

### DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslo kryptis (šaka) kodas	Fakultetas, institutas	Katedra, skyrius
<b>Organinių reakcijų mechanizmai</b>	Chemija 03P	Chemijos ir geomokslų fakultetas	Organinės chemijos katedra
Studijų būdas	Kreditų skaičius	Studijų būdas	Kreditų skaičius
paskaitos	3	konsultacijos	1
individualus	5	seminarai	

#### Dalyko anotacija

Reakcijos mechanizmo samprata. Elektroninio tankio pasiskirstymo molekulėje ir molekulių orbitalių teorijų samprata. Termodinamikos, kinetikos, stereochemijos taikymas organinių reakcijų mechanizams tirti, tiesioginis mechanizmų stebėjimas bei teoriniai, kvantų mechanikos principais besiremiantys, skaičiavimai. Pagrindinės mechanizmo koncepcijos, reakcijos tarpinė būseną. Reakcijos mechanizmo nustatymo metodai. Nukleofilinio pakeitimo reakcijų  $S_N1$ ,  $S_N2$  ir  $S_Ni$  mechanizmai – substrato struktūros, nukleofilškumo, nukleofugo įtaka reakcijos mechanizmui. Eliminavimo reakcijų E2, E1, E1cB ir Ei mechanizmai, eliminavimo reakcijų stereochemija. Prisijungimas prie C=C ryšio. Elektrofilinis ( $Ad_E$ ) ir nukleofilinis ( $Ad_N$ ) prisijungimas. Karbonio ir karbenio jonai, neklasikiniai karbokatijonai. Radikalų generavimas ir jų nustatymas. Radikalinės pakeitimo, prisijungimo ir ciklizacijos reakcijos. Elektrofilinis pakeitimas aromatiniam žiede:  $S_EAr$  mechanizmas. Aromatiškumas. Pakeitimo aromatiniam žiede orientacija. Nukleofilinis pakeitimas aromatiniam žiede. Rūgštys ir bazės. Prisijungimas prie C=O ir kitų ryšių anglis-heteroatomas. Reakcijos, kurių metu hidridas arba metalo jonas prisijungia prie heteroatomo. Organinių metalo junginių reakcijos. Enoliatai. Karboniljunginių kondensacijos reakcijos. Periciklinės reakcijos, jų klasifikacija, HOMO ir LUMO orbitalių sąveika. Cikloprisijungimo ir cikloeliminavimo reakcijos. Elektrociklinės reakcijos. Sigmatropiniai persigrupavimai. Organinių ir fermentinių reakcijų mechanizmų palyginimas. Fotocheminės reakcijos. Molekuliniai persigrupavimai: nukleofiliniai ir elektrofiliniai persigrupavimai.

#### Pagrindinė literatūra

M. B. Smith, J. March. *March's Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms, and Structure*. Wiley-Interscience; 6th edition, 2007.

F. A. Carroll. *Perspectives on Structure and Mechanism in Organic Chemistry*, 2nd Edition, Wiley, 2010.

R. Brückner, *Organic Mechanisms*, M. Harmata, Ed., Springer; 2010.

F.A. Carey, R.J. Sandberg. *Advanced Organic Chemistry*. 5th edition, Springer; 2007.

Konsultuojančiųjų dėstytojų vardas, pavardė	mokslo laipsnis	pedag. vardas	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
Viktoras Masevičius	dr.	prof.	<p>Aleksandr Osipenko, Alexandra Plotnikova, Milda Nainytė, <b>Viktoras Masevičius</b>, Saulius Klimašauskas, and Giedrius Vilkaitis, <i>Angew. Chem. Int. Ed.</i> <b>2017</b>, 56, 6507–6510</p> <p>Rasa Rakauskaitė, Giedrė Urbanavičiūtė, Audronė Rukšėnaitė, Zita Liutkevičiūtė, Robertas Juškėnas, <b>Viktoras Masevičius</b> and Saulius Klimašauskas. <i>Chem. Commun.</i> <b>2015</b>, 51, 8245-8248.</p> <p>Alexandra Plotnikova, Aleksandr Osipenko, <b>Viktoras Masevičius</b>, Giedrius Vilkaitis and Saulius Klimašauskas. <i>J. Am. Chem. Soc.</i> <b>2014</b>, 136, 13550–13553</p>

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

Komiteto pirmininkas prof. habil. dr. Aivaras Kareiva.