

## DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslo kryptis (šaka) kodas	Fakultetas / Centras	Katedra
Organinių junginių spektroskopija	Chemija N 003	Chemijos ir geomokslų fakultetas	Organinės chemijos katedra
Studijų būdas	Kreditų skaičius	Studijų būdas	Kreditų skaičius
Paskaitos		Konsultacijos	3
Individualus	7	Seminarai	

### Dalyko anotacija

Spektroskopinių metodų taikymas ir spektrų analizė, skirta organinių junginių struktūros nustatymui.

Pagrindiniai metodai ir jų pagrindai:

**UV/RŠ spektroskopija** – organinių junginių UV spektrai, jų struktūra. Tirpiklio, konjugacijos, struktūrinių pokyčių įtaka absorbcijos juostų intensyvumui bei padėčiai. Chiroptiniai metodai – optinio sukimo dispersija ir apskritiminis dichrozimas;

**IR ir Ramano spektroskopija** – spektrų interpretacija, valentinių, deformacinių virpesių sritys. Faktoriai, turintys įtakos sugerties smailių padėčiai, pločiui, intensyvumui. Informacija, gaunama iš Ramano spektrų. Paviršiaus sustiprinta Ramano spektroskopija;

**Masių spektrometrija** – molekulinio jono gavimo būdai. Fragmentacijos taisyklės ir mechanizmai;

**BMR spektroskopija** – principai, spektro registravimo būdai. Cheminis poslinkis. Deekranavimas elektroneigiamais elementais, vandenilniais ryšiais. Anizotropija. Sukinių sąveika. Signalų multipletumas. Sąveikos konstanta, jos skaičiavimas. Cheminis ir magnetinis branduolių ekvivalentiškumas.

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

Erdvinės organinių junginių struktūros nustatymas spektriniais metodais.

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, tarp molekuliniai protonų mainai. Kitų branduolių (<sup>13</sup>C, <sup>15</sup>N, <sup>19</sup>F, <sup>31</sup>P ir kt.) spektroskopija, jos taikymas. Įvairių branduolių relaksacijos laikai, jų palyginimas. Poslinkio reagentai, chiralinio poslinkio reagentai. Branduolių dvigubojo rezonanso eksperimentai (sukinių sąveikos panaikinimas, tiesioginis sukinių tyrimas, tarp molekulinis 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

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

Konsultuojančiųjų dėstytojų vardas, pavardė	Mokslo laipsnis	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
Ieva Žutautė	Dr.	<ol style="list-style-type: none"> <li>I. Karpavičienė, M. Jonušis, K. Leduskrasts, I. Misiūnaitė, E. Suna, I. Čikotienė, <i>Dyes and Pigments</i>, <b>2019</b>, 170, 107646.</li> <li>J. Dinić, C. Ríos-Luci, I. Karpaviciene, I. Cikotiene, M. X. Fernandes, M. Pešić, J. M. Padrón, <i>Invest New Drugs</i>, <b>2020</b>, 38, 584 – 598.</li> <li>T. Javorskis, I. Karpavičienė, A. Jurys, G. Snarskis, R. Bukšnaitienė, E. Orentas, <i>Angew. Chem. Int. Ed.</i>, <b>2020</b>, 59, 20120– 20128.</li> </ol>

Patvirtinta Vilniaus universiteto ir Fizinių ir technologijos mokslų centro Chemijos mokslo krypties doktorantūros komitete 2021 m. spalio 6 d., protokolo Nr. 610000-KT-153.

Komiteto pirmininkas prof. habil. dr. Aivaras Kareiva