

### ABSTRAK

Kuersetin merupakan bahan dalam pembuatan produk farmasi karena memiliki efek seperti, antimikroba, antioksidan, dll. Akan tetapi, kuersetin mempunyai kelarutan yang rendah dalam air dan bioavailabilitas yang rendah. Untuk mengatasi hal tersebut dapat digunakan teknologi farmasi berupa nanoemulsi. Nanoemulsi dapat membantu dalam melarutkan senyawa yang lipofilik, akan tetapi membutuhkan konsentrasi surfaktan yang tinggi untuk dapat menstabilkan formulasi. Untuk melihat dinamika pada level molekuler nanoemulsi dapat menggunakan teknik simulasi pemodelan. Penelitian ini bertujuan untuk memodelkan sistem nanoemulsi menggunakan *GROMACS*.

Penelitian yang dilakukan termasuk penelitian deskriptif eksploratif. Sistem nanoemulsi kuersetin dengan fase minyak dimodelkan melalui *GROMACS*. Sistem nanoemulsi sebanyak 100 molekul di minimisasi energi pada suhu 300° K dan tekanan 1 bar dan disimulasikan selama 50 ns. Hasil simulasi dianalisis secara visual melalui aplikasi PyMOL. Dalam 50 ns, tampak molekul-molekul yang telah membentuk droplet nanoemulsi. Nilai SASA memperlihatkan dalam 5 ns terakhir, pemodelan droplet nanoemulsi telah stabil.

**Kata kunci** : Pemodelan, *GROMACS*, Kuersetin, *Virgin Coconut Oil*, Tween 80, Span 80

### ABSTRACT

Quercetin is utilized in the pharmaceutical industry due to its antimicrobial, antioxidant, and other beneficial effects. However, it exhibits poor solubility in water and have low bioavailability. Nanoemulsion technology can be employed to address these challenges. Nanoemulsions can enhance the solubility of lipophilic compounds, although they require high concentrations of surfactants to stabilize the formulation. Molecular simulation techniques, such as the GROMACS software, can provide insights into the molecular dynamics of nanoemulsions. This research aims to model a quercetin nanoemulsion system using GROMACS.

The study follows a descriptive-exploratory approach. The quercetin nanoemulsion system, consisting of an oil phase, was modeled using GROMACS. A total of 100 molecules were subjected to energy minimization at 300°C and 1 bar pressure, followed by 50 ns simulation. The simulation results were analyzed visually using the PyMOL application. Within the 50 ns timeframe, molecules were observed able to form nanoemulsion droplet. SASA values shown in last 5 ns, nanoemulsion simulation were stable

**Keyword:** Modelling, *GROMACS*, Quercetin, Virgin Coconut Oil, Tween 80, Span 80

