

بسمه تعالی

طرح درس مباحث خاص در شیمی معدنی

مقطع: دکتری

مدرس: عاتکه سادات ترحمی

دانشگاه سمنان، گروه شیمی

مقدمه ای بر شیمی محاسباتی	جلسه اول	هفته اول
آشنایی با روش های مختلف محاسباتی	جلسه دوم	هفته دوم
روش های مکانیک کوانتومی	جلسه سوم	
روش هاتری-فاک	جلسه چهارم	هفته سوم
روش های نیمه تجربی	جلسه پنجم	هفته چهارم
روش تابع چگال	جلسه ششم	
آشنایی با نرم افزار Gaussian	جلسه هفتم	هفته پنجم
آشنایی با نرم افزار Gaussian	جلسه هشتم	هفته ششم
آشنایی با نرم افزار Gaussview	جلسه نهم	
آشنایی با نرم افزار Gaussview	جلسه دهم	هفته هفتم
آشنایی با دستورهای مختلف برای انجام محاسبات با Gaussian	جلسه یازدهم	هفته هشتم
آشنایی با دستورهای مختلف برای انجام محاسبات با Gaussian	جلسه دوازدهم	
انجام محاسبات بهینه سازی ساختار مولکولی و تفسیر نتایج	جلسه سیزدهم	هفته نهم
انجام محاسبات فرکانس های ارتعاشی و تفسیر نتایج	جلسه چهاردهم	هفته دهم
انجام محاسبات NBO و تفسیر نتایج	جلسه پانزدهم	
انجام محاسبات طیف سنجی UV-Vis و تفسیر نتایج	جلسه شانزدهم	هفته یازدهم
انجام محاسبات طیف سنجی NMR و تفسیر نتایج	جلسه هفدهم	هفته دوازدهم
انجام محاسبات و نمایش اوربیتال های مولکولی و سطوح انرژی آنها	جلسه هجدهم	
آشنایی با خطاهای گوسین	جلسه نوزدهم	هفته سیزدهم
آشنایی با نرم افزار AIM2000	جلسه بیستم	هفته چهاردهم
فایل ورودی AIM	جلسه بیست و یکم	
روش محاسبه نقاط بحرانی	جلسه بیست و دوم	هفته پانزدهم
تفسیر برهمکنش های بین مولکولی از جمله پیوندهای هیدروژنی به وسیله محاسبات AIM	جلسه بیست و سوم	هفته شانزدهم