

ประมวลรายวิชา (Course Syllabus)

1. รหัสวิชา 2302531
2. จำนวนหน่วยกิต 2 หน่วยกิต
3. ชื่อวิชา Molecular Modeling I
4. คณะ/ภาควิชา คณะวิทยาศาสตร์/ภาควิชาเคมี
5. ภาคการศึกษา ภาคต้น
6. ปีการศึกษา 2554
7. ชื่อผู้สอน รศ.ดร. วุฒิชัย พาราสุข
ผศ.ดร. สมศักดิ์ เพ็ญรวณิช
8. เงื่อนไขรายวิชา
 - 8.1 วิชาที่ต้องเรียนมาก่อน ไม่มี
 - 8.2 วิชาบังคับร่วม ไม่มี
 - 8.3 วิชาควบ ไม่มี
9. สถานภาพของวิชา วิชาเลือก
10. ชื่อหลักสูตร วิทยาศาสตร์มหาบัณฑิตและวิทยาศาสตรดุษฎีบัณฑิต
11. วิชาระดับ ปริญญาโทและปริญญาเอก
12. จำนวนชั่วโมงที่สอน/สัปดาห์ 2 ชั่วโมง/สัปดาห์
13. เนื้อหารายวิชา ตามที่ปรากฏในหลักสูตร
บทนำ ทฤษฎีพื้นฐานเกี่ยวกับแบบจำลองโมเลกุล การสร้างโครงสร้างเคมีบนคอมพิวเตอร์ การคำนวณแบบจำลองโมเลกุล การประยุกต์ด้านโครงสร้างและเสถียรภาพของโครงสร้าง การประยุกต์ด้านปฏิกิริยาเคมี การประยุกต์ด้านสมบัติ
Introduction, basic theory for molecular modeling, building chemical structure on computer, molecular modeling calculations, applications to structure and their stability, applications to chemical reactions, applications to properties
14. ประมวลการเรียนรายวิชา
 - 14.1 วัตถุประสงค์ทั่วไปและ/หรือวัตถุประสงค์เชิงพฤติกรรม
 1. อธิบายหลักการของการสร้างแบบจำลองโมเลกุล
 2. วิเคราะห์ผลที่ได้จากการสร้างแบบจำลองโมเลกุล
 3. สร้างแบบจำลองโมเลกุลจากโครงสร้าง 2 มิติ
 4. ออกแบบการทดลองการสร้างแบบจำลองโมเลกุลเพื่อศึกษาระบบทางเคมี
 - 14.2 เนื้อหารายวิชาต่อสัปดาห์

สัปดาห์ที่	หัวข้อ	รายละเอียด
1	Building and Displaying Molecules	- แนะนำให้รู้จักโปรแกรมที่ใช้สำหรับงานทางด้าน molecular modeling - ฝึกให้นิสิตสามารถสร้างและแสดงผลโครงสร้างโมเลกุลด้วยโปรแกรมทางเคมีคอมพิวเตอร์
2	Performing calculations	- ฝึกให้สามารถคำนวณเพื่อปรับโครงสร้างด้วยวิธี molecular mechanics และ semi-empirical
3	Theoretical Background	- อธิบายถึงทฤษฎีต่าง ๆ ทั้ง 3 แบบที่ใช้ในการคำนวณ คือ ab initio, semi-empirical และ molecular mechanics
4	Stabilities of Molecules	- ฝึกให้นิสิตสามารถทำการคำนวณเพื่อเปรียบเทียบเสถียรภาพของโมเลกุลต่าง ๆ ได้
5	Enthalpies of Reactions	- ฝึกให้นิสิตสามารถทำการคำนวณเพื่อหาค่า enthalpy ของปฏิกิริยาเคมี และแปลผลจากข้อมูลที่คำนวณได้ เพื่อนำไปใช้ประโยชน์ต่อไป
6	Frontier Molecular Orbitals	- เข้าใจทฤษฎี Frontier molecular orbital และทำการคำนวณโดยใช้โปรแกรมทางเคมีคอมพิวเตอร์เพื่อนำความรู้ไปประยุกต์ใช้สำหรับปฏิกิริยาเคมี
7	Hardness and Softness	- ฝึกให้นิสิตสามารถคำนวณหาค่า hardness และ softness ของสารต่าง ๆ เพื่อประกอบการพิจารณาค่า nucleophilicity และ electrophilicity ของสารต่าง ๆ
8	Spectroscopy: Vibrational and Electronic	- ฝึกให้นิสิตสามารถคำนวณหา spectrum ของสาร ทั้งแบบโหมดการสั่น และแบบ electronic โดยใช้โปรแกรมทางเคมีคำนวณ
9	Coordination Chemistry	- ฝึกให้นิสิตสามารถนำความรู้ด้านเคมีคำนวณไปประยุกต์ใช้ในการแก้ปัญหาทางด้าน coordination chemistry
10	Proton Affinities	- ฝึกให้นิสิตสามารถคำนวณหาค่าความเป็นกรดและเป็นเบสของสารต่าง ๆ ได้
11	Molecular Similarities	- ทำการเปรียบเทียบความเหมือนหรือแตกต่างทางโครงสร้างของสารต่าง ๆ ด้วยวิธีการซ้อนทับโมเลกุลและคำนวณหาค่า RMSD
12	Special Project	- ฝึกให้นิสิตรู้จักนำเอาความรู้ทางเคมีคอมพิวเตอร์ที่ได้เรียนมาไปประยุกต์ใช้ในการแก้ปัญหาต่าง ๆ ทางเคมี

14.3 วิธีจัดการเรียนการสอน

- การบรรยาย (Lecture) 1 ชั่วโมง/ครั้ง = ร้อยละ 50
- การฝึกฝน (Practice) 1 ชั่วโมง/ครั้ง = ร้อยละ 50

14.4 สื่อการสอน

- สื่อนำเสนอในรูปแบบ PowerPoint
- สื่ออิเล็กทรอนิกส์ / เว็บไซต์
- เครื่องคอมพิวเตอร์

14.5 การวัดผลการเรียน

- 14.6.1 การประเมินการทำงานหรือกิจกรรมในชั้นเรียน ร้อยละ 70
- 14.6.2 การประเมินผลงานที่ได้มอบหมาย ร้อยละ 30

15. รายชื่อหนังสือหรือแหล่งข้อมูลสำหรับอ่านประกอบ

15.1 หนังสือบังคับ

- เอกสารประกอบการเรียนวิชา 2302531

15.2 หนังสืออ่านเพิ่มเติม

- Andrew R. Leach, Molecular Modelling: Principles and Applications, 2nd edition, Prentice Hall

16. การประเมินผลการเรียนการสอน

16.1 ใช้แบบประเมินการสอนรูปแบบที่ 11 (การสอนแบบบรรยายเชิงปฏิบัติ)

16.2 การปรับปรุงจากผลการประเมินการสอนครั้งที่ผ่านมา

- ทำการปรับปรุงข้อมูลเนื้อหาต่าง ๆ ให้ทันสมัย ตามเทคโนโลยีที่เปลี่ยนไป

16.3 การอภิปรายหรือการวิเคราะห์ที่เสริมสร้างคุณลักษณะที่พึงประสงค์ของบัณฑิตจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

- การสอนแบบบรรยายเชิงปฏิบัติ ทำให้นิสิตได้ฝึกฝนการใช้คอมพิวเตอร์ซึ่งเป็นเครื่องมือพื้นฐานที่จำเป็นอย่างยิ่งในยุคสมัยปัจจุบัน จึงจะมีส่วนช่วยต่อการทำงานในอนาคตของนิสิต (คุณลักษณะด้านทักษะและวิชาชีพ)
- การให้แบบฝึกหัดทุกสัปดาห์ ทำให้นิสิตได้ฝึกฝนการใช้ความรู้ ความสามารถในการแก้ปัญหา เป็นการส่งเสริมคุณลักษณะด้านสติปัญญาและวิชาการ