كلية الصيدلة

المجموعات البحثية > مجموعة تصميم الأدوية وحركيتها

مجموعة تصميم الأدوية وحركيتها

للتواصل

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

الأعضاء

- د. نور الدين عطاطرة
- أ. د. أمل يوسف
- د. محمد غطاس
- د. سوسن أبو حمدة
- د. عمار حموري
- د. محمد السرخي
- أ. سارة الرواشدة

نطاقات البحث

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

اهتمامات البحث

يركز بحثنا الحالي على:

- التحقيق في أنواع مختلفة من الأسر 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 لتثبيط تفاعلات البروتينات البروتينية واستهداف أنواع مختلفة من الإنزيمات التي تتداخل مع التسبب في السرطان (أي MPS1 ، 7-MCF) ، داء السكري (أي ENRs)، أي) 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 لمستخلصات نباتية مختلفة.

مرافق الأبحاث

- يشمل مختبر النمذجة الجزيئية:

- اثنان من محطات العمل المتقدمة
- برامج تصميم 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, 270282. DOI: https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2017.05.010
2. Youssef AM Malki A, Elbayaa RY, Ali O, Sultan A, . Novel quinuclidinone derivatives induced apoptosis in human breast cancer via targeting p53. Bioorganic Chemistry 2017, 72: 57-63. DOI: https://doi.org/10.1016/j.bioorg.2017.03.010
3. Atatreh N , Eissa NA, Bardaweel SK, Abu Mellal A,Ghattas MA . ComputerAided discovery of antimicrobial agents as potential enoyl acyl carrier protein reductase inhibitors, Tropical Journal of Pharmaceutical Research 2017, 16 (2), 397-405. http://dx.doi.org/10.4314/tjpr.v16i2.19
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), 212-216. http://doi.org/10.1016/j.ejmg.2017.01.004
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, 9(2):160. DOI: 10.22159/ijpps.2017v9i2.15511
6. Druggability Al Sorkhy M, Atatreh N Raslan N, Sadeq A,Ghattas MA, . analysis and classification of protein tyrosine phosphatase active sites. Drug Design, Development and Therapy 2016, 10:3197-3209. DOI 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. Ghattas MA , Al Sorkhy M, Atatreh, N. In silico design of new MPS1

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 bothAl Sorkhy M., .9
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.
, Mansour RA, Atatreh N, Bryce RA. Analysis of enoyl acyl Ghattas MA .10
carrier protein reductase structure and interactions yield an efficient virtual screening approach and suggest a potential allosteric site. Chemical
DOI: 10.1111/cbdd.12635Biology and Drug Design. 87(1): 131142, 2016.
, Muhi-eldeen ZA. Ghattas MA Al-jomaily M, Arafat T, Al-kaissi EN, .11
Synthesis of 2-{[4-(t-amino-1-yl)but-2-ny-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, AlJbour N, .12
AA. Glucosamine Enhances Paracetamol Bioavailability by Reducing Its
DOI:Metabolism. Journal of Pharmaceutical Sciences. 104:257265, 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-(t-amino-1-yl)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 Atatreh N ,Ghattas MA .15
phosphatases: Ligand interaction analysis and optimisation of virtual screening. Journal of Molecular Graphics and Modelling. 2014; 52.
DOI:10.1016/j.jmgm.2014.06.011114-123.
, Adam A. Anti-inflammatory agents of the Hamrouni AM Sadek B, .16
carbamoylmethyl ester class: synthesis, characterization, and pharmacological evaluation. Journal of Inflammation Research 2013:6 1-9.
, 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.S39743Tripolitana Medical Journal. 2012; 1 (2), 94-99.
. Novel Youssef AM Malki A, Elbayaa RY, Ashour HMA, Loffredo CA, .18
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

DOI:10.3109/14756366.2014.971781 2014.
19. Atatreh N ,Ghattas MA Sadek B, Khanian S, Ashoor A, Prytkova T, Nurulain SM, Yang KS, Howarth FC, Oz M. Effects of antihistamines on the function of Human 7-nicotinic acetylcholine receptors. European Journal of Pharmacology. 2015; 746: 308316.
DOI:10.1016/j.ejphar.2014.10.046

المؤتمرات

1. Ghattas MA , Eissa NA, Obaid D, Atatreh N . Discovery of Novel Antimicrobial Agents via Structure-Based Drug Design. Frontiers in Medicinal Chemistry 12th 15th Feb 2017, Bern, Switzerland.
2. Ghattas MA ,Abu Hamdah S ,Al-Rawashdeh S ,Atatreh N . Drug Design Approach for Discovering New Butyrylcholinesterase Inhibitors. Frontiers in Medicinal Chemistry 12th 15th Feb 2017, Bern, Switzerland.
3. Ghattas MA , Mansour RA, Atatreh N. A Novel Approach to Improve Enoyl Acyl Carrier Protein Reductases Virtual Screens. Drug Design 2014 23rd Conference, 26th September 2014, Oxford, United Kingdome.
4. Youssef AM , Malki A. Synthesis and Anticancer Activity of Novel Quinuclidinone Derivatives Against Breast Cancer Cells. DUPHAT 12th Conference, 10th March 2013, Dubai, United Arab Emirates.

عرض الصفحة