

## DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslo kryptis (šaka) kodas	Fakultetas, institutas	Katedra, skyrius
<b>Heterociklinių junginių chemija</b>	Chemija 03P	Chemijos ir geomokslų fakultetas	Organinės chemijos katedra
Studijų būdas	Kreditų skaičius	Studijų būdas	Kreditų skaičius
paskaitos		konsultacijos	2
individualus	3	Seminarai, laboratoriniai darbai	2

### Dalyko anotacija

Heterocikliniai junginiai gamtoje ir jų vieta organinėje chemijoje.

Heterociklinių junginių nomenklatura: trivalieji ir pusiau trivalieji pavadinimai, sisteminė monociklinių heterociklų nomenklatura, kondensuotų heterociklų pavadinimai ir numeracija, Pakeitimo nomenklatura.

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, elektrociklinės reakcijos.

2. *Cikloprisijungimo* reakcijos: 1,3-dipoliarinis cikloprisijungimas, Dilso-Alderio ([4+2] cikloprisijungimo) reakcija, [2+2] cikloprisijungimo reakcija, cheletropinė reakcija.

Heteroaromatiškumas. Heterociklų klasifikacija pagal  $\pi$ -elektronų deficito ir pertekliaus koncepciją.  $\pi$ -Deficitiniai,  $\pi$ -pertekliniai ir  $\pi$ -amfoteriniai heterociklai. Heteroaromatiškumo kriterijai: struktūriniai, energiniai, diamagnetinės žiedo srovės efektas, cheminiai.

Penkianariai heterociklai: Pirolas, furanas, tiofenas. Indolas (benzofuranas, benzotiofenas).

1,2-, 1,3-Azolai. Triazolai, oksadiazolai, oksatiadiazolai, mezojoniniai junginiai (sidnonai), tetrazolai. Dimroto, Boultono-Katrickio persigrupavimai. Sintezė, cheminės savybės, paplitimas gamtoje ir taikymas.

Šešianariai heterociklai: Piridinas. Chinolinas, izochinolinas, chinazolinas. Pirilio druskos, 2*H*-pironai2, 4*H*-pironai-4, benzopirilio katijonas, kumarinas, chromonas. Pirimidinas, piridazinas, pirazinas. Dažniausiai pasitaikantys mechanizmai heterociklų chemijoje.  $S_N2Ar$ , AE-kine ir telemechanizmai, ANRORC<sup>n</sup>, ANRORC<sup>kine</sup> ir ANRORC<sup>tele</sup> mechanizmai. Triazinai, tetrazinas. Benzokondensuoti diazinai: cinolinas, ftalazinas, chinazolinas, 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", Vilnius, 2008, p. 258.

J.A.Joule, K.Mills "Heterocyclic Chemistry", Blackwell, 2010, p. 690.

Thomas L. Gilchrist "Heterocyclic Chemistry", Longman, 1997, p. 414.

Jie-Jack Li „Name Reactions in Heterocyclic Chemistry“, Wiley, 2005.

T.Eicher, S.Hauptmann "The Chemistry of Heterocycles", Thieme, 2004.

Konsultuojančiųjų dėstytojų vardas, pavardė	mokslo laipsnis	pedag. vardas	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
Algirdas Brukštus	Dr.	Doc.	I. Cikotiene, M. Morkunas, D. Motiejaitis, S. Rudys, A. Brukštus; The First Tandem Acetalization/5-Exo-dig Cyclization of 6-Phenylethynylpyrimidine-5-carbaldehydes: Efficient Synthesis of 5-Alkoxy-(7Z)-7-benzylidene-5,7-dihydrofuro[3,4-d]pyrimidines, <i>Synlett</i> , 2008, 11, 1693 - 1698.
			I. Cikotiene, V. Kairys, R. Buksnaitiene, M. Morkunas, S. Rudys, A. Brukštus, M. X. Fernandes; Study on the cyclization of 6-arylethynylpyrimidine-5-carbaldehydes with tertbutylamine: microwave versus thermal preparation of pyrido[4,3-d]pyrimidines, <i>Tetrahedron</i> , 2009, 65 (34), p. 5752–9.
			I. Cikotiene, M. Morkunas, S. Rudys, R. Buksnaitiene, A. Brukštus; An Efficient One-Pot Synthetic Method of 2,4-Disubstituted 7-Arylpyrido[4,3-d]pyrimidines from 2,4-Disubstituted 6-Arylethynylpyrimidine-5-carbaldehydes and <i>tert</i> -Butylamine, <i>Synlett</i> , 2008, 18, 2799 - 2802. <u>Highlighted by <i>Synfacts</i>, 2009, 1, 16.</u>
			I. Cikotiene, E. Pudziulevityte, A. Brukštus, Efficient One-Pot Synthesis of 6-Arylpyrrolo[3,2-d]pyrimidines from 6-Arylethynyl-5-nitropyrimidines, <i>Synlett</i> , 2010, 1107 - 1109.
			I. Karpaviciene, R. Lapinskaite, A. Brukštus, I. Cikotiene, Reductive Ring Cleavage of Nonconjugated $\Delta^2$ -Isoxazolines to $\beta$ -Hydroxy Ketones with Aluminum and Copper(II) Chloride <i>Synlett</i> , 2012(3), 381-384.

Patvirtinta Chemijos m. krypties Doktorantūros komitete 2017 m. rugsėjo 21 d., protokolo Nr. 610000-DP-44.

Komiteto pirmininkas prof. habil. dr. Aivaras Kareiva.