

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

برنامه آموزشی
دوره‌های تحصیلات تکمیلی
رشته شیمی فیزیک

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 رشته‌های مختلف در دوره‌های تحصیلات تکمیلی رشته شیمی در دانشگاه اصفهان در دستور کار قرار گرفت و سرفصل‌های مربوط نیز تعریف گردید. برنامه درسی و آموزشی تنظیم شده برای دوره‌های تحصیلات تکمیلی که شامل آموزش‌های نظری و عملی می‌باشد به گونه‌ای است که انتظار می‌رود دانش‌آموختگان این رشته‌ها 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- ضرورت و اهمیت

با بررسی دروس مقاطع تحصیلات تکمیلی رشته شیمی و بحث و تبادل نظر 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 تحصیلات تکمیلی نیاز به تغییر اساسی داشته و در نظر گرفتن شیمی به عنوان یک رشته با پنج گرایش شیمی آلی، شیمی پلیمر، شیمی تجزیه، شیمی فیزیک و شیمی معدنی تقریباً منسوخ شده است. بر این اساس تخصصی شدن بیشتر برنامه‌های آموزشی در دوره‌های تحصیلات تکمیلی و توجه ویژه به دروس مرتبط با زمینه‌های جدید و به روز علمی و دروسی که به فراهم شدن زمینه‌های تحقیقاتی بین رشته‌ای می‌انجامد، ضروری می‌باشد.

۳- تعریف

دوره‌های تحصیلات تکمیلی شیمی دانشگاه اصفهان دوره‌ای با رشته‌های تخصصی پنج‌گانه (شیمی آلی، شیمی پلیمر، شیمی تجزیه، شیمی فیزیک و شیمی معدنی) است که مشخصات هر رشته با دروس اختصاصی آن رشته و محتوای پایان‌نامه تعیین می‌گردد. در هر رشته مجموعه‌ای از دروس اصلی تخصصی، 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.

۴- واحدهای درسی

۴-۱- دوره‌های کارشناسی ارشد شیمی

تعداد کل واحدهای درسی دوره‌های کارشناسی ارشد شیمی در رشته‌های مختلف ۲۸ واحد است که برای دوره‌های آموزشی و پژوهشی شامل ۱۲ واحد اصلی تخصصی، ۹ واحد اختیاری، ۱ واحد سمینار و ۶ واحد پایان‌نامه می‌باشد و برای دوره‌های آموزش محور شامل ۱۲ واحد اصلی تخصصی، ۱۲ واحد اختیاری، ۴ واحد سمینار می‌باشد.

انتخاب پروژه تحقیقاتی در رشته‌های مختلف شیمی با نظر استاد راهنما و موافقت گروه انجام می‌گیرد. باتوجه به اهمیت تحقیقات و نوآوری در دانش شیمی توصیه می‌گردد که در این انتخاب حتی‌الامکان نکات زیر رعایت شود:

۱- روش یا راه‌حل موردنظر دارای تازگی و نوآوری باشد.

۲- موضوع و طرح موردنظر در جهت شناخت یا رفع مشکلات جامعه باشد.

دانشجویان دوره‌های آموزشی و پژوهشی هر رشته باتوجه به موضوع پایان‌نامه و نظر گروه می‌توانند کمبود واحدهای آموزشی خود را (تا سقف ۹ واحد)، از جدول دروس اختیاری رشته مربوط و یا جدول دروس اصلی تخصصی دکتری رشته خود و در موارد خاص با پیشنهاد استاد راهنما و تأیید گروه (حداکثر تا سقف ۶ واحد درسی) از دروس ارائه شده در سایر رشته‌های مصوب دانشگاه اصفهان اخذ نمایند.

در خصوص سمینارهای دوره آموزش محور انتخاب موضوع، ارائه‌ی آن و ارزیابی دانشجو در چارچوب مقررات مصوب دانشگاه انجام می‌گیرد.

۴-۲- دوره‌های دکتری شیمی

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

انتخاب موضوع پایان‌نامه در رشته‌های مختلف شیمی با نظر استاد راهنما و موافقت گروه انجام می‌گیرد. باتوجه به اهمیت تحقیقات و نوآوری در دانش شیمی توصیه می‌گردد که در این انتخاب حتی‌الامکان نکات زیر رعایت شود:

۱- روش یا راه‌حل موردنظر دارای تازگی و نوآوری باشد.

۲- موضوع و طرح موردنظر در جهت شناخت یا رفع مشکلات جامعه باشد.

دانشجویان هر رشته باتوجه به موضوع پایان‌نامه و نظر گروه می‌توانند کمبود واحدهای آموزشی خود را (تا سقف ۹ واحد)، از جدول دروس اختیاری رشته مربوط و در موارد خاص با پیشنهاد استاد راهنما و تأیید گروه (حداکثر تا سقف ۶ واحد درسی) از دروس ارائه شده در سایر رشته‌های مصوب دانشگاه اصفهان اخذ نمایند.

۱- تعداد کل واحد درسی دوره کارشناسی ارشد شیمی ۲۸ واحد و برای کلیه رشته‌ها به شرح زیر می‌باشد.

دوره‌های آموزشی و پژوهشی

تعداد واحد	
۱۲	دروس اصلی تخصصی
۹	دروس اختیاری
۱	سمینار
۶	پایان‌نامه
۲۸	جمع

دوره‌های آموزش محور

تعداد واحد	
۱۲	دروس اصلی تخصصی
۱۲	دروس اختیاری
۴	سمینار
۲۸	جمع

۲- تعداد کل واحد درسی دوره دکتری شیمی ۳۶ واحد و برای کلیه رشته‌ها به شرح زیر می‌باشد.

تعداد واحد	
۶	دروس اصلی تخصصی
۹	دروس اختیاری
۱	سمینار
۲۰	پایان‌نامه
۳۶	جمع

جدول ۱: دروس اصلی تخصصی دوره کارشناسی ارشد شیمی فیزیک

ردیف	نام درس	تعداد واحد	صفحه
۱	شیمی فیزیک پیشرفته	۳	۱
۲	ترمودینامیک آماری ۱	۳	۳
۳	سینتیک و دینامیک شیمیایی	۳	۵
۴	شیمی کوانتومی ۱	۳	۸
	جمع واحد	۱۲	

جدول ۲: دروس اصلی تخصصی دوره دکتری شیمی فیزیک

ردیف	نام درس	تعداد واحد	صفحه
۱	ترمودینامیک آماری ۲	۳	۱۰
۲	شیمی کوانتومی ۲	۳	۱۲
	جمع واحد	۶	

دانشجویان شیمی فیزیک موظف به گذراندن دروس فوق می باشند.

جدول ۳: دروس اختیاری رشته شیمی فیزیک

ردیف	نام درس	تعداد واحد	صفحه
۱	اصول بیوشیمی بیوفیزیک	۳	۱۴
۲	اصول سینتیک آنزیمی	۳	۱۶
۳	ترمودینامیک آماری جذب	۳	۱۸
۴	ترمودینامیک غیر تعادلی	۳	۲۰
۵	تکنیک‌های بیوشیمی بیوفیزیک پیشرفته	۳	۲۲
۶	شیمی تجزیه پیشرفته-دستگاهی*	۳	۲۴
۷	شیمی حالت جامد	۳	۲۶
۸	شیمی فیزیک سطح	۳	۲۹
۹	شیمی کوانتومی محاسباتی	۳	۳۲
۱۰	شیمی کوانتومی وابسته به زمان	۳	۳۵
۱۱	طیف‌سنجی مولکولی ۱	۳	۳۷
۱۲	طیف‌سنجی مولکولی ۲	۳	۳۹
۱۳	فرآیندهای برگشت‌ناپذیر	۳	۴۱
۱۴	مباحث ویژه در شیمی فیزیک	۳	۴۳
۱۵	مکانیک آماری جامدات	۳	۴۴
	جمع	۴۵	

*دانشجویان **دکتری** مجاز به اخذ این دروس نمی‌باشند.

*دانشجویان **کارشناسی ارشد** مجاز به اخذ ۹ واحد از جدول ۲ یا ۳ و یا دروس ارائه شده از سایر

گروه‌های آموزشی (تا سقف ۶ واحد) با نظر گروه می‌باشند

*دانشجویان **دکتری** مجاز به اخذ ۹ واحد از جدول ۳ و یا دروس ارائه شده از سایر گروه‌های آموزشی

با نظر گروه می‌باشند.



شیمی فیزیک پیشرفته

Advanced Physical Chemistry

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: -
نوع درس: اصلی تخصصی (کارشناسی ارشد)	حل تمرین: -
	پیش نیاز: -

هدف درس:

کسب دانش عمیق تر در زمینه‌ی پدیده‌ها و نظریه‌های شیمی فیزیک با تأکید بر ترمودینامیک شیمیایی

رئوس مطالب:

۱- معرفی دقیق و عمیق قوانین ترمودینامیک

- تعریف تعادل گرمائی و معرفی قانون صفرم ترمودینامیک، تعریف کار در ترمودینامیک، فرآیندهای ایستاوار، کار در سیستم هیدرواستاتیکی ساده، کار در فرآیندهای ایستاوار، محاسبه کار در سیستم‌های ساده، مفهوم ماکروسکوپی و میکروسکوپی گرما، کار بی‌دررو، قانون اول و فرمول‌بندی‌های مختلف آن، ظرفیت‌های گرمائی و اهمیت آن در ترمودینامیک و روش اندازه‌گیری آن، انتقال گرما در یک فرایند ایستاوار، قانون دوم ترمودینامیک به بیان کلاوسیوس، قانون دوم ترمودینامیک به بیان کلونین - پلانک

۲- برگشت پذیری و مقیاس دمای کلونین

- تعریف ماکروسکوپی برگشت پذیری و برگشت‌ناپذیری، انواع برگشت‌ناپذیری (گرمائی، مکانیکی و شیمیائی)، اثبات وجود سطوح ادیاباتیک برگشت پذیر برای یک سیستم (اصل کاراتئودوری)، آنتگرال پذیری dq، مقیاس دمای کلونین، اثبات تساوی مقیاس دمای ترمودینامیکی و گاز کامل

۳- آنتروپی و مفهوم مولکولی آن

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

۴- ترمودینامیک غیر تعادلی

- معرفی حالات عدم تعادل، ایده‌های اساسی در ترمودینامیک برگشت‌ناپذیر مرتبه اول، موازنه آنتروپی و تولید آنتروپی، استخراج معادلات پیوستگی جرم، انرژی، بار الکتریکی و اندازه حرکت خطی، معرفی نیروها، شارها و ضرائب فنومنولوژیکال، اثبات اصل متقابل انزاگر (قانون چهارم ترمودینامیک) و برخی از کاربردهای اصل انزاگر (اثر دوفر، اثر سورت و اثر پلیرت...)

۵- مکانیک آماری

- اصول اساسی و معرفی اصول موضوعه مکانیک آماری، توزیع تعادلی، تابع افزار، تابع افزار یک گاز کامل تک اتمی، رابطه تابع افزار با توابع ترمودینامیکی سیستم، اثبات اصل هم پخشی انرژی، توزیع تندیهای مولکولی، تعبیر آماری کار و گرما

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

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

۷- واکنش‌های تعادلی در سیستم‌های 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 و واکنش‌های مزدوج

۸- سینتیک شیمیایی واکنش‌ها و نظریه سرعت‌های 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، فرمول‌بندی ترمودینامیکی تئوری حالت گذار

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهایی	پروژه
-	+	+	-

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

- 1- M. Zemansky, R. H. Dittman, *Heat and Thermodynamics*, New York, John Wiley & Sons, 2001.
- 2- R. R. Rife, *Heat and Statistical Physics*, New York, John Wiley & Sons 2005.
- 3- I. N. Levine, *Physical Chemistry, McGraw Hill Higher Education*; 5th Ed, 2007.



ترمودینامیک آماری ۱

Statistical Thermodynamics 1

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: -
نوع درس: اصلی تخصصی (کارشناسی ارشد)	حل تمرین: -
	پیش نیاز: -

هدف درس:

بررسی ترمودینامیک شیمیایی سیستم‌های ماکروسکوپی از دیدگاه مولکولی

رئوس مطالب:

۱- توزیع آماری استاندارد بولتسمان گیبس

- مقدمه و یادآوری، مجموعه‌های کانونی، کانونی بزرگ، کانونی کوچک و همدمای همفشار - نظریه افت و خیزها، آمار بولتسمان، آمارهای کوانتومی، فرمی دیراک و بوز اینشتاین، گازهای ایده آل تک‌اتمی، دو اتمی و چند اتمی، مکانیک آماری کلاسیکی و تعادل شیمیایی

۲- مکانیک آماری غیرمقداری و ترمودینامیک

- تاریخچه و ترمودینامیک Tsallis (نظریه آماری غیرمقداری، استنتاج آمار - q غیرمقداری و آمار کوانتومی غیرمقداری)

۳- خاصیت آنتروپی Tsallis و اصل افزایش آنتروپی

- افزایش آنتروپی در آمار بولتسمان - گیبس و افزایش آنتروپی در آمار غیرمقداری

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهایی	پروژه
-	+	+	-

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

- 1- D. A. McQuarrie, *Statistical Thermodynamics*, 2nd Ed., University Science Books, 2000.
- 2- T. L. Hill, *An Introduction to Statistical Thermodynamics*, 1^{Ed}. Dover publications, 1986.
- 3- L. K. Nash, *Elements of Statistical Thermodynamics*, 2nd Ed., Dover Publications, 2006.
- 4- S. Abe and Y. Okamoto, *Nonextensive Statistical Mechanics and Its Applications*, Series Lecture in physics, Heidelberg: Springer- Verlag.
- 5- C. Tsallis, *Introduction to nonextensive statistical mechanics*, Springer Science and Business Media, New York, USA, 2008.



سینتیک و دینامیک شیمیایی
Chemical Kinetics and Dynamics

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: - حل تمرین: -
نوع درس: اصلی تخصصی (کارشناسی ارشد)	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 (دو طرفه، 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 اختلالات بزرگ توسط تابش پرتوهای شدید نوری (نورکافت سیلابی و لیزری)، برخورد الکترونها پرنرژی، امواج ضربهای صوتی و فراصوتی، شیوههای ایجاد اغتشاشهای کوچک در مطالعه پدیدههای آسایش شیمیایی شامل یک جابهجایی کوچک 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 گرانشی، رسانایی گرمایی، نفوذ و قوانین فیک)، و 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

۴- دینامیک شیمیایی

- دینامیک شیمیایی مولکولی، نظریه پراش (سطح مقطع برخورد های 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 بینمولکولی 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 اتم ها و مولکول ها و شیوه های ارتعاشی آنها توسط نور لیزر فمتوثانیه، پراش کوانتومی، واکنشهای حالتبهرحال و واکنشهای بدون سد انرژی

۵- 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 ثابت دیالکتریک بر روی سرعت واکنشها در محلول، سازوکار و سرعت واکنشهای الکتروشیمیایی (نفوذ متقابل در محلول، لایه دو گانه، چگالی جریان و نفوذ در بافت الکتروود) و روشهای مطالعه آنها

۶- 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

۷- 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

۸- 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 و نانولولههای کربنی)، تسهیل و تسریع با نور و امواج صوتی و فراصوتی

روش ارزیابی:

پروژه	آزمون نهائی	میان ترم	ارزشیابی مستمر
-	+	+	+

منابع اصلی:

- 1- P. L. Houston, *Chemical Kinetics and Reaction Dynamics*, McGraw-Hill, New York, 2005.
- 2- R. D. Levine, *Chemical Dynamics*, Cambridge University Press, Cambridge, 2005.
- 3- J. I. Steinfeld, J. S. Francisco, W. L. Hase, *Chemical Kinetics and Dynamics*, 2nd Ed, Prentice-Hall, London, 1999.
- 4- K. J. Laidler, *Chemical Kinetics*, 3rd Ed, Pearson, New York, 1997.



شیمی کوانتومی ۱

Quantum Chemistry I

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: -
نوع درس: اصلی تخصصی (کارشناسی ارشد)	حل تمرین: -
	پیش نیاز: -

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

- 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 ویژه بردارها، چند کاربرد قضیه وردشی

۳ - نظریه اغتشاش (اختلال)

- نظریه اغتشاش بدون هم‌ترازی، نظریه اغتشاش با هم‌ترازی، مقایسه روش‌های وردشی و اغتشاش، نظریه اغتشاش وابسته به زمان و کاربردهای آن و نظریه اغتشاش تقارن‌سازگار

۴ - 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-اینشتین، 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 تک دترمینانی 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

۶ - 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 ویریا و هلمن - فاینمن و کاربردهای آنها

- توابع همگن، قضیه ویریا و کاربردهای آن، قضیه (بیانیه) الکترواستاتیک، مشتق تابعیتی، قضیه هلمن - فاینمن و کاربردهای آن

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهائی	پروژه
+	+	+	-

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

- 1- I. N. Levine, *Quantum Chemistry*, 5th Ed, Prentice Hall, London, 2000.
- 2- P. W. Atkins, R. S. Friedman, *Molecular Quantum Mechanics*, 4th Ed, Oxford University Press, 2005.
- 3- K. T. Hecht, *Quantum Mechanics*, Springer, New York, 2000.
- 4- J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, 2nd Ed, Addison-Wesley, Canada, 1994.



ترمودینامیک آماری ۲

Statistical Thermodynamic II

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: - حل تمرین: -
نوع درس: اصلی تخصصی (دکتری)	پیش نیاز: ترمودینامیک آماری ۱

هدف درس:

بررسی سیستم‌های تعادلی دارای برهمکنش از دیدگاه ترمودینامیک آماری

رئوس مطالب:

۱- آمار کوانتومی

- گاز فرمی - دیراک ایده آل با چندحالتی ضعیف، گاز فرمی - دیراک ایده آل با چندحالتی شدید، گاز بوز، انیشتاین ایده آل با چندحالتی ضعیف، گاز بوز - انیشتاین ایده آل با چندحالتی شدید

۲- گازهای غیر کامل

- معادله حالت ویريال از تابع تقسیم کانونی بزرگ، ضرائب ویريال در حد کلاسیکی، دومین و سومین ضریب ویريال، ضرائب ویريال بالاتر برای پتانسیل کره سخت، 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

۴- دو نظریه ساده درباره‌ی مایعات

- نظریه ساختمان‌های بامعنی، 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 Kirkwood برای $g(r)$ ، تابع ارتباطی مستقیم، بسط‌های دانسته‌ای توابع توزیع مختلف، معادله انتگرالی Percus-Yevick و Hyper-Chain و Netted بسط‌های چگالی معادلات انتگرالی مختلف و مقایسه معادلات انتگرالی با یافته‌های تجربی

۶- نظریه‌های اغتشاش مایعات

- نظریه‌های اغتشاش مایعات، نظریه اغتشاش مکانیک آماری، معادله وان در والس و چند نظریه اغتشاش مایعات (نظریه Barker-Henderson و نظریه Chandler-Weeks-Anderson)

۷- مقدمه‌ای بر آمارهای شبکه: جذب، اتصال و تیتراسیون

- گاز شبکه ایده آل (نظریه جذب لانگمویر)، تابع تقسیم بزرگ برای یک جایگاه یا زیرسیستم مستقل منفرد، سیستم‌های تشکیل شده از زیرسیستم‌های مستقل، تمیزناپذیر و جذب بر یک زنجیر پلیمری خطی

۸- آمارهای شبکه

- گاز شبکه یک‌بعدی، کشسانی یک زنجیر پلیمری خطی، شبکه مربعی دو‌بعدی، تقریب براگ و ویلیام (Bragg-Williams)، تقریب شبه-شیمیایی (Quasi-Chemical) و انتقالات فاز مرتبه اول

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهائی	پروژه
+	+	+	-

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

- 1- D. A. McQuarrie, *Statistical Thermodynamics*, 2nd Ed., University Science Books, 2000.
- 2- T. L. Hill, *An Introduction to Statistical Thermodynamics*, Dover Publications, 1986.



شیمی کوانتومی ۲ Quantum Chemistry II

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: - حل تمرین: -
نوع درس: اصلی تخصصی (دکتری)	پیش نیاز: شیمی کوانتومی ۱

هدف درس:

فراگیری مفاهیم و روش‌های شیمی کوانتومی 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 چرخش 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-اربت

۴- نظریه پراش

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

۵- سامانه‌های دارای ذرات یکسان

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

۶- دینامیک کوانتومی

- بسته موج ذره آزاد، بسته موج گاوسی، ارتباط میان دینامیک کلاسیکی و دینامیک کوانتومی، تحول زمانی و معادله شرودینگر، انواع پدیده‌های وابسته به زمان 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

۷- مکانیک کوانتومی نسبی

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

۸- زیرسامانه‌های باز کوانتومی و نظریه اتم در مولکول

- تعاریف کلاسیکی اتم در مولکول، ریخت‌شناسی (توپولوژی) چگالی الکترونی 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 ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهائی	پروژه
+	+	+	-

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

- 1- P. W. Atkins, R. S. Friedman, *Molecular Quantum Mechanics*, 4th Ed, Oxford University Press, 2005.
- 2- K. T. Hecht, *Quantum Mechanics*, Springer, New York, 2000.
- 3- J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, 2nd Ed., Addison-Wesley, Canada, 1994.
- 4- M. Weissbluth, *Atoms and Molecules*, Academic Press, 1978.
- 5- R. F. W. Bader, *Atoms in Molecules: A Quantum Theory*, Oxford Univ., New York, 1995.
- 6- D. Tannor, *Introduction to Quantum Mechanics, A Time-Dependent Perspective*, University Science Books, 2007.
- 7- M. H. Levitt, *Spin Dynamics; Basics of Nuclear Magnetic Resonance*, Wiley, Chichester, 2001.
- 8- J. Z. H. Zhang, *Theory and Application of Quantum Molecular Dynamics*, World Scientific, Singapur, 1999.



اصول بیوشیمی بیوفیزیک

Principles of Biophysical Chemistry

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

هدف درس:

بررسی پایداری پروتئین‌ها و آنزیم‌ها و عوامل مؤثر بر آن از دیدگاه مولکولی و ترمودینامیکی و عوامل مؤثر بر پیوند شدن لیگاند به بیوماکرومولکول‌ها

رئوس مطالب:

۱- پایداری ساختمانی پروتئین‌ها

- مقدمه و معرفی مفاهیم اساسی در مبحث پایداری پروتئین - نقش نیروهای غیرکوالات 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 غیرطبیعی شدن و رابطه آنها با تغییرات کانفورماسیونی و میزان پایداری پروتئین - غیرطبیعی شدن گرمائی 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- پیوند شدن مولکول‌های کوچک (لیگاند) به بیوماکرومولکول‌ها

- مقدمه و معرفی مفاهیم اساسی - اهمیت پیوند شدن لیگاند در بیولوژی مولکولی و طراحی داروها - معرفی روش‌های تجربی مطالعه پدیده‌ی پیوند شدن لیگاند (دیالیز تعادلی - روش‌های الکتروشیمیائی - روش‌های طیف‌سنجی، کالری متری 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 مکانیسم 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 ارزیابی:

پروژه	آزمون نهائی	میان ترم	ارزشیابی مستمر
-	+	+	-

منابع اصلی:

- 1- A. Cooper, *Biophysical Chemistry*, The Royal Society of Chemistry, 2004.
- 2- K. E. Van Holde, W. C. Johnson, P. S. Ho, *Principles of Physical Biochemistry*, London, Prentice Hall, 1998.
- 3- D. Sheehan, *Physical Biochemistry: Principles and Applications*, New York, Wiley, 2000.
- 4- T. K. Sauer, J. C. Wang, J. D. Puglisi, *Physical Chemistry: Principles and Applications in Biological Sciences*, Englewood Cliffs, Prentice Hall, 4th Ed, 2002.
- 5- B. A. Shirley, *Protein Stability and Folding*, New Jersey, Humana Press, 1995.
- 6- J. Wyman, S. J. Gill, *Binding and Linkage: Functional Chemistry of Biological Macromolecules*, New York, Science, 1990.



اصول سینتیک آنزیمی

Principles of Enzyme Kinetics

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

هدف درس:

دستیابی به شناخت عمیق از مشخصات فیزیکی- شیمیایی آنزیم‌ها و معرفی اصول نظری سینتیک واکنش‌های آنزیمی

رئوس مطالب:

۱- آنزیم، مشخصات و خواص آن

- آمینو اسیدها، خصوصیات آنها، سطوح ساختمانی پروتئین‌ها، خواص عمومی، کاتالیزوری آنزیم‌ها، طبقه‌بندی آنزیم‌ها، نام‌گذاری آنزیم‌ها، جایگاه فعال آنزیم، انواع پیوند در مجموعه آنزیم، ماده اولیه، عوامل عمده در بازدهی کاتالیزوری آنزیم‌ها، آنزیم‌های تنظیمی، زایموژن‌ها و ایزوزیم‌ها

۲- سینتیک واکنش‌های ساده آنزیمی

- آنزیم‌ها به عنوان کاتالیزورهای بیولوژیکی، میانجی واکنش‌های جفت شده، مطالعه یک سیستم تک‌واکنش دهنده با تعادل سریع، روش حالت یکنواخت، روش میکائیس- منتن و محدودیت‌های آن، ارتباط بین ثابت‌های سرعت، ثابت تعادل و روش‌های مختلف ترسیم داده‌های سینتیکی

۳- سینتیک مهار شدن عمل آنزیم‌ها

- مهار کننده‌های کامل و جزئی، مهار کننده‌های غیررقابتی، مهار کننده‌گی ضد رقابتی، مهار کننده‌گی مختلط خطی و مرتبه مهار کننده‌گی

۴- سینتیک واکنش‌های آنزیمی با چندین جایگاه فعال

- آنزیم‌های آلوستریک و غیر آلوستریک، سینتیک آنزیم‌های دو سوبسترای راندوم، سینتیک آنزیم‌های دو سوبسترای متوالی، سینتیک آنزیم‌های چندجایگاهی کنش‌گر و آنالیز داده‌های سینتیکی با استفاده از معادله هیل

۵- سینتیک فعال سازی آنزیم‌ها

- فرمول‌بندی عمومی سینتیک فعال کننده‌های غیر ضروری، رقابت مهار کننده با فعال کننده، فرمول‌بندی کلی، چگونگی تجزیه و تحلیل داده‌های سینتیکی انواع فعال کننده‌ها

۶- اثرات دما و pH در سینتیک واکنش‌های آنزیمی

- معادله تجربی آرنیوس، اثر دما بر فعالیت آنزیم‌ها، دمای غیرفعال‌شدن آنزیم‌ها، اثر pH بر پایداری آنزیم‌ها، نمودارهای سرعت بیشینه بر حسب pH و تنوع جواب‌های اثر pH

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهائی	پروژه
-	+	+	-

منابع اصلی :

- 1- T. Bugg, *An Introduction to Enzyme and Coenzyme Chemistry*, Blackwell Science, 1997.
- 2- I. H. Seigel, *Enzyme Kinetics: Behavior and Analysis of Rapid Equilibrium and Steady-State Enzyme Systems*, John Wiley, 1975.
- 3- H. Zollner, *Handbook of Enzyme Inhibitors*, John Wiley, 1999.
- 4- A. Fersht, *Structure and Mechanism in Protein Science: a Guide to Enzyme Catalysis and Protein Folding*, Freeman Publisher, 1999.
- 5- D.L. Purich, *Advances in Enzymology and Related Areas of Molecular Biology*, John Wiley, 1999.



ترمودینامیک آماری جذب

Statistical Thermodynamics of Adsorption

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: - حل تمرین: -
نوع درس: اختیاری	پیش نیاز: ترمودینامیک آماری ۱

هدف درس:

بررسی پدیده جذب از دیدگاه مکانیک آماری با تکیه بر جذب در سیستم‌های بیولوژیکی

رئوس مطالب:

۱- سیستم‌های ساده بدون برهمکنش

- گاز ایده آل، مخلوط آنها، تعادل شیمیایی در مخلوط گاز ایده آل، گاز ایده آل در میدان الکتریکی خارجی، گاز ایده آل در میدان گرانشی و سانتریفوژی، دوقطبی‌های مغناطیسی نابرهمکنش گر در میدان مغناطیسی، همدماهای جذب ساده (مدل مولکولی و پاسخ آن، ترمودینامیک و همدمای لانگمویر، حصول دوباره‌ی همدمای لانگمویر با استفاده از تابع تقسیم کانونی بزرگ، احتمالات اشغال و انرژی آزاد تشکیل حفره، تشابه پتانسیل شبه شیمیایی، 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 جزئی در فرمالیز مدل مخلوط)

۲- سیستم‌های ساده با برهمکنش

- دو جایگاه یکسان بر پلیمر: برهمکنش مستقیم بین لیگاندها (همدمای اتصال، توابع توزیع، تعمیم‌ها و برخی مثال‌های عددی)، دو جایگاه یکسان بر پلیمری 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 دون واحدی که هر یک یک جایگاه دارند: اثر آلوستریک (پلیمر تهی، پتانسیل نیروی متوسط بین دون واحدها، 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 دون واحد و دو مورد محدودکننده)، سه جایگاه یکسان بر پلیمری که دو حالت آرایشی دارد:

همبستگی های سه تایی (ترمودینامیک اتصال، توابع همبستگی زوج، تابع همبستگی سه تایی و پتانسیل سه تایی میدان متوسط، تقریب برهنه: جمع ناپذیری پتانسیل سه تایی میدان متوسط و انرژی هلمولتز اتصال بر سومین جایگاه)، سه دون واحد که هر یک می توانند در یکی از دو آرایش باشند (سیستم تهی، سیستم با لیگاندها، آزمودن بیشتر توابع همبستگی و اثر جمع ناپذیری و تعاونی)، چهار تایی تتراهدراال: مدل کوچکی از اتصال اکسیژن به هموگلوبین (مدل، برخی موارد ویژه، ترمودینامیک اتصال و توابع همبستگی، مقایسه با مدل مربعی و ملزومات بر ثابت های اتصال اول) و آنزیم های با قاعده (قاعده سازی با اتصال رقابتی، یک پلیمر با جایگاه یک فعالی و یک قاعده گی و یک مدل کوچک برای آنزیم با قاعده)

۳- مدل های یک بعدی

- ساده ترین مدل های آیزینگ (مدل یک بعدی اسپین های برهمکنش گر، گاز شبکه، مدل شبکه یک مخلوط دوسازنده ای و تعادل دو حالتی تعدیل شده توسط میدان خارجی)، توابع توزیع مولکولی در مدل آیزینگ (تابع توزیع منفرد، تابع توزیع زوج، توابع توزیع سه تایی و مرتبه بالاتر، توابع همبستگی، برخی مثال ها برای گاز شبکه و یک راه دیگر برای به دست آوردن توابع توزیع مولکولی از تابع تقسیم)، برخی تعمیم ها از مدل آیزینگ (مدل گاز شبکه ی مخلوط دو تایی، حالت های چندگانه اما همتراز، مدل آیزینگ با برهمکنش های نزدیک ترین و بعد از نزدیک ترین همسایه)، سیالات یک بعدی (مدل و پاسخ آن، ترمودینامیک و معادله حالت، حصول دیگری از میله های سخت، آب یک بعدی، مخلوط سیالات یک بعدی و انحلال در سیستم یک بعدی)، انتقال فاز در سیستم یک بعدی (مدل و پاسخ آن، ترمودینامیک و انتقال فاز در نمودار PV)، انتقال Helix-Coil در پروتئین ها، مسئله غیرطبیعی شدن پروتئین و انتقال Helix-Coil و تابع تقسیم

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهائی	پروژه
-	+	+	-

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

- 1- A. Ben-Naim, *Statistical Thermodynamics for Chemists and Biochemist*, Plenum Press, 1992.
- 2- K. A. Dill, S. Bromberg, *Molecular Driving forces: Statistical Thermodynamics in Chemistry and Biology*, Taylor & Francis Group, 2003.
- 3- D. A. McQuarrie, *Statistical Thermodynamics*, 2nd Ed., University Science Books, 2000.
- 4- T. L. Hill, *An Introduction to Statistical Thermodynamics*, Dover Publications, 1986.



ترمودینامیک غیر تعادلی

Nonequilibrium Thermodynamics

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

هدف درس:

تبیین مفاهیم و بررسی پدیده‌های غیر تعادلی (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 غیر تعادلی با تولید آنتروپی و مسیرهای مختلف

۳- ترمودینامیک غیر تعادلی 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 غیر خطی و تعمیم روابط پدیده‌شناسی

۴- مفاهیم و مبانی مولکولی و آماری پدیده‌های غیر تعادلی

- 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 غیر تعادلی

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

سونوشیمی

روش ارزیابی:

پروژه	آزمون نهائی	میان ترم	ارزشیابی مستمر
-	+	+	-

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

- 1- S. R. DeGroot, P. Mazur, *Nonequilibrium Thermodynamics*, Dover, New York, 1986.
- 2- Y. L. Yao, *Irreversible Thermodynamics*, Science Press, New York, 1981.
- 3- D. D. Fitts, *Nonequilibrium Thermodynamics*, McGraw Hill, London, 1962.
- 4- B. C. Eu, *Nonequilibrium Statistical Mechanics: Ensemble Method*, Kluwer, Netherland, 1998.
- 5- K. S. Førland, T. Førland, S. K. Ratkje, *Irreversible Thermodynamics (Theory and Applications)*, Wiley, Toronto, 1988.



تکنیک‌های بیوشیمی - بیوفیزیک پیشرفته

Advanced Biophysical and Biochemical Techniques

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

هدف درس:

تبیین اصول نظری و کاربردی تکنیک‌های مورد استفاده در مطالعات بیوشیمی - بیوفیزیک

رئوس مطالب:

۱- طیف‌سنجی فلورسانس در مطالعه پروتئین‌ها

- اصول نظری، شدت فلورسانس، انرژی متوسط نشر، پلاریزاسیون فلورسانس، روش تجربی انجام آزمایش‌های فلورسانس بر روی پروتئین‌ها، اندازه‌گیری‌های حالت پایا، اندازه‌گیری‌های Time resolved انواع خاموش کننده‌های فلورسانس و ردیاب فلورسانس در پروتئین‌ها

۲- طیف‌سنجی جذبی ماوراءبنفش - مرئی در مطالعه پروتئین‌ها

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

۳- طیف‌سنجی دو رنگ نمائی چرخشی (CD) در مطالعه پروتئین‌ها

- 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 پروتئین‌ها با استفاده از آنالیز طیف‌های CD

۴- کاربرد تکنیک کالریمتری تیتراسیون همدمما در مطالعه پروتئین‌ها

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

۵- کاربرد تکنیک کالریمتری اسکن تفاضلی (DSC) در مطالعه پروتئین‌ها

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

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهایی	پروژه
-	+	+	-

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

- 1- B. A. Shirley, *Protein Stability and Folding*, Humana Press; 1995.
- 2- C. Tanford, *Physical Chemistry of Macromolecules*, John Wiley & Sons Inc, 2005.
- 3- C. Cantor, *Biophysical Chemistry*, Freeman Publisher, 1980.



شیمی تجزیه پیشرفته - دستگاهی

Advanced Analytical Chemistry-Instrumental

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

هدف درس:

کسب دانش عمیق تر در زمینه تعادلات شیمیایی و روش های دستگاهی و کلاسیک تجزیه ای و به کار گیری آمار در تحلیل نتایج تجزیه ای

رئوس مطالب:

- ۱- اندازه گیری تجزیه ای
مفاهیم کلی، آمار و روش های کالیبراسیون
- ۲- تعادلات شیمیایی
مفاهیم کلی، تعادلات اسید- باز، تیتراسیون و بافرها
- ۳- الکتروشیمی
پتانسیومتری، کولومتری، آمپرومتری، ولتامتری و پلاروگرافی
- ۴- مقدمه ای بر طیف سنجی
تابش الکترومغناطیس، منابع تابش، انتخاب گوی های طول موج و آشکارسازها
- ۵- طیف سنجی اتمی و مولکولی
روش های جذب و نشر اتمی در شعله، روش های نشر اتمی در پلاسما، روش های جذب و فلورسانس اتمی با کوره ی الکتریکی
- ۶- اسپکترومتری جرمی
تئیستم های ورود نمونه، روش های یونیزاسیون و آنالیزورهای جرمی
- ۷- مقدمه ای بر روش های کروماتوگرافی
تقسیم بندی، پارامترهای کروماتوگرافی، تفکیک و متغیرهای سینتیکی مؤثر بر پهن شدن پیک
- ۸- کروماتوگرافی مایع
دستگاه وری کروماتوگرافی مایع با کار آیی بالا، کروماتوگرافی جذبی و کروماتوگرافی توزیعی
- ۹- کروماتوگرافی گازی
فاز ساکن، گاز حامل، آشکارسازها و برنامه ریزی دمایی

روش ارزیابی:

پروژه	آزمون نهائی	میان ترم	ارزشیابی مستمر
-	+	+	-

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

- 1- D. Harvey, *Modern Analytical Chemistry*, McGraw-Hill, 2000.
- 2- J. Wang, *Analytical Electrochemistry*, 3rd Ed., Wiley-VCH, 2006.
- 3- D. A. Skoog, F. J. Holler, T. A. Nieman, *Principles of Instrumental Analysis*, Harcourt Brace College Publishers, 2005.



شیمی حالت جامد
Solid State Chemistry

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

هدف درس:

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

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، گروه‌های 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 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

۴- روش‌های پراش در مطالعه جامدات

- روش‌های پراش (اشعه X، الکترون و نوترون)، رابطه و قانون براگ، معادلات لاوه (فون لاوه)، 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

۵- روش‌های میکروسکوپی، و‌های نوری، الکترونی و تشدید مغناطیسی در مطالعه جامدات

- انواع‌های 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

۶- روش‌های گرمایی در مطالعه جامدات

- روش گرماتوزین (TG)، روش گرماسنجی پیمایشی تفاضلی (DSC)، روش مغناطومتري گرمایی (TM)، روش گرماسنجی همدم، مطالعه سینتیک واکنش‌ها، تبدیلات حالت به روش‌های گرمایی و گرماشیمیایی و روش‌های گرمایی - طیف‌سنجی

۷- نقایص بلوری، استوکیومتری ناقص و محلول‌های جامد

- انواع نواقص نقطه‌ای (شاتکی، فرنکل، رنگی، جای خالی، خوشه‌ای و جانشینی)، انواع نقص‌های خطی و صفحه‌ای، جابه‌جایی‌ها و نابه‌جایی‌ها (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 چوکراسکی، بریجمن-استوکبارگر، ذوب منطقه‌ای، ترسیب مدیریت شده، 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 نیمه‌هادی‌ها، یاخته‌های خورشیدی و قطعات مدارات الکترونیکی

روش ارزیابی :

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهائی	پروژه
+	+	+	-

منابع اصلی:

- 1- A. R. West, *Basic Solid State Chemistry*, 2nd Ed, Wiley, Chichester, 2003.
- 2- L. E. Smart, E. A. Moore, *Solid State Chemistry: An Introduction*, 3rd Ed, Taylor & Francis (CRC), Singapore, 2005.
- 3- C. Kittel, P. McEuen, *Introduction to Solid State Physics*, 8th Ed, Wiley, New York, 2004.
- 4- A. K. Cheethan, P. Day (Editors), *Solid State Chemistry*, Volumes 1 & 2, Oxford University Press, New York, 2001.
- 5- R. C. Ropp, *Solid State Chemistry*, Elsevier, New York, 2003.



شیمی فیزیک سطح
Surface Physical Chemistry

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

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 کثوردیناسیون اتم‌های عمقی و سطحی، انواع نیروهای بین مولکولی و نقش آن در نظم کوتاه‌برد و دوربرد در حالت توده‌ای انرژی پایداری، تأثیر الکترون‌های غیر پیوندی، پیوند هیدروژنی و تأثیر آن بر خواص مایعات و جامدات

۲- خواص سطوح مایعات و جامدات

- کشش سطحی و کشش بین سطحی، انرژی آزاد سطح، معادله یانگ-لاپلاس، فشار بخار و میعان، مویینگی 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 کلومین، 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

- برهمکنش های بین مولکولی، جذب سطحی فیزیکی، جذب سطحی شیمیایی، منحنی ها و مدل های انرژی پتانسیل (زنجیره خطی نوسانگرهای هماهنگ، مدل های مکعب های سخت و نرم، مدل چاه مربعی)، نظریه های پیش واکنش و پیش ماده جذب سطحی، گرماهای جذب، روش های ارزیابی مساحت سطح (نظیر روش BET)، همدماهای جذب (لانگمویر، فرنلچ و هینشلوود)، همدماهای منحنی های احتمال جذب و وابستگی دمایی آنها، چند مثال از جذب و واجذب گونه ها بر روی بلورهای با برش های مختلف (جذب منو کسید کربن، اکسیژن، نیتروژن و منو کسید نیتروژن بر روی تک بلورهای مس، تنگستن، نقره و طلا با برش های مختلف)، شیوه های تجربی برای به دست آوردن منحنی های جذب و واجذب، تجزیه و تحلیل منحنی های واجذب، جذب گونه ها بر روی سطوح مایعات و جامدات از محلول، ترمودینامیک انتقال گونه ها، انتقال الکترون و واکنش در لایه دو گانه و سطح الکتروود در فرآیندهای الکتروشیمیایی، نقش ترکننده ها، کاهنده های کشش سطحی و اسفنجی کننده ها، رشد بلور و شناوری

۴- تعیین ساختار سطوح و گونه های سطحی

- روش های پراش الکترون (پراش ناکشسان، پراش الکترون با انرژی پائین LEED، طیف سنجی کاهش انرژی الکترون EELS، تفسیر الگوهای LEED بر اساس شبکه معکوس، موقعیت های نقطه ای، الگوهای سطح تمیز و الگوهای لایه جذب شده، دینامیک پراش LEED شبکه های یک بعدی و دوبعدی، پراش چندتابی)، پراش زاویه کوچک اشعه X (SAX) و فلورسانس اشعه X (تابش Synchrotron)، طیف سنجی الکترونی اشعه X (XPS)، اثر فتوالکتریک در حالت جامد، توصیف کوانتوم مکانیکی، نظریه کوپمن، حساسیت سطح و عمق نفوذ فتوالکتریک، طیف سنجی الکترون اوژه (AES)، نام گذاری و انرژی الکترون های اوژه، تجزیه و تحلیل کمی، طیف سنجی فتوالکتریک (برای فلزات و گونه های سطحی)، میکروسکوپی نشر و یونش میدانی (FEM و FIM)، روش های میکروسکوپی الکترونی پیمایشی و عبوری (SEM و TEM)، روش های میکروسکوپی روبشی SPM (STM، AFM و MFM)، ملاحظات ویژه نانوبلورها و نانو خوشه های سطحی، تعیین پتانسیل های سطح به کمک های ارتعاشی زیرقرمز و رامان، تحلیل نظریه گروه ها، روش های تجربی طیف سنجی ارتعاشی سطوح جامدات و مایعات و گونه ها و لایه های سطحی

۵- سینتیک و دینامیک پدیده های سطحی

- پتانسیل های برهمکنش با سطح، برخورد (پراش) کشسان، ناکشسان و واکنشی مولکول ها و اتم ها با سطوح مایعات و جامدات، پراش و واجذب با برنامه ریزی دمایی، انواع فرآیندهای سطحی، رفتار مولکول های جذب شده فیزیکی، تبادل انرژی در فاز گازی، تبادل انرژی در روی سطح، سازو کار واکنش های سطحی، توصیف کلی سازو کار واکنش های ناهمگن، واکنش های سطحی تک مولکولی و دو مولکولی، سازو کارهای لانگمویر-هینشلوود و الی - ریدل و روش های تجربی مطالعه سینتیک واکنش های سطحی (سرعت برخورد مولکول های گاز با سطح، سرعت جذب و سرعت واجذب)

۶- کاتالیزورهای ناهمگن

- تهیه کاتالیزورها، توصیف عمومی ساختار سطحی و پیوندی کاتالیزورهای ناهمگن، نظریه حالت گذار در مورد واکنش‌های ناهمگن، جهت‌یابی و گزینش‌پذیری در واکنش‌های کاتالیز شده در سطوح، فعالیت کاتالیزورها، قدرت جذب سطح شیمیایی، چند مثال از مطالعه ترمودینامیک، سینتیک و دینامیک واکنش‌های کاتالیز شده در سطوح کاتالیزورها

۷- مباحث ویژه و نو در شیمی فیزیک سطح

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهائی	پروژه
+	+	+	-

منابع اصلی:

- 1- H. Y. Erbil, *Surface Chemistry of Solid and Liquid Interfaces*, Blackwell, New York, 2006.
- 2- A. W. Adamson, A. P. Gast, *Physical Chemistry of Surfaces*, 6th Ed, Wiley, New York, 1997.
- 3- P. C. Hiemenz, R. Rajagopalan, *Principles of Colloid and Surface Chemistry*, 3rd Ed, Marcel Dekker (CRC), New York, 1997.
- 4- H. J. Butt, K. Graf, M. Kappl, *Physics and Chemistry of Interfaces*, Wiley, Berlin, 2003.
- 5- C. Kittel, P. McEuen, *Introduction to Solid State Physics*, 8th Ed, Wiley, New York, 2004.
- 6- A. R. West, *Basic Solid State Chemistry*, 2nd Ed, Wiley, Chichester, 2003.



شیمی کوانتومی محاسباتی

Computational Quantum Chemistry

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

هدف درس:

بررسی روش‌ها و کاربردهای شیمی کوانتومی محاسباتی در مطالعه ساختار و خواص اتم‌ها و مولکول‌ها

رئوس مطالب:

۱- هامیلتونی و معادله شرودینگر اتم‌های چندالکترونی و مولکول‌های چنداتمی

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

۲- روش میدان خودسازگار هارتری-فوک و روش روتان

- روش میدان خودسازگار هارتری-فوک، عملگر فوک، معادله فوک، توابع موج تک‌الکترونی اوربیتالی، اسپین-اوربیتالی، دترمینان اسلیتر، انتگرال‌های کولن، تعویض، روش روتان، چرخه محاسبات خودسازگار محدود شده (RHF)، انواع توابع پایه (هیدروژن‌مانند، اسلیتری و گاوسی)، انواع مجموعه پایه (کمینه، یک و چندتایی، ظرفیت شکافته، قطبیده و نفوذی)، خطای قطع مجموعه پایه، خطای پوش مجموعه پایه، اصلاحیه از بالا به پایین بویز (CP)، انتگرال‌های یک و دو الکترونی، تعداد، تقارن انتگرال‌های دو الکترونی و چرخه محاسبات خودسازگار محدود نشده (UHF)

۳- نظریه تابعیت چگالی

- نظریه فرمی-توماس برای گاز الکترون، تابعیت، انواع عملیات ریاضی بر روی تابعیت‌ها، قضیه هوهنبرگ-کوهن، قضیه وردشی هوهنبرگ-کوهن، روش خودسازگار کوهن-شم، تابعیت‌های انرژی تعویض، انرژی همبستگی و پتانسیل تعویض-همبستگی، تقریب چگالی محلی، تقریب چگالی اسپین محلی، روش $X\alpha$ ، تقریب غیرمحلی شیب‌های عمومی، تابعیت اصلاح‌شده با شیب، تابعیت مرکب و نظریه تابعیت چگالی وابسته به زمان

۴- بهینه‌سازی هندسه مولکولی به روش میدان خودسازگار

- توصیف هندسه مولکول با مختصات دکارتی، آرایه Z (طول‌ها، زوایای پیوندی و زوایای دو وجهی)، پتانسیل مولکولی، هندسه تعادلی، آرایه نیروها، آرایه ثابت‌های نیرو (آرایه هس)، روش‌های مختلف کمینه‌سازی انرژی، بهینه‌سازی هندسه (روش پرشیب‌ترین مسیر، روش شیب‌های جفت‌شده از طریق قطری‌سازی آرایه هس و روش نیمه کلاسیکی مکانیک مولکولی)، یافتن نقطه گذار به روش ساده، روش‌های QST2 و QST3، مسیر ذاتی واکنش (IRC) و روش یافتن سطوح انرژی مربوط به حرکت‌های درون مولکولی (با هندسه محدود شده و با هندسه آزاد)

۵- تحلیل ارتعاشی و ترموشیمی

- قطری‌سازی آرایه هس (آرایه ثابت‌های نیرو) برای یافتن بردارهای جابه‌جایی (مختصات ارتعاشی) متعامد بر حسب مختصات دکارتی هسته‌ها، نمایش بردارهای جابه‌جایی متعامد (نمایش شیوه‌های ارتعاشی) مختلف، محاسبه انرژی پتانسیل شیوه‌های ارتعاشی متعامد، چرخش‌های درون مولکولی، توابع افراز (تقسیم) انتقالی، چرخشی، ارتعاشی، الکترونی، خواص ترمودینامیکی، نقش دما، فشار و جرم ایزوتوپی اتم‌ها، کمیت‌های ترمودینامیکی انواع واکنش‌های شیمیایی در حالت گازی، در حالت مایع و محلول، اثر بافت، اثر حلال، روش میدان واکنشی خودسازگار (SCRF)، طرح انزاگر، محیط پیوسته قطبش‌پذیر، طرح محیط پیوسته قطبش‌پذیر هم‌چگال و روش (دقیق) انضمام صریح مولکول‌های حلال در محاسبات SCF

۶- محاسبه خواص الکترونی، الکتریکی و مغناطیسی اتم‌ها و ملکول‌ها

- ابعاد، حجم اتمی، مولکولی، تحلیل جمعیت‌ها، بارهای اتمی مولیکن (Mulliken)، لودین (Löwdin)، اتم در مولکول (AIM)، ارزیابی روابط پیوندی، ضدپیوندی مستقیم از طریق فضا بین اتم‌ها براساس جمعیت‌ها، نمودارهای مقطعی چگالی، میدان الکتروستاتیک در فضای مولکولی، تعریف لایه، پوسته برای اتم‌ها براساس انرژی‌های اوربیتالی تک‌الکترونی و براساس تابع چگالی الکترونی شعاعی، دستگاه مرجع، گشتاورهای دو و چندقطبی الکتریکی، آرایه‌های قطبش‌پذیری، آرایه‌های مغناطیس‌پذیری (دیامغناطیس، پارامغناطیس و کل)، چرخش نوری و پوشیدگی‌های شیمیایی هسته‌ها در پیمان‌های مختلف

۷- محاسبات و رای SCF و خواص طیفی اتم‌ها و مولکول‌ها

- توابع حالت آرایشی، توابع موج چندترمینانی، روش برهمکنش آرایشی (CI) با انضمام انواع دترمینان‌های یک، دو، سه و چهار، بار تحریک شده، اصلاح دیویدسون، فضای فعال کامل (CAS)، فضای فعال محدود (RAS, CAS(n,m))، روش برهمکنش آرایشی چندمرجعی (MRCI)، روش میدان خودسازگار چندآرایشی (MCSCF)، روش‌های اغتشاشی (مولر-پلست) MPn و CASPT2، روش خوشه‌های جفت‌شده (CC)، انرژی یونش، انرژی الکترون‌خواهی و انرژی انتقالات الکترونی در اتم‌ها، مولکول‌ها، قضیه کوپمن، تأثیر آسایش ساختار هندسی بر انرژی‌های سه گانه، محاسبه طیف الکترونی اتم‌ها،

مولکول‌ها، طیف‌های ORD، CD و VCD مولکول‌ها، طیف فتوالکترون (UPS، XPS، Auger) اتم‌ها و مولکول‌ها

۸- نرم‌افزارهای شیمی کوانتومی محاسباتی و انجام نمونه محاسبات

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

۹- مباحث ویژه در شیمی کوانتومی محاسباتی

- محاسبه انرژی برهمکنش بین مولکولی، یافتن ساختار بهینه گونه‌های مرکب و اندروالسی، محاسبه ثابت‌های معادله و اندروالسی، محاسبات چندلایه و روش‌های IMOMO و ONIOM، قضیه ویریا در شیمی کوانتومی محاسباتی، روش میدان معین در محاسبه خواص پاسخی اتم‌ها، مولکول‌ها، اصلاح هامیلتونی با جمله میدان، روش‌های تحلیل، تقریب جمله میدان، روش حل میدان خودسازگار معادله شرودینگر در حضور صریح جملات برهمکنش با میدان‌های الکتریکی، مغناطیسی، محاسبه هندسه بهینه، ترازهای انرژی اربیتال در حضور میدان ارزیابی اثر میدان، اثرات نسبیتی (معادلات دیراک و کلاین-گوردن)، حل خودسازگار معادله هارتری-فوک و کوهن-شم با هامیلتونی نسبیتی

۱۰- روش‌های نیمه تجربی

- تقریب‌های نیمه تجربی در ساده‌سازی هامیلتونی، روش‌های اوربیتال مولکولی هوکل (ساده و بسط داده شده)، روش PPP، خانواده تقریب‌های همپوشانی جزئی صفر (ZDO، CNDO، MNDO، NDDO، INDO، MINDO، MINDO/d، AM1، PM3)، روش‌های SAM1 و ZINDO

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهائی	پروژه
+	+	+	-

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

- 1- I. N. Levine, *Quantum Chemistry*, 5th Ed, Prentice Hall, 2000.
- 2- R. E. Christofferson, *Basic Principles and Techniques of Molecular Quantum Mechanics*, Springer, 1989.
- 3- C. M. Quinn, *Computational Quantum Chemistry*, Academic Press, 2002.
- 4- I. Mayer, *Simple Theorems, Proofs and Derivations in Quantum Chemistry (Mathematical and Computational Chemistry)*, Kluwer, 2002.
- 5- F. Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*, 2nd Ed, Wiley, 2006.
- 6- A. Szabo, N Ostlund, *Modern Quantum Chemistry*, Dover, 1989.



شیمی کوانتومی وابسته به زمان
Time-Dependent Quantum Chemistry

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: - حل تمرین: -
نوع درس: اختیاری	پیش نیاز: شیمی کوانتومی ۱

هدف درس:

آشنایی با پدیده‌های کوانتومی وابسته به زمان 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 وابسته به زمان بر اساس هامیلتونی، وابستگی زمانی مقادیر چشمداشتی، 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، بنا کردن و حل انتگرال‌های اثر و مسیر برای ذره آزاد و ذره در میدان مرکزی، اثر و مسیر ناشی از دو میدان همزمان، آزمایش اشترن- گراخ در غیاب و در حضور میدان گرانش

۳- نظریه پراش

- پراش از روی چاه، سد یک بعدی، قالب بندی پدیده‌های پراش، پراش چندمسیره، توابع گرین، تقریب بورن، توابع جزئی حالت‌های پراشیده ایستا، جابه جایی فاز، تشدید مداری و رفتار زمانی آن، عملگر چگالی شار، توصیف پویایی پراش، دینامیک مولکولی کلاسیکی و کوانتومی

۴- انتقالات یک و چند فوتونی وابسته به زمان

- انتقالات الکترونی و ارتعاشی یک و چند فوتونی اتم‌ها و مولکول‌ها، فوتیونش در میدان‌های لیزری ضعیف و قوی، روش بسته موج، همدوسی حالات، همدوسی چند کوانتومی (چرخشی، ارتعاشی و الکترونی)، واهمدوسی و پویایی زمانی جفت شدگی حالات

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

- پتانسیل‌های درون‌مولکولی و بین‌مولکولی در رو 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، باز توزیع چرخشی، ارتعاشی درون‌مولکولی و رفتار زمانی چگالی حالات

۶- 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 جابه‌جایی، 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 فرو کوتاه، تحول بسته موج شبه‌ذره حرکت هسته‌ای یک مولکول‌های دو اتمی و سه اتمی خطی و غیرخطی در میدان لیزر

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهائی	پروژه
+	+	+	-

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

- 1- D. Tannor, *Introduction to Quantum Mechanics, A Time-Dependent Perspective*, University Science Books, 2007.
- 2- K. T. Hecht, *Quantum Mechanics*, Springer, New York, 2000.
- 3- J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, 2nd Ed, Addison-Wesley, Canada, 1994.
- 4- M. H. Levitt, *Spin Dynamics; Basics of Nuclear Magnetic Resonance*, Wiley, Chichester, 2001.
- 5- R. E. Wyatt, C. J. Trahan, *Quantum Dynamics with Trajectories: Introduction to Quantum Hydrodynamics*, Springer, 2005.
- 6- J. Z. H. Zhang, *Theory and Application of Quantum Molecular Dynamics*, World Scientific, Singapur, 1999.



طیف‌سنجی مولکولی ۱

Molecular Spectroscopy I

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

هدف درس:

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

رئوس مطالب:

۱- مقدمات

- نور و خواص آن، 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 مولکول دو اتمی، تقریب بورن-اپنهايمر، جداسازی حرکت‌ها، نظریه اغتشاش وابسته به زمان، انتگرال‌ها، قواعد انتخاب و معادله شرودینگر اتمی

۲- طیف‌سنجی چرخشی

- تحلیل کوانتومی حرکت چرخشی مولکول‌ها، استخراج قواعد گزینش در طیف چرخشی خالص مولکول‌های دو اتمی، خطی، چرخنده فرقه‌ای متقارن، فرقه‌ای نامتقارن و کروی

۳- طیف‌سنجی ارتعاشی

- تحلیل کوانتومی حرکت ارتعاشی مولکول‌های دو اتمی، مولکول‌های چند اتمی، استخراج قواعد گزینش انتقالات ارتعاشی مولکول‌های فرقه‌ای متقارن و فرقه‌ای نامتقارن و کروی، پدیده پیش‌تفکیک، پدیده تشدید فرمی، انتقالات مرکب و قواعد گزینش آنها

۴- 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 جذبی

روش ارزیابی :

پروژه	آزمون نهائی	میان ترم	ارزشیابی مستمر
-	+	+	+

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

- 1- P. F. Bernath, *Spectra of Atoms and Molecules*, Oxford University Press, 2005.
- 2- J. Brown and A. Carrington, *Rotational Spectroscopy of Diatomic Molecules*, Cambridge University Press, 2003.
- 3- J. M. Hollas, *Modern Spectroscopy*, Wiley, New York, 2004.
- 4- D. C. Harris, and M. D. Bertolucci, *Symmetry and Spectroscopy, An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy*, Dover, New York, 1989.
- 5- N. Levine, *Molecular Spectroscopy*, Wiley, 1975.
- 6- P. W. Atkins, and R. S. Friedman, *Molecular Quantum Mechanics*, 4th Ed., Oxford University Press, 2005.



طیف‌سنجی مولکولی ۲

Molecular Spectroscopy II

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

هدف درس:

تبیین مفاهیم و پدیده‌های طیف‌سنجی 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 یون‌های اتمی و اثرات نسبیتی در طیف‌سنجی اتمی

۲- حل معادله شرودینگر مولکول دواتمی

- تقریب بورن-اپنهایم، پتانسیل‌ها مولکولی و حالت‌های کوانتومی مولکول دواتمی، روش دانهام، روش نیمه کلاسیکی (WKB) در تحلیل ترازها و حالات کوانتومی یک پتانسیل عمومی

۳- طیف‌سنجی الکترونی مولکول‌های دواتمی

- انتقالات دو قطبی الکترونی، ساختارهای ارتعاشی و چرخشی انتقالات الکترونی، تقارن‌های $C_{\infty V}$ و $D_{\infty h}$ حالات مولکول‌های دواتمی و زوجیت (پارته)، تفکیک و پیش تفکیک، 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 مولکول‌ها

۴- 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- تله، یان- تله و رنه- تله، فلوتورسانس، فسفرسانس، گذارهای بی‌تابش و نمودارهای جابلونسکی

۵- طیف‌سنجی فتوالکترون اتم‌ها و مولکول‌ها و روش‌های وابسته

- طیف‌سنجی فتوالکترون، طیف‌سنجی فلورسانس اشعه ایکس، طیف‌سنجی الکترون اوژه، ساختار ارتعاشی و چرخشی طیف‌های فتوالکترون، طیف یونش و قضیه کوپمن و طیف‌سنجی فتوالکترونی سطوح جامدات

۶- طیف‌سنجی لیزری

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

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهائی	پروژه
+	+	+	-

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

- 1- P. F. Bernath, *Spectra of Atoms and Molecules*, Oxford University Press, 2005.
- 2- J. M. Hollas, *Modern Spectroscopy*, Wiley, New York, 2004.
- 3- D. C. Harris, M. D. Bertolucci, *Symmetry and Spectroscopy, An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy*, Dover, New York, 1989.
- 4- N. Levine, *Molecular Spectroscopy*, Wiley, New York, 1975.
- 5- M. Ellis, M. Feher, T. G. Wright, *Electronic and Photoelectron Spectroscopy*, Cambridge University Press, 2005.
- 6- H. Lefebvre-Brion, R. W. Field, *The Spectra and Dynamics of Diatomic Molecules*, Elsevier, Netherland, 2004.
- 7- Z. B. Maksić (Editor) *Molecular Spectroscopy, Electronic Structure, and Intramolecular Interactions (Theoretical Models of Chemical Bonding, Part 3)* Springer, Berlin, 1991.
- 8- G. Herzberg, *Molecular Spectra and Molecular Structure; Vols 1 and 2*, Reitell Press, 2008.



فرآیندهای برگشت ناپذیر

Irreversible Phenomena

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: -
نوع درس: اختیاری	حل تمرین: -
	پیش نیاز: ترمودینامیک آماری ۱

هدف درس:

تبیین مفاهیم و پدیده‌های غیرتعادلی و برگشت ناپذیر (دیدگاه مولکولی - آماری) و کاربردهای آن

رئوس مطالب:

۱- مقدمات

- قوانین بقاء، ترمودینامیک (تولید، مصرف انرژی و آنتروپی)، معادلات ناویر-استوکس، قضیه و روابط انزاگر-کازیمیر، معادله لیوویل کلاسیکی، روابط پدیده‌شناسی خطی و غیرخطی، معرفی پدیده‌های برگشت ناپذیر یک تایی و دو تایی، 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 بی حافظه (مارکوفی-گاوسی)، پدیده‌های حافظه‌دار، نوفه و انواع آن و قضیه افت وخیز-اتلاف

۳- معادله بولتسمن و نظریه جنبشی

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

۴- حل عمومی معادله بولتسمن

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

۵- معادله بولتسمن خطی شده و معادله بولتسمن عمومی

- خطی‌سازی معادله ناویر-استوکس و معادله بولتسمن، حل اغتشاشی (اختلالی) برای معادله مقدار ویژه، حل چند جمله‌ای، مقادیر اولیه و شرایط مرزی، استفاده از توابع گرین در تبدیل و ساده‌سازی معادله

بولتسمن، سلسله‌ی معادلات BBCKY، معادله لیوویل و معادلات نظریه جنبشی، معادله BGK، انواع عملگرها، حل سلسله معادلات، مطالعه رفتار زمانی پاسخ‌ها و قوانین بقاء از دیدگاه معادله بولتسمن

۶- 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 گرمایی و گرانبندی، مجموعه‌های غیرتعادلی، معادلات هیدرودینامیک و فرآیندهای آسایش

۷- توابع همبستگی و ضرایب انتقال

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

۸- دینامیک کوانتومی

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

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهایی	پروژه
-	+	+	-

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

- 1- J DeGroot, P. Mazur, *Nonequil. A. McLennan, Nonequilibrium Statistical Thermodynamics*, Prentice Hall, New Jersey, 1989.
- 2- R. Zwanzig, *Nonequilibrium Statistical Mechanics*, Oxford University, Oxford, 2001.
- 3- B. C. Eu, *Nonequilibrium Statistical Mechanics: Ensemble Method*, Kluwer, Netherland, 1998.
- 4- Y. Oono, *Introduction to Nonequilibrium Statistical Thermodynamics*, Univ. of Illinois, 2003.
- 5- S. R. *ibrium Thermodynamics*, Dover, New York, 1986.



مباحث ویژه در شیمی فیزیک
Special Topics in Physical Chemistry

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

هدف درس:

آشنایی با آخرین پیشرفت‌های علمی در شیمی فیزیک

رئوس مطالب:

مطالب مربوط در هر ترم توسط استاد درس پیشنهاد و پس از تأیید در گروه تدریس می‌شود.

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهائی	پروژه
-	+	+	-

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

جدیدترین منابع معتبر در زمینه شیمی و به ویژه شیمی فیزیک



مکانیک آماری جامدات

Statistical Mechanics of Solids

تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: - حل تمرین: -
نوع درس: اختیاری	پیش نیاز: ترمودینامیک آماری ۲

هدف درس:

مطالعه سیستم‌های جامد از دیدگاه مکانیک آماری

رئوس مطالب:

۱- اصول مکانیک آماری

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

۲- آمارهای ذره

- توابع توزیع ذرات، آمارهای ذره، ترمودینامیک، گاز ایده‌آل - آمارهای ذره از مجموعه کانونی بزرگ، نمایش دانسیته حالت‌ها، توزیع سرعت ماکسول، گاز ایده‌آل دوبعدی، ذرات مستقل و زیرسیستم‌ها

۳- بلورهای هم‌هنگ

- مدل هم‌هنگ، زنجیر خطی تک‌اتمی، تجزیه، تحلیل شیوه عادی، تابع تقسیم، انرژی آزاد بلور هم‌هنگ، معادلات ظرفیت گرمایی عام، مدل انیشتاین، برهم‌نهی نوسانات انیشتاین، مدل دبای، انرژی دبای، ظرفیت گرمایی، رابطه بین دمای مشخصه انیشتاین، دبای، مقایسه نظریه دبای با تجربه و گاز فنون

۴- خواص ناهم‌هنگی و معادله حالت

- انرژی پتانسیل بلور، خواص ناهم‌هنگی و فرضیه گرونیسن (Gruneisen)، ظرفیت گرمایی در فشار ثابت، نظریه دبای و فرضیه گرونیسن، ناهم‌هنگی ارتعاشی و نظریه پارامتر گرونیسن

۵- نظریه الکترون آزاد در فلزات و نیمه‌هادی‌ها

- 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 نیمه‌هادی‌ها، توزیع الکترون در در نیمه‌هادی‌های ذاتی،

آمارهای الکترون در نیمه‌هادی‌های ذاتی، قانون عمل جرم در نیمه‌هادی‌های ذاتی، رابطه بین تراز فرمی و غلظت ناخالصی

۶- نظریه جنبشی - آمار انتقال الکترون

- الکترون‌های آزاد در میدان‌های خارجی، گرادیان‌های دمایی، شیوه جنبشی آمار، معادله انتقال بولتسمن، معادلات شار فرمال، هدایت الکتریکی فلزات، هدایت حرارتی، قانون Wiedemann-Franz، اثر همدمای Hall و هدایت الکتریکی در نیمه‌هادی‌ها

۷- آلیاژهای نظم - بی نظم

- ساختارهای نظم - بی نظم، انتقال نظم، بی نظم، توصیف درجه نظم، تابع تقسیم نظم، بی نظم، روش کیر کوود (Kirkwood)، تقریب براگ و ویلیام، تقریب لحظه ثانویه، تقریب شبه‌شیمیایی و مقایسه با تجربه

۸- نظم مغناطیسی

- پاسخ مغناطیسی، پارامغناطیسی گشتاورهای مستقل، پارامغناطیسی الکترون‌های آزاد، فرومغناطیسی: تئوری میدان متوسط، مدل ایزینگ برای فرومغناطیسی، ضد فرومغناطیسی: تئوری میدان متوسط و امواج اسپین

۹- تعادل فاز

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

۱۰- نماهای بحرانی و هنجارسازی مجدد گروه (Renormalization Group)

- مدل‌های معادل، نقاط بحرانی، تئوری Landau، بسط کیر کوود، افت و خیزها، طول همبستگی، زنجیر آیزینگ تک‌اتمی، هنجارسازی مجدد مدل آیزینگ یک‌بعدی، ساختار Kadanoff، مقیاس‌بندی، هنجارسازی مجدد گروه و اعداد

۱۱- سطوح و بین سطح‌ها

- مفاهیم اساسی، ترمودینامیک بین سطح، ترمودینامیک جذب بر سطوح جامد، چسبندگی، پیوستگی، نقطه بحرانی، نمای بحرانی برای کشش سطحی، جذب تک‌لایه: همدمای لانگمویر، جذب تک‌لایه: لایه متحرک، جذب چندلایه: همدمای B.E.T و جداسازی ناخالصی‌ها در بین سطوح

۱۲- حفرات و شکاف‌ها در بلورهای تک‌اتمی

- انتخاب مجموعه، غلظت حفرات، انرژی آزاد بلور، حفرات، توابع ترمودینامیکی، توابع تشکیل حفره و برخی نتایج عددی

۱۳- نقص‌های نقطه‌ای در آلیاژهای رقیق

- تفاسیر عام، شمارش آماری برای نقص‌های جایگزینی، فرمول غلظت نقص برای نقص‌های جایگزینی، پایستگی Quenched-in آلیاژهای دوتایی رقیق، برخی نظریه‌های عام و ترمودینامیک آلیاژ رقیق

۱۴- نفوذ در بلورهای ساده

- قوانین تجربی نفوذ، احتمالات انتقال، قوانین فیک، پرش های اتمی، ضرایب نفوذ، فرکانس پرش در یک بعد، نظریه چند، جسمی فرکانس پرش و ضرایب نفوذ

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهائی	پروژه
-	+	+	-

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

- 1- L. A. Girifalco, *Statistical Mechanics of Solids*, Oxford University Press, 2000.
- 2- M. Plischke, B. Bergersen, *Equilibrium Statistical Physics*, 3rd Ed. World Scientific, 2005.
- 3- L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Statistical Physics*, 3rd Ed. Part:1, 2, Pergamon Press, New York, 1981.



سمینار کارشناسی ارشد

MSc. Seminar

تعداد واحد نظری: ۱	تعداد واحد عملی: - حل تمرین: -
نوع درس: الزامی	پیش نیاز: -

هدف درس:

تبیین اصول انتخاب یک موضوع علمی، جمع آوری اطلاعات مرتبط با آن موضوع و ارائه آن

رئوس مطالب:

در این درس نحوه جمع آوری اطلاعات در مورد یک مبحث علمی و ارائه آن به صورت های مختلف مانند پوستر، سخنرانی و یا مقاله به دانشجو آموزش داده می شود. سپس دانشجو با هماهنگی یکی از اساتید گروه یکی از موضوعات روز شیمی را انتخاب کرده و پس از جمع آوری اطلاعات مرتبط با آن موضوع، آن را به صورت یک سخنرانی علمی عمومی ارائه می نماید. انتخاب موضوع، ارائه آن و ارزیابی دانشجو در چارچوب مقررات مصوب گروه شیمی انجام می گیرد.

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهائی	پروژه
-	-	-	+

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

کتاب ها و مقالات علمی جدید و معتبر مرتبط با موضوع سمینار



سمینار دکتری

PhD. Seminar

تعداد واحد نظری: ۱	تعداد واحد عملی: - حل تمرین: -
نوع درس: الزامی	پیش نیاز: -

هدف درس:

تبیین اصول انتخاب یک موضوع تخصصی، جمع آوری اطلاعات مرتبط با آن موضوع و ارائه آن

رئوس مطالب:

دانشجو با هماهنگی یکی از اساتید گروه یکی از موضوعات تخصصی شیمی فیزیک را انتخاب کرده و پس از جمع آوری اطلاعات مرتبط با آن موضوع، آن را به صورت یک سخنرانی و ترجیحاً به زبان انگلیسی ارائه می نماید. انتخاب موضوع، ارائه آن و ارزیابی دانشجو در چارچوب مقررات مصوب گروه شیمی انجام می گیرد.

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهائی	پروژه
-	-	-	+

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

کتابها و مقالات علمی جدید و معتبر مرتبط با موضوع سمینار



پایان نامه کارشناسی ارشد

MSc. Dissertation

تعداد واحد نظری: -	تعداد واحد عملی: ۶ حل تمرین: -
نوع درس: الزامی	پیش نیاز: -

هدف درس:

برخورداری دانشجو از توانمندی لازم برای انجام پژوهش

رئوس مطالب:

در این درس دانشجو با هماهنگی استاد راهنما یک پروژه تحقیقاتی در یکی از شاخه‌های شیمی فیزیک را انتخاب و به گروه معرفی می‌نماید. گروه با در نظر گرفتن معیارهای تازگی و نوآوری موضوع و یا اهمیت کاربردی آن موضوع را تصویب می‌نماید.

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهائی	پروژه
-	-	-	+

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

کتاب‌ها و مقالات علمی جدید و معتبر مرتبط با موضوع پایان نامه



پایان نامه دکتری

PhD. Dissertation

تعداد واحد نظری: -	تعداد واحد عملی: ۲۰ حل تمرین: -
نوع درس: الزامی	پیش نیاز: -

هدف درس:

ایجاد توانائی های لازم در دانشجو برای انجام پژوهش مستقل در یک زمینه ی تخصصی شیمی

رئوس مطالب:

در این درس دانشجو با هماهنگی استاد راهنما یک موضوع تحقیقاتی در زمینه شیمی فیزیک را انتخاب کرده و آن را به صورت یک پیشنهادیه به گروه ارائه می نماید. گروه پس از بررسی اولیه پیشنهادیه و در صورت بر خورداری آن از نوآوری و یا توانائی در رفع یکی از مشکلات ملی جلسه دفاع از پیشنهادیه را تشکیل می دهد در صورت تأیید موضوع و توانمندی دانشجو پیشنهادیه تصویب شده و دانشجو وارد مرحله عملی پیشنهادیه می گردد.

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهائی	پروژه
-	-	-	+

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

کتاب ها و مقالات علمی جدید و معتبر مرتبط با موضوع پایان نامه



سمینار کارشناسی ارشد (آموزش محور)

MSc. Seminar 1

تعداد واحد نظری: ۲	تعداد واحد عملی: - حل تمرین: -
نوع درس: الزامی	پیش نیاز: -

هدف درس:

تبیین اصول انتخاب یک موضوع علمی، جمع آوری اطلاعات مرتبط با آن موضوع و ارائه آن

رئوس مطالب:

دانشجو با هماهنگی یکی از اساتید گروه یکی از موضوعات روز گرایش را انتخاب کرده و نحوه جمع آوری اطلاعات در مورد این مبحث علمی و ارائه آن به صورت های مختلف مانند پوستر، سخنرانی و یا مقاله به او آموزش داده می شود. پس از جمع آوری اطلاعات مرتبط با آن موضوع، آن را به صورت یک سخنرانی علمی عمومی ارائه می نماید. انتخاب موضوع، ارائه آن و ارزیابی دانشجو در چارچوب مقررات مصوب دانشگاه انجام می گیرد.

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهائی	پروژه
-	-	-	+

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

کتاب ها و مقالات علمی جدید و معتبر مرتبط با موضوع سمینار



سمینار ۲ کارشناسی ارشد (آموزش محور)

MSc. Seminar 2

تعداد واحد نظری: ۲	تعداد واحد عملی: - حل تمرین: -
نوع درس: الزامی	پیش نیاز: -

هدف درس:

ارائه و تدوین یک موضوع تخصصی و جمع آوری اطلاعات مرتبط با آن

رئوس مطالب:

دانشجو با هماهنگی یکی از اساتید گروه یکی از موضوعات تخصصی گرایش را انتخاب کرده و پس از جمع آوری اطلاعات مرتبط با آن موضوع، آن را هم به صورت سخنرانی و هم به صورت مدون ارائه می نماید. انتخاب موضوع، ارائه آن و ارزیابی دانشجو در چارچوب مقررات مصوب دانشگاه انجام می گیرد.

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون نهائی	پروژه
-	-	-	+

بازدید: ندارد

منابع اصلی:

کتابها و مقالات علمی جدید و معتبر مرتبط با موضوع سمینار