naudojami socialinėse aplinkose, kur komunikacija su žmonėmis yra kritiškai svarbi. Efektyviam ir produktyviam bendravimui su robotais humanoidais, žmonės turi turėti galimybę bendrauti jų gimtąja kalba – lietuvių. Tyrimo tikslas yra sukurti žmogaus ir roboto humanoido bendravimo priemones, techninę ir programinę įrangą, šnekantis lietuviškai.

Robotu humanoidu pasirinktas robotas humanoidas NAO, turintis pakankamai daug galimybių, sąlyginai nebrangus, kurį galima pritaikyti mokant moksleivius robotikos pagrindų. Pasirinkta NAO roboto programinė įranga, kurios operacinė sistema Gentoo Linux ir roboto valdymo programinė įranga Choregraphe. Programinės įrangos trūkumas – neturi bendravimo priemonių šnekant lietuviškai.

Žmonių ir robotų humanoidų NAO bendravimo šnekantis lietuviškai įgyvendinimui pasitelkta lietuvių šnekos sintezavimo LiepaTTS ir lietuvių šnekos atpažinimo LiepaASR programinė įranga. Tyrimo metu sukurta programinė įranga, užtikrinanti sąveiką tarp roboto humanoido NAO ir lietuviškos programinės įrangos. Iš mikrofono ateinantis garsas, kurį atpažintuvas paverčia į teksto kodus, perduodamas naudojantis roboto specifiniu protokolu į jo atmintį išsaugoti duomenis. Remiantis roboto protokolais, teksto kodai, saugomi roboto atmintyje, yra persiunčiami sintezatoriui, kurie yra paverčiami į sintezuotą balsą. Lietuvių kalbos sintezatorius ir atpažintuvas generuoja ir perduoda informaciją tokiu pačiu duomenų perdavimo paketu kaip ir robotas. Kad pritaikyti LiepaTTS ir LiepaASR variklius roboto programinei įrangai, reikėjo keisti jų kodą. Roboto operacinėje sistemoje reikėjo pakeisti automatinio įkėlimo kodą ir užregistruoti naujus procesus.

Demonstruota veikianti žmogaus ir roboto humanoido sąsaja.

SKAITMENINIO DVYNIŲ NAUDOJIMAS GAMYBOS PROCESĖ

Simona Bukantaitė

UAB „NMF Metal“, Šiauliai

e. paštas simona.bukantaite@gmail.com

IV-osios pramonės revoliucijos epochoje, šiuolaikinėje pramonėje plačiai taikomos produkto gyvavimo ciklo stebėjimo programos – jose perteikiami visi produkto etapai nuo idėjos iki masinės gamybos ir perdirbimo. Tai leidžia kontroliuoti produkto gamybą, keisti jį, modifikuoti. Didėjant įmonių apkrovimui, didėja poreikis stebėti visą gamybos procesą, kuris dažnai susideda iš daug skirtingų gaminių su savo gyvavimo ciklais. Šiuo metu naudojamos programos leidžia stebėti gamybos pajėgumus, atsargų kiekius, sandėlio likučius, tačiau nėra sistemos, kuri apjungtų turimus duomenis ir esamojo laiko pokyčius. Kiekvieną dieną gamybinės įmonės susiduria su nenumatytais problemomis – vėluoja pirkimo užsakymai, gaunami nekokybiški komponentai, į darbą neatvyksta darbuotojai ar padaroma klaida viename iš proceso etapų. Tokios netikėtos, bet kasdieniškos situacijos, nėra fiksuojamos programose, todėl negalima gauti realaus atsakymo apie tikslus gamybos terminus po įvykusių klaidų ar kitų svarbių duomenų. Skaitmeninio dvynio principo panaudojimas leistų atkurti gamybą virtualioje erdvėje, kur suvedus esamą informaciją (gautą iš darbuotojų ar įrenginių), būtų galima simuliuoti ir modeliuoti tolesnius veiksmus. Pranešimo metu bus detalčiau paaiškinta skaitmeninio dvynio panaudojimo galimybė.

VARIO DALELĖS SMŪGIO Į VARINĮ PAVIRŠIŲ MODELIS ESANT DIDELIEMS GREIČIAMS IR PLASTINĖMS DEFORMACIJOMS

Giedrius Jočbalis

VGTV Antano Gustaičio aviacijos institutas

e. paštas giedrius.jocbalis@vgtu.lt

Dalelės smūgis į materialiosios terpės paviršių yra fizinis reiškinys sutinkamas įvairiose technologiniuose procesuose ir tiriant medžiagų mechanines savybes. Bene plačiausiai paplitusios šio reiškinio taikymo sritys yra įvairios paviršių padengimo purškimo technologijos. Pastaruoju metu šio reiškinio svarba padidėjo tobulinant trimačio spausdinimo technologijose. Tikslusnis dalelė ir paviršiaus sąveikos vertinimas turi potencialią galimybę pagerinti spausdinamų gaminių kokybę. Dalelės ir smogiamojo paviršiaus sąveika yra išsamiai tirta sąlygiškai mažų greičių, siekiančių iki 5,0 m/s. Priklausomai nuo dalelių dydžio, dalelių skersmens paviršiaus savybių vyrauja klampaus slopinimo, riboto plastinio deformavimo mechanizmai. Atitinkamai padengimo technologijose nustatyti greičio langai kada vyksta depoziacija.

Pranešime pateikiami sferinės metalo (vario) mikrodalelės, skersmuo 40 mikrometru, normalinis smūgis į glotnųjį vario paviršių greičiui kintant nuo 1 iki 600 m/s. Didėjant greičiui keičiasi dalelės deformavimo pobūdis, plastinis tekėjimas išplinta visame dalelės tūryje ir ir deformacijų sukelta temperatūra pasiekia lydymosi temperatūrą. Tuo pačiu apkrovimo metu atsiranda vienas kitam priešingi efektai – takumo riba didėja kaupiantis plastinėms deformacijoms ir mažėja didėjant temperatūrai bei mažėjant plastinės deformacijos greičiui, o ypač apkrovimo fazės pabaigoje. Plastinis tekėjimas aprašomas ir Johnson-Cook takumo kriterijų, Tyrimai atlikti skaitiškai integruojant dalelės judėjimo lygtis, o dalelės deformavimas nagrinėjamas taikant baigtinių elementų metodą.

TIESIOGINIO LAZERINIO RAŠYMO NAUDOJIMAS MEDICININIŲ MIKROPRIETAISŲ GAMYBOJE

Linas Jonušauskas

UAB „Femtika“

e. paštas linas@femtika.lt

Per pastaruosius dešimtmečius femtosekundiniai (fs) lazeriai buvo panaudoti daugybėje sričių, įskaitant lazerinį medžiagų apdirbimą. Dėka jais indukuotos ultrasparčios šviesos-medžiagos sąveikos fs lazeriais įmanoma pasiekti ypač aukštą apdirbimo raišką (mažiau nei 1 mikrometras) ir minimalų terminį poveikį bandiniui. Be to, galima realizuoti tiek adityvią tiek subtraktyvią gamybą. Šiame darbe nagrinėjamos perspektyvos panaudoti fs lazerį integruotų medicininių mikroprietaisų gamybai. Pavyzdžiai apima į kateterinę adatą integruotą tėkmės matuoklį su tikslumu kuris siekia nl/min; į mikrofluidinę sistemą integruotą mikromechaninį ląstelių perforatorių; nanofiltru (poros dydis nuo 250 nm) paremtą makromolekulių separatorių. Paašškintas šių prietaisų veikimo principas, pademonstruota jų gamyba panaudojant hibridinį adityvų-subtraktyvų fs lazerinį apdirbimą. Taip pat aptariamos tokios gamybos ir šių prietaisų komercializavimo galimybės.

DEIMANTO TIPO ANGLIES IR SIDABRO NANODALELIŲ NANOKOMPOZITŲ LAZERINIS PADIRBIMAS

Aušrinė Jurkevičiūtė, Tomas Tamulevičius, Sigitas Tamulevičius

Kauno technologijos universiteto Medžiagų mokslo institutas

e. paštas ausrine.jurkeviciute@ktu.lt

Tiesioginis lazerinis interferencinis struktūrizavimas yra spartus periodinių mikrostruktūrų formavimo metodas. Jis unikalus tuo, kad dėl interferencijos reiškinio lazerinio poveikio raiška paviršiuje yra neapribota difrakcijos, tačiau galima formuoti vien periodines struktūras. Norint efektyviai pašalinti medžiagą nuo paviršiaus, lazerio energija turi būti didesnė nei abliacijos slenkstis. Kai paviršiuje norima suformuoti struktūrą nepašalinant medžiagos, mažiausią reikalingą energiją būtų galima vadinti struktūrizavimo slenkščiu.

Tiesioginio lazerinio interferencinio struktūrizavimo metodu buvo suformuotos 564 nm ir 1306 nm periodų vienmatės periodinės struktūros deimanto tipo anglies nanokompozitinėse dangose su sidabro nanodalelėmis. Tam buvo naudojama Yb:KGW femtosekundinio lazerio antroji harmonika keičiant lazerio įteki ir impulsų skaičių. Struktūrizavimo slenkstis netiesiogiai buvo įvertintas matuojant lazeriu suformuotų interferencinių juostų pločius ir periodiškumo matomumą skenuojančio elektronų mikroskopo mikrofotografijose naudojant greitąją Furje transformaciją.

Tyrimo metu buvo nustatyta, kad didinant impulsų skaičių pasireiškia inkubacijos efektas – struktūrizavimo slenkstinė vertė mažėja. Taip pat mažesnės sidabro koncentracijos nanokompozitui struktūrizavimo slenkstinė vertė yra žemesnė nei didesnės koncentracijos. Apibendrinant lazerio spinduliuotės poveikį deimanto tipo anglies su sidabro nanodalelėmis nanokompozitams buvo išskirti tokie tipai: struktūros nebuvimas (lazerio energija žemesnė nei struktūrizavimo slenkstis), nanodalelių pakitimų nebuvimas (struktūra suformuojama dėl pakitusių matricos savybių), fragmentacija (dalelių skaidymasis į mažesnes), aglomeracija (dalelių jungimasis į didesnes) ir abliacija (dalelių pašalinimas).

AMORFINIAI FLUORENO JUNGINIAI SKIRTI SKYLES PERNEŠANTIEMS SLUOKSNIAMS TIRPALŲ LIEJIMO BŪDU SUFORMUOTIEMS ORGANINIAMS ŠVIESŲ DIODAMS / FLUORENE BASED AMORPHOUS HOLE TRANSPORTING MATERIALS FOR SOLUTION PROCESSED ORGANIC LIGHT-EMITTING DIODES

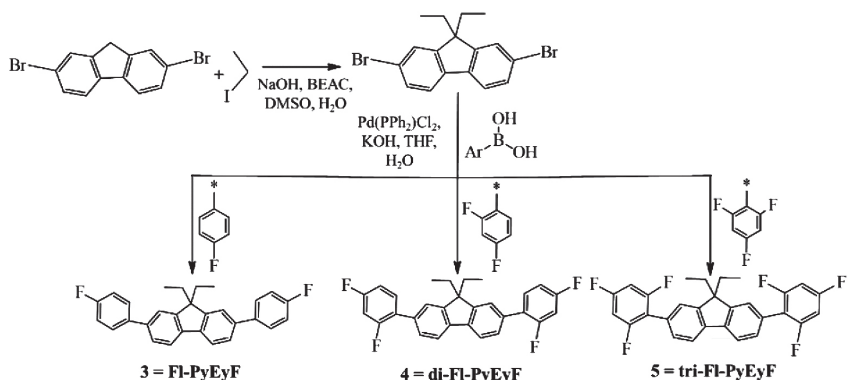
Gintarė Kručaitė

Kauno technologijos universitetas

e. paštas gintare.krucaite@ktu.lt

After three decades of extensive research, noteworthy development has been made in organic electroluminescent materials and device architecture for energy-efficient organic light-emitting diodes (OLEDs). As a result, mass-produced OLED television screens, mobile displays and lighting panels are now enthusiastically available in our daily life.

The synthesis of dual fluorophenyl, difluorophenyl or trifluorophenyl substituted 2,7-diaryl 9,9-diethylfluorenes derivatives, FI-PyEyF, di-FI-PyEyF and tri-FI-PyEyF was carried out by a multi-step synthetic route as shown in Scheme 1.



Scheme 1. Synthesis of the two fluorophenyl, difluorophenyl or trifluorophenyl substituted with 9,9-diethylfluorenes derivatives

All the molecules exhibited high thermal stability, high triplet energy, outstanding solubility in common organic green solvents, appropriate molecular orbital energy level, and suitable ionization potential to work as a hole transporting layer in OLEDs. The hole-transport properties of all the HTMs are shown to be better than that exhibited by NPB. The tri-FI-PyEyF based yellow phosphorescent OLED device revealed a maximum PE of 39.5 lm/W and CE of 61.0 cd/A, that improves by 55.8 and 52.8%, respectively, compared to the NPB based control OLED device.

DIDELĖS ERDVINĖS SKYROS VAIZDINIMO SISTEMA POLIMERINIŲ GELIŲ DOZIMETRIJAI

Mantvydas Merkis, Benas Gabrielis Urbonavičius
Kauno technologijos universitetas, Fizikos katedra
e. paštas mantvydasmerkis@ktu.edu

Šiuolaikinės spindulinės medicinos esmę sudaro energijos perdavimo ir sugerties biologiniame audinyje procesai, kurie leidžia panaudoti jonizuojančiąją spinduliuotę ligų diagnostikai ir gydymui. Apšvita visada siejama su radiobiologiniais efektais, todėl privaloma įvertinti net ir mažiausias spinduliuotės dozes. Teoriniam procedūrų planavimui dažniausiai naudojamas kompiuterinis modeliavimas, tačiau poveikio kontrolei yra būtinas dozimetrinis.

Sudaryto spindulinio gydymo plano verifikavimui gali būti panaudojami įvairiais fiziniais principais paremti dozimetrai, tačiau tik polimerinių gelių dozimetrija leidžia atlikti dozių pasiskirstymo trimatėje erdvėje vertinimą. Polimerinių gelių veikimas pagrįstas jonizuojančiąja spinduliuote paveikto gelio polimerizacija, kurios laipsnis yra proporcingas sugertajai dozei. Šis dozimetrinis metodas taip pat leidžia sumažinti matavimo neapibrėžtį, kadangi polimerinių gelių sudėtis yra artima biologiniam audiniui spinduliuotės sugerties prasme.

Vienas iš išskirtinių dozimetrinių gelių taikymų yra erdvinė dozimetrija didelės dozės galios gradiento spinduliuotės laukuose. Šiuo atveju gelio nuskaitymo metodas turi pasižymėti didele erdvine skyra. Esamų nuskaitymo metodų erdvinė skyra siekia ~1 mm, kas yra nepakankama norint charakterizuoti dozimetrinius gelius gradientiniame lauke.

Šiai problemai spręsti buvo sukurta nesudėtinga optinė skanavimo sistema, kuri leidžia gauti dozės pasiskirstymo informaciją tiriamajame tūryje remiantis optine sugertimi. Sukurta įranga susideda iš specialios kiuvetės pozicionavimo sistemos, kurios erdvinė skyra – 0,1 mm, ir spektrometro. Pradiniai sistemos bandymai buvo atlikti panaudojant MAGAT polimerinį gelį, apšvitintą linijiniu greitintuvu.

FOTOPLETIZMOGRAFINIO SIGNALO MORFOLOGIJA GRĮŠTAS PSICHOFIZIOLOGINIO STRESO VERTINIMAS / PHOTOPLETHYSMOGRAM SIGNAL MORPHOLOGY-BASED STRESS ASSESSMENT

Mantas Rinkevičius¹, Spyridon Kontaxis², Eduardo Gil², Raquel

Bailón², Jesus Lázaro², Pablo Laguna², Vaidotas Marozas¹

Kauno technologijos universitetas, Biomedicininės inžinerijos institutas

²Saragosos universitetas, Ispanija

e. paštas mantas.rinkevicius@ktu.lt

Įvadas. Stresas yra natūralus žmogaus organizmo atsakas į nujaučiamą ar realiai egzistuojančią grėsmę. Kai stresas tampa vis dažnesnis, jis pradeda mažinti žmogaus atliekamo darbo produktyvumą, padidina riziką susirgti įvairiomis ligomis bei daro didžiulę neigiamą įtaką gyvenimo kokybei. Apie organizmo patiriamą stresą gali signalizuoti tokių fiziologinių parametų pokyčiai, kaip padidėję kraujo spaudimas ir tiesioginės bei atsispindėjusios pulsinių bangų greičiai, susiję su arterijų standumu, širdies ritmas ir kt. Šio darbo tikslas – išanalizuoti fotopletizmogramos (FPG) signalo morfologinius parametrus, kurių pokyčiais remiantis būtų galima įvertinti žmogaus patiriamą psichofiziologinį stresą.

Metodai. Streso vertinimo algoritmas buvo kuriamas panaudojant juostiniu filtru apdoroto FPG signalo 2-ojo ir 3-iojo laipsnio išvestines. Surasti šeši signalo morfologiniai parametrai – tiesioginės pulsinės bangos amplitudė A_r , sistolės trukmė T_r , diastolės trukmė T_d , atspindžio vėlinimo laikai T_{12} ir T_{13} nuo inkstų ir šlaunies centrinių arterijų išsišakojimų, atitinkamai, ir impulso trukmė T_p . Statistinei analizei atlikti panaudota Saragosos universitete užregistruota signalų duomenų bazė. Ištirta 18 sveikų subjektų, kuriems stresas buvo sukeltas panaudojant modifikuotą Triero Socialinį Streso Testą (TSST).

Rezultatai. Didžiausią statistinį skirtumą reikšmingumą parodė A_r , T_d , T_{13} ir T_p parametrai, kurių verčių sumažėjimą galima paaiškinti simpatinės nervų sistemos aktyvacija. Mažiausią statistinį skirtumą reikšmingumą parodė T_{12} parametras.

Viėšinimas. 46-oji tarptautinė mokslinė konferencija: *Computing in Cardiology (CinC)*, 2019 m. rugsėjo 8–11 d., Singapūras. Straipsnio pavadinimas – *Photoplethysmogram Signal Morphology-Based Stress Assessment*. Lietuvos mokslo tarybos (LMT) organizuota studentų mokslinių darbų konferencija, 2019 m. birželio 12 d., Vilnius, Lietuva. Konferencijos metu pristatyti 09.3.3-LMT-K-712-10-0222 projekto „Elektroninės sistemos prototipas psichofiziologinio streso stebėsenai ir valdymui“ vykdymo metu gauti rezultatai.

PIRMINIO KRAIKINIO VIŠTŲ MĚŠLO APDOROJIMO BIOLOGINIAIS METODAIS ĮTAKĄ BIOCHEMINIO METANO SUSIDARYMO POTENCIALUI IR AMONIAKO EMISIJAI

Mantas Rubežius

UAB „Addeco“ mokslo darbuotojas

VDU Žemės ūkio akademijos doktorantas

e. paštas mantas.rubezius@gmail.com

Paukščių mėšlas turi didelį atsinaujinančios energetikos potencialą panaudojant jį biodujų gamyboje. Tačiau ypač didelis N kiekis lemia nestabilias anaerobinio proceso sąlygas, įskaitant tokių tarpinių medžiagų, kaip amoniakas kaupimąsi, dėl kurio sumažėja biodujų kiekis ir prastėja biodujų kokybė. Išankstinis biologinis paukščių mėšlo apdorojimas yra perspektyvus šios problemos sprendimo būdas, dėl žemų sąnaudų ir ekologiškumo. Tyrime buvo įvertinta pirminio kraikinio vištų mėšlo apdorojimo biologiniais metodais įtaką biocheminio metano susidarymo potencialui bei amoniako emisijų mažinimui. Įvertinus SOM medžiagos skirtumus (nuostolius) tarp neapdoroto ir apdoroto substrato, nustatyta, kad optimalių sąlygų palaikymas ir biologinių priedų naudojimas pirminio apdorojimo metu biocheminio metano išeiga padidina nuo 11,00 iki 89,94 l CH₄/kg SOM. Taip pat, pirminis kraikinio paukščių mėšlo apdorojimas biologiniais metodais turi teigiamos įtakos biodujų sudėčiai – metano koncentracija po pirminio apdorojimo išauga 6,3–10,4 %, o tokių priemaišų, kaip H₂S koncentracija sumažėja nuo 1,1 iki 17,4 kartų. Išmatavus NH₃ garavimo intensyvumą, nustatyta, kad amoniako emisijos visais kraikinio paukščių mėšlo apdorojimo atvejais yra didesnės už emisijas iš neapdoroto paukščių mėšlo. Tačiau išmatavus NH₃ garavimo intensyvumą iš digestato, nustatyta, kad NH₃ emisijų normos turėjo panašias tendencijas, lyginat apdorota ir neapdorotą substratą.

SIDABRO NANODARINIŲ SINTEZĖ, JŲ MODIFIKAVIMAS IR TAIKYMAS PAVIRŠIUJE STIPRINAMOS RAMANO SKLAIDOS JUTIKLIAMS

Asta Tamulevičienė, Nadzheya Khinevich, Mantas Mikalkevičius,
Mindaugas Juodėnas, Tomas Tamulevičius, Sigitas Tamulevičius
Kauno technologijos universiteto Medžiagų mokslo institutas
e. paštas asta.tamuleviciene@ktu.lt

Pastaraisiais metais, tobulėjant nanotechnologijoms ir plečiantis supratimui apie nanomedžiagų plazmonines savybes, paviršiuje stiprinama Ramano sklaida (angl. SERS – Surface enhanced Raman Scattering) sulaukia vis daugiau dėmesio kaip itin jautrus analitinis metodas plačiai taikomas elektrochemijoje, cheminėje fizikoje, kieto kūno fizikoje, biofizikoje bei medicinoje. Signalo stiprinimui naudojamas vis platesnis medžiagų ratas, tame tarpe įvairūs metalų oksidai (NiO, CuO), grafas ir kt. Visgi dažniausiai naudojamos taurių metalų, tokių kaip sidabras ir auksas, nanodalelės, kadangi jos užtikrina didžiausią signalo stiprinimą.

Šiame darbe buvo tiriamas sidabro nanodalelių taikymas SERS jutikliuose. Nanodalelės buvo susintetintos poliolio sintezės (kubinės dalelės) bei cheminės redukcijos (sferinės dalelės) metodais. Keičiant cheminės sintezės sąlygas buvo keičiama dalelių forma bei dydis. Dalelių dydžių skirstinys ir jų forma taip pat buvo modifikuojami femtosekundinio lazerio (Yb:KGW, 1030 nm, 300 fs, 200 kHz, Pharos, Light Conversion) apšvieta. SERS tyrimai buvo atliekami naudojant skirtingos koncentracijos rodaminą 6G (iki 10^{-10} M koncentracija) ir 2-naftalentiolį (iki 10^{-8} M) Ramano sklaidos signalo žaditimui naudojant 532 nm bangos ilgį (in Via spektrometras, Renishaw). Nustatyta, jog naudojant nanodaleles signalo stiprinimas gali siekti iki $1,6 \times 10^4$ kartų.

AUTOMATINĖ VEIDINĖ DALIES KAULŲ SEGMENTACIJA KOMPIUTERINĖS TOMOGRAFIJOS VAIZDUOSE

Mantas Vaitiekūnas

Kauno technologijos universitetas, UAB „Reface“

e. paštas mantas.vaitiekunas@ktu.lt

Problema. Trimačio modelio (3D) tikslumas lemia ligos diagnozavimą, gydymo suplanavimą bei paciento pooperacinę stebėseną. Visa tai yra labai svarbu veido ir žandikaulių chirurgijoje, ortodontijoje, endodontijoje, ortopedijoje. Daugumos mokslinėje literatūroje bei klinikinėje praktikoje pristatomų ir naudojamų 3D modeliavimo programinių paketų naudoja įprastus ir subjektyvius metodus, kurie grįsti globalios slenkstinės Hounsfieldo skalės vertės rankiniu nustatymu.

Metodas. Šiame tyrime yra pristatytas pilnai automatinis metodas, skirtas atlikti veidinės dalies kaulų segmentaciją iš kompiuterinės tomografijos vaizdų. Tyrime buvo panaudota keturiasdešimt kūginio pluošto kompiuterinės tomografijos (KPKT) vaizdų rinkinių. Pristatomo automatinio metodo veikimas grįstas Otsu metodo, analizuojamos vaizdo histogramos filtro bei slenkančio lango veikimo principais. Dėl šių prižasčių segmentacija tampa pilnai automatinė, lokali ir ypatingai sparti. Galutinis segmentacijos rezultatas nepriklauso tik nuo vienos slenkstinės vertės. Gauti rezultatai buvo palyginti su gydytojo eksperto segmentacijų rezultatais siekiant įvertinti pasiūlyto metodo tikslumą.

Rezultatai. Atlikus tyrimus nustatyti šie pasirinktų kiekybinių įverčių vertės: Vidutinis Dice panašumo koeficientas priešoperacinių atvejų 0.921, pooperacinių 0.911. Vidutinė kvadratinė šaknies vertė tarp paviršių priešoperacinių atvejų 0.559 mm, pooperacinių 0.647 mm. Vidutinė sparta atlikti priešoperacinių atvejų segmentacijas 45 s, pooperacinių 47 s.

Išvados. Pasiūlyto metodo privalumas tas, jog nereikia nustatyti konkrečių slenkstinių verčių, dėl to norimų sričių išskyrimas yra objektyvus, paprastas bei spartus.

FINTECH RIZIKOS IR BITKOINO KRIPTOGRAFINĖS VALIUTOS NEĮPRASTŲ TRANSAKCIJŲ MAŠININIS IDENTIFIKAVIMAS

Evaldas Žilinskas

Kauno technologijos universitetas

e. paštas eva.zilinskas@ktu.edu

Susidomėjimas fintech metodais ir blokų grandinės technologija auga nuo šios idėjos atsiradimo 2008 metais. Tai palyginti nauja technologija, kuri gyvuoja šiek tiek daugiau nei 10 metų, tačiau tiek žiniasklaidos, tiek mokslininkų dėmesio sulaukia nemažai. Pagrindinis domėjimosi objektas yra bitkoino kriptografinė valiuta, kuriai blokų grandinės technologija pirmiausia ir buvo sukurta. Kriptografinių valiutų populiarumas pritraukia ir įvairių sukčių, kurie vykdo nekorektiškas veiklas ir stengiasi gauti finansinės naudos. Nuo 2011 iki 2018 metų didžiausios kriptografinių valiutų vagystės ir apgavystės vertinamos 1,7 milijardu dolerių, o vien tik per 2019 metų pirmus tris ketvirčius pagal kriptografinės valiutos kovos su pinigų plovimu ataskaitą vagysčių ir apgaulių suma yra vertinama 4 milijardais dolerių. Kadangi bitkoinas yra populiariausia valiuta, tai jai ir tenka didžiausia šių vagysčių ir apgavysčių sąlygotų nuostolių suma. Neįprastų transakcijų identifikavimas yra pirmas veiksmas norint sumažinti fintech riziką ir apsisaugoti nuo galimų vagysčių ir apgavysčių. Šio tyrimo tikslas – pasitelkiant didžiųjų duomenų analitikos metodus sukurti mašininio mokymosi modelį, kuris sugebėtų apdoroti didelių duomenų kiekius ir sėkmingai identifikuoti neįprastas ir įtartinas transakcijas bitkoino blokų grandinėje. Visos bitkoino transakcijos ir istorinės kainos yra viešai prieinamos. Panaudojant šiuos didžiuosius duomenis buvo išskirti parametrai/kintamieji (įvesčių transakcijoje skaičius, išvesčių transakcijoje skaičius, vidutinė įvesčių transakcijoje vertė ir pan.), kurie naudojami kuriant modelius. Neįprastų transakcijų identifikavimo modeliui sukurti buvo pritaikytas k vidurkių metodas, k vidurkių metodo BFR modifikacija ir izoliavimo miškas. Šio modelio pagrindu buvo atlikti bandomieji bitkoino kriptografinės valiutos rizikos vertinimai.