

ID: 619

The role and potential of in silico studies in medicinal plant research

Ezgi Aksakallı¹, Müberra Koşar¹, Fatih Demirci²

¹Department of Pharmacognosy, Faculty of Pharmacy, Eastern Mediterranean University, Famagusta, Cyprus

² Department of Pharmacognosy, Faculty of Pharmacy, Anadolu University, Eskişehir, Türkiye

Abstract

In silico studies, which have become increasingly widespread, are a crucial tool in overcoming the limitations of laboratory facilities, the high costs of chemicals, and the equipment and time requirements encountered in medicinal plant research. These studies generate data by analyzing the chemical structures of target molecules and enzymes, utilizing various online servers, computational, and visualization tools. The data generated can support, predict, or validate laboratory operations. Based on structure-activity relationships and prior clinical and preclinical data, *in silico* studies offer valuable predictions. Online resources help ascertain the physicochemical and pharmacokinetic characteristics of molecules. Interaction analyses are performed by calculating binding energies and the stabilities of molecules. Furthermore, a variety of computational techniques are employed to predict biological activities. *In silico* predictions are generally consistent with data obtained from previous clinical and preclinical studies, playing a crucial role in medicinal plant research. The implementation of such studies should be promoted, as they contribute to cost reduction and time efficiency. This study presents several examples to support the wider use of *in silico* studies in medicinal plant research.

Key Words: *In silico*, Binding energy, Molecular docking, ADME, Medicinal plants

In siliko çalışmaların tıbbi bitki araştırmalarındaki yeri ve potansiyeli

Ezgi Aksakallı¹, Müberra Koşar¹, Fatih Demirci²

¹Farmakognozi Anabilim Dalı, Eczacılık Fakültesi, Doğu Akdeniz Üniversitesi, Mağusa, KKTC

² Farmakognozi Anabilim Dalı, Eczacılık Fakültesi, Anadolu Üniversitesi, Eskişehir, Türkiye

Özet

Günümüzde oldukça yaygınlaşan *in siliko* çalışmalar, tıbbi bitki araştırmalarında kısıtlayıcı faktör olarak karşımıza çıkan laboratuvar altyapısındaki sınırlamalar, yüksek kimyasal maliyetleri, zaman yönetimi ve gerekli ekipman gereksinimlerini aşmak için önemli bir araçtır. Bu çalışmalar, hedef molekül ve enzimlerin kimyasal yapılarının yanı sıra çeşitli hesaplama ve görselleştirme yazılımları ve çevrimiçi sunucular kullanarak veri üretir ve üretilen veriler laboratuvar faaliyetlerini desteklemek, tahmin etmek ya da doğrulamak amacıyla kullanılabilir. *In siliko* çalışmalar, önceki klinik ve klinik öncesi verilerle yapı-aktivite ilişkileri üzerinden tahminler yapmaktadır. Moleküllerin fizikokimyasal ve farmakokinetik özellikleri çevrimiçi araçlarla belirlenmektedir. Etkileşim analizleri, moleküllerin bağlanma enerjileri ve kararlılıkları hesaplanarak yapılmaktadır. Ayrıca, biyolojik aktiviteleri tahmin etmek için, çeşitli hesaplamalı yöntemler kullanılmaktadır. *In siliko* tahminler, daha önceki klinik ve klinik öncesi çalışmalardan elde edilen verilerle çoğunlukla uyumlu olup, tıbbi bitki araştırmalarında önemli bir rol oynamaktadır. Bu tür çalışmaların kullanımı, araştırma maliyetlerini düşürme ve zaman kazandırma açısından teşvik edilmelidir. Bu çalışmada, *in silico* çalışmalarının tıbbi bitki araştırmalarında daha yaygın bir şekilde kullanılmasını desteklemek amacıyla bazı örnekler sunulmaktadır.

Anahtar Kelimeler: *in siliko*, bağlanma enerjisi, moleküler kenetleme, ADME, tıbbi bitkiler

