

## INTISARI

*Asiaticoside* merupakan senyawa triterpenoid dari ekstrak tanaman pegagan (*Centella asiatica*) yang diketahui memiliki aktivitas sebagai agen antimelanogenesis. Zat aktif ini memiliki kelemahan karena kelarutannya yang rendah dalam air bila diformulasikan sebagai sediaan topikal. Nanoemulsi dipilih sebagai pengembangan formulasi sediaan yang dapat membantu meningkatkan kelarutan zat aktif dengan mengurangi ukuran partikel dan meningkatkan luas permukaannya. Penelitian ini bertujuan untuk membuktikan bahwa simulasi pemodelan molekul dengan *GROMACS* dapat digunakan dalam observasi secara empiris serta memperoleh formula nanoemulsi *asiaticoside* yang optimum terhadap karakteristik nanoemulsi.

Penelitian ini dilakukan dengan jenis penelitian eksperimental murni menggunakan variabel bebas berupa konsentrasi surfaktan Tween-80 dan ko-surfaktan Propilen Glikol (PG). Rancangan penelitian ini dilakukan menggunakan desain faktorial dengan 2 faktor (surfaktan dan ko-surfaktan) dan 2 level (level rendah dan level tinggi). Analisis data penelitian dilakukan melalui uji statistik *two-way ANOVA* dengan taraf kepercayaan 95% menggunakan perangkat lunak *Design Expert Version 13*. Hasil ukuran dan morfologi partikel nanoemulsi *asiaticoside* dari pemodelan molekul menggunakan *GROMACS* akan dibandingkan secara deskriptif dengan hasil empiris yang diperoleh.

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, simulasi pemodelan molekul menggunakan *GROMACS* dapat digunakan dalam observasi secara empiris. Hal ini dibuktikan melalui hasil simulasi ukuran partikel dengan ukuran box berukuran  $7,487 \times 7,487 \times 7,487 \text{ \AA}$  dapat menghasilkan hasil ukuran partikel nanoemulsi *asiaticoside* sebesar  $3,85 \pm 0,154 \text{ nm}$  yang setara dengan ukuran partikel  $13,36 \pm 0,252 \text{ nm}$  pada hasil empiris. Sementara itu, hasil morfologi partikel yang disimulasikan menggunakan *GROMACS* memiliki kemiripan dengan hasil morfologi secara empiris. Formula optimum yang diperoleh dari analisis dengan perangkat lunak *Design Expert* diperoleh pada komposisi tween-80 sebanyak 10g dan PG sebanyak 3g dengan nilai *desirability* sebesar 1. Berdasarkan hasil optimasi formula nanoemulsi diperoleh hasil bahwa penggunaan tween-80 dan PG pada formula nanoemulsi *asiaticoside* memberikan pengaruh yang signifikan terhadap karakteristik nanoemulsi *asiaticoside* (ukuran partikel, zeta potensial, dan pH).

Kata Kunci :

*Asiaticoside*, *GROMACS*, nanoemulsi, Propilen Glikol, Tween-80.

## ABSTRACT

*Asiaticoside* is a triterpenoid compound in *Centella asiatica* L. extract which is efficacious as an antitimelanogenesis agent. This active substance has a weakness due to its low solubility in water when formulated as a topical preparation. Nanoemulsion was chosen as the development of a preparation formulation that can help increase the solubility of the active substance by reducing particle size and increasing its surface area. This study aims to prove that molecular modeling simulations with *GROMACS* can be used in empirical observations and to obtain the optimum *asiaticoside* nanoemulsion formula for nanoemulsion characteristics.

This study was conducted with a pure-experimental research type using independent variables in the form of Tween-80 as surfactant and Propylene Glycol (PG) as co-surfactant. The design of this study was carried out using a factorial design with 2 factors (surfactant and co-surfactant) and 2 levels (low level and high level). The research data analysis was conducted through a *two-way ANOVA* statistical test with a 95% confidence level using *Design Expert Version 13*. The results of the size and morphology of *asiaticoside* nanoemulsion particles from molecular modeling using *GROMACS* will be compared descriptively with the empirical results obtained.

Based on the research, molecular modeling simulation using *GROMACS* can be used in empirical observations. This is evidenced by the results of particle size simulations with a box size of  $7.487 \times 7.487 \times 7.487 \text{ \AA}$  which can produce an *asiaticoside* nanoemulsion particle size of  $3,85 \pm 0,154 \text{ nm}$  which is equivalent to a particle size of  $13,36 \pm 0,252 \text{ nm}$  in the empirical results. Meanwhile, the results of particle morphology simulated using *GROMACS* are similar to the empirical morphology results. The optimum formula obtained from the analysis with *Design Expert* software was obtained at a composition of tween-80 of 10g and PG of 3g with a desirability value of 1. Based on the results of the nanoemulsion formula optimization, it was found that the use of tween-80 and PG in the *asiaticoside* nanoemulsion formula had a significant effect on the characteristics of the *asiaticoside* nanoemulsion (particle size, zeta potential, and pH).

Keywords:

*Asiaticoside*, GROMACS, nanoemulsion, Propylene Glycol, Tween-80.