

แผนการสอน (Course Syllabus)

ภาคปลาย ปีการศึกษา 2555

1. คณะ ศิลปศาสตร์และวิทยาศาสตร์ สาขาวิชา เคมี

รหัสวิชา 01403345 จำนวนหน่วยกิต 3 (2-3)

ชื่อวิชา (ไทย) การจำลองแบบด้วยคอมพิวเตอร์ในวิชาเคมีและวิศวกรรมเคมี
(อังกฤษ) Computer Simulation in Chemistry and Chemical Engineering

2. เนื้อหารายวิชา (Course Description)

ทฤษฎีพันธะเคมี ระเบียบวิธีแฮมิลตัน เซมิแฮมิลตัน และนอนแฮมิลตัน หลักการและการประยุกต์ของทฤษฎีโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์ และการจำลองแบบด้วยคอมพิวเตอร์ในวิชาเคมีและวิศวกรรมเคมี โดยมีการทดลองโครงงานตามที่กำหนด

3. วัตถุประสงค์ของรายวิชา

- 3.1 เพื่อให้เรียนรู้ความหมายของเทอมต่าง ๆ และความสำคัญของวิชาเคมีคอมพิวเตอร์
- 3.2 เพื่อให้เข้าใจการนำทฤษฎีออร์บิทัลเชิงโมเลกุล และทฤษฎีที่สำคัญอื่น ๆ มาใช้ในการศึกษาระบบที่สนใจ
- 3.3 เพื่อให้เข้าใจระเบียบวิธี และการประมาณต่าง ๆ ทางเคมีคอมพิวเตอร์ และสามารถเลือกใช้ระเบียบวิธีการคำนวณที่เหมาะสมกับระบบที่สนใจศึกษาได้
- 3.4 เพื่อให้สามารถใช้โปรแกรมประยุกต์ทางเคมีคอมพิวเตอร์ในการศึกษาระบบทางเคมีเบื้องต้น

4. หัวข้อวิชา (Course Outline)

บรรยาย

- 1) Introduction-Overview
- 2) Quantum Mechanics
- 3) Hartree-Fock theory, Energy Calculation
- 4) Computing Vibrational Frequencies
- 5) Basis Sets Effect
- 6) Semi-Empirical, Electron Correlation and Post SCF Methods, Density Functional Theory
- 7) High Accuracy Energy Models
- 8) Studying Chemical Reactions and Reactivity
- 9) An Outlook for computational chemistry

ปฏิบัติการ

- 1) ความรู้เบื้องต้นเกี่ยวกับระบบปฏิบัติการ Linux และการเขียน Internal coordinate
- 2) Hydrogen bond system using Gaussian Calculation

- 3) Stability of Molecules and Potential Energy Surface
- 4) Conducting polymer (HOMO-LUMO)
- 5) Basis set Effects and BSSE correction
- 6) Studying Chemical Reaction and Reactivity
- 7) Structure and Catalytic Properties of Petrochemical Catalysts (Adsorption of hydrocarbon on zeolite)
- 8) Structure and Catalytic Properties of Petrochemical Catalysts (Reaction mechanism of hydrocarbon on zeolite)
- 9) Structure and Catalytic Properties of Petrochemical Catalysts (Adsorption of hydrocarbon on zeolite using ONIOM)
- 10) การศึกษาปฏิกิริยาเคมีตามโครงการวิจัยที่สนใจ

5. วิธีสอนและระบบการสอนที่เน้นผู้เรียนเป็นศูนย์กลาง

การบรรยาย อภิปราย ปฏิบัติการ และให้นิสิตศึกษาค้นคว้าด้วยตนเอง ทำรายงาน นำเสนอหน้าชั้นเรียนและการทำโครงการวิจัย

6. อุปกรณ์และสื่อการสอน

เครื่องคอมพิวเตอร์ เครื่องฉายLCD เอกสารประกอบคำบรรยาย ซอฟต์แวร์คำนวณทางเคมี คอมพิวเตอร์ (Gaussian) คอมพิวเตอร์ระบบปฏิบัติการ Linux

7. การวัดผลสัมฤทธิ์ทางการเรียน

7.1 ภาคบรรยาย 50 % แบ่งออกเป็น

- | | |
|---------------|------|
| 1) สอบกลางภาค | 20 % |
| 2) สอบปลายภาค | 30 % |

7.2 ภาคปฏิบัติการ 50 % แบ่งออกเป็น

- | | |
|---------------------------------|------|
| 1) รายงานปฏิบัติการและแบบฝึกหัด | 20 % |
| 2) การนำเสนอโครงการวิจัย | 30 % |

8. การประเมินผลทางการเรียน

ใช้วิธีตัดเกรดแบบอิงเกณฑ์และกลุ่ม

9. การให้โอกาสนอกเวลาเรียนแก่นิสิตเข้าพบ และให้คำแนะนำในด้านการเรียน

ทุกวัน เวลา ที่นิสิตและอาจารย์มีช่วงว่างตรงกัน

10. เอกสารอ่านประกอบ

- 1) Foresman, J. B., and Frisch, A., **Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods**. 2nd Ed., Gaussian, Inc., Pittsburgh, p. 302.
- 2) Jensen, F., **Introduction to Computational Chemistry**. 2nd Ed., John Wiley & Sons, 2007, p 595.
- 3) Atkins, P. W., **Molecular Quantum Mechanics**. 3rd Ed., Oxford University Press, 2001, p 545.
- 4) Cramer, C. J., **Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models**. John Wiley & Sons, LTD, West Sussex, 2002, p 542.
- 5) Leach, A. R., **Molecular Modeling: Principles and Applications**. Addison Wesley Longman Limited., Essex, England, 1996, p 595.

11. งานวิจัยที่เพิ่มเติมใช้ในการเรียนการสอน

- 1) Skeletal Isomerization of 1-Butene over Ferrierite Zeolite: A Quantum Chemical Analysis of Structures and Reaction Mechanisms
C. Wattanakit, S. Nokbin, B. Boekfa, P. Pantu and J. Limtrakul
J. Phys. Chem. C, (2012) 116 (9), 5655-5663
- 2) Selective oxidation of methane to methanol over catalytic Fe-ZSM-5 zeolite: a DFT (M06-L) study
Boekfa, Bundet; Maihim, Thana; Wannakao, Sippakorn; Limtrakul, Jumras
Preprints - ACS, Division of Energy & Fuels (2012), 57(2), 490-494.
- 3) Structure and reaction mechanism of CO₂ hydrogenation to formic acid over copper alkoxide functionalization in metal-organic frameworks
Maihom, Thana; Wannakao, Sippakorn; Boekfa, Bundet; Limtrakul, Jumras
Preprints - ACS, Division of Energy & Fuels (2012), 57(2), 362-365.
- 4) Dehydrogenation of ethanol to acetaldehyde on FeO-embedded graphene: a periodic density functional theory study
Chareunviengnuea, Patipan; Boekfa, Bundet; Maihom, Thana; Wannakao, Sippakorn;
Khongpracha, Pipat; Limtrakul, Jumras
Preprints - ACS, Division of Energy & Fuels (2012), 57(2), 88-89.
- 5) Density functional theory study on catalytic cracking of n-hexane on heteropoly acid: A comparison with acidic zeolite

S. Choomwattana, T. Maihom, B. Boekfa, P. Pantu and J. Limtrakul

Canadian Journal of Chemical Engineering , (2012) 90(4), 865-872.

- 6) Adsorption and Tautomerization Reaction of Acetone on Acidic Zeolites: The Confinement Effect in Different Types of Zeolites
B. Boekfa, P. Pantu, M. Probst, and J. Limtrakul.
J. Phys. Chem. C, 114 (2010) 15061-15067.
- 7) Oxidative Dehydrogenation of Propane over a VO₂-exchanged MCM-22 zeolite: a DFT Study
S. Wannakao, B. Boekfa, P. Khongpracha, M. Probst and J. Limtrakul.
ChemPhysChem, 11 (2010) 3432-3438.
- 8) Effects of the Zeolite Framework on the Adsorption and Hydrogen Exchange Reactions of Unsaturated Aliphatic, Aromatic and Heterocyclic compounds in ZSM-5 Zeolite: A Combination of Perturbation Theory (MP2) and a Newly Developed Density Functional Theory (M06-2X) in ONIOM scheme
B. Boekfa, S. Choomwattana, P. Khongpracha and J. Limtrakul.
Langmuir, 25 (2009) 12990-12999.

12. ตารางกิจกรรมที่เกี่ยวข้องกับการเรียน ประจำภาค ปลาย ปีการศึกษา 2555

บรรยาย ทุกวันจันทร์ เวลา 16.30-18.30 น. ห้อง SC5-301

ปฏิบัติการ ทุกวันศุกร์ เวลา 13.00-16.00 น. ห้อง SC1-104

| สัปดาห์ | วัน-เดือน-ปี | เนื้อหา | กิจกรรม |
|---------------------------------|--------------|--|------------|
| 1 | 5 พ.ย. 55 | Introduction-Overview: Theory, Computational, and Modeling | บรรยาย |
| | 9 พ.ย. 55 | ความรู้เบื้องต้นเกี่ยวกับระบบปฏิบัติการ | ปฏิบัติการ |
| 2 | 12 พ.ย. 55 | Quantum Mechanics, the Variation principle & Perturbation theory | บรรยาย |
| | 16 พ.ย. 55 | การเขียน internal coordinate | ปฏิบัติการ |
| 3 | 19 พ.ย. 55 | Hartree-Fock theory, Energy Calculation | บรรยาย |
| | 23 พ.ย. 55 | Hydrogen bond system using Gaussian (Water interaction) | ปฏิบัติการ |
| 4 | 26 พ.ย. 55 | Computing Vibrational Frequencies | บรรยาย |
| | 30 พ.ย. 55 | Stability of Molecules and Potential Energy Surface | ปฏิบัติการ |
| 5 | 3 ธ.ค. 55 | Basis Sets Effect | บรรยาย |
| | 7 ธ.ค. 55 | Conducting Polymer (HOMO-LUMO) | ปฏิบัติการ |
| 6 | 17 ธ.ค. 55 | Semiempirical methods; Density functional theory (DFT) | บรรยาย |
| | 21 ธ.ค. 55 | Basis Set Effects and BSSE correction | ปฏิบัติการ |
| 22-31 ธ.ค. 55 สอบกลางภาค | | | |
| 7 | 7 ม.ค. 56 | Electron correlation Methods | บรรยาย |
| | 11 ม.ค. 56 | Basis Set Effects and BSSE correction (cont.) | ปฏิบัติการ |
| 8 | 14 ม.ค. 56 | Reaction and Transition State | บรรยาย |
| | 18 ม.ค. 56 | Studying Chemical Reaction and Reactivity (Tautomerization of Acetaldehyde) | ปฏิบัติการ |
| 9 | 21 ม.ค. 56 | Classical Molecular mechanics, Force Fields, Molecular Dynamics | บรรยาย |
| | 25 ม.ค. 56 | Structure and Catalytic Properties of Petrochemical Catalysts (Reaction mechanism of hydrocarbon on Zeolite) | ปฏิบัติการ |
| 10 | 28 ม.ค. 56 | Paper presentation | บรรยาย |
| | 1 ก.พ. 56 | Structure and Catalytic Properties of Petrochemical Catalysts (Adsorption of hydrocarbon on Zeolite using ONIOM) | ปฏิบัติการ |

| | | | |
|---------------------------------|------------|---|------------|
| 11 | 4 ก.พ. 56 | An Outlook for computational chemistry (DFT and ONIOM) | บรรยาย |
| | 8 ก.พ. 56 | Project | ปฏิบัติการ |
| 12 | 11 ก.พ. 56 | An Outlook for computational chemistry (Zeolites) | บรรยาย |
| | 15 ก.พ. 56 | Project | ปฏิบัติการ |
| 13 | 18 ก.พ. 56 | An Outlook for computational chemistry (Graphene & Carbon Nanotube) | บรรยาย |
| | 22 ก.พ. 56 | Project | ปฏิบัติการ |
| 14 | 25 ก.พ. 56 | An Outlook for computational chemistry (Metal Organic Framework) | บรรยาย |
| | 1 มี.ค. 56 | Present Project | ปฏิบัติการ |
| 4-15 มี.ค. 55 สอบกลางภาค | | | |

1. การทบทวนเพื่อปรับปรุงวิธีสอนและระบบการสอนที่เน้นผู้เรียนเป็นศูนย์กลาง

- ไม่ทบทวน
- ทบทวน โดย ไม่แก้ไขปรับปรุง แก้ไขปรับปรุงดังนี้

มีการปรับเปลี่ยนการให้คะแนนโดยเพิ่มคะแนนการทำโครงการ และมีการปรับเปลี่ยนเนื้อหาโดยนำงานวิจัยที่ได้ไปเสนอที่ประชุมต่างประเทศ (American Chemical Society) และงานวิจัยที่ได้ตีพิมพ์ เข้ามาใช้ในการเรียนการสอน

2. การปรับปรุงการสอนจากผลการประเมิน

- ไม่มีการประเมินการสอน ไม่มีปรับปรุง
- มีการประเมินการสอน โดย มีการปรับปรุงดังนี้

3. ผู้สอน

ดร. บุญเดช เบิกฟ้า ห้องพัก 2-323 email: Bundet.b@ku.ac.th

รายงาน ณ วันที่ 5 พฤศจิกายน 2555

ลงชื่อ

(อ.ดร.บุญเดช เบิกฟ้า)

ผู้จัดการรายวิชา 01403345