جمهوری اسلامی ایران

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری

شورای گسترش و برنامه‌ریزی آموزش عالی

برنامه درسی رشته

شیمی

Chemistry

مقطع تحصیلات تکمیلی(کارشناسی ارشد ناپیوسته و دکتری تخصصی)

گرایش

Physical chemistry	**شیمی فیزیک**

گروه علوم پایه

پیشنهادی دانشگاه فردوسی مشهد

باسمه تعالی

نام رشته: شیمی

عنوان گرایش: شیمی فیزیک

گروه: علوم پایه

دوره تحصیلی: تحصیلات تکمیلی (کارشناسی ارشد ناپیوسته و دکتری تخصصی)

کارگروه تخصصی: شیمی

نوع مصوبه: بازنگری

پیشنهادی: دانشگاه فردوسی مشهد

تاریخ تصویب: ۱۴۰۰/۰۸/۱۶

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 برنامه‌ریزی 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 برنامه‌ریزی 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 محمدرضا آهنچیان

دبیر کمیسیون برنامه‌ریزی آموزشی

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
شورای عالی برنامه ریزی و آموزشی

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
شورای عالی برنامه ریزی و 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 تدوین‌شده 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 تدوین‌شده 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.

مرتضی کرمی
رئیس گروه برنامه‌ریزی آموزشی و درسی دانشگاه

ایمان الله بیگدلی
مدیر برنامه‌ریزی و توسعه آموزش دانشگاه

رضا پیش‌قدم
معاون آموزشی دانشگاه

رأی صادره جلسه مورخ ۹۹/۰۸/۱۲ شورای برنامه‌ریزی درسی دانشگاه در موردبازنگری برنامه درسی شیمی گرایش شیمی فیزیک در دوره‌های کارشناسی ارشد و دکتری صحیح است. به واحد ذی‌ربط ابلاغ شود.

محمد کافی
رئیس دانشگاه

معاونت آموزشی

شورای برنامه‌ریزی درسی

برنامه درسی

دوره‌های: کارشناسی ارشد و دکتری

رشته: شیمی

گرایش: شیمی فیزیک

فصل اول

کلیات

بسمه‌تعالی

تعریف رشته:

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

شیمی‌فیزیک 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 شیمی‌فیزیک (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 به‌صورت آموزشی-پژوهشی می‌باشد.

دانشجوی بایستی در نیمسال اول تحصیلی استاد راهنمای خود را طبق قوانین مصوب دانشگاه انتخاب و مراحل مربوط به پایان‌نامه / 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 پایان‌نامه می‌باشد.

برای دانش‌آموختگان کارشناسی که از رشته‌های غیر شیمی پذیرفته‌شده‌اند، 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 می‌باشد.

شرایط و ضوابط ورود به دوره:

کارشناسی ارشد: داشتن شرایط عمومی مطابق با مصوبات وزارت علوم، تحقیقات و فناوری و داشتن مدرک کارشناسی در رشته‌های شیمی، مهندسی مواد و مهندسی شیمی (از یکی از دانشگاه‌های 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 گرایش‌های شیمی، مهندسی مواد و مهندسی شیمی (از یکی از دانشگاه‌های 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			پیش‌نیاز/ هم نیاز
		نظری	عملی	جمع	نظری	عملی	جمع	
۱	شیمی‌فیزیک ۳	۳	–	۳	۴۸	–	۴۸	–
	جمع کل	۳	–	۳	۴۸	–	۴۸	–

جدول ۲- دروس تخصصی کارشناسی ارشد

ردیف	نام درس	تعداد واحد			تعداد ساعات			پیش‌نیاز/ هم نیاز
		نظری	عملی	جمع	نظری	عملی	جمع	
۱	شیمی‌فیزیک 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**	**–**	**–**	**۱۴۴**	**–**	**–**	

۱. دانشجویان کارشناسی ارشد شیمی‌فیزیک، با توجه به موضوع پایان‌نامه و با تأیید استاد راهنما، ۱۲ واحد از مجموعه واحدهای ارائه‌شده در جدول دروس تحصیلات تکمیلی (جدول شماره ۳) را می‌توانند اخذ نمایند.

۲. دانشجویان دکتری شیمی‌فیزیک، با توجه به موضوع رساله و با تأیید استاد راهنما، ۱۲ واحد از مجموعه واحدهای ارائه‌شده در جدول دروس تحصیلات تکمیلی (جدول شماره ۳) را می‌توانند اخذ نمایند.

۳. دانشجویان مقاطع تحصیلات تکمیلی (کارشناسی ارشد و دکتری)، با نظر استاد راهنما می‌توانند حداکثر ۳ واحد از مجموعه واحدهای تحصیلات تکمیلی ارائه‌شده در سایر گرایش‌های شیمی، گروه فیزیک و دانشکده مهندسی اخذ نمایند.

جدول ۳- بسته دروس تحصیلات تکمیلی

ردیف	نام درس	تعداد واحد			تعداد ساعات			پیش‌نیاز / هم نیاز
		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	شیمی کوانتومی ۱
۷	شبیه‌سازی مقیاس اتمی برای مولکول‌ها و اتم‌ها	۳	–	۳	۴۸	–	۴۸	شیمی کوانتومی ۱
۸	مدل‌سازی محاسباتی سینتیک شیمیایی	۳	–	۳	۴۸	–	۴۸	شیمی کوانتومی ۱
۹	شیمی کوانتومی ۲	۳	–	۳	۴۸	–	۴۸	شیمی کوانتومی ۱
۱۰	شیمی محاسباتی	۳	–	۳	۴۸	–	۴۸	شیمی کوانتومی ۱
۱۱	شیمی و فیزیک نانو ساختارها	۳	–	۳	۴۸	–	۴۸	–
۱۲	شیمی‌فیزیک پروتئین‌ها	۳	–	۳	۴۸	–	۴۸	–
۱۳	شیمی‌فیزیک 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	ترمودینامیک آماری ۱
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 حالت‌جامد	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	–
۲۹	[illegible] مولکولی ۲	۳	–	۳	۴۸	–	۴۸	–
۳۰	[illegible] آماری ۲	۳	–	۳	۴۸	–	۴۸	ترمودینامیک آماری ۱

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

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

فصل سوم:

سرفصل دروس

دروس تخصصی کارشناسی ارشد

مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): **شیمی‌فیزیک پیشرفته**			
عنوان درس (انگلیسی):**Advanced Physical Chemistry**			
نوع درس: تخصصی	پیش‌نیاز/ هم نیاز: دارد ☐	ندارد ■	پیش‌نیاز: -
تعداد واحد: ۳	نوع واحد: نظری		تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

- استفاده از اصول ترمودینامیکی برای پیش‌بینی 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 فازی

سرفصل درس

- **اصول موضوعه در ترمودینامیک کلاسیک**

  توابع ترمودینامیکی، معادلات اصلی در ترمودینامیک، فرایندهای برگشت‌پذیر و برگشت‌ناپذیر
- **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 تراکم‌پذیری، معادلات حالت واندروالس، ویریال 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:

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

فهرست منابع:

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

M. W. Zemamsky 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	پیش‌نیاز/ هم نیاز: دارد ☐	ندارد ■	پیش‌نیاز: -
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**

شیمی‌فیزیک، حوزه‌های شیمی‌فیزیک، 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 قابل‌دسترس، روش‌های مکانیک آماری شامل نظریه فضای فاز و نظریه انسامبل، برخی از پذیرهای نظریه انسامبل و فرضیه ارگودیک.

- **آمار بولتزمن-انسامبل کانونیکال**

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

- **آمار بولتزمن_ انسامبل گرندکانونیکال**

روش محتمل‌ترین سرعت، تابع مشخصه، خواص ترمودینامیکی انسامبل گرندکانونیکال با استفاده از تابع مشخصه، انسامبل میکروکانونیکال، نظریه افت‌وخیز شامل افت‌وخیز انرژی در کانونیکال انسامبل، افت‌وخیز تعداد ذرات در انسامبل گرند کانونیکال، یافتن تابع مشخصه با استفاده از نظریه افت‌وخیز برای انسامبل کانونیکال و گرندکانونیکال

- **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 دواتمی 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 دواتمی جور هسته شامل فرمیون‌ها و بوزون‌ها، خواص ترمودینامیکی شامل انرژی هلمهولتز، انرژی داخلی، فشار، انتروپی، پتانسیل شیمیایی، ظرفیت گرمایی در حجم ثابت.

- **گازهای چنداتمی 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 باقی‌مانده، 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:

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

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	پیش‌نیاز/ هم نیاز: دارد ☐	ندارد ■	پیش‌نیاز: -
تعداد واحد: ۳	نوع واحد: نظری		تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

- استفاده از کوانتوم به‌عنوان 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 قابل‌انتظار 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-انیشتین، 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، برهم‌کنش 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	میان‌ترم	آزمون نهایی	پروژه
٪۱۰ ٪۲۰ تکالیف	٪۲۰	نوشتاری: ٪۵۰ عملکردی: -	-

فهرست منابع:

Hecht, K. T. (2000). *Quantum Mechanics*, Springer, New York.

Szabo, A. & Ostlund, N. S. (2000). M*odern 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., Wiely.

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	پیش‌نیاز/ هم نیاز: دارد ☐	ندارد ■	پیش‌نیاز: -
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 تجزیه‌وتحلیل 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 بین‌مولکولی، 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 گام‌به‌گام، 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 گرانروی و دما، واکنش‌های کنترل نفوذی بین یون‌ها، انتقال به واکنش‌های کنترل‌شده با فعال‌سازی، فرمول ترمودینامیکی ضریب سرعت، اثرات قدرت یونی، تأثیر فشار بر ضریب سرعت، دینامیک واکنش‌های محلول، واکنش‌های قفس، واکنش-های خوشه‌ای، الکترون حلال‌پوشی 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:

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

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 پیلینگ و پال دبلیو 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	پیش‌نیاز/ هم نیاز: دارد ☐	ندارد ■	پیش‌نیاز: -
تعداد واحد: ۳	نوع واحد: نظری		تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

- آشنایی با سینتیک واکنش‌های آنزیمی ساده و پیچیده
- شناخت واکنش‌های دو سوبسترایی
- آشنایی با عوامل محیطی تأثیرگذار بر فعالیت آنزیم‌ها

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد:

- کاربرد نظریه‌های سینتیک آنزیمی در مطالعه پیوند یون یا مولکول کوچک به آنزیم و بررسی تأثیر این پیوند در فعالیت کاتالیزور حیاتی آنزیم
- تشخیص شرایط بهینه به‌کارگیری آنزیم‌ها
- طراحی مهارکننده‌ها و فعال‌کننده‌های آنزیمی

سرفصل درس:

- **سینتیک ساده واکنش‌های آنزیمی**
  - سینتیک آنزیم‌های با یک جایگاه فعال
  - روش تعادل سریع و حالت یکنواخت
  - سرعت اولیه و معادله میکائلیس – منتون
  - سنجش‌های آنزیمی
  - تعیین ثابت‌های سینتیکی آنزیم، روش‌های لینویور-برگ، هانز-ولف، ادی-هافستی و غیره
  - محدودیت‌های معادله میکائلیس – منتون
  - روش دیکسون در تعیین ثابت‌های سینتیکی آنزیم
  - ثابت‌های میکائلیس سوبسترا و محصول و سرعت کلی (غیر اولیه) واکنش آنزیمی
  - آنزیم‌های 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 سوبسترایی تصادفی و ترتیبی
  - آنزیم‌های دو سوبسترایی با مکانیسم پینگ پنگی
- **سینتیک فعال شدن آنزیمی**
  - فعال‌کننده‌های غیرضروری آنزیم
  - فعال‌کننده‌های ضروری آنزیم
  - رقابت مهارکننده و فعال‌کننده با یکدیگر
  - ضدمهارکننده و ضدفعال کننده 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:

ارزشیابی مستمر	میان‌ترم	آزمون نهایی	پروژه
٪۳۰ ٪۳۰ تکالیف	-	نوشتاری: ٪۴۰ عملکردی: -	-

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	پیش‌نیاز/ هم نیاز: دارد ☐	ندارد ■	پیش‌نیاز: -
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 راماچاندران
- پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین
- نوکلئوتیدها - تعادلات یونش بازها
- اتومری 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:

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

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): **روش‌های مطالعه ساختار و عمل زیستی**			
عنوان درس (انگلیسی):**Techniques for the Study of Biological Structure and Function**			
نوع درس: اختیاری	پیش‌نیاز/ هم نیاز: دارد ☐	ندارد ■	پیش‌نیاز: -
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 روش‌های طیف‌سنجی، روش‌های هیدرودینامیکی و روش‌های گرماسنجی

سرفصل درس:

- ساختار درشت‌مولکول‌های زیستی
- عملکرد درشت‌مولکول‌های زیستی
- طیف‌سنجی فرابنفش - مرئی
- طیف‌سنجی فروسرخ و رامان
- مشتقات طیفی
- طیف‌سنجی فلورسانس
- طیف‌سنجی ORD و CD
- طیف‌سنجی NMR
- ویسکومتری
- ته‌نشینی
- الکتروفورز
- ITC, DSC
- QSAR
- QM
- MD

روش یاددهی- یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

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

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/ هم نیاز: دارد ☐ ندارد ■ | پیش‌نیاز: -

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

اهداف درس:

- درک روش‌ها، توانایی‌ها و محدودیت‌های شبیه‌سازی مولکولی جهت قضاوت درزمینه‌ی 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، لناردجونز، 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، مدل‌های 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 مونت‌کارلو، معرفی شبیه‌سازی مونت‌کارلو شامل: مراحل اساسی در شبیه‌سازی مونت‌کارلو متروپولیس، معرفی شبیه‌سازی مونت‌کارلو، شبیه‌سازی مونت‌کارلو در انسامبل‌های مختلف، شبیه‌سازی‌های مولکولی ترکیبی شامل: مونت‌کارلو 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 قابل‌انتظار میانگین نمونه‌ای، شرایط مرزی تناوبی شامل: تعداد سلول‌های تصویری، نوع جعبه، محدودیت‌ها، قرارداد حداقل تصویر، پتانسیل قطع‌شده (truncation potential)، پتانسیل نیروی انتقال‌یافته (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 کاهش‌یافته، 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 ورلت، الگوریتم سرعت ورلت، الگوریتم جهشی ورلت، 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 قابل‌اطمینان بودن نتایج شامل: مرحله تعادل، بررسی قوانین بقا و بررسی مقادیر خواص مختلف.

- **دینامیک مولکولی انسامبل‌ها**

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، برندسن)، انسامبل هم‌فشار-هم‌انتالپی، روش‌های کنترل فشار با استفاده از مقیاس‌بندی حجم، باروستات‌ها (برندسن، 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، تراکم‌پذیری آدیاباتیک، ضریب فشار گرمایی، خواص انتروپی شامل: انتروپی، انتگرال‌گیری 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 نرم افزارهای دینامیک مولکولی مانند نرم‌افزار DL_POLY، نرم‌افزار LAMMPS، نرم‌افزار GROMACS.

روش یاددهی- یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان‌ترم	آزمون نهایی	پروژه
٪۱۰ ٪۲۰ تکالیف	٪۲۰	نوشتاری: ٪۵۰ 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.

شاهی، الهه؛ موسوی، مجید و موسوی، فاطمه (۱۳۹۳). *مبانی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی*، 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): **نانو مواد: شبیه‌سازی و طراحی**			
عنوان درس (انگلیسی):**Nanomaterials: Design and Simulation**			
نوع درس: اختیاری	پیش‌نیاز/ هم نیاز: دارد ■	ندارد □	پیش‌نیاز: 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 با الکتروستاتیک پیشرفته
- مشخصه‌های الکتریکی توده
- خواص ساختاری نانوخوشه‌های خالص و مخلوط با استفاده از شبیه‌سازی‌های کامپیوتری
- شبیه‌سازی انتقال فاز مایع–جامد در نانوذرات فلزی
- شبیه‌سازی نانوخوشه‌های بور
- شبیه‌سازی کامپیوتری نانوخوشه‌های کربن و نانوخوشه‌های معدنی
- شبیه‌سازی چندمرحله‌ای تهیه نانودات‌های کوانتومی و آرایه‌های آن‌ها
- مشخصه‌یابی ساختاری مواد متخلخل نانو و مزو با استفاده از شبیه‌سازی مولکولی
- پایداری گرمایی نانوسامانه‌های کربنی

• شبیه‌سازی و مدل‌سازی نانولوله‌های کربنی

روش یاددهی- یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

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

فهرست منابع:

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

Balbuena, P. B. & Seminario, J. M. (2007). N*anomaterials: 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/ هم نیاز: 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، کربوهیدارت‌ها و لیپیدها) پلیمرها (بلورها، سامانه‌های آمورف و کوپلیمرها)، نیمه‌رساناها (گروه IV, III-V، سطوح و نقوص)، سامانه‌های معدنی (سرامیک‌ها، زئولیت‌ها، 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 نیمه‌تجربی و کارایی آنان
- **امتیازات روش‌های ab initio، نظریه تابعی چگالی و مکانیک کوانتومی حالت‌جامد**

  سامانه‌های open-shell، همبستگی الکترونی، ملاحظات تجربی در انجام محاسبات ab initio، تحلیل جزء انرژی، نظریه تابعی چگالی، روش‌های مکانیک کوانتومی مطالعه حالت‌جامد

- **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 حالت‌جامد

- **روش‌های شبیه‌سازی کامپیوتری**

محاسبه خواص ترمودینامیک ساده، فضای فاز، جنبه‌های کاربردی و عملی شبیه‌سازی کامپیوتری، مرزها، دیده‌بانی تعادل، قطع پتانسیل و قرارداد حداقل تصویر، 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، واردکردن اثر حلال به شبیه‌سازی دینامیک مولکولی: پتانسیل‌های نیروی میانگین و دینامیک اتفاقی، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی زنجیرهای آمفیفیل، بقای انرژی در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

- **شبیه‌سازی مونت‌کارلو**

محاسبه خواص با استفاده از انتگرال‌گیری، پیش‌زمینه نظری روش متروپولیس، انجام روش مونت‌کارلو متروپولیس، مدل‌های استفاده‌شده در شبیه‌سازی مونت‌کارلوی پلیمرها، روش‌های مونت‌کارلوی Biased، مسئله Quasi-ergodicity، انسامبل‌های مختلف در شبیه‌سازی مونت‌کارلو، محاسبه پتانسیل شیمیایی، شبیه‌سازی تعادلات فازی توسط شبیه‌سازی مونت‌کارلوی 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 simlulated 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 حالت‌جامد**

محاسبات انرژی آزاد، محاسبه تفاوت‌های انرژی آزاد، کاربردهای روش‌های محاسبه تفاوت‌های انرژی آزاد، محاسبه تفاوت‌های انتالپی و انتروپی، تقسیم‌بندی انرژی آزاد، pitfall های 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 حالت‌جامد

- **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:

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

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): **مدل‌سازی محاسباتی سینتیک شیمیایی**			
عنوان درس (انگلیسی):**Computational Modeling of Chemical Kinetics**			
نوع درس: اختیاری	پیش‌نیاز/ هم نیاز: دارد ■	ندارد □	پیش‌نیاز: شیمی کوانتومی ۱
تعداد واحد: ۳	نوع واحد: نظری		تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

کاربرد مدل‌سازی محاسباتی در تعیین سرعت و مکانیسم واکنش‌های شیمیایی

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد:

مدل‌سازی سینتیک واکنش‌های مختلف در فاز گازی و محلول

سرفصل درس:

- نظریه حالت گذار
- مروری بر پیشرفت‌های اخیر در نظریه TST- حالت گذار وردشی
- حالت گذار میکروکانونیکال-کانونیکال
- بررسی کوانتومی TST
- مسیرهای تونلی-ضرایب انتقال
- شبیه‌سازی حالت گذار با روش‌های درون‌یابی
- شبیه‌سازی حالت گذار موضعی (روش‌های زینی-زنجیری-نیوتن رافسون و غیره)
- شبیه‌سازی سطوح پتانسیل (PESکانتورها-نیمرخ‌ها)
- سدهای پتانسیل تدریجی و ناگهانی
- مطالعه حالت گذار در واکنش‌های آلی
- مدل‌سازی محاسباتی سینتیک واکنش‌ها در فاز گازی (روش‌های آغازین و تابعی دانسیته)
- واکنش‌های هماهنگ همزمان و غیر همزمان-اندیس‌های ویبرگ
- مدل‌سازی محاسباتی سینتیک واکنش‌ها در فاز محلول
- اثرات قطبیت- پتانسیل‌های الکتروستاتیک-شبیه‌سازی حالت گذار یونی
- مدل‌سازی محاسباتی سینتیک واکنش‌ها در سطح جامد (نانولوله‌ها)

- مدل‌سازی محاسباتی سامانه‌های زیستی (حالات گذار- مطالعه انواع پیوند هیدروژنی)
- روش‌های تلفیقی QM/MM
- کارگاه مدل‌سازی ۱-بهینه‌سازی ساختار
- کارگاه مدل‌سازی ۲- محاسبات ترموشیمی
- کارگاه مدل‌سازی ۳- محاسبات قدرت اسیدی و بازی در محلول
- کارگاه مدل‌سازی ۴- تعیین ساختار حالت گذار گازی
- کارگاه مدل‌سازی ۵- تعیین ساختار حالت گذار در محلول
- چند نمونه مطالعه موردی

روش یاددهی- یادگیری:

روش تدریس توضیحی سمینار دانشجویی

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان‌ترم	آزمون نهایی	پروژه
٪۱۰ ٪۲۰ تکالیف	٪۲۰	نوشتاری: ٪۵۰ 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	پیش‌نیاز/ هم نیاز: دارد ■	ندارد □	پیش‌نیاز: 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-انیشتین از دیدگاه کوانتومی
- میدان خودسازگار هارتری، نظریه HF و بررسی اتم‌ها
- بررسی یون مولکول هیدروژن، مولکول هیدروژن و مولکول‌های دواتمی
- نظریه پیوند ظرفیت و اربیتال مولکولی، مدل‌های اصلاح‌شده آن‌ها و مقایسه آن‌ها
- محاسبه چگالی احتمال الکترون و بررسی عدد اشغال در سامانه‌های کوانتومی
- قضایای کوانتومی: ویریال، الکتروستاتیک، هلمن-فاینمن
- بررسی مختصر نظریه تابعی چگالی و کاربردهای آن در شیمی

روش یاددهی- یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان‌ترم	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**			
نوع درس: اختیاری	پیش‌نیاز/ هم نیاز: دارد ■	ندارد □	پیش‌نیاز: شیمی کوانتومی ۱
تعداد واحد: ۳	نوع واحد: نظری		تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

بررسی روش‌های شیمی محاسباتی در مطالعه ساختار و خواص سامانه‌های اتمی و مولکولی

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد:

تسلط بر شیمی محاسباتی

سرفصل درس:

- **مقدمه**

  تعریف محاسباتی و تفاوت آن با شیمی نظری و مدل‌سازی، کمیت‌های قابل‌محاسبه، برآورد هزینه و کارایی در محاسبات شیمیایی

- **مکانیک مولکولی**

  اصول، توابع انرژی پتانسیل، میدان نیرو، بهینه‌سازی ساختاری

- **شبیه‌سازی مجموعه مولکولی**

  فضای فازی و گذرگاه‌ها، دینامیک مولکولی، مونت‌کارلو

- **نظریه اربیتال مولکولی**

  بررسی توابع موج در شیمی کوانتومی، توابع آزمون، نظریه هوکل، توابع موج چند الکترونی

- **محاسبات نیمه تجربی**

  نظریه هوکل توسعه‌یافته، NDDO, CNDO, INDO

- **روش‌های آغازین**

  مجموعه‌های پایه، نظریه HF، کاربرد آن در محاسبه انرژی، توزیع بار و شکل هندسی

- **روش‌های همبستگی الکترونی**

  نظریه CI، SCF، نظریه اختلال و CCT

- **نظریه 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:

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

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 | پیش‌نیاز/ هم نیاز: دارد ☐ | ندارد ■ | پیش‌نیاز: -

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 منحصربه‌فرد 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**

کشش‌سطحی و روش‌های اندازه‌گیری آن، زاویه تماس و روش‌های اندازه‌گیری آن، پدیده ترشوندگی، سطوح ابر آب‌دوست و ابر آب‌گریز، طبقه‌بندی مواد فعال‌سطحی، کنترل کشش‌سطحی (سورفکتانت‌ها، Hydrophilization، Electrowetting)، 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 هم‌دماهای 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 نشرمیدانی، میکروسکوپ الکترونی عبوری، میکروسکوپ الکترونی عبوری با قدرت تفکیک بالا و میکروسکوپ الکترونی روبشی عبوری، میکروسکوپ الکترونی‌های غیر الکترونی شامل میکروسکوپ تونلی روبشی و میکروسکوپ نیروی اتمی، پراش پرتو ایکس، فلورسانس پرتوایکس، طیف‌سنجی فوتوالکترون پرتوایکس، طیف‌سنجی الکترون اژه

- **روش‌های تهیه مواد نانوساختار**

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

روش یاددهی- یادگیری:

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

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان‌ترم	آزمون نهایی	پروژه
٪۱۰ ٪۲۰ تکالیف	٪۲۰	نوشتاری: ٪۵۰ 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. Filipponi, 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): **شیمی‌فیزیک پروتئین‌ها**			
عنوان درس (انگلیسی):**Physical Chemistry of Proteins**			
نوع درس: اختیاری	پیش‌نیاز/ هم نیاز: دارد ☐	ندارد ■	پیش‌نیاز: -
تعداد واحد: ۳	نوع واحد: نظری		تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

- شناخت مسیر تاخوردگی پروتئین‌ها از حالت بازشده به حالت طبیعی (تاخورده)
- شناخت حدواسط ایجادشده 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 برتاخوردن پروتئین
- چگونگی پیش‌بینی تاخوردگی پروتئین

سرفصل درس:

- نگرش فیزیکی بر تاخوردگی پروتئین و مراحل آن
- نقش حدواسط‌ها در تاخوردگی پروتئین و نقش مولتن گلبول 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:

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

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.

موسوی‌موحدی، علی‌اکبر؛ خان‌چمنی، جمشید؛ تقوی، امیرحسین و مقدم‌نیا سیدحسن (۱۳۸۳). *پروتئین، ساختار و عملکرد*، موسسه چاپ و انتشارات دانشگاه تهران.

مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): **شیمی‌فیزیک پلیمرها**			
عنوان درس (انگلیسی):**Physical Chemistry of Polymers**			
نوع درس: اختیاری	پیش‌نیاز/ هم نیاز: دارد ☐	ندارد ■	پیش‌نیاز: -
تعداد واحد: ۳	نوع واحد: نظری		تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

آشنایی و تسلط بر اصول شیمی‌فیزیک پلیمرها

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد

درک شیمی‌فیزیک پلیمرها

سرفصل درس:

- **مقدمه**

  خواص فیزیکی پلیمرها، ساختمان شیمیایی پلیمرها، انواع پیوندها.

- **انعطاف‌پذیری 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.

- **خودپذیری 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 تکالیف	٪۲۰	نوشتاری: ٪۵۰ 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). *شیمی‌فیزیک پلیمرها*، انتشارات دانشگاه صنعتی امیرکبیر.

جعفری، سیدحسن؛ سیفی، جواد و بنکدار حسین‌علی (۱۳۹۲). *مبانی شیمی‌فیزیک 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/ هم نیاز: 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:

تجزیه‌وتحلیل 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 میکروارگانیسم‌ها توسط نانوفوتوکاتالیزورها
- نقش نانوفوتوکاتالیزورها در شکافت آب و کاهش کربن‌دی‌اکسید
- نقش نانوفوتوکاتالیزورها در تبدیل انرژی خورشیدی و حفاظت از محیط‌زیست

روش یاددهی- یادگیری:

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

کلاس

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان‌ترم	آزمون نهایی	پروژه
٪۳۰ تکالیف	٪۳۰	نوشتاری: ٪۴۰	-
		عملکردی: -	

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): **زیست‌حسگرها**			
عنوان درس (انگلیسی):**Biosensors**			
نوع درس: اختیاری	پیش‌نیاز/ هم نیاز: دارد ☐	ندارد ■	پیش‌نیاز: -
تعداد واحد: ۳	نوع واحد: نظری		تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

- آشنایی با مبانی احساس شیمیایی در موجودات زنده و نحوه مشابه‌سازی به‌گونه‌ای که منجر به ساخت زیست‌حسگر شود.
- شناخت انواع مبدل‌های فیزیکی که بتوانند عملکرد اختصاصی گیرنده‌های زیستی را به سیگنال الکتریکی قابل‌اندازه‌گیری تبدیل کنند.
- یادگیری فنون ساخت و کاربردهای زیست‌حسگرها در زمینه‌های مختلف از جمله در تشخیص‌های پزشکی، آنالیز نمونه‌های صنعتی، اتوماسیون فرایندها، کنترل‌های زیست‌محیطی و کاربردهای نظامی

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد:

- شناخت انواع مبدل‌های فیزیکی
- یادگیری فنون ساخت زیست‌حسگرها

سرفصل درس:

- **کلیات**
  - تعریف، اساس کار و دسته‌بندی
  - احساس شیمیایی – انتقال پیام شیمیایی در موجودات زنده
  - طراحی زیست‌حسگرها به تقلید از موجودات زنده
- **کاربردها**
  - کاربرد زیست‌حسگرها در شرایط In vivo
  - کاربرد تشخیص پزشکی
  - آنالیزهای صنعتی اتوماسیون فرایندها
  - کنترل زیست‌محیطی

- کاربردهای نظامی

- **مثال‌ها**

-زیست‌حسگر قند خون، آشکارسازهای عوامل شیمیایی، زیست‌حسگر آشکارساز ویروس‌ها

- **عناصر زیستی**
  - آنزیم‌ها، آنتی‌بادی‌ها، اسیدهای نوکلئیک و گیرنده‌ها
  - بافت‌های گیاهی یا جانوری، ریزاندامگان، اجزای سلولی (میتوکندری)
- **تثبیت اجزای زیستی (فنون ساخت زیست‌حسگرها)**
  - روش‌های فیزیکی جذب، سینتیک جذب (هم‌دمای لانگمویر)، 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 غیرکربنی، پلیمر الکترودها، الکترودهای یک‌بارمصرف
- **مبدل‌های فیزیکی**
  - مبدل‌های الکتروشیمیایی

الف - روش‌های پتانسیومتری، اساس کار، الکترودهای مرجع، معادله نرنست، الکترودهای یون گزین (غشاء شیشه، غشاء حالت‌جامد، 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، مبدل‌های BAW, SAW
- مبدل‌های گرمایی، ترمیستور و زیست‌حسگرهای گرمایی

- **عوامل مؤثر بر عملکرد زیست‌حسگرها**
  - 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 زیست‌حسگر
- طول عمر – پایداری در طول عملیات، پایداری در زمان نگهداری

روش یاددهی- یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان‌ترم	آزمون نهایی	پروژه
۳۰٪ ۳۰٪ تکالیف	-	نوشتاری: ۴۰٪ عملکردی: -	-

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 زیست‌حسگرها*، ترجمه هدایت الله قرچیان، انتشارات دانشگاه تهران.

مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): **نانوکاتالیزورها**

عنوان درس (انگلیسی):**Nanocatalysts**

نوع درس: اختیاری | پیش‌نیاز/ هم نیاز: دارد ☐ ندارد ■ | پیش‌نیاز: –

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

اهداف درس:

- بررسی حساسیت ساختاری در واکنش‌های کاتالیزوری ناهمگن
- آشنایی با روش‌های ساخت کاتالیزورهای نانوساختاری

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد

- درک واکنش‌های سطحی ناهمگن
- آشنایی با روش سنتز کاتالیزورها و نانوکاتالیزورهای جامد
- آشنایی با روش‌های ارزیابی خصوصیات شیمی‌فیزیکی کاتالیزورهای جامد

سرفصل درس:

- واکنش‌ها بر روی سطح جامدات،
- ساختار بلوری جامدات، انواع سطوح و ساختار آن‌ها از دید مولکولی
- روش‌های بررسی خصوصیات سطحی جامدات به روش‌های جذب و دفع دمایی،
- طیف‌سنجی و تصویربرداری الکترونی
- انواع کاتالیزورهای ناهمگن (پایه‌دار و توده‌ایی)
- روش‌های متداول در ساخت کاتالیزورهای نانوساختاری
- تأثیر نانو ابعاد بر واکنش‌های کاتالیزوری و روش‌های بررسی آن‌ها
- بررسی حساسیت ساختاری در واکنش‌های کاتالیزوری
- تأثیر ابعاد فاز فعال بر سرعت واکنش‌های کاتالیزوری
- بررسی مداخلات پایه با فاز فعال در نانوکاتالیزورهای پایه‌دار
- روش‌های لیتوگرافی در نانوکاتالیزورها، نانوکاتالیزورهای چندعاملی
- نانوفوتوکاتالیزورها
- نقش نانو ابعاد در فرایندهای غیرفعال شدن کاتالیزورها،

- جنبه‌های شیمی فیزیکی در کاربرد نانوکاتالیزورها
- شبیه‌سازی واکنش‌های نانوکاتالیزوری بین سطحی.

روش یاددهی- یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

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

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/ هم نیاز: 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 کربن‌دی اکسید

- **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 سلول‌سوختی، سلول‌های سوختی با غشای پلیمری؛ ساختار و عملکرد، سلول‌های سوخت اکسید جامد، سلول‌های سوختی میکروبی، کاربردهای سلول‌های سوختی

- **فتوولتاییک خورشیدی**

معرفی، مبانی PV خورشیدی، تکامل فوتوولتاییک، 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

- **زیست‌توده (Biomass)**

معرفی، ترکیب شیمیایی زیست‌توده، گزینه‌های واکنش‌پذیری و تبدیل، شروع زیست‌توده: برداشت و پردازش، فرایندهای ترموشیمیایی، فرایندهای بیوشیمیایی

روش یاددهی- یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان‌ترم	آزمون نهایی	پروژه
٪۱۰ ٪۲۰ تکالیف	٪۲۰	نوشتاری: ٪۵۰ 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 Revie*ws (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	پیش‌نیاز/ هم نیاز: دارد ■	ندارد □	پیش‌نیاز: ترمودینامیک آماری ۱
تعداد واحد: ۳	نوع واحد: نظری		تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

آشنایی با مکانیک آماری سامانه‌هایی که در تعادل به دلیل افت‌وخیزهای خودبه‌خود 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 افت‌وخیز

- قضیه افت وخیز-اتلاف (Fluctuation-Dissipation Theorem)
- روابط کاری غیرتعادلی
- انتگرال مسیر در مطالعه فرایندهای تصادفی

روش یاددهی- یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

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

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/ هم نیاز: دارد ☐	ندارد ■	پیش‌نیاز: -
تعداد واحد: ۳	نوع واحد: نظری		تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

- کسب بینش در زمینه پدیده‌های بین سطحی و سامانه‌های کلوییدی
- آشنایی با طیف گسترده‌ای از زمینه‌های کاربردی شیمیایی، دارویی، متالورژی، زیست‌فناوری، نانوفناوری 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 دوجزئی
- 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
- زوایه تماس و ترشوندگی
- بررسی ترمودینامیکی زاویه تماس
- اندازه‌گیری 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	میان‌ترم	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	پیش‌نیاز/ هم نیاز: دارد ☐	ندارد ■	پیش‌نیاز: -
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 تجزیه‌وتحلیل 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 به‌عنوان 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 حبابی و سونولومینسانس چند حبابی)
- 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:

ارزشیابی مستمر	میان‌ترم	آزمون نهایی	پروژه
۳۰٪ تکالیف	۳۰٪	نوشتاری: ۴۰٪	-
		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	پیش‌نیاز/ هم نیاز: دارد ☐	ندارد ■	پیش‌نیاز: -
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 فازی

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 حالت‌جامدات تحت‌فشار
- بررسی ترمودینامیک سطحی در کاتالیزوری جامد

روش یاددهی- یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

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

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	پیش‌نیاز/ هم نیاز: دارد ☐	ندارد ■	پیش‌نیاز: -
تعداد واحد: ۳	نوع واحد: نظری		تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

آشنایی با قواعد حاکم بر برهم‌کنش و اتصال هدفمند درشت‌مولکول‌های زیستی و سایر مولکول‌های مرتبط با آن‌ها

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد

- شناخت انواع برهم‌کنش‌های درون‌مولکولی و بین‌مولکولی
- بازشناخت مولکولی در سامانه‌های مختلف زیستی
- آشنایی با طراحی دارو

سرفصل درس:

- بازشناخت مولکولی در فرایندهای زیستی
- مبانی فیزیکی برهم‌کنش مولکول‌ها و خواص مولکولی مرتبط با آن
- انواع نیروهای بین‌مولکولی شامل واندروالسی، الکترواستاتیکی، هیدروژنی، آب‌گریزی و غیره
- اثر حلال در بازشناخت مولکولی و روش‌های محاسبه آن
- بازشناخت مولکولی در برهم‌کنش 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 برهم‌کنش آنتی‌ژن – آنتی‌بادی
- مکانیسم‌های بازشناخت مولکولی ایستا و دینامیک
- نقش بازشناخت مولکولی در شبکه‌های زیستی
- معرفی پایگاه داده‌های مرتبط با بازشناخت زیست مولکولی

روش یاددهی- یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان‌ترم	آزمون نهایی	پروژه
٪۳۰ ٪۳۰ تکالیف	-	نوشتاری: ٪۴۰ عملکردی: -	-

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	پیش‌نیاز/ هم نیاز: دارد ☐	ندارد ■	پیش‌نیاز: -
تعداد واحد: ۳	نوع واحد: نظری		تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

- آشنایی با اطلاعات آزمایشگاهی موردنیاز 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 موردنیاز 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 شیمی‌فیزیکی نظیر مدل‌سازی ترمودینامیکی، مدل‌سازی سینتیکی و داده‌های هیدرودینامیکی موردنیاز
- 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 موردنیاز
- تهیه تجهیزات فرایندی و اطلاعات اولیه واحد
- ارزیابی انواع فرایندهای شیمیایی

روش یاددهی- یادگیری:

توضیحی

روش ارزیابی:

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

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 حالت‌جامد**			
عنوان درس (انگلیسی):**Solid State Chemistry**			
نوع درس: اختیاری	پیش‌نیاز/ هم نیاز: دارد ☐	ندارد ■	پیش‌نیاز: -
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)
- بررسی ساختارهای بلوری یونی
- انجام 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 تکالیف	٪۲۰	نوشتاری: ٪۵۰ 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/ هم نیاز: 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 خارج دانه‌ای 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
- [illegible]های انتقال سیال درون محیط‌های متخلخل

روش یاددهی- یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

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

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/ هم نیاز: 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
- تجزیه‌وتحلیل 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 مولکولی

• روش‌های پراش پرتوایکس و پراش الکترونی

روش یاددهی- یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

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

فهرست منابع:

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

R. J. Abraham, & Mobli, M. (2008). *Modelling ^{1}HNMR 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/ هم نیاز: 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 مولکول 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، تاخوردن و بازشدن 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	میان‌ترم	آزمون نهایی	پروژه
٪۱۰ ٪۲۰ تکالیف	٪۲۰	نوشتاری: ٪۵۰ عملکردی: -	-

فهرست منابع:

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

رنه آلبانی، جیهاد (۱۳۹۱). *اصول و مبانی طیف‌سنجی فلورسانس*، ترجمه علی‌اکبر 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/ هم نیاز: 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
- الگوهای 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	پیش‌نیاز/ هم نیاز: دارد ■	ندارد □	پیش‌نیاز: 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 دبای، 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 ویریال با استفاده از مکانیک آماری، تقریب جمع جفت گونه، تابع f- مایر، ضریب سوم ویریال با در نظر گرفتن تقریب جمع جفت گونه، نمایش گرافیکی ضرایب ویریال «انبساط خوشه»، ضریب دوم ویریال، وابستگی دمایی، چند مدل پتانسیل، گازهای شامل مولکول‌های غیر کروی، استخراج تابع انرژی پتانسیل برهم‌کنش بین دو مولکول، روش برازش، روش وارونگی، تصحیحات

کوانتومی، اصل حالت‌های متناظر، ضریب سوم ویریال، 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 ویریال، 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 ویریال، 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- اندرسون، نظریه‌ی وردشی

روش یاددهی- یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان‌ترم	آزمون نهایی	پروژه
٪۴۰ ٪۴۰ تکالیف	-	نوشتاری: ٪۲۰ 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، ا لهه 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 | پیش‌نیاز/ هم نیاز: دارد ☐ ندارد ■ | پیش‌نیاز: -

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

اهداف درس:

- طراحی و بررسی خواص و رفتار برهم‌کنش‌های مولکولی
- به‌کارگیری علوم در سطح مولکولی برای طراحی دستگاه‌ها، فرایندها و فناوری‌های پیشرفته

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد:

توانایی طراحی دستگاه‌ها، فرایندها و فناوری‌های پیشرفته در سطح مولکولی

سرفصل درس:

- روش-رابطه کمی ساختار- عملکرد (QSAR)
- رابطه کمی ساختار- خاصیت (QSPR)
- طراحی حساس کننده‌های نوری
- طراحی پیش‌دارو و آنالیز اربیتال‌های مولکولی
- طراحی مواد با خاصیت آنتی‌باکتریایی
- طراحی برخی از الگوهای مولکولی برای ذخیره هیدروژن
- طراحی کاتالیزور و زئولیت‌های مناسب برای جذب سطحی گازها و مواد شیمیایی فعال
- طراحی مایعات یونی جدید برای جذب گازهای کربن‌دی‌اکسید و هیدروژن‌سولفید
- طراحی مقلدهای آنزیمی
- طراحی زیست‌حسگرهای زیستی

روش یاددهی- یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

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

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	پیش‌نیاز/ هم نیاز: دارد ☐	ندارد ■	پیش‌نیاز: -
تعداد واحد: ۳	نوع واحد: نظری		تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

- آشنایی با روش‌های تحقیق و روش‌شناسی آن
- تعریف و تدوین طرح تحقیقاتی
- حق‌وحقوق 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 پیشنهاده (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
- معرفی نشریات معتبر بین‌المللی و معیارهای ارزیابی و نمایه‌سازی نشریات علمی

- معرفی کتابخانه دیجیتال
- جایگاه مقالات استنادی و رویکردهای نوین در تجزیه‌وتحلیل 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 ٪۴۰ تکالیف	-	نوشتاری: ٪۲۰ 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 شیمی‌فیزیک**			
عنوان درس (انگلیسی): **Special Topics in Physical Chemistry**			
نوع درس: اختیاری	پیش‌نیاز/ هم نیاز: دارد ☐	ندارد ■	پیش‌نیاز: -
تعداد واحد: ۳	نوع واحد: نظری		تعداد ساعت: ۴۸

اهداف درس:

آشنایی با آخرین پیشرفت‌های علمی در شیمی‌فیزیک

توانایی و شایستگی‌هایی که درس پرورش می‌دهد

آشنایی با مباحثی فراتر از مباحث شیمی‌فیزیکی مرسوم

سرفصل درس:

عناوین مطرح‌شده در این درس توسط استاد (اساتید) مربوطه در هرسال 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	میان‌ترم	آزمون نهایی	پروژه
٪۱۰ ٪۲۰ تکالیف	٪۲۰	نوشتاری: ٪۵۰ عملکردی: -	-

فهرست منابع:

جدیدترین منابع معتبر در شیمی‌فیزیک

مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): **شیمی آلی پیشرفته**			
عنوان درس (انگلیسی):**Advanced Organic Chemistry**			
نوع درس: اختیاری	پیش‌نیاز/ هم نیاز: دارد ☐	ندارد ■	پیش‌نیاز: -
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 غیرکلاسیک

- **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 امین، 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) منبع 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 درون‌مولکولی، نوآرایی و شکست، فرایند استخلاف S_{RN1}

روش یاددهی- یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

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

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 Sythesis*, Springer.

مشخصات درس:

عنوان درس (فارسی): **شیمی تجزیه پیشرفته**

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

نوع درس: اختیاری | پیش‌نیاز/ هم نیاز: دارد ☐ | ندارد ■ | پیش‌نیاز: –

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 غیرآبی
- استانداردهای شیمیایی
- کاربرد تیتراژهای اسید و باز
- حلالیت و رسوب‌ها
- تشکیل و خواص رسوب‌ها و آلودگی‌ها

روش یاددهی- یادگیری

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

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

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 پیش‌نیاز/ هم نیاز: دارد ☐ ندارد ■ پیش‌نیاز: –

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

اهداف درس:

- آشنایی با اصول و مفاهیم پیشرفته شیمی معدنی
- درک عمیق‌تر 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، حاصل‌ضرب 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 $\square_o$ در آرایش‌های d^n بر اساس انتقالات الکترونی

- **سینتیک واکنش‌های شیمیایی، ترکیبات کوئوردیناسیون و واکنش‌های آن‌ها**

روش یاددهی- یادگیری:

روش تدریس توضیحی

روش ارزیابی:

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

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	شیمی‌فیزیک 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	پایان‌نامه	۶	-	۶
جمع کل		۱۰	-	۱۰

ترم چهارم

ردیف	نام درس	تعداد واحد
۱	پایان‌نامه	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.