

# 國立東華大學教師個人基本資料表

聯絡電話：03-8633-609

E-mail：leong@mail.ndhu.edu.tw

最高學歷/起迄：美國德州大學奧斯汀校區 University of Texas  
at Austin Chemical Physics, Ph.D./ 1993/8~1997/5

現職/起迄：教授 / 2015, 8 月~至今

到任年月份(東華)：2005/8 月

專長：1. Bioinformatics 生物資訊學 2. Chemoinformatic 化學訊息學  
3. Pharmcoinformatics 藥理資訊學 4. Toxicoinformatics 毒理資訊學

姓名:梁剛荐

英文名稱:Max K. Leong



## ■研究 (2012~2016)

- 注意事項：**（一）請詳列個人申請截止日前五年內（此段期間曾懷孕及生產者，得延長至七年內（2012.01~2016.12），但須檢附相關證明文件）發表之學術性著作，包括：期刊論文、專書及專書論文、研討會論文、技術報告及其他等，並請依各類著作之重要性自行排列先後順序。
- （二）各類著作請按發表時間先後順序填寫。各項著作請務必依作者姓名（按原出版之次序，**通訊作者請加註\***。）、出版年、月份、題目、期刊名稱（專書出版社）、起迄頁數之順序填寫。
- （三）若期刊屬於SCI、EI、SSCI或A&HCI等時，請註明。

### 一、期刊論文：

A、具匿名審查制度之期刊：

1. Leong, M. K.;\* Chen, H.-B.; Shih, Y.-H., Prediction of Promiscuous P-Glycoprotein Inhibition Using a Novel Machine Learning Scheme, *PLoS One* **2012**, 7, (3), e33829. SCI期刊。
2. Ding, Y.-L., Shih, Y.-H., Tsai, F.-Y., Leong, M. K.\* *In Silico* Prediction of Inhibition of Promiscuous Breast Cancer Resistance Protein (BCRP/ABCG2), *PLoS One* **2014**, 9, (3), e90689. SCI 期刊。
3. Leong, M. K.\* *In Silico* Prediction of the Blood-Brain Barrier Permeation: Are We There Yet? *Medicinal Chemistry* **2015**, 5:130-130, e1000254。

4. Leong, M. K.\*, Syu, R.-G., Ding, Y.-L. and Weng, C.-F.\*, Prediction of N-Methyl-D-Aspartate Receptor GluN1-Ligand Binding Affinity by a Novel SVM-Pose/SVM-Score Combinatorial Ensemble Docking Scheme. *Sci. Rep.* **2016**, **6**, 40053. SCI 期刊。
5. Ding, Y.-L, Lyu, Y.-C. Leong, M. K.\*, *In Silico* Prediction of the Mutagenicity of Nitroaromatic Compounds Using a Novel Two-QSAR Approach. *Toxicol. Vitro.* **2016**, pii: S0887-2333(16)30269-7. doi: 10.1016/j.tiv.2016.12.013. SCI 期刊。

## 二、研討會論文：

1. Leong, M. K., (2012) Development of an *In Silico* Model for Predicting Activation of Promiscuous Drug Transporter hPXR, in *2nd International Conference on Proteomics & Bioinformatics*, Las Vegas, USA.
2. Leong, M. K., (2013) Predicting Inhibition of Promiscuous P-Glycoprotein by Pharmacophore Ensemble/Support Vector Machine Approach. In *3rd International Conference on Proteomics & Bioinformatics*, Philadelphia, USA.
3. Leong, M. K., (2014) *In Silico* Prediction of Promiscuous Breast Cancer Resistance Protein Inhibition. In *Molecular Medicine Tri Conference*, San Francisco, USA.
4. Leong, M. K., Lyu, Y.-C. and Ding, Y.-L. (2014) Predicting Mutagenicity of Nitroaromatic Compounds Using Hierarchical Support Vector Regression Approach, In *248th ACS National Meeting & Exposition*, San Francisco, CA.
5. Leong, M. K., (2016) A Local Model or a Global Model: *Quo Vadis?* In *International Conference on Engineering and Natural Science–Summer Session (ICENS-Summer 2016)*, Kyoto, Japan.

## 三、三年內之研究計畫 (2013~2016)：

起迄年月	研究計畫名稱	主持人/共同主持人	計畫經費	補助單位
2013/08/01   2014/07/31	發展預測混雜 ADME/Tox 蛋白質親和力的理論模型	主持人	1,250,000	行政院國科會

2014/08/01	以支持向量機為基礎之基於   structure 及 analogue 之分子	主持人	900,000	科技部
2015/07/31	模擬應用			
2015/08/01	發展理論模型以預測各項血腦   屏障穿透參數	主持人	1,150,000	科技部
2017/07/31				



## ■ 教學 (2014~2016)

### 四、三年內開授課程：

學年度	課程名稱(必/選)	學分數/時	選修人數
103 上	普通化學實驗(一)AE (學程)	1/0:3	24
	普通化學實驗(一)AB (學程)	1/0:3	28
	化學數學(二)(學程)	2/2	67
	專題研究(一)AB (學程)	1/2	17
	服務學習(二)化學系(必)	1/2	75
	專題研究(三)AC (必)	3/3	1
	普通化學(一)AE (學程)	3/3	45
	論文研究(一)AM (選)	3/3	2
103 下	專題研究(六) (選)	3/3	1
	專題討論(二)AD (必)	1/2	5
	普通化學實驗(二)AB (學程)	1/0:3	28
	論文研究(二)AM (選)	3/3	2
	服務學習(一)化學系(必)	1/2	68
	專題討論(四)AD (選)	1/2	7
	專題研究(二)AB (學程)	1/2	17
	專題研究(四)AB (學程)	2/2	18
	引導研究(二)AM (必)	3/3	2

104 上	普通化學實驗(一)AF (學程)	1/0:3	23
	普通化學實驗(一)AB (學程)	1/0:3	23
	化學數學(二)(學程)	2/2	75
	專題研究(五) (博)(選)	3/3	1
	服務學習(二)化學系(必)	1/2	137
	專題研究(三) AB (學程)	2/2	25
	普通化學(一)AE (學程)	3/3	56
	引導研究(一)AK (碩)(必)	3/3	1
104 下	引導研究(二)AI (碩)(必)	3/3	1
	普通化學實驗(二)AB (學程)	1/0:3	25
	計算化學 (碩)(選)	3/3	12
	專題研究(四)AB (學程)	2/2	28
	專題研究(八)AB (博)(選)	3/3	1
	服務學習(一)化學系 (必)	1/2	58
105 上	論文研究(一)AH (碩)(必)	3/3	1
	普通化學(一)AE (學程)	3/3	83
	普通化學實驗(一)AA (學程)	1/0:3	30
	普通化學實驗(一)AE (學程)	1/0:3	23
	化學數學(二) (學程)	2/2	74
	引導研究(一)AH (碩)(必)	3/3	3
	專題研究(七) AB (博)(選)	3/3	1
	服務學習(二)_化學系 (必)	0/2	57
	專題研究(三)AB (學程)	2/2	18
	專題研究(一)AB (學程)	1/2	22

### 五、三年內指導研究生狀況：

學年度	碩士班(人)	博士班(人)	畢業人數	
			碩士	博士
105	5	1	-	-
104	3	1	1	-
103	3	1	1	-



## ■ 服務 (2012.~2016)

### 六、校內校、院、系(所、科及中心)各級公共事務參與：

年/月	校/院/系級	項目
2005/8~至今	任職東華大學化學系	教學、服務。
2005/8~至今	化學系導師	輔導所擔任班級的學生們。
2012	化學系招生小組	參與化學系招生工作等相關事項。
2012	101 學年度大學轉學	參與大學轉學考等相關事項。
2012	院務會議代表	參與院務會議各事項。
2013	化學系圖儀委員	規劃本系圖書儀器設備之採購、處理本系圖書儀器設備之保管與使用。
2013	院務會議代表	參與院務會議相關事項。
2013	研究所甄選招生小組	參與化學系研究所甄選普化命題等相關事項。
2013	化學系研究所口試委員	參與研究所甄選研究所碩士班口試等相關事項。
2013/04	獎學金審查會議	101 學年度第二學期徠福公司獎學金審查會議。
2014	103 學年度大學甄選	化學系大學甄選面試等相關事項。
2014-2015	院國際事務暨獎學金委員	參與院內學生相關國際事務暨獎學金頒發審核等相關事項。
2015	化學系圖儀委員	規劃本系圖書儀器設備之採購、處理本系圖書儀器設備之保管與使用。
2016	院課程委員	參與院內課程相關事項會議討論。

### 七、專業學術服務工作項目：

年/月	校內/校外	項目
2009~2014	校外	Editorial board of <i>Journal of Bioanalysis &amp; Biomedicine</i> 學術期刊編輯
2009~至今	校外	Editorial board of <i>Journal of Bioequivalence &amp; Bioavailability</i> 學術期刊編輯
2012	校外	Romanian National Council for Scientific Research Austrian Science Fund (Grant Application Reviewer)
2012	校外	PLoS One 審查委員
2013	校外	Polycyclic Aromatic Compounds 審查委員

2013	校外	AAPS PharmSciTech 審查委員
2013	校外	Biomedical Journal 審查委員
2013, 2014	校外	Austrian Science Fund (Grant Application Reviewer)
2014	校外	PLoS One 審查委員
2015	校外	International Journal of Pharmaceutics 審查委員
2016	校外	SAR and QSAR in Environmental Research 審查委員
2016	校外	<i>Monatshefte für Chemie</i> 審查委員
2016	校外	International Conference on Engineering and Natural Science - Conference chair
2016	校外	<i>ACS Omega</i> 審查委員

以上資料屬實。填表人簽名：\_\_\_\_\_（電子檔免填），填表日期：2016/12/30。