



جمهوری اسلامی ایران

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری

برنامه درسی

(بازنگری شده)

دوره: کارشناسی ارشد

رشته: شیمی گرایش شیمی معدنی

گروه: علوم پایه



مصوبه جلسه شماره ۹۲ مورخ ۱۳۹۵/۱۲/۰۱

کمیسیون برنامه ریزی آموزشی

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

عنوان برنامه: شیمی گرایش شیمی معدنی

۱. برنامه درسی بازنگری شده دوره کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش شیمی معدنی در جلسه شماره ۹۲ مورخ ۱۳۹۵/۱۲/۰۱ کمیسیون برنامه ریزی آموزشی تصویب شد.
۲. برنامه درسی بازنگری شده دوره کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش شیمی معدنی از تاریخ ۱۳۹۵/۱۲/۰۱ جایگزین برنامه درسی دوره کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش شیمی معدنی مصوب جلسه شماره ۱۶۷ مورخ ۱۳۶۸/۰۷/۰۹ شورای عالی برنامه ریزی می شود.
۳. برنامه درسی مذکور از تاریخ ۱۳۹۵/۱۲/۰۱ برای تمامی دانشگاه ها و مؤسسه های آموزش عالی و پژوهشی کشور که طبق مقررات مصوب وزارت علوم، تحقیقات و فناوری فعالیت می کنند برای اجرا ابلاغ می شود.
۴. این برنامه درسی از تاریخ ۱۳۹۵/۱۲/۰۱ به مدت ۵ سال قابل اجرا است و پس از آن قابل بازنگری است.

عبدالرحیم نوه ابراهیم

مدیر شورای عالی برنامه ریزی آموزشی

رئیس



۳

کتابخانه



پیش‌گفتار

باتوجه به پیشرفت روز افزون علم شیمی و نیازهای رو به رشد جوامع بشری در به‌کارگیری علوم جدید، پرورش نیروهای مجرب، متعهد و آگاه به این علوم از الزامات اولیه‌ی یک جامعه‌ی رو به رشد است. در این راستا بازنگری و به‌روز درآوردن برنامه‌ی آموزشی دوره‌ی کارشناسی ارشد شیمی در گرایش‌های شیمی فیزیک، شیمی آلی، شیمی معدنی، شیمی تجزیه و شیمی کاربردی هدف کار قرار گرفت.

برنامه درسی و آموزشی تنظیم شده برای این دوره شامل آموزش‌های نظری و عملی است تا فارغ‌التحصیلان این گرایش بتوانند توانایی‌های لازم برای عهده‌دار شدن مسئولیت هدایت آزمایشگاه‌های آموزشی، همکاری در زمینه‌های مختلف با دانشگاه‌ها و نیز مؤسسات پژوهشی کشور، آمادگی برای ادامه‌ی تحصیلات تکمیلی در مقاطع بالاتر، سرپرستی آزمایشگاه‌ها در صنایع شیمیایی موجود و ارائه طرح‌های جدید برای راه‌اندازی صنایع جدید و کارآفرینی را کسب نمایند. تجدید نظر به عمل آمده در برنامه‌ی گرایش شیمی مقطع ارشد در جهت به‌روز شدن منابع و سرفصل‌های درس‌ها، ارائه درس‌هایی که هم‌خوانی بیشتر با موضوعات روز مانند محیط‌زیست و کارآفرینی را دارند و کاربردی‌تر شدن مطالب تدریس شده می‌گردد. سرفصل‌های ارائه شده حاصل روزها تلاش و مطالعه‌ی صاحب‌نظران این گرایش است.

جزئیات کامل مربوط به گرایش شیمی معدنی مقطع کارشناسی ارشد در ادامه آورده شده است.

کمیته شیمی شورای عالی برنامه‌ریزی



فهرست عناوین

عنوان	صفحه
پیشگفتار	3
فهرست عناوین	4
فصل اول: مشخصات کلی	6
1-1 مقدمه	7
2-1 تعریف و هدف	7
3-1 ضرورت و اهمیت	7
4-1 طول دوره	7
5-1 تعداد و نوع واحدهای درسی	7
1-5-1 دروس الزامی	8
2-5-1 دروس اختیاری	8
3-5-1 سمینار	8
4-5-1 پایان نامه	8
6-1 نقش و توانایی فارغ التحصیلان	8
7-1 شرایط و ضوابط ورود به گرایش شیمی معدنی	9
8-1 مواد و شرایط امتحانی	9
فصل دوم: جدول دروس	10
1-2 دروس الزامی گرایش شیمی معدنی	11
2-2 دروس اختیاری گرایش شیمی معدنی	12
فصل سوم: سرفصل دروس	14
1-3 شیمی معدنی پیشرفته	15
2-3 سینتیک و ترمودینامیک واکنشهای معدنی	18
3-3 طیف بینی معدنی	21
4-3 شیمی فیزیک معدنی	26
5-3 نظریه گروه	28
6-3 پلیمرهای معدنی	29
7-3 سنتز مواد معدنی	31
8-3 شیمی آلی فلزی	33



- 35..... 9-3 شیمی هسته‌ای
- 37..... 10-3 شیمی کوانتوم 1
- 39..... 11-3 پلی‌سنجی مولکولی 1
- 40..... 12-3 نانو مواد معدنی
- 42..... 13-3 شیمی سل - ژل
- 44..... 14-3 کریستالوگرافی اشعه X



فصل اول:

مشخصات کلی



1-1 مقدمه:

ضرورت بازننگری در برنامه دوره کارشناسی ارشد شیمی به دلیل سرعت روزافزون در پیشرفت‌های علمی انکارناپذیر است. به نظر می‌رسد که برنامه‌های آموزشی دوره‌های مختلف در رشته‌های علوم تجربی به بازننگری اساسی، هر چند سال یکبار، نیاز دارد. کمیته شیمی شورای عالی برنامه ریزی، تدوین برنامه آموزشی، به منظور تفکیک رشته‌های تخصصی را در دستور کار خود قرار داده است. برنامه حاضر دوره کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش شیمی معدنی را با مشخصات زیر شامل می‌شود:

2-1 تعریف و هدف:

کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش شیمی معدنی دوره‌ای است که دانشجویان با گذراندن آن با اصول تحقیق آشنا شده و آموزش‌های لازم برای نحوه تعریف و بررسی تحقیقی یک موضوع را می‌آموزد، به نحوی که برای ادامه تحصیل در دوره دکترا بتواند به صورت مستقل اندیشه نماید و یا در تعریف و حل مسائل و مشکلات صنایع شیمیایی به طور مستقل اقدام کند.

3-1 ضرورت و اهمیت:

اهمیت این دوره در تربیت متخصصان و پژوهشگران مجرب برای کار در مؤسسات پژوهشی و صنایع کشور است.

4-1 طول دوره:

طول دوره کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش شیمی معدنی چهار نیمسال تحصیلی است، که در موارد خاص با تصویب شورای تحصیلات تکمیلی دانشکده، یک نیمسال قابل افزایش می‌باشد. نظام دوره دوره کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش شیمی معدنی آموزشی-پژوهشی است. دانشجویان با گذراندن دروس نظری و انتخاب استاد راهنما و موضوع پایان نامه، این دوره را در مهلت مقرر به پایان می‌رسانند.

5-1 تعداد و نوع واحدهای درسی:

تعداد کل واحدهای درسی دوره کارشناسی ارشد گرایش شیمی معدنی 28 واحد درسی بصورت زیر است:

دروس الزامی	9 واحد
دروس اختیاری	12 واحد
سمینار	1 واحد
پایان نامه	6 واحد



1-5-1 دروس الزامی:

9 واحد درس نظری است که دانشجو با رعایت پیش‌نیاز آنها را ترجیحاً در نیمسال اول تحصیلی انتخاب می‌نماید.

2-5-1 دروس اختیاری:

مجموعه ای از دروس نظری و یا دروس نظری و سمینار 2 است که دانشجو می‌تواند دروس اختیاری خود را از جدول مربوطه انتخاب نماید. در صورت تشخیص استاد راهنما، دانشجو می‌تواند 3 واحد از دروس اختیاری خود را از سایر دروس دوره های کارشناسی ارشد و دکتری انتخاب نماید.

3-5-1 سمینار:

سمینار 1: این سمینار الزامی بوده و موضوع آن بررسی و ارائه یک موضوع از میان مطالب علمی روز می باشد. به نحوی که قدرت تحقیق دانشجو را افزایش داده و بر معلومات دانشجو و سایرین بیافزاید. سمینار در محدوده زمانی یک ساعت ارائه شده و حضور دانشجویان دوره‌های کارشناسی ارشد و دکترای گرایش شیمی معدنی بر اساس آیین نامه ای که به تصویب شورای تحصیلات تکمیلی دانشکده خواهد رسید در جلسات این سمینارها الزامی است.

سمینار 2: این سمینار اختیاری بوده و از نظر شرایط ارائه مانند سمینار 1 می باشد.

4-5-1 پایان‌نامه:

انتخاب استاد راهنما و موضوع پایان‌نامه حداکثر در آغاز نیمسال دوم انجام می‌گیرد. در انتخاب موضوع پایان‌نامه رعایت نکات زیر توصیه می‌شود:

الف- موضوع و طرح موردنظر در جهت شناخت یا رفع مشکلات جامعه باشد.

ب- روش یا راه‌حل موردنظر دارای تازگی و نوآوری باشد.

6-1 نقش و توانایی فارغ التحصیلان:

- عهده‌دار شدن مسئولیت تدریس در رشته شیمی و نیز هدایت آزمایشگاهها
- همکاری در زمینه‌های مختلف شیمی در دانشگاهها و نیز مؤسسات پژوهشی کشور
- آمادگی برای ادامه تحصیلات بالاتر
- حل مشکلات صنایع در زمینه شیمی



7-1 شرایط و ضوابط ورود به گرایش شیمی معدنی:

- دارا بودن مدرک کارشناسی مطابق قوانین سازمان سنجش و ترجیحا رشته های مرتبط علوم، مهندسی و پزشکی
- پذیرفته شدن در آزمون ورودی

8-1 مواد و ضرایب امتحانی:

آزمون ورودی دوره کارشناسی ارشد مطابق دستورالعمل های سازمان سنجش آموزش کشور در یک یا دو مرحله انجام می گیرد. در صورت یک مرحله ای بودن آزمون مواد و ضرایب به صورت جدول زیر می باشد.

جدول 4-1 مواد و ضرایب امتحانی گرایش شیمی معدنی

شیمی معدنی		
ردیف	مواد امتحانی	ضریب
1	زبان عمومی و تخصصی	1
2	شیمی آلی (دروس آلی 1, 2, 3 جداسازی و شناسایی ترکیبات آلی و کاربرد طیف سنجی در شیمی آلی، شیمی فیزیک آلی)	1
3	شیمی معدنی (دروس شیمی معدنی 1, 2، آلی فلزی)	2
4	شیمی تجزیه (دروس تجزیه 1, 2، شیمی تجزیه دستگاهی)	1
5	شیمی فیزیک (دروس شیمی فیزیک 1, 2 کوانتوم و طیف سنجی)	1
6	شیمی کاربردی (اصول محاسبات شیمی صنعتی، شیمی صنعتی 1, 2، اصول تصفیه آب و پسابهای صنعتی و خوردگی فلزات).	0

در صورت دو مرحله ای بودن آزمون، مراحل آن به شرح زیر خواهد بود.

مرحله اول: آزمون ورودی تستی که توسط سازمان سنجش برگزار شده و مطابق جدول بالا می باشد.



مرحله دوم: آزمون تشریحی از دروس تخصصی مربوط به رشته شیمی معدنی که شامل دروس شیمی معدنی 1، شیمی معدنی 2، با ضرایب مساوی است. این آزمون پس از اعلام اسامی پذیرفته شدگان مرحله اول، توسط دانشکده انجام می‌گیرد.



فصل دوم: جدول دروس



جدول 1) دروس الزامی گرایش شیمی معدنی

پیش تیمز	تعداد ساعت			تعداد واحد	عنوان درس	ردیف
	جمع	عملی	نظری			
ندارد	48	-	48	3	سینتیک، ترمودینامیک و مکانیزم واکنشهای معدنی	1
ندارد	48	-	48	3	طیف ستجی معدنی	2
ندارد	48	-	48	3	شیمی معدنی پیشرفته	3
ندارد	-	-	-	6	پایان نامه	4
ندارد	16	-	16	1	سمینار	5

گذراندن هر سه درس برای دانشجویان گرایش معدنی الزامی است.



جدول 2) دروس اختیاری گرایش شیمی معدنی

پیش نیاز	تعداد ساعت			تعداد واحد	عنوان درس	ردیف
	جمع	عملی	نظری			
شیمی معدنی پیشرفته	48	-	48	3	شیمی آلی فلزی	1
شیمی معدنی پیشرفته	48	-	48	3	کریستالوگرافی	2
شیمی معدنی پیشرفته	96	64	32	4	سنتز و شناسایی کمپلکسهای معدنی	3
شیمی معدنی پیشرفته	48	-	48	3	بیوشیمی معدنی	4
شیمی معدنی پیشرفته و شیمی فیزیک پیشرفته	48	-	48	3	شیمی حالت جامد	5
شیمی معدنی پیشرفته	48	-	48	3	مباحث نوین در شیمی	6
-	48	-	48	3	نانوشیمی	7
شیمی معدنی پیشرفته	48	-	48	3	کاربرد نظریه گروه در شیمی	8
شیمی معدنی پیشرفته	34	-	34	2	شیمی ترکیبات کلاستر	9
شیمی معدنی پیشرفته و کوانتوم شیمی 1	48	-	48	3	شیمی محاسباتی ترکیبات معدنی	10
شیمی معدنی پیشرفته	48	-	48	3	شیمی هسته ای	11
شیمی معدنی پیشرفته	48	-	48	3	شیمی تابش	12



-	48	-	48	3	شیمی آلی پیشرفته	13
-	48	-	48	3	شیمی تجزیه پیشرفته	14
-	48	-	48	3	شیمی فیزیک پیشرفته	15
ندارد	48	-	48	3	شیمی کوانتومی 1	16
شیمی معدنی پیشرفته	48	-	48	3	شیمی فیزیک معدنی	17
روشهای سنتز مواد نانو ساختار	48	-	48	3	نانو مواد معدنی	18
روشهای سنتز مواد نانوساختار	48	-	48	3	شیمی سل-زل	19

*گذراتدن 12 واحد از جدول فوق برای دانشجویان گرایش معدنی الزامی است.
تبصره: هر گروه آموزشی با نظر شورای تحصیلات تکمیلی گروه مربوطه میتواند تا سقف دو درس
از دروس فوق الزامی اعلام نماید.



فصل سوم: سرفصل دروس



شیمی معدنی پیشرفته

شیمی معدنی پیشرفته		فارسی	عنوان	
Advanced Inorganic Chemistry		انگلیسی	درس	
تعداد ساعات	تعداد واحد	نوع واحد		
شیمی معدنی 2	48	3	اختیاری	
			نظری	عملی
	آموزش تکمیلی عملی:		دارد <input type="checkbox"/>	ندارد <input type="checkbox"/>
	سفر علمی:		دارد <input type="checkbox"/>	ندارد <input type="checkbox"/>
	حل تمرین:		دارد <input type="checkbox"/>	ندارد <input type="checkbox"/>
آزمایشگاه:		دارد <input type="checkbox"/>	ندارد <input type="checkbox"/>	

هدف درس:

آشنائی و تسلط بر اصول و تئوریهای شیمی معدنی

سرفصل ها:

1- نظریه گروه:

گروه های نقطه ای، جدول ضرب گروه، طبقه های گروه تقارنی، گروه های حلقوی و آبله، جدول ماهیت گروه، نمایش های کاهش پذیر و کاهش ناپذیر و حاصل ضرب مستقیم نمایش ها، کاربرد های نظریه گروه در نظریه پیوند ظرفیت، نظریه اوربیتال مولکولی و طیف ارتعاشی

2- پیوند و طیف الکترونی ترکیبات کوئوردیناسیون

ترم طیفی یون آزاد- روش فاکتورگیری از اسپین

شکافنگی اوربیتال های d در میدان های لیگاند مختلف نظریه میدان بلور شکافنگی ترم های طیفی در میدان های مختلف - نمودارهای ارگل، بر همکنش آرایش، پارامترهای را کا، سری نفلوکس، نمودارهای تانابه - سوگاتو

تعیین ترم طیفی پایه با استفاده از نمودار همبستگی و روش کاهش تقارن، تعیین انرژی نسبی اوربیتالهای d با استفاده از روش کریشنامورتنی - شاپ، روش همپوشانی زاویه ای، انرژی ارجحیت ساختاری

نامگذاری کمپلکس ها برای ایزومرهای هندسی و نوری به روش آیو پاک برای اعداد کوئوردیناسیون مختلف (CN= 2-12)، نماد های چند وجهی، شاخص های پیکربندی و علائم پیکربندی

پسماند مغناطیسی کمپلکس ها- تاثیر پذیری مغناطیسی، گشتاور مغناطیسی، قانون کوری، قانون کوری- وایس، خاصیت پارامغناطیسی، دیامغناطیسی (ثابت های پاسکال)، فرو مغناطیسی، آنتی فرو مغناطیسی، فری مغناطیسی و سوپر مغناطیسی

3- سینتیک واکنش های معدنی:

واکنش های جایگزینی لیگاند، کمپلکس های فعال و بی اثر، مکانیسم های A, D, Ia و Id پارامترهای فعالسازی و مکانیسم واکنش های جایگزینی لیگاند، ΔH^\ddagger , ΔS^\ddagger , ΔV^\ddagger ، واکنش های جایگزینی لیگاند در کمپلکس



های هست و جبهی و مسطح مربعی، اثر ترانس، اثر سیس توضیح اثر ترانس با استفاده از اثر پیوندهای σ و π و نظریه همپوشانی زاویه ای، تغییرات استرنو شیمی در واکنش های جایگزینی لیگاند.

واکنش های انتقال الکترون (ردوکس) در ترکیبات کونوردیناسیون: مکانیسم های فضای خارجی و داخلی، بررسی عوامل موثر در سرعت واکنش های انتقال الکترون از جمله تقارن HOMO و LUMO کاهنده و اکسنده، اثر پارامترهای ترمودینامیکی و انرژی پایداری میدان بلور در سرعت واکنش های ردوکس

مکانیسم واکنش های نو آرایی در ایزومری های نوری و هندسی، مکانیسم های رسمی شدن و ایزومری شدن.

4- نظریه اوربیتال های مولکولی و مدل همپوشانی زاویه ای

تعیین ترازهای انرژی اوربیتال های مولکولی کمپلکس های عناصر واسطه ML_n با تقارن های گوناگون بر حسب پارامترهای همپوشانی زاویه ای

محاسبه انرژی برتری ساختاری و نیز ساختار برتر در ترکیب های کمپلکس $(ML_n)_Xm$

تعیین حالت های الکترونی کمپلکس های عناصر واسطه سری 3d و تفسیر طیف الکترونی این کمپلکس ها

5- شیمی مواد معدنی و نانو مواد

سنتز مواد معدنی

انواع نقص ها در مواد معدنی و چگونگی انتقال یون ها در مواد جامد

اکسید، نترید، فلونوئورید، سولفید و هیدرید فلزات، نیمه رساناها و ابر رساناها

خواص الکتریکی و نوری مواد معدنی و کاربرد آن ها در ساخت باتری و LED

مواد مولکولی، سوپرا مولکول ها و MOF ها و کاربرد آن ها

نانو مواد

ساختارهای نانو و خواص و کاربرد آن ها

6- کاتالیست ها

اصول کلی

کاتالیست های همگن و کاربرد آن ها در فرایندهای تولید صنعتی ترکیب های آلی

کاتالیست های هتروژن و کاربرد آن ها در فرایندهای تولید صنعتی مواد

کاتالیست های هیبرید و کاربرد آن ها

روش ارزیابی:

سنجش مستمر	آزمون میانی	آزمون پایانی	پژوهش درسی
+	+	+	+



1. Douglas, B.E.; McDaniel, D.H.; Alexander, J.J. *Concepts and Models of Inorganic Chemistry*, 3rd ed.; John Wiley & Sons: New York, 1994.
2. Miessler, G.L.; Fischer, P.J.; Tarr, D.A. *Inorganic Chemistry*, 5th ed.; Pearson: New York, 2014.
3. Housecraft, C.; Sharpe, A.G. *Inorganic Chemistry*, 4th ed.; Pearson: England, 2102.
4. Huheey, J.H.; Keiter, E.A.; Keiter, R.L. *Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*, 4th ed.; Prentice Hall: N.J., 1997.
5. Purcell, K.F.; Kotz, J.C. *Introduction to Inorganic Chemistry*, Holt Rinehart & Winston: New York, N.Y., 1980.
6. Cotton, F.A. *Chemical Applications of Group Theory*, 3rd ed.; Wiley-Interscience Publishing: New York, 1990.
7. Atkins, P.; Overton, T.; Rourke, J. *Shriver & Atkins Inorganic Chemistry*, 5th ed.; W.H. Freeman and Company: New York, 2014.



سینتیک و ترمودینامیک واکنشهای معدنی

سینتیک و ترمودینامیک واکنشهای معدنی			فارسی		عنوان			
Kinetics and Thermodynamics of Inorganic Reactions			انگلیسی		درس			
درس‌های پیش‌نیاز	تعداد ساعت	تعداد واحد	نوع واحد					
شیمی معدنی 2	48	3	اختیاری		الزامی			
			عملی	نظری	عملی	نظری		
			آموزش تکمیلی عملی: <input type="checkbox"/> دارد <input checked="" type="checkbox"/> ندارد		سفر علمی: <input type="checkbox"/> دارد <input checked="" type="checkbox"/> ندارد		حل تمرین: <input type="checkbox"/> دارد <input checked="" type="checkbox"/> ندارد	
			آزمایشگاه: <input type="checkbox"/> دارد <input checked="" type="checkbox"/> ندارد		آزمایشگاه: <input type="checkbox"/> دارد <input checked="" type="checkbox"/> ندارد		آزمایشگاه: <input type="checkbox"/> دارد <input checked="" type="checkbox"/> ندارد	
			آزمایشگاه: <input type="checkbox"/> دارد <input checked="" type="checkbox"/> ندارد		آزمایشگاه: <input type="checkbox"/> دارد <input checked="" type="checkbox"/> ندارد		آزمایشگاه: <input type="checkbox"/> دارد <input checked="" type="checkbox"/> ندارد	

هدف:

آشنائی و تسلط بر اصول سینتیک و ترمودینامیک واکنشهای معدنی

سرفصل‌ها:

1- مقدمه ای بر مفاهیم بنیادی سینتیک و ترمودینامیک - فاکتورهای تعیین کننده سد انرژی - واکنشهای نخستین - دسته بندی واکنش های نخستین - رابطه بین قانون سرعت کامل و مکانیسم - تقریب حالت پایا - اثرات حلال - تقسیم بندی حلال ها - رابطه بین ثابت سرعت و خواص حلال - توابع انتقال - اثرات قدرت یونی - سینتیک و تعادل - برگشت پذیری میکروسکوپی - تعادل و حالت پایا - رابطه انرژی آزاد خطی - پایداری ترمودینامیکی و سینتیکی - استنتاج مکانیسم واکنش - حد واسط و توصیف و تفسیر مکانیسمی قوانین سرعت.

2- رخداد ها در سطح مولکولی (کمپلکس فعال شده)

توصیف کیفی برخورد های مولکولی - بستگی دمایی واکنش (معادله آرنیوس) - معادله Eyring - مقایسه کیفی انرژی های فعال سازی متفاوت - جنبه های عملی - تاثیرات فشار و حجم روی پارامتر های فعال سازی (تعاریف و مفاهیم) - ساختار کمپلکس فعال شده - روش های مطالعه ساختار کمپلکس فعال شده.

3- مکانیسم و ساختار

ساختار هندسی و مکانیسم - فاکتور فضایی - اندازه - شکل - اثرات فضاویزه - LUMO, HOMO - مسیر های حداقل انرژی و حداکثر شرایط همپوشانی - پذیرنده ها و دهنده های سیگما و پی - تمایل شیمیایی برای جابه جایی الکترون - قطبش اوربیتال ها.

4- روشهای تجربی اندازه گیری سرعت واکنش.

NMR, EPR, Emission spectroscopy, Stopped-flow method, Electrochemistry

5_ واکنش انتقال اتم و انتقال گروه



انواع واکنش های جانشینی - مکانیسم های جانشینی - مکانیسم مولکولی - شرایط تجربی برای مکانیسم جانشینی - قانون سرعت مشاهده شده - وابستگی به ماهیت لیگاند وارد شونده - شناسایی حد واسطه - آنژیومی فعال سازی - حجم فعال سازی - تاثیر لیگاند غیر ترک کننده - تشکیل حلقه کیلیت - بسط فضایی کئوردیناسیون - افزایش و تراکم - کمپلکس های تراهدال - روش های ارتباط ساختاری در جانشینی تراهدال - جانشینی در کمپلکس های مسطح مربع - قانون سرعت و مکانیسم - بستگی ماهیت لیگاند وارد شونده - بستگی ماهیت لیگاند ترک کننده - بستگی ماهیت مرکز فلزی - اثر ترانس در واکنش جانشینی کمپلکس های مسطح مربع - مدل ساده الکترواستاتیکی - اثر سیس - کاربرد ها در سنتز - مسیر های واکنش جانشینی کمپلکس های مسطح مربع - جانشینی در کمپلکس های اکتا هدرال CO III - اثر لیگاند ترک کننده - ازدحام فضا ویژه - اثرات لیگاند غیر ترک کننده - مسیر های واکنش جانشینی در کمپلکس های CO III اکتاهدرال در هیدرولیز اسیدی و بازی - مکانیسم تجمعی و تفکیکی در کمپلکس های اکتا هدرال Cr III - فعالیت یون های آب دار - آکواسیون کمپلکس های آرگانوکروم(III) - کانالیز اسیدی - انتقال درون مولکولی و برون مولکولی پروتون - توصیف عمومی - HOMO و LUMO در انتقال پروتون اثر کیلیت - اثر ماکروسیکل - اثر پیش سازمان دهی در ترکیبات ماکروسیکل برای تشکیل کمپلکس (اثرات سینتیکی و ترمودینامیکی)

6- واکنش های انتقال الکترون

رابطه بین عدد اکسایش، شکل هندسی و ترکیب فضای کئوردیناسیون اول - مکانیسم و قوانین سرعت - دسته بندی - انتقال الکترون مستقیم و غیر مستقیم - میانجیگری حلال و الکترون حلال پوشی شده - انتقال الکترون فضای داخل - انتقال الکترون فضای خارج - معادله مارکوس - ترم های متفاوت در معادله مارکوس - انتقال الکترون درون مولکولی - ترکیبات دارای ظرفیت مختلف - انتقال "2 الکترونی - واکنش های تکمیلی و غیر تکمیلی - مدل دهنده و گیرنده - تفاوت در طول پیوند - تفاوت در الکترو نگاتیویته.

7- فعالسازی لیگاندهای کئوردینه شده به بون های فلزی و مکانیسم واکنش های مربوطه

8- واکنش های ایزومری و بازاریابی ساختار فضایی ترکیب های کئوردیناسیون - سینتیک و مکانیسم این واکنش ها

9- روشهای تجربی اندازه گیری سرعت واکنش:

NMR, EPR, Emission spectroscopy, Stopped-flow method, Electrochemistry

روش ارزیابی:

سنجش مستمر	آزمون میانی	آزمون پایانی	پژوهش درسی
+	+	+	+



1. Wilkins, R.G. *Kinetics and mechanism of Reaction of Transition metal Complexes*, 2nd ed., Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA: Weinheim, FRG, **2002**.
2. Jordan, R.F. *Reaction Mechanisms of Inorganic and Organometallic Systems*, 3rd ed.; Oxford University Press: New York, **2007**.
3. Espenson, J.H. *Chemical Kinetics and Reaction Mechanisms*, 2nd ed.; McGraw-Hill: New York, **1995**.
4. Atwood, J.D. *Inorganic and Organometallic Reactions Mechanisms*, 2nd ed.; Wiley-VCH: New York, **1997**.



طیف بینی معدنی

طیف بینی معدنی			فارسی		عنوان			
Inorganic Spectroscopy			انگلیسی		درس			
درس های پیش نیاز	تعداد ساعات	تعداد واحد	نوع واحد					
اصول طیف بینی مولکولی	48	3	اختیاری		الزامی			
			عملی	نظری	عملی	نظری		
			آموزش تکمیلی عملی: <input type="checkbox"/> دارد <input checked="" type="checkbox"/> ندارد					
			سفر علمی: <input type="checkbox"/> دارد <input checked="" type="checkbox"/> ندارد					
			حل تمرین: <input type="checkbox"/> دارد <input checked="" type="checkbox"/> ندارد					
آزمایشگاه: <input type="checkbox"/> دارد <input checked="" type="checkbox"/> ندارد								

هدف:

آشنائی و تسلط بر اصول و کاربرد طیف بینی معدنی

سرفصل ها:

- فصل 1 مقدمه عمومی برای طیف بینی
 - 1-1- طبیعت امواج الکترومغناطیس
 - 2-1- انرژی مطابق با انواع امواج
 - 3-1- انتقال اتمی و مولکولی
 - 4-1- قواعد انتخاب
 - 5-1- اثر آسایش و جابجایی شیمیایی روی پهنای باند طیفی
 - 6-1- کاربردهای عمومی
 - 7-1- تعیین غلظت
 - 8-1- نقاط ایزوستیک
 - 9-1- روش جاب برای محلولهای ایزو مولار
- فصل 2 طیف بینی جذب الکترونی
 - 1-2- سطوح انرژی الکترونی و ارتعاشی در مولکول های دو اتمی
 - 2-2- رابطه منحنی انرژی پتانسیل با طیف الکترونی
 - 3-2- نام گذاری حالت های الکترونی در مولکول
 - 4-2- کوپلاژ اسپین و اربیتال
 - 5-2- برهمکنش های آرایشها
 - 6-2- نکات مهم در تعیین باندهای جذبی



- 7-2- انتقال ممان و قدرت نوسانگر
- 8-2- انحراف در بعضی از قواعد انتخاب
- 9-2- طیف فرع‌الدهید
- 10-2- سهم های کوپلاز اسپین-اربیثال و کوپلاز ارتعاشی در شدت باند های جذبی
- 11-2- اختلاط اربیتال های p و d در بعضی تقارن ها معین
- 12-2- سهم دوقطبی مغناطیسی و چهار قطبی الکتریکی در شدت باندهای جذبی
- 13-2- انتقالات الکترونی انتقال بار
- 14-2- طیف جذبی امواج پلاریزه شده
- 15-2- اثر قطبیت حلال روی انتقالات الکترونی انتقال بار
- 16-2- طیف بینی ORD و CD و کاربردهای آنها
- 17-2- طیف بینی MCD و کاربرد های آن
- فصل 3- طیف بینی ارتعاشی مادون قرمز و رامان
- 1-3- ارتعاش های هارمونیک و غیر هارمونیک
- 2-3- جذب امواج بوسیله ارتعاشهای مولکولی و قواعد انتخاب مرتبط با آن
- 3-3- ثابت نیروی یک پیوند
- 4-3- قواعد $3N-6(5)$
- 5-3- عواملی که باعث افزایش تعداد باندهای جذبی می شوند
- 6-3- تعیین باندهای جذبی ارتعاشی برای گروههای عاملی در مولکول های پیچیده و محدودیت های موجود
- 7-3- طیف بینی رامان
- 8-3- قواعد انتخاب مربوط به طیف بینی رامان
- 9-3- نامگذاری های مختلف برای ارتعاش ها
- 10-3- استفاده از نظریه گروه برای تعیین تعداد باندهای فعال در طیف بینی مادون قرمز و رامان
- 11-3- شرایط تقارنی مورد نیاز برای کوپلاز باندهای ترکیبی و رزونانس قرمی
- 12-3- تغییر در طیف همراه با تغییر در تقارن ناشی از کنوردیناسیون
- فصل 4- طیف بینی رزونانس مغناطیسی هسته ها
- 1-4- مقدمه
- 2-4- بعضی از تعاریف اولیه - گشتاور زاویه ای هسته، اسپین هسته و نسبت مگنتوجیرک
- 3-4- رفتار یک مگنت در میدان مغناطیسی خارجی، گشتاور، انرژی، فرکانس لارمو و مگنتیزاسیون خالص
- 4-4- سیستم مختصات XY چرخشی
- 5-4- بردارهای مگنتیزاسیون و زمان های آسایش T_1, T_2



6-4- انتقال در NMR و معادله بلاخ

7-4- توصیف منحنی FID

8-4- اثر پوششی دیامغناطیسی و پارامغناطیسی (معادله رمسی) و رنج جابجایی شیمیایی برای هسته های مختلف

9-4- جابجایی شیمیایی ناشی از اثرات غیرهمسانگرد

10-4- مکانیزم کوپلاژ از طریق پیوند و وابستگی آن به خصلت S پیوند، طول پیوند (فاصله بین هسته ها) و جهت گیری هسته ها (زاویه دی هدرال)

11-4- کوپلاژ بین هسته ها از طریق فضا

12-4- طیف های مرتبه دو (AB) و اسپین سیستم های مختلف

13-4- بدست آوردن پارامترهای ترمودینامیکی با استفاده از NMR

14-4- بدست آوردن ثابت سرعت، مرتبه واکنش و انتالپی اکتیواسیون با استفاده از NMR

15-4- بررسی دینامیک مولکولی با طیف بینی NMR

16-4- اثر NOE و بررسی مکانیزم آن روی شدت سیگنال ها

17-4- اساس پالس NMR (تکنیک تبدیل فوریه)

18-4- آزمایش اندازه گیری T1 با روش پالس NMR

19-4- تکنیکهای NMR با پالس های ترکیبی (Spin-Echo, SPI, DEPT, DEPT 135)

20-4- تکنیک های NMR دو بعدی (C,H-COSY; H,H-COSY, NOSY)

21-4- مثال هایی از NMR دو بعدی ترکیبات معدنی و آلی فلزی

فصل 5- NMR ترکیبات پارامغناطیسی

1-5- مقدمه و خواص ترکیبات پارامغناطیسی

2-5- جابجایی از طریق تماس (contact shift)

3-5- جابجایی از طریق شبه تماس

4-5- عوامل موثر بر تماس و شبه تماس

5-5- فاكتورهای اثر گذار بر اساس هسته در ترکیبات پارامغناطیسی

6-5- کاربردهای طیف بینی NMR ترکیبات پارامغناطیسی در تعیین ساختار

فصل 6- طیف بینی ماس باور

1-6- مقدمه و اساس طیف بینی ماس باور

2-6- روش تهیه طیف ماس باور

3-6- توصیف جابجایی ایزومری

4-6- برهمکنش های چهار قطبی و اثر آن روی طیف ماس باور



- 5-6- اثر میدان مغناطیسی خارجی روی طیف ماس باور
- 6-6- کاربرد های طیف بینی ماس باور در تعیین ساختار هندسی و الکترونی کمپلکس های معدنی
- فصل 7- طیف بینی رزنانس اسپین الکترون
- 1-6- اساس طیف بینی رزنانس مغناطیسی الکترون
- 2-6- شکافتگی ناشی از هسته ها
- 3-6- توصیف و نحوه شکل گیری طیف ESR اتم هیدروژن
- 4-6- نحوه نمایش طیف ESR
- 5-6- شکافتگی در سیستم های ایزوتوپی شامل دو یا چند هسته
- 6-6- سهم های موجود در مقدار ثابت کوپلاژ
- 7-6- اثرات غیرهمسانگردی در مقدار g
- 8-6- طیف بینی رزنانس مغناطیسی الکترون کمپلکس های معدنی
- فصل 8- طیف بینی الکترونی کمپلکس های فلزات واسطه
- 1-8- مقدمه
- 2-8- برهمکنش های الکترون-الکترون
- 3-8- کوپلاژ اسپین-اربییتال در یون آزاد
- 4-8- اثر لیگاندها روی انرژی اربیتال ها
- 5-8- مفاهیم تقارنی شکافتگی اربیتال های d توسط لیگاندها
- 6-8- گروه های دبل
- 7-8- کوپلاژ مغناطیسی در کلاستر های یونهای فلزات
- 8-8- طیف الکترونی کمپلکس ها
- 9-8- محاسبه Dq, β برای کمپلکس های معدنی
- 10-8- مشاهدات ساختاری با استفاده از طیف الکترونی
- 11-8- پارامتر های پیوندی سیگما و پی با استفاده از طیف های تراگونال
- روش ارزیابی:

سنجش مستمر	آزمون میانی	آزمون پایانی	پژوهش درسی
+	+	+	+



1. Drago, R.S. *Physical Methods for Chemists*, 2nd ed.; Saunders College Publishing: Orlando, Florida, 1992.
2. Ebsworth, E.V.A.; David W. H. Rankin, D.W.H.; Cradock, S. *Structural Methods in Inorganic chemistry*, 2nd ed.; Blackwell: Oxford, UK, 1991.
3. Nakamoto, K. *Infrared and Raman Spectra of Inorganic and coordination compounds, Part A. Theory and Applications in Inorganic Chemistry*, 6th ed.; John Wiley & Sons: New Jersey, 2009.
4. Nakamoto, K. *Infrared and Raman Spectra of Inorganic and coordination compounds, Part B. Application in Coordination, Organometallic, and Bioinorganic Chemistry*, 6th ed.; John Wiley & Sons: New Jersey, 2009.
5. Parish, R.V. *NMR, NQR, EPR, and Mossbauer Spectroscopy in Inorganic Chemistry*, Ellis Harwood: Oxford, UK, 1990.



شیمی فیزیک معدنی

شیمی فیزیک معدنی		فارسی	عنوان
Inorganic Physical Chemistry		انگلیسی	درس
درس های پیش نیاز	تعداد ساعت	تعداد واحد	نوع واحد
شیمی معدنی پیشرفته	48	3	الزامی
			اختیاری
			نظری
			عملی
			آموزش تکمیلی عملی:
			دارد <input type="checkbox"/> ندارد <input checked="" type="checkbox"/>
			دارد <input type="checkbox"/> ندارد <input checked="" type="checkbox"/>
			دارد <input type="checkbox"/> ندارد <input checked="" type="checkbox"/>
			دارد <input type="checkbox"/> ندارد <input checked="" type="checkbox"/>
			دارد <input type="checkbox"/> ندارد <input checked="" type="checkbox"/>

سرفصل ها:

- 1- ویژگی های الکترونی عناصر واسطه در حالت های اکسایش مختلف و نیز ترکیبات کوئوردیناسیون آن ها
 - 1-1 آرایش الکترونی
 - 2-1 حالت الکترونی
 - 3-1 توابع موج آرایش d^1
- 2- پتانسیل الکترواستاتیک میدان بلور (نظریه میدان بلور)
 - 1-2 پتانسیل میدان هشت وجهی و تاثیر آن بر انرژی اوربیتال های d
 - 2-2 پتانسیل میدان چهار وجهی و تاثیر آن بر انرژی بیتال های d
 - 3-2 پتانسیل میدان D_h (تراگتال)
 - 4-2 پتانسیل میدان کلی D_2d
- 3- آرایش الکترونی d^n
 - 1-3 دافعه بین الکترونی و تعیین حالت های الکترونی یون d^n
 - 2-3 تعیین توابع موج حالت های الکترونی یون d^n آزاد
 - 3-3 محاسبه انرژی حالت های الکترونی یون d^n آزاد بر حسب پارامترهای راکا
 - 4-3 تعیین شکافتگی حالت های الکترونی d^n در میدان های لیگاند با تقارن های گوناگون
 - 5-3 میدان لیگاند قوی
- 4- خواص مغناطیسی ترکیب های ک.ئوردیناسیون
 - 1-4 مغناطیس پذیری یون های پارامغناطیس
 - 2-4 تاثیر اختلال های متوالی بر تراز های الکترونی یون های پارامغناطیس
 - 5- تعیین مغناطیس پذیری و گشتاور مغناطیسی یون های کمپلکس با آرایش d^n
 - 1-5 تعیین مغناطیس پذیری یون های کمپلکس هشت وجهی



2-5 تعیین مغناطیس پذیری یون های کمپلکس در تقارن تترانگنال

6- تعیین مغناطیس پذیری و گشتاور مغناطیسی یون های کمپلکس چند هسته ای

6-1 تعیین مغناطیس پذیری کمپلکس های دو هسته ای

6-2 تعیین مغناطیس پذیری کمپلکس های سه هسته ای

6-3 کاربرد خواص مغناطیسی و مغناطیس های مولکولی

روش ارزیابی:

پژوهش درسی	آزمون پایانی	آزمون میانی	سنجش مستمر
+	+	+	+

منابع

1. Figgis, B.N.; Hitchman, M.A. *Ligand Field Theory and Its Applications*, 2nd ed.; Wiley-VCH: New York, 2005.
2. Drago, R.S. *Physical Methods for Chemists*, 2nd ed.; Saunders College Publishing: Orlando, Florida, 1992.



نظریه گروه

نظریه گروه		فارسی	عنوان		
Group Theory		انگلیسی	درس		
درس های پیش نیاز	تعداد ساعت	تعداد واحد	نوع واحد		
			الزامی	اختیاری	
شیمی معدنی پیشرفته	48	3	نظری	عملی	
			آموزش تکمیلی عملی:	دارد <input type="checkbox"/>	ندارد <input checked="" type="checkbox"/>
			سفر علمی:	دارد <input type="checkbox"/>	ندارد <input checked="" type="checkbox"/>
			حل تمرین:	دارد <input type="checkbox"/>	ندارد <input checked="" type="checkbox"/>
			آزمایشگاه:	دارد <input type="checkbox"/>	ندارد <input checked="" type="checkbox"/>

هدف:

آشنائی و تسلط بر اصول تئوری و کاربرد شیمیائی نظریه گروه

سرفصل ها:

گروه های نقطه ای و تقارن: چرخش، انعکاس، چرخش غیر صحیح،

معکوس شدن، تکثیر اعمال تقارنی،

جدول مشخصات و کاربردهای آن،

نمایش اوبیتالهای مولکولی کاربردهای شیمیایی،

شکل های مولکولی، قوانین انتخاب در طیف بینی،

نظریه میدان کریستالی، نظریه اوربیتال مولکولی،

جفت شدن اسپین اوربیت، فرکانسهای کششی در IR و رامان،

قوانین وود وارد - هافمن و تقارن

روش ارزیابی:

سنجش مستمر	آزمون میانی	آزمون پایانی	پژوهش درسی
+	+	+	+

منابع

- عابدینی، منصور؛ آقلیزرگ، حسین؛ نظریه گروه و تقارن در شیمی، چاپ دوم، انتشارات دانشگاه تهران، 1379.
- Hall, L.H. *Group Theory and Symmetry in Chemistry*, McGraw-Hill: New York, 1969.
- Cotton, F.A. *Chemical Applications of Group Theory*, 3rd ed.: Wiley-Interscience Publishing: New York, 1990.



پلیمرهای معدنی

پلیمرهای معدنی			فارسی	عنوان
Inorganic Polymers			انگلیسی	درس
درس های پیش نیاز	تعداد ساعت	تعداد واحد	نوع واحد	
شیمی معدنی 2	51	3	اختیاری	
			عملی	نظری
	آموزش تکمیلی عملی:		دارد <input type="checkbox"/>	ندارد <input checked="" type="checkbox"/>
	سفر علمی:		دارد <input type="checkbox"/>	ندارد <input checked="" type="checkbox"/>
	حل تمرین:		دارد <input type="checkbox"/>	ندارد <input checked="" type="checkbox"/>
آزمایشگاه:		دارد <input type="checkbox"/>	ندارد <input checked="" type="checkbox"/>	

هدف:

آشنائی و تسلط بر تئوری و کاربرد پلیمرهای معدنی

سرفصل ها:

معرفی پلیمرهای معدنی و انواع آنها و روشهای تهیه نوین پلیمرهای معدنی
 شناسائی پلیمرهای معدنی (توزیع جرم مولکولی - حلالیت - کریستالینیتی - نقطه انتقال شیشه ای - طیف
 بینی - خواص فیزیکی)
 پلی فسفازینها (روشهای تهیه - ساختار و خواص - مواد سازگار یا سیستم زیستی بر پایه پلی فسفازینها -
 پلی فسفازینهای آلی فلزی - پلیمرهای کریستالی مایع - پلی کربوفسفازینها و پلی تیوفسفازینها)
 پلی سیلوکسانها (تهیه و آنالیز - خواص عمومی - هوموپلیمرهای فعال - کاربردها)
 پلی سیلاتها و پلیمرهای مربوطه (سنتز - اصلاح شیمیائی پلی سیلاتها - خواص فیزیکی - خواص
 الکترونی و کنفورماسیون پیوندهای عرضی در پلی سیلاتها - ساختار پلی سیلاتها - تکنولوژی پلی
 سیلاتها).
 سایر پلیمرهای معدنی (پلیمرهای فسفره - پلیمرهای سیلیس دار - پلی ژرمانها - سولفور و سلنیم پلیمری،
 پلیمرهای شامل بور - پلیمرهای دارای آلومینیوم - پلیمرهای دارای قلع - پلیمرهای فلزات واسطه.
 پلیمرهای پایه فروسن

روش ارزیابی:

سنجش مستمر	آزمون میانی	آزمون پایانی	پژوهش درسی
+	+	+	+



1. Ray, N.H. *Inorganic Polymers*, Academic: New York, 1979.
2. Zeldin, M.; Wynne, K.J.; Allcock, H.L. *ACS Symposium Series*, 360; American Chemical Society: Washington, DC, 1978.
3. Mark, J.E.; Allcock, R.H.; West, R. *Inorganic Polymers*, 2nd ed.; Oxford University Press: New York, 2005.
4. Chandrasekhar, V. *Inorganic and Organometallic Polymers*, Springer Berlin Heidelberg: New York, 2005.



سنتز مواد معدنی

عنوان		فارسی		عنوان		انگلیسی	
		سنتز مواد معدنی				Inorganic Synthesis	
نوع واحد	تعداد واحد	تعداد ساعت	درس های پیش نیاز				
			الزامی		اختیاری		
نظری	عملی	نظری	عملی	نظری	عملی	نظری	عملی
آموزش تکمیلی عملی:	<input type="checkbox"/> دارد	<input type="checkbox"/> ندارد					
سفر علمی:	<input type="checkbox"/> دارد	<input type="checkbox"/> ندارد					
حل تمرین:	<input type="checkbox"/> دارد	<input type="checkbox"/> ندارد					
آزمایشگاه:	<input type="checkbox"/> دارد	<input type="checkbox"/> ندارد					

هدف:

آشنایی و تسلط بر اصول روشهای سنتز مواد معدنی

سرفصل ها:

1- سلامتی در آزمایشگاه و شناخت MSDS

2- واکنشهای حالت جامد

الف) واکنش بین ترکیبات جامد (روش سرامیک - کاهش هیدروترمال - سنتز احتراقی - تف جوشی، ب)

واکنش های جامد با گاز، ج) واکنشهای intercalation

3- تشکیل مواد جامد از فاز گازی، الف) CVD ، ب) CVT ، ج) فرایند Aerosol

4- تشکیل جامدها از مواد مذاب و محلولها، الف) شیشه ، ب) Biomaterial ، ج) فرایند Solvol

thermal

5- مواد حفره دار ، الف) فلزات حفره دار ، ب) aerogel ، ج) میکروهمزوماکروپورها

6- ترکیبات نانو-ساختار ، الف) نانو -ذرات و نانو-بلورها، ب) نانو-تیوب، ج) تک -چندلایه ها

روش ارزیابی:

سنجش مستمر	آزمون میانی	آزمون پایانی	پژوهش درسی
+	+	+	+

منابع

1. Schubert, U.; Hüsing, N. *Synthesis of Inorganic Materials*, Wiley-VCH: New York, 2004.
2. Weller, M.T. *Inorganic Materials Chemistry*, Oxford University Press: New York, 1995.
3. Rao, C.N.R. *Chemical Approaches to Synthesis of Inorganic Materials*, John Wiley: New



York, 1995.

4. Jolly, W. L. *The Synthesis and Characterization of Inorganic Compounds*, Prentice-Hall: New Jersey, 1970.



شیمی آلی فلزی

شیمی آلی فلزی		فارسی	عنوان		
Organometallic Chemistry		انگلیسی	درس		
درس های پیش نیاز	تعداد ساعات	تعداد واحد	نوع واحد		
شیمی آلی فلزی	48	3	اختیاری		
			عملی	نظری	
			دارد <input type="checkbox"/>	ندارد <input checked="" type="checkbox"/>	آموزش تکمیلی عملی:
			دارد <input type="checkbox"/>	ندارد <input checked="" type="checkbox"/>	سفر علمی:
			دارد <input type="checkbox"/>	ندارد <input checked="" type="checkbox"/>	حل تمرین:
		دارد <input type="checkbox"/>	ندارد <input checked="" type="checkbox"/>	آزمایشگاه:	

هدف:

آشنائی و تسلط بر اصول روشهای سنتز و کاربرد ترکیبات آلی فلزی

سرفصل ها:

1- مقدمه

- معرفی ترکیبات آلی فلزی و کاربرد آن ها در سنتز
- شیمی آلی فلزی عناصر اصلی گروه های اول تا دوازدهم
- روش تهیه، واکنش ها و کاربرد آن ها در سنتز
- 3- مروری بر کمپلکس های آلی فلزی فلزات واسطه بر اساس نوع لیگاند
- اصل ایزولوبال، دهنده های هالوزن های دار، اکسیژندار و نیتروژن دار، فسفین ها، مطالعات P-NMR، NMR، اوبال، دهنده های هالوزن های دار، اکسیژندار و نیتروژن دار، فسفین ها، مطالعات N ها هیدریدها، سنتز و خصوصیات اسیدی و سایر خصوصیات آن ها، الکیل های فلزات واسطه، آریل ها و فنل ها، آسیل ها و لیگاندهای وابسته به آن ها، کربونیل ها، تیو کربونیل ها، سلنو کربونیل ها، کاربن ها، کاربن دی نیتروژن ها، در اکسیژن ها و سایر لیگاندها
- 4- واکنش های ترکیبات آلی - فلزی
- تعریف و نام گذاری واکنش ها، مکانیسم و بررسی های ترموشیمیایی، واکنش های جانشینی، تفکیکی و تجمعی، کانالیزورهای انتقال الکترون، واکنش های جانشینی در کلاسترها، واکنش های اکسایشی - افزایشی و احیائی - حذفی، واکنش های اکسایشی - افزایشی و ملاحظیات ترمودینامیکی، واکنشگرهای غیر

قطبی و قطبی و الکتروفیل ها، مکانیسم واکنش های اکسایشی-افزایش و احیائی-حذفی، واکنش های الحاقی یا جایگیری، الحاق کربن منو کسید، سینتیک، استرئوشیمی، الحاق کربن ها، هیدریدها، الکن ها و آلکین ها، حمله نوکلئوفیلی به کمپلکس های کربن و ایزونیتیل ها، حمله نوکلئوفیلی به لیگاندهای غیر شباع، اولفین ها، آلکین ها و آلکیل ها، حمله الکتروفیلی به لیگاندها، شکستن الکتروفیلی پیوند سیکمای فلز-کربن، واکنش های الحاقی الکتروفیلیو اصلاحات الکتروفیلی لیگاندهای کوئوردینه شده

5- متالوسیکل ها

- تهیه، خصوصیات متالوسیکلوبوتان، متالوسیکلویو تا دی ان، متالوسیکلوبوتن و واکنش های کاتالیزوری شامل متالوسیکل ها

6- کاربردهای کاتالیزور ترکیبات آلی فلزی فلزات واسطه

- واکنش های هیدروژن دار شدن اولفین ها، واکنش های پلیمریزاسیون اولفین ها و استیلن ها و واکنش های حاوی کربن منو کسید، فرایند اکسو و کربونیلایون الکل ها

روش ارزیابی:

سنجش مستمر	آزمون میانی	آزمون پایانی	پژوهش درسی
+	+	+	+

منابع

1. Elshenbroich, C.; Salzer, A. *Organometallics*, 2nd ed.; Wiley-VCH Verlag GmbH: New York, 2005.
2. Collman, J.P.; Hegedus, L.S.; Nötrton, J. R.; Finke, R.G.; *Principle and Application of Organotransition Metal Chemistry*, University Science Books: Sausalito, CA, 1987.
3. Crabtree, R.H. *The Organometallic Chemistry of the Transition Metals*, 4th ed.; John Wiley & Sons: New York, 2005.



شیمی هسته‌ای

شیمی هسته‌ای		فارسی	عنوان		
Nuclear Chemistry		انگلیسی	درس		
درس‌های پیش‌نیاز	تعداد ساعت	تعداد واحد	نوع واحد		
شیمی معدنی 1	51	3	اختیاری		
			عملی	نظری	
			الزامی	عملی	نظری
			آموزش تکمیلی عملی:	<input type="checkbox"/> دارد	<input type="checkbox"/> ندارد
			سفر علمی:	<input type="checkbox"/> دارد	<input type="checkbox"/> ندارد
		حل تمرین:	<input type="checkbox"/> دارد	<input type="checkbox"/> ندارد	
		آزمایشگاه:	<input type="checkbox"/> دارد	<input type="checkbox"/> ندارد	

هدف:

آشنائی و تسلط بر اصول شیمی هسته‌ای

سرفصل‌ها:

مقدمه و یادآوری (شامل تحول فکری و آزمایشاتی که منجر به پیشنهاد وجود هسته در ساختمان اتم گردید، تعریف برخی اصطلاحات نظیر ایزوبار، ایزومر، ایزوتوپ و غیره) تعریف واحد جرم اتمی یگانه، (U) فراوانی، نسبی، ایزوتوپهای طبیعی و محاسبه U اندازه هسته اتم با توجه به آزمایشات بخش ذرات گوناگون توسط هسته - رابطه شعاع هسته با عدد جرمی - شکل هسته و چگونگی توزیع جرم و بار ذرات تشکیل دهنده هسته با توجه به آزمایشات بخش اجزاء تشکیل دهنده هسته و بررسی عدم مکان وجود الکترون‌ها در هسته با کاربرد اصل عدم قطعیت، اسپین و ممان مغناطیسی هسته آزمایشاتی که منجر به کشف نوترون گردید و دلایل وجود نوترون در هسته - هسته‌های پایدار و ناپایدار (رادیواکتیو) - منحنی پایداری و تغییرات نسبت نوترون به پروتون در هسته‌های سبک و سنگین - چگونگی تباهی هسته‌های رادیواکتیو به پایدار با توجه به منحنی پایداری انواع فرآیندهای تباهی رادیواکتیو و سری‌های رادیواکتیو انرژی پیوندی هسته - کاستی جرم منحنی‌های تغییرات انرژی پیوندی هسته و کاستی جرم به نسبت تغییرات اعداد جرمی و اتمی و توضیح درباره منشأ انرژی هسته‌ای ناشی از شکافت (Fission) یا گداخت (Fusion) هسته‌ای با توجه به منحنی‌های مذکور توضیح مختصر درباره راکتورهای هسته‌ای و چگونگی تولید برق از آنها. مختصری درباره برخی از واکنشهای مهم گداخت هسته‌ای در رابطه با سنتز عناصر گوناگون در جهان و در ستارگان و چگونگی تحول ستارگان طبیعت انرژی هسته‌ای و ساختمان هسته با توجه به منحنی‌های پتانسیل هسته‌ای - فواصل ذرات تشکیل دهنده هسته (نوکلئونها) از یکدیگر و آزادی حرکت آنها در داخل هسته با توجه به منحنی پتانسیل نوکلئونها و مقایسه آن با منحنی پتانسیل الکترونها و پیوند شیمیایی مدل‌های هسته‌ای - مدل قطره مایع - مدل لایه‌ای - ادغام مدل قطره مایع و لایه‌ای و بدست آوردن فرمول



نیمه تجربی انرژی پیوندی هسته - علت رادیو اکتیو یا پایدار بودن اتمها و مکانیزم تباهی اتمهای رادیواکتیو با توجه به مدل لایه‌ای و اعداد جادویی - اعداد کوانتومی نوکلئونها، کوپلاژها و شکافتگی ترازهای الکترونی طبق روش آنها و توضیح علت متفاوت بودن خواص عناصر - رادیواکتیویته و طبیعت آماری آن، نیمه عمر و میانگین عمر عناصر رادیواکتیو و فرمول و محاسبات مربوطه - واکنشهای هسته‌ای آشکارسازی (Detection) ذرات و تابشهای هسته‌ای - کاربرد رادیوایزوتوپها تعیین عمر اشیاء در باستانشناسی و غیره توسط روش C14 - تعیین عمر سنگها و لایه‌های زمین شناس و عمر کره زمین توسط روشهای سال‌یابی رادیواکتیو - کاربرد رادیوایزوتوپها در تعیین مکانیسم واکنشهای شیمی آلی و معدنی - کاربرد روشهای حساس گوناگون رادیوشیمیایی در شیمی تجزیه شامل روشهای اندازه‌گیری عنصری و مولکولی - کاربرد رادیوایزوتوپها در شیمی فیزیک شامل روشهای اندازه‌گیری ضرب دپرفرادیون - فشار بخارهای فوق‌العاده کم و غیره.

روش ارزیابی:

سنجش مستمر	آزمون میانی	آزمون پایانی	پژوهش درسی
+	+	+	+

منابع:

1. Harvey, B.G. *Introduction to Nuclear Physics and Chemistry*, 2nd ed.; Prentice-Hall: New Jersey, 1969.
2. Beiser, A. *Concepts of Modern Physics*, 6th ed.; McGraw Hill: New York, 2003.
3. Friedlander, G.; Kennedy, J.W., Macias, E.S.; Miller, J.M. *Nuclear and Radiochemistry*, 3rd ed., John Wiley: New York, 1981.
4. McKay, H.A.G. *Principles of Radiochemistry*, Butterworths: London, 1971.



شیمی کوانتوم 1

شیمی کوانتوم 1		فارسی	عنوان		
Quantum chemistry 1		انگلیسی	درس		
تعداد ساعات	تعداد واحد	نوع واحد			
مبانی شیمی کوانتوم	48	3	اختیاری		الزامی
			عملی	نظری	عملی
			آموزش تکمیلی عملی: <input type="checkbox"/> دارد <input checked="" type="checkbox"/> ندارد		نظری
			سفر علمی: <input type="checkbox"/> دارد <input checked="" type="checkbox"/> ندارد		عملی
			حل تمرین: <input type="checkbox"/> دارد <input checked="" type="checkbox"/> ندارد		نظری
آزمایشگاه: <input type="checkbox"/> دارد <input checked="" type="checkbox"/> ندارد					

هدف:

آشنائی و تسلط بر اصول پیشرفته شیمی کوانتوم

سرفصل ها:

یادآوری مبانی مکانیک تحلیلی، مکاناک نیوونی، لاگرانژی و هامیلتونی، قوانین بقا نیروهای مرکزی، چرخش های سه بعدی

پاکتهای موج و روابط نایقینی: پاکت موج گوسی شکل، انتشار پاکت موج، سرعت گروه، رابطه دوبروی معادله موج شرودینگر در یک بعد: معادله شرودینگر برای ذره آزاد، تفسیر تابع موج، بقای فلاکس، مقادیر متوسط، عملگر اندازه حرکت خطی، حقیقی بودن مقادیر متوسط، معادله شرودینگر یک بعدی برای یک ذره در میدان پتانسیل

توابع خاص و مقادیر خاص: معادله مقادیر خاص برای عملگر انرژی، مسئله مقدار خاص برای ذره در جعبه، تئوری بسط یک تابع بر حسب توابع ارتوگنال، ذره در جعبه و تفسیر با پارته، توابع خاص عملگر اندازه حرکت خطی، حالتهای غیر نرمالیزه قابل نرمالیزه شدن، حالتهای هم انرژی و توابع خاص، توابع چند عملگر، نوسان کننده هارمونیک

ساختمان عمومی مکانیک موجی: قضیه بسط توابع و شباهت آن با فضاها برداری، عملگرهای خطی و عملگرهای هرمیتی، قضایای مربوط به عملگرهای هرمیتی، قضایای مربوط به عملگرهای جابجاشونده، مجموعه کامل عملگرهای جابجاشونده برای یک سیستم، روابط نایقینی سد کلاسیکی تئوری کوانتومی و قضیه ارنفست

کوانتوم دینامیک: تحول یک سیستم مکانیک کوانتومی با زمان، فرمول بندی شرودینگر، هیزنبرگ، بررسی مسئله نوسان کننده هارمونیک با یکاربرد عملگر بالابرنده و پایین برنده، کاربرد عملگرهای بالابرنده و پایین برنده به عنوان مثالی از حرکت برای عملگرها



معادله شرودینگر. در سه بعد:

جدا کردن حرکت مرکز ثقل یک سیستم دو ذره ای، توابع خاص و مقادیر خاص عملگرهای اندازه حرکت زاویه ای، بحث کلی درباره حرکت تحت نیروهای مرکزی، قواعد انتحاب در میدانهای مرکزی-چرخشی، چرخش و ارتعاش مولکولهای دو اتمی، حرکت الکترون تحت نیروهای کولنی، حرکت یک الکترون تحت یک میدان کولنی در یک میدان مغناطیسی ضعیف، حرکت یک الکترون آزاد در یک میدان مغناطیسی با قدرت دلخواه

روش ارزیابی:

سنجش مستمر	آزمون میانی	آزمون پایانی	پژوهش درسی
+	+	+	+

منابع

1. Gasiorowicz, S. *Quantum Physics*, 3rd ed.; John Wiley: New York, 2003.
2. Sakurai, J.J.; Napolitano, J.J. *Modern Quantum Mechanics*, 2nd ed.; Pearson: UK, 2104.
3. Brandson, B.H.; C.J. Joachain, C.J. *Physics of Atoms and Molecules*, 2nd ed.; Pearson: UK, 2003.



طیف‌سنجی مولکولی 1

طیف‌سنجی مولکولی 1			فارسی		عنوان	
Molecular Spectroscopy 1			انگلیسی		درس	
درس‌های پیش‌نیاز	تعداد ساعت	تعداد واحد	نوع واحد			
اصول طیف‌سنجی مولکولی	51	3	اختیاری		الزامی	
			عملی	نظری	عملی	
			آموزش تکمیلی عملی: <input type="checkbox"/> دارد <input checked="" type="checkbox"/> ندارد			
			سفر علمی: <input type="checkbox"/> دارد <input checked="" type="checkbox"/> ندارد			
			حل تمرین: <input type="checkbox"/> دارد <input checked="" type="checkbox"/> ندارد			
آزمایشگاه: <input type="checkbox"/> دارد <input checked="" type="checkbox"/> ندارد						

هدف:

آشنائی و تسلط بر اصول طیف‌سنجی مولکولی

سرفصل‌ها:

تابش‌های الکترومغناطیسی، جذب و نشر نور بوسیلهٔ اتمها و یا مولکولها، اصول اندازه‌گیری و انواع طیف‌سنجی،

مختصری از تقارن و تئوری گروه و کاربرد آن در طیف‌سنجی

طیف چرخشی (امواج ریز) مولکولها، رابطه ساختمان مولکول

طیف ارتعاشی (زیرقرمز و رامان)، استفاده در تعیین ساختمان مولکول و تجزیه شیمیایی طیف ارتعاشی - چرخشی

طیف ارتعاشی (مولکولهای دو اتمی، ساختمان ظریف ارتعاشی-چرخشی مولکولهای درشت) قوانین و ملاحظات تجربی در طیف‌سنجی مرئی و فرابنفش

روش ارزیابی:

سنجش مستمر	آزمون میانی	آزمون پایانی	بزهوش درسی
+	+	+	+

منابع

1. اصول طیف‌سنجی مولکولی، گوردن بارو، ترجمه دکتر خدادادی و دکتر عابدینی، انتشارات دانشگاه تهران.
2. Banwell, C.N.; McCash, E.M. *Fundamental of Molecular Spectroscopy*, 4th ed.; McGraw-Hill: New York, 1994.
3. Levine, I.N. *Molecular Spectroscopy*, 1st ed.; John Wiley: New York, 1975.



نانو مواد معدنی

عنوان درس		فارسی		انگلیسی		
		نانو مواد معدنی				
نوع واحد	تعداد واحد	تعداد ساعت	درس های پیش نیاز			
			الزامی		اختیاری	
نظری	عملی	نظری	عملی	نظری	عملی	
آموزش تکمیلی عملی:	<input type="checkbox"/> دارد	<input type="checkbox"/> ندارد	<input type="checkbox"/> دارد	<input type="checkbox"/> ندارد	روشهای سنتز مواد نانو ساختار	
سفر علمی:	<input type="checkbox"/> دارد	<input type="checkbox"/> ندارد	<input type="checkbox"/> دارد	<input type="checkbox"/> ندارد		
حل تمرین:	<input type="checkbox"/> دارد	<input type="checkbox"/> ندارد	<input type="checkbox"/> دارد	<input type="checkbox"/> ندارد		
آزمایشگاه:	<input type="checkbox"/> دارد	<input type="checkbox"/> ندارد	<input type="checkbox"/> دارد	<input type="checkbox"/> ندارد		

هدف:

آشنائی و تسلط بر اصول تئوری و کاربرد نانو مواد معدنی

سرفصل ها:

- 1- نانو کلاسترها
- 2- کربن نانو تیوب
- 3- نانو تیوب های معدنی
- 4- نانو ذرات معدنی
- 5- نانو سیستم های پلیمرهای معدنی
- 6- نانو فیلترهای معدنی
- 7- سل-ژل در سنتز نانو مواد معدنی

روش ارزیابی:

سنجش مستمر	آزمون میانی	آزمون پایانی	پژوهش درسی
+	+	+	+

منابع

1. Feldheim, D.L.; Foss, C.A. *Metal Nanoparticles, Synthesis, Characterization and Application*, 1st ed.; Marcell Dekker: New York, 2002.
2. Reich, S.; Thomsen, C.; Maultzsch, J. *Carbon Nanotubes*, Wiley-VCH Verlag GmbH: New York, 2004.
3. Yang, P. *The Chemistry of Nanostructured Materials*, World Scientific: New Jersey, 2003.
4. Jena, P.; Khanna, S.N.; Rao, B.K. *Cluster and Nano-assemblies*, World Scientific: New Jersey, 2005.



شیمی سل-ژل

شیمی سل-ژل			فارسی		عنوان			
Sol-Gel Chemistry			انگلیسی		درس			
درس های پیش نیاز	تعداد ساعت	تعداد واحد	نوع واحد					
روشهای سنتز مواد نانوساختار	48	3	اختیاری		الزامی			
			عملی	نظری	عملی	نظری		
			آموزش تکمیلی عملی: <input type="checkbox"/> دارد <input checked="" type="checkbox"/> ندارد		آموزش تکمیلی نظری: <input type="checkbox"/> دارد <input checked="" type="checkbox"/> ندارد			
			سفر علمی: <input type="checkbox"/> دارد <input checked="" type="checkbox"/> ندارد		حل تمرین: <input type="checkbox"/> دارد <input checked="" type="checkbox"/> ندارد			
			آزمایشگاه: <input type="checkbox"/> دارد <input checked="" type="checkbox"/> ندارد		آزمایشگاه: <input type="checkbox"/> دارد <input checked="" type="checkbox"/> ندارد			

هدف:

آشنائی و تسلط بر اصول اصول تئوری و کاربرد شیمی سل-ژل

سرفصل ها:

- معرفی سل-ژل، هیدرولیز و تراکم مواد غیرسیلیکاتی و سیلیکاتی (فلزات واسطه، آلومیناتها،
- سیستم های بورات، سیلیکاتهای آبی، هیدرولیز و تراکم آلکوکساید های سیلیکون، سیلیکاتهای چند جزئی)،
- ژلاتینه کردن (تئوری کلاسیک، مدل های سینتیکی)،
- تئوری تغییر شکل و جریان در ژل ها (نیروهای مؤثر برای هم زدن، انتقال مایعات، رئولوژی شبکه متخلخل، تئوری تغییر شکل)،
- خشک کردن (فشار خشک کردن، جلوگیری از شکستگی، لایه های نازک)

روش ارزیابی:

سنجش مستمر	آزمون میانی	آزمون پایانی	پژوهش درسی
+	+	+	+



1. Brinker, C.G.; Scherer, G.W. *Sol-Gel Science: The Physics and Chemistry of Sol-Gel Processing* 1st ed.; Academic Press: New York, **1990**.
2. Bradley, D.C.; Mehrotra, R.C.; Rothwell, I.P.; Singh, A. *Alkoxo and Aryloxo Derivatives of Metals*, Academic Press: New York, **2001**.
3. Wright, J.D.; Sommerdijk, Nico A.J.M. *Sol-Gel Materials: Chemistry and Application*, Taylor & Francis: London, **2001**.



کریستالوگرافی اشعه X

کریستالوگرافی اشعه X		فارسی	عنوان	
X-ray Crystallography		انگلیسی	درس	
تعداد واحد	تعداد ساعات	نوع واحد		
3	48	اختیاری		الزامی
		عملی	نظری	عملی
شیمی معدنی پیشرفته		دارد <input type="checkbox"/> ندارد <input checked="" type="checkbox"/>		آموزش تکمیلی عملی:
		دارد <input type="checkbox"/> ندارد <input checked="" type="checkbox"/>		سفر علمی:
		دارد <input type="checkbox"/> ندارد <input checked="" type="checkbox"/>		حل تمرین:
		دارد <input type="checkbox"/> ندارد <input checked="" type="checkbox"/>		آزمایشگاه:

هدف:

آشنایی با اصول کریستالوگرافی اشعه X

سرفصل ها:

تئوری:



- 1- رشد بلور - سیستم حلال - تکنیک ها - انتخاب بلور
- 2- نشان دادن بلور - تکنیک ها - دستگاه تجهیزات - پین - چسب ها
- 3- سلول واحد - شبکه براوه
- 4- شبکه مستقیم و معکوس - ساخت هندسی آن
- 5- قانون براگ - اندیس های میلر - کره اوالد (Ewald)
- 6- ابراتورهای تقارنی - عناصر تقارنی - تقارن گروه فضایی - موقعیت عمومی و خاص - واحد بی تقارن - Z', z و جداول بین المللی
- 7- فاکتور ساختاری - دانسیته الکترونی - رابطه بین فاکتور ساختاری و دانسیته الکترون - قانون فریدل، تقارن الگوی پراش - مسئله فاز
- 8- تعیین گروه فضایی - تقارن لایه - غیبت های منظم
- 9- بررسی داده ها؛ انتگرال گیری داده ها - تصحیحات لورنتز (Lorentz) - پولاریزاسیون و جذب - R_{int} R_{sigma} redundancy

حل ساختار:

- 1- پالایش ساختار: دستور کار بهینه سازی حداقل مربعات - تعریف مدل و پالایش - مقیاس وزنی - همگرایی - پارامترها - قیدهای سخت و نرم.
- 2- پالایش آنیزوتروپی (ناهمسانگرد) - افزودن اتم های H و جنبه های دیگر

3- بدست آوردن پارمترهای هندسی: طول پیوند، زوایا، زوایای دو وجهی، صفحات حداقل مربعی - خلاصه

کردن نتایج - الگوی پیوند هیدروژنی

4- اعتبار سنجی نتایج، CIF - خطاهای CIF از نوع G.C.B. A...

5- ساختار پیچیده: بی نظمی - دوقلوبی و شبه تقارن

دستگاهی:

مروری بر دستگاههای متفاوت در بلور شناسی

عملی:

1- نرم افزار بررسی داده های اشعه X

ORTEP3, OLEX2, WINGX, SHELXTL, SHELX, PUBLCIF, MERCURY,
PLATON

2- کارگاه عملی (حل ساختار)

آموزش حل و پالایش ساختار برای ترکیبات آلی - مثال ارگاتیک - ارگانومتال و ترکیبات معدنی

Natural product

روش ارزیابی:

سنجش مستمر	آزمون میانی	آزمون پایانی	پژوهش درسی
+	+	+	+

منابع

1. Peter, L. *Modern X-ray Analysis on Single Crystals*, 2nd ed.; De Gruyter: 2014.
2. Massa, W. *Crystal Structure Determination*, 2nd ed.; Springer: Berlin, 2004.
3. Müller, P.; Herbst-Irmer, R.; Spek, A.L.; Schneider, T.R.; Sawaya, M.R. *Crystal Structure Refinement*, Müller, P., Editor; International Union of Crystallography; Oxford University Press: New York, 2006, 8.
4. Giacovazzo, C.; Monaco, H.L.; Artioli, G.; Viterbo, D.; Ferraris, G.; Gilli, G.; Zanotti, G.; Catti, M. *Fundamentals of Crystallography*, 2nd ed.; Giacovazzo, C., Editor; International Union of Crystallography; Oxford University Press: New York, 2002, 7.

