

## المستخلص العربي

يعد السرطان سببًا بارزًا للوفاة ولا يزال مسؤولاً بشكل كبير عن انخفاض متوسط العمر المتوقع على مستوى العالم. لذلك، فإن الوقاية الكيميائية، جنبًا إلى جنب مع المستخلصات الكيميائية النباتية، هي نهج ناشئ في علاج السرطان. تم موضوع هذه الدراسة لاستكشاف *Phragmanthera austroarabica* كمصدر لمركبات الرصاص الواقية من السرطان (*Phragmanthera austroarabica* (Loranthaceae)، عشبة طفيليات نصفية، معروفة على نطاق واسع بمركبات البوليفينول العالية، المسؤولة عن خصائصها المضادة للأكسدة والمضادة للالتهابات. تم استخدام مقاييس السمية اللونية للخلايا لاستكشاف التأثير المضاد للتكاثر لإثنين من مستخلصات الأوراق المحتملة، الإيثانول، و n-hexane. بالمقارنة، أظهر مستخلص الإيثانول أعلى تأثير بقيم IC50 60.71 و 23,02 ميكروغرام / مل في 48 و 72 ساعة على التوالي. تم اعتبار مستخلص n-hexane بتأثير متوسط في العلاج لمدة 72 ساعة (IC50 = 55.61 ميكروغرام / مل). في وقت لاحق، تم تحليل المستخلصات من خلال تحليل GC-MS، مما أدى إلى 10 مواد كيميائية نباتية محتملة. علاوة على ذلك، تم تطبيق الالتحام الجزيئي حاسوبيا لفحص المرشح الأكثر ملاءمة مع البروتين المضاد للخلايا، وهو البروتين المستهدف. حدد التحليل أهم خمسة مكونات نباتية نشطة وفقًا لدرجة الالتحام (كيلو كالوري / مول)، وهي بيتا أميرين (8,3-)، لوبيول (7,9-)، جاما سيتوستيرول (7,6-)، فيتامين إي (7,2-)، و البنزوفينون (7,1-). تم تطبيق دراسة الحركة الدوائية والسمية بمساعدة الكمبيوتر بشكل إضافي لتبرير التوافر البيولوجي وملف تعريف السلامة للمواد الكيميائية النباتية. امتثلت جميع المركبات للمعايير المستهدفة وتم تبريرها كمرشحين فعالين للأدوية لعلاج السرطان. لذلك، بررت *P. austroarabica* التأثير المضاد للسرطان على خط خلايا سرطان الثدي عبر مسارات موت الخلايا المبرمج المستهدفة. ومع ذلك، توصي هذه الدراسة بمزيد من التبرير المعلمي المكثف لاستكشاف الآليات الجزيئية في المنظورات المستقبلية.

### الكلمات المفتاحية:

*Phragmanthera austroarabica*، السمية الخلوية، GC-MS، الالتحام الجزيئي، ADME، درجة السمية، بروتين Bcl-2.

## ABSTRACT

Cancer is one of the leading causes of death and remains largely responsible for the worldwide decline in life expectancy. Therefore, chemoprevention in combination with phytochemicals is an emerging approach in cancer therapy. The aim of this study was to investigate *Phragmanthera austroarabica* as a source of cancer protective lead compounds. *Phragmanthera austroarabica* (Loranthaceae), a hemiparasitic herb, is widely known for its high content of polyphenolic compounds responsible for its antioxidant and anti-inflammatory properties. A colorimetric cytotoxicity assay was used to investigate the antiproliferative effects of two potential leaf extracts, ethanol and n-hexane. In comparison, the ethanol extract showed the highest effect with  $IC_{50}$  values of 60.71 and 23.02  $\mu\text{g/ml}$  for 48 and 72 hours of treatment, respectively. The n-hexane extract showed a moderate effect ( $IC_{50} = 55.61 \mu\text{g/ml}$ ) at the 72-hour treatment. Later, the extracts were subjected to GC-MS analysis, which revealed 10 potential phytochemicals. Moreover, in-silico molecular docking was applied to screen the most suitable candidate with an anti-apoptotic protein, the target protein. The analysis identified the five most active phytoconstituents by docking score (kcal/mol), namely beta-amyrin (-8.3), lupeol (-7.9), gamma-sitosterol (-7.6), vitamin E (-7.2), and benzophenone (-7.1). Computer-aided pharmacokinetic and toxicological studies were performed to demonstrate the bioavailability and safety profile of the phytochemicals. All compounds met the targeted parameters and proved to be potent candidates for cancer therapy. Therefore, *P. austroarabica* justified the anticancer effect on the breast cancer cell line via targeted apoptotic pathways. However, this study recommends further extensive laboratory studies to explore molecular mechanisms in the future.

**Keywords:** *Phragmanthera austroarabica*, Cytotoxicity, GC-MS, Molecular docking, ADME, Toxicity, Bcl-2 protein.