

## ประมวลรายวิชา (Course Syllabus)

- |   |   |
|---|---|
| 1. รหัสวิชา   | 2302662   |
| 2. จำนวนหน่วยกิต  | 2 หน่วยกิต  |
| 3. ชื่อวิชา   | เรื่องคัดเฉพาะทางเคมีฟิสิกัล 2<br>(Selected Topic in Physical Chemistry II)   |
| 4. คณะ/ภาควิชา  | คณะวิทยาศาสตร์/ภาควิชาเคมี  |
| 5. ภาควิชาการศึกษา                                      | ต้น   |
| 6. ปีการศึกษา   | 2554  |
| 7. ชื่อผู้สอน   | รศ.ดร.วิทยา เรืองพรวิสุทธิ  |
| 8. เงื่อนไขรายวิชา                                      |   |
| 8.1 วิชาที่ต้องเรียนมาก่อน                              | ไม่มี   |
| 8.2 วิชาบังคับร่วม                                      | ไม่มี   |
| 8.3 วิชาควบ   | ไม่มี   |
| 9. สถานภาพของวิชา                                       | วิชาเลือก   |
| 10. ชื่อหลักสูตร  | วิทยาศาสตร์มหาบัณฑิตและดุษฎีบัณฑิต  |
| 11. วิชาระดับ   | ปริญญาโท/ปริญญาเอก  |
| 12. จำนวนชั่วโมงที่สอน/สัปดาห์                          | 2 ชั่วโมง/สัปดาห์   |
| 13. เนื้อหารายวิชา                                      | <p>พื้นฐานความรู้ทฤษฎีสำหรับการคำนวณทางเคมี การคำนวณทางโครงสร้างโมเลกุล ปฏิบัติการเปลี่ยนแปลงโครงสร้าง ปฏิบัติการทอโทเมอไรเซชัน ปฏิบัติการรับจ่ายโปรตอน ปฏิบัติการเกิดสารประกอบเชิงซ้อน การคำนวณค่าคงที่อัตราเร็วปฏิกิริยา การวิเคราะห์และการแสดงผล</p> <p>Theory and principal in computational chemistry; Molecular structure optimization; Conformational conversion; Tautomerization; Protonation and deprotonation; Complexation; Rate of reaction; Techniques used for data collection, data processing and the interpretation of results</p> |
| 14. ประมวลการเรียนรายวิชา                               |   |
| 14.1 วัตถุประสงค์ทั่วไปและ/หรือวัตถุประสงค์เชิงพฤติกรรม | <p>เพื่อเข้าใจหลักการและทฤษฎีทางคำนวณทางเคมีที่เกี่ยวข้องกับ โครงสร้างโมเลกุล ปฏิบัติการ และอัตราเร็วปฏิกิริยา เทคนิคและการประยุกต์ การรวบรวมข้อมูล และการวิเคราะห์ข้อมูล</p>   |
| 14.2 เนื้อหารายวิชาต่อสัปดาห์                           |   |

ลำดับที่	หัวข้อ	รายละเอียด	ผู้สอน
1	พื้นฐานความรู้ทางทฤษฎีบางอย่าง	ทฤษฎีสถิติภาวะแทรกซ้อน และ ทฤษฎีทางอุณหพลศาสตร์ โครงสร้างและโครงรูป ความถี่ การสั่นของโมเลกุล	รศ.ดร.วิทยา
2	พื้นฐานความรู้การคำนวณปฏิกิริยา	ปฏิกิริยา อัตราเร็วปฏิกิริยา สมดุลเคมี สมบัติอุณหพลศาสตร์	รศ.ดร.วิทยา
3	การคำนวณปฏิกิริยาพื้นฐาน	ปฏิกิริยาการเปลี่ยนแปลงโครงรูป ปฏิกิริยาทอโทเมอไรเซชัน	รศ.ดร.วิทยา
4	การคำนวณปฏิกิริยาอื่น ๆ	ปฏิกิริยาการรับจ่ายโปรตอน ปฏิกิริยาการเกิดสารประกอบเชิงซ้อน ปฏิกิริยาเร่ง	รศ.ดร.วิทยา
5	อัตราเร็วปฏิกิริยา	การคำนวณค่าคงที่อัตราเร็ว ปฏิกิริยา ปฏิกิริยาทอโทเมอไรเซชัน	รศ.ดร.วิทยา
6	การสืบสวนกลไกปฏิกิริยา	ปฏิกิริยาเร่งโดยสารประกอบเชิงซ้อน และตัวเร่งอื่น ๆ ค่าการกระจายตัวของผลิตภัณฑ์	รศ.ดร.วิทยา
7	การวิเคราะห์ข้อมูลและการใช้ประโยชน์	การรวบรวมข้อมูล การวิเคราะห์ข้อมูล การนำเสนอข้อมูล ในรูปแบบรายงาน และการตีพิมพ์	รศ.ดร.วิทยา

#### วิธีการเรียนการสอน

- การบรรยาย 28 ชั่วโมง/7 ครั้ง/14 คาบ/ร้อยละ100
- การบรรยายเชิงอภิปราย
- การระดมสมอง และการอภิปรายกรณีศึกษา  
เพื่อให้รู้จักการวิเคราะห์ และการแก้ปัญหา
- การสรุปประเด็นสำคัญ หรือการนำเสนอ  
ผลของการสืบค้นหรือผลของงานที่ได้รับมอบหมาย
- อื่นๆ

#### 14.3 สื่อการสอน

- แผ่นใสและแผ่นทึบ
- สื่อนำเสนอในรูปแบบ
- สื่ออิเล็กทรอนิกส์ / เว็บไซต์

## □ อื่นๆ

### 14.4 การมอบหมายงาน ผ่านระบบเครือข่าย

#### 14.4.1 เขียนรายงาน และการสืบค้นข้อมูลที่กำหนดให้

#### 14.4.2 คอมพิวเตอร์และอินเทอร์เน็ต

### 14.5 การวัดผลการเรียน

#### 14.5.1 รายงานและสอบข้อเขียน

#### 14.5.2 การเข้าเรียนและความสนใจ

#### 14.5.3 การประเมินผลงานตามคุณภาพ เนื้อหา และความเข้าใจในการเขียนรายงาน

#### 14.5.4 อื่นๆ (ไม่มี)

### 15. รายชื่อหนังสืออ่านประกอบ

#### 15.1 หนังสือบังคับ (ไม่มี)

#### 15.2 หนังสืออ่านเพิ่มเติม (ไม่มี)

#### 15.3 บทความวิจัย/บทความวิชาการ

- Ruangpornvisuti, V. "A DFT study of transformation of nitrosothiol isomers and their decomposition to nitric oxide in gas phase" *Int. J. Quant. Chem.* 2009, 109, 275–284.
- Pinisakul, A.; Kritayakornupong, C.; Ruangpornvisuti, V. "Molecular modeling of nitrosamines adsorbed on H-ZSM-5 zeolite: An ONIOM study" *J. Mol. Mod.* 2008, 14, 1035–1041.
- Navakhun, K.; Ruangpornvisuti, V. "Anion binding of 3,4-dichloro-2,5-diamidopyrrole and anionic self-assembly dimerization of its deprotonated species" *J. Mol. Struct. (Theochem)* 2008, 864, 26–30.
- Thipyapong, K.; Ruangpornvisuti, V. "Isomers of various species of 1-hydroxy-2-pyridinone-6-carboxylic acid, their proton dissociation and complexes with Cr(III) and Zn(II)" *J. Mol. Struct.* 2008, 891, 1–10.
- Sang-aroon, W.; Ruangpornvisuti, V. "Determination of aqueous acid-dissociation constants of aspartic acid using PCM/DFT method" *Int. J. Quant. Chem.* 2008, 108, 1181-1180.
- Wanbayor, R. ; Ruangpornvisuti, V. "Theoretical study of adsorption of C1 to C3 alkoxides on various cap-ended and open-ended armchair (5,5) single-walled carbon nanotubes" *Carbon* 2008, 46, 12-18.

- Sang-aroon, W.; Ruangpornvisuti, V. "Conformational analysis of alkali metal complexes of anionic species of aspartic acid, their interconversion and deprotonation: A DFT investigation" J. Mol. Graph. Model. 2008, 26, 982-990.
- Ruangpornvisuti, V. "A DFT study of molecular structures and tautomerizations of 2-benzoylpyridine semicarbazone and picolinaldehyde N-oxide thiosemicarbazone and their complexations with Ni(II), Cu(II) and Zn(II)" Struct. Chem. 2007, 18, 977-984.
- Sang-aroon, W.; Ruangpornvisuti, V. "Conformational analysis of alkali metal complexes of aspartate dianion and their interactions in gas phase" J. Mol. Graph. Model. 2007, 26, 342-351.
- Wanbayer, R.; Ruangpornvisuti, V. "Adsorptions of proton, hydroxide on various capped and open-ended armchair (5,5) single-walled carbon nanotubes" Chem. Phys. Lett. 2007, 441, 127-131.
- Keawwangchai, S.; Tuntulani, T.; Ruangpornvisuti, V. "Molecular structures of 3,6-di(hexylthioureido)acridine conformers, their protonation, <sup>1</sup>H NMR and IR analyses: Theoretical and experimental studies" J. Mol. Struct. 2007, 832, 16-25.
- Ruangpornvisuti, V.; Wann, B.; "Molecular model for host-guest interaction of tetraamino-tert-butylthiacalix[4]arene and tetraamino-tert-butylcalix[4]arene receptors with carboxylate and dicarboxylate guests: An ONIOM study" J. Mol. Model. 2007, 13, 65-77.
- Wann, B.; Ruangpornvisuti, V. "Tautomeric and rotameric transformations of 4-methyl-3,6-pyridazinedione isomers" Chem. Phys. Lett. 2005, 415, 176-182.
- Rungnim, C.; Ruangpornvisuti, V. "A density functional study of propylene glycol conversion to propanal and propanone of various acid-catalyzed reaction models: A water-addition effect" J. Comput. Chem. 2005, 26, 1592-1599.

#### 15.4 สื่ออิเล็กทรอนิกส์ หรือ เว็บไซต์ที่เกี่ยวข้อง

- บทความวิจัยเรื่องใหม่ ๆ โดยสืบค้นบนเว็บไซต์

### 16. การประเมินผลการสอน

#### 16.1 การประเมินการสอน

- รูปแบบที่ 4 การสอนแบบการบรรยาย

#### 16.2 การปรับปรุงจากผลการประเมินการสอนครั้งที่ผ่านมา

- ได้ปรับปรุงการสอนโดยใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์เฉพาะด้าน

### 16.3 การอภิปรายหรือการวิเคราะห์ที่เสริมสร้างคุณลักษณะที่พึงประสงค์ของบัณฑิต

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

- นิสิตสามารถทำงานวิจัยได้ง่ายและมีความรู้สำหรับแข่งขันในระดับนานาชาติ
- นิสิตสามารถเรียนรู้ด้วยตัวเองมากขึ้น