



ประมวลการสอน
ภาค ต้น ปีการศึกษา 2567

1. คณะ วิทยาศาสตร์ ศรีราชา

มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ วิทยาเขตศรีราชา

2. รหัสวิชา 01403345 ชื่อวิชา (ไทย) การจำลองแบบด้วยคอมพิวเตอร์ในวิชาเคมีและวิศวกรรมเคมี
จำนวนหน่วยกิต 3(2-3-6) (อังกฤษ) Computer Simulation in Chemistry and Chemical Engineering
วิชาพื้นฐาน 01403343 อุณหพลศาสตร์เชิงสถิติ
หมู่ 800 บรรยาย วันศุกร์ เวลา 13.00 – 15.00 น. ห้อง 25612
หมู่ 830 ปฏิบัติการ วันศุกร์ เวลา 15.00 – 18.00 น. ห้อง 25612

3. ผู้สอน ดร. มาลินี พรหมชิตแก้ว

E-mail: malinee.prom@ku.th, malinee.prom@live.ku.th

4. การให้นิสิตเข้าพบและให้คำแนะนำนอกเวลาเรียน

ห้องพักอาจารย์เคมี อาคาร 26 คณะวิทยาศาสตร์ ศรีราชา ชั้น 8 ห้อง 26806/8

MS team “67_01403345 Computer Simulation in Chemistry and Chemical Engineering”

รหัสชั้นเรียน 1mmhlcx

5. จุดประสงค์ของวิชา

เพื่อให้นิสิตสามารถใช้โปรแกรมประยุกต์ทางเคมีคอมพิวเตอร์ในการศึกษาระบบทางเคมีต่าง ๆ ได้ ซึ่งจะเป็นประโยชน์กับงานวิจัยทางเคมี

6. ผลลัพธ์การเรียนรู้ระดับรายวิชา (Course-level Learning Outcomes: CLOs)

เมื่อสิ้นสุดการเรียนการสอนแล้ว นิสิตที่สำเร็จการศึกษาในรายวิชา สามารถ (CLOs)

1. CLO๑ บูรณาการความรู้พื้นฐานเทคนิคและระเบียบวิธีการใช้งานโปรแกรมประยุกต์ทางเคมีคอมพิวเตอร์ในการศึกษาระบบทางเคมีต่าง ๆ และอธิบายความก้าวหน้าใหม่ของสาขาเคมีเชิงฟิสิกส์ได้
2. CLO๒ สามารถนำความรู้ทางทฤษฎี วิเคราะห์และอธิบายผลงานวิจัยความรู้พื้นฐานเทคนิคและระเบียบวิธีการใช้งานโปรแกรมประยุกต์ทางเคมีคอมพิวเตอร์ในการศึกษาระบบทางเคมีต่าง ๆ อย่างมีเหตุผลตามหลักการ
3. CLO๓ สามารถวิเคราะห์และสังเคราะห์ความรู้พื้นฐานเทคนิคและระเบียบวิธีการใช้งานโปรแกรมประยุกต์ทางเคมีคอมพิวเตอร์เพื่ออธิบายผลงานใหม่หรือพัฒนางานใหม่ที่สอดคล้องกับสถานการณ์ปัจจุบัน เพื่อนำไปสู่การสร้างนวัตกรรม
4. CLO๔ ประยุกต์ความรู้ทางคณิตศาสตร์และสถิติ ทักษะภาษาอังกฤษ และสามารถใช้ภาษาที่เหมาะสม เพื่อการค้นคว้าและอธิบายงานความรู้พื้นฐานเทคนิคและระเบียบวิธีการใช้งานโปรแกรมประยุกต์ทางเคมีคอมพิวเตอร์ได้อย่างมีประสิทธิภาพ
5. CLO๕ มีวินัย มีความซื่อสัตย์ เคารพสิทธิของผู้อื่น มีจิตอาสา มีจรรยาบรรณวิชาการ และปฏิบัติตามระเบียบที่กำหนด
6. CLO๖ มีความรับผิดชอบต่องานที่ได้รับมอบหมายและพัฒนาตนเอง และสามารถทำงานร่วมกับผู้อื่นได้

7. คำอธิบายรายวิชา

ทฤษฎีพันธะเคมี ระเบียบวิธีเอมพิริกัล เซมิเอมพิริกัล และนอนเอมพิริกัล หลักการและการประยุกต์ของทฤษฎีโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์ และการจำลองแบบด้วยคอมพิวเตอร์ในวิชาเคมีและวิศวกรรมเคมี โดยมีการทดลองโครงการตามที่กำหนด (Theories of chemical bonding, empirical, semi-empirical and non-empirical methods, principles and applications of electronic structure theory, computer simulation techniques in solving chemistry and chemical engineering problems, assigned projects included.)

8. คำอธิบายรายวิชา

บรรยาย

(30 ชั่วโมง)

- 1) บทนำเกี่ยวกับเคมีคอมพิวเตอร์ (Introduction to Computational Chemistry)
- 2) กลศาสตร์แบบดั้งเดิมและกลศาสตร์ควอนตัม (Classical mechanics and quantum mechanics)
- 3) เบซิส เซต (Basis Sets)
- 4) ระเบียบวิธีเอมพิริกัล เซมิเอมพิริกัล และนอนเอมพิริกัล (Theories of empirical, semi-empirical, and non-empirical)
- 5) การจำลองแบบด้วยคอมพิวเตอร์ในวิชาเคมีและวิศวกรรมเคมี (Computer simulation techniques in solving chemistry and chemical engineering problems)

ปฏิบัติการ

(45 ชั่วโมง)

- 1) ความรู้เบื้องต้นเกี่ยวกับโปรแกรมประยุกต์ทางเคมีคอมพิวเตอร์ (Program for Computational Chemistry)
- 2) การคำนวณหาพลังงานยึดเหนี่ยว (Binding Energy) ของระบบพันธะไฮโดรเจน (Hydrogen Bond System)
- 3) การคำนวณหาค่าพลังงานและศึกษาอิทธิพลของเบซิส เซต
- 4) การคำนวณหาค่าพลังงานด้วยระเบียบวิธีต่างๆ
- 5) การคำนวณหาค่า NMR และ Frequency (NMR and Frequency Calculations)
- 6) การคำนวณหาโครงสร้างที่เสถียรและพื้นผิวพลังงานที่มีศักย์ภาพ (Stability of Molecules and Potential Energy Surface)
- 7) การคำนวณหาช่องว่างระดับพลังงาน HOMO-LUMO ของพอลิเมอร์นำไฟฟ้า (HOMO-LUMO Energy Gap of Conducting Polymer)
- 8) การคำนวณหาโครงสร้างที่เหมาะสมในสถานะพื้นและสถานะกระตุ้น (Ground and Excited State Optimization)
- 9) การคำนวณหาค่าการดูดกลืนแสงและการคายแสงและศึกษาอิทธิพลของตัวทำละลาย (Absorption /Emission Properties and Solvent Effect)
- 10) การศึกษาปฏิบัติการเคมีตามโครงการวิจัยที่สนใจ (Project for Computational Chemistry)

9. วิธีสอนที่เน้นผู้เรียนเป็นสำคัญ

การบรรยาย อภิปราย ปฏิบัติการ และให้นิสิตศึกษาค้นคว้าด้วยตนเอง ทำรายงาน นำเสนอหน้าชั้นเรียนและการทำโครงการวิจัย โปรแกรมการคำนวณทางเคมีคอมพิวเตอร์

10. อุปกรณ์และสื่อการสอน

คอมพิวเตอร์ เครื่องฉายข้ามศีรษะ เอกสารประกอบคำบรรยาย เอกสารประกอบการเรียนการสอน โปรแกรมการคำนวณทางเคมีคอมพิวเตอร์

11. การวัดผลสัมฤทธิ์ในการเรียน

11.1	การสอบ	
	- สอบข้อเขียนกลางภาค	25
	- สอบข้อเขียนปลายภาค	25
	- สอบปฏิบัติการ	10
11.2	การเข้าห้องเรียนและการมีส่วนร่วมในชั้นเรียน	5
11.3	แบบฝึกหัดและการบ้าน	5
11.4	รายงานปฏิบัติการ	15
11.5	การนำเสนอโครงงานวิจัยและรายงาน	15
	รวม	100

โดยมีเกณฑ์การประเมินการให้คะแนนรายงานปฏิบัติการ (Rubric scores) ดังแสดงในตาราง

หัวข้อ		ระดับ 1 (น้อย)	ระดับ 2 (ปานกลาง)	ระดับ 3 (ดี)
1. การรายงานผลการ คำนวณ (5)	คะแนนเต็ม รายละเอียด	3 คะแนน เนื้อหาไม่สมบูรณ์และไม่ ถูกต้อง > 5 จุด	4 คะแนน เนื้อหาไม่สมบูรณ์และไม่ ถูกต้อง 1-4 จุด	5 คะแนน เนื้อหาถูกต้องและครบ สมบูรณ์
2. วิเคราะห์ผลการคำนวณ (3)	คะแนนเต็ม รายละเอียด	2 คะแนน วิเคราะห์ผลการคำนวณไม่ ครบ > 3 จุด	2.5 คะแนน วิเคราะห์ผลการคำนวณไม่ ครบ 1-2 จุด	3 คะแนน วิเคราะห์ผลการคำนวณ ครบถ้วน
3. สรุปผลการคำนวณ (1)	คะแนนเต็ม รายละเอียด	0 คะแนน ไม่สรุปผลการคำนวณ	0.5 คะแนน สรุปผลการคำนวณไม่ครบ	1 คะแนน สรุปผลการคำนวณ ครบถ้วน
4. ความรับผิดชอบ (1)	คะแนนเต็ม รายละเอียด	0 คะแนน ไม่ส่งงานภายในวันและ เวลาที่กำหนด	0.5 คะแนน ส่งงานภายในวันที่กำหนด แต่ไม่ตามเวลาที่กำหนด	1 คะแนน ส่งงานภายในวันและ เวลาที่กำหนด
5. การส่งไฟล์เก็บข้อมูลการ คำนวณ .log (5)	คะแนนเต็ม รายละเอียด	3 คะแนน ไม่ส่งไฟล์ .log หรือ ไฟล์ .log ไม่ถูกต้อง > 3 ไฟล์	4 คะแนน ไม่ส่งไฟล์ .log หรือ ไฟล์ .log ไม่ถูกต้อง 1-2 ไฟล์	5 คะแนน ไฟล์ .log ครบถ้วนและ สมบูรณ์
รวมคะแนน		8 คะแนน	11.5 คะแนน	15 คะแนน

โดยมีเกณฑ์การประเมินการให้คะแนนการนำเสนอโครงงานวิจัยและรายงาน (Rubric scores) ดังแสดงในตาราง

หัวข้อ		ระดับ 1 (น้อย)	ระดับ 2 (ปานกลาง)	ระดับ 3 (ดี)
1. เนื้อหารายงาน (3)	คะแนนเต็ม รายละเอียด	2 คะแนน เนื้อหาไม่สมบูรณ์และไม่ ถูกต้อง > 5 จุด	2.5 คะแนน เนื้อหาไม่สมบูรณ์และไม่ ถูกต้อง 1-4 จุด	3 คะแนน เนื้อหาถูกต้องและครบ สมบูรณ์
2. เอกสารอ้างอิง (1)	คะแนนเต็ม รายละเอียด	0 คะแนน ไม่มีเอกสารอ้างอิง	0.75 คะแนน มีเอกสารอ้างอิง แต่ไม่ครบ สมบูรณ์	1 คะแนน มีเอกสารอ้างอิง ถูกต้อง สมบูรณ์

3. ความรับผิดชอบ (1)	คะแนนเต็ม รายละเอียด	0.5 คะแนน ไม่ส่งงานภายในวันและ เวลาที่กำหนด	0.75 คะแนน ส่งงานภายในวันที่กำหนด แต่ไม่ตามเวลาที่กำหนด	1 คะแนน ส่งงานภายในวันและ เวลาที่กำหนด
4. ความถูกต้องของ PowerPoint (1)	คะแนนเต็ม รายละเอียด	0.5 คะแนน เนื้อหาไม่สมบูรณ์และไม่ ถูกต้อง > 5 จุด	0.75 คะแนน เนื้อหาไม่สมบูรณ์และไม่ ถูกต้อง 1-4 จุด	1 คะแนน เนื้อหาถูกต้องและครบ สมบูรณ์
5. ความสามารถในการ ถ่ายทอด (2)	คะแนนเต็ม รายละเอียด	1.5 คะแนน ถ่ายทอดโดยขาดความ เข้าใจ และอ่านเอกสาร	1.75 คะแนน ถ่ายทอดได้ปานกลาง และ อ่านเอกสารเป็นบางครั้ง	2 คะแนน ถ่ายทอดได้ดี เนื้อหา ต่อเนื่อง
6. ความรู้ความเข้าใจใน เนื้อหาที่นำเสนอ (2)	คะแนนเต็ม รายละเอียด	1.5 คะแนน เข้าใจเนื้อหาน้อย ตอบ คำถามไม่ได้ > 3 ข้อ	1.75 คะแนน เข้าใจเนื้อหาปานกลาง ตอบคำถามไม่ได้ 3 ข้อ	2 คะแนน เข้าใจเนื้อหาปานกลาง ตอบคำถามได้ทุกข้อ
7. การฝึกปฏิบัติการ โครงงานวิจัยที่สนใจ (5)	คะแนนเต็ม รายละเอียด	4 คะแนน การคำนวณและวิเคราะห์ ผลการคำนวณไม่ครบ ตามที่กำหนด > 3 โครงสร้าง	4.5 คะแนน ทำการคำนวณและ วิเคราะห์ผลการคำนวณไม่ ครบตามที่กำหนด 3 โครงสร้าง	5 คะแนน ทำการคำนวณและ วิเคราะห์ผลการคำนวณ ครบและถูกต้องสมบูรณ์
รวมคะแนน		10 คะแนน	12.75 คะแนน	15 คะแนน

12. การประเมินผลการเรียน

โดยวิธีอิงเกณฑ์และอิงกลุ่มร่วมกัน โดยระดับคะแนนเป็น A, B⁺, B, C⁺, C, D⁺, D และ F

13. เอกสารอ่านประกอบ

- 1) Jensen, F., Introduction to Computational Chemistry. 2nd Ed., John Wiley & Sons, 2007
- 2) Cramer, C. J., Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models. John Wiley & Sons, LTD, West Sussex, 2002
- 3) เอกสารประกอบการเรียนการสอน รายวิชา 01403345 การจำลองแบบด้วยคอมพิวเตอร์ในวิชาเคมีและวิศวกรรมเคมี / ผศ. ดร.มาลินี พรหมขัติแก้ว

งานวิจัยที่เพิ่มเติมใช้ในการเรียนการสอน

- 1) Promkatkaew M., S. Suramitr, T. Karpkird, M. Ehara, and S. Hannongbua. 2013, Absorption and Emission Properties of Various Substituted Cinnamic Acids and Cinnamates, Based on TDDFT Investigation. *International Journal of Quantum Chemistry*, 113, 542–554. (<https://doi.org/10.1002/qua.24169>)
- 2) Promkatkaew M., D. Gleeson, S. Hannongbua and M. P. Gleeson, 2014, Skin Sensitization Prediction Using Quantum Chemical Calculations: A Theoretical Model for the S_MAr Domain. *Chemical Research in Toxicology*, 27, 51–60. (<https://doi.org/10.1021/tx400323e>)
- 3) Promkatkaew M., S. Suramitr, T. Karpkird, S. Wanichweacharungrang, M. Ehara, and S. Hannongbua. 2014, Photophysical and Photochemical Properties of the Substituted Cinnamates and Cinnamic Acids for UVB Blocking Function: Effect of Hydroxy, Nitro, and Fluoro Substitutions at *ortho*-, *meta*-, and *para*-Positions. *Photochemical and Photobiological Sciences*, 13, 583-594. (<https://doi.org/10.1039/C3PP50319D>)

- 4) Chaichana K., N. Phutlaprungreang, L. Chaicharoenwimolkul, **M. Promkatkaew**, S. Kongsriprapan, **2019**, A selective fluorescence probe based on naphthalene for the detection of barium(II). Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 207, 118-122. (<https://doi.org/10.1016/j.saa.2018.09.006>)
- 5) **Promkatkaew M.**, P. Boonsri, and S. Hannongbua, **2019**, Structural and Spectroscopic Properties of Metal Complexes with Ruhemann's Purple Compounds Calculated using Density Functional Theory, Key Engineering Materials, 824, 204-211. (<https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/KEM.824.204>)
- 6) **Promkatkaew M.**, Songwut Suramitr, Thitinun Karpkird, Masahiro Ehara, and Supa Hannongbua, **2020**, DFT/TD-DFT investigation on the photoinduced electron transfer of diruthenium and viologen complexes, Journal of Luminescence, 222, 117121. (<https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2020.117121>)
- 7) **Promkatkaew M.**, L. C. Chuaitammakit, K. Naree, J. Sillapa, S. Kongsriprapan, **2023**, A Highly Sensitive and Selective Fluorescent Probe for the Detection of Cerium(III) Using Tridentate Based-Oxazolidine: Experimental and DFT Investigation, Journal of Fluorescence, 33(1), 145-152. (<https://doi.org/10.1007/s10895-022-03043-9>)
- 8) Chantarasunthon K., **M. Promkatkaew**, P. Waranwongcharoen, A. Sueksachat, N. Prasop, T. Norasi, N. Sonsiri, S. Sansern, S. Chomngam, K. Wechakorn, C. Thana, W. Sakulsaknimitr, P. Kongsaree, P. Srisuratsiri, **2023**, A novel highly selective FRET sensor for Fe(III) and DFT mechanistic evaluation, 2023, Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 286, 122031 (<https://doi.org/10.1016/j.saa.2022.122031>)
- 9) **Promkatkaew M.**, P. Boonsri, S. Suramitr, T. Karpkird, P. Wolschann, S. Hannongbua, **2023** Stability improvement of UV-filter between methoxy cinnamic acid derivatives and cyclodextrins inclusion complexes based on DFT and TD-DFT investigations, Journal of Molecular Graphics and Modelling, 125, 108619 (<https://doi.org/10.1016/j.jmgm.2023.108619>)

14. ตารางกิจกรรมการเรียนการสอน

ครั้งที่	วัน / เดือน / ปี	เนื้อหา	กิจกรรม
1-7	24 มิ.ย. 67 - 9 ส.ค. 67	หัวข้อที่ 1 - 3	บรรยายและแบบฝึกหัด
		ปฏิบัติการที่ 1-6	ปฏิบัติการ
10 ส.ค. - 18 ส.ค. 67 สอบกลางภาค (25%)			
8-13	19 ส.ค. 67 - 4 ต.ค. 67	หัวข้อที่ 4 - 5	บรรยายและแบบฝึกหัด
		ปฏิบัติการที่ 7-10	ปฏิบัติการ
14	11 ต.ค. 67	นำเสนอโครงงานวิจัย (15%)	นำเสนอหน้าชั้นเรียน
15	18 ต.ค. 67	สอบปฏิบัติการ (10%)	สอบปฏิบัติการ
21 ต.ค. - 1 พ.ย. 67 สอบปลายภาค (25%)			

* เนื้อหาบางหัวข้อและเวลาในการสอน อาจจะมีการเปลี่ยนแปลงตามความเหมาะสม ถ้าหากมีวันหยุดราชการในวัดใด จะนัดชดเชยการเรียนการสอนภายหลัง

ลงนาม.....มาลินี พรหมขัติแก้ว.....ผู้รายงาน
(ผศ.ดร.มาลินี พรหมขัติแก้ว)
วันที่ 24 มิถุนายน 2567