



جمهوری اسلامی ایران

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری

برنامه درسی

(بازنگری شده)

دوره: کارشناسی ارشد

رشته: شیمی

گرایش: شیمی فیزیک

گروه: علوم پایه



مصوبه جلسه شماره ۹۳ مورخ ۱۳۹۵/۱۲/۰۱

کمیسیون برنامه‌ریزی آموزشی

بِسْمِ اللّٰهِ الرَّحْمٰنِ الرَّحِیْمِ

برنامه بازنگری شده: دوره کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک

۱. برنامه درسی بازنگری شده دوره کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک در جلسه شماره ۹۳ مورخ ۱۳۹۵/۱۲/۰۱ کمیسیون برنامه ریزی آموزشی تصویب شد.
۲. برنامه درسی بازنگری شده دوره کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک از جایگزین برنامه درسی دوره کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک مصوب جلسه شماره ۱۶۷ مورخ ۱۳۶۸/۰۷/۰۹ شورای عالی برنامه ریزی می شود.
۳. برنامه درسی مذکور در سه فصل: مشخصات کلی، جدول واحد های درسی و سرفصل دروس تنظیم شده و برای تمامی دانشگاه ها و مؤسسه های آموزش عالی و پژوهشی کشور که طبق مقررات مصوب وزارت علوم، تحقیقات و فناوری فعالیت می کنند، برای اجرا ابلاغ می شود.
۴. این برنامه درسی از شروع سال تحصیلی ۱۳۹۸-۱۳۹۷ به مدت ۵ سال قابل اجراست و پس از آن نیازمند بازنگری می باشد.

عبدالرحیم نوده ابراهیم

دبیر شورای عالی برنامه ریزی آموزشی

نوده ابراهیم





جمهوری اسلامی ایران
وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
شورای عالی برنامه‌ریزی
گروه علوم پایه
کارگروه تخصصی شیمی

برنامه آموزشی دوره کارشناسی ارشد
رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک



سلامت باد



پیش‌گفتار

باتوجه به پیشرفت روز افزون علم شیمی و نیازهای رو به رشد جوامع بشری در به‌کارگیری علوم جدید، پرورش نیروهای مجرب، متعهد و آگاه به این علوم از الزامات اولیه‌ی یک جامعه‌ی رو به رشد است. در این راستا بازنگری و به‌روز درآوردن برنامه‌ی آموزشی دوره‌ی کارشناسی ارشد شیمی در گرایش‌های شیمی فیزیک، شیمی آلی، شیمی معدنی شیمی تجزیه و شیمی کاربردی هدف کار قرار گرفت.

برنامه درسی و آموزشی تنظیم شده برای این دوره شامل آموزش‌های نظری و عملی است تا فارغ‌التحصیلان این رشته بتوانند توانایی‌های لازم برای عهده‌دار شدن مسئولیت هدایت آزمایشگاه‌های آموزشی، همکاری در زمینه‌های مختلف با دانشگاه‌ها و نیز مؤسسات پژوهشی کشور، آمادگی برای ادامه‌ی تحصیلات تکمیلی در مقاطع بالاتر، سرپرستی آزمایشگاه‌ها در صنایع شیمیایی موجود و ارائه طرح‌های جدید برای راه‌اندازی صنایع جدید و کارآفرینی را کسب نمایند. تجدید نظر به عمل آمده در برنامه‌ی رشته شیمی مقطع ارشد در جهت به‌روز شدن منابع و سرفصل‌های درس‌ها، ارائه درس‌هایی که هم‌خوانی بیشتر با موضوعات روز مانند محیط‌زیست و کارآفرینی را دارند و کاربردی‌تر شدن مطالب تدریس شده می‌گردد. سرفصل‌های ارائه شده حاصل روزها تلاش و مطالعه‌ی صاحب‌نظران این رشته است.

جزئیات کامل مربوط به رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک مقطع کارشناسی ارشد در ادامه آورده شده است.

کمیته شیمی شورای عالی برنامه‌ریزی



فهرست عناوین

صفحه	عنوان
۳	پیشگفتار
۴	فهرست عناوین
۵	فصل اول: مشخصات کلی
۶	۱-۱ مقدمه
۶	۲-۱ تعریف و هدف
۶	۳-۱ ضرورت و اهمیت
۶	۴-۱ طول دوره
۷	۵-۱ تعداد و نوع واحدهای درسی
۷	۱-۵-۱ دروس الزامی
۷	۲-۵-۱ دروس اختیاری
۷	۳-۵-۱ سمینار
۸	۴-۵-۱ پایان نامه
۱۰	۶-۱ نقش و توانایی فارغ التحصیلان
۱۰	۷-۱ شرایط و ضوابط ورود به رشته شیمی - شیمی فیزیک
۱۰	۸-۱ مواد و ضرایب امتحانی
۱۱	فصل دوم: سرفصل درس‌ها
۱۲	۱-۲ شیمی فیزیک پیشرفته
۱۴	۲-۲ ترمودینامیک آماری
۱۶	۳-۲ مکانیک کوانتومی
۱۷	۴-۲ طیف سنجی مولکولی
۱۸	۵-۲ شیمی سطح و حالت جامد
۲۰	۶-۲ سینتیک و دینامیک شیمیایی
۲۱	۷-۲ ریاضیات در شیمی فیزیک
۲۲	۸-۲ شیمی محاسباتی
۲۳	۹-۲ شیمی فیزیک پلیمرها
۲۴	۱۰-۲ آشنایی با صنایع شیمیایی ایران



فصل اول:

مشخصات کلی



۱-۱ مقدمه:

ضرورت بازنگری در برنامه دوره کارشناسی ارشد شیمی به دلیل سرعت روز افزون در پیشرفت‌های علمی انکارناپذیر است. به نظر می‌رسد که برنامه‌های آموزشی دوره‌های مختلف در رشته‌های علوم تجربی به بازنگری اساسی، هر چند سال یکبار، نیاز دارد. ایجاد دوره کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک به منظور تربیت متخصص و پژوهشگر در زمینه‌های مورد نیاز صنایع شیمیایی، نوآوری و بهبود فرایندهای شیمیایی از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. رشد روز افزون صنایع شیمیایی و پتروشیمی نیاز به دانش آموختگان مسلط به علم شیمی که قابلیت استفاده از آن را برای حل مشکلات و نوآوری در صنایع وابسته به شیمی داشته باشند ایجاد نموده است. کمیته شیمی شورا عالی برنامه ریزی با استفاده از نقطه نظرات اساتید بارز این رشته، برنامه دوره کارشناسی ارشد رشته شیمی فیزیک مصوب ۱۳۶۷/۷/۹ را با مشخصات زیر بازنگری و تدوین نموده است.

۲-۱ تعریف و هدف:

دوره کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک دوره‌ای است که دانشجویان با گذراندن آن با اصول تحقیق آشنا شده و آموزش‌های لازم برای نحوه تعریف و بررسی تحقیقی یک موضوع را می‌آموزد. در واقع، دانشجویان در این مرحله از تحصیل با کسب دانش پیشرفته در یک زمینه علم شیمی توانایی لازم برای حل مسائل و مشکلات صنایع شیمیایی را به دست آورده و یا از نظر علمی خواهد توانست در دوره دکتری تخصصی ادامه تحصیل دهد. هدف از این دوره تربیت نیروی انسانی متخصص و کارآمد در رشته شیمی- شیمی فیزیک به منظور شناخت و حل مشکلات اساسی صنایع شیمیایی، نفت، پتروشیمی، داروسازی و سایر زمینه‌های وابسته می‌باشد.

۳-۱ ضرورت و اهمیت:

ضرورت و اهمیت این دوره در تربیت پژوهشگر با تفکر خلاق و مستقل برای کار در صنایع شیمیایی، پتروشیمی، داروسازی، نفت و گاز، بیوتکنولوژی و دانشگاه‌ها و موسسات پژوهشی کشور و همچنین کارآفرینی در این رشته می‌باشد. دانشجویان پس از اتمام تحصیل باید توانایی حل برخی مشکلات صنایع شیمیایی کشور، آمادگی همکاری در موسسات پژوهشی و یا ادامه تحصیل مرحله بالاتر را پیدا کنند.

۴-۱ طول دوره:

طول دوره کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک چهار نیمسال تحصیلی است، که در موارد خاص با تصویب شورای تحصیلات تکمیلی دانشکده، تا یک نیمسال قابل افزایش می‌باشد. نظام دوره کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک، آموزشی- پژوهشی است. دانشجویان با گذراندن دروس



نظری و انتخاب استاد راهنما و موضوع پایان نامه و در آخر دفاع از پایان نامه، این دوره را در مهلت مقرر به پایان می‌رساند.

۱-۵- تعداد و نوع واحدهای درسی:

تعداد کل واحدهای درسی دوره کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک ۲۸ واحد بصورت زیر است:

دروس الزامی	۹ واحد
دروس اختیاری	۱۲ واحد
سمینار	۱ واحد
پایان نامه	۶ واحد

۱-۵-۱- دروس الزامی:

دروس الزامی شامل ۹ واحد درس نظری است که دانشجو ترجیحاً این ۹ واحد را با رعایت پیشنهاد (در صورت لزوم) در نیمسال اول تحصیلی از جدول ۱-۱ انتخاب می‌نماید.

۱-۵-۲- دروس اختیاری:

مجموعه‌ای از دروس نظری یا عملی است که دانشجو از جدول دروس اختیاری (جدول ۱-۲) چهار درس سه واحدی انتخاب می‌نماید. در صورت تشخیص استاد راهنما، دانشجو می‌تواند یک درس اختیاری خود را از دروس الزامی سایر دوره‌های کارشناسی ارشد و دکتری انتخاب نماید.

تبصره ۱: در صورت تشخیص استاد راهنما و با تأیید شورای تحصیلات تکمیلی- پژوهشی دانشکده دانشجو تا ۶ واحد از دروس کارشناسی را به عنوان دروس جبرانی می‌گذراند.

تبصره ۲: دانشجو باید در نیمسال اول و حداکثر تا قبل از تصویب پروپوزال پایان نامه، دوره "آشنایی با اصول ایمنی در آزمایشگاه" را طی کرده و گواهی موفقیت در آزمون این دوره دریافت کند. با دریافت این گواهی به دانشجو اجازه ورود به آزمایشگاه داده می‌شود.

۱-۵-۳- سمینار:

سمینار درسی یک واحدی و الزامی بوده و موضوع آن بررسی و ارائه یک موضوع از میان مطالب علمی روز می‌باشد. به نحوی که قدرت تحقیق دانشجو را افزایش داده و بر معلومات دانشجو و سایرین بیفزاید. سمینار در محدوده زمانی یک ساعت ارائه شده و حضور دانشجویان دوره‌های کارشناسی ارشد رشته شیمی فیزیک بر اساس آیین نامه‌ای که به تصویب شورای تحصیلات تکمیلی دانشکده خواهد رسید در جلسات این سمینارها الزامی است. توصیه می‌شود که این سمینار حداکثر تا پایان نیمسال دوم ارایه شود.



دانشجو باید حداکثر در آغاز نیمسال دوم استاد راهنمای پایان نامه کارشناسی ارشد خود را انتخاب کرده و تا قبل از شروع نیمسال سوم پروپوزال خود را که به تأیید استاد راهنما رسیده باشد به دانشکده تحویل دهد. در صورت تأیید پروپوزال پایان نامه توسط شورای تحصیلات تکمیلی دانشکده، کار پژوهشی دانشجو به طور رسمی آغاز خواهد شد. در انتخاب موضوع پایان نامه رعایت نکات زیر توصیه می‌شود:

الف- موضوع و طرح مورد نظر در جهت شناخت یا رفع مشکلات جامعه باشد.

ب- روش یا راه حل مورد نظر دارای تازگی و نوآوری باشد.

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

تبصره ۳: چنانچه دانشجو در مدت مجاز تحصیل (۲ سال) نتواند پایان نامه خود را به اتمام رساند و برای ادامه تحصیل درخواست افزایش سنوات کند، موضوع به همراه گزارش پیشرفت پایان نامه وی در شورای تحصیلات تکمیلی- پژوهشی دانشکده بررسی خواهد شد. شورا می‌تواند حداکثر با یک نیمسال اضافه سنوات موافقت کند.

پس از تدوین پایان نامه توسط دانشجو، استاد راهنما آمادگی دانشجو را جهت برگزاری مراسم دفاع از پایان نامه به معاون تحصیلات تکمیلی- پژوهشی دانشکده اعلام کرده و یک نسخه پایان نامه جهت طرح در شورای تحصیلات تکمیلی- پژوهشی به دانشکده تحویل می‌شود. پس از تأیید بلامانع بودن دفاع از پایان نامه توسط شورای تحصیلات تکمیلی- پژوهشی، هیأت داوران متشکل از استاد راهنما، یک نفر داور داخلی و یک داور خارج از دانشکده جهت برگزاری جلسه دفاع از پایان نامه تعیین خواهد شد. در صورتی که پایان نامه دارای استاد مشاور باشد تعیین استاد مدعو داخلی ضروری نیست. شورای تحصیلات تکمیلی- پژوهشی می‌تواند یک نفر از اعضای هیأت علمی را به عنوان نماینده جهت حضور و نظارت بر برگزاری جلسه دفاع تعیین کند.

دفاع از پایان نامه در جلسه‌ای عمومی با حضور هیأت داوران و نماینده شورای تحصیلات تکمیلی- پژوهشی (در صورت نیاز) انجام خواهد شد. پس از ارائه کارهای پژوهشی مربوط به پایان نامه، دانشجو به سئوال‌های هیأت داوران پاسخ می‌دهد. هیأت داوران، جلسه محرمانه خود را به منظور اعلام نظر تشکیل داده و در مورد تأیید و یا عدم تأیید و نیز تعیین سطح پایان نامه تصمیم می‌گیرد. در صورت عدم تأیید پایان نامه، هیأت داوران در مورد نحوه ادامه کار دانشجو تصمیم‌گیری خواهد کرد.



جدول ۱-۱ دروس الزامی کارشناسی ارشد شیمی گرایش شیمی فیزیک

ردیف	نام درس	تعداد واحد			تعداد ساعت		
		نظری	عملی	جمع	نظری	عملی	جمع
۱	شیمی فیزیک پیشرفته	۳	-	۳	۴۸	-	۴۸
۲	ترمودینامیک آماری	۳	-	۳	۴۸	-	۴۸
۳	مکانیک کوانتومی	۳	-	۳	۴۸	-	۴۸
	جمع کل	۹	-	۹	۱۴۴	-	۱۴۴

جدول ۲-۱ دروس اختیاری کارشناسی ارشد شیمی گرایش شیمی فیزیک

ردیف	نام درس	تعداد واحد			تعداد ساعت		
		نظری	عملی	جمع	نظری	عملی	جمع
۱	طیف سنجی مولکولی	۳	-	۳	۴۸	-	۴۸
۲	شیمی سطح و حالت جامد	۳	-	۳	۴۸	-	۴۸
۳	سینتیک و دینامیک شیمیایی	۳	-	۳	۴۸	-	۴۸
۴	ریاضیات در شیمی فیزیک	۳	-	۳	۴۸	-	۴۸
۵	شیمی محاسباتی	۳	-	۳	۴۸	-	۴۸
۶	شیمی فیزیک پلیمرها	۳	-	۳	۴۸	-	۴۸
۷	آشنایی با صنایع شیمیایی ایران	۳	-	۳	۴۸	-	۴۸
	جمع کل	۲۱	-	۲۱	۳۳۶	-	۳۳۶

- * دانشجو می‌تواند یا نظر استاد راهنما یک درس از دروس الزامی سایر رشته‌های کارشناسی ارشد و یا دکتری دانشکده‌های علوم و فنی را به عنوان یک درس اختیاری انتخاب کند.
- * دانشجو ملزم به گذراندن ۱۲ واحد درس اختیاری می‌باشد.

جدول ۳-۱ دروس کمبود و جبرانی کارشناسی ارشد شیمی گرایش شیمی فیزیک

ردیف	نام درس	تعداد واحد			تعداد ساعت		
		نظری	عملی	جمع	نظری	عملی	جمع
۱	شیمی فیزیک ۱	۳	-	۳	۴۸	-	۴۸
۲	شیمی فیزیک ۲	۳	-	۳	۴۸	-	۴۸
۳	شیمی فیزیک ۳	۳	-	۳	۴۸	-	۴۸
	جمع کل	۹	-	۹	۱۴۴	-	۱۴۴



چنانچه دانشجوی در مقطع قبلی دروس جدول ۱-۳ را نگذرانده باشد با نظر بخش تخصصی مربوط باید حداکثر ۶ واحد از دروس جبرانی را بگذراند. 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.

۱-۶ نقش و توانایی فارغ التحصیلان:

- عهده‌دار شدن مسئولیت تدریس در رشته شیمی و نیز هدایت آزمایشگاه‌ها
- همکاری در زمینه‌های مختلف شیمی در دانشگاه‌ها و مؤسسات پژوهشی کشور
- آمادگی برای ادامه تحصیلات بالاتر
- حل مشکلات صنایع در زمینه شیمی

۱-۷ شرایط و ضوابط ورود به رشته شیمی فیزیک:

- دارا بودن مدرک کارشناسی مطابق قوانین مصوب و ترجیحا رشته‌های مرتبط علوم، مهندسی و پزشکی
- پذیرفته شدن در آزمون ورودی

۱-۸ مواد و ضرایب امتحانی:

آزمون ورودی دوره کارشناسی ارشد مطابق دستورالعمل‌های سازمان سنجش آموزش کشور انجام می‌گیرد. مواد و ضرایب آن به صورت جدول ۱-۴ پیشنهاد می‌شود.

جدول ۱-۴ مواد و ضرایب امتحانی رشته شیمی - شیمی فیزیک

ردیف	مواد امتحانی	ضریب
۱	زبان عمومی و تخصصی	۱
۲	شیمی آلی (دروس آلی ۱، ۲ و ۳ و کاربرد طیف سنجی در شیمی آلی)	۱
۳	شیمی فیزیک ۱ و ۲، کوانتوم و طیف سنجی	۲
۴	شیمی تجزیه (دروس تجزیه ۱ و ۲، شیمی تجزیه دستگاهی)	۱

سرفصل کلیه دروس الزامی و اختیاری در فصل بعد آورده شده است.



فصل دوم:

سرفصل دروس



"دروس الزامی کارشناسی ارشد شیمی گرایش شیمی فیزیک"

شیمی فیزیک پیشرفته

شیمی فیزیک پیشرفته		فارسی	عنوان	
Advanced physical chemistry		انگلیسی	درس	
درس‌های پیش‌نیاز	تعداد ساعت	تعداد واحد	نوع واحد	
ندارد	۴۸	۳	الزامی	
			اختیاری	الزامی
			عملی	نظری
			آموزش تکمیلی عملی:	دارد <input type="checkbox"/> ندارد <input checked="" type="checkbox"/>
			سفر علمی:	دارد <input type="checkbox"/> ندارد <input checked="" type="checkbox"/>
حل تمرین:	دارد <input type="checkbox"/> ندارد <input checked="" type="checkbox"/>			
آزمایشگاه:	دارد <input type="checkbox"/> ندارد <input checked="" type="checkbox"/>			

هدف درس:

آشنائی و تسلط بر اصول و کاربرد ترمودینامیک و سینتیک شیمیایی

سرفصل‌ها:

- اصول موضوعه در ترمودینامیک کلاسیک، توابع ترمودینامیکی، معادلات اصلی در ترمودینامیک، حالت‌های تعادلی و غیرتعادلی، فرایندهای برگشت‌پذیر و برگشت ناپذیر
- مفهوم پایداری و شرایط پایداری ترمودینامیکی، شرایط رسیدن به حالت تعادل ترمودینامیکی، نظریه کلاسیکی پایداری در ترمودینامیک تعادلی، پایداری توابع پتانسیل ترمودینامیکی
- تبدیلات لژاندر و معادلات گیبس، قضیه اویلر و شکل انتگرالی معادلات گیبس، روابط ماکسول
- معادله حالت، معادله حالت وان‌دروالس، معادلات اصلاح شده وان‌دروالس، معادله حالت ویریال، رفتار ترمودینامیکی مخلوط‌گازها، حالت بحرانی، رفتار معادله وان‌دروالس و ضابطه ماکسول
- گذار فاز، انواع گذار فاز در سیستم‌های خالص، گذار فاز در جامدات، گذار نظم - بی نظم، گذار فاز در محلول‌ها، قاعده فاز
- پدیده بحرانی، ضابطه نقطه بحرانی در مخلوط‌ها، قانون‌های توتی، قانون‌های مقیاس
- سینتیک شیمیایی، سرعت واکنش‌های شیمیایی، روش‌های تجربی در تعیین سرعت واکنش‌های شیمیایی، مرتبه و مولکولاریته واکنش‌های شیمیایی، واکنش‌های بنیادی، واکنش‌های مختلط، تقریب‌ها در محاسبه سرعت واکنش‌ها، نظریه‌های برخورد و حالت گذار

روش ارزیابی:

سنجش مستمر	آزمون میانی	آزمون پایانی	پژوهش درسی
+	+	+	+



منابع اصلی:

۱. علی مقاری، مباحث پیشرفته ترمودینامیک و مکانیک آماری تعادلی و غیرتعادلی، انتشارات دانشگاه تهران، جلد اول (۲۰۱۴).

۲. Levine I.N., *Physical Chemistry*, Sixth Edition, (۲۰۰۹), translated by Islampour G.R., Maghari A., Najafi B., Parsafar G.A., Fatemi Publisher (۲۰۱۱).
۳. Callen H.B., *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*, John Wiley & Sons (۱۹۸۵).
۴. Goodwin A.R.H., Sengers J.V., Peters C.J., *Applied Thermodynamics of Fluids*, International Union of Pure and Applied Chemistry, RSC (۲۰۱۰).



ترمودینامیک آماری

ترمودینامیک آماری		فارسی	عنوان		
Statistical thermodynamics		انگلیسی	درس		
تعداد واحد	تعداد ساعت	نوع واحد			
۳	۴۸	اختیاری		الزامی	
		عملی	نظری	نظری	
شیمی فیزیک پیشرفته		آموزش تکمیلی عملی:		دارد <input type="checkbox"/>	ندارد <input checked="" type="checkbox"/>
		سفر علمی:		دارد <input type="checkbox"/>	ندارد <input checked="" type="checkbox"/>
		حل تمرین:		دارد <input type="checkbox"/>	ندارد <input checked="" type="checkbox"/>
		آزمایشگاه:		دارد <input type="checkbox"/>	ندارد <input checked="" type="checkbox"/>

هدف درس:

آشنایی و تسلط بر اصول و کاربرد ترمودینامیک آماری

سرفصل‌ها:

۱. اصول و نظریه‌های اساسی در مکانیک آماری تعادلی: تناظر میان تعادل ترمودینامیکی و اصل بیشینه احتمال، اصول موضوعه در مکانیک آماری، نظریه مجموعه‌های گیبس: مجموعه کانونی کوچک، مجموعه کانونی (مجموعه استاندارد)، مجموعه کانونی بزرگ، کمیت‌های ترمودینامیکی در مجموعه‌های آماری
۲. یکسان بودن مجموعه‌ها، نظریه آفت و خیزها
۳. مکانیک آماری کلاسیک
۴. مکانیک آماری کوانتومی: حالت‌های خالص و مخلوط و مجموعه‌های کوانتومی، ماتریس چگالی، مجموعه‌های کوانتومی، فرمیون‌ها و بوزون‌ها
۵. کاربرد مکانیک آماری در استخراج خواص ترموفیزیکی سیالات ایده‌آل: تابع تقسیم مولکولی، ترمودینامیک آماری گاز ایده‌آل تک اتمی، تابع تقسیم انتقالی مولکول گاز ایده‌آل تک اتمی، تابع تقسیم الکترونی مولکول گاز ایده‌آل تک اتمی، تابع تقسیم هسته ای مولکول‌های تک اتمی، توابع ترمودینامیکی گاز ایده‌آل تک اتمی
۶. ترمودینامیک آماری گازهای ایده‌آل دو اتمی: تابع تقسیم انتقالی مولکول‌های دو اتمی، تابع تقسیم الکترونی مولکول‌های دو اتمی، تابع تقسیم ارتعاشی مولکول‌های دو اتمی، تابع تقسیم چرخشی مولکول‌های دو اتمی نا جور هسته، تابع تقسیم چرخشی مولکول‌های دو اتمی جور هسته
۷. ترمودینامیک آماری گازهای ایده‌آل چند اتمی: تابع تقسیم انتقالی مولکول‌های چند اتمی، تابع تقسیم الکترونی مولکول‌های چند اتمی، تابع تقسیم چرخشی در مولکول‌های چند اتمی، تابع تقسیم ارتعاشی مولکول‌های چند اتمی، کاربرد آمار فرمی-دیراک و بوز-اینشتین در گاز ایده‌آل کوانتومی، گاز ایده‌آل فرمی-دیراک، گاز ایده‌آل بوز-اینشتین

روش ارزیابی:

سنجش مستمر	آزمون میانی	آزمون پایانی	پژوهش درسی
+	+	+	+



منابع اصلی:

۱. علی مقاری، مباحث پیشرفته در ترمودینامیک و مکانیک آماری تعادلی و غیرتعادلی، انتشارات دانشگاه تهران، جلد اول (۲۰۱۴).
۲. Pathria R.K., *Statistical Mechanics*, 1st ed., Pergamon Press, Oxford (۱۹۹۶).
۳. Schwabl F., *Statistical Mechanics*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (۲۰۰۶).
۴. Pathria R.K., Beale P.D., *Statistical Mechanics*, Elsevier (۲۰۱۱).
۵. Linder B., *Thermodynamics and Introductory Statistical Mechanics*, John Wiley & Sons (۲۰۰۴).
۶. McQuarrie D.A., *Statistical Mechanics*, Harper & Row, N.Y. (۱۹۷۶).



مکانیک کوانتومی

مکانیک کوانتومی			فارسی	عنوان
Quantum mechanics			انگلیسی	درس
درس‌های پیش‌نیاز	تعداد ساعت	تعداد واحد	نوع واحد	
ندارد	۴۸	۳	اختیاری	
			الزامی	
			عملی	نظری
			آموزش تکمیلی عملی:	
			ندارد	دارد
سفر علمی:		ندارد	دارد	
حل تمرین:		ندارد	دارد	
آزمایشگاه:		ندارد	دارد	

هدف درس: آشنائی و تسلط بر مباحث اصلی فیزیک کوانتوم و کاربرد آن در شیمی کوانتوم

سرفصل‌ها:

۱. مروری بر شکل‌گیری تاریخی مکانیک کوانتومی
۲. چبر عملگری، عملگرهای خطی، عملگرهای هرمیتی، مشاهده‌پذیرهای فیزیکی، معادله ویریه تابع - ویژه مقدار
۳. معادله شرودینگر در یک بعد: معادله شرودینگر برای ذره آزاد، حل معادله شرودینگر برای مدل‌های ساده پتانسیل (مسأله ذره در جعبه، چاه پتانسیل، پله پتانسیل و ...)، مسأله ذره در جعبه سه بعدی، مفهوم تبهگنی
۴. اصول موضوعه در مکانیک کوانتومی: نمایشات برداری و ماتریسی برای حالت‌های کوانتومی و عملگرها
۵. برخی قضایای مهم در مکانیک کوانتومی: خواص عملگرهای هرمیتی، توابع موج خوش رفتار، مفهوم اندازه‌گیری، اصل ناپذیری هایزنبرگ، اصل تناظر بورن
۶. مروری بر حل معادله شرودینگر برای مدل‌های نوسانگر هماهنگ یک و سه بعدی، عملگرهای خلق کننده و نابود کننده، پتانسیل‌های مرکزی، مجموعه عملگرهای جابه‌جا شونده و قوانین پایستگی، تبهگنی در اتم هیدروژن
۷. تکانه زاویه‌ای اربیتالی، تکانه زاویه‌ای اسپین، تکانه زاویه‌ای تممیم‌یافته، معادله ویژه مقدار برای تکانه زاویه‌ای، عملگرهای پلکانی
۸. روش‌های تقریبی در حل معادله شرودینگر: روش وردش، روش اختلال، اتم هیدروژن در میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی
۹. اتم‌های چند الکترونی: ذرات تمیزناپذیر و تقارن در توابع ویژه، توابع موج دترمینانی، روش‌های ab initio

روش ارزیابی:

سنجش مستمر	آزمون میانی	آزمون پایانی	پژوهش درسی
+	+	+	+

منابع اصلی:

۱. Gasiosowicz S., *Quantum Physics*, ۲nd ed., Wiley, New York (۱۹۹۶).
۲. Bes D. R., *Quantum Mechanics*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (۲۰۰۷).
۳. Jensen F., *Introduction to Computational Chemistry*, ۲nd ed., John Wiley & Sons (۲۰۰۷).
۴. Szabo A., Ostlund, N.S., *Modern Quantum Chemistry*, McGraw-Hill (۱۹۸۲).
۵. Nouredine Z., *Quantum Mechanics: concepts and applications*, ۲nd ed., John Wiley & Sons (۲۰۰۹).
۶. Daniel R. Bes, *Quantum Mechanics*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (۲۰۱۲).



"دروس اختیاری کارشناسی ارشد شیمی - شیمی فیزیک"

طیف سنجی مولکولی

طیف سنجی مولکولی		فارسی	عنوان
Molecular spectroscopy		انگلیسی	درس
درس های پیش نیاز	تعداد ساعت	تعداد واحد	نوع واحد
مکانیک کوانتومی	۴۸	۳	الزامی
			اختیاری
			نظری
			عملی
			آموزش تکمیلی عملی:
			دارد <input type="checkbox"/> ندارد <input checked="" type="checkbox"/>
			سفر علمی:
			دارد <input type="checkbox"/> ندارد <input checked="" type="checkbox"/>
			حل تمرین:
			دارد <input type="checkbox"/> ندارد <input checked="" type="checkbox"/>
			آزمایشگاه:
			دارد <input type="checkbox"/> ندارد <input checked="" type="checkbox"/>

هدف درس:

آشنائی و تسلط بر اصول طیف‌سنجی مولکولی

سرفصل‌ها:

- تابشهای الکترومغناطیسی، جذب و نشر نور بوسیله اتم‌ها و یا مولکول‌ها، اصول اندازه‌گیری و انواع طیف‌سنجی، مختصری از تقارن و نظریه گروه و کاربرد آن در طیف‌سنجی
- طیف چرخشی (ریزموج) مولکول‌ها، ساختار ظریف طیفی، قواعد انتخاب
- طیف ارتعاشی (زیرقرمز و رامان)، استفاده در تعیین ساختار مولکول و تجزیه شیمیایی طیف ارتعاشی - چرخشی
- طیف ارتعاشی (مولکول‌های دو اتمی، ساختار ظریف ارتعاشی - چرخشی مولکول‌های درشت)
- طیف الکترونی مولکول‌ها، قوانین و ملاحظات تجربی در طیف‌سنجی مرئی و فرابنفش

روش ارزیابی:

سنجش مستمر	آزمون میانی	آزمون پایانی	پژوهش درسی
+	+	+	+

منابع اصلی:

- Jensen P., Bunker P., *Computational Molecular Spectroscopy*, Wiley (۲۰۰۰).
- Mueller M.P., *Fundamentals of Quantum Chemistry: Molecular Spectroscopy and Modern Electronic Structure*, Springer (۲۰۰۱).
- Struve W.S., *Fundamentals of Molecular Spectroscopy*, Wiley-Interscience (۱۹۸۹).
- Laane J., *Frontiers of Molecular Spectroscopy*, Elsevier Science (۲۰۰۸)



- Δ. Stavros C. Farantos, *Nonlinear Hamiltonian Mechanics Applied to Molecular Dynamics: Theory and Computational Methods for Understanding Molecular Spectroscopy and Chemical Reactions*, Springer International Publishing (۲۰۱۴).



شیمی سطح و حالت جامد

شیمی سطح و حالت جامد			فارسی	عنوان		
Surface and solid state Chemistry			انگلیسی	درس		
درس های پیش نیاز	تعداد ساعت	تعداد واحد	نوع واحد			
ندارد	۴۸	۳	اختیاری		الزامی	
			عملی	نظری	عملی	
			دارد <input type="checkbox"/>	ندارد <input checked="" type="checkbox"/>	آموزش تکمیلی عملی:	
			دارد <input type="checkbox"/>	ندارد <input checked="" type="checkbox"/>	سفر علمی:	
			دارد <input type="checkbox"/>	ندارد <input checked="" type="checkbox"/>	حل تمرین:	
			دارد <input type="checkbox"/>	ندارد <input checked="" type="checkbox"/>	آزمایشگاه:	

هدف درس: آشنائی و تسلط بر اصول نظری شیمی سطح و حالت جامد

سرفصل ها:

۱. معرفی ساختارهای ساده بلوری: ساختارهای اولیه، تقارن و گروه‌های نقطه‌ای شبکه‌ها و سلول‌های واحد، جامدات بلوری، انرژی شبکه
۲. روش‌های آماده سازی، سرامیک، سنتز میکروویو، روش سل-ژل، روش پیش ساختار، روش هیدروترمال، ته نشین شدن بخارات شیمیایی
۳. پیوند در جامدات و خواص الکترونی، مدل نوار، هدایت الکترونی، نیمه هادی‌ها، نیمه هادی‌های doped باند در ترکیبات
۴. نقص‌ها و حالت‌های غیراستوکیومتری: انواع نواقص و مقدار آنها، هدایت یونی در جامدات، الکترولیت‌های جامد، ترکیبات غیراستوکیومتری
۵. ژئولیت‌ها، خاک‌ها و ساختارهای مرتبط: تهیه ژئولیت‌ها، تعیین ساختار، خاک‌های معدنی دیگر قالب‌های ساختاری
۶. خواص نوری جامدات: برهم کنش نور و اتم، جذب و نشر تابش در نیمه هادی‌ها، فیبرهای نوری
۷. خواص دی‌الکتریکی و مغناطیسی، نفوذپذیری مغناطیسی، پارامغناطیس در کمپلکس‌های فلزی فلزات فرومغناطیس و ترکیبات، آنتی فرومغناطیس، قطبش پذیری الکتریکی، بلورهای Piezoelectric، اثر فروالکتریک
۸. ابرهادی‌ها: خواص مغناطیسی، اثرات Josephson ابر هادی‌های دمای بالا، کاربرد، ساختار فلزات: ساختار سطح فلزات، ساختار سطح فلزات fcc، ساختار سطح فلزات hcp، ساختار سطح فلزات bcc، انرژی سطح، آسایش و بازسازی سطوح، فلزات ذره ای تک بلورهای سطوح.
۹. جذب مولکول‌ها روی سطح: معرفی جذب مولکولی، چگونگی اتصال مولکول‌ها به سطح، سینتیک جذب، منحنی‌های انرژی پتانسیل و انرژی جذب، هندسه و ساختار جاذب‌ها، فرآیند خودجذب
۱۰. همدمای لانگمویر: انحراف از تعادل، انحراف سینتیکی، تغییرات پوشش سطح با T و P، اثرات فشار گاز و UHV: معرفی UHV، اثرات فشار گاز
۱۱. ساختارهای فوق لایه‌ای و شکست سطح: انکسار الکترونی کم انرژی، انکسار الکترونی پر انرژی انعکاسی، ساختار سطوح



روش ارزیابی:

پژوهش درسی	آزمون پایانی	آزمون میانی	سنجش مستمر
+	+	+	+

منابع اصلی:

1. Richard C. Ropp, *Solid State Chemistry*, Elsevier Science (۲۰۰۳).
2. D. P. Woodruff and T. A. Delchar, *Modern Techniques of Surface Science*, Cambridge solid state science series (۱۹۹۴).
3. R. Vanselow, R. Howe, *Chemistry and Physics of Solid-State*, Springer Series in Chemical Physics (۲۰۱۳).
4. Guido Busca, *Heterogeneous Catalytic Materials. Solid State Chemistry, Surface Chemistry and Catalytic Behaviour*, Elsevier (۲۰۱۴).
5. Moore, Elaine A.; Smart, Lesley, *Solid state chemistry: an introduction*, CRC Press (۲۰۱۲).



سینتیک و دینامیک شیمیایی

سینتیک و دینامیک شیمیایی			فارسی	عنوان		
Chemical kinetics and dynamics			انگلیسی	درس		
درس‌های پیش‌نیاز	تعداد ساعت	تعداد واحد	نوع واحد			
ندارد	۴۸	۳	اختیاری		الزامی	
			عملی	نظری	عملی	
			ندارد	دارد	آموزش تکمیلی عملی:	
			ندارد	دارد	سفر علمی:	
			ندارد	دارد	حل تمرین:	
ندارد	دارد	ندارد		آزمایشگاه:		

هدف درس: آشنائی و تسلط بر اصول سینتیک و دینامیک شیمیایی

سرفصل‌ها:

۱. مروری بر سرعت واکنش و تعیین آن از روشهای تجربی
۲. مروری بر بحث نیروهای بین اتم‌ها و مولکول‌ها و روابط تجربی پتانسیل بین مولکولی
۳. نظریه برخورد برای کرات سخت در واکنش‌های فاز گازی
۴. سطوح انرژی پتانسیل
۵. نظریه پراکندگی (Scattering) کلاسیکی
۶. سطح مقطع پراکندگی برخوردهای کشسان و غیرکشسان
۷. نظریه حالت گذار
۸. فرمول‌بندی ترمودینامیک ثابت سرعت طبق نظریه حالت گذار
۹. مکانسیم انتقال انرژی (Collisional of radiationless)
۱۰. واکنش‌های تک‌مولکولی (شامل فرمول رایس-رامسپرگر-کاسل در مورد Kuni)
۱۱. واکنش‌های سه‌مولکولی
۱۲. واکنش‌ها در محلول (شامل واکنش‌های سریع، واکنش‌های تحت تأثیر نفوذ، ...)

روش ارزیابی:

سنجش مستمر	آزمون میانی	آزمون پایانی	پژوهش درسی
+	+	+	+

منابع اصلی:

۱. Taylor P.G., *Chemical Kinetics and Mechanism*, Michael Mortimore, Royal Society of Chemistry (۲۰۰۳).
۲. Pozrikidis C., *Fluid Dynamics: theory, Computation, and Numerical Simulation*, Springer (۲۰۰۹).
۳. Zaikov G.E.; Artur J M Valente; Lexei L Iordanskiĭ, *Advances in Kinetics and Mechanism of Chemical Reactions*, Apple Academic Press (۲۰۱۳).



ریاضیات در شیمی فیزیک

ریاضیات در شیمی فیزیک			فارسی	عنوان		
Mathematics in physical chemistry			انگلیسی	درس		
درس های پیش نیاز	تعداد ساعت	تعداد واحد	نوع واحد			
ندارد	۴۸	۳	اختیاری		الزامی	
			عملی	نظری	عملی	
			دارد <input type="checkbox"/>	ندارد <input checked="" type="checkbox"/>	آموزش تکمیلی عملی:	
			دارد <input type="checkbox"/>	ندارد <input checked="" type="checkbox"/>	سفر علمی:	
			دارد <input type="checkbox"/>	ندارد <input checked="" type="checkbox"/>	حل تمرین:	
دارد <input checked="" type="checkbox"/>	ندارد <input type="checkbox"/>	آزمایشگاه:				

هدف درس: آشنائی و تسلط بر مباحث ریاضیات مورد نیاز شیمی فیزیک

سرفصل ها:

۱. آنالیز برداری: بردارها، نمایشات برداری، مشتقات برداری، انتگرال های برداری
۲. سیستم های مختصات: تبدیل دستگاه های مختصات به یکدیگر، ژاکوبی تبدیل
۳. مختصری درباره آنالیز تانسوری: نمایش تانسوری، انقباض تانسوری، دیادها و پلی یادها
۴. دترمینان ها و ماتریس ها
۵. سری ها
۶. توابع متغیرهای مختلط
۷. معادلات دیفرانسیل خاص در ریاضی فیزیک: معادله بسل، معادله هرمیت، معادله لژاندر، معادله لاگر
۸. سری های فوریه و انتگرال های فوریه
۹. حساب مانده ها، توابع تحلیلی، قطب ها، حل انتگرال های غیر تحلیلی

روش ارزیابی:

سنجش مستمر	آزمون میانی	آزمون پایانی	پژوهش درسی
+	+	+	+

منابع اصلی:

۱. Arfken G., *Mathematical Methods for Physicists*, six edition, Academic Press. Inc., (۲۰۰۵).
۲. Butkov E., *Mathematical Physics*, Addison Wesley (۲۰۰۲).
۳. Boas M.L., *Mathematical Methods in the Physical Sciences*, John Wiley & Sons (۱۹۹۶).
۴. Vaughn M.T., *Introduction to Mathematical Physics*, Wiley-VCH (۲۰۰۷).
۵. Masujima M., *Applied Mathematical Methods in Theoretical Physics*, Wiley-VCH (۲۰۰۹).
۶. Philippe Blanchard, Erwin Brünig, *Mathematical Methods in Physics: Distributions, Hilbert Space Operators, Variational Methods, and Applications in Quantum Physics*, Birkhäuser Basel (۲۰۱۵).



شیمی محاسباتی

شیمی محاسباتی		فارسی	عنوان	
Computational chemistry		انگلیسی	درس	
درس های پیش نیاز	تعداد ساعت	تعداد واحد	نوع واحد	
مکانیک کوانتومی	۴۸	۳	اختیاری	
			عملی	نظری
			الزامی	
			عملی	نظری
			آموزش تکمیلی عملی:	
		ندارد	دارد	<input type="checkbox"/>
		ندارد	دارد	<input type="checkbox"/>
		ندارد	دارد	<input type="checkbox"/>
		ندارد	دارد	<input type="checkbox"/>

هدف درس: آشنائی و تسلط بر شیمی محاسباتی

سرفصل ها:

۱. روش های شبیه سازی رایانه ای: آنالیز عددی شبیه سازی مونت کارلو، مکانیک مولکولی و شبیه سازی دینامیک مولکولی، محاسبه هندسه و ساختار الکترونی آنها و مولکول ها.
۲. محاسبات کوانتومی: روش های ab-initio و Semiempirical در مورد مولکول های چند اتمی، توابع پایه، کاهش تعداد انتگرال ها، آنالیز جمعیت، هندسه مولکولی، برهم کنش کنفیگوراسیون ها، روش های Semiempirical برای مولکولهای مزدوج مسطح، روشهای مکانیک مولکولی.

روش ارزیابی:

سنجش مستمر	آزمون میانی	آزمون پایانی	پژوهش درسی
+	+	+	+

منابع اصلی:

۱. C. J. Cramer, *Essentials of Computational Chemistry*, John Wiley and Sons (۲۰۱۲).
۲. T. Clark A, *Handbook of Computational Chemistry*, Wiley, New York (۱۹۸۵).
۳. R. Dronskowski, *Computational Chemistry of Solid State Materials*, Wiley-VCH (۲۰۰۵).
۴. A.K. Hartmann, *Practical Guide to Computer Simulations*, World Scientific (۲۰۰۹).
۵. F. Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*, John Wiley & Sons (۱۹۹۹).



شیمی فیزیک پلیمرها

شیمی فیزیک پلیمرها		فارسی	عنوان	
Physical chemistry of polymers		انگلیسی	درس	
درس های پیش نیاز	تعداد ساعت	تعداد واحد	نوع واحد	
ندارد	۴۸	۳	اختیاری	
			نظری	عملی
			آموزش تکمیلی عملی:	دارد <input type="checkbox"/> ندارد <input checked="" type="checkbox"/>
			سفر علمی:	دارد <input type="checkbox"/> ندارد <input checked="" type="checkbox"/>
			حل تمرین:	دارد <input type="checkbox"/> ندارد <input checked="" type="checkbox"/>
آزمایشگاه:	دارد <input type="checkbox"/> ندارد <input checked="" type="checkbox"/>			

هدف درس: آشنائی و تسلط بر اصول شیمی فیزیک پلیمرها

سرفصل ها:

۱. مقدمه: خواص فیزیکی پلیمرها، ساختمان شیمیائی پلیمرها، انواع پیوندها
۲. انعطاف پذیری زنجیرهای پلیمری، ایزومری چرخشی، کنفیگوراسیون و کنفورماسیون مولکول ها، ابعاد مارپیچ های ماکرومولکولی، ترمودینامیک انعطاف پذیری یک زنجیر، سینتیک انعطاف پذیری یک زنجیر
۳. حالت های فیزیکی و ساختمانی پلیمرها: حالت های فیزیکی و فازی مواد، تبلور، انتقال شیشه ای، حالت های ویژه پلیمرهای آرایش یافته، قابلیت متبلور شدن، مکانیسم و سینتیک تبلور پلیمرها، ترمودینامیک ذوب و تبلور پلیمرها، حجم آزاد پلیمرها، پلیمرهای آمورف
۴. محلول های واقعی پلیمرها: خواص ویژه محلول های واقعی پلیمرها، حلالیت و تورم پلیمرها، محلول های دی الکتریک، عوامل موثر بر حلالیت و تورم پلیمرها، کاربرد قانون فازها در مورد محلول های پلیمری، خواص سینتیکی محلول های پلیمری، اثر متقابل پلیمرها بر حلال
۵. تئوریهای محلول های پلیمری: تئوری فلوری-هاگینز، تئوری مونی، تئوری جدید فلوری
۶. ترمودینامیک محلول های پلیمری: کمیت های جزء مولی، محلول های ایده آل، فشار بخار محلول های پلیمری، فشار اسمزی، فشار تورمی، حرارت های انتگرالی محلول و رقت، حرارت های دیفرانسیلی محلول و رقت، آنتروپی اختلاط، ترمودینامیک محلول و ساختمان پلیمر، اثر حرارت، انرژی داخلی فرآیند اختلاط
۷. نفوذپذیری پلیمرها: نفوذپذیری گازها، روش تعیین نفوذپذیری، جذب بخار بوسیله پلیمرها، محاسبه سطح ویژه جذب، محاسبه جذب در حجم های خالی

روش ارزیابی:

سنجش مستمر	آزمون میانی	آزمون پایانی	پژوهش درسی
+	+	+	+

منابع اصلی:

۱. Tager A., *Physical Chemistry of Polymers*, Mir, Moscow (۱۹۷۸).
۲. Sperling L.H., *Introduction to Physical Polymer Science*, John Wiley & Sons (۲۰۰۸).
۳. Rudin A., *The elements of Polymer Science and Engineering*, Academic Press (۱۹۹۴).
۴. Gnanou Y., Fontanille M., *Organic and Physical Chemistry of Polymers*, Wiley-Interscience, (۲۰۰۸).



آشنایی با صنایع شیمیایی ایران

آشنایی با صنایع شیمیایی ایران		فارسی	عنوان	
Understanding the chemical industries of Iran		انگلیسی	درس	
درس های پیش نیاز	تعداد ساعت	تعداد واحد	نوع واحد	
ندارد	۴۸	۳	اختیاری	
			عملی	نظری
			■ ندارد	□ دارد
			□ ندارد	■ دارد
			■ ندارد	□ دارد
				الزامی
				عملی
				نظری
				آموزش تکمیلی عملی:
				سفر علمی:
				حل تمرین:
				آزمایشگاه:

هدف درس:

آشنا شدن دانشجویان با تعدادی از صنایع شیمیایی کشور

سرفصل ها:

با نظر شورای تحصیلات تکمیلی و صناعی که از آنها دعوت می شود. برای این درس حداقل دو جلسه بازدید از صنایع شیمیایی انجام می شود.

روش ارزیابی:

سنجش مستمر	آزمون میانی	آزمون پایانی	پژوهش درسی
+	-	+	+

