جمهوری اسلامی ایران

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری

شورای عالی برنامه ریزی آموزشی

برنامه درسی رشته

شیمی

Chemistry

مقطع دکتری تخصصی

گرایش

Physical Chemistry	شیمی فیزیک

گروه علوم پایه

پیشنهادی دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان

باسمه تعالی

نام رشته: شیمی **عنوان گرایش: شیمی فیزیک**

گروه تحصیلی: علوم پایه **دوره تحصیلی: دکتری تخصصی**

زیرگروه تحصیلی: شیمی **نوع مصوبه: بازنگری**

پیشنهادی: دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان **تاریخ تصویب: ۱۴۰۲/۰۴/۱۸**

برنامه درسی بازنگری شده دوره دکتری تخصصی رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک، در جلسه شماره ۱۷۲ تاریخ ۱۴۰۲/۰۴/۱۸ کمیسیون برنامه‌ریزی درسی، محتوا و سرفصل رشته‌های تحصیلی به شرح زیر تصویب شد:

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

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

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

ماده چهار- این برنامه درسی از شروع سال تحصیلی ۱۴۰۳-۱۴۰۲ به مدت ۵ سال قابل اجرا است و پس از آن، در صورت تشخیص کارگروه تخصصی مربوطه، نیاز به بازنگری دارد.

دکتر رضا نقی‌زاده
مدیر کل دفتر برنامه ریزی آموزش عالی
و دبیر کمیسیون

دکتر قاسم عموعابدینی
معاون آموزشی و رئیس کمیسیون

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
شورای عالی برنامه‌ریزی آموزش عالی

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

برنامه درسی رشته

شیمی گرایش شیمی فیزیک

PHYSICAL CHEMISTRY

مقطع دکتری تخصص

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

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

برنامه درسی رشته

شیمی گرایش شیمی فیزیک

PHYSICAL CHEMISTRY

مقطع دکتری تخصص

پیشنهادی دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان

تهیه‌کنندگان (به ترتیب حروف الفبا):

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

فصل اول

مشخصات کلی برنامه درسی

الف) مقدمه

دوره دکتری تخصصی بالاترین سطح آموزش دانشگاهی در مقطع تحصیلات تکمیلی است که دانشجویان این دوره علاوه بر آشنایی با مسائل و چالش‌های ملی با چالش‌های بین‌المللی نیز درگیر شده و در عین حال که به تحصیل دروس نظری و انجام پژوهش‌های خود در سطح عالی و مرزهای دانش پرداخته و با کسب تخصص و تجربیات لازم بدنبال بومی‌سازی راه حل‌ها هستند که به کمک آن می‌توان به توسعه پایدار چه در سطح ملی و چه در سطح بین‌المللی دست یافت. در این راستا، توجه به شیمی فیزیک بدلیل ماهیت بین رشته‌ای و نگرش بنیادی آن به مسائل نه تنها در علوم پایه حائز اهمیت است، بلکه از هر دو جنبه‌ی آموزشی و پژوهشی، تدریس دروس مرتبط با این شاخه از شیمی و به کارگیری آنها در انجام فعالیت‌های تحقیقاتی بنیادی-کاربردی، در پیشبرد سایر رشته‌های علمی و مهندسی همچون نانوفناوری و علم مواد، الکترونیک مولکولی و نوری، انرژی، آب و سوخت، مسائل زیستی و دارویی، و سایر زمینه‌های مرتبط، از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است.

ب) مشخصات کلی، تعریف و اهداف

بدلیل ماهیت بین رشته‌ای و در عین حال رویکرد بنیادین شیمی فیزیک، برنامه دوره‌ی دکترا طیف وسیعی از پدیده‌ها و مسائل علمی و کاربردی را شامل می‌گردد. برای تربیت نیروهای متخصص و رسیدن به این هدف، دروس تخصصی (الزامی و اختیاری) به همراه برنامه سمینار و انجام رساله دکتری با تقویت پایه‌ی علمی به ایجاد تخصص‌های مورد نظر در بین دانش‌آموختگان این رشته منجر می‌گردد.

پ) ضرورت و اهمیت

تربیت گنجینه‌های انسانی متخصص در مقطع دکتری تخصصی با پایه علمی قوی و توانمندی در انجام پژوهش‌های بنیادی و کاربردی بین‌رشته‌ای از ضرورت‌های مورد نیاز صنایع مختلف، پژوهشگاه‌ها و موسسات علمی/آموزشی/پژوهشی و فناوری کشور است. رسیدن به یک توسعه‌ی پایدار و رفع مشکلات ملی-بین المللی نیازمند تربیت نیروهای متخصص و تامین منابع انسانی برای پیشرفت کشور در سطوح مختلف است.

ت) تعداد و نوع واحدهای درسی

جدول (۱)- توزیع واحدها (شیمی فیزیک)

نوع دروس	تعداد واحد
تخصصی	۶
اختیاری	۶
رساله	۲۴
جمع	۳۶

ث) مهارت، توانمندی و شایستگی دانش‌آموختگان

مهارت‌ها، شایستگی‌ها و توانمندی‌های ویژه	دروس مرتبط
توانمندی حل مسایل پیچیده به شکل بنیادی	دروس تخصصی
حل مسائل زیستی/دارویی با رویکرد پایه‌ای	دروس مباحث نوین و موضوعات ویژه – رساله
حل مسائل زیست‌محیطی، آب، انرژی و سوخت	دروس مباحث نوین و موضوعات ویژه – رساله
توانایی پیش‌بینی و سنتز کاتالیست‌های جدید و کارامد	دروس مباحث نوین و موضوعات ویژه – رساله
شبیه‌سازی و محاسبات کوانتمی سامانه‌های پیچیده	دروس تخصصی و رساله
مهارت در انجام پژوهش‌های تجربی و نظری	دروس تخصصی و رساله
مهارت در تحقیقات الکترودی، خوردگی و نیم‌رسانا	دروس تخصصی و رساله
مهارت تدریس و آموزش درس‌های گرایش	دروس نظری و سمینار (دستیار آموزشی)

ج) شرایط و ضوابط ورود به دوره

متقاضیان این مقطع، دانش‌آموختگان کارشناسی ارشد در یکی از رشته‌های علوم پایه یا فنی و مهندسی هستند که اسامی آنها از طریق آزمون متمرکز دکتری تخصصی توسط سازمان سنجش به دانشگاه (به شکل چند برابر ظرفیت) معرفی شده و اسامی پذیرفته شدگان نهایی پس از انجام مصاحبه علمی از طریق سازمان سنجش اعلام می‌گردد. ورود به دوره دکترای تخصصی شیمی فیزیک همچنین از طریق آیین‌نامه پذیرش استعدادهای درخشان (انجام مصاحبه علمی از داوطلب برای ورود به مقطع دکتری بدون نیاز به شرکت در آزمون کتبی سازمان سنجش) امکان پذیر است.

فصل دوم

جدول عناوین و مشخصات دروس

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

ردیف	عنوان درس	تعداد واحد	نوع واحد			تعداد ساعات		پیش نیاز / هم نیاز
			نظری	عملی	نظری - عملی	نظری	عملی	
۱.	بیو شیمی فیزیک دکتری	۲	*			۳۲		ندارد
۲.	ترمودینامیک آماری دکتری ۱	۲	*			۳۲		ترمودینامیک آماری کارشناسی ارشد
۳.	خوردگی پیشرفته دکتری	۲	*			۳۲		الکتروشیمی پیشرفته (با توافق استاد)
٤.	شیمی کوانتومی ۳	۲	*			۳۲		شیمی کوانتومی ۱

* اخذ ۶ واحد از دروس جدول ۳ الزامی است.

جدول (٤)- عنوان و مشخصات کلی دروس اختیاری شیمی گرایش شیمی فیزیک (به ترتیب حروف الفبا)

ردیف	عنوان درس	تعداد واحد	نوع واحد			تعداد ساعات		پیش نیاز / هم نیاز
			نظری	عملی	نظری - عملی	نظری	عملی	
.۱	ترمودینامیک آماری دکتری ۲	۲	*			۳۲		ترمودینامیک آماری دکتری ۱
.۲	سمینار	۲	*			۳۲		-
.۳	سینتیک شیمیایی دکتری	۲	*			۳۲		سینتیک پیشرفته (با توافق استاد)
.٤	مباحث نوین در شیمی فیزیک ۱ (دکتری)	۲	*			۳۲		با نظر استاد درس
.٥	مباحث نوین در شیمی فیزیک ۲ (دکتری)	۲	*			۳۲		با نظر استاد درس
.٦	موضوعات ویژه (اصول نظریه‌ی تابعی چگالی)	۲	*			۳۲		با نظر استاد درس
.۷	موضوعات ویژه (شبیه سازی دینامیک مولکولی)	۲	*			۳۲		ترمودینامیک آماری ۱، با نظر استاد درس
.۸	موضوعات ویژه (شیمی نظری و محاسباتی پیشرفته: کاربرد مبانی)	۲	*			۳۲		شیمی کوانتومی ۱ و ترمودینامیک آماری ۱، با نظر استاد درس
.۹	موضوعات ویژه (شیمی نظری و محاسباتی پیشرفته: مبانی)	۲	*			۳۲		شیمی کوانتومی ۱ و ترمودینامیک آماری ۱، با نظر استاد درس

* گذراندن ۳ درس (به همراه سمینار) از دروس جدول ۴ الزامی است.

فصل سوم

ویژگی‌های دروس

سرفصل دروس

عنوان درس به فارسی:	بیو شیمی فیزیک دکتری		
عنوان درس به انگلیسی:	Biophysical Chemistry (PhD)	نوع درس و واحد	
دروس پیش‌نیاز:	-	پایه ☐	نظری ☒
دروس هم‌نیاز:		تخصصی ☒	عملی ☐
تعداد واحد:	۲	اختیاری ☐	نظری-عملی ☐
تعداد ساعت:	۳۲	رساله / پایان‌نامه ☐	

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

هدف کلی:

اهداف ویژه:

پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

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

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

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

- سایر پلیمرهای بیولوژیکی: پلی‌ساکاریدها، تجمع‌های شکل گرفته بین انواع مختلف ماکرومولکول‌ها، گلیکوپروتئین‌ها، نوکلئوپروتئین‌ها، لیپیدها در غشاهای بیولوژیکی، برهمکنش‌های پروتئین-لیپید

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

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

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

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

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

فعالیت‌های کلاسی در طول نیم‌سال ... درصد

آزمون پایان نیم‌سال ... درصد

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

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

۱) Cantor, C. R.; Schimmel, P. R. *Biophysical Chemistry- Part I*: The conformation of biological macromolecules; W. H. Freeman and Company: New York, ۱۹۸۰.

۲) Allen, J. P. *Biophysical Chemistry*; Wiley-Blackwell: Oxford, ۲۰۰۸.

۳) Walla, P. J. *Modern Biophysical Chemistry*; Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KgaA: Weinheim, ۲۰۰۹.

عنوان درس به فارسی:	ترمودینامیک آماری دکتری ۱		نوع درس و واحد	
عنوان درس به انگلیسی:	Statistical Thermodynamics Ph.D. I			
دروس پیش‌نیاز:	ترمودینامیک آماری کارشناسی ارشد		پایه ☐	نظری ☒
دروس هم‌نیاز:			تخصصی ☒	عملی ☐
تعداد واحد:	۲		اختیاری ☐	نظری-عملی ☐
تعداد ساعت:	۳۲		رساله / پایان‌نامه ☐	

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

هدف کلی: آشنایی با مبانی بنیادی ترمودینامیک آماری سامانه های دارای برهمکنش های کوانتومی یا کلاسیکی

اهداف ویژه: ارایه آمار کوانتومی فرمی-دیراک، بوزی-انیشتین و آمار بولتزمن، مبانیترمودینامیک آماری گازهای حقیقی، جامدات و مایعات

پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

آمار کوانتومی: مرور اجمالی بر آمارهای فرمی-دیراک، بوزی-انیشتین و آمار بولتزمن و شرایط صادق بودن هر آمار، تعیین تابع تقسیم گرند-کانونیکال و معادله حالت ذرات فرمی و بوزی ایده ال، استخراج توابع ترمودینامیکی بر حسب تابع تقسیم برای ذرات کوانتومی، بررسی اثرات کوانتومی ضعیف، قوی و شدید (بر اساس مقدار λ) برای ذرات فرمی و بوزی و تعیین برخی خواص فیزیکی و ترمودینامیکی در این شرایط.

گازهای حقیقی: استخراج معادله حالت ویریال، بیان چگونگی تبدیل مساله N- ذره ای به مساله ۱، ۲، ۳ و چند ذره ای، بررسی کارایی معادله حالت ویریال در مطالعه گازهای حقیقی، معرفی ضریب دوم و سوم ویریال، بیان تقریب جمع پذیر جفت گونه، تعیین ضرایب ویریال بر حسب توابع f- مایر، معرفی مدل های پتانسیل مختلف و ارزیابی آنها، اهمیت سهم غیر جمع پذیر پتانسیل.

بلورها (جامدات): مدل گلوله و فنر برای توصیف شبکه بلور و ارتعاش سیستم، استفاده از مختصات نرمال، پیوسته در نظر گرفتن فرکانس ها و معرفی تابع دانسیته فرکانس ها ($g(\nu)$)، بیان توابع ترمودینامیکی بر حسب $g(\nu)$، استفاده از مدل های انیشتین و دبای برای استخراج تابع $g(\nu)$، ارزیابی دو مدل در رابطه با قانون T^3 و ظرفیت گرمایی بلورها، اصل حالت های متناظر و قانون دولانگ و پتیت.

سیالات چگال (مایعات): بیان پیچیدگی بررسی سیالات چگال از دیدگاه مولکولی، کارآیی معادله حالت ویریال برای سیالات چگال، معرفی توابع توزیع و پیش بینی رفتار سیالات چگال به کمک توابع توزیع، معرفی تابع توزیع شعاعی (تابع همبستگی جفت،$g(r)$) ، اهمیت تابع $g(r)$ و تفسیر فیزیکی آن، استخراج روابط توابع ترمودینامیکی و مکانیکی (انرژی داخلی و فشار) بر حسب $g(r)$ با در نظر گرفتن تقریب جمع پذیر جفت گونه، مقایسه $g(r)$ سیال واقعی و سیال کره سخت، اهمیت نیروهای دافعه در ساختار مایع.

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

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

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

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

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

۱) Donald A. McQuarrie, *Statistical Mechanics*, Harper's chemistry series, New York, ۱۹۷۶.

۲) Terrell L. Hill, *An Introduction to Statistical Thermodynamics*, Dover, New York, ۱۹۸۶.

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

عنوان درس به فارسی:	خوردگی پیشرفته دکتری			
عنوان درس به انگلیسی:	Advanced Corrosion (PhD)		نوع درس و واحد	
دروس پیش‌نیاز:	الکتروشیمی پیشرفته (با توافق استاد)		پایه ☐	نظری ☒
دروس هم‌نیاز:			تخصصی ☒	عملی ☐
تعداد واحد:	۲		اختیاری ☐	نظری-عملی ☐
تعداد ساعت:	۳۲		رساله / پایان‌نامه ☐	

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

هدف کلی: یادگیری مفاهیم بنیادی و پیشرفته خوردگی

اهداف ویژه: تئوری و مکانیسم خوردگی و بازدارندگی، حفاظت فلزات، خوردگی‌های زیستی و غیر زیستی، لایه روئین و خواص نیم‌رسانایی و ....

پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

- مقدمه‌ای بر خوردگی و اهمیت آن. فرایندهای آندی و کاتدی خوردگی. هیدوژن و خسارات (تُردی) هیدروژنی. تک بلور، چندبلور و مرز دانه. روش‌های اندازه‌گیری سرعت خوردگی (کاهش جرم، پلاریزاسیون پتانسیوپویش، امپدانس و ...).
- رابطه‌ی تافل و استخراج آن. رابطه‌ی استرن-گری و استخراج آن. خوردگی و ارتباط آن با الکتروشیمی. تعیین نظری و تجربی جریان و پتانسیل خوردگی.
- نظریه‌ی بازدارندگی خوردگی. بازدارنده‌ها. اثر تزاید. روئین‌کننده‌ها. لایه‌ی رویین و خوردگی حفره‌ای. مکانیسم خوردگی حفره‌ای و بازدارندگی آن. اثر یون کلرید. پلاریزاسیون آندی چرخه‌ای. اثر سرعت جاروب پتانسیل.
- نیم‌رساناهای اکسیدی، خواص رسانایی، ساختار نوار و خوردگی نوری.
- حفاظت آندی و کاتدی. نمودار اوانس و ارتباط آن با تافل. جمع‌کننده‌ی اکسیژن. خوردگی و نظریه‌ی امپدانس الکتروشیمیایی. رابطه‌ی نفوذی واربورگ (استخراج رابطه برای لایه‌ی نفوذی محدود و نامحدود).
- خوردگی میکروبی (متاثر از فعل و انفعالات ریزموجودات). پدیده‌ی تنفس و خوردگی. اثرات بازدارندگی و خوردگی ناشی از ریزموجودات. روش‌های الکتروشیمیایی مطالعات این سیستم‌ها.

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

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

فعالیت‌های کلاسی در طول نیم‌سال	۴۰ درصد
آزمون پایان نیم‌سال	۶۰ درصد

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

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

۱) P. Marcus, *Corrosion Mechanism in Theory and Practice*, CRC Press (۲۰۱۲).

۲) N. Perez, Electrochemistry and Corrosion Science, Springer (۲۰۱۶)

۳) E. McCafferty, *Surface Chemistry of Aqueous Corrosion Processes*, Springer (۲۰۱۵).

۴) B. J. Little, J. S. Lee, *Microbiologically Induced Corrosion*, Wiley (۲۰۰۷).

۵) J.O'M. Bockris, Amulya K.N. Reddy and Maria Gaboa-Aldeco, *Modern Electrochemistry*, Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York, Vol. ۲B (۲۰۰٤).

عنوان درس به فارسی:	شیمی کوانتومی ۳		
عنوان درس به انگلیسی:	Quantum Chemistry III	نوع درس و واحد	
دروس پیش‌نیاز:	شیمی کوانتومی ۱	پایه ☐	نظری ☒
دروس هم‌نیاز:		تخصصی ☒	عملی ☐
تعداد واحد:	۲	اختیاری ☐	نظری-عملی ☐
تعداد ساعت:	۳۲	رساله / پایان‌نامه ☐	

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

هدف کلی: آشنایی باکاربر دهای مکانیک کوانتومی در طراحی سامانه های الکترونیکی

اهداف ویژه: تربیت دانشجویان برای استفاده از مفاهیم بنیادی در تحقیق

پ) مباحث یا سرفصل‌ها: مقدمه: انگیزه ی اصلی، مکانیک کلاسیک (نوسانگر هماهنگ یک بعدی، نوسانگر هماهنگ در مولکول های دو اتمی، زنجیر تک اتمی خطی، زنجیر خطی دو اتمی)، الکترومغناطیس کلاسیک (الکترو استاتیک، الکترودینامیک)، تمرین بر اساس برنامه نویسی در محیط متلب. رویکرد مکانیک کوانتومی: تداخل و پراکندگی نور، تابش جسم سیاه و کوانتش نور، اثر فتو الکتریک و ذرات فوتون، ارتباط کوانتومی ایمن، ار تباط بین کوانتش فوتونی با کوانتش ذرات دیگر، پراکندگی و تداخل الکترون ها، چه هنگامی یک ذره موج است؟، معادله ی موج شرودینگر، توصیف تابع موجی الکترون در فضای آزاد، بسته ی موج الکترون و پراکندگی، اتم هیدروژن، جدول تناوبی عناصر، ساختار بلوری، خاصیت های الکترونی توده ی نیمه هادی هاو ساختارهای ناهمگون، تمرین بر اساس برنامه نویسی در محیط متلب.

کاربرد معادله ی موج شرودینگر: تاثیر ناپیوستگی در تابع موج و شیب آن، نرمالیزاسیون تابع موج و کاملیت، تقارن وارونگی در پتانسیل، پتانسیل چاه مستطیلی با سد انرژی بینهایت، حل عددی معادله ی شرودینگر، انتشار جریان،جریان در پتانسیل چاه مستطیلی با سد انرژی بینهایت ، انتشار جریان به واسطه ی امواج متحرک، تبهگنی به عنوان نتیجه ی تقارن، حالت های مقیددر سه بعد و تبهگنی ویژه مقدارها، سد پتانسیل متناهی متقارن، ترابر و انعکاس حالت های نامقید، پراکندگی از سد های پتانسیل پله ای متفاوت، احتمال دانسیته ی جریانبرای پراکندگی در پله ها، تطابق امپدانس برای ترابرد واحد از پله ی پتاسیل، تونل زنی ذرات، کاهش اندازه ی ترانزیستورهای CMOS و تونل زنی الکترونی، ترانزیستور الکترونی ناتعادلی، تمرین بر اساس برنامه نویسی در محیط متلب.

انتشار الکترون: روش ماتریس انتشار، برنامه برای محاسبه ی احتمال عبور، تقارن بازگشت زمانی، ابقا جریان و ماترسی انتشار، سد پتانسیل مستطیلی، احتمال عبور برای سد پتانسیل مستطیلی، عبور به صورت تابع انرژی، عبور رزنانسی، تونل زنی رزنانسی، ترانزیستور دو قطبیبه سد تونل زنی رزنانسی، تونل زنی رزنانسی بین دو چاه پتانسیل، نوارهای انرژی در پتانسیل تناوبی، نظریه ِ بلوخ، کاربرد ماتریس انتشار در سامانه هایی با پتانسیل تناوبی، تقریب تنگبست، اندازه حرکت بلور و جرم موثر الکترون، دیگر کاربرد های مهندسی: تقریب WKB، تونل زنی از میان سد انرژی بالا با پهنای محدود، تمرین بر اساس برنامه نویسی در محیط متلب.

لیزرهابر پایه نیمه هادی: نشر خودبخودی و القایی، جذب و ارتباط آن با نشر خود بخودی، نشر نوری بر اساس قاعده ی طلایی فرمی گولدن، افزایش نوری در حضور پراکندگی الکترون، طراحی دیود لیزری، حفره ی نوری، طول عمر فوتونی، لیزر FP، معادله های سرعت دیودی لیزری نیمه هادی، روش های حل عددی معادله ها،نوفه در نشر نوری دیود لیزری، دلیل کار آمدی مدل، تمرین بر اساس برنامه نویسی در محیط متلب.

ت) راهبردهای تدریس و یادگیری متناسب با محتوا و هدف: استفاده از روش های آموزش ماشینی و برنامه نویسی

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

فعالیت‌های کلاسی در طول نیم‌سال	۳۰	درصد
آزمون نیم سال	۳۵	درصد
آزمون پایان نیم‌سال	۳۵	درصد

ج) ملزومات، تجهیزات و امکانات مورد نیاز برای ارائه: کامپیوتر مجهز به کتابخانه های محاسباتی

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

۱) Applied quantum mechanics, A. F. J. Levi, Cambridge University Press, ۲۰۰۶.

۲) Quantum physics for scientists and technologists, Paul Sanghera, John Wiley & Sons, ۲۰۱۱.

عنوان درس به فارسی:	ترمودینامیک آماری دکتری ۲		نوع درس و واحد	
عنوان درس به انگلیسی:	Statistical Thermodynamics Ph.D. II			
دروس پیش‌نیاز:	ترمودینامیک آماری دکتری ۱		پایه ☐	نظری ☒
دروس هم‌نیاز:			تخصصی ☐	عملی ☐
تعداد واحد:	۲		اختیاری ☒	نظری-عملی ☐
تعداد ساعت:	۳۲		رساله / پایان‌نامه ☐	

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

هدف کلی: آشنایی با نظریه های ترمودینامیک آماری جامدات و مایعات، ارتباط بین ترمودینامیک آماری و روش شبیه سازی دینامیک مولکولی

اهداف ویژه: ارایه مباحث کاربردی ترمودینامیک آماری جامدات و مایعات و استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی برای مطالعه ی آنها

پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

ادامه بررسی بلورها (جامدات): نقص های شبکه ای، پدیده بانظمی-بی نظمی، معرفی و استفاده از مدل آیزینگ، روش حل ماتریس مشخصه، روش های تقریبی (تقریب براگ ویلیام، شبه شیمیایی و کیکوچی)، معرفی معادله حالت برای مطالعه جامدات و محاسبه خواص آنها، معادله حالت تیت-مارنگان برای جامدات تحت فشار، استخراج معادله حالت به روش نیمه تجربی.

ادامه مطالعه سیالات چگال (مایعات): معرفی نظریه سلول و نظریه ساختارهای بامعنی برای مطالعه سیالات، معرفی نظریه اختلال و نظریه وردشی برای محاسبه خواص ترمودینامیکی مایعات، مروری بر نظریه های اختلال ارایه شده (BH و WCA) قواعد نیمه تجربی حاکم بر سیالات چگال نظیر قاعده همدماهای خطی (LIR)، معرفی معادله های حالت برای سیالات چگال نظیر معادله حالت واندروالس و معادله حالت LIR.

معرفی اصول و کاربرد روش شبیه سازی دینامیک مولکولی: ارتباط روش شبیه سازی با ترمودینامیک آماری و استفاده از آن در تعیین خواص میکروسکوپی و ماکروسکوپی سامانه های پیچیده

بررسی پیشرفت ها و پژوهش های نو در عرصه ترمودینامیک آماری: مروری بر مقالات جدید چاپ شده با موضوع ترمودینامیک آماری و کاربردهای آن.

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

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

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

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

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

۱) Donald A. McQuarrie, *Statistical Mechanics*, Harper's chemistry series, New York, ۱۹۷۶.

۲) Terrell L. Hill, *An Introduction to Statistical Thermodynamics*, Dover, New York, ۱۹۸۶.

۳) S. Alavi, Molecular simulations: fundamentals and practice. John Wiley & Sons, ۲۰۲۰.

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

عنوان درس به فارسی:	سینتیک شیمیایی دکتری		
عنوان درس به انگلیسی:	Chemical Kinetics (PhD)	نوع درس و واحد	
دروس پیش‌نیاز:	سینتیک شیمیایی (با توافق استاد)	پایه ☐	نظری ☒
دروس هم‌نیاز:		تخصصی ☐	عملی ☐
تعداد واحد: ۲		اختیاری ☒	نظری-عملی ☐
تعداد ساعت: ۳۲		رساله / پایان‌نامه ☐	

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

هدف کلی: آشنایی با موضوعات پیشرفته در مبحث سینتیک شیمیایی

اهداف ویژه:

پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

مروری بر مفاهیم پیشرفته و قوانین بنیادی حاکم بر سینتیک پدیده‌های شیمیایی. واکنش‌های شیمیایی، دیدگاه سطح انرژی پتانسیل و نظریه‌ی حالت گذار. فرایندهای مبتنی بر انتقال بار در ناحیه‌ی فصل مشترک و دینامیک حاکم بر آنها. اثر محیط بر سرعت واکنش و مدل پیوسته‌ی قطبیده. سطح و کاتالیزورهای ناهمگن. رویکرد مکانیسمی (نظری/تجربی) در بررسی فرایندهای شیمیایی. واکنش‌های پلیمریزاسیونی، رادیکالی و پدیده‌های فوتوشیمیایی/الکتروشیمیایی. واکنش جامد-سیال. تکنیک‌های پیشرفته در مطالعات سینتیکی فرایندهای شیمیایی.

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

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

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

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

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

۱) J. I Steinfeld, J.S. Francisco and W.L. Hase, *Chemical Kinetics and Dynamics*, Prentice Hall, Englewood Cliffs (۱۹۹۹).
۲) K. J. Laidler, *Chemical Kinetics*, Harper and Row, New York (۱۹۸۷).
۳) S. K. Upadhyay, *Chemical Kinetics and Reaction Dynamics*, Springer, New York (۲۰۰۶).
٤) P. L. Brozenic, *Chemical Kinetics and Process Dynamics in Aquatic Systems*, Lewis Pub., Boca Raton (۲۰۰۲).
٥) P. L. Houston, *Chemical Kinetics and Reaction Dynamics*, Dover Publication Inc., New York (۲۰۰۱).
٦) H. Schemalzried, *Chemical Kinetics of Solids*, Wiley-VCH, Weinheim (۱۹۹٤).
۷) P. W. Atkins, J. D. Paula, J. Keeler, *Atkins' Physical Chemistry*, ۱۱th ed., Oxford Univ. Press, Oxford (۲۰۱۸).

عنوان درس به فارسی:	مباحث نوین در شیمی فیزیک ۱ (دکتری)		نوع درس و واحد	
عنوان درس به انگلیسی:	New Topics in Physical Chemistry I (PhD)			
دروس پیش‌نیاز:	با نظر استاد درس		پایه ☐	نظری ☒
دروس هم‌نیاز:			تخصصی ☐	عملی ☐
تعداد واحد:	۲		اختیاری ☒	نظری-عملی ☐
تعداد ساعت:	۳۲		رساله / پایان‌نامه ☐	

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

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

اهداف ویژه:

پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

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

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

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

فعالیت‌های کلاسی در طول نیم‌سال	۶۰ درصد
آزمون پایان نیم‌سال	۴۰ درصد

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

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

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

عنوان درس به فارسی:	مباحث نوین در شیمی فیزیک ۲ (دکتری)		نوع درس و واحد	
عنوان درس به انگلیسی:	New Topics in Physical Chemistry II (PhD)		پایه ☐	نظری ☒
دروس پیش‌نیاز:	با نظر استاد درس		تخصصی ☐	عملی ☐
دروس هم‌نیاز:			اختیاری ☒	نظری-عملی ☐
تعداد واحد:	۲		رساله / پایان‌نامه ☐	
تعداد ساعت:	۳۲			

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

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

اهداف ویژه:

پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

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

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

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

فعالیت‌های کلاسی در طول نیم‌سال	۶۰ درصد
آزمون پایان نیم‌سال	۴۰ درصد

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

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

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

عنوان درس به فارسی:	موضوعات ویژه (اصول نظریه‌ی تابعی چگالی)		نوع درس و واحد	
عنوان درس به انگلیسی:	Special Topics (Principles of DFT)			
دروس پیش‌نیاز:	شیمی کوانتومی ۱ و ۲		پایه ☐	نظری ☒
دروس هم‌نیاز:			تخصصی ☐	عملی ☐
تعداد واحد:	۲		اختیاری ☒	نظری-عملی ☐
تعداد ساعت:	۳۲		رساله / پایان‌نامه ☐	

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

هدف کلی: یادگیری و کاربرد نظریه ی تابعی چگالی

اهداف ویژه:

پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

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

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

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

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

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

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

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

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

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

فعالیت‌های کلاسی در طول نیم‌سال ... درصد

آزمون پایان نیم‌سال ... درصد

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

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

۱) Richard M. Martin, *Electronic Structure*, Cambridge University Press, ۲۰۰۴.

۲) Robert G. Parr and Weitao Yang, *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*, Oxford University Press, ۱۹۸۹.

۳) Jorge Kohanoff, , Electronic Structure Calculations for Solids and Molecules: Theory and Computational Methods , Cambridge university press, ۲۰۰۶.

عنوان درس به فارسی:	**موضوعات ویژه (شبیه سازی دینامیک مولکولی)**		
عنوان درس به انگلیسی:	**Special Topics (Molecular Dynamics Simulation)**		**نوع درس و واحد**
دروس پیش‌نیاز:	ترمودینامیک آماری ۱، با نظر استاد درس		پایه ☐ نظری ☒
دروس هم‌نیاز:			تخصصی ☐ عملی ☐
تعداد واحد:	**۲**		اختیاری ☒ نظری-عملی ☐
تعداد ساعت:	**۳۲**		رساله / پایان‌نامه ☐

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

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

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

پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

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

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

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

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

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

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

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

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

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

۱) M. P. Allen and D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*, Oxford University Press, Oxford, ۱۹۸۷

۲) Daan Frenkel and Berend Smit, *Understanding Molecular Simulation*, ۲nd edition, Academic Press, San Diego, ۲۰۰۲.

۳) J. M. Haile, *Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods*, Wiley, New York, ۱۹۹۲.

٤) Andrew R. Leach, *Molecular Modeling: Principles and Applications*, Prentice-Hall, Essex, England, ۱۹۹٦.

٥) S. Alavi, Molecular simulations: fundamentals and practice. John Wiley & Sons, ۲۰۲۰.

عنوان درس به فارسی:	**موضوعات ویژه (شیمی نظری و محاسباتی پیشرفته: مبانی)**

عنوان درس به انگلیسی:	Special Topics (Advanced Theoretical and Computational Chemistry: Basics)		نوع درس و واحد
دروس پیش‌نیاز:	شیمی کوانتومی ۱ و ترمودینامیک آماری ۱، با نظر استاد درس		پایه ☐ نظری ☒
دروس هم‌نیاز:			تخصصی ☐ عملی ☐
تعداد واحد:	۲		اختیاری ☒ نظری-عملی ☐
تعداد ساعت:	۳۲		رساله / پایان‌نامه ☐

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

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

اهداف ویژه:

پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

بخش محاسبات کوانتومی ساختار الکترونی: ۱. اصول نظریه تابعیت چگالی: ایده اولیه برای کاربرد های تعادلی و غیر تعادلی، فرمولاسیون نظریه ی تابعیت چگالی بر پایه ی توابع موج تخت بزرگ مقیاس: موازی سازی و کاربرد.

۲. چگونگی حل معادله ی شرودینگر بسیار ذره ای به طور صحیح در صورتی که مقیاس بندی مناسب با توجه به اندازه ی سیستم انجام شده است (مونت کارلوی کوانتومی).روش های خوشه ی جفت شده برای مولکول های بزرگ و سیستم های توسعه یافته

۳. الکترون های قویا هم بسته : نظریه ی ساختار نواری نرمال شده و روش های شیمی کوانتومی. روش های بر پایه ی تجزیه انرژی برای محاسبه ی انرژی کل، ساختار ها و حواص مولکولی سیستم های بزرگ در سطح روش های آغازین.

۴. اسپینترونیک مولکولی ۵. دینامیک مولکولی کوانتومی (بر پایه روش های آغازین) ۶. روش تنگ بست

۷. روش ONIOM برای سیستم های بزرگ. ۸. کاربرد شبکه های عصبی در حل معادله ی شرودینگر مبانی و اصول اولیه

۹. استخراج الگو از داده های محاسباتی شیمی کوانتومی با کمک شبکه ی عصبی مصنوعی مبانی و اصول اولیه

بخش اصول شبیه سازی دینامیک مولکولی:

۱. مقدمه ای بر مکانیک آماری: اشاره به اصول و مفاهیم پایه مکانیک آماری (احتمال، تابع تقسیم، مجموعه) که روش های شبیه سازی مولکولی بر مبنای آنها استفاده می شوند،تعیین خواص ماکروسکوپی با اعمال متوسط گیری های زمانی در مجموعه های آماری، افت و خیز کمیت های ترمودینامیکی، اساس و جایگاه کلی شبیه سازی دینامیک مولکولی کلاسیکی و شبیه سازی مونت کارلو در بین روشهای محاسباتی، توانمندی ها و محدودیت های روش شبیه سازی دینامیک مولکولی. ۲. اصول شبیه سازی دینامیک مولکولی: به کارگیری مکانیک کلاسیک برای سیستم های بسیار ذره ای

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

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

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

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

۱. چ) فهرست منابع پیشنهادی:

۱. Materials Research by Means of Multiscale Computer Simulation, MRS Bulletin, ۲۰۰۱.
۲. Atomistic Theory and Simulation of Fracture, MRS Bulletin, ۲۰۰۰.
۳. A. P. Sutton: Electronic Structure of Materials, Clarendon Press, ۱۹۹٤.
۴. D. G. Pettifor: Bonding and Structure of Molecules and Solids, Clarendon Press, ۱۹۹٦.
۵. W. A. Harrison: Tight-Binding Methods, Surface Science ۳۰۰, ۲۹۸, ۱۹۹٤.
۶. M. E. J. Newman and G. T. Barkema: Monte Carlo Methods in Statistical Physics, Clarendon Press, ۱۹۹۹.
۷. M. P. Allen and D. J. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Oxford University Press, Oxford, ۱۹۸۷.
۸. Daan Frenkel and Berend Smit, Understanding Molecular Simulation, ۲nd edition, Academic Press, San Diego, ۲۰۰۲.
۹. J. M. Haile, Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods, Wiley, New York, ۱۹۹۲.
۱۰. Andrew R. Leach, Molecular Modeling: Principles and Applications, Prentice-Hall, Essex, England, ۱۹۹٦.
۱۱. K.T. Schütt , M. Gastegger, A. Tkatchenko, K.-R. Müller & R.J. Maurer, Unifying machine learning and quantum chemistry with a deep neural network for molecular wave- functions, Nature Communications, https://doi.org/۱۰,۱۰۳۸/s٤١٤٦٧-٠١٩-١٢٨٧٥-٢.
۱۲. S. Alavi, Molecular simulations: fundamentals and practice. John Wiley & Sons, ۲۰۲۰.

عنوان درس به فارسی:	**موضوعات ویژه (شیمی نظری و محاسباتی پیشرفته: کاربرد مبانی)**		**نوع درس و واحد**
عنوان درس به انگلیسی:	**Special Topics (Advanced Theoretical and Computational Chemistry: Application of Basics)**		**پایه ☐ نظری ☒**
دروس پیش‌نیاز:	**شیمی کوانتومی ۱ و ترمودینامیک آماری ۱**، با نظر استاد درس		**تخصصی ☐ عملی ☐**
دروس هم‌نیاز:			**اختیاری ☒ نظری-عملی ☐**
تعداد واحد:	**۲**		**رساله / پایان‌نامه ☐**
تعداد ساعت:	**۳۲**		

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

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

اهداف ویژه: کسب مهارت های محاسباتی پیشرفته، آشنایی با برنامه های رایانه ای مرتبط با شیمی نظری و محاسباتی

پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

بخش محاسبات کوانتومی (روش های تحلیل تابع موج): ۱. روش های به دست آوردن تابع موج سیستم های بسیار الکترونی ، معرفی روش های تقریبی برای حل معادله ی شرودینگر و استخراج تابع موج، معرفی یک نرم افزارو کار با آن و استخراج تابع موج (به عنوان مثال نرم افزار گوسین، کوانتو اسپرسو ، ان-دبلیو-کم)، ۲. روش اتم در مولکول برای تحلیل تابع موج، معرفی نظریه ی کوانتومی اتم در مولکول، روش های لاگرانژین در شیمی، خواص پاسخ دهی اتمی، توپولوژی و خواص دانسیته ی الکترونی در جامدات،کاربرد نظریه ی اتم در مولکول برای بررسی جایگاه های فعال در روی سطح، معرفی نرم افزار اتم در مولکول به عنوان ابزاری که مباحث اتم در مولکول به صورت عملی تجربه می شود. ۳. تجزیه و تحلیل اربیتال طبیعی پیوندی، معرفی و زمینه ینظری روش تجزیه وتحلیل اربیتال طبیعی پیونری:ماتریس چگالی، اربیتال های طبیعی مستقر، اربیتال های طبیعی غیر مستقر، ساختارهای رزنانس طبیعی و وزن آنها و غیره، پیوند های الکترواستاتیک و یونی، پیوند های مولکولی در عناصر جدول تناوبی با استفاده از اربیتال های طبیعی پیوندی، مزدوج شدن و فوق مزدوج شدن با استفاده از اربیتال های طبیعی پیوندی، معرفی نرم افزار NBO.۵ به عنوان ابزاری که تجزیه و تحلیل های اربیتال طبیعی پیوندی با آن ها امکان پذیر است. ۴. ترابرد کوانتومی، مفا هیم اولیه (گاز الکترونی همگن دو بعدی، خواص پایه، گاز الکترونی تبهگن و غیر تبهگن، مقیاس طولی و.....) ، ترابرد نفوذی، ترابرد بالستیک، افت و خیز در هدایت، اثر کوانتومی هال، اغتشاش در سیستم های مزوسکوپی، تصحیح کوانتومی برای هدایت، بدست آوردن فرمول لانداور، معرفی و کار با نرم افزار PWCOND که با استفاده از تابع موج سامانه های بس ذره ای ترابرد بالستیک را محاسبه می کند.برنامه نویسی پایتون در راستای به کار گیری شبکه های ی عصبی مصنوعی، مثال نوعی استخراج رابطه ی بین ساختار و فعالیت با استفاده از شبکه ی عصبی مصنوعی

بخش شبیه سازی دینامیک مولکولی: تعیین خواص سامانه های مختلف به کمک روش شبیه سازی و کاربردهای آن

۱. آنالیز نتایج شبیه سازی، محاسبه خواص و کاربردهای شبیه سازی: آشنایی با روش های محاسبه خواص از روی داده های خروجی شبیه سازی، برای نمونه: تعیین خواص ساختاری فازهای مختلف مواد(توابع توزیع شعاعی)، تعیین خواص ترمودینامیکی سامانه ها در حالت های مختلف (توده ای یا نانومتری)، تعیین رفتار دینامیکی مولکول ها و خواص وابسته به زمان با استفاده از توابع همبستگی زمانی، نحوه محاسبه ضریب نفوذ و بهبود آماری متوسط گیری ها، محاسبات مربوط به انرژی آزاد، تحلیل نتایج و ارزیابی خطاها در شبیه سازی دینامیک مولکولی، معرفی مقالات کاربردی شبیه سازی در زمینه های مختلف، افزایش مهارت در انجام محاسبات علمی با استفاده از قابلیت های سیستم عامل لینوکس، برنامه نویسی رایانه ای جهت آنالیز و محاسبه خواص. ۲. آشنایی عملی با برخی نرم افزارهای متداول شبیه سازی دینامیک مولکولی: بیان ساختار کلی نرم افزار، معرفی فایل های ورودی و خروجی برنامه شبیه سازی با مثال عملی، آشنایی با نحوه اجرای برنامه ها و ابزارهای کمکی جهت آنالیز و محاسبه خواص، معرفی الگوریتم های مورد استفاده و قابلیت های نرم افزاری.

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

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

فعالیت‌های کلاسی در طول نیم‌سال ۵۰ درصد

آزمون پایان نیم‌سال ۵۰ درصد

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

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

۱. F. Jensen "Introduction to Computational Chemistry" *John Wiley & Sons* (۱۹۹۹).

۲. Edited by Cherif F. Matta and Russell J. Boyd "The Quantum Theory of atoms in Molecules from Solid state to DNA and Drug Design" John Wiley & Sons (۲۰۰۷).

۳. Frank Weinhold and Clark Landis "Valency and bonding: A natural bond orbital donor–acceptor perspective" Cambridge (۲۰۰۵).

۴. S. Datta "Quantum transport: atom to transistor" Cambridge (۲۰۰۵).

۵. M. P. Allen and D. J. Tildesley, "Computer Simulation of Liquids", Oxford University Press, Oxford, (۱۹۸۷).

۶. Daan Frenkel and Berend Smit, "Understanding Molecular Simulation", ۲nd edition, Academic Press, San Diego, (۲۰۰۲).

۷. J. M. Haile, "Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods", Wiley, New York, (۱۹۹۲).

۸. Andrew R. Leach, "Molecular Modeling: Principles and Applications", Prentice-Hall, Essex, England, (۱۹۹۶).

۹. S. Raschka and V. Mirjalili, Python Machine Learning – Second Edition: Machine Learning and Deep Learning with Python, scikit-learn, and TensorFlow, ۳rd edition ۲۰۲۰.

۱۰. S. Alavi, Molecular simulations: fundamentals and practice. John Wiley & Sons, ۲۰۲۰.