

**PEMODELAN MOLEKUL PEMBENTUKAN LIPOSOM DENGAN  
FOSFOLIPID *1,2-dipalmitoyl-sn-glycero-3-phosphatidylcholine*  
(DPPC): MENGGUNAKAN GROMACS DAN NAMD**

**Roy Gunawan Wicaksono**

Fakultas Farmasi, Universitas Sanata Dharma, Yogyakarta, Indonesia

**ABSTRAK**

Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui adanya perbedaan hasil pemodelan molekul pembentukan liposom menggunakan GROMACS dan NAMD. Penelitian ini dilakukan karena belum ada penelitian yang menampilkan adanya perbedaan hasil pemodelan molekul pembentukan liposom menggunakan *MARTINI Force-field* pada GROMACS dan NAMD. 2400 molekul fosfolipid *1,2-dipalmitoyl-sn-glycero-3-phosphatidylcholine* (DPPC) disimulasikan menggunakan GROMACS dan NAMD dengan *MARTINI Force-field*. Perbedaan hasil pemodelan dapat dilihat dari liposom yang terbentuk, energi total, dan lama waktu simulasi yang dibutuhkan. Liposom yang terbentuk berupa MLV (*Multilamellar Vesicle*) pada GROMACS maupun NAMD. GROMACS membutuhkan waktu lebih sedikit dibanding NAMD dalam pemodelan molekul.

Kata kunci: Pemodelan molekul, DPPC, liposom, GROMACS, NAMD, dan *MARTINI Force-field*

## ABSTRACT

The aim of molecular this research is to find the difference in liposome formation molecular modelling using GROMACS and NAMD. This study was conducted because no studies have shown any differences in molecular modelling of liposome formation using *MARTINI Force-field* on GROMACS and NAMD. 2400 molecules phospholipids *1,2-dipalmitoyl-sn-glycero-3-phosphatidylcholine* (DPPC) simulated using GROMACS and NADM with *MARTINI Force-field*. The differences in modeling results can be seen from the formed liposome, total energy, and the duration of the simulation required. Liposome formed in MLV (Multilamellar Vesicle) on GROMACS or NAMD. GROMACS take less time to simulate than NAMD.

Keywords: molecular modelling, DPPC, liposome, GROMACS, NAMD, and *MARTINI Force-field*