3rd International Health Services Congress
Toros University
3-4 February 2026

(Bildiri Kodu)----------·

In Silico Evaluation of The Antifungal Activity of The Main Components of *Anemone Apennina* (Blue Anemone) Flower Oil Against *Aspergillus Spp.*

Eray Korkmaz YALÇIN[1], Gülçin ÖZCAN ATEŞ[2]

[1] *Çanakkale Onsekiz Mart University, School of Graduate Studies, Department of Bioengineering and Materials Engineering, Çanakkale, Türkiye,*

[2] *Çanakkale Onsekiz Mart University, Health Services Vocational School, Medical Services and Techniques Department, Çanakkale, Türkiye, gulciozcan@comu.edu.tr,*

ABSTRACT

Natural products remain an important source of bioactive compounds in antifungal drug development. In this study, the binding potential of the main compounds obtained from Anemone apennina flower oil to three different fungal target proteins was evaluated using in silico molecular docking. Gas chromatography–mass spectrometry (GC–MS) analysis revealed that the three compounds with the highest concentrations were benzyl acetate (8.82%), α-hexylcinnamic aldehyde (7.49%), and 2- hydroxybenzoic acid, phenylmethyl ester (7.07%). These ligands were docked with Aspergillus niger endoglucanase (PDB ID: 1KS4), Aspergillus fumigatus cytochrome P450 protein (PDB ID: 2C3B), and Aspergillus flavus squalene synthase AflSQS protein (PDB ID: 7WGI). During the protein preparation phase, water molecules in the crystal structure were removed, hydrogen atoms were added, geometry cleaning and valence adjustments were made using BIOVIA Discovery Studio software. Following ligand optimizations, docking was performed on all protein structures using the blind docking method in PyRx. Binding affinities were evaluated based on the conformations with the lowest binding energy. The results showed that 2-hydroxybenzoic acid, phenylmethyl ester, exhibited the highest binding affinity for all target proteins (−6.7 kcal/mol for 1KS4, −7.8 kcal/mol for 2C3B, and −7.4 kcal/mol for 7WGI). α-Hexylcinnamic aldehyde exhibited moderate binding energies (−5.4,−7.3, and −6.7 kcal/mol, respectively), while benzyl acetate showed lower but significant affinity values for all proteins (−5.2, −5.7, and −5.7 kcal/mol). In conclusion, compounds derived from A. apennina flower oil have been shown to interact with key enzymes involved in fungal cell wall degradation, sterol metabolism, and secondary metabolite biosynthesis. In particular, 2- hydroxybenzoic acid, a phenylmethyl ester compound, stands out as a promising candidate for advanced antifungal studies.

Keywords: Molecular docking, In silico analysis, Blue anemone flower oil, *Aspergillus*

3rd International Health Services Congress
Toros University
3-4 February 2026

(Bildiri Kodu)----------·

Anemone apennina (Mavi Anemon) Çiçeği Yağının Ana Bileşenlerinin *Aspergillus* Türlerine Karşı Antifungal Aktivitesinin in Silico Değerlendirilmesi

Eray Korkmaz YALÇIN[1], Gülçin ÖZCAN ATEŞ[2]

[1]*Çanakkale Onsekiz Mart Üniversitesi, Lisansüstü Eğitim Enstitüsü, Biyomühendislik ve Malzeme Mühendisliği Bölümü, Çanakkale, Türkiye,*
[2]*Çanakkale Onsekiz Mart Üniversitesi, Sağlık Hizmetleri Meslek Yüksekokulu, Tıbbi Hizmetler ve Teknikler Bölümü, Çanakkale, gulciozcan@comu.edu.tr*

ÖZET

Doğal ürünler, antifungal ilaç geliştirme çalışmalarında önemli bir biyoaktif bileşik kaynağı olmaya devam etmektedir. Bu çalışmada, *Anemone apennina* çiçek yağından elde edilen başlıca bileşiklerin üç farklı fungal hedef protein üzerindeki bağlanma potansiyeli, in silico moleküler docking yaklaşımı kullanılarak değerlendirilmiştir. Gaz kromatografisi–kütle spektrometrisi (GC–MS) analizi sonucunda en yüksek oranda bulunan üç bileşik benzyl acetate (%8,82), α-hexylcinnamic aldehyde (%7,49) ve 2- hydroxybenzoic acid, phenylmethyl ester (%7,07) olarak belirlenmiştir. Bu ligandlar; *Aspergillus niger* endoglukanazı (PDB ID: 1KS4), *Aspergillus fumigatus* sitokrom P450 proteini (PDB ID: 2C3B) ve *Aspergillus flavus* ait squalene synthase AflSQS proteini (PDB ID: 7WGI) ile dock edilmiştir. Protein hazırlık aşamasında BIOVIA Discovery Studio yazılımı kullanılarak kristal yapıda bulunan su molekülleri uzaklaştırılmış, hidrojen atomları eklenmiş, geometri temizliği ve valans düzenlemeleri yapılmıştır. Ligand optimizasyonlarının ardından docking işlemleri PyRx programı aracılığıyla tüm protein yapıları üzerinde blind docking yöntemi ile gerçekleştirilmiştir. Bağlanma afiniteleri, en düşük bağlanma enerjisine sahip konformasyonlar temel alınarak değerlendirilmiştir. Elde edilen sonuçlar, 2- hydroxybenzoic acid, phenylmethyl ester bileşiğinin tüm hedef proteinler için en yüksek bağlanma afinitesini gösterdiğini ortaya koymuştur (1KS4 için −6.7 kcal/mol, 2C3B için −7.8 kcal/mol ve 7WGI için −7.4 kcal/mol). α-Hexylcinnamic aldehyde bileşiği orta düzey bağlanma enerjileri sergilemiş (sırasıyla −5.4, −7.3 ve −6.7 kcal/mol), benzyl acetate ise tüm proteinler için daha düşük ancak dikkate değer afinite değerleri göstermiştir (−5.2, −5.7 ve −5.7 kcal/mol). Sonuç olarak, *A. apennina* çiçek yağından elde edilen bileşiklerin, fungal hücre duvarı yıkımı, sterol metabolizması ve sekonder metabolit biyosentezinde rol oynayan temel enzimlerle etkileşime girebildiği gösterilmiştir. Özellikle 2-hydroxybenzoic acid, phenylmethyl ester bileşiği, ileri düzey antifungal çalışmalar için umut vadeden bir aday olarak öne çıkmaktadır.

Anahtar Kelimeler: Moleküler docking, In silico analiz, Mavi anemone çiçek yağı, *Aspergillus*