



Potensi Toksisitas Andrografolid dari Sambiloto (*Andrographis paniculata* (Burm.f.) Nees) pada kulit dan mata secara *In Silico*

Susanti, N. M. P.¹, Warditiani, N. K.¹, Juwianti, C.¹, Wisesa, I. N. T.¹

¹Jurusan Farmasi Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Udayana

Korespondensi: Ni Made Pitri Susanti

Jurusan Farmasi Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Udayana

Jalan Kampus Unud-Jimbaran, Jimbaran-Bali, Indonesia 80364 Telp/Fax: 0361-703837

Email: dekpitsusanti@unud.ac.id

ABSTRAK

Andrografolid adalah kandungan kimia utama yang terdapat dalam tanaman sambiloto (*Andrographis paniculata*). Andrografolid memiliki banyak aktivitas farmakologi antara lain sebagai antiaterosklerosis, antiinflamasi, antioksidan, antihiperlipidemik, dan antimalaria. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengetahui toksisitas dari senyawa andrografolid dalam tanaman sambiloto secara *in silico* menggunakan *software* Toxtree v2.6.13.

Uji toksisitas dilakukan menggunakan *software* Toxtree dengan menginput struktur 2 dimensi dari senyawa andrografolid dan diujikan terhadap 2 parameter uji yaitu *Skin Irritation/Corrosion* dan *Eye Irritation and Corrosion*. Hasil penelitian menunjukkan bahwa senyawa andrografolid tidak berpotensi menyebabkan korosi maupun iritasi pada kulit dan tidak berpotensi menyebabkan luka bakar dan luka bakar yang parah pada mata.

Kata kunci: andrografolid, toksisitas, *in silico*

1. PENDAHULUAN

Andrografolid merupakan senyawa kimia utama yang terdapat dalam tanaman sambiloto (*Andrographis paniculata*). Andrografolid (C₂₀H₃₀O₅) merupakan senyawa golongan diterpenoid lakton bisiklik berbentuk kristal tak berwarna dengan rasa yang sangat pahit (Chao and Lin, 2010). Andrografolid telah terbukti memiliki berbagai aktivitas farmakologi, diantaranya: antiinflamasi, antiaterosklerosis, antioksidan, antihiperlipidemik, dan antimalarial (Jarukamjorn and Nemoto, 2008; Lin *et al.*, 2009; Zhang *et al.*, 2009). Penelitian secara *in vivo* maupun secara *in vitro* telah dilakukan untuk mengetahui mekanisme aktivitas farmakologi yang dimiliki oleh andrografolid.

Dalam melakukan pengembangan obat tradisional diperlukan suatu hasil data empiris yang didukung oleh adanya bukti ilmiah mengenai khasiat dan keamanannya pada manusia. Oleh karena itu, diperlukan suatu penelitian untuk mengetahui ada tidaknya efek toksik yang ditimbulkan oleh suatu bahan obat terkait dengan aktivitas senyawa tersebut dalam tubuh. Uji toksisitas merupakan salah

satu parameter yang penting dilakukan dalam melakukan pengembangan senyawa baru dalam dunia kesehatan dan dilakukan untuk menjamin keamanan dari suatu senyawa sebelum dapat dilepas pemakaiannya ke masyarakat (BPOM RI, 2008). Salah satu metode yang dapat dilakukan adalah memanfaatkan kimia komputasi melalui pengujian secara *in silico* (Raunio 2011). Metode *in silico* ini memiliki beberapa keuntungan, diantaranya waktu yang dibutuhkan singkat, biaya yang diperlukan rendah, berpotensi dalam mengurangi penggunaan hewan coba, dan dapat diaplikasikan untuk memprediksi toksisitas dari suatu senyawa (Raunio 2011; Deeb and Goodarzi, 2012).

Salah satu *software* yang dapat digunakan untuk melakukan uji toksisitas pada manusia adalah Toxtree. Toxtree adalah aplikasi yang mampu memperkirakan toksisitas dari suatu molekul. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui potensi toksisitas senyawa andrografolid dari tanaman sambiloto (*A. paniculata*) dengan menggunakan program Toxtree secara *in silico*.

2. BAHAN DAN METODE

2.1 Program yang Digunakan

Toxtree v2.6.13.

2.2 Penyiapan Struktur Senyawa Andrografolid

Struktur 2 dimensi senyawa andrografolid diunduh dari <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov> dengan CAS number 5508-58-7 dan format (*.sdf).

2.3 Uji Toksisitas *In Silico* Senyawa Andrografolid

Struktur 2 dimensi senyawa uji (andrografolid) dengan format (*.sdf) yang dilengkapi dengan sifat kimia fisika diinput ke dalam *software* Toxtree. Uji toksisitas dilakukan dengan menggunakan 2 parameter yaitu yaitu *Skin Irritation/Corrosion* dan *Eye Irritation and Corrosion*.

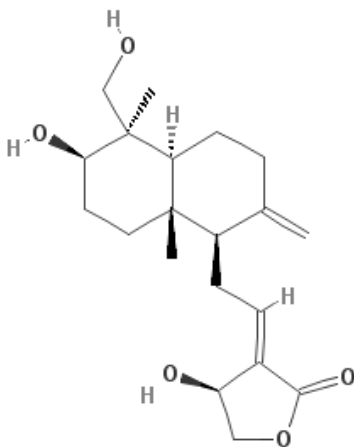
2.4 Analisis Data

Analisis data yang diperoleh dari 2 parameter yaitu *Skin Irritation/Corrosion* dan *Eye Irritation and Corrosion* dilakukan secara deskriptif.

3. HASIL

3.1 Penyiapan Struktur Senyawa Andrografolid

Struktur 2 dimensi senyawa andrografolid dengan format (*.sdf) diunduh dari <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>. Struktur 2 dimensi senyawa andrografolid ditampilkan pada Gambar 1.



Gambar 1. Struktur 2 Dimensi Senyawa Andrografolid

3.2 Uji Toksisitas *In Silico* Senyawa Andrografolid

Hasil uji toksisitas andrografolid terhadap 2 parameter uji pada *software* Toxtree ditampilkan pada Tabel 1.

4. PEMBAHASAN

Toxtree memiliki banyak parameter uji dengan hasil akhir pengujian toksisitas yang berbeda (Cronin *et al.*, 2013). Uji toksisitas andrografolid dilakukan dengan menggunakan 2 parameter uji, yaitu *Skin Irritation/Corrosion* dan *Eye Irritation and Corrosion*.

Skin Irritation/Corrosion adalah parameter yang dapat menilai suatu bahan kimia apakah dapat berpotensi menyebabkan iritasi atau korosi maupun kombinasi dari keduanya. Apabila suatu bahan kimia memiliki titik leleh lebih besar dari 200°C, maka senyawa tersebut dapat dikatakan tidak memiliki potensi menyebabkan iritasi maupun korosi. Andrografolid memiliki titik leleh sebesar 228-230°C (Rajani *et al.*, 2000), sehingga pada parameter ini diperoleh hasil yaitu senyawa andrografolid tidak mengiritasi atau korosif. Kategori iritasi atau korosi disini dimaksudkan bahwa senyawa tidak menyebabkan luka bakar dan luka bakar parah serta tidak mengiritasi kulit (Ideaconult, 2009).

Eye Irritation and Corrosion diperlukan data sifat fisika kimia seperti halnya pengujian pada parameter *Skin Irritation/Corrosion* berupa titik leleh. Hasil pengujian senyawa andrografolid pada parameter ini adalah tidak korosif pada kulit yaitu tidak menyebabkan luka bakar dan luka bakar yang parah pada mata.

Tabel 1. Hasil Uji Toksisitas Senyawa Andrografolid dengan Toxtree

Parameter Uji	Hasil Toksisitas senyawa Andrografolid
<i>Skin Irritation/Corrosion</i>	Tidak mengiritasi atau korosif
<i>Eye Irritation</i>	Tidak korosif pada kulit



and Corrosion (tidak menyebabkan luka bakar dan luka bakar yang parah)

5. KESIMPULAN

Senyawa andrografolid tidak berpotensi menyebabkan korosi maupun iritasi pada kulit dan tidak berpotensi menyebabkan luka bakar dan luka bakar yang parah pada mata.

6. UCAPAN TERIMAKASIH

Penulis mengucapkan terimakasih kepada seluruh dosen pengajar, rekan analisis serta staf pegawai di Jurusan Farmasi Fakultas MIPA Universitas Udayana.

PUSTAKA

- BPOM RI. 2008. Mutu Keamanan & Kemanfaatan Suatu Produk Bahan Alam. *Naturalkos*. Vol. 3 (8).
- Chao, W. and B. Lin. 2010. Isolation and Identification of Bioactive Compounds in *Andrographis paniculata*. *Chinese Medicine*. Vol. 5 (17): 1-15.
- Cronin, M. T. D., J. C. Madden, S. J. Enoch, and D. W. Roberts. 2013. *Chemical Toxicity Prediction Category Formation and Read-Across*. UK: The Royal Society of Chemistry.
- Deeb, O. and M. Goodarzi. *In Silico* Quantitative Structure Toxicity Relationship of Chemical Compounds: Some Case Studies. *Curr. Drug. Saf.* Vol. 7 (4): 289-297.
- Ideaconsult. 2009. *ToxTree User Manual*. Bulgaria: Ideaconsult Ltd.
- Rajani, N., N. Shrivastava, and M. N. Ravishankara. 2000. A rapid method for isolation of andrographolide from *Andrographis paniculata* Nees (Kalmegh). *Pharmaceut. Biol.* Vol. 38: 204.
- Raunio, H. 2011. *In Silico* Toxicology: Non Testing Methods. *Frontiers in Pharmacology*. Vol. 2 (33): 1-8.
- Jarukamjorn, K. and N. Nemoto. 2008. Pharmacological Aspects of *Andrographis paniculata* on Health and Its Major Diterpenoid Constituent Andrographolide. *Journal of Health Science*. Vol. 54 (4): 370-381.

Lin, F. L., S. J. Wu, and S.C. Lee. 2009. Antioxidant, Antioedema and Analgesic Activities of *Andrographis paniculata* extracts and their active constituent

andrographolide. *Phytother Res.* Vol. 23 (7): 958-964.

Zhang, Z., J. Jiang, P. Yu, X. Zeng, J. W. Larrick, and Y. Wang. 2009. Hypoglycemic and Beta Cell Protective Effects of Andrographolide Analogue for Diabetes Treatment. *Journal of Translational Medicine*. Vol. 7: 62.