

## بسمه تعالی

طرح درس روشهای تجزیه دستگاهی پیشرفته (۳ واحد)

رشته تحصیلی: PhD فارماکوگنوزی

نیمسال تحصیلی: نیمسال اول ۹۴-۹۳

مدرس: دکتر سید ابراهیم سجادی- دکتر سید مصطفی قنادیان- دکتر مسعود صادقی

نوع درس: تئوری و عملی

زمان برگزاری: دوشنبه ۹-۱۱-۹۳ شنبه ۳-۵

---

### هدف درس:

- توانایی استفاده از طیف ماوراء بنفش- مرئی (UV-Vis)، مادون قرمز (IR)، جرم (MS) و رزنانس مغناطیس هسته (NMR) در تعیین ساختار ملکولی ترکیبات مختلف
- توانایی تهیه طیفهای مختلف از نمونه های مختلف

---

### References:

- 1-Williams DH and Fleming I. Spectroscopic Methods in Organic Chemistry, 6<sup>th</sup> ed. McGraw-Hill Education, New York, 2007.
- 2- Silverstein RM, Bassler GC and Morrill TC. Spectrometric Identification of Organic Compounds. John Wiley & Sons Inc., New York (Last Edition).
- 3- Sanders JKM, Hunter BK. Modern NMR Spectroscopy: A Guide for Chemists Oxford University Press, Oxford, (Last Edition).
- ۴- پاپویا دونالد، لمپن گری، کریز جورج. نگرشی بر طیف سنجی، ترجمه دکتر برهن موثق، انتشارات علمی و فنی، تهران (چاپ آخر).

- 
- ۱- تابش الکترومغناطیس و کاربرد آن در آنالیز دستگاهی
  - ۲- مبانی جذب تابش ماوراء بنفش- مرئی و چگونگی کاربرد آن
  - ۳- تجزیه و تحلیل طیفهای ماوراء بنفش- مرئی
  - ۴- آشنائی با نمونه های مختلف طیف ماوراء بنفش- مرئی شامل دی انهای مزدوج، انونها، اسیدها، استرها، الدهید های غیر اشباع، ترکیبات آروماتیک و چگونگی محاسبه جذب ماکزیمم هر کدام از آنها

۵- استفاده تشخیصی از طیف ماوراء بنفش- مرئی در شناسایی ترکیبات

۶- کاربردهای کمی طیف بینی ماوراء بنفش- مرئی

۷- فرایند جذب مادون قرمز، انتقالهای کششی و خمشی، خواص پیوندها و روش جذب انرژی مادون قرمز

۸- خواص پیوندها و روش جذب انرژی

۹- موارد کاربرد طیف بینی مادون قرمز

۱۰- چگونگی استخراج اطلاعات حاصل از طیف مادون قرمز

۱۱- تجزیه و تحلیل طیفهای مادون قرمز دستجات مختلف ترکیبات آلی از جمله کتونها، آلدهیدها، اسیدها، انونها، آمینها، آمیدها، نیتروها، نیتریلها، ترکیبات آروماتیک و غیره

۱۲- مبانی طیف بینی جرم

۱۳- روشهای مختلف تولید یون در دستگاههای جرم

۱۴- الگوهای مختلف شکست مهمترین دستجات ترکیبات آلی و انواع نوآرایی از جمله نوآرایی مک لافرتی

۱۵- تجزیه و تحلیل طیف جرمی ترکیبات مختلف آلی از جمله آلکانها، آلکینها، آلکینها، ترکیبات آروماتیک، الکلها، فنلها، اترها، آلدهیدها، سنتها، استرها، اسیدها، آمینها، آمیدها، نیتریلها، ترکیبات نیترو، تیولها، ترکیبات هالوژنه و غیره

۱۶- مبانی و مفاهیم طیف بینی رزناس مغناطیس هسته شامل اسپین هسته، گشتاور مغناطیسی، جذب انرژی و غیره

۱۷- تغییر مکان شیمیائی و اثرمانع، انتگرال و انتگرال گیری

۱۸- تغییر مکان شیمیائی، اثرمانع دیامغناطیسی و آنیزوتروپی مغناطیسی

۱۹- قاعده  $n+1$ ، شکاف اسپین، ثابتهای کوپلاژ، انواع تک پیوندی، دو پیوندی، و سه پیوندی

۲۰- سیستمهای اسپینی مختلف

۲۱- طیف ترکیبات آروماتیک و حلقه های بنزنی استخلاف شده

۲۲- پروتونهای مستقر در اکسیژن و نیتروژن

۲۳- سیستمهای هموتوپی، انانتیوتوپی و دیاستروتوپی

۲۴- ان ام آر تپشی، توالی تپ و ویژگیهای مختلف آن

۲۵-، هسته کربن و تغییرات شیمیایی آن، تقویت هسته ای اورهازر، کربنهای معادل

۲۷- طیف DEPT، کاربردها و چگونگی تفسیر آن

- ۲۶- طیف کربن ترکیبات آلی مختلف آلیفاتیک و آروماتیک
- ۲۷- روشهای مختلف طیف بینی دوبعدی، کاربردها و چگونگی تفسیر آنها
- ۲۸- طیفهای COSY، NOESY، کاربردها و چگونگی تفسیر آنها
- ۲۹- طیفهای HSQC، HMBC، کاربردها و چگونگی تفسیر آنها
- ۳۰- تفسیر و حل مسئله تعدادی از مهمترین دستجات ترکیبات طبیعی

### قسمت عملی:

- ۱- کار عملی با دستگاه اسپکتروفتومتر ماوراء بنفش- مرئی و تهیه طیف از ترکیبات دارای جذب مختلف
- ۲- کار عملی با اسپکتروفتومتر مادون قرمز و تهیه طیف از نمونه های جامد و مایع
- ۳- کار عملی با اسپکتروفتومتر جرمی و تهیه طیف از چند نمونه مختلف
- ۴- تهیه طیف پروتون و کربن
- ۵- تهیه طیفهای دو بعدی مختلف
- ۶- کار با دستگاههای آنالیز مورد نیاز دیگر از جمله HPLC، GC-MS، TLC-Scanner، MPLC