

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

نام و نام خانوادگی استاد: ولی اله نوبخت	مرتبه علمی: استادیار	آدرس ایمیل: v.nobakht@scu.ac.ir
دانشکده: علوم	گروه: شیمی	نیمسال تحصیلی: اول ۱۴۰۰-۱۳۹۹
دوره تحصیلی: دکتری	نام درس: واسط‌های فعالی	تعداد واحد: ۳ واحد
جایگاه درس در برنامه درسی دوره: درس اصلی		
<p style="text-align: center;">هدف کلی:</p> <p style="text-align: center;">آشنایی با شیوه‌های دستیابی به ساختار گونه‌های پیچیده - From Single crystal to structure</p>		
<p style="text-align: center;">اهداف یادگیری:</p> <p style="text-align: center;">- آشنایی با شیوه‌های کریستالیزاسیون - آشنایی با شیوه دستیابی به ساختار اولیه ترکیبات بلورین - بررسی انواع روش‌های تفسیر ساختاری</p>		
<p style="text-align: center;">رفتار ورودی:</p> <p style="text-align: center;">آشنایی با موضوعات مورد بحث درسی</p>		
<p style="text-align: center;">مواد و امکانات آموزشی:</p> <p style="text-align: center;">تدریس به صورت حضوری در کلاس درس با استفاده از ویدیو پروژکتور در صورت نیاز به صورت مجازی از طریق تدریس آنلاین یا تهیه فیلم‌های آموزشی</p>		
<p style="text-align: center;">روش تدریس:</p> <p style="text-align: center;">- ارائه مطالب درسی - پرسش و پاسخ و بحث دوطرفه با دانشجو - واگذاری تکالیف به دانشجویان جهت ارائه کوتاه</p>		

وظایف دانشجو:

- شرکت در جلسات درس
- بررسی و مشارکت در مباحث درسی
- بررسی پیوسته نرم افزارهای مربوطه و رفع اشکال
- انجام فعالیت های واگذار شده و ارائه کوتاه
- شرکت در امتحانات درسی

شیوه آزمون و ارزیابی:

- سنجش مستمر
- امتحان پایانی
- ارزیابی فعالیت های کلاسی

منابع درس:

Blatov, V.A., A.P. Shevchenko, and D.M. Proserpio, *Applied topological analysis of crystal structures with the program package ToposPro*. Crystal Growth & Design, 2014. **14**(7): p. 3576-3586

Macrae, C.F., et al., *Mercury 4.0: From visualization to analysis, design and prediction*. Journal of applied crystallography, 2020. **53**(1): p. 226-235.

And ...

هفته یکم

آشنایی با تک بلورها

شیوه های عملی آماده سازی بلورها جهت تعیین ساختار

هفته دوم

روش های بلورگیری ساختارهای پلیمری

هفته سوم

روش های بلورگیری ساختارهای پلیمری

هفته چهارم

آشنایی مقدماتی با شیوه تعیین ساختارهای بلوری

هفته پنجم

آشنایی با نرم افزار مرکوری

هفته ششم

آشنایی با نرم افزار مرکوری و بررسی ساختارهای منتخب

آشنایی با نرم افزار توپوز

هفته هفتم

آشنایی با نرم افزار توپوز

هفته هشتم

ساده سازی ساختارهای پیچیده با نرم افزار توپوز

هفته نهم

تعیین توپولوژی ساختاری با نرم افزار توپوز

هفته دهم

آشنایی با نرم افزار powdercell

بررسی و تفسیر الگوهای پراش اشعه ایکس پودری ساختارهای بلوری

هفته یازدهم

آشنایی با نرم افزار powdercell

بررسی و تفسیر الگوهای پراش اشعه ایکس پودری ساختارهای بلوری

هفته دوازدهم

آشنایی با نرم افزار Olex

هفته سیزدهم

آشنایی با نرم افزار Diamond

هفته چهاردهم

آشنایی با نرم افزار X'powder

هفته پانزدهم

آشنایی با نرم افزار X'pert

بررسی فایل ساختارهای بلوری با نرم افزارهای مختلف

هفته شانزدهم

بررسی فایل ساختارهای بلوری با نرم افزارهای مختلف