



جمهوری اسلامی ایران
وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
شورای عالی گسترش و برنامه‌ریزی آموزش عالی



برنامه درسی رشته

شیمی فیزیک

PHYSICAL CHEMISTRY

مقطع کارشناسی ارشد



بر اساس مصوبه جلسه شماره تاریخ شورای گسترش و برنامه‌ریزی آموزش عالی



جمهوری اسلامی ایران
وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
شورای عالی گسترش و برنامه‌ریزی آموزش عالی

برنامه درسی رشته

شیمی فیزیک

PHYSICAL CHEMISTRY

مقطع کارشناسی ارشد

پیشنهادی دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان

تهیه‌کنندگان (به ترتیب حروف الفبا):

عضو هیات علمی دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه	دکتر محمدحسین کوثری
عضو هیات علمی دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه	دکتر محسن لشگری
عضو هیات علمی دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه	دکتر فخری السادات محمدی
عضو هیات علمی دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه	دکتر فریبا نظری

فصل اول

مشخصات کلی برنامه درسی

با توجه به اهمیت رو به گسترش علوم پایه در پیشرفت علم و فناوری بشر و تاکید نهادهای ملی و بین‌المللی بر این اهمیت، تربیت متخصصین جوان و پرانرژی که با دانش روز جهان آشنایی کافی دارند و مهارت‌های لازم را برای حل مسائل مختلف در حوزه تخصصی خود کسب کرده‌اند، حائز اهمیت فراوان و نیاز روز کشور است. دوره کارشناسی ارشد شیمی فیزیک در علوم پایه، گامی در پاسخ به این نیاز است.

ب) مشخصات کلی، تعریف و اهداف

شیمی فیزیک علمی بین‌رشته‌ای با نگرش بنیادی به پدیده‌ها است که علاوه بر اهمیت و نقش آن در پیوند شاخه‌های مختلف علوم پایه و فهم عمیق ارتباط بین آنها، حل مسائل بصورت بنیادی در سایر رشته‌های کاربردی و مهندسی نیز با آن در ارتباط است؛ طوری که یافته‌ها و تحقیقات شیمی فیزیکی نوین در پیشبرد شاخه‌های علم مواد و خوردگی، مهندسی شیمی و پلیمر، انرژی/سوخت/آب، الکترونیک مولکولی، رایانه‌های کوانتومی، فرایندهای صنعتی، زیستی/دارویی، شبیه‌سازی، نانوفناوری و دیگر شاخه‌های علمی مرتبط، نقش کلیدی و راهبردی دارد. در این راستا از جنبه آموزشی نیز، برخی دروس رشته شیمی فیزیک در بسیاری از شاخه‌های مهندسی به دانشجویان ارایه می‌شود. با توجه به ماهیت دینامیکی و بین‌رشته‌ای و رویکرد بنیادی شیمی فیزیک، این رشته از توانایی و علاقمندی ذاتی برای فهم و بررسی مسائل پیچیده و چالشی روز دنیا و برقراری ارتباط با سایر علوم برخوردار است. این شاخه علمی با تعریف و اجرای پروژه‌های بنیادی-کاربردی می‌تواند به شناخت مکانیسمی از پدیده‌ها دست یافته و راه حل اساسی برای رفع مشکل پیشنهاد نماید.

پ) ضرورت و اهمیت

تربیت نیروی انسانی متخصص و کارآمد با توانایی بالا در حل مسائل پیچیده و دارای مهارت لازم در سطوح بنیادی/بین-رشته‌ای/کاربردی از ضرورت‌های کشور برای رسیدن به یک توسعه پایدار است. اهمیت پذیرش دانشجویان در دوره تحصیلات تکمیلی شیمی فیزیک، در ارتقای توانمندی و مهارت‌های شغلی دانشجویان و دانش‌آموختگان دانشگاهی رشته شیمی موثر بوده و با ایجاد توانمندی‌های بین‌رشته‌ای در فارغ‌التحصیلان، قادر به پاسخ‌گویی به مسائل روز و تامین نیروی انسانی مورد نیاز بازار کار کشور است.

ت) تعداد و نوع واحدهای درسی

جدول (۱) - توزیع واحدها (شیمی فیزیک)

تعداد واحد	نوع درس
۱۰	تخصصی
۱۲	اختیاری
۶	پایان‌نامه
۲۸	جمع

ث) مهارت، توانمندی و شایستگی دانش آموختگان

مهارت‌ها، شایستگی‌ها و توانمندی‌های ویژه	دروس مرتبط
توانایی انجام پژوهش‌های بنیادی، محاسباتی و نظری	موضوعات ویژه، مباحث نوین، پایان نامه
توانایی انجام پژوهش‌های تجربی، کاربردی/صنعتی در حوزه‌های زیستی/دارویی، انرژی/ساخت/آب و رفع مشکلات زیست محیطی و صنعت	موضوعات ویژه، مباحث نوین، پایان نامه
مهارت‌های آزمایشگاهی و محاسباتی، آنالیز مسئله، ارائه راهکار و تولید محصول	موضوعات ویژه، مباحث نوین، پایان نامه
پایه علمی قوی	دروس الزامی و اختیاری
توانایی حرکت در مرزهای دانش با بینش بنیادی	سمینار/رساله/مباحث نوین (موضوعات ویژه)
شایستگی برای تحصیل در مقطع بالاتر یا جذب در موسسات تحقیقاتی و بازار کار	دروس الزامی-اختیاری و پایان نامه
توانمندی ویژه در روش‌های محاسبات کوانتومی و شبیه‌سازی مولکولی	موضوعات ویژه، مباحث نوین، پایان نامه
توانمندی ویژه در روش‌های الکتروشیمی/خوردگی و بیوشیمی فیزیک	موضوعات ویژه، مباحث نوین، پایان نامه
حل مسائل پیچیده، پیش‌بینی نتیجه و فهم مکانیسمی	دروس تخصصی (الزامی+اختیاری)/ پایان نامه

ج) شرایط و ضوابط ورود به دوره

دانش آموختگان مقطع کارشناسی در یکی از رشته‌های علوم پایه یا فنی و مهندسی می‌توانند از طریق کنکور سراسری کارشناسی ارشد سازمان سنجش آموزش کشور وارد این دوره شوند. در صورت کسب مجوزهای لازم، ترجیح داده می‌شود که پذیرش به صورت نیمه متمرکز انجام شده و پذیرفته شدگان نهایی با مصاحبه علمی و از بین داوطلبین معرفی شده چند برابر ظرفیت انتخاب شوند. ورود به دوره از طریق آیین‌نامه پذیرش بدون آزمون استعدادهای درخشان نیز امکان پذیر است.

فصل دوم

جدول عناوین و مشخصات دروس

جدول (۳) - عنوان و مشخصات کلی دروس تخصصی شیمی گرایش شیمی فیزیک (به ترتیب حروف الفبا)

نام گرایش	ردیف	عنوان درس	تعداد واحد	نوع واحد			تعداد ساعات		پیش نیاز / هم نیاز
				نظری	عملی	نظری - عملی	نظری	عملی	
شیمی فیزیک	۱.	الکتروشیمی پیشرفته ۱	۲	x			۳۲		ندارد
	۲.	ترمودینامیک آماری ۱	۲	x			۳۲		شیمی فیزیک پیشرفته
	۳.	سنتیک شیمیایی پیشرفته	۲	x			۳۲		شیمی فیزیک پیشرفته
	۴.	شیمی فیزیک پیشرفته	۲	x			۳۲		ندارد
	۵.	شیمی کوانتومی ۱	۲	x			۳۲		شیمی فیزیک پیشرفته
	۶.	طیف سنجی مولکولی	۲	x			۳۲		شیمی فیزیک پیشرفته

* لازم است دانشجو ۱۰ واحد از دروس جدول ۳ را اخذ نماید.

** بنا بر ضرورت و تشخیص استاد راهنما و مجوز گروه دانشجو می تواند یک درس از دروس سایر گرایش ها/دانشکده ها را اخذ نماید.

جدول (۴) - عنوان و مشخصات کلی دروس اختیاری شیمی گرایش شیمی فیزیک (به ترتیب حروف الفبا)

نام گرایش	ردیف	عنوان درس	تعداد واحد	نوع واحد			تعداد ساعات		پیش نیاز / هم نیاز
				نظری	عملی	نظری - عملی	نظری	عملی	
شیمی فیزیک	۱.	الکتروشیمی پیشرفته ۲	۲	X			۳۲		الکتروشیمی پیشرفته ۱
	۲.	بیوشیمی فیزیک	۲	X			۳۲		ندارد
	۳.	ترمودینامیک آماری ۲	۲	X			۳۲		ترمودینامیک آماری ۱
	۴.	خوردگی پیشرفته	۲	X			۳۲		الکتروشیمی پیشرفته (با توافق استاد)
	۵.	ریاضیات در شیمی فیزیک	۲	X			۳۲		ندارد
	۶.	سمینار	۱	X			۱۶		ندارد
	۷.	شیمی آلی پیشرفته	۲	X			۳۲		ندارد
	۸.	شیمی تجزیه پیشرفته	۲	X			۳۲		ندارد
	۹.	شیمی کوانتومی ۲	۲	X			۳۲		شیمی کوانتومی ۱
	۱۰.	شیمی معدنی پیشرفته	۲	X			۳۲		ندارد
	۱۱.	مباحث نوین در شیمی فیزیک	۲	X			۳۲		با نظر استاد درس
	۱۲.	موضوعات ویژه (اصول نظریه ی تابعی چگالی)	۲	X			۳۲		با نظر استاد درس
	۱۳.	موضوعات ویژه (شبیه سازی دینامیک مولکولی)							با نظر استاد درس
	۱۴.	موضوعات ویژه (شیمی نظری و محاسباتی پیشرفته: مبانی)							با نظر استاد درس
	۱۵.	انگلیسی با اهداف دانشگاهی	۲	X			۳۲		ندارد

* لازم است دانشجو ۱۲ واحد از دروس جدول ۴ (بهمراه درس سمینار) را اخذ نماید.

** دروس بیوشیمی فیزیک، خوردگی پیشرفته و مباحث نوین (موضوعات ویژه) مشترک با دوره ی دکترا بوده و اخذ آن با توافق استاد انجام می شود.

فصل سوم

ویژگی‌های دروس

عنوان درس به فارسی:		الکتروشیمی پیشرفته ۱	
عنوان درس به انگلیسی:		Advanced Electrochemistry I	
دروس پیش‌نیاز:	ندارد	نوع درس و واحد	
دروس هم‌نیاز:		<input type="checkbox"/> پایه	<input checked="" type="checkbox"/> نظری
تعداد واحد:	۲	<input checked="" type="checkbox"/> تخصصی	<input type="checkbox"/> عملی
تعداد ساعت:	۳۲	<input type="checkbox"/> اختیاری	<input type="checkbox"/> نظری-عملی
		<input type="checkbox"/> رساله / پایان‌نامه	

نوع آموزش تکمیلی عملی (در صورت نیاز): سفر علمی آزمایشگاه سمینار کارگاه موارد دیگر:

هدف کلی: آشنایی با مفاهیم بنیادی و پیشرفته در الکتروشیمی

اهداف ویژه: ورود به حوزه تحقیقاتی الکتروشیمی با رویکرد شیمی فیزیکی

پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

- مقدمه‌های بر الکتروشیمی و وسعت کاربرد آن در صنایع و حوزه‌های مختلف. مروری بر تعاریف، مفاهیم اولیه و قوانین الکتریکی حاکم بر سیستم‌ها. ترازهای انرژی مربوط به گونه ردکس و الکتروود فلزی. انتقالات الکترونی در فرایندهای الکتروودی و مقایسه آن با طیف سنجی الکترونی.

- دولایه‌ی الکتریکی، فصل مشترک فلز/محلول و خواص فیزیکوشیمیایی حاکم بر آن. ساختار فصل مشترک و توصیف آن توسط مدل‌های مختلف. خازن دولایه‌ی الکتریکی، مقاومت انتقال بار و مدار الکتریکی معادل. بیناب‌نگاری امیدانس الکتروشیمیایی و کاربرد آن در مطالعات مکانیسمی پدیده‌های الکتروودی.

- مکانیسم هدایت الکتریکی در بخش‌های مختلف سل الکتروشیمیایی، پدیده‌های همرفت، مهاجرت و نفوذ. لایه نفوذی نرنست و جریان حدی. شارش بار و جریان الکتریکی. اتلاف حرارتی در سل‌های الکتروشیمیایی. انواع کار در فرایندهای الکتروشیمیایی و فرمولبندی مجدد توابع ترمودینامیکی بر حسب آنها.

ارتباط کشش سطحی با بار اضافه مربوط به سطح الکتروود. توزیع بولتزمن، پواسون، استخراج روابط حاکم بر پتانسیل الکتریکی، و چگالی بار خالص (درون الکترولیت) بصورت تابعی از فاصله از سطح الکتروود. محاسبه ظرفیت خازن دیفرانسیلی. پتانسیل بار صفر. جذب اتصالی (تماسی) و معیار انرژی آزاد.

- انتقال الکترون در فصل مشترک، تعمیم نظریه کمپلکس فعال به فرایندهای الکتروودی و معرفی رابطه باتلر-ولمر. مفاهیم اضافه ولتاژ، چگالی جریان تبدیلی، فاکتور تقارن. استنتاج رفتارهای تافلی و خطی برای منحنی‌های جریان-پتانسیل در اضافه ولتاژهای بالا و پایین. نحوه جذب مولکول‌های حلال بر سطح الکتروود. ظرفیت خازنی مربوط به مولکول‌های حلال در ناحیه فصل مشترک. برهم‌کنش‌های جانبی، الکتریکی و شیمیایی. رقابت بین مولکول‌های آلی و حلال جهت جذب بر روی فصل مشترک. پتانسیل بار صفر و اهمیت آن در جذب.

- معادله نرنست و پیل غلظتی. منحنی‌های پتانسیو پویش. باتری‌ها و خصیصه‌یابی آنها. جریان شارژ دولایه و تعیین سطح واقعی الکتروکاتالیست و

ت) راهبردهای تدریس و یادگیری متناسب با محتوا و هدف:

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

فعالیت‌های کلاسی در طول نیم‌سال ۵۰ درصد

آزمون پایان نیم‌سال ۵۰ درصد

ج) ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

- 1) J. O'M Bockris, Amulya K.N. Reddy and Maria Gaboa-Aldeco, *Modern Electrochemistry: Fundamentals of Electrodeics*, Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York, Vol. 2A (2004).
- 2) M. Lashgari, *Advanced Electrochemistry (Fundamentals and Application)*, Nikan-Ketab, Zanjan (2012).
- 3) A. J. Bard and Larry R. Faulkner, *Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications*, John Wiley & Sons, Inc, New York (2000).

عنوان درس به فارسی: ترمودینامیک آماری ۱		عنوان درس به انگلیسی: Statistical Thermodynamics I	
نوع درس و واحد	پایه <input type="checkbox"/> نظری <input checked="" type="checkbox"/>	شیمی فیزیک پیشرفته	
	تخصصی <input checked="" type="checkbox"/> عملی <input type="checkbox"/>	دروس پیش نیاز:	
	اختیاری <input type="checkbox"/> نظری-عملی <input type="checkbox"/>	دروس هم نیاز:	
	رساله / پایان نامه <input type="checkbox"/>	۲	تعداد واحد:
		۳۲	تعداد ساعت:

نوع آموزش تکمیلی عملی (در صورت نیاز): سفر علمی آزمایشگاه سمینار کارگاه موارد دیگر:

هدف کلی: آشنایی با مبانی و مفاهیم بنیادی ترمودینامیک آماری

اهداف ویژه:

پ) مباحث یا سرفصل ها:

مقدمه و مروری بر مفاهیم پایه، آمار، احتمال و مقدمات ریاضی مورد نیاز: معرفی ترمودینامیک آماری، یادآوری روابط اساسی ترمودینامیک کلاسیک، مروری بر مفاهیم آمار و احتمال و رفتار تابع توزیع، مفهوم مجموعه و اصول مهم ترمودینامیک آماری.

مجموعه های آماری: معرفی مجموعه های کانونیکال، میکرو کانونیکال، گرنند کانونیکال، همدما-هم فشار و روابط بنیادی این مجموعه ها، محاسبه احتمال، معرفی تابع تقسیم، نحوه محاسبه خواص ترمودینامیکی (انرژی درونی، فشار، آنتروپی، ...)

نظریه افت و خیز: اهمیت بررسی افت و خیز کمیت ها در مجموعه، وضعیت توزیع کمیت ها حول مقدار متوسط

آمارهای بولتزمن، فرمی دیراک و بوزی اینشتین: معرفی عمومی ذرات فرمی، بوزی و ماکسولونی، تعیین تابع تقسیم سیستم N-ذره ای و اعمال شرط تمیزناپذیری ذرات، تعیین شرایط برقراری هر یک از آمارها، تابع تقسیم کانونیکال در آمار بولتزمن.

مطالعه آماری گاز ایده ال تک اتمی و دو اتمی: نحوه محاسبه تابع تقسیم مولکولی گاز ایده ال تک اتمی و دو اتمی با تعیین سهم درجات آزادی مختلف، تعیین کمیت های ترمودینامیکی با استفاده از تابع تقسیم برای گاز ایده ال تک اتمی و دو اتمی.

ت) راهبردهای تدریس و یادگیری متناسب با محتوا و هدف:

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

فعالیت های کلاسی در طول نیم سال ۵۰ درصد

آزمون پایان نیم سال ۵۰ درصد

ج) ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

1) Donald A. McQuarrie, *Statistical Mechanics*, Harper's chemistry series, New York, 1976.

2) Terrell L. Hill, *An Introduction to Statistical Thermodynamics*, Dover, New York, 1986.

۳) غلامعباس پارسافر، ترمودینامیک آماری: مبانی و کاربرد ها، ویرایش دوم، چاپ چهارم، انتشارات دانشگاه صنعتی اصفهان، ۱۳۹۸.

عنوان درس به فارسی: سینتیک شیمیایی پیشرفته		عنوان درس به انگلیسی: Advanced Chemical Kinetics	
نوع درس و واحد	شیمی فیزیک پیشرفته	پایه <input type="checkbox"/>	نظری <input checked="" type="checkbox"/>
تخصصی <input checked="" type="checkbox"/>		عملی <input type="checkbox"/>	
اختیاری <input type="checkbox"/>		نظری-عملی <input type="checkbox"/>	
رساله / پایان نامه <input type="checkbox"/>		تعداد واحد: ۲	
		تعداد ساعت: ۳۲	

نوع آموزش تکمیلی عملی (در صورت نیاز): سفر علمی آزمایشگاه سمینار کارگاه موارد دیگر:

هدف کلی: آشنایی با مبانی و مفاهیم بنیادی سینتیک شیمیایی

اهداف ویژه:

پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

۱- مفاهیم بنیادی سینتیک: تعریف سرعت یک واکنش شیمیایی، مرتبه واکنش و مولکولاریته، قانون سرعت واکنشهای بنیادی، تعیین مرتبه واکنش، زمان نیمه عمر واکنش، وابستگی دمایی ثابت سرعت واکنش (معادله آرنیوس)، مکانیسم واکنش.

۲- واکنشهای پیچیده: حل‌های تحلیلی دقیق برای واکنشهای پیچیده، روشهای تقریبی، روش تبدیل لاپلاس، روش ماتریسی.

۳- واکنشها در محلول: ویژگی‌های عمومی واکنشها در محلول، نظریه پدیده شناختی سرعت واکنشها، واکنش تحت کنترل نفوذ، واکنشهای آهسته، تاثیر قدرت یونی بر واکنشهای بین یونها، روشهای آسایش.

۴- کاتالیزگری (Catalysis): واکنشهای کاتالیستی و تعادل، کاتالیست همگن، واکنشهای خودکاتالیستی و واکنشهای نوسانی، واکنشهای سینتیک آنزیمی، کاتالیست ناهمگن و واکنشهای گازی در سطح جامد.

۵- سطوح انرژی پتانسیل: پتانسیلهای برد بلند، پتانسیل‌های بین مولکولی نیمه تجربی، پتانسیلهای پیوند مولکولی، مختصات داخلی و مدهای نرمال ارتعاش، سطح انرژی پتانسیل.

۶- دینامیک واکنشهای تک مولکولی: نظریه لیندمن-هینشل وود و واکنشهای تک مولکولی، نظریه RRK، نظریه RRKM.

ت) راهبردهای تدریس و یادگیری متناسب با محتوا و هدف:

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

فعالیت‌های کلاسی در طول نیم‌سال ... درصد

آزمون پایان نیم‌سال ... درصد

ج) ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

- 1) Chemical Kinetics and Dynamics, Jeffrey I. Steinfeld; Joseph S. Francisco; William L. Hase. 1989
- 2) Chemical Kinetics and Reaction Dynamics, Paul Houston, 1995
- 3) Chemical Kinetics: Fundamental and Recent Developments, E. T. Denisov, Gertz I. Likhtenshtein, and Oleg Sarkisov, 2003.

شیمی فیزیک پیشرفته		عنوان درس به فارسی:	
Advanced Physical Chemistry		عنوان درس به انگلیسی:	
نوع درس و واحد		ندارد	
<input type="checkbox"/> پایه	<input checked="" type="checkbox"/> نظری	دروس پیش نیاز:	
<input checked="" type="checkbox"/> تخصصی	<input type="checkbox"/> عملی	دروس هم نیاز:	
<input type="checkbox"/> اختیاری	<input type="checkbox"/> نظری-عملی	۲	تعداد واحد:
<input type="checkbox"/> رساله / پایان نامه		۳۲	تعداد ساعت:

نوع آموزش تکمیلی عملی (در صورت نیاز): سفر علمی آزمایشگاه سمینار کارگاه موارد دیگر:

هدف کلی: آشنایی با مبانی و مفاهیم بنیادی ترمودینامیک آماری

اهداف ویژه:

ب) مباحث یا سرفصل ها:

- ۱- هدف و محدوده ترمودینامیک: قوانین ترمودینامیک (قانون اول، دوم و سوم ترمودینامیک)، دما، ترمومتر فشار ثابت، ترمومتر حجم ثابت، مقیاس دمای مطلق (کلوین)
- ۲- انرژی و قانون اول ترمودینامیک: قانون بقای انرژی کل جهان، فرم های مختلف انرژی، توابع حالت ترمودینامیکی، انرژی داخلی و معادلات حالت، فرایندهای برگشت پذیر، فرایندهای غیر برگشت پذیر، کار و گرما، ظرفیت گرمایی، آنتالپی.
- ۳- آنتروپی و قانون دوم ترمودینامیک: آنتروپی به عنوان یک تابع حالت ترمودینامیکی، آنتروپی و بی نظمی، ماشین حرارتی کارنو، یخچال کارنو، آنتروپی و احتمال.
- ۴- توابع ترمودینامیکی: انرژی آزاد گیبس و انرژی آزاد هلمهولتز، معادلات ماکسول، پتانسیل شیمیایی، کمیتهای مولی جزئی، معادله گیبس-دوهم.
- ۵- قانون سوم ترمودینامیک و آنتروپی مطلق: آنتروپی حالتهای شبه پایدار، آنتروپی حالت یخ زده، دسترسی ناپذیری صفر مطلق، روش مغناطیس زدایی آدیاباتیک برای کاهش دما.
- ۶- ترمودینامیک واکنشهای شیمیایی: تعریف حالت استاندارد مواد، آنتالپی استاندارد تشکیل، وابستگی دمایی تغییرات آنتالپی استاندارد واکنش، وابستگی دمایی تغییرات آنتروپی واکنش، توابع انرژی آزاد و کاربرد آنها در محاسبات ترمودینامیکی.
- ۷- قانون فاز و دیاگرام فاز سیستم های تک جزئی: تعداد اجزای مستقل سیستم، شرط تعادل فاز و قانون فاز، دیاگرام فاز، دی اکسید کربن، هلیوم، تقسیم بندی انتقالات فاز بر مبنای ارنفست.
- ۸- تعادلات فاز و تابع فعالیت: معادله کلاپیرن و شیب خطوط انتقال فاز، معادله کلاپیرن-کلاپیرن و شیب خطوط انتقال فاز، تابع فعالیت و رفتار غیر ایده ال.
- ۹- ثابت های تعادل: معادله لوییس و وابستگی تغییرات انرژی آزاد گیبس واکنش به فعالیت مواد اولیه و فرآورده ها، وابستگی دمایی ثابت تعادل واکنش و معادله وانت هوف، اصل لوشاتلیه.

ت) راهبردهای تدریس و یادگیری متناسب با محتوا و هدف:

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

فعالیت های کلاسی در طول نیم سال ۵۰ درصد

آزمون پایان نیم سال ۵۰ درصد

ج) ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

- 1) Chemical Thermodynamics; Peter A. Rock, 1983.
- 2) Physical Chemistry, Ira N. Levine, 6 edition, 2009.
- 3) Physical Chemistry, PW. Atkins, de Paula Julio, 8 edition, 2016.

شیمی کوانتومی ۱		عنوان درس به فارسی:
Quantum Chemistry I		عنوان درس به انگلیسی:
نظری <input checked="" type="checkbox"/>	پایه <input type="checkbox"/>	دروس پیش نیاز:
عملی <input type="checkbox"/>	تخصصی <input checked="" type="checkbox"/>	دروس هم نیاز:
نظری-عملی <input type="checkbox"/>	اختیاری <input type="checkbox"/>	تعداد واحد: ۲
رساله / پایان نامه <input type="checkbox"/>		تعداد ساعت: ۳۲

نوع آموزش تکمیلی عملی (در صورت نیاز): سفر علمی آزمایشگاه سمینار کارگاه موارد دیگر:

هدف کلی: آشنایی با مبانی و مفاهیم بنیادی شیمی کوانتومی

اهداف ویژه:

ب) مباحث یا سرفصل‌ها:

۱- معادله ی شرودینگر: شیمی کوانتومی، پیشینه ی تاریخی مکانیک کوانتومی، اصل نایقینی، معادله ی وابسته به زمان شرودینگر، معادله ی مستقل از زمان شرودینگر، احتمال، اعداد مختلط، یکاها

۲- ذره در جعبه: معرفی معادله ی دیفرانسیل، ذره در جعبه ی یک بعدی، ذره ی آزاد در یک بعد، تونل زنی

۳- اپراتورها: اپراتورها، ویژه حالت ها و ویژه مقادیرها، معادله ی شرودینگر سه بعدی بسیار ذره ای، تبهگنی، مقادیرهای میانگین، شرایط مورد نیاز برای تابع موج خوش رفتار

۴- نوسانگر هماهنگ: حل سری برای معادله های دیفرانسیلی، نوسانگر هماهنگ یک بعدی، ارتعاش های مولکولی،

۵- اندازه حرکت زاویه ای: اندازه گیری همزمان چند خاصیت فیزیکی، بردارها، اندازه حرکت سامانه ی تک ذره ای، اپراتور نردبانی برای اندازه حرکت زاویه ای

۶- اتم هیدروژن: مساله ی میدان نیروی مرکزی تک ذره ای، ذره های نابرمکنشی و جداسازی متغیرها، کاهش مساله ی دو ذره ای به مساله ی تک ذره ای، چرخنده ی صلب دو ذره ای، اتم هیدروژن، تابع موج اتم هیدروژن مقید، اربیتال های شبه هیدروژنی، اثر زیمان

۷- نظریه های مکانیک کوانتومی: اپراتورهای هرمیتی، بسط براساس ویژه حالت ها، ویژه حالت های اپراتورهای جابجاپذیر، پاریتی، اندازه گیری و برهم نهی حالت ها، ویژه حالت های اپراتور مکان، اصول موضوعه ی مکانیک کوانتومی، اندازه گیری و باز تعریف مکانیک کوانتومی

ت) راهبردهای تدریس و یادگیری متناسب با محتوا و هدف:

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

فعالیت های کلاسی در طول نیم سال	۳۰ درصد
آزمون نیم سال	۳۵ درصد
آزمون پایان نیم سال	۳۵ درصد

ج) ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

1. Quantum Chemistry by Ira N. Levine, John Wiley and Sons (7th Edition).

عنوان درس به فارسی: طیف سنجی مولکولی		عنوان درس به انگلیسی: Molecular Spectroscopy	
نوع درس و واحد		شیمی فیزیک پیشرفته	
<input checked="" type="checkbox"/> نظری	<input type="checkbox"/> پایه		
<input type="checkbox"/> عملی	<input checked="" type="checkbox"/> تخصصی		
<input type="checkbox"/> نظری-عملی	<input type="checkbox"/> اختیاری	۲	تعداد واحد:
<input type="checkbox"/> رساله / پایان نامه		۳۲	تعداد ساعت:

نوع آموزش تکمیلی عملی (در صورت نیاز): سفر علمی آزمایشگاه سمینار کارگاه موارد دیگر:

هدف کلی: آشنایی با مبانی و مفاهیم بنیادی طیف سنجی مولکولی

اهداف ویژه:

پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

- مقدمه ای بر تابش الکترومغناطیس و برهمکنش آن با اتم ها و مولکول ها: معرفی تابش الکترومغناطیس و انواع نور، برهمکنش نور با ماده، مبانی جذب، نشر خودبخودی و نشر القایی، تئوری اختلال وابسته به زمان برای سیستم دو ترازوی و چند ترازوی، شدت خطوط طیفی و احتمال انتقال بین سطوح انرژی، رابطه طلایی فرمی در مورد احتمال انتقال، انواع پهن شدگی خطوط طیفی و راه های حذف آنها

- تقارن و نظریه گروه: عناصر تقارنی و گروه های نقطه ای، جدول کاراکتر، بیان ماتریسی و نحوه ی استخراج نمایه های کاهش پذیر به صورت ترکیب خطی کاراکترهای کاهش ناپذیر و کاربرد آن در بررسی تقارن شیوه های ارتعاشی مولکول های چند اتمی - طیف سنجی چرخشی مولکول های دو اتمی و چند اتمی: قواعد گزینش، اثرات سانتریفوژی، محل خطوط و شدت خطوط طیف چرخشی، انواع چرخنده های چند اتمی، اثر استارک،

- طیف سنجی رامان: توجیه کوانتومی پخش، پخش رایلی و رامان، طیف رامان چرخشی، اوزان آماری هسته، قواعد گزینش رامان - طیف سنجی ارتعاشی: طیف های زیر قرمز و رامان، اثرات ناهماهنگی الکتریکی و مکانیکی، طیف سنجی ارتعاشی-چرخشی، روش ترکیب اختلاف ها، قواعد گزینش، محل خطوط و فرکانس انتقالات، سطوح انرژی پتانسیل ارتعاشی - طیف سنجی الکترونی: طیف های اتمی و طیف های مولکول های دو اتمی، اوربیتال های مولکولی، ترم مولکولی، قواعد گزینش، اصل فرانک کاندون

- طیف سنجی فوتوالکترون: مقدمه ای بر طیف سنجی الکترونی فرابنفش، اوژه و فلورسانس پرتو ایکس

ت) راهبردهای تدریس و یادگیری متناسب با محتوا و هدف:

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

فعالیت های کلاسی در طول نیم سال ۵۰ درصد

آزمون پایان نیم سال ۵۰ درصد

ج) ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

- 1) J. M. Hollas, Modern Spectroscopy, John Wiley & sons, 1996.
- 2) Ira N. Levine, Molecular Spectroscopy, John Wiley and Sons, 1975.
- 3) P. W. Atkins, R. S. Friedman, Molecular Quantum Mechanics, 5th edition, University of Oxford, 2011.

عنوان درس به فارسی:		الکتروشیمی پیشرفته ۲	
عنوان درس به انگلیسی:		Advanced Electrochemistry II	
دروس پیش نیاز:		الکتروشیمی پیشرفته ۱	
دروس هم نیاز:			
تعداد واحد:		۲	
تعداد ساعت:		۳۲	
نوع درس و واحد			
<input type="checkbox"/> پایه <input checked="" type="checkbox"/> نظری			
<input type="checkbox"/> تخصصی <input type="checkbox"/> عملی			
<input type="checkbox"/> نظری-عملی <input checked="" type="checkbox"/> اختیاری			
رساله / پایان نامه			

نوع آموزش تکمیلی عملی (در صورت نیاز): سفر علمی آزمایشگاه سمینار کارگاه موارد دیگر:

هدف کلی: آشنایی با مفاهیم جدید و پیشرفته در الکتروشیمی: حالت جامد، پیل‌های سوختی و میکروبی، فوتوالکتروشیمی و الکتروشیمی نیم‌رسانا

اهداف ویژه: ورود به حوزه تحقیقاتی الکتروشیمیایی مرتبط با انرژی‌های نو و تجدیدپذیر، مسائل زیست‌محیطی، تبدیل فوتون به الکتریسته و بالعکس، و ...

پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

- الکتروشیمی حالت جامد: مقدمه‌ای بر انرژی، موتور حرارتی، احتراق سرد و مبدل‌های الکتروشیمیایی. بازده موتورهای الکتروشیمیایی. فرایند رفورمینگ و تولید هیدروژن. سنتز الکترو-مولد. مقایسه ترمودینامیکی راندمان تولید الکتریسته به روش الکتروشیمیایی با سایر روش‌های مبتنی بر موتورهای حرارتی کارنو.

- بحران انرژی، مشکلات زیست‌محیطی و موتورهای جدید الکتروشیمیایی (مبتنی بر احتراق سرد). پیل‌های سوختی (قلیایی، کربنات مذاب، مبادله پروتونی با الکترولیت پلیمری، اکسید فلزی) و باتری‌ها. ملاحظات مهندسی در طراحی و ساخت مولدهای الکتروشیمیایی. انواع هدایت الکتریکی (الکترونی، یونی و مختلط). نقص‌های بلوری و فرمول نویسی آنها. استخراج رابطه اساسی حاکم بر جریان کل، هدایت الکتریکی (یونی و الکترونی) و پتانسیل شیمیایی. الکترولیت‌های جامد و مکانیسم‌های هدایت. بررسی مکانیسم‌های تشکیل یون اکسید بر روی سطح الکتروود (با هدایت یونی، الکترونی و مختلط) و نحوه انتقال آن به داخل الکترولیت.

- سامانه‌های زیستی و پیل‌های سوختی میکروبی (مفاهیم اولیه تنفس، متابولیسم، باکتری، زیست فیلم، الکتروود زیستی، و کاربرد آن برای تامین انرژی بروش زیستی).

- فوتوالکتروشیمی نیم‌رسانا: مقدمه و تعاریف اولیه، ساختار الکترونی نیم‌رساناها (نظریه‌ی نوار و ارییتال مولکولی). انواع نیم‌رسانا. تراز فرمی. نوار سطح. شکاف نواری. مفهوم فضاچار. نوار ظرفیت و هدایت. اتصال p-n، دیود و رابطه‌ی نمایی حاکم بر آن و مقایسه با سامانه‌های الکتروودی. یکسوساز جریان، سلول خورشیدی (فوتوولتائی) و مقایسه آن با سایر منابع مولد/ذخیره قدرت. دیودهای نورگسیل. خمیدگی نوار و جهت آن. ساختار نوار در فصل مشترک نیم‌رسانا/الکترولیت. فوتوالکتروود، فوتوآند، فوتوکاتد. فرایندهای ردکس و فوتوردکس انجام شونده بر روی الکتروود نیم‌رسانا. رابطه‌ی مات-شاتکی و اهمیت آن. سامانه‌های فوتوالکتروشیمیایی.

ت) راهبردهای تدریس و یادگیری متناسب با محتوا و هدف:

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

فعالیت‌های کلاسی در طول نیم‌سال ۵۰ درصد
آزمون پایان نیم‌سال ۵۰ درصد

ج) ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

- 1) J. O'M Bockris, Amulya K.N. Reddy and Maria Gaboa-Aldeco, *Modern electrochemistry: Fundamentals of electrochemistry*, Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York, Vol. 2A (2004).
- 2) John O'M Bockris and Amulya K.N. Reddy, *Modern electrochemistry: Electrochemistry in chemistry, biology and environmental science*, Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York, Vol. 2B (2004).
- 3) M. Lashgari, *Advanced Electrochemistry (Fundamentals and application)*, Nikan-Ketab, Zanjan (2012).

عنوان درس به فارسی:		بیوشیمی فیزیک	
عنوان درس به انگلیسی:		Biophysical Chemistry	
دروس پیش نیاز:		-	
دروس هم نیاز:			
تعداد واحد:	۲	نوع درس و واحد	
تعداد ساعت:	۳۲	<input type="checkbox"/> پایه <input checked="" type="checkbox"/> نظری <input type="checkbox"/> تخصصی <input type="checkbox"/> عملی <input checked="" type="checkbox"/> اختیاری <input type="checkbox"/> نظری-عملی <input type="checkbox"/> رساله / پایان نامه	

نوع آموزش تکمیلی عملی (در صورت نیاز): سفر علمی آزمایشگاه سمینار کارگاه موارد دیگر:

هدف کلی: آشنایی با بیوشیمی فیزیک

اهداف ویژه:

پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

- مقدمه‌ای بر اهداف و خط مشی بیوشیمی فیزیک: انواع ساختارهای ماکرومولکول‌های بیولوژیکی، برخی از سؤالات اصلی در بیوشیمی فیزیک، برخی از استراتژی‌ها در بیوشیمی فیزیک

- ساختار پروتئین‌ها: ویژگی‌های اسیدهای آمینه، ساختار اول، ساختار دوم، ساختار سوم و ساختار چهارم

- ساختار نوکلئیک اسیدها: ویژگی‌های نوکلئوسیدها و نوکلئوتیدها، ترکیب نوکلئیک اسید، DNA، RNA، ساختار اول، ساختار دوم، ساختار سوم و ساختار چهارم

- سایر پلیمرهای بیولوژیکی: پلی‌ساختارها، تجمع‌های شکل گرفته بین انواع مختلف ماکرومولکول‌ها، گلیکوپروتئین‌ها، نوکلئوپروتئین‌ها، لپیدها در غشاهای بیولوژیکی، برهمکنش‌های پروتئین-لپید

- آنالیز کنفورماسیونی و نیروهای تعیین کننده ساختار پروتئین: مسائل اساسی ساختار پروتئین، هندسه‌های زنجیر پلی‌پپتیدی، تخمین‌های انرژی پتانسیل و نتایج محاسبات انرژی پتانسیل، پیوند هیدروژنی، برهمکنش‌های هیدروفوب و ساختار آب، برهمکنش‌های یونی، پیوندهای دی‌سولفیدی، کاربرد داده‌های ساختار پروتئین، پیش‌گویی ساختار پروتئین، ساخت مدل مولکولی توسط کامپیوتر

- آنالیز کنفورماسیونی و نیروهای تعیین کننده ساختار نوکلئیک اسید: ویژگی‌های عمومی ساختار نوکلئیک اسید، ایزومرهای چرخشی پیوند گلیکوسیدی و چروکیدگی ریوز، زوایای چرخشی اسکلت و ممانعت‌های فضایی، نیروهای پایدار کننده فرم‌های منظم، جفت باز، base stacking، ساختار سوم در نوکلئیک اسیدها

- تکنیک‌های مطالعه ساختار و عملکرد بیولوژیکی: طیف سنجی جذب و آنالیز بیوپلیمرها، اثرات کنفورماسیون بر جذب، برهمکنش بین کروموفورهای مختلف، طیف‌سنجی دورنگ‌نمایی دورانی (CD) و (ORD)، طیف‌سنجی فلورسانس، نظریه انتقال انرژی فورستر، طیف‌سنجی مادون قرمز و رامان، طیف‌سنجی رزونانس مغناطیسی هسته (NMR)، طیف‌های NMR سیستم‌های بیولوژیکی، رزونانس پارامغناطیس الکترون (EPR)، کالریتری تیتراسیون همدم (ITC)، کالریتری روبشی تفاضلی (DSC)، Ultracentrifugation، ویسکومتری، الکتروفورز، کریستالوگرافی اشعه ایکس، میکروسکوپی الکترون، پراش نوترون، پراش نور

ت) راهبردهای تدریس و یادگیری متناسب با محتوا و هدف:

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

فعالیت‌های کلاسی در طول نیم‌سال ... درصد

آزمون پایان نیم‌سال ... درصد

ج) ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

- 1) Cantor, C. R.; Schimmel, P. R. *Biophysical Chemistry- Part I: The conformaion of biological macromolecules*; W. H. Freeman and Company: New York, **1980**.
- 2) Allen, J. P. *Biophysical Chemistry*; Wiley-Blackwell: Oxford, **2008**.
- 3) Walla, P. J. *Modern Biophysical Chemistry*; Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KgaA: Weinheim, **2009**.

عنوان درس به فارسی: ترمودینامیک آماری ۲		عنوان درس به انگلیسی: Statistical Thermodynamics II	
نوع درس و واحد	ترمودینامیک آماری ۱	دروس پیش نیاز:	پایه <input type="checkbox"/> نظری <input checked="" type="checkbox"/>
		دروس هم نیاز:	تخصصی <input type="checkbox"/> عملی <input type="checkbox"/>
		تعداد واحد:	اختیاری <input checked="" type="checkbox"/> نظری-عملی <input type="checkbox"/>
		تعداد ساعت:	رساله / پایان نامه <input type="checkbox"/>
			۲
			۳۲

نوع آموزش تکمیلی عملی (در صورت نیاز): سفر علمی آزمایشگاه سمینار کارگاه موارد دیگر:

هدف کلی: آشنایی با مبانی و مفاهیم بنیادی ترمودینامیک آماری

اهداف ویژه:

پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

مکانیک آماری کلاسیکی: ضرورت استفاده از رهیافت کلاسیکی در حل مسائل آماری، نحوه‌ی نوشتن تابع تقسیم کلاسیکی، معرفی انتگرال پیکربندی، بیان مفاهیم پایه‌ای مکانیک آماری کلاسیکی (فضای فاز، گذرگاه، مجموعه، قیود)، معادله لیوویل. مطالعه آماری گاز ایده‌ال چند اتمی: تابع تقسیم مولکولی گاز ایده‌ال چند اتمی با در نظر گرفتن مختلف، تعیین کمیت‌های ترمودینامیکی (انرژی درونی، فشار، آنتروپی، انرژی آزاد...) مولکول‌های چند اتمی با استفاده از تابع تقسیم مولکولی. مطالعه تعادل شیمیایی از دید آماری: رابطه‌ی کلی بین ثابت تعادل واکنش (K_p و K_c) و تابع تقسیم مواد اولیه و فراورده‌ها مطالعه اجمالی گازهای حقیقی: معرفی معادله حالت ویریا و بررسی کارایی آن، اشاره به رویکرد تبدیل مساله N -ذره ای به مساله ۱، ۲، ۳ و چند ذره ای، معرفی ضریب دوم و سوم ویریا، تقریب جمع پذیر جفت گونه، ارزیابی مدل‌های پتانسیل مختلف. بررسی بلورها (جامدات): مدل گلوله و فتر برای توصیف شبکه بلور و ارتعاش سیستم، استفاده از مختصات نرمال، $(g(V))$ ، بیان توابع ترمودینامیکی به کمک تابع دانسیته فرکانس‌ها $(g(V))$ ، مدل انیشتین و دبای برای استخراج تابع $g(V)$ بلور و ارزیابی آنها. مطالعه اجمالی سیالات چگال (مایعات): بیان پیچیدگی سیال چگال، معرفی نظریه سلول (لنارد-جونز-دونشر) و نظریه ساختارهای بامعنی، معرفی و بیان اهمیت تابع توزیع شعاعی (تابع همبستگی جفت، $g(r)$)، ارتباط توابع ترمودینامیکی.

ت) راهبردهای تدریس و یادگیری متناسب با محتوا و هدف:

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

فعالیت‌های کلاسی در طول نیم سال ۵۰ درصد

آزمون پایان نیم سال ۵۰ درصد

ج) ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

- 1) Donald A. McQuarrie, *Statistical Mechanics*, Harper's chemistry series, New York, 1976.
- 2) Terrell L. Hill, *An Introduction to Statistical Thermodynamics*, Dover, New York, 1986.
- ۳) غلامعباس پارسا، ترمودینامیک آماری: مبانی و کاربرد ها، ویرایش دوم، چاپ چهارم، انتشارات دانشگاه صنعتی اصفهان، ۱۳۹۸.

عنوان درس به فارسی: خوردگی پیشرفته		عنوان درس به انگلیسی: Advanced Corrosion	
نوع درس و واحد		الکتروشیمی پیشرفته (با توافق استاد)	
<input type="checkbox"/> پایه	<input checked="" type="checkbox"/> نظری	دروس پیش نیاز:	
<input type="checkbox"/> تخصصی	<input type="checkbox"/> عملی	دروس هم نیاز:	
<input checked="" type="checkbox"/> اختیاری	<input type="checkbox"/> نظری-عملی	۲	تعداد واحد:
رساله / پایان نامه <input type="checkbox"/>		۳۲	تعداد ساعت:

نوع آموزش تکمیلی عملی (در صورت نیاز): سفر علمی آزمایشگاه سمینار کارگاه موارد دیگر:

هدف کلی: یادگیری مفاهیم بنیادی و پیشرفته خوردگی

اهداف ویژه: تئوری و مکانیسم خوردگی و بازدارندگی، حفاظت فلزات، خوردگی های زیستی و غیر زیستی، و ...

(پ) مباحث یا سرفصل ها:

- مقدمه ای بر خوردگی و اهمیت آن. فرایندهای آندی و کاتدی خوردگی. هیدروژن و خسارات (تُر دی) هیدروژنی. تک بلور، چندبلور و مرز دانه. روش های اندازه گیری سرعت خوردگی (کاهش جرم، پلازیماسیون پتانسیوپویش، امپدانس و ...).
- رابطه ی تافل و استخراج آن. رابطه ی استرن-گری و استخراج آن. خوردگی و ارتباط آن با الکتروشیمی. تعیین نظری جریان و پتانسیل خوردگی.
- نظریه ی بازدارندگی خوردگی. بازدارنده ها. اثر تزاید. روئین کننده ها. لایه ی رویین و خوردگی حفره ای. مکانیسم خوردگی حفره ای و بازدارندگی آن. اثر یون کلرید. پلازیماسیون آندی چرخه ای. اثر سرعت جاروب پتانسیل.
- حفاظت آندی و کاتدی. نمودار اوانس و ارتباط آن با تافل. جمع کننده ی اکسیژن. خوردگی و نظریه ی امپدانس الکتروشیمیایی. رابطه ی نفوذی و اربورگ (استخراج رابطه برای لایه ی نفوذی محدود و نامحدود).
- خوردگی میکروبی (متاثر از فعل و انفعالات ریزموجودات). پدیده ی تنفس و خوردگی. اثرات بازدارندگی و خوردگی ناشی از ریزموجودات. روش های الکتروشیمیایی مطالعات این سیستم ها.

(ت) راهبردهای تدریس و یادگیری متناسب با محتوا و هدف:

(ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

- فعالیت های کلاسی در طول نیم سال ۴۰ درصد
- آزمون پایان نیم سال ۶۰ درصد

(ج) ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

(چ) فهرست منابع پیشنهادی:

- 1) P. Marcus, *Corrosion Mechanism in Theory and Practice*, CRC Press (2012).
- 2) N. Perez, *Electrochemistry and Corrosion Science*, Springer (2016)
- 3) E. McCafferty, *Surface Chemistry of Aqueous Corrosion Processes*, Springer (2015).
- 4) B. J. Little, J. S. Lee, *Microbiologically Induced Corrosion*, Wiley (2007).
- 5) J.O'M. Bockris, Amulya K.N. Reddy and Maria Gaboa-Aldeco, *Modern Electrochemistry*, Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York, Vol. 2B (2004).

عنوان درس به فارسی: ریاضیات در شیمی فیزیک		عنوان درس به انگلیسی: Mathematics in Physical Chemistry	
نوع درس و واحد	پایه <input type="checkbox"/> نظری <input checked="" type="checkbox"/>	ندارد	دروس پیش نیاز:
	تخصصی <input type="checkbox"/> عملی <input type="checkbox"/>		دروس هم نیاز:
	اختیاری <input checked="" type="checkbox"/> نظری-عملی <input type="checkbox"/>	۲	تعداد واحد:
رساله / پایان نامه <input type="checkbox"/>		۳۲	تعداد ساعت:

نوع آموزش تکمیلی عملی (در صورت نیاز): سفر علمی آزمایشگاه سمینار کارگاه موارد دیگر:

هدف کلی: آشنایی با کاربردهای مفاهیم ریاضی در شیمی فیزیک، یادآوری مفاهیم ریاضی با مثال‌هایی که برگرفته از دروس شیمی است.

اهداف ویژه: تربیت دانشجویان برای استفاده از ابزارها و مفاهیمی که کاربرد ریاضیات در درس‌های تخصصی را آسان می‌کند.

پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

۱. مروری بر تابع‌های تک متغیره: تابع، حد، پیوستگی، مشتق، دیفرانسیل، نظریه‌ی مقدار متوسط، انتگرال گیری.
۲. سری‌های نامحدود: دنباله نامحدود، همگرایی و واگرایی سری‌های نامحدود، تست همگرایی، سری‌های متناوب، همگرایی یکنواخت، سری توانی، سری تیلور، کاربرد سری تیلور، بسط مجانبی.
۳. توابع تعریف شده به عنوان انتگرال: تابع گاما، تابع خطا، انتگرال نمایی، انتگرال بیضوی، تابع دلتای دیراک.
۴. اعداد و توابع مختلط: اعداد مختلط و صفحه‌ی مختلط، تابع متغیرهای مختلط، فرمول اویلر و شکل قطبی اعداد مختلط، توابع تریگونومتریک و هایپربولیک، لگاریتم اعداد مختلط، توان‌های اعداد مختلط.
۵. بردارها: بردارها در دو و سه بعد، جمع، تفریق و ضرب بردارها، ضرب سه تایی بردارها، فضای معکوس، گرادیان، کرل، دیورژانس، لاپلاسیان، انتگرال‌های خطی، مختصات خطی-منحنی، توابع برداری در دو و سه بعد، میدان‌های برداری، انتگرال‌های سطحی، فضای برداری، دترمینان، خواص دترمینان، ماتریس، جبر ماتریسی، مساله‌ی ویژه مقدراری، تغییر پایه‌ها.
۶. معادله‌های دیفرانسیل معمولی: معادله‌های دیفرانسیل مرتبه‌ی یک، معادله‌های دیفرانسیل مرتبه‌ی دو، حل سری معادله‌های دیفرانسیل (نوسانگر هماهنگ و نوسانگر هماهنگ میرا)، اپراتورهای دیفرانسیلی (نوسانگر هماهنگ، معادله‌های ناهمگون، ارتعاش‌های جبری)، توابع خاص (چند جمله‌ای‌های هرمیت، توابع وابسته لژاندر، توابع وابسته لاگر، توابع بسل).
۷. معادله‌های دیفرانسیل با مشتق‌های جزئی: مثال برای این نوع معادله، جداسازی متغیرها، شرایط مرزی، شرایط اولیه، معادله گرما.
۸. تبدیل‌های انتگرالی: تبدیل فوریه، کانولوشن، تبدیل لاپلاس، تبدیل مشتق، حل معادله دیفرانسیل با تبدیل‌های انتگرالی، تابع گرین.
۹. آمار و احتمال: جایگشت، ترکیب، احتمال، تقریب استرلینگ، ضریب نامعین لاگرانژ، تمیز پذیری و تمیز ناپذیری، توابع توزیع.

ت) راهبردهای تدریس و یادگیری متناسب با محتوا و هدف:

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

فعالیت‌های کلاسی در طول نیم‌سال	۳۰ درصد
آزمون نیم سال و پایان نیم‌سال	(هر کدام) ۳۵ درصد

ج) ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

1. Mathematical methods for scientists and engineers, Donald A. McQuarrie, University Science Books, 2003.
2. Mathematics for chemistry and physics, G. Turrell, 1st edition, Academic press, New York, 2001.

شیمی آلی پیشرفته		عنوان درس به فارسی:
Advanced Organic Chemistry		عنوان درس به انگلیسی:
نظری <input checked="" type="checkbox"/>	پایه <input type="checkbox"/>	ندارد
عملی <input type="checkbox"/>	تخصصی <input type="checkbox"/>	ندارد
نظری-عملی <input type="checkbox"/>	اختیاری <input checked="" type="checkbox"/>	۲
رساله / پایان نامه <input type="checkbox"/>		۳۲
		تعداد واحد:
		تعداد ساعت:

نوع آموزش تکمیلی عملی (در صورت نیاز): سفر علمی آزمایشگاه سمینار کارگاه موارد دیگر:

اهداف کلی: آشنایی با مفاهیم پایه شیمی آلی

اهداف ویژه:

پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

۱- استرئوشیمی: شامل روابط آنانتیومری، دیاسترومیری و پروکایرال، تعیین کانفیگوراسیون مواد کایرال، استروشیمی واکنشهای ترکیبات کایرال
 ۲- واکنش های جانشینی نوکلئوفیلی: بررسی دقیق مکانیسمهای مرزی در واکنشهای جانشینی نوکلوفیلی، بررسی اثرات حلال و ترک کننده و نوکلوفیل در واکنشهای جانشینی نوکلوفیلی، استروشیمی واکنشهای جانشینی نوکلوفیلی، اثرات همسایه در واکنشهای جانشینی نوکلوفیلی، کربوکاتیونها و بررسی نوآرایی

۳- کنفورماسیون و اثرات کنفورمیری: بررسی کنفورماسیون ترکیبات خطی و حلقوی، بررسی اثرات هترو اتم در پایداری کنفورمرها، بررسی قواعد بالد-وین در حلقه زایی، بررسی اثرات استروالکترونیک در واکنش پذیری

ت) راهبردهای تدریس و یادگیری متناسب با محتوا و هدف:

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

فعالیت‌های کلاسی در طول نیم‌سال ... درصد
 آزمون پایان نیم‌سال ... درصد

ج) ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

- 1) "Advanced Organic Chemistry", Frances, A. Carey (Latest Edition).
- 2) "Advanced Organic Chemistry", J. March (Latest Edition).

عنوان درس به فارسی: شیمی تجزیه پیشرفته		عنوان درس به انگلیسی: Advanced Analytical Chemistry	
نوع درس و واحد		ندارد	
<input checked="" type="checkbox"/> نظری	<input type="checkbox"/> پایه	دروس پیش نیاز:	
<input type="checkbox"/> عملی	<input type="checkbox"/> تخصصی	دروس هم نیاز:	
<input type="checkbox"/> نظری-عملی	<input checked="" type="checkbox"/> اختیاری	۲	تعداد واحد:
رساله / پایان نامه	<input type="checkbox"/>	۳۲	تعداد ساعت:

نوع آموزش تکمیلی عملی (در صورت نیاز): سفر علمی آزمایشگاه سمینار کارگاه موارد دیگر:

هدف کلی:

اهداف ویژه: آشنایی با اصول و مفاهیم شیمی تجزیه

پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

۱. خطا در اندازه گیریهای تجزیه‌ای
۲. توزیع پدیده های رندوم و خطای رندوم
۳. کالیبراسیون خطی و روش های به دست آوردن بهترین خط کالیبراسیون
۴. انتشار خطا
۵. شبیه سازی فرایندهای مختلف شیمیایی با نرم افزار اکسل
۶. مزاحمت، اثر ماتریس و روش افزایش استاندارد
۷. کالیبراسیون غیر خطی
۸. آنالیز مخلوط‌های دوتایی
۹. تعادلهای اسید و باز و تعیین ثابت اسیدی
۱۰. تعادلهای میکروسکوپی در سیستمهای اسید و باز
۱۱. شبیه سازی تیتراسیونهای اسید و باز
۱۲. تعادلهای تشکیل کمپلکس

ت) راهبردهای تدریس و یادگیری متناسب با محتوا و هدف:

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

فعالیت‌های کلاسی در طول نیم‌سال ... درصد
آزمون پایان نیم‌سال ... درصد

ج) ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

1. Gray D. Christian, Analytical Chemistry, Last Edition.
2. Daniel C. Harris, Quantitative Chemical Analysis, W. H. Freeman, 2010.
3. Brian M. Tissue, Basics of Analytical Chemistry and Chemical equilibria, John Wiley & Sons.
4. J. N. Miller, J. C. Miller, Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry, Pearson, Last Edition.
5. P. C. Meier, R. E. Zund, Statistical Methods in Analytical Chemistry, John Wiley & Sons, 2000.

عنوان درس به فارسی: شیمی کوانتومی ۲		عنوان درس به انگلیسی: Quantum Chemistry II	
نوع درس و واحد	شیمی کوانتومی ۱	پایه <input type="checkbox"/>	نظری <input checked="" type="checkbox"/>
تخصصی <input type="checkbox"/>		عملی <input type="checkbox"/>	
اختیاری <input checked="" type="checkbox"/>		نظری-عملی <input type="checkbox"/>	
رساله / پایان نامه <input type="checkbox"/>		تعداد واحد: ۲	
		تعداد ساعت: ۳۲	

نوع آموزش تکمیلی عملی (در صورت نیاز): سفر علمی آزمایشگاه سمینار کارگاه موارد دیگر:

هدف کلی: آشنایی با کاربرد مفاهیم مکانیک کوانتومی در سامانه های شیمیایی

اهداف ویژه:

پ) مباحث یا سرفصل ها:

- اصول تجربی نظریه ی کوانتوم: مفاهیم کلاسیک اندازه حرکت زاویه ای، اندازه حرکت خطی و انرژی، سطوح انرژی و فوتون ها، آزمایش های برای بررسی اثر الکترون، طیف اتمی، کوانتش، اندازه حرکت زاویه ای، اندازه حرکت فوتون، دو گانگی موج ذره
- فضای برداری و تبدیلات خطی: فضای برداری، استقلال خطی، پایه ها، افزایش ابعاد، فضای حاصل ضرب درونی، ارتونرمالیتی و مجموعه های کامل، فضای هیلبرت، فضای تابعی و سری فوریه تعمیم یافته، تناظر یک به یک بین فضای تابعی و فضای هیلبرت، مثال هایی از مجموعه ی کامل توابع، منیم کردن توابع با اعمال قید، اپراتور های خطی، جبر اپراتورهای خطی، اپراتور های خطی با ویژگی خاص، ویژه توابع و ویژه بردارها،
- مختصری در مورد ماتریس ها و دترمینان ها
- اصول موضوعه مکانیک کوانتومی
- روش های تقریبی: اصل وردش، صحت محاسبات، مثال اتم هیدروژن، مثال اتم هلیم، روش وردش خطی، مثال اتم هیدروژن، نظریه ی اختلال رایلی شرویدنگر، مثال اثر استارک، مقایسه ی روش های وردش و اختلال،
- اسپین-الکترون و اصل طرد پاولی: اسپین الکترون، اسپین و اتم هیدروژن، اصل پاولی، اتم هلیم، اصل طرد پاولی، دترمینان های سلیتر، بررسی اختلالی حالت پایه ی اتم لیتیم، بررسی وردشی حالت پایه ی لیتیم، ممان مغناطیسی اسپین، عملگر های پلکانی برای اسپین الکترون،
- اتم های چند الکترونی: روش میدان خود سازگار هارتری فاک، هم بستگی الکترونی، افزودن اندازه حرکت های زاویه ای، اندازه حرکت های زاویه ای در اتم های چند الکترونی، برهم کنش اسپین-اربیتر، هامیلتونیان اتمی، قواعد سلیتر کوندون، حل اتم هلیم با روش هارتری فاک
- تابع موج بسیار الکترونی و اپراتورها: تقریب بورن اینهایمر، اسپین-اربیتر، اپراتور ها و عناصر ماتریسی، کوانتیزه شدن نوع دوم، پیکربندی های اسپین سازش یافته
- تقریب هارتری فاک برای مولکول ها: معادلات هارتری فاک، اپراتور مبادله و کولمب، اپراتور فاک، به دست آوردن معادله ی هارتری فاک، حل معادله ی هارتری فاک، تفسیر نتایج به دست آمده از معادله ی هارتری فاک، معادله ی روتان، HeH^+ متعامد سازی پایه ها

ت) راهبردهای تدریس و یادگیری متناسب با محتوا و هدف:

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

فعالیت های کلاسی در طول نیم سال	۳۰ درصد
آزمون نیم سال	۳۵ درصد
آزمون پایان نیم سال	۳۵ درصد

ج) ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

1. Basic Principles and Techniques of Molecular Quantum Mechanics by *Ralph E. Christoffersen*
2. Modern Quantum Chemistry - Introduction to advanced electronic structure theory” by *A. Szabo and N. S. Ostlund* (Dover Publications; Reprint Edition (July 2, 1996)).
3. Quantum Chemistry by *I. N. Levine* (7th Edition).
4. Quantum Chemistry by *Mc Quarrie*. (University Science Books; 2nd edition (August 15, 2007))
5. Molecular Electronic-Structure Theory, *Poul Jorgensen , Jeppe Olsen* 1st Edition
6. Molecular Quantum Mechanic by *Atkins* (Oxford University Press; 5th edition (December 30, 2010)

شیمی معدنی پیشرفته		عنوان درس به فارسی:	
Advanced Inorganic Chemistry		عنوان درس به انگلیسی:	
نوع درس و واحد		ندارد	
نظری <input checked="" type="checkbox"/>	پایه <input type="checkbox"/>	دروس پیش نیاز:	
عملی <input type="checkbox"/>	تخصصی <input type="checkbox"/>	دروس هم نیاز:	
نظری-عملی <input type="checkbox"/>	اختیاری <input checked="" type="checkbox"/>	۲	تعداد واحد:
رساله / پایان نامه <input type="checkbox"/>		۳۲	تعداد ساعت:

نوع آموزش تکمیلی عملی (در صورت نیاز): سفر علمی آزمایشگاه سمینار کارگاه موارد دیگر:

هدف کلی: تسلط به کاربرد شیمیایی نظریه گروه و مباحث کلی مطروحه در شیمی معدنی

اهداف ویژه: تسلط به کاربرد شیمیایی نظریه گروه

پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

تعاریف و قضایای نظریه گروه (گروه، زیر گروه، جدول ضرب گروه، طبقه)، تقارن (معرفی عناصر تقارن و اعمال مربوط به آنها، حاصل ضرب اعمال تقارن، گروه‌های نقطه ای تقارن، تعیین گروه نقطه‌ای مولکول‌ها، ممان دوقطبی، فعالیت نوری، کاربرد نظریه گروه در شیمی -ماتریس‌ها، بردارها و نمادها (representations)، اعمال ماتریس، بردارها و حاصل ضرب عددی آنها، نمادهای ماتریسی و گروه‌های تقارن، نمادهای گروه‌ها، متعامد بودن نمادها، کاهش نمادهای کاهش پذیر، جدول‌های ماهیت (character Tables).

نظریه میدان بلور و شیمی فلزات واسطه، الگوی شکافتگی اوربیتال‌های d در میدان‌های دارای تقارن مختلف، انرژی پایداری میدان بلور، حالت‌های انرژی اتمی و علایم جمله‌های طیفی، جمله‌های طیفی الکترون‌های ناهم‌ارز و الکترون‌های هم‌ارز، علایم جمله‌های طیفی برای آرایش‌های الکترونی مختلف (هم‌ارز)، قواعد هوند، شکافتگی ترازها و جمله‌های طیفی در میدان‌های دارای تقارن مختلف، یک معرفی مختصر از نمودارهای ارتباط، نمودارهای تانابه-سوگانو، قواعد انتخاب در جهش‌های الکترونی (اسپین و تقارن)، جهش‌های انتقال بار

ت) راهبردهای تدریس و یادگیری متناسب با محتوا و هدف:

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

فعالیت‌های کلاسی در طول نیم‌سال ...درصد

آزمون پایان نیم‌سال ...درصد

ج) ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

1. F. A. Cotton and G. Wilkinson, *Basic Inorganic Chemistry*, 3rdedn., Wiley, 1994,
2. F. A. Cotton and G. Wilkinson, *Advanced Inorganic Chemistry*, 6thedn., Wiley-Interscience, 1999.
3. K. F. Purcell, J. C. Kotz, *Inorganic Chemistry*, W. B. Saunders, Philadelphia, 1977.
4. J. E. Huheey, E. A. Keiter, R. L. Keiter, O. K. Medhi, 4thedn., Pearson Education, 2006.
5. F. A. Cotton, *Chemical Application of Group Theory*, 3rdedn., Wiley-Interscience publication, 1990.
6. D. F. Shriver, P. W. Atkins, C. H. Langford, *Inorganic Chemistry*, 5th edn., Oxford University Press, 2010.
7. Gary L. Miessler, Paul J. Fischer, Donald A. Tarr, *Inorganic Chemistry*, 5th edition, Pearson, 2013.

عنوان درس به فارسی:		مباحث نوین در شیمی فیزیک	
عنوان درس به انگلیسی:		New Topics in Physical Chemistry	
دروس پیش نیاز:		با نظر استاد درس	
دروس هم نیاز:			
تعداد واحد:		۲	
تعداد ساعت:		۳۲	
نوع درس و واحد			
<input type="checkbox"/> پایه	<input checked="" type="checkbox"/> نظری		
<input type="checkbox"/> تخصصی	<input type="checkbox"/> عملی		
<input checked="" type="checkbox"/> اختیاری	<input type="checkbox"/> نظری-عملی		
<input type="checkbox"/> رساله / پایان نامه			

نوع آموزش تکمیلی عملی (در صورت نیاز): سفر علمی آزمایشگاه سمینار کارگاه موارد دیگر:

هدف کلی: آشنایی با موضوعات جدید و متنوع در زمینه علم شیمی فیزیک و کاربردهای آن

اهداف ویژه:

پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

آشنایی با موضوعات پژوهشی جدید در شاخه های مختلف شیمی فیزیک، بیان مبانی، مفاهیم و کاربردهای ویژه آنها بر اساس آخرین پیشرفت های بین المللی موجود، تمرکز بر مقالات بین المللی و کتب معتبر مرتبط با موضوعات انتخابی

ت) راهبردهای تدریس و یادگیری متناسب با محتوا و هدف:

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

فعالیت های کلاسی در طول نیم سال ۶۰ درصد

آزمون پایان نیم سال ۴۰ درصد

ج) ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

کتب و مجلات معتبر بین المللی مرتبط با مباحث شیمی فیزیکی بدیع و بین رشته ای مرتبط

عنوان درس به فارسی: موضوعات ویژه (اصول نظریه ی تابعی چگالی)		عنوان درس به انگلیسی: Special Topics (Principles of DFT)	
نوع درس و واحد	پایه <input type="checkbox"/> نظری <input checked="" type="checkbox"/>	شیمی کوانتومی ۱ و ۲	
	تخصصی <input type="checkbox"/> عملی <input type="checkbox"/>	دروس پیش نیاز:	
	اختیاری <input checked="" type="checkbox"/> نظری-عملی <input type="checkbox"/>	دروس هم نیاز:	
رساله / پایان نامه <input type="checkbox"/>		۲	تعداد واحد:
		۳۲	تعداد ساعت:

نوع آموزش تکمیلی عملی (در صورت نیاز): سفر علمی آزمایشگاه سمینار کارگاه موارد دیگر:

هدف کلی: یادگیری و کاربرد نظریه ی تابعی چگالی

اهداف ویژه:

پ) مباحث یا سرفصل ها:

۱. مسئله ی ساختار مواد: تقریب آدیاباتیک، تقریب هسته های کلاسیکی

۲. مسئله ی الکترونی: پوشش: تجزیه و تحلیل گوی-چاپمن، تجزیه و تحلیل دبابی-هوکل، تابع همبستگی جفت، نظریه ی بس ذره ای

۳. مقدمه و کلیاتی درباره مطالعه سیستم های بس ذره ای: نقش الکترون در مواد، مدل های ارایه شده برای توصیف الکترون های یک بلور، تقریب الکترون های مستقل و نظریه نواری، مدل سامرفلد (ژله ای)، مشکلات روش الکترون های مستقل، روش موج تخت اصلاح شده، روش شبه پتانسیل، خواص مرتبط با حالت پایه الکترونی و خواص مرتبط با حالت برانگیخته الکترونی ماده، مغناطش منبعث از برهم کنش الکترون-الکترون، ممان مغناطیسی اتم (قواعد هوند)، مقایسه کلی روش های کلاسیکی و کوانتومی در مطالعه سیستماتیک سیستم های بس ذره ای، معادله شرودینگر سیستم بس ذره ای، معرفی عملگر چگالی، گاز الکترونی و اعمال قضیه هلمن-فاینمن، محاسبه کوانتومی تنش، قضیه تنش، قضیه ویریا، مکانیک آماری و ماتریس چگالی، تقریب الکترون های مستقل، روش هارتری و هارتری-فاک، قضیه کوپمن، چگالی احتمال ساده و مرکب، تابع توزیع جفتی، انرژی پتانسیل سیستم های همبسته و غیر همبسته

۴. گاز الکترونی همگن (مدل ژله ای): هامیلتونی و ماتریس دانسیته مدل ژله ای، انرژی و حفره تبادلی، انرژی تبادلی-همبستگی

۵. مقدمات نظریه تابعیت چگالی: نظریه توماس-فرمی، تقریب چگالی موضعی، استفاده از وردش برای رسیدن به رابطه اصلی توماس-فرمی، نواقص مدل توماس-فرمی، تعمیم نظریه توماس-فرمی به نظریه توماس-فرمی-دیراک

۶. نظریه تابعیت چگالی: اثبات قضایای اول و دوم هوهنبرگ-کوهن، چگالی های N نمایش پذیر و V نمایش پذیر، فرمالیزم لوی و لوب، تعمیم قضایای هوهنبرگ-کوهن، تعمیم نظریه تابعیت چگالی به دمای غیر صفر و در مجموعه کانونیک و گرند کانونیک، رهیافت مرمین، نظریه تابعیت چگالی سیستم کلاسیک، رهیافت کوهن-شم و سیستم مجازی غیر برهمکنشی، جمله تبادلی-همبستگی و تعبیر آن، تابعی های متداول برای بیان تبادلی-همبستگی، روش های دستیابی به خواص حالت پایه، حل معادلات کوهن-شم از طریق قطری کردن هامیلتونی یا به روش کار-پارینلو (دینامیک مولکولی کوانتومی)، کمیته کردن تابعی چند متغیری انرژی

۷. حل مسئله ی الکترونی در عمل: معادلات کوهن-شم، فازهای متراکم: نظریه ی بلاخ، شرایط مرزی دوره ای

ت) راهبردهای تدریس و یادگیری متناسب با محتوا و هدف:

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

فعالیت های کلاسی در طول نیم سال ... درصد
آزمون پایان نیم سال ... درصد

ج) ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

- 1) Richard M. Martin, *Electronic Structure*, Cambridge University Press, 2004.
- 2) Robert G. Parr and Weitao Yang, *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*, Oxford University Press, 1989.
- 3) Jorge Kohanoff, *Electronic Structure Calculations for Solids and Molecules: Theory and Computational Methods*, Cambridge university press, 2006.

عنوان درس به فارسی: موضوعات ویژه (شبیه سازی دینامیک مولکولی)	
نوع درس و واحد	Special Topics (Molecular Dynamics Simulation)
پایه <input type="checkbox"/> نظری <input checked="" type="checkbox"/>	ترمودینامیک آماری ۱
تخصصی <input type="checkbox"/> عملی <input type="checkbox"/>	
اختیاری <input checked="" type="checkbox"/> نظری-عملی <input type="checkbox"/>	۲
رساله / پایان نامه <input type="checkbox"/>	۳۲
	تعداد واحد: ۲
	تعداد ساعت: ۳۲

نوع آموزش تکمیلی عملی (در صورت نیاز): سفر علمی آزمایشگاه سمینار کارگاه موارد دیگر:

هدف کلی: آشنایی با مبانی و مفاهیم و کاربردهای روش شبیه سازی دینامیک مولکولی

اهداف ویژه: تدریس آخرین پیشرفت ها در عرصه شبیه سازی سامانه های پیچیده

پ) مباحث یا سرفصل ها:

۱- مقدمه: تاریخچه، جایگاه مدل سازی و شبیه سازی در مطالعه سامانه ها، ارتباط بین شبیه سازی مولکولی رایانه ای با روش های تجربی و نظری، دیدگاه مکانیک کلاسیکی حل مساله، تعیین خواص ماکروسکوپی با اعمال متوسط گیری های زمانی در مجموعه ها بر اساس مکانیک آماری، اساس شبیه سازی دینامیک مولکولی کلاسیکی و شبیه سازی مونت کارلو، توانمندی ها و محدودیت های روش شبیه سازی دینامیک مولکولی.

۲- اصول شبیه سازی دینامیک مولکولی: انتگرال گیری از معادله های حرکت نیوتن، معرفی الگوریتم های انتگرال گیری (الگوریتم ورله، جهش قورباغه ای و سرعتی ورله)، معرفی پتانسیل های درون مولکولی و بین مولکولی و انتخاب میدان نیرو، بیان مراحل نوعی انجام شبیه سازی دینامیک مولکولی کلاسیکی (ایجاد پیکربندی مکانی و سرعت اولیه ذرات)، (طراحی مدل برهم کنش بین ذرات (پتانسیل پیکربندی یا میدان نیرو))، (اجرای برنامه شبیه سازی و به تعادل رسانی سامانه)، (نمونه برداری، متوسط گیری و محاسبه خواص)، {شرایط مرزی تناوبی، شعاع قطع و قرارداد نزدیک ترین تصویر، اصول بقا، شبیه سازی دینامیک مولکولی کرات سخت و نرم، دینامیک مولکولی در مجموعه های NVE ، NVT ، NPT ، ...، ترموستات و باروستات نوزه-هوور، روش جمع اوالد.

۳- آنالیز نتایج شبیه سازی، محاسبه خواص و کاربردهای شبیه سازی: روش های محاسبه خواص از روی داده های خروجی شبیه سازی، تعیین خواص ساختاری ($g(r)$) و ترمودینامیکی، تعیین رفتار دینامیکی و خواص وابسته به زمان، توابع همبستگی زمانی، نحوه محاسبه ضریب نفوذ، محاسبات مربوط به انرژی آزاد، تحلیل نتایج و ارزیابی خطاها، معرفی مقالات کاربردی شبیه سازی در زمینه های مختلف، آشنایی با برنامه نویسی رایانه ای جهت آنالیز و محاسبه خواص.

۴- آشنایی عملی با برخی نرم افزارهای متداول شبیه سازی دینامیک مولکولی: ساختار کلی نرم افزار، فایل های ورودی و خروجی برنامه شبیه سازی با مثال عملی، آشنایی با نحوه اجرای برنامه ها و ابزارهای کمکی جهت آنالیز و محاسبه خواص، معرفی الگوریتم های مورد استفاده و قابلیت های نرم افزاری.

ت) راهبردهای تدریس و یادگیری متناسب با محتوا و هدف:

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

فعالیت های کلاسی در طول نیم سال ۵۰ درصد

آزمون پایان نیم سال ۵۰ درصد

ج) ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

- 1) M. P. Allen and D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*, Oxford University Press, Oxford, 1987
- 2) Daan Frenkel and Berend Smit, *Understanding Molecular Simulation*, 2nd edition, Academic Press, San Diego, 2002.
- 3) J. M. Haile, *Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods*, Wiley, New York, 1992.
- 4) Andrew R. Leach, *Molecular Modeling: Principles and Applications*, Prentice-Hall, Essex, England, 1996.
- 5) S. Alavi, *Molecular simulations: fundamentals and practice*. John Wiley & Sons, 2020.

عنوان درس به فارسی: موضوعات ویژه (شیمی نظری و محاسباتی پیشرفته: مبانی)		عنوان درس به انگلیسی: Special Topics (Advanced Theoretical and Computational Chemistry: Basics)	
نوع درس و واحد	پایه <input type="checkbox"/> نظری <input checked="" type="checkbox"/>	شیمی کوانتومی ۱ و ترمودینامیک آماری ۱	دروس پیش نیاز:
	تخصصی <input type="checkbox"/> عملی <input type="checkbox"/>		دروس هم نیاز:
	اختیاری <input checked="" type="checkbox"/> نظری-عملی <input type="checkbox"/>		تعداد واحد: ۲
	رساله / پایان نامه <input type="checkbox"/>		تعداد ساعت: ۳۲

نوع آموزش تکمیلی عملی (در صورت نیاز): سفر علمی آزمایشگاه سمینار کارگاه موارد دیگر:

هدف کلی: آشنایی با مبانی موضوعات پژوهشی در شاخه شیمی نظری و محاسباتی پیشرفته

اهداف ویژه:

پ) مباحث یا سرفصل ها:

بخش محاسبات کوانتومی ساختار الکترونی: ۱. اصول نظریه تابعیت چگالی: ایده اولیه برای کاربرد های تعادلی و غیر تعادلی، فرمولاسیون نظریه ی تابعیت چگالی بر پایه ی توابع موج تخت بزرگ مقیاس: موازی سازی و کاربرد. ۲. چگونگی حل معادله ی شرودینگر بسیار ذره ای به طور صحیح در صورتی که مقیاس بندی مناسب با توجه به اندازه ی سیستم انجام شده است (مونت کارلوی کوانتومی). ۳. روش های خوشه ی جفت شده برای مولکول های بزرگ و سیستم های توسعه یافته ۴. الکترون های قویا هم بسته: نظریه ی ساختار نواری نرمال شده و روش های شیمی کوانتومی. ۵. روش های بر پایه ی تجزیه انرژی برای محاسبه ی انرژی کل، ساختار ها و خواص مولکولی سیستم های بزرگ در سطح روش های آغازین. ۶. اسپینترونیک مولکولی ۷. دینامیک مولکولی کوانتومی (بر پایه روش های آغازین) ۸. روش تنگ بست ۹. روش ONIOM برای سیستم های بزرگ. ۱۰. کاربرد شبکه های عصبی در حل معادله ی شرودینگر مبانی و اصول اولیه ۱۱. استخراج الگو از داده های محاسباتی شیمی کوانتومی با کمک شبکه ی عصبی مصنوعی مبانی و اصول اولیه

بخش اصول شبیه سازی دینامیک مولکولی:

۱. مقدمه ای بر مکانیک آماری: اشاره به اصول و مفاهیم پایه مکانیک آماری (احتمال، تابع تقسیم، مجموعه) که روش های شبیه سازی مولکولی بر مبنای آنها استفاده می شوند، تعیین خواص ماکروسکوپی با اعمال متوسط گیری های زمانی در مجموعه های آماری، افت و خیز کمیت های ترمودینامیکی، اساس و جایگاه کلی شبیه سازی دینامیک مولکولی کلاسیکی و شبیه سازی مونت کارلو در بین روشهای محاسباتی، توانمندی ها و محدودیت های روش شبیه سازی دینامیک مولکولی. ۲. اصول شبیه سازی دینامیک مولکولی: به کارگیری مکانیک کلاسیک برای سیستم های بسیار ذره ای: حل آنالیتیکی معادلات حرکت نیوتن برای سامانه های ساده و حل عددی آن به روش اختلاف متناهی برای سامانه های بسیار ذره ای، معرفی الگوریتم های انتگرال گیری از معادله های حرکت نیوتن، مفهوم مسیر تحول سامانه بسیار ذره ای با زمان، معرفی پتانسیل های درون مولکولی و بین مولکولی و انتخاب یا طراحی میدان نیرو، تعیین پارامترهای میدان نیرو به کمک محاسبات کوانتومی، بیان مراحل نوعی انجام شبیه سازی دینامیک مولکولی کلاسیکی، به تعادل رسانی سامانه مورد شبیه سازی، سایر جزئیات مورد استفاده در یک برنامه شبیه سازی دینامیک مولکولی: شرایط مرزی تناوبی، شعاع قطع مربوط به نیروهای کوتاه برد واندروالسی و قرارداد نزدیک ترین تصویر، اصول بقا، شبیه سازی دینامیک مولکولی کرات سخت و نرم، دینامیک مولکولی در مجموعه های آماری مختلف، ترموستات و باروستات نوزه-هورر، روش جمع اولد جهت تعیین نیروهای بلند برد الکترواستاتیک، تعیین میانگین گیری های ترمودینامیکی از روی مسیر تحول دینامیک مولکولی و روش زمان های آغازی چندتایی، استخراج خواص از روی داده های خروجی شبیه سازی

ت) راهبردهای تدریس و یادگیری متناسب با محتوا و هدف:

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

فعالیت های کلاسی در طول نیم سال ... درصد
آزمون پایان نیم سال ... درصد

ج) ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

1. Materials Research by Means of Multiscale Computer Simulation, MRS Bulletin, 2001.
2. A. P. Sutton: Electronic Structure of Materials, Clarendon Press, 1994.
3. D. G. Pettifor: Bonding and Structure of Molecules and Solids, Clarendon Press, 1996.
4. W. A. Harrison: Tight-Binding Methods, Surface Science **300**, 298, 1994.
5. M. E. J. Newman and G. T. Barkema: Monte Carlo Methods in Statistical Physics, Clarendon Press, 1999.
6. M. P. Allen and D. J. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Oxford University Press, Oxford, 1987.
7. Daan Frenkel and Berend Smit, Understanding Molecular Simulation, 2nd edition, Academic Press, San Diego, 2002.
8. J. M. Haile, Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods, Wiley, New York, 1992.
9. Andrew R. Leach, Molecular Modeling: Principles and Applications, Prentice-Hall, Essex, England, 1996.
10. K.T. Schütt , M. Gastegger, A. Tkatchenko, K.-R. Müller & R.J. Maurer, Unifying machine learning and quantum chemistry with a deep neural network for molecular wave- functions, Nature Communications, <https://doi.org/10.1038/s41467-019-12875-2>.
11. S. Alavi, Molecular simulations: fundamentals and practice. John Wiley & Sons, 2020.

عنوان درس به فارسی:		انگلیسی با اهداف دانشگاهی	
عنوان درس به انگلیسی:		English for Academic Purposes	
دروس پیش نیاز:	-	نوع درس و واحد	
دروس هم نیاز:	-	پایه <input type="checkbox"/> نظری <input checked="" type="checkbox"/>	
تعداد واحد:	۲	تخصصی <input type="checkbox"/> عملی <input type="checkbox"/>	
تعداد ساعت:	۳۲	اختیاری <input checked="" type="checkbox"/> نظری-عملی <input type="checkbox"/>	
		رساله / پایان نامه <input type="checkbox"/>	

نوع آموزش تکمیلی عملی (در صورت نیاز): سفر علمی آزمایشگاه سمینار کارگاه موارد دیگر:

هدف کلی: این دوره به گونه ای طراحی شده است که به دانشجویان کمک نماید با مهارت های زبانی لازم برای موفقیت تحصیلی و پیشرفت عالی در محیط های دانشگاهی آشنا گردد.

اهداف ویژه:

دوره زبان انگلیسی با اهداف دانشگاهی یک دوره فشرده، مدرن، حرفه ای و مهارتی است که می تواند به کیفیت مطالعات و تحقیقات دانشجویان، با تسهیل به کارگیری منابع انگلیسی زبان و ارتباطات بین المللی، کمک نماید؛ لذا گذراندن این درس در فصول قبل از آغاز تحقیقات توصیه می شود.

پ) مباحث یا سرفصل ها:

آشنایی با مهارت های پایه خواندن متون علمی

آشنایی با ساختار چکیده مقالات و پایان نامه ها و تمرین نگارش آن

یادگیری چند صد واژه پر کاربرد در متون علمی و چند صد واژه از فهرست کلمات عمومی پر کاربرد

فراگیری اصول رایانامه نگاری و نگارش سه رایانامه مورد نیاز دانشگاهی

اصول کلی و تمرین سخنرانی علمی به زبان انگلیسی (شامل تمرین تلفظ صحیح واژه های تخصصی حوزه تحصیلی پژوهشی دانشجوی)

نگارش شرح حال علمی

ت) راهبردهای تدریس و یادگیری متناسب با محتوا و هدف: ارائه مطلب، گفتگو، تمرین مکتوب و شفاهی

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

ج) ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

یک بسته کمک آموزشی برای این کتاب تهیه شده است که حاوی فیلم های آموزشی، فلش کارت، چند نمونه شرح حال و سوابق تحصیلی می باشد.

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

کتاب انگلیسی با اهداف دانشگاهی، که این کتاب توسط گروه آموزشی زبان های خارجی دانشگاه جهت تدریس به دانشجویان مقطع کارشناسی ارشد تدوین و تالیف شده است.