

DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslo kryptis (šaka) kodas	Fakultetas / Centras	Katedra
Šiuolaikinė organinė sintezė	Chemija N 003	Chemijos ir geomokslų fakultetas	Organinės chemijos katedra
Studijų būdas	Kreditų skaičius	Studijų būdas	Kreditų skaičius
Paskaitos		Konsultacijos	3
Individualus	5	Seminarai	

Dalyko anotacija

Šiuolaikinės ir totalinės sintezės principai.

Žaliosios organinės sintezės principai. Atomų ekonomija. Fotocheminės reakcijos, pritaikymas. Mikrobangų inicijuota sintezė. Aparatūra, naudojami tirpikliai, metodų taikymo galimybės. Joninių skysčių panaudojimas. Tekmės reaktoriai organinėje sintezėje. Cheminių procesų optimizavimas.

Viengubųjų C-C ir C-Het ryšių formavimo rinkiniai skyriai. C-H aktyvavimas ir funkcionalizavimas organinėje sintezėje. C-H aktyvavimo mechanizmai. Neaktyvuotų ir aktyvuotų C(sp³)-H ryšių funkcionalizavimas, regio ir stereoselektyvumo principai. Aromatinių junginių funkcionalizavimas, orto-strategija, nukreipiančios grupės. Aromatinių junginių selektyvus meta-funkcionalizavimas. C-H aktyvavimo panaudojimas gamtinių junginių sintezėje.

Mukayama-Aldol reakcija ir jos panaudojimas kryptingoje organinėje sintezėje. Samario (II) jodido katalizuojamos reakcijos. Barbier'o reakcija. Reformatskio ir aldolinio tipo reakcijos. Karbonil-enuų reakcijos. Pinakolinio tipo reakcija. Fragmentacijos reakcijos.

Keliagubųjų C-C ir C-Het ryšių formavimas ir reakcijos. Dvigubojo ryšio formavimo reakcijų apžvalga: Wittig'o, Aza-Wittig'o, Horner-Wadsworth-Emmons'o, Horner-Wittig'o, Julia, Petersono, Corey-Winter'o reakcijos, jų tarpusavio palyginimas ir vaidmuo kryptingoje organinėje sintezėje.

Metatezės reakcijos organinėje sintezėje. Alkenų, eninų, alkinų intra- ir intermolekulinės metatezės reakcijos, jų mechanizmai. Naudojamų katalizatorių apžvalga.

Aukso katalizuojamos nesočiųjų substratų reakcijos. N-Heterociklinių karbenų katalizuojamos reakcijos. Prins'o tipo ciklizacijos reakcijos, jų rolė gamtinių junginių sintezėje. Multikomponentinės reakcijos. Elektrofilinės, nukleofilinės, radikalinės, periciklinės ir metalų katalizuojamos tandeminės reakcijos.

Pagrindinė literatūra

- Wyatt, P.; Warren, S. *Organic Synthesis: Strategy and Control*, Wiley, 2007.
- Zweifel, G.S.; Nantz M.H. *Modern Organic Synthesis: An Introduction*, W. H. Freeman and Company, New York, 2007.
- Clayden J., Greeves N., Warren S., Wothers P. *Organic Chemistry*. Oxford, OUP. 2001.
- Dale L. Boger, *Modern Organic Synthesis: Lecture Notes*, La Jolla, CA : TSRI Press, 1999.
- K.C. Nicolaou, E.J. Sorensen, *Classics in Total Synthesis, Targets, Strategies, Methods*, VCH, 1996
- Periodinė mokslinė literatūra (nurodoma konsultacijų metu).

Konsultuojančiųjų dėstytojų vardas, pavardė	Mokslo laipsnis	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
leva Žutautė	Dr.	<ol style="list-style-type: none"> I. Misiūnaitė, R. Bukšnaitienė, J. Pošiūnas, A. Brukštus, <i>I. Žutautė, J. Het. Chem</i>, 2022, 59, 10, 1712 – 1722. I. Misiūnaitė, R. Bajarūnaitė, R. Bukšnaitienė, A. Brukštus, <i>I. Žutautė, Synthesis</i>, 2023, 55, 24, 4213-4223. P. Kaziukonytė, T. Venslauskas, K. Venskūnaitė, <i>I. Žutautė, A. Brukštus, CHEMIJA</i>, 2023, 34, 4, 163–170. P. Kaziukonytė, V. Petraška, V. Kairys, A. Brukštus, <i>I. Žutautė, Asian J. Org. Chem.</i> 2024, 13, e202400170. I. Misiūnaitė, K. Mikalauskaitė, M. Paulauskaitė, R. Sniečkutė, V. Smirnovas, A. Brukštus, M. Žiaunys, <i>I. Žutautė, ACS Chem. Neurosci.</i> 2024, 15, 24, 4418–4430.

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.