SRU Publications

NJC

ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY

PAPER

View Article Online
View Journal | View Issue

Published on 06 July 2020. Downloaded by ASSIUT UNIVERSITY on 8/19/2020 12:55:55 PM.

Check for updates

Cite this: *New J. Chem.*, 2020, 44, 13007

CK2 inhibition, lipophilicity and anticancer activity of new N^1 *versus* N^2-substituted tetrabromobenzotriazole regioisomers†

Ahmed El-Kardocy,[a] Yaser A. Mostafa,[b] Noha G. Mohamed,[a] Mohammad Nabil Abo-Zeid,[c] Nivin A. Hassan,[d] Helal F. Hetta[ef] and Abu-Baker M. Abdel-Aal *[ab]

A new series of antiproliferative casein kinase 2α (CK2α) inhibitors were synthesized incorporating either a hydrophilic group (carboxylic or hydrazide) or a hydrophobic group (ester) at N^1 or N^2 of 4,5,6,7-tetrabromobenzotriazole (TBBt). New compounds were prepared *via* *N*-alkylation of TBBt followed by base-catalysed hydrolysis or hydrazinolysis. All the compounds demonstrated low sub-micromolar inhibition of CK2α and antiproliferative activity against both breast and lung cancer cell lines (MCF-7, and A549, respectively), at low micromolar concentrations with N^2-regioisomers exhibiting higher activity than their corresponding N^1-isomers. The most active compound incorporates an acetic acid hydrazide moiety at the N^2 of the TBBt triazole nucleus with IC_{50} at 0.131 μM (CK2α), 9.1 μM (MCF-7) and 6.3 μM (A549). It induced apoptosis in the MCF-7 cell line through upregulation of bax (pro-apoptotic gene) four to five times higher than the corresponding ester or acid analogues. Molecular docking suggests that the hydrophilic group at N^2 of the TBBt triazole nucleus provides binding with important residues (Asp175, Lys68 and Trp176) in the ATP binding site of the CK2α enzyme. We are the first to experimentally estimate the lipophilicity of TBBt derivatives. Our study demonstrated that TBBt hydrazides are more lipophilic than their corresponding acids in contrast to the contradicting calculated lipophilicity using four well-known software programs. This may explain the higher anticancer activity of the most active hydrazide over its corresponding acid despite their nearly equipotent enzyme inhibition.

Received 9th March 2020,
Accepted 2nd July 2020

DOI: 10.1039/d0nj01194k

rsc.li/njc

JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION

pubs.acs.org/jchemeduc

Laboratory Experiment

Solvent-Free *N*-Formylation: An Experimental Application of Basic Concepts and Techniques of Organic Chemistry

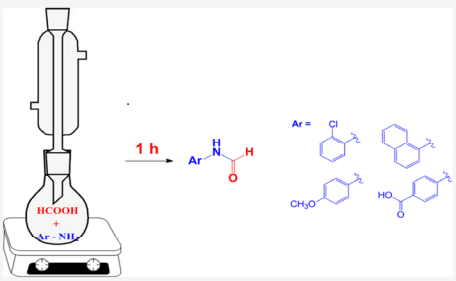
Yasser M. Omar, Noha G. Mohamed, Andrew N. Boshra, and Abu-Baker M. Abdel-Aal*

Cite This: https://dx.doi.org/10.1021/acs.jchemed.9b00983

Read Online

ACCESS | Metrics & More | Article Recommendations | Supporting Information

ABSTRACT: *N*-Formamides are important intermediates in the synthesis of many pharmacologically active compounds and are used as protecting groups for amines or as catalysts in different reactions. The current *N*-formylation experiment is designed as a part of an introductory organic chemistry course for undergraduate students. The experiment includes formylation of substituted aromatic amines using formic acid under solvent-free conditions. Students are introduced to laboratory safety precautions, reaction mechanism, and basic laboratory techniques such as a solvent-free reaction setup, reflux, filtration, melting point determination, yield calculation, and lab report write-up. Students synthesized four different formamides in 50−80% yield as a straightforward application of nucleophilic substitution reactions.



KEYWORDS: *Organic Chemistry, Amides, Second-Year Undergraduate*

SRU
Student Research Unit

قام بافتتاح الوحدة

أ.د شحاتة غريب
نائب رئيس الجامعة لشئون التعليم و الطلاب

أ.د. طارق عبدالله مرسى الجمال
رئيس الجامعة

أ.د أحمد عبد المولى
عميد كلية الصيدلة

تم الموافقة على انشاء وحدة الأبحاث الطلابية بكلية الصيدلة بمجلس الجامعة رقم 685 المنعقد في 27/3/2018
برئاسة أ.د. أحمد عبده جعيص
و تم تشكيل إدارة الوحدة على النحو الاتي
السيد أ.د. عميد الكلية (رئيسا)
السيد أ.د. وكيل الكلية لشئون الطلاب (مشرفا عاما) السيد د. أبو بكر مصطفى عبد العال (منسق الوحدة)

المشاركون فى أنشطة الوحدة (2018-2020)

من أعضاء هيئة التدريس

د. أبو بكر مصطفى عبد العال د. أحمد صفوت أبو ريه د. محمد أحمد المختار

من الهيئة المعاونة

م.م. ياسر محمد عمر م.م. أندرو نبيل بشري م.م. نهى جمال محمد فكرى
ص. مصطفي أحمد حسن ص. أحمد محمود مصطفى

من الطلاب الزائرين

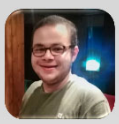
رامى (الجزائر) مالا (اندونيسيا) كينزا (فرنسا)
يارا (اندونيسيا) هانا (كندا) شينيلو (فرنسا)

من الطلاب الحاليين

يوستينا ايمن ماهر (رابعة كلينيكال) لبنى أنور عبد الحفيظ (ثالثة كلينيكال) مارينا جمال شهدي (خامسة كلينيكال)
أمنية أحمد ابراهيم (رابعة عام) عثمان محمد حسن (ثالثة عام) كيرليس بهاء (ثالثة عام)

من الطلاب السابقين

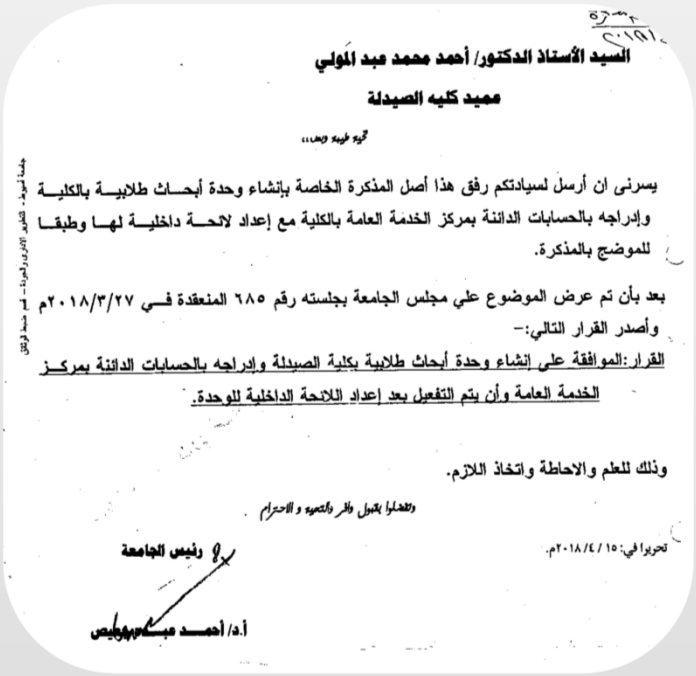
خريجو 2020 : كيرليس يسرى كوثر سحيب شيماء جمال
خريجو 2019 : محمد أحمد محمود محمد أحمد عبد الباقي محمد عادل خليفة
ريم محروس محمد فتحي همام عمر الشاذلي اماني خميس أمل عبد الفتاح مارك حسني
خريجو 2018 : أحمد بدر الدين



SRU
Student Research Unit
وحدة الأبحاث الطلابية

أ.د أحمد عبد المولى
عميد كلية الصيدلة

قرار الجامعة لانشاء الوحدة



السيد الأستاذ الدكتور/ أحمد محمد عبد المولي

عميد كليه الصيدلة

تحيه طيبه وبعد،،

يسرنى ان أرسل لسيادتكم رفق هذا أصل المذكرة الخاصة بإنشاء وحدة أبحاث طلابية بالكلية وإدراجه بالحسابات الدائنة بمركز الخدمة العامة بالكلية مع إعداد لائحة داخلية لها وطبقا للموضح بالمذكرة.

بعد بأن تم عرض الموضوع علي مجلس الجامعة بجلسته رقم ٦٨٥ المنعقدة في ٢٠١٨/٣/٢٧م وأصدر القرار التالي:-

القرار: الموافقة على إنشاء وحدة أبحاث طلابية بكلية الصيدلة وإدراجه بالحسابات الدائنة بمركز الخدمة العامة وأن يتم التفعيل بعد إعداد اللائحة الداخلية للوحدة.

وذلك للعلم والاحاطة واتخاذ اللازم.

وتفضلوا بقبول فائق التحية و الاحترام

تحريرا في: ١٥ / ٤ / ٢٠١٨م.

رئيس الجامعة

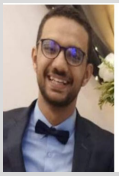
أ.د/ احمد عبد الموجود

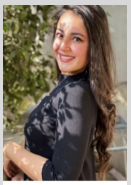
د. محمد أحمد المختار

د. أحمد صفوت أبو ريه

د. أبو بكر مصطفى عبد العال

د/ياسر عبدالهادى مصطفى





زيارة عميد كلية الصيدلة الاستاذ الدكتور أحمد عبد المولى لوحدة الأبحاث الطلابية لتفقد تجهيز و تطوير الوحدة
أبدى سيادته دعمه لأعمال الوحدة و تشجيعه للطلاب لمزيد من الابداع و البحث العلمى و أثنى على تميز وحدة الأبحاث الطلابية على مستوى الجامعات المصرية.