

عنوان درس: آنالیز دستگاهی نظری	مخاطبان: دانشجویان ترم پنجم دکترای حرفه‌ای داروسازی
تعداد و نوع واحد: ۳ واحد نظری	درس پیش‌نیاز: -
زمان ارائه درس: پنجشنبه ۱۰-۱۲	ساعت مشاوره: دوشنبه ۱۶-۱۴
مدرس: دکتر علیرضا علی‌آبادی (۱/۵ واحد)	

هدف کلی درس: آشنایی با روش‌های طیف‌سنجی رزونانس مغناطیسی هسته‌ای (NMR)، مادون قرمز (IR) و

جرمی (MS)، نحوه بکارگیری و استفاده از روش طیف‌سنجی جهت شناسایی و آنالیز ترکیبات شیمیایی و دارویی

اهداف کلی جلسات:

۱. حالات و عدد کوانتومی اسپین هسته و عناصر فعال در NMR
۲. اصول دستگاهی NMR، حالات اسپین و پدیده رزونانس
۳. حلال‌های NMR، تغییر مکان شیمیایی و اثر شیلدینگ
۴. معادل بودن شیمیایی، انتگرال، اثر شیلدینگ محلی، اثر آنیزوتروپی
۵. اسپلینگ و قاعده $n+1$ ، مثلث پاسکال
۶. ثابت کوپلاژ، مکانیسم کوپلاژ و انواع کوپلاژ
۷. کوپلاژ در آلکنها، کوپلاژ آلیلی و کوپلاژهای دوربرد
۸. کوپلاژ پروتون نامستقر در الکل‌ها و آمین‌ها و پدیده تبادل پروتون
۹. کوپلاژ در ترکیبات آروماتیک، کوپلاژ در سیستم‌های دیاستریوتوپیک
۱۰. طیف‌سنجی رزونانس مغناطیسی هسته‌ای کربن- ^{13}C (NMR- ^{13}C)
۱۱. اصول طیف‌سنجی مادون قرمز (IR)، انواع ارتعاشات کششی و خمشی
۱۲. طیف‌سنجی IR در آلکانها، آلکینها، الکل‌ها و ترکیبات آروماتیک
۱۳. طیف‌سنجی IR در ترکیبات کربونیل‌دار، آمین‌ها
۱۴. اصول طیف‌سنجی جرمی (MS) و طیف‌سنجی جرمی آلکانها، آلکینها، آلکینها
۱۵. طیف‌سنجی جرمی الکل‌ها، اترها و ترکیبات کربونیل‌دار

اهداف ویژه رفتاری به تفکیک اهداف کلی هر جلسه

جلسه اول

هدف کلی: حالات و عدد کوانتومی اسپین هسته و عناصر فعال در NMR

اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد.

۱-۱- مفهوم عدد کوانتومی اسپین هسته را توضیح دهد.

۱-۲- تعداد حالات مجاز اسپین را برای هر اتم محاسبه کند.

۱-۳- عناصر فعال در NMR را شناسایی کند.

جلسه دوم

هدف کلی: اصول دستگاهی NMR، حالات اسپین و پدیده رزونانس

اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد.

۲-۱- اصول دستگاه NMR را شرح دهد.

۲-۲- پدیده رزونانس را شرح دهد.

۲-۳- مفاهیم میدان خارجی، فرکانس لارمور و نسبت ژيرومگنتیک را شرح دهد.

جلسه سوم

هدف کلی: حلال‌های NMR، تغییر مکان شیمیایی و اثر شیلدینگ

اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد.

۳-۱- ویژگیهای لازم یک حلال NMR را توضیح دهد.

۳-۲- حلال‌های رایج در NMR را نام ببرد.

۳-۳- مفهوم جابجایی شیمیایی را شرح دهد.

۳-۴- مفهوم اثر شیلدینگ را شرح دهد.

جلسه چهارم

هدف کلی: معادل بودن شیمیایی، انتگرال، اثر شیلدینگ محلی، اثر آنیزوتروپی

اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد.

۴-۱- مفهوم معادل بودن شیمیایی را توضیح دهد.

۴-۲- مفهوم انتگرال را شرح داده و نحوه استفاده از آن را توضیح دهد.

۴-۳- اثر شیلدینگ محلی را شرح دهد.

۴-۴- اثر آنیزوتروپی را توضیح دهد.

۴-۵- گروه‌های دارای اثر آنیزوتروپی را بشناسد.

جلسه پنجم

هدف کلی: اسپلتینگ و قاعده $n+1$ ، مثلث پاسکال

اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد.

۵-۱- مفهوم اسپلتینگ را توضیح دهد.

۵-۲- قاعده $n+1$ را توضیح دهد.

۵-۳- مثلث پاسکال را شرح دهد.

جلسه ششم

هدف کلی: ثابت کوپلاژ، مکانیسم کوپلاژ و انواع کوپلاژ

اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد.

۶-۱- مفهوم ثابت کوپلاژ را توضیح دهد.

۶-۲- مکانیسم‌های کوپلاژ را شرح دهد.

۶-۳- انواع کوپلاژ (مستقیم، ویسینال و ژمینال) را شرح دهد.

جلسه هفتم

هدف کلی: کوپلاژ در آلکنها، کوپلاژ آلیلی و کوپلاژهای دوربرد

اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد.

۷-۱- نحوه کوپلاژ در آلکنها (باند دوگانه) را توضیح دهد.

۷-۲- کوپلاژ آلیلی را شرح دهد.

۷-۳- کوپلاژ دوربرد را شرح دهد.

جلسه هشتم

هدف کلی: کوپلاژ پروتون نامستقر در الکل‌ها و آمین‌ها و پدیده تبادل پروتون

اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد.

۸-۱- نحوه کوپلاژ هیدروژن گروه هیدروکسی در الکلها را توضیح دهد.

۸-۲- نحوه کوپلاژ هیدروژن گروه آمینی را توضیح دهد.

۸-۳- پدیده تبادل پروتون در الکلها و آمینها را شرح دهد.

جلسه نهم

هدف کلی: کوپلاژ در ترکیبات آروماتیک، کوپلاژ در سیستمهای دیاستریوتوپیک

اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد.

۹-۱- نحوه کوپلاژ در ترکیبات آروماتیک و هتروآروماتیک را توضیح دهد.

۹-۲- مفهوم هیدروژنهای هموتوپیک، انانتیوتوپیک و دیاستریوتوپیک را توضیح دهد.

۹-۳- نحوه کوپلاژ در هیدروژنهای هموتوپیک، انانتیوتوپیک و دیاستریوتوپیک را شرح دهد.

جلسه دهم

هدف کلی: طیف سنجی رزونانس مغناطیسی هسته‌ای کربن- $^{13}\text{C-NMR}$

اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد.

۱۰-۱- طیف کربن جفت شده و واجفت شده با هیدروژن را توضیح دهد.

۱۰-۲- نحوه جابجایی شیمیایی کربنهای مختلف در $^{13}\text{C-NMR}$ را توضیح دهد.

جلسه یازدهم

هدف کلی: اصول طیف سنجی مادون قرمز (IR)، انواع ارتعاشات کششی و خمشی
اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد.

۱-۱۱- اصول طیف سنجی مادون قرمز و نقش جرم اتمی و طول پیوند را توضیح دهد.

۱-۱۲- انواع ارتعاشات کششی متقارن و نامتقارن و خمشی را شرح دهد.

جلسه دوازدهم

هدف کلی: طیف سنجی IR در آلکانها، آلکینها، الکلها و ترکیبات آروماتیک

اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد.

۱-۱۲- انواع ارتعاشات کششی و خمشی در آلکانها، آلکینها، الکلها و ترکیبات آروماتیک را شرح دهد.

۱-۱۲- نقش هیبریداسیون در تغییر عدد موج را توضیح دهد.

جلسه سیزدهم

هدف کلی: طیف سنجی IR در ترکیبات کربونیل دار، آمینها

اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد.

۱-۱۳- ارتعاشات کششی و خمشی در انواع ترکیبات کربونیل دار و آمینها شرح دهد.

۱-۱۳- نقش رزونانس، حلقوی شدن، پیوند هیدروژنی در تغییر عدد موج را توضیح دهد.

جلسه چهاردهم

هدف کلی: اصول طیف سنجی جرمی (MS) و طیف سنجی جرمی آلکانها، آلکنها، آلکینها
اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد.

۱-۱۴- اصول طیف سنجی جرمی (MS) را شرح دهد.

۱۴-۲- تفاوت ایزوتوپ‌های مختلف کلر و برم در طیف سنجی جرمی را توضیح دهد.

۱۴-۳- روش‌های شایع و نحوه شکسته شدن آلکانها، آلکنها و آلکینها در طیف سنجی جرمی را توضیح دهد.

جلسه پانزدهم

هدف کلی: طیف سنجی جرمی الکل‌ها، اترها و ترکیبات کربونیل دار
اهداف ویژه:

در پایان دانشجو قادر باشد.

۱۵-۱- روش‌های شایع و نحوه شکسته شدن الکل‌ها، اترها و ترکیبات کربونیل دار در طیف سنجی جرمی را توضیح دهد.

۱۵-۲- قاعده مک لافرتی در ترکیبات کربونیل دار را شرح دهد.

منابع:

1. Pavia, Lampman, Kriz, Vyvyan; Introduction to spectroscopy, 4th edition, 2015.
2. Silverstein, Spectroscopic identification of organic compounds, 7th, 2005.
3. L.D. Field, S. Sternhell, J.R. Kalman; Organic structures from spectra, 3rd edition, 2002.

۲- کروماتوگرافی و طیف سنجی، دکتر عباس شفیعی

۳- طیف سنجی تشدید مغناطیسی هسته‌ای یک بعدی و دو بعدی، دکتر عباس شفیعی

روش تدریس:

وسایل کمک آموزشی: ویتروالایزر، وایت بورد

ساعت	تاریخ	سهم از نمره کل (برحسب درصد)	روش	آزمون
		۱۰ درصد	کتبی	کوئیز
		۴۰ درصد	-	میان ترم
		۴۰ درصد	کتبی	پیان ترم
		-	-	حضور فعال در کلاس

عنوان درس: روشهای آنالیز دستگاهی نظری

محل برگزاری: کلاس شماره ۲ داروسازی

جلسه	ایام هفته	تاریخ	ساعت	نام مدرس	عنوان درس
۱	شنبه	۹۴/۶/۲۰	۸-۱۰	دکتر شهبایی	
۲	پنجشنبه	۹۴/۶/۲۵	۱۰-۱۲	دکتر علی آبادی	حالات و عدد کوانتومی اسپین هسته و عناصر فعال در NMR
۳	شنبه	۹۴/۷/۳	۸-۱۰	دکتر شهبایی	
۴	پنجشنبه	۹۴/۷/۸	۱۰-۱۲	دکتر علی آبادی	اصول دستگاهی NMR، حالات اسپین و پدیده رزونانس
۵	شنبه	۹۴/۷/۱۰	۸-۱۰	دکتر شهبایی	
۶	پنجشنبه	۹۴/۷/۱۵	۱۰-۱۲	دکتر علی آبادی	حلال‌های NMR، تغییر مکان شیمیایی و اثر شیلدینگ
۷	شنبه	۹۴/۷/۱۷	۸-۱۰	دکتر شهبایی	
۸	پنجشنبه	۹۴/۷/۲۲	۱۰-۱۲	دکتر علی آبادی	معادل بودن شیمیایی، انتگرال، اثر شیلدینگ محلی، اثر آنیزوتروپی
۹	شنبه	۹۴/۷/۲۴	۸-۱۰	دکتر شهبایی	
۱۰	پنجشنبه	۹۴/۷/۲۹	۱۰-۱۲	دکتر علی آبادی	اسپلینگ و قاعده n+1، مثلث پاسکال
۱۱	شنبه	۹۴/۸/۱	۸-۱۰	دکتر شهبایی	
۱۲	پنجشنبه	۹۴/۸/۶	۱۰-۱۲	دکتر علی آبادی	ثابت کوپلاز، مکانیسم کوپلاز و انواع کوپلاز
۱۳	شنبه	۹۴/۸/۷	۸-۱۰	دکتر شهبایی	
۱۴	پنجشنبه	۹۴/۸/۱۲	۱۰-۱۲	دکتر علی آبادی	کوپلاز در آلکنها، کوپلاز آلیلی و کوپلازهای دوربرد
۱۵	شنبه	۹۴/۸/۱۴	۸-۱۰	دکتر شهبایی	
۱۶	پنجشنبه	۹۴/۸/۱۹	۱۰-۱۲	دکتر علی آبادی	کوپلاز پروتون نامستقر در الکل‌ها و آمین‌ها و پدیده تبادل پروتون
۱۷	شنبه	۹۴/۸/۲۱	۸-۱۰	دکتر شهبایی	
۱۸	پنجشنبه	۹۴/۸/۲۶	۱۰-۱۲	دکتر علی آبادی	کوپلاز در ترکیبات آروماتیک، کوپلاز در سیستم‌های دیاستریوتوپیک
۱۹	شنبه	۹۴/۹/۲۸	۸-۱۰	دکتر شهبایی	
۲۰	پنجشنبه	۹۴/۹/۳	۱۰-۱۲	دکتر علی آبادی	¹³ C-NMR
۲۱	شنبه	۹۴/۹/۵	۸-۱۰	دکتر شهبایی	
۲۲	پنجشنبه	۹۴/۹/۱۰	۱۰-۱۲	دکتر علی آبادی	اصول طیف سنجی مادون قرمز (IR)، انواع ارتعاشات کششی و خمشی
۲۳	شنبه	۹۴/۹/۷	۸-۱۰	دکتر شهبایی	
۲۴	پنجشنبه	۹۴/۹/۱۲	۱۰-۱۲	دکتر علی آبادی	طیف سنجی IR در آلکانها، آلکنها، آلکینها، الکل‌ها و ترکیبات آروماتیک
۲۵	شنبه	۹۴/۹/۱۴	۸-۱۰	دکتر شهبایی	
۲۶	پنجشنبه	۹۴/۹/۱۹	۱۰-۱۲	دکتر علی آبادی	طیف سنجی IR در ترکیبات کربونیل‌دار، آمین‌ها
۲۷	شنبه	۹۴/۹/۲۱	۸-۱۰	دکتر شهبایی	
۲۸	پنجشنبه	۹۴/۱۰/۲۶	۱۰-۱۲	دکتر علی آبادی	اصول طیف سنجی جرمی (MS) و طیف سنجی جرمی آلکانها، آلکنها، آلکینها
۲۹	شنبه	۹۴/۱۰/۲۸	۸-۱۰	دکتر شهبایی	
۳۰	پنجشنبه	۹۴/۱۰/۳	۱۰-۱۲	دکتر علی آبادی	طیف سنجی جرمی الکل‌ها، اترها و ترکیبات کربونیل‌دار

دانشگاه: EDO نام و امضای مدرس:

نام و امضای مدیر گروه:

نام و امضا مسئول

تاریخ تحویل:

تاریخ ارسال:

تاریخ ارسال: