

## DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslo kryptis (šaka) kodas	Fakultetas / Centras	Katedra
Organinių reakcijų mechanizmai	Chemija N 003	CHGF	Organinės chemijos
Studijų būdas	Kreditų skaičius	Studijų būdas	Kreditų skaičius
Paskaitos	-	Konsultacijos	4
Individualus	5	Seminarai	-

### Dalyko anotacija

Organinių reakcijų mechanizmai yra pagrindas norint suvokti reakcijos vykimo kryptį ir pagal poreikį keisti rezultata. Doktorantams siekiantiems šioje srityje pagilinti žinias yra duodama užduotis parengti pranešimą aktualia tema ir jį pristatyti viešai auditorijoje prieš komisiją ir kitus besidominčius ta tema VU bendruomenės narius bei žodžiu atsakyti į susirinkusiems iškilusius klausimus.

Organinių reakcijų mechanizmų kurso bazinė aprėptis yra ši:

Reakcijos mechanizmo samprata, nustatymo būdai, kinetika.

Nukleofilinio pakeitimo reakcijos ( $S_N1$ ,  $S_N2$ ,  $S_Ni$ ). Nukleofilškumas. Nukleofilškumas fermentinėse reakcijose.

Eliminavimo reakcijos ( $E2$ ,  $E1$ ,  $E1cb$ ), eliminavimo reakcijų stereochemija. Nukleofilinio pakeitimo ir eliminavimo reakcijų konkurencija, reakcijų sąlygų įtaka tam.

Prisijungimas prie  $C=C$  ryšio (elektrofilinis -  $Ad_E$  ir nukleofilinis  $Ad_N$ ). Karbenio, karbonio jonai. Neklasikiniai karbokatijonai. Elektrofiliniai persigrupavimai.

Elektrofilinis pakeitimas aromatiniam žiede ( $S_EAr$ ). Pakaitų orientavimas. Nukleofilinis pakeitimas aromatiniam žiede ( $S_NAr$ ). Aromatiškumas.

Radikalinės reakcijos. Radikalų generavimas ir aptikimas. Radikalinio pakaitų, prijungimo ir ciklizacijos reakcijos.

Rūgštys ir bazės organinėse reakcijose. Karbonilinių junginių rūgštingumas, enoliatai.

Prisijungimas ir pakeitimas prie  $C=X$ , kur  $X$  – heteroatomas, funkcinės grupės. Karbonilinių junginių kondensacijos reakcijos.

Periciklinės reakcijos, jų klasifikacija, HOMO ir LUMO orbitalių sąveika. Cikloprisijungimo ir cikloeliminavimo reakcijos.

Elektrociklinės reakcijos. Sigmatropiniai persigrupavimai.

Fotocheminės reakcijos. Pereinamųjų metalų kompleksai su organiniais junginiais.

Doktorantas neturintis organinių reakcijų mechanizmų pagrindų gali pasirinkti lankyti to paties pavadinimo kurso paskaitas skirtas antros pakopos chemijos programos studentams.

### Pagrindinė literatūra

F.A. Carey, R.J.Sandberg. 2007; Advanced Organic Chemistry; Springer.

M. B. Smith, J.March. 2007; March's Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms, and Structure; Wiley-Interscience.

E. Butkus, V. Masevičius, S. Stončius, 2012; Organinių reakcijų mechanizmų uždaviniai (Problems in organic reaction mechanisms); UAB TEV.

F. A. Carroll, 2010; Perspectives on Structure and Mechanism in Organic Chemistry; Wiley.

J. Clayden, N. Greeves, S. Warren, P. Wothers, 2000; Organic chemistry; Oxford University Press.

Konsultuojančiųjų dėstytojų vardas, pavardė	Mokslo laipsnis	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
Viktoras Masevičius	Dr.	<ol style="list-style-type: none"> <li>Rakauskaitė, R., Urbanavičiūtė, G., Simanavičius, M., Lasickienė, R., Vaitiekaitė, A., Petraitytė, G., Masevičius, V., Žvirblienė, A., Klimašauskas, S., Photocage-Selective Capture and Light-Controlled Release of Target Proteins, ISCIENCE (2020), doi: <a href="https://doi.org/10.1016/j.isci.2020.101833">https://doi.org/10.1016/j.isci.2020.101833</a>.</li> <li>Gražina Petraitytė, Vytenis Vaitkevičius, Besra Ōzer, <b>Viktoras Masevičius</b>.</li> </ol>

		<p>Synthesis of 5-substituted and 5,6-disubstituted furo[2,3-d]pyrimidines from 2-methylthio-4,6-pyrimidindione and bifunctional electrophiles. <i>Tetrahedron Lett.</i> <b>2019</b>, 1019-1021.</p> <p>3. Milda Mickutė, Milda Nainytė, Lina Vasiliauskaitė, Alexandra Plotnikova, <b>Viktoras Masevičius</b>, Saulius Klimašauskas, Giedrius Vilkaitis. Animal Hen1 2'-O-methyltransferases as tools for 3'-terminal functionalization and labelling of single-stranded RNAs. <i>NAR</i> <b>2018</b>, 46, e104.</p> <p>4. Aleksandr Osipenko, Alexandra Plotnikova, Milda Nainytė, <b>Viktoras Masevičius</b>, Saulius Klimašauskas, and Giedrius Vilkaitis. Oligonucleotide-Addressed Covalent 3'-Terminal Derivatization of Small RNA Strands for Enrichment and Visualization. <i>Angew. Chem. Int. Ed.</i> <b>2017</b>, 56, 6507–6510.</p>
--	--	--

Patvirtinta Vilniaus universiteto ir Fizinių ir technologijos mokslų centro Chemijos mokslo krypties doktorantūros komitete 2021 m. rugsėjo 28 d., protokolo Nr. 610000-KT-142.

Komiteto pirmininkas prof. habil. dr. Aivaras Kareiva