



KAUNO
TECHNOLOGIJOS
UNIVERSITETAS

SINTETINĖS
CHEMIJOS
INSTITUTAS



2011

METŲ VEIKLOS ATASKAITA

Turinys

1. Direktoriaus žodis	3
2. Studijuojančiųjų kompetencijos ugdymas ir studijų kokybės gerinimas.....	4
3. Žinių ir technologijų kūrimas ir perdavimas	5
4. SCI veiklos užtikrinimas.....	10
5. SCI akademinė aplinka ir infrastruktūra.	11
6. 2011 m. pagrindiniai statistiniai rodikliai	12

Direktorius žodis

Funkcinių molekulių ir medžiagų kūrimas, sintezė ir tikslių savybių tyrimai yra viena iš svarbiausių šiuolaikinio chemijos mokslo krypčių. Daugelio aukštųjų technologijų sričių: šiuolaikinių vaistų paieška, nanotechnologijos, informacinės technologijos ir kt., plėtra gerokai sąlygojama naujų efektyvių funkcinių medžiagų prieinamumu.

Vyraujanti tendencija medžiagų kūrimo strategijose yra funkcinių medžiagų gavimas, pradedant molekulinio lygiu. Siekiama sukurti naujas molekules, turinčias funkcines grupes, kurių buvimas lemia ir medžiagos funkcines savybes. Iš esmės yra kuriamos ne molekulės, o tikslinės funkcijos. Be tokio požiūrio būtų neįmanoma sukurti naujų vaistų, nanomedžiagų, organinių fotopūsloidininkų ir daugelio kitų svarbių medžiagų. Šiuo metu egzistuojantys molekulių ir jų savybių modeliavimo metodai dažnai leidžia numatyti, kokių funkcinių molekulių reikėtų, kad jų pagrindu gauta medžiaga įgytų norimas savybes. Deja, šiuolaikinės sintezės metodai dar nėra pajėgūs tenkinti visų naudojant molekulių dizainą sukurtų molekulių sintezės reikalavimų. Todėl naujų efektyvių sintezės metodų paieška yra ne

mažiau svarbus uždavinys nei pačių molekulių dizainas. Svarbu pažymėti, kad sintezės metodai turi būti efektyvūs ir darniosios chemijos reikalavimų požiūriu: tiek produktai, tiek žaliavos turi būti kuo mažiau pavojingi aplinkai ir žmonėms, procese neturi susidaryti atliekų ar jų kiekis turi būti minimalus, bent dalis žaliavų turi būti gauta iš atsinaujinančių šaltinių, procesams vykdyti energijos sąnaudos turi būti minimalios. Norint suderinti šiuos darniosios chemijos tikslus su technologiniais reikalavimais medžiagoms, reikalinga atlikti intensyvius tyrimus tiek, pavyzdžiui, ieškant katalitinių procesų, tiek panaudojant naujas žaliavas, gaunamas iš atsinaujinančių šaltinių.

KTU Sintetinės chemijos instituto pagrindinė mokslinė veiklos kryptis yra funkcinių organinių junginių, taikomų aukštosiose technologijose, kūrimas ir efektyvių jų sintezės metodų paieška. Šių tyrimų tikslas – didelę pridėtinę vertę turinčių mokslinių ir technologinių žinių generavimas ir tolesnis transformavimas į inovatyvius produktus. Atliekant minėtos krypties tyrimus, pagrindiniai uždaviniai yra organinių junginių, turinčių naujų reikalingų vidinių savybių, dizainas naudojant karbociklinių ir heterociklinių junginių struktūras, efektyvi organinių junginių sintezė ir funkcionalizavimas taikant katalitinius metodus, junginių struktūros nustatymas taikant branduolių magnetinio rezonanso spektroskopijos, rentgeno struktūrinės analizės ir kitus metodus, taip pat kai kurių vidinių medžiagų savybių nustatymas.



Direktorius
prof. habil. dr. Algirdas Šačkus



2 Studijuojančiųjų kompetencijos ugdymas ir studijų kokybės gerinimas

SCI darbuotojai 2011 m. dalyvavo studijų procese – dėstė atskirus modulius ir vadovavo studentų moksliniams darbams. 2011 m. KTU Cheminės technologijos fakultete SCI darbuotojai dėstė *Medicininės chemijos* ir *Žaliosios chemijos* kursus magistrų studijose, vadovavo 5 studentų moksliniam darbui.

Modernizavus instituto infrastruktūrą, numatoma suaktyvinti instituto veiklą, rengiant studentų mokslinius darbus ir daktaro disertacijas bei vykdant podoktorantūros studijas.



3 Žinių ir technologijų kūrimas ir perdavimas

Pagrindinė KTU Sintetinės chemijos instituto tyrimų ir eksperimentinės plėtos kryptis yra **funkcinių molekulių ir medžiagų kūrimas, sintezė, struktūros ir tikslinių savybių nustatymas**. Dirbant šios krypties darbus, atliekami tokių tematikų tyrimai

- Heterociklinių junginių sintezė ir tyrimai,
- Biologiškai aktyvių medžiagų kūrimas,
- Organinių optinių medžiagų kūrimas,
- Atsinaujinančių biomedžiagų panaudojimas organinėje sintezėje,
- Metalais katalizuojamos kryžminio jungimo reakcijos.

Tyrimų tematika yra tiesiogiai susijusi tiek su skelbiamaisiais atvirojo mokslinėje spaudoje moksliniais tyrimais, tiek su konfidencialiais užsakomaisiais tyrimais.

2011 metais heterociklinių junginių sintezės ir tyrimų srityje pastangos buvo koncentruojamos į dvi kryptis: naujų funkcionalizuotų biciklinių darinių sintezę ir pirazolo darinių sintezę. Bicikliniai organiai junginiai buvo toliau naudojami kaip pagrindiniai struktūriniai elementai sintetinant įvairius biologiškai aktyvius junginius. Kita šios tematikos tyrimų kryptis apėmė funkcionalizuotų pirazolo darinių sintezę. Toliau buvo kuriami metodai, kaip iš lengvai prieinamų, pramonėje gaminamų pirazolo darinių susintetinti polifunkcionalizuotus darinius, kurie toliau galėtų būti naudojami kaip vertingi sintonai biologiškai aktyvių medžiagų sintezėje, ir gauti optoelektronines medžiagas. Šiam tikslui toliau buvo tiriamas pirazolo darinių funkcionalizavimas, panaudojant Pd-katalizuojamas kryžminio jungimo reakcijas. Tyrimai buvo atliekami bendradarbiaujant su prof. W. Holzer (Vienos universitetas, Austrija) mokslo grupe.

Kuriant biomolekulių analogus, gautos naujos suvaržytos konformacijos aminorūgštys kaip foldamerų sintonai. Atliekant šiuos tyrimus, buvo bendradarbiaujama su prof. N. De Kimpe grupe (Gento universitetas, Belgija).

Atsinaujinančių biomedžiagų tyrimų srityje toliau buvo dirbama ieškant glicerolio transformacijos į aktyvius reagentus būdų, taip pat kaip toliau panaudoti šiuos reagentus heterocikliniams junginiams funkcionalizuoti. Šis projektas buvo vykdomas bendradarbiaujant su prof. A. Tatibouet ir prof. P. Rollin (Orleano universitetas, Prancūzija) grupe, tęsiant Gillibert projekto „Žalioji chemija: glicerolio, atsinaujinančio sintono tiksliajai chemijai“ darbus.





2011 metais buvo baigti tyrimai, siekiant panaudoti glicerolio karbonatą tokiems heterocikliniams junginiams funkcionalizuoti.

Organinių optinių medžiagų kūrimas koncentravosi į funkcionalizuotus pirazolo darinius kaip sintonus nanodalelėms generuoti. Vykdam bendradarbiavimą su VU Kvantinės elektronikos katedra, susintetinti ir ištirti nauji originalūs ultragreiti organiniai fotojungikliai.

KTU Sintetinės chemijos institute atliekami tyrimai yra glaudžiai integruoti su daugelio užsienio biotechnologinių kompanijų vykdomais vaistų kūrimo darbais. Šių tyrimų bendra apimtis 2011 metais sudarė 375 000 Lt. Pagrindinės užsakomųjų tyrimų kryptys: suvaržytos konformacijos aminorūgščių sukūrimas, sintezė ir charakterizavimas, biciklinių heterociklų sintezės metodų sukūrimas, heterociklinių junginių funkcionalizavimo metodų sukūrimas, funkcionalizuotų heterociklų sintezė ir charakterizavimas.

KTU SCI 2011 m. darbuotojai kartu su bendraautoriais pateikė vieną pranešimą tarptautinėje mokslinėje konferencijoje:

Šačkus A., Martynaitis V., Kleizienė N., Amankavičienė V., Kontenis L., Vengris, M. 5a,13-Methano-1,3-benzoxazepino[3,2-*a*] indoles as new ultrafast photochromic switches. *12th Tetrahedron Symposium, Sitges, Spain, June 21–24, 2011, Delegate Manual and CD Rom, P1.131.*

Sintetinės chemijos institutas
2011 m. kartu su bendraautoriais
paskelbė 6 publikacijos publikacijos
„Thomson Reuters Web of Knowledge“
sąrašo leidiniuose su citavimo indeksu:

1. Vilkauskaitė G., Eller G. A., Šačkus A., Holzer W. The Sonogashira coupling offers a new synthetic route to thieno[2,3-c]pyrazoles. *Synthetic Commun.*, **2011**, vol. 41, No 4, 541–547.
2. Arbačiauskienė E., Vilkauskaitė G., Šačkus A., Holzer W. Ethyl 3- and 5-trifloyloxy-1*H*-pyrazole-4-carboxylates in the synthesis of condensed pyrazoles by Pd-catalyzed cross-coupling reactions. *Eur. J. Org. Chem.*, **2011**, 1880–1890.
3. Martynaitis V., Steponavičiūtė R., Krikštolaitytė S., Solovjova J., Mangelinckx S., De Kimpe N., Holzer W., Šačkus A. Synthesis and reactions of 1-hydroxy-1,2,3,9a-tetrahydroimidazo[1,2-*a*]indol-2(9*H*)-ones. *Tetrahedron*, **2011**, vol. 67, 3945–3953.
4. Arbačiauskienė E., Martynaitis V., Krikštolaitytė S., Holzer W., Šačkus A. Synthesis and Pd-catalyzed cross-coupling reactions of 3-trifloyloxy-1-phenyl-1*H*-pyrazole-4-carbaldehyde and the corresponding ethanone. *Arkivoc*, **2011**, (xi), 1–21.
5. Žukauskaitė A., Mangelinckx, S., Buinauskaitė V., Šačkus A., De Kimpe, N. Synthesis of new functionalized aziridine-2- and azetidine-3-carboxylic acid derivatives of potential interest for biological and foldameric applications. *Amino Acids*, **2011**, vol. 41, 541–558.
6. Vilkauskaitė G., Šačkus A., Holzer W. Sonogashira-type reactions with 5-chloro-1-phenyl-1*H*-pyrazole-4-carbaldehydes: A straightforward approach to pyrazolo[4,3-*c*]pyridines. *Eur. J. Org. Chem.* **2011**, 5123–5133.





Atsižvelgiant į 2011 metų rezultatus, daromos šios išvados:

1. Institutas sėkmingai tęsė veiklą tarptautinėje mokslo ir technologinės plėtros darbų rinkoje, sudarė ir įvykdė užsakomųjų tyrimų darbus su užsienio biotechnologinėmis kompanijomis.
2. Pasirinktos sintetinės chemijos kryptys: Pd-katalizuojamos kryžminio jungimo reakcijų taikymas heterociklams funkcionalizuoti, suvaržytos konformacijos aminorūgščių ir biciklinių heterociklų sintezės būdų paieška, biomolekulių analogų sintezė ir atsinaujinančių biomedžiagų panaudojimas, yra aktualios šiuolaikinės sintetinės organinės chemijos mokslo temos.

Aktualūs uždaviniai ir siūlymai dėl 2012 metų veiklos plano:

1. Išplėsti reakcijų, naudojamų anglis-anglis ir anglis-heteroatomas sudaryti, ratą, šias reakcijas taikant biologiškai aktyvių optoelektroninių funkcinių medžiagų sintezei.
2. Sintezės darbuose plačiau taikyti darniosios chemijos principus.
3. Plėsti tarpinstitucinį ir tarptautinį bendradarbiavimą funkcinių molekulių chemijos srityje.
4. Tęsti ir intensyvinti užsakomuosius mokslinių tyrimų ir eksperimentinės plėtros darbus.



4 SCI veiklos užtikrinimas

SCI biudžetą 2011 m. sudarė 157,5 tūkst Lt valstybės biudžeto asignavimų ir 375,0 tūkst . Lt MTEP darbų užsakymų lėšų. Taigi už MTEP darbų vykdymą gautos lėšos gerokai viršijo valstybės biudžeto asignavimus, o sumokėti į valstybės biudžetą mokesčiai viršijo valstybės skirtas lėšas.



5 SCI akademinė aplinka ir infrastruktūra.

2011 metais SCI iš slėnio „Santaka“ lėšų įsigijo rentgeno struktūrinės analizės difraktometrą *SMART X2S* (Bruker, Vokietija) ir keletą kitų smulkesnių prietaisų. 2012 metais numatoma įsigyti keletą cheminių reaktorių, iš jų mikrobangų reaktorių.

2011 metais buvo įsigyta *APEX2* programa, reikalinga dirbti su difraktometru. 2012 metais numatyta įsigyti molekulių kompiuterinio modeliavimo programų.

2012 metais numatoma iš esmės modernizuoti SCI infrastruktūrą (įsigyti iš NKP ir slėnio „Santaka“ programų naują mokslinę aparatūrą), todėl numatoma gerokai padidinti išlaidas darbuotojų kvalifikacijai kelti (dalyvavimas kursuose ir mokslinėse konferencijose).



6 2011 m. pagrindiniai statistiniai rodikliai

	64 Sintetinės chemijos institutas	Iš viso 2011
Darbuotojų užimtų etatų / žmonių skaičius	5 / 6	5 / 6
Profesorių	0,0	0,0
Docentų	0,0	0,0
Lektorių	0,0	0,0
Asistentų	0,0	0,0
Projektų dėstytojų	0,0	0,0
Dėstytojų valandininkų	0,0	0,0
Mokslo darbuotojų ir kitų tyrėjų	3,5 / 4	3,5 / 4
Administracijos darbuotojų	0 / 1	0 / 1
Kitų darbuotojų	1,5 / 2	1,5 / 2

Gautos lėšos, tūkst. Lt	64 Sintetinės chemijos institutas	Iš viso 2011
Valstybės biudžeto asignavimai	157,5	157,5
Kitos tikslinės valstybės biudžeto lėšos	0,0	0,0
ES struktūrinių fondų remiamų projektų	0,0	0,0
Tarptautinių mokslo projektų	0,0	0,0
Tarptautinių studijų projektų	0,0	0,0
Kitų tarptautinių projektų	0,0	0,0
MTEP darbų užsakymų	375,0	375,0
Technologinių ir kitų paslaugų	0,0	0,0
Studijų (valstybės nefinansuojamų)	0,0	0,0
Kvalifikacijos kėlimo	0,0	0,0

Publikacijų skaičius (indėlis)	64 Sintetinės chemijos institutas	Iš viso 2011
Mokslo monografijų ir studijų	0,0	0,0
Vadovėlių ir mokomųjų knygų	0,0	0,0
Straipsnių „ISI WEB of Science“ leidiniuose, turinčiuose citavimo indeksą	2,94	2,94
Straipsnių „ISI WEB of Science“ leidiniuose, neturinčiuose citavimo indekso	0,0	0,0
Straipsniai „ISI WEB of Science“ konferencijų medžiagoje	0,0	0,0
Straipsnių leidiniuose, referuojamuose kitose tarptautinėse duomenų bazėse	0,0	0,0
Straipsnių kituose recenzuojamuose mokslo leidiniuose	0,0	0,0
Patentų skaičius (JAP, JAV, ES)	0,0	0,0

