

สถาบันวิจัยและพัฒนาแห่งมหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

รายการผลงานวิจัย

ชื่อ	ดร.แมทธิว พอล กลีสัน	สังกัด	ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ บางเขน
ตำแหน่ง	อาจารย์		
การศึกษา			
สาขาเชี่ยวชาญ/สนใจ			
โครงการวิจัย			
ปี 2553-2556	การศึกษาทางพิษวิทยาของอัลบูมินในเซรัมมนุษย์ เพื่อการเป็นโปรตีนขนส่งในพลาสมาซึ่งเกี่ยวกับสมบัติทางเภสัชจลนศาสตร์ (หัวข้อโครงการ) ได้รับทุนจากสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย		
ปี 2553-2556	ออกแบบและสังเคราะห์สารยับยั้งโปรตีน HIV1-RT (หัวข้อโครงการ) ได้รับทุนจากสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย		
ปี 2556	การออกแบบ สังเคราะห์ และการประเมินผลทางชีวภาพของตัวยับยั้งของ Plasmodium Falciparum Plasmodium falciparum (หัวข้อโครงการ) ได้รับทุนจากทุนอุดหนุนวิจัย มก.		
ปี 2557-2560	การวิเคราะห์และพัฒนาสารประกอบของยาอย่างเป็นระบบ: เข้าใจสาเหตุของการถดถอยของยาและที่มาของแนวทางสำหรับใช้พัฒนาในห้องปฏิบัติการ (หัวข้อโครงการ) ได้รับทุนจากทุนอุดหนุนวิจัย มก.		
ปี 2557-2560	การวิเคราะห์และพัฒนาสารประกอบของยาอย่างเป็นระบบ : เข้าใจสาเหตุของการถดถอยของยาและที่มาของแนวทางสำหรับใช้พัฒนาในห้องปฏิบัติการ (หัวข้อโครงการ) ได้รับทุนจากสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย (สกว.)		
ปี 2557-2558	การออกแบบ การสังเคราะห์และการทดสอบทางชีวภาพของสารยับยั้งโคเนสทูล์มใหม่ (ผู้ร่วมโครงการ) ได้รับทุนจากคณะวิทยาศาสตร์		
ปี 2558-2560	การประยุกต์ใช้การคำนวณ QM/MM เพื่ออธิบายกลไกปฏิกิริยาของเอนไซม์ Histone Deacetylase 8 และ Dimethyl Malate Lyase กับศักยภาพทางเภสัชวิทยา (หัวข้อโครงการ) ได้รับทุนจากทุนอุดหนุนวิจัย มก.		
ปี 2558-2561	การค้นหายารักษาโรคมะเร็งและเบาหวานจาก ทรัพยากรพืชและราของไทยและการศึกษาการออกฤทธิ์:การศึกษาการออกฤทธิ์ทางเภสัชของสารออกฤทธิ์ทางชีวภาพ (ผู้ร่วมโครงการ) ได้รับทุนจากสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย		
ปี 2561	การพัฒนาตัวยับยั้งเอนไซม์โคเนสเพื่อเป็นสารต้านมาลาเรียกลุ่มใหม่ (ผู้ร่วมโครงการ) ได้รับทุนจากทุนอุดหนุนวิจัย มก.		
บทความวิจัยในวารสารวิชาการ			
ระดับนานาชาติ			
- Matthew Paul Gleeson, Waters, Nigel J., Paine, Stuart W., Davis, Andrew M., "In Silico Human and Rat Vss Quantitative Structure-Activity Relationship Models", J. Med. Chem. 49 (6) (2006) 1953-1963			
- Matthew Paul Gleeson, Davis, Andrew M., Chohan, Kamaldeep K., Paine, Stuart W., Boyer, Scott, Gavaghan, Claire L., Amby, Catrin Hasselgren, Kankkonen, Cecilia, Albertson, Nan, "Generation of in-silico cytochrome P450 1A2, 2C9, 2C19, 2D6, and 3A4 inhibition QSAR models", J.Comp. Aided Mol. Des. 21 (10-11) (2007) 559-573			
- Matthew Paul Gleeson, "Plasma Protein Binding Affinity and Its Relationship to Molecular Structure: An In-silico Analysis", J. Med. Chem. 50 (1) (2007) 101-112			
- Matthew Paul Gleeson, "Generation of a Set of Simple, Interpretable ADMET Rules of Thumb", J. Med. Chem. 51 (4) (2008) 817-834			
- Matthew Paul Gleeson, "The importance of the domain of applicability in QSAR modeling", J. Mol. Graph. Mod. 26 (8) (2008) 1315-1326			
- Matthew Paul Gleeson, Gianpaolo Bravi, Sandeep Modi, Daniel Lowe, "ADMET rules of thumb II: A comparison of the effects of common substituents on a range of ADMET parameters", Bioorg. Med. Chem. Lett. 17 (16) (2009) 5906-5919			
- Matthew Paul Gleeson, Duangkamol Gleeson, "QM/MM As a Tool in Fragment Based Drug Discovery. A Cross-Docking, Rescoring Study of Kinase Inhibitors", J. Chem. Inf. Model. 49 (6) (2009) 1437-1448			

สถาบันวิจัยและพัฒนาแห่งมหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

รายการผลงานวิจัย

ชื่อ	ตำแหน่ง	สังกัด
ดร.แมทธิว พอล กิลีสัน	อาจารย์	ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ บางเขน
<p>- Matthew Paul Gleeson, Gleeson, D., "QM/MM Calculations in Drug Discovery: A Useful Method for Studying Binding Phenomena?", <i>J. Chem. Inf. Model.</i> 49 (3) (2009) 670-677</p> <p>- Matthew Paul Gleeson, Supa Hannongbua, Duangkamol Gleeson, "QM methods in structure based design: Utility in probing protein-ligand interactions", <i>Journal of Molecular Graphics and Modelling</i> 29 (4) (2010) 507-517</p> <p>- Chittchang, M., Matthew Paul Gleeson, Ploypradith, P., Ruchirawat, S., "Assessing the drug-likeness of lamellarins, a marine-derived natural product class with diverse oncological activities", <i>Eur. J. Med. Chem.</i> 45 (6) (2010) 2165-2172</p> <p>- Matthew Paul Gleeson, Ruchirawat, S., Deechongkit, S., "Molecular dynamics investigation of psalmopeotoxin I. Probing the relationship between 3D structure, anti-malarial activity and thermal stability.", <i>J. Mol. Mod.</i> 17 (4) (2010) 769-775</p> <p>- Matthew Paul Gleeson, Hersey, A., Montanari, D., Overington, J., "Probing the links between in vitro potency, ADMET and physicochemical parameters", <i>Nat. Rev. Drug. Discov.</i> 10 (3) (2011) 197-208</p> <p>- Matthew Paul Gleeson, Hersey, A., Supa Hannongbua, "In-silico ADME Models: A General Assessment of their Utility in Drug Discovery Applications?", <i>CURRENT TOPICS IN MEDICINAL CHEMISTRY</i> 11 (4) (2011) 358-381</p> <p>- Montanari, D, Chiarparin, E, Matthew Paul Gleeson, Braggio, S, Longhi, R, Valko, K, Rossi, T, "Application of drug efficiency index in drug discovery: a strategy towards low therapeutic dose", <i>EXPERT OPINION ON DRUG DISCOVERY</i> 8 (9) (2011) 913-920</p> <p>- Sudjit Sanguanruang, N. Fagnem, R. Leotphayakkarat, C. Chawengkijwanich, Matthew Paul Gleeson, Nattamon Koonsaeng, "Effect of titanium-tetraisoopropoxide concentration on the photocatalytic efficiency of nanocrystalline thin films TiO₂ used for the photodegradation of textile dyes", <i>Journal of Physics and Chemistry of Solids</i> 73 (2) (2012) 1483-1486</p> <p>- Duangkamol Gleeson, Ben Tehan, Matthew Paul Gleeson, Jumras Limtrakul, "Evaluating the enthalpic contribution to ligand binding using QM calculations: effect of methodology on geometries and interaction energies", <i>Organic and Biomolecular Chemistry</i> 10 (35) (2012) 7053-7061</p> <p>- Matthew Paul Gleeson, Dino Montanari, "Strategies for the generation, validation and application of in silico ADMET models in lead generation and optimization.", <i>Expert Opin Drug Metab Toxicol.</i> 8 (11) (2012) 1435-1446</p> <p>- Tuanjai Somboon, Matthew Paul Gleeson, Supa Hannongbua, "Insight into the reaction mechanism of cis-,cis-muconate lactonizing enzymes: a DFT QM/MM study.", <i>J. Mol. Model.</i> 18 (2) (2012) 525-531</p> <p>- 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.", <i>Current Pharmaceutical Design</i> 18 (9) (2012) 1266-1291</p> <p>- Pakomwit Sampitak, Kanokrat Trongchit, Yulia Kostenko, Supapom Sathalalai, Matthew Paul Gleeson, Somsak Ruchirawat, Poonsakdi Ploypradith, "Synthesis of Substituted 2-Arylindanes from E-(2-Stilbenyl)methanols via Lewis Acid-Mediated Cyclization and Nucleophilic Transfer from Trialkylsilyl Reagents.", <i>The Journal of Organic Chemistry</i> 78 (17) (2013) 8281-8296</p> <p>- Napat Songtawee, Matthew Paul Gleeson, Kiattawee Choowongkamon, "Computational study of EGFR inhibition: molecular dynamics studies on the active and inactive protein conformations.", <i>J Mol Model.</i> 19 (2) (2013) 497-509</p> <p>- Boonyarattanakalin, S., Ruchirawat, S., Matthew Paul Gleeson, "Ring opening polymerization of mannosyl tricyclic orthoesters: Rationalising the stereo and regioselectivity of glycosidic bond formation using quantum chemical calculations", <i>MedChemComm</i> 4 (1) (2013) 265-268</p> <p>- Thipvaree Wangchareansak, Arunee Thitithanyanont, Daungmanee Chuakheaw, Matthew Paul Gleeson, Peter A. Lieberzeit, Chak Sangma, "Influenza A virus molecularly imprinted polymers and their application in virus sub-type classification", <i>Journal of Materials Chemistry B</i> - (-) (2013)</p> <p>- Prapasiri Pongprayoon, Matthew Paul Gleeson, "Probing the binding site characteristics of HSA: A combined molecular dynamics and cheminformatics investigation", <i>Journal of Molecular Graphics and Modelling</i> 54 (-) (2014) 164-173</p>		

สถาบันวิจัยและพัฒนาแห่งมหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

รายการผลงานวิจัย

<p>ชื่อ ดร.แมทธิว พอล กลีสัน</p> <p>ตำแหน่ง อาจารย์</p>	<p>สังกัด ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ บางเขน</p>
<ul style="list-style-type: none"> - 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 - Niran , Napat, Matthew Paul Gleeson, Supa Hannongbua, Kiattawee Choowongkomon, "Insight into HIV-1 reverse transcriptase–aptamer interaction from molecular dynamics simulations.", Journal of Molecular Modeling 20 (8) (2014) 2380-2388 - 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 - J. , Matthew Paul Gleeson, S. , C. , "ZrCl4-promoted facile synthesis of indole derivatives.", RSC Advances 4 (38) (2014) 20048-20052 - 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 - Duangkamol Gleeson, Matthew Paul Gleeson, "Application of QM/MM and QM methods toinvestigate histone deacetylase 8", Med. Chem. Commun. 6 (3) (2015) 477-485 - Nathjanan Jongkon, Matthew Paul Gleeson, "Probing the Catalytic Mechanism Involved in the Isocitrate LyaseSuperfamily: Hybrid Quantum Mechanical/Molecular MechanicalCalculations on 2,3-Dimethylmalate Lyase", The Journal of Physical Chemistry B 119 (35) (2015) 11473-11484 - Oraphan Phuangswai, Paul Beswick, Siriluk Ratanabunyong, Lueacha Tabtimmai, Praphasri Suphakun, Phongphat Obounchoey, Pimonwan Srisook, Natharinee Horata, Irina Chuckowree, Supa Hannongbua, Simon E. Ward, Kiattawee Choowongkomon, Matthew Paul Gleeson, "European Journal of Medicinal Chemistry", European Journal of Medicinal Chemistry 124 (1) (2016) 896-905 	
<p>บทความวิจัยในการประชุมวิชาการ</p> <p>ระดับนานาชาติ</p> <ul style="list-style-type: none"> - 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) 	
<p>รางวัลประกาศเกียรติคุณ/เชิดชูเกียรติการวิจัย</p> <ul style="list-style-type: none"> - New Talent: Asia-Pacific Award ประจำปี 2558 จาก Royal Society of Chemistry - Thailand Frontier Author Awards 2015 ประจำปี 2558 จาก บริษัท Thomson Reuters 	

ผลงานวิจัยนี้เป็นรายการรวบรวมระหว่างปี 1 มกราคม 2549 - 14 สิงหาคม 2563