

Lista tematów w przedmiocie: Przemysłowe Syntezy Związków Organicznych

1. Obsługa programów do rysowania struktur chemicznych np. Chem Draw, Isis Draw, Chem Sketch, Accelerys Draw itp. (tydzień 1)

Zadanie domowe

Proszę zainstalować i zgłębić obsługę jednego z edytorów struktur chemicznych np. Chem Draw, Isis Draw, Chem Sketch, Accelerys Draw itp. (są dostępne wersje darmowe do użytku akademickiego)

Proszę narysować i dostarczyć na adres mak@pg.edu.pl w jednym z formatów np .cdx .chm .skc .sk2, przebieg następującej reakcji uzupełnić reagenty, produkty uboczne, warunki reakcji

- a) Benzen, chlorobenzen, anilina, N-metyloanilina, N-metylo-N-fenylacetamid
- b) Octan etylu, bromooctan etylu, 2-cyjanooctan etylu, 2-cyjanopropionian etylu, propiononitryl
- c) 1-buten, 1-butanol, 1-bromobutan, bromek butylomagnezowy, 1-butanotiol
- d) Kwas benzoesowy, bezwodnik benzoesowy, benzoesan benzylu, benzamid, benzonitryl
- e) 1-propanol, kwas propionowy, propionamid, propiononitryl, 3-pentanon
- f) Benzen, bromobenzen, bromek fenylomagnezowy, kwas benzoesowy, benzoesanetylu
- g) Toluen, p-nitrotoluen, p-toluidyna, chlorek p-toluidiazeniowy, (E)-4-(p-tolylidiazenyl)phenol
- h) n-butan, 2-bromobutan, bromek sec-butylomagnezowy, ester etylowy kwasu 2-metylobutanowego, kwas 2-metylobutanowy
- i) 2-metylopropan, bromek tert-butylu, 2-metylopropen, 2-metylopropan-1-ol, octan izobutyli
- j) Benzen, nitrobenzen, anilina, chlorek fenylodiazoniowy, benzonitryl
- k) Naftalen, 1-bromonaftalen, bromek 1-naftylomagnezowy, 1-naftol, benzoesan 1-naftyli



- l) Kwas octowy, octan fenylu, p-hydroksyaceton, p-metoksyacetofenon, oksym p-metoksyacetofenonu
- m) Toluen, kwas benzoowy, chlorek benzoilu, aldehyd benzoowy, alkoholbenzylowy
- n) Benzen, toluen, kwas benzoowy, alkohol benzylowy, chlorek benzylu
- o) piwaloamid, 2,2-dimetylo propiononitryl, kwas piwalowy, chlorek piwaloilu, keton fenylowo tert-butyloowy
- p) Benzen, nitrobenzen, anilina, fenol, 4-nitrofenol, eter metylo-p-nitrofenylowy
- q) Malonian dietylu, benzylo maloniandietylu, kwas 3-fenylopropanowy, chlorek kwasu 3-fenylopropanowego, 3-fenylopropanal
- r) p-toluidyna, chlorek p-toluidylozoniowy, p-bromotoluen, N-metylo-p-toluidyna, N-nitrozo-N-metylo-p-toluidyna
- s) malonian dietylu, izonitrozomalonian dietylu, acetamido malonian dietylu, N-acetylo-fenylalanina, fenylalanina
- t) L-walina, ester tert-butyloowy L-waliny, ester tert-butyloowy N-acetylo L-waliny, N-acetylo L-walina

2. Korzystanie z baz danych, abstraktowych pełnotekstowych, baz patentów.

(tydzień 2)

Zadanie domowe

W bazie wydawnictwa ACS z jednego z poniższych czasopism”

The Journal of Organic Chemistry

Journal of Medicinal Chemistry

The Journal of American Chemical Society

Organic Letters

odszukaj publikację dotyczącą syntezy i spełniającą następujące kryteria:

rok opublikowania 1995-2015

zawierającą w tytule jedno ze słów kluczowych: *chalcone*, *imidazole*, *carbazole*, *allenes*, *organocuprate*, *palladium*, *phosphine*

wybierz jeden z przepisów eksperymentalnych i przetłumacz go na język polski.

Proszę o przesłanie publikacji w pdf z zaznaczonym na kolorowo w Adobe fragmentem który został przetłumaczony



3. Korzystanie z baz danych – bazy pełnotekstowe.

(tydzień 3)

Zadanie domowe

W bazie wydawnictwa ACS lub Thieme pobierz instrukcje dla autorów oraz szablon publikacji dla np. Journal of Organic Chemistry lub Synthesis. Wybierz jeden z przepisów preparatywnych ze skryptu „Syntezy i Transformacje Związków Organicznych” D. Witt, K. Dzierzbicka, J. Rachoń lub „Preparatyki Organicznej” A Vogel lub innej preparatyki organicznej

Na podstawie tego przepisu utwórz „publikację” wg szablonu czasopisma tj. tytuł, autor, abstrakt kilka zdań, wprowadzenie do tematu czyli opis danej grupy reakcji, krótka dyskusja wyników, rysunek (schemat) prowadzonej reakcji, przepis preparatywny, literatura. Wszystko powinno się zmieścić na jednej stronie



4. Korzystanie z baz danych – bazy patentowe.

(tydzień 4 i 5)

Zadanie domowe

Ze strony polskiego urzędu patentowego pobierz jeden dowolny opis patentowy jako wzór (szablon). Wybierz jeden z przepisów preparatywnych ze skryptu „Syntezy i Transformacje Związków Organicznych” D. Witt, K. Dzierzbicka, J. Rachoń lub „Preparatyki Organicznej” A Vogel. (inny niż poprzednio)

Na podstawie tego przepisu „utwórz opis patentowy” na np. syntezę estrów kwasów karboksylowych tj. tytuł, autor, opis wynalazku, Przykład, zastrzeżenia patentowe (jakie związki zastrzegamy, czym znamieną jest nasza metoda: rozpuszczalniki, warunki reakcji, katalizatory)

Przesyłamy patent z naszym nazwiskiem jako wynalazcy i opisem tego co zastrzegamy i przykładem wykonania.



5. Korzystanie z baz danych bazy abstraktowe Sci Finder Zadanie domowe

(tydzień 6)

Założenie konta na Sci-Finder. Odnalezienie publikacji pozwalającej na syntezę:

- a) 1-Cyano-5-methylaminonaphthalene
- b) 1-Cyanomethylnaphthalene
- c) 4-Aminobenzeneacetonitrile
- d) 1-(4-Nitrophenyl)acetonitrile
- e) 3-Azido-2-methyl-3-buten-2-ol
- f) 4-Fluorobenzeneacetonitrile
- g) 1-(Chloromethyl)-4-fluorobenzene
- h) 1,1'-[Oxybis(methylene)]bis[4-fluorobenzene]
- i) 4-Fluorobenzaldehyde
- j) 4-Fluorobenzenemethanol
- k) 6-Fluoro-1,2,3,4-tetrahydro-1-methylnaphthalene
- l) 2,3,5,6-Tetrafluoro-1,4-benzoquinone
- m) 2,3,5,6-Tetrafluoro-4-aminophenol
- n) 3-Bromoindole
- o) 3-Indolylcarboxylic acid
- p) 1,2,3,4-Tetrahydronaphthalen-1-one
- q) 1,2,3,4-Tetrahydro-1-naphthalenol
- r) 1H-4-Oxoquinoline
- s) 9-Acridone
- t) 5-Methyl-5,10-dihydrophenazine
- u) 9-Acridone
- v) 5-Methyl-5,10-dihydrophenazine

Proszę o przesłanie publikacji w pdf z zaznaczonym na kolorowo w Adobe przepisem na syntezę



6. Korzystanie z baz danych bazy abstraktowe Sci Finder oraz bazy widm
Zadanie domowe

(tydzień 7 i 8)

Odnalezienie danych spektroskopowych dla jednego z wymienionych związków (innego niż poprzednio):

- a) 1-Cyano-5-methylaminonaphthalene
- b) 1-Cyanomethylnaphthalene
- c) 4-Aminobenzeneacetonitrile
- d) 1-(4-Nitrophenyl)acetonitrile
- e) 3-Azido-2-methyl-3-buten-2-ol
- f) 4-Fluorobenzeneacetonitrile
- g) 1-(Chloromethyl)-4-fluorobenzene
- h) 1,1'-[Oxybis(methylene)]bis[4-fluorobenzene]
- i) 4-Fluorobenzaldehyde
- j) 4-Fluorobenzenemethanol
- k) 6-Fluoro-1,2,3,4-tetrahydro-1-methylnaphthalene
- l) 2,3,5,6-Tetrafluoro-1,4-benzoquinone
- m) 2,3,5,6-Tetrafluoro-4-aminophenol
- n) 3-Bromoindole
- o) 3-Indolylcarboxylic acid
- p) 1,2,3,4-Tetrahydronaphthalen-1-one
- q) 1,2,3,4-Tetrahydro-1-naphthalenol
- r) 1H-4-Oxoquinoline
- s) 9-Acridone
- t) 5-Methyl-5,10-dihydrophenazine
- u) 9-Acridone
- v) 5-Methyl-5,10-dihydrophenazine

Proszę o przesłanie publikacji w pdf z zaznaczonym na kolorowo w Adobe nazwą związku i opisem widm np. IR, ¹H NMR, ¹³C NMR, ¹⁹F NMR, MS, HRMS. Najwyżej punktowane będzie przesłanie oryginałów widm (Supporting Info)
Przesyłamy wszystko w jednym pliku



Fundusze Europejskie
Wiedza Edukacja Rozwój



Rzeczpospolita
Polska

Unia Europejska
Europejski Fundusz Społeczny



7. Patentowanie własnego wynalazku

(tydzień 9)

Zadanie domowe

Na podstawie przepisu z publikacji z zadania nr 5 (tydzień 6) „utwórz opis patentowy” na syntezę tego związku tj. tytuł, autor, opis wynalazku Przykład, zastrzeżenia patentowe (jakie związki zastrzegamy, czym znamienna jest nasza metoda: rozpuszczalniki, warunki reakcji, katalizatory)



8. Odszukanie literaturowej ścieżki syntezy

(tydzień 10 i 11)

Zadanie domowe

Odszukaj w bazach danych (abstrakty pełnotekstowe patentowe) metodę syntezy następującego związku: uzyskane informacje streść krótko w sprawozdaniu zawierającym: autora, nazwę ścieżki syntezy, rysunek syntez, oraz opisy preparatywne. Wymagane jest co najmniej cztery etapy syntezy. (cytaty literaturowe wraz z załączoną literaturą także należy dostarczyć)

- a) Cyprofloksacyna
- b) Levofloxacin
- c) Oksazepam
- d) Cefamandole
- e) Sulfametoksazol
- f) Haloperydol
- g) Sulfafurazole
- h) Klotrimazol
- i) Ondansetron
- j) Klonazepam
- k) Tadalafil
- l) Rosuwastatin
- m) Fludrokortyzon
- n) Sildenafil
- o) Chloramfenikol
- p) Doksycyklina
- q) Cefadroksyl
- r) Betametazon
- s) Hydroksyzyna
- t) Karbamazepina



9. Praca z programami do obróbki widm NMR *mestrec.exe*
Zadanie domowe

(tydzień 12)

Należy pobrać i rozpakować plik z programem mesterc23.exe

<http://nrc.iisc.ernet.in/mes.htm>

po otwarciu programu przejść do folderu z widmem NMR (enauczanie), otworzyć plik fid ustawiając aparat Varian Unity.

Wykonać transformacje Fouriera, następnie zintegrować wybrane sygnały, oznaczyć przesunięcia, wykonać rozszerzenie fragmentu widma, zapisać obraz widma kopiując do edytora tekstu i przerobić na pdf.



Rzeczpospolita
Polska

Unia Europejska
Europejski Fundusz Społeczny



10. Patentowanie własnego wynalazku II

(tydzień 13,14 i 15)

Zadanie domowe

Korzystając z opracowanej ścieżki syntezy (zadanie 8) dla **jednego** etapu dokonać opisu patentowego z własną nowością naukową, swoją innowację opisujemy i zastrzegamy czym znamienna jest nasza metoda.