



به نام ایزدوانا

(کاربرگ طرح درس)

تاریخ به روز رسانی: ۹۹/۴/۲۴

دانشگاه شیمی

نیمسال اول/دوم سال تحصیلی ۹۸-۹۷

نام درس		فارسی: کاربرد رایانه در شیمی		تعداد واحد: نظری ۱		مقطع: کارشناسی <input checked="" type="checkbox"/> کارشناسی ارشد <input type="checkbox"/> دکتری <input type="checkbox"/>	
		لاتین: The Application of Computer in Chemistry		پیش نیازها و هم نیازها: از ترم سوم به بعد			
مدرس/مدرسین: سیده مریم سجادی		شماره تلفن اتاق: ۰۲۳-۳۱۵۳-۲۸۲۳					
پست الکترونیکی:		sajjadi@semnan.ac.ir ; lmsajjadi@gmail.com		منزلگاه اینترنتی:		http://sajjadi.profile.semnan.ac.ir/#about_me	
برنامه تدریس در هفته و شماره کلاس: چهارشنبه ساعت ۱۳-۱۵							
اهداف درس: آشنایی عملی دانشجویان با روش های تجزیه کلاسیک							
امکانات آموزشی مورد نیاز: سایت کامپیوتر							
نحوه ارزشیابی		فعالیت های کلاسی و آموزشی		ارزشیابی مستمر (کوئیز)		امتحان میان ترم	
درصد نمره		۵۰		-		۵۰	
منابع و مآخذ درس		1. Some articles in Journal of Chemical Education		2. کاربرد کامپیوتر در شیمی، عبدالحسین ناصری و همکاران- انتشارات دانشگاه تبریز ۱۳۹۵			

بودجه بندی درس

توضیحات	مبحث	شماره هفته آموزشی
در صورت نیاز دانشجویان	آشنایی با کامپیوتر و محیط Windows	۱
	معرفی زبانهای برنامه نویسی و آموزش Excel برای برنامه نویسی در جلسات آینده	۲
	شبیه سازی تیتراسیون اسید و باز قوی تک پروتونه و رسم نمودار	۳
	مشتق گیری عددی و استفاده از آن در منحنی های pH متری	۴
	شبیه سازی کسر مولی اجزاء در گیر در تعادلات اسیدهای چند پروتونه در pH های مختلف	۵
	شبیه سازی سینتیک مرتبه اول	۶
	شبیه سازی واکنشهای سینتیکی پی در پی	۷
	شبیه سازی توزیع سرعت مولکولها در حالت گازی در دماهای مختلف بر اساس معادله ماکسول-بولتزمن	۸
	شبیه سازی طیف نشری عناصر نظیر هیدروژن و نئون	۹
	شبیه سازی طیف نشری عناصر نظیر هیدروژن و نئون	۱۰
	بیان اصول رگرسیون خطی و تعیین مدل درجه واکنشهای سینتیکی	۱۱
	محاسبه ثابت سینتیک و خطای مربوطه به آن توسط رگرسیون خطی	۱۲
	محاسبه پارامترهای غیر خطی توسط Solver	۱۳

	محاسبه پارامترهای غیر خطی توسط Solver	۱۴
	آشنایی با ماتریسها و عملگرهای آنها و رگرسیون چند جمله ای	۱۵
عملی	ارزیابی دانشجویان و رفع اشکال	۱۶