جمهوری اسلامی ایران

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری

شورای عالی برنامه ریزی آموزشی

برنامه درسی

رشته شیمی

دوره دکتری تخصصی

گروه علوم پایه

به استناد آیین نامه واگذاری اختیارات برنامه ریزی درسی مصوب جلسه شماره ۸۸۲ تاریخ ۱۳۹۵/۱۱/۲۳ شورای عالی برنامه ریزی آموزشی

باسمه تعالی

نام رشته: شیمی

عنوان گرایش: ۱-شیمی آلی ۲-شیمی پلیمر ۳-شیمی تجزیه ۴-شیمی فیزیک ۵-شیمی معدنی ۶-شیمی کاربردی

گروه: علوم پایه

دوره تحصیلی: دکتری تخصصی

کارگروه تخصصی: شیمی

نوع مصوبه: بازنگری

پیشنهادی دانشگاه: تهران

به استناد آیین نامه واگذاری اختیارات برنامه ریزی درسی مصوب جلسه شماره ۸۸۲ تاریخ ۱۳۹۵/۱۱/۲۳ شورای عالی برنامه ریزی آموزشی، برنامه درسی بازنگری شده دوره کارشناسی ارشد ناپیوسته شیمی با گرایش های ۱-شیمی آلی ۲-شیمی پلیمر ۳- شیمی تجزیه ۴-شیمی فیزیک ۵-شیمی معدنی ۶-شیمی کاربردی، طی نامه شماره ۱۲۳/۲۴۷۹۸۱ تاریخ ۱۳۹۶/۰۸/۱۷ از دانشگاه تهران دریافت شد:

ماده یک- این برنامه درسی برای دانشجویانی که از مهر ماه سال ۱۳۹۸ وارد دانشگاه می شوند، قابل اجرا است.

ماده دو- برنامه درسی بازنگری شده دوره دکتری تخصصی شیمی با گرایش های ۱-شیمی آلی ۲-شیمی پلیمر ۳- شیمی تجزیه ۴-شیمی فیزیک ۵-شیمی معدنی ۶-شیمی کاربردی، در سه فصل: مشخصات کلی، جدول واحدهای درسی و سرفصل دروس تنظیم شده است و برای اجرا به دانشگاه ها ابلاغ می شود.

ماده سه- این برنامه درسی از تاریخ تصویب به مدت ۵ سال قابل اجرا بوده و پس از آن نیاز به بازنگری دارد.

دکتر محمدرضا آهنچیان

دبیر کمیسیون برنامه ریزی آموزشی

دانشگاه تهران

مشخصات کلی، برنامه درسی و سرفصل دروس

دوره :دکتری

رشته های:

- شیمی گرایش شیمی آلی
- شیمی گرایش شیمی پلیمر
- شیمی گرایش شیمی تجزیه
- شیمی گرایش شیمی فیزیک
- شیمی گرایش شیمی معدنی
- شیمی کاربردی
- علوم و فناوری نانو - نانوشیمی (۴ گرایش)
  - گرایش نانو پلیمر
  - گرایش نانو مواد معدنی
  - گرایش نانو سوپرا مولکول
  - گرایش نانوشیمی نظری

پردیس علوم

مصوب جلسه مورخ ۹۵/۴/۲۸ شورای برنامه ریزی، گسترش و نظارت آموزشی دانشگاه

این برنامه بر اساس آیین نامه وزارتی تفویض اختیارات برنامه ریزی درسی به دانشگاههای دارای هیات ممیزه توسط اعضای هیات علمی دانشکده فیزیک پردیس علوم بازنگری شده و در سیصد و دومین جلسه شورای برنامه ریزی، گسترش و نظارت آموزشی دانشگاه مورخ ۹۵/۴/۲۸ به تصویب رسیده است.

مصوبه شورای برنامه ریزی، گسترش و نظارت آموزشی دانشگاه تهران در خصوص برنامه درسی

مقطع : دکتری

رشته های:

شیمی گرایش شیمی آلی،شیمی گرایش شیمی تجزیه، شیمی گرایش شیمی فیزیک، شیمی گرایش شیمی معدنی،شیمی – شیمی پلیمر، شیمی کاربردی و علوم و فناوری نانو – نانوشیمی با ۴ گرایش

برنامه درسی دوره دکتری رشته های فوق الذکر که توسط اعضای هیات علمی دانشکده شیمی پردیس علوم بازنگری شده است با اکثریت آراء به تصویب رسید.

- این برنامه از تاریخ تصویب لازم الاجرا است.
- برنامه درسی بازنگری شده دکتری رشته های فوق الذکر شیمی مصوب جلسه مورخ ۹۵/۴/۲۸ شورای برنامه ریزی، گسترش و نظارت آموزشی دانشگاه جایگزین کلیه برنامه های درسی دوره دکتری رشته های شیمی می‌شود.
- هر نوع تغییر در برنامه مجاز نیست مگر آنکه به تصویب شورای برنامه ریزی، گسترش و نظارت آموزشی دانشگاه برسد.

سید حسین حسینی
معاون آموزشی دانشگاه

فرزانه شمیرانی
دبیرشورای برنامه ریزی آموزشی دانشگاه

رای صادره جلسه مورخ ۹۵/۴/۲۸ شورای برنامه ریزی، گسترش و نظارت آموزشی دانشگاه در مورد بازنگری برنامه درسی رشته های شیمی در مقطع دکتری صحیح است، به واحد ذیربط ابلاغ شود.

محمود نیلی احمد آبادی
رئیس دانشگاه تهران

به نام خداوند جان و خرد

برنامه دورهٔ دکتری تخصصی (PhD) رشته های شیمی

شیمی گرایش شیمی آلی

شیمی - شیمی پلیمر

شیمی گرایش شیمی تجزیه

شیمی گرایش شیمی فیزیک

شیمی کاربردی

شیمی گرایش شیمی معدنی

علوم و فناوری نانو - نانوشیمی (با گرایش‌های نانوپلیمر، نانو سوپرامولکول، نانو مواد معدنی و نانو شیمی نظری)

۱۳۹۵

فهرست

	شمارهٔ صفحه
فصل اول- مشخصات و ضوابط	۷
۱- تعریف و هدف	۸
۲- طول دوره و شکل نظام	۸
۲-۱- مرحلهٔ آموزشی	۸
۲-۲- - مرحلهٔ پژوهشی	۹
۲-۳- فرصت مطالعاتی دانشجوی دکتری	۱۰
۲-۴- شیوه ارزیابی فعالیت دانشجو در دوران پژوهشی	۱۰
۲-۵- دفاع از رساله	۱۰
۳- تعداد و نوع واحدهای درسی	۱۱
۴- شرایط و ضوابط ورود به دوره دکتری رشته شیمی	۱۲
فصل دوم- جداول دروس	۱۳
دکترای شیمی- شیمی آلی	۱۴
جدول ۱- الف. دروس جبرانی دکترای رشتهٔ شیمی- شیمی آلی	۱۵
جدول ۱-ب. دروس اصلی دکترای رشتهٔ شیمی- شیمی آلی	۱۶
جدول ۱-پ. دروس اختیاری دکترای رشتهٔ شیمی- شیمی آلی	۱۷
دکترای شیمی- شیمی پلیمر	۱۸
جدول ۲-الف. دروس جبرانی دکترای رشتهٔ شیمی- شیمی پلیمر	۱۹
جدول ۲-ب. دروس اصلی دکترای رشتهٔ شیمی- شیمی پلیمر	۲۰
جدول ۲-پ. دروس اختیاری دکترای رشتهٔ شیمی- شیمی پلیمر	۲۱
دکتری شیمی- شیمی تجزیه	۲۲
جدول ۳-الف. دروس جبرانی دکتری رشتهٔ شیمی- شیمی تجزیه	۲۳
جدول ۳-ب. دروس اصلی دکترای رشتهٔ شیمی- شیمی تجزیه	۲۴
جدول ۳-پ. دروس اختیاری دکترای رشتهٔ شیمی- شیمی تجزیه	۲۵
دکترای شیمی- شیمی فیزیک	۲۶
جدول ۴-الف. دروس جبرانی دکترای رشتهٔ شیمی- شیمی فیزیک	۲۷
جدول ۴-ب. دروس اصلی دکترای رشتهٔ شیمی- شیمی فیزیک	۲۸
جدول ۴-پ. دروس اختیاری دکترای رشتهٔ شیمی- شیمی فیزیک	۲۹
دکترای شیمی- شیمی کاربردی	۳۰
جدول ۵-الف. دروس جبرانی دکترای رشتهٔ شیمی- شیمی کاربردی	۳۱
جدول ۵-ب. دروس اصلی دکترای رشتهٔ شیمی- شیمی کاربردی	۳۲
جدول ۵-پ. دروس اختیاری دکترای رشتهٔ شیمی- شیمی کاربردی	۳۳
دکترای شیمی- شیمی معدنی	۳۴
جدول ۶-الف. دروس جبرانی دکترای رشتهٔ شیمی- شیمی معدنی	۳۵
جدول ۶-ب. دروس اصلی دکتری رشتهٔ شیمی- شیمی معدنی	۳۶

فهرست

شمارهٔ صفحه

جدول ۶-پ. دروس اختیاری دکتری رشتهٔ شیمی- شیمی معدنی ۳۷

دکترای شیمی- نانوشیمی (گرایش‌های نانوپلیمر، سوپرامولکول، نانو معدنی و نانونظری) ۳۸

جدول ۷-الف. دروس جبرانی دکتری رشتهٔ شیمی- نانو شیمی ۳۹

جدول ۷-ب. دروس الزامی مشترک دکتری رشتهٔ شیمی- نانو شیمی ۴۰

جدول ۷-پ. دروس اصلی تخصصی دکتری رشتهٔ شیمی- نانو شیمی- گرایش نانوپلیمر ۴۱

جدول ۷-ت. دروس اختیاری دورهٔ دکتری رشتهٔ شیمی- نانوشیمی-گرایش نانو پلیمر ۴۲

جدول ۷-ث. دروس اصلی تخصصی دکتری رشتهٔ شیمی- نانو شیمی- گرایش سوپرامولکول ۴۳

جدول ۷-ج. دروس اختیاری دورهٔ دکتری رشتهٔ شیمی- نانوشیمی-گرایش سوپرامولکول ۴۴

جدول ۷-چ. دروس اصلی تخصصی دکتری رشتهٔ شیمی- نانو شیمی- گرایش نانومعدنی ۴۵

جدول ۷-ح. دروس اختیاری دورهٔ دکتری رشتهٔ شیمی- نانوشیمی-گرایش نانومعدنی ۴۶

جدول ۷-خ. دروس اصلی تخصصی دکتری رشتهٔ شیمی- نانو شیمی- گرایش نانو نظری ۴۷

جدول ۷-د. دروس اختیاری دورهٔ دکتری رشتهٔ شیمی- نانوشیمی-گرایش نانونظری ۴۸

فصل سوم- سر فصل دروس ۴۹

سرفصل دروس اصلی و اختیاری دکترای رشتهٔ شیمی آلی ۵۰

NMR پیشرفته ۵۱

سنتز پیشرفته مواد آلی ۵۲

حد واسط‌های فعال ۵۳

مباحثی در استرئوشیمی ۵۴

شیمی حالت برانگیخته ۵۵

شیمی فیزیک آلی پیشرفته ۵۶

شیمی آلی زیستی ۵۷

طراحی و سنتز دارو ۵۸

سرفصل دروس اصلی و اختیاری دکترای رشتهٔ شیمی پلیمر ۵۹

شیمی فیزیک پیشرفته پلیمرها ۶۰

سنتز و سینتیک پیشرفته پلیمرها ۶۱

فناوری‌های پیشرفته پلیمرها ۶۲

شیمی و فناوری اصلاح پلیمرها ۶۳

شیمی و فناوری کامپوزیت‌های پلیمری ۶۴

پلیمرهای معدنی ۶۵

مباحث پیشرفته در پلیمرها ۶۶

سرفصل دروس اصلی و اختیاری دکترای شیمی تجزیه ۶۷

روش‌های نوین الکتروشیمی ۶۸

طیف‌بینی تجزیه‌ای پیشرفته ۶۹

شیمی تجزیه در محلول‌های غیرآبی ۷۰

فهرست

	شمارهٔ صفحه
روش‌های نوین شیمیایی و فیزیکی جداسازی	۷۱
لیزر و کاربرد آن در شیمی تجزیه	۷۲
کاربرد روش‌های آماری در شیمی تجزیه	۷۳
روش‌های نوین تجزیه دستگاهی	۷۴
مباحث پیشرفته در شیمی تجزیه	۷۵
الکتروشیمی در محلول‌های غیرآبی	۷۶
کاربرد کامپیوتر، الکترونیک و آمار در شیمی تجزیه	۷۷
نانو الکتروشیمی	۷۸
کاربرد مواد نانوساختار در جداسازی و استخراج	۷۹
نانومواد در حسگرها و زیست حسگرها	۸۰
سرفصل دروس اصلی و اختیاری دکترای رشتهٔ شیمی فیزیک	**۸۱**
مکانیک کوانتومی پیشرفته	۸۲
مکانیک آماری پیشرفته	۸۳
ترمودینامیک و مکانیک آماری غیرتعادلی	۸۴
طیف سنجی مولکولی پیشرفته	۸۵
مباحث پیشرفته در شیمی فیزیک	۸۶
ریاضیات پیشرفته در شیمی فیزیک	۸۷
شیمی محاسباتی پیشرفته	۸۸
شیمی کلوئید و سطح	۸۹
سرفصل دروس اصلی و اختیاری دکترای رشتهٔ شیمی کاربردی	**۹۰**
پدیده‌های انتقال پیشرفته	۹۱
فرایندهای شیمیایی و طراحی رآکتور پیشرفته	۹۲
روش‌های جداسازی وخالص سازی صنعتی	۹۳
طراحی و کاربرد کاتالیزگرهای بستردار	۹۴
سنتزهای برگزیده کاربردی	۹۵
آنزیم‌های صنعتی	۹۶
روش‌های شیمیایی لایه نشانی	۹۷
فناوری‌های نوین پالایش و تبدیل گاز	۹۸
فناوری‌های نوین پالایش و تبدیل نفت	۹۹
طراحی تصفیه‌خانه آب و فاضلاب	۱۰۰
شبیه‌سازی فرآیندهای شیمیایی	۱۰۱
مواد افزودنی و اصلاح‌کننده‌های شیمیایی	۱۰۲
طراحی فرآیندهای شیمیایی	۱۰۳
غشاها و فرآیندهای غشایی	۱۰۴

فهرست	شمارهٔ صفحه
سنتز و سینتیک پیشرفته پلیمرها	۱۰۵
فناوری‌های پیشرفته پلیمرها	۱۰۶
سرفصل دروس اصلی و اختیاری دکترای رشتهٔ شیمی معدنی	**۱۰۷**
ساختار و پیوند در ترکیبات معدنی	۱۰۸
شیمی فلزات واسطه	۱۰۹
کاتالیزگرهای همگن و ناهمگن	۱۱۰
تعیین ساختار با پراش پرتو X	۱۱۱
مهندسی بلور	۱۱۲
روش‌های طیف بینی کاتالیزگرها	۱۱۳
فوتوشیمی ترکیبات معدنی	۱۱۴
الکتروشیمی ترکیبات معدنی	۱۱۵
زیست شیمی معدنی	۱۱۶
پلیمرهای معدنی	۱۱۷
مباحث پیشرفته در شیمی معدنی	۱۱۸
سرفصل دروس الزامی مشترک، اصلی و اختیاری دکترای رشتهٔ نانوشیمی	**۱۱۹**
مباحثی در نانوشیمی و نانوفناوری	۱۲۰
شیمی فیزیک پیشرفته پلیمرها	۱۲۱
سنتز و سینتیک پیشرفته پلیمرها	۱۲۲
فناوری‌های پیشرفته پلیمرها	۱۲۳
نانو فناوری پلیمرها	۱۲۴
نانوکامپوزیت‌های پلیمری	۱۲۵
نانوفناوری غشاها	۱۲۶
مباحث پیشرفته در نانوپلیمرها	۱۲۷
پلیمرها در سطح و لایه‌های مرزی	۱۲۸
نانوداروها و سامانه‌های انتقال دارو	۱۲۹
NMR پیشرفته	۱۳۰
سنتز پیشرفته مواد آلی	۱۳۱
حد واسط‌های فعال	۱۳۲
شیمی سوپرامولکولی پیشرفته	۱۳۳
نانوساختارهای خودآرا	۱۳۴
نانوداروها و سامانه‌های انتقال دارو	۱۳۵
نانوبیوفناوری پیشرفته	۱۳۶
ساختار و پیوند در ترکیبات معدنی	۱۳۷
شیمی فلزات واسطه	۱۳۸
کاتالیزگرهای همگن و ناهمگن	۱۳۹

فهرست	شمارهٔ صفحه
تعیین ساختار با پراش پرتو X	۱۴۰
مواد نانومتخلخل	۱۴۱
مباحث پیشرفته در نانومواد معدنی	۱۴۲
نانوکاتالیزگرهای معدنی	۱۴۳
روش‌های سنتز نانو مواد معدنی	۱۴۴
کاربرد نانومواد معدنی در انرژی‌های نو	۱۴۵
نانومواد در شیمی سبز	۱۴۶
مکانیک کوانتومی پیشرفته	۱۴۷
مکانیک آماری پیشرفته	۱۴۸
ترمودینامیک و مکانیک آماری غیرتعادلی	۱۴۹
مباحث پیشرفته در نانوشیمی نظری	۱۵۰
مکانیک آماری سیستم‌های ناهمگن	۱۵۱
نانوشیمی فیزیک محاسباتی	۱۵۲

فصل اول

مشخصات و ضوابط

۱- تعریف و هدف:

دوره دکتری تخصصی (PhD) رشتهٔ شیمی با تمام گرایش‌های آن بالاترین مقطع تحصیلی دانشگاهی در این رشته می‌باشد که به اعطای درجهٔ دکتری شیمی در آن رشته می‌انجامد و شامل مجموعه‌ای هماهنگ از فعالیت‌های آموزشی و پژوهشی است. در این دوره ابداع، نوآوری و گسترش دانش شیمی از اهمیت خاصی برخوردار بوده که رسالت ویژه دانشجویان است. هدف از دوره، تربیت نیروی انسانی متخصص و کارآمد در این رشته است.

ضرورت و اهمیت این دوره در تربیت پژوهشگر با تفکر خلاق و مستقل برای کار در موسسات پژوهشی و صنایع شیمیایی کشور و یا تأمین هیأت علمی دانشگاه‌هاست.

۲-طول دوره و شکل نظام:

طول دوره دکتری رشتهٔ شیمی هشت نیمسال است که با موافقت شورای تحصیلات تکمیلی دانشکده، تا دو نیمسال قابل افزایش است. افزایش بیش از این مشمول مقررات دانشگاه است.

دورهٔ دکتری رشتهٔ شیمی به دو مرحله آموزشی و پژوهشی تقسیم می شود:

۲-۱- مرحلهٔ آموزشی:

این مرحله شامل حداقل دو و حداکثر چهار نیمسال تحصیلی است که پس از پذیرفته شدن دانشجو در آزمون ورودی و ثبت نام در دانشگاه آغاز می‌شود. اهداف این مرحله افزایش معلومات دانشجو به منظور آمادگی برای استفاده از آخرین دستاوردهای علمی جهان است. مرحلهٔ آموزشی از زمان پذیرفته شدن دانشجو در آزمون ورودی آغاز و به امتحان جامع و دفاع از طرح پژوهشی رساله (پروپوزال) ختم می‌شود.

در مرحلهٔ آموزشی دانشجو باید ۲ درس الزامی (۶ واحد) از دروس اصلی و ۲ درس (۶ واحد) از دروس اختیاری را بگذراند (در رشتهٔ نانوشیمی گذراندن یک درس الزامی مشترک میان کلیهٔ گرایش‌ها و یک درس از دروس اصلی گرایش الزامی است). در صورت تشخیص استاد راهنما و با تأیید شورای تحصیلات تکمیلی-پژوهشی دانشکده دانشجو می‌تواند تا ۶ واحد از دروس کارشناسی ارشد را به عنوان دروس جبرانی بگذراند. برای اتمام مرحلهٔ آموزشی و ورود به مرحلهٔ پژوهشی دانشجو باید واجد شرایط زیر باشد:

(الف) دانشجو باید دورهٔ **"آشنایی با اصول ایمنی در آزمایشگاه"** را طی کرده و گواهی موفقیت در آزمون این دوره دریافت کند.

(ب) حداقل در دو درس نمرهٔ بالای ۱۶ کسب کند.

(پ) معدل دروس مرحلهٔ آموزشی باید بالای ۱۶ باشد.

تبصره: در صورتی که میانگین معدل دانشجو کمتر از ۱۶ باشد و یا ۲ درس با نمرهٔ بالاتر از ۱۶ نداشته باشد، حداکثر یک نیمسال به وی فرصت داده می‌شود تا آن را جبران کرده و شرایط مذکور در این بند را برای انجام امتحان جامع کسب کند. در صورتی که دانشجو بعد از این فرصت نتواند کمبود نمره یا معدل خود را جبران کند، اجازهٔ ادامهٔ تحصیل نخواهد داشت.

(ت) در آزمون جامع کتبی (یا شفاهی طبق مقررات مربوطه) شرکت کرده و نمره قبولی کسب کند. حداقل نمره قبولی در امتحان جامع بر اساس مقررات دانشگاه می‌باشد.

تبصره ۱: چنانچه دانشجو در زمینه ارزیابی معلومات موفق نباشد، هیأت داوران با تعیین منابع درسی یک نیمسال دیگر به دانشجو برای افزایش معلومات خود فرصت خواهد داد.

۲-۲- مرحلهٔ پژوهشی: مرحله پژوهشی شامل موارد زیر است:

(الف) تدوین طرح پژوهشی رساله (پروپوزال): دانشجو پروپوزال خود را با راهنمایی استاد (اساتید) راهنما تدوین کرده و حداکثر تا قبل از پایان نیمسال چهارم تحصیلی آن را همراه با نامهٔ تأیید استاد راهنما به معاون تحصیلات تکمیلی- پژوهشی دانشکده جهت طرح در شورای تحصیلات تکمیلی ارائه می‌کند. شورای تحصیلات تکمیلی- پژوهشی دانشکده بر اساس پیشنهاد استاد راهنما هیأت داوران را که شامل استاد (اساتید) راهنما، استاد مشاور (استاد مشاور باید در طول تکمیل رساله در پیشبرد آن نقش موثر داشته باشد. تشخیص نیاز به استاد مشاور بر عهدهٔ استاد راهنماست)، یک داور داخلی و دو داور از خارج دانشکده را تعیین می‌کند.

تبصره ۱: شورای تحصیلات تکمیلی دانشکده یکی از اعضای هیات علمی را به عنوان نماینده خود جهت شرکت در جلسه دفاع از پروپوزال تعیین می‌کند. وظیفه این نماینده تایید برگزاری دفاع از پروپوزال رسالهٔ دکتری با حضور کلیه اعضای هیات داوران است. نمایندهٔ تحصیلات تکمیلی عضو هیأت داوران نمی‌باشد.

(ب) دفاع از طرح پژوهشی رساله (پروپوزال): دانشجو باید تا پایان نیمسال چهارم تحصیلی در جلسه دفاع از پروپوزال، ایدهٔ پژوهشی خود را جهت انجام رساله دکتری به هیأت داوران ارائه کرده و از آن دفاع کند. هیأت داوران طرح پژوهشی پیشنهادی را بررسی و رأی خود را مبنی بر تأیید یا ارائه فرصت بیشتر به دانشجو برای تکمیل و بارور ساختن ایدهٔ پژوهشی اعلام می‌کند.

(پ) ثبت موضوع رساله دکتری: در صورت تأیید هیأت داوران، موضوع رساله دانشجو به طور رسمی توسط دانشکده ثبت و به اطلاع استاد (اساتید) راهنما، استاد مشاور و دانشجو خواهد رسید. آغاز رسمی مرحلهٔ پژوهشی دورهٔ دکتری با ثبت موضوع رساله می‌باشد.

(ت) انجام کار پژوهشی: در این مرحله دانشجو کارهای پژوهشی خود را برای دستیابی به اهداف تعریف شده در رسالهٔ دکتری ادامه می‌دهد. دانشجو موظف است با فواصل یکسال بعد از تصویب موضوع رساله، دستاوردهای پژوهشی خود را در حضور استاد راهنما و استاد مشاور و سایر دانشجویان دوره‌های تحصیلات تکمیلی ارائه کرده و به پرسش های آنها پاسخ دهد.

۲-۳- فرصت مطالعاتی دانشجوی دکتری

دانشجو در طول دوره پژوهشی می‌تواند با موافقت استاد راهنمای خود و تایید شورای تحصیلات تکمیلی- پژوهشی دانشکده برای یک دوره ۶ ماهه از فرصت مطالعاتی در دانشگاه‌های معتبر استفاده کند. برای استفاده از فرصت مطالعاتی، دانشجو باید حداقل یکسال کار پژوهشی خود را با جدیت انجام داده و نتایج آنها را در

سمینارهای داخلی دانشکده ارائه کرده باشد. مدت فرصت مطالعاتی با موافقت استاد راهنما و تایید شورای تحصیلات تکمیلی-پژوهشی دانشکده می‌تواند حداکثر در دو مرحلهٔ ۳ ماهه (تا ۶ ماه) تمدید شود.

تبصره ۱- پرداخت هزینه فرصت مطالعاتی دانشجو براساس مقررات وزارت علوم است.

تبصره ۲- دانشجو موظف است در انتهای فرصت مطالعاتی، ضمن اعلام حضور در دانشکده، گزارش فعالیت پژوهشی خود را در دورهٔ فرصت مطالعاتی که به تایید استاد راهنمای خارجی رسیده باشد را به استاد راهنمای اصلی خود ارائه کرده و پس از تایید ایشان یک نسخه را به معاون تحصیلات تکمیلی دانشکده تحویل دهد. همچنین دانشجو موظف است کارهای انجام شده در دورهٔ فرصت مطالعاتی را به صورت سمینار ارائه کند.

تبصره ۳- در صورت عدم حضور دانشجو در دانشکده پس از اتمام زمان فرصت مطالعاتی، شورای تحصیلات تکمیلی در مورد وی تصمیم‌گیری خواهد کرد.

۲-۴- شیوه ارزیابی فعالیت دانشجو در دوران پژوهشی

دانشجو موظف است پس از تصویب رسالهٔ دکتری به طور تمام وقت در آزمایشگاه تحقیقاتی به انجام رسالهٔ دکتری بپردازد. انجام فعالیت آموزشی دیگر با تأیید استاد راهنما و مشروط بر آنکه آسیبی به فعالیت پژوهشی وی وارد نشود بلامانع است.

تبصره ۱- برای ثبت نام در هر نیمسال دانشجو باید گزارش کوتاهی از فعالیت‌های پژوهشی خود و میزان پیشرفت رسالهٔ دکتری نوشته و استاد راهنما آن‌را تأیید کند. این فرم‌ها در پروندهٔ دانشجو نگهداری خواهد شد. در صورت عدم تأیید استاد راهنما از فعالیت تمام وقت دانشجو و عدم رضایت از پیشرفت رسالهٔ دانشجو موضوع در شورای بخش تخصصی مربوطه بررسی و در مورد ادامهٔ تحصیل دانشجو تصمیم‌گیری شده و نظر بخش مربوط جهت تأیید به شورای تحصیلات تکمیلی دانشگده منعکس خواهد شد.

تبصره ۲- چنانچه دانشجو در مدت مجاز تحصیل (۴ سال) نتواند مرحلهٔ پژوهشی را به اتمام رساند و برای ادامهٔ تحصیل درخواست افزایش سنوات کند، موضوع به همراه گزارش پیشرفت رسالهٔ وی در شورای تحصیلات تکمیلی- پژوهشی بررسی خواهد شد.

۲-۵- دفاع از رساله

پس از تدوین رساله توسط دانشجو، استاد راهنما آمادگی دانشجو را جهت برگزاری مراسم دفاع از رساله همراه با یک نسخه از رساله و حداقل یک مقاله چاپ شده و یا پذیرفته شده برای چاپ در مجلات دارای نمایه بین‌المللی برای معاون تحصیلات تکمیلی- پژوهشی دانشکده ارسال می‌کند. معاون تحصیلات تکمیلی دانشکده، رساله و مقالات را به صورت محرمانه جهت داوری برای یکی از اعضای هیئت علمی خارج از دانشکده با تخصص مربوطه ارسال می‌کند. پس از تأیید بلامانع بودن دفاع از رساله توسط داور، مراتب در شورای تحصیلات تکمیلی- پژوهشی دانشکده مطرح و در صورت تأیید بلامانع بودن دفاع توسط این شورا، هیأت داوران را جهت برگزاری جلسه دفاع از رساله تعیین خواهد کرد.

دفاع از رساله در جلسه‌ای با حضور هیأت داوران (متشکل از استاد (اساتید) راهنما، استاد مشاور (در صورت موجود بودن)، یک داور داخلی و دو داور از خارج دانشکده و نمایندهٔ شورای تحصیلات تکمیلی- پژوهشی انجام خواهد شد. پس از ارائهٔ کارهای پژوهشی مربوط به رساله، دانشجو به سئوال‌های هیأت داوران پاسخ می‌دهد. هیأت داوران، جلسه محرمانه خود را به منظور اعلام نظر تشکیل و در مورد تایید (در سه سطح عالی، خیلی خوب و خوب) و یا عدم تأیید اظهار نظر می‌کند. در صورت عدم تایید، هیات داوران در مورد نحوه ادامه کار دانشجو تصمیم گیری خواهد کرد.

۳-تعداد و نوع واحدهای درسی:

تعداد کل واحدهای درسی دورهٔ دکتری در تمام گرایش‌های رشتهٔ شیمی ۳۶ واحد درسی به صورت زیر است.

دروس نظری	۱۲ واحد
رساله	۲۴ واحد

۳-۱- دروس نظری:

دروس نظری دورهٔ دکتری در تمام گرایش‌های رشتهٔ شیمی ۱۲ واحد شامل ۶ واحد الزامی (ازجدول دروس اصلی) و ۶ واحد اختیاری (از جدول دروس اختیاری) می‌باشد. دانشجو با نظر معاون تحصیلات تکمیلی- پژوهشی دانشکده (تا قبل از انتخاب استاد راهنما) و یا استاد راهنما، ۱۲ واحد درسی را در دو نیمسال از بین واحدهای درسی ارائه شده انتخاب می‌کند.

تبصره: در رشتهٔ نانوشیمی گذراندن یک درس الزامی مشترک میان کلیهٔ گرایش‌ها و یک درس از دروس اصلی گرایش الزامی است.

۳-۲- رساله:

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

ب- رساله باید دارای جامعیت باشد به نحوی که در زمینهٔ تحقیقی که دانشجو انجام می‌دهد دستاورد قابل ملاحظه‌ای کسب کند.

پ- حداقل یک مقاله مورد نیاز برای دفاع از رساله براساس موضوع تحقیقی رساله نوشته شده باشد. این مقاله باید به طور کامل سهم دانشجو باشد و دانشجوی دیگری در آن مشارکت نداشته باشد. در ضمن نام استاد (اساتید) راهنما باید روی مقاله باشد.

تبصره: ارائه حداقل یک سمینار مستخرج از رساله دکتری توسط دانشجو در سمینارها و یا کنفرانس های داخلی یا بین الملل معتبر که در آن صرفا نام دانشجو و استاد (اساتید) راهنما قید شده باشد، در طول دورهٔ دکتری الزامی است.

۴- شرایط و ضوابط ورود به دوره دکتری رشتهٔ شیمی

الف - دارا بودن مدرک کارشناسی ارشد در رشته‌های علوم و مهندسی

ب - پذیرفته شدن در آزمون ورودی. نحوه و شرایط پذیرش بر اساس مقرراتی است که هر سال توسط دانشگاه اعلام خواهد شد.

پ - مصاحبه: داوطلبان ورود به دورهٔ دکتری در جلسهٔ مصاحبهٔ علمی شرکت می‌نمایند و در این جلسه میزان دانش دانشجو در زمینهٔ رشتهٔ مورد نظر و توانایی و تسلط وی بر کارهای پژوهشی سنجیده می‌شود.

ت – قبولی در آزمون زبان انگلیسی مطابق ضوابط دانشگاه تهران.

فصل دوم

جداول دروس

جداول دروس

شیمی - شیمی آلی

جدول ۱- الف. جدول دروس جبرانی

رشته شیمی-شیمی آلی　　مقطع: دکتری

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات		
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی
۱	شیمی آلی پیشرفته	۳	۳		۴۸	۴۸	
۲	سنتز مواد آلی	۳	۳		۴۸	۴۸	
۳	طیف سنجی مواد آلی	۳	۳		۴۸	۴۸	

*در صورتیکه دانشجو این دروس را در دوره کارشناسی ارشد نگذرانده باشد، گذراندن این دروس به صورت جبرانی الزامی است. اگر دانشجو در مقطع قبلی این دروس را تحت عنوان دیگری گذرانده باشد، شورای بخش تخصصی می‌تواند با تطبیق آن با محتوای این دروس تصمیم بگیرد.

جدول ۱-ب. جدول دروس اصلی

رشته شیمی-شیمی آلی*

مقطع: دکتری

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات			پیش نیاز**
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی	
۱	NMR پیشرفته	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۲	سنتز پیشرفته مواد آلی	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۳	حد واسط‌های فعال	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
	جمع	۹	۹		۱۴۴	۱۴۴	-	

*دانشجو موظف است ۶ واحد از بین دروس این جدول را با موافقت استاد راهنما و یا شورای تحصیلات تکمیلی دانشکدهٔ شیمی انتخاب کند. دانشجو می‌تواند یک درس از این جدول را با نظر استاد راهنما به عنوان درس اختیاری انتخاب کند.

**در صورتیکه دانشجو این دروس را در دوره کارشناسی ارشد نگذرانده باشد، گذراندن این دروس به صورت جبرانی الزامی است. اگر دانشجو در مقطع قبلی این دروس را تحت عنوان دیگری گذرانده باشد، شورای بخش تخصصی می‌تواند با تطبیق آن با محتوای این دروس تصمیم بگیرد.

جدول ۱-پ. جدول دروس اختیاری

رشته : شیمی-شیمی آلی* مقطع: دکتری

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات			پیش نیاز
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی	
۱	مباحثی در استرئوشیمی	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۲	شیمی حالت برانگیخته	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۳	شیمی فیزیک آلی پیشرفته	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۴	شیمی آلی زیستی	۳	۳	-	۴۸	۴۸		سنتز پیشرفته مواد آلی
۵	طراحی و سنتز دارو	۳	۳	-	۴۸	۴۸		سنتز پیشرفته مواد آلی
	جمع	۱۵	۱۵		۲۴۰	۲۴۰	-	

دانشجو می‌تواند دروس اختیاری خود را از این جدول انتخاب کند. همچنین دانشجو می‌تواند یکی از دروس جدول ۱-ب را با نظر استاد راهنما به عنوان درس اختیاری انتخاب کند.

*دانشجو می‌تواند ۳ واحد از واحدهای اختیاری خود را از بین دروس دکتری رشته‌های علوم و مهندسی با رعایت شرایط زیر انتخاب نماید.

الف- دروسی که انتخاب می‌کند برای انجام پایان نامه ضروری باشد.

ب- از دروس اصلی سایر رشته‌ها و یا دروس اصلی یا اختیاری رشته‌های دکتری شیمی باشد.

جداول دروس

شیمی - شیمی پلیمر

جدول ۲-الف. جدول دروس جبرانی

رشته شیمی-شیمی پلیمر

مقطع: دکتری

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات		
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی
۱	شیمی و سینتیک پلیمریزاسیون	۳	۳		۴۸	۴۸	
۲	شناسایی مواد پلیمری	۳	۳		۴۸	۴۸	

*در صورتیکه دانشجو این دروس را در دوره کارشناسی ارشد نگذرانده باشد، گذراندن این دروس به صورت جبرانی الزامی است. اگر دانشجو در مقطع قبلی این دروس را تحت عنوان دیگری گذرانده باشد، شورای بخش تخصصی می‌تواند با تطبیق آن با محتوای این دروس تصمیم بگیرد.

جدول ۲-ب. جدول دروس اصلی

رشته: شیمی-شیمی پلیمر*

مقطع: دکتری

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات			پیش نیاز**
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی	
۱	شیمی فیزیک پیشرفته پلیمرها	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۲	سنتز و سینتیک پیشرفته پلیمرها	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۳	فناوری‌های پیشرفته پلیمرها	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
	جمع	۹	۹		۱۴۴	۱۴۴		

*دانشجو موظف است ۶ واحد از بین دروس این جدول را با موافقت استاد راهنما و یا شورای تحصیلات تکمیلی دانشکدهٔ شیمی انتخاب کند. دانشجو می‌تواند یک درس از این جدول را با نظر استاد راهنما به عنوان درس اختیاری انتخاب کند.

**در صورتیکه دانشجو این دروس را در دوره کارشناسی ارشد نگذرانده باشد، گذراندن این دروس به صورت جبرانی الزامی است. اگر دانشجو در مقطع قبلی این دروس را تحت عنوان دیگری گذرانده باشد، شورای بخش تخصصی می‌تواند با تطبیق آن با محتوای این دروس تصمیم بگیرد.

جدول ۲-پ. جدول دروس اختیاری

رشته شیمی-شیمی پلیمر* مقطع: دکتری

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات			پیش نیاز
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی	
۱	شیمی و فناوری اصلاح پلیمرها	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۲	شیمی و فناوری کامپوزیت‌های پلیمری	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۳	پلیمرهای معدنی	۳	۳	-	۴۸	۴۸		
۴	مباحث پیشرفته در پلیمرها	۳	۳	-	۴۸	۴۸		
	جمع	۱۲	۱۲		۱۹۲	۱۹۲	-	

دانشجو می‌تواند دروس اختیاری خود را از این جدول انتخاب کند. همچنین دانشجو می‌تواند یکی از دروس جدول ۲-ب را با نظر استاد راهنما به عنوان درس اختیاری انتخاب کند.

*دانشجو می‌تواند ۳ واحد از واحدهای اختیاری خود را از بین دروس دکتری رشته‌های علوم و مهندسی با رعایت شرایط زیر انتخاب نماید.

الف- دروسی که انتخاب می‌کند برای انجام پایان نامه ضروری باشد.

ب- از دروس اصلی سایر رشته‌ها و یا دروس اصلی یا اختیاری رشته‌های دکتری شیمی باشد.

جداول دروس

شیمی - شیمی تجزیه

جدول ۳- الف. جدول دروس جبرانی

رشته: شیمی-شیمی تجزیه

مقطع: دکتری

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات		
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی
۱	الکتروشیمی تجزیه‌ای	۳	۳		۴۸	۴۸	
۲	روشهای فیزیکی و شیمیایی جداسازی	۳	۳		۴۸	۴۸	
۳	طیف‌بینی اتمی تجزیه‌ای	۳	۳		۴۸	۴۸	

*در صورتیکه دانشجو این دروس را در دوره کارشناسی ارشد نگذرانده باشد، گذراندن این دروس به صورت جبرانی الزامی است. اگر دانشجو در مقطع قبلی این دروس را تحت عنوان دیگری گذرانده باشد، شورای بخش تخصصی می‌تواند با تطبیق آن با محتوای این دروس تصمیم بگیرد.

جدول ۳-ب. جدول دروس اصلی

رشته شیمی-شیمی تجزیه*

مقطع: دکتری

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات			پیش نیاز**
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی	
۱	روش‌های نوین الکتروشیمی	۳	۳		۴۸	۴۸		
۲	طیف‌بینی تجزیه‌ای پیشرفته	۳	۳		۴۸	۴۸		
۳	شیمی تجزیه در محلول‌های غیرآبی	۳	۳		۴۸	۴۸		
۴	روش‌های نوین شیمیایی و فیزیکی جداسازی	۳	۳		۴۸	۴۸		
	جمع	۱۲	۱۲		۱۹۲	۱۹۲		

*دانشجو موظف است ۶ واحد از بین دروس این جدول را با موافقت استاد راهنما و یا شورای تحصیلات تکمیلی دانشکدهٔ شیمی انتخاب کند. دانشجو می‌تواند یک درس از این جدول را با نظر استاد راهنما به عنوان درس اختیاری انتخاب کند.

**در صورتیکه دانشجو این دروس را در دوره کارشناسی ارشد نگذرانده باشد، گذراندن این دروس به صورت جبرانی الزامی است. اگر دانشجو در مقطع قبلی این دروس را تحت عنوان دیگری گذرانده باشد، شورای بخش تخصصی می‌تواند با تطبیق آن با محتوای این دروس تصمیم بگیرد.

جدول ۳-پ. جدول دروس اختیاری

رشته : شیمی-شیمی تجزیه * مقطع: دکتری

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات			پیش نیاز
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی	
۱	لیزر و کاربرد آن در شیمی تجزیه	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۲	کاربرد روش‌های آماری در شیمی تجزیه	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۳	روش‌های نوین تجزیه دستگاهی	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	طیف‌بینی تجزیه‌ای پیشرفته
۴	مباحث پیشرفته در شیمی تجزیه	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	-
۵	الکتروشیمی در محلول‌های غیرآبی	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	روش‌های نوین الکتروشیمی
۶	کاربرد کامپیوتر، الکترونیک و آمار در شیمی تجزیه	۳	۳	-	۴۸	۴۸		
۷	نانو الکتروشیمی	۳	۳	-	۴۸	۴۸		
۸	کاربرد مواد نانوساختار در جداسازی و استخراج	۳	۳	-	۴۸	۴۸		
۹	نانومواد در حسگرها و زیست حسگرها	۳	۳	-	۴۸	۴۸		
	جمع	۲۱	۲۱					

دانشجو می‌تواند دروس اختیاری خود را از این جدول انتخاب کند. همچنین دانشجو می‌تواند یکی از دروس جدول ۳-ب را با نظر استاد راهنما به عنوان درس اختیاری انتخاب کند.

*دانشجو می‌تواند ۳ واحد از واحدهای اختیاری خود را از بین دروس دکتری رشته های علوم و مهندسی با رعایت شرایط زیر انتخاب نماید.

الف- دروسی که انتخاب می‌کند برای انجام پایان نامه ضرورت داشته باشد.

ب- از دروس اصلی سایر رشته‌ها و یا دروس اصلی یا اختیاری رشته‌های دکتری شیمی باشد.

جداول دروس

شیمی - شیمی فیزیک

جدول ۴-الف. جدول دروس جبرانی

رشته : شیمی-شیمی فیزیک

مقطع: دکتری

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات		
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی
۱	ترمودینامیک آماری	۳	۳		۴۸	۴۸	
۲	شیمی فیزیک پیشرفته	۳	۳		۴۸	۴۸	
۳	مکانیک کوانتومی	۳	۳		۴۸	۴۸	

*در صورتیکه دانشجو این دروس را در دوره کارشناسی ارشد نگذرانده باشد، گذراندن این دروس به صورت جبرانی الزامی است. اگر دانشجو در مقطع قبلی این دروس را تحت عنوان دیگری گذرانده باشد، شورای بخش تخصصی می‌تواند با تطبیق آن با محتوای این دروس تصمیم بگیرد.

جدول ۴-ب. جدول دروس اصلی

رشته : شیمی-شیمی فیزیک* مقطع: دکتری

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات			پیش نیاز**
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی	
۱	مکانیک کوانتومی پیشرفته	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۲	مکانیک آماری پیشرفته	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۳	ترمودینامیک و مکانیک آماری غیرتعادلی	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
	جمع	۹	۹		۱۴۴	۱۴۴	-	

*دانشجو موظف است ۶ واحد از بین دروس این جدول را با موافقت استاد راهنما و یا شورای تحصیلات تکمیلی دانشکدهٔ شیمی انتخاب کند. دانشجو می‌تواند یک درس از این جدول را با نظر استاد راهنما به عنوان درس اختیاری انتخاب کند.

**در صورتیکه دانشجو این دروس را در دوره کارشناسی ارشد نگذرانده باشد، گذراندن این دروس به صورت جبرانی الزامی است. اگر دانشجو در مقطع قبلی این دروس را تحت عنوان دیگری گذرانده باشد، شورای بخش تخصصی می‌تواند با تطبیق آن با محتوای این دروس تصمیم بگیرد.

جدول ۴-پ. جدول دروس اختیاری

رشته : شیمی-شیمی فیزیک　　مقطع: دکتری

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات			پیش نیاز
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی	
۱	طیف سنجی مولکولی پیشرفته	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۲	مباحث پیشرفته در شیمی فیزیک	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۳	ریاضیات پیشرفته در شیمی فیزیک	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۴	شیمی محاسباتی پیشرفته	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۵	شیمی کلوئید و سطح	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
	جمع	۱۵	۱۵		۲۴۰	۲۴۰	-	

دانشجو می‌تواند دروس اختیاری خود را از این جدول انتخاب کند. همچنین دانشجو می‌تواند یکی از دروس جدول ۴-ب را با نظر استاد راهنما به عنوان درس اختیاری انتخاب کند.

دانشجو می‌تواند ۳ واحد از واحدهای اختیاری خود را از بین دروس دکتری رشته‌های علوم و مهندسی با رعایت شرایط زیر انتخاب نماید.

الف- دروسی که انتخاب می‌کند برای انجام پایان نامه ضرورت داشته باشد.

ب- از دروس اصلی سایر رشته‌ها و یا دروس اصلی یا اختیاری رشته‌های دکتری شیمی باشد.

جداول دروس

شیمی - شیمی کاربردی

جدول ۵-الف. جدول دروس جبرانی

رشته شیمی-شیمی کاربردی

مقطع: دکتری

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات		
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی
۱	واکنشگاه‌ها	۳	۳		۴۸	۴۸	
۲	پدیده‌های انتقال	۳	۳		۴۸	۴۸	
۳	شیمی و سینتیک پلیمریزاسیون	۳	۳		۴۸	۴۸	

*در صورتیکه دانشجو این دروس را در دوره کارشناسی ارشد نگذرانده باشد، گذراندن این دروس به صورت جبرانی الزامی است. اگر دانشجو در مقطع قبلی این دروس را تحت عنوان دیگری گذرانده باشد، شورای بخش تخصصی می‌تواند با تطبیق آن با محتوای این دروس تصمیم بگیرد.

جدول ۵-ب. جدول دروس اصلی

رشته: شیمی-شیمی کاربردی *

مقطع: دکتری

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات			پیش نیاز**
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی	
۱	پدیده‌های انتقال پیشرفته	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۲	فرایندهای شیمیایی و طراحی راکتور پیشرفته	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۳	روش‌های جداسازی وخالص سازی صنعتی	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
	جمع	۹	۹		۱۴۴	۱۴۴		

*دانشجو موظف است ۶ واحد از بین دروس این جدول را با موافقت استاد راهنما و یا شورای تحصیلات تکمیلی دانشکدهٔ شیمی انتخاب کند. دانشجو می‌تواند یک درس از این جدول را با نظر استاد راهنما به عنوان درس اختیاری انتخاب کند.

**در صورتیکه دانشجو این دروس را در دوره کارشناسی ارشد نگذرانده باشد، گذراندن این دروس به صورت جبرانی الزامی است. اگر دانشجو در مقطع قبلی این دروس را تحت عنوان دیگری گذرانده باشد، شورای بخش تخصصی می‌تواند با تطبیق آن با محتوای این دروس تصمیم بگیرد.

جدول ۵-پ. جدول دروس اختیاری

رشته : شیمی-شیمی کاربردی *

مقطع: دکتری

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات			پیش نیاز
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی	
۱	طراحی و کاربرد کاتالیزگرهای بستردار	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۲	سنتزهای برگزیده کاربردی	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۳	آنزیم‌های صنعتی	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۴	شیمی و فناوری روانسازها	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۵	روش‌های شیمیایی لایه نشانی	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۶	فناوری‌های نوین پالایش و تبدیل گاز	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۷	فناوری‌های نوین پالایش و تبدیل نفت	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۸	طراحی تصفیه‌خانه آب و فاضلاب	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۹	شبیه‌سازی فرآیندهای شیمیایی	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۱۰	مواد افزودنی و اصلاح‌کننده‌های شیمیایی	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۱۱	طراحی فرآیندهای شیمیایی	۳	۳	-	۴۸	۴۸		
۱۲	غشاها و فرآیندهای غشایی	۳	۳	-	۴۸	۴۸		
۱۳	سنتز و سینتیک پیشرفته پلیمرها	۳	۳	-	۴۸	۴۸		
۱۴	فناوری‌های پیشرفته پلیمرها	۳	۳	-	۴۸	۴۸		

دانشجو می‌تواند دروس اختیاری خود را از این جدول انتخاب کند. همچنین دانشجو می‌تواند یکی از دروس جدول ۵-ب را با نظر استاد راهنما به عنوان درس اختیاری انتخاب کند.

*دانشجو می‌تواند ۳ واحد از واحدهای اختیاری خود را از بین دروس دکتری رشته‌های علوم و مهندسی با رعایت شرایط زیر انتخاب نماید.

الف- دروسی که انتخاب می‌کند برای انجام پایان نامه ضرورت داشته باشد.

ب- از دروس الزامی سایر رشته‌ها و یا دروس اصلی یا اختیاری رشته‌های دکتری شیمی باشد.

جداول دروس

شیمی - شیمی معدنی

جدول ۶-الف.جدول دروس جبرانی

رشته : شیمی-شیمی معدنی مقطع: دکتری

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات		
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی
۱	شیمی معدنی پیشرفته	۳	۳		۴۸	۴۸	
۲	سینتیک و ترمودینامیک واکنش‌های معدنی	۳	۳		۴۸	۴۸	
۳	طیف بینی معدنی	۳	۳		۴۸	۴۸	

*در صورتیکه دانشجو این دروس را در دوره کارشناسی ارشد نگذرانده باشد، گذراندن این دروس به صورت جبرانی الزامی است. اگر دانشجو در مقطع قبلی این دروس را تحت عنوان دیگری گذرانده باشد، شورای بخش تخصصی می‌تواند با تطبیق آن با محتوای این دروس تصمیم بگیرد.

جدول ۶-ب. جدول دروس اصلی

رشته: شیمی-شیمی معدنی* مقطع: دکتری

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات			پیش نیاز**
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی	
۱	ساختار و پیوند در ترکیبات معدنی	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۲	شیمی فلزات واسطه	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۳	کاتالیزگرهای همگن و ناهمگن	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۴	تعیین ساختار با پراش پرتو X	۳	۳	-	۴۸	۴۸		
	جمع	۱۲	۱۲		۱۹۲	۱۹۲	-	

*دانشجو موظف است ۶ واحد از بین دروس این جدول را با موافقت استاد راهنما و یا شورای تحصیلات تکمیلی دانشکدهٔ شیمی انتخاب کند. دانشجو می‌تواند یک درس از این جدول را با نظر استاد راهنما به عنوان درس اختیاری انتخاب کند.

**در صورتیکه دانشجو این دروس را در دوره کارشناسی ارشد نگذرانده باشد، گذراندن این دروس به صورت جبرانی الزامی است. اگر دانشجو در مقطع قبلی این دروس را تحت عنوان دیگری گذرانده باشد، شورای بخش تخصصی می‌تواند با تطبیق آن با محتوای این دروس تصمیم بگیرد.

جدول ۶-پ. جدول دروس اختیاری

رشته شیمی-شیمی معدنی*

مقطع: دکتری

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات			پیش نیاز
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی	
۱	مهندسی بلور	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۲	روش‌های طیف بینی کاتالیزگرها	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۳	فوتوشیمی ترکیبات معدنی	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۴	الکتروشیمی ترکیبات معدنی	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۵	زیست شیمی معدنی	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۶	پلیمرهای معدنی	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۷	مباحث پیشرفته در شیمی معدنی	۳	۳	-	۴۸	۴۸		
	جمع	۱۸	۱۸		۳۳۶	۳۳۶	-	

*دانشجو می‌تواند دروس اختیاری خود را از این جدول انتخاب کند. همچنین دانشجو می‌تواند یکی از دروس جدول ۶-ب را با نظر استاد راهنما به عنوان درس اختیاری انتخاب کند.

*دانشجو می‌تواند ۳ واحد از واحدهای اختیاری خود را از بین دروس دکتری رشته‌های علوم و مهندسی با رعایت شرایط زیر انتخاب نماید.

الف- دروسی که انتخاب می‌کند برای انجام پایان نامه ضرورت داشته باشد.

ب- از دروس اصلی سایر رشته‌ها و یا دروس اصلی یا اختیاری رشته‌های دکتری شیمی باشد.

جداول دروس

شیمی – نانو شیمی

با گرایش‌های نانوپلیمر، سوپرامولکول، نانو معدنی و نانونظری

دروس جبرانی دکترای نانو شیمی:

با توجه به نوع گرایش دانشجو، دروس جبرانی از لیست دروس مندرج در جداول ۱-الف (در گرایش سوپرامولکول)، ۲-الف (در گرایش نانوپلیمر)، ۴-الف (در گرایش نانونظری)، ۶-الف (در گرایش نانومعدنی) و یا جدول زیر (برای همه گرایش‌های نانوشیمی) مبنی بر تشخیص معاونت تحصیلات تکمیلی انتخاب می‌شود.

جدول ۷-الف. جدول دروس جبرانی

رشته: نانوشیمی

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات		
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی
۱	روش‌های سنتز نانو مواد	۳	۳		۴۸	۴۸	
۲	شناسایی و تعیین ساختار نانو مواد	۳	۳		۴۸	۴۸	
۳	جمع	۶	۶		۹۶	۹۶	

*در صورتیکه دانشجو این دروس را در دوره کارشناسی ارشد نگذرانده باشد، گذراندن این دروس به صورت جبرانی الزامی است. اگر دانشجو در مقطع قبلی این دروس را تحت عنوان دیگری گذرانده باشد، شورای بخش تخصصی می‌تواند با تطبیق آن با محتوای این دروس تصمیم بگیرد.

جدول ۷-ب. جدول دروس اصلی مشترک

رشته: نانوشیمی　　مقطع: دکتری

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات			پیش نیاز**
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی	
۱	مباحثی در نانوشیمی و نانوفناوری	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
	جمع	۳	۳		۴۸	۴۸	-	

*دانشجو موظف است ۳ واحد این جدول را انتخاب کند.

**در صورتیکه دانشجو این دروس را در دوره کارشناسی ارشد نگذرانده باشد، گذراندن این دروس به صورت جبرانی الزامی است. اگر دانشجو در مقطع قبلی این دروس را تحت عنوان دیگری گذرانده باشد، شورای بخش تخصصی می‌تواند با تطبیق آن با محتوای این دروس تصمیم بگیرد.

جدول ۷-پ. جدول دروس تخصصی

رشته: نانوشیمی گرایش نانوپلیمر* مقطع: دکتری

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات			پیش نیاز**
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی	
۱	شیمی فیزیک پیشرفته پلیمرها	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۲	سنتز و سینتیک پیشرفته پلیمرها	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۳	فناوری‌های پیشرفته پلیمرها	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
	جمع	۹	۹		۱۴۴	۱۴۴		

*دانشجو موظف است ۳ واحد از بین دروس این جدول را با موافقت استاد راهنما و یا شورای تحصیلات تکمیلی دانشکدهٔ شیمی انتخاب نماید.

**در صورتیکه دانشجو این دروس را در دوره کارشناسی ارشد نگذرانده باشد، گذراندن این دروس به صورت جبرانی الزامی است. اگر دانشجو در مقطع قبلی این دروس را تحت عنوان دیگری گذرانده باشد، شورای بخش تخصصی می‌تواند با تطبیق آن با محتوای این دروس تصمیم بگیرد.

جدول ۷-ت. جدول دروس اختیاری

رشته: نانوشیمی گرایش نانوپلیمر* **مقطع: دکتری**

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات			پیش نیاز
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی	
۱	نانو فناوری پلیمرها	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۲	نانوکامپوزیت‌های پلیمری	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۳	نانوفناوری غشاها	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۴	مباحث پیشرفته در نانوپلیمرها	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۵	پلیمرها در سطح و لایه‌های مرزی	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۶	نانوداروها و سامانه‌های انتقال دارو	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
	جمع	۱۸	۱۸		۲۸۸	۲۸۸	-	

دانشجو می‌تواند دروس اختیاری (۶ واحد) خود را از این جدول انتخاب کند. همچنین دانشجو می‌تواند یکی از دروس جدول ۷-ب را با نظر استاد راهنما به عنوان درس اختیاری انتخاب کند.

*دانشجو می‌تواند ۳ واحد از واحدهای اختیاری خود را از بین دروس دکتری رشته های علوم و مهندسی با رعایت شرایط زیر انتخاب نماید.

الف- دروسی که انتخاب می‌کند برای انجام پایان نامه ضرورت داشته باشد.

ب- از دروس اصلی سایر رشته‌ها و یا دروس اصلی یا اختیاری رشته‌های دکتری شیمی باشد.

جدول ۷-ث. جدول دروس تخصصی

رشته : نانوشیمی گرایش نانوسوپرامولکول* مقطع: دکتری

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات			پیش نیاز
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی	
۱	NMR پیشرفته	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	طیف سنجی آلی
۲	سنتز پیشرفته مواد آلی	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	سنتز مواد آلی
۳	حد واسطهای فعال	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	شیمی‌آلی پیشرفته
	جمع	۹	۹		۱۴۴	۱۴۴	-	

*دانشجو موظف است ۳ واحد از بین دروس این جدول را با موافقت استاد راهنما و یا شورای تحصیلات تکمیلی دانشکدهٔ شیمی انتخاب نماید.

جدول ۷-ج. جدول دروس اختیاری

رشته : نانوشیمی گرایش نانو سوپرامولکول* مقطع: دکتری

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات			پیش نیاز
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی	
۱	شیمی سوپرامولکولی	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	روشهای سنتز مواد نانو ساختار
۲	نانوساختارهای خودآرا	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	شیمی سوپرامولکول
۳	نانوداروها و سامانه‌های انتقال دارو	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۴	مباحثی در نانوشیمی	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
	جمع	۱۲	۱۲		۱۹۲	۱۹۲	-	

دانشجو می‌تواند دروس اختیاری (۶ واحد) خود را از این جدول انتخاب کند. همچنین دانشجو می‌تواند یکی از دروس جدول ۷-ث را با نظر استاد راهنما به عنوان درس اختیاری انتخاب کند.

*دانشجو می‌تواند ۳ واحد از واحدهای اختیاری خود را از بین دروس دکتری رشته های علوم و مهندسی با رعایت شرایط زیر انتخاب نماید.

الف- دروسی که انتخاب می‌کند برای انجام پایان نامه ضرورت داشته باشد.

ب- از دروس اصلی سایر رشته‌ها و یا دروس اصلی یا اختیاری رشته‌های دکتری شیمی باشد.

جدول ۷-چ. جدول دروس تخصصی

رشته : نانوشیمی گرایش نانو موادمعدنی* مقطع: دکتری

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات			پیش نیاز**
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی	
۱	ساختار و پیوند در ترکیبات معدنی	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	شیمی معدنی پیشرفته
۲	شیمی فلزات واسطه	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	شیمی معدنی پیشرفته
۳	کاتالیزگرهای همگن و ناهمگن	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	شیمی معدنی پیشرفته
۴	تعیین ساختار با پراش پرتو X	۳	۳	-	۴۸	۴۸		شیمی معدنی پیشرفته
	جمع	۱۲	۱۲		۱۹۲	۱۹۲	-	

*دانشجو موظف است ۳ واحد از بین دروس این جدول را با موافقت استاد راهنما و یا شورای تحصیلات تکمیلی دانشکدهٔ شیمی انتخاب نماید.

جدول ۷-ح. جدول دروس اختیاری

رشته : نانوشیمی گرایش نانو موادمعدنی* مقطع: دکتری

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات			پیش نیاز
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی	
۱	مواد نانومتخلخل	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۲	مباحث پیشرفته در نانومواد معدنی	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	
۳	نانوکاتالیزگرهای معدنی	۳	۳	-	۴۸	۴۸		شیمی سطح و حالت جامد
۴	روش‌های سنتز نانو مواد معدنی	۳	۳	-	۴۸	۴۸		
	جمع	۱۲	۱۲				-	

دانشجو می‌تواند دروس اختیاری (۶ واحد) خود را از این جدول انتخاب کند. همچنین دانشجو می‌تواند یکی از دروس جدول ۷-ج را با نظر استاد راهنما به عنوان درس اختیاری انتخاب کند.

*دانشجو می‌تواند ۳ واحد از واحدهای اختیاری خود را از بین دروس دکتری رشته های علوم و مهندسی با رعایت شرایط زیر انتخاب نماید.

الف- دروسی که انتخاب می‌کند برای انجام پایان نامه ضرورت داشته باشد.

ب- از دروس اصلی سایر رشته‌ها و یا دروس اصلی یا اختیاری رشته‌های دکتری شیمی باشد.

جدول ۷-خ. جدول دروس تخصصی

رشته : نانوشیمی گرایش نانوشیمی نظری* مقطع: دکتری

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات			پیش نیاز**
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی	
۱	مکانیک کوانتومی پیشرفته	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	شیمی کوانتومی
۲	مکانیک آماری پیشرفته	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	ترمودینامیک آماری
۳	ترمودینامیک و مکانیک آماری غیرتعادلی	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	شیمی فیزیک پیشرفته
	جمع	۹	۹		۱۴۴	۱۴۴	-	

*دانشجو موظف است ۳ واحد از بین دروس این جدول را با موافقت استاد راهنما و یا شورای تحصیلات تکمیلی دانشکدهٔ شیمی انتخاب نماید.

جدول ۷-د. جدول دروس اختیاری

رشته : نانوشیمی گرایش نانو شیمی نظری* **مقطع: دکتری**

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات			پیش نیاز
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی	
۱	مباحث پیشرفته در نانوشیمی نظری	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	ندارد
۲	مکانیک آماری سیستم‌های ناهمگن	۳	۳	-	۴۸	۴۸	-	مکانیک آماری پیشرفته
۳	نانوشیمی فیزیک محاسباتی	۳	۳		۴۸	۴۸		ندارد
	جمع	۹	۹		۱۴۴	۱۴۴	-	

دانشجو می‌تواند دروس اختیاری (۶ واحد) خود را از این جدول انتخاب کند. همچنین دانشجو می‌تواند یکی از دروس جدول ۷-خ را با نظر استاد راهنما به عنوان درس اختیاری انتخاب کند.

*دانشجو می‌تواند ۳ واحد از واحدهای اختیاری خود را از بین دروس دکتری رشته های علوم و مهندسی با رعایت شرایط زیر انتخاب نماید.

الف- دروسی که انتخاب می‌کند برای انجام پایان نامه ضرورت داشته باشد.

ب- از دروس اصلی سایر رشته‌ها و یا دروس اصلی یا اختیاری رشته‌های دکتری شیمی باشد.

فصل سوم

سر فصل دروس

سرفصل دروس دکتری

رشته : شیمی - شیمی آلی

عنوان درس به فارسی: NMR پیشرفته	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	✓ اصلی	✓ نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
عنوان درس به انگلیسی: Advanced NMR	تعداد ساعت: ۴۸		اختیاری	نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر نظریه و کاربرد NMR

سرفصل درس:

دینامیک سیستم های اسپینی هسته (معادله حرکت، هامیلتونین اسپین هسته، عملگرهای آسایش، دینامیک اسپین در اثر واکنش‌های شیمیایی)، بکارگیری هامیلتونی اسپین هسته (تئوری هامیلتونی میانگین، هامیلتونی میانگین در اثر اغتشاشات غیرمتناوب)، طیف سنجی فوریه یک بعدی (تئوری پاسخ، توضیح کلاسیک طیف سنجی فوریه، حساسیت طیف سنجی فوریه، توضیح مکانیک کوانتومی طیف سنجی فوریه، انتقال قطبش بین هسته‌های متفاوت، بررسی فرآیندهای دینامیکی، آسایش، و تبادل شیمیایی، رزونانس دوگانه فوریه)، انتقالات کوانتومی چندگانه (تعداد انتقالات، آشکارسازی انتقالات کوانتومی چندگانه به وسیله NMR موج پیوسته، طیف سنجی کوانتومی چندگانه دامنه بر حسب زمان، آسایش همفاز شدگی چند کوانتومی)، طیف سنجی فوریه دو بعدی (اصول اولیه، تئوری تفصیلی طیف سنجی دو بعدی، مسیرهای انتقال همفازی، تبدیل فوریه دو بعدی، شکل پیک ها در طیف های دو بعدی، بکارگیری طیف های دو بعدی، عبارت های عملگر و ساختار های چندگانگی در طیف های دو بعدی، حساسیت طیف های دو بعدی)، جدایی دو بعدی برهم کنش ها (اصول اولیه، جدایی جابه جایی های شیمیایی و کوپلاژ های عددی در فاز های همگرا، جدایی جابه جایی های شیمیایی و کوپلاژ های دو قطبی در فاز های جهت دار، جدایی جابه جایی های شیمیایی همگرا و واگرا)، روش های همیستگی دو بعدی بر اساس انتقال همفازی (انتقال همفازی در طیف سنجی ارتباط دو بعدی: فراوانی ها و قواعد انتخاب، طیف سنجی ارتباط دو بعدی بین هسته های مشابه، آزمایش های ارتباط دوبعدی اصلاح شده، طیف سنجی کوانتومی چندگانه بین هسته های مشابه، انتقال همفازی بین هسته های متفاوت)، مطالعه فرآیند های دینامیکی به وسیله طیف سنجی دوبعدی تبادلی (انتقال قطبش در روش های یک بعدی و دو بعدی، انتخاب مسیر های انتقال هم فازی، آسایش متقابل و تبادل در سیستم های فاقد کوپلاژ های مشخص، طیف سنجی تبادل دو بعدی در سیستم های اسپینی جفت شده، طیف سنجی اختلاف تبادل دو بعدی، تعیین ثابت سرعت به وسیله طیف سنجی آکوردئون، آسایش متقابل و اثر هسته ای اورهاوزر، تبادل شیمیایی، آشکارسازی غیر مستقیم آسایش طولی در سیستم های اسپینی چند سطحی، فرآیند های دینامیکی در جامدات)، تصویر برداری رزونانس مغناطیسی هسته (طبقه بندی تکنیک های تصویر برداری، روش های نقاط متوالی، روش خطوط متوالی، روش صفحه های متوالی، مقایسه حساسیت و زمان انجام روش های تصویر برداری مختلف)

منابع

[1] Ernst, R. R.; Bodenhausen, G.; Wokaun, A.; *Principles of Nuclear Magnetic Resonance in One and Two Dimensions*, Clarendon Press (1990)

[2] Gunther, H.; *NMR Spectriscopy-Basic Principles, Concepts and Applications in Chemistry*, 3rd ed., Wiley (2013)

[3] Macomber, R. S.; *A Complete Introduction to Modern NMR Spectroscopy*, Wiley (1998)

[4] Claridge, T. D. W.; *High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry*, 3rd ed., Elsevier 2016

عنوان درس به فارسی: سنتز پیشرفته مواد آلی عنوان درس به انگلیسی: Advanced organic synthesis	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	✓ اصلی	✓ نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			اختیاری	نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر سنتز پیشرفته مواد آلی

سرفصل دروس:

کنترل شیمی فضایی ماکروسیکل ها: کنترل صورت بندی حلقه های دارای اندازه متوسط، سنتز نامتقارن با حلقه های اندازه متوسط، کنترل شیمی فضایی ماکروسیکل ها در پپتید های حلقوی. واکنشهای افزایش به گروه کربونیل: القای نامتقارن ۱و۲ کیلیت نشده (اثرات فضایی و الکترونی)، پیشبینی القای نامتقارن ۱و۲ تحت کنترل کیلیت شدن. القای نامتقارن ۱و۳ از مراکز استرئوژنیک **Cβ**. القای نامتقارن به وسیله مراکز فضایی دور. افزایش انانتوگزین کاتالیتیکی گونه های آلی فلزی روی به گروه کربونیل. احیای انانتیوگزین کتون ها. احیای آنزیمی کتون ها. تشکیل انانتیوگزین سیانوهیدرین ها. افزایش انانتیوگزین آلکین ها. واکنش ها نامتقارن **ene** گروه کربونیل. عامل دار کردن موقعیت α انولات ها: آلکیل دار کردن α دیاسترئوگزین انولات های کایرال. انولات های استخلاف دار شده با هترواتم ها. آلکیل دار کردن نامتقارن انولات ها با استفاده از کمک دهنده های کایرال. آلکیل دار کردن انانتیوگزین انولات ها. هیدروکسیل دار کردن و هالوژن دار کردن موقعیت α انولات ها. واکنش‌های آلدولی: انولات های کایرال از طریق کمک دهنده های کایرال یا گروه‌های کنترل کننده کایرال. واکنش‌های تحت کنترل ماده اولیه با ترکیبات کربونیل کایرال. واکنش‌های آلدولی کاتالیتیکی انانتوگزین. افزایش آلدولی کاتالیز شده توسط پرولین. انول سیلان ها و استانان‌ها. آلیل دار کردن پیوند های **C=O** فعالی. افزایش بورونات ها. افزایش انانتوگزین واکنشگرهای آلیل بور. آلیل دار کردن دیاسترئوگزین با بور ها. سیلان ها و استانان های کایرال. افزایش آلیل سیلان ها و آلیل استانان ها به آلدئید ها بهینه شده با اسید لوییس. کنترل کیلیت شدن در آلیل دار کردن α و β-آلکوکسی آلدیید ها. واکنشگر های آلیل کروم. آلیل دار کردن کاتالیتیکی نامتقارن. استال های کایرال: واکنش های دیاسترئوگزین استال های کایرال. گلیکوزیل دار کردن. اسپایروکتال ها در سنتز ترکیبات طبیعی. هیدروبور دار کردن آلکن: هیدروبور دار کردن با. کنترل فضایی غیر حلقوی. هیدروبور دار کردن کاتالیز شده توسط فلزات. هیدروبوردار کردن نامتقارن با بوران های کایرال. هیدروبور دار کردن . هیدروسیلیل دار کردن. و هیدروآلومینیوم دار کردن نامتقارن کاتالیتیکی. احیاء اولفین ها: احیاء دیاسترئوگزین اولفین ها. هیدروژن دار کردن نامتقارن کاتالیتیکی. اکسایش اولفین ها: اپوکسی دار کردن انانتیوگزین و دیاسترئوگزین. باز شدن نامتقارن حلقه اپوکسید. سنتز آزیریدین ها. بدو لاکتونی شدن و سایر حلقوی شدن القا شدن اولفین ها به وسیله الکتروفیل ها. دی هیدروکسیل دار شدن دیاسترئوگزین و دیاسترئوگزین. آمینو هیدروکسیل دار کردن انانتیوگزین. آمینو اسید ها: هیدروژن دار کردن انانتیوگزین α و β- دی دهیدرو آمینو اسید ها. آلکیل دار کردن انولات ها در حضور کمک دهنده های کایرال. آلکیل دار کردن معادل های انیون گلایسین در حضور کاتالیزور های انتقال فاز کایرال. آمین دار کردن انولات ها. سنتز انزیمی α-آمینو اسید ها. واکنش های نامتقارن **Strecker** کاتالیتیکی. افزایش به پیوند های **C=N**. افزایش دیاسترئوگزین تحت کنترل مواد اولیه. افزایش به ایمین دارای کمک دهنده های کایرال پیوند شده به نیتروژن. تشکیل β-لاکتام ها از طریق واکنش های **Staudinger**. حلقوی شدن درون مولکولی دیاسترئوگزین یون های ایمینیوم (حلقوی شدن مانیخ، حلقوی شدن یون های آسیل ایمینیوم)، واکنش های **Pictet-Spengler**. احیای نامتقارن کاتالیتیکی ایمین هاو مشتقات آن ها. واکنش های کاتالیتیکی انانتیوگزین مانیخ و انواع آن. افزایش انانتیوگزین نوکلئوفیل های کربنی به پیوند **C=N**. افزایش مزدوج: افزایش مزدوج دیاسترئوگزین (کمک دهنده های کایرال)، افزایش مزدوج انانتیوگزین (انولات ها و سایر نوکلئوفیل های کربنی پایدار، گونه های آلی فلزی، رادیکال ها. نوکلئوفیل های هتروآتم)، احیاء مزدوج، واکنش های انانتیوگزین کاتالیتیکی **Stetter**. کربانیون های کایرال: واکنش گر های آلی لیتیم به وسیله جابه جایی فلز در واکنش گر های آلی قلع. کربانیون ها به وسیله روش های احیاء. کربانیون های کایرال به وسیله پروتون زدایی. کربانیون های پایدار شده سولفوکسید و فسفر،عامل دار کردن انانتیوگزین اولفین ها به وسیله فلزات. آلیل دار کردن کاتالیز شده به وسیله فلز: واکنش های دیاسترئوگزین و انانتیوگزین کاتالیز شده توسط پالادیوم. واکنش های انانتیوگزین کاتالیز شده توسط ایندیم. واکنش های S_N2 کاتالیز شده به وسیله مس. واکنش های باز شدن نامتقارن حلقه در هتروسیکل های غیر اشباع. تولید حلقه سیکلوپروپان و واکنش های داخل شدن به پیوند **C-H**: تولید حلقه سیکلوپروپان دیاسترئوگزین و انانتوگزین با کاربنوییدهای تولید شده از دی آزو آلکان ها. واکنش های دیاسترئوگزین و انانتیوگزین تولید حلقه سیکلوپروپان سیمونز-اسمیت. واکنش های دیاسترئوگزین و انانتیوگزین کاتالیتیکی داخل شدن به پیوند **C-H**. آمین دار کردن پیوند های **C-H**. نوآرایی های سیگماتروپی: نوآرایی های سیگماتروپی [۳و۳] کلایزن و انواع آن (واکنش های دیاسترئوگزین، انانتیوگزین و کمک دهنده های کایرال)، نوآرایی های سیگماتروپی [۳و۳] کوپ و انواع آن، نوآرایی های سیگماتروپی [۲و۳]، نوآرایی ویتیگ. نوآرایی های ایلید های اکسونیوم، آمونیوم و سولفوکسید. واکنش های **Ene**. حلقوی شدن **Nazarov**. واکنش های دیلز-آلدر و هترو دیلز-آلدر: واکنش های درون مولکولی و بین مولکولی دیاسترئوگزین دیلز-آلدر (کمک دهنده های کایرال)، واکنش های کاتالیتیکی انانتیوگزین دیلز-آلدر، واکنش های انانتیوگزین و دیاسترئوگزین هترو دیلز-آلدر. واکنش های حلقه افزایی [۲+۲] و [۲+۲]. حلقه افزایی دیاسترئوگزین [۱و۳] دوقطبی (تحت کنترل ماده اولیه، کمک دهنده های کایرال)، حلقه افزایی [۳+۱] دو قطبی انانتیوگزین کاتالیتیکی، حلقه افزایی [۳+۳] با معادل های تری متیلن متان، حلقه افزایی کتن ها، حلقه افزایی فوتوشیمیایی [۲+۲]

منابع:

[1] Carreira, E. M.; Kvaerno, L.; *Classics in Stereoselective Synthesis*, Wiley-VCH (2009)

عنوان درس به فارسی: حد واسط‌های فعال عنوان درس به انگلیسی: Reactive intermediates	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	✓ اصلی	عملی	✓ نظری
			اختیاری	نظری	
				عملی	
دروس پیش‌نیاز: ندارد					

هدف: آشنائی و تسلط بر بعضی اصول واکنشها و مکانیسم واکنش‌های آلی

سرفصل دروس:

- ✓ کربوکاتیون ها: یونهای کربونیوم و کاربنیوم، ساختار و شکل هندسی کربوکاتیون ها، تولید کربوکاتیون ها، پایداری و نوآرایی کربوکاتیون ها، یون های غیر کلاسیک، رادیکال کاتیون ها، اغتشاش ایزوتوپی تفارن، کربوکاتیون های مقاوم تحت شرایط پایدار یونی، واکنش پذیری کربوکاتیون ها(معیار N_+، ساعت آزید، همبستگی سرعت-تعادل، مقیاس Mayr برای هسته دوستی و الکترون دوستی)، عبور از مرز بین واکنش های جانشینی هسته دوستی SN1 و SN2 در کربن آلیفاتیک (نمودار های مختصات واکنش O'Ferrall)
- ✓ کربانیون ها: ساختار کربانیون ها، شکل هندسی، شیمی فضایی و راسمیک شدن، خواص مغناطیسی و NMR، خواص بازی کربانیون ها و خواص اسیدی کربن اسید ها، اثرات ساختار بر خواص بازی کربانیون ها (پیوند های C-H با هیبرید های sp^3, sp^2 و sp)، اندازه گیری خاصیت اسیدی کربن در فازهای متراکم، (اسیدیته کربن در DMSO، جفت شدن یون ها، اسیدیته در فاز گازی به نسبت فاز متراکم)، فعالیت (حدواسط های کربانیونی در واکنش های حذفی و افزایشی (افزایش نوکلئوفیلی به آلکن ها، جانشینی نوکلئوفیلی آروماتیک)، حدواسط های کربانیونی در نوآرایی ها، واکنش های کربانیون ها در فاز گازی)
- ✓ رادیکال ها: ساختار و خواص فضا شیمیایی رادیکال های آزاد، پایداری رادیکال ها و انرژی شکستن پیوند های C-H (اثرات استخلاف)، رادیکال های پایدار و مقاوم، رادیکال های آزاد با طول عمر زیاد، تولید و شناسایی رادیکال ها (ESR, CIDNP)
- ✓ مولکول های غیر ککوله به عنوان حدواسط های فعال: هیدروکربن های Schlenk–Brauns، قاعده هوند، طیف سنجی رزونانس اسپین الکترون در نمونه های دارای جهت گیری اتفاقی، وابستگی ارجحیت حالت اسپینی به ساختار، طیف سنجی اسپین الکترون (پارامغناطیس) در ماتریس (شکافتگی میدان صفر، قانون کوری و کاربرد آن)، وابستگی حالت اسپین به شیوه اتصال مولکول ها، اندازه گیری و تفسیر مغناطیس پذیری و حساسیت مغناطیسی.
- ✓ رادیکال-یون های آلی: تولید رادیکال یون ها، آشکار سازی و مشاهده رادیکال یون ها، ساختار رادیکال یون ها، واکنش های رادیکال کاتیون ها (ارتباط با سایر حدواسط ها)
- ✓ کاربن ها: کاربن های یکتایی (واکنش های اصلی: واکنش های افزایشی و داخل شدن)، کاربن های یکتایی پایدار (سنتز و فعالیت)، کاربن های سه تایی (تولید و واکنش های کاربن های سه تایی، مشاهده مستقیم کاربن های سه تایی، تخمین آزمایشگاهی اختلاف انرژی S-T ، کاربن های سه تایی مقاوم)
- ✓ سایر حدواسط های فعال: کربن اتمی، نایترن ها، شیمی کاربن ها و نایترن های سنتزی، یون های نایترنیوم، سیلیلن ها (و جرمیلن ها، استانیلن ها، پلامبیلن ها)، هیدروکربن های تحت فشار، آرین ها، کاتیون ها، رادیکال ها و آنیون های دارای مرکز سیلیسوم، زرمانیوم و قلع

منابع:

[1] Moss, R. A., Platz, M. S., Jones Jr, M.; *Reactive Intermediate Chemistry*, Wiely (2004)
[2] Moss, R. A., Jones Jr, M.; *Reviews of Reactive Intermediate Chemistry*, Wiely (2007)

عنوان درس به فارسی: مباحثی در استرئوشیمی	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
عنوان درس به انگلیسی: Topics in stereochemistry	تعداد ساعت: ۴۸		✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر شیمی فضائی

سرفصل درس:

- ✓ اصول کایرالیته و شیمی فضایی دینامیکی: شیمی فضایی دینامیکی ترکیبات کایرال حلقوی و غیر حلقوی
- ✓ واکنش های ایزومری شدن ترکیبات کایرال: راسمیک شدن، انانتیومری شدن، دیاسترئومری شدن، اپیمری شدن و موتاروتاسیون، دگرگونی فضایی ترکیبات کایرال- مکانیزم ها و سدهای انرژی، آتروپ ایزومر شدن، اهمیت فارماکولوژیکی و فارماکوسینتیکی راسمیک شدن
- ✓ روش های تجزیه ای: روش های نوری بررسی ترکیبات کایرال، طیف سنجی NMR، کروماتوگرافی دینامیکی، بررسی های جریات متوقف کروماتوگرافی و الکتروفورزی
- ✓ اصول سنتز نامتقارن: طبقه بندی واکنش های نامتقارن، کنترل سینتیکی و ترمودینامیکی، القای نامتقارن،
- ✓ سنتز نامتقارن با ترکیبات استرئودینامیکی: معرفی، تبدیل و انتقال کایرالیته: سنتز نامتقارن با واکنش گر های آلی لیتیم کایرال، سنتز آتروپ گزین بی آریل های دارای کایرالیته محوری، آتروپ ایزومر های غیر بی آریلی، انتقال کایرالیته و تبدیل عناصر کایرال به یکدیگر، خود بازسازی استرئوژنیکی و تقویت کایرالیته، کاتالیست نامتقارن به وسیله لیگاند های استرئوفعال، سنتز فضا گزین در فاز جامد
- ✓ تفکیک نامتقارن و تبدیل ترکیبات کایرال تحت کنترل ترمودینامیکی و سینتیکی: تبدیل نامتقارن نوع اول و دوم، تفکیک سینتیکی و تفکیک سینتیکی دینامیک، تبدیل نامتقارن سینتیکی دینامیک، تفکیک ترمودینامیکی دینامیک از پروانه های کایرال تا موتور های یک جهته: پایداری و فعالیت دنده های استرئودینامیکی، ساختار و وارونگی حلقه پروانه های مولکولی، چرخ دنده های دینامیکی در پروانه های بی آریل، تری آریل و تترا آریل، چرخ دنده های مولکولی Bevel، کمپلکس های کئوردیناسیونی پروانه مانند با کنترل هلیسیته، چرخ دنده های استاتیک و سیکلو استرئو ایزومری، ترمزها، درهای چرخان و قیچی‌های مولکولی، سوییچ‌های مولکولی کایرال، حسگرهای استرئودینامیکی، موتورهای مولکولی کایرال
- ✓ ایزومری توپولوژیکی و کایرالیته: سنتز کاتنان ها و روتاکسان ها، کاتنان های کایرال، روتاکسان های کایرال، گره ها و حلقه های Borromean، ایزومری توپولوژیکی شاتل ها، سوییچ ها، حسگر ها و چرخنده ها

منابع:

[1] Wolf, C.; *Stereochemistry of Chiral Compounds*, RSC Publishing (2008)
[2] Eliel, E. L.; Wilen, S. H.; *Stereochemistry of Organic Compounds*, Wiley (1994)

عنوان درس به فارسی: شیمی حالت برانگیخته	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
عنوان درس به انگلیسی: Excited states chemistry	تعداد ساعت: ۴۸		✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر بعضی اصول واکنشها و مکانیسم واکنش‌های آلی

سرفصل درس:

مفاهیم تعریفی، جذب نور و حالت های برانگیخته الکترونی، پیکربندی های الکترونی، ارتعاشی و اسپینی حالت های برانگیخته الکترونی، غیر فعال سازی فیزیکی حالت های برانگیخته، انتقال بین حالت ها- فرآیند های فوتوفیزیکی، انتقالات تابشی بین حالت های الکترونی، انتقالات فوتوفیزیکی بدون تابش، به سوی تئوری کلی واکنش های فوتوفیزیکی آلی بر مبنای سطوح انرژی پتانسیل، قانون متع عبور و موارد تخلف از آن، انتقال انرژی و انتقال الکترون، واکنش های افزایشی نوری و استخلافی نوری، واکنش های حلقه افزایی، ایزومری شدن و نوآرایی ها، واکنش تجزیه شدن نوری، اکسیژن یکتایی و واکنش های فوتولومینسانس

منابع:

[1] Turro, N. J.; Ramamurthy, V.; Scaiano, J. C.; *Modern Molecular Photochemistry of Organic Molecules*, University Science Books (2010)

عنوان درس به فارسی: شیمی فیزیک آلی پیشرفته	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
عنوان درس به انگلیسی: Advanced physical organic chemistry	تعداد ساعت: ۴۸		✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر بعضی اصول واکنشها و مکانیسم واکنشهای آلی

سرفصل درس:

- ✓ مروری بر مفاهیم پیوند ها: سطوح انرژی و بررسی های سینتیکی، تئوری اوربیتال مولکولی، تئوری اوربیتال مولکولی هوکل(HMO) ، کاربرد خواص تقارنی در ساده سازی محاسبات HMO، پایداری پلی ان ها، قانون هوکل و خصلت آروماتیکی، قانون هوکل و آنولن های ۴، ۶، ۸، ۱۲، ۱۴، ۱۶ و ...، آروماتیسیته در سیستم های پند حلقه ای و روش دوار، ضریب فعالیت دوار، تئوری کلر و ششتایی آروماتیکی، دخالت دافعه الکترون الکترون (در موارد ساده نظیر اتیلن در حالت پایه و برانگیخته)، برهمکنش های پیکربندی، اختلاط اوربیتال ها- ساخت مولکول های بزرگ تر
- ✓ کشش و پایداری: ترموشیمی مولکول های پایدار، ترموشیمی حدواسط های فعال، ارتباط بین ساختار و انرژی – بررسی اولیه صورت بندی، اثرات الکترونی، مولکول های تحت فشار زیاد، مکانیک مولکولی
- ✓ نیروهای پیوندی غیر کووالانسی: برهم کنش های جفت یون ها، برهم کنش های الکترواستاتیک از جمله بر هم کنش های دو قطبی، پیوند هیدروژنی، اثرات π و بر هم کنش های دو قطبی القایی، اثرات آبگریزی.
- ✓ حلال و خواص محلول ها: ترمودینامیک محلول ها، مدل سازی محاسباتی انحلال
- ✓ شیمی اسید و باز: محلول های آبی، سیستم های غیر آبی، پیش بینی قدرت اسیدی در محلول ها
- ✓ فعالیت، سینتیک و مکانیزم ها: سطوح انرژی، نمودار های مختصات واکنش، طبیعت کمپلس فعال/ حالت گذار، تئوری حالت گذار (TST)، فرضیه هاموند، اصل فعالیت در برابر گزینش پذیری، اصل **Curtin-Hammett**، کنترل سینتیکی در برابر کنترل ترمودینامیکی، واکنش های پیچیده- رمز گشایی مکانیزم ها.
- ✓ آزمایش های مرتبط با ترمودینامیک و سینتیک: اثرات ایزوتوپی، اثرات استخلافی، نمودار های **Hammett**- معمول ترین **LFER**، اثرات مرتبط با اسید و باز- روابط برونشتد.
- ✓ کاتالیز: اصول کلی، اشکال کاتالیز، کاتالیز اسید و باز برونشتد، کاتالیز آنزیمی، مکانیزم واکنش های آلی
- ✓ ساختار الکترونی: معرفی مکانیک کوانتومی، روش های محاسباتی- حل معادله شرودینگر برای سیستم های پیچیده، تئوری افتشاش- قوانین اختلاط اوربیتال ها.
- ✓ واکنش های پری سیکلیکی حرارتی: حلقه افزایی، واکنش های الکتروسیکلیکی، نوآرایی سیگماتروپیک، واکنش های **Cheletropic**
- ✓ مواد آلی الکترونیکی: پلیمر های رسانا، مواد مغناطیسی آلی، فوق رسانایی، اپتیک های غیر خطی **(NLO)**، مواد حساس به نور

منابع:

[1] Anslyn, E. V., Dougherty, D. A.; *Modern Physical Organic Chemistry*, University Science Books (2006)
[2] Lowry, T. H., Richardson k. S.; *Mechanism and Theory in Organic Chemistry*, 3rd Ed., Harper & Row (1987)
[3] Carey, F. A.; Sundberg, R. J. *Advanced Organic Chemistry. Part A: Structure and Mechanisms*, 5th Ed.
[4] Zimmerman, H. E.; *Quantum mechanics for organic chemists* (1975).

عنوان درس به فارسی: شیمی آلی زیستی عنوان درس به انگلیسی: Bioorganic chemistry	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: سنتز پیشرفته مواد آلی
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر اصول شیمی آلی در محیط زنده

سرفصل درس:

کربوهیدارت‌ها، لیپیدها، پروتئین‌ها، اسیدهای نوکلئیک، آنزیم‌ها، ویتامین‌ها، بیوانرژتیک، متابولیسم کربوهیدرات‌ها، تابولیسم لیپیدها، متابولیسم پروتئین و تعادل ازت، متابولیسم اسیدهای نوکلئیک و سنتز پروتئین، متابولیسم مواد معدنی، متابولیسم اریتروسیت، هموگلوبین و بیماری‌های وراثتی.

منابع:

[1] Schmidtchen, F.P., *Bioorganic Chemistry: Models and Applications*, Springer (2004).
[2] Hecht, Sidney M., *Bioorganic Chemistry: Carbohydrate*, Pergaman Press (1998).
[3] Hecht, Sidney M., *Bioorganic Chemistry: Peptide and Proteins*, Pergaman Press (1998).
[4] Van Vranken D., Weiss G.A., *Introduction to Bioorganic Chemistry and Chemical Biology*, 1st Edition, Garland Science (2012)

عنوان درس به فارسی: طراحی و سنتز دارو عنوان درس به انگلیسی: Design and synthesis of drugs	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: سنتز پیشرفته مواد آلی
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر سنتز داروها

سرفصل درس:

- ✓ طراحی دارو، فاکتورهای فیزیکی- شیمیایی و فعالیت‌های بیولوژیکی
- ✓ مدل مولکولی و طراحی دارو
- ✓ طراحی داروهای بیهوشی عمومی و موضعی
- ✓ طراحی آرام‌بخش‌ها و خواب‌آورها
- ✓ طراحی داروهای ضدتشنج و شل کننده‌های عضلانی
- ✓ طراحی محرک‌های سیستم عصبی مرکزی
- ✓ طراحی مسکن‌های تببر و مسکن‌های مواد مخدر
- ✓ طراحی داروهای قلب و عروق و طراحی داروهای اتونومیک
- ✓ طراحی دیورتیک‌ها و طراحی آنتی‌هستامین‌ها
- ✓ طراحی داروهای ضدالتهاب غیراستروییدی
- ✓ طراحی سولفونامیدها و طراحی عوامل ضدپارکینسون
- ✓ طراحی ضدسرفه‌ها و اکسپکتورانت‌ها
- ✓ طراحی آنتی‌مالاریاها
- ✓ Anthelmintics
- ✓ عوامل هیپوگلیسیمی قندخوراکی و انسولین
- ✓ استروییدها و استروییدهای ادرنوکمورتیکال
- ✓ آنتی‌بیوتیک‌ها و داروهای ضدباکتری و ضدویروسی
- ✓ عوامل ضدسرطان
- ✓ داروهای ضدحالت‌های روانی و داروهای جدید برای بیماری‌های جدید

منابع:

[1] Kar, A., *Medicinal Chemistry*, New Age Internatinal Pvt LTd Publisher (2007).

[2] V. Andrushko, N. Andrushko, *Stereoselective Synthesis of Drugs and Natural Products*, Wiley (2013)

سرفصل دروس دکتری

رشته : شیمی - شیمی پلیمر

عنوان درس به فارسی: شیمی فیزیک پیشرفتهٔ پلیمرها عنوان درس به انگلیسی: Advanced physical chemistry of polymers	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	✓ اصلی اختیاری	✓ نظری عملی نظری عملی	دروس پیش‌نیاز: ندارد

هدف: آشنائی و تسلط بر شیمی فیزیک پیشرفته پلیمرها

سر فصل درس:

بعضی رفتارها و اصول اساسی:

- ✓ رابر الاستیسیته: ترمودینامیک رابر کشسانی، کشسانی در تغییر شکل‌ها، کنفیگوراسیون زنجیر، نیروی کشسان رابر ولکانیزه شده، معادله موتری-ریولین، تبلور و جهت گیری القائی، دینامیک مولکولی ویسکوکشسان، طیف دینامیکی تنش- بازیابی
- ✓ مدلهای نظری: مدل حجم آزاد Eyring ، مدل تکرارdeGennes ، مدل لوله Doi-Edward
- ✓ رئولوژی در تغییر شکلها و فرم‌های بزرگ
- ✓ رفتار ژل‌ها و سوسپانسیون‌ها
- ✓ استحکام رابرها و پُرکننده‌های فعال
- ✓ استحکام پلاستیک‌ها و الیاف
- ✓ نظریهٔ مواد شبه شبکه‌ای در ابعاد ماکرو و بزرگ، مدل شبه شبکه ای، مباحث جدید ترمودینامیکی و سینتیکی زنجیرهای مولکولی، نظریهٔ انتقال شیشه ای، نظریهٔ ذوب شدن ونرم شدن، نظریهٔ اثرات دمای انتقال شیشه ای، نظریهٔ پرکننده های فعال، نظریهٔ ترموپلاستیک الاستومرها

منابع:

[1] Sun S.F., *Physical Chemistry of Macromolecules*, 2nd ed., Wiley-Interscience, (2004).

[2] Furukaw, J., *Physical Chemistry of Polymer Rheology*, Springer (2005).

[3] Sperling L.H., *Introduction to Physical Polymer Science*, 4th Ed., Wiley-Interscience, (2005).

عنوان درس به فارسی: سنتز و سینتیک پیشرفته پلیمرها عنوان درس به انگلیسی: Advanced synthesis and kinetics of polymers	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	✓ اصلی اختیاری	✓ نظری عملی نظری عملی	دروس پیش‌نیاز: ندارد

هدف: آشنائی و تسلط بر سنتز پیشرفته پلیمرها

سر فصل درس :

- ✓ روشهای جدید سنتز پلیمرها
  - پلیمریزاسیون حلقه گشای آنیونی
  - پلیمریزاسیون حلقه گشای کاتیونی
  - پلیمریزاسیون حلقه گشای رادیکالی
  - پلیمریزاسیون زنده رادیکالی
  - لیمریزاسیون حلقه گشای متاتسیز
- ✓ -گونه های ویژه وجدید پلیمرها
  - پلی الکترولیتها: روشهای سنتز و کاربردها
  - پلیمرهای رسانا: روشهای سنتز و کاربردها
  - پلیمرهای هوشمند: روشهای سنتز و کاربردها
  - یونومرها: روشهای سنتز و کاربردها
  - پلیمرهای هیبریدی آلی- معدنی: روشهای سنتز و کاربردها

منابع:

[1] Mijs W.J., *New Methods for Polymer Synthesis*, Plenum Press, New York (1992).
[2] Ebdon J.R., *New Methods of Polymer Synthesis*, Kluwer Academic Publishers, (2000).
[3] Folkes M.J., Hope P.S., *Polymer Blends and Alloys*, Chapman & Hall, London (1993).
[4] Qiu B., Qiu S., Ben T., *Porous Polymers: Design, Synthesis and Applications*, Royal Society of Chemistry (2016).
[5] Braun D., Cherdron H., Rehahn M., Ritter H., Voit B., *Polymer Synthesis: Theory and Practice: Fundamentals, Methods, Experiments*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2013).

عنوان درس به فارسی: فناوری‌های پیشرفته پلیمرها	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
عنوان درس به انگلیسی: Advanced polymer technology	تعداد ساعت: ۴۸		✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر فناوری پیشرفته پلیمرها

سر فصل درس :

- ✓ خواص و فناوری الیاف:
- ✓ ارتباط ساختار و خواص فیزیکی
- ✓ روشهای تشخیص ساختمان داخلی الیاف مختلف مانند پنبه، پشم، نایلون و پلی استر
- ✓ تعاریف اولیه راجع به خصوصیات الیاف و طبقه بندی آنها
- ✓ معرفی و بررسی روشهای مختلف ریسندگی الیاف
- ✓ معرفی و بررسی انواع الیاف نایلونی، آرامیدی و کریستال مایع
- ✓ معرفی و بررسی انواع الیاف پلی استر و اکریلیک
- ✓ معرفی و بررسی انواع الیاف الاستومری، پلییورتانی و ریسندگی شیمیایی
- ✓ جرم مخصوص الیاف (اهمیت، روشهای اندازه گیری، تأثیرات)
- ✓ جذب آب بوسیله الیاف (اهمیت، روشهای اندازه گیری، تأثیرات)
- ✓ حرارت جذب رطوبت (اهمیت، روشهای اندازه گیری، تأثیرات)
- ✓ تورم الیاف (اهمیت، روشهای اندازه گیری، تأثیرات)
- ✓ ظرافت الیاف (اهمیت، روشهای اندازه گیری، تأثیرات)
- ✓ خواص و فناوری سرامیک: پیوندهای شیمیایی و فیزیکی، اصول فناوری سرامیک، مراحل فراورش از پودر تا سرامیک، بهینه کردن مساحت سطح، کلوئیدهای مصرفی در سرامیکها، جذب adsorbate به پودر، ذرات باردار در سوسپانسیون، سوسپانسیون‌های پایدار، ویسکوزیته، حلالها ، Binder ها

منابع:

[1] Walter M., *Polymer Processing*, Hanser (1995).
[2] Walczak Z. K., *Processes of Fiber Formation*, Elsevier (2002).
[3] King A.G., *Ceramic Technology and Processing*, Noyes Publications/William Andrew Pub (2002).
[4] Sabu Thomas, Weimin Yang, *Advances in Polymer Processing: From Macro- to Nano-Scales*, Woodhead Publishing Ltd (2009).
[5] Chanda M., Roy S.K., *Industrial Polymers, Specialty Polymers, and their application*, CRC Press (2008).

عنوان درس به فارسی: شیمی و فناوری اصلاح پلیمرها	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	اصلی	نظری	
				عملی	
عنوان درس به انگلیسی: Technology of polymer modification	تعداد ساعت: ۴۸		✓ اختیاری	✓ نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر شیمی و فناوری اصلاح پلیمرها

سر فصل درس :

- ✓ سطح پلیمر: اصلاح و آنالیز آن، اندازه گیری زاویه برخورد، سینتیک و مکانیسم،
- ✓ اصلاح توده و ماتریس پلیمر: اصلاحات ماکروملکولی، کاربرد پلیمرهای اصلاح شده توده ای
- ✓ اصلاح سطح: روشهای اصلاح سطح، اصلاح شیمیایی: پیوند زدن ، کمپلکس‌های فلز- پلیمر، اصلاح توسط پلاسما، اصلاح کرونا، اصلاح تشعشعی: اشعه گاما ، لیزر ، UV، کاربرد پلیمرهای اصلاح شده سطحی
- ✓ اصلاح بیولوژیکی پلیمرها: انتقال از طریق اتصال شیمیایی پلیمرهای آبدوست به سطح پلیمرها، روش تشعشع، روش خوردگی، سطح پلیمرها
- ✓ پلیمرهای تعویض کننده یونی: روشهای سنتز و اصلاح، روشهای احیا، ایجاد منطقه ای جهت بالا بردن بازدهی تعویض کننده‌ها

منابع:

[1] Meister J., *Polymer Modification: Principles, Techniques and Applications*, Marcell Dekker (2000).

[2] Jagur-Grodzinski J., *Heterogeneous Modification of Polymers: Matrix and Surface Reactions*, Wiley, New York (1997).

[3] Mazumdar S.K., *Composite Manufacturing: Materials, Product and Process Engineering*" CRC press (2002).

[4] Drobny J.G., *Radiation Technology for Polymers*, Second Edition, CRC Press (2010).

عنوان درس به فارسی: شیمی و فناوری کامپوزیت‌های پلیمری	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			اختیاری	✓ نظری	
عنوان درس به انگلیسی: Chemistry and technology of polymer composites	تعداد ساعت: ۴۸			عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر شیمی و فناری کامپوزیت‌های پلیمری

سر فصل درس :

- ✓ مقدمه و تعاریف،
- ✓ الیاف و ماتریس‌ها، تقویت کننده‌های لیفی، نوع لیف، شکل لیف، ماتریس‌ها،
- ✓ مواد ترموست، رزین‌های اپوکسی، فنولی، پلی استر، وینیل استر و ...
- ✓ مواد ترموپلاستیک: نایلون‌ها، PP، PEEK، PPS،
- ✓ روش‌های تهیه: پیش شکل دهی، قالب‌گیری، تغییر شکل کشسان کامپوزیت‌های الیاف بلند، تغییر شکل کشسان لامیناها، تنش و کرنش در کامپوزیت‌های الیاف کوتاه، کشسانی کامپوزیتها، چقرمگی کامپوزیت‌ها،
- ✓ کاربردهای کامپوزیت‌ها

منابع:

[1] Hull D., Clyne T.W., *Introduction to Composite Materials*, 2Ed., Cambridge University Press (1996).
[2] Chawla K.K., *Composite Materials: Science and Engineering*, 3Ed., Springer- Verlag, New York (2012).
[3] Mazumdar S.K., *Composite Manufacturing: Materials, Product and Process Engineering*" CRC press (2002).

عنوان درس به فارسی: **پلیمرهای معدنی**	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
عنوان درس به انگلیسی: **Inorganic polymers**	تعداد ساعت: ۴۸		✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر نظریه و کاربردهای پلیمرهای معدنی

سر فصل درس:

- ✓ معرفی , شناسائی پلیمرهای معدنی، انواع آنها و ویژگی های مشخصه آنها
- ✓ پلی فسفازین ها (روشهای سنتز، واکنش های سطحی آنها، سیستم‌های هیبریدی کوپلیمری، سیستم‌های هیبریدی کامپوزیتی، پلی فسفازین‌های آلی فلزی، ساختار مولکولی پلی فسفازین‌های خطی، رابطه بین ساختار و خواص پلی فسفازین ها)
- ✓ پلی سیلوکسان‌ها (تهیه و آنالیز، خواص عمومی، هوموپلیمرهای فعال، روش های جدید شناسایی آنها، کوپلیمرها، شبکه‌های درهم نفوذی و کاربردها)
- ✓ پلی سیلان‌ها و پلیمرهای مربوطه (سنتز، اصلاح شیمیائی پلی سیلان‌ها، خواص فیزیکی و الکترونی آنها، لومینسانس، هدایت الکتریکی و نوری آنها، پیوندهای عرضی در پلی سیلان‌ها، ساختار پلی سیلان‌ها و فناوری پلی‌سیلان‌ها)
- ✓ سایر پلیمرهای معدنی (پلیمرهای بر پایه فروسن، پلیمرهای دارای فسفر، پلیمرهای دارای بور، پلیمرهای دارای سیلیس، پلی‌ژرمان‌ها، پلیمرهای دارای سولفور و سلنیم، پلیمرهای دارای آلومینیوم، پلیمرهای دارای قلع، پلیمرهای دارای آرسنیک)
- ✓ پلیمرهای کوئوردیناسیونی فلزات (اصول و تعاریف، روشهای سنتز و شناسائی آنها، خواص و کاربرد های آنها شامل خواص تخلخل، کاتالیزوری، رسانایی، مغناطیسی، نوری غیر خطی، لومینسانس، رنگی، اکسایش و کاهش، دارو رسانی، به عنوان حسگر، ذخیره و جداسازی گازها)
- ✓ کامپوزیت های هیبریدی آلی-معدنی (سرامیک های سل-ژل، فیلرها در الاستومرها، سرامیک های اصلاح شده پلیمری)
- ✓ پلیمرهای معدنی مورد استفاده در سرامیک ها (فرایند سل-ژل در سرامیک های اکسیدی، فیبر کربنی، سیلیکون کاربیدی، سیلیکون نیتریدی، نیترید بور، کاربید بور، نیترید آلومینیوم، نیترید فسفر)

منابع:

[1] Ray N.H., *Inorganic Polymers*, Academics, New York(1978).

[1] Mark J.E., Allcock H.R., West R., *Inorganic Polymers*, 2 Ed., Oxford University Press (2005).

[3] Hong M.C., Chen L., *Design and Construction of Coordination Polymers*, John Wiley & Sons (2009).

[4] Ortiz O.L., Ramirez, L.D., *Coordination Polymers and Metal Organic Frameworks: Properties, Types and Applications*, Nova Science Pub Inc (2012).

عنوان درس به فارسی: مباحث پیشرفته در پلیمرها	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
عنوان درس به انگلیسی: Advanced topics in polymers	تعداد ساعت: ۴۸		✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنایی با آخرین پیشرفت های صورت گرفته در زمینه پلیمرها

سرفصل درس:

- ✓ تدریس و معرفی آخرین پیشرفت های صورت گرفته در زمینه سنتز، شناسایی و کاربردهای پلیمرها.
- ✓ بررسی مقالات مجلات معتبر و کتاب های به روز بین المللی در زمینه های ذکرشده.

منابع:

مقالات جدید، به ویژه مقالات مروری (Review articles) و Lecture notes

سرفصل دروس دکتری

رشته : شیمی - شیمی تجزیه

عنوان درس به فارسی: **روش‌های نوین الکتروشیمی** عنوان درس به انگلیسی: **Modern electrochemical methods**	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	✓ اصلی	✓ نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			اختیاری	نظری	
				عملی	

هدف: آشنایی با پیشرفت‌های نوین در روش‌های الکتروشیمی

سر فصل درس :

- ✓ چگونگی تکامل نظریه‌ها در رابطه با ساختار لایه مضاعف الکتریکی و سینتیک واکنش‌های الکترودی.
- ✓ ترمودینامیک پتانسیل الکترودی و انواع اختلاف پتانسیل در سطح تماس.
- ✓ سینتیک واکنش‌های الکترودی، نوع و خواص رابطه پتانسیل اضافی و جریان، حالات خاص معادله تافل، تعیین ضریب انتقال، اهمیت و تعیین جریان معاوضه، نظریات مختلف مربوط به پدیده انتقال بار الکتریکی، انرژی فعال-سازی و جمله پیش نمایی، واکنشهای متوالی الکترودی، تعیین مکانیسم به کمک استوکیومتری، تعیین مکانیسم به کمک اندازه‌گیری درجه واکنش، همراهی واکنش‌های الکترودی و شیمیایی.
- ✓ سینتیک واکنش‌های الکترودی در حضور پدیده جذب سطحی، قوانین سرعت تحت شرایط جذب لانگمور و تمکین و فرومکین، اثر چندین جذب شونده، اثر ناهمگن بودن سطوح الکترودها، شرایط جذب واسطه‌ها و آثار مربوطه.
- ✓ روش‌های نوین الکتروشیمی تجزیه‌ای، روش‌های مبتنی بر ولتامتری، ولتامتری چرخه‌ای، ولتامتری پالسی، ولتامتری موج مربعی، ولتامتری ac، روش‌های ولتامتری عاری‌سازی، کرونوآمپرومتری، کرونوپتانسیومتری.
- ✓ آمپدانس و ادمیتنس الکتروشیمیایی، اصول و کاربردها، نمودارهای نایکویست، مدار معادل.
- ✓ استفاده از توابع فوریه در بهینه‌سازی نسبت سیگنال به نویز.
- ✓ سیستم‌های تزریق جریان.

منابع:

[1] Stojek Z., Scholz F., *Electroanalytical Methods; Guide to Experiments and Applications*, 2nd ed., Springer Berlin Heidelberg (2010).

عنوان درس به فارسی: طیف‌بینی تجزیه‌ای پیشرفته	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	✓ اصلی	✓ نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
عنوان درس به انگلیسی: Advanced analytical spectroscopy	تعداد ساعت: ۴۸		اختیاری	نظری	
				عملی	

هدف: آشنایی با پیشرفت‌های نوین در طیف‌بینی تجزیه‌ای

سر فصل درس :

- ✓ نور و خاصیت موجی آن، پدیده های شکست، تفرق و پراش، اثرات نوری غیرخطی،
- ✓ لیزر و انواع آن، تاثیر لیزر بر روشهای طیف‌بینی،
- ✓ قانون بقاء تابش، قانون فرنل، انواع منشور، انواع وسایل پراکندگی خطی، نسبت سیگنال به نویز، منابع نویز، انواع نویز در روش‌های مختلف طیف‌بینی و راه‌های کاهش آن، انواع آشکارسازها در طیف‌بینی و تفاوت آنها با یکدیگر،
- ✓ فیبرهای نوری و تاثیر آن بر روش‌های طیف بینی، روش‌های فتوترمال شامل روش فتواکوستیک و روش ترمال لنز اسپکتروسکوپی (TLS)،
- ✓ اسپکتروفتومتری فرابنفش و مرئی، تجزیه کمّی و کیفی در اسپکتروفتومتری فرابنفش و مرئی، مطالعه تشکیل کمپلکس،
- ✓ منشاء طیف‌های مادون قرمز (IR) و رامان، خطاهای اندازه‌گیری، منشاء طیف جذبی IR و کاربرد آن، اصول طیف سنجی رامان، کاربردهای طیف‌سنجی رامان کمی و کیفی،
- ✓ اصول طیف‌بینی فلورسانس و فسفرسانس، طیف‌سنجی لومینانس، تجزیه کمّی و کیفی بوسیله فلورسانس و فسفرسانس،
- ✓ اصول طیف‌سنجی جرمی، انواع کاشنده‌های جرمی، روش تفسیر طیف‌های جرمی، کاربردهای کمی طیف‌سنجی جرمی،
- ✓ طیف سنجی رزنانس مغناطیسی هسته کلاسیک و ضربانی، کاربردهای جدید NMR در تجزیه کمّی و کیفی، معادلات بلاک، بررسی برهم کنش حلال-یون فلزی، عدد کئوردینانسیون.

منابع:

[1] Ingle, J.D. and Crouch, S.R., *Spectrochemical Analysis*, Prentice Hall (1988)

[2] Steinfeld, J.I., *Molecules and Radiation: An Introduction to Modern Molecular Spectroscopy* (2nd Ed.) Courier Corporation, (2012).

عنوان درس به فارسی: شیمی تجزیه در محلول‌های غیرآبی عنوان درس به انگلیسی: Analytical chemistry of non-aqueous solutions	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	✓ اصلی	✓ نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			اختیاری	نظری	
				عملی	

هدف: آشنایی با پدیده‌های شیمی تجزیه‌ای در محلول‌های غیرآبی

سر فصل درس :

- ✓ خواص فیزیکوشیمیایی حلال‌ها.

  دسته‌بندی حلال‌ها.

  خواص و ویژگی‌های حلال‌ها، گستره مایع بودن، ویسکوزیته، قطبیت، ثابت خودیونیزاسیون، هدایت ویژه، آنتروپی تبخیر، قدرت حلال پوشی، مقدار γ، مقدار z، GD، AN، و قدرت کئوردیناسیون.
- ✓ برهم‌کنش حلال- حلال.
- ✓ برهم‌کنش حل شونده-حلال.
- ✓ برهم‌کنش حل شونده-حل شونده، کمپلکس شدن یون‌ها با لیگاندها از جهت‌های مختلف مانند توپولوژی لیگاند، چندبعدی بودن لیگاند، اتم‌های دهنده لیگاند، نوع و تعداد اتم‌ها، اندازه حفره‌ها، آب‌گریزی، ضخامت لیگاند، ترمودینامیک تشکیل کمپلکس.

منابع:

[1] John O'M. Bockris, *Physical Chemistry of Ionic Solutions*, (1986).

[2] Hansen, J.P., Bellissent-Funel, M.-C, Neilson, G.W., *The Physics and Chemistry of Aqueous Ionic Solutions*, Springer (1987)

[3] Andriiko, A.A., Andriyko, Y.O. and Nauer, G.E., *Many-electron Electrochemical Processes: Reactions in Molten Salts, Room-Temperature Ionic Liquids and Ionic Solutions*, Springer-Verlag (2013).

عنوان درس به فارسی: روش‌های نوین شیمیایی و فیزیکی جداسازی	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	✓ اصلی	✓ نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			اختیاری	نظری	
عنوان درس به انگلیسی: Modern methods for chemical and physical separations	تعداد ساعت: ۴۸			عملی	

هدف: آشنایی با روش‌های نوین فیزیکی و شیمیایی جداسازی

سر فصل درس :

- ✓ روش‌های پیشرفته جداسازی (استخراج فاز مایع، استخراج فاز جامد، استخراج سیال فوق بحرانی).
- ✓ مرور مختصری بر استخراج فاز مایع (اصول، کاربردها، مزایا و معایب) و مقایسه با کروماتوگرافی جریان مخالف.
- ✓ میکرواستخراج فاز مایع (قطره آویزان، فضای فوقانی، پخشی با استفاده از حلال پخش کننده، با استفاده از امواج فراصوت،
- ✓ استخراج مایع-مایع با کمک تغییر قدرت یونی، روش QuEChRS، استخراج دوسرنگی). استخراج فاز جامد (اصول، کاربردها، مزایا و معایب، و مقایسه با کروماتوگرافی.
- ✓ روش‌های استخراج فاز جامد ستونی و پخشی.
- ✓ استخراج فاز جامد برپایه نانوساختارها (استخراج فاز جامد مغناطیسی، استخراج فاز جامد مبتنی بر نانوالیاف‌ها، پوسته-هسته، فازهای جامد هیدروژل‌های حساس به pH و حساس به دما، نانوکامپوزیت‌ها، حسگرهای نوری، کروماتوگرافی لایه نازک).
- ✓ استخراج سیال فوق بحرانی؛ روش‌های الکتروجداسازی؛ سانتریفوژ ؛
- ✓ روش‌های جداسازی مبتنی بر استفاده از غشاء

منابع:

[1] Poole C.F., Cooke M., Wilson I.D., *Encyclopedia of Separation Science*, Academic Press (2000).
[2] Kellner R., Mermet J.M., Otto M., Valcarcel M., Widmer H.M., *Analytical Chemistry. A Modern Approach to Analytical Science*, Wiley-VCH (2004).
[3] Meloan C.E., *Chemical Separation Principles, Techniques and Experiments* , Wiley-Interscience (1999).
[4] Issaq H.J, *A century of separation science*, CRC Press (2001).
[5] Seader J.D., Henley E.J., Roper D.K., *Separation Process Principles with Applications using Process Simulators*, Wiley-VCH (2010).
[6] Anderson J., Berthod A., Pino V., Stalcup A.M., Analytical Separation Science, 5 Volume Set, Wiley-VCH (2016).

عنوان درس به فارسی: **لیزر و کاربرد آن در شیمی تجزیه**	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
عنوان درس به انگلیسی: **Lasers and its application in analytical chemistry**	تعداد ساعت: ۴۸		✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنایی با لیزر و کاربردهای آن در شیمی تجزیه

سر فصل‌های درس:

لیزرها، اساس و انواع لیزرها، مکانیسم تولید لیزر، لیزرهای چند ترازی، ضریب آستانه انواع رزوناتور، انواع مد در لیزر، انواع لیزر جامد، مایع و گاز، دیود لیزر، لیزرهای الکترون آزاد (FEL) ، لیزرهای پرتو ایکس، خصوصیات پرتو لیزر، روش‌های قفل کردن مد. کاربرد لیزر در طیف بینی.

منابع:

[1] Chang W.S.C., *Principles of Lasers and Optics*, Cambridge university press, The Edinburgh Building, Cambridge (2005).

عنوان درس به فارسی: کاربرد روش‌های آماری در شیمی تجزیه عنوان درس به انگلیسی: Application of statistical methods in analytical chemistry	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنایی با کاربرد روش‌های آماری در شیمی تجزیه

سر فصل درس :

- ✓ تکثیر خطای تصادفی و معین، اصول اولیه احتمال و قانون بیز، توزیع متغیرهای پیوسته و گسسته،
- ✓ هموارسازی داده‌ها، روش کیوسام، متوسط متحرک، حدود اطمینان برای متوسط و واریانس، توزیع نرمال،
- ✓ کای دو- F Z—t روش‌های تعیین انحراف از حالت نرمال، روش‌های خلاصه‌سازی داده و بررسی داده‌های پرت،
- ✓ بافت نماها، توزیع فراوانی ساده و تجمعی، آزمون فرضیه یک طرفه و دو طرفه،
- ✓ اصول کنترل کیفیت و نمودارهای کنترل و روش شش و نه سیگما، تاثیر اندازه نمونه و انحراف معیار بر خطای نوع اول و دوم، رگرسیون خطی ساده و چندگانه، روش‌های رگرسیون غیرخطی، روش گوس، روش مارکواد- لونبرگ، روش‌های ارزشیابی در مدل سازی و روش‌های مقاوم، آنالیز فاکتوری، روش‌های کاهش داده و ابعاد، تحلیل مولفه اصلی رگرسیون PCR و PLS.

منابع:

[1] Freund R.J., Mohr D., Wilson W.J., *Statistical Methods,* Academic Press (2010).
[2] Milner J.C., Milner J.N., *Statistics for Analytical Chemistry*, 6 Ed, Pearson Education Limited (2010).
[3] Davies O.L., Goldsmith P.L., *statistical methods in Research and production*, Longmans, London (1982).
[4] Caulcutt R., Boddy R., *Statistics for Analytical Chemists*, Chapman & Hall, London, (1983).
[5] Thompson M., Lowthian P.J., *Notes on Statistics and Data Quality for Analytical Chemists,* World Scientific, Imperial College Press (2011).

عنوان درس به فارسی: **روش‌های نوین تجزیه دستگاهی** عنوان درس به انگلیسی: **Modern techniques in instrumental Analysis**	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: طیف بینی تجزیه‌ای پیشرفته
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنایی با روش‌های نوین تجزیه دستگاهی

سر فصل درس :

- ✓ طیف‌سنجی جرمی پیشرفته (منابع یونی (یونش الکترواسپری، یونش شیمیایی فشار اتمسفر، فوتویونش فشار اتمسفری)، آنالیزورها (کوادروپل، TOF، تله یونی، FT-ICR تبدیل فوریه یون رزنانس سیکلوترون)، تفکیک القاشده توسط برخورد و طیف سنجی جرمی چند مرحله‌ای tandem MS، MS/MS، MS)،
- ✓ کروماتوگرافی چندبعدی (اصول و کاربردها)
- ✓ کروماتوگرافی مایع-طیف سنجی جرمی
- ✓ روش‌های طیف بینی اتمی پیشرفته
- ✓ مروری بر روش‌های تعیین مشخصات نانوساختارها.

منابع:

[1] Skoog D.A., Holler J.F., Crouch R.T., *Principles of Instrumental Analysis*, 6th Edition, Tomas Higher Education (2007).

[2] Freitag R., *Modern Advances in Chromatography*, Springer (2002).

[3] Mondello L., Lewis A.C., Bartle K.D., *Multidimentional Chromatography*, John Wiley (2002).

[4] Skoog D.A., West D.M., Holler F.J., Crouch S.R., *Fundamentals of Analytical Chemistry*, 9th Edition, Cengage Learning (2013)

عنوان درس به فارسی: مباحث پیشرفته در شیمی تجزیه عنوان درس به انگلیسی: Advanced topics in analytical chemistry	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنایی با آخرین پیشرفت های صورت گرفته در زمینه شیمی تجزیه

سرفصل درس:

- ✓ تدریس و معرفی آخرین پیشرفت های صورت گرفته در زمینه شیمی تجزیه.
- ✓ بررسی مقالات مجلات معتبر و کتاب های به روز بین المللی در زمینه های ذکرشده.

منابع:

مقالات جدید، به ویژه مقالات مروری (Review articles) و Lecture notes

عنوان درس به فارسی: الکتروشیمی در محلول‌های غیرآبی	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: روش‌های نوین الکتروشیمی
				عملی	
عنوان درس به انگلیسی: Nonaqueous electrochemistry	تعداد ساعت: ۴۸		✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنایی با پدیده‌های الکتروشیمی تجزیه‌ای در محلول‌های غیرآبی

سر فصل درس:

- ✓ طبقه‌بندی انواع محیط‌های شیمیایی در الکتروشیمی.
- ✓ محدودیت‌های فرایندهای الکتروشیمیایی در حلال‌های آبی.
- ✓ خواص شیمیایی و فیزیکی حلال‌های غیر آبی.
- ✓ انواع الکترولیت‌های پشتیبان در الکتروشیمی.
- ✓ انتخاب الکترولیت‌های پشتیبان در الکتروشیمی در حلال‌های غیر آبی.
- ✓ اصول حلال پوشی یون‌ها و الکترولیت‌ها در حلال‌های غیر آبی.
- ✓ مفاهیم اسید-باز در حلال‌های غیر آبی.
- ✓ واکنش‌های انتقال الکترون در حلال‌های غیر آبی.
- ✓ پنجره پتانسیل در حلال‌های غیرآبی و تاثیر الکترولیت پشتیبان و ماهیت الکترود بر آن.
- ✓ طراحی الکترودهای مرجع در حلال‌های غیر آبی.
- ✓ اصول هدایت یونی و هدایت‌سنجی در حلال‌های غیر آبی.
- ✓ پتانسیومتری در حلال‌های غیر آبی.
- ✓ روش‌های ولتامتری در حلال‌های غیر آبی.
- ✓ استفاده از حلال‌های غیر آبی در فناوری‌های الکتروشیمیایی نوین.
- ✓ الکتروشیمی در نمک‌های مذاب و مایعات یونی.
- ✓ الکتروشیمی در جامدات.

منابع:

[1] Izutsu K., *Electrochemistry in Nonaqueous Solution*, Wiley-VCH (2009).

[2] Aurbach D., *Nonaqueous Electrochemistry*, Marcel Dekker (1999).

[3] Plieth W., *Electrochemistry for Materials Science*, Elsevier (2008).

[4] Cynthia G. Zoski, *Handbook of Electrochemistry*, Elsevier (2007).

عنوان درس به فارسی: کاربرد کامپیوتر، الکترونیک و آمار در شیمی تجزیه	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
عنوان درس به انگلیسی: Application of computer, electronics and statistics in analytic chemistry	تعداد ساعت: ۴۸		✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنایی با کاربرد کامپیوتر، الکترونیک و آمار در شیمی تجزیه

سر فصل درس:

- ✓ اصول مدارهای قیاسی و رقمی
- ✓ اجزاء مدارهای قیاسی و رقمی
- ✓ شیوه هم مرز کردن دستگاههای قیاسی و رقمی
- ✓ مبدل آنالوگ به دیجیتال و دیجیتال به آنالوگ با ظرفیت ۸ تا ۱۶ بیت
- ✓ تقویت کنندههای عملیاتی و کاربردهای آنها
- ✓ کاربرد روش تبدیل فوریه سریع در حذف نویز و تشخیص منابع نویز و مکانیسم پاسخ
- ✓ مقدمه ای بر روشهای آماری
- ✓ انواع آزمون های آماری
- ✓ اصول احتمال و کاربرد آنها در نمونه برداری
- ✓ اصول بردارها و ماتریس ها
- ✓ شیوه جمع آوری داده های تجربی و تنظیم مناسب جهت پردازش های آماری درست
- ✓ اصول تحلیل مولفه اصلی و کاربرد آن، تشخیص تعداد گونه ها و وجود الگو در داده ها
- ✓ کالیبراسیون چند متغیره رگرسیون خطی چندگانه رگرسیون مولفه اصلی و رگرسیون حداقل مربعات جزیی
- ✓ دسته بندی و خوشه بندی و تشخیص الگو
- ✓ روشهای دسته بندی خطی و غیر خطی
- ✓ شبکه های عصبی و الگوریتم ژنتیک
- ✓ روشهای انتخاب متغیر و زیر مجموعه ها

منابع:

[1] Shanefield D.J., *Industrial Electronics for Engineers, Chemists, and Technicians*, William Andrew (2001).
[2] Kumari R., *Computers and Their Applications to Chemistry*, CRC Press (2002).
[3] Milner J.C., Milner J.N., *Statistics for Analytical Chemistry*, 5th edition, Pearson/Prentice Hall (2005).
[4] Miller J., Miller J.C., *Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry*, 6th Edition Pearson Education Canada, (2010).

عنوان درس به فارسی: **نانو الکتروشیمی** عنوان درس به انگلیسی: **Nanoelectrochemistry**	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنایی با فناوریهای نانو وکاربردهای آن در الکتروشیمی

سر فصل درس:

- ✓ اصول اولیه فناوری نانو و سنتز نانومواد.
- ✓ تئوری نانوالکتروشیمی.
- ✓ الکتروفابریکیشن نانومواد.
- ✓ الکتروشیمی ساختارهای نانو کربن.
- ✓ الکتروشیمی نانو مواد نیمه رسانا.
- ✓ نانو الکتروکاتالیستها.
- ✓ نانوپلیمرهای هادی.
- ✓ نانوتکنولوژی در باتریها، ابرخازن‌ها.
- ✓ نانوتکنولوژی در پیل های سوختی.
- ✓ نانومواد در اصلاح الکترودها.
- ✓ نانوحسگرهای الکتروشیمیایی و بیوچیپ‌ها.
- ✓ نانومواد در طراحی و ساخت حسگرها و بیوحسگرها.

منابع:

[1] Osaka T., Yosi M.D., Shacham D., *Electrochemical Nanotechnologies*, Springer Science+Business Media, LLC (2010).
[2] Mirkin M.V., Amemiya S., *Nanoelectrochemistry*, CRC Press (2015).

عنوان درس به فارسی: کاربرد مواد نانوساختار در جداسازی و استخراج عنوان درس به انگلیسی: Application of nanomaterials in separation and extraction	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنایی با کاربرد مواد نانوساختار در جداسازی و استخراج

سرفصل درس:

- ✓ مروری بر روشهای پیشرفته جداسازی (استخراج فاز مایع، استخراج فاز جامد، استخراج سیال فوق بحرانی).
- ✓ استخراج فاز جامد (اصول، کاربردها، مزایا و معایب، و مقایسه با کروماتوگرافی).
- ✓ روش‌های استخراج فاز جامد ستونی و پخشی .
- ✓ تاثیر اندازه مواد در راندمان جداسازی و استخراج.
- ✓ کاربردهای نانوذرات در روش‌های نوین جداسازی (الکتروفورز مویین، الکتروفورز میکروچیپ، الکتروکروماتوگرافی، کروماتوگرافی مایع، کروماتوگرافی گازی، کروماتوگرافی یونی).
- ✓ استخراج فاز جامد برپایه نانوساختارها (استخراج فاز جامد مغناطیسی، استخراج فاز جامد مبتنی بر نانوالیافها، نانوساختارهای هسته/پوسته، فازهای جامد هیدروژل حساس به pH و حساس به دما، نانوکامپوزیت¬ها، کروماتوگرافی لایه نازک.)
- ✓ روش‌های جداسازی و تفکیک نانوذرات. نانوغشاء-اولترافیلتراسیون- سانتریفوژ

منابع:

[1] Georgakilas V., Otyepka M., Bourlinos A. B., Chandra V., Kim N., Kemp K.C., Hobza P., Zboril R., Kim K.S., *Functionalization of graphene: Covalent and Non-Covalent Approaches, Derivatives and Applications*, Chemical Reviews 112 (2012) 6156-6214.

[2] Chaudhuri R.G., Paria S., Core/shell *Nanoparticles: Classes, Properties, Synthesis Mechanisms, Characterization, and Applications*, Chemical Reviews 112 (2012) 2373-2433.

[3] Mahmoudi M., Sant S., Wang B., Laurent S., Sen T., *Superparamagnetic iron oxide nanoparticles (SPIONs): Development, Surface Modification and Applications in Chemotherapy*, *Advanced Drug* Delivery Reviews 63 (2015) 24-46.

[4] Spietelun A., Kloskowski A., Chrzanowski W., Namieśnik J., *Understanding Solid-Phase Microextraction: Key Factors Influencing the Extraction Process and Trends in Improving the Technique*, Chemical Reviews 113 (2013) 1667-1685.

[5] Reddy L.H., Arias J.L., Nicolas J., Couvreur P., *Magnetic Nanoparticles: Design and Characterization, Toxicity and Biocompatibility, Pharmaceutical and Biomedical Applications*, Chemical Reviews 112 (2012) 5818-5878.

عنوان درس به فارسی: نانومواد در حسگرها و زیست حسگرها عنوان درس به انگلیسی: Nanomaterials in sensors and Biosensors	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر شیمی نانومواد در حسگرها و زیست حسگرها

سر فصل درس:

- ✓ آشنایی با مفاهیم اولیه حسگر و بیو حسگر های شیمیایی (نوری، الکتروشیمیایی، جرمی و حرارتی) و کاربردهای آن.
- ✓ اصول پایه در طراحی و ساخت حسگرها و بیو حسگرها، انواع مبدلها، FET و ISFET و روشهای تولید سیگنال.
- ✓ سلکتفورها و طراحی آنها، بیومایمتیک زیستی.
- ✓ حسگرها و بیوحسگرها برپایه نانومواد و نانوساختارها.
- ✓ نانومواد جهت اصلاح سطح، نانو مواد در تثبیت سلکتفورها و بیومولکولها، نانو مواد به منظور اصلاح پاسخ حسگر.
- ✓ گرافن و مواد برپایه گرافن در کاربردهای حسگری.
- ✓ حسگرهای نانوکامپوزیتی.
- ✓ اصلاح سطح نانوساختارها جهت کاربردهای حسگری.
- ✓ نانوحسگر، فوتولومینسانس نانوحسگر، مکانیسم FRET، نقاط کوانتومی.
- ✓ نانوبیوحسگر.
- ✓ کاربردهای صنعتی، پزشکی، غذایی، نظامی.
- ✓ نانوذرات فلزات نوبل به عنوان پروبهای رنگ آمیزی در بیولوژی.
- ✓ نانوذرات مغناطیسی در بیوحسگرها و درمان سرطان.
- ✓ نانواکسیدهای فلزی در حسگرهای گازی.
- ✓ نانو تکنولوژی و Lab-on-Chip.

منابع:

[1] Khanna V.K., *Nanosensors: Physical, Chemical, and Biological*, Series in Sensors; CRC Press (2011).

[2] Li J., Wu N., *Biosensors Based on Nanomaterials and Nanodevices, series of Nanomaterials and their Applications*, CRC Press (2013)

[3] Cusano A., Arregui F.J., Giordano M., Cutolo A., *Optochemical Nanosensors*; Series in Sensors; CRC Press (2012).

[4] Eranna G., *Metal Oxide Nanostructures as Gas Sensing Devices*, CRC Press (2011).

سرفصل دروس دکتری

رشته : شیمی - شیمی فیزیک

عنوان درس به فارسی: مکانیک کوانتومی پیشرفته عنوان درس به انگلیسی: Advanced quantum mechanics	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	✓ اصلی	✓ نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			اختیاری	نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر مباحث پیشرفتهٔ مکانیک کوانتومی

سر فصل درس:

- ✓ مروری بر اصول موضوعه در مکانیک کوانتومی،
- ✓ نمایشات و تبدیلات، نمایش بردارهای حالت و عملگرها در فضای مکان و تکانه،
- ✓ تصویرهای شرودینگر، هایزنبرگ و برهم کنش در دینامیک کوانتومی،
- ✓ دینامیک کوانتومی و حل معادله شرودینگر وابسته به زمان،
- ✓ افزودن تکانه زاویه‌ای، فضاهای جفت شده و جفت نشده، ضرایب کلبش-گوردن،
- ✓ نظریه‌های اختلال، تصحیح انرژی نسبیتی، نظریهٔ اختلال مولر-پلست
- ✓ سیستم های چندالکترونی، معادلات هارتری- فوک و پساهارتری-فوک،
- ✓ نظریهٔ تابعی چگالی
- ✓ نظریه کوانتومی پراکندگی

منابع:

[1] Sakurai, J.J. and Tuan, S.F., *Modern Quantum Mechanics*, Addison Wesley (1994).
[2] Dick, R., *Advanced Quantum Mechanics*, Springer (2012).
[3] Newton, R.G., *Quantum Physics: A Text for Graduate Students*, Springer (2002).
[4] Alonso, M. and Valk, H., *Quantum Mechanics*, Addison Wesley (1973

عنوان درس به فارسی: **مکانیک آماری پیشرفته** عنوان درس به انگلیسی: **Advanced statistical mechanics**	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	✓ اصلی	اختیاری	✓ نظری عملی نظری عملی	دروس پیش‌نیاز: ندارد

هدف: آشنائی و تسلط بر مباحث پیشرفتهٔ مکانیک آماری سیالات

سر فصل درس:

- ✓ مکانیک آماری سیالات در حضور برهم‌کُنش: پتانسیل‌های بین مولکولی، انتگرال پیکری و بسط‌های خوشه‌ای، معادلهٔ حالت ویریال، ضرایب دوم و سوم ویریال، ضرایب ویریال مرتبه‌های بالاتر، رفتار کوانتومکانیکی ضریب دوم ویریال
- ✓ مکانیک آماری جامدات: ظرفیت گرمایی بلورها، مدل انیشتن، مدل دبای، مدل‌های اسپین-شبکه، مدل آیزینگ، سیستم‌های پارامغناطیس، ارتعاشات شبکه در جامدات مولکولی، دینامیک شبکه،
- ✓ مکانیک آماری مایعات: توابع توزیع در مکانیک آماری سیالات، تابع توزیع شعاعی و رفتار فیزیکی آن، ارتباط خواص ترمودینامیکی سیالات خالص با تابع توزیع شعاعی، معادلات انرژی داخلی، فشار، پتانسیل شیمیایی، تراکم‌پذیری، روش تجربی در تعیین تابع توزیع شعاعی، روش‌های شبیه‌سازی مونت‌کارلو و دینامیک مولکولی در تعیین تابع توزیع شعاعی، روش‌های نظری در تعیین تابع توزیع شعاعی، معادلات انتگرالی کِرک‌وود، BGY و OZ، تقریب‌های زنجیرهٔ آبرشبکه، PY، میانگین کروی، معادلهٔ حالت کارناهان- استارلینگ برای سیال کرهٔ سخت، نظریهٔ اختلال ترمودینامیکی ویکز- چَندلر- آندرسون، روش اختلال ورتهیم و نظریهٔ آماری سیالات تجمعی

منابع

[۱] علی مقاری، مباحث پیشرفتهٔ ترمودینامیک و مکانیک آماری تعادلی و غیر تعادلی، انتشارات دانشگاه تهران، جلد دوم، ۲۰۱۴

[2] Schwabl, F., *Statistical Mechanics*, Springer-Verlag (2006).

[3] Pathria, R.K., *Statistical Mechanics*, Springer-Verlag (2006).

[4] McQuarrie, D.A., *Statistical Mechanics*, Harper&Row publisher (1976).

[5] Barry M McCoy, *Advanced Statistical Mechanics*, Oxford University Press (2010)

عنوان درس به فارسی: ترمودینامیک و مکانیک آماری غیرتعادلی	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	✓ اصلی	✓ نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			اختیاری	نظری	
عنوان درس به انگلیسی: Thermodynamics and nonequilibrium statistical mechanics	تعداد ساعت: ۴۸			عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر مباحث پیشرفتهٔ فرایندهای غیربرگشتی و مکانیک آماری غیرتعادلی

سر فصل درس:

- ✓ ترمودینامیک کلاسیک غیرتعادلی و معادلات توازن درهیدرودینامیک: مفهوم برگشت‌ناپذیری، ترمودینامیک برگشت‌ناپذیر کلاسیک، فرض تعادل موضعی، معادلات توازن در هیدرودینامیک، اصل موضوعهٔ اول تعمیم یافته، آنتروپی و اصل موضوعهٔ دوم در ترمودینامیک، معادلهٔ توازن آنتروپی، تعمیم معادلهٔ اصلی ترمودینامیک تعادلی، چرخه‌های برگشت‌ناپذیر، قضیهٔ کاراتئودوری
- ✓ ترمودینامیک کلاسیک غیرتعادلی: ترمودینامیک خطی و ضرایب پدیده شناختی، قیدهای ضرایب پدیده شناختی، ترمودینامیک برگشت‌ناپذیر توسعه یافته و منطقی، ترمودینامیک برگشت‌ناپذیر تعمیم‌یافته، معادلات گیبس تعمیم‌یافته، محاسبهٔ آنتالپی در فرایند برگشت‌ناپذیر، نزول نقطهٔ ذوب تحت اثر تنش‌های بُرشی، اصول موضوعهٔ ترمودینامیک غیرتعادلی تعمیم یافته
- ✓ اصول و نظریه‌های اساسی در مکانیک آماری غیرتعادلی: دینامیک کلاسیک، قضیهٔ لیوویل و معادلهٔ لیوویل، خواص عملگر لیوویل، روش‌های حل معادلهٔ لیوویل، معادلهٔ وان‌نیومن، فرایندهای تصادفی، نظریهٔ حرکت براونی و معادلهٔ لانگوین، نظریهٔ حرکت براونی، معادلهٔ فوکر- پلانک، معادلهٔ مَستِر، نظریهٔ پاسخ خطی، قضیهٔ اُفت‌وخیز- استهلاک، نظریهٔ مجموعه‌های غیرتعادلی، نظریهٔ توابع همبستگی زمانی، ضرایب نفوذ جفتی، ضرایب خودنفوذی، ویسکوزیتهٔ بُرشی، هدایت‌گرمایی
- ✓ نظریهٔ جنبشی گازهای رقیق و معادلهٔ بولتزمان: استخراج معادلهٔ BBGKY از معادلهٔ لیوویل، معادلهٔ بولتزمان، قضیهٔ H-بولتزمان، تاورداهای برخوردی، معادلات تغییر، معادلات تغییر برای تاورداهای برخوردی، معادلهٔ بولتزمان خطی شده، معادلهٔ کوانتومی بولتزمان (معادلهٔ وِلازوف)، حل معادلهٔ بولتزمان
- ✓ مکانیک آماری غیرتعادلی سیالات چگال: نظریهٔ اِنسکوگ برای سیال کرهٔ‌سخت، تصحیح معادلهٔ اِنسکوگ برای سیال چاه مربعی، معادلهٔ بولتزمان تعمیم‌یافته برای سیال نیمه‌چگال

منابع:

[۱] علی مقاری، مباحث پیشرفتهٔ ترمودینامیک و مکانیک آماری تعادلی و غیر تعادلی، انتشارات دانشگاه تهران، جلد دوم، ۲۰۱۴

[2] Prigogine, I., *From Being to Becoming*, Freeman (1980).

[3] Balescu, R., *Equilibrium and Non-Equilibrium Statistical Mechanics*, John Wiley and Sons, Inc., (1991).

[4] Zwanzig, J.L., Phys. Today, Sep., 32 (1993).

[5] Kreuzer, H.J., *Non-Equilibrium Thermodynamics and its Statistical Foundations*, Clarendon Press, Oxford (1986).

[6] Jou D., Casas-Vazquez J., Lebon G.: *Extended Irreversible Thermodynamics*, Springer, Berlin (1993).

[7] Dario Villamaina, Transport Properties in Non-Equilibrium and Anomalous Systems, Springer, (2014).

عنوان درس به فارسی: طیف سنجی مولکولی پیشرفته	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
عنوان درس به انگلیسی: Advanced molecular spectroscopy	تعداد ساعت: ۴۸		✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر مباحث پیشرفتهٔ طیف سنجی مولکولی

سر فصل درس:

- ✓ نظریهٔ میدان‌های کوانتومکانیکی، برهم کنش نور- ماده و حل معادلهٔ دینامیکی کوانتومی در تصویر برهم کنش،
- ✓ طیف سنجی جذبی، نشرخودبخودی و نشرتهییجی (لیزرها)، طیف سنجی چند فوتونی،
- ✓ طیف سنجی چرخشی- ارتعاشی- الکترونی مولکول‌ها،
- ✓ اثرات غیر آدیاباتیک روی طیف چرخشی- ارتعاشی- الکترونی مولکول‌ها
- ✓ نظریه گروه‌های تقارن هندسی و جابه جایی- وارونی، کاربرد نظریهٔ گروه در مکانیک کوانتومی،
- ✓ تقارن شیوه‌های ارتعاشی مولکول‌های چنداتمی، جفت شدن تکانه های زاویه‌ای در مولکول دو اتمی، حالت‌های هوند،
- ✓ جمله‌های طیفی مولکول‌های دو اتمی،
- ✓ طیف سنجی رزنانس مغناطیس هسته ها

منابع:

[1] Philip Bunker, *Molecular Symmetry and Spectroscopy*, Academic Press (1979).
[2] Stavros C. Farantos, *Nonlinear Hamiltonian Mechanics Applied to Molecular Dynamics: Theory and Computational Methods for Understanding Molecular Spectroscopy and Chemical Reactions*, Springer International Publishing (2014)
[3] Walter S. Struve, *Fundamentals of Molecular Spectroscopy*, Wiley-Interscience (1989)
[4] J. Laane, *Frontiers of Molecular Spectroscopy*, Elsevier Science (2008)

عنوان درس به فارسی: مباحث پیشرفته در شیمی فیزیک عنوان درس به انگلیسی: Advanced topics in physical chemistry	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنایی با آخرین پیشرفت های صورت گرفته در زمینه شیمی فیزیک

سرفصل درس:

- ✓ تدریس و معرفی آخرین پیشرفت های صورت گرفته در زمینه شیمی فیزیک.
- ✓ بررسی مقالات مجلات معتبر و کتاب های به روز بین المللی در زمینه های ذکرشده.

منابع:

مقالات جدید، به ویژه مقالات مروری (Review articles) و Lecture notes

عنوان درس به فارسی: ریاضیات پیشرفته در شیمی فیزیک عنوان درس به انگلیسی: Advanced mathematics in physical chemistry	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر مباحث پیشرفتهٔ ریاضی فیزیک

سر فصل درس:

- ✓ مروری بر عملگرهای برداری، فضایای گوس، استوکس وگرین، دستگاههای مختصات تعمیم یافته
- ✓ توابع تحلیلی و قضیه کوشی، حساب مانده، قضیه اشتورم- لیوویل
- ✓ حساب وردشی، معادلات اویلر- لاگرانژ
- ✓ تابعی (functionals) و مشتق‌گیری از تابعی
- ✓ معادلات دیفرانسیل و توابع خاص (بسل، لژاندر و هرمیت)
- ✓ معادلات انتگرالی، حل معادلهٔ شرودینگر به روش resolvent، سری‌های دایسون، عملگرهای گرین مستقل از زمان و وابسته به زمان
- ✓ معادلات غیرخطی و فرآیندهای آشوبناک
- ✓ فرایندهای تصادفی و مکانیک کوانتومی، انتگرال مسیر فاینمن، فرمول فاینمن-کاک
- ✓ کاربرد انتگرال‌های تابعی، بسط اختلال فاینمن، انتگرال تابعی و توپولوژی

منابع:

[1] F. Strocchi, *An Introduction to the Mathematical Structure of Quantum Mechanics*, 2nd Edition, World Scientific Publishing Co. (2008).

[2] Sergio A. Albeverio, Wilhelm A. J. Luxemburg, Manfred P. H. Wolff, *Advances in Analysis, Probability and Mathematical Physics*, Springer-Science (1995).

[3] Gustafsson B., Vasil'ev A., *Analysis and Mathematical Physics*, Birkhäuser Verlag AG (2009).

عنوان درس به فارسی: شیمی محاسباتی پیشرفته عنوان درس به انگلیسی: Advanced computational chemistry	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر مباحث پیشرفتهٔ شیمی محاسباتی

سر فصل‌های درس:

روشهای محاسباتی در مکانیک کوانتومی (محاسبات آغازین):

- ✓ روش هارتری- فوک
- ✓ روش های پساهارتری فوک
- ✓ نظریه تابعی چگالی (DFT)، محاسبات وابسته به زمان در نظریهٔ تابعی چگالی (TDDFT)
- ✓ مولکول‌های بزرگ و خوشه ها
- ✓ ساختارهای الکترونی و پاسخ خطی قطعات تک مولکولی
- ✓ ساختارهای الکترونی و پاسخ خطی قطعات تک مولکولی
- ✓ روشهای محاسباتی درمکانیک آماری (شبیه سازی‌ها)
- ✓ شبیه سازی مونت کارلو
- ✓ شبیه سازی دینامیک مولکولی
- ✓ مدلسازی نانو لوله‌ها، نانوسیم ها و نقاط کوانتومی

منابع:

[1] Leimkuhler B., Matthews C., *Molecular Dynamics: With Deterministic and Stochastic Numerical Methods*, Springer International Publishing Switzerland (2015).

[2] Karniadakis G., Beskok A., Aluru N., *Microflows and Nanoflows: Fundamentals and Simulation*, Springer (2005).

[3] Sutcliffe B.T. , Diercksen G.H.F., Sutcliffe B.T., Veillard A., *Computational Techniques in Quantum Chemistry and Molecular Physics*: Proceedings of the NATO Advanced Study Institute held at Ramsau, Germany, 4–21 September, 1974, pringer Netherlands (1975).

[4] Diercksen G.H.F., Sutcliffe B.T., Veillard A., *Computational Techniques in Quantum Chemistry and Molecular Physics*, D. Reidel Publishing Company (1974).

عنوان درس به فارسی: شیمی کلوئید و سطح عنوان درس به انگلیسی: Colloid and surface chemistry	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر مباحث پیشرفتهٔ شیمی سطح و کلوئیدها

سر فصل درس:

- ✓ حالت کلوئیدی،
- ✓ حرکت براونی و خواص سینتیکی،
- ✓ خواص نوری و پراکندگی نور با برخورد به کلوئیدها،
- ✓ خواص مایسلی،
- ✓ خواص بین فازی مایع-گاز، مایع-مایع،
- ✓ خواص فیزیکی و شیمیایی سطوح جامد، فیلم‌ها،
- ✓ زاویهٔ برخورد، گرافن و لایه‌های نانو ساختار،
- ✓ ترمودینامیک و سینتیک جذب شیمیایی گازها، پیوندهای شیمیایی روی سطوح، سطوح باردار،
- ✓ کاربردهای کاتالیزگرها و مواد الکترونی، نواحی نانوساختار،

منابع:

[1] Shaw D.J., *Introduction to Colloid and Surface Chemistry*, Butterworth-Heinemann (2003).
[2]Adamson A.W., Gast A.P., *Physical Chemistry of Surfaces*, John Wiley & Sons, Inc. (2002).
[3] Leja J., (revised by Rao, S. Ramachandra), *Surface chemistry of froth flotation*, Springer Science (2004).

سرفصل دروس دکتری

رشته : شیمی - شیمی کاربردی

عنوان درس به فارسی: پدیده‌های انتقال پیشرفته عنوان درس به انگلیسی: Advanced transport phenomena	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	✓ اصلی	✓ نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			اختیاری	نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط در استفاده از روابط پدیده‌های انتقال در طراحی تجهیزات فرایندی

سر فصل درس:

بخش یک: مکانیک سیالات

✓نظریه لایه مرزی: تعاریف ضخامت‌های لایه مرزی، معادلات لایه مرزی، تقریب انتگرال تکانه جریان در یک صفحه مسطح (آرام و درهم)، جدایی لایه مرزی

✓جریان متلاطم: معادله متوسط زمانی پیوستگی رینولدز، تنش‌های رینولدز، ویسکوزیته Eddy ، جریان متلاطم در لوله، جریان متلاطم لایه مرزی

✓جریان اجسام غوطه‌ور: نیروهای دراگ، دراگ جریان آرام و متلاطم معادلات تغییر برای سیستم‌های همدما ب

بخش دوم: انتقال حرارت

✓مسائل انتقال حرارت در حالت ناپایدار- تبدیلات لاپلاس، انتقال حرارت به طریقهٔ جابجایی، معادلات انرژی، تکانه و پیوستگی، معادلات انرژی، تکانه و پیوستگی در مورد لایه مرزی، جابجایی اجباری در جریان آرام، جابجایی اجباری در جریان درهم- مشابهت انتقال حرارت و تکانه

✓مسائل انتقال حرارت در مبدل‌ها (دولوله‌ای، پوسته و لوله‌ای، تک‌گذر و پندگذر)، انتقال حرارت در کوره‌ها (هدایت، جابجایی، تابش)، مدل‌های انتقال حرارت در محفظه احتراق (مدل‌های کوره همگن، کوره بلند، آنالیز متطقه‌ای)

بخش سوم- انتقال جرم:

✓انتقال جرم در جریان آرام، لایه مرزی روی صفحه مسطح، جابجایی آرام در صفحه عمودی، انتقال جرم بین دو جریان همسوی غیرقابل انحلال، انتقال جرم بین دو صفحه مسطح موازی، انتقال جرم بین دو استوانه هم محور

✓انتقال جرم در جریان درهم: لایه مرزی در صفحه مسطح، جابجایی طبیعی روی صفحه عمودی، انتقال جرم در سقوط آزاد قیلم، مشابهت انتقال جرم و انتقال تکانه، انتقال همزمان جرم و حرارت، انتقال جرم و واکنش شیمیایی

منابع:

[1] Bird R., Stewart W.E. and Lightfoot E.N., *Transport phenomena*, Wiley (2002).
[2] White F.M., *Fluid Mechanics*, McGraw-Hill (2003).
[3] Favre-Marinet M., Tardu S., *Convective Heat transfer*, Pergamon (2009).
[4] Cussler E.L., *Diffusion, Mass Transfer in Fluid Systems*, Cambridge University Press (2009).
[5] Golshahi L. and Finlay, W. H., *Advances in Transport Phenomena*: 2009, Springer-Verlag (2009).

عنوان درس به فارسی: فرایندهای شیمیایی و طراحی رآکتور پیشرفته عنوان درس به انگلیسی: Advanced chemical processes and reactor design	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	✓ اصلی	✓ نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			اختیاری	نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط در فرایندهای شیمیایی و طراحی رآکتور پیشرفته

سر فصل درس:

- ✓ فرآیندهای ناهمگن در واکنشگاه‌ها
- ✓ آمیختگی سیالها در واکنشگاه‌ها
- ✓ طراحی واکنشگاه‌ها برای واکنش‌های ناهمگون (واکنش‌های سیال- سیال و واکنش‌های سیال- جامد)
- ✓ واکنش‌هایی که با دخالت کاتالیزور جامد انجام می‌گیرد.
- ✓ سینتیک واکنش‌های کاتالیزوری هتروژن
- ✓ پدیده‌های انتقال در واکنش‌هایی که با کاتالیست‌های جامد تسریع می‌شوند. (واکنش همراه با انتقال جرم و حرارت در دانه کاتالیست)
- ✓ آنالیز و طراحی واکنشگاه‌های کاتالیزوری بستر ثابت
- ✓ مطالب تکمیلی

منابع:

[1] Levenspiel O., *Chemical Reaction Engineering*, 3rd Ed., Wiley (1999).
[2] Froment G.F., Bischof, K.B., *Chemical Reactor Analysis and design*, 3rd Ed., Wiley (2011).

عنوان درس به فارسی: روش‌های جداسازی وخالص سازی صنعتی عنوان درس به انگلیسی: Industerial separation and purification methods	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	✓ اصلی	✓ نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			اختیاری	نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط در روش‌های جداسازی وخالص سازی صنعتی

سر فصل درس:

- ✓ فرایند خشک کردن، اصول خشک کردن، سرعت حرارت دادن، سرعت خشک کردن و مکانیسم عمل انواع خشک کن‌ها
- ✓ جداسازی مکانیکی، فیلتراسیون، اصول فیلترها و موارد استفاده آنها
- ✓ سانتریفوژ کردن، اصول و محاسبات
- ✓ جداسازی از طریق ممبران اسمز معکوس، اصول و محاسبات مربوطه
- ✓ همگن‌سازی و مخلوط کردن، اصول بهم زن‌ها برای مخلوط مایع
- ✓ پدیده جذب سطحی،روش های کروماتوگرافی،محاسبات لازم و سیستم های کاربردی(کربن فعال)
- ✓ تخلیص و جداسازی با روشهای کریستالیزاسیون، کروماتوگرافی، رسوب دهی

منابع:

[1] McCabe W.L., Smith J.C. and Harriott P., *Unit Operations of Chemical Engineering*, McGraw Hill (1987).

[2] Ramaswamy S., Huang H.J. and Ramarao B.V., *Separation and Purification Technologies in Biorefineries*, Wiley (2013).

عنوان درس به فارسی: **طراحی و کاربرد کاتالیزگرهای بستردار** عنوان درس به انگلیسی: **Design and application of supported catalysts**	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی با طراحی کاتالیزگرها برای استفاده در صنعت

سر فصل درس:

انتخاب‌پذیری در کاتالیز اکسایشی، کاتالیز غربال مولکولی فروپورها، زئولیت بتا و استفاده آن در واکنش‌های آلی، مواد هیبریدی آلی- معرفی فروپور کایرال در کاتالیز واکنش‌های آنانتیومر انتخابی، اسیدهای لوئیس بی‌تحرک و استفاده در آنها در شیمی آلی، تأثیر ترکیب زئولیت بر روی فعالیت کاتالیستی، استفاده از پایهٔ پلیمری برای سنتز کتابخانه بزرگ حلقه‌ها، کاتالیزگرهای بی‌تحرک و کاربرد آنها در سنتز محصولات شیمیایی ظریف و حد واسط، فرآیند کاتالسیتی آزیریدین و اپوکسید دار نمودن آلکن‌ها با استفاده از مواد اصلاح شده میکروپور و مزوپور، آلکیلاسیون آنانتیومر انتخابی بنزالدهید با استفاده از دی‌اتیل روی و Ephedrine بر روی بستر MTS . اسیدهای پرفلورو آلکان دی‌سولفونیک بستردار به عنوان کاتالیزگر در آلکیلاسیون ایزوبوتن، استفاده از TEMPE متصل به پلیمر برای اکسیداسیون الکل‌ها، تهیه و عامل‌دار کردن (وینیل) پلی‌استیرن پلی HIPE . بازهای قوی پلی‌نیتروژن به عنوان کاتالیزگر بی‌تحرک، سنتز انتخابی ۲- استیل ۶ متوکسی نفتالین با استفاده از زئولیت HBEA . تأثیر اصلاحات فوق اسیدی بر روی کاتالیزگرهای ZnO_2 و Fe_2O_3 مورد استفاده در احتراق متان، تخریب اکسایشی راف گلوکونات کلسیم با استفاده از مس II- تعویض شده (Y Faujasite) ، کمپلکس‌های آنی فلزی متصل شده به پلیمر به عنوان کاتالیزگر در سنتز آلی، ایزومراسیون دی‌هیدرو روی **n**- بوتان به ایزوبوتن با استفاده از گالیم شامل کاتالیزگر زئولیت، کاتالیزگر گوانیدین بر روی بستر سیلیکا و سیلیکاهای به شکل مایسل، اصلاح آلی سیلیکا مزوپورهای شش وجهی، پلیمرهای شبکه‌ای فتالوسیانین برای کاتالیز هتروژن، جفت شدن Suzuki با استفاده از Pd (0) و Kf/Al^2O^3 ، فضاگزینی‌های غیرمعمول مشاهده شده در الیگومریزاسیون پروپن با استفاده از کاتالیزگر آلومینا- سیلیکای تبادل یون شده با نیکل II ، انتخاب‌پذیری با استفاده از کاتالیزگرهای هتروژن، کاتالیزگرهای اسیدلوئیس جدید به واسطه بی‌تحرک کردن مایعات یونی، هیدروژناسیون انانتیومر انتخابی هتروژن تری‌فلورومتیل کتونها، خواص ساختاری و فعالیت‌پذیری فلزات واسطه بستردار، کاتالیزگرهای پلیمری فلوئور محلول برای هیدروفورمیله دار کردن اولفین‌ها در فازهای فلوروس و CO_2 فوق بحرانی

منابع:

[1] Sherrington D.C., Kybett A.P., *Supported Catalysts and Their Application*, the Royal society of chemistry (2001).

[2] Furimsky E. and Spivey J.J., *Carbons and Carbon Supported Catalysts in Hydroprocessing*, Royal Society of Chemistry (2008).

عنوان درس به فارسی: **سنتزهای برگزیده کاربردی**	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
عنوان درس به انگلیسی: **Applied synthesis highlight**	تعداد ساعت: ۴۸		✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی با روش استفاده از فنون سنتز

سر فصل درس:

- ✓ نکات مختلفی از واکنش‌های افزایش تمایز دهنده آرایش فضایی، واکنش‌های حلقه‌زایی، کاربرد فلزات واسطه در سنتز آلی، کاربرد الکتروشیمی در بعضی سنتزهای منتخب، روش‌های بر پایه استفاده از مواد زیستی، سنتز با استفاده از مواد آغاز کننده غنی از قسمت‌های کایرال، برگزیده‌هایی از سنتزهای آلکالوییدی اخیر
- ✓ سنتز منحصر به فرد ترکیبات طبیعی: Mevinolin و Compactin ، داستان Coriolin ، Frontalin ، Swainsonine ، Daunosamine ،milbemycin β_3 ، سنتز Statine
- ✓ سنتز ترکیبات غیرطبیعی: Fenestranes ، نگاهی بر آسیب‌های ساختاری، دندریمرهای ستاره‌ای و آربورول‌ها، سنتز O-Glycoside، سنتز Cembranoid ، سنتز مشتقات Glycerol فعال نوری، سنتز نامتقارن α-آمینواسید، استفاده از متاتزیز آلکن‌ها در سنتز آلی، متاتزیز اولفین با استفاده از کمپلکس‌های کاملاً طراحی شده مولیبدن و تنگستن،
- ✓ واکنش‌های متاتزیز کاتالیز شده با روتنیوم در سنتز آلی، متاتزیز حلقه بستن در سنتز Epothilones و محصولات طبیعی پلی‌اتر، متاتزیز کاتالیستی حلقه بستن و سپینرنت فرآیند انتخاب انانتیومری، متاتزیز اِن این، متاتزیز متقاطع، پیشرفت‌های اخیر در شیمی ADMET ، پلیمرهای زیست فعال

منابع:

[1] Furstner A., Gibson S.E., Dixneuf P., *Alkene Metathesis in Organic Synthesis*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1998).

[2] Mulzer J., Altenbach H.J., Bravu M., Krohn K., Reissing H.U., *Organic Synthesis Highlight*, VCH, Weinheim (2003).

عنوان درس به فارسی: **آنزیم‌های صنعتی** عنوان درس به انگلیسی: **Industrial enzymes**	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی با کاربرد آنزیم‌ها در تولید مواد با ارزش

سر فصل درس:

- ✓ آنزیم‌های آمولیتیک، استفاده از آنزیم‌های فرآوری نشاسته در صنایع غذایی، سلولازها برای تبدیل تودهٔ زیستی، سلولازها در صنعت نساجی، زیلانزها ، استرهای کربوهیدرات زیلانولئیک میکروبی، ساختار و خواص زیست شیمی پکتینازها، α-L- رامنوزیدازها، کاربرد گلیکوزیدازها و ترانس گلیکوزیدازها، معرفی پپتیدازها و پایگاه داده MEROPS ، پروتئازهای سیستئین، سابتیلیزین، استفاده از پروتئازهای اسپارتیک در ساخت پنیر، متالوپروتئازها، آمینوپپتیدازها
- ✓ لیپازها: استفاده از لیپازها در محصولات صنعتی، استفاده از لیپازها در سنتز آلی، استفاده از لیپازها در تهیه محصولات بیودیزل، استفاده از لیپازها در سنتز لیپیدهای ساختاری به کمک کربن دی‌اکسید فوق بحرانی
- ✓ اندونوکلئازهای برش دهنده، پلیمرازهای DNA برای کاربردهای PCR، آنزیم‌های رونویسی معکوس،
- ✓ دایسر: ساختار و نقش آن در مسیر خاموش‌سازی ژن وابسته به RNA
- ✓ تولید هیدروژن پراکسید و تخریب آنزیم‌ها (استفاده آنها در سنسورهای زیستی و کاربردهای دیگر
- ✓ لاک‌کازها : عوامل بیولوژیکی، ساختار مولکولی و کاربرد صنعتی
- ✓ پراکسیدازها با پتانسیل کاهشی بالا ، دهیدروژنازهای اسید آمینه
- ✓ فتیازها: منبع، ساختار و کاربرد ، هیدرولازهای نیتریل، آسپارتازها: ساختار مولکولی، عوامل بیوشیمی و کاربردهای بیوتکنولوژیکی، ترانس گلوتامتیازها، اسیلاز پنی‌سیلین، هیدانتوئینازها

منابع:

[1] Polania J., MacCabe A.P., *Industrial Enzymes*, Springer, Netherlands (2007).

عنوان درس به فارسی: **روش‌های شیمیایی لایه نشانی** عنوان درس به انگلیسی: **Chemical methods of deposition**	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: فراگیری و انتخاب بهترین روش لایه نشانی

سر فصل درس:

- ✓ مروری بر لایه نشانی بخار شیمیایی
- ✓ راکتورهای CVD و فناوری سیستم‌های رهایش
- ✓ مدلی از فرایندهای CVD
- ✓ لایه‌نشانی اتمی
- ✓ شیمی فرآیند مواد اولیه CVD و ALD
- ✓ CVD نیمه‌رساناهای ترکیبی گروه III-V
- ✓ لایه‌نشانی بخار شیمیایی روی فلزات: Ru, Cu, Al, W
- ✓ لایه‌نشانی بخار شیمیایی اکسیدهای فلزی برای کاربردهای میکروالکترونیک
- ✓ لایه‌نشانی شیمیایی نیتریدهای فلزی مقاوم با استفاده از فلز- مواد آلی
- ✓ CVD پوشش‌های عامل‌دار روی شیشه
- ✓ CVD به روش فتوشیمیایی
- ✓ فرآیندهای لایه‌نشانی بخار شیمیایی به کمک پلاسما
- ✓ جنبه اقتصادی CVD

منابع:

[1] Jones A.C., Hitchman M.L., *Overview of Chemical Vapour Deposition*, Royal society of chemistry (2009).

[2] Gleason K.K., *CVD Polymers: Fabrication of Organic Surfaces and Devices*, Wiley-VCH (2015).

عنوان درس به فارسی: فناوری‌های نوین پالایش و تبدیل گاز	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
عنوان درس به انگلیسی: Modern technology of gas conversion and refinery	تعداد ساعت: ۴۸		✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنایی با روش‌های نوین تصفیه وتبدیل گاز طبیعی به فراورده‌های با ارزش

سر فصل درس:

- ✓ فناوری فیشر- تروپش
- ✓ راکتورهای فیشر- تروپش
- ✓ اصول شیمیایی کاربری‌های مهندسی
- ✓ تولید گاز سنتز برای سنتز فیشر- تروپش
- ✓ کاربرد تجاری فرآیند فیشر- تروپش
- ✓ فرآوری محصولات اولیه فیشر- تروپش
- ✓ کاتالسیت فیشر تروپش
- ✓ سینتیک و انتخاب‌پذیری سنتزهای فیشر- تروپش
- ✓ مدل توزیعی محصول بازجذبی (α-olefin) برای سنتزهای فیشر- تروپش گاز- جامد
- ✓ سینتیک‌های ذاتی جامد- گاز فیشر- تروپش و واکنش‌های گاز سنتز- بخار آب
- ✓ سینتیک‌ها و انتخاب‌پذیری سنتزهای گاز- اسلاری فیشر- تروپش
- ✓ مدل مهندسی واکنش چندجزئی برای سنتز تجاری فیشر- تروپش در راکتورهای ستونی حبابدار اسلاری

منابع:

[1] Markdry A.S., *Fisher-Tropsch Technology*, Elsevier science and technology books (2004).
[2] Laan G.P.V., *Kinetics, Selectivity and Scale up of Fisher-Tropsch Synthesis*, (1999).
[3] de Klerk A., *Fischer-Tropsch Refining*, John Wiley & Sons (2012).

عنوان درس به فارسی: فناوری‌های نوین پالایش و تبدیل نفت	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
عنوان درس به انگلیسی: Modern technology of Petroleum refining processes	تعداد ساعت: ۴۸		✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنایی با روش‌های نوین پالایش و تبدیل نفت

سر فصل درس:

- ✓ هیدروکراکینگ باقی مانده‌های نفتی
- ✓ افزایش کیفیت نفت پایه آسفالت‌زدایی شده با استفاده از کاتالیزگر، افزایش کیفیت با هیدروتریتینگ و شکستن ویسکوزیته با آب
- ✓ هیدروپیرولیز سریع باقی مانده‌های نفتی، هیدروکراکینگ ملایم نفت سنگین با کاتالیزگرهای اصلاح شده بر پایه آلومینا، تصفیه کاتالیستی باقی مانده‌های نفتی، شکست کاتالیستی باقی مانده‌های نفتی (Hydrocracking) ، افزایش کیفیت باقی مانده نفتی با فناوری فاز اسلاری فشار بالا ، حذف آسفالتن در حین هیدروپرسس نمودن باقی مانده‌های نفتی سنگین، غیرفعال شدن کاتالیست در روند افزایش کیفیت قیر، مقایسه کاتالیزگرهای متخلخل تک کاره با دو کاره در باقی مانده‌های هیدروتریتینگ، فرآیند هیدروترتینگ دو مرحله‌ای مواد میان تقطیری برای تولید سوخت دیزل و سوخت جت، اشباع شدن آروماتیک‌ها روی کاتالیزگرهای هیدروتریتینگ
- ✓ تولید سوخت دیزل سوندی نوع I با استفاده از فرآیند دو مرحله‌ای
- ✓ فرآیند سل برای هیدروژناسیون برش‌های میان تقطیری
- ✓ مطالعه مقایسه‌ای کاتالیزگرها برای کاهش آروماتیکی‌ها در سوخت دیزل، اثرات H_2S بر روی کاتالیزگر ($COMO/Al_2O_3$) مورد مصرف در هیدروترتینگ، کاتالیزگرهای هیدروپرسینگ جدید با استفاده از کمپلکس‌های مولکولی، شکست کاتالیستی فلودایز برای کاهش گوگرد نفت، فرآیند جدید برای افزایش کیفیت امولسیون‌های نفت سنگین

منابع:

[1] Oballa M.C., Shih S.S., *Catalytic Hydroprocessing of Petroleum and Distillates*, Marcel Dekker (1994).

[2] Occeli M.L., *Studies in Surface Science and Catalysis*, Vol. 166, Elsevier B. V, Ed, 1st, (2007).

[3] Gray M., *Upgrating Petroleum Residues and Heavy Oil*, Marcel Dekker (1994).

[4] Meyers R.A.Handbook of Petroleum Refining Processes, 4th Edition McGraw-Hill Education (2016).

عنوان درس به فارسی: **طراحی تصفیه‌خانه آب و فاضلاب** عنوان درس به انگلیسی: **Design of wastewater plants**	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنایی با طراحی تصفیه خانه فاضلاب و استفاده از آن درساخت تصفیه خانه فاضلاب

سر فصل درس:

- ✓ مشخصات کیفی فاضلاب وانتخاب فرایند تصفیه
- ✓ انواع راکتورهای شیمیایی وبیوشیمیایی قابل کاربرد در تصفیه خانه
- ✓ معرفی واحدهای عملیاتی وفرآیندی تصفیه خانه فاضلاب
- ✓ بررسی عملکرد هیدرودینامیکی واحدهای عملیاتی وفرآیندی
- ✓ طراحی تفصیلی آشغالگیر
- ✓ طراحی تفصیلی دانه گیر
- ✓ طراحی تفصیلی ته نشینی اولیه
- ✓ طراحی تفصیلی واحد فرآیندی حذف بیولوژیکی CNP (BPNR)
- ✓ طراحی تفصیلیته نشینی ثانویه
- ✓ طراحی تفصیلی واحد کلر زنی
- ✓ طراحی تفصیلی واحد های پردازش لجن (تغلیظ لجن، هضم هوازی وبیهوازی ، آبگیری و.....)
- ✓ دیاگرام جریان تصفیه خانه فاضلا ب
- ✓ دیاگرام موازنه جرم تصفیه خانه فاضلا ب
- ✓ پروفیل هیدرولیکی واحد های تصفیه خانه

منابع:

[1] Qasim S.R., *Wastewater Treatment Plants: Planning, Design, and Operation*, Technomic Pub. Co. (1999).

[2] Metcalf L., Eddy H., *Wastewater Engineering*, 4th edition, McGraw Hill (2003).

[3] Droste R.L., *Theory and Practice of Water and Wastewater Treatment*, John Wiley, New York (1996).

[4] Karia G.L., Christian R.A., *Wastewater Treatment: Concepts and Design Approach*, Phi Learning Private Limited; 2nd Edition edition (2013).

عنوان درس به فارسی: شبیه‌سازی فرآیندهای شیمیایی	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
عنوان درس به انگلیسی: Simulation of chemical processes	تعداد ساعت: ۴۸		✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنایی با اصول مدل سازی و شبیه سازی و کاربرد آن در فرآیندهای شیمیایی

سر فصل درس:

- ✓ معادلات پیوستگی، معادلات مومنتم (افت فشار)، معادلات بقا انرژی، معادلات بقا جرم
- ✓ روش‌های مختلف مدل سازی (کنترل ولیومی- دیفرانسیلی)
- ✓ مدل سازی فرآیندهای متفاوت شیمیایی شامل:
- ✓ فرآیندهای تقطیر
- ✓ فرآیندهای جداسازی در سیستم‌های پیوسته
- ✓ عملیات مرحله‌ای
- ✓ سینتیک و طراحی راکتورهای شیمیایی
- ✓ بسترهای ثابت و سیالی
- ✓ مبدل‌های حرارتی و ....
- ✓ آشنایی با نرم افزارهای طراحی فرآیندهای شیمیایی (مجموعه معادلات حاصل از هر فرایند با شبیه سازی با کامپیوترهای دیجیتال حل خواهند شد).
- ✓ استفاده از شبکه‌های عصبی در مدل سازی و شبیه سازی فرآیندهای شیمیایی

منابع:

[1] Ramirez W.F., *Computational Methods for Process Simulation*, 2nd edition, Butter worth- Heinemann (1997).

[2] Franks R.G.E., *Modeling and Simulation in Chemical Engineering*, 1st edition, John Wiley & Sons (1972).

[3] Luyben W.L., Lubean W.L., *Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers*, 2nd edition, McGraw-Hill Science/Engineering/Math (1989).

[4] Thoma J.U., Ould-Bouamama B., *Modeling and Simulation in Thermal and Chemical Engineering*, 1st edition, Springer Verlag (2000).

[5] Bequette B.W., Bequette W.B., *Process Dyamics: Modeling, Analysis and Simulation*, 1st edition, Pearson Education POD (1998).

[6] Chaves I.D.G., López J.R.G., Zapata J.L.G., Robayo A.L., Niño G.R., *Process Analysis and Simulation in Chemical Engineering*, Springer (2015).

عنوان درس به فارسی: **مواد افزودنی و اصلاح-کننده‌های شیمیایی**	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
عنوان درس به انگلیسی: **Chemical additives and Modifiers**	تعداد ساعت: ۴۸		✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنایی با مواد افزودنی و اصلاح‌کننده‌های شیمیایی

سر فصل درس:

- ✓ اساس فرمولاسیون پلیمری: مقدمه‌ای بر فرمولاسیون PVC سخت و انعطاف ناپذیر، فناوری پلاستیزول و ارگانوسول-ها، فرمولاسیون پلی اتیلن، فرمولاسیون پلی استیرن، فرمولاسیون پلی اولفین‌ها، فرمولاسیون پلی الاستومرهای ترموپلاستیک
- ✓ عوامل محافظت کننده (پایدارساز)
- ✓ ضد اکسیدان‌ها (مفاهیم عمومی، فرمولاسیون، ارزیابی عملکرد و نقش عوامل پایدار ساز محیطی و پایدار کننده‌های مخلوط فلزی)
- ✓ پلاستیزول‌ها (ترم کننده‌ها): پلاستیزول‌های مونومری برای PVC، استرهای بنزوییک اسید ترفتالاته و ایزوبوتیرات، استرهای سیترات، روغن‌های نفتی، روغن‌های معدنی، استرهای فسفاته، پارافین‌های کلرینه و پلاستیزول‌های پلیمری
- ✓ افزودنی‌های معدنی: پرکننده‌ها، عوامل تقویت کننده (نقش و عملکرد، کربنات کلسیم، کائولین، سیلیکا، تالک و میکا)
- ✓ مواد رنگی: اصول اولیه، اندازه گیری و رنگ پذیری (رنگدانه‌های آلی، رنگدانه‌های معدنی، رنگدانه‌های فلورسانس، دی اکسید تیتانیم و کربن سیاه)
- ✓ افزودنی‌های مرحله پروسسینگ: روان‌سازها و انواع آن (روغن‌های نفتی، پلی اتیلن با جرم مولکولی پایین و ...)
- ✓ افزودنی‌هایی با عملکرد ویژه: آنتی استاتیک‌ها، مونومرهای فعال، عوامل ایجاد کننده پیوندهای عرضی، عوامل معلق ساز، عوامل رهاساز، عوامل کوپل کننده، غلیظ کننده‌ها و مستربچ‌ها، عوامل ضد آتش

منابع:

[1] Edenbaum J., *Plastics Additives and Modifiers Hand Book*, Chapman and Hall, London(1996).

[2] ASM Internatinal Handbook Committee, *Engineered Materials Handbook*, Vol. II-*Engineering plastics ASM Internatinal*, USA (1987).

[3] Ghosh P., *Polymer Science and Technology of Plastics and Rubbers*, Tata McGraw Hill Publishing Company Limited (1992).

[4] Guerra E.S., Lima E.V., *Handbook of Polymer Synthesis, Characterization, and Processing*, John Wiley & Sons, (2013).

عنوان درس به فارسی: طراحی فرآیندهای شیمیایی عنوان درس به انگلیسی: Design of chemical processes	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنایی با اصول حاکم در طراحی و گسترش واحدهای تولیدی و تبیین معیارهای اقتصادی در فرآیندهای شیمیایی

سر فصل درس:

- ✓ مقدمه
- ✓ طراحی دستگاه صنعتی بر مبنای یافته‌های آزمایشگاهی و نیمه صنعتی
- ✓ نمای کلی از چگونگی طراحی مفهومی فرآیندها
- ✓ بررسی اقتصادی طرح‌های صنعتی
- ✓ موارد اجمالی در زمینه طرح و اقتصاد مهندسی
- ✓ مقدمه ای بر روش تصمیم‌گیری با معیار اقتصادی
- ✓ فاز صفر: نحوه کسب و تامین اطلاعات اولیه
- ✓ فاز اول: انتخاب سیستم ناپیوسته یا پیوسته و معیارهای مربوطه
- ✓ فاز دوم: تعیین ساختار و مشخصه‌ها برای جریانهای ورودی و خروجی به یک فرآیند
- ✓ فاز سوم: تعیین ساختار و مشخصه های جریانهای برگشتی
- ✓ فاز چهارم: تعیین ساختار و مشخصه ها در فرآیندهای جداسازی
- ✓ فاز پنجم: تعیین ساختار شبکه حرارتی و آشنایی با روش pinch

منابع:

[1] Douglas T.M., *Conceptual Design of Chemical Processes*, Mc Graw Hill Pub. (1988).

[2] Peters M., Timmerhaus K., West R., *Plant Design and Economics for Chemical Engineers*, 5th Ed., Mc Graw Hill Pub. (2002).

[3] Turton R., Bailie R.C., Whiting W.B., Shaeiwitz J.A., Bhattacharyya D., *Analysis, Synthesis and Design of Chemical Processes*, Prentice Hall, (2012).

عنوان درس به فارسی: غشاها و فرآیندهای غشایی عنوان درس به انگلیسی: Memberanes and Memberane processes	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنایی با اصول و کارکرد غشاءها و عملکرد فرآیندهای غشایی

سر فصل درس:

- ✓ آشنایی با غشاءها
- ✓ جنس، ساختار و خواص غشاءها
- ✓ ساخت غشاءها
- ✓ مدول‌های غشائی
- ✓ فرآیندهای غشائی
- ✓ میکروفیلتراسیون، الترافیلتراسیون و نانوفیلتراسیون
- ✓ اسمز معکوس
- ✓ دیالیز و الکترودیالیز
- ✓ غشاءهای مایع
- ✓ کاربرد غشاءها در صنایع مختلف
- ✓ مزایا و محدودیت های فرآیندهای غشائی
- ✓ گرفتگی غشاءها و راهکارهای کاهش آن
- ✓ آشنایی با آخرین دستاوردها در زمینه غشاءها و فرآیندهای غشایی

منابع:

۱- دکتر سیاوش مدائنی، غشاءها و فرآیندهای غشائی، انتشارات دانشگاه رازی، ۱۳۸۲

۲- فرآیندهای غشائی صنعتی، دکتر سیاوش مدائنی، انتشارات دانشگاه رازی، ۱۳۸۴

[3] Dickson J, Hu K., *Membrane Processes for Dairy Ingredient Separation*, John Wiley & Sons (2015).

عنوان درس به فارسی: سنتز و سینتیک پیشرفته پلیمرها عنوان درس به انگلیسی: Advanced synthesis and kinetics of polymers	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر سنتز پیشرفته پلیمرها

سر فصل درس :

- ✓ روشهای جدید سنتز پلیمرها:
  - پلیمریزاسیون حلقه گشای آنیونی
  - پلیمریزاسیون حلقه گشای کاتیونی
  - پلیمریزاسیون حلقه گشای رادیکالی
  - پلیمریزاسیون زنده رادیکالی
  - پلیمریزاسیون حلقه گشای متاتسیز
- ✓ گونه های ویژه وجدید پلیمرها:
  - پلی الکترولیتها: روشهای سنتز و کاربردها
  - پلیمرهای رسانا: روشهای سنتز و کاربردها
  - پلیمرهای هوشمند: روشهای سنتز و کاربردها
  - یونومرها: روشهای سنتز و کاربردها
  - پلیمرهای هیبریدی آلی- معدنی: روشهای سنتز و کاربردها

منابع:

[1] Mijs W.J., *New Methods for Polymer Synthesis*, Plenum Press, New York (1992).
[2] Ebdon J.R., *New Methods of Polymer Synthesis*, Kluwer Academic Publishers, (2000).
[3] Folkes M.J., Hope P.S., *Polymer Blends and Alloys*, Chapman & Hall, London (1993).
[4] Qiu B., Qiu S., Ben T., *Porous Polymers: Design, Synthesis and Applications*, Royal Society of Chemistry (2016).
[5] Braun D., Cherdron H., Rehahn M., Ritter H., Voit B., *Polymer Synthesis: Theory and Practice: Fundamentals, Methods, Experiments*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2013).

عنوان درس به فارسی: فناوری‌های پیشرفته پلیمرها عنوان درس به انگلیسی: Advanced technology of polymers	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر فناوری پیشرفته پلیمرها

سر فصل درس :

- ✓ خواص و فناوری الیاف:
- ✓ ارتباط ساختار و خواص فیزیکی
- ✓ روشهای تشخیص ساختمان داخلی الیاف مختلف مانند پنبه، پشم، نایلون و پلی استر
- ✓ تعاریف اولیه راجع به خصوصیات الیاف و طبقه بندی آنها
- ✓ معرفی و بررسی روشهای مختلف ریسندگی الیاف
- ✓ معرفی و بررسی انواع الیاف نایلونی، آرامیدی و کریستال مایع
- ✓ معرفی و بررسی انواع الیاف پلی استر و اکریلیک
- ✓ معرفی و بررسی انواع الیاف الاستومری، پلییورتانی و ریسندگی شیمیایی
- ✓ جرم مخصوص الیاف (اهمیت، روشهای اندازه گیری، تأثیرات)
- ✓ جذب آب بوسیله الیاف (اهمیت، روشهای اندازه گیری، تأثیرات)
- ✓ حرارت جذب رطوبت (اهمیت، روشهای اندازه گیری، تأثیرات)
- ✓ تورم الیاف (اهمیت، روشهای اندازه گیری، تأثیرات)
- ✓ ظرافت الیاف (اهمیت، روشهای اندازه گیری، تأثیرات)
- ✓ خواص و فناوری سرامیک: پیوندهای شیمیایی و فیزیکی، اصول فناوری سرامیک، مراحل فراورش از پودر تا سرامیک، بهینه کردن مساحت سطح، کلوئیدهای مصرفی در سرامیک‌ها، جذب پودر، ذرات باردار در سوسپانسیون، سوسپانسیون‌های پایدار، ویسکوزیته، حلالها ، Binder ها

منابع:

[1] Walter M., *Polymer Processing*, Hanser (1995).
[2] Walczak Z. K., *Processes of Fiber Formation*, Elsevier (2002).
[3] King A.G., *Ceramic Technology and Processing*, Noyes Publications/William Andrew Pub (2002).
[4] Sabu Thomas, Weimin Yang, *Advances in Polymer Processing: From Macro- to Nano-Scales*, Woodhead Publishing Ltd (2009).
[5] Chanda M., Roy S.K., *Industrial Polymers, Specialty Polymers, and their application*, CRC Press (2008).

سرفصل دروس دکتری

رشته : شیمی - شیمی معدنی

عنوان درس به فارسی: **ساختار و پیوند در ترکیبات معدنی** عنوان درس به انگلیسی: **Chemical structure and bond in inorganic chemistry**	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	✓ اصلی	✓ نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			اختیاری	نظری	
				عملی	

هدف: کسب دانش لازم برای شناخت انواع پیوندها و ساختارهای ترکیبات معدنی

سر فصل درس :

- ✓ ساختار و پیوند در ترکیبات عنصرهای اصلی
- ✓ ساختار و پیوند در ترکیبات عنصرهای واسطه
- ✓ بررسی اوربیتالهای مولکولی کمپلکس فلز-آلی و آلی فلزی
- ✓ ساختار و پیوند در جامدات و بررسی روش های محاسبه انرژی شبکه جامدات
- ✓ الکترونگاتیوی (مطلق) و سختی و نرمی (مطلق)
- ✓ شیمی اکسیدهای فلزی و سنتز آنها
- ✓ پیوند فلز - فلز ، خوشه های اتم فلز
- ✓ نانو ساختارهای معدنی

منابع:

[1] Brawn I.D., *The chemical bond in inorganic chemistry: the bond valance model* (2006).

[2] Parkin G., *Structure and Bonding: Metal-Metal Bonding*, (2010).

[3] Cao G., Wang Y., *Nanostructures and Nanomaterials: Synthesis, Properties, and Applications*, (2011).

[4] Meier G.H., *Concepts in Inorganic Materials: Thermodynamics of surfaces and interfaces*, (2014).

[5] Cotton, Wilkinson, Murillo and Bochmann, *Advanced Inorganic Chemistry*, (1999).

[6] Jolivet J.P., *Metal Oxide Chmistry, Syntheses*, (2003).

عنوان درس به فارسی: شیمی فلزات واسطه عنوان درس به انگلیسی: Chemistry of transition metals	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	✓ اصلی	✓ نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			اختیاری	نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر اصول شیمی فلزات واسطه

سر فصل درس :

- ✓ پیمایش عناصر واسطه (تیتانیم، وانادیم، کروم، منگنز، آهن، کبالت، نیکل، مس)
- ✓ عناصر سری دوم و سوم (زیرکونیونیم، هافنیوم، نیوبیوم، تانتالیم، مولیبدنیم، تنگستن، تکنیسیوم، رنیم، فلزات گروه پلاتین، رودیم، ایریدیم، پالادیم، پلاتین،نقره وطلا)
- ✓ فلزات نوبل (پلاتین، پالادیوم، رودیم، ایریدیوم، روتنیوم، اسمیم، طلا و نقره)

منابع:

[1] Cotton S.A., *Chemistry of Precious Metals*, Chapman & Hall (1997).

[2] Greenwood and Earnshaw, *Chemistry of the Elements*, 2nd Ed., (1998).

[3] Cotton F.A.; Wilkinson G., Murillo C.A., Bochmann M., *Advanced Inorganic Chemistry*, 6th edition, (1999).

[4] Robert H. Crabtree, *The Organometallic Chemistry of the Transition Metals*, Wiley (2014).

[5] Chen, Wei; Chen, Shaowei; Schneider, Hans-jrg; Shahinpoor, Mohsen; Bigioni, Terry, *Functional Nanometer-sized Clusters of Transition Metals Synthesis, Properties and Applications*, Royal Society of Chemistry (2014).

عنوان درس به فارسی: **کاتالیزگرهای همگن و ناهمگن** عنوان درس به انگلیسی: **Homogeneous and Heterogeneous Catalysis**	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	✓ اصلی	✓ نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			اختیاری	نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر اصول شیمی کاتالیزگرهای همگن و ناهمگن

سر فصل درس :

- ✓ پدیده کاتالیزوری، روشهای بیان فعالیت کاتالیزورها، گزینش پذیری، طبقه بندب کاتالیزورها، مقایسه کاتالیزورهای همگن و ناهمگن
- ✓ کاتالیزگرهای هموژن

فسفین و دی فسفین،کمپلکسهای آمینی، کمپلکسهای کاربن و کربن منوکسید

- ✓ مکانیسم واکنشهای کاتالیستی هموژن

واکنشهای اکسایش و کاهش، واکنشهای حذفی، واکنشهای الحاقی، واکنشهای حلقوی شدن، فعال شدن گروههای عاملی مختلف نسبت به حمله نوکلئوفیلی

- ✓ سینتیک واکنشهای کاتالیستی
- ✓ واکنشهای مورد علاقه صنعتی کاتالیست شده توسط کاتالیزگرهای هموژن
- ✓ کاتالیزگرهای هتروژن

سایت فعال، متغیرهای واکنش، انواع واکنش گاهها، انواع بسترهای کاتالیستی

- ✓ واکنشهای مورد علاقه صنعتی کاتالیست شده توسط کاتالیزگرهای هتروژن

منابع:

[1] Augustine L.R., *Heterogeneous Catalysis for the Synthetic Chemist (Chemical Industries)*, Marcel Dekker Inc. (1996).

[2] Leeuwen V., Piet W.N.M., *Homogeneous Catalysis: Understanding the Art*, Klumer Academic Publishers (2004).

[3] Hagen J., *Industrial Catalysis: A Practical Approach*, Wiley-VCH (2006).

[4] K.L. Ameta; Andrea Penoni, *Heterogeneous Catalysis: A Versatile Tool for the Synthesis of Bioactive Heterocycles*, Taylor and Francis, CRC Press (2014).

عنوان درس به فارسی: **تعیین ساختار با پراش پرتو X** عنوان درس به انگلیسی: **X-ray diffraction structure determination**	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	✓ اصلی	✓ نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			اختیاری	نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر اصول تعیین ساختار به کمک پراش پرتو X

سر فصل درس :

- ✓ مقدمه ای بر تاریخچه و اهمیت بلورشناسی
- ✓ بلور و تقارن انتقالی
- ✓ پرتو ایکس (اساس، پراش و قانون براگ)
- ✓ فضای وارون (شبکه وارون، بردارهای شبکه وارون، سلول واحد شبکه وارون، سنتز اوالد)
- ✓ فاکتور پراش اتمی و عوامل موثر بر آن، فاکتورهای ساختاری و تبدیل فوریه
- ✓ الگوی پراش و تقارن آن
- ✓ دستگاهوری (شامل منبع تابش، موازی ساز، جهت یاب، سیستم سرمایش، قطع کننده پرتو، آشکار ساز)،
- ✓ جمع آوری داده‌ها (شرایط جمع آوری، خطاهای سیستمی، کاهش داده‌ها، تصحیح جذب) و روش های تعیین ساختار (روش مستقیم و روش پترسون)، اتم‌های هیدروژن

منابع:

[1] Luger P., *Modern X-ray Analysis on Single Crystals*, Walter de Gruyter GmbH, Berlin (2014).

[2] Giacovazzo C., Monaco H.L., *Fundamental of Crystallography*, Oxford (2002).

[3] Stout G., Jensen L., *X-ray Structure Determination*, John Wiley & Sons (1989).

[4] Massa W., *Crystal Structure Determination*, Springer (2004).

[۵] علیرضا عباسی، شکوفه گرانمایه: اصول بلورشناسی، تعیین ساختار تک بلور و پودر، نانوساختارها و پروتئین ها، چاپ دوم ۱۳۹۴، انتشارات دانشگاه تهران

عنوان درس به فارسی: **مهندسی بلور** عنوان درس به انگلیسی: **Crystal engineering**	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنایی با اصول و مبانی مهندسی ترکیب های بلوری

سر فصل درس:

- ✓ تاریخچه مهندسی بلور، مقدمه‌ای بر اهمیت مهندسی بلور، شیمی ترکیبات سوپرامولکول، نیروهای بین مولکولی، نیروهای غیرکووالانس، پیوند هیدروژنی، انرژی و هندسه پیوند هیدروژنی، پیوند هیدروژنی ضعیف و قوی، پیوند هالوژنی و مقایسه آن با پیوند هیدروژنی، قاعده‌ی اتر، سینتون و سینتون‌های سوپرامولکولی، تکتون‌ها و شبکه‌های حاصل از آنها، شبکه‌های حاصل از پیوندهای هیدروژنی، شبکه‌های 1D، 2D و 3D، توپولوژی شبکه، پلیمرهای کوئوردیناسیونی، طراحی پلیمرهای کوئوردیناسیونی متخلخل و کاربرد آنها در ذخیره‌سازی گازها، جداسازی و ... ، پلیمرفها، انواع پلیمرفها، کوکریستال، تکنیک‌های بلورگیری به اختصار، روش‌های شناسایی به اختصار

منابع:

[1] Desiraju G. R., Vittal J. J., Ramanan A., *Crystal Engineering: A Textbook*, World Scientific Publishing Company (2011).

[2] Tiekink E. R. T., Vittal J. J., Zaworotko M. J., *Organic Crystal Engineering : Frontiers in Crystal Engineering*, Wiley (2010).

[3] Steed J. W. and Atwood J. L., *Supramolecular Chemistry*, Wiley & Sons (2000).

[4] Desiraju G. R., *Perspectives in Supramolecular Chemistry, Vol 2: The Crystal as a Supramolecular Entity*, Wiley (1996).

عنوان درس به فارسی: روش‌های طیف بینی کاتالیزگرها	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
عنوان درس به انگلیسی: Spectroscopy methods for catalysts	تعداد ساعت: ۴۸		✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر اصول روشهای طیف بینی کاتالیزگرها

سر فصل درس :

- ✓ کاتالیز ناهمگن، هدف از شناسایی کاتالیزگر، فنون طیف بینی، راهبردهای پژوهشی
- ✓ فنون شامل برنامه ریزی دما: کاهش برنامه ریزی شده، سولفید دار کردن برنامه ریزی شده، طیف بینی برنامه ریزی شده واکنش، طیف بینی واجذبی گرمایی
- ✓ نشر فوتون و طیف بینی اوژه – XPS – UPS –طیف بینی الکترونی اوژه
- ✓ طیف بینی یون، طیف سنجی جرمی یون ثانویه، طیف سنجی جرمی ذره خنثی نوع دوم، طیف سنجی پس پراکنی را درفورد، پراکنش یون کم انرژی
- ✓ طیف بینی موزباور، اثرموزباور، طیف بینی موزباور ، طیف بینی موزباور در شناسایی کاتالیزگر
- ✓ پراش و EXAFS ، پراش پرتوایکس، پراش الکترون کم انرژی، ساختار ظریف جذب پرتوایکس دنباله دار
- ✓ میکروسکوپی و تصویربرداری، میکروسکوپی الکترونی، میکروسکوپی یون، فنون تصویربرداری
- ✓ طیف بینی ارتعاشی، نظریه ارتعاش مولکولی، طیف بینی زیرقرمز، طیف بینی رامان، طیف بینی اتلاف انرژی الکترون
- ✓ چند مورد از شناسایی کاتالیزگر، کاتالیزگرهای رودیم نشانده شده روی بستر، ارتقا دهنده های قلیایی روی سطوح فلزی، کاتالیزگرهای هیدروگوگرد زدایی، کاتالیزگرهای کروم برای بسپارش

منابع:

[1] Ebsworth E.A.V., Rankin D. W. H., *Structural methosd in inorganic chemistry*, (1991).
[2] Parish R.V., *NMR, NQR, EPR, and Mossbauer Spectroscopy in Inorganic Chemistry*, (1990).
[3] Brisdon A.K., *Inorganic Spectroscopy methods*, (1998).
[4] van Santen, R. A. and Neurock, M. *Molecular Heterogeneous Catalysis*, (2006).

عنوان درس به فارسی: فوتوشیمی ترکیبات معدنی عنوان درس به انگلیسی: Photochemistry of inorganic compounds	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنایی با برهمکنش نور با ماده و بررسی واکنش‌ها در حالت برانگیخته

سر فصل درس :

- ✓ فتوشیمی و اصول اولیه
- ✓ قوانین فتوشیمی و راه‌های استراحت حالت برانگیخته
- ✓ انواع واکنش‌های فتوشیمیایی: واکنش‌های جانشینی، پیش بینی واکنش‌های جانشینی بر اساس معادلات ون کوئیکن بورن، واکنش‌های تخریبی، واکنش‌های فتو ایزومریزاسیون
- ✓ فتو فیزیک و کاربرد آن
- ✓ فتوحساس کننده‌ها و زمینه‌های کاربردی آن‌ها: سل‌های خورشیدی ، فوتودینامیک تراپی، سوئیچ‌های ملکولی، ماشین‌های ملکولی نوری، مدارهای منطقی ملکولی
- ✓ فوتوشیمی ترکیبات نانو مواد معدنی

منابع:

[1] Balzani V., Ceroni P., Juris A., *Photochemistry and photophysics*, Wiley (2014).

[2] Feringa B.L., *Molecular Switches*, Wiley-VCH, Weinheim (2001).

[3] Balzani V., *Molecular Devices and Machines– A Journey in the Nano World*, Wiley-VCH (2003).

[4] Schliwa M., *Molecular Motors*, Wiley-VCH, Weinheim (2003).

[5] Sauvage J.-P., *Molecular Machines and Motors*, Springer, Berlin (2001).

[6] Kelly T. R., *Molecular Machines*, Springer, Berlin (2005).

عنوان درس به فارسی: الکتروشیمی ترکیبات معدنی عنوان درس به انگلیسی: Inorganic electrochemistry	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: بررسی شیمی ردوکس و واکنشهای انتقال الکترون در کمپلکس های فلزی

سر فصل درس :

- ✓ نظریه الکتروشیمی: تاریخچه الکتروشیمی معدنی
- ✓ مقدمه ای بر تکنیک های الکتروشیمیایی: ولتامتری چرخه ای، ولتامتری پالسی، کرونوکولومتری
- ✓ اساس واکنش های الکترودی: لایه دوگانه الکتریکی و ساختار آن، واکنش های انتقال الکترون، مطالعه مکانیسم واکنش های الکترودی
- ✓ سینتیک واکنش های الکترودی: سینتیک واکنش های انتقال الکترون، سیستم های برگشت پذیر، شبه برگشت پذیر و برگشت ناپذیر
- ✓ ملاحظات تجربی ولتامتری چرخه ای: الکترود ها، خصوصیات و ملاحظات کاربردی حلال، الکترولیت زمینه، استاندارد درونی
- ✓ الکتروشیمی سیستم های سوپراملکولی: تعیین ثابت تعادل واکنش های تسهیم نامتناسب و تسهیم متناسب، دسته بندی کمپلکس های آمیخته والانس با استفاده از ولتامتری چرخه ای، ارتباط فعالیت کاتالیتیکی و خواص الکتروشیمیایی، الکتروشیمی سیستم های تبدیل انرژی
- ✓ فاکتورهای تاثیر گذار بر پتانسیل های اکسایش – کاهش: تغییر قدرت دهندگی سیگما و پذیرندگی پای لیگاندهای کئوردینه شده، اثرات فضایی، توآرایی ساختاری و رفتار الکتروشیمیایی، اثر سرعت اسکن، سری الکتروشیمیایی لیگاند، مدل بارستن، مدل P_L، مدل E_L
- ✓ الکتروشیمی محلول های غیر آبی: حلال های غیر آبی، پنجره های رویش پتانسیل، ناخالصی های مزاحم در حلال های غیر آبی
- ✓ الکتروشیمی کمپلکس های فلزی، تفسیر و پیش بینی واکنش های الکتروشیمیایی: الکتروشیمی کمپلکس های فلزی با مراکز فلزی مختلف نظیر Co(III), Co(II), Ni(II), Cu(I), Cu(II), Zn(II), Cd(II) با لیگاندهای مختلف کئوردینه شونده
- ✓ سوئیچ زدن الکتروشیمیایی: سوئیچ الکتروشیمیایی کاتیون و آنیون، سیکلوفن ها و گیرنده های ملکولی، سیم های ملکولی

منابع:

[1] Zanello P., Nervi C., Fabrizi de Biani F., *Inorganic Electrochemistry: Theory, Practice and Application*, 2nd ed., Cambridge, UK. (2012).

[2] Kaifer A., Gómez-Kaifer M., *Supramolecular Electrochemistry*, Wiley-VCH (2007).

[3] Armando J.L., Pombeiro C.A., *Terends in Molecular Electrochemistry*, CRC Press (2004).

[4] Zoski C.G., *Handbook of Electrochemistry*, Elsevier (2007).

[5] Aurbach D., *Nonaqueous Electrochemistry*, Marcel Dekker, New York (1999).

[6] Gutmann V., *The Donor-Acceptor Approach to Molecular Interactions*, PlenumPress, New York (1978).

عنوان درس به فارسی: زیست شیمی معدنی	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
عنوان درس به انگلیسی: Bioinorganic chemistry	تعداد ساعت: ۴۸		✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر اصول زیست شیمی معدنی

سر فصل درس :

- ✓ عناصر اصلی، عناصر مضر،
- ✓ لیگاندهای طبیعی، لیگاندهای کی لیت کننده،
- ✓ کاربرد لیگاندهای کی لیت کننده در درمان، اثرات فلزات،
- ✓ اصول شیمی کئوردیناسیون بیومعدنی، اثر ساختار، تجمع خودبخود،
- ✓ خواص مولکولهای بیولوژیکی، انتقال یونهای فلزی، کنترل و کاربرد غلظت یون فلزات،
- ✓ اتصال DNA کاتالیز اسیدی مفید آنزیمها،
- ✓ مطالعات NMR ، توسعه هیدرولیزی متالوآنزیمها، انتقال الکترون و منابع انرژی برای زندگی،
- ✓ پروتئین‌های آهن - گوگرد،
- ✓ اسپکتروسکوپی موزبار،
- ✓ هیدروژنازها ، نیتروژنازها، شیمی انتقال اتم و گروه،
- ✓ آنزیمهای احیاکننده، مواد داروئی رادیواکتیو.

منابع:

[1] Gasser G., *Inorganic Chemical Biology: Principles, Techniques and Applications*, Wiley (2014).

[2] Kaim W., Schwederski B., Klein A., *Bioinorganic Chemistry - Inorganic Elements in the Chemistry of Life: An Introduction and Guide*, 2nd Edition, Wiley (2013).

[3] Culotta V., *Metals in Cells*, Wiley (2013).

[4] Maayan G., Albrecht M., *Metallofoldamers: Supramolecular Architectures from Helicates to Biomimetics*, Wiley (2013).

[5] Stephanos J.J., Addison A.W., *Chemistry of Metalloproteins: Problems and Solutions in Bioinorganic Chemistry*, Wiley (2014).

[6] Ueno T., Watanabe Y., *Coordination Chemistry in Protein Cages: Principles, Design, and Applications*, Wiley (2013).

[7] Bertini I., Gray H.B., Lippard S.J., Valentine J.S., *Bioinorganic Chemistry*, University Science Books , Mill Valley, CA. (1994).

[8] Bertini I., Gray H.B., Stiefel E.I., Valentine, J.S., *Biological Inorganic Chemistry, Structure and Reactivity*, (2007).

[9] Crichton R.R., *Biological Inorganic Chemistry, An Introduction*, First Edition, Elsevier (2008).

عنوان درس به فارسی: **پلیمرهای معدنی** عنوان درس به انگلیسی: **Inorganic polymers**	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر نظریه و کاربردهای پلیمرهای معدنی

سر فصل درس:

- ✓ معرفی , شناسائی پلیمرهای معدنی، انواع آنها و ویژگی های مشخصه آنها
- ✓ پلی فسفازین ها (روشهای سنتز، واکنش های سطحی آنها، سیستم های هیبریدی کوپلیمری، سیستم های هیبریدی کامپوزیتی، پلی فسفازین های آلی فلزی، ساختار مولکولی پلی فسفازین های خطی، رابطه بین ساختار و خواص پلی فسفازین ها)
- ✓ پلی سیلوکسان ها (تهیه و آنالیز، خواص عمومی، هوموپلیمرهای فعال، روش های جدید شناسایی آنها، کوپلیمرها، شبکه های درهم نفوذی و کاربردها)
- ✓ پلی سیلان ها و پلیمرهای مربوطه (سنتز، اصلاح شیمیائی پلی سیلان ها، خواص فیزیکی و الکترونی آنها، لومینسانس، هدایت الکتریکی و نوری آنها، پیوندهای عرضی در پلی سیلان ها، ساختار پلی سیلان ها و فناوری پلی سیلان ها)
- ✓ سایر پلیمرهای معدنی (پلیمرهای بر پایه فروسن، پلیمرهای دارای فسفر، پلیمرهای دارای بور، پلیمرهای دارای سیلیس، پلی‌ژرمان ها، پلیمرهای دارای سولفور و سلنیم، پلیمرهای دارای آلومینیوم، پلیمرهای دارای قلع، پلیمرهای دارای آرسنیک)
- ✓ پلیمرهای کوئوردیناسیونی فلزات (اصول و تعاریف، روشهای سنتز و شناسائی آنها، خواص و کاربرد های آنها شامل خاصیت های تخلخل، کاتالیزوری، رسانایی، مغناطیسی، نوری غیر خطی، لومینسانس، رنگی، اکسایش و کاهش، دارو رسانی، به عنوان حسگر، ذخیره و جداسازی گازها)
- ✓ کامپوزیت های هیبریدی آلی-معدنی (سرامیک های سل-ژل، فیلرها در الاستومرها، سرامیک های اصلاح شده پلیمری)
- ✓ پلیمرهای معدنی مورد استفاده در سرامیک ها (فرایند سل-ژل در سرامیک های اکسیدی، فیبر کربنی، سیلیکون کاربیدی، سیلیکون نیتریدی، نیترید بور، کاربید بور، نیترید آلومینیوم، نیترید فسفر)

منابع:

[1] Ray N.H., *Inorganic Polymers, Academics*, New York (1978).

[2] Zeldi M., Wynne K.J., Allcock H.L., *ACS Symposium Series*, No. 360-(1978), ISBN 0-8412-1442-5.

[3] Mao-Chun Hong, M-C. Chen L., *Design and Construction of Coordination Polymers*, John Wiley & Sons, Inc. (2009).

[4] Orti O.L., Ramirez L.D., *Coordination Polymers and Metal Organic Frameworks: Properties, Types and Applications*, Nova Science Pub Inc. (2012).

عنوان درس به فارسی: **مباحث پیشرفته در شیمی معدنی** عنوان درس به انگلیسی: **Advanced topics in inorganic chemistry**	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنایی با مباحث روز و جدید در رشته شیمی معدنی

سر فصل درس :

- ✓ تدریس و معرفی آخرین پیشرفت های شیمی معدنی
- ✓ بررسی مقالات مجلات معتبر و کتاب های به روز بین المللی در زمینه های تحقیقاتی مختلف شیمی معدنی

منابع:

مقالات جدید، به ویژه مقالات مروری (Review articles) و Lecture notes

سرفصل دروس دکتری

رشته : شیمی – نانو شیمی

با گرایش‌های نانوپلیمر، سوپرامولکول، نانو معدنی و نانونظری

عنوان درس به فارسی: مباحثی در نانوشیمی و نانوفناوری عنوان درس به انگلیسی: Topics in nanochemistry and nanotechnology	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	✓ اصلی مشترک اختیاری	✓ نظری عملی نظری عملی	دروس پیش‌نیاز: ندارد

هدف: آشنائی و تسلط بر نانوشیمی و نانوفناوری

سر فصل درس:

اصول اولیه نانو شیمی، الگوبرداری شیمیایی و لیتوگرافی، خود تجمعی لایه لایه، نانو میله، نانو لوله و نانو سیم های خود تجمع یافته، سنتز و خود تجمعی نانوکریستال ها، کره های میکرو، مواد با اندازه تخلخل میکرو و مواد با اندازه تخلخل ۲ تا ۵۰ نانو متر از واحد های ساختاری نرم، بلاک کوپلیمر های خود تجمع یافته، بیومواد و الهام از طبیعت، خود تجمعی واحد های سازنده بزرگ

منابع:

[1] Ozin, G. A.; Arsenault, A. C.; Cademartiri, L.; Nanochemistry: *A Chemical Approach to Nanomaterials*, RSC Publication (2009)

عنوان درس به فارسی: شیمی فیزیک پیشرفته پلیمرها عنوان درس به انگلیسی: Advanced physical chemistry of polymers	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	✓ تخصصی اختیاری	✓ نظری عملی نظری عملی	دروس پیش‌نیاز: ندارد

هدف: آشنائی و تسلط بر شیمی فیزیک پیشرفته پلیمرها

سر فصل درس:

بعضی رفتارها و اصول اساسی:

- ✓ رابر الاستیسیته: ترمودینامیک رابر کشسانی، کشسانی در تغییر شکل‌ها، کنفیگوراسیون زنجیر، نیروی کشسان رابر ولکانیزه شده، معادله مونری-ریولین، تبلور و جهت گیری القائی، دینامیک مولکولی ویسکوکشسان، طیف دینامیکی تنش- بازیابی
- ✓ مدلهای نظری: مدل حجم آزاد Eyring ، مدل تکرارdeGennes ، مدل لوله Doi-Edward
- ✓ رئولوژی در تغییر شکلها و فرم‌های بزرگ
- ✓ رفتار ژل‌ها و سوسپانسیون‌ها
- ✓ استحکام رابرها و پُرکننده‌های فعال
- ✓ استحکام پلاستیک‌ها و الیاف
- ✓ نظریهٔ مواد شبه شبکه‌ای در ابعاد ماکرو و بزرگ، مدل شبه شبکه ای، مباحث جدید ترمودینامیکی و سینتیکی زنجیرهای مولکولی
- ✓ نظریهٔ انتقال شیشه ای، نظریهٔ ذوب شدن ونرم شدن، نظریهٔ اثرات دمای انتقال شیشه ای، نظریهٔ پرکننده های فعال، نظریهٔ ترموپلاستیک الاستومرها

منابع:

[1] Sun S.F., *Physical Chemistry of Macromolecules*, 2nd ed., Wiley-Interscience, (2004).

[2] Furukaw, J., *Physical Chemistry of Polymer Rheology*, Springer (2005).

[3] Sperling L.H., *Introduction to Physical Polymer Science*, 4Ed., Wiley-Interscience, (2005).

عنوان درس به فارسی: سنتز و سینتیک پیشرفته پلیمرها عنوان درس به انگلیسی: Advanced synthesis and kinetics of polymers	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	✓ تخصصی	✓ نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			اختیاری	نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر سنتز پیشرفته پلیمرها

سر فصل درس :

- ✓ روشهای جدید سنتز پلیمرها
- ✓ پلیمریزاسیون حلقه گشای آنیونی
- ✓ پلیمریزاسیون حلقه گشای کاتیونی
- ✓ پلیمریزاسیون حلقه گشای رادیکالی
- ✓ پلیمریزاسیون زنده رادیکالی
- ✓ پلیمریزاسیون حلقه گشای متاتسیز
- ✓ گونه های ویژه وجدید پلیمرها
- ✓ پلی الکترولیتها: روشهای سنتز و کاربردها
- ✓ پلیمرهای رسانا: روشهای سنتز و کاربردها
- ✓ پلیمرهای هوشمند: روشهای سنتز و کاربردها
- ✓ یونومرها: روشهای سنتز و کاربردها
- ✓ پلیمرهای هیبریدی آلی- معدنی: روشهای سنتز و کاربردها

منابع:

[1] Mijs W.J., *New Methods for Polymer Synthesis*, Plenum Press, New York (1992).
[2] Ebdon J.R., *New Methods of Polymer Synthesis*, Kluwer Academic Publishers, (2000).
[3] Folkes M.J., Hope P.S., *Polymer Blends and Alloys*, Chapman & Hall, London (1993).
[4] Qiu B., Qiu S., Ben T., *Porous Polymers: Design, Synthesis and Applications*, Royal Society of Chemistry (2016).
[5] Braun D., Cherdron H., Rehahn M., Ritter H., Voit B., *Polymer Synthesis: Theory and Practice: Fundamentals, Methods, Experiments*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2013).

عنوان درس به فارسی: فناوری‌های پیشرفته پلیمرها عنوان درس به انگلیسی: Advanced polymer technology	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	✓ تخصصی	✓ نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			اختیاری	نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر فناوری پیشرفته پلیمرها

سر فصل درس :

- ✓ خواص و فناوری الیاف:
- ✓ ارتباط ساختار و خواص فیزیکی
- ✓ روشهای تشخیص ساختمان داخلی الیاف مختلف مانند پنبه، پشم، نایلون و پلی استر
- ✓ تعاریف اولیه راجع به خصوصیات الیاف و طبقه بندی آنها
- ✓ معرفی و بررسی روشهای مختلف ریسندگی الیاف
- ✓ معرفی و بررسی انواع الیاف نایلونی، آرامیدی و کریستال مایع
- ✓ معرفی و بررسی انواع الیاف پلی استر و اکریلیک
- ✓ معرفی و بررسی انواع الیاف الاستومری، پلییورتانی و ریسندگی شیمیایی
- ✓ جرم مخصوص الیاف (اهمیت، روشهای اندازه گیری، تأثیرات)
- ✓ جذب آب بوسیله الیاف (اهمیت، روشهای اندازه گیری، تأثیرات)
- ✓ حرارت جذب رطوبت (اهمیت، روشهای اندازه گیری، تأثیرات)
- ✓ تورم الیاف (اهمیت، روشهای اندازه گیری، تأثیرات)
- ✓ ظرافت الیاف (اهمیت، روشهای اندازه گیری، تأثیرات)
- ✓ خواص و فناوری سرامیک: پیوندهای شیمیایی و فیزیکی، اصول فناوری سرامیک، مراحل فراورش از پودر تا سرامیک، بهینه کردن مساحت سطح، کلوئیدهای مصرفی در سرامیکها، جذب adsorbate به پودر، ذرات باردار در سوسپانسیون، سوسپانسیون‌های پایدار، ویسکوزیته، حلالها ، Binder ها

منابع:

[1] Walter M., *Polymer Processing*, Hanser (1995).
[2] Walczak Z. K., *Processes of Fiber Formation*, Elsevier (2002).
[3] King A.G., *Ceramic Technology and Processing*, Noyes Publications/William Andrew Pub (2002).
[4] Sabu Thomas, Weimin Yang, *Advances in Polymer Processing: From Macro- to Nano-Scales*, Woodhead Publishing Ltd (2009).
[5] Chanda M., Roy S.K., *Industrial Polymers, Specialty Polymers, and their application*, CRC Press (2008).

عنوان درس به فارسی: نانو فناوری پلیمرها عنوان درس به انگلیسی: Polymer nanotechnology	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر شیمی و نانو فناوری پلیمرها

سر فصل درس:

- ✓ فراورش، سنتز شیمیایی و فراورش پودرها و فیلم‌های با ساختار نانو ذرات: شامل فلزات، آلیاژها، کامپوزیتها، سرامیکها، مواد هیبریدی
- ✓ فیلم‌ها و پوشش‌ها: شامل فلزات و سرامیک‌ها
- ✓ فراورش پاششی حرارتی مواد نانو کریستالی
- ✓ تهیه پودرهای نانو کریستالی برای پاشش حرارتی
- ✓ پاشش حرارتی
- ✓ تهیه مواد و کامپوزیت‌های نانو ساختار با فراورش فاز جامد
- ✓ پایداری فاز در دماهای بالا
- ✓ مواد نانو ساختار Electrodeposited
- ✓ سنتز مواد نانو ساختار با Electrodeposition
- ✓ ساختار مواد نانو تهیه شده با این روش
- ✓ خصوصیات مواد نانو تهیه شده با این روش که شامل خصوصیات فیزیکی، الکتریکی، مغناطیسی، حرارتی و ...
- ✓ کاربردها
- ✓ سنسورهای گازی و ذخیره سازی گازها
- ✓ کاتالیزگرها
- ✓ نانوکامپوزیت‌ها
- ✓ لاستیک‌های تقویت شده
- ✓ پلاستیک‌های تقویت شده

منابع:

[1] Koch C.C., *Nanostructured materials: Processing, Properties and Potential Applications*, Noyes/William Andrew Publishing (2002).

[2] Thomas S., Shanks R., Chandrasekharakurup S., Nanostructured Polymer Blends, Elsevier Science & Technology Books, (2013).

عنوان درس به فارسی: نانوکامپوزیت‌های پلیمری	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
عنوان درس به انگلیسی: Polymer Nanocomposites	تعداد ساعت: ۴۸		✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر شیمی و فناوری نانوکامپوزیت‌های پلیمری

سر فصل درس :

- ✓ خواص عمومی نانوکامپوزیت‌ها: فیزیکی، مکانیکی، شیمیائی
- ✓ نانوکامپوزیت‌های بر پایه پلیمر: سنتز، فرایند، شناسایی و کاربرد
- ✓ نانوکامپوزیت‌های پر شده با پلیمر: سنتز، فرایند، شناسایی و کاربرد
- ✓ نانوکامپوزیت‌های بر پایه پلیمر / سیلیکات لایه ای: سنتز، فرایند، شناسایی و کاربردها بیو انوکامپوزیت‌ها
- ✓ نانوکامپوزیت‌های پلی متیل متاکریلات سنتز شده به وسیله پلیمریزاسیون امولسیونی
- ✓ پُرکننده‌های نیترید بور جهت کامپوزیت‌های پلیمری
- ✓ پیش بینی رفتار فازی نانوکامپوزیت‌های پلیمری- خاک رس
- ✓ ساختارمزوسکوپی نانوکامپوزیت‌های پلیمرمعدنی
- ✓ تجاری سازی نانوکامپوزیت‌های پلیمری
- ✓ پخش و هسته زایی پُرکننده‌های خاک رُس در فیلم‌های پلیمری نانوکامپوزیتی

منابع:

[1] Ajayan P.M., Schadler L.S., Braun P.V., *Nanocomposite science and Technology*,Wiley-VCH, Weinheim (2003).

[2] Krishnamoorti R., Vceia R.A., *Polymer Nanocomposites:synthesis, characterization, and modej*, ACS series 804 (2001).

[3] Dasari A., Njuguna J., Functional and Physical Properties of Polymer Nanocomposites, John Wiley & Sons, (2016).

عنوان درس به فارسی: نانوفناوری غشاها عنوان درس به انگلیسی: Membrane nanotechnology	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی ✓ اختیاری	نظری عملی ✓ نظری عملی	دروس پیش‌نیاز: ندارد

هدف: آشنائی و تسلط بر نانوفناوری غشاها

سر فصل درس:

- ✓ آشنائی با مواد مناسب جهت تهیه غشاء و روشهای تهیه غشاء
- ✓ آشنائی با انواع فرایندهای غشائی
- ✓ معرفی و بررسی تکنیکهای غشائی بر پایه نانوفناوری در تصفیه آب
- ✓ نانوفیلتراسیون در محیط های آبی و آلی
- ✓ معرفی و بررسی انواع غشاء های مورد استفاده در بیوتکنولوژی و کاربردهای پزشکی
- ✓ مهندس بافت به وسیله غشاء
- ✓ جداسازی مواد داروئی ویژه بوسیله فرایند های غشائی
- ✓ همودیالیز
- ✓ ساخت انواع مواد داروئی خوراکی بر پایه مواد غشائی
- ✓ معرفی و بررسی غشاء های کاتالیستی بر پایه نانوذرات

منابع:

[1] Nunes, S. P. and Peinemann, K-V., *Membrane Technology in the Chemical Industry*, Wiley-VCH Verlag GmbH, Weinheim, Germany (2010).

[2] Li, N. N., Fane, A. G., Winston, W. S. and Matsuura, H.T., *Advanced Membrane Technology and Application*, John Wiley & Sons, New Jersey (2008).

[3] Marcano, J. G. S, Tsotsis, T. T., *Catalytic Membrane and Membrane Reactors*, Wiley-VCH Verlag GmbH, Germany (2012).

[4] Street A., Savage N., Nanotechnology Applications for Clean Water: Solutions for Improving Water Quality, Elsevier Science & Technology (2014).

عنوان درس به فارسی: مباحث پیشرفته در نانوپلیمرها عنوان درس به انگلیسی: Advanced topics in nanopolymers	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی ✓ اختیاری	نظری عملی ✓ نظری عملی	دروس پیش‌نیاز: ندارد

هدف: آشنایی با آخرین پیشرفت های صورت گرفته در زمینه نانومواد پلیمری

سرفصل درس:

- ✓ تدریس و معرفی آخرین پیشرفت های صورت گرفته در زمینه سنتز، شناسایی و کاربردهای نانو پلیمرها.
- ✓ بررسی مقالات مجلات معتبر و کتاب های به روز بین المللی در زمینه های ذکرشده.

منابع:

مقالات جدید، به ویژه مقالات مروری (Review articles) و Lecture notes

عنوان درس به فارسی: **پلیمرها در سطح و لایه‌های مرزی** عنوان درس به انگلیسی: **Polymers at Surfaces and Interfaces**	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنایی با رفتار فازی بر روی سطح پلیمرها و لایهٔ مرزی

سرفصل درس:

خواص و رفتار سطی پلیمر مذاب، ساختار لایه های مرزی بین پلیمرهای مختلف و بین پلیمرها و نانو پلیمرها، اصول مولکولی چسبیدن، خواص پلیمرها در سطوح مایع، رفتار آماری پلیمرها نزدیک لایه های مرزی، پلیمرهای توزیع شده در لایه های مرزی هوا- مایع

منابع:

[1] Jones, R.A., Richards, R.W., *Polymer at Surfaces and Interfaces,* Cambridge University Press (1999).

[2] Goodwin, J., *Colloids and Interfaces with Surfactants and Polymers*, Second Edition, Wiley (2009).

عنوان درس به فارسی: نانوداروها و سامانه-های انتقال دارو	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
عنوان درس به انگلیسی: Nanodrugs and nanodrug delivery systems	تعداد ساعت: ۴۸		✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر نانوداروها و سامانه‌های انتقال دارو

سرفصل دروس:

- ✓ نانودارو و نانوسامانه‌های رهایش دارو، پلیمری، فلزی، کربنی و معدنی، سیلیکا، لیپوزوم و درختسان‌ها، و نانوسامانه‌های هسته-پوسته
- ✓ سدهای زیستی در برابر انتقال عوامل دارویی و تشخیصی، برهمکنش و نفوذ دارو در بافت‌ها
- ✓ سینتیک و ساز و کار رهایش دارو
- ✓ ژن درمانی و انتقال ژن توسط نانوسامانه‌ها
- ✓ دارورسانی هدفمند، اجزاء و کاربردها
- ✓ مطالعات درون تنی و برون تنی نانوسامانه های انتقال دارو
- ✓ اثرات خواص مختلف نانودارو و نانوسامانه‌ها بر زیست سازگاری
- ✓ نانو داروها برای درمان سرطان
- ✓ نانوسامانه های تشخیصی
- ✓ دستاوردها و آینده

منابع:

[1] Duzgunes, N., *Nanomedicine: Cancer, Diabetes, and Cardiovascular*, Central Nervous System, Academic Press (2012).

[2] Tibbals , H.F., *Medical Nanotechnology and Nanomedicine*, CRC Press (2011).

عنوان درس به فارسی: NMR پیشرفته عنوان درس به انگلیسی: Advanced NMR	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	✓ تخصصی	✓ نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			اختیاری	نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر نظریه و کاربرد NMR

سرفصل درس:

- ✓ معرفی طیف الکترومغناطیسی،
- ✓ ^{1}H-NMR، جابجایی شیمیایی، انتگراسیون، جفت‌شدگی،
- ✓ کاربرد NMR در کنار دیگر روش‌های طیف‌سنجی،
- ✓ ^{13}C-NMR، ساده سازی طیف، دکوپلاژ، APT, DEPT ،روش‌های FT, FID،
- ✓ اثر استخلاف، اثر g، گروه‌های عاملی مختلف،
- ✓ کوپلاژ دو اسپینی، سه اسپینی و سیستم‌های پیچیده تر، تفسیر ثابت کوپلاژ، کوپلاژ دوربُرد،
- ✓ معرف‌های جابه‌جاکننده، آسایش، T_1,T_2 در پروتون،
- ✓ کربن و دیگر هسته‌ها، هسته‌های چهار قطبی، D-NMR یک بعدی و دو بعدی،
- ✓ آزمایش اسپین- اکو، COSY, HETCOR ,HMQC, NOE, HOSEY, ROSEY, INADEQUATE, EXSY حذف پیک آب، کالیبراسیون پالس برای کانال دکوپلاژ، شکل کالیبراسون پالس، کالیبراسیون برای ^{15}N, ^{13}C .

منابع:

[1] Friebolin H., *Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy*, 5th Ed., VCH (2010).
[2] Macomber R.S., *A Complete Introduction to Modern NMR Spectroscopy*, Wiley NY (1998).
[3] Breitmaier E., *Structure Elucidation by NMR in Organic Chemistry*: a Practical Guide, 3ed., Wiley (2002).
[4] Günther H., *NMR Spectroscopy - Basic Principles, Concepts and Applications in Chemistry*, John Wiley (1995).
[5] Sanders J.K.M. and Hunter B.K., *Modern NMR Spectroscopy, A Guide for Chemists*, 2nd Ed., Oxford (1993).
[6] Derome A.E., *Modern NMR Techniques for Chemistry Research*, 1st Ed., Pergamon Press (1987).
[7] Claridge T.D.W., *High-resolution NMR Techniques in Organic Chemistry*,2 Ed., Elsevier Science (2009).

عنوان درس به فارسی: سنتز پیشرفته مواد آلی عنوان درس به انگلیسی: Advanced synthesis of organic materials	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	✓ تخصصی اختیاری	✓ نظری عملی نظری عملی	دروس پیش‌نیاز: ندارد

هدف: آشنائی و تسلط بر سنتز پیشرفته مواد آلی

سرفصل دروس:

محصولات شکست کربن رادیکالی: تشکیل پیوند کربن - کربن از طریق رادیکالها و کاربن ها؛ ساختار رادیکال، تشکیل رادیکالها با ترمولیز، تشکیل فتوشیمیائی، واکنشهای رادیکال آزاد، واکنشهای رادیکالی درون مولکول و بین مولکولی، واکنشهای رادیکالی القا شده به وسیله فلزات، کاربن ها و کاربنوئیدها، واکنشهای متاتز، واکنش Pauson. Khand؛ روشهای جدید در سنتز فضاگزین: واکنش Simmons– Smith فضاگزین، اکسازولین ها، واحدهای کایرال ساختاری، لیگاندها و واحدهای کمکی، واکنشهای پی در پی جدید با معرفهای انتقال دهنده یک الکترون، از بین بردن راسمیزاسیون با تفاضل انانیتومری دی ال های ۱،۳ و ۱،۵ . آتروپ ایزومرهایی غیر از بی آریل ها مشتقات آمینواسیدها به وسیله واکنشهای چندجزئی. سنتز پلی ال ها، انتخاب فضا در حالت پایا. روشهای آلی فلزی با فلزات واسطه: کمپلکسهای آلیل پالادیم، واکنشهای جفت شدن در حضور پالادیم، کمپلکسهای آلیل نیکل، کمپلکسهای آلیلی سیلان، آلکیل تیتان و آلیل تین، کمپلکسهای آهن الکتروفیلی، فتولیز کمپلکسهای فیشر –کاربن، کمپلکسهای روی، متاتز حلقه بندی اولفین، کاتالیز فلزی برای هیدروفرمیلاسیون ، کاتالیز با فلزات کمیاب، دی تیواستال ها به عنوان راهی برای شیمی آلکیلیدین –تیتان، گسترش واکنش Pauson – Khand ، کاتالیست های چندجزئی برای واکنشهای احیا پیوند، سنتز مواد طبیعی با کاتالیست Rh؛ سنتز انانیتومرگزین: واکنش Heck به صورت انانیتومر گزین، واکنشهای آلدول با کاتالیست نامتقارن، بی نفتیل، ترکیبات فلوروتیتان، آنزیم ها و سبکهای فلزات واسطه، جداسازی سینتیکی غیرآنزیمی، افزایش مایکل انانیتور گزین کاتالیز شده با مس، لیگاندهای با تقارن C3 برای کاتالیز، واکنشهای احیای کتونها به صورت انانیتومر گزین؛ سنتز کلی ترکیبات طبیعی: سنتز کلی چندنمونه ترکیبات طبیعی، سنتز با کاتالیست Pd برای ویتامین D ، سنتز بازدارنده ها، سنتز ترکیبات طبیعی دریایی. سنتز ترکیبات غیرطبیعی و مواد: سیلکوفانها، نانوتیوبها و نانوسیلندرها؛ سنتز فاز جامد و شیمی ترکیبی؛ روشهای ترکیبی، استفاده از پلیمرهای محلول، کاتالیست های پلیمری، شیمی ترکیبی برای سنتز کربوهیدراتها ، بیوسنتز ترکیبی پلی کتیدها.

منابع:

[1] Smith, M. B., *Organic Synthesis*, Third Edition, Academic Press (2011).
[2] Hans-Gunter Schmalz, *Organic Synthesis Highlights V*, part 1, 2, Wiley-VCH Verlag GmbH (2008).
[3] Carey F.A., Sundberg R.J, *Advanced Organic Chemistry, part B: Reactions and synthesis*, Springer (2007).

عنوان درس به فارسی: **حد واسط‌های فعال** عنوان درس به انگلیسی: **Reactive intermediates**	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	✓ تخصصی	✓ نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			اختیاری	نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر بعضی اصول واکنشها و مکانیسم واکنش‌های آلی

سرفصل دروس:

کربوکاتیونها، برخورد مکانیسم های مرزی SN_1 و SN_2 در کربن آلیفاتیک، کربانیونها ساختار، وضعیت هندسی، استریوشیمی و راسمیک شدن ، خواص مغناطیسی و NMR ، قدرت بازی کربانیونها و قدرت اسیدی کربن اسیدها، اثرات ساختاری روی قدرت بازی (هیبرید sp ، sp^2 و sp^3) اندازه گیریهای قدرت اسیدی در فاز متراکم (قدرت اسیدی در DMSO ، زوج یون، فازهای متراکم نسبت به فاز گاز) واکنش پذیری (حدواسط کربنی در واکنشهای حذفی، و افزایشی، افزایش نوکلئوفیلی به آلکانها، افزایشی استخلافی آروماتیکی) حدواسط کربن در نوآرایی ها واکنشهای کربانیونی در فاز گاز: رادیکالها : ساختار ، پایداری رادیکالها و انرژی تفکیک پیوند C-H ، رادیکالهای پایدار و مقاوم، شناسایی رادیکالها، واکنشهای رادیکالی چندمرحله ای (واکنشهای زنجیری و غیرزنجیری) ، واکنشهای رادیکالی (مرحله آغازی، ترمولیز، فتولیز، انتقال الکترون) واکنشهای مرحله انتشار (واکنشهای هومولیتیک و هترولیتیک، واکنشهای مرحله پایانی. مولکولهای فاقد ساختار ککوله به عنوان حدواسط های فعال: هیدروکربن های Schlenk Brauns ، قاعده هوند، طیف ESR نمونه هایی که به طور اتفاقی جهت گیری دارند ، وابستگی حالت اسپین به ساختار، ESR در ماتریکس ها (شکافتگی میدان صفر ، قانون کوری و کاربردهای آن)، وابستگی حالت اسپینی به اتصال مولکولی، اندازه گیری و تفسیر نفوذپذیری مغناطیسی؛ رادیکال یونهای آلی؛ کاربن های یکتایی؛ کاربن های سه تایی؛ کربن اتم؛ نایترین؛ شیمی سنتزی کاربن و نایترین؛ یونهای نایترنیوم؛ سایلایلین ، ژرمایلین، استانایلین و پلمبایلین: سایلین؛ هیدروکربن های تحت فشار؛ آراین ها

منابع:

[1] Robert A. Moss, Matthew S. Platz, Maitland Jones Jr., *Reactive Intermediate Chemistry*, Wiley (2004).

[2] Robert A. Moss, Maitland Jones, *Reviews of Reactive Intermediate Chemistry*, Wiley, (2007).

عنوان درس به فارسی: شیمی سوپرامولکولی پیشرفته عنوان درس به انگلیسی: Advanced supramolecular chemistry	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر شیمی سوپرامولکولی

سرفصل درس:

تعریف و توسعه شیمی سوپرامولکولی، طبیعت برهم کنش های سوپرامولکولی، بازشناخت مولکولی، مولکول های میهمان-میزبان سوپرامولکولی، شیمی میزبان-میهمان محلول ها، میزبان های با پیوند کاتیونی، پیوند آنیونی، پذیرنده های جفت یونی، مولکول های پذیرنده های دوم و بازشناسی چندگانه، دینامیک سوپرامولکولی، شیمی سوپرامولکولی فاز جامد، تقلید از سیستم های زیستی، فعالیت و کاتالیست سوپرامولکولی، دستگاه های مولکلولی (ابزار تبدیل نور و انتقال انرژی، پذیرنده های مولکلولی حساس به نور، مغناطیس های مولکولی، مواد سوپرامولکولی رسانای جریان الکتریکی، ترانزیستور های آلی کنترل کننده با میدان الکتریکی، ابزار منتشر کننده نور آلی، ابزار آلی فوتوولتایی، تک لایه های خود تجمع یافته، خود پردازش ها- سیستم های سوپرامولکولی برنامه ریزی شده (خود تجمعی، خود سازماندهی، خود بازشناسی، خود تکثیری)، تجمعات در فصل مشترک لایه ها و تجمع در مایعات.

منابع:

[1] Steed, J. W.; Atwood, J. L.; Supramolecular Chemistry, 2nd ed., Wiely (2009)
[2] Lehn, J. M.; Supramolecular Chemistry, VCH (1995)
[3] Steed, J. W.; Turner, D. R.; Wallace, K. J.; Core Concepts in Supramolecular Chemistry and Nanochemistry, John Wiley & Sons (2007)
[4] Koch, N.; Supramolecular Materials for Opto-Electronics, Royal Society of Chemistry (2015)

عنوان درس به فارسی: نانوساختارهای خودآرا عنوان درس به انگلیسی: Self-assembled nanostructures	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			اختیاری ✓	نظری ✓	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر بعضی از ساختارهای نانو

سر فصل درس :

مواد خود تجمع یافته سنتزی: برهم کنش های ماکروسکوپی و میکروسکوپی، مواد فعال سطحی و مولکول های دوگانه دوست، انتقال از فاز پراکنده به فاز متراکم، هندسه فشردگی، نانو ساختار های خود تجمع یافته ی بلاک کوپلیمر ها، هم تجمعی ساختار های کریستال مایع با مواد معدنی

مواد دارای مقیاس نانو در طبیعت: اصول تئوری خود تجمعی زیستی، پپتید های خود تجمع کننده طبیعی و طراحی شده و کاربرد آنها در نانوفناوری زیستی، موادر دارای پایه پپتیدی به وسیله خود تجمعی مولکولی، نانو ساختار های خود تجمع کننده پپتیدی- به سوی نانومواد پروتئینی مصنوعی فعال زیستی

خود تجمعی نانو کریستال ها: خود تجمعی ذرات در فاز محلول، خود تجمعی با کمک قالب ها

شناسایی ساختار طراحی های نانو: پراش اشعه ایکس، میکروسکوپ های کاوشگر روبشی، میکروسکوپ الکترونی روبشی، میکروسکوپ الکترونی روبشی

فعالیت شیمیایی و فوتوشیمیایی طراحی های نانو، پتانسیل اکسایش-کاهش نانومواد، واکنش های شیمیایی و فوتوشیمیایی، واکنش های فوتو الکتروشیمیایی، فوتوکاتالیست و کربرد های محیط زیستی، بازشناسی مولکولی و برهم کنش های ویژه سطحی

خواص نوری، الکترونیکی و دینامیکی نانومواد نیمه رسانا: سطوح انرژی و چگالی های حالت در سیستم های دارای ابعاد کاهش یافته، ساختار الکترونی و خواص الکترونیکی، خواص نوری نانومواد نیمه رسانا، کاربرد های خواص نوری، دینامیک حمل کننده های بار در نانوذرات نیمه رسانا

سلول های خورشیدی دارای ساختار نانو

ساختار های خود سازمان یافته ی چند لایه نقاط کوانتومی

منابع:

[1] Zhang, J. Z.; Wang, Zh. L.; Lui, J.; Chen, Sh.; Lui, G. Y.; Self-Assembled Nanostructures, Kluwer Academic Publishers (2004)

[2] Castillo-Leon, J.; Svendsen, W. E.; Self-Assembled Peptide Nanostructures

[3] Henini, M.; Handbook of Self-Assembled Semiconductor Nanostructures for Novel Devices in Photonics and Electronics, Elsevier (2008)

عنوان درس به فارسی: نانوداروها و سامانه-های انتقال دارو عنوان درس به انگلیسی: Nanodrugs and nanodrug delivery systems	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر نانوداروها و سامانه‌های انتقال دارو

سرفصل دروس:

- ✓ نانودارو و نانوسامانه‌های رهایش دارو، پلیمری، فلزی، کربنی و معدنی، سیلیکا، لیپوزوم و درختسان‌ها، و نانوسامانه‌های هسته-پوسته
- ✓ سدهای زیستی در برابر انتقال عوامل دارویی و تشخیصی، برهمکنش و نفوذ دارو در بافت‌ها
- ✓ سینتیک و ساز و کار رهایش دارو
- ✓ ژن درمانی و انتقال ژن توسط نانوسامانه‌ها
- ✓ دارورسانی هدفمند، اجزاء و کاربردها
- ✓ مطالعات درون تنی و برون تنی نانوسامانه های انتقال دارو
- ✓ اثرات خواص مختلف نانودارو و نانوسامانه‌ها بر زیست سازگاری
- ✓ نانو داروها برای درمان سرطان
- ✓ نانوسامانه های تشخیصی
- ✓ دستاوردها و آینده

منابع:

[1] Duzgunes, N., *Nanomedicine: Cancer, Diabetes, and Cardiovascular*, Central Nervous System, Academic Press (2012).

[2] Tibbals , H.F., *Medical Nanotechnology and Nanomedicine*, CRC Press (2011).

عنوان درس به فارسی: نانوبیوفناوری پیشرفته عنوان درس به انگلیسی: Advanced nanobiothecnology	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر پیشرفت‌ها در نانوفناوری‌های زیستی

سرفصل دروس:

- ✓ مروری بر ساختار و عملکرد بیومولکول ها (پروتئین ها، اسیدهای نوکلئیک، کربوهیدراتها، لیپیدها)
- ✓ نانوتکنولوژی بر پایه پپتیدها و پروتئین ها
- ✓ نانوتکنولوژی بر پایه دی.ان.آر
- ✓ دی.ان.آ-زیم
- ✓ نانو ذرات ویروس مانند
- ✓ آپتامرها و کاربرد آنها در نانوتکنولوژی
- ✓ دستکاری ژنتیکی و استفاده از پروتئین های فلورسنت در نانوتکنولوژی
- ✓ واکسن برپایه DNA و ذرات شبه ویروسی
- ✓ تکنولوژی های نوین توالی یابی.
- ✓ زیست سامانه ها و استفاده از آن در نانوتکنولوژی
- ✓ روش‌های تصویربرداری زیستی

منابع:

[1] Dixit, Chandra K.; Kaushik, Ajeet Kumar, *Nanobiotechnology for sensing applications: from lab to field*, Apple Academic Press (2017).
[2] Ram Prasad, *Advances and Applications through Fungal Nanobiotechnology*, Springer (2016).
مقالات مروری در زمینه های فوق در سه سال اخیر

عنوان درس به فارسی: ساختار و پیوند در ترکیبات معدنی	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	✓ تخصصی	✓ نظری	دروس پیش‌نیاز: -
				عملی	
عنوان درس به انگلیسی: Chemical structure and bond in inorganic chemistry	تعداد ساعت: ۴۸		اختیاری	نظری	
				عملی	

هدف: کسب دانش لازم برای شناخت انواع پیوندها و ساختارهای ترکیبات معدنی

سر فصل درس :

- ✓ ساختار و پیوند در ترکیبات عنصرهای اصلی
- ✓ ساختار و پیوند در ترکیبات عنصرهای واسطه
- ✓ بررسی اوربیتالهای مولکولی کمپلکس فلز-آلی و آلی فلزی
- ✓ ساختار و پیوند در جامدات و بررسی روش های محاسبه انرژی شبکه جامدات
- ✓ الکترونگاتیوی (مطلق) و سختی و نرمی (مطلق)
- ✓ شیمی اکسیدهای فلزی و سنتز آنها
- ✓ پیوند فلز - فلز ، خوشه های اتم فلز
- ✓ نانو ساختارهای معدنی

منابع:

[1] Brawn I.D., *The chemical bond in inorganic chemistry: the bond valance model* (2006).

[2] Parkin G., *Structure and Bonding: Metal-Metal Bonding*, (2010).

[3] Cao G., Wang Y., *Nanostructures and Nanomaterials: Synthesis, Properties, and Applications*, (2011).

[4] Meier G.H., *Concepts in Inorganic Materials: Thermodynamics of surfaces and interfaces*, (2014).

[5] Cotton, Wilkinson, Murillo and Bochmann, *Advanced Inorganic Chemistry*, (1999).

[6] Jolivet J.P., *Metal Oxide Chmistry, Syntheses*, (2003).

عنوان درس به فارسی: شیمی فلزات واسطه عنوان درس به انگلیسی: Chemistry of transition metals	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	✓ تخصصی اختیاری	✓ نظری عملی نظری عملی	دروس پیش‌نیاز: ندارد

هدف: آشنائی و تسلط بر اصول شیمی فلزات واسطه

سر فصل درس :

- ✓ - پیمایش عناصر واسطه (تیتانیم، وانادیم، کروم، منگنز، آهن، کبالت، نیکل، مس)
- ✓ - عناصر سری دوم و سوم (زیرکونیونیم، هافنیوم، نیوبیوم، تانتالیم، مولیبدنیم، تنگستن، تکنیسیوم، رنیم، فلزات گروه پلاتین، رودیم، ایریدیم، پالادیم، پلاتین،نقره وطلا)
- ✓ - فلزات نوبل (پلاتین، پالادیوم، رودیم، ایریدیوم، روتنیوم، اسمیم، طلا و نقره)

منابع:

[1] Cotton S.A., *Chemistry of Precious Metals*, Chapman & Hall (1997).

[2] Greenwood and Earnshaw, *Chemistry of the Elements*, 2nd Ed., (1998).

[3] Cotton F.A.; Wilkinson G., Murillo C.A., Bochmann M., *Advanced Inorganic Chemistry*, 6th edition, (1999).

[4] Robert H. Crabtree, *The Organometallic Chemistry of the Transition Metals*, Wiley (2014).

[5] Chen, Wei; Chen, Shaowei; Schneider, Hans-jrg; Shahinpoor, Mohsen; Bigioni, Terry, *Functional Nanometer-sized Clusters of Transition Metals Synthesis, Properties and Applications*, Royal Society of Chemistry (2014).

عنوان درس به فارسی: کاتالیزگرهای همگن و ناهمگن	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	✓ تخصصی	✓ نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			اختیاری	نظری	
عنوان درس به انگلیسی: Homogeneous and Heterogeneous Catalysis	تعداد ساعت: ۴۸			عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر اصول شیمی کاتالیزگرهای همگن و ناهمگن

سر فصل درس :

- ✓ - کاتالیزگرهای هموژن
- ✓ فسفین و دی فسفین،کمپلکسهای آمینی، کمپلکسهای کاربن و کربن منوکسید
- ✓ مکانیسم واکنشهای کاتالیستی هموژن
- ✓ واکنشهای اکسایش و کاهش، واکنشهای حذفی، واکنشهای الحاقی، واکنشهای حلقوی شدن، فعال شدن گروههای عاملی مختلف نسبت به حمله نوکلئوفیلی
- ✓ سینتیک واکنشهای کاتالیستی
- ✓ واکنشهای مورد علاقه صنعتی کاتالیست شده توسط کاتالیزگرهای هموژن
- ✓ کاتالیزگرهای هتروژن
- ✓ سایت فعال، متغیرهای واکنش، انواع واکنش گاهها، انواع بسترهای کاتالیستی
- ✓ واکنشهای مورد علاقه صنعتی کاتالیست شده توسط کاتالیزگرهای هتروژن

منابع:

[1] Augustine L.R., *Heterogeneous Catalysis for the Synthetic Chemist (Chemical Industries)*, Marcel Dekker Inc. (1996).

[2] Leeuwen V., Piet W.N.M., *Homogeneous Catalysis: Understanding the Art*, Klumer Academic Publishers (2004).

[3] Hagen J., *Industrial Catalysis: A Practical Approach*, Wiley-VCH (2006).

[4] K.L. Ameta; Andrea Penoni, *Heterogeneous Catalysis: A Versatile Tool for the Synthesis of Bioactive Heterocycles*, Taylor and Francis, CRC Press (2014).

عنوان درس به فارسی: تعیین ساختار با پراش پرتو X	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	✓ تخصصی	✓ نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
عنوان درس به انگلیسی: X-ray diffraction structure determination	تعداد ساعت: ۴۸		اختیاری	نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر اصول تعیین ساختار به کمک پراش پرتو X

سر فصل درس :

- ✓ مقدمه ای بر تاریخچه و اهمیت بلورشناسی، تقارن انتقالی در بلورها
- ✓ پراش پرتو ایکس و قانون پراگ،
- ✓ شبکه وارون، بردارهای شبکه وارون، سلول واحد شبکه وارون، معادله براگ در شبکه وارون،
- ✓ روشهای دستگاهی، منبع تابش، موازی ساز، جهت یاب و سر جهت یاب، سیستم سرمایش، قطع کننده پرتو، آشکار ساز،
- ✓ جمع آوری و پالایش داده ها، شرایط جمع آوری، خطاهای سیستمی، کاهش داده ها، تصحیح جذب،
- ✓ روش‌های تعیین ساختار: انتقال فوریه، حل ساختار، روش مستقیم، روش پترسون، پالایش ساختار، پالایش به روش حداقل مربعات،پارامترهای جابجایی ناهمسانگرد، اتم های هیدروژن،
- ✓ آنالیز ساختار در شرایط غیر معمول، توپولوژی، بلورشناسی پروتئین

منابع:

[1] Luger P., *Modern X-ray Analysis on Single Crystals*, Walter de Gruyter GmbH, Berlin (2014).

[2] Giacovazzo C., Monaco H.L., *Fundamental of Crystallography*, Oxford (2002).

[3] Stout G., Jensen L., *X-ray Structure Determination*, John Wiley & Sons (1989).

[4] Massa W., *Crystal Structure Determination*, Springer (2004).

[۵] علیرضا عباسی، شکوفه گرانمایه: اصول بلورشناسی، تعیین ساختار تک بلور و پودر، نانوساختارها و پروتئین ها، چاپ دوم ۱۳۹۴، انتشارات دانشگاه تهران

عنوان درس به فارسی: مواد نانومتخلخل عنوان درس به انگلیسی: Nanoporous materials	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر شیمی نانو و شیمی مواد نانومتخلخل معدنی

سرفصل درس:

- ✓ - مقدمه ای بر مواد نانوحفره با حفره های منظم و نامنظم و تعریف آن
- ✓ - زئولیت ها (با حفره های کمتر از ۲ نانومتر، سنتز، مکانیسم و روشهای شناسایی)
- ✓ - خانواده M415 , SBA (مزوپورها با حفره بین ۲ تا ۵۰ نانومتر، سنتز، مکانیسم و روشهای شناسایی)
- ✓ - درشت حفره های منظم(با حفره بزرگتر از ۵۰ نانومتر، سنتز، مکانیسم و روشهای شناسایی)
- ✓ - تغییر سطح مواد نانوحفره با گروههای آلی
- ✓ - ترکیبات نانوحفره با دیواره های آلی- معدنی (PMO)
- ✓ - چارچوب های فلز- آلی (اصول و تعاریف، طراحی و انواع روش های سنتز)
- ✓ - انواع چارچوب های فلز- آلی (با قالب های آلی، با توپولوژی زئولیت ها، ساخته شده از کلاسترهای فلزی، مزومتخلخل، با ساختار کایرال و با مراکز فلزات خاکی کمیاب)
- ✓ - طراحی تخلخل، تخلخل انعطاف پذیر، تخلخل سخت.
- ✓ - تعویض مهمان انعطاف پذیر، تعویض مهمان صلب، تعویض یون.
- ✓ - کاربردهای مواد نانوحفره

منابع:

[1] Lu G.L., Zhao X.S., *Nanoporous Material*, Imperial College Press (2004).
[2] Laeri F., Schüth F., Simon U., Wark M.F., *Host-Guest-Systems Based on Nanoporous Crystal*, Wiley-VCH (2003).
[3] Sayari A., Jaronic M., *Naporous Material*, (2002).
[4] Karge H.G., Weitkamp J., *Molecular Sieves*, Springer (1999).
[5] Ortiz O.L., Ramirez L.D., Ortiz, O. L., Ramirez, L. D., *Coordination Polymers and Metal Organic Frameworks: Properties, Types and Applications*, Nova Science Pub Inc (2012).

عنوان درس به فارسی: **مباحث پیشرفته در نانومواد معدنی** عنوان درس به انگلیسی: **Advanced topics in nanoinorganic materials**	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنایی با آخرین پیشرفت های صورت گرفته در زمینه نانومواد معدنی

سرفصل درس:

- ✓ - تدریس و معرفی آخرین پیشرفت های صورت گرفته در زمینه سنتز، شناسایی و کاربردهای نانومواد معدنی.
- ✓ - بررسی مقالات مجلات معتبر و کتاب های به روز بین المللی در زمینه های ذکرشده.

منابع:

مقالات جدید، به ویژه مقالات مروری (Review articles) و Lecture notes

عنوان درس به فارسی: نانوکاتالیزگرهای معدنی عنوان درس به انگلیسی: Nanoinorganic catalysts	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر شیمی نانو و نانو کاتالیزگرها

سرفصل درس:

- ✓ - مقدمه ای بر نانو کاتالیست، رفتار کاتالیزگرها در مقیاس نانو
- ✓ - اصول جذب در کاتالیزگرهای هتروژن (بررسی ساختار و دینامیک، ایزوترمهای جذب و انرژی)
- ✓ - روشهای شناسایی کاتالیزگرها و سطح آنها (با مثال)
- ✓ - الگهای مولکولی نانو ساختار (سنتز و شناسایی و روشهای تغییرسطح مواد ریز حفره (micropore)، میان حفره (mesopore)، و درشت حفره (macropore)
- ✓ - کاتالیزگرهای نانو کلاستر
- ✓ - نانوذرات به عنوان کاتالیزگرها
- ✓ - نانوبیوکاتالیزگرها

منابع:

[1] Thomas J.M., Thomas W.J., *Principles and Practice of Heterogeneous Catalysis*, Wiley-VCH (1996).

[2] Wehrspohn R.B., *Ordered Porous Nanostructures and Application*, Springer (2005).

[3] Lu G.Q., Zhao X.S., *Nanoporous Materials Science and Engineering*, Imperial College Press (2004).

[4] Feldheim D.L., Foss C.A., *Metal Nanoparticles, Synthesis, Characterization and Application*, Marcel Dekker (2002).

[5] Nishimura Sh., *Handbook of Heterogeneous Catalytic Hydrogenation for Organic Synthesis*, Wiley-Interscience (2001).

[6] Tiwari A., Titinchi S., *Advanced Catalytic Materials*, Wiley-Scrivener (2015).

عنوان درس به فارسی: روش‌های سنتز نانو مواد معدنی عنوان درس به انگلیسی: Synthesis methods for nanoinorganic materials	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر روشهای نوین سنتز مواد نانو ساختار

سر فصل درس:

- ✓ - نانومواد خاص (فولرنهای کربن و نانوتیوبها، مواد میکرو پور و مزوپور، ساختارهای پوسته-هسته، هیبریدهای آلی-معدنی، نانوکامپوزیتها)
- ✓ - سنتز شیمیایی و فراورش پودرهاو فیلمهای پلیمری با ساختار نانو، ذرات: شامل فلزات، آلیاژها، کامپوزیتها، سرامیکها، مواد هیبریدی، فیلمها و پوششها: شامل فلزات و سرامیکها
- ✓ - فراورش پاششی حرارتی مواد نانو کریستالی، تهیه پودرهای نانو کریستالی برای پاشش حرارتی، پاشش حرارتی
- ✓ - نانو سیستم های پلیمرهای معدنی
- ✓ - نانو فیلترهای معدنی
- ✓ - سل-ژل در سنتز نانو مواد معدنی
- ✓ - شیمی سوپرامولکولی و روشهای سنتز مواد سوپرامولکولی

منابع:

[1] Koch C., *Nanostructured materials: Processing, Properties and Potential Applications*, William Andrew Inc (2002).

[2] Feldheim D.L., Foss C.A., Metal Nanoparticles, Synthesis, Characterization and Application, Marcel Dekker (2002)..

[3] Steed J.W., Atwood J. L., *Supramolecular Chemistry*, CRC Press (2004).

[4] Cao G., *Nanostructures and Nanomaterials Synthesis, Properties, and Applications*, Imperial College Press (2004).

[5] Thomas S., Kalarikkal N., Manuel Stephan A., Raneesh B., Haghi A.K. "*Advanced Nanomaterials: Synthesis, Properties, and Applications*, CRC Press (2014).

عنوان درس به فارسی: کاربرد نانومواد معدنی در انرژی‌های نو عنوان درس به انگلیسی: Application of nanoinorganic materials in new energies	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: مطالعه کاربرد ترکیبات نانو مواد معدنی در انرژی

سرفصل درس:

انرژی های نو، نیاز ضروری جهان در آینده، معرفی انرژی های نو و مقایسه آنها با منابع انرژی فسیلی، نقش مواد معدنی در تولید انرژی ، نانو مواد معدنی، نانو ذرات معدنی، نانو کامپوزیت ها، نانو ساختارها، نانولوله ها، سلو های فوتو ولتائیک، اساس کار و اجزای سازنده، فوتوحساس کننده های شیمیایی، فوتوحساس کننده های ملکولی بر پایه ترکیبات نانو مواد معدنی، کاربرد نانو تکنولوژی در بازده تبدیل سل های خورشیدی، سل های خورشیدی شامل گرافن سه بعدی و نانو لوله های تثبیت شده بر سطح گرافن، سل های خورشیدی بر پایه نقاط کوانتومی، سل های خورشیدی ساخته شده از نانو لایه های تک ورقه ای، سل های خورشیدی بر پایه فلزات و نانو اکسید های آنها، نیمه هادی ها، پیل های سوختی، اساس کار پیل های سوختی، نانو ذرات معدنی در پیل های سوختی، تولید هیدروژن با استفاده، از نانو مواد معدنی، باطری های شیمیایی بر پایه ترکیبات معدنی، نانو باطری ها

منابع:

[1] Sørensen, B., *Renewable Energy Conversion, Transmission and Storage*, Academic Press (2007).
[2] Sørensen, B., *Hydrogen and Fuel Cells, Emerging Technologies and Applications*, 2nd Edition, Elsevier (2012).
[3] Supramaniam, S., *Fuel Cells, From Fundamentals to Applications*, Springer (2006).
[4] Kalyanasundaram, K., *Dye-Sensitized Solar Cells*, CRC Press, (2010),.
[5] Roel, V. K., Grätzel, M., *Photoelectrochemical Hydrogen Production*, Springer (2012).
[6] Kosyachenko, leonid A., *Solar Cells – Dye- Sensitized Devices*, In Tech. (2011).
[7] Lin, Ching-Fuh Su, Wei-Fang., Organic, *Inorganic and Hybrid Solar Cells: Principles and Practice*, Wiley-VCH (2012).
[8] Borchert, H., *Solar Cells Based on Colloidal Nanocrystals*, Springer (2014).
[9] Crabtree, *Robert, H., Energy Production and Storage: Inorganic Chemical Strategies for a Warming* World, Wiley-VCH (2010).
[11] Bocarsly, A., Michael P. Mingos, D., *Fuel Cells and Hydrogen Storage*, Springer (2011).
[12] Yoshio, M., Brodd, Ralph J., *Lithium-Ion Batteries: Science and Technologies*, Springer (2009).

عنوان درس به فارسی: نانومواد در شیمی سبز	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
عنوان درس به انگلیسی: Nanomaterials in green chemistry	تعداد ساعت: ۴۸		✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر روش های سنتز و کاربردهای سبز نانومواد

سرفصل درس:

- ✓ آشنایی با ایمنی در نانو
- ✓ بررسی روش های سنتز سبز در نانوشیمی
- ✓ سنتز سبز نانوذرات فلزی
- ✓ تبدیل و ذخیره انرژی توسط نانوذرات فلزی.
- ✓ روش های سبز تولید سوخت های زیستی با استفاده از نانوذرات فلزی.
- ✓ سنتز سبز و کاربردهای زیست-محیطی نانومواد.
- ✓ سنتز سبز ترکیبات نانو متخلخل جهت جذب و جداسازی گاز کربن دی اکسید.
- ✓ نانو کاتالیزورها در واکنش های شیمیایی.
- ✓ سنتز نانو حسگرها جهت شناسایی ترکیبات سمی.

منابع:

[1] Luque, R., Varma, R. S., *Sustainable Preparation of Metal Nanoparticles: Methods and Applications*, RSC Publishing group (2013).

[2] Perosa, A., Selva, M., *Green Processes*, John Wiley & Sons, Inc. (2012).

عنوان درس به فارسی: مکانیک کوانتومی پیشرفته عنوان درس به انگلیسی: Advanced quantum mechanics	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	✓ تخصصی	✓ نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			اختیاری	نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر مباحث پیشرفتهٔ مکانیک کوانتومی

سر فصل درس:

- ✓ مروری بر اصول موضوعه در مکانیک کوانتومی،
- ✓ نمایشات و تبدیلات، نمایش بردارهای حالت و عملگرها در فضای مکان و تکانه،
- ✓ تصویرهای شرودینگر، هایزنبرگ و برهم کنش در دینامیک کوانتومی،
- ✓ دینامیک کوانتومی و حل معادله شرودینگر وابسته به زمان،
- ✓ افزودن تکانه زاویه‌ای، فضاهای جفت شده و جفت نشده، ضرایب کلبش-گوردن،
- ✓ نظریه‌های اختلال، تصحیح انرژی نسبیتی، نظریهٔ اختلال مولر-پلست
- ✓ سیستم های چندالکتروئی، معادلات هارتری- فوک و پساهارتری-فوک،
- ✓ نظریهٔ تابعی چگالی
- ✓ نظریه کوانتومی پراکندگی

منابع:

[1] Sakurai, J.J. and Tuan, S.F., *Modern Quantum Mechanics*, Addison Wesley (1994).
[2] Dick, R., *Advanced Quantum Mechanics*, Springer (2012).
[3] Newton, R.G., *Quantum Physics: A Text for Graduate Students*, Springer (2002).
[4] Alonso, M. and Valk, H., *Quantum Mechanics*, Addison Wesley (1973

عنوان درس به فارسی: مکانیک آماری پیشرفته عنوان درس به انگلیسی: Advanced statistical mechanics	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	✓ تخصصی اختیاری	✓ نظری عملی نظری عملی	دروس پیش‌نیاز: ندارد

هدف: آشنائی و تسلط بر مباحث پیشرفتهٔ مکانیک آماری سیالات

سر فصل درس:

- ✓ مکانیک آماری سیالات در حضور برهم‌کُنش: پتانسیل‌های بین مولکولی، انتگرال پیکری و بسط‌های خوشه‌ای، معادلهٔ حالت ویریال، ضرایب دوم و سوم ویریال، ضرایب ویریال مرتبه‌های بالاتر، رفتار کوانتومکانیکی ضریب دوم ویریال
- ✓ مکانیک آماری جامدات: ظرفیت گرمایی بلورها، مدل انیشتن، مدل دبای، مدل‌های اسپین-شبکه، مدل آیزینگ، سیستم‌های پارامغناطیس، ارتعاشات شبکه در جامدات مولکولی، دینامیک شبکه،
- ✓ مکانیک آماری مایعات: توابع توزیع در مکانیک آماری سیالات، تابع توزیع شعاعی و رفتار فیزیکی آن، ارتباط خواص ترمودینامیکی سیالات خالص با تابع توزیع شعاعی، معادلات انرژی داخلی، فشار، پتانسیل شیمیایی، تراکم‌پذیری، روش تجربی در تعیین تابع توزیع شعاعی، روش‌های شبیه‌سازی مونت‌کارلو و دینامیک مولکولی در تعیین تابع توزیع شعاعی، روش‌های نظری در تعیین تابع توزیع شعاعی، معادلات انتگرالی کِرک‌وود، BGY و OZ، تقریب‌های زنجیرهٔ آبرشبکه، PY، میانگین کروی، معادلهٔ حالت کارناهان- استارلینگ برای سیال کرهٔ سخت، نظریهٔ اختلال ترمودینامیکی ویکز- چندلر- آندرسون، روش اختلال ورتهیم و نظریهٔ آماری سیالات تجمعی

منابع

- ✓ ۱- علی مقاری، مباحث پیشرفتهٔ ترمودینامیک و مکانیک آماری تعادلی و غیر تعادلی، انتشارات دانشگاه تهران، جلد دوم، ۲۰۱۴

[2] Schwabl, F., *Statistical Mechanics*, Springer-Verlag (2006).
[3] Pathria, R.K., *Statistical Mechanics*, Springer-Verlag (2006).
[4] McQuarrie, D.A., *Statistical Mechanics*, Harper&Row publisher (1976).
[5] Barry M McCoy, *Advanced Statistical Mechanics*, Oxford University Press (2010)

عنوان درس به فارسی: ترمودینامیک و مکانیک آماری غیرتعادلی	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	✓ تخصصی	✓ نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			اختیاری	نظری	
عنوان درس به انگلیسی: Thermodynamics and nonequilibrium statistical mechanics	تعداد ساعت: ۴۸			عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر مباحث پیشرفتهٔ فرایندهای غیربرگشتی و مکانیک آماری غیرتعادلی

سر فصل درس:

- ✓ ترمودینامیک کلاسیک غیرتعادلی و معادلات توازن درهیدرودینامیک: مفهوم برگشت‌ناپذیری، ترمودینامیک برگشت‌ناپذیر کلاسیک، فرض تعادل موضعی، معادلات توازن در هیدرودینامیک، اصل موضوعهٔ اول تعمیم یافته، آنتروپی و اصل موضوعهٔ دوم در ترمودینامیک، معادلهٔ توازن آنتروپی، تعمیم معادلهٔ اصلی ترمودینامیک تعادلی، چرخه‌های برگشت‌ناپذیر، قضیهٔ کاراتئودوری
- ✓ ترمودینامیک کلاسیک غیرتعادلی: ترمودینامیک خطی و ضرایب پدیده شناختی، قیدهای ضرایب پدیده شناختی، ترمودینامیک برگشت‌ناپذیر توسعه یافته و منطقی، ترمودینامیک برگشت‌ناپذیر تعمیم‌یافته، معادلات گیبس تعمیم‌یافته، محاسبهٔ آنتالپی در فرایند برگشت‌ناپذیر، نزول نقطهٔ ذوب تحت اثر تنش‌های بُرشی، اصول موضوعهٔ ترمودینامیک غیرتعادلی تعمیم یافته
- ✓ اصول و نظریه‌های اساسی در مکانیک آماری غیرتعادلی: دینامیک کلاسیک، قضیهٔ لیوویل و معادلهٔ لیوویل، خواص عملگر لیوویل، روش‌های حل معادلهٔ لیوویل، معادلهٔ وان‌نیومن، فرایندهای تصادفی، نظریهٔ حرکت براونی و معادلهٔ لانگوین، نظریهٔ حرکت براونی، معادلهٔ فوکر- پلانک، معادلهٔ مَستر، نظریهٔ پاسخ خطی، قضیهٔ اُفت‌وخیز- استهلاک، نظریهٔ مجموعه‌های غیرتعادلی، نظریهٔ توابع همبستگی زمانی، ضرایب نفوذ جفتی، ضرایب خودنفوذی، ویسکوزیتهٔ بُرشی، هدایت‌گرمایی
- ✓ نظریهٔ جنبشی گازهای رقیق و معادلهٔ بولتزمان: استخراج معادلهٔ BBGKY از معادلهٔ لیوویل، معادلهٔ بولتزمان، قضیهٔ H-بولتزمان، ناورداهای برخوردی، معادلات تغییر، معادلات تغییر برای ناورداهای برخوردی، معادلهٔ بولتزمان خطی شده، معادلهٔ کوانتومی بولتزمان (معادلهٔ وِلازوف)، حل معادلهٔ بولتزمان،
- ✓ مکانیک آماری غیرتعادلی سیالات چگال: نظریهٔ اِنسکوگ برای سیال کرۀسخت، تصحیح معادلهٔ اِنسکوگ برای سیال چاه مربعی، معادلهٔ بولتزمان تعمیم‌یافته برای سیال نیمه‌چگال

منابع:

[۱]علی مقاری، مباحث پیشرفتهٔ ترمودینامیک و مکانیک آماری تعادلی و غیر تعادلی، انتشارات دانشگاه تهران، جلد دوم، ۲۰۱۴

[2] Prigogine, I., *From Being to Becoming*, Freeman (1980).

[3] Balescu, R., *Equilibrium and Non-Equilibrium Statistical Mechanics*, John Wiley and Sons, Inc., (1991).

[4] Zwanzig, J.L., Phys. Today, Sep., 32 (1993).

[5] Kreuzer, H.J., *Non-Equilibrium Thermodynamics and its Statistical Foundations*, Clarendon Press, Oxford (1986).

[6] Jou D., Casas-Vazquez J., Lebon G.: *Extended Irreversible Thermodynamics*, Springer, Berlin, (1993).

[7] Dario Villamaina, Transport Properties in Non-Equilibrium and Anomalous Systems, Springer, (2014).

عنوان درس به فارسی: مباحث پیشرفته در نانوشیمی نظری عنوان درس به انگلیسی: Advanced topics in theoretical nanochemistry	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنایی با آخرین پیشرفت های صورت گرفته در زمینهٔ نظریه‌های نانوشیمی

سرفصل درس:

- ✓ - تدریس و معرفی آخرین پیشرفت های صورت گرفته در زمینه نظریه‌های شیمی و فیزیک سیستم‌های نانو.
- ✓ - بررسی مقالات مجلات معتبر و کتاب های به روز بین المللی در زمینه های ذکرشده.

منابع:

مقالات جدید، به ویژه مقالات مروری (Review articles) و Lecture notes

عنوان درس به فارسی: مکانیک آماری سیستم‌های ناهمگن	تعداد واحد: ۳	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
عنوان درس به انگلیسی: Statistical mechanics of non-uniform systems	تعداد ساعت: ۴۸		✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر مباحث مکانیک آماری سیستم‌های ناهمگن

سر فصل درس:

- ✓ ترمودینامیک لایهٔ میان فازی، پتانسیل مجموعهٔ کانونی بزرگ و کشش سطحی، سطح تقسیم گیبس، توابع تقسیم و چگالی موضعی انرژی آزاد در سیالات ناهمگن.
- ✓ نامساوی بوگولیوبوف و اصل وَردِش در مکانیک آماری.
- ✓ نظریهٔ تابعی چگالی (DFT) در سیالات ناهمگن، تقریب چگالی موضعی (LDA)، تقریب غیرموضعی میدان متوسط، تقریب‌های چگالی وزن‌دارشده (WDA).
- ✓ پروفایل چگالی در ناحیهٔ بین فازهای مایع- بخار، کشش سطحی، نظریهٔ کِرکوود- بوف برای کشش سطحی.
- ✓ نظریهٔ تابعی چگالی برای کشش سطحی.
- ✓ نظریهٔ گرادیان چگالی برای کشش سطحی.
- ✓ مکانیک آماری سیستم‌های کوچک، نانوسیستم‌ها.
- ✓ پدیده‌های نانوسیال، هسته زایی، ترشوندگی و زاویهٔ تماس مایع با سطح

منابع :

[1] Tsallis, C., *Introduction to nonextensive statistical mechanics: approaching a complex world*, New York: Springer (2009).
[2] Gell-Mann, M., Tsallis, C., *Nonextensive Entropy—Interdisciplinary Applications*, Oxford University Press, Oxford (2003).
[3] Abe, S. and Okamoto, Y., *Nonextensive Statistical Mechanics and its Applications*, Lecture Notes in Physics, Vol. 560, Springer, Heidelberg (2001).
[4] Hill, T.L., *Thermodynamics of Small Systems*, Dover, New York (1994).
[5] Di Ventra, M., Evoy, S. and Heflin, J. R., *Introduction to Nanoscale Science and Technology*, Nanostructure Science and Technology, Kluwer Academic, Boston (2004).
[6] Han, J., in *Introduction to Nanoscale Science and Technology*, edited by M. Di Ventra, S. Evoy, and J. R. Heflin, Kluwer Academic, Boston (2004).
[7] Daiguji, H., *Comprehensive Nanoscience and Technology*.| *Nanofluidics*, Elsevier (2011).

عنوان درس به فارسی: نانوشیمی فیزیک محاسباتی عنوان درس به انگلیسی: Computational nano physical chemistry	تعداد واحد: ۳ تعداد ساعت: ۴۸	نوع واحد	اصلی	نظری	دروس پیش‌نیاز: ندارد
				عملی	
			✓ اختیاری	✓ نظری	
				عملی	

هدف: آشنائی و تسلط بر روش‌های محاسباتی برای سیستم‌های نانو

سر فصل درس:

- ✓ الگوریتم‌های پیش‌بینی خواص فیزیکی ساختارهای بلوری،
- ✓ روش‌های محاسبات کوانتومی برای محاسبهٔ خواص الکترونی نانوساختارها،
- ✓ محاسبات DFT در خواص گرافیت، گرافن و نانو لوله‌های کربنی،
- ✓ سطوح انرژی پتانسیل، سیالات محصور شده درون حفره،
- ✓ نقاط کوانتومی و سیم‌های کوانتومی،
- ✓ محاسبات کوانتومی فرایند جذب و پراکندگی سیال- سطح،
- ✓ شبیه سازی دینامیک مولکولی سیالات محدود شده و رفتار گذار فازی آنها،
- ✓ محاسبات DFT در لایه‌های میان فازی،
- ✓ شبیه سازی در محاسبهٔ زاویهٔ تماس روی سطوح نانوساختارها

منابع :

[1] Bichoutskaia, E., *Computational Nanoscience*, RSC Theoretical and Computational Chemistry Series No. 4, Royal Society of Chemistry (2011).

[2] Mercader, Andrew G., Castro, Eduardo A. and Haghi, A. K., Na and Computational Chemistry, Apple Academic Press (2013).

University of Tehran

PhD Programs in Chemistry

Analytical Chemistry, Applied Chemistry, Organic Chemistry, Polymer Chemistry, Physical Chemistry, Inorganic Chemistry and Nano-Chemistry (in the fields of supramolecule, nanopolymer, theoretical nanochemistry and nanoinorganic)

2017