دانشگاه تهران

مشخصات کلی، برنامه درسی و سرفصل دروس

دوره : کارشناسی ارشد

رشته : نانو شیمی

پردیس علوم

مصوب جلسه مورخ ۸۴/۸/۲۴ شورای برنامه ریزی آموزشی دانشگاه

این برنامه بر اساس مصوبه جلسه ۵۵۴ مورخ ۸۴/۵/۸ شورای برنامه ریزی آموزش عالی مبنی بر ضرورت ایجاد رشته نانو شیمی و مطابق با مواد آیین نامه واگذاری اختیارات برنامه ریزی درسی به دانشگاهها، توسط اعضای هیات علمی دانشکده شیمی پردیس علوم تدوین شده و در یکصد و بیست و دومین جلسه شورای برنامه ریزی آموزشی دانشگاه مورخ ۸۴/۸/۲۴ به تصویب رسیده است.

شماره: ۳۰/۸۳۷۷۳
تاریخ: ۹۴/۱۱/۵
پیوست:

دانشگاه آزاد اسلامی
سازمان مرکزی

بسمه تعالی

بخشنامه به واحدها و مراکز آموزشی دانشگاه آزاد اسلامی

موضوع: تکمیل واحدهای درسی دوره کارشناسی ارشد رشته نانوشیمی

به پیوست تصویر مصوبه جلسه ۲۲۱ مورخ ۱۳۹۴/۱۰/۱ شورای برنامه ریزی آموزشی و درسی دانشگاه، درخصوص تکمیل تعداد واحدها در برنامه درسی دوره کارشناسی ارشد رشته نانوشیمی مصوب مورخ ۸۴/۸/۲۴ دانشگاه تهران جهت اجرا ارسال می شود.

دکتر فرهاد حسین زاده لطفی
معاون آموزشی و تحصیلات تکمیلی

نشانی: تهران انتهای بزرگراه شهید ستاری(شمال)، میدان دانشگاه،بلوار شهدای حصارک، سازمان رکزی دانشگاه آزاد اسلامی کدپستی۱۴۷۷۸۹۳۸۵۵
تلفن: ۴۷۳۵۰۰۰۰ و تلفن گویای۴۷۴۸

دانشگاه تهران

مشخصات کلی، برنامه درسی و سرفصل دروس

دوره : کارشناسی ارشد

رشته : نانو شیمی

پردیس علوم

مصوب جلسه مورخ ۸۴/۸/۲۴ شورای برنامه ریزی آموزشی دانشگاه

این برنامه بر اساس مصوبه جلسه ۵۵۴ مورخ ۸۴/۵/۸ شورای برنامه ریزی آموزش عالی مبنی بر ضرورت ایجاد رشته نانو شیمی و مطابق با مواد آیین نامه واگذاری اختیارات برنامه ریزی درسی به دانشگاهها، توسط اعضای هیات علمی دانشکده شیمی پردیس علوم تدوین شده و در یکصد و بیست و دومین جلسه شورای برنامه ریزی آموزشی دانشگاه مورخ ۸۴/۸/۲۴ به تصویب رسیده است.

شماره :
تاریخ :
پیوست :

دانشگاه آزاد اسلامی
سازمان مرکزی

باسمه تعالی

تکمیل واحد های درسی دوره کارشناسی ارشد نانو شیمی

مصوب جلسه ۲۲۱ مورخ ۱۳۹۴/۱۰/۱ شورای برنامه‌ریزی آموزشی و درسی دانشگاه آزاد اسلامی

شورای برنامه ریزی آموزشی و درسی دانشگاه آزاد اسلامی بنا به پیشنهاد واحد علوم و تحقیقات مبنی بر تکمیل واحدها در برنامه درسی دوره کارشناسی ارشد نانوشیمی، تعداد واحدهای این دوره را بدون تغییر در محتوا به صورت زیر تعیین و تصویب کرد.

۱.دروس اصلی و تخصصی ۹ واحد	
۲.دروس اختیاری	۱۶ واحد
۳. سمینار	۱ واحد
۴. پایان نامه	۶ واحد
جمع	۳۲ واحد

این مصوبه از تاریخ تصویب قابل اجرا است.

رأی صادره جلسه ۲۲۱ مورخ ۱۳۹۴/۱۰/۱ شورای برنامه‌ریزی آموزشی و درسی دانشگاه آزاد اسلامی درخصوص تکمیل واحدها در برنامه درسی دوره کارشناسی ارشد نانو شیمی صحیح است جهت اجرا ابلاغ شود .

دکتر حمید میرزاده
رئیس دانشگاه آزاد اسلامی

رونوشت: به واحدهای مجری ابلاغ شود .

دکتر فرهاد حسین زاده لطفی
معاون آموزشی و تحصیلات تکمیلی دانشگاه

دانشگاه آزاد اسلامی
شورای برنامه ریزی آموزشی و درسی

مصوبه شورای برنامه ریزی آموزشی دانشگاه تهران در خصوص برنامه درسی

رشته : نانو شیمی

مقطع : کارشناسی ارشد

برنامه درسی دوره کارشناسی ارشد نانو شیمی که توسط اعضای هیات علمی دانشکده شیمی پردیس علوم تدوین شده است با اکثریت آراء به تصویب رسید.

- این برنامه از تاریخ تصویب لازم الاجرا است.
- هر نوع تغییر در برنامه مجاز نیست مگر آنکه به تصویب شورای برنامه ریزی آموزشی دانشگاه برسد .

سید حسن حسینی
معاون آموزشی و تحصیلات تکمیلی دانشگاه

جلیل راشد محصل
دبیر شورای برنامه ریزی آموزشی دانشگاه

رای صادره جلسه مورخ ۸۴/۸/۲۴ شورای برنامه ریزی آموزشی دانشگاه در مورد تدوین برنامه درسی رشته نانو شیمی در مقطع کارشناسی ارشد صحیح است، به واحد ذیربط ابلاغ شود.

عباسعلی عمید زنجانی
رئیس دانشگاه

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
شورای برنامه ریزی آموزش عالی

دانشگاه تهران
شورای برنامه ریزی آموزشی

فصل اول

مشخصات کلی

وزارت علوم تحقیقات و فناوری
شورای برنامه ریزی آموزش عالی
دانشگاه تهران
شورای برنامه ریزی آموزشی

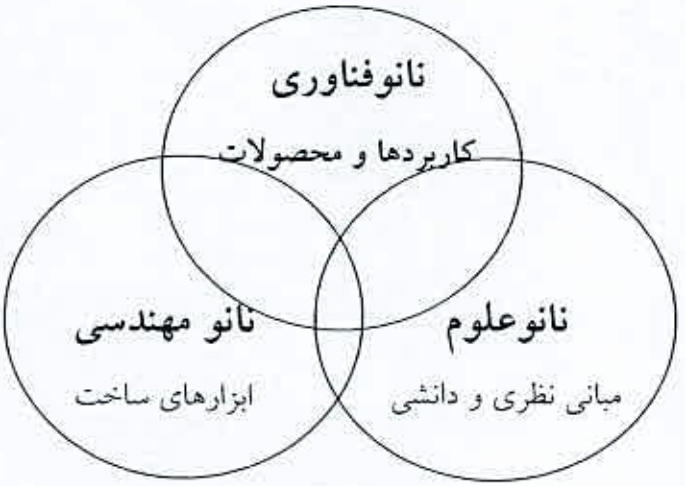
مشخصات کلی دوره کارشناسی ارشد رشته نانو شیمی

۱- مقدمه:

نانوفناوری نوعی فناوری است که روی مطالعه، تولید و بکارگیری ساختارها، لایه‌ها، واحدهای مولکولی، لایه‌ها و سطوح مرزی داخلی با ابعاد دقیق یا محدودهٔ ساخت از حدود ۱۰۰nm تا چند اتم (۰/۱ تا 1nm) متمرکز می‌باشد، هرچند که فقط جنبه‌های هندسی و کوچکی ابعاد در ارتباط با نانوفناوری مطرح نیست. یکی از جنبه‌های مهم نانوفناوری تغییر عمده و جدی در خواص مواد و پدیده‌های فیزیکی مرتبط با آن در مقیاس نانو می‌باشد. نانوفناوری نمایندهٔ یک فناوری متحدالشکل نبوده بلکه اجتماعی از رشته‌های کوچکتر علمی و فنی متفاوت می‌باشد.

گرچه تمایز و خط کشی دقیقی بین نانوعلم و نانوفناوری وجود ندارد اما می‌توان گفت که نانوعلم مطالعه و "بررسی پدیده‌ها و تغییر و جابجایی مواد" در مقیاس اتمی و مولکولی است در حالیکه نانوفناوری طراحی، تولید و تعیین ویژگی و کاربرد ساختارها، وسایل و سیستم‌ها از طریق شکل و اندازهٔ مواد در مقیاس نانومتر می‌باشد. به عبارت دیگر در حالیکه نانوعلم روی درک و فهم تغییرات طی فرآیند کاهش اندازهٔ آنها به مقیاس نانومتر متمرکز است، نانوفناوری روی بهره جستن از چنین اثراتی برای ایجاد ساختارها، وسایل و سیستم‌های حایز کارکرد و خواص ناب متمرکز است. در این میان زمینهٔ دیگری بنام نانومهندسی نیز مطرح است که روی ابزارهای لازم جهت طراحی و ساخت ساختارها، وسایل و سیستم‌های ساخته شده از عناصر نانومتری متمرکز است. در شمای زیر زمینه‌های کارکرد هر یک از سه جنبه نانوعلوم، نانو مهندسی و نانوفناوری نمایش داده شده است.

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
شورای برنامه ریزی آموزش عالی
دانشگاه تهران
شورای برنامه ریزی آموزشی



کشف فولرنها یا باکیبالها- نانو ساختار جدیدی که از کربن ساخته می‌شود- توسط سه شیمیدان معروف کرلکروتوو اسمالی در سال ۱۹۸۵ منتهی به کشف ساختارهای لوله مانندی از اتم‌های کربن در سال ۱۹۹۱ گردید که اساساً ورق‌های (صفحات) گرافیت رول شده‌ای هستند که از ناحیهٔ لبه‌هایشان به هم وصل شده و استوانه‌ای را تشکیل می‌دهند. این مواد به خاطر خواص عالی و متمایز، پتانسیل کاربردهای گسترده‌ای در زمینهٔ الکترونیک و مهندسی مواد دارند. ایدهٔ ساخت مولکولی با مقالهٔ اریک دکسلر تحت عنوان طراحی پروتئین راهی برای ساخت مولکولی به تصویر کشیده شد. در کار بعدی روش‌های احتمالی ساخت قطعات و ساختارها با مشخصات و ویژگیهای پیچیدهٔ اتمی به کمک خلق یک آرایندهٔ خودتکثیر (Self-replicating Assembler) تبیین و توصیف شده است. این ابزار وسیله‌ای چندمنظوره برای ساخت مولکولی بوده که قادر است واکنش‌های شیمیایی را از طریق چیدمان مولکول‌ها (Positioning molecules) هدایت کند. گرچه چنین نگاهی به یک آرایندهٔ فراگیر (Universal Assembler) خیلی بحث‌انگیز بود اما اکنون روش‌های ساخت از پایین به بالا برای تولید نانو مواد، شاخهٔ مهمی از رشتهٔ نانوفناوری شده است.

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
دفتر برنامه‌ریزی آموزش عالی
دانشگاه تهران
دفتر برنامه‌ریزی آموزشی

نانوفناوری اشاره به دست‌کاری و یا خودآرایی اتم‌ها و مولکول‌های منفرد یا دسته (خوشه)های مولکولی برای خلق مواد و ابزارهایی با خواص جدید یا خیلی غیرمعمول می‌باشد. نانوفناوری می‌تواند روش‌های نوینی را برای ساخت چیزها فراهم نماید. رویکردِ ساختِ بالا به پایین به معنای کاهش اندازهٔ کوچکترین ساختارها به مقیاس نانو بوده که به وضوح در نانوالکترونیک و نانومهندسی که فتونیک یکی از کاربردهای اخیر آن است، دیده می‌شود. رویکردِ ساخت ، پایین به بالا به معنای دست‌کاری و چیدمان اتم‌ها و مولکول‌های منفرد برای دست‌یابی به نانوساختارها است که بیشتر در حیطه ی شیمی قرار می گیرد.

رویکرد پایین به بالا از چیدمان اتم‌ها، مولکول‌ها یا مجموعه‌های مولکولی (Molecular aggregates) برای ساخت سیستم‌ها و اجزاء بزرگتر استفاده می کند. این روش عمدتاً از اصول خودآرایی (Self-organization)، سطوح مرزی آلی-معدنی (Organic-inorganic boundary surfaces)و اتصال انتخابیِ فیزیکی یا شیمیاییِ سیستم‌های مولکولی به سطوح آماده بهره می گیرد. نمونه‌های زیستی متعددی از ساختارهای اَبرمولکولی نظیر مارپیچ دوگانه، پوشش‌های پروتئینی و کمپلکس‌های چند پروتئینی از طریق ساختاریابی خودبخودی (Self-Structuring) تهیه می‌شوند. سیستم‌های مولکولی یا اَبرمولکولی برنامه‌پذیری از این دست، از اهمیت زیادی در ایجاد احتمالی کارکردهای خیلی انتخابی نظیر فرآیندهای بازشناسی (Recognition)، انتقال علامت (Signal transfer) و یا تولید ساختارهای نانومتری دارا می‌باشند. با استفاده از فرآیندهای بازشناسیِ بسیار متنوع، امکان شکل‌دهی به ساختار، اشکال و الگوهای متعدد در ابعاد نانومتری مانند حلقه‌ها، استوانه‌ها، فیلم‌ها، پوشش‌ها و ... وجود دارد. بنابراین فرآیندهایی که بوسیلهٔ بازشناسی مولکولی (Molecular Recognition) هدایت می‌شوند از اهمیتی به‌سزا برای ساخت کنترل شدهٔ اجسام جامد برخوردارند. در عمل روش‌های متعددی مبتنی بر خودآرایی (Self-Assembly) توسعه یافته‌اند که قابلیت کاربرد در فاز گازی، فاز مایع و یا خلاء را برای ساخت و شکل‌دهی به خوشه‌ها یا لایه‌های نانوساختار دارند. بعضی از عمده‌ترین روش‌ها تک‌لایه‌های خودآراسته (SAM)

دانشگاه تهران
وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
دفتر برنامه‌ریزی آموزش عالی

(Self Assembled Monolayer) ، سنتز شیمیایی‌ترو روش‌های لایه‌نشانی (Deposition) فاز گاز یا خلاء می‌باشند.

نقش شیمی و شیمیدانها در ایجاد، توسعه و تکامل نانوفناوری بر هیچ یک از دانشمندان و صاحبان خرد پوشیده نیست. این موضوع انگیزه تعریف و تدوین مجموعه حاضر می‌باشد.

برنامهٔ آموزشی پیوست دورهٔ کارشناسی ارشد و علوم و فناوری نانو- رشته نانوشیمی را دربر می گیرد. در دورهٔ کارشناسی ارشد، دانشجو با مفاهیم، ابزار و کاربردهای نانوفناوری آشنا شده و با انتخاب موضوع پایان‌نامه، خود را برای دورهٔ دکترای نانو آماده می‌سازد.

۲-تعریف و هدف:

دورهٔ کارشناسی ارشد علوم و فناوری نانو- رشته نانو شیمی دوره‌ای است که دانشجو با گذراندن آن با اصول تحقیق آشنا شده و آموزشهای لازم برای نحوهٔ تعریف و بررسی تحقیقی یک موضوع را می‌آموزد به نحوی که برای ادامهٔ تحصیل در دورهٔ دکترا بتواند به صورت مستقل اندیشه نماید .

۳- ضرورت و اهمیت:

اهمیت این دوره در تربیت پژوهشگر برای کار در زمینه علوم و فناوری نانو است.

۴-طول دوره و شکل نظام:

طول دوره کارشناسی ارشد علوم و فناوری نانو- رشته نانو شیمی چهار نیمسال تحصیلی است، که در موارد خاص با تصویب شورای تحصیلات تکمیلی دانشکده، یک نیمسال قابل افزایش می باشد. نظام دوره کارشناسی ارشد علوم و فناوری نانو- رشته نانو شیمی آموزشی- پژوهشی است. دانشجو با گذراندن دروس نظری و انتخاب استاد راهنما و موضوع پایان نامه، این دوره را در مهلت مقرر به پایان می رساند.

۵- تعداد و نوع واحدهای درسی:

تعداد کل واحدهای درسی دورهٔ کارشناسی ارشد علوم و فناوری نانو- رشته نانو شیمی۲۸ واحد به صورت زیر است:

۵-۱- دروس اصلی	۹ واحد
۵-۲- دروس اختیاری	۱۰ واحد
۵-۳- سمینار	۱ واحد
۵-۴ – پایان نامه	۸ واحد

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
شورای برنامه‌ریزی آموزش عالی
دانشگاه تهران

۵-۱- دروس اصلی:

۹ واحد درس نظری است که دانشجو با رعایت پیش‌نیاز آنها را ترجیحاً در نیمسال اول تحصیلی انتخاب می‌نماید.

۵-۲-دروس اختیاری:

مجموعه ای از دروس نظری و سمینار ۲ است که دانشجو می‌تواند دروس اختیاری خود را از جدول مربوطه انتخاب نماید. در صورت تشخیص استاد راهنما، دانشجو می‌تواند ۳ واحد از دروس اختیاری خود را از سایر دروس دوره های کارشناسی ارشد و دکتری انتخاب نماید..

۵-۳- سمینار:

سمینار۱: این سمینار الزامی بوده و موضوع آن بررسی و ارائه یک موضوع از میان مطالب علمی روز در زمینه نانوفناوری می باشد به نحوی که قدرت تحقیق دانشجو را افزایش داده و بر معلومات دانشجو و سایرین بیافزاید. سمینار در محدودهٔ زمانی یک ساعت ارائه شده و حضور دانشجویان دوره‌های کارشناسی ارشد و دکتری علوم و فناوری نانو- رشته نانو شیمی بر اساس آیین نامه ای که به تصویب شورای تحصیلات تکمیلی دانشکده خواهد رسید در جلسات این سمینارها الزامی است.

سمینار۲: این سمینار اختیاری بوده و از نظر شرایط مانند سمینار۱ می باشد.

۵-٤- پایان‌نامه:

انتخاب استاد راهنما و موضوع پایان‌نامه حداکثر در آغاز نیمسال دوم انجام می‌گیرد. در انتخاب موضوع پایان‌نامه رعایت نکات زیر توصیه می‌شود:

الف- موضوع و طرح موردنظر در جهت شناخت و توسعه پژوهش در زمینه علوم و فناوری نانو باشد.

ب- روش یا راه‌حل موردنظر دارای تازگی و نوآوری باشد.

۶- نقش و توانایی فارغ التحصیلان:

۶-۱- عهده‌دار شدن مسئولیت پژوهش در زمینه علوم و فناوری نانو

۶-۲- همکاری در زمینه‌های علوم و فناوری نانو در مؤسسات پژوهشی کشور

۶-۳- آمادگی برای ادامه تحصیلات بالاتر

۷- شرایط و ضوابط ورود به دوره علوم و فناوری نانو- رشته نانو شیمی:

۷-۱- دارا بودن مدرک کارشناسی مطابق قوانین سازمان سنجش و ترجیحا رشته های مرتبط علوم، مهندسی و پزشکی

۷-۲-پذیرفته شدن در آزمون ورودی

۸-مواد و ضرایب امتحانی:

آزمون ورودی دورهٔ کارشناسی ارشد نانوشیمی مطابق دستورالعمل‌های سازمان سنجش آموزش کشور در یک یا دو مرحله انجام می گیرد. در صورت یک مرحله‌ای بودن آزمون مواد وضرائب به صورت جدول زیر میباشد.

نانوشیمی		
ردیف	مواد امتحانی	ضریب
۱	زبان‌عمومی وتخصصی	۱
۲	شیمی آلی (دروس آلی ۱، ۲، ۳جداسازی و شناسایی ترکیبات آلی و کاربردطیف‌سنجی در شیمی آلی، شیمی فیزیک‌آلی)	۱
۳	شیمی‌معدنی (دروس شیمی معدنی ۱، ۲، آلی فلزی)	۱
۴	شیمی‌تجزیه (دروس تجزیه ۱، ۲، شیمی تجزیه دستگاهی)	۱
۵	شیمی فیزیک (دروس‌شیمی‌فیزیک ۱، ۲کوانتوم وطیف‌سنجی)	۱
۶	شیمی کاربردی(اصول محاسبات شیمی‌صنعتی، شیمی صنعتی ۱، ۲،اصول تصفیه آب‌و پسابهای صنعتی و خوردگی فلزات).	۱

در صورت دو مرحله‌ای بودن آزمون، مراحل آن به شرح زیر خواهد بود.

مرحله اول: آزمون ورودی تستی که توسط سازمان سنجش برگزار شده و مطابق جدول بالا میباشد.

مرحله دوم: آزمون تشریحی از دروس تخصصی کاربرد طیف سنجی در شیمی آلی، شیمی فیزیک۲و مبانی شیمی کوانتومی و شیمی معدنی ۲ با ضرایب مساوی است. این آزمون پس از اعلام اسامی پذیرفته شدگان مرحله اول، توسط دانشکده انجام می گیرد.

فصل دوم

جداول دروس

جدول شماره ۱:

دروس الزامی رشته نانو شیمی دورهٔ کارشناسی ارشد

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات			توضیحات
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی	
۱	شیمی نظری ساختارهای نانو	۳	۳	-	٤٨	٤٨	-	*مبانی شیمی کوانتومی
۲	روشهای سنتز مواد نانو ساختار۱	۳	۳	-	٤٨	٤٨	-	*شیمی فیزیک۲
۳	شناسایی و تعیین ساختار نانومواد۱	۳	۳	-	٤٨	٤٨	-	*کاربرد طیف سنجی در شیمی آلی
جمع		۹	۹	-	۱۴۴	۱۴۴	-	

***دروس جبرانی** - در صورتیکه دانشجو این دروس را در دوره کارشناسی نگذرانده باشدو یا حد نصاب لازم را در آزمون ورودی دوره کارشناسی ارشد (مرحله دوم آزمون) کسب ننموده باشد، گذراندن این دروس به صورت جبرانی الزامی است.

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
شورای برنامه ریزی آموزش عالی
دانشگاه تهران
شورای برنامه ریزی آموزشی

جدول شماره ۲:

دروس اختیاری رشته نانو شیمی دورهٔ کارشناسی ارشد

ردیف	نام درس	واحد	ساعات			پیش‌نیاز
			جمع	نظری	عملی	
۱	شیمی سطح و حالت جامد	۳	٤٨	٤٨	-	شیمی فیزیک۲
۲	شیمی سل-ژل	۳	٤٨	٤٨	-	روشهای سنتز مواد نانوساختار
۳	کاربرد سونو شیمی درسنتز مواد نانو	۳	٤٨	٤٨	-	روشهای سنتز مواد نانوساختار
۴	کارگاه سنتز و شناسایی مواد نانوساختار	۱	۳۲	-	۳۲	روشهای سنتز مواد نانوساختار
۵	نانو فناوری پلیمرها	۳	٤٨	٤٨	-	روشهای سنتز مواد نانوساختار
۶	نانو مواد معدنی	۳	٤٨	٤٨	-	روشهای سنتز مواد نانو ساختار
۷	شیمی سوپرامولکولی	۳	٤٨	٤٨	-	روشهای سنتز مواد نانوساختار- و استریوشیمی
۸	محاسبات کوانتومی مواد نانو ساختار۱	۳	٤٨	٤٨	-	شیمی نظری ساختارهای نانو
۹	سمینار۲	۱	۱٦	-	-	-
	جمع	۲۳	۳۸٤	۳۵۲	۳۲	

- دانشجو میتواند ۷ واحد از دروس اختیاری را از این جدول و ۳ واحد باقی مانده را از این جدول و یا از دروس کارشناسی ارشد و یا دکترای سایر رشته های شیمی با موافقت استاد راهنما و شورای تحصیلات تکمیلی گروه انتخاب نماید.

وزارت علوم تحقیقات و فناوری
شورای برنامه ریزی آموزش عالی
دانشگاه تهران
شورای برنامه ریزی آموزشی

فصل سوم

سر فصل دروس

فصل سوم

سرفصل دروس

شیمی نظری ساختارهای نانو

تعداد واحد: ۳

پیشنیاز : مبانی شیمی کوانتومی

نوع واحد: نظری

هدف: آشنائی و تسلط بر اصول و کاربرد شیمی نظری ساختارهای نانو

سر فصل درس :

۱-مقدمه: تعاریف، دسته بندی مواد نانو، تاریخچه پیشرفت نانو

۲-اصول اساسی:

الف - اندازه و مقیاس : واحدها، قوانین اندازه گیری، اتمها، مولکولها، کلاسترها و سوپرا مولکولها

ب- پدیده های انجام پذیر در مقیاس نانو : تونل زدن، ساختارهای مولکولی و کریستالی، سطوح و سطوح مشترک، پیوندهای شیمیایی (انواع و قدرت) ، ساختارهای سلسله مراتبی، انتقالات توده به سطح ، نیروهای بین مولکولی، خودآرائی و دوباره سازی سطحی (self-assembly and surface reconstruction)

۳- پیوند کئووالانی: تئوری MO ، تئوری VB ، کنفیگوراسیون الکترونی و MO و VB ، حالتهای الکترونی MO و VB ، مقایسه روشهای MO و VB

٤- روش نیمه تجربی مولکولهای چنداتمی: روش MO بدون الکترون، روش MO هوکل توسعه یافته، روش Pariser-Parr-Pople، تئوری SCF ، تقارن در تئوری SCF ، مقایسه تئوری هوکل و SCF ، رابطه الکترونی.

۵-محاسبات کوانتومی:

وزارت علوم تحقیقات و فناوری
دانشگاه تهران

روشهای Ab-initioو Semiemprical در مورد مولکولهای چند اتمی، توابع پایه، کاهش تعداد انتگرال ها، آنالیز جمعیت، هندسه مولکولی، برهم کنش کنفیگوراسیونها، روشهای Semiempricalبرای مولکولهای مزدوج مسطح، روشهای مکانیک مولکولی.

مراجع:

1."Nanomaterical – Synthesis, Properties and Applications", edited by A.S. Edelstein and R.C. Cammarata, institute of physics publishing, London, 1998.

2."Handbook of Nanostructured Materials and Nanotechnology", edited by H .S. Nolwa vols.1-5, academic press (2000).

3."Science of Fullerenes and Nanotubes", by M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, and P. Eklund, Academic press (1996).

4."Nanostructured Carbon for Advanced Applications", edited by G.Bncedek etal, kluwer Academic publishers (2001).

5."Quantum Chemistry"; 4th Edition; I.R.Levine; 1991.

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
شورای برنامه ریزی آموزش عالی

دانشگاه تهران
شورای برنامه ریزی آموزشی

روشهای سنتز مواد نانو ساختار ۱

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : شیمی فیزیک۲

هدف: آشنائی و تسلط بر اصول روشهای سنتز مواد نانو ساختار

سر فصل درس:

۱-ساختارهای نانوی صفر بعدی : نانو ذرات

-مقدمه

-سنتز نانوذرات از طریق هسته زایی هموژن (-سنتز نانوذرات فلزی و -سنتز نانوذرات نیمه هادی)

-سنتز نانوذرات از طریق هسته زایی هتروژن (-صول هسته زایی هتروژن و سنتز نانوذرات مختلف)

۲- ساختارهای نانوی یک بعدی : Nanowires and Nanorods

-مقدمه

-رشد خودبخودی

-رشد تبخیری-تراکمی

-رشد بخار- مایع- جامد (VLS)

-رسد محلول- مایع- جامد (SLS)

-سنتز بر اساس الگو: -الکتروشیمیایی ، -الکتروفورزی ، -پر کردن الگو

۳- ساختارهای نانوی دو بعدی : فیلمهای نازک

- اساس رشد فیلم

- Physical Vapor Deposition (PVD) , - Chemical Vapor Deposition (CVD)
- Atomic Layer Deposition (ALD) , - Electrochemical Deposition

-خود آرایی

-فیلمهای سل-ژل

٤- نانومواد خاص

-فولرنهای کربن و نانوتیوبها ، -مواد میکرو پور و مزوپور

-ساختارهای پوسته-هسته ، -هیبریدهای آلی-معدنی

-نانو کامپوزیتها

مراجع:

1. G. Cao, " Nanostructures and nanomaterials: Synthesis, properties and Application", Imperial College press, 2004.
2. M. S. Dresselhous et al, " Carbon nanotube: Synthesis, Structure, Properties and Application", Springer, New-York, 2001.
3. K. J. Klabande, "Nanoscale materials in chemistry", Wiley, 2001.

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
شورای برنامه ریزی آموزش عالی

دانشگاه تهران
شورای برنامه ریزی

شناسایی و تعیین ساختار نانومواد۱

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : کاربرد طیف سنجی در شیمی آلی

هدف: آشنائی و تسلط بر اصول روشهای شناسایی و تعیین ساختار نانومواد

سر فصل درس:

۱-آنالیز سطح: Auger, UPS, XPS, ESCA

۲-تکنیکهای X-ray

WAXS

SAXS

EXAFS

XANES

XRD

XRF

۳- تکنیکهای اسپکتروسکوپی شناسایی ساختار: , Raman , NMR ,(نشری، انعکاسی، فوتواکوستیسک)FTIR، الکترواسپکتروسکوپی

٤-روشهای میکروسکوپ الکترونی : میکروسکوپی با نور و الکترون، الکترونها و واکنش آنها با نمونه، پراش الکترونی، SEM, TEM, STEM, EMA، آنالیز شیمیایی در میکروسکوپ الکترونی، آنالیز تفکیک انرژی، آنالیز تفکیک طول موج، آنالیز پرتو Xنمونه های حجیم و نازک، آنالیز کمی در یک میکروسکوپ الکترونی

مراجع:

1. Z. L. Wang, "Characterization of Nanophase materials", Wiley-VCH, 2000.

شیمی سطح و حالت جامد

تعداد واحد: ۳

نوع واحد: نظری

پیشنیاز: شیمی فیزیک۲

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

سرفصل درس:

۱)معرفی ساختارهای ساده کریستالی: ساختارهای اولیه ، تقارن و گروههای نقطه ای شبکه ها و سلولهای واحد، جامدات کریستالی، انرژی شبکه.

۲)روشهای آماده سازی، روشهای سرامیک، سنتز مایکروویو، روش سل –ژل، روش پیش ساختار ، روش هیدروترمال، ته نشین شدن بخارات شیمیایی

۳)پیوند در جامدات و خواص الکترونی، مدل باند ، هدایت الکترونی، نیمه هادیها، نیمه هادیهای dopped باند در ترکیبات

٤)نقص ها و حالت های غیراستوکیومتری: انواع نواقص و مقدار آنها، هدایت یونی در جامدات، الکترولیت های جامد، ترکیبات غیراستوکیومتری

٥)زئولیت ها، خاکها و ساختارهای مرتبط: تهیه زئولیت ها، تعیین ساختار، خاکهای معدنی دیگر قالبهای ساختاری

٦)خواص نوری جامدات: برهم کنش نور و اتم ، جذب و نشر تابش در نیمه هادیها، فیبرهای نوری

۷)خواص دی الکتریکی و مغناطیسی ، نفوذپذیری مغناطیسی، پارامغناطیس در کمپلکسهای فلزی فلزات فرومغناطیس و ترکیبات، آنتی فرومغناطیس، قطبش پذیری الکتریکی، کریستالهای Piezoelectic، اثر فروالکتریک

۸)فوق هادیها: خواص مغناطیسی، تئوری، اثرات Josephson، فوق هادیهای دمای بالا، کاربرد.

۹)ساختار فلزات: ساختار سطح فلزات، ساختار سطح فلزات fcc، ساختار سطح فلزات hcp، ساختار سطح فلزات bcc، انرژی سطح، آسایش و بازسازی سطوح، فلزات ذره ای تک کریستالهای سطوح.

۱۰)جذب مولکولهای روی سطح: معرفی جذب مولکولی، چگونگی اتصال مولکولها به سطح، سینتیک جذب منحنی های انرژی پتانسیل و انرژی جذب، هندسه و ساختار جاذبها، فرآیند خودجذب

۱۱)منحنی همدمای لانگمویر: معرفی، انحراف از حالت تعادلی، انحراف های سینتیکی، تغییرات پوشش سطح با T و P، کاربردها.

۱۲)اثرات فشار گاز و UHV: معرفی UHV، اثرات فشار گاز

۱۳)ساختارهای فوق لایه ای و شکست سطح: طبقه بندی سا ختارهای فوق لایه ای، انکسار الکترونی کم انرژی، انکسار الکترونی پر انرژی انعکاسی، ساختار سطوح

مراجع:

1. Richard C. Ropp; "Solid State Chemistry"; 2003.
2. D. P. Woodruff, et al; "Modern Techniques of Surface Science"; 1994.
3. Ralf and Walter; England Vanselow; "Chemistry and Physics of Solid-State".

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
شورای برنامه ریزی آموزش عالی

دانشگاه تهران
شورای برنامه ریزی آموزشی

شیمی سل- ژل

تعداد واحد: ۳

نوع واحد: نظری

پیشنیاز: روشهای سنتز مواد نانوساختار

هدف: آشنائی و تسلط بر اصول شیمی سل- ژل

سرفصل درس:

۱) معرفی سل- ژل، هیدرولیز و تراکم مواد غیرسیلیکاتی و سیلیکاتی(فلزات واسطه، آلومیناتها،

۲) سیستم های بورات، سیلیکاتهای آبی، هیدرولیز و تراکم آلکوکسایدهای سیلیکون، سیلیکاتهای چند جزیی).

۳) ژلاتینه کردن(تئوری کلاسیک،مدلهای سینتیکی).

٤) تئوری تغییر شکل و جریان در ژل ها(نیروهای موثر برای هم زدن، انتقال مایعات، رئولوژی شبکه متخلخل، تئوری تغییر شکل).

٥) خشک کردن (فشار خشک کردن، جلوگیری از شکستگی، لایه های نازک)

مراجع:

1.C.J.Brinker; G.W.Scherer; "Sol-Gel Science"; Accademic Press; 1990.

2.D.C.Bradley; R.C.Mehrotra; I.P.Rothwell; A.Singh; " Alkoxo and Aryloxo Derivatives of Metals" ; Accademic Press; 2001.

3. C. Jeffrey Brinker; George W. Scherer ; "Sol-Gel Science: The Physics and Chemistry of Sol-Gel Processing"; 1990.

4. John D. Wright; Nico A.J.M. Sommerdijk; "Sol-Gel Materials: Chemistry and Application"; 2000.

کاربرد سونوشیمی در سنتز مواد نانو

تعداد واحد: ۳

نوع واحد: نظری

پیشنیاز : روشهای سنتز مواد نانو ساختار

هدف: آشنائی و تسلط بر اصول و کاربرد سونوشیمی در سنتز مواد نانو

سر فصل درس :

۱) مقدمه ای بر سونوشیمی.

۲) سنتز نانوپودرهای فلزی از طریق سونوشیمی.

۳) سنتز نانوآلیاژهای فلزی از طریق سونوشیمی.

٤) نشاندن ذرات نانو بر روی سطوح کروی ومسطح از طریق سونوشیمی.

۵) سنتز کمپوزیتهای فلز-پلیمر از طریق سونوشیمی.

٦) سنتز مواد نانو کپسوله شده در ماتریکسهای کربنی از طریق سونوشیمی.

۷) سنتز نانواکسیدهای فلزی از طریق سونوشیمی.

۸) سنتز ساختارهای نانو SnO , SnO_2 از طریق سونوشیمی جهت کاربرد بعنوان مواد الکترودی

۹) سنتز سونوشیمیائی مواد نانوکریستالی

مراجع :

1.C. N.R. Rao, M . A. K. Cheetham,"The chemistry of Nano materials", Wiley-VCH Verlag Gmbh& Co., Weiheim, 2004.

کارگاه سنتز و شناسایی مواد نانوساختار

تعداد واحد: ۱

نوع واحد: عملی

پیشنیاز: روشهای سنتز مواد نانوساختار

هدف: آشنائی و تسلط بر روشهای عملی سنتز و شناسایی مواد نانوساختار

سرفصل درس:

۱) مواد نانوساختار: مقدمه، اصول مواد

سنتز: اصول عمومی، آزمایشگاه تهیه سیالهای آهن، ساخت مواد نانو، آزمایشگاه تهیه ذرات نانو طلا، PDMS.

مشخصات: خواص مکانیکی، شکست و انتقال نوری، پروبهای میکروسکوپی اسکنی و الکترونی

۲) خواص و کاربردها:

سنسورهای شیمیایی، بیوسنسورها، نانوتیوبها، الکترونیک مولکولی، نانوساختارهای مغناطیسی، نقطه های کوانتومی،

آزمایشگاه نقطه های کوانتومی نیمه هادی، فلزات آمورف و شبه کریستال، آزمایشگاه ته نشست الکترولیتیکی نانومیله ها.

مراجع :

1. Z. L. Wang, "Characterization of Nanophase materials", Wiley-VCH, 2000.

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
شورای برنامه ریزی آموزش عالی
دانشگاه تهران
شورای برنامه ریزی آموزشی

نانو فناوری پلیمرها

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : روشهای سنتز مواد نانو ساختار

هدف: آشنائی و تسلط بر اصول نانو فناوری پلیمرها

سر فصل درس:

۱-فراورش

-سنتز شیمیایی و فراورش پودرهاو فیلمهای با ساختار نانو

-ذرات : شامل فلزات، آلیاژها، کامپوزیتها، سرامیکها، مواد هیبریدی

-فیلمها و پوششها : شامل فلزات و سرامیکها

-فراورش پاششی حرارتی مواد نانو کریستالی

-تهیه پودرهای نانو کریستالی برای پاشش حرارتی

-پاشش حرارتی

-تهیه مواد و کامپوزیتهای نانو ساختار با فراورش فاز جامد

-خصوصیات

-پایداری فاز در دماهای بالا

-مواد نانو ساختار Electrodeposited

-سنتز مواد نانو ساختار با Electrodeposition

-ساختار مواد نانو تهیه شده با این روش

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
شورای برنامه ریزی آموزش عالی
دانشگاه تهران
شورای برنامه ریزی آموزشی

-خصوصیات مواد نانو تهیه شده با این روش که شامل خصوصیات فیزیکی، الکتریکی، مغناطیسی، حرارتی و ...

۲- کاربردها

-سنسورهای گازی و ذخیره سازی گازها

-کاتالیزگرها

-نانوکامپوزیتها

-لاستیکهای تقویت شده

-پلاستیکهای تقویت شده

مراجع:

1.C. Koch, " Nanostructured materials: Processing, Properties and Potential Applications" William Andrew Inc., 2002.

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
شورای برنامه ریزی آموزش عالی

دانشگاه تهران
شورای برنامه ریزی آموزشی

نانو مواد معدنی

تعداد واحد:۳

نوع واحد: نظری

پیشنیاز: روشهای سنتز مواد نانوساختار

هدف: آشنائی و تسلط بر اصول تئوری و کاربرد نانو مواد معدنی

سرفصل درس:

۱-نانو کلاسترها

۲-کربن نانو تیوب

۳-نانو تیوب های معدنی

٤-نانو ذرات معدنی

٥-نانو سیستم های پلیمرهای معدنی

٦-نانو فیلترهای معدنی

۷-سل-ژل در سنتز نانو مواد معدنی

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
شورای برنامه ریزی آموزش عالی

مراجع:

1.Feldheim, D.L.; Foss, C.A.; "Metal Nanoparticles, Synthesis , Characterization and Application", 2004.

2.Reich, S., et al.; "Carbon Nanotubes", 2004.

3. Yang, P.; "The Chemistry of Nanostructured Materials", 2003.

4.Jena, P.; Khanna, S.N.; Rao, B.K.; "Cluster and Nano-assemblies",2005.

دانشگاه تهران
واحد برنامه ریزی آموزشی

شیمی سوپرامولکولی

تعداد واحد:۳

نوع واحد: نظری

پیشنیاز: روشهای سنتز مواد نانوساختار- استریوشیمی

هدف: آشنائی و تسلط بر اصول تئوری و کاربرد شیمی سوپرامولکولی

سرفصل درس:

۱) شیمی سوپرامولکولی بر اساس سیستم های فلزی و آلی.

۲) ماهیت برهم کنش های سوپرامولکولی.

۳) ساختار، پایداری و دینامیک کمپلکسهای سوپرامولکولی.

٤) آرایش سیستم های سوپرامولکولی.

٥) نقش کمپلکسهای سوپرامولکولی در شناسایی مولکول ها.

٦) کاتالیست واکنشها، انتقال مواد وbiomimicry و نانوفناوری.

۷) دندریم ها، مولکول های مزدوج، شیمی میزبان-میهمان.

۸) ساختار و خواص و سنتز گروه های اصلی میزبان های خنثی، آنیونی و کاتیونی.

۹) ترمودینامیک کمپلکسهای میزبان-میهمان دارای چند محل برهم کنش.

۱۰) کاربرد نظریه های سوپرامولکولی در طراحی مولکولی

مراجع:

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
شورای برنامه ریزی آموزش عالی

دانشگاه تهران
شورای برنامه ریزی آموزشی

1."Supramolecular Organization and Materials Design"; Edited by W. Jones; C. N. R. Rao ; 2001.

2.Paul D. Beer, Philip A. Gale and David K. Smith "Supramolecular Chemistry", Oxford Science Publications.

3."Supramolecular Chemistry "; by Jonathan W. Steed, Jerry L. Atwood; 2000.

4."Nano-Surface Chemistry "by Morton Rosoff (Editor); 2001.

5."Chemistry at the Beginning of the Third Millenium : Molecular Design, Supranolecules, Nanotechnology and Beyond"; L.Fabbrizzi; A. Poggi; Springer; 2001.

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
شورای برنامه ریزی آموزش عالی

دانشگاه تهران
شورای برنامه ریزی

محاسبات کوانتومی مواد نانو ساختار ۱

تعداد واحد:۳

نوع واحد: نظری

پیشنیاز: شیمی نظری ساختارهای نانو

هدف: آشنائی و تسلط بر اصول تئوری و کاربرد محاسبات کوانتومی مواد نانو ساختار

سرفصل درس:

۱) مقدمه: معادله شرودینگر ، معادله شرودینگر -دیراک.

۲) ویژگیهای مدلهای تئوری: پیشگویی، تأیید، کاربرد، فرمول بندی، هدف، مفهوم Ab-initio .

۳) مدلهای هارتری- فاک: اتم هیدروژن، اتم هلیم، مدل هارتری، نظریه اوربیتال مولکولی دترمینان اسلیتر، روش هارتری- فاک، روش روتان، توابع نوع اسلیتر، توابع GTO دسته توابع پایه، توابع پایه، ابتدایی، جمع شده و جمع نشده، مفهوم و کاربرد دسته توابع پایه: HF/STO-nG* , HF/3-21G , HF/6-31G, HF/6-31G.

٤) روشهای وابسته: مفهوم وابستگی، روش برهم کنش آرایشی، روش Moller Pleset ، روش Coupled Cluster ، روش RISD.

۵) مدلهای عمومی انرژی: جدول پاپل، مدلهای G13 و G2 و G1.

٦) نظریه تابع دانسیته اساس نظریه، معادلات ریاضی، تفاوت با Ab-initio.

۷) انواع مدلهای تابع دانسیته: مدلهای خالص، مدلهای هیبریدی.

۸) آشنایی و کار با نرم افزارهای: Chemcraft و Hyperchem و GAUSSIAN و GAMESS

مراجع:

1."Approximation Molecular Orbital Theory", Pople, J.A.; Beveridge, D.L.; 1970.

2."Ab initio Molecular Orbital Theory", Hehre, W.J.; Radom, L.; Schleyer, P.V.R.; Pople, J.A; 1986.

3."A Handbook of Computational Chemistry", Clark, T.; 1985.

4."Handbook of Gaussian Basis Sets", Porier, R.; Kari, R.; Czimadia, I.G.

5."molecular Electronic Structure Theory", Helgaker, T.; Jorgensen, P.; Olsen, J.

6."Approximation Density Functional Theory as a Practical Tool in Molecular Energetics and Dynamics", Ziegler, T.; Chem. Rev.; 1991, 91, 651-667.

7."Conceptual Density Functional Theory" , Geerlings, P.; Proft, F; Langenaeker, W.; Chem. Rev.; 2003, 103, 1793-1873.

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
شورای برنامه ریزی آموزش عالی

دانشگاه تهران
شورای برنامه ریزی آموزشی