SEBHA UNIVERSITY JOURNAL OF PURE & APPLIED SCIENCES VOL.23 NO. 2 2024
DOI: 10.51984/JOPAS.V23I2.3085

مجلة جامعة سبها للعلوم البحتة والتطبيقية
Sebha University Journal of Pure & Applied Sciences
Journal homepage: www.sebhau.edu.ly/journal/jopas

In Silico Medicinal and Pharmacological Evaluation of Phytochemical Constituents from the Root Bark Extract of *Enantia Chlorantha* as Potential Antimalarial Drugs

*Sulyman Ibrahim[a], Halimat Lukman[b], Yusuf Ayipo[c], Halimah Babamale[a], Fatimah Abdulkadir[a], Abdulmumeen Hamid[b,d], Marili Zubair[a], Olubunmi Atolani[b]

[a]Department of Industrial Chemistry, Faculty of Physical Sciences, University of Ilorin, Ilorin, Nigeria
[b]Department of Chemical Sciences, College of Natural and Applied Sciences, Summit University, Offa, Nigeria.
[c]Department of Chemistry and Industrial Chemistry, Kwara State University, P M B, 1530 Malete Ilorin, Nigeria
[d]Department of Chemistry, Faculty of Physical Sciences, University of Ilorin, Ilorin, Nigeria

Keywords:
Plasmodium Falciparum
Drug-Likeness
Enantia Chlorantha
Enzyme
Ethnomedicine

ABSTRACT

Enantia chlorantha is a preferred medicinal plant among local healthcare providers in Nigeria for the treatment of malaria. While numerous studies have validated its potency, this updated report investigates the mechanistic and synergistic phytochemicals of the plant responsible for its antimalarial properties. The chemical composition of the methanol root bark extract was analyzed using Gas Chromatography-Mass Spectroscopy (GC-MS). The in silico pharmacological and toxicological profiles were determined using SwissADME and Protox II online servers. The simulation modeled the interaction between phytochemicals and Plasmodium falciparum dihydrofolate reductase-thymidylate synthase enzymes implicated in the pathogenic process of malaria via molecular docking. Docking was performed using PyRx-0.8 software coupled with AutoDock Vina. The findings indicate that N-[2-(2-Hydroxy-1-naphthylmethyleneamino)-4-methoxyphenyl] (-9.4 kcal/mol), squalene (-8.6 kcal/mol), curlone (-7.7 kcal/mol), tumerone (-7.8 kcal/mol), and ar-tumerone (-7.9 kcal/mol) demonstrated stronger binding affinities to the target protein compared to standard antimalarial medications such as artemether (-7.6 kcal/mol) and lumefantrine (-6.6 kcal/mol). These results were further confirmed by the phytochemicals' binding free energy ΛG_{Bind} (MMGBSA) values: N-[2-(2-Hydroxy-1-naphthylmethyleneamino)-4-methoxyphenyl] acetamide (-64.14 kcal/mol), squalene (-63.74 kcal/mol), and tumerone (-41.78 kcal/mol), compared to artemether (-23.39 kcal/mol) and lumefantrine (-43.01 kcal/mol). The toxicological profile suggests that the phytochemicals from E. chlorantha demonstrated reasonably low toxicity, comparable to standard drugs.

في التقييم الطبي والصيدلاني للمكونات الكيميائية لمستخلص لحاء جذر *Enantia* كلورانثا كأدوية محتملة مضادة للملاريا

*سليمان إبراهيم[a]، حليمة لقمان[b]، يوسف أيبو[c]، حليمة بابامالي[a]، فاطمة عبد القادر[a]، عبد المؤمن حميد[b,d]، ماريلي زوبير[1]، أولوبونمي أتولاني [2]

[1]قسم الكيمياء الصناعية، كلية العلوم الفيزيائية، جامعة إيلورين، إيلورين، نيجيريا
[2] قسم العلوم الكيميائية، كلية العلوم الطبيعية والتطبيقية، جامعة ساميت، أوفا، نيجيريا.
[3]قسم الكيمياء والكيمياء الصناعية، جامعة ولاية كوارا، PMB ، 1530 ماليت إيلورين، نيجيريا
[4]قسم الكيمياء، كلية العلوم الفيزيائية، جامعة إيلورين، إيلورين، نيجيريا

الكلمات المفتاحية:
المتصورة المنجلية
التشابه الدوائي
إنانتيا كلورانثا
إنزيم
الطب العرقي

الملخص

إن نبات *Enantia Chlorantha* هو نبات طبي مفضل بين العديد من مقدمي الرعاية الصحية المحليين في نيجيريا لعلاج الملاريا .وفي حين أثبتت العديد من الدراسات فاعليته، فإن هذا التقرير الشامل المحدث الذي يبحث في المواد الكيميائية النباتية الميكانيكية والتآزرية للنبات المسؤول عن الادعاء بأنه مضاد للملاريا .تم تحليل التركيب الكيميائي لمستخلص لحاء جذر الميثانول باستخدام كروماتوغرافيا الغاز - مطيافية الكتلة (GC-MS).تم تحديد الملف الدوائي والسمية الحاسوبية باستخدام خادم ADME السويسري و Protox II

*Corresponding author.
E-mail addresses: ibrahim.sio@unilorin.edu.ng ,(H. Y. Lukman) lukman.halimat@summituniversity.edu.ng ,(Y. O. Ayipo), yusuf.ayipo@kwasu.edu.ng , (H. Fu. Babamale) babamale.hf@unilorin.edu.ng , (F. R. Abdulkadir) abdulkadir.fr@unilorin.edu.ng, (A. A. Hamid) hamid.aa@unilorin.edu.ng, (M. F. Zubair) marilizub@unilorin.edu.ng, (O. Atolani) atolani.o@unilorin.edu.ng

Article History: Received 24 March 2024 - Received in revised form 18 December 2024 - Accepted 22 December 2024