

طرح درس شیمی معدنی ۲

هفته اول (۱-۴):

تولد شیمی کوئوردیناسیون و معرفی کمپلکس‌های معدنی با طرح نظریه Werner و توضیح عبارت‌های: لیگاند، یون فلز مرکزی، عدد کوئوردیناسیون، یون همراه، ظرفیت اولیه، ظرفیت ثانویه، کره کوئوردیناسیون اول و دوم، یون کمپلکس، شیوه محاسبه حالت اکسایش یون فلز مرکزی، تشخیص حضور هالوژن‌ها در داخل یا خارج از کره کوئوردیناسیون توسط نقره نیترات و مقایسه پیوند هر یک از این دو با یون فلز مرکزی. حل تمرین

هفته دوم (۵-۱۱):

توضیح مدل سیدویک (Sidg Wick model) در مورد پیوند کوئوردیناسیون، قاعده عدد اتمی مؤثر (EAN) و حل تمرین، قوانین IUPAC برای نامگذاری لیگاند های متداول یک تا شش دندانه، قوانین IUPAC برای نامگذاری کمپلکس های غیر یونی (مولکولی)، یونی مثبت، یونی منفی و نامگذاری ایزومرهای هندسی *trans/cis* و *fac/mer*

هفته سوم (۱۲-۱۷):

قوانین IUPAC برای نامگذاری ایزومرهای نوری و همچنین کمپلکس های دوهسته با اتم های فلز غیر یکسان. حل تمرین در کلاس و به صورت تکلیف.

ایزومری در ترکیبات کوئوردیناسیون: توضیح و مثال برای ایزومرهای ساختاری شامل: ایزومرهای کوئوردیناسیون، یونیزاسیون، ئیدراتاسیون، کانفورماسیون، ظرفیت، لیگاند، محل کوئوردیناسیون، پلی مریزاسیون (کوئوردیناسیونی و هسته ای).

هفته چهارم (۱۸-۲۱):

ایزومری اتصال برای لیگاندهای دوسر دندانه و سه نظریه: رقابت پیوند π ، سمبیویس و یورگنسن (در ادامه اسیدها و بازهای سخت و نرم توسط پیرسون) و نظریه ممانعت فضایی. ایزومرهای فضایی از نوع هندسی برای کمپلکس های مربعی و هشت وجهی.

هفته پنجم (۲۲-۲۶):

ایزومرهای فضایی از نوع نوری: مفهوم عبارت های: استریوایزومر، چرخش ویژه، انانتیومر، دیاسترومر، نامتقارن، بی تقارن، کایرال، مخلوط راسمیک، دستگاه پلاریمتر. ایزومری نوری در کمپلکس های مربعی و هشت وجهی، توضیح مفصل روش بیلار (Bailar) جهت تعیین تعداد ایزومر در کمپلکس های به فرمول کلی $Mabcdef$ و مشتقات آن.

هفته ششم (۲۷-۳۰):

خواص مغناطیسی ترکیب های کمپلکس: منشاء مغناطیس، مواد دیا مغناطیس، پارا مغناطیس، فرو مغناطیس و آنتی فرومغناطیس. اثبات معادله ممان مؤثر به روش تجربی با توجه به ترازوی گای (Gauy). رفتار گرافیکی مواد پارا، فرو و آنتی فرو (منحنی های تأثیر پذیری بر حسب دما).

هفته هفتم (۳۱-۳۵):

محاسبه ممان پارا مغناطیسی براساس مدل کوانتومی و مکانیک موجی.

بررسی و محاسبه ممان مؤثر برای چهار دسته ترکیب های کوئوردیناسیونی براساس جفت شدن های متفاوت ممان ها در درون مواد.

حالت اول $L=0$ ، $\mu_l = 0$ بنابراین $\mu_{eff} = \mu_s$

حالت دوم $L \neq 0$ ولی μ_l در ممان کل سهم ندارد

حالت سوم و چهارم $L \neq 0$ ، $\mu l > 0$ بررسی معادله میدان قوی و میدان ضعیف با مثال

حل تمرین در خصوص رابطه ایزومری و هیبریداسیون با ممان مغناطیس

هفته هشتم (۳۶-۴۱):

اشاره ای به کمبودهای نظریه های VSEPR، Werner، طرح نظریه باند والانس پائولی، بحث هیبریداسیون براساس نظریه باند والانس برای آرایش های $d^0 - d^{10}$ کمپلکس های هشت وجهی پراسپین و کم اسپین و همچنین کمپلکس های مربع مسطح و چهار وجهی.

هفته نهم (۴۲-۴۷):

نظریه میدان بلور: شکافتگی اوربیتال d، عوامل مؤثر بر مقدار $10 Dq$ (حالت اکسایش یون فلز مرکزی، اشکال هندسی، نوع لیگاند، سری اسپکتروشیمی، شکافتگی در گروه های عناصر واسطه $(3d \rightarrow 4d \rightarrow 5d)$ ، محاسبه انرژی پایداری میدان بلور (CFSE) و متعاقب آن بحث در مورد آرایش الکترونی، وضعیت مغناطیسی، انرژی زوج شدن در کمپلکس های هشت وجهی و چهار وجهی.

شکافتگی اوربیتال d در میانهای خطی، مثلثی، مربعی، چهار وجهی، هرم با قاعده مربع، دو هرمی با قاعده مثلث، مقایسه شکافتگی هشت وجهی منظم با z-in و z-out، پدیدهرنگ در ترکیبات کوئوردیناسیون.

هفته دهم (۴۸-۵۳):

اثر یان-تلر با توجه به: دلیل و تشخیص انحراف z-in و z-out در $d^0 - d^{10}$ هشت وجهی، اثر یان-تلر استاتیک و دینامیک با ذکر مثال تجربی، اثر یان-تلر در کمپلکس های چهار وجهی $d^0 - d^{10}$ و مربعی.

هفته یازدهم (۵۴-۶۰):

نظریه اوربیتال مولکولی: کمبودهای نظریه های قبل، مقایسه آن با CFT، هم پوشانی صفر (الکترووالانس) و صد (کووالانس)، مفهوم LGOS یا TASO، شیوه هم پوشانی اوربیتال های لایه ظرفیت فلز مرکزی (d, p, s) با لیگاندها و محاسبه سهم هم پوشانی هر یک در تشکیل پیوند سیگما. دیاگرام اوربیتال مولکولی برای کمپلکسهایی که فقط پیوند سیگما دارند با لیگاند ضعیف (پراسپین) و قوی (کم اسپین)، شیوه هم پوشانی اوربیتالهای لایه ظرفیت فلز مرکزی (بین محوری ها) و محاسبه سهم هم پوشانی هر یک در تشکیل پیوند π ، رسم دیاگرام اوربیتال مولکولی که فقط پیوند سیگما دارد و مقایسه آن با دیاگرامهای اوربیتال مولکولی با پیوند π و طرح مفهوم دهنده سیگما/ دهنده π و پذیرنده سیگما/ پذیرنده π .

مفهوم انرژی زوج شدن (PE)، مفهوم سری اسپکتروشیمی از دیدگاه نظریه اوربیتال مولکولی، اشاره به انتقالات $d \rightarrow d$ و CT و نحوه تشخیص این دو.

هفته دوازدهم (۶۱-۶۹):

ترازهای انرژی: طرح مفهوم علائم مولیکن ($t_{1u}, a_{1g}, e_g, t_{2g}, \dots$) برای کمپلکس های هشت وجهی، مربعی، چهار وجهی و هرم مربع القاعده

حالت های الکترونی: توضیح عبارت

Groups of microstate having same energy is called state

توضیح روش ساده برای پیدا کردن حالت پایه و سپس حالت های برانگیخته در سیستم هشت وجهی و طیفهای UV-Vis آنها. ارائه روشی نه چندان دقیق برای پیدا کردن $10 Dq$ هشت وجهی و چهار وجهی.

هفته سیزدهم (۷۳-۷۰):

محاسبه ترم های طیفی برای آرایش های $d^1 - d^{10}$ و نشان دادن ترمهای حالت پایه و برانگیخته این آرایش ها. ترم ها مانند اوربیتالهای هم نام شان در میدان مربوط شکافته میشوند. نشان دادن جدول شکافتگی ترمهای G, F, D, P, S در میدان های هشت وجهی و چهار وجهی. ارتباط حالت های انرژی و ترمهای طیفی و شکافتگی ترمهای طیفی در میدان هشت وجهی برای آرایش های $d^1 - d^{10}$ به کمک دیاگرامهای معروف ارگل (Orgel) و رسم طیفهای UV-Vis هر یک از این آرایش ها. اشاره ای به دیاگرام های تانا به-سوگانو (Tanabe-Sugano)

هفته چهاردهم (۷۶-۷۴):

سینتیک و مکانیسم کمپلکسهای معدنی: مقدمه ای بر ضرورت اندازه گیری سرعت و مکانیسم واکنش های کمپلکس های معدنی، مقیاس های زمانی برای روش های کلاسیک و

طیف سنجی. مفاهیم $unstable, stable, unlabile, labile, RDS, (A)SN_2, (D)SN_1$ ، قوانین سرعت، نمودار انرژی در فرایند واکنش، چاه پتانسیل، فرایند تبادلی (I, I_a, I_d)، مولکولاریته. اینکه واکنش ها دو نوعند (استخلافی و انتقال الکترون) واکنش های استخلافی مربع مسطح: اثبات $(A)SN_2$ بودن کمپلکس های مربعی.

هفته پانزدهم (۸۱-۷۷):

عوامل مؤثر بر واکنش های مسطح مربع شامل: اثر گروه وارد شونده، اثر گروه ترک کننده، اثر گروه باقیمانده، اثر ترانس، اثر فلز مرکزی. شیمی فضایی کمپلکس های مربع مسطح.

واکنش های استخلافی در کمپلکس های هشت وجهی: تشخیص $unlability$ و $lability$ ، باز مزدوج SN_1CB ، شیمی فضایی کمپلکس های هشت وجهی، ایزومریزاسیون، رسمیزاسیون کمپلکسهای تریس کیلیت.

واکنش های انتقال الکترون: توضیح و مثال برای انواع آنها.

هفته شانزدهم: مرور نکات مهم و رفع اشکال.