



جمهوری اسلامی ایران

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری

برنامه درسی

دوره: دکتری

رشته: شیمی

گرایش: شیمی آلی

گروه: علوم پایه

کمیته: شیمی



مصوبه جلسه شماره ۲۴۱ مورخ ۱۳۷۱/۰۴/۱۴

شورای عالی برنامه ریزی آموزشی



جمهوری اسلامی ایران
وزارت فرهنگ و آموزش عالی
شورای عالی برنامه ریزی

مشخصات کلی، برنامه و سرفصل دروس دوره

دکترای شیمی

گروه علوم پایه

کمیته تخصصی شیمی



مصوب دویست و چهارمین جلسه شورای عالی برنامه ریزی

۱۳۷۱/۴/۱۴

—ورخ

بسم الله الرحمن الرحيم



برنامه آموزشی

دوره دکترای شیمی

گروه : علوم پایه
رشته : شیمی
دوره : دکترا
کمیته تخصصی : شیمی
شاخه :
کدرشته :

شورای عالی برنامه ریزی در دیست و جهل و یکمین جلسه
مورخ ۱۳۷۱/۴/۱۴ بر اساس طرح دوره دکترای شیمی که
توسط کمیته تخصصی شیمی گروه علوم پایه شورای عالی
برنامه ریزی تهیه شده و به تأیید این گروه رسیده است برنامه آموزشی این دوره
را در سه فصل (مشخصات کلی، برنامه و سرفصل دروس) بشرح پیوست تصویب
کرد و مقرر میدارد:

ماده ۱) برنامه آموزشی دوره دکترای شیمی از تاریخ تصویب برای کلیه
دانشگاهها و موسسات آموزش عالی کشور که مشخصات زیر را دارند لازم الاجرا
است .

الف : دانشگاهها و موسسات آموزش عالی که زیر نظر وزارت فرهنگ و آموزش عالی
اداره میشوند .

ب : موسساتی که با اجازه رسمی وزارت فرهنگ و آموزش عالی و بر اساس
قوانین ، تاسیس میشوند و بنابراین تابع مقررات شورای عالی برنامه ریزی میباشد .
ج : موسسات آموزش عالی دیگر که مطابق قوانین خاص تشکیل میشوند و باید تابع ضوابط
دانشگاهی جمهوری اسلامی ایران باشند .

ماده ۲) از تاریخ ۱۳۷۱/۴/۱۴ کلیه دوره‌های آموزشی و برنامه‌های مشابه موسسات در زمینه دکترای شیمی در همه دانشگاهها و موسسات آموزش عالی منکوح در ماده ۱ منسوخ میشوند و دانشگاهها و موسسات آموزش عالی یادشده مطابق مقررات میتوانند این دوره را دایر و برنامه جدید را اجرا نمایند.

ماده ۲) مشخصات کلی و برنامه درسی و سرفصل دروس دوره : دکترای شیمی در سه فصل جهت اجرا به وزارت فرهنگ و آموزش عالی ابلاغ میشود. رای صادره دویست و چهل و یکمین جلسه شورای عالی برنامه‌ریزی مورخ ۱۳۷۱/۴/۱۴ در مورد برنامه آموزشی دوره دکترای شیمی



۱) برنامه آموزشی دوره دکترای شیمی که از طرف گروه علوم پایه پیشنهاد شده بود با اکثریت آراء بتصویب رسید. ۲) برنامه آموزشی دوره دکترای شیمی از تاریخ تصویب قابل اجرا است.

رای صادره دویست و چهل و یکمین جلسه شورای عالی برنامه‌ریزی مورخ ۱۳۷۱/۴/۱۴ در مورد برنامه آموزشی دوره دکترای شیمی صحیح است بمورد اجرا گذاشته شود.

مورد تأیید است دکتر مصطفی معین وزیر فرهنگ و آموزش عالی رونوشت : به معاونت آموزشی وزارت فرهنگ و آموزش عالی جهت اجرا ابلاغ میشود.

سید محمد کاظم نائینی دبیر شورای عالی برنامه‌ریزی



بسم الله الرحمن الرحيم

فصل اول

مشخصات کلی دوره دکترای شیمی

با اتکاء به تجارب حاصل از اجرای دوره کارشناسی ارشد شیمی و توفیق در این زمینه و با عنایت به مشی کلی شورای عالی انقلاب فرهنگی در راستای تأسیس دوره دکترای علوم در قالب آئین‌نامه مربوطه، کمیته تخصصی شیمی‌گروه علوم پایه شورای عالی برنامه ریزی برنامه دوره دکترای شیمی را بر اساس نیازهای کشور جمهوری اسلامی ایران، در جهت تأمین اهداف عالی انقلاب فرهنگی بشرح زیر تدوین نموده است تا پس از تأیید گروه علوم پایه، جهت تصویب شورای عالی برنامه ریزی پیشنهاد شود.

۱- تعریف و هدف

دوره دکترای شیمی بالاترین مقطع تحصیلی دانشگاهی در این رشته میباشد که به اعطای درجه دکترای شیمی منتهی میگردد و شامل مجموعه‌ای هماهنگ از فعالیتهای آموزشی و پژوهشی است. از اهداف مهم این دوره، علاوه بر تأمین هیئت علمی دانشگاهها تربیت افرادی است که دارای تفکری خلاق و مستقل بوده و نهایتاً "بر روشهای پیشرفته پژوهشی احاطه یافته و با تسلطی که بر یک یا چند موضوع در شیمی پیدا میکنند، قادر به درک مشکلات علمی جامعه باشند و به حل آنها بپردازند. در این دوره ابداع نوآوری و گسترش دانش شیمی از اهمیت خاص برخوردار بوده و رسالت ویژه فارغ التحصیلان را تشکیل میدهد.

۲- نظام دوره

دوره دکترای شیمی به دو مرحله آموزشی و پژوهشی تقسیم میگردد:

مرحله آموزشی: این مرحله پس از پذیرفته شدن داوطلب در امتحان ورودی آغاز میگردد. هدف این مرحله برطرف ساختن کمبود اطلاعات علمی دانشجویان میباشد که با گذراندن برخی از دروس پیشرفته شیمی نقائص او مرتفع میگردد. این دوره با برگزاری یک امتحان جامع پایان میپذیرد.

مرحله پژوهشی: این مرحله پس از اتمام مرحله آموزشی و قبولی دانشجویان در امتحان جامع شروع میشود. هدف از این مرحله آشنائی کامل دانشجویان با شیوه‌های پژوهش و کسب توانائیهای لازم جهت انجام پژوهش در یک یا چند زمینه خاص شیمی میباشد که میتواند به کشف یا نوآوریهای در شیمی منتهی گردد. حاصل این دوره با تدوین و تالیف رساله



همراه است که با دفاع از آن ، این دوره نیز پایان میپذیرد

۲- نحوه آزمون ورودی

آزمون تخصصی ورودی دوره دکترای شیمی از دروس پایه دوره کارشناسی ارشد شیمی در زمینه های شیمی آلی ، شیمی تجزیه ، شیمی معدنی و شیمی فیزیک بعمل میآید . این امتحان تخصصی همراه با امتحان زبان خارجه بصورت کتبی برگزار میگردد . نمرات این آزمون در موضوعات فوق الذکر به انضمام نمرات داوطلبان در دوره کارشناسی ارشد کارشناسی ، همچنین معرفی نامه های علمی که بوسیله اساتید دوره های قبلی داوطلب مستقیم^۱ به دانشگاه ارسال میگردد و نیز مصاحبه علمی، ملاک گزینش دانشجو خواهد بود .
دارندگان دانشنامه کارشناسی ارشد در رشته شیمی از یکی از دانشگاههای معتبر داخل یا خارج کشور ، که به تائید وزارت فرهنگ و آموزش عالی رسیده است ، داوطلبان اصلی شرکت کننده در آزمون ورودی را تشکیل میدهند .

تبصره ۱:

در صورتیکه داوطلب دارای درجه کارشناسی ارشد در یکی از رشته های علوم پایه ، علوم پزشکی و فنی و مهندسی باشد و هم چنین دارنده مدرک دکترای عمومی گروه پزشکی که بتوانند از عهده امتحان ورودی و شرایط مندرج در آئین نامه دکترای مصوب شورای عالی برنامه ریزی برآید، میتواند در دوره دکترای شیمی ادامه تحصیل دهد.

تبصره ۲:

دانشجویان نیمسال آخر کارشناسی ارشد رشته شیمی و سایر رشته ها میتوانند در آزمون ورودی شرکت کنند لیکن ثبت نام آنها منوط به ارائه دانشنامه کارشناسی ارشد است.

تبصره ۳:

داوطلب علاوه بر قبولی در آزمون ورودی میبایستی صلاحیت عمومی ورود به دوره دکترای را نیز دارا باشد .

۴- مراحل دوره :

الف : مرحله آموزشی : دانشجویی که برای دوره دکترای ثبت نام می نماید در این مرحله موظف است علاوه بر سمینارهای او ۲ شانزده واحد از دروس جدول پیشنهادی ضمیمه ویسا معادل آن که توسط گروه و یا دانشکده ارائه میشود را با مشورت استاد راهنما انتخاب نموده و

با موفقیت بگذرانند. مضافاً در مواردیکه استاد راهنما ضروری تشخیص دهد، دانشجو باید یک یا چند درس اضافی را از سایر رشته‌هاییکه در ارتباط با کار پژوهش وی میباشد نیز با موفقیت بگذرانند. تعداد و نوع دروس باید باتصویب شورای تحصیلات تکمیلی گروه یلدانشکده باشد و در هر صورت تعداد کل واحدها نباید از میزان واحدهای تعیین شده در آئین نامه دکترای مصوب شورایعالی برنامه ریزی، بیشتر گردد. بهر حال برنامه آموزشی دوره دکترای هر گروه و یا دانشکده باید طبق بند ۱ رای صادره یکصد و نود و ششمین جلسه شورایعالی برنامه ریزی مورخ ۱۳۶۹/۲/۳۰ در مورد واگذاری پاره‌ای از اختیارات شورایعالی برنامه ریزی به دانشگاهها تدوین گردد. موضوع سمینار ۱ توسط دانشجو و با موافقت استاد راهنما تعیین میگردد ولیکن مطالب سمینار ۲ باید حتماً در ارتباط با برنامه پژوهشی دانشجو باشد. استاد راهنما طبق شرایط مندرج در آئین نامه دکترای مصوب شورایعالی برنامه ریزی تعیین میشود. برای هر یک از سمینارهای فوق یک واحد درسی منظور می‌شود. پس از گذراندن دروس فوق الذکر، دانشجو میتواند در امتحان جامع شرکت نماید. این امتحان در سطح دروسی خواهد بود که دانشجو در مرحله آموزشی داشته است و شرایط آن طبق آئین نامه دوره دکترای مصوب شورایعالی برنامه ریزی میباشد. دانشجو جهت اتمام رسانیدن مرحله آموزشی میبایستی توانائی خود را در استفاده از زبانهای خارجی به یکی از دو طریق زیر باثبات رساند:

۱- قبولی در امتحان کتبی ترجمه متون شیمی در یکی از زبانهای انگلیسی، فرانسه، آلمانی یا روسی

۲- تسلط به یکی از زبانهای خارجی فوق الذکر به نحوی که بتواند در زمینه تخصصی مطلوب خلاصه کارهای تحقیقاتی یا طرح تحقیقاتی خود را به آن زبان بیان کند.

ب: مرحله پژوهشی: دانشجویانیکه مرحله آموزشی را با تمام رسانیده‌اند بایستی جهت ادامه تکمیل در مرحله پژوهشی ثبت نام نموده و به فعالیتهای علمی و تحقیقاتی در زمینه مورد نظر خود و نیز تنظیم و تدوین رساله بپردازند. این فعالیتهای علمی و تحقیقاتی با هدایت و نظارت استاد راهنما و زیر نظر کمیته اساتید مشا و ر که طبق شرایط آئین نامه دوره دکترای مصوب شورایعالی برنامه ریزی تعیین میشوند، بطریق زیر انجام میگردد:

دانشجو موظف است در ظرف شش ماه اول مرحله پژوهشی بار اهنمائی استاد راهنما عنوان رساله خود را همراه با طرح کامل موضوع تحقیقاتی خود مشخص نموده و پس از تأیید



اساتید مشاور جهت تصویب به گروه آموزشی ارائه دهد. ارزش پایان نامه ۴۴ واحد می باشد.

تبصره ۱:

چنانچه طرح پژوهشی فوق الذکر به تصویب نرسد یا دانشجو با توافق استاد راهنما بخواهد موضوع پژوهشی خود را تغییر دهد موظف است که حداکثر ظرف شش ماه دیگر طرح خود را کامل، تصحیح یا تجدید کند بگونه ای که تصویب آن میسر باشد. دانشجو باید نتیجه تحقیقات خود را هر شش ماه یکبار به اطلاع کمیته ای متشکل از استاد راهنمای و اساتید مشاور خود برساند.

تبصره ۲:

در صورتیکه پیشرفت دانشجوی در کار تحقیقاتی بعد از هر شش ماه مطلوب نباشد، بنا بر این درخواست استاد راهنما و تأیید اساتید مشاور و موافقت شورای تحصیلات تکمیلی برای بار اول به دانشجو کتبا "اخطار" میشود که در صورت عدم پیشرفت در شش ماه بعدی از ادامه تحصیل او جلوگیری خواهد شد.



تبصره ۳:

با توجه به پیشرفتهای سریع دانش شیمی و لزوم همگام بودن پژوهشگران این رشته با آنها و به منظور ترغیب دانشجویان به مطالعات علمی و مسأله "القاء حس بازنگری و استمرار آموزش در مراحل بعد از تحصیل، ارزیابی اطلاعات حاصل از مطالعات انفرادی آنها در مرحله پژوهشی و قبل از دفاع از پایان نامه به شیوه زیر خواهد بود.

هر دو ماه یکبار (جمعا " پنج نوبت در سال) آزمونهای کتبی در زمینه های مختلف شیمی توسط اعضاء گروه آموزشی طرح و ارائه میگردد. موضوع سئوالات از بین مطالب تحقیقاتی منتشر شده در مجلات علمی شیمی موجود در کتابخانه هردانشگاه و یا سمینارهای مختلف ارائه شده در بخش یا دانشکده انتخاب میشود. موفقیت در سه آزمون از ده آزمون متوالی قبل از دفاع از پایان نامه الزامی خواهد بود.

ج - دفاع از رساله :

پس از آماده شدن رساله و اعلام آمادگی دانشجو و تأیید استاد راهنما، دفاع از رساله صورت خواهد گرفت. همزمان با تشکیل جلسه دفاع، لازم است از نتایج کار تحقیقاتی دانشجو، مندرج در پایان نامه حداقل یک مقاله توسط یکی از مجلات بین المللی مورد تأیید وزارت فرهنگ و آموزش عالی جهت انتشار پذیرفته شده و مراتب به جلسه دفاع

فصل دوم

جدول دروس



از رساله منعکس شود . جلسه دفاع با حضور هیئت داوران ، طبق آئین نامه دوره دکتری مصوب شورای عالی برنامه ریزی تشکیل می شود . دانشجو در جلسه ای که در حضور این هیئت تشکیل میشود گزارش از کار تحقیقاتی خود را عرضه و از آن دفاع می نماید . اعطای درجه دکتری به داوطلب منوط به پذیرفته شدن رساله بوسیله هیئت داوران است .

تبصره :

دردوران تحصیل در دوره دکترای شیمی ، دانشجو موظف به رعایت کلیه آئین نامه ها و مقررات دوره دکتری وزارت فرهنگ و آموزش عالی میباشد .



فهرست دروس دوره دکتری شیمی

کد درس	نام درس	تعداد واحد	ساعت		پیشنیاز یا زمان ارائه درس
			نظری	عملی	
۱	نظریه گرافهای شیمی	۳	۵۱	۵۱	ندارد
۲	کامپیوتر در شیمی	۳	۵۱	۵۱	ندارد
۳	تحلیل آماری نتایج	۳	۵۱	۵۱	ریاضیات آماری
۴	روشهای نوین در آنالیز دستگامی	۳	۵۱	۵۱	شیمی تجزیه پیشرفته
۵	الکتروشیمی تجزیه ای در حلالهای ناآبی	۳	۵۱	۵۱	الکتروشیمی و شیمی تجزیه در محیطهای غیر آبی
۶	لیزر و کاربرد آن در شیمی	۳	۵۱	۵۱	اسپکتروسکوپی تجزیه ای
۷	روشهای رادیوشیمیایی	۳	۵۱	۵۱	ندارد
۸	مباحث نوین در شیمی تجزیه	۳	۵۱	۵۱	با نظراستاد
۹	ترمودینامیک فرآیندهای برگشتناپذیر	۳	۵۱	۵۱	شیمی فیزیک پیشرفته
۱۰	ترمودینامیک آماری ۲	۳	۵۱	۵۱	ترمودینامیک آماری ۱
۱۱	ترمودینامیک شیمیائی جامدات	۳	۵۱	۵۱	شیمی فیزیک پیشرفته
۱۲	ریاضیات در شیمی فیزیک	۳	۵۱	۵۱	ندارد
۱۳	سمینار ۱	۱	۱۷	۱۷	ندارد
۱۴	شیمی کوانتومی ۳	۳	۵۱	۵۱	شیمی کوانتومی ۲
۱۵	طیفسنجی مولکولی ۲	۳	۵۱	۵۱	طیفسنجی مولکولی ۱
۱۶	مباحث نوین در شیمی فیزیک	۳	۵۱	۵۱	با نظراستاد
۱۷	شیمی هتروسیکلیک پیشرفته	۳	۵۱	۵۱	شیمی آلی پیشرفته



ادامه فهرست دروس دوره دکتری شیمی

پیشنیاز یا زمان ارائه درس	ساعت			تعداد	نام درس	کد درس
	عملی	نظری	جمع			
ندارد	-	۱۷	۱۷	۱	سینار ۲	۱۸
مبانی پلیمر	-	۵۱	۵۱	۳	شیمی پلیمر پیشرفته	۱۹
شیمی آلی پیشرفته	-	۵۱	۵۱	۳	پیشرفته‌های نوین در ترکیبات طبیعی	۲۰
شیمی آلی پیشرفته	-	۵۱	۵۱	۳	شیمی آلی حیاتی	۲۱
با نظراستاد	-	۵۱	۵۱	۳	مباحث نوین در شیمی آلی	۲۲
ندارد	-	۵۱	۵۱	۳	شیمی حالت برا نگیخته و حدود اسطهای فعال	۲۳
فتوشیمی	-	۵۱	۵۱	۳	فتوشیمی پیشرفته	۲۴
ندارد	-	۵۱	۵۱	۳	شیمی پلیمرهای معدنی	۲۵
ندارد	-	۵۱	۵۱	۳	ساختمان و پیوند در ترکیبات معدنی	۲۶
با نظراستاد	-	۵۱	۵۱	۳	مباحث نوین در شیمی معدنی	۲۷
شیمی تجزیه پیشرفته	-	۵۱	۵۱	۳	روشهای حرارتی و سینتیکی در تجزیه	۲۸



فصل سوم

سرفصل دروس



نظریه گرافهای شیمیائی

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز: ندارد

مبانی نظریه گرافها - گرافهای شیمیائی - ماتریسهای توپولوژیکی -
خصلت بس جمله ای یک گراف شیمیائی - جنبه های توپولوژیکی نظریه هوکل -
مولکولهای همطیف - مولکولهای زیرطیف - انرژی رزونانس توپولوژیکی -
شمارش ساختارهای ککوله ای - الگوی مدارهای مزدوج شده - شاخص های
توپولوژیکی و کلازبردهای آنها در پیشگویی رابطه های ساختار / خواص و ساختار
/ فعالیت - شمارش ایزومرها .

منابع :

Trinajstić, N., "Chemical Graph Theory", CRC Press Inc.,

Vol I & II, 1983.



کامپیوتر در شیمی

تعداد واحد : ۳

نوع واجید :

پیشنیاز : ندارد

برنامه نویسی کامپیوتری زبان فورترن (Fortran 77), آشنائی با کامپیوتر فورترن 77 (FORTVS) و فورترن چهار (FORTHX), امکانات و کاربرد CMS, VM در کامپیوترهای IBM 370. آشنائی با برنامه های EXEC در کامپیوترهای مرکزی, آشنائی با سیستم عامل در کامپیوترها (MS-DOS) و نحوه استفاده از یک Software و package.

منابع :

C.E.Klopfenstein, C.L.Wilkins, Computers in Chemical and Biochemical Research, Academic Press

T.R.Dickson, The Computer and Chemistry W.H.Freeman and Company.

Delos F.Detar, Computer Programs for Chemistry W.A.Benjamin, INC.

K.Ebert, H.Ederer and T.L.Isenhour, Computer applications in Chemistry, Verlag Chem. 1989.



تحلیل آماری نتایج



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : ریاضیات آماری

بررسی خطاها در تجزیه شیمیایی ، اندازه گیری ها و خطاهای مربوطه
در هر روش روشهای عددی و نموداری در تعیین خطاها . تستهای معنی دار -
آنالیز برگشتی و وابستگی کنترل کیفیت و نمونه برداری و بررسی خطاها ،
آنالیز فاکتوری ، بهینه سازی کمپلکس در تجزیه شیمیایی محاسبات جدید .

منابع :

1. G.W. Snedecor & W. Cochran, Statistical Methods, Iowa State University Press 6th edition, Ames, Iowa (1976).
2. K. Eckschlager, M.Sc., D.Ph., dr. R.A. Chalmers Van Nostrand Reinhold Company
Errors, Measurement and results in Chemical Analysis.
3. J.C. Milner & J.N. Milner, Statistics for Analytical Chemistry, 2nd edition, Ellis Harwood, Sussex 1987.
4. O.L. Davies. and P.L. Goldsmith, Statistical Methods in Research and Production, Longmans, London, 1982.
5. G.P. Box, W.G. Hunter and J.S. Hunter, Statistics for Experimentalists, Wiley, New York, 1978.
6. G.T. Werninont, use of Statistics to develop and Evaluate Analytical Methods, Association of official Analytical Chemists, Arlington, Virginia, 1985.
7. R. Caulcutt. and R. Boddy, Statistics for Analytical Chemists. Chapman & Hall, London, 1983.

روشهای نوین در آنالیز دستگاهی

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : شیمی تجزیه پیشرفته

تکنیک های GC/MS و GC/IR و چگونگی پیوند دستگاه GC به دستگاه های MS و IR - دستگاه پیوندی GC/FT-IR - مقایسه تکنیک های پیوندی GC/IR و GC/MS و دستگاه های MS و IR تکنیک LC/MS و چگونگی پیوند دستگاه و مقایسه آن با دستگاه GC/MS - تکنیک های TLC/IR و چگونگی پیوند این دستگاهها تکنیک GC/MS/IR و چگونگی پیوند این دستگاهها و مقایسه آن با دستگاه های GC/MS و MS/ICP - تکنیک و چگونگی پیوند آن -

منابع :

- 1.G.M.Message," Practical Aspects of Gas Chromatography/Mass Spectrometry ",Wiley,New York 1984.
- 2.E.S.Yeung",Dectectors for Liquid Chromatography ",John Wiley and Sons,1986.



الکتروشیمی تجزیه‌ای در حلال های ناآبی



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : الکتروشیمی تجزیه‌ای ، شیمی تجزیه در محیطهای غیرآبی

- اثر حلال بر واکنش های الکتروشیمیایی (تاثیر بر سینتیک مبادله الکترون ، سینتیک واکنش شیمیایی همراه برپدیته جذب سطحی و...) محدوده فعالیت الکتروشیمیایی (Electroactivity Lange) در حلالهای ناآبی ، تاثیر نوع حلال ، نوع الکترولیت حامل و جنس الکتروده بر وسعت این محدوده .
 - روش های الکتروآنالیتیکی در حلالهای ناآبی ، پتانسیومتری ، ولتامتری و راههای گوناگون آن : پلاروگرافی ، ولتامتری با الکتروشدهای چرخان ، ولتامتری چرخه‌ای .
 - کاربرد روشهای ولتامتری در تعیین تابعهای ترمودینامیکی ، تجزیه کیفی تجزیه کمی و تعیین مکانیسم فرآیندهای الکترودی .
 - کروماتوگرافی پتانسیومتری ، الکترولیز ممتد . دیگر روشهای کمکی نظیر ESR و اسپکتروالکتروشیمی در حلال های ناآبی .
 - مروری بر شرایط اجرای روش های الکتروشیمیایی تجزیه در حلالهای ناآبی
 - اشاره ای بر واکنش های اکسایش و کاهش نمونه در حلالهای ناآبی .
 - کاربرد نمک های مذاب بعنوان حلال در الکتروشیمی تجزیه
- منابع :

1. G. Charlot, I. Badoz-Lambling and B. Tremillon, *Electrochemical Reactions*, Elsevier, 1962.
2. C.K. Mann and K.K. Barnes, *Electrochemical Reactions in Nonaqueous systems*, Marcel Dekker Inc., 1970.
3. M.M. Baizer (ed), *Organic Electrochemistry*, Marcel Dekker Inc., 1973.

لیزر و کاربرد آن در شیمی



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : اسپکتروسکوپی تجزیه‌ای

- ۱- اصول فیزیکی لیزر (مفاهیم مقدماتی ، خواص لیزر ، برخورد لیزر با ماده و انواع لیزر).
- ۲- طیف‌بینی تجزیه‌ای با استفاده از اتم‌کننده‌های لیزری (لیزرهای حالت جامد ، مایع و گازی) طیف‌ها ، دکتورها ، اسپکتروگرافها و چگونگی سهمیه‌سازی شرایط کار با لیزر ، دامنه کاربرد تجزیه‌ای
- ۳- طیف‌سنجی جذب اتمی ، فلورسانس اتمی ، جذب مولکولی و فلورسانس مولکولی

منابع :

1. Nicolò Omenetto " Analytical Laser Spectroscopy " John Wiley & Sons, 1979.
2. E.H. Piepneier " Analytical Applications of Lasers " John Wiley 1987.
3. D.L. Andrews. "Lasers in Chemistry ", Springer-Verlag 1986.

روش های رادیوشیمیایی

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : ندارد

- اساس رادیواکتیویته - انواع تشعشعات هسته‌ای و ویژگی های آنها
ابزارهای تشخیص و اندازه‌گیری تشعشعات رادیواکتیو - انواع واکنش های
هسته‌ای و ویژگی های آنها - راههای آداسازی نمونه‌های فعال شده - واکنش
های نوترون - گاما (n, γ) - منابع تولید نوترون - تجزیه روش فعال
سازی (AA) - شرایط انجام واکنش های هسته‌ای و بهره‌برداری تجزیه‌ای
از آنها - ویژگی های آماری تجزیه‌های رادیوشیمیایی - معرف های رادیو-
آکتیو - استفاده از معرف های رادیواکتیو در تیتراسیون های رادیومتری .

منابع :

- 1.W.S.Lyon,Jr. (ed.),"Guide to Activation Analysis.", Van Nostrand Co.Inc.N.Y.1964.
- 2.T.Braun and J. Toigyessy," Radiometric ", Pergamon Press, N.Y.,1967.
- 3.M.T.Kelley (ed)," Radiochemistry, Connected Works" Analytical Chemistry,1959.



مباحث نوین در شیمی تجزیه

تعداد واحد : ۱ تا ۳

نوع واحد: نظری

پیشنیاز : با نظراستاد

تدریس آخرین پیشرفتهای علمی در شیمی تجزیه از بررسی آخرین منابع
معتبر علمی شیمی تجزیه در سطح بین المللی .



ترمودینامیک فرآیندهای برگشتناپذیر

تعداد واحد: ۳

نوع واحد: نظری

پیشنیاز: شیمی فیزیک پیشرفته

۱- برخی مفاهیم ترمودینامیک مرتبه اول

۲- توازن انتروپی و حصول انتروپی

۳- نیرو، شار و معادلات پدیده شناسی

۴- قضیه دوچانگی انزاگر

نظریه افت و خیز

بزرگشت پذیری میکروسکوپی

وایسازی (رگرسیون) افت و خیز

۵- کاربرد قضیه انزاگر در پدیده ترموالکتریک و اشرودفر

۶- حالات ایستا و سیستمهای بیولوژیکی

منابع:

S.R.de Groot and J.Mazur, " Non-Equilibrium Thermodynamics",
North Holland Publishing Co.,Amsterdam (1962).



ترمودینامیک آماری ۲



تعداد واحد: ۳

نوع واحد: نظری

پیشنیاز: ترمودینامیک آماری ۱

آمار بلورها

طیف ارتعاشی بلور تک اتمی، نظریه های انیشتاین و دبای در مورد ظرفیت گرمایی بلورها، فونونها، نقص بلوری و انواع آن

محاسبات و بررسی آماری شبکه های بلوری

بررسی و محاسبه کمیت های ترمودینامیکی بلورها در حالت پایدار ترمودینامیکی، روشهای تقریبی برای محاسبه عامل ترکیبی (روش بررسی حل دقیق خواص ترمودینامیکی شبکه های یک بعدی، دوبعدی و سه بعدی تبدیل فاز جامد - جامد

مایعات و گازها

نظریه ساختمان با اهمیت و نظریه لندارد - جونز و نشر، بررسی سیستم های ایده آل در میدان های الکتریکی و مغناطیسی، بررسی گازهای غیرایده آل
از دیدگاه آماری
منابع:

1. D.A. McQuarrie "Statistical Thermodynamics" Happer and Row 1973.
2. T.L. Hill "Statistical mechanics" New York McGraw-Hill 1956
3. T.L. Hill "introduction to statistical thermodynamics" Addison-Wesly Publishins Company, Inc. London 1960

ترمودینامیک شیمیایی جامدات

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : شیمی فیزیک پیشرفته

مقدمه‌ای بر قوانین ترمودینامیک با تأکید بر خواص جامدات ، خواص
ترمودینامیکی محلولهای جامد ، تعادل بین فازهای چندجزئی ،
ترمودینامیک سطح و فصل مشترک ، نقاشی در بلورهای یونی و فلزی ،
نقاشی در نیمه‌هادی ها ، نقاشی در ترکیبات استکیومتری و غیر استکیومتری
متر .

منابع :

- 1- R,A.Swafen " Thermodynamiers of Solids" 2nd.Ed.,
John Wiley 1972.



ریاضیات در شیمی فیزیک

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : ندارد

۱- آنالیز برداری

۲- سیستم های مختصات

۳- مختصری درباره آنالیز تانسوری

۴- دترمینانها و ماتریس ها

۵- سریها

۶- توابع متغیرهای مختلط

۷- معادلات دیفرانسیل - جوابهای سری مانند (Power Series Solutions)

۸- معادلات دیفرانسیل

۹- سریهای فوریه و انتگرالهای فوریه

منابع :

1. G.Arften, Mathematical Methods for Physicists (Academic Press. Inc.,1985)
2. E.Butkov, Mathematical Physics (Addison Wesley,1973).
3. M.L.Boas, Mathematical Methods in the Physical Sciences (John Wiley & Sons,1983).



سمینارا

تعدادواحد : ۱

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : ندارد

موضوع ونحوه، اجرای آن توسط شورای تحمیلات تکمیلی تعیین می شود.



شیمی کوانتومی ۲



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : شیمی کوانتومی ۱

Generalized Angular Momentum

- اندازه حرکت زاویه‌ای تعمیم یافته

تثوری عمومی اندازه حرکت زاویه‌ای - کاربرد عملکردهای بالابرنده
وپایین برنده در تعیین بردارهای خاص و مقادیر خاص عملکردهای اندازه
حرکت زاویه‌ای - اندازه حرکت زاویه‌ای و چرخش‌ها - جفت شدن دو-بردار
اندازه حرکت زاویه‌ای - جفت شدن سه بردار اندازه حرکت زاویه‌ای - ضرائب
Clebsch Gordon و Racah - نمادهای $3J$ و $6J$ و غیره - نمایش
ماتریسی چرخش‌ها - سریهای Clebsch Gordon - تانسورهای کاهش ناپذیر
Wigner Eckart - عناصر ماتریس ضرب‌های اسکالر، تانسورهای
کاهش ناپذیر - میدان‌های اسکالر، برداری و اسپینور (Spinors).

- سیستم‌های چندالکترونی

بحث عمومی درباره ذرات یکسان و خواص تقارن توابع موج آنها
درمینانهای Slater - محاسبه عناصر ماتریس عملکردهای یک و دو الکترونی
و استنتاج قواعد Slater - Condon - تقریب میدان مرکزی - معادلات
Hartree-Fock - خواص جوابهای Hartree-Fock، روش‌های محاسبه
عددی - Configuration interaction - چندتایی‌های (multiplets)
مربوط به دو الکترون - نمادهای طیفی سیستم‌های الکترونی - سنت-ز
توابع موج چندتایی‌ها - محاسبه انرژی چندتایی‌ها - اثر متقابل اسپین-
اوربیتال در سیستم‌های چندالکترونی .

منابع :

- 1.M.Weissbluth, Atoms and Molecules (Academic Press, 1978)
- 2.M.Alonso and H.Valk, Quantum Mechanics; Principles and Applications (Addison- Wesley, 1973).

1. R. Loudon, "The Quantum Theory of light", Clarendon Press. Oxford, 1981.
2. J. I. Steinfeld "Molecules and Radiation"; An Introduction to Modern Molecular Spectroscopy, The MIT Press, 1979.
3. B. P. Straugham and S. Walker, Vols. I, II, III (Chapman and Hall Ltd, 1976).
4. S. Califano, "Vibrational States", John Wiley & Sons, 1976.



طیف‌سنجی مولکولی ۲



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : طیف‌سنجی مولکولی ۱

- طیف‌سنجی الکترونی

تقریب بورن - اپنهايمر Born-Oppenheimer approximation

طیف‌سنجی الکترونی مولکولهای دواتمی - اصل فرانک کوندون - طیف‌سنجی

الکترونی مولکولهای چنداتمی - طیف‌سنجی فوتوالکترونی

- طیف‌سنجی تشدید مغناطیسی Magnetic resonance Spectroscopy

ممانهای مغناطیسی هسته‌ای - تشدید مغناطیسی هسته‌ای - جابجایی های

شیمیایی - حفت‌شدنهای اسپین - اسپین هسته‌ای - آسایش اسپینی - تشدید

اسپین الکترونی -

- تئوری گروهها Group Theory - یادآوری مفاهیم بنیادی تئوری

گروهها - تئوری گروهها و ساختمان الکترونی مولکولها - تئوری گروهها

و ارتعاشات مولکول - تئوری گروهها و چرخش های مولکولی

منابع :

Ira N. Levine, Molecular Spectroscopy (John Wiley, 1975)

مباحث نوین در شیمی فیزیک

تعداد واحد : ۱ تا ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : با نظراستاد

تدریس آخرین پیشرفتهای شیمی فیزیک و بررسی مجلات و کتب معتبر
بین المللی در زمینه های مختلف شیمی فیزیک .



شیمی هتروسیکلیک پیشرفته



تعداد واحد: ۳

نوع واحد: نظری

پیشنیاز: شیمی آلی پیشرفته

در این درس راجع به بسیاری از ترکیبات سیکلیک و آروماتیک که دارای اتمهای مختلفه ازت، گوگرد، اکسیژن، سیلنیم، تلوریوم و غیره میباشند میتوان صحبت کرد. هر مورد شامل واکنشها و مکانیسم آنها، سنتزهای مختلفه اسپکتروسکوپی و در بعضی از موارد بیوسنتز مواد مورد نظر بحث میگردد.

منابع:

1. Elderfield, R.C. "Heterocyclic Compounds" Wiley, New York.
2. Katritzky, A.R. "Physical Methods in Heterocyclic Chemistry", Academic Press, New York.
3. Katritzky, A.R. "Advances in Heterocyclic Chemistry", Academic Press, New York.
4. Weisberger, A. "Heterocyclic Compounds", Interscience Publishers, New York.
5. E.C. Taylor & A. Weisberger "General Heterocyclic Chemistry Series" Wiley-Interscience, New York.
6. Acheson, R.M., "An Introduction to the Chemistry of Heterocyclic Compounds", 2nd Ed. Interscience New York.
7. Albert, A. "Heterocyclic Chemistry: An Introduction", Athlone Press, London.
8. Allcock, M.R. "Heteroatom Ring Systems and Polymers", Academic Press, New York.
9. Badger, G.M. "The Chemistry of Heterocyclic Compounds", Academic Press, New York.
10. Fitton, A.D. and Sma R.K., "Practical Heterocyclic Chemistry", Academic Press, New York.

سمینار ۲

تعداد واحد: ۱

نوع واحد: نظری

پیشنیاز: ندارد

موضوع ونحوه، اجرای آن توسط شورای تحمیلات تکمیلی تعیین می شود.



شیمی پلیمر پیشرفته



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : مبانی پلیمر

- ۱- مفهوم وزن مولکولی متوسط و توزیع اوزان مولکولی در سیستم خطی مرحله‌ای و در سیستم غیرخطی مرحله‌ای .
- ۲- تهیه پلیمرهای : با مقاومت حرارتی بالا، از طریق باز شدن حلقه پلیمرهای فعال نوری ، پلیمرهای زنده ، پلیمرهای هادی ، پلیمری الکتروولت ها ، پلیمرهای ارگانومتالیک .
- ۳- سنتتیک پلیمریزاسیون Ziegler-Natta
- ۴- واکنش های : سنتزی پلیمرها ، از هم پاشی پلیمرها ، پلیمریزاسیون در محیط آبی ، ایزومری شدن پلیمرها .
- ۵- پلیمرهای تحقیقاتی : انواع مختلف پلیمرهای هتروسیکلیک ، پلیمریزاسیون : از طریق واکنش دیلز آلدِر ، واکنش اضافی (۳دی پلار ، کوپلی- مرهای مختلف ، پلیمرهای محلول در آب ، پلیمرهای جدید از طریق واکنش استخلافی الکتروفیلی آروماتیک ، پلیمرهای حیاتی.
- ۶- فتوشیمی فاز شروع در پلیمریزاسیون رادیکالی.
- ۷- مختصری در مورد شیمی فضائی پلیمرها .

منابع :

1. Odian, G., "Principles of Polymerization", McGraw-Hill, 1970.
2. Lenz, R.W., "Organic Chemistry of Synthetic High Polymers", Interscience Publishers, 1967.
3. Flory, P.J., "Principles of Polymer Chemistry", Cornell University Press, 1953.
4. Culbertson, B.M.; McGrath J.E., "Advances In Polymer Synthesis", Polymer Science and Technology Series Vol. 31, Plenum Press, 1985.
5. Frisch, K.C., Reegen, S.L., "Ring Opening Polymerization", Marcel Dekker.
6. Keii, T. "Kinetics of Ziegler-Natta Polymerization, Kodanasha LTD.
7. Ketley, A.D., "The Stereochemistry of Macromolecules". Edward Arnold Publishers.
8. Rempp, P.; Merrill, E.W., "Polymer Synthesis" Huething & Wepf Publishers.
9. Mathur, N.K.; Narang, C.K.; Williams, R.E. "Polymer as Aids in Organic Chemistry". Academic Press.



پیشرفتهای نوین در ترکیبات طبیعی

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : شیمی آلی پیشرفته

در این درس راجع به قسمتی از سنتز، بیوسنتز، استریوشیمی، اسکتروسکپی و استفاده‌های دارویی آلکالوئیدها، استروئیدها، پروستاگلندین‌ها، نوکلئوئیدها، نوکلئوزیدها، ماکرولیدها، بتالاکتسام‌ها و غیره میتوان بحث و گفتگو کرد.

1. J.S. Bindra and R. Bindra, " Prostaglandin Synthesis", Academic Press, New York, 1977.
2. W.W. Zorbach, R.S. Tipson, "Synthetic Procedures in Nucleic Acid Chemistry", Vol. 1 and 2, Wiley interscience New York, 1968, 1973.
3. J. Elks (Ed). "Recent Advances in the Chemistry of β -Lactam Antibiotics", Glaxo Research Ltd. The Chemical Society, Burlington House London W1V 0BN.
4. G.I. Gregory, (Ed), "Recent Advances in β -Lactam Antibiotics", Second International Symposium, Glaxo Research Ltd. The Chem. Soc. Burlington House, London, W1V 0BN, 1980.
5. L. Fieser and M. Fieser, "Steroids" Reinhold, New York 1959.
6. R. Monske, and F. Helmuth, " The Alkaloids", Academic Press, New York, from 1950.
7. A. Katritzky (Ed), "Advances in Heterocyclic Chemistry", Academic Press. New York, from 1963.
8. Journals; JACS, JOC, J. Chem. Soc, Heterocycles, Tetrahedron, Helv. Chem, Acta. Can. J. Chem. etc.

شیمی آلی حیاتی



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : شیمی آلی پیشرفته

- ۱- مقدمه‌ای بر شیمی آلی حیاتی شامل پدیده نزدیکی و جورشدن ملکول‌های حیاتی و مدل‌های آلی
 - ۲- خصوصیت مولکول‌های آلی حیاتی و آمینواسیدها و پپتیدها
 - ۳- شیمی آلی حیاتی فسفات‌ها
 - ۴- مدل‌های آنزیمی (شیمی کمپلکس دهنده‌ها - پذیرنده‌ها)
 - ۵- یون‌های فلزی و نقش آنها در فعالیت آنزیم‌ها
 - ۶- شیمی کوآنزیم‌ها
 - ۷- سینتیک آنزیم‌ها
- منابع :

- 1.H.Dugas & C.Penney", Bioorganic Chemistry a Chemical Approach to Enzyme Action," Springer New York,1981.
- 2.F.Vogtle,E.Weber (Eds.),"Biomimetic and Bioorganic Chemistry" I,II, Springer,1985,1986.

مباحث نوین در شیمی آلی

تعداد واحد : ۱ تا ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : با نظراستاد

تدریس آخرین پیشرفتهای شیمی آلی در سطح علمی بین المللی با
بررسی مجلات و کتب علمی منتشره در زمینه شیمی آلی.



شیمی حالت برانگیخته و حدود اسطهای فعال



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : ندارد

- ۱- ایجاد حالت برانگیخته و تشخیص آن
- ۲- ایجاد حالت های برانگیخته فعال به روش های شیمیایی و حرارتی و مطالعه آنها
- ۳- ایجاد حالت های برانگیخته فعال به روش های تابشی و مطالعه آنها
- ۴- ایجاد حالت های برانگیخته فعال به روش های الکتروشیمیایی و مطالعه آنها
- ۵- کاربرد شیمی حالت برانگیخته

1. Ware, W. " Creation and detection of the Excited state" Marcel Dekker, INC., New York and Basel, 1976, ISBN 0-8247-6451-X
2. Faulkner, L.R.; Glass, R.S., "Chemical and Biological generation of Excited states", Adam, W.; Cilento, G., Eds., Academic Press, New York, 1982.
3. Lever, A.B.P. "Excited states and Reactive Intermediates " , ACS symposium series, No.307 (1986).
ISSN 0097-6156; 307
ISBN 0-18412-0971-5

فتوشیمی پیشرفته



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : فتوشیمی

- ۱- حالت برانگیخته الکترونی در ترکیبات آلی دارای کروموفور و کمپلکس های معدنی .
- ۲- چگونگی ایجاد حالت برانگیخته توسط تابش نور با طول موج مناسب و تعیین آن توسط روشهای اسپکتروسکوپی .
- ۳- چگونگی زوال حالت برانگیخته - فتوفیزیک و فتوشیمی
- ۴- واکنشهای فتوجانشینی و فتوایزومریزاسیون در کمپلکس های عناصر واسطه .
- ۵- واکنشهای فتوردوکس (فتوشیمی همراه با انتقال الکترون)
- ۶- واکنشهای فتوشیمیایی بین سطحی (الکترولیت / الکتروود)
- ۷- واکنشهای فتوشیمیایی در سیستم های منظم (مایسل ، پلیمر ...)
- ۸- واکنشهای فتوشیمیایی تزکیبات آلی - فلزی
- ۹- کاربرد واکنش های فتوشیمیایی در تبدیل انرژی نوری به انرژیهای مفید دیگر .

1. Wrighton, M.S., "Inorganic and Organometallic Photochemistry," Advances in Chemistry Series, No. 168, 1978, ACS, ISBN 0-8412-0398-9.
2. Wrighton, M.S.; Interfacial Photoprocesses: Energy Conversion and Synthesis," Advances in Chemistry Series No. 184, 1980, ACS, ISBN 0-8412-0474-8.
3. Ferraudi, G.J., "Elements of Inorganic Photochemistry," Wiley-Interscience John-Wiley & Sons, Inc., 1988, ISBN(1-813225-7).
4. Yersin, H., and Vogler, A. eds. "Photochemistry and Photophysics of Coordination Compounds", Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York 1987 ISBN 3-540-17808-2.
5. Volman, D.H., Hammond, G.S. and Gollinck, K. eds, "Advances in Photochemistry " Vol. 14., John Wiley & Sons, New York, N.Y. 1988.

شیمی پلیمرهای معدنی

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاساز: ندارد



۱- پلی سیلانها و پلی کربوسیلانها

۲- پلی سیلانها و پلی سیلانوکسانها

۳- پلی سیلوکسانها

۴- پلی فسفازانها

۵- پلیمرهای ارگانو-اکسومریوط به فرآیند سل وژل

۶- پلیمرهای ترکیبات بوران

۷- پلیمرهای دارای فلزات و شبه فلزات

1. Ray, N.H., "Inorganic Polymers," Academic, New York, 1978.

2. Zeidin, M. and Wynne, K.J. and Allcock, H.L., ACS Symposium series,

No. 360-(1978), ISBN 0-8412-1442-5.

ساختمان و پیوند در ترکیبات معدنی



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : ندارد

- ۱- ساختمان و پیوند در ترکیبات عنا صراصلی
- ۲- ساختمان و پیوند در ترکیبات کمپلکس عنا صروا سطر
- ۳- ساختمان و پیوند در ترکیبات آلی فلزی
- ۴- ساختمان و پیوند در کلاسترهای عنا صروا سطر

1. Dekock, R., and Gray, H. "Chemical Structure and Bonding", Benjamin/Cummings, Redding, Mass, 1980.
2. Burdett, J.K. "Molecular Shapes: Theoretical Models of Inorganic Stereochemistry", Wiley-Interscience: New York, 1980.
3. Albright, T.A.; Burdett, J.K., and Whangbo, M.H. "Orbital Interactions in Chemistry", John Wiley, New York, NY (1985).
4. Johnson, B.F.G. "Transition Metal Clusters", Wiley Interscience, Chichester, Engl., (1980).
5. Cotton, F.A. and Walton, R.A. "Multiple Bonds Between Metal Atoms". Wiley; New York, (1982).
6. O'Keefe, M. and Navrotsky, A. eds., "Structure and Bonding in Crystals", Vols. I and II, Academic, New York, 1981.
7. Wells, A.F. "Structural Inorganic Chemistry, 5th ed., Oxford University Press: London, 1984.

مباحث نوین در شیمی معدنی

تعداد واحد : ۱ تا ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : با نظر استاد

تدریس آخرین پیشرفتهای شیمی معدنی و بررسی مجلات و کتب معتبر
بین المللی در زمینه های مختلف شیمی معدنی.



روشهای حرارتی و سینتیکی در تجزیه



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : شیمی تجزیه پیشرفته

اصول و ویژگی های وزن سنجی حرارتی - اساس روش تجزیه حرارتی
تفاضلی (DTA) راههای افزایش کارآیی روش DTA از طریق ترکیب
آن با سایر روشهای افزایش تجزیه نظیر طیف سنجی جرمی و استفاده از پرتو.
روشهای سینتیکی در واکنشهای کاتالیزوری و غیر کاتالیزوری، روشهای
سینتیکی در اندازه گیری مخلوط های مشابه - روشهای اندازه گیری مثبتی
بر سرعت تفاضلی واکنشها در تجزیه .

منابع :

1. W.Smykatz-Kloss, " Differential Thermal Analysis Springer Verlag, 1979.
2. W.M.Wendlandt, " Thermal Methods of Analysis" Interscience Pub. N.Y. 1967
3. H.A.Mottoia, " Kinetic Aspects of Analytical Chemistry ", John Wiley and Sons, 1982.



خوردگی پیشرفته ۲

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : الکتروشیمی پیشرفته

سرفصل درس:

فصل اول : پدیده شناختی سینتیک الکتrod:

مقدمه - ماهیت و سینتیک واکنش‌های الکتروشیمیایی - معادله تابلر - ولمر - فاکتورهای پیش‌نمایی - سینتیک چند مرحله‌ای الکتrod - مرحله تعیین‌کننده سرعت فرمولاسیون مکانیسم تحت فرضیه شبه تعادل

فصل دوم : بعضی جنبه‌های پایداری مواد :

مقدمه - اندازه‌گیری خوردگی - دیاگرام‌های سینتیک اوانس - هوار - محاسبه پتانسیل و سرعت خوردگی - سینتیک الکتروشیمیایی بعنوان پایه‌ای برای واکنش‌های ناهمگن - مکانیسم انحلال آهن - مکانیسم کاتالیستی - اثرات ناهمگن سطح

فصل سوم : جنبه‌های خوردگی آلیاژها

مقدمه - جنبه‌های تجربی اغلال - ثابت‌های سرعت اجزاء در انحلال، آلیاژها، دیاگرام تافل و کاهش جریان معادله از طریق آلیاژسازی - انحلال انتخابی - مطالعه انحلال آندی آلیاژهای دوتائی توسط تکنیک‌های الکتروشیمیایی و آنالیز سطح، شبیه‌سازی کامپیوتری انحلال انتخابی

فصل چهارم : روئین‌شدگی :

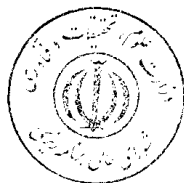
مقدمه - مکانیسم رشد فیلم روئین و ماهیت آن - پایداری فیلم روئین در آهن و نیکل، شکست فیلم‌های روئین و نقش یون کلرید در آن، منحنی‌های پلاریزاسیون (جاروی پتانسیودینامیک POS و پلاریزاسیون چرخه‌ای CP) دراوئینگی - طیف بین‌امپدانس الکتروشیمیایی

فصل پنجم : مکانیسم‌های اثر بازدارنده‌های خوردگی :

مقدمه - تصحیح ضرایب انتظار انتقال بار در پدیده جذب بازدارنده - بازدارندگی در اثر واکنش‌های کاتدی و آندی بازدارنده‌ها - اثرات ویژه بازدارنده‌ها بر اساس سرعت واکنش‌ها تشکیل لایه‌های پلیمری محافظ - اثرات بازدارندگی‌ها در شکنندگی هیدروژن - مکانیسم‌های دیگر

منابع :

1. J.O'M. Bockris and Shahed U.M. Khan, *Surface Electrochemistry*, 1993. Plenum Press, New York.
2. P. Marcus and J. Oudar, *Corrosion Mechanisms in Theory and Practice*, 1995, Mareel Dekker Inc., New York.
3. W. Stephen Tait, *An Introduction to Electrochemical Corrosion Testing for Practicing Engineers and Scientists*, 1994, Pairo Docs Publications, Racine, Wisconsin.
4. J.O'M. Bockris and A.K.N. Reddy, *Modern electrochemistry Vols. 1&2*, Plenum Pub. Coar. New York.



شیمی فیزیک محلولها

تعداد واحد: ۳
نوع واحد: نظری

سرفصل درس

- ۱- مقدمه: اهمیت محلولها و تقسیم‌بندی انواع محلولها (*Athematic, Regular*, ...).
- ۲- مقدمه‌ای بر مکانیک آماری محلولها:
(الف) تقریب یک سیال وان‌در‌والس - معادلات حالت در محلولهای مایع
(ب) تقریب دو سیال
- ۳- ترمودینامیک محلولهای فوق بحرانی
- ۴- شیمی فیزیک محلولهای آبی الکترولیت: معادلات پیترز و ... برای پیش‌بینی فعالیت، ضریب فعالیت، فشار بخار و ...
- ۵- تئوری‌های جدید مربوط به پیش‌بینی خواص ترمودینامیکی محلولهای چند تائی (سه‌تایی و بالاتر) شامل الکترولیت و حلال
- ۶- روشهای تجربی تعیین کمیت‌های ترمودینامیکی محلولها

مراجع:

1. E.A. Guggenheim, *Thermodynamics, An Advanced Treatment for Chemists and Physicists*, NHPL, 1988.
2. K.S. Pitzer, *Activity Coefficient in Electrolyte Solutions*, 3rd ed., 1999.
3. R.C. Reid J.M. Prausnitz and B.E. Polling, *The Properties of Gases and Liquids*, Fourth ed., McGraw - Hill, 1987.

۴- مقالات موجود در مجلات تمیز علمی



جمهوری اسلامی ایران

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری

برنامه درسی

دوره: دکتری

رشته: شیمی

گرایش: شیمی تجزیه

گروه: علوم پایه

کمیته: شیمی



مصوبه جلسه شماره ۲۴۱ مورخ ۱۳۷۱/۰۴/۱۴

شورای عالی برنامه ریزی آموزشی



جمهوری اسلامی ایران
وزارت فرهنگ و آموزش عالی
شورای عالی برنامه ریزی

مشخصات کلی، برنامه و سرفصل دروس دوره

دکترای شیمی

گروه علوم پایه

کمیته تخصصی شیمی



مصوب دویست و چهارمین جلسه شورای عالی برنامه ریزی

۱۳۷۱/۴/۱۴

—ورخ

بسم الله الرحمن الرحيم



برنامه آموزشی

دوره دکترای شیمی

گروه : علوم پایه
رشته : شیمی
دوره : دکترا
کمیته تخصصی : شیمی
شاخه :
کدرشته :

شورای عالی برنامه ریزی در دیست و جهل و یکمین جلسه
مورخ ۱۳۷۱/۴/۱۴ بر اساس طرح دوره دکترای شیمی که
توسط کمیته تخصصی شیمی گروه علوم پایه شورای عالی
برنامه ریزی تهیه شده و به تأیید این گروه رسیده است برنامه آموزشی این دوره
را در سه فصل (مشخصات کلی، برنامه و سرفصل دروس) بشرح پیوست تصویب
کرد و مقرر میدارد:

ماده ۱) برنامه آموزشی دوره دکترای شیمی از تاریخ تصویب برای کلیه
دانشگاهها و موسسات آموزش عالی کشور که مشخصات زیر را دارند لازم الاجرا
است .

الف : دانشگاهها و موسسات آموزش عالی که زیر نظر وزارت فرهنگ و آموزش عالی
اداره میشوند .

ب : موسساتی که با اجازه رسمی وزارت فرهنگ و آموزش عالی و بر اساس
قوانین ، تاسیس میشوند و بنابراین تابع مقررات شورای عالی برنامه ریزی میباشد .
ج : موسسات آموزش عالی دیگر که مطابق قوانین خاص تشکیل میشوند و باید تابع ضوابط
دانشگاهی جمهوری اسلامی ایران باشند .

ماده ۲) از تاریخ ۱۳۷۱/۴/۱۴ کلیه دوره‌های آموزشی و برنامه‌های مشابه موسسات در زمینه دکترای شیمی در همه دانشگاهها و موسسات آموزش عالی منکوح در ماده ۱ منسوخ میشوند و دانشگاهها و موسسات آموزش عالی یادشده مطابق مقررات میتوانند این دوره را دایر و برنامه جدید را اجرا نمایند.

ماده ۲) مشخصات کلی و برنامه درسی و سرفصل دروس دوره : دکترای شیمی در سه فصل جهت اجرا به وزارت فرهنگ و آموزش عالی ابلاغ میشود. رای صادره دویست و چهل و یکمین جلسه شورای عالی برنامه‌ریزی مورخ ۱۳۷۱/۴/۱۴ در مورد برنامه آموزشی دوره دکترای شیمی



۱) برنامه آموزشی دوره دکترای شیمی که از طرف گروه علوم پایه پیشنهاد شده بود با اکثریت آراء بتصویب رسید. ۲) برنامه آموزشی دوره دکترای شیمی از تاریخ تصویب قابل اجرا است.

رای صادره دویست و چهل و یکمین جلسه شورای عالی برنامه‌ریزی مورخ ۱۳۷۱/۴/۱۴ در مورد برنامه آموزشی دوره دکترای شیمی صحیح است بمورد اجرا گذاشته شود.

مورد تأیید است دکتر مصطفی معین وزیر فرهنگ و آموزش عالی رونوشت : به معاونت آموزشی وزارت فرهنگ و آموزش عالی جهت اجرا ابلاغ میشود.

سید محمد کاظم نائینی دبیر شورای عالی برنامه‌ریزی



بسم الله الرحمن الرحيم

فصل اول

مشخصات کلی دوره دکترای شیمی

با اتکاء به تجارب حاصل از اجرای دوره کارشناسی ارشد شیمی و توفیق در این زمینه و با عنایت به مشی کلی شورای عالی انقلاب فرهنگی در راستای تأسیس دوره دکترای علوم در قالب آئین‌نامه مربوطه، کمیته تخصصی شیمی‌گروه علوم پایه شورای عالی برنامه ریزی برنامه دوره دکترای شیمی را بر اساس نیازهای کشور جمهوری اسلامی ایران، در جهت تأمین اهداف عالی انقلاب فرهنگی بشرح زیر تدوین نموده است تا پس از تأیید گروه علوم پایه، جهت تصویب شورای عالی برنامه ریزی پیشنهاد شود.

۱- تعریف و هدف

دوره دکترای شیمی بالاترین مقطع تحصیلی دانشگاهی در این رشته میباشد که به اعطای درجه دکترای شیمی منتهی میگردد و شامل مجموعه‌ای هماهنگ از فعالیتهای آموزشی و پژوهشی است. از اهداف مهم این دوره، علاوه بر تأمین هیئت علمی دانشگاهها تربیت افرادی است که دارای تفکری خلاق و مستقل بوده و نهایتاً "بر روشهای پیشرفته پژوهشی احاطه یافته و با تسلطی که بر یک یا چند موضوع در شیمی پیدا میکنند، قادر به درک مشکلات علمی جامعه باشند و به حل آنها بپردازند. در این دوره ابداع نوآوری و گسترش دانش شیمی از اهمیت خاص برخوردار بوده و رسالت ویژه فارغ التحصیلان را تشکیل میدهد.

۲- نظام دوره

دوره دکترای شیمی به دو مرحله آموزشی و پژوهشی تقسیم میگردد:

مرحله آموزشی: این مرحله پس از پذیرفته شدن داوطلب در امتحان ورودی آغاز میگردد. هدف این مرحله برطرف ساختن کمبود اطلاعات علمی دانشجویان میباشد که با گذراندن برخی از دروس پیشرفته شیمی نقائص او مرتفع میگردد. این دوره با برگزاری یک امتحان جامع پایان میپذیرد.

مرحله پژوهشی: این مرحله پس از اتمام مرحله آموزشی و قبولی دانشجویان در امتحان جامع شروع میشود. هدف از این مرحله آشنائی کامل دانشجویان با شیوه‌های پژوهش و کسب توانائیهای لازم جهت انجام پژوهش در یک یا چند زمینه خاص شیمی میباشد که میتواند به کشف یا نوآوریهای در شیمی منتهی گردد. حاصل این دوره با تدوین و تالیف رساله



همراه است که با دفاع از آن ، این دوره نیز پایان میپذیرد

۲- نحوه آزمون ورودی

آزمون تخصصی ورودی دوره دکترای شیمی از دروس پایه دوره کارشناسی ارشد شیمی در زمینه های شیمی آلی ، شیمی تجزیه ، شیمی معدنی و شیمی فیزیک بعمل میآید . این امتحان تخصصی همراه با امتحان زبان خارجه بصورت کتبی برگزار میگردد . نمرات این آزمون در موضوعات فوق الذکر به انضمام نمرات داوطلبان در دوره کارشناسی ارشدو کارشناسی ، همچنین معرفی نامه های علمی که بوسیله اساتید دوره های قبلی داوطلب مستقیم^۱ به دانشگاه ارسال میگردد و نیز مصاحبه علمی، ملاک گزینش دانشجو خواهد بود .
دارندگان دانشنامه کارشناسی ارشد در رشته شیمی از یکی از دانشگاههای معتبرداخل یا خارج کشور ، که به تائید وزارت فرهنگ و آموزش عالی رسیده است ، داوطلبان اصلی شرکت کننده در آزمون ورودی را تشکیل میدهند .

تبصره ۱:

در صورتیکه داوطلب دارای درجه کارشناسی ارشد در یکی از رشته های علوم پایه ، علوم پزشکی و فنی و مهندسی باشد و هم چنین دارنده مدرک دکترای عمومی گروه پزشکی که بتوانند از عهده امتحان ورودی و شرایط مندرج در آئین نامه دکترای مصوب شورای عالی برنامه ریزی برآید، میتواند در دوره دکترای شیمی ادامه تحصیل دهد.

تبصره ۲:

دانشجویان نیمسال آخر کارشناسی ارشد رشته شیمی و سایر رشته ها میتوانند در آزمون ورودی شرکت کنند لیکن ثبت نام آنها منوط به ارائه دانشنامه کارشناسی ارشد است.

تبصره ۳:

داوطلب علاوه بر قبولی در آزمون ورودی میبایستی صلاحیت عمومی ورود به دوره دکترای را نیز دارا باشد .

۴- مراحل دوره :

الف : مرحله آموزشی : دانشجویی که برای دوره دکترای ثبت نام می نماید در این مرحله موظف است علاوه بر سمینارهای او ۲ شانزده واحد از دروس جدول پیشنهادی ضمیمه ویسا معادل آن که توسط گروه و یا دانشکده ارائه میشود را با مشورت استاد راهنما انتخاب نموده و

با موفقیت بگذرانند. مضافاً در مواردیکه استاد راهنما ضروری تشخیص دهد، دانشجو باید یک یا چند درس اضافی را از سایر رشته‌هاییکه در ارتباط با کار پژوهش وی میباشد نیز با موفقیت بگذرانند. تعداد و نوع دروس باید باتصویب شورای تحصیلات تکمیلی گروه یلدانشکده باشد و در هر صورت تعداد کل واحدها نباید از میزان واحدهای تعیین شده در آئین نامه دکترای مصوب شورایعالی برنامه ریزی، بیشتر گردد. بهر حال برنامه آموزشی دوره دکترای هر گروه و یا دانشکده باید طبق بند ۱ رای صادره یکصد و نود و ششمین جلسه شورایعالی برنامه ریزی مورخ ۱۳۶۹/۲/۳۰ در مورد واگذاری پاره‌ای از اختیارات شورایعالی برنامه ریزی به دانشگاهها تدوین گردد. موضوع سمینار ۱ توسط دانشجو و با موافقت استاد راهنما تعیین میگردد ولیکن مطالب سمینار ۲ باید حتماً در ارتباط با برنامه پژوهشی دانشجو باشد. استاد راهنما طبق شرایط مندرج در آئین نامه دکترای مصوب شورایعالی برنامه ریزی تعیین میشود. برای هر یک از سمینارهای فوق یک واحد درسی منظور می‌شود. پس از گذراندن دروس فوق الذکر، دانشجو می‌تواند در امتحان جامع شرکت نماید. این امتحان در سطح دروسی خواهد بود که دانشجو در مرحله آموزشی داشته است و شرایط آن طبق آئین نامه دوره دکترای مصوب شورایعالی برنامه ریزی میباشد. دانشجو جهت اتمام رسانیدن مرحله آموزشی میبایستی توانائی خود را در استفاده از زبانهای خارجی به یکی از دو طریق زیر باثبات رساند:

۱- قبولی در امتحان کتبی ترجمه متون شیمی در یکی از زبانهای انگلیسی، فرانسه، آلمانی یا روسی

۲- تسلط به یکی از زبانهای خارجی فوق الذکر به نحوی که بتواند در زمینه تخصصی مطلوب خلاصه کارهای تحقیقاتی یا طرح تحقیقاتی خود را به آن زبان بیان کند.

ب: مرحله پژوهشی: دانشجویانیکه مرحله آموزشی را با تمام رسانیده‌اند بایستی جهت ادامه تکمیل در مرحله پژوهشی ثبت نام نموده و به فعالیتهای علمی و تحقیقاتی در زمینه مورد نظر خود و نیز تنظیم و تدوین رساله بپردازند. این فعالیتهای علمی و تحقیقاتی با هدایت و نظارت استاد راهنما و زیر نظر کمیته اساتید مشا و ر که طبق شرایط آئین نامه دوره دکترای مصوب شورایعالی برنامه ریزی تعیین میشوند، بطریق زیر انجام میگردد:

دانشجو موظف است در ظرف شش ماه اول مرحله پژوهشی بار اهنمائی استاد راهنما عنوان رساله خود را همراه با طرح کامل موضوع تحقیقاتی خود مشخص نموده و پس از تأیید



اساتید مشاور جهت تصویب به گروه آموزشی ارائه دهد. ارزش پایان نامه ۴۴ واحد می باشد.

تبصره ۱:

چنانچه طرح پژوهشی فوق الذکر به تصویب نرسد یا دانشجو با توافق استاد راهنما بخواهد موضوع پژوهشی خود را تغییر دهد موظف است که حداکثر ظرف شش ماه دیگر طرح خود را کامل، تصحیح یا تجدید کند بگونه ای که تصویب آن میسر باشد. دانشجو باید نتیجه تحقیقات خود را هر شش ماه یکبار به اطلاع کمیته ای متشکل از استاد راهنمای و اساتید مشاور خود برساند.

تبصره ۲:

در صورتیکه پیشرفت دانشجوی در کار تحقیقاتی بعد از هر شش ماه مطلوب نباشد، بنا بر این درخواست استاد راهنما و تأیید اساتید مشاور و موافقت شورای تحصیلات تکمیلی برای بار اول به دانشجو کتبا "اخطار" میشود که در صورت عدم پیشرفت در شش ماه بعدی از ادامه تحصیل او جلوگیری خواهد شد.



تبصره ۳:

با توجه به پیشرفتهای سریع دانش شیمی و لزوم همگام بودن پژوهشگران این رشته با آنها و به منظور ترغیب دانشجویان به مطالعات علمی و مسأله "القاء حس بازنگری و استمرار آموزش در مراحل بعد از تحصیل، ارزیابی اطلاعات حاصل از مطالعات انفرادی آنها در مرحله پژوهشی و قبل از دفاع از پایان نامه به شیوه زیر خواهد بود.

هر دو ماه یکبار (جمعا " پنج نوبت در سال) آزمونهای کتبی در زمینه های مختلف شیمی توسط اعضاء گروه آموزشی طرح و ارائه میگردد. موضوع سئوالات از بین مطالب تحقیقاتی منتشر شده در مجلات علمی شیمی موجود در کتابخانه هردانشگاه و یا سمینارهای مختلف ارائه شده در بخش یا دانشکده انتخاب میشود. موفقیت در سه آزمون از ده آزمون متوالی قبل از دفاع از پایان نامه الزامی خواهد بود.

ج - دفاع از رساله :

پس از آماده شدن رساله و اعلام آمادگی دانشجو و تأیید استاد راهنما، دفاع از رساله صورت خواهد گرفت. همزمان با تشکیل جلسه دفاع، لازم است از نتایج کار تحقیقاتی دانشجو، مندرج در پایان نامه حداقل یک مقاله توسط یکی از مجلات بین المللی مورد تأیید وزارت فرهنگ و آموزش عالی جهت انتشار پذیرفته شده و مراتب به جلسه دفاع

فصل دوم

جدول دروس



از رساله منعکس شود . جلسه دفاع با حضور هیئت داوران ، طبق آئین نامه دوره دکتری مصوب شورای عالی برنامه ریزی تشکیل می شود . دانشجو در جلسه ای که در حضور این هیئت تشکیل میشود گزارش از کار تحقیقاتی خود را عرضه و از آن دفاع می نماید . اعطای درجه دکتری به داوطلب منوط به پذیرفته شدن رساله بوسیله هیئت داوران است .

تبصره :

دردوران تحصیل در دوره دکترای شیمی ، دانشجو موظف به رعایت کلیه آئین نامه ها و مقررات دوره دکتری وزارت فرهنگ و آموزش عالی میباشد .



فهرست دروس دوره دکتری شیمی

کد درس	نام درس	تعداد واحد	ساعت		پیشنیازها زمان ارائه درس
			نظری	عملی	
۱	نظریه گرافهای شیمی	۳	۵۱	۵۱	ندارد
۲	کامپیوتر در شیمی	۳	۵۱	۵۱	ندارد
۳	تحلیل آماری نتایج	۳	۵۱	۵۱	ریاضیات آماری
۴	روشهای نوین در آنالیز دستگامی	۳	۵۱	۵۱	شیمی تجزیه پیشرفته
۵	الکتروشیمی تجزیه ای در حلالهای ناآبی	۳	۵۱	۵۱	الکتروشیمی و شیمی تجزیه در محیطهای غیرآبی
۶	لیزر و کاربرد آن در شیمی	۳	۵۱	۵۱	اسپکتروسکوپی تجزیه ای
۷	روشهای رادیوشیمیایی	۳	۵۱	۵۱	ندارد
۸	مباحث نوین در شیمی تجزیه	۳	۵۱	۵۱	با نظراستاد
۹	ترمودینامیک فرآیندهای برگشتناپذیر	۳	۵۱	۵۱	شیمی فیزیک پیشرفته
۱۰	ترمودینامیک آماری ۲	۳	۵۱	۵۱	ترمودینامیک آماری ۱
۱۱	ترمودینامیک شیمیایی جامدات	۳	۵۱	۵۱	شیمی فیزیک پیشرفته
۱۲	ریاضیات در شیمی فیزیک	۳	۵۱	۵۱	ندارد
۱۳	سمینار ۱	۱	۱۷	۱۷	ندارد
۱۴	شیمی کوانتومی ۳	۳	۵۱	۵۱	شیمی کوانتومی ۲
۱۵	طیفسنجی مولکولی ۲	۳	۵۱	۵۱	طیفسنجی مولکولی ۱
۱۶	مباحث نوین در شیمی فیزیک	۳	۵۱	۵۱	با نظراستاد
۱۷	شیمی هتروسیکلیک پیشرفته	۳	۵۱	۵۱	شیمی آلی پیشرفته



ادامه فهرست دروس دوره دکتری شیمی

پیشنیازها زمان ارائه درس	ساعت			تعداد	نام درس	کد درس
	عملی	نظری	جمع			
ندارد	-	۱۷	۱۷	۱	سینار ۲	۱۸
مبانی پلیمر	-	۵۱	۵۱	۳	شیمی پلیمر پیشرفته	۱۹
شیمی آلی پیشرفته	-	۵۱	۵۱	۳	پیشرفته‌های نوین در ترکیبات طبیعی	۲۰
شیمی آلی پیشرفته	-	۵۱	۵۱	۳	شیمی آلی حیاتی	۲۱
با نظراستاد	-	۵۱	۵۱	۳	مباحث نوین در شیمی آلی	۲۲
ندارد	-	۵۱	۵۱	۳	شیمی حالت برا نگیخته و حدود اسطهای فعال	۲۳
فتوشیمی	-	۵۱	۵۱	۳	فتوشیمی پیشرفته	۲۴
ندارد	-	۵۱	۵۱	۳	شیمی پلیمرهای معدنی	۲۵
ندارد	-	۵۱	۵۱	۳	ساختمان و پیوند در ترکیبات معدنی	۲۶
با نظراستاد	-	۵۱	۵۱	۳	مباحث نوین در شیمی معدنی	۲۷
شیمی تجزیه پیشرفته	-	۵۱	۵۱	۳	روشهای حرارتی و سینتیکی در تجزیه	۲۸



فصل سوم

سرفصل دروس



نظریه گرافهای شیمیائی

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز: ندارد

مبانی نظریه گرافها - گرافهای شیمیائی - ماتریسهای توپولوژیکی -
خصلت بس جمله ای یک گراف شیمیائی - جنبه های توپولوژیکی نظریه هوکل -
مولکولهای همطیف - مولکولهای زیرطیف - انرژی رزونانس توپولوژیکی -
شمارش ساختارهای ککوله ای - الگوی مدارهای مزدوج شده - شاخص های
توپولوژیکی وکلازبردهای آنها در پیشگویی رابطه های ساختار / خواص و ساختار
/ فعالیت - شمارش ایزومرها .

منابع :

Trinajstić, N., "Chemical Graph Theory", CRC Press Inc.,

Vol I & II, 1983.



کامپیوتر در شیمی

تعداد واحد : ۳

نوع واجید :

پیشنیاز : ندارد

برنامه نویسی کامپیوتری زبان فورترن (Fortran 77), آشنائی با کامپیوتر فورترن 77 (FORTVS) و فورترن چهار (FORTHX), امکانات و کاربرد CMS, VM در کامپیوترهای IBM 370. آشنائی با برنامه های EXEC در کامپیوترهای مرکزی, آشنائی با سیستم عامل در کامپیوترها (MS-DOS) و نحوه استفاده از یک Software و package.

منابع :

C.E.Klopfenstein, C.L.Wilkins, Computers in Chemical and Biochemical Research, Academic Press

T.R.Dickson, The Computer and Chemistry W.H.Freeman and Company.

Delos F.Detar, Computer Programs for Chemistry W.A.Benjamin, INC.

K.Ebert, H.Ederer and T.L.Isenhour, Computer applications in Chemistry, Verlag Chem. 1989.



تحلیل آماری نتایج



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : ریاضیات آماری

بررسی خطاها در تجزیه شیمیایی ، اندازه گیری ها و خطاهای مربوطه
در هر روش روشهای عددی و نموداری در تمییز خطاها . تستهای معنی دار -
آنالیز برگشتی و وابستگی کنترل کیفیت و نمونه برداری و بررسی خطاها ،
آنالیز فاکتوری ، بهینه سازی کمپلکس در تجزیه شیمیایی محاسبات جدید .

منابع :

1. G.W. Snedecor & W. Cochran, Statistical Methods, Iowa State University Press 6th edition, Ames, Iowa (1976).
2. K. Eckschlager, M.Sc., D.Ph., dr. R.A. Chalmers Van Nostrand Reinhold Company
Errors, Measurement and results in Chemical Analysis.
3. J.C. Milner & J.N. Milner, Statistics for Analytical Chemistry, 2nd edition, Ellis Harwood, Sussex 1987.
4. O.L. Davies. and P.L. Goldsmith, Statistical Methods in Research and Production, Longmans, London, 1982.
5. G.P. Box, W.G. Hunter and J.S. Hunter, Statistics for Experimentalists, Wiley, New York, 1978.
6. G.T. Werninont, use of Statistics to develop and Evaluate Analytical Methods, Association of official Analytical Chemists, Arlington, Virginia, 1985.
7. R. Caulcutt. and R. Boddy, Statistics for Analytical Chemists. Chapman & Hall, London, 1983.

روشهای نوین در آنالیز دستگاهی

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : شیمی تجزیه پیشرفته

تکنیک های GC/MS و GC/IR و چگونگی پیوند دستگاه GC به دستگاه های MS و IR - دستگاه پیوندی GC/FT-IR - مقایسه تکنیک های پیوندی GC/IR و GC/MS و دستگاه های MS و IR تکنیک LC/MS و چگونگی پیوند دستگاه و مقایسه آن با دستگاه GC/MS - تکنیک های TLC/IR و GC/MS و چگونگی پیوند این دستگاهها تکنیک GC/MS/IR و چگونگی پیوند این دستگاهها و مقایسه آن با دستگاه های GC/MS و MS/ICP - تکنیک و چگونگی پیوند آن -

منابع :

- 1.G.M.Message," Practical Aspects of Gas Chromatography/Mass Spectrometry ",Wiley,New York 1984.
- 2.E.S.Yeung",Dectectors for Liquid Chromatography ",John Wiley and Sons,1986.



الکتروشیمی تجزیه‌ای در حلال های ناآبی



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : الکتروشیمی تجزیه‌ای ، شیمی تجزیه در محیطهای غیرآبی

- اثر حلال بر واکنش های الکتروشیمیایی (تاثیر بر سینتیک مبادله الکترون ، سینتیک واکنش شیمیایی همراه برپدیته جذب سطحی و...) محدوده فعالیت الکتروشیمیایی (Electroactivity Lange) در حلالهای ناآبی ، تاثیر نوع حلال ، نوع الکترولیت حامل و جنس الکتروده بر وسعت این محدوده .
 - روش های الکتروآنالیتیکی در حلالهای ناآبی ، پتانسیومتری ، ولتامتری و راههای گوناگون آن : پلاروگرافی ، ولتامتری با الکتروشدهای چرخان ، ولتامتری چرخه‌ای .
 - کاربرد روشهای ولتامتری در تعیین تابعهای ترمودینامیکی ، تجزیه کیفی تجزیه کمی و تعیین مکانیسم فرآیندهای الکترودی .
 - کروماتوگرافی ، الکترولیز ممتد . دیگر روشهای کمکی نظیر ESR واسپکتروالکتروشیمی در حلال های ناآبی .
 - مروری بر شرایط اجرای روش های الکتروشیمیایی تجزیه در حلالهای ناآبی
 - اشاره ای بر واکنش های اکسایش و کاهش نمونه در حلالهای ناآبی .
 - کاربرد نمک های مذاب بعنوان حلال در الکتروشیمی تجزیه
- منابع :

1. G.Charlot, I. Badoz-Lambling and B. Tremillon, *Electrochemical Reactions*, Elsevier, 1962.
2. C.K.Mann and K.K.Barnes, *Electrochemical Reactions in Nonaqueous systems*, Marcel Dekker Inc., 1970.
3. M.M.Baizer (ed), *Organic Electrochemistry*, Marcel Dekker Inc., 1973.

لیزر و کاربرد آن در شیمی



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : اسپکتروسکوپی تجزیه‌ای

- ۱- اصول فیزیکی لیزر (مفاهیم مقدماتی ، خواص لیزر ، برخورد لیزر با ماده و انواع لیزر).
- ۲- طیف‌بینی تجزیه‌ای با استفاده از اتم‌کننده‌های لیزری (لیزرهای حالت جامد ، مایع و گازی) طیف‌ها ، دکتورها ، اسپکتروگرافها و چگونگی سهمیه‌سازی شرایط کار با لیزر ، دامنه کاربرد تجزیه‌ای
- ۳- طیف‌سنجی جذب اتمی ، فلورسانس اتمی ، جذب مولکولی و فلورسانس مولکولی

منابع :

1. Nicolò Omenetto " Analytical Laser Spectroscopy " John Wiley & Sons, 1979.
2. E.H. Piepneier " Analytical Applications of Lasers " John Wiley 1987.
3. D.L. Andrews. "Lasers in Chemistry ", Springer-Verlag 1986.

روش های رادیوشیمیایی

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : ندارد

- اساس رادیواکتیویته - انواع تشعشعات هسته‌ای و ویژگی های آنها
ابزارهای تشخیص و اندازه‌گیری تشعشعات رادیواکتیو - انواع واکنش های
هسته‌ای و ویژگی های آنها - راههای آداسازی نمونه‌های فعال شده - واکنش
های نوترون - گاما (n, γ) - منابع تولید نوترون - تجزیه روش فعال
سازی (AA) - شرایط انجام واکنش های هسته‌ای و بهره‌برداری تجزیه‌ای
از آنها - ویژگی های آماری تجزیه‌های رادیوشیمیایی - معرف های رادیو-
آکتیو - استفاده از معرف های رادیواکتیو در تیتراسیون های رادیومتری .

منابع :

- 1.W.S.Lyon,Jr. (ed.),"Guide to Activation Analysis.", Van
Nostrand Co.Inc.N.Y.1964.
- 2.T.Braun and J. Toigyessy," Radiometric ", Pergamon Press,
N.Y.,1967.
- 3.M.T.Kelley (ed)," Radiochemistry, Connected Works" Analytical
Chemistry,1959.



مباحث نوین در شیمی تجزیه

تعداد واحد : ۱ تا ۳

نوع واحد: نظری

پیشنیاز : با نظراستاد

تدریس آخرین پیشرفتهای علمی در شیمی تجزیه از بررسی آخرین منابع
معتبر علمی شیمی تجزیه در سطح بین المللی .



ترمودینامیک فرآیندهای برگشتناپذیر

تعداد واحد: ۳

نوع واحد: نظری

پیشنیاز: شیمی فیزیک پیشرفته

۱- برخی مفاهیم ترمودینامیک مرتبه اول

۲- توازن انتروپی و حصول انتروپی

۳- نیرو، شار و معادلات پدیده شناسی

۴- قضیه دوچانگی انزاگر

نظریه افت و خیز

بزرگشت پذیری میکروسکوپی

وایسازی (رگرسیون) افت و خیز

۵- کاربرد قضیه انزاگر در پدیده ترموالکتریک و اشرودفر

۶- حالات ایستا و سیستمهای بیولوژیکی

منابع:

S.R.de Groot and J.Mazur, " Non-Equilibrium Thermodynamics",
North Holland Publishing Co.,Amsterdam (1962).



ترمودینامیک آماری ۲



تعداد واحد: ۳

نوع واحد: نظری

پیشنیاز: ترمودینامیک آماری ۱

آمار بلورها

طیف ارتعاشی بلور تک اتمی، نظریه های انیشتاین ودبای در مورد ظرفیت گرمایی بلورها، فونونها، نقص بلوری و انواع آن

محاسبات و بررسی آماری شبکه های بلوری

بررسی و محاسبه کمیت های ترمودینامیکی بلورها در حالت پایدار ترمودینامیکی، روشهای تقریبی برای محاسبه عامل ترکیبی (روش بررسی حل دقیق خواص ترمودینامیکی شبکه های یک بعدی، دوبعدی و سه بعدی تبدیل فاز جامد - جامد

مایعات و گازها

نظریه ساختمان با اهمیت و نظریه لندارد - جونز و نشر، بررسی سیستم های ایده آل در میدان های الکتریکی و مغناطیسی، بررسی گازهای غیرایده آل
از دیدگاه آماری
منابع:

1. D.A. McQuarrie " Statistical Thermodynamics Happer and Row 1973.
2. T.L. Hill " Statistical mechanics" New York McGraw-Hill 1956
3. T.L. Hill " introduction to statistical thermodynamics" Addison-Wesly Publishins Company, Inc. London 1960

ترمودینامیک شیمیایی جامدات

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : شیمی فیزیک پیشرفته

مقدمه‌ای بر قوانین ترمودینامیک با تأکید بر خواص جامدات ، خواص
ترمودینامیکی محلولهای جامد ، تعادل بین فازهای چندجزئی ،
ترمودینامیک سطح و فصل مشترک ، نقاشی در بلورهای یونی و فلزی ،
نقاشی در نیمه‌هادی ها ، نقاشی در ترکیبات استکیومتری و غیر استکیومتری
متر .

منابع :

- 1- R,A.Swafen " Thermodynamiers of Solids" 2nd.Ed.,
John Wiley 1972.



ریاضیات در شیمی فیزیک

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : ندارد

۱- آنالیز برداری

۲- سیستم های مختصات

۳- مختصری درباره آنالیز تانسوری

۴- دترمینانها و ماتریس ها

۵- سریها

۶- توابع متغیرهای مختلط

۷- معادلات دیفرانسیل - جوابهای سری مانند (Power Series Solutions)

۸- معادلات دیفرانسیل

۹- سریهای فوریه و انتگرالهای فوریه

منابع :

1. G.Arften, Mathematical Methods for Physicists (Academic Press. Inc.,1985)
2. E.Butkov, Mathematical Physics (Addison Wesley,1973).
3. M.L.Boas, Mathematical Methods in the Physical Sciences (John Wiley & Sons,1983).



سمینارا

تعدادواحد : ۱

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : ندارد

موضوع ونحوه، اجرای آن توسط شورای تحمیلات تکمیلی تعیین می شود.





تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : شیمی کوانتومی ۱

Generalized Angular Momentum

- اندازه حرکت زاویه‌ای تعمیم یافته

تثوری عمومی اندازه حرکت زاویه‌ای - کاربرد عملکردهای بالابرنده
 وپایین برنده در تعیین بردارهای خاص ومقادیر خاص عملکردهای اندازه
 حرکت زاویه‌ای - اندازه حرکت زاویه‌ای وچرخش ها - جفت شدن دوبردار
 اندازه حرکت زاویه‌ای - جفت شدن سه بردار اندازه حرکت زاویه‌ای - ضرائب
 Clebsch Gordon و Racah - نمادهای $3J$ و $6J$ وغیره - نمایش
 ماتریسی چرخش ها - سریهای Clebsch Gordon - تانسورهای کاهش ناپذیر
 Wigner Eckart - عناصر ماتریس ضرب های اسکالر، تانسورهای
 کاهش ناپذیر - میدان های اسکالر، برداری واسپینور (Spinors).

- سیستم های چندالکترونی

بحث عمومی درباره ذرات یکسان وخواص تقارن توابع موج آنها
 درمینانهای Slater - محاسبه عناصر ماتریس عملکردهای یک ودوالکترونی
 واستنتاج قواعد Slater - Condon - تقریب میدان مرکزی - معادلات
 Hartree-Fock - خواص جوابهای Hartree-Fock، روش های محاسبه
 عددی - Configuration interaction - چندتایی های (multiplets)
 مربوط به دوالکترون - نمادهای طیفی سیستم های الکترونی - سنتسز
 توابع موج چندتایی ها - محاسبه انرژی چندتایی ها - اثرمتقابل اسپین
 - اوربیتال درسیستم های چندالکترونی .

منابع :

- 1.M.Weissbluth, Atoms and Molecules (Academic Press, 1978)
- 2.M.Alonso and H.Valk, Quantum Mechanics; Principles and Applications (Addison- Wesley, 1973).

1. R. Loudon, "The Quantum Theory of light", Clarendon Press. Oxford, 1981.
2. J. I. Steinfeld "Molecules and Radiation"; An Introduction to Modern Molecular Spectroscopy, The MIT Press, 1979.
3. B. P. Straugham and S. Walker, Vols. I, II, III (Chapman and Hall Ltd, 1976).
4. S. Califano, "Vibrational States", John Wiley & Sons, 1976.



طیف‌سنجی مولکولی ۲



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : طیف‌سنجی مولکولی ۱

- طیف‌سنجی الکترونی

تقریب بورن - اپنهايمر Born-Oppenheimer approximation

طیف‌سنجی الکترونی مولکولهای دواتمی - اصل فرانک کوندون - طیف‌سنجی

الکترونی مولکولهای چنداتمی - طیف‌سنجی فوتوالکترونی

- طیف‌سنجی تشدید مغناطیسی Magnetic resonance Spectroscopy

ممانهای مغناطیسی هسته‌ای - تشدید مغناطیسی هسته‌ای - جابجایی های

شیمیایی - حفت‌شدنهای اسپین - اسپین هسته‌ای - آسایش اسپینی - تشدید

اسپین الکترونی -

- تئوری گروهها Group Theory - یادآوری مفاهیم بنیادی تئوری

گروهها - تئوری گروهها و ساختمان الکترونی مولکولها - تئوری گروهها

و ارتعاشات مولکول - تئوری گروهها و چرخش های مولکولی

منابع :

Ira N. Levine, Molecular Spectroscopy (John Wiley, 1975)

مباحث نوین در شیمی فیزیک

تعداد واحد : ۱ تا ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : با نظراستاد

تدریس آخرین پیشرفتهای شیمی فیزیک و بررسی مجلات و کتب معتبر
بین المللی در زمینه های مختلف شیمی فیزیک .



شیمی هتروسیکلیک پیشرفته



تعداد واحد: ۳

نوع واحد: نظری

پیشنیاز: شیمی آلی پیشرفته

در این درس راجع به بسیاری از ترکیبات سیکلیک و آروماتیک که دارای اتمهای مختلفه ازت، گوگرد، اکسیژن، سیلنیم، تلوریوم و غیره میباشند میتوان صحبت کرد. هر مورد شامل واکنشها و مکانیسم آنها، سنتزهای مختلفه اسپکتروسکوپی و در بعضی از موارد بیوسنتز مواد مورد نظر بحث میگردد.

منابع:

1. Elderfield, R.C. "Heterocyclic Compounds" Wiley, New York.
2. Katritzky, A.R. "Physical Methods in Heterocyclic Chemistry", Academic Press, New York.
3. Katritzky, A.R. "Advances in Heterocyclic Chemistry", Academic Press, New York.
4. Weisberger, A. "Heterocyclic Compounds", Interscience Publishers, New York.
5. E.C. Taylor & A. Weisberger "General Heterocyclic Chemistry Series" Wiley-Interscience, New York.
6. Acheson, R.M., "An Introduction to the Chemistry of Heterocyclic Compounds", 2nd Ed. Interscience New York.
7. Albert, A. "Heterocyclic Chemistry: An Introduction", Athlone Press, London.
8. Allcock, M.R. "Heteroatom Ring Systems and Polymers", Academic Press, New York.
9. Badger, G.M. "The Chemistry of Heterocyclic Compounds", Academic Press, New York.
10. Fitton, A.D. and Sma R.K., "Practical Heterocyclic Chemistry", Academic Press, New York.

سمینار ۲

تعداد واحد: ۱

نوع واحد: نظری

پیشنیاز: ندارد

موضوع ونحوه، اجرای آن توسط شورای تحمیلات تکمیلی تعیین می شود.



شیمی پلیمر پیشرفته



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : مبانی پلیمر

- ۱- مفهوم وزن مولکولی متوسط و توزیع اوزان مولکولی در سیستم خطی مرحله‌ای و در سیستم غیرخطی مرحله‌ای .
- ۲- تهیه پلیمرهای : با مقاومت حرارتی بالا، از طریق باز شدن حلقه پلیمرهای فعال نوری ، پلیمرهای زنده ، پلیمرهای هادی ، پلیمری الکتروولیت ها ، پلیمرهای ارگانومتالیک .
- ۳- سنتیک پلیمریزاسیون Ziegler-Natta
- ۴- واکنش های : سنتزی پلیمرها ، از هم پاشی پلیمرها ، پلیمریزاسیون در محیط آبی ، ایزومری شدن پلیمرها .
- ۵- پلیمرهای تحقیقاتی : انواع مختلف پلیمرهای هتروسیکلیک ، پلیمریزاسیون : از طریق واکنش دیلز آلدِر ، واکنش اضافی (۳دی پلار ، کوپلی- مرهای مختلف ، پلیمرهای محلول در آب ، پلیمرهای جدید از طریق واکنش استخلافی الکتروفیلی آروماتیک ، پلیمرهای حیاتی .
- ۶- فتوشیمی فاز شروع در پلیمریزاسیون رادیکالی .
- ۷- مختصری در مورد شیمی فضائی پلیمرها .

منابع :

1. Odian, G., "Principles of Polymerization", McGraw-Hill, 1970.
2. Lenz, R.W., "Organic Chemistry of Synthetic High Polymers", Interscience Publishers, 1967.
3. Flory, P.J., "Principles of Polymer Chemistry", Cornell University Press, 1953.
4. Culbertson, B.M.; McGrath J.E., "Advances In Polymer Synthesis", Polymer Science and Technology Series Vol. 31, Plenum Press, 1985.
5. Frisch, K.C., Reegen, S.L., "Ring Opening Polymerization", Marcel Dekker.
6. Keii, T. "Kinetics of Ziegler-Natta Polymerization, Kodanasha LTD.
7. Ketley, A.D., "The Stereochemistry of Macromolecules". Edward Arnold Publishers.
8. Rempp, P.; Merrill, E.W., "Polymer Synthesis" Huething & Wepf Publishers.
9. Mathur, N.K.; Narang, C.K.; Williams, R.E. "Polymer as Aids in Organic Chemistry". Academic Press.



پیشرفتهای نوین در ترکیبات طبیعی

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : شیمی آلی پیشرفته

در این درس راجع به قسمتی از سنتز، بیوسنتز، استریوشیمی، اسکتروسکپی و استفاده‌های دارویی آکالوئیدها، استروئیدها، پروستاگلندین‌ها، نوکلئوئیدها، نوکلئوزیدها، ماکرولیدها، بتالاکتسام‌ها و غیره میتوان بحث و گفتگو کرد.

1. J.S. Bindra and R. Bindra, " Prostaglandin Synthesis", Academic Press, New York, 1977.
2. W.W. Zorbach, R.S. Tipson, "Synthetic Procedures in Nucleic Acid Chemistry", Vol. 1 and 2, Wiley interscience New York, 1968, 1973.
3. J. Elks (Ed). "Recent Advances in the Chemistry of β -Lactam Antibiotics", Glaxo Research Ltd. The Chemical Society, Burlington House London W1V 0BN.
4. G.I. Gregory, (Ed), "Recent Advances in β -Lactam Antibiotics", Second International Symposium, Glaxo Research Ltd. The Chem. Soc. Burlington House, London, W1V 0BN, 1980.
5. L. Fieser and M. Fieser, "Steroids" Reinhold, New York 1959.
6. R. Monske, and F. Helmuth, " The Alkaloids", Academic Press, New York, from 1950.
7. A. Katritzky (Ed), "Advances in Heterocyclic Chemistry", Academic Press. New York, from 1963.
8. Journals; JACS, JOC, J. Chem. Soc, Heterocycles, Tetrahedron, Helv. Chem, Acta. Can. J. Chem. etc.

شیمی آلی حیاتی



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : شیمی آلی پیشرفته

- ۱- مقدمه‌ای بر شیمی آلی حیاتی شامل پدیده نزدیکی و جورشدن ملکول‌های حیاتی و مدل‌های آلی
 - ۲- خصوصیت مولکول‌های آلی حیاتی و آمینواسیدها و پپتیدها
 - ۳- شیمی آلی حیاتی فسفات‌ها
 - ۴- مدل‌های آنزیمی (شیمی کمپلکس دهنده‌ها - پذیرنده‌ها)
 - ۵- یون‌های فلزی و نقش آنها در فعالیت آنزیم‌ها
 - ۶- شیمی کوآنزیم‌ها
 - ۷- سینتیک آنزیم‌ها
- منابع :

- 1.H.Dugas & C.Penney," Bioorganic Chemistry a Chemical Approach to Enzyme Action," Springer New York,1981.
- 2.F.Vogtle,E.Weber (Eds.),"Biomimetic and Bioorganic Chemistry" I,II, Springer,1985,1986.

مباحث نوین در شیمی آلی

تعداد واحد : ۱ تا ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : با نظراستاد

تدریس آخرین پیشرفتهای شیمی آلی در سطح علمی بین المللی با
بررسی مجلات و کتب علمی منتشره در زمینه شیمی آلی.



شیمی حالت برانگیخته و حدود اسطهای فعال



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : ندارد

- ۱- ایجاد حالت برانگیخته و تشخیص آن
- ۲- ایجاد حالت های برانگیخته فعال به روش های شیمیایی و حرارتی و مطالعه آنها
- ۳- ایجاد حالت های برانگیخته فعال به روش های تابشی و مطالعه آنها
- ۴- ایجاد حالت های برانگیخته فعال به روش های الکتروشیمیایی و مطالعه آنها
- ۵- کاربرد شیمی حالت برانگیخته

1. Ware, W. " Creation and detection of the Excited state" Marcel Dekker, INC., New York and Basel, 1976, ISBN 0-8247-6451-X
2. Faulkner, L.R.; Glass, R.S., "Chemical and Biological generation of Excited states", Adam, W.; Cilento, G., Eds., Academic Press, New York, 1982.
3. Lever, A.B.P. "Excited states and Reactive Intermediates " , ACS symposium series, No. 307 (1986).
ISSN 0097-6156; 307
ISBN 0-18412-0971-5

فتوشیمی پیشرفته



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : فتوشیمی

- ۱- حالت برانگیخته الکترونی در ترکیبات آلی دارای کروموفور و کمپلکس های معدنی .
- ۲- چگونگی ایجاد حالت برانگیخته توسط تابش نور با طول موج مناسب و تعیین آن توسط روشهای اسپکتروسکوپی .
- ۳- چگونگی زوال حالت برانگیخته - فتوفیزیک و فتوشیمی
- ۴- واکنشهای فتوجانشینی و فتوایزومریزاسیون در کمپلکس های عناصر واسطه .
- ۵- واکنشهای فتوردوکس (فتوشیمی همراه با انتقال الکترون)
- ۶- واکنشهای فتوشیمیایی بین سطحی (الکترولیت / الکتروود)
- ۷- واکنشهای فتوشیمیایی در سیستم های منظم (مایسل ، پلیمر ...)
- ۸- واکنشهای فتوشیمیایی تزکیبات آلی - فلزی
- ۹- کاربرد واکنش های فتوشیمیایی در تبدیل انرژی نوری به انرژیهای مفید دیگر .

1. Wrighton, M.S., "Inorganic and Organometallic Photochemistry," Advances in Chemistry Series, No. 168, 1978, ACS, ISBN 0-8412-0398-9.
2. Wrighton, M.S.; Interfacial Photoprocesses: Energy Conversion and Synthesis," Advances in Chemistry Series No. 184, 1980, ACS, ISBN 0-8412-0474-8.
3. Ferraudi, G.J., "Elements of Inorganic Photochemistry," Wiley-Interscience John-Wiley & Sons, Inc., 1988, ISBN(1-813225-7).
4. Yersin, H., and Vogler, A. eds. "Photochemistry and Photophysics of Coordination Compounds", Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York 1987 ISBN 3-540-17808-2.
5. Volman, D.H., Hammond, G.S. and Gollinck, K. eds, "Advances in Photochemistry " Vol. 14., John Wiley & Sons, New York, N.Y. 1988.

شیمی پلیمرهای معدنی

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاساز: ندارد



۱- پلی سیلانها و پلی کربوسیلانها

۲- پلی سیلانها و پلی سیلانوکسانها

۳- پلی سیلواکسانها

۴- پلی فسفازانها

۵- پلیمرهای ارگانو-اکسومریوط به فرآیند سل وژل

۶- پلیمرهای ترکیبات بوران

۷- پلیمرهای دارای فلزات و شبه فلزات

1. Ray, N.H., "Inorganic Polymers," Academic, New York, 1978.

2. Zeidin, M. and Wynne, K.J. and Allcock, H.L., ACS Symposium series,

No. 360-(1978), ISBN 0-8412-1442-5.

ساختمان و پیوند در ترکیبات معدنی



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : ندارد

- ۱- ساختمان و پیوند در ترکیبات عنا صراصلی
- ۲- ساختمان و پیوند در ترکیبات کمپلکس عنا صروا سطر
- ۳- ساختمان و پیوند در ترکیبات آلی فلزی
- ۴- ساختمان و پیوند در کلاسترهای عنا صروا سطر

1. Dekock, R., and Gray, H. "Chemical Structure and Bonding", Benjamin/Cummings, Redding, Mass, 1980.
2. Burdett, J.K. "Molecular Shapes: Theoretical Models of Inorganic Stereochemistry", Wiley-Interscience: New York, 1980.
3. Albright, T.A.; Burdett, J.K., and Whangbo, M.H. "Orbital Interactions in Chemistry", John Wiley, New York, NY (1985).
4. Johnson, B.F.G. "Transition Metal Clusters", Wiley Interscience, Chichester, Engl., (1980).
5. Cotton, F.A. and Walton, R.A. "Multiple Bonds Between Metal Atoms". Wiley; New York, (1982).
6. O'Keefe, M. and Navrotsky, A. eds., "Structure and Bonding in Crystals", Vols. I and II, Academic, New York, 1981.
7. Wells, A.F. "Structural Inorganic Chemistry, 5th ed., Oxford University Press: London, 1984.

مباحث نوین در شیمی معدنی

تعداد واحد : ۱ تا ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : با نظر استاد

تدریس آخرین پیشرفتهای شیمی معدنی و بررسی مجلات و کتب معتبر
بین المللی در زمینه های مختلف شیمی معدنی.



روشهای حرارتی و سینتیکی در تجزیه



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : شیمی تجزیه پیشرفته

اصول و ویژگی های وزن سنجی حرارتی - اساس روش تجزیه حرارتی
تفاضلی (DTA) راههای افزایش کارآیی روش DTA از طریق ترکیب
آن با سایر روشهای افزایش تجزیه نظیر طیف سنجی جرمی و استفاده از پرتو.
روشهای سینتیکی در واکنشهای کاتالیزوری و غیر کاتالیزوری، روشهای
سینتیکی در اندازه گیری مخلوط های مشابه - روشهای اندازه گیری مثبتی
بر سرعت تفاضلی واکنشها در تجزیه .

منابع :

1. W.Smykatz-Kloss, " Differential Thermal Analysis Springer Verlag, 1979.
2. W.M.Wendlandt, " Thermal Methods of Analysis" Interscience Pub. N.Y. 1967
3. H.A.Mottoia, " Kinetic Aspects of Analytical Chemistry ", John Wiley and Sons, 1982.



خوردگی پیشرفته ۲

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : الکتروشیمی پیشرفته

سرفصل درس:

فصل اول : پدیده شناختی سینتیک الکتrod:

مقدمه - ماهیت و سینتیک واکنش‌های الکتروشیمیایی - معادله تابلر - ولمر - فاکتورهای پیش‌نمایی - سینتیک چند مرحله‌ای الکتrod - مرحله تعیین‌کننده سرعت فرمولاسیون مکانیسم تحت فرضیه شبه تعادل

فصل دوم : بعضی جنبه‌های پایداری مواد :

مقدمه - اندازه‌گیری خوردگی - دیاگرام‌های سینتیک اوانس - هوار - محاسبه پتانسیل و سرعت خوردگی - سینتیک الکتروشیمیایی بعنوان پایه‌ای برای واکنش‌های ناهمگن - مکانیسم انحلال آهن - مکانیسم کاتالیستی - اثرات ناهمگن سطح

فصل سوم : جنبه‌های خوردگی آلیاژها

مقدمه - جنبه‌های تجربی اغلال - ثابت‌های سرعت اجزاء در انحلال، آلیاژها، دیاگرام تافل و کاهش جریان معادله از طریق آلیاژسازی - انحلال انتخابی - مطالعه انحلال آندی آلیاژهای دوتائی توسط تکنیک‌های الکتروشیمیایی و آنالیز سطح، شبیه‌سازی کامپیوتری انحلال انتخابی

فصل چهارم : روئین‌شدگی :

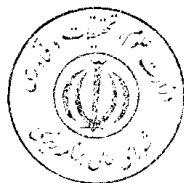
مقدمه - مکانیسم رشد فیلم روئین و ماهیت آن - پایداری فیلم روئین در آهن و نیکل، شکست فیلم‌های روئین و نقش یون کلرید در آن، منحنی‌های پلاریزاسیون (جاروی پتانسیودینامیک POS و پلاریزاسیون چرخه‌ای CP) دراوئینگی - طیف بین‌امپدانس الکتروشیمیایی

فصل پنجم : مکانیسم‌های اثر بازدارنده‌های خوردگی :

مقدمه - تصحیح ضرایب انتظار انتقال بار در پدیده جذب بازدارنده - بازدارندگی در اثر واکنش‌های کاتدی و آندی بازدارنده‌ها - اثرات ویژه بازدارنده‌ها بر اساس سرعت واکنش‌ها تشکیل لایه‌های پلیمری محافظ - اثرات بازدارندگی‌ها در شکنندگی هیدروژن - مکانیسم‌های دیگر

منابع :

1. J.O'M. Bockris and Shahed U.M. Khan, *Surface Electrochemistry*, 1993. Plenum Press, New York.
2. P. Marcus and J. Oudar, *Corrosion Mechanisms in Theory and Practice*, 1995, Mareel Dekker Inc., New York.
3. W. Stephen Tait, *An Introduction to Electrochemical Corrosion Testing for Practicing Engineers and Scientists*, 1994, Pairo Docs Publications, Racine, Wisconsin.
4. J.O'M. Bockris and A.K.N. Reddy, *Modern electrochemistry Vols. 1&2*, Plenum Pub. Coar. New York.



شیمی فیزیک محلولها

تعداد واحد: ۳
نوع واحد: نظری

سرفصل درس

- ۱- مقدمه: اهمیت محلولها و تقسیم‌بندی انواع محلولها (*Athetal*, *Regular*, ...).
- ۲- مقدمه‌ای بر مکانیک آماری محلولها:
(الف) تقریب یک سیال وان‌در‌والس - معادلات حالت در محلولهای مایع
(ب) تقریب دو سیال
- ۳- ترمودینامیک محلولهای فوق بحرانی
- ۴- شیمی فیزیک محلولهای آبی الکترولیت: معادلات پیترز و ... برای پیش‌بینی فعالیت، ضریب فعالیت، فشار بخار و ...
- ۵- تئوری‌های جدید مربوط به پیش‌بینی خواص ترمودینامیکی محلولهای چند تائی (سه‌تایی و بالاتر) شامل الکترولیت و حلال
- ۶- روشهای تجربی تعیین کمیت‌های ترمودینامیکی محلولها

مراجع:

1. *E.A. Guggenheim, Thermodynamics, An Advanced Treatment for Chemists and Physicists, NHPL, 1988.*
2. *K.S. Pitzer, Activity Coefficient in Electrolyte Solutions, 3rd ed., 1999.*
3. *R.C. Reid J.M. Prausnitz and B.E. Polling, The Properties of Gases and Liquids, Fourth ed., McGraw - Hill, 1987.*

۴- مقالات موجود در مجلات تمیز علمی



جمهوری اسلامی ایران

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری

برنامه درسی

دوره: دکتری

رشته: شیمی

گرایش: شیمی فیزیک

گروه: علوم پایه

کمیته: شیمی



مصوبه جلسه شماره ۲۴۱ مورخ ۱۳۷۱/۰۴/۱۴

شورای عالی برنامه ریزی آموزشی



جمهوری اسلامی ایران
وزارت فرهنگ و آموزش عالی
شورای عالی برنامه ریزی

مشخصات کلی، برنامه و سرفصل دروس دوره

دکترای شیمی

گروه علوم پایه

کمیته تخصصی شیمی



مصوب دویست و چهارمین جلسه شورای عالی برنامه ریزی

۱۳۷۱/۴/۱۴

—ورخ

بسم الله الرحمن الرحيم



برنامه آموزشی

دوره دکترای شیمی

گروه : علوم پایه
رشته : شیمی
دوره : دکترا
کمیته تخصصی : شیمی
شاخه :
کدرشته :

شورای عالی برنامه ریزی در دیست و جهل و یکمین جلسه
مورخ ۱۳۷۱/۴/۱۴ بر اساس طرح دوره دکترای شیمی که
توسط کمیته تخصصی شیمی گروه علوم پایه شورای عالی
برنامه ریزی تهیه شده و به تأیید این گروه رسیده است برنامه آموزشی این دوره
را در سه فصل (مشخصات کلی، برنامه و سرفصل دروس) بشرح پیوست تصویب
کرد و مقرر میدارد:

ماده ۱) برنامه آموزشی دوره دکترای شیمی از تاریخ تصویب برای کلیه
دانشگاهها و موسسات آموزش عالی کشور که مشخصات زیر را دارند لازم الاجرا
است .

الف : دانشگاهها و موسسات آموزش عالی که زیر نظر وزارت فرهنگ و آموزش عالی
اداره میشوند .

ب : موسساتی که با اجازه رسمی وزارت فرهنگ و آموزش عالی و بر اساس
قوانین ، تاسیس میشوند و بنابراین تابع مقررات شورای عالی برنامه ریزی میباشد .
ج : موسسات آموزش عالی دیگر که مطابق قوانین خاص تشکیل میشوند و باید تابع ضوابط
دانشگاهی جمهوری اسلامی ایران باشند .

ماده ۲) از تاریخ ۱۳۷۱/۴/۱۴ کلیه دوره‌های آموزشی و برنامه‌های مشابه موسسات در زمینه دکترای شیمی در همه دانشگاهها و موسسات آموزش عالی منکوح در ماده ۱ منسوخ میشوند و دانشگاهها و موسسات آموزش عالی یادشده مطابق مقررات میتوانند این دوره را دایر و برنامه جدید را اجرا نمایند.

ماده ۲) مشخصات کلی و برنامه درسی و سرفصل دروس دوره : دکترای شیمی در سه فصل جهت اجرا به وزارت فرهنگ و آموزش عالی ابلاغ میشود. رای صادره دویست و چهل و یکمین جلسه شورای عالی برنامه‌ریزی مورخ ۱۳۷۱/۴/۱۴

در مورد برنامه آموزشی دوره دکترای شیمی



۱) برنامه آموزشی دوره دکترای شیمی که از طرف گروه علوم پایه پیشنهاد شده بود با اکثریت آراء بتصویب رسید.
۲) برنامه آموزشی دوره دکترای شیمی از تاریخ تصویب قابل اجرا است.

رای صادره دویست و چهل و یکمین جلسه شورای عالی برنامه‌ریزی مورخ ۱۳۷۱/۴/۱۴ در مورد برنامه آموزشی دوره دکترای شیمی صحیح است بمورد اجرا گذاشته شود.

مورد تأیید است
دکتر مصطفی معین
وزیر فرهنگ و آموزش عالی
رونوشت : به معاونت آموزشی وزارت فرهنگ و آموزش عالی جهت اجرا ابلاغ میشود.

سید محمد کاظم نائینی
دبیر شورای عالی برنامه‌ریزی



بسم الله الرحمن الرحيم

فصل اول

مشخصات کلی دوره دکتری شیمی

با اتکاء به تجارب حاصل از اجرای دوره کارشناسی ارشد شیمی و توفیق در این زمینه و با عنایت به مشی کلی شورای عالی انقلاب فرهنگی در راستای تأسیس دوره دکتری علوم در قالب آئین‌نامه مربوطه، کمیته تخصصی شیمی گروه علوم پایه شورای عالی برنامه ریزی برنامه دوره دکتری شیمی را براساس نیازهای کشور جمهوری اسلامی ایران، در جهت تأمین اهداف عالی انقلاب فرهنگی بشرح زیر تدوین نموده است تا پس از تأیید گروه علوم پایه، جهت تصویب شورای عالی برنامه ریزی پیشنهاد شود.

۱- تعریف و هدف

دوره دکتری شیمی بالاترین مقطع تحصیلی دانشگاهی در این رشته میباشد که به اعطای درجه دکتری شیمی منتهی میگردد و شامل مجموعه‌ای هماهنگ از فعالیتهای آموزشی و پژوهشی است. از اهداف مهم این دوره، علاوه بر تأمین هیئت علمی دانشگاهها تربیت افرادی است که دارای تفکری خلاق و مستقل بوده و نهایتاً "بر روشهای پیشرفته پژوهشی احاطه یافته و با تسلطی که بر یک یا چند موضوع در شیمی پیدا میکنند، قادر به درک مشکلات علمی جامعه باشند و به حل آنها بپردازند. در این دوره ابداع نوآوری و گسترش دانش شیمی از اهمیت خاص برخوردار بوده و رسالت ویژه فارغ التحصیلان را تشکیل میدهد.

۲- نظام دوره

دوره دکتری شیمی به دو مرحله آموزشی و پژوهشی تقسیم میگردد:

مرحله آموزشی: این مرحله پس از پذیرفته شدن داوطلب در امتحان ورودی آغاز میگردد. هدف این مرحله برطرف ساختن کمبود اطلاعات علمی دانشجویان میباشد که با گذراندن برخی از دروس پیشرفته شیمی نقائص او مرتفع میگردد. این دوره با برگزاری یک امتحان جامع پایان میپذیرد.

مرحله پژوهشی: این مرحله پس از اتمام مرحله آموزشی و قبولی دانشجویان در امتحان جامع شروع میشود. هدف از این مرحله آشنائی کامل دانشجویان با شیوههای پژوهش و کسب توانائیهای لازم جهت انجام پژوهش در یک یا چند زمینه خاص شیمی میباشد که میتواند به کشف یا نوآوریهای در شیمی منتهی گردد. حاصل این دوره با تدوین و تالیف رساله



همراه است که با دفاع از آن ، این دوره نیز پایان میپذیرد

۲- نحوه آزمون ورودی

آزمون تخصصی ورودی دوره دکترای شیمی از دروس پایه دوره کارشناسی ارشد شیمی در زمینه های شیمی آلی ، شیمی تجزیه ، شیمی معدنی و شیمی فیزیک بعمل میآید . این امتحان تخصصی همراه با امتحان زبان خارجه بصورت کتبی برگزار میگردد . نمرات این آزمون در موضوعات فوق الذکر به انضمام نمرات داوطلبان در دوره کارشناسی ارشد کارشناسی ، همچنین معرفی نامه های علمی که بوسیله اساتید دوره های قبلی داوطلب مستقیم^۱ به دانشگاه ارسال میگردد و نیز مصاحبه علمی، ملاک گزینش دانشجو خواهد بود .
دارندگان دانشنامه کارشناسی ارشد در رشته شیمی از یکی از دانشگاههای معتبر داخل یا خارج کشور ، که به تائید وزارت فرهنگ و آموزش عالی رسیده است ، داوطلبان اصلی شرکت کننده در آزمون ورودی را تشکیل میدهند .

تبصره ۱:

در صورتیکه داوطلب دارای درجه کارشناسی ارشد در یکی از رشته های علوم پایه ، علوم پزشکی و فنی و مهندسی باشد و هم چنین دارنده مدرک دکترای عمومی گروه پزشکی که بتوانند از عهده امتحان ورودی و شرایط مندرج در آئین نامه دکترای مصوب شورای عالی برنامه ریزی برآید، میتواند در دوره دکترای شیمی ادامه تحصیل دهد.

تبصره ۲:

دانشجویان نیمسال آخر کارشناسی ارشد رشته شیمی و سایر رشته ها میتوانند در آزمون ورودی شرکت کنند لیکن ثبت نام آنها منوط به ارائه دانشنامه کارشناسی ارشد است.

تبصره ۳:

داوطلب علاوه بر قبولی در آزمون ورودی میبایستی صلاحیت عمومی ورود به دوره دکترای را نیز دارا باشد .

۴- مراحل دوره :

الف : مرحله آموزشی : دانشجویی که برای دوره دکترای ثبت نام می نماید در این مرحله موظف است علاوه بر سمینارهای ۱ و ۲ شانزده واحد از دروس جدول پیشنهادی ضمیمه ویسا معادل آن که توسط گروه و یا دانشکده ارائه میشود را با مشورت استاد راهنما انتخاب نموده و

با موفقیت بگذرانند. مضافاً در مواردیکه استاد راهنما ضروری تشخیص دهد، دانشجو باید یک یا چند درس اضافی را از سایر رشته‌هاییکه در ارتباط با کار پژوهش وی میباشد نیز با موفقیت بگذرانند. تعداد و نوع دروس باید باتصویب شورای تحصیلات تکمیلی گروه یلدانشکده باشد و در هر صورت تعداد کل واحدها نباید از میزان واحدهای تعیین شده در آئین نامه دکترای مصوب شورایعالی برنامه ریزی، بیشتر گردد. بهر حال برنامه آموزشی دوره دکترای هر گروه و یا دانشکده باید طبق بند ۱ رای صادره یکصد و نود و ششمین جلسه شورایعالی برنامه ریزی مورخ ۱۳۶۹/۲/۳۰ در مورد واگذاری پاره‌ای از اختیارات شورایعالی برنامه ریزی به دانشگاهها تدوین گردد. موضوع سمینار ۱ توسط دانشجو و با موافقت استاد راهنما تعیین میگردد ولیکن مطالب سمینار ۲ باید حتماً در ارتباط با برنامه پژوهشی دانشجو باشد. استاد راهنما طبق شرایط مندرج در آئین نامه دکترای مصوب شورایعالی برنامه ریزی تعیین میشود. برای هر یک از سمینارهای فوق یک واحد درسی منظور می‌شود. پس از گذراندن دروس فوق الذکر، دانشجو می‌تواند در امتحان جامع شرکت نماید. این امتحان در سطح دروسی خواهد بود که دانشجو در مرحله آموزشی داشته است و شرایط آن طبق آئین نامه دوره دکترای مصوب شورایعالی برنامه ریزی میباشد.

دانشجو جهت اتمام رسانیدن مرحله آموزشی میبایستی توانائی خود را در استفاده از زبانهای خارجی به یکی از دو طریق زیر باثبات رساند:

۱- قبولی در امتحان کتبی ترجمه متون شیمی در یکی از زبانهای انگلیسی، فرانسه، آلمانی یا روسی

۲- تسلط به یکی از زبانهای خارجی فوق الذکر به نحوی که بتواند در زمینه تخصصی مطلوب خلاصه کارهای تحقیقاتی یا طرح تحقیقاتی خود را به آن زبان بیان کند.

ب: مرحله پژوهشی: دانشجویانیکه مرحله آموزشی را با تمام رسانیده‌اند بایستی جهت ادامه تکمیل در مرحله پژوهشی ثبت نام نموده و به فعالیتهای علمی و تحقیقاتی در زمینه مورد نظر خود و نیز تنظیم و تدوین رساله بپردازند. این فعالیتهای علمی و تحقیقاتی با هدایت و نظارت استاد راهنما و زیر نظر کمیته اساتید مشا و ر که طبق شرایط آئین نامه دوره دکترای مصوب شورایعالی برنامه ریزی تعیین میشوند، بطریق زیر انجام میگردد:

دانشجو موظف است در ظرف شش ماه اول مرحله پژوهشی بار اهنمائی استاد راهنما عنوان رساله خود را همراه با طرح کامل موضوع تحقیقاتی خود مشخص نموده و پس از تأیید



اساتید مشاور جهت تصویب به گروه آموزشی ارائه دهد. ارزش پایان نامه ۴۴ واحد می باشد.

تبصره ۱:

چنانچه طرح پژوهشی فوق الذکر به تصویب نرسد یا دانشجو با توافق استاد راهنما بخواهد موضوع پژوهشی خود را تغییر دهد موظف است که حداکثر ظرف شش ماه دیگر طرح خود را کامل، تصحیح یا تجدید کند بگونه ای که تصویب آن میسر باشد. دانشجو باید نتیجه تحقیقات خود را هر شش ماه یکبار به اطلاع کمیته ای متشکل از استاد راهنمای و اساتید مشاور خود برساند.

تبصره ۲:

در صورتیکه پیشرفت دانشجوی در کار تحقیقاتی بعد از هر شش ماه مطلوب نباشد، بنا بر این درخواست استاد راهنما و تأیید اساتید مشاور و موافقت شورای تحصیلات تکمیلی برای بار اول به دانشجو کتبا "اخطار" میشود که در صورت عدم پیشرفت در شش ماه بعدی از ادامه تحصیل او جلوگیری خواهد شد.



تبصره ۳:

با توجه به پیشرفتهای سریع دانش شیمی و لزوم همگام بودن پژوهشگران این رشته با آنها و به منظور ترغیب دانشجویان به مطالعات علمی و مسأله "القاء حس بازنگری و استمرار آموزش در مراحل بعد از تحصیل، ارزیابی اطلاعات حاصل از مطالعات انفرادی آنها در مرحله پژوهشی و قبل از دفاع از پایان نامه به شیوه زیر خواهد بود.

هر دو ماه یکبار (جمعا " پنج نوبت در سال) آزمونهای کتبی در زمینه های مختلف شیمی توسط اعضاء گروه آموزشی طرح و ارائه میگردد. موضوع سئوالات از بین مطالب تحقیقاتی منتشر شده در مجلات علمی شیمی موجود در کتابخانه هردانشگاه و یا سمینارهای مختلف ارائه شده در بخش یا دانشکده انتخاب میشود. موفقیت در سه آزمون از ده آزمون متوالی قبل از دفاع از پایان نامه الزامی خواهد بود.

ج - دفاع از رساله :

پس از آماده شدن رساله و اعلام آمادگی دانشجو و تأیید استاد راهنما، دفاع از رساله صورت خواهد گرفت. همزمان با تشکیل جلسه دفاع، لازم است از نتایج کار تحقیقاتی دانشجو، مندرج در پایان نامه حداقل یک مقاله توسط یکی از مجلات بین المللی مورد تأیید وزارت فرهنگ و آموزش عالی جهت انتشار پذیرفته شده و مراتب به جلسه دفاع

فصل دوم

جدول دروس



از رساله منعکس شود . جلسه دفاع با حضور هیئت داوران ، طبق آئین نامه دوره دکتری مصوب شورای عالی برنامه ریزی تشکیل می شود . دانشجو در جلسه ای که در حضور این هیئت تشکیل میشود گزارش از کار تحقیقاتی خود را عرضه و از آن دفاع می نماید . اعطای درجه دکتری به داوطلب منوط به پذیرفته شدن رساله بوسیله هیئت داوران است .

تبصره :

دردوران تحصیل در دوره دکترای شیمی ، دانشجو موظف به رعایت کلیه آئین نامه ها و مقررات دوره دکتری وزارت فرهنگ و آموزش عالی میباشد .



فهرست دروس دوره دکتری شیمی

کد درس	نام درس	تعداد واحد	ساعت		پیشنیازها زمان ارائه درس
			نظری	عملی	
۱	نظریه گرافهای شیمی	۳	۵۱	۵۱	ندارد
۲	کامپیوتر در شیمی	۳	۵۱	۵۱	ندارد
۳	تحلیل آماری نتایج	۳	۵۱	۵۱	ریاضیات آماری
۴	روشهای نوین در آنالیز دستگامی	۳	۵۱	۵۱	شیمی تجزیه پیشرفته
۵	الکتروشیمی تجزیه ای در حلالهای ناآبی	۳	۵۱	۵۱	الکتروشیمی و شیمی تجزیه در محیطهای غیرآبی
۶	لیزر و کاربرد آن در شیمی	۳	۵۱	۵۱	اسپکتروسکوپی تجزیه ای
۷	روشهای رادیوشیمیایی	۳	۵۱	۵۱	ندارد
۸	مباحث نوین در شیمی تجزیه	۳	۵۱	۵۱	با نظراستاد
۹	ترمودینامیک فرآیندهای برگشتناپذیر	۳	۵۱	۵۱	شیمی فیزیک پیشرفته
۱۰	ترمودینامیک آماری ۲	۳	۵۱	۵۱	ترمودینامیک آماری ۱
۱۱	ترمودینامیک شیمیایی جامدات	۳	۵۱	۵۱	شیمی فیزیک پیشرفته
۱۲	ریاضیات در شیمی فیزیک	۳	۵۱	۵۱	ندارد
۱۳	سمینار ۱	۱	۱۷	۱۷	ندارد
۱۴	شیمی کوانتومی ۳	۳	۵۱	۵۱	شیمی کوانتومی ۲
۱۵	طیفسنجی مولکولی ۲	۳	۵۱	۵۱	طیفسنجی مولکولی ۱
۱۶	مباحث نوین در شیمی فیزیک	۳	۵۱	۵۱	با نظراستاد
۱۷	شیمی هتروسیکلیک پیشرفته	۳	۵۱	۵۱	شیمی آلی پیشرفته



ادامه فهرست دروس دوره دکتری شیمی

پیشنیازها زمان ارائه درس	ساعت			تعداد	نام درس	کد درس
	عملی	نظری	جمع			
ندارد	-	۱۷	۱۷	۱	سینار ۲	۱۸
مبانی پلیمر	-	۵۱	۵۱	۳	شیمی پلیمر پیشرفته	۱۹
شیمی آلی پیشرفته	-	۵۱	۵۱	۳	پیشرفته‌های نوین در ترکیبات طبیعی	۲۰
شیمی آلی پیشرفته	-	۵۱	۵۱	۳	شیمی آلی حیاتی	۲۱
با نظراستاد	-	۵۱	۵۱	۳	مباحث نوین در شیمی آلی	۲۲
ندارد	-	۵۱	۵۱	۳	شیمی حالت برا نگیخته و حدود اسطهای فعال	۲۳
فتوشیمی	-	۵۱	۵۱	۳	فتوشیمی پیشرفته	۲۴
ندارد	-	۵۱	۵۱	۳	شیمی پلیمرهای معدنی	۲۵
ندارد	-	۵۱	۵۱	۳	ساختمان و پیوند در ترکیبات معدنی	۲۶
با نظراستاد	-	۵۱	۵۱	۳	مباحث نوین در شیمی معدنی	۲۷
شیمی تجزیه پیشرفته	-	۵۱	۵۱	۳	روشهای حرارتی و سینتیکی در تجزیه	۲۸



فصل سوم

سرفصل دروس



نظریه گرافهای شیمیائی

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز: ندارد

مبانی نظریه گرافها - گرافهای شیمیائی - ماتریسهای توپولوژیکی -
خصلت بس جمله ای یک گراف شیمیائی - جنبه های توپولوژیکی نظریه هوکل -
مولکولهای همطیف - مولکولهای زیرطیف - انرژی رزونانس توپولوژیکی -
شمارش ساختارهای ککوله ای - الگوی مدارهای مزدوج شده - شاخص های
توپولوژیکی وکلازبردهای آنها در پیشگویی رابطه های ساختار / خواص و ساختار
/ فعالیت - شمارش ایزومرها .

منابع :

Trinajstić, N., "Chemical Graph Theory", CRC Press Inc.,

Vol I & II, 1983.



کامپیوتر در شیمی

تعداد واحد : ۳

نوع واجید :

پیشنیاز : ندارد

برنامه نویسی کامپیوتری زبان فورترن (Fortran 77), آشنائی با کامپیوتر فورترن 77 (FORTVS) و فورترن چهار (FORTHX), امکانات و کاربرد CMS, VM در کامپیوترهای IBM 370. آشنائی با برنامه های EXEC در کامپیوترهای مرکزی, آشنائی با سیستم عامل در ریز کامپیوترها (MS-DOS) و نحوه استفاده از یک Software و package.

منابع :

C.E.Klopfenstein, C.L.Wilkins, Computers in Chemical and Biochemical Research, Academic Press

T.R.Dickson, The Computer and Chemistry W.H.Freeman and Company.

Delos F.Detar, Computer Programs for Chemistry W.A.Benjamin, INC.

K.Ebert, H.Ederer and T.L.Isenhour, Computer applications in Chemistry, Verlag Chem. 1989.



تحليل آماری نتایج



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : ریاضیات آماری

بررسی خطاها در تجزیه شیمیایی ، اندازه گیری ها و خطاهای مربوطه
در هر روش روشهای عددی و نموداری در تمییز خطاها . تستهای معنی دار -
آنالیز برگشتی و وابستگی کنترل کیفیت و نمونه برداری و بررسی خطاها ،
آنالیز فاکتوری ، بهینه سازی کمپلکس در تجزیه شیمیایی محاسبات جدید .

منابع :

1. G.W. Snedecor & W. Cochran, Statistical Methods, Iowa State University Press 6th edition, Ames, Iowa (1976).
2. K. Eckschlager, M.Sc., D.Ph., dr. R.A. Chalmers Van Nostrand Reinhold Company
Errors, Measurement and results in Chemical Analysis.
3. J.C. Milner & J.N. Milner, Statistics for Analytical Chemistry, 2nd edition, Ellis Harwood, Sussex 1987.
4. O.L. Davies. and P.L. Goldsmith, Statistical Methods in Research and Production, Longmans, London, 1982.
5. G.P. Box, W.G. Hunter and J.S. Hunter, Statistics for Experimentalists, Wiley, New York, 1978.
6. G.T. Werninont, use of Statistics to develop and Evaluate Analytical Methods, Association of official Analytical Chemists, Arlington, Virginia, 1985.
7. R. Caulcutt. and R. Boddy, Statistics for Analytical Chemists. Chapman & Hall, London, 1983.

روشهای نوین در آنالیز دستگاهی

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : شیمی تجزیه پیشرفته

تکنیک های GC/MS و GC/IR و چگونگی پیوند دستگاه GC به دستگاه های MS و IR - دستگاه پیوندی GC/FT-IR - مقایسه تکنیک های پیوندی GC/IR و GC/MS و دستگاه های MS و IR تکنیک LC/MS و چگونگی پیوند دستگاه و مقایسه آن با دستگاه GC/MS - تکنیک های TLC/IR و GC/MS و چگونگی پیوند این دستگاهها تکنیک GC/MS/IR و چگونگی پیوند این دستگاهها و مقایسه آن با دستگاه های GC/MS و MS/ICP - تکنیک و چگونگی پیوند آن -

منابع :

- 1.G.M.Message," Practical Aspects of Gas Chromatography/Mass Spectrometry ",Wiley,New York 1984.
- 2.E.S.Yeung",Dectectors for Liquid Chromatography ",John Wiley and Sons,1986.



الکتروشیمی تجزیه‌ای در حلال های ناآبی



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : الکتروشیمی تجزیه‌ای ، شیمی تجزیه در محیطهای غیرآبی

- اثر حلال بر واکنش های الکتروشیمیایی (تاثیر بر سینتیک مبادله الکترون ، سینتیک واکنش شیمیایی همراه برپدیته جذب سطحی و...) محدوده فعالیت الکتروشیمیایی (Electroactivity Lange) در حلالهای ناآبی ، تاثیر نوع حلال ، نوع الکترولیت حامل و جنس الکتروده بر وسعت این محدوده .
 - روش های الکتروآنالیتیکی در حلالهای ناآبی ، پتانسیومتری ، ولتامتری و راههای گوناگون آن : پلاروگرافی ، ولتامتری با الکتروشدهای چرخان ، ولتامتری چرخه‌ای .
 - کاربرد روشهای ولتامتری در تعیین تابعهای ترمودینامیکی ، تجزیه کیفی تجزیه کمی و تعیین مکانیسم فرآیندهای الکترودی .
 - کروماتوگرافی پتانسیومتری ، الکترولیز ممتد . دیگر روشهای کمکی نظیر ESR و اسپکتروالکتروشیمی در حلال های ناآبی .
 - مروری بر شرایط اجرای روش های الکتروشیمیایی تجزیه در حلالهای ناآبی
 - اشاره ای بر واکنش های اکسایش و کاهش نمونه در حلالهای ناآبی .
 - کاربرد نمک های مذاب بعنوان حلال در الکتروشیمی تجزیه
- منابع :

1. G.Charlot, I. Badoz-Lambling and B. Tremillon, *Electrochemical Reactions*, Elsevier, 1962.
2. C.K.Mann and K.K.Barnes, *Electrochemical Reactions in Nonaqueous systems*, Marcel Dekker Inc., 1970.
3. M.M.Baizer (ed), *Organic Electrochemistry*, Marcel Dekker Inc., 1973.

لیزر و کاربرد آن در شیمی



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : اسپکتروسکوپی تجزیه‌ای

- ۱- اصول فیزیکی لیزر (مفاهیم مقدماتی ، خواص لیزر ، برخورد لیزر با ماده و انواع لیزر).
- ۲- طیف‌بینی تجزیه‌ای با استفاده از اتم‌کننده‌های لیزری (لیزرهای حالت جامد ، مایع و گازی) طیف‌ها ، دکتورها ، اسپکتروگرافها و چگونگی سهمیه‌سازی شرایط کار با لیزر ، دامنه کاربرد تجزیه‌ای
- ۳- طیف‌سنجی جذب اتمی ، فلورسانس اتمی ، جذب مولکولی و فلورسانس مولکولی

منابع :

1. Nicolò Omenetto " Analytical Laser Spectroscopy " John Wiley & Sons, 1979.
2. E.H. Piepneier " Analytical Applications of Lasers " John Wiley 1987.
3. D.L. Andrews. "Lasers in Chemistry ", Springer-Verlag 1986.

روش های رادیوشیمیایی

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : ندارد

- اساس رادیواکتیویته - انواع تشعشعات هسته‌ای و ویژگی های آنها
ابزارهای تشخیص و اندازه‌گیری تشعشعات رادیواکتیو - انواع واکنش های
هسته‌ای و ویژگی های آنها - راههای آداسازی نمونه‌های فعال شده - واکنش
های نوترون - گاما (n, γ) - منابع تولید نوترون - تجزیه روش فعال
سازی (AA) - شرایط انجام واکنش های هسته‌ای و بهره‌برداری تجزیه‌ای
از آنها - ویژگی های آماری تجزیه‌های رادیوشیمیایی - معرف های رادیو-
آکتیو - استفاده از معرف های رادیواکتیو در تیتراسیون های رادیومتری .

منابع :

- 1.W.S.Lyon,Jr. (ed.),"Guide to Activation Analysis.", Van
Nostrand Co.Inc.N.Y.1964.
- 2.T.Braun and J. Toigyyssy," Radiometric ", Pergamon Press,
N.Y.,1967.
- 3.M.T.Kelley (ed)," Radiochemistry, Connected Works" Analytical
Chemistry,1959.



مباحث نوین در شیمی تجزیه

تعداد واحد : ۱ تا ۳

نوع واحد: نظری

پیشنیاز : با نظراستاد

تدریس آخرین پیشرفتهای علمی در شیمی تجزیه از بررسی آخرین منابع
معتبر علمی شیمی تجزیه در سطح بین المللی .



ترمودینامیک فرآیندهای برگشتناپذیر

تعداد واحد: ۳

نوع واحد: نظری

پیشنیاز: شیمی فیزیک پیشرفته

۱- برخی مفاهیم ترمودینامیک مرتبه اول

۲- توازن انتروپی و حصول انتروپی

۳- نیرو، شار و معادلات پدیده شناسی

۴- قضیه دوچانگی انزاگر

نظریه افت و خیز

بزرگشت پذیری میکروسکوپی

وایسازی (رگرسیون) افت و خیز

۵- کاربرد قضیه انزاگر در پدیده ترموالکتریک و اشرودفر

۶- حالات ایستا و سیستمهای بیولوژیکی

منابع:

S.R.de Groot and J.Mazur, " Non-Equilibrium Thermodynamics",
North Holland Publishing Co.,Amsterdam (1962).



ترمودینامیک آماری ۲



تعداد واحد: ۳

نوع واحد: نظری

پیشنیاز: ترمودینامیک آماری ۱

آمار بلورها

طیف ارتعاشی بلور تک اتمی، نظریه های انیشتاین و دبای در مورد ظرفیت گرمایی بلورها، فونونها، نقص بلوری و انواع آن

محاسبات و بررسی آماری شبکه های بلوری

بررسی و محاسبه کمیت های ترمودینامیکی بلورها در حالت پایدار ترمودینامیکی، روشهای تقریبی برای محاسبه عامل ترکیبی (روش بررسی حل دقیق خواص ترمودینامیکی شبکه های یک بعدی، دوبعدی و سه بعدی تبدیل فاز جامد - جامد

مایعات و گازها

نظریه ساختمان با اهمیت و نظریه لندارد - جونز و نشر، بررسی سیستم های ایده آل در میدان های الکتریکی و مغناطیسی، بررسی گازهای غیرایده آل از دیدگاه آماری
منابع:

1. D.A. McQuarrie " Statistical Thermodynamics Happer and Row 1973.
2. T.L. Hill " Statistical mechanics" New York McGraw-Hill 1956
3. T.L. Hill " introduction to statistical thermodynamics" Addison-Wesly Publishins Company, Inc. London 1960

ترمودینامیک شیمیایی جامدات

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : شیمی فیزیک پیشرفته

مقدمه‌ای بر قوانین ترمودینامیک با تأکید بر خواص جامدات ، خواص
ترمودینامیکی محلولهای جامد ، تعادل بین فازهای چندجزئی ،
ترمودینامیک سطح و فصل مشترک ، نقاشی در بلورهای یونی و فلزی ،
نقاشی در نیمه‌هادی ها ، نقاشی در ترکیبات استکیومتری و غیر استکیومتری
متر .

منابع :

- 1- R,A.Swafen " Thermodynamiers of Solids" 2nd.Ed.,
John Wiley 1972.



ریاضیات در شیمی فیزیک

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : ندارد

۱- آنالیز برداری

۲- سیستم های مختصات

۳- مختصری درباره آنالیز تانسوری

۴- دترمینانها و ماتریس ها

۵- سریها

۶- توابع متغیرهای مختلط

۷- معادلات دیفرانسیل - جوابهای سری مانند (Power Series Solutions)

۸- معادلات دیفرانسیل

۹- سریهای فوریه و انتگرالهای فوریه

منابع :

1. G.Arffen, Mathematical Methods for Physicists (Academic Press. Inc.,1985)
2. E.Butkov, Mathematical Physics (Addison Wesley,1973).
3. M.L.Boas, Mathematical Methods in the Physical Sciences (John Wiley & Sons,1983).



سمینارا

تعدادواحد : ۱

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : ندارد

موضوع ونحوه، اجرای آن توسط شورای تحمیلات تکمیلی تعیین می شود.





تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : شیمی کوانتومی ۱

Generalized Angular Momentum

- اندازه حرکت زاویه‌ای تعمیم یافته

تثوری عمومی اندازه حرکت زاویه‌ای - کاربرد عملکردهای بالابرنده
 وپایین برنده در تعیین بردارهای خاص ومقادیر خاص عملکردهای اندازه
 حرکت زاویه‌ای - اندازه حرکت زاویه‌ای وچرخش ها - جفت شدن دوبردار
 اندازه حرکت زاویه‌ای - جفت شدن سه بردار اندازه حرکت زاویه‌ای - ضرائب
 Clebsch Gordon و Racah - نمادهای $3J$ و $6J$ وغیره - نمایش
 ماتریسی چرخش ها - سریهای Clebsch Gordon - تانسورهای کاهش ناپذیر
 Wigner Eckart - عناصر ماتریس ضرب های اسکالر، تانسورهای
 کاهش ناپذیر - میدان های اسکالر، برداری واسپینور (Spinors).

- سیستم های چندالکترونی

بحث عمومی درباره ذرات یکسان وخواص تقارن توابع موج آنها
 درمینانهای Slater - محاسبه عناصر ماتریس عملکردهای یک ودوالکترونی
 واستنتاج قواعد Slater - Condon - تقریب میدان مرکزی - معادلات
 Hartree-Fock - خواص جوابهای Hartree-Fock، روش های محاسبه
 عددی - Configuration interaction - چندتایی های (multiplets)
 مربوط به دوالکترون - نمادهای طیفی سیستم های الکترونی - سنتسز
 توابع موج چندتایی ها - محاسبه انرژی چندتایی ها - اثر متقابل اسپین
 - اوربیتال درسیستم های چندالکترونی .

منابع :

- 1.M.Weissbluth, Atoms and Molecules (Academic Press, 1978)
- 2.M.Alonso and H.Valk, Quantum Mechanics; Principles and Applications (Addison- Wesley, 1973).

1. R. Loudon, "The Quantum Theory of light", Clarendon Press. Oxford, 1981.
2. J. I. Steinfeld "Molecules and Radiation"; An Introduction to Modern Molecular Spectroscopy, The MIT Press, 1979.
3. B. P. Straugham and S. Walker, Vols. I, II, III (Chapman and Hall Ltd, 1976).
4. S. Califano, "Vibrational States", John Wiley & Sons, 1976.



طیف‌سنجی مولکولی ۲



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : طیف‌سنجی مولکولی ۱

- طیف‌سنجی الکترونی

تقریب بورن - اپنهايمر Born-Oppenheimer approximation

طیف‌سنجی الکترونی مولکولهای دواتمی - اصل فرانک کوندون - طیف‌سنجی

الکترونی مولکولهای چنداتمی - طیف‌سنجی فوتوالکترونی

- طیف‌سنجی تشدید مغناطیسی Magnetic resonance Spectroscopy

ممانهای مغناطیسی هسته‌یی - تشدید مغناطیسی هسته‌یی - جابجایی های

شیمیایی - حفت‌شدنهای اسپین - اسپین هسته‌یی - آسایش اسپینی - تشدید

اسپین الکترونی -

- تئوری گروهها Group Theory - یادآوری مفاهیم بنیادی تئوری

گروهها - تئوری گروهها و ساختمان الکترونی مولکولها - تئوری گروهها

و ارتعاشات مولکول - تئوری گروهها و چرخش های مولکولی

منابع :

Ira N. Levine, Molecular Spectroscopy (John Wiley, 1975)

مباحث نوین در شیمی فیزیک

تعداد واحد : ۱ تا ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : با نظراستاد

تدریس آخرین پیشرفتهای شیمی فیزیک و بررسی مجلات و کتب معتبر
بین المللی در زمینه های مختلف شیمی فیزیک .



شیمی هتروسیکلیک پیشرفته



تعداد واحد: ۳

نوع واحد: نظری

پیشنیاز: شیمی آلی پیشرفته

در این درس راجع به بسیاری از ترکیبات سیکلیک و آروماتیک که دارای اتمهای مختلفه ازت، گوگرد، اکسیژن، سیلنیم، تلوریوم و غیره میباشند میتوان صحبت کرد. هر مورد شامل واکنشها و مکانیسم آنها، سنتزهای مختلفه اسپکتروسکوپی و در بعضی از موارد بیوسنتز مواد مورد نظر بحث میگردد.

منابع:

1. Elderfield, R.C. "Heterocyclic Compounds" Wiley, New York.
2. Katritzky, A.R. "Physical Methods in Heterocyclic Chemistry", Academic Press, New York.
3. Katritzky, A.R. "Advances in Heterocyclic Chemistry", Academic Press, New York.
4. Weisberger, A. "Heterocyclic Compounds", Interscience Publishers, New York.
5. E.C. Taylor & A. Weisberger "General Heterocyclic Chemistry Series" Wiley-Interscience, New York.
6. Acheson, R.M., "An Introduction to the Chemistry of Heterocyclic Compounds", 2nd Ed. Interscience New York.
7. Albert, A. "Heterocyclic Chemistry: An Introduction", Athlone Press, London.
8. Allcock, M.R. "Heteroatom Ring Systems and Polymers", Academic Press, New York.
9. Badger, G.M. "The Chemistry of Heterocyclic Compounds", Academic Press, New York.
10. Fitton, A.D. and Sma R.K., "Practical Heterocyclic Chemistry", Academic Press, New York.

سمینار ۲

تعداد واحد: ۱

نوع واحد: نظری

پیشنیاز: ندارد

موضوع ونحوه، اجرای آن توسط شورای تحمیلات تکمیلی تعیین می شود.



شیمی پلیمر پیشرفته



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : مبانی پلیمر

- ۱- مفهوم وزن مولکولی متوسط و توزیع اوزان مولکولی در سیستم خطی مرحله‌ای و در سیستم غیرخطی مرحله‌ای .
- ۲- تهیه پلیمرهای : با مقاومت حرارتی بالا، از طریق باز شدن حلقه پلیمرهای فعال نوری ، پلیمرهای زنده ، پلیمرهای هادی ، پلیمری الکتروولت ها ، پلیمرهای ارگانومتالیک .
- ۳- سنتیک پلیمریزاسیون Ziegler-Natta
- ۴- واکنش های : سنتزی پلیمرها ، از هم پاشی پلیمرها ، پلیمریزاسیون در محیط آبی ، ایزومری شدن پلیمرها .
- ۵- پلیمرهای تحقیقاتی : انواع مختلف پلیمرهای هتروسیکلیک ، پلیمریزاسیون : از طریق واکنش دیلز آلدِر ، واکنش اضافی (۳دی پلار ، کوپلی- مرهای مختلف ، پلیمرهای محلول در آب ، پلیمرهای جدید از طریق واکنش استخلافی الکتروفیلی آروماتیک ، پلیمرهای حیاتی .
- ۶- فتوشیمی فاز شروع در پلیمریزاسیون رادیکالی .
- ۷- مختصری در مورد شیمی فضائی پلیمرها .

منابع :

1. Odian, G., "Principles of Polymerization", McGraw-Hill, 1970.
2. Lenz, R.W., "Organic Chemistry of Synthetic High Polymers", Interscience Publishers, 1967.
3. Flory, P.J., "Principles of Polymer Chemistry", Cornell University Press, 1953.
4. Culbertson, B.M.; McGrath J.E., "Advances In Polymer Synthesis", Polymer Science and Technology Series Vol. 31, Plenum Press, 1985.
5. Frisch, K.C., Reegen, S.L., "Ring Opening Polymerization", Marcel Dekker.
6. Keii, T. "Kinetics of Ziegler-Natta Polymerization, Kodanasha LTD.
7. Ketley, A.D., "The Stereochemistry of Macromolecules". Edward Arnold Publishers.
8. Rempp, P.; Merrill, E.W., "Polymer Synthesis" Huething & Wepf Publishers.
9. Mathur, N.K.; Narang, C.K.; Williams, R.E. "Polymer as Aids in Organic Chemistry". Academic Press.



پیشرفتهای نوین در ترکیبات طبیعی

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : شیمی آلی پیشرفته

در این درس راجع به قسمتی از سنتز، بیوسنتز، استریوشیمی، اسکتروسکپی و استفاده‌های دارویی آلکالوئیدها، استروئیدها، پروستاگلندین‌ها، نوکلئوئیدها، نوکلئوزیدها، ماکرولیدها، بتالاکتسام‌ها و غیره میتوان بحث و گفتگو کرد.

1. J.S. Bindra and R. Bindra, " Prostaglandin Synthesis", Academic Press, New York, 1977.
2. W.W. Zorbach, R.S. Tipson, "Synthetic Procedures in Nucleic Acid Chemistry", Vol. 1 and 2, Wiley interscience New York, 1968, 1973.
3. J. Elks (Ed). "Recent Advances in the Chemistry of β -Lactam Antibiotics", Glaxo Research Ltd. The Chemical Society, Burlington House London W1V 0BN.
4. G.I. Gregory, (Ed), "Recent Advances in β -Lactam Antibiotics", Second International Symposium, Glaxo Research Ltd. The Chem. Soc. Burlington House, London, W1V 0BN, 1980.
5. L. Fieser and M. Fieser, "Steroids" Reinhold, New York 1959.
6. R. Monske, and F. Helmuth, " The Alkaloids", Academic Press, New York, from 1950.
7. A. Katritzky (Ed), "Advances in Heterocyclic Chemistry", Academic Press. New York, from 1963.
8. Journals; JACS, JOC, J. Chem. Soc, Heterocycles, Tetrahedron, Helv. Chem, Acta. Can. J. Chem. etc.

شیمی آلی حیاتی



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : شیمی آلی پیشرفته

- ۱- مقدمه‌ای بر شیمی آلی حیاتی شامل پدیده نزدیکی و جورشدن ملکول‌های حیاتی و مدل‌های آلی
 - ۲- خصوصیت مولکول‌های آلی حیاتی و آمینواسیدها و پپتیدها
 - ۳- شیمی آلی حیاتی فسفات‌ها
 - ۴- مدل‌های آنزیمی (شیمی کمپلکس دهنده‌ها - پذیرنده‌ها)
 - ۵- یون‌های فلزی و نقش آنها در فعالیت آنزیم‌ها
 - ۶- شیمی کوآنزیم‌ها
 - ۷- سینتیک آنزیم‌ها
- منابع :

- 1.H.Dugas & C.Penney," Bioorganic Chemistry a Chemical Approach to Enzyme Action," Springer New York,1981.
- 2.F.Vogtle,E.Weber (Eds.),"Biomimetic and Bioorganic Chemistry" I,II, Springer,1985,1986.

مباحث نوین در شیمی آلی

تعداد واحد : ۱ تا ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : با نظراستاد

تدریس آخرین پیشرفتهای شیمی آلی در سطح علمی بین المللی با
بررسی مجلات و کتب علمی منتشره در زمینه شیمی آلی.



شیمی حالت برانگیخته و حدود اسطهای فعال



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : ندارد

- ۱- ایجاد حالت برانگیخته و تشخیص آن
- ۲- ایجاد حالت های برانگیخته فعال به روش های شیمیایی و حرارتی و مطالعه آنها
- ۳- ایجاد حالت های برانگیخته فعال به روش های تابشی و مطالعه آنها
- ۴- ایجاد حالت های برانگیخته فعال به روش های الکتروشیمیایی و مطالعه آنها
- ۵- کاربرد شیمی حالت برانگیخته

1. Ware, W. " Creation and detection of the Excited state" Marcel Dekker, INC., New York and Basel, 1976, ISBN 0-8247-6451-X
2. Faulkner, L.R.; Glass, R.S., "Chemical and Biological generation of Excited states", Adam, W.; Cilento, G., Eds., Academic Press, New York, 1982.
3. Lever, A.B.P. "Excited states and Reactive Intermediates " , ACS symposium series, No. 307 (1986).
ISSN 0097-6156; 307
ISBN 0-18412-0971-5

فتوشیمی پیشرفته



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : فتوشیمی

- ۱- حالت برانگیخته الکترونی در ترکیبات آلی دارای کروموفور و کمپلکس های معدنی .
- ۲- چگونگی ایجاد حالت برانگیخته توسط تابش نور با طول موج مناسب و تعیین آن توسط روشهای اسپکتروسکوپی .
- ۳- چگونگی زوال حالت برانگیخته - فتوفیزیک و فتوشیمی
- ۴- واکنشهای فتوجانشینی و فتوایزومریزاسیون در کمپلکس های عناصر واسطه .
- ۵- واکنشهای فتوردوکس (فتوشیمی همراه با انتقال الکترون)
- ۶- واکنشهای فتوشیمیایی بین سطحی (الکترولیت / الکتروود)
- ۷- واکنشهای فتوشیمیایی در سیستم های منظم (مایسل ، پلیمر ...)
- ۸- واکنشهای فتوشیمیایی تزکیبات آلی - فلزی
- ۹- کاربرد واکنش های فتوشیمیایی در تبدیل انرژی نوری به انرژیهای مفید دیگر .

1. Wrighton, M.S., "Inorganic and Organometallic Photochemistry," Advances in Chemistry Series, No. 168, 1978, ACS, ISBN 0-8412-0398-9.
2. Wrighton, M.S.; Interfacial Photoprocesses: Energy Conversion and Synthesis," Advances in Chemistry Series No. 184, 1980, ACS, ISBN 0-8412-0474-8.
3. Ferraudi, G.J., "Elements of Inorganic Photochemistry," Wiley-Interscience John-Wiley & Sons, Inc., 1988, ISBN(1-813225-7).
4. Yersin, H., and Vogler, A. eds. "Photochemistry and Photophysics of Coordination Compounds", Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York 1987 ISBN 3-540-17808-2.
5. Volman, D.H., Hammond, G.S. and Gollinck, K. eds, "Advances in Photochemistry " Vol. 14., John Wiley & Sons, New York, N.Y. 1988.

شیمی پلیمرهای معدنی

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاساز: ندارد



۱- پلی سیلانها و پلی کربوسیلانها

۲- پلی سیلانها و پلی سیلانوکسانها

۳- پلی سیلوکسانها

۴- پلی فسفازانها

۵- پلیمرهای ارگانو-اکسومریوط به فرآیند سل وژل

۶- پلیمرهای ترکیبات بوران

۷- پلیمرهای دارای فلزات و شبه فلزات

1. Ray, N.H., "Inorganic Polymers," Academic, New York, 1978.

2. Zeidin, M. and Wynne, K.J. and Allcock, H.L., ACS Symposium series,

No. 360-(1978), ISBN 0-8412-1442-5.

ساختمان و پیوند در ترکیبات معدنی



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : ندارد

- ۱- ساختمان و پیوند در ترکیبات عنا صراصلی
- ۲- ساختمان و پیوند در ترکیبات کمپلکس عنا صروا سطر
- ۳- ساختمان و پیوند در ترکیبات آلی فلزی
- ۴- ساختمان و پیوند در کلاسترهای عنا صروا سطر

1. Dekock, R., and Gray, H. "Chemical Structure and Bonding", Benjamin/Cummings, Redding, Mass, 1980.
2. Burdett, J.K. "Molecular Shapes: Theoretical Models of Inorganic Stereochemistry", Wiley-Interscience: New York, 1980.
3. Albright, T.A.; Burdett, J.K., and Whangbo, M.H. "Orbital Interactions in Chemistry", John Wiley, New York, NY (1985).
4. Johnson, B.F.G. "Transition Metal Clusters", Wiley Interscience, Chichester, Engl., (1980).
5. Cotton, F.A. and Walton, R.A. "Multiple Bonds Between Metal Atoms". Wiley; New York, (1982).
6. O'Keefe, M. and Navrotsky, A. eds., "Structure and Bonding in Crystals", Vols. I and II, Academic, New York, 1981.
7. Wells, A.F. "Structural Inorganic Chemistry, 5th ed., Oxford University Press: London, 1984.

مباحث نوین در شیمی معدنی

تعداد واحد : ۱ تا ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : با نظر استاد

تدریس آخرین پیشرفتهای شیمی معدنی و بررسی مجلات و کتب معتبر
بین المللی در زمینه های مختلف شیمی معدنی.



روشهای حرارتی و سینتیکی در تجزیه



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : شیمی تجزیه پیشرفته

اصول و ویژگی های وزن سنجی حرارتی - اساس روش تجزیه حرارتی
تفاضلی (DTA) راههای افزایش کارآیی روش DTA از طریق ترکیب
آن با سایر روشهای افزایش تجزیه نظیر طیف سنجی جرمی و استفاده از پرتو.
روشهای سینتیکی در واکنشهای کاتالیزوری و غیر کاتالیزوری، روشهای
سینتیکی در اندازه گیری مخلوط های مشابه - روشهای اندازه گیری مثبتی
بر سرعت تفاضلی واکنشها در تجزیه .

منابع :

1. W.Smykatz-Kloss, " Differential Thermal Analysis Springer Verlag, 1979.
2. W.M.Wendlandt, " Thermal Methods of Analysis" Interscience Pub. N.Y. 1967
3. H.A.Mottoia, " Kinetic Aspects of Analytical Chemistry ", John Wiley and Sons, 1982.



خوردگی پیشرفته ۲

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : الکتروشیمی پیشرفته

سرفصل درس:

فصل اول : پدیده شناختی سینتیک الکترو:

مقدمه - ماهیت و سینتیک واکنش‌های الکتروشیمیایی - معادله تابلر - ولمر - فاکتورهای پیش‌نمایی - سینتیک چند مرحله‌ای الکترو - مرحله تعیین‌کننده سرعت فرمولاسیون مکانیسم تحت فرضیه شبه تعادل

فصل دوم : بعضی جنبه‌های پایداری مواد :

مقدمه - اندازه‌گیری خوردگی - دیاگرام‌های سینتیک اوانس - هوار - محاسبه پتانسیل و سرعت خوردگی - سینتیک الکتروشیمیایی بعنوان پایه‌ای برای واکنش‌های ناهمگن - مکانیسم انحلال آهن - مکانیسم کاتالیستی - اثرات ناهمگن سطح

فصل سوم : جنبه‌های خوردگی آلیاژها

مقدمه - جنبه‌های تجربی اغلال - ثابت‌های سرعت اجزاء در انحلال، آلیاژها، دیاگرام تافل و کاهش جریان معادله از طریق آلیاژسازی - انحلال انتخابی - مطالعه انحلال آندی آلیاژهای دوتائی توسط تکنیک‌های الکتروشیمیایی و آنالیز سطح، شبیه‌سازی کامپیوتری انحلال انتخابی

فصل چهارم : روئین‌شدگی :

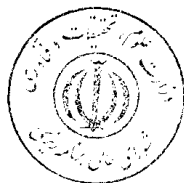
مقدمه - مکانیسم رشد فیلم روئین و ماهیت آن - پایداری فیلم روئین در آهن و نیکل، شکست فیلم‌های روئین و نقش یون کلرید در آن، منحنی‌های پلاریزاسیون (جاروی پتانسیودینامیک POS و پلاریزاسیون چرخه‌ای CP) دراوئینگی - طیف بین‌امپدانس الکتروشیمیایی

فصل پنجم : مکانیسم‌های اثر بازدارنده‌های خوردگی :

مقدمه - تصحیح ضرایب انتظار انتقال بار در پدیده جذب بازدارنده - بازدارندگی در اثر واکنش‌های کاتدی و آندی بازدارنده‌ها - اثرات ویژه بازدارنده‌ها بر اساس سرعت واکنش‌ها تشکیل لایه‌های پلیمری محافظ - اثرات بازدارندگی‌ها در شکنندگی هیدروژن - مکانیسم‌های دیگر

منابع :

1. J.O'M. Bockris and Shahed U.M. Khan, *Surface Electrochemistry*, 1993. Plenum Press, New York.
2. P. Marcus and J. Oudar, *Corrosion Mechanisms in Theory and Practice*, 1995, Mareel Dekker Inc., New York.
3. W. Stephen Tait, *An Introduction to Electrochemical Corrosion Testing for Practicing Engineers and Scientists*, 1994, Pairo Docs Publications, Racine, Wisconsin.
4. J.O'M. Bockris and A.K.N. Reddy, *Modern electrochemistry Vols. 1&2*, Plenum Pub. Coar. New York.



شیمی فیزیک محلولها

تعداد واحد: ۳
نوع واحد: نظری

سرفصل درس

- ۱- مقدمه: اهمیت محلولها و تقسیم‌بندی انواع محلولها (*Athetal*, *Regular*, ...).
- ۲- مقدمه‌ای بر مکانیک آماری محلولها:
(الف) تقریب یک سیال وان‌در‌والس - معادلات حالت در محلولهای مایع
(ب) تقریب دو سیال
- ۳- ترمودینامیک محلولهای فوق بحرانی
- ۴- شیمی فیزیک محلولهای آبی الکترولیت: معادلات پیترز و ... برای پیش‌بینی فعالیت، ضریب فعالیت، فشار بخار و ...
- ۵- تئوری‌های جدید مربوط به پیش‌بینی خواص ترمودینامیکی محلولهای چند تائی (سه‌تایی و بالاتر) شامل الکترولیت و حلال
- ۶- روشهای تجربی تعیین کمیت‌های ترمودینامیکی محلولها

مراجع:

1. *E.A. Guggenheim, Thermodynamics, An Advanced Treatment for Chemists and Physicists, NHPL, 1988.*
2. *K.S. Pitzer, Activity Coefficient in Electrolyte Solutions, 3rd ed., 1999.*
3. *R.C. Reid J.M. Prausnitz and B.E. Polling, The Properties of Gases and Liquids, Fourth ed., McGraw - Hill, 1987.*

۴- مقالات موجود در مجلات تمیز علمی



جمهوری اسلامی ایران

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری

برنامه درسی

دوره: دکتری

رشته: شیمی

گرایش: شیمی معدنی

گروه: علوم پایه

کمیته: شیمی



مصوبه جلسه شماره ۲۴۱ مورخ ۱۳۷۱/۰۴/۱۴

شورای عالی برنامه ریزی آموزشی



جمهوری اسلامی ایران
وزارت فرهنگ و آموزش عالی
شورای عالی برنامه ریزی

مشخصات کلی، برنامه و سرفصل دروس دوره

دکترای شیمی

گروه علوم پایه

کمیته تخصصی شیمی



مصوب دویست و چهارمین جلسه شورای عالی برنامه ریزی

۱۳۷۱/۴/۱۴

—ورخ

بسم الله الرحمن الرحيم



برنامه آموزشی

دوره دکترای شیمی

گروه : علوم پایه
رشته : شیمی
دوره : دکترا
کمیته تخصصی : شیمی
شاخه :
کدرشته :

شورای عالی برنامه ریزی در دیست و جهل و یکمین جلسه
مورخ ۱۳۷۱/۴/۱۴ بر اساس طرح دوره دکترای شیمی که
توسط کمیته تخصصی شیمی گروه علوم پایه شورای عالی
برنامه ریزی تهیه شده و به تأیید این گروه رسیده است برنامه آموزشی این دوره
را در سه فصل (مشخصات کلی، برنامه و سرفصل دروس) بشرح پیوست تصویب
کرد و مقرر میدارد:

ماده ۱) برنامه آموزشی دوره دکترای شیمی از تاریخ تصویب برای کلیه
دانشگاهها و موسسات آموزش عالی کشور که مشخصات زیر را دارند لازم الاجرا
است .

الف : دانشگاهها و موسسات آموزش عالی که زیر نظر وزارت فرهنگ و آموزش عالی
اداره میشوند .

ب : موسساتی که با اجازه رسمی وزارت فرهنگ و آموزش عالی و بر اساس
قوانین ، تاسیس میشوند و بنابراین تابع مقررات شورای عالی برنامه ریزی میباشد .
ج : موسسات آموزش عالی دیگر که مطابق قوانین خاص تشکیل میشوند و باید تابع ضوابط
دانشگاهی جمهوری اسلامی ایران باشند .

ماده ۲) از تاریخ ۱۳۷۱/۴/۱۴ کلیه دوره‌های آموزشی و برنامه‌های مشابه موسسات در زمینه دکترای شیمی در همه دانشگاهها و موسسات آموزش عالی منکوح در ماده ۱ منسوخ میشوند و دانشگاهها و موسسات آموزش عالی یادشده مطابق مقررات میتوانند این دوره را دایر و برنامه جدید را اجرا نمایند.

ماده ۲) مشخصات کلی و برنامه درسی و سرفصل دروس دوره : دکترای شیمی در سه فصل جهت اجرا به وزارت فرهنگ و آموزش عالی ابلاغ میشود. رای صادره دویست و چهل و یکمین جلسه شورای عالی برنامه‌ریزی مورخ ۱۳۷۱/۴/۱۴ در مورد برنامه آموزشی دوره دکترای شیمی



۱) برنامه آموزشی دوره دکترای شیمی که از طرف گروه علوم پایه پیشنهاد شده بود با اکثریت آراء بتصویب رسید. ۲) برنامه آموزشی دوره دکترای شیمی از تاریخ تصویب قابل اجرا است.

رای صادره دویست و چهل و یکمین جلسه شورای عالی برنامه‌ریزی مورخ ۱۳۷۱/۴/۱۴ در مورد برنامه آموزشی دوره دکترای شیمی صحیح است بمورد اجرا گذاشته شود.

مورد تأیید است دکتر مصطفی معین وزیر فرهنگ و آموزش عالی رونوشت : به معاونت آموزشی وزارت فرهنگ و آموزش عالی جهت اجرا ابلاغ میشود.

سید محمد کاظم نائینی دبیر شورای عالی برنامه‌ریزی



بسم الله الرحمن الرحيم

فصل اول

مشخصات کلی دوره دکتری شیمی

با اتکاء به تجارب حاصل از اجرای دوره کارشناسی ارشد شیمی و توفیق در این زمینه و با عنایت به مشی کلی شورای عالی انقلاب فرهنگی در راستای تأسیس دوره دکتری علوم در قالب آئین‌نامه مربوطه، کمیته تخصصی شیمی‌گروه علوم پایه شورای عالی برنامه ریزی برنامه دوره دکتری شیمی را بر اساس نیازهای کشور جمهوری اسلامی ایران، در جهت تأمین اهداف عالی انقلاب فرهنگی بشرح زیر تدوین نموده است تا پس از تأیید گروه علوم پایه، جهت تصویب شورای عالی برنامه ریزی پیشنهاد شود.

۱- تعریف و هدف

دوره دکتری شیمی بالاترین مقطع تحصیلی دانشگاهی در این رشته میباشد که به اعطای درجه دکتری شیمی منتهی میگردد و شامل مجموعه‌ای هماهنگ از فعالیتهای آموزشی و پژوهشی است. از اهداف مهم این دوره، علاوه بر تأمین هیئت علمی دانشگاهها تربیت افرادی است که دارای تفکری خلاق و مستقل بوده و نهایتاً "بر روشهای پیشرفته پژوهشی احاطه یافته و با تسلطی که بر یک یا چند موضوع در شیمی پیدا میکنند، قادر به درک مشکلات علمی جامعه باشند و به حل آنها بپردازند. در این دوره ابداع نوآوری و گسترش دانش شیمی از اهمیت خاص برخوردار بوده و رسالت ویژه فارغ التحصیلان را تشکیل میدهد.

۲- نظام دوره

دوره دکتری شیمی به دو مرحله آموزشی و پژوهشی تقسیم میگردد:

مرحله آموزشی: این مرحله پس از پذیرفته شدن داوطلب در امتحان ورودی آغاز میگردد. هدف این مرحله برطرف ساختن کمبود اطلاعات علمی دانشجویان میباشد که با گذراندن برخی از دروس پیشرفته شیمی نقائص او مرتفع میگردد. این دوره با برگزاری یک امتحان جامع پایان میپذیرد.

مرحله پژوهشی: این مرحله پس از اتمام مرحله آموزشی و قبولی دانشجویان در امتحان جامع شروع میشود. هدف از این مرحله آشنائی کامل دانشجویان با شیوه‌های پژوهش و کسب توانائیهای لازم جهت انجام پژوهش در یک یا چند زمینه خاص شیمی میباشد که میتواند به کشف یا نوآوریهای در شیمی منتهی گردد. حاصل این دوره با تدوین و تالیف رساله



همراه است که با دفاع از آن ، این دوره نیز پایان میپذیرد

۲- نحوه آزمون ورودی

آزمون تخصصی ورودی دوره دکترای شیمی از دروس پایه دوره کارشناسی ارشد شیمی در زمینه های شیمی آلی ، شیمی تجزیه ، شیمی معدنی و شیمی فیزیک بعمل میآید . این امتحان تخصصی همراه با امتحان زبان خارجه بصورت کتبی برگزار میگردد . نمرات این آزمون در موضوعات فوق الذکر به انضمام نمرات داوطلبان در دوره کارشناسی ارشد کارشناسی ، همچنین معرفی نامه های علمی که بوسیله اساتید دوره های قبلی داوطلب مستقیم^۱ به دانشگاه ارسال میگردد و نیز مصاحبه علمی، ملاک گزینش دانشجو خواهد بود .
دارندگان دانشنامه کارشناسی ارشد در رشته شیمی از یکی از دانشگاههای معتبر داخل یا خارج کشور ، که به تائید وزارت فرهنگ و آموزش عالی رسیده است ، داوطلبان اصلی شرکت کننده در آزمون ورودی را تشکیل میدهند .

تبصره ۱:

در صورتیکه داوطلب دارای درجه کارشناسی ارشد در یکی از رشته های علوم پایه ، علوم پزشکی و فنی و مهندسی باشد و هم چنین دارنده مدرک دکترای عمومی گروه پزشکی که بتوانند از عهده امتحان ورودی و شرایط مندرج در آئین نامه دکترای مصوب شورای عالی برنامه ریزی برآید، میتواند در دوره دکترای شیمی ادامه تحصیل دهد.

تبصره ۲:

دانشجویان نیمسال آخر کارشناسی ارشد رشته شیمی و سایر رشته ها میتوانند در آزمون ورودی شرکت کنند لیکن ثبت نام آنها منوط به ارائه دانشنامه کارشناسی ارشد است.

تبصره ۳:

داوطلب علاوه بر قبولی در آزمون ورودی میبایستی صلاحیت عمومی ورود به دوره دکترای را نیز دارا باشد .

۴- مراحل دوره :

الف : مرحله آموزشی : دانشجویی که برای دوره دکترای ثبت نام می نماید در این مرحله موظف است علاوه بر سمینارهای او ۲ شانزده واحد از دروس جدول پیشنهادی ضمیمه ویسا معادل آن که توسط گروه و یا دانشکده ارائه میشود را با مشورت استاد راهنما انتخاب نموده و

با موفقیت بگذرانند. مضافاً در مواردیکه استاد راهنما ضروری تشخیص دهد، دانشجو باید یک یا چند درس اضافی را از سایر رشته‌هاییکه در ارتباط با کار پژوهش وی میباشد نیز با موفقیت بگذرانند. تعداد و نوع دروس باید باتصویب شورای تحصیلات تکمیلی گروه یلدانشکده باشد و در هر صورت تعداد کل واحدها نباید از میزان واحدهای تعیین شده در آئین نامه دکترای مصوب شورایعالی برنامه ریزی، بیشتر گردد. بهر حال برنامه آموزشی دوره دکترای هر گروه و یا دانشکده باید طبق بند ۱ رای صادره یکصد و نود و ششمین جلسه شورایعالی برنامه ریزی مورخ ۱۳۶۹/۲/۳۰ در مورد واگذاری پاره‌ای از اختیارات شورایعالی برنامه ریزی به دانشگاهها تدوین گردد. موضوع سمینار ۱ توسط دانشجو و با موافقت استاد راهنما تعیین میگردد ولیکن مطالب سمینار ۲ باید حتماً در ارتباط با برنامه پژوهشی دانشجو باشد. استاد راهنما طبق شرایط مندرج در آئین نامه دکترای مصوب شورایعالی برنامه ریزی تعیین میشود. برای هر یک از سمینارهای فوق یک واحد درسی منظور می‌شود. پس از گذراندن دروس فوق الذکر، دانشجو می‌تواند در امتحان جامع شرکت نماید. این امتحان در سطح دروسی خواهد بود که دانشجو در مرحله آموزشی داشته است و شرایط آن طبق آئین نامه دوره دکترای مصوب شورایعالی برنامه ریزی میباشد. دانشجو جهت اتمام رسانیدن مرحله آموزشی میبایستی توانائی خود را در استفاده از زبانهای خارجی به یکی از دو طریق زیر باثبات رساند:

۱- قبولی در امتحان کتبی ترجمه متون شیمی در یکی از زبانهای انگلیسی، فرانسه، آلمانی یا روسی

۲- تسلط به یکی از زبانهای خارجی فوق الذکر به نحوی که بتواند در زمینه تخصصی مطلوب خلاصه کارهای تحقیقاتی یا طرح تحقیقاتی خود را به آن زبان بیان کند.

ب: مرحله پژوهشی: دانشجویانیکه مرحله آموزشی را با تمام رسانیده‌اند بایستی جهت ادامه تکمیل در مرحله پژوهشی ثبت نام نموده و به فعالیتهای علمی و تحقیقاتی در زمینه مورد نظر خود و نیز تنظیم و تدوین رساله بپردازند. این فعالیتهای علمی و تحقیقاتی با هدایت و نظارت استاد راهنما و زیر نظر کمیته اساتید مشا و ر که طبق شرایط آئین نامه دوره دکترای مصوب شورایعالی برنامه ریزی تعیین میشوند، بطریق زیر انجام میگردد:

دانشجو موظف است در ظرف شش ماه اول مرحله پژوهشی بار اهنمائی استاد راهنما عنوان رساله خود را همراه با طرح کامل موضوع تحقیقاتی خود مشخص نموده و پس از تأیید



اساتید مشاور جهت تصویب به گروه آموزشی ارائه دهد. ارزش پایان نامه ۴۴ واحد می باشد.

تبصره ۱:

چنانچه طرح پژوهشی فوق الذکر به تصویب نرسد یا دانشجو با توافق استاد راهنما بخواهد موضوع پژوهشی خود را تغییر دهد موظف است که حداکثر ظرف شش ماه دیگر طرح خود را کامل، تصحیح یا تجدید کند بگونه ای که تصویب آن میسر باشد. دانشجو باید نتیجه تحقیقات خود را هر شش ماه یکبار به اطلاع کمیته ای متشکل از استاد راهنمای و اساتید مشاور خود برساند.

تبصره ۲:

در صورتیکه پیشرفت دانشجوی در کار تحقیقاتی بعد از هر شش ماه مطلوب نباشد، بنا بر این درخواست استاد راهنما و تأیید اساتید مشاور و موافقت شورای تحصیلات تکمیلی برای بار اول به دانشجو کتبا "اخطار" میشود که در صورت عدم پیشرفت در شش ماه بعدی از ادامه تحصیل او جلوگیری خواهد شد.



تبصره ۳:

با توجه به پیشرفتهای سریع دانش شیمی و لزوم همگام بودن پژوهشگران این رشته با آنها و به منظور ترغیب دانشجویان به مطالعات علمی و مسأله "القاء حس بازنگری و استمرار آموزش در مراحل بعد از تحصیل، ارزیابی اطلاعات حاصل از مطالعات انفرادی آنها در مرحله پژوهشی و قبل از دفاع از پایان نامه به شیوه زیر خواهد بود.

هر دو ماه یکبار (جمعا " پنج نوبت در سال) آزمونهای کتبی در زمینه های مختلف شیمی توسط اعضاء گروه آموزشی طرح و ارائه میگردد. موضوع سئوالات از بین مطالب تحقیقاتی منتشر شده در مجلات علمی شیمی موجود در کتابخانه هردانشگاه و یا سمینارهای مختلف ارائه شده در بخش یا دانشکده انتخاب میشود. موفقیت در سه آزمون از ده آزمون متوالی قبل از دفاع از پایان نامه الزامی خواهد بود.

ج - دفاع از رساله :

پس از آماده شدن رساله و اعلام آمادگی دانشجو و تأیید استاد راهنما، دفاع از رساله صورت خواهد گرفت. همزمان با تشکیل جلسه دفاع، لازم است از نتایج کار تحقیقاتی دانشجو، مندرج در پایان نامه حداقل یکمقاله توسط یکی از مجلات بین المللی مورد تأیید وزارت فرهنگ و آموزش عالی جهت انتشار پذیرفته شده و مراتب به جلسه دفاع

فصل دوم

جدول دروس



از رساله منعکس شود . جلسه دفاع با حضور هیئت داوران ، طبق آئین نامه دوره دکتری مصوب شورای عالی برنامه ریزی تشکیل می شود . دانشجو در جلسه ای که در حضور این هیئت تشکیل میشود گزارش از کار تحقیقاتی خود را عرضه و از آن دفاع می نماید . اعطای درجه دکتری به داوطلب منوط به پذیرفته شدن رساله بوسیله هیئت داوران است .

تبصره :

دردوران تحصیل در دوره دکترای شیمی ، دانشجو موظف به رعایت کلیه آئین نامه ها و مقررات دوره دکتری وزارت فرهنگ و آموزش عالی میباشد .



فهرست دروس دوره دکتری شیمی

کد درس	نام درس	تعداد واحد	ساعت		پیشنیاز یا زمان ارائه درس
			نظری	عملی	
۱	نظریه گرافهای شیمی	۳	۵۱	۵۱	ندارد
۲	کامپیوتر در شیمی	۳	۵۱	۵۱	ندارد
۳	تحلیل آماری نتایج	۳	۵۱	۵۱	ریاضیات آماری
۴	روشهای نوین در آنالیز دستگامی	۳	۵۱	۵۱	شیمی تجزیه پیشرفته
۵	الکتروشیمی تجزیه ای در حلالهای ناآبی	۳	۵۱	۵۱	الکتروشیمی و شیمی تجزیه در محیطهای غیرآبی
۶	لیزر و کاربرد آن در شیمی	۳	۵۱	۵۱	اسپکتروسکوپی تجزیه ای
۷	روشهای رادیوشیمیایی	۳	۵۱	۵۱	ندارد
۸	مباحث نوین در شیمی تجزیه	۳	۵۱	۵۱	با نظراستاد
۹	ترمودینامیک فرآیندهای برگشتناپذیر	۳	۵۱	۵۱	شیمی فیزیک پیشرفته
۱۰	ترمودینامیک آماری ۲	۳	۵۱	۵۱	ترمودینامیک آماری ۱
۱۱	ترمودینامیک شیمیایی جامدات	۳	۵۱	۵۱	شیمی فیزیک پیشرفته
۱۲	ریاضیات در شیمی فیزیک	۳	۵۱	۵۱	ندارد
۱۳	سمینار ۱	۱	۱۷	۱۷	ندارد
۱۴	شیمی کوانتومی ۳	۳	۵۱	۵۱	شیمی کوانتومی ۲
۱۵	طیفسنجی مولکولی ۲	۳	۵۱	۵۱	طیفسنجی مولکولی ۱
۱۶	مباحث نوین در شیمی فیزیک	۳	۵۱	۵۱	با نظراستاد
۱۷	شیمی هتروسیکلیک پیشرفته	۳	۵۱	۵۱	شیمی آلی پیشرفته



ادامه فهرست دروس دوره دکتری شیمی

پیشنیاز یا زمان ارائه درس	ساعت			تعداد	نام درس	کد درس
	عملی	نظری	جمع			
ندارد	-	۱۷	۱۷	۱	سینار ۲	۱۸
مبانی پلیمر	-	۵۱	۵۱	۳	شیمی پلیمر پیشرفته	۱۹
شیمی آلی پیشرفته	-	۵۱	۵۱	۳	پیشرفته‌های نوین در ترکیبات طبیعی	۲۰
شیمی آلی پیشرفته	-	۵۱	۵۱	۳	شیمی آلی حیاتی	۲۱
با نظراستاد	-	۵۱	۵۱	۳	مباحث نوین در شیمی آلی	۲۲
ندارد	-	۵۱	۵۱	۳	شیمی حالت برا نگیخته و حدود اسطهای فعال	۲۳
فتوشیمی	-	۵۱	۵۱	۳	فتوشیمی پیشرفته	۲۴
ندارد	-	۵۱	۵۱	۳	شیمی پلیمرهای معدنی	۲۵
ندارد	-	۵۱	۵۱	۳	ساختمان و پیوند در ترکیبات معدنی	۲۶
با نظراستاد	-	۵۱	۵۱	۳	مباحث نوین در شیمی معدنی	۲۷
شیمی تجزیه پیشرفته	-	۵۱	۵۱	۳	روشهای حرارتی و سینتیکی در تجزیه	۲۸



فصل سوم

سرفصل دروس



نظریه گرافهای شیمیائی

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز: ندارد

مبانی نظریه گرافها - گرافهای شیمیائی - ماتریسهای توپولوژیکی -
خصلت بس جمله ای یک گراف شیمیائی - جنبه های توپولوژیکی نظریه هوکل -
مولکولهای همطیف - مولکولهای زیرطیف - انرژی رزونانس توپولوژیکی -
شمارش ساختارهای ککوله ای - الگوی مدارهای مزدوج شده - شاخص های
توپولوژیکی وکلازبردهای آنها در پیشگویی رابطه های ساختار / خواص و ساختار
/ فعالیت - شمارش ایزومرها .

منابع :

Trinajstić, N., "Chemical Graph Theory", CRC Press Inc.,

Vol I & II, 1983.



کامپیوتر در شیمی

تعداد واحد : ۳

نوع واجید :

پیشنیاز : ندارد

برنامه نویسی کامپیوتری زبان فورترن (Fortran 77), آشنائی با کامپیوتر فورترن 77 (FORTVS) و فورترن چهار (FORTHX), امکانات و کاربرد CMS, VM در کامپیوترهای IBM 370. آشنائی با برنامه های EXEC در کامپیوترهای مرکزی, آشنائی با سیستم عامل در ریز کامپیوترها (MS-DOS) و نحوه استفاده از یک Software و package.

منابع :

C.E.Klopfenstein, C.L.Wilkins, Computers in Chemical and Biochemical Research, Academic Press

T.R.Dickson, The Computer and Chemistry W.H.Freeman and Company.

Delos F.Detar, Computer Programs for Chemistry W.A.Benjamin, INC.

K.Ebert, H.Ederer and T.L.Isenhour, Computer applications in Chemistry, Verlag Chem. 1989.



تحلیل آماری نتایج



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : ریاضیات آماری

بررسی خطاها در تجزیه شیمیایی ، اندازه گیری ها و خطاهای مربوطه
در هر روش روشهای عددی و نموداری در تمییز خطاها . تستهای معنی دار -
آنالیز برگشتی و وابستگی کنترل کیفیت و نمونه برداری و بررسی خطاها ،
آنالیز فاکتوری ، بهینه سازی کمپلکس در تجزیه شیمیایی محاسبات جدید .

منابع :

1. G.W. Snedecor & W. Cochran, Statistical Methods, Iowa State University Press 6th edition, Ames, Iowa (1976).
2. K. Eckschlager, M.Sc., D.Ph., dr. R.A. Chalmers Van Nostrand Reinhold Company
Errors, Measurement and results in Chemical Analysis.
3. J.C. Milner & J.N. Milner, Statistics for Analytical Chemistry, 2nd edition, Ellis Harwood, Sussex 1987.
4. O.L. Davies. and P.L. Goldsmith, Statistical Methods in Research and Production, Longmans, London, 1982.
5. G.P. Box, W.G. Hunter and J.S. Hunter, Statistics for Experimentalists, Wiley, New York, 1978.
6. G.T. Werninont, use of Statistics to develop and Evaluate Analytical Methods, Association of official Analytical Chemists, Arlington, Virginia, 1985.
7. R. Caulcutt. and R. Boddy, Statistics for Analytical Chemists. Chapman & Hall, London, 1983.

روشهای نوین در آنالیز دستگاهی

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : شیمی تجزیه پیشرفته

تکنیک های GC/MS و GC/IR و چگونگی پیوند دستگاه GC به دستگاه های MS و IR - دستگاه پیوندی GC/FT-IR - مقایسه تکنیک های پیوندی GC/IR و GC/MS و دستگاه های MS و IR تکنیک LC/MS و چگونگی پیوند دستگاه و مقایسه آن با دستگاه GC/MS - تکنیک های TLC./IR و GC/MS و چگونگی پیوند این دستگاهها تکنیک GC/MS/IR و چگونگی پیوند این دستگاهها و مقایسه آن با دستگاه های GC/MS و MS/ICP - تکنیک و چگونگی پیوند آن -

منابع :

- 1.G.M.Message," Practical Aspects of Gas Chromatography/Mass Spectrometry ",Wiley,New York 1984.
- 2.E.S.Yeung",Dectectors for Liquid Chromatography ",John Wiley and Sons,1986.



الکتروشیمی تجزیه‌ای در حلال های ناآبی



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : الکتروشیمی تجزیه‌ای ، شیمی تجزیه در محیطهای غیرآبی

- اثر حلال بر واکنش های الکتروشیمیایی (تاثیر بر سینتیک مبادله الکترون ، سینتیک واکنش شیمیایی همراه برپدیته جذب سطحی و...) محدوده فعالیت الکتروشیمیایی (Electroactivity Lange) در حلالهای ناآبی ، تاثیر نوع حلال ، نوع الکتروولیت حامل و جنس الکتروده بر وسعت این محدوده .
 - روش های الکتروآنالیتیکی در حلالهای ناآبی ، پتانسیومتری ، ولتامتری و راههای گوناگون آن : پلاروگرافی ، ولتامتری با الکترودهای چرخان ، ولتامتری چرخه‌ای .
 - کاربرد روشهای ولتامتری در تعیین تابعهای ترمودینامیکی ، تجزیه کیفی تجزیه کمی و تعیین مکانیسم فرآیندهای الکترودی .
 - کروماتوگرافی پتانسیومتری ، الکتروولیز ممتد . دیگر روشهای کمکی نظیر ESR و اسپکتروالکتروشیمی در حلال های ناآبی .
 - مروری بر شرایط اجرای روش های الکتروشیمیایی تجزیه در حلالهای ناآبی
 - اشاره ای بر واکنش های اکسایش و کاهش نمونه در حلالهای ناآبی .
 - کاربرد نمک های مذاب بعنوان حلال در الکتروشیمی تجزیه
- منابع :

1. G.Charlot, I. Badoz-Lambling and B. Tremillon, *Electrochemical Reactions*, Elsevier, 1962.
2. C.K.Mann and K.K.Barnes, *Electrochemical Reactions in Nonaqueous systems*, Marcel Dekker Inc., 1970.
3. M.M.Baizer (ed), *Organic Electrochemistry*, Marcel Dekker Inc., 1973.

لیزر و کاربرد آن در شیمی



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : اسپکتروسکوپی تجزیه‌ای

- ۱- اصول فیزیکی لیزر (مفاهیم مقدماتی ، خواص لیزر ، برخورد لیزر با ماده و انواع لیزر).
- ۲- طیف‌بینی تجزیه‌ای با استفاده از اتم‌کننده‌های لیزری (لیزرهای حالت جامد ، مایع و گازی) طیف‌ها ، دکتورها ، اسپکتروگرافها و چگونگی سهمیه‌سازی شرایط کار با لیزر ، دامنه کاربرد تجزیه‌ای
- ۳- طیف‌سنجی جذب اتمی ، فلورسانس اتمی ، جذب مولکولی و فلورسانس مولکولی

منابع :

1. Nicolò Omenetto " Analytical Laser Spectroscopy " John Wiley & Sons, 1979.
2. E.H. Piepneier " Analytical Applications of Lasers " John Wiley 1987.
3. D.L. Andrews. "Lasers in Chemistry ", Springer-Verlag 1986.

روش های رادیوشیمیایی

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : ندارد

- اساس رادیواکتیویته - انواع تشعشعات هسته‌ای و ویژگی های آنها
ابزارهای تشخیص و اندازه‌گیری تشعشعات رادیواکتیو - انواع واکنش های
هسته‌ای و ویژگی های آنها - راههای آداسازی نمونه‌های فعال شده - واکنش
های نوترون - گاما (n, γ) - منابع تولید نوترون - تجزیه روش فعال
سازی (AA) - شرایط انجام واکنش های هسته‌ای و بهره‌برداری تجزیه‌ای
از آنها - ویژگی های آماری تجزیه‌های رادیوشیمیایی - معرف های رادیو-
آکتیو - استفاده از معرف های رادیواکتیو در تیتراسیون های رادیومتری .

منابع :

- 1.W.S.Lyon,Jr. (ed.),"Guide to Activation Analysis.", Van
Nostrand Co.Inc.N.Y.1964.
- 2.T.Braun and J. Toigyessy," Radiometric ", Pergamon Press,
N.Y.,1967.
- 3.M.T.Kelley (ed)," Radiochemistry, Connected Works" Analytical
Chemistry,1959.



مباحث نوین در شیمی تجزیه

تعداد واحد : ۱ تا ۳

نوع واحد: نظری

پیشنیاز : با نظراستاد

تدریس آخرین پیشرفتهای علمی در شیمی تجزیه از بررسی آخرین منابع
معتبر علمی شیمی تجزیه در سطح بین المللی .



ترمودینامیک فرآیندهای برگشتناپذیر

تعداد واحد: ۳

نوع واحد: نظری

پیشنیاز: شیمی فیزیک پیشرفته

۱- برخی مفاهیم ترمودینامیک مرتبه اول

۲- توازن انتروپی و حصول انتروپی

۳- نیرو، شار و معادلات پدیده شناسی

۴- قضیه دوچانگی انزاگر

نظریه افت و خیز

بزرگشت پذیری میکروسکوپی

وایسازی (رگرسیون) افت و خیز

۵- کاربرد قضیه انزاگر در پدیده ترموالکتریک و اشرودفر

۶- حالات ایستا و سیستمهای بیولوژیکی

منابع:

S.R.de Groot and J.Mazur, " Non-Equilibrium Thermodynamics",
North Holland Publishing Co.,Amsterdam (1962).



ترمودینامیک آماری ۲



تعداد واحد: ۳

نوع واحد: نظری

پیشنیاز: ترمودینامیک آماری ۱

آمار بلورها

طیف ارتعاشی بلور تک اتمی، نظریه های انیشتاین و دبای در مورد ظرفیت گرمایی بلورها، فونونها، نقص بلوری و انواع آن

محاسبات و بررسی آماری شبکه های بلوری

بررسی و محاسبه کمیت های ترمودینامیکی بلورها در حالت پایدار ترمودینامیکی، روشهای تقریبی برای محاسبه عامل ترکیبی (روش بررسی حل دقیق خواص ترمودینامیکی شبکه های یک بعدی، دوبعدی و سه بعدی تبدیل فاز جامد - جامد

مایعات و گازها

نظریه ساختمان با اهمیت و نظریه لندارد - جونز و نشر، بررسی سیستم های ایده آل در میدان های الکتریکی و مغناطیسی، بررسی گازهای غیرایده آل از دیدگاه آماری
منابع:

1. D.A. McQuarrie "Statistical Thermodynamics" Happer and Row 1973.
2. T.L. Hill "Statistical mechanics" New York McGraw-Hill 1956
3. T.L. Hill "introduction to statistical thermodynamics" Addison-Wesly Publishins Company, Inc. London 1960

ترمودینامیک شیمیایی جامدات

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : شیمی فیزیک پیشرفته

مقدمه‌ای بر قوانین ترمودینامیک با تأکید بر خواص جامدات ، خواص
ترمودینامیکی محلولهای جامد ، تعادل بین فازهای چندجزئی ،
ترمودینامیک سطح و فصل مشترک ، نقاشی در بلورهای یونی و فلزی ،
نقاشی در نیمه‌هادی ها ، نقاشی در ترکیبات استکیومتری و غیر استکیومتری
متر .

منابع :

- 1- R,A.Swafen " Thermodynamiers of Solids" 2nd.Ed.,
John Wiley 1972.



ریاضیات در شیمی فیزیک

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : ندارد

۱- آنالیز برداری

۲- سیستم های مختصات

۳- مختصری درباره آنالیز تانسوری

۴- دترمینانها و ماتریس ها

۵- سریها

۶- توابع متغیرهای مختلط

۷- معادلات دیفرانسیل - جوابهای سری مانند (Power Series Solutions)

۸- معادلات دیفرانسیل

۹- سریهای فوریه و انتگرالهای فوریه

منابع :

1. G.Arften, Mathematical Methods for Physicists (Academic Press. Inc.,1985)
2. E.Butkov, Mathematical Physics (Addison Wesley,1973).
3. M.L.Boas, Mathematical Methods in the Physical Sciences (John Wiley & Sons,1983).



سمینارا

تعدادواحد : ۱

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : ندارد

موضوع ونحوه، اجرای آن توسط شورای تحمیلات تکمیلی تعیین می شود.



شیمی کوانتومی ۲



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : شیمی کوانتومی ۱

Generalized Angular Momentum

- اندازه حرکت زاویه‌ای تعمیم یافته

تثوری عمومی اندازه حرکت زاویه‌ای - کاربرد عملکردهای بالابرنده
و پایین برنده در تعیین بردارهای خاص و مقادیر خاص عملکردهای اندازه
حرکت زاویه‌ای - اندازه حرکت زاویه‌ای و چرخش‌ها - جفت شدن دو-بردار
اندازه حرکت زاویه‌ای - جفت شدن سه بردار اندازه حرکت زاویه‌ای - ضرائب
Clebsch Gordon و Racah - نمادهای $3J$ و $6J$ و غیره - نمایش
ماتریسی چرخش‌ها - سریهای Clebsch Gordon - تانسورهای کاهش ناپذیر
Wigner Eckart - عناصر ماتریس ضرب‌های اسکالر، تانسورهای
کاهش ناپذیر - میدان‌های اسکالر، برداری و اسپینور (Spinors).

- سیستم‌های چندالکترونی

بحث عمومی درباره ذرات یکسان و خواص تقارن توابع موج آنها
درمینانهای Slater - محاسبه عناصر ماتریس عملکردهای یک و دو الکترونی
و استنتاج قواعد Slater - Condon - تقریب میدان مرکزی - معادلات
Hartree-Fock - خواص جوابهای Hartree-Fock، روش‌های محاسبه
عددی - Configuration interaction - چندتایی‌های (multiplets)
مربوط به دو الکترون - نمادهای طیفی سیستم‌های الکترونی - سنت-ز
توابع موج چندتایی‌ها - محاسبه انرژی چندتایی‌ها - اثر متقابل اسپین-
اوربیتال در سیستم‌های چندالکترونی .

منابع :

- 1.M.Weissbluth, Atoms and Molecules (Academic Press, 1978)
- 2.M.Alonso and H.Valk, Quantum Mechanics; Principles and Applications (Addison- Wesley, 1973).

1. R. Loudon, "The Quantum Theory of light", Clarendon Press. Oxford, 1981.
2. J. I. Steinfeld "Molecules and Radiation"; An Introduction to Modern Molecular Spectroscopy, The MIT Press, 1979.
3. B. P. Straugham and S. Walker, Vols. I, II, III (Chapman and Hall Ltd, 1976).
4. S. Califano, "Vibrational States", John Wiley & Sons, 1976.



طیف‌سنجی مولکولی ۲



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : طیف‌سنجی مولکولی ۱

- طیف‌سنجی الکترونی

تقریب بورن - اپنهايمر Born-Oppenheimer approximation

طیف‌سنجی الکترونی مولکولهای دواتمی - اصل فرانک کوندون - طیف‌سنجی

الکترونی مولکولهای چنداتمی - طیف‌سنجی فوتوالکترونی

- طیف‌سنجی تشدید مغناطیسی Magnetic resonance Spectroscopy

ممانهای مغناطیسی هسته‌ای - تشدید مغناطیسی هسته‌ای - جابجایی های

شیمیایی - حفت‌شدنهای اسپین - اسپین هسته‌ای - آسایش اسپینی - تشدید

اسپین الکترونی -

- تئوری گروهها Group Theory - یادآوری مفاهیم بنیادی تئوری

گروهها - تئوری گروهها و ساختمان الکترونی مولکولها - تئوری گروهها

و ارتعاشات مولکول - تئوری گروهها و چرخش های مولکولی

منابع :

Ira N. Levine, Molecular Spectroscopy (John Wiley, 1975)

مباحث نوین در شیمی فیزیک

تعداد واحد : ۱ تا ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : با نظراستاد

تدریس آخرین پیشرفتهای شیمی فیزیک و بررسی مجلات و کتب معتبر
بین المللی در زمینه های مختلف شیمی فیزیک .



شیمی هتروسیکلیک پیشرفته



تعداد واحد: ۳

نوع واحد: نظری

پیشنیاز: شیمی آلی پیشرفته

در این درس راجع به بسیاری از ترکیبات سیکلیک و آروماتیک که دارای اتمهای مختلفه ازت، گوگرد، اکسیژن، سیلنیم، تلوریوم و غیره میباشند میتوان صحبت کرد. هر مورد شامل واکنشها و مکانیسم آنها، سنتزهای مختلفه اسپکتروسکوپی و در بعضی از موارد بیوسنتز مواد مورد نظر بحث میگردد.

منابع:

1. Elderfield, R.C. "Heterocyclic Compounds" Wiley, New York.
2. Katritzky, A.R. "Physical Methods in Heterocyclic Chemistry", Academic Press, New York.
3. Katritzky, A.R. "Advances in Heterocyclic Chemistry", Academic Press, New York.
4. Weisberger, A. "Heterocyclic Compounds", Interscience Publishers, New York.
5. E.C. Taylor & A. Weisberger "General Heterocyclic Chemistry Series" Wiley-Interscience, New York.
6. Acheson, R.M., "An Introduction to the Chemistry of Heterocyclic Compounds", 2nd Ed. Interscience New York.
7. Albert, A. "Heterocyclic Chemistry: An Introduction", Athlone Press, London.
8. Allcock, M.R. "Heteroatom Ring Systems and Polymers", Academic Press, New York.
9. Badger, G.M. "The Chemistry of Heterocyclic Compounds", Academic Press, New York.
10. Fitton, A.D. and Sma R.K., "Practical Heterocyclic Chemistry", Academic Press, New York.

سمینار ۲

تعداد واحد: ۱

نوع واحد: نظری

پیشنیاز: ندارد

موضوع ونحوه، اجرای آن توسط شورای تحمیلات تکمیلی تعیین می شود.



شیمی پلیمر پیشرفته



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : مبانی پلیمر

- ۱- مفهوم وزن مولکولی متوسط و توزیع اوزان مولکولی در سیستم خطی مرحله‌ای و در سیستم غیرخطی مرحله‌ای .
- ۲- تهیه پلیمرهای : با مقاومت حرارتی بالا، از طریق باز شدن حلقه پلیمرهای فعال نوری ، پلیمرهای زنده ، پلیمرهای هادی ، پلیمری الکتروولیت ها ، پلیمرهای ارگانومتالیک .
- ۳- سنتیک پلیمریزاسیون Ziegler-Natta
- ۴- واکنش های : سنتزی پلیمرها ، از هم پاشی پلیمرها ، پلیمریزاسیون در محیط آبی ، ایزومری شدن پلیمرها .
- ۵- پلیمرهای تحقیقاتی : انواع مختلف پلیمرهای هتروسیکلیک ، پلیمریزاسیون : از طریق واکنش دیلز آلدِر ، واکنش اضافی (۳دی پلار ، کوپلی- مرهای مختلف ، پلیمرهای محلول در آب ، پلیمرهای جدید از طریق واکنش استخلافی الکتروفیلی آروماتیک ، پلیمرهای حیاتی .
- ۶- فتوشیمی فاز شروع در پلیمریزاسیون رادیکالی .
- ۷- مختصری در مورد شیمی فضائی پلیمرها .

منابع :

1. Odian, G., "Principles of Polymerization", McGraw-Hill, 1970.
2. Lenz, R.W., "Organic Chemistry of Synthetic High Polymers", Interscience Publishers, 1967.
3. Flory, P.J., "Principles of Polymer Chemistry", Cornell University Press, 1953.
4. Culbertson, B.M.; McGrath J.E., "Advances In Polymer Synthesis", Polymer Science and Technology Series Vol. 31, Plenum Press, 1985.
5. Frisch, K.C., Reegen, S.L., "Ring Opening Polymerization", Marcel Dekker.
6. Keii, T. "Kinetics of Ziegler-Natta Polymerization, Kodanasha LTD.
7. Ketley, A.D., "The Stereochemistry of Macromolecules". Edward Arnold Publishers.
8. Rempp, P.; Merrill, E.W., "Polymer Synthesis" Huething & Wepf Publishers.
9. Mathur, N.K.; Narang, C.K.; Williams, R.E. "Polymer as Aids in Organic Chemistry". Academic Press.



پیشرفتهای نوین در ترکیبات طبیعی

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : شیمی آلی پیشرفته

در این درس راجع به قسمتی از سنتز، بیوسنتز، استریوشیمی، اسکتروسکپی و استفاده‌های دارویی آلکالوئیدها، استروئیدها، پروستاگلندین‌ها، نوکلئوئیدها، نوکلئوزیدها، ماکرولیدها، بتالاکتسام‌ها و غیره میتوان بحث و گفتگو کرد.

1. J.S. Bindra and R. Bindra, " Prostaglandin Synthesis", Academic Press, New York, 1977.
2. W.W. Zorbach, R.S. Tipson, "Synthetic Procedures in Nucleic Acid Chemistry", Vol. 1 and 2, Wiley interscience New York, 1968, 1973.
3. J. Elks (Ed). "Recent Advances in the Chemistry of β -Lactam Antibiotics", Glaxo Research Ltd. The Chemical Society, Burlington House London W1V 0BN.
4. G.I. Gregory, (Ed), "Recent Advances in β -Lactam Antibiotics", Second International Symposium, Glaxo Research Ltd. The Chem. Soc. Burlington House, London, W1V 0BN, 1980.
5. L. Fieser and M. Fieser, "Steroids" Reinhold, New York 1959.
6. R. Monske, and F. Helmuth, " The Alkaloids", Academic Press, New York, from 1950.
7. A. Katritzky (Ed), "Advances in Heterocyclic Chemistry", Academic Press. New York, from 1963.
8. Journals; JACS, JOC, J. Chem. Soc, Heterocycles, Tetrahedron, Helv. Chem, Acta. Can. J. Chem. etc.

شیمی آلی حیاتی



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : شیمی آلی پیشرفته

- ۱- مقدمه‌ای بر شیمی آلی حیاتی شامل پدیده نزدیکی و جورشدن ملکول‌های حیاتی و مدل‌های آلی
 - ۲- خصوصیت مولکول‌های آلی حیاتی و آمینواسیدها و پپتیدها
 - ۳- شیمی آلی حیاتی فسفات‌ها
 - ۴- مدل‌های آنزیمی (شیمی کمپلکس دهنده‌ها - پذیرنده‌ها)
 - ۵- یون‌های فلزی و نقش آنها در فعالیت آنزیم‌ها
 - ۶- شیمی کوآنزیم‌ها
 - ۷- سینتیک آنزیم‌ها
- منابع :

- 1.H.Dugas & C.Penney," Bioorganic Chemistry a Chemical Approach to Enzyme Action," Springer New York,1981.
- 2.F.Vogtle,E.Weber (Eds.),"Biomimetic and Bioorganic Chemistry" I,II, Springer,1985,1986.

مباحث نوین در شیمی آلی

تعداد واحد : ۱ تا ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : با نظراستاد

تدریس آخرین پیشرفتهای شیمی آلی در سطح علمی بین المللی با
بررسی مجلات و کتب علمی منتشره در زمینه شیمی آلی.



شیمی حالت برانگیخته و حدود اسطهای فعال



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : ندارد

- ۱- ایجاد حالت برانگیخته و تشخیص آن
- ۲- ایجاد حالت های برانگیخته فعال به روش های شیمیایی و حرارتی و مطالعه آنها
- ۳- ایجاد حالت های برانگیخته فعال به روش های تابشی و مطالعه آنها
- ۴- ایجاد حالت های برانگیخته فعال به روش های الکتروشیمیایی و مطالعه آنها
- ۵- کاربرد شیمی حالت برانگیخته

1. Ware, W. "Creation and detection of the Excited state" Marcel Dekker, INC., New York and Basel, 1976, ISBN 0-8247-6451-X
2. Faulkner, L.R.; Glass, R.S., "Chemical and Biological generation of Excited states", Adam, W.; Cilento, G., Eds., Academic Press, New York, 1982.
3. Lever, A.B.P. "Excited states and Reactive Intermediates " , ACS symposium series, No. 307 (1986).
ISSN 0097-6156; 307
ISBN 0-18412-0971-5

فتوشیمی پیشرفته



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : فتوشیمی

- ۱- حالت برانگیخته الکترونی در ترکیبات آلی دارای کروموفور و کمپلکس های معدنی .
- ۲- چگونگی ایجاد حالت برانگیخته توسط تابش نور با طول موج مناسب و تعیین آن توسط روشهای اسپکتروسکوپی .
- ۳- چگونگی زوال حالت برانگیخته - فتوفیزیک و فتوشیمی
- ۴- واکنشهای فتوجانشینی و فتوایزومریزاسیون در کمپلکس های عناصر واسطه .
- ۵- واکنشهای فتوردوکس (فتوشیمی همراه با انتقال الکترون)
- ۶- واکنشهای فتوشیمیایی بین سطحی (الکترولیت / الکتروود)
- ۷- واکنشهای فتوشیمیایی در سیستم های منظم (مایسل ، پلیمر ...)
- ۸- واکنشهای فتوشیمیایی تزکیبات آلی - فلزی
- ۹- کاربرد واکنش های فتوشیمیایی در تبدیل انرژی نوری به انرژیهای مفید دیگر .

1. Wrighton, M.S., "Inorganic and Organometallic Photochemistry," Advances in Chemistry Series, No. 168, 1978, ACS, ISBN 0-8412-0398-9.
2. Wrighton, M.S.; Interfacial Photoprocesses: Energy Conversion and Synthesis," Advances in Chemistry Series No. 184, 1980, ACS, ISBN 0-8412-0474-8.
3. Ferraudi, G.J., "Elements of Inorganic Photochemistry," Wiley-Interscience John-Wiley & Sons, Inc., 1988, ISBN(1-813225-7).
4. Yersin, H., and Vogler, A. eds. "Photochemistry and Photophysics of Coordination Compounds", Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York 1987 ISBN 3-540-17808-2.
5. Volman, D.H., Hammond, G.S. and Gollinck, K. eds, "Advances in Photochemistry " Vol. 14., John Wiley & Sons, New York, N.Y. 1988.

شیمی پلیمرهای معدنی

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاساز: ندارد



۱- پلی سیلانها و پلی کربوسیلانها

۲- پلی سیلانها و پلی سیلانوکسانها

۳- پلی سیلوکسانها

۴- پلی فسفازانها

۵- پلیمرهای ارگانو-اکسومریوط به فرآیند سل وژل

۶- پلیمرهای ترکیبات بوران

۷- پلیمرهای دارای فلزات و شبه فلزات

1. Ray, N.H., "Inorganic Polymers," Academic, New York, 1978.

2. Zeidin, M. and Wynne, K.J. and Allcock, H.L., ACS Symposium series,

No. 360-(1978), ISBN 0-8412-1442-5.

ساختمان و پیوند در ترکیبات معدنی



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : ندارد

- ۱- ساختمان و پیوند در ترکیبات عنا صراصلی
- ۲- ساختمان و پیوند در ترکیبات کمپلکس عنا صروا سطر
- ۳- ساختمان و پیوند در ترکیبات آلی فلزی
- ۴- ساختمان و پیوند در کلاسترهای عنا صروا سطر

1. Dekock, R., and Gray, H. "Chemical Structure and Bonding", Benjamin/Cummings, Redding, Mass, 1980.
2. Burdett, J.K. "Molecular Shapes: Theoretical Models of Inorganic Stereochemistry", Wiley-Interscience: New York, 1980.
3. Albright, T.A.; Burdett, J.K., and Whangbo, M.H. "Orbital Interactions in Chemistry", John Wiley, New York, NY (1985).
4. Johnson, B.F.G. "Transition Metal Clusters", Wiley Interscience, Chichester, Engl., (1980).
5. Cotton, F.A. and Walton, R.A. "Multiple Bonds Between Metal Atoms". Wiley; New York, (1982).
6. O'Keefe, M. and Navrotsky, A. eds., "Structure and Bonding in Crystals", Vols. I and II, Academic, New York, 1981.
7. Wells, A.F. "Structural Inorganic Chemistry, 5th ed., Oxford University Press: London, 1984.

مباحث نوین در شیمی معدنی

تعداد واحد : ۱ تا ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : با نظر استاد

تدریس آخرین پیشرفتهای شیمی معدنی و بررسی مجلات و کتب معتبر
بین المللی در زمینه های مختلف شیمی معدنی.



روشهای حرارتی و سینتیکی در تجزیه



تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : شیمی تجزیه پیشرفته

اصول و ویژگی های وزن سنجی حرارتی - اساس روش تجزیه حرارتی
تفاضلی (DTA) راههای افزایش کارآیی روش DTA از طریق ترکیب
آن با سایر روشهای افزایش تجزیه نظیر طیف سنجی جرمی و استفاده از پرتو.
روشهای سینتیکی در واکنشهای کاتالیزوری و غیر کاتالیزوری، روشهای
سینتیکی در اندازه گیری مخلوط های مشابه - روشهای اندازه گیری مثبتی
بر سرعت تفاضلی واکنشها در تجزیه .

منابع :

1. W.Smykatz-Kloss," Differential Thermal Analysis Springer Verlag,1979.
- 2.W.M.Wendlandt," Thermal Methods of Analysis" Interscience Pub. N.Y. 1967
- 3.H.A.Mottoia", Kinetic Aspects of Analytical Chemistry ", John Wiley and Sons,1982.



خوردگی پیشرفته ۲

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : الکتروشیمی پیشرفته

سرفصل درس:

فصل اول : پدیده شناختی سینتیک الکتrod:

مقدمه - ماهیت و سینتیک واکنش‌های الکتروشیمیایی - معادله تابلر - ولمر - فاکتورهای پیش‌نمایی - سینتیک چند مرحله‌ای الکتrod - مرحله تعیین‌کننده سرعت فرمولاسیون مکانیسم تحت فرضیه شبه تعادل

فصل دوم : بعضی جنبه‌های پایداری مواد :

مقدمه - اندازه‌گیری خوردگی - دیاگرام‌های سینتیک اوانس - هوار - محاسبه پتانسیل و سرعت خوردگی - سینتیک الکتروشیمیایی بعنوان پایه‌ای برای واکنش‌های ناهمگن - مکانیسم انحلال آهن - مکانیسم کاتالیستی - اثرات ناهمگن سطح

فصل سوم : جنبه‌های خوردگی آلیاژها

مقدمه - جنبه‌های تجربی اغلال - ثابت‌های سرعت اجزاء در انحلال، آلیاژها، دیاگرام تافل و کاهش جریان معادله از طریق آلیاژسازی - انحلال انتخابی - مطالعه انحلال آندی آلیاژهای دوتائی توسط تکنیک‌های الکتروشیمیایی و آنالیز سطح، شبیه‌سازی کامپیوتری انحلال انتخابی

فصل چهارم : روئین‌شدگی :

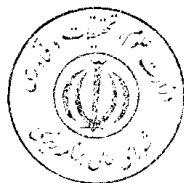
مقدمه - مکانیسم رشد فیلم روئین و ماهیت آن - پایداری فیلم روئین در آهن و نیکل، شکست فیلم‌های روئین و نقش یون کلرید در آن، منحنی‌های پلاریزاسیون (جاروی پتانسیودینامیک POS و پلاریزاسیون چرخه‌ای CP) دراوئینگی - طیف بین‌امپدانس الکتروشیمیایی

فصل پنجم : مکانیسم‌های اثر بازدارنده‌های خوردگی :

مقدمه - تصحیح ضرایب انتظار انتقال بار در پدیده جذب بازدارنده - بازدارندگی در اثر واکنش‌های کاتدی و آندی بازدارنده‌ها - اثرات ویژه بازدارنده‌ها بر اساس سرعت واکنش‌ها تشکیل لایه‌های پلیمری محافظ - اثرات بازدارندگی‌ها در شکنندگی هیدروژن - مکانیسم‌های دیگر

منابع :

1. J.O'M. Bockris and Shahed U.M. Khan, *Surface Electrochemistry*, 1993. Plenum Press, New York.
2. P. Marcus and J. Oudar, *Corrosion Mechanisms in Theory and Practice*, 1995, Mareel Dekker Inc., New York.
3. W. Stephen Tait, *An Introduction to Electrochemical Corrosion Testing for Practicing Engineers and Scientists*, 1994, Pairo Docs Publications, Racine, Wisconsin.
4. J.O'M. Bockris and A.K.N. Reddy, *Modern electrochemistry Vols. 1&2*, Plenum Pub. Coar. New York.



شیمی فیزیک محلولها

تعداد واحد: ۳
نوع واحد: نظری

سرفصل درس

- ۱- مقدمه: اهمیت محلولها و تقسیم‌بندی انواع محلولها (*Athetal*, *Regular*, ...).
- ۲- مقدمه‌ای بر مکانیک آماری محلولها:
(الف) تقریب یک سیال وان‌در‌والس - معادلات حالت در محلولهای مایع
(ب) تقریب دو سیال
- ۳- ترمودینامیک محلولهای فوق بحرانی
- ۴- شیمی فیزیک محلولهای آبی الکترولیت: معادلات پیترز و ... برای پیش‌بینی فعالیت، ضریب فعالیت، فشار بخار و ...
- ۵- تئوری‌های جدید مربوط به پیش‌بینی خواص ترمودینامیکی محلولهای چند تائی (سه‌تایی و بالاتر) شامل الکترولیت و حلال
- ۶- روشهای تجربی تعیین کمیت‌های ترمودینامیکی محلولها

مراجع:

1. *E.A. Guggenheim, Thermodynamics, An Advanced Treatment for Chemists and Physicists, NHPL, 1988.*
2. *K.S. Pitzer, Activity Coefficient in Electrolyte Solutions, 3rd ed., 1999.*
3. *R.C. Reid J.M. Prausnitz and B.E. Polling, The Properties of Gases and Liquids, Fourth ed., McGraw - Hill, 1987.*

۴- مقالات موجود در مجلات تمیز علمی