



به نام ایزد دانا

**(کاربرگ طرح درس)**

تاریخ به روز رسانی: بهمن ماه 1403

نام درس	فارسی: کاربرد رایانه در شیمی لاتین: Application of computer in chemistry	تعداد واحد: نظری ۲ عملی - پیش نیازها و هم نیازها:	مقطع: کارشناسی ■ کارشناسی ارشد □ دکتری □
مدرس / مدرسین: علی عرب	شماره تلفن اتاق: +۰۲۳۳۱۵۳۲۸۲۸		
پست الکترونیکی: a.arab@semnan.ac.ir	منزگاه اینترنتی: http://aarab.profile.semnan.ac.ir		
برنامه تدریس در هفته و شماره کلاس: طبق برنامه ثبت شده در سامانه گلستان			
اهداف درس: آشنایی با چند نرم افزار کاربردی برای دانشجویان شیمی			
امکانات آموزشی مورد نیاز: ----			
نحوه ارزشیابی	فعالیت‌های کلاسی و آموزشی	ارزشیابی مستمر (کوئیز)	امتحان میان ترم
درصد نمره	50 %	-	50 %
منابع و مآخذ درس	۱. عبدالحسین ناصری، سید رضا نبوی، مهتاب پیرومند، ساحله شیخی زاده میزان، کاربرد کامپیوتر در شیمی، انتشارات دانشگاه تبریز، ۱۳۹۵		

**بودجه بندی درس**

شماره هفته آموزشی	مبحث	توضیحات
۱	آشنایی با اکسل	
۲	مقدمه، معرفی صفحه گسترده، وارد کردن داده ها، رسم نمودارها	
۳	رسم چند نمودار در یک شکل، سازمان دهی نمودار، رسم نمودارهای پیشرفته	
۴	برازش در اکسل، رگرسیون خطی	
۵	برازش در اکسل، رگرسیون غیر خطی	
۶	چند مثال کاربردی از شیمی	
۷	آنالیزهای آماری در اکسل به همراه چند مثال کاربردی در شیمی	
۸	انجام محاسبات عددی در اکسل به همراه چند مثال کاربردی در شیمی	
۹	آشنایی کلی با نرم افزارهای Gauss View و Gaussian	
۱۰	نحوه نصب نرم افزارها، ایجاد فایل ورودی و نحوه ران کردن آن	
۱۱	مروری بر روشهای شیمی محاسباتی، تفاوتها و شباهت های آنها	
۱۲	روشهای نیمه تجربی، آغازین، اختلال، خوشه جفت شده و برهمکنش پیکربندی	
۱۳	مجموعه پایه (تعریف، اهمیت، کاربردها و انواع)	
۱۴	ایجاد چند فایل ورودی با تابعی ها و مجموعه پایه های متفاوت و ران کردن آنها	
۱۵	بهبود ساختار، سطوح انرژی پتانسیل، مفهوم مینیمم های موضعی، نقطه زینی، بهبود کردن یک ساختار به عنوان تمرین	
۱۶	بررسی فایل خروجی یک فرایند بهبود سازی و نکات قابل استخراج از آن	
۱۷	تعیین هیبریداسیون، محاسبه مرتبه پیوند و ایلبرگ	
۱۸	محاسبات فرکانس، ایجاد فایل ورودی و ران کردن آن، نتایج حاصل از محاسبات فرکانس، مشاهده طیف IR و رامان در نرم افزارهای Chemcraft, GaussSum	