

Analisis Toksisitas Senyawa Kimia pada Daun Kelor (*Moringa oleifera* L.) Terhadap Kulit Wajah secara In Siliko.

Dhea Percatawati¹, Eka Wahyu Widia Prasasti¹, dan Agus Muji Santoso^{*1}

¹Program Studi Pendidikan Biologi Universitas Nusantara PGRI Kediri

*Penulis korespondensi: agusmujisantoso@unpkediri.ac.id

ABSTRACT

Moringa oleifera L. leaves are used as an organic facial mask containing phytochemical compounds that can be used to improve facial skin health. However, all chemical compounds have different reactions to the skin. The purpose of this study was to determine the toxicity of *Moringa* leaves. The method used was descriptive exploratory using the Pubchem web and toxtree software. *Moringa* leaves contain 14 chemical compounds and from these compounds, 5 compounds were found with the highest peak area (31.82) *n*-hexadecanoic acid, (27.21) *cis*-vaccenic acid, (7.21) 3-chloro-*n*-isochroman-1-ylmethylpropionamide, (4.82) octadecanoic acid, and (2.82) gamma-sitosterol. The results showed that of the five compounds, 3 compounds have the potential to irritate the skin, namely *n*-hexadecanoic acid, *cis*-vaccenic acid, and octadecanoic acid. Meanwhile, 2 compounds, namely 3-chloro-*n*-isochroman-1-ylmethylpropionamide and gamma-sitosterol, do not have the potential to cause irritation.

Key words:

Moringa leaves, compounds, toxicity

Riwayat artikel

Diterima:16/11/2025

Diperbaiki:-

Terbit:8/5/2026

PENDAHULUAN

Salah satu bagian organ tubuh yang paling penting untuk dirawat adalah kulit wajah. Kulit wajah yang tampak cantik dan sehat merupakan impian bagi setiap wanita. Dermatologi kosmetika Indonesia menunjukkan terdapat 80% penderita jerawat pada tahun 2010 dan 85% pada tahun 2013, paling banyak terjadi di usia 15 tahun (Lynn, dkk. 2016). Terdapat beberapa hal yang menyebabkan kulit wajah menjadi kurang sehat diantaranya adalah banyak mengkonsumsi makanan yang tidak sehat (makanan yang mengandung lemak tinggi, makanan yang tidak mengandung zat yang dibutuhkan oleh tubuh), kurangnya istirahat, sering melakukan aktivitas fisik yang berat, sering beraktivitas diluar ruangan yang menyebabkan kulit banyak terkena sinar matahari, debu, asap rokok, polusi kendaraan Perwita, M. H. (2019), serta kurangnya menjaga kesehatan kulit terutama kulit wajah. Kebiasaan tersebut dapat menimbulkan masalah pada kulit wajah seperti penuaan dini, kusam, flek hitam dan jerawat. Proses penuaan merupakan proses jaringan pada kulit kehilangan kemampuan untuk regenerasi dan mempertahankan fungsi kulit.

Melakukan perawatan terhadap kulit wajah hal yang paling pertama dilakukan yakni mengenal tipe kulit wajah. Tipe-tipe kulit wajah terbagi menjadi 3 tipe yaitu tipe kulit kering, tipe kulit berminyak, dan tipe kulit normal. Perawatan wajah yang paling mudah yakni menggunakan masker wajah (Sari & Setyowati, 2014). Masker wajah telah terbukti dapat membantu merawat

kesehatan kulit. Masker wajah dapat membersihkan pori-pori wajah, menjaga wajah tetap terhidrasi dan membuat wajah terlihat lebih cerah. Menurut Rohana (2014), masker wajah berdasarkan bentuknya terbagi menjadi 4 yaitu masker bubuk, masker krim, masker kertas atau kain, dan masker dalam bentuk gel. Berdasarkan bahan pembuatannya, masker wajah terbagi menjadi 2 yaitu masker berbahan dasar kimia dan masker berbahan dasar bahan alami/organik. Masker berbahan dasar alami seperti buah, sayuran, dan rempah. Perawatan menggunakan bahan alami dipercaya masyarakat dapat nutrisi kulit wajah, membantu mengobati dan memulihkan kulit wajah yang bermasalah seperti jerawat, flek hitam, dan penuaan tanpa menimbulkan efek samping. Masker organik memiliki kandungan senyawa yang baik untuk wajah. Masker organik dapat dibuat dengan memanfaatkan tumbuhan yang ada disekitar seperti daun kelor (Putra, 2016). Kelor memiliki nama latin *Moringa oleifera* L. mengandung senyawa fitokimia yang dapat digunakan untuk meningkatkan kesehatan kulit wajah. *Moringa oleifera* L. dapat membuat kulit wajah menjadi cerah, lembut, dan terhidrasi. Selain itu, menurut Maarif & Septianisa (2019) masker daun kelor dapat membantu memulihkan masalah kulit wajah diantaranya kusam, jerawat, flek hitam dan mencegah penuaan.

Berdasarkan hasil penelitian sebelumnya masih dijelaskan pemanfaatan ekstrak *Moringa oleifera* L. sebagai masker organik untuk merawat kesehatan kulit wajah. Akan tetapi, penelitian mengenai uji toksisitas senyawa kimia hasil ekstraksi daun kelor belum banyak ditemukan. Senyawa yang berasal dari alam memiliki karakteristik dan aktivitas yang berbeda-beda terhadap manusia khususnya kulit wajah. Oleh karena itu, penelitian ini dibuat untuk mengetahui tingkat toksisitas senyawa pada daun kelor terhadap kulit wajah sebagai masker alami.

METODE

Penelitian ini merupakan penelitian kualitatif menggunakan metode penelitian deskriptif eksploratif. Penelitian deskriptif adalah penelitian yang melakukan analisis sampai pada menganalisis dan menyajikan data secara sistematis. Sedangkan penelitian eksploratif adalah jenis penelitian yang bertujuan untuk mengungkapkan suatu fakta yang baru berupa pengelompokan suatu gejala, fakta, dan penyakit tertentu. Adapun alat dan bahan, serta prosedur yang digunakan dalam penelitian ini meliputi :

1. Alat dan Bahan

Alat yang digunakan yaitu perangkat keras berupa laptop, perangkat lunak Pubchem, dan software Toxtree. Bahan yang digunakan dalam penelitian adalah kandungan senyawa yang terdapat pada daun kelor. Kandungan senyawa ini diperoleh melalui studi literatur.

2. Prosedur

2.1 Penyiapan canonical SMILES

Data canonical SMILES diperoleh dari website Pubchem dengan tautan laman berikut <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/> dengan cara mengunjungi website tersebut kemudian tulis di bagian pencarian senyawa yang akan dianalisis. Pilih senyawa yang sama dengan pencarian. Kemudian tarik ke bawah, data canonical SMILES terdapat pada nomor 2.1.14.

2.2 Uji toksisitas

Uji toksisitas senyawa pada daun kelor menggunakan software toxtree-3.1.0. Software toxtree diperlukan untuk menganalisis data canonical SMILES yang telah didapat. Penganalisisan dilakukan satu persatu untuk setiap senyawa. Tulis pada chemical identifier kemudian klik bagian atas bertuliskan method, pilih select a decision tree, pilih skin irritation / skin corrosion.

3. Analisis Data

Data yang diperoleh berupa kategori iritasi dan korosi kulit.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Tabel 1. Kandungan Senyawa, Canonical Smile, dan Peak Area pada Daun Kelor

No.	Nama Senyawa	Canonical Smile	Peak area (%)
1.	Siklo Pentanetriol	<chem>C1CC(C(C1O)O)O</chem>	1,68
2.	L-galaktosa, 6-deoksi-	<chem>CC(C(C(C(C=O)O)O)O)O</chem>	1,68
3.	Asam n-Hexadecanoic	<chem>CC(C)CCCCCCCCCCCC C(=O)O</chem>	31,82
4.	Asam Tetradekanoat	<chem>CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O</chem>	2,18
5.	Asam cis-vaccenic	<chem>CCCCCCC=CCCCCCCC CCC(=O)O</chem>	27,21
6.	Asam Oktadekanoat	<chem>CCCCCCCCCCCCCCCCCC CC(=O)O</chem>	4.82
7.	Palmitoil Klorida	<chem>CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)Cl</chem>	1,51
8.	3-Kloro-N-Idokroman-1-ylmethylpropionamide	<chem>C1C(OCC2=CC=CC=C21) C#N</chem> <chem>CNC(=O)C3=CC=CC(=C3)</chem>	7,21
9.	Asamm 2-Butenoat, 2-Metoksi- 3-metil-, metil ester	<chem>COCC1=CC(=CC=C1)C(=O)O</chem>	1,70
10.	3,4-Diklorobenzonitril	<chem>C1=CC(=C(C(=C1C#N)N)Cl)Cl</chem>	2,28
11.	Manitol,1,4-di-O-metil-,tetraasetat	<chem>CC(=O)OCC(C(COC(=O)C)(COC(=O)C)OCSC)OC(=O)C</chem>	1,72
12.	Beta.-1-Rhamnofuranosida, thio-octyl	<chem>CC(=O)OCC(C(COC(=O)C)(COC(=O)C)OCSC)OC(=O)C</chem>	1,0
13.	Gamma.-Sitosterol	<chem>CCC(CCC(C)C1CCC2C1(CCC3C2CC=C4C3(CCC(C4)O)C)C(C)C</chem>	2,82
14.	Pregn-5,7-dien-3-ol-20-satu	<chem>CC(=O)C1CCC2C1(CCC3 C2CC=C4C3(CCC(=O)C4) C)C</chem>	1,41

Kandungan senyawa bioaktif pada suatu bagian tanaman dapat dicari melalui data base online. Berdasarkan hasil koleksi senyawa bioaktif yang terdapat di ekstrak daun kelor sebanyak 14 senyawa (tabel 1), yang terdiri dari siklo pentanetriol, l-galaktosa, 6-deoksi-, asam n-hexadecanoic, asam cis-vaccenic, asam oktadekanoat, palmitoil klorida, 3-kloro-n- isokroman-1-ylmethylpropionamide, asam 2-butenat, 2-metoksi-3-metil-, metil ester, 3,4-diklorobenxonitril, manitol,1,4-di-O-metil,tetraasetat, beta.-1-rhamnofuranosida,thio-octyl, gamma.-sitosterol, dan pregn-5,7-dien-3-ol-20-satu (Jee & Kumar, 2020). Selanjutnya dilakukan

penganalisisan menggunakan data base PubChem yang bertujuan untuk memperoleh data Canonical SMILES. Fungsi data Canonical SMILES digunakan untuk memprediksi setiap senyawa dengan menggunakan software toxtree.

Puncak area/luas puncak adalah luas area yang berada di bawah puncak yang ditentukan oleh tinggi dan lebar dasar puncak dimana semakin tinggi puncak dan semakin lebar dasar puncak, maka semakin besar luas puncak. Data peak area (luas puncak) berhubungan dengan konsentrasi senyawa dimana semakin luas puncak suatu senyawa maka semakin tinggi konsentrasi senyawa tersebut. Peak area ditentukan oleh faktor sensitivitas detektor dan keakuratan alat pengolahan data (Pontoh & Buyung, 2011). Data peak area digunakan untuk memperoleh 5 senyawa tertinggi (tabel 2) yang terdapat pada daun kelor yaitu asam n-Hexadecanoic (31,82%), asam cis-Vaccenic (27,21%), 3-Kloro-N-isokroman-1-ylmethylpropionamide (7,21%), asam oktadekanoat (4,82%), dan gamma.-sitosterol (2,82%).

Data kelima senyawa tersebut kemudian diuji dengan menggunakan software toxtree yang digunakan untuk pengujian toksisitas senyawa (Tabel 2). Toxtree memiliki banyak parameter uji dengan hasil akhir pengujian toksisitas yang berbeda. Uji toksisitas senyawa dilakukan dengan menggunakan parameter Skin Toxicity / Skin Corrosion.

Hexadecanoic acid methyl ester (metil palmitat) termasuk asam lemak yang memiliki sifat antibakteri dengan merusak struktur dinding dan membran sel dengan mekanisme secara sinergis dengan berbagai senyawa aktif sehingga dapat meningkatkan pengaruh aktivitas antibakteri (Padmini, et al. 2010). Senyawa Cis-Vaccenic acid merupakan senyawa asam dominan yang memiliki sifat antibakteri (Semwal dkk, 2018). Asam oktadekanoat dilaporkan memiliki antioksidan, antiinflamasi, aktivitas antikanker, antibakteri dan antihipertensi (Burns et al., 2012). Senyawa Gamma.-sitosterol ditemukan memiliki aktivitas antikanker (Yogesh et al., 2012). Pemanfaatan dan bioaktivitas dari senyawa *Moringa oleifera* L. dapat dijadikan sebagai antimikroba, antioksidan, pencegahan malnutrisi, serta anti kanker (Purba,, 2020).

Tabel 2. Hasil Analisis Toksisitas 5 Kandungan Senyawa Tertinggi *Moringa oleifera* L.

Peak Area	Nama Senyawa	Skin Irritation	Skin Corosion
31,82	asam n-Hexadecanoic	+	-
27,21	asam cis-Vaccenic	+	-
7,21	l-isokroman- 1-ylmethylpropionamide	-	-
4,82	asam oktadekanoat	+	-
2,82	Gamma.-Sitosterol	-	-

Pengujian iritasi bertujuan untuk mengetahui apakah senyawa tersebut dapat mengiritasi ketika digunakan pada kulit (Aruan, 2017). Hasil analisis senyawa tidak menimbulkan iritasi seperti timbulnya kemerahan pada kulit, rasa sakit maupun rasa terbakar (Ningrum, 2018). Hasil analisis software toxtree menunjukkan terdapat 3 senyawa yang berpotensi mengiritasi kulit yaitu senyawa asam n-Hexadecanoic, asam cis-Vaccenic, dan asam oktadekanoat. Sedangkan analisis negatif menunjukkan bahwa senyawa tersebut tidak berpotensi mengiritasi kulit. Terdapat 2 senyawa yaitu 3-Kloro-N-isokroman-1-ylmethylpropionamide dan gamma.- Sitosterol tidak berpotensi mengiritasi. Pada parameter *skin corrosion*, kelima senyawa tersebut tidak berpotensi merusak kulit.

SIMPULAN

Pada daun Moringa oleifera L. ditemukan 14 senyawa yang dilaporkan dapat berfungsi sebagai antibakteri, antioksidan, antiinflamasi, dan antikanker. Daun Moringa oleifera L. juga dapat digunakan sebagai masker wajah alami. Hasil menunjukkan dari 5 senyawa tertinggi yang terdapat pada daun kelor, 3 senyawa asam berpotensi mengiritasi kulit.

DAFTAR RUJUKAN

- Aruan, L. P. A. (2017). Formulasi Sediaan Masker Peel Off yang Mengandung Ekstrak Buah Apel Hijau (*Malus domestica* Borkh.) sebagai Anti-Skin. Skripsi. Medan: Program Ekstensi Sarjana Farmasi Fakultas Farmasi.
- Burns, T. A., Kadegowda, A. K. G., Duckett, S. K., Pratt, S. L., & Jenkins, T. C. (2012). Palmitoleic (16: 1 cis-9) and Cis-Vaccenic (18: 1 cis-11) Acid Alter Lipogenesis In Bovine Adipocyte Culture. *Lipids*, 47, 1143-1153.
- Lynn, D. D., Umari, T., Dunnick, C. A., & Dellavalle, R. P. (2016). The epidemiology of acne vulgaris in late adolescence. *Adolescent health, medicine and therapeutics*, 13-25.
- Maarif, V., Nur, H. M., & Septianisa, T. A. (2019). Sistem Pendukung Keputusan Pemilihan Skincare yang Sesuai dengan Jenis Kulit Wajah Menggunakan Logika Fuzzy. *EVOLUSI: Jurnal Sains dan Manajemen*, 7(2).
- Ningrum, W. A. (2018). Pembuatan dan Evaluasi Fisik Sediaan Masker Gell Peel-Off Ekstrak Etanol Daun Teh (*Camelia sinensis* L.). *Jurnal farmasi Sains dan Praktis*, 4(2), 60.
- Padmini, E., Valarmathi, A., & Rani, M. U. (2010). Comparative Analysis of Chemical Composition and Antibacterial Activities of *Mentha Spicata* and *Camellia Sinensis*. *Asian J. Exp. Biol. Sci*, 1(4), 772-781.
- Perwita, M. H. (2019). Pemanfaatan Ekstrak Moringa oleifera sebagai Masker Organik untuk Merawat Kesehatan Kulit Wajah. *Jurnal Keluarga Sehat Sejahtera*, 17(2), 36-41.
- Purba, E. C. (2020). Kelor (*Moringa oleifera* lam.) : Pemanfaatan dan Bioaktivitas. *Jurnal: Pro-Life*, 1(7). <https://doi.org/10.33541/jpvol6iss2pp102>
- Putra, I. W. D. P., Dharmayudha, A. A. G. O., & Sudimartini, L. M. (2016). Identifikasi Senyawa Kimia Ekstrak Etanol Daun Kelor (*Moringa oleifera* L.) di Bali. *Indonesia Medicus Veterinus*, 5(5), 464-473.
- Pontoh, J., & Buyung, N. T. (2011). Analisa Asam Lemak dalam Minyak Kelapa Murni (VCO) dengan Dua Peralatan Kromatografi Gas. *Jurnal Ilmiah Sains*, 11(2), 278-280.
- Rohana, R. (2014). Pengaplikasian Masker Ekstrak Essensial Oil Mawar Pada Jenis Kulit Kering Untuk Usia Setengah Baya. *Jurnal Keluarga Sehat Sejahtera*, 12(2).
- Sari, N. R., & Setyowati, E. (2014). Pengaruh Masker Jagung dan Minyak Zaitun terhadap Perawatan Kulit Wajah. *Beauty and Beauty Health Education*, 3(1).
- Semwal, P., Painuli, S., Badoni, H., & Bacheti, R. K. (2018). Screening of Phytoconstituents and Antibacterial Activity of Leaves and Bark of *Quercus Leucotrichophora* A. Camus from Uttarakhand Himalaya. *Clinical Phytoscience*, 4, 5.
- Yogesh M. C., V Detane, S., S Kulthe, S., C Godhani, C., N Inamdar, N., M Shirolkar, S., ... & K Mourya, V. (2012). Low Molecular Weight Palmitoyl Chitosan: Synthesis, Characterization and Nanoparticle Preparation. *Advanced Materials Letters*, 3(6), 487-492.