

## DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslo kryptis (šaka) kodas	Fakultetas / Centras	Katedra
Organometalinių junginių chemija	Chemija N 003	Chemijos ir geomokslų fakultetas, Chemijos institutas	Organinės chemijos katedra
Studijų būdas	Kreditų skaičius	Studijų būdas	Kreditų skaičius
Paskaitos	3	Konsultacijos	1
Individualus	4	Seminarai	1

### Dalyko anotacija

Organometalinių junginių klasifikacija, nomenklatūra. Ryšio "anglis-metalas" prigimtis. Organiniai magnio junginiai, jų sandara, sintezės metodai. Grignard'o junginių panaudojimas sintezėje: reakcijos ir jų mechanizmai bei stereochemija su karboniliniiais junginiais, su orto formiatais, prisijungimas prie nesočiųjų karbonilinių junginių, epoksidų reakcijos su nitroareneis ir kt. Organiniai ličio junginiai, jų sandara, reaktivitys priklausomybė nuo agregacijos laipsnio, sandaros ypatumų bei ligandų prigimties. Organinių ličio junginių sintezės metodai ir cheminės savybės. Organinių ličio junginių reakcijos. Organiniai boro junginiai. Organiniai boranai, jų sandaros ypatybės, multicentrinių ryšių susidarymas. Organiniai alavo junginiai. Trialkilalavo halogenidų sintezė, savybės, sandara. Stananų sintezė ir savybės, jų taikymas organinių ličio junginių sintezėje. Radikalinės halogeno hidrogenolizės bei alkilhalogenidų jungimo reakcijos prie aktyvuoto dvigubojo ryšio, panaudojant trialkilalavo hidridą. Organiniai vario junginiai, jų klasifikacija, sandara, sintezė ir reaktivitys. Kupratinių reagentų reakcijos su karboniliniiais junginiais, halogenidais, rūgščių chloranhidridais, nesočiaisiais karboniliniiais junginiais ir t.t. Reakcijų regio- ir stereoselektyvumas. Mišrių kupratų panaudojimas sintezėje. Organiniai boro junginiai. Organiniai boranai, jų sandaros ypatumai, multicentrinių ryšių susidarymas. Hidroborinimo reakcijos regio- ir stereoselektyvumas. Mišrių boranų panaudojimas hidroborinimo reakcijoje. Alil- ir krotilboranų reakcijos su aldehidais. Organoboranų reakcijos su dichlormetiličiu ir jų panaudojimas chiralinių junginių sintezėje; alkilboranų protonolizės, halogenolizės, karbonilinimo, cianidinimo ir kt. reakcijos. Organiniai silicio junginiai. Silicio ir anglies elementų palyginimas. Organiniai silanoliai ir silikonai. Silenai ir polisilenai. Nukleofilinis pakeitimas prie Si atomo. Arilsilanų ipso pakeitimo reakcijos. Vinilsilanų sintezės būdai ir jų reakcijos su elektrofiliniais reagentais. Alilsilanų sintezės metodai ir jų reakcijos su elektrofiliniais reagentais. Sililepksidų reakcijos su nukleofiliniais reagentais. Petersono reakcija.

Organometaliniai junginiai - organinių reakcijų katalizatoriai. C-C, C-N ir C-O ryšių sudarymo reakcijos; šių reakcijų taikymas aromatinių ir heteroaromatinių junginių sintezėje. Inter- bei intramolekulinė Hecko reakcija, jos regio- ir stereochemija. Pd(0) katalizuojamos reakcijos su alilo elektrofilais, 1,3- ir 1,4-dienais. Karbonilinimo reakcija, jos panaudojimas aldehidų, ketonų, esterių sintezėje. Sonogashira, Stille, Suzuki, Kumada, Negishi reakcijos, jų mechanizmai, ypatumai, panaudojimas aciklinių ir heterociklinių bei poliaromatinių funkcinių medžiagų, naudojamų organinėje elektronikoje ir nanotechnologijose, sintezėje ir taikymo galimybės. Organinių junginių C-H aktyvavimo reakcijos. C-N ir C-O ryšių sudarymo reakcijos. Ni katalizuojamos fotoredokso reakcijos C-C ryšio formavime.

### Pagrindinė literatūra

Moksliniai straipsniai tarptautiniuose periodiniuose mokslo žurnaluose J. Organomet Chem.; Organometallics, Advanced Synthesis and Catalysis, JACS, J. Org. Chem, ACIE, Org. Letters, J. Materials chemistry C ir kt.  
 Sigita Tumkevičius. Organinių metalų junginių chemija. – Vilnius: UAB TEV, 2012, 202 p.  
 Gary O. Spessard, Gary L. Miessler. Organometallic Chemistry. 2nd Ed. Oxford University Press, 2009, 752p.  
 Modern Organonickel Chemistry. Ed. Y. Tamaru. WILEY-VCH, 2005, 327 p.  
 P. R. Jenkins. Organometallic Reagents in Synthesis. - New York: Oxford University Press, 2001.  
 Metal-Catalyzed Cross-Coupling Reactions, Second, Completely Revised and Enlarged Edition, 2004  
 Eds: Armin de Meijere, Francois Diederich.  
 J. Tsuji. Palladium Reagents and Catalysts. Innovations in Organic Synthesis.-J.Wiley and Sons, 1999, 560 p.

Konsultuojančiųjų dėstytojų vardas, pavardė	Mokslo laipsnis	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
<p>Jelena Dodonova-Vaitkūnienė (pagrindinis)</p> <p>Sigitas Tumkevičius</p>	<p>Dr.</p> <p>Habil. dr.</p>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Polita, Artūras; Žvirblis, Rokas; Dodonova-Vaitkūnienė, Jelena; Shivabalan, Arun Prabha; Maleckaitė, Karolina; Valinčius, Gintaras. Bimodal effects on lipid droplets induced in cancer and non-cancer cells by chemotherapy drugs as revealed with a green-emitting BODIPY fluorescent probe // Journal of materials chemistry B. Cambridge : Royal Society of Chemistry. ISSN 2050-750X. eISSN 2050-7518. 2024, vol. 12, iss. 12, p. 3022-3030. DOI: <a href="https://doi.org/10.1039/d3tb02979d">10.1039/d3tb02979d</a>.</li> <li>2. Serevičius, Tomas; Skaisgiris, Rokas; Tumkevičius, Sigitas; Dodonova-Vaitkūnienė, Jelena; Juršėnas, Saulius Antanas. High reverse intersystem crossing rate diminishes the impact of conformational disorder phenomenon in solid-state TADF // Advanced optical materials. Weinheim : John Wiley and Sons Inc. eISSN 2195-1071. 2024, vol. 12, iss. 36, art. no. 2401819, p. [1-6]. DOI: <a href="https://doi.org/10.1002/adom.202401819">10.1002/adom.202401819</a>.</li> <li>3. Polita, Artūras; Stancikaitė, Milda; Žvirblis, Rokas; Maleckaitė, Karolina; Dodonova-Vaitkūnienė, Jelena; Tumkevičius, Sigitas; Shivabalan, Arun Prabha; Valinčius, Gintaras. Designing a green-emitting viscosity-sensitive 4,4-difluoro-4-bora-3a,4a-diaza- s -indacene (BODIPY) probe for plasma membrane viscosity imaging // RSC advances. Cambridge : Royal Society of Chemistry (RSC). ISSN 2046-2069. eISSN 2046-2069. 2023, vol. 13, iss. 28, p. 19257-19264. DOI: <a href="https://doi.org/10.1039/D3RA04126C">10.1039/D3RA04126C</a>.</li> <li>4. Žvirblis, Rokas; Maleckaitė, Karolina; Dodonova-Vaitkūnienė, Jelena; Jurgutis, Džiugas; Žilėnaitė, Rugilė; Karabanovas, Vitalijus; Tumkevičius, Sigitas; Vyšniauskas, Aurimas. A red-emitting thiophene-modified BODIPY probe for fluorescence lifetime-based polarity imaging of lipid droplets in living cells // Journal of materials chemistry B. Cambridge : Royal Society of Chemistry. ISSN 2050-750X. eISSN 2050-7518. 2023, vol. 11, iss. 17, p. 3919-3928. DOI: <a href="https://doi.org/10.1039/d3tb00305a">10.1039/d3tb00305a</a>.</li> <li>5. Serevičius, Tomas; Skaisgiris, Rokas; Banevičius, Dovydas; Tumkevičius, Sigitas; Dodonova-Vaitkūnienė, Jelena; Juršėnas, Saulius Antanas. Modulation of nonradiative emission decay rate by spacer unit in donor-acceptor TADF compounds // Dyes and pigments. London : Elsevier. ISSN 0143-7208. eISSN 1873-3743. 2023, vol. 220, art. no. 111711, p. [1-6]. DOI: <a href="https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2023.111711">10.1016/j.dyepig.2023.111711</a>.</li> <li>6. Tomas Serevičius, Rokas Skaisgiris, Sigitas Tumkevičius, Jelena Dodonova-Vaitkūnienė, Saulius Juršėnas. Understanding the temporal dynamics of thermally activated delayed fluorescence in solid hosts // Journal of materials chemistry C. Cambridge : Royal Society of Chemistry (RSC). 2023, vol. 11,</li> </ol>

iss. 36, p. 12147-12155. DOI:  
10.1039/D3TC02347H.

7. Polita, Artūras; Stancikaitė, Milda; Žvirblis, Rokas; Maleckaitė, Karolina; Dodonova-Vaitkūnienė, Jelena; Tumkevičius, Sigitas; Shivabalan, Arun Prabha; Valinčius, Gintaras. Designing a green-emitting viscosity-sensitive 4,4-difluoro-4-bora-3a,4a-diazas-indacene (BODIPY) probe for plasma membrane viscosity imaging // RSC advances. Cambridge : Royal Society of Chemistry (RSC). ISSN 2046-2069. eISSN 2046-2069. 2023, vol. 13, iss. 28, p. 19257-19264. DOI: [10.1039/D3RA04126C](https://doi.org/10.1039/D3RA04126C).
8. Maleckaitė, Karolina; Narkevičius, Domantas; Žilėnaitė, Rugilė; Dodonova-Vaitkūnienė, Jelena; Toliautas, Stepas; Tumkevičius, Sigitas; Vyšniauskas, Aurimas. Give or take: effects of electron-accepting/-withdrawing groups in red-fluorescent BODIPY molecular rotors // Molecules. Basel : MDPI AG. eISSN 1420-3049. 2022, vol. 27, iss. 1, art. no. 23, p. 1-14. DOI: [10.3390/molecules27010023](https://doi.org/10.3390/molecules27010023).
9. Serevičius, Tomas; Skaisgiris, Rokas; Dodonova-Vaitkūnienė, Jelena; Fiodorova, Irina; Genevičius, Kristijonas; Tumkevičius, Sigitas; Kazlauskas, Karolis; Juršėnas, Saulius Antanas. Temporal dynamics of solid-state thermally activated delayed fluorescence: disorder or ultraslow solvation? // Journal of physical chemistry letters. Washington : American Chemical Society. ISSN 1948-7185. 2022, vol. 13, no. 7, p. 1839-1844. DOI: [10.1021/acs.jpcllett.1c03810](https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.1c03810).
10. Jurgutis, Džiugas; Jarockytė, Greta; Poderys, Vilius; Dodonova-Vaitkūnienė, Jelena; Tumkevičius, Sigitas; Vyšniauskas, Aurimas; Rotomskis, Ričardas; Karabanovas, Vitalijus. Exploring BODIPY-Based sensor for Imaging of intracellular microviscosity in human breast cancer cells // International journal of molecular sciences. Basel : MDPI. ISSN 1422-0067. eISSN 1422-0067. 2022, vol. 23, iss. 10, art. no. 5687, p. 1-17. DOI: [10.3390/ijms23105687](https://doi.org/10.3390/ijms23105687).
11. Maleckaitė, Karolina; Dodonova-Vaitkūnienė, Jelena; Žilėnaitė, Rugilė; Tumkevičius, Sigitas; Vyšniauskas, Aurimas. Red fluorescent BODIPY molecular rotor for high microviscosity environments // Methods and applications in fluorescence. Bristol : IOP Publishing. ISSN 2050-6120. eISSN 2050-6120. 2022, vol. 10, iss. 3, art. no. 034008, p. 1-8. DOI: [10.1088/2050-6120/ac7943](https://doi.org/10.1088/2050-6120/ac7943).
12. Skaisgiris, Rokas; Serevičius, Tomas; Dodonova, Jelena; Banevičius, Dovydas; Kazlauskas, Karolis; Tumkevičius, Sigitas; Juršėnas, Saulius Antanas. Tuning of HOMO-LUMO localization for achieving thermally activated delayed fluorescence // Journal of luminescence. Amsterdam : Elsevier. ISSN 0022-2313. eISSN 1872-7883.

		<p>2022, vol. 241, art. no. 118473, p. [1-7]. DOI: <a href="https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2021.118473">10.1016/j.jlumin.2021.118473</a>.</p> <p>13. T. Serevicius, R. Skaisgiris, G. Kreiza, <b>J. Dodonova</b>, K. Kazlauskas, E. Orentas, <b>S. Tumkevicius</b>, S. Jursenas. TADF parameters in solid-state: an easy way to wrong conclusions. <i>Journal of physical Chemistry A</i>, <b>2021</b>, 125, 7, 1637-1641; <a href="https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpca.0c10391">https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpca.0c10391</a></p> <p>14. T. Serevičius, R. Skaisgiris, I. Fiodorova, G. Kreiza, D. Banevičius, K. Kazlauskas, <b>S. Tumkevicius</b>, S. Juršėnas. Single-exponential solid-state delayed fluorescence decay in TADF compounds with minimized conformational disorder. <i>Journal of Materials Chemistry C</i>, <b>2021</b>, 9, 836-861. <a href="https://doi.org/10.1039/D0TC05503D">https://doi.org/10.1039/D0TC05503D</a></p> <p>15. J. Jovaisaitė, D. Cīrule, A. Jeminejs, I. Novosjolova, M. Turks, P. Baronas, R. Komskis, <b>S. Tumkevicius</b>, G. Jonusauskas, S. Jursenas. Proof of principle of a purine D–A–D' ligand based ratiometric chemical sensor harnessing complexation induced intermolecular PET. <i>Physical Chemistry Chemical Physics</i>, <b>2020</b>, 22 (45), 26502-26508; <a href="https://dx.doi.org/10.1039/d0cp04091f">https://dx.doi.org/10.1039/d0cp04091f</a></p> <p>16. T. Serevičius, <b>J. Dodonova</b>, R. Skaisgiris, D. Banevičius, K. Kazlauskas, S. Juršėnas, <b>S. Tumkevicius</b>. Optimization of the carbazole–pyrimidine linking pattern for achieving efficient TADF. <i>Journal of Materials Chemistry C</i>, <b>2020</b>, 8, 11192–11200; <a href="https://dx.doi.org/10.1039/d0tc02194f">https://dx.doi.org/10.1039/d0tc02194f</a></p> <p>17. T. Serevičius, R. Skaisgiris, <b>J. Dodonova</b>, L. Jagintavičius, D. Banevičius, K. Kazlauskas, <b>S. Tumkevicius</b>, S. Juršėnas. Achieving Submicrosecond TADF Lifetime and Highly Efficient Electroluminescence by Fine Tuning of Phenoxazine-Pyrimidine Structure. <i>ACS Applied Materials and Interfaces</i>, <b>2020</b>, 12, 10727–10736. <a href="https://dx.doi.org/10.1021/acsami.9b21394">https://dx.doi.org/10.1021/acsami.9b21394</a></p> <p>18. T. Serevicius, R. Skaisgiris, I. Fiodorova, V. Steckis, <b>J. Dodonova</b>, D. Banevicius, K. Kazlauskas, S. Jursenas, <b>S. Tumkevicius</b>. Achieving efficient deep-blue TADF in carbazole-pyrimidine compounds. <i>Organic Electronics</i>, <b>2020</b>, 82, art.no. 105723; <a href="https://doi.org/10.1016/j.orgel.2020.105723">https://doi.org/10.1016/j.orgel.2020.105723</a></p> <p>19. T. Serevičius, R. Skaisgiris, <b>J. Dodonova</b>, K. Kazlauskas, S. Juršėnas, <b>S. Tumkevicius</b>. Minimization of solid-state conformational disorder in donor–acceptor TADF compounds. <i>Physical Chemistry Chemical Physics</i>, <b>2020</b>, 22, 265-272; DOI: 10.1039/C9CP05907E</p>
--	--	--

Patvirtinta Vilniaus universiteto ir Fizinių ir technologijos mokslų centro Chemijos mokslo krypties doktorantūros komitete 2025 m. kovo 3 d., protokolo Nr. 15600-KT-79.

Komiteto pirmininkas prof. habil. dr. Audrius Padarauskas.