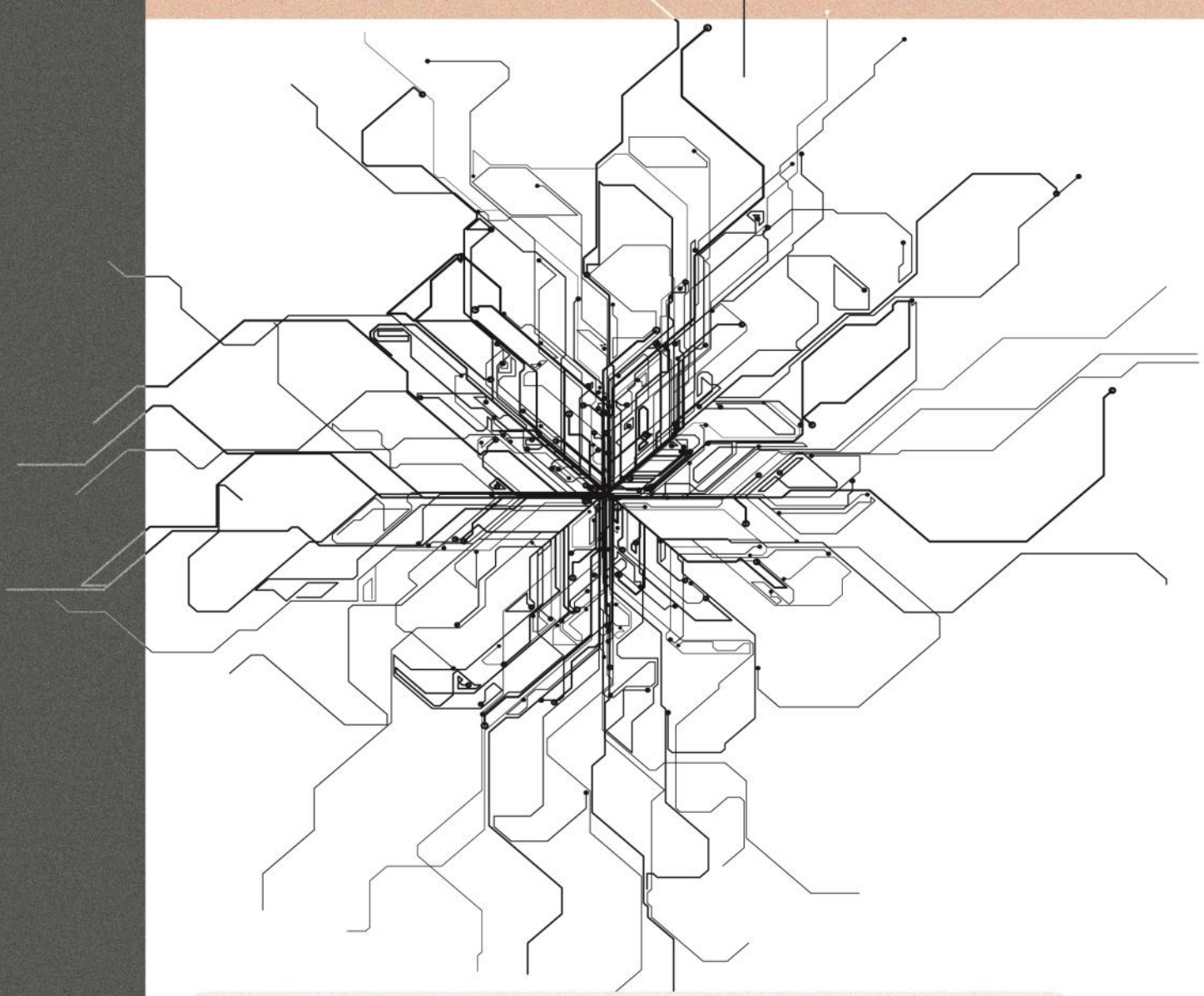
انجمن علمی شیمی دانشگاه شیراز

دو فصلنامه علمی-دانشجویی مول

سال سوم، شماره‌ی 6، پاییز 1403

|Mole Student Scientific Magazine|

Autumn 2024, 6th Edition, 3th years



| What's the Chemistry Behind Flavor?

| The 2024 Nobel Prize

آینده یا پایان نسل بشریت؟ !!

- هوش مصنوعی

گفت و گو با دکتر همتی نژاد

- دانشمند ٪۲ برتر جهان

وَ إِذْ قَالَ رَبُّکَ لِلْمَلائِکَه إِنِّی جَاعِلٌ فِی الْأَرْضِ خَلِیفَه (۳۰-بقره)

هنگامی که پروردگارت به فرشتگان گفت: من بر آنم که در زمین جانشینی قرار دهم.

فهرست مطالب

مطالب علمی

۶ هوش مصنوعی در شیمی
۹ هوش مصنوعی در شیمی تجزیه
۱۲ هوش مصنوعی در شبکه های حسگر
۱۴ پیشرفت در تکنیک‌های هوش مصنوعی
۱۶ هوش مصنوعی در شیمی آلی و معدنی
۱۷ هوش مصنوعی در شیمی فیزیک
۱۹ مسیرهای آینده
۲۰ طعم‌ها در شیمی
۲۱ مزه‌ها
۲۳ بوها

۲۶ معرفی مقالات اخیر
۲۷ بخش شیمی تجزیه
۲۸ بخش شیمی آلی
۲۹ بحش شیمی فیزیک
۳۰ بخش شیمی معدنی

۳۱ معرفی پژوهشگران ۲٪ برتر دانشگاه شیراز در سال ۲۰۲٤
۳۲ مصاحبه با دکتر بهرام همتی نژاد

۳۴ زنده یاد پروفسور هاشم شرقی

۳۶ نوبل ۲۰۲٤

۳۹ رویدادهای پاییز ۱٤۰۳

۴۳ فکاهی

۴۵ جدول

۴۶ سخن بزرگان

شناسنامه

نشریه علمی دانشجویی مول

شماره مجوز: ٦٣٢ / ک ن ش		صاحب امتیاز: انجمن علمی شیمی دانشگاه شیراز
سال ۳، شماره ٦، پاییز ۱۴۰۳		مدیر مسئول: نازنین اسمعیلی سردبیر نشریه: دانیال عبدالهی

طراح و صفحه آرا:
معین ابراهیمی‌پارسا

راه‌های ارتباطی با تیم نشریه:
دانشگاه شیراز، پردیس علوم، بخش شیمی طبقه همکف، انجمن علمی شیمی
chemistryshirazuni@gmail.com

SHIRAZUNI_CHEMSOCIETY

@SACS_SHIRAZUNI

ویراستاران:
یاسمین اکبری
آرین زیدآبادی
معین ابراهیمی‌پارسا

هیئت تحریریه (الفبا):
نازنین اسمعیلی
یاسمین اکبری
هانیه روزبه
آرین زیدآبادی
دانیال عبداللهی
حدیث کامیاب
ملیکا گلستانی
فاطمه گندم‌کار
ساغر مرادی
محمد نامجو

با اشتیاق فراوان شما را دعوت به مطالعه آخرین شماره نشریه مول می‌کنم. در این شماره ما مجموعه‌ای از کارهای علمی را ارائه می‌کنیم، که منعکس‌کننده مشارکت‌های متنوع و پویا جامعه محققان است. مانند همیشه، هدف فراهم کردن بستری برای گفتمان دانشگاهی، چالش‌ها و تقویت نوآوری است که افق‌های دانش را گسترش می‌دهد.

در این شماره، خوشحالیم که مقالاتی را ارائه می‌کنیم که با برخی از جذابترین مسائل در حوزه شیمی درگیر هستند. از هوش مصنوعی و کاربردهای آن تا طعم ها در شیمی، که وسعت، عمق تحقیق و چشم اندازهای جالب و در حال تحول رشته ما را برجسته می کند. هر موضوع بینش های ارزشمندی را ارائه می‌دهد که امیدواریم الهام بخش کاوش و بحث بیشتر باشد.

ما همچنین برای معرفی بخش ژورنال ها هیجان‌زده هستیم که هدف آن معرفی برترین مقاله های چاپ شده در گروهای آلی، تجزیه، معدنی و شیمی فیزیک بخش شیمی دانشگاه شیراز می‌باشد. این افزوده بر پیشبرد تحقیقات سنتی به تقویت همکاری بین رشته ای و گسترش دامنه آنچه تحقیق آکادمیک در نظر گرفته می شود تأکید می کند. در این شماره همچنین به رویدادهای رخ داده در بخش شیمی، مصاحبه با اساتید حاضر و یادواره ای مربوط به اساتید گذشته پرداخته شده است. بعلاوه مسائل جالب مانند نوبل و فکاهی در شیمی نیز منتظر نگاه‌های شما خوانندگان محترم هستند.

از گروه تحریریه، همه نویسندگان و طراح گرامی جناب آقای معین ابراهیمی‌پارسا که از این نشریه حمایت کردند تشکر می‌کنم. فداکاری و دقت فکری شما چیزی است که نشریه مول را به یک فضای دانشگاهی واقعاً مشارکتی و پر رونق تبدیل می‌کند.

ما مشتاقانه منتظر رشد مداوم این نشریه هستیم و شما را تشویق می کنیم که با تحولات هیجان انگیز در شماره های آینده همراه بمانید. از حمایت همیشگی شما و اینکه بخشی از این سفر هستید سپاسگزاریم.

با احترام

نازنین اسمعیلی

مدیر مسئول نشریه مول

درود به همه جویندگان دانش

مفتخریم که ششمین شماره نشریه مول متعلق به انجمن علمی شیمی دانشگاه شیراز را تقدیم اذهان پرسشگر و علم جوی شما عزیزان کنیم.

شیمی یکی از شاخه‌های مهم علوم پایه است که ارتباط تنگاتنگ و ملموسی با زندگی بشری داشته و دارد و این موضوع اهمیت پیشرفت وتوسعه این علم برای دنیا و مهمتر از آن برای سرزمینمان ایران را نشان می‌دهد؛ امید است تا جامعه علمی ما روز به روز پر بار تر وپر توان تر در مسیر رهیابی به این سرمایه ارزشمند، گام بردارد. ما نیز در این نشریه تلاش داریم گامی حتی کوچک در این مسیر برداریم و خوانندگان را با علم روز دنیا همگام سازیم.

انجمن علمی شیمی دانشگاه شیراز این بار با رویکردی نو به سوی نشریه مول می رود و تلاش داریم سازنده فضایی سرشار از دانش و همدلی باشیم؛ امیدواریم شما عزیزان نیز در این مسیر همراه ما شوید و برای شماره بعدی نشریه شاهد حضور شما در خانواده دانشور مول باشیم. به منظور بهبود کیفیت نشریه، شنیدن صدای شما عزیزان و همکاری شما با انجمن تقاضا دارم انتقادات و پیشنهادات و مقالات خودرا از طریق راه های ارتباطی انجمن علمی ویا آدرس chemistryshirazuni@gmail.com برای ما ارسال کنید. بی شک توجه و مطالعه شما عزیزان بهترین هدیه برای ماست.

در آخر تشکری ویژه دارم از سرکار خانم نازنین اسماعیلی، مدیر مسئول محترم نشریه و جناب آقای معین ابراهیمی‌پارسا، گرافیست محترم نشریه و همه عزیزانی که بدون آنها این شماره از مول آماده نمی‌شد.

در نهایت،علم را پایانی نیست...

هرگز دل من ز علم محروم نشد
کم ماند ز اسرار که معلوم نشد
هفتاد و دو سال فکر کردم شب و روز
معلومم شد که هیچ معلوم نشد

خیام

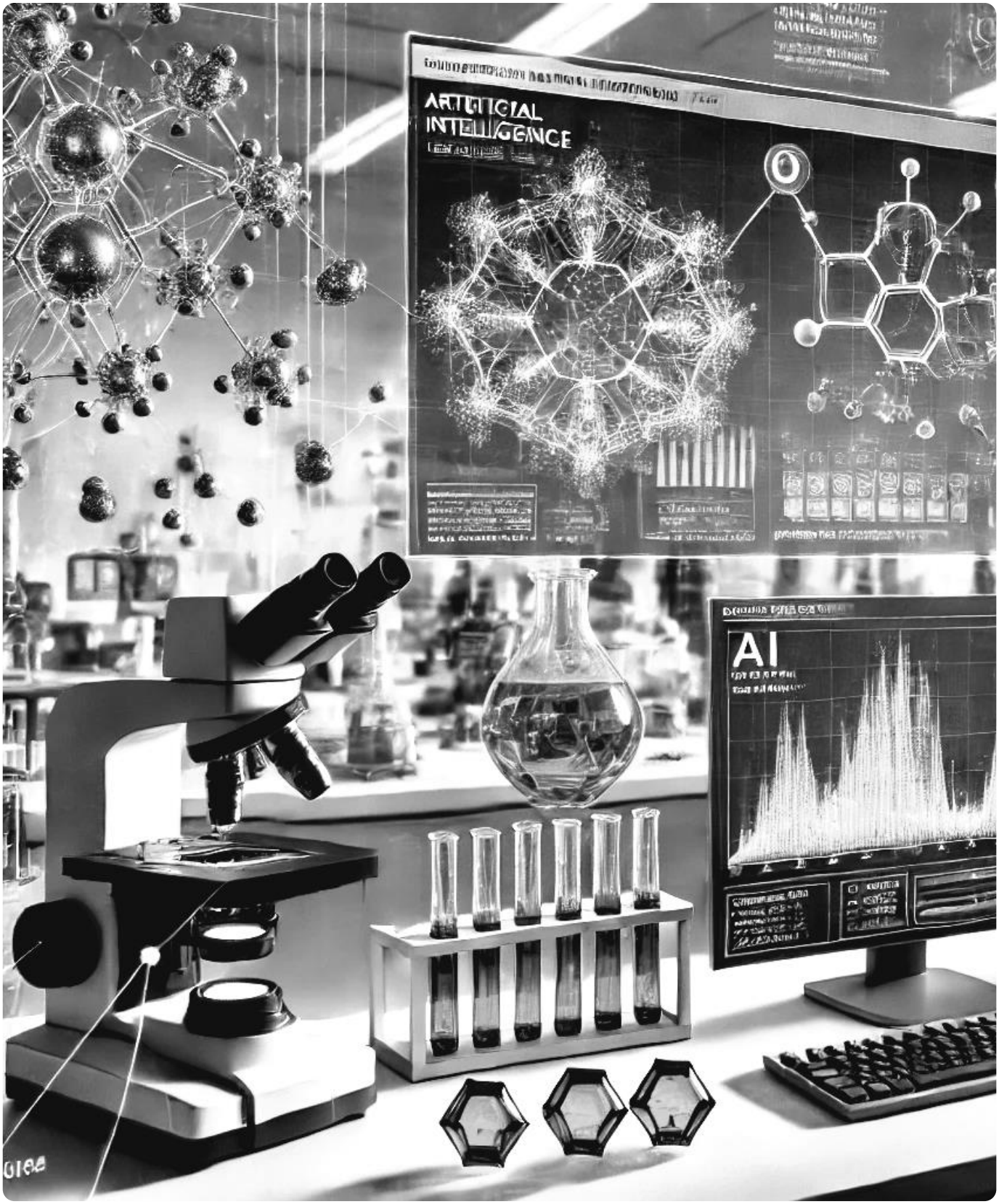
با آرزوی موفقیت روز افزون

دانیال عبداللهی

دبیر انجمن شیمی و سردبیر نشریه مول

بخش اول | مطالب علمی

- هوش مصنوعی در شیمی
  - + هوش مصنوعی در شیمی تجزیه
  - + هوش مصنوعی در شبکه های حسگر
  - + پیشرفت در تکنیک‌های هوش مصنوعی
- طعم‌ها در شیمی
  - + مزه‌ها
  - + بوها



Designed by AI

هوش مصنوعی در شیمی

گردآورنده: **نازنین اسمعیلی**، دانشجو دکتری شیمی تجزیه دانشگاه شیراز
naesmaeili@yahoo.com

با همکاری **یاسمین اکبری**، دانشجو کارشناسی شیمی محض دانشگاه شیراز
Yasaminakbari2420@gmail.com

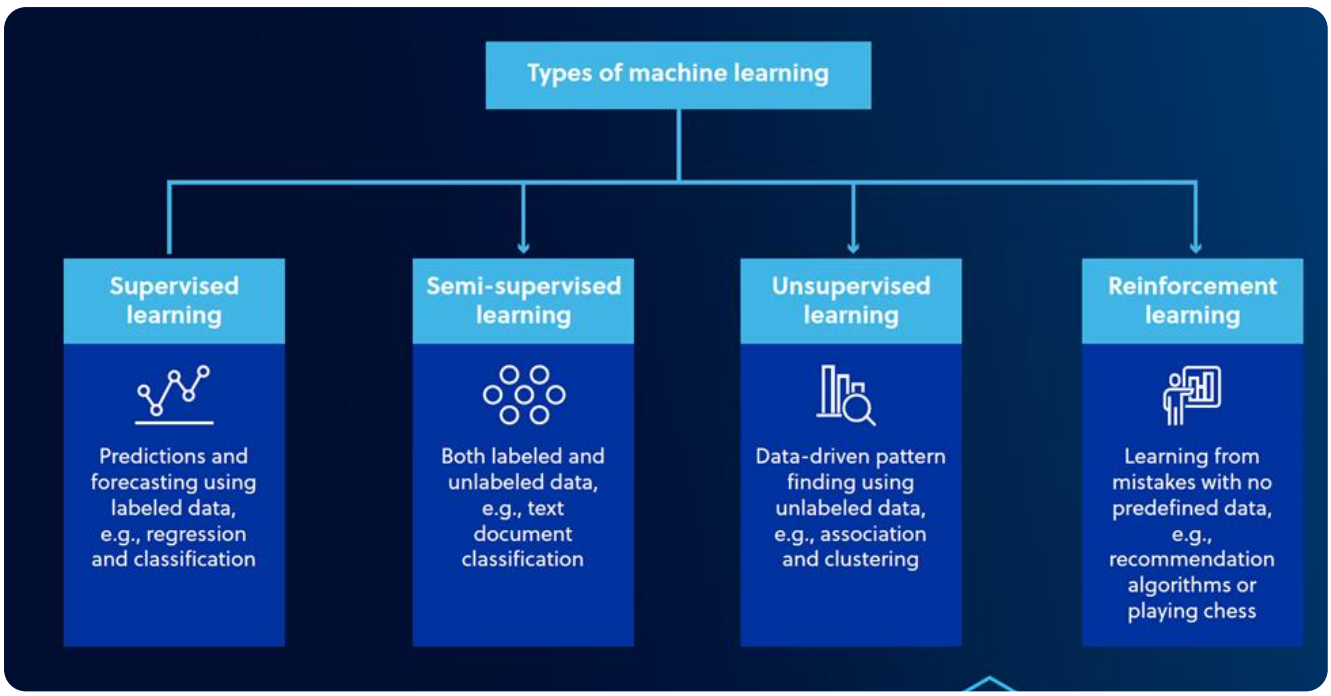
مقدمه

Re: CAS.org/Artificial Intelligence in Chemistry: Current landscape and future opportunities - AI.

بهتر است برای شروع ابتدا به تعریفی ساده از هوش مصنوعی بپردازیم. هوش مصنوعی (AI) یک فناوری تحول‌آفرین است که هوش انسان را برای انجام وظایف و حل مشکلات شبیه‌سازی می‌کند .با استفاده از الگوریتم‌های پیشرفته و حجم وسیعی از داده‌ها، سیستم‌های هوش مصنوعی می‌توانند تجربه کنند، یاد بگیرند، با اطلاعات جدید سازگار شوند و با افزایش استقلال تصمیم‌گیری کنند. از دستیاران مجازی و موتورهای توصیه گرفته تا مدل‌های پیچیده یادگیری ماشینی، هوش مصنوعی در بخش‌های مختلفی از جمله مراقبت‌های بهداشتی، مالی، آموزش و حمل‌ونقل ادغام می‌شود. همانطور که هوش مصنوعی به تکامل خود ادامه می دهد، نوید افزایش کارایی، هدایت نوآوری و رسیدگی به چالش های پیچیده را به روش هایی که قبلا غیرقابل تصور بود، می دهد و اساساً نحوه زندگی و کار ما را تغییر می دهد.

حال به این موضوع می پردازیم که هوش مصنوعی چگونه رشته شیمی را مورد تغییر و تحول قرار می دهد. هوش مصنوعی (AI) توانایی ماشین ها برای شبیه‌سازی هوش انسانی است. در جایی که رایانه‌های معمولی طوری برنامه‌ریزی شده‌اند که بر اساس قوانین از پیش برنامه‌ریزی‌شده عمل کنند، مانند گزاره‌های درست/نادرست یا اگر/دیگر، هوش مصنوعی برای درک روابط بین داده‌ها و ایجاد راه‌حل‌های جدید برای مشکلات طراحی شده است. از دهه ۱۹۵۰، بسیاری از انواع AI ظهور کرده اند، از جمله یادگیری ماشین (شکل ۱). هر تخصص کامپیوترها را آموزش می دهد تا از داده ها به روش های منحصر به فردی یاد بگیرند. تکنیک های AI به طور گسترده در طیف وسیعی از رشته‌ها به کار گرفته شده است، به ویژه در تحقیقات علمی که در آن از AI برای درک خواص مولکولی، طراحی مولکول ها و پیش بینی نتایج واکنش استفاده شده است. یکی از حوزه‌های علمی که افزایش زیادی در تحقیقات مرتبط با AI داشته است، شیمی است.

از سال ۲۰۱۵، انتشارات و ثبت اختراعات با استفاده از روش های AI به شدت افزایش یافته است. از طریق AI، محققان توانسته‌اند جهش‌هایی در پردازش داده‌ها انجام دهند که در غیر این صورت، اگر به صورت دستی انجام می‌شد، چندین دهه طول می‌کشید. برخی از نمونه‌ها عبارتند از: پیش‌بینی زیست فعالی داروهای جدید – بهینه‌سازی شرایط واکنش – پیشنهاد مسیرهای مصنوعی به مولکول‌های هدف پیچیده علی‌رغم پیشرفت‌های موجود در حل مسائل مرتبط با آن، ممکن است هنوز فرصت‌های قابل‌توجهی برای رشته‌های شیمی که پذیرش AI کم دارند وجود داشته باشد. برای درک اینکه این فرصت ها کجا هستند، ما چشم انداز AI را در شیمی و موانع پذیرش آن بررسی کردیم.

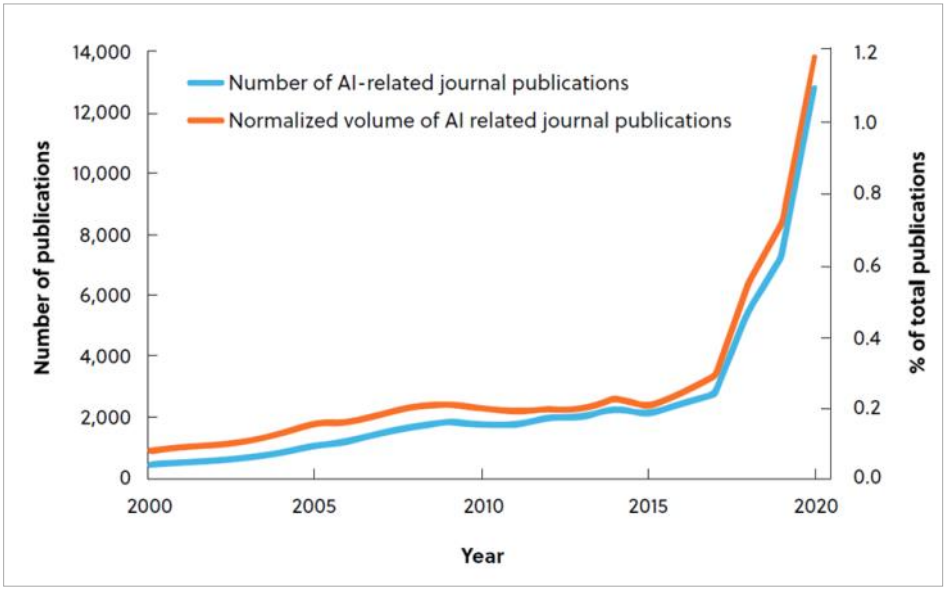


شکل ۱

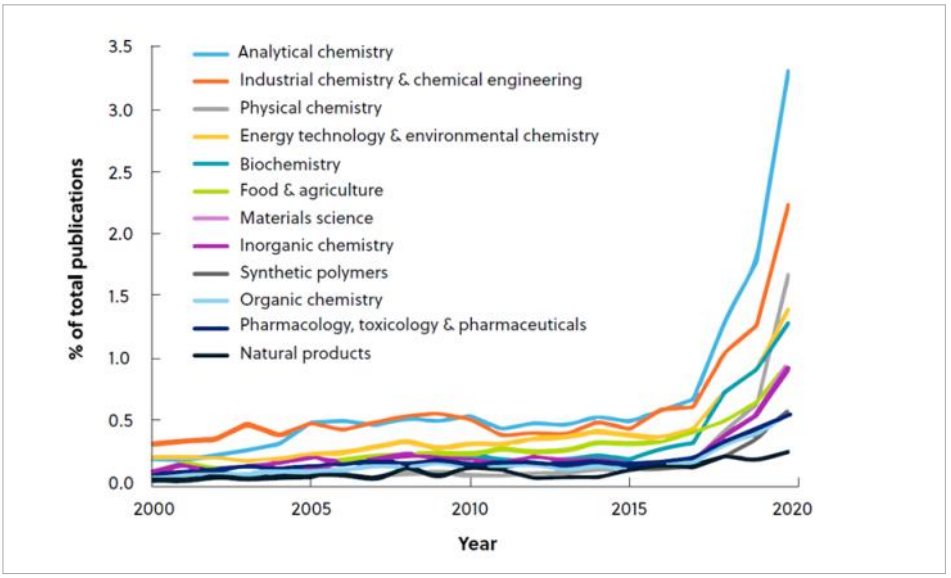
مجموعه محتوای CAS بزرگ‌ترین کتابخانه اطلاعات شیمیایی است و از آن برای طبقه‌بندی و کمی کردن تمام نشریات شیمی مرتبط با AI بین سال‌های ۲۰۰۰ و ۲۰۲۰ برای زمینه‌سازی چشم‌انداز فعلی AI استفاده شده است. در سرتاسر جهان، انتشارات علمی با نرخی در حدود ۸ درصد در سال رشد می کنند، که معادل افزایش دو برابری تولید علمی در هر ۹ سال است. جالب توجه است که تعداد فزاینده انتشارات مجلات مرتبط در شیمی، نسبت به همه نشریات مجلات علمی (همانطور که در شکل ۲ مشاهده می شود)، نشان می دهد که این موضوع به سرعت در حال افزایش در جامعه تحقیقاتی است.

انفجار انتشارات AI در شیمی از سال ۲۰۱۵ شامل معرفی چارچوب‌های یادگیری ماشینی منبع باز، مانند TensorFlow و PyTorch، و نمایش‌های یادگیری عمیق و تشخیص تصویر که همگی به طور فزاینده‌ای توجه افراد جامعه علمی را به خود جلب کرده‌اند. در واقع ۵۰ درصد از کل انتشارات شیمی مرتبط با AI در ۴ سال گذشته منتشر شده است. کشورهای پیشرو در این زمینه ایالات متحده و چین هستند که بیش از ۴۰ درصد از انتشارات مجلات در سراسر جهان را به خود اختصاص داده اند. هند , ایران , انگلیس و آلمان با هم ۲۰ ٪ از کل مقالات منتشر شده را تشکیل می دهند.

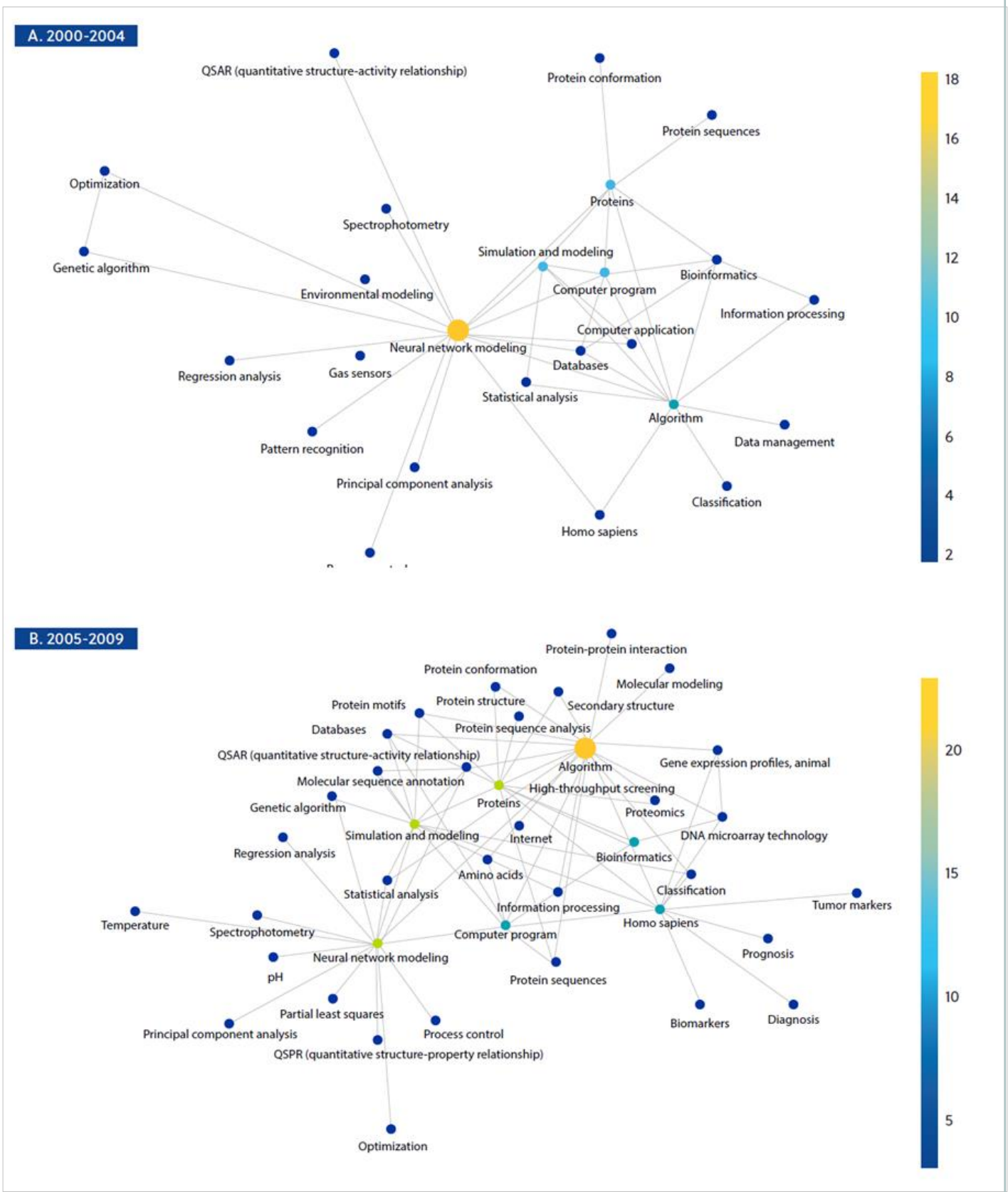
تجزیه و تحلیل ها نشان می دهد که مشارکت کنندگان عمده در انتشارات مجلات مرتبط شامل شیمی تجزیه، شیمی صنعتی و مهندسی شیمی، و شیمی فیزیک است. نواحی با پذیرش کمتر شامل محصولات طبیعی، شیمی آلی و فارماکولوژی، سم شناسی و داروسازی است. برای مقایسه دقیق، تعداد انتشارات مرتبط در هر بخش را به حجم کل انتشار سال مربوطه آن بخش در شکل ۳ مشاهده می شود. جالب اینجاست که وقتی به پتنت ها نگاه می کنیم بیوشیمی از جمله رشته هایی است که در کاربردهای مرتبط با علم در کنار شیمی تجزیه بیشترین همکاری را دارد. با این حال، از نظر انتشارات مجلات، نسبت آن متوسط است. این ثبت فناوری AI می تواند به طور بالقوه به دلیل استفاده از بیوشیمی در تحقیق و توسعه دارو باشد. علاوه بر بررسی اعداد، ارتباط بین مفاهیم پرکاربرد موضوعات تحقیق و الگوریتم های AI در ۲۰ سال گذشته برای درک مسائلی که AI به حل آنها کمک می کند، مورد بررسی قرار گرفته است (شکل ۴).



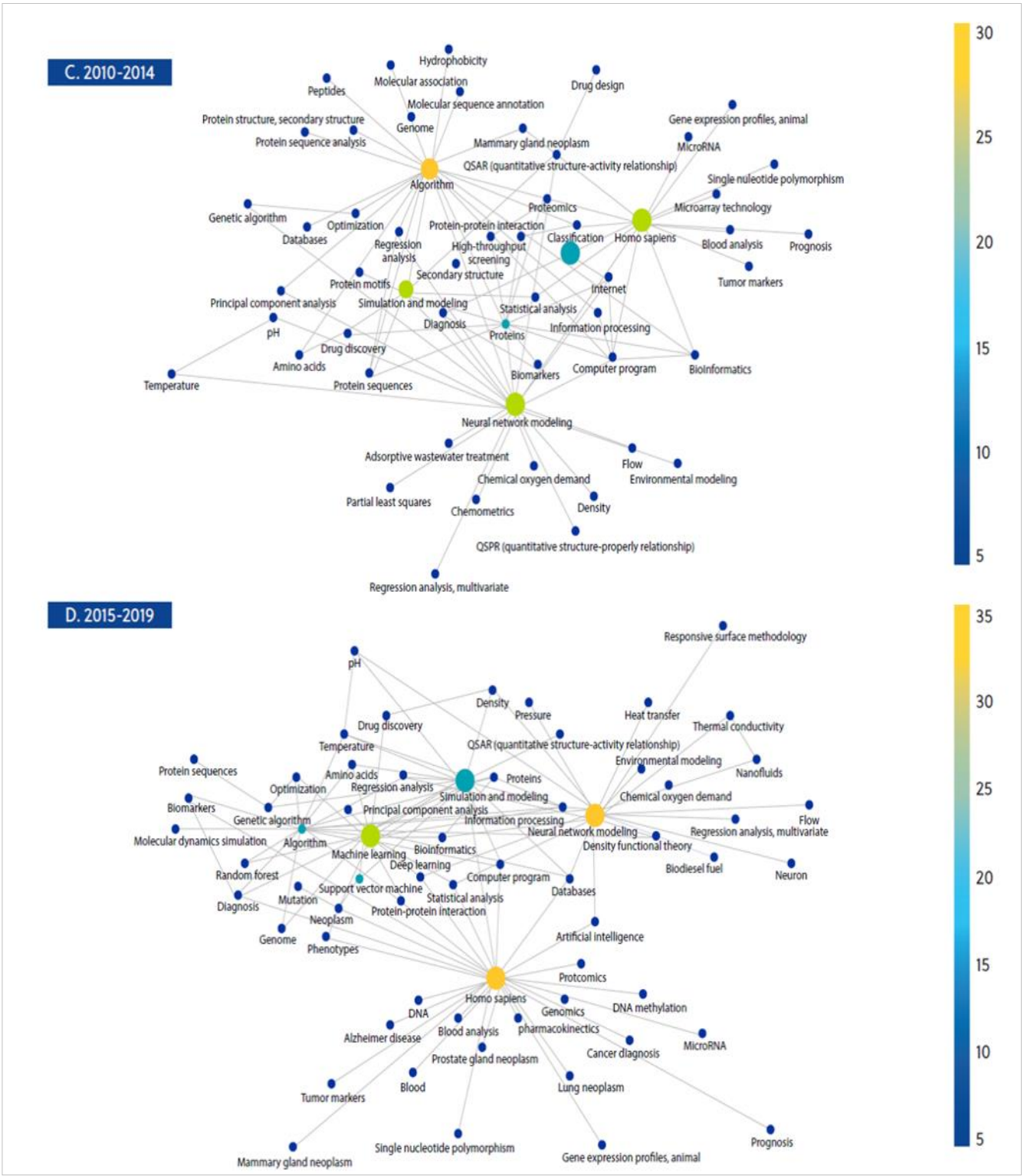
شکل ۲



شکل ۳


A. 2000-2004
QSAR (quantitative structure-activity relationship)
Protein conformation
Protein sequences
Optimization
Proteins
Spectrophotometry
Genetic algorithm
Simulation and modeling
Bioinformatics
Environmental modeling
Computer program
Information processing
Computer application
Neural network modeling
Databases
Regression analysis
Gas sensors
Statistical analysis
Algorithm
Pattern recognition
Data management
Principal component analysis
Classification
Homo sapiens
18
16
14
12
10
8
6
4
2
B. 2005-2009
Protein-protein interaction
Protein conformation
Molecular modeling
Protein motifs
Protein structure
Secondary structure
Databases
Protein sequence analysis
QSAR (quantitative structure-activity relationship)
Algorithm
Gene expression profiles, animal
Molecular sequence annotation
High-throughput screening
Genetic algorithm
Proteins
Proteomics
Simulation and modeling
Internet
DNA microarray technology
Regression analysis
Bioinformatics
Amino acids
Statistical analysis
Classification
Information processing
Tumor markers
Temperature
Homo sapiens
Spectrophotometry
Computer program
Prognosis
Neural network modeling
pH
Protein sequences
Partial least squares
Biomarkers
Diagnosis
Principal component analysis
Process control
QSPR (quantitative structure-property relationship)
Optimization
20
15
10
5

شکل ۴



ادامه شکل ۴

نشریه مول تلاش می کند تا در این شماره به بررسی هوش مصنوعی و کاربردهای آن در شاخه های مختلف شیمی ازجمله های شیمی آلی، شیمی معدنی، شیمی فیزیک و شیمی تجزیه از دیدگاه هوش مصنوعی بپردازد. هوش مصنوعی و کاربردهای آن در شیمی آلی، شیمی معدنی و شیمی فیزیک ارائه شده است. به دلیل اینکه عمده مشارکت در انتشارمقالات در مجله های مختلف مرتبط با شیمی تجزیه بوده است، در قسمت شیمی تجزیه با جزئیات بیشتری به هوش مصنوعی و کاربردهای آن پرداخته شده است.

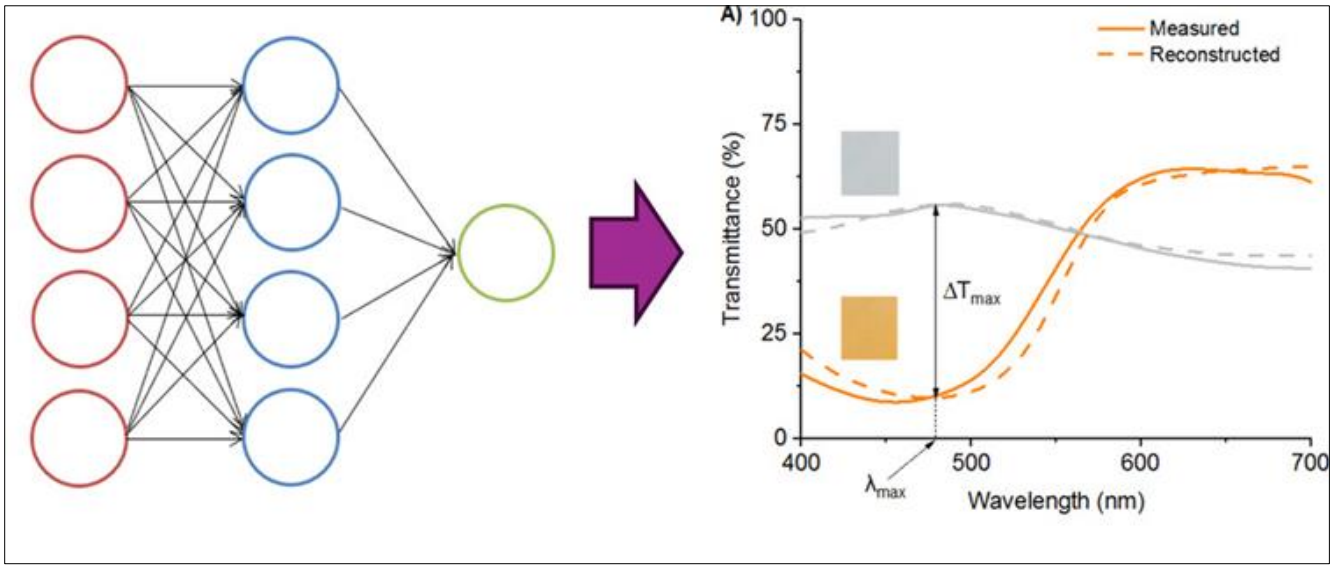
هوش مصنوعی در شیمی تجزیه

Designed by AI

مقدمه. شیمی تجزیه، شاخه ای از شیمی که نقش مهمی در زمینه های مختلف علمی دارد و بر تجزیه و تحلیل کمی و کیفی مواد متمرکز است که امکان شناسایی و تعیین کمیت مواد را فراهم می کند، با ادغام هوش مصنوعی (AI) یک تغییر دگرگونی را تجربه می کند. اخیراً، ادغام هوش مصنوعی (AI) در شیمی تجزیه، روش‌های سنتی را تغییر داده است که با استفاده از یادگیری ماشین (ML)و سایر تکنیک‌های هوش مصنوعی، شیمیدانان تجزیه می‌توانند تجزیه و تحلیل داده‌ها را بهبود بخشند، فرآیندها را ساده‌سازی کنند و دقت نتایج را بهبود بخشند. این مقاله به بررسی کاربردها، مزایا، چالش ها و جهت گیری های هوش مصنوعی در تجزیه و تحلیل طیف‌سنجی، شبکه‌های حسگر، اتوماسیون و بهینه‌سازی در حوزه شیمی تجزیه می‌پردازد.

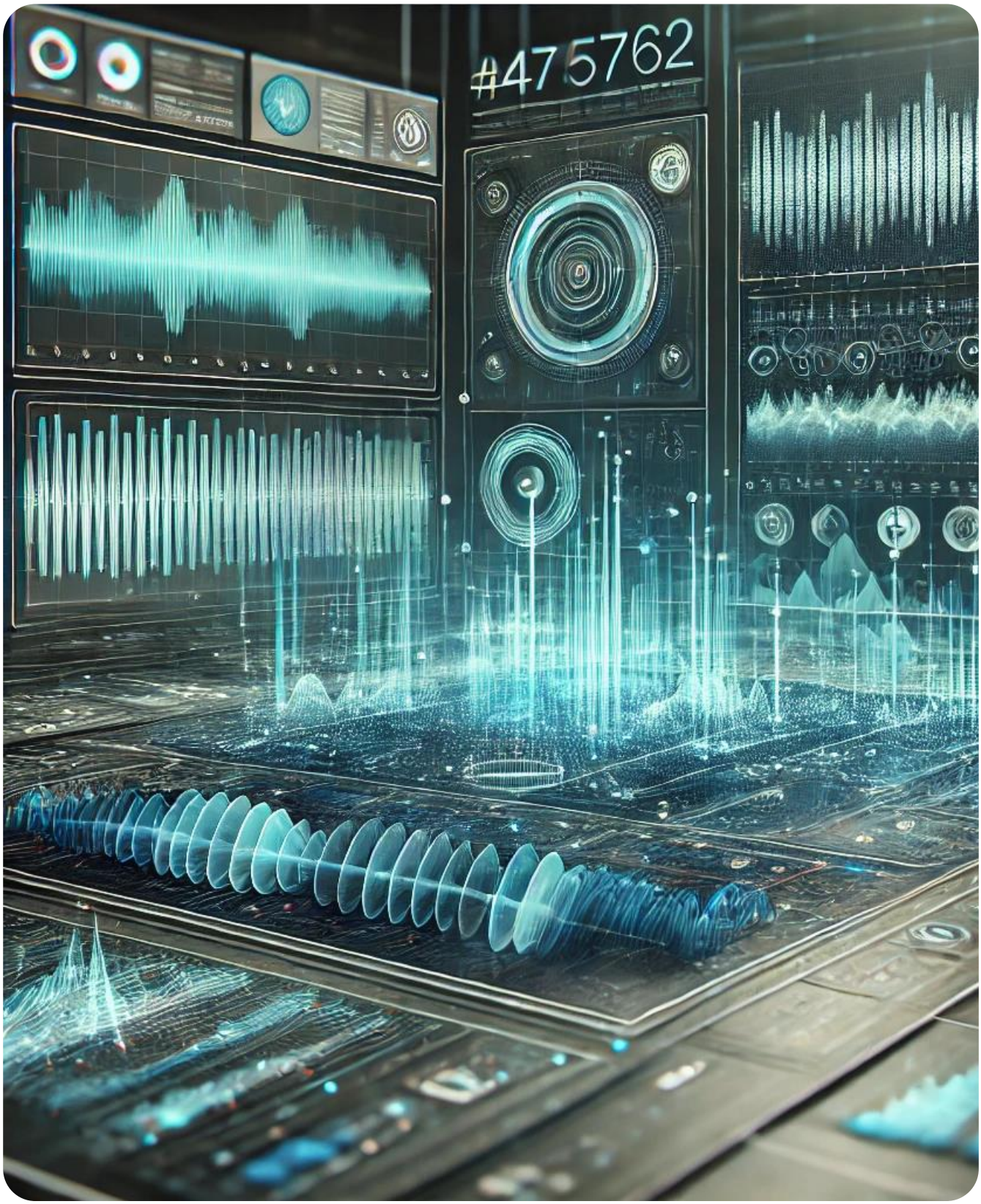
هوش مصنوعی در آنالیز طیف سنجی

تکنیک ها و تفسیر داده ها. روش های طیف سنجی، از جمله مادون قرمز(IR) ، رزونانس مغناطیسی هسته ای (NMR) و طیف سنجی جرمی(MS) ، برای شناسایی و کمی سازی ترکیبات شیمیایی حیاتی هستند. هوش مصنوعی نقش مهمی در تقویت این تکنیک ها از طریق بهبود تفسیر داده ها ایفا می کند. الگوریتم‌های یادگیری ماشین را می‌توان برای تشخیص الگوها در داده‌های طیفی آموزش داد که امکان شناسایی سریع‌تر و دقیق‌تر مواد را فراهم می‌کند. مدل‌های یادگیری عمیق می‌توانند داده‌های طیفی پیچیده را تجزیه و تحلیل کنند و بین ترکیبات نزدیک به هم که ممکن است



Cánovas-Saura, ACS Applied Optical Materials, June 2024

پردازش سیگنال پیشرفته. هوش مصنوعی همچنین قابلیت های پردازش سیگنال را افزایش می دهد، نویز را کاهش می دهد و وضوح طیف ها را بهبود می بخشد. الگوریتم‌های پیشرفته می‌توانند تداخل پس‌زمینه را فیلتر کنند و وضوح بهتر سیگنال‌های مورد نظر را ممکن می‌سازند. این پیشرفت در زمینه هایی مانند داروسازی، که در آن اندازه گیری های دقیق برای توسعه دارو ضروری است، بسیار مهم است.

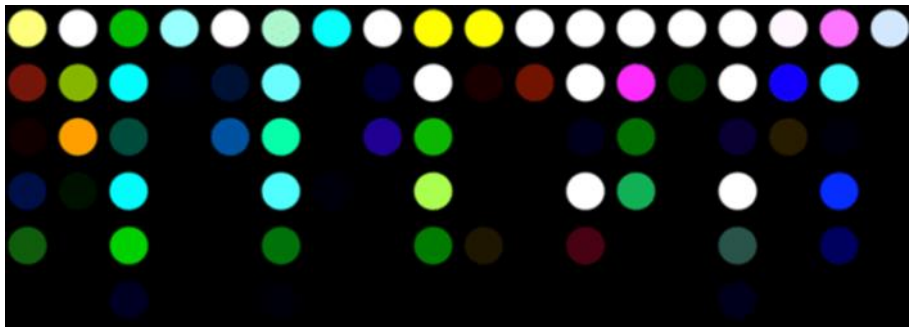


Designed by AI

هوش مصنوعی در شبکه های حسگر

مروری بر آرایه های حسگر:

آرایه های حسگر از چندین حسگر تشکیل شده است که برای شناسایی گونه های شیمیایی مختلف به طور همزمان طراحی شده اند. هر حسگر در آرایه می تواند به خواص شیمیایی خاصی مانند ترکیبات فرار، رسانایی یا جذب پاسخ دهد. هنگامی که این حسگرها با هم آرایه می شوند، مشخصات جامعی از محیط شیمیایی ارائه می دهند.



Jacqueline M Rankin, The Analyst, 2015

انواع حسگرها

شبکه های حسگر شامل دستگاه های مختلفی هستند که برای نظارت بر پارامترهای شیمیایی، فیزیکی و بیولوژیکی طراحی شده اند. این حسگرها در کاربردهای مختلف از نظارت بر محیط تا کنترل فرآیندهای صنعتی و تشخیص مراقبت های بهداشتی بسیار مهم هستند. ادغام هوش مصنوعی (AI) در شیمی تجزیه، انقلابی در نحوه انجام تجزیه و تحلیل های شیمیایی، به ویژه از طریق استفاده از آرایه های حسگر، ایجاد کرده است .این سیستم‌ها نظارت و تجزیه و تحلیل ترکیبات شیمیایی را در محیط‌های مختلف امکان‌پذیر می‌سازند و حساسیت، ویژگی و کارایی عملیاتی را افزایش می‌دهند.

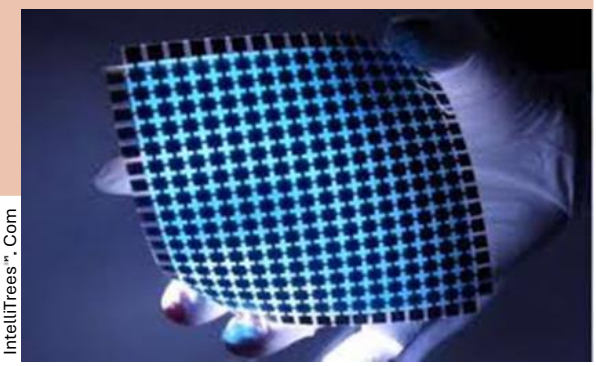
انواع متداول سنسورهای مورد استفاده در آرایه ها عبارتند از:

سنسورهای شیمیایی. شناسایی مواد شیمیایی خاص، اغلب با استفاده از روش های الکتروشیمیایی یا نوری.

Designed by AI

حسگرهای گاز. ترکیبات گازی را که معمولاً از اکسید فلزی یا فناوریهای پلیمری رسانا استفاده می‌کنند، نظارت می‌کنند.

سنسورهای نوری. از جذب نور، فلورسانس یا بازتاب برای شناسایی و تعیین کمیت گونه های شیمیایی استفاده می کنند.



IntelliTrees™.Com

Sensor Array

ادغام هوش مصنوعی در آرایه های حسگر

اکتساب و پردازش داده ها هوش مصنوعی عملکرد آرایه های حسگر را با فعال کردن تکنیک های پیچیده جمع آوری و پردازش داده ها افزایش می دهد. الگوریتم های یادگیری ماشین می توانند مجموعه داده های بزرگ تولید شده توسط حسگرها را تجزیه و تحلیل کنند و الگوها و همبستگی های معناداری را استخراج کنند که ممکن است با روش های سنتی نادیده گرفته شوند.

تجزیه و تحلیل پیش بینی و تشخیص ناهنجاری

هوش مصنوعی شبکه های حسگر را از طریق تجزیه و تحلیل پیش بینی و تشخیص ناهنجاری افزایش می دهد. مدل‌های یادگیری ماشین می‌توانند داده‌های دریافتی از چندین حسگر را برای شناسایی روندها، پیش‌بینی خرابی تجهیزات و تشخیص ناهنجاری‌ها تجزیه و تحلیل کنند. به عنوان مثال، در پایش محیط زیست، هوش مصنوعی می‌تواند داده‌های حسگرهای کیفیت هوا را برای پیش‌بینی افزایش آلودگی و اطلاع‌رسانی پاسخ‌های بهداشت عمومی تجزیه و تحلیل کند.

تشخیص الگو و طبقه بندی

هوش مصنوعی در تشخیص الگو برتر است و به آن اجازه می‌دهد تا نشانه های شیمیایی را بر اساس پاسخ‌های آرایه حسگر طبقه‌بندی کند. این قابلیت به ویژه در محیط های پیچیده که

Designed by AI

ممکن است چندین ماده شیمیایی به طور همزمان وجود داشته باشد مفید است. به عنوان مثال، الگوریتم‌های هوش مصنوعی می‌توانند بین ترکیبات آلی فرار مختلف (VOCs) در پایش کیفیت نمونه های مختلف، تمایز قائل شوند.

نظارت و تصمیم گیری در زمان واقعی

با هوش مصنوعی، آرایه های حسگر می توانند نظارت بر زمان واقعی محیط های شیمیایی را فراهم کنند. مدل‌های یادگیری ماشینی می‌توانند تغییرات در غلظت‌های شیمیایی را پیش‌بینی کنند و پاسخ‌های فعالانه به خطرات احتمالی در تنظیمات صنعتی یا نظارت بر محیط زیست را ممکن می‌سازند.

کاربردهای آرایه های حسگر تقویت شده با هوش مصنوعی

۱. پایش محیط زیست.

آرایه های حسگر مبتنی بر هوش مصنوعی به طور گسترده برای نظارت بر کیفیت هوا و آب استفاده می شود. این سیستم ها

Designed by AI

با شناسایی آلاینده ها و مواد شیمیایی خطرناک، به اطمینان از رعایت مقررات زیست محیطی و محافظت از سلامت عمومی کمک می کنند. به عنوان مثال، آرایه های مجهز به حسگرهای گاز می توانند به طور مداوم کیفیت هوا را کنترل کنند و مقامات را در مورد سطوح خطرناک سموم آگاه سازند.

۲. کنترل فرآیندهای صنعتی.

در تولید، آرایه‌های حسگر هوش مصنوعی می‌توانند واکنش‌های شیمیایی و فرآیندهای تولید را نظارت کنند. با تجزیه و تحلیل داده ها در زمان واقعی، هوش مصنوعی می تواند شرایط را بهینه کند، کیفیت و بازده محصول را افزایش دهد و در عین حال ضایعات را به حداقل برساند. به عنوان مثال، در صنعت پتروشیمی، آرایه‌های حسگر می‌توانند ترکیب مواد اولیه را کنترل کرده و فرآیندها را بر اساس آن تنظیم کنند.

۳. تشخیص مراقبت های بهداشتی.

در تشخیص پزشکی، آرایه‌های حسگر یکپارچه هوش مصنوعی برای تشخیص سریع نشانگرهای زیستی در مایعات بدن در حال توسعه هستند. این سیستم ها می توانند نمونه ها را به سرعت و با دقت تجزیه و تحلیل کنند و تشخیص زودهنگام بیماری و رویکردهای پزشکی شخصی را تسهیل کنند.

پیشرفت در تکنیک های هوش مصنوعی

توسعه مستمر روش های هوش مصنوعی، از جمله یادگیری عمیق و یادگیری تقویتی، قابلیت های آرایه های حسگر را افزایش می دهد.

کوچک سازی و کاهش هزینه: همانطور که فناوری حسگر تکامل می یابد، می توانیم انتظار سنسورهای کوچکتر و مقرون به صرفه تری داشته باشیم که استقرار گسترده را امکان پذیر می کند.

ادغام با اینترنت اشیا: ترکیبی از هوش مصنوعی، آرایه های حسگر و اینترنت اشیا (IoT) به اشتراک گذاری یکپارچه داده ها و نظارت از راه دور را امکان پذیر می کند و دامنه کاربردها را در زمینه های مختلف افزایش می دهد.

چالش ها و محدودیت ها

در حالی که ادغام هوش مصنوعی با آرایه های حسگر مزایای قابل توجهی را ارائه می دهد، چالش ها باقی می مانند:کیفیت داده ها: دقت پیش بینی های هوش مصنوعی به کیفیت داده های جمع آوری شده توسط سنسورها بستگی دارد. کالیبراسیون و نگهداری برای اطمینان از اندازه گیری های قابل اعتماد ضروری است.

پیچیدگی الگوریتم‌ها: پیچیدگی الگوریتم‌های هوش مصنوعی ممکن است منجر به مسائل قابل تفسیر شود و درک فرآیند تصمیم‌گیری را برای پزشکان دشوار کند.

تداخل و نویز: در محیط های شیمیایی پیچیده، پاسخ های حسگر را می توان تحت تاثیر تداخل ها قرار داد که نیاز به الگوریتم های قوی برای فیلتر کردن نویز و تمرکز روی سیگنال های مربوطه دارد.

هوش مصنوعی در اتوماسیون

فناوری های اتوماسیون در شیمی تجزیه. اتوماسیون فرآیندهای آزمایشگاهی، مانند جابجایی نمونه رباتیک و ابزارهای تحلیلی خودکار، برای افزایش کارایی و کاهش خطای فردی حیاتی است. سیستم‌های اتوماسیون مبتنی بر هوش مصنوعی می‌توانند با یادگیری از داده‌های تاریخی و تطبیق پروتکل‌ها در زمان واقعی، گردش‌های کاری آزمایشگاه را بهینه کنند.

اتوماسیون مبتنی بر هوش مصنوعی. فناوری‌های هوش مصنوعی آزمایشگاه‌ها را قادر می‌سازد تا نه تنها وظایف تکراری را خودکار کنند، بلکه فرآیندهای تصمیم‌گیری را نیز بهبود بخشند. به عنوان مثال،

University of Liverpool

سیستم‌های هوش مصنوعی می‌توانند آزمایش‌های قبلی را برای پیشنهاد پروتکل‌های بهینه، بهبود سرعت و دقت نتایج تحلیلی تجزیه و تحلیل

Designed by AI

کنند. این سازگاری به‌ویژه در محیط‌هایی با توان عملیاتی بالا که تجزیه و تحلیل سریع ضروری است مفید است.

هوش مصنوعی در بهینه سازی

تکنیک‌های هوش مصنوعی به طور فزاینده‌ای برای بهینه‌سازی روش‌های تحلیلی استفاده می‌شوند. بهینه سازی شامل تنظیم شرایط آزمایشی، مانند غلظت معرف و زمان واکنش، برای دستیابی به بهترین نتایج است. الگوریتم های هوش مصنوعی می توانند مجموعه داده های بزرگ را برای شناسایی سریع شرایط بهینه تجزیه و تحلیل کنند و زمان و منابع مورد نیاز برای توسعه تجربی را کاهش دهند.

هوش مصنوعی در مدل سازی پیش بینی

هوش مصنوعی می تواند برای پیش بینی رفتارها و واکنش های شیمیایی استفاده شود. برای مثال، مدل‌ها می‌توانند زمان‌های ماند را در کروماتوگرافی پیش‌بینی کنند یا نتایج سنتز شیمیایی را بر اساس داده‌های تاریخی پیش‌بینی کنند، کارایی را بهبود بخشند وهزینه‌های آزمایشی را کاهش دهند.

هوش مصنوعی در کنترل و تضمین کیفیت

در صنایع دارویی و غذایی، هوش مصنوعی به حفظ کنترل کیفیت کمک می کند. مدل‌های یادگیری ماشینی می‌توانند به سرعت تغییرات در فرآیندهای تولید را تجزیه و تحلیل کنند و ناهنجاری‌ها را در کیفیت محصول شناسایی کنند و از انطباق با استانداردها اطمینان حاصل کنند.

مزایای هوش مصنوعی در شیمی تجزیه

بهبود دقت. الگوریتم های هوش مصنوعی می توانند مجموعه داده های پیچیده را با دقت و سرعت بیشتری نسبت به روش های سنتی پردازش کنند و خطای انسانی را کاهش دهند و سرعت تجزیه و تحلیل را افزایش دهند .این به ویژه در محیط های با توان بالا مفید است.

مدیریت داده پیشرفته. سیستم‌های هوش مصنوعی می‌توانند حجم وسیعی از داده‌ها را به‌طور مؤثر مدیریت و تفسیر کنند، یکپارچه‌سازی اطلاعات از تکنیک‌های تحلیلی مختلف را تسهیل کرده و گردش کار کلی داده‌ها را بهبود می‌بخشند.

کاهش هزینه. با بهینه سازی فرآیندها و کاهش نیاز به مداخله دستی گسترده، هوش مصنوعی می تواند هزینه های عملیاتی در آزمایشگاه های تحلیلی را کاهش دهد. تعمیر و نگهداری پیش‌بینی‌شده توسط هوش مصنوعی همچنین می‌تواند زمان خرابی و خرابی تجهیزات را کاهش دهد.

تحقیق و توسعه تسهیل شده. هوش مصنوعی آزمایش و اعتبارسنجی سریع‌تر فرضیه‌ها را امکان‌پذیر می‌کند و مراحل تحقیق و توسعه در داروسازی، علم مواد و تجزیه و تحلیل محیطی را تسریع می‌بخشد.

onvol.com

چالش های هوش مصنوعی در شیمی تجزیه

Designed by AI

علیرغم کاربردهای امیدوارکننده هوش مصنوعی در شیمی تجزیه، چالش های متعددی باقی مانده که در ادامه به آنها اشاره شده است. غلبه بر این چالش ها مستلزم همکاری بین رشته ای و تحقیقات مداوم است.

کیفیت و در دسترس بودن داده. مدل‌های هوش مصنوعی به داده‌های با کیفیت بالا و مرتبط برای آموزش نیاز دارند. مجموعه داده های ناسازگار یا ناقص می تواند منجر به مدل های نادرست و پیش بینی های غیر قابل اعتماد شود.

تفسیر و شفافیت. پیچیدگی الگوریتم های هوش مصنوعی می تواند تفسیر نتایج را چالش برانگیز کند. محققان ممکن است برای درک استدلال پشت پیش‌بینی‌های تولید شده توسط هوش مصنوعی که برای آنها دشواراست تلاش کنند، که منجر به مشکلات اعتماد در برنامه‌های کاربردی می‌شود.

یکپارچه سازی با سیستم های موجود. ترکیب هوش مصنوعی در جریان کار آزمایشگاهی موجود می تواند پیچیده باشد. ممکن است نیاز به تغییرات قابل توجهی در زیرساخت، آموزش کارکنان، و تنظیمات در پروتکل های عملیاتی داشته باشد.

نگرانی های اخلاقی و مقرراتی. همانطور که فناوری‌های هوش مصنوعی در حال تکامل هستند، ملاحظات اخلاقی مربوط به حریم خصوصی داده‌ها، تعصب در الگوریتم‌ها و انطباق با مقررات باید مورد توجه قرار گیرد تا از استفاده مسئولانه در شیمی تجزیه اطمینان حاصل شود.

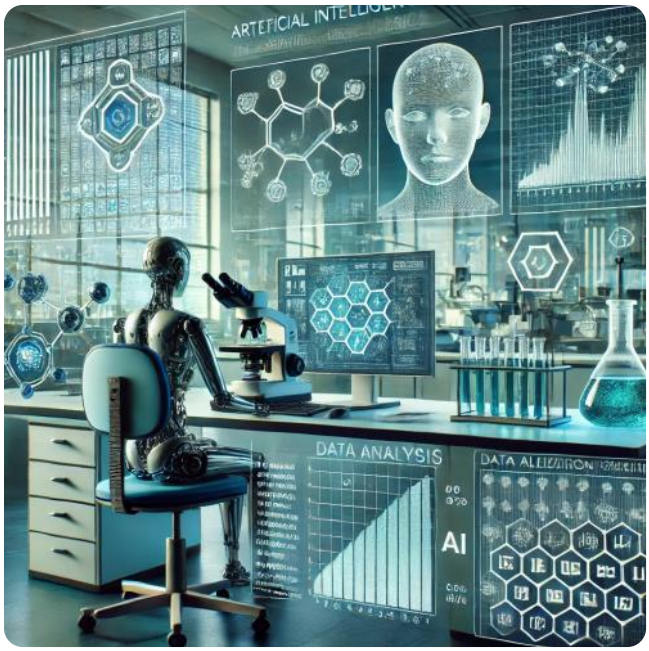
هوش مصنوعی در شیمی آلی

هوش مصنوعی با کمک به محققان در جنبه‌های مختلف این زمینه، از جمله کشف دارو، پیش‌بینی واکنش، طراحی مولکولی و علم مواد، پیشرفت‌های چشمگیری در شیمی آلی دارد. در اینجا چند روش کلیدی برای استفاده از هوش مصنوعی در شیمی آلی آورده شده است:

کشف دارو. هوش مصنوعی با کمک به طراحی مولکول های جدید با فعالیت بیولوژیکی مطلوب، روند کشف دارو را تسریع می کند. الگوریتم‌های یادگیری ماشینی می‌توانند ساختارهای مولکولی را تجزیه و تحلیل کنند و پیش‌بینی کنند که چگونه ممکن است به اهداف خاص متصل شوند، بنابراین شناسایی دارویی امیدوارکننده را تسریع می‌کنند.

برنامه ریزی سنتز خودکار. ابزارهای هوش مصنوعی مانند برنامه ریزان رتروسنتز می توانند مسیرهای مصنوعی را برای مولکول های آلی پیچیده پیشنهاد کنند. این در بهینه سازی استراتژی های سنتز، کاهش نیاز به آزمایش های آزمون و خطا، و صرفه جویی در زمان در کار آزمایشگاهی مفید است.

علم مواد و کاتالیز. هوش مصنوعی برای شناسایی مواد جدید با خواص خاص یا کشف کاتالیزورهای جدید برای واکنش های شیمیایی استفاده می شود. این می تواند با غربالگری از طریق کتابخانه های شیمیایی وسیع یا تجزیه و تحلیل مکانیسم های واکنش، به یافتن کاتالیزورهای بهینه کمک کند.



Designed by AI

هوش مصنوعی در شیمی معدنی

هوش مصنوعی به طور فزاینده ای در شیمی معدنی استفاده می شود و به محققان کمک می کند تا در زمینه هایی مانند کشف مواد، کاتالیز و پیش بینی واکنش به پیشرفت هایی دست یابند. در اینجا برخی از روش های برجسته استفاده از هوش مصنوعی در شیمی معدنی آورده شده است:

۱. طراحی و کشف مواد

هوش مصنوعی در طراحی و کشف مواد معدنی جدید انقلابی ایجاد کرده است. با تجزیه و تحلیل مجموعه داده های بزرگ از خواص مواد، هوش مصنوعی می تواند ترکیبات جدیدی را با ویژگی های خاص، مانند رسانایی بالا، مغناطیس، یا خواص نوری خاص شناسایی کند. این امر به ویژه در زمینه هایی مانند ذخیره انرژی، الکترونیک و نیمه هادی ها بسیار ارزشمند است، جایی که یافتن مواد جدید با خواص بهینه می تواند فرآیندی زمان بر باشد.

۲. کشف و بهینه سازی کاتالیست

در شیمی معدنی، کاتالیزورها برای فرآیندهای صنعتی مانند تولید هیدروژن، کاهش CO_2 و سنتز آمونیاک بسیار مهم هستند. هوش مصنوعی می تواند کاتالیزورهای معدنی جدید را با تجزیه و تحلیل ساختار کاتالیزورهای شناخته شده و شرایط واکنش آنها پیش بینی کند. الگوریتم‌های یادگیری ماشینی می‌توانند ویژگی‌های کلیدی را شناسایی کنند که فعالیت کاتالیزوری را تعیین می‌کنند و کاتالیزورهای جدید و کارآمدتر یا مسیرهای واکنش را پیشنهاد می‌کنند.

۳. پیش بینی مکانیسم واکنش

هوش مصنوعی به پیش بینی نتایج و مکانیسم های واکنش در شیمی معدنی کمک می کند، به ویژه برای واکنش های پیچیده شامل فلزات واسطه و ترکیبات هماهنگ. مدل‌های یادگیری ماشینی که بر روی مجموعه داده‌های واکنش بزرگ آموزش داده شده‌اند، می‌توانند محصولات احتمالی، واکنش‌های جانبی و شرایط واکنش بهینه را پیش‌بینی کنند، بنابراین فرآیند تحقیق را تسریع می‌کنند و آزمایش‌های آزمایش و خطا را کاهش می‌دهند.

٤ .غربالگری با توان بالا.

در شیمی معدنی، غربالگری با توان عملیاتی بالا تکنیکی است که برای ارزیابی سریع بسیاری از ترکیبات یا واکنش ها استفاده می شود. هوش مصنوعی غربالگری خودکار مجموعه داده‌های بزرگ را امکان‌پذیر می‌کند و به محققان کمک می‌کند تا نامزدهای امیدوارکننده را به طور کارآمدتر شناسایی کنند. این امر به ویژه در علم مواد مهم است، جایی که ترکیبات جدید را می توان به سرعت برای سودمندی آنها در کاربردهایی مانند باتری ها، سلول های سوختی و ابررساناها آزمایش کرد.

۵. محیط زیست و شیمی سبز.

هوش مصنوعی برای توسعه کاتالیزورها و فرآیندهای جدیدی استفاده می شود که می تواند به مقابله با چالش های زیست محیطی مانند کاهش CO_2 یا حذف آلاینده ها از آب و هوا کمک کند. مدل‌های یادگیری ماشینی می‌توانند به شناسایی

کاتالیزورهایی کمک کنند که هم مؤثر و هم پایدار هستند و باعث پیشرفت در شیمی سبز و کنترل آلودگی می‌شوند.

٦. شیمی حالت جامد و ابررساناها

هوش مصنوعی در طراحی و بهینه سازی مواد حالت جامد مانند سرامیک ها، نیمه هادی ها و ابررساناها مفید است. الگوریتم‌های هوش مصنوعی می‌توانند پیش‌بینی کنند که چگونه آرایش‌های اتمی مختلف بر خواص مواد تأثیر می‌گذارند، که در توسعه مواد نسل بعدی برای دستگاه‌های الکترونیکی، ذخیره‌سازی انرژی و سایر کاربردهای فناوری ضروری است.

نتیجه گیری

هوش مصنوعی در حال تبدیل شدن به یک ابزار ضروری در شیمی معدنی است که به همه چیز از کشف مواد و بهینه‌سازی کاتالیزور گرفته تا پیش‌بینی مکانیسم واکنش و تجزیه و تحلیل داده‌ها کمک می‌کند. با استفاده از قدرت هوش مصنوعی، محققان می توانند سرعت نوآوری را تسریع کنند، زمان صرف شده برای آزمایش و خطا را کاهش دهند و اکتشافات جدیدی را انجام دهند که می تواند منجر به پیشرفت در فناوری، انرژی و پایداری شود.

هوش مصنوعی در شیمی فیزیک

هوش مصنوعی (هوش مصنوعی) به طور فزاینده ای در شیمی فیزیک استفاده می شود و روش انجام تحقیقات را متحول می کند و درک ما از فرآیندهای شیمیایی پیچیده را افزایش می دهد. در اینجا نحوه تأثیرگذاری هوش مصنوعی بر چند جنبه ی مختلف شیمی فیزیک آمده است:

۱. مدلسازی و شبیه سازی مولکولی

هوش مصنوعی برای پیش بینی و شبیه سازی رفتار مولکولی استفاده می شود که در درک سیستم های شیمیایی اساسی است. به عنوان مثال:

شیمی کوانتومی. الگوریتم‌های هوش مصنوعی مانند شبکه‌های عصبی می‌توانند خواص مولکولی، ساختارهای پیوند و دینامیک واکنش را پیش‌بینی کنند و بر روش‌های سنتی مانند نظریه تابعی چگالی (DFT) که می‌تواند از نظر محاسباتی گران باشد، بهبود یابد.

پتانسیل های یادگیری ماشینی. مدل های هوش مصنوعی، از جمله تکنیک های یادگیری عمیق، می توانند پتانسیل های بین اتمی دقیقی ایجاد کنند و شبیه سازی های سریع تر دینامیک مولکولی را ممکن می سازند. از این مدل ها می توان برای شبیه سازی واکنش های شیمیایی، خواص مواد و رفتار مولکولی در طول زمان استفاده کرد.

۲. پیش بینی واکنش و توضیح مکانیسم

هوش مصنوعی برای پیش‌بینی واکنش‌های شیمیایی، مسیرهای واکنش و مکانیسم‌هایی استفاده می‌شود که در غیر این صورت پیش‌بینی آن‌ها دشوار است. با تجزیه و تحلیل مجموعه داده‌های بزرگ واکنش‌های شیمیایی، هوش مصنوعی می‌تواند واکنش‌ها و مکانیسم‌های جدیدی را بر اساس الگوها و همبستگی‌ها در داده‌ها پیشنهاد کند.

مدل های مولد. روش های

Designed by AI

Designed by AI

یادگیری ماشین، مانند یادگیری تقویتی عمیق یا شبکه های متخاصم مولد(GANs) ، می توانند برای پیشنهاد مولکول های جدید و پیش بینی نتایج واکنش بر اساس ساختار و شرایط واکنش استفاده شوند.

۳. پایگاه های اطلاعات شیمی انفورماتیک و شیمی محاسباتی

هوش مصنوعی برای مدیریت و استخراج پایگاه‌های داده شیمیایی بزرگ مانند پایگاه داده ساختاری کمبریج (CSD) استفاده می‌شود. این پایگاه‌های اطلاعاتی حاوی اطلاعات گسترده‌ای در مورد مولکول‌ها، کریستال‌ها و خواص مواد هستند و هوش مصنوعی می‌تواند به پیش‌بینی یا کشف الگوها کمک کند.

تشخیص الگو. با یادگیری از داده های موجود، هوش مصنوعی می تواند همبستگی ها یا ویژگی های ناشناخته را در مجموعه داده های شیمیایی شناسایی کند و بینش هایی را در مورد رفتار مولکولی، واکنش پذیری یا سمیت ارائه دهد.

٤. بهینه سازی فرآیندهای تجربی

مدل های پیش بینی برای بهینه سازی فرآیند: مدل های یادگیری ماشین برای پیش بینی و بهینه سازی شرایط واکنش، بازده واکنش، و کارایی فرآیند، بهبود نتایج تجربی و استفاده از منابع استفاده می شود.

۵. درک سیستم های پیچیده

هوش مصنوعی به مدل‌سازی و درک سیستم‌های پیچیده، مانند محلول‌های کلوئیدی، شبکه‌های واکنش، و مجموعه‌های ماکرومولکولی کمک می‌کند. این سیستم‌ها اغلب شامل اجزای متقابل متعددی هستند و مدل‌های مبتنی بر هوش مصنوعی می‌توانند الگوهایی را در داده‌هایی که رویکردهای سنتی ممکن است از دست بدهند، شناسایی کنند.

چالش ها و فرصت ها

در حالی که هوش مصنوعی در شیمی فیزیک نوید قابل توجهی را نشان داده است، چالش ها همچنان باقی می مانند:

کیفیت و کمیت داده. داده های با کیفیت بالا برای عملکرد خوب مدل های هوش مصنوعی بسیار مهم است. در برخی از حوزه‌های شیمی، مجموعه داده‌ها ممکن است محدود باشد که منجر به مدل‌های ناقص یا مغرضانه شود.

هوش مصنوعی قابل تفسیر: بسیاری از مدل های هوش مصنوعی، به ویژه مدل های یادگیری عمیق، می توانند به عنوان «جعبه سیاه» عمل کنند. نیاز فزاینده‌ای به هوش مصنوعی قابل تفسیرتر در شیمی وجود دارد، جایی که درک منطق پشت پیش‌بینی‌ها برای دانشمندان حیاتی است.

ادغام با روش‌های سنتی. ابزارهای هوش مصنوعی قدرتمند هستند اما اغلب در ارتباط با روش‌های شیمی محاسباتی سنتی استفاده می‌شوند.

هماهنگ کردن این ابزارها در گردش کار برای پذیرش گسترده تر آنها مهم خواهد بود. به طور کلی، هوش مصنوعی با افزایش قابلیت‌های پیش‌بینی، خودکارسازی تحلیل‌های پیچیده و تسریع در کشف ترکیبات و مواد شیمیایی جدید، شیمی فیزیکی را متحول می‌کند.

مسیرهای آینده

چشم اندازهای آینده هوش مصنوعی در شیمی با پیشرفت‌های بالقوه در فناوری و روش‌شناسی روشن است. با ادامه تکامل الگوریتم‌های هوش مصنوعی و بهبود فناوری حسگر، ادغام هوش مصنوعی در فرآیندهای تحلیلی احتمالاً پیچیده‌تر می‌شود. این تکامل کارایی، دقت و قابلیت اطمینان روش های تحلیلی را در برنامه های مختلف افزایش می‌دهد. در ادامه به چند مورد از مسیرهای آینده اشاره می شود.

پیشرفت در تکنیک‌های یادگیری ماشین. انتظار می‌رود پیشرفت‌های مستمر در الگوریتم‌های یادگیری ماشین، از جمله یادگیری عمیق و یادگیری تقویتی، قابلیت‌های هوش مصنوعی را در شیمی افزایش دهد و به مدل‌های پیچیده‌تر منجر شود.

همکاری بین رشته‌ای. همکاری بین شیمیدانان، دانشمندان داده و کارشناسان هوش مصنوعی برای توسعه راه‌حل‌های خلاقانه هوش مصنوعی متناسب با نیازهای خاص شیمی بسیار مهم خواهد بود.

توسعه ابزارهای کاربر پسند. ایجاد ابزارهای هوش مصنوعی کاربر پسند که تجزیه و تحلیل داده ها را برای شیمیدانان بدون دانش برنامه نویسی گسترده ساده می کند، دسترسی و کاربرد هوش مصنوعی را در این زمینه گسترش می دهد.

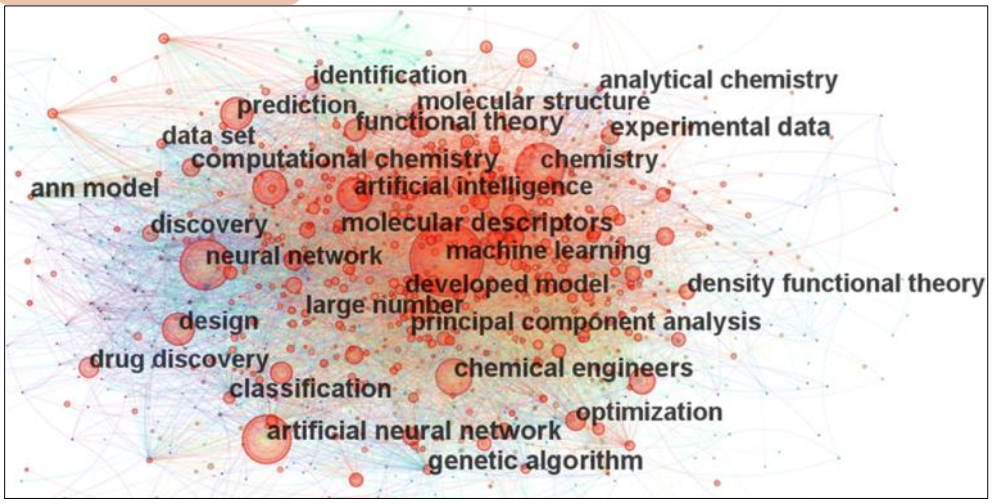
تاکید بر هوش مصنوعی قابل توضیح. توسعه روش‌هایی برای هوش مصنوعی قابل توضیح به دانشمندان کمک می‌کند تا بینش‌های مبتنی بر هوش مصنوعی را درک کرده و به آن اعتماد کنند و پذیرش بیشتر این فناوری‌ها را در شیوه‌های تقویت کند.

Designed by AI

نتیجه گیری

هوش مصنوعی به طور قابل توجهی شیمی را تغییر می دهد، به ویژه در تجزیه و تحلیل طیف سنجی، شبکه های حسگر، اتوماسیون و بهینه سازی. آرایه‌های حسگر تقویت‌شده با هوش مصنوعی، آنالیز شیمیایی را در شیمی تغییر می‌دهند و قابلیت‌های پیشرفته‌ای را برای نظارت و تفسیر محیط‌های شیمیایی پیچیده ارائه می‌دهند. این سیستم‌ها با استفاده از هوش مصنوعی برای پردازش داده‌ها، تشخیص الگو و نظارت در زمان واقعی، بینش‌های ارزشمندی را در مورد برنامه‌های کاربردی مختلف، از حفاظت از محیط زیست گرفته تا فرآیندهای صنعتی و تشخیص مراقبت‌های بهداشتی ارائه می‌کنند. با پیشرفت فناوری، پتانسیل هوش مصنوعی در این زمینه همچنان به رشد خود ادامه می دهد و راه را برای راه حل های تحلیلی هوشمندتر و کارآمدتر هموار می‌کند. با استفاده از قدرت هوش مصنوعی، محققان و پزشکان می توانند کارایی و دقت تجزیه و تحلیل های شیمیایی را بهبود بخشند و منجر به پیشرفت در تشخیص سریع بیماری ها، داروسازی، نظارت بر محیط زیست و موارد دیگر شود. همانطور که این رشته به تکامل خود ادامه می‌دهد، رابطه هم افزایی بین هوش مصنوعی و شیمی، نوید ارائه راه حل های نوآورانه برای چالش های تحلیلی پیچیده را می دهد.

ادغام هوش مصنوعی در شیمی نوید تحول آفرین، بهبود کارایی، دقت و نوآوری را ارائه می دهد. با وجود چالش‌ها، پیشرفت‌ها و همکاری‌های بین‌رشته‌ای نویدبخش افزایش نقش هوش مصنوعی در این زمینه مهم است و راه را برای تکنیک‌های تحلیلی پیچیده‌تر و نتایج علمی بهبود یافته هموار می‌کند. همانطور که این فناوری بالغ می شود، کاربرد آن احتمالاً گسترش خواهد یافت و هوش مصنوعی را به ابزاری ضروری در آینده شیمی تبدیل می‌کند.



Lin Yang, Chemical Communications, June

طعم ها در شیمی

گردآورنده: **امیر سمیعانی**. دانشجو کارشناسی
شیمی محض دانشگاه شیراز
amirsky2003@gmail.com

مقدمه

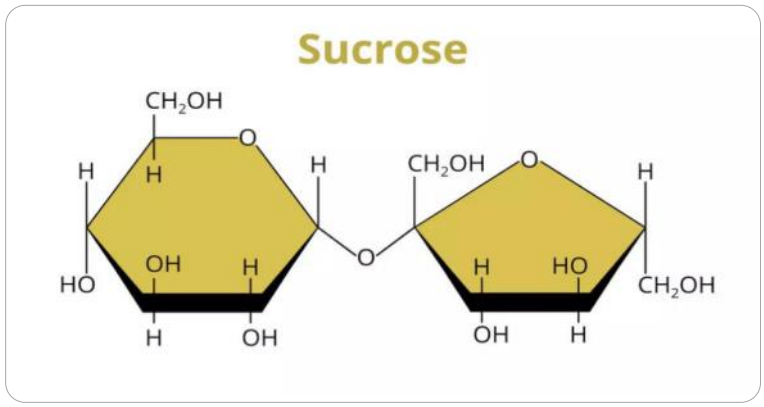
طعم ها نقش بسیار مهمی را در تجربه های غذایی ما ایفا می کنند، به آنها عمق و پیچیدگی داده و لذت را به غذا و نوشیدنی هایی که می خوریم می بخشند. در پس طعم های وسوسه انگیز دنیایی از شیمی نهفته که در این مقاله به باز کردن پیچ و تاب های فرایند های شیمیایی که به وجود آورنده ی این طعم های لذت بخش هستند می پردازیم.

طعم، ترکیبی از بو و مزه است. در حالی که مزه هایی مانند شیرینی، ترشی، شوری، تلخی و اومامی به سادگی توسط جوانه های چشایی ما احساس می شوند، بو ها نقش بیشتری در پیچیده و متنوع کردن طعم ها ایفا می کنند.این پیچیدگی شیمیایی مزه و بو با یکدیگر باعث می شود که سمفونی طعم هایی که تجربه میکنیم پدید بیاید.

bitly.cx/azg6

مزه ها

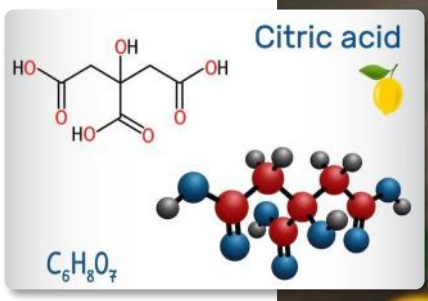
مزه ی شیرینی. معمولا از کربوهیدرات ها و ترکیبات شکری مانند ساکارز (شکر)، فروکتوز (قند موجود در میوه ها) و لاکتوز (قند شیر) نشات میگیرد. این ترکیبات یک برهمکنش دوقطبی متقارن با گیرنده های مزه داده و همین باعث احساس کردن طعم شیرینی لذتبخشی می شود.



chocolate academy, bitly.cx/azg6

Zahra Aghajanzadeh, Basalam

مزه ی ترشی. هنگامی احساس می شود که ترکیبات اسیدی پدیدار می شوند. این ترکیبات یک برهمکنش نامتقارن بین یون هیدروژن و جزء هسته دوست گیرنده ایجاد می کنند و طعم ترشی از این طریق احساس می شود. سیتریک اسید در لیمو و استیک اسید در سرکه ترکیباتی هستند که باعث این فرایند می شوند.



Bacsica, freepik

Fararu.com

Jessica Clifton, tinyurl.com

شوری. معمولا نمک های معدنی باعث درک این مزه می‌شوند؛ به طور مثال در نمک خوراکی، یون های سدیم برهمکنشی متقارن و یونی با گیرنده ها داده و باعث طعم شوری می شود. به جز سدیم کلرید، نمک های دیگری نیز مانند پتاسیم کلرید می توانند عامل احساس کردن طعم شوری باشند.

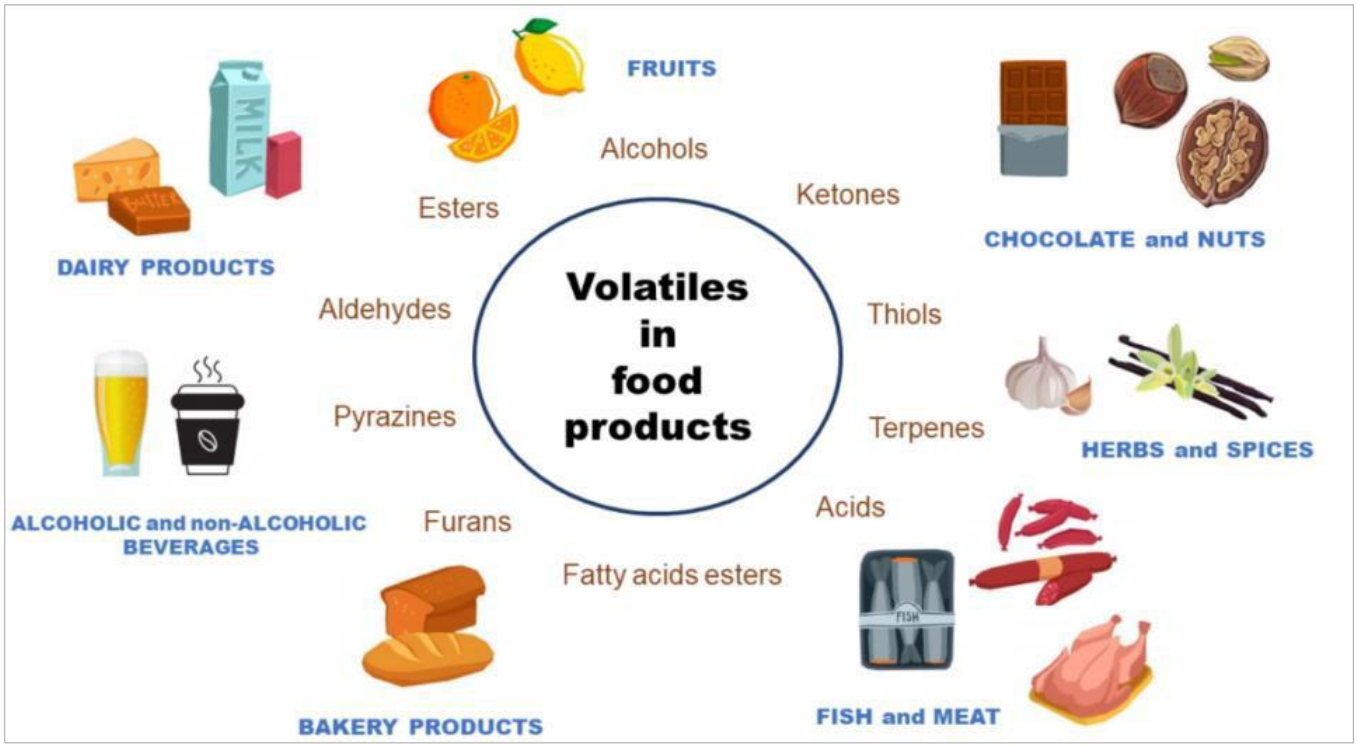
Abigail Roberts, bitly.cx

تلخی. این مزه معمولا به آلکالوییید های معینی مربوط شده و از آن به عنوان پیچیده ترین مزه برای توصیف کردن یاد می‌شود. خیلی از ترکیبات طبیعی، مانند کافیین در قهوه و کوینین) آلکالوییدی برای درمان ماالریا (در آب گازداری به نام آب تونیک، باعث می شوند که ما طعم تلخی را احساس کنیم که این ناشی از برهمکنش دوقطبی نامتقارن یونی یا آلی این مواد با گیرنده هاست. گمان می شود که گیرنده های مزه ی تلخی به عنوان یک مکانیسم دفاعی در برابر ترکیب های سمی عمل می‌کنند.

Dykla Levy Frances, bitly.cx

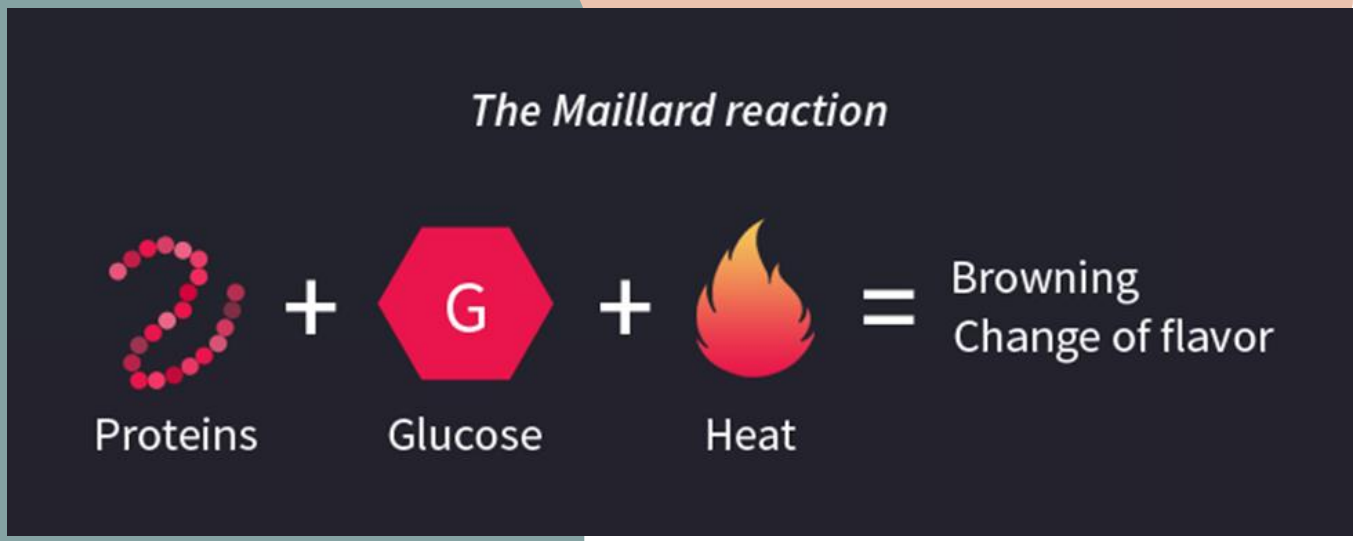
بوها

ترکیبات آلی فرار. این ترکیبات عامل خصوصیت های معطر در طعم ها هستند. این ترکیبات فرار به راحتی از ماده ی جامد متصاعد شده و به گیرنده های بویایی در حفره ی بینی می رسند، به طور مثال استر ها، آلدهید ها و کتون ها که به ترتیب به بوهای میوه، گل و آجیل مربوط می شوند.



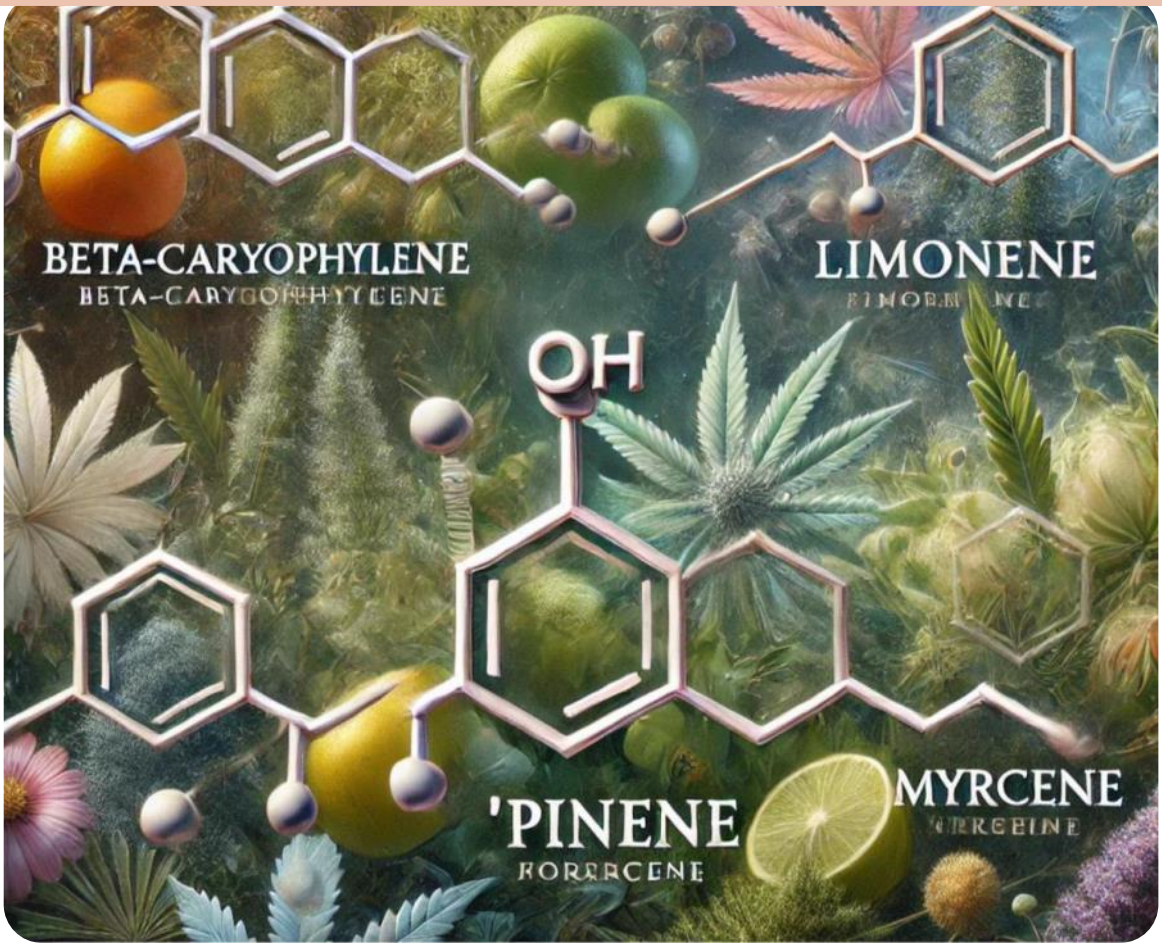
Eurofin, bitly.cx

واکنش مایارد، یک واکنش شیمیایی پیچیده بین آمینواسید هاست که فراورده ی این واکنش کربوهیدرات می باشد. این واکنش عامل براونینگ (عمل جدا شدن چربی های اضافی از گوشت و گرفتن رنگ قهوه ای در اثر پختن آن) و ایجاد بوی خوش در هنگام پخت و پز است. این واکنش ها طعم های کبابی، برشته شده و کاراملی شده را در غذا بر می انگیزند.



Rob, Pastry science, bitly.cx

ترپن ها. این ترکیبات، گروه وسیعی از هیدروکربن های سیر نشده ی فرار هستند که در گیاهان متفاوتی یافت شده و عامل رایحه ی گیاهان، ادویه جات و میوه ها هستند. می توان از لیمونن (ترکیب آلی موجود در مرکبات) و پاینن در برگ های سوزنی کاج به عنوان مثال هایی از ترپن ها یاد کرد.



CannTerp team, bitly.cx

Laura, Prancier, bitly.cx

ترکیبات فنولی. این ترکیبات به وفور در ادویه جات و چای یافت می‌شوند و عامل طعم های تند و دودی می باشند. ترکیبات فنولی، دارای خواص آنتی اکسیدانی هستند و مزایای زیادی برای بدن انسان دارند.

نتیجه گیری. ساختن طعم ها هنری است که تلفیقی از دانش علمی، تخصص آشپزی و درک عمیقی از علایق مصرف کننده است. شیمی دان های طعم با دقت ترکیبات سنتز شده و طبیعی مختلفی را انتخاب و با یکدیگر مخلوط کرده تا طعم های جذاب و هماهنگی را تولید کنند. آنها فاکتور هایی مانند غلظت، پایداری و سازگاری را در نظر گرفته تا مطمئن شوند که طعم مدنظر حاصل شده است.

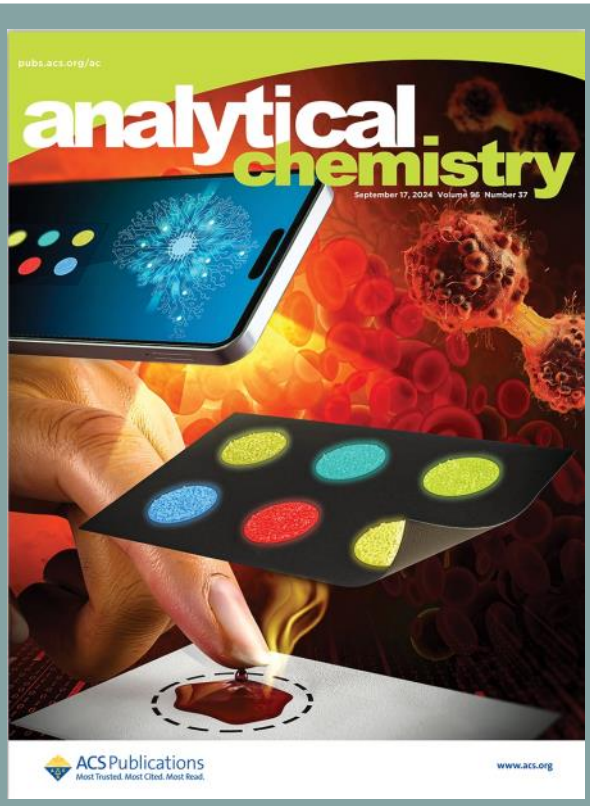
Keira Wingate, bitly.cx

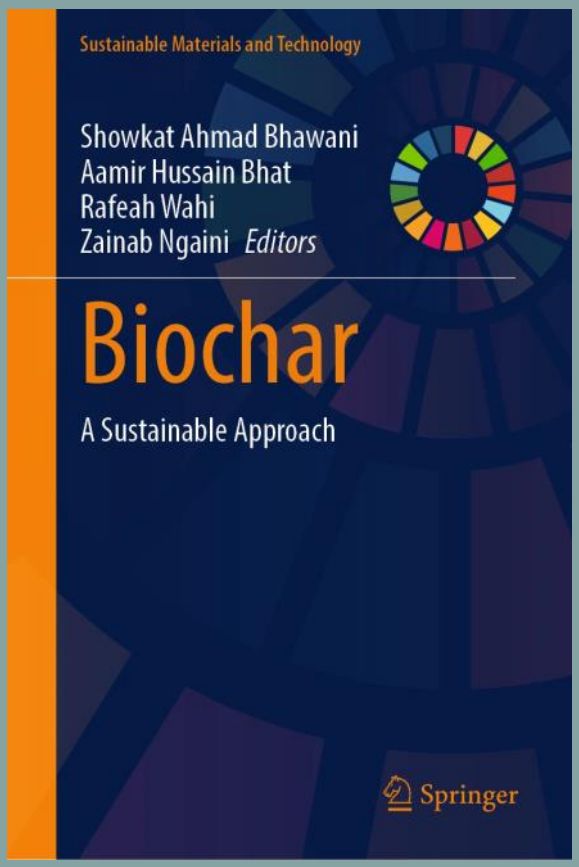
علم شیمی طعم ها راز طعم های لذتبخشی را که در غذا و نوشیدنی های مورد علاقه مان حس میکنیم، برملا می سازد؛ پس دفعه ی بعدی که یک غذای خوش طعم را چشیدید یا جرعه ای از یک نوشیدنی لذتبخش نوشیدید، لحظه ای را برای تحسین جادویی که روی جوانه های چشایی یا سیستم بویایی تان اتفاق می افتد، اختصاص دهید.

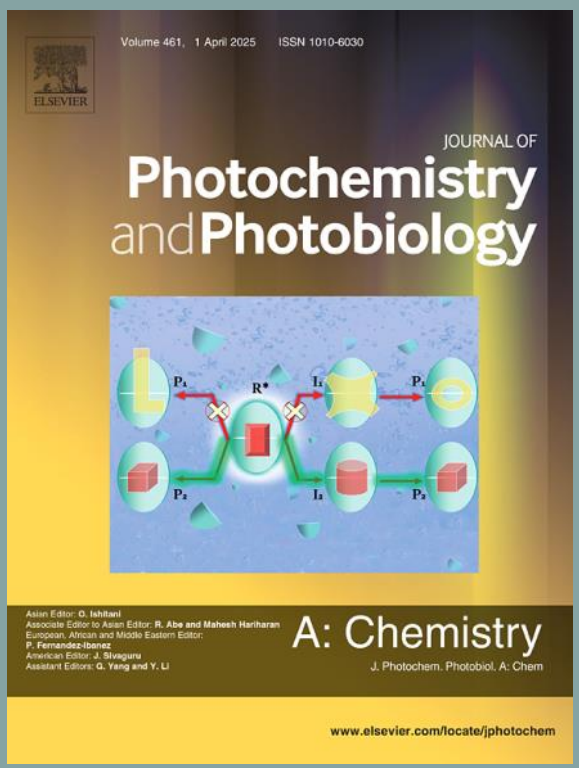
Designed by AI

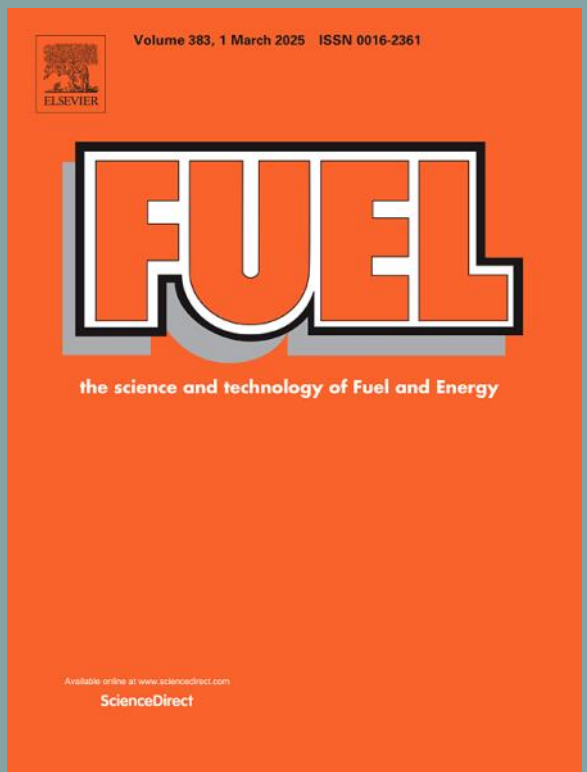
معرفی مقالات اخیر

نشریه مول در این قسمت به طور اختصاصی به دانشجویان تحصیلات تکمیلی بخش شیمی پرداخته و چهار مقاله در بخش های شیمی آلی، شیمی معدنی، شیمی تجزیه و شیمی فیزیک که اخیرا در مجلات معتبری به چاپ رسیدند را تحت عنوان مقالات اخیر بخش ارائه می دهد.









analytical chemistry

pubs.acs.org/ac Article

Miniaturized Sniffing Device based on an Array of Fluorescent Carbon Quantum Dots and Metallic Nanoclusters Efficiently Identifies Hematologic Malignancy in Adults

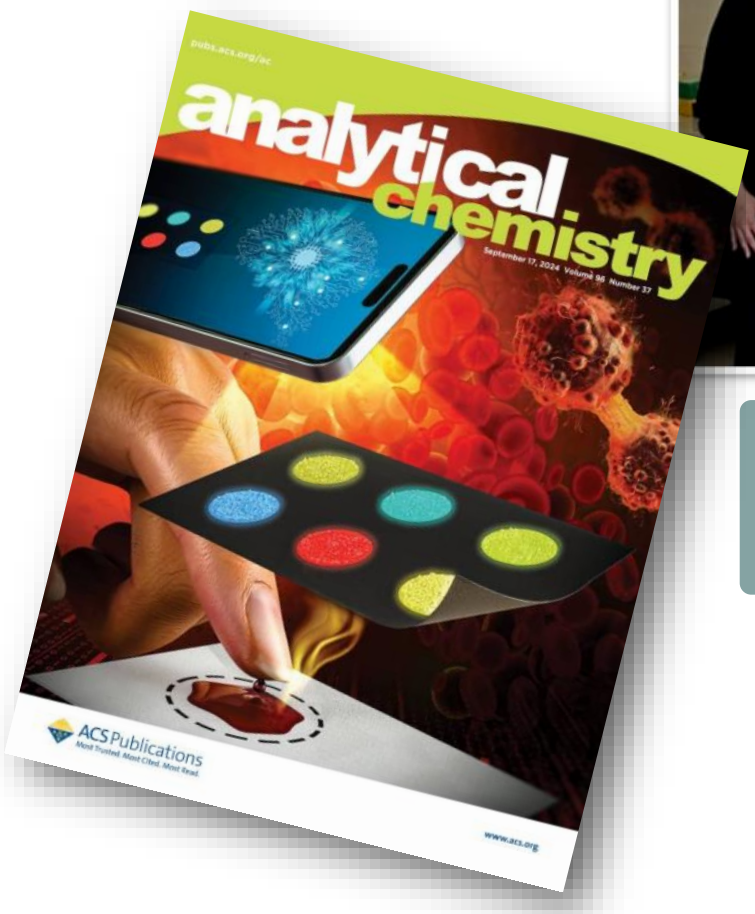
Shiva Pesaran, Abolfazl Khalafinezhad, Vahid Mohammad-Karimi, Javad Tashkhourian, Zahra Shojaeifard, Mani Ramzi, and Bahram Hemmateenejad*

Cite This: https://doi.org/10.1021/acs.analchem.4c02243 Read Online

ACCESS | Metrics & More | Article Recc

گردآورنده: **نازنین اسمعیلی**. دانشجو دکتری شیمی تجزیه دانشگاه شیراز
naesmaeili@yahoo.com

بخش شیمی تجزیه



دستگاه اسنیفینگ کوچک بر اساس آرایه ای از نقاط کوانتومی کربن فلورسنت و نانوخوشه های فلزی به طور موثر بدخیمی خونی را در بزرگسالان شناسایی می کند.

با توجه به اینکه ترکیبات آلی فرار (VOCs) در خون به‌عنوان بیومارکرهای مفید برای لوسمی شناخته می‌شوند، این مطالعه نشان‌دهنده پتانسیل یک بینی نوری ساخته‌شده با آرایه‌ای از نانومواد فلورسانت روی بستر کاغذ برای تشخیص زودهنگام لوسمی در بزرگسالان است.در این طراحی مینیاتوری و یکپارچه، نواحی حسگر و محفظه نمونه‌گیری بر روی یک ورق کوچک کاغذ تعبیه شده و سپس درون یک محفظه واکنش مکعبی کوچک (30 × 30 × 0.02 mm) که با فناوری چاپ سه‌بعدی ساخته شده، جای‌گذاری شده‌اند. این دستگاه حسگر که شامل هفت عنصر فلورسانت مانند نانوخوشه‌های فلزی، نقاط کوانتومی و نقاط کربنی است، می‌تواند VOC های موجود در فضای بالای (headspace)خون را شناسایی کرده و امضای رنگ‌سنجی ارائه دهد که قادر به تفکیک نمونه‌های خون افراد سالم و مبتلا به سرطان می‌باشد. در مجموع، ۷۰ مورد جدید لوسمی و ۵۱ فرد سالم به‌عنوان گروه کنترل در سنین ۲۰ تا ۵۰ سال مورد بررسی قرار گرفتند. این دستگاه به ۶۰ میکرولیتر نمونه خون نیاز داشته و پس از قرارگیری به مدت ۳ ساعت در دمای ۵۰ درجه سانتی‌گراد به VOCهای خون پاسخ می‌دهد. داده‌های تصویری این دستگاه با استفاده از تحلیل تفکیکی خطی (LDA) پردازش شده و نتایج، شناسایی کارآمد نمونه‌های بیمار از نمونه‌های سالم با دقت ۱۰۰ درصد را تأیید کرد. به‌طور کلی، این سیستم آرایه‌ای غیرتهاجمی (یا کم‌تهاجمی)، قابل حمل، سریع، ارزان و نیازمند مقدار کمی از نمونه خون است.

بخش شیمی آلی

دکتر داریوش خلیلی

Khalili et al. Biochar (2024) 6:6
https://doi.org/10.1007/s42773-023-00286-y

Biochar

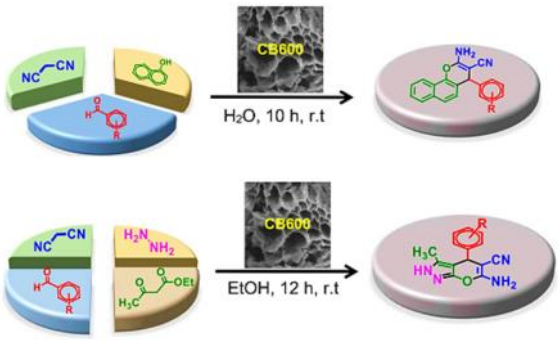
ORIGINAL RESEARCH Open Access

Biochar: a high performance and renewable basic carbocatalyst for facilitating room temperature synthesis of 4*H*-benzo[*h*]chromene and pyranopyrazoles in water

Dariush Khalili[1*], Ali Asghar Ramjerdi[1], Hamid Reza Boostani[2] and Arash Ghaderi[3]

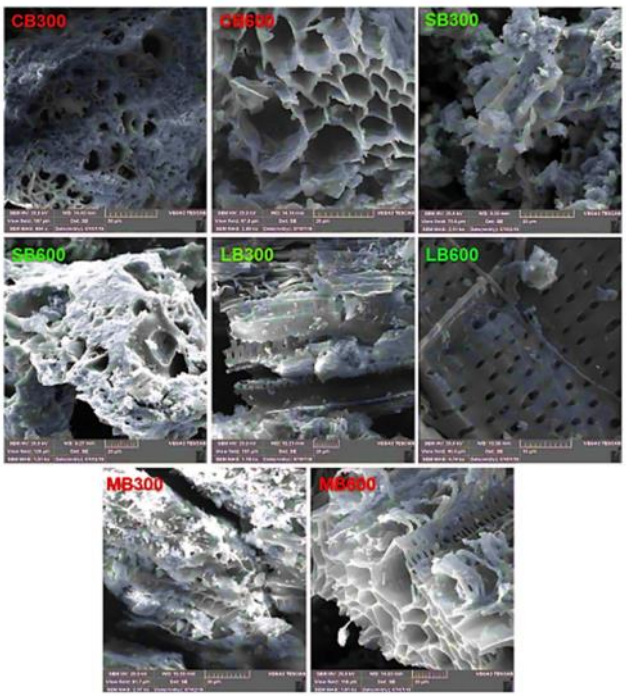
بیوچار: یک کربوکاتالیست بازی با کارایی بالا و تجدیدپذیر برای تسهیل سنتز ٤-H-بنزو[h]کرومن و پیرانوپیرازول در دمای اتاق در آب

در راستای تضمین آینده‌ای پایدار برای جامعه و علم، به‌ویژه در پرتو نگرانی‌های فزاینده درباره آلودگی محیط زیست و کمبود انرژی، ضروری است که استفاده از مواد اولیه تجدیدپذیر در اولویت قرار گیرد. زیست‌توده حاصل از زباله‌های شهری، خانگی و زیستی به عنوان منبعی طبیعی و فراوان، ظرفیت بالایی برای تولید انرژی، گرما و مواد شیمیایی با مزیت‌های اقتصادی و حداقل انتشار گازهای گلخانه‌ای دارد. تکنیک‌های پیرولیز و گازی‌سازی معمولاً برای تبدیل زیست‌توده به بیوچار، که به شکل کربن جامد باقی‌مانده است، به کار می‌روند. بیوچار تولید شده از تجزیه حرارتی زیست‌توده به‌عنوان یک ماده ارزان و متراکم کربن، در بهبود کیفیت خاک، حذف آلاینده‌های آلی و معدنی و ترویج جذب کربن موثر است. به‌علاوه، به‌دلیل مزایای اقتصادی، تحرک‌پذیری و پایداری، کاربردهای بیوچار به صنایع پیشرفته همچون انرژی و مراقبت‌های بهداشتی گسترش یافته است. شیمی بیوچار به تازگی توجه زیادی را در سطح عمومی و علمی جلب کرده است و کشف کاربردهای جدید در این حوزه همواره مورد توجه قرار دارد. با این حال، استفاده از بیوچار در زمینه کاتالیزورها در یک ناحیه محدود مطالعه شده است.



شکل ۱. سنتز چند جزئی H۴-بنزو[h]کرومن و پیرانوپیرازول

این مطالعه یک روش نوآورانه را با به‌کارگیری بیوچار به عنوان کربوکاتالیست پایه در واکنش‌های چند جزئی معرفی می‌کند. بیوچاری که از تجزیه کودی و ضایعات آلی با استفاده از فرآیند پیرولیز-کربنیزاسیون تحت شرایط اکسیژن محدود تولید شده است، به بررسی فعالیت آن در دو واکنش کاتالیستی پایه می‌پردازد: سنتز چند جزئی H۴-بنزو[h]کرومن و پیرانوپیرازول (شکل ۱). از بین نانوبیوچارهای بررسی شده(شکل ۲)، بیوچار تولید شده از کود گاوی در دمای ۶۰۰ درجه سانتی‌گراد به عنوان بهترین کاتالیزور ناهمگن جامد برای سنتز این ترکیبات در شرایط سبز و بدون فلز شناخته شد. نتایج این تحقیق فرصت‌های جدیدی را برای توسعه کربوکاتالیست‌های مبتنی بر زباله‌های زیستی در سنتز هتروسیکل‌های چند جزئی فراهم می‌آورد.



شکل ۲. نانوبیوچارهای بررسی شده

گردآورنده: **محمد نامجو**. دانشجو دکتری شیمی آلی دانشگاه شیراز.
mohammadnamjo20@gmail.com

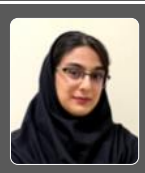
Fuel
Volume 327, 1 November 2022, 124831

Full Length Article

Biodiesel and adipic acid production using molybdenum(VI) complex of a bis(phenol) diamine ligand supported on Fe_3O_4 magnetic nanoparticles

Pegah Mohammadpour, Elham Safaei

گردآورندگان: **یاسمین اکبری**، دانشجو کارشناسی شیمی محض دانشگاه شیراز
Yasaminakbari2420@gmail.com



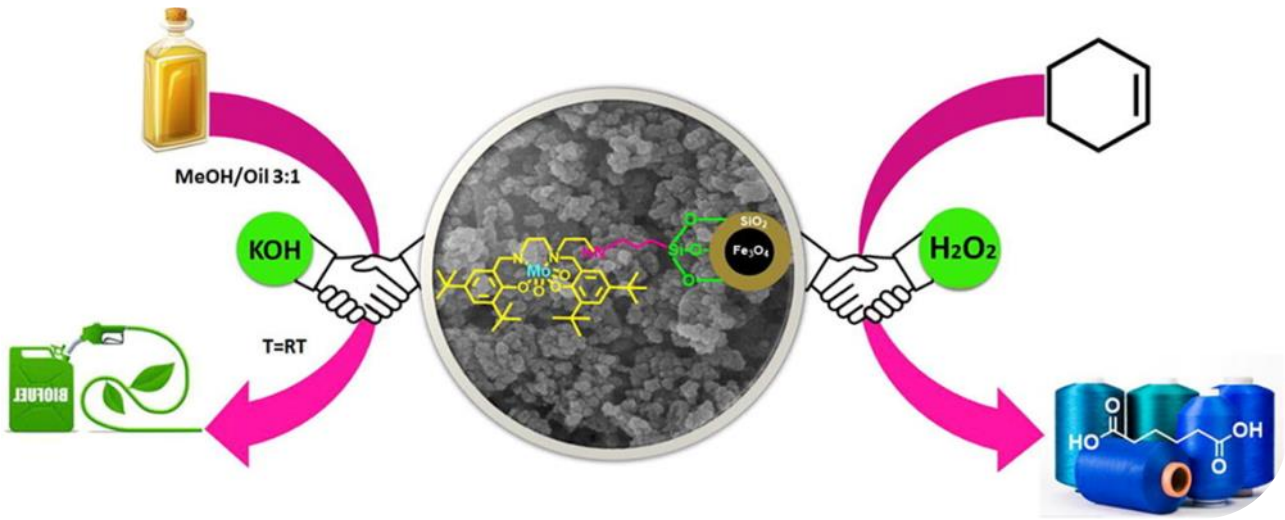
و **حدیث کامیاب**، دانشجو کارشناسی شیمی محض دانشگاه شیراز
hadiskamyab200328@gmail.com

بخش شیمی معدنی

دکتر الهام صفایی

تولید بیودیزل و اسید آدیپیک با استفاده از کمپلکس مولیبدن(VIیک لیگاند دی آمین بیس(فنول) پشتیبانی شده بر روی نانوذرات مغناطیسی Fe_3O_4

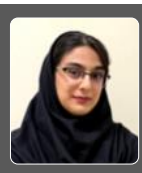
یک کمپلکس همگن Mo(VI)-dioxo شامل لیگاند بیس(فنول) دی‌آمین چهار دندانه‌ای که به‌طور کووالانسی بر روی نانوذرات مغناطیسی ناهمگن دارای گروه‌های آمینه گرافت شده است. ما این کاتالیزور جدید را با استفاده از تکنیک‌های TEM، SEM، FTIR، TGA، VSM، XPS، XRD، EDX، NH3-TDP، BET و آنالیز عنصری بیشتر شناسایی کردیم. قابلیت ماده جامد حاصل در واکنش ترانس استریفیکاسیون روغن خوراکی به بیودیزل مورد بررسی قرار گرفت. این مطالعه تولید بیودیزل نوآورانه و سبز را از طریق همکاری هسته اسیدی لوئیس کاتالیزور ناهمگن بر پایه مولیبدن و مقادیر جزئی KOH قلیایی برای فعال‌سازی متانول نشان می‌دهد. استفاده از مزایای خواص کاتالیزوری همگن و ناهمگن منجر به تبدیل ۹۹٪ بیودیزل تولید شده تحت شرایط نسبتاً ملایم واکنش شامل ۲.۳ درصد مول کاتالیزور، ۰.۰۵ میلی‌مول KOH، نسبت مولی متانول/روغن ۳:۱، زمان ۴۵ دقیقه در دمای اتاق شد. بیودیزل تولید شده با استفاده از H NMR، FTIR و GC–MS شناسایی شد. علاوه بر این، تبدیل اکسیداتیو ضروری صنعتی سیکلوهگزن به اسید آدیپیک بر روی کاتالیزور ناهمگن شامل Mo(VI)-dioxo تحت شرایط بهینه (۱ میلی‌مول سیکلوهگزن، ۶۰ میلی‌گرم کاتالیزور، ۵ معادل H_2O_2، زمان ۱۳ ساعت در ۸۰ درجه سانتی‌گراد) مورد بررسی قرار گرفت و ۶۸٪ اسید آدیپیک خالص تولید شد. علاوه بر این، مطالعات ما نشان می‌دهد که کاتالیزور از نظر ساختاری و مورفولوژیکی پایدار است و قابلیت استفاده مجدد خوبی پس از ۵ و ۱۱ چرخه به ترتیب برای واکنش‌های انتقال اتم اکسیژن و ترانس استریفیکاسیون دارد.



Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry
Volume 447, 15 January 2024, 115261

Investigating the performance of nickel molybdate nanostructure in dye sensitized solar cells: Computational and experimental analysis

Amin Reza Zolghadr [a 1], Shaghayegh Nozari [a], Maryam Heydari Dokoohaki [a], Hadi Salari [a 1]



گردآورندگان: **حدیث کامیاب**، دانشجو کارشناسی شیمی محض دانشگاه شیراز
hadiskamyab200328@gmail.com

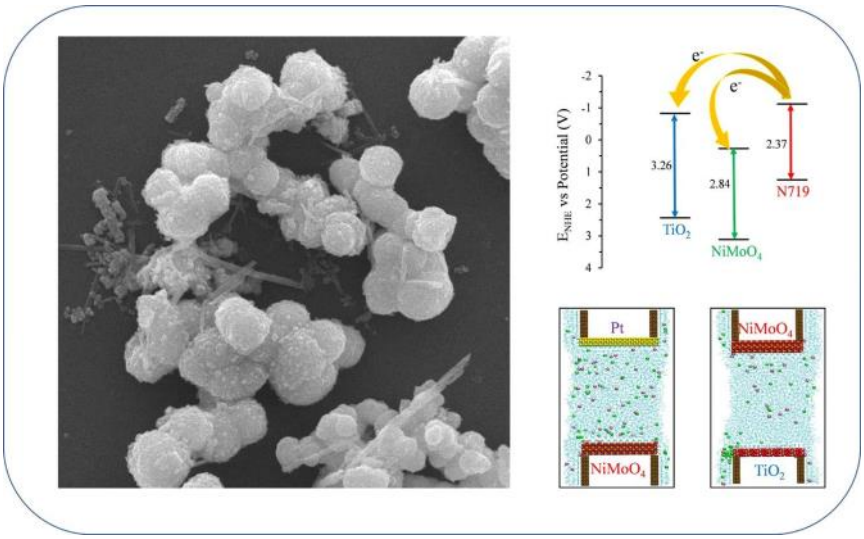
و **یاسمین اکبری**، دانشجو کارشناسی شیمی محض دانشگاه شیراز
Yasaminakbari2420@gmail.com

بخش شیمی فیزیک

دکتر امین‌رضا ذوالقدر

دکتر هادی سالاری

بررسی عملکرد نانوساختار نیکل مولیبدات در سلول‌های خورشیدی حساس به رنگ: تحلیل محاسباتی و تجربی



این مطالعه به بررسی جنبه‌های محاسباتی و تجربی سلول‌های خورشیدی نسل سوم، به‌ویژه سلول‌های خورشیدی حساس به رنگ (DSSCs) با استفاده از نیکل مولیبدات ($NiMoO_4$) به‌عنوان یک لایه انتقال الکترون جدید (الکترود کاری، WE) و الکترود معکوس (CE) می‌پردازد. نانوذرات سنتز شده ۴NiMoO دارای اندازه متوسط ۸۰۰ نانومتر و اندازه بلوری ۲۴.۱۲ نانومتر با استفاده از میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) و طیف‌سنجی پراش اشعه ایکس (XRD) هستند.

نتایج نشان می‌دهد که DSSCs مبتنی بر $NiMoO_4$ عملکرد فتوولتائیک پایینی به دلیل تولید ضعیف فتوکُنت دارند. با این حال، زمانی که $NiMoO_4$ به‌عنوان WE (با پلاتین به‌عنوان CE) استفاده می‌شود؛ جریان کوتاه‌مدت بهتری (Jsc = 220.04 μA/cm) و عملکرد کلی فتوولتائیک بهتری نسبت به TiO2 WE (با $NiMoO_4$ به‌عنوان CE) (Jsc = 0.23 μA/ ۲cm) ارائه می‌دهد. جالب است که DSSCs با $NiMoO_4$ به‌عنوان WE کمترین کاهش عملکرد را نشان دادند (۹۰ درصد کارایی پس از ۲۵۰ ساعت حفظ شده است). علاوه بر این، این مطالعه توزیع الکترولیت بین لایه‌های $NiMoO_4$/Pt و TiO2/$NiMoO_4$ را با استفاده از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی (MD) بررسی می‌کند و به سهم مؤثر آن در هدایت یونی (Λ) اشاره می‌کند که در نهایت منجر به افزایش فتوکُنت برای سیستم NiMoO4/Pt، (Λ برابر با 27.51 (10−4 S.m²/mol در مقایسه با TiO2/NiMoO4 (Λ برابر با 13.45 10−4 (S.m²/mol می‌شود. جالب است که یون‌های یدید با نیمه‌رسانای TiO_2 (در فاصله 0.32 نانومتر) نسبت به $NiMoO_4$ تعامل نزدیک‌تری دارند.

معرفی پژوهشگران 2% برتر دانشگاه شیراز در سال 2024

گردآورنده: **نازنین اسمعیلی**. دانشجو دکتری شیمی تجزیه دانشگاه شیراز
naesmaeili@yahoo.com

۵۰ پژوهشگر از دانشگاه شیراز در شمار پژوهشگران پراستناد ۲٪ برتر جهان در سال ۲۰۲۴

به‌گزارش روابط‌عمومی دانشگاه شیراز، طبق تازه‌ترین گزارش سال ۲۰۲۴ الزویر از عملکرد استنادی پژوهشگران (تحلیل عملکرد سال ۲۰۲۳ پژوهشگران) که براساس شاخص‌های استنادی برگرفته از پایگاه اسکوپس منتشر شده است، ۵۰ نفر از پژوهشگران دانشگاه شیراز در شمار پژوهشگران پراستناد ۲درصد برتر جهان قرار دارند.

شاخص‌های استنادی شامل شاخص اچ، استناد به مقالات و شاخص ترکیبی است که در دو سطح ارائه می‌شود: عملکرد استنادی در طول خدمت و عملکرد استنادی سال ۲۰۲۳. پژوهشگرانی که حداقل ۵ مقاله منتشر کرده‌اند، در تحلیل‌ها وارد می‌شوند و در ۲۲ حوزه علمی و ۱۷۴ زیرشاخه طبقه‌بندی می‌گردند.

۱۳ نفر از این ۵۰ پژوهشگر دانشگاه شیراز از استاید برجسته بخش شیمی هستند که حضورشان مایه مباهات بخش شیمی دانشگاه شیراز است.

در ادامه به مصاحبه با یکی از این اساتید گرانقدر دکتر بهرام همتی نژاد و یادی از دکتر هاشم شرقی پرداخته شده است.

مصاحبه با دکتر بهرام همتی نژاد

گردآورنده: **فاطمه گندم کار**، دانشجو کارشناسی
شیمی محض دانشگاه شیراز
fatemegandomkar1381@gmail.com

خودتون و معرفی میکنید لطفا:

بهرام همتی نژاد هستم فارغ التحصیل شیمی تجزیه از دانشگاه شیراز و هم اکنون استاد تمام دانشگاه شیراز در رشته شیمی.

متولد زمستان سال ۵۱.

از روستایی به نام چهل زرعی عرب ،یه روستای دورافتاده از توابع استان بوشهر.

دوران کودکی و نوجوانی چگونه گذشت؟

در روستای خودمان دبستان بود و تا کلاس پنجم و آنجا ادامه دادم اما بعد از آن در روستای ما مدرسه راهنمایی و دبیرستان وجود نداشت برای همین مجبور شدم برای دوره راهنمایی به گناوه بروم زیرا آنجا مدرسه شبانه روزی داشت.

برای دوره دبیرستان هم به شیرازآمدم. سال اول کنکور را رد شدم و یکسال پشت کنکور ماندم، ۹ ماه سربازی رفتم. در سربازی مجدد کنکور دادم و اولین انتخابم شیمی بود و ادامه دادم.

راحت نبود ولی خب گذشت، الان که برمیگردم میبینم که تلاش هایی که انجام شد ارزشش و داشت.

وضعیت تحصیلی پدر و مادر چگونه بود؟

هم پدر و هم مادر بی سواد بودند، اما باید بگویم که شاید سواد علمی نداشتند ولی اینقدر درک و شعور داشتند که من را محدود نکنند. چونکه در آن

زمان پدر و مادرها دوست داشتند فرزندشان کنارشان باشد و عصای دستشان شود و در کار کشاورزی کمکشان کند. ولی مادرم این احساس مادرانه را رها کرد و اجازه داد تا من در سن ۱۱ سالگی ازاو دور بشوم و هفته ای یک بار من را ببیند.

از افتخارات و دستاوردهای خود بگویید:

متاسفانه در کشور ما تحقیقات هنوز آنقدر قوی نشده که بتوانیم داروی خاص خودمان را داشته باشیم اما در جهان این تحقیقات محاسباتی و کامپیوتری و علوم داده کمک کرده که فرایند دسترسی به یک دارو که در بحث سنتی ۳۰ سال به طول می انجامد،۱۰ سال یا ۸ سال زمان ببرد.

من در این زمینه پژوهش های زیادی انجام دادم که باعث شناخته شدنم در جهان شد و به خاطر همین تحقیقات در جشنواره رازی علوم پزشکی، یکبار سال ۸۲ رتبه آوردم و یکبار هم سال ۸۸ در علوم دارویی رتبه اول کشور را کسب کردم.

بسیاری از تحقیقات من در زمینه ی توسعه علم chemometrics (شیمی سنجی) بوده.

من در سال ۲۰۱۲ یه جایزه جهانی chemometrics گرفتم.

با این عنوان که بدلیل توسعه علم chemometrics در جهان، این جایزه به شما اهدا میشه.

عضوآکادمی علوم کشورهای درحال توسعه به نام twas شدم.

از کشور آلمان یک بورس گرفتم و این بورسیه از موسسه هامبولت هست که لازم است بگویم بالاترین و باارزش ترین بورسیه های تحقیقاتی را این موسسه به دانشمندان اهدا میکند.

در انجمن شیمی ایران به عنوان شیمی دان برتر کشوری انتخاب شدم.

در حال حاضر عمده تحقیقات من ارائه روشهای تشخیصی سریع و هوشمند هست. علاقه داریم این روش تشخیصی را داخل خانه ها ببریم. نتیجه این تلاش ها تا اکنون ۲۶۰ تا مقاله بوده که همه در جاهای خوب چاپ شده.

چه آرزویی دارید؟

آرزوی شخصی من این هست که تمام جوانان ایرانی بتوانند در ایران شاغل شوند و همین جا بمانند و مجبور به رفتن نشوند.

آرزویم این است که تمام جوانانی که در ایران و خارج از ایران فارغ التحصیل میشوند، شرایطش فراهم شود که به ایران برگردند و همه با هم برای ایران کار کنیم.

زنده یاد پروفسور هاشم شرقی

گردآورنده: **ساغر مرادی**، دانشجو کارشناسی
آموزش شیمی دانشگاه شیراز
saghar40233981@gmail.com

پروفسور هاشم شرقی در سال ۱۳۲۸ در خانواده ای روحانی و متوسط در شیراز متولد شد نام پروفسور هاشم شرقی از سال ۲۰۰۲ در فهرست دانشمندان جهان در نمایه مؤسسه اطلاعات علمی (ISI) قرار گرفت و عضو انجمن علمی نیویورک، انجمن علمی شیمی آمریکا و انجمن شیمی و مهندسی شیمی ایران است. زنده یاد دکتر شرقی، استاد پیشکسوت شیمی دانشگاه شیراز و چهره ماندگار شیمی است. در کارنامه ی ایشان، عناوینی چون دانشمند بر تر جهان اسلام (۱۳۸۸)، دانشمند برتر یک درصد و دو درصد (۲۰۱۹-۲۰۲۲)، شیمیدان برجسته کشوری (سال۹۰)، استاد نمونه کشوری (۱۳۸۲)، چهره ی ماندگار استان فارس، پژوهشگر و استاد نمونه ی دانشگاه شیراز دیده می شود. شادروان پروفسور شرقی، عمر گرانبهای خود را صرف تعلیم و تعلم فرزندان این مرز و بوم کرد و عاملی بسیار موثر در رشد و تعالی جامعه علمی کشور، به ویژه دانشگاه شیراز بود. وی به دلیل بیماری و کهولت سن در ۷۵ سالگی درگذشت.

دکتر داریوش خلیلی:

بنده در مقطع ارشد و دکتری با استاد شرقی درس شیمی آلی پیشرفته داشتم. اخلاق نیکو، آرامش و متانت ایشون در برخورد با دانشجویان از خصوصیات بارز استاد بود. از نظر من تدریس استاد بی نظیر و حتی بهترین بود. شیوه ی بیان ایشون بسیار شیوا و شمرده بود. استاد شرقی اصلا استاد سختگیری نبودند اما هیچوقت نمیتوانم امتحانات خاص استاد را فراموش کنم. امتحانات استاد بسیار طولانی بود و گاهی امتحانات ما از ۹ صبح شروع می شد و تا ۳ بعد از ظهر به درازا می کشید. آنقدر جواب امتحانات طولانی بود که حتی بعد از امتحان طرح خودکار بخاطر نوشتن بسیار روی انگشتانمان نقش می بست.

دکتر مونا حسینی:

در مقطع ارشد و دکتری افتخار این رو داشتم که دانشجوی استاد شرقی باشم. استاد شرقی بسیار مهربان بودند و ایشون برای من حکم پدر معنوی را داشتند. من بسیار از حضور در کلاس استاد لذت می بردم و برای من گذر زمان اصلا قابل لمس نبود. استاد شرقی مولکول ها را بسیار زیبا برای ما با گچ پای تخته رسم می کردند و همین بسیار در یادگیری ما موثر بود. در زمان تحصیل من، منزل استاد بسیار به دانشگاه نزدیک بود و گاه استاد را می دیدیم که در حالی که پیاده به دانشگاه می آمدند در حال مطالعه هستند تا در کلاس با آمادگی کامل و با مطالب و مثال های بروز از مقالات جدید، حضور پیدا کنند و این نشان دهنده ی پویایی استاد بود. استاد شرقی در کار پژوهشی بسیار جدی بودند. برای مثال، در زمانی که ما میبایست از هشت صبح تا هشت شب در آزمایشگاه مشغول به کار عملی می بودیم، گاه استاد پس از رفتن به منزل خود، دوباره به ما سر می زدند و اگر می دیدند دانشجوی ایشون در زمان نبود استاد، آزمایشگاه ا ترک کرده است، آن دانشجو را اخراج می کردند . در آن زمان من متوجه شدم که کار تحقیقاتی نیاز به استمرار مداوم دارد . من موفقیت خودم را مدیون سختگیری های استاد میدانم و علاقه من به شیمی آلی فقط و فقط بخاطر استاد شرقی بود.

دکتر امیر عبدالملکی:

خداوند دکتر شرقی را رحمت کند. من در مقطع فوق لیسانس با استاد شرقی، آلی پیشرفته داشتم. برای استاد شرقی درک مفاهیم بسیار مهم بود و به همین دلیل امتحانات استاد گاهی پنج ساعت هم طول می کشید. نحوه ی تصحیح امتحانات استاد اینگونه بود که، به کامل ترین جواب، نمره ی کامل می دادند و باقی جواب ها را نسبت به آن میسنجیدند. استاد شرقی علاقه خاصی به فوتبال داشتند و گاهی با ما دانشجوهای خود به فوتبال می آمدند. ما دانشجویان استاد، بخاطر حضور استاد، هیچ وقت در رقابت بازی از استاد توپ را نمی گرفتیم. و حتی به یاد دارم که استاد یک روز با کارمندان دانشگاه به فوتبال رفته بودند و در بازی، دست استاد شکست. استاد بعد از شکستن دستشون به ما گفتند الان متوجه شدم که شما در بازی مراعات من را می کردید. حتی شکستن دست استاد در فوتبال هم باعث کاهش علاقه ایشون به فوتبال نشد . استاد همواره به برنامه‌ریزی و انجام همه تلاش خود برای انجام هر کاری تاکید داشتند و معتقد بودند باید در هر کاری بهترین خودت باشی.

دکتر سهیلا قاسمی:

من در مقطع دکتری با استاد شرقی کلاس شیمی آلی پیشرفته داشتم. دست خط بسیار زیبا و منحصر به فرد استاد همواره در خاطر من خواهد بود. دست خط ایشون با گچ روی تخته سیاه همواره من را مشتاق یادگیری مطالب جدید می‌کرد. همچنین، چینش اتاق استاد شرقی بسیار خاص بود. یادم هست که در اتاق کوچک ایشون، یک کمد پر از ظرف های شیشه ای کوچک که از باقی مانده مواد سنتز شده ی دانشجویان مقطع دکتری استاد، پر شده بود وجود داشت و نمای زیبایی به اتاق دکتر بخشیده بود. امتحانات استاد شرقی شامل سوالات بسیار طولانی بود که گاه برای هر سوال تقریبا نیاز بود چهار صفحه بنویسیم. استاد به دانشجویان خود اعتماد کامل داشتند و گاه در زمان امتحان، کلاس را ترک می کردند و به دانشجویان خود اعلام می کردند پس از اتمام امتحان جواب های خود را به بخش آموزش تحویل دهند. می توان گفت استاد شرقی یکی از بهترین اساتید شیمی آلی پیشرفته بودند. استاد در کلاس درس آنقدر مفاهیم را عالی منتقل می کردند، هیچگاه نیاز نبود مطلبی را صرفا حفظ کنیم. بلکه آن را با تمام وجود درک میکردیم.

نوبل 2024

گردآورنده: **ملیکا گلستانی**. دانشجو
کارشناسی شیمی محض دانشگاه شیراز.
Melikahm.g46@gamil.com

Re: www.nobelprize.org/prizes/chemistry/2024/summary

جایزه‌ی نوبل معتبرترین جایزه‌ای است که در حوزه‌های علمی به یک دانشمند تعلق می‌گیرد. جایزه نوبل در سال ۱۸۹۵، به وصیت کارخانه‌دار و شیمی‌دان سوئدی، آلفرد نوبل که بیشتر او را به دلیل ابداع دینامیت می‌شناسند، پایه‌گذاری شد. در سال ۱۹۰۱ (میلادی)، نخستین جوایز این بنیاد داده شدند. در حال حاضر، حوزه های اصلی جایزه نوبل شامل جایزه نوبل ادبیات، شیمی، فیزیک، اقتصاد، پزشکی و نوبل صلح است.

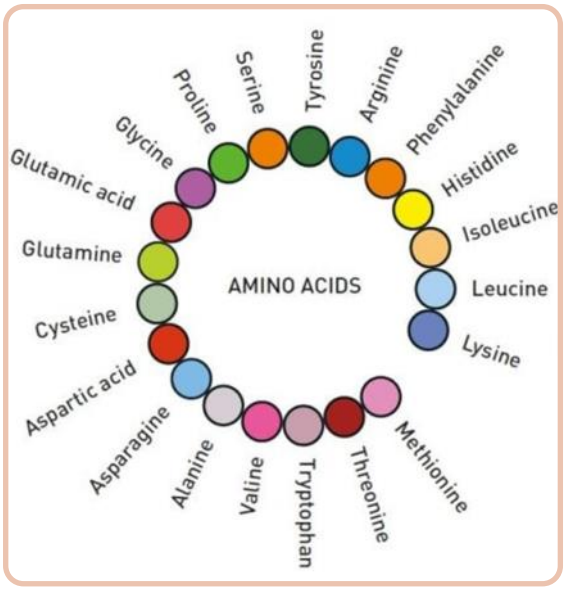
آکادمی سلطنتی علوم سوئد امسال جایزه نوبل شیمی را به سه دانشمند اختصاص داد که در دو حوزه‌ی بسیار مهم فعالیت داشته‌اند: دیوید بیکر آمریکایی با "طراحی محاسباتی پروتئین" و دمیس هاسابیس و جان.ام جامپر از بریتانیا با "پیش بینی ساختار پروتئین" به طور مشترک برنده‌ی جایزه‌ی نوبل شدند.

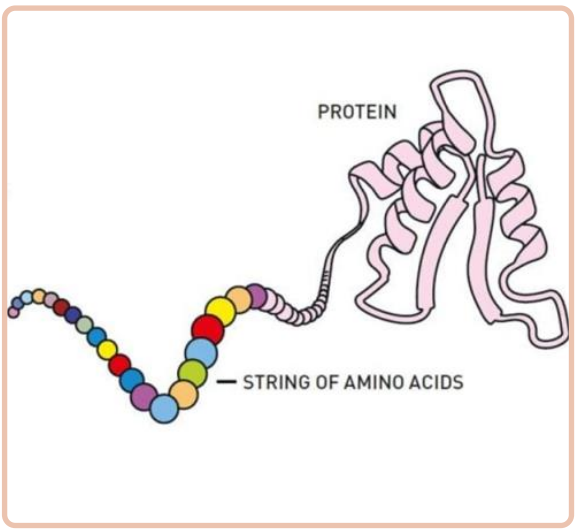
آنها رمز ساختار شگفت‌انگیز پروتئین‌ها را گشودند. دیوید بیکر با موفقیت به چالشی تقریباً غیرممکن پاسخ داده و توانسته است پروتئین‌های کاملاً جدیدی بسازد. دمیس هسابیس و جان جامپر نیز مدل هوش مصنوعی‌ای توسعه داده‌اند که توانسته مشکل دیرینه "پیش‌بینی ساختارهای پیچیده پروتئین‌ها" را حل کند.

پروتئین‌ها، این مولکول‌های شگفت‌انگیز و پیچیده، نقش حیاتی در زندگی دارند. آن‌ها به‌عنوان ماشین‌های شیمیایی، واکنش‌های شیمیایی را که اساس زندگی را تشکیل می‌دهند، هدایت می‌کنند. همچنین، پروتئین‌ها نقش‌های گوناگونی به عنوان هورمون‌ها، سیگنال‌های شیمیایی، آنتی‌بادی‌ها واجزای سازنده بافت‌های بدن ایفا می‌کنند.

دیوید بیکر و خلق پروتئین‌های جدید:

دیوید بیکر موفق شده است پروتئین‌های کاملاً جدیدی را با استفاده از طراحی محاسباتی خلق کند. بیکر از حدود ۲۰ اسید





آمینه استفاده کرد تا پروتئینی بسازد که شبیه هیچ پروتئین شناخته‌شده دیگری نیست. دستاورد او به تیمش این امکان را داده تا پروتئین‌های جدیدی بسازند که در داروسازی، تولید واکسن‌ها، مواد نانو و حسگرهای میکروسکوپی کاربرد دارند.

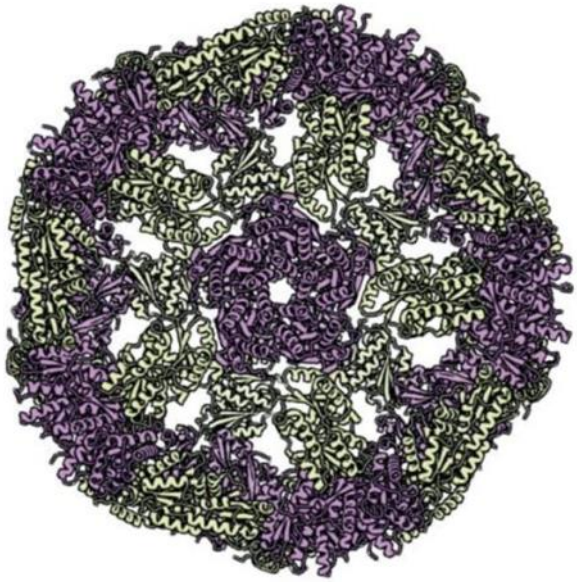
بیکر به‌عنوان پیشگامی در زمینه طراحی پروتئین، راه‌های جدیدی را برای ساختن مولکول‌هایی که قابلیت‌های بی‌نظیری دارند، باز کرده است. او نشان داده که می‌توان با تغییر در ساختار اسیدهای آمینه، عملکردهای متنوعی را ایجاد کرد و حتی پروتئین‌هایی طراحی کرد که در طبیعت یافت نمی‌شوند.

دمیس هسابیس و جان جامپر: پیش‌بینی ساختار پروتئین‌ها با هوش مصنوعی

دستاورد دوم توسط تیم دمیس هسابیس و جان جامپر به دست آمد که مدل هوش مصنوعی AlphaFold2را توسعه دادند. این مدل توانست مشکل قدیمی پیش‌بینی ساختار پروتئین‌ها را حل کند. باکمک AlphaFold2، آن‌ها موفق شدند ساختار سه‌بعدی تقریباً تمام ۲۰۰ میلیون پروتئین شناخته‌شده را پیش‌بینی کنند. این موفقیت بزرگی برای دانش پروتئین‌شناسی و بیوشیمی به حساب می‌آید.

پروتئین‌ها از زنجیره‌های بلندی از اسیدهای آمینه تشکیل شده‌اند که به شکل سه‌بعدی پیچیده‌ای می‌پیچند. این شکل سه‌بعدی برای عملکرد پروتئین بسیار مهم است، اما پیش‌بینی آن همیشه یکی از چالش‌های بزرگ علم بوده است. با معرفی AlphaFold2، اکنون دانشمندان قادرند ساختارهای پیچیده پروتئین‌ها را به‌صورت دقیق و سریع پیش‌بینی کنند. از زمان معرفی این مدل، بیش از دو میلیون نفر در سراسر جهان از آن استفاده کرده‌اند، و این فناوری در پژوهش‌های علمی و

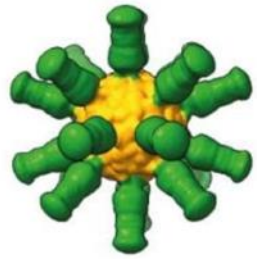
توسعه داروها به کار گرفته شده است.
این دستاوردها به دانشمندان این امکان را می‌دهد که مواد زیستی نوین بسازند. همچنین پروتئین‌هایی که بر آنزیم‌ها اثر می‌گذارند و مواد را تجزیه می‌کنند را شبیه‌سازی کنند.
جایزه نوبل شیمی ۲۰۲۴ که ارزش آن ۱۱ میلیون کرون سوئد است، بین دیوید بیکر و دمیس هسابیس و جان جامپر تقسیم خواهد شد.



2016: New nanomaterials where up to 120 proteins spontaneously link together.

2017: Proteins that bind to an opioid called fentanyl (purple). These could be used to detect fentanyl in the environment.

2022: Proteins that function as a type of molecular rotor.

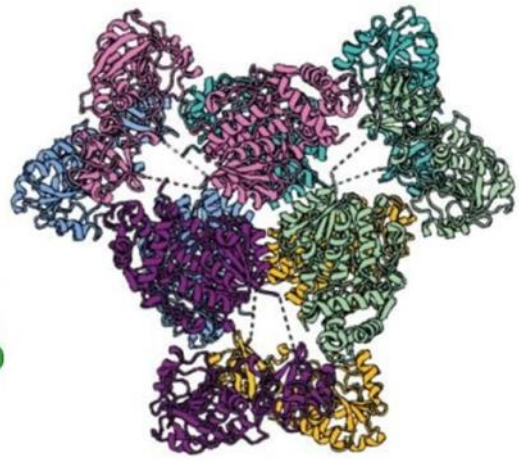


2021: Nanoparticles (yellow) with proteins imitating influenza virus on the surface (green) that can be used as a vaccine for influenza. Successful in animal models.

2024: Geometrically shaped proteins that can change their shape due to external influences. Could be used for producing tiny sensors.

2022: Part of a huge molecular structure in the human body. More than a thousand proteins form a pore through the membrane surrounding the cell nucleus.

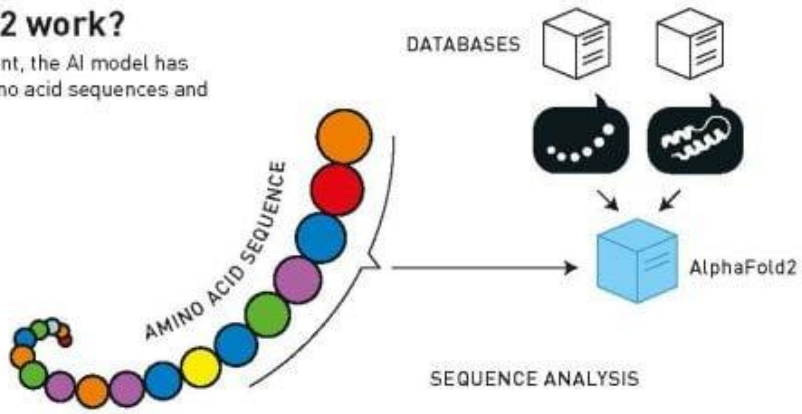
2022: Natural enzymes that can decompose plastic. The aim is to design proteins that can be used to recycle plastic.



2023: A bacterial enzyme that causes antibiotic resistance. The structure is important for discovering ways of preventing antibiotic resistance.

How does AlphaFold2 work?

As part of AlphaFold2's development, the AI model has been trained on all the known amino acid sequences and determined protein structures.



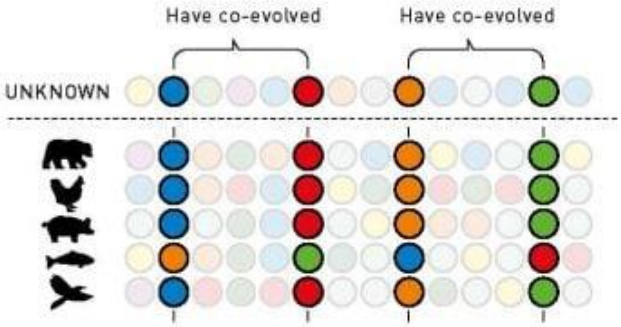
1. DATA ENTRY AND DATABASE SEARCHES

An amino acid sequence with unknown structure is fed into AlphaFold2, which searches databases for similar amino acid sequences and protein structures.

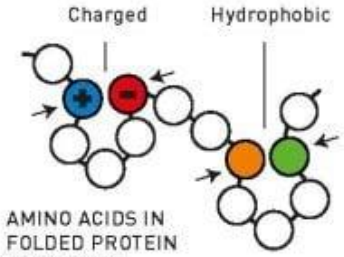
SEQUENCE ANALYSIS

2. SEQUENCE ANALYSIS

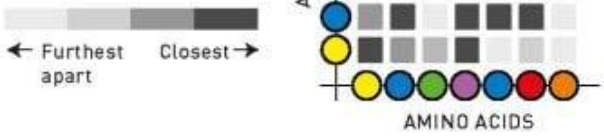
The AI model aligns all the similar amino acid sequences – often from different species – and investigates which parts have been preserved during evolution.

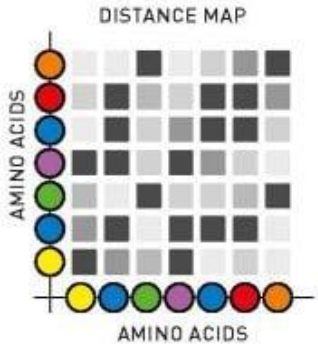


In the next step, AlphaFold2 explores which amino acids could interact with each other in the three-dimensional protein structure. Interacting amino acids co-evolve. If one is charged, the other has the opposite charge, so they are attracted to each other. If one is replaced by a water-repellent (hydrophobic) amino acid, the other also becomes hydrophobic.



Using this analysis, AlphaFold2 produces a distance map that estimates how close amino acids are to each other in the structure.



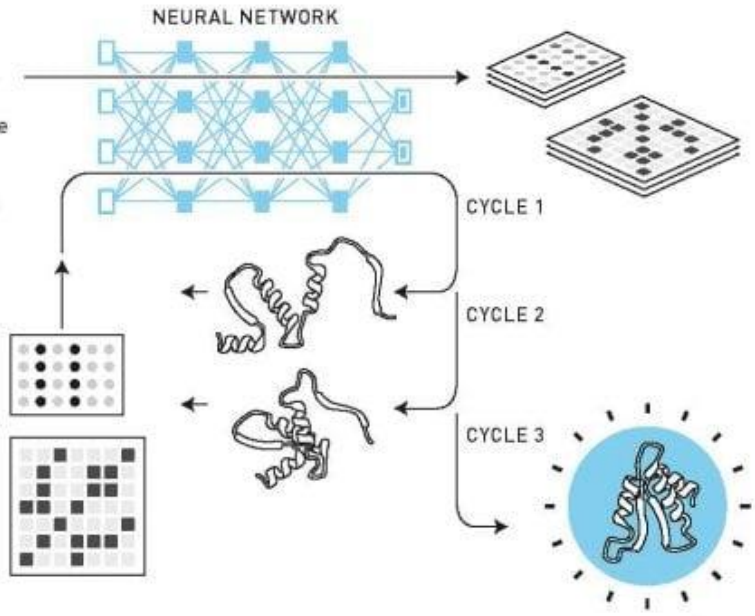


3. AI ANALYSIS

Using an iterative process, AlphaFold2 refines the sequence analysis and distance map. The AI model uses neural networks called transformers, which have a great capacity to identify important elements to focus on. Data about other protein structures – if they were found in step 1 – is also utilised.

4. HYPOTHETICAL STRUCTURE

AlphaFold2 puts together a puzzle of all the amino acids and tests pathways to produce a hypothetical protein structure. This is re-run through step 3. After three cycles, AlphaFold2 arrives at a particular structure. The AI model calculates the probability that different parts of this structure correspond to reality.



رویدادها پاییز 1403

گردآورنده: **فاطمه گندم کار.** دانشجو کارشناسی شیمی محض دانشگاه شیراز
fatemegandomkar1381@gmail.com

رویداد شب علم در دانشگاه شیراز: ترویج علم شیمی با خلاقیت و هیجان

رویداد شب علم دانشگاه شیراز در تاریخ ۲۵ مهرماه ۱۴۰۳ با حضور ۱۳۰۰۰ نفری از مردم شیراز برگزار گردید. در این رویداد به هررشته غرفه هایی اختصاص داده شده بود تا بتوانند گوشه ای از رشته ی خود را با مردم به اشتراک بگذارند. انجمن علمی شیمی نیز با هدف ترویج علم شیمی و ایجاد علاقه در مخاطبان با تمامی گروه‌های سنی، غرفه‌ای خلاقانه و متنوع ارائه داد. این غرفه، که با همکاری اعضای مرکزی انجمن علمی و تیمی ازدانشجویان و اساتید شیمی طراحی شده بود، شامل بخش‌های متعددی بود که سرگرم‌کننده و آموزشی بودند.

بخش‌های اصلی غرفه شیمی

۱. آزمایش‌های علمی جذاب: نمایش آزمایش‌هایی همچون خمیر دندان فیل، مار سیاه، آتش‌فشان کف آلود و تولید یخ خشک با هدف آشنایی بازدیدکنندگان با اصول علمی در پشت این تغییرات شگفت‌انگیز.

۲. کارگاه شیشه‌گری: با هنرنمایی استاد علی مقدم وهمکاری چندی از دانشجویان، شیشه‌های رنگی زیبا خلق شد که به عنوان یادگاری به بازدیدکنندگان هدیه داده می‌شد.

۳. کارگاه شیمی و زندگی: آگاهی‌بخشی درباره کاربردها و خطرات مواد شیمیایی خانگی و ارائه راهکارهایی ساده برای زندگی روزمره

٤. مسابقات علمی: مسابقه‌ای با محوریت جدول تناوبی و پرسش‌های ساده شیمی و همچنین مسابقه مار و پله علوم برای ایجاد هیجان در بازدیدکنندگان و اهدای جوایز ارزنده به آنها

دستاوردهای این غرفه.

– افزایش علاقه به شیمی در بین کودکان و نوجوانان.
– پاسخ به سوالات بازدیدکنندگان و هدایت دانش‌آموزان به سمت رشته شیمی.
– نمایش دستاوردهای دانشگاه شیراز و آموزش مفاهیم علمی به زبان ساده.

بازخورد بازدیدکنندگان نشان داد که این تلاش‌ها موفق بوده‌اند. شگفت‌زدگی و لبخند مخاطبان، از کودکان تا بزرگسالان، گواهی بر موفقیت این رویداد بود و شبی خاطره‌انگیز برای دانشگاه شیراز و بازدیدکنندگان به ارمغان آورد.
درنهایت غرفه شیمی در بین غرفه های **برتر** از طرف مدیریت دانشگاه شیراز معرفی شد.

ناهار با اساتید ویژه دانشجویان جدیدالورود

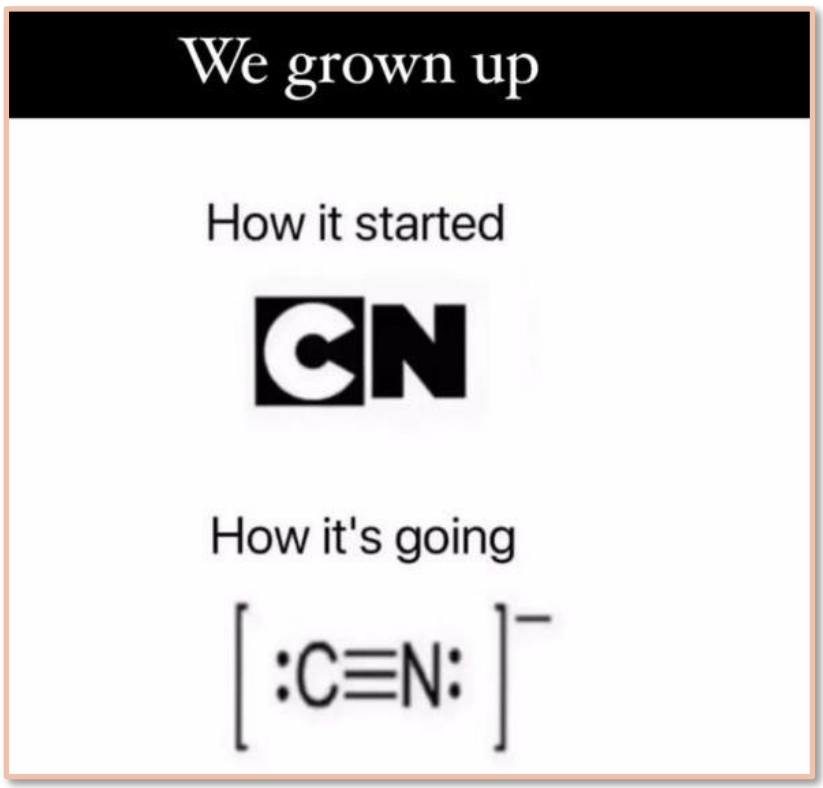
معارفه نو ورودان

فکاهی

گردآورندگان: **آرین زیدآبادی.** دانشجو کارشناسی
شیمی محض دانشگاه شیراز
aryan.zeydabadiu@gmail.com

و **نازنین اسمعیلی.** دانشجو دکتری شیمی تجزیه
دانشگاه شیراز
naesmaeili@yahoo.com

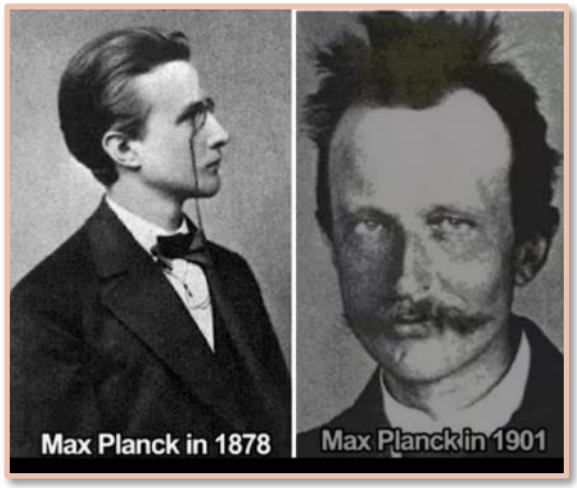
مثلا چرا هیدروژن عنصر مودبی نیست؟ چون خیلی سبکه

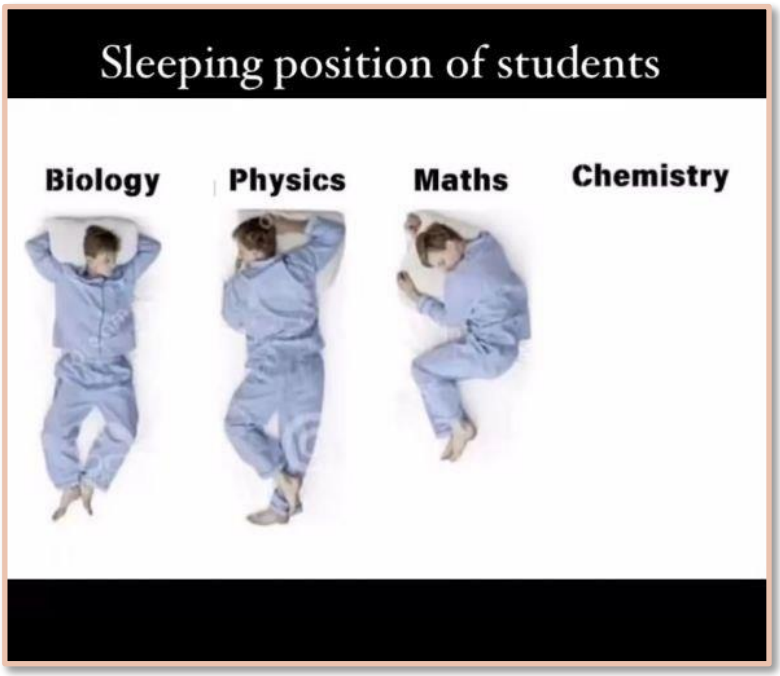


زمین: چرا زهره کلاس شیمی نمیاد؟
مریخ: چون کنترل دماشو نداره

چرا دخترا از کربن متنفرن؟
چون هرجا میره، یه پیوند جدید میزنه

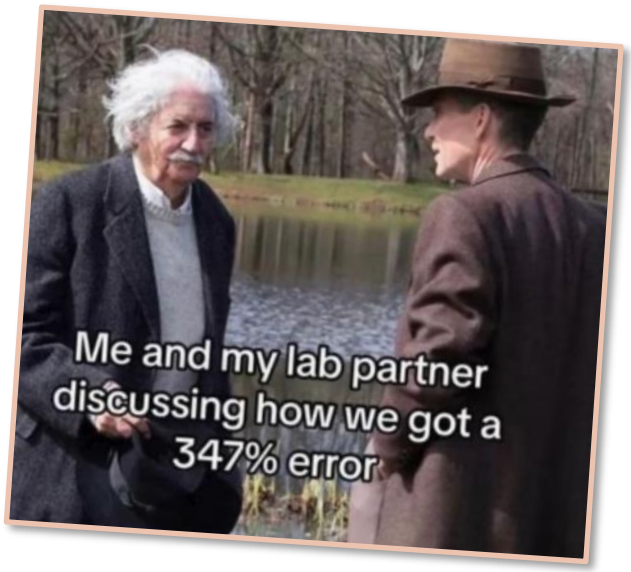
به کلر میگن تاحالا عاشق شدی؟
میگه Na

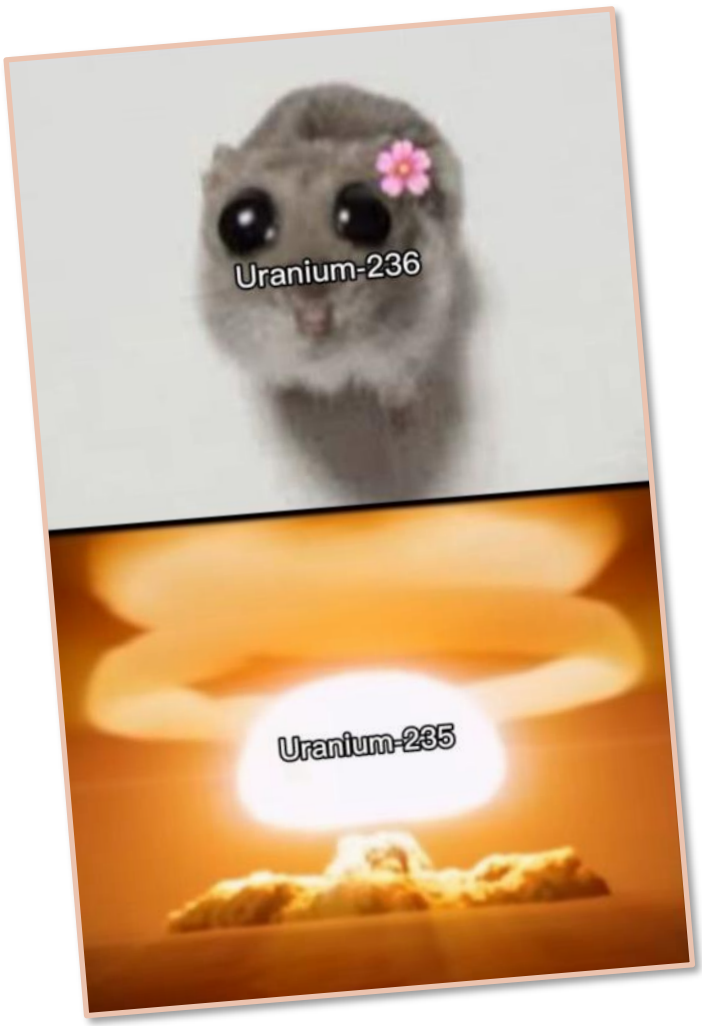


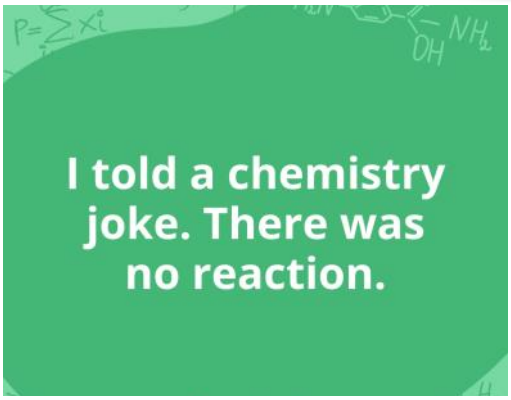


فقط وقتی دو نفر با هم OK هستن که یه نفر اکسیژن باشه یه نفر پتاسیم

اگه اکسیژن و هیدروژن تصادف کنند چی میشه؟ آب از آب تکون نمیخوره





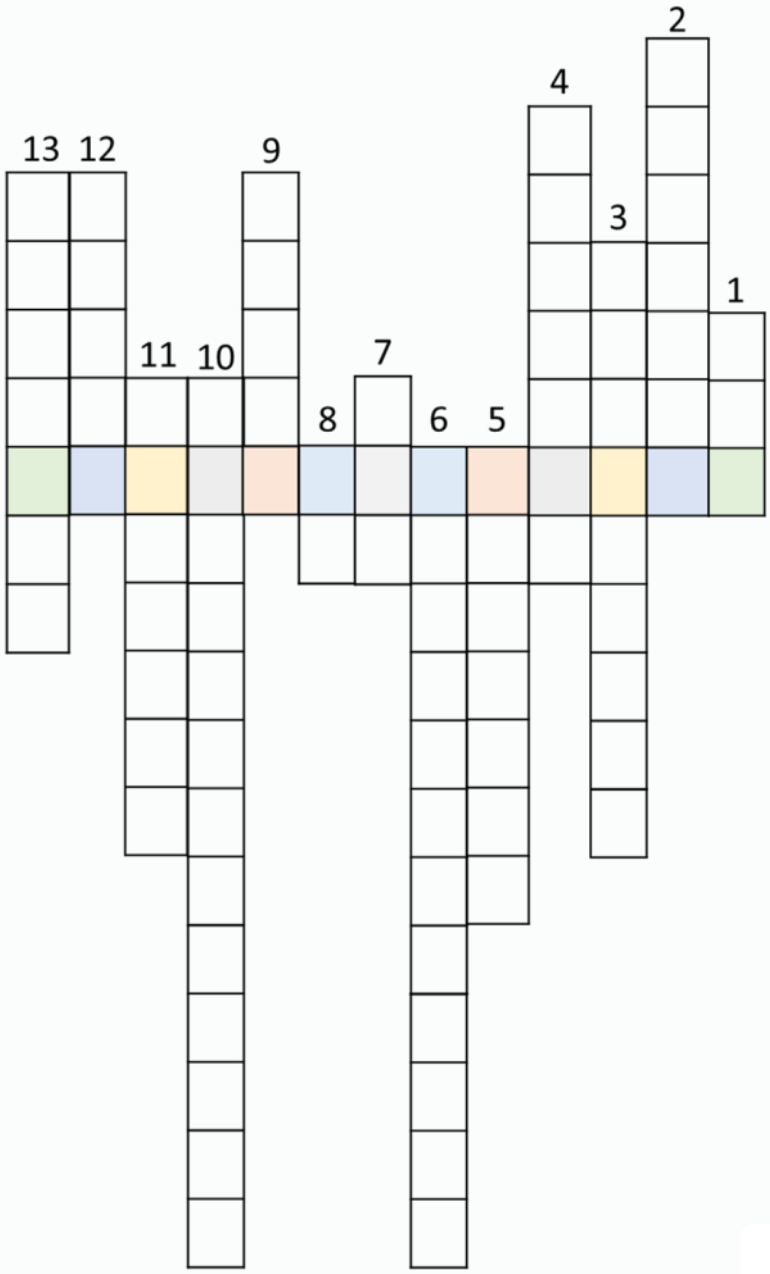


شیمیست ها وقتی میخوان از یکی تعریف کنن
درسته مثل گرافیت سیاهی ولی قلبت الماسه

به ترتیب از راست به چپ:
مولاریته، مولالیته، نرمالیته

گردآورنده: **هانیه روزبه.** دانشجو کارشناسی شیمی
محض دانشگاه شیراز
Haniyehroozbe@gmail.com

جدول



سوالات جدول

۱.نماد Au برای کدام عنصر است؟

۲.عنصری با بیشترین فراوانی در جهان.

۳.نویسنده معروف حوزه الکتروشیمی.

۴.نویسنده شاخص کتاب شیمی عمومی.

۵.عنصر شماره ۷ جدول تناوبی

۶.چند ذره در یک مول از هر ماده وجود دارد؟

۷.عنصری از گروه ۱۷ جدول تناوبی

۸. نماد شیمیایی Cu برای چه عنصری است؟

۹. شاخه ای از شیمی که به مطالعه کمپلکس ها میپردازد.

۱۰.فرایندی که منجر به تشکیل پیوند کوولانسی میشو د.

۱۱.عنصری از گروه ۱۴ که در تولید تراشه های کامپیوتری کاربردی است.

۱۲. کاتالیزور بیوشیمیایی.

۱۳.ترکیب شیمیایی که به عنوان تمیزکننده خانگی استفاده میشود.

سخن بزرگان

گردآورندگان: **دانیال عبداللهی**، دانشجو کارشناسی
شیمی محض دانشگاه شیراز
daniyalabdo@gmail.com

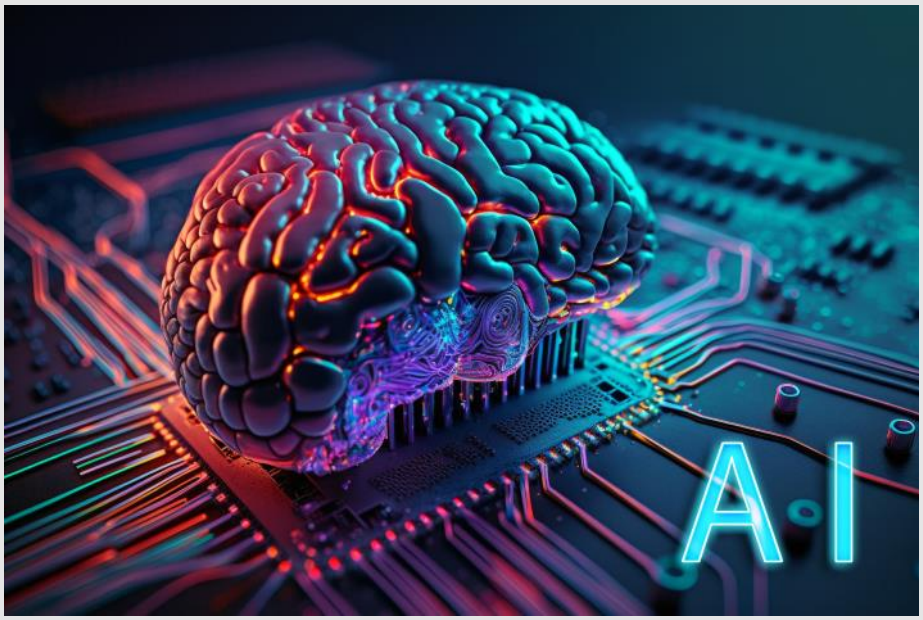
گردآورنده: **نازنین اسمعیلی**، دانشجو دکتری
شیمی تجزیه دانشگاه شیراز
naesmaeili@yahoo.com

استیون هاوکینگ، فیزیکدان نظری فقید

موفقیت در ایجاد هوش مصنوعی بزرگترین رویداد در تاریخ بشر خواهد بود. متأسفانه، ممکن است آخرین مورد نیز باشد، مگر اینکه یاد بگیریم چگونه از خطرات جلوگیری کنیم. توسعه هوش مصنوعی کامل می‌تواند پایان نسل بشر باشد.

تیم کوک، مدیر عامل اپل
هوش مصنوعی بخشی از هر کاری که در آینده انجام می‌دهیم خواهد بود.

ایلان ماسک، مدیرعامل تسلا و اسپیس ایکس
با پیشرفته‌تر شدن، سیستم‌های هوش مصنوعی می‌توانند از هوش انسانی پیشی بگیرند و از کنترل ما خارج شوند



Designed by AI

پاسخ نامه جدول

۱. طلا
۲. هیدروژن
۳. آلن جی بارد
٤. مورتیمر
٥. نیتروژن
٦. عدد آووگادرو
۷. کلر
۸. مس
۹. معدنی
۱۰. اشتراک الکترون
۱۱. سیلیکون
۱۲. آنزیم
۱۳. آمونیاک

رمز جدول: انجمن علمی شیمی

ما نمیتوانیم پرسش هایمان را با همان نگرشی که آنها را مطرح کرده ایم حل کنیم.
آلبرت انیشتین

در علم، حقیقت همیشه پیروز می‌شود.
دیمیتری مندلیف

شیمی در ستارگان آغاز می شود. جایی که منشا تولید عناصریست که آجر های ساختمان ماده را شکل می‌دهند.
پیتر آتکینز

ما نمیتوانیم پرسش هایمان را با همان نگرشی که آنهارا مطرح کرده ایم حل کنیم.
آلبرت انیشتین

ما باید دانشمان را تازه نگه داریم. اگر ما یاد نگیریم،پیش نمی رویم.
ماری کوری

فردریش ویلهلم اوستوالد (۲ سپتامبر ۱۸۵۳ - ۴ آوریل ۱۹۳۲) یک شیمی‌دان و فیلسوف آلمانی بود. اوستوالد به همراه یاکوبوس هنریکوس وانت هف، والتر نرنست و سوانته آرنیوس، یکی از بنیان‌گذاران رشته شیمی فیزیک محسوب می‌شود. او در سال ۱۹۰۹ به دلیل کمک‌های علمی‌اش در زمینه‌های کاتالیز، تعادل شیمیایی و سرعت واکنش، جایزه نوبل شیمی را دریافت کرد.
پس از بازنشستگی از زندگی دانشگاهی در سال ۱۹۰۶، اوستوالد بسیار درگیر فلسفه، هنر و سیاست شد. او سهم قابل توجهی در هر یک از این زمینه‌ها داشت. او به عنوان یک دانشمند همه فن حریف توصیف شده است.