



جمهورية العراق  
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي  
جامعة الموصل  
كلية علوم البيئة وتقاناتها  
قسم علوم البيئة

تطبيقات الارساء الجزيئي في اختبار كفاءة بعض المستخلصات النباتية  
ضد خميرة المبيضات البيضاء *C. albicans*

أبو بكر عبدالرحيم ذنون الغزال

رسالة ماجستير

في علوم البيئة

بإشراف

الأستاذ الدكتور

محمد إبراهيم خليل

## الخلاصة

استعملت تقنية الارساء الجزيئي للتوصل إلى مادة فعالة تستخدم كمضاد للفطر (*Candida albicans*) من العديد من الأنواع النباتية حيث، اختبرت هذه المواد الفعالة افتراضياً (*In silico*) لمعرفة فعاليتها في تثبيط البروتين المسؤول عن تصنيع الدهون التي تدخل في تركيب الغشاء الخلوي للفطر. تم استخدام عدة برامج حاسوبية منها (PYMOL) للعرض وصف المركبات الكيميائية و(PYRX) لأجراء عملية الارساء الجزيئي وبعض البرامج الأخرى لمعالجة الليغاندات مثل .Open babel ,Avogadro

تم اختيار البروتين الهدف وهو إنزيم (cyp51) (cytochrome P450 monooxygenase) كونه من البروتينات الأساسية في نمو وتطور الفطريات، حيث يدخل في تصنيع الغشاء الخلوي للفطر. وفضلاً عن إلى ذلك تم اختيار البروتين من ضمن مجموعة من البروتينات على أساس ضوابط خاصة للإرساء الجزيئي منها وضوح البروتين وخلوه من الطفرات وعوامل أخرى.

تم ترتيب المواد حسب ألفة الأصرة من (8.8-11.9) وتعدّ هذه النسبة مرتفعة بالنسبة إلى المركبات الطبيعية والتي تمثل أعلى قيم تم الحصول عليها بواسطة الارساء الجزيئي، ومن ثم تم التأكد من عدم سمية هذه المواد وكذلك خواصها الأخرى مثل درجة الامتصاص في الجهاز الهضمي وعبورها الحاجز الدموي الدماغي وقابلية امتصاصها السطحية من الجلد وسهولة تصنيعها وعوامل أخرى مهمة.

تم التوصل إلى ثلاث مواد فعالة قادرة على تثبيط الفطر بناء على نتائج الارساء الجزيئي وهي (Astragalín, Apiin, Epicatechin) حيث أظهرت هذه المواد خواص تثبيطية لبروتين (cyp51).

أجري استخلاص المواد الفعالة بناء على نتائج الارساء الجزيئي واستخدمت المستخلصات الخام في تثبيط الفطر حيث وضعت أقراص مشبعة بالمواد الفعالة على الأطباق الفطرية. أظهر مستخلص حبة

---

السوداء ثم مستخلص الزعرور الأوربي يليه مستخلص الكمون خواص تثبيطية جيدة وبأقطار (1.073، 0.885، 0.834) سنتمتر على التوالي.

تم تشخيص المواد الفعالة في المستخلص الخام وتحديد مكونات المستخلص الخام باستخدام تقنية الكروماتوغرافيا السائلة عالية الأداء HPLC ومن ضمنها المواد التي تم اختيارها بالاستناد على نتائج الارساء الجزيئي. حيث عزلت المواد الفعالة (Astragalin, Apiin, Epicatechin) وتمت تثقيتها وتركيزها للحصول على مستخلص عالي النقاوة لغرض استخدامه كمثبط فطري. أظهرت المواد الفعالة فعالية تثبيطية، حيث أظهر Astragalin أفضل تثبيط يليه Apiin بقطر تثبيط قطره ( 1.348,1.648 ) على التوالي في حين لم تظهر مادة epicatechin أي تثبيط للفطر.

**Republic of Iraq**  
**Ministry of Higher Education**  
**University of Mosul**  
**College of Environmental Sciences**  
**And Technology**



**Molecular Docking Application in testing the efficiency of  
some plants extracts against some pathogenic  
microorganisms in different environments**

**By**

**Abubaker Abdulrahem Thanon Al ghazal Al Taey**

M.Sc./Thesis

Environmental Sciences

Supervised by

**Professor**

**Dr. Mohammad Ibrahim Khalil**

---

## Abstract

Molecular docking was used to find active compounds to use as antifungal "candida albicans", which they collected from many parts of plants and then test them in silico to find out their ability to inhibit the fungal cell wall protein which is responsible for fat forming. Many software were used such as PYMOL to recognize the chemical structure and active compounds and the software PYRX to assimilate the Molecular docking and other software to treat the ligands such as Avogadro and Open Babel.

The CYP51 enzyme was chosen as a target for molecular docking due to its role in fungal growth and development.

The compounds were arranged according to their affinity bond from (11.9 - 9) and this ratio is considered high in relation to natural compounds which consider the highest values obtained by molecular docking.

and then the toxicity of compounds was tested to ensure that they are safe to body and other properties such as absorption in digestive and crossing the brain blood tissue and their ability to adsorb by skin and easy to build it and other factors.

Three active compounds were selected according to Molecular docking results "Astragaloside, Apigenin, Epigallocatechin"

The crude active compound which was detected by Molecular docking was extracted and used as antifungal agent using agar diffusion by crude active compound. The black seed showed the highest inhibition than cumin (1.073, 0.885, 0.84) cm respectively but *Crataegus rhipidophylla* never showed any inhibition.

The active compounds were identified from crude extraction by high performance liquid chromatography (HPLC) and examined their activity as pure compound in inhibition of growth of *Candida albicans*. The compound was Apigenin, Astragaloside. where the epigallocatechin did not show any activity in inhibition.