



جمهوری اسلامی ایران
وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
دانشگاه ملی مهارت

معاونت آموزشی

مرکز ارتقاء مهارت و صلاحیت حرفه‌ای

دوره ارتقای شایستگی

مدرسای مولکولی و شیمی نظری با استفاده از

Quantum ESPRESSO

گروه حرفه‌ای: مهندسان شیمی

ساعت دوره: ۳۰ ساعت

رشته تحصیلی مرتبط با دوره: شیمی، فیزیک، مهندسی مواد، مهندسی مکانیک، مهندسی

برق، علوم کامپیوتر



QUANTUM ESPRESSO



کد دوره:

۵	۰	۵	۶	۱	۰	۵	۴	۱	۲
شناسه شایستگی	سطح صلاحیت	سطح	شناسه حرفه	ISCO-08					
		ISCED							

هدف کلی:

فرد توانایی لازم را برای انجام وظایف مشخص و کمی پیچیده در معرض تغییر، مدلسازی مولکولی و شیمی نظری با استفاده از Quantum ESPRESSO که نسبتاً قابل پیش بینی می باشد و کارها نیازمند استقلال و انتخاب های محدود هست را دارا می باشد.

این دوره برای چه کسانی مناسب است؟

دانشجویان و فارغ التحصیلان رشته های مرتبط با مواد، شیمی، فیزیک و مهندسی
سایر شاغلین در حوزه مواد، شیمی، فیزیک و مهندسی

چه کسانی این دوره را می توانند ارائه دهند؟

مدرسان دانشگاه ملی مهارت که تجربه مفید را در گروه های شیمی نظری، فیزیک حالت جامد، مهندسی مواد که تخصصشان در زمینه محاسبات DFT است، را دارند.

متخصصین بازار کار در حوزه مدلسازی مولکولی و شیمی نظری با استفاده از Quantum ESPRESSO

ردیف	فرد پس از موفقیت در دوره قادر به انجام چه کارهایی می باشد؟
۱	آماده سازی سیستم های فیزیکی و شیمیایی
۲	انجام محاسبات اولیه ساختار الکترونیکی
۳	بهینه سازی هندسی
۴	محاسبه و تحلیل خواص مکانیکی و ارتعاشی
۵	محاسبه خواص الکترونیکی و نوری
۶	محاسبات دینامیک مولکولی (MD) مبتنی بر DFT (Ab-initio MD)
۷	تحلیل و تجسم نتایج
۸	عیب یابی و بهینه سازی محاسبات
۹	کار با سیستم های موازی
۱۰	تفسیر نتایج و ارتباط با کاربردهای عملی
جمع ساعات نیاز به آموزش ۱۰ ساعت تئوری ۲۰ ساعت عملی	

فرد باتوجه به آماده شدن برای شغل مرتبط با دوره می بایست حداقل به ۲ مهارت نرم شغلی ذیل تسلط پیدا کند:





خدمات مشتری

مشتری مداری

مدیریت شکایات

توسعه فردی

کار تیمی

کار در تیم ها یا گروه ها

تعامل با همکاران

احترام به افکار و نظرات دیگران در گروه

درک و مشارکت در اهداف سازمان

برنامه ریزی و تصمیم گیری با دیگران و حمایت از اهداف

ایجاد مشارکت و ممانعتی انواع تجربه ها، کار در جهت اجماع گروهی در تصمیم گیری

ارزش گذاری به ورودی دیگران

پذیرش بازخورد

منتوری و مربیگری و بازخورد دادن

بسیج گروهی برای افزایش کارایی

همکاری فارغ از جنسیت، نژاد، مذهب یا اقناع سیاسی در سنین مختلف

دانستن نحوه تعریف نقش به عنوان بخشی از تیم

خود مدیریتی

داشتن چشم انداز و اهداف شخصی

ارزیابی و نظارت بر عملکرد خود

داشتن دانش و اطمینان به ایده ها و چشم اندازهای خود

بیان ایده ها و چشم اندازهای شخصی

قبول مسئولیت

فناوری

داشتن طیف وسیعی از مهارت های اساسی فناوری اطلاعات

استفاده از IT به عنوان یک ابزار مدیریتی

استفاده از IT برای سازماندهی داده ها

تمایل به یادگیری مهارت های جدید IT

داشتن ظرفیت فیزیکی برای استفاده از فناوری

انطباق پذیری

انعطاف پذیری

سازگاری

قاب آوری

مدیریت استرس

هوش هیجانی

خود آگاهی

خودتنظیمی

آگاهی اجتماعی

خلاقیت

تفکر واگرا

تفکر خلاق

نقشه برداری ذهنی

بینش

بصیرت

درون بینی

نوآوری

آزمایش کردن

پرسش کردن

طراحی

مدیریت زمان

تعیین هدف

اولویت بندی

خود راه اندازی

برنامه ریزی

تصمیم سازی

تمرکز

نمایندگی

مدیریت استرس

کنار آمدن

سازماندهی

روش اجرا:

شرکت کنندگان ابتدا باید از طریق یک محتوای خودآموز، مباحث مربوطه را بیاموزند. این محتوا شامل مطالعه متون، سوالات، آزمون‌ها، فیلم‌های آموزشی، سخنرانی‌ها و ابزارهای تعاملی است.

– پس از یادگیری، شرکت کنندگان باید یک آزمون دانش را گذرانده تا میزان یادگیری آن‌ها ارزیابی شود.

دانش:

- مبانی مکانیک کوانتومی و تئوری تابع چگالی
- مفاهیم اساسی فیزیک حالت جامد و شیمی کوانتومی .
- مفاهیم شبه پتانسیل و توابع موج تخت
- ساختار نرم افزار Quantum ESPRESSO
- فرمت فایل‌های ورودی و خروجی
- مبانی دینامیک مولکولی

دانش



روش اجرا:

پس از موفقیت در آزمون، شرکت کنندگان باید ضمن انجام کار عملی یک بخش از پروژه خود را با نظارت مدرس دوره تکمیل کنند.

مهارت:

- کار با سیستم عامل لینوکس و خط فرمان
- نصب و پیکربندی (Quantum ESPRESSO) اختیاری
- نوشتن و ویرایش اسکریپت‌های ورودی
- اجرای محاسبات و مدیریت آن‌ها
- پس پردازش داده‌ها
- تجسم داده‌ها
- تحلیل نتایج
- برنامه‌نویسی مقدماتی پایتون (برای تحلیل داده)

مهارت

روش اجرا:

کاربرد شایستگی: در طول هر صلاحیت/شایستگی، داوطلبان به تفکر درباره جنبه‌های انسانی، اخلاقی و اجتماعی طراحی پروژه پرداخته تا پروژه‌هایی پایدار و موفق ایجاد کنند.

کاربرد شایستگی:

- دقت و توجه به جزئیات
- تفکر سیستمی و حل مسئله
- صبر و پشتکار
- رویکرد نقادانه
- کنجکاوی علمی
- مسئولیت پذیری

کاربرد شایستگی

مشاهده	شکل ارزیابی
محصول و/ یا فرآیند حین کار	مصادیق
چک لیست، مقایسه رتبه بندی، دفتر گزارش روزانه، کتاب مهارت، دفتر خاطرات تجارب کاری، تحلیل فعل و انفعال، ارزیابی های همکار، تحلیل های سری زمانی	نوع ابزار
۱۰	سهم این مرحله از آزمون از ۱۰۰
آزمون های مهارت	شکل ارزیابی
نمونه کار، نمونه مهارت، پروژه عملی	مصادیق
چک لیست، مقیاس های رتبه بندی، وظایف پژوهشی، تکالیف	نوع ابزار
۵۰	سهم این مرحله از آزمون از ۱۰۰
شبیه سازی ها	شکل ارزیابی
شبیه سازی، مشاهده محصول و/ یا فرآیند	مصادیق
مطالعه موردی، شبیه سازه ها، آزمون های تطبیقی کامپیوتر، عیب یابی	نوع ابزار
۱۰	سهم این مرحله از آزمون از ۱۰۰
پرسش	شکل ارزیابی
شفاهی، کتبی، تحقیقی	مصادیق
منابع پاسخ (پاسخ کوتاه، توضیح محدود، توضیح گسترده) در مقابل انتخاب گزینه جواب (انتخاب چند گزینه ای، جورکردنی، کامل کردنی، صحیح غلط، پاسخ جایگزین، شناسایی)، امتحان شفاهی و خود ارزیابی	نوع ابزار
۳۰	سهم این مرحله از آزمون از ۱۰۰

شرایط دریافت گواهینامه این دوره:

- موفقیت در آزمون تئوری و عملی ارائه شده در دوره
- کسب دست کم نمره ۴۰ در درس های تئوری و نمره ۶۰ در درس های عملی
- افرادی که میانگین نمرات آنان در هر یک از دروس تئوری و عملی به حدنصاب ۶۰ نرسد، مردود اعلام می گردد. - حداکثر تا یکسال و فقط برای دو بار فرصت دارند در آزمون تجدیدی شرکت نمایند و چنانچه موفق گردند گواهینامه آنان صادر می شود.
- حضور مستمر و فعال در کالس های عملی و تئوری.

تجهیزات مورد نیاز آموزش

– سیستم کامپیوتر

ابزار مورد نیاز آموزش

– نرم افزارهای مرتبط با دوره

راههای دسترسی به دوره:

–وب سایت مرکز ارتقاء مهارت و صلاحیت حرفه ای

–با مراجعه به وب سایت و حضوری کلیه دانشکده و آموزشکده های سراسر کشور