

بسمه تعالی

طرح درس مباحث نوین در شیمی معدنی

مقطع: کارشناسی ارشد

مدرس: عاتکه سادات ترحمی

دانشگاه سمنان، گروه شیمی

درس اشتراکی: مباحث ذکر شده در جلسات یک ساعته در هر هفته ارائه می شود

هفته اول	جلسه اول	آشنایی با پایگاه های ثبت داده های کریستالوگرافی
هفته دوم	جلسه دوم	آشنایی با فایل اطلاعات کریستالوگرافی (CIF) و تفسیر داده های آن
هفته سوم	جلسه سوم	آشنایی با فایل اطلاعات کریستالوگرافی (CIF) و تفسیر داده های آن
هفته چهارم	جلسه چهارم	چگونگی ارزیابی کیفیت داده های کریستالوگرافی (CheckCIF)
هفته پنجم	جلسه پنجم	جدول بندی و تفسیر نتایج حاصل از بلورنگاری پرتوی ایکس با استفاده از نرم افزارها enCIF و دیگر نرم افزارهای IUCR
هفته ششم	جلسه ششم	آشنایی با نرم افزار Mercury برای تفسیر و بررسی نتایج حاصل از CIF
هفته هفتم	جلسه هفتم	آشنایی با نرم افزار Mercury برای تفسیر و بررسی نتایج حاصل از CIF
هفته هشتم	جلسه هشتم	رسم ساختار مولکولی در Mercury
هفته نهم	جلسه نهم	بررسی پیوندهای هیدروژنی و دیگر برهم کنش های بین مولکولی در Mercury
هفته دهم	جلسه دهم	بررسی انواع انباشتگی ساختاری در Mercury
هفته یازدهم	جلسه یازدهم	آشنایی با نرم افزار PLATON برای رسم ساختار مولکولی ترکیبات به صورت بیضوی های گرمایی (ORTEP)
هفته دوازدهم	جلسه دوازدهم	آشنایی با نرم افزار Diamond
هفته سیزدهم	جلسه سیزدهم	بررسی برهم کنش های بین مولکولی با استفاده از آنالیز سطح هرشفلد
هفته چهاردهم	جلسه چهاردهم	آشنایی با نرم افزار CrystalExplorer جهت محاسبه سطوح هرشفلد
هفته پانزدهم	جلسه پانزدهم	تفسیر نتایج حاصل از آنالیز سطح هرشفلد
هفته شانزدهم	جلسه شانزدهم	تفسیر نتایج حاصل از آنالیز سطح هرشفلد