



Analisis Potensi Senyawa Bioaktif *Cassia alata* sebagai Antijamur terhadap *Trichophyton rubrum* melalui *Molecular Docking* dan Prediksi ADME

Nurhikmah

Universitas Islam Negeri Sultan Aji Muhammad Idris Samarinda

Received : 12 December 2025

Accepted : 31 January 2026

Published : 03 February 2026

Corresponding Author:

Author Name*: Nurhikmah

Email*: nurhikmah@uinsi.ac.id



DOI:

Copyright © 2022 Nurhikmah

Abstrak

Abstrak

Trichophyton rubrum merupakan salah satu dermatofit penyebab infeksi kulit, rambut, dan kuku. *Cassia alata* L. diketahui memiliki aktivitas antijamur sehingga berpotensi menjadi sumber senyawa bioaktif. Penelitian ini bertujuan menganalisis potensi Hexadecanoic acid, methyl ester dari *C. alata* terhadap *T. rubrum* melalui molecular docking dan prediksi ADME. Penelitian dilakukan secara *in silico* menggunakan protein target Aspartate β -semialdehyde dehydrogenase (ASADH). Molecular docking dilakukan menggunakan PyRx, sedangkan prediksi sifat fisikokimia dan ADME menggunakan Lipinski's Rule of Five dan SwissADME. Hasil docking menunjukkan nilai binding affinity Hexadecanoic acid, methyl ester sebesar $-5,4$ kcal/mol, sedangkan ketokonazol sebesar $-8,4$ kcal/mol. Senyawa memenuhi Lipinski's Rule of Five dengan berat molekul 270,45 g/mol, H-bond donor 0, H-bond acceptor 2, dan logP 4,41. Prediksi ADME menunjukkan absorpsi gastrointestinal tinggi dan bioavailability score 0,55. Hasil tersebut menunjukkan bahwa Hexadecanoic acid, methyl ester berpotensi sebagai kandidat antijamur terhadap *T. rubrum* dan dapat dikaji lebih lanjut.

Kata kunci: *Cassia alata*, Hexadecanoic acid, methyl ester; *Trichophyton rubrum*; molecular docking; ADME

Abstract

Trichophyton rubrum is a common dermatophyte that causes infections of the skin, hair, and nails. *Cassia alata* L. has demonstrated antifungal activity and may serve as a source of bioactive compounds. This study aimed to analyze the potential of Hexadecanoic acid, methyl ester from *C. alata* against *T. rubrum* using molecular docking and ADME prediction. An *in silico* study was conducted using Aspartate β -semialdehyde dehydrogenase (ASADH) as the target protein. Molecular docking was performed using PyRx, while physicochemical and ADME properties were evaluated using Lipinski's Rule of Five and SwissADME. The docking results showed a binding affinity of -5.4 kcal/mol for Hexadecanoic acid, methyl ester, compared with -8.4 kcal/mol for ketoconazole. The compound fulfilled Lipinski's Rule of Five, with a molecular weight of 270.45 g/mol, 0 hydrogen-bond donors, 2 hydrogen-bond acceptors, and a logP of 4.41. ADME prediction showed high gastrointestinal absorption and a bioavailability score of 0.55. These findings indicate that Hexadecanoic acid, methyl ester has potential as an antifungal candidate against *T. rubrum* and warrants further investigation.

Keywords: *Cassia alata*; Hexadecanoic acid, methyl ester; *Trichophyton rubrum*; molecular docking; ADME

PENDAHULUAN

Pengembangan kandidat obat berbasis bahan alam memerlukan identifikasi senyawa bioaktif yang memiliki potensi aktivitas biologis serta karakteristik farmakokinetik yang mendukung. Seiring berkembangnya bidang bioinformatika dan kimia komputasi, pendekatan *In Silico* menjadi salah satu metode yang banyak digunakan untuk mengeksplorasi potensi senyawa alami melalui analisis interaksi molekuler dan prediksi sifat farmakokinetiknya (Mukesh, 2011). Pendekatan ini berperan dalam memberikan informasi mengenai kemampuan suatu senyawa untuk berinteraksi dengan protein target serta memprediksi karakteristik yang berkaitan dengan absorpsi, distribusi, metabolisme, ekskresi, dan toksisitas (ADME) (Onkara, 2013).

Molecular docking merupakan salah satu metode *In Silico* yang digunakan untuk memprediksi pola interaksi antara ligan dan protein target berdasarkan afinitas ikatan serta jenis interaksi yang terbentuk pada sisi aktif protein. Informasi tersebut dapat digunakan untuk mengidentifikasi senyawa yang memiliki potensi aktivitas biologis terhadap target tertentu (Onkara, 2013). Selain itu, prediksi ADME menjadi bagian penting dalam proses identifikasi kandidat senyawa karena memberikan gambaran mengenai sifat *drug-likeness*, profil farmakokinetik, dan potensi toksisitas, sehingga kandidat senyawa yang diperoleh tidak hanya memiliki kemampuan berikatan dengan protein target, tetapi juga memenuhi karakteristik awal sebagai kandidat obat (Mukesh, 2011).

Trichophyton rubrum merupakan salah satu dermatofit yang paling sering menyebabkan infeksi pada kulit, rambut, dan kuku manusia. Jamur ini menjadi penyebab utama berbagai bentuk dermatofitosis yang masih banyak ditemukan di berbagai negara. Kondisi tersebut mendorong upaya eksplorasi senyawa antijamur baru yang berasal dari sumber daya alam, termasuk tanaman obat yang diketahui

mengandung berbagai metabolit sekunder dengan aktivitas biologis (Haerani, 2021).

Salah satu tanaman yang berpotensi dikembangkan sebagai sumber senyawa antijamur adalah *Cassia alata* L. (ketepeng china). Tanaman ini diketahui mengandung berbagai metabolit sekunder, seperti flavonoid, antrakuinon, alkaloid, tanin, saponin, dan senyawa fenolik yang telah banyak dilaporkan memiliki berbagai aktivitas biologis (Mari'e, 2022). Penelitian yang telah dilakukan sebelumnya menunjukkan bahwa *Cassia alata* memiliki aktivitas antijamur terhadap *Trichophyton rubrum*. Temuan tersebut menunjukkan bahwa tanaman ini berpotensi menjadi sumber kandidat senyawa antijamur yang perlu dikaji lebih lanjut pada tingkat molekuler (Nurhikmah, 2024).

Meskipun demikian, informasi mengenai senyawa bioaktif yang berpotensi sebagai antijamur, mekanisme interaksinya dengan protein target *Trichophyton rubrum*, serta karakteristik farmakokinetik dan toksisitasnya masih terbatas. Sebagian besar penelitian masih berfokus pada pelaporan aktivitas biologis tanaman, sedangkan kajian yang mengintegrasikan identifikasi senyawa bioaktif, analisis *molecular docking*, dan prediksi ADME terhadap *Trichophyton rubrum* masih belum banyak dilaporkan. Keterbatasan informasi tersebut menyebabkan belum teridentifikasinya senyawa-senyawa yang paling prospektif untuk dikembangkan sebagai kandidat antijamur.

Berdasarkan kondisi tersebut, penelitian ini dilakukan untuk menganalisis potensi senyawa bioaktif *Hexadecanoic acid, methyl ester* yang terdapat pada *Cassia alata* berdasarkan penelitian yang telah dilakukan oleh (Nurhikmah, 2024) sebagai kandidat antijamur terhadap *Trichophyton rubrum* melalui pendekatan *molecular docking* dan prediksi ADME.

METODE

Metode penelitian yang digunakan adalah metode berbasis bioinformatika dengan

menggunakan pendekatan In Silico, Adapun tahapannya adalah sebagai berikut:

1. Preparasi Protein Target/Reseptor

Protein target yang dapat diperoleh dari database Protein Data Bank (<http://www.rcsb.org/pdb>) dalam format PDB. Struktur yang dipilih adalah struktur yang memiliki resolusi tinggi berdasarkan struktur yang berasal dari jamur penyebab Tinea pedis. File yang berbentuk PDB masing masing protein target dimodelkan melalui (<http://swissmodel.expasy.org/>).

2. Preparasi Ligan

Ligan yang digunakan berasal dari senyawa antifungi dari ekstrak tanaman *Casia alata* L, data ligan diunduh melalui website (<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>) dalam bentuk 3D dengan format SDF*.

3. Penambatan Molekul (Molecul Docking)

Software yang digunakan dalam molecule docking yakni software PyRx. Reseptor dan Ligan dibuka menggunakan PyRx dan disimpan dalam format PDBQT. Setelah reseptor dan ligan siap, klik vina wizard dan start docking pada toolbar. Selanjutnya, klik semua reseptor dan ligan yang akan didocking, selanjutnya klik forward pada toolbar, kemudian grid box diatur, klik forward untuk running. Setelah proses running selesai maka nilai dari energy ikatan (Binding affinity) akan muncul. Semakin kecil nilai energy ikatan, maka semakin stabil ikatan tersebut, hal ini menandakan bahwa aktivitas antara reseptor dan ligan semakin besar.

4. Visualisasi Hasil

Docking Hasil docking molekul divisualisasikan dengan menggunakan software PyMol, hasil visualisasi dari PyMol ditampilkan dalam bentuk 3D.

5. Uji Lipinski Rule of Five

Langkah pertama adalah memperoleh struktur kimia senyawa yang akan diuji, baik dalam format SMILES, InChI, atau file struktur

lainnya. Kemudian, struktur senyawa dimasukkan ke dalam perangkat lunak atau platform yang dapat menghitung parameter yang terkait dengan Rule of Five, seperti Swiss ADME atau ChemDraw.

6. Analisis SwissADME

Langkah pertama dalam prosedur ini adalah mengakses situs web Swiss ADME. Setelah itu, pengguna akan diminta untuk mengunggah struktur senyawa yang akan diuji, baik dalam format SMILES, InChI, atau file struktur lainnya. Setelah senyawa diunggah, pengguna dapat memilih parameter yang ingin dievaluasi, seperti kelarutan dalam air, logP, bioavailabilitas, serta pengaruhnya terhadap enzim CYP450 dan transporter obat. Sistem Swiss ADME kemudian akan memproses data tersebut dan menghasilkan laporan yang mencakup hasil evaluasi terhadap sifat fisikokimia dan potensi farmakologis senyawa yang diuji. Hasil ini dapat digunakan untuk menentukan kelayakan senyawa dalam pengembangan lebih lanjut sebagai kandidat obat.

HASIL DAN PEMBAHASAN (RESULT AND DISCUSSION)

1. Molecular Docking

Uji aktivitas antimikroba dengan menggunakan metode Uji In Silico dilakukan untuk mengetahui interaksi antara dua molekul, yaitu interaksi antara ligan (senyawa *Hexadecanoic acid, Methyl ester*) dan protein target Aspartate β -semialdehyde dehydrogenase (ASADH) dengan melihat afinitas ligan terhadap protein target, yang dapat memberikan informasi tentang mekanisme kerja senyawa yang diuji, melalui metode docking molecular (P. C.Agu, 2023).

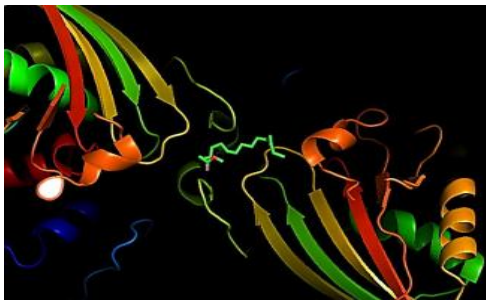
Protein target yang digunakan pada molekuler docking adalah *Aspartate β -semialdehyde dehydrogenase* (ASADH). ASADH adalah enzim kunci untuk biosintesis asam amino esensial dan metabolitnya pada prokariota, jamur, dan beberapa tumbuhan

tingkat tinggi. ASADH memiliki peran penting dalam jalur diaminopimelate (DAP), yang mengarah pada biosintesis lisin. Diaminopimelat adalah penyusun peptidoglikan; Menonaktifkan ASADH menghilangkan sel diaminopimelate, menyebabkan kurangnya sintesis dinding sel dan dapat menyebabkan kematian mikroba (Rajender Kumar, 2024).

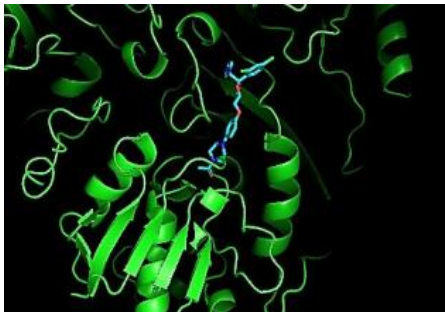
Ketika mikroorganisme tidak mempunyai asam amino esensial, mereka umumnya menggunakan mekanisme transpor yang berbeda untuk mengekstraksi asam amino yang ada di lingkungan inangnya. Penghambatan enzim ASADH dapat menjadi target obat potensial untuk pengembangan antimikroba baru dan selektif. Seperti senyawa fungisida, atau herbisida untuk melawan ancaman yang semakin besar dari organisme menular yang resistan terhadap berbagai obat (N J Mank, 2018).

Tabel 1: Hasil uji molecular docking senyawa

No	Senyawa Ligan	Proteon Target (ASADH)
1	Hexadecanoic acid, methyl ester	-5,4
2	Ketokenazol (Kontrol)	-8,4



Gambar 1. Visualisasi senyawa *Hexadecanoic acid, methyl ester* terhadap ASADH



Gambar 2. Visualisasi senyawa Ketokenazol terhadap ASADH

Ketokenazol dipilih sebagai kontrol positif, disebabkan karena ketokenazol merupakan obat antifungi sistemik pertama yang berspektrum luas. Ketokonazol merupakan turunan imidazol sintetis yang bersifat lipofilik dan larut dalam air pada pH asam. Ketokonazol bekerja dengan cara berinteraksi dengan C-14 D-demetilase (enzim P-450 sitokrom) untuk menghambat dimetilasi lanosterol menjadi ergosterol yang merupakan sterol penting untuk membran jamur. Penghambatan ini mengganggu fungsi membran dan meningkatkan permeabilitas. Ketokonazol mempunyai ikatan yang kuat dengan keratin dan mencapai keratin dalam waktu 2 jam melalui kelenjar keringat eccrine (Eriska Agustin, 2024)

Docking dilakukan untuk memperoleh nilai energi ikatan (*Binding affinity*). Binding affinity merupakan parameter kemampuan ligan untuk berikatan dengan protein target. Interaksi antara ligan dan protein target akan cenderung berada pada kondisi energi yang paling rendah. Energi yang paling rendah menunjukkan bahwa molekul berada pada kondisi yang stabil, sehingga semakin rendah nilai binding affinity maka interaksi ligan dan protein target semakin stabil (Lovepreet Kaur, 2024). Nilai binding affinity yang diperoleh dari hasil *docking molecular* antara ligan dan protein target dapat dilihat pada (Tabel 1).

Berdasarkan (Tabel 1) nilai binding affinity yang diperoleh, dari ligan (senyawa *Hexadecanoic acid, Methyl ester*) yang berikatan dengan protein target (ASADH) adalah -5,4. Selanjutnya nilai binding affinity dari Ketokenazol sebagai kontrol positif yang berikatan dengan protein target (ASADH) adalah -8,4. Berdasarkan Hasil binding affinity

antara senyawa *Hexadecanoic acid*, *Methyl ester* dan ketokenazol sebagai kontrol positif terhadap protein target (ASADH) mendapatkan hasil bahwa interaksi ligan dan protein target berada dalam keadaan stabil. Selanjutnya, hasil molecular docking dalam penelitian ini memberikan informasi tambahan yang secara teoritis dapat menjelaskan aktivitas antifungi ekstrak *Cassia alata* terhadap *Trichophyton rubrum* yang telah dilaporkan melalui pengujian *in vitro*. Hasil pengujian menunjukkan bahwa ekstrak daun *C. alata*, yang mengandung senyawa *Hexadecanoic acid*, *methyl ester*, mampu menghambat pertumbuhan *T. rubrum*, salah satu jamur penyebab *tinea pedis*, dengan zona hambat berkriteria kuat. Sementara itu, molecular docking memberikan gambaran mengenai potensi interaksi senyawa aktif dalam *C. alata* dengan protein target *T. rubrum*, sehingga secara teoritis dapat mendukung kemungkinan mekanisme molekuler yang mendasari aktivitas antifungi tersebut.

2. Analisis farmakokinetik

a. Uji Lipinski Rule of Five

Uji *Lipinski Rule of Five* atau aturan lima Lipinski adalah metode untuk mengetahui sifat fisikokimia dan permeabilitas suatu senyawa kimia. Uji ini digunakan untuk menentukan apakah senyawa tersebut dapat menjadi obat aktif pada manusia.

Tabel 2: Hasil Uji *Lipinski's Rule of Five*

	Senyawa (<i>Hexadecanoic acid</i> , <i>methyl ester</i>)
<i>Molecular Weight</i>	270.45 g/mo
<i>Hydrogen Bond Donor</i>	0
<i>Hydrogen Bond Acceptors</i>	2
<i>LogP</i>	4.41
<i>Molar Refractivity</i>	85.12

Druglikeness sangat berguna untuk melihat potensi senyawa yang akan dijadikan obat, serta dapat diterima oleh tubuh secara farmakokinetik. Pengujian pertama untuk analisis farmakokinetik ialah

prediksi sifat fisikokimia obat berdasarkan aturan *Lipinski's Rule of Five* (RO5). Parameter fisikokimia yang sesuai dengan aturan Lipinski ditentukan untuk mengamati permeabilitas obat dalam melakukan difusi pasif terhadap lipid bilayer pada tubuh target. Persyaratan Lipinski terdiri dari berat molekul (BM) tidak boleh di atas 500 Da, tidak memiliki nilai koefisien partisi (logP) yang lebih dari 5, jumlah ikatan donor dan ikatan hidrogen harus kurang dari 5, serta akseptor ikatan yang dimiliki harus lebih kecil dari 10 (Lipinski, 2012). Hasil yang didapatkan dari studi sifat fisikokimia senyawa *Hexadecanoic acid*, *methyl ester* dapat dilihat pada (Tabel 2) yang hasilnya memenuhi aturan Lipinski. sehingga senyawa tersebut dapat dilanjutkan untuk kemudian dibuat menjadi sediaan oral.

Donor dan akseptor ikatan hidrogen merupakan besaran kapasitas ikatan hidrogen. Apabila kapasitas hidrogen semakin tinggi, maka energi yang dibutuhkan untuk proses absorpsi semakin tinggi pula, berdasarkan aturan Lipinski untuk nilai jumlah ikatan donor dan ikatan hidrogen harus kurang dari 5, agar energi yang dibutuhkan untuk proses absorpsi stabil. Hasil jumlah ikatan donor dan ikatan hidrogen senyawa *Hexadecanoic acid*, *methyl ester* adalah 0 dan 2. Rendahnya jumlah HBA dan HBD dari senyawa, menunjukkan bahwa senyawa mudah diserap oleh tubuh dengan mudah dan memerlukan energi yang rendah. Jumlah H-bond yang lebih rendah menunjukkan bahwa molekul memiliki potensi permeasi membran yang lebih tinggi dibandingkan dengan molekul dengan jumlah H-bond yang lebih banyak. Hasil ini memenuhi syarat berdasarkan aturan Lipinski (Lipinski, 2012).

Berat molekul senyawa yang dapat menembus membrane biologis menurut

aturan Lipinski adalah tidak lebih dari 500 g/mol, karena apabila berat molekul lebih dari 500 g/mol maka obat tidak bisa berdifusi menembus membrane sel. Dari hasil uji didapatkan bahwa senyawa Hexadecanoic acid, methyl ester telah memenuhi syarat dengan berat molekul 270.45 g/mol (Thais Batista Fernandes, 2016).

Nilai log P yang memenuhi syarat aturan Lipinski adalah tidak lebih dari 5. Didapat hasil bahwa nilai log P senyawa Hexadecanoic acid, methyl ester yakni 4.41. Nilai log P menggambarkan kemampuan senyawa untuk dapat larut dalam cairan membrane biologis (kelarutan oktanol/air). Semakin besar nilai log P, maka semakin hidrofobik molekul tersebut, molekul yang memiliki sifat terlalu hidrofobik cenderung memiliki tingkat toksisitas yang besar karena akan tertahan lebih lama pada lipid bilayer dan terdistribusi lebih luas di dalam tubuh, sehingga selektifitas ikatan menjadi berkurang terhadap enzim target (Lipinski C. A., 2016).

b. Uji Analisis ADME

Uji analisis ADME adalah serangkaian pengujian yang digunakan untuk menilai bagaimana suatu senyawa (biasanya obat atau bahan aktif) diserap, didistribusikan, dimetabolisme, dan diekskresikan dalam tubuh.

Analisis ADME Analisis SwissADME senyawa aktif Hexadecanoic acid, methyl ester dilakukan untuk mengetahui sifat farmakokinetik berdasarkan absorpsi, distribusi, metabolisme, dan ekskresi (ADME). Hasil dari analisis SwissADME dapat dilihat pada (Tabel 3).

Tabel 3: Hasil Uji ADME	
Uji ADME	Senyawa (Hexadecanoic acid, methyl ester)
Water Solubility	-5.18

Uji ADME	Senyawa (Hexadecanoic acid, methyl ester)
GI absorption	High
BBB permeant	Yes
Log Kp	-2.71 cm/s
Bioavailability Score	0.55
Synthetic accessibility	2.53

Water solubility (Kelarutan) suatu senyawa kandidat obat sangat menentukan keberhasilan dalam mencapai protein atau sisi aktif target. Jika suatu senyawa terlalu larut dalam air (bersifat hidrofilik), maka akan sulit menembus membran yang tersusun atas lapisan-lapisan lipid. Sebaliknya, jika senyawa terlalu hidrofobik, maka akan sulit diedarkan oleh cairan tubuh (Savjani, 2012). Berdasarkan hasil analisis SwissADME nilai Water solubility senyawa Hexadecanoic acid, methyl ester adalah -5,28 dan tergolong moderately soluble. Senyawa yang tergolong kedalam moderately soluble adalah senyawa yg memiliki nilai Water solubility berkisar antara -6 hingga -4. Nilai ini tergolong pertengahan, yang menunjukkan bahwa senyawa selain dapat larut di pelarut air, juga dapat pula menembus membran yang tersusun atas lipid (Daina, 2017).

Aspek bioavailabilitas berikutnya adalah GI absorption, yakni kemampuan senyawa diserap dalam saluran gastrointestinal. Aspek ini menjadi penting karena sebagian besar senyawa obat diadministrasikan melalui oral dan di distribusikan hingga ke lambung, kemudian dimetabolisme pada saluran cerna. Hasil dari GI absorption adalah perbandingan antara WLOGP (indikator lipofilisitas) dan TPSA (indikator polaritas). Berdasarkan hasil pada (Tabel 5), senyawa Hexadecanoic acid, methyl ester dapat diserap dengan baik oleh tubuh ditandai dengan hasil parameter GI-absorption yaitu "High" (Hairunnisa, 2022).

Permeant Blood-Brain Barrier (BBB) adalah pembuluh darah mikro di sistem saraf pusat (SSP) yang berfungsi sebagai penjaga sistem pertahanan dan homeostasis otak. BBB bersifat selektif dalam memfasilitasi masuknya senyawa ke otak, dan mampu mencegah masuknya zat asing dan patogen ke dalam jaringan otak (Daina A. &, 2016). Berdasarkan (Tabel 5) senyawa Hexadecanoic acid, methyl ester dapat terabsorpsi dan menembus BBB, ditandai dengan hasil pada analisis Swiss ADME yaitu "Yes".

Log Kp merupakan parameter hasil prediksi yang menunjukkan suatu senyawa mempunyai sifat permeabilitas kulit. Ambang batas dimana suatu senyawa dapat dikatakan permeabilitas pada kulit yaitu memiliki log Kp > -2,5 cm/s. Berdasarkan prediksi SwissADME, senyawa Hexadecanoic acid, methyl ester memiliki nilai log Kp -2,71 cm/s, sehingga senyawa ini memiliki permeabilitas kulit yang baik (Pires, 2015).

Bioavailabilitas merupakan parameter yang menunjukkan antara hubungan dosis obat dan jumlah relatif obat yang dikirim ke aliran darah. Suatu senyawa dikatakan dapat diserap secara baik oleh tubuh apabila memiliki nilai bioavailabilitas sama besar dengan 0,55, yang artinya tidak menjadi anion di pH 6 dan memenuhi seluruh kriteria Lipinski Ro5. Berdasarkan (Tabel 5) nilai bioavailabilitas senyawa Hexadecanoic acid, methyl ester yaitu 0,55 (Daina A. &, 2016).

Synthetic accessibility, kriteria terakhir ini lebih berkaitan dengan aspek kimia organik. Aksesibilitas sintesis (AS) menjadi penting terutama jika dilakukan perancangan senyawa berbasis kimia komputasi, seperti Quantitative Structure-Activity Relationship (QSAR). QSAR adalah pemodelan yang digunakan untuk menentukan sifat biologis molekul kimia berdasarkan struktur kimianya. Nilai

Synthetic accessibility adalah salah satu parameter yang dapat menjadi acuan perancangan suatu senyawa, apabila nilai Synthetic accessibility tidak memenuhi syarat maka suatu senyawa sulit atau bahkan tidak dapat disintesis. Kisaran nilai Synthetic accessibility yang baik berada di antara angka 1 hingga 10, di mana semakin mendekati angka 1, maka senyawa semakin mudah disintesis dan sebaliknya semakin mendekati angka 10 senyawa semakin sulit disintesis (Hairunnisa, 2022). Berdasarkan (Tabel 5) nilai Synthetic accessibility senyawa Hexadecanoic acid, methyl ester adalah 2,53 yang berarti lebih mendekati angka 1, sehingga senyawa ini dapat disintesis.

SIMPULAN

Berdasarkan hasil Molecular docking, dapat disimpulkan bahwa senyawa Hexadecanoic acid, methyl ester yang terkandung dalam ekstrak tanaman *Cassia alata* memiliki potensi yang baik dalam menghambat pertumbuhan *Trycophyton rubrum*, dengan menunjukkan interaksi yang stabil dengan hasil binding affinity -5,4.

DAFTAR PUSTAKA

1. Daina, A. &. (2016). A BOILED-Egg To Predict Gastrointestinal Absorption and Brain Penetration of Small Molecules. *ChemMedChem*. Vol 11(11): 1117–1121.
2. Daina, A. M. (2017). SwissADME: a free web tool to evaluate pharmacokinetics, drug-likeness and medicinal chemistry friendliness of small molecules . *Scientific Reports*. Vol 7 (1) : 42717.
3. Eriska Agustin, G. D. (2024). Formulation and Evaluation of Ketoconazole Nano-suspension Suspension. *J.Food Pharm.Sci*. Vol 12 (1) : 1-7.

4. Haerani, Z. (2021). Review: Tinea Pedis. *Prosiding Biologi Achieving the Sustainable Development Goals*, (pp. 59-64). Gowa.
5. Hairunnisa, I. A. (2022). Profil ADME dari Entitas Molekul Baru yang Disetujui oleh FDA Tahun 2021: Suatu Kajian In Silico. *Jamb.J.Chem.* Vol 4 (2): 1-11.
6. Hairunnisa, I. A. (2022). Profil ADME dari Entitas Molekul Baru yang Disetujui oleh FDA Tahun 2021: Suatu Kajian In Silico. *Jamb.J.Chem.* Vol 4 (2): 1-11.
7. Lipinski, C. A. (2012). Experimental and Computational Approaches to Estimate Solubility and Permeability in Drug Discovery and Development Settings. *Advanced Drug Delivery Reviews*. Vol 64 (1-3): 4-17.
8. Lipinski, C. A. (2016). Target and Ligand Structural Limitations, Ligand Chemistry Structure and Drug Discovery Project Decisions. *Advanced Drug Delivery Reviews*. Vol 101: 34–41.
9. Lovepreet Kaur, R. S. (2024). Purification, characterization and molecular docking studies of analogous alpha amylase inhibitor compounds. *Journal of King Saud University – Science*. Vol 36.
10. Mari'e. (2022). Antibacterial Activity of Cassia alata Stems Ethanol Extract Against *Staphylococcus Aureus*. *Acta Pharm Indo*. Vol 10 (1): 54-62.
11. Mukesh, B. a. (2011). Molecular Docking. A review. *International journal of Research in Ayurveda and Pharmacy*. Vol 2 (6): 1746-1751.
12. N J Mank, S. P. (2018). Structure of aspartate β -semialdehyde dehydrogenase from *Francisella tularensis*. Vol 74 (1) :14-22.
13. Onkara. (2013). Molecular Docking Studies Synthesis adn Anti-bacterial Molecular Docking Studies Synthesis adn Anti-bacterial Properties of new Mannich Bases. *International Journal of Pharma and Bio Science*. Vol 4 (2): 263-270.
14. P. C.Agu, C. O. (2023). Molecular docking as a tool for the discovery of molecular targets of nutraceuticals in diseases management. *Scientific Reports*. Vol 13: 13398.
15. Pires, D. E. (2015). pkCSM: Predicting small molecule pharmacokinetic and toxicity properties using graph-based signatures. . *Journal of Medicinal Chemistry*. Vol 58 (9): 4066–4072
16. Rajender Kumar, R. R. (2024). Structural–functional analysis of drug target aspartate semialdehyde dehydrogenase. *Drug Discovery Today*. Vol 29 (3).
17. Thais Batista Fernandes, M. C. (2016). Analysis of the Applicability and Use of Lipinski's Rule for Central Nervous System Drugs. *Letters in Drug Design & Discovery*. Vol 13 (9).