

แบบฟอร์มแจ้งความประสงค์การใช้งบประมาณสำหรับการพัฒนาบุคลากรคณะวิทยาศาสตร์

ประจำปีงบประมาณ พ.ศ.2558

ข้าพเจ้า นางสาวฉวีรัตน์ รัตนเดชาดิษฐ์ ตำแหน่ง ผู้ช่วยศาสตราจารย์สังกัด คณะวิทยาศาสตร์
ได้ขออนุญาตเข้าร่วม การประชุมวิชาการแห่งชาติ PACCON 2015 และนิทรรศการผลงานวิจัย
ตามหนังสือขออนุญาต ศธ.0523.4. 3 / 7 24 ลงวันที่ 24 พ.ย. 57 โดยข้าพเจ้ามีความประสงค์จะขอ
ใช้งบประมาณพัฒนาบุคลากรของคณะวิทยาศาสตร์ ใน

- ☐ กรณีที่ 1 ไม่มีเอกสารใด ๆ เสนอคณะฯ (คนละไม่เกิน 6,000 บาท)
- ☐ กรณีที่ 2 มีเอกสารรายงานสรุปเนื้อหา (คนละไม่เกิน 8,000 บาท) โดยจัดส่งเอกสาร
รายงานสรุปเนื้อหาและการนำไปใช้ประโยชน์ อย่างน้อย 1 หน้ากระดาษ A4
- ☒ กรณีที่ 3 เข้าร่วมนำเสนอผลงานวิชาการฯ
- คนละไม่เกิน 15,000 บาท (สำหรับสายวิชาการ)
 - คนละไม่เกิน 10,000 บาท (สำหรับสายสนับสนุนวิชาการ)

โดยจะจัดส่งหนังสือตอบรับการเข้าร่วมนำเสนอผลงานฯ และเอกสารดังต่อไปนี้

1. บทคัดย่อ หรือสำเนาโปสเตอร์(ย่อขนาด A4) หรือบทความฯ ฉบับเต็ม
2. รายงานสรุปเนื้อหาและการนำไปใช้ประโยชน์ อย่างน้อย 1 หน้ากระดาษ A4
3. เอกสารอื่น ๆ (โปรดระบุ).....

- ☐ กรณีที่ 4 เข้าร่วมแข่งปฏิบัติการฯ
- คนละไม่เกิน 15,000 บาท (สำหรับสายวิชาการ)
 - คนละไม่เกิน 10,000 บาท (สำหรับสายสนับสนุนวิชาการ)

โดยจะจัดส่งหนังสือตอบรับการเข้าร่วมอบรมแข่งปฏิบัติการฯ และเอกสารดังต่อไปนี้

1. สำเนาใบรับรอง หรือหนังสือรับรอง หรือใบประกาศนียบัตร หรือวุฒิบัตร จากการเข้าร่วมฯ
2. รายงานสรุปเนื้อหาและการนำไปใช้ประโยชน์ อย่างน้อย 1 หน้ากระดาษ A4
3. เอกสารอื่น ๆ (โปรดระบุ).....

ในปีงบประมาณ พ.ศ.2558 (1 ต.ค.57 -30 ก.ย.58) ข้าพเจ้าได้ใช้งบประมาณบุคลากรฯ ไปแล้ว จำนวนทั้งสิ้น..... ครั้ง ดังต่อไปนี้

-ครั้งที่ เลือกใช้กรณีที่..... ใช้งบประมาณไปแล้วเป็นจำนวนเงินทั้งสิ้น.....บาท

-ครั้งที่ เลือกใช้กรณีที่..... ใช้งบประมาณไปแล้วเป็นจำนวนเงินทั้งสิ้น.....บาท

-ครั้งที่ เลือกใช้กรณีที่..... ใช้งบประมาณไปแล้วเป็นจำนวนเงินทั้งสิ้น.....บาท

(หากมีจำนวนครั้งเกินกว่านี้ ให้ทำรายละเอียดแนบท้ายเพิ่มเติม)

นางสาวฉวีรัตน์ รัตนเดชาดิษฐ์ ผู้ขออนุญาต
24 / พ.ย. / 2557

(นายศักดิ์ชัย เสือศรีเพ็ญกุล) ประธานหลักสูตร/เลขานุการคณะ/หัวหน้างาน
24 / พ.ย. / 57

หมายเหตุ : 1. งบประมาณที่ใช้สำหรับการพัฒนาบุคลากร หมายถึงรวมถึงค่าใช้จ่ายทุกประเภทที่ใช้ในการเข้าร่วมการอบรม/สัมมนา/ประชุม เช่น
ค่าลงทะเบียน ค่าใช้จ่ายในการเดินทาง และอื่น ๆ ที่เกี่ยวข้อง

2. การใช้งบประมาณพัฒนาบุคลากรในที่คณะวิทยาศาสตร์จัดสรร ให้ถือปฏิบัติตามเงื่อนไขที่ได้กำหนดไว้ในแต่ละกรณี

(ฉบับปรับปรุงใหม่ตามมติที่ประชุมคณะกรรมการประจำคณะฯ ครั้งที่ 5/2556 เมื่อวันที่ 10 พฤษภาคม 2556)

รายงานสรุปเนื้อหาและการนำไปใช้ประโยชน์จากการเข้าร่วมประชุมวิชาการนานาชาติ PACCON 2015

ข้าพเจ้า นางสาววัลรัตน์ รัตนเดชนาคินทร์ ตำแหน่ง ผู้ช่วยศาสตราจารย์ สังกัด หลักสูตร วิทยาศาสตร์บัณฑิต สาขาวิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ ขอนำเสนอรายงานสรุปเนื้อหาและการนำไปใช้ประโยชน์จากการเข้าร่วมการประชุมวิชาการระดับนานาชาติ Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON 2015) ภายใต้หัวข้อเรื่อง “Innovative Chemistry for Sustainability of the AEC and Beyond” จัดประชุมโดยคณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีพระจอมเกล้าธนบุรี ร่วมกับสมาคมเคมีแห่งประเทศไทยในพระอุปถัมภ์ของ ศาสตราจารย์ ดร.สมเด็จพระเจ้าลูกเธอ เจ้าฟ้าจุฬาภรณวลัยลักษณ์ อัครราชกุมารี และนำเสนอผลงานทางวิชาการในรูปแบบโปสเตอร์ ระหว่างวันที่ 21-23 มกราคม 2558 ณ โรงแรม อมารี วอเตอร์เกต กรุงเทพฯ ตามหนังสือขออนุมัติ ที่ ศธ 0523.4.3/734 ลงวันที่ 26 พฤศจิกายน 2557

ข้าพเจ้าได้ใช้งบประมาณการพัฒนาศักยภาพบุคลากรกรณีที่ 2 จึงขอสรุปเนื้อหาและการนำไปใช้ประโยชน์จากการเข้าร่วมประชุม ดังต่อไปนี้

1. การเข้าร่วมประชุมวิชาการ PACCON 2015 มีหัวข้อที่น่าสนใจเกี่ยวกับสารอินทรีย์ การสังเคราะห์สารอินทรีย์ ความรู้ที่ได้รับสามารถนำมาพัฒนางานวิจัยด้านเคมีอินทรีย์ เคมีอินทรีย์ของสารธรรมชาติ เคมีอินทรีย์เชิงคำนวณ ใช้ประโยชน์ในการเรียนการสอน วิชา เคมีอินทรีย์ เคมีอินทรีย์ของสารธรรมชาติ ต่อไป

Plenary Lecture โดย Prof. Dr. Yongyuth Yuthavong บรรยายในหัวข้อเรื่อง “Chemistry for Society: Thailand and ASEAN”

Plenary Lecture โดย Prof. Dr. Naoto Chatani บรรยายในหัวข้อเรื่อง “A New Stage of Catalytic Functionalization of C-H Bonds”

Plenary Lecture โดย Prof. Dr. Supot Hannongbua บรรยายในหัวข้อเรื่อง “Computational Studies of Structure, Dynamics and Reactivity in Biological and Material Systems”

2. การนำผลงานวิจัยไปเผยแพร่ในระดับนานาชาติ ถือได้ว่าเป็นส่วนหนึ่งที่สำคัญสำหรับกระบวนการวิจัย และนำความรู้ที่ได้จากการวิจัยไปสอนให้ความรู้แก่นักศึกษาในห้องเรียน
3. ผลงานวิจัยที่ข้าพเจ้าได้นำไปเสนอในการประชุมวิชาการระดับนานาชาติ PACCON 2015 นั้นเป็นงานที่ทำต่อจากผลงานวิจัยที่ได้นำเสนอในการประชุมวิชาการนานาชาติ PACCON 2014
4. ข้าพเจ้าได้นำไปเสนอผลงานวิจัยในงาน PACCON 2015 ในรูปแบบโปสเตอร์ (Poster Presentation) ด้วย Presentation Code : PHY-PO-007 เรื่อง “The Effect of Reversing the Location of Donor and Acceptor Groups on the Aromaticity and Electronic Structure of a Series of Substituted Poly-2,7-[2]calicenes” ในวันที่ 21 มกราคม 2558 เวลา 12.00-18.00 น. งานวิจัยฯ

เป็นองค์ความรู้ใหม่เกี่ยวกับการศึกษาผลของหมู่แทนที่ 2 ชนิด คือ หมู่ให้อิเล็กตรอน และหมู่รับอิเล็กตรอน ที่มีต่อความเป็นอะโรมาติกของสาร Poly-2,7-[2]calicenes

5. ข้าพเจ้าและผู้เข้าร่วมประชุมได้นำเสนอความก้าวหน้าของงานวิจัย มีการแลกเปลี่ยนความรู้ และประสบการณ์ซึ่งกันและกัน ช่วยให้เพิ่มประสิทธิภาพงานวิจัยต่อไป
6. จากการเข้าร่วมประชุมจะทำให้เกิดเครือข่ายความร่วมมือด้านการวิจัยในระดับนานาชาติระหว่างมหาวิทยาลัยและสถาบันต่างๆ ต่อไป

ประโยชน์ที่ได้รับต่อตนเอง

1. การเข้าร่วมประชุมวิชาการนานาชาติ PACCON 2015 ในครั้งนี้เป็นการพัฒนาตนเองของข้าพเจ้าทางวิชาการ
2. การประชุมวิชาการระดับนานาชาติ PACCON ได้จัดขึ้นทุกปี การเข้าร่วมประชุมวิชาการระดับนานาชาติ PACCON 2015 และการนำเสนอผลงานทางวิชาการของข้าพเจ้า เป็นการกระตุ้นให้ดิฉันทำงานวิจัยอย่างต่อเนื่อง
3. การเข้าร่วมประชุมวิชาการระดับนานาชาติ PACCON 2015 และการนำเสนอผลงานทางวิชาการ เป็นการเพิ่มประสบการณ์และศักยภาพ แนวคิดและวิสัยทัศน์ของการเป็นนักวิชาการที่ดี
4. ทำให้ข้าพเจ้าได้มีการแลกเปลี่ยนความรู้ ความคิดเห็น และประสบการณ์กับผู้เข้าร่วมประชุม สามารถนำความรู้ที่ได้แลกเปลี่ยนกันมาเพิ่มประสิทธิภาพงานวิจัยของดิฉันต่อไป

ประโยชน์ที่ได้รับต่อหน่วยงาน

1. การเข้าร่วมประชุมวิชาการระดับนานาชาติ PACCON 2015 และการนำเสนอผลงานทางวิชาการของข้าพเจ้า เป็นการสร้างชื่อเสียงให้หน่วยงาน และทำให้หน่วยงานต่างๆ ที่เข้าร่วมงานประชุมได้รู้จักบุคลากรจากคณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยแม่โจ้
2. จากการเข้าร่วมประชุมจะทำให้เกิดเครือข่ายความร่วมมือด้านการวิจัยในระดับนานาชาติระหว่างมหาวิทยาลัยและสถาบันต่างๆ ต่อไป
3. การเข้าร่วมประชุมวิชาการระดับนานาชาติ PACCON 2015 และการนำเสนอผลงานทางวิชาการของข้าพเจ้า ในรูปแบบโปสเตอร์ เป็นผลงานที่ใช้ประกอบการประกันคุณภาพทางวิชาการของ คณะวิทยาศาสตร์ และมหาวิทยาลัยแม่โจ้

ลงชื่อ.....

(นางสาววัลรัตน์ รัตนเดชานาคินทร์)

ตำแหน่ง ผู้ช่วยศาสตราจารย์

...../...../.....

ความคิดเห็นของประธานคณะกรรมการประจำหลักสูตร

.....
.....
.....

ลงชื่อ.....

(นายศักดิ์ชัย เสถียรพืระกุล)

ตำแหน่ง ประธานคณะกรรมการประจำหลักสูตรวิทยาศาสตร์บัณฑิต

สาขาวิชาเคมี

๑ / ๗ / ๕๕

ความคิดเห็นของคณบดี

.....
.....
.....

ลงชื่อ.....

(นางศิรินทร์ญา ภักดี)

ตำแหน่ง คณบดีคณะวิทยาศาสตร์

...../...../.....



PACCON
PURE AND APPLIED CHEMISTRY
INTERNATIONAL CONFERENCE 2015



*Certificate of Appreciation for Your Contribution
as a Presenter at*

*Pure and Applied Chemistry International Conference 2015
“Innovative Chemistry for Sustainability of the AEC and Beyond”*

21st – 23rd January 2015

Amari Watergate Hotel, Bangkok, Thailand

Presented to

Thawalrat Ratanadachanakin

Sinul

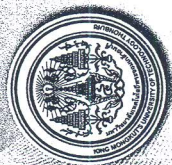
*Associate Professor Dr. Surin Laosooksatit
President of Chemical Society of Thailand*

Sakarin Bhunthun

*Associate Professor Dr. Sakarin Bhunthun
President of King Mongkut's University of Technology Thonburi*

PACCON 2015

Pure and Applied Chemistry
International Conference 2015



*"Innovative Chemistry for Sustainability
of the AEC and Beyond"*

21st - 23rd January 2015

Amari Watgate Hotel
Bangkok, Thailand



Organized by The Chemical Society of Thailand
under the Patronage of Her Royal Highness Princess Chulabhorn Mahidol

Coorganized by Department of Chemistry, Faculty of Science
King Mongkut's University of Technology Thonburi



INFORMATION FOR AUTHORS AND PRESENTERS

SESSION CODES

PL	Plenary Lecture
INV	Invited Speaker
ANC	Analytical Chemistry
CHE	Chemical Education
ENV	Environmental Chemistry and Renewable Energy
FAC	Food and Agricultural Chemistry
ICI	Industrial Chemistry and Innovation
INC	Inorganic Chemistry
MSN	Materials Science and Nanotechnology
NMC	Natural Products, Biological Chemistry and Medicinal Chemistry
ORC	Organic and Green Chemistry
PHY	Physical and Theoretical Chemistry
PPC	Polymer and Petroleum Chemistry

PRESENTATION CODE

Presentation codes are assigned for each presentation in form of

AAA-OR-000 for Oral presentation, and

AAA-PO-000 for Poster presentation

Where AAA is the abbreviation for conference session and 000 is identification number for each article (starting from 001, 002, 003, ...)

ORAL PRESENTATION

Oral presentation rooms will be equipped with the following items:

- A computer running WINDOWS 7 operating system, with MS office 2007/2010, Acrobat Reader 10.0
- A LCD video projector

All presenters can upload their presentation files to the computer in the oral presentation room located on the 3rd, 7th, and 8th floor from 08.15 a.m. onwards. A technician will be available to assist you. The time slot for 30 minutes including discussion is allocated for each invited speaker, and 15 minutes including discussion is for each oral presentation (12 minutes for presentation and 3 minutes for discussion).

POSTER PRESENTATION

There are two poster presentation sessions for PACCON2015. The poster size is 120 centimeters (Height) by 90 centimeter (Width). Your poster code will be located on the poster board in the Watergate Ballroom on the 6th floor. Mounting materials will be provided in the poster presentation session area. Due to a large number of poster contributions, the presenters are kindly requested to mount up and remove the posters strictly following the appointed schedule.



Poster Presentation Session/Session Code	Time			
	Installation and Poster Registration	Display	Discussion	Removal
Poster presentation session I Wednesday, January 21, 2015 (Watergate Ballroom Section A)	ANC-1 MSN-1 CHE FAC NMC PHY	12.00-16.00	12.00-18.00	17.00-18.00
Poster presentation session II Thursday, January 22, 2015 (Watergate Ballroom Section A)	ANC-2 MSN-2 ENV ICI INC ORC PPC	12.00-16.00	12.00-18.00	17.00-18.00
				Before 18.30

Presentation Code	Title	Presenter	Presentation Date	Paper ID
ORC-PO-028	Synthesis of Pyrrolidiny Peptide Nucleic Acid Carrying Novel Hydrophilic β -Amino Acid Spacer	Haruthai Pansuwan	22-Jan-15	222
ORC-PO-029	Electron Donating Abilities of Certain Polyaromatic Amines	Peera Acharasatian	22-Jan-15	57
ORC-PO-030	Convenient Method for Conversion of 2,4- Dinitrophenyl hydrazones to the Carbonyl Compounds by $\text{Bi}(\text{NO}_3)_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ and CuCl_2 under Ultrasonic Conditions	Abbas Amini Manesh	22-Jan-15	651
PHY: Physical and Theoretical Chemistry				
PHY-PO-001	An application of the reaction class transition state theory (RC-TST): Hydrogen abstraction of alkanes by nitrate radical	Natthaporn Manojai	21-Jan-15	50
PHY-PO-002	The Removal of Pb(II) by River Watari Sediment, Kano, Nigeria:A Thermodynamic and Kinetic Approach	Ayuba Abdullahi Muhammad	21-Jan-15	79
PHY-PO-003	Theoretical study on 3d transition metal-doped ovalene: structural and electronic properties	Niwat Promthong	21-Jan-15	92
PHY-PO-004	DFT and TD-DFT Investigations of $[\text{M}(\text{dcbpyH})(\text{qsalX})\text{CN}]$ ($\text{M} = \text{Zn}, \text{Ru}$ and $\text{X} = \text{H}, \text{Br}, \text{OMe}$) Complexes for DSSCs Applications: Effect of Metal and Ligand Substitute Group	Jitnapa Sirirak	21-Jan-15	103
PHY-PO-005	Spectral Study of Aggregation behavior of Anionic Remazol Brilliant Violet - 5R (RBV-5R) Dye in different Cationic Ligand Solutions	Ashraf El-Hashani	21-Jan-15	110
PHY-PO-006	Studies of Tween 20 and Styrene-(Ethylene Butylene)-Styrene Interactions Using Fluorescence Polarity Indicator and Steady-State Anisotropy	Wachirapong Phongphew	21-Jan-15	120
PHY-PO-007	The Effect of Reversing the Location of Donor and Acceptor Groups on the Aromaticity and Electronic Structure of a Series of Substituted Poly-2,7-[2]calicenes	Thawalrat Ratanadachanakin	21-Jan-15	134
PHY-PO-008	Specific interactions between diarylpyrimidine derivatives and HIV-1 RT: Molecular docking and ab initio FMO calculations	Ryushi Kadoya	21-Jan-15	152
PHY-PO-009	Specific interactions between acetyl- and butyryl-cholinesterase and their inhibitors: ab initio molecular simulations	Tomoya Suzuki	21-Jan-15	153

Presentation Code	Title	Presenter	Presentation Date	Paper ID
PHY-PO-010	Epoxidation of Styrene and Cyclohexene by TBHP oxidant: A Reaction Mechanism Investigation using Density Functional Theory	Rangsiman Ketkaew	21-Jan-15	188
PHY-PO-011	Specific Interactions between M. tuberculosis CYP130 and Novel Inhibitors: Ab Initio Molecular Simulations	Noriyuki Kurita	21-Jan-15	200
PHY-PO-012	Analysis of Cyclic Voltammogram of Hydrogen Adsorption and Oxide formation at Pt/ H_2SO_4 Interface	Poemyot Wongbua-ngam	21-Jan-15	216
PHY-PO-013	Characterization of Turbulent Waves in the 1, 4-Cyclohexanedione Belousov-Zhabotinsky by Using Space-Time Plots	Wannabhom Motina	21-Jan-15	235
PHY-PO-014	Kinetics Adsorption of Methylene Blue using Pineapple Leaf Fiber	Panukorn Sombut	21-Jan-15	240
PHY-PO-015	Ligand Effects in the Proton Responsive $\text{Cp}^*\text{Ir(III)}$ Complexes for Hydrogenation of CO_2 : A DFT Study	Tanakorn Wonglakhon	21-Jan-15	242
PHY-PO-016	Synthesis and Characterization of Ruthenium Poly(vinyl pyridine) as a Metallopolymer for the Belousov-Zhabotinsky Reaction	Suwalak Thongsut	21-Jan-15	243
PHY-PO-017	Study of the "Hypercoordination" properties of hydroxide (OH^-) in water by comparing of HF/MM and B3LYP/MM MD simulations	Pathumwadee Yotmanee	21-Jan-15	249
PHY-PO-018	Temporal Oscillations of the 1,4-Cyclohexanedione Belousov-Zhabotinsky Reaction with $\text{Ru}(\text{bpy})_3\text{SO}_4$ as a Catalyst	Suparintorn Anupong	21-Jan-15	252
PHY-PO-019	Effect of the Secondary Catalyst on the Temporal Oscillations in the Ruthenium-Catalyzed Belousov-Zhabotinsky Reaction	Titikan Somboon	21-Jan-15	255
PHY-PO-020	Characterization of Meandering Spiral Waves in the Belousov-Zhabotinsky Reaction	On-Uma Kheowan	21-Jan-15	279
PHY-PO-021	The prediction of interaction between HIV-1 Integrase and Dolutegravir revealed by Molecular modeling technique	Sawarin Pansuwanwong	21-Jan-15	283
PHY-PO-022	Study of Mercury Adsorption on Boron Doped Graphene Surface Decorated by Transition Metals Using Computer Simulation	Yuttna Wongnongwa	21-Jan-15	352
PHY-PO-023	Crystallographic, Spectroscopic and DFT/TD-DFT Investigations of Halo Substituted N-(2'-pyridylmethylene)aniline Ligands	Songwuit Chanthee	21-Jan-15	385

**PHY
PO
006** Studies of Tween 20 and Styrene-(Ethylene Butylene)-Styrene Interactions
using Fluorescence Polarity Indicator and Steady-state Anisotropy

Wachirapong Phongphaw¹, Sunan Saikrasun² and Opas Tojira^{1*}

¹Department of Chemistry, Faculty of Science and Technology, Thammasat University,
Pathum Thani, 12120, Thailand

²Department of Chemistry and Center of Excellence for Innovation in Chemistry,
Mahasarakham University, Mahasarakham 44150, Thailand
*E-mail: opas_tojira@yahoo.com

- Two different fluorescence-based techniques: pyrene polarity indicator and pyrene steady-state anisotropy have been used to study the surfactant-polymer interactions of polyoxyethylene (20) sorbitan monolaurate (Tween 20) and styrene-(ethylene butylene)-styrene (SEBS) in toluene.
- The fluorescence polarity data from the system describe changes in dimension and behaviour of tween 20 when the concentration increases. The fluorescence anisotropy shows increase in the system viscosity when the concentration of SEBS was increased.
- Fluctuation in the fluorescence data which was observed in the mixture of Tween 20 and SEBS in toluene indicates the complication of the intermolecular interactions within the system.

Keywords Styrene-(ethylene butylene)-styrene; Tween 20; Fluorescence anisotropy; Fluorescence polarity

**PHY
PO
007** The Effect of Reversing the Location of Donor and Acceptor Groups on
the Aromaticity and Electronic Structure of a Series of Substituted
Poly-2,7-[2]calicenes

Thawarat Ratanadachanakin^{1*}, Willard E. Collier^{2*}

¹Faculty of Science, Maejo University, Sansai, Chiang Mai, 50290, Thailand

²Department of Chemistry, Tuskegee University, Tuskegee, AL 36088, USA
*E-mail: wecollier@mytu.tuskegee.edu; thawarat@mjtu.ac.th

- We used -NH₂ (push) and -BH₂, -C≡N, -NO₂ and -F (pull) groups to attenuate the polarity of a series of poly-2,7-[2]calicenes.
- "Reversed" poly-2,7-[2]calicene derivatives range from 0.8D to 10.5D compared to unsubstituted poly-2,7-[2]-calicene at 13.0D.
- Combined with earlier work, we have demonstrated that poly-2,7-[2]calicene derivatives can be tuned from 0.8D to 31.5D.

Keywords Push-pull effect; Calicene; Density functional theory; Nucleus independent chemical shift; Aromaticity

**PHY
PO
008** Specific Interaction Between Diarylpyrimidine Derivatives and
HIV-1 RT: Molecular Docking and *Ab Initio* FMO Calculations

Ryushi Kadoya¹, Taisuro Mizushima¹, Tomoya Suzuki¹, Pharit Kamrui²,
Pijitra Meewong², Pompan Pungpo² and Noriyuki Kurita^{1*}

¹Department of Computer Science and Engineering, Toyohashi University of Technology,
Tempaku-cho, Toyohashi, Aichi, 441-8580, Japan

²Department of Chemistry, Faculty of Science, Ubon Ratchathani University, 85 Stho Ilmark Rd.,
Warinchamrap, Ubonratchathani 34190, Thailand.
*E-mail: kurita@cs.tut.ac.jp



Using *ab initio* molecular simulations, we studied the specific interactions between HIV-1 RT and some diarylpyrimidines at atomic and electronic levels. This figure shows the structure of the RT + a novel ligand complex obtained by our simulations. Our *ab initio* MO calculations also elucidated that this ligand binds strongly to RT, indicating that this ligand can be a potent inhibitor to RT.

Keywords Diarylpyrimidines; TMC derivatives; Fragment molecular orbital; Binding energy; Specific interaction; Inhibitor to RT

**PHY
PO
009** Specific Interactions between Acetyl- and Butyryl-Cholinesterase
and their Inhibitors: *Ab Initio* Molecular Simulations

Tomoya Suzuki¹, Takeru Murakawa¹, Ryushi Kadoya¹, Mahmud Tareq Hassan Khan²
and Noriyuki Kurita^{1*}

¹Department of Computer Science and Engineering, Toyohashi University of Technology,
Tempaku-cho, Toyohashi, Aichi, 441-8580, Japan

²Holmbøvegen 3B, 9010 Tromsø, Norway
*E-mail: kurita@cs.tut.ac.jp



We investigated the specific interactions between acetyl- and butyryl-cholinesterase and novel ligands, using molecular simulations based on classical molecular mechanics and *ab initio* fragment molecular orbital methods. Based on the results simulated, we elucidated which part of the ligands contributes to the binding to the cholinesterases and proposed novel potent ligands, which have strong binding affinity to the both cholinesterases. Figure shows the optimized structure of the complex of butyryl-cholinesterase + ligand.

Keywords Protein-ligand docking; Molecular mechanics; Molecular orbital calculation; Inhibitor; Acetylcholine

The Effect of Reversing the Location of Donor and Acceptor Groups on the Aromaticity and Electronic Structure of a Series of Substituted Poly-2,7-[2]calicenes

Thawalrat Ratanadachanakin^{1*}, Willard E. Collier^{2*}

¹Faculty of Science, Maejo University, Sansai, Chiang Mai, 50290, Thailand

²Department of Chemistry, Tuskegee University, Tuskegee, AL 36088, USA

*E-mail: wcollier@mytu.tuskegee.edu; thawalrat@mju.ac.th

Earlier research had reported the push-pull effect on the aromaticity and electronic structure of a series of substituted poly-2,7-[2]calicenes using density functional theory (DFT). Since poly-2,7-[2]calicene is asymmetrical, in that study we used -NH_2 as an electron donor (push) on the terminal three-membered ring and -BH_2 , $\text{-C}\equiv\text{N}$, -NO_2 , and -F as electron acceptors (pull) on the terminal five-membered ring to enhance the natural polarity of the molecule. The dipole moments of the nine derivatives ranged from 16.0 D to 31.5 D compared to 13.0 D for unsubstituted poly-2,7-[2]calicene. In this study, we used -NH_2 as an electron donor (push) on the terminal five-membered ring and -BH_2 , $\text{-C}\equiv\text{N}$, -NO_2 , and -F as electron acceptors (pull) on the terminal three-membered ring in order to attenuate the natural polarity of the series of substituted poly-2,7-[2]calicenes. The dipole moments of the “reversed” derivatives ranged from 0.8 D to 10.5 D. We will discuss these results along with the “reversed” push-pull effect on the structures and NMR properties of this series of substituted poly-2,7-[2]calicenes. The properties of the reference molecules calicene, benzene, cyclopentadienyl anion, and cyclopropenyl cation are also included. All geometries, vibrational frequencies, and properties (dipoles, NMR, etc.) are reported at B3LYP/6-31+g(d,p) level of theory.

Keywords Push-pull Effect; Calicene; Density Functional Theory; Nucleus Independent Chemical Shift; Aromaticity

References

1. Ratanadachanakin, T. and Collier, W. E., 2014, *Proceeding of Pure and Applied Chemistry International Conference* 235-238. Available from: <http://paccon2014.kku.ac.th/>. [28 April 2014].
2. Schleyer, P. v. R., Maerker, C., Dransfeld, A., Jiao, H. and Hommes, N. J. R. v. E., 1996, *J. Am. Chem. Soc.* 118, 6317-6318.
3. Yoshida, Z., 1982, *Pure & Appl. Chem* 54, 1059-1074.
4. B. Halton, 2005, *Eur. J. Org. Chem.* 16, 3391-3414.