

DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslų kryptis (šaka) kodas	Fakultetas Institutas	Katedra Skyrius
Organinių junginių spektroskopija	Chemija 03P	Chemijos ir geomokslų fakultetas	Organinės chemijos katedra
Studijų būdas	Kreditu skaičius	Studijų būdas	Kreditu skaičius
paskaitos		konsultacijos	3
individualus	7,5	seminarai	

Dalyko anotacija

Spektroskopinių metodų taikymas organiniams junginiams identifikuoti.

Pagrindiniai metodai ir jų pagrindai: **UV/RŠ** (organinių junginių UV spektrai, jų struktūra, informacija gaunama iš spektrų. Tirpiklio, konjugacijos, struktūrinių pokyčių įtaka absorbcijos juostų intensyvumui bei padėčiai); **IR** (spektrų interpretacija, valentinių, deformacinių virpesių sritys. Faktoriai, turintys įtakos sugerties smailių padėčiai, pločiui, intensyvumui), **Ramano** (Informacija, gaunama iš Ramano spektrų. Paviršiaus sustiprinta Ramano spektroskopija.); **BMR** spektroskopija (principai, spektro registravimo būdai. Informacija, gaunama iš BMR spektrų. Cheminis poslinkis. Deekranavimas elektroneigiamais elementais, vandenilniais ryšiais. Anizotropija. Sukinių sąveika. Signalų multipletumas. Sąveikos konstanta, jos skaičiavimas. Cheminis ir magnetinis branduolių ekvivalentiškumas.) ir **masių** spektrometrija (Molekulinio jono gavimo būdai. Fragmentacijos taisyklės ir mechanizmai, informacija, gaunama iš masių spektrų.).

Sočiųjų, nesočiųjų, aromatinių ir funkcionalizuotų organinių junginių spektrinė analizė. UV/RŠ, IR, Ramano, BMR spektroskopijos ir masių spektrometrijos taikymas.

Erdvinės organinių junginių struktūros nustatymas spektriniais metodais. Chiroptiniai metodai – optinio sukimo dispersija ir apskritiminių dichrozmas.

Modernių BMR metodų taikymas organinių junginių struktūros nustatyme. Sukinių sistemos, pirmos bei aukštesnės eilės spektrai. Nelygiaverčių sukinių sąveikos aprašymas, „medžio“ diagramos. Aukštesnės eilės BMR spektrų nagrinėjimas. Dinaminiai procesai BMR spektroskopijoje. Koalescencijos temperatūros ir atitinkamos greičio konstantos skaičiavimai. Kitimų, vykstančių per tarpinę būseną, greičio konstantos, ketoenolinė tautomerija, tarpmolekuliniai protonų mainai. Kitų branduolių (¹¹B, ¹⁵N, ¹⁹F, ³¹P ir kt) spektroskopija, jos taikymas. Įvairių branduolių relaksacijos laikai, jų palyginimas. Poslinkio reagentai, chiralinio poslinkio reagentai. Branduolių dvigubos rezonanso eksperimentai (sukinių sąveikos panaikinimas, tiesioginis sukinių tyrimas, tarpmolekulinis dvigubas rezonansas ir kt). Branduolinis Overhauserio efektas, jo principai. 2D ir 3D BMR spektroskopija. Dvimačiai homokoreliaciniai, heterokoreliaciniai, NOESY, TOCSY spektrai.

Stambiamolekulinių ir gamtinių junginių struktūros nustatymo ypatumai.

Pagrindinė literatūra

1. H. Hesse, A. Meyer, A. Zeeh, Spectroscopic Methods in Organic Chemistry, Thieme, 1997.
2. R. M. Silverstein, F.X. Webster, Spectroscopic identification of Organic Compounds, NY, John Wiley, 1997
3. P. Atkins, J. de Paula, "Atkin's Physical Chemistry", 2006.
4. Clayden J., Greeves N., Warren S., Wothers P. Organic Chemistry. Oxford, OUP. 2001.
5. H. Friebolin. Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy. Wiley-VCH. 1991.

Konsultuojančiųjų dėstytojų vardas, pavardė	mokslo laipsnis	pedag. vardas	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
Inga Čikotienė	dr.	Prof.	<p>1. A. Urbanaitė, L. Šteinys, A. Brukštus, <u>I. Čikotienė</u>; Addition of Primary Amines to 2-(1-Alkynyl)-2-cycloalken-1-ones, <i>Eur. J. Org. Chem.</i>, 2017, 1624 – 1627.</p> <p>2. R. Bukšnaitienė, A. Urbanaitė, <u>I. Čikotienė</u>; Formation of Condensed 1<i>H</i>-Pyrrol-2-ylphosphonates and 1,2-Dihydropyridin-2-ylphosphonates <i>via</i> the Kabachnik-Fields Reaction of Acetylenic Aldehydes and Subsequent 5-<i>Exo</i>-dig or 6-<i>Endo</i>-dig Cyclizations, <i>J. Org. Chem.</i>, 2014, 79, 6532 – 6553.</p> <p>3. C. Trujillo, G. Sánchez-Sanz, I. Karpavičienė, U. Jahn, <u>I. Čikotienė</u>, L. Rulíšek; Divergent Pathways and Competitive Mechanisms of Metathesis Reactions between 3-Arylprop-2-ynyl esters and Aldehydes: An Experimental and Theoretical Study, <i>Chem. Eur. J.</i>, 2014, 20, (33), 10360 – 10370.</p> <p>4. <u>I. Čikotienė</u>; Rearrangements of Propargylic Esters can be Induced by Some Electrophiles, <i>Org. Lett.</i>, 2014, 16, 2260 – 2263.</p> <p>5. I. Karpaviciene, <u>I. Čikotienė</u>; A Unique Cascade Reaction between 3-Arylprop-2-ynylcarboxylates and Benzaldehydes Leading to the Formation of Morita-Baylis-Hillman Adducts, <i>Org. Lett.</i>, 2013, 15 (1), 224 - 227.</p>

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

Komiteto pirmininkas prof. habil. dr. Aivaras Kareiva.