

DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO PROGRAMA

Dalyko pavadinimas	Mokslų kryptis (šaka) kodas	Fakultetas Institutas	Katedra skyrius
Šiuolaikinė organinė sintezė	Chemija 03P	Chemijos ir geomokslų fakultetas	Organinės chemijos katedra
Studijų būdas	Kreditu skaičius	Studijų būdas	Kreditu skaičius
paskaitos		konsultacijos	2
individualus	5	seminarai	
Dalyko anotacija			
<p>Šiuolaikinės ir totalinės sintezės principai.</p> <p>Organinių junginių konformacijos analizė ir įtaka reaktiškumui. Organinių reakcijų termodinamika ir kinetika, pereinamosios būsenos. Reakcijų mechanizmai.</p> <p>Klasikinių organinės sintezės metodų analizė ir įvedimas į moderniąją chemiją, pritaikymas gamtinių junginių sintezėje.</p> <p>Prinso tipo ciklizacijos, Diels-Alderio cikloprisijungimo reakcijos, jų rolė gamtinių junginių sintezėje. Tandeminės reakcijos. Elektrofiliškos, nukleofiliškos, radikalinės, periciklinės ir metalų katalizuojamos tandeminės reakcijos. Multikomponentinės reakcijos.</p> <p>Fotochemijos principai, pagrindiniai mechanizmai, [2+2] cikloprisijungimo reakcijos, indėlis į totalinę sintezę. Fotoredukso reakcijos ir katalizatoriai.</p> <p>Viengubųjų C-C ir C-Het ryšių formavimo rinktiniai skyriai. C-H aktyvavimas ir funkcionalizavimas organinėje sintezėje. C-H aktyvavimo mechanizmai. Neaktyvuotų ir aktyvuotų C(sp³)-H ryšių funkcionalizavimas, regio ir stereoselektyvumo principai. Aromatinių junginių funkcionalizavimas, orto- ir meta-strategijos, nukreipiančios grupės. C-H aktyvavimo panaudojimas gamtinių junginių sintezėje.</p> <p>Keliagubųjų C-C ir C-Het ryšių formavimas ir reakcijos. Dvigubojo ryšio formavimo reakcijų apžvalga: Wittigo, Aza-Wittig'o, Horner-Wadsworth-Emmonso, Horner-Wittigo, Julia, Petersono, Corey-Wintero reakcijos, jų tarpusavio palyginimas ir vaidmuo kryptingose organinėje sintezėje.</p> <p>Metatezės reakcijos organinėje sintezėje. Alkenų, eninų, alkinų intra- ir intermolekulinės metatezės reakcijos, jų mechanizmai. Naudojamų katalizatorių apžvalga.</p> <p>Aukso katalizuojamos nesočiųjų substratų reakcijos. N-Heterociklinių karbenų katalizuojamos reakcijos.</p> <p>Mikrobangų inicijuota sintezė. Aparatūra, naudojami tirpikliai, metodų taikymo galimybės.</p> <p>Žaliosios organinės sintezės principai. Atomų ekonomija.</p> <p>Joninių skysčių panaudojimas. Tekmės reaktoriai organinėje sintezėje. Cheminių procesų optimizavimas.</p>			
Pagrindinė literatūra:			
<ol style="list-style-type: none"> Wyatt, P.; Warren, S. Organic Synthesis: Strategy and Control, Wiley, 2007. Zweifel, G.S.; Nantz M.H. Modern Organic Synthesis: An Introduction, W. H. Freeman and Company, New York, 2007. Clayden J., Greeves N., Warren S., Wothers P. Organic Chemistry. Oxford, OUP. 2001. Dale L. Boger, Modern Organic Synthesis: Lecture Notes, La Jolla, CA : TSRI Press, 1999. K.C. Nicolaou, E.J. Sorensen, Classics in Total Synthesis, Targets, Strategies, Methods, VCH, 1996 Periodinė mokslinė literatūra (nurodoma konsultacijų metu). 			

Konsultuojančiųjų dėstytojų vardas, pavardė	mokslo laipsnis	pedag. vardas	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
Ieva Karpavičienė	dr.	Asist.	<p>1. <u>I. Karpavičienė</u>, G. Valiulienė, V. Raškevičius, I. Lebedytė, A. Brukštus, V. Kairys, R. Navakauskienė, I. Čikotienė; Synthesis and Antiproliferative Activity of α-Branched α,β-Unsaturated Ketones in Human Hematological and Solid Cancer Cell Lines, <i>Eur. J. Med. Chem.</i>, 2015, 98, 30 – 48.</p> <p>2. C. Trujillo, G. Sánchez-Sanz, <u>I. Karpavičienė</u>, U. Jahn, I. Čikotienė, L. Rulišek; 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, 10360 – 10370.</p> <p>3. <u>I. Karpaviciene</u>, I. Cikotiene, José M. Padrón; Synthesis and antiproliferative activity of α-branched α,β-unsaturated ketones, <i>Eur. J. Med. Chem.</i>, 2013, 70, 568 – 578.</p> <p>4. <u>I. Karpaviciene</u>, I. Cikotiene; 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> <p>5. <u>I. Karpaviciene</u>, R. Lapinskaite, A. Brukštus, I. Cikotiene; Reductive Ring Cleavage of Nonconjugated Δ^2-Isoxazolines to β-Hydroxy Ketones with Aluminum and Copper (II) Chloride, <i>Synlett</i>, 2012, 23, 381 – 384.</p>

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

Komiteto pirmininkas prof. habil. dr. Aivaras Kareiva.