



Mahmoud A. A. Ibrahim, Dr.

Leader of CompChem Research Group
Chemistry Department,
Faculty of Science, Minia University,
Minia 61519, Egypt.

Phone: +201024161444
Email: m.ibrahim@compchem.net
m.ibrahim@mu.edu.eg
Website: www.compchem.net

EDUCATION	Doctor of Philosophy in Science (Ph.D.) 2008-2012 Institution: School of Chemistry, The University of Manchester, UK Subject: Physical Chemistry (Computational Chemistry) Title: "Development and Applications in Computer-Aided Drug Discovery"
	Master of Science (M.Sc.) 2005-2007 Institution: Faculty of Science, Minia University, Egypt Subject: Chemistry Title: "Novel potentiometric membrane sensors for selective determination of some cations"
	Bachelor of Science (B.Sc.) 1998-2002 Institution: Faculty of Science, Minia University, Egypt Subject: Chemistry Grade: 79.5% (top of the class)

EMPLOYMENT	1) Name and Address of Employer: Faculty of Science, Minia University, Egypt Position: Demonstrator at Chemistry Department Period: from 25/11/2002 to 30/01/2008
	2) Name and Address of Employer: Faculty of Science, Minia University, Egypt Position: Assistant Lecturer at Chemistry Department Period: from 31/01/2008 to 25/11/2012
	3) Name and Address of Employer: Faculty of Science, Minia University, Egypt Position: Lecturer at Chemistry Department Period: from 26/11/2012 to 27/05/2019
	4) Name and Address of Employer: School of Health Sciences, University of KwaZulu-Natal, South Africa Position: Honorary Research Fellow Period: from 1/07/2022 to 31/06/2027
	5) Name and Address of Employer: Faculty of Science, Minia University, Egypt Position: Ass. Professor at Chemistry Department Period: from 28/05/2019 to present

RESEARCH INTERESTS	• Computer-aided drug discovery • Molecular modeling • Quantum mechanics and Molecular Dynamics
SCHOLARSHIPS	• Scholarship: PhD Degree University: The University of Manchester, United Kingdom Duration: 4 years (9/2008-8/2012) Funding Organization: Egyptian Ministry of Higher Education and Scientific Research • Scholarship: Visiting Scholar/Professor University: Purdue University, USA Duration: 6 months (2/2022-7/2022) Funding Organization: Egyptian Ministry of Higher Education and Scientific Research
ACADEMIC ACTIVITIES	• Founded Computational Chemistry Lab at Chemistry Department, Faculty of Science, Minia University, Egypt • Supervisor for 11 M.Sc. and 2 Ph.D. students. • Reviewed more than 500 research articles for RSC, ACS, Springer, Taylor&Francis, Elsevier, and Willey. • Examined 8 M.Sc. and 5 Ph.D. theses • Evaluated a research project for the French National Research Agency • Evaluated a research project for the Science, Technology & Innovation Funding Authority (STDF)
TEACHING EXPERIENCE	• General Chemistry (I), 1st Level BSc., Faculty of Science, Minia University • General Chemistry (II), 1st Level BSc., Faculty of Science, Minia University • Quantum Chemistry (I), 2nd Level BSc., Faculty of Science, Minia University • Quantum Chemistry (II), 3rd Level BSc., Faculty of Science, Minia University • Applied Chemistry, 3rd Level BSc., Faculty of Fine Arts, Minia University • Physical Chemistry (I), 3rd Level BSc., Faculty of Science, Minia University • Advanced Quantum Chemistry, MSc., Faculty of Science, Minia University • Drug Design and Discovery, 4th Level, Biotechnology Program, Faculty of Science, Cairo University • Inorganic Chemistry, 1st Level BSc. Faculty of Dentistry, Minia University • Practical Inorganic Chemistry, 1st Level BSc., Faculty of Science, Minia University • Practical Inorganic Chemistry, 2nd Level BSc., Faculty of Science, Minia University • Practical Physical Chemistry, 3rd Level BSc., Faculty of Science, Minia University
MEMBERSHIPS	<u>Scientific Organization/Body</u> • Founder and Chairman of Egyptian Society of Theoretical and Computational Chemistry (ESTCC)(from 12/2015 to present). • Member of the National Pure and Applied Chemistry Committee (ASRT-Egypt) (from 8/2022 to present). • Fellow of Academy of Scientific Research and Technology (ASRT-Egypt) (from 10/2015 to present).

- Member of American Chemistry Society (ACS; ID: 30172913) (from 1/2016 to 12/2024).
- Former Member of Egyptian Young Academy of Sciences (EYAS) (from 1/2018 to 12/2020).
- Member of Egyptian Chemical Society (ECS; Egypt) (from 10/2018 to present).
- Member of Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC) (from 6/2016 to present).
- Member of Royal Society of Chemistry (RSC, UK) (ID: 479217) (from 1/2012 to 12/2018).
- Member in Drug Research Council, ASRT, Egypt (from 10/2015 to 9/2018).
- Member of Molecular Graphics and Modelling Society (MGMS, UK) (from 2/2010 to 8/2012)
- IUPAC-Affiliate Membership (from 1/2014 to 12/2015)

Editorial Board

- Editor for "The Protein Journal", Springer (from 8/2021 to present).
- Editor for "PLOS One", Public Library of Science (from 8/2021 to present).
- Editorial Secretary of El-Minia Science Bulletin, Minia University, Egypt (from 5/2018 to 2/2022).
- Editor for "Oriental Journal of Physical Sciences" (from 11/2016 to present).
- Editor for "SF Journal of Pharmaceutical and Analytical Chemistry" (from 9/2017 to present).
- Editor for "Journal of Organic and Biomolecular Simulations" (from 10/2013 to present).

FUNDED PROJECTS

- **Project Title:** Halogen bonding: a multipronged study towards better definition and application in drug discovery
Role: Principal Investigator
Budget: 1,497,322 EGP
Starting Date: 25/05/2014
Duration: 36 months
Funding Organization: Science and Technology Development Fund, Egypt
- **Project Title:** Lead discovery and optimization of LTB4 inhibitors for the treatment of inflammatory diseases
Role: Principal Investigator
Starting Date: 16/10/2014
Budget: 852,628 EGP
Duration: 24 months
Funding Organization: Science and Technology Development Fund, Egypt
- **Project Title:** Towards manufacturing of active and inactive pharmaceutical ingredients in Egypt
Role: Contributor
Budget: 100,000 EGP
Starting Date: 27/10/2015
Duration: 12 months
Funding Organization: Academy of Scientific Research and Technology, Egypt
- **Project Title:** Multidrug resistance protein-oriented anticancer drug discovery (MRP-ADD)

Role: Computational Chemistry Group Leader

Budget: 3,000,000 EGP

Starting Date: 31/12/2017

Duration: 24 months

Funding Organization: Science and Technology Development Fund, Egypt

- **Project Title:** *In-silico* and *in-vitro* lead discovery and optimization of novel PI4KIII β inhibitors for the treatment of breast cancer

Role: Main Supervisor

Budget: 74,250 EGP

Starting Date: 15/3/2018

Duration: 6 months

Funding Organization: Academy of Scientific Research and Technology, Egypt

- **Project Title:** Discovering and developing corrosion inhibitors for active metals in space using computational chemistry techniques

Role: Main Supervisor

Budget: 74,500 EGP

Starting Date: 15/3/2020

Duration: 6 months

Funding Organization: Academy of Scientific Research and Technology, Egypt

- **Project Title:** Artificial Intelligence (AI) application in drug discovery of potent inhibitors towards COVID-19 disease

Role: Main Supervisor

Starting Date: 15/3/2021

Budget: 60,000 EGP

Duration: 6 months

Funding Organization: Academy of Scientific Research and Technology, Egypt

- **Project Title:** Discovery of ABCG2 inhibitors to overcome breast cancer drug resistance: corroborative *in silico/in vitro* strategies

Role: Consultant

Budget: 50,000 SAR

Starting Date: 7/12/2021

Duration: 12 months

Funding Organization: University of Hafr Al Batin, Saudi Arabia

- **Project Title:** Discovery of prospective BCL-2 inhibitor to conquer cancer drug resistance hybrid *in silico* and *in vitro* investigations

Role: Main Supervisor

Budget: 74,325 EGP

Starting Date: 15/3/2022

Duration: 6 months

Funding Organization: Academy of Scientific Research and Technology, Egypt

- **Project Title:** Microbial and natural metabolites as neurophilin-1 (NRP1) drug candidates against COVID-19 remediation: hybrid computational/cell bioassay study

Role: Main Supervisor

Budget: 74,050 EGP

Starting Date: 15/3/2022

Duration: 6 months

Funding Organization: Academy of Scientific Research and Technology, Egypt

- **Project Title:** Microbial and natural products as inhibitors of BCL-2 protein for cancer therapy: a computational/in vivo hybrid study

Role: Consultant

Budget: 95,000 SAR

Starting Date: 13/4/2022

Duration: 12 months

Funding Organization: University of Hafr Al Batin, Saudi Arabia

- **Project Title:** Exploring Natural Compounds and Approved Drugs for Hunting Bcl-2 Inhibitors as Prospective Anticancer Drug candidates: *In Silico* and *In Vitro* Study

Role: Consultant

Budget: 50,000 SAR

Starting Date: 15/5/2022

Duration: 12 months

Funding Organization: University of Umm Al-Qura, Saudi Arabia

- **Project Title:** Exploring and Developing Nanocarriers for Anti-COVID-19 Drug Delivery

Role: Consultant

Budget: 50,000 SAR

Starting Date: 15/5/2022

Duration: 12 months

Funding Organization: University of Umm Al-Qura, Saudi Arabia

- **Project Title:** Exploring Natural Products for Hunting SIRT2 Inhibitors as Anticarcinoma Drug Candidates: Hybrid In-silico/In-vitro Study

Role: Consultant

Budget: 40,000 SAR

Starting Date: 15/12/2022

Duration: 12 months

Funding Organization: University of Umm Al-Qura, Saudi Arabia

- **Project Title:** Enhancement and upgrading the technical capacity of the scientific and applied research unit at Faculty of Science – Minia University

Role: Principal Investigator

Budget: 3,000,000 EGP

Starting Date: 20/10/2022

Duration: 18 months

Funding Organization: Academy of Scientific Research and Technology, Egypt

- **Project Title:** Developing Nanomaterials as Anti-Cancer Drug Carriers in Drug Delivery Process

Role: Consultant

Budget: 40,000 SAR

Starting Date: 15/12/2022

Duration: 12 months

Funding Organization: University of Umm Al-Qura, Saudi Arabia

**CONFERENCES
& WORKSHOPS**

- 7th Modeling & Design of Molecular Modeling Interaction Conference, 26th-30th June 2016, Wroclaw University of Technology, Poland.
- Drug Design Euro 2016, 18th-22nd June 2016, University of Milano, Italy.
- Innovative Approaches to Computational Drug Discovery, 2nd-6th October 2011, EPFL, Lausanne, Switzerland.
- MGMS Young Modellers' Forum 2011, School of Oriental & African Studies, London University, UK.
- MGMS Young Modellers' Forum 2010, School of Oriental & African Studies, London University, UK.
- Understanding Molecular Simulations, 4th-15th January 2010, University of Amsterdam, Netherland.
- International Computational Drug Discovery 2010, 21st June–2nd July 2010, Radboud University Nijmegen, Netherlands.
- Free-Energy calculations with LUMED, 28th September-1st October 2010, CECAM, EPFL, Lausanne, Switzerland.

**SCIENTIFIC
ACHIEVEMENTS**

- **Total no. of publications:** 184
- **h index:** 27
- **Citations:** 2584
- **Scopus ID:** 37561365700

**SCIENTIFIC
PRIZES**

- The world's Top 2% of Scientists List, Stanford University (2023)
- Minia University's International Publication prize (2023)
- The world's Top 2% of Scientists List, Stanford University (2022)
- Minia University's International Publication prize (2022)
- Honorary Research Fellow from The University of KwaZulu-Natal, South Africa, 2022-2027.
- The world's Top 2% of Scientists List, Stanford University (2021)
- Minia University's International Publication prize (2021)
- Minia University's International Publication prize (2020)
- Minia University's Encouragement prize (Basic Sciences, 2019)
- Minia University's International Publication prize (2019)
- Minia University's International Publication prize (2018)
- Minia University's Scientific Project prize (2018)
- Minia University's Scientific Project prize (2017)
- Minia University's International Publication prize (2014)
- Minia University's International Publication prize (2013)

**PUBLISHED
BOOKS**

- **Book Title:** Towards manufacturing of active and inactive pharmaceutical ingredients in Egypt
- **Authors:** Ehab S. I. Desoky *et. al.* (Mahmoud A. A. Ibrahim)
- **Publisher:** Academy of Scientific Research and Technology, Egypt
- **Year:** 2017
- **ISSN:** 978-977-268-704-6

**PUBLICATION
LIST**

1. M. N. Ahmed, H. Andleeb, A. M. Fahim, M. Madni, S. W. Khan, B. Kaboudin, M. A. A. Ibrahim, P. A. Sidhom and D. M. Gil, *J. Mol. Struct.*, 2024, **1296**.

2. O. B. Akawa, F. O. Okunlola, M. I. Alahmdi, N. E. Abo-Dya, P. A. Sidhom, M. A. A. Ibrahim, M. F. Shibl, S. Khan and M. E. S. Soliman, *European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics*, 2024, **194**, 9-19.
3. A. A. Aly, E. M. Abdallah, S. A. Ahmed, M. M. Rabee, O. Fuhr, M. A. A. Ibrahim, H. Ali Alzahrani and B. G. M. Youssif, *Polyhedron*, 2024, **251**.
4. M. A. Bashir, M. N. Ahmed, D. M. Gil, A. Frontera, J. G. Sun, T. M. Almutairi, M. N. Tahir and M. A. A. Ibrahim, *J. Mol. Struct.*, 2024, **1315**.
5. E. Dabbish, S. Scoditti, M. N. I. Shehata, I. Ritacco, M. A. A. Ibrahim, T. Shoeib and E. Sicilia, *J. Comput. Chem.*, 2024, **45**, 663-670.
6. H. R. El-Seedi, H. M. S. Ibrahim, N. Yosri, M. A. A. Ibrahim, M. F. Hegazy, W. N. Setzer, Z. Guo, X. Zou, M. S. Refaey, S. E. Salem, S. G. Musharraf, A. Saeed, S. E. Salem, B. Xu, C. Zhao and S. A. M. Khalifa, *Curr. Med. Chem.*, 2024, **31**, 62-101.
7. M. S. Elnaggar, N. Ibrahim, A. M. Elissawy, A. Anwar, M. A. A. Ibrahim and S. S. Ebada, *Phytochem.*, 2024, **217**, 113901.
8. G. M. Happi, K. G. Sikam, M. A. A. Ibrahim, L. C. Dzouemo, G. P. M. Kemayou, P. L. Keuteu, P. A. Sidhom, S. R. M. Sayed, M. E. F. Hegazy and J. D. Wansi, *Open Chemistry*, 2024, **22**.
9. N. M. Hegazi, T. A. Mohamed, A. Salama, A. R. Hamed, H. H. Saad, I. A. Saleh, E. H. Reda, A. A. A. Elsayed, M. A. A. Ibrahim, P. W. Pare, T. Efferth and M. F. Hegazy, *Food & Function*, 2024, **15**, 4354-4364.
10. M. A. A. Ibrahim, H. A. A. Abuelliel, N. A. M. Moussa, A. S. M. Rady, S. R. M. Sayed, M. A. El-Tayeb, M. N. Ahmed, M. K. Abd El-Rahman and T. Shoeib, *RSC Adv.*, 2024, **14**, 22408-22417.
11. M. A. A. Ibrahim, M. H. A. Hamad, N. A. M. Moussa, O. H. Abd-Elkader, S. R. M. Sayed, M. N. Ahmed, A. M. Awad and T. Shoeib, *RSC Adv.*, 2024, **14**, 13915-13925.
12. M. A. A. Ibrahim, A. H. H. Mahmoud, A.-s. S. M. Rady, P. A. Sidhom, S. R. M. Sayed, M. T. Yassin, A. I. M. Rabee, T. Shoeib and L. A. Mohamed, *J. Mol. Struct.*, 2024, **1315**, 138995.
13. M. A. A. Ibrahim, A. M. M. Mahmoud, M. N. I. Shehata, R. R. A. Saeed, N. A. M. Moussa, S. R. M. Sayed, M. K. Abd El-Rahman and T. Shoeib, *ACS Omega*, 2024, **9**, 10391-10399.
14. M. A. A. Ibrahim, A. S. M. Rady, P. A. Sidhom, S. R. M. Sayed, K. E. Ibrahim, A. M. Awad, T. Shoeib and L. A. Mohamed, *ACS Omega*, 2024, **9**, 25203-25214.
15. O. u. R. Khan, S. Latif, B. A. Khan, S. Yousaf, M. Ashfaq, K. S. Munawar, Z. Rashid, S. R. M. Sayed, P. A. Sidhom, M.-E. F. Hegazy and M. A. A. Ibrahim, *J. Mol. Struct.*, 2024, **1305**.
16. T. A. Mohamed, S. M. Abdelmawgoud, A. A. Hamdy, M. A. A. Ibrahim, A. I. Elshamy, M. A. M. Atia, H. A. Kassem, M. F. Hegazy and N. M. Selim, *Nat. Prod. Res.*, 2024, **38**, 512-522.
17. M. S. Mughal, B. Akram, B. A. Khan, T. A. Mughal, S. Sulaiman, O. H. Abd-Elkader, S. R. M. Sayed, M. A. A. Ibrahim and A. M. Sidky, *ACS Omega*, 2024, **9**, 22979-22989.
18. T. Noor, M. Waqas, M. Shaban, S. Hameed, R. Ateeq Ur, S. B. Ahmed, H. A. Alrafai, S. I. Al-Saeedi, M. A. A. Ibrahim, N. M. A. Hadia, R. A. Khera and A. A. Hassan, *ACS Omega*, 2024, **9**, 6403-6422.
19. X. Q. Peters, G. Elamin, A. Aljoundi, M. I. Alahmdi, N. E. Abo-Dya, P. A. Sidhom, A. M. Tawfeek, M. A. A. Ibrahim, O. Soremekun and M. E. S. Soliman, *Current Pharmaceutical Biotechnology*, 2024, **25**, 1288-1303.
20. S. Sadiq, R. A. Khera, A. M. Tawfeek, M. A. A. Ibrahim, F. Abbas, S. Ali, A. Mahal, D. Meitao and M. Waqas, *J. Phys. Org. Chem.*, 2024, **37**.
21. W. C. Sum, S. S. Ebada, M. A. A. Ibrahim, H. Kellner and M. Stadler, *Molecules*, 2024, **29**.

22. W. C. Sum, D. Gonkhom, M. A. A. Ibrahim, M. Stadler and S. S. Ebada, *Mycological Progress*, 2024, **23**.
23. J. P. Wennrich, C. Holzenkamp, S. Ashrafi, W. Maier, H. Wang, M. A. A. Ibrahim, S. S. Ebada and M. Stadler, *Chem. Biodivers.*, 2024, **n/a**, e202401152.
24. Q. Zou, J. Chunduru, N. LaRoe, Y. Yang, T. A. Mohamed, N. M. Hegazi, M. A. A. Ibrahim, M. F. Hegazy, D. Pappas and P. W. Pare, *Fitoterapia*, 2024, **177**, 106124.
25. M. N. Ahmed, M. Akhtar, H. Andleeb, M. A. Bashir, M. A. A. Ibrahim, P. A. Sidhom, I. Arshad, M. N. Tahir, D. M. Gil, R. M. Gomila and A. Frontera, *CrystEngComm*, 2023, **25**, 6710-6718.
26. S. J. Akram, N. M. A. Hadia, A. M. Shawky, J. Iqbal, M. I. Khan, N. S. Alatawi, M. A. A. Ibrahim, M. Ans and R. A. Khera, *ACS Omega*, 2023, **8**, 11118-11137.
27. R. A. A. Al-Shuaeeb, A. A. Yassin, M. A. A. Ibrahim, H. R. Abd El-Mageed, M. A. Ghandour and M. M. Khalil, *J. Biomol. Struct. Dyn.*, 2023, **41**, 1553-1560.
28. L. H. Al-Wahaibi, E. M. El-Sheref, A. A. Hassan, S. Brase, M. Nieger, B. G. M. Youssif, M. A. A. Ibrahim and H. N. Tawfeek, *Pharmaceuticals (Basel)*, 2023, **16**.
29. R. Ali, S. Nadeem, R. A. Khera, A. A. AlObaid, I. Warad, M. A. A. Ibrahim and M. Waqas, *J. Comput. Biophys. Chem.*, 2023, **22**, 1013-1040.
30. N. M. Almansour, A. H. M. Abdelrahman, E. Ismail Fagiree and M. A. A. Ibrahim, *J. Biomol. Struct. Dyn.*, 2023, **41**, 7651-7664.
31. N. M. Almansour, K. S. Allemailem, A. A. Abd El Aty, D. Boussofoufa, E. Ismail Fagiree and M. A. A. Ibrahim, *J. Biomol. Struct. Dyn.*, 2023, DOI: 10.1080/07391102.2023.2180668, 1-17.
32. N. M. Almansour, K. S. Allemailem, A. A. Abd El Aty, E. I. F. Ismail and M. A. A. Ibrahim, *Molecules*, 2023, **28**, 783.
33. A. A. Aly, M. B. Alshammari, A. Ahmad, H. A. M. Gomaa, B. G. M. Youssif, S. Bräse, M. A. A. Ibrahim and A. H. Mohamed, *Arab. J. Chem.*, 2023, **16**.
34. Y. Boulaamane, I. Touati, N. Goyal, A. Chandra, L. Kori, M. A. A. Ibrahim, M. R. Britel and A. Maurady, *J. Biomol. Struct. Dyn.*, 2023, DOI: 10.1080/07391102.2023.2260879, 1-18.
35. Z. F. Dube, O. S. Soremekun, T. Ntombela, M. I. Alahmdi, N. E. Abo-Dya, P. A. Sidhom, A. M. Shawky, M. F. Shibl, M. A. Ibrahim and M. E. Soliman, *Future Med. Chem.*, 2023, **15**, 1719-1738.
36. G. Elamin, O. S. Soremekun, S. R. M. Sayed, P. A. Sidhom, M. A. A. Ibrahim, M. N. Ahmed and M. E. S. Soliman, *J. Comput. Biophys. Chem.*, 2023, **23**, 207-221.
37. M. Elsbaey, Y. Igarashi, M. A. A. Ibrahim and E. Elattar, *RSC Adv.*, 2023, **13**, 2871-2883.
38. G. Ghaly, H. Tallima, E. Dabbish, N. Badr Eldin, M. K. Abd El-Rahman, M. A. A. Ibrahim and T. Shoeib, *Molecules*, 2023, **28**.
39. P. P. Guo, M. A. A. Ibrahim, H. Zhang, Y. H. Wu, F. X. Yin, X. X. Zhang, A. Hussain, M. N. R. Dar, D. Y. Jiang, Y. M. Li, J. Zhang and Y. S. Han, *Arab. J. Chem.*, 2023, **16**.
40. O. Ibitoye, M. A. A. Ibrahim and M. E. S. Soliman, *Journal of Receptors and Signal Transduction*, 2023, **43**, 133-143.
41. M. A. A. Ibrahim, M. M. H. Abdelhamid, K. A. A. Abdeljawaad, A. H. M. Abdelrahman, G. A. H. Mekhemer, P. A. Sidhom, S. R. M. Sayed, P. W. Pare, M. F. Hegazy and T. Shoeib, *Molecules*, 2023, **28**.
42. M. A. A. Ibrahim, K. A. A. Abdeljawaad, A. H. M. Abdelrahman, M. M. H. Abdelhamid, M. A. Naeem, G. A. H. Mekhemer, P. A. Sidhom, S. R. M. Sayed, P. W. Pare and M. F. Hegazy, *PLoS One*, 2023, **18**, e0288919.
43. M. A. A. Ibrahim, K. A. A. Abdeljawaad, A. H. M. Abdelrahman, P. A. Sidhom, A. M. Tawfeek, G. A. H. Mekhemer, M. K. Abd El-Rahman, E. Dabbish and T. Shoeib, *Pharmaceuticals (Basel)*, 2023, **16**.
44. M. A. A. Ibrahim, K. A. A. Abdeljawaad, L. A. Jaragh-Alhadad, H. F. Oraby, M. A. M. Atia, O. R. Alzahrani, G. A. H. Mekhemer, M. F. Moustafa, A. M. Shawky, P. A.

- Sidhom and A. H. M. Abdelrahman, *J. Biomol. Struct. Dyn.*, 2023, DOI: 10.1080/07391102.2023.2176360, 1-16.
45. M. A. A. Ibrahim, K. A. A. Abdeljawaad, E. Roshdy, D. E. M. Mohamed, T. F. S. Ali, G. A. Gabr, L. A. Jaragh-Alhadad, G. A. H. Mekhemer, A. M. Shawky, P. A. Sidhom and A. H. M. Abdelrahman, *Sci. Rep.*, 2023, **13**, 2146.
46. M. A. A. Ibrahim, A. H. M. Abdelrahman, D. E. M. Mohamed, K. A. A. Abdeljawaad, M. A. Naeem, G. A. Gabr, A. M. Shawky, M. E. S. Soliman, P. A. Sidhom, P. W. Pare and M. F. Hegazy, *Viruses*, 2023, **15**.
47. M. A. A. Ibrahim, S. S. M. Ali, K. A. A. Abdeljawaad, A. H. M. Abdelrahman, G. A. Gabr, A. M. Shawky, G. A. H. Mekhemer, P. A. Sidhom, P. W. Pare and M. E. F. Hegazy, *J. Taibah Univ. Sci.*, 2023, **17**.
48. M. A. A. Ibrahim, M. H. A. Hamad, A. H. M. Mahmoud, G. A. H. Mekhemer, S. R. M. Sayed, M. K. A. El-Rahman, P. A. Sidhom, E. Dabbish and T. Shoeib, *Journal*, 2023, **15**.
49. M. A. A. Ibrahim, M. H. A. Hamad, A. H. M. Mahmoud, G. A. H. Mekhemer, P. A. Sidhom, S. R. M. Sayed, N. A. M. Moussa, A. I. M. Rabee, E. Dabbish and T. Shoeib, *RSC Adv.*, 2023, **13**, 17465-17475.
50. M. A. A. Ibrahim, A. H. M. Mahmoud, N. A. M. Moussa, G. A. H. Mekhemer, S. R. M. Sayed, M. N. Ahmed, M. K. Abd El-Rahman, E. Dabbish and T. Shoeib, *Molecules*, 2023, **28**.
51. M. A. A. Ibrahim, N. A. M. Moussa, A. H. M. Mahmoud, S. R. M. Sayed, P. A. Sidhom, M. K. Abd El-Rahman, T. Shoeib and L. A. Mohamed, *RSC Adv.*, 2023, **13**, 29023-29034.
52. M. A. A. Ibrahim, A. S. M. Rady, L. A. Mohamed, A. M. Shawky, T. H. A. Hasanin, P. A. Sidhom and N. A. M. Moussa, *J. Biomol. Struct. Dyn.*, 2023, DOI: 10.1080/07391102.2023.2169763, 1-15.
53. M. A. A. Ibrahim, A. S. M. Rady, N. A. M. Moussa, M. N. Ahmed, P. A. Sidhom, A. M. Shawky, A. M. Alqahtani and L. A. Mohamed, *J. Mol. Liq.*, 2023, **372**.
54. M. A. A. Ibrahim, R. R. A. Saeed, M. N. I. Shehata, N. A. M. Moussa, A. M. Tawfeek, M. N. Ahmed, M. K. Abd El-Rahman and T. Shoeib, *ACS Omega*, 2023, **8**, 32828-32837.
55. M. A. A. Ibrahim, M. N. I. Shehata, H. A. A. Abuelliel, N. A. M. Moussa, S. R. M. Sayed, M. N. Ahmed, M. K. Abd El-Rahman, E. Dabbish and T. Shoeib, *R. Soc. Open Sci.*, 2023, **10**, 231362.
56. M. A. A. Ibrahim, M. N. I. Shehata, N. A. M. Moussa, R. R. A. Hemia, H. S. M. Abd Elhafez, M. K. Abd El-Rahman, S. R. M. Sayed, P. A. Sidhom, E. Dabbish and T. Shoeib, *ACS Omega*, 2023, **8**, 27553-27565.
57. A. Idrees, Ateeq-ur-Rehman, M. Waqas, M. Shaban, S. I. Al-Saeedi, N. S. Alatawi, M. A. A. Ibrahim, T. H. A. Hasanin, N. M. A. Hadia and R. A. Khera, *J. Comput. Biophys. Chem.*, 2023, **22**, 1041-1066.
58. M. Ishtiaq, M. Waqas, H. Zubair, R. F. Mehmood, N. Al-Zaqri, R. A. Khera, M. A. A. Ibrahim and J. Iqbal, *J. Mol. Liq.*, 2023, **386**.
59. A. R. Issahaku, M. A. A. Ibrahim, N. Mukelabai and M. E. S. Soliman, *Protein J.*, 2023, **42**, 263-275.
60. A. R. Issahaku, S. M. Mncube, C. Agoni, S. K. Kwofie, M. I. Alahmdi, N. E. Abo-Dya, P. A. Sidhom, A. M. Tawfeek, M. A. A. Ibrahim, N. Mukelabai, O. Soremekun and M. E. S. Soliman, *J. Mol. Model.*, 2023, **29**, 122.
61. B. A. Khan, S. S. Hamdani, M. Khalid, M. Ashfaq, K. S. Munawar, M. N. Tahir, A. A. C. Braga, A. M. Shawky, A. M. Alqahtani, M. A. S. Abourehab, G. A. Gabr, M. A. A. Ibrahim and P. A. Sidhom, *Pharmaceuticals (Basel)*, 2023, **16**.
62. S. Khanam, S. J. Akram, R. A. Khera, S. T. Zohra, A. M. Shawky, N. S. Alatawi, M. A. A. Ibrahim and E. U. Rashid, *J. Mol. Graph. Model.*, 2023, **125**, 108580.

63. S. Khruengsai, P. Pripdeevech, C. Tanapichatsakul, W. C. Sum, M. A. A. Ibrahim, M. Stadler and S. S. Ebada, *RSC Adv.*, 2023, **13**, 19373-19378.
64. M. Majeed, M. Waqas, Z. Aloui, M. Essid, M. A. A. Ibrahim, R. A. Khera, M. Shaban and M. Ans, *ACS Omega*, 2023, **8**, 45384-45404.
65. M. H. Maqsood, R. A. Khera, R. F. Mehmood, S. J. Akram, N. Al-Zaqri, M. A. A. Ibrahim, S. Noor and M. Waqas, *J. Mol. Graph. Model.*, 2023, **124**, 108550.
66. K. Metwally, N. E. Abo-Dya, M. I. Alahmdi, M. Z. Albalawi, G. Yahya, A. Aljoundi, E. Y. Salifu, G. Elamin, M. A. A. Ibrahim, Y. Sayed, S. Fanucchi and M. E. S. Soliman, *Molecules*, 2023, **28**.
67. K. Metwally, N. E. Abo-Dya, A. M. E. Hamdan, M. N. Alrashidi, M. S. Alturki, O. M. Aly, A. Aljoundi, M. Ibrahim and M. E. S. Soliman, *Cell Biochem. Biophys.*, 2023, DOI: 10.1007/s12013-023-01163-y.
68. A. S. M. Rady, N. A. M. Moussa, L. A. Mohamed, P. A. Sidhom, S. R. M. Sayed, M. K. Abd El-Rahman, E. Dabbish, T. Shoeib and M. A. A. Ibrahim, *Heliyon*, 2023, **9**, e18690.
69. M. Rafiq, M. S. Mahr, R. Imran, M. Shaban, S. I. Al-Saeedi, T. H. A. Hasanin, M. Salim and M. A. A. Ibrahim, *J. Comput. Biophys. Chem.*, 2023, DOI: 10.1142/S2737416523420127.
70. E. H. Reda, N. M. Hegazi, M. Marzouk, Z. T. A. Shakour, A. M. El-Halawany, E. A. El-Kashoury, T. A. Mohamed, M. A. A. Ibrahim, K. A. Shams, N. S. Abdel-Azim, C. J. Kampf, T. Efferth, P. W. Pare and M. F. Hegazy, *Molecules*, 2023, **28**.
71. F. U. Rehman, S. Hameed, R. A. Khera, M. Shaban, M. Essid, Z. Aloui, S. I. Al-Saeedi, M. A. A. Ibrahim and M. Waqas, *ACS Omega*, 2023, **8**, 42492-42510.
72. F. U. Rehman, M. Waqas, M. Imran, M. A. A. Ibrahim, J. Iqbal, R. A. Khera, N. M. A. Hadia, S. I. Al-Saeedi and M. Shaban, *ACS Omega*, 2023, **8**, 43792-43812.
73. J. Rukhsar, M. Waqas, M. S. Akhter, M. Shaban, S. I. Al-Saeedi, M. S. Mahr, T. H. A. Hasanin, M. A. A. Ibrahim, N. S. Alatawi and R. A. Khera, *J. Phys. Org. Chem.*, 2023, **37**.
74. M. M. Saleh, T. El-Moselhy, E. El-Bastawissy, M. A. A. Ibrahim, S. R. M. Sayed, M. F. Hegazy, T. Efferth, L. A. Jaragh-Alhadad and P. A. Sidhom, *Eur. J. Med. Chem.*, 2023, **259**, 115675.
75. P. A. Sidhom, E. El-Bastawissy, M. A. A. Ibrahim, A. M. Shawky, A. Salama and T. El-Moselhy, *J. Med. Chem.*, 2023, **66**, 991-1010.
76. W. C. Sum, S. S. Ebada, M. Kirchenwitz, H. Kellner, M. A. A. Ibrahim, T. E. B. Stradal, J. C. Matasyoh and M. Stadler, *J. Agric. Food Chem.*, 2023, **71**, 11094-11103.
77. E. Ullah Rashid, N. Al-Zaqri, A. Boshala, I. Warad, J. Iqbal, M. Ans, M. Rizwan, M. A. A. Ibrahim and R. Ahmad Khera, *Comput. Theor. Chem.*, 2023, **1220**.
78. A. Zahoor, S. Sadiq, R. A. Khera, M. Essid, Z. Aloui, N. S. Alatawi, M. A. A. Ibrahim, T. H. A. Hasanin and M. Waqas, *J. Mol. Graph. Model.*, 2023, **125**, 108613.
79. H. Zubair, R. F. Mahmood, M. Waqas, M. Ishtiaq, J. Iqbal, M. A. A. Ibrahim, S. R. M. Sayed, S. Noor and R. A. Khera, *RSC Adv.*, 2023, **13**, 26050-26068.
80. M. Abdallah, K. A. Soliman, R. Alfattani, A. S. Al-Gorair, A. Fawzy and M. A. A. Ibrahim, *Int. J. Hydrog. Energy*, 2022, **47**, 12782-12797.
81. E. R. Abdelaleem, M. N. Samy, T. F. S. Ali, M. Mustafa, M. A. A. Ibrahim, G. Bringmann, S. A. Ahmed, U. R. Abdelmohsen and S. Y. Desoukey, *RSC Adv.*, 2022, **12**, 2992-3002.
82. M. B. Alshammari, A. A. Aly, S. Brase, M. Nieger, M. A. A. Ibrahim and L. E. Abd El-Haleem, *ACS Omega*, 2022, **7**, 34463-34475.
83. M. B. Alshammari, A. A. Aly, B. G. M. Youssif, S. Brase, A. Ahmad, A. B. Brown, M. A. A. Ibrahim and A. H. Mohamed, *Front. Chem.*, 2022, **10**, 1076383.

84. F. Amin, M. A. A. Ibrahim, S. Rizwan-Ul-Hasan, S. Khaliq, G. A. Gabr, Muhammad, A. Khan, P. A. Sidhom, P. Tikmani, A. M. Shawky, S. Ahmad and S. H. Abidi, *Molecules*, 2022, **27**, 8658.
85. Y. Boulaamane, M. A. A. Ibrahim, M. R. Britel and A. Maurady, *Journal of integrative bioinformatics*, 2022, **19**.
86. M. Elsbaey, M. A. A. Ibrahim and M. F. Hegazy, *RSC Adv.*, 2022, **12**, 12583-12589.
87. M. Elsbaey, M. A. A. Ibrahim, A. M. Shawky and T. Miyamoto, *ACS Omega*, 2022, **7**, 22725-22734.
88. M. I. Fatthalla, H. A. Abd El Salam, E. M. Zayed, M. A. A. Ibrahim and E. B. Pedersen, *Chemistryselect*, 2022, **7**.
89. M. Ghias, M. N. Ahmed, B. Sajjad, M. A. A. Ibrahim, U. Rashid, S. W. A. Shah, M. Shoaib, M. Madni, M. N. Tahir and M. A. Macías, *J. Mol. Struct.*, 2022, **1253**.
90. M. A. A. Ibrahim, K. A. A. Abdeljawaad, A. H. M. Abdelrahman, L. A. Jaragh-Alhadad, H. F. Oraby, E. B. Elkaeed, G. A. H. Mekhemer, G. A. Gabr, A. M. Shawky, P. A. Sidhom, M. E. S. Soliman, M. F. Moustafa, P. W. Pare and M. F. Hegazy, *Molecules*, 2022, **27**, 3104.
91. M. A. A. Ibrahim, A. H. M. Abdelrahman, E. A. A. Badr, N. M. Almansour, O. R. Alzahrani, M. N. Ahmed, M. E. S. Soliman, M. A. Naeem, A. M. Shawky, P. A. Sidhom, G. A. H. Mekhemer and M. A. M. Atia, *Mol. Divers.*, 2022, DOI: 10.1007/s11030-022-10389-6.
92. M. A. A. Ibrahim, A. H. M. Abdelrahman, L. A. Jaragh-Alhadad, M. A. M. Atia, O. R. Alzahrani, M. N. Ahmed, M. S. Moustafa, M. E. S. Soliman, A. M. Shawky, P. W. Pare, M. F. Hegazy and P. A. Sidhom, *Pharmaceuticals*, 2022, **15**, 153.
93. M. A. A. Ibrahim, E. A. A. Badr, A. H. M. Abdelrahman, N. M. Almansour, G. A. H. Mekhemer, A. M. Shawky, M. F. Moustafa and M. A. M. Atia, *Mol. Inform.*, 2022, **41**, e2060039.
94. M. A. A. Ibrahim, A. H. M. Mahmoud, G. A. H. Mekhemer, A. M. Shawky, M. E. S. Soliman and N. A. M. Moussa, *Nanomaterials (Basel)*, 2022, **12**.
95. M. A. A. Ibrahim, A. H. M. Mahmoud, K. A. Soliman, G. A. H. Mekhemer, M. N. Ahmed, A. M. Shawky, M. A. S. Abourehab, E. B. Elkaeed, M. E. S. Soliman and N. A. M. Moussa, *Nanomater.*, 2022, **12**, 1028.
96. M. A. A. Ibrahim, Y. A. M. Mohamed, H. S. M. Abd Elhafez, M. N. I. Shehata, M. E. S. Soliman, M. N. Ahmed, H. R. Abd El-Mageed and N. A. M. Moussa, *J. Mol. Graph. Model.*, 2022, **111**, 108097.
97. M. A. A. Ibrahim, N. A. M. Moussa, A. A. K. Kamel, M. N. I. Shehata, M. N. Ahmed, F. Taha, M. A. S. Abourehab, A. M. Shawky, E. B. Elkaeed and M. E. S. Soliman, *Molecules*, 2022, **27**, 2963.
98. M. A. A. Ibrahim, N. A. M. Moussa, S. M. A. Saad, M. N. Ahmed, A. M. Shawky, M. E. S. Soliman, G. A. H. Mekhemer and A. S. M. Rady, *ACS Omega*, 2022, **7**, 11264-11275.
99. M. A. A. Ibrahim, A. S. M. Rady, A. M. A. Mandarawe, L. A. Mohamed, A. M. Shawky, T. H. A. Hasanin, P. A. Sidhom, M. E. S. Soliman and N. A. M. Moussa, *Pharmaceuticals*, 2022, **15**, 1181.
100. M. A. A. Ibrahim, R. R. A. Saeed, M. N. I. Shehata, M. N. Ahmed, A. M. Shawky, M. M. Khowdiary, E. B. Elkaeed, M. E. S. Soliman and N. A. M. Moussa, *Int. J. Mol. Sci.*, 2022, **23**, 3114.
101. M. A. A. Ibrahim, R. R. A. Saeed, M. N. I. Shehata, E. E. B. Mohamed, M. E. S. Soliman, J. H. Al-Fahemi, H. R. A. El-Mageed, M. N. Ahmed, A. M. Shawky and N. A. M. Moussa, *J. Mol. Struct.*, 2022, **1265**, 133232.
102. M. A. A. Ibrahim, M. N. I. Shehata, A. S. M. Rady, H. A. A. Abuelliel, H. S. M. Abd Elhafez, A. M. Shawky, H. F. Oraby, T. H. A. Hasanin, M. E. S. Soliman and N. A. M. Moussa, *Int. J. Mol. Sci.*, 2022, **23**, 13023.

103. M. A. A. Ibrahim, M. N. I. Shehata, M. E. S. Soliman, M. F. Moustafa, H. R. A. El-Mageed and N. A. M. Moussa, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2022, **24**, 3386-3399.
104. B. A. Khan, S. S. Hamdani, M. N. Ahmed, S. Hameed, M. Ashfaq, A. M. Shawky, M. A. A. Ibrahim and P. A. Sidhom, *J. Enzyme Inhib. Med. Chem.*, 2022, **37**, 1464-1478.
105. B. A. Khan, S. S. Hamdani, M. N. Ahmed, U. Rashid, S. Hameed, M. A. A. Ibrahim, J. Iqbal, C. C. Granados and M. A. Macias, *J. Mol. Struct.*, 2022, **1265**, 133317.
106. B. A. Khan, S. S. Hamdani, S. Jalil, S. A. Ejaz, J. Iqbal, A. M. Shawky, A. M. Alqahtani, G. A. Gabr, M. A. A. Ibrahim and P. A. Sidhom, *Pharmaceuticals (Basel)*, 2022, **16**.
107. R. O. Kumi, C. Agoni, M. A. A. Ibrahim and M. E. S. Soliman, *Inform. Med. Unlocked*, 2022, **29**.
108. L. J. Li, Q. Y. Zou, J. Chunduru, M. A. A. Ibrahim, E. M. Hassan, N. Laroe, M. E. F. Hegazy and P. W. Pare, *Med. Chem. Res.*, 2022, **31**, 666-673.
109. Q. Liu, Y. Yao, M. A. A. Ibrahim, A. M. E. Halawany, L. Yang and X. Zhang, *Mar. Biotechnol.*, 2022, DOI: 10.1007/s10126-022-10104-4.
110. M. Madni, M. N. Ahmed, G. Abbasi, S. Hameed, M. A. A. Ibrahim, M. N. Tahir, M. Ashfaq, D. M. Gil, R. M. Gomila and A. Frontera, *ChemistrySelect*, 2022, **7**, e202202287.
111. T. A. Mohamed, S. K. Ali, A. I. Elshamy, I. A. Saleh, M. A. A. Ibrahim, M. A. M. Atia, S. O. Alshammari, A. E. H. Mohamed, T. A. Hussien, A. R. Hamed, H. R. E. Saedi, N. S. Abdel-Azim, K. A. Shams, T. Efferth, M. Saker, P. W. Pare and M. F. Hegazy, *Phytomedicine*, 2022, **100**, 154019.
112. S. M. Mostafa, A. A. Aly, A. A. Hassan, E. M. Osman, S. Brase, M. Nieger, M. A. A. Ibrahim and A. H. Mohamed, *Molecules*, 2022, **27**, 2125.
113. E. Y. Salifu, A. R. Issahaku, C. Agoni, M. A. A. Ibrahim, N. Manimbulu and M. E. S. Soliman, *Cell Biochem. Biophys.*, 2022, **80**, 11-21.
114. M. N. Samy, A. A. R. Gomaa, E. Z. Attia, M. A. A. Ibrahim, S. Y. Desoukey and M. S. Kamel, *S. Afr. J. Bot.*, 2022, **147**, 576-585.
115. M. Waqas, N. M. A. Hadia, M. M. Hessien, S. J. Akram, A. M. Shawky, J. Iqbal, M. A. A. Ibrahim and R. A. Khera, *Comput. Theor. Chem.*, 2022, **1217**.
116. M. Waqas, N. M. A. Hadia, M. M. Hessien, J. Iqbal, G. A. M. Mersal, S. Hameed, A. M. Shawky, Z. Aloui, M. A. A. Ibrahim and R. A. Khera, *J. Mol. Liq.*, 2022, **368**.
117. S. H. Abidi, N. M. Almansour, D. Amerzhanov, K. S. Allemailem, W. Rifaat, M. A. A. Ibrahim, P. la Fleur, M. Lukac and S. Ali, *Sci. Rep.*, 2021, **11**.
118. M. N. Ahmed, M. Ghias, S. W. A. Shah, M. Shoaib, M. N. Tahir, M. Ashfaq, M. A. A. Ibrahim, H. Andleeb, D. M. Gil and A. Frontera, *New J. Chem.*, 2021, **45**, 19928-19940.
119. B. Akbay, S. H. Abidi, M. A. A. Ibrahim, Z. Mukhatayev and S. Ali, *Vaccines*, 2021, **9**.
120. M. B. Alshammari, M. Ramadan, A. A. Aly, E. M. El-Sheref, M. A. Bakht, M. A. A. Ibrahim and A. M. Shawky, *J. Mol. Struct.*, 2021, **1230**.
121. A. A. Aly, A. A. Hassan, A. H. Mohamed, E. M. Osman, S. Bräse, M. Nieger, M. A. A. Ibrahim and S. M. Mostafa, *Mol. Divers.*, 2021, **25**, 461-471.
122. H. R. A. El-Mageed and M. A. A. Ibrahim, *J. Mol. Liq.*, 2021, **326**.
123. S. M. Elgengehi, S. El-Taher, M. A. A. Ibrahim and K. E. El-Kelany, *Comput. Theor. Chem.*, 2021, **1199**.
124. M. Elsbaey, M. A. A. Ibrahim, F. A. Bar and A. A. Elgazar, *S. Afr. J. Bot.*, 2021, **141**, 278-289.
125. A. I. Elshamy, T. A. Mohamed, M. A. A. Ibrahim, M. A. M. Atia, T. Yoneyama, A. Umeyama and M. E. Hegazy, *RSC Adv.*, 2021, **11**, 20151-20163.
126. M. A. A. Ibrahim, K. A. A. Abdeljawaad, A. H. M. Abdelrahman, O. R. Alzahrani, F. M. Alshabmi, E. Khalaf, M. F. Moustafa, F. Alrumaihi, K. S. Allemailem, M. E. S.

- Soliman, P. W. Pare, M. F. Hegazy and M. A. M. Atia, *Antibiotics (Basel)*, 2021, **10**, 934-956.
127. M. A. A. Ibrahim, K. A. A. Abdeljawaad, A. H. M. Abdelrahman and M. F. Hegazy, *J. Biomol. Struct. Dyn.*, 2021, **39**, 5722-5734.
128. M. A. A. Ibrahim, A. H. M. Abdelrahman, K. S. Allemailem, A. Almatroudi, M. F. Moustafa and M. F. Hegazy, *Protein J.*, 2021, **40**, 296-309.
129. M. A. A. Ibrahim, A. H. M. Abdelrahman, M. A. M. Atia, T. A. Mohamed, M. F. Moustafa, A. R. Hakami, S. A. M. Khalifa, F. A. Alhumaydhi, F. Alrumaihi, S. H. Abidi, K. S. Allemailem, T. Efferth, M. E. Soliman, P. W. Pare, H. R. El-Seedi and M. F. Hegazy, *Mar. Drugs*, 2021, **19**, 391.
130. M. A. A. Ibrahim, A. H. M. Abdelrahman and M. F. Hegazy, *J. Biomol. Struct. Dyn.*, 2021, **39**, 5756-5767.
131. M. A. A. Ibrahim, A. H. M. Abdelrahman, T. A. Mohamed, M. A. M. Atia, M. A. M. Al-Hammady, K. A. A. Abdeljawaad, E. M. Elkady, M. F. Moustafa, F. Alrumaihi, K. S. Allemailem, H. R. El-Seedi, P. W. Pare, T. Efferth and M. F. Hegazy, *Molecules*, 2021, **26**, 2082-2103.
132. M. A. A. Ibrahim, O. A. M. Ahmed, S. El-Taher, J. H. Al-Fahemi, N. A. M. Moussa and H. Moustafa, *ACS Omega*, 2021, **6**, 3319-3329.
133. M. A. A. Ibrahim, E. A. A. Badr, A. H. M. Abdelrahman, N. M. Almansour, A. M. Shawky, G. A. H. Mekhemer, F. Alrumaihi, M. F. Moustafa and M. A. M. Atia, *Cell Biochem. Biophys.*, 2021, **79**, 189-200.
134. M. A. A. Ibrahim, A. A. K. Kamel, M. E. S. Soliman, M. F. Moustafa, H. R. A. El-Mageed, F. Taha, L. A. Mohamed and N. A. M. Moussa, *ACS Omega*, 2021, **6**, 25476-25485.
135. M. A. A. Ibrahim, E. A. R. Mohamed, A. H. M. Abdelrahman, K. S. Allemailem, M. F. Moustafa, A. M. Shawky, A. Mahzari, A. R. Hakami, K. A. A. Abdeljawaad and M. A. M. Atia, *J. Mol. Graph. Model.*, 2021, **105**, 107904.
136. M. A. A. Ibrahim, Y. A. M. Mohamed, H. A. A. Abuelliel, A. S. S. M. Rady, M. E. S. Soliman, M. N. Ahmed, L. A. Mohamed and N. A. M. Moussa, *ChemistrySelect*, 2021, **6**, 11856-11864.
137. M. A. A. Ibrahim, N. A. M. Moussa, M. E. S. Soliman, M. F. Moustafa, J. H. Al-Fahemi and H. R. A. El-Mageed, *ACS Omega*, 2021, **6**, 19330-19341.
138. M. A. A. Ibrahim, A.-s. S. M. Rady, M. E. S. Soliman, M. F. Moustafa, H. R. A. El-Mageed and N. A. M. Moussa, *Struct. Chem.*, 2021, **33**, 9-21.
139. M. A. A. Ibrahim, S. M. A. Saad, J. H. Al-Fahemi, G. A. H. Mekhemer, S. A. Ahmed, A. M. Shawky and N. A. M. Moussa, *RSC Adv.*, 2021, **11**, 4022-4034.
140. M. A. A. Ibrahim and E. M. Z. Telb, *RSC Adv.*, 2021, **11**, 4011-4021.
141. M. Kandeel, A. H. M. Abdelrahman, K. Oh-Hashi, A. Ibrahim, K. N. Venugopala, M. A. Morsy and M. A. A. Ibrahim, *J. Biomol. Struct. Dyn.*, 2021, **39**, 5129-5136.
142. T. A. Mohamed, A. I. Elshamy, M. A. A. Ibrahim, M. A. M. Atia, R. F. Ahmed, S. K. Ali, K. A. Mahdy, S. O. Alshammari, A. M. Al-Abd, M. F. Moustafa, A. R. H. Farrag and M. E. F. Hegazy, *Biomolecules*, 2021, **11**.
143. S. Nazir, A. A. El-Sherif, N. T. Abdel-Ghani, M. A. A. Ibrahim, M. E. F. Hegazy and M. A. M. Atia, *Plants*, 2021, **10**.
144. P. Poonan, C. Agoni, M. A. A. Ibrahim and M. E. S. Soliman, *Protein J.*, 2021, **40**, 601-655.
145. E. Roshdy, M. Mustafa, A. E. Shaltout, M. O. Radwan, M. A. A. Ibrahim, M. E. Soliman, M. Fujita, M. Otsuka and T. F. S. Ali, *Eur. J. Med. Chem.*, 2021, **224**, 113709.
146. N. Yosri, A. A. Abd El-Wahed, R. Ghonaim, O. M. Khattab, A. Sabry, M. A. A. Ibrahim, M. F. Moustafa, Z. Guo, X. Zou, A. F. M. Algethami, S. H. D. Masry, M. F. AlAjmi, H. S. Afifi, S. A. M. Khalifa and H. R. El-Seedi, *Foods*, 2021, **10**.

147. A. A. Aly, S. Brase, A. A. Hassan, N. K. Mohamed, L. E. A. El-Haleem, M. Nieger, N. M. Morsy, M. B. Alshammari, M. A. A. Ibrahim and E. M. N. Abdelhafez, *Molecules*, 2020, **25**.
148. S. M. Elgengehi, S. El-Taher, M. A. A. Ibrahim, J. K. Desmarais and K. E. El-Kelany, *Appl. Surf. Sci.*, 2020, **507**, 145038.
149. M. A. A. Ibrahim, A. H. M. Abdelrahman, T. A. Hussien, E. A. A. Badr, T. A. Mohamed, H. R. El-Seedi, P. W. Pare, T. Efferth and M. F. Hegazy, *Comput. Biol. Med.*, 2020, **126**, 104046.
150. M. A. A. Ibrahim, A. H. M. Mahmoud and N. A. M. Moussa, *Chem. Pap.*, 2020, **74**, 3569-3580.
151. M. A. A. Ibrahim and N. A. M. Moussa, *ACS Omega*, 2020, **5**, 21824-21835.
152. M. A. A. Ibrahim, A. s. S. M. Rady, J. H. Al-Fahemi, E. M. Z. Telb, S. A. Ahmed, A. M. Shawky and N. A. M. Moussa, *ChemistrySelect*, 2020, **5**, 13223-13231.
153. M. A. A. Ibrahim and E. M. Z. Telb, *ACS Omega*, 2020, **5**, 21631-21640.
154. T. A. Mohamed, A. I. Elshamy, M. A. A. Ibrahim, A. Zellagui, M. F. Moustafa, A. H. M. Abdelrahman, S. Ohta, P. W. Pare and M. F. Hegazy, *RSC Adv.*, 2020, **10**, 34541-34548.
155. B. Sever, M. D. Altıntop, A. Özdemir, G. A. Çiftçi, D. E. Ellakwa, H. Tateishi, M. O. Radwan, M. A. A. Ibrahim, M. Otsuka, M. Fujita, H. I. Ciftci and T. F. S. Ali, *Molecules*, 2020, **25**.
156. A. A. Aly, E. M. El-Sheref, M. E. M. Bakheet, M. A. E. Mourad, S. Bräse, M. A. A. Ibrahim, M. Nieger, B. K. Garvalov, K. N. Dalby and T. S. Kaoud, *Bioorg. Chem.*, 2019, **82**, 290-305.
157. A. A. Aly, M. A. A. Ibrahim, E. M. El-Sheref, A. M. A. Hassan and A. B. Brow, *J. Mol. Struct.*, 2019, **1175**, 414-427.
158. M. F. Hegazy, T. A. Mohamed, A. I. Elshamy, A. R. Hamed, M. A. A. Ibrahim, S. Ohta, A. Umeyama, P. W. Pare and T. Efferth, *RSC Adv.*, 2019, **9**, 27183-27189.
159. S. E. Helaly, W. Kuephadungphan, P. Phainuphong, M. A. A. Ibrahim, K. Tasanathai, S. Mongkolsamrit, J. J. Luangsa-Ard, S. Phongpaichit, V. Rukachaisirikul and M. Stadler, *Beilstein J. Org. Chem.*, 2019, **15**, 2968-2981.
160. M. A. A. Ibrahim, A. H. M. Abdelrahman and A. M. A. Hassan, *Comput. Biol. Chem.*, 2019, **80**, 79-89.
161. M. A. A. Ibrahim, O. A. M. Ahmed, N. A. M. Moussa, S. El-Taher and H. Moustafa, *RSC Adv.*, 2019, **9**, 32811-32820.
162. M. A. A. Ibrahim and A. A. M. Hasb, *Theor. Chem. Acc.*, 2019, **138**, 2-13.
163. M. A. A. Ibrahim and M. E. A. Safy, *Phosphorus, Sulfur Relat. Elem.*, 2019, **194**, 444-454.
164. M. A. A. Ibrahim and E. M. Z. Telb, *ChemistrySelect*, 2019, **4**, 5489-5495.
165. R. M. Shaker, H. A. Abd El-Naby, E. K. Ahmed, M. A. A. Ibrahim and S. A. Gedamy, *Phosphorus, Sulfur Relat. Elem.*, 2019, **194**, 147-155.
166. A. A. Aly, E. M. El-Sheref, M. E. M. Bakheet, M. A. E. Mourad, A. B. Brown, S. Brase, M. Nieger and M. A. A. Ibrahim, *Bioorg. Chem.*, 2018, **81**, 700-712.
167. M. F. Hegazy, A. R. Hamed, M. A. A. Ibrahim, Z. Talat, E. H. Reda, N. S. Abdel-Azim, F. M. Hammouda, S. Nakamura, H. Matsuda, E. G. Haggag, P. W. Pare and T. Efferth, *Molecules*, 2018, **23**, 2221.
168. M. A. A. Ibrahim, A. A. M. Hasb and G. A. H. Mekhemer, *Theor. Chem. Acc.*, 2018, **137**, 38-47.
169. M. A. A. Ibrahim and A. M. A. Hassan, *Protein J.*, 2018, **37**, 518-530.
170. M. A. A. Ibrahim, N. A. M. Moussa and M. E. A. Safy, *J. Mol. Model.*, 2018, **24**, 219.
171. N. Swapana, T. Tominaga, A. I. Elshamy, M. A. A. Ibrahim, M. F. Hegazy, C. Brajakishor Singh, M. Suenaga, H. Imagawa, M. Noji and A. Umeyama, *Fitoterapia*, 2018, **129**, 47-53.

172. A. A. Aly, A. A. Hassan, E. S. S. M. AbdAl-Latif, M. A. A. Ibrahim, S. Bräse and M. Nieger, *Arkivoc*, 2017, **2018**, 102-111.
 173. A. A. Aly, A. A. Hassan, S. Bräse, M. A. A. Ibrahim, E. S. M. Abd Al-Latif, E. Spuling and M. Nieger, *J. Sulfur Chem.*, 2017, **38**, 69-75.
 174. A. A. Aly, A. A. Hassan, A. B. Brown, M. A. A. Ibrahim and E. S. M. AbdAl-Latif, *J. Sulfur Chem.*, 2017, **38**, 11-17.
 175. M. F. Hegazy, A. I. Elshamy, T. A. Mohamed, A. R. Hamed, M. A. A. Ibrahim, S. Ohta and P. W. Pare, *Mar. Drugs*, 2017, **15**, 192.
 176. R. A. Mekheimer, K. Al-Zaydi, M. A. A. Ibrahim, A. Al-Shamary and K. Sadek, *Z. Naturforsch. B*, 2017, **72**, 317-326.
 177. M. Mustafa, D. Abdelhamid, E. M. N. Abdelhafez, M. A. A. Ibrahim, A. M. Gamal-Eldeen and O. M. Aly, *Eur. J. Med. Chem.*, 2017, **141**, 293-305.
 178. A. A. Hassan, Y. R. Ibrahim, E. M. El-Sheref, M. A. A. Ibrahim and S. Bräse, *J. Heterocycl. Chem.*, 2015, **52**, 1201-1207.
 179. S. M. Ahmed, H. G. Kruger, T. Govender, G. E. Maguire, Y. Sayed, M. A. A. Ibrahim, P. Naicker and M. E. Soliman, *Chem. Biol. Drug Des.*, 2013, **81**, 208-218.
 180. P. Naicker, I. Achilonu, S. Fanucchi, M. Fernandes, M. A. A. Ibrahim, H. W. Dirr, M. E. Soliman and Y. Sayed, *J. Biomol. Struct. Dyn.*, 2013, **31**, 1370-1380.
 181. M. A. A. Ibrahim, *J. Mol. Model.*, 2012, **18**, 4625-4638.
 182. M. A. A. Ibrahim, *The journal of physical chemistry. B*, 2012, **116**, 3659-3669.
 183. M. A. A. Ibrahim, *J. Comput. Chem.*, 2011, **32**, 2564-2574.
 184. M. A. A. Ibrahim, *J. Chem. Inf. Model.*, 2011, **51**, 2549-2559.
-