



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



برنامه درسی رشته

نانوشیمی

Nanochemistry

مقطع کارشناسی ارشد ناپیوسته



گروه علوم پایه

پیشهادی دانشگاه خوارزمی



بیت

نام رشته: نانوشیمی

عنوان گرایش: -

گروه: علوم پایه

دوره تحصیلی: کارشناسی ارشد ناپیوسته

کارگروه تخصصی: شیمی

نوع مصوبه: بازنگری

پیشنهادی: دانشگاه خوارزمی

تاریخ تصویب: ۱۴۰۱/۰۳/۰۱

برنامه درسی دوره کارشناسی ارشد ناپیوسته رشته نانوشیمی، در جلسه شماره ۱۶۵ تاریخ ۱۴۰۱/۰۳/۰۱ کمیسیون برنامه ریزی آموزشی به شرح زیر تصویب شد:

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

ماده دو - این برنامه درسی، بر اساس برنامه درسی رشته نانوشیمی مصوب جلسه ۵۵۴ تاریخ ۱۳۸۴/۰۵/۰۸ شورای عالی برنامه ریزی بازنگری شده است.

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

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

دکتر قاسم عموعابدینی

ریس کمیسیون برنامه ریزی آموزشی





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



دانشگاه خوارزمی

برنامه درسی رشته

نانوشیمی

NANOCHEMISTRY

مقطع کارشناسی ارشد

تهیه‌کنندگان:

دکتر مجید ماستری فراهانی

دکتر مریم محمدی کیش

عضو هیات علمی دانشگاه خوارزمی

عضو هیات علمی دانشگاه خوارزمی



جدول تغییرات

ردیف	در برنامه قبلی	در برنامه بازنگری شده
۱.	شیمی نظری ساختارهای نانو	شیمی نظری ساختارهای نانو
۲.	روش های سنتز مواد نانوساختار	روش های سنتز مواد نانوساختار
۳.	شناسایی و تعیین ساختار نانومواد	شناسایی و تعیین ساختار نانومواد
۴.	شیمی سطح و حالت جامد	شیمی سطح و حالت جامد
۵.	شیمی سل-ژل	شیمی سل-ژل
۶.	-	نانوالکتروشیمی
۷.	-	فتوشیمی
۸.	نانوفناوری پلیمرها	نانوفناوری پلیمرها
۹.	-	نانوفناوری در تصفیه آب و پساب
۱۰.	-	کاربرد نانومواد معدنی در انرژیهای نو
۱۱.	کاربرد سونوشیمی در سنتز مواد نانو	کاربرد سونوشیمی در سنتز مواد نانو
۱۲.	نانومواد معدنی	نانومواد معدنی
۱۳.	محاسبات کوانتومی مواد نانو ساختار	محاسبات کوانتومی مواد نانو ساختار

فصل اول

مشخصات کلی برنامه درسی



ضرورت بازنگری در برنامه دوره کارشناسی ارشد نانوشیمی به دلیل سرعت روزافزون در پیشرفتهای علمی انکارناپذیر است. به نظر می‌رسد که برنامه آموزشی رشته نانوشیمی به بازنگری اساسی در هر چندسال یکبار نیاز دارد. بر اساس آئین نامه واگذاری اختیارات برنامه ریزی و تجدیدنظر در دوره‌های آموزشی مصوب شورای عالی برنامه‌ریزی، تدوین برنامه آموزشی به منظور تفکیک رشته‌های تخصصی در دستور کار دانشکده شیمی قرار گرفته است. برنامه حاضر دوره کارشناسی ارشد رشته نانوشیمی شامل مشخصات زیر است.

ب) مشخصات کلی، تعریف و اهداف

دوره کارشناسی ارشد رشته نانوشیمی دوره ای است که دانشجو با گذراندن آن با آن با اصول تحقیق آشنا شده و آموزش های لازم برای نحوه تعریف و بررسی تحقیقی یک موضوع را می آموزد و شامل مجموعه‌ای هماهنگ از فعالیتهای آموزشی و پژوهشی است. در این دوره ابداع، نوآوری و گسترش دانش نانوشیمی از اهمیت خاص برخوردار بوده و رسالت ویژه دانشجویان را تشکیل می‌دهد. هدف از دوره تربیت نیروی انسانی متخصص و کارآمد در رشته علوم و فناوری نانو می باشد.

پ) ضرورت و اهمیت

ضرورت و اهمیت این دوره تربیت پژوهشگر، انجام پژوهش و توسعه مرزهای دانش در زمینه علوم و فناوری نانو است.

ت) تعداد و نوع واحدهای درسی

جدول (۱) - توزیع واحدها

تعداد واحد	نوع دروس
۹	دروس تخصصی
۱۲	دروس اختیاری
۱	سمینار
۶	رساله / پایان نامه
۲۸	جمع

۱. دروس اصلی دوره کارشناسی ارشد رشته نانوشیمی ۹ واحد نظری است که ترجیحاً در نیمسال اول تحصیل انتخاب می‌شود.
۲. دروس اختیاری شامل مجموعه ای از دروس نظری است که دانشجو می تواند از جدول مربوط انتخاب نماید. در صورت تشخیص استاد راهنما دانشجو میتواند ۳ واحد از دروس اختیاری را از سایر دروس دوره های کارشناسی ارشد و دکترا انتخاب نماید.
۳. سمینار: این سمینار الزامی بوده و بر پایه جمع آوری مقاله های پژوهشی و مروری در یکی از موضوعات علوم و فناوری نانو است به نحوی که قدرت تجزیه و تحلیل، گردآوری و تدوین یک مطلب علمی را در دانشجو بارور نماید. سمینار یک در حدود یک ساعت ارائه شده و دانشجو به سئوالات حضار پاسخ میدهد.

۴. پایان نامه: انتخاب استاد راهنما و موضوع پایان نامه حداکثر در آغاز نیمسال دوم صورت میگیرد. در انتخاب موضوع پایان نامه نکات زیر را در نظر بگیرید:
 - الف) موضوع پایان نامه به نحوی انتخاب شود که به گسترش مرزهای دانش در زمینه علوم و فناوری نانو کمک نماید.
 - ب) پایان نامه دارای جامعیت باشد به نحوی که در زمینه تحقیقی که دانشجو انجام می دهد دستاورد قابل ملاحظه ای کسب نماید.



ث) مهارت، توانمندی و شایستگی دانش آموختگان

- الف- همکاری در زمینه‌های علوم و فناوری نانو در مؤسسات پژوهشی کشور
- ب- تربیت افرادی که دارای تفکری خلاق و مستقل باشند و به روشهای پیشرفته پژوهش در زمینه علوم و فناوری نانو احاطه داشته باشند.
- ج- توانایی درک مشکلات علمی جامعه و حل آنها با استفاده از فناوری نانو را داشته باشند.

مهارت‌ها، شایستگی‌ها و توانمندی‌های ویژه	دروس مرتبط
توانایی ارائه روش‌های مناسب جهت تهیه نانومواد مختلف	روش‌های سنتز مواد نانو ساختار، نانومواد معدنی
توانایی معرفی نانومواد مناسب برای کاربردهای مختلف	نانوفناوری در تصفیه آب و پساب، نانوفناوری پلیمرها، کاربرد نانومواد معدنی در انرژیهای نو
توانایی شناسایی نانومواد مختلف	شناسایی و تعیین ساختار نانومواد، شیمی سطح و حالت جامد
مهارت‌ها، شایستگی‌ها و توانمندی‌های عمومی	دروس مرتبط

ج) شرایط و ضوابط ورود به دوره

- دارا بودن مدرک کارشناسی رشته‌های علوم و مهندسی
 - پذیرفته شدن در آزمون ورودی
- تبصره:** دانشجویانی که رشته مقطع قبلی آنان با این رشته غیر مرتبط می‌باشد بایستی تا ۱۲ واحد را به عنوان دروس جبرانی از میان دروس دوره قبل این رشته را در نیمسال اول تا دوم بگذرانند. انتخاب این دروس به تشخیص گروه آموزشی دانشگاه / موسسه می‌باشد و بایستی شامل دروسی باشد که دانش پایه و اصلی این رشته را در بر بگیرد. تعداد واحدهای جبرانی نیز به تشخیص گروه آموزشی دانشگاه / موسسه و بر مبنای میزان ارتباط رشته با رشته دوره قبلی دانشجو می‌باشد.



فصل دوم

جدول عناوین و مشخصات دروس

جدول (۳) - عنوان و مشخصات کلی دروس تخصصی گرایش نانوشیمی

ردیف	عنوان درس	تعداد واحد (۱-۳ واحد)	نوع واحد			تعداد ساعات		پیش نیاز	هم نیاز
			نظری	عملی	نظری - عملی	نظری	عملی		
۱.	روش های سنتز مواد نانوساختار	۳	■			۴۸		ندارد	
۲.	شناسایی و تعیین ساختار نانومواد	۳	■			۴۸		ندارد	
۳.	فتوشیمی	۳	■			۴۸		ندارد	

جدول (۴) - عنوان و مشخصات کلی دروس اختیاری گرایش نانوشیمی

ردیف	عنوان درس	تعداد واحد (۱-۳ واحد)	نوع واحد			تعداد ساعات		پیش نیاز	هم نیاز
			نظری	عملی	نظری - عملی	نظری	عملی		
۱.	شیمی سطح و حالت جامد	۳	■			۴۸		ندارد	
۲.	شیمی سل-ژل	۳	■			۴۸		ندارد	
۳.	نانوالکتروشیمی	۳	■			۴۸		ندارد	
۴.	شیمی نظری ساختارهای نانو	۳	■			۴۸		ندارد	
۵.	نانوفناوری پلیمرها	۳	■			۴۸		ندارد	
۶.	نانوفناوری در تصفیه آب و پساب	۳	■			۴۸		ندارد	
۷.	کاربرد نانومواد معدنی در انرژیهای نو	۳	■			۴۸		ندارد	
۸.	کاربرد سونوشیمی در سنتز مواد نانو	۳	■			۴۸		ندارد	
۹.	نانومواد معدنی	۳	■			۴۸		ندارد	
۱۰.	محاسبات کوانتومی مواد نانو ساختار	۳	■			۴۸		ندارد	

*دانشجو می‌تواند ۳ واحد از واحدهای اختیاری خود را از بین سایر دروس کارشناسی ارشد رشته علوم و مهندسی با رعایت شرایط زیر انتخاب نماید:

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

ب- از دروس الزامی سایر رشته‌ها باشد (انتخاب دروس اختیاری سایر رشته‌ها مزاد بر حداقل واحدهای دوره کارشناسی ارشد بلامانع است).



فصل سوم

ویژگی‌های دروس

عنوان درس به فارسی: روشهای سنتز مواد نانوساختار		عنوان درس به انگلیسی: Synthesis methods of nanostructured materials	
نوع درس و واحد			
پایه ☐	نظری ☒	ندارد	
تخصصی ☒	عملی ☐		
اختیاری ☐	نظری-عملی ☐	۳	تعداد واحد:
رساله / پایان نامه ☐		۴۸	تعداد ساعت:

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

هدف کلی:

- آشنایی و تسلط بر اصول روش های سنتز مواد نانو ساختار

اهداف ویژه:

- آشنایی دانشجویان با تقسیم بندی نانومواد در شاخه های مختلف
- شناخت روشهای مختلف فیزیکی و شیمیایی سنتز نانومواد

پ) مباحث یا سرفصل ها:

- سنتز نانو ذرات از طریق هسته زایی همگن (سنتز نانو ذرات فلزی و نانوذرات نیمه رسانا)
- سنتز نانو ذرات از طریق هسته زایی ناهمگن (اصول هسته زایی ناهمگن نانوذرات مختلف)
- طبقه بندی روشهای ساخت نانو مواد
- تهیه نانومواد با روشهای شیمیایی
- تهیه نانومواد با روشهای فیزیکی
- تهیه نانومواد با روشهای مکانیکی
- سنتز ساختارهای هسته- پوسته، هیبریدهای آلی- معدنی
- سنتز گرافن، گرافن اکسید و گرافن اکسید کاهش یافته
- سنتز نقاط کوانتومی

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

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

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

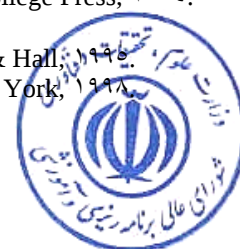
- | | |
|---------------------------------|---------|
| فعالیت های کلاسی در طول نیم سال | ۲۵ درصد |
| آزمون پایان نیم سال | ۷۵ درصد |

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

وسایل کمک آموزشی شامل ویدئو پروژکتور

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

- G. Cao, Nanostructures and nanomaterials: Synthesis, properties and application, Imperial College Press, ۲۰۰۴.
- J.W. Niemantsverdriet, Spectroscopy in catalysis, ۲nd Ed., Wiley-VCH, ۲۰۰۰.
- P.J. Haines, Thermal methods of analysis; principles, applications, and problems, Chapman & Hall, ۱۹۹۵.
- C. Suryanarayana; M. G. Norton, X-ray diffraction; a practical approach; Plenum Press, New York, ۱۹۹۸.



عنوان درس به فارسی: شناسایی و تعیین ساختار نانومواد		عنوان درس به انگلیسی: Characterization and structure determination of nanomaterials	
نوع درس و واحد			
پایه ☐	نظری ☒	ندارد	
تخصصی ☒	عملی ☐		
اختیاری ☐	نظری-عملی ☐	۳	تعداد واحد:
رساله / پایان نامه ☐		۴۸	تعداد ساعت:

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

هدف کلی:

- آشنایی و تسلط بر اصول روش‌های شناسایی و تعیین ساختار نانومواد

اهداف ویژه:

- آشنایی با روشهای مختلف شناسایی نانومواد
- توانمند کردن دانشجویان در ارائه روش شناسایی یک نانو ماده خاص

پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

- آنالیز سطح
- Auger, UPS, XPS, ESCA
- X-ray
- WAXS
- SAXS
- EXAFS
- XANES
- XRD
- XRF
- شناسایی ساختار با تکنیک‌های طیف سنجی رامان (نشری، انعکاسی، فوتو اکوستیک)، FT-IR
- روش‌های میکروسکوپ الکترونی: میکروسکوپی با نور و الکترون، الکترون‌ها و برهم کنش آن‌ها با نمونه، پراش الکترونی، SEM, TEM, STEM, EMA
- آنالیز شیمیایی با میکروسکوپ الکترونی، آنالیز تفکیک انرژی، آنالیز تفکیک طول موج، آنالیز پرتو ایکس نمونه های حجیم و نازک

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

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

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

- | | |
|---------------------------------|---------|
| فعالیت‌های کلاسی در طول نیم سال | ۲۵ درصد |
| آزمون پایان نیم سال | ۷۵ درصد |

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

وسایل کمک آموزشی شامل ویدئو پروژکتور

چ) فهرست منابع پیشنهادی:



Z. L. Wang, "Characterization of nanophase materials", Wiley-VCH, ۲۰۰۰.

J. W. Niemantsverdriet, Spectroscopy in Catalysis: An Introduction, Wiley-VCH, ۲۰۰۷.



عنوان درس به فارسی: فوتوشیمی		عنوان درس به انگلیسی: Photochemistry	
نوع درس و واحد			
پایه ☐	نظری ☒	ندارد	
تخصصی ☒	عملی ☐		
اختیاری ☐	نظری-عملی ☐	۳	تعداد واحد:
رساله / پایان نامه ☐		۴۸	تعداد ساعت:

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

هدف کلی:

- آشنایی و تسلط بر اصول فوتوشیمی

اهداف ویژه:

- آشنایی دانشجویان با خواص فتوشیمیایی ترکیبات مختلف
- کاربردهای فتوشیمی در فناوری های نوین

پ) مباحث یا سرفصل ها:

- مفاهیم مقدماتی فتوشیمی، ماهیت کوانتومی نور و ماده، حالت های الکترونی، مفهوم بازده کوانتومی
- جذب نور و حالت های برانگیخته الکترونی، اساس فیزیکی جذب نور توسط مولکولها، اصل فرانک-کاندن، قواعد انتخاب
- غیرفعال سازی فیزیکی حالت های برانگیخته، نمودار جابلونسکی، آسایش ارتعاشی، تبدیل درونی، گذار بین سیستمی، فلوئورسانس و فسفرسانس، طول عمر حالت برانگیخته
- فرایندهای تابشی حالت های برانگیخته، طیف سنجی فلوئورسانس، قاعده کاشا، عوامل موثر بر رفتار فلوئورسانس، فلوئورسانس مولکولی در شیمی تجزیه، فسفرسانس، فلوئورسانس تاخیری
- فرایندهای غیر تابشی درون مولکولی حالت های برانگیخته، قانون شکاف انرژی، قواعد ال ساید، اثر اتم سنگین
- فرایندهای فیزیکی بین مولکولی حالت های برانگیخته، فرایندهای خاموش سازی، اکسایمرها و اکسی پلکسها
- انتقال انرژی الکترونی بین مولکولی، مکانیسم انتقال انرژی الکترونی بین مولکولی، انتقال الکترون القا شده نوری، حساس سازی نوری.
- برخی جنبه های خواص شیمیایی حالت های برانگیخته، فتودینامیک تراپی، تولید اکسیژن یکتایی، فتوکاتالیز، سلولهای خورشیدی.

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

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

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

- | | |
|---------------------------------|---------|
| فعالیت های کلاسی در طول نیم سال | ۲۵ درصد |
| آزمون پایان نیم سال | ۷۵ درصد |

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

وسایل کمک آموزشی شامل ویدئو پروژکتور

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

- B. Wardle, Principles and Applications of Photochemistry, John Wiley and Sons, ۲۰۰۹.
- J.A. Barltrop and J.D. Coyle, Principles of photochemistry, John Wiley and Sons, ۱۹۷۹.
- V. Balzani, P. Ceroni, Al. Juris, Photochemistry and Photophysics: Concepts, Research, Applications, John Wiley and Sons, ۲۰۱۴.



عنوان درس به فارسی: شیمی سطح و حالت جامد		عنوان درس به انگلیسی: Surface and solid state chemistry	
نوع درس و واحد			
پایه ☐	نظری ☒	ندارد	
تخصصی ☐	عملی ☐		
اختیاری ☒	نظری-عملی ☐	۳	تعداد واحد:
رساله / پایان نامه ☐		۴۸	تعداد ساعت:

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

هدف کلی:

- آشنایی و تسلط بر اصول شیمی سطح و حالت جامد

اهداف ویژه:

- آشنایی دانشجویان با انواع جامدات معدنی و ساختار آنها به ویژه جامدات پر کاربرد
- آشنایی دانشجویان با برخی خواص مهم جامدات معدنی مانند نیم رساناها، ابررساناها و ترکیبات مغناطیسی

پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

- معرفی ساختارهای ساده بلوری: ساختارهای اولیه، تقارن و گروه‌های نقطه ای شبکه ها و سلول‌های واحد، جامدات بلوری، انرژی شبکه.
- صفحات بلوری در ساختارهای بلوری، تعیین اندیس های میلر
- اصول پراش اشعه ایکس، پراش از مواد بلوری و بی شکل، معادله شرر
- پیوند در جامدات و خواص الکترونی، نظریه نوار، رسانایی الکترونی، نیمه رساناها، نیمه رساناهای دوپه شده
- ژئولیت ها، خاک ها و ساختارهای مرتبط: تهیه ژئولیت ها، تعیین ساختار، خاک های معدنی دیگر
- خواص مغناطیسی، نفوذپذیری مغناطیسی، پارامغناطیس در کمپلکس های فلزی فلزات فرومغناطیس و ترکیبات آنتی فرومغناطیس، قطبش پذیری الکتریکی، بلور های پیزوالکتریک، اثر فروالکتریک
- ابررساناها: خواص مغناطیسی، ابررساناهای دمای بالا، کاربرد.
- جذب مولکول های روی سطح: معرفی جذب مولکولی، چگونگی اتصال مولکول ها به سطح، سینتیک جذب، هندسه و ساختار جاذب ها
- ایزوترمهای جذبی و انواع آنها، تفسیر ایزوترمهای جذبی مختلف، تعیید مساحت سطح و اندازه حفره

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

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

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

- | | |
|---------------------------------|---------|
| فعالیت های کلاسی در طول نیم سال | ۲۵ درصد |
| آزمون پایان نیم سال | ۷۵ درصد |

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

وسایل کمک آموزشی شامل ویدئو پروژکتور

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

- R.C. Ropp, Solid State Chemistry, Elsevier, ۲۰۰۳.
- J. W. Niemantsverdriet, Spectroscopy in Catalysis: An Introduction, Wiley-VCH, ۲۰۰۷.



۳. E.A. Moore, L.E. Smart, Solid State Chemistry: An introduction, CRC Press, ۲۰۱۲.



عنوان درس به فارسی:		شیمی سل ژل	
عنوان درس به انگلیسی:		Sol-gel chemistry	
دروس پیش نیاز:	ندارد	نوع درس و واحد	
دروس هم نیاز:		☐ پایه ☐ نظری	
تعداد واحد:	۳	☐ تخصصی ☐ عملی	
تعداد ساعت:	۴۸	☐ اختیاری ☐ نظری-عملی	
		رساله / پایان نامه	

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

هدف کلی:

- آشنایی و تسلط بر اصول و کاربردهای شیمی سل-ژل

اهداف ویژه:

- آشنایی دانشجویان با فرایند سل-ژل و کاربرد آن در سنتز مواد معدنی و نانومواد مهم و پر کاربرد
- کاربردهای فرایند سل-ژل در فراوری نانومواد معدنی و سرامیکها
-

پ) مباحث یا سرفصل ها:

- معرفی فرایند سل-ژل
- هیدرولیز و تراکم مواد غیر سیلیکاتی و سیلیکاتی (فلزات، واسطه، آلومینات-ها، ...)
- سیستم های بورات و سیلیکات-های آبی
- هیدرولیز و تراکم آلکو کسیدهای سیلیسیم، سیلیکات-های چند جزیی.
- ژلاتینه کردن (تئوری کلاسیک، مدل-های سینتیکی)
- تئوری تغییر شکل و جریان در ژل ها نیروهای موثر برای هم زدن، انتقال مایعات
- رئولوژی شبکه های متخلخل، تئوری تغییر شکل.
- خشک کردن (فشار خشک کردن، جلوگیری از شکستگی، لایه های نازک)

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

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

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

- | | |
|---------------------------------|---------|
| فعالیت های کلاسی در طول نیم سال | ۲۵ درصد |
| آزمون پایان نیم سال | ۷۵ درصد |

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

وسایل کمک آموزشی شامل ویدئو پروژکتور

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

- C.J. Brinker; G.W. Scherer, Sol-Gel Science, Academic Press, ۱۹۹۰.
- D.C. Bradley; R.C. Mehrotra; I.P. Rothwell; A. Singh, Alkoxo and Aryloxo Derivatives of Metals, Academic Press, ۲۰۰۱.
- L. Klein, M. Aparicio, A. Jitiano, Handbook of Sol-Gel science and technology, Springer, ۲۰۱۸.



عنوان درس به فارسی: نانوالکتروشیمی		عنوان درس به انگلیسی: Nanoelectrochemistry	
نوع درس و واحد			
پایه ☐	نظری ☒	ندارد	
تخصصی ☐	عملی ☐		
اختیاری ☒	نظری-عملی ☐	۳	تعداد واحد:
رساله / پایان نامه ☐		۴۸	تعداد ساعت:

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

هدف کلی:

- آشنایی با مبانی نظری و روش های نانوالکتروشیمی

اهداف ویژه:

- آشنایی دانشجویان با خواص الکتروشیمیایی ترکیبات مختلف
- کاربردهای الکتروشیمی در فناوری های نوین

پ) مباحث یا سرفصل ها:

- مبانی نظری نانوالکتروشیمی (مفاهیم مقدماتی الکتروشیمی و ترکیب های نانو ساختار)
- انتقال الکترون در سیستم های نانوالکتروشیمی؛ اثرهای لایه دوگانه الکتریکی بر انتقال الکترون و یون در مقیاس نانو).
- سیستم های نانوالکتروشیمی (الکتروشیمی تک لایه های خود مونتاژ شده)
- الکتروشیمی خوشه های تک لایه پوشیده شده؛ انتقال الکترون و واکنش های ردوکس در لوازم الکترونیکی ملکولی حالت جامد.
- رویدادهای تصادفی در سیستم های نانوالکتروشیمی
- کاربردهای نانو ساختارهای کربنی و نانوذرات فلزی در الکتروشیمی
- الکتروشیمی نانوزیستی: پروتئین ها؛ آنزیم ها و زیست حسگرها.
- روش های نانوالکتروشیمیایی (نانوالکترودها؛ سیستم های الکتروشیمیایی با طراحی میکرو؛ پتانسیومتری در مقیاس نانو).

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

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

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

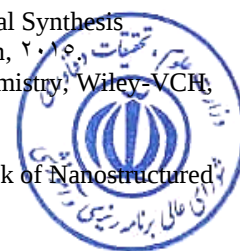
- | | |
|---------------------------------|---------|
| فعالیت های کلاسی در طول نیم سال | ۲۵ درصد |
| آزمون پایان نیم سال | ۷۵ درصد |

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

وسایل کمک آموزشی شامل ویدئو پروژکتور

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

- M.V. Mirkin, S. Amemiya, Nanoelectrochemistry, CRC Press, ۲۰۱۵.
- M. Aliofkhazraei, A.S.H. Makhlof, Handbook of Nanoelectrochemistry: Electrochemical Synthesis Methods, Properties, and Characterization Techniques, Springer International Publication, ۲۰۱۹.
- A. Eftekhari, R.C. Alkire, Y. Gogotsi, P. Simon, Nanostructured Materials in Electrochemistry, Wiley-VCH, ۲۰۰۸.
- W. Plieth, Electrochemistry for Materials Science, Elsevier Science, ۲۰۰۸.
- P.R. Bueno, C. Gabrielli, Electrochemistry, Nanomaterials and Nanostructures, Handbook of Nanostructured Materials for Alternative Energy Devices, Springer International Publication, ۲۰۰۶.



عنوان درس به فارسی: شیمی نظری ساختارهای نانو		عنوان درس به انگلیسی: Theoretical chemistry of nanostructures	
نوع درس و واحد			
نظری ■	پایه □	ندارد	
عملی □	تخصصی □		
نظری-عملی □	اختیاری ■	۳	
رساله / پایان نامه □		۴۸	

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

هدف کلی:

- آشنایی و تسلط بر اصول و کاربرد شیمی نظری ساختارهای نانو

اهداف ویژه:

- آشنایی دانشجویان با اصول شیمی نظری
- آشنایی دانشجویان با کاربرد شیمی نظری

پ) مباحث یا سرفصل‌ها:

- مقدمه تعاریف، دسته بندی مواد نانو، تاریخچه پیشرفت نانو
- اندازه و مقیاس: واحدها، قوانین اندازه گیری، اتم-ها، مولکول-ها، کلاسترها و سوپرا مولکول-ها
- پدیده های انجام پذیر در مقیاس نانو: تونل زدن، ساختارهای مولکولی و بلوری، سطوح و سطوح مشترک
- پیوندهای شیمیایی (انواع و قدرت)، ساختارهای سلسله مراتبی، انتقالات توده به سطح، نیروهای بین مولکولی، خود آرایی و دوباره سازی سطحی
- پیوند کووالانسی: تئوری MO، تئوری VB، آرایش الکترونی و MO و VB، حالت-های الکترونی MO و VB
- روش نیمه تجربی مولکول-های چند اتمی: روش MO بدون الکترون، روش MO هوکل توسعه یافته، روش Pariser-Parr-Pople، تئوری SCF، تقارن در تئوری SCF، مقایسه تئوری هوکل و SCF، رابطه الکترونی
- محاسبات کوانتومی Ab-initio و نیمه تجربی در مورد مولکولهای چند اتمی، روشهای نیمه تجربی برای مولکول های مزدوج مسطح، روش-های مکانیک مولکولی.

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

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

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

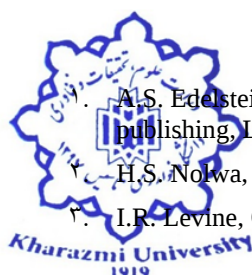
- | | |
|---------------------------------|---------|
| فعالیت‌های کلاسی در طول نیم سال | ۲۵ درصد |
| آزمون پایان نیم سال | ۷۵ درصد |

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

وسایل کمک آموزشی شامل ویدئو پروژکتور

۱. فهرست منابع پیشنهادی:

- A.S. Edelstein and R.C. Cammarata, Nanomaterial - Synthesis, Properties and Applications, institute of physics publishing, London, ۱۹۹۸.
- H.S. Nohwa, Handbook of Nanostructured Materials and Nanotechnology, academic press, ۲۰۰۰.
- I.R. Levine, Quantum Chemistry, ۴th Edition, ۱۹۹۱.



عنوان درس به فارسی: نانوفناوری پلیمرها		عنوان درس به انگلیسی: Nanotechnology of polymers	
نوع درس و واحد			
نظری ■	پایه □	ندارد	
عملی □	تخصصی □		
نظری-عملی □	اختیاری ■	۳	تعداد واحد:
رساله / پایان نامه □		۴۸	تعداد ساعت:

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

هدف کلی:

- آشنایی و تسلط بر اصول و کاربرد نانو فناوری پلیمرها

اهداف ویژه:

- آشنایی دانشجویان با سنتز انواع ترکیبات پلیمری و نانو کامپوزیت پلیمری
- آشنایی با کاربردهای نانو کامپوزیتهای پلیمری در فناوری های نوین

پ) مباحث یا سرفصل ها:

- سنتز شیمیایی و فراورش پودرها و فیلم های با ساختار نانو
- ذرات : شامل فلزات، آلیاژها، کامپوزیت ها، سرامیک ها، مواد هیبریدی
- فیلم ها و پوشش ها : شامل فلزات و سرامیک ها
- فراورش پاششی حرارتی مواد نانو کریستالی
- تهیه پودرهای نانوبلوری برای پاشش حرارتی
- تهیه مواد و کامپوزیت های نانو ساختار با فراورش فاز جامد
- نانو کامپوزیت ها
- لاستیک ها و پلاستیک های تقویت شده

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

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

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

- | | |
|---------------------------------|---------|
| فعالیت های کلاسی در طول نیم سال | ۲۵ درصد |
| آزمون پایان نیم سال | ۷۵ درصد |

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

وسایل کمک آموزشی شامل ویدئو پروژکتور

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

- C. Koch, Nanostructured materials: Processing, Properties and Potential Applications, William Andrew Inc., ۲۰۰۲.
- K.K. Kar, J.K. Pandey, S.K. Rana, Handbook of Polymer Nanocomposites. Processing, Performance and Application, Springer, ۲۰۱۵.



عنوان درس به فارسی: نانوفناوری در تصفیه آب و پساب		عنوان درس به انگلیسی: Nanotechnology in water and wastewater treatment	
نوع درس و واحد			
نظری	پایه	ندارد	
عملی	تخصصی		
نظری-عملی	اختیاری	۳	تعداد واحد:
رساله / پایان نامه		۴۸	تعداد ساعت:

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

هدف کلی:

- آشنایی و تسلط بر اصول تصفیه آب

اهداف ویژه:

- آشنایی با فرایندهای تصفیه ای که نانومواد و نانوفناوری در آنها می تواند نقش بسزایی داشته باشد.
- آشنایی با نانومواد که در فرایندهای تصفیه آب مورد استفاده قرار می گیرند.

پ) مباحث یا سرفصل ها:

- مقدمه ای بر اهمیت تصفیه آب و پساب: چرخه آب در طبیعت، منابع تأمین آب، شیمی آب های طبیعی، ضرورت و اهمیت تصفیه فاضلاب، انواع پساب های آلوده، مصارف مهم آب و تصفیه فاضلاب در ایران، استفاده مجدد پساب و فاضلاب تصفیه شده.
- انواع آلودگی آب و پساب و پارامترهای اندازه گیری آن: انواع آلاینده های آب (مواد شیمیایی، ذرات معلق، pH و ...)، پارامترهای میزان آلاینده ها (TDS, TSS, TS, TOC, COD, BOD₅, DO, ...).
- مروری بر روش های تصفیه آب و پساب: روشهای فیزیکی (آشغالگیرها، ته نشینی، زلال سازی و فیلتراسیون)، روش های بیولوژیکی (لجن فعال و لاگونها، بی هوازی، روش هوازی و ...)
- روش های شیمیایی (انعقادسازی، لخته سازی، حذف سختی، رزین های تبادل یونی و روش های ضد عفونی).
- نانومواد به عنوان جاذب های مؤثر آلاینده ها: انواع جاذب ها، انواع ستونهای جاذب، مکانیسم های جاذب، افزایش سطح نانوجاذب ها
- عامل دار کردن نانوذرات برای افزایش ظرفیت جاذب، زئولیت های نانوحفره، نانو ذرات مغناطیسی در تصفیه آب.
- استفاده از نانومواد در فرایندهای اکسیداسیون پیشرفته: نانوفتوکاتالیست های نور UV و نور مرئی، الکترونانوفتوکاتالیست ها.
- نقش نانوفناوری در فرایندهای غشایی: انواع فرایندهای غشایی مورد استفاده در تصفیه آب و پساب، نانوفیلتراسیون، غشاهای نانوکامپوزیتی، نقش نانوذرات در کاهش گرفتگی و افزایش شار غشاها، نانوالیاف در ساخت غشاها.

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

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

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

فعالیت های کلاسی در طول نیم سال	۲۵ درصد
آزمون پایان نیم سال	۷۵ درصد

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

وسایل کمک آموزشی شامل ویدئو پروژکتور

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

- M.R. Servos, Nanotechnology for Water Treatment and Purification, Springer, ۲۰۱۴.
- Shahid-Ul-Islam, Environmental Nanotechnology for Water Purification, Wiley, ۲۰۲۰.



عنوان درس به فارسی: کاربرد نانومواد معدنی در انرژی های نو		
عنوان درس به انگلیسی: Application of inorganic nanomaterials in new energies		نوع درس و واحد
دروس پیش نیاز:	ندارد	پایه ☐ نظری ☒
		تخصصی ☐ عملی ☐
دروس هم نیاز:		اختیاری ☒ نظری-عملی ☐
تعداد واحد:	۳	رساله / پایان نامه ☐
تعداد ساعت:	۴۸	

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

هدف کلی:

- مطالعه کاربرد ترکیبات نانو مواد معدنی در انرژی

اهداف ویژه:

۱. آشنایی دانشجویان با انرژیهای نو
۲. آشنایی با کاربردهای نانومواد مختلف در تولید انرژیهای نو

پ) مباحث یا سرفصل ها:

۱. انرژی های نو
۲. نیاز ضروری جهان در آینده
۳. معرفی انرژی های نو و مقایسه آنها با منابع انرژی فسیلی
۴. نقش مواد معدنی در تولید انرژی
۵. نانو مواد معدنی، نانو ذرات معدنی، نانو کامپوزیت ها، نانو ساختارها، نانولوله ها
۶. سلول های فوتو ولتائیک، اساس کار و اجزای سازنده
۷. فوتوحساس کننده های شیمیایی، فوتوحساس کننده های ملکولی بر پایه ترکیبات نانو مواد معدنی
۸. سلول های خورشیدی بر پایه نقاط کوانتومی
۹. سلول های سوختی، اساس کار پیل های سوختی
۱۰. نانو ذرات معدنی در سلول های سوختی، تولید هیدروژن با استفاده از نانو مواد معدنی
۱۱. باتری های شیمیایی بر پایه ترکیبات معدنی، نانو باتری ها

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

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

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

- | | |
|---------------------------------|---------|
| فعالیت های کلاسی در طول نیم سال | ۲۵ درصد |
| آزمون پایان نیم سال | ۷۵ درصد |

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

وسایل کمک آموزشی شامل ویدئو پروژکتور

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

۱. B. Sørensen, Renewable Energy Conversion, Transmission and Storage, Academic Press, ۲۰۰۷.
۲. B. Sørensen, Hydrogen and Fuel Cells, Emerging Technologies and Applications, ۲nd Edition, Elsevier, ۲۰۱۱.
۳. S. Supramaniam, Fuel Cells, From Fundamentals to Applications, Springer, ۲۰۰۶.
۴. K. Kalyanasundaram, Dye-Sensitized Solar Cells, CRC Press, ۲۰۱۰.



عنوان درس به فارسی: کاربرد سونوشیمی در سنتز مواد نانو		عنوان درس به انگلیسی: Application of sonochemistry in the synthesis of nanomaterials	
نوع درس و واحد			
نظری ☒	پایه ☐	ندارد	
عملی ☐	تخصصی ☐		
نظری-عملی ☐	اختیاری ☒	۳	تعداد واحد:
رساله / پایان نامه ☐		۴۸	تعداد ساعت:

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

هدف کلی:

- آشنایی و تسلط بر اصول و کاربرد سونوشیمی در سنتز مواد نانو

اهداف ویژه:

- آشنایی دانشجویان با فرایندهای سونوشیمیایی و کاربرد آن در سنتز مواد معدنی و نانومواد مهم و پرکاربرد
- کاربردهای فرایندهای سونوشیمیایی در فراوری نانومواد معدنی و سرامیکها

پ) مباحث یا سرفصلها:

- مقدمه ای بر سونوشیمی
- سنتز نانو پودرهای فلزی از طریق سونوشیمی
- سنتز نانو آلیاژهای فلزی از طریق سونوشیمی-
- نشاندن ذرات نانو بر روی سطوح کروی و مسطح از طریق سونوشیمی
- سنتز کامپوزیت های فلز-پلیمر از طریق سونوشیمی
- سنتز مواد نانو کیسوله شده در ماتریس های کربنی از طریق سونوشیمی.
- سنتز نانو اکسیدهای فلزی از طریق سونوشیمی
- سنتز ساختارهای نانو از طریق سونوشیمی جهت کاربرد بعنوان مواد الکترونی

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

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

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

- فعالیت های کلاسی در طول نیم سال ۲۵ درصد
- آزمون پایان نیم سال ۷۵ درصد

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

وسایل کمک آموزشی شامل ویدئو پروژکتور

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

- C. N.R. Rao, M. A. K. Cheetham, "The chemistry of nanomaterials", WileyVCH Verlag Gmbh& Co., Weiheim, ۲۰۰۴.
- J.C. Colmenares, G. Chatel, Sonochemistry, Springer, ۲۰۱۷.
- F.J. Mason, J.P. Lorimer, Applied Sonochemistry: Uses of Power Ultrasound in Chemistry and Processing, Wiley-VCH, ۲۰۰۱.



۴.

عنوان درس به فارسی: نانومواد معدنی		عنوان درس به انگلیسی: Inorganic nanomaterials	
نوع درس و واحد			
پایه ☐	نظری ☒	ندارد	
تخصصی ☐	عملی ☐		
اختیاری ☒	نظری-عملی ☐	۳	تعداد واحد:
رساله / پایان نامه ☐		۴۸	تعداد ساعت:

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

هدف کلی:

- آشنایی و تسلط بر اصول تئوری و کاربرد نانو مواد معدنی

اهداف ویژه:

- آشنایی دانشجویان با انواع نانومواد معدنی مهم و کاربرد
- آشنایی با کاربردهای نانومواد معدنی

پ) مباحث یا سرفصل ها:

۱. نانو کلاسترها
۲. نقاط کوانتومی و انواع آن
۳. نانولوله های کربنی
۴. گرافن، گرافن اکسید و گرافن اکسید کاهش یافته
۵. نانولوله های معدنی
۶. نانو ذرات معدنی اکسیدی و غیر اکسیدی
۷. نانوسیستم های پلیمرهای معدنی
۸. نانو فیلترهای معدنی

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

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

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

- | | |
|---------------------------------|---------|
| فعالیت های کلاسی در طول نیم سال | ۲۵ درصد |
| آزمون پایان نیم سال | ۷۵ درصد |

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

وسایل کمک آموزشی شامل ویدئو پروژکتور

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

۱. D.L. Feldheim, C.A. Foss, Metal Nanoparticles, Synthesis, Characterization and Application, CRC Press, ۲۰۰۴.
۲. S. Reich, Carbon Nanotubes: Basic Concepts and Physical Properties, Wiley, ۲۰۰۴.
۳. P. Yang, The Chemistry of Nanostructured Materials, World Scientific, ۲۰۰۳.
۴. P. Jená, S.N. Khanna, B.K. Rao, Cluster and Nano-assemblies, World Scientific,



عنوان درس به فارسی:		محاسبات کوانتومی مواد نانو ساختار	
عنوان درس به انگلیسی:		Quantum computation of nanostructured materials	
دروس پیش نیاز:	ندارد	نظری	پایه
دروس هم نیاز:		عملی	تخصصی
تعداد واحد:	۳	نظری-عملی	اختیاری
تعداد ساعت:	۴۸	رساله / پایان نامه	

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

هدف کلی:

- آشنایی و تسلط بر اصول تئوری و کاربرد محاسبات کوانتومی مواد نانو ساختار

اهداف ویژه:

- آشنایی دانشجویان با محاسبات کوانتومی پایه
- کاربردهای محاسبات کوانتومی در پیش بینی خواص مواد نانو ساختار

پ) مباحث یا سرفصل ها:

- معادله شرودینگر، معادله شرودینگر دیراک
- ویژگیهای مدل های تئوری: پیشگویی، تأیید، کاربرد، فرمول بندی، هدف، مفهوم. Ab-initio.
- مدل های هارتری-فاک: اتم هیدروژن، اتم هلیوم، مدل هارتری، نظریه اوربیتال مولکولی درمینان
- اسلیر، روش هارتری-فاک، روش روتان، توابع نوع اسلیر، توابع GTO، دسته توابع پایه، توابع پایه، ابتدایی، جمع شده و جمع نشده، مفهوم و کاربرد دسته توابع پایه
- مدل های عمومی انرژی: جدول پاپل، مدل های G^1 و G^2 و G^3
- نظریه تابع دانسته اساس نظریه، معادلات ریاضی، تفاوت با. Ab-initio.
- انواع مدل های تابع دانسته: مدل های خالص، مدل های هیبریدی
- آشنایی و کار با نرم افزارهای Chercraft و Hyperchem و GAUSSIAN و GAMESS

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

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

ث) راهبردهای ارزشیابی (پیشنهادی):

- | | |
|---------------------------------|---------|
| فعالیت های کلاسی در طول نیم سال | ۲۵ درصد |
| آزمون پایان نیم سال | ۷۵ درصد |

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

وسایل کمک آموزشی شامل ویدئو پروژکتور

چ) فهرست منابع پیشنهادی:

- J.A. Pople, D.L. Beveridge, Approximation Molecular Orbital Theory, McGraw-Hill, ۱۹۷۰.
- W.J. Hehre, L. Radom, P.V.R. Schleyer, J.A. Pople, Ab initio Molecular Orbital Theory, Wiley, ۱۹۸۶.
- R. Porier, R. Kari, I.G. Czimadia, Handbook of Gaussian Basis Sets, Elsevier, ۱۹۸۵.
- V.V. Mitin, D.I. Sementsov, N.Z. Vagidov, Quantum Mechanics for Nanostructures, Cambridge University Press, ۲۰۰۲.

