CV

Seyed Ahmad Ebadi

Department of Medicinal Chemistry, School of Pharmacy, Hamadan University of Medical Sciences, Hamadan, Iran
Tel: +9881 3838 1675, Ext. 389
E-mail: a.ebadi@umsha.ac.ir

Personal Information

Nationality: Iranian
Date of Birth: 14/04/1984
Place of birth: Tehran
Marital Status: Married

Academic position

Assistant Professor, 2014 – now

Education

- Ph.D. in Medicinal Chemistry, Faculty of Pharmacy, Shiraz University of Medical Sciences, 2009-2014
  Dissertation Title: Synthesis and molecular modeling of novel nonpeptidic small molecules as p38MAPK inhibitors and evaluation of TNF-α production in a cell model
  Supervisors: Prof. Miri R. & Prof. Firouzi O., *Advisors*: Prof. Javidnia K. & Prof. Ghahramani M. H.

- M.Sc. in Organic chemistry, Faculty of Chemistry, K. N. Toosi University of Technology, 2007-2009
  Thesis Title: Design and Synthesis of Novel Peptides as Anti-Cancer Agents
  Supervisor: Prof. Balalaie S., *Advisor*: Prof. Davoodi J.

- B.S. in Applied Chemistry, Faculty of Science, K. N. Toosi University of Technology, 2002-2007

Research Interests:

Molecular Dynamics Simulation
Computational Chemistry
Virtual Screening and Molecular Modeling
Synthesis of Peptide and Peptidomimetic Molecules
Synthesis of Novel Bioactive Heterocyclic Molecules

Ongoing Research Projects

Design, molecular modeling and synthesis of peptidic inhibitors of AChE
In silico and *in vitro* screening of natural products as DNA binding agents

Design, molecular modeling and synthesis of anti-mitotic peptides

Teaching Interests

Organic Chemistry
Computational Chemistry and Molecular Modeling
Medicinal Chemistry

Computer Skills

Operating Systems: Windows, Linux
Docking: AutoDock, AutoDock Vina
MD Simulation: GROMACS, SIESTA
Ab Initio: ORCA
Programming Skills: Shell programming, C++, Python

Publications

1. Ekhtiyari MS, Moradkhani S, **Ebadi** A, Dastan D. Chemical Composition of the Essential Oils from the Aerial Parts of Eryngium bornmuelleri. Chem Nat Compd. 2020;56(6):1154–5.
2. Tahmasebi E, Dastan D, **Ebadi** A. Design, synthesis and biological evaluation of anticholinesterase peptides: Fragment-based vs. template-based peptide design. Bioorg Chem. 2020;105:104351.
3. **Ebadi** A, Olyaie SS, Dastan D. To be ionized or not to be ionized: the vital role of physicochemical properties of galbanic acid derivatives in AChE assay. J Biomol Struct Dyn. 2020;
4. Dastan D, Fasihi K, **Ebadi** A. From Venom to AChE Inhibitor: Design, Molecular Modeling, and Synthesis of a Peptidic Inhibitor of AChE. Int J Pept Res Ther. 2020;
5. Sharifi H, **Ebadi** A, Soleimani M. Biological evaluation and molecular modeling of 3,4-dihydropyrimidine-2(1h)-one derivatives as cytotoxic agents on breast cancer in vitro. Lett Drug Des Discov. 2020;17(8):983–92.
6. Razzaghi-Asl N, **Ebadi** A, Shahabipour S, Gholamin D. Identification of a potential SARS-CoV2 inhibitor via molecular dynamics simulations and amino acid decomposition analysis. J Biomol Struct Dyn. 2020;
7. Razzaghi-Asl N, Sepehri S, **Ebadi** A, Karami P, Nejatkhah N, Johari-Ahar M. Insights into the current status of privileged N-heterocycles as antileishmanial agents. Mol Divers. 2020;24(2):525–69.
8. Razzaghi-Asl N, **Ebadi** A. In silico design of peptide inhibitors of tubulin: amyloid-β as a lead compound. J Biomol Struct Dyn. 2020;
9. Dastan D, Validi S, **Ebadi** A. Kamonolol acetate from Ferula pseudalliacea as AChE inhibitor: in vitro and in silico studies. Struct Chem. 2020;31(3):965–73.
10. Razzaghi-Asl N, Karimi A, **Ebadi** A. The potential of natural product vs neurodegenerative disorders: In silico study of artoflavanocoumarin as BACE-1 inhibitor. Comput Biol Chem. 2018;77:307–17.
11. Miri R, Bohlooli F, Razzaghi-Aslb N, **Ebadi** A. Molecular modeling of indeno [1, 2-b]

quinoline-9, 11-diones as cytotoxic agents. Iran J Pharm Res. 2018;17(4):1249–62.

12. Ebrahimi M, Firuzi O, Miri R, Razzaghi-Asl N, **Ebadi** A. Structural Insight into Binding Mode of 9-Hydroxy Aristolochic Acid, Diclofenac and Indomethacin to PLA2. Interdiscip Sci Comput Life Sci. 2018;10(2):400–10.

13. **Ebadi** A, Khoshneviszadeh M, Javidnia K, Ghahremani MH, Firuzi O, Miri R. 3,4-Dihydropyrimidin-2(1H)-one C5 amides as inhibitors of T NFα production: Synthesis, biological evaluation and molecular modeling. Lett Drug Des Discov. 2017;14(8):885–97.

14. **Ebadi** A, Dastan D, Azami M, Karimi A, Razzaghi-Asl N. Molecular Modeling of Human CCR2 Receptor within POPC Lipid Bilayer. Struct Chem. 2017;28(3):849–57.

15. Razzaghi-Asl N, Sepehri S, **Ebadi** A, Miri R, Shahabipoura S. Effect of biomolecular conformation on docking simulation: A case study on a potent HIV-1 protease inhibitor. Iran J Pharm Res. 2015;14(3):785–802.

16. Razzaghi-Asl N, Shahabipour S, **Ebadi** A, Bagheri A. Quantum chemical analysis of potential anti-Parkinson agents. J Chem Sci. 2015;127(7):1211–20.

17. Razzaghi-Asl N, Sepehri S, **Ebadi** A, Miri R, Shahabipour S. Molecular docking and quantum mechanical studies on biflavonoid structures as BACE-1 inhibitors. Struct Chem. 2015;26(2):607–21.

18. **Ebadi** SA, Razzaghi-Asl N, Khoshneviszadeh M, Miri R. Detailed atomistic molecular modeling of a potent type II p38α inhibitor. Struct Chem. 2015;26(4):1125–37.

19. **Ebadi** A, Razzaghi-Asl N, Shahabipour S, Miri R. Ab-initio and conformational analysis of a potent VEGFR-2 inhibitor: A case study on Motesanib. Iran J Pharm Res. 2014;13(2):405–15.

20. Razzaghi-Asl N, Hemmateenejad B, **Ebadi** A, Shahabipour S, Miri R. A new insight into computational molecular design: A case study on BACE-1 inhibitors. J Comput Methods Sci Eng. 2014;14(4–5):315–25.

21. Nikkhoo AR, Miri R, Arianpour N, Firuzi O, **Ebadi** A, Salarian AA. Cytotoxic activity assessment and c-Src tyrosine kinase docking simulation of thieno[2,3-b] pyridine-based derivatives. Med Chem Res. 2014;23(3):1225–33.

22. Razzaghi-Asl N, **Ebadi** A, Edraki N, Shahabipour S, Miri R. Fragment-based binding effciency indices in bioactive molecular design: A computational approach to BACE-1 inhibitors. Iran J Pharm Res. 2013;12(3):423–36.

23. Razzaghi-Asl N, **Ebadi** A, Edraki N, Shahabipour S, Miri R. Ab initio modeling of a potent isophthalamide-based BACE-1 inhibitor: Amino acid decomposition analysis. Med Chem Res. 2013;22(7):3259–69.

24. **Ebadi** A, Razzaghi-Asl N, Khoshneviszadeh M, Miri R. Comparative amino acid decomposition analysis of potent type i p38α inhibitors. DARU, J Pharm Sci. 2013;21(1).

25. Razzaghi-Asl N, **Ebadi** A, Edraki N, Mehdipour A, Shahabipour S, Miri R. Response surface methodology in docking study of small molecule BACE-1 inhibitors. J Mol Model. 2012;18(10):4567–76.

26. Salami M, Moosavi-Movahedi AA, Ehsani MR, Yousefi R, Haertlé T, Chobert J-M, et al. Improvement of the antimicrobial and antioxidant activities of camel and bovine whey proteins by limited proteolysis. J Agric Food Chem. 2010;58(6):3297–302.

Conference Papers

1. Karimi, A., **Ebadi A.**, Dastan, D. Molecular Modeling of Self-assembled Rosette Nanotubes. The 2nd Iranian Nanomedicine Congress, Zanjan, Iran, September 2016.
2. Tabei, L., Dastan, D., **Ebadi, A**. Phytochemical Investigation and Molecular Modelling of Galbanic Acid from *Ferula pseudalliacea* as FTase inhibitor. 14th Iranian Pharmaceutical Sciences Congress, Tehran , Iran, December 2015.
3. Karimi, A., **Ebadi, A.**, Dastan, D., Virtual Screening for BRD4 Bromodomain Inhibitors: 2-hydroxynaphthalen-1(4H)-one as New Scaffold. 19th Iranian Pharmacy Students Seminar, Shiraz , Iran, October 2015
4. Abbasnia, M., **Ebadi, A.**, Dastan, D., Homology Modeling of C-C Chemokine Receptor Type 2. 19th Iranian Pharmacy Students Seminar, Shiraz , Iran, October 2015
5. Jalilian, M., Dastan, D., **Ebadi, A.** Chemical composition, antioxidant and antimicrobial activities of *Eremurus spectabilis* essential oil and extracts from Iran**.** 19th Iranian Pharmacy Students Seminar, Shiraz , Iran, October 2015
6. **Ebadi, S. A.**, Ebrahimi, M., Homology Modeling and Molecular Dynamic Simulation of PLA_2 form *Vipera Lebetina*. The 1st National Congress of Toxicology and Animal Poisoning, Tehran, Iran, October 2014
7. **Ebadi, S. A.**, Arbanian, A., Davoodi, J., Ahangharian, B., Balalaie, S. Design and Efficient Synthesis of Novel Peptidic Apoptosis Mimetics. 16th Iranian Conference of Organic Chemistry, Zanjan, Iran, August 2009

Thesis

1. Synthesis and molecular modeling of novel 3,4-dihydropyrimidin-2-one derivatives as BACE-1 inhibitors; 2015; Supervisor.
2. Phytochemical analysis of *Ferula pseudalliacea* essential oils and molecular modeling of Galbanic acid as farensyl transferase inhibitor; 2015; Supervisor.
3. Molecular modeling and Synthesis of novel 3,4-dihydropyrimidin-2-one derivatives as anticancer agents; 2015; Supervisor.
4. Design and synthesis of novel 3,4-dihydropyrimidine-2-one derivatives; 2014; Adviser.

Research projects

1. Design, Molecular Modeling and Synthesis of Peptidic Compounds as Acetylcholinesterase Inhibitors; 2017
2. Design, synthesis, molecular modeling and binding studies of 2-benzylidenecycloalkane-1,3-dione derivatives to DNA; 2016
3. Biological evaluation and molecular modeling of coumarin compounds from *Ferula pseudalliacea* as AChE inhibitor in the treatment of alzheimer disease; 2015

Public URL

ORCID: *0000-0002-4675-0224*
Researcher ID: *N-5599-2017*
Scopus ID: *55210384200*

References

Prof. Ramin Miri Ph. D.

Medicinal and Natural Products Chemistry Research Center, Shiraz University of Medical Sciences, Shiraz, Iran. PO Box 3288-71345, E-mail: mirir@sums.ac.ir, Tel: +9871 3485 3734

Prof. Saeed Balalaie Ph. D.

Department of Chemistry - K.N.Toosi University of Technology, P.O. Box 15875-4416, Tehran, Iran. E-mail: balalaie@kntu.ac.ir, Tel: +9821 2306 4226 – 226

باسمه تعالی

کارنامه سوابق آموزشی، پژوهشی و اجرایی:

۱. اطلاعات شخصی

نام: سید احمد

نام خانوادگی: عبادی

دانشکده: داروسازی

شماره تلفن محل کار: ۳۸۵ – ۱۶۷۵ ۳۸۳۸ ۰۸۱

آدرس پست الکترونیکی: a.ebadi@umsha.ac.ir

۲. سوابق تحصیلی

رشته تحصیلی	گرایش رشته تحصیلی	درجه علمی	دانشگاه محل تحصیل	شهر محل تحصیل	کشور محل تحصیل	زمان فارغ التحصیل
داروسازی	شیمی دارویی	PhD	دانشگاه علوم پزشکی شیراز	شیراز	ایران	۱۳۹۳
شیمی	شیمی آلی	کارشناسی ارشد	دانشگاه صنعتی خواجه نصیر الدین طوسی	تهران	ایران	۱۳۸۸
شیمی	شیمی کاربردی	کارشناسی	دانشگاه صنعتی خواجه نصیر الدین طوسی	تهران	ایران	۱۳۸۶

۳. موقعیت های شغلی و حرفه ای

الف) سابقه ارائه خدمات آموزشی

موسسه محل آموزش	مقطع تحصیلی	نوع فعالیت	عنوان درس	زمان آموزش
دانشکده داروسازی همدان	دکتری عمومی داروسازی	تدریس	شیمی دارویی ۱	۹۴ تا کنون
دانشکده داروسازی همدان	دکتری عمومی داروسازی	تدریس	شیمی دارویی ۲	۹۴ تا کنون
دانشکده داروسازی همدان	دکتری عمومی داروسازی	تدریس	شیمی دارویی ۳	۹۳ تا کنون
دانشکده داروسازی همدان	دکتری عمومی داروسازی	تدریس	آزمایشگاه شیمی آلی ۱	۹۳ تا کنون
دانشکده داروسازی همدان	دکتری عمومی داروسازی	تدریس	آزمایشگاه شیمی آلی ۲	۹۳ تا کنون

۴. پروژه های تحقیقاتی تصویب شده

عنوان طرح	نوع فعالیت در طرح	مجریان همکار	موسسه محل پژوهش	وضعیت فعلی طرح	طول مدت طرح

طراحی و سنتز ترکیبات ۳و۴-دی هیدروپیریمیدین-۲-اونی جدید	استاد مشاور	دکتر رامین میری	دانشکده داروسازی شیراز، مرکز تحقیقات شیمی دارویی و گیاهی	به پایان رسیده است	۷ ماه
مدل سازی مولکولی و سنتز مشتقات جدید ۳و۴-دی هیدروپیریمیدین-۲-اونی به عنوان عوامل ضد سرطان	استاد راهنما	دکتر چهاردولی	دانشکده داروسازی همدان	درحال اجرا	
سنتز و مدلسازی مولکولی مشتقات ۳و۴-دی هیدروپیریمیدین-۲-اون جدید به عنوان مهارکننده های آنزیمBACE-1	استاد راهنما	دکتر رزاقی اصل	دانشکده داروسازی همدان	درحال اجرا	
بررسی فیتوشیمیایی اسانس ریشه گیاه *Ferula pseudalliacea* و مدل سازی مولکولی ترکیب گالبانیک اسید به عنوان مهارکننده آنزیم فارنزیل ترانسفراز	استاد راهنما	دکتر دستان	دانشکده داروسازی همدان	درحال اجرا	
ارزیابی بیولوژیک و مدل سازی مولکولی ترکیبات کومارینی گیاه *Ferula pseudalliacea* به عنوان عوامل مهار کننده استیل کولین استراز در درمان آلزایمر	مجری	دکتر دستان	دانشکده داروسازی همدان	در حال اجرا	

۵. شرکت در دوره های مختلف (آموزش، پژوهشی، اجرایی)

ردیف	مهارت های شغلی و عملی
۱	**کارگاه Patent**
۲	**کارگاه شبیه سازی دینامیک مولکولی**