فرم ب. ب

بسمه تعالی

دانشگاه شهید بهشتی

مشخصات کلی، برنامه درسی و

سرفصل دروس رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک

دوره دکتری

دانشکده علوم شیمی ونفت

مصوب جلسه شورای آموزشی دانشگاه مورخ ۱۳۹۷/۱۲/۲۱

این برنامه بر اساس آئین‌نامه واگذاری اختیارات برنامه درسی به دانشگاه‌ها مبنی بر ضرورت بازنگری رشته **شیمی گرایش شیمی فیزیک** در **دانشگاه شهید بهشتی** توسط اعضای گروه علمی**شیمی فیزیک و محاسباتی** دانشکده **علوم شیمی و نفت** بازنگری و در جلسه مورخ ۱۳۹۷/۱۲/۲۱ شورای آموزشی دانشگاه به تصویب رسید.

۱۳۳۸
معاونت آموزشی

مصوبه شورای آموزشی دانشگاه مورخ ۱۳۹۷/۱۲/۲۱ در خصوص بازنگری
برنامه درسی رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک دوره دکتری

برنامه درسی رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک دوره دکتری که توسط گروه علمی‌شیمی فیزیک و محاسباتی دانشکده علوم شیمی و نفت بازنگری شده بود با اکثریت آراء به تصویب رسید.
این برنامه از تاریخ تصویب لازم الاجرا است.*
*: هر نوع تغییر در برنامه مجاز نیست مگر آنکه به تصویب شورای آموزشی دانشگاه برسد.

رأی صادره جلسه مورخ ۱۳۹۷/۱۲/۲۱ شورای آموزشی دانشگاه در مورد برنامه درسی بازنگری شده رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک دوره دکتری صحیح است به واحدهای ذیربط ابلاغ شود.

محسن ابراهیمی مقدم
مدیر برنامه‌ریزی و ارزیابی آموزشی

علی اکبر افضلیان
معاون آموزشی دانشگاه

دانشگاه شهید بهشتی ۱۳۳۸
معاونت آموزشی
کد (۲۰۰)

اسامی کمیته برنامه‌ریزی درسی

۱- نام و نام خانوادگی: منصور زاهدی	تخصص: شیمی فیزیک	مرتبه علمی: استاد
۲- نام و نام خانوادگی: محمد حسن پیروی	تخصص: شیمی فیزیک	مرتبه علمی: دانشیار
۳- نام و نام خانوادگی: محبوبه تصویری	تخصص: شیمی فیزیک	مرتبه علمی: استادیار
٤- نام و نام خانوادگی: مهدی ظریف	تخصص: شیمی فیزیک	مرتبه علمی: استادیار
٥- نام و نام خانوادگی: سید شهاب الدین نقوی	تخصص: شیمی فیزیک	مرتبه علمی: استادیار

فصل اول:

مشخصات کلی رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک

دوره دکتری

«گزارش توجیهی برای ایجاد رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک دوره دکتری»

۱- تعریف:

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

۲- هدف:

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

۳- ضرورت و اهمیت:

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

٤- طول دوره و شکل نظام:

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

۵- تعداد و نوع واحدهای درسی دوره:

تعداد کل واحدهای درسی دوره دکتری شیمی فیزیک ۳٦ واحد به صورت زیر است:

دروس تخصصی: ۱۳ واحد

رساله: ۲۳ واحد

٦- نقش و توانایی فارغ التحصیلان:

الف: تامین هیات علمی دانشگاه‌ها

ب: تربیت افرادی که دارای تفکری خلاق و مستقل باشند و به روش‌های پیشرفته پژوهشی احاطه داشته باشند.

ج: توانایی درک مشکلات علمی جامعه و حل آنها

د: همکاری در ایجاد فناوری و تکمیل چرخه علم به ثروت

۷- شرایط ورود به رشته/گرایش:

الف- داشتن مدرک معتبر پایان دوره کارشناسی ارشد اعم از پیوسته و ناپیوسته مورد تایید وزارت عتف

ب- تایید شایستگی‌های عمومی ورود به دوره

پ- احراز توانایی در بکارگیری زبان خارجی(ارائه گواهی آن شرط لازم برای صدور مجوز ارزیابی جامع آموزشی ،پژوهشی) است

د- قبولی در آزمون ورودی و یا کسب پذیرش از دانشگاه طبق مقررات مصوب

۸- مواد و ضرایب امتحانی و...:

مواد آزمون ورودی هر ساله توسط کمیته شیمی گروه علوم پایه شورای برنامه‌ریزی آموزش عالی مشخص می‌شود.

دانشگاه شهید بهشتی ۱۳۳۸
معاونت آموزشی
کد (۲۰۰)

فصل دوم:
جداول دروس

۱- جدول دروس تخصصی

دانشگاه شهید بهشتی
۱۳۳۸
معاونت آموزشی
کد (۲۰۰)

بسمه تعالی

فرم بازنگری برنامه درسی

دانشکده/ پژوهشکده: علوم شیمی و نفت **رشته/ گرایش:** شیمی گرایش شیمی فیزیک **دوره:** دکتری

تعداد کل واحد در دوره: ۳۶ **تعداد واحد دروس تخصصی:** ۱۳

تاریخ آخرین بازنگری/ تصویب سرفصل:

تاریخ اخذ مجوز رشته: **تعداد دوره‌های اجرا شده در دانشکده/ پژوهشکده:**

دروس در برنامه جاری (قدیم)							دروس در برنامه بازنگری شده						
ردیف	نام درس	شماره درس	نوع درس (پایه، تخصصی الزامی و ...)	نوع واحد	تعداد واحد	توضیحات *	ردیف	نام درس	نوع درس (پایه، تخصصی الزامی و ...)	نوع واحد	تعداد واحد	نوع سرفصل (جدیداً تدوین شده یا از قبل وجود داشته)	توضیحات (۲ الی ۵) *
۱	موضوعات ویژه در گرایش	۳۳۱۵۵۱۰	اصلی	نظری	۳	۱							
۲	نظریه گرافهای شیمی	۳۳۱۶۵۰۴	اصلی	نظری	۳	۱							
۳	روشهای رادیوشیمیایی	۳۳۱۷۵۰۲	اصلی	نظری	۳	۱							
۴	تحلیل آماری نتایج	۳۳۱۷۵۱۱	اصلی	نظری	۳	۱							

۵	طیف سنجی مولکولی ۲	۳۳۱۸۵۰۵	اصلی	نظری	۳	۱									
۶	مباحث نوین در شیمی فیزیک	۳۳۱۸۰۰۸	اصلی	نظری	۳	۱									
۷	ریاضیات در شیمی فیزیک	۳۳۱۸۰۱۴	اصلی	نظری	۳	۱									
۸	شیمی حالت جامد و کریستالوگرافی	۳۳۱۶۵۰۷	اصلی	نظری	۳			شیمی فیزیک حالت جامد و مواد		تخصصی	نظری	۳			۲
۹	ترمودینامیک فرآیندهای برگشت ناپذیر	۳۳۱۸۵۰۰	اصلی	نظری	۳			ترمودینامیک و مکانیک آماری غیرتعادلی		تخصصی	نظری	۳			۲
۱۰	ترمودینامیک آماری ۲	۳۳۱۸۵۰۱	اصلی	نظری	۳			ترمودینامیک آماری پیشرفته		تخصصی	نظری	۳			۲
۱۱	ترمودینامیک شیمیایی جامدات	۳۳۱۸۵۰۲	اصلی	نظری	۳			ترمودینامیک شیمیایی جامدات		تخصصی	نظری	۳			۳
۱۲	ترمودینامیک محلول‌ها	۳۳۱۸۵۰۶	اصلی	نظری	۳			ترمودینامیک محلول‌ها		تخصصی	نظری	۳			۳
۱۳	طیف سنجی مولکولی ۳	۳۳۱۸۵۰۷	اصلی	نظری	۳			طیف سنجی مولکولی پیشرفته		تخصصی	نظری	۳			۲
۱۴	شیمی کوانتومی ۳	۳۳۱۸۵۰۸	اصلی	نظری	۳			شیمی کوانتوم پیشرفته		تخصصی	نظری	۳			۲
۱۵	شیمی سطح	۳۳۱۸۵۱۱	اصلی	نظری	۳			شیمی سطح و کاتالیست		تخصصی	نظری	۳			۲
۱۶	لیزر و کاربرد آن در	۳۳۱۸۵۱۲	اصلی	نظری	۳			لیزر و کاربرد آن در		تخصصی	نظری	۳			۳

	شیمی								شیمی				
۱۷	سینتیک شیمیایی محلول‌ها	۳۳۱۸۵۱۳	اصلی	نظری	۳				سینتیک شیمیایی محلول‌ها	تخصصی	نظری	۳	۳
۱۸									شیمی محاسباتی پیشرفته	تخصصی	نظری	۳	۴
۱۹	سمینار	۳۳۱۵۵۱۵	اصلی	نظری	۱				سمینار	تخصصی	نظری	۱	۳

*
۱= درس از برنامه درسی حذف شده است.

*
۲= درس تغییر عنوان داده و محتوا تغییر کرده است
۳ = درس تغیر عنوان نداده ولی محتوا تغییر کرده است.
۴= درس جدید تدوین شده است.
۵= تغییر در نوع واحد

دانشگاه شهید بهشتی
۱۳۳۸
معاونت آموزشی
کد (۲۰۰)

جدول دروس تخصصی

ردیف	عنوان درس	تعداد واحد	تعداد ساعت			پیش‌نیاز یا هم‌نیاز
			نظری	عملی	جمع	
۱	ترمودینامیک و مکانیک آماری غیر تعادلی	۳	۴۸	-	۴۸	-
۲	ترمودینامیک آماری پیشرفته	۳	۴۸	-	۴۸	-
۳	ترمودینامیک شیمیایی جامدات	۳	۴۸	-	۴۸	-
۴	طیف سنجی مولکولی پیشرفته	۳	۴۸	-	۴۸	-
۵	ترمودینامیک محلول‌ها	۳	۴۸	-	۴۸	-
۶	شیمی کوانتم پیشرفته	۳	۴۸	-	۴۸	-
۷	شیمی سطح و کاتالیست	۳	۴۸	-	۴۸	-
۸	لیزر و کاربرد آن در شیمی	۳	۴۸	-	۴۸	-
۹	سینتیک شیمیایی محلول‌ها	۳	۴۸	-	۴۸	-
۱۰	شیمی فیزیک حالت جامد و مواد	۳	۴۸	-	۴۸	-
۱۱	شیمی محاسباتی پیشرفته	۳	۴۸	-	۴۸	-
۱۲	سمینار	۱	۱۶	-	۱۶	-

گذراندن ۱۲ واحد (ردیف ۱ تا ۱۱) از جدول فوق و درس سمینار برای دانشجویان گرایش شیمی فیزیک الزامی است.

دانشگاه شهید بهشتی ۱۳۳۸
معاونت آموزشی کد (۲۰۰)

فصل سوم :

شناسنامه و سرفصل

دروس رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک

دوره دکتری

دانشگاه شهید بهشتی
۱۳۳۸
معاونت آموزشی
کد (۲۰۰)

لطفا در این قسمت چیزی ننویسید

سرفصل درس: شیمی فیزیک حالت جامد و مواد					
عنوان درس به فارسی: شیمی فیزیک حالت جامد و مواد	تعداد واحد:۳	نوع واحد	تخصصی	تعداد واحد نظری:۳	دروس پیش‌نیاز: ندارد
	تعداد ساعت: ۴۸			تعدا واحد عملی:	
عنوان درس به انگلیسی: Physical Chemistry of Solid State and Materials	آموزش تکمیلی عملی: ☐ دارد ■ندارد سفر علمی ☐ کارگاه ☐ آزمایشگاه ☐ سمینار ☐				
	سال ارائه درس:				

اهداف درس آشنایی و تسلط بر مباحث پیشرفته شیمی و فیزیک حالت جامد و مواد

سرفصل درس: شیمی فیزیک حالت جامد و مواد

هفته	سرفصل
اول	ساختار بلوری و گروه‌های فضایی
دوم	شبکه وارونه و منطقه بریلوئن
سوم	قانون براگ و بلورشناسی پرتو ایکس
چهارم	انرژی همبستگی
پنجم	فنون در ساختارهای بلوری
ششم	مدل ژلیوم
هفتم	پتانسیل متناوب و نظریه بلاخ
هشتم	مدل تنگ بست و نظریه ماده چگال
نهم	ساختارهای نواری
دهم	همبستگی الکترونی
یازدهم	پتانسیل شیمیایی و توزیع فرمی
دوازدهم	چگالی حالتها و پراکندگی انرژی
سیزدهم	جرم مؤثر و مفهوم حفره (hole)
چهاردهم	انتقال حرارتی و الکترونی در ساختارهای بلوری
پانزدهم	نیمه رساناها و دوپ کردن
شانزدهم	مغناطیس در ساختارهای بلوری

دانشگاه شهید بهشتی ۱۳۳۸
معاونت آموزشی کد (۲۰۰)

ارزشیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون‌های نهایی		پروژه
		نوشتاری	عملکردی	
دارد	دارد	دارد		

ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

منابع اصلی:

1. Roque-Malherbe, Rolando MA. The physical chemistry of materials: energy and environmental applications, CRC Press (2016).
2. Smart, Lesley E., and Elaine A. Moore. Solid state chemistry: an introduction, CRC press (2016).
3. C. Kittel, Introduction to solid state physics, Wiley (1976).
4. R. E. Peierls, Quantum theory of solids, Clarendon, Oxford (1955).
5. R. Martin, Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods, Cambridge University Press (2004).
6. Walter Ashley Harrison, Elementary Electronic Structure, World Scientific (1999).

منابع کمکی:

1. J.M. Ziman, Electrons and Phonons: The Theory of Transport Phenomena in Solids, Clarendon Press (1960).

دانشگاه شهید بهشتی ۱۳۳۸
معاونت آموزشی
کد (۲۰۰)

سرفصل درس: ترمودینامیک و مکانیک آماری غیرتعادلی					
عنوان درس به فارسی: ترمودینامیک و مکانیک آماری غیرتعادلی	تعداد واحد:۳	نوع واحد	تخصصی	تعداد واحد نظری:۳	دروس پیش‌نیاز: ندارد
	تعداد ساعت: ۴۸			تعدا واحد عملی:	
عنوان درس به انگلیسی: Thermodynamics and Non-equilibrium Statistical Mechanics	آموزش تکمیلی عملی: ☐ دارد ■ندارد سفر علمی ☐ کارگاه ☐ آزمایشگاه ☐ سمینار ☐				
	سال ارائه درس:				

اهداف درس: **آشنایی و تسلط بر مباحث پیشرفته مکانیک و ترمودینامیک آماری فرآیندهای غیرتعادلی**

سرفصل درس: **ترمودینامیک و مکانیک آماری غیرتعادلی**

هفته	سرفصل
اول	مروری بر مفهوم برگشت پذیری و برگشت ناپذیری
دوم	ترمودینامیک برگشت ناپذیر کلاسیکی، معادلات توازن در هیدرودینامیک
سوم	ترمودینامیک کلاسیک غیر تعادلی – ترمودینامیک خطی و ضرایب پدیده شناختی
چهارم	ترمودینامیک برگشت ناپذیر تعمیم یافته – معادلات گیبس تعمیم یافته
پنجم	محاسبه آنتالپی در فرآیندبرگشت ناپذیر – اصول موضوعه ترمودینامیک غیرتعادلی
ششم	دینامیک کلاسیک – قضیه لیوویل و معادله لیوویل
هفتم	قضیه افت وخیز- اتلاف، نظریه توابع همبستگی زمانی – ضرایب نفوذ
هشتم	حافظه پدیده‌ها
نهم	فرآیندهای تصادفی – فرآیندهای مارکوف و حافظه دار
دهم	نظریه حرکت براونی و معادله لانژوین
یازدهم	معادلات فوکر-پلانک – معادله مستر
دوازدهم	قضیه H بولتزمان، ناورداهای برخوردی، معادلات تغییر، معادله بولتزمان خطی
سیزدهم	تبدیل فاز (ترمودینامیک، مکانیک آماری و قضیه لاندائو)
چهاردهم	پدیده های بحرانی
پانزدهم	سینتیک نظم فازها (سرد کردن، روش لانژوین، توابع همبستگی و ...)
شانزدهم	سیستم های فشرده و شیشه ای

دانشگاه شهید بهشتی ۱۳۳۸
معاونت آموزشی کد (۲۰۰)

ارزشیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون‌های نهایی		پروژه
		نوشتاری	عملکردی	
دارد	دارد	دارد		

ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

منابع اصلی:

۱- علی مقاری، مباحث پیشرفته ترمودینامیک و مکانیک آماری تعادلی و غیر تعادلی، انتشارات دانشگاه تهران ۱۳۹۳.

2. B. C. Eu, Non-equilibrium Statistical Mechanics: Ensemble Method, Kluwer, Netherland (1998).

3. Livi, R., Politi, P., Non-equilibrium statistical physics, A modern perspective, Cambridge University Press (2017).

4. Kardar, M., Statistical Physics of fields, Cambridge University Press (2012).

منابع کمکی:

1. K. S. Førland, T. Førland, S. K. Ratkje, Irreversible Thermodynamics (Theory and Applications), Wiley, Toronto (1988).

دانشگاه شهید بهشتی ۱۳۴۸
معاونت آموزشی
کد (۲۰۰)

سرفصل درس: ترمودینامیک آماری پیشرفته

عنوان درس به فارسی: ترمودینامیک آماری پیشرفته	تعداد واحد:۳	نوع واحد	تخصصی	تعداد واحد نظری:۳	دروس پیش‌نیاز: ندارد
	تعداد ساعت: ۴۸			تعدا واحد عملی:	
عنوان درس به انگلیسی: Advanced Statistical Thermodynamics	آموزش تکمیلی عملی: ☐ دارد ■ندارد سفر علمی ☐ کارگاه ☐ آزمایشگاه ☐ سمینار ☐				
	سال ارائه درس:				

اهداف درس: آشنایی و تسلط بر مباحث پیشرفته مکانیک و ترمودینامیک آماری

سرفصل درس: ترمودینامیک آماری پیشرفته

هفته	سرفصل
اول	مروری بر مجموعه های ترمودینامیک آماری
دوم	گازهای حقیقی – معادله ویریال
سوم	ضریب دوم و سوم ویریال
چهارم	ضرایب ویریال مرتبه های بالاتر
پنجم	بلورهای تک اتمی – مدل انیشتین
ششم	مدل دبای
هفتم	مدل اسپین - شبکه
هشتم	نقص‌های شبکه
نهم	مدل آیزینگ – مدل پاتس
دهم	سیالات چگال – توابع توزیع
یازدهم	تابع توزیع شعاعی
دوازدهم	رابطه بین تابع توزیع شعاعی و خواص ترمودینامیکی
سیزدهم	معادلات انتگرالی برای تابع توزیع شعاعی
چهاردهم	معادله انتگرالی کرک وود – معادله انتگرالی گرین – یوان(BGY)
پانزدهم	معدله انتگرالی پرکاش – یوویک (PY) وHNC
شانزدهم	معادله حالت کارناهان – استارلینگ برای کرات سخت

معاونت آموزشی

ارزشیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون‌های نهایی		پروژه
		نوشتاری	عملکردی	
دارد	دارد	دارد		

ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

منابع اصلی:

۱- علی مقاری، مباحث پیشرفته ترمودینامیک و مکانیک آماری تعادلی و غیر تعادلی، انتشارات دانشگاه تهران ۱۳۹۳.

2. Pathria, P.K., Statistical Mechanics, 3rd Ed. Academic Press (2011).
3. Chandler, D., Introduction to Modern Statistical Mechanics, Oxford University Press (1987).
4. Kardar, M., Statistical Physics of Particles, Cambridge University Press (2012).
5. Oono, Y., Perspectives on Statistical Thermodynamics, Cambridge University Press (2017).

منابع کمکی:

1. Hill, T.L., An introduction to statistical thermodynamics, Dover Publication (1986).

دانشگاه شهید بهشتی ۱۳۳۸
معاونت آموزشی
کد (۲۰۰)

سرفصل درس: **ترمودینامیک شیمیایی جامدات**

عنوان درس به فارسی: ترمودینامیک شیمیایی جامدات	تعداد واحد:۳	نوع واحد	تخصصی	تعداد واحد نظری:۳	**دروس پیش‌نیاز: ندارد**
عنوان درس به انگلیسی: **Chemical Thermodynamics of Solids**	**تعداد ساعت: ۴۸**			تعدا واحد عملی:	
آموزش تکمیلی عملی: ☐ دارد ■ندارد سفر علمی ☐ کارگاه ☐ آزمایشگاه ☐ سمینار ☐					
سال ارائه درس:					

اهداف درس: **آشنایی و تسلط بر مباحث پیشرفته ترمودینامیک شیمیایی جامدات**

سرفصل درس: **ترمودینامیک شیمیایی جامدات**

هفته	سرفصل
اول	مقدمه و مروری بر قوانین ترمودینامیک (قانون اول، دوم و سوم ترمودینامیک)
دوم	خواص ترمودینامیکی محلول‌های جامد
سوم	آشنایی با قاعده فاز گیبس
چهارم	ترمودینامیک و دیاگرام فاز سیستمهای تک جزئی
پنجم	ترمودینامیک و دیاگرام فاز سیستمهای دوجزئی
ششم	ترمودینامیک و دیاگرام فاز سیستمهای دوجزئی
هفتم	ترمودینامیک و دیاگرام فاز سیستمهای سه جزئی
هشتم	تعادل بین فازهای چند جزئی
نهم	ترمودینامیک سطح و فصل مشترک
دهم	انواع نقص در بلورهای یونی و فلزی
یازدهم	نقص در نیمه هادی ها
دوازدهم	نقص در نیمه هادی ها
سیزدهم	نقص در ترکیبات استوکیومتری و غیراستوکیومتری
چهاردهم	ترمودینامیک سیستمهای دارای نقص
پانزدهم	پدیده نفوذ و هدایت در جامدات
شانزدهم	روشهای تجربی شناسایی نقص

۱۳۳۸
معاونت آموزشی
کد (۲۰۰)

ارزشیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون‌های نهایی		پروژه
		نوشتاری	عملکردی	
دارد	دارد	دارد		

ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

منابع اصلی:

1 . Levine, I., Physical Chemistry, McGraw-Hill Education Pvt. Ltd (2013).
2 . Atkins, P., and J. de Paula., Physical Chemistry. 7th ed., W.H. Freeman and Company (2001).
3 . Ericksen, J. L., Introduction to the Thermodynamics of Solids, Springer US, (1991).
4 . Choudhary, C.B. Maiti, H.S. Subbarao E.C., Solid Electrolytes and Their Application, Springer US (1980).
5 . Swalin, Richard A., Thermodynamics of Solids, Wiley-VCH (1973).

منابع کمکی:

1.Hagenmuller, P. and Van Gool, W., Solid Electrolytes: General Principles, Characterization, Materials, Applications, Academic Press (1978).

دانشگاه شهید بهشتی ۱۳۴۸
معاونت آموزشی
کد (۲۰۰)

سرفصل درس: **ترمودینامیک محلول‌ها**

عنوان درس به فارسی: **ترمودینامیک محلول‌ها**	تعداد واحد:۳	نوع واحد	تخصصی	تعداد واحد نظری:۳	**دروس پیش‌نیاز: ندارد**
عنوان درس به انگلیسی: **Thermodynamics of Solutions**	تعداد ساعت: ۴۸			تعدا واحد عملی:	
آموزش تکمیلی عملی: ☐ دارد ■ندارد سفر علمی ☐ کارگاه ☐ آزمایشگاه ☐ سمینار ☐					
سال ارائه درس:					

اهداف درس: **آشنایی و تسلط بر مباحث پیشرفته ترمودینامیک محلول‌ها**

سرفصل درس: **ترمودینامیک محلول‌ها**

هفته	سرفصل
اول	مقدمه و مروری بر قوانین ترمودینامیک (قانون اول، دوم و سوم ترمودینامیک)
دوم	کمیتهای مولی جزئی
سوم	کمیتهای امتزاج
چهارم	محلول‌های ایده آل
پنجم	خواص ترمودینامیکی محلول‌های ایده آل
ششم	محلول‌های رقیق ایده آل
هفتم	خواص ترمودینامیکی محلول‌های ایده آل
هشتم	محلول‌های غیرایده آل
نهم	فعالیتها و ضرایب فعالیت
دهم	توابع اضافی
یازدهم	پتانسیل شیمیایی در محلول‌های الکترولیت
دوازدهم	نظریه دبای-هوکل برای محلول‌های الکترولیت
سیزدهم	خواص کولیگاتیو
چهاردهم	ترمودینامیک سیستمهای الکتروشیمیایی
پانزدهم	نمودار فاز سیستم دو جزئی
شانزدهم	نمودار فاز سیستم دو جزئی

دانشگاه شهید بهشتی ۱۳۳۸
معاونت آموزشی

ارزشیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون‌های نهایی		پروژه
		نوشتاری	عملکردی	
دارد	دارد	دارد		

ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

منابع اصلی:

1 . Levine Ira. Physical Chemistry, McGraw-Hill Education Pvt. Ltd (2013).
2 . Atkins, P., and J. de Paula. Physical Chemistry. 7th ed., W.H. Freeman and Company, (2001).
3 . Castellan, G. Physical Chemistry. 3rd ed. Reading, MA: Addison-Wesley (1983).

دانشگاه شهید بهشتی
۱۳۳۸
معاونت آموزشی
کد (۲۰۰)

سرفصل درس: طیف سنجی مولکولی پیشرفته					
عنوان درس به فارسی: طیف سنجی مولکولی پیشرفته	تعداد واحد:۳	نوع واحد	تخصصی	تعداد واحد نظری:۳	دروس پیش‌نیاز: ندارد
	تعداد ساعت: ۴۸			تعدا واحد عملی:	
عنوان درس به انگلیسی: Advanced Molecular Spectroscopy	آموزش تکمیلی عملی: ☐ دارد ■ندارد سفر علمی ☐ کارگاه ☐ آزمایشگاه ☐ سمینار ☐				
	سال ارائه درس:				

اهداف درس: آشنایی و تسلط بر مباحث پیشرفته طیف سنجی مولکولی

سرفصل درس: طیف سنجی مولکولی پیشرفته

هفته	سرفصل
اول	مروری بر شیمی کوانتومی
دوم	توزیع بولتزمان – قانون بیر-لامبرت
سوم	انتقالات مجاز و غیر مجاز – اصل فرانک کوندون
چهارم	نظریه ی میدانهای کوانتومکانیکی
پنجم	برهمکنش نور – ماده و حل معادله ی دینامیکی کوانتومی در تصویر برهم کنش
ششم	طیف سنجی جذبی – نشر خودبخودی و نشر تهییجی (لیزر)
هفتم	طیف سنجی چند فوتونی
هشتم	طیف سنجی چرخشی – ارتعاشی – الکترونی مولکول ها
نهم	اثرات غیر آدیاباتیک روی طیف چرخشی- ارتعاشی- الکترونی مولکولها
دهم	نظریه گروههای تقارن هندسی و جابه جایی- وارونی
یازدهم	کاربرد نظریه ی گروه در مکانیک کوانتومی
دوازدهم	تقارن شیوه های ارتعاشی مولکولهای چنداتمی
سیزدهم	جفت شدن تکانه های زاویه ای در مولکول دو اتمی
چهاردهم	حالتهای هوند
پانزدهم	جمله های طیفی مولکول های دو اتمی
شانزدهم	طیف سنجی رزونانس مغناطیس هسته ها

معاونت آموزشی
کد (۲۰۰)

ارزشیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون‌های نهایی		پروژه
		نوشتاری	عملکردی	
دارد	دارد	دارد		

ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

منابع اصلی:

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).

منابع کمکی:

1. Alan Vincent, Molecular Symmetry and Group Theory (Second Edition), John Wiley &Sons, LTD (2010).

دانشگاه شهید بهشتی ۱۳۳۸
معاونت آموزشی
کد (۲۰۰)

سرفصل درس: شیمی کوانتوم پیشرفته

عنوان درس به فارسی: شیمی کوانتوم پیشرفته	تعداد واحد:۳	نوع واحد	تخصصی	تعداد واحد نظری:۳	دروس پیش‌نیاز: ندارد
	تعداد ساعت: ۴۸			تعدا واحد عملی:	
عنوان درس به انگلیسی: Advanced Quantum Chemistry	آموزش تکمیلی عملی: ☐ دارد ■ندارد سفر علمی ☐ کارگاه ☐ آزمایشگاه ☐ سمینار ☐				
	سال ارائه درس:				

اهداف درس: آشنایی و تسلط بر مباحث پیشرفته شیمی کوانتومی

سرفصل درس: شیمی کوانتوم پیشرفته

هفته	سرفصل
اول	مروری بر اصول موضوعه مکانیک کوانتومی
دوم	توابع موجی و عملگرهای سیستمهای چند الکترونی
سوم	عملگرها و عناصر ماتریسی
چهارم	مقدمه‌ای بر کوانتیزیشن کانونیک (second quantization)
پنجم	تقریب هارتری-فاک
ششم	همبستگی الکترونی
هفتم	روشهای پسا هارتری-فاک
هشتم	نظریه تابع چگال از مدل توماس فرمی تا نظریه هوهنبرگ-کوهن
نهم	معادلات کوهن-شام
دهم	معادلات نسبیتی دیراک و برهم کنش اسپین-اوربیتال
یازدهم	توابع تبادلی-همبستگی (Exchange-Correlation functionals)
دوازدهم	حل معادلات کوهن-شام
سیزدهم	انواع توابع پایه
چهاردهم	نظریه بلاخ و معادله شرودینگر برای سیستمهای متناوب
پانزدهم	ساختارهای نواری الکترونی
شانزدهم	خلاصه ای بر کدهای موجود در شیمی محاسباتی

دانشگاه شهید بهشتی ۱۳۳۸
معاونت آموزشی کد (۲۰۰)

ارزشیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون‌های نهایی		پروژه
		نوشتاری	عملکردی	
دارد	دارد	دارد		

ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

منابع اصلی:

1. Sholl, David, and Janice A. Steckel. Density functional theory: a practical introduction. John Wiley & Sons (2011).
2. Attila Szabo, Neil S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory, McGraw-Hill (2012).
3. R. Martin, Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods, Cambridge (2004).
4. T.Oinishi, Quantum Computational Chemistry: Modelling and Calculation for Functional Materials, Springer, 2017.

دانشگاه شهید بهشتی
۱۳۳۸
معاونت آموزشی
کد (۲۰۰)

سرفصل درس: شیمی سطح و کاتالیست					
عنوان درس به فارسی: شیمی سطح و کاتالیست	تعداد واحد:۳	نوع واحد	تخصصی	تعداد واحد نظری:۳	دروس پیش‌نیاز: ندارد
	تعداد ساعت: ۴۸			تعدا واحد عملی:	
عنوان درس به انگلیسی: Surface Chemistry and Catalyst	آموزش تکمیلی عملی: ☐ دارد ■ندارد سفر علمی ☐ کارگاه ☐ آزمایشگاه ☐ سمینار ■				
	سال ارائه درس:				

اهداف درس: **آشنائی و تسلط بر اصول نظری شیمی سطح و کاتالیست‌های هتروژن**

سرفصل درس: شیمی سطح و کاتالیست

هفته	سرفصل
اول	مقدمه ای بر مفاهیم شیمی سطح
دوم	برهمکنش شیمیایی مولکول و جامد
سوم	فرآیندهای کاتالیزوری و انواع کاتالیزورها
چهارم	مدل های جذب سطحی، ایزوترم لانگمیر و اثبات معادلات
پنجم	ایزوترم BET و اثبات معادلات
ششم	تعیین مساحت سطح فلزی با استفاده از روش جذب حجم سنجی
هفتم	کاتالیزورها و واکنش های آنها
هشتم	ویژگی های کاتالیزورهای ناهمگن
نهم	تهیه کاتالیزورها (موارد مورد استفاده در ساخت کاتالیزور)
دهم	روش های مختلف برای تهیه کاتالیزورها
یازدهم	عملیات لازم برای ساخت کاتالیزور
دوازدهم	خواص فیزیکی و شیمیایی کاتالیزورها
سیزدهم	تفسیر شیمیایی عدد اکتان و عوامل موثر بر آن
چهاردهم	واکنش های کاتالیزوری و کاربرد صنعتی آنها
پانزدهم	ارائه سمینار توسط دانشجویان
شانزدهم	ارائه سمینار توسط دانشجویان

دانشگاه شهید بهشتی ۱۳۳۸
معاونت آموزشی کد (۲۰۰)

ارزشیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون‌های نهایی		پروژه
		نوشتاری	عملکردی	
دارد	دارد	دارد		

ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

منابع اصلی:

1 . Richard C .Ropp, Solid State Chemistry, Elsevier Science (2003).
2 . D. P. Woodruff and T. A. Delchar, Modern Techniques of Surface Science. (1994).
3 . R. Vanselow, R. Howe, Chemistry and Physics of Solid State, Springer Series in Chemical Physics.(2013).
4 . Guido Busca, Heterogeneous Catalytic Materials. Solid State Chemistry, Surface Chemistry and Catalytic Behavior, Elsevier. (2014).
5 . Moore, Elaine A,; Smart, Lesley, Solid state Chemistry; an introduction, CRC press. (2012).
6. پیروی، م.ح. شیمی سطح و کاتالیستهای صنعتی، انتشارات دانشگاه شهید بهشتی ۱۳۹۲.

دانشگاه شهید بهشتی
۱۳۳۸
معاونت آموزشی
کد (۲۰۰)

سرفصل درس: طیف سنجی لیزری

عنوان درس به فارسی: طیف سنجی لیزری	تعداد واحد:۳	نوع واحد	تخصصی	تعداد واحد نظری:۳	دروس پیش‌نیاز: ندارد
عنوان درس به انگلیسی: Laser Spectroscopy	تعداد ساعت: ۴۸			تعدا واحد عملی:	
آموزش تکمیلی عملی: ☐ دارد ■ندارد سفر علمی ☐ کارگاه ☐ آزمایشگاه ☐ سمینار ■					
سال ارائه درس:					

اهداف درس: آشنایی و تسلط بر مباحث پیشرفته لیزر و طیف سنجی لیزر و کاربردهای آن در شیمی

سرفصل درس: طیف سنجی لیزری

هفته	سرفصل
اول	زیر بنای کوانتمی لیزر
دوم	تاثیر متقابل نور و ماده
سوم	حل معادله زمانی شرودینگر
چهارم	حل معادله زمانی شرودینگر
پنجم	ضرایب انیشتنی جذب و نشر و نشر القایی
ششم	ضریب بهره
هفتم	حصول وارونگی جمعیت
هشتم	نوسان کننده نوری
نهم	ضریب بهره آستانه
دهم	مدهای لیزر
یازدهم	عملکرد لیزرهای عایق دپ شده
دوازدهم	عملکرد لیزرهای نیمه هادی
سیزدهم	عملکرد لیزرهای گازی
چهاردهم	عملکرد لیزرهای مایع(رزینه ای)
پانزدهم	خواص تابش لیزر
شانزدهم	سمینار دانشجویان

معاونت آموزشی
کد (۲۰۰)

ارزشیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون‌های نهایی		پروژه
		نوشتاری	عملکردی	
دارد	دارد	دارد		

ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

منابع اصلی:

1. Andrews, D. L., Lasers in Chemistry, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1997).
2. Levine, I.N., Molecular Spectroscopy, Wiley(1979).
3. Laurence, C. L., The Laser Book: A New Technology of Light, Prentice Hall (1986).
4. Wilson, J., Hawkes, J. F. B., Lasers, principles and applications, Prentice Hall (1987).
5. Demtröder, W., Laser Spectroscopy 1: Basic Principles, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2014).

معاونت آموزشی
کد (۳۰۰)

سرفصل درس: **سینتیک شیمیایی محلول‌ها**

عنوان درس به فارسی: سینتیک شیمیایی محلول‌ها	تعداد واحد:۳	نوع واحد	تخصصی	تعداد واحد نظری:۳	دروس پیش‌نیاز: ندارد
	تعداد ساعت: ۴۸			تعدا واحد عملی:	
عنوان درس به انگلیسی: Chemical Kinetics of Solutions	آموزش تکمیلی عملی: ☐ دارد ■ندارد سفر علمی ☐ کارگاه ☐ آزمایشگاه ☐ سمینار ☐				
	سال ارائه درس:				

اهداف درس: **آشنایی و تسلط بر مباحث پیشرفته سینتیک شیمیایی محلول‌ها**

سرفصل درس: **سینتیک شیمیایی محلول‌ها**

هفته	سرفصل
اول	مقدمه و مروری بر مفاهیم اولیه سینتیک شیمیایی (سرعت واکنش، قوانین سرعت و ...)
دوم	سینتیک واکنش‌های بنیادی
سوم	سینتیک واکنش‌های پیچیده
چهارم	مکانیزم واکنش
پنجم	نظریه های سینتیکی: تئوری برخورد
ششم	نظریه های سینتیکی: تئوری کمپلکس فعال
هفتم	اثر ایزوتوپی
هشتم	واکنش در محلول: اثر حلال بر سرعت واکنش
نهم	واکنش‌های یونی در محلول: مدل تک کره ای
دهم	واکنش‌های یونی در محلول: مدل دو کره ای
یازدهم	اثر قدرت یونی محلول برسرعت واکنش: معادله دبای-هوکل
دوازدهم	اثر فشار برسرعت واکنش در محلول: مفهوم فشار درونی و انرژی چسبندگی
سیزدهم	مدلهای کیفی واکنش در محلول
چهاردهم	واکنش‌های تحت کنترل نفوذ
پانزدهم	واکنش‌های تک مولکولی
شانزدهم	سینتیک واکنش‌های آنزیمی

معاونت آموزشی
کد (۲۰۰)

ارزشیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون‌های نهایی		پروژه
		نوشتاری	عملکردی	
دارد	دارد	دارد		

ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

منابع اصلی:

1 . Laidler K. J. Chemical kinetics, New York, Mc Graw-Hill Book Company (1965).
2 . Levine Ira. Physical Chemistry McGraw-Hill Education (2013).
3 . Houston, P. Chemical Kinetics and Reaction Dynamics, McGraw-Hill (2001).
4 . Steinfeld, J.I, Francisco, J.S, Hase, W.L, Chemical kinetics and dynamics, Prentice Hall (1998).

دانشگاه شهید بهشتی ۱۳۴۸
معاونت آموزشی
کد (۲۰۰)

سرفصل درس: شیمی محاسباتی پیشرفته

عنوان درس به فارسی: شیمی محاسباتی پیشرفته	تعداد واحد:۳	نوع واحد	تخصصی	تعداد واحد نظری:۳	دروس پیش‌نیاز: ندارد
	تعداد ساعت: ۴۸			تعدا واحد عملی:	
عنوان درس به انگلیسی: Advanced Computational Chemistry	آموزش تکمیلی عملی: ☐ دارد ■ندارد سفر علمی ☐ کارگاه ☐ آزمایشگاه ☐ سمینار ☐				
	سال ارائه درس:				

اهداف درس: آشنایی و تسلط بر مباحث پیشرفته شیمی محاسباتی

سرفصل درس: شیمی محاسباتی پیشرفته

هفته	سرفصل
اول	توابع چگالی الکترونی و حفره (hole)
دوم	نظریه ماده چگال و معادلات کوهن شام
سوم	روشهای عددی برای حل معاده کوهن-شام
چهارم	مروری بر توابع تعادلی- همبستگی (exchange-correlation functional)
پنجم	مغناطیس و برهم کنش الکترون-الکترون
ششم	توابع بلاخ و سیستمهای بلوری
هفتم	موجهای تخت و شبه پتانسیل ها
هشتم	سوپرسل : سطح , سطوح مشترک, فنونها, نقص در بلورها
نهم	روش های محاسباتی در مکانیک آماری
دهم	شبیه سازی مونت کارلو
یازدهم	شبیه سازی دینامیک مولکولی تعادلی
دوازدهم	نمونه گیری چتری (Umbrella Sampling)
سیزدهم	معادلات دیفرانسیلی کاتوره ای
چهاردهم	شبیه سازی دینامیک مولکولی غیرتعادلی (حرکت براونی)
پانزدهم	کاربرد نوفه ی سفید و نوفه ی رنگی در شبیه سازی سیستم های تعادلی و دور از تعادل
شانزدهم	اثرات کوانتومی در شبیه سازی کریستال ها

۱۳۲۸
معاونت آموزشی
کد (۲۰۰)

ارزشیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون‌های نهایی		پروژه
		نوشتاری	عملکردی	
دارد	دارد	دارد		

ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه:

منابع اصلی:

1. Sholl, David, and Janice A. Steckel. Density functional theory: a practical introduction. John Wiley & Sons (2011).
2. Attila Szabo, Neil S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory, McGraw-Hill (1989).
3. R. Martin, Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods, Cambridge University Press (2004).
4. D. Frenkel and B. Smit, Understanding Molecular Simulation, Academic Press (2002)
5. Frank Jensen, Introduction to computational chemistry, John Wiley and Sons (2017).

معاونت آموزشی
کد (۲۰۰)

سرفصل درس: سمینار

عنوان درس به فارسی: سمینار	تعداد واحد:۱	نوع واحد	تخصصی	تعداد واحد نظری:۱	دروس پیش‌نیاز: ندارد
	تعداد ساعت: ۱۶			تعدا واحد عملی:	
عنوان درس به انگلیسی: Seminar	آموزش تکمیلی عملی: ☐ دارد ■ندارد سفر علمی ☐ کارگاه ☐ آزمایشگاه ☐ سمینار ☐				
	سال ارائه درس:				

اهداف درس:

ارائه سمینار در زمینه های بنیادی یا کاربردی.

موضوع توسط دانشجو انتخاب و به تایید استاد راهنما و مسؤول برگزاری سمینار خواهد رسید.

معاونت آموزشی
کد (۲۰۰)