ประมวลรายวิชา (Course Syllabus)

1. รหัสวิชา 2302633

2. จำนวนหน่วยกิต (Course Credit) 3

3. ชื่อวิชา เคมีควอนตัมและสเปกโทรสโกปี
(Quantum Chemistry and Spectroscopy)

4. คณะ/ภาควิชา วิทยาศาสตร์/เคมี

5. ภาคการศึกษา (ต้น/ปลาย/ฤดูร้อน) ภาคต้น

6. ปีการศึกษา 2554

7. ชื่อผู้สอน รศ.ดร. ศิริรัตน์ ก๊กผล
ผศ.ดร. สมศักดิ์ ตนหมั่นเพียร

8. เงื่อนไขรายวิชา

8.1 วิชาที่ต้องเรียนมาก่อน -

8.2 วิชาบังคับ -

8.3 วิชาควบ -

9. สถานภาพของวิชา วิชาบังคับ

10. ชื่อหลักสูตร วิทยาศาสตรมหาบัณฑิตและดุษฎีบัณฑิต

11. วิชาระดับ ปริญญาโทและเอก

12. จำนวนชั่วโมงที่สอน/สัปดาห์ 3 ชั่วโมง/สัปดาห์

13. เนื้อหารายวิชา (Course Description) **ตามที่ปรากฏในหลักสูตร**

หลักกลศาสตร์ควอนตัมและการประยุกต์ หลักการสำหรับสเปกโทรสโกปี และการประยุกต์
Principles quantum mechanics and applications; principles spectroscopy and applications

14. ประมวลการเรียนรายวิชา (Course Outline) **ระบุรายละเอียดเกี่ยวกับ**

14.1 วัตถุประสงค์ทั่วไปและ/หรือวัตถุประสงค์เชิงพฤติกรรม

เพื่อเสริมความรู้ทางด้านกลศาสตร์ควอนตัมและสเปกโทรสโกปีที่จำเป็นสำหรับการศึกษาระดับมหาบัณฑิตและดุษฎีบัณฑิตแขนงวิชาเคมีฟิสิกัล

14.2 เนื้อหารายวิชาต่อสัปดาห์

สัปดาห์	ผู้สอน	เนื้อหาวิชา
1	รศ.ดร.ศิริรัตน์	Brief review of principle of quantum mechanics
		- The Schroedinger Equation
		- Exact Solution: Linear Motion
		- Exact Solution: Rotational Motion
2	รศ.ดร.ศิริรัตน์	Orbital Angular Momentum
3-4	รศ.ดร.ศิริรัตน์	Techniques of Approximation
		- The Variation Method
		- Perturbation Theory
		- The Hellman-Feynman Theorem
		The Variation Method – Linear variation function
5	รศ.ดร.ศิริรัตน์	Electron Spin
		Many Electron Atoms
		Electronic Structure of Diatomic Molecules
		- Born-Oppenheimer Approximation
		- Atomic Units
		- H_2^+
		- H_2
		- Hartree Fock Method for Molecules
6-7	รศ.ดร.ศิริรัตน์	SCF-MO of Polyatomic Molecules
		Basis Functions
		Population Analysis
		Atomic Charges
		Semiempirical Method
8	ผศ.ดร.สมศักดิ์	Atomic Spectroscopy
		- Fundamental Spectroscopy
		- The Spectrum of Hydrogen Atom
		- Selection Rule
9	ผศ.ดร.สมศักดิ์	- Many-Electron Atoms
		Molecular Rotational Spectra
		- Diatomic Molecules

สัปดาห์	ผู้สอน	เนื้อหาวิชา
10	ผศ.ดร.สมศักดิ์	- Linear Polyatomic Molecules
		- Polyatomic Molecules
11	ผศ.ดร.สมศักดิ์	Molecular Vibrational Spectra
		- Diatomic Molecules
		- Anharmonicity
12	ผศ.ดร.สมศักดิ์	- Rotation-Vibration
		- Polyatomic Vibrations
13	ผศ.ดร.สมศักดิ์	Molecular Electronic Spectra
		- Diatomic Molecules
14	ผศ.ดร.สมศักดิ์	- Polyatomic Molecules
		- Vibronic Transition and the Franck-Condon Principle

14.3 วิธีจัดการเรียนการสอน บรรยาย

14.4 สื่อการสอน เอกสารประกอบการสอน แผ่นใส ปากกาเขียนแผ่นใส Overhead Projector คอมพิวเตอร์ สำเนาเนื้อหาวิชา

14.5 การวัดผลการเรียน

14.5.1 ส่วนของ รศ.ดร.ศิริรัตน์ ก๊กผล 50 % โดยแบ่งเป็น

ทำแบบฝึกหัดในเวลาเรียน	10 %
การบ้าน	10 %
สอบข้อเขียนกลางภาค	30 %

14.5.2 ส่วนของ ผศ.ดร.สมศักดิ์ ตนหมั่นเพียร 50 % โดยแบ่งเป็น

การบ้าน	10 %
สอบย่อย	15 %
สอบข้อเขียนปลายภาค	25 %

15. รายชื่อหนังสืออ่านประกอบ

15.1 Pauling, L., Wilson, E.B. Jr., Introduction to Quantum Mechanics, McGraw-Hill, N.Y., 1935.

15.2 Barrow, G.M., Physical Chemistry, McGraw-Hill, Singapore, 1988.

15.3 Levine, I.N., Quantum Chemistry, 4th edition, Prentice Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1991.

15.4 Hanna, M.W., Quantum Mechanics, 3rd edition, Benjamin Inc., C.A., 1981.

15.5 Frank, L.P., Elementary Quantum Chemistry, McGraw-Hill, Singapore, 1990.

15.6 Ratner, M.A. and Schatz, G.C., Introduction to Quantum Mechanics in Chemistry, Prentice Hall, N.J., 2001.

15.7 Pople, J.A., Beveridge, D.L., Approximate Molecular Orbital Theory, McGraw-Hill Book Company, N.Y., 1970.

15.8 ศิริรัตน์ ก๊กผล, การคำนวณทางเคมีควอนตัม, ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, 2534.

15.9 Atkins, P.W., Molecular Quantum Mechanics, 2nd edition, Oxford University Press, 1983.

15.10 Dykstra, C.E., Quantum Chemistry & Molecular Spectroscopy, Prentice Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1991.

15.11 Atkins, P.W., Physical Chemistry, 6th edition, Oxford University Press, 1997.

15.12 Gerry, P.A., BASIC Molecular Spectroscopy, 1st edition, Butterworths, England, 1985.

15.13 Banwell, C.N., Fundamentals of Molecular Spectroscopy, 3rd edition, McGraw-Hill Book Company, England, 1983.

16. การประเมินผลการเรียนการสอน

16.1 ใช้แบบประเมินการสอนรูป แบบบรรยาย 04

16.2 การปรับปรุงจากผลการประเมินการสอนครั้งที่ผ่านมา

- เพิ่มเติมโจทย์ตัวอย่างมากขึ้น และให้นิสิตออกมาทำหน้ากระดาน