



دانشگاه سمنان

برنامه آموزشی

(کاربرد طرح درس)

تاریخ به روز رسانی: بهمن 98

نیمسال دوم سال تحصیلی 1398

نام درس	فارسی: شیمی محاسباتی لاتین: Computational Chemistry	تعداد واحد: نظری 3 عملی - پیش نیازها و هم نیازها: مکانیک کوانتومی	مقطع: کارشناسی □ کارشناسی ارشد ■ دکتری □
مدرس / مدرسین: علی عرب	شماره تلفن اتاق: 02331532828		
پست الکترونیکی: a.arab@semnan.ac.ir	منزلگاه اینترنتی: http://aarab.profile.semnan.ac.ir		
برنامه تدریس در هفته و شماره کلاس: سه شنبه 8 تا 10 و چهارشنبه 8 تا 9			
اهداف درس: آشنایی با روشهای محاسبات کوانتومی، آشنایی با چند نرم افزار مانند: Gaussian, Gauss View, Chemcraft, GaussSum, Chemission,			
امکانات آموزشی مورد نیاز: درس به صورت پاورپوینت ارائه می شود. دانشجویان باید جهت محاسبات، لب تاپ به همراه داشته باشند.			
نحوه ارزشیابی	فعالیت های کلاسی و آموزشی	ارزشیابی مستمر (کوئیز)	امتحان میان ترم
درصد نمره	25٪	25٪	50٪
1. David C. Young, Computational Chemistry, A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems, John Wiley & Sons, 2001.			
2. J.B. Foresman, E. Frisch, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, third edition, 2015.			
3. M.J. Frisch, H.P. Hratchian, A.B. Nielsen, Gaussian 09 Programmer's Reference, 2009.			
منابع و مأخذ درس			

بودجه بندی درس

شماره هفته آموزشی	مبحث	توضیحات
1	آشنایی کلی با نرم افزارهای Gauss View و Gaussian، نحوه نصب آنها، ایجاد فایل ورودی و نحوه ران کردن آن	
2	مروری بر روشهای شیمی محاسباتی، تفاوتها و شباهت های آنها	
3	روشهای نیمه تجربی، آغازین، اختلال، خوشه جفت شده و برهمکنش پیکربندی	
4	نظریه تابعی دانسیته، انواع تابعی ها و کاربرد آنها	
5	مجموعه پایه (تعریف، اهمیت، کاربردها و انواع)	
6	ایجاد چند فایل ورودی با تابعی ها و مجموعه پایه های متفاوت و ران کردن آنها	
7	بهینه کردن ساختار، سطوح انرژی پتانسیل، مفهوم مینیمم های موضعی، نقطه زینی، بهینه کردن یک ساختار به عنوان تمرین	
8	بررسی فایل خروجی یک فرایند بهینه سازی و نکات قابل استخراج از آن	
9	محاسبات NBO، ایجاد فایل ورودی مناسب، اطلاعات قابل استخراج از محاسبات NBO	

	تعیین هیبریداسیون، محاسبه مرتبه پیوند وایبرگ	10
	محاسبات فرکانس، ایجاد فایل ورودی و ران کردن آن، نتایج حاصل از محاسبات فرکانس، مشاهده طیف IR و رامان در نرم افزارهای Chemcraft, GaussSum	11
	اطلاعات ترموشیمی، محاسبه گرمای تشکیل، کاربرد فرکانس در تعیین حالت گذار واکنشهای شیمیایی	12
	روشهای پیدا کردن حالت گذار واکنشهای شیمیایی با حل مثال، دستور scan	13
	تشریح روشهای QST2 و QST3 با حل مثال	14
	محاسبات در فاز محلول، بررسی طیفهای UV و NMR	15
	بررسی تعدادی از خطاهای متداول در نرم افزار Gaussian و نحوه برطرف کردن آنها	16