

## ABSTRAK

Nama: Muhammad Alfatih Taufik

Program Studi: Kedokteran Gigi Program Sarjana

Judul: Analisis Kelarutan Medikamen Intrakanal Terhadap Penetrasi Ke Lesi

Periapikal: *Pendekatan Pemodelan Komputasional*

**Latar belakang:** Lesi periapikal merupakan infeksi yang terjadi akibat penyebaran bakteri dari jaringan pulpa yang nekrotik dan menjadi salah satu penyebab utama kegagalan perawatan saluran akar. Salah satu faktor penting dalam keberhasilan perawatan endodontik adalah penggunaan medikamen intrakanal yang efektif dalam mengeliminasi mikroorganisme. Efektivitas bahan ini dipengaruhi oleh kelarutan dan kemampuannya menembus jaringan periapikal. **Tujuan:** Menganalisis kelarutan berbagai jenis medikamen intrakanal terhadap penetrasi ke lesi periapikal menggunakan pendekatan pemodelan komputasional COSMO-RS serta meninjau hasilnya berdasarkan pandangan Islam. **Metode Penelitian:** Penelitian ini merupakan penelitian observasional analitik dengan desain *cross-sectional* yang dilakukan secara *in silico*. Sampel berupa struktur kimia dari delapan kelompok medikamen intrakanal (minyak esensial, senyawa fenol, aldehida, kalsium hidroksida, halogen, chlorhexidine gluconate, antibiotik, dan kombinasi kortikosteroid–antibiotik) yang diperoleh melalui database PubChem. Analisis dilakukan menggunakan perangkat lunak COSMO-RS dan diuji secara statistik dengan *independent t-test* serta *one-way ANOVA*. **Hasil:** Terdapat perbedaan bermakna ( $p < 0,05$ ) antara kelarutan seluruh medikamen intrakanal dan terdapat perbedaan kelarutan medikamen intrakanal pada suhu 36°C dan 37°C. Hasil ini menunjukkan bahwa peningkatan suhu fisiologis rongga mulut berpengaruh terhadap kelarutan dan efektivitas medikamen. Fenol menunjukkan tingkat kelarutan dan penetrasi paling tinggi terhadap lesi periapikal dibandingkan golongan lainnya. Sedangkan, kelarutan terendah dihasilkan oleh chlorhexidine. **Kesimpulan:** Kelarutan dan penetrasi medikamen intrakanal berhubungan erat dengan efektivitas penyembuhan lesi periapikal, dan penggunaan pendekatan pemodelan komputasional dapat menjadi alternatif analisis awal dalam menentukan bahan medikamen yang optimal. Selain itu, perbedaan sifat kelarutan yang dipengaruhi faktor seperti suhu mencerminkan ketetapan Allah SWT atas ciptaan-Nya (*bi-qadar*), yang memberikan hikmah bagi manusia dalam memahami dan memanfaatkan karakteristik setiap zat untuk meningkatkan keberhasilan perawatan endodontik.

**Kata kunci:** COSMO-RS, kelarutan, lesi periapikal, medikamen intrakanal, pemodelan komputasional

## ABSTRACT

Name: Muhammad Alfatih Taufik

Study Program: Kedokteran Gigi Program Sarjana

Title: Analysis of Intracanal Medicament Solubility on Penetration into Periapical Lesions: A Computational Modeling Approach

**Background:** Periapical lesions are infections caused by the spread of bacteria from necrotic pulp tissue and are among the leading causes of failure in root canal treatment. One of the key factors determining the success of endodontic therapy is the use of intracanal medicaments that effectively eliminate microorganisms. The efficacy of these medicaments is influenced by their solubility and ability to penetrate periapical tissues. **Objective:** To analyze the solubility of various types of intracanal medicaments and their penetration into periapical lesions using the COSMO-RS computational modeling approach, as well as to review the findings from an Islamic perspective. **Methods:** This study employed an analytical observational design with a cross-sectional approach conducted *in silico*. The samples consisted of the chemical structures of eight groups of intracanal medicaments (essential oils, phenolic compounds, aldehydes, calcium hydroxide, halogens, chlorhexidine gluconate, antibiotics, and corticosteroid–antibiotic combinations) obtained from the PubChem database. Data were analyzed using the COSMO-RS software, and statistical tests were performed using independent t-test and one-way ANOVA. **Results:** There were significant differences ( $p < 0.05$ ) among the solubility values of all intracanal medicaments, and solubility also differed between 36°C and 37°C. These findings indicate that an increase in the physiological temperature of the oral cavity affects the solubility and effectiveness of the medicaments. Phenolic compounds demonstrated the highest solubility and penetration into periapical lesions, while chlorhexidine showed the lowest solubility. **Conclusion:** The solubility and penetration of intracanal medicaments are closely related to the effectiveness of periapical lesion healing, and the use of computational modeling offers a valuable preliminary approach for determining the optimal medicament. Additionally, variations in solubility influenced by factors such as temperature reflect Allah SWT's predetermined design of all creations (*bi-qadar*), providing insight for humans to understand and utilize the characteristics of each substance to enhance the success of endodontic treatment.

**Keywords:** Computational modeling, COSMO-RS, intracanal medicament, periapical lesion, solubility