

DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslo kryptis (šaka) kodas	Fakultetas / Centras	Katedra
Heterociklinių junginių chemija	Chemija N 003	Chemijos ir geomokslų fakultetas	Organinės chemijos
Studijų būdas	Kreditų skaičius	Studijų būdas	Kreditų skaičius
Paskaitos		Konsultacijos	2
Individualus	3	Seminarai	2

Dalyko anotacija

Heterocikliniai junginiai gamtoje ir jų vieta organinėje chemijoje.
 Heterociklinių junginių nomenklatūra: trivalieji ir pusiau trivalieji pavadinimai, sisteminė monociklinių heterociklų nomenklatūra, kondensuotų heterociklų pavadinimai ir numeracija, Pakeitimo nomenklatūra. Dažniausiai heterocikluose sutinkamų heteroatomų ypatumai, kuo jie skiriasi nuo anglies.
 Heterociklizacijos reakcijų tipai:
 1. Ciklo užsidarymo (ciklizacijos) reakcijos: nukleofilinis pakeitimas prie anglies atomo, vidujmolekulinės radikalinės reakcijos, cikloužsidarymas dalyvaujant karbenams ir nitrenams, elektrocininės reakcijos.
 2. Cikloprisijungimo reakcijos: 1,3-dipoliarinis cikloprisijungimas, Dilso-Alderio ([4+2] cikloprisijungimo) reakcija, [2+2] cikloprisijungimo reakcija, cheletropinė reakcija.
 Heteroaromatiškumas. Heteroaromatiškumo kriterijai: struktūriniai, energiniai, diamagnetinės žiedo srovės efektas, cheminiai.
 Penkianariai heterociklai: Pirolas, furanas, tiofenas. Indolas (benzofuranas, benzotiofenas).
 1,2-, 1,3-Azoliai. Triazolai, oksadiazoliai, oksatiadiazoliai, mezojoniniai junginiai (sidonai), tetrazoliai. Dimroto, Boultono-Katrickio persigrupavimai. Sintezė, cheminės savybės, paplitimas gamtoje ir taikymas.
 Šešianariai heterociklai: Piridinas. Chinolinas, izochinolinas, chinazolinai. Pirilio druskos, 2H-pironai, 2,4H-pironai-4, benzopirilio katijonas, kumarinas, chromonas. Pirimidinas, piridazinas, pirazinas. Dažniausiai pasitaikantys mechanizmai heterociklų chemijoje. SN2Ar, AE-kine ir tele-mechanizmai, ANRORCn, ANRORCkine ir ANRORCtele mechanizmai. Triazinai, tetrazinas. Benzokondensuoti diazinai: cinolinas, ftalazinas, chinazolinai, chinoksalinas, fenazinas. Sintezė, cheminės savybės, paplitimas gamtoje ir taikymas.
 Kondensuotos heterociklinės sistemos: purinai, pteridinai. Sintezė, cheminės savybės, paplitimas gamtoje ir taikymas.
 Nearomatiniai heterocikliniai junginiai:
 Trinariai, keturnariai, septynnariai heterocikliniai junginiai. Sintezė, cheminės savybės, paplitimas gamtoje ir taikymas.

Pagrindinė literatūra

S. Tumkevičius, A. Brukštus „Heterociklinių junginių chemija“, 2008, Vilniaus, Pedagoginio universiteto leidykla.
 J.A. Joule, K. Mills „Heterocyclic Chemistry“, 2010, Blackwell.
 Papildoma literatūra
 Thomas L. Gilchrist „Heterocyclic Chemistry“ 1997, Longman.

Konsultuojančiųjų dėstytojų vardas, pavardė	Mokslo laipsnis	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
Algirdas Brukštus	Dr.	1. E. Kazlauskas, A. Brukštus, H. Petrikas, V. Petrikaitė, I. Čikotienė, D. Matulis, Improving the Hsp90 Inhibitors Containing 4-(2,4-Dihydroxyphenyl)-1,2,3-thiadiazole Scaffold: Synthesis, Affinity and Effect on Cancer Cells, Anticancer Agents Med Chem, 2017, 17, 1593-1603. 2. A. Urbanaitė, L. Šteinys, A. Brukštus, I. Čikotienė, Addition of Primary Amines to 2-(1-Alkynyl)-2-cycloalken-1-ones, Eur. J. Org. Chem., 2017, 12, 1624-1627.

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