



جمهوری اسلامی ایران

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری

شورای گسترش و برنامه ریزی آموزش عالی



برنامه درسی رشته

شیمی

Chemistry

مقطع تحصیلات تکمیلی (کارشناسی ارشد ناپیوسته و دکتری تخصصی)



گرایش

شیمی فیزیک

Physical chemistry

گروه علوم پایه

پیشنهادی دانشگاه فردوسی مشهد



بیت

عنوان گرایش: شیمی فیزیک

نام رشته: شیمی

دوره تحصیلی: تحصیلات تکمیلی (کارشناسی ارشد)

گروه: علوم پایه

نایب‌رسته و دکتری تخصصی)

نوع مصوبه: بازنگری

کار گروه تخصصی: شیمی

تاریخ تصویب: ۱۴۰۰/۰۸/۱۶

پیشنهادی: دانشگاه فردوسی مشهد

برنامه درسی بازنگری شده دوره تحصیلات تکمیلی (کارشناسی ارشد ناپیوسته و دکتری تخصصی) رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک، در جلسه شماره ۱۶۲ تاریخ ۱۴۰۰/۰۸/۱۶ کمیسیون برنامه ریزی آموزشی به شرح زیر تصویب شد: ماده یک- این برنامه درسی برای دانشجویانی که پس از تصویب این برنامه درسی در دانشگاه‌ها و موسسات آموزش عالی پذیرفته می‌شوند، قابل اجرا است.

ماده دو- این برنامه درسی، بر اساس برنامه درسی رشته دوره کارشناسی ارشد ناپیوسته شیمی گرایش شیمی فیزیک مصوب جلسه ۹۳ تاریخ ۱۳۹۵/۱۲/۰۱ کمیسیون برنامه ریزی آموزشی و برنامه درسی رشته دوره دکتری تخصصی شیمی گرایش شیمی فیزیک مصوب جلسه ۲۴۱ تاریخ ۱۳۷۱/۰۴/۲۴ شورای عالی برنامه ریزی بازنگری شده است.

ماده سه- این برنامه درسی در سه فصل: مشخصات کلی، جدول‌های واحدهای درسی و سرفصل دروس تنظیم شده است و برای اجرا در دانشگاه‌ها و موسسات آموزش عالی پس از اخذ مجوز پذیرش دانشجو از شورای گسترش و برنامه ریزی آموزش عالی و سایر ضوابط و مقررات مصوب وزارت علوم، تحقیقات و فناوری، ابلاغ می‌شود.

ماده چهار- این برنامه درسی از شروع سال تحصیلی ۱۴۰۱-۱۴۰۲ به مدت ۵ سال قابل اجرا است و پس از آن، در صورت تشخیص کارگروه تخصصی مربوطه، نیاز به بازنگری دارد.

دکتر محمد رضا آهنچیان
دبیر کمیسیون برنامه ریزی آموزشی





برنامه درسی

رشته: شیمی

گرایش: شیمی فیزیک

دوره‌های: کارشناسی ارشد و دکتری

دانشکده: علوم

مصوب جلسه مورخ ۹۹/۰۸/۱۲ شورای برنامه‌ریزی درسی دانشگاه

این برنامه براساس آیین‌نامه شماره ۲۱/۲۳۸۰۶ وزارت علوم تحقیقات و فناوری در خصوص تفویض اختیارات برنامه‌ریزی درسی به دانشگاه‌های دارای هیات ممیزه توسط اعضای هیات علمی دانشکده علوم تدوین شده و در جلسه مورخ ۹۹/۰۸/۱۲ شورای برنامه‌ریزی درسی دانشگاه به تصویب رسیده است.



مصوبه شورای برنامه‌ریزی درسی دانشگاه فردوسی مشهد

رشته: شیمی

گرایش: شیمی فیزیک

دوره‌های: کارشناسی ارشد و دکتری

برنامه درسی دوره‌های کارشناسی ارشد و دکتری که توسط اعضای هیات علمی گروه آموزشی شیمی تدوین شده است با اکثریت آراء به تصویب رسید.

- این برنامه از تاریخ تصویب لازم‌الاجرا است.

- هر نوع تغییر در برنامه درسی مجاز نیست مگر آنکه به تصویب شورای برنامه‌ریزی درسی دانشگاه برسد.

ایمان الله بیگدلی

مدیر برنامه‌ریزی و توسعه آموزش دانشگاه

موتضی کریمی

رئیس گروه برنامه‌ریزی آموزشی و درسی دانشگاه

رضا پیش قدم

معاون آموزشی دانشگاه

رای صادره جلسه مورخ ۹۹/۰۸/۱۲ شورای برنامه‌ریزی درسی دانشگاه در مورد بازنگری برنامه درسی شیمی گرایش شیمی فیزیک در دوره‌های کارشناسی ارشد و دکتری صحیح است. به واحد ذی ربط ابلاغ شود.



محمد کافی

رئیس دانشگاه





معاونت آموزشی

شورای برنامه ریزی درسی

برنامه درسی

دوره‌های: کارشناسی ارشد و دکتری

رشته: شیمی

گرایش: شیمی فیزیک





فصل اول

کلیات



بسمه تعالی

تعریف رشته:

شیمی فیزیک مطالعه اصول فیزیکی حاکم بر رفتار و خواص سامانه‌های شیمیایی هست. درک عمیق شیمی از طریق شیمی فیزیک - اعم از تجربی و نظری - در دوره تحصیلات تکمیلی (کارشناسی ارشد و دکتری شیمی فیزیک) حاصل می‌شود.

هدف رشته:

- ایجاد زیرساخت‌های علمی برای تولید دانش فنی و گسترش مرزهای دانش
- تربیت افراد متخصص، متعهد و پژوهشگر
- افزایش کمی و کیفی تولیدات علمی

ضرورت و اهمیت رشته:

شیمی فیزیک طیف گسترده‌ای از تحقیقات تجربی و نظری شامل ویژگی‌های نانو مواد، سونوشیمی، بیوشیمی فیزیک، شیمی محیط‌زیست، شیمی کوانتومی و طیف‌سنجی، شیمی محاسباتی، کاتالیزور، الکتروشیمی، سینتیک شیمیایی و موارد دیگر را در برمی‌گیرد.

نقش، توانایی و شایستگی دانش‌آموختگان:

دانش‌آموختگان تحصیلات تکمیلی شیمی فیزیک (مقاطع کارشناسی ارشد و دکتری) می‌توانند در واحدهای تحقیقاتی صنایع شیمیایی مختلف نظیر صنایع رنگ‌سازی، چرم‌سازی، پتروشیمی، مواد غذایی، دارویی، آرایشی و بهداشتی و در آزمایشگاه‌های کنترل کیفیت مواد شیمیایی و یا واحد تولید آن‌ها نقش کلیدی ایفا کنند. هم‌چنین، می‌توانند در طراحی، نظارت و اجرای طرح‌های تحقیقاتی در زمینه شیمی مشارکت داشته باشند. دانش‌آموختگان این گرایش می‌توانند خدمات آموزشی در سطح دبیرستان‌ها (دانش‌آموختگان کارشناسی ارشد)، مؤسسات آموزش عالی و دانشگاه‌ها (دانش‌آموختگان مقطع دکتری) ارائه دهند.

طول دوره و شکل نظام:

مدت مجاز تحصیل در دوره کارشناسی ارشد ۴ نیمسال تحصیلی و دوره دکتری ۸ نیمسال تحصیلی و به صورت آموزشی - پژوهشی می‌باشد.



دانشجوی بایستی در نیمسال اول تحصیلی استاد راهنمای خود را طبق قوانین مصوب دانشگاه انتخاب و مراحل مربوط به پایان نامه / رساله خود را تحت نظارت ایشان شروع و پیگیری کند.

تعداد و نوع واحدهای درسی:

کارشناسی ارشد: تعداد کل واحدهای این دوره ۲۸ واحد شامل ۱۰ واحد تخصصی ۱۲ واحد اختیاری و ۶ واحد پایان نامه می باشد.

برای دانش آموختگان کارشناسی که از رشته های غیر شیمی پذیرفته شده اند، گذراندن دروس جبرانی (حداکثر ۳ واحد) با نظر استاد راهنما و تصویب کمیته تحصیلات تکمیلی گروه الزامی هست.

دکتری: تعداد کل واحدهای این دوره ۳۶ واحد شامل ۱۲ واحد تخصصی و ۲۴ واحد رساله می باشد.

شرایط و ضوابط ورود به دوره:

کارشناسی ارشد: داشتن شرایط عمومی مطابق با مصوبات وزارت علوم، تحقیقات و فناوری و داشتن مدرک کارشناسی در رشته های شیمی، مهندسی مواد و مهندسی شیمی (از یکی از دانشگاه های معتبر داخل یا خارج کشور که مورد تأیید وزارت علوم، تحقیقات و فناوری باشد) الزامی است.

دکتری: داشتن شرایط عمومی مطابق با مصوبات وزارت علوم، تحقیقات و فناوری و همچنین، داشتن مدرک کارشناسی ارشد در گرایش های شیمی، مهندسی مواد و مهندسی شیمی (از یکی از دانشگاه های معتبر داخل یا خارج کشور که مورد تأیید وزارت علوم، تحقیقات و فناوری باشد) الزامی است.





فصل دوم:

جداول دروس



جدول ۱- دروس جبرانی کارشناسی ارشد

| ردیف | نام درس | تعداد واحد | | | تعداد ساعات | | | پیش نیاز / هم نیاز |
|------|--------------|------------|------|-----|-------------|------|-----|--------------------|
| | | نظری | عملی | جمع | نظری | عملی | جمع | |
| ۱ | شیمی فیزیک ۳ | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ | - |
| | جمع کل | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ | - |

جدول ۲- دروس تخصصی کارشناسی ارشد

| ردیف | نام درس | تعداد واحد | | | تعداد ساعات | | | پیش نیاز / هم نیاز |
|------|---------------------|------------|------|-----|-------------|------|-----|--------------------|
| | | نظری | عملی | جمع | نظری | عملی | جمع | |
| ۱ | شیمی فیزیک پیشرفته | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ | - |
| ۲ | ترمودینامیک آماری ۱ | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ | - |
| ۳ | شیمی کوانتومی ۱ | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ | - |
| ۴ | سمینار | ۱ | - | ۱ | - | - | - | - |
| | جمع کل | ۱۰ | - | ۱۰ | ۱۴۴ | - | ۱۴۴ | - |

۱. دانشجویان کارشناسی ارشد شیمی فیزیک، با توجه به موضوع پایان نامه و با تأیید استاد راهنما، ۱۲ واحد از مجموعه واحدهای ارائه شده در جدول دروس تحصیلات تکمیلی (جدول شماره ۳) را می توانند اخذ نمایند.
۲. دانشجویان دکتری شیمی فیزیک، با توجه به موضوع رساله و با تأیید استاد راهنما، ۱۲ واحد از مجموعه واحدهای ارائه شده در جدول دروس تحصیلات تکمیلی (جدول شماره ۳) را می توانند اخذ نمایند.
۳. دانشجویان مقاطع تحصیلات تکمیلی (کارشناسی ارشد و دکتری)، با نظر استاد راهنما می توانند حداکثر ۳ واحد از مجموعه واحدهای تحصیلات تکمیلی ارائه شده در سایر گرایش های شیمی، گروه فیزیک و دانشکده مهندسی اخذ نمایند.



جدول ۳- بسته دروس تحصیلات تکمیلی

| ردیف | نام درس | تعداد واحد | | | تعداد ساعات | | |
|------|--|------------|------|-----|-------------|------|-----|
| | | نظری | عملی | جمع | نظری | عملی | جمع |
| ۱ | سینتیک و دینامیک شیمیایی | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |
| ۲ | سینتیک آنزیمی | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |
| ۳ | بیوشیمی فیزیک | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |
| ۴ | روش‌های مطالعه ساختار و عمل زیستی | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |
| ۵ | شبیه‌سازی دینامیک مولکولی | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |
| ۶ | نانو مواد: شبیه‌سازی و طراحی | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |
| ۷ | شبیه‌سازی مقیاس اتمی برای مولکول‌ها و اتم‌ها | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |
| ۸ | مدل‌سازی محاسباتی سینتیک شیمیایی | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |
| ۹ | شیمی کوانتومی ۲ | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |
| ۱۰ | شیمی محاسباتی | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |
| ۱۱ | شیمی و فیزیک نانو ساختارها | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |
| ۱۲ | شیمی فیزیک پروتئین‌ها | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |
| ۱۳ | شیمی فیزیک پلیمرها | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |
| ۱۴ | اصول، ساختارها و کاربردهای نانوفوتوکاتالیزورها | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |
| ۱۵ | زیست‌حسگرها | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |
| ۱۶ | نانوکاتالیزورها | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |
| ۱۷ | شیمی انرژی‌های تجدیدپذیر | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |
| ۱۸ | مکانیک آماری وابسته به زمان | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |
| ۱۹ | پدیده‌های بین سطحی در شیمی | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |
| ۲۰ | اثرات شیمیایی، فیزیکی و زیستی امواج فراصوت | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |
| ۲۱ | ترمودینامیک شیمیایی جامدات | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |
| ۲۲ | بازشناخت زیست مولکولی | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |
| ۲۳ | توسعه فرایندهای شیمیایی از آزمایشگاه به صنعت | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |
| ۲۴ | شیمی حالت جامد | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |
| ۲۵ | پدیده‌های انتقال در محیط‌های متخلخل | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |
| ۲۶ | طیف‌های مولکولی و ساختار مولکولی | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |
| ۲۷ | طیف‌سنجی زیستی | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |
| ۲۸ | شیمی پلیمرها | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |
| ۲۹ | مولکولی ۲ | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |
| ۳۰ | آماري ۲ | ۳ | - | ۳ | ۴۸ | - | ۴۸ |

| پیش نیاز / هم نیاز | تعداد ساعات | | | تعداد واحد | | | نام درس | ردیف |
|--------------------|-------------|------|------|------------|------|------|--------------------------|------|
| | جمع | عملی | نظری | جمع | عملی | نظری | | |
| - | ۴۸ | - | ۴۸ | ۳ | - | ۳ | مهندسی مولکولی | ۳۱ |
| - | ۴۸ | - | ۴۸ | ۳ | - | ۳ | اخلاق، روش و منطق تحقیق* | ۳۲ |
| - | ۴۸ | - | ۴۸ | ۳ | - | ۳ | مباحث ویژه در شیمی فیزیک | ۳۳ |
| - | ۴۸ | - | ۴۸ | ۳ | - | ۳ | شیمی آلی پیشرفته | ۳۴ |
| - | ۴۸ | - | ۴۸ | ۳ | - | ۳ | شیمی تجزیه پیشرفته | ۳۵ |
| - | ۴۸ | - | ۴۸ | ۳ | - | ۳ | شیمی معدنی پیشرفته | ۳۶ |

* فقط دانشجویان کارشناسی ارشد مجاز به انتخاب این درس می‌باشند.





فصل سوم:

سرفصل دروس



دروس تخصصی کارشناسی ارشد

مشخصات درس:

| | |
|---|---|
| عنوان درس (فارسی): شیمی فیزیک پیشرفته | |
| عنوان درس (انگلیسی): Advanced Physical Chemistry | |
| نوع درس: تخصصی | پیش نیاز / هم نیاز: دارد <input type="checkbox"/> ندارد <input checked="" type="checkbox"/> |
| تعداد واحد: ۳ | نوع واحد: نظری |
| تعداد ساعت: ۴۸ | پیش نیاز: - |

اهداف درس:

- استفاده از اصول ترمودینامیکی برای پیش بینی پدیده‌های فیزیکی و شیمیایی
- آشنایی و کسب دانش در ترمودینامیک شیمیایی

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد

- توسعه درک دانشجویان از ترمودینامیک کلاسیک
- کاربرد مفاهیم اساسی ترمودینامیک در طیف وسیعی از فناوری‌ها
- کاربرد روابط ترمودینامیک در سامانه‌های چند فاز

سرفصل درس

- **اصول موضوعه در ترمودینامیک کلاسیک**
توابع ترمودینامیکی، معادلات اصلی در ترمودینامیک، فرایندهای برگشت پذیر و برگشت ناپذیر
- **پایداری و شرایط پایداری ترمودینامیکی**
شرایط رسیدن به اصل حالت تعادل ترمودینامیکی، پایداری در ترمودینامیک تعادلی، پایداری توابع پتانسیل ترمودینامیکی، اصل لوشاتلیه و نارسایی آن
- **روابط بین توابع ترمودینامیکی**
تبدیلات لژاندر، معادلات گیبس، ادویه اویلر، روابط ماکسول
- **گازهای غیرایده‌آل**
فاکتور تراکم پذیری، معادلات حالت واندروالس، ویریا و غیره
- **ترمودینامیک محلول‌های غیرایده‌آل**



اساس فرمولبندی ترمودینامیک محلول‌ها، خواص ترمودینامیکی محلول‌ها، پتانسیل شیمیایی اجزا در محلول‌های ایده‌آل و غیرایده‌آل، معرفی فعالیت و ضریب فعالیت، نظریه دبای هوکل، مخلوط‌های گازی غیرایده‌آل، فوگاسیته

• واکنش‌های تعادلی در سامانه‌های غیر تعادل غیرایده‌آل

ثابت تعادل، واکنش‌های تعادلی در محلول‌های غیر الکترولیت، واکنش‌های تعادلی در محلول‌های الکترولیت، واکنش‌های تعادلی در مخلوط گاز غیر ایده‌آل، وابستگی ثابت تعادل به دما

روش یاددهی - یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

| پروژه | آزمون نهایی | میان ترم | ارزشیابی مستمر |
|-------|--------------|----------|----------------|
| - | نوشتاری: ۵۰٪ | ۲۰٪ | ۱۰٪ |
| | عملکردی: - | | ۲۰٪ تکالیف |

فهرست منابع:

Levine, I. N. (2009). *Physical Chemistry*, 6th ed., McGraw Hill.

M. W. Zemansky and Dittman, R. H. (2011). *Heat and Thermodynamics*, 8th ed., McGraw Hill.

Atkins, P. W. and Paula, J. de (2014). *Physical Chemistry*, 10th ed., Oxford University Press.



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): ترمودینامیک آماری ۱

عنوان درس (انگلیسی): Statistical Thermodynamics 1

نوع درس: تخصصی پیش نیاز / هم نیاز: دارد ندارد پیش نیاز: -

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

دستیابی به درک صحیح از اصول اساسی ترمودینامیک آماری و کاربرد آن در مسائل مختلف

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد:

توسعه‌ی درک کاربرد کوانتوم مکانیک در ترمودینامیک

سرفصل درس:

• مقدمات

شیمی فیزیک، حوزه‌های شیمی فیزیک، طبقه‌بندی و زمینه مقدماتی مکانیک آماری، مروری بر برخی مقدمات و آمار شامل تقریب استرلینگ، روش جمله ماکزیمم، روش ضرایب لاگرانژ، قوانین روش شمارش، عدم قطعیت ریشه دوم میانگین مجذور، توزیع احتمال، ریزحالت‌ها، درشت حالت‌ها، تعداد ریزحالت‌های هر آرایش، تعداد ریزحالت‌های قابل دسترس، روش‌های مکانیک آماری شامل نظریه فضای فاز و نظریه انسامل، برخی از پذیرهای نظریه انسامل و فرضیه ارگودیک.

• آمار بولتزمن-انسامل کانونیکال

روش محتمل‌ترین توزیع، تابع تقسیم، دژنرسی حالات، خواص ترمودینامیکی

• آمار بولتزمن-انسامل گرند کانونیکال

روش محتمل‌ترین سرعت، تابع مشخصه، خواص ترمودینامیکی انسامل گرند کانونیکال با استفاده از تابع مشخصه، انسامل میکرو کانونیکال، نظریه افت و خیز شامل افت و خیز انرژی در کانونیکال انسامل، افت و خیز تعداد ذرات در انسامل گرند کانونیکال، یافتن تابع مشخصه با استفاده از نظریه افت و خیز برای انسامل کانونیکال و گرند کانونیکال

• آمار ذرات-آمار فرمی دیراک و بوز انیشتین



آمار ماکسول بولتزمن برای ذرات تمیزپذیر و ذرات تمیزناپذیر، آمار کوانتومی شامل فرمی دیراک و بوز انیشتین، خواص ترمودینامیکی سامانه‌ای از فرمیون‌ها و بوزون‌ها شامل انرژی و تعداد ذرات، آمار عدد اشغال برای فرمیون‌ها و بوزون‌ها

• **گازهای تک اتمی ایده‌آل با دژنرسی ضعیف**

تابع تقسیم انتقالی، تابع تقسیم الکترونی، تابع تقسیم هسته‌ای، خواص ترمودینامیکی شامل انرژی هلمهولتز، انرژی داخلی، فشار، انتروپی، پتانسیل شیمیایی، ظرفیت گرمایی در حجم ثابت.

• **گازهای دو اتمی ایده‌آل با دژنرسی ضعیف**

تقریب بورن اوپنهایمر، تقریب نوسانگر هماهنگ، تابع تقسیم انتقالی، تابع تقسیم چرخشی، تابع تقسیم ارتعاشی، تابع تقسیم الکترونی، تابع تقسیم هسته‌ای، آمار کوانتومی مولکول‌های دو اتمی جور هسته شامل فرمیون‌ها و بوزون‌ها، خواص ترمودینامیکی شامل انرژی هلمهولتز، انرژی داخلی، فشار، انتروپی، پتانسیل شیمیایی، ظرفیت گرمایی در حجم ثابت.

• **گازهای چند اتمی ایده‌آل با دژنرسی ضعیف**

تابع تقسیم انتقالی، تابع تقسیم چرخشی شامل مولکول‌های خطی و غیرخطی، تابع تقسیم ارتعاشی، تابع تقسیم الکترونی، خواص ترمودینامیکی بری مولکول‌های خطی و غیرخطی، شامل انرژی هلمهولتز، انرژی داخلی، فشار، انتروپی، پتانسیل شیمیایی، ظرفیت گرمایی در حجم ثابت، انتروپی باقی مانده، چرخش ممانعت شده.

• **آمار کوانتومی**

گاز تک اتمی ایده‌آل فرمیونی با دژنرسی ضعیف، تعداد ذرات، معادله حالت، انرژی داخلی
گاز تک اتمی ایده‌آل بوزونی با دژنرسی ضعیف، تعداد ذرات، معادله حالت، انرژی داخلی
گاز تک اتمی ایده‌آل فرمیونی با دژنرسی کامل، تعداد ذرات، معادله حالت، انرژی داخلی، دمای فرمی، انرژی فرمی.

گاز تک اتمی ایده‌آل فرمیونی با دژنرسی شدید، تعداد ذرات، معادله حالت، انرژی داخلی، فشار، ظرفیت گرمایی در حجم ثابت

گاز تک اتمی ایده‌آل بوزونی، خواص ترمودینامیکی در چگالی ثابت و در دمای ثابت، تراکم بوز انیشتینی

روش یاددهی - یادگیری:

روش تدریس توضیحی



روش ارزیابی:

| پروژه | آزمون نهایی | میان ترم | ارزشیابی مستمر |
|-------|--------------|----------|----------------|
| - | نوشتاری: ۵۰٪ | ۲۰٪ | ۱۰٪ |
| | عملکردی: - | | ۲۰٪ تکالیف |

فهرست منابع:

McQuarrie, D. A. (2000). *Statistical Mechanics*, University Science Books, California.

Pathria, P. K. & Beale, P. (2011). *Statistical Mechanics Statistical Mechanics*, 3rd ed. United States: Elsevier/Academic Press.

گوهرشادی، الهه و موسوی (۱۳۸۸). مجید ترمودینامیک آماری، مشهد: انتشارات دانشگاه فردوسی مشهد.

منابع مطالعاتی:

Scientific journals like *The Journal of Chemical Physics* (AIP), *Physical Review A* (American Physical Society), *Physical Review B* (American Physical Society), *Physical Review C* (American Physical Society), *Physical Review D* (American Physical Society), *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* (Elsevier).



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): شیمی کوانتومی ۱

عنوان درس (انگلیسی): Quantum Chemistry 1

نوع درس: تخصصی پیش نیاز / هم نیاز: دارد ندارد پیش نیاز: -

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

- استفاده از کوانتوم به عنوان ابزاری برای درک ساختار و خواص اتمی و مولکولی
- کاربرد شیمی کوانتومی در سامانه‌های شیمیایی

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد:

- درک تفاوت بین جهان کلاسیک و کوانتوم
- حل مسائل مولکولی به کمک روش‌های تقریبی مکانیک کوانتومی
- درک نقش اندازه حرکت اسپینی در ساختار الکترونی اتم‌ها و مولکول‌ها
- توصیف اتم‌های چندالکترونی با استفاده از مدل ذره مستقل

سرفصل درس:

- مفاهیم بنیادی مکانیک کوانتومی
تابع موج، تابع احتمال و اندازه‌گیری، نمایش کت-برا برای توابع موج و عملگرها، نمایش برداری و آرایه‌ای عملگرها، مقادیر ویژه و توابع ویژه، مقادیر قابل انتظار کمیت‌ها، عملگرهای هرمیتی، مشاهده‌پذیرها، روابط عدم قطعیت.
- روش وردشی
قضیه وردشی و تعمیم آن، دستگاه معادلات خطی و کاربرد آن در روش وردشی، آرایه‌ها، قطری‌سازی، مقادیر ویژه، چند مثال برای قضیه وردشی.
- نظریه اختلال
نظریه اختلال در سامانه‌های بدون همترازی، نظریه اختلال در سامانه‌های دارای همترازی، مقایسه‌ی روش‌های وردشی و اختلال، نظریه اختلال وابسته به زمان، چند مثال برای نظریه اختلال.
- اسپین الکترون و اصل طرد پائولی



آزمایش اشترن-گرلاخ، اسپین الکترون، گشتاور مغناطیسی اسپین، ذرات معادل در سامانه‌های چندذره‌ای، آمار اسپینی فرمی-دیراک، آمار اسپینی بوز-انیشتن، تراکم بوز-انیشتن، اصل طرد پائولی، دترمینان اسلیتر، بررسی حالت پایه‌ی اتم‌های هلیوم و لیتیم با استفاده از روش وردشی و نظریه اختلال، آرایه‌های پائولی، عملگرهای نردبانی.

• اتم‌های چند الکترونی

تابع موج تک دترمینانی، روش خودسازگار هارتری-فاک، انتگرال‌های تعویض و کولن، لایه‌های الکترونی، اوربیتال‌ها و جدول تناوبی، همبستگی الکترونی، جمع تکانه‌های زاویه‌ای و کاربرد آن‌ها در اتم‌های چندالکترونی، برهم کنش اسپین-اوربیت و هامیلتونی اتمی، قواعد کاندون-اسلیتر.

• کاربردهای اصول شیمی کوانتومی در محاسبات شیمیایی

ترمودینامیک شیمیایی، پایداری شیمیایی، سینتیک شیمیایی.

روش یاددهی - یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

| ارزشیابی مستمر | میان ترم | آزمون نهایی | پروژه |
|----------------|----------|--------------|-------|
| ۱۰٪ | ۲۰٪ | نوشتاری: ۵۰٪ | - |
| ۲۰٪ تکالیف | | عملکردی: - | |

فهرست منابع:

Hecht, K. T. (2000). *Quantum Mechanics*, Springer, New York.
 Szabo, A. & Ostlund, N. S. (2000). *Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*, Mc-Graw Hill.
 Atkins, P. W. & Friedman, R. S. (2005). *Molecular Quantum Mechanics*, 4th ed., Oxford University Press.
 Zettili, N. (2009). *Quantum Mechanics: Concepts and Applications*, 2nd ed., Wiley.
 Levine, I. N. (2014). *Quantum Chemistry*, 7th ed., Prentice Hall, London.



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): سینتیک و دینامیک شیمیایی

عنوان درس (انگلیسی): Chemical Kinetics and Reaction Dynamics

نوع درس: اختیاری پیش نیاز / هم نیاز: دارد ندارد پیش نیاز: -

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

درک مفاهیم بنیادی و روش‌های مطالعه دینامیک، سینتیک و مکانیسم واکنش‌های شیمیایی

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد:

افزایش قدرت تجزیه و تحلیل مسائل مربوط به دینامیک، سینتیک و مکانیسم واکنش‌های شیمیایی

سرفصل درس:

- مروری بر سینتیک ماکروسکوپی:
درجه واکنش، مولکولاریته و معادله آرنیوس
- توابع و سطوح انرژی پتانسیل:
منشاء نیروهای بین مولکولی، سطوح انرژی پتانسیل، مختصه واکنش
- سینتیک میکروسکوپی:
سطح کل و دیفرانسیلی واکنش، ارتباط بین ثابت سرعت و سطح مقطع واکنش، ارتباط بین انرژی آستانه و انرژی فعال‌سازی
- نظریه برخورد
- نظریه حالت گذار:
فرضیات، فرمولاسیون مکانیک آماری برای نظریه حالت گذار، فرمولاسیون ترمودینامیک برای نظریه حالت گذار، ساختار حالت گذار، کاربردهای نظریه حالت گذار، اثرات ایزوتوپی، تونل‌زنی
- دینامیک واکنش و سطوح انرژی پتانسیل:
سطوح انرژی پتانسیل، محاسبات خواص سینتیکی از سطوح انرژی پتانسیل، محاسبات دینامیکی در مقابل نظریه حالت گذار
- فوتوشیمی:



جذب، نشر، آسایش ارتعاشی، انتقالات بدون تابش، فرایندهای خاموش کردن (Quenching processes)، تجزیه، سینتیک فوتوشیمیایی، بهره کوانتومی برای فلورسانس، طول عمر یک حالت برانگیخته، نمودارهای استرن-ولمر، تجزیه به نور، تفکیک مستقیم، تفکیک گام به گام، جداسازی قبل، مطالعات زمان واقعی از فرایند تجزیه به کمک نور

• واکنش‌ها در محلول:

جفت برخورد، واکنش‌های کنترل نفوذی، وابستگی ضریب سرعت واکنش‌های کنترل نفوذی به گرانش و دما، واکنش‌های کنترل نفوذی بین یون‌ها، انتقال به واکنش‌های کنترل شده با فعال‌سازی، فرمول ترمودینامیکی ضریب سرعت، اثرات قدرت یونی، تأثیر فشار بر ضریب سرعت، دینامیک واکنش‌های محلول، واکنش‌های قفس، واکنش‌های خوشه‌ای، الکترون حلال پوشی شده، واکنش‌های انتقال الکترون.

روش یاددهی - یادگیری:

پرسش و پاسخ، بحث گروهی، انتخاب پروژه مطالعاتی در ارتباط با درس بر اساس مقالات جدید و ارائه در کلاس

روش ارزیابی:

| پروژه | آزمون نهایی | میان‌ترم | ارزشیابی مستمر |
|-------|--------------|----------|----------------|
| - | نوشتاری: ۵۰٪ | ۲۰٪ | ۱۰٪ |
| | عملکردی: - | | ۲۰٪ تکالیف |

فهرست منابع:

Levine, R. D. (2009). *Molecular Reaction Dynamics*, Cambridge University Press.

Houston, P. L. (2012). *Chemical Kinetics and Reaction Dynamics*, Courier Corporation (Recommended).

مایکل ج پیلینینگ و پال دلیو سیکینز (۱۳۸۵)، سینتیک واکنش‌های شیمیایی، ترجمه شهناز خالقی، الهه گوهرشادی، لیدا فتوحی، مرکز نشر دانشگاهی.



مشخصات درس:

| | |
|--------------------------------------|---|
| عنوان درس (فارسی): سینتیک آنزیمی | |
| عنوان درس (انگلیسی): Enzyme Kinetics | |
| نوع درس: اختیاری | پیش نیاز / هم نیاز: دارد <input type="checkbox"/> ندارد <input checked="" type="checkbox"/> |
| تعداد واحد: ۳ | نوع واحد: نظری |
| تعداد ساعت: ۴۸ | |

اهداف درس:

- آشنایی با سینتیک واکنش های آنزیمی ساده و پیچیده
- شناخت واکنش های دو سوبسترای
- آشنایی با عوامل محیطی تأثیر گذار بر فعالیت آنزیم ها

توانایی و شایستگی هایی که درس پرورش می دهد:

- کاربرد نظریه های سینتیک آنزیمی در مطالعه پیوند یون یا مولکول کوچک به آنزیم و بررسی تأثیر این پیوند در فعالیت کاتالیزور حیاتی آنزیم
- تشخیص شرایط بهینه به کارگیری آنزیم ها
- طراحی مهارکننده ها و فعال کننده های آنزیمی

سرفصل درس:

- سینتیک ساده واکنش های آنزیمی
 - سینتیک آنزیم های با یک جایگاه فعال
 - روش تعادل سریع و حالت یکنواخت
 - سرعت اولیه و معادله میکائلیس - منتون
 - سنجش های آنزیمی
 - تعیین ثابت های سینتیکی آنزیم، روش های لینویور-برگ، هانز-ولف، ادی-هافستی و غیره
 - محدودیت های معادله میکائلیس - منتون
 - روش دیکسون در تعیین ثابت های سینتیکی آنزیم
 - ثابت های میکائلیس سوبسترا و محصول و سرعت کلی (غیر اولیه) واکنش آنزیمی
 - آنزیم های دو شکلی و عمل دو آنزیم بر روی یک سوبسترا



• **سینتیک مهارشدن آنزیمی**

- مهارکننده‌های برگشت‌پذیر و برگشت‌ناپذیر
- مهارکننده جزئی و کامل
- مهارکننده‌های رقابتی، غیررقابتی، ضد رقابتی و مختلط
- نظریه عمومی مهارکنندگی
- درجه مهارکنندگی

• **سینتیک واکنش‌های آنزیمی چند جایگاهی**

- آنزیم‌های چند جایگاهی غیرمتعاون
- آنزیم‌های چندجایگاهی متعاون و آلوستریک: معادله هیل
- آنزیم‌های دو سوبسترای تصادفی و ترتیبی
- آنزیم‌های دو سوبسترای با مکانیسم پینگ پنگی

• **سینتیک فعال شدن آنزیمی**

- فعال‌کننده‌های غیرضروری آنزیم
- فعال‌کننده‌های ضروری آنزیم
- رقابت مهارکننده و فعال‌کننده با یکدیگر
- ضد‌مهارکننده و ضدفعال‌کننده آنزیم

• **اثرات عوامل محیطی بر سینتیک آنزیمی**

- اثر دما بر فعالیت آنزیم
- اثر فعال‌کنندگی و معادله آرنیوس
- اثر pH بر فعالیت آنزیم
- سینتیک غیرفعال شدن آنزیم تحت تأثیر تغییر pH
- نمودارهای لگاریتمی دیکسون - وب
- تأثیر pH بر گروه‌های یونیزه شونده مؤثر در فعالیت آنزیم
- تأثیر نوع بافر و قدرت یونی در فعالیت آنزیم
- تأثیر یون‌های فلزی بر فعالیت و ساختار آنزیم

روش یاددهی - یادگیری:



تدریس توضیحی



روش ارزیابی:

| پروژه | آزمون نهایی | میان ترم | ارزشیابی مستمر |
|-------|--------------|----------|----------------|
| - | نوشتاری: ۴۰٪ | - | ۳۰٪ |
| | عملکردی: - | | ۳۰٪ تکالیف |

فهرست منابع:

Leskovac, V. (2003). *Enzyme Kinetics*, Plenum.

Smith, H. & Simons, C. (2005). *Enzymes and Their Inhibitory: Drug Development*, CRC Press.

Sauro, H. M. (2011). *Enzyme Kinetics for Systems Biology*, Ambrosius.

Bisswanger, H. (2017). *Enzyme Kinetics: Principles and Methods*, Wiley.



مشخصات درس:

| | | | |
|---|---|---|-------------|
| عنوان درس (فارسی): بیوشیمی فیزیک | | | |
| عنوان درس (انگلیسی): Biophysical Chemistry | | | |
| نوع درس: اختیاری | پیش نیاز / هم نیاز: دارد <input type="checkbox"/> | ندارد <input checked="" type="checkbox"/> | پیش نیاز: - |
| تعداد واحد: ۳ | نوع واحد: نظری | تعداد ساعت: ۴۸ | |

اهداف درس:

آشنایی با روش‌های مختلف بررسی ساختار و عملکرد زیستی درشت‌مولکول‌های زیستی

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد:

- درک استحکام ساختارهای زیستی
- درک نیروهای تأثیرگذار در ساختار درشت‌مولکول‌ها
- درک تاخوردن پروتئین‌ها و عملکرد آن‌ها

سرفصل درس:

- اسیدهای آمینه - تعادلات یونش
- ثابت‌های میکروسکوپی
- پپتیدها و پروتئین‌ها
- آب‌گریزی پروتئین‌ها و روش ارزیابی آن
- ساختارهای مارپیچ و صفحات چین‌خورده
- ساختار سوم و چهارم
- نقشه تماس
- نیروهای مؤثر در ساختارهای مختلف
- تاخوردن پروتئین‌ها و زوایای چرخشی
- نمودارهای رامانچاندران
- پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین
- کلوتیدها - تعادلات یونش بازها
- بازها و تأثیر آن



- RNA و DNA- آرایش‌های سین و آنتی
- زوایای چرخشی در اسیدهای نوکلئیک
- پیوند هیدروژنی و انباشتگی بازها و نقش آن‌ها در ساختارهای دوم و سوم
- ترکیب غشاء سلولی
- پایداری پروتئین‌ها
- عملکرد درشت‌مولکول‌های زیستی

روش یاددهی - یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

| پروژه | آزمون نهایی | میان‌ترم | ارزشیابی مستمر |
|-------|--------------|----------|----------------|
| - | نوشتاری: ۴۰٪ | ۲۰٪ | ۲۰٪ |
| | عملکردی: - | | ۴۰٪ تکالیف |

فهرست منابع:

Van Holde, K. E.; Johnson, W. C. & Ho, P. S. (2006). *Principles of Physical Biochemistry* Pearson/Prentice Hall.

Creighton, T. E. (2010). *The Biophysical Chemistry of Nucleic Acids and Proteins*, Helvetian Press.



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): روش های مطالعه ساختار و عمل زیستی

عنوان درس (انگلیسی): **Techniques for the Study of Biological Structure and Function**

نوع درس: اختیاری پیش نیاز / هم نیاز: دارد ندارد پیش نیاز: -

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

آشنایی با روش های مختلف بررسی ساختار و عملکرد زیستی درشت مولکول های زیستی

توانایی و شایستگی هایی که درس پرورش می دهد:

- درک روش های طیف سنجی، روش های هیدرودینامیکی و روش های گرماسنجی

سرفصل درس:

- ساختار درشت مولکول های زیستی
- عملکرد درشت مولکول های زیستی
- طیف سنجی فرابنفش - مرئی
- طیف سنجی فروسرخ و رامان
- مشتقات طیفی
- طیف سنجی فلورسانس
- طیف سنجی ORD و CD
- طیف سنجی NMR
- ویسکومتری
- ته نشینی
- الکتروفورز
- ITC, DSC
- QSAR
- QM



روش یاددهی - یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

| پروژه | آزمون نهایی | میان ترم | ارزشیابی مستمر |
|-------|--------------|----------|----------------|
| - | نوشتاری: ۴۰٪ | - | ۲۰٪ |
| | عملکردی: - | | ۴۰٪ تکالیف |

فهرست منابع:

Ladbury, J. E. & Doyle, M. L. (2004). *Biocalorimetry*, Wiley.

Van Holde, K. E.; Johnson, W. C.; Johnson, C. & Ho, P. S. (2006). *Principles of Physical Biochemistry*, Pearson/Prentice Hall.

Serdyuk, I. N.; Zaccai, N. R. & Zaccai, J. (2017). *Methods in Molecular Biophysics*, Cambridge University Press.



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

عنوان درس (انگلیسی): Molecular Dynamics Simulation

نوع درس: اختیاری پیش‌نیاز / هم‌نیاز: دارد ندارد پیش‌نیاز: -

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

- درک روش‌ها، توانایی‌ها و محدودیت‌های شبیه‌سازی مولکولی جهت قضاوت در زمینه‌ی کیفیت مطالعات شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در متون مختلف
- کار با نرم‌افزارهای مختلف شبیه‌سازی
- درک عمیق‌اساس مولکولی رفتار فیزیکی بسیاری از سامانه‌ها

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد:

- کاربرد شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در تفسیر
- درک پدیده‌های فیزیکی، شیمیایی و زیستی

سرفصل درس:

- مقدمه
- چشم‌انداز تاریخی و برخی از کاربردهای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، برخی از ملاحظات مهم: مدل‌سازی و شبیه‌سازی، نظریه در مقابل تجربه، کاهش‌سازی در مقابل شبیه‌سازی، سامانه‌های مدل: پتانسیل‌های جفتی برای اتم‌ها و مولکول‌های ساده شامل پتانسیل‌های کره سخت، کره نرم، چاه مربعی، مثلثی، ساترلند، کایرا، لnardجونز، باکینگهام و کرنر، پتانسیل برای سامانه‌های مولکولی پیچیده‌تر شامل: پتانسیل‌های بین‌مولکولی یونی و قطبی، پیوند هیدروژنی، پتانسیل برهم‌کنش بین اتم‌های پیوندی شامل: کشش در طول پیوند (پتانسیل مورس و شکل‌های توسعه‌یافته پتانسیل مورس)، خمش بین پیوندها (پتانسیل خمش زاویه‌ای و پتانسیل خمش خارج از صفحه) و چرخش حول پیوندها (پتانسیل‌های دووجهی و پیچشی)، پتانسیل‌های متقابل داخل مولکولی شامل: برهم‌کنش‌های کششی-کششی بین پیوندهای مجاور، پتانسیل برهم‌کنش بین کشش و زاویه پیوند و غیره، میدان‌های نیرو شامل: AMBER (EXPP/3), CHARMM, GROMOS, DREIDING و غیره،

پتانسیل‌های ساده پتانسیل برای آب شامل: TIP3P, TIP4P, مدل‌های ۳ تا شش مکانی، برهم‌کنش‌های

چندذره‌ای شامل پتانسیل‌های پراکندگی سه‌ذره‌ای برای اتم‌ها و پتانسیل‌های مؤثر (جاذبه و دافعه)، پتانسیل‌های چهارذره‌ای، انواع شبیه‌سازی‌های کامپیوتری شامل اتفاقی و جبری، پیوسته و مجزا، محلی و توزیع‌شده، معرفی دینامیک مولکولی شامل: معرفی، محدودیت‌ها و مقایسه آن با شبیه‌سازی مونت کارلو، معرفی شبیه‌سازی مونت کارلو شامل: مراحل اساسی در شبیه‌سازی مونت کارلو متروپولیس، معرفی شبیه‌سازی مونت کارلو، شبیه‌سازی مونت کارلو در انسامبل‌های مختلف، شبیه‌سازی‌های مولکولی ترکیبی شامل: مونت کارلو به اعمال نیرو (force biased Monte Carlo)، شبیه‌سازی دینامیکی لانگوین، دینامیک براوانی

• اصول دینامیک مولکولی

دینامیک نیوتنی، دینامیک هامیلتونی، دینامیک لاگرانژی، مراحل اساسی برای به دست آوردن مقادیر خواص از شبیه‌سازی، میانگین زمانی و میانگین بازه‌ای، توزیع سرعت‌ها، عناصر نظریه نمونه‌برداری شامل: میانگین مسیر (trajectory average)، میانگین نمونه‌ای (sample average) و مقدار قابل انتظار میانگین نمونه‌ای، شرایط مرزی تناوبی شامل: تعداد سلول‌های تصویری، نوع جعبه، محدودیت‌ها، قرارداد حداقل تصویر، پتانسیل قطع شده (truncation potential)، پتانسیل نیروی انتقال یافته (Shifted-force potential)، جمع اوالد، اصول بقا شامل: اثر شرایط مرزی تناوبی بر اصول بقای جرم، انرژی کل، اندازه حرکت خطی و اندازه رکت زاویه‌ای، سیستم واحدها، واحدهای کاهش یافته، توابع پتانسیل

• شبیه‌سازی دینامیک مولکولی کرات سخت

برتری‌ها و معایب شبیه‌سازی دینامیک مولکولی کرات سخت، دینامیک کرات سخت در یک بعد و سه بعد، جدول‌بندی زمان برخورد، الگوریتم شبیه‌سازی شامل: الگوریتم الدر و وین-رایت، مکان‌ها و سرعت‌های اولیه، بررسی تعادل با استفاده از پارامتر نظم مکانی و تابع H (H function)، محاسبه خواص، بررسی اعتبار کد شبیه‌سازی دینامیک مولکولی کره سخت شامل: رسیدن به تعادل و اصول بقا، مراحل الگوریتم شبیه‌سازی برای اجسام سخت شامل: مراحل آغازین، مرحله تعادل و تولید.

• شبیه‌سازی دینامیک مولکولی کرات نرم

تفاوت بین شبیه‌سازی دینامیک مولکولی کرات سخت و نرم، روش‌های اختلاف-متناهی، خطاها شامل: خطای قطع و خطای گرد کردن، خطای موضعی و خطای کلی، دینامیک مولکولی پتانسیل‌های پیوسته، الگوریتم‌های انتگرالی شامل: الگوریتم ورت، الگوریتم سرعت ورت، الگوریتم جهشی ورت، الگوریتم بیمن، الگوریتم پیش‌بینی کننده- تصحیح کننده گیر، مقایسه‌ی الگوریتم‌های انتگرالی، مراحل الگوریتم شبیه‌سازی برای اجسام نرم شامل: مراحل آغازین، مرحله تعادل و تولید، ارزیابی قابل اطمینان بودن نتایج شامل: مرحله تعادل، بررسی قوانین بقا و بررسی مقادیر خواص مختلف.

دینامیک مولکولی انسامل‌ها



انسامبل میکروکانونیکال، انسامبل کانونیکال شامل کنترل دما با سه روش: مقیاس بندی سرعت، اتصال به حمام گرمایی و استفاده از ترموستات‌ها (اندرسن، نوز، گوسین، نوز-هوور، برندنسن)، انسامبل هم‌فشار-هم‌انتالی، روش‌های کنترل فشار با استفاده از مقیاس بندی حجم، باروستات‌ها (برندنسن، اندرسن، نوز-هوور، پارینلو-رحمان برای کنترل فشار)، چند مثال کاربردی از مقالات و مجلات معتبر

• محاسبه خواص

خواص ترمودینامیکی ساده (نظیر انرژی جنبشی، دما، انرژی پیکربندی، انرژی داخلی، فشار، میانگین مجذور نیرو، تصحیحات بلند برد)، توابع ترمودینامیکی پاسخ شامل: ظرفیت گرمایی، تراکم پذیری آدیاباتیک، ضریب فشار گرمایی، خواص انتروپی شامل: انتگرال گیری ترمودینامیک، روش ذره آزمایشی، خواص ساختاری استاتیک شامل: تابع همبستگی جفتی یا تابع توزیع شعاعی (اثر دما و اثر چگالی بر تابع توزیع شعاعی)، تابع ساختار، خواص دینامیکی شامل: توابع همبستگی زمانی (جابجایی میانگین مجذور (mean square displacement))، تابع خودهمبستگی سرعت، ضرایب انتقالی شامل: ضریب خودنفوذی، ویسکوزیته، رسانش گرمایی، چند مثال کاربردی در خصوص محاسبه خواص ترمودینامیکی و خواص انتقالی از مجلات بین‌المللی معتبر

• معرفی نرم‌افزارهای مهم شبیه‌سازی

آشنایی با طرز کار برخی از نرم‌افزارهای دینامیک مولکولی مانند نرم‌افزار DL_POLY، نرم‌افزار LAMMPS، نرم‌افزار GROMACS.

روش یاددهی - یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

| ارزشیابی مستمر | میان ترم | آزمون نهایی | پروژه |
|----------------|----------|--------------|-------|
| ۱۰٪ | ۲۰٪ | نوشتاری: ۵۰٪ | - |
| ۲۰٪ تکالیف | | عملکردی: - | |

فهرست منابع

Allen, M. P. & Tildesley, D. J. (2001). *Computer Simulation of Liquids*, Oxford, Science Publications.
 Rapaport, D. C. (2004). *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, 2nd ed., Cambridge University Press.
 Alavi, S. (2020). *Molecular Simulations Fundamentals and Practice*, 1st ed., Wiley.



Scientific journals like *The Journal of Chemical Physics* (AIP), *Physical Review A* (American Physical Society), *Physical Review B* (American Physical Society), *Physical Review C* (American Physical Society), *Physical Review D* (American Physical Society), *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* (Elsevier)



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): **نانو مواد: شبیه سازی و طراحی**

عنوان درس (انگلیسی): **Nanomaterials: Design and Simulation**

نوع درس: اختیاری پیش نیاز / هم نیاز: دارد ■ ندارد □ پیش نیاز: شیمی کوانتومی ۱

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

معرفی و بررسی پیشرفت‌های نائل شده در زمینه طراحی نانو ساختارها با استفاده از تنوعی از روش‌ها نظیر *ab initio* *electronic structure*، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و دینامیک مولکولی *ab initio* و روش‌های دانه‌بندی و پیوسته (*coarse-graining and continuum methods*)

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد:

توانایی استفاده از محاسبات کامپیوتری برای طراحی نانو مواد و پیش‌بینی خواص فیزیکی و شیمیایی آنها

سرفصل درس:

- مقدمه‌ای بر اصول اتمی و الکترونی، اصول مکانیک کوانتوم و مکانیک کلاسیک
- الگوریتم‌های نمونه‌برداری پیشرفته
- تحلیل کمی با استفاده از روش‌های مکانیک مولکولی و روش‌های ترکیبی مکانیک مولکولی و دینامیک مولکولی
- توسعه میدان‌های نیرو و با الکتروستاتیک پیشرفته
- مشخصه‌های الکتریکی توده
- خواص ساختاری نانو خوشه‌های خالص و مخلوط با استفاده از شبیه‌سازی‌های کامپیوتری
- شبیه‌سازی انتقال فاز مایع-جامد در نانو ذرات فلزی
- شبیه‌سازی نانو خوشه‌های بور
- شبیه‌سازی کامپیوتری نانو خوشه‌های کربن و نانو خوشه‌های معدنی
- شبیه‌سازی چندمرحله‌ای تهیه نانوذرات‌های کوانتومی و آرایه‌های آنها
- مشخصه‌یابی ساختاری مواد متخلخل نانو و مزو با استفاده از شبیه‌سازی مولکولی

گرمایی نانو سامانه‌های کربنی



• شبیه‌سازی و مدل‌سازی نانولوله‌های کربنی

روش یاددهی - یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

| پروژه | آزمون نهایی | میان‌ترم | ارزشیابی مستمر |
|-------|--------------|----------|----------------|
| - | نوشتاری: ۵۰٪ | ۲۰٪ | ۱۰٪ |
| | عملکردی: - | | ۲۰٪ تکالیف |

فهرست منابع:

Rieth, M. & Schommers, W. (2005). *Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology*, American Scientific Publishers.

Balbuena, P. B. & Seminario, J. M. (2007). *Nanomaterials: Design and Simulation*, 1st ed., Elsevier.

Bichoutskaia, E. (2011). *Computational Nanoscience*, Royal Society of Chemistry

Boustani, I. (2020). *Molecular Modelling and Synthesis of Nanomaterials Applications in Carbon- and Boron-based Nanotechnology*, Springer

Sapalidis, A. (2020). *Membrane Desalination: From Nanoscale to Real World Applications*, 1st ed., CRC Press.

منابع مطالعاتی:

Journals such as Journal of Computational and Theoretical Nanoscience



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): شبیه‌سازی مقیاس اتمی برای مولکول‌ها و اتم‌ها

عنوان درس (انگلیسی): Atomic-Level Simulations of Materials and Molecules

نوع درس: اختیاری پیش‌نیاز / هم‌نیاز: دارد ■ ندارد □ پیش‌نیاز: شیمی کوانتومی ۱

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

- ارائه اطلاعات در زمینه پیش‌بینی ساختار و خواص مولکول‌ها و جامدات همراه با پیش‌بینی خواص دینامیکی با استفاده از مکانیک کوانتومی و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی
- بررسی ساختار، خواص و دینامیک در زمینه‌های متفاوت همچون سامانه‌های زیستی (پروتئین‌ها، DNA، کربوهیدرات‌ها و لیپیدها) پلیمرها (بلورها، سامانه‌های آمورف و کوپلیمرها)، نیمه‌رساناها (گروه IV, III-V، سطوح و نقوص)، سامانه‌های معدنی (سرامیک‌ها، ژئولیت‌ها، ابرساناها و فلزات)، مواد آلی-فلزی و کاتالیزورها (ناهمگن، همگن و الکتروکاتالیزورها)
- ارائه روش‌های پایه همراه با کاربردهای hands-on برای سامانه‌های موردنظر با استفاده از نرم‌افزارهای مدرن

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد:

کاربرد روش‌های محاسبات کامپیوتری در طراحی نانو مواد و پیش‌بینی خواص فیزیکی و شیمیایی آن‌ها

سرفصل درس:

- مفاهیم مهم در مدل‌سازی مولکولی
سیستم‌های مختصات، سطوح انرژی پتانسیل، تاریخچه مدل‌سازی مولکولی
- مقدمه‌ای بر مکانیک کوانتومی محاسباتی
اتم‌های تک الکترونی و چند الکترونی، مولکول‌ها، محاسبات اربیتال مولکولی، معادلات هارتری-فاک، مجموعه پایه‌ها، محاسبه خواص مولکولی از مکانیک کوانتومی ab initio، تقریب‌های نظریه‌های اربیتال مولکولی، نظریه هوکل، روش‌های نیمه تجربی و کارایی آنان
- امتیازات روش‌های ab initio، نظریه تابعی چگالی و مکانیک کوانتومی حالت جامد
سامانه‌های open-shell، همبستگی الکترونی، ملاحظات تجربی در انجام محاسبات ab initio، تحلیل جزء



• مدل‌های میدان نیروی تجربی: مکانیک مولکولی

جنبه‌های عمومی میدان‌های نیروی مکانیک مولکولی، کشش پیوند، خمش زاویه، جملات پیچشی، پیچش‌های نامتعارف و حرکت‌های خمشی خارج از صفحه، میدان‌های نیروی دسته ۱، ۲ و ۳، برهم‌کنش‌های غیر پیوندی، اثرات چندجسمی در پتانسیل‌های تجربی، پتانسیل جفتی مؤثر، پیوند هیدروژنی در مکانیک مولکولی، میدان‌های نیروی united atom، محاسبه خواص ترمودینامیکی با استفاده از میدان نیرو، پارامتری کردن میدان نیرو، قابلیت انتقال پارامترهای میدان نیرو، سامانه‌های غیرمستقر، میدان‌های نیرو در مولکول‌های معدنی، میدان‌های نیرو در جامدات، پتانسیل‌های نیمه تجربی در فلزات و نیمه‌هادی‌ها،

• حداقل‌سازی انرژی و روش‌های مرتبط برای جستجوی سطوح انرژی

روش‌های حداقل‌سازی غیر-مشتقی، روش‌های حداقل‌سازی مرتبه اول، روش‌های مشتق دوم مانند روش نیوتن رافسون، روش‌های شبه‌نیوتونی، انتخاب روش حداقل‌سازی مناسب، کاربرد حداقل‌سازی انرژی، دینامیت شبکه و استاتیک شبکه در سامانه‌های حالت جامد

• روش‌های شبیه‌سازی کامپیوتری

محاسبه خواص ترمودینامیک ساده، فضای فاز، جنبه‌های کاربردی و عملی شبیه‌سازی کامپیوتری، مرزها، دیده‌بانی تعادل، قطع پتانسیل و قرارداد حداقل‌تصویر، نیروهای بلندبرد، تحلیل نتایج شبیه‌سازی و تخمین خطاها

• روش‌های شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

دینامیک مولکولی با استفاده از مدل‌های ساده، دینامیک مولکولی با پتانسیل‌های پیوسته، آماده‌سازی و اجرای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، دینامیک مقید، خواص وابسته به زمان، وارد کردن اثر حلال به شبیه‌سازی دینامیک مولکولی: پتانسیل‌های نیروی میانگین و دینامیک اتفاقی، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی زنجیرهای آمفیفل، بقای انرژی در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

• شبیه‌سازی مونت کارلو

محاسبه خواص با استفاده از انتگرال‌گیری، پیش‌زمینه نظری روش متروپولیس، انجام روش مونت کارلو متروپولیس، مدل‌های استفاده‌شده در شبیه‌سازی مونت کارلوی پلیمرها، روش‌های مونت کارلوی Biased، مسئله Quasi-ergodicity، انسامبل‌های مختلف در شبیه‌سازی مونت کارلو، محاسبه پتانسیل شیمیایی، شبیه‌سازی تعادلات فازی توسط شبیه‌سازی مونت کارلوی انسامبل گیبس

• تحلیل کنفورماسیون

روش‌های سیستماتیک جستجوی فضای کنفورماسیونی، رویکردهای ساخت مدل، روش‌های جستجوی رندم، distance geometry، جستجوی فضای کنفورماسیونی با استفاده از روش‌های شبیه‌سازی، مقایسه



روش‌های مختلف جستجوی فضای کنفورماسیونی، تغییرات در روش‌های استاندارد، یافتن حداقل انرژی global، ارزیابی الگوریتم‌ها و simulated annealing، پایگاه داده ساختاری، برازش مولکولی، الگوریتم‌های کلاسترشدن و روش‌های تشخیص الگو، dimensionality reduction مجموعه داده‌ها، پوشش فضای کنفورماسیونی poling، مسأله بهینه‌سازی کلاسیکی، پیش‌بینی ساختارهای کلاسیکی

- **پیش‌بینی ساختار پروتئین، تحلیل توالی و پیچش پروتئین**

اصول پایه‌ای ساختار پروتئین، روش‌های first-principle برای پیش‌بینی ساختار پروتئین‌ها، معرفی مدل‌سازی مقایسه‌ای، sequence alignment، ساخت و ارزیابی یک مدل مقایسه‌ای، پیش‌بینی ساختارهای پروتئین توسط Threading، مقایسه مدل‌های پیش‌بینی ساختار پروتئین: CASP، folding و unfolding پروتئین

- **چهار چالش در مدل‌سازی مولکولی: انرژی آزاد، حلالیت، واکنش‌ها و نقص‌ها حالت جامد**

محاسبات انرژی آزاد، محاسبه تفاوت‌های انرژی آزاد، کاربردهای روش‌های محاسبه تفاوت‌های انرژی آزاد، محاسبه تفاوت‌های انتالپی و انتروپی، تقسیم‌بندی انرژی آزاد، pitfall‌های پتانسیل با محاسبات انرژی آزاد، پتانسیل‌های نیروی میانگین، روش‌های انرژی آزاد سریع و تقریب‌ها، نمایش‌های پیوسته حلال، سهم الکتروستاتیک بر انرژی آزاد حلال‌پوشی: مدل‌های انزاگر و بورن، سهم غیرالکتروستاتیک بر انرژی آزاد حلال‌پوشی، مدل‌های حلال‌پوشی بسیار ساده، مدل‌سازی واکنش‌های شیمیایی، مدل‌سازی نقوص حالت جامد

- **استفاده از مدل‌سازی مولکولی و شیمی انفورماتیک برای کشف و طراحی مولکول‌های جدید**

مدل‌سازی مولکولی در کشف دارو، نمایش‌های کامپیوتری مولکول‌ها، پایگاه‌های داده شیمیایی و جستجوی ریزساختار دوبعدی، جستجوی پایگاه‌های داده سه‌بعدی، منابع داده‌ها در پایگاه‌های داده سه‌بعدی، molecular docking، کاربردهای جستجوی پایگاه‌های داده سه‌بعدی و molecular docking، جستجوی شباهت و شباهت مولکولی، توصیف‌کننده‌های مولکولی، انتخاب مجموعه‌های گسترده‌ای از ترکیبات، ساختار بر پایه De Novo برای طراحی لیگاند، روابط فعالیت-ساختار کمی QSAR، حداقل مربعات جزئی، کتابخانه‌های combinatorial

روش یاددهی - یادگیری:

روش تدریس توضیحی



روش ارزیابی:

| پروژه | آزمون نهایی | میان ترم | ارزشیابی مستمر |
|-------|--------------|----------|----------------|
| - | نوشتاری: ۵۰٪ | ۲۰٪ | ۱۰٪ |
| | عملکردی: - | | ۲۰٪ تکالیف |

فهرست منابع:

Leach, A. R. *Molecular Modelling: Principles and Applications*, 2nd ed., Prentice Hall (2001).

Deak, P. Frauenheim, T. M. Pederson, R. (2005). *Computer Simulation of Materials at Atomic Level*, Wiley

R. Zhou, *Molecular Modeling at the Atomic Scale: Methods and Applications in Quantitative Biology*, CRC Press, Taylor & Francis Group (2015).

منابع مطالعاتی:

Scientific journals like *The Journal of Chemical Physics* (AIP), *Physical Review A* (American Physical Society), *Physical Review B* (American Physical Society), *Physical Review C* (American Physical Society), *Physical Review D* (American Physical Society), *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* (Elsevier)



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): مدل سازی محاسباتی سینتیک شیمیایی

عنوان درس (انگلیسی): Computational Modeling of Chemical Kinetics

نوع درس: اختیاری پیش نیاز / هم نیاز: دارد ■ ندارد □ پیش نیاز: شیمی کوانتومی ۱

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

کاربرد مدل سازی محاسباتی در تعیین سرعت و مکانیسم واکنش های شیمیایی

توانایی و شایستگی هایی که درس پرورش می دهد:

مدل سازی سینتیک واکنش های مختلف در فاز گازی و محلول

سرفصل درس:

- نظریه حالت گذار
- مروری بر پیشرفت های اخیر در نظریه -TST حالت گذار وردشی
- حالت گذار میکرو کانونیکال - کانونیکال
- بررسی کوانتومی TST
- مسیرهای تونلی - ضرایب انتقال
- شبیه سازی حالت گذار با روش های درون یابی
- شبیه سازی حالت گذار موضعی (روش های زینی - زنجیری - نیوتن رافسون و غیره)
- شبیه سازی سطوح پتانسیل (PES کانتورها - نیمرخ ها)
- سدهای پتانسیل تدریجی و ناگهانی
- مطالعه حالت گذار در واکنش های آلی
- مدل سازی محاسباتی سینتیک واکنش ها در فاز گازی (روش های آغازین و تابعی دانسیته)
- واکنش های هماهنگ همزمان و غیر همزمان - اندیس های ویرگ
- مدل سازی محاسباتی سینتیک واکنش ها در فاز محلول
- اثرات قطبیت - پتانسیل های الکتروستاتیک - شبیه سازی حالت گذار یونی
- مدل سازی محاسباتی سینتیک واکنش ها در سطح جامد (نانولوله ها)



- مدل سازی محاسباتی سامانه های زیستی (حالات گذار - مطالعه انواع پیوند هیدروژنی)
- روش های تلفیقی QM/MM
- کارگاه مدل سازی ۱- بهینه سازی ساختار
- کارگاه مدل سازی ۲- محاسبات ترموشیمی
- کارگاه مدل سازی ۳- محاسبات قدرت اسیدی و بازی در محلول
- کارگاه مدل سازی ۴- تعیین ساختار حالت گذار گازی
- کارگاه مدل سازی ۵- تعیین ساختار حالت گذار در محلول
- چند نمونه مطالعه موردی

روش یاددهی - یادگیری:

روش تدریس توضیحی سمینار دانشجویی

روش ارزیابی:

| ارزشیابی مستمر | میان ترم | آزمون نهایی | پروژه |
|----------------|----------|--------------|-------|
| ۱۰٪ | ۲۰٪ | نوشتاری: ۵۰٪ | - |
| ۲۰٪ تکالیف | | عملکردی: - | |

فهرست منابع:

Solomon, E. I.; Scott, R. A. & King, R. B. (2010). *Computational Inorganic and Bioinorganic Chemistry*, Wiley.

Leszczynski, J. (2010). *Kinetics and Dynamics from Nano-to Bio-Scale*, Springer.

Soroush, M. (2018). *Computational Quantum Chemistry: Insights into Polymerization Reactions*, Elsevier.

Carr, R. W. (2018). *Modeling of Chemical Reactions: Comprehensive Chemical Kinetics*, Elsevier Science.

ایزدیار، محمد و بزرگمهر، محمدرضا (۱۳۹۷). سینتیک شیمیایی-مبانی و کاربردها، انتشارات دانشگاه آزاد اسلامی مشهد.



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): شیمی کوانتومی ۲

عنوان درس (انگلیسی): Quantum Chemistry 2

نوع درس: اختیاری پیش نیاز / هم نیاز: دارد ■ ندارد □ پیش نیاز: شیمی کوانتومی ۱

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

آشنایی و تسلط در زمینه مکانیک کوانتومی و کاربرد آن در شیمی کوانتومی

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد:

توانایی استفاده از روش‌های شیمی کوانتومی در بررسی خواص و پدیده‌های مولکولی

سرفصل درس:

- خواص فرمیون، بوزون و تراکم بوز-انیشتمین از دیدگاه کوانتومی
- میدان خودسازگار هارتری، نظریه HF و بررسی آنها
- بررسی یون مولکول هیدروژن، مولکول هیدروژن و مولکول‌های دو اتمی
- نظریه پیوند ظرفیت و اربیتال مولکولی، مدل‌های اصلاح شده آنها و مقایسه آنها
- محاسبه چگالی احتمال الکترون و بررسی عدد اشغال در سامانه‌های کوانتومی
- قضایای کوانتومی: ویریا، الکتروستاتیک، هلمن-فاینمن
- بررسی مختصر نظریه تابعی چگالی و کاربردهای آن در شیمی

روش یاددهی - یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

| ارزیابی مستمر | میان ترم | آزمون نهایی | پروژه |
|---------------|----------|--------------|-------|
| ۱۰٪ | ۲۰٪ | نوشتاری: ۵۰٪ | - |
| ۲۰٪ تکالیف | | عملکردی: - | |



فهرست منابع:

Szabo, A. & Ostlund, N. S. (2000). *Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*, Mc-Graw Hill.

Atkins, P. W. & Friedman, R. S. (2005). *Molecular Quantum Mechanics*, 4th ed., Oxford University Press.

Zettili, N. (2009). *Quantum Mechanics: Concepts and Applications*, 2nd ed., John-Wiely.

Levine, I. N. (2014). *Quantum Chemistry*, 7th ed., Prentice Hall, London.



مشخصات درس:

| | | | |
|--|--------------------------------|--|------------------|
| عنوان درس (فارسی): شیمی محاسباتی | | | |
| عنوان درس (انگلیسی): Computational Chemistry | | | |
| پیش نیاز: شیمی کوانتومی ۱ | <input type="checkbox"/> ندارد | <input checked="" type="checkbox"/> دارد / هم نیاز: دارد | نوع درس: اختیاری |
| تعداد واحد: ۳ | نوع واحد: نظری | تعداد ساعت: ۴۸ | |

اهداف درس:

| |
|---|
| بررسی روش های شیمی محاسباتی در مطالعه ساختار و خواص سامانه های اتمی و مولکولی |
|---|

توانایی و شایستگی هایی که درس پرورش می دهد:

| |
|-----------------------|
| تسلط بر شیمی محاسباتی |
|-----------------------|

سرفصل درس:

| |
|--|
| <ul style="list-style-type: none">• مقدمه تعریف محاسباتی و تفاوت آن با شیمی نظری و مدل سازی، کمیت های قابل محاسبه، برآورد هزینه و کارایی در محاسبات شیمیایی• مکانیک مولکولی اصول، توابع انرژی پتانسیل، میدان نیرو، بهینه سازی ساختاری• شبیه سازی مجموعه مولکولی فضای فازی و گذرگاه ها، دینامیک مولکولی، مونت کارلو• نظریه اربیتال مولکولی بررسی توابع موج در شیمی کوانتومی، توابع آزمون، نظریه هوکل، توابع موج چند الکترونی• محاسبات نیمه تجربی نظریه هوکل توسعه یافته، NDDO, CNDO, INDO• روش های آغازین مجموعه های پایه، نظریه HF، کاربرد آن در محاسبه انرژی، توزیع بار و شکل هندسی• روش های همبستگی الکترونی نظریه SCF, CI, CCT و نظریه اختلال و DFT |
|--|



روش کان-شام، توابع همبستگی-تبادلی، محاسن و معایب

• توزیع بار و خواص طیفی

گشتاور چندقطبی الکترونی، پتانسیل الکتروستاتیک مولکولی، بارهای اتمی جزئی، اسپین، قطبش، طیف‌های چرخش-ارتعاش و NMR

• نرم‌افزارها و سخت‌افزارهای محاسباتی (گوسین و غیره) و تعریف یک پروژه محاسباتی

روش یاددهی - یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

| پروژه | آزمون نهایی | میان‌ترم | ارزشیابی مستمر |
|-------|--------------|----------|----------------|
| - | نوشتاری: ۵۰٪ | ۲۰٪ | ۱۰٪ |
| | عملکردی: - | | ۲۰٪ تکالیف |

فهرست منابع:

Cramer, C. J. (2004). *Essentials of Computational Chemistry Theories and Models*, 2nd ed., Wiley

Leszczynski, J. (2010). *Recent Progress in Coupled Cluster Methods Theory and Applications*, Springer.

Young, D. (2012). *Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real World Problems*, Wiley.

Lewars, E. G. (2016). *Computational Chemistry Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics*, Springer.



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): شیمی و فیزیک نانو ساختارها

عنوان درس (انگلیسی): Physics and Chemistry of Nanostructures

نوع درس: اختیاری پیش نیاز / هم نیاز: دارد ندارد پیش نیاز: -

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

درک صحیح از اصول فناوری نانو، ابزارها و تجهیزات تولید نانو مواد و خواص نانو مواد

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد

انجام کارهای آزمایشگاهی در ارتباط با تهیه و خواص مواد نانو (نوری، مغناطیسی و الکترونی)

سرفصل درس:

• اصول فناوری نانو

تاریخچه مختصر فناوری نانو در دنیا و ایران، بازار فناوری نانو در دنیا و ایران، واژه‌نامه (نانو فناوری، نانو مواد، خود مونتاژ مولکولی، نانوبلورها، نانوحباب‌ها، نانوسیم‌ها، نقاط کوانتومی)، خواص منحصر به فرد مواد در مقیاس نانو، روش‌های کلی تهیه نانو مواد (بالا به پایین و پایین به بالا)، معرفی برخی از کاربردها

• مروری مختصر در زمینه شیمی سطح

کشش سطحی و روش‌های اندازه‌گیری آن، زاویه تماس و روش‌های اندازه‌گیری آن، پدیده ترشوندگی، سطوح ابر آب‌دوست و ابر آب‌گریز، طبقه‌بندی مواد فعال سطحی، کنترل کشش سطحی (سورفکتانت‌ها، Electrowetting, Hydrophilization)، ترمودینامیک سطح

• مروری در سامانه‌های کلوئیدی

نظریه DLVO، پایداری سامانه‌های کلوئیدی (پایداری الکترواستاتیک و پایداری فضایی)، لایه دوگانه الکتریکی، روش‌های بررسی پایداری سامانه‌های کلوئیدی (پتانسیل زتا، پراکندگی نور چندگانه همراه با اسکن عمودی (Turbiscan)، طیف‌سنجی فرابنفش-مرئی)، خواص کلوئیدها (پخش نور، جذب سطحی، جذب و غیره)، تأثیر شکل و اندازه ذرات در خواص، توزیع اندازه ذرات در سامانه‌های کلوئیدی معلق، اندازه‌گیری میانگین اندازه ذرات با روش‌های مختلف نظیر پراکندگی دپلری لیزری (Doppler Laser Scattering)، پراش لیزر و غیره، اندازه‌گیری مساحت سطح (BET isotherm)، انواع هم‌دمای جذب-

سطحی آیوپاک، آنالیز ساختار منافذ، رئولوژی سامانه‌های کلوئیدی



• برخی از روش‌های مهم مشخصه‌یابی نانو مواد

میکروسکوپ الکترونی‌های الکترونی شامل میکروسکوپ الکترونی روبشی، میکروسکوپ الکترونی روبشی، میکروسکوپ الکترونی عبوری با قدرت تفکیک بالا و میکروسکوپ الکترونی عبوری، میکروسکوپ الکترونی شامل میکروسکوپ تونلی روبشی و میکروسکوپ نیروی اتمی، پراش پرتو ایکس، فلورسانس پرتو ایکس، طیف‌سنجی فوتوالکترون پرتو ایکس، طیف‌سنجی الکترون اژه

• روش‌های تهیه مواد نانو ساختار

با استفاده از امواج مایکروویو و امواج فراصوت، آسیاب کاری (Ball milling)، سل-ژل، میکروامولسیون، روش‌های الکتروشیمیایی

روش یاددهی - یادگیری:

روش توضیحی همراه با بازدید از آزمایشگاه برای آشناسدن با دستگاه‌های مشخصه‌یابی مواد

روش ارزیابی:

| ارزشیابی مستمر | میان‌ترم | آزمون نهایی | پروژه |
|----------------|----------|--------------|-------|
| ۱۰٪ | ۲۰٪ | نوشتاری: ۵۰٪ | - |
| ۲۰٪ تکالیف | | عملکردی: - | |

فهرست منابع:

Warren, B. E (2003). *X-Ray Diffraction*, Dover Publications Inc.

Yang, S. & Sheng, P. (2005). *Physics and Chemistry of Nano-structured Materials*, Taylor and Francis.

Kirkland, A. J. & Hutchison, L. (2007). *Nanocharacterization*, RSC Publishing, Oxford, UK

Amelinckx, S. van Dyck, D. van Landuyt, J. & van Tendeloo, G. (2008). *Electron Microscopy: Principles and Fundamentals*, Wiley

Birdi, K. S. (2010). *Surface and Colloid Chemistry: Principles and Applications*, Taylor and Francis.

L. Filippini, D. Sutherland, (2012). *Nanotechnologies: Principles, Applications, Implications and Hands-on Activities*, European Union.

منابع مطالعاتی:

Scientific journals like *Advanced Materials*, *Advanced Energy Materials*, *Nature Nanotechnology*



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): شیمی فیزیک پروتئین‌ها

عنوان درس (انگلیسی): Physical Chemistry of Proteins

نوع درس: اختیاری پیش‌نیاز / هم‌نیاز: دارد ندارد پیش‌نیاز: -

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

- شناخت مسیر تاخوردگی پروتئین‌ها از حالت باز شده به حالت طبیعی (تاخورده)
- شناخت حدواسط ایجاد شده در مسیر تاخوردگی و ارتباط بین ساختار و عملکرد پروتئین‌ها

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد

- تعیین ارتباط ساختار و عمل زیستی
- تشخیص عوامل تأثیرگذار بر تاخوردن پروتئین
- چگونگی پیش‌بینی تاخوردگی پروتئین

سرفصل درس:

- نگرش فیزیکی بر تاخوردگی پروتئین و مراحل آن
- نقش حدواسط‌ها در تاخوردگی پروتئین و نقش مولتن گلوبول در تاخوردگی پروتئین
- نقش پیوند دی سولفیدی در تاخوردگی پروتئین
- نقش گرما در تاخوردگی
- نقش قدرت یونی، pH، حلال و دیگر عوامل در تاخوردگی پروتئین
- نگرش سینتیکی در تاخوردگی پروتئین
- نقش حالات گوناگون بنای فضایی در تاخوردگی پروتئین
- پیشگویی تاخوردگی پروتئین
- ارتباط عملکرد با ساختار پروتئین
- اجتماع دون واحدها در ساختار پروتئین



روش یاددهی - یادگیری

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

| پروژه | آزمون نهایی | میان ترم | ارزشیابی مستمر |
|-------|--------------|----------|----------------|
| - | نوشتاری: ۴۰٪ | - | ۲۰٪ |
| | عملکردی: - | | ۴۰٪ تکالیف |

فهرست منابع:

Munoz, V. (2008). *Protein Folding, Misfolding and Aggregation*, RSC.

Creighton, T. E. (2010). *The Biophysical Chemistry of Nucleic Acids & Proteins*, Helvetian Press.

Fabian, H. & Naumann, D. (2012). *Protein Folding and Misfolding*, Springer.

موسوی موحدی، علی اکبر؛ خان چمنی، جمشید؛ تقوی، امیرحسین و مقدم نیا سیدحسن (۱۳۸۳). پروتئین، ساختار و عملکرد، موسسه چاپ و انتشارات دانشگاه تهران.



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): شیمی فیزیک پلیمرها

عنوان درس (انگلیسی): Physical Chemistry of Polymers

نوع درس: اختیاری پیش نیاز / هم نیاز: دارد ندارد پیش نیاز: -

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

آشنایی و تسلط بر اصول شیمی فیزیک پلیمرها

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد

درک شیمی فیزیک پلیمرها

سرفصل درس:

- مقدمه
خواص فیزیکی پلیمرها، ساختمان شیمیایی پلیمرها، انواع پیوندها.
- انعطاف پذیری زنجیرهای پلیمری
ایزومری چرخشی، کنفیگوراسیون و کنفورماسیون مولکول‌ها، ابعاد مارپیچ‌های درشت‌مولکولی، ترمودینامیک انعطاف‌پذیری یک زنجیر، سینتیک انعطاف‌پذیری یک زنجیر.
- محلول‌های واقعی پلیمرها
خواص ویژه محلول‌های واقعی پلیمرها، حلالیت و تورم پلیمرها، عوامل مؤثر بر حلالیت و تورم پلیمرها، کاربرد قانون فازها در مورد محلول‌های پلیمری، خواص سینتیکی محلول‌های پلیمری، اثر متقابل پلیمرها بر حلال.
- نظریه‌های محلول‌های پلیمری
نظریه فلوری-هاگینز، نظریه مونی، نظریه جدید فلوری.
- روش‌های اندازه‌گیری وزن مولکولی پلیمرها
- ترمودینامیک محلول‌های پلیمری
کمیت‌های جزء مولی، محلول‌های ایده‌آل، فشار اسمزی، انتروپی اختلاط، ترمودینامیک محلول و ساختار پلیمر، تأثیر گرما، انرژی داخلی فرایند اختلاط.

پایه‌های پلیمرها



نفوذپذیری گازها، روش تعیین نفوذپذیری، جذب بخار توسط پلیمرها، محاسبه سطح ویژه جذب.

• حالت‌های فیزیکی و ساختاری پلیمرها

حالت‌های فیزیکی و فازی مواد، تبلور، انتقال شیشه‌ای، حالت‌های ویژه پلیمرهای آرایش یافته، قابلیت متبلور شدن، ترمودینامیک ذوب و تبلور پلیمرها، پلیمرهای آمورف.

روش یاددهی - یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

| ارزشیابی مستمر | میان‌ترم | آزمون نهایی | پروژه |
|----------------|----------|--------------|-------|
| ٪۱۰ | ٪۲۰ | نوشتاری: ٪۵۰ | - |
| ٪۲۰ تکالیف | | عملکردی: - | |

فهرست منابع:

Cowie, J. M. G. & Arrighi, V. (2009). *Polymers: Chemistry and Physics of Modern Materials*, 3rd ed., Chapman and Hall.

Seiffert, S. (2020). *Physical Chemistry of Polymers*, De Gruyter.

محمدی، ناصر (۱۳۸۹). شیمی فیزیک پلیمرها، انتشارات دانشگاه صنعتی امیرکبیر.

جعفری، سیدحسن؛ سیفی، جواد و بنکدار حسین علی (۱۳۹۲). مبانی شیمی فیزیک پلیمرها، پژوهشگاه پلیمر و پتروشیمی ایران.

میرمحمد صادقی، گیتی و کشکولی، یاسر (۱۳۹۸). فیزیک پلیمرها، دانشگاه صنعتی امیرکبیر.

منابع مطالعاتی:

Scientific journals like *Polemer* (Elsevier), *European Polymer Journal* (Elsevier)



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): اصول، ساختارها و کاربردهای نانوفوتوکاتالیزورها

عنوان درس (انگلیسی): Fundamentals, Structures, and Applications of

Nanophotocatalysts

نوع درس: اختیاری پیش‌نیاز / هم‌نیاز: دارد ندارد پیش‌نیاز: -

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

آشنایی با ساختارها، طراحی و کاربردهای نانوفوتوکاتالیزورها

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد:

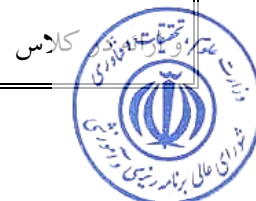
تجزیه و تحلیل مسائل مربوط به نانوذرات با کاربرد فوتوکاتالیزوری

سرفصل درس:

- مکانیسم فرایند فوتوکاتالیزوری نانو مواد
- بررسی متغیرهای تأثیرگذار بر فرایند فوتوکاتالیزوری
- طراحی فوتوکاتالیزورهای مناسب از طریق مهندسی شکاف انرژی
- اصلاح فوتوکاتالیزورها به روش‌های مختلف
- فوتوکاتالیزورهای فعال به نور مرئی
- نهش نانوفیلم‌های مختلف روی بستر
- تأثیر نوع بستر روی فرایند فوتوکاتالیزوری
- غیرفعال کردن میکروارگانیزم‌ها توسط نانوفوتوکاتالیزورها
- نقش نانوفوتوکاتالیزورها در شکافت آب و کاهش کربن دی‌اکسید
- نقش نانوفوتوکاتالیزورها در تبدیل انرژی خورشیدی و حفاظت از محیط زیست

روش یاددهی - یادگیری:

پرسش و پاسخ در حین ارائه درس - بحث گروهی - انتخاب پروژه مطالعاتی در ارتباط با درس بر اساس مقالات جدید



روش ارزیابی:

| پروژه | آزمون نهایی | میان ترم | ارزشیابی مستمر |
|-------|----------------------------|----------|----------------|
| - | نوشتاری: ۴۰٪ عملکردی: - | ۳۰٪ | ۳۰٪ تکالیف |

فهرست منابع:

Lu, M. & Pichat, P. (2013). *Photocatalysis and Water Purification: From Fundamentals to Recent Applications*, Wiley.

Hernandez-Ramirez, A. & Medina-Ramirez, I. (2014). *Photocatalytic Semiconductors: Synthesis, Characterization, and Environmental Application*, Springer.

Ghosh, S. (2018). *Visible-Light-Active Photocatalysis: Nanostructured Catalyst Design, Mechanisms, and Applications*, Wiley.

Rajendran, S., Naushad, M., Cornejo Ponce, L., Lichtfouse, E. (2020). *Green Photocatalysts for Energy and Environmental Process*, Springer.

منابع مطالعاتی:

Scientific journals like *ACS Nano* (American Chemical Society), *Journal of Photochemistry and Photobiology A* (Elsevier), *Journal of Photochemistry and Photobiology B* (Elsevier), *Journal of Photochemistry and Photobiology C* (Elsevier),



مشخصات درس:

| | | |
|---------------------------------|---|----------------|
| عنوان درس (فارسی): زیست حسگرها | | |
| عنوان درس (انگلیسی): Biosensors | | |
| نوع درس: اختیاری | پیش نیاز / هم نیاز: دارد <input type="checkbox"/> ندارد <input checked="" type="checkbox"/> | پیش نیاز: - |
| تعداد واحد: ۳ | نوع واحد: نظری | تعداد ساعت: ۴۸ |

اهداف درس:

- آشنایی با مبانی احساس شیمیایی در موجودات زنده و نحوه مشابه سازی به گونه ای که منجر به ساخت زیست حسگر شود.
- شناخت انواع مبدل های فیزیکی که بتوانند عملکرد اختصاصی گیرنده های زیستی را به سیگنال الکتریکی قابل اندازه گیری تبدیل کنند.
- یادگیری فنون ساخت و کاربردهای زیست حسگرها در زمینه های مختلف از جمله در تشخیص های پزشکی، آنالیز نمونه های صنعتی، اتوماسیون فرایندها، کنترل های زیست محیطی و کاربردهای نظامی

توانایی و شایستگی هایی که درس پرورش می دهد:

- شناخت انواع مبدل های فیزیکی
- یادگیری فنون ساخت زیست حسگرها

سرفصل درس:

- کلیات
 - تعریف، اساس کار و دسته بندی
 - احساس شیمیایی - انتقال پیام شیمیایی در موجودات زنده
 - طراحی زیست حسگرها به تقلید از موجودات زنده
- کاربردها
 - کاربرد زیست حسگرها در شرایط In vivo
 - کاربرد تشخیص پزشکی
 - آنالیزهای صنعتی اتوماسیون فرایندها
 - کنترل زیست محیطی



- کاربردهای نظامی

• مثال‌ها

- زیست حسگر قند خون، آشکارسازهای عوامل شیمیایی، زیست حسگر آشکارساز ویروس‌ها

• عناصر زیستی

- آنزیم‌ها، آنتی‌بادی‌ها، اسیدهای نوکلئیک و گیرنده‌ها

- بافت‌های گیاهی یا جانوری، ریزاندامگان، اجزای سلولی (میتوکندری)

• تثبیت اجزای زیستی (فنون ساخت زیست حسگرها)

- روش‌های فیزیکی جذب، سینتیک جذب (هم‌دمای لانگمیر)، ریزپوشینه‌سازی، محبوس‌سازی

- روش‌های شیمیایی، پیوندهای عرضی، پیوندهای کووالانسی، انواع بسترهای مناسب برای تثبیت شیمیایی،

گروه‌های عاملی آزاد آنزیم‌ها، واکنش شیمیایی و تثبیت مواد زیستی

- روش‌های اصلاح الکترودها، الکترودهای غیر کربنی، پلیمر الکترودها، الکترودهای یک‌بار مصرف

• مبدل‌های فیزیکی

- مبدل‌های الکتروشیمیایی

الف - روش‌های پتانسیومتری، اساس کار، الکترودهای مرجع، معادله نرنست، الکترودهای یون‌گزین (غشاء

شیشه، غشاء حالت جامد، غشاء حساس به گاز)

ب- روش‌های ولتامتری، ولتامتری روش خطی، ولتامتری چرخه‌ای و آمپرومتری

ج- روش‌های رسانایی، اساس رسانایی در محلول‌ها و واکنش‌های بیولوژیک

د- ترانزیستورهای اثر میدان - CHEMFET, ISFET, ENFET

• مبدل‌های نوری

الف- عوامل جذب و نشر در برهم‌کنش‌های آنزیمی

ب- روش‌های طیف‌سنجی جذبی فرابنفش-مرئی، نشر فلورسانس و بیولومینسانس

ج- تازه‌های نوری اصول کار و طرز ساخت Fiber optic biosensors

د- تشدید پلاسمون سطحی

- مبدل‌های پیزوالکتریک - QCM, EQCM, BAW, SAW

- مبدل‌های گرمایی، ترمیستور و زیست حسگرهای گرمایی

• عوامل مؤثر بر عملکرد زیست حسگرها

- گزینش، منشاء گزینش در مولکول‌های زیستی

گستره خطی، حد آشکارسازی، تعیین غلظت نمونه مجهول



- تکرارپذیری و قابلیت اعتماد
- زمان پاسخ و عوامل مؤثر بر سرعت عمل زیست حسگر
- طول عمر - پایداری در طول عملیات، پایداری در زمان نگهداری

روش یاددهی - یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

| پروژه | آزمون نهایی | میان ترم | ارزشیابی مستمر |
|-------|--------------|----------|----------------|
| - | نوشتاری: ۴۰٪ | - | ۳۰٪ |
| | عملکردی: - | | ۳۰٪ تکالیف |

فهرست منابع:

Cooper, J. & Cass, T. (2004). *Biosensors*, Oxford University Press

J. L. Nianqiang Wu,

Jun, Li, & Nianqiang, Wu (2014). *Biosensors Based on Nanomaterials and Nanodevices*, CRC Press.

اگینس، برایان (۱۳۸۰). *دیباچه‌ای بر زیست حسگرها*، ترجمه هدایت الله قرچیان، انتشارات دانشگاه تهران.



مشخصات درس:

| | | | |
|--|---|---|-------------|
| عنوان درس (فارسی): نانو کاتالیزورها | | | |
| عنوان درس (انگلیسی): Nanocatalysts | | | |
| نوع درس: اختیاری | پیش نیاز / هم نیاز: دارد <input type="checkbox"/> | ندارد <input checked="" type="checkbox"/> | پیش نیاز: - |
| تعداد واحد: ۳ | نوع واحد: نظری | تعداد ساعت: ۴۸ | |

اهداف درس:

- بررسی حساسیت ساختاری در واکنش های کاتالیزوری ناهمگن
- آشنایی با روش های ساخت کاتالیزورهای نانو ساختاری

توانایی و شایستگی هایی که درس پرورش می دهد

- درک واکنش های سطحی ناهمگن
- آشنایی با روش سنتز کاتالیزورها و نانو کاتالیزورهای جامد
- آشنایی با روش های ارزیابی خصوصیات شیمی فیزیکی کاتالیزورهای جامد

سرفصل درس:

- واکنش ها بر روی سطح جامدات،
- ساختار بلوری جامدات، انواع سطوح و ساختار آن ها از دید مولکولی
- روش های بررسی خصوصیات سطحی جامدات به روش های جذب و دفع دمایی،
- طیف سنجی و تصویربرداری الکترونی
- انواع کاتالیزورهای ناهمگن (پایه دار و توده ای)
- روش های متداول در ساخت کاتالیزورهای نانو ساختاری
- تأثیر نانو ابعاد بر واکنش های کاتالیزوری و روش های بررسی آن ها
- بررسی حساسیت ساختاری در واکنش های کاتالیزوری
- تأثیر ابعاد فاز فعال بر سرعت واکنش های کاتالیزوری
- بررسی مداخلات پایه با فاز فعال در نانو کاتالیزورهای پایه دار
- روش های لیتوگرافی در نانو کاتالیزورها، نانو کاتالیزورهای چندعاملی
- نانو فوتو کاتالیزورها

نانو ابعاد در فرایندهای غیرفعال شدن کاتالیزورها،



- جنبه‌های شیمی فیزیکی در کاربرد نانو کاتالیزورها
- شبیه‌سازی واکنش‌های نانو کاتالیزوری بین سطحی.

روش یاددهی - یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

| پروژه | آزمون نهایی | میان ترم | ارزشیابی مستمر |
|-------|--------------|----------|----------------|
| - | نوشتاری: ۵۰٪ | ۲۰٪ | ۱۰٪ |
| | عملکردی: - | | ۲۰٪ تکالیف |

فهرست منابع:

Chorkendorff, I. & Niemantsverdriet, J. W. (2003). *Concepts of modern catalysis and kinetics*, 1st ed., Wiley.

Heiz, U. & Landman, U. (2006). *Nanocatalysis*, Springer.

Niemantsverdriet, J. W. (2007). *Spectroscopy in Catalysis: An Introduction*, 3rd ed., Wiley.

Corain, B., Schmid, G. & Toshima, N (2008). *Metal Nanoclusters in Catalysis and Materials Science: The Issue of Size Control*, 1st ed., Elsevier.

Zecchina, A., Bordiga, S. & Groppo, E. (2011). *Selective Nanocatalysts and Nanoscience: Concepts for Heterogeneous and Homogeneous Catalysis*, 1st ed., Wiley.

Polshettiwar, V. & Asefa, T. (2013). *Nanocatalysis: Synthesis and Applications*, Wiley.



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): شیمی انرژی‌های تجدیدپذیر

عنوان درس (انگلیسی): Chemistry of Renewable Energies

نوع درس: اختیاری پیش‌نیاز/ هم‌نیاز: دارد ندارد پیش‌نیاز: -

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

- آشنایی و توسعه راه‌حل‌های جدید برای تولید برق و سوخت با استفاده از انرژی‌های تجدیدپذیر و ذخیره انرژی
- آشنایی با عوامل مرتبط با فرایندهای انرژی تجدیدپذیر مانند تأثیرات زیست‌محیطی، اقتصادی و اجتماعی

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد:

توانایی انجام تحقیقات در دانشگاه یا تحقیق و توسعه در صنعت

سرفصل درس:

- سوخت‌های فسیلی
استخراج سوخت‌های فسیلی، پالایش، جذب و ذخیره کربن، گرم شدن کره زمین، انرژی جایگزین و جذب کربن دی‌اکسید
- انرژی
انرژی، فناوری و پایداری، انواع انرژی‌های تجدیدپذیر نظیر انرژی باد، انرژی جزر و مدی، انرژی خورشید و غیره
- تولید هیدروژن
تولید هیدروژن، انتقال هیدروژن، ذخیره هیدروژن، تولید زیستی هیدروژن، شکافت آب
- سلول‌های سوختی
معرفی، ترمودینامیک و سلول‌های سوختی، بازده و سلول‌های سوختی، ساختار و عملکرد سلول سوختی، انواع سلول‌های سوختی، الکتروکاتالیزورهای سلول سوختی، سلول‌های سوختی با غشای پلیمری؛ ساختار و عملکرد، سلول‌های سوخت اکسید جامد، سلول‌های سوختی میکروبی، کاربردهای سلول‌های سوختی
- فتوولتائیک خورشیدی



معرفی، مبانی PV خورشیدی، تکامل فوتوولتائیک، نسل اول سلول‌های خورشیدی، نسل دوم سلول‌های خورشیدی، نسل سوم سلول‌های خورشیدی، سلول‌های خورشیدی بر پایه پروسکایت هالید آلی-معدنی، ساختار سلول خورشیدی پروسکایت، تهیه سلول خورشیدی پروسکایت، عملکرد سلول‌های خورشیدی پروسکایت

• زیست توده (Biomass)

معرفی، ترکیب شیمیایی زیست توده، گزینه‌های واکنش پذیری و تبدیل، شروع زیست توده: برداشت و پردازش، فرایندهای ترموشیمیایی، فرایندهای بیوشیمیایی

روش یاددهی - یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

| ارزشیابی مستمر | میان نترم | آزمون نهایی | پروژه |
|----------------|-----------|--------------|-------|
| ٪۱۰ | ٪۲۰ | نوشتاری: ٪۵۰ | - |
| ٪۲۰ تکالیف | | عملکردی: - | |

فهرست منابع:

M. Kaltschmitt, Streicher, W. Wiese, A. (2007), *Renewable Energy: Technology, Economics, and Environment*, Springer.

Letcher, T. (2008). *Future Energy: Improved, Sustainable, and Clean Options for our Planet*, Elsevier

Li, X. (2011). *Green Energy: Basic Concepts and Fundamentals*, Springer.

Carpenter, N. E. (2014). *Chemistry of Sustainable Energy*, Chapman and Hall/CRC

منابع مطالعاتی:

Scientific journals like *Renewable Energy* (Elsevier), *Renewable & Sustainable Energy Reviews* (Elsevier), *Advanced Energy Materials* (Wiley).



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): مکانیک آماری وابسته به زمان

عنوان درس (انگلیسی): **Time-Dependent Statistical Mechanics**

نوع درس: اختیاری پیش نیاز / هم نیاز: دارد ■ ندارد □ پیش نیاز: ترمودینامیک آماری ۱

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

آشنایی با مکانیک آماری سامانه‌هایی که در تعادل به دلیل افت و خیزهای خود به خود یا اعمال میدان‌های خارجی نیستند.

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد:

توانایی پیش‌گویی خواص انتقالی سامانه‌های مختلف

سرفصل درس:

- فضای فاز و معادله لیوویل
- توابع همبستگی زمان تعادلی (Time Correlation Functions, TCFs)
- مدل‌های ساده TCF
- توابع پاسخ، نظریه پاسخ خطی و ضرایب انتقالی شامل ضرایب نفوذ
- ویسکوزیته و رسانش گرمایی
- روابط متقابل Onsager
- عملگرهای Projection
- معادلات تعمیم‌یافته حرکت
- معادله Fokker-Planck
- معادله Langevin و معادله Langevin تعمیم‌یافته
- معادلات Navier-Stokes
- دینامیک واکنش شیمیایی
- معادله کرامرز (Kramers equation)

نظریه‌های افت و خیز



- قضیه افت و خیز-اتلاف (Fluctuation-Dissipation Theorem)
- روابط کاری غیر تعادلی
- انتگرال مسیر در مطالعه فرایندهای تصادفی

روش یاددهی - یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

| پروژه | آزمون نهایی | میان ترم | ارزشیابی مستمر |
|-------|--------------|----------|----------------|
| - | نوشتاری: ۵۰٪ | ۲۰٪ | ۱۰٪ |
| | عملکردی: - | | ۲۰٪ تکالیف |

فهرست منابع:

Lebon, G. & Jou, D. (2008). *Understanding Non-equilibrium Thermodynamics: Foundations, Applications, Frontiers*, Springer-Verlag.

Berne, B. J. (2014). *Statistical Mechanics: Part B: Time-Dependent Processes*, Springer.

Livi, R. & Politi, P. (2017). *Nonequilibrium Statistical Mechanics: A Modern Perspective*, Cambridge University Press

منابع مطالعاتی:

Scientific journals like *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* (Elsevier), *Journal of Statistical Physics* (Springer).



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): پدیده‌های بین‌سطحی در شیمی

عنوان درس (انگلیسی): Interfacial Phenomena in Chemistry

نوع درس: اختیاری پیش‌نیاز / هم‌نیاز: دارد ندارد پیش‌نیاز: -

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

- کسب بینش در زمینه پدیده‌های بین‌سطحی و سامانه‌های کلوییدی
- آشنایی با طیف گسترده‌ای از زمینه‌های کاربردی شیمیایی، دارویی، متالورژی، زیست‌فناوری، نانو فناوری و الکترونیک و غیره

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد

- توسعه دانش در مورد پدیده‌های سطحی برای حل مشکلات عملی مهندسی شیمی
- درک نیروهای مختلف درگیر در پدیده‌های سطحی
- درک اهمیت سورفاکتانت‌ها در پدیده‌های سطحی

سرفصل درس

- بررسی خواص بین‌سطحی مایع-گاز
- مروری بر روش‌های تجربی اندازه‌گیری
- عوامل مؤثر بر کشش سطحی
- کشش سطحی و محلول‌های دو جزئی
- لایه‌های نازک روی سطوح مایعات زاویه تماس و ترشوندگی
- پخش مایع روی مایع و بررسی ضریب پخش
- کشش بین‌سطحی مایع-مایع
- بررسی ترمودینامیکی مایع-مایع و ضریب پخش
- فصل مشترک جامد-مایع
- زاویه تماس و ترشوندگی
- بررسی ترمودینامیکی زاویه تماس

انرژی‌گیری زاویه تماس و جنبه‌های کاربردی آن



- مکانیسم پاک‌کنندگی سطوح جامد
- بررسی کلی ترمودینامیک فصل مشترک فازها
- جذب‌های فیزیکی و شیمیایی
- مدل‌های جذبی
- سطوح باردار و منشاء بارهای سطحی
- مواد فعال سطحی
- خود تجمعی مواد فعال سطحی
- موازنه آبدوستی و آبگریزی مواد فعال سطحی
- امولسیون‌ها و میکروامولسیون‌ها

روش یاددهی - یادگیری

پرسش و پاسخ در حین ارائه درس - بحث گروهی - انتخاب پروژه مطالعاتی در ارتباط با درس بر اساس مقالات جدید و ارائه در کلاس

روش ارزیابی:

| ارزشیابی مستمر | میان ترم | آزمون نهایی | پروژه |
|----------------|----------|----------------------------|-------|
| ۳۰٪ تکالیف | ۳۰٪ | نوشتاری: ۴۰٪ عملکردی: - | - |

فهرست منابع:

Myers, D. (1999). *Surfaces, Interfaces, and Colloids: Principles and Applications*, 2nd ed., Wiley.

Butt, H. J., Graf, K. & Kappl, M. (2003). *Physics and Chemistry of Interfaces*, Wiley Verlag GmbH & Co. KGaA.

Pashley, R. M. & Karaman, M. E. (2004). *Applied Colloid and Surface Chemistry*, Wiley.

Butt, H. J.; Graf, K. & Kappl, M. (2013). *Physics and Chemistry of Interfaces*, 3rd ed., Wiley

Bracco, G. & Holst, B. (2013). *Surface Science Techniques (Springer Series in Surface Sciences (51))*, Springer.

منابع مطالعاتی:

Scientific journals like *Surface Science*, *Applied Surface Science*, *Surface and Coatings Technology*, *Surface and Interface Analysis*, *ACS Applied Materials & Interfaces*



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): اثرات شیمیایی، فیزیکی و زیستی امواج فراصوت

عنوان درس (انگلیسی): **Ultrasound: Its Chemical, Physical, and Biological Effects**

نوع درس: اختیاری پیش نیاز / هم نیاز: دارد ندارد پیش نیاز: -

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

آشنایی با کاربردهای امواج فراصوت در سامانه‌های مختلف

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد:

افزایش قدرت تجزیه و تحلیل مسائل مربوط به اثرات امواج فراصوت روی سامانه‌های مختلف

سرفصل درس:

- سونوشیمی (امواج صوتی، انواع ارتعاشات صوتی، انتشار امواج صوتی در محیط، امواج فراصوت، روش‌های تولید امواج فراصوت، عبور امواج فراصوت از محیط مایع، ویژگی‌های امواج فراصوت، حفره‌زایی و مراحل آن، نظریه‌های حفره‌زایی، پارامترهای مؤثر در حفره‌زایی آکوستیک، ویژگی‌های آکوستیک، معادلات دینامیکی باب آکوستیک)
- سونوشیمی سامانه‌های همگن (اکسیداسیون محلول پتاسیم یدید به عنوان یک سامانه همگن و بررسی پارامترهای تأثیرگذار امواج فراصوت از قبیل فرکانس، شدت، نوع گاز، تخریب سونوشیمیایی، آلاینده‌های محلول در آب و غیره)
- سونوشیمی سامانه‌های ناهمگن (سامانه مایع-مایع و سامانه جامد-مایع)
- سونولومینسانس صوتی (سونولومینسانس یک جابایی و سونولومینسانس چند جابایی)
- اثرات زیستی امواج فراصوت (امواج فراصوت و آنزیم‌ها، امواج فراصوت و آزاد کردن دارو و غیره)
- کاربرد امواج در زمینه‌های مختلف (امواج فراصوت و سامانه‌های نانو، امواج فراصوت و پدیده‌های بین سطحی، امواج فراصوت و الکتروشیمی، امواج فراصوت و پوشش‌دهی سطوح و غیره)



روش یاددهی - یادگیری:

پرسش و پاسخ در حین ارائه درس-بحث گروهی-انتخاب پروژه مطالعاتی در ارتباط با درس بر اساس مقالات جدید و ارائه در کلاس

روش ارزیابی:

| پروژه | آزمون نهایی | میان ترم | ارزشیابی مستمر |
|-------|--------------|----------|----------------|
| - | نوشتاری: ۴۰٪ | ۳۰٪ | ۳۰٪ تکالیف |
| | عملکردی: - | | |

فهرست منابع:

Suslick, K. S. (1988). *Ultrasound: Its Chemical, Physical, and Biological Effects*, VCH,
Ashokkumar, M. (2016). *Handbook of Ultrasonics and Sonochemistry*, Springer
Ameta, S. C. , Ameta, R. & Ameta, G. (2018). *Sonochemistry: An Emerging Green Technology*, CRC Press.

منابع مطالعاتی:

Scientific journals like *Ultrasonics Sonochemistry* (Elsevier), *Journal of Ultrasound in Medicine* (Wiley).



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): ترمودینامیک شیمیایی جامدات

عنوان درس (انگلیسی): **Chemical Thermodynamics of Solids**

نوع درس: اختیاری پیش نیاز / هم نیاز: دارد ندارد پیش نیاز: -

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

- استفاده از اصول ترمودینامیک شیمیایی برای بررسی ساختارهای جامدات بلوری
- کسب دانش در ترمودینامیک شیمیایی سامانه‌های جامد چند جزئی

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد:

- درک ترمودینامیک جامدات
- کاربرد مفاهیم اساسی ترمودینامیک در طیف وسیعی از فناوری‌ها
- کاربرد روابط ترمودینامیک در سامانه‌های چند فاز

سرفصل درس:

- بررسی ترمودینامیکی سامانه‌های چند جزئی جامد
- ترمودینامیک فصل مشترک و سطوح
- خواص ترمودینامیکی و دینامیکی شبکه‌های بلوری جامد
- تعادل بین فازهای چند جزئی
- بررسی ترمودینامیکی تشکیل نقوص در بلورهای یونی و فلزی
- نقص در ترکیبات استوکیومتری و غیراستوکیومتری
- پدیده نفوذ در جامدات
- خواص ترمودینامیکی محلول‌های جامد
- معرفی معادلات حالت جامدات تحت فشار
- بررسی ترمودینامیک سطحی در کاتالیزوری جامد



روش یاددهی - یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

| پروژه | آزمون نهایی | میان ترم | ارزشیابی مستمر |
|-------|--------------|----------|----------------|
| - | نوشتاری: ۵۰٪ | ۲۰٪ | ۱۰٪ |
| | عملکردی: - | | ۲۰٪ تکالیف |

فهرست منابع:

DeHoff, R. (2006). *Thermodynamics in Materials Science*, 2nd ed., CRC Taylor & Francis.

Chaplot, S. L. Mittal, R. & Choudhary, N. (2010). *Thermodynamic Properties of Solids: Experiment and Modeling*, 1st ed., Wiley.



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): **بازشناخت زیست مولکولی**

عنوان درس (انگلیسی): **Biomolecular Recognition**

نوع درس: اختیاری پیش نیاز / هم نیاز: دارد ندارد پیش نیاز: -

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

آشنایی با قواعد حاکم بر برهم کنش و اتصال هدفمند درشت مولکول‌های زیستی و سایر مولکول‌های مرتبط با آن‌ها

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد

- شناخت انواع برهم کنش‌های درون مولکولی و بین مولکولی
- بازشناخت مولکولی در سامانه‌های مختلف زیستی
- آشنایی با طراحی دارو

سرفصل درس:

- بازشناخت مولکولی در فرایندهای زیستی
- مبانی فیزیکی برهم کنش مولکول‌ها و خواص مولکولی مرتبط با آن
- انواع نیروهای بین مولکولی شامل واندروالسی، الکترواستاتیکی، هیدروژنی، آب‌گریزی و غیره
- اثر حلال در بازشناخت مولکولی و روش‌های محاسبه آن
- بازشناخت مولکولی در برهم کنش پروتئین - پروتئین، نوکلئیک اسید - پروتئین و نوکلئیک اسید - نوکلئیک اسید
- بازشناخت مولکولی در سامانه‌های پذیرنده - لیگاند
- طراحی پپتید و طراحی دارو بر اساس اصول بازشناخت مولکولی
- نقش بازشناخت مولکولی در سامانه ایمنی و برهم کنش آنتی‌ژن - آنتی‌بادی
- مکانیسم‌های بازشناخت مولکولی ایستا و دینامیک
- نقش بازشناخت مولکولی در شبکه‌های زیستی
- نگاه داده‌های مرتبط با بازشناخت زیست مولکولی



روش یاددهی - یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

| پروژه | آزمون نهایی | میان ترم | ارزشیابی مستمر |
|-------|--------------|----------|----------------|
| - | نوشتاری: ۴۰٪ | - | ۳۰٪ |
| | عملکردی: - | | ۳۰٪ تکالیف |

فهرست منابع:

Bohm, H-J. & Schneider, G. (2003). *Protein-Ligand Interactions: From Molecular Recognition to Drug Design*, Wiley.

Dukhovich, F. S. (2005). *Pharmacological Aspects of Molecular Recognition*, Nova Publishers.

Jelinek, R. (2009). *Cellular and Biomolecular Recognition*, Wiley.

Zourob, M. (2010). *Recognition Receptors in Biosensors*, Springer.

Buckingham, A. D.; Legon, A. C. & Roberts, S. M. (2012). *Principles of Molecular Recognition*, Springer.



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): توسعه فرایندهای شیمیایی از آزمایشگاه به صنعت

عنوان درس (انگلیسی): Development of Chemical Processes from Laboratory to Industry

نوع درس: اختیاری پیش نیاز / هم نیاز: دارد ندارد پیش نیاز: -

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

- آشنایی با اطلاعات آزمایشگاهی مورد نیاز برای توسعه فرایندهای شیمیایی
- آشنایی با مسیر توسعه یک فرایند شیمیایی از آزمایشگاه به صنعت
- آشنایی با تفاوت انجام واکنش‌های شیمیایی در آزمایشگاه و صنعت شیمی

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد

- شناخت روش تهیه اطلاعات مورد نیاز در آزمایشگاه
- شناخت مسیر توسعه یک فرایند آزمایشگاهی به صنعت
- درک روش‌های ارزیابی واکنش‌های شیمیایی در مقیاس آزمایشگاهی و پایلوت

سرفصل درس:

- اطلاعات اساسی برای توسعه واکنش‌های شیمیایی
- اطلاعات شیمی فیزیکی نظیر مدل‌سازی ترمودینامیکی، مدل‌سازی سینتیکی و داده‌های هیدرودینامیکی مورد نیاز
- اجزاء یک واحد صنعتی شامل کاتالیزور، راکتور و جداکننده‌های محصولات
- مسیر استاندارد برای توسعه فرایند شیمیایی در مقیاس آزمایشگاهی و پایلوت
- مسیر استاندارد برای توسعه فرایند شیمیایی در مقیاس نیمه‌صنعتی
- مسیر تهیه اطلاعات مهندسی مورد نیاز
- تهیه تجهیزات فرایندی و اطلاعات اولیه واحد
- ارزیابی انواع فرایندهای شیمیایی

روش یاددهی - یادگیری:



روش ارزیابی:

| پروژه | آزمون نهایی | میان ترم | ارزشیابی مستمر |
|-------|--------------|----------|----------------|
| - | نوشتاری: ۵۰٪ | ۲۰٪ | ۱۰٪ |
| | عملکردی: - | | ۲۰٪ تکالیف |

فهرست منابع:

Zlokarnik, M. (2006). *Scale-Up in Chemical Engineering*, 2nd ed., Wiley.

Santacesaria, E. & Tesser, R. (2018). *The Chemical Reactor from Laboratory to Industrial Plant A Modern Approach To Chemical Reaction Engineering with Different Case Histories and Exercises*, Springer.



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): شیمی حالت جامد

عنوان درس (انگلیسی): Solid State Chemistry

نوع درس: اختیاری پیش نیاز / هم نیاز: دارد ندارد پیش نیاز: -

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

- آشنایی با ساختار جامدات بلوری و بررسی ترمودینامیکی آنها
- آشنایی با انجام واکنش‌ها درون ساختارهای جامد

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد:

- درک ساختارهای جامد
- آشنایی با واکنش‌های درون ساختار جامدات
- آشنایی با روش‌های ارزیابی ساختارهای جامد

سرفصل درس:

- خواص جامدات (جامدات فلزی، جامدات یونی، جامدات مولکولی و جامدات آمورف)
- ساختار جامدات بلوری
- انواع ساختارهای جامدات
- تقارن در ساختارهای جامدات بلوری
- انواع نقص در ساختارهای جامدات
- علت تشکیل نقوص در ساختارهای جامد
- ترمودینامیک تشکیل نقص
- انواع جابه‌جایی‌ها در ساختار جامدات
- محلول‌های جامد بلوری
- خواص فیزیکی جامدات (الکتریکی، مکانیکی، مغناطیسی و ترکیبی نظیر اثر پیزوالکتریک)

ساختارهای بلوری یونی

واکنش‌ها در ساختارهای جامد



- پدیده‌های نفوذ در جامدات بلوری
- مکانیسم‌های نفوذ در جامدات
- بررسی ساختارهای فلزی
- بررسی ساختارهای غیرفلزی و نیمه‌هادی‌ها
- روش‌های بررسی ساختار جامدات
- روش‌های گرمایی در مطالعات جامدات (گرماسنجی پیمایش تفاضلی، گرما توزین و غیره)

روش یاددهی - یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

| ارزشیابی مستمر | میان‌ترم | آزمون نهایی | پروژه |
|----------------|----------|--------------|-------|
| ۱۰٪ | ۲۰٪ | نوشتاری: ۵۰٪ | - |
| ۲۰٪ تکالیف | | عملکردی: - | |

فهرست منابع:

Ropp, R. (2003). *Solid State Chemistry*, 1st ed., Elsevier.

Tilley, R. (2006). *Crystals and Crystal Structures*, 1st ed., Wiley.

Moore, E. A. & Smart, L. E. (2012). *Solid State Chemistry: An Introduction*, 4th ed., CRC Press.

منابع مطالعاتی:

Scientific journals like *Journal of Chemistry and Physics of Solids* (Elsevier)



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): پدیده‌های انتقال در محیط‌های متخلخل

عنوان درس (انگلیسی): **Transport Phenomena in Porous Media**

نوع درس: اختیاری پیش‌نیاز / هم‌نیاز: دارد ندارد پیش‌نیاز: -

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

- آشنایی با اصول پدیده‌های انتقال
- درک ساختارهای متخلخل نظیر جاذب‌ها و کاتالیزورها
- شناخت پدیده‌های انتقال نظیر نفوذ در محیط متخلخل

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد

- درک اثرات نفوذ واکنشگرها در واکنش‌های شیمیایی ساختارهای متخلخل
- درک ساختارهای متخلخل
- آشنایی با حرکت سیالات در محیط‌های متخلخل

سرفصل درس:

- اصول پدیده‌های انتقال
- ساختارهای متخلخل و نقش آن‌ها در واکنش‌های شیمیایی
- نقش فرایندهای انتقال در کنترل واکنش‌های شیمیایی درون ساختارهای متخلخل
- اثرات نفوذ درون‌دانه‌ای بر واکنش‌های شیمیایی درون ساختارهای متخلخل
- اثرات نفوذ خارج‌دانه‌ای بر واکنش‌های شیمیایی درون ساختارهای متخلخل
- خواص انتقالی محیط‌های متخلخل
- معادلات ماکروسکوپی پدیده‌های انتقال
- بررسی حرکت سیالات درون محیط‌های متخلخل
- انتقال فاز گاز درون محیط‌های متخلخل
- انتقال سایر سیالات در محیط‌های متخلخل
- انتقال سیال درون محیط‌های متخلخل



روش یاددهی - یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

| پروژه | آزمون نهایی | میان ترم | ارزشیابی مستمر |
|-------|--------------|----------|----------------|
| - | نوشتاری: ۵۰٪ | ۲۰٪ | ۱۰٪ |
| | عملکردی: - | | ۲۰٪ تکالیف |

فهرست منابع:

Ingham, D. & Pop, I. (2005). *Transport Phenomena in Porous Media III*, 1st ed., Elsevier.

Civan, F. (2011). *Porous Media Transport Phenomena*, 1st ed., Wiley.



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): طیف‌های مولکولی و ساختار مولکولی

عنوان درس (انگلیسی): **Molecular Spectra and Molecular Structure**

نوع درس: اختیاری پیش‌نیاز / هم‌نیاز: دارد ندارد پیش‌نیاز: -

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

- آشنایی با اصول انواع طیف‌سنجی
- تفسیر نتایج طیف‌سنجی برای دسترسی به ساختار مولکولی

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد:

کاربرد انواع روش‌های طیف‌سنجی در مشخصه‌یابی ساختار مواد

سرفصل درس:

- بررسی نظری ساختار مولکولی طیف‌های ارتعاشی، انتقالات مولکولی و ساختار حالات برانگیخته
- تجزیه و تحلیل مختصات نرمال با توجه به ساختار مولکولی
- روش جدانمایی طیفی برای انتساب بهتر و دقیق‌تر نتایج طیف‌سنجی در تعیین ساختار مولکول
- بررسی روش‌های پراش در تعیین ساختار مولکولی
- کاربرد طیف‌سنجی فرابنفش-مرئی در تعیین ساختار
- کاربرد طیف‌سنجی فلورسانس و فسفرسانس در بررسی ساختار
- کاربرد طیف‌سنجی تشدید مغناطیسی هسته، جابجایی‌های شیمیایی و آشنایی با طیف‌سنجی NMR در تعیین ساختار و استخلاف ایزوتوپی در تعیین ساختار
- کاربرد طیف‌سنجی جرمی در شناسایی ساختار
- کاربرد طیف‌سنجی چرخشی در تأیید ساختار
- کاربرد طیف ارتعاشی (فروسرخ و رامان) در تعیین ساختار مولکول
- تونل‌زنی یک‌بعدی و دوبعدی در پیوندهای هیدروژنی خطی و خمیده

استفاده از نرم‌افزارهای محاسباتی برای محاسبه ارتعاشات مولکولی و توزیع انرژی پتانسیل (PED) ارتعاشات



موسسه عالی پژوهش‌های کاربردی



• روش‌های پراش پرتو ایکس و پراش الکترونی

روش یاددهی - یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

| پروژه | آزمون نهایی | میان ترم | ارزشیابی مستمر |
|-------|--------------|----------|----------------|
| - | نوشتاری: ۵۰٪ | ۲۰٪ | ۱۰٪ |
| | عملکردی: - | | ۲۰٪ تکالیف |

فهرست منابع:

Laane, J. (2008). *Frontiers of Molecular Spectroscopy*, Elsevier.

R. J. Abraham, & Mobli, M. (2008). *Modelling ¹HNMR Spectra of Organic Compounds: Theory, Applications and NMR Prediction Software*, 1st ed., Wiley.

Ning, Y. C. (2011). *Interpretation of Organic Spectra*, 1st ed., Wiley.

Antonov, L. (2014). *Tautomerism: Methods and Theories*, 1st ed., Wiley.

Smith, E. & Dent, G. (2019). *Modern Raman Spectroscopy-A Practical Approach*, 2nd ed., Wiley.



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): طیف‌سنجی زیستی

عنوان درس (انگلیسی): Biospectroscopy

نوع درس: اختیاری پیش‌نیاز / هم‌نیاز: دارد ندارد پیش‌نیاز: -

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۳۲

اهداف درس:

آشنایی با روش‌های مختلف طیف‌سنجی و کاربردهای آن در علوم زیستی

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد:

کاربرد روش‌های مختلف طیف‌سنجی در تعیین ساختار مولکول‌های زیستی

سرفصل درس:

- اصول و مبانی طیف‌سنجی
دیدگاه کوانتومی برهم‌کنش نور و ماده، طیف‌سنجی اتمی و مولکولی، بخش‌های مختلف دستگاه‌های طیف‌سنجی و استفاده از کامپیوتر در طیف‌سنجی
- طیف‌سنجی فرابنفش-مرئی
اصول دستگاهی، اصول تجزیه کمی و کیفی، سنجش‌های کمی و کیفی در مولکول‌های زیستی، برهم‌کنش‌های درشت‌مولکول‌ها و مطالعات پیوندی در سامانه‌های مختلف، سنجش پایداری پروتئین و سنجش‌های آنزیمی
- طیف‌سنجی فروسرخ و رامان
اصول دستگاهی، اصول تجزیه کمی و شناسایی گروه‌های عاملی، تعیین ساختار دوم پروتئین‌ها و مطالعات ساختاری در مولکول‌های زیستی با فروسرخ و رامان
- طیف‌سنجی جرمی
اصول دستگاهی، اصول شکست در مولکول‌ها و شناسایی کیفی، نقش ایزوتوپ‌ها در شناسایی کیفی و کاربردهای زیستی
- طیف‌سنجی دورنگ‌نمایی دورانی
اصول دستگاهی، مطالعه ساختار دوم پروتئین‌ها، مطالعه ساختار سوم پروتئین‌ها و کاربرد در مطالعات ساختاری



اسیدهای نوکلئیک

طیف‌سنجی فلورسانس



اصول دستگاهی، فلورسانس ذاتی و عارضی، مطالعه پایداری و ساختار سوم پروتئین‌ها، تا خوردن و باز شدن ساختار پروتئین‌ها، مطالعات ترمودینامیکی پیوندی لیگاند به درشت‌مولکول زیستی و کاربردهای زیستی دیگر

• طیف‌سنجی رزونانس مغناطیسی هسته

اصول دستگاهی، رزونانس مغناطیسی هسته در عناصر مختلف، جابجایی شیمیایی و مبانی شناسایی کیفی، مبانی تفسیر طیف‌ها در شناسایی مواد، تعیین ساختار در پروتئین‌ها، برهم‌کنش لیگاند-درشت‌مولکول زیستی و کاربردهای زیستی مختلف

روش یاددهی - یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

| ارزشیابی مستمر | میان ترم | آزمون نهایی | پروژه |
|----------------|----------|--------------|-------|
| ۱۰٪ | ۲۰٪ | نوشتاری: ۵۰٪ | - |
| ۲۰٪ تکالیف | | عملکردی: - | |

فهرست منابع:

Hammes, G. G. (2005). *Spectroscopy for Biological Sciences*, Wiley.

رنه آلبانی، جهاد (۱۳۹۱). اصول و مبانی طیف‌سنجی فلورسانس، ترجمه علی اکبر صبوری و مریم سعیدی فر، انتشارات دانشگاه تهران



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): طیف‌سنجی مولکولی ۲

عنوان درس (انگلیسی): Molecular spectroscopy-II

نوع درس: اختیاری پیش‌نیاز / هم‌نیاز: دارد ندارد پیش‌نیاز: -

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

آشنایی با انواع طیف‌سنجی‌های چرخشی، ارتعاشی، الکترونی و تشدید مغناطیسی هسته از دیدگاه مولکولی

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد:

درک طیف‌سنجی

سرفصل درس:

- تابش الکترومغناطیس - جذب و نشر تابش نور
- معادله شرودینگر وابسته به زمان
- اصول اندازه‌گیری و انواع طیف‌سنجی
- مختصری از تقارن، نظریه گروه و کاربرد در طیف‌سنجی
- مکانیک کوانتومی و تعیین ترازهای انرژی چرخشی و ارتعاشی مولکول‌های دواتمی و قواعد انتخاب
- مکانیک کوانتومی و تعیین ترازهای انرژی چرخشی و ارتعاشی مولکول‌های چنداتمی و قواعد انتخاب
- مکانیک کوانتومی و تعیین شیوه‌های نرمال ارتعاشی در مولکول‌های چنداتمی
- طیف ارتعاشی (فروسرخ و رامان)، طیف ارتعاشی مولکول‌های دواتمی و چنداتمی، کاربرد طیف ارتعاشی در تعیین ساختار مولکول، استفاده از نرم‌افزارهای محاسباتی محاسبه ارتعاشات مولکولی و توزیع انرژی پتانسیل PED ارتعاشات، روش جدانمایی طیفی.
- برهم‌کنش انتقالات الکترونی، ارتعاشی و چرخشی و ساختار حاصل از آن در طیف
- برهم‌کنش ارتعاش-چرخش و ساختار ظریف در طیف ارتعاشی مولکول‌ها
- ساختار ظریف ارتعاش-چرخش مولکول‌ها
- طیف‌سنجی الکترونی مولکول‌های دواتمی و چنداتمی، اصل فرانک-کاندون
- جفت‌شدگی هوند و تأثیر آن بر طیف الکترونی مولکول‌ها



- طیف‌سنجی تشدید مغناطیسی هسته، جابجایی‌های شیمیایی
- طیف‌سنجی تشدید پارامغناطیس الکترون یا تشدید اسپین الکترون
- طیف‌سنجی‌های نشری الکترونی

روش یاددهی - یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

| ارزشیابی مستمر | میان‌ترم | آزمون نهایی | پروژه |
|----------------|----------|--------------|-------|
| ۳۰٪ تکالیف | ۲۰٪ | نوشتاری: ۷۰٪ | - |
| | | عملکردی: - | |

فهرست منابع:

Brown, J. M. & Carrington, A. (2003). *Rotational Spectroscopy of Diatomic Molecules*, Cambridge University Press

Hollas, J. M. (2004). *Modern Spectroscopy*, 4th ed., Wiley

Bernath, P. F. (2015). *Spectra of Atoms and Molecules*, 3rd ed., Oxford University Press.



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): ترمودینامیک آماری ۲

عنوان درس (انگلیسی): Statistical Thermodynamics II

نوع درس: اختیاری پیش نیاز / هم نیاز: دارد ■ ندارد □ پیش نیاز: ترمودینامیک آماری ۱

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

آشنایی با مفاهیم، نظریه‌ها و کاربردهای مختلف ترمودینامیک آماری جامدات، گازهای حقیقی و مایعات

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد:

تفسیر نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی در جامدات، مایعات و گازهای حقیقی

سرفصل درس:

• فصل اول مکانیک آماری جامدات

خواص ترمودینامیکی، ظرفیت گرمایی در حجم ثابت، نافلزات، دیدگاه کلاسیک، دیدگاه مکانیک کوانتومی (مدل انیشتین، مدل دبی، فونون‌ها، خواص فونون‌ها، اهمیت فونون‌ها و خواص ترمودینامیکی)، فلزات (دیدگاه کلاسیک و دیدگاه کلاسیک کوانتوم)، ضریب انبساط گرمایی طولی، جامد با ارتعاشات هماهنگ، جامد با ارتعاشات ناهماهنگ، رسانش گرمایی، گاز ایده‌آل، دیدگاه کلاسیک «قانون ویدمن-فرانز»، دیدگاه مکانیک کوانتوم، بررسی مکانیک آماری برخی از پدیده‌ها در جامدات، نقص‌ها در بلورها، نقص نقطه‌ای، غلظت نقص‌ها، تأثیر نقص‌ها بر خواص بلورها، تأثیر نقص‌ها بر نفوذ در بلورها، تأثیر نقص‌ها بر رنگ بلور «مراکز رنگ»، پدیده‌های همکاری یا انتقالات فازی مرتبه‌ی دوم یا بالاتر در جامدات، انتقال فازی آلوتروپی، انتقال فازی نظم-بی‌نظمی، ظهور ابررسانایی در برخی جامدات در زیر یک دمای بحرانی، انتقال بین فازهای فرومغناطیس و پارامغناطیس در نقطه‌ی کوری.

• فصل دوم گازهای غیر کامل

گاز ایده‌آل، گازهای غیر کامل، استخراج معادله‌ی حالت ویریا با استفاده از مکانیک آماری، تقریب جمع جفت گونه، تابع f -مایر، ضریب سوم ویریا با در نظر گرفتن تقریب جمع جفت گونه، نمایش گرافیکی ضرایب ویریا «انبساط خوشه»، ضریب دوم ویریا، وابستگی دمایی، چند مدل پتانسیل، گازهای شامل مولکول‌های کروی، استخراج تابع انرژی پتانسیل برهم‌کنش بین دو مولکول، روش برازش، روش وارونگی، تصحیحات



کوانتومی، اصل حالت‌های متناظر، ضریب سوم ویریا، کرات سخت، اصل حالت‌های متناظر، غیرجمع‌پذیر بودن پتانسیل سه ذره‌ای، پتانسیل دو ذره‌ای مؤثر

• فصل سوم مایعات

نظریه‌ی شبکه یا نظریه‌ی حجم آزاد یا نظریه‌ی حفره یا نظریه‌ی سلول، محاسبه‌ی انتروپی اشتراکی مایع، نظریه‌ی لنارد-جونز دونشایر، برخی از مشخصات معادله‌ی حالت لنارد-جونز-دونشایر، نظریه‌ی بسط ویریا، نظریه‌ی تابع توزیع شعاعی، تعریف تابع توزیع شعاعی، شکل ریاضی RDF ، مشخصه‌های مهم تابع توزیع شعاعی، اندازه‌گیری تجربی RDF ، ساخت تابع توزیع شعاعی، رابطه‌ی بین تابع توزیع شعاعی و خواص ترمودینامیکی، انرژی داخلی، ظرفیت گرمایی، فشار، ضرایب ویریا، انتروپی، پتانسیل شیمیایی، تراکم‌پذیری هم‌دما، تابع توزیع شعاعی سیالات مختلف، کره سخت، معادلات انتگرالی، معادله‌ی انتگرالی کیرکوود، معادله‌ی انتگرالی بورن-گرین-یون، معادله‌ی انتگرالی ارشتاین-زرنایک، معادله‌ی انتگرالی پرکس-یوویک، معادله‌ی انتگرالی زنجیری فوق مشبک، نظریه‌های اختلال، روش زوان زیگ، نظریه‌ی بارکر-هندرسون، نظریه ویکز-چندلر-اندلسون، نظریه‌ی وردشی

روش یاددهی - یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

| ارزشیابی مستمر | میان‌ترم | آزمون نهایی | پروژه |
|----------------|----------|--------------|-------|
| ۴۰٪ | - | نوشتاری: ۲۰٪ | - |
| ۴۰٪ تکالیف | - | عملکردی: - | - |

فهرست منابع:

McQuarrie, D. A. (2000). *Statistical Mechanics*, University Science Books, California.

Girifalco, L. A. (2000). *Statistical Mechanics of Solids*, Oxford University Press, Oxford.

Turton, R. (2000). *The Physics of Solids*, Oxford University Press, Oxford.

گوهرشادی، الهه و فزرانه، علی (۱۳۹۷). مکانیک آماری جامدات، گازهای حقیقی و مایعات، انتشارات دانشگاه فردوسی مشهد.

منابع مطالعاتی:

Scientific journals like *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* (Elsevier), *Journal of Statistical Physics* (Springer).



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): مهندسی مولکولی

عنوان درس (انگلیسی): Molecular Engineering

نوع درس: اختیاری پیش نیاز / هم نیاز: دارد ندارد پیش نیاز: -

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

- طراحی و بررسی خواص و رفتار برهم کنش های مولکولی
- به کار گیری علوم در سطح مولکولی برای طراحی دستگاه ها، فرایندها و فناوری های پیشرفته

توانایی و شایستگی هایی که درس پرورش می دهد:

توانایی طراحی دستگاه ها، فرایندها و فناوری های پیشرفته در سطح مولکولی

سرفصل درس:

- روش - رابطه کمی ساختار - عملکرد (QSAR)
- رابطه کمی ساختار - خاصیت (QSPR)
- طراحی حساس کننده های نوری
- طراحی پیش دارو و آنالیز اربیتال های مولکولی
- طراحی مواد با خاصیت آنتی باکتریایی
- طراحی برخی از الگوهای مولکولی برای ذخیره هیدروژن
- طراحی کاتالیزور و زئولیت های مناسب برای جذب سطحی گازها و مواد شیمیایی فعال
- طراحی مایعات یونی جدید برای جذب گازهای کربن دی اکسید و هیدروژن سولفید
- طراحی مقلدهای آنزیمی
- طراحی زیست حسگرهای زیستی

روش یاددهی - یادگیری:

روش تدریس توضیحی



روش ارزیابی:

| پروژه | آزمون نهایی | میان ترم | ارزشیابی مستمر |
|-------|--------------|----------|----------------|
| - | نوشتاری: ۲۰٪ | - | ۴۰٪ |
| | عملکردی: - | | ۴۰٪ تکالیف |

فهرست منابع:

Zhang, J. X. J. & Hoshino, K. (2014). *Molecular Sensors and Nanodevices*, Elsevier.

Ul-Haq, Z. & Madura, J. D. (2016). *Frontiers in Computational Chemistry*, Elsevier.

Prickril, B. & Rasooly, A. (2017). *Biosensors and Biodetection*, Springer.

Haghi, A. H.; Pogliani, L. & Torrens, F. (2020). *Molecular Chemistry and Biomolecular Engineering*, CRC Press.



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): اخلاق، روش و منطق تحقیق

عنوان درس (انگلیسی): **Research Ethics, Method, and Logic**

نوع درس: اختیاری پیش نیاز / هم نیاز: دارد ندارد پیش نیاز: -

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

- آشنایی با روش‌های تحقیق و روش‌شناسی آن
- تعریف و تدوین طرح تحقیقاتی
- حق و حقوق ارزش‌های مطرح در فعالیت‌های گروهی، مالکیت معنوی

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد:

- تدوین طرح تحقیقاتی
- آشنایی با شیوه یافتن مقالات و داده‌های علمی و مطالعات علم‌سنجی
- آشنایی با نگارش مقالات علمی در سطح بین‌المللی

سرفصل درس:

- اصول تعریف، تدوین و نگارش پیشنهاد (Proposal)
- مالکیت معنوی و اصول فعالیت‌های گروهی
- اخلاق علمی و معرفی تخلف‌های علمی و ادبی
- اصول مطرح در جمع‌آوری اطلاعات و تدوین پایان‌نامه
- روش‌های تدوین گزارش پیشرفت کار
- اصول مهم در شرکت در همایش‌های علمی و تدوین پوستر یا سخنرانی
- قواعد تنظیم و نگارش مقاله پژوهشی، پایان‌نامه، نامه‌های علمی، فصل کتاب تحقیقاتی، مقاله ترویجی و چکیده
- و یا مقاله کامل برای ارائه در همایش‌های علمی
- نرم‌افزارهای منابع و متون علمی

نشریات معتبر بین‌المللی و معیارهای ارزیابی و نمایه‌سازی نشریات علمی



- معرفی کتابخانه دیجیتال
- جایگاه مقالات استنادی و رویکردهای نوین در تجزیه و تحلیل آن
- معرفی وبگاه علوم و سایر وبگاه‌های استنادی و کاربرد آن در تحقیق و مطالعات علم‌سنجی
- شیوه نگارش مقالات علمی برای ارسال به نشریات بین‌المللی

روش یاددهی - یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

| ارزشیابی مستمر | میان‌ترم | آزمون نهایی | پروژه |
|----------------|----------|--------------|-------|
| ۴۰٪ | - | نوشتاری: ۲۰٪ | - |
| ۴۰٪ تکالیف | - | عملکردی: - | - |

فهرست منابع:

Shuttieworth, M. (2010). *How to Write a Research Paper*, Experiment-Resources Publisher.

صبوری، علی‌اکبر؛ موسوی موحدی، علی‌اکبر و امینی، مهناز (۱۳۸۷). *راهنمای نشریات بین‌المللی استنادی*، انتشارات دانشگاه تهران.



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): **مباحث ویژه در شیمی فیزیک**

عنوان درس (انگلیسی): **Special Topics in Physical Chemistry**

نوع درس: اختیاری پیش نیاز / هم نیاز: دارد ندارد پیش نیاز: -

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

آشنایی با آخرین پیشرفت‌های علمی در شیمی فیزیک

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد

آشنایی با مباحثی فراتر از مباحث شیمی فیزیکی مرسوم

سرفصل درس:

عناوین مطرح شده در این درس توسط استاد (اساتید) مربوطه در هر سال تغییر خواهد کرد و لازم است مدرس درس در هر نیمسال تحصیلی حداقل دو ماه قبل از شروع نیمسال تحصیلی، سرفصل درس و منابع را مشخص و به تایید گروه آموزشی برساند.

روش یاددهی - یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

| ارزشیابی مستمر | میان ترم | آزمون نهایی | پروژه |
|----------------|----------|--------------|-------|
| ۱۰٪ | ۲۰٪ | نوشتاری: ۵۰٪ | - |
| ۲۰٪ تکالیف | | عملکردی: - | |

فهرست منابع:

جدیدترین منابع معتبر در شیمی فیزیک



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): شیمی آلی پیشرفته

عنوان درس (انگلیسی): **Advanced Organic Chemistry**

نوع درس: اختیاری پیش نیاز / هم نیاز: دارد ندارد پیش نیاز: -

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

تسلط بر اصول پایه‌ای شیمی آلی

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد:

درک شیمی آلی

سرفصل درس:

• استخلاف نوکلئوفیلی

موارد حدی (SN_1 و SN_2)، مکانیسم مرزی، کربوکاتیون‌ها، هسته‌دوستی و اثر گروه ترک‌کننده، ساختار ماده اولیه، اثرات فضایی روی سرعت واکنش، استریوشیمی، مکانیسم نوآرایی کربوکاتیون، کاتیون‌های نوربورنیل و دیگر کربوکاتیون‌های غیر کلاسیک

• افزایش قطبی و واکنش‌های حذفی

افزایش هیدروژن هالید به آلکن، افزایش آب با کاتالیزور اسیدی و واکنش‌های افزایشی مشابه، افزایش هالوژن‌ها، افزایش الکتروفیلی در حضور یون‌های فلزی، افزایش به آلکین و آلن‌ها، مکانیسم E_1 ، E_2 و $CB1E$ جهت‌گزینی، استریوشیمی، آب‌گیری از الکل‌ها، واکنش‌های حذفی غیر از پیوندهای C-H، حذف حرارتی، افزایش نوکلئوفیلی به پیوندهای چندگانه، اثر ساختار روی سرعت، اصل واکنش‌پذیری-گزینش‌پذیری، واکنش استخلافی آروماتیکی نوکلئوفیلی و الکتروفیلی

• کربوکاتیون‌ها و دیگر گونه‌های کربنی

اسیدیته هیدروکربن‌ها، کربانیون‌های پایدار شده با گروه‌های عاملی، انولات و انامین، کربانیون‌ها به‌عنوان نوکلئوفیل در واکنش SN_2 ، واکنش‌های الکتروفیلی آلیفاتیکی، بنزاین

• کاربن

کاربن‌های یک‌تایی و سه‌تایی، استریوشیمی، واکنش‌های افزایشی و داخل‌شدن، نایترین



• واکنش ترکیبات کربونیل

افزایش آب و الکل، واکنش‌های افزایشی-حذفی، افزایش نوکلئوفیل کربن به گروه کربونیل واکنش‌پذیری ترکیبات کربونیل نسبت به واکنش‌های افزایشی، هیدرولیز استرها، آمینولیز استرها، هیدرولیز آمید، آسیلاسیون اکسیژن نوکلئوفیلی و گروه‌های نیتروژن، کاتالیز درون مولکولی

• واکنش‌های رادیکالی

تولید و شناسایی، پایداری و مقاومت رادیکال‌های آزاد، شناسایی رادیکال‌ها (EPR, CIDNP) منع تشکیل رادیکال‌های آزاد، استریوشیمی، گونه‌های رادیکالی باردار، واکنش‌های دارای حدواسط‌های رادیکالی، استخلاف رادیکالی (هالوژناسیون و اکسیداسیون)، واکنش‌های افزایشی رادیکالی (افزایش هیدروژن هالید و هالومتان) افزایش دیگر رادیکال‌های کربنی، واکنش‌های رادیکالی درون مولکولی، نوآرایی و شکست، فرایند استخلاف SRNI

روش یاددهی - یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

| پروژه | آزمون نهایی | میان‌ترم | ارزشیابی مستمر |
|-------|--------------|----------|----------------|
| - | نوشتاری: ۵۰٪ | ۲۰٪ | ۱۰٪ |
| | عملکردی: - | | ۲۰٪ تکالیف |

فهرست منابع:

Carey, F. A. & Sundberg, R. J. (2007). *Advanced Organic Chemistry*, Part A: Structure and Mechanisms, 4th ed., Springer.

Carey, F. A. & Sundberg, R. J. (2007). *Advanced Organic Chemistry*, Part B: Reaction and Synthesis, 4th ed., Springer.

Bruckner, R. (2014). *Organic Mechanisms, Reactions, Stereochemistry and Synthesis*, Springer.



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): شیمی تجزیه پیشرفته

عنوان درس (انگلیسی): **Advanced Analytical Chemistry**

نوع درس: اختیاری پیش نیاز / هم نیاز: دارد ندارد پیش نیاز: -

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

آشنایی با اصول و مفاهیم شیمی تجزیه

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد

درک شیمی تجزیه

سرفصل درس:

- کاربرد روش‌های آماری در ارزیابی نتایج بدست آمده: آمار اندازه‌گیری‌های تکراری، آزمون‌های معنی‌دار بودن، رگرسیون خطی و غیرخطی *curve fitting*، عیارسنجی روش‌ها، روش‌های غیر پارامتری
- نمونه‌برداری، استراتژی نمونه‌برداری، تعداد نمونه‌برداری، معرفی روش‌های مختلف کنترل کیفیت، آشنایی با انواع منحنی‌های کنترل و ارزیابی روش
- تعادل و فعالیت
- تعادلت اسید و باز در آب
- تعادلت اسید و باز در حلال‌های غیر آبی
- استانداردهای شیمیایی
- کاربرد تیتراژهای اسید و باز
- حلالیت و رسوب‌ها
- تشکیل و خواص رسوب‌ها و آلودگی‌ها

روش یاددهی - یادگیری

روش تدریس توضیحی



روش ارزیابی:

| پروژه | آزمون نهایی | میان ترم | ارزشیابی مستمر |
|-------|--------------|----------|----------------|
| - | نوشتاری: ۵۰٪ | ۲۰٪ | ۱۰٪ |
| | عملکردی: - | | ۲۰٪ تکالیف |

فهرست منابع:

Pletcher, D.; Greff, R.; Peat, R.; Peter, L. M. & Robinson, J. (2001). *Instrumental Methods in Electrochemistry*, Woodhead Publishing

Skoog, D. A.; West, D. M. Holler, F. J., & Crouch, S. R. (2004). *Fundamentals of Analytical Chemistry*, 8th ed., Thomson.

Christian, G. D. (2004). *Analytical Chemistry*, 6th ed., Wiley.

Harris, D. C. (2010). *Quantitative Chemical Analysis*, 7th ed., Thomson.

Dash, D. C. (2017). *Analytical Chemistry*, 2nd ed., PHI.



مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): شیمی معدنی پیشرفته

عنوان درس (انگلیسی): **Advanced Inorganic Chemistry**

نوع درس: اختیاری پیش نیاز / هم نیاز: دارد ندارد پیش نیاز: -

تعداد واحد: ۳ نوع واحد: نظری تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

- آشنایی با اصول و مفاهیم پیشرفته شیمی معدنی
- درک عمیق تر مباحث نظری شیمی معدنی جهت ورود به مباحث بنیادی

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد:

درک شیمی معدنی

سرفصل درس:

- **تقارن**
تعاریف و قضایای نظریه گروه، معرفی تقارن و اعمال مربوط به آن‌ها، حاصل ضرب اعمال تقارن، گروه‌های نقطه‌ای، گشتاور دوقطبی، فعالیت نوری، ماتریس‌ها، نمایش‌های کاهش‌پذیر و نمایش‌های کاهش‌ناپذیر، جداول شناسایی، نمادهای مولیکن
- **کاربردهای تقارن در شیمی**
تعیین هیبریداسیون اتم مرکزی و اربیتال‌های اتم مرکزی درگیر در تشکیل پیوند سیگما، تعیین اربیتال‌های اتمی درگیر در تشکیل پیوند پای، ارتعاشات مولکولی و تفسیر طیف IR ترکیب، شناسایی کمپلکس‌های متال کاربونیل، تعیین سالک‌ها و رسم دیاگرام اربیتال مولکولی
- **بررسی پیوند و خواص طیفی (با استفاده از دیدگاه کمی نظریه اربیتال مولکولی)**
نظریه‌های مختلف پیوند، نظریه اربیتال مولکولی، محاسبات کمی ترازهای انرژی در اربیتال مولکولی، تقریب AOM و محاسبه انرژی ترازهای اربیتال مولکولی در میدان‌های مختلف، انرژی ترجیحی ساختاری و برتری ساختاری آرایش‌های مختلف d^n در میدان‌های مختلف بر اساس AOM، شواهد شکافتگی اربیتال‌های d در نظریه AOM، تاریخچه اثر یان تلر، محاسبه نوع انحراف یان تلر بر اساس AOM، محدودیت‌های انحراف

یان تلر بر اساس AOM



• ساختار ترکیبات و ارتباط آن با خواص طیفی

طیف الکترونی در کمپلکس‌های فلزی، انواع انتقالات الکترونی، قوانین انتخاب، عوامل تأثیرگذار بر شدت انتقالات الکترونی، آرایش الکترونی، ریزحالت‌ها، ترم‌های طیفی و شکافتگی ترم‌ها در میدان کمپلکس، دیاگرام‌های ارگل و تانابه-سوگانو، انتقالات الکترونی و تفسیرهای طیفی، محاسبه \square_0 در آرایش‌های d^n بر اساس انتقالات الکترونی

• سینتیک واکنش‌های شیمیایی، ترکیبات کونوردیناسیون و واکنش‌های آن‌ها

روش یاددهی - یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

| پروژه | آزمون نهایی | میان‌ترم | ارزشیابی مستمر |
|-------|--------------|----------|----------------|
| - | نوشتاری: ۵۰٪ | ۲۰٪ | ۱۰٪ |
| | عملکردی: - | | ۲۰٪ تکالیف |

فهرست منابع:

Huheey, J. E.; Keiter, E. A. & Keiter, R. L. (2008). *Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*, 4th ed., Harper-Collins.

Li, W. K.; Zhou, G. D. & Mak, T. (2008). *Advanced Structural Inorganic Chemistry (International Union of Crystallography Texts on Crystallography)*, Oxford University Press.

Atkins, P. & Overton, T. (2010). *Shriver and Atkins' Inorganic Chemistry*, 5th ed., Oxford University Press.

Shriver, D.; Weller, M.; Overton, T.; Rourke, J. & Armstrong, F. (2014). *Inorganic Chemistry*, 6th ed., Macmillan Education (W. H. Freeman).

Miessler, G.; Fischer, P. & Tarr, D. (2014). *Inorganic chemistry*, 5th ed., Pearson.





فصل چهارم:

ترم بندی دروس



ترم بندی کارشناسی ارشد

ترم اول

| ردیف | نام درس | تعداد واحد | | |
|---------------|---------------------------|------------|----------|----------|
| | | نظری | عملی | جمع |
| ۱ | شیمی فیزیک پیشرفته | ۳ | - | ۳ |
| ۲ | ترمودینامیک آماری ۱ | ۳ | - | ۳ |
| ۳ | شیمی کوانتومی ۱ | ۳ | - | ۳ |
| ۴ | درس جبرانی (در صورت نیاز) | ۳ | - | ۳ |
| جمع کل | | ۹ | - | ۹ |

ترم دوم

| ردیف | نام درس | تعداد واحد | | |
|---------------|-------------|------------|----------|----------|
| | | نظری | عملی | جمع |
| ۱ | درس اختیاری | ۳ | - | ۳ |
| ۲ | درس اختیاری | ۳ | - | ۳ |
| ۳ | درس اختیاری | ۳ | - | ۳ |
| جمع کل | | ۹ | - | ۹ |



ترم سوم

| ردیف | نام درس | تعداد واحد | | |
|---------------|-------------|------------|------|-----|
| | | نظری | عملی | جمع |
| ۱ | درس اختیاری | ۳ | - | ۳ |
| ۲ | سمینار | ۱ | - | ۱ |
| ۳ | پایان نامه | ۶ | - | ۶ |
| جمع کل | | ۱۰ | - | ۱۰ |

ترم چهارم

| ردیف | نام درس | تعداد واحد |
|---------------|------------|------------|
| ۱ | پایان نامه | ۶ |
| جمع کل | | ۶ |



ترم بندی دکتری

ترم اول

| ردیف | نام درس | تعداد واحد | | |
|---------------|-------------|------------|------|-----|
| | | نظری | عملی | جمع |
| ۱ | درس اختیاری | ۳ | - | ۳ |
| ۲ | درس اختیاری | ۳ | - | ۳ |
| جمع کل | | ۶ | - | ۶ |

ترم دوم

| ردیف | نام درس | تعداد واحد | | |
|---------------|-------------|------------|------|-----|
| | | نظری | عملی | جمع |
| ۱ | درس اختیاری | ۳ | - | ۳ |
| ۲ | درس اختیاری | ۳ | - | ۳ |
| جمع کل | | ۶ | - | ۶ |

از نیمسال سوم، دانشجو بایستی آزمون جامع و دفاع از پروپوزال را انجام داده و سپس کارهای مربوط به رساله خود را آغاز نماید.

