



รายงานวิจัยฉบับสมบูรณ์

เมธีวิจัยอาวุโส สกว.

โครงการ นวัตกรรมวิจัยเพื่อการค้นหาต้านเอดส์ (ระยะที่ 2)
“Innovative Research on Anti-AIDS Drug Discovery (Phase II)”

โดย นางสุภา หารหนองบัว และคณะ

พฤษภาคม 2558

รายงานวิจัยฉบับสมบูรณ์

โครงการ นวัตกรรมวิจัยเพื่อการค้นหายาต้านเอดส์ (ระยะที่ 2)
“Innovative Research on Anti-AIDS Drug Discovery (Phase II)”
”

ผู้วิจัย นางสุภา หารหนองบัว และคณะ
ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์
มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์
จตุจักร กทม. 10900

สนับสนุนโดยสำนักงานคณะกรรมการการอุดมศึกษา
และสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย

(ความเห็นในรายงานนี้เป็นของผู้วิจัยสกอ. และ สกว. ไม่จำเป็นต้องเห็นด้วยเสมอไป)

สารบัญ

เรื่อง	หน้า
บทคัดย่อ	1
ABSTRACT	2
เนื้อหาทางวิจัย	3
OUTPUT ที่ได้จากโครงการ	7
1. ผลงาน	7
1.1 ผลงานตีพิมพ์ในวารสารวิชาการนานาชาติ	
1.2 ผลงานวิชาการตีพิมพ์ในหนังสือ	12
1.3 ความก้าวหน้าในการสร้างทีมวิจัย	13
1.4 การนำผลจากโครงการไปใช้ประโยชน์	18
2. กิจกรรมที่ได้ดำเนินการ	19
2.1 จัดประชุมกลุ่มวิจัย	19
2.2 จัดซื้อวัสดุ สารเคมี ครุภัณฑ์ วิทยาศาสตร์	19
2.3 ประชุมสัมมนากลุ่มวิจัย	19
2.4 เสนอผลงานวิจัยในที่ประชุมวิชาการระดับนานาชาติ	19
2.5 เสนอผลงานวิจัยในที่ประชุมวิชาการระดับชาติ	29
2.6 จัดการสัมมนาพิเศษ	33
3. กิจกรรมอื่นๆ ที่เกี่ยวข้อง	36
3.1 ผลงานอื่นๆ	36
3.2 การได้รับทุนอื่นๆ ทั้งในและต่างประเทศ	39
3.3 กิจกรรมที่เกี่ยวข้องกับการนำผลจากโครงการไปใช้ประโยชน์	49
3.4 การเชื่อมโยงทางวิชาการกับนักวิชาการอื่นๆ ทั้งในและต่างประเทศ	49
3.5 การได้รับทุนการศึกษา	50
4. การจัดประชุมประจำปี	51
5. เอกสารที่ผลิตสื่อ แผ่นพับ เอกสารประชาสัมพันธ์	54
6. ผลงานอื่น ๆ ที่เกี่ยวข้อง	54
7. ความคิดเห็นของผู้วิจัย	55

เอกสารแนบ บทความในวารสารวิชาการระดับนานาชาติ

บทคัดย่อ

โครงการวิจัยได้ศึกษาความสัมพันธ์ระหว่างโครงสร้างและการยับยั้งเอนไซม์การถ่ายแบบ เอช ไอ - 1 และนำไปสู่การออกแบบโครงสร้างสารยับยั้ง รวมทั้งการสังเคราะห์สารใหม่ ผลจากการศึกษาทางโครงการประสบความสำเร็จในการผลิตเอนไซม์การถ่ายแบบเอช ไอ วี-1 ที่มีความสมบูรณ์ และนำไปสู่การศึกษาทดลองทางชีวฟิสิกส์ คือ การพัฒนาวิธีทดสอบการยับยั้งในห้องปฏิบัติการ และจลนพลศาสตร์ของเอนไซม์ และได้ทำการศึกษาสมบัติของการจับกันระหว่างเอนไซม์การถ่ายแบบเอช ไอ วี-1 กับตัวยับยั้ง โดยระเบียบวิธี เอนเอ็มอาร์ สเปกโตรสโคปี สำหรับยาสามกลุ่ม คือ เนวีราพีน (first generation drug) เอฟาไวรีน (second generation drug) และ เอทราไวรีน (third generation drug) และนับเป็นครั้งแรกที่มีการศึกษาระบบดังกล่าวได้เป็นผลสำเร็จ รวมทั้งสารสังเคราะห์ใหม่สองโครงสร้าง ซึ่งถือได้ว่างานวิจัยมีความก้าวหน้าเป็นอย่างมาก ผลจากการทดลองนำไปสู่ความรู้ใหม่ที่บ่งบอกถึงการจับของยาต้านเอดส์ทั้งสามกลุ่มที่มีโครงสร้างและการยับยั้งที่แตกต่างกัน และผลจากเอนเอ็มอาร์ สเปกโตรสโคปี สามารถบอกรูปแบบการจับของตัวยากับเอนไซม์โดยการกำหนดเครื่องหมายผ่านกรดอะมิโน M134 ที่มีความจำเพาะเจาะจง และสามารถนำไปใช้เป็นเทคนิคหนึ่งเพื่อการคัดสรรยาต้านเอดส์ใหม่ในอนาคต โดยสามารถทำนายรูปแบบการจับว่ามีความเหมือนหรือแตกต่างจากยาทั้งสามกลุ่ม ซึ่งจะช่วยลดขั้นตอนในการพัฒนายาได้อีกทางหนึ่ง รวมทั้งได้ศึกษาการหาค่าพลังงานการจับของเอนไซม์การถ่ายแบบเอช ไอ วี-1 กับตัวยาโดยระเบียบวิธี isothermal titration calorimetry (ITC) ซึ่งผลการทดลองสำหรับยาเนวีราพีน พบว่าให้ผลที่ดีและสอดคล้องกับผลทางทฤษฎี นอกจากนี้ ยังได้ดำเนินการศึกษาโครงสร้างผลึกของเอนไซม์ซึ่งจับกับตัวยา โดยเป็นวิธีที่จะนำไปสู่ความเข้าใจเกี่ยวกับการยับยั้งและกลไกการออกฤทธิ์ของสารยับยั้ง เพื่อเปรียบเทียบกับกลไกการจับของสารกับเอนไซม์โดยระเบียบวิธีทางจาลองโครงสร้าง และได้พัฒนา MD Simulations protocol ที่สามารถทำนายค่าพลังงานการจับได้ถูกต้องตรงกับผลของการทดลอง นับว่าเป็นการพัฒนาเทคนิควิธีการจาลองโมเลกุลทางคอมพิวเตอร์ที่มีความสำคัญ ในการดำเนินงานที่ผ่านมาทางโครงการยังได้ออกแบบโครงสร้างโดยวิธี *de novo design* และสังเคราะห์ใหม่ได้จำนวนหนึ่งและอยู่ในระหว่างการทดสอบฤทธิ์ทางชีวภาพ และการจับกับเอนไซม์โดยวิธีเอกซ์เรย์ ซึ่งคาดว่าจะสามารถได้สารต้นแบบที่เป็น fourth generation drug ในอนาคต นอกจากนี้แล้ว ทางโครงการได้พัฒนาความรู้ด้านการทำนายความเป็นพิษของสารโดยทำนายสมบัติ ADMET โดยวิธีเคมีคอมพิวเตอร์ ซึ่งจะช่วยในการคัดสรรสารต้นแบบที่จะนำไปสู่การทดสอบในสัตว์ทดลองได้

โครงการฯ ยังได้ศึกษาความสัมพันธ์ระหว่างโครงสร้างกับการยับยั้งของโรคอื่น ๆ เช่น สารยับยั้งเอนไซม์ดีเอชเอฟอาร์ซึ่งเป็นเป้าหมายของมาลาเรีย สารยับยั้งไวรัสไข้เลือดออก สารยับยั้งวัณโรค สารต้านโรคมะเร็ง สารต้านอนุมูลอิสระ เป็นต้น รวมทั้งศึกษากลไกการเกิดปฏิกิริยาเคมีที่ไม่สามารถทำการทดลองในห้องปฏิบัติการได้ เช่น สารให้แสงฟลูออเรสเซนซ์ พอลิเมอร์เพื่อการพัฒนาฟิล์มบาง วัสดุเพื่อการพัฒนาโซลาร์เซลล์ เป็นต้น โดยสรุป โครงการวิจัยนี้มุ่งสู่การวิจัยและพัฒนาสารยับยั้งเอนไซม์การถ่ายแบบ เอช ไอ วี-1 ที่มีการกลายพันธุ์ โดยนำเอาวิธีวิจัยแบบสหสาขาที่มีความทันสมัยและความก้าวหน้าเทียบเท่าการวิจัยชั้นนำในระดับนานาชาติ เพื่อนำไปสู่สารต้นแบบที่มีศักยภาพสูงเพื่อการจดสิทธิบัตรและเพื่อพัฒนาเป็นยาต้านเอดส์ต่อไป ได้สร้างองค์ความรู้ที่ได้พัฒนาขึ้นในประเทศไทย โดยเฉพาะอย่างยิ่งในสาขา Computer aided molecular design for drug discovery อย่างครบถ้วนทุกด้าน ที่สำคัญที่สุดจะนำไปสู่การพัฒนาประเทศให้มีความยั่งยืนและพึ่งพาตนเองได้ต่อไป

ABSTRACT

Structure-activity relationships of HIV-1 reverse transcriptase and its inhibitors to design the next generation drug, including new synthesized compounds were investigated, leading to biophysical investigation, enzyme assay development and enzyme kinetics investigation. The binding of HIV-1 RT and three generation drugs, including nevirapine (first generation drug), efavirenz (second generation drug) and etravirene (third generation drug) were successfully performed. This can be the first time of investigation based on NMR spectroscopic technique. The obtained results demonstrated an advancement of enzyme-drug interaction that can distinguish the difference of each drug generation. NMR spectroscopic analysis can explain the specificity of drug binding through the labeled M134 amino acid. The finding can be a useful screening technique of new compound in the future, based on the chemical shift pattern differences of each drug generation and reduction of drug screening process. In addition, the energy binding of the enzyme and its inhibitor, such as nevirapine, were also investigated, based on isothermal titration calorimetry (ITC). The results show an agreement between experimental and theoretical investigation. Moreover, x-ray crystallographic study of the enzyme and its inhibitors were also investigated. The understanding of the enzyme structure can give insight into drug-enzyme interaction and its mechanism. In this work, MD Simulations protocol was developed in order to predict the binding energy of enzyme and inhibitors and compared well with experimental results. Some compounds were synthesized based on *de novo* design, and biological activity testing and crystallographic study were performed. The expectation is to obtain the new lead for the fourth generation drug in near future. The predicted toxicity of the compounds, based on ADMET properties was investigated and can also be a helpful technique to screen new lead compound prior to animal testing.

It is worth to mention that structure-activity relationships for molecular targets of some diseases such as DHFR for anti-malarials, anti-Dengue, anti-tuberculosis, anti-cancer, anti-oxidant were also studied. Investigation on kinetics of some chemical reactions which is hardly performed by experiment, is also emphasized. The tasks were focused on fluorescent compounds, thin-film polymers, polymers for solar cell applications. In conclusion, the development of HIV-1 RT inhibitor for mutant enzyme has been investigated based on multidisciplinary approaches and frontier in drug discovery research at international standard. The potential lead compound will be further studied to develop as a next generation anti-AIDS drug. The strength of Computer aided molecular design for drug discovery research has been completely set up in Thailand and help to the sustainable development of the country for future.

สัญญาเลขที่ RTA5380010

โครงการ: นวัตกรรมวิจัยเพื่อการค้นหาต้านเอชไอวี (ระยะที่ 2)

รายงานฉบับสมบูรณ์

ชื่อหัวหน้าโครงการผู้รับทุน : นางสาว ทารทองบัว

รายงานในช่วงตั้งแต่วันที่ 30 สิงหาคม 2553 ถึง วันที่ 30 พฤษภาคม 2558

เนื้อหางานวิจัย

โครงการวิจัยได้บุกเบิกด้านการออกแบบโครงสร้างโมเลกุลยา โดยอาศัยวิธีคำนวณทางเคมีคอมพิวเตอร์ และได้มุ่งเน้นทำงานวิจัยด้านนี้เพื่อศึกษาวิจัยในการจำลองโครงสร้างเอนไซม์ที่เป็นโมเลกุลเป้าหมายเพื่อการใช้ยาในการรักษาโรคต่าง ๆ โดยเฉพาะอย่างยิ่งด้านการรักษาโรคเอชไอวี โรคติดเชื้อที่เป็นปัญหาของประเทศ ตลอดจนวิจัยโมเลกุลเป้าหมาย (Target molecules) ในการพัฒนายาใหม่ และทางกลุ่มวิจัยได้พัฒนาวิธีทดสอบฤทธิ์ทางชีวภาพของเอนไซม์การถ่ายแบบ เอช ไอ วี-1 (HIV-1 RT assay) และการทำนายความเป็นพิษของสาร (Chemical toxicity prediction) และทำการศึกษาค้นคว้าโครงสร้างการจับระหว่างเอนไซม์การถ่ายแบบ เอช ไอ วี-1 ที่จับกับยาในกลุ่ม 1st, 2nd, และ 3rd generation drug โดยวิธีนิวเคลียร์แมกเนติกสเปกโตรสโคปี และศึกษาการพลังงานการจับโดยวิธีไอโซเทอร์มัล ไทเทรชัน นับว่ามีความก้าวหน้าในการเป็นกลุ่มวิจัยที่ศึกษาค้นหาต้านเอชไอวี เป็นอย่างยิ่ง และยังได้ศึกษาความสัมพันธ์ระหว่างโครงสร้างกับการยับยั้งของโรคอื่น ๆ เช่น สารยับยั้งเอนไซม์ดีเอชเอฟอาร์ซึ่งเป็นเป้าหมายของมาลาเรีย สารยับยั้งไวรัสไข้เลือดออก สารยับยั้งวัณโรค สารต้านโรคมะเร็ง สารต้านอนุมูลอิสระ เป็นต้น รวมทั้งศึกษากลไกการเกิดปฏิกิริยาเคมีที่ไม่สามารถทำการทดลองในห้องปฏิบัติการได้ เช่น สารให้แสงฟลูออเรสเซนซ์ พอลิเมอร์เพื่อการพัฒนาฟิล์มบาง วัสดุเพื่อการพัฒนาโซลาร์เซลล์ เป็นต้น โดยสรุป โครงการวิจัยนี้มุ่งสู่การวิจัยและพัฒนาสารยับยั้งเอนไซม์การถ่ายแบบ เอช ไอ วี-1 ที่มีกลายพันธุ์ โดยนำเอาวิธีวิจัยแบบสหสาขาที่มีความทันสมัยและความก้าวหน้าเทียบเท่าการวิจัยชั้นนำในระดับนานาชาติ เพื่อนำไปสู่สารต้นแบบที่มีศักยภาพสูงเพื่อการจดสิทธิบัตรและพัฒนาเป็นยาต้านเอชไอวีต่อไป ได้สร้างองค์ความรู้ที่ได้พัฒนาขึ้นในประเทศไทย โดยเฉพาะอย่างยิ่งในสาขา Computer aided molecular design for drug discovery อย่างครบถ้วนทุกด้านโดยในโครงการมีผลงานวิจัยตีพิมพ์ในวารสารวิชาการนานาชาติจำนวนกว่า 40 เรื่อง ผลงานวิจัยโดยสรุปที่ได้รับจากโครงการมีดังต่อไปนี้

1. ความเข้าใจอันตรกิริยาระหว่างตัวยับยั้งกับเอนไซม์นำไปสู่การออกแบบยาใหม่

การวิจัยและพัฒนายาในปัจจุบันต้องอาศัยระเบียบวิธีทางเคมีคอมพิวเตอร์ และการคำนวณทางเคมีควอนตัม ซึ่งจะช่วยให้เข้าใจกลไกการเกิดปฏิกิริยาในระดับโมเลกุล รวมทั้งการเกิดอันตรกิริยาระหว่างตัวยากับโมเลกุลเป้าหมาย (target molecule) ทั้งนี้ ต้องอาศัยการจำลองโมเลกุลในสามมิติ (three-dimensional molecular modeling) นอกจากนี้แล้ว การศึกษาทางเคมีทฤษฎียังสนับสนุนผลการวิจัยที่ได้จากการทดลอง หรือในทางกลับกัน การศึกษาทางเคมีทฤษฎียังมีส่วนช่วยอธิบายหรือทำนายผลการทดลองบางระบบที่ไม่สามารถศึกษาได้ในทางปฏิบัติ เช่น กลไกการเกิดปฏิกิริยาของ

เอนไซม์ การเกิดพันธะไฮโดรเจน ผลของความเป็นโพลาไรในโครงสร้าง การทำนายสเปกตรัมของโมเลกุลที่ซับซ้อน เป็นต้น และด้วยการพัฒนาด้านวิทยาการคอมพิวเตอร์ และวิทยาการคำนวณ ส่งผลให้การศึกษาโดยวิธีเคมีคอมพิวเตอร์และการจำลองระบบมีความถูกต้องและใกล้เคียงกับระบบจริงมากยิ่งขึ้น และทำให้เกิดการพัฒนาความรู้ทางด้านทฤษฎีพื้นฐานขึ้นอย่างมาก และเป็นส่วนสำคัญในกระบวนการวิจัยด้านการค้นหาและพัฒนา ยา (Drug discovery and development) (ผลงานวิจัยหมายเลข 1-2, 7, 9, 10-12, 14, 19, 22, 26-27, 31-33, 37, 40, และ 42)

จากผลการศึกษาอันตรกิริยาของตัวยับยั้งเอนไซม์การถ่ายแบบ เอช ไอ วี-1 กับตัวยับยั้งนั้น โครงการวิจัยได้นำเอาวิธีคำนวณทางเคมีควอนตัมแบบผสม นับเป็นวิธีใหม่ที่ได้ศึกษาในระบบของเอนไซม์ และมีการอ้างอิงรายงานผลการวิจัยกว่า การคำนวณทางเคมีควอนตัมแบบผสม ในบริเวณที่เกี่ยวข้องกับอันตรกิริยา และบริเวณโครงสร้างที่เหลืออาศัยวิธีคำนวณที่ต่ำกว่า สามารถนำมาประยุกต์ใช้กับตัวยับยั้งภายในบริเวณโพรงการจับได้ และอาศัยการศึกษาเกี่ยวกับโมเดลของเอนไซม์การถ่ายแบบ เอช ไอ วี-1 กับตัวยับยั้ง แสดงให้เห็นว่ามีอันตรกิริยาแบบเฉพาะเจาะจงระหว่างตัวยากับโพรงการจับ ซึ่งนำไปสู่การอธิบายถึงความสามารถในการยับยั้งเอนไซม์

2. การทำนายสมบัติพลวัตและการจับของโมเลกุลโดยวิธีโมเลคิวลาร์ ไดนามิกส์ซิมูเลชัน และวิธีโมเลคิวลาร์ดอกกิง

ส่วนที่มีความสำคัญอีกประการหนึ่งคือ การศึกษาในเรื่องนี้ทำให้เกิดแนวทางในการวิจัยเกี่ยวกับอันตรกิริยาระหว่างตัวยับยั้งกับเอนไซม์โดยวิธีออนเนียม และจะได้นำไปประยุกต์กับตัวยับยั้งอื่น ๆ หรือโมเลกุลเป้าหมายอื่น ๆ ต่อไป วิธีการคำนวณเคมีควอนตัมแบบผสมอีกวิธีหนึ่งคือ Quantum Mechanics and Molecular Mechanics (QM/MM) ซึ่งสามารถนำไปศึกษาในระบบที่มีขนาดใหญ่ เช่น เอนไซม์ได้ จึงนับเป็นครั้งแรกที่มีการศึกษากลไกในการเกิดปฏิกิริยา (mechanistic reaction) ของเอนไซม์ที่เป็นเป้าหมายของโรคต่าง ๆ เช่น มะเร็ง วัณโรค และมาลาเรีย เป็นต้น ซึ่งความเข้าใจดังกล่าวจะเป็นพื้นฐานสำคัญในการออกแบบตัวยับยั้ง ที่มีสมบัติที่ดีสำหรับการค้นหา ยาใหม่ที่มีความจำเพาะต่อการออกฤทธิ์ (ผลงานวิจัยหมายเลข 3-4, 16, 23-25, 28-30, 36, 39, 41 และ 43)

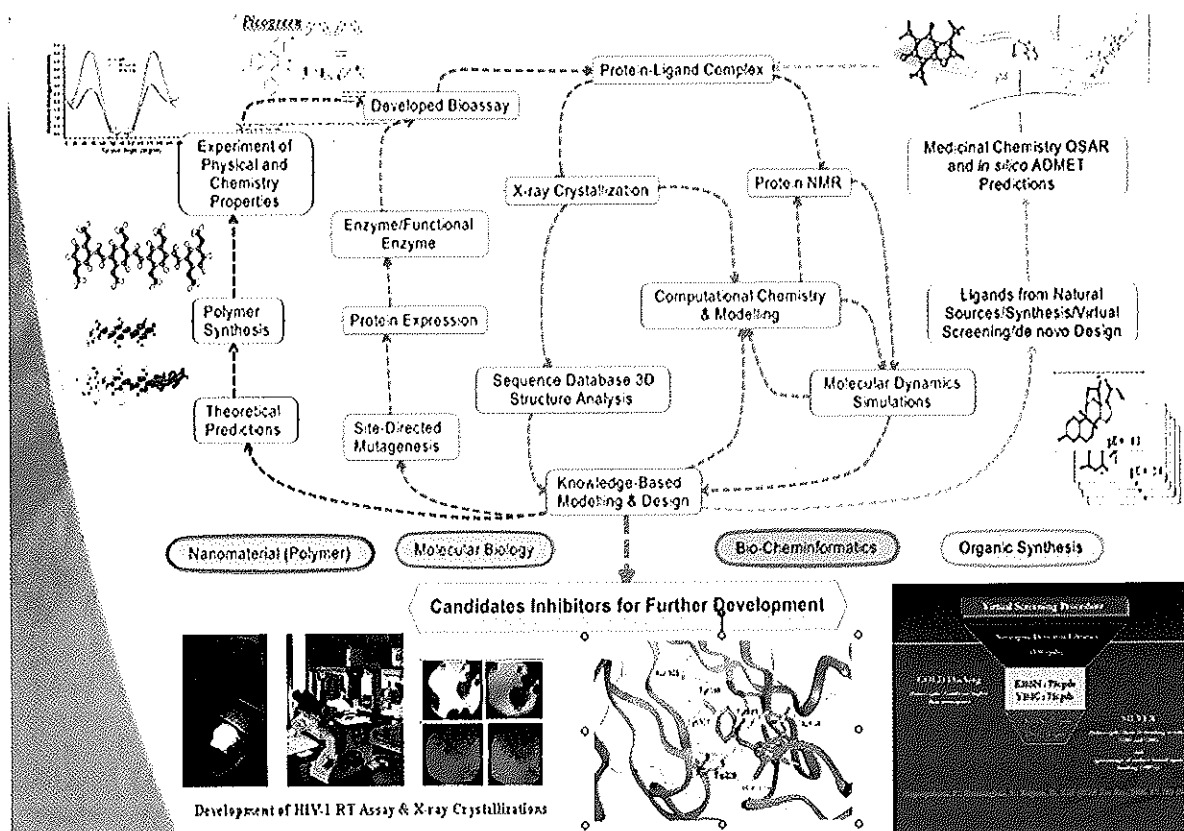
3. นวัตกรรมการศึกษาทางโครงสร้างของเอนไซม์และตัวยับยั้งโดยวิธีทางชีวฟิสิกส์ เอ็น เอ็ม อาร์ สเปกโตรสโคปี

จากการที่โครงการ ฯ ได้เริ่มจัดกลุ่มด้าน Biological research platform โดยมีมุ่งทำการทดลองด้าน biophysical techniques เพื่อสนับสนุนการศึกษาทางทฤษฎี คือ การดำเนินการพัฒนา biological activity assay และ enzyme kinetics study ของเอนไซม์ HIV-1 RT โดยเริ่มจาก enzyme assay ความก้าวหน้าในโครงการนี้คือการศึกษาโครงสร้างของเอนไซม์และตัวยับยั้งโดยวิธีทางชีวฟิสิกส์ ด้วยวิธีเอ็น เอ็ม อาร์ สเปกโตรสโคปี โดยศึกษารูปแบบการเปลี่ยนแปลงเคมีคอลชีพของอะตอมไนโตรเจนในบริเวณการจับของตัวยับยั้ง และมีการเปรียบเทียบระหว่างตัวยับยั้งสามรุ่นคือ เนวราพีน เอฟาเวเรนซ์ และทีเอ็มซี (1st, 2nd and 3rd generation drugs) ผลการศึกษานับว่าเป็นครั้งแรกของการใช้วิธีเอ็น เอ็ม อาร์ กับยาต้านเอชไอวี และสามารถอธิบายการจับของตัวยากับแตกต่างกันในยาทั้งสามรุ่นได้ แนวทางดังกล่าวนี้ อาจนำไปสู่การใช้เทคนิค เอ็น เอ็ม อาร์ ในการพัฒนาระเบียบวิธี Drug screening แนวใหม่ได้ (innovative drug discovery research based

on structural dynamics information) ส่วนการวิจัยเพื่อศึกษาวิจัยโดยวิธีผลึกศาสตร์ (X-ray crystallography) ของ HIV-1 RT/inhibitor complex สำหรับเอนไซม์ที่มีการกลายพันธุ์ ยังไม่สามารถพัฒนาผลึกของ HIV-1 RT ที่จับกับตัวยาคได้ และทางโครงการ ฯ ยังทำงานวิจัยด้านนี้อย่างต่อเนื่อง (ผลงานวิจัยหมายเลข 12 และ 31)

4. การศึกษาความเป็นพิษโดยวิธีการทำนาย ADME/Tox และการทดลอง

ในกระบวนการค้นหา เมื่อได้สารต้นแบบแล้ว ความยากในขั้นตอนต่อไปคือการทดสอบความเป็นพิษ ทั้งนี้ การทำการทดลองในสัตว์ทดลองมีความยุ่งยากมาก และใช้งบประมาณสูง ในโครงการ ฯ จึงสนใจที่จะศึกษาวิธีการทำนายความเป็นพิษของสาร โดยอาศัยสมบัติทาง physicochemical properties คือ การดูดซับ (Adsorption) การกระจาย (Distribution) การเมตาโบไลต์ (Metabolism) และการขับออก (Excretion) รวมทั้ง สมบัติความเป็นพิษ (Toxicity) หรือ ADMET ทั้งนี้ นักวิจัยในโครงการ ฯ ประสบความสำเร็จในการทำนายสมบัติความเป็นพิษโดยใช้ระเบียบวิธีเคมีคำนวณ (ผลงานวิจัยหมายเลข 7, 10, 19) ซึ่งจากการตีพิมพ์ผลงานวิจัยทำให้มีการอ้างอิงค่อนข้างสูง และการทดสอบความเป็นพิษในไขของปลาหมอลาย (ผลงานวิจัยหมายเลข 27) นับว่าเป็นความก้าวหน้าในการวิจัยด้าน Drug discovery research ในประเทศอีกก้าวหนึ่ง



แผนภาพแสดง ความเชื่อมโยงของ research platforms ในกลุ่มวิจัยนวัตกรรมวิจัยเพื่อค้นหา ยาต้านเอชไอวี (Innovative Research on Anti-AIDS Drug Discovery)

5. ศึกษาโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์ของสารที่ให้แสงฟลูออเรสเซนซ์

นอกจากความรู้ทางเคมีทางยาและการออกแบบโมเลกุลที่เกิดขึ้นจากการวิจัยพื้นฐานแล้ว ศึกษาโครงสร้างสารที่มีสมบัติเป็น fluorescence resonance energy transfer materials สำหรับการพัฒนาสารที่ให้แสง fluorescence สำหรับการทดสอบฤทธิ์ทางชีวภาพ ซึ่งอาจนำไปสู่การพัฒนาวิธี high throughput screening technology เพื่อการคัดสรรสารออกฤทธิ์ยับยั้งเอนไซม์ HIV-1 RT bioassay แนวทางใหม่ ที่ให้ผลการทดสอบที่ถูกต้อง แม่นยำ และมีราคาถูก ดังนั้น จึงต้องนำเอาการศึกษาทางเคมีทฤษฎีที่เกี่ยวข้องกับ Molecular recognition on host-guest interaction มารวมในโครงการวิจัย สารที่สนใจคือ สารที่มีโครงสร้างที่สามารถให้แสง fluorescence ที่นำไปสู่การพัฒนาวัตกรรมการใหม่ ๆ ได้ในอนาคต เช่น สาร fluorescent dye ที่ใช้ใน biological assay สารพอลิเมอร์กึ่งตัวนำ สารพอลิเมอร์เพื่อพัฒนา solar cell เป็นต้น

จากการศึกษาความสัมพันธ์ระหว่างสมบัติทางโครงสร้างและอิเล็กทรอนิกส์ที่สภาวะพื้นและสภาวะการถูกกระตุ้นของสารกลุ่มต่าง ๆ ด้วยระเบียบวิธีการคำนวณทางเคมีควอนตัม ทำให้สามารถทำนายความสามารถในการเรืองแสงหลังจากถูกกระตุ้นโดยพิจารณาจากค่า fluorescence lifetime เพื่อที่จะทำความเข้าใจและอธิบายสมบัติต่างๆ ที่ได้จากการทดลองของสาร ความรู้ที่ได้จากงานวิจัยนี้ จะสามารถนำไปอธิบายการดูดกลืนและการเปล่งแสงของสารและใช้เป็นแนวทางในการพัฒนาและออกแบบวัสดุที่มีสมบัติทางแสงที่หลากหลายได้ เช่น การเป็นสารปกป้องยูวี ความเข้าใจในเรื่องการถ่ายโอนอิเล็กตรอน ความเข้าใจในกลไกการถ่ายโอนโปรตรอน นำไปสู่การออกแบบวัสดุหรือสารใหม่ที่มีสมบัติจำเพาะ และนำไปสู่การสังเคราะห์และศึกษาสมบัติการเรืองแสงของวัสดุใหม่เพื่อการใช้ประโยชน์เชิงพาณิชย์ได้ (5, 6, 8, 13, 15, 17, 18, 20, 21, 30, 34, 35, 38 และ 44)

จะเห็นได้ว่า จากโครงการวิจัยที่ได้ดำเนินงานมานั้น ได้สร้างองค์ความรู้ใหม่ให้เกิดขึ้นในวงการวิจัยของประเทศ (body of knowledge) ได้แสดงถึงการมีความคิดริเริ่มสร้างสรรค์ในงานวิจัย (creativity) และมีความเป็นผู้นำด้านวิชาการ (leadership) ดังกล่าวมาแล้ว ผลลัพธ์ที่ได้ นอกเหนือจากผลงานวิจัยที่ได้เผยแพร่และเป็นที่ยอมรับทางวิชาการดังกล่าวมาแล้ว ทางโครงการยังได้สร้างทรัพยากรมนุษย์ที่มีคุณค่าต่อประเทศไทย คือ การสร้างนักวิจัยรุ่นใหม่ที่มีศักยภาพสูงด้านการออกแบบและพัฒนายา ในระดับนักวิจัยหลังปริญญาเอก (14 คน) และบัณฑิตศึกษาทั้งในระดับปริญญาโท-เอก (30 คน) สร้างทีมวิจัยกลุ่มย่อยที่มีความสามารถสูงและเป็นนักวิจัยมืออาชีพ โดยแต่ละกลุ่มนั้น นักวิจัยจะมีการเชื่อมโยงความรู้เฉพาะทางเข้าด้วยกัน ด้วย

6. งานวิจัยในอนาคต

เนื่องจากมีโรคไวรัสที่ระบาดอยู่มาก การค้นหาใหม่ที่มีประสิทธิภาพสูง ยังมีความจำเป็นที่ต้องดำเนินการวิจัยและพัฒนาอยู่อย่างไม่มีที่สิ้นสุด ความเข้าใจพื้นฐานและพฤติกรรมต่าง ๆ ในระดับโมเลกุลและระดับอิเล็กทรอนิกส์ของเป้าหมายของโรค จึงมีความจำเป็นเพื่อให้สามารถเตรียมการป้องกันและแนวทางหายาเพื่อการรักษาโรคในอนาคต ที่เป็นไปตามทิศทางที่สอดคล้องกับกระแสโลกอีกด้วย ในส่วนของการออกแบบโครงสร้างของโมเลกุลยาซึ่งกำลังดำเนินอยู่นั้น โครงการวิจัยได้มีความร่วมมือกับกลุ่มนักวิจัยเคมีสังเคราะห์เพื่อทำการสังเคราะห์สาร และนำสารไปทดสอบฤทธิ์ทางชีวภาพ ผลงานวิจัยที่ได้รับจะก่อประโยชน์ต่อการสร้างความรู้ในแง่ของการตีพิมพ์ผลงานวิจัยในวารสารระดับ

นานาชาติ พัฒนางานวิจัยซึ่งอาจนำไปสู่การพบสารออกฤทธิ์ที่ต่อต้านเอนไซม์ที่มีการกลายพันธุ์ซึ่งอาจนำไปสู่การจดสิทธิบัตร รวมทั้งการสร้างนักวิจัยรุ่นใหม่ที่มีศักยภาพสูงในระดับปริญญาโทและเอกด้านเคมีคอมพิวเตอร์และเคมีทางยา (Medicinal chemistry) ในประเทศไทย ซึ่งขณะนี้กำลังได้รับการสนับสนุนให้เกิดความร่วมมือและการพัฒนางานวิจัยแบบมีทิศทาง เพื่อให้เกิดความเข้มแข็งด้านวิชาการ และนำความรู้ที่ได้รับไปพัฒนาเคมีทางยา และสร้างความยั่งยืนให้แก่ประเทศต่อไป

OUTPUT ที่ได้จากโครงการ

1. ผลงาน (ตีพิมพ์รวม 40 เรื่อง)

1.1 ผลงานตีพิมพ์ในวารสารวิชาการนานาชาติ 40 เรื่อง (รายละเอียด ตามเอกสารแนบ), to be submitted 3 เรื่อง

1. Saparpakorn, P.*, Wolschann, P., Karpfen, A., Pungpo, P., and Hannongbua, S., Systematic investigation on the binding of GW420867X as HIV-1 reverse transcriptase inhibitor, Monatsh. Chemie., 142(9), 961-971 (2011) (IF 2012 = 1.629)
2. Boonsri, P., Kuno, M. and Hannongbua, S.*, Key interaction of the mutant HIV-1 Reverse Transcriptase/Efavirenz: an evidence obtained from ONIOM method, Med. Chem. Comm., 2, 1181-1187 (2011) (IF 2012 = 2.722)
3. Somboon, T., Gleeson, M.P.*, and Hannongbua, S., Insight into the reaction mechanism of cis,cis-muconate lactonizing enzymes: a DFT QM/MM study, J. Mol. Mod., 18, 525-531 (2012) (IF 2012 = 1.984)
4. Sawatdichaikul, O., Hannongbua, S., Sangma, C., Wolschann, P., and Choowongkomon, K.*, In silico screening of epidermal growth factor receptor (EGFR) in the tyrosine kinase domain through a medicinal plant compound database, J. Mol. Mod., 18, 1241-1254 (2012) (IF 2012 = 1.984)
5. Treesuwan, W., Hajime, H., Morokuma, K., and Hannongbua, S.*, Characteristic vibration patterns and protein binding of odor compounds from bread baking volatiles upon protein binding density functional and ONIOM study and principle component analysis, J. Mol. Mod., 18, 2227-2240 (2012) (IF 2012 = 1.984)
6. Suramitr, S.*, Phalinyot, S., Wolschann, P., Fukuda, R., Ehara, M., and Hannongbua, S., Photophysical properties and photochemistry of EE-, EZ-, and ZZ-1,4-dimethoxy-2,5-bis[2-(thien-2-yl)ethenyl] benzene in solution: Theory and experiment, J. Phy. Chem. A, 116, 924-937 (2012). (IF 2012=2.771)
7. Gleeson, M. P.*, Modi, S., Bender, A., Marchese Robinson, R. L., Kirchmair, J., Promkatkaew, M., Hannongbua, S., Glen. R. C. The challenges involved in

- Modeling Toxicity Data in silico: A Review. *Curr. Pharm. Des.* 18, 1266-1291 (2012). (IF 2012 = 3.311)
8. Suramitr, S.*, Piriyaagagoon, A., Wolschann, P., and Hannongbua, S., Theoretical Study on the Structures and Electronic Properties of Oligo(p-Phenylenevinylene) Carboxylic Acid and Its Derivatives: Effects of Spacer and Anchor Groups, *Theor. Chem. Account*, 131(4), 1209 (2012). (IF 2012 = 2.233)
 9. Pankwang, A., Hannongbua, S., Pungpo, P.*, Molecular Dynamics simulations of azanaphthoquinone annelated pyrrole derivatives as anticancer agent in DNA duplex, *Int. J. Quant. Chem.*, 113 (4), 542-554 (2013). (IF 2012 = 1.302)
 10. Promkatkaew, S., Suramitr, S., Karpkird, T., Ehara, S., Hannongbua, S.* Absorption and emission properties of various substituted cinnamic acids and cinnamates, based on TDDFT investigation, *Int. J. Quant. Chem.*, 113 (4), 555-562 (2013). (IF 2012 = 1.306)
 11. Saparpakorn, P., Kobayashi, M., Hannongbua, S., Nakai, H.*, Divide-and-conquer based quantum chemical study for interaction between HIV-1 reverse transcriptase and MK-4965 inhibitor *Int. J. Quant. Chem.*, 113 (4), 510-517 (2013). (IF 2012 = 1.306)
 12. Boonsri, P., Olson, A.L., Neumann, T.S., Cai, S., Herdendorf, T.J., Miziorko, H.M., Hannongbua, S.*, and Sem, D.S.*, Molecular Docking and NMR Binding Studies to Identify Novel Inhibitors of Phosphomevalonate Kinase, *Biochem. Biophys. Res. Com.*, 430(1), 313-319 (2013). (IF 2012 = 2.406)
 13. Prajongtat, P., Suramitr, S., Gleeson, M.P., Mitsuke, K., and Hannongbua, S.*, Enhancement of the Solubility, Thermal Stability, and Electronic Properties of Carbon Nanotubes Functionalized with MEH-PPV: A Combined Experimental and Computational study, *Monatshfte fuer Chemie*, 144(7), 925-935 (2013). (IF 2012 = 1.629)
 14. Prajongtat, P., Promyothee, D., and Hannongbua, S.*, Key Role of Hydrazine to the Interaction between Oxaloacetic against Phosphoenolpyruvic Carboxykinase (PEPCK): ONIOM Calculations, *J.Mol.Mod.*, 19(8), 3165-3174 (2013). (IF 2012 = 1.984)
 15. Kungwan, N.*, Daengngern, R., Piansawan, T., Hannongbua, S., and Barbatti, M., Theoretical study on excited-state intermolecular proton transfer reactions of 1H-pyrrolo[3,2-h]quinoline with water and methanol, *Theor. Chem. Acc.*, 132, 1397 (2013). (IF 2012 = 2.233) DOI 10.1007/s00214-013-1397-x
 16. Kamsri, P., Punkvang, A., Pongprom, N., Srisupan, A., Saparpakorn, P., Hannongbua, S., Wolschann, P., Pungpo, P.*, Key structural features of azanaphthoquinone annelated pyrrole derivative as anticancer agents based

- on the rational drug design approaches, *Molecular Informatics* 32 (5-6) , 541-554 (2013). (IF 2012 = 2.338)
17. Daengngern, R., Kerdpol, K., Kungwan, N.*, Hannongbua, S., and Barbatti, M., Dynamics simulations of excited-state triple proton transfer in 7-azaindole complexes with water, water-methanol and methanol, *J. Photochem Photobio A:Chemistry*, 266 , 28-36 (2013). (IF 2012 = 2.416)
 18. Promkatkaew, M., Suramitr, S., Karpkird, T., Wanichwecharungruang, S., Ehara, M., and Hannongbua, S.*, Photophysical Properties and Photochemistry of Substituted Cinnamates and Cinnamic Acids for UVB Blocking: Effect of Hydroxy, Nitro, and Fluoro Substitutions at ortho, meta, and para Positions, *Photochemical & Photobiological Sciences*, 13, 583 January (2014). (IF 2013 = 2.939).
 19. Promkatkaew, M. Gleeson, D. Hannongbua, Supa, Gleeson, M. P.*, Skin Sensitization Prediction Using Quantum Chemical Calculations: A Theoretical Model for the SNAr Domain, *Chemical Research in Toxicology*, 27(1), 51-60 (2014) (IF 2013 = 4.19)
 20. Okoshi, M., Saparpakorn, P., Takada, Y., Hannongbua, S., and Nakai, H., Theoretical Study on the Selective Fluorescence of PicoGreen: Binding Models and Photophysical Properties, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 87(2), 267-273 (2014). (IF 2013 = 2.222)
 21. Kungwan, N., Kerdpol, K., Daengngern, R., Hannongbua, S., Barbatti, M., Effects of the second hydration shell on excited-state multiple proton transfer: dynamics simulations of 7-azaindole:(H₂O)₁₋₅ clusters in the gas phase, *Theoretical Chemistry Accounts*, 133, 1480, March (2014) (IF 2013 = 2.143)
 22. Rungrotmongkol, T., Mulholland, A.J., and Hannongbua, S.*, QM/MM simulations indicate that Asp185 is the likely catalytic base in the enzymatic reaction of HIV-1 reverse transcriptase, *Med. Chem. Commun.*, 5 (5), 593 – 596, April (2014) DOI:10.1039/C3MD00319A. (IF 2013 = 2.626)
 23. Somboon, T., Ochial, J., Treesuwan, W., Gleeson, M.P., Hannongbua, S.* and Mori, S.*, Mechanistic insights into the catalytic reaction of plant allene oxide synthase (pAOS) via QM and QM/MM calculations, *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 52, 20-29, (July) (2014). DOI: 10.1016/j.jmgm.2014.05.012 (IF 2013 = 2.002)
 24. Kamsri, P., Punkvang, A., Saparpakorn, P., Hannongbua, S., Irle, S., and Pungpo, P.*, Elucidating the structural basis of diphenyl ether derivatives as highly potent enoyl-ACP reductase inhibitors through molecular dynamics simulations and 3D-QSAR study, *J. Mol Mod.*, 20, 2319 (2014). DOI 10.1007/s00894-014-2319-0 (IF 2013 = 1.867)

25. Mokmak W, Chunsriviro S, Hannongbua S, Yuthavong Y, Tongsimma S, Kamchonwongpaisan S.* Molecular Dynamics of Interactions between Rigid and Flexible Antifolates and Dihydrofolate Reductase from Pyrimethamine-Sensitive and Pyrimethamine-Resistant Plasmodium falciparum. *Chem Biol Drug Des.* 84(4), 450-61, (October) (2014) (Impact Factor 2013 = 2.507)
26. Chainukool, S., Goto, M., Hannongbua, S., and Shotipruk, A.*, Subcritical Water Extraction of Resveratrol from Barks of *Shorea Roxburghii* G. Don. *Separation Science and Technology*, 49, 13, 2014 DOI:10.1080/01496395.2014.905595 (IF 2013 = 1.2)
27. Jungtanasombut, W., Preeprem, P., Kovitvadhi, U., Hannongbua, S.*, and Kovitvadhi, S., Effects of Reactive Red 239 on Morphological Development of Zebrafish (*Danio rerio*) Embryos, *Kasetsart J. (Nat. Sci.)* 48: 619 – 628 (2014).
28. Chen, C. J., Jiang, R., Wang, G., Jiao, R. H., Tanchaoen, C., Sudto, K., Vajaro Thai, S., Hannongbua, S., Ge, H.M., Tan, R.X., Oligostilbenoids with Acetylcholinesterase Inhibitory Activity from *Dipterocarpus alatus*. *Planta Med.* 80: 1641 – 1646 (2014) (IF 2013 = 2.35). DOI: 10.1055/s-0034-1383194
29. Phuangsawai, O., Hannongbua, S., Gleeson, M.P.*, Elucidating the Origin of the Esterase Activity of Human Serum Albumin using QM/MM Calculations, *J.Phys. Chem. B*, 2014, 118 (41), 11886-11894. (IF 2013 = 3.377)
30. Treesuwan, W.*, Suramitr, S., and Hannongbua, S., Elucidation of hydroxyl groups-antioxidant relationship in mono- and dihydroxyflavones based on O-H bond dissociation enthalpies, *J. Mol. Graph. Mod.* 21: 137 (2015). (IF 2013 = 2.022)
31. Thammaporn, R., Yagi-Utsumi, M., Yamaguchi, T., Boonsri, P., Saparpakorn, P., Choowongkomon, K., Techasakul, S., Kato, K., and Hannongbua, S.*, NMR analysis of [methyl-13C]methionine HIV-1 reverse transcriptase binding to the first, second and third generation NNRTIs, *Sci. Rep.* (2015), revised.
32. Sudto, K., Tanchaoen, C., Thammaporn, R., Phromyothin, D., Jankam, C., Qin, Yan-Hua, Vajrodaya, S., Techasakul, S., Ingkaninan, K., Ge, Hui-Ming, Tan, Ren-Xiang, and Hannongbua, S.* Resveratrol oligomers from stem bark of Thai Dipterocarpaceous plant (*Shorea roxburghii* G. Don), to be submitted (2015).
33. Boonyarat, W., Treesuwan, W., Saparpakorn, P., Choowongkomol, K., and Hannongbua, S.* Distribution and dynamics of retinol, α -tocopherol and phylloquinone into Dipalmitoyl(phosphatidylcholine (DPPC) bilayer by MD simulations, to be submitted (2015)

34. Prajongtat, P., Sriyab, S., Suramitr, S., and Hannongbua, S.*, Low-Temperature Solution-Processed Carbon Nanotubes Encapsulated with Ferrocene, to be submitted (2015).

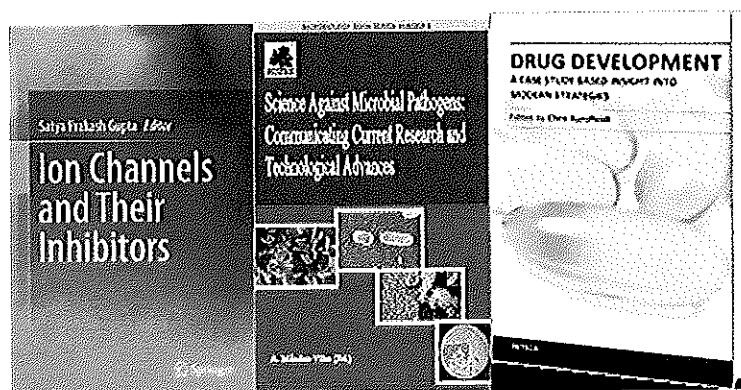
1.2 ผลงานตีพิมพ์ในวารสารวิชาการนานาชาติ 9 เรื่อง

35. Suwanruji, P.*, Chuaybamrung, L., Suesat, J., Hannongbua, S., Taylor, J.A., Phillips, D.A.S., Study of the removal of a disperse dye stain from a polyester/elastane blend, *Coloration Technology*, 128(2), 103-107 (2012). (IF 2012 = 0.899).
36. Jaisamut, S.*, Prabpai, S., Tancharoen, C., Yuenyongsawad, S., Hannongbua, S., Kongsaree, P., Plubrukarn, A.* Bridged tricyclic sesquiterpenes from the tubercle nudibranch *Phyllidia coelestis* Bergh *J. Nat. Prod.*, 76 (11) 2158-2161 November (2013). (IF 2012 = 3.285) [dx.doi.org/10.1021/np4007074](https://doi.org/10.1021/np4007074)
37. Nawae, W., Hannongbua, S., and Ruengjitchatchawalya, M.*, Defining the membrane disruption mechanism of kalata B1 via coarse-grained molecular dynamics simulations, *Sci. Rep.*, 4, 3933 (2014). DOI:10.1038/srep03933. (IF 2013 = 5.078)
38. Boonyavong, N., Suwanruji, P., Hannongbua, S., Li, F., Sun, L., and Karpkird, T.*, Synthesis, electrochemistry and photo-induced electron transfer of unsymmetrical dinuclear ruthenium osmium 2,2'-bipyridine complexes, *J. Photochem Photobiol A: Chemistry*, 287(1), 40-48, (August) (2014). (IF 2013 = 2.291)
39. Aeksiri, N., Songtawee, N., Gleeson, M.P., Hannongbua, S., Choowongkamon, K.*, Insight into HIV-1 reverse transcriptase–aptamer interaction from molecular dynamics simulations, *J. Mol. Mod.* 20:2380 (2014). (IF 2013 = 1.867) (DOI 10.1007/s00894-014-2380-8)
40. Punkhang, A., Saparpakorn, P., Hannongbua, S., Wolschann, P., Irle, S., Pungpo, P.* Key structures and interactions for binding of *M. tuberculosis* protein kinase B inhibitors based on molecular dynamics simulation, *Chem Bio Drug Des.*, Article first published online : 24 NOV 2014, DOI: 10.1111/cbdd.12465 (2014). (Impact Factor 2013 = 2.507)
41. Nawae, W., Hannongbua, S., and Ruengjitchatchawalya, M.*, Dynamic Scenario of Membrane Binding Process of Kalata B1. *PLOS One*, DOI:10.1371/journal.pone.0114473, online December 2014 (IF 2013 = 2.534)
42. Kamsri, P., Punkvang, A., Hannongbua, S., Saparpakorn, P. and Pungpo, P., Elucidating structural basis of benzofuran pyrrolidine pyrazole derivatives for enhancing potency against both the InhA enzyme and intact *M. tuberculosis* cells: a combined MD simulations and 3D-QSAR study, *RSC Adv.*, 2015, 5, 52926–52937 (IF 2014 = 3.84)

43. Jitnonom, J., Kungwan, N.*, and Hannongbua, S., A DFT study of the unusual substrate-assisted mechanism of *Serratia marcescens* chitinase B reveals the role of solvent and mutational effect on catalysis, *J. Mol. Graph. Mod.* 56: 53-59 (2015). (IF 2013 = 2.022)

1.2 ผลงานวิชาการตีพิมพ์ในหนังสือ

- 1.2.1 Hannongbua, S., Treesuwan, W and Boonyarat, W. “Advanced Molecular Modeling Techniques Applied to Ion Channels Blockers”. In **Ion Channels and Their Inhibitors**, Satya Prakash Gupta (Ed), Springer, New York, ISBN: 978-3-642-19921-9, DOI: 10.1007/978-3-642-19922-6, pp. 53-78, 2011.
- 1.2.2 Punkvang, A., Kamsri, P., Kumkong, A., Kunasa1, K., Saparpakorn, P., Hannongbua, S., Wolschann, P., Pungpo, P.* “The structural requirement of direct InhA inhibitors for high potency against *M. Tuberculosis* based on computer aided molecular design”. In **Science against microbial pathogens: communicating current research and technological advances**. Antonio Méndez-Vilas (Ed.), Formatex Research Center Publisher, Volume 1, ISBN (13): 978-84-939843-1-1, pp. 160-168, December 2011.
- 1.2.3 Punkvang, A., Kamsri, P., Kunasa, K., Saparpakorn, P., Hannongbua, S., Wolschann P. and Pungpo, P. “Insight into the key structural features of potent InhA inhibitors based on computer aided molecular design”. In **Drug Development – A Case Study Based Insight into Modern Strategies**, InTech. ISBN 978-953-307-257-93, pp. 259-278, 2011.



1.3 ความก้าวหน้าในการสร้างทีมวิจัย

ในโครงการวิจัยมีนักวิจัยที่เกี่ยวข้องในงานวิจัย จำนวน 27 ท่าน จาก 17 หน่วยงาน ประกอบด้วยนักวิจัยอาวุโสจำนวน 3 ท่าน นักวิจัยรุ่นกลาง จำนวน 10 ท่าน และนักวิจัยรุ่นใหม่ซึ่งยังคงเป็นนักวิจัยหลังปริญญาเอก จำนวน 14 คน อีกทั้ง มีนักศึกษาปริญญาเอก จำนวน 17 คน นักศึกษาระดับปริญญาโท จำนวน 7 คน นักศึกษาระดับปริญญาตรี จำนวน 3 คน และผู้ช่วยนักวิจัย จำนวน 2 คนรายละเอียด ดังนี้

ลำดับที่	ชื่อ นามสกุล	หน่วยงาน	
นักวิจัยอาวุโส			
1	ศ. ดร. สุภา ทารหนองบัว	ภาควิชาเคมี มหาวิทยาลัย เกษตรศาสตร์ (วิทยาเขต บางเขน)	
2	รศ. ดร. สุพรรณา เตชะสกุล	ภาควิชาเคมี มหาวิทยาลัย เกษตรศาสตร์ (วิทยาเขต บางเขน)	
3	รศ. ดร. วราภรณ์ พาราสุข	ภาควิชาเคมี มหาวิทยาลัย เกษตรศาสตร์ (วิทยาเขต บางเขน)	
นักวิจัยรุ่นกลาง			
4	รศ. ดร. ลักขณา หล่อตระกูล	ภาควิชาวิศวกรรมและเทคโนโลยีเคมีชีวภาพ สถาบันเทคโนโลยีนานาชาติสิรินธร มหาวิทยาลัยธรรมศาสตร์	

นักวิจัยรุ่นกลาง(ต่อ)

5 ผศ. ดร. พรพรรณ พึ่งโพธิ์

ภาควิชาเคมี
มหาวิทยาลัย อุบลราชธานี



6 ผศ. ดร. เกียรติทวี ชวงศ์โกมล

ภาควิชาชีวเคมี
มหาวิทยาลัย เกษตรศาสตร์
(วิทยาเขต บางเขน)



7 ผศ. ดร. พจนารถ สุวรรณรุจิ

ภาควิชาเคมี
มหาวิทยาลัย เกษตรศาสตร์
(วิทยาเขต บางเขน)



8 ผศ. ดร. มะยุไซะ กุโน

ภาควิชาเคมี
มหาวิทยาลัย ศรีนครินทรวิโรฒ



9 ผศ.ดร.พัชรินทร์ ทรัพย์อากาศ

ภาควิชาเคมี
มหาวิทยาลัย เกษตรศาสตร์
(วิทยาเขต บางเขน)



10 ผศ.ดร. ทรงวุฒิ สุรมิตร

ภาควิชาเคมี
มหาวิทยาลัย เกษตรศาสตร์
(วิทยาเขต บางเขน)



11 ดร. แมทธิว พอล กลีสัน

ภาควิชาเคมี
มหาวิทยาลัย เกษตรศาสตร์
(วิทยาเขต บางเขน)



12 ผศ.ดร. อิตินันท์ กาพย์เกิด

ภาควิชาเคมี
มหาวิทยาลัย เกษตรศาสตร์
(วิทยาเขต บางเขน)



- 13 ดร. นาวิ กังวาลย์ ภาควิชาเคมี
มหาวิทยาลัยเชียงใหม่



นักวิจัยรุ่นใหม่/นักวิจัยหลัง
ปริญญาเอก

- 14 ดร. ประภาศิริ พงษ์ประยูร ภาควิชาเคมี
มหาวิทยาลัย เกษตรศาสตร์
(วิทยาเขต บางเขน)



- 15 ดร. ชีระชาติ ลีประเสริฐ ภาควิชาเคมี
มหาวิทยาลัย เกษตรศาสตร์
(วิทยาเขต บางเขน)



- 16 ดร. วิชชา ตรีสุวรรณ สถาบันคั้นคั่วและพัฒนาผลิตภัณฑ์อาหาร
มหาวิทยาลัย เกษตรศาสตร์
(วิทยาเขต บางเขน)



- 17 ดร. พจมาลย์ พูลมี สาขาเคมี
มหาวิทยาลัย เกษตรศาสตร์
(วิทยาเขต กำแพงแสน)



- 18 ผศ.ดร. วีรมลล์ ไวลิชิต สาขาเคมี
มหาวิทยาลัย เกษตรศาสตร์
(วิทยาเขต กำแพงแสน)



- 19 ดร.นาริรัตน์ กิตติศรีปัญญา สาขาเคมี
มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์
(วิทยาเขตเฉลิมพระเกียรติ จังหวัดสกลนคร)



- 20 ดร. กัญจน์ ศิลปสิทธิ์ สถาบันสิ่งแวดล้อมและทรัพยากร
มหาวิทยาลัย ศรีนครินทรวิโรฒ
(วิทยาเขต องค์กรักษ์)



21 ดร. ดารินี พรหมโยธิน วิทยาลัยนาโนเทคโนโลยีพระจอมเกล้าลาดกระบัง
มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหาร
ลาดกระบัง



22 ดร. ณัฐนันท์ จงกล วิทยาลัยเทคโนโลยีอุตสาหกรรม
ภาควิชาวิทยาศาสตร์ประยุกต์และสังคม
มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีพระจอมเกล้าพระนครเหนือ



23 ผศ. ดร. เพ็ญศรี เพ็ญประไพ สาขาวิทยาศาสตร์
มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีราชมงคลศรีวิชัย



24 ดร. รุ่งทิวา ชิดทอง สาขาเคมี
มหาวิทยาลัย ราชภัฏนครปฐม



25 ดร. พูนศิริ ทิพย์เนตร สาขาเคมี
คณะวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี
มหาวิทยาลัย ราชภัฏเพชรบุรี



26 ดร. วิชนีย์ มีโต สาขาวิทยาศาสตร์ (เคมี)
คณะวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี
มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีราชมงคลสุวรรณภูมิ



27 ดร. พรพิมล ไมตรัตน์ Nano Science and Technology Research
Center
Shanghai University
CHINA



นักศึกษาปริญญาเอก มีดังนี้

1. นางสาว พรทิพย์ บุญศรี ภาควิชาเคมี มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์
(บางเขน)
2. นางสาว วราภรณ์ จังธนสมบัติ ภาควิชาเคมี มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์
(บางเขน)

- | | |
|--|--|
| 3. นางสาว รัตน์สุภา ธรรมมาภรณ์
(บางเขน) | ภาควิชาเคมี มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ |
| 4. นางสาว มาลินี พรหมชาติแก้ว
(บางเขน) | ภาควิชาเคมี มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ |
| 5. นางสาว วราภรณ์ บุญรัตน์
(บางเขน) | ภาควิชาเคมี มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ |
| 6. นาย พงศ์เทพ ประจักษ์ตัน
(บางเขน) | ภาควิชาเคมี มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ |
| 7. นาย นิกร แสงสุวรรณ
(บางเขน) | ภาควิชาเคมี มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ |
| 8. นางสาว สุวรรณ ศรียาบ
(บางเขน) | ภาควิชาเคมี มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ |
| 9. นางสาว เตือนใจ สมบูรณ์
(บางเขน) | ภาควิชาเคมี มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ |
| 10. นางสาว อรพรรณ พวงไสว
(บางเขน) | ภาควิชาเคมี มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ |
| 11. นาย อภิพล พิริยะกากุล
(บางเขน) | ภาควิชาเคมี มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ |
| 12. นายวรท โชติปฏิเวชกุล
(บางเขน) | ภาควิชาเคมี มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ |
| 13. นาย ณภัทร สองทวี
(บางเขน) | ภาควิชาชีวเคมี มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ |
| 14. นางสาว กนกอร สุดโต
วิทยาลัย | โครงการสหสาขา สาขาพันธุวิศวกรรมบัณฑิต
มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ (บางเขน) |
| 15. นางสาว พูนทรัพย์ ณ นคร
วิทยาลัย | โครงการสหสาขา สาขาพันธุวิศวกรรมบัณฑิต
มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ (บางเขน) |
| 16. นายสุริยันต์แดงใหญ่ | ภาควิชาเภสัชเวช มหาวิทยาลัย สงขลานครินทร์ |
| 17. นายวินอนันท์ นาแวร์ | หลักสูตร ชีววิทยาศาสตร์และเทคโนโลยีและชีววิทยาระบบ
มหาวิทยาลัย เทคโนโลยีพระจอมเกล้าธนบุรี |

นักศึกษาปริญญาโท มีดังนี้

- | | |
|--------------------------------------|------------------------------------|
| 1. นางสาว ชมกฤษ ดันเจริญ
(บางเขน) | ภาควิชาเคมี มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ |
| 2. นาย ณัฐพงษ์ อธิอาภา
(บางเขน) | ภาควิชาเคมี มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ |

- | | |
|---|------------------------------------|
| 3. นาย เอกชัย ปัญญาธรากร
(บางเขน) | ภาควิชาเคมี มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ |
| 4. นางสาว ปณิดา มณีกอบกุลวงศ์
(บางเขน) | ภาควิชาเคมี มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ |
| 5. นางสาววิลาวัลย์ อมตพิทักษ์สกุล
(บางเขน) | ภาควิชาเคมี มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ |
| 6. นาย ญัฐพล วิริยะธนากร
(บางเขน) | ภาควิชาเคมี มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ |
| 7. นายสุริยา ดาเที่ยง | ภาควิชาเคมี มหาวิทยาลัยเชียงใหม่ |

นักศึกษาปริญญาตรี มีดังนี้

- | | |
|---|------------------------------------|
| 1. นางสาววิไลลักษณ์ แก้วศรี
(บางเขน) | ภาควิชาเคมี มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ |
| 2. นางสาวณัฐชยาสมานมิตร
(บางเขน) | ภาควิชาเคมี มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ |
| 3. นางสาวมินตรา บุญเรือง
(บางเขน) | ภาควิชาเคมี มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ |

ผู้ช่วยนักวิจัย

- | | |
|--|---|
| 1. นางสาว จิราภรณ์ ยงพิศาลภพ
(บางเขน) | ภาควิชาเคมี มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์
(ก.ย. 53-พ.ค.55) |
| 2. นางสาวชมภูษุ ตันเจริญ
(บางเขน) | ภาควิชาเคมี มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์
(มิ.ย.55- ปัจจุบัน) |

1.4 การนำผลจากโครงการไปใช้ประโยชน์

ผลงานวิจัยเป็นการสร้างองค์ความรู้ที่เน้นการตีพิมพ์ผลการวิจัยในวารสารวิชาการนานาชาติ จำนวน 31 เรื่อง และอยู่ในระหว่างการส่งตีพิมพ์ผลงานอีก 3 เรื่อง และใช้ประโยชน์ในการอ้างอิงเชิงวิชาการ และการพัฒนาศักยภาพทางการวิจัยของทีมวิจัยและนักวิจัยรุ่นใหม่ และนักศึกษาระดับปริญญาโท-เอก ผลงานวิจัยของโครงการ ที่ได้รับการตีพิมพ์ในวารสารวิชาการระดับนานาชาติ ได้ถูกนำไปใช้อ้างอิงทางวิชาการอย่างแพร่หลายซึ่งเป็นประโยชน์อย่างมากสำหรับนักวิจัยทั้งในและต่างประเทศซึ่งพิจารณาจากฐานข้อมูลบทความทางวิทยาศาสตร์ระดับนานาชาติที่น่าเชื่อถือและเป็นที่ยอมรับ พบว่าจำนวนการอ้างอิงบทความที่ได้จากโครงการภายใต้การดูแลของ ศ. ดร. สุภา หารหนองบัว จนถึงปัจจุบัน มีจำนวนอ้างอิง (citation) 1025 โดยฐานข้อมูล Scopus (www.scopus.com) และ 870 ครั้ง โดยฐานข้อมูล ISI (Web of Science) และมี h-index = 16

2. กิจกรรมที่ได้ดำเนินการ

2.1 จัดประชุมกลุ่มวิจัย จำนวน 8 ครั้ง โดยมีนักวิจัยในโครงการจำนวน 20 คน เพื่อรายงานความก้าวหน้าของโครงการ

2.2 จัดซื้อ วัสดุ สารเคมี ครุภัณฑ์ วิทยาศาสตร์ ที่จำเป็นต้องใช้ในโครงการแก่นักวิจัย สำหรับโครงการนวัตกรรมวิจัยเพื่อการค้นหาสายเอดส์ ระยะที่ 2 นี้ได้จัดซื้อวัสดุ สารเคมี และครุภัณฑ์วิทยาศาสตร์ที่จำเป็นต้องใช้ในโครงการให้นักวิจัยที่ได้รับการสนับสนุนด้านการเงินจากสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย (สกว.) โดยมีครุภัณฑ์และวัสดุคอมพิวเตอร์ ดังนี้

2.2.1 เครื่องอ่านปฏิกิริยาบนไมโครเพลท แบบ Multimode

2.2.2 วัสดุคอมพิวเตอร์สมรรถนะสูง

2.2.3 วัสดุคอมพิวเตอร์ เช่น เครื่องสำรองไฟ, เครื่อง Wireless Router, Uninterruptible Power Supply เป็นต้น

2.3 ประชุมสัมมนากลุ่มวิจัย ที่มีนักวิจัยระดับปริญญาโท-เอก เสนอความก้าวหน้าของการวิจัยทุกอาทิตย์

2.4 เสนอผลงานวิจัยในที่ประชุมวิชาการนานาชาติ

2.4.1 ชื่อประชุมวิชาการ The 7th Thai Summer School of Computational Chemistry สถานที่ The Faculty of Liberal Arts and Science, Kasetsart University Kamphaengsaen Campus, Nakhon Pathom, Thailand ระหว่างวันที่ October 11-14, 2010 จำนวน 1 เรื่อง

2.4.1.1 เรื่อง: Theoretical Studies the Effects of Substitution Groups of meso-Tetraphenylporphyrin on Structure and Electronics Properties (N. Saengsuwan, W. Meeto, S. Suramitr, and S. Hannongbua; Poster Presentation)

2.4.2 ชื่อประชุมวิชาการ Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON2011) สถานที่ Miracle Grand Convention Hotel, Bangkok, Thailand. ระหว่างวันที่ January 5-7, 2011 จำนวน 10 เรื่อง

2.4.2.1 เรื่อง: Molecular Modeling investigations of inhibitors binding to M. tuberculosis dihydrofolate reductase (W. Pornthanakasem, U. Leartsakulpanich, D. Kongkasuriyachai, W. Ittarat, S.K. Boonyarattanakalin and L. Lawtrakul; Oral presentation)

2.4.2.2 เรื่อง: Encapsulation of Thai basil essential oil by cyclodextrins: Molecular inclusion complexes investigation (L. Sitthikornkul, P. Purpiriyapan, S. Tantisuk and L. Lawtrakul; Oral Presentation)

2.4.2.3 เรื่อง: Structural Characterization of natural zeolites and environmental applications for ammonia and sulfide ions adsorption from aqueous solution at laboratory scale (K. Bandasak, P. Suwannakham, U. Traklang, S. Phakapon, S. Champasa, U. Onthong, P. Pungpo and M. Prajuabsuk; Poster Presentation)

- 2.4.2.4 เรื่อง: Biological active alkaloids isolated from the tuber of *Stephania venosa* (Blume) Spreng (A. Makarasen, S. Mogkhuntod, N. Kunnawutmanotham, N. Chimnoi and S. Techasakul; Poster Presentation)
- 2.4.2.5 เรื่อง: Finding out the potential binding mode of calanolide a derivatives in WT HIV-1 RT based on molecular modeling (A. Kumkong, A. Punkvang, P. Khamsri, P. Saparpakorn, S. Hannongbua, P. Wolschann, G. Liu and P. Pungpo; Poster Presentation)
- 2.4.2.6 เรื่อง: Investigation of inhibition mechanism of arylamide inhibitors as anti-tubercular agent on InhA MD simulations (A. Punkvang, P. Saparpakorn, S. Hannongbua, H.A. Wahab, P. Wolschann and P. Pungpo; Poster Presentation)
- 2.4.2.7 เรื่อง: Study on the binding of azanaphthoquinone annelated pyrrole derivatives as anti-cancer agent in DNA duplex using MD simulations (P. Pungpo, A. Punkvang, A. Kumkong, P. Khamsri, P. Saparpakorn, N. Pongprom, P. Wolschann and S. Hannongbua; Poster Presentation)
- 2.4.2.8 เรื่อง: Effect of Type and Content of Bio-Gelling Additives on Porosity of Sintered Natural Zeolite (P. Kamsri, P. Pungpo, R. Sanngam and T. Panyathanmaporn)
- 2.4.2.9 เรื่อง: MD-ONIOM2 of amines in DMSO for full QM-like predictions without the full QM cost (V. Vailikhit, W. J. Holzschuh and S. Hannongbua; Poster Presentation)
- 2.4.2.10 เรื่อง: Theoretical Investigation on wild type and L100I/K103N HIV-1 reverse transcriptase complexed with TMC 278, based on Quantum mechanical methods (P. Srivub, P. Nokkaew and S. Hannongbua; Poster Presentation)
- 2.4.3 ชื่อประชุมวิชาการ 15th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (15) สถานที่ Bangkok University, Bangkok, Thailand. ระหว่างวันที่ March 30- April 1, 2011 จำนวน 7 เรื่อง
- 2.4.3.1 เรื่อง: A Correction Interaction Energy on Mycolic Acid Cyclopropane Synthase Cofactor Binding Site by MD-ONIOM Calculations (D. Phromyothin, M. Takayanagi, M. Nagaoka and S. Hannongbua; Oral Presentation)
- 2.4.3.2 เรื่อง: Excitation Energies of Triphenylamine Cyanoacrylic Acid Derivatives for Dye-Sensitized Solar Cells Applications in Solution Using Long-Range Corrected Time-Dependent Density Functional Theory (C. Chitpakdee, S. Hannongbua and S. Suramit; Oral Presentation)
- 2.4.3.3 เรื่อง: Molecular Dynamics Simulations of Retinol in Dipalmitoyl-phosphatidylcholine Bilayer (W. Boonyarat, W. Treesuwan, P. Saparpakorn, K. Choowongkomo, P. Wolschann and S. Hannongbua; Oral Presentation)

- 2.4.3.4 เรื่อง: Molecular Docking Study to the Natural Compounds from Dipterocarpaceous Bark Extract Against Acetylcholinesterase (J. Yongpisanphop, K. Sudto, C. Tancharoen, Y.H. Qin, S. Vajrodaya, H.M. Ge, R.X. Tan, K. Ingkaninan, P. Saparpakorn, S. Techasakul and S. Hannongbua; Oral Presentation)
- 2.4.3.5 เรื่อง: Elucidating Inhibition Mechanism of Arylamide Inhibitors as an Antitubercular Agent on InhA Based on MD Simulations (A. Punkvang, P. Saparpakorn, S. Hannongbua, H. A. Wahab, P. Wolschann and P. Pungpo; Oral Presentation)
- 2.4.3.6 เรื่อง: Theoretical Study on Structures and Electronic Properties of 9-octyl-3,6-di(thiophen-2-yl)-Carbazole Derivatives (S. Sriyab, S. Suramitr, and S. Hannongbua; Oral Presentation)
- 2.4.3.7 Drug-target Interaction Prediction of Type 2 Diabetes and Bioactive Compounds from Chinese Herbs Using Network-based Method (P. Jaikaew, S. Hannongbua, M. Ruengjitchatchawalya; Oral Presentation)
- 2.4.4 ชื่อประชุมวิชาการ “The Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC)” สถานที่ Santiago de Compostela, Spain ระหว่างวันที่ July 17-22, 2011 จำนวน 3 เรื่อง
- 2.4.4.1 เรื่อง: Stereoselectivity Of Strecker Reaction Catalyzed By Titanium-N-Salicylyl-Aminoalcohol Complex: A DFT Study (W. Parasuk and V. Parasuk; Poster Presentation)
- 2.4.4.2 เรื่อง: DFT Studies on Arabidopsis thaliana Allene Oxide Synthase (T. Somboon, M.P. Gleeson, W. Treesuwan, J. Ochiai, S. Mori and S. Hannongbua; Poster Presentation)
- 2.4.4.3 เรื่อง: A New Possible Enzymatic Mechanism of Neuraminidase (NA): Quantum Calculation Approaches (N. Jongkon, P. Khongpracha, S. Hannongbua, M. P. Gleeson and C. Sangma; Poster Presentation)
- 2.4.5 ชื่อประชุมวิชาการ “26th International Conference on Defects in Semiconductors” สถานที่ Nelson, Newzealand. ระหว่างวันที่ July 17-22, 2011 จำนวน 1 เรื่อง
- 2.4.5.1 เรื่อง: Theoretical study of Single-walled Carbon Nanotube Funcyionalized with MEH-PPV Residues: A DFT Calculation (P. Prajongtat, R. Palangsuntikul, S. Hannongbua and S. Suramitr; Poster Presentation)
- 2.4.6 ชื่อประชุมวิชาการ “The 6th International Symposium Protein Society of Thailand”, สถานที่ Bangkok, Thailand, ระหว่างวันที่ August 31 - September 2, 2011 จำนวน 1 เรื่อง
- 2.4.6.1 เรื่อง: Elucidating Structural and Dynamic Properties of a TMC278 Analog as a Highly Potent HIV-1 RT Inhibitor Through Molecular Dynamics

- Simulations (P. Kamsri, A. Punkvang, K. Kun-asa, P. Saparpakorn, S. Hannongbua, P. Wolschann, S. Prueksaaron and P. Pungpo; Poster Presentation)
- 2.4.7 ชื่อประชุมวิชาการ “The Seventh Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP-VII)” สถานที่ Waseda University, Tokyo Japan ระหว่างวันที่ September 2-8, 2011 จำนวน 7 เรื่อง
- 2.4.7.1 เรื่อง: 4D-QSAR Analysis for the Cytotoxicity of Lamellarins against Human Hormone-Dependent T47D Breast Cancer Cells (P. Thipnate, J. Liu, S. Hannongbua and A.J. Hopfinger; Oral Presentation)
- 2.4.7.2 เรื่อง: Biomimetic design of Charged Brush-like Nanopores: Simulation Studies (P. Pongprayoon, O. Beckstein and M.SP. Sansom; Oral Presentation)
- 2.4.7.3 เรื่อง: Structural and Energetic Analysis of Mutant K103N HIV-1 Reverse Transcriptase/Efavirenz Complex using ONIOM Calculations (P. Boonsri, M. Kuno and S. Hannongbua; Oral Presentation)
- 2.4.7.4 เรื่อง: Absorption and Emission Properties of the F, OH and NO₂ Substituted Cinnamates: A TD-DFT Investigation (M. Promkatkaew, S. Suramitr, T. Karpkird and S. Hannongbua; Oral Presentation)
- 2.4.7.5 เรื่อง: Distribution and Orientation of Retinol in Dipalmitoylphosphatidylcholine Bilayer (W. Boonyarat, W. Treesuwan, P. Saparpakorn, K. Choowongkomol, P. Wolschann and S. Hannongbua; Oral Presentation)
- 2.4.7.6 เรื่อง: Molecular modeling on anti-tuberculosis agent to investigate the structural basis for improving potency against M. tuberculosis strain (A. Punkvang, P. Saparpakorn, P. Wolschann, S. Hannongbua and P. Pungpo; Poster Presentation)
- 2.4.7.7 เรื่อง: Molecular dynamics simulations of azanaphthoquinone annelated pyrrole derivatives as anti-cancer agent in DNA duplex (P. Pungpo, A. Punkvang, A. Kumkong, P. Khamisri, P. Saparpakorn, N. Pongprom, P. Wolschann and S. Hannongbua; Poster Presentation)
- 2.4.8 ชื่อประชุมวิชาการ “14th Asian Chemical Congress (14ACC)” สถานที่ Queen Sirikit National Convention Center, Bangkok, Thailand ระหว่างวันที่ September 5-8, 2011 จำนวน 8 เรื่อง
- 2.4.8.1 เรื่อง: Theoretical Elucidation of Antioxidant Properties of Hydroxyflavone on O-H Bond Dissociation Enthalpies (W. Treesuwan and S. Hannongbua; Oral Presentation)
- 2.4.8.2 เรื่อง: Comparative Molecular Field Analysis Study On Anti HIV-1 RT Diarylaniline Derivatives (N. Ithiapa, P. Maitarad, C. Tancharoen, S. Suramitr, P. Saparpakorn and S. Hannongbua; Oral Presentation)

- 2.4.8.3 เรื่อง: 3D-QSAR Study On Resveratrol Analogues As Aromatase Inhibitors (C. Tancharoen, P. Maitarad, N. Ithiapa, S. Suramitr, P. Saparpakorn and S. Hannongbua; Oral Presentation)
- 2.4.8.4 เรื่อง: Resveratrol oligomers from stem bark of Thai Dipterocarpaceous plants (*Shorea roxburghii* G. Don) (K. Sudto, C. Tancharoen, S. Vajrodaya, S. Techasakul, Y.H. Qin, H.M. Ge, R.X. Tan and S. Hannongbua; Oral Presentation)
- 2.4.8.5 เรื่อง: Insight into The Binding Interaction of Arylamide Derivatives as an Antitubercular Agents Based on Quantum Calculations (A. Punkvang, P. Kamsri, P. Saparpakorn, S. Hannongbua, P. Wolschann, P. Pungpo; Poster Presentation)
- 2.4.8.6 เรื่อง: Elucidating the Potential Binding Mode of Calanolide a Derivatives in WT and Y181C HIV-1 RTs Based on Molecular Modelling (P. Pungpo, A. Punkvang, P. Kamsri, P. Wolschann, P. Saparpakorn, Gang Liu, S. Hannongbua; Poster Presentation)
- 2.4.8.7 เรื่อง: Molecular Modeling and Quantum Chemical Calculations of High Potency Anti-Tuberculosis Agents in Class of Triclosan and Diphenyl Ether Derivatives as INHA Enzyme of Mycobacterium Tuberculosis (P. Kamsri, A. Punkvang, K. Kun-asa, P. Saparpakorn, S. Hannongbua, P. Wolschann, S. Prueksaaron and P. Pungpo; Poster Presentation)
- 2.4.8.8 เรื่อง: Elucidating the key structural feature of pseudo-cinnamic derivatives as a novel series of antituberculosis agents Based on Computer Aided Molecular Design (K. Kunasa, A. Punkvang, P. Kamsri, A. Kumkong, P. Saparpakorn, S. Hannongbua, P. Wolschann and P. Pungpo; Poster Presentation)
- 2.4.9 ชื่อประชุมวิชาการ “The 37th Congress on Science and Technology of Thailand” สถานที่ Bangkok, Thailand ระหว่างวันที่ October 10-12, 2011 จำนวน 1 เรื่อง
- 2.4.9.1 เรื่อง: Insight into the Binding Interactions of Anti-Mycobacterial Agents in Class of B-ring Modified Alkyl Diphenyl Ether Based on Molecular Modeling (P. Kamsri, A. Punkvang, K. Kun-asa, P. Saparpakorn, S. Hannongbua, P. Wolschann, S. Prueksaaron and P. Pungpo; Poster Presentation)
- 2.4.10 ชื่อประชุมวิชาการ “IUPAC 7th International Conference on Novel Materials and their Synthesis (NMS-VII) & 21st International Symposium on Fine Chemistry and Functional Polymers (FCFP-XXI)” สถานที่ Shanghai, China ระหว่างวันที่ October 16-21, 2011 จำนวน 1 เรื่อง
- 2.4.10.1 เรื่อง: 3D-QSAR Study of 2-Hydroxycyclohexylsulfonamide Derivatives against Botrytis Cinerea (W. Chotpatiwetchku, P. Maitarad, S. Tateing, N. Kungwan and S. Hannongbua; Poster Presentation)

- 2.4.11 ชื่อประชุมวิชาการ “The 23rd Annual Meeting of the Thai Society of Biotechnology Systems Biotechnology” สถานที่ The Imperial Queen’s Park Hotel, Bangkok, Thailand ระหว่างวันที่ October 27-28, 2011 จำนวน 1 เรื่อง
- 2.4.11.1 เรื่อง: Bioactive compounds–target interaction networks in Chinese herbs formula for type 2 diabetes (P. Jaikaew, S. Hannongbua and M. Ruengjitchatchawalya; Oral Presentation)
- 2.4.12 ชื่อประชุมวิชาการ “The 7th International Student Conference” สถานที่ Ibaraki University, Ibaraki, Japan ระหว่างวันที่ December 3-4, 2011 จำนวน 1 เรื่อง
- 2.4.12.1 เรื่อง: DFT Studies on Allene Oxide Synthases (T. Somboon, M. P. Gleeson, W. Treesuwan, J. Ochiai, S. Mori and S. Hannongbua; Oral Presentation)
- 2.4.13 ชื่อประชุมวิชาการ “The 5th Asian Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 5)” สถานที่ Massey University, Ibaraki University, Rotorua, New Zealand ระหว่างวันที่ December 9-13, 2011 จำนวน 1 เรื่อง
- 2.4.13.1 เรื่อง: Structure of Titanium-N-Salicylyl-Aminoalcohol Complexes (W. Parasuk, T. Choteimudom, and V. Parasuk; Poster Presentation)
- 2.4.14 ชื่อประชุมวิชาการ “Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON 2012)” สถานที่ The Empress Hotels, Chiang Mai, Thailand ระหว่างวันที่ January 11-13, 2012 จำนวน 10 เรื่อง
- 2.4.14.1 เรื่อง: QSAR and 3D-QSAR Study of 2-Hydroxycyclohexylsulfonamide Derivatives against Botrytis cinerea (W. Chotpatiwetchkul, P. Maitarad, S. Tateing, N. Kungwan and S. Hannongbua; Oral Presentation)
- 2.4.14.2 เรื่อง: Theoretical Investigation On The Adsorption Geometries And Electronic Structures Of Azo Dyes On TiO₂ Surface (P. Prajongtat, Supa Hannongbua, K. Nakajima and K. Mitsuke; Oral Presentation)
- 2.4.14.3 เรื่อง: Virtual Screening of Novel H1N1/A Inhibitors from Isolated Compounds of Andrographis paniculata (Burm.F.) Wall.ex Nees, Using Molecular Docking (S. Tateing, P. Boonsri, P. Maitarad, W. Chotpatiwetchkul, S. Hannongbua and N. Kungwan; Oral Presentation)
- 2.4.14.4 เรื่อง: The Structural Guideline for Modification of Novel Diarylpyrimidines with Hydromethyl Linker as HIV-1 NNRTIs based on QSAR Studies (D. Kasamsri, A. Punkvang, P. Khumsri, K. Kun-asa, P. Saparpakor, S. Hannongbua, P. Wolschann, and P. Pungpo; Poster Presentation)
- 2.4.14.5 เรื่อง: Computer aided Molecular Design on Newly Naphthyl Substituted Diarylpyrimidines as Non-Nucleoside Reverse Transcriptase

Inhibitors (K. Kun-asa, A. Punkvang, P. Kamsri, D. Kasamsri, P. Saparpakor, S. Hannongbua, P. Wolschann and P. Pungpo; Poster Presentation)

2.4.14.6 เรื่อง: The Binding Mode Investigation of Potential Bi-Substrate Inha Inhibitors as Anti-Tuberculosis agents using Molecular Modeling (P. Kamsri, A. Punkvang, K. Kun-asa, D. Kasamsri, P. Saparpakorn, S. Hannongbua, P. Wolschann, S. Prueksaaron and Pornpan Pungpo; Poster Presentation)

2.4.14.7 เรื่อง: Effect Of The Electron Donor/Acceptor Orientation On The Fluorescence Efficiency Of 3,6-Carbazole-Based (S. Suramitr, S. Sriyab and S. Hannongbua; Poster presentation)

2.4.14.8 เรื่อง: Distribution and Orientation of Phylloquinone in Dipalmitoylphosphatidylcholine Bilayer (W. Boonyarat, W. Treesuwan, P. Saparpakorn, K. Choowongkomol, P. Wolschann and S. Hannongbua; Poster Presentation)

2.4.14.9 เรื่อง: Molecular Interaction of Lamellarins in the Binding Pocket of Epidermal Growth Factor Receptor by using Molecular Operating Environment Program (MOE) (P. Thipnate, K. Choowongkomon, P. Wolschann and S. Hannongbua; Poster Presentation)

2.4.14.10 เรื่อง: Understanding on Fluorescence Energies and Radiative Life Times of Thienylene-Phenylene Copolymer based on Quantum Chemical Calculation (R. Chidthong, P. Ponkate, S. Hannongbua; Poster Presentation)

2.4.15 ชื่อประชุมวิชาการ 16th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE16) สถานที่ Chiang Mai University, Chiang Mai, Thailand. ระหว่างวันที่ March 23-25, 2012 จำนวน 5 เรื่อง

2.4.15.1 เรื่อง: Prediction of Bioactive Components in Spirulina (Arthrospira platensis) related to Type 2 Diabetes Treatment (P. Sae-Tang, V. Plengvidhya, M. Ruengjitchatchawalya, S. Hannongbua, U. Supasitthimethee; Oral Presentation)

2.4.15.2 เรื่อง: Computer Aided Molecular Design of Novel Diarylpyrimidines with Cyano and Hydroxymethyl Linker as HIV-1 NNRTIs Using QSAR Studies (P. Kamsri, D. Kasamsri, A. Srisupan, K. Kun-asa, A. Punkvang, P. Saparpakorn, S. Hannongbua, P. Wolschann, S. Prueksaaron, and P. Pungpo; Oral Presentation)

2.4.15.3 เรื่อง: An insight into the role of Calcium-spirulan in HSV-1 inhibition by Molecular modeling (C. Sonthirod, S. Hannongbua, W. Nawae, M. Ruengjitchatchawalya; Oral Presentation)

2.4.15.4 เรื่อง: Exploring the Key Interactions for Binding of the Direct Inha Inhibitors Using Individual Interaction Energy Calculations (A. Punkvang,

- P. Kamsri, P. Saparpakorn, S. Hannongbua, P. Wolschann, P. Pungpo; Oral Presentation)
- 2.4.15.5 เรื่อง DFT Investigation of P3HT-Monomer-Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes and Synthesis (A. Panyatharakorn, S. Suramitr, and S. Hannongbua; Oral Presentation)
- 2.4.16 ชื่อประชุมวิชาการ “JST International Symposium on “Multi-scale Simulation of Condensed-phase Reacting Systems” สถานที่ Nakoya University, Nakoya Japan ระหว่างวันที่ May 9-12, 2012 จำนวน 1 เรื่อง
- 2.4.16.1 เรื่อง: Computer aided-molecular design to optimal drug design: applications to Anti-TB Agents, Anti-cancer Agents and Anti-HIV-1 Inhibitors (P. Pungpo, A. Punkvang, P. Khumsri, D. Kasamsri, A. Srisupan, P. Saparpakorn, S. Hannongbua, P. Wolschann, and S. Prueksaaron; Poster Presentation)
- 2.4.17 ชื่อประชุมวิชาการ “2012 IOCO International Conference on Functional Molecule Nature” สถานที่ The Mandarin Garden Hotel, Nanjing, P.R. China ระหว่างวันที่ 22-24 กันยายน 2556 จำนวน 2 เรื่อง
- 2.4.17.1 เรื่อง: Resveratrol Oligomer Compounds from The Bark of Dipterocarpaceae Family Plant in Thailand Against HIV-1 Reverse Transcriptase (C. Tancharoen, K. Sudto, T. Yan, R. Thammaphorn, S. Vajrodaya, S. Techasakul, H. M. Ge, R. X. Tan and S. Hannongbua; Poster Presentation)
- 2.4.17.2 เรื่อง: Antimicrobial activity of Hopeahainol C from stem bark of Shorea roxburghii G. Don (K. Sudto, C. Tancharoen, D. Phromyothin, Y. H. Qin, S. Vajrodaya, S. Techasakul, H. M. Ge, R. X. Tan, S. Hannongbua; Poster Presentation)
- 2.4.18 ชื่อประชุมวิชาการ The 4th-China –Thailand Joint Workshop on Natural Products and Drug Discovery สถานที่ BP Samila Beach Hotel and Resort, Hat-Yai, Songkhla, Thailand ระหว่างวันที่ November 26-30, 2012 จำนวน 1 เรื่อง
- 2.4.18.1 เรื่อง: Absolute Configuration Identification for The New Resveratrol Trimer: Experimental and Computational Investigation (S. Hannongbua; Poster Presentation)
- 2.4.19 ชื่อประชุมวิชาการ Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON 2013) สถานที่ The Tide Resort, Bangsaen Beach, Chon Buri, Thailand ระหว่างวันที่ January 23-25, 2013 จำนวน 9 เรื่อง
- 2.4.19.1 เรื่อง: Molecular Docking and NMR Studies of Structure and Dynamics of HIV-1 Reverse Transcriptase Induced by Non-Nucleoside Inhibitors (NNRTIs) (P. Boonsri and S. Hannongbua; Poster Presentation)
- รายละเอียดแสดงในเอกสารแนบ 1/4

- 2.4.19.2 เรื่อง: Acute Toxicity Investigation of C.I. Acid Yellow 199 on Zebra Fish Embryos (P. Preeprem, W. Jungtanasonbat, S. Hannongbua and S. Kovitvadhi; Poster Presentation)
- 2.4.19.3 เรื่อง: Density Functional Theory Studies on Allene Oxide Synthase (T. Somboon, M. P. Gleeson, W. Treesuwan, J. Ochiai, S. Mori and S.Hannongbua; Poster Presentation)
- 2.4.19.4 เรื่อง: Key Structural Guidelines of Diarylpyrimidines Derivatives as HIV-1 Non-Nucleoside Reverse Transcriptase Wild-Type and K103N/Y181C Using 2D and 3D-QSAR Approaches (A. Srisupan, P. Kamsri, A.Punkvang, K. Kun-asa, P. Saparpakorn, S. Hannongbua, P. Wolschann, S. Prueksaaron and P. Pungpo; Poster Presentation)
- 2.4.19.5 เรื่อง: Insight into The Binding Mode of The Potential Bi-Substrate InhA Inhibitors as Anti-Tuberculosis Agents: Molecular Dynamics Simulations (P. Kamsri, A. Srisupan, A. Punkvang, P. Saparpakorn, S. Hannongbua, P. Wolschann, S. Prueksaaron and P. Pungpo; Poster Presentataion)
- 2.4.19.6 เรื่อง: Elucidating The Key Structural Features of Direct InhA Inhibitors in A Series of Diphenyl Ether Derivatives as Anti-Tuberculosis Agents: QSAR Studies (N. Koohatammakun, P. Kamsri, A. Srisupan, K. Kun-asa, A. Punkvang, P. Saparpakorn, S. Hannongbua, P. Wolchann and S. Prueksaaron; Poster Presentation)
- 2.4.19.7 เรื่อง: Computer-Aided Molecular Design of Diarylpyrimidine Derivatives as HIV-1 NNRTIs: Molecular Docking Calculations and QSAR Studies (K. Kun-asa, N. Koohatammakun, P. Kamsri, A. Srisupan, A. Punkvang, P. Saparpakorn, S. Hannongbua, P. Wolchann and S. Prueksaaron; Poster Presentation)
- 2.4.19.8 เรื่อง: Screening for Novel Anti-Tuberculosis Agents Using Computational Tool (A. Punkvang, P. Kamsri, P. Saparpakorn, S. Hannongbua, P. Wolchann and P. Pungpo; Poster Presentation)
- 2.4.19.9 เรื่อง: Finding Out The Structural Basis of Azanaphthoquinone Annelated Pyrrol Derivatives as Anti-Cancer Agents Based on QSAR Approaches (P. Pungpo, N. Pongprom, P. Kamsri, A. Srisupan, A. Punkvang, P. Saparpakorn, S. Hannongbua, P. Wolchann, H. Spreitzer, S. Prueksaaron; Oral Presentation)
- 2.4.20 ชื่อประชุมวิชาการ17th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE17) สถานที่ Khon Kaen University, Khon Kaen, Thailandระหว่างวันที่ March 27-29, 2013 จำนวน 6 เรื่อง

- 2.4.20.1 เรื่อง: Investigation the Electronic Properties of Cu (I) Complex with 2, 2'-Bipyridine-Based for Dye-Sensitized Solar Cells: Study by Using TD-DFT (S. Dejnakorn, S. Hannongbua and S. Suramitr; Oral Presentation)
- 2.4.20.2 เรื่อง: Insight into the Key Structural Feature of Anti-Cancer Agents in Class of Azanaphtho Quinone Annelated Pyrrole Derivatives as Based on QSAR Approaches (P. Kamsri, N. Pongprom, A. Srisupan, A. Punkvank, P. Saparpakorn, S. Hannongbua, P. Wolchann, H. Spreitzer, S. Prueksaaron and P. Pungpo; Poster Presentation)
- 2.4.20.3 เรื่อง: Theoretical Study of Dimerization Mechanism of Acrolein (N. Saengsuwan, S. Suramitr, A. Karpfen, P. Wolschann and S. Hannongbua; Oral Presentation)
- 2.4.20.4 เรื่อง: Theoretical study on the Sensing Mechanism of Salicylaldimine Based Chemosensor: Excited-State Proton Transfer (N. Klinhom, S. Hannongbua and S. Suramitr; Oral Presentation)
- 2.4.20.5 เรื่อง: Understanding on Structure and Electronic Transitions of Dye-Sensitized Solar Cell Utilizing Organic Dyads Containing Triarylene Conjugates, Based on TDDFT Investigation (K.Jorn-lat, S. Hannongbua and S. Suramitr; Poster Presentation)
- 2.4.20.6 เรื่อง: Photophysical Properties and Photochemistry of E- and Z-Thienyl Chalcone Derivatives, Based on TDDFT Investigation (K. Soongpilai, S. Hannongbua and S. Suramitr; Poster Presentation)
- 2.4.21 ชื่อประชุมวิชาการ International Symposium of Homogeneous Chemical Reactivity สถานที่ Mito Campus, Ibaraki University, JAPAN. ระหว่างวันที่ 14-15 June 2013 จำนวน 1 เรื่อง
- 2.4.21.1 เรื่อง: Skin Sensitization Prediction Based on Quantum Chemical Calculations: A Non-animal Model for the SNAr Domain Chemicals (M. Promkatkaew, S. Hannongbua and M. P. Gleeson; Oral Presentation)
- 2.4.22 ชื่อประชุมวิชาการ 2013 The European magnetic resonance community (EUROMAR 2013 conference) สถานที่ Hersonissos, Crete, Greece ระหว่างวันที่ June 28 – July 5, 2013 จำนวน 1 เรื่อง
- 2.4.22.1 เรื่อง: Structural Analyses of HIV-1 Reverse Transcriptase Induced by Non-Nucleoside Inhibitors, Based on NMR Studies and Molecular Dynamics Simulations (Boonsri, P., Yagi-Utsunmi, M., Thammaporn, R., Yamaguchi, T., Yanagi, K., Choowongkamon, K., Kato, K., and Hannongbua, S; Poster Presentation)
- 2.4.23 ชื่อประชุมวิชาการ The VIIIth congress of the International Society of Theoretical Chemical Physics (ISTCP-VIII) สถานที่ Budapest, HUNGARY ระหว่างวันที่ 25-31 August 2013 จำนวน 1 เรื่อง

- 2.4.23.1 เรื่อง: Photophysical Properties and Photochemistry of Substituted Cinnamates for UVB Blocking: Effect of Hydroxy, Nitro, and Fluoro Substitutions at ortho, meta, and para Positions (M. Promkatkaew, S. Suramitr, T. Karpkird, M. Ehara and S. Hannongbua; Poster Presentation)
- 2.4.24 ชื่อประชุมวิชาการ The 15th Asian Chemical Congress (15ACC) สถานที่ Resort World Sentosa, SINGAPORE ระหว่างวันที่ 19-23 August 2013 จำนวน 3 เรื่อง
- 2.4.24.1 เรื่อง: Structural, Electronic, and UV Absorption Properties of Various Substituted Cinnamic Acids and Cinnamates, Based on TD-DFT and SAC-CI Investigations (M. Promkatkaew, S. Suramitr, T. Karpkird, M. Ehara and S. Hannongbua; Poster Presentation)
- 2.4.24.2 เรื่อง: Molecular Docking Studies and Potential Activity of Diptoinonesin D against Gram-Positive Bacteria (K. Sudto, C. Tancharoen, D. Phromyothin, P. Saparpakorn, Y. H. Qin, S. Vajrodaya, S. Techasakul, H. M. Ge, R. X. Tan and S. Hannongbua; Poster Presentation)

2.5 เสนอผลงานวิจัยในที่ประชุมวิชาการระดับชาติ

- 2.5.1 การประชุมวิชาการ “โครงการปริญญาเอกกาญจนาภิเษก ครั้งที่ 12” ซึ่งจัดขึ้นที่โรงแรมจอมเทียน ปาล์มบีช รีสอร์ท เมืองพัทยา จ.ชลบุรี ประเทศไทย ระหว่างวันที่ 1-3 เมษายน 2554 จำนวน 1 เรื่อง
- 2.5.1.1 เรื่อง: Molecular Docking and NMR Binding studies to Identify Novel Inhibitors of Phosphomevalonate Kinase (Pornthip Boonsri, Andrew Olson, Sheng Cai, Timothy J. Herdendorf, Henry M. Miziorko, Supa Hannongbua and Daniel S. Sem: Oral Presentation)
- 2.5.2 ชื่อประชุมวิชาการ “การประชุมวิชาการ ม.อ. วิจัย ครั้งที่ 5” สถานที่ Bangkok, Thailand ระหว่างวันที่ 4-5 สิงหาคม 2554 จำนวน 1 เรื่อง
- 2.5.2.1 เรื่อง: การศึกษาอันตรกิริยาของสารยับยั้งไตรโคซานและสารอนุพันธ์กับเอนไซม์ Enoyl-ACP Reductase Mycobacterium Tuberculosis ด้วยระเบียบวิธีการคำนวณโมเลกุล ลาร์ดอกกิ้ง (พลุทธิ์ คำศรี, อรดี พันธุ์กว้าง, กชกร ชันอาสา, อมรรัตน์ คำคง, พชรินทร์ ทรัพย์อาภากร, สุภา หารหนองบัวและ พรพรรณ พิงโพธิ์)
- 2.5.3 การประชุมวิชาการ “The 8th-Thai Summer School of Computational Chemistry” ซึ่งจัดขึ้นที่ จ.เชียงใหม่ ประเทศไทย ระหว่างวันที่ 24-27 กันยายน 2554 จำนวน 1 เรื่อง
- 2.5.3.1 เรื่อง: The Key Interactions for Binding of Enoyl-ACP Reductase Inhibitors as Anti-tuberculosis Agents, Based on Quantum Chemical Calculations (P. Kamsri, A. Punkvang, K. Kun-asa, D. Kasamsri, P. Saparpakorn, S. Hannongbua, P. Wolschann, S. Prueksaaron and P. Pungpo)
- 2.5.4 การประชุมวิชาการ “The International Kasetsart University Science and Technology Annual Research Symposium: Science Frontier towards ASEAN (I-

KUSTAR)” ซึ่งจัดขึ้นที่ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ บางเขน กรุงเทพฯ ประเทศไทย ระหว่างวันที่ 28-29 มีนาคม 2556

2.5.4.1 เรื่อง: Structure and Energetic Properties of HIV-1 Reverse Transcriptase Inhibitors for Design of Next Generation Drug (W. Kaewsri, P. Saparpakorn and S. Hannongbua)

2.5.5 การประชุมวิชาการ The3rd Chemistry Postgraduate Symposium (ChPGS3) จัดที่ ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ บางเขน กรุงเทพฯ วันที่ 28 ตุลาคม 2556 จำนวน 4 เรื่อง

2.5.5.1 เรื่อง: Skin Sensitization Prediction Based using Quantum Chemical Calculations: A Theoretical Model for the SNAr Domain (M. Promkatkaew, D. Gleeson, S. Hannongbua; Oral Presentation)

2.5.5.2 เรื่อง: Conformation Study of IIA Binding Site in Human Serum Albumin to Succeed Enzymatic Activity for Aspirin Prodrugs by using Molecular Dynamics Simulations (O. Phuangswai, S. Hannongbua and M. P. Gleeson; Oral Presentation)

2.5.5.3 เรื่อง: Insights into the Catalytic Mechanism of Plant Allene Oxide Synthase (pAOS): Quantum mechanics Calculations (T. Somboon, M. P. Gleeson, W. Treesuwan, J. Ochiai, S. Mori and S. Hannongbua; Oral Presentation)

2.5.5.4 เรื่อง: QM and QM/MM Calculations on the Catalytic Reaction of Plant Allene Oxide Synthase (pAOS) (T. Somboon, M. P. Gleeson, W. Treesuwan, J. Ochiai, S. Mori and S. Hannongbua; Poster Presentation)

2.5.6 การประชุมวิชาการ IU-KU Symposium on Integrative Molecular Biosciences จัดที่ อาคาร 45 ปี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ บางเขน กรุงเทพฯ วันที่ 13 ธันวาคม 2556 จำนวน 14 เรื่อง

2.5.6.1 เรื่อง: Research Direction of Faculty of Science, Kasetsart University (S. Ratanapo; Oral Presentation)

2.5.6.2 เรื่อง: Overview of the College of Science, Ibaraki University and Local Sustainability Course for AIMS University Students (S. Mori; Oral Presentation)

2.5.6.3 เรื่อง: Overview of the Interdisciplinary graduate program in Genetic Engineering: Example of applying to Veterinary medical research. (S. Prapong, T. Sritrakul, C. Suphatpahrapol, W. Surachetpong, P. Lekcharoensuk and W. Wajjwalku1; Oral Presentation)

2.5.6.4 เรื่อง: Introduction of Ibaraki University Cooperation between Agriculture and Medicine (IUCAM) (A. Toyoda; Oral Presentation)

2.5.6.5 เรื่อง: Genetic influence on caste determination in Reticulitermes termites. (IUCAM) (O. Kitade; Oral Presentation)

- 2.5.6.6 เรื่อง: Biofuel production from sweet sorghum (Y. Kurusu, K. Ohyama, M. Kanemoto, M. Akiyama, S. Chohnan, F. Shiotsu, Y. Nitta and H. Ohta; Oral Presentation)
- 2.5.6.7 เรื่อง: Palm-Oil Research in KU for Biofuel (V. Punsuvon; Oral Presentation)
- 2.5.6.8 เรื่อง: Molecular Modelling of Odorant Compounds and Some Anti-Oxidants (W. Treesuwan1 and S. Hannongbua; Oral Presentation)
- 2.5.6.9 เรื่อง: Systematic Analysis of the Physicochemical Parameters of Oral Drugs, Clinical and Preclinical Compounds (M. Paul Gleeson, D. Montanari, Paul D. Leeson; Oral Presentation)
- 2.5.6.10 เรื่อง: Computer-aided Protein Modeling: A Case Study From Tyrosine Kinase (TK) Domain of EGFR (K. Choowongkamon, O. Sawadeechaikul, N. Songtawee, S. Ratanabunyong, S. Semsri; Oral Presentation)
- 2.5.6.11 เรื่อง: Theoretical studies on biosynthesis of prostaglandin G2 by cyclooxygenase-2 (T. Yoshimura, Paul Gleeson, S. Hannongbua, S. Mori; Oral Presentation)
- 2.5.6.12 เรื่อง: Mechanistic Insights into the Catalytic Reaction of Plant Allene Oxide Synthase (pAOS) via QM and QM/MM Calculations (T. Somboon, J. Ochjai, W. Treesuwan, M. Paul Gleeson, S. Hannongbua, S. Mori; Oral Presentation)
- 2.5.6.13 เรื่อง: Weak Interaction Effect at Active Site Geometry and Electronic Structure of Met16X Pseudoazurin: Cu and S K-edge X-ray Absorption Spectroscopic Studies (T. Yamaguchi, J. Yano, V. Yachandra, R. K. Szilagy, T. Kohzuma; Oral Presentation)
- 2.5.6.14 เรื่อง: Bioinorganic Chemistry of Cytochrome c' Based on High Resolution Crystallographic Analyses (A. Takashina, M. Tiedemann, M. Unno, M. Stillman, T. Kohzuma; Oral Presentation)
- 2.5.7 การประชุมวิชาการ Joint IMS-KU Workshop on Molecular Sciences towards Green Sustainability จัดที่ อาคาร 45 ปี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ บางเขน กรุงเทพฯ วันที่ 6-7 มกราคม 2557 จำนวน 18 เรื่อง
- 2.5.7.1 เรื่อง: Integrative Research on Anti-AIDS and Drug Discovery (S. Hannongbua; Oral Presentation)
- 2.5.7.2 เรื่อง: Au and Au/Pd Nanocluster Catalysts (Masahiro Ehara; Oral Presentation)
- 2.5.7.3 เรื่อง: Theoretical and experimental study of solvent effects on the structure, vibrational spectra, and tautomerism of salicylaldehyde based (S. Suramitr, S. Hannongbua; Oral Presentation)
- 2.5.7.4 เรื่อง: Amyloid Disruption by Cavitation Studied by Non-Equilibrium Molecular Dynamics Simulation (H. Okumura; Oral Presentation)

- 2.5.7.5 เรื่อง: Theoretical investigation of PicoGreen as a DNA intercalating dye (P. Saparpakorn, S. Hannongbua, H. Nakai; Oral Presentation)
- 2.5.7.6 เรื่อง: Dynamic Assembly of Proteins Involved in the Ubiquitin-/Proteasome-mediated Protein Degradation System (K. Kato; Oral Presentation)
- 2.5.7.7 เรื่อง: Computer-aided Protein Modeling: A Case Study From Tyrosine Kinase (TK) Domain of EGFR (K. Choowongkamon, O. Sawadeechaikul, N. Songtawee, S. Ratanabunyong, S. Semsri; Oral Presentation)
- 2.5.7.8 เรื่อง: Regulation of Gene Expression by a Novel Heme-sensing Transcriptional Regulator HrtR (S. Aono; Oral Presentation)
- 2.5.7.9 เรื่อง: Molecularly Imprinted Polymer (MIP) Based Biosensor for Influenza A Virus Detection (C. Sangma, T. Wangchareansak, A. Thitihanyanont, M. Paul Gleeson and P. A. Lieberzeit; Oral Presentation)
- 2.5.7.10 เรื่อง: Water Oxidation Catalyzed by Transition Metal Complexes (S. Masaoka; Oral Presentation)
- 2.5.7.11 เรื่อง: Systematic Analysis of the Physicochemical Parameters of Oral Drugs, Clinical and Preclinical Compounds (M. Paul Gleeson, D. Montanari, Paul D. Leeson; Oral Presentation)
- 2.5.7.12 เรื่อง: Pt-nanoparticles with PEDOT:PSS - a mixture conducive to being an effective replacement for Pt counter-electrodes in DSSC (V. Vailikhit, L. A. S. Morenos, T. Nagata and K. Mitsuke; Oral Presentation)
- 2.5.7.13 เรื่อง: Formulation and storage stability of oil-in-water emulsions encapsulating baicalein (W. Treesuwan, S. Ichikawa, Z. Wang, M. A. Neves, K. Uemura, M. Nakajima and I. Kobayashi; Oral Presentation)
- 2.5.7.14 เรื่อง: Ions distribution in Na⁺ channel revealed by the method of statistical mechanics of liquid (S. Phongphanphanee, N. Yoshida, F. Hirata; Oral Presentation)
- 2.5.7.15 เรื่อง: A molecular study of small- and large-ring cyclodextrins (W. Khuntawee, W. Sangpheak, T. Chakcharoensap, B. Nutho, T. Rungrotmongkol; Oral Presentation)
- 2.5.7.16 เรื่อง: Organic sensitizers with modified di(thiophen-2-yl)phenylamine donor units for efficient dye-sensitized solar cells: a computational study (S. Namuangruk, J. Meeprasert, S. Jungsuttiwong, V. Promarak, and N. Kungwan; Oral Presentation)
- 2.5.7.17 เรื่อง: Development of Metal Phosphate and Phosphide Catalysts for Biomass Conversion to Platform Chemicals and Biofuel (P. Khemthong; Oral Presentation)

2.5.7.18 เรื่อง: Pyrrolidinyl peptide nucleic acids immobilized on cellulose paper as a DNA sensor (T. Praneenarat, N. Jirakittwut, N. Panyain, T. Nuanyai, and T. Vilaivan; Oral Presentation)

2.6 จัดการสัมมนาพิเศษ

2.6.1 เรื่อง “Surface Analysis an Integrated Approach” โดยเชิญ Professor Harry J. Whitlow จาก Department of Physics, University of Jyväskylä ระหว่างวันที่ 16-28 กุมภาพันธ์ 2554 ณ ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

2.6.2 เรื่อง “Developing New Gold-catalyzed Reaction: A Flexibility-driven Approach” โดยเชิญ Professor Young Ho Rhee วันที่ 22 กุมภาพันธ์ 2554 ณ ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

2.6.3 เรื่อง “Molecular Modeling of Membrane Protein” โดยเชิญ Prof. Dr. Peter Wolschann จาก University of Vienna ประเทศ ออสเตรีย วันที่ 16 กุมภาพันธ์ 2554 ณ ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ และมีจำนวนผู้เข้าร่วมประชุมทั้งหมด 25 คน

2.6.4 เรื่อง “Enantioselective Carbon-Carbon bond Formation Promoted by Camphor Derived Chiral Ligands” โดยเชิญ Professor Bing-Jiun Uang วันที่ 16 กุมภาพันธ์ 2554 ณ ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

2.6.5 เรื่อง “High Stereochemical Control in Natural Product Synthesis- Carbanion and Metal Cluster for C-C Bond Formation, Functionalized Cyclobutane ring Synthesis, Acetylene Cobalt Mediated Synthesis” โดยเชิญ Professor Minoru Isobe วันที่ 9 กุมภาพันธ์ 2554 ณ ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

2.6.6 เรื่อง “New Synthesis Strategy for Nitrogen Heterocycles and its Application to Total Synthesis of Structurally Complex Alkaloids” โดยเชิญ Professor Hidetoshir Tokuyama วันที่ 25 มกราคม 2554 ณ ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

2.6.7 เรื่อง “Applying Photoactivable Reagents in Electrokineticsystems for Biological and Environmental Analysis” โดยเชิญ Professor Dr. Vincent T. Remcho วันที่ 11 มกราคม 2554 ณ ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ และมีจำนวนผู้เข้าร่วมประชุมทั้งหมด 30 คน

2.6.8 เรื่อง “Cyclic Sulfamidated Asymmetric Synthesis of “Lead-like” N-Heterocycles” โดยเชิญ Professor Tim Gallagher วันที่ 10 มกราคม 2554 ณ ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

2.6.9 เรื่อง “Synthetic and Biosynthetic Studies on Polyketide Derived Natural Product” โดยเชิญ Professor Christine Willis วันที่ 10 มกราคม 2554 ณ ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

2.6.10 เรื่อง "Role of Natural Organic Matter in Aquatic Environment" โดยเชิญ Dr. Ron Beckett จาก School of Chemistry Monash University จากประเทศ ออสเตรเลีย ระหว่างวันที่ 16-27 ธันวาคม 2553 ณ ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

2.6.11 เรื่อง “Transition Metal Chemistry” โดยเชิญ Professor Dr. Neil Connelly from University of Bristol, ประเทศสหราชอาณาจักรระหว่างวันที่ 8-13 พฤศจิกายน 2553 ณ ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

2.6.12 เรื่อง "Energy Related to Catalysis" โดยเชิญ Prof. Dr. Olaf Deutschmann จาก Karlsruhe Institute of Technology ประเทศ สหพันธ์สาธารณรัฐเยอรมนี ระหว่างวันที่ 28 ตุลาคม ถึง 1 พฤศจิกายน 2553 ณ ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

2.6.13 เรื่อง “Advanced methods in ATR-FTIR spectroscopy for the use in biophysical chemistry” โดยเชิญ Prof. Dieter Baurecht จาก Institute for Biophysical Chemistry, Faculty of chemistry, University of Vienna ประเทศ ออสเตรเลีย วันที่ 23 กันยายน 2554 ณ ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์และมีจำนวนผู้เข้าร่วมประชุมทั้งหมดโดยประมาณ 15 คน

2.6.14 เรื่อง “New insights from quantum chemical molecular dynamics simulations on the formation mechanism of metallofullerenes” โดยเชิญ Prof. Stephan Irle จาก Institute for Advanced Research and Development of Chemistry Graduate School of Science Nagoya University ประเทศ ญี่ปุ่น วันที่ 17 ตุลาคม 2554 เวลา 10.00-11.00 น. ณ ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์และมีจำนวนผู้เข้าร่วมประชุมทั้งหมดโดยประมาณ 30 คน

2.6.15 เรื่อง “Computational chemistry with the roll of a dice: stochastic structure generation from metal clusters to ionic liquids” โดยเชิญ Dr. Matt Addicoat จาก Institute for Advanced Research and Development of Chemistry Graduate School of Science Nagoya University ประเทศ ญี่ปุ่น วันที่ 17 ตุลาคม 2554 เวลา 11.00 -12.00 น. ณ ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์และมีจำนวนผู้เข้าร่วมประชุมทั้งหมดโดยประมาณ 30 คน

2.6.16 เรื่อง “NMR-Spectroscopy to Study Biocatalyzed Reactions-From Analysis to Synthetic Applications” โดยเชิญ Prof. Lothar Brecker จาก Department of Organic Chemistry, University of Vienna และมีผู้เข้าร่วมประชุมทั้งหมดโดยประมาณ 35 คน

2.6.18 รองศาสตราจารย์ ดร.สุภา ทารหนองบัว ได้เข้าร่วมสัมมนาเชิงวิชาการในหัวข้อเรื่อง “นักวิจัยรุ่นใหม่พบเมธีวิจัยอาวุโส สกว.” ณ โรงแรมฮอติเต็ยอินน์ รีสอร์ท รีเจนท์ บีช ชะอำ จังหวัดเพชรบุรี และเป็นประธานกลุ่ม Natural Products and Pharmaceutical Science ระหว่างวันที่ 10-12 ตุลาคม 2555

2.6.19 รองศาสตราจารย์ ดร.สุภา ทารหนองบัว เป็นผู้แทนสมาคมเคมีแห่งประเทศไทย ฯ เข้าร่วมประชุม 62th FACS EXCO Meeting วันที่ 20 ตุลาคม 2555 ณ เมือง Siem Reap, Cambodia

2.6.20 เรื่อง “Understanding and Using High Performance Computing over National e-Science Infrastructure Consortium’s Resources” โดยเชิญ วิทยากรจาก ศูนย์เทคโนโลยีอิเล็กทรอนิกส์และคอมพิวเตอร์แห่งชาติ (NECTEC) ณ ห้อง 602 ชั้น 6 อาคาร ภคพ ชูติมา ภาควิชาเคมี จำนวน 18 คน

2.6.21 มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ จัดพิธีมอบปริญญาปรัชญาดุษฎีบัณฑิตกิตติมศักดิ์ สาขาวิชาเคมี แก่ Professor Dr. Aaron Ciechanover จาก Tumor and Vascular Biology Research Center The Rappaport Faculty of Medicine and Research Institute Technion-Israel Institute of Technology นักวิทยาศาสตร์รางวัลโนเบล สาขาเคมี ประจำปี 2004 และบรรยายพิเศษ เรื่อง The revolution of personalized medicine - are we going to cure all diseases and at what price ? ในวันศุกร์ที่ 19 ตุลาคม 2555 เวลา 10.00 – 12.00 น. ห้องประชุมสุธรรมอารีกุล อาคารสารนิเทศ 50 ปี คณาจารย์และ นักวิจัยได้เข้าร่วมฟังและได้รับประโยชน์จากการบรรยายในครั้งนี้เป็นอย่างมาก

2.6.22 เรื่อง “Structure-Based Drug Design and Drug Development at Concordia University Wisconsin – from Tuberculosis to Vascular Disease” โดย Associate Professor Daniel S. Sem, Ph.D. จาก Concordia University Wisconsin, Wisconsin ประเทศสหรัฐอเมริกา ให้กับนิสิตระดับบัณฑิตศึกษา คณาจารย์ และผู้สนใจ ในวันที่ 23 พฤศจิกายน พ.ศ. 2555 เวลา 13.00 – 14.00 น. ณ ห้อง 602 ชั้น 6 อาคารภคพ ชูติมา ภาควิชาเคมี

2.6.23 เรื่อง "Mechanism of the West Nile Virus NS3 protease inhibitor using quantum chemical calculations" ในงาน 4th Research Digest โดย ผศ.ดร.พัชรินทร์ ทวีทรัพย์อากาศ ในวันที่ 4 มกราคม พ.ศ. 2556 ณ ห้อง 602 ชั้น 6 อาคารภคพ ชูติมา ภาควิชาเคมี

2.6.24 เรื่อง "Molecular modeling of outer membrane proteins" ในงาน 6th Research Digest โดย ดร.ประภาศิริ พงษ์ประยูร ในวันที่ 18 มกราคม พ.ศ. 2556 ณ ห้อง 202 ชั้น 2 อาคารภคพ ชูติมา ภาควิชาเคมี

2.6.25 เรื่อง “Structural Views of Carbohydrate-Protein Interaction Systems as Potential Therapeutic Targets” โดย Professor Koichi Kato จาก Institute for Molecular Science and Okazaki Institute for Integrative Bioscience, Okazaki, Japan ให้กับนิสิตระดับบัณฑิตศึกษา คณาจารย์ และผู้สนใจ ในวันที่ 22 มกราคม พ.ศ. 2556 เวลา 13.30 – 14.30 น. ณ ห้อง 602 ชั้น 6 อาคารภคพ ชูติมา ภาควิชาเคมี

2.6.26 เรื่อง "Asymmetric Synthesis of C3 Symmetric Buckybowls" จาก Professor Hidehiro Sakurai, Ph.D., Institute for Molecular Science, Japan ให้กับ นิสิตระดับบัณฑิตศึกษา คณาจารย์ และผู้สนใจ ในวันอังคารที่ 19 กุมภาพันธ์ 2556 ณ ห้อง 602 ชั้น 6 อาคารภคพ ชูติมา ภาควิชาเคมี

2.7 จัดอบรมเชิงปฏิบัติการ

2.7.1 เรื่อง “Molecular Modelling for Drug Design” โดยเชิญนักวิจัยรุ่นใหม่เป็นวิทยากร ได้แก่ ดร. วิชชา ตรีสุวรรณ และ ดร. พรพิมล โมตรัตน์ และนักศึกษาปริญญาเอก ได้แก่ นาย พงศ์เทพ ประจักษ์ทัศน์, นาย นิกร แสงสุวรรณและนางสาว รัตน์สุภา ธรรมมาภรณ์เป็นวิทยากร ระหว่างวันที่ 31 มกราคม - 24 กุมภาพันธ์ พ.ศ. 2555 ณ ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ และมีจำนวนผู้เข้าร่วมอบรมทั้งหมดประมาณ 20 คน

2.7.2 เรื่อง “Basic of Computer-aided Ligand Design” โดยมีนักศึกษาปริญญาเอก และปริญญาโท ที่เชี่ยวชาญในแต่ละเทคนิค เป็นผู้ให้การอบรม ได้แก่ นางสาว พรทิพย์ บุญศรี อบรมเรื่อง “การใช้เทคนิค ONIOM” นางสาว ชมกฤษณ์ ตันเจริญ อบรมเรื่อง “Molecular docking by GOLD” และนางสาว จิราภรณ์ ยงพิศาลภพ อบรม เรื่อง “Molecular docking by AutoDock version 4 on Window” ระหว่างวันที่ 15-17 กุมภาพันธ์ พ.ศ. 2555 ณ ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์โดยมีนักศึกษาระดับปริญญาเอก จาก มหาวิทยาลัยสงขลานครินทร์ วิทยาเขต หาดใหญ่ ซึ่งเป็นนักศึกษาภายใต้การดูแลของ นักวิจัยที่มีความร่วมมือทางวิชาการกับโครงการ และนักศึกษาระดับปริญญาเอกและโท ของ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์



2.7.3 เรื่อง “Chirality in Biologically Active Molecules” โดย Professor Madalena M. M. Pinto, Professor of Organic and Medicinal Chemistry Faculty of Pharmacy and Research Centre of Medicinal Chemistry University of Porto ระหว่างวันที่ 21 – 25 มกราคม 2556 เวลา 9.00 - 16.00 น. ณ ห้อง 602 ชั้น 6 อาคาร กฤษฎา ชูติมา

3. กิจกรรมอื่น ๆ ที่เกี่ยวข้อง ได้แก่

3.1 ผลงานอื่น ๆ เช่นการไปเสนอผลงาน การได้รับเชิญเป็นวิทยากร การได้รับรางวัล และการไปเยี่ยมชมห้องปฏิบัติการ

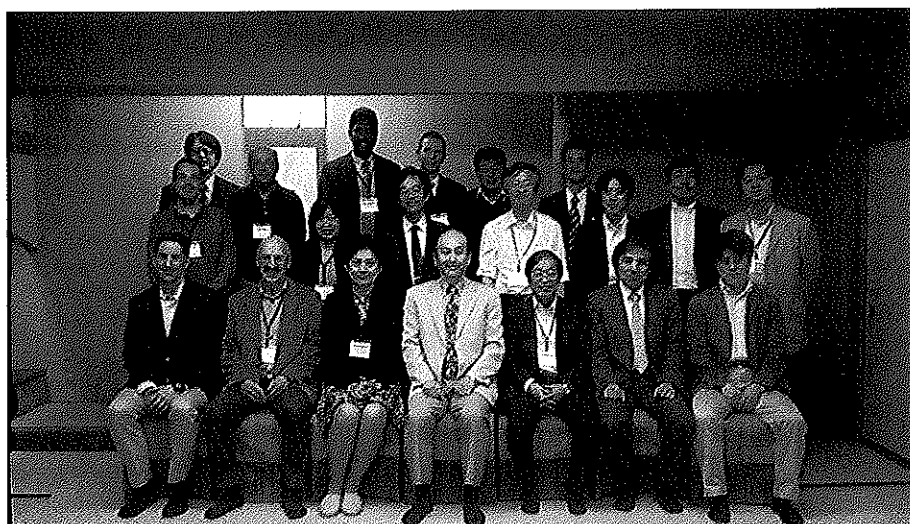
3.1.1 การได้รับเชิญเป็นวิทยากร

- 3.1.1.1 ศาสตราจารย์ ดร. สุภา หารทองบัว ได้รับเชิญเป็น Invited speaker บรรยายในหัวข้อเรื่อง “Theoretical investigation on HIV-1 reverse transcriptase/inhibitor interaction, base on ONIOM method” ในการประชุมวิชาการ 11th Eurasia Conference on Chemical Sciences สถานที่ The Dead Sea, Jordan ระหว่างวันที่ 6-10 October, 2010
- 3.1.1.2 ศาสตราจารย์ ดร. สุภา หารทองบัว ได้รับเชิญเป็น Invited Speaker บรรยายในหัวข้อเรื่อง “Research and Development of Food Production in Thailand” ในการประชุม Asia America Chemical Symposium ครั้งที่ 241 ซึ่งจัดโดย President of American Chemical Society (241st ACS National Meeting), สถานที่ Disneyland Hotel, Magic Ballroom, Anaheim, California, วันที่ March 29, 2011



- 3.1.1.3 อาจารย์ ดร. ทรงวุฒิ สุรมิตร ได้รับเชิญเป็น Invited Speaker บรรยายในหัวข้อเรื่อง “Excitation Energies of Triphenylamine Cyanoacrylic Acid for Dye-Sensitized Solar Cells Using Long-Range Corrected Time-Dependent Density Functional Theory” ในการประชุมวิชาการ 15th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE15) สถานที่ Bangkok University, Bangkok, Thailand. ระหว่างวันที่ March 30- April 1, 2011
- 3.1.1.4 ดร. วิชชา ตริสุวรรณ ได้รับเชิญเป็น Invited Speaker บรรยายในหัวข้อเรื่อง “Molecular Dynamics Simulations Strategy for Drug Design” ในการประชุมวิชาการ 15th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE15) สถานที่ Bangkok University, Bangkok, Thailand. ระหว่างวันที่ March 30- April 1, 2011
- 3.1.1.5 ศาสตราจารย์ ดร. สุภา หารทองบัว ได้รับเชิญเป็น Invited Speaker บรรยายในหัวข้อเรื่อง “Enzyme-inhibitor interaction : Key Structural and Energetic Properties for Inhibitor Design” ในการประชุมวิชาการนานาชาติ XVth International Workshop on Quantum Systems in

- Chemistry and Physics (QSCP-XVI)สถานที่ Ishikawa Prefecture Museum of Art, Kanazawa, JAPAN ระหว่างวันที่ 11-17 September 2011
- 3.1.1.6 ศาสตราจารย์ ดร. สุภา หารหนองบัว ได้รับเชิญเป็น Invited Speaker บรรยายในหัวข้อเรื่อง “ONIOM: A useful Combined Quantum Chemical Calculations for Key Enzyme-inhibitor Interactions” ในการประชุมเชิงปฏิบัติการระดับนานาชาติ Computer-aided Drug Design Seminar and Workshopสถานที่ Eastin Hotel, Penang, ประเทศ Malaysia ระหว่างวันที่ 5-8December, 2011
- 3.1.1.7 ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. พรพรรณ พิงโก๊ะ ได้รับเชิญเป็น Invited Speaker บรรยายในหัวข้อเรื่อง “Optimal Drug Design of anti-TB agents, anti-cancer agent and anti-HIV-1 inhibitors, based on computer-aided Molecular Design”ในการประชุมเชิงปฏิบัติการระดับนานาชาติ Computer-aided Drug Design Seminar and Workshopสถานที่ Eastin Hotel, Penang, ประเทศ Malaysia ระหว่างวันที่ 5-8December, 2011
- 3.1.1.8 ศาสตราจารย์ ดร. สุภา หารหนองบัว ได้รับเชิญเป็น Invited speaker บรรยายในหัวข้อเรื่อง “QM/MM Investigation on the Enzymatic Reaction of HIV-1 Reverse Transcriptase” ในการประชุมวิชาการระดับนานาชาติ JST International Symposiumon “Multi-scale Simulation of Condensed-phase Reacting Systems” ซึ่งจัดขึ้น Nakoya University ES hallณ เมือง Nakoya ประเทศ ญี่ปุ่น ระหว่างวันที่ 9 พฤษภาคม 2555 ถึง 12 พฤษภาคม 2555



- 3.1.1.9 ศาสตราจารย์ ดร. สุภา หารหนองบัว ได้รับเชิญเป็น Invited speaker บรรยายในหัวข้อเรื่อง “Structural requirement for new generation of HIV-1 reverse transcriptase inhibitor: Cheminformatics approach”ในการประชุมวิชาการAsia America Chemical Symposium ครั้งที่ 244ซึ่งจัดโดย

President of American Chemical Society(244th ACS National Meeting), สถานที่ Pennsylvania Convention Center Halls A and B, Philadelphia, USAวันที่August 21, 2012

- 3.1.1.10 ศาสตราจารย์ ดร. สุภา ทารหนองบัว ได้รับเชิญเป็น Invited speaker บรรยายในหัวข้อเรื่อง "Search for Bioactive Compounds from Dipterocarpaceae Plant in Thailand, Against HIV-1 Reverse Transcriptase, Acetylcholinesterase and Antimicrobial Activities" ในการประชุมวิชาการ 2012 IOCD International Conference on Functional Molecules in Nature: "Chemistry in biosystems and bioprocess", สถานที่ The Mandarin Garden Hotel, Nanjing, P.R. China, วันที่ 22-24 กันยายน 2555
- 3.1.1.11 ศาสตราจารย์ ดร. สุภา ทารหนองบัว ได้รับเชิญเป็น Invited speaker บรรยายในหัวข้อเรื่อง "Theoretical Investigation on the Absolute Configuration of A new Resveratrol Trimer" ในการประชุมวิชาการ Cambodian Malaysian Chemical Conference (CMCC) ณ Angkor Century Resort and Spa เมือง Siem Reap ประเทศ Cambodia, วันที่ 19- 21ตุลาคม2555
- 3.1.1.12 ศาสตราจารย์ ดร. สุภา ทารหนองบัว ได้รับเชิญเป็น Plenary speaker บรรยายในหัวข้อเรื่อง "A New Resveratrol Trimer and Oligomers from Dipterocarpaceae Plant in Thailand : Biological Activities, Structures and Molecular Interaction of HIV-1 Reverse Transcriptase: QM/MM Investigation" ในงานประชุมวิชาการ Computer Aided-Drug Design (CADD2012) ณ เมือง Selangor, Malaysia,วันที่ 3-4 ธันวาคม 2555
- 3.1.1.13 ศาสตราจารย์ ดร. สุภา ทารหนองบัว ได้รับเชิญเป็น Plenary speaker บรรยายในหัวข้อเรื่อง "Enzymatic Reaction of HIV-1 Reverse Transcriptase: QM/MM Investigation" ในงานประชุมวิชาการ Computer Aided-Drug Design (CADD2012) ณ เมือง Selangor, Malaysia,วันที่ 3-4 ธันวาคม 2555
- 3.1.1.14 Dr. Matthew Paul Glesson ได้รับเชิญเป็น Invited speaker บรรยายในหัวข้อเรื่อง "Further Analyses of the Link between Efficacy, ADMET and Physico-Chemical Parameters" ในงานประชุมวิชาการ Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON 2013) สถานที่ The Tide Resort, Bangsaen Beach, Chon Buri, Thailand ระหว่างวันที่ January 23-25, 2013.
- 3.1.1.15 ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. พชรินทร์ ททรัพย์อากาศ ได้รับเชิญเป็น Invited speaker บรรยายในหัวข้อเรื่อง "Binding Investigation of the West Nile Virus NS3 Protease Inhibitor using Divide-and-Conquer Method" ในงานประชุมวิชาการ 17th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE17) สถานที่ Khon Kaen University, Khon Kaen, Thailandระหว่างวันที่ March 27-29, 2013

- 3.1.1.16 ศาสตราจารย์ ดร. สุภา หารหนองบัว ได้รับเชิญเข้าร่วมบรรยายในหัวข้อเรื่อง “From Molecular Interactions to Design of the Next Generation HIV-1 Reverse Transcriptase Inhibitor” ในงานประชุมวิชาการ International Symposium of Homogenous Chemistry Reactivity (ISHCR 2013) ณ เมือง Mito Campus, Ibaraki University ,Thailand ระหว่างวันที่ 14-15 มิถุนายน 2556
- 3.1.1.17 ศาสตราจารย์ ดร. สุภา หารหนองบัว ได้รับเชิญเข้าร่วมบรรยายในหัวข้อเรื่อง “Structural and Photo-physical Properties of Conducting Polymers and UVB Blocking Materials Through the Lens of Computational Microscope” ภายใต้หัวข้อวิจัย Green Energy and Nano-Chemistry ในงานประชุมวิชาการ 48th The Korean Society of Industrial and Engineering Chemistry (KSIEC) ณ Yuseong Hotel, Daejeon Convention Center, Korea ระหว่างวันที่ 30 ตุลาคม – 1 พฤศจิกายน 2556

3.1.2 การได้รับรางวัลและการได้รับตำแหน่งในองค์กรระดับนานาชาติ

- 3.1.2.1 นางสาวกนกอร สุดโต ได้รับรางวัล Best Poster Awards ในการนำเสนอผลงานวิจัยในงานประชุมวิชาการนานาชาติ 2012 IOCD International Conference on Functional Molecules in Nature: “Chemistry in biosystems and bioprocess”, สถานที่ The Mandarin Garden Hotel, Nanjing, P.R. China, วันที่ 22-24 กันยายน 2555



- 3.1.2.2 ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.พรพรรณ พิงโก๊ะ ได้รับการเชิดชูเกียรติในการได้รับทุนสนับสนุนการวิจัย ในโครงการ 2010 L’Oreal For Women in Science in Thailand โดยการสนับสนุนของ ลอรีอัล (ประเทศไทย) จำกัด ร่วมมือกับสำนักเลขาธิการคณะกรรมการแห่งชาติว่าด้วยการศึกษา วิทยาศาสตร์ และวัฒนธรรม แห่งสหประชาชาติ (ยูเนสโก)



- 3.1.2.3 ศาสตราจารย์ ดร. สุภา หารหนองบัว ได้รับตำแหน่งเลขาธิการทั่วไปของสมาพันธ์สมาคมแห่งเอเชีย (Federation of Asian Chemical Society, Secretary General) ระหว่างปี 2011-2013 โดยมีสมาคมเคมีจากประเทศต่าง ๆ ในเอเชีย จำนวน 29 ประเทศ เป็นสมาชิก
- 3.1.2.4 ดร. วิชชา ตรีสุวรรณ ได้รับรางวัล “IUPAC Young Chemist Awards” ในการนำเสนอผลงานวิจัยในงานประชุมวิชาการนานาชาติ “14th Asian Chemical Congress (14ACC)” สถานที่ Queen Sirikit National Convention Center, Bangkok, THAILAND ระหว่างวันที่ 5-8 September 2011
- 3.1.2.5 น.ส. กนกอร สุดโต ได้รับรางวัล “Bangkok Bank Young Chemist Awards” ในการนำเสนอผลงานวิจัยในงานประชุมวิชาการนานาชาติ “14th Asian Chemical Congress (14ACC)” สถานที่ Queen Sirikit National Convention Center, Bangkok, THAILAND ระหว่างวันที่ 5-8 September 2011
- 3.1.2.6 น.ส. ชมกฤษ ดันเจริญ ได้รับรางวัล “Bangkok Bank Young Chemist Awards” ในการนำเสนอผลงานวิจัยในงานประชุมวิชาการนานาชาติ “14th Asian Chemical Congress (14ACC)” สถานที่ Queen Sirikit National Convention Center, Bangkok, THAILAND ระหว่างวันที่ 5-8 September 2011
- 3.1.2.7 นาย ณัฐพงษ์ อธิอาภา ได้รับรางวัล “Bangkok Bank Young Chemist Awards” ในการนำเสนอผลงานวิจัยในงานประชุมวิชาการนานาชาติ “14th Asian Chemical Congress (14ACC)” สถานที่ Queen Sirikit National Convention Center, Bangkok, THAILAND ระหว่างวันที่ 5-8 September 2011
- 3.1.2.8 น.ส. เตือนใจ สมบูรณ์ ได้รับรางวัล “ผลงานวิทยานิพนธ์ชมเชย สาขาวิชาเคมี กลุ่มวิทยาศาสตร์กายภาพ ระดับปริญญาโท ประจำปีการศึกษา 2553”
- 3.1.2.9 น.ส. พูนทรัพย์ ณ นคร ได้รับรางวัล “ผลงานวิทยานิพนธ์ชมเชย สาขาวิชาชีวเคมี กลุ่มวิทยาศาสตร์ชีวภาพ ระดับปริญญาโท ประจำปีการศึกษา 2553”
- 3.1.2.10 ศาสตราจารย์ ดร. สุภา หารหนองบัว เข้ารับพระราชทานโล่เมธีวิจัยอาวุโส สกว. ประจำปี 2553จากสมเด็จพระเทพรัตนราชสุดาฯ สยามบรมราชกุมารี ณ มูลนิธิชัยพัฒนา เมื่อวันที่ 23 ตุลาคม 2554



3.1.2.11 นางสาวพรทิพย์ บุญศรี ได้รับรางวัล The 2nd Honor of the Outstanding Dissertation Award from Graduate School, Kasetsart University สาขาชีวภาพ ในหัวข้องานวิจัยเรื่อง “NMR Spectroscopic Investigation And Molecular Modeling On Ligand-Protein Interactions; Sarcotoxin IA, Phosphomevalonate Kinase, and HIV-1 Reverse Transcriptase

3.1.2.12 นายพงศ์เทพ ประจักษ์ณ์ ได้รับรางวัล The 2nd Honor of the Outstanding Dissertation Award from Graduate School, Kasetsart University (2013) ในหัวข้อวิทยานิพนธ์เรื่อง From Nanoparticles to Electronic Devices: Synthesis, Theoretical Study, and Applications of Carbon Nanotubes Functionalized with Poly[2-Methoxy-5-(2'-Ethyl-Hexyloxy)-1,4-Phenylenevinylene]

3.1.2.13 นางสาวมาลินี พรหมชาติแก้ว ได้รับรางวัล Outstanding Oral Presentation ในงานประชุมวิชาการโครงการปริญญาเอกกาญจนาภิเษก ครั้งที่ 15 (RGJ-Ph.D. Congress XV) ระหว่างวันที่ 28-30 พฤษภาคม 2557 ณ โรงแรมจอมเทียน ปาล์ม บีช รีสอร์ท จ.ชลบุรี

3.1.3 การไปเยี่ยมชมห้องปฏิบัติการ

3.1.3.1 ศาสตราจารย์ ดร. สุภา ทารหนองบัวและคณะนักวิจัย ได้ไปเยี่ยมชมห้องปฏิบัติการ ณ Institute of Functional Biomolecules Medical School, Nanjing University ประเทศสาธารณรัฐประชาชนจีน ในเดือนสิงหาคม 2553 และนักวิจัยไปทำวิจัยระยะสั้น ระหว่าง สิงหาคม – กันยายน 2553 และ พฤษภาคม – มิถุนายน 2554

3.1.3.2 นางสาว ชมพูนุช ตันเจริญ ได้รับทุนจากโครงการขอบฟ้านานาชาติ (International Horizon Project) ประจำปี 2554 รุ่นที่ 3 (IHP 2011) ไปเยี่ยมชมห้องปฏิบัติการ ณ National University of Singapore (NUS) และ

Nanyang Technology University (NTU) ประเทศ สิงคโปร์ ระหว่างวันที่ 11-13 ตุลาคม 2554



3.1.3.3 ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.พจนารถ สุวรรณรุจิ เดินทางไปเจรจาความร่วมมือด้านการวิจัยเกี่ยวกับ Effect of Nonrubber Component on Adhension and Friction of Natural Rubber ภายใต้โครงการ Franco-Thai Collaboration ณ Institute de science des Matériaux de Mulhouse เมือง Mulhouse, France ระหว่างวันที่ 11-17 พฤศจิกายน 2555

3.1.3.4 รองศาสตราจารย์ ดร. วราภรณ์ พาราสุข ได้รับเชิญให้เข้าร่วมโครงการ “ 2013 Nigata Graduated Research Forum” ณ Nigata University, Japan ระหว่างวันที่ January 9-16, 2013

3.2 การได้รับทุนอื่น ๆ จากทั้งในและต่างประเทศ

3.4.1 ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. พชรินทร์ ทรัพย์อากาศ ได้รับทุน The Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology ภายใต้โครงการ “Project for Establishing Core Universities for Internationalization (Global30)” ให้ทำวิจัย Application of DC-MP2 method to investigate the interaction energy of MK-4965 in HIV-1 RT binding pocket ณ มหาวิทยาลัยวาเซดะประเทศญี่ปุ่น ระหว่าง กันยายน 2553 ถึง สิงหาคม 2555

3.4.2 ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ทรงวุฒิ สุรมิตร ได้รับทุน ASEA-UNINET ให้ทำวิจัย ณ Institute of theoretical Chemistry, University of Vienna ประเทศ ออสเตรีย ระยะเวลา 38 วัน ระหว่างวันที่ 24 ตุลาคม 2553 ถึง 30 พฤศจิกายน 2553

3.4.3 ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. พรพรรณ พิงโก๊ะ ได้รับทุนวิจัย โครงการทุนวิจัยลอรีอัล ประเทศไทย “เพื่อสตรีในงานวิทยาศาสตร์” (For Women in Science L'OREAL Thailand) ครั้งที่ 8 ประจำปี 2553 ในสาขาวิทยาศาสตร์ชีวภาพ (Life Science) เป็นจำนวน 200,000 บาท จาก บริษัท ลอรีอัล (สตรีในงานวิทยาศาสตร์ประเทศไทย) จำกัด ร่วมกับสำนักเลขาธิการคณะกรรมการแห่งชาติว่าด้วย



การศึกษาวิทยาศาสตร์และวัฒนธรรมแห่งสหประชาชาติ (ยูเนสโก) เมื่อวันที่ 30 พฤศจิกายน 2553

3.4.4 อาจารย์ ดร. ชีระชาติ ลีประเสริฐได้รับทุนTechnology Grants ภายใต้โครงการความร่วมมือทางวิทยาศาสตร์ เทคโนโลยีและศิลปะ ระหว่าง ประเทศไทยกับ ประเทศออสเตรีย ประจำปี 2553 ให้ทำวิจัยหลังปริญญาเอก ใน สาขาการสังเคราะห์ยา ณ University of Vienna ประเทศ ออสเตรีย ระยะเวลา 6 เดือน

3.4.5 ดร. วิชชา ตรีสุวรรณ ได้รับทุน French Junior Research Fellowship program 2011ให้ทำวิจัยเรื่อง “Study of bioactive compounds distribution in the culinary transformation: from soymilk to tofu” ภายใต้การดูแลของ Prof. Hervé ณ สถาบัน AgroParisTech ประเทศสาธารณรัฐฝรั่งเศส ระยะเวลา 2 เดือน

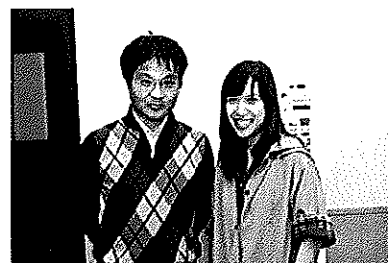
3.4.6 อาจารย์ ดร. ประภาศิริ พงษ์ประยูร ได้รับทุนFrench Junior Research Fellowship program 2011ให้ทำวิจัยในหัวข้อเรื่อง“Simulation Studies of G-coupled protein receptor (BLT2)”ประเทศ สาธารณรัฐฝรั่งเศสระยะเวลา 2 เดือน

3.4.7 อาจารย์ ดร. ประภาศิริ พงษ์ประยูร ได้รับทุนให้ไปอบรมเชิงปฏิบัติการCentre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire (CECAM) เรื่อง “Coarse-grained biomolecular modeling” ณ Lausanne ประเทศ สวิตเซอร์แลนด์ ระหว่างวันที่ 17-21ตุลาคม2554

3.4.8 นายพงศ์เทพ ประจักษ์ตน ได้รับทุนจาก พสวท. ให้ทำวิจัยเรื่อง “From Nanoparticles to Electronics Devices: Synthesis, Theoretical Study, and Applications of Carbon Nanotubes Functionalized with Poly[2-methoxy-5-(2-ethyl-hexyloxy)-1,4-phenylene-vinylene” ณ Institute for Integrative Bioscience, National Institutes of Natural Sciencesประเทศ ญี่ปุ่น เป็นเวลา 1 ปี (กุมภาพันธ์ 2554 – มกราคม 2555)

3.4.9 นางสาว มาลินี พรหมชาติแก้ว ได้รับทุนจาก Institute ofMolecular Science (IMS) ให้ทำวิจัยเรื่อง “Theoretical investigation of various substituted cinnamates byusing the symmetry-adapted cluster configuration interaction (SAC-CI) method”ณ Okazaki,ประเทศ ญี่ปุ่น ระยะเวลา 5 เดือน

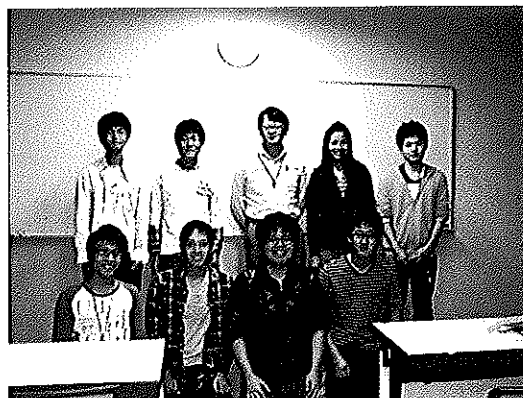
3.4.10 นางสาว พรทิพย์ บุญศรี ได้รับทุนJapan-East Asia Network of Exchange for Students and Youths (JENESYS) program ใน โครงการ Exchange Scientist จาก Institute ofMolecular Science (IMS)ภายใต้การดูแลของ Prof. Koichi Kato ให้ทำวิจัยเรื่อง“NMR Analyses of the Sarcotoxin IA Antimicrobial Peptide Interacted to Lipid A” และ “NMR Characterization of the Efavirenz Binding to p51 Monomer of



HIV-1RT” ณ *The Institute for Molecular Science and Okazaki Institute for Integrative Bioscience, National Institutes of Natural Sciences* ประเทศ ญี่ปุ่น ระยะเวลา 2 เดือน นับตั้งแต่ 22 สิงหาคม ถึง 31 ตุลาคม 2554 จากนั้นได้รับทุน RGJ ให้ทำวิจัยต่อเนื่อง อีก 18 วัน ระหว่างวันที่ 1-18 พฤศจิกายน 2554



- 3.4.11 นางสาว เตือนใจ สมบูรณ์ ได้รับทุนจาก Grant-in-aid for Scientific Research on Innovative Areas, “Molecular Activation Directed toward Straightforward Synthesis” ให้ทำวิจัยเรื่อง DFT studies on Allene Oxide Synthase ณ Ibaraki University ประเทศญี่ปุ่น ระหว่างวันที่ 25 กันยายนถึง 5 ธันวาคม 2554



- 3.4.12 นางสาว ชมกฤษต์ตันเจริญ ได้รับทุนจาก “Sokendai Asian Winter School (Basics and Frontiers in Molecular Science)” เสนอผลงานวิจัย “A CoMSIA Study on Resveratrol Derivatives Active against Aromatase Enzyme of Breast Cancer”(C. Tancharoen, P. Maitarad, N. Ithiapa, S. Suramitr, P. Saparpakorn and S. Hannongbua; Poster Presentation) ณ Okazaki Conference Center, ประเทศ ญี่ปุ่นระหว่างวันที่ 10-13 มกราคม 2555



- 3.4.13 อาจารย์ ดร. ประภาศิริ พงษ์ประยูร ได้รับทุน จาก University of Vienna และ ASE-Uninet ให้ทำวิจัยในหัวข้อเรื่อง “Simulation Studies of G-coupled protein receptor (BLT2)” ประเทศออสเตรีย ระยะเวลา 2 เดือน (22 เมษายน ถึง 15 มิถุนายน 2555)
- 3.4.14 ดร. วิชชา ตริสุวรรณ ได้รับทุน UNU-KIRIN FELLOWSHIP 2012-2013 ให้ทำวิจัย เรื่อง Formulation And Characterization Of Micro/ Nanodispersions Encapsulating Functional Food Components ภายใต้การดูแลของ Prof. Sosaku Ichikawa ที่ Food Engineering Division, National Food Research Institute, Tsukuba, Japan เป็นเวลา 1 ปี (23 เม.ย. 2555 – 15 มี.ค. 2556)
- 3.4.15 นางสาวรัตนสุภา ธรรมาภรณ์ ได้รับทุนโครงการปริญญาเอกกาญจนาภิเษก (RGJ) และ ทุนสนับสนุนการแลกเปลี่ยนนิสิตวิจัยขาออก (ORSE) ร่วมทำวิจัย เรื่อง Investigation of Novel NNRTIs of Wild Type and Mutant HIV-1 RT by using Isothermal Titration Calorimetry ณ Okazaki Institute for Integrative Bioscience, National Institutes of Natural Sciences เมือง Okazaki ประเทศญี่ปุ่น ภายใต้การดูแลของ Prof. Koichi Kato ตั้งแต่วันที่ 1 กรกฎาคม 2555 ถึงวันที่ 30 ธันวาคม 2555 (รวม เวลา 6 เดือน)
- 3.4.16 ดร.ธีรชาติ ลิ้มประเสริฐ ได้รับทุนไปทำวิจัยเรื่อง “Synthesis of New Anticancer Compounds with DNA Intercalating Properties” ณ Institut für Pharmazeutische Chemie, Universitat Wien, Austria ระหว่างวันที่ 5 สิงหาคม ถึง 2 กันยายน 2555
- 3.4.17 นางสาวกนกอร สุดโต ได้รับทุน EXODASS (post-JENESYS) program 2012 จาก Institute of Molecular Science (IMS) ภายใต้การดูแลของ Prof.Kunihiro KUWAJIMA ให้ทำวิจัยเรื่อง “Elucidation of Molecular Mechanisms of Protein Folding” ณ Okazaki Institute for Integrative Bioscience National Institutes of Natural Sciences ประเทศ ญี่ปุ่น ระยะเวลา 2 เดือน นับตั้งแต่ 31 ตุลาคม ถึง 31 ธันวาคม 2555



- 3.4.18 นายนิกร แสงสุวรรณ ได้รับทุน จาก University of Vienna และ ASEA-Uninet ให้ทำวิจัยในหัวข้อเรื่อง “Theoretical Study of Dimerization Mechanism of Acrolein” ณ Institute of Theoretical Chemistry, University of Vienna, Austria ระยะเวลา 3 เดือน (3 พฤศจิกายน 2555 ถึง 31 มกราคม 2556)



- 3.4.19 นางสาวมาลินี พรหมขัติแก้ว ได้รับทุนโครงการปริญญาเอกกาญจนาภิเษก (RGJ) ทำวิจัยในหัวข้อเรื่อง “Understanding the Interactions between Methoxycinnamic Acid and Cyclodextrins: Density Functional Calculations and Molecular Dynamic Simulations” ณ Institute of Molecular Science (IMS) ระยะเวลา 3 เดือน (13 พฤษภาคม ถึง 4 สิงหาคม 2556) และ ณ Institute of Theoretical Chemistry, University of Vienna, Austria ระยะเวลา 3 เดือน (1 ธันวาคม 2555 ถึง 28 กุมภาพันธ์ 2556)



- 3.4.20 นางสาววิไลลักษณ์ แก้วศรี ได้รับทุนจาก Rhom Scholarship 2012 และ Outbound Research Student Exchange , ORSE ให้ทำวิจัยในหัวข้อเรื่อง “Structure and Energetic Properties of HIV-1 Reverse Transcriptase Inhibitors for Design of Next Generation Drug” ณ Department of Chemistry and Biochemistry School of Advance and Engineering, Waseda University, Shinjuku-ku, Tokyo, Japan ระยะเวลา 2 เดือน (1 กุมภาพันธ์ ถึง 27 มีนาคม 2556)



- 3.4.21 นางสาววราภรณ์ บุญญรัตน์ ได้รับทุนจาก The Southeast Asian Regional Center for Graduate Study and Research in Agriculture (SEARCA) ให้ทำวิจัยในหัวข้อเรื่อง “The Affinity of Different P38 Kinase Inhibitors using Molecular dynamics and Free Energy Calculations” ณ School of Chemistry and Molecular Biosciences, University of Queensland, Australia ระยะเวลา 5 เดือน (1 มิถุนายน ถึง 31 ตุลาคม 2556)

- 3.4.22 นางสาวพรทิพย์ บุญศรี ได้รับเชิญจาก Prof. Koichi Kato เข้าร่วมงาน the Bioorganization 2013 ณ Okazaki Institute for Integrative Bioscience, Institute for Molecular Science (IMS), Okazaki, Japan ระหว่างวันที่ August 22 - 24, 2013
- 3.4.23 นายณัฐพล วิริยะธนากร ได้รับทุนจาก Outbound Research Student Exchange, ORSE และ 2013 NCTU Taiwan Elite Internship Program ให้ทำวิจัยในหัวข้อเรื่อง "Binding Investigation of Dengue Virus NS3 Protease Inhibitors using Quantum Chemical Calculations" ณ Institute of Bioinformatics and Systems Biology, National Chiao Tung University, Taiwan ระยะเวลา 60 วัน (1 ตุลาคม ถึง 30 พฤศจิกายน 2556)
- 3.4.22 นางสาวรัตนสุภา ธรรมาภรณ์ ได้รับทุนจาก โครงการปริญญาเอกกาญจนาภิเษก (คปก.) และ Outbound Research Student Exchange, ORSE ให้ทำวิจัยในหัวข้อเรื่อง Investigation of Novel NNRTIs of Wild Type HIV-1 RT by using Isothermal Titration Calorimetry (ITC), X-ray Crystallography and NMR spectroscopy ณ Okazaki Institute for Integrative Bioscience, National Institutes of Natural Sciences เมือง Okazaki ประเทศญี่ปุ่น ระยะเวลา 1 ปี 6 เดือน (23 กรกฎาคม 2555 ถึง 22 มกราคม 2557)
- 3.4.23 นางสาวสุวรรณี ศรียาบ ได้รับทุนจาก Bilateral Research Cooperation, BRC คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ ให้ทำวิจัยในหัวข้อเรื่อง "Theoretical Studies Fluorescence Quenching of Novel Organic Donor-Acceptor Dyad as Fluorescent Sensors towards Highly Sensitive and Selective Sensing of Nitroaromatics Vapors" ณ Institute for Theoretical Chemistry, University of Vienna, Austria ระยะเวลา 104 วัน (19 เมษายน ถึง 31 กรกฎาคม 2558)

3.3 กิจกรรมที่เกี่ยวข้องกับการนำผลจากโครงการไปใช้ประโยชน์

เนื่องจาก โครงการนี้ เน้น การผลิตผลงานทางวิชาการที่เกี่ยวข้องกับการค้นหายาต้านเอดส์และโรคอื่นๆ ที่เป็นปัญหาของประเทศ ดังนั้นประโยชน์ที่จะได้รับจากโครงการ คือ การผลิตความรู้ใหม่ที่เกี่ยวข้องและเป็นที่ยอมรับในระดับสากล นั่นคือ ผลงานทั้งหมด 31 เรื่อง ที่ได้ตีพิมพ์ลงในวารสารวิชาการระดับนานาชาติ และมีบทความที่ร่วมกับนักวิจัยรุ่นใหม่เพื่อสร้างความเชี่ยวชาญของนักวิจัย อีก 9 เรื่อง เพื่อเป็นการเผยแพร่ความรู้ใหม่ ให้กับนักวิจัยและผู้สนใจ สามารถนำความรู้นี้ไปใช้เป็นข้อมูลอ้างอิง เพื่อให้ก่อให้เกิดผลประโยชน์ต่อไปในอนาคต

3.4 การเชื่อมโยงทางวิชาการกับนักวิชาการอื่น ๆ ทั้งในและต่างประเทศ

มีความเชื่อมโยงและร่วมมือกับนักวิจัยในประเทศและต่างประเทศ ดังต่อไปนี้

- ศ. ดร. ยงยุทธ ยุทธวงศ์ BIOTEC/สำนักงานพัฒนาวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยีแห่งชาติ
- ดร.สุมาลี กำจรวงศ์ไพศาล BIOTEC/สำนักงานพัฒนาวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยีแห่งชาติ

- ดร.ศรเทพ วรรณรัตน์ NECTEC/สำนักงานพัฒนาวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยีแห่งชาติ
- ดร.พูนศักดิ์ ปล่อยประดิษฐ์ สถาบันวิจัยจุฬาภรณ์
- ผศ.ดร.มารศรี เรืองจิตต์ชวัลย์ KMUTT
- รศ.ดร.สรัญญา วัชรโรทัย ภาควิชาพฤกษศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์
- รศ.ดร.อนุชิต พลับรู่กาล คณะเภสัชศาสตร์ มหาวิทยาลัยสงขลานครินทร์
- รศ.ดร.ลักขณา หล่อตระกูล สถาบันเทคโนโลยีนานาชาติสิรินธร (SIIT)
- Prof. Dr. Peter Wolschann, U. of Vienna, Austria
- Prof. Dr. Hans Liskha, U. of Vienna, Austria
- Dr. Danial Sem, Marquette University, USA
- Dr. Adrian Mulholland, U. of Bristol, UK
- Prof. Dr. Simon Mackay, U. of Strathclyde, Scotland, UK
- Prof. Jae Kim, Dongduk Women’s University, Seoul, Korea
- Prof. Ren xiang Tan, Nanjing University, People Republic of China
- Prof. Bechan Sharma, University of Allahabad, India
- Prof. Masahiro Ehara, Institute for Material Science, Okazaki, Japan
- Assist. Prof. Dr. Jen-Shiang K. Yu, National Chiao Tung University, Taiwan
- Prof. Dr. Hiromi Nakai, Waseda University, Japan
- Prof. Dr. Masataka Nagaoka, Graduate School of Information Science, Nagoya University, Japan
- Prof. Dr. Seji Mori, Faculty of Science, Ibaraki University, Japan
- Prof. Dr. Stephan Irel, Nagoya University, Japan

3.5 การได้รับทุนการศึกษา

- ได้รับทุนผู้ช่วยวิจัยโครงการปริญญาเอกกาญจนาภิเษก รุ่น 9 จำนวน 1 ทุน (นางสาว พรทิพย์ บุญศรี)
- ได้รับทุนผู้ช่วยวิจัยโครงการปริญญาเอกกาญจนาภิเษก รุ่น 11 จำนวน 1 ทุน (นางสาว รัตน์สุภา ธรรมรัตน์)
- ได้รับทุนผู้ช่วยวิจัยโครงการปริญญาเอกกาญจนาภิเษก รุ่น 12 จำนวน 1 ทุน (นางสาว มาลินี พรหมขัติแก้ว)
- ได้รับทุนผู้ช่วยวิจัยโครงการปริญญาเอกกาญจนาภิเษก รุ่น 13 จำนวน 1 ทุน (นางสาว เตือนใจ สมบูรณ์)
- ได้รับทุนปริญญาเอกร่วมในประเทศและต่างประเทศเพื่อพัฒนากลุ่มวิจัย ภายใต้โครงการ เครือข่ายกลยุทธ์เพื่อการผลิตและพัฒนาอาจารย์ในสถาบันอุดมศึกษา ปี 2550 จำนวน 1 ทุน (นางสาว วราภรณ์ จังชนสมบัติ)

- ได้รับทุนปริญญาเอกร่วมในประเทศและต่างประเทศเพื่อพัฒนากลุ่มวิจัย ภายใต้โครงการ เครือข่ายกลยุทธ์เพื่อการผลิตและพัฒนาอาจารย์ในสถาบันอุดมศึกษา ปี 2551 จำนวน 1 ทุน (นาย นิกร แสงสุวรรณ)
- ได้รับทุนอุดหนุนการวิจัย ประเภทบัณฑิตศึกษา ประจำปี 2557 จากสำนักงานคณะกรรมการวิจัยแห่งชาติ ให้ทำวิจัยในหัวข้อเรื่อง “การสกัดและการวิเคราะห์โครงสร้าง Absolute configuration ของตัวยับยั้งชนิดใหม่ที่มีฤทธิ์ต้านจุลชีพด้วยเทคนิค RDC-base NMR และ Motif-inspired Assay จากเปลือกต้นพะยอม *Shorea roxburghii* D. Gon.” จำนวน 1 ทุน (นางสาวกนกอร สุดโต)

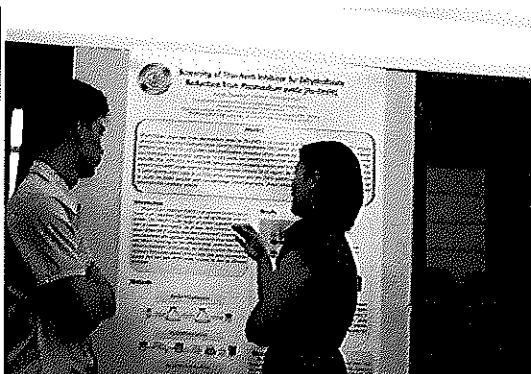
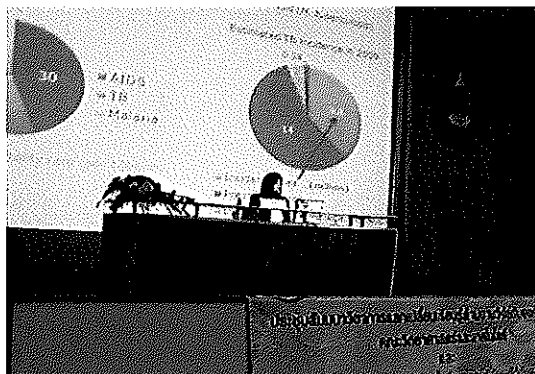
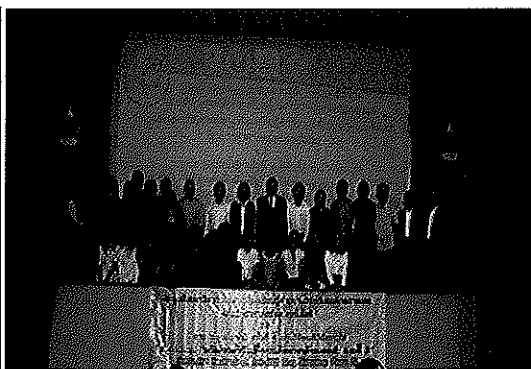
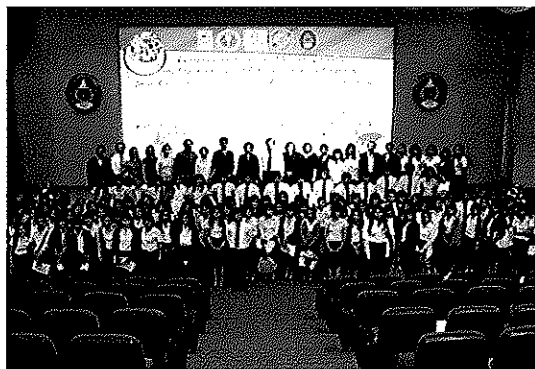
4. จัดประชุมกลุ่มวิจัยประจำปี

4.1 ในการประชุมครั้งแรก เมื่อเดือน กันยายน 2553 มีนักวิจัยในโครงการจำนวน 20 คน เข้าร่วมประชุม โดยมีวัตถุประสงค์เพื่อแจ้งให้นักวิจัยทราบถึงแนวทางการวิจัยของโครงการในระยะที่ 2 อีกทั้ง แลกเปลี่ยนความคิดเห็นซึ่งกันและกันเพื่อสร้างความร่วมมือระหว่างนักวิจัย ซึ่งมาจากสถาบันต่างๆ



4.2 ในการประชุมครั้งที่ 2 กลุ่มวิจัยเมธีวิจัยอาวุโส สำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย (สกว.) เป็นเจ้าภาพร่วมกับ สาขาเคมี คณะวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี มหาวิทยาลัยราชภัฏเพชรบุรี จังหวัด เพชรบุรีโดยได้จัดให้มีการประชุมประจำปี ครั้งที่ 4 ภายใต้ขอบเขตงานวิจัยเกี่ยวกับ นวัตกรรมวิจัยเพื่อการค้นหายาต้านเอดส์: ระยะที่ 2 “Innovative Research on Anti-AIDS Drug Discovery: Phase II” ระหว่างวัน ที่ 29-30 กรกฎาคม 2554 เวลา 9.00 น. - 16.30 น. ณ ห้องประชุมวิทยากรมย์ 1 สำนักงานอธิการบดี มหาวิทยาลัยราชภัฏเพชรบุรี จังหวัดเพชรบุรี โดยมีวัตถุประสงค์ เพื่อเสนอผลงานความก้าวหน้าในโครงการ แลกเปลี่ยนความรู้ เพื่อผลิตผลงานทางวิชาการที่มีคุณภาพสูง และนำไปสู่ความเป็นเลิศด้านงานวิจัย และสร้างนักวิจัยรุ่นใหม่ และนิสิตระดับ

บัณฑิตศึกษาที่มีศักยภาพสูง มีนักวิจัยในโครงการเข้าร่วมการประชุมทั้งสิ้น 40 คน และมีผู้ร่วมฟังการบรรยายโดยวิทยากรจากโครงการในวันแรกเป็นจำนวนมาก (รายละเอียดได้แสดงไว้ในรายงานของการประชุม และได้จัดส่งมายังสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัยเรียบร้อยแล้ว) นอกจากนี้ รศ. ดร. สุภา หารหนองบัว ได้รับเชิญให้เป็นวิทยากรให้ความรู้แก่ คณาจารย์ นิสิตนักศึกษา ในหัวข้อเรื่อง “ทำวิจัยอย่างไรให้ประสบความสำเร็จ และแนวโน้มของงานวิจัยไทยในยุคเปิดอาเซียน” และ “แนวทางการเขียนข้อเสนอโครงการวิจัยวิทยาศาสตร์” อีกด้วย



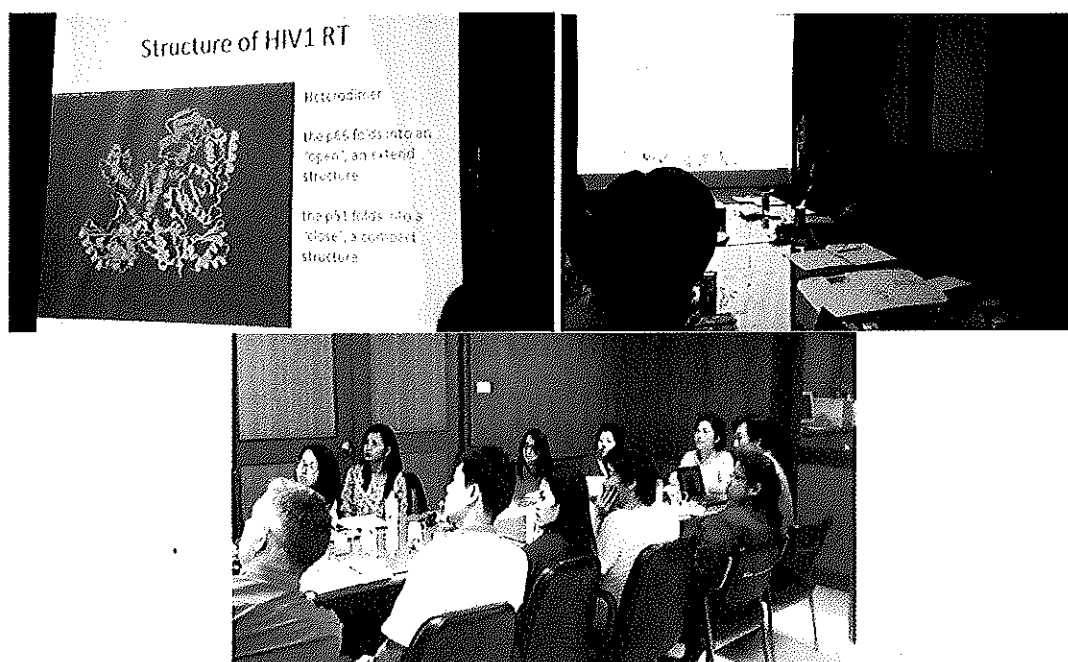
- 4.3 สำหรับการประชุมครั้งที่ 3 ได้จัดขึ้นเมื่อวันที่ 28 กุมภาพันธ์ พ.ศ. 2555 ณ ห้อง 402 ชั้น 4 อาคารกฤษฎา ชูติมา ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ วิทยาเขตบางเขน เวลา 13.00 – 15.00 น. โดยมีนักวิจัยและนักศึกษาในโครงการจำนวน 18 คน เข้าร่วมประชุม สำหรับวัตถุประสงค์ของการประชุมครั้งนี้ มีดังนี้ 1) เพื่อแจ้งให้นักวิจัยทราบถึงผลการดำเนินงานวิจัยโดยภาพรวมของโครงการในรอบ 18 เดือนที่ผ่านมาและความก้าวหน้าของงานวิจัยของนักวิจัยแต่ละท่าน 2) เพื่อหาแนวทางร่วมกันในการที่จะดำเนินงานวิจัยในขั้นต่อไป อีกทั้ง แลกเปลี่ยนความคิดเห็นซึ่งกันและกัน ตลอดจน กระตุ้นให้นักวิจัยตีพิมพ์ผลงานในวารสารวิชาการนานาชาติที่มีค่า impact factor สูงอีกด้วยและ 3) เพื่อนัดหมายการประชุมครั้งต่อไป ซึ่งคาดว่าจะจัดขึ้นที่มหาวิทยาลัยราชภัฏนครปฐม ในเดือน กรกฎาคม พ.ศ. 2555 สำหรับบรรยากาศการประชุม แสดงดังภาพ



4.4 ในการประชุมครั้งที่ 4 ได้จัดขึ้นเมื่อวันที่ 28 สิงหาคม 2555 เวลา 9.00 น. - 17.30 น. ณ ห้องประชุมเจ้าพระยา มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีราชมงคลสุวรรณภูมิ ศูนย์วาสุกรี จังหวัดพระนครศรีอยุธยาโดยกลุ่มวิจัยเมธีวิจัยอาวุโส สำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย (สกว.) เป็นเจ้าภาพร่วมกับมหาวิทยาลัยเทคโนโลยีราชมงคลสุวรรณภูมิ ได้จัดงานประชุมประจำปี ครั้งที่ 5 ภายใต้ขอบเขตงานวิจัยเกี่ยวกับ นวัตกรรมวิจัยเพื่อการค้นหา ยาต้านเอดส์: ระยะที่ 2 "Innovative Research on Anti-AIDS Drug Discovery: Phase II" ซึ่งมีวัตถุประสงค์เพื่อให้ นักวิจัยได้มีการเสนอผลงาน แลกเปลี่ยนความรู้ ร่วมมือกันแก้ไขปัญหา อีกทั้งให้เกิดความก้าวหน้าในโครงการอย่างต่อเนื่อง ในงานนี้นักวิจัยเข้าร่วมการประชุมทั้งสิ้น 37 คน (รายละเอียดได้แสดงไว้ในรายงานของการประชุม และได้จัดส่งมายังสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัยเรียบร้อยแล้ว)



4.5 สำหรับการประชุมครั้งที่ 5 ได้จัดขึ้นเมื่อวันที่ 28 กุมภาพันธ์ พ.ศ. 2556 ณ ห้อง 111 ชั้น 1 อาคารภคินา ชูติมา ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ วิทยาเขต บางเขน เวลา 13.00 – 15.00 น. โดยมีนักวิจัยและนักศึกษาในโครงการจำนวน 13 คน เข้าร่วมประชุม สำหรับวัตถุประสงค์ของการประชุมครั้งนี้ เพื่อแลกเปลี่ยนความรู้ ร่วมมือกันแก้ไขปัญหา พร้อมทั้งช่วยกันเสนอแนวความคิดในการทำให้งานวิจัยมีประสิทธิภาพ อีกทั้งช่วยกันคิดหาหนทาง เพื่อให้งานวิจัยในการสังเคราะห์สารออกฤทธิ์ในการยับยั้งเอนไซม์ HIV-1 reverse transcriptase นั้น ดำเนินต่อไปได้อย่างราบรื่นและสามารถแก้ไขปัญหาได้อย่างรวดเร็ว



5. เอกสารที่ผลิตสื่อ แผ่นพับ เอกสารประชาสัมพันธ์

5.1 เอกสารประชาสัมพันธ์ในงาน มหกรรมวิชาการ สกว. “วิจัยตามรอยพระยุคลบาท: สร้างสรรค์ปัญญา เพื่อพัฒนาประเทศ” ระหว่างวันที่ 21-24 มิถุนายน 2555 ณ อิมแพค เมืองทองธานี

6. ผลงานอื่นๆที่เกี่ยวข้อง

- 6.1 ศาสตราจารย์ ดร.สุภา ทารหนองบัว เขียนบทความตีพิมพ์ใน Chemistry International (Official Newsletter of IUPAC) ในหัวข้อเรื่อง “Contemporary Chemistry for Sustainability and Economic Sufficiency” May-June, 2012, vol. 34, no. 3, pp. 30-31.
- 6.2 บทความโดย Prof. Minoru Isobe ในหัวข้อเรื่อง “Recent Advances in Natural Products Chemistry” ตีพิมพ์ใน Chemistry-Asian Journal, May-June, 2012, vol. 34, no. 3, pp. 29-30.

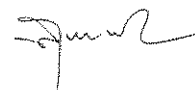
- 6.3 เป็นผู้ร่วมจัดการประชุม ACS-FACS Symposium ในการประชุม ACS 244th National Meeting ในหัวข้อ “East Meet West Innovative Research for Health and Medicine”

7. ความเห็นของผู้วิจัย

ผลของการดำเนินงานวิจัยของโครงการนวัตกรรมวิจัยเพื่อการค้นหาสาเหตุของโรคระยะที่ 2 ซึ่งต่อเนื่องจากโครงการ ฯ ระยะที่ 1 เป็นไปตามที่ได้ตั้งเป้าหมายไว้และ อาจสรุปความสำคัญของโครงการได้ ดังนี้

- 7.1 งานวิจัยที่ได้ทำอยู่นั้น เริ่มจากขั้นตอนของการออกแบบยาโดย ศึกษาด้วยระเบียบวิธีการจำลองโครงสร้างของสารต้านเอดส์ในทุกระเบียบวิธี ทำให้เกิดความสมบูรณ์แบบและนับเป็นต้นแบบของการวิจัยการออกแบบยาที่ดี และเป็นแนวทางให้นักวิจัยรุ่นใหม่ได้ดำเนินการศึกษาวิจัย และฝึกฝนให้เกิดความชำนาญ
- 7.2 นักวิจัยรุ่นใหม่ในโครงการ ฯ ระยะที่ 1 ได้เจริญก้าวหน้าขึ้นเป็นนักวิจัยรุ่นกลางในโครงการ ฯ ระยะที่ 2 จึงถือได้ว่าโครงการที่ให้ทุนสนับสนุนเมธีวิจัยอาวุโส สกว. มีส่วนสำคัญในการสร้างนักวิจัยอาชีพ และทำให้เกิดความก้าวหน้าอย่างยั่งยืนในการสร้างทีมวิจัยที่มีศักยภาพสูงให้กับประเทศ
- 7.3 ผลการวิจัยในโครงการ ฯ ระยะที่ 2 นำไปสู่การสังเคราะห์สารใหม่ และการศึกษาด้านโครงสร้างของสารกับเอนไซม์เป้าหมาย โดยวิธี NMR Spectroscopy ได้สำเร็จ นับเป็นความก้าวหน้าทางวิชาการระดับแนวหน้า โดยผลงานวิจัยในเรื่องนี้มีความยากและต้องใช้นิติปัญญาเอก ภายใต้โครงการปริญญาเอกกาญจนาภิเษกถึง 3 คน และผลงานวิจัยอยู่ในระหว่างการแก้ไขบทความในวารสาร Scientific Report และน่าจะนำไปสู่การพัฒนาตัวยับยั้งกลุ่มใหม่ที่มีศักยภาพในการที่จะพัฒนาไปเป็นตัวยารักษาโรคเอดส์ต่อไป

ลงนาม



(ศาสตราจารย์ ดร.สุภา ทารหนองบัว)

หัวหน้าโครงการวิจัย

วันที่ 30 พฤษภาคม 2558