หน้าสรุปโครงการ (Executive Summary)

0. ชื่อโครงการ

ภาษาไทย: การศึกษาสมบัติไดนามิกส์ที่สภาวะกระตุ้นของสารตัวนำพอลิเมอร์นำไฟฟ้าใน กลุ่มของอนุพันธ์พอลีคาร์บาโซล โดยวิธีคำนวณทางเคมีทฤษฎีและระเบียบวิธีทางสเปคโทรสโคปี

ภาษาอังกฤษ: Theoretical and spectroscopic investigation on the dynamic excited state properties of the conducting polymer in the class of carbazole derivatives

1. ชื่อหัวหน้าโครงการ หน่วยงานที่สังกัด ที่อยู่ หมายเลขโทรศัพท์ โทรสาร และ e-mail

ดร.ทรงวุฒิ สุรมิตร สังกัด ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์
โทรศัพท์ 02-5625555 ต่อ 2227 โทรสาร 02-5625555 ต่อ 2175
มือถือ 085-441-3637
E-mail: *fsciswsm@ku.ac.th*

2. สาขาวิชาที่ทำการวิจัย Computational Chemistry, Physical Chemistry

3. งบประมาณทั้งโครงการ 480,000 บาท

4. ระยะเวลาดำเนินงาน 2 ปี ตั้งแต่ 15พฤษภาคม 2551- 14 พฤษภาคม 2553

5. ปัญหาที่ทำการวิจัย และความสำคัญของปัญหา

พอลิเมอร์นำไฟฟ้าถูกค้นพบครั้งแรกโดยนักวิทยาศาสตร์ 3 ท่าน ได้แก่ ศาสตราจารย์ อลัน เจ ฮีเกอร์ (Alan J. Heeger) ศาสตราจารย์ อลัน จี แมคไดอาร์มิด (Alan G. MacDiarmid) และ ศาสตราจารย์ ฮิเดกิ ชิรากาวา (Hideki Shirakawa) ในปี 1977 ถือเป็นการค้นพบองค์ความรู้ใหม่ เนื่องจากพอลิเมอร์โดยทั่วไปจะมีสมบัติเป็นฉนวนไฟฟ้า แต่พอลิเมอร์นำไฟฟ้าจำพวกนี้กลับมีสมบัติเป็นพอลิเมอร์ เช่น มีความยืดหยุ่น บิดงอได้ และมีสมบัตินำไฟฟ้าได้ดี มีความมันวาวซึ่งเป็นสมบัติของโลหะ จากการค้นพบของนักวิทยาศาสตร์ทั้ง 3 ท่านนี้ถือว่ามีประโยชน์อย่างสูงต่อเทคโนโลยีในปัจจุบัน ทำให้ได้รับรางวัลโนเบล ในสาขาเคมีในปี ค.ศ. 2000 ซึ่งในปัจจุบันพอลิเมอร์นำไฟฟ้าเป็นที่รู้จักกันอย่างกว้างขวางและได้รับความสนใจจากนักวิจัยสาขาต่างๆ อย่างมาก เพื่อศึกษาสมบัติและพัฒนาพอลิเมอร์นำไฟฟ้าไปใช้ในอุตสาหกรรมกึ่งตัวนำของโลกซึ่งอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ทั้งหลายจะมีมิติเปลี่ยนไป จอภาพที่แบนบาง เหมือนกระดาษ สามารถกาง ออก

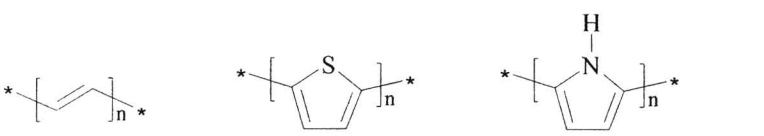
และพบได้ อุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ที่ย่อยสลายได้ในธรรมชาติ เนื่องจากพอลิเมอร์นำไฟฟ้ามีสมบัติเฉพาะตัวที่โดดเด่น เช่น

- มีสมบัติเป็นพอลิเมอร์และโลหะ
- ภายในโครงสร้างประกอบด้วยพันธะคู่และพันธะเดียวสลับกันภายในสายโซ่หลักของพอลิเมอร์โดยอิเล็กตรอนสามารถจะวิ่งบนสายโซ่ของโมเลกุลตามระยะคอนจูเกต
- มีช่องว่างของพลังงาน HOMO-LUMO อยู่ในช่วง 1.5-4.0 eV ทำให้มีสมบัติเป็นสารกึ่งตัวนำ
- ราคาถูกและการปรับเปลี่ยนสมบัติทางอิเลกโทรนิกทำได้ง่าย เช่นการปรับเปลี่ยนหมู่แทนที่ โคพอลิเมอไรเซชั่นกับโมโนเมอร์ชนิดต่างๆ เป็นต้น

เนื่องจากมีสมบัติเฉพาะตัวที่โดดเด่นดังกล่าวทำให้สามารถนำพอลิเมอร์นำไฟฟ้ามาใช้ทดแทนสารโลหะกึ่งตัวนำได้ ซึ่งในปัจจุบันนี้พอลิเมอร์นำไฟฟ้าถูกนำมาใช้ทำประโยชน์ได้หลายเทคโนโลยี เช่น

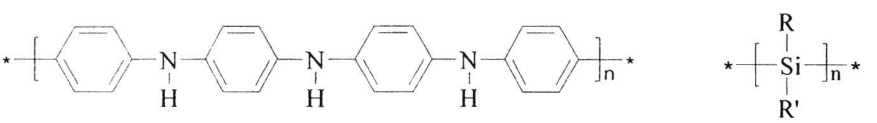
- Solar Cells, Photodetectors และ Imaging Technology
- Chemical & Biosensors
- Polymer Based Thin Film Transistors
- Electrochromic
- Devices, Batteries
- Polymer Based Photovoltaics
- LEDs, Lasers เป็นต้น

ตัวอย่างของสารตัวนำพอลิเมอร์นำไฟฟ้าแสดงในรูปที่ 1 เช่น พอลิอะเซทีรีน พอลิไทโอพีน พอลิพีโรน พอลิพาราฟีนิลลีน พอลิฟีนิลลีนไวนิลลีน พอลิอะนิลีนและ พอลิไซเลน เป็นต้น



Polyacetylene (PA) Polythiophene (PT) Polypyrrole (PPy)

Poly(para-phenylene) (PPP) Poly(para-phenylenevinylene) (PPV)



Polyaniline (PANI) Polysilanes

รูปที่ 1 แสดงตัวอย่างโครงสร้างของพอลิเมอร์นำไฟฟ้า

ในงานวิจัยนี้ทำการศึกษาเกี่ยวกับพอลิเมอร์นำไฟฟ้าที่ถูกนำมาใช้ส่วนประกอบในวัสดุเรืองแสงวัสดุเรืองแสง (Polymer Light Emitting Diodes: PLEDs) พอลิเมอร์นำไฟฟ้าได้รับความสนใจเป็นอย่างมากในอุตสาหกรรมอิเล็กทรอนิกส์แทนสารจำพวกอนินทรีย์ เหตุผลที่สำคัญอย่างหนึ่งคือสารตัวนำพอลิเมอร์นำไฟฟ้านั้นสามารถให้สีที่หลากหลาย มีความยืดหยุ่นสูง มีน้ำหนักเบา และสามารถทำการปรับเปลี่ยนสมบัติได้ง่าย เป็นต้น และเนื่องจากความต้องการที่จะผลิตวัสดุที่ให้แสงแม่สีได้ครบถ้วน (แดง เขียว น้ำเงิน (RGB))

ซึ่งสารตัวนำพอลิเมอร์นำไฟฟ้าในกลุ่มที่สนใจคือ พอลีคาร์บาโซลและอนุพันธ์ของพอลีคาร์บาโซล เนื่องจากมีประสิทธิภาพในการเปล่งแสง ทั้งแบบโฟโตลูมิเนสเซนส์ (Photoluminescence) และอิเล็กโทรลูมิเนสเซนส์ (Electroluminescence) ในช่วงแสงสีน้ำเงิน สามารถปรับช่วงการเปล่งแสงสีได้ง่าย และมีความเสถียรสูง แต่อย่างไรก็ตามในเรื่องการปรับเปลี่ยนโครงสร้างโดยการเพิ่มหมู่แทนที่เพื่อปรับสมบัติให้ได้ตามที่ต้องการของพอลีคาร์บาโซลยังมีข้อจำกัดอยู่พอสมควรเพราะอาจส่งผลต่อความสามารถในการละลายของพอลีคาร์บาโซลเอง วิธีการหนึ่งที่น่าสนใจก็คือการทำโคพอลิเมอไรเซชัน (Co-polymerization) ซึ่งเป็นการปรับเปลี่ยนโครงสร้างของพอลิเมอร์ โดยการนำโมโนเมอร์ต่างชนิดกันมาต่อกันเป็นสายโซ่พอลิเมอร์ สมบัติการเปล่งแสงของพอลิเมอร์จะเปลี่ยนแปลงไปโดยตามชนิดของมอนอเมอร์ที่นำมาโคพอลิเมอไรซ์กัน

ดังนั้นในงานวิจัยนี้จึงสนใจที่จะทำการศึกษาสมบัติทางโครงสร้างและสมบัติเชิงอิเล็กทรอนิกของพอลีคาร์บาโซลและอนุพันธ์ของพอลีคาร์บาโซล ด้วยการคำนวณทางเคมีควอนตัมและการคำนวณเชิงไดนามิกส์ เนื่องจากในปัจจุบันการคำนวณทางเคมีควอนตัม ได้กลายเป็นเครื่องมือที่นำไปใช้ประโยชน์อย่างกว้างขวางในการทำนาย ออกแบบ และตอบปัญหาเกี่ยวกับปรากฏการณ์ต่างๆ เช่น การดูดกลืนแสง การเปล่งแสง อิเลกตรอนทรานสเพอร์ เป็นต้น ที่พบในการทดลอง ในการศึกษาในขั้นต้นนั้นเป็นการศึกษารายละเอียดเกี่ยวกับโครงสร้างและพลังงานของพอลีคาร์บาโซลและอนุพันธ์ของพอลีคาร์บาโซลโอลิโกเมอร์ ที่สภาวะพื้นและสภาวะกระตุ้นโดยใช้ระเบียบวิธีทางเคมีควอนตัมเพื่อที่จะทำความเข้าใจและอธิบายสมบัติต่างๆ ที่ได้จากการทดลองของพอลิเมอร์และเพื่อที่จะทำนายสมบัติและออกแบบพอลิเมอร์ชนิดใหม่ ความรู้ที่ได้จากงานวิจัยนี้จะสามารถนำไปอธิบายการดูดกลืนและการเปล่งแสงของสารและใช้เป็นแนวทางในการพัฒนาและออกแบบพอลิเมอร์กึ่งตัวนำให้มีสมบัติทางแสงที่หลากหลายได้

6. วัตถุประสงค์

1. ศึกษาสมบัติทางโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์ของพอลิเมอร์นำไฟฟ้าได้แก่ พอลีคาร์บาโซล และอนุพันธ์ของพอลีคาร์บาโซล โดยวิธีการคำนวณทางเคมีควอนตัม
2. เพื่อศึกษาโครงสร้างที่สภาวะพื้นและสภาวะถูกกระตุ้นของพอลีคาร์บาโซลและอนุพันธ์ของพอลีคาร์บาโซล โอลิโกเมอร์
3. เพื่อศึกษาสเปกตรัมของการดูดกลืนแสงและการคายแสงของอนุพันธ์ของพอลีคาร์บาโซล ด้วยระเบียบวิธีเคมีควอนตัม และเปรียบเทียบผลที่ได้กับการทดลอง

7. ระเบียบวิธีวิจัย

โครงการวิจัยนี้เป็นการศึกษาสมบัติทางโครงสร้างและสมบัติเชิงอิเล็กทรอนิกของพอลิเมอร์ นำไฟฟ้าในกลุ่มของพอลีคาร์บาโซล และอนุพันธ์ของพอลีคาร์บาโซล โดยอาศัยระเบียบวิธีทางเคมีควอนตัมซึ่งอยู่ในรูปของสมการทางคณิตศาสตร์และถูกจัดการให้อยู่ในรูปของโปรแกรมทางเคมีคำนวณเพื่อความสะดวกในการศึกษา โดยระเบียบวิธีที่ใช้ในงานวิจัยครั้งนี้เพื่อศึกษาสมบัติต่างๆ คือ Density Functional Theory (DFT) ซึ่งทำการคำนวณโดยใช้ฟังก์ชันแบบต่างๆ และอธิบายพฤติกรรมของอิเล็กตรอนด้วยในออร์บิทัล ด้วยเซตมูลฐาน (basis set) โดยขนาดของพอลิเมอร์นำไฟฟ้าที่ใช้ศึกษานั้นจะมีพิจารณาในรูปของโอลิโกเมอร์ ตั้งแต่ 2-5 โมโนเมอร์ โดยที่จะนำข้อมูลที่ได้จากการศึกษาจากระบบโอลิโกเมอร์ เพื่อที่จะนำไปอธิบายสมบัติต่างๆ ของระบบพอลีเมอร์ที่โมเลกุลใหญ่ได้ ความรู้ที่ได้จะสามารถนำไปอธิบายการดูดกลืนและการเปล่งแสงของสารและใช้เป็นแนวทางในการพัฒนาและออกแบบพอลิเมอร์นำไฟฟ้าให้มีสมบัติทางแสงที่หลากหลายได้ ซึ่งพอลิเมอร์นำไฟฟ้านี้เป็นวัสดุนาโนชนิดหนึ่งและจะเป็นวัสดุที่มีศักยภาพสูงในการใช้งานด้านอิเล็กทรอนิกส์ต่อไปในอนาคต โดยเพื่อให้โครงการวิจัยนี้สำเร็จลุล่วงไปได้ด้วยดี ดังนั้นวิธีดำเนินการวิจัยในโครงการนี้สามารถสรุปได้ดังนี้

7.1 ในขั้นตอนแรกเป็นการศึกษาผลของระเบียบวิธีและเบซิตเซตในการศึกษาสมบัติทางโครงสร้างและอิเลกโทรนิก ของพอลิเมอร์นำไฟฟ้าในกลุ่มของพอลีคาร์บาโซลและอนุพันธ์ของพอลีคาร์บาโซล เพื่อเป็นการทดสอบระเบียบวิธีที่เหมาะสมในการศึกษาที่จะใช้ในการศึกษาต่อไป โดยเปรียบเทียบผลที่ได้จากการคำนวณกับระบบโอลิโกเมอร์ที่มีขนาดเล็กกับค่าที่ได้จากการทดลอง เช่น ค่าการดูดกลืนพลังงานแสง ค่าการคายพลังงานแสง เป็นต้น

7.2 หลังจากที่ได้ระเบียบวิธีและเบซิตเซตในการศึกษาสมบัติทางโครงสร้างและอิเลกโทรนิกที่เหมาะสมจากขั้นตอนที่ 8.1 แล้วจะทำการศึกษาสมบัติทางโครงสร้างของพอลิเมอร์นำไฟฟ้าในกลุ่มของพอลีคาร์บาโซล และอนุพันธ์ของพอลีคาร์บาโซล ทั้งในสภาวะที่สภาวะพื้นและสภาวะการกระตุ้น โดยจะพิจารณาการจัดเรียงตัวโครงสร้างของโมเลกุลโอลิโกเมอร์ว่าโครงสร้างมีความเป็นระนาบหรือบิดงอเมื่อในสภาวะที่สภาวะพื้นและสภาวะการกระตุ้น เพราะสมบัติในการเรืองแสงของพอลิเมอร์ขึ้นอยู่กับการจัดเรียงของพอลิเมอร์ ฉะนั้นเมื่อเราทราบการจัดเรียงตัวของโครงสร้างเราสามารถทำนายสมบัติการเรืองแสงของพอลิเมอร์ได้

7.3 ทำการศึกษาสมบัติทางอิเลกโทรนิกของพอลิเมอร์นำไฟฟ้าในกลุ่มของพอลีคาร์บาโซลและอนุพันธ์ของพอลีคาร์บาโซล โดยทำการคำนวณค่าพลังการค่าซึ่งทำให้เราเข้าใจอิเลกโทรนิกทรานซิชั่นในการเกิดการดูดกลืนพลังงานแสงและค่าการคายพลังงานแสงกระตุ้น

7.4 รวบรวมและวิเคราะห์ผลที่ได้จากการศึกษาทั้งหมดและสรุปผล โดยเฉพาะการพิจารณาข้อมูลที่ได้จาก 8.2 8.3 และ 8.4 เพื่อใช้ในการออกแบบพอลิเมอร์นำไฟฟ้าในกลุ่มของพอลีคาร์บาโซลและอนุพันธ์ของพอลีคาร์บาโซล

ประวัตินักวิจัยที่ปรึกษา

1. ชื่อ- นามสกุล (ภาษาไทย) รศ.ดร.สุภา หารหนองบัว

(ภาษาอังกฤษ) Assoc Prof.Dr.Supa Hannongbua

เพศ หญิง อายุ 46 ปี

สถานภาพสมรส ☐ โสด ☑ สมรส

2. การทำงาน

ตำแหน่งปัจจุบัน (อาจารย์, ผศ., รศ., ศ.) รองศาสตราจารย์ ระดับ 10

สถานที่ทำงาน ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

จังหวัด กรุงเทพ รหัสไปรษณีย์ 10900

โทรศัพท์ 02-5625555 ext. 2140 โทรสาร 02-5625555 ext. 2140

E-mail: fscisph@ku.ac.th

3. ที่อยู่ (ที่บ้าน) 35/99 หมู่บ้าน มณียา ซ.รามอินทรา 34 ถ.รามอินทรา แขวงคลองกุ่ม เขตบึงกุ่ม กทม. 10230

4. ประวัติการศึกษา

4.1 ปริญญาตรีสาขา เคมี ปีที่จบ 2528	สถาบัน จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
4.2 ปริญญาโทสาขา เคมีเชิงฟิสิกส์ ปีที่จบ 2531	สถาบัน จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
4.3 ปริญญาเอกสาขา Physical Chemistry ปีที่จบ 2534	สถาบัน University of Innsbruck

5. สาขาวิชาที่เชี่ยวชาญ

1. Computational Chemistry
2. Computer-Aided Molecular Modeling and Drug Design
3. Protein-based drug design
4. Bioinformatics, Cheminformatics
5. Glycomics, Nanopolymer
6. Conducting polymer
7. Polyaromatic Hydrocarbon.

6. ผลงานวิจัย (ปี 2009-2010)

1. Olson, A. L., Yao, H., Saparpakorn, P., Hannongbua, S., Herdendorf, T.J., Miziorko, H. M., Cai, Sheng, and Sem, D. S.*, Substrate Induced Structural and Dynamics Changes in Human Phosphomevalonate Kinase and Implications for Mechanism, *PROTEINS*, 75(1), 127-138 (**2009**). (IF 2008 = 3.419)
2. Pungpo, P.*, Saparpakorn, P., Punkvang, A., Wolschann, P., Hannongbua, S., Recent Advances in NNRTI Design: Computer-Aided Molecular Design Approaches, *Curr Comput Aided Drug Des.*, 5, 174-199 (**2009**).
3. Maitarad, P., Saparpakorn, P., Hannongbua, S.*, Kamchonwongpaisan, S., Tarnchompoo, B., and Yuthavong, Y., Particular Interaction between Pyrimethamine Derivatives and Quadruple Mutant Type Dihydrofolate Reductase of *Plasmodium falciparum*: CoMFA and Quantum Chemical Calculations Studies, *J. Enz. Inh. Med. Chem.*, 23, 241-252 **(2009)**. (IF 2008 = 1.421)
4. Phanasant, K., Maitarad, P., Hannongbua, S., Sudta, P., Suksamrarn, S., Tantirungrotchai, Y.* and Limtrakul, J., CoMFA and CoMSIA Studies on Xanthone Derivatives Against Oral Human Epidermoid Carcinoma (KB) Cancer Cell Line, *Monatshefte Chemie* 140 (3), 273-280 **(2009)**. (IF 2008 = 1.426)
5. Maitarad, P., Kamchonwongpaisan, S., Vanichtanankul, J., Vilaivan, T., Yuthavong, Y., Hannongbua, S.*, Interactions between Cycloguanil Derivatives and Wild-Type and Resistance-Associated Mutant *P. falciparum* Dihydrofolate Reductases, *J.Comput-Aided Drug Des.*, 23(4), 241-252 (**2009**) (IF 2008 = 3.62)
6. Treesuwan, W., and Hannongbua, S.*, Converting of HIV-1 RT wild type to mutant Y181C HIV-1 RT complex with Nevirapine through Molecular Dynamics Simulations: MM-PBSA calculations, **(2009)** J.Mol.Graph.Mod. 27(8), 921-929.. (IF 2008 = 2.347)
7. Saparpakorn, P.*, Thammaporn, R., and Hannongbua, S., Investigation the binding mode of Pyrazinones to HIV-1 RT using 3D-QSAR and Quantum Chemical Calculations, (**2009**) *Monatsh. Chemie*, 140(6), 587-594. (IF 2008 = 1.426)
8. Jungtanasombut, W., Boonsri, P., Kapkerd, T., and Hannongbua, S.*, QSAR Studies for Toxicity Prediction of Substituted Benzene Derivatives against *Tetrahymena pyriformis*. In the Proceedings of International Conference on Integrating Health and Environment, June 14-15, **2009**, Catholic University of Daegu, Daegu, Korea, pp. 183-186.
9. Khunnawutmanotham, N., Chimnoi, N., Thitithanyanont, A, Saparpakorn, P., Choowongkomon, K., Pungpo, P., Hannongbua, S., and Techasakul, S.,

Dipyridodiazepinone Derivatives; Synthesis and Anti HIV-1 Activity, *Beilstein Journal of Organic Chemistry*, 5(36) (**2009**). (Impact Factor 2008 = 0.8)

10. Thipnate, P., Liu, J., Hannongbua, S. and Hopfinger, A., 3D-Pharmacophore Mapping Using 4D-QSAR Analysis for the Cytotoxicity of Lamellarins Against Human Hormone-Dependent T47D Breast Cancer Cells, *J.Chem.Inf.Mod.*, 49(10) 2312-2322 (**2009**) (Impact Factor 2008 = 3.643)
11. Treesuwan, W., Wittayanarakul, K., Anthony, N., Huchet, G., Alniss, H., Hannongbua, S., Khalaf, A., Suckling, C., Parkinson, J., Waigh, R., Mackay, S.*, A detailed binding free energy study of 2:1 ligand-DNA complex formation by experiment and simulation, *PhysChemChemPhys.,* 11(45), 10529-10530 (**2009**). (Impact Factor 2008 = 4.064)
12. Sae-Tang, D., Kittakoop, P., and Hannongbua, S.*, Role of Key Residue Specific to Cyclooxygenase II: An ONIOM Study, *Monatsh. Chemie*, 140, 1533-1541 (**2009**). (IF 2008 = 1.426)
13. Promkatkaew, M., Suramitr, S., Monhaphol, T.K., Namuangruk, S., Ehara, M., Hannongbua, S.*, Absorption and Emission Spectra of Methoxy Substituted Cinnamates Investigated Using the Symmetry-Adapted Cluster Configuration Interaction Method, *J. Chem. Phys.,* 131, 224306 (**2009**). (Impact Factor 2008 = 3.149)
14. Meeto, W., Suramitr, S., Lukeš, V., Wolschann, P., and Hannongbua, S.*, Quantum chemical calculations of the CN and NH_2 substitutional effects on the geometrical and optical properties of model vinyl-fluorenes, *J. Mol. Struct. (THEOCHEM),* 939, 75-81 (**2010**). (IF 2008 = 1.167)
15. Suramitr, S.*, Meeto, W., Wolschann, P., Hannongbua, S., Understanding on Absorption and Fluorescence Electronic Transitions of Carbazole-Based Conducting Polymers: TD-DFT Approaches, *Theor. Chem. Acc.,* 125(1-2), 35-44 **(2010)**. (Impact Factor 2008 = 2.37)
16. Chidthong, R.*, Hannongbua, S., Excited State Properties, Fluorescence Energies and Lifetimes of a Poly(fluorene-phenylene) Copolymer, Base on TD-DFT Investigation, *J. Comput. Chem.,* (**2010**), *in press.* (Impact Factor 2008 = 3.39)
17. Poolmee, P., Hannongbua, S., Investigation on Excited State Properties of Fluorene-Thiophene Oligomer by SAC-CI Theoretical Approach, *J. Comput. Chem.*, **(2010)** *in press.* (Impact Factor 2008 = 3.39)
18. M. Ehara, B. Saha, P. Poolmee, M. Promkatkaew, S. Hannongbua, Y. Lu, H. Nakatsuji, Electronic Structure and Optical Properties of Conjugated Molecules: SAC-

CI Study. In COMPUTATION IN MODERN SCIENCE AND ENGINEERING: Proceedings of the International Conference on Computational Methods in Science and Engineering 2009 (ICCMSE 2009): VOLUME 1, in press.

19. Vailikhit, V, Holzschuh, w.j. and Hannongbua, S., ^{1}H-NMR chemical shifts of some DMSO-solvated amines using MDONIOM2.
20. Saparpakorn, P., Wolschann, P., Karpfen, A., Pungpo, P., Hannongbua, S., Systematic investigation on the methodology in the binding of GW420867X as NNRTI by using quantum chemical calculations, (**2010**), *J.Mol.Mod. Submitted.*
21. Pongprayoon, P., and Hannongbua, S.*, Human Angiotensin-converting Enzyme-2 (ACE2): The evaluation of the particular interactions of the inhibitor, MLN-4760, in an active site using quantum chemical approach, *Interdisciplinary Science* **(2010)** *Submitted.*
22. Chidthong, R., Maitarad, P., and Hannongbua, S., Structural and Electronic Properties of Poly(fluorene-pyrrole) Copolymer: Time Dependent Density Functional Theory Investigation, IEEE, **(2010)** *submitted.*
23. Thengyai, S., Maitarat, P., Hannongbua, S., Suwanborirux, K., and Plubrukarn, A.* Structural requirements for antitubercular activity of scalarane derivatives: 2D-QSAR and CoMFA approaches, Bioorg. Med.Chem., **(2010)** *submitted.*
24. *Sae-Tang, D., Anthony, N.G., Kamchonwongpaisan, S., Coxon, G.D., Mackay, S.,P.,* and Hannongbua, S., Quantum Chemical Studies on Tuberculosis Target Cyclopropane Mycolic Acid Synthase: Comparison of the Interaction Energies with Cofactors SAM, SAH and the Inhibitor Sinefungin, *J.Chem.Inf.Mod.*, (**2010**) *submitted.*
25. Maitarad, A., Saparpakorn, P., Maitarad, P., Treesuwan, W., Gleeson, M.P., Techasakul, S., and Hannongbua, S. A theoretical study of HIV-1 RT inhibition using MM, QM and multivariate methods: A comparison of Docking and MM optimized starting complexes and an assessment of residues contributions in the wild-type and two Major Mutants., *J.Chem.Inf.Mod.*, (**2010**), *submitted.*
26. Gleeson, M.P., Hersey, A., and Hannongbua, S., A critical Assessment of In-silico ADME-T Models. How useful are they in Drug Discovery? *Curr.Med.Chem.*, (**2010**), *to be submitted*
27. Thipnate, P., Chittchang, M., Thasana, N., Saparpakorn, P., Ploypradith, P., and Hannongbua, S., 3D-QSAR analysis for cytotoxicity of lamellarins against human hormone-dependent T47D and hormone-independent MDA-MB-231 breast cancer cells, *J.Mol.Mod.* **(2010)**, *to be submitted.*

28. Punkvang, A, Saparpakorn, P., Hannongbua, S., Wolschann, P., and Pungpo, P., Insight into Crucial Inhibitor-Enzyme Interaction of Arylamides as Novel Direct Inhibitors of the Enoyl ACP Reductase (InhA) from Mycobacterium Tuberculosis : Molecular Docking Calculations and 2D- and 3D-QSAR Studies, **(2010)** *to be submitted.*
29. Kuno, M.*, Hongkrengkai, R., Boonsri, P., and Hannongbua, S., Energetic Analysis for Y181C Mutant HIV-1 RT/Nevirapine Complex Using DFT, MP2 and ONIOM Calculations, (**2010**) *submitted.*
30. Nunruim, P., Sangma, C., Hannongbua, S.*, Particular Receptor-HA (Human H1 viruses) Interaction: Avian and Human Receptors (Neu5Acα2, 3Galβ1, 4GlcNAc and Neu5Acα2, 6Galβ1, 4GlcNAG linkages) within binding site as explained by the ONIOM2 method, *to be submitted.*
31. Boonsri, P., Kuno, M. and Hannongbua, S.*, Structural and Enegetic Analysis of Mutant K103N HIV-1 Reverse Transcriptase/Efavirenz Complex, Using ONIOM Calculations, **(2010)** *to be submitted.*

7. ผลงานวิชาการอื่น ๆ (เช่น Proceeding ตำรา ฯลฯ)

1. Pungpo, P., Wolschann, P., and Hannongbua, S. "Quantitative Strcuture-Activity Relationships of H I V -1 Reverse Transcriptase Inhibitors, Using Hologram QSAR". In ***Rational Approaches to Drug Design***, Hoeltje, H.-D. and Sippl, W. (eds.) Prous Science, Barcelona, Spain, pp. 206-210, 2001.
2. Hannongbua, S. (2006) "Structural Information and Drug-Enzyme Interaction of the Non-Nucleoside Reverse Transcriptase Inhibitors Based on Computational Chemistry Approaches". In QSAR and Molecular Modeling Studies in Heterocyclic Drugs II. Series: Topics in Heterocyclic Chemistry, *Vol. 4,* ***Gupta, S.P. (ed.) Springer-Verlag, Tiergartenstrasse 17, 69121 Heidelberg, Germany, pp. 55-84, 2006.***
3. Pornpan Pungpo, Auradee Punkvang, Patchreenart Saparpakorn and Supa Hannongbua. "Chapter VIII - Understanding the Interaction and the Structure-Activity Correlation of HIV-1 RT Inhibitors of Efavirenz Derivatives and WT and K103N HIV-1 RT using Molecular Docking, 3D-QSAR Approaches and Quantum Chemical Calculations", In ***Drug Design Research Trend***, Columbus, F. (ed.), Nova Science Publishers, NY, pp. 213-249 **2007**.

8. รางวัลที่เคยได้รับ (ด้านวิชาการโดยเฉพาะอย่างยิ่งที่เกี่ยวกับงานวิจัย)

1987	Phumipol Assay Awards, Chulalongkorn University
1988	Phumipol Assay Awards, Chulalongkorn University
1997	Young Scientist Awards, the Science Society of Thailand under the Patronage of His Majesty the King
1997-2003	TRF Research Scholar
2000	NRCT Research Awards in Chemistry and Pharmaceutical Chemistry
2001	Thailand Academy of Science and Technology Member
1997-2003	1^{st}-7^{th} Annual National Symposium on Computational Science and Engineering organizing committee
2002	Coordinator of the TRF Directed basic research in Medicinal Chemistry
2003-Present	Thailand Theoretical Chemistry Summer School organizing committee.
1998-Present	Golden Jubilee Ph.D. Scholars holder
2003	2002 TWAS Young Scientists in Thailand, TWAS (Third World Academy of Science), Italy and NRCT, Thailand.
2005	2004 Outstanding Government Officer Awards
2006	L'Oreal for Women in Science Research Scholar
2007	TRF Senior Research Scholar
2009-2010	Federation of Asian Chemical Societies, Secretary General-Elect