



Interactive Python Program for Lab Waste
(การจัดการสารเคมีในห้องปฏิบัติการด้วยโปรแกรม Python)
รายวิชา 01159532 การสร้างและใช้สื่อนวัตกรรมการเรียนรู้วิทยาศาสตร์
ภาคเรียนที่ 2/2567

จัดทำโดย

นางสาวกัญจิรา เทียรทอง

รหัสนิสิต 6714650507

นิสิตปริญญาโท สาขาวิชาวิทยาศาสตร์ศึกษา

อาจารย์ผู้สอน

รศ.ดร.พงศ์ประพันธ์ พงษ์โสภณ

มีนาคม 2568

คณะศึกษาศาสตร์ สาขาวิชาวิทยาศาสตร์ศึกษา มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

Interactive Python Program for Lab Waste

(การจัดการสารเคมีในห้องปฏิบัติการด้วยโปรแกรม Python)

1. บริบทและเหตุผล (Introduction)

ห้องปฏิบัติการวิทยาศาสตร์เป็นแหล่งที่มีการใช้สารเคมีหลากหลายชนิด ซึ่งแต่ละชนิดมีคุณสมบัติแตกต่างกัน ทั้งความเป็นกรด-เบส ความสามารถในการละลายน้ำ และผลกระทบต่อสิ่งแวดล้อม การจัดการสารเคมีอย่างไม่ถูกต้องอาจก่อให้เกิดมลพิษทางน้ำและดิน สร้างความเสียหายต่อระบบนิเวศ และอาจเป็นอันตรายต่อสุขภาพของผู้ปฏิบัติงาน ปัจจุบัน หลายห้องปฏิบัติการยังขาดระบบอัตโนมัติที่ช่วยตรวจสอบว่าสารเคมีใดสามารถทิ้งลงอ่างล้างอุปกรณ์ได้อย่างปลอดภัย และสารใดต้องถูกกำจัดด้วยวิธีเฉพาะ การพัฒนาระบบที่สามารถช่วยตรวจสอบและแนะนำแนวทางการจัดการสารเคมีอย่างถูกต้องจึงเป็นสิ่งจำเป็น

2. วัตถุประสงค์ของโครงการ (Objectives)

พัฒนาโปรแกรม Python เพื่อให้นักเรียนตรวจสอบข้อมูลสารเคมี และเรียนรู้วิธีการจัดการสารเคมีอย่างปลอดภัยตามประเภทของเสีย

3. ผลลัพธ์การเรียนรู้ (Learning Outcomes)

หลังจากใช้งานโปรแกรมนี้ นักเรียนจะสามารถ:

1. ระบุและเข้าใจข้อมูลสำคัญของสารเคมี เช่น ชื่อสาร, การละลายน้ำ, ค่า pKa, และประเภทของเสีย
2. เข้าใจวิธีการจัดการสารเคมีอย่างปลอดภัยตามประเภทของเสีย

4. กลุ่มเป้าหมายและการบูรณาการกับการสอนวิทยาศาสตร์ (Target Learners and Integration with Science Teaching)

4.1 ระดับชั้นเรียนหรือกลุ่มผู้เรียน

- นักเรียนระดับชั้นมัธยมศึกษาตอนปลาย

4.2 หัวข้อทางวิทยาศาสตร์/สิ่งแวดล้อมที่ครอบคลุม

- โครงการนี้เชื่อมโยงกับหลักสูตรเคมี ระดับมัธยมศึกษาตอนปลาย โดยโครงการนี้สอดคล้องกับการเรียนรู้เกี่ยวกับคุณสมบัติและการจัดการสารเคมีที่อาจมีผลกระทบต่อสุขภาพและสิ่งแวดล้อม เช่น การศึกษาค่า pKa, การละลายน้ำของสารเคมี และวิธีการกำจัดของเสียอย่างปลอดภัย ซึ่งเป็นเนื้อหาที่เกี่ยวข้องกับการศึกษาความเป็นพิษและการจัดการสารเคมีในห้องปฏิบัติการ

4.3 แนวทางทางวิชาการ/แนวปฏิบัติ

- สามารถบูรณาการเครื่องมือการโค้ดนี้กับบทเรียน โดยใช้ Problem-solving เริ่มต้นจากนักเรียนได้รับโจทย์ปัญหาจากสถานการณ์จริง เช่น "การกำจัดการเคมีนี้จะทำอะไรให้ปลอดภัย?" และใช้โปรแกรมเพื่อหาข้อมูลที่เป็นในการแก้ไขปัญหาเหล่านั้น เช่น การศึกษาคุณสมบัติของสารเคมีและวิธีการกำจัดที่เหมาะสม จากนั้นนักเรียนใช้โปรแกรมในการหาข้อมูลเพื่อวิเคราะห์และตัดสินใจเกี่ยวกับวิธีการจัดการสารเคมีในสถานการณ์จำลอง เช่น การเลือกวิธีการกำจัดที่เหมาะสมตามประเภทของเสีย ซึ่งการบูรณาการเครื่องมือนี้ในบทเรียนสามารถช่วยให้นักเรียนพัฒนาทักษะในการใช้ข้อมูลทางวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยีในการตัดสินใจและแก้ไขปัญหาต่างๆ ที่เกี่ยวข้องกับสารเคมีและการจัดการสิ่งแวดล้อมได้อย่างมีประสิทธิภาพ

5.การออกแบบโครงงานและอัลกอริทึม (Project Design and Algorithm)

5.1 ภาพรวมของโปรแกรม/เครื่องมือ

- อ่านข้อมูลสารเคมีจากไฟล์ CSV ตรวจสอบข้อมูลจากสูตร SMILES, และแสดงโครงสร้างโมเลกุลสามมิติ โดยใช้ไลบรารี ได้แก่ RDKit และ py3Dmol นอกจากนี้ยัง แนะนำวิธีการกำจัดการเคมีอย่างปลอดภัย โดยการตรวจสอบประเภทของเสียและวิธีการกำจัดที่เหมาะสมตามข้อมูลพื้นฐานข้อมูล

5.2 อัลกอริทึมหรือผังงาน (Flowchart)

1. โปรแกรมเริ่มทำงานและรอรับข้อมูลจากผู้ใช้
2. รับข้อมูลจากผู้ใช้ (SMILES) : โปรแกรมขอให้ผู้ใช้กรอกสูตรเคมี SMILES หรือพิมพ์คำว่า "exit" เพื่อออกจากโปรแกรม
3. ดึงข้อมูลสารเคมีจากฐานข้อมูล: โปรแกรมค้นหาข้อมูลสารเคมีจากไฟล์ CSV โดยใช้สูตร SMILES ที่ผู้ใช้กรอก
4. ตรวจสอบข้อมูลสารเคมี: หากพบข้อมูลสารเคมีในฐานข้อมูล โปรแกรมจะแสดงข้อมูลสารเคมีนั้น หากไม่พบข้อมูลโปรแกรมจะแจ้งเตือนว่าไม่มีข้อมูลของสารนี้
5. แสดงโครงสร้างโมเลกุลสามมิติ: โปรแกรมใช้ RDKit และ py3Dmol เพื่อแสดงโครงสร้างโมเลกุลสามมิติของสารเคมีที่ผู้ใช้กรอก
6. ตรวจสอบวิธีการกำจัดการเคมี: โปรแกรมตรวจสอบข้อมูลเกี่ยวกับวิธีการกำจัดการเคมีจากฐานข้อมูล หากข้อมูลการกำจัดการเคมีมีอยู่ โปรแกรมจะแสดงวิธีการกำจัดการเคมีที่เหมาะสม
7. แสดงข้อมูลการกำจัดการเคมี: โปรแกรมแสดงข้อมูลเกี่ยวกับประเภทของเสียและวิธีการกำจัดที่เหมาะสม โปรแกรมจะบอกว่าผู้ใช้สามารถกำจัดการนี้ได้อย่างไร
8. สิ้นสุดการทำงาน: หลังจากแสดงข้อมูลทั้งหมดแล้ว โปรแกรมจะรอให้ผู้ใช้กรอกสูตร SMILES ใหม่หรือลงคำว่า "exit" เพื่อออกจากโปรแกรม

5.3 ฟังก์ชันสำคัญ (Key Functions)

1. `def get_chemical_info(smiles):` ใช้เพื่อดึงข้อมูลสารเคมีจากฐานข้อมูล CSV โดยใช้สูตร SMILES ที่ผู้ใช้กรอก
2. `def show_3D_molecule(smiles):` ใช้เพื่อแสดงโครงสร้างโมเลกุลสามมิติของสารเคมีที่ผู้ใช้กรอก
3. `check_disposal(smiles):` ใช้เพื่อตรวจสอบและแสดงวิธีการกำจัดสารเคมีตามประเภทของเสียและวิธีการกำจัดที่เหมาะสมจากข้อมูลในฐานข้อมูล

5.4 ไลบรารีที่ใช้ (Libraries Used)

1. `py3Dmol` : ใช้สำหรับแสดงโครงสร้างโมเลกุลสามมิติ
2. `pandas` : ใช้สำหรับอ่านและจัดการข้อมูลจากไฟล์ CSV ซึ่งเป็นฐานข้อมูลสารเคมี
3. `rdkit` : ไลบรารีทางเคมีที่ใช้ในการประมวลผลโครงสร้างโมเลกุล

6. การพัฒนาโค้ด (Coding Implementation)

6.1 โค้ด (Code Snippets)

```
import py3Dmol
import pandas as pd
from rdkit import Chem
from rdkit.Chem import AllChem

# โหลดฐานข้อมูลสารเคมีจากไฟล์ CSV
file_path = "lab_chemicals_database_2.csv"
df = pd.read_csv(file_path)

def get_chemical_info(smiles):
    "ดึงข้อมูลสารเคมีจากฐานข้อมูล CSV"
    chem_info = df[df["SMILES"] == smiles]
    if not chem_info.empty:
        return chem_info.iloc[0].to_dict()
    return None
```

อ่านฐานข้อมูลจาก CSV และค้นหาข้อมูลสารเคมีโดยใช้สูตร SMILES

```

import py3Dmol
import pandas as pd
from rdkit import Chem
from rdkit.Chem import AllChem

def show_3D_molecule(smiles):
    "แสดงโครงสร้างโมเลกุลสามมิติ"
    mol = Chem.MolFromSmiles(smiles)
    if mol:
        mol_h = Chem.AddHs(mol)
        AllChem.EmbedMolecule(mol_h, AllChem.ETKDG())
        mol_block = Chem.MolToMolBlock(mol_h)
        viewer = py3Dmol.view(width=400, height=400)
        viewer.addModel(mol_block, "mol")
        viewer.setStyle({"stick": {}, "sphere": {"radius": 0.3}})
        viewer.zoomTo()
        viewer.show()
    else:
        print("❌ ไม่สามารถแสดงโครงสร้าง 3D ได้")

```

ใช้ RDKit สร้างโมเลกุลจาก SMILES ใช้ py3Dmol แสดงโครงสร้างโมเลกุลในรูปแบบ 3D

```

def check_disposal(smiles):
    "ตรวจสอบว่าสารควรทิ้งลงอ่างหรือไม่"
    info = get_chemical_info(smiles)
    if not info:
        print("⚠️ ไม่มีข้อมูลของสารนี้ในฐานข้อมูล!")
        return

    name = info["Name"]
    solubility = info["WaterSolubility"]
    pKa = info["pKa"]
    waste_category = info["WasteCategory"]
    disposal_method = info["DisposalMethod"]

    print(f"📄 ชื่อสาร: {name}")
    print(f"💧 การละลายน้ำ: {solubility} g/L")
    print(f"🔥 ค่า pKa: {pKa}")
    print(f"🗑️ ประเภทของเสีย: {waste_category}")
    print(f"⚠️ วิธีการกำจัด: {disposal_method}")

    if disposal_method.startswith("Neutralize") or disposal_method.startswith("Treat"):
        print("✅ สามารถกำจัดสารนี้ได้ตามขั้นตอนที่เหมาะสม")
    else:
        print("❌ ห้ามทิ้งสารนี้ลงอ่างล้างอุปกรณ์!")
        print("💡 โปรดปฏิบัติตามแนวทางการกำจัดของเสียอันตรายอย่างถูกต้อง")

```

ดึงข้อมูลของสารเคมีทั้ง ค่า pKa ความสามารถในการละลายน้ำ ประเภทของเสีย และวิธีการกำจัด และแสดงแจ้งเตือนถ้าสารเป็นอันตรายและห้ามทิ้งลงอ่าง พร้อมให้คำแนะนำวิธีการกำจัด

```
# รับข้อมูลจากผู้ใช้
while True:
    smiles_input = input("\n กรอกสูตรเคมี SMILES (หรือ 'exit' เพื่อออก): ").strip()
    if smiles_input.lower() == "exit":
        print("👋 ขอขอบคุณที่ใช้โปรแกรม!")
        break
    elif smiles_input:
        check_disposal(smiles_input)
        show_3D_molecule(smiles_input)
    else:
        print("⚠️ กรุณากรอกสูตรเคมีที่ถูกต้อง")
```

วนลูป รับค่า SMILES จากผู้ใช้ และเรียกใช้งานฟังก์ชัน

ถ้าผู้ใช้พิมพ์ "exit" → จบโปรแกรม

6.2 คำอธิบายขั้นตอนหลัก

1. รับค่า SMILES จากผู้ใช้
2. ค้นหาข้อมูลสารเคมีจากฐานข้อมูล CSV
3. ใช้เงื่อนไข (if-else) ในการตรวจสอบวิธีการกำจัดของเสีย
4. แสดงโครงสร้างโมเลกุล 3D
5. ใช้ While True ในการวนลูปรับค่า SMILES จากผู้ใช้แบบต่อเนื่อง จนกว่าผู้ใช้จะพิมพ์ "exit"

6.3 การทดสอบและแก้ไข (Testing and Debugging)

1. ขณะที่รวบรวมข้อมูลเป็นไฟล์ csv. ที่เป็นข้อมูลภาษาไทย และอัปเดตลงบนโปรแกรม ดังภาพ

A	B	C	D	E	F	G
SMILES	Name	MolWeight	pKa	WaterSolubility	WasteCategory	DisposalMethod
O	Water	18.02	15.7	1000	ไม่เป็นอันตราย	สามารถทิ้งลงบ่อน้ำได้
CCO	Ethanol	46.07	15.9	1000	ของเสียทั่วไป	สามารถทิ้งลงบ่อน้ำได้ แต่ต้องพิจารณาปริมาณที่ทิ้ง หากเป็นจำนวนมากอาจต้องมีการบำบัด
CC(=O)C	Acetone	58.08		1000	ของเสียที่ติดไฟง่าย	บำบัดในระบบบำบัดน้ำเสียทางชีวภาพ
C1=CC=CC=C1	Benzene	78.11		0.18	ของเสียที่มีพิษ	ส่งกำจัดไปยังผู้รับบริการตามกฎหมาย เช่น โรงงานบำบัดน้ำเสีย โรงงานเผาของเสีย โรงคัดแยกของเสีย โรงงานฝังกลบของเสีย
C1=CC=C(C(=C1)O)	Phenol	94.11	9.95	8.3	ของเสียที่มีพิษ	ส่งกำจัดไปยังผู้รับบริการตามกฎหมาย เช่น โรงงานบำบัดน้ำเสีย โรงงานเผาของเสีย โรงคัดแยกของเสีย โรงงานฝังกลบของเสีย
ClCCl	Dichloromethane	84.93		1.32	ของเสียที่มีพิษ	ส่งกำจัดไปยังผู้รับบริการตามกฎหมาย เช่น โรงงานบำบัดน้ำเสีย โรงงานเผาของเสีย โรงคัดแยกของเสีย โรงงานฝังกลบของเสีย
ClC1=CC=CC=C1	Chlorobenzene	112.56		0.05	ของเสียที่มีพิษ	ส่งกำจัดไปยังผู้รับบริการตามกฎหมาย เช่น โรงงานบำบัดน้ำเสีย โรงงานเผาของเสีย โรงคัดแยกของเสีย โรงงานฝังกลบของเสีย
OS(=O)(=O)O	Sulfuric Acid	98.08	-3	1000	ของเสียที่เป็นกรด	ระมัดระวังอย่าให้เข้าตาและผิวหนัง
Cl	Hydrochloric Acid	36.46	-6.3	1000	ของเสียที่เป็นกรด	ระมัดระวังอย่าให้เข้าตาและผิวหนัง
[Na+].[OH-]	Sodium Hydroxide	40	13	1000	ของเสียที่เป็นด่าง	ระมัดระวังอย่าให้เข้าตาและผิวหนัง
CC1=CC=CC=C1	Toluene	92.14		0.52	ของเสียที่มีพิษ	ส่งกำจัดไปยังผู้รับบริการตามกฎหมาย เช่น โรงงานบำบัดน้ำเสีย โรงงานเผาของเสีย โรงคัดแยกของเสีย โรงงานฝังกลบของเสีย
N	Ammonia	17.03	9.25	1000	ของเสียที่เป็นด่าง	ระมัดระวังอย่าให้เข้าตาและผิวหนัง
CO	Methanol	32.04	15.5	1000	ของเสียทั่วไป	สามารถทิ้งลงบ่อน้ำได้ แต่ต้องพิจารณาปริมาณที่ทิ้ง หากเป็นจำนวนมากอาจต้องมีการบำบัด

ผลปรากฏว่า ไม่สามารถแสดงผลลัพธ์ได้ เนื่องจาก โปรแกรมไม่รองรับข้อมูลที่เป็นภาษาไทย จึงเป็นข้อมูลเป็นภาษาอังกฤษ จึงจะสามารถรันโปรแกรมได้

A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
SMILES	Name	MolWeight	pKa	WaterSolubility	WasteCategory	DisposalMethod			
O	Water	18.02	15.7	1000	Non-hazardous chemicals	Can be disposed of in the drain			
CCO	Ethanol	46.07	15.9	1000	General waste	Can be disposed of in the drain			
CC(=O)C	Acetone	58.08		1000	Biodegradable organic waste	Should be treated in a biological wastewater treatment system			
C1=CC=CC=C1	Benzene	78.11		0.18	Non-biodegradable organic waste	Should be disposed of by authorized services, such as wastewater treatment plants, waste incineration facilities, waste			
C1=CC=C(C(=C1)O)	Phenol	94.11	9.95	8.3	Non-biodegradable organic waste	Should be disposed of by authorized services, such as wastewater treatment plants, waste incineration facilities, waste			
ClCCl	Dichloromethane	84.93		1.32	Non-biodegradable organic waste	Should be disposed of by authorized services, such as wastewater treatment plants, waste incineration facilities, waste			
ClC1=CC=CC=C1	Chlorobenzene	112.56		0.05	Non-biodegradable organic waste	Should be disposed of by authorized services, such as wastewater treatment plants, waste incineration facilities, waste			
OS(=O)(=O)O	Sulfuric Acid	98.08	-3	1000	Acidic waste	Should be neutralized with a base and then disposed of			
Cl	Hydrochloric Acid	36.46	-6.3	1000	Acidic waste	Should be neutralized with a base and then disposed of			
[Na+].[OH-]	Sodium Hydroxide	40	13	1000	Base waste	Should be neutralized with an acid and then disposed of.			
CC1=CC=CC=C1	Toluene	92.14		0.52	Non-biodegradable organic waste	Should be disposed of by authorized services, such as wastewater treatment plants, waste incineration facilities, waste			
N	Ammonia	17.03	9.25	1000	Base waste	Should be neutralized with an acid and then disposed of.			
CO	Methanol	32.04	15.5	1000	General waste	Can be disposed of in the drain			

7. แนวการนำไปใช้ในชั้นเรียน (Classroom Implementation Plan)

7.1 โครงสร้างบทเรียน (Lesson Outline)

สามารถใช้เป็น เครื่องมือเสริมการเรียนการสอนในวิชาเคมี โดยเฉพาะในหัวข้อการจัดการสารเคมีในห้องปฏิบัติการ เกี่ยวกับ ความปลอดภัยในการใช้สารเคมี และหลักการกำจัดของเสียอันตรายในห้องปฏิบัติการ

7.2 ลำดับขั้นตอนการสอน (Instructional Sequence)

1. ระบุปัญหา

นักเรียนเริ่มต้นด้วยสถานการณ์สมมติ เช่น “หากมีนักวิจัยทำการทดลองและทิ้งสารเคมีบางอย่างลงอ่างโดยไม่ตรวจสอบก่อน” แล้วตั้งคำถามว่า “นักเรียนคิดว่าเป็นการกระทำที่ถูกต้องหรือไม่ เพราะเหตุใด หากเป็นนักเรียนจะอย่างไรในการกำจัดสารเคมีชนิดนั้น” เป็นขั้นกระตุ้นการคิดและช่วยให้นักเรียนเห็นความสำคัญ ตระหนักถึงผลกระทบของการกำจัดของเสียที่ไม่เหมาะสมได้

2. ทดลองใช้ และวิเคราะห์ข้อมูล

อธิบายโค้ด และแนบการป้อนข้อมูลแบบ SMILES เพื่ออำนวยความสะดวกให้นักเรียนได้ใช้โปรแกรมได้ง่ายขึ้น ซึ่งนักเรียนจะได้ข้อมูลสำคัญ เช่น ความสามารถในการละลายน้ำ (Water Solubility), ค่า pKa, ประเภทของเสีย (Waste Category) และวิธีการกำจัด (Disposal Method) จากนั้นพิจารณาว่าสารนั้นสามารถทิ้งลงอ่างได้หรือไม่

3. เสนอแนวทางแก้ไข

จากข้อมูลที่ได้ นักเรียนอภิปรายและเสนอแนวทางกำจัดสารเคมีที่เหมาะสม เช่น การเจือจาง, การปรับสภาพทางเคมี, หรือการส่งกำจัดเป็นสารเคมีที่อันตราย โดยเปรียบเทียบข้อดีข้อเสียของแต่ละแนวทาง

4. สรุปและสะท้อนคิด

นักเรียนสรุปสิ่งที่ได้เรียนรู้ พร้อมสะท้อนว่าหากไม่มีโปรแกรมนี จะหาข้อมูลการกำจัดสารเคมีอย่างไร และผลกระทบของการกำจัดที่ผิดพลาดคืออะไร ซึ่งช่วยเชื่อมโยงบทเรียนเข้ากับสถานการณ์จริง

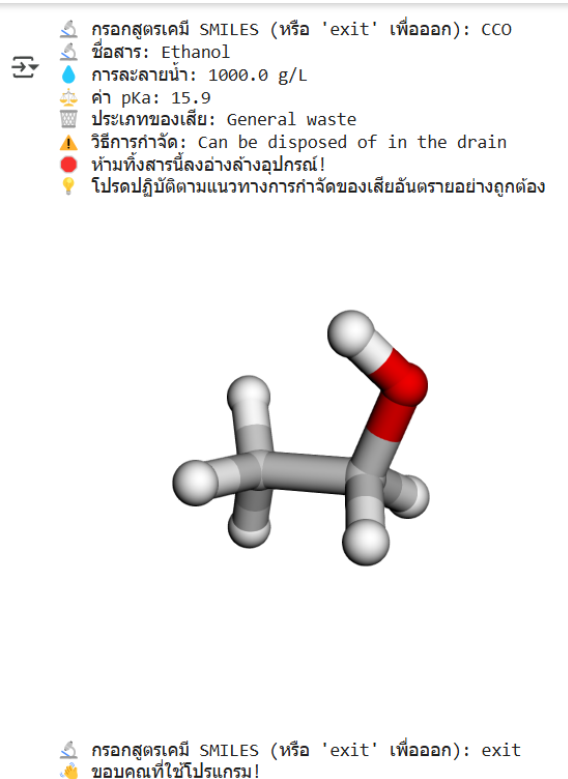
7.3 การประเมิน (Assessment Strategy)

1. การประเมินผลจากการทำกิจกรรม: การประเมินการป้อนข้อมูล SMILES ดูว่านักเรียนสามารถใช้โปรแกรมในการป้อน SMILES ของสารเคมี และดึงข้อมูลสำคัญมาใช้ได้ถูกต้องหรือไม่

2. การประเมินผลจากการอภิปรายกลุ่มและการนำเสนอ เกี่ยวกับแนวทางการกำจัดสารเคมีในห้องเรียน โดยต้องอธิบายได้ว่าเลือกวิธีใดและเหตุผลในการเลือกวิธีนั้น รวมถึงอธิบายว่ามีผลกระทบอย่างไรหากไม่ปฏิบัติตามขั้นตอนการกำจัดที่ถูกต้อง

8. ผลลัพธ์และข้อสังเกต (Results and Observations)

ตัวอย่างผลลัพธ์ที่เกิดขึ้นหลังจากรันโค้ด



เนื่องจากยังไม่มีผลการทดลองใช้กับนักเรียน จึงขอเสนอผลลัพธ์ในเชิงสมมติ ดังนี้

1. ความสนใจของนักเรียน (Student Engagement)

- นักเรียนสนุกกับการใช้โปรแกรมเพื่อวิเคราะห์สมบัติของสารเคมีและดูโมเลกุลในรูปแบบ 3D ซึ่งช่วยกระตุ้นความสนใจในหัวข้อที่อาจดูซับซ้อน เช่น การจัดการสารเคมีและความปลอดภัยในการกำจัดของเสีย พวกเขารู้สึกตื่นเต้นเมื่อเห็นการเปลี่ยนแปลงของโมเลกุลในโครงสร้างสามมิติและได้ลองหาวิธีการกำจัดสารเคมีในห้องปฏิบัติการอย่างถูกต้อง

- นักเรียนบางคนอาจพบปัญหาเกี่ยวกับการป้อนข้อมูล SMILES ของสารเคมีที่บางครั้งมีความซับซ้อน หรือไม่รู้จักคำศัพท์ทางเคมีทั้งหมด ซึ่งอาจทำให้พวกเขารู้สึกท้อใจหากไม่มีการสนับสนุนจากครูในการอธิบายขั้นตอน

2. พัฒนาการด้านการเรียน (Learning Gains)

- หลังจากการใช้โปรแกรม นักเรียนสามารถวิเคราะห์และแยกแยะสารเคมีจากข้อมูลที่โปรแกรมแสดงผลได้ดีขึ้น เช่น การเข้าใจถึง การละลายน้ำ และ ค่า pKa ของสาร รวมถึงการเลือกวิธีการกำจัดที่เหมาะสมกับสารนั้น ๆ นักเรียนที่เคยรู้สึกสับสนกับการใช้ข้อมูลทางเคมีในห้องเรียนจะมีความเข้าใจที่ดีขึ้นจากการใช้โปรแกรมในการจำลองการกำจัดสารเคมีอย่างถูกต้อง

3. อุปสรรคหรือปัญหา (Challenges)

- ปัญหาการเชื่อมต่ออินเทอร์เน็ต

หากโรงเรียนไม่มีการเชื่อมต่ออินเทอร์เน็ตที่เสถียร หรือการเข้าถึงไฟล์ฐานข้อมูลที่โปรแกรมต้องการ การใช้โปรแกรมในห้องเรียนจะเกิดความล่าช้า และนักเรียนอาจไม่สามารถเข้าถึงข้อมูลสารเคมีได้ในเวลาที่ต้องการ

9. สรุปผลและแนวทางในอนาคต (Conclusion and Future Directions)

วัตถุประสงค์หลักของโครงการนี้คือ พัฒนาโปรแกรม Python เพื่อให้นักเรียนตรวจสอบข้อมูลสารเคมี และเรียนรู้วิธีการกำจัดสารเคมีอย่างปลอดภัยตามประเภทของเสีย ซึ่งผลงานสำคัญที่ได้จากโครงการนี้คือการที่นักเรียนสามารถใช้โปรแกรมเพื่อ

- วิเคราะห์ข้อมูลสารเคมีได้จาก SMILES
- ดูการแสดงผลโมเลกุล 3D
- เข้าใจวิธีการกำจัดสารเคมีตามข้อกำหนดความปลอดภัย

แนวทางขยายผลหรือปรับปรุงในอนาคต

- เพิ่มฟีเจอร์ใหม่

ในอนาคตสามารถขยายฟีเจอร์ให้รองรับการใช้งานฐานข้อมูลที่หลากหลายมากขึ้น เช่น การรองรับข้อมูลสารเคมีจากแหล่งข้อมูลโลกจริง ที่สามารถดึงข้อมูลจากฐานข้อมูลสารเคมีที่เป็นมาตรฐาน เช่น PubChem หรือ ChemSpider เพื่อเพิ่มความหลากหลายและความถูกต้องของข้อมูลที่โปรแกรมให้

- การปรับปรุงประสบการณ์ผู้ใช้

การปรับปรุงโปรแกรมให้ง่ายต่อการใช้งานมากขึ้น เช่น การเพิ่มคำแนะนำหรือแนะนำการใช้โปรแกรมให้แก่ผู้ใช้งานมือใหม่ โดยใช้การออกแบบที่เป็นมิตรกับผู้ใช้

- เพิ่มการวิเคราะห์สารเคมีในเชิงลึก

โปรแกรมสามารถพัฒนาให้มีการวิเคราะห์ ผลกระทบต่อสิ่งแวดล้อม หรือ การสังเคราะห์สารเคมี เพื่อนำไปสู่การศึกษาในระดับที่สูงขึ้น

ความเป็นไปได้ในการวิจัยหรือการสอนในภาคเรียนถัดไป

การนำโปรแกรมนี้มาใช้ในภาคเรียนถัดไปจะมีความเป็นไปได้สูง เนื่องจากการเรียนรู้ในปัจจุบันมีการนำเทคโนโลยีมาใช้มากขึ้น นักเรียนสามารถเรียนรู้การใช้โปรแกรมในการวิเคราะห์สารเคมีและประเมินวิธีการกำจัดของเสียจากสารเคมี นอกจากนี้การใช้โปรแกรมนี้อาจยังสามารถนำไปปรับใช้ในหลายๆ หัวข้อของวิชาเคมีได้ เช่น การสอนเกี่ยวกับโครงสร้างของสาร หรือรูปร่างของโมเลกุล โดยการแสดงผล 3D จะช่วยให้เข้าใจได้ง่ายขึ้น และเพิ่มความสนุกสนานในการเรียนรู้



บรรณานุกรม (References)

RDKit. (n.d.). *RDKit: Open-Source cheminformatics software*. Retrieved from

<https://www.rdkit.org/docs/Install.html>

In Silico Chemistry. (n.d.). *Chemistry Visualization with py3Dmol*. Retrieved from

<https://www.insilicochemistry.io/tutorials/foundations/chemistry-visualization-with-py3dmol>

United States Environmental Protection Agency (EPA). (2003). *SMILES: Simplified Molecular Input Line*

Entry System. Retrieved from http://archive.epa.gov/med/med_archive_03/web/html/smiles.html



ภาคผนวก (Appendices)

โค้ดทั้งหมด

The screenshot shows the LabWaste application interface. At the top, there's a navigation bar with the LabWaste logo, a star icon, and a cloud icon. Below it, there's a search bar and a list of items: ไฟล์, แก๊ส, มุมมอง, แทกร, รันใหม่, เครื่องมือ, ความช่วยเหลือ. On the right, there's a user profile icon labeled 'แชร', a Gemini icon, and a 'P' icon. Below the navigation bar, there's a section for 'pip install rdkit' and 'pip install py3Dmol'. The terminal output shows the installation progress for rdkit-2024.9.6 and py3Dmol-2.4.2. Below the terminal output, there's a code editor showing Python code for reading a CSV file and displaying 3D molecular structures.

```

pip install rdkit

Collecting rdkit
  Downloading rdkit-2024.9.6-cp311-cp311-manylinux_2_28_x86_64.whl.metadata (4.0 kB)
Requirement already satisfied: numpy in /usr/local/lib/python3.11/dist-packages (from rdkit) (1.26.4)
Requirement already satisfied: Pillow in /usr/local/lib/python3.11/dist-packages (from rdkit) (11.1.0)
Downloading rdkit-2024.9.6-cp311-cp311-manylinux_2_28_x86_64.whl (34.3 MB)
34.3/34.3 MB 39.6 MB/s eta 0:00:00
Installing collected packages: rdkit
Successfully installed rdkit-2024.9.6

[ ] pip install py3Dmol

Collecting py3Dmol
  Downloading py3Dmol-2.4.2-py2.py3-none-any.whl.metadata (1.9 kB)
  Downloading py3Dmol-2.4.2-py2.py3-none-any.whl (7.0 kB)
Installing collected packages: py3Dmol
Successfully installed py3Dmol-2.4.2

import py3Dmol
import pandas as pd
from rdkit import Chem
from rdkit.Chem import AllChem

# โหลดฐานข้อมูลสารเคมีจากไฟล์ CSV
file_path = "lab_chemicals_database_2.csv"
df = pd.read_csv(file_path)

def get_chemical_info(smiles):
    "ดึงข้อมูลสารเคมีจากฐานข้อมูล CSV"
    chem_info = df[df["SMILES"] == smiles]
    if not chem_info.empty:
        return chem_info.iloc[0].to_dict()
    return None

def show_3D_molecule(smiles):
    "แสดงโครงสร้างโมเลกุลสามมิติ"
    mol = Chem.MolFromSmiles(smiles)
    if mol:
        mol_h = Chem.AddHs(mol)
        AllChem.EmbedMolecule(mol_h, AllChem.ETKDG())
        mol_block = Chem.MolToMolBlock(mol_h)
        viewer = py3Dmol.view(width=400, height=400)
        viewer.addModel(mol_block, "mol")
        viewer.setStyle({"stick": {}, "sphere": {"radius": 0.3}})
        viewer.zoomTo()
        viewer.show()
    else:
        print("❌ ไม่สามารถแสดงโครงสร้าง 3D ได้")
  
```

```

def check_disposal(smiles):
    "ตรวจสอบว่าสารควรทิ้งลงอ่างหรือไม่"
    info = get_chemical_info(smiles)
    if not info:
        print("⚠️ ไม่มีข้อมูลของสารนี้ในฐานข้อมูล!")
        return

    name = info["Name"]
    solubility = info["WaterSolubility"]
    pKa = info["pKa"]
    waste_category = info["WasteCategory"]
    disposal_method = info["DisposalMethod"]

    print(f"📄 ชื่อสาร: {name}")
    print(f"💧 การละลายน้ำ: {solubility} g/L")
    print(f"🔥 ค่า pKa: {pKa}")
    print(f"🗑️ ประเภทของเสีย: {waste_category}")
    print(f"⚠️ วิธีการกำจัด: {disposal_method}")

    if disposal_method.startswith("Neutralize") or disposal_method.startswith("Treat"):
        print("✅ สามารถกำจัดสารนี้ได้ตามขั้นตอนที่เหมาะสม")
    else:
        print("🚫 ห้ามทิ้งสารนี้ลงอ่างล้างอุปกรณ์!")
        print("💡 โปรดปฏิบัติตามแนวทางการกำจัดของเสียอันตรายอย่างถูกต้อง")

# รับข้อมูลจากผู้ใช้
while True:
    smiles_input = input("\n📄 กรอกสูตรเคมี SMILES (หรือ 'exit' เพื่อออก): ").strip()
    if smiles_input.lower() == "exit":
        print("👋 ขอคุณที่ใช้โปรแกรม!")
        break
    elif smiles_input:
        check_disposal(smiles_input)
        show_3D_molecule(smiles_input)
    else:
        print("⚠️ กรุณากรอกสูตรเคมีที่ถูกต้อง")

```

ตัวอย่างการแสดงผล

```

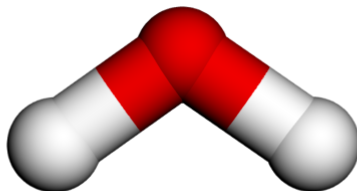
กรอกสูตรเคมี SMILES (หรือ 'exit' เพื่อออก):
⚠️ กรุณากรอกสูตรเคมีที่ถูกต้อง

กรอกสูตรเคมี SMILES (หรือ 'exit' เพื่อออก): ClCCl
ชื่อสาร: Dichloromethane
การละลายน้ำ: 1.32 g/L
ค่า pKa: nan
ประเภทของเสีย: Non-biodegradable organic waste
วิธีการกำจัด: Should be disposed of by authorized services, such as wastewater treatment plants, waste incineration facilities, waste separation plants, or landfills
⚠️ ห้ามทิ้งสารนี้ลงอ่างล้างอุปกรณ์!
💡 โปรดปฏิบัติตามแนวทางการกำจัดของเสียอันตรายอย่างถูกต้อง

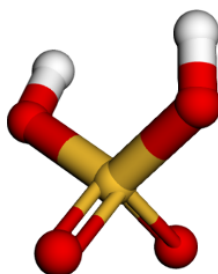
```



...
 กรอกสูตรเคมี SMILES (หรือ 'exit' เพื่อออก): O
 ชื่อสาร: Water
 การละลายน้ำ: 1000.0 g/L
 ค่า pKa: 15.7
 ประเภทของเสีย: Non-hazardous chemicals
 วิธีการกำจัด: Can be disposed of in the drain
 ห้ามทิ้งสารนี้ลงอ่างล้างอุปกรณ์!
 โปรดปฏิบัติตามแนวทางการกำจัดของเสียอันตรายอย่างถูกต้อง



...
 กรอกสูตรเคมี SMILES (หรือ 'exit' เพื่อออก): OS(=O)(=O)O
 ชื่อสาร: Sulfuric Acid
 การละลายน้ำ: 1000.0 g/L
 ค่า pKa: -3.0
 ประเภทของเสีย: Acidic waste
 วิธีการกำจัด: Should be neutralized with a base and then disposed of
 ห้ามทิ้งสารนี้ลงอ่างล้างอุปกรณ์!
 โปรดปฏิบัติตามแนวทางการกำจัดของเสียอันตรายอย่างถูกต้อง



กรอกสูตรเคมี SMILES (หรือ 'exit' เพื่อออก): exit
 ขอบคุณที่ใช้โปรแกรม!