

## ABSTRAK

# AKTIVITAS ANTIALOPEZIA DAN KAJIAN MEKANISME MOLEKULER SENYAWA BIOAKTIF DAUN LIDAH MERTUA (*Sansevieria trifasciata* P.) DALAM MENGHAMBAT RESEPTOR ANDROGEN BERDASARKAN STUDI *IN VIVO* DAN *IN SILICO*

Oleh

**Henny Kasmawati**

**NPM: 260130190007**

Alopesia merupakan kelainan dermatologis yang ditandai dengan kerontokan rambut yang tidak normal. Alopesia Androgenetik (AGA) merupakan jenis alopesia yang paling banyak terjadi yaitu di atas 90% dari kejadian alopesia. AGA menghasilkan kerontokan rambut yang kronis, progresif, dan berpola pada pria dan wanita. Hormon androgen khususnya dihidrotestosteron berikatan dengan reseptor androgen di folikel rambut, respon berlebihan terhadap androgen dapat memicu kerontokan rambut parah di kulit kepala yang ditandai dengan terjadinya miniaturisasi rambut dan kerontokan rambut secara progresif. Minoksidil merupakan satu dari dua obat AGA yang telah mendapat persetujuan FDA (*Food and Drug Administration*). Aktivitas antialopesia minoksidil yaitu mempercepat fase anagen, memperpendek fase telogen dan meningkatkan ukuran folikel rambut. Khasiat minoksidil kurang optimal dalam mengurangi kerontokan rambut dan merangsang pertumbuhan rambut, setelah satu tahun empat bulan pemberian minoksidil 5%, hanya sekitar 38,6% menunjukkan perkembangan pertumbuhan rambut. Iritasi kulit kepala yang dapat terjadi akibat penggunaan minoksidil topikal, khasiatnya yang kurang optimal, serta terbatasnya pilihan pengobatan untuk pasien AGA, merupakan beberapa alasan pasien mencari pengobatan alternatif dengan menggunakan tanaman tradisional. Hal ini menjadi dasar perlu dilakukan pencarian bahan baku obat baru yang lebih efektif dan aman, bersumber terutama dari bahan alam. Daun lidah mertua (*Sansevieria trifasciata* P.) secara empiris telah digunakan sebagai antialopesia. Penelitian ini bertujuan untuk membuktikan, menentukan dan mengungkap potensi senyawa bioaktif daun lidah mertua (*Sansevieria trifasciata* P.) sebagai antialopesia.

Pengujian aktivitas antialopesia melalui pendekatan *Bioassay Guided Isolation* secara *in vivo* menggunakan metode Tanaka yang dimodifikasi dan metode Matias

yang dimodifikasi, dengan parameter panjang pertumbuhan rambut, gambaran mikroskopik folikel rambut, proporsi pertumbuhan rambut dan rasio anagen telogen. Hewan uji yang digunakan dalam pengujian aktivitas antialopesia terhadap ekstrak dan fraksi daun lidah mertua adalah kelinci jantan sebanyak 4 ekor (Metode Tanaka). Punggung kelinci dicukur dan dibuat 6 plot/kompartemen yang menunjukkan kelompok perlakuan yaitu KI (kontrol, Na CMC 1%); KII (minoksidil 2%); KIII (ekstrak etanol daun lidah mertua (DLM) 20%); KIV (fraksi *n*-heksan DLM 20%); KV (fraksi etil asetat DLM 20%); KVI (fraksi air DLM 20%). Metode Matias menggunakan 24 ekor kelinci yang diinduksi alopesia menggunakan hormon dehidrotestosteron (DHT) dan ditambah 4 ekor kelinci sebagai kontrol normal. Hewan uji tersebut dibagi menjadi 7 kelompok seperti pembagian kelompok pada metode Tanaka ditambah kelompok K(-). Pengujian antialopesia pada subfraksi etil asetat dibagi menjadi 8 kelompok yaitu KI (kontrol, Na CMC 1%); KII (minoksidil 2%); KIII (subfraksi A DLM 20%); KIV (subfraksi B DLM 20%); KV (subfraksi C DLM 20%), KVI (subfraksi D DLM 20%); KVII (subfraksi E DLM 20%) dan KVIII (subfraksi F DLM 20%). Data disajikan dalam Mean  $\pm$  SD. Data dibandingkan dengan kelompok kontrol menggunakan *IBM SPSS* Statistik 24 ANOVA satu arah. Identifikasi senyawa bioaktif subfraksi C, D, E dan F fraksi etil asetat DLM melalui analisis LC-MS/MS dan aktivitas penghambatan senyawa bioaktif terhadap reseptor androgen (PDB ID:4K7A) dievaluasi secara molekuler menggunakan studi penambatan molekul dan simulasi dinamika molekul dengan membandingkan energi ikatan, interaksi, dan stabilitasnya terhadap minoksidil.

Hasil penelitian aktivitas antialopesia terhadap ekstrak dan fraksi menggunakan metode Tanaka yang dimodifikasi dengan parameter panjang pertumbuhan rambut yaitu sebagai berikut; ekstrak etanol daun lidah mertua 20% dapat menumbuhkan rambut kelinci pada hari ke-18 sebesar 2,06 cm  $\pm$ 0,32 yang berbeda bermakna ( $p < 0,05$ ) terhadap kelompok KI. Fraksi etil asetat DLM 20% dapat menumbuhkan rambut kelinci sebesar 2,07 cm  $\pm$ 0,06 sampai pada hari ke-18 yang berbeda bermakna  $p < 0,05$  terhadap kelompok KI dan memiliki efektivitas yang sama dengan minoksidil 2% dalam merangsang pertumbuhan rambut. Hasil penelitian terhadap ekstrak dan fraksi dengan parameter gambaran mikroskopik folikel rambut, persen proporsi rambut dan rasio anagen (A) telogen (T) (A/T) menggunakan metode Matias yang dimodifikasi yaitu; hormon DHT pada dosis 0,01 mg/mL yang diberikan secara subkutan selama 21 hari dapat menyebabkan terjadinya alopesia pada kelinci dengan parameter indeks alopesia 3-4. Kelinci alopesia kemudian diterapi berdasarkan kelompoknya, dua kali sehari secara topikal selama 21 hari. Evaluasi mikroskopik pada biopsi kulit kelinci kelompok KII (kontrol negatif) menunjukkan miniaturisasi folikel rambut yang ditandai dengan proporsi rambut anagen lebih sedikit dari rambut telogen yaitu 39,47% : 60,56% dengan rasio 1:1,5 (A/T), pada kelompok KIII (minoksidil 2%) mengalami peningkatan jumlah anagen dibanding telogen dengan proporsi rambut anagen 69,73% dan telogen 30,26% dengan rasio 2:1 (A/T). Kelompok KVI yang diberi terapi fraksi etil asetat 20% lebih baik dalam memperbaiki pertumbuhan rambut dibanding kelompok hewan uji lainnya yaitu proporsi rambut anagen 89,47% dan

telogen 10,52% dengan rasio 8,5:1 (A/T). Hasil penelitian pada tahap ini diperoleh bahwa fraksi etil asetat daun lidah mertua merupakan fraksi yang paling aktif sebagai antialopesia.

Penelitian ini kemudian dilanjutkan dengan pemisahan senyawa bioaktif daun lidah mertua yang berperan sebagai antialopesia. Berdasarkan hasil pemisahan menggunakan KCV (Kromatograksi Cair Vakum) diperoleh 16 subfraksi. Subfraksi dengan profil pemisahan dan nilai Rf yang sama selanjutnya digabungkan dan diperoleh 6 subfraksi gabungan utama yaitu subfraksi A (gabungan subfraksi 1-4), subfraksi B (gabungan subfraksi 5-7), subfraksi C (gabungan subfraksi 8-9), subfraksi D (subfraksi 10), subfraksi E (subfraksi 11-14), subfraksi F (subfraksi 15-16). Setelah penggabungan subfraksi kemudian dilakukan uji farmakologi terhadap enam subfraksi tersebut untuk mengetahui subfraksi aktif antialopesia daun lidah mertua.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa subfraksi C, D, E dan F DLM dengan konsentrasi masing-masing 20% memiliki aktivitas pertumbuhan rambut dari hari ke-6 hingga hari ke-18 yang berbeda bermakna ( $p < 0,05$ ) dibandingkan dengan KI, dengan panjang pertumbuhan rambut secara beurut yaitu  $2,80 \text{ cm} \pm 0,00$ ;  $2,17 \text{ cm} \pm 0,29$ ;  $2,20 \text{ cm} \pm 0,35$ ; dan  $2,17 \text{ cm} \pm 0,40$  dan memiliki efektivitas yang sama dengan minoksidil 2% dalam merangsang pertumbuhan rambut. Parameter lain yang digunakan untuk menilai aktivitas antialopesia pada subfraksi etil asetat DLM yaitu melalui gambaran mikroskopis folikel rambut, rasio anagen telogen (A:T), dan proporsi pertumbuhan rambut melalui biopsi kulit kelinci. Evaluasi mikroskopik ditemukan jumlah anagen lebih banyak dari jumlah telogen, yang ditandai dengan proporsi anagen lebih banyak dibanding telogen pada kelompok yang diberi subfraksi C, D, E dan F berturut-turut adalah 84,44:15,56%; 80,76:19,24%; 82,05:17,95%; dan 80,95:19,05%. Rasio anagen tertinggi terjadi pada kelompok yang diberikan subfraksi C yaitu 5,43:1 (A/T). Berdasarkan uji aktivitas antialopesia terhadap subfraksi etil asetat daun lidah mertua diperoleh empat subfraksi aktif, yaitu subfraksi C, D, E, dan F. Selanjutnya dilakukan identifikasi senyawa bioaktif terhadap ke-4 subfraksi tersebut menggunakan metode LC-MS/MS.

Hasil analisis LC-MS/MS diperoleh dua puluh senyawa, tujuh senyawa teridentifikasi melalui data based MS, yaitu *Methyl pyrophaeophorbide A* (1), *Oliveramine* (2), *(2S)-3',4'-Methylenedioxy-5,7-dimethoxyflavane* (3), *1-Acetyl- $\beta$ -carboline* (4), *Digiprolactone* (5), *Trichosanic acid* (6) dan *Methyl gallate* (7) dari subfraksi daun tanaman ini. Ke-tujuh senyawa ini kemudian dilakukan kajian mekanisme molekularnya yang berperan sebagai antialopesia terhadap reseptor androgen secara *in silico*.

Potensi penghambatan reseptor androgen dievaluasi menggunakan penambatan molekul dan simulasi dinamika molekul. Senyawa *Methyl pyrophaeophorbide A*, *Oliveramine*, *(2S)-3',4'-Methylenedioxy-5,7-dimethoxyflavane*, *1-Acetyl- $\beta$ -*

*carboline*, memiliki skor penambatan molekul lebih rendah dari minoksidil yaitu -7,0, -6,3, -5,8, dan -5,2 kkal/mol. Analisis interaksi molekuler dari hasil penambatan mengungkapkan bahwa empat senyawa yaitu *Methyl pyrophaeophorbide A*, *Oliveramine*, *(2S)-3',4'-Methylenedioxy-5,7-dimethoxyflavane*, *1-Acetyl- $\beta$ -carboline*, mampu berikatan dengan tempat ikatan kofaktor. Situs katalitik ini berada di wilayah residu Tyr857, Gln858, Lys861, Glu793, Trp796, dan Leu797. Interaksi senyawa *Methyl pyrophaeophorbide A* menunjukkan bahwa gugus karboksil-metil membentuk ikatan hydrogen (H) dengan residu asam amino Glu793. Interaksi hidrofobik dengan Trp796, Leu797, dan His789 pada masing-masing kelompok metil-siklopentana. Senyawa *Oliveramine*, terdapat dua ikatan H yang berbeda, yaitu residu His789 dan Leu862, dengan atom oksigen pada setiap cincin tetrahidro-piran. Senyawa *(2S)-3',4'-Methylenedioxy-5,7-dimethoxyflavane* tidak menunjukkan adanya ikatan H dengan reseptor AR tetapi memiliki tiga interaksi hidrofobik dengan residu Trp796, Leu797, dan Lys861. Senyawa *1-Acetyl- $\beta$ -carboline* membentuk ikatan H dengan residu Gln858 pada gugus karbonilnya, yang tidak teramati pada senyawa lain, dan interaksi hidrofobik dengan residu Tyr857. Akhirnya, semua senyawa membentuk ikatan Pi-Anion dengan residu Glu793 di situs katalitik AR, diketahui bahwa pengikatan terhadap residu Glu793 berperan penting dalam menghambat AR.

Simulasi dinamika molekul senyawa *Methyl pyrophaeophorbide A*, *Oliveramine*, *(2S)-3',4'-Methylenedioxy-5,7-dimethoxyflavane*, *1-Acetyl- $\beta$ -carboline*, menunjukkan stabilitas yang sama berdasarkan analisis RMSD (*Root Mean Square Deviation*), RMSF (*Root Mean Square Fluctuation*), dan SASA (*Solvent-Accessible Surface Area*). Senyawa *Methyl pyrophaeophorbide A* lebih stabil pada analisis Rg (*Radius Gyration*) dan PCA (*Principal Component Analysis*) selama simulasi 100 ns. Energi ikatan senyawa yang terkandung pada daun lidah mertua terhadap AR diketahui dengan menggunakan metode MM-PBSA (*Molecular Mechanics Poisson Boltzmann Surface Area*) untuk memprediksi bahwa potensi ke-empat senyawa lebih baik dari pada minoksidil, dengan energi bebas ikatan sebesar *Methyl pyrophaeophorbide A*; -66,13 kJ/mol, *Oliveramine*; -40,39 kJ/mol, *(2S)-3',4'-Methylenedioxy-5,7-dimethoxyflavane*; 59,36 kJ/mol, dan *1-Acetyl- $\beta$ -carboline*; -40,25.

Penelitian ini berhasil membuktikan, dan mengungkap aktivitas antialopesia senyawa bioaktif daun lidah mertua (*Sansevieria trifasciata* P.) melalui studi *in vivo* dan *in silico*, serta menentukan tujuh senyawa menggunakan analisis LC-MS/MS. Senyawa yang diperoleh tersebut teridentifikasi sebagai senyawa yang baru dilaporkan terdapat dalam *Sansevieria trifasciata* P berdasarkan analisis LC-MS/MS. Senyawa *Methyl pyrophaeophorbide A*, *Oliveramine*, *(2S)-3',4'-Methylenedioxy-5,7-dimethoxyflavane*, *1-Acetyl- $\beta$ -carboline* diprediksi memiliki aktivitas antialopesia yang lebih baik dari minoksidil dalam menghambat reseptor androgen melalui pendekatan *in silico*.

**Kata Kunci:** Alopesia, *in vivo*, *in silico*, LC-MS/MS, *Sansevieria trifasciata* P.

## **ABSTRACT**

### **ANTIALOPECIA ACTIVITY AND MOLECULAR MECHANISM OF BIOACTIVE COMPOUND OF LIDAH MERTUA LEAVES (*Sansevieria trifasciata P.*) AGAINST ANDROGEN RECEPTOR IN VIVO AND IN SILICO**

*By:*

**Henny Kasmawati**

**NPM: 260130190007**

*Alopecia is a dermatological disorder characterized by abnormal hair loss. Androgenetic alopecia (AGA) is the most common alopecia type, exceeding 90% of alopecia incidence. AGA results in chronic, progressive, and patterned hair loss in both men and women. Androgen hormone, especially dihydrotestosterone, binds to androgen receptors in hair follicles, excessive response to androgens can trigger severe hair loss on the scalp, characterized by hair miniaturization and progressive hair loss. Minoxidil is one of two AGA drugs that have received FDA (Food and Drug Administration) approval. The anti-alopecia activity of minoxidil accelerates the anagen phase, shortening the telogen phase and increasing hair follicle size. The efficacy of minoxidil is less than optimal in reducing progressive hair loss and stimulating hair growth. After one year and four months of topical 5% minoxidil administration, only about 38.6% showed hair growth progression. Scalp irritation that can occur due to topical minoxidil, in addition to suboptimal efficacy, and limited treatment options for AGA patients, are several reasons for patients to search for new alternative treatments using traditional plants. This then becomes a basis for the need to search for new drugs that are more effective and safe from natural ingredients. *Sansevieria trifasciata* Prain empirically has been used as an anti-alopecia. This study aims to explore, identify and assess the potential of the bioactive compounds of the *Sansevieria trifasciata* Prain leaves for developing new drugs that are safe and effective for the treatment of alopecia.*

*Evaluation of antialopecia activity was conducted through the Bioassay Guided Isolation approach in vivo using the modified Tanaka method and the modified Matias method, which parameters of hair growth length, microscopic appearance of hair follicles, hair proportion and anagen telogen ratio. The animals used for*

*antialopecia activity assay were four male rabbits as normal animals (Tanaka method), the backs of the rabbits were shaved and 6 plots/compartments were made showing the treatment group, namely KI (control, Na CMC 1%); KII (minoxidil 2%); KIII (ethanol extract of lidah mertua leaves (DLM); KIV (n-hexane fraction of DLM); KV (ethyl acetate of fraction DLM); KVI (water fraction of DLM). In the Matias method using twenty-four rabbits as alopecia models with hormone dehydrotestosterone (DHT) induction and added the four rabbits as normal control. The animals were divided into seven groups such as the treatment group in the Tanaka method plus the K(-) group. The antialopecia assay on the ethyl acetate subfraction was divided into 8 groups, namely KI (control, Na CMC 1%); KII (minoxidil 2%); KIII (subfraction A); KIV (subfraction B. ); KV (subfraction C), KVI (subfraction D); KVII (subfraction E) and KVIII (subfraction F). All data are presented in Mean  $\pm$  SD. Data were compared with the control group using IBM SPSS Statistics 24 one-way ANOVA. The bioactive compounds were analyzed using LC-MS/MS. The inhibitory activity of bioactive compounds from Lidah mertua leaves to androgen receptors (PDB ID:4K7A) was evaluated molecularly using molecular docking studies and molecular dynamics simulations by comparing bond energy, interaction, and stability to minoxidil.*

*The results of the antialopecia assay using the modified Tanaka method, with the parameters of hair growth length, showed that the ethanol extract of the Lidah mertua leaves may stimextractulated the rabbit hair growth until the 18th day of treatment by 2.06 cm  $\pm$  0.32, which was significantly different ( $p < 0.05$ ) from the KI group. The ethyl acetate fraction 20% of Lidah mertua leaves could stimulate the hair growth by 2.07 cm  $\pm$  0.06 until the 18th day of treatment, which was significantly different ( $p < 0.05$ ) from the control group and had the same effectiveness as the 2% minoxidil group in stimulating the hair growth. The results of the microscopic appearance of hair follicles, percent hair proportions, and anagen telogen ratio (A/T) using the modified Matias method showed that; the administration of DHT hormone at a dose of 0.01 mg/mL subcutaneously for 21 days could induce alopecia in rabbits with an alopecia index parameter of 3-4. Alopecia rabbits were treated with ethanol extract, n-hexane fraction, ethyl acetate fraction, and water fraction of lidah mertua leaves twice a day for 21 days. Microscopic evaluation of rabbit skin from the negative control group (KII) showed the hair follicle miniaturization characterized by a the proportion of anagen being less than telogen; 39.47% : 60.56% with a ratio of 2:1 (A/T). In the group KIII (minoxidil 2%) an increase in the number of anagen compared to telogen with the proportion of hair anagen 39.47% and telogen 30.26% with a ratio of 2:1 (A/T). Treatment group KVI was given ethyl acetate fraction 20% therapy showed better hair growth, with a higher A/T ratio (8.5:1) than the other groups, and the proportion of anagen hair was 89.47%, and telogen hair was 10.52%. This result indicated that the ethyl acetate fraction was the active fraction of lidah mertua leaves as an antialopecia.*

*The active fraction used for the separation of bioactive compounds. The results of the separation using VLC (Vacuum Liquid Chromatography) obtained sixteen subfractions. Subfractions with the same separation profile and Rf value were combined and obtained six main combined subfractions, namely subfraction A (subfractions 1-4), subfraction B (subfractions 5-7), subfraction C (subfractions 8-9), subfraction D (subfraction 10), subfraction E (subfraction 11-14), subfraction F (subfraction 15-16). The combined subfraction was then used for pharmacological tests to determine the antialopecia active subfraction of Lidah mertua leaves.*

*The results showed that subfractions-C, D, E, and F had hair growth activity from day 6 to day 18, which was significantly different ( $p < 0.05$ ) compared to the negative control group (KI), with hair growth length. ie  $2.80 \text{ cm} \pm 0.00$ ;  $2.17 \text{ cm} \pm 0.29$ ;  $2.20 \text{ cm} \pm 0.35$ ; and  $2.17 \text{ cm} \pm 0.40$  respectively and had the same effectiveness as 2% minoxidil (KII) in stimulating hair growth. Other parameters used to assess the antialopecia activity of the ethyl acetate subfraction were the microscopic appearance of the hair follicles, the anagen telogen ratio (A/T), and the proportion of hair growth by biopsy of rabbit skin. Histopathological results found the amount of anagen was more than the number of telogens. The proportion of hair growth between Anagen (A) and Telogen (T) against groups C, D, E, and F, respectively was 84.44:15.56%; 80.76:19.24%; 82.05:17.95%; 80.95:19.05%. The highest anagen ratio occurred in the group given subfraction C, which was 5.43:1 (A/T). Based on the antialopecia activity test on the ethyl acetate subfraction of the sansevieria trifasciata P. Four active subfractions were obtained: subfractions C, D, E, and F. Then, the bioactive compounds were identified using the LC-MS/MS method.*

*The results of the LC-MS/MS analysis obtained twenty compounds, of which seven compounds were identified through the MS database, namely Methyl pyrophaeophorbide A (1), Oliveramine (2), (2S)-3',4'-Methylenedioxy-5,7-dimethoxyflavane (3), 1-Acetyl- $\beta$ -carboline (4), Digiprolactone (5), Trichosanic acid (6) and Methyl gallate (7). These seven compounds were then studied for their molecular mechanisms that act as antialopecia against androgen receptors in-silico.*

*The inhibitory potential of the androgen receptor was evaluated using molecular docking and molecular dynamics simulations. The compound of Methyl pyrophaeophorbide A, Oliveramine, (2S)-3',4'-Methylenedioxy-5,7-dimethoxyflavane, 1-cetyl- $\beta$ -carboline, had a lower molecular anchoring score than minoxidil, i.e. -7.0, -6, 3, -5.8, and -5.2 kcal/mol. Molecular interaction analysis of the tethering results revealed that four compounds, i.e. Methyl pyrophaeophorbide A, Oliveramine, (2S)-3',4'-Methylenedioxy-5,7-dimethoxyflavane, 1-Acetyl- $\beta$ -carboline, were able to bind to the cofactor binding site. These catalytic sites were in the residue region of Tyr857, Gln858, Lys861,*

*Glu793, Trp796, and Leu797. The interaction of Methyl pyrophaeophorbide A showed that the carboxyl-methyl group formed hydrogen (H) bonds with the amino acid residue Glu793. Hydrophobic interactions with Trp796, Leu797, and His789 in each methyl-cyclopentane group. Oliveramine compounds showed two different H bonds, i.e. residues His789 and Leu862 with an oxygen atom in each tetrahydropyran ring. The compound of (2S)-3',4'-Methylenedioxy-5,7-dimethoxyflavane did not show any H binding to the AR receptor but had three hydrophobic interactions with residues Trp796, Leu797, and Lys861. The compound of 1-Acetyl- $\beta$ -carboline formed an H-bond with residue Gln858 on its carbonyl group, which was not observed in other compounds, and hydrophobic interactions with residue Tyr857. Finally, all compounds formed Pi-Anion bonds with Glu793 residues at the AR catalytic site. It has been found that binding to Glu793 residues plays an important role in inhibiting AR.*

*The binding energy of the compounds against AR was determined using the MM-PBSA method to predict that the potency of the four compounds was better than that of minoxidil, with a free bond energy of Methyl pyrophaeophorbide A; -66.13 kJ/mol, Oliveramine; -40.39 kJ/mol, (2S)-3',4'-Methylenedioxy-5,7-dimethoxyflavane; 59.36 kJ/mol, and 1-Acetyl- $\beta$ -carboline; -40.25. Further molecular dynamics simulations showed that the four compounds showed the same stability based on RMSD (Root Mean Square Deviation), RMSF (Root Mean Square Fluctuation), and SASA (Solvent Accessible Surface Area) analysis. However, the methyl pyrophaeophorbide A compound was found more stable on Rg (Radius Gyration) and PCA (Principal Component Analysis) analysis during 100 ns simulation.*

*This study succeeded in tracing and revealing the antialopecia activity of the bioactive compound in Lidah mertua leaves (*Sansevieria trifasciata P.*) through in vivo and in silico studies and succeeded in determining seven compounds using LC-MS/MS analysis. The seven compounds obtained were identified as newly reported compounds in *Sansevieria trifasciata P* based upon LC-MS/MS analysis. The compounds methyl pyrophaeophorbide A, oliveramine, (2S)-3',4'-methylenedioxy-5,7-dimethoxyflavane, 1-acetyl- $\beta$ -carboline compounds are predicted to have better antialopecia activity than minoxidil in inhibiting androgen receptors through an in-silico approach.*

**Keywords:** Alopecia, in vivo, in silico, LC-MS/MS, *Sansevieria trifasciata P.*