

## Analisis In Silico Aktivitas Biologis, Profil ADME dan Toksisitas Senyawa Utama Dari *Ageratum Conyzoides* (Bandotan): Studi Pada Precocene I, Precocene II, Dan $\beta$ -Caryophyllene

Nerdy N., Nilsya F. Zebua, A.Hafiz, M. Hari Suhardi, Nur S. Afni Hasibuan, Raihan R. Panjaitan, Rinaldi syahputra  
Universitas Tjut Nyak Dhien Medan

### Article History:

Received Mar 13<sup>rd</sup>, 2026

Accepted Apr 28<sup>th</sup>, 2026

Publish May 25<sup>th</sup>, 2026

### Abstrak

*Ageratum conyzoides* (Bandotan) secara tradisional digunakan sebagai obat anti-inflamasi, dan aktivitas ini dikaitkan dengan senyawa utamanya: Precocene I, Precocene II, dan  $\beta$ -caryophyllene. Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi potensi aktivitas biologis, profil farmakokinetik (ADME), dan toksisitas ketiga senyawa tersebut menggunakan pendekatan komputasi in silico. Prediksi dilakukan menggunakan PASS Online untuk aktivitas biologis, pkCSM untuk profil ADME, dan ProTox-II untuk toksisitas. Hasil prediksi menunjukkan bahwa Precocene II ( $P_a = 0,955$ ) dan Precocene I ( $P_a = 0,948$ ) memiliki probabilitas sangat tinggi sebagai HIF1A expression inhibitor, yang sangat relevan dengan mekanisme anti-inflamasi. Analisis farmakokinetik menunjukkan bahwa ketiga senyawa memiliki bioavailabilitas oral yang sangat baik (penyerapan usus  $> 95\%$ ) dan diprediksi tidak bersifat hepatotoksik. Meskipun semua senyawa berada di Kelas Toksisitas 4,  $\beta$ -caryophyllene menunjukkan margin keamanan akut oral terbaik dengan LD50 tertinggi (1680 mg/kg). Namun, Precocene II dan  $\beta$ -caryophyllene diprediksi sebagai inhibitor CYP1A2, mengindikasikan potensi interaksi obat. Disimpulkan bahwa Precocene I dan Precocene II adalah kandidat senyawa yang paling menjanjikan sebagai agen anti-inflamasi. Data in silico ini memberikan dasar ilmiah yang kuat untuk melanjutkan penelitian in vitro dan in vivo guna memvalidasi aktivitas penargetan HIF-1 $\alpha$  dan menentukan dosis terapeutik yang aman.

**Kata Kunci:** *Ageratum conyzoides*, Precocene I, Precocene II,  $\beta$ -caryophyllene, in silico, Anti-inflamasi, ADMET

## 1. PENDAHULUAN

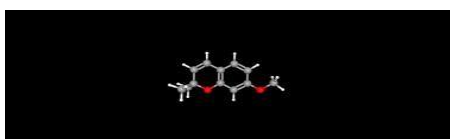
*Ageratum conyzoides* (Bandotan) adalah tanaman obat yang banyak ditemukan di wilayah tropis dan telah lama digunakan dalam pengobatan tradisional untuk mengatasi berbagai kondisi seperti peradangan, infeksi, luka, dan gangguan kulit. Aktivitas farmakologis tanaman ini terutama dikaitkan dengan keberadaan metabolit sekundernya, termasuk golongan alkaloid, flavonoid, terpenoid, serta senyawa spesifik seperti Precocene I, Precocene II, dan  $\beta$ -caryophyllene. Ketiga senyawa ini telah dilaporkan memiliki berbagai potensi biologis, seperti anti-inflamasi, antimikroba, dan modulasi stres oksidatif, yang menjadikannya kandidat menarik untuk dikaji lebih lanjut dalam konteks pengembangan obat berbasis bahan alam.

Dalam beberapa tahun terakhir, metode komputasi in silico berkembang pesat sebagai pendekatan awal yang efisien untuk menyaring dan mengevaluasi potensi farmakologis senyawa bioaktif sebelum memasuki uji praklinis maupun klinis. Pendekatan ini memungkinkan analisis cepat terhadap prediksi aktivitas biologis, profil farmakokinetik, interaksi molekuler, serta perkiraan toksisitas suatu senyawa dengan memanfaatkan basis data dan algoritma komputasi. Platform seperti PASS Online digunakan untuk memprediksi aktivitas biologis potensial, pkCSM menyediakan estimasi parameter ADME (Absorption, Distribution, Metabolism, and Excretion), sedangkan Protox II memudahkan identifikasi kategori toksisitas berdasarkan struktur kimia.

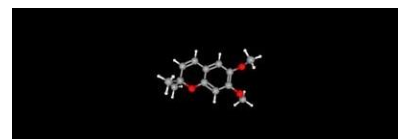
Dengan memanfaatkan ketiga perangkat in silico tersebut, penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi aktivitas biologis, profil ADME, dan toksisitas dari Prococene I, Prococene II, dan  $\beta$ -caryophyllene sebagai senyawa utama dari *Ageratum conyzoides*. Analisis ini diharapkan dapat memberikan gambaran awal mengenai kelayakan farmakokimia dan keamanan ketiga senyawa tersebut, sekaligus mendukung eksplorasi tanaman Bandotan sebagai sumber kandidat obat potensial.

## 2. METODOLOGI PENELITIAN

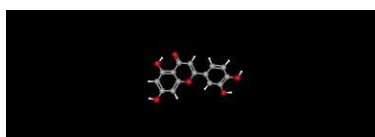
Penelitian ini menggunakan pendekatan in silico untuk mengevaluasi aktivitas biologis, profil farmakokinetik, dan toksisitas senyawa Prococene I, Prococene II, dan  $\beta$ -caryophyllene. Struktur kimia masing-masing senyawa diperoleh dari basis data PubChem dalam format SMILES, yang kemudian digunakan sebagai input pada berbagai perangkat lunak analisis. Prediksi aktivitas biologis dilakukan menggunakan PASS Online (Prediction of Activity Spectra for Substances) untuk memperoleh nilai Pa dan Pi dari berbagai kemungkinan aktivitas farmakologis. Evaluasi parameter ADME, termasuk absorpsi, distribusi, metabolisme, dan ekskresi, dianalisis melalui platform pkCSM berbasis graph-based signatures. Sementara itu, profil toksisitas mencakup estimasi LD50, klasifikasi toksisitas, serta kemungkinan efek toksik organ-spesifik dianalisis menggunakan Protox II. Seluruh proses komputasi dilakukan secara daring dengan memasukkan kode SMILES masing-masing senyawa tanpa modifikasi struktur.



Gambar 1. Struktur senyawa 3D Prococene I



Gambar 2. Struktur senyawa 3D Prococene II



Gambar 3. Struktur senyawa 3D  $\beta$ -caryophyllene

## 3. HASIL DAN PEMBAHASAN

### 1) Hasil

Tabel 1. Data Pubchem

Senyawa	Pubchem CID	IUPAC	SMILES
Prococene I	28619	7-methoxy-2,2-dimethylchromene	<chem>CC1(C=CC2=C(O1)C=C(C=C2)OC)C</chem>
Prococene II	12565	6,7-dimethoxy-2,2-dimethylchromene	<chem>C1=CC(=C(C=C1)C2=CC(=O)C3=C(C=C(C3O2)O)O)O</chem>
$\beta$ -caryophyllene	5281515	B-caryophyllene	<chem>C1=CC(=C(C=C1)C2=C(C(=O)C3=C(C=C(C3O2)O)O)O)O</chem>

Tabel 2. Hasil Prediksi PASS Online

Senyawa	aktivitas	Skor Pa
Prococene I	HIF1A expression inhibitor	0,950
	CYP2C12 substrate	0,948
	Aspulvinone dimethylallyltransferase inhibitor	0,923
Prococene II	HIF1A expression inhibitor	0,955
	CYP2C12 substrate	0,936
	Aspulvinone dimethylallyltransferase inhibitor	0,889
$\beta$ -caryophyllene	HIF1A expression inhibitor	
	CYP2C12 substrate	0,565
	Aspulvinone dimethylallyltransferase inhibitor	0,682

Hasil prediksi aktivitas biologi menggunakan perangkat lunak PASS Online menunjukkan adanya potensi kuat untuk ketiga senyawa sebagai agen anti-inflamasi. Aktivitas yang paling relevan yang diprediksi adalah sebagai HIF1A expression inhibitor, yang merupakan jalur penting dalam mereduksi respons peradangan. Proccocene I ( $P_a = 0,948$ ) dan Proccocene II ( $P_a = 0,955$ ) menunjukkan probabilitas yang sangat tinggi (mendekati 1,0) dalam menghambat ekspresi HIF-1 $\alpha$ . Potensi yang sangat kuat ini menyiratkan bahwa kedua senyawa turunan tersebut dapat bekerja sebagai agen anti-inflamasi dengan menargetkan regulasi transkripsi yang mendasari produksi mediator pro-inflamasi. Sebagai pembanding,  $\beta$ -caryophyllene juga memprediksi aktivitas serupa, namun dengan  $P_a$  yang moderat (0,565).

Selain itu, Proccocene I dan Proccocene II diprediksi memiliki probabilitas sangat tinggi sebagai substrat untuk enzim sitokrom P450, CYP2C12 ( $P_a > 0,94$ ). Prediksi ini mengindikasikan bahwa kedua senyawa ini kemungkinan akan mengalami metabolisme hepatik yang cepat, informasi krusial yang harus divalidasi dalam studi farmakokinetik dan toksisitas berikutnya.

Tabel 3. Hasil Prediksi Protox II (analisis toksisitas)

Nama Senyawa	Kelas Toksisitas	Prediksi LD50	Prediksi akurasi
Prococene I	4	500mg/kg	68,07%
Prococene II	4	500mg/kg	68,07%
B-caryophyllene	4	1680mg/kg	69,26%

Analisis selanjutnya berfokus pada keseimbangan antara efikasi potensial dan keamanan senyawa. Berdasarkan prediksi toksisitas akut oral ProTox-II (Tabel 3), ketiga senyawa diklasifikasikan dalam Kelas Toksisitas 4 (Toksisitas Sedang). Namun, terdapat perbedaan signifikan pada nilai LD 50. Proccocene I dan Proccocene II diprediksi memiliki LD50 yang identik yaitu 500 mg/kg, sedangkan  $\beta$ -caryophyllene memiliki LD50 yang jauh lebih tinggi, yaitu 1680 mg/kg.

Menggabungkan hasil ini dengan prediksi aktivitas (Tabel 2), dapat disimpulkan bahwa Proccocene II menunjukkan potensi efikasi anti-inflamasi tertinggi ( $P_a = 0,955$ ), tetapi memiliki margin

keamanan akut oral yang relatif sempit LD50 = 500 mg/kg. Sebaliknya,  $\beta$ - caryophyllene menawarkan keamanan akut terbaik LD50= 1680 mg/kg, meskipun dengan potensi anti-inflamasi yang lebih moderat ( $P_a = 0,565$ ).

Hal ini menggaris bawahi perlunya studi toksisitas in vivo yang komprehensif, terutama untuk turunan Proccocen, guna menetapkan indeks terapeutik (rasio dosis efektif terhadap dosis toksik) yang aman. Secara keseluruhan, data prediksi ini mendukung Proccocen I dan Proccocen II sebagai kandidat utama yang layak untuk diuji coba aktivitas anti-inflamasi in vitro dan in vivo secara mendalam.

Tabel 4. Hasil Prediksi pkCSM

Property	Model Name	Predicted Value	Unit
Absorption	Water solubility	-3.109	Numeric (log mol/L)
Absorption	Caco2 permeability	1.262	Numeric (log Papp in 10 <sup>-6</sup> cm/s)
Absorption	Intestinal absorption (human)	96.302	Numeric (% Absorbed)
Absorption	Skin Permeability	-2.063	Numeric (log Kp)
Absorption	P-glycoprotein substrate	No	Categorical (Yes/No)
Absorption	P-glycoprotein I inhibitor	No	Categorical (Yes/No)
Absorption	P-glycoprotein II inhibitor	No	Categorical (Yes/No)
Distribution	VDss (human)	0.317	Numeric (log L/kg)
Distribution	Fraction unbound (human)	0.335	Numeric (Fu)
Distribution	BBB permeability	0.284	Numeric (log BB)
Distribution	CNS permeability	-2.218	Numeric (log PS)
Metabolism	CYP2D6 substrate	No	Categorical (Yes/No)
Metabolism	CYP3A4 substrate	No	Categorical (Yes/No)
Metabolism	CYP1A2 inhibitor	Yes	Categorical (Yes/No)

<b>Excretion</b>	Total Clearance	<b>0.294</b>	Numeric (log ml/min/kg)
<b>Excretion</b>	Renal OCT2 substrate	<b>No</b>	Categorical (Yes/No)
<b>Toxicity</b>	AMES toxicity	<b>No</b>	Categorical (Yes/No)
<b>Toxicity</b>	Max. tolerated dose (human)	<b>0.77</b>	Numeric (log mg/kg/day)
<b>Toxicity</b>	hERG I inhibitor	<b>No</b>	Categorical (Yes/No)
<b>Toxicity</b>	hERG II inhibitor	<b>No</b>	Categorical (Yes/No)
<b>Toxicity</b>	Oral Rat Acute Toxicity (LD50)	<b>1.838</b>	Numeric (mol/kg)
<b>Toxicity</b>	Oral Rat Chronic Toxicity (LOAEL)	<b>2.086</b>	Numeric (log mg/kg_bw/day)
<b>Toxicity</b>	Hepatotoxicity	<b>No</b>	Categorical (Yes/No)
<b>Toxicity</b>	Skin Sensitisation	<b>Yes</b>	Categorical (Yes/No)
<b>Toxicity</b>	<i>T.Pyriformis</i> toxicity	<b>1.165</b>	Numeric (log ug/L)
<b>Toxicity</b>	Minnow toxicity	<b>0.773</b>	Numeric (log mM)

## Prococene II

Property	Model Name	Predicted Value	Unit
<b>Absorption</b>	Water solubility	<b>-2.611</b>	Numeric (log mol/L)
<b>Absorption</b>	Caco2 permeability	<b>1.91</b>	Numeric (log Papp in 10 <sup>-6</sup> cm/s)
<b>Absorption</b>	Intestinal absorption (human)	<b>95.28</b>	Numeric (% Absorbed)
<b>Absorption</b>	Skin Permeability	<b>-2.141</b>	Numeric (log Kp)

<b>Absorption</b>	P-glycoprotein substrate	No	Categorical (Yes/No)
<b>Absorption</b>	P-glycoprotein I inhibitor	No	Categorical (Yes/No)
<b>Absorption</b>	P-glycoprotein II inhibitor	No	Categorical (Yes/No)
<b>Distribution</b>	VDss (human)	0.139	Numeric (log L/kg)
<b>Distribution</b>	Fraction unbound (human)	0.288	Numeric (Fu)
<b>Distribution</b>	BBB permeability	0.097	Numeric (log BB)
<b>Distribution</b>	CNS permeability	-2.35	Numeric (log PS)
<b>Metabolism</b>	CYP2D6 substrate	No	Categorical (Yes/No)
<b>Metabolism</b>	CYP3A4 substrate	No	Categorical (Yes/No)
<b>Metabolism</b>	CYP1A2 inhibitor	Yes	Categorical (Yes/No)
<b>Metabolism</b>	CYP2C19 inhibitor	No	Categorical (Yes/No)
<b>Metabolism</b>	CYP2C9 inhibitor	No	Categorical (Yes/No)
<b>Metabolism</b>	CYP2D6 inhibitor	No	Categorical (Yes/No)
<b>Metabolism</b>	CYP3A4 inhibitor	No	Categorical (Yes/No)
<b>Excretion</b>	Total Clearance	0.243	Numeric (log ml/min/kg)
<b>Excretion</b>	Renal OCT2 substrate	No	Categorical (Yes/No)
<b>Toxicity</b>	AMES toxicity	No	Categorical (Yes/No)
<b>Toxicity</b>	Max. tolerated dose (human)	0.568	Numeric (log mg/kg/day)
<b>Toxicity</b>	hERG I inhibitor	No	Categorical (Yes/No)
<b>Toxicity</b>	hERG II inhibitor	No	Categorical (Yes/No)
<b>Toxicity</b>	Oral Rat Acute Toxicity (LD50)	2.046	Numeric (mol/kg)
<b>Toxicity</b>	Oral Rat Chronic Toxicity (LOAEL)	1.892	Numeric (log mg/kg_bw/day)
<b>Toxicity</b>	Hepatotoxicity	No	Categorical (Yes/No)
<b>Toxicity</b>	Skin Sensitisation	No	Categorical (Yes/No)
<b>Toxicity</b>	<i>T.Pyriformis</i> toxicity	1.504	Numeric (log ug/L)
<b>Toxicity</b>	Minnow toxicity	1.105	Numeric (log mM)

## $\beta$ -caryophyllene

Property	Model Name	Predicted Value	Unit
Absorption	Water solubility	-4.818	Numeric (log mol/L)
Absorption	Caco2 permeability	1.405	Numeric (log Papp in 10 <sup>-6</sup> cm/s)
Absorption	Intestinal absorption (human)	95.645	Numeric (% Absorbed)
Absorption	Skin Permeability	-1.461	Numeric (log Kp)
Absorption	P-glycoprotein substrate	No	Categorical (Yes/No)
Absorption	P-glycoprotein I inhibitor	No	Categorical (Yes/No)
Absorption	P-glycoprotein II inhibitor	No	Categorical (Yes/No)
Distribution	VDss (human)	0.629	Numeric (log L/kg)
Distribution	Fraction unbound (human)	0.33	Numeric (Fu)
Distribution	BBB permeability	0.786	Numeric (log BB)
Distribution	CNS permeability	-2.104	Numeric (log PS)
Metabolism	CYP2D6 substrate	No	Categorical (Yes/No)
Metabolism	CYP3A4 substrate	No	Categorical (Yes/No)
Metabolism	CYP1A2 inhibitor	No	Categorical (Yes/No)
Metabolism	CYP2C19 inhibitor	No	Categorical (Yes/No)
Metabolism	CYP2C9 inhibitor	No	Categorical (Yes/No)
Metabolism	CYP2D6 inhibitor	No	Categorical (Yes/No)
Metabolism	CYP3A4 inhibitor	No	Categorical (Yes/No)
Excretion	Total Clearance	0.104	Numeric (log ml/min/kg)
Excretion	Renal OCT2 substrate	No	Categorical (Yes/No)
Toxicity	AMES toxicity	No	Categorical (Yes/No)
Toxicity	Max. tolerated dose (human)	0.366	Numeric (log mg/kg/day)
Toxicity	hERG I inhibitor	No	Categorical (Yes/No)
Toxicity	hERG II inhibitor	No	Categorical (Yes/No)
Toxicity	Oral Rat Acute Toxicity (LD50)	1.611	Numeric (mol/kg)
Toxicity	Oral Rat Chronic Toxicity (LOAEL)	1.413	Numeric (log mg/kg_bw/day)
Toxicity	Hepatotoxicity	No	Categorical (Yes/No)
Toxicity	Skin Sensitisation	Yes	Categorical (Yes/No)
Toxicity	<i>T.Pyriformis</i> toxicity	1.132	Numeric (log ug/L)
Toxicity	Minnow toxicity	0.825	Numeric (log mM)

Analisis sifat farmakokinetik (ADMET) menggunakan perangkat lunak pkCSM memberikan wawasan krusial mengenai nasib senyawa dalam sistem biologis. Secara umum, ketiga senyawa menunjukkan profil absorpsi oral yang sangat baik, dengan persentase penyerapan usus (Intestinal Absorption) di atas 95% untuk Proccocen I, Proccocen II, dan  $\beta$ -caryophyllene, serta diprediksi tidak menjadi substrat bagi P-glycoprotein (P-gp), mendukung bioavailabilitas tinggi. Dalam aspek distribusi, ditemukan perbedaan signifikan: Proccocen I menunjukkan permeabilitas Sawar Darah Otak (BBB) yang tertinggi, mengindikasikan bahwa senyawa ini berpotensi mencapai sistem saraf pusat. Sebaliknya, Proccocen II memiliki Log BB yang mendekati ambang batas, menyiratkan permeabilitas BBB yang rendah, sementara  $\beta$ -caryophyllene berada di antaranya.

Mengenai metabolisme, ketiga senyawa diprediksi aman dari inhibisi enzim CYP3A4, enzim utama dalam metabolisme obat. Namun, perlu dicatat bahwa Proccocen II dan  $\beta$ -caryophyllene diprediksi sebagai inhibitor CYP1A2. Potensi inhibisi ini penting karena dapat memicu interaksi obat yang tidak diinginkan jika diberikan bersamaan dengan obat lain yang dimetabolisme oleh CYP1A2, sehingga memerlukan validasi lebih lanjut. Dari sisi keamanan toksikologi, data pkCSM memperkuat kesimpulan sebelumnya; ketiga senyawa diprediksi tidak bersifat hepatotoksik (merusak hati) dan tidak menghambat hERG I, menunjukkan risiko minimal terhadap toksisitas hati dan aritmia jantung. Namun, perbedaan muncul pada sensitivitas kulit, di mana Proccocen I dan  $\beta$ -caryophyllene diprediksi menyebabkan sensitivitas, sementara Proccocen II diprediksi aman. Secara keseluruhan, Proccocen I memiliki profil metabolisme dan toksisitas yang paling bersih di antara ketiganya, namun Proccocen II unggul dalam hal keamanan kulit.

## 2) Pembahasan

Evaluasi terpadu dari aktivitas biologis, toksisitas, dan farmakokinetik ketiga senyawa memberikan gambaran yang komprehensif mengenai potensi terapeutiknya sebagai agen anti-inflamasi. Berdasarkan PASS Online, Proccocen II ( $P_a = 0,955$ ) dan Proccocen I ( $P_a = 0,948$ ) menunjukkan probabilitas sangat tinggi sebagai penghambat ekspresi HIF-1 $\alpha$ , suatu mekanisme yang relevan dengan regulasi peradangan, menjadikan keduanya kandidat utama yang unggul dibandingkan dengan  $\beta$ -caryophyllene ( $P_a = 0,565$ ). Dalam aspek keamanan, meskipun ketiga senyawa terklasifikasi dalam Kelas Toksisitas 4 (toksisitas sedang),  $\beta$ -caryophyllene menawarkan margin keamanan akut oral yang paling lebar LD50 = 1680 mg/kg, sementara Proccocen I dan II diprediksi memiliki LD50 yang lebih rendah 500 mg/kg meskipun ketiganya diprediksi tidak hepatotoksik. Dari sisi farmakokinetik (pkCSM), semua senyawa menunjukkan bioavailabilitas oral yang sangat baik dengan penyerapan usus di atas 95%. Perlu diwaspadai bahwa Proccocen II dan  $\beta$ -caryophyllene diprediksi sebagai inhibitor CYP1A2, menimbulkan potensi interaksi obat, sementara Proccocen I menunjukkan profil metabolisme terbersih. Secara keseluruhan, data ini mendukung Proccocen I dan Proccocen II sebagai subjek uji yang paling menjanjikan dari segi efikasi, tetapi menekankan pentingnya validasi eksperimental *in vivo* untuk mengkonfirmasi aktivitas anti-inflamasi dan menentukan indeks terapeutik yang aman, terutama mengingat perbedaan pada profil LD50 dan potensi inhibisi CYP1A2.

## 4. KESIMPULAN

Berdasarkan hasil prediksi komputasi, Proccocen II dan Proccocen I merupakan kandidat yang paling menjanjikan sebagai agen anti-inflamasi potensial, ditandai dengan probabilitas aktivitas ( $P_a$ ) yang sangat tinggi sebagai HIF1A expression inhibitor (mendekati 0,95). Profil farmakokinetik ketiga senyawa secara umum baik, dengan bioavailabilitas oral yang sangat tinggi (penyerapan usus >95%) dan prediksinya yang tidak bersifat hepatotoksik. Meskipun demikian, analisis keamanan

menunjukkan bahwa  $\beta$ -caryophyllene memiliki margin keamanan akut oral terbaik (LD50 tertinggi), sementara Proccocen I dan Proccocen II memiliki LD50 yang lebih rendah. Selain itu, potensi inhibisi CYP1A2 oleh Proccocen II dan  $\beta$ -caryophyllene mengindikasikan risiko interaksi obat yang perlu diwaspadai, sedangkan Proccocen I menunjukkan profil metabolisme terbersih. Secara keseluruhan, data *in silico* ini memberikan dasar yang kuat untuk melanjutkan penelitian *in vitro* dan *in vivo* guna memvalidasi aktivitas anti-inflamasi, khususnya menargetkan jalur HIF-1 $\alpha$ , serta untuk menentukan batas dosis terapeutik yang aman bagi Proccocen I dan Proccocen II.

## DAFTAR PUSTAKA

- Poroikov, V. V., & Filimonov, D. A. (2019). PASS prediction of biological activity spectra for substances. *Pharm. Chem. J.*, 52(10), 754-762.
- Drwal, M. N., Hasan, M., Drwal, N., & Preissner, R. (2014). ProTox-II: A web server for the prediction of toxicity of compounds. *Nucleic Acids Research*, 42(W1), W50-W54.
- Pires, D. E. V., Blundell, T. L., & Ascher, D. B. (2015). pkCSM: predicting small-molecule pharmacokinetic properties using graph-based signatures. *Journal of Medicinal Chemistry*, 58(9), 4066–4072.
- Kamboj A, Saluja AK. *Ageratum conyzoides* L.: A Review on its phytochemical and pharmacological profile. *Int J Green Pharm.* 2008;2(2):59–68.
- Okunade AL. *Ageratum conyzoides* L. (Asteraceae). *Fitoterapia.* 2002;73(1):1–16.
- Bouquet A, Debray M. Medicinal plants in the Ivory Coast: their chemical and pharmacological properties. *J Ethnopharmacol.* 1974;2(3):225–248.