**Οδηγίες για την Εργασία**

Επιλέξτε μια από τις ακόλουθες ενώσεις που σας δίνονται (επόμενη σελίδα). Εργαστείτε μόνος/μόνη ή ομαδικά με ένα ή δύο συμφοιτητές/συμφοιτήτριες σας.

Η εργασία είναι φασματοσκοπική και στοχεύει:

(α) να μάθετε να χρησιμοποιείτε τις βάσεις δεδομένων για να αντλήσετε φασματοσκοπικές πληροφορίες και

(β) να εφαρμόσετε στρατηγική ταυτοποίησης της ένωσης.

Τα φασματοσκοπικά δεδομένα που θα πρέπει να αναζητήσετε από τις ενώσεις είναι: (α) UV (β) MS (γ) IR και (δ) NMR

Τα περισσότερα από τα μόρια που σας δίνονται είναι φάρμακα και μια βάση δεδομένων που περιέχει φασματοσκοπικά δεδομένα είναι η Drug Bank (<https://www.drugbank.ca/>). Εάν γράψετε το φάρμακο που θέλετε στη βάση αυτή δεδομένων π.χ. losartan θα σας δώσει αρκετές πληροφορίες.

Η δομή της εργασίας είναι η ακόλουθη:

1. Εισαγωγή για την ένωση (περίπου ½- 1 σελίδα). Εάν είναι φάρμακο θα γράψετε πως δρα και τις φυσικοχημικές του ιδιότητες. Εάν είναι φυσικό προϊόν που το βρίσκουμε και τη βιοδραστικότητά του. Πάντα στην πρώτη σελίδα θα υπάρχει η δομή της ένωσης.
2. Φασματοσκοπικά δεδομένα (UV, IR, MS και NMR).
3. Στρατηγική ταυτοποίησης του. Θα μιλήσουμε γι’ αυτή στο μάθημα και θα σας δώσω ένα παράδειγμα στην τάξη. Σε πρώτη φάση μαζέψετε τις πληροφορίες που αναφέρονται στο 1 και 2.

Ο τίτλος εργασίας για όλους θα είναι:

**Φασματοσκοπικά δεδομένα για την ένωση ιμποπροφαίνη (ibuprofen)**

απλά αντί ιμπουπροφαίνη θα γράψετε το όνομα της ένωσης που θα επιλέξετε.

Οι παρακάτω ενώσεις είναι ενδεικτικές. Μπορείτε και από μόνοι/μόνες σας να επιλέξετε άλλη ένωση.

**ΕΝΩΣΕΙΣ ΠΡΟΣ ΕΠΙΛΟΓΗ**

1. Ασπιρίνη
2. Θεοβρωμινη
3. Καφεΐνη
4. Κουρκουμίνη
5. Κερκετίνη (quercetin)
6. Ροσμαρινικό οξύ
7. Ιρμπεσαρτάνη (irbesartan)
8. Βαλσαρτάνη (Valsartan)
9. Καντεσαρτάνη (Candesartan)
10. Ολμεσαρτάνη (Olmesartan)
11. Αζιδοθυμιθίνη (AZT)
12. Ιμπουπροφαίνη (ibuprofen)
13. Ασπαρτάμη
14. Ινδομεθακίνη
15. Βεραπαμόλη (verapamil)
16. Αμανταδίνη
17. Viagra (sildenafil citrate)
18. Λεβοσετιριζίνη διυδροχλωρική. (xozal)
19. Καπτοπρίλη
20. Εναλαπρίλη
21. Λισινοπρίλη
22. Αλισκιρένη
23. β-κυκλοδεξτρίνη (β-CD)
24. 2-υδροξυπροπυλο-κυκλοδεξτρίνη (2-HP-β-CD)
25. Γλυκόζη
26. Πενικιλλίνη
27. Ισονιαζίδιο ή Ισονιαζίδη
28. Βενζοπιαδεζίμη
29. Σουκρόζη
30. Παρακεταμόλη
31. Ντοπαμίνη
32. Σελεγιλίνη
33. Θεοφυλλίνη
34. Λοξαπίνη
35. Κλοζαπίνη
36. Ναλτρεξάνη
37. Διαζεπάμη
38. Πραζοσίνη
39. Φουροσεμίδη
40. Κλονιδίνη
41. Ρεζερπίνη
42. Παργυλίνη
43. Λισινοπρίλη
44. Νιτροπρουσσίδη
45. Βεραπαμίλη
46. Νιφεδιπίνη
47. Φεζοδιπίνη
48. Κινιδίνη
49. Προπανολόλη
50. Εσμολόλη
51. Νιανίνη
52. Βορφαρίνη
53. Αλβουστερόλη
54. Τερβουταλίνη
55. Σιμετιδίνη
56. Αμπικιλλίνη
57. Μεθυκιλλίνη
58. Σουλφαδιαζίνη
59. Σουλφισοξαζόλη
60. Ριμαντιδίνη
61. Ιντρακοναζόλη
62. Κινίνη
63. Λινδάνη
64. Κυκλοφωσφαμίδη
65. Χλωραμβουκίλη
66. Μεθετρεξάτη
67. 5-φθοριοουρακίλη
68. Βινκριστίνη
69. Βινμπλαστίνη
70. Αλλοπουρινόλη
71. Προβενεσίδη
72. Χλωροκίνη
73. Αστεμιζόλη
74. Τολβουταμίδη
75. Τολαζομίδη
76. Γλυβουρίδη
77. Χλωροπροπαμίδη
78. Τολβουταμίδη
79. Μιτονάνη
80. Μεθιμοζόλη
81. Αμινογλουτεθαμίδη
82. Μεξιλετίνη
83. Δισοπυραμίδη
84. Φαινυτοΐνη
85. Λιδοκαΐνη
86. Προπαϊναμίδη