



## كلية الصيدلة

البحث العلمي < مجموعة تصميم الأدوية وحركيتها

### مجموعة تصميم الأدوية وحركيتها

#### للتواصل

د. محمد غطاس  
كلية الصيدلة، مبنى (P)  
جامعة العين للعلوم والتكنولوجيا  
ص. ب.: 64141، العين، دولة الإمارات العربية المتحدة  
البريد الإلكتروني: [mohammad.ghattas@au.ac.ae](mailto:mohammad.ghattas@au.ac.ae)  
هاتف: +971 3 7024878  
فاكس: +971 3 7024777

#### الأعضاء

- د. نور الدين عطايرة
- [أ.د. أهل يوسف](#)
- [د. محمد غطاس](#)
- [د. سوسن أبو جهدة](#)
- [د. عمار جهوري](#)
- [د. محمد السرخي](#)
- أ. سارة الرواشدة

## نطاقات البحث

- دراسة الانزيمات في السيليكو
- تقييم ربط مواقع الانزيمات druggability وتحليل تفاعلات ال-بروتين-ليجند الخاصة بها
- تصميم أدوية بمساعدة الكمبيوتر
- اكتشاف الأدوية متعددة التخصصات والتحسين
- نموذج جزيئات صغيرة
- توقع الديناميكيات والتفاعلات
- التقييم الهجري
- تشخيص النشاط البيولوجي / والهضاد للبكتيريا للمركبات الكيميائية والكيميائية النباتية

## اهتمامات البحث

يركز بحثنا الحالي على:

- التحقيق في أنواع مختلفة من النسر الانزيمية من حيث التصرف النشط في الموقع وتفاعلات بروتين الليكند (التي ينبغي أن تساعد الصيدلي الكيميائي / الكيميائي الحيوي في جهوده للعثور على مثبطات جديدة)
- استخدام تصميم الأدوية القائم على الكمبيوتر لتنشيط تفاعلات البروتينات البروتينية واستهداف أنواع مختلفة من الإنزيمات التي تتداخل مع التسبب في السرطان (أي MPS1 ، MCF-7) ، داء السكري (أي ENRs) البكتيرية والالتهابات (PTP1B).
- إجراء محاكاة ديناميكية جزيئية لدراسة التفاصيل الجزيئية لظواهر التجميع من مثبطات مختلفة. والتي من شأنها أن تساعد الباحثين في المستقبل في الحد من النتائج الإيجابية الكاذبة التي عادة ما تكون مصحوبة بفحص عالي الإنتاجية ،
- إجراء اختبارات في المختبر للمركبات التي يقترحها تصميم الأدوية على أساس الكمبيوتر وكذلك لهستخلصات نباتية مختلفة.

## مرافق الأبحاث

- يشمل مختبر النمذجة الجزيئية:

- اثنان من محطات العمل المتقدمة
- برامج تصوير الأدوية المتخصصة (مثل MOE و Maestro و AMBER و ChemAxon)
- مختبر علم الأحياء الدقيقة مع أحدث المعدات

## المنشورات

1. , Abdou IM. Antibacterial Atatreh N ,Ghattas MA AlNeyadi SS, Salem AA, activity and mechanism of action of the benzazole acrylonitrile-based compounds: In vitro, spectroscopic, and docking studies. European Journal of Medicinal Chemistry 2017, 136, 270-282.  
<https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2017.05.010>DOI:
2. Novel quinuclidinone Youssef AM Malki A, Elbayaa RY, Ali O, Sultan A, derivatives induced apoptosis in human breast cancer via targeting p53. Bioorganic Chemistry 2017, 72: 57-63.  
<https://doi.org/10.1016/j.bioorg.2017.03.010>DOI:
3. ComputerAatreh N , Eissa NA, Bardaweel SK, Abu Mellal A,Ghattas MA aided discovery of antimicrobial agents as potential enoyl acyl carrier protein reductase inhibitors, Tropical Journal of Pharmaceutical Research <http://dx.doi.org/10.4314/tjpr.v16i2.19>2017, 16 (2), 397-405.
4. Hertecant J, Komara M, Nagi A, Al-Zaabi O, Fathallah W, Cui H, Yang Y, , Al-Gazali L, Ali BR. A de novo Ghattas MA ,Sorkhy MEng CM, Al mutation in the X-linked PAK3 gene is the underlying cause of intellectual disability and macrocephaly in monozygotic twins. European Journal of Medical Genetics 2017, 60 (4),  
<http://doi.org/10.1016/j.ejmg.2017.01.004>212-216.
5. , Arafat T, Ghattas MA Basim A, Muhi-Eldeen ZA, Al-Kaissi E, Sauifan G, Al-Adham I. Design, synthesis and biological screening of aminoacetylenictetrahydrophthalimide analogues as novel COX inhibitors. International Journal of Pharmacy and Pharmaceutical Sciences 2017, DOI: [10.22159/ijpps.2017v9i2.15511](https://doi.org/10.22159/ijpps.2017v9i2.15511)9(2):160.
6. . Druggability Al Sorkhy M, Atatreh N Raslan N, Sadeq A,Ghattas MA, analysis and classification of protein tyrosine phosphatase active sites. [DOI](https://doi.org/10.2147/DDDT.S111443)Drug Design, Development and Therapy 2016, 10:3197-3209.  
[10.2147/DDDT.S111443](https://doi.org/10.2147/DDDT.S111443)
7. The choice of pharmacy profession as a Hamrouni AM Abduelkarem AR, career: UAE experience. Asian Journal of Pharmaceutical and Clinical Research, 2016; 9(4); 1-7.
8. , Al Sorkhy M, Atatreh, N. In silico design of new MPS1 Ghattas MA

- Der inhibitors via a validated structure-based virtual screening approach. [365-374, 2016.](#) , 8(2):Pharma Chemica
- Jalili E, Fillfield, B and LA Porter. Direct Interactions with both p27 and Cdk2 Regulate Spy1-Mediated Proliferation in vivo and in vitro. Cell cycle. 2016;15(1):128-36. doi: 10.1080/15384101.2015.1121327. .9
- , Mansour RA, Atatreh N, Bryce RA. Analysis of enoyl acyl carrier protein reductase structure and interactions yield an efficient virtual screening approach and suggest a potential allosteric site. Chemical [DOI: 10.1111/cbdd.12635](#)Biology and Drug Design. 87(1): 131-142, 2016. .10
- , Muhi-eldeen ZA. Ghattas MA Al-jomaily M, Arafat T, Al-kaissi EN, .11  
Synthesis of 2-[[4-(4-aminophenyl)but-2-yn-1-yl]oxy]-benzophenone derivatives as H3-antagonists. International Journal of Pharmaceutical and Pharmaceutical Sciences. 7(6):174-179, 2015.
- , Badwan Ghattas MA Qinna NA, Shubbar MH, Matalka KZ, Al-Jbour N, .12  
AA. Glucosamine Enhances Paracetamol Bioavailability by Reducing Its [DOI:Metabolism. Journal of Pharmaceutical Sciences. 104:257-265, 2015.](#)  
[10.1002/jps.24269](#)
- . The Hypoglycemic Effect of Hamrouni AM Shkshak K, Afan A, Auzi A, .13  
Libyan truffle in Experimental Induced rates. Tripolitana Medical Journal. 2014; 3 (1) 1-4.
- , Muhi-eldeen Z. SynthesisGhattas M Al-Rahmani R, Al-kaissi E, Arafat T, .14  
of 2-[[4-(4-aminophenyl)but-2-yn-1-yl]oxy]-1,3-benzothiazole derivatives as [DOI:H3-antagonists. IOSR Journal of Pharmacy. 2014; 4\(9\):40-49.](#)  
[10.9790/3013-0409040049](#)
- , Bichenkova EV, Bryce RA. Protein tyrosine phosphatases: Ligand interaction analysis and optimisation of virtual screening. Journal of Molecular Graphics and Modelling. 2014; 52. .15  
[DOI:10.1016/j.jmgm.2014.06.011](#)114-123.
- , Adam A. Anti-inflammatory agents of the carbamoylmethyl ester class: synthesis, characterization, and pharmacological evaluation. Journal of Inflammation Research 2013;6 1-9. .16
- , Musa F, Alatery A, Aburawi S, Alzatreny A, Auzi A. Hamrouni AM .17  
Phytochemical, Antioxidant, Antibacterial and Anti-Inflammatory Investigation of the Methanolic Extract of Amaranthus Tricolor Seed. [DOI: 10.2147/JIR.S39743](#)Tripolitana Medical Journal. 2012; 1 (2), 94-99.
- . Novel thiosemicarbazides induced apoptosis in human MCF-7 breast cancer cells via JNK signaling. Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry. Posted online on November 3 .18

[DOI:10.3109/14756366.2014.971781](https://doi.org/10.3109/14756366.2014.971781)2014.

, Atatreh N ,Ghattas MA Sadek B, Khanian S, Ashoor A, Prytkova T, .19  
Nurulain SM, Yang KS, Howarth FC, Oz M. Effects of antihistamines on  
the function of Human  $\alpha$ 7-nicotinic acetylcholine receptors. European  
Journal of Pharmacology. 2015; 746:  
[DOI:10.1016/j.ejphar.2014.10.046](https://doi.org/10.1016/j.ejphar.2014.10.046)308-316.

## المؤتمرات

- .1 Discovery of Novel Antimicrobial Agents via Structure-Based Drug Design. Frontiers in Feb 2017, Bern, Switzerland <sup>th</sup> 15 <sup>th</sup> Medicinal Chemistry 12
- .2 Drug Design Approach for Discovering New Butyrylcholinesterase Inhibitors. Frontiers Feb 2017, Bern, Switzerland. <sup>th</sup> 15 <sup>th</sup> in Medicinal Chemistry 12
- .3 , Mansour RA, Atatreh N. A Novel Approach to Improve Enoyl Acyl Carrier Protein Reductases Virtual Screens. Drug Design 2014 Oxford, United Kingdom. September 2014, <sup>th</sup> 26 <sup>rd</sup> 23 Conference,
- .4 , Malki A. Synthesis and Anticancer Activity of Novel Quinuclidinone Derivatives Against Breast Cancer Cells. DUPHAT March 2013, Dubai, United Arab Emirates. <sup>th</sup> 12 <sup>th</sup> Conference, 10

عرض الصفحة