

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 فر	مرتبه علمی: دانشیار	آدرس ایمیل: z_mahdavifar@scu.ac.ir
دانشکده: علوم	گروه: شیمی	نیمسال تحصیلی: دوم 98-99
دوره تحصیلی: دکتری	نام درس: مباحث نوین در شیمی فیزیک	تعداد واحد: 3 واحد
جایگاه درس در برنامه درسی دوره: درس اصلی		
هدف کلی:		
مرور، آشنایی و بررسی آشنایی با آخرین پیشرفت های علمی در شیمی فیزیک		
اهداف یادگیری:		
- آشنایی با پایگاه های معتبر علمی ، آشنایی با مقالات علمی - آشنایی با روش های محاسباتی و آشنایی با کد های محاسباتی - آشنایی با مبانی اولیه یادگیری ماشینی - کاربرد یادگیری ماشین در شیمی فیزیک و طراحی مواد جدید		
رفتار ورودی:		
آگاهی از اصول و مبانی یادگیری ماشین در شیمی فیزیک		
مواد و امکانات آموزشی:		
تدریس به صورت حضوری با استفاده از تابلو و استفاده از ویدیو پروژکتور و سایت کامپیوتر		
روش تدریس:		
- ارائه مطالب درسی جدید - پرسش و پاسخ و بحث دوطرفه با دانشجو، ارائه سمینار در ارتباط با درس توسط دانشجو		

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

(98/11/12 تا 98/11/5)

معرفی پایگاه های معتبر اطلاعاتی علمی

هفته دوم

(98/11/19 تا 98/11/12)

چگونگی استفاده از پایگاه های معتبر اطلاعاتی علمی

هفته سوم

(98/11/26 تا 98/11/19)

معرفی مقالات معتبر علمی

هفته چهارم

(98/12/3 تا 98/11/26)

معرفی اجزاء یک مقاله علمی

هفته پنجم

(98/12/10 تا 98/12/3)

آموزش نگارش مقاله علمی

هفته ششم

(98/12/17 تا 98/12/10)

Introduction to Machine Learning

هفته هفتم

(98/12/24 تا 98/12/17)

Introduction to Machine Learning

هفته هشتم

(99/1/23 تا 99/1/16)

Supervised (inductive) learning

هفته نهم

(99/1/30 تا 99/1/23)

Machine learning and chemistry

هفته دهم

(99/2/6 تا 99/1/30)

Machine learning and chemistry

هفته یازدهم

(99/2/13 تا 99/2/6)

Machine Learning and DFT calculations

هفته دوازدهم

(99/2/20 تا 99/2/13)

Machine Learning and DFT calculations

هفته سیزدهم

(99/2/27 تا 99/2/20)

Machine Learning Methods Applied to Materials Design

هفته چهاردهم

(99/3/3 تا 99/2/27)

Machine Learning Methods Applied to Materials Design

هفته پانزدهم

(99/3/10 تا 99/3/3)

ارائه سمینار توسط دانشجویان

هفته شانزدهم

(99/3/17 تا 99/3/10)

ارائه سمینار توسط دانشجویان