

Phytochemical Profiling, *In Vitro* Biological Activities and *In Silico* Studies of *Nymphaea alba* Flowers

Deepika PATHAK & Avijit MAZUMDER *

Noida Institute of Engineering and Technology (Pharmacy Institute)
19 Knowledge Park-II, Institutional Area,
Greater Noida, U.P-201306 – India

SUMMARY. Natural formulations have been used for several years as a major source of the drugs. With the availability of appropriate technology and holistic methods that can be used to produce safe and affordable formulas, interest in herbal medicine has increased over the years. This research highlighted the phytochemical evaluation, antioxidant activity and antimicrobial activity of *Nymphaea alba* flower extract (NAFE). In the present study phytochemical evaluation was performed on water, ethanol, acetone, butanol, petroleum ether and chloroform extract of *Nymphaea alba* flowers. On the basis of phytochemical evaluation and extractive value, hydroalcoholic extract was found to be most appropriate for our study. Antioxidant activity was analyzed by the DPPH (2,2-diphenyl-1-picrylhydrazyl) method. The flavonoid content was evaluated with standard quercetin method. Antimicrobial activity was identified on two pathogenic gram-positive (*Staphylococcus aureus* and *Staphylococcus epidermidis*) and six strains of gram-negative (*Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Pseudomonas fluorescens*, *Vibrio cholerae*, *Klebsiella pneumoniae*, and *Aeromonas hydrophila*). Also, antimicrobial activity was carried out for the extract. The findings were correlated with the help of in-silico experimentation molecular docking using binding affinity score and ligand protein interaction. Butanolic and ethanolic extract reported maximum number of phytochemicals. NAFE demonstrated phenolic content equivalent to 15.25 mg GAE/100 mg extract whereas flavonoid content equivalent to 0.68 mg quercetin/100 mg extract. NAFE had shown good antioxidant activity comparable to ascorbic acid. The zone of inhibition was highest against *Pseudomonas aeruginosa*, followed by *Escherichia coli* and *Staphylococcus aureus*. Quercetin, apigenin and myricitrin have shown good binding affinity score. The results suggested that the flowers of *Nymphaea alba* have antioxidant and antimicrobial potential due to the presence of bioactives like quercetin, apigenin and myricitrin in it and can be utilized further to develop an alternative novel antimicrobial formulation.

RESUMEN. Las formulaciones naturales se han utilizado durante varios años como fuente principal de fármacos. Con la disponibilidad de tecnología apropiada y métodos holísticos que pueden usarse para producir fórmulas seguras y asequibles, el interés en la medicina herbaria ha aumentado a lo largo de los años. Esta investigación destacó la evaluación fitoquímica, la actividad antioxidante y la actividad antimicrobiana del extracto de flores de *Nymphaea alba* (NAFE). En el presente estudio se realizó una evaluación fitoquímica en agua, etanol, acetona, butanol, éter de petróleo y extracto de cloroformo de flores de *Nymphaea alba*. Sobre la base de la evaluación fitoquímica y el valor extractivo, se encontró que el extracto hidroalcohólico era el más apropiado para nuestro estudio. La actividad antioxidante se analizó por el método DPPH (2,2-difenil-1-picrilhidrazilo). El contenido de flavonoides se evaluó con el método estándar de quercetina. Se identificó actividad antimicrobiana en dos cepas patogénicas grampositivas (*Staphylococcus aureus* y *Staphylococcus epidermidis*) y seis cepas gramnegativas (*Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Pseudomonas fluorescens*, *Vibrio cholerae*, *Klebsiella pneumoniae* y *Aeromonas hydrophila*). Además, se llevó a cabo actividad antimicrobiana para el extracto. Los hallazgos se correlacionaron con la ayuda del acoplamiento molecular de experimentación in-silico utilizando la puntuación de afinidad de unión y la interacción de la proteína del ligando. Los extractos butanólico y etanólico reportaron el máximo número de fitoquímicos. NAFE demostró un contenido fenólico equivalente a 15,25 mg de GAE/100 mg de extracto, mientras que un contenido de flavonoides equivalente a 0,68 mg de quercetina/100 mg de extracto. NAFE había mostrado una buena actividad antioxidante comparable al ácido ascórbico. La zona de inhibición fue más alta frente a *Pseudomonas aeruginosa*, seguida de *Escherichia coli* y *Staphylococcus aureus*. La quercetina, la apigenina y la miricitrina han mostrado una buena puntuación de afinidad de unión. Los resultados sugirieron que las flores de *Nymphaea alba* tienen un potencial antioxidante y antimicrobiano debido a la presencia de bioactivos como la quercetina, la apigenina y la miricitrina y pueden utilizarse más para desarrollar una nueva formulación antimicrobiana alternativa.

KEY WORDS: antimicrobial, antioxidant, flavonoid, molecular docking, *Nymphaea alba*.

* Author to whom correspondence should be addressed. E-mail: avijitmazum@yahoo.com