

## ورشة عمل فى تصميم الادوية باستخدام الحاسوب

استمرارا لاهتمامات قسم الكيمياء الصيدلانية – بصيدلة عين شمس باستخدام التقنيات الحديثة فى مجال النمذجة الجزيئية والتصميم الدوائي، نتشرف بدعوة سيادتكم لحضور ورشة العمل الثالثة التي يعقدها القسم لمدة ثلاثة أيام فى الفترة من 11-13 يوليو 2017 بمعمل تصميم الأدوية بالقسم وذلك تحت عنوان:

### “New trends in molecular docking and ligand-based drug design techniques”

Molecular modeling techniques are continuously updating. Researchers in the field are required to keep an eye on new developments. In this workshop, the department of Pharmaceutical Chemistry, Ain Shams University will present several important methods & techniques in drug design using Discovery Studio software that includes: docking and ligand-based drug design (LBDD) with its main approaches; the quantitative structure-activity relationship (QSAR) and pharmacophore elucidation. We will also consider the new trends in LBDD like the ADMET properties modeling. This up-to-date theoretical background will come to life through hand-on training sessions using contemporary CADD programs to handle real CADD scenarios.

#### رسوم الاشتراك:

أولاً: 850 (ثمانمائة وخمسون جنيها) للمشاركين من خارج جامعة عين شمس فى حالة الدفع قبل 1 يوليو 2017

950 (تسعمائة وخمسون جنيها) فى حالة الدفع بعد 1 يوليو 2017

ثانياً: 750 (سبعمائة وخمسون جنيها) للمشاركين من داخل جامعة عين شمس فى حالة الدفع قبل 1 يوليو 2017

850 (ثمانمائة وخمسون جنيها) فى حالة الدفع بعد 1 يوليو 2017

يشمل الاشتراك (حضور المحاضرات وورش العمل – مطبوعات – غداء – استراحة)

تسدد رسوم الورشة على حساب وحدة التجارب والبحوث بالكلية رقم 9\450\80774\4 – بنك مصر – فرع جامعة عين شمس.

أ.د. خالد أبوزيد محمد

أ.د. مها فاروق

أستاذ ورئيس قسم الكيمياء الصيدلانية

قائم بعمل عميد الكلية

موبايل: 01222165624

Email: [pharm.chem@pharma.asu.edu.eg](mailto:pharm.chem@pharma.asu.edu.eg)

Website : [pharma.asu.edu.eg](http://pharma.asu.edu.eg)

## Time Plan:

| Day I<br>11-7-2017  | Day II<br>12-7-2017  | Day III<br>13-7-2017  |
|---|--|---|
| <b>Lectures</b>   | <b>Practical Sessions</b>  | <b>Practical Sessions</b>   |
| 9:00 – 10:00: registration<br>10:00-10:30: Opening, Welcome<br>Note<br>10:30-12:30: Dr. Tamer<br>12:30-2:30: Dr. Mohamed<br>ElAraby<br>2:30-3:30: coffee break<br>3:30-5:30: Dr. Yasmeen<br>mandour | 10 – 12:00: <b>Practical Session (1)</b><br>Building & application of a QSAR<br>model for public database.<br>(Department staff & TA's).<br>1:00 – 3:00: <b>Practical Session (2)</b><br>Construction & application of a<br>pharmacophore map for a set of<br>drug-like molecules using<br>Discovery Studio Software<br>(Department staff & TA's). | 10:00 – 12:00: <b>Practical Session<br/>(1)</b><br>Docking Tutorial (Case I)<br>(Department staff & TA's).<br>1:00 – 3:00: <b>Practical Session (2)</b><br>Docking Tutorial (Case II)<br>(Department staff & TA's). |