

**SKRIPSI SARJANA FARMASI**

**EKSPLORASI SENYAWA METABOLIT SEKUNDER BIJI PINANG  
(*Areca catechu* L.) SEBAGAI AGEN ANTIBIOFILM TERHADAP  
*Streptococcus mutans* MELALUI PENDEKATAN *IN SILICO***



Oleh:

**VANNESHA YUNINGZIA**

**NIM: 2211012055**

**PEMBIMBING :**

- 1. apt. Yori Yuliandra, M.Farm., PhD**
- 2. apt. Nova Syafni, M.Farm., PhD**

**FAKULTAS FARMASI**

**UNIVERSITAS ANDALAS**

**2025**

**SKRIPSI SARJANA FARMASI**

**EKSPLORASI SENYAWA METABOLIT SEKUNDER BIJI PINANG  
(*Areca catechu* L.) SEBAGAI AGEN ANTIBIOFILM TERHADAP  
*Streptococcus mutans* MELALUI PENDEKATAN *IN SILICO***



**Oleh:**

**VANNESHA YUNINGZIA**

**NIM: 2211012055**

**PEMBIMBING :**

- 1. apt. Yori Yuliandra, M.Farm., PhD**
- 2. apt. Nova Syafni, M.Farm., PhD**

**FAKULTAS FARMASI**

**UNIVERSITAS ANDALAS**

**2025**

## ABSTRAK

### EKSPLORASI SENYAWA METABOLIT SEKUNDER BIJI PINANG (*Areca catechu* L.) SEBAGAI AGEN ANTIBIOFILM TERHADAP *Streptococcus mutans* MELALUI PENDEKATAN *IN SILICO*

Oleh:

Vannessa Yuningzia

2211012055

(Program Studi Sarjana Farmasi)

Karies gigi merupakan masalah kesehatan global yang dipicu oleh pembentukan biofilm *Streptococcus mutans*, tingginya resistensi bakteri terhadap agen konvensional menuntut eksplorasi kandidat antibiofilm baru dari bahan alam. Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi potensi metabolit sekunder biji pinang (*Areca catechu* L.) sebagai inhibitor protein target 8FG8, 8FJ9, dan 6CAM pada *S. mutans* melalui pendekatan *in silico*. Kajian ini didasarkan pada teori interaksi molekuler dan farmakokinetika kimia komputasi. Metode penelitian meliputi penapisan virtual melalui *molecular docking* menggunakan Schrödinger Maestro, prediksi profil ADMET dengan QikProp, serta validasi kestabilan melalui simulasi *Molecular Dynamics* (MD) menggunakan Desmond. Data dikumpulkan melalui preparasi struktur serta analisis trajektori simulasi untuk mengukur afinitas pengikatan dan stabilitas struktural kompleks. Hasil penelitian menunjukkan bahwa *catechin* menunjukkan potensi afinitas pengikatan yang lebih baik sebagai kandidat inhibitor pada ketiga protein target. Simulasi MD mengonfirmasi bahwa kompleks *catechin*-protein mempertahankan stabilitas struktur pada varian 8FG8 dan 8FJ9, didukung oleh profil ADMET yang memenuhi kriteria farmakokinetika yang baik, meskipun teramati adanya disosiasi ligan pada varian 6CAM. Disimpulkan bahwa *catechin* dari *Areca catechu* L. merupakan kandidat agen antibiofilm yang menjanjikan secara *in silico* dan layak untuk diuji lebih lanjut melalui studi *in vivo*.

Kata Kunci: *Areca catechu* L., *Streptococcus mutans*, *In Silico*, Dinamika Molekuler, Catechin.

## ABSTRACT

### EXPLORATION OF SECONDARY METABOLITES FROM ARECA NUT (*ARECA CATECHU* L.) SEED AS ANTIBIOFILM AGENTS AGAINST *Streptococcus Mutans* USING AN *IN SILICO* APPROACH

By:  
Vannessa Yuningzia  
2211012055  
(Bachelor of Pharmacy)

Dental caries is a global health issue primarily driven by the biofilm formation of *Streptococcus mutans*, where the rising prevalence of bacterial resistance to conventional agents necessitates the exploration of novel antibiofilm candidates from natural products. This study aims to evaluate the potential of secondary metabolites from betel nut (*Areca catechu* L.) as inhibitors of the target proteins 8FG8, 8FJ9, and 6CAM in *S. mutans* using an *in silico* approach. The research is grounded in molecular interaction theory and computational pharmacokinetics. The methodology involved virtual screening via molecular docking using Schrödinger Maestro, ADMET profile prediction via QikProp, and stability validation through Molecular Dynamics (MD) simulations using Desmond. Data were gathered through structure preparation and simulation trajectory analysis to measure binding affinities and structural stability. The research findings indicate that catechin demonstrates a stronger binding affinity potential as a candidate inhibitor across all three target proteins. MD simulations confirmed that the catechin-protein complex maintains structural stability in the 8FG8 and 8FJ9 variants, supported by favorable ADMET properties, although ligand dissociation was observed in the 6CAM variant. In conclusion, catechin from *Areca catechu* L. represents a promising antibiofilm agent *in silico* that warrants further *in vivo* investigation.

Keywords: *Areca catechu* L., *Streptococcus mutans*, *In Silico*, Molecular Dynamics, Catechin.