

تاریخ: ۲۱/۹/۸۷  
شماره: ۳۱۶۲۰  
پست: .....



دانشگاه آزاد اسلامی  
سازمان مرکزی

باسمه تعالی

از: سازمان مرکزی دانشگاه  
به: واحدهای دانشگاهی مجری دوره کارشناسی ارشد ناپیوسته رشته های  
شیمی کاربردی، شیمی تجزیه، شیمی معدنی، شیمی فیزیک و شیمی آلی

با سلام

به پیوست سرفصل درس شیمی محاسباتی به ارزش ۳ واحد نظری  
ارسال و اعلام می دارد بر اساس مصوبه جلسه ۱۱۶ شورای برنامه ریزی  
آموزشی و درسی دانشگاه ارائه این درس به عنوان درس اختیاری در دوره  
کارشناسی ارشد رشته های شیمی کاربردی، شیمی تجزیه، شیمی معدنی،  
شیمی فیزیک و شیمی آلی بلامانع است. (۹۱۰/۱)

دکتر حسین چی

معاون آموزشی دانشگاه آزاد اسلامی

## شیمی محاسباتی



پیشنیاز: شیمی کوانتوم

تعداد واحد: ۳ واحد

فصل اول: مقدمه

محاسبات شیمیایی

فصل دوم: ساختار الکترونی مولکولها

مقدمه، تقریب بورن اوپنهاইمر، سطوح انرژی پتانسیل، شکل های هندسی، بهینه کردن شکلهای هندسی، ترکیب خطی اوربیتالهای اتمی، تصویر اوربیتالهای مولکولی، نظریه اوربیتال مولکولی، تابعهای موج خود سازگار، حالتهاى طیفی، همبستگی الکترون.

فصل سوم: روش های نیمه تجربی

نظریه اوربیتال مولکولی نیمه تجربی

AM1, PM3, MNDO, MINDO, MINDO3, ZINDO

فصل چهارم: روش های محاسباتی.

HF, Post HF (MP n CI, QCI, CC, BD), DFT (Local, non-Local, hybrid, metal-

فصل پنجم: مجموعه های پایه.

مجموعه های پایه رایج، توابع قطبیده، توابع نفوذی.

فصل ششم: آشنایی با نرم افزارهای رایج.

HYPERChem, Chemoffics, Gaussian, Gaussian View, Gamess, ...

فصل هفتم: تجزیه و تحلیل یک مقاله.

**Additional reading :**

1. A. Szabo and N. Ostlund: *Modern Quantum Chemistry, Last Edition.*

2. C. J. Cramer: *Essentials Of Computational Chemistry-theories and model. , Last Edition.*

3. F. Jensen: *Introduction to Computational Chemistry, Last Edition.*

4. T. Helgaker, P. Jorgensen, J. Olsen: *Molecular Electronic-Structure Theory, Last Edition.*

۵. نظریه تابعیت چگالی، مجید منجمی و همکاران، انتشارات اندیشه سرا، ۱۳۸۶.

۶. برنامه گرافیک مولکولی، هامفری، ازوالی ویتس و همکاران، ترجمه مجید منجمی و همکاران، انتشارات قلم فرزادگان، ۱۳۸۴. مد ۸۷