

دانشگاه شهید چمران اهواز  
 معاونت آموزشی و تحصیلات تکمیلی  
 طرح درس ویژه درس های تحصیلات تکمیلی دانشگاه

نام و نام خانوادگی استاد: ذبیح اله مهدوی	مرتبه علمی: استاد	آدرس ایمیل: <a href="mailto:z_mahdavifar@scu.ac.ir">z_mahdavifar@scu.ac.ir</a>
دانشکده: علوم	گروه: شیمی	نیمسال تحصیلی: دوم 1401-1402
دوره تحصیلی: کارشناسی ارشد	نام درس: شیمی محاسباتی	تعداد واحد: 3 واحد
جایگاه درس در برنامه درسی دوره: درس اصلی		
<b>هدف کلی:</b>		
مرور، آشنایی و بررسی آشنایی با آخرین پیشرفت های علمی در شیمی فیزیک		
<b>اهداف یادگیری:</b>		
- آشنایی با پایگاه های معتبر علمی ، - آشنایی با مقالات علمی - آشنایی با روش های محاسباتی و آشنایی با کدهای محاسباتی - آشنایی با مبانی اولیه یادگیری ماشینی - کاربرد یادگیری ماشین در شیمی فیزیک و طراحی مواد جدید		
<b>رفتار ورودی:</b>		
آگاهی از اصول و مبانی شیمی محاسباتی و یادگیری ماشین در شیمی فیزیک		
<b>مواد و امکانات آموزشی:</b>		
تدریس به صورت حضوری با استفاده از تابلو و استفاده از ویدیو پروژکتور		
<b>روش تدریس:</b>		
<ul style="list-style-type: none"> <li>• ارائه مطالب درسی جدید</li> <li>• پرسش و پاسخ و بحث دوطرفه با دانشجو، ارائه سمینار در ارتباط با درس توسط دانشجو</li> </ul>		

● **وظایف دانشجو:**

- شرکت در کلیه کلاس های درسی
- مشارکت در بحث های دوطرفه در کلاس
- مطالعه دروس جلسات قبلی و آمادگی در پاسخ به سوالات مطرح شده در کلاس
- در صورت نیاز بررسی مقالات چاپ شده جدید و آمادگی جهت ارائه آنها در کلاس
- شرکت در امتحانات برنامه ریزی شده

● **شیوه آزمون و ارزیابی:**

- ارائه گزارش در مورد یک موضوع مرتبط با درس
- ارائه سمینارهای کلاسی
- امتحان درس
- 

● **منابع درس:**

منابع این درس بر پایه آخرین اطلاعات علمی در رشته شیمی فیزیک است که از پایگاه های علمی معتبر استخراج می گردد.

**1- Reviews in Computational Chemistry, Book by Kenny B. Lipkowitz**

**2- Machine Learning in Chemistry: The Impact of Artificial Intelligence**

**3- Applications of artificial intelligence in chemistry, Book by Hugh M. Cartwright**

هفته یکم

(1401/11/11 تا 1401/11/9)

معرفی پایگاه های معتبر اطلاعاتی علمی

هفته دوم

(1401/11/18 تا 1401/11/16)

چگونگی استفاده از پایگاه های معتبر اطلاعاتی علمی

هفته سوم

(1401/11/25 تا 1401/11/23)

معرفی مقالات معتبر علمی

هفته چهارم

(1401/02/2 تا 1401/11/30)

معرفی اجزاء یک مقاله علمی

هفته پنجم

(1402/12/7)

آموزش نگارش مقاله علمی

هفته ششم

(1401/12/14 تا 1401/12/9)

**Introduction to Quantum Chemistry**

هفته هفتم

(1401/12/21 تا 1401/12/16)

**Introduction to Quantum Chemistry**

هفته هشتم

(1401/12/23)

**Introduction to Computational Chemistry**

هفته نهم

(1402/1/20 تا 1402/1/16)

**Introduction to Computational Chemistry**

هفته دهم

(1402/1/27 تا 1402/1/22)

**Advanced Computational Chemistry**

هفته یازدهم

(1402/2/5 تا 1402/2/3)

آموزش نرم افزارهای شیمی محاسباتی

هفته دوازدهم

(1402/2/12 تا 1402/2/10)

آموزش نرم افزارهای شیمی محاسباتی

هفته سیزدهم)

(1402/2/19 تا 1402/2/17)

آموزش نرم افزارهای شیمی محاسباتی

هفته چهاردهم

(1402/2/26 تا 1402/2/24)

ادامه مبحث شیمی محاسباتی

هفته پانزدهم

(1402/3/5 تا 1402/3/3)

ارائه سمینار توسط دانشجویان

هفته شانزدهم

(1402/3/10)

ارائه سمینار توسط دانشجویان