Upaya Penelusuran Aktivitas Sitotoksik dan Antioksidan Fraksi N-Heksan Herba Bandotan (*Ageratum conyzoides L.*) terhadap Sel Kanker Payudara secara *In Vitro* dan *In Silico*

Windy Andriati Lubis, Rifki Febriansah
Prodi Farmasi Fakultas Kedokteran dan Ilmu Kesehatan
Universitas Muhammadiyah Yogyakarta

INTISARI

Kanker payudara merupakan salah satu kanker penyebab kematian terbesar pada wanita di Indonesia. Penggunaan agen kemoterapi dalam pengobatan kanker payudara menimbulkan efek samping dan resistensi, untuk itu diperlukan pengobatan berbahan dasar dari alam sebagai agen kemopreventif salah satunya yaitu herba bandotan. Penelitian sebelumnya mengenai herba bandotan menggunakan berbagai fraksi dan sel kanker sehingga diperlukan penelusuran lebih lanjut mengenai herba bandotan sebagai antikanker. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui aktivitas antikanker fraksi n-heksan bandotan (FNB) secara *in vitro* pada sel MCF-7 dan *in silico* pada protein target HER-2.

Bandotan diekstraksi dengan metode maserasi yang kemudian difraksinasi menggunakan pelarut n-heksan dan dilanjutkan dengan evaporasi sehingga didapatkan fraksi kental n-heksan. Identifikasi kandungan senyawa pada bandotan menggunakan metode Kromatografi Lapis Tipis (KLT), untuk uji antioksidan dilakukan dengan metode DPPH dengan menggunakan vitamin C sebagai pembandingnya dan uji sitotoksik menggunakan metode MTT *assay*, sedangkan untuk uji secara *in silico* menggunakan metode *docking* molekuler dengan mempreparasi senyawa Ageratokromen terhadap protein target HER-2.

Hasil penelitian menunjukkan dari 1,2 kg bandotan diperoleh 1,7 gram FNB. Hasil uji KLT menunjukkan bahwa Bandotan memiliki kandungan alkaloid dan steroid, aktivitas antioksidan FNB diperoleh nilai IC_{50} 493 µg/ml. Potensi sitotoksik FNB diukur terhadap sel MCF-7 dengan nilai IC_{50} 306 µg/ml sedangkan pada *docking* molekuler dapat dilihat dari kemampuan ageratokromen menghambat protein target HER-2 dengan afinitas -6,2 kkal/mol.

Dari hasil yang diperoleh dapat dikatakan bahwa FNB memiliki potensi lemah sebagai kemopreventif kanker payudara MCF-7.

Kata kunci : *Docking* molekuler, Fraksi n-heksan bandotan (*Ageratum conyzoides L.*), MCF-7, Uji antioksidan, Uji sitotoksik.

Cytotoxic and Antioxidant Activity of N-Hexane Fraction Bandotan (Ageratum Conyzoides L.) in Breast Cancer Cells Line by In Vitro and In Silico

Windy Andriati Lubis, Rifki Febriansah
School of Pharmacy, Faculty of Medicine and Health Sciences,
Universitas Muhammadiyah Yogyakarta

ABSTRACT

Breast cancer is one of the most common cancers that causes the highest morbidity and mortality in woman at Indonesia. Some anticancer medicines are not efficient and also have many side effects then needed cancers treatment based on nature one of them use bandotan as chemopreventive agent. Previous research on bandotan used various fraction and cancer cells then it's necessary further research about bandotan as anticancer. This study aimed to analyze the cytotoxic activity of n-hexane fraction bandotan (NFB) in breast cancer cells MCF-7 in vitro and study the molecular mechanism of the active component NFB in silico, with the target protein HER-2.

Identification of the compounds content in bandotan by Thin Layer Chromatography (TLC). Antioxidant Test NFB measured by DPPH and cytotoxicity assay NFB performed with MTT, test carried out by molecular docking protein preparation and docking test compounds ageratochromene on HER-2.

Based on the research of 1.2 kg to obtain NFB concentrated 1.7 gram which will then be tested TLC, check the antioxidant and cytotoxic test. The test results of TLC showed that bandotan has alkaloid and steroid content, antioxidant activity of NFB showed with value of IC_{50} 493 µg/ml and potential bandotan as a cytotoxic agent is mediated by the ability of ageratochromene inhibit HER-2 protein targets with affinity -6,2 kcal/mol. Cytotoxic potential of NFB with an IC_{50} value of NFB 306 µg/ml to inhibit the growth of MCF-7 cells line.

From the result obtained can be said that NFB has a weak potential as chemopreventif for breast cancer MCF-7 cell line.

Keyword : *Bandotan (Ageratum conyzoides L.), Chemopreventive agent, HER-2, Molecular docking, MCF-7.*