

## ประมวลรายวิชา (Course Syllabus)

- |                                   |   |
|-----------------------------------|---|
| 1. รหัสวิชา                       | 2302638   |
| 2. จำนวนหน่วยกิต (Course Credit)  | 2   |
| 3. ชื่อวิชา (Course Title)        | Advanced Quantum Chemistry                            |
| 4. คณะ/ภาควิชา                    | วิทยาศาสตร์/เคมี                                      |
| 5. ภาคการศึกษา (ต้น/ปลาย/ฤดูร้อน) | ภาคปลาย   |
| 6. ปีการศึกษา                     | 2553  |
| 7. ชื่อผู้สอน                     | รศ.ดร. วุฒิชัย พาราสุข<br>ผศ.ดร. วิวัฒน์ วชิรวงศ์กวิน |
8. เนื้อหารายวิชา
- |                            |   |
|----------------------------|---|
| 8.1 วิชาที่ต้องเรียนมาก่อน | - |
| 8.2 วิชาบังคับร่วม         | - |
| 8.3 วิชาควบ                | - |
9. สถานภาพของวิชา (วิชาบังคับ/วิชาเลือก) วิชาเลือก
10. ชื่อหลักสูตร วิทยาศาสตร์มหาบัณฑิต และ วิทยาศาสตร์ดุสิตบัณฑิต สาขาเคมี
11. วิชาระดับ (ปริญญาตรี/ปริญญาโท/ปริญญาเอก) ปริญญาโท/ปริญญาเอก
12. จำนวนชั่วโมงที่สอน/สัปดาห์ 2 ชม./สัปดาห์
13. เนื้อหารายวิชา (Course Description) ตามที่ปรากฏในหลักสูตร
- โมเมนต์เชิงมุมของออร์บิทัลในระบบอะตอมที่มีหลายอิเล็กตรอน แลคเตอร์โอเปอเรเตอร์สำหรับโมเมนต์เชิงมุม สปินโมเมนต์เชิงมุมและการควบคู่ของสปิน-ออร์บิต ระดับมัลติเพลตในอะตอม กฎการเลือกสำหรับอะตอมเชิงซ้อน กระบวนการออร์ธอนอร์มอลของแกรม-ชมิทท์ ทฤษฎีไวเรียล ทฤษฎีเฮลล์แมน-ไฟน์แมน เฟอร์เทอเบชันที่ขึ้นกับเวลา ทฤษฎีการแผ่รังสี แอลซีเอ ไอ-เอ็ม ไอ เซลฟ์-คอนซิสเตนต์ฟิลด์ เบซิสเซต วิธีเคมีควอนตัมสำหรับระบบหลายอิเล็กตรอน การคำนวณแบบเคมี-เอ็มพีรีกัล
- Orbital angular momentum in many-electron atoms, ladder operators for angular momentum, the spin angular momentum and spin-orbital coupling, multiplet levels in atoms, selection rules for complex atoms, Gram-Schmidt process of orthonormalization, the Virial Theorem, Hellmann-Feynman theory, time dependent perturbations, radiation theory, LCAO-MO self consistent-field method, basis sets, quantum chemical methods for large system, semi-empirical calculations.
14. ประมวลการเรียนรายวิชา (Course Outline) ระบุรายละเอียดเกี่ยวกับ
- |   |  |
|---|--|
| 14.1 วัตถุประสงค์ทั่วไปและ/หรือวัตถุประสงค์เชิงพฤติกรรม                                 |  |
| 14.1.1 มีความรู้และเข้าใจในหลักการทางเคมีควอนตัมขั้นสูง                                 |  |
| 14.1.2 รู้เทคนิคทางเคมีควอนตัมขั้นสูงที่นำมาประยุกต์ใช้อธิบายสมบัติของอะตอม และ โมเลกุล |  |

### 14.1.3 สามารถอ่านบทความวิชาการที่น่าหลักทางเคมีควมตัมมาใช้

#### 14.2 เนื้อหารายวิชาต่อสัปดาห์

สัปดาห์ที่	หัวข้อ	ผู้สอน
1	Introduction to R program Simple Hückel Method (SHM)	ผศ.ดร. วิวัฒน์
2	Extended Hückel Method (EHM)	ผศ.ดร. วิวัฒน์
3	Hartree-Fock I	ผศ.ดร. วิวัฒน์
4	Hartree-Fock II	ผศ.ดร. วิวัฒน์
5	Hartree-Fock III	ผศ.ดร. วิวัฒน์
6	Basis sets	ผศ.ดร. วิวัฒน์
7	Semiempirical Calculations on Large Molecules	ผศ.ดร. วิวัฒน์
8	Applications of HF theory - Mulliken's analysis - Koopman's theorem	รศ.ดร. วุฒิชัย
9	Performance of HF - HF-limit - Dissociation	รศ.ดร. วุฒิชัย
10	Post HF (I) - Electron correlation - Configuration Interaction (CI)	รศ.ดร. วุฒิชัย
11	Post HF (II) - Rayleigh-Schrödinger perturbation theory (RSPT) - Møller-Plesset perturbation theory (MPPT)	รศ.ดร. วุฒิชัย
12	Post HF (III) - 2 <sup>nd</sup> quantization - Coupled-cluster (CC)	รศ.ดร. วุฒิชัย
13	Density Functional Theory (I) - Hohenberg-Kohn theorem - Kohn-Sham equation	รศ.ดร. วุฒิชัย
14	Density Functional Theory (II) - Local Density Approximation (LDA) - Generalized Gradient Approximation (GGA)	รศ.ดร. วุฒิชัย
15	Density Functional Theory (III) - Hybrid Functional - Advance Functional	รศ.ดร. วุฒิชัย
	Special Topics* - Basis-set superposition error (BSSE) - Extrapolated methods such as ONIOM, Gn series and complete basis sets (CBS)	รศ.ดร. วุฒิชัย

\* กรณีมีเวลาสอนเพียงพอ

#### 14.3 วิธีจัดการเรียนการสอน (Method)

04 การสอนแบบการบรรยาย

2 ชม./สัปดาห์

ร้อยละ 100

#### 14.4 สื่อการสอน (Media)

กระดานและแผ่นใส

#### 14.5 การวัดผลการเรียน (Evaluation)

การบ้าน	20%
รายงานและการนำเสนอ	30%
สอบกลางภาค	20%
สอบปลายภาค	30%

#### 15. รายชื่อหนังสืออ่านประกอบ

##### 15.1 หนังสือบังคับ

**15.1.1** A. Saabo and N.S. Oslund, *Modern Quantum chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*, Dover Publication, Inc., New York, 1996.

**15.1.2** E.G. Lewars, *Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2003.

**15.1.3** C. M. Quinn, *Computational Quantum Chemistry: An Interactive Guide to Basis Set Theory*, Academic Press, California, 2002.

##### 15.2 หนังสืออ่านเพิ่มเติม

**15.2.1** C.J. Cramer, *Essential of Computational Chemistry: Theories and Models*, John Wiley & Sons, Chichester, West Sussex, 2004.

**15.2.2** F. Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*, John Wiley & Sons, Chichester, West Sussex, 2007.

##### 15.3 สื่ออิเล็กทรอนิกส์ หรือ เว็บไซต์ที่เกี่ยวข้อง

**15.3.1** <http://www.r-project.org/>

**15.3.2** [http://www.csm.ornl.gov/comp\\_chemistry/ChemText.html](http://www.csm.ornl.gov/comp_chemistry/ChemText.html)

#### 16. การประเมินผลการสอน

##### 16.1 การประเมินการสอน

ใช้แบบประเมินการสอนแบบ 04 การสอนแบบบรรยาย ตามรูปแบบของมหาวิทยาลัย

##### 16.2 การปรับปรุงจากผลการประเมินการสอนครั้งที่ผ่านมา

ปรับปรุงรายละเอียดเนื้อหาบางส่วน

##### 16.3 การอภิปรายหรือการวิเคราะห์ที่เสริมสร้างคุณลักษณะที่พึงประสงค์ของบัณฑิต จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

**ด้านสติปัญญาและวิชาการ** เสริมสร้างให้นิสิตมีความรู้ลึกในหลักการทางเคมีควอนตัมขั้นสูง

**ด้านทักษะและวิชาชีพ** ส่งเสริมให้นิสิตนำความรู้ไปอธิบายสมบัติของอะตอมและ โมเลกุล

**ด้านคุณธรรม** เสริมสร้างให้นิสิตมีความซื่อสัตย์ สุจริต ในการทำงาน

**ด้านสังคม** เสริมสร้างให้นิสิตรู้จักการแบ่งปันความรู้และประสบการณ์ จากการสืบค้นของตนเอง และแลกเปลี่ยนความคิดเห็นจากผู้อื่น