جمهوری اسلامی ایران

وزارت علوم، تحقیقات و فنّاوری

برنامه درسی

(بازنگری شده)

دوره: کارشناسی ارشد

رشته: شیمی گرایش شیمی معدنی

گروه : علوم پایه

مصوبه جلسه شماره ۹۲ مورخ ۱۳۹۵/۱۲/۰۱

کمیسیون برنامه‌ریزی آموزشی

بسم الله الرّحمن الرّحیم

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 ومؤسسه 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 نوه‌ابراهیم

دبیر شورای عالی برنامه‌ریزی آموزشی

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 به روز 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 به روز 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

3-5-1سمینار 8

4-5-1 پایان‌نامه 8

6-1 نقش و توانایی فارغ التحصیلان 8

7-1 شرایط و ضوابط ورود به گرایش شیمی معدنی 9

8-1 مواد و ضرایب امتحانی 9

فصل دوم: جدول دروس 10

2-1دروس الزامی گرایش شیمی معدنی 11

2-2دروس اختیاری گرایش شیمی معدنی 12

فصل سوم: سرفصل دروس 14

3-1 شیمی معدنی پیشرفته 15

3-2 سینتیک و ترمودینامیک واکنشهای معدنی 18

3-3 طیف بینی معدنی 21

3-4 شیمی فیزیک معدنی 26

3-5 نظریه گروه 28

3-6 پلیمرهای معدنی 29

3-7 سنتز مواد معدنی 31

3-8 شیمی آلی فلزی 33

9-3 شیمی هسته‌ای 35
10-3 شیمی کوانتوم1 37
11-3 طیف‌سنجی مولکولی 1 39
12-3 نانو مواد معدنی 40
13-3 شیمی سل- ژل 42
14-3 کریستالوگرافی اشعه X 44

فصل اول:

مشخصات کلی

1-1 مقدمه:

ضرورت بازنگری 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 بازنگری 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. برنامهٔ حاضر دورهٔ کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش شیمی معدنی را با مشخصات زیر شامل می‌شود:

1-2 تعریف و هدف:

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

1-3 ضرورت و اهمیت:

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

1-4 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 می باشد. نظام دوره دوره کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش شیمی معدنی آموزشی- پژوهشی است. دانشجو با گذراندن دروس نظری و انتخاب استاد راهنما و موضوع پایان نامه، این دوره را در مهلت مقرر به پایان می رساند.

1-5 تعداد و نوع واحدهای درسی:

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

دروس الزامی	9 واحد
دروس اختیاری	12 واحد
سمینار	1 واحد
پایان‌نامه	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.

1-5-2 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.

1-5-3 سمینار:

سمینار1: 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 محدودهٔ 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.

سمینار2: این سمینار اختیاری بوده و از نظر شرایط ارایه مانند سمینار1 می باشد.

1-5-4 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.

1-6 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

1-7 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

1-8 مواد و ضرایب امتحانی:

آزمون ورودی دورهٔ کارشناسی ارشد مطابق دستورالعمل‌های سازمان سنجش آموزش کشور در یک یا دو مرحله انجام می‌گیرد. در صورت یک مرحله‌ای بودن آزمون مواد وضرائب به صورت جدول زیر میباشد.

جدول 1-4 مواد و ضرایب امتحانی گرایش شیمی معدنی

شیمی معدنی		
ردیف	مواد امتحانی	ضریب
1	زبان‌عمومی وتخصصی	1
2	شیمی آلی (دروس آلی1، 2، 3جداسازی و شناسایی‌ترکیبات‌آلی و کاربردطیف‌سنجی در شیمی آلی، شیمی فیزیک‌آلی)	1
3	شیمی‌معدنی (دروس شیمی معدنی1، 2، آلی فلزی)	2
4	شیمی‌تجزیه (دروس تجزیه1، 2، شیمی‌تجزیه دستگاهی)	1
5	شیمی فیزیک (دروس‌شیمی‌فیزیک1، 2کوانتوم وطیف‌سنجی)	1
6	شیمی کاربردی(اصول محاسبات شیمی‌صنعتی، شیمی صنعتی1، 2، اصول تصفیه آب و پسابهای صنعتی و خوردگی فلزات).	0

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

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

مرحله دوم: آزمون تشریحی از دروس تخصصی مربوط به رشتهٔ شیمی معدنی که شامل دروس شیمی معدنی 1، شیمی معدنی2،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

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

گذراندن هر سه درس برای دانشجویان گرایش معدنی الزامی است.

جدول 2) دروس اختیاری گرایش شیمی معدنی

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

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

*گذراندن 12واحد از جدول فوق برای دانشجویان گرایش معدنی الزامی است.

تبصره: هر گروه اموزشی با نظر شورای تحصیلا ت تکمیلی گروه مربوطه میتواند تا سقف دو درس از دروس فوق را الزامی اعلام نمائید.

فصل سوم:

سرفصل دروس

شیمی معدنی پیشرفته

عنوان درس	فارسی	شیمی معدنی پیشرفته							درس‌های پیش‌نیاز
	انگلیسی	Advanced Inorganic Chemistry							
نوع واحد					تعداد واحد	تعداد ساعت			
الزامی		اختیاری			3	48			
نظری	عملی	نظری	عملی						
آموزش تکمیلی عملی:		دارد □ ندارد ■							شیمی معدنی 2
سفر علمی:		دارد □ ندارد ■							
حل تمرین: دارد □		ندارد ■							
آزمایشگاه: دارد □		ندارد ■							

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 حلقو ی و آبلی، 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

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

تعیین ترم طیفی پایه با استفاده از نمودار همبستگی و روش کاهش تقارن، تعیین انرژی نسبی اوربیتالهای d با استفاده از روش کریشنامورتی – 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، کمپلس های فعال و بی اثر، مکانیسم های A، D و Ia و Id پارامترهای فعالسازی و مکانیسم واکنش های جایگزینی لیگاند، $\Delta H^{\#}$ ، $\Delta S^{\#}$، $\Delta V^{\#}$ ، واکنش های جایگزینی لیگاند در کمپلکس

های هشت و جهی و مسطح مربعی، اثر ترانس، انرسیس توضیح اثر ترانس با استفاده از اثر پیوندهای σ و π و نظریه همپوشانی زاویه ای، تغییرات استرئو شیمی در واکنش های جایگزینی لیگاند.

واکنش های انتقال الکترون (ردوکس) در ترکیبات کوئوردیناسیون: 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 راسمی شدن و ایزومری شدن.

4- نظریه اوربیتال های مولکولی و مدل همپوشانی زاویه ای

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

محاسبه انرژی برتری ساختاری و نیز ساختار برتر در ترکیب های کمپکس (MLn)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 د رمواد معدنی و چگونگی انتقال یون ها در مواد جامد

اکسید، نیترید ،فلوئورید،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
+	+	+	+

منابع

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. Shirver & Atkins Inorganic Chemistry*, 5th ed.; W.H. Freeman and Company: New York, **2014**.

سینتیک و ترمودینامیک واکنشهای معدنی

عنوان درس	فارسی	سینتیک و ترمودینامیک واکنشهای معدنی						
	انگلیسی	Kinetics and Thermodynamics of Inorganic Reactions						
نوع واحد				تعداد واحد	تعداد ساعت	درس‌های پیش‌نیاز		
الزامی		اختیاری		3	48	شیمی معدنی 2		
نظری	عملی	نظری	عملی					
آموزش تکمیلی عملی: دارد □ ندارد ■								
سفر علمی: دارد □ ندارد ■								
حل تمرین: دارد □ ندارد ■								
آزمایشگاه: دارد □ ندارد ■								

هدف:

آشنائی و تسلط بر اصول سینتیک و ترمودینامیک واکنشهای معدنی

سرفصل ها:

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 وحالت پایا- رابطهٔ 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 مکانسیم- فاکتور فضایی- اندازه- شکل- اثرات فضاویژه- LUMO،HOMO - مسیر های حداقل انرژی و حداکثرشرایط همپوشانی- پذیرنده ها و دهنده های سیگما و پای- 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 واسط- آنتروپی فعال سازی- حجم فعال سازی- تاثیر لیگاند غیر ترک کننده- تشکیل حلقه کیلیت- بسط فضایی کئوردیناسیون- افزایش و تراکم- کمپلکس های تتراهدال- روش های ارتباط ساختاری در جانشینی تتراهدال- 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 ارگانوکروم(III) - کاتالیز 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 کوئوردینه شده به یون های فلزی و مکانیسم واکنش های مربوطه

8- واکنش های ایزومری و بازآرایی ساختار فضایی ترکیب های کوئوردیناسیون . 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
+	+	+	+

منابع

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

عنوان درس	فارسی	طیف بینی معدنی					
	انگلیسی	Inorganic Spectroscopy					
نوع واحد				تعداد واحد	تعداد ساعت	درس‌های پیش‌نیاز	
الزامی		اختیاری		3	48	اصول طیف بینی مولکولی	
نظری	عملی	نظری	عملی				
آموزش تکمیلی عملی: دارد □ ندارد ■							
سفر علمی: دارد □ ندارد ■							
حل تمرین: دارد □ ندارد ■							
آزمایشگاه: دارد □ ندارد ■							

هدف:

آشنائی و تسلط بر اصول و کاربرد طیف بینی معدنی

سرفصل ها:

فصل 1 مقدمه عمومی برای طیف بینی

۱-۱- طبیعت امواج الکترومغناطیس

۱-۲- انرژی مطابق با انواع امواج

۱-۳- انتقالات اتمی و مولکولی

۱-٤- قواعد انتخاب

۱-٥- اثر آسایش و جابجایی شیمیایی روی پهنای باند طیفی

۱-٦- کاربردهای عمومی

۱-۷- تعیین غلظت

۱-۸- نقاط ایزوبستیک

۱-۹- روش جاب برای محلولهای ایزو مولار

فصل 2 طیف بینی جذب الکترونی

2-1- سطوح انرژی الکترونی و ارتعاشی در مولکول های دو اتمی

2-2- رابطه منحنی انرژی پتانسیل با طیف الکترونی

2-3- نام گذاری حالتهای الکترونی در مولکول

2-4- کوپلاژ اسپین و اربیتال

2-5- برهمکنش های آرایشها

2-6- نکات مهم در تعیین باندهای جذبی

2-7- انتگرال انتقال ممان و قدرت نوسانگر
2-8- انحراف در بعضی از قواعد انتخاب
2-9- طیف فرمالدهید
2-10- سهم های کوپلاژ اسپین-اربیتال و کوپلاژ ارتعاشی در شدت باند های جذبی
2-11- اختلاط اربیتال های p و d در بعضی تقارن ها معین
2-12- سهم دوقطبی مغناطیسی و چهار قطبی الکتریکی در شدت باندهای جذبی
2-13- انتقالات الکترونی انتقال بار
2-14- طیف جذبی امواج پلاریزه شده
2-15- اثر قطبیت حلال روی انتقالات الکترونی انتقال بار
2-16- طیف بینی ORD و CD و کاربردهای آنها
2-17- طیف بینی MCD و کاربرد های آن
فصل 3- طیف بینی ارتعاشی مادون قرمز و رامان
3-1- ارتعاش های هارمونیک و غیر هارمونیک
3-2- جذب امواج بوسیله ارتعاشهای مولکولی وقواعد انتخاب مرتبط با آن
3-3- ثابت نیروی یک پیوند
3-4- قواعد 3N-6(5)
3-5- عواملی که باعث افزایش تعداد باندهای جذبی می شوند
3-6- تعیین باندهای جذبی ارتعاشی برای گروهای عاملی در مولکول های پیچیده و محدودیت های موجود
3-7- طیف بینی رامان
3-8- قواعد انتخاب مربوط به طیف بینی رامان
3-9- نامگذاری های مختلف برای ارتعاش ها
3-10- استفاده از نظریه گروه برای تعیین تعداد باندهای فعال در طیف بینی مادون قرمز و رامان
3-11- شرایط تقارنی مورد نیاز برای کوپلاژ باندهای ترکیبی و رزنانس فرمی
3-12- تغییر در طیف همراه با تغییر در تقارن ناشی از کنوردینانسیون
فصل 4- طیف بینی رزونانس مغناطیسی هسته ها
4-1- مقدمه
4-2- بعضی از تعاریف اولیه- گشتاور زاویه ای هسته، اسپین هسته و نسبت مگنتوجیرک
4-3- رفتار یک مگنت در میدان مغناطیسی خارجی، گشتاور، انرژی، فرکانس لارمو و مگنتیزاسیون خالص
4-4- سیستم مختصات XY چرخشی
4-5- بردارهای مگنتیزاسیون و زمان های آسایش T1, T2

4-6- انتقالات درNMR و معادله بلاخ

4-7- توصیف منحنی FID

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

4-9- جابجایی شیمیایی ناشی از اثرات غیرهمسانگرد

4-10- 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)

4-11- کوپلاژ بین هسته ها از طریق فضا

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

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

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

4-15- بررسی دینامیک مولکولی با طیف بینی NMR

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

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

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

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

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

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

فصل 5- NMR ترکیبات پارامغناطیس

5-1 مقدمه و خواص ترکیبات پارامغناطیس

5-2 جابجایی از طریق تماس(contact shift

5-3 جابجایی از طریق شبه تماس

5-4 عوامل موثربر تماس و شبه تماس

5-5 فاکتورهای اثر گذار بر اسایش هسته در ترکیبات پارامغناطیس

5-6 کاربردهای طیف بینی NMR ترکیبات پارامغناطیس در تعین ساختار

فصل 6- طیف بینی ماس باور

6-1- مقدمه و اساس طیف بینی ماس باور

6-2- روش تهیه طیف ماس باور

6-3- توصیف جابجایی ایزومری

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

6-5- 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

7-1- اساس طیف بینی رزنانس مغناطیسی الکترون

7-2- شکافتگی ناشی از هسته ها

7-3- توصیف و نحوه شکل گیری طیف esr اتم هیدروژن

7-4- نحوه نمایش طیف esr

7-5- شکافتگی در سیستم های ایزوتوپی شامل دو یا چند هسته

7-6- سهم های موجود در مقدار ثابت کوپلاژ

7-7- اثرات غیرهمسانگردی در مقدار g

7-8- طیف بینی رزنانس مغناطیسی الکترون کمپلکس های معدنی

فصل 8- طیف بینی الکترونی کمپلکس های فلزات واسطه

8-1- مقدمه

8-2- برهمکنش های الکترون-الکترون

8-3- کوپلاژ اسپین-اربیتال در یون آزاد

8-4- اثر لیگاندها روی انرژی اربیتال ها

8-5- مفاهیم تقارنی شکافتگی اربیتال های d توسط لیگاندها

8-6- گروهای دبل

8-7- کوپلاژ مغناطیسی در کلاستر های یونهای فلزات

8-8- طیف الکترونی کمپلکس ها

8-9- محاسبه Dq, β برای کمپلکس های معدنی

8-10- مشاهدات ساختاری با استفاده از طیف الکترونی

8-11- پارامتر های پیوندی سیگما و پی با استفاده از طیف های تتراگونال

روش ارزیابی:

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

منابع

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

عنوان درس	فارسی	شیمی فیزیک معدنی					
	انگلیسی	Inorganic Physical Chemistry					
نوع واحد				تعداد واحد	تعداد ساعت	درس‌های پیش‌نیاز	
الزامی		اختیاری					
نظری	عملی	نظری	عملی				
				3	48	شیمی معدنی پیشرفته	
آموزش تکمیلی عملی: دارد □ ندارد ■							
سفر علمی: دارد □ ندارد ■							
حل تمرین: دارد □ ندارد ■							
آزمایشگاه: دارد □ ندارد ■							

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 Dh (تتراگنال)

4-2 پتانسیل میدان کلی $D_{\infty}d$

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 کوئوردیناسیون

1-4 مغناطیس پذیری یون های پارامغناطیس

2-4 تاثیر اختلال های متوالی بر تراز های الکترونی یون های پارا مغناطیس

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 تتراگنال

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

1-6 تعیین مغناطیس پذیری کمپلکس های دو هسته ای

2-6 تعیین مغناطیس پذیری کمپلکس های سه هسته ای

3-6 کاربرد خواص مغناطیسی و مغناطیس های مولکولی

روش ارزیابی:

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

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

عنوان درس	فارسی	نظریه گروه					
	انگلیسی	Group Theory					
نوع واحد				تعداد واحد	تعداد ساعت	درس‌های پیش‌نیاز	
الزامی		اختیاری		3	48	شیمی معدنی پیشرفته	
نظری	عملی	نظری	عملی				
آموزش تکمیلی عملی: دارد □ ندارد ■							
سفر علمی: دارد □ ندارد ■							
حل تمرین: دارد □ ندارد ■							
آزمایشگاه: دارد □ ندارد ■							

هدف:

آشنائی و تسلط بر اصول تئوری و کاربرد شیمیائی نظریه گروه

سرفصل ها:

گروه‌های نقطه‌ای و تقارن: چرخش، انعکاس، چرخش غیرصحیح،

معکوس شدن، تکثیر اعمال تقارنی،

جدول مشخصات و کاربردهای آن،

نمایش اوبیتالهای مولکولی کاربردهای شیمیایی،

شکل های مولکولی، قوانین انتخاب در طیف‌بینی،

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

1. عابدینی، منصور ؛ آقابزرگ، حسین ؛ نظریه گروه وتقارن در شیمی، چاپ دوم، انتشارات دانشگاه تهران، 1379.

2. Hall, L.H. *Group Theory and Symmetry in Chemistry*, McGraw-Hill: New York, **1969**.

3. Cotton, F.A. *Chemical Applications of Group Theory*, 3rd ed.; Wiley-Interscience Publishing: New York, **1990**.

پلیمرهای معدنی

عنوان درس	فارسی	پلیمرهای معدنی					
	انگلیسی	Inorganic Polymers					
نوع واحد				تعداد واحد	تعداد ساعت	درس‌های پیش‌نیاز	
الزامی		اختیاری		3	51	شیمی معدنی 2	
نظری	عملی	نظری	عملی				
آموزش تکمیلی عملی: دارد □ ندارد ■							
سفر علمی: دارد □ ندارد ■							
حل تمرین: دارد □ ندارد ■							
آزمایشگاه: دارد □ ندارد ■							

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 -خلیف بینی -خواص فیزیکی)

پلی فسفازینها (روشهای تهیه -ساختار و خواص -مواد سازگار با 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 سیلانها و پلیمرهای مربوطه (سنتز -اصلاح شیمیائی پلی سیلانها -خواص فیزیکی -خواص الکترونی و کنفورماسیون پیوندهای عرضی در پلی سیلانها -ساختار پلی سیلانها -تکنولوژی پلی سیلانها)

سایر پلیمرهای معدنی (پلیمرهای فسفره -پلیمرهای سیلیس دار-پلی‌ژرمانها-سولفور و سلینم 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
+	+	+	+

منابع

1. Ray, N.H. *Inorganic Polymers*, Academics: 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 درس	فارسی	سنتز مواد معدنی					
	انگلیسی	Inorganic Synthesis					
نوع واحد				تعداد واحد	تعداد ساعت	درس‌های پیش‌نیاز	
الزامی		اختیاری					
نظری	عملی	نظری	عملی				
				3	51	شیمی معدنی پیشرفته	
آموزش تکمیلی عملی: دارد □ ندارد ■							
سفر علمی: دارد □ ندارد ■							
حل تمرین: دارد □ ندارد ■							
آزمایشگاه: دارد □ ندارد ■							

هدف:

آشنائی 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) میکرو-مزو-ماکروپورها

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

عنوان درس	فارسی	شیمی آلی فلزی					
	انگلیسی	Organometallic Chemistry					
نوع واحد				تعداد واحد	تعداد ساعت	درس‌های پیش‌نیاز	
الزامی		اختیاری		3	48	شیمی آلی فلزی	
نظری	عملی	نظری	عملی				
آموزش تکمیلی عملی: دارد □ ندارد ■							
سفر علمی: دارد □ ندارد ■							
حل تمرین: دارد □ ندارد ■							
آزمایشگاه: دارد □ ندارد ■							

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

2- 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 هالوژن های دار، اکسیژندار و نیتروژن دار،فسفین ها، مطالعات P-NMR..NMRوبال، دهنده های هالوژن های دار، اکسیژندار و نیتروژن دار،فسفین ها، مطالعات ن 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 ان ها، کربونیل ها، تیو کربونیل ها، سلنو کربونیل ها، کاربن ها، کاربین ها، 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، کاتالیزورهای انتقال الکترون، واکنش های جانشینی در کلاسترها، واکنش های اکسایشی-افزایشی و احیائی-حذفی، واکنش های اکسایشی-افزایشی و ملاحضات 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، استریوشیمی، الحاق کاربن ها، هیدریدها، الکن ها و آلکین ها، حمله نوکلئوفیلی به کمپلکس های کربن و ایزونیتریل 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، متالوسیکلوبو 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 پلیمریز اسیون اولفین ها و استیلن ها و واکنش های حاوی کربن منو کسید، فرآیند اکسو و کربونیلاسیون 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.; Notrton, 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

عنوان درس	فارسی	شیمی هسته ای					
	انگلیسی	Nuclear Chemistry					
نوع واحد				تعداد واحد	تعداد ساعت	درس‌های پیش‌نیاز	
الزامی		اختیاری		3	51	شیمی معدنی 1	
نظری	عملی	نظری	عملی				
آموزش تکمیلی عملی: دارد □ ندارد ■							
سفر علمی: دارد □ ندارد ■							
حل تمرین: دارد □ ندارد ■							
آزمایشگاه: دارد □ ندارد ■							

هدف:

آشنائی و تسلط بر اصول شیمی هسته‌ای

سرفصل ها:

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 پخش 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 دربارهٔ منشاء انرژی هسته‌ای ناشی از شکافت (Fission) یا گداخت (Fuston) هسته‌ای با توجه به منحنیهای مذکور توضیح مختصر دربارهٔ راکتورهای هسته‌ای و چگونگی تولید برق از آنها. مختصری دربارهٔ 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 جادوئی –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 زمین‌شناس 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 ضریب دیفردیون- 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. Priedlander, 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 کوانتوم1

عنوان درس	فارسی	شیمی کوانتوم 1						
	انگلیسی	Quantum chemistry 1						
نوع واحد				تعداد واحد	تعداد ساعت	درس‌های پیش‌نیاز		
الزامی		اختیاری		3	48	مبانی شیمی کوانتوم		
نظری	عملی	نظری	عملی					
آموزش تکمیلی عملی: دارد □ ندارد ■								
سفر علمی: دارد □ ندارد ■								
حل تمرین: دارد □ ندارد ■								
آزمایشگاه: دارد □ ندارد ■								

هدف:

آشنائی و تسلط بر اصول پیشرفته شیمی کوانتوم

سرفصل ها:

یادآوری مبانی مکانیک تحلیلی، مکاناک نیوتنی، 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 پاریته، 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 فضاهای 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 بکاربردن 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 انتخاب 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

عنوان درس	فارسی	طیف سنجی مولکولی 1						درس‌های پیش‌نیاز
	انگلیسی	Molecular Spectroscopy 1						
	نوع واحد			تعداد واحد	تعداد ساعت			
	الزامی		اختیاری		3	51		
	نظری	عملی	نظری	عملی				
آموزش تکمیلی عملی:	دارد □ ندارد ■							اصول طیف سنجی مولکولی
سفر علمی:	دارد □ ندارد ■							
حل تمرین:	دارد □ ندارد ■							
آزمایشگاه:	دارد □ ندارد ■							

هدف:

آشنائی و تسلط بر اصول طیف‌سنجی مولکولی

سرفصل ها:

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	پژوهش درسی
+	+	+	+

منابع

1. اصول طیف‌سنجی مولکولی، کوردن 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	نانو مواد معدنی					
	انگلیسی						

نوع واحد				تعداد واحد	تعداد ساعت	درس‌های پیش‌نیاز
الزامی		اختیاری				
نظری	عملی	نظری	عملی	3	48	روشهای سنتز مواد نانوساختار

آموزش تکمیلی عملی: دارد □ ندارد ■

سفر علمی: دارد □ ندارد ■

حل تمرین: دارد □ ندارد ■

آزمایشگاه: دارد □ 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

عنوان درس	فارسی	شیمی سل-ژل					
	انگلیسی	Sol-Gel Chemistry					
نوع واحد				تعداد واحد	تعداد ساعت	درس‌های پیش‌نیاز	
الزامی		اختیاری		3	48	روشهای سنتز مواد نانوساختار	
نظری	عملی	نظری	عملی				
آموزش تکمیلی عملی: دارد □ ندارد ■							
سفر علمی: دارد □ ندارد ■							
حل تمرین: دارد □ ندارد ■							
آزمایشگاه: دارد □ 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، آلومینانها،
- سیستم های بورات، سیلیکاتهای ابی، هیدرولیز و تراکم آلکوکسایدهای سیلیکون، سیلیکاتهای چند جزیی)،
- ژلاتینه کردن(تئوری کلاسیک،مدلهای سینتیکی)،
- تئوری تغییر شکل و جریان در ژل ها(نیروهای موثر 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
+	+	+	+

منابع

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

عنوان درس	فارسی	کریستالوگرافی اشعه X					
	انگلیسی	X-ray Crystallography					
نوع واحد				تعداد واحد	تعداد ساعت	درس‌های پیش‌نیاز	
الزامی		اختیاری		3	48	شیمی معدنی پیشرفته	
نظری	عملی	نظری	عملی				
آموزش تکمیلی عملی: دارد □ ندارد ■							
سفر علمی: دارد □ ندارد ■							
حل تمرین: دارد □ ندارد ■							
آزمایشگاه: دارد □ ندارد ■							

هدف:

آشنائی با اصول کریستالوگرافی اشعه X

سرفصل ها:

تئوری :

1ـ رشد بلور- سیستم حلال- تکنیک ها- انتخاب بلور

2ـ نشاندن بلور- تکنیک ها- دستگاه تجهیزات- پین- چسب ها

3ـ سلول واحد- شبکه براوه

4ـ شبکه مستقیم و معکوس- ساخت هندسی آن

5ـ قانون براگ- اندیس های میلر- کره اوالد (Ewald)

6ـ اپراتورهای تقارنی- عناصر تقارنی- تقارن گروه فضایی- موقعیت عمومی و خاص- واحد بی تقارن- z',z وجداول بین المللی

7ـ فاکتور ساختاری- دانسیته الکترونی- رابطه بین فاکتور ساختاری و دانسیته الکترون- قانون فریدل، تقارن الگوی پراش- مسئله فاز

8ـ تعیین گروه فضایی- تقارن لاوه- غیبت های منظم

9ـ بررسی داده ها: انتگرال گیری داده ها- تصحیحات لورنتز(Lorentz)- پولاریزاسیون و جذب- redundancy، R_{sigma}، R_{int}

حل ساختار:

1ـ پالایش ساختار: دستور کار بهینه سازی حداقل مربعات- تعریف مدل و پالایش- مقیاس وزنی- همگرایی- پارامترها- قیدهای سخت و نرم

2ـ پالایش آنیزوتروپی (ناهمسانگرد)- افزودن اتم هایH و جنبه های دیگر

3ـ بدست آوردن پارمترهای هندسی: طول پیوند،زوایا، زوایای دو وجهی، صفحات حداقل مربعی- خلاصه کردن نتایج- الگوی پیوند هیدروژنی

4ـ اعتبار سنجی نتایج، CIF- خطاهایCIF از نوع A ،B ،C وG...

5ـ ساختار پیچیده: بی نظمی- دوقلویی و شبه تقارن

دستگاهوری :

مروری بر دستگاهای متفاوت در بلور شناسی

عملی:

1ـ نرم افزار بررسی داده های اشعه X

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

2ـ کارگاه عملی (حل ساختار)

آموزش حل و پالایش ساختار برای ترکیبات آلی- متال ارگانیک- ارگانومتال و ترکیبات معدنی و 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.