

**EKSPLORASI SECARA *IN SILICO* EKSTRAK BUAH
MENGKUDU (*Morinda citrifolia* L) SEBAGAI
KANDIDAT BAHAN PROTEKSI RADIASI**

SKRIPSI



Oleh :
FARAH TARIZA HARLENS
NIM : 021911133035

FAKULTAS KEDOKTERAN GIGI

UNIVERSITAS AIRLANGGA

SURABAYA

2022

**EKSPLORASI SECARA *IN SILICO* EKSTRAK BUAH
MENGKUDU (*Morinda citrifolia* L) SEBAGAI
KANDIDAT BAHAN PROTEKSI RADIASI**

SKRIPSI



Oleh :
FARAH TARIZA HARLENS
NIM : 021911133035

**FAKULTAS KEDOKTERAN GIGI
UNIVERSITAS AIRLANGGA**

SURABAYA

2022

LEMBAR PENGESAHAN

**EKSPLORASI SECARA *IN SILICO* EKSTRAK BUAH
MENGKUDU (*Morinda citrifolia* L) SEBAGAI
KANDIDAT BAHAN PROTEKSI RADIASI

SKRIPSI**

**Diajukan Sebagai Salah Satu Syarat Untuk Menyelesaikan
Pendidikan Dokter Gigi Di Fakultas Kedokteran Gigi Universitas
Airlangga Surabaya**

Oleh :

FARAH TARIZA HARLENS

NIM : 021911133035

Pembimbing Utama

Menyetujui,

Pembimbing Serta

**Dr. Sri Wigati M. M., drg., M.Kes
NIP: 196601011991032003**

**Dr. Eha Renwi Astuti, drg., M.Kes., Sp. RKG(K)
NIP: 196105131988032003**

**FAKULTAS KEDOKTERAN GIGI
UNIVERSITAS AIRLANGGA
SURABAYA**

2022

PENETAPAN PANITIA PENGUJI SKRIPSI

Skripsi ini telah diuji pada tanggal 8 November 2022

PANITIA PENGUJI SKRIPSI

1. Deny Saputra, drg., M.Kes (Ketua Penguji)
2. Ramadhan Hardani Putra, drg., M.Kes., Ph.D (Sekretaris Penguji)
3. Otty Ratna Wahjuni, drg., M.Kes (Anggota Penguji)
4. Yunita Savitri, drg., M.Kes (Anggota Penguji)
5. Aga Satria Nurrachman, drg., Sp.RKG (Anggota Penguji)

SURAT PERNYATAAN TENTANG ORISINALITAS

Yang bertanda tangan di bawah ini, saya :

Nama : Farah Tariza Harlens

NIM : 021911133035

Program Studi : Pendidikan Dokter Gigi Fakultas Kedokteran Gigi

Jenjang : Sarjana (S1)

Menyatakan bahwa saya tidak melakukan plagiat dalam penulisan skripsi saya yang berjudul :

EKSPLORASI SECARA *IN SILICO* EKSTRAK BUAH MENGGUDU

(*Morinda citrifolia* L) SEBAGAI KANDIDAT BAHAN PROTEKSI

RADIASI

Apabila pada suatu saat nanti terbukti melakukan tindakan plagiat, maka saya akan menerima sanksi yang telah ditetapkan.

Demikian surat pernyataan ini saya buat dengan sebenar-benarnya.

Surabaya, 15 Desember 2022


FARAH

NS
NIM 021911133035

UCAPAN TERIMA KASIH

Puji syukur penulis panjatkan ke hadirat Allah Subhanahu Wa Ta'ala untuk segala rahmat, hidayah, dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan penyusunan skripsi ini dengan baik. Perkenankanlah penulis untuk mengucapkan terima kasih yang sebesar-besarnya kepada:

1. Dr. Agung Sosiawan, drg., M.Kes., S.H., M.H selaku Dekan Fakultas Kedokteran Gigi Universitas Airlangga yang telah memberikan kesempatan untuk menempuh Pendidikan di Fakultas Kedokteran Gigi Universitas Airlangga.
2. Dr. Sri Wigati Mardi Mulyani, drg., M.Kes selaku Ketua Departemen Radiologi Kedokteran Gigi dan juga dosen pembimbing utama yang telah memberikan izin dalam pembuatan skripsi serta yang selalu memberikan bimbingan, masukan, arahan, koreksi, dan evaluasi, serta meluangkan waktu selama penyusunan skripsi.
3. Dr. Eha Renwi Astuti, drg., M.Kes., SpRKG (K) selaku dosen pembimbing serta yang selalu memberikan bimbingan, masukan, arahan, serta meluangkan waktu selama penyusunan skripsi.
4. Seluruh dosen penguji yang telah membantu melalui koreksi, masukan, saran, serta berbagi ilmu yang berguna dalam penyusunan skripsi ini.
5. Seluruh dosen dan staff Departemen Radiologi Kedokteran Gigi Fakultas Kedokteran Gigi Universitas Airlangga.
6. Dr. Hendrik Setiabudi drg., M.Kes selaku dosen wali yang telah memberikan bimbingan selama proses perkuliahan.

7. Papa, Mama, Kakak tercinta; Febri Harlen, SE, Rina Marlina, S.Pd, dan Fariz Kevin Harlen, S.Pi serta keluarga besar yang telah memberikan doa, semangat, kasih sayang, dan dukungan yang tiada henti dalam segala hal.
8. Christopher Bryan, Aisya Surya, Adhela Maheswari, Lailatul Hikmah, Putri Alfa, Hilda Majidah dan teman-teman skripsi departemen RKG lainnya yang telah memberikan semangat, dukungan, saran, dan masukan selama mengerjakan skripsi bersama.
9. Ameilia Rizqiani, Jihan Azzahra, Real Akbar, Kurnia Putri, Rosandhina, Devina Farahamida, Baharuddin Wiradika, Naila Mufidah, Adiningsih, Hana Syafa dan semua teman dekat dan teman-teman Desmodentium angkatan 2019 yang selalu memberikan dukungan satu sama lain.
10. Seluruh pihak yang tidak dapat disebutkan satu persatu terkait penyusunan skripsi ini.

Penulis menyadari bahwa penulisan skripsi ini masih membutuhkan penyempurnaan, oleh karena itu penulis mengharapkan kritik dan saran yang membangun. Semoga skripsi ini dapat bermanfaat bagi semua pihak yang memerlukan.

Surabaya, Desember 2022

Penulis

***Exploration of Noni Fruit Extract (*Morinda citrifolia* L) as a Candidate for
Radiation Protection Materials: In Silico***

ABSTRACT

Background: Dental radiography is important to make a diagnosis, determine a treatment plan and evaluate treatment outcomes. In addition to providing many benefits, radiographic examination also has side effects. Noni fruit is one of the medicinal plants that have antioxidant bioactive compounds that can be used to reduce the side effects of radiation and can be used as radiation protection materials. **Purpose:** To determine the potential of noni fruit extract as a candidate for radiation protection in silico. **Methods:** Using in silico or computational methods. The databases used are PubChem, PASS Online, and ProTox-II. **Results:** There were 9 bioactive compounds in noni fruit extract, namely Quercetin, Kaempferol, Morindin, Morindone, Alizarin, Nicotinamide, beta-Sitosterol, Squalene, and n-hexadecanoic acid. Kaempferol, Squalene, and n-hexadecanoic acid are the most potent compounds as antioxidants. Kaempferol has a low level of toxicity (grade 5). The activity of Kaempferol as an antioxidant was 0.856 ($Pa \geq 0.7$), free radical scavenger was 0.771 ($Pa \geq 0.7$), and radioprotector was 0.538 (Pa 0.3-0.7). Squalene acts as a triterpene which has a low level of toxicity (class 5). The activity of Squalene as an antioxidant is 0.657 (Pa 0.3-0.7), free radical scavenger is 0.456 (Pa 0.3-0.7), and radioprotector is 0.649 (Pa 0.3-0.7). n-hexadecanoic acid is a metabolite compound with a moderate level of toxicity (class 4). The activity of n-hexadecanoic acid as an antioxidant is 0.222 ($Pa \leq 0.3$), Morindin has a value as a free radical scavenger of 0.315 (Pa 0.3-0.7). and a radioprotector of 0.628 (Pa 0.3-0.7). **Conclusion:** Kaempferol, Squalene, and n-hexadecanoic acid compounds in noni fruit extract have the potential to be candidates for radiation protection in silico.

Key words: Dental radiography, noni fruit, radiation protection, antioxidant

Eksplorasi Ekstrak Buah Mengkudu (*Morinda citrifolia* L) sebagai Kandidat Bahan Proteksi Radiasi : Secara In Silico

ABSTRAK

Latar belakang: Pemeriksaan radiografi kedokteran gigi adalah hal yang penting dilakukan untuk menegakkan diagnosis, menentukan rencana perawatan dan evaluasi hasil perawatan. Selain memberikan banyak manfaat, pemeriksaan radiografi juga memiliki efek samping. Buah mengkudu merupakan salah satu tanaman obat yang mempunyai senyawa bioaktif antioksidan yang dapat digunakan untuk meredam efek samping radiasi dan dapat digunakan sebagai bahan proteksi radiasi. **Tujuan:** Mengetahui potensi ekstrak buah mengkudu sebagai kandidat bahan proteksi radiasi secara *in silico*. **Metode:** Menggunakan metode *in silico* atau komputasi. Database yang digunakan adalah PubChem, PASS Online, dan ProTox-II. **Hasil:** Didapatkan 9 senyawa bioaktif pada ekstrak buah mengkudu yaitu Quercetin, Kaempferol, Morindin, Morindone, Alizarin, Nicotinamide, beta-Sitosterol, Squalene, dan n-hexadecanoic acid. Kaempferol, Squalene, dan n-hexadecanoic acid adalah senyawa yang paling poten sebagai antioksidan. Kaempferol memiliki level toksisitas yang rendah (kelas 5). Aktivitas Kaempferol sebagai bahan antioksidan sebesar 0,856 ($Pa \geq 0,7$), free radical scavenger sebesar 0,771 ($Pa \geq 0,7$), dan radioprotektor sebesar 0,538 (Pa 0,3-0,7). Squalene berperan sebagai triterpene yang memiliki level toksisitas yang rendah (kelas 5). Aktivitas Squalene sebagai bahan antioksidan sebesar 0,657 (Pa 0,3-0,7), free radical scavenger sebesar 0,456 (Pa 0,3-0,7), dan radioprotektor sebesar 0,649 (Pa 0,3-0,7). n-hexadecanoic acid merupakan senyawa metabolit dengan level toksisitas yang sedang (kelas 4). Aktivitas n-hexadecanoic acid sebagai bahan antioksidan sebesar 0,222 ($Pa \leq 0,3$), Morindin memiliki nilai sebagai free radical scavenger sebesar 0,315 (Pa 0,3-0,7). dan radioprotektor sebesar 0,628 (Pa 0,3-0,7). **Kesimpulan:** Senyawa Kaempferol, Squalene, dan n-hexadecanoic acid pada ekstrak buah mengkudu berpotensi menjadi kandidat bahan proteksi radiasi secara *in silico*.

Kata kunci: Radiografi kedokteran gigi, buah mengkudu, proteksi radiasi, antioksidasi

DAFTAR ISI

	Halaman
Sampul Depan	i
Sampul Dalam	ii
Lembar Pengesahan.....	iii
Penetapan Panitia Penguji Skripsi	iv
Surat Pernyataan Tentang Orisinalitas	v
Ucapan Terimakasih	vi
<i>Abstract</i>	viii
Abstrak	ix
Daftar Isi.....	x
Daftar Tabel	xiii
Daftar Gambar	xiv
Daftar Lampiran	xv
 BAB 1. PENDAHULUAN.....	 1
1.1 Latar Belakang Masalah	1
1.2 Rumusan Masalah	4
1.3 Tujuan Penelitian.....	5
1.3.1 Tujuan Umum.....	5
1.3.2 Tujuan Khusus.....	5
1.4 Manfaat Penelitian.....	5
1.4.1 Manfaat Teoritis	5
1.4.2 Manfaat Praktis.....	5
 BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA.....	 6
2.1 Radiasi	6
2.1.1 Definisi Radiasi	6
2.1.2 Jenis Radiasi Ionisasi.....	6
2.1.3 Efek Radiasi Pada Manusia	8
2.1.4 Efek Radiasi Terhadap Sistem Biologi.....	10
2.2 Radikal Bebas.....	11
2.2.1 Mekanisme Pembentukan Radikal Bebas	13

2.3 Proteksi Radiasi	14
2.3.1 Definisi Proteksi Radiasi	14
2.3.2 Jenis atau Macam Bahan Proteksi Radiasi	15
2.4 Antioksidan	16
2.4.1 Mekanisme Kerja Antioksidan dalam Menghambat Radikal Bebas	18
2.5 Buah Mengkudu	20
2.5.1 Klasifikasi	20
2.5.2 Tinjauan Umum Buah Mengkudu (<i>Morinda citrifolia</i> L)	20
2.5.3 Kandungan Senyawa Bioaktif	21
2.5.4 Aktivitas Antioksidan	23
2.6 Uji <i>In Silico</i>	24
2.6.1 Aktivitas Senyawa Bioaktif	26
2.6.2 Aktivitas Biologis	26
2.6.3 Prediksi Toksisitas	28
 BAB 3. KERANGKA KONSEPTUAL	 31
3.1 Kerangka Konseptual	31
3.2 Keterangan Kerangka Konseptual	32
3.3 Hipotesis	33
 BAB 4. METODOLOGI PENELITIAN	 34
4.1 Jenis Penelitian	34
4.2 Desain Penelitian	34
4.3 Waktu dan Lokasi Penelitian	34
4.4 Definisi Operasional	34
4.5 Alat dan Bahan Penelitian	35
4.5.1 Alat	35
4.5.2 Bahan	35
4.6 Prosedur Penelitian	35
4.6.1 Koleksi Sampel Metabolit Sekunder dari Buah Mengkudu (<i>Morinda citrifolia</i> L) dari <i>Database</i> PubChem	36
4.6.2 Analisis Prediksi Aktivitas Biologis Senyawa Metabolit Sekunder dari Buah Mengkudu (<i>Morinda citrifolia</i> L) dengan <i>Webserver PASS Online</i>	36
4.6.3 Analisis Prediksi Toksisitas Senyawa Metabolit Sekunder dari Buah Mengkudu (<i>Morinda citrifolia</i> L) dengan <i>Webserver</i> Protox-II	37

4.7 Alur Penelitian.....	38
4.8 Analisis Data	38
 BAB 5. HASIL PENELITIAN	40
5.1 Analisis Senyawa Ekstrak Buah Mengkudu (<i>Morinda citrifolia</i> L) dengan Pubchem.....	40
5.2 Aktifitas Biologis Ekstrak Buah Mengkudu (<i>Morinda citrifolia</i> L) dengan PASS Online	41
5.3 Analisis Toksisitas Senyawa Buah Mengkudu (<i>Morinda citrifolia</i> L) dengan Protox-II	46
 BAB 6. PEMBAHASAN	49
 BAB 7. KESIMPULAN DAN SARAN	58
7.1 Kesimpulan	58
7.2 Saran.....	58
 DAFTAR PUSTAKA	59
 LAMPIRAN.....	65

DAFTAR TABEL

Tabel 5.1	Hasil Analisis Senyawa Ekstrak Buah Mengkudu (<i>Morinda citrifolia</i> L) dengan Pubchem	40
Tabel 5.2	Prediksi Aktivitas Senyawa Biologis dengan Menggunakan Nilai Pa	42
Tabel 5.3	Hasil Aktivitas Biologi Senyawa Buah Mengkudu (<i>Morinda citrifolia</i> L) dengan <i>PASS Online</i>	43
Tabel 5.4	Hasil Analisis Toksisitas Senyawa Buah Mengkudu (<i>Morinda citrifolia</i> L) dengan Protox-II	46

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1	Medan Listrik dan Magnet	7
Gambar 2.2	Klasifikasi Antioksidan Alami	17
Gambar 2.3	Buah Mengkudu	20
Gambar 2.4	Prediksi Toksikologi in silico	30
Gambar 5.1	Diagram Batang Aktivitas Biologi Senyawa Buah Mengkudu (<i>Morinda citrifolia</i> L)	44

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1		65
Lampiran 2		69
Lampiran 3		74