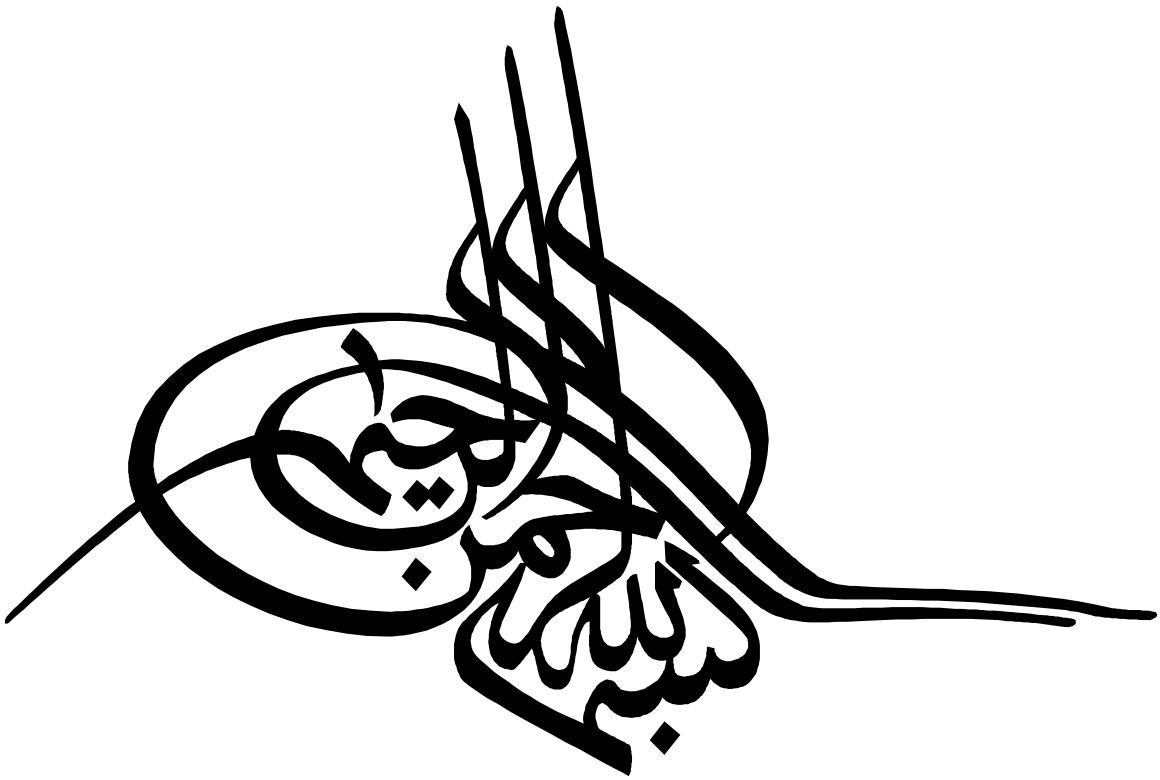
بسم الله الرحمن الرحيم

دانشکده شیمی
گروه شیمی‌فیزیک

جمهوری اسلامی ایران
وزارت علوم، تحقیقات و فناوری

دانشگاه اصفهان

مشخصات کلی برنامه و سرفصل دروس

تحصیلات تکمیلی گروه شیمی‌فیزیک

دانشکده شیمی

مصوب هفدهمین جلسه شورای دانشگاه

۱۴۰۲/۳/۲۱

دانشگاه اصفهان

دانشکده شیمی

گروه شیمی‌فیزیک

مشخصات کلی برنامه و سرفصل دروس

تحصیلات تکمیلی شیمی‌فیزیک

Graduate studies in Physical Chemistry

فهرست مطالب :

فصل اول : مشخصات کلی تحصیلات تکمیلی شیمی‌فیزیک

۱- مقدمه ۶
۲- اهداف ۶
۳ - اهمیت و ضرورت ۶
۴- نقش، توانایی و شایستگی دانش آموختگان ۷
۵- تعداد و نوع واحدهای درسی ۷

فصل دوم : جدول عناوین و مشخصات دروس

جدول ۱ : نوع دروس جبرانی کارشناسی ارشد شیمی‌فیزیک ۹
جدول ۲ : نوع دروس کارشناسی ارشد شیمی‌فیزیک ۹
جدول ۳ : نوع دروس دکتری شیمی‌فیزیک ۹
جدول ۴ : دروس تخصصی دوره‌ی کارشناسی ارشد شیمی‌فیزیک ۱۰
جدول ۵ : دروس تخصصی دوره‌ی دکتری شیمی‌فیزیک ۱۰
جدول ۶ : دروس اختیاری دوره‌های کارشناسی ارشد و دکتری شیمی‌فیزیک ۱۱

فصل سوم : ویژگیهای هریک از دروس (هدف و سرفصل دروس)

دروس تخصصی دوره‌ی کارشناسی‌ارشد شیمی‌فیزیک:

۱- ترمودینامیک شیمیایی ۱۳
۲- ترمودینامیک‌آماری ۱ ..... ۱۶
۳- سینتیک و دینامیک شیمیایی ۱۹
۴- شیمی‌کوانتومی ۱ ..... ۲۳
۵- سمینار ۲۴

دروس تخصصی دوره‌ی دکتری شیمی‌فیزیک

۱- ترمودینامیک آماری ۲ ..... ۲۵
۲- شیمی‌کوانتومی ۲ ..... ۲۷
۳- سمینار دکتری ۳۰

دروس اختیاری دوره‌های کارشناسی‌ارشد و دکتری شیمی‌فیزیک

۱- اصول بیوشیمی‌فیزیک ۳۱
۲- شبیه‌سازی‌های مولکولی ۳۳
۳- ترمودینامیک آماری جذب ۳۷
۴- ترمودینامیک غیرتعادلی ۳۹
۵- روش‌های بیوشیمی‌فیزیک ۴۱
۶- شیمی‌حالت جامد ۴۳
۷- شیمی‌فیزیک سطح ۴۶
۸- شیمی‌کوانتومی محاسباتی ۴۹
۹- شیمی‌کوانتومی وابسته به زمان ۵۲
۱۰- طیف‌سنجی مولکولی ۱ ..... ۵۴
۱۱- طیف‌سنجی مولکولی ۲ ..... ۵۶
۱۲- فرآیندهای برگشت‌ناپذیر ۵۸
۱۳- مباحث ویژه در شیمی‌فیزیک ۶۱
۱۴- مکانیک آماری جامدات ۶۲
۱۵- شیمی‌فیزیک نانوساختارها ۶۵
۱۶- طیف‌سنجی تشدید مغناطیسی هسته ۱ ..... ۶۸
۱۷- طیف‌سنجی تشدید مغناطیسی هسته ۲ ..... ۷۱

پیوست :

۱- علت بازنگری ۷۴
۲- جدول تطبیقی دروس تخصصی کارشناسی‌ارشد و دکتری شیمی‌فیزیک ۷۵
۳- جدول تطبیقی دروس اختیاری کارشناسی‌ارشد و دکتری شیمی‌فیزیک ۷۶

فصل اول

مشخصات کلی برنامه درسی

۱-مقدمه :

باتوجه به پیشرفت روزافزون علم شیمی و اهمیت این علم در جوامع بشری، پرورش نیروهای متخصص، متعهد و آگاه از لزومات اولیه یک جامعه در حال توسعه می‌باشد. در این راستا تأسیس گرایش‌های مختلف در دوره‌های تحصیلات‌تکمیلی رشته شیمی در دانشگاه اصفهان در دستور کار قرار گرفت و سرفصل‌های مربوط نیز تعریف گردید. برنامه درسی و آموزشی تنظیم شده برای دوره‌های تحصیلات‌تکمیلی که شامل آموزش‌های نظری و عملی می‌باشد به گونه‌ای است که انتظار می‌رود دانش‌آموختگان این گرایش‌ها بتوانند توانایی‌های لازم در زمینه‌های آموزشی، پژوهشی و صنعتی را داشته باشند و از منابع و استعدادهای موجود در کشور به بهترین شکل استفاده نمایند.

۲- اهداف

دوره‌های تحصیلات‌تکمیلی شیمی دانشگاه اصفهان دوره‌ای با گرایش‌های تخصصی پنج‌گانه (شیمی‌آلی، شیمی‌پلیمر، شیمی‌تجزیه، شیمی‌فیزیک و شیمی‌معدنی) است که مشخصات هر گرایش با دروس اختصاصی آن رشته و محتوای پایان‌نامه تعیین می‌گردد. در هر گرایش مجموعه‌ای از دروس تخصصی- الزامی، دروس انتخابی، سمینار و پایان‌نامه به نحوی ارائه می‌گردد که سمت و سوی تحقیقات در کنار آموزش شکل کاملی گرفته و شخص را برای ابداع و خلاقیت در زمینه‌های مختلف و کاربرد علم شیمی در صنایع آماده می‌کند. اتکاء به نفس و قوه ابتکار و پژوهش در دانشجو برای انجام تحقیق مستقل در شیمی رشد می‌یابد و افزایش توانایی و مهارت او را به منظور احراز مسئولیت‌های شغلی در سطح یک صاحب‌نظر در یکی از زمینه‌های تخصصی باتوجه به نیازهای جامعه (تربیت کادر آموزشی و پژوهشی مورد نیاز دانشگاه‌ها و مؤسسات تحقیقاتی دولتی و غیردولتی) به همراه خواهد داشت.

۳-اهمیت و ضرورت

با بررسی دروس مقاطع تحصیلات‌تکمیلی رشته شیمی و بحث و تبادل‌نظر با متخصصان گروه و صاحب‌نظران در سایر گروه‌های شیمی کشور و مطالعه برنامه‌های آموزشی دانشگاه‌های معتبر جهان این نتیجه حاصل شد که برنامه‌های فعلی دوره‌های تحصیلات‌تکمیلی نیاز به تغییر اساسی داشته و در نظر گرفتن شیمی به عنوان یک رشته با پنج گرایش شیمی‌آلی، شیمی‌پلیمر، شیمی‌تجزیه، شیمی‌فیزیک و شیمی‌معدنی تقریباً منسوخ شده است. بر این اساس تخصصی‌شدن بیشتر برنامه‌های آموزشی در دوره‌های تحصیلات‌تکمیلی و توجه ویژه به دروس مرتبط با زمینه‌های جدید و به روز علمی و دروسی که به فراهم‌شدن زمینه‌های تحقیقاتی بین‌رشته‌ای می‌انجامد، ضروری می‌باشد.

۴- نقش، توانایی و شایستگی دانش آموختگان

دانشجویان تحصیلات تکمیلی گرایش شیمی‌فیزیک می‌آموزند که چگونه به حل مسئله پرداخته، بهترین راه وروش را برای حل مسئله با توجه به آموخته های خود برگزینند. از آنجا که آنان در این دوره مسلح به اصول علمی پایه و هنر اندیشه درست در مورد پدیده های شیمیایی می‌شوند، قادر خواهند بود که در مورد انواع سامانه های مطالعاتی نظر داده و تحقیق نمایند و نیز به کمک سایر گرایش‌های چهارگانه شیمی شتافته و آنان را در حل مسئله کمک نمایند. دانش‌آموختگان این دوره قادر خواهند بود در صنایع وابسته به شیمی و پژوهشکده‌ها وموسسات تحقیقاتی مشغول به کار شوند.

۵- تعداد و نوع واحدهای درسی

تعداد کل واحدهای درسی دوره‌های **کارشناسی‌ارشد** شیمی در گرایش‌های مختلف ۲۸ واحد است که شامل ۱۲ واحد تخصصی- الزامی، ۹ واحد اختیاری، ۱ واحد سمینار و ۶ واحد پایان‌نامه می‌باشد.

تعداد کل واحدهای درسی دوره **دکتری** شیمی در گرایش‌های مختلف ۳۶ واحد است که شامل ۶ واحد تخصصی- الزامی، ۹ واحد اختیاری، ۱ واحد سمینار و ۲۰ واحد پایان‌نامه می‌باشد.

انتخاب پروژه تحقیقاتی در گرایش‌های مختلف شیمی با نظر استاد راهنما و موافقت گروه انجام می‌گیرد.

فصل دوم

جدول عناوین و مشخصات دروس

جدول ۱ : نوع دروس جبرانی کارشناسی ارشد شیمی‌فیزیک

ردیف	نوع واحد درسی	تعداد واحد
۱	شیمی فیزیک ۳	۳
جمع		۳

-دروس جبرانی به تشخیص گروه شیمی فیزیک و در صورت نیاز ارائه خواهد شد.

جدول۲: نوع دروس کارشناسی ارشد شیمی‌فیزیک

ردیف	نوع واحد درسی	تعداد واحد
۱	تخصصی	۱۲
۲	اختیاری	۹
۳	پایان نامه	۶
۴	سمینار	۱
جمع		۲۸

جدول ۳ : نوع دروس دکتری شیمی‌فیزیک

ردیف	نوع واحد درسی	تعداد واحد
۱	تخصصی	۶
۲	اختیاری	۹
۳	رساله	۲۰
۴	سمینار	۱
جمع		۳۶

جدول ٤ : دروس تخصصی دوره‌ی کارشناسی‌ارشد شیمی‌فیزیک

ردیف	نام درس	تعداد واحد		تعداد ساعات		پیش نیاز یا هم نیاز
		نظری	عملی	نظری	عملی	
۱	ترمودینامیک شیمیایی	۳	–	۴۸	–	ندارد
۲	ترمودینامیک‌آماری ۱	۳	–	۴۸	–	ندارد
۳	سینتیک و دینامیک شیمیایی	۳	–	۴۸	–	ندارد
۴	شیمی‌کوانتومی ۱	۳	–	۴۸	–	ندارد
	جمع کل	۱۲		۱۹۲		

جدول ٥: دروس تخصصی دوره‌ی دکتری شیمی‌فیزیک

ردیف	نام درس	تعداد واحد		تعداد ساعات		پیش نیاز یا هم نیاز
		نظری	عملی	نظری	عملی	
۱	ترمودینامیک آماری ۲	۳	–	۴۸	–	ترمودینامیک آماری ۱
۲	شیمی‌کوانتومی ۲	۳	–	۴۸	–	شیمی کوانتمی ۱
	جمع کل	۶		۹۶		

جدول ٦ : دروس اختیاری دوره‌های کارشناسی ارشد و دکتری شیمی‌فیزیک

ردیف	نام درس	تعداد واحد		تعداد ساعات		پیش نیاز یا هم نیاز
		نظری	عملی	نظری	عملی	
۱	اصول بیوشیمی‌فیزیک	۳	–	۴۸	–	
۲	شبیه‌سازی‌های مولکولی	۳	–	۴۸	–	
۳	ترمودینامیک آماری جذب	۳	–	۴۸	–	ترمودینامیک آماری ۱
۴	ترمودینامیک غیرتعادلی	۳	–	۴۸	–	
۵	روش‌های‌بیوشیمی‌فیزیک	۳	–	۴۸	–	
۶	شیمی‌حالت جامد	۳	–	۴۸	–	
۷	شیمی‌فیزیک سطح	۳	–	۴۸	–	
۸	شیمی‌کوانتومی محاسباتی	۳	–	۴۸	–	شیمی کوانتومی ۱
۹	شیمی‌کوانتومی وابسته به زمان	۳	–	۴۸	–	شیمی کوانتومی ۱
۱۰	طیف‌سنجی مولکولی ۱	۳	–	۴۸	–	
۱۱	طیف‌سنجی مولکولی ۲	۳	–	۴۸	–	طیف‌سنجی مولکولی ۱
۱۲	فرآیندهای برگشت‌ناپذیر	۳	–	۴۸	–	ترمودینامیک آماری ۱
۱۳	مباحث ویژه در شیمی‌فیزیک	۳	–	۴۸	–	
۱۴	مکانیک آماری جامدات	۳	–	۴۸	–	ترمودینامیک آماری ۲
۱۵	شیمی‌فیزیک نانوساختارها	۳	–	۴۸	–	
۱۶	طیف‌سنجی تشدید مغناطیسی هسته ۱	۳	–	۴۸	–	مبانی طیف‌سنجی مولکولی
۱۷	طیف‌سنجی تشدید مغناطیسی هسته ۲	۳	–	۴۸	–	طیف‌سنجی تشدید مغناطیسی هسته ۱
	جمع کل	۵۱	-	۸۱۶	--	

–دانشجو می‌تواند با تایید شورای گروه و استاد راهنما تا دودرس از سایر رشته‌ها و گرایش‌های مرتبط موجود در دانشکده به‌عنوان دروس اختیاری اخذ نماید.

فصل سوم

ویژگیهای هریک از دروس (هدف و سرفصل دروس)

ترمودینامیک شیمیایی

Chemical Thermodynamics

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: – حل تمرین:
نوع درس: تخصصی	پیش‌نیاز: –

هدف درس:
کسب دانش عمیق‌تر در زمینه‌ی پدیده‌ها و نظریه‌های شیمی‌فیزیک با تأکید بر ترمودینامیک شیمیایی

رئوس مطالب:

۱- معرفی دقیق و عمیق قوانین ترمودینامیک

تعریف تعادل گرمایی و معرفی قانون صفرم ترمودینامیک، تعریف کار در ترمودینامیک، فرآیندهای ایستاوار، کار در سامانه هیدروستاتیکی ساده، کار در فرآیندهای ایستاوار، محاسبه کار در سامانه‌های ساده، مفهوم ماکروسکوپی و میکروسکوپی گرما، کار بی‌دررو، قانون اول و قالب‌بندی‌های مختلف آن، ظرفیت‌های گرمایی و اهمیت آن در ترمودینامیک و روش اندازه‌گیری آن، انتقال گرما در یک فرایند ایستاوار، قانون دوم ترمودینامیک به بیان کلاسیوس، قانون دوم ترمودینامیک به بیان کلوین- پلانک

۲- برگشت‌پذیری و مقیاس دمای کلوین

تعریف ماکروسکوپی برگشت‌پذیری و برگشت‌ناپذیری، انواع برگشت‌ناپذیری (گرمایی، مکانیکی و شیمیایی)، اثبات وجود سطوح بی‌درو برگشت‌پذیر برای یک سامانه (اصل کاراتئودوری)، انتگرال‌پذیری dq، مقیاس دمای کلوین، اثبات تساوی مقیاس دمای ترمودینامیکی و مقیا دمای گاز کامل

۳- آنتروپی و مفهوم مولکولی آن

مفهوم آنتروپی، نمودار TS، چرخه کارنول، آنتروپی و برگشت‌پذیری و برگشت‌ناپذیری پدیده‌ها، آنتروپی و اصل زوال انرژی، رابطه آنتروپی و تعداد حالات میکروسکوپی (رابطه اصلی بولتسمان) مفهوم مولکولی آنتروپی

٤- ترمودینامیک غیرتعادلی

معرفی حالات غیرتعادلی، اندیشه‌های اساسی در ترمودینامیک برگشت‌ناپذیر مرتبه اول، موازنه آنتروپی و تولید آنتروپی، استخراج معادلات پیوستگی جرم، انرژی، بار الکتریکی و تکانه خطی، معرفی نیروها، شارها و ضرایب پدیده‌شناختی، اثبات اصل متقابل انزاگر (قانون چهارم ترمودینامیک)، برخی از کاربردهای اصل انزاگر (اثر دوفر، اثر سورت و اثر پلتیه ...)

۵- مکانیک آماری

اصول بنیادین و معرفی اصول موضوعه مکانیک آماری، توزیع تعادلی، تابع تقسیم، تابع تقسیم یک گاز کامل تک اتمی، رابطه تابع تقسیم با توابع ترمودینامیکی سامانه، اثبات اصل هم بخشی انرژی، توزیع تندیهای مولکولی، تعبیر آماری کار و گرما

٦- ترمودینامیک محلول‌های غیرایده‌آل، معرفی و دیدگاه‌های مولکولی در محاسبه کمیت‌های ترمودینامیکی محلول‌ها

اساس قالب‌بندی ترمودینامیک محلول‌ها، خواص ترمودینامیکی محلول‌ها، پتانسیل شیمیایی اجزاء در محلول‌های ایده‌آل و غیرایده‌آل، معرفی فعالیت و ضریب فعالیت، نظریه دبای- هوکل (معرفی مفاهیم اساسی و اثبات روابط)، تجمع یونی، مخلوط‌های گازی غیرایده‌آل (فوگاسیته) و چگونگی محاسبه نظری آن

۷- واکنش‌های تعادلی در سامانه‌های غیرایده‌آل

ثابت تعادل، واکنش‌های تعادلی در محلول‌های غیرالکترولیت، واکنش‌های تعادلی در محلول‌های الکترولیت، واکنش‌های تعادلی در مخلوط گاز غیرایده‌آل، وابستگی ثابت تعادل به دما و فشار، واکنش‌های جفت‌شده

۸- سینتیک شیمیایی واکنش‌ها و نظریه سرعت واکنش

سینتیک واکنش، واکنش‌های سریع، واکنش در محلول‌های مایع، کاتالیزورها، کاتالیزورهای آنزیمی، کاتالیزورهای ناهمگن، نظریه برخورد کره سخت در واکنش‌های فاز گازی، سطوح انرژی پتانسیل، دینامیک واکنش مولکولی، قالب‌بندی ترمودینامیکی نظریه حالت‌گذار

روش ارزشیابی :

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهایی	پروژه
–	+	+	+

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

1. Zemamsky, M. W., Dittman, R. H. (1997) *Heat and Thermodynamics* (7th Ed.) McGraw-Hill, New York.

2. Levine, I. N. (2009) *Physical Chemistry* (6th Ed.), McGraw Hill; New York.

3. McQuarrie, D. A., Simon, J. D. (1999) *Molecular thermodynamics*, University Science Books.

4. Gyftopoulos, E. P., Beretta, G. P. (2020) *Thermodynamics: Foundations and Applications* (2nd Ed.), Dover Publications.

ترمودینامیک آماری ۱

Statistical Thermodynamics 1

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: – حل تمرین:
نوع درس: تخصصی	پیش‌نیاز: –

هدف درس:
بیان اصول و مبانی ترمودینامیک آماری به عنوان پلی بین خواص ماکروسکوپی و ویژگی‌های مولکولی است.

رئوس مطالب:

۱- برخی از روشهای ریاضی مورد استفاده در ترمودینامیک آماری

جابه‌جایی(جایگشتی)، تعریف جابه‌جایی، قواعد جابه‌جایی، توزیع احتمال، تابع توزیع گاوسی، توزیع پواسون، افت‌وخیز (ریشهٔ دوم میانگین عدم‌یقین)، روش جمله‌ی ماکزیمم، تقریب استرلینگ، روش ضرایب لاگرانژ.

۲- اصول و نظریه‌های اساسی در مکانیک آماری تعادلی

برخی از تعاریف متداول در ترمودینامیک آماری، آرایش(پیکربندی)، ریزحالت یا حالت کوانتومی، درشت‌حالت، ریزحالتهای قابل‌دسترس، همترازی، مجموعه (ensemble)، تابع تقسیم، برخی از پذیره‌های مکانیک آماری مورد استفاده در نظریه‌ی مجموعه، برخی از مجموعه‌های مهم در مکانیک آماری، مجموعه میکروکانونیکال، مجموعه کانونیکال، مجموعه گرندکانونیکال، مجموعه گیبس یا مجموعه هم دما – هم فشار، تعیین خواص ترمودینامیکی با استفاده از نظریهٔ مجموعه و مفهوم تابع مشخصه، نظریهٔ افت‌وخیز.

۳- آمار کلاسیک و آمار کوانتومی

شرایط لازم برای پیروی از آمارکلاسیک یا آمار بولتزمن، شرایط لازم برای پیروی از آمارکوانتومی، فرمیون‌ها (Fermions) و بوزون‌ها (Bosons) آمار بوز – انیشتین(BE) ، آمار فرمی – دیراک(FD) ، میانگین عدد اشغال.

٤- گازهای ایده آل با اثرات کوانتومی بسیارکم (تک اتمی، دواتمی و چند اتمی)

برخی از تعاریف مهم، محاسبه‌ی توابع تقسیم مولکولی انتقالی، الکترونی و هسته‌ای گاز ایده‌آل تک‌اتمی، توابع ترمودینامیکی گاز ایده‌آل تک‌اتمی، محاسبه‌ی توابع تقسیم مولکولی انتقالی، الکترونی، ارتعاشی، چرخشی و هسته‌ای مولکول‌های دو اتمی جور و ناجور هسته، توابع ترمودینامیکی گاز ایده‌آل شامل مولکول‌های دواتمی، محاسبه‌ی توابع تقسیم مولکولی انتقالی، الکترونی، ارتعاشی، چرخشی و هسته‌ای مولکول‌های چند اتمی، توابع ترمودینامیکی گاز ایده‌آل شامل مولکول‌های چنداتمی، اوزان آماری هسته‌ای برای مولکول‌های دو اتمی جور هسته، آنتروپی باقیمانده.

٥- تعادلات شیمیایی

محاسبه‌ی ثابت تعادل برحسب توابع تقسیم برای سیستم‌های مختلف.

٦- مکانیک آماری کلاسیک

نظریه‌ی فضای فاز، قضیه‌ی لایوویل، قضیه‌ی هم‌بخشی انرژی.

٧- مکانیک آماری غیرمقداری و ترمودینامیک

تاریخچه و ترمودینامیک Tsallis (نظریه‌ی آماری غیرمقداری، استنتاج آمار- q غیرمقداری و آمار کوانتمی غیرمقداری).

روش ارزشیابی :

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهایی	پروژه
-	+	+	+

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

1. McQuarrie, D. A. (2000) *Statistical Thermodynamics* (2nd Ed.), University Science Books.

2. Hill, T. L. (2017) *An Introduction to Statistical Thermodynamics* (1st Ed.), Dover publications.

3. Nash, L. K. (2006) *Elements of Statistical Thermodynamics* (2nd Ed.), Dover Publications.

4. Chandler, D. (2017) *Introduction to Modern Statistical Mechanics*, Oxford University Press.

5. Tsallis, C. (2008) *Introduction to nonextensive statistical mechanics***,** Springer Science and Business Media**,** New York, USA**.**

سینتیک و دینامیک شیمیایی

Chemical Kinetics and Dynamics

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: – حل تمرین:
نوع درس: تخصصی	پیش‌نیاز: –

هدف درس:
تبیین مفاهیم بنیادی و بررسی روش‌های مطالعه دینامیک، سینتیک و سازوکار واکنش‌های شیمیایی

رئوس مطالب :

۱- سینتیک شیمیایی

سینتیک شیمیایی (و مقایسه آن با ترمودینامیک شیمیایی)، معادله سرعت واکنش‌های بنیادی، مرتبه و مولکولاریته واکنش، معادله سرعت واکنش‌های پیچیده، سازوکار و تعیین مرتبه واکنش و ثابت سرعت، انتگرال‌گیری از معادله سرعت واکنش‌های مرتبه اول، دوم و بالاتر، روش‌های تجربی تعیین مرتبه واکنش، سینتیک واکنش‌های پیچیده (دوطرفه، پی‌درپی، موازی و چندمرحله‌ای) با گونه‌های واسطه پایدار و ناپایدار، تقریب حالت پایا، نوسانات و آشوب شیمیایی، استفاده از روش تبدیل لاپلاس و نرم‌افزارهای جبری و عددی برای حل دستگاه معادلات سرعت

۲- روش‌های آزمایشگاهی مطالعه سینتیک واکنش‌های شیمیایی

فعال‌سازی هسته‌ای، تخلیه الکتریکی، حرارتی و نورشیمیایی، واکنش‌های حساس به نور، آشکارسازی رادیکال‌ها، مطالعه سرعت واکنش‌ها در سامانه‌های جاری، شیوه‌های ایجاد اختلال‌های بزرگ توسط تابش پرتوهای شدید نوری (نورکافت سیلابی و لیزری)، برخورد الکترون‌های پرانرژی، امواج ضربه‌ای صوتی و فراصوتی، شیوه‌های ایجاد اغتشاش‌های کوچک در مطالعه پدیده‌های آسایش شیمیایی شامل جابه‌جایی جزیی تعادل توسط جهش‌های ناگهانی دما، فشار، میدان الکتریکی و امواج فراصوت

۳- نظریه‌های سرعت واکنش‌های شیمیایی

مروری بر نتایج نظریه جنبشی گازها و نتایج آن (توزیع ماکسول– بولتسمن سرعت‌ها و انرژی‌های جنبشی، کمیت‌های انتقالی گرانروی، رسانایی گرمایی، نفوذ و قوانین فیک)، ترمودینامیک آماری، نظریه برخورد ساده برای واکنش‌های دو مولکولی، نظریه برخورد اصلاح شده، نظریه گونه مرکب (کمپلکس) فعال یا نظریه حالت گذار، معادله آیرینگ، مقایسه بین نظریه‌های برخورد و

حالت گذار، سازوکار ترکیب مجدد دو اتم در حضور جسم سوم، سازوکار لیندمن برای واکنش‌های تک‌مولکولی و نظریه رایس- رامسپرگر- کاسل- مارکوس

٤- دینامیک شیمیایی

دینامیک شیمیایی مولکولی، نظریه پراش (سطح مقطع برخوردهای کشسان و ناکشسان) ، تبادل انرژی در برخوردهای کشسان و ناکشسان، سطح مقطع پراش برای برخورد کرات سخت و برخورد ذرات برهمکنش کننده، انواع سطوح انرژی پتانسیل بین مولکولی و درون‌مولکولی، انواع پراش‌های واکنشی و غیرواکنشی، روش‌های پرتوه مولکولی، سرعت گذار از یک چاه پتانسیل به چاه پتانسیل دیگر، چند مثال از دینامیک مولکولی، تأثیر میدان بر سطوح انرژی پتانسیل، هدایت و مدیریت اتم‌ها و مولکول‌ها و شیوه‌های ارتعاشی آنها توسط نور لیزر فمتوثانیه، پراش کوانتومی، واکنش‌های حالت‌به‌حالت و واکنش‌های بدون سد انرژی

٥- سینتیک و دینامیک واکنش‌های شیمیایی در محلول

تأثیر حلال بر سازوکار و سرعت واکنش‌ها، نظریه سرعت واکنش‌ها در محلول، پدیده نفوذ در محلول، واکنش‌های تحت تأثیر نفوذ، واکنش‌های تحت تأثیر تبدیل شیمیایی، واکنش بین یون‌ها، اثرات حلال، قدرت یونی و ثابت‌دی‌الکتریک بر روی سرعت واکنش‌ها در محلول، سازوکار و سرعت واکنش‌های الکتروشیمیایی (نفوذ متقابل در محلول، لایه دوگانه، چگالی جریان و نفوذ در بافت الکترود) و روش‌های مطالعه آنها

٦- سینتیک و دینامیک واکنش‌های رادیکالی، زنجیره‌ای و بسپارش

واکنش‌های رادیکالی و یونی غیرزنجیره‌ای، واکنش‌های زنجیره‌ای مستقیم و شاخه‌دار، واکنش‌های انفجاری (زنجیره‌ای و گرمایی) انواع واکنش‌های بسپارش، سازوکار و سرعت واکنش‌های بسپارش، سرعت مصرف تکپار (مونومر)، سرعت رشد زنجیر بسپار، روش‌های توصیف پیشرفت واکنش‌های بسپارش، نقش آغازگر در سرعت و سازوکار واکنش‌های زنجیره‌ای و بسپارش

٧- سینتیک و دینامیک واکنش‌های شیمیایی در سطح مشترک فازها

پدیده‌های جذب سطحی و پراش از روی سطح مایعات و جامدات، سینتیک و دینامیک واکنش‌های سطح مشترک دو فاز (واکنش‌های جامد-جامد، مایع-مایع و جامد-مایع)، سازوکار و سرعت واکنش‌های انحلال، تصعید و رشد بلورها

٨- تسهیل و تسریع (کاتالیز) واکنش‌های شیمیایی

انواع تسهیل و تسریع (کاتالیز) و تأثیر آن بر سازوکار و سرعت واکنش‌های شیمیایی، تسهیل و تسریع همگن (مصرفی، اسید-باز، آنزیمی)، تسهیل و تسریع ناهمگن (مایع-جامد، گاز-جامد)، تسهیل و تسریع در محیط‌های متخلخل (زئولیت‌ها، ساختارهای فلز-آلی و نانولوله‌های کربنی)، تسهیل و تسریع با نور و امواج صوتی و فراصوتی

روش ارزشیابی :

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهایی	پروژه
+	+	+	+

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

1. Houston, P. L. (2006) *Chemical Kinetics and Reaction Dynamics*, Dover publication, New York.
2. Levine, R. D. (2005) *Molecular Reaction Dynamics*, Cambridge University Press, Cambridge.
3. Steinfeld, J. I., Francisco, J. S., Hase, W. L. W. (1999) *Chemical Kinetics and Dynamics* (2nd Ed.), Prentice-Hall, London.
4. Laidler, K. J. (1987) *Chemical Kinetics* (3rd Ed.), Pearson, New York.
5. Steinfeld, J. I., Francisco, J. S., and Hase, W. L. (2019) *Chemical Kinetics and Dynamics* (2nd Ed.), Pearson.

شیمی‌کوانتومی ۱

Quantum Chemistry I

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: – حل تمرین: –
نوع درس: تخصصی	پیش‌نیاز: –

هدف درس:
فراگیری قضایا و روش‌های مکانیک کوانتومی و کاربرد آنها در حل مسائل شیمیایی

رئوس مطالب:

۱- مروری بر مفاهیم بنیادی، گزاره‌ها و قضایای مکانیک کوانتومی

اصول موضوعه مکانیک کوانتم، تابع موج، تابع احتمال و اندازه‌گیری، نمایش کت–برا برای توابع موج و عملگرها، نمایش برداری و آرایه‌ای عملگرها و مقادیر ویژه و چشمداشتی کمیت‌ها، عملگرهای هرمیتی، زوجیت، اندازه‌گیری، مشاهده پذیرها و روابط عدم قطعیت، توابع موج در فضای موقعیت و اندازه حرکت و تعابیر گوناگون مکانیک کوانتومی

۲- روش وردشی (تغییر)

قضیه وردشی و تعمیم آن، دستگاه معادلات خطی و کاربرد آن در روش وردشی، آرایه‌ها، قطری‌سازی، ویژه مقدارها و ویژه‌بردارها، چند کاربرد قضیه وردشی

۳- نظریه اغتشاش (اختلال)

نظریه اغتشاش بدون هم‌ترازی، نظریه اغتشاش با هم‌ترازی، مقایسه روش‌های وردشی و اغتشاش

٤- اسپین الکترون و اصل طرد پائولی

آزمایش اشترن– گرلاخ، اسپین الکترون، گشتاور مغناطیسی اسپین، ذرات یکسان در سامانه‌های بس‌ذره‌ای، آمارهای اسپینی فرمی– دیراک و بوز– انیشتن، اصل طرد پاولی و دترمینان اسلیتر، بررسی وردشی و اغتشاشی حالت پایه اتم‌های هلیوم و لیتیم، آرایه‌های پاولی و عملگرهای نردبانی برای اسپین الکترون

۵- اتم‌های چند الکترونی

تابع موج تک‌دترمینانی و روش خودسازگار هارتری- فاک، انتگرال‌های تعویض و کولن و تعابیر فیزیکی آنها، لایه‌های الکترونی، اوربیتال‌ها و جدول تناوبی، همبستگی الکترونی، جمع تکانه‌های زاویه‌ای و کاربرد آن در اتم‌های چندالکترونی، برهمکنش اسپین- اربیت و هامیلتونی اتمی و قواعد کاندون- اسلیتر

٦- ساختار الکترونی مولکول‌های دواتمی

تقریب بورن- اپنهایمر، جداسازی هامیلتونی حرکت هسته‌ها از هامیلتونی کل در مولکول‌های دو اتمی، نظریه‌های MO، VB و روش عمومی HF، یون ملکول هیدروژن و مولکول هیدروژن

۷- قضایای ویریال و هلمن- فاینمن و کاربردهای آنها

توابع همگن، قضیه ویریال و کاربردهای آن، قضیه الکترواستاتیک، مشتق تابعیتی، قضیه هلمن- فاینمن و کاربردهای آن

روش ارزشیابی :

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهایی	پروژه
+	+	+	+

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

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

2. Atkins, P. W., Friedman, R. S. (2010) *Molecular Quantum Mechanics* (5th Ed.), Oxford University Press.

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

4. Sakurai, J. J. (1994) *Modern Quantum Mechanics (*2nd Ed.), Addison-Wesley, Canada.

5. Szabo, A., and Ostlund, N. S. (2012) *Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory* (2nd Ed.), Dover Publications.

سمینار

Seminar

تعداد واحد نظری: ۱	تعداد واحد عملی: – حل تمرین: –
نوع درس:	پیش‌نیاز: –

هدف درس:
تبیین اصول انتخاب یک موضوع علمی، جمع‌آوری اطلاعات مرتبط با آن موضوع و ارائه‌ی آن

رئوس مطالب:
در این درس نحوه جمع‌آوری اطلاعات در مورد یک مبحث علمی و ارائه‌ی آن به صورت‌های مختلف مانند پوستر، سخنرانی و یا مقاله به دانشجو آموزش داده می‌شود. سپس دانشجو با هماهنگی یکی از اساتید گروه یکی از موضوعات روز شیمی را انتخاب کرده و پس از جمع‌آوری اطلاعات مرتبط با آن موضوع، آن را به صورت یک سخنرانی علمی عمومی ارائه می‌نماید. انتخاب موضوع، ارائه‌ی آن و ارزیابی دانشجو در چارچوب مقررات مصوب گروه شیمی انجام می‌گیرد.

روش ارزشیابی :

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهایی	پروژه
–	+	+	–

بازدید: ندارد

منابع اصلی:
کتاب‌ها و مقالات علمی جدید و معتبر مرتبط با موضوع سمینار

ترمودینامیک آماری ۲

Statistical Thermodynamic II

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: – حل تمرین:–
نوع درس: تخصصی	پیش‌نیاز: ترمودینامیک آماری ۱

هدف درس:
بررسی سامانه‌های تعادلی دارای برهمکنش از دیدگاه ترمودینامیک آماری

رئوس مطالب:

۱- آمار کوانتومی

گاز فرمی- دیراک ایده‌آل با چندحالتی ضعیف، گاز فرمی- دیراک ایده‌آل با چندحالتی شدید، گاز بوز، انیشتاین ایده‌آل با چندحالتی ضعیف، گاز بوز- انیشتاین ایده‌آل با چندحالتی شدید

۲- گازهای غیرکامل

معادله حالت ویریال از تابع تقسیم کانونی بزرگ، ضرایب ویریال در حد کلاسیکی، دومین و سومین ضریب ویریال، ضرایب ویریال بالاتر برای پتانسیل کره‌سخت، تصحیح‌های کوانتومی برای $B_2(T)$ و قانون حالت‌های متناظر

۳- بلورها

طیف ارتعاشی یک بلور تک‌اتمی، نظریه‌های انیشتاین و دبای در مورد گرماهای ویژه‌ی بلورها

٤- دو نظریه ساده درباره‌ی مایعات

نظریه ساختمان‌های بامعنی و نظریه لنارد-جونز و دونشایر در مورد مایعات

۵- توابع توزیع در مایعات تک‌اتمی کلاسیکی

توابع توزیع، رابطه‌ی توزیع ترمودینامیکی با $g(r)$، معادله انتگرالی کرکوود برای $g(r)$، تابع ارتباطی مستقیم، بسط‌های برحسب چگالی توابع توزیع مختلف، معادله انتگرالی پرکوس یویک و هایپر-نتدچین، بسط‌های برحسب چگالی معادلات انتگرالی مختلف و مقایسه معادلات انتگرالی با یافته‌های تجربی

٦- نظریه‌های اغتشاش مایعات

نظریه‌های اغتشاش مایعات، نظریه اغتشاش مکانیک آماری، معادله وان‌دروالس و چند نظریه اغتشاش مایعات (نظریه بارکر-هندرسن و نظریه چندلر-ویک-اندرسن

۷- مقدمه‌ای بر آمارهای شبکه: جذب، اتصال

گاز شبکه ایده‌آل (نظریه جذب لانگمویر)، تابع تقسیم بزرگ برای یک جایگاه یا زیرسامانه مستقل منفرد، سامانه‌های تشکیل شده از زیرسامانه‌های مستقل، تمیزناپذیر و جذب بر یک زنجیر پلیمری خطی

۸- آمارهای شبکه

گاز شبکه یک‌بعدی، کشسانی یک زنجیر بسپاری خطی، شبکه مربعی دوبعدی، تقریب براگ ویلیام ، تقریب شبه-شیمیایی و انتقالات فاز مرتبه اوّل

روش ارزشیابی :

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهایی	پروژه
+	+	+	+

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

1. McQuarrie, D. A. (2000) *Statistical Thermodynamics* (2nd Ed.), University Science Books.

2. Hill, T. L. (1986) *An Introduction to Statistical Thermodynamics*, Dover Publications.

3. Honerkamp, J. (2012) *Statistical Physics* (3rd Ed.), Springer, Berlin, Heidelberg.

4. Chandler, D. (2017) *Introduction to Modern Statistical Mechanics*, Oxford University Press.

شیمی‌کوانتومی ۲

Quantum Chemistry 2

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: – حل تمرین: –
نوع درس: تخصصی	پیش‌نیاز: شیمی‌کوانتومی ۱

هدف درس:

فراگیری مفاهیم و روش‌های شیمی‌کوانتومی و کاربردهای آنها در بررسی خواص و پدیده‌های مولکولی

رئوس مطالب:

۱- خواص الکتریکی مولکول‌ها

تابع توزیع فضایی چگالی الکترونی، گشتاورهای دوقطبی و چندقطبی، برهمکنش اتم‌ها و مولکول‌ها با میدان الکتریکی، آرایه‌های قطبش‌پذیری، ثابت دی‌الکتریک، ضریب شکست، چرخش (فعالیت) نوری، طیف‌های CD و ORD و برهمکنش مولکول‌ها با میدان‌های الکتریکی نوسانی

۲- خواص مغناطیسی مولکول‌ها

توصیف میدان‌های مغناطیسی، توابع و میدان‌های عددی و برداری، تحلیل کامل آزمایش اشترن– گرلاخ، هامیلتونی، توابع ویژه و مقادیر ویژه تکانه زاویه‌ای در میدان مغناطیسی، اثر زیمان، پوشیدگی شیمیایی هسته‌ها، برهمکنش‌های دوقطبی، چهارقطبی و جفت‌شدگی J و نقش آنها در جابه‌جایی و شکافتگی ترازهای تکانه زاویه‌ای اسپین در میدان مغناطیسی، میدان بسامد رادیویی (RF) و انتقال بین حالات تکانه زاویه‌ای اسپینی (آزمایش‌های ESR، NMR، NQR و ENDOR)

۳- نظریه تکانه زاویه‌ای

تکانه زاویه‌ای، هماهنگ‌های کروی و توابع وابسته، عملگرهای چرخشی و تکانه زاویه‌ای تعمیم یافته، جفت‌شدگی تکانه‌های زاویه‌ای، قضیه ترکیب هماهنگ‌های کروی (دنباله کلبش– گوردن)، نمادهای $3nJ$، تانسورهای کروی، عناصر آرایه‌های عملگرهای برداری، قضیه ویگنر– اکارت و جفت‌شدگی اسپین– اربیت

٤- نظریه پراش

پراش از روی چاه و سد یک‌بعدی، قالب‌بندی پدیده‌های پراش، پراش چندمسیره ، توابع گرین، تقریب بورن، پراش از روی پتانسیل مرکزی، توابع جزیی حالت‌های پراشیده ایستا و جابجایی فاز، تشدید مداری و رفتار زمانی آن، عملگر چگالی شار و توصیف پویایی پراش، پراش ناکشسان و پراش واکنشی

٥- سامانه‌های دارای ذرات یکسان

تقارن جایگشتی، بوزون‌ها و فرمیون‌ها، متقارن‌سازی، سامانه‌های اتمی و مولکولی دو و چندالکترونی، اصل طرد و پراش ذرات یکسان

٦- دینامیک کوانتومی

بسته موج ذره آزاد، بسته موج گاوسی، ارتباط میان دینامیک کلاسیکی و دینامیک کوانتومی، تحول زمانی و معادله شرودینگر، انواع پدیده‌های وابسته‌به‌زمان براساس هامیلتونی، وابستگی زمانی مقادیر چشمداشتی، حرکت تقدیمی اسپین، دامنه همبستگی و رابطه عدم قطعیت زمان- انرژی، نمایش ویگنر، عملگر آرایه چگالی و دینامیک کوانتومی مولکولی

٧- مکانیک کوانتومی نسبیتی

نمایش چهاربردار، معادله کلاین- گوردن و معادله دیراک، معادله ذره آزاد نسبیتی، معادله دیراک با جفت‌شدگی مغناطیسی، خواص و پدیده‌های نسبیتی اتمی و مولکولی (اتم‌های داغ و اتم‌های سنگین)

٨- زیرسامانه‌های باز کوانتومی و نظریه اتم در مولکول

تعاریف کلاسیکی اتم در مولکول، ریخت‌شناسی (توپولوژی) چگالی الکترونی، نقاط بحرانی و تعاریف پیوند، حلقه و قفس براساس آن، توصیف هندسه مولکولی براساس انرژی و ریخت‌شناسی چگالی الکترونی، اتم مکانیک کوانتومی، مکانیک برهمکنش اتم با محیط درون مولکول، انتگرال اثر برای زیرسامانه‌های کوانتومی باز، اصل اثرات اتمی، طرح‌ها، نظریه‌های پیوندی و رابطه آنها با لاپلاسی چگالی الکترونی

روش ارزشیابی :

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهایی	پروژه
+	+	+	+

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

1. Atkins, P. W., Friedman, R. S. (2010) *Molecular Quantum Mechanics*, (5th Ed.), Oxford University Press.

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

3. Sakurai, J. J. (1994) *Modern Quantum Mechanics* (2nd Ed.), Addison-Wesley, Canada.

4. Weissbluth, M. (1978) *Atoms and Molecules*, Academic Press.

5. Bader, R. F. W. (1995) *Atoms in Molecules: A Quantum Theory*, Oxford Univ., New York.

منابع فرعی:

1. Tannor, D. (2007) *Introduction to Quantum Mechanics, A Time-Dependent Perspective*, University Science Books.

2. Levitt, M. H. (2001) *Spin Dynamics; Basics of Nuclear Magnetic Resonance*, Wiley, Chichester.

3. Zhang, J. Z. H. (1999) *Theory and Application of Quantum Molecular Dynamics*, World Scientific, Singapour.

4. Szabo, A., Ostlund, N. S. (2012) *Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory* (2nd Ed.), Dover Publications.

سمینار دکتری

PhD. Seminar

تعداد واحد نظری: ۱	تعداد واحد عملی: – حل تمرین: –
نوع درس: الزامی	پیش‌نیاز: –

هدف درس:

تبیین اصول انتخاب یک موضوع تخصصی، جمع‌آوری اطلاعات مرتبط با آن موضوع و ارائه‌ی آن

رئوس مطالب:

دانشجو با هماهنگی یکی از اساتید گروه یکی از موضوعات تخصصی شیمی‌فیزیک را انتخاب کرده و پس از جمع‌آوری اطلاعات مرتبط با آن موضوع، آن را به صورت یک سخنرانی و ترجیحاً به زبان انگلیسی ارائه می‌نماید. انتخاب موضوع، ارائه‌ی آن و ارزیابی دانشجو در چارچوب مقررات مصوب گروه شیمی انجام می‌گیرد.

روش ارزشیابی :

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهایی	پروژه
–	+	+	–

بازدید: ندارد

منابع اصلی:
کتاب‌ها و مقالات علمی جدید و معتبر مرتبط با موضوع سمینار

اصول بیوشیمی‌فیزیک

Principles of Biophysical Chemistry

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: – حل تمرین: –
نوع درس: اختیاری	پیش‌نیاز: –

هدف درس:

بررسی پایداری پروتئین‌ها، آنزیم‌ها و عوامل مؤثر بر آن از دیدگاه مولکولی و ترمودینامیکی و عوامل مؤثر بر پیوند شدن لیگاند به درشت مولکول‌های زیستی

رئوس مطالب:

۱- پایداری ساختمانی پروتئین‌ها

مقدمه و معرفی مفاهیم اساسی در مبحث پایداری پروتئین- نقش نیروهای غیرکووالان در پایداری کانفورماسیونی پروتئین‌ها- غیرطبیعی شدن شیمیائی پروتئین و معرفی مدل‌های مختلف جهت محاسبه میزان پایداری پروتئین- روند تغییرات پارامترهای طیف‌سنجی پروتئین در طی فرآیند غیرطبیعی‌شدن و رابطه آنها با تغییرات کانفورماسیونی و میزان پایداری پروتئین- غیرطبیعی‌شدن گرمایی پروتئین‌ها و معرفی روش‌های مختلف تجزیه و تحلیل داده‌ها- پایداری پروتئین‌های الیگومر- نقش پیوندهای دی‌سولفیدی در میزان پایداری پروتئین- پایدارسازی ساختمان پروتئین از طریق حلال- جهش‌های هدایت شده جهت پایدارسازی ساختار پروتئین

۲- پیوندشدن مولکول‌های کوچک (لیگاند) به درشت مولکول‌های زیستی

مقدمه و معرفی مفاهیم اساسی- اهمیت پیوند شدن لیگاند در زیست ناسی مولکولی و طراحی داروها- معرفی روش‌های تجربی مطالعه‌ی پدیده‌ی پیوند شدن لیگاند (دیالیز تعادلی- روش‌های الکتروشیمیایی- روش‌های طیف‌سنجی، کالری‌متری و ...)- منحنی‌های پیوندی- معرفی مدل‌های مختلف ترمودینامیکی جهت تجزیه و تحلیل منحنی‌های پیوندی (مدل تک‌جایگاهی- مدل مجموعه جایگاه مستقل- مدل مجموعه جایگاه‌های کنش‌گر)- منحنی‌های هیل- اسکاچارد و کلودز- معادله ادیر- مفهوم تعاونی و سازوکار مولکولی آن در فرآیند اتصال لیگاند- نقش و اهمیت تعاونی در فرآیند اتصال لیگاند- معرفی روش‌های محاسباتی جهت محاسبه‌ی پارامترهای ترمودینامیکی پیوند شدن لیگاند و کاربرد آنها در طراحی داروها

روش ارزشیابی :

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهایی	پروژه
–	+	+	+

منابع اصلی:

1. Cooper, A. (2004) *Biophysical Chemistry* (2nd Ed.), RSC publishing.

2. Van Holde, K. E., Johnson, W. C., Ho, P. S. (2006) *Principles of Physical Biochemistry*, London, Prentice Hall.

3. Sheehan, D. (2000) *Physical Biochemistry: Principles and Applications*, New York, Wiley.

4. Sauer, T. K., Wang, J. C., Puglisi, J. D. (2002) *Physical Chemistry: Principles and Applications in Biological Sciences* (4th Ed.), Englwood Cliffs, Prentice Hall.

5. Wyman, J., Gill, S. J. (1990) *Binding and Linkage: Functional Chemistry of Biological Macromolecules*, New York, University Science Book.

منابع فرعی:

1. Hammes G. G., Hammes-Schiffer, S. (2015) *Physical Chemistry for the Biological Sciences*, Wiley.

2. Walla, P. J. (2014) *Modern biophysical chemistry: detection and analysis of biomolecules*, John Wiley & Sons.

3. Templer R. H., Leatherbarrow, R. (2002) *Biophysical Chemistry: Membranes and Proteins*, Royal Society of Chemistry.

دانشکده شیمی
گروه شیمی‌فیزیک

شبیه‌سازی‌های مولکولی

Molecular Simulations

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: حل تمرین: –
نوع درس: اختیاری	پیش‌نیاز: ترمودینامیک آماری ۱

هدف درس:

درک مبانی و اصول شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی و مونت کارلو و همچنین شناخت روش‌ها، توانایی‌ها، و محدویت‌های آن‌ها

رئوس مطالب:

۱- مقدمه

زمینه تاریخی، مدل‌سازی و شبیه‌سازی، شبیه‌سازی: نظریه یا تجربه، کوچک‌سازی و شبیه‌سازی، سیستم‌های مدل و پتانسیل-های برهم‌کنش برای سیستم‌های اتمی و مولکولی، پتانسیل‌های جفتی ساده، میدان‌های نیرو، انواع شبیه‌سازی‌های کامپیوتری، شبیه‌سازی‌های اتفاقی و جبری، معرفی دینامیک مولکولی، معرفی شبیه‌سازی مونت کارلو، روش مونت کارلو با تحمیل نیرو، مقایسه بین روش مونت کارلو و روش دینامیک مولکولی، شبیه‌سازی دینامیک لانگ‌وین، شبیه‌سازی‌های پیوسته و ناپیوسته، شبیه‌سازی‌های موضعی یا توزیعی.

۲- اصول و مبانی دینامیک مولکولی

معادلات حرکت، دینامیک نیوتنی، دینامیک هامیلتونی، دینامیک لاگرانژی، طبقه‌بندی سیستم‌های دینامیکی، طبقه‌بندی سیستم‌های دینامیکی، تعیین خواص ماکروسکوپی، مراحل اساسی برای تعیین خواص با استفاده از شبیه‌سازی، مسائل و مشکلات ناشی از برابر قرار دادن A_m و $\left(A_m=\langle A\rangle\right)\langle A\rangle$، توزیع اساسی، توزیع سرعت‌ها، عناصر نظری نمونه‌سازی، متوسط مسیر حرکت (آمار مسیر حرکت)، آمار نمونه‌گیری، مقدار قابل انتظار برای متوسط نمونه یا آمار توزیع نمونه‌برداری، رابطه‌ی بین متوسط‌های مختلف، شرایط مرزی تناوبی، اثرات سطحی، از بین بردن اثرات سطحی، انواع سل، تعداد سل‌ها یا جعبه‌های تصویر، محدودیت‌های کاربرد شرایط مرزی تناوبی، پتانسیل قطع‌شده، اثرات قطع کردن پتانسیل، پتانسیل نیروی انتقال یافته، قرارداد حداقل تصویر، اصول بقا (پایستگی)، اثر شرایط مرزی تناوبی بر اصول بقا، سیستم واحدها.

۳- شبیه‌سازی دینامیک مولکولی کرات نرم (اجسام نرم)

روش اختلاف متناهی (FDM)، روش اولر، خطاها، خطای قطع (te)، خطای گردکردن، خطای موضعی و خطای کلی، روش رانگ‌کاتا (RK)، دینامیک مولکولی پتانسیل‌های پیوسته، الگوریتم‌های انتگرالی، الگوریتم ورلت، الگوریتم سرعت ورلت، الگوریتم جهشی ورلت، الگوریتم پیش‌بینی‌کننده- تصحیح‌کننده، الگوریتم پیش‌بینی‌کننده- تصحیح‌کنندهٔ گیر، الگوریتم بیمان، مقایسه الگوریتم‌های انتگرالی، مراحل الگوریتم شبیه‌سازی برای اجسام نرم، مرحله آغازین، مقدمات، سیستم واحدها، شرایط حالت، شرایط مرزی، هندسه ظرف، الگوریتم اختلاف متناهی و گام زمانی، شرایط اوّلیّه برای اتم‌ها، تعادل، تولید، ارزیابی قابل اطمینان بودن نتایج، تعادل، بررسی قوانین بقا، بررسی مقادیر خواص مختلف. انسامبل کانونیکال (*NVT*) یا انسامبل دمای ثابت، مقیاس‌بندی سرعت، ترموستات اندرسن، ترموستات گوسین، معادلات نوز- هوور، انسامبل هم فشار- هم انتالپی (*NPH*)، الگوریتم اندرسن، انسامبل هم دما- هم فشار (*NPT*)، ترکیب مونت‌کارلو- دینامیک مولکولی، بسط معادلات نوز- هوور.

٤- محاسبه خواص ترمودینامیکی با استفاده ازشبیه‌سازی دینامیک مولکولی

توابع ترمودینامیکی ساده، تعیین میانگین‌های ترمودینامیکی با استفاده از دینامیک مولکولی، انرژی داخلی، فشار، میانگین مجذور نیرو، تصحیحات بلند برد، توابع ترمودینامیکی پاسخ، مقایسه بین دو روش، خواص وابسته به آنتروپی، انتگرال‌گیری ترمودینامیکی، روش ذره آزمایشی، خواص ساختاری استاتیکی، اثر چگالی روی *RDF*، جامدهای کریستالی، گازها در چگالی کم، مایعات.

٥- شبیه‌سازی دینامیک مولکولی درشت‌دانه

اصول و مفاهیم میدان نیروی درشت‌دانه در مقابل میدان نیروی تمام اتم، مفهوم دانه‌بندی، روش‌های مختلف تولید میدان نیروی درشت‌دانه (روش‌های پایین به بالا، بالا به پایین و ترکیبی)، قابلیت بازتولید (representability) و.. انتقال‌پذیری (transferability)، پتانسیل‌های جفتی موثر، درجات آزادی کند (slow DoFs) و سریع (fast DoFs)، پتانسیل‌های پیوندی و غیرپیوندی درشت‌دانه، روش‌های سیستماتیک تولید میدان‌های نیروی درشت‌دانه (روش‌های پارامتری شده و روش‌های اشتقاقی)، روش‌های IBI ، MSCG، IMC، FM، PPMF ، CRW و ... ، مقایسه کارایی روش‌های مختلف در توانایی بازتولید و انتقال‌پذیری، در سیستم‌های مختلف مانند مایعات مولکولی غیرقطبی، بلورهای مایع مولکولی، آب و مایعات مولکولی قطبی، پلیمرها، مایعات یونی و ... .

٦- شبیه‌سازی واکنش‌ها به کمک میدان نیروی واکنشی

جایگاه شبیه‌سازی میدان نیروی واکنشی (RMD) در میان روش‌های شیمی محاسباتی، معرفی میدان نیروی ReaxFF، توابع پتانسیل میدان نیروی واکنشی، مرتبه پیوند و انرژی پیوند، انرژی زوج الکترون‌های تنها، انرژی بیش‌پیوندی و کم‌پیوندی، انرژی زوایای پیوندی (انرژی جبرانی، انرژی‌های جملات مزدوج سه‌ذره‌ای و چهارذره‌ای)، انرژی زاویه‌های دو وجهی، انرژی برهمکنش‌های پیوند هیدروژنی، اصلاح انرژی پیوندهای ویژه، انرژی برهمکنش‌های غیرپیوندی، تاریخچه گسترش شبیه‌سازی‌های میدان نیروی واکنشی و کاربردهای میدان نیروی ReaxFF.

۷- شبیه‌سازی‌های مونت کارلو

معرفی روش مونت کارلو به زبان ساده، انتگرال‌گیری به روش‌مونت کارلو، نمونه‌برداری تصادفی، تولید اعداد تصادفی بر اساس تابع توزیع مشخص، بررسی وابستگی بین متغیرهای تصادفی، همگرایی روش مونت کارلو، حل چند مساله به روش مونت کارلو، نمونه‌برداری با اهمیت، زمینه‌های نظری روش متروپولیس، مراحل انجام شبیه‌سازی مونت‌کارلو، محاسبه پتانسیل شیمیایی، شبیه‌سازی مونت کارلو در انسامبل‌های مختلف، شبیه‌سازی مونت کارلو برای سیستم‌های مولکولی صلب و انعطاف پذیر، مقایسه شبیه‌سازی‌های مونت کارلو و دینامیک مولکولی.

۸- آشنایی با مبانی برنامه‌نویسی (کدنویسی)

مبانی برنامه‌نویسی، آشنایی با پراستفاده‌ترین زبان‌های برنامه نویسی در نرم‌افزارهای محاسباتی (Fortran, C++)، مبانی زبان فرترن، انواع متغیرها، ورودی و خروجی اطلاعات، ساختارهای کنترلی برنامه، ساختارهای تکرار در برنامه، آرایه‌ها و تعریف نوع جدید متغیر، ساختار کلی برنامه، توابع (Functions) و زیربرنامه‌ها (Subroutines)، توابع آماده فرترن، آشنایی با محیط Microsoft Visual Studio ، اجرای چند برنامه ساده.

۹- آشنایی با طرز کار برخی از نرم‌افزارهای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

آشنایی با برخی از نرم‌افزارهای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی رایج نظیر LAMMPS، Materials Studio و ... و تهیه فایل‌های ورودی و انجام شبیه سازی برای چند سیستم ساده و تفسیر فایل‌های خروجی.

روش ارزشیابی :

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهایی	پروژه
–	+	+	+

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

1. Haile, J. M. (1996) *Molecular Dynamics Simulation*: Elementary Methods, John Wiley.

2. Allen, M. P., Tildesley, D. J. (2001) *Computer Simulation of Liquids*, Oxford, Science Publications.

3. Rapaport, D. C. (2004) *The Art of Molecular Dynamics Simulation* (2nd Ed.), Cambridge University Press.

4. Frenkel, D., Smit, B., Ratner, M. A. (1996) *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*, Academic Press.

5. Alavi, S. (2020) *Molecular Simulations: Fundamentals and Practice*, Wiley-VCH, Weinheim, German, June.

منابع فرعی:

۱. گوهرشادی، ا ، موسوی، م ، موسوی، ف،(۱۳۸۷). *مبانی شبیه سازی دینامیک مولکولی*، انتشارات دانشگاه فردوسی مشهد.

2. Hospital, A., Goñi, J. R., Orozco, M., Gelpí, J. L. (2015) *Molecular dynamics simulations: advances and applications*, Advances and applications in bioinformatics and chemistry.

ترمودینامیک آماری جذب

Statistical Thermodynamics of Adsorption

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: – حل تمرین: –
نوع درس: اختیاری	پیش‌نیاز: ترمودینامیک آماری۱

هدف درس:
بررسی پدیده جذب از دیدگاه مکانیک‌آماری

رئوس مطالب:

۱- سامانه‌های ساده بدون برهمکنش

گاز ایده‌آل، مخلوط آنها، تعادل شیمیایی در مخلوط گاز ایده‌آل، گاز ایده‌آل در میدان الکتریکی خارجی، گاز ایده‌آل در میدان گرانشی و سانتریفوژی، دوقطبی‌های مغناطیسی نابرهمکنش‌گر در میدان مغناطیسی، همدماهای جذب ساده (مدل مولکولی و پاسخ آن، ترمودینامیک و همدمای لانگمویر، دستیابی به همدمای لانگمویر با استفاده از تابع تقسیم کانونی بزرگ، احتمالات اشغال و انرژی آزاد تشکیل حفره، تشابه پتانسیل شبه‌شیمیایی، مخلوط لیگاندها و دو نوع جایگاه)، اشغال چندگانه جایگاه‌ها (استنتاج ترمودینامیکی و جایگاه‌های تمیزناپذیر) و جذب با تغییرات آرایشی در مولکول‌های جاذب (مدل و پاسخ آن، همدمای جذب، ترمودینامیک فرآیند جذب و کمیت‌های ترمودینامیکی مولکولی جزیی در فرمالیز مدل مخلوط)

۲- سامانه‌های ساده با برهمکنش

دو جایگاه یکسان بر روی بسپار: برهمکنش مستقیم بین لیگاندها (همدمای اتصال، توابع توزیع، تعمیم‌ها و برخی مثال‌های عددی)، دو جایگاه یکسان بر روی بسپاری که دو حالت آرایشی دارد: همبستگی‌های مستقیم و غیرمستقیم (مدل و پاسخ آن، احتمالات، تابع همبستگی، انرژی‌های هلمولتز اتصال بر اولین و دومین جایگاه، تعاونی، انرژی اتصال بر اولین و دومین جایگاه، تعاونی و تغییرات آرایشی القایی و همدمای اتصال)، دو دون‌واحدی که هر یک یک جایگاه دارند: اثر آلوستریک (پلیمر تهی، پتانسیل نیروی متوسط بین دون‌واحدها، همدمای اتصال، احتمالات، انرژی‌های هلمولتز اتصال بر اولین و دومین جایگاه، تابع همبستگی و تعاونی، تغییر انرژی برای اتصال بر یک و دو جایگاه، تغییرات آرایشی القایی در دو دون‌واحد و دو مورد محدودکننده)، سه جایگاه یکسان بر پلیمری که دو حالت آرایشی دارد: همبستگی‌های سه‌تایی (ترمودینامیک اتصال، توابع همبستگی زوج، تابع همبستگی سه‌تایی و پتانسیل سه‌تایی میدان متوسط، تقریب برهمنهی: جمع‌ناپذیری پتانسیل سه‌تایی

میدان متوسط و انرژی هلمولتز اتصال بر سومین جایگاه)، سه ریزواحد که هر کدام می‌توانند در یکی از دو آرایش باشند (سامانه تهی، سامانه با لیگاندها، آزمودن بیشتر توابع همبستگی و اثر جمع‌ناپذیری و تعاونی)، چهارتایی چهار وجهی: مدل کوچکی از اتصال اکسیژن به هموگلوبین (مدل، برخی موارد ویژه، ترمودینامیک اتصال و توابع همبستگی، مقایسه با مدل مربعی) و آنزیم‌های با قاعده (قاعده‌سازی با اتصال رقابتی، یک بسپار با یک جایگاه فعال و یک قاعده‌گی و یک مدل کوچک برای آنزیم با قاعده)

۳- مدل‌های یک‌بعدی

ساده‌ترین مدل‌های آیزینگ (مدل یک‌بعدی اسپین‌های برهمکنش‌گر، گاز شبکه، مدل شبکه یک مخلوط دوسازنده‌ای و تعادل دو حالتی تعدیل‌شده توسط میدان خارجی)، توابع توزیع مولکولی در مدل آیزینگ (تابع توزیع منفرد، تابع توزیع زوج، توابع توزیع سه‌تایی و مرتبه بالاتر، توابع همبستگی، برخی مثال‌ها برای گاز شبکه و یک راه دیگر برای به دست آوردن توابع توزیع مولکولی از تابع تقسیم)، برخی تعمیم‌ها از مدل آیزینگ (مدل گاز شبکه‌ی مخلوط دوتایی، حالت‌های چندگانه اما همتراز، مدل آیزینگ با برهمکنش‌های نزدیک‌ترین و بعد از نزدیک‌ترین همسایه)، سیالات یک‌بعدی (مدل و پاسخ آن، ترمودینامیک و معادله حالت، حصول دیگری از میله‌های سخت، آب یک‌بعدی، مخلوط سیالات یک‌بعدی و انحلال در سامانه یک‌بعدی)، انتقال فاز در سامانه یک‌بعدی (مدل و پاسخ آن، ترمودینامیک و انتقال فاز در نمودار PV)، انتقال Helix-Coil در پروتئین‌ها، مسئله غیرطبیعی‌شدن پروتئین و انتقال Helix-Coil و تابع تقسیم

روش ارزشیابی :

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهایی	پروژه
–	+	+	+

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

1. Ben-Naim, A. (1992) *Statistical Thermodynamics for Chemists and Biochemist*, Plenum Press.
2. Dill, K. A., Bromberg, S. (2003) *Molecular Driving forces: Statistical Thermodynamics in Chemistry and Biology*, Taylor & Francis Grou.
3. McQuarrie, D. A. (2000) *Statistical Thermodynamics* (2nd Ed.), University Science Books.
4. Rabe, M., Verdes, D., Seeger, S. (2011) *Understanding protein adsorption phenomena at solid surfaces*, Advances in colloid and interface science.

ترمودینامیک غیرتعادلی

Nonequilibrium Thermodynamics

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: – حل تمرین: –
نوع درس: اختیاری	پیش‌نیاز: –

هدف درس:
تبیین مفاهیم و بررسی پدیده‌های غیرتعادلی (دیدگاه پدیده‌شناسی) و کاربردهای آن

رئوس مطالب:

۱- مقدمات

قانون دوم ترمودینامیک و نامساوی کلازیوس، فرض تعادل موضعی و شرایط اعتبار کمیت‌های شدتی، قوانین بقاء، موازنه و پیوستگی، معادله هیدرودینامیکی ناویر- استوکس، شار و جریان ماده، انرژی و تکانه

۲- تولید آنتروپی (قضیه‌ی H)

تولید و مصرف آنتروپی، جریان آنتروپی، مسیر کمینه‌ی تولید آنتروپی، مثال‌هایی از سامانه‌ها و فرآیندهای غیرتعادلی با تولید آنتروپی و مسیرهای مختلف

۳- ترمودینامیک غیرتعادلی خطی

روابط و ضرایب پدیده‌شناسی خطی، تأثیر تقارن بر روابط و ضرایب پدیده‌شناسی و اصل کوری، قضیه و روابط متقابل انزاگر- کازیمیر، مقدمه‌ای بر اثرات غیرخطی و تعمیم روابط پدیده‌شناسی

٤- مفاهیم و مبانی مولکولی و آماری پدیده‌های غیرتعادلی

موازنه تفصیلی و برگشت‌پذیری میکروسکوپی، معادله لانژون و حرکت براونی، حافظه پدیده‌ها، توابع و زمان‌های همبستگی، فرآیندهای بی‌حافظه (مارکوف) و حافظه‌دار، قضیه افت‌وخیز- اتلاف، معرفی معادله فوکر- پلانک، توصیف، تفسیر و کاربرد آن، معرفی معادله بولتسمن، توصیف، تفسیر و کاربرد آن

۵- کاربرد روابط پدیده‌شناسی در مطالعه پدیده‌های غیرتعادلی

پدیده‌های یکتایی نفوذ (جرم، ماده، انرژی، تکانه و بار الکتریکی)، اثر سورت، اثر دوفر، اثر سیبک، اثر پلتیه، اثر هال، اثر نرنست، جریان‌های گرانرو، الکتروفورز، واکنش‌های شیمیایی، پدیده‌های آسایش، ته‌نشست، رسوب‌گذاری و سانتریفیوژ، واکنش‌های الکتروشیمیایی، اسمز، امواج صوتی و واکنش‌های سونوشیمی

روش ارزشیابی :

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهایی	پروژه
–	+	+	–

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

1. DeGroot, S. R., Mazur, P. (2013) *Nonequilibrium Thermodynamics*, Dover, New York.

2. Yao, Y. L. (1981) *Irreversible Thermodynamics*, Science Press, New York.

3. Kleidon, A., Ralph, D. L. (2004) *Non-equilibrium thermodynamics and the production of entropy: life, earth, and beyond*, Springer Science & Business Media.

4. Eu, B. C. (1998) *Nonequilibrium Statistical Mechanics: Ensemble Method*, Kluwer, Netherland.

5. Førland, K. S., Førland, T., Ratkje, S. K. (1988) *Irreversible Thermodynamics* (*Theory and Applications*), Wiley.

منابع فرعی:

1. Demirel, Y. (2007) *Nonequilibrium thermodynamics: transport and rate processes in physical, chemical and biological systems*, Elsevier.

روش‌های بیوشیمی فیزیک

Biophysical chemistry Techniques

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: – حل تمرین: –
نوع درس: اختیاری	پیش‌نیاز: –

هدف درس:
تبیین اصول نظری و کاربردی تکنیک‌های مورد استفاده در مطالعات بیوشیمی– بیوفیزیک

رئوس مطالب:

۱– طیف‌سنجی فلورسانس

اصول نظری، شدت فلورسانس، انرژی متوسط نشر، پلاریزاسیون فلورسانس، روش تجربی انجام آزمایش‌های فلورسانس بر روی پروتئین‌ها، اندازه‌گیری‌های حالت پایا، اندازه‌گیری‌های وابسته به زمان انواع خاموش‌کننده‌های فلورسانس و ردیاب فلورسانس در پروتئین‌ها

۲– طیف‌سنجی جذبی ماوراءبنفش– مرئی

اصول نظری، طیف UV پروتئین‌ها، آنالیز کمّی پروتئین‌ها، تعیین محتوای اسید آمینه‌های آروماتیک پروتئین به کمک مشتق طیف‌ها، آنالیز تبدیلات باز و بسته شدن پروتئین توسط مطالعات UV، اصول طیف‌سنجی تفاضلی، طیف سنجی UV دور و کروموفورهای خارجی در پروتئین‌ها

۳– طیف‌سنجی دو رنگ نمائی چرخشی (CD)

اصول نظری CD، اندازه‌گیری‌های سینتیکی به کمک CD، چگونگی تفسیر طیف CD پروتئین‌ها، چگونگی تشخیص Molten global توسط CD و تعیین ساختار دوم و سوم پروتئین ها با استفاده از آنالیز طیف های CD

٤– کالریمتری تیتراسیونی همدما

اصول نظری، مبانی دستگاهی و روش‌های اندازه‌گیری، معرفی مدل‌های مختلف در تجزیه و تحلیل داده‌ها، چگونگی مطالعه برهمکنش داروها و پایداری آنها با ساختارهای زیستی و مطالعه سینتیک واکنش‌های آنزیمی با استفاده از این روش

۵- کالریمتری اسکن تفاضلی (DSC)

اصول نظری، روش اندازه‌گیری، ظرفیت گرمائی مطلق پروتئین‌ها، تابع ظرفیت گرمائی اضافی، توصیف مکانیک آماری تابع ظرفیت گرمائی اضافی، ارزیابی تجربی تابع توزیع، تفکیک (Deconvolution) تابع ظرفیت گرمائی اضافی، آنالیز وانت هوف، غیرطبیعی‌شدن گرمایی و سرمائی (DSC) دو بعدی و ترمودینامیک ساختمانی

روش ارزشیابی :

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهایی	پروژه
–	+	+	+

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

1. Shirley, B. A. (1995) *Protein Stability and Folding :Theory and practice*, Humana Press.

2. Tanford, C. (2005) *Physical Chemistry of Macromolecules*, Wiley, New York.

3. Cantor, C. (1998) *Biophysical Chemistry, Part III the Behaviour of Biological Macromolecules*, Freeman Publisher, New York.

4. Walla, P. J. (2014) *Modern biophysical chemistry: detection and analysis of biomolecules*. John Wiley & Sons.

5. Renaud, J. P., Chung, C. W., Danielson, U. H., Egner, U., Hennig, M., Hubbard, R. E., Nar, H. (2016) *Biophysics in drug discovery: impact, challenges and opportunities*, Nature reviews Drug discovery.

شیمی حالت جامد

Solid State Chemistry

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: – حل تمرین: –
نوع درس: اختیاری	پیش‌نیاز: –

هدف درس:
تبیین ساختارهای پیوندی، خواص، واکنش‌ها و روش‌های مطالعه مواد در حالت جامد

رئوس مطالب:

۱- ساختار مواد جامد و بلورشناسی

چیدمان اتمی و مولکولی در حالت جامد، سلول واحد، چیدمان‌های پکیده و ساختارهای بلوری مولکولی و فلزی، ساختارهای بلوری یونی با استوکیومتری ساده، توصیف ساختارهای بلوری، شاخص‌های میلر، شبکه براوه، شبکه وارون، گروه‌های نقطه‌ای، گروهای فضایی و انواع شبکه‌های بلوری مواد مختلف

۲- خواص پیوندی جامدات

خواص پیوندی جامدات فلزی، نوار ظرفیت، نوار هدایت، طول پیوند و شعاع فلزی و رابطه آنها با چگالی و ساختار شبکه فلزی، قدرت پیوند و گرماهای ذوب و تصعید شبکه فلزی، خواص پیوندی جامدات یونی، رابطه بین شعاع یونی کاتیون‌ها و ابعاد سلول واحد، انرژی شبکه یونی و چرخه بورن– هابر، رابطه انرژ شبکه کاپوستینسکی، تمایز بین ساختار پیوندی در حالت‌های تک‌مولکولی و شبکه‌ای، عدد کئوردیناسیون، ثابت مادلانگ، درجه یونی پیوند و نمودار موزر– پیرسون، جامدات مولکولی و نقش نوع و آرایش پیوندهای درون‌مولکولی بر نیروهای بین‌مولکولی و چیدمان و ساختار شبکه، انواع نیروهای بین‌مولکولی و نقش آن در چیدمان و انرژی پایداری شبکه و تأثیر الکترون‌های غیرپیوندی

۳- حالت‌های جامد ویژه

حالت بی‌شکل، چندبلوری، همریختی و شبکه دوتایی (دوقلو)، چندریختی، حالت جامد بسپارهای آلی، معدنی و زیستی، بلورهای مایع و ساختارها، خواص و کاربردهای آنها، حالت شیشه‌ای، جامدات متشکل از نانوبلورها و نانوخوشه‌ها و لایه‌های نازک

٤- روش‌های پراش در مطالعه جامدات

روش‌های پراش (اشعه X، الکترون و نوترون)، رابطه و قانون براگ، معادلات لاوه (فون‌لاوه)، روش‌های گردی (پودری)، پراش از تک‌بلورها، نکات و ملاحظات فیزیکی دستگاهی در روش‌های پراش، شدت پراش و ساختار بلوری، ضریب پراش اتمی، غیبت منظم در طیف تابش پراشیده، جابجایی فاز، شدت، ضریب ساختار و ضریب R، نقشه چگالی الکترونی، روش پترسون، روش فوریه و روش مستقیم (در استخراج ساختار بلورین از الگوی پراش)، پراش الکترون، پراش نوترون، مطالعه خواص مغناطیسی جامدات و ساختارهای محلی در مایعات با استفاده از پراش نوترون

٥- روش‌های میکروسکوپی، و طیف‌سنجی‌های نوری، الکترونی و تشدید مغناطیسی در مطالعه جامدات

انواع طیف‌سنجی جذبی (عبوری) و نشری اشعه X، طیف‌سنجی مرئی- فرابنفش، طیف‌سنجی ارتعاشی (جذبی، انعکاسی زیرقرمز و رامان)، میکروسکوپی نوری قطبیده، ناقطبیده انعکاسی و عبوری، میکروسکوپی الکترونی (اندازه، شکل، ترکیب شیمیایی و ساختار بلوری ریزبلورهای محلی)، طیف‌سنجی الکترونی شامل روش‌های فتوالکترون (XPS و UPS) و اوژه (AES)، تجزیه شیمیایی (ESCA)، کاهش انرژی الکترون (EELS)، روش NMR گردی (چندبلوری) و تک‌بلوری، روش ESR (EPR) و روش موزباور

٦- روش‌های گرمایی در مطالعه جامدات

روش گرماتوزین (TG)، روش گرماسنجی پیمایشی تفاضلی (DSC)، روش مغناطومتری گرمایی (TM)، روش گرماسنجی همدما، مطالعه سینتیک واکنش‌ها در حالت جامد، تبدیلات حالت به روش‌های گرمایی و گرماشیمیایی و روش‌های گرمایی- طیف‌سنجی

٧- نقایص بلوری، استوکیومتری ناقص و محلول‌های جامد

انواع نواقص نقطه‌ای (شاتکی، فرنکل، رنگی، جای خالی، خوشه‌ای و جانشینی)، انواع نقص‌های خطی و صفحه‌ای، جابجایی‌ها و نابجایی‌ها (گوشه‌ای، پیچشی و دوره‌ای)، خواص مکانیکی جامدات و تأثیر نواقص بلوری بر روی آنها، روش مشاهده و مطالعه نقص‌ها، ترمودینامیک آماری نقص‌های ذاتی و غیرذاتی شبکه‌های بلوری، انواع محلول‌های جامد (محلول‌های کامل و محلول‌های موضعی نقطه‌ای و بین‌لایه‌ای)، تأثیر متقابل انحلال حل‌شونده‌ها در جامدات و نقص‌های بلوری، جانشینی کاتیونی، آنیونی و کلی، همریختی، موازنه بارهای یونی و الکترون‌های پیوندی در سطح تماس دو گونه در یک محلول جامد، روش‌های مطالعه محلول‌های جامد، کاربرد محلول‌های جامد، تمام‌نگاری (هولوگرافی) عمقی و مباحث مربوط

۸- روش‌های تهیه، واکنش‌های شیمیایی و تبدیلات حالت در جامدات

روش‌های تهیه جامدات شامل انجماد و تبلور مایعات، چگالش شیمیایی و فیزیکی گازها، اکسایش-کاهش الکتروشیمیایی، لایه‌های نازک، روش‌های تهیه تک‌بلورها شامل چوکرالسکی، بریجمن- استوکبارگر، ذوب منطقه‌ای، ترسیب مدیریت‌شده، ذوب با مشعل (روش ورنویل)، نفوذ در جامدات، تغییر ساختار بلوری و تبدیل حالت (فاز)، ترمودینامیک تبدیل حالت جامدات خالص، سازوکار ذوب جامدات، انجماد، تبلور مایعات با و بدون تغییر آرایش پیوندی (جامدات بلوری یونی، مولکولی و شبکه‌ای)، نمودارهای حالت (فاز) مخلوط جامدات، تحلیل مولکولی و پیوندی آنها، واکنش‌های کاتالیزوری جامدات

۹- خواص فیزیکی جامدات

خواص مکانیکی، الکتریکی، مغناطیسی و ترکیبی (مثل اثر پیزوالکتریک) و رابطه آنها با ساختارهای بلوری و پیوندی، نظریه‌های فیزیکی رفتار نیمه‌رساناها، یاخته‌های خورشیدی و قطعات مدارات الکترونیکی

روش ارزشیابی :

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهایی	پروژه
+	+	+	+

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

1. West, A. R. (1999) *Basic Solid-State Chemistry* (2nd Ed.), Wiley, Chichester.

2. Smart, L. E., Moore, E. A. (2012) *Solid State Chemistry: An Introduction* (4rd Ed.), Taylor & Francis (CRC), Singapore.

3. Kittel, C., McEuen, P. (2004) *Introduction to Solid State Physics* (8th Ed.), Wiley, New York.

4. Cheethan, A. K., Day, P. (2001) *Solid State Chemistry*, Volumes 1 & 2, Oxford University Press, New York.

5. Ropp, R. C. (2003) *Solid State Chemistry*, Elsevier, New York.

منابع فرعی:

1. West, A. R. (2022) *Solid state chemistry and its applications*. John Wiley & Sons.

2. Jha, A. K. (2023) *Solid-State Chemistry: A Modern Approach*, CRC Press.

شیمی‌فیزیک سطح

Surface Physical Chemistry

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: – حل تمرین: –
نوع درس: اختیاری	پیش‌نیاز: –

هدف درس:

تبیین خواص سطوح مایعات و جامدات، ترمودینامیک، سینتیک و دینامیک واکنش‌ها و پدیده‌های سطحی و روش‌های مطالعه آنها

رئوس مطالب:

۱- ساختار و خواص پیوندی مواد در حالت‌های جامد و مایع

چیدمان اتمی و مولکولی در حالت جامد، سلول واحد، چیدمان‌های پکیده و ساختارهای بلوری مولکولی و فلزی، ساختارهای بلوری یونی با استوکیومتری ساده، توصیف ساختارهای بلوری، شاخص‌های میلر، شبکه براوه، شبکه وارون، انواع شبکه‌های بلوری مواد مختلف، انواع برش‌ها و انواع سطوح، نواقص شبکه، نواقص سطوح، خواص پیوندی جامدات فلزی، یونی و مولکولی، تمایز بین ساختار پیوندی در حالت‌های تک مولکولی و توده‌ای، عدد کئوردیناسیون اتم‌های عمقی و سطحی، انواع نیروهای بین‌مولکولی و نقش آن در نظم کوتاه‌برد و دوربرد در حالت توده‌ای انرژی پایداری، تأثیر الکترون‌های غیرپیوندی، پیوند هیدروژنی و تأثیر آن بر خواص مایعات و جامدات.

۲- خواص سطوح مایعات و جامدات

کشش سطحی و کشش بین‌سطحی، انرژی آزاد سطح، معادله یانگ– لاپلاس، فشار بخار و میعان، موییینگی و زاویه تماس، تأثیر اندازه قطره (انحنای سطح) بر خواص تعادلی، تشکیل حباب مایعات، شکل تعادلی بلورها و سطوح جامدات، برآورد انرژی آزاد سطح برای جامدات بلوری (ایده‌آل، فلزی، یونی، مولکولی و شبکه‌ای)، معادله کلوین، ظرفیت آزاد پیوندی و تحرک گونه‌ها در لایه سطحی، لغزش لایه‌های سطحی بر روی یکدیگر، نقش نوع برش لایه سطحی در خواص سطح، رفتار الکترون‌ها در سطح فلزات و مواد رسانا، تابع موج الکترونی سطحی، پتانسیل سطحی، جایگاه‌های سطحی، پتانسیل

الکترواستاتیک بلورها، تأثیر بار الکتریکی بر خواص سطحی، لایه سطحی لانگمویر- بلوگت، تأثیر میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی بر رفتار سطوح مایعات و جامدات، ویژگی‌های لایه دوگانه در فرآیندهای الکتروشیمیایی، اصطکاک و نرمی سطح، اثرات سطحی در محلول‌های تعلیق (مایع- مایع، جامد- مایع و مایسل‌ها) کاهنده‌های کشش سطحی، لایه سطحی درشت مولکول‌ها و بسپارها و خواص سطحی مواد در ابعاد نانو.

۳- ترمودینامیک جذب سطحی (فیزیکی و شیمیایی) و واجذب

برهمکنش‌های بین‌مولکولی، جذب سطحی فیزیکی، جذب سطحی شیمیایی، منحنی‌ها و مدل‌های انرژی پتانسیل (زنجیره خطی نوسانگرهای هماهنگ، مدل‌های مکعب‌های سخت و نرم، مدل چاه مربعی)، نظریه‌های پیش واکنش و پیش ماده جذب سطحی، گرماهای جذب، روش‌های ارزیابی مساحت سطح (نظیر روش BET)، همدماهای جذب (لانگمویر، فرندلیچ و هینشلوود)، همدماها و منحنی‌های احتمال جذب و وابستگی دمایی آنها، چند مثال از جذب و واجذب گونه‌ها بر روی بلورهای با برش‌های مختلف (جذب منوکسید کربن، اکسیژن، نیتروژن و منوکسید نیتروژن بر روی تک‌بلورهای مس، تنگستن، نقره و طلا با برش‌های مختلف)، شیوه‌های تجربی برای به دست آوردن منحنی‌های جذب و واجذب، تجزیه و تحلیل منحنی‌های واجذب، جذب گونه‌ها بر روی سطوح مایعات و جامدات از محلول، ترمودینامیک انتقال گونه‌ها، انتقال الکترون و واکنش در لایه دوگانه و سطح الکترود در فرآیندهای الکتروشیمیایی، نقش ترکننده‌ها، کاهنده‌های کشش سطحی و اسفنجی‌کننده‌ها، رشد بلور و شناوری.

٤- تعیین ساختار سطوح و گونه‌های سطحی

روش‌های پراش الکترون، پراش ناکشسان، پراش الکترون با انرژی پایین LEED، طیف‌سنجی کاهش انرژی الکترون EELS، تفسیر الگوهای LEED براساس شبکه وارون، موقعیت‌های نقطه‌ای، الگوهای سطح تمیز و الگوهای لایه جذب شده، دینامیک پراش LEED شبکه‌های یک‌بعدی و دوبعدی، پراش چندتایی، پراش زاویه کوچک اشعه X (SAX) و فلوئورسانس اشعه X (تابش Synchrotron)، طیف‌سنجی الکترونی اشعه X (XPS)، اثر فتوالکتریک در حالت جامد، توصیف کوانتوم مکانیکی، نظریه کوپمنز، حساسیت سطح و عمق نفوذ فتوالکترون، طیف‌سنجی الکترون اوژه (AES)، نام‌گذاری و انرژی الکترون‌های اوژه، تجزیه و تحلیل کمی، طیف‌سنجی فتوالکترون فرابنفش (برای فلزات و گونه‌های سطحی)، میکروسکوپی نشر و یونش میدانی (FEM و FIM)، روش‌های میکروسکوپی الکترونی پیمایشی و عبوری (SEM و TEM)، روش‌های میکروسکوپی روبشی SPM (STM، AFM و MFM)، ملاحظات ویژه نانوبلورها و نانوخوشه‌های سطحی، تعیین پتانسیل‌های سطح به کمک طیف‌سنجی‌های ارتعاشی زیرقرمز و رامان، تحلیل نظریه گروه‌ها، روش‌های تجربی طیف‌سنجی ارتعاشی سطوح جامدات و مایعات و گونه‌ها و لایه‌های سطحی.

۵- سینتیک و دینامیک پدیده‌های سطحی

پتانسیل‌های برهمکنش با سطح، برخورد (پراش) کشسان، ناکشسان و واکنشی مولکول‌ها و اتم‌ها با سطوح مایعات و جامدات، پراش و واجذب با برنامه‌ریزی دمایی، انواع فرآیندهای سطحی، رفتار مولکول‌های جذب شده فیزیکی، تبادل انرژی در فاز گازی، تبادل انرژی در روی سطح، سازوکار واکنش‌های سطحی، توصیف کلی سازوکار واکنش‌های ناهمگن، واکنش‌های سطحی تک مولکولی و دو مولکولی، سازوکارهای لانگمویر- هینشلوود و الی—ریدل و روش‌های تجربی مطالعه سینتیک واکنش‌های سطحی، سرعت برخورد مولکول‌های گاز با سطح، سرعت جذب و سرعت واجذب.

٦- کاتالیزورهای ناهمگن

تهیه تسهیل‌کننده‌ها، توصیف عمومی ساختار سطحی و پیوندی کاتالیزورهای ناهمگن، نظریه حالت‌گذار در مورد واکنش‌های ناهمگن، جهت‌یابی و گزینش‌پذیری در واکنش‌های کاتالیزشده در سطوح، فعالیت تسهیل‌کننده‌ها، قدرت جذب سطح شیمیایی، چند مثال از مطالعه ترمودینامیک، سینتیک و دینامیک واکنش‌های تسهیل‌شده در سطوح تسهیل‌کننده‌ها

۷- مباحث ویژه و نو در شیمی‌فیزیک سطح

روش ارزشیابی :

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهایی	پروژه
+	+	+	+

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

1. Erbil, H. Y. (2006) *Surface Chemistry of Solid and Liquid Interfaces*, Blackwell, New York.

2. Adamson, A. W., Gast, A. P. (1997) *Physical Chemistry of Surfaces* (6th Ed.), Wiley, New York.

3. Butt, H. J., Graf, K., Kappl, M. (2023) *Physics and chemistry of interfaces*, John Wiley & Sons.

4. Bikerman, J. J. (2013) *Surface chemistry: theory and applications*, Elsevier.

شیمی کوانتمی محاسباتی

Computational Quantum Chemistry

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: – حل تمرین: –۰
نوع درس: نظری	پیش‌نیاز: شیمی کوانتمی ۱

هدف درس:
آشنایی با روشها و کاربردهای شیمی کوانتمی محاسباتی در مطالعه ساختار و خواص اتمها و مولکولها

رئوس مطالب:

۱- هامیلتونی و معادله شرودینگر اتمهای چندالکترونی و مولکولهای چنداتمی

عملگرهای انرژی جنبشی و انرژی پتانسیل، سطوح انرژی پتانسیل مولکولی، تقریب بورن- اپنهایمر (تقریب هسته‌های گیرافتاده و تقریب بی‌دررو)، تناظر تقارن هامیلتونی با گروه نقطه‌ای مولکول. نظریه اربیتال مولکولی محلی ساده، تعداد الکترونها، بار الکتریکی و چندگانگی اسپین.

۲- روش میدان خودسازگار هارتری– فوک و و روش روتان

روش میدان خودسازگار هارتری- فوک، عملگر فوک، معادله فوک، توابع موج تک‌الکترونی اربیتالی و اسپین- اربیتالی، دترمینان اسلیتر، بسط دترمینان بر اساس روابط ریاضی، محاسبه مقدار چشم داشتی خواص فیزیکی به کمک بسط دترمینان، اثر عملگرهای تک الکترونی و دو الکترونی در نتایج حاصل از مقادیر چشم داشتی، دترمینان های تحریک شده، قواعد کاندون–اسلیتر در ارزیابی عناصر ماتریسی، انتگرالهای کولن و تعویض، روش روتان، ماتریس جمعیت، چرخه محاسبات خودسازگار محدودشده(RHF)، چرخه محاسبات خودسازگار محدودنشده(UHF)، حل معادله هارتری–فوک روتان با روش قطری سازی، انواع روش های قطری سازی در حل معادلات ماتریسی.

۳- توابع پایه

انواع توابع پایه (هیدروژن‌مانند، اسلیتری و گاوسی)، انواع مجموعه پایه (کمینه، یک و چندزتایی، ظرفیت‌شکافته، قطبیده و نفوذی)، توابع پوپل، توابع آلریچ و انواع توابع پایه موجود در بسته های روز محاسباتی، مقایسه و تحلیل اثر تابع پایه در هرینه های محاسباتی، خطای قطع مجموعه پایه، توابع پتانسیل مغزی و اثرات نسبیتی، خطای پوش مجموعه پایه، اصلاحیه ازبالابه‌پایین بویز(CP)، انتگرالهای یک و دوالکترونی، تعداد و تقارن انتگرالهای دوالکترونی.

۴- بهینه‌سازی هندسه مولکولی به‌روش میدان خودسازگار

توصیف هندسه مولکول با مختصات دکارتی و آرایه Z (طولها و زوایای پیوندی و زوایای دووجهی)، پتانسیل مولکولی و هندسه تعادلی، آرایه نیروها، آرایه ثابتهای نیرو (آرایه هس)، روشهای مختلف کمینه‌سازی انرژی و بهینه‌سازی هندسه (روش پرشیب‌ترین مسیر، روش شیب‌های جفت‌شده از طریق قطری‌سازی آرایه هس و روش نیمه‌کلاسیکی مکانیک مولکولی)، یافتن نقطه گذار به روش ساده و روشهای QST2 و QST3 ، مسیر ذاتی واکنش (IRC) ، روش یافتن سطوح انرژی مربوط به حرکتهای درون‌مولکولی (با هندسه محدودشده و با هندسه آزاد).

۵- تحلیل ارتعاشی و ترموشیمی

قطری‌سازی آرایه هس (آرایه ثابتهای نیرو) برای یافتن بردارهای جابجایی (مختصات ارتعاشی) متعامد بر حسب مختصات دکارتی هسته‌ها، نمایش بردارهای جابجایی متعامد (نمایش شیوه‌های ارتعاشی) مختلف.

۶- محاسبه خواص الکترونی مولکول‌ها

ابعاد و حجم اتمی و مولکولی، تحلیل جمعیتها، بارهای اتمی مولیکن (Mulliken) ، لودین (Löwdin) و اتم- در- مولکول (AIM)، ارزیابی روابط پیوندی و ضدپیوندی مستقیم و ازطریق‌فضا بین اتمها براساس جمعیتها، نمودارهای مقطعی چگالی و میدان الکتروستاتیک در فضای مولکولی، تعریف لایه و پوسته برای اتمها بر اساس انرژی‌های اربیتالی تک‌الکترونی و بر اساس تابع چگالی الکترونی شعاعی.

۷- نرم‌افزارهای شیمی کوانتمی محاسباتی و انجام نمونه محاسبات

نرم‌افزارهای عمومی بسته تجاری‌شده (مثلاً: Gaussian ، MOLPRO و HyperChem)، نرم‌افزارهای عمومی آزاد (مثلاً: DALTON، GAMESS و WIEN2K)، تهیه پرونده‌های ورودی، اجرای محاسبات و بررسی محتویات پرونده‌های خروجی برای چند نمونه اتم و مولکول.

روش ارزشیابی :

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهایی	پروژه
+	+	+	+

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

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

2. Jensen, F. (2006) *Introduction to Computational Chemistry* (2nd Ed.), Wiley.

3. Cook, D. B. (2005) *Handbook of computational quantum chemistry*, Courier Corporation.

4. Onishi, T. (2018) *Quantum computational chemistry*, Springer.

5. Mayer, I. (2003) *Simple Theorems, Proofs and Derivations in Quantum Chemistry (Mathematical and Computational Chemistry)*, Kluwer, New York.

شیمی کوانتمی وابسته‌به‌زمان

Time-Dependent Quantum Chemistry

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: – حل تمرین: –
نوع درس: اختیاری	پیش‌نیاز: شیمی کوانتومی ۱

هدف درس:
آشنایی با پدیده‌های کوانتومی وابسته‌به‌زمان و کاربردهای آن در شیمی

رئوس مطالب:

۱- مقدمه‌ای بر دینامیک کوانتومی

بسته موج ذره آزاد، بسته موج گاوسی، ارتباط میان دینامیک کلاسیکی و دینامیک کوانتومی، تحول زمانی، معادله شرودینگر، انواع پدیده‌های وابسته‌به‌زمان براساس هامیلتونی، وابستگی زمانی مقادیر چشمداشتی تحول زمانی تابع موج، تحول زمانی عملگرها، حرکت تقدیمی اسپین، دامنه همبستگی، رابطه عدم قطعیت زمان– انرژی، نمایش ویگنر و عملگر چگالی

۲- انتگرال‌های اثر و مسیر

اثر، مسیر و انتگرال‌های اثر و مسیر، مسیر کمینه اثر، دامنه انتقال و تحول زمانی آن، بناکردن و حل انتگرال‌های اثر و مسیر برای ذره آزاد و ذره در میدان مرکزی، اثر و مسیر ناشی از دو میدان همزمان، آزمایش اشترن– گرلاخ در غیاب و در حضور میدان گرانش

۳- نظریه پراش

پراش از روی چاه، سد یک‌بعدی، قالب‌بندی پدیده‌های پراش، پراش چندمسیره ، توابع گرین، تقریب بورن، توابع جزیی حالت‌های پراشیده ایستا، جابجایی فاز، تشدید مداری و رفتار زمانی آن، عملگر چگالی شار، توصیف پویایی پراش، دینامیک مولکولی کلاسیکی و کوانتومی

٤- انتقالات یک و چندفوتونی وابسته‌به‌زمان

انتقالات الکترونی و ارتعاشی یک و چندفوتونی اتم‌ها و مولکول‌ها، یونش تک فوتونی تک الکترونی، یونش تک فوتونی دوالکترونی، فوتویونش در میدان‌های لیزری ضعیف و قوی، روش بسته موج، همدوسی حالات، همدوسی چندکوانتمی (چرخشی، ارتعاشی و الکترونی)، واهمدوسی و پویایی زمانی جفت‌شدگی حالات

۵- هدایت واکنش‌های شیمیایی با قطار تپ‌های فمتوثانیه (فمتوشیمی)

پتانسیل‌های درون‌مولکولی و بین‌مولکولی دررو و بی‌دررو، روش تحریک- تعقیب در مطالعه پویایی حالات برانگیخته، تپ‌های فمتوثانیه، پراش، نفوذ و فرار بسته‌های موج حاصل از تحریک، مسیرهای واکنشی مختلف، فلورسانس خودی و القایی، انتقال جمعیت حالات، بازتوزیع چرخشی و ارتعاشی درون‌مولکولی و رفتار زمانی چگالی حالات

٦- تشدید مغناطیسی الکترون و هسته (روش عملگر آرایه چگالی)

هامیلتونی، توابع ویژه، مقادیر ویژه اسپین در میدان مغناطیسی، برهمکنش‌های دوقطبی، چهارقطبی، جفت‌شدگی J و نقش آنها در جابجایی، شکافتگی ترازهای اسپین در میدان مغناطیسی، میدان بسامد رادیویی (RF)، انتقال بین حالات اسپینی (آزمایش‌های ESR و NMR)، آرایه چگالی، روش عملگرهای چرخشی، توصیف تحول زمانی چگالی حالات اسپینی و انواع زمان‌های آسایش

۷- تحول زمانی توابع موج هسته‌ای و الکترونی

توابع موج ساده، بسته موج تک‌الکترون، برهمکنش بسته موج سامانه‌های تک‌الکترونی تک اتمی و دو اتمی با میدان شدید لیزر فروکوتاه، تحول بسته موج شبه‌ذره حرکت هسته‌ای مولکول‌های دو اتمی و سه اتمی خطی و غیرخطی در میدان لیزر

روش ارزشیابی :

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهایی	پروژه
+	+	+	+

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

1. Tannor, D. (2007) *Introduction to Quantum Mechanics, A Time-Dependent Perspective*, University Science Books.
2. Wyatt, R. E., Trahan, C. J. (2005) *Quantum Dynamics with Trajectories: Introduction to Quantum Hydrodynamics*, Springer.
3. Levitt, M. H. (2001) *Spin Dynamics; Basics of Nuclear Magnetic Resonance*, Wiley, Chichester.
4. Lindh, R., Leticia, G. (2020) *Quantum Chemistry and Dynamics of Excited States: Methods and Applications*, John Wiley & Sons.

طیف‌سنجی مولکولی ۱

Molecular Spectroscopy I

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی:- حل تمرین: -
نوع درس: اختیاری	پیش‌نیاز: -

هدف درس:

تبیین مفاهیم بنیادی و مبانی کوانتومی طیف‌سنجی، تبیین اصول طیف‌سنجی‌های چرخشی، ارتعاشی و رامان

رئوس مطالب:

۱- مقدمات

نور و خواص آن، ضرایب جذب و نشر انیشتن، طیف الکترومغناطیس، شدت تابش، پهن‌شدگی خطوط طیفی، تبدیل فوریه، نظریه گروه‌ها و کاربرد آن در استخراج قواعد گزینش، نمایش آرایه‌ای معادله شرودینگر، تقارن در هامیلتونی، معادله شرودینگر اتمی و معادله شرودینگر مولکول دو اتمی، تقریب بورن- اپنهایمر، جداسازی حرکت‌ها، نظریه اغتشاش وابسته به زمان، انتگرال‌ها، قواعد گزینش.

۲- طیف‌سنجی چرخشی

تحلیل کوانتومی حرکت چرخشی مولکول‌ها، استخراج قواعد گزینش در طیف‌سنجی چرخشی خالص مولکول‌های دواتمی، خطی، چرخنده‌های فرفره‌ای متقارن، فرفره‌ای نامتقارن و کروی، آمار هسته ای و طیف چرخشی.

۳- طیف‌سنجی ارتعاشی

تحلیل کوانتومی حرکت ارتعاشی مولکول‌های دواتمی و مولکول‌های چنداتمی، استخراج قواعد گزینش انتقالات ارتعاشی مولکول‌های فرفره‌ای متقارن و فرفره‌ای نامتقارن و کروی، پدیده پیش‌تفکیک، پدیده تشدید فرمی، انتقالات مرکب و قواعد گزینش آنها،استفاده از نظریه گروه‌ها برای استخراج قواعد گزینش.

٤- طیف‌سنجی رامان

الگوی کلاسیکی پدیده رامان، الگوی کوانتومی پدیده رامان، قطبش و واقطبش، طیف‌سنجی رامان چرخشی، طیف‌سنجی رامان ارتعاشی- چرخشی، استخراج قواعد گزینش انتقالات رامان با استفاده از نظریه گروه‌ها، الگوی شدتی طیف‌های رامان و مقایسه آن با الگوی شدتی طیف‌های ارتعاشی جذبی زیر قرمز

٥- طیف‌سنجی ارتعاشی مایعات، جامدات و گونه های سطحی

قواعد گزینش و الگوی نوارهای ارتعاشی جامدات و گونه های سطحی، طیف سنجی ارتعاشی گونه ها در مایعات، محلول ها و بافت های برهمکنشی و خنثی

روش ارزشیابی :

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهایی	پروژه
+	+	+	+

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

1. Bernath, P. F. (2005) *Spectra of Atoms and Molecules*, Oxford University Press.
2. Brown, J., Carrington, (2003) A. *Rotational Spectroscopy of Diatomic Molecules*, Cambridge Uniersity Press.
3. Ozaki, Y., Marek, J. W., Jürgen, P. (2019) *Molecular Spectroscopy: A Quantum Chemistry Approach*. John Wiley & Sons.
4. Harris, D. C., Bertolucci, M. D. (1989) *Symmetry and Spectroscopy, An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy*, Dover, New York.
5. Kakkar, R. (2015) *Atomic and Molecular Spectroscopy*. Cambridge University Press.

طیف‌سنجی مولکولی ۲

Molecular Spectroscopy II

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: – حل تمرین: –
نوع درس: اختیاری	پیش‌نیاز: طیف‌سنجی مولکولی ۱

هدف درس:
تبیین مفاهیم و پدیده‌های طیف‌سنجی الکترونی و کاربرد آنها در مطالعه ساختار اتم‌ها و مولکول‌ها

رئوس مطالب:

۱- طیف‌سنجی الکترونی اتم‌ها

اتم‌های تک‌الکترونی و چندالکترونی، تکانه زاویه‌ای اوربیتالی و اسپینی، ترکیب تکانه‌های زاویه‌ای و نمادهای طیفی، طیف‌های نشری و جذبی اتم‌ها، قواعد گزینش، اثرات عادی و غیرعادی زیمان، طیف‌سنجی الکترونی اتم‌ها و یون‌های اتمی و اثرات نسبیتی در طیف‌سنجی اتمی

۲- حل معادله شرودینگر مولکول دواتمی

تقریب بورن–اپنهایمر، پتانسیل‌ها مولکولی و حالت‌های کوانتومی مولکول دواتمی، روش دانهام، روش نیمه‌کلاسیکی (WKB) در تحلیل ترازها و حالات کوانتومی یک پتانسیل عمومی، نظریه نزدیک حد تفکیک

۳- طیف‌سنجی الکترونی مولکول‌های دواتمی

انتقالات دوقطبی الکتریکی الکترونی، ساختارهای ارتعاشی و چرخشی انتقالات الکترونی، تاثیر آمار اسپین هسته بر ساختار چرخش طیف الکترونی، تقارن‌های $C_{\infty V}$ و $D_{\infty h}$ حالات مولکول‌های دواتمی و زوجیت (پاریته)، تفکیک و پیش‌تفکیک، ساختار پیوستار، روش‌های انعکاس و RKR، جدول دزلاندرز و سهمی‌های کندن، انتقالات عمودی و اصل فرانک– کندن، توالی‌ها و پیشرفت‌ها، الگوهای جفت‌شدگی هوند و تأثیر آن بر طیف الکترونی مولکول‌های دو اتمی.

٤- طیف‌سنجی الکترونی مولکول‌های چنداتمی

حالت‌های کوانتومی و ترازهای الکترونی مولکول‌های چنداتمی، تقارن هسته‌ای و تقارن الکترونی، مولکول‌های سه اتمی و نمودار والش، روش هوکل و طیف‌سنجی الکترونی مولکول‌های دارای سامانه π گسترده، ساختار ارتعاشی انتقالات الکترونی،

جفت‌شدگی الکترونی- ارتعاشی- چرخشی: اثرات هرزبرگ- تلر، یان- تلر و رنه- تلر، فلوئورسانس، فسفرسانس، گذارهای بی‌تابش و نمودارهای جابلونسکی

۵- طیف‌سنجی فوتوالکترون اتم‌ها و مولکول‌ها و روش‌های وابسته

طیف‌سنجی فوتوالکترون، طیف‌سنجی فلورسانس اشعه ایکس، طیف‌سنجی الکترون اوژه، ساختار ارتعاشی و چرخشی طیف‌های فوتوالکترون، طیف یونش و قضیه کوپمنز و طیف‌سنجی فوتوالکترونی سطوح جامدات

٦- طیف‌سنجی لیزری

پدیده لیزر و روش‌های تولید نور لیزر، کلید Q، قفل‌کردن شیوه‌ها، لیزرهای رنگی و کوک‌شدنی، چند نمونه لیزر گازی و جامد، لیزرهای نیمه‌رسانا (دیودی)، لیزرهای شدید و تولید هماهنگ‌های بالاتر، کاربرد لیزر در طیف‌سنجی رامان، تحریک چندفوتونی، طیف‌سنجی فوتوالکترون، طیف‌سنجی لیزری تحریک- تعقیب گونه‌های گذار، فرآیندهای وابسته به زمان طیف‌سنجی الکترونی- ارتعاشی فمتوثانیه و آتوثانیه، مطالعه گونه‌ها در پرتوهای اتمی و مولکولی

روش ارزشیابی :

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهایی	پروژه
+	+	+	+

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

1. Bernath, P. F. (2005) *Spectra of Atoms and Molecules*, Oxford University Press.
2. Hollas, J. M. (2004) *Modern Spectroscopy*, Wiley, New York.
3. Harris, D. C., Bertolucci, M. D. (1989) *Symmetry and Spectroscopy, An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy*, Dover, New York.
4. Ellis, M., Feher, M., Wright, T. G. (2005) *Electronic and Photoelectron Spectroscopy*, Cambridge University Press.
5. Lefebvre-Brion, H., Field, R. W. (2004) *The Spectra and Dynamics of Diatomic Molecules*, Elsevier, Netherland.

منابع فرعی:

1. Herzberg, G. (2008) *Molecular Spectra and Molecular Structure*, Reitell Press.

فرآیندهای برگشت‌ناپذیر

Irreversible Phenomena

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: – حل تمرین: –
نوع درس: اختیاری	پیش‌نیاز: ترمودینامیک آماری ۱

هدف درس:
تبیین مفاهیم و پدیده‌های غیرتعادلی و برگشت‌ناپذیر (دیدگاه مولکولی– آماری) و کاربردهای آن

رئوس مطالب:

۱– مقدمات

قوانین بقاء، ترمودینامیک (تولید و مصرف انرژی و آنتروپی)، معادلات ناویر– استوکس، قضیه و روابط انزاگر– کازیمیر، معادله لیوویل کلاسیکی، روابط پدیده‌شناسی خطی و غیرخطی، معرفی پدیده‌های برگشت‌ناپذیر یک‌تایی و دوتایی، ترمودینامیک آماری و نتایج آن (تابع توزیع و انواع مجموعه‌ها)

۲– حرکت براونی و معادله لانژون

نظریه انیشتین، معادله فوکر– پلانک و حل آن، حرکت براونی (انتقالی، چرخشی، تاخوردگی پلیمرها و ارتعاشی)، همبستگی پدیده‌ها و زمان همبستگی، حافظه پدیده‌ها، پدیده‌های بی‌حافظه (مارکوفی– گاوسی)، پدیده‌های حافظه‌دار، نوفه و انواع آن و قضیه افت‌وخیز– اتلاف

۳– معادله بولتسمان و نظریه جنبشی

اثبات، توصیف و تفسیر معادله بولتسمن، عملگر برخورد، حالت تعادل، آنتروپی و قضیه H، پاسخ‌های محلی ماکسولی، روش ماکسول– گراد و ارتباط معادله بولتسمن با معادله فوکر– پلانک

٤- حل عمومی معادله بولتسمان

بسط چاپمن- انسکوگ، ضرایب انتقالی، توصیف پدیده‌های رسانایی گرمایی و گرانروی، معادله تکانه برای جریان لایه‌ی سیال لغزان، خطی‌سازی عملگر برخورد و تبدیل فوریه‌ی آن، حل وردشی، توابع ویژه عملگر برخورد خطی‌شده و خواص آن، خواص تقارنی عملگر برخورد، قضیه انزاگر و تقارن زمان- فضای عمگر برخورد

٥- معادله بولتسمان خطی‌شده و معادله بولتسمان عمومی

خطی‌سازی معادله ناویر-استوکس و معادله بولتسمان، حل اغتشاشی (اختلالی) برای معادله مقدار ویژه، حل چندجمله‌ای، مقادیر اولیه و شرایط مرزی، استفاده از توابع گرین در تبدیل و ساده‌سازی معادله بولتسمان، مجموعه معادلات BBCKY، معادله لیوویل و معادلات نظریه جنبشی، معادله BGK، انواع عملگرها، حل مجموعه معادلات، مطالعه رفتار زمانی پاسخ‌ها و قوانین بقاء از دیدگاه معادله بولتسمان

٦- افت‌وخیز و اتلاف

مجموعه‌های تعادلی و افت‌وخیزهای حول حالت تعادل، تعادل موضعی از نگاه مکانیک کوانتومی، نظریه پاسخ (ایستا، پویا و خطی)، روابط کوبو- گرین، پدیده‌های نفوذ، رسانایی گرامایی و گرانروی، مجموعه‌های غیرتعادلی، معادلات هیدرودینامیک و فرآیندهای آسایش

٧- توابع همبستگی و ضرایب انتقال

همبستگی‌های مستقل از زمان و وابسته به زمان، توابع همبستگی از نگاه معادله بولتسمان و بسط خوشه‌ای، برخوردهای دوتایی و سه‌تایی و خواص انتقالی گازهای کامل و حقیقی

٨- دینامیک کوانتومی

عملگر لیوویل کوانتومی، معادله فوکر- پلانک، ناهمدوس شدن، معادلات بلاخ، پراش کوانتومی، واکنش شیمیایی و سطح مقطع برخورد

روش ارزشیابی :

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهایی	پروژه
+	+	+	+

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

1. de Groot, S. R., Mazur, P. (1962) *Non-Equilibrium Thermodynamics*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam.

2. McLennan, A. (1989) *Nonequilibrium Statistical Thermodynamics*, Prentice Hall, New Jersey.

3. Zwanzig, R. (2001) *Nonequilibrium Statistical Mechanics*, Oxford University, Oxford.

4. Eu, B. C. (1998) *Nonequilibrium Statistical Mechanics: Ensemble Method*, Kluwer, Netherland.

5. Oono, Y. (2003) *Introduction to Nonequilibrium Statistical Thermodynamics*, Univ. of Illinois.

منابع فرعی:

1. Roldán, E. (2014) *Irreversibility and dissipation in microscopic systems*, Springer.

مباحث ویژه در شیمی‌فیزیک

Special Topics in Physical Chemistry

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: – حل تمرین: –
نوع درس: اختیاری	پیش‌نیاز: –

هدف درس:

آشنایی با آخرین پیشرفت‌های علمی در شیمی‌فیزیک

رئوس مطالب:

مطالب مربوط در هر تنیمسال توسط استاد درس پیشنهاد می‌شود و پس از تأئید در گروه، ارائه می‌شود.

روش ارزشیابی :

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهایی	پروژه
–	+	+	+

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

جدیدترین منابع معتبر در زمینه شیمی و به ویژه شیمی‌فیزیک

مکانیک آماری جامدات

Statistical Mechanics of Solids

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: – حل تمرین: –
نوع درس: اختیاری	پیش‌نیاز: ترمودینامیک آماری ۲

هدف درس:
مطالعه‌ی سامانه‌های جامد از دیدگاه مکانیک آماری

رئوس مطالب:

۱– اصول مکانیک‌آماری

حالت ترمودینامیکی، مقایسه حالت ماکروسکوپی و میکروسکوپی و رابطه بین آنها، مجموعه‌ها، خلاصه‌ای از تعاریف احتمالات، آنتروپی آماری، قانون دوم ترمودینامیک و افت‌وخیزها

۲- آمارهای ذره

توابع توزیع ذرات، آمارهای ذره، ترمودینامیک، گاز ایده‌آل– آمارهای ذره از مجموعه کانونی بزرگ، نمایش چگالی حالت‌ها، توزیع سرعت‌های ماکسول، گاز ایده‌آل دوبعدی، ذرات مستقل و زیرسامانه‌ها

۳- بلورهای هماهنگ

مدل هماهنگ، زنجیر خطی تک‌اتمی، تجزیه–تحلیل شیوه‌های متعامد، تابع تقسیم (افراز)، انرژی آزاد بلور هماهنگ، معادلات عمومی ظرفیت گرمایی، مدل انیشتاین، برهمنهی نوسانات انیشتاین، مدل دبای، انرژی دبای، ظرفیت گرمایی، رابطه بین دماهای مشخصه انیشتاین و دبای، مقایسه نتایج نظریه دبای با نتایج تجربی و گاز فونون

٤- خواص ناهماهنگی و معادله حالت

انرژی پتانسیل بلور، خواص ناهماهنگی و فرضیه گرونایسن (Gruneisen)، ظرفیت گرمایی در فشار ثابت، نظریه دبای و فرضیه گرونایسن، ناهماهنگی ارتعاشی و نظریه سنجه گرونایسن

۵- نظریه الکترون آزاد در فلزات و نیمه‌رساناها

الکترون‌های آزاد در فلزات، آمارها برای گاز الکترون، توزیع الکترون‌های آزاد، خواص ترمودینامیکی گاز الکترون آزاد، ظرفیت گرمایی الکترونی در فلزات، معادله حالت گاز الکترون آزاد، نظریه توماس- فرمی، مروری بر نتایج نظریه پیوند، سطوح ناخالصی در نیمه‌رساناها، توزیع الکترون در نیمه‌رساناهای ذاتی، آمارهای الکترون در نیمه‌رساناهای ذاتی، قانون اثر جرم در نیمه‌رساناهای ذاتی، رابطه بین تراز فرمی و غلظت ناخالصی

٦- نظریه جنبشی- آمار انتقال الکترون

الکترون‌های آزاد در میدان‌های خارجی، شیب‌های دمایی، شیوه جنبشی آمار، معادله انتقال بولتسمان، معادلات متعارف شار، رسانایی الکتریکی فلزات، رسانایی حرارتی، قانون وایدمن-فرانز، اثر همدمای هال و هدایت الکتریکی در نیمه‌رساناها

۷- آلیاژهای بانظمی- بی‌نظمی

ساختارهای بانظمی- بی‌نظمی، انتقال نظم- بی‌نظمی، توصیف درجه نظم، تابع تقسیم نظم، بی‌نظمی، روش کرکوود ، تقریب براگ -ویلیام، تقریب لحظه ثانویه، تقریب شبه‌شیمیایی و مقایسه با تجربه

۸- نظم مغناطیسی

پاسخ مغناطیسی، گشتاورهای پارامغناطیسی مستقل، پارامغناطیسی الکترون‌های آزاد، فرومغناطیسی: نظریه میدان متوسط، مدل آیزینگ برای فرومغناطیسی، پادفرومغناطیسی: نظریهمیدان متوسط و امواج اسپین

۹- تعادل فاز

تعادل فاز در سامانه‌های تک سازنده‌ای، مدل وان‌دروالس، تصعید، حالت مایع، آنتروپی Communal، ارتعاشات، ذوب، ذوب و نظریه محلول با قاعده آلیاژهای دوتایی

۱۰- نماهای بحرانی و گروه باز بهنجارش (Renormalization Group)

مدل‌های معادل، نقاط بحرانی، نظریه لاندائو ، بسط کرکوود، افت‌وخیزها، طول همبستگی، زنجیر آیزینگ تک‌اتمی، بازبهنجارش مدل آیزینگ یک‌بعدی، ساختار کادانوف، مقیاس‌بندی، گروه باز بهنجارش و اعداد

۱۱- سطوح و سطوح مشترک

مفاهیم اساسی، ترمودینامیک سطح مشترک، ترمودینامیک جذب بر روی سطوح جامد، چسبندگی، پیوستگی، نقطه بحرانی، نمای بحرانی برای کشش سطحی، جذب تک‌لایه: همدمای لانگمویر، جذب تک‌لایه: لایه متحرک، جذب چندلایه و همدمای BET و جداسازی ناخالصی‌ها در سطح مشترک

روش ارزشیابی :

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهایی	پروژه
–	+	+	+

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

1. Girifalco, L. A. (2000) *Statistical Mechanics of Solids*, Oxford University Press.
2. Plischke, M., Bergersen, B. (2005) *Equilibrium Statistical Physics*, 3rd Ed. World Scientific.
3. Landau, L. D., Lifshitz, E. M. (1981) *Statistical Physics* (3rd Ed.), Part:1, 2, Pergamon Press, New York.
4. Hofmann, P. (2022) *Solid state physics: an introduction*, John Wiley & Sons.
5. Kittel, C., Paul, Mc. (2018) *Introduction to solid state physics*, John Wiley & Sons.

شیمی‌فیزیک نانوساختارها

Physical Chemistry of Nanostructures

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: – حل تمرین: –
نوع درس: اختیاری	پیش‌نیاز:

هدف درس:
آشنایی دانشجویان با شیمی و فیزیک حاکم بر پدیده‌های در مقیاس نانو و روش‌های شناخته شده ساخت مواد و ساختارهای نانومتری.

رئوس مطالب:

۱- اصول و مبانی نانوتکنولوژی

مبانی نانو تکنولوژی، تاریخچه فناوری نانو، انواع ساختارهای نانو: نانوبلورها، نانوسیم‌ها، نقاط کوانتمی و ... ، نانوبیوتکنولوژی، خودآرایی (self- assembly)، روش‌های پایین به بالا (bottom-up) و روش‌های بالا به پایین (up-bottom)، کاربردها و چالش‌های فناوری نانو.

۲- مقدمه‌ای بر شیمی سطح

شیمی و فیزیک سطح، ناحیه بین سطحی، کشش سطحی و انرژی آزاد سطح، روش‌های اندازه‌گیری کشش سطحی، خاصیت مویینگی، پدیده ترشوندگی، مواد فعال سطحی: ساختار و خواص آن‌ها، مواد فعال سطحی دوقلو: ساختار و خواص، غلظت میسل شدن بحرانی (CMC)، روش‌های تعیین CMC، کنترل کشش سطحی، ترمودینامیک سطح، کمیت‌های ترمودینامیکی سطحی برای یک ماده خالص، انرژی سطحی کل، تغییر فشار بخار برای یک سطح انحنادار، اثر انحنا بر کشش سطحی، اثر فشار بر کشش سطحی، لایه‌های نازک جذب شده در سطح مایعات، جذب گازها بر روی سطح جامدات، جذب شیمیایی و جذب فیزیکی، هم‌دماهای جذب، هم‌دماهای لانگمویر، هم‌دماهای فروندلیچ، معادله برونوئر–امت–تلر (BET).

۳- نانوبلورهای کلوئیدی

سیستم‌های کلوئیدی، اهمیت کلوئیدها، انواع کلوئیدها (سول، ایروسول، امولسیون، ژل، ایروژل، فوم، تعلیق کلوئیدی، کف)، کلوئیدهای حلال دوست، کلوئیدهای حلال گریز، عامل تعلیق‌درآورنده، پخش (Dispersion)، برهم‌کنش بین ذرات کلوئیدی و عوامل موثر بر ایجاد یک تعلیق پایدار، تئوری DLVO، تجمع (Aggregation)، فلاکوله شدن یا تجمع برگشت پذیر

(Flocculation)، کوآگوله شدن یا تجمع برگشت ناپذیر (Coagolation)، روش‌های تهیه، خواص فیزیکی، اثر تیندال، منشا بارهای سطحی، پتانسیل زتا و نقطه ایزوالکتریک، اثر شکل ذرات روی خواص کلوئیدها، توزیع اندازه ذرات در تعلیق‌های کلوئیدی (PSD)، تجمع سانتریفیوژی.

٤- تولید کنترل‌شده نانوساختارها

روش‌های بالا به پایین (روش آسیاب گلوله‌ای) و روش‌های پایین به بالا (CVD، سل-ژل و ...)، سنتز نانوذرات فلزی و اکسید فلزی و کنترل اندازه ذرات، اثر پایدارکننده‌های پلیمری، فرایند سونوشیمی، روش میکرو امولسیون.

٥- نانوسیالات

سیالات انتقال حرارت، ساختار نانوسیالات، اهمیت نانوسیالات، انواع نانوسیالات، خواص فیزیکی (هدایت حرارتی، گرانروی، چگالی، ظرفیت حرارتی)، علت رفتار غیرعادی نانوسیالات، روش‌های تهیه نانوسیالات، روش‌یک مرحله‌ای و روش دو مرحله‌ای، روش‌های بهبود پایداری یک نانوسیال، تفاوت یک پخش کننده و یک ماده فعال سطحی، مدل‌های نظری برای تعیین هدایت حرارتی و گرانروی نانوسیالات، مکانیسم‌های افزایش هدایت حرارتی در نانوسیالات، کاربرد نانوسیالات.

٦- مبانی فیزیکی روش‌های شناسایی در سیستم‌های نانو

مبانی، چگونگی عملکرد و اصول فیزیکی حاکم بر ابزارهای شناسایی در ابعاد نانو مانند: میکروسکوپ روبشی الکترونی(Scanning Electron Microscope)، میکروسکوپ پروب روبشی(Scanning Probe Microscope)، میکروسکوپ الکترون عبوری پیمایشی (Scanning Transmission Electron Microscope)، پراش اشعه ایکس (X-ray Diffraction)، میکروسکوپ نیروی اتمی (Atomic Force Microscope)، اندیس‌های میلر، روش تعیین اندیس‌های میلر، قانون براگ و معادله شرر.

٧- روش‌های نظری مطالعه خواص در سیستم‌های نانو

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی سیستم‌های نانو، ابزارهای شبیه‌سازی عددی در مقیاس نانو، مسیرهای حرکت مکان- زمان، انسامبل مناسب برای شبیه‌سازی سیستم‌های نانو، پتانسیل‌های بین اتمی، پتانسیل اتم‌های فلزی، پتانسیل‌های روش اتم‌شده محاط شده (EAM)، پتانسیل‌های فینیز و سینکلار (FS)، پتانسیل‌های بین اتمی متصل با پیوند- کووالانسی، پتانسیل‌های چند ذرّه‌ای ترسف برایC-C، Si-Si، و C-Si، پتانسیل‌های هیدروکربنی از نوع برنر- ترسا، پتانسیل‌های غیرپیوندی کربن- کربن، پتانسیل کربن- فلز، مثال‌هایی از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در سیستم‌های نانو، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ذوب نانو ذرّات آلومینیم، پتانسیل الکترواستاتیک مثبت (+ES)، جزئیات شبیه‌سازی.

روش ارزشیابی :

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهایی	پروژه
–	+	+	+

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

1. Yang, P. (2003) *The Chemistry of Nanostructured Materials*, World Scientific Publishing Co., California.

2. Cao, G. (2003) *Nanostructures& Nanomaterials (Synthesis, Properties & Applications)*, Imperial College Press, London.

3. Caruso, F. (2004) *Colloids and Colloid Assemblies (Synthesis, Modification, Organization, and Utilization of Colloid Particles*, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co., Australia.

4. Bharat, B. (2007) *Springer Handbook of Nanotechnology* (2nd Ed.), Springer.

5. Schmid, G. (2011) *Nanoparticles: from theory to application*. John Wiley & Sons.

منابع فرعی:

1. Owens, F. J., Poole. Jr Charles., P. (2008) *The physics and chemistry of nanosolids*. John Wiley & Sons.

طیف‌سنجی تشدید مغناطیسی هسته ۱

Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy I

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: ۱ حل تمرین: –
نوع درس: اختیاری	پیش‌نیاز: مبانی طیف سنجی مولکولی (کارشناسی)

هدف درس:
آشنایی با مفاهیم و مبانی فیزیکی پدیده‌های مرتبط با تشدید مغناطیسی هسته و کاربردهای آن

رئوس مطالب:

۱- مقدمات

اسپین هسته و اسپین الکترون، رابطه اسپین هسته با عدد اتمی و عدد جرمی، توزیع پروتونها و نوترونها در هسته‌های دوقطبی و چهارقطبی، فراوانی ایزوتوپها، نظریه‌های ساختار هسته (قطره‌ای و اربیتالی)، واپاشی هستکها و هسته‌ها، تکانه زاویه‌ای و گشتاور مغناطیسی، برهمکنش گشتاورهای دوقطبی و چهارقطبی مغناطیسی با میدان مغناطیسی، مبانی نظری و نتایج آزمایش اشترن– گرلاخ، نتایج نظریه الکترومغناطیس و روابط ماکسول، قوانین آمپر، فلمینگ و بیو– ساوار، مغناطیس‌پذیری و مغناطیس‌شدگی توده‌ای. دیامغناطیس، پارامغناطیس، فرومغناطیس و پادفرومغناطیس، نیروی مغناطیسی انواع آهن‌رباها (دائمی، الکتریکی، ابررسانا)، همگنی میدان و همگن‌سازی (قلق‌گیری، Shimming)، ساختار الکترونی، چگالی احتمال و چگالی شار الکترونی، حالات ماده، حرکتهای اتمی– مولکولی، چیدمان و نیروهای بین‌مولکولی.

۲- پدیده تشدید مغناطیسی الکترون و هسته

شکافتگی ترازهای اسپین هسته در میدان مغناطیسی، توزیع جمعیتها، مغناطیس‌شدگی، رابطه کوری و تأثیر دما بر آن، تحول زمانی مغناطیس‌شدگی، حرکت تقدیمی و بسامد لارمور، تأثیر میدان تابش با بسامد رادیویی (RF) بر بردار مغناطیس‌شدگی، آزمایش NMR با میدان RF پیوسته (CW-NMR) و تحلیل پاسخ اسپین هسته‌ها، آزمایش NMR با تپ RF ، طیف‌سنجی تبدیل فوریه و تحلیل تحول مغناطیس‌شدگی در حین و پس از اعمال تپ RF، وادوسی (واهم‌فازشدن) ناشی از پوشیدگی شیمیایی، آسایش طولی (انرژی) و عرضی (انتروپی)، تشدید مغناطیسی الکترون (ESR)، تشدید مغناطیسی دوگانه الکترون و هسته (ENDOR).

۳- پوشیدگی شیمیایی

میدانهای محلی، منشأ پوشیدگی شیمیایی هسته‌ها، محیط الکترونی و شیمیایی، پوشیدگی هسته‌های چهارقطبی و ناهمسانگردی پوشیدگی، پوشیدگی ناشی از پدیده‌های پویا، جدول پوشیدگی‌های هسته‌های مختلف در ترکیبات مختلف، تغییر پوشیدگی شیمیایی با استفاده از نمکهای پارامغناطیس لانتانیدها و آکتینیدها.

۴- توصیف کوانتومی برهمکنش‌ها و جفت‌شدگی‌ها

جفت‌شدگی نوع J و تحلیل کوانتمی آن، چندتایی‌های درجه اول و الگوهای مختلف چندتایی در اثر جفت‌شدگی با گروههای هسته‌های مختلف، تأثیر فاصله و زوایای پیوندی بر جفت‌شدگی نوع J ، خودواجفت‌شدگی، جفت‌شدگی دوقطبی- دوقطبی و تحلیل کوانتمی آن، شکافتگی‌های ناشی از جفت‌شدگی دوقطبی، جفت‌شدگی چهارقطبی و تحلیل کوانتمی آن، تشدید چهارقطبی هسته (NQR) و NMR میدان صفر.

۵- پویایی و زمانهای آسایش

زمان آسایش طولی T_1 و روش وارونگی- بازیافت، زمان آسایش عرضی T_2، بازتاب اسپینی (Spin Echo) و روش کار- پارسل- میبوم-گیل (CPMG)، زمان آسایش در دستگاه چرخان، زمان آسایش چهارقطبی و روش ینر- بروئکارت، پویایی و تعویض شیمیایی (چرخش درون‌مولکولی و جابجایی درون‌مولکولی و بی‌ن‌مولکولی) سریع و کند، انتقال اشباعیت، تأثیر دما بر پدیده‌های پویایی در NMR.

۶- انتقال قطبش و اثر اورهاوزر هسته‌ای

جفت‌شدگی دوقطبی و انتقال جمعیت تحت تأثیر جملات برهمکنش دوقطبی، انتقالات صفر، یک و دو کوانتمی، روابط سولومون، اثر اورهاوزر هسته‌ای (NOE)، اشباع کردن یک هسته برای مدیریت جمعیت ترازهای هسته دیگر و تقویت پاسخ NMR آن، واجفت‌شدگی و ساده‌سازی طیف NMR و استخراج الگوی جفت‌شدگی هسته‌ها.

۷- تشدید مغناطیسی هسته در نمونه‌های جامد

هامیلتونی اسپین هسته‌ها در جامدات، متوسط‌گیری حرکتی و متوسط‌سازی چرخشی، چرخش در زاویه جادویی (MAS)، واجفت‌کردن هسته‌ها برای ساده‌سازی طیف NMR جامدات و تقویت پاسخ از طریق انتقال قطبش و ناشی از اثر NOE (آزمایش CP-MAS)،

۸- نکات آزمایشگاهی

چیدمان دستگاهی، ردیاب، سیم‌پیچ‌های فرستنده و گیرنده، سیم‌پیچ‌های هلمهولتز و نرنست، تقویت‌کننده و تضعیف‌کننده، مولد قطار تپ، تنظیم ردیاب، همگن‌سازی (شیم) میدان، قفل‌کردن میدان، یافتن طول تپ مناسب و بهبود کیفیت تپ، تعداد پیمایش، قطار تپ و تنظیم الگوی توالی فاز تپها، تنظیم جدول زمانهای قطار تپ، آزمایشهای دمای متغیر و معیاربندی دمای نمونه، لوله NMR ، محل استقرار و سرعت چرخش آن، ملاحظات ایمنی، دریافت پاسخ سامانه اسپینی و جمع‌آوری اطلاعات و ثبت FID حقیقی و مجازی، تبدیل فوریه، اعمال تابع پنجره گاوسی و لورنتزی، تنظیم خط پایه، قله‌یابی، محاسبه سطح زیر قله‌ها، استفاده از نرم‌افزارها برای طیف‌خوانی و انتساب قله‌ها، نکات دستگاهی آزمایش NMR جامدات (CP-MAS).

۹- آزمایشهای تشدید مغناطیسی هسته دوبعدی

انتقال اطلاعات اسپینی، تشدید دوگانه و قطار تپ دوگانه هم‌قدم‌شده برای دو نوع هسته مختلف، زمان تحول، زمان اختلاط و زمان آسایش، توصیف پدیده و قطار تپ انواع آزمایشهای دوبعدی (COSY، NOESY، TOCSY، HMQC ، HMBC ، DEPT ، INEPT، INADEQUATE)، مطالعه چند نمونه طیف دوبعدی.

روش ارزشیابی :

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهایی	پروژه
+	+	+	+

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

1. Harris, R. K. (1986) *Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy*: *A Physicochemical View*, Longman, Harlow.
2. Levitt, M. H. (2008) *Spin Dynamics: Basics of Nuclear Magnetic Resonance* (2nd Ed.), Wiley, Chichester.
3. Sandström, J. (1982) *Dynamic NMR Spectroscopy*, Academic Press, London.
4. A. E. Derome, (1987) *Modern NMR Techniques for Chemistry Research*, Pergamon Press, Oxford.
5. Steigel, A., Spiess, H. W. (1978) *Dynamic NMR Spectroscopy*, Springer, Berlin.

طیف‌سنجی تشدید مغناطیسی هسته ۲

Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy II

تعداد واحد نظری: ۳	**تعداد واحد عملی:** ۰ **حل تمرین:** -
نوع درس: اختیاری	**پیش‌نیاز:** طیف‌سنجی تشدید مغناطیسی هسته ۱ (کارشناسی ارشد)

هدف درس:
آشنایی با روش آرایه چگالی و عملگرهای ضربی در تحلیل پدیده‌های تشدید مغناطیسی هسته و کاربردهای آن

رئوس مطالب:

۱- مقدمات

الف) NMR -آزمایش NMR تپی، توزیع جمعیتها و تحول زمانی آنها، وادوسی (واهم فازشدن)، آسایش طولی (انرژی) و آسایش عرضی (انتروپی)، آزمایشهای EPR (ESR) و ENDOR ، پوشیدگی شیمیایی همسانگرد و ناهمسانگرد هسته‌ها، پوشیدگی ناشی از پدیده‌های پویا، جفت‌شدگی‌های نوع J ، دوقطبی و چهارقطبی و تحلیل کوانتمی آنها، خودواجفت‌شدگی، تشدید چهارقطبی هسته (NQR)، اثر اورهاوزر هسته‌ای (NOE)، اشباع‌کردن و مدیریت جمعیت ترازهای اسپین هسته، واجفت‌شدگی، پدیده‌های پویا در NMR ، آزمایش CP-MAS ، تشدید دوگانه و قطار تپ دوگانه هم‌قدم‌شده برای دو نوع هسته مختلف، توصیف زمان تحول، زمان اختلاط و زمان آسایش، معرفی ، روش انجام و کاربرد انواع آزمایشهای NMR دوبعدی.

ب) مکانیک کوانتومی-فضای هیلبرت، نمادگذاری دیراک، عملگرهای فضای هیلبرت، عملگرهای همیوغ هرمیتی، بردارهای پایه، آرایه متناظر با یک عملگر، توصیف اثر عملگرها در فضای آرایه‌ها ، عملگرهای هرمیتی، تبدیل تشابه و تبدیل یکانی، ابرعملگرها، تبدیلات دورانی، عملگرهای ضربی و خواص آنها

۲- آرایه چگالی سامانه‌های اسپینی و پدیده تشدید مغناطیسی هسته

آرایه چگالی و جمعیت (چگالی) حالات. توزیع تعادلی جمعیتها، توصیف تحول زمانی یک کمیت فیزیکی بر اساس تحول مقادیر عناصر آرایه چگالی متناظر با آن، معادله تحول زمانی آرایه چگالی، آرایه عملگرهای اسپینی I_x ،I_y ،I_z ،I_+ ،I_- و I^2 و انواع ترکیبات جمع جبری و ضربی آنها ، آرایه چگالی حالات اسپین هسته و تحلیل یک

آزمایش NMR ساده (شامل تأثیر تپ بسامد رادی‌ویی، تحول جمعیتها پس از اعمال تپ و آسایش)، آرایه چگالی حالات اسپین یک سامانه دو اسپینی، تحلیل آزمایشهای NMR دوبعدی (شامل روشهای J-Mod، HETCOR، COSY، TOCSY، HMBC، INADEQUATE، DEPT، INEPT، NOESY و HMQC) براساس تغییرات عناصر آرایه چگالی.

۳- تحلیل پدیده‌های تشدید مغناطیسی هسته با استفاده از عملگرهای ضربی دورانی

روابط عملگری در فضای آرایه‌ها، شکل عمومی یک عملگر ضربی، توصیف پدیده‌ها و تحولات سامانه بر اساس جبر آرایه‌ای عملگرهای ضربی، انتقال جمعیت از یک حالت به حالت دیگر با استفاده از تبدیلات دورانی تحت اثر عملگرهای ضربی دورانی، انتقال اطلاعات و رصد تحولات اسپینی با استفاده از عملگرهای ضربی مناسب، توصیف ضربی عملگرهای اسپینی I_x، I_y، I_z، I_+، I_- و I^2 و انواع ترکیبات جمع جبری و ضربی آنها، تحلیل آزمایش NMR ساده براساس عملگرهای ضربی اسپینی، تحول زمانی سامانه اسپینی از نگاه عملگری، عملگرهای متناظر با جابجایی شیمیایی و جفت‌شدگی‌های نوع J، دوقطبی و چهارقطبی، عملگرهای متناظر با پدیده‌های آسایش، تحلیل آزمایشهای NMR دوبعدی (شامل روشهای J-Mod ، HETCOR ، COSY ، TOCSY ، HMBC ، INADEQUATE ، DEPT ، INEPT ، NOESY و HMQC)، تحلیل پدیده تعویض شیمیایی و تأثیر آن بر طیف NMR با استفاده از روش عملگرهای ضربی.

۴- تحلیل آرایه‌ای و عملگری نکات عملی آزمایشهای NMR دوبعدی

ملاحظات کوانتمی و عملگری کارکرد بخشهای مختلف یک قطار تپ نوعی، طراحی قطار تپ و تنظیم الگوی توالی فاز تپها (چرخش فاز، Phase Cycling) ، نقش زمانهای مشخصه قطار تپ، تحول FID های حقیقی و مجازی، آزمایشات CP-MAS و High-Res. برای نمونه‌های جامد، خطاها، ردهای مجازی و شبح در طیف‌های NMR دوبعدی.

۵- استفاده از روش عملگرهای ضربی و آرایه چگالی در شبیه‌سازی پدیده‌های NMR

شبیه‌سازی دو آزمایش NMR یک‌بعدی و دو آزمایش NMR دوبعدی بر اساس روش عملگرهای ضربی و آرایه چگالی با استفاده از نرم‌افزارهای NMR کوانتومی موجود و با استفاده از نرم‌افزارهای MATLAB یا MAPLE .

روش ارزشیابی :

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهایی	پروژه
+	+	+	+

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

1. Goldman, M. (1988) *Quantum Description of High-Resolution NMR in Liquids*, Clarendon Press, Oxford.

2. Levitt, M. H. (2008) *Spin Dynamics*: *Basics of Nuclear Magnetic Resonance* (2nd Ed.), Wiley, Chichester.

3. Steigel, A., Spiess, H. W. (1978) *Dynamic NMR Spectroscopy*, Springer, Berlin, 1978.

4. Duer, M. J. (2002) *Solid-State NMR Spectroscopy: Principles and Applications*, Blackwell Science.

5. Kaplan, J., Fraenkel, I. G. (1980) *NMR of Chemically Exchanging Systems*, Academic Press, Toronto.

پیوست:

۱- علت بازنگری سر فصل مصوب ۱۳۹۰/۹/۲۹ :

نیاز متغیر جامعه بشری و در راستای آن رشد روز افزون علوم برای تامین آن به همرا تجربه کسب‌شده در دوره تقریبا ۵ ساله، انگیزه بازنگری مطالب تدریس‌شده از نظر کیفی و کمی می‌باشد. گر چه دروس تخصصی که در واقع مبتنی بر اصول و مبانی پایه برای دوره‌ی تحصیلات تکمیلی درنظر گرفته شده است، آن‌چنان قابل‌تغییر نبوده، ولی دروس اختیاری از نظر حجم مطالب ارائه‌شده و تناسب آنها با طول ترم و توانایی‌های دانشجویان و همچنین با درنظر گرفتن نیاز دانشجویان در ارتباط با امر تحقیق بازنگری گردید که شرح کامل آن در جداول ارائه شده آمده است.

۲- جدول تطبیقی دروس تخصصی کارشناسی ارشد و دکتری

دروس قدیم			دروس جدید			استاد بازنگری کننده درس	توضیحات
نام درس	تعداد واحد		نام درس	تعداد واحد			
	نظری	عملی		نظری	عملی		
شیمی‌فیزیک پیشرفته	۳	–	ترمودینامیک شیمیایی	۳	–	دکتر رضا امیدیان ، دکتر حسن سبزیان ، دکتر ناهید فرضی و دکتر مجید موسوی	بدون تغییررئوس مطالب، مراجع ومطالب بازنگری شده
ترمودینامیک‌آماری ۱	۳	–	ترمودینامیک‌آماری ۱	۳	–	دکتر ناهید فرضی و دکتر مجید موسوی	بدون تغییررئوس مطالب، مراجع ومطالب بازنگری شده
سینتیک و دینامیک شیمیایی	۳	–	سینتیک و دینامیک شیمیایی	۳	–	دکتر حسن سبزیان و دکتر مجید موسوی	بدون تغییررئوس مطالب، مراجع ومطالب بازنگری شده
شیمی‌کوانتومی ۱	۳	–	شیمی‌کوانتومی ۱	۳	–	دکتر رضا امیدیان، دکتر اکبرامیدوار و دکتر حسن سبزیان	بدون تغییررئوس مطالب، مراجع ومطالب بازنگری شده
ترمودینامیک آماری ۲	۳	–	ترمودینامیک آماری ۲	۳	–	دکتر ناهید فرضی و دکتر مجید موسوی	بدون تغییررئوس مطالب، مراجع ومطالب بازنگری شده
شیمی‌کوانتومی ۲	۳	–	شیمی‌کوانتومی ۲	۳	–	دکتر رضا امیدیان، دکتر اکبرامیدوار و دکتر حسن سبزیان	بدون تغییررئوس مطالب، مراجع ومطالب بازنگری شده

۳- جدول تطبیقی دروس اختیاری کارشناسی ارشد و دکتری

دروس قدیم			دروس جدید			استاد بازنگری کننده درس	توضیحات
نام درس	تعداد واحد		نام درس	تعداد واحد			
	نظری	عملی		نظری	عملی		
اصول بیوشیمی- بیوفیزیک	۳	–	اصول بیوشیمی‌فیزیک	۳	–	دکترعبدالخالق بردبار	نام درس تغییریافته و مراجع بازنگری شده
–		–	شبیه‌سازی‌های مولکولی	۲	۱	دکتر مجید موسوی	درس جدید
ترمودینامیک آماری جذب	۳	–	ترمودینامیک آماری جذب	۳	–	دکتر ناهید فرضی	بدون تغییررئوس مطالب، مراجع ومطالب بازنگری شده
ترمودینامیک غیرتعادلی	۳	–	ترمودینامیک غیرتعادلی	۳	–	دکتر حسن سبزیان	بدون تغییررئوس مطالب، مراجع ومطالب بازنگری شده
تکنیک‌های بیوشیمی بیوفیزیک پیشرفته	۳	–	روش‌های‌بیوشیمی‌فیزیک	۳	–	دکترعبدالخالق بردبار	نام درس تغییریافته، مراجع بازنگری شده
شیمی‌تجزیه پیشرفته-دستگاهی	۳	–	–	۳	–	دکتر رضا امیدیان ، دکتر حسن سبزیان ، دکتر ناهید فرضی و دکتر مجید موسوی	–
شیمی‌حالت جامد	۳	–	شیمی‌حالت جامد	۳	–	دکتر حسن سبزیان	بدون تغییررئوس مطالب، مراجع ومطالب بازنگری شده
شیمی‌فیزیک سطح	۳	–	شیمی‌فیزیک سطح	۳	–	دکتر حسن سبزیان	بدون تغییررئوس مطالب، مراجع ومطالب بازنگری شده
شیمی‌کوانتومی محاسباتی	۳	–	شیمی‌کوانتومی محاسباتی	۳	–	دکتر رضا امیدیان و دکتر حسن سبزیان	بدون تغییررئوس مطالب، مراجع ومطالب بازنگری شده
شیمی‌کوانتومی وابسته به زمان	۳	–	شیمی‌کوانتومی وابسته به زمان	۳	–	دکتر رضا امیدیان و دکتر حسن سبزیان	بدون تغییررئوس مطالب، مراجع ومطالب بازنگری شده
طیف‌سنجی مولکولی ۱	۳	–	طیف‌سنجی مولکولی ۱	۳	–	دکتر رضا امیدیان و دکتر حسن سبزیان	بدون تغییررئوس مطالب، مراجع ومطالب بازنگری شده

طیف‌سنجی مولکولی ۲	۳	–	طیف‌سنجی مولکولی ۲	۳	–	دکتر رضا امیدیان و دکتر حسن سبزیان	بدون تغییررئوس مطالب، مراجع ومطالب بازنگری شده
فرآیندهای برگشت‌ناپذیر	۳	–	فرآیندهای برگشت‌ناپذیر	۳	–	دکتر حسن سبزیان	بدون تغییررئوس مطالب، مراجع ومطالب بازنگری شده
مباحث ویژه در شیمی‌فیزیک	۳	–	مباحث ویژه در شیمی‌فیزیک	۳	–	دکتر رضا امیدیان ، دکتر اکبر امیدوار، دکتر حسن سبزیان ، دکتر ناهید فرضی و دکتر مجید موسوی	بدون تغییررئوس مطالب، مراجع ومطالب بازنگری شده
مکانیک آماری جامدات	۳	–	مکانیک آماری جامدات	۳	–	دکتر ناهید فرضی	بدون تغییررئوس مطالب، مراجع ومطالب بازنگری شده
شیمی‌فیزیک نانوساختارها	۳	–	شیمی‌فیزیک نانوساختارها	۳	–	دکتر مجید موسوی	درس جدید
طیف‌سنجی تشدید مغناطیسی هسته ۱	۳	–	طیف‌سنجی تشدید مغناطیسی هسته ۱	۳	–	دکتر حسن سبزیان	درس جدید
طیف‌سنجی تشدید مغناطیسی هسته ۲	۳	–	طیف‌سنجی تشدید مغناطیسی هسته ۲	۳	–	دکتر حسن سبزیان	درس جدید