

ABSTRAK

Nama : Irsandy Idris
Program Studi : Kedokteran Gigi Program Sarjana
Judul : Analisis Kelarutan Bahan Irigasi Endodontik di Dalam Saluran Akar:
Pendekatan Pemodelan Komputasional.

Latar Belakang: Larutan irigasi endodontik berperan penting dalam keberhasilan perawatan saluran akar karena mampu membersihkan debris, melarutkan jaringan nekrotik, dan mengurangi jumlah bakteri. Namun, efektivitas bahan irigasi dapat dipengaruhi oleh faktor suhu selama prosedur klinis. Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis pengaruh suhu terhadap kelarutan beberapa bahan irigasi endodontik menggunakan metode pemodelan komputasional COSMO-RS sebagai pendekatan prediktif. **Metode Penelitian:** Penelitian ini merupakan studi observasional analitik dengan desain *cross-sectional* yang melibatkan tiga bahan irigasi, yaitu *Chlorhexidine digluconate* (CHX), *Ethylenediaminetetraacetic Acid* (EDTA), dan *Mixture of Tetracycline, Acid, and Detergen* (MTAD). Data struktur kimia diperoleh melalui *database* PubChem dan dianalisis menggunakan perangkat lunak COSMO-RS, sedangkan uji statistik dilakukan dengan *independent t-test* dan *One-Way ANOVA*. **Hasil:** Hasil penelitian menunjukkan bahwa peningkatan suhu dari 36°C menjadi 37°C secara signifikan meningkatkan kelarutan seluruh bahan irigasi ($p < 0,05$). CHX memiliki kelarutan tertinggi, diikuti oleh EDTA dan MTAD. **Kesimpulan:** Peningkatan suhu terbukti meningkatkan kelarutan bahan irigasi endodontik, sementara metode komputasional COSMO-RS efektif memprediksi kelarutan secara efisien sebelum uji laboratorium dilakukan. Karena itu, pemilihan bahan irigasi harus didasarkan pada ilmu pengetahuan dan tanggung jawab profesional agar tidak menimbulkan mudarat.

Kata Kunci: COSMO-RS, *Chlorhexidine digluconate*, EDTA, kelarutan, Larutan irigasi endodontik, MTAD, suhu.

ABSTRACT

Name : Irsandy Idris
Study Program : Kedokteran Gigi Program Sarjana
Title : Solubility Analysis of Endodontic Irrigation Materials in Root canals:
Computational Modeling Approach.

Background: Endodontic irrigation solutions play an important role in the success of root canal treatment because they are able to clean debris, dissolve necrotic tissue, and reduce the number of bacteria. However, the effectiveness of irrigation materials can be affected by temperature factors during clinical procedures. This study aims to analyze the effect of temperature on the solubility of several endodontic irrigation materials using the COSMO-RS computational modeling method as a predictive approach. **Methods:** This study is an analytical observational study with a cross-sectional design involving three irrigation materials, namely *Chlorhexidine digluconate* (CHX), *Ethylenediaminetetraacetic Acid* (EDTA), and *Mixture of Tetracycline, Acid, and Detergent* (MTAD). Chemical structure data were obtained from the PubChem database and analyzed using COSMO-RS software, while statistical tests were performed with *Independent t-test* and *One-Way ANOVA*. **Results:** The results showed that increasing the temperature from 36°C to 37°C significantly increased the solubility of all irrigation materials ($p < 0.05$). CHX had the highest solubility, followed by EDTA and MTAD. **Conclusion:** Increasing temperature has been shown to increase the solubility of endodontic irrigants, while the COSMO-RS computational method effectively predicts solubility before laboratory testing. Therefore, the selection of irrigants must be based on scientific knowledge and professional responsibility to avoid harm.

Keywords: COSMO-RS, *Chlorhexidine digluconate*, EDTA, Endodontic irrigation solution, MTAD, solubility, temperature.