

ANALISIS LC-MS/MS, AKTIVITAS ANTIOKSIDAN, DAN ANTIBAKTERI EKSTRAK DAUN *Asclepias curassavica* L. TERHADAP BAKTERI KARIES GIGI

ERWINCE FALLO



**PROGRAM STUDI BIOKIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2026**



@Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

PERNYATAAN MENGENAI TESIS, SUMBER INFORMASI, PENGGUNAAN AI, DAN PELIMPAHAN HAK CIPTA

Dengan ini saya menyatakan bahwa tesis dengan judul “Analisis LC-MS/MS, Aktivitas Antioksidan, dan Antibakteri Ekstrak Daun *Asclepias curassavica* L. Terhadap Bakteri Karies Gigi” merupakan salah satu syarat untuk memperoleh gelar magister Biokimia. Karya ini merupakan karya saya dengan arahan dari dosen pembimbing dan belum diajukan dalam bentuk apa pun kepada perguruan tinggi mana pun. Sumber informasi yang berasal atau dikutip dari karya yang diterbitkan maupun tidak diterbitkan dari penulis lain telah disebutkan dalam teks dan dicantumkan dalam Daftar Pustaka di bagian akhir tesis ini.

Dengan ini saya melimpahkan hak cipta atas karya tulis saya kepada Institut Pertanian Bogor.

Bogor, Juni Tahun 2026

Erwince Fallo
G8501241004

© Hak Cipta milik IPB, tahun 2026¹
Hak Cipta dilindungi Undang-Undang

Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan atau menyebutkan sumbernya. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik, atau tinjauan suatu masalah, dan pengutipan tersebut tidak merugikan kepentingan IPB.

Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apa pun tanpa izin IPB.



IPB University

— Bogor Indonesia —

SOROTAN

ERWINCE FALLO. Analisis LC-MS/MS, Aktivitas Antioksidan, dan Antibakteri Ekstrak Daun *Asclepias curassavica* L. Terhadap Bakteri Karies Gigi. Dibimbing oleh SYAMSUL FALAH dan DIMAS ANDRIANTO.

1. Penelitian ini mengkaji potensi daun *Asclepias curassavica* sebagai antikaries alami.
2. Analisis LC-MS/MS digunakan untuk mengidentifikasi senyawa bioaktif dalam ekstrak daun.
3. Ekstrak menunjukkan aktivitas antioksidan dan antibakteri terhadap bakteri penyebab karies gigi.
4. Molecular docking menunjukkan potensi penghambatan enzim GtfB *S. mutans*.
5. Penelitian ini mendukung pengembangan bahan alami untuk kesehatan gigi dan mulut.

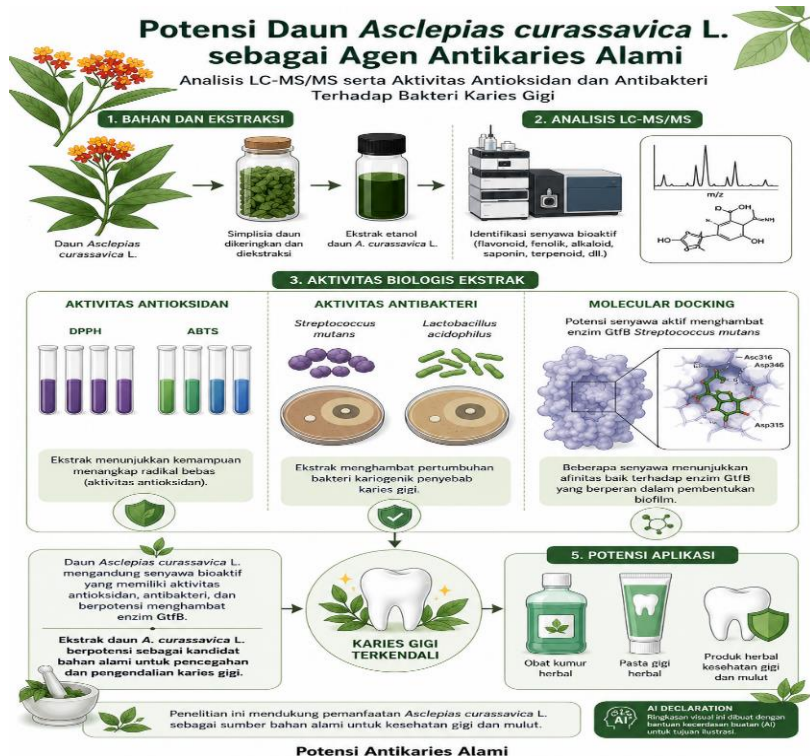
HIGHLIGHTS

ERWINCE FALLO. LC-MS/MS Analysis, Antioxidant and Antibacterial Activities of *Asclepias curassavica* Leaf Extract Against Dental Caries Bacteria. Supervised by SYAMSUL FALAH and DIMAS ANDRIANTO.

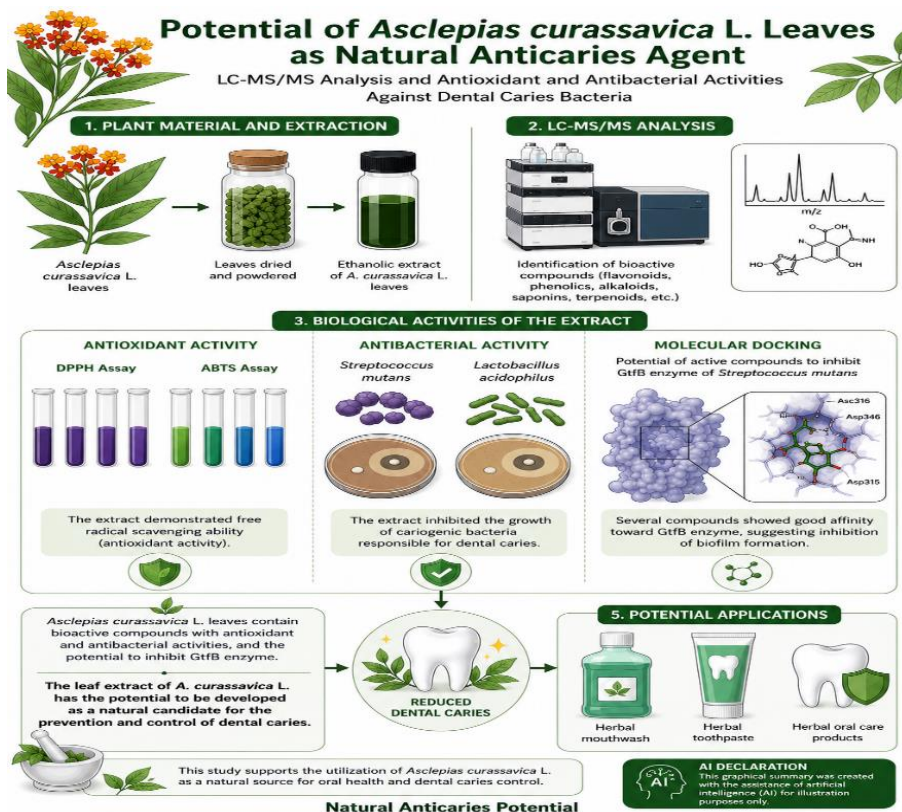
1. This study explored *Asclepias curassavica* leaves as natural anticaries agents.
2. LC-MS/MS analysis identified bioactive compounds in leaf extracts.
3. The extract showed antioxidant and antibacterial activities against cariogenic bacteria.
4. Molecular docking indicated potential inhibition of the *S. mutans* GtfB enzyme.
5. The study supports the development of natural materials for oral health applications.



RINGKASAN VISUAL



GRAPHICAL SUMMARY



Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
 1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.

2. Dilarang mengumunkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



RINGKASAN

ERWINCE FALLO. Analisis LC-MS/MS, Aktivitas Antioksidan dan Antibakteri Ekstrak Daun *Asclepias curassavica* L. Terhadap Bakteri Karies Gigi. Dibimbing oleh SYAMSUL FALAH dan DIMAS ANDRIANTO.

Karies gigi merupakan salah satu masalah kesehatan mulut yang banyak disebabkan oleh aktivitas bakteri kariogenik, terutama *Streptococcus mutans* dan *Lactobacillus acidophilus*. Selain faktor mikrobiologis, stres oksidatif akibat radikal bebas juga berperan dalam memperparah kerusakan jaringan rongga mulut. Penggunaan antibakteri sintetis dalam jangka panjang berpotensi menimbulkan resistensi bakteri dan gangguan keseimbangan mikrobiota oral, sehingga diperlukan pengembangan bahan alami yang memiliki aktivitas antibakteri sekaligus antioksidan. Salah satu tanaman yang berpotensi dikembangkan adalah *Asclepias curassavica* L. yang secara tradisional dimanfaatkan sebagai obat sakit gigi dan peradangan.

Penelitian ini bertujuan untuk mengidentifikasi profil senyawa bioaktif dalam ekstrak daun *Asclepias curassavica* L. menggunakan analisis LC-MS/MS serta mengevaluasi aktivitas antioksidan dan antibakterinya terhadap bakteri penyebab karies gigi. Selain itu, penelitian ini juga bertujuan untuk menganalisis potensi penghambatan senyawa aktif terhadap enzim glukosiltransferase B (GtfB) melalui pendekatan *in silico*. Metode penelitian diawali dengan preparasi dan ekstraksi daun menggunakan pelarut metanol, etil asetat, dan n-heksana. Identifikasi senyawa bioaktif dilakukan menggunakan metode LC-MS/MS. Kandungan total fenolik dan flavonoid dianalisis secara spektrofotometri. Aktivitas antioksidan dievaluasi menggunakan metode DPPH dan ABTS. Aktivitas antibakteri diuji terhadap *Streptococcus mutans* dan *Lactobacillus acidophilus*. Analisis *molecular docking* dilakukan untuk mengevaluasi interaksi senyawa aktif daun *Asclepias curassavica* terhadap enzim GtfB sebagai target penting dalam pembentukan biofilm bakteri penyebab karies gigi.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa ekstrak daun *Asclepias curassavica* L. mengandung 47 senyawa bioaktif yang didominasi oleh golongan flavonoid, fenolik, alkaloid, dan terpenoid. Ekstrak menunjukkan kapasitas antioksidan berdasarkan metode DPPH dan ABTS yang mengindikasikan kemampuan menangkal radikal bebas. Selain itu, ekstrak juga menunjukkan aktivitas antibakteri terhadap bakteri kariogenik, meskipun masih tergolong rendah hingga sedang. Analisis *molecular docking* mengidentifikasi enam senyawa dengan afinitas pengikatan yang lebih baik dibandingkan amoksisilin, yaitu *Scortechinone B*, *Charantoside II*, *Quercetin-3-neohesperidoside*, *Digitoxigenin-3-O-β-D-glucopyranoside*, *Rutin*, dan *16α-acetoxycasclepin*. Di antara senyawa tersebut, *Digitoxigenin-3-O-β-D-glucopyranoside* menunjukkan profil ADMET yang paling baik sehingga berpotensi sebagai kandidat senyawa antikaries.

Temuan ini membuka peluang pemanfaatan daun *Asclepias curassavica* sebagai sumber senyawa bioaktif antikaries yang perlu dikaji lebih lanjut melalui pengujian *in vitro* lanjutan, *in vivo*, dan studi formulasi produk kesehatan gigi dan mulut.

Kata kunci: antibakteri, antioksidan, *Asclepias curassavica*, karies gigi, LC-MS/MS



- 

SUMMARY

ERWINCE FALLO. LC-MS/MS Analysis, Antioxidant and Antibacterial Activities of *Asclepias curassavica* L. Leaf Extract Against Dental Caries Bacteria. Supervised by SYAMSUL FALAH and DIMAS ANDRIANTO.

Dental caries is one of the most prevalent oral health problems and is primarily caused by the activity of cariogenic bacteria, particularly *Streptococcus mutans* and *Lactobacillus acidophilus*. In addition to microbiological factors, oxidative stress induced by free radicals contributes to the progression of oral tissue damage. The long-term use of synthetic antibacterial agents may lead to bacterial resistance and disruption of the oral microbiota balance, highlighting the need for natural alternatives possessing both antibacterial and antioxidant properties. One plant with promising potential is *Asclepias curassavica* L., which has traditionally been used to treat toothache and inflammation.

This study aimed to identify the bioactive compound profile of *Asclepias curassavica* leaf extracts using LC-MS/MS analysis and to evaluate their antioxidant and antibacterial activities against cariogenic bacteria. In addition, the inhibitory potential of the identified compounds against glucosyltransferase B (GtfB) was investigated through an in silico approach. The study began with leaf preparation and extraction using methanol, ethyl acetate, and *n*-hexane solvents. Bioactive compounds were identified using LC-MS/MS analysis. Total phenolic and flavonoid contents were determined spectrophotometrically. Antioxidant capacity was evaluated using DPPH and ABTS assays, while antibacterial activity was assessed against *Streptococcus mutans* and *Lactobacillus acidophilus*. Molecular docking analysis was performed to evaluate the interactions between bioactive compounds from *A. curassavica* leaves and the GtfB enzyme, a key target involved in biofilm formation by cariogenic bacteria.

The results revealed that *Asclepias curassavica* leaf extracts contained 47 bioactive compounds, predominantly belonging to flavonoid, phenolic, alkaloid, and terpenoid groups. The extracts exhibited antioxidant capacity in both DPPH and ABTS assays, indicating their ability to scavenge free radicals. Furthermore, the extracts demonstrated antibacterial activity against cariogenic bacteria, although the inhibitory effects were categorized as low to moderate. Molecular docking analysis identified six compounds with stronger binding affinities to GtfB than amoxicillin, namely Scortechinone B, Charantoside II, Quercetin-3-neohesperidoside, Digitoxigenin-3-O- β -D-glucopyranoside, Rutin, and 16 α -acetoxyasclepin. Among these compounds, Digitoxigenin-3-O- β -D-glucopyranoside exhibited the most favorable ADMET profile, suggesting its potential as an anti-caries candidate compound.

These findings highlight the potential of *Asclepias curassavica* leaves as a source of anti-caries bioactive compounds and warrant further investigation through advanced in vitro and in vivo studies, as well as the development and formulation of dental and oral healthcare products.

Keywords: antibacterial, antioxidant, *Asclepias curassavica*, dental caries, LC-MS/MS



@Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

Tim Penguji pada Ujian Tesis:

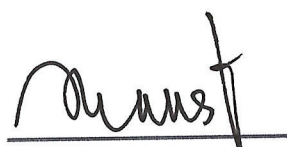
- 1 Prof. Dr. Dra. Laksmi Ambarsari, MS.
- 2 Dr. Syamsul Falah, S.Hut.,M.Si
3. Dr. Dimas Andrianto, S.Si.,M.Si

Judul Tesis : Analisis LC-MS/MS, Aktivitas Antioksidan dan Antibakteri Ekstrak Daun *Asclepias curassavica* L. terhadap Bakteri Karies Gigi

Nama : Erwince Fallo
NIM : G8501241004

Disetujui oleh

Pembimbing 1:
Dr. Syamsul Falah, S.Hut.,M.Si



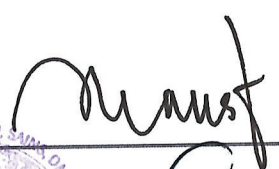
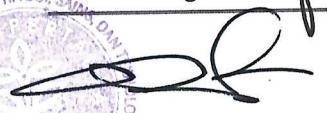
Pembimbing 2:
Dr. Dimas Andrianto, S.Si.,M.Si



Diketahui oleh

Ketua Program Studi S2 Biokimia
Dr. Syamsul Falah, S.Hut.,M.Si
NIP 19700503 200501 1 001

Dekan Fakultas MIPA
Dr. Berry Juliandi, S.Si.,M.Si
NIP 19780723 200701 1 001


Tanggal Ujian: 23 Juni 2026

Tanggal Lulus:

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



@Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

PRAKATA

Puji dan syukur penulis panjatkan kepada Tuhan Yang Maha Esa atas segala karunia-Nya sehingga tesis ini berhasil diselesaikan. Judul dalam penelitian yang dilaksanakan sejak bulan Agustus 2025 sampai bulan Februari 2026 ini ialah Analisis LC-MS/MS, Aktivitas Antioksidan dan Antibakteri Ekstrak Daun *Asclepias curassavica* L. Terhadap Bakteri Karies Gigi. Penulisan tesis ini tidak terlepas dari dukungan dan bantuan dari berbagai pihak. Oleh karena itu, penghargaan dan ucapan terima kasih penulis sampaikan kepada:

1. Ketua komisi pembimbing Dr. Syamsul Falah, S.Hut.,M.Si, dan anggota komisi pembimbing Dr. Dimas Andrianto, S.Si.,M.Si, yang telah membimbing, memotivasi, dan memberikan saran dalam penyelesaian tesis ini.
2. Penguji luar komisi pembimbing Prof. Dr. Dra. Laksmi Ambarsari. MS atas komentar dan masukkan untuk tesis penulis.
3. Lembaga Pengelola Dana Pendidikan (LPDP), atas kepercayaan yang diberikan melalui beasiswa, mendukung studi magister penulis.
4. Segenap sivitas akademika Departemen Biokimia IPB yang telah mendukung dan menjadi bagian dari keluarga penulis selama proses studi.
5. Saudara Nikarmi Z. Nuban, yang telah membantu penulis dalam pengambilan dan pengeringan sampel.
6. Keluarga tercinta di rumah, Bapak Charles Fallo, Ibu Bendelina Olla, Nenek Orpa Anin, Tii Ince Olla, Besa Dortia Olla, Adik Tilda, Delta dan, Rudi yang selalu memberikan doa dan dukungan.
7. Semua keluarga besar Fallo, Olla, Tefa, Nuban, Oematan, Baun, serta semua pihak yang tidak dapat disebutkan satu per satu, yang telah mendukung penulis baik secara materi maupun moral.
8. Teman-teman seperjuangan di Program Studi Biokimia IPB angkatan 2024 atas kebersamaan, dukungan, dan semangat yang diberikan selama menempuh studi.
9. Kakak-kakak yang tergabung dalam kelompok GAMANUSRATIM yang telah mendukung dan membantu penulis dalam penyelesaian studi.

Semoga tugas akhir ini bermanfaat bagi pihak yang membutuhkan dan bagi kemajuan ilmu pengetahuan.

Bogor, Juni 2026

Erwince Fallo



@Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

DAFTAR ISI

DAFTAR TABEL	x
DAFTAR GAMBAR.....	x
DAFTAR LAMPIRAN	x
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Tujuan	2
1.4 Manfaat	3
1.5 Ruang Lingkup.....	3
II TINJAUAN PUSTAKA	4
2.1 <i>Asclepias curassavica</i>	4
2.2 Metabolit sekunder dan senyawa bioaktif tumbuhan.....	5
2.3 Karies gigi.....	6
2.4 Bakteri penyebab karies gigi.....	7
2.5 Antibakteri	7
2.6 Antioksidan	8
2.7 <i>Liquid Chromatography-Mass Spectrometry</i>	9
2.8 Molecular docking	9
2.9 Enzim glukosiltransferase	10
III METODE	11
3.1 Waktu dan tempat penelitian	11
3.2 Alat dan bahan penelitian.....	11
3.3 Prosedur kerja	12
3.4 Analisis data.....	18
IV HASIL	19
4.1 Kadar air dan hasil ekstraksi daun <i>Asclepias curassavica</i>	19
4.2 Identifikasi senyawa bioaktif daun <i>Asclepias curassavica</i>	20
4.3 Kandungan total fenolik, flavonoid, dan antioksidan	22
4.4 <i>In vitro</i> antibakteri.....	23
4.5 Molecular docking	27
4.6 Analisis ADMET	28
4.7 Prediksi PASS.....	28
V PEMBAHASAN.....	31
5.1 Ekstrak daun <i>Asclepias curassavica</i>	31
5.2 Kandungan senyawa aktif daun <i>Asclepias curassavica</i>	32
5.3 Kapasitas antioksidan daun <i>Asclepias curassavica</i>	34
5.4 Aktivitas antibakteri.....	35
5.5 molekuler docking	40
5.6 Analisis ADMET	41
5.6 Prediksi PASS.....	42
VII SIMPULAN DAN SARAN	44
DAFTAR PUSTAKA	45
LAMPIRAN.....	55
RIWAYAT HIDUP	57

DAFTAR TABEL

1 Identifikasi senyawa dalam ekstrak metanol daun <i>A. curassavica</i>	20
2 Identifikasi senyawa dalam ekstrak etil asetat daun <i>A. curassavica</i>	20
3 Identifikasi senyawa dalam ekstrak n-heksana daun <i>A. curassavica</i>	21
4 Aktivitas antioksidan, total fenolik dan flavonoid daun <i>A. curassavica</i>	22
5 Karakteristik struktur pengikatan 1 enzim GtfB	24
6 Nilai enrgy pengikatan hasil molekuler docking terhadap GtfB	25
7 Hasil uji aktivitas antibakteri secara in vitro	27
8 Profil ADMET senyawa terpilih	28
9 Profil PASS senyawa terpilih	29

DAFTAR GAMBAR

1 Tanaman <i>Asclepias curassavica</i>	4
2 Tahapan terjadinya karies gigi	6
3 Morfologi <i>Streptococcus mutans</i>	7
4 Morfologi <i>Lactobacillus spp.</i>	7
5 Sistem dan alur kerja LC-MS/MS	9
6 Struktur enzim glukosiltransferase B	11
7 Hasil ekstraksi (%) ekstrak daun <i>A. curassavica</i>	19
8 Validasi struktur GtfB menggunakan server SAVES dan ProSA-web.	23
9 Visualisasi protein GtfB dan kantong pengikatan 1	24
10 Visualisasi kompleks ligan-GtfB. Diagram interaksi 2D dan 3D	26

DAFTAR LAMPIRAN

1 Alur penelitian	54
2 Kromatogram LC-MS ekstrak methanol daun <i>Asclepias curassavica</i>	55
3 Kromatogram LC-MS ekstrak etil asetat daun <i>Asclepias curassavica</i>	55
4 Kromatogram LC-MS ekstrak n-heksana daun <i>Asclepias curassavica</i>	56
5 Kurva standard penentuan total fenolik	56
6 Kurva standard penentuan total flavonoid	57
7 Kurva standard penentuan kapasitas antioksidan DPPH	57
8 Kurva standard penentuan kapasitas antioksidan ABTS	57
9 Hasil identifikasi tanaman <i>A. curassavica</i>	58
10 Visualisasi zona hambat uji aktivitas antibakteri	59
11 Hasil evaluasi kualitas struktur protein GtfB	60
12 Visualisasi kompleks ligan_GtfB	61
13 Contoh perhitungan	62

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumunkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.