



ประมวลการสอน
ภาค ต้น ปีการศึกษา 2566

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 วันพุธ เวลา 12.30 – 14.30 น.
หมู่ 830 ปฏิบัติการ วันพุธ เวลา 14.30 – 17.30 น.
3. ผู้สอน ดร. มาลินี พรหมขัติแก้ว

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 “66_ComChem” รหัสชั้นเรียน “fjf4noz”

5.จุดประสงค์ของวิชา

เพื่อให้นิสิตสามารถใช้โปรแกรมประยุกต์ทางเคมีคอมพิวเตอร์ในการศึกษาระบบทางเคมีต่าง ๆ ได้ ซึ่งจะเป็นประโยชน์กับงานวิจัยทางเคมี

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

เมื่อสิ้นสุดการเรียนการสอนแล้ว นิสิตที่สำเร็จการศึกษาในรายวิชา สามารถ (CLOs)

๑. CLO๑ บูรณาการความรู้พื้นฐานเทคนิคและระเบียบวิธีการใช้งานโปรแกรมประยุกต์ทางเคมีคอมพิวเตอร์ในการศึกษาระบบทางเคมีต่าง ๆ และอธิบายความก้าวหน้าใหม่ของสาขาเคมีเชิงฟิสิกส์ได้
๒. CLO๒ สามารถนำความรู้ทางทฤษฎี วิเคราะห์และอธิบายผลงานวิจัยความรู้พื้นฐานเทคนิคและระเบียบวิธีการใช้งานโปรแกรมประยุกต์ทางเคมีคอมพิวเตอร์ในการศึกษาระบบทางเคมีต่าง ๆ อย่างมีเหตุผลตามหลักการ
๓. CLO๓ สามารถวิเคราะห์และสังเคราะห์ความรู้พื้นฐานเทคนิคและระเบียบวิธีการใช้งานโปรแกรมประยุกต์ทางเคมีคอมพิวเตอร์เพื่ออธิบายผลงานใหม่หรือพัฒนางานใหม่ที่สอดคล้องกับสถานการณ์ปัจจุบัน เพื่อนำไปสู่การสร้างนวัตกรรม
๔. CLO๔ ประยุกต์ความรู้ทางคณิตศาสตร์และสถิติ ทักษะภาษาอังกฤษ และสามารถใช้ภาษาที่เหมาะสมเพื่อการค้นคว้าและอธิบายงานความรู้พื้นฐานเทคนิคและระเบียบวิธีการใช้งานโปรแกรมประยุกต์ทางเคมีคอมพิวเตอร์ได้อย่างมีประสิทธิภาพ
๕. CLO๕ มีวินัย มีความซื่อสัตย์ เคารพสิทธิของผู้อื่น มีจิตอาสา มีจรรยาบรรณวิชาการ และปฏิบัติตามระเบียบที่กำหนด
๖. CLO๖ มีความรับผิดชอบต่องานที่ได้รับมอบหมายและพัฒนาตนเอง และสามารถทำงานร่วมกับผู้อื่นได้

7. คำอธิบายรายวิชา

ทฤษฎีพันธะเคมี ระเบียบวิธีเอมพิริกัล เซมิเอมพิริกัล และนอนเอมพิริกัล หลักการและการประยุกต์ของทฤษฎีโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์ และการจำลองแบบด้วยคอมพิวเตอร์ในวิชาเคมีและวิศวกรรมเคมี โดยมีการทดลองโครงการตามที่ กำหนด (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) การคำนวณหาโครงสร้างที่เสถียรและพื้นผิวพลังงานที่มีศักยภาพ (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 และให้นักศึกษาค้นคว้าด้วยตนเอง ทำรายงาน นำเสนอหน้าชั้นเรียนและการทำโครงการวิจัย โปรแกรมการคำนวณทางเคมีคอมพิวเตอร์

10. อุปกรณ์และสื่อการสอน

คอมพิวเตอร์ เครื่องฉายข้ามศีรษะ เอกสารประกอบคำบรรยาย เอกสารประกอบการเรียนการสอน โปรแกรมการคำนวณทางเคมีคอมพิวเตอร์

11. การวัดผลสัมฤทธิ์ในการเรียน

11.1	การเข้าห้องเรียนและการมีส่วนร่วมในชั้นเรียน	5
11.2	รายงานปฏิบัติการ/ แบบฝึกหัด/ การบ้าน	20
11.3	การนำเสนอโครงงานวิจัย	15
11.4	การสอบ	
	- สอบข้อเขียนกลางภาค	25
	- สอบข้อเขียนปลายภาค	25
	- สอบปฏิบัติการ	10
	รวม	100

โดยมีเกณฑ์การประเมินการให้คะแนนการนำเสนอโครงงานวิจัย (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 พรหมชาติแก้ว

งานวิจัยที่เพิ่มเติมใช้ในการเรียนการสอน

- 1) Malinee Promkatkaew, Songwut Suramitr, Thitinun Karpkird, Masahiro Ehara, and Supa 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.
- 2) Malinee Promkatkaew, Duangkamol Gleeson, Supa Hannongbua and M. Paul Gleeson, 2014, Skin Sensitization Prediction Using Quantum Chemical Calculations: A Theoretical Model for the S_NAr Domain. *Chemical Research in Toxicology*, 27, 51–60,
- 3) Malinee Promkatkaew, Songwut Suramitr, Thitinun Karpkird, Supason Wanichweacharungang, Masahiro Ehara, and Supa 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.
- 4) Kanokwan Chaichana, Napha Phutlaprungrueang, Laksamee Chaicharoenwimolkul, Malinee Promkatkaew, Sopanat 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.
- 5) Malinee Promkatkaew, Pornthip Boonsri, and Supa 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.
- 6) Malinee Promkatkaew, 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.
- 7) Malinee Promkatkaew, Sunan Kitjaruwankul, Supaporn Baiya, Suree Tongwanichniyom, Pornthip Boonsri, and Supa Hannongbua, 2022, A DFT-based Analysis of Metals Adsorption on Chitosan Monomer, *SWU Sci. J. Vol. 38 No. 2*, 37-47.
- 8) Malinee Promkatkaew, Laksamee Chaicharoenwimolkul Chuaitemmakit, Kitiya Naree, Jinnapus Sillapa, Sopanat 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.
- 9) Ketsarin Chantarasunthon, Malinee Promkatkaew, Patthreera Waranwongcharoen, Anek Sueksachat, Nitchanan Prasop, Thanaporn Norasi, Narisa Sonsiri, Sirirat Sansern, Sinchai Chomngam, Kanokorn Wechakorn, Chant Thanana, Wissawat Sakulsaknimitr, Palangpon Kongsaree, Pailin 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

14. ตารางกิจกรรมการเรียนการสอน

ครั้งที่	วัน / เดือน / ปี	เนื้อหา	กิจกรรม
1-7	28 มิ.ย. 66 - 9 ส.ค. 66	หัวข้อที่ 1 - 3	บรรยายและแบบฝึกหัด
		ปฏิบัติการที่ 1-6	ปฏิบัติการ
12 ส.ค. - 20 ส.ค. 66 สอบกลางภาค (25%)			
8-13	16 ส.ค. 66 - 4 ต.ค. 66	หัวข้อที่ 4 - 5	บรรยายและแบบฝึกหัด
		ปฏิบัติการที่ 7-10	ปฏิบัติการ
14	11 ต.ค. 66	นำเสนอโครงงานวิจัย	นำเสนอ
15	18 ต.ค. 66	สอบปฏิบัติการ	สอบปฏิบัติการ
23 ต.ค. - 3 พ.ย. 66 สอบปลายภาค (25%)			

* เนื้อหาบางหัวข้อและเวลาในการสอน อาจจะมีการเปลี่ยนแปลงตามความเหมาะสม ถ้าหากมีวัดหยุดราชการในวัดใด จะนัดชดเชยการเรียนการสอนภายหลัง

ลงนาม.....มาลินี พรหมขัติแก้ว.....ผู้รายงาน
 (ผศ.ดร.มาลินี พรหมขัติแก้ว)
 วันที่ 26 มิถุนายน 2566