

## طرح درس مباحث نوین دکتری

کتاب مرجع: کتب مربوط به NMR مولتی

هر هفته در شروع کلاس، مبحث جدیدی در رابطه با NMR مطرح و در باره آن در طی ۱۶ جلسه ترم، بحث می شود. مثلاً به مباحث زیر دقت فرمایید:

**هفته اول:** اساس طیف سنجی رزونانس مغناطیسی هسته ای، اندازه حرکت زاویه ای هسته ای و گشتاور مغناطیسی، اصول پایه آزمایش NMR، روش NMR پالسی، جا به جایی شیمیایی، انواع سیستم های اسپینی، هسته های با اسپین  $I=1/2$ ، و هسته های با اسپین  $I>1/2$

**هفته دوم:** کوپلاژ اسپین-اسپین، رابطه ثابت های کوپلاژ هیدروژن ها و ساختار شیمیایی، کوپلاژ ژمینال، کوپلاژ ویسینال، کوپلاژ در ترکیبات آروماتیک، کوپلاژ دوربرد، رابطه ثابت های کوپلاژ هیدروژن و کربن و ساختار شیمیایی، مکانیزم کوپلاژ و کوپلاژ سایر هسته ها

**هفته سوم:** انواع سیستم های اسپینی، نام گذاری، عوامل موثر در نام گذاری سیستم اسپینی، هم ارزی مغناطیسی و شیمیایی، تاپسیسته، سیستم های دو اسپینی (AX) و (AB)، سیستم های سه اسپینی (AX<sub>2</sub>)، (AK<sub>2</sub>, AB<sub>2</sub>, A<sub>3</sub>)، سیستم های سه اسپینی (ABC, ABX, AMX)، سیستم های چهار اسپینی (A<sub>2</sub>B<sub>2</sub>, A<sub>2</sub>X<sub>2</sub>, AA'BB', AA'XX', ABMX) سیستم های هفت اسپینی، سیستم های اسپینی ABX<sub>m</sub>Y<sub>n</sub>Z<sub>o</sub> و آنالیز طیف <sup>13</sup>C NMR

**هفته چهارم:** آزمایش رزونانس مضاعف، واگردن اسپین در طیف بینی <sup>1</sup>H NMR، واگردن اسپین در طیف بینی <sup>13</sup>C NMR، زدودن پیک حلال

**هفته پنجم:** آسایش، مکانیزم آسایش، اندازه گیری تجربی T<sub>1</sub>، تأثیر پروتون های مختلف روی آسایش، اثرات اندازه مولکول، تحرک گروه ها، آنیزوتروپی تحرک مولکول، چرخش اسپین، اثر عنصر پارامغناطیس، آسایش T<sub>2</sub>، پهنای پیک های NMR

**هفته ششم:** آزمایش های NMR یک بعدی، آزمایش انتقال قطبش (Polarization Transfer)، آزمایش پژواک اسپین بر اساس J، آزمایش APT، آزمایش DEPT، آزمایش INEPT، آزمایش TOCSY، آزمایش INADEQUATE

**هفته هفتم:** آزمایش های NMR دو بعدی، آزمایش COSY، آزمایش HETCOR، آزمایش TOCSY، آزمایش NOESY، آزمایش ROESY، آزمایش EXSY، آزمایش gs-HMBC، آزمایش INADEQUATE 2D

**هفته هشتم:** اثر هسته ای اورهاوزر (Nuclear Overhauser Effect)، اساس NOE، NOE

تفاضلی

**هفته نهم:** طیف سنجی دینامیک (DNMR)، روابط تجربی، انواع دینامیک مولکولی

**هفته دهم:** معرف های جا به جایی، مزایا، معرف های جا به جایی لانتانیدی غیر کایرال (LSRs) ،  
معرف های جا به جایی لانتانیدی کایرال (LSRs) ، محاسبات، و حلال های کایرال (CSA)  
**هفته یازدهم:** ماکرومولکول ها (Macromolecule) ، انواع پلیمرها، تاکتیسیتی پلی دی ان ها،  
تاکتیسیتی کوپلیمرها  
**هفته دوازدهم:** طیف سنجی NMR در پزشکی و بیوشیمی، مثال های NMR در پزشکی به ویژه  
 $^{31}\text{P}$  NMR و مثال های NMR در بیوشیمی  
**چهار هفته بقیه:** طرح نمونه سوالات NMR ، حل سوالات و آرایه پاسخ های تشریحی