



جمهوری اسلامی ایران

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری

شورای گسترش و برنامه ریزی آموزش عالی



برنامه درسی رشته

شیمی

Chemistry

مقطع دکتری تخصصی



کرلش

شیمی فیزیک

Physical Chemistry

گروه علوم پایه

پیشنهادی دانشگاه خوارزمی



بیت

نام رشته: شیمی	عنوان گرایش: شیمی فیزیک
گروه: علوم پایه	دوره تحصیلی: دکتری تخصصی
کار گروه تخصصی: شیمی	نوع مصوبه: بازنگری
پیشنهادی: دانشگاه خوارزمی	تاریخ تصویب: ۱۴۰۱/۰۳/۰۱

برنامه درسی دوره دکتری تخصصی رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک، در جلسه شماره ۱۶۵ تاریخ ۱۴۰۱/۰۳/۰۱ کمیسیون برنامه ریزی آموزشی به شرح زیر تصویب شد:

**ماده یک-** این برنامه درسی برای دانشجویانی که پس از تصویب این برنامه درسی در دانشگاهها و موسسات آموزش عالی پذیرفته می‌شوند، قابل اجرا است.

**ماده دو -** این برنامه درسی، بر اساس برنامه درسی رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک مصوب جلسه ۲۴۱ تاریخ ۱۳۷۱/۰۴/۱۴ شورای عالی برنامه ریزی بازنگری شده است.

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

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

دکتر قاسم عموعابدینی  
رئیس کمیسیون برنامه ریزی آموزشی





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



برنامه درسی رشته

شیمی

CHEMISTRY

مقطع دکتری

مشمول بر گرایش های:

۱. شیمی فیزیک | Physical Chemistry

تهیه کنندگان:

عضو هیات علمی دانشگاه خوارزمی  
عضو هیات علمی دانشگاه خوارزمی  
عضو هیات علمی دانشگاه خوارزمی  
عضو هیات علمی دانشگاه حکیم سبزواری

دکتر غلامرضا اسلامپور  
دکتر علیرضا حریفی مود  
دکتر مهرداد قائمی  
دکتر حامد اکبرزاده



## جدول تغییرات\*

ردیف	در برنامه قبلی	در برنامه بازنگری شده
۱.	شیمی کوانتومی ۳	شیمی کوانتومی پیشرفته
۲.	طیف سنجی مولکولی ۲	طیف سنجی مولکولی پیشرفته
۳.	ترمودینامیک آماری ۲	ترمودینامیک آماری پیشرفته ۱
۴.	ترمودینامیک فرایندهای برگشت ناپذیر	ترمودینامیک آماری پیشرفته ۲
۵.	مباحث نوین در شیمی فیزیک	مباحث نوین در شیمی فیزیک
۶.	سمینار	سمینار
۷.	-	سینتیک شیمیایی واکنشها در محلول
۸.	-	سینتیک شیمیایی واکنش های کاتالیزوری
۹.	-	ترمودینامیک محلول ها
۱۰.	-	شیمی فیزیک سطح و فصل مشترک های فازی
۱۱.	-	روش های محاسباتی و شبیه سازی در شیمی
۱۲.	-	شیمی حلالها

\* لازم به ذکر است جدول شامل بر مقایسه عناوین و سرفصل های پیشنهادی با برنامه و سرفصل مصوب دوپست و چهل و

یکمین جلسه (مورخ ۱۳۷۱/۴/۱۴) شورای عالی برنامه ریزی آموزشی وزارت فرهنگ و آموزش عالی است.

## فصل اول

# مشخصات کلی برنامه درسی

در میان رشته گرایش‌های شیمی و علوم پایه، شیمی فیزیک یکی از رشته‌های شناخته شده با موضوعات بنیادی و اساسی در مفاهیم شیمی می‌باشد. ارتباط تنگاتنگ آن با دانش فیزیک و ریاضی پل واصل بین علوم پایه می‌باشد. ضرورت بازننگری در برنامه دوره دکتری شیمی به دلیل سرعت روزافزون در پیشرفتهای علمی انکارناپذیر است. به نظر می‌رسد که برنامه های آموزشی دوره‌های مختلف رشته شیمی به بازننگری اساسی در هر چندسال یکبار نیاز دارد. لازم است دانشجویان این رشته با توانمندیهای روز این دانش و کاربرد آن در عرصه جامعه و صنعت بیشتر آشنا شوند. معمولا در همه بخش‌های صنعتی از مراحل طراحی تا تولید حضور دانش شیمی فیزیک به چشم می‌خورد. در سالهای بسیار طولانی به این رشته تنها با نگاه مفاهیم تئوری، ریاضی و کاربرد آن در سطح آزمایشگاهی نگریسته می‌شد، غافل از اینکه نه تنها فیزیک و ریاضی شاخه‌های مرتبط با این دانش هستند بلکه علوم مهندسی از طراحی فرایند گرفته تا سینتیک، ترمودینامیک و فرایندهای انتقال مدیون این رشته با موضوعات گسترده است. بر اساس آئین نامه واگذاری اختیارات برنامه ریزی و تجدیدنظر در دوره‌های آموزشی مصوب شورای عالی برنامه ریزی، تدوین برنامه آموزشی به منظور تفکیک رشته‌های تخصصی در دستور قرار گرفته و بر این اساس برنامه حاضر دوره دکتری رشته شیمی فیزیک با رویکرد فوق‌الذکر و مشخصات زیر ارائه می‌دهد.

### ب) مشخصات کلی، تعریف و اهداف

دوره دکتری شیمی فیزیک بالاترین مقطع تحصیلی دانشگاهی در این رشته می‌باشد که به اعطای درجه دکترای شیمی فیزیک منتهی می‌شود و شامل مجموعه‌ای هماهنگ از فعالیتهای آموزشی و پژوهشی است. در این دوره ابداع، نوآوری و گسترش دانش شیمی از اهمیت خاصی برخوردار بوده و رسالت ویژه دانشجویان را تشکیل می‌دهد.

هدف از دوره تربیت نیروی انسانی متخصص و کارآمد در رشته مربوطه است.

### پ) ضرورت و اهمیت

ضرورت و اهمیت این دوره در تربیت پژوهشگر متفکر، خلاق و مستقل برای کار در دانشگاهها و موسسات پژوهشی و صنایع کشور می‌باشد.

### ت) تعداد و نوع واحدهای درسی

طول دوره دکتری شیمی فیزیک هشت نیمسال تحصیلی بوده که در موارد خاص مطابق با آیین نامه دوره دکتری تخصصی و شیوه‌نامه دانشگاه قابل افزایش است. این دوره شامل دو بخش آموزشی و پژوهشی است که دانشجو با گذراندن بخش

آموزشی و تعیین استاد راهنما وارد بخش پژوهشی می‌گردد. دوره آموزشی و پژوهشی مجموعاً شامل ۳۶ واحد درسی به شرح جدول (۱) است.



## جدول (۱) - توزیع واحدها

تعداد واحد	نوع دروس
۱۲	دروس تخصصی
۱	سمینار
۲۳	رساله
۳۶	جمع

بخش‌های مختلف مندرج در جدول (۱) عبارتند از:

۱- دروس نظری دوره دکتری شیمی فیزیک حداقل ۱۲ واحد از بین واحدهای درسی جدول پیوست ترجیحا در دو نیمسال خواهد بود.

۲- سمینار بر پایه جمع آوری مقاله‌های پژوهشی و مروری در یکی از موضوعات علمی روز است به نحوی که قدرت تجزیه و تحلیل، گردآوری و تدوین یک مطلب علمی را در دانشجو بارور نماید.

۳- رساله:

الف- موضوع رساله باید به نحوی انتخاب شود که به گسترش مرزهای دانش در رشته مربوطه کمک نماید.

ب- شرط کفایت دفاع از رساله کسب حداقل شروط لازم از انتشار دستاوردهای پژوهشی بر اساس موضوع تحقیقاتی رساله و مطابق با مصوبات شوراهای بالادستی است.

### ث) مهارت، توانمندی و شایستگی دانش‌آموختگان

با توجه به گستردگی و اهمیت دانش شیمی فیزیک در دنیا و توسعه سریع آن همگام با فن آوری های روز و فعال بودن مراکز تحقیقاتی و دانشگاهی متعدد در زمینه علوم پایه در اکثر کشورهای توسعه یافته و در حال توسعه، در این دوره تحصیلی تخصصی تلاش می‌شود تا دانشجو با گذراندن دروس بنیادی و کاربردی در کنار هم با اصول پیشرفته این گرایش آشنا و در بخش پژوهش و تحقیق با حداقل یکی از این موضوعات به طور تخصصی و در قالب رساله دکتری آشنا و ورزیده گردد. همچنین آموزشهای لازم برای نحوه انجام پژوهش در یک موضوع را می‌آموزد. در واقع، دانشجو در این مرحله از تحصیل با کسب دانش پیشرفته در یک زمینه علم شیمی فیزیک توانایی لازم برای حل مسائل و مشکلات کلیه صنایع شیمیایی و بخش‌های مرتبط با مهندسی شیمی و فرایند را به دست آورده یا از نظر علمی خواهد توانست به عنوان یک عضو هیات علمی در عرصه آموزش و پژوهش دانشگاهها و مراکز پژوهشی فعالیت داشته باشد.

مهارت‌ها، شایستگی‌ها و توانمندی‌های ویژه	دروس مرتبط
تامین هیئت علمی دانشگاهها	کلیه دروس
تربیت افرادی که دارای تفکری خلاق و مستقل باشند و به روشهای پیشرفته پژوهشی احاطه داشته باشند.	کلیه دروس و رساله
توانایی درک مشکلات علمی جامعه و حل آنها	کلیه دروس و رساله
مهارت‌ها، شایستگی‌ها و توانمندی‌های عمومی	دروس مرتبط
مهارت برقراری ارتباط با سایر رشته‌های علوم پایه	شیمی کوانتومی پیشرفته، مکانیک آماری ۱ و ۲
طراحی فرایند و طراحی راکتور در علوم مهندسی	سینتیک شیمیایی واکنش‌ها در محلول، سینتیک شیمیایی واکنش‌های کاتالیزوری، ترمودینامیک محلول‌ها
رفع نیازهای صنایع شیمیایی مواد شوینده، پتروشیمی، پالایش نفت	شیمی فیزیک سطح و فصل مشترک‌های فازی، سینتیک شیمیایی واکنش‌های کاتالیزوری
طراحی فرایندهای صنعتی	روشهای محاسباتی و شبیه‌سازی در شیمی، سینتیک شیمیایی واکنش‌ها در محلول، سینتیک شیمیایی واکنش‌های کاتالیزوری، ترمودینامیک محلول‌ها، شیمی فیزیک سطح و فصل مشترک‌های فازی

### ج) شرایط و ضوابط ورود به دوره

داوطلبان پذیرش در دوره دکتری شیمی فیزیک باید شرایط مندرج در زیر را دارا بوده یا کسب نمایند:

۱- دانش آموخته مقطع کارشناسی ارشد رشته‌های علوم و مهندسی

۲- پذیرفته شدن در آزمون ورودی

آزمون ورودی دوره دکتری شیمی فیزیک در دو مرحله کتبی و مصاحبه برگزار می‌شود:

الف- آزمون کتبی: این آزمون به منظور سنجش معلومات دانشجوی و از طریق آزمون دکتری که هر ساله توسط سازمان سنجش آموزش کشور برگزار می‌شود؛ صورت می‌گیرد.





## دکتری شیمی / ۷


ب- مصاحبه: داوطلبان ورود به دوره دکتری در جلسه مصاحبه علمی شرکت می نمایند. در این جلسه توانایی و تسلط دانشجو بر کارهای پژوهشی سنجیده می شود.

**تبصره ۱:** دانشجویانی که رشته مقطع قبلی آنان با این رشته غیر مرتبط می باشد بایستی تا ۶ واحد را به عنوان دروس جبرانی از میان دروس دوره قبل این رشته را در نیمسال اول بگذرانند. انتخاب این دروس به تشخیص گروه آموزشی دانشگاه / موسسه می باشد و بایستی شامل دروسی باشد که دانش پایه و اصلی این رشته را در بر بگیرد. تعداد واحدهای جبرانی نیز به تشخیص گروه آموزشی دانشگاه / موسسه و بر مبنای میزان ارتباط رشته با رشته دوره قبلی دانشجو می باشد.

**تبصره ۲:** دانشجو می تواند ۳ واحد از واحدهای سایر دروس دکتری رشته علوم و مهندسی با رعایت این شرط انتخاب نماید که درس انتخابی به تشخیص و تایید استاد راهنما برای انجام پایان نامه ضرورت داشته باشد.



فصل دوم

## جدول عناوین و مشخصات دروس



جدول (۲) - عنوان و مشخصات کلی دروس تخصصی دکتری شیمی فیزیک

ردیف	عنوان درس	تعداد واحد	نوع واحد			تعداد ساعات		پیش نیاز	هم نیاز
			نظری	عملی	نظری - عملی	نظری	عملی		
۱.	شیمی کوانتومی پیشرفته	۳	*			۴۸	-	مکانیک کوانتومی (ارشد)	ندارد
۲.	طیف سنجی مولکولی پیشرفته	۳	*			۴۸	-	شیمی کوانتومی پیشرفته	ندارد
۳.	ترمودینامیک آماری پیشرفته ۱	۳	*			۴۸	-	ندارد	ندارد
۴.	ترمودینامیک آماری پیشرفته ۲	۳	*			۴۸	-	ندارد	ندارد
۵.	سینتیک شیمیایی واکنشها در محلول	۳	*			۴۸	-	ندارد	ندارد
۶.	سینتیک شیمیایی واکنشهای کاتالیزوری	۳	*			۴۸	-	ندارد	ندارد
۷.	ترمودینامیک محلولها	۳	*			۴۸	-	ندارد	ندارد
۸.	شیمی فیزیک سطح و فصل مشترکهای فازی	۳	*			۴۸	-	ندارد	ندارد
۹.	روشهای محاسباتی و شبیه سازی در شیمی	۳			*	۳۲	۳۲	ندارد	ندارد
۱۰.	شیمی حلالها	۳	*			۴۸	-	ندارد	ندارد
۱۱.	مباحث نوین در شیمی فیزیک	۳	*			۴۸	-	ندارد	ندارد
۱۲.	سمینار	۱	*			۱۶	-	ندارد	ندارد

فصل سوم

## ویژگی‌های دروس



عنوان درس به فارسی:		شیمی کوانتومی پیشرفته	
عنوان درس به انگلیسی:		Advanced Quantum Chemistry	
نوع درس و واحد			
نظری <input checked="" type="checkbox"/> / پایه <input type="checkbox"/>		مکانیک کوانتومی	
عملی <input type="checkbox"/> / تخصصی <input checked="" type="checkbox"/>		ندارد	
نظری-عملی <input type="checkbox"/> / اختیاری <input type="checkbox"/>		۳	تعداد واحد:
رساله / پایان نامه <input type="checkbox"/>		۴۸	تعداد ساعت:

اگر واحد عملی دارد، چه نوع آموزش تکمیلی نیاز است؟: سفر علمی  آزمایشگاه  سمینار  کارگاه  موارد دیگر: .....  
**هدف کلی:**

- توسعه دانش شیمی کوانتومی دانشجویان

**اهداف ویژه:**

۱. فراگیری مباحث پیشرفته شیمی کوانتومی
۲. فراگیری مباحث کوانتومی پیشرفته در ساختار الکترونی اتمی و مولکولی

**پ) مباحث یا سرفصل‌ها:**

۱. مروری بر اصول بنیادی مکانیک کوانتومی حالتها و مشاهده پذیرها، اصول موضوع، سازگاری مشاهده پذیرها، نمایشها و تبدیلهای بردارهای حالت و عملگرها، معادله وابسته به زمان، تبدیلهای وابسته به زمان (تصویرهای شرودینگر، هایزنبرگ، و برهمکنش)
۲. روش های تقریبی روش تغییر، نظریه اختلال مستقل از زمان و وابسته به زمان
۳. اسپین الکترون و قضیه آمار-اسپین اصل طرد پاولی
۴. ساختار الکترونی اتم ها روش میدان-خود-سازگار هارتری فاک، قواعد اسلیتر-کوندون، اوربیتال ها و جداول تناوبی، همبستگی الکترونی، افزودن اندازه حرکتها (تکانه های) زاویه های و ضرایب Clebsch-Gordan، اندازه حرکتها (تکانه های) زاویه ای در اتمهای چند الکترونی، جمله های طیفی
۵. ساختار الکترونی مولکولها تقریب بورن-اپنهايمر، یون مولکولی هیدروژن، آرایشهای اوربیتال مولکولی مولکولهای دو اتمی، جمله های طیفی مولکولی دو اتمی، روش هارتری-فاک برای مولکولها
۶. قضیه های مکانیک کوانتومی قضیه ویريال و پیوند شیمایی، قضیه هلمن-فاینمن، قضیه الکترو استاتیک
۷. مقدمه ای بر شیمی محاسباتی روش های *ab initio* هارتری فاک، روش های نیم-تجربی، روش تابعی- دانسته

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

آموزش بر پایه استفاده از متون علمی، شامل کتابهایی که در مراجع ذکر گردیده اند، مقالات تحقیقاتی و مروری چاپ شده جدید در این زمینه در مجلات معتبر بین المللی و اختراعات است.

**ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):**

ارزشیابی به صورت مستمر در طول ترم تحصیلی، میان ترم و پایان ترم انجام می شود. اختصاص نمره برای پروژه به تشخیص استاد خواهد بود.

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

وسایل کمک آموزشی شامل ویدئو پرژکتور

**چ) فهرست منابع پیشنهادی:**

۱. I. N. Levine, *Quantum Chemistry*, ۷<sup>th</sup> ed., Pearson Prentice Hall, ۲۰۱۳.
۲. M. Alonso and H. Valk, *Quantum Mechanics: Principles and Applications*, Addison-Wesley, ۱۹۷۳.
۳. M. Weissbluth, *Atoms and Molecules*, Academic Press, ۱۹۷۸.
۴. F. L. Pilar, *Elementary Quantum Chemistry*, ۲<sup>nd</sup> ed. McGraw-Hill, ۱۹۹۰.
۵. J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, ۱۹۸۵.
۶. F. Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*, Wiley, ۱۹۹۹.



عنوان درس به فارسی: طیف سنجی مولکولی پیشرفته		عنوان درس به انگلیسی: Advanced Molecular Spectroscopy	
نوع درس و واحد	پایه <input type="checkbox"/> نظری <input checked="" type="checkbox"/>	شیمی کوانتومی پیشرفته	دروس پیش نیاز:
	تخصصی <input checked="" type="checkbox"/> عملی <input type="checkbox"/>	ندارد	دروس هم نیاز:
	اختیاری <input type="checkbox"/> نظری-عملی <input type="checkbox"/>	۳	تعداد واحد:
رساله / پایان نامه <input type="checkbox"/>		۴۸	تعداد ساعت:

اگر واحد عملی دارد، چه نوع آموزش تکمیلی نیاز است؟: سفر علمی  آزمایشگاه  سمینار  کارگاه  موارد دیگر: .....

### هدف کلی:

- توسعه دانش تئوری طیف سنجی مولکولی دانشجویان

### اهداف ویژه:

۱. فراگیری مباحث پیشرفته طیف سنجی مولکولی
۲. بهره گیری از دانش شیمی کوانتومی پیشرفته در مباحث طیف سنجی

### پ) مباحث یا سرفصل ها:

۱. برهم کنشهای ماده-تابش محاسبه احتمال های جهش (در فرآیندهای جذب، نشر تهییجی، نشر خودبخود)، سینتیک فرآیندهای جذب و نشر تابش و ضرایب A و B اینشتین، قواعد انتخاب
۲. ارتعاش و چرخش مولکولهای دو اتمی ترازهای انرژی ارتعاشی-چرخشی، قواعد انتخاب برای جهشهای چرخشی و ارتعاشی، طیفهای چرخشی، طیفهای ارتعاشی-چرخشی
۳. طیفهای الکترونی مولکولهای دو اتمی اصل فرانک-کوندون، جفت شدن اندازه حرکتها (تکانه های) زاویه ای، ساختار ظریف چرخشی در طیفهای نواری
۴. چرخش مولکولهای چند اتمی عملگر هامیلتونی چرخشی، طبقه بندی مولکولها از نظر چرخشی، حالتها و ترازهای انرژی چرخشی، قواعد انتخاب برای جهشهای چرخشی محض، طیف ریز موج مولکولهای چند اتمی
۵. ارتعاش مولکولهای چند اتمی شیوه های عادی ارتعاشی، طبقه بندی تقارنی شیوه های عادی، قواعد انتخاب در جهشهای ارتعاشی، ساختار ظریف چرخشی در نوارهای ارتعاشی، ترازهای ارتعاشی چند حالتی و نزدیک به چند حالتی (پدیده رزونانس فرمی)
۶. طیفهای الکترونی مولکولهای چند اتمی جفت شدن وایبرونیک، فرآیندهای آسایشی بدون تابش
۷. مقدمه ای بر فرآیندهای دو-فوتونی جذب دو-فوتونی، طیف سنجی رامان و رزونانس-رامان

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

آموزش بر پایه استفاده از متون علمی، شامل کتابهایی که در مراجع ذکر گردیده اند، مقالات تحقیقاتی و مروری چاپ شده جدید در این زمینه در مجلات معتبر بین المللی و اختراعات است.

### ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

ارزشیابی به صورت مستمر در طول ترم تحصیلی، میان ترم و پایان ترم انجام می شود. اختصاص نمره برای پروژه به تشخیص استاد خواهد بود.

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

وسایل کمک آموزشی شامل ویدئو پرژکتور

### چ) فهرست منابع پیشنهادی:

۱. W. S. Struve, *Fundamentals of Molecular Spectroscopy*, Wiley, ۱۹۸۹.
۲. I. N. Levine *Molecular Spectroscopy*, Wiley, ۱۹۷۵.
۳. J. L. McHale, *Molecular Spectroscopy*, Prentice-Hall, ۱۹۹۹.
۴. J. O. Graybeal, *Molecular Spectroscopy*, McGraw-Hill, ۱۹۸۸.



عنوان درس به فارسی: ترمودینامیک آماری پیشرفته ۱		عنوان درس به انگلیسی: Advanced Statistical Thermodynamics	
نوع درس و واحد	۱		
<input type="checkbox"/> پایه <input checked="" type="checkbox"/> نظری	ندارد	دروس پیش نیاز:	ندارد
<input type="checkbox"/> عملی <input checked="" type="checkbox"/> تخصصی	ندارد	دروس هم نیاز:	ندارد
<input type="checkbox"/> نظری-عملی <input type="checkbox"/> اختیاری	۳	تعداد واحد:	۳
<input type="checkbox"/> رساله / پایان نامه	۴۸	تعداد ساعت:	۴۸

اگر واحد عملی دارد، چه نوع آموزش تکمیلی نیاز است؟: سفر علمی  آزمایشگاه  سمینار  کارگاه  موارد دیگر: .....

### هدف کلی:

- توسعه دانش ترمودینامیک آماری دانشجویان

### اهداف ویژه:

۱. آشنایی و تسلط بر روش های ترمودینامیک آماری برای بررسی سیستمهای دارای برهمکنش

### پ) مباحث یا سرفصل ها:

۱. آمار کوانتومی
۲. بلورها
۳. گازهای حقیقی و معادله ویرال
۴. ضریب دوم ویرال و پتانسیل های بین مولکولی
۵. ضریب سوم ویرال و ضرایب مرتبه بالاتر ویرال
۶. توابع توزیع در مایعات
۷. مدل ایزینگ و روش های میدان میانگین
۸. روش ماتریس انتقال در حل مدل یک بعدی
۹. مدل پاتس

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

آموزش بر پایه استفاده از متون علمی، شامل کتابهایی که در مراجع ذکر گردیده اند، مقالات تحقیقاتی و مروری چاپ شده جدید در این زمینه در مجلات معتبر بین المللی و اختراعات است.

### ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

ارزشیابی به صورت مستمر در طول ترم تحصیلی، میان ترم و پایان ترم انجام می شود. اختصاص نمره برای پروژه به تشخیص استاد خواهد بود.

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

وسایل کمک آموزشی شامل ویدئو پرژکتور

### چ) فهرست منابع پیشنهادی:

۱. D. A. McQuarrie, *Statistical Mechanics*, University Science Books, ۲۰۰۰.
۲. T. L. Hill, *An Introduction to Statistical Thermodynamics*, Dover Publications, ۱۹۸۷
۳. K. Huang, *Statistical Mechanics*, Wiley, ۱۹۸۷.
۴. D. Chandler, *Introduction to Modern Statistical Mechanics*, Oxford University press, ۱۹۸۷
۵. H. B. Callen, *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*, Wiley, ۱۹۹۱.



عنوان درس به فارسی:		ترمودینامیک آماری پیشرفته ۲	
عنوان درس به انگلیسی:		Advanced Statistical Thermodynamics ۲	
دروس پیش نیاز:		ترمودینامیک آماری پیشرفته ۱	
دروس هم نیاز:		ندارد	
تعداد واحد:		۳	
تعداد ساعت:		۴۸	
نوع درس و واحد			
نظری	<input checked="" type="checkbox"/>	پایه	<input type="checkbox"/>
عملی	<input type="checkbox"/>	تخصصی	<input checked="" type="checkbox"/>
نظری-عملی	<input type="checkbox"/>	اختیاری	<input type="checkbox"/>
		رساله / پایان نامه	<input type="checkbox"/>

اگر واحد عملی دارد، چه نوع آموزش تکمیلی نیاز است؟: سفر علمی  آزمایشگاه  سمینار  کارگاه  موارد دیگر: .....

### هدف کلی:

- توسعه دانش ترمودینامیک آماری دانشجویان

### اهداف ویژه:

- آشنایی و تسلط بر روش های ترمودینامیک آماری برای فرایندهای وابسته به زمان

### پ) مباحث یا سرفصل ها:

۱. فضای فاز و معادله لیوویل
۲. معادله بولتزمان
۳. فرایندهای کتره ای
۴. معادله مستر
۵. معادله لانگوین
۶. معادله فوکر-پلانک
۷. نظریه توابع همبستگی زمانی
۸. دینامیک واکنش های شیمیایی

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

آموزش بر پایه استفاده از متون علمی، شامل کتابهایی که در مراجع ذکر گردیده اند، مقالات تحقیقاتی و مروری چاپ شده جدید در این زمینه در مجلات معتبر بین المللی و اختراعات است.

### ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

ارزشیابی به صورت مستمر در طول ترم تحصیلی، میان ترم و پایان ترم انجام می شود. اختصااص نمره برای پروژه به تشخیص استاد خواهد بود.

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

وسایل کمک آموزشی شامل ویدئو پرژکتور

### چ) فهرست منابع پیشنهادی:

۱. N.G. Van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, Elsevier, ۲۰۰۷.
۲. R. L. Liboff, *Kinetic Theory: Classical, Quantum, and Relativistic Descriptions*, Springer New York, ۲۰۱۱.
۳. D. Chandler, *Introduction to Modern Statistical Mechanics*, Oxford University press, ۱۹۸۷.
۴. D. A. McQuarrie, *Statistical Mechanics*, University Science Books, ۲۰۰۰.



عنوان درس به فارسی:		سینتیک شیمیایی واکنش‌ها در محلول	
عنوان درس به انگلیسی:		Chemical Kinetics of Reactions in Solution	
نظری <input checked="" type="checkbox"/>	پایه <input type="checkbox"/>	ندارد	دروس پیش‌نیاز:
عملی <input type="checkbox"/>	تخصصی <input checked="" type="checkbox"/>	ندارد	دروس هم‌نیاز:
نظری-عملی <input type="checkbox"/>	اختیاری <input type="checkbox"/>	۳	تعداد واحد:
	رساله / پایان‌نامه <input type="checkbox"/>	۴۸	تعداد ساعت:

اگر واحد عملی دارد، چه نوع آموزش تکمیلی نیاز است؟: سفر علمی  آزمایشگاه  سمینار  کارگاه  موارد دیگر: .....

### هدف کلی:

- توسعه دانش سینتیک واکنش‌های شیمیایی دانشجویان

### اهداف ویژه:

۱. آشنایی دانشجویان با محیط محلول به عنوان یک فاز تسهیل‌گر در واکنش
۲. شناخت خواص حلال و تاثیر آن بر سینتیک واکنش‌های شیمیایی

### پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

۱. مقدمه‌ای بر اصول سینتیک شیمیایی واکنش‌ها
۲. حلال در واکنش شیمیایی و جایگاه آن
۳. برهمکنش‌های حلال-حل شونده در محیط محلول نظیر یون-دوقطبی، دوقطبی-دوقطبی، دهندگی و گیرندگی پیوند هیدروژنی و الکترون
۴. پارامترهای فیزیکی حلال و نقش آنها بر سینتیک واکنش‌ها، قطبیت تجربی معیاری برای معرفی نقش حلال در سرعت واکنش‌های شیمیایی
۵. خصوصیات فیزیکی حلال مبتنی بر خواص حلال‌رنگی و پارامترهای کملت-تفت
۶. معادله هامت و همبستگی خطی انرژی آزاد
۷. همبستگی خطی انرژی آزاد انتقال بار با پارامترهای قطبیت حلال
۸. آشنایی با روش‌های آماری تحلیل داده‌های سرعت با همبستگی‌های خطی چندپارامتری
۹. حلال‌پوشی ترجیحی در سیستم‌های دوتایی و سه‌تایی حلال و تاثیر بر پدیده‌های فیزیکی و شیمیایی متاثر از حلال
۱۰. روش‌های مطالعه سینتیک واکنش‌های سریع در فاز محلول نظیر جریان متوقف شده و زمان آسایش
۱۱. اثر سینتیکی ایزوتوپی اولیه و ثانویه، اثر ایزوتوپی حلال
۱۲. مروری بر سینتیک برخی از واکنش‌های فاز محلول نظیر واکنش‌های آنزیمی، واکنش‌های الکتروشیمیایی و ...

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

آموزش بر پایه استفاده از متون علمی، شامل کتابهایی که در مراجع ذکر گردیده اند، مقالات تحقیقاتی و مروری چاپ شده جدید در این زمینه در مجلات معتبر بین‌المللی و اختراعات است.

### ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

ارزشیابی به صورت مستمر در طول ترم تحصیلی، میان ترم و پایان ترم انجام می‌شود. اختصاص نمره برای پروژه به تشخیص استاد خواهد بود.

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

وسایل کمک آموزشی شامل ویدئو پرژکتور

### چ) فهرست منابع پیشنهادی:

۱. Jeffrey I. Steinfeld, *Chemical Kinetics and Dynamics*, Pearson; 2nd edition, ۱۹۹۸.
۲. C. Reichardt, T. Welton. *Solvents and Solvent Effects in Organic Chemistry*. John Wiley & Sons, ۲۰۱۱.
۳. Kenneth A. Connors, *Chemical Kinetics: The Study of Reaction Rates in Solution*, Wiley, ۱۹۹۰.
۴. Claude F. Bernasconi, *Relaxation Kinetics*, Academic Press, ۱۹۷۶.

عنوان درس به فارسی:		سینتیک شیمیایی واکنش‌های کاتالیزوری	
عنوان درس به انگلیسی:		Chemical Kinetics of Catalytic Reactions	
دروس پیش‌نیاز:	ندارد	پایه <input type="checkbox"/>	نظری <input checked="" type="checkbox"/>
دروس هم‌نیاز:	ندارد	تخصصی <input checked="" type="checkbox"/>	عملی <input type="checkbox"/>
تعداد واحد:	۳	اختیاری <input type="checkbox"/>	نظری-عملی <input type="checkbox"/>
تعداد ساعت:	۴۸	رساله / پایان‌نامه <input type="checkbox"/>	

اگر واحد عملی دارد، چه نوع آموزش تکمیلی نیاز است؟: سفر علمی  آزمایشگاه  سمینار  کارگاه  موارد دیگر: .....

### هدف کلی:

- توسعه دانش سینتیک واکنش‌های شیمیایی کاتالیزوری دانشجویان

### اهداف ویژه:

- آشنایی دانشجویان با واکنش‌های مختلف شیمیایی کاتالیز شده و سینتیک شیمیایی آنها
- آشنایی دانشجویان با سینتیک واکنش‌های کاتالیزگری همگن و ناهمگن

### پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

- مروری بر مبانی اولیه سینتیک واکنش‌های کاتالیزوری
- واکنش‌های کاتالیزوری با حد واسط آرنیوسی و وانتف هوفی
- سینتیک واکنش‌های کاتالیزوری اسید-باز، سینتیک واکنش‌های کاتالیزوری هسته دوستی و الکترون دوستی
- واکنش‌های کاتالیزوری آنزیمی، سینتیک واکنش‌های آنزیمی تک سابسטרیتی و دو سابسטרیتی
- بازدارندگی در واکنش‌های کاتالیزوری و انواع آنها
- روش کینگ آلمن در سینتیک واکنش‌های آنزیمی
- مروری بر کاربرد صنعتی کاتالیزگرهای همگن در صنایع غذایی، شیمیایی و سایر صنایع
- مبانی واکنش‌های کاتالیزوری ناهمگن
- کاتالیزگرهای و انتقال فاز و سینتیک واکنش‌های کاتالیزوری دوفازی
- جذب سطحی و ایزوترم‌های مختلف فرایند جذب سطحی، سینتیک واکنش‌های انجام شده در سطح کاتالیزورهای جامد
- واکنش‌های فتوکاتالیزوری و فوتوکاتالیست‌های نانو ساختار
- مروری بر کاربرد صنعتی کاتالیزگرهای ناهمگن در صنایع غذایی، پتروشیمی و سایر صنایع

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

آموزش بر پایه استفاده از متون علمی، شامل کتابهایی که در مراجع ذکر گردیده اند، مقالات تحقیقاتی و مروری چاپ شده جدید در این زمینه در مجلات معتبر بین‌المللی و اختراعات است.

### ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

ارزشیابی به صورت مستمر در طول ترم تحصیلی، میان ترم و پایان ترم انجام می‌شود. اختصاص نمره برای پروژه به تشخیص استاد خواهد بود.

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

وسایل کمک آموزشی شامل ویدئو پرژکتور

### چ) فهرست منابع پیشنهادی:

- H. Maskill, *The Physical Basis of Organic Chemistry*, Oxford University Press, ۱۹۸۶.
- H. Bisswanger, *Enzyme Kinetics: Principles and Methods*, Wiley-VCH; ۲rd edition, ۲۰۱۷.
- M. Boudart, *Kinetics of Heterogeneous Catalytic Reactions*, Princeton University Press, ۲۰۱۶.
- C. H. Bartholomew, R. J. Farrauto, *Fundamentals of Industrial Catalytic Processes*, Wiley, ۲۰۱۳.

عنوان درس به فارسی:		ترمودینامیک محلول‌ها	
عنوان درس به انگلیسی:		Thermodynamics of Solutions	
نوع درس و واحد			
پایه <input type="checkbox"/> نظری <input checked="" type="checkbox"/>		ندارد	دروس پیش نیاز:
تخصصی <input checked="" type="checkbox"/> عملی <input type="checkbox"/>		ندارد	دروس هم‌نیاز:
اختیاری <input type="checkbox"/> نظری-عملی <input type="checkbox"/>		۳	تعداد واحد:
رساله / پایان‌نامه <input type="checkbox"/>		۴۸	تعداد ساعت:

اگر واحد عملی دارد، چه نوع آموزش تکمیلی نیاز است؟: سفر علمی  آزمایشگاه  سمینار  کارگاه  موارد دیگر: .....

### هدف کلی:

- توسعه دانش دانشجویان در مباحث ترمودینامیک محلول‌ها

### اهداف ویژه:

۱. آشنایی دانشجویان با ترمودینامیک محلول‌های الکترولیتی و غیر الکترولیتی ایده‌آل و حقیقی به صورت خاص، تخصصی و پیشرفته
۲. آشنایی با روشهای اندازه‌گیری تجربی خواص ترمودینامیکی محلول‌ها

### پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

۱. مروری بر قوانین ترمودینامیک
۲. معادلات گیس و تابع پتانسیل شیمیایی
۳. تعادل در سیستم‌های ترمودینامیکی
۴. توابع گیس و پلانگ در تبدیلات فازی
۵. ترمودینامیک سیستم‌های مخلوط، کمیت‌های مولی جزئی، کمیت‌های اختلاط، توابع اضافی، روش‌های تجربی اندازه‌گیری آنها
۶. ترمودینامیک مخلوط‌های گازی، فوگاسیته، گازهای حقیقی در مخلوط‌های حقیقی
۷. محلول‌های ایده‌آل و رقیق ایده‌آل غیرالکترولیتی
۸. محلول‌های حقیقی غیرالکترولیتی، فعالیت و ضریب فعالیت و روش‌های اندازه‌گیری آنها
۹. محلول‌های منظم و قانون هنری
۱۰. ترمودینامیک محلول‌های الکترولیتی، اندازه‌گیری فعالیت، ضریب فعالیت و توابع اضافی در این محلول‌ها
۱۱. خواص کولیگاتیو در محلول‌های الکترولیتی و غیر الکترولیتی
۱۲. ترمودینامیک پیل‌ها و واکنش‌های الکتروشیمیایی با رویکرد محلول‌های ایده‌آل و حقیقی

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

آموزش بر پایه استفاده از متون علمی، شامل کتابهایی که در مراجع ذکر گردیده‌اند، مقالات تحقیقاتی و مروری چاپ شده جدید در این زمینه در مجلات معتبر بین‌المللی و اختراعات است.

### ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

ارزشیابی به صورت مستمر در طول ترم تحصیلی، میان ترم و پایان ترم انجام می‌شود. اختصاص نمره برای پروژه به تشخیص استاد خواهد بود.

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

وسایل کمک آموزشی شامل ویدئو پرژکتور

### چ) فهرست منابع پیشنهادی:

F. M. Klotz, R. M. Rosenberg, *Chemical Thermodynamics Basic Concepts and Methods*, Wiley, ۲۰۰۸.

D. A. McQuarrie, J. D. Simon, *Molecular Thermodynamics*, University Science Books, ۱۹۹۹.

I. N. Levine, *Physical Chemistry*, ۶th ed., McGraw-Hill Education, ۲۰۰۸.



عنوان درس به فارسی:		شیمی فیزیک سطح و فصل مشترک‌های فازی	
عنوان درس به انگلیسی:		Physical Chemistry of Surface and Interfaces	
دروس پیش نیاز:	ندارد	پایه <input type="checkbox"/>	نظری <input checked="" type="checkbox"/>
دروس هم‌نیاز:	ندارد	تخصصی <input checked="" type="checkbox"/>	عملی <input type="checkbox"/>
تعداد واحد:	۳	اختیاری <input type="checkbox"/>	نظری-عملی <input type="checkbox"/>
تعداد ساعت:	۴۸	رساله / پایان نامه <input type="checkbox"/>	

اگر واحد عملی دارد، چه نوع آموزش تکمیلی نیاز است؟: سفر علمی  آزمایشگاه  سمینار  کارگاه  موارد دیگر: .....

### هدف کلی:

- توسعه دانش دانشجویان در مباحث پیشرفته شیمی سطح و حالت جامد

### اهداف ویژه:

- آشنایی و آشنایی دانشجویان با اصول فرایندهای فیزیکی و شیمیایی در سطح
- آشنایی با خواص ترمودینامیکی فرایندهای سطحی

### پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

- خواص بین فازی مایع-گاز و مایع-مایع
- خواص فیزیکی نظیر کشش سطحی و خاصیت موینگی و روش‌های اندازه‌گیری آنها
- ترمودینامیک فصل مشترک فازی و تعریف توابع ترمودینامیکی سطح
- خواص الکتریکی سطحی، دانسیته بار و اندازه‌گیری آن - انتقالات الکترونی در سطوح و در فرایندهای الکتروشیمیایی،
- پدیده الکتروسینتیک و زتا پتانسیل
- زاویه تماس، روش‌های اندازه‌گیری و کاربردهای صنعتی آن
- خواص بین فازی جامد-گاز و جامد-مایع
- روش‌های بررسی و مطالعه خواص سطوح جامد مانند روش‌های میکروسکوپی، پراش اشعه ایکس و اسپکتروسکوپی
- جذب سطحی، مدل‌ها و همدم‌های تئوری و تجربی، همدمای جذب BET، روابط، مبانی و کاربرد آن
- ترمودینامیک جذب سطحی
- مختصری از واکنش‌های کاتالیزوری ناهمگن و قابل انجام در فصل مشترک جامد-گاز یا جامد-مایع
- کاربرد صنعتی و مصارف روزمره دانش شیمی سطح و فرایندهای سطحی نظیر روان‌کننده‌ها، پوشش‌ها، سورفاکتانت‌ها، امولسیون‌ها، فوم‌ها و ..

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

آموزش بر پایه استفاده از متون علمی، شامل کتابهایی که در مراجع ذکر گردیده‌اند، مقالات تحقیقاتی و مروری چاپ شده جدید در این زمینه در مجلات معتبر بین‌المللی و اختراعات است.

### ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

ارزشیابی به صورت مستمر در طول ترم تحصیلی، میان ترم و پایان ترم انجام می‌شود. اختصاص نمره برای پروژه به تشخیص استاد خواهد بود.

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

وسایل کمک آموزشی شامل ویدئو پرژکتور

### چ) فهرست منابع پیشنهادی:

- H. J. Butt, K. Graf, M. Kappl, *Physics and Chemistry of Interfaces*, John Wiley & Sons, ۲۰۰۲
- A. W. Adamson, A. P. Gast, *Physical Chemistry of Surfaces*, John Wiley & Sons, ۱۹۹۷.
- J. Lyklema, *Fundamentals of Interface and Colloid Science I: Fundamentals*, Academic Press, ۱۹۹۶.



عنوان درس به فارسی: روشهای محاسباتی و شبیه سازی در شیمی		عنوان درس به انگلیسی: Computational and Simulation Methods in Chemistry	
نوع درس و واحد	پایه <input type="checkbox"/> نظری <input type="checkbox"/>	تخصصی <input checked="" type="checkbox"/> عملی <input type="checkbox"/>	اختیاری <input type="checkbox"/> رساله / پایان نامه <input type="checkbox"/>
دروس پیش نیاز:	ندارد	دروس هم نیاز:	ندارد
تعداد واحد:	۲+۱	تعداد ساعت:	۳۲+۳۲

اگر واحد عملی دارد، چه نوع آموزش تکمیلی نیاز است؟: سفر علمی  آزمایشگاه  سمینار  کارگاه  موارد دیگر: .....

### هدف کلی:

- توسعه دانش دانشجویان در مباحث شیمی محاسباتی

### اهداف ویژه:

- آشنایی و تسلط بر اصول و اجرای شبیه سازی های مولکولی

### پ) مباحث یا سرفصل ها:

۱. مقدمه ای بر ابزار های رایج در شیمی محاسباتی
۲. محاسبات ساختار الکترونی، بدست آوردن ساختارهایی با کمینه انرژی و مسیر واکنش
۳. شبیه سازی دینامیک مولکولی
۴. مکانیک کلاسیک و روش های عددی (حل های تحلیلی معادلات نیوتونی و فضای فاز، معرفی انواع الگوریتم های برای حل معادلات حرکت)
۵. پتانسیل های درون مولکولی و بین مولکولی در شبیه سازی ها (بررسی انواع میدان های نیروی الکتروستاتیک، واندروالس، پیوندی، زاویه ای)
۶. مکانیک دینامیک مولکولی (شرایط مرزی تناوبی، بردارهای سل شبیه سازی، شعاع قطع، شبیه سازی مولکول های صلب)
۷. نظریه احتمال و شبیه سازی مولکولی (فرآیندهای معین و تصادفی، توزیع های احتمالی تک متغیری، توزیع های چند متغیری، توزیع سرعت ماکسول-بولتسمن، توصیف فضای فاز یک گاز ایده آل)
۸. مکانیک آماری در شبیه سازی های مولکولی (انسامبل ها، افت و خیز در کمیت های ترمودینامیکی، میانگین کمیت های ترمودینامیکی)
۹. ترموستات ها و باروستات ها (معرفی انواع باروستات ها و ترموستات ها و همچنین شرایط استفاده ترکیبی از آن ها)
۱۰. شبیه سازی خواص ترمودینامیکی و ساختاری (معرفی روش های مختلف به دست آوردن خواص مختلف: کشش سطحی، تابع توزیع شعاعی)
۱۱. بررسی خواص دینامیکی با استفاده از شبیه سازی (معرفی روش های مختلف به دست آوردن میانگین مجذور جابجایی، نفوذ، شاخص لیندمن و ضرایب انتقال)
۱۲. شبیه سازی دینامیک مولکولی نانوسیستم ها (معرفی تفاوت روش های شبیه سازی نانوسیستم ها با سیستم های بالک)
۱۳. معرفی روش های درشت دانه (با معرفی این روش ها تسهیل در زمان محاسبات دینامیک مولکولی بررسی خواهند شد)
۱۴. شبیه سازی های مونت کارلو (بررسی شبیه سازی مونت کارلو در انسامبل های مختلف، شبیه سازی ایزوترم های جذب گاز، شبیه سازی تعادل)
۱۵. روش نمونه برداری مهم، الگوریتم متروپولس، الگوریتم های پیشرفته و پرسرعت

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

آموزش بر پایه استفاده از متون علمی، شامل کتابهایی که در مراجع ذکر گردیده اند، مقالات تحقیقاتی و مروری چاپ شده جدید در این زمینه در مجلات معتبر بین المللی و اختراعات است.

### ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

ارزشیابی به صورت مستمر در طول ترم تحصیلی، میان ترم و پایان ترم انجام می شود. اختصاص نمره برای پروژه به تشخیص استاد خواهد بود.

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

وسایل کمک آموزشی شامل ویدئو پرژکتور

### چ) فهرست منابع پیشنهادی:



۱. I. N. Levine, *Quantum Chemistry*, ۷<sup>th</sup> ed., Pearson Prentice-Hall, ۲۰۱۳.
۲. D. Frenkel, B. Smit, *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to applications*, Elsevier, ۲۰۰۲.
۳. A. Leach, *Molecular Modeling: Principles and Applications*, Prentice Hall, ۲۰۰۱.
۴. S. Alavi, *Molecular Simulations: Fundamentals and Practice*, Wiley ۲۰۲۰.
۵. M. P. Allen, D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*, Oxford University Press, ۲۰۱۷.
۶. C. C. Aggarwal, *Neural Networks and Deep Learning: A Textbook* Springer ۲۰۱۸.
۷. D. Chandler, *Introduction to Modern Statistical Mechanics*, oxford University press, ۱۹۸۷.



شیمی حلال‌ها		عنوان درس به فارسی:
Chemistry of Solvents		عنوان درس به انگلیسی:
نوع درس و واحد		دروس پیش نیاز:
<input type="checkbox"/> پایه <input checked="" type="checkbox"/> نظری		ندارد
<input type="checkbox"/> عملی <input checked="" type="checkbox"/> تخصصی		ندارد
<input type="checkbox"/> نظری-عملی <input type="checkbox"/> اختیاری		تعداد واحد: ۳
<input type="checkbox"/> رساله / پایان نامه		تعداد ساعت: ۴۸

اگر واحد عملی دارد، چه نوع آموزش تکمیلی نیاز است؟: سفر علمی  آزمایشگاه  سمینار  کارگاه  موارد دیگر: .....

### هدف کلی:

- توسعه دانش دانشجویان در مباحث شیمی محلولها و نقش حلال در فرایندهای شیمیایی

### اهداف ویژه:

۱. آشنایی دانشجویان با خواص، تقسیم بندی و کاربرد حلال‌ها در شاخه‌های مختلف علم شیمی
۲. شناخت ماهیت و تغییر رفتار برهمکنش‌های بین مولکولی در فاز محلول، آشنایی با اثرات حلال بر فرایندهای فیزیکی و شیمیایی

### پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

۱. حلال‌ها به عنوان محیط مناسب برای تسهیل فرایندهای فیزیکی و شیمیایی
۲. تقسیم بندی حلال‌ها بر اساس خواص فیزیکی و شیمیایی آنها
۳. برهمکنش‌های حلال-حلال-حل شونده در محیط محلول نظیر یون-دوقطبی، دوقطبی-دوقطبی، دهندگی و گیرندگی پیوند هیدروژنی و الکترون
۴. اثرات الکترونی و الکتریکی حلال‌ها و تاثیر بر پدیده‌های انتقال حرارت و انتقال جرم در محلول
۵. اثرات حلال بر تعادلات شیمیایی، فرایندهای اسید-باز د فاز محلول، واکنش‌های توتومری، ایزومری شدن و انتقال الکترون
۶. اثر حلال بر واکنش‌های شیمیایی و واکنش پذیری مواد در محیط محلول، حلال پوشی و تاثیر بر ضریب فعالیت و واکنش پذیری، واکنش بین یون‌ها و یون-مولکول‌ها در فاز محلول و اثر برهمکنش‌های حلال-حل شونده بر سرعت واکنش
۷. واکنش‌های کاتالیزوری در محیط محلول و اثر حلال بر فرایندهای کاتالیزوری همگن و ناهمگن
۸. اثرات ایزوتوپی حلال
۹. پارامترهای مرتبط با قطبیت حلال، همبستگی پارامترهای فیزیکی قطبیت با رفتار فیزیکی و شیمیایی حلال‌ها، تاثیرات حلال بر طیف جذبی ترکیبات شیمیایی، قطبیت تجربی و کاربرد آن در توجیه رفتار حلال، پارامترهای کملت-تفت، همبستگی‌های خطی انرژی آزاد
۱۰. مخلوط حلال‌ها و برهمکنش‌های حلال-حلال، تغییر ماهیت برهمکنش‌ها در مخلوط حلال‌ها. کاربرد مخلوط حلال در فرایندها
۱۱. نسل جدید حلال‌ها با عنوان حلال‌های سبز و جایگزین برای حلال‌های پر مصرف شیمیایی، حلال‌های فوق بحرانی و تغییر خواص فیزیکی آنها در مقایسه با شرایط نرمال، مایعات یونی، حلال‌های اوتکتیک عمیق و نقش جایگزین آنها برای مایعات یونی، حلال‌های یونی و اوتکتیک عمیق آبدوست و آبگریز و تفاوت رفتاری آنها
۱۲. فعالیت‌های صورت گرفته در جایگزینی حلال‌های سبز و دوست‌دار محیط زیست در صنایع شیمیایی، بازیافت حلال‌ها، کاربرد حلال‌های سبز در فرایند جذب و ذخیره‌سازی دی‌اکسید کربن

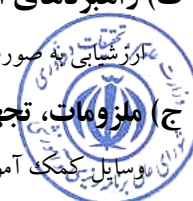
### ت) راهبردهای تدریس و یادگیری متناسب با محتوا و هدف:

آموزش بر پایه استفاده از متون علمی، شامل کتابهایی که در مراجع ذکر گردیده اند، مقالات تحقیقاتی و مروری چاپ شده جدید در این زمینه در مجلات معتبر بین المللی و اختراعات است.

### ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

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

وسایل کمک آموزشی شامل ویدئو پرژکتور



۱. C. Reichardt, T. Welton. *Solvents and Solvent Effects in Organic Chemistry*. John Wiley & Sons, ۲۰۱۱.
۲. G. Wypych. *Handbook of Solvents (Third Edition)*, ChemTec Publishing, ۲۰۱۹.
۳. P. Wasserscheid, T. Welton, eds. *Ionic liquids in synthesis*. John Wiley & Sons, ۲۰۰۸.
۴. S. Fourmentin, Sophie. *Deep Eutectic Solvents for Medicine, Gas Solubilization and Extraction of Natural Substances*, Vol. ۵۶. Springer Nature, ۲۰۲۰.
۵. P.L. Houston, *Chemical kinetics and reaction dynamics*, Courier Corporation, ۲۰۱۲.
۶. S.K. Upadhyay, *Chemical kinetics and reaction dynamics*, Springer Science & Business Media, ۲۰۰۷.



عنوان درس به فارسی:		مباحث نوین در شیمی فیزیک	
عنوان درس به انگلیسی:		New Topics in Physical Chemistry	
نوع درس و واحد			
پایه <input type="checkbox"/> نظری <input checked="" type="checkbox"/>		ندارد	دروس پیش نیاز:
تخصصی <input checked="" type="checkbox"/> عملی <input type="checkbox"/>		ندارد	دروس هم نیاز:
اختیاری <input type="checkbox"/> نظری-عملی <input type="checkbox"/>		۳	تعداد واحد:
رساله / پایان نامه <input type="checkbox"/>		۴۸	تعداد ساعت:

اگر واحد عملی دارد، چه نوع آموزش تکمیلی نیاز است؟: سفر علمی  آزمایشگاه  سمینار  کارگاه  موارد دیگر: .....

### هدف کلی:

- توسعه دانش دانشجویان در مباحث جدید شیمی

### اهداف ویژه:

- آشنایی دانشجویان با موضوعات جدید و به روز شیمی فیزیک در شاخه های مختلف

### پ) مباحث یا سرفصل ها:

۱. بررسی آخرین پیشرفتها و مباحث به روز شیمی فیزیک در مجلات و کتب معتبر بین المللی
۲. ارائه سمینارهای علمی در موضوعات مشخص

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

آموزش بر پایه استفاده از متون علمی، شامل کتابهایی که در مراجع ذکر گردیده اند، مقالات تحقیقاتی و مروری چاپ شده جدید در این زمینه در مجلات معتبر بین المللی و اختراعات است.

### ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

با توجه به ماهیت مطالعاتی مباحث نوین علمی و متون مربوطه، ارزشیابی به صورت مستمر در طول ترم تحصیلی، میان ترم و پایان ترم به تشخیص مدرس درس انجام می شود. اختصاص نمره برای پروژه نیز به تشخیص استاد خواهد بود. توصیه می شود ارائه چند سمینار علمی در برنامه کاری دانشجو قرار گیرد.

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

وسایل کمک آموزشی شامل ویدئو پرژکتور

### چ) فهرست منابع پیشنهادی:

۱. مجلات معتبر مروری و کتابهای تخصصی جدید شیمی



عنوان درس به فارسی:		سمینار	
عنوان درس به انگلیسی:		Seminar	
دروس پیش نیاز:	ندارد	نوع درس و واحد	پایه <input type="checkbox"/> نظری <input checked="" type="checkbox"/>
دروس هم نیاز:	ندارد		تخصصی <input checked="" type="checkbox"/> عملی <input type="checkbox"/>
تعداد واحد:	۱		اختیاری <input type="checkbox"/> نظری-عملی <input type="checkbox"/>
تعداد ساعت:	۱۶		رساله / پایان نامه <input type="checkbox"/>

اگر واحد عملی دارد، چه نوع آموزش تکمیلی نیاز است؟: سفر علمی  آزمایشگاه  سمینار  کارگاه  موارد دیگر: .....

### هدف کلی:

- تقویت توان دانشجوی در مطالعه متون علمی و ارائه عمومی آن

### اهداف ویژه:

- آشنایی با مسایل روز شیمی و ارائه یک سمینار علمی در زمینه‌های بنیادی یا کاربردی

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

آموزش بر پایه استفاده از متون علمی، شامل کتابهایی که در مراجع ذکر گردیده اند، مقالات تحقیقاتی و مروری چاپ شده جدید در این زمینه در مجلات معتبر بین المللی و اختراعات است.

### ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

با توجه به ماهیت مطالعاتی مباحث نوین علمی و متون مربوطه و ارائه سمینار ارزشیابی مستمر در طول ترم تحصیلی، میان ترم و پایان ترم ندارد.

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

وسایل کمک آموزشی شامل ویدئو پرژکتور

### چ) فهرست منابع پیشنهادی:

۱. مجلات معتبر مروری و کتابهای تخصصی جدید شیمی

