

ประมวลรายวิชา (Course Syllabus)

1. รหัสวิชา 2302664
2. จำนวนหน่วยกิต 3 หน่วยกิต
3. ชื่อวิชา เทคนิคการคำนวณทางคอมพิวเตอร์ในวิชาเคมี
(Computational Methods in Chemistry)
4. คณะ/ภาควิชา คณะวิทยาศาสตร์/ภาควิชาเคมี
5. ภาควิชาการศึกษาศึกษา ต้น
6. ปีการศึกษา 2554
7. ชื่อผู้สอน ผศ. ดร. วิวัฒน์ วชิรวงศ์กวิน (ส่วนแรก)
รศ. ดร. วิทยา เรืองพรวิสุทธิ (ส่วนที่สอง)
รศ. ดร. พรเทพ สมพรพิสุทธิ (ส่วนที่สาม)
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 3 ชั่วโมง/สัปดาห์
13. เนื้อหารายวิชา
บทนำ สมการเชิงอนุพันธ์ อินทิเกรตเชิงตัวเลข การประยุกต์ในเคมีสารละลาย การประยุกต์ในเคมีควอนตัม การวิเคราะห์หรือสเปกตรัมมอนติคาร์โลเทคนิค การคุมแต่งข้อมูล
Introduction, differential equations, numerical integrations, applications in solution chemistry, applications in quantum chemistry, regression analysis, Monte-Carlo technique, data manipulations.
14. ประมวลการเรียนรายวิชา
 - 14.1 วัตถุประสงค์ทั่วไปและ/หรือวัตถุประสงค์เชิงพฤติกรรม
เพื่อเข้าใจพฤติกรรมของการเกิดสปีชีส์ต่าง ๆ ในสารละลาย โดยอาศัยค่าคงที่ของการเกิดสมดุลเคมีของสารประกอบที่ได้จากการคำนวณทางคอมพิวเตอร์ เรียนเทคนิควิธีการทดลองเพื่อให้สอดคล้องกับการคำนวณโดยโปรแกรมคอมพิวเตอร์
 - 14.2 เนื้อหารายวิชาต่อสัปดาห์

| สัปดาห์ที่ | หัวข้อ | รายละเอียด | ผู้สอน |
|------------|--|---|---------------|
| 1 | ความรู้เบื้องต้นเกี่ยวกับการเขียนโปรแกรม | <ul style="list-style-type: none"> - การใช้ editor ในระบบปฏิบัติการ Linux - ประเภทของภาษาที่ใช้ในการเขียนโปรแกรม - หลักการทั่วไปในการเขียนโปรแกรม | ผศ.ดร.วิวัฒน์ |
| 2 | การเขียนโปรแกรมด้วยภาษา Perl | <ul style="list-style-type: none"> - พื้นฐานการเขียนโปรแกรมด้วยภาษา Perl - ตัวแปรในภาษา Perl - การเขียนคำสั่งเพื่อทำงานเป็น loop - การเขียนคำสั่งในการตัดสินใจ | ผศ.ดร.วิวัฒน์ |
| 3 | การอ่านข้อมูลและประมวลผลข้อมูลจากไฟล์ด้วยภาษา Perl | <ul style="list-style-type: none"> - การเปิดและปิดไฟล์ ASCII - การอ่านข้อมูลและจัดการข้อมูลจากไฟล์ที่เปิดอ่าน | ผศ.ดร.วิวัฒน์ |
| 4 | การเขียนโปรแกรมคำนวณทาง numerical ด้วยภาษา Perl | <ul style="list-style-type: none"> - The Bar-Graph Approximation - The Trapezoidal Approximation - Simpson's Rule | ผศ.ดร.วิวัฒน์ |
| 5 | Introduction to digital signal process | <ul style="list-style-type: none"> - Velocity autocorrelation function - Discrete Fourier transformation (DFT) - Fast Fourier transformation (FFT) | ผศ.ดร.วิวัฒน์ |
| 6 | พื้นฐานคอมพิวเตอร์ และระบบเครือข่ายคอมพิวเตอร์ คำจำกัดความทางเคมี คำนวณและแบบจำลอง | <ul style="list-style-type: none"> - ระบบเครือข่ายคอมพิวเตอร์ ระบบสายแลน อุปกรณ์เชื่อมต่อสัญญาณ ระบบตรวจสอบการทำงานของเครือข่ายคอมพิวเตอร์ - การทำงานระหว่างคอมพิวเตอร์ไคลเอน และเซิร์ฟเวอร์ - ระบบปฏิบัติการ Linux และ Windows - โปรแกรมสื่อสาร และการรับส่งไฟล์อินเทอร์เน็ต ไฟล์อินเทอร์เน็ต และการใช้คำสั่งทางไกล - คณิตศาสตร์กับการคำนวณ และบทบาทของวิธี Least-Square Method - แบบจำลองโมเลกุล (Molecular Modeling) - แบบจำลองสารละลาย | รศ.ดร.วิทยา |

| | | | |
|----|--|--|-------------|
| | | - กรณีศึกษา | |
| 7 | การคำนวณทางเคมีควอนตัม | - การใช้โปรแกรม Gaussian 03 - การคำนวณโครงสร้างโมเลกุล (Structure optimization) - การหาโครงสร้าง (Isomer) - การคำนวณพลังงานการเปลี่ยนแปลงโครงสร้าง | รศ.ดร.วิทยา |
| 8 | การคำนวณทางเคมีควอนตัม (ต่อ) | - พลังงานการเกิดปฏิกิริยาชนิดต่าง ๆ - การคำนวณปฏิกิริยาในตัวทำละลายชนิดต่าง ๆ - กรณีศึกษา | รศ.ดร.วิทยา |
| 9 | ปฏิกิริยากับแทรนซิชันสเตต | - ทฤษฎีแทรนซิชันสเตต - การคำนวณโครงสร้างแทรนซิชันสเตต - ค่าคงที่อัตราเร็ว และค่าคงที่สมดุล - กรณีศึกษา | รศ.ดร.วิทยา |
| 10 | โปรแกรมแสดงภาพ สมบัติของโมเลกุล การคำนวณ IR สเปกตรัม | - การใช้โปรแกรม Molekel 4.3 บนระบบ Windows เพื่อแสดงภาพโมเลกุล และการพลอตความหนาแน่นอิเล็กตรอน การคำนวณดัชนีเคมี (Chemical Index) และการคำนวณ Energy Gaps - การใช้โปรแกรม GaussView 03 ในการแสดง IR สเปกตรัม โดยผลลัพธ์ที่คำนวณได้จากโปรแกรม Gaussian 03 - กรณีศึกษา | รศ.ดร.วิทยา |
| 11 | เคมีคอมพิวเตอร์สำหรับการศึกษาชีวโมเลกุล | - เทคนิคเคมีคอมพิวเตอร์เบื้องต้น โครงสร้างพื้นฐานและองค์ประกอบทางเคมีของสารชีวโมเลกุล - ระดับโครงสร้างของโปรตีน - โปรแกรมและข้อมูลทางโครงสร้างในรูปแบบต่างๆ | รศ.ดร.พรเทพ |
| 12 | ฐานข้อมูล Protein Data | - การสืบค้นโครงสร้างสามมิติของชีวโมเลกุล | รศ.ดร.พรเทพ |

| | | | |
|----|--|--|-------------|
| | Bank (PDB) | จาก PDB - การเรียนรู้และทำความเข้าใจข้อมูลทางโครงสร้างในรูปแบบ PDB - เทคนิคเบื้องต้นในการใช้โปรแกรมสำเร็จรูปเพื่อแสดงภาพ แอนิเมชัน และวิเคราะห์โครงสร้างโมเลกุลของโปรตีน - การเขียนโปรแกรมภาษา UNIX เบื้องต้นสำหรับการสร้างอินพุตและเอาต์พุตจากข้อมูล PDB - ปฏิบัติการ 2 | |
| 13 | ภาษาฟอร์แทรนสำหรับการศึกษาชีวโมเลกุล | - การเขียนโปรแกรมเบื้องต้นสำหรับการสร้างอินพุตและเอาต์พุตจากข้อมูล PDB - การเขียนโปรแกรมแปลงรูปแบบข้อมูล - ปฏิบัติการ 3 | รศ.ดร.พรเทพ |
| 14 | ภาษาฟอร์แทรนสำหรับการศึกษาชีวโมเลกุล (ต่อ) | - การเขียนโปรแกรมเพื่อวิเคราะห์โครงสร้างโมเลกุล - การเขียนโปรแกรมเพื่อเปลี่ยนโคออร์ดิเนต - ปฏิบัติการ 4 | รศ.ดร.พรเทพ |
| 15 | การอินเทอร์เฟสภาษา | - การเขียนชุดคำสั่ง - การเขียนโปรแกรมอินเทอร์เฟส - ปฏิบัติการ 5 | รศ.ดร.พรเทพ |

วิธีการจัดการเรียนการสอน

- การบรรยาย 30 ชั่วโมง/15 ครั้ง/30 คาบ/ร้อยละ 40
- การปฏิบัติการ 45 ชั่วโมง/15 ครั้ง/45 คาบ/ร้อยละ 60
- การบรรยายเชิงอภิปราย
- การระดมสมอง และการอภิปรายกรณีศึกษา
เพื่อให้รู้จักการวิเคราะห์ และการแก้ปัญหา
- การสรุปประเด็นสำคัญ หรือการนำเสนอ
ผลของการสืบค้นหรือผลของงานที่ได้รับมอบหมาย
- อื่นๆ

14.3 สื่อการสอน

- แผ่นใสและแผ่นทึบ
- สื่อนำเสนอในรูปแบบ
- สื่ออิเล็กทรอนิกส์ / เว็บไซต์
- อื่นๆ

14.4 การมอบหมายงาน ผ่านระบบเครือข่าย

14.4.1 กำหนดแบบฝึกหัดการคำนวณบนคอมพิวเตอร์ของภาควิชาเคมี

14.4.2 คอมพิวเตอร์ และอินเทอร์เน็ต

14.5 การวัดผลการเรียน

14.5.1 คะแนนแบบฝึกหัด

14.5.2 คะแนนการเข้าเรียนและงานปฏิบัติการ

14.5.3 รายงานและการสอบวัดผล

14.5.4 อื่นๆ (ไม่มี)

15. รายชื่อหนังสืออ่านประกอบ

15.1 หนังสือบังคับ (ไม่มี)

15.2 หนังสืออ่านเพิ่มเติม (ไม่มี)

15.3 บทความวิจัย/บทความวิชาการ

16. การประเมินผลการสอน

16.1 การประเมินการสอน

- o รูปแบบที่ 4 การสอนแบบการบรรยาย

16.2 การปรับปรุงจากผลการประเมินการสอนครั้งที่ผ่านมา

- o ปรับปรุงแบบฝึกหัด

16.3 การอภิปรายหรือการวิเคราะห์ที่เสริมสร้างคุณลักษณะที่พึงประสงค์ของบัณฑิต

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

- o นิสิตมีศักยภาพในการทำวิจัย
- o นิสิตมีทักษะในการค้นคว้าข้อมูล