

DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslo kryptis (šaka) kodas	Fakultetas / Centras	Katedra
Organometalinių junginių chemija	Chemija N 003	Chemijos ir geomokslų fakultetas, Chemijos institutas	Organinės chemijos katedra
Studijų būdas	Kreditų skaičius	Studijų būdas	Kreditų skaičius
Paskaitos	3	Konsultacijos	1
Individualus	4	Seminarai	1

Dalyko anotacija

Organometalinių junginių klasifikacija, nomenklatūra. Ryšio "anglis-metalas" prigimtis. Organiniai magnio junginiai, jų sandara, sintezės metodai. Grignard'o junginių panaudojimas sintezėje: reakcijos ir jų mechanizmai bei stereochemija su karbonilniais junginiais, su orto formiatais, prisijungimas prie nesočiųjų karbonilinių junginių, epoksidų reakcijos su nitroareneis ir kt. Organiniai ličio junginiai, jų sandara, reaktivitys priklausomybė nuo agregacijos laipsnio, sandaros ypatumų bei ligandų prigimties. Organinių ličio junginių sintezės metodai ir cheminės savybės. Organinių ličio junginių reakcijos. Organiniai boro junginiai. Organiniai boranai, jų sandaros ypatybės, multicentrinų ryšių susidarymas. Organiniai alavo junginiai. Trialkilalavo halogenidų sintezė, savybės, sandara. Stananų sintezė ir savybės, jų taikymas organinių ličio junginių sintezėje. Radikalinės halogeno hidrogenolizės bei alkilhalogenidų jungimo reakcijos prie aktyvuoto dvigubojo ryšio, panaudojant trialkilalavo hidridą. Organiniai vario junginiai, jų klasifikacija, sandara, sintezė ir reaktivitys. Kupratinių reagentų reakcijos su karbonilniais junginiais, halogenidais, rūgščių chloranhidridais, nesočiaisiais karbonilniais junginiais ir t.t. Reakcijų regio- ir stereoselektyvumas. Mišrių kupratų panaudojimas sintezėje. Organiniai boro junginiai. Organiniai boranai, jų sandaros ypatumai, multicentrinų ryšių susidarymas. Hidroborinimo reakcijos regio- ir stereoselektyvumas. Mišrių boranų panaudojimas hidroborinimo reakcijoje. Alil- ir krotilboranų reakcijos su aldehidais. Organoboranų reakcijos su dichlormetiličiu ir jų panaudojimas chiralinių junginių sintezėje; alkilboranų protonolizės, halogenolizės, karbonilinimo, cianidinimo ir kt. reakcijos. Organiniai silicio junginiai. Silicio ir anglies elementų palyginimas. Organiniai silanoliai ir silikonai. Silenai ir polisilenai. Nukleofilinis pakeitimas prie Si atomo. Arilsilanų ipso pakeitimo reakcijos. Vinilsilanų sintezės būdai ir jų reakcijos su elektrofiliniais reagentais. Alilsilanų sintezės metodai ir jų reakcijos su elektrofiliniais reagentais. Sililepoksido reakcijos su nukleofiliniais reagentais. Petersono reakcija.

Organometaliniai junginiai - organinių reakcijų katalizatoriai. C-C, C-N ir C-O ryšių sudarymo reakcijos; šių reakcijų taikymas aromatinių ir heteroaromatinių junginių sintezėje. Inter- bei intramolekulinė Hecko reakcija, jos regio- ir stereochemija. Pd(0) katalizuojamos reakcijos su alilo elektrofilais, 1,3- ir 1,4-dienais. Karbonilinimo reakcija, jos panaudojimas aldehidų, ketonų, esterių sintezėje. Sonogashira, Stille, Suzuki, Kumada, Negishi reakcijos, jų mechanizmai, ypatumai, panaudojimas aciklinių ir heterociklinių bei poliaromatinių funkcinių medžiagų, naudojamų organinėje elektronikoje ir nanotechnologijose, sintezėje ir taikymo galimybės. Organinių junginių C-H aktyvavimo reakcijos. C-N ir C-O ryšių sudarymo reakcijos. Ni katalizuojamos fotoredukso reakcijos C-C ryšio formavime.

Pagrindinė literatūra

Moksliniai straipsniai tarptautiniuose periodiniuose mokslo žurnaluose J. Organomet Chem.; Organometallics, Advanced Synthesis and Catalysis, JACS, J. Org. Chem, ACIE, Org. Letters, J. Materials chemistry C ir kt.
 Sigita Tumkevičiūtė. Organinių metalų junginių chemija. – Vilnius: UAB TEV, 2012, 202 p.
 Gary O. Spessard, Gary L. Miessler. Organometallic Chemistry. 2nd Ed. Oxford University Press, 2009, 752p.
 Modern Organonickel Chemistry. Ed. Y. Tamaru. WILEY-VCH, 2005, 327 p.
 P. R. Jenkins. Organometallic Reagents in Synthesis. - New York: Oxford University Press, 2001.
 Metal-Catalyzed Cross-Coupling Reactions, Second, Completely Revised and Enlarged Edition, 2004
 Eds: Armin de Meijere, Francois Diederich.
 J. Tsuji. Palladium Reagents and Catalysts. Innovations in Organic Synthesis. -J.Wiley and Sons, 1999, 560 p.

Konsultuojančiųjų dėstytojų vardas, pavardė	Mokslo laipsnis	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
Sigitas Tumkevičius	Habil.dr.	<ol style="list-style-type: none"> 1. T. Serevičius, R. Skaisgiris, G. Kreiza, J. Dodonova, K. Kazlauskas, E. Orentas, S. Tumkevičius, S. Jursenas. TADF parameters in solid-state: an easy way to wrong conclusions. <i>Journal of physical Chemistry A</i>, 2021, 125, 7, 1637-1641; https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpca.0c10391 2. T. Serevičius, R. Skaisgiris, I. Fiodorova, G. Kreiza, D. Banevičius, K. Kazlauskas, S. Tumkevičius, S. Juršėnas. Single-exponential solid-state delayed fluorescence decay in TADF compounds with minimized conformational disorder. <i>Journal of Materials Chemistry C</i>, 2021, 9, 836-861. https://doi.org/10.1039/D0TC05503D 3. J. Jovaisaite, D. Cīrule, A. Jeminejs, I. Novosjolova, M. Turks, P. Baronas, R. Komskis, S. Tumkevičius, G. Jonusauskas, S. Jursenas. Proof of principle of a purine D–A–D' ligand based ratiometric chemical sensor harnessing complexation induced intermolecular PET. <i>Physical Chemistry Chemical Physics</i>, 2020, 22 (45), 26502-26508; https://dx.doi.org/10.1039/d0cp04091f
Jelena Dodonova-Vaitkūnienė	Dr.	<ol style="list-style-type: none"> 4. T. Serevičius, J. Dodonova, R. Skaisgiris, D. Banevičius, K. Kazlauskas, S. Juršėnas, S. Tumkevičius. Optimization of the carbazole–pyrimidine linking pattern for achieving efficient TADF. <i>Journal of Materials Chemistry C</i>, 2020, 8, 11192–11200; https://dx.doi.org/10.1039/d0tc02194f 5. T. Serevičius, R. Skaisgiris, J. Dodonova, L. Jagintavičius, D. Banevičius, K. Kazlauskas, S. Tumkevičius, S. Juršėnas. Achieving Submicrosecond TADF Lifetime and Highly Efficient Electroluminescence by Fine Tuning of Phenoxazine-Pyrimidine Structure. <i>ACS Applied Materials and Interfaces</i>, 2020, 12, 10727–10736. https://dx.doi.org/10.1021/acsami.9b21394 6. T. Serevičius, R. Skaisgiris, I. Fiodorova, V. Steckis, J. Dodonova, D. Banevičius, K. Kazlauskas, S. Jursenas, S. Tumkevičius. Achieving efficient deep-blue TADF in carbazole-pyrimidine compounds. <i>Organic Electronics</i>, 2020, 82, art.no. 105723; https://doi.org/10.1016/j.orgel.2020.105723 7. T. Serevičius, R. Skaisgiris, J. Dodonova, K. Kazlauskas, S. Juršėnas, S. Tumkevičius. Minimization of solid-state conformational disorder in donor–acceptor TADF compounds.

		<p><i>Physical Chemistry Chemical Physics</i>, 2020, 22, 265-272; DOI: 10.1039/C9CP05907E</p> <p>8. S. Toliautas, J. Dodonova, A. Žvirblis, I. Čiplys, A. Polita, A. Devižis, S. Tumkevičius, J. Šulskus, A. Vyšniauskas. Enhancing the Viscosity-Sensitive Range of a BODIPY Molecular Rotor by Two Orders of Magnitude. <i>Chemistry – A European Journal</i>, 2019, 25(44), 10342-10349; doi: 10.1002/chem.201901315.</p> <p>9. T. Serevičius, R. Skaisgiris, J. Dodonova, L. Jagintavičius, J. Bucevičius, K. Kazlauskas, S. Juršėnas, S. Tumkevičius. Emission wavelength dependence on the rISC rate in TADF compounds with large conformational disorder. <i>Chemical Communications</i>, 2019, 55, 1975-1978; DOI: 10.1039/c8cc08906j</p> <p>10. A. Šišulins, J. Bucevičius, Y.-T. Tseng, I. Novosjolova, K. Traskovskis, Ē. Bizdēna, H.-T. Chang, S. Tumkevičius, M. Turks. Synthesis and fluorescent properties of N(9)-alkylated 2-amino-6-triazolylpurines and 7-deazapurines. <i>Beilstein Journal of Organic Chemistry</i> 2019, 15, 474–489, doi:10.3762/bjoc.15.41</p>
--	--	---

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