

## ข้อมูลอาจารย์มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

<b>ชื่อ</b> นางสาว หารหนองบัว	
<b>ตำแหน่งทางวิชาการ</b> ศาสตราจารย์	<b>สังกัด</b> ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์
<b>การดำรงตำแหน่งบริหาร</b>	
ก.พ. 2557 - ก.พ. 2561	คณบดี คณะวิทยาศาสตร์
พ.ค. 2553 - พ.ค. 2557	หัวหน้าภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์
ม.ย. 2549 - พ.ค. 2553	รองหัวหน้าภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์
<b>การศึกษา</b> Dr.rer.nat. (Physical Chemistry), Universität Innsbruck, Austria, 2534 วท.ม. (เคมีเชิงฟิสิกส์), จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, ไทย, 2531 วท.บ. (เคมี), จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, ไทย, 2529	
<b>สาขาเชี่ยวชาญ/สนใจ</b> เคมีเชิงฟิสิกส์ เคมีคอมพิวเตอร์ Physical Chemistry, Computational Chemistry	
<b>งานสอน</b>	
Advance Research Techniques Advanced Research Methodology in Chemistry Advanced Technologies in Genetic Engineering Computer-aided Molecular Design Group Theory Physical Chemistry I Physical Chemistry III Practical Physical Chemistry Research Methods in Chemistry Research Methods in Genetic Engineering Selected Topics in Chemistry Senior Project Special Problems	
<b>โครงการวิจัย</b>	
ปี 2540-2541 การศึกษาความสัมพันธ์ระหว่างโครงสร้างและกัมมันตภาพของตัวยับยั้งเอนไซม์การถ่ายแบบเอช ไอ วี-1 สำหรับสารในกลุ่มโดโพร์โคดีเอซีฟิโนน และการออกแบบโมเลกุลบนพื้นฐานของเคมีคอมพิวเตอร์ ( หัวหน้าโครงการ ) ได้รับทุนจากทุนพัฒนานักวิจัย	
ปี 2540-2541 การศึกษาความสัมพันธ์ระหว่างโครงสร้างและกัมมันตภาพของตัวยับยั้งเอนไซม์การถ่ายแบบเอชไอวี-1 สำหรับสารในกลุ่มโดโพร์โคดีเอซีฟิโนน และการออกแบบโมเลกุลบนพื้นฐานของเคมีคอมพิวเตอร์ ( หัวหน้าโครงการ ) ได้รับทุนจากสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย	
ปี 2541 การศึกษาความสัมพันธ์ระหว่างโครงสร้างและกัมมันตภาพของตัวยับยั้งเอนไซม์การถ่ายแบบเอช ไอ วี-1 สำหรับสารในกลุ่มโดโพร์โคดีเอซีฟิโนน และการออกแบบโมเลกุลบนพื้นฐานของเคมีคอมพิวเตอร์ ( หัวหน้าโครงการ ) ได้รับทุนจากทุนพัฒนานักวิจัย	
ปี 2541 การออกแบบโครงสร้างของตัวยับยั้งเอนไซม์การถ่ายแบบ เอช ไอ วี-1 โดยคอมพิวเตอร์ ( หัวหน้าโครงการ ) ได้รับทุนจากโครงการปริญญาเอกกาญจนาภิเษก	
ปี 2545-2546 การสังเคราะห์เนวีราพีน (Nevirapine) และอนุรักษเพื่อเพิ่มมันตภาพในการยับยั้งเอนไซม์การถ่ายแบบเอชไอวี-1 ( หัวหน้าโครงการ ) ได้รับทุนจากทบวงมหาวิทยาลัย	
ปี 2546-2549 โครงการพัฒนาอัจฉริยะภาพทางวิทยาศาสตร์สำหรับเด็กและเยาวชน ( หัวหน้าโครงการ ) ได้รับทุนจากสำนักงานพัฒนาวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยีแห่งชาติและสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย	
ปี 2547 การสังเคราะห์เอพารีเรนซ์และการศึกษาอัตราการจับกับเอนไซม์การถ่ายแบบ เอช ไอ วี-1 (ทุนอุดหนุนวิจัยเกี่ยวกับโรคเอดส์) ( หัวหน้าโครงการ ) ได้รับทุนจากสำนักงานคณะกรรมการอุดมศึกษา	
ปี 2547-2548 การศึกษากลไกการยับยั้งการถ่ายแบบของเอนไซม์ เอช ไอ วี-1 ที่มีการกลายพันธุ์และไม่กลายพันธุ์ของตัวยับยั้งในกลุ่มนอนนิวคลีโอไซด์โดยวิธีเคมีคอมพิวเตอร์ ( หัวหน้าโครงการ ) ได้รับทุนจากสำนักงานคณะกรรมการวิจัยแห่งชาติ	
ปี 2547-2548 การศึกษากลไกการยับยั้งการถ่ายแบบของเอนไซม์ เอช ไอ วี-1 ที่มีการกลายพันธุ์และไม่กลายพันธุ์ของตัวยับยั้งในกลุ่มนอนนิวคลีโอไซด์โดยวิธีเคมีคอมพิวเตอร์ (ทุนอุดหนุนการวิจัยประเภทเพื่อพัฒนาเศรษฐกิจและสังคมด้วยวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี) ( หัวหน้าโครงการ ) ได้รับทุนจากสำนักงานคณะกรรมการวิจัยแห่งชาติ	
ปี 2547-2549 Investigation on the Interaction Between Non-Nucleoside Inhibitors and Mutant HIV-1 Reverse Transcriptase (Y181C and K103 N), Base on the Combined Quantum Mechanical Methods and Inhibitor Design ( หัวหน้าโครงการ ) ได้รับทุนจากสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย	
ปี 2545-2550 การจำลองแบบโมเลกุลของตัวเร่งปฏิกิริยาขนาดนาโนเมตร : ผลของความจำกัดของโครงสร้างต่อสมบัติการดูดซับของตัวเร่งปฏิกิริยาซีโอไลต์ที่สำคัญทางอุตสาหกรรม ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากทุนอุดหนุนวิจัย มก.	
ปี 2545-2550 การวิเคราะห์และการสร้างเครื่องมือและเนื้อหาทางชีวสารสนเทศ ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากทุนอุดหนุนวิจัย มก.	
ปี 2545-2555 การจำลองแบบโมเลกุลของตัวเร่งปฏิกิริยาขนาดนาโนเมตร : บทบาทและกลไกของสารที่มีโครงสร้างและรูพรุนระดับนาโนเมตร ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากทุนอุดหนุนวิจัย มก.	
ปี 2547-2549 การสังเคราะห์อนุพันธ์ของโดโพร์โค ไดอะซีฟิโนน เพื่อเพิ่มกัมมันตภาพในการยับยั้งเอนไซม์การถ่ายแบบ เอช ไอ วี-1 ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย	

## ข้อมูลอาจารย์มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

ชื่อ นางสาว หารหนองบัว	สังกัด ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์
ปี 2547-2550	การพัฒนาโปรแกรมการสร้างฐานข้อมูล โครงสร้างสามมิติและการสืบค้นข้อมูลของสารที่ออกฤทธิ์ทางชีวภาพ ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากทุนอุดหนุนวิจัย มก.
ปี 2547-2550	องค์ความรู้สารผลิตภัณฑ์ธรรมชาติในประเทศไทยสำหรับการวิเคราะห์และสืบค้นสารออกฤทธิ์ทางชีวภาพ ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากทุนอุดหนุนวิจัย มก.
ปี 2549-2553	โครงการจัดตั้งหน่วยปฏิบัติการเชี่ยวชาญเฉพาะด้านเคมีศาสตร์สนเทศ ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากทุนอุดหนุนวิจัย มก.
ปี 2549-2554	การออกแบบโมเลกุลและการผลิตรัสต์ที่มีโครงสร้างระดับนาโนเมตร ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากทุนอุดหนุนวิจัย มก.
ปี 2550	การพัฒนาฐานข้อมูลเพื่อทำนายโครงสร้าง คุณสมบัติ และความเป็นอันตรายของสารเคมี ( หัวหน้าโครงการ ) ได้รับทุนจากสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย
ปี 2550-2551	การศึกษาโครงสร้างของ HIV-1 รีเวิร์สทรานสคริปเตสและมิวแทนกับสารออกฤทธิ์ยับยั้ง ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากกระทรวงวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี ศูนย์ปฏิบัติการวิจัยเครื่องกำเนิดแสงซินโครตรอนแห่งชาติ
ปี 2550-2552	นวัตกรรมวิจัยเพื่อการค้นหาต้านเอดส์ ( หัวหน้าโครงการ ) ได้รับทุนจากสำนักงานคณะกรรมการวิจัยแห่งชาติ
ปี 2545-2555	หน่วยปฏิบัติการวิจัยเชี่ยวชาญเฉพาะด้าน Catalytic and Bimolecular Design ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากทุนอุดหนุนวิจัย มก.
ปี 2551	การศึกษาความสัมพันธ์ระหว่างประสิทธิภาพในการยับยั้งและอัตราการเกิดปฏิกิริยาที่มีต่อกรดอะมิโนในโครงการจับของตัวยับยั้งนอนนิวคลีโอไซด์ของเอนไซม์การถ่ายแบบ เอช ไอ วี-1 ด้วยระเบียบวิธีโมเลกุลลาร์ต็อกกิ่งและการคำนวณเคมีควอนตัม ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย ร่วมกับสำนักงานคณะกรรมการการอุดมศึกษา
ปี 2551	การศึกษาโครงสร้างของ HIV-1 รีเวิร์สทรานสคริปเตสและมิวแทนกับสารออกฤทธิ์ยับยั้ง ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากคณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์
ปี 2551-2552	การพัฒนาฐานข้อมูลและงานวิจัย QSAR เพื่อการจัดการความปลอดภัยสารเคมี: กรณีศึกษาสารสังเคราะห์ในอุตสาหกรรมสิ่งทอและอุตสาหกรรมเครื่องสำอาง ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย
ปี 2551-2552	การศึกษาความสัมพันธ์ระหว่างประสิทธิภาพในการยับยั้งและอัตราการเกิดปฏิกิริยาที่มีต่อกรดอะมิโนในโครงการจับของตัวยับยั้งนอนนิวคลีโอไซด์ของเอนไซม์การถ่ายแบบ เอช ไอ วี-1 ด้วยระเบียบวิธีโมเลกุลลาร์ต็อกกิ่งและการคำนวณเคมีควอนตัม ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย ร่วมกับสำนักงานคณะกรรมการการอุดมศึกษา
ปี 2552-2554	สารออกฤทธิ์ทางชีวภาพจากพืช Dipterocarpaceous ในประเทศไทย ( หัวหน้าโครงการ ) ได้รับทุนจากสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย
ปี 2553-2556	นวัตกรรมวิจัยเพื่อค้นหาต้านเอดส์ ( ระยะที่ 2 ) ( หัวหน้าโครงการ ) ได้รับทุนจากสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย
ปี 2553-2556	ออกแบบและสังเคราะห์สารยับยั้งโปรตีน HIV1-RT ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย
ปี 2553-2555	ออกแบบ การสังเคราะห์ วิเคราะห์ และศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของพอลิเมอร์นำไฟฟ้าในกลุ่มของอนุพันธ์ พาราฟีนิลลีน ไวนิลลีน ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากทุนอุดหนุนวิจัย มก.
ปี 2548-2554	การออกแบบโมเลกุลและการผลิตรัสต์ที่มีโครงสร้างระดับนาโนเมตร ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากศูนย์นาโนเทคโนโลยีแห่งชาติ สำนักงานพัฒนาวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยีแห่งชาติ
ปี 2554-2555	โครงการยกระดับมาตรฐานความปลอดภัยห้องปฏิบัติการวิจัยในประเทศไทย ( ในส่วนของภาควิชาเคมี มก. ) ( หัวหน้าโครงการ ) ได้รับทุนจากสำนักงานคณะกรรมการวิจัยแห่งชาติ
ปี 2554-2556	ซูพราโมเลกุลของสารประกอบเชิงซ้อนรูทีเนียมกับคิวเคอปีทริลเพื่อใช้เป็นลิย้อมไวแสงสำหรับเซลล์พลังงานแสงอาทิตย์ ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย
ปี 2555-2556	การสังเคราะห์ ตรวจสอบลักษณะ และการศึกษาทางทฤษฎี ของท่อนาโนที่มีการปรับหมู่ฟังก์ชันโดยพอลิไอโซพรีนและเมทัล โลซินเพื่อเป็นสารขับเคลื่อนในดินปืน ( หัวหน้าโครงการ ) ได้รับทุนจากสถาบันเทคโนโลยีป้องกันประเทศ ( องค์กรมหาชน )
ปี 2556	การศึกษาอันตรกิริยาของสารเคอคูมินธรรมชาติกับโปรตีน HER2 ในส่วนของโดเมนโคเนส โดยวิธีการศึกษาแบบจำลองเคมีคำนวณ ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากทุนอุดหนุนวิจัย มก.
ปี 2557	การศึกษาคุณสมบัติทางทฤษฎีของโครงสร้างพื้นฐานและสมบัติทางแสงของแกรฟีนหนึ่งถึงหลายชั้น ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากทุนอุดหนุนวิจัย มก.
ปี 2556-2557	โครงการจัดการสารเคมีห้องปฏิบัติการวิจัยเคมีอินทรีย์สังเคราะห์ ในมหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ ( หัวหน้าโครงการ ) ได้รับทุนจากสำนักงานคณะกรรมการวิจัยแห่งชาติ
ปี 2558-2560	แผนแม่บทเพื่อการอนุรักษ์และพัฒนาพื้นที่สีเขียวข้างกะเจ้าสุความยั่งยืน ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากบริษัท ปตท.สำรวจและผลิตปิโตรเลียม จำกัด ( ปตท.สผ. )
ปี 2558-2560	การพัฒนาตัวตรวจวัดทางเคมีไฟฟ้าด้วยการออกแบบโมเลกุลบนคาร์บอนอิเล็กโทรดแบบพิมพ์สกรีนที่ถูกต้องแปรด้วยกราฟีนสำหรับการตรวจวัดสารในกลุ่มเมตาอะโกนีสต์อย่างจำเพาะเจาะจง ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากทุนอุดหนุนวิจัย มก.
ปี 2558-2560	การศึกษาการเกาะตัวของสารประกอบอินทรีย์บนทรงกระบอกขนาดนาโนไฮโดรเจลเพื่อเพิ่มการนำไฟฟ้าโปรตอน ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากทุนอุดหนุนวิจัย มก.
ปี 2558-2560	การศึกษาการยึดเกาะด้วยไฟฟ้าของโลหะผสมแพลตตินัมและดีบุกเพื่อใช้เป็นตัวเร่งปฏิกิริยาในเซลล์เชื้อเพลิงชนิดเอทานอล ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากทุนอุดหนุนวิจัย มก.
ปี 2558-2560	การศึกษาโครงสร้างของรีเวิร์สทรานสคริปเตส HIV-1 ในรูปแบบโมโนเมอร์และออกแบบการยับยั้งการเกิดโดเมอร์ ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากทุนอุดหนุนวิจัย มก.

**ข้อมูลอาจารย์มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์**

<b>ชื่อ</b> นางสุภา หารหนองบัว	
<b>ตำแหน่งทางวิชาการ</b> ศาสตราจารย์	<b>สังกัด</b> ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์
ปี 2558-2560 การศึกษาโครงสร้างของรีเวิร์สทรานสคริปเตสของ HIV-1 ในรูปแบบโมโนเมอร์และการยับยั้งการจับกันเป็นไดเมอร์ ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากทุนอุดหนุนวิจัย มก.	
ปี 2559-2561 การค้นหาตัวยับยั้ง NS2B/NS3 โปรติเอสของไวรัสเดงกีจากฐานข้อมูลสมุนไพรรักษาโดยอาศัยวิธีการคัดสรรเสมือนจริงและการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุล ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากทุนอุดหนุนวิจัย มก.	
ปี 2558-2561 การค้นหาสารต้นแบบสำหรับยารักษาโรคอัลไซเมอร์และเบาหวานจาก ทรัพยากรพืชและราของไทยและการศึกษากลไกการออกฤทธิ์:การศึกษา กลไกการออกฤทธิ์ทางเภสัชของสารออกฤทธิ์ทางชีวภาพ ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย	
ปี 2560 การออกแบบ การศึกษาสมบัติทางสเปกโทรสโกปีและการคำนวณทางทฤษฎี และการสังเคราะห์อนุพันธ์อินทรีย์ชนิดใหม่สำหรับการตรวจสอบลายนิ้วมือแฝง ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากทุนอุดหนุนวิจัย มก.	
ปี 2561 การปรับปรุงพื้นผิวของท่อนาโนสาลลอยโซลเพื่อใช้เป็นสารตรวจจับก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์ ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากทุนอุดหนุนวิจัย มก.	
ปี 2561 การพัฒนาตัวยับยั้งเอนไซม์โคเนสเพื่อเป็นสารต้านมาลาเรียกลุ่มใหม่ ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากทุนอุดหนุนวิจัย มก.	
ปี 2561 การออกแบบ สังเคราะห์ ศึกษาสมบัติทางสเปกโทรสโกปี และการคำนวณทางทฤษฎี ของอนุพันธ์โบนแนฟทิวสำหรับเซนเซอร์ตรวจจับโลหะ ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากทุนอุดหนุนวิจัย มก.	
ปี 2561 ฐานข้อมูล โครงสร้างสามมิติของสารออกฤทธิ์ทางชีวภาพจากเห็ดที่พบในประเทศไทย ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากทุนอุดหนุนวิจัย มก.	
ปี 2560-2561 เพิ่มประสิทธิภาพการปลูกและการแปรรูปสับปะรดเพื่อเพิ่มมูลค่า ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากสำนักงานคณะกรรมการวิจัยแห่งชาติ	
ปี 2561-2564 ศูนย์เครือข่ายการวิจัยด้านนาโนเทคโนโลยีนาโนเทคโนโลยี-มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ ด้านการวิจัยตัวเร่งปฏิกิริยาและวัสดุนาโนเพื่อพลังงานและสิ่งแวดล้อมที่ยั่งยืน ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากศูนย์นาโนเทคโนโลยีแห่งชาติ	
ปี 2562-2563 การวิจัย การออกแบบและนวัตกรรมสำหรับวัตถุดับเพลิง ผลิตภัณฑ์ เครื่องมือทดสอบคุณภาพและกระบวนการผลิตยางโฟมขั้นสูงเพื่อควบคุมคุณสมบัติของผลิตภัณฑ์ การยศาสตร์ และมีความเป็นมิตรต่อสิ่งแวดล้อม สำหรับการผลิตเป็นหมอนหรือที่นอนยางพาราเกรดพิเศษ (110711) ( ผู้ร่วมโครงการ ) ได้รับทุนจากสำนักงานพัฒนาการวิจัยการเกษตร (สวก.)	

**บทความวิจัยในวารสารวิชาการ**

ระดับชาติ

- Thongchai Rohitatisa Srinophakun, Supa Hannongbua, Kiattawee Choowongkorn, พิรวัฒน์ ทองจันทร์, "การศึกษากลไกการเกิดเป็น micelle ของGlycolchitosan กับ Doxorubicin", Journal of Research in Engineering and Technology 20 (61) (2007) 47-53

ระดับนานาชาติ

- Saen-Oon, S, Kuno, M, Supa Hannongbua, "Binding energy analysis for wild-type and Y181C mutant HIV-1 RT/8-CI TIBO complex structures: Quantum chemical calculations based on the ONIOM method", PROTEINS-STRUCTURE FUNCTION AND BIOINFORMATICS 61 (4) (2005) 859-869

- Chanprapaph, S, Patchreenart Saparpakorn, Chak Sangma, Niyomrattanakit, P, Supa Hannongbua, Angsuthanasombat, C, Katzenmeier, G, "Competitive inhibition of the dengue virus NS3 serine protease by synthetic peptides representing polyprotein cleavage sites", BIOCHEMICAL AND BIOPHYSICAL RESEARCH COMMUNICATIONS 330 (4) (2005) 1237-1246

- Chak Sangma, Chuakheaw, D, Jongkon, N, Saenbandit, K, Nunrium, P, Putchong Uthayopas, Supa Hannongbua, "Virtual screening for anti-HIV-1 RT and anti-HIV-1 PR inhibitors from the Thai medicinal plants database: A combined docking with neural networks approach", COMBINATORIAL CHEMISTRY & HIGH THROUGHPUT SCREENING 8 (5) (2005) 417-429

- Songarsa, S, Rajviroongit, S, Sae-Tang, D, Supa Hannongbua, Kirtikara, K, Kittakoo, P, "New racemosol derivatives as potent cyclooxygenase (COX) inhibitors", CHEMISTRY & BIODIVERSITY 2 (12) (2005) 1635-1647

- Weinzinger, P, Supa Hannongbua, Wolschann, P, "Molecular mechanics PBSA ligand binding energy and interaction of Efavirenz derivatives with HIV-1 reverse transcriptase", JOURNAL OF ENZYME INHIBITION AND MEDICINAL CHEMISTRY 20 (2) (2005) 129-134

- Potjaman Poolmee, Ehara, M, Supa Hannongbua, Nakatsuji, H, "SAC-CI theoretical investigation on electronic structure of fluorene-thiophene oligomers", POLYMER 46 (17) (2005) 6474-6481

- Nunrium, P, Kuno, M, Saen-Oon, S, Supa Hannongbua, "Particular interaction between efavirenz and the HIV-1 reverse transcriptase binding site as explained by the ONIOM2 method", CHEMICAL PHYSICS LETTERS 405 (1-3) (2005) 198-202

- Boonsong Kongkathip, Chak Sangma, Kirtikara, K, Luangkamin, S, Hasitapan, K, Jongkon, N, Supa Hannongbua, Ngampong Kongkathip, "Inhibitory effects of 2-substituted-1-naphthol derivatives on cyclooxygenase I and II", BIOORGANIC & MEDICINAL CHEMISTRY 13 (6) (2005) 2167-2175

- Suramitr, S, Kerdcharoen, T, Srihirin, T, Supa Hannongbua, "Electronic properties of alkoxy derivatives of poly(para-phenylenevinylene), investigated by time-dependent density functional theory calculations", SYNTHETIC METALS 155 (1) (2005) 27-34

- Chak Sangma, Nunrium, P, Supa Hannongbua, "The analysis of binding patterns on different receptors bound to hemagglutinin of avian and avian-like influenza virus using quantum chemical calculations", JOURNAL OF THEORETICAL & COMPUTATIONAL CHEMISTRY 5 (4) (2006) 753-768

- Sriwichitkamol, K, Suramitr, S, Potjaman Poolmee, Supa Hannongbua, "Structures, absorption spectra, and electronic properties of polyfluorene and its derivatives: A theoretical study", JOURNAL OF THEORETICAL & COMPUTATIONAL CHEMISTRY 5 (3) (2006) 595-608

## ข้อมูลอาจารย์มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

ชื่อ นางสาว หารหนองบัว	
ตำแหน่งทางวิชาการ ศาสตราจารย์	สังกัด ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Kuno, M, Hongkengkai, R, Supa Hannongbua, "ONIOM-BSSE scheme for H center dot center dot center dot pi system and applications on HIV-1 reverse transcriptase", CHEMICAL PHYSICS LETTERS 424 (1-3) (2006) 172-177</li> <li>- Vaillikhit, V, PENSRI BUNSAWANSONG, Supanna Techasakul, Supa Hannongbua, "Conformational analysis of nevirapine in solutions based on NMR spectroscopy and quantum chemical calculations", JOURNAL OF THEORETICAL &amp; COMPUTATIONAL CHEMISTRY 5 (4) (2006) 913-924</li> <li>- Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, Rognan, D, "Design of nevirapine derivatives insensitive to the K103N and Y181C HIV-1 reverse transcriptase mutants", SAR AND QSAR IN ENVIRONMENTAL RESEARCH 17 (2) (2006) 183-194</li> <li>- Pungpo, P, Patchreenart Saparpakorn, Wolschann, P, Supa Hannongbua, "Computer-aided molecular design of highly potent HIV-1 RT inhibitors: 3D QSAR and molecular docking studies of efavirenz derivatives", SAR AND QSAR IN ENVIRONMENTAL RESEARCH 17 (4) (2006) 353-370</li> <li>- Chak Sangma, Supa Hannongbua, "Structural Information and Computational Methods Used in Design of Neuraminidase Inhibitors", CURRENT COMPUTER-AIDED DRUG DESIGN 3 (2) (2007) 113-132</li> <li>- Kitisripanya, N, Wolschann, P, Supa Hannongbua, "Particular interactions between galanthamine and the acetylcholinesterase as explained by quantum chemical calculations", DRUGS OF THE FUTURE 32 (2007) 134-134</li> <li>- Supa Hannongbua, "Chemistry, Medicinal; Computer Science, Interdisciplinary Applications.", CURRENT COMPUTER-AIDED DRUG DESIGN 3 (2) (2007) 85-86</li> <li>- Suramitr, S, Supa Hannongbua, Wolschann, P, "Conformational analysis and electronic transition of carbazole-based oligomers as explained by density functional theory", JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 807 (1-3) (2007) 109-119</li> <li>- Khunnawutmanotham, N, Chinoini, N, Saparpakorn, P, Pungpo, P, Louisirootchanaikul, S, Supa Hannongbua, Techasakul, S, "Novel 2-Chloro-8-arylthiomethyldipyridodiazepinone Derivatives with Activity against HIV-1 Reverse Transcriptase", MOLECULES 12 (2) (2007) 218-230</li> <li>- Chidthong, R, Supa Hannongbua, Aquino, AJA, Wolschann, P, Lischka, H, "Excited state properties, fluorescence energies, and lifetime of a poly(fluorene-pyridine) copolymer, based on TD-DFT investigation", JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY 28 (10) (2007) 1735-1742</li> <li>- Saparpakorn, P, Kim, JH, Supa Hannongbua, "Investigation on the binding of polycyclic aromatic hydrocarbons with soil organic matter: A theoretical approach", MOLECULES 12 (4) (2007) 703-715</li> <li>- Veeramol VAILIKHIT, Witcha Treesuwan, Supa Hannongbua, "A combined MD-ONIOM2 approach for <sup>1</sup>H NMR chemical shift calculations including a polar solvent", Journal of Molecular Structure: THEOCHEM 806 (1-3) (2007) 99-104</li> <li>- Rungrotmongkol, Thanyada, Mulholland, Adrian J., Supa Hannongbua, "Active site dynamics and combined quantum mechanics/molecular mechanics (QM/MM) modelling of a HIV-1 reverse transcriptase/DNA/dTTP complex", Journal of Molecular Graphics and Modelling 26 (1) (2007) 1-13</li> <li>- Supa Hannongbua, "Editorial [Hot topic: Anti-viral agents and emerging disease: Part - 1]", Current Computer-Aided Drug Design 3 (2) (2007) 85-86</li> <li>- Lawtrakul L., Supa Hannongbua, "Molecular dynamics study on the unbinding of HBY 097 in the K103N mutant RT", MONATSHEFTE FUR CHEMIE 38 (10) (2007) 1029-1034</li> <li>- กัญจน์ ศิลป์ประสิทธิ์, รัตน์สุภา ธรรมภรณ์, Supa Hannongbua, Kiattawee Choowongkorn, "Cloning, Expression, Purification, Determining Activity of Recombinant HIV-1 Reverse Transcriptase", Kasetsart Journal (Natural Science)(วารสารวิทยาศาสตร์ สาขาวิทยาศาสตร์) 42 (5) (2008) 231-239</li> <li>- Pensri Srivab, Supa Hannongbua, "A study of the binding energies of efavirenz to wild-type and K103N/Y181C HIV-1 reverse transcriptase based on the ONIOM method", CHEMMEDCHEM 3 (5) (2008) 803-811</li> <li>- Pungpo, P, Pankwang, O, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, "Understanding the interaction and the structure-activity correlation of efavirenz derivatives and WT and K103N HIV-1 RT by molecular docking and 3D-QSAR approaches", Infection, Genetics and Evolution 8 (4) (2008) S43-S43</li> <li>- Meeto, W, Songwut Suramitr, Vannarat, S, Supa Hannongbua, "Structural and electronic properties of poly(fluorene-vinylene) copolymer and its derivatives: Time-dependent density functional theory investigation", CHEMICAL PHYSICS 349 (1-3) (2008) 1-8</li> <li>- Ge, Hui Ming, Zhang, Wei Yun, Ding, Gang, Patchreenart Saparpakorn, Song, Yong Chun, Supa Hannongbua, Tan, Ren Xiang, "Chaetoglobins A and B, two unusual alkaloids from endophytic Chaetomium globosum culture", CHEMICAL COMMUNICATIONS 7 (45) (2008) 5978-5980</li> <li>- Patchreenart Saparpakorn, Thammaporn, R, Supa Hannongbua, "Use of 3D QSAR to investigate the mode of binding of pyrazinones to HIV-1 RT", MONATSHEFTE FUR CHEMIE 140 (6) (2009) 587-594</li> <li>- Witcha Treesuwan, Supa Hannongbua, "Bridge water mediates nevirapine binding to wild type and Y181C HIV-1 reverse transcriptase-Evidence from molecular dynamics simulations and MM-PBSA calculations", JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS &amp; MODELLING 27 (8) (2009) 921-929</li> <li>- Khunnawutmanotham, N., Chimnoi, N., Thitithyanont, A, Patchreenart Saparpakorn, Kiattawee Choowongkorn, Pungpo, Pornpan, Supa Hannongbua, Supanna Techasakul, "Dipyridodiazepinone derivatives; synthesis and anti HIV-1 activity", Beilstein Journal of organic chemistry 5 (36) (2009)</li> </ul>	

## ข้อมูลอาจารย์มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

<b>ชื่อ</b> นางสาว หารหนองบัว	
<b>ตำแหน่งทางวิชาการ</b> ศาสตราจารย์	<b>สังกัด</b> ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Pungpo, P, Punkvang, A, Patchreenart Saparpakorn, Wolschann, P, Supa Hannongbua, "Recent Advances in NNRTI Design: Computer-Aided Molecular Design Approaches", CURRENT COMPUTER-AIDED DRUG DESIGN 5 (3) (2009) 174-199</li> <li>- Thipnate, P, Liu, JZ, Supa Hannongbua, Hopfinger, AJ, "3D Pharmacophore Mapping Using 4D QSAR Analysis for the Cytotoxicity of Lamellarins Against Human Hormone-Dependent T47D Breast Cancer Cells", JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND MODELING 49 (10) (2009) 2312-2322</li> <li>- Witcha Treesuwan, Wittayanarakul, Kitiyaporn, Anthony, Nahoum G, Huchet, Guillaume, Alniss, Hasan, Supa Hannongbua, Khalaf, Abedawn I, Suckling, Colin J, Parkinson, John A, Mackay, Simon P, "A detailed binding free energy study of 2: 1 ligand-DNA complex formation by experiment and simulation", PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 11 (45) (2009) 10682-10693</li> <li>- Promkatkaew, Malinee, Songwut Suramitr, Thitinun Karpkird, Namuangruk, Supawadee, Ehara, Masahiro, Supa Hannongbua, "Absorption and emission spectra of ultraviolet B blocking methoxy substituted cinnamates investigated using the symmetry-adapted cluster configuration interaction method", JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 131 (22) (2009)</li> <li>- Sae-Tang, Darinee, Kittakoop, Prasat, Supa Hannongbua, "Roles of key residues specific to cyclooxygenase II: an ONIOM study", MONATSFORTE FUR CHEMIE 140 (12) (2009) 1533-1541</li> <li>- Supa Hannongbua, Patchreenart Saparpakorn, Kim, JH, "Quantitative structure-activity relationship models for potent DNA alkylating agents", MOLECULAR &amp; CELLULAR TOXICOLOGY 5 (3) (2009) 81-81</li> <li>- Suphavanich, K, Maitarad, P, Supa Hannongbua, Sudta, P, Suksamrarn, S, Tantirungrotechai, Y, Jumras Limtrakul, "CoMFA and CoMSIA studies on a new series of xanthone derivatives against the oral human epidermoid carcinoma (KB) cancer cell line", MONATSFORTE FUR CHEMIE 140 (3) (2009) 273-280</li> <li>- Maitarad, P, Kamchonwongpaisan, S, Vanichtanankul, J, Vilaivan, T, Yuthavong, Y, Supa Hannongbua, "Interactions between cycloguanil derivatives and wild type and resistance-associated mutant Plasmodium falciparum dihydrofolate reductases", JOURNAL OF COMPUTER-AIDED MOLECULAR DESIGN 23 (4) (2009) 241-252</li> <li>- Olson, AL, Yao, HL, Herdendorf, TJ, Mizioro, HM, Supa Hannongbua, Patchreenart Saparpakorn, Cai, S, Sem, DS, "Substrate induced structural and dynamics changes in human phosphomevalonate kinase and implications for mechanism", PROTEINS-STRUCTURE FUNCTION AND BIOINFORMATICS 75 (1) (2009) 127-138</li> <li>- พรพิมล โมตรัตน์, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, สุมาลี กัจจรวังไพศาล, บงกช ธารชมพู, ยงยุทธ ยุทธวงศ์, "Particular interaction between pyrimethamine derivatives and quadruple mutant type dihydrofolate reductase of Plasmodium falciparum: CoMFA and quantum chemical calculations studies.", JOURNAL OF ENZYME INHIBITION AND MEDICINAL CHEMISTRY 24 (2) (2009) 471-479</li> <li>- Ehara, M., Saha, B., Potjaman Poolmee, Promkatkaew, M., Supa Hannongbua, Lu, Y.-P., Nakatsuji, H., "Electronic structure and optical properties of conjugated molecules: SAC-CI study", AIP Conference Proceedings 1504 (2009) 279-290</li> <li>- Gleeson, M.P., Supa Hannongbua, Gleeson, D., "QM methods in structure based design: Utility in probing protein-ligand interactions", Journal of Molecular Graphics and Modelling 29 (4) (2010) 507-517</li> <li>- Punkvang, A., Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, Wolschann, P., Beyer, A., Pungpo, P., "Investigating the structural basis of arylamides to improve potency against M. tuberculosis strain through molecular dynamics simulations", European Journal of Medicinal Chemistry 45 (12) (2010) 5585-5593</li> <li>- Matthew Paul Gleeson, Supa Hannongbua, Duangkanol Gleeson, "QM methods in structure based design: Utility in probing protein-ligand interactions", Journal of Molecular Graphics and Modelling 29 (4) (2010) 507-517</li> <li>- Songwut Suramitr, นางสาววิชนิ มีโต, Peter Wolschann, Supa Hannongbua, "Understanding on absorption and fluorescence electronic transitions of carbazole-based conducting polymers: TD-DFT approaches ", Theoretical Chemistry Accounts 2553 (125) (2010) 35-44</li> <li>- นางสาววิชนิ มีโต, Songwut Suramitr, Peter Wolschann, Supa Hannongbua, "Effects of the CN and NH2 substitutions on the geometrical and optical properties of model vinylfluorenes, based on DFT calculations ", Journal of Molecular Structure: THEOCHEM 2553 (939) (2010) 75-81</li> <li>- Punkvang, A, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, Wolschann, P, Pungpo, P, "Elucidating Drug-Enzyme Interactions and Their Structural Basis for Improving the Affinity and Potency of Isoniazid and Its Derivatives Based on Computer Modeling Approaches", MOLECULES 15 (4) (2010) 2791-2813</li> <li>- Chidthong, R, Supa Hannongbua, "Excited State Properties, Fluorescence Energies, and Lifetimes of a Poly(fluorene-phenylene), Based on TD-DFT Investigation", JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY 31 (7) (2010) 1450-1457</li> <li>- Thengyai, S, Maitarat, P, Supa Hannongbua, Suwanborirux, K, Plubrukarn, A, "Probing the structural requirements for antitubercular activity of scalarane derivatives using 2D-QSAR and CoMFA approaches", MONATSFORTE FUR CHEMIE 141 (6) (2010) 621-629</li> <li>- Potjaman Poolmee, Supa Hannongbua, "Investigation of Excited-State Properties of Fluorene-Thiophene Oligomers by the SAC-CI Theoretical Approach", JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY 31 (10) (2010) 1945-1955</li> <li>- Punkvang, A, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, Wolschann, P, Berner, H, Pungpo, P, "Insight into crucial inhibitor-enzyme interaction of arylamides as novel direct inhibitors of the enoyl ACP reductase (InhA) from Mycobacterium tuberculosis: computer-aided molecular design", MONATSFORTE FUR CHEMIE 141 (9) (2010) 1029-1041</li> </ul>	

## ข้อมูลอาจารย์มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

<b>ชื่อ</b> นางสาว หารหนองบัว	
<b>ตำแหน่งทางวิชาการ</b> ศาสตราจารย์	<b>สังกัด</b> ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์
<ul style="list-style-type: none"> <li>- ดร.กิตติยาพร วิทยานรากุล, Dr.Nahoum G. Anthony, Witcha Treesuwan, Supa Hannongbua, Hasan Alniss, Dr.Abedawn I. Khalaf, Prof.Colin J. Suckling, Dr.John A. Parkinson, Prof.Simon P. Mackay, "Ranking ligand affinity for the DNA minor groove by experiment and simulation", ACS Medicinal Chemistry Letters 18 (6) (2010) 1052-1062</li> <li>- Veeramol VAILIKHIT, Holzschuh, W.J., Supa Hannongbua, "H-1 NMR chemical shifts of some DMSO-solvated amines using MD-ONIOM2", Journal of Molecular Structure: THEOCHEM 944 (1-3) (2010) 173-176</li> <li>- Na Nakorn, P., Witcha Treesuwan, Kiattawee Choowongkorn, Supa Hannongbua, Nonlawat Boonyalai, "In vitro and in silico binding study of the peptide derived from HIV-1 CA-CTD and LysRS as a potential HIV-1 blocking site", Journal of Theoretical Biology 270 (1) (2011) 88-97</li> <li>- Fun, H.-K., Sudto, K., Ge, H.-M., Tan, R.-X., Supa Hannongbua, Chantrapromma, S., "Hopeahainol C monohydrate", Acta Crystallographica Section E: Structure Reports Online 67 (6) (2011) o1392-o1393</li> <li>- Patchreenart Saparpakorn, Wolschann, P, Karpfen, A, Pungpo, P, Supa Hannongbua, "Systematic investigation on the binding of GW420867X as HIV-1 reverse transcriptase inhibitor", MONATSHEFTE FUR CHEMIE 142 (9) (2011) 961-971</li> <li>- Silprasit, K, Seetaha, S, Pongsanarakul, P, Supa Hannongbua, Kiattawee Choowongkorn, "Anti-HIV-1 reverse transcriptase activities of hexane extracts from some Asian medicinal plants", JOURNAL OF MEDICINAL PLANTS RESEARCH 5 (17) (2011) 4194-4201</li> <li>- Boonsri, P., Kuno, M., Supa Hannongbua, "Key interactions of the mutant HIV-1 reverse transcriptase/efavirenz: An evidence obtained from ONIOM method", MedChemComm 2 (12) (2011) 1181-1187</li> <li>- Yakhanthip, T, Kungwan, N, Jitonnorn, J, PICHED ANURAGUDOM, Jungsuttiwong, S, Supa Hannongbua, "Theoretical Investigation on the Electronic and Optical Properties of Poly(fluorenevinylene) Derivatives as Light-Emitting Materials", INTERNATIONAL JOURNAL OF PHOTOENERGY 2011 (Article ID) (2011)</li> <li>- Silprasit, K., Thammaporn, R., Tecchasakul, S., Supa Hannongbua, Kiattawee Choowongkorn, "Simple and rapid determination of the enzyme kinetics of HIV-1 reverse transcriptase and anti-HIV-1 agents by a fluorescence based method", Journal of Virological Methods 171 (2) (2011) 381-387</li> <li>- Thipnate, P., Chittchang, M., Thasana, N., Patchreenart Saparpakorn, Ploypradith, P., Supa Hannongbua, "Exploring the molecular basis for selective cytotoxicity of lamellarins against human hormone-dependent T47D and hormone-independent MDA-MB-231 breast cancer cells", Monatshefte fur Chemie 142 (1) (2011) 97-109</li> <li>- Kitisripanya, N., Patchreenart Saparpakorn, Wolschann, P., Supa Hannongbua, "Binding of huperzine A and galanthamine to acetylcholinesterase, based on ONIOM method", Nanomedicine: Nanotechnology, Biology, and Medicine 7 (1) (2011) 60-68</li> <li>- Gleeson, MP, Hersey, A, Supa Hannongbua, "In-Silico ADME Models: A General Assessment of their Utility in Drug Discovery Applications", CURRENT TOPICS IN MEDICINAL CHEMISTRY 11 (4) (2011) 358-381</li> <li>- Matthew Paul Gleeson, Hersey, A, Supa Hannongbua, "In-silico ADME Models: A General Assessment of their Utility in Drug Discovery Applications?", CURRENT TOPICS IN MEDICINAL CHEMISTRY 11 (4) (2011) 358-381</li> <li>- Tuanjai Somboon, Matthew Paul Gleeson, Supa Hannongbua, "Insight into the reaction mechanism of cis,cis-muconate lactonizing enzymes: a DFT QM/MM study.", J. Mol. Model. 18 (2) (2012) 525-531</li> <li>- Matthew Paul Gleeson, Modi, S., Bender, A., Marchese Robinson, R.L, Kirchmair, J., Promkatkaew, M., Supa Hannongbua, Glen, R. C., "The Challenges Involved in Modeling Toxicity Data In Silico: A Review.", Current Pharmaceutical Design 18 (9) (2012) 1266-1291</li> <li>- Songwut Suramitr, Phalinyot, Suphawat, Wolschann, Peter, Fukuda, Ryoichi, Ehara, Masahiro, Supa Hannongbua, "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", JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 116 (3) (2012) 924-937</li> <li>- Somboon, T, Gleeson, MP, Supa Hannongbua, "Insight into the reaction mechanism of cis,cis-muconate lactonizing enzymes: a DFT QM/MM study", JOURNAL OF MOLECULAR MODELING 18 (2) (2012) 525-531</li> <li>- Songwut Suramitr, Apipol Piriyagagoon, Peter Wolschann, Supa Hannongbua, "Theoretical study on the structures and electronic properties of oligo(p-phenylenevinylene) carboxylic acid and its derivatives: effects of spacer and anchor groups", Theoretical Chemistry Accounts: Theory, Computation, and Modeling (Theoretica Chimica Acta) 131 (4) (2012) 1-15</li> <li>- Potjanart Suwanruji, Chuaybamrung, L., Jantip Setthayanond, Supa Hannongbua, 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) (2012) 103-107</li> <li>- Witcha Treesuwan, Hirao, H., Morokuma, K., Supa Hannongbua, "Characteristic vibration patterns of odor compounds from bread-baking volatiles upon protein binding: Density functional and ONIOM study and principal component analysis", Journal of Molecular Modeling 18 (5) (2012) 2227-2240</li> <li>- Sawatdichaikul, O., Supa Hannongbua, Chak Sangma, Wolschann, P., Kiattawee Choowongkorn, "In silico screening of epidermal growth factor receptor (EGFR) in the tyrosine kinase domain through a medicinal plant compound database", Journal of Molecular Modeling 18 (3) (2012) 1241-1254</li> <li>- Gleeson, M.P., Modi, S., Bender, A., Marchese Robinson, R.L., Kirchmair, J., Promkatkaew, M., Supa Hannongbua, Glen, R. C., "The challenges involved in modeling toxicity data in silico: A review", Current Pharmaceutical Design 18 (9) (2012) 1266-1291</li> </ul>	

## ข้อมูลอาจารย์มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

ชื่อ นางสาว หารหนองบัว	
ตำแหน่งทางวิชาการ ศาสตราจารย์	สังกัด ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Isobe, M., Wong, H.N.C., Shing, T.K.M., Huang, P.-Q., Kanokmedhakul, S., Supa Hannongbua, Chittchang, M., Nishida, A., "JSPS Asian Core Program: Cutting-edge organic chemistry in Asia (phase II), 14th Asian Chemical Congress, and IUPAC Joint Workshop: Strategic planning for a new east and southeast Asian network for organic chemistry", Chemistry - An Asian Journal 7 (7) (2012) 1468-1471</li> <li>- Thengyai, S, Supa Hannongbua, Plubrukarn, A, "Derivatizations and QSAR of marine-derived antitubercular scalaranes", PLANTA MEDICA 78 (11) (2012) 1050-1050</li> <li>- Prajongtat, P., Songwut Suramitr, Gleeson, M.P., Mitsuke, K., Supa Hannongbua, "Enhancement of the solubility, thermal stability, and electronic properties of carbon nanotubes functionalized with MEH-PPV: A combined experimental and computational study", Monatshefte fur Chemie 144 (7) (2013) 925-935</li> <li>- Kamsri, P., Punkvang, A., Pongprom, N., Srisupan, A., Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, 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) (2013) 541-554</li> <li>- Prajongtat, P., Phromyothin, D.S.-T., Supa Hannongbua, "Key role of hydrazine to the interaction between oxaloacetic against phosphoenolpyruvic carboxykinase (PEPCK): ONIOM calculations", Journal of Molecular Modeling 19 (8) (2013) 3165-3174</li> <li>- อรดี พันธุ์กว้าง, พรพรรณ พิงโกวิท, Kamsri, P, Srisupan, A , Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, Wolschann, P, Prueksaaron, S, Pongprom, N , "Molecular Dynamics simulations of azanaphthoquinone annelated pyrrole derivatives as anticancer agent in DNA duplex", International Journal of Quantum Chemistry 113 (4) (2013) 542-554</li> <li>- Patchreenart Saparpakorn, Kobayashi, M, Supa Hannongbua, Nakai, H , "Divide-and-conquer based quantum chemical study for interaction between HIV-1 reverse transcriptase and MK-4965 inhibitor", International Journal of Quantum Chemistry 113 (4) (2013) 510-517</li> <li>- Rathawat Daengngern, Khanittha Kerdpol, นวี่ กังวาล, Supa Hannongbua, Mario Barbatti, "Dynamics simulations of excited-state triple proton transfer in 7-azaindole complexes with water, water-methanol and methanol", J. Photochem Photobio A:Chemistry 266 (-) (2013) 28-36</li> <li>- Jaisamut, S , Prabpai, S, Tancharoen, C, Yuenyongsawad, S, Supa Hannongbua, Kongsaree, P, อนุชิต พลันรุฎการ, "Bridged tricyclic sesquiterpenes from the tubercle nudibranch Phyllidia coelestis Bergh", J. Nat. Prod., 76 (11) 2158-2161 (2013). (IF 2012 = 3.285) 76 (11) (2013) 2158-2161</li> <li>- Kungwan, N, Daengngern, R, Piansawan, T, Supa Hannongbua, Barbatti, M, "Theoretical study on excited-state intermolecular proton transfer reactions of 1H-pyrrolo[3,2-h]quinoline with water and methanol", THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS 132 (11) (2013)</li> <li>- Promkatkaew, M., Songwut Suramitr, Thitinun Karpkird, Ehara, M., Supa Hannongbua, "Absorption and emission properties of various substituted cinnamic acids and cinnamates, based on TDDFT investigation", International Journal of Quantum Chemistry 113 (4) (2013) 542-554</li> <li>- Boonsri, P., Neumann, T.S., Olson, A.L., Cai, S., Herdendorf, T.J., Mizioro, H.M., Supa Hannongbua, Sem, D.S., "Molecular docking and NMR binding studies to identify novel inhibitors of human phosphomevalonate kinase", Biochemical and Biophysical Research Communications 430 (1) (2013) 313-319</li> <li>- Masaki Okoshi, Patchreenart Saparpakorn, Yuta Takada, Supa Hannongbua, Hiromi Nakai, "Theoretical Study on the Selective Fluorescence of PicoGreen: Binding Models and Photophysical Properties", Bull. Chem. Soc. Jpn. 87 (2) (2014) 267-273</li> <li>- Malinee Promkatkaew, Songwut Suramitr, Thitinun Karpkird, Supason Wanichwecharungruang, Ehara, Masahiro, Supa Hannongbua, "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 and Photobiological Sciences 13 (3) (2014) 583-594</li> <li>- Malinee Promkatkaew, Duangkamol Gleeson, Supa Hannongbua, Matthew Paul Gleeson, "Skin Sensitization Prediction Using Quantum Chemical Calculations: A Theoretical Model for the SNAr Domain", Chemical Research in Toxicology 27 (1) (2014) 51-60</li> <li>- Rungrotmongkol, T, Mulholland, AJ, Supa Hannongbua, "QM/MM simulations indicate that Asp185 is the likely catalytic base in the enzymatic reaction of HIV-1 reverse transcriptase", MEDCHEMCOMM 5 (5) (2014) 593-596</li> <li>- Kungwan, N, Kerdpol, K, Daengngern, R, Supa Hannongbua, 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 (5) (2014)</li> <li>- Nawae, W, Supa Hannongbua, Ruengjitchachawalya, M, "Defining the membrane disruption mechanism of kalata B1 via coarse-grained molecular dynamics simulations", SCIENTIFIC REPORTS 4 (-) (2014)</li> <li>- Kamsri, P, Koohatammakun, N, Srisupan, A, Meewong, P, Punkvang, A, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, Wolschann, P, Prueksaaron, S, Leartsakulpanich, U, Pungpo, P, "Rational design of InhA inhibitors in the class of diphenyl ether derivatives as potential anti-tubercular agents using molecular dynamics simulations", SAR AND QSAR IN ENVIRONMENTAL RESEARCH 25 (6) (2014) 473-488</li> <li>- นางสาวนฤมล บุญญวงษ์, Potjanart Suwanruji, Supa Hannongbua, Dr. Fei Li, Prof. Licheng Sun, Thitinun Karpkird, "Synthesis, Electrochemistry and Photo-induced Electron Transfer of Unsymmetrical Dinuclear Ruthenium Osmium 2,2'-Bipyridine Complexes", Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry 287 (-) (2014) 40-48</li> <li>- Kungwan, N, Ogata, Y, Supa Hannongbua, Tachikawa, M, "Nuclear quantum effect and temperature dependency on the hydrogen-bonded structure of 7-azaindole dimer", THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS 133 (9) (2014)</li> <li>- Kamsri, P, Punkvang, A, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, Irle, S, 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", JOURNAL OF MOLECULAR MODELING 20 (7) (2014)</li> </ul>	

## ข้อมูลอาจารย์มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

ชื่อ นางสาว หารหนองบัว	
ตำแหน่งทางวิชาการ ศาสตราจารย์	สังกัด ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Mokmak, W, Chunsriviro, S, Supa Hannongbua, Yuthavong, Y, Smarn Tongsima, Kamchonwongpaisan, S, "Molecular Dynamics of Interactions between Rigid and Flexible Antifolates and Dihydrofolate Reductase from Pyrimethamine-Sensitive and Pyrimethamine-Resistant Plasmodium falciparum", CHEMICAL BIOLOGY &amp; DRUG DESIGN 84 (4) (2014) 450-461</li> <li>- Chainukool, S, Goto, M, Supa Hannongbua, Shotipruk, A, "Subcritical Water Extraction of Resveratrol from Barks of Shorea Roxburghii G. Don.", SEPARATION SCIENCE AND TECHNOLOGY 49 (13) (2014) 2073-2078</li> <li>- Oraphan , Supa Hannongbua, Matthew Paul Gleeson, "Elucidating the Origin of the Esterase Activity of Human Serum Albumin Using QM/MM Calculations.", J. Phys. Chem. B 118 (41) (2014) 11886-11894</li> <li>- Niran , Napat, Matthew Paul Gleeson, Supa Hannongbua, Kiattawee Choowongkorn, "Insight into HIV-1 reverse transcriptase–aptamer interaction from molecular dynamics simulations.", Journal of Molecular Modeling 20 (8) (2014) 2380-2388</li> <li>- Tuanjai , Jun , Witcha , Matthew Paul Gleeson, Supa Hannongbua, Seiji , "Mechanistic insights into the catalytic reaction of plant allene oxidesynthase (pAOS) via QM and QM/MM calculations.", J. Mol. Graph. Modell. 52 (1) (2014) 20-29</li> <li>- Nawae, Wanapinun, Supa Hannongbua, Ruengjitchatchawalya, Marasri, "Dynamic Scenario of Membrane Binding Process of Kalata B1", PLOS ONE 9 (12) (2014)</li> <li>- Chao Jun Chen, Rong Jiang, Gang Wang, Rui Hua Jiao, Chompoonuch Tancharoen, Kanokorn Sudto, Srunya Vajrodaya, Supa Hannongbua, Hui Ming Ge1, Ren Xiang Tan, "Oligostilbenoids with Acetylcholinesterase Inhibitory Activity from Dipterocarpus alatus", Planta Medica 80 (17) (2014) 1641-1646</li> <li>- Jitnonom, Jitrayut, Sattayanon, Chanchai, Kungwan, Nawe, Supa Hannongbua, "A DFT study of the unusual substrate-assisted mechanism of Serratia marcescens chitinase B reveals the role of solvent and mutational effect on catalysis", JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS &amp; MODELLING 56 (2015) 53-59</li> <li>- Witcha Treesuwan, Songwut Suramitr, Supa Hannongbua, "Elucidation of hydroxyl groups-antioxidant relationship in mono- and dihydroxyflavones based on O-H bond dissociation enthalpies", Journal of Molecular Modeling 21 (6) (2015)</li> <li>- Punkvang, Auradee, Kamsri, Pharit, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, Wolschann, Peter, Irlle, Stephan, Pungpo, Pornpan, "Key Structures and Interactions for Binding of Mycobacterium tuberculosis Protein Kinase B Inhibitors from Molecular Dynamics Simulation", CHEMICAL BIOLOGY &amp; DRUG DESIGN 86 (1) (2015) 871-881</li> <li>- Kamsri, Pharit, Punkvang, Auradee, Supa Hannongbua, Patchreenart Saparpakorn, Pungpo, Pornpan, "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 ADVANCES 5 (65) (2015) 52926-52937</li> <li>- Thammaporn, Ratsupa, Yagi-Utsumi, Maho, Yamaguchi, Takumi, Boonsri, Pornthip, Patchreenart Saparpakorn, Kiattawee Choowongkorn, Supanna Techasakul, Kato, Koichi, Supa Hannongbua, "NMR characterization of HIV-1 reverse transcriptase binding to various non-nucleoside reverse transcriptase inhibitors with different activities", SCIENTIFIC REPORTS 5 (-) (2015) 1-6</li> <li>- Siriporn Sasimontokul, นายชานัญ ชินสิทธิ์, TUMRONG PUTTAPITUKPORN, Supa Hannongbua, Cyril J. Donnelly,, Gillian Weir , Jacqueline A. Alderson, "Lower-limb Dynamics and Energy Absorption during Three Different Types of Single LegLandings", JURNAL SAINS SUKAN &amp; PENDIDIKAN JASMANI Journal of Sports Science &amp; Physical Education 3 (-) (2015) 9-16</li> <li>- Thammaporn, Ratsupa, Ishii, Kentaro, Yagi-Utsumi, Maho, Uchiyama, Susumu, Supa Hannongbua, Kato, Koichi, "Mass Spectrometric Characterization of HIV-1 Reverse Transcriptase Interactions with Non-nucleoside Reverse Transcriptase Inhibitors", BIOLOGICAL &amp; PHARMACEUTICAL BULLETIN 39 (3) (2016) 450-454</li> <li>- Seetaha, Supaporn, Yagi-Utsumi, Maho, Yamaguchi, Takumi, Ishii, Kentaro, Supa Hannongbua, Kiattawee Choowongkorn, Kato, Koichi, "Application of Site-Specific Spin Labeling for NMR Detecting Inhibitor-Induced Conformational Change of HIV-1 Reverse Transcriptase", ChemMedChem 11 (4) (2016) 363-366</li> <li>- Maha, Athip, Rukachaisirikul, Vatcharin, Saithong, Saowanit, Phongpaichit, Souwalak, Poonswan, Wimarak, Sakayaroj, Jariya, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, "Terezine derivatives from the fungus Phoma herbarum PSU- H256", PHYTOCHEMISTRY 122 (2016) 223-229</li> <li>- Rungnim, C., Promarak, V., Supa Hannongbua, Kungwan, N., Namuangruk, S., "Complete reaction mechanisms of mercury oxidation on halogenated activated carbon", Journal of Hazardous Materials 310 (-) (2016) 253-260</li> <li>- Punkvang, A, Supa Hannongbua, Patchreenart Saparpakorn, Pungpo, P, "Insight into the structural requirements of aminopyrimidine derivatives for good potency against both purified enzyme and whole cells of M-tuberculosis: combination of HQSAR, CoMSIA, and MD simulation studies", JOURNAL OF BIOMOLECULAR STRUCTURE &amp; DYNAMICS 34 (5) (2016) 1079-1091</li> <li>- Sriyab, S., Gleeson, M.P., Supa Hannongbua, Songwut Suramitr, "Photophysical properties and computational investigation on substituent effects on the structural and electronic properties of 3,6-di(thiophene-2-yl)-carbazole-based derivatives", Journal of Molecular Structure 1125 (-) (2016) 532-539</li> <li>- Thangsunan, P., Tateing, S., Supa Hannongbua, Suree, N., "Structural insights into the interactions of phorbol ester and bryostatin complexed with protein kinase C: a comparative molecular dynamics simulation study", Journal of Biomolecular Structure and Dynamics 34 (7) (2016) 1561-1575</li> <li>- Chotpatiwetchkul, W., Jongkon, N., Supa Hannongbua, Gleeson, M.P., "QM/MM investigation of the reaction rates of substrates of 2,3-dimethylmalate lyase: A catabolic protein isolated from Aspergillus niger", Journal of Molecular Graphics and Modelling 68 (-) (2016) 29-38</li> </ul>	



## ข้อมูลอาจารย์มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

<b>ชื่อ</b> นางสาว หารหนองบัว	
<b>ตำแหน่งทางวิชาการ</b> ศาสตราจารย์	<b>สังกัด</b> ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Thangsunan, P., Kittiwachana, S., Meepowpan, P., Kungwan, N., Prangki, P., Supa Hannongbua, Suree, N., "Rapid activity prediction of HIV-1 integrase inhibitors: harnessing docking energetic components for empirical scoring by chemometric and artificial neural network approaches", <i>Journal of Computer-Aided Molecular Design</i> 30 (6) (2016) 471-488</li> <li>- Lanchakorn Kittiratanawasin, Supa Hannongbua, "The effect of edges and shapes on band gap energy in graphene quantum dots", <i>Integrated ferroelectrics</i> 175 (1) (2016) 211-219</li> <li>- Oraphan Phuangsawai, Paul Beswick, Siriluk Ratanabunyong, Lueacha Tabtimmai, Praphasri Suphakun, Phongphat Obounchoey, Pimonwan Srisook, Natharinee Horata, Irina Chuckowree, Supa Hannongbua, Simon E. Ward, Kiattawee Choowongkorn, Matthew Paul Gleeson, "European Journal of Medicinal Chemistry", <i>European Journal of Medicinal Chemistry</i> 124 (1) (2016) 896-905</li> <li>- Phuangsawai, O., Beswick, P., Ratanabunyong, S., Tabtimmai, L., Suphakun, P., Obounchoey, P., Srisook, P., Horata, N., Chuckowree, I., Supa Hannongbua, Ward, S.E., Kiattawee Choowongkorn, Gleeson, M.P., "Evaluation of the anti-malarial activity and cytotoxicity of 2,4-diamino-pyrimidine-based kinase inhibitors", <i>European Journal of Medicinal Chemistry</i> 124 (29) (2016) 896-905</li> <li>- Rajachan, O.-A., Kanokmedhakul, K., Sanmanoch, W., Boonlue, S., Supa Hannongbua, Patchreenart Saparpakorn, Kanokmedhakul, S., "Chevalone C analogues and globoscinic acid derivatives from the fungus <i>Neosartorya spinosa</i> K11", <i>Phytochemistry</i> 132 (2016) 68-75</li> <li>- Chi-Ho Siu, Lawrence Tien Lin Lee, Po-Yu Ho, Cheuk-Lam Ho, Tao Chen, Songwut Suramitr, Supa Hannongbua, Zhiyuan Xie, Mingdeng Wei, Wai-Yeung Wong, "Bis(phenothiazyl-ethynylene)-Based Organic Dyes Containing Di-Anchoring Groups with Efficiency Comparable to N719 for Dye-Sensitized Solar Cells", <i>Chemistry - An Asian Journal</i> 12 (3) (2017) 332-340</li> <li>- Pongthep Prajongtat, Songwut Suramitr, Somkiat Nokbin, Porf. Koichi Nakajima, Prof. Koichiro Mitsuke, Supa Hannongbua, "Density functional theory study of adsorption geometries and electronic structures of azo-dye-based molecules on anatase TiO<sub>2</sub> surface for dye-sensitized solar cell applications", <i>Journal of Molecular Graphics and Modelling</i> In Press (In Press) (2017)</li> <li>- Pongthep Prajongtat, ดร.สุวรรณี ศรียาม, Prof. Thomas Zentgraf, Supa Hannongbua, "Optimisation of stability and charge transferability of ferrocene-encapsulated carbon nanotubes", <i>Molecular Physics</i> In Press (In Press) (2017)</li> <li>- Nawae, W., Supa Hannongbua, Ruengjitchatchawalya, M., "Molecular dynamics exploration of poration and leaking caused by Kalata B1 in HIV-infected cell membrane compared to host and HIV membranes", <i>Scientific Reports</i> 7 (1) (2017)</li> <li>- Toviwek, B, Suphakun, P, Kiattawee Choowongkorn, Supa Hannongbua, Gleeson, MP, "Synthesis and evaluation of the NSCLC anti-cancer activity and physical properties of 4-aryl-N-phenylpyrimidin-2-amines", <i>BIOORGANIC &amp; MEDICINAL CHEMISTRY LETTERS</i> 27 (20) (2017) 4749-4754</li> <li>- Aeksiri, N., Chompunuch Warakulwit, Supa Hannongbua, Sasimanas Unajak, Kiattawee Choowongkorn, "Use of Capillary Electrophoresis to Study the Binding Interaction of Aptamers with Wild-Type, K103N, and Double Mutant (K103N/Y181C) HIV-1 RT: Studying the Binding Interaction of Wild-Type, K103N, and Double Mutant (K103N/Y181C) HIV-1 RT with Aptamers by Performing the Capillary Electrophoresis", <i>Applied Biochemistry and Biotechnology</i> 182 (2) (2017) 546-558</li> <li>- Khuntawee, W., Kunaseth, M., Rungnim, C., Intagorn, S., Wolschann, P., Kungwan, N., Rungrotmongkol, T., Supa Hannongbua, "Comparison of Implicit and Explicit Solvation Models for Iota-Cyclodextrin Conformation Analysis from Replica Exchange Molecular Dynamics", <i>Journal of Chemical Information and Modeling</i> 57 (4) (2017) 778-786</li> <li>- Nattee, C., Khamsemanan, N., Lawtrakul, L., Toochinda, P., Supa Hannongbua, "A novel prediction approach for antimalarial activities of Trimethoprim, Pyrimethamine, and Cycloguanil analogues using extremely randomized trees", <i>Journal of Molecular Graphics and Modelling</i> 71 (2017) 13-27</li> <li>- Jitapunkul, K., Poachanukoon, O., Supa Hannongbua, Toochinda, P., Lawtrakul, L., "Simulation Study of Interactions Between Two Bioactive Components from Zingiber cassumunar and 5-Lipoxygenase", <i>Cellular and Molecular Bioengineering</i> 11 (1) (2018) 77-89</li> <li>- Decha Dechtrirat, bunyarithi sookcharoenpinyo, Pongthep Prajongtat, Sriprachuabwong, C., Arsooth Sanguankiat, Tuantranont, A., Supa Hannongbua, "An electrochemical MIP sensor for selective detection of salbutamol based on a graphene/PEDOT:PSS modified screen printed carbon electrode", <i>RSC Advances</i> 8 (1) (2018) 206-212</li> <li>- Jitnonom, J., Ketudat-Cairns, J.R., Supa Hannongbua, "QM/MM modeling of the hydrolysis and transfructosylation reactions of fructosyltransferase from <i>Aspergillus japonicus</i>, an enzyme that produces prebiotic fructooligosaccharide", <i>Journal of Molecular Graphics and Modelling</i> 79 (2018) 175-184</li> <li>- Jitnonom, J, Supa Hannongbua, "Theoretical study of the arabinan hydrolysis by an inverting GH43 arabinanase", <i>MOLECULAR SIMULATION</i> 44 (8) (2018) 631-637</li> <li>- Suwannee Sriyab, Kitiya Jorn-lat, Panida Prompinit, Peter Wolschann, Supa Hannongbua, Songwut Suramitr, "Photophysical properties of 1-pyrene-based derivatives for nitroaromatic explosives detection: Experimental and theoretical studies", <i>Journal of Luminescence</i> 2018 (203) (2018) 492-499</li> <li>- Muangnil, P, Satitsri, S, Tadpetch, K, Patchreenart Saparpakorn, Chatsudthipong, V, Supa Hannongbua, Rukachaisirikul, V, Muanprasat, C, "A fungal metabolite zearalenone as a CFTR inhibitor and potential therapy of secretory diarrheas", <i>BIOCHEMICAL PHARMACOLOGY</i> 150 (2018) 291-302</li> <li>- Pongthep Prajongtat, Supa Hannongbua, "A Combined Theoretical and Experimental Study of CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub> Containing AVAI Films Prepared via an Intramolecular Exchange Process", <i>Journal of Physical Chemistry C</i> 122 (34) (2018) 19705-19711</li> </ul>	

**ข้อมูลอาจารย์มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์**

<p><b>ชื่อ</b> นางสาว หารหนองบัว</p> <p><b>ตำแหน่งทางวิชาการ</b> ศาสตราจารย์</p>	<p><b>สังกัด</b> ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์</p>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- ดร.สุวรรณี ศรียาม, Songwut Suramitr, Supa Hannongbua, Pongthep Prajongtat, "Encapsulation of ferrocene in carbon nanotubes using low temperature resolution processing: influence of surface environment, diameter, and length", Monatshefte für Chemie - Chemical Monthly 149 (-) (2018) 1963-1969</li> <li>- Chen, Z, Wang, LQ, Ho, CL, Chen, SM, Songwut Suramitr, Plucksacholatan, A, Zhu, NY, Supa Hannongbua, Wong, WY, "Smart Design on the Cyclometalated Ligands of Iridium(III) Complexes for Facile Tuning of Phosphorescence Color Spanning from Deep-Blue to Near-Infrared", ADVANCED OPTICAL MATERIALS 6 (23) (2018)</li> <li>- Khamsemanan, N., Nattee, C., Lawtrakul, L., Toochinda, P., Supa Hannongbua, "Predicting inhibition constants of antimalarial drug compounds using support vector regression", Journal of Nonlinear and Convex Analysis 19 (9) (2018) 1555-1562</li> <li>- Pobsuk, N, Paracha, TU, Chaichamnong, N, Salalay, N, Suphakun, P, Supa Hannongbua, Kiattawee Choowongkamon, Pekthong, D, Chootip, K, Ingkaninan, K, Gleeson, MP, "Design, synthesis and evaluation of N-2,N-4-diaminoquinazoline based inhibitors of phosphodiesterase type 5", BIOORGANIC &amp; MEDICINAL CHEMISTRY LETTERS 29 (2) (2019) 267-270</li> <li>- Kunaseth, M., Supa Hannongbua, Nakano, A., "Shift/collapse on neighbor list (SC-NBL): Fast evaluation of dynamic many-body potentials in molecular dynamics simulations", Computer Physics Communications 235 (-) (2019) 88-94</li> <li>- Paracha, T.U., Pobsuk, N., Salalay, N., Suphakun, P., Pekthong, D., Supa Hannongbua, Kiattawee Choowongkamon, Khorana, N., Temkitthawon, P., Ingkaninan, K., Gleeson, M.P., Chootip, K., "Elucidation of vasodilation response and structure activity relationships of N2,N4-disubstituted quinazoline 2,4-diamines in a rat pulmonary artery model", Molecules 24 (2) (2019)</li> <li>- Miengmern, N., Koonwong, A., Sriyab, S., Anwaraporn Suramitr (Niltharach), Poo-arporn, R.P., Supa Hannongbua, Songwut Suramitr, "Aggregation-induced emission enhancement (AIEE) of N,N'-Bis(Salicylidene)-p-Phenylenediamine Schiff base: Synthesis, photophysical properties and its DFT studies", Journal of Luminescence 210 (-) (2019) 493-500</li> <li>- Pongthep Prajongtat, นายชาติกร ศรีประจวบวงษ์, นางสาวรัชฎา วงษ์กันยา, Decha Dechtrirat, Jutarat Sudchanham, Nirachawadee Srisamran, Winyoo Sangthong, Piyachat Chuysinuan, Adisorn Tuantranont, Supa Hannongbua, Nattaporn Chattham, "Moisture-resistant electrospun polymer membranes for efficient and stable fully printable perovskite solar cells prepared in humid air", ACS Applied Materials &amp; Interfaces 11 (31) (2019) 27677-27685</li> <li>- Pobsuk, N., Suphakun, P., Supa Hannongbua, Nantasenamat, C., Kiattawee Choowongkamon, Paul Gleeson, M., "Synthesis, plasmodium falciparum inhibitory activity, cytotoxicity and solubility of n2,n4-disubstituted quinazoline-2,4-diamines", Medicinal Chemistry 15 (6) (2019) 691-702</li> <li>- Malinee Promkatkaew, ดร.พรทิพย์ บุญศรี, Supa Hannongbua, "Structural and Spectroscopic Properties of Metal Complexes with Ruhemann's Purple Compounds Calculated using Density Functional Theory", Key Engineering Materials 2019 (824) (2019) 204-211</li> <li>- Suppamat Makjan, Malinee Promkatkaew, Supa Hannongbua, ดร.พรทิพย์ บุญศรี, "Theoretical Study of the Electronic Structure and Properties of Alternating Donor-Acceptor Couples of Carbazole-Based Compounds for Advanced Organic Light-Emitting Diodes (OLED)", Key Engineering Materials 824 (-) (2019) 236-244</li> <li>- ดร.เดือนใจ สมบูรณ์, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, "Torsional flexibility of undecorated catechol diether compound as potent NNRTI targeting HIV-1 reverse transcriptase", Journal of Molecular Graphics and Modelling 86 (-) (2019) 286-297</li> <li>- ดร.วราภรณ์ บุญรัตน์, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, "Predicting the Binding Affinity of P38 Map Kinase Inhibitors using Free Energy Calculations", Chiang Mai Journal of Science 46 (1) (2019) 93-105</li> <li>- Nutjarin Klinhom, Nikorn Saengsuwan, Suwannee Sriyab, Panida Prompinit, Supa Hannongbua, Songwut Suramitr, "Photophysical properties for excited-state intramolecular proton transfer (ESIPT) reaction of N-salicylidene-o-aminophenol: Experimental and DFT based approaches", Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy 206 (206) (2019) 359-366</li> <li>- Malinee Promkatkaew, Songwut Suramitr, Thitinun Karpkird, Masahiro Ehara, Supa Hannongbua, "DFT/TD-DFT investigation on the photoinduced electron transfer of diruthenium and viologen complexes", Journal of Luminescence 2020 (222) (2020) 1-9</li> </ul>	
<p><b>บทความวิจัยในการประชุมวิชาการ</b></p> <p>ระดับชาติ</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- อรดี พันธุ์กว้าง, Patchreenart Saparpakorn, Songwut Suramitr, Supa Hannongbua, พรพรรณ พึ่งโพธิ์, "MOLECULAR MODELING AND COMPUTER-AIDED MOLECULAR DESIGN OF HIGHLY POTENT HIV-1 REVERSE TRANSCRIPTASE INHIBITORS IN THE CLASS OF EFAVIRENZ DERIVATIVES", การประชุมวิชาการวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยีแห่งประเทศไทย ครั้งที่ 33 (วทท. 33: 2550) (2007)</li> <li>- อรดี พันธุ์กว้าง, พรพรรณ พึ่งโพธิ์, Patchreenart Saparpakorn, Songwut Suramitr, Supa Hannongbua, "Molecular Docking Calculations and Conformation Analysis of HIV-1 RT Inhibitor of Efavirenz Derivatives", German-Thai Symposium on Nanoscience and Nanotechnology (2007)</li> <li>- วิชนัน มีโต, ศรเทพ วรณรัตน์, Songwut Suramitr, Supa Hannongbua, "Electronic Properties of the Poly(flourenevinylene) Derivatives: Time Dependent Density Functional Theory Calculations", German-Thai Symposium on Nanoscience and Nanotechnology (2007)</li> <li>- Songwut Suramitr, วิชนัน มีโต, Peter Wolschann, Supa Hannongbua, "TD-DFT Theoretical Study on the Ground and Excited States of Carbazole-based Molecules: Structure and Excitation Energy", German-Thai Symposium on Nanoscience and Nanotechnology (2007)</li> </ul>	

**ข้อมูลอาจารย์มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์**

<p><b>ชื่อ</b> นางสาว หารหนองบัว</p>	
<p><b>ตำแหน่งทางวิชาการ</b> ศาสตราจารย์</p>	<p><b>สังกัด</b> ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์</p>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- พรพรรณ พึ่งโพธิ์, ศิริพร จึงสุธิกุล, อรดี พันธุ์กว้าง, วินิช พรหมอารักษ์, Songwut Suramitr, Supa Hannongbua, "Theoretical Investigations on Structural, Electronic and Optical Properties of Carbazole-capped Molecules, Based on Quantum Chemical Calculations", German-Thai Symposium on Nanoscience and Nanotechnology (2007)</li> <li>- Songwut Suramitr, กัดนิกา, มาลินี พรหมชาติแก้ว, Thitinun Karpkird, Supa Hannongbua, "Investigation on Structural and Energetic Properties of Methoxy Substituted 2-Ethylhexyl-Cinnamates, Based on Quantum Chemical Calculations", The 12th Annual Symposium on Computational Science and Engineering (2008)</li> <li>- Patchreenart Saparpakorn, อรดี พันธุ์กว้าง, กิตติศักดิ์ ลักษณะันการท, Songwut Suramitr, Supa Hannongbua, พรพรรณ พึ่งโพธิ์, "Understanding the Binding Interaction of HIV-1 RT Inhibitor of Diarylpyrimidine Derivatives in WT and K103N HIV-1 RT Based on Quantum Chemical Calculations", The 12th Annual Symposium on Computational Science and Engineering (2008)</li> <li>- อรดี พันธุ์กว้าง, Patchreenart Saparpakorn, Songwut Suramitr, Supa Hannongbua, พรพรรณ พึ่งโพธิ์, "Molecular Modeling and Quantum Chemical Calculations of Antituberculosis Agents in a Series of Isoniazid Derivatives", The 12th Annual Symposium on Computational Science and Engineering (2008)</li> <li>- กัญจน์ ศิลป์ประสิทธิ์, รัตน์สุภา ธรรมภรณ์, Supa Hannongbua, Kiattawee Choowongkorn, "Cloning, expression, purification, activity assay of recombinant HIV-1 reverse transcriptase in Escherichia coli", การประชุมทางวิชาการของมหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ ครั้งที่ 46 (2008)</li> <li>- Kiattawee Choowongkorn, รัตน์สุภา ธรรมภรณ์, กัญจน์ ศิลป์ประสิทธิ์, พรทิพย์ บุญตรี, Supanna Techasakul, Supa Hannongbua, "Inhibition of hiv-1 reverse transcriptase activity with dipyrrodoiazepinone derivatives", 34th Congress on Science and Technology of Thailand (2008)</li> <li>- อภิพล พิริยะภากุล, Songwut Suramitr, Supa Hannongbua, "Theoretical study the structures and electronic properties of oligo(para-phenylene) carboxylic acid and its derivatives", การประชุมทางวิชาการวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยีแห่งประเทศไทยครั้งที่ 34 (2008)</li> <li>- มาลินี พรหมชาติแก้ว, Songwut Suramitr, Thitinun Karpkird, สุภาวดี นามเมืองรัก, Supa Hannongbua, "The photophysical properties of structural and electronic of methoxy substituted 2-ethylhexyl-cinnamates, based on quantum chemical calculations", การประชุมทางวิชาการวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยีแห่งประเทศไทยครั้งที่ 34 (2008)</li> <li>- นิกร แสงสุวรรณ, Songwut Suramitr, Supa Hannongbua, "Theoretical study on structural and electronic properties of porphyrin metal-complexes, based on density functional theory", การประชุมทางวิชาการวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยีแห่งประเทศไทยครั้งที่ 34 (2008)</li> <li>- สุภาวรัตน์ ฝลีนยศ, Songwut Suramitr, Supa Hannongbua, "Theoretical studies of poly(phenylene-vinylene) copolymer by substitutions to functional group", การประชุมทางวิชาการวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยีแห่งประเทศไทยครั้งที่ 34 (2008)</li> <li>- S. Thengyai, พรพิมล โมตรรัตน์, Supa Hannongbua, A. Plubrukarn, "Classical QSAR of Antitubercular Scalarane Derivatives", Keystone Symposia on Molecular and Cellular Biology (2008)</li> <li>- A. Punkvang, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, P. Wolschann, พรพรรณ พึ่งโพธิ์, "Insight into the Binding Interaction of Highly Potent Mycobacterium Tuberculosis Enoyl ACP Reductase Inhibitors in the Class of Arylamide", Keystone Symposia on Molecular and Cellular Biology (2008)</li> <li>- พรพิมล โมตรรัตน์, วิชชา ดรีสุวรรณ, Chak Sangma, ธรรมบุญ ทวีชัย, S. Kamchonwongpaisan, ยงยุทธ ยุทธวงศ์, Supa Hannongbua, "Proven Binding Energies of Cycloguanil, Pyrimethamine and WR99210 Antifolates to PfDHFR, Based on MD/Three-Layer ONIOM Method", Keystone Symposia on Molecular and Cellular Biology (2008)</li> <li>- Silprasit, K., Thammaporn, R., Supa Hannongbua, Kiattawee Choowongkorn, "Fluoroscopic Determining Activity of Recombinant HIV-1 Reverse Transcriptase.", The 4th Annual Symposium of Protein Society of Thailand (2009)</li> <li>- Amphawan Maitarad, Witcha Treesuwan, Phornphimon Maitarad, Patchreenart Saparpakorn, Supanna Techasakul, Supa Hannongbua, "Quantum Chemical Calculations on Particular Interaction Energy of HIV-1 Reverse Transcriptase Inhibitors (68nv, T4 and T5) Bound in K103N HIV-1 RT", Pure and Applied Chemistry (2009)</li> <li>- Supa Hannongbua, "New frontier research for HIV-1 reverse transcriptase inhibitor discovery", Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON2010) (2010)</li> <li>- Patchreenart Saparpakorn, P. Pungpo, Supa Hannongbua, "Binding study of NNRTIs using residue interaction energy calculations", Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON2010) (2010)</li> <li>- Nareerat Kitisripanya, Supa Hannongbua, "Theoretical Investigation on the Binding of Huperzine A and Galanthamine to Acetylcholinesterase, Based on ONIOM Method", The 1st International Conference on Computation for Science and Technology (ICCST-1) (2010)</li> <li>- Suchada Dejnakorn, Supa Hannongbua, Songwut Suramitr, "Investigation the electronic properties of Cu (I) complex with 2,2'-bipyridine-based for dye-sensitized solar cells: Study by using TD-DFT", The 17th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE 17) (2013)</li> <li>- Nutjarin Klinhom, Supa Hannongbua, Songwut Suramitr, "Theoretical Study on the Sensing Mechanism of Salicylaldehyde Based Chemosensor: Excited-State Proton Transfer", The 17th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE 17) (2013)</li> <li>- Suwannee Sriyab, Supa Hannongbua, Songwut Suramitr, "DFT study of molecular interactions between DNT and 4-(p-tolyethylene)pyrene based on FT-IR and FT-Raman spectra", The 18th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE 18) (2014)</li> <li>- ชานาญ ชินสีห์, Supa Hannongbua, TUMRONG PUTTAPITUKPORN, Siriporn Sasimontokul, "The relationship between mechanical energy absorption and anterior cruciate ligament injury risk during single leg landing", ประชุมวิชาการแห่งชาติ ครั้งที่ 12 มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ กำแพงแสน (2015)</li> </ul>	

## ข้อมูลอาจารย์มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

<b>ชื่อ</b> นางสาว หารหนองบัว	
<b>ตำแหน่งทางวิชาการ</b> ศาสตราจารย์	<b>สังกัด</b> ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์
<b>ระดับนานาชาติ</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Songwut Suramitr, Alfred Karpfen, Peter Wolschann, Supa Hannongbua, "Torsional Potentials by Using Bicarbazole and Bifluorene at High-level ab initio and DFT calculations", The 3rd Asian Pacific Conference on Theoretical &amp; Computational Chemistry (2007)</li> <li>- พรทิพย์ บุญศรี, วราภรณ์ จังธนสมบัติ, Supa Hannongbua, "QSAR Study on Toxicity of Benzene Derivatives Against Poecilia Reticulate and Tetrahymena Pyriformis Using Molecular Descriptors", Pure and Applied Chemistry International Conference 2008 (PACCON2008) (2008)</li> <li>- Nareerat Kitisripanya, ดำรงค์ศักดิ์ อายุวานานนท์, Peter Wolchann, Supanna Techasakul, Supa Hannongbua, "Molecular Docking Studies on Coumarin-Donepezil Hybrid Derivatives as Potent Inhibitors of Acetylcholinesterase", Pure and Applied Chemistry International Conference 2008 (PACCON2008) (2008)</li> <li>- พรพรรณ พึ่งโพธิ์, กิตติศักดิ์ ลักษณะงาม, ออฤดี พักตร์วาง, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, "Theoretical Investigation of Interactions of NNRTIs and Its HIV-1 RT Binding Pocket at the Molecular Level of Diarylpyrimidine Derivatives Using the Molecular Docking Simulations", Pure and Applied Chemistry International Conference 2008 (PACCON2008) (2008)</li> <li>- ออฤดี พักตร์วาง, Patchreenart Saparpakorn, Songwut Suramitr, Supa Hannongbua, พรพรรณ พึ่งโพธิ์, "Understanding in the Binding of Isonicotinyl-NAD Adduct to Wild-Type and Isoniazid Resistant Enoyl-ACP Reductase from Mycobacterium Tuberculosis Using Molecular Docking and Quantum Chemical Calculations", Pure and Applied Chemistry International Conference 2008 (PACCON2008) (2008)</li> <li>- Veeramol VAILIKHIT, Wilhelm J. Holzschuh, Supa Hannongbua, "Extending MD-ONIOM2 Modelling: Predicting 1 H-NMR of the Acidic Protons of Aniline in a Highly Polar Solvent", Pure and Applied Chemistry International Conference 2008 (PACCON2008) (2008)</li> <li>- พรพรรณ พึ่งโพธิ์, A. Punkvang, Patchreenart Saparpakorn, P. Wolschann, Supa Hannongbua, "Elucidating Inhibitor-enzyme Interaction of Highly Potent Non-nucleoside Reverse Transcriptase Inhibitors Active Against Wild-type and Mutant HIV-1 Strains: Computer-aided Molecular Design Approaches", 2nd World Conference on Magic Bullets (2008)</li> <li>- พงศ์เทพ ประจักษ์สันต์, ดาริณี แซ่ตั้ง, พรพิมล โมตรรัตน์, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, "Interaction Energies of Oxaloacetate and Binding Site of Phosphoenolpyruvate Carboxykinase (PEPCK) by MP2 calculation, Pongthep Prajongtat, Darinee Sae-Tang, Phronphimon Maitarat, Patchreenart Saparpakorn, and Supa Hannongbua", Pure and Applied Chemistry International Conference 2008 (PACCON2008) (2008)</li> <li>- มาลินี พรหมเกตต์แก้ว, Songwut Suramitr, Thitinun Karpkird, Supa Hannongbua, "Photophysical Properties of Methoxy Substituted 2-Ethylhexyl-Cinnamates: A Quantum Chemical Calculations", Pure and Applied Chemistry International Conference 2009, PACCON2009 (2009)</li> <li>- สุภาวรัตน์ ผลินยศ, Songwut Suramitr, Supa Hannongbua, "Electronic Properties of p-Methoxy phenylene vinylene Derivatives, Investigated by Quantum Chemical Calculation", Pure and Applied Chemistry International Conference 2009, PACCON2009 (2009)</li> <li>- Ehara, M., Saha, B., Potjaman Poolmee, Promkatkaew, M., Supa Hannongbua, Lu, Y.-P., Nakatsuji, H., "Electronic structure and optical properties of conjugated molecules: SAC-CI study", International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2009, ICCMSE 2009 (2009)</li> <li>- Chidthong, R., Maitarat, P., Supa Hannongbua, "Structural and electronic properties of poly(fluorene-pyrrole) copolymer: Time dependent density functional theory investigation", IEEE International NanoElectronics Conference (INEC) 2010 (2010)</li> <li>- Boonsri, P, Supa Hannongbua, Kiattawee Choowongkorn, Olson, A, Herdendorf, T. J., Mizioro H. M., Sem D. S., "Docking From Natural Product, Drug And Chemical Libraries, Followed By NMR Binding Studies To Identify Novel Inhibitors Of Phosphomevalonate Kinase", Biophysical Society 54th Annual Meeting (2010)</li> <li>- C. Sonthirod, Patchreenart Saparpakorn, N. Waraporn, R. Palangsantikul, Supa Hannongbua, M. Ruengjitchawalya, "Structural optimization of Ca-spirulan target on glycoprotein-D of HSV-1", Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON2010) (2010)</li> <li>- P. Kaewmanee, Supa Hannongbua, Patchreenart Saparpakorn, K. Porkaew, V. Chumchua, N. Chirasuwan, M. Ruengjitchawalya, "Molecular docking of HSV-1 for identification of sulfolipid (SQDG) targeted protein", Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON2010) (2010)</li> <li>- A. Punkvang, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, P. Wolschann, H. Berner, P. Pungpo, "Computer-aided molecular design of arylamide as the novel direct inhibitors of the enoyl ACP reductase (InhA) from M. tuberculosis based on molecular docking calculations and QSAR studies", Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON2010) (2010)</li> <li>- S. Sukiattichaisakul, K. Noytanom, W. Jungtanasombut, T. Karpkird, W. Parasuk, Supa Hannongbua, "Calculation of partition coefficient (Log P) of synthesized cinnamic acid and cinnamate derivatives", Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON2010) (2010)</li> <li>- A. Kumkong, A. Punkvang, N. Kuntiya, C. Kheawsod, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, P. Pungpo, "Understanding the binding interaction of diarylpyrimidine derivatives in wild type and double mutant type HIV-1 RT based on computer aided molecular design", Proceedings of PACCON2010 Ubon Ratchathani University (2010)</li> <li>- C. Kheawsod, A. Punkvang, N. Kuntiya, A. Kumkong, P. Wolschann, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, N. Pongprom, P. Pungpo, "Binding investigation of azanaphthoquinone annelated pyrrole derivatives as cytostatic compounds in DNA using molecular modeling approaches", Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON2010) (2010)</li> </ul>	

## ข้อมูลอาจารย์มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

<b>ชื่อ</b> นางสาว หารหนองบัว	
<b>ตำแหน่งทางวิชาการ</b> ศาสตราจารย์	<b>สังกัด</b> ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์
<ul style="list-style-type: none"> <li>- N. Kutiya, A. Punkvang, A. Kumkong, C. Kheawsod, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, P. Wolschann, P. Pungpo, "Molecular modeling and quantum chemical calculations of InhA inhibitors as anti-tuberculosis agents in class of arylamide", Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON2010) (2010)</li> <li>- T. Somboon, M. P. Gleeson, Supa Hannongbua, "Hybrid Quantum Mechanical/Molecular Mechanical studies on Two Families of cis,cis-Muconate Lactonizing Enzymes", 14th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE14) (2010)</li> <li>- Supa Hannongbua, "Understanding of different binding energies of Efavirenz to wild type and K103N/Y181C HIV-1 Reverse transcriptase based on the ONIOM method", The 27th CCS Congress (2010)</li> <li>- อ. ดร. ดารินี แซ่ตั้ง, Supa Hannongbua, "Quantum Chemical Calculation and ONIOM Study on Cyclopropane Synthase as Tuberculosis Drug Target", JENESYS Program at Fukui Institute for Fundamental Chemistry, Kyoto University, with Keiji Morokuma as the principal coordinator (2010)</li> <li>- นาย นิกร แสงสุวรรณ, อ.ดร. วิชนัน มีโต, Songwut Suramitr, Supa Hannongbua, "Theoretical Studies the Effects of Substitution Groups of meso-Tetraphenylporphyrin on Structure and Electronics Properties", The 7th Thai Summer School of Computational Chemistry (2010)</li> <li>- J. Yongpisanphop, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, M. Ruengjitchachawalya, "De novo Design of HIV-1 Reverse Transcriptase Inhibitor against K103N/Y181C Mutant: Bioinformatics Approach", 14th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE14) (2010)</li> <li>- A. Kumkong, อ. ดร. อรดี พันธุ์กว้าง, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, Prof. Dr. Peter Wolschann, G. Liu, ผศ.ดร. พรพรรณ พึ่งโพธิ์, "Finding out the potential binding mode of calanotide derivatives in WT HIV-1 RT based on molecular modeling", Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON 2011) (2011)</li> <li>- อ. ดร. อรดี พันธุ์กว้าง, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, H.A. Wahab, Prof. Dr. Peter Wolschann, ผศ.ดร. พรพรรณ พึ่งโพธิ์, "Investigation of Inhibition Mechanism of Arylamide Inhibitors as an Antitubercular Agent on InhA Using MD Simulations", Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON 2011) (2011)</li> <li>- ผศ.ดร. พรพรรณ พึ่งโพธิ์, อ. ดร. อรดี พันธุ์กว้าง, A. Kumkong, P. Khamsri, Patchreenart Saparpakorn, N. Pongprom, Prof. Dr. Peter Wolschann, Supa Hannongbua, "Study on the Binding Mode of Azanaphthoquinone Annelated Pyrrole Derivatives as Anti-Cancer Agent in DNA Duplex Using MD Simulations", Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON 2011) (2011)</li> <li>- ดร. วีรมวล ไวลิชิต, W. J. Holzschuh, P. Akayothin, S. Nithakorn, Supa Hannongbua, "MD-ONIOM2 of Amines in DMSO for Full QM-Like Predictions Without the Full QM Cost", Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON 2011) (2011)</li> <li>- ผศ.ดร. เพ็ญศรี ศรีวัณ, P. Nokkaew, Supa Hannongbua, "Theoretical Investigation On Wild Type And L100I/K103N HIV-1 RT Complexed with TMC278, Based on Quantum Mechanical Methods", Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON 2011) (2011)</li> <li>- อ.ดร. ดารินี พรหมโยธิน, Masayoshi Takayanagi, Masataka Nagaoka, Supa Hannongbua, "A Correction Interaction Energy on Mycolic acid Cyclopropane Synthase Cofactor Binding Site by MD-ONIOM Calculations", 15th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE 15) (2011)</li> <li>- นางสาว วราภรณ์ บุญรัตน์, Witcha Treesuwan, Patchreenart Saparpakorn, Kiattawee Choowongkorn, Prof. Dr. Peter Wolschann, Supa Hannongbua, "Molecular Dynamics Simulations of Retinol in Dipalmitoylphosphatidylcholine Bilayer", 15th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE 15) (2011)</li> <li>- นางสาว จิราภรณ์ ยงพิศาลภพ, นางสาว กนกอร สุดโต, นางสาว ชมพูนุช ต้นเจริญ, Y.H. Qin, Srunya Vajrodaya, H.M. Ge, R.X. Tan, รศ. ดร. กรกนก อิงคินันท์, Patchreenart Saparpakorn, Supanna Techasakul, Supa Hannongbua, "Molecular Docking Study to the Natural Compounds from Dipterocarpaceous Bark Extract against Acetylcholinesterase", 15th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE 15) (2011)</li> <li>- อ.ดร. อรดี พันธุ์กว้าง, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, H. A. Wahab, Prof. Dr. Peter Wolschann, ผศ.ดร. พรพรรณ พึ่งโพธิ์, "Elucidating Inhibition Mechanism of Arylamide Inhibitors as an Antitubercular Agent on InhA Based on MD Simulations", 15th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE 15) (2011)</li> <li>- นาย จิรวัชร จิตภักดี, Songwut Suramitr, Supa Hannongbua, "Excitation Energies of Triphenylamine Cyanoacrylic Acid for Dye-Sensitized Solar Cells Using Long-Range Corrected Time-Dependent Density Functional Theory", 15th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE 15) (2011)</li> <li>- Supa Hannongbua, Songwut Suramitr, นางสาว สุวรรณี ศรียาน, "Theoretical Study on Structures and Electronic Properties of 9-octyl-3,6-di(thiophen-2-yl)-Carbazole Derivatives", 15th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE 15) (2011)</li> <li>- Supa Hannongbua, นาย ภูภิภัทร ใจแก้ว, ผศ.ดร. มารศรี เรืองจิตต์ชัชวาลย์, "Drug-target interaction prediction of type 2 diabetes and bioactive compounds from Chinese herbs using network-based method", 15th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE 15) (2011)</li> <li>- นางสาว เตือนใจ สมบูรณ์, Dr. Mathew Paul Glesson, Witcha Treesuwan, J. Ochiai, S. Mori, Supa Hannongbua, "DFT STUDIES ON AROBIDOPSIS THALIANA ALLENE OXIDE SYNTHASE", The Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC) (2011)</li> <li>- ดร. ณัฐจันทน์ จงกล, P. Khongpracha, Supa Hannongbua, Dr. Mathew Paul Glesson, Chak Sangma, "A POSSIBLE MECHANISM OF SIALIDASE (NEURAMINIDASE): QUANTUM CALCULATION APPROACHES", The Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC) (2011)</li> </ul>	

## ข้อมูลอาจารย์มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

<b>ชื่อ</b> นางสาว หารหนองบัว	
<b>ตำแหน่งทางวิชาการ</b> ศาสตราจารย์	<b>สังกัด</b> ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์
<ul style="list-style-type: none"> <li>- นาย พงศ์เทพ ประจงทัศน์, R. Palangsantikul, Supa Hannongbua, Songwut Suramitr, "Theoretical study of single-walled carbon nanotubes functionalized with MEH-PPVresidues: A DFT calculation", 26th International Conference on Defects in Semiconductors (2011)</li> <li>- Pharit Kamsri, ดร. อรดี พันธุ์กว้าง, Kodchakon Kun-asa, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, Prof. Dr. Peter Wolschann, Supakit Prueksaaron, ผศ.ดร. พรพรรณ พึ่งโพธิ์, "Elucidating Structural and Dynamic Properties of a TMC278 Analog as a HighlyPotent HIV-1 RT Inhibitor Through Molecular Dynamics Simulations", The 6th International Symposium Protein Society of Thailand (2011)</li> <li>- ดร. พูนศิริ ทิพย์เนตร, Jianzhong Liu, Supa Hannongbua, A. J. Hopfinger, "4D-QSAR Analysis for the Cytotoxicity of Lamellarins Against HumanHormone-Dependent T47D Breast Cancer Cells", The Seventh Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP-VII)" (2011)</li> <li>- Supa Hannongbua, นางสาว วราภรณ์ บุญรัตน์, Witcha Treesuwan, Patchreenart Saparpakorn, "Distribution and Orientation of Retinol in Dipalmitoylphosphatidylcholine BilayerWarabhorn", The Seventh Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP-VII) (2011)</li> <li>- Pharit Kamsri, อ. ดร. อรดี พันธุ์กว้าง, Kodchakon Kunasa, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, Prof. Dr. Peter Wolschann, ผศ.ดร. พรพรรณ พึ่งโพธิ์, "IDENTIFICATION OF THE BINDING OF ALKYL DIPHENYL ETHER SERIES AS THE SPECIFIC INHIBITOR OF InhA M. TUBERCULOSIS POCKET BASED ON MOLECULAR MODELING", The 37th Congress on Science and Technology of Thailand (2011)</li> <li>- นาย วรท โชติปฏิเวชกุล, ดร. พรพิมล ไมตรรัตน์, นาย สุรียา ตาเที่ยง, อ ดร. นาวิ กังวาลย์, Supa Hannongbua, "3 D-QSAR Study of 2-Hydroxycyclohexylsulfonamide Derivatives against Botrytis Cinerea", IUPAC 7th International Conference on Novel Materials and their Synthesis (NMS-VII) &amp; 21st International Symposium on Fine Chemistry and Functional Polymers (FCFP-XXI) (2011)</li> <li>- นาย ภูภิภัทร ใจแก้ว, Supa Hannongbua, ผศ. ดร. มารศรี เรืองจิตซ์ชาวลัย, "Bioactive compounds–target interaction networks in Chinese herbs formula for type 2 diabetes", The 23rd Annual Meeting of the Thai Society of Biotechnology Systems Biotechnology (2011)</li> <li>- นางสาว เตือนใจ สมบูรณ์, Matthew Paul Gleeson, Witcha Treesuwan, Jun Ochiai, Seiji Mori, Supa Hannongbua, "DFT Studies on Allene Oxide Synthase", The 7th International Student Conference (2011)</li> <li>- นาย ภัทรพงษ์ อธิอาภา, ดร. พรพิมล ไมตรรัตน์, นางสาว ชมพูนุช ตันเจริญ, Songwut Suramitr, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, "COMPARATIVE MOLECULAR FIELD ANALYSIS STUDY ON ANTIHIV-1 RT DIARYLANILINE DERIVATIVES", 14th Asian Chemical Congress (14ACC) (2011)</li> <li>- นางสาว ชมพูนุช ตันเจริญ, ดร. พรพิมล ไมตรรัตน์, นาย ภัทรพงษ์ อธิอาภา, Songwut Suramitr, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, "3 D-QSAR STUDY ON RESVERATROL ANALOGUES AS AROMATASE INHIBITORS", 14th Asian Chemical Congress (14ACC) (2011)</li> <li>- นางสาว กนกอร สุดโต, นางสาว ชมพูนุช ตันเจริญ, Srunya Vajrodaya, Supanna Techasakul, Y. H. Qin, H.M. Ge, R.X.Tan, Supa Hannongbua, "Resvertol oligomers from stem bark of Thai Dipterocarpaceous plants (Shorea roxburghii G. Don)", 14th Asian Chemical Congress (14ACC) (2011)</li> <li>- อ ดร. อรดี พันธุ์กว้าง, P. Kamsri, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, Prof. Dr. Peter Wolschann, ผศ.ดร. พรพรรณ พึ่งโพธิ์, "INSIGHT INTO THE BINDING INTERACTION OF ARYLAMIDE DERIVATIVES AS AN ANTITUBERCULAR AGENTS BASED ON QUANTUM CALCULATIONS", 14th Asian Chemical Congress (14ACC) (2011)</li> <li>- ผศ.ดร. พรพรรณ พึ่งโพธิ์, อ ดร. อรดี พันธุ์กว้าง, P. Kamsri, Prof. Dr. Peter Wolschann, Patchreenart Saparpakorn, Gang Liu, Supa Hannongbua, "ELUCIDATING THE POTENTIAL BINDING MODE OF CALANOLIDE A DERIVATIVES IN WTAND Y181C HIV-1 RTS BASED ON MOLECULAR MODELLING", 14th Asian Chemical Congress (14ACC) (2011)</li> <li>- Pharit Kamsri, อ ดร. อรดี พันธุ์กว้าง, Kodchakon Kun-asa, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, Prof. Dr. Peter Wolschann, Supakit Prueksaaron, ผศ.ดร. พรพรรณ พึ่งโพธิ์, "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", 14th Asian Chemical Congress (14ACC) (2011)</li> <li>- Kodchakon Kunasa, อ ดร. อรดี พันธุ์กว้าง, Pharit Kamsri, Amornrat Kumkong, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, Prof. Dr. Peter Wolschann, ผศ.ดร. พรพรรณ พึ่งโพธิ์, "Elucidating the key structural feature of pseudo-cinnamic derivatives as a novel series of antituberculosis agents Based on Computer AidedMolecular Design", 14th Asian Chemical Congress (14ACC) (2011)</li> <li>- นางสาว พรทิพย์ บุญศรี, ผศ.ดร. มะยุไซชะ ภูโน , Supa Hannongbua, "Structural and Energetic Analysis of Mutant K103N HIV-1 Reverse Transcriptase/Efavirenz Complex using ONIOM Calculations", The Seventh Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP-VII) (2011)</li> <li>- นางสาว มลีนี พรหมขัติแก้ว, Songwut Suramitr, Thitinun Karpkird, Supa Hannongbua, "Absorption and Emission properties of the F, OH and NO2 Substituted Cinnamates: A TD-DFT Investigation", The Seventh Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP-VII) (2011)</li> <li>- อ ดร. อรดี พันธุ์กว้าง, Patchreenart Saparpakorn, Prof. Dr. Peter Wolschann, Supa Hannongbua, ผศ.ดร. พรพรรณ พึ่งโพธิ์, "Molecular modeling on anti-tuberculosis agent to investigate the structural basis for improving potency against M. tuberculosis strain", The Seventh Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP-VII) (2011)</li> <li>- ผศ.ดร. พรพรรณ พึ่งโพธิ์, อ ดร. อรดี พันธุ์กว้าง, Amonrat Kumkong, Parit Kamsri, Patchreenart Saparpakorn, Nipawan Pongprom, Prof. Dr. Peter Wolschann, Supa Hannongbua, "Molecular dynamics simulations of azanaphthoquinone annelatedpyrrole derivatives as anti-cancer agent in DNA duplex", The Seventh Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP-VII) (2011)</li> </ul>	

## ข้อมูลอาจารย์มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

<b>ชื่อ</b> นางสาว หารหนองบัว	
<b>ตำแหน่งทางวิชาการ</b> ศาสตราจารย์	<b>สังกัด</b> ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Supa Hannongbua, "Enzyme-inhibitor interaction: Key Structural and Energetic Properties for Inhibitor Design", XVIth International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics (QSCP-XVI) (2011)</li> <li>- Supa Hannongbua, "ONIOM: A useful combined Quantum Chemical Calculations for Key Enzyme-inhibitor interactions", Computer-aided Drug Design Seminar and Workshop" (2011)</li> <li>- ผศ.ดร. พรพรรณ พึ่งโพธิ์, อ.ดร. อรดี พันธุ์กว้าง, Pharit Kamsri, Kodchakon Kun-asa, Patchreenart Saparpakorn, Prof. Dr. Peter Wolschann, Supa Hannongbua, "Computer Aided Molecular Design to Optimal Drug Design: Applications to anti-TB Agents, anti-Cancer Agents and anti-HIV-1 Inhibitors", Computer-aided Drug Design Seminar and Workshop" (2011)</li> <li>- Witcha Treesuwan, Supa Hannongbua, "Theoretical Elucidation of Antioxidant Properties of Hydroxyflavone on O-H Bond Dissociation Enthalpies", 14th Asian Chemical Congress (14ACC) (2011)</li> <li>- นาย วรท โชติปฏิเวชกุล, ดร. พรพิมล ไมตรัตน์, นาย สุรียา ตาเที่ยง, ดร. นาวิ กังวาลย์, Supa Hannongbua, "QSAR and 3 D-QSAR Study of 2-Hydroxycyclohexylsulfonamide Derivatives against Botrytis cinerea", Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON 2012) (2012)</li> <li>- นาย พงศ์เทพ ประจักษ์สัน, Supa Hannongbua, Koichi Nakajima, Koichiro Mitsuke, "Theoretical Investigation On The Adsorption Geometries And Electronic Structures Of Azo Dyes On Tio2 Surface", Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON 2012) (2012)</li> <li>- นาย สุรียา ตาเที่ยง, นางสาว พรทิพย์ บุญศรี, ดร. พรพิมล ไมตรัตน์, นาย วรท โชติปฏิเวชกุล, Supa Hannongbua, อ.ดร. นาวิ กังวาลย์, "Virtual Screening of Novel H1N1/A Inhibitors from Isolated Compounds of Andrographis Paniculata (Burm.F.) Wall.ex Nees, Using Molecular Docking", Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON 2012) (2012)</li> <li>- Dararat Kasamsri, ดร. อรดี พันธุ์กว้าง, Parit Khumsri, Kodchakon Kun-asa, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, Prof. Dr. Peter Wolschann, ผศ.ดร. พรพรรณ พึ่งโพธิ์, "The Structural Guideline for Modification of Novel Diarylpyrimidines with Hydromethy Linker as HIV-1 NNRTIs based on QSAR Studies", Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON 2012) (2012)</li> <li>- Kodchakon Kun-asa, ดร. อรดี พันธุ์กว้าง, Phirit Kamsri, Dararat Kasamsri, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, Prof. Dr. Peter Wolschann, ผศ.ดร. พรพรรณ พึ่งโพธิ์, "COMPUTER AIDED MOLECULAR DESIGN ON NEWLY NAPHTHYL SUBSTITUTEDDIARYLPYRIMIDINES AS NON-NUCLEOSIDE REVERSETRANSCRIPTASE INHIBITORS", Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON 2012) (2012)</li> <li>- Pharit Kamsri, อ.ดร. อรดี พันธุ์กว้าง, Kodchakon Kun-asa, Dararat Kasamsri, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, Prof. Dr. Peter Wolschann, Supakit Prueksaaron, ผศ.ดร. พรพรรณ พึ่งโพธิ์, "THE BINDING MODE INVESTIGATION OF POTENTIAL BI-SUBSTRATE InhA INHIBITORS ASANTI-TUBERCULOSIS AGENTS USING MOLECULAR MODELING", Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON 2012) (2012)</li> <li>- Songwut Suramitr, นางสาว สุวรรณี ศรียาม, Supa Hannongbua, "EFFECT OF THE ELECTRON DONOR/ACCEPTOR ORIENTATION ON THE FLUORESCENCEEFFICIENCY OF 3,6-CARBAZOLE-BASED", Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON 2012) (2012)</li> <li>- นางสาว วราภรณ์ บุญรัตน์, Witcha Treesuwan, Patchreenart Saparpakorn, Kiattawee Choowongkomon, Prof. Dr. Peter Wolschann, Supa Hannongbua, "DISTRIBUTION AND ORIENTATION OF PHYLLOQUINONE IN DIPALMITOYLPHOSPHATIDYLCHOLINE BILAYE", Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON 2012) (2012)</li> <li>- อ.ดร. พูนศิริ ทิพย์เนตร, Kiattawee Choowongkomon, Prof. Dr. Peter Wolschann, Supa Hannongbua, "MOLECULAR INTERACTION OF LAMELLARINS IN THE BINDING POCKET OF EPIDERMALGROWTH FACTOR RECEPTOR BY USING MOLECULAR OPERATING ENVIRONMENTPROGRAM (MOE)", Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON 2012) (2012)</li> <li>- อ.ดร. รุ่งทิวา ชิตทอง, Panjama Ponkate, Supa Hannongbua, "UNDERSTANDING ON FLUORESCENCE ENERGIES AND RADIATIVE LIFETIMESOFTHIENYLENE-PHENYLENE COPOLYMER BASED ONQUANTUM CHEMICAL CALCULATION", Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON 2012) (2012)</li> <li>- นางสาว ชมภูษณ ตันเจริญ, ดร. พรพิมล ไมตรัตน์, นาย ภัทรพงษ์ อิทธิภาภา , Songwut Suramitr, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, "A CoMSIA Study on Resveratrol Derivatives Active againstAromatase Enzyme of Breast Cancer", Sokendai Asian Winter School (Basics and Frontiers in Molecular Science) (2012)</li> <li>- Thitinun Karpkird, Patraporn Saiwattanasuk, Supa Hannongbua, Licheng Sun, "Photo-Induce Electron Transfer of Ruthenium Complexes with One and Two Linked Viologens Trapped CB[7] in Organic Solution", 4th Hybrid and Organic Photovoltaic Conference (2012)</li> <li>- น.ส.นฤมล บุญญวงษ์, Potjanart Suwanruji, Prof.Lichen Sun, Supa Hannongbua, Patraporn Saiwattanasuk, Thitinun Karpkird, "SYNTHESIS OF RUTHENIUM COMPLEXES AND PHOTOINDUCED ELECTRON-TRANSFER STUDY IN NONAQUEOUS SOLUTION", Pure and Applied Chemistry International Conference 2013 (2013)</li> <li>- Orathai Sawatdichaikul, วรณรัตน์ ยิ้มอ้อม, ดร.ณภัทร ส่องทวี, ศ.ดร.อภิชาติ สุขสำราญ, Kiattawee Choowongkomon, Supa Hannongbua, "Elucidating the interaction of curcumin analogs toward HER2-kinase, the dominant protein in human breast cancer", 1st Nakhon Phanom National and International conference in Healthcare (NPNICH) (2014)</li> <li>- Keerati Soongpilai, Supa Hannongbua, Songwut Suramitr, "PHOTOISOMERIZATION PROPERTIES OF A NEW NATURAL PRODUCT 3,4,3',5'-TETRAMETHOXYSTILBENE : TD-DFT CALCULATION", Pure and Applied Chemistry International Conference 2014 (PACCON2014) (2014)</li> <li>- Kitiya Jorn-lat, Supa Hannongbua, Songwut Suramitr, "Synthesis, optical properties and explosive sensing performances of a series of novel pyrene end capped with ?-conjugated", Pure and Applied Chemistry International Conference 2014 (PACCON2014) (2014)</li> </ul>	

## ข้อมูลอาจารย์มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

<b>ชื่อ</b> นางสาว หารหนองบัว <b>ตำแหน่งทางวิชาการ</b> ศาสตราจารย์	<b>สังกัด</b> ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์
<ul style="list-style-type: none"> <li>- สุวรรณี ศรียาม, Anwaraporn Suramitr (Niltharach), Supa Hannongbua, Songwut Suramitr, "Structural and Electronics Photophysical Properties of 3,6-Carbazole-Based: A Combined Theoretical and Experimental Study", 2014 Asia Conference on Nanoscience and Nanotechnology (2014)</li> <li>- Nuttapon Wiriyatanakorn, Waraborn Boonyarat, ผศ.ดร. พรพรรณ พิงโพธิ์, Supa Hannongbua, Patchreenart Saparpakorn, "BINDING INVESTIGATION OF BZ-NKRR-H DENGUE VIRUS NS3PROTEASE INHIBITORS USING MD SIMULATIONS", Pure and Applied Chemistry International Conference 2014 (PACCON2014) (2014)</li> <li>- Decha Dechtrirat, bunyarithi sookcharoenpinyo, Pongthep Prajongtat, นายชาคริต ศรีประจวบวงศ์, ดร.อดิสร เตือนตรานนท์, Supa Hannongbua, Prof. Dr. I-MING TANG, "Molecularly imprinted electrochemical sensor based on gold nanoparticle modified screen-printed carbon electrode for selective nitrofurantoin detection", 26th Anniversary World Congress on Biosensors (Biosensors 2016) (2016)</li> <li>- Decha Dechtrirat, bunyarithi sookcharoenpinyo, Pongthep Prajongtat, นายชาคริต ศรีประจวบวงศ์, ดร.อดิสร เตือนตรานนท์, Supa Hannongbua, "ELECTROCHEMICAL MIP SENSORS BASED ON GRAPHENE-MODIFIED ELECTRODES FOR SELECTIVE BETA-AGONIST DETECTION", The 9th International Conference on Molecular Imprinting (2016)</li> <li>- Autchara Namkhaw, Nuttapon Wiriyatanakorn, รศ.ดร. พรพรรณ พิงโพธิ์, Supa Hannongbua, Patchreenart Saparpakorn, "Binding investigation of 8-hydroxyquinoline derivative as Dengue virus NS3 protease inhibitor using molecular modeling", Pure and Applied Chemistry International Conference 2016 (PACCON2016) (2016)</li> <li>- Desell Suanburi, Supa Hannongbua, "COMMUNITY GROUNDWATER SUPPLY ACHIEVE AS SUSTAINABLE RELIEF DROUGHT CRISIS WITH ACCOMPLISHED RESISTIVITY SCANNING TECHNIQUE IN FOUR DISTRICTS OF KANCHANABURI PROVINCE", The 42 nd Congress on Science and Technology of Thailand (STT 42) "Knowledge of the Land towards Innovation for Sustainable Future" (2016)</li> <li>- Chayanin Hanwarinroj, Pharit Kamsri, Pijitra Meewong, Naruedon Phusi, Auradee Punkvang, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, Pornpan Pungpo, "Structure based inhibitor design of 4-aminoquinolone piperidine amides for DprE1 inhibitors as anti-tuberculosis agents", Pure and Applied Chemistry International Conference 2016 (PACCON2016) (2016)</li> <li>- Suwannee Sriyab, Peter Wolschann, Supa Hannongbua, Songwut Suramitr, "DFT and TD-DFT study on intermolecular charge transfer between 4-(p-tolyethynyl)pyrene and nitroaromatic explosives", The 2016 Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON 2016) (2016)</li> <li>- Jitpinan Teanwarawat, Supa Hannongbua, Songwut Suramitr, "Electrochemical properties of Rhodamine B derivative: Experimental and DFT based approach", The Pure and Applied Chemistry International Conference 2017 (PACCON 2017) (2017)</li> <li>- Aunyanee Plucksacholatan, Supa Hannongbua, Songwut Suramitr, "A theoretical investigation on electronic transition of PhOLEDs relevant tetradentate Pt(II) complexes with <math>\pi</math>-donor and <math>\pi</math>-acceptor carrier ligands", The Pure and Applied Chemistry International Conference 2017 (PACCON 2017) (2017)</li> <li>- Supawadee Sainimnuan, Waraborn Boonyarat, Autchara Namkhaw, Supa Hannongbua, Patchreenart Saparpakorn, "Binding Mode Study of Estradiol in Complex with Estrogen Receptor Beta by Computational Methods", Pure and Applied Chemistry International Conference 2017 (PACCON2017) (2017)</li> <li>- Kanokorn Sudto, Chompoonuch Tanchaoren, Darinee Phromyothin, Patchreenart Saparpakorn, Yan Hua Qin, Srunya Vajrodaya, Supanna Techasakul, Hui-Ming Ge, Ren Xiang Tan, Supa Hannongbua, "Target identification of hopeahainol C for antibacterial activity", Pure and Applied Chemistry International Conference 2017 (PACCON2017) (2017)</li> <li>- Malinee Promkatkaew, Supa Hannongbua, Matthew Paul Gleeson, "Quantum Chemical Calculations to Predict the LLNA Skin Sensitization Potential for the Azalactones of the Acyl Chemical Domain", Pure and Applied Chemistry International Conference 2017 (PACCON 2017) (2017)</li> <li>- Nichakan Miengmarn, Supa Hannongbua, Songwut Suramitr, "Theoretical study of twisted intramolecular charge transfer and intermolecular double proton transfer in the excited state of N,N'-bis(salicylidene)-p-phenylene- diamine Schiff base", Pure and Applied Chemistry International Conference 2018 (PACCON 2018) (2018)</li> <li>- Amonchat Koonwong, Suwannee Sriyab, Supa Hannongbua, Songwut Suramitr, "Substituent effect on photophysical properties of salicylidene Schiff base and its derivatives as colorimetric dyes: a TD-DFT study", The 2018 Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON 2018) (2018)</li> <li>- นายบรรพต อินทรทัศน์, นางสาวอัจฉรา น้ำขาว, นางสาวสุภาวดี ไทรนันทกุล, Supa Hannongbua, Patchreenart Saparpakorn, "Studies of sildenafil and phosphodiesterase type 5 binding properties by using computational methods", Pure and Applied Chemistry International Conference 2018 (PACCON2018) (2018)</li> <li>- นายชาติวินิต สุขสำราญ, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, "Computational Study of Binding Mode of Depsidones in Vascular Endothelial Growth Factor Receptor-2", The 22nd International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (2018)</li> <li>- นายธีรวัฒน์ จันทร์รัตน์, นายดนูเดช เก้ารัตน์, Patchreenart Saparpakorn, Supa Hannongbua, "3 D-QSAR studies on HIV-1 protease inhibitors using tertiary amines as P2-ligands from Darunavir analogue", Pure and Applied Chemistry International Conference 2019 (2019)</li> </ul>	
<b>รางวัลประกาศเกียรติคุณ/เชิดชูเกียรติการวิจัย</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>- รางวัลนักวิทยาศาสตร์รุ่นใหม่ เคมี ประจำปี 2540 จาก มูลนิธิส่งเสริมวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยีในพระบรมราชูปถัมภ์</li> <li>- นักวิจัยที่มีผลงานวิจัยตีพิมพ์ในวารสารมาตรฐานสากลสูงสุด ปี 2550 สาขาวิทยาศาสตร์กายภาพ ประจำปี 2551 จาก สถาบันวิจัยและพัฒนา มก.</li> </ul>	



## ข้อมูลอาจารย์มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

<b>ชื่อ</b> นางสาว หารทองบัว <b>ตำแหน่งทางวิชาการ</b> ศาสตราจารย์	<b>สังกัด</b> ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์
<ul style="list-style-type: none"> <li>- โสเกียรติคุณ เมธีวิจัยอาวุโส สกว. เคมีคอมพิวเตอร์ ประจำปี 2551 จาก สำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย</li> <li>- รางวัลผลงานวิจัยตีพิมพ์ระดับนานาชาติ ปี 2551 ประเภทบุคคล-ผู้สร้างสรรค์ผลงานวิจัยตีพิมพ์ กลุ่ม 1 จำนวน 1 ผลงาน ประจำปี 2552 จาก มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์</li> <li>- รางวัลประเภทบุคคล-นักวิจัยผู้สร้างสรรค์ผลงานวิจัยตีพิมพ์ระดับนานาชาติ ปี 2557 ประจำปี 2559 จาก มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์</li> </ul>	
<b>รางวัลผลงานวิจัย/สิ่งประดิษฐ์</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>- รางวัลผลงานวิจัยตีพิมพ์ระดับนานาชาติ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ ปี 2552(รางวัลประเภทบุคคล-ผู้สร้างสรรค์ผลงานวิจัยตีพิมพ์ กลุ่ม 1) สาขาวิทยาศาสตร์ ประจำปี 2553 เรื่อง "3D Pharmacophore Mapping Using 4D QSAR Analysis for the Cytotoxicity of Lamellarins Against Human Hormone-Dependent T47D Breast Cancer Cells" จาก มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์</li> <li>- รางวัลผลงานวิจัยตีพิมพ์ระดับนานาชาติ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ ปี 2552(รางวัลประเภทบุคคล-ผู้สร้างสรรค์ผลงานวิจัยตีพิมพ์ กลุ่ม 1) สาขาวิทยาศาสตร์ ประจำปี 2553 เรื่อง "Absorption and emission spectra of ultraviolet B blocking methoxy substituted cinnamates investigated using the symmetry-adapted cluster configuration interaction method" จาก มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์</li> <li>- รางวัลผลงานวิจัยตีพิมพ์ระดับนานาชาติ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ ปี 2552(รางวัลประเภทบุคคล-ผู้สร้างสรรค์ผลงานวิจัยตีพิมพ์ กลุ่ม 1) สาขาวิทยาศาสตร์ ประจำปี 2553 เรื่อง "Bridge water mediates nevirapine binding to wild type and Y181C HIV-1 reverse transcriptase-Evidence from molecular dynamics simulations and MM-PBSA calculations" จาก มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์</li> <li>- รางวัลผลงานวิจัยตีพิมพ์ระดับนานาชาติ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ ปี 2552(รางวัลประเภทบุคคล-ผู้สร้างสรรค์ผลงานวิจัยตีพิมพ์ กลุ่ม 1) สาขาวิทยาศาสตร์ ประจำปี 2553 เรื่อง "Dipyridodiazepinone derivatives; synthesis and anti HIV-1 activity" จาก มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์</li> <li>- รางวัลผลงานวิจัยตีพิมพ์ระดับนานาชาติ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ ปี 2552(รางวัลประเภทบุคคล-ผู้สร้างสรรค์ผลงานวิจัยตีพิมพ์ กลุ่ม 1) สาขาวิทยาศาสตร์ ประจำปี 2553 เรื่อง "Interactions between cycloguanil derivatives and wild type and resistance-associated mutant Plasmodium falciparum dihydrofolate reductases" จาก มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์</li> <li>- รางวัลผลงานวิจัยตีพิมพ์ระดับนานาชาติ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ ปี 2552(รางวัลประเภทบุคคล-ผู้สร้างสรรค์ผลงานวิจัยตีพิมพ์ กลุ่ม 1) สาขาวิทยาศาสตร์ ประจำปี 2553 เรื่อง "Particular interaction between pyrimethamine derivatives and quadruple mutant type dihydrofolate reductase of Plasmodium falciparum: CoMFA and quantum chemical calculations studies." จาก มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์</li> <li>- รางวัลผลงานวิจัยตีพิมพ์ระดับนานาชาติ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ ปี 2552(รางวัลประเภทบุคคล-ผู้สร้างสรรค์ผลงานวิจัยตีพิมพ์ กลุ่ม 1) สาขาวิทยาศาสตร์ ประจำปี 2553 เรื่อง "Roles of key residues specific to cyclooxygenase II: an ONIOM study" จาก มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์</li> </ul>	
<b>รางวัลผลงานนำเสนอในการประชุมวิชาการ</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>- The Out Standing Poster Persentation Award ประจำปี 2552 เรื่อง "Development of logP Experiments on Synthetic Disperse Azo Dyes, Based on Spectroscopic Techniques" จาก KSEH International Conference 2009</li> <li>- THE OUTSTANDING POSTER PRESENTATION AWARD Physical Chemistry ประจำปี 2552 เรื่อง "Photophysical Properties of MethoxySubstituted 2-Ethylhexyl-Cinnamates: A Quantum Chemical Calculations" จาก Chemical Society of Thailand</li> </ul>	

ผลงานวิจัยนี้เป็นรายการรวบรวมระหว่างปี 1 มกราคม 2540 - 1 เมษายน 2563