



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.



## 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 .

جلیل راشد محصل

دبیر شورای برنامه ریزی آموزشی دانشگاه

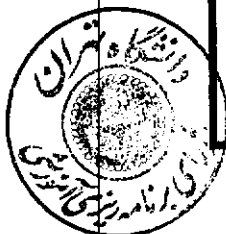
سید حسین حسینی

معاون آموزشی و تحصیلات تکمیلی 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 حمید زنجانی

رئیس دانشگاه



# فصل اول

## مشخصات کلی



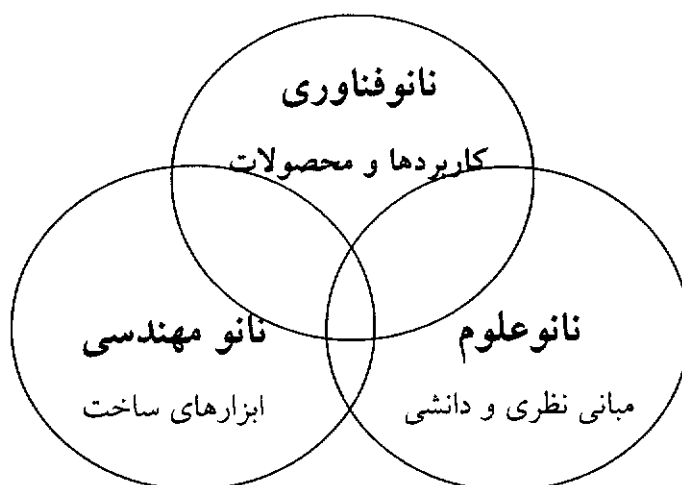
## مشخصات کلی دوره کارشناسی ارشد رشته نانو شیمی

۱- مقدمه:

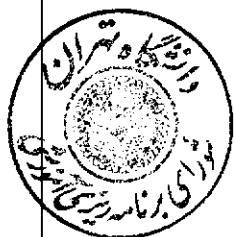
نانوفناوری نوعی فناوری است که روی مطالعه، تولید و بکارگیری ساختارها، لایه‌ها، واحدهای مولکولی، لایه‌ها و سطوح مرزی داخلی با ابعاد دقیق یا محدوده ساخت از حدود  $100\text{nm}$  تا چند اتم ( $0.1$  تا  $1\text{nm}$ ) متمرکز می‌باشد، هر چند که فقط جنبه‌های هندسی و کوچکی ابعاد در ارتباط با نانوفناوری مطرح نیست. یکی از جنبه‌های مهم نانوفناوری تغییر عمده و جدی در خواص مواد و پدیده‌های فیزیکی مرتبط با آن در مقیاس نانو می‌باشد. نانوفناوری نماینده یک فناوری متحدالشکل نبوده بلکه اجتماعی از رشته‌های کوچکتر علمی و فنی متفاوت می‌باشد.

گرچه تمایز و خط‌کشی 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 اندازه مواد در مقیاس نانومتر می‌باشد. به عبارت دیگر در حالیکه نانوعلم روی درک و فهم تغییرات طی فرآیند کاهش اندازه 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 زمینه 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 نانوعلم، نانو مهندسی و نانوفناوری نمایش داده شده است.





کشف فولرنها یا باکیبالها- نانو ساختار جدیدی که از کربن ساخته می شود- توسط سه شیمیدان معروف کرلکروتو و اسمالی در سال ۱۹۸۵ منتهی به کشف ساختارهای لوله مانند از اتم های کربن در سال ۱۹۹۱ گردید که اساساً ورق های (صفحات) گرافیت رول شده ای هستند که از ناحیه لبه هایشان به هم وصل شده و استوانه ای را تشکیل می دهند. این مواد به خاطر خواص عالی و متمایز، پتانسیل کاربردهای گسترده ای در زمینه الکترونیک و مهندسی مواد دارند. ایده ساخت مولکولی با مقاله اریک دکسلر تحت عنوان طراحی پروتئین راهی برای ساخت مولکولی به تصویر کشیده شد. در کار بعدی روش های احتمالی ساخت قطعات و ساختارها با مشخصات و ویژگیهای پیچیده اتمی به کمک خلق یک آراینده خود تکثیر (Self-replicating Assembler) تبیین و توصیف شده است. این ابزار وسیله ای چند منظوره برای ساخت مولکولی بوده که قادر است واکنش های شیمیایی را از طریق چیدمان مولکول ها (Positioning molecules) هدایت کند. گرچه چنین نگاهی به یک آراینده فراگیر (Universal Assembler) خیلی بحث انگیز بود اما اکنون روش های ساخت از پایین به بالا برای تولید نانو مواد، شاخه مهمی از رشته نانو فناوری شده است.



نانوفناوری اشاره به دست کاری 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. رویکرد ساخت بالا به پایین به معنای کاهش اندازه کوچکترین ساختارها به مقیاس نانو بوده که به وضوح در نانوالکترونیک و نانومهندسی که فتونیک یکی از کاربردهای اخیر آن است، دیده می‌شود. رویکرد ساخت ، پایین به بالا به معنای دست کاری و چیدمان اتم‌ها و مولکول‌های منفرد برای دستیابی به نانو ساختارها است که بیشتر در حیطه ی شیمی قرار می‌گیرد.

رویکرد پایین به بالا از چیدمان اتم‌ها، مولکول‌ها یا مجموعه‌های مولکولی (Molecular aggregates) برای ساخت سیستم‌ها و اجزاء بزرگتر استفاده می‌کند. این روش عمدتاً از اصول خودآرایی (Self-organization)، سطوح مرزی آلی-معدنی (Organic-inorganic boundary surfaces) و اتصال انتخابی فیزیکی یا شیمیایی سیستم‌های مولکولی به سطوح آماده بهره می‌گیرد. نمونه‌های زیستی متعددی از ساختارهای آبرمولکولی نظیر ماریپچ دوگانه، پوشش‌های پروتئینی و کمپلکس‌های چند پروتئینی از طریق ساختاریابی خودبخودی (Self-Structuring) تهیه می‌شوند. سیستم‌های مولکولی یا آبرمولکولی 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 بازشناسی بسیار متنوع، امکان شکل‌دهی به ساختار، اشکال و الگوهای متعدد در ابعاد نانومتری مانند حلقه‌ها، استوانه‌ها، فیلم‌ها، پوشش‌ها و ... وجود دارد. بنابراین فرآیندهایی که بوسیله بازشناسی مولکولی (Molecular Recognition) هدایت می‌شوند از اهمیتی به‌سزا برای ساخت کنترل شده 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 نانو ساختار دارند. بعضی از عمده‌ترین روش‌ها تک‌لایه‌های خودآراسته

(SAM)



(Self Assembled Monolayer)، سنتز شیمیایی تر و روش های لایه نشانی (Deposition) فاز گاز یا خلاء

می باشند.

نقش شیمی و شیمیادانها در ایجاد، توسعه و تکامل نانو فناوری بر هیچ یک از دانشمندان و صاحبان خرد

پوشیده نیست. این موضوع انگیزه تعریف و تدوین مجموعه حاضر می باشد.

برنامه آموزشی پیوست دوره کارشناسی ارشد و علوم و فناوری نانو- رشته نانوشیمی را دربر می گیرد. در دوره

کارشناسی ارشد، دانشجو با مفاهیم، ابزار و کاربردهای نانوفناوری آشنا شده و با انتخاب موضوع پایان نامه، خود

را برای دوره دکتری نانو آماده می سازد.

## ۲- تعریف و هدف:

دوره کارشناسی ارشد علوم و فناوری نانو- رشته نانو شیمی دوره ای است که دانشجو با گذراندن آن با اصول

تحقیق آشنا شده و آموزشهای لازم برای نحوه تعریف و بررسی تحقیقی یک موضوع را می آموزد به نحوی که برای ادامه تحصیل در دوره دکتری 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 تصوب 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 دوره کارشناسی ارشد علوم و فناوری نانو- رشته نانو شیمی ۲۸ واحد به صورت

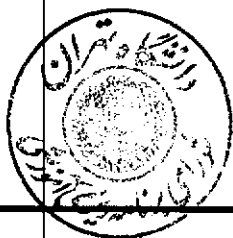
زیر است:

۵-۱- دروس اصلی ۹ واحد

۵-۲- دروس اختیاری ۱۰ واحد

۵-۳- سمینار ۱ واحد

۵-۴- پایان نامه ۸ واحد



۱-۵- دروس اصلی:

۹ واحد درس نظری است که دانشجوی با رعایت پیش نیاز آنها را ترجیحاً در نیمسال اول تحصیلی انتخاب می نماید.

۲-۵- دروس اختیاری:

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

۳-۵- سمینار:

سمینار ۱: 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 محدوده زمانی یک ساعت ارائه شده و حضور دانشجویان دوره های 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.

سمینار ۲: این سمینار اختیاری بوده و از نظر شرایط مانند سمینار ۱ می باشد.

۴-۵- پایان نامه:

انتخاب استاد راهنما و موضوع پایان نامه حداکثر در آغاز نیمسال دوم انجام می گیرد. در انتخاب موضوع پایان نامه رعایت نکات زیر توصیه می شود:

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

ب- روش یا راه حل مورد نظر دارای تازگی و نوآوری باشد.

## ۶- نقش و توانایی فارغ التحصیلان:

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

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

۳-۶- آمادگی برای ادامه تحصیلات بالاتر



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

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

پزشکی

۲-۷- پذیرفته شدن در آزمون ورودی





## ۸- مواد و ضرایب امتحانی:

آزمون ورودی دوره کارشناسی ارشد نانوشیمی مطابق دستورالعمل‌های سازمان سنجش آموزش کشور در یک یا دو مرحله انجام می‌گیرد. در صورت یک مرحله‌ای بودن آزمون مواد و ضرایب به صورت جدول زیر می‌باشد.

نانوشیمی		
ردیف	مواد امتحانی	ضریب
۱	زبان عمومی و تخصصی	۱
۲	شیمی آلی (دروس آلی ۱، ۲، ۳ جداسازی و شناسایی ترکیبات آلی و کاربرد طیف‌سنجی در شیمی آلی، شیمی فیزیک آلی)	۱
۳	شیمی معدنی (دروس شیمی معدنی ۱، ۲، آلی فلزی)	۱
۴	شیمی تجزیه (دروس تجزیه ۱، ۲، شیمی تجزیه دستگاهی)	۱
۵	شیمی فیزیک (دروس شیمی فیزیک ۱، ۲ کوانتوم و طیف‌سنجی)	۱
۶	شیمی کاربردی (اصول محاسبات شیمی صنعتی، شیمی صنعتی ۱، ۲، اصول تصفیه آب و پسابهای صنعتی و خوردگی فلزات).	۱

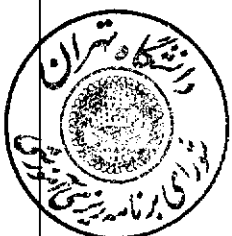
در صورت دو مرحله‌ای بودن آزمون، مراحل آن به شرح زیر خواهد بود.

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

مرحله دوم: آزمون تشریحی از دروس تخصصی کاربرد طیف‌سنجی در شیمی آلی، شیمی فیزیک ۲ و مبانی

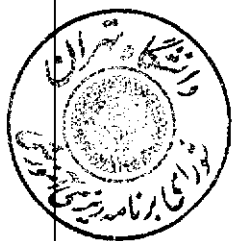
شیمی کوانتومی و شیمی معدنی ۲ با ضرایب مساوی است. این آزمون پس از اعلام اسامی پذیرفته شدگان مرحله

اول، توسط دانشکده انجام می‌گیرد.



# فصل دوم

# جداول دروس



جدول شماره ۱:

دروس الزامی رشته نانو شیمی دوره کارشناسی ارشد

ردیف	نام درس	تعداد واحدها			ساعات		
		جمع	نظری	عملی	جمع	نظری	عملی
۱	شیمی نظری ساختارهای نانو	۳	۳	-	۴۸	-	*مبانی شیمی کوانتومی
۲	روشهای سنتز مواد نانو ساختار	۳	۳	-	۴۸	-	*شیمی فیزیک ۲
۳	شناسایی و تعیین ساختار نانو مواد ۱	۳	۳	-	۴۸	-	*کاربرد طیف سنجی در شیمی آلی
	جمع	۹	۹	-	۱۴۴	-	

\*دروس جبرانی - در صورتیکه دانشجو این دروس را در دوره کارشناسی نگذرانده باشد و 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.



جدول شماره ۲:

دروس اختیاری رشته نانو شیمی دوره کارشناسی ارشد

پیش نیاز	ساعات			واحد	نام درس	ردیف
	عملی	نظری	جمع			
شیمی فیزیک ۲	-	۴۸	۴۸	۳	شیمی سطح و حالت جامد	۱
روشهای سنتز مواد نانوساختار	-	۴۸	۴۸	۳	شیمی سل-ژل	۲
روشهای سنتز مواد نانوساختار	-	۴۸	۴۸	۳	کاربرد سونو شیمی در سنتز مواد نانو	۳
روشهای سنتز مواد نانوساختار	۳۲	-	۳۲	۱	کارگاه سنتز و شناسایی مواد نانوساختار	۴
روشهای سنتز مواد نانوساختار	-	۴۸	۴۸	۳	نانو فناوری پلیمرها	۵
روشهای سنتز مواد نانو ساختار	-	۴۸	۴۸	۳	نانو مواد معدنی	۶
روشهای سنتز مواد نانوساختار- و استریوشیمی	-	۴۸	۴۸	۳	شیمی سوپرامولکولی	۷
شیمی نظری ساختارهای نانو	-	۴۸	۴۸	۳	محاسبات کوانتومی مواد نانو ساختار ۱	۸
-	-	-	۱۶	۱	سمینار ۲	۹
	۳۲	۳۵۲	۳۸۴	۲۳	جمع	

- 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.

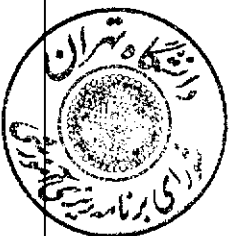


# فصل سوم

## سرفصل دروس



فصل سوم  
سر فصل 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، خودآرایی و دوباره سازی سطحی (self-assembly and surface reconstruction)

۳- پیوند کتووالانی: تئوری MO، تئوری VB، کنفیگوراسیون الکترونی و MO و VB، حالت های الکترونی

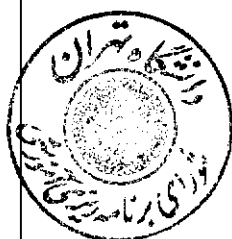
MO و VB، مقایسه روشهای MO و VB

۴- 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:



روشهای Ab-initio و Semiempirical در مورد مولکولهای چند اتمی، توابع پایه، کاهش تعداد انتگرال ها، آنالیز جمعیت، هندسه مولکولی، برهم کنش کنفیگوراسیونها، روشهای Semiempirical برای مولکولهای مزدوج مسطح، روشهای مکانیک مولکولی.

مراجع:

- 1."Nanomaterial – 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"; 4<sup>th</sup> Edition; I.R.Levine; 1991.





# روشهای سنتز مواد نانو ساختار ۱

تعداد واحد : ۳

نوع واحد : نظری

پیشنیاز : شیمی فیزیک ۲

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 هموزن ( -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)

-رشد 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

۴- نانومواد خاص

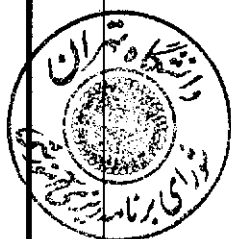
-فولرنهای کربن و نانوتیوبها ، -مواد میکرو پور و مزوپور

-ساختارهای پوسته-هسته ، -هیبریدهای آلی-معذنی

-نانوکامپوزیتها

مراجع:

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



# شناسایی و تعیین ساختار نانومواد ۱

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،

فوتو اکوستیک) FTIR، الکترو اسپکتروسکوپی

۴- 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 X نمونه 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 فیزیک ۲

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 doped باند

در ترکیبات

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

جامد، ترکیبات غیراستوکیومتری

۵) ژئولیت ها، خاکها و ساختارهای مرتبط: تهیه ژئولیت ها، تعیین ساختار، خاکهای معدنی دیگر قالبهای

ساختاری

۶) 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 Piezoelectric، 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 ساختارهای 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".



# شیمی سل - ژل

تعداد واحد: ۳

نوع واحد: نظری

پیشیناز: روشهای سنتز مواد نانو ساختار

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 آلکوکساید های سیلیکون، سیلیکاتهای چند جزئی).
- ۳) ژلاتینه کردن (تئوری کلاسیک، مدل های سینتیکی).
- ۴) تئوری تغییر شکل و جریان در ژل ها (نیروهای موثر برای هم زدن، انتقال مایعات، رئولوژی شبکه متخلخل، تئوری تغییر شکل).
- ۵) 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.
- (۴) نشانیدن ذرات نانو بر روی سطوح کروی و مسطح از طریق سونوشیمی.
- (۵) سنتز کمپوزیتهای فلز-پلیمر از طریق سونوشیمی.
- (۶) سنتز مواد نانو کپسوله شده در ماتریکسهای کربنی از طریق سونوشیمی.
- (۷) سنتز نانو اکسیدهای فلزی از طریق سونوشیمی.
- (۸) سنتز ساختارهای نانو  $\text{SnO}_2$ ,  $\text{SnO}$  از طریق سونوشیمی جهت کاربرد بعنوان مواد الکترودی
- (۹) سنتز سونوشیمیائی مواد نانو کریستالی

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 نانو ساختار

تعداد واحد: ۱

نوع واحد: عملی

پیشنیاز: روشهای سنتز مواد نانو ساختار

هدف: آشنائی و تسلط بر روشهای عملی سنتز و شناسایی مواد نانو ساختار

سرفصل درس:

(۱) مواد نانو ساختار: 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، نانو ساختارهای مغناطیسی، نقطه های

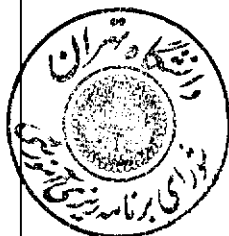
کوانتومی،

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.





# 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 پودرها و فیلمهای با ساختار نانو

- ذرات: شامل فلزات، آلیاژها، کامپوزیتهای، 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



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

حرارتی و ...

۲- کاربردها

-سنسورهای گازی و ذخیره سازی گازها

-کاتالیزورها

-نانو کامپوزیتها

-لاستیکهای تقویت شده

-پلاستیکهای تقویت شده

مراجع:

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



## نانو مواد معدنی

تعداد واحد: ۳

نوع واحد: نظری

پیشنیاز: روشهای سنتز مواد نانو ساختار

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

۴- نانو ذرات معدنی

۵- نانو سیستم های پلیمرهای معدنی

۶- نانو فیلترهای معدنی

۷- سل-ژل در سنتز نانو مواد معدنی



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.



## شیمی سوپرامولکولی

تعداد واحد: ۳

نوع واحد: نظری

پیشنیاز: روشهای سنتز مواد نانو ساختار- 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.
- ۴) آرایش سیستم های سوپرامولکولی.
- ۵) نقش کمپلکسهای سوپرامولکولی در شناسایی مولکول ها.
- ۶) کاتالیست واکنشها، انتقال مواد و biomimicry 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:



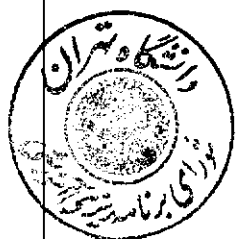
1."Supramolecular Organization and Materials Design"; Edited by W. Jones; C. N. R. Rao ; 2001.

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.



## 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
- ۴) روش‌های وابسته: مفهوم وابستگی، روش برهم کنش آرایش، روش Moller Pleset، روش Coupled Cluster، روش RISD
- ۵) مدل‌های عمومی انرژی: جدول پاپل، مدل‌های G1 و G2 و G13.
- ۶) 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.

