

Studi interaksi berbagai new psychoactive substances terhadap reseptor cannabinoid-1 secara in silico = In silico interaction study of various new psychoactive substances on cannabinoid-1 receptor

Saras Aulia Rahmiati, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20500099&lokasi=lokal>

Abstrak

Zat-zat serupa narkotika dan psikotropika baru yang dikenal sebagai New Psychoactive Substances (NPS) telah berkembang di pasaran dalam beberapa tahun terakhir di dunia Internasional maupun di Indonesia. Telah teridentifikasi sebanyak 27 NPS diantara 74 jenis yang beredar di Indonesia pada tahun 2019 yang merupakan turunan kanabinoid dan sudah diatur dalam Peraturan Menteri Kesehatan No. 50 Tahun 2018. Prediksi terhadap NPS perlu dilakukan dan dapat dilakukan menggunakan metode in silico. Penelitian ini bertujuan memperoleh model interaksi dan afinitas penambatan molekuler dari New Psychoactive Substances (NPS) terhadap reseptor Cannabinoid-1 (CB1) dilakukan secara in silico. Penambatan molekuler dilakukan menggunakan AutoDock melalui program PyRx serta dilakukan visualisasi interaksi hasil penambatan molekuler menggunakan Ligplot dan PyMOL. Parameter optimasi yang didapatkan untuk penambatan molekuler CB1 adalah menggunakan grid box 50x50x50 unit dengan energi evaluasi medium (2.500.000). Golongan NPS yang termasuk pada rentang energi ikatan -9,00 hingga -11,00 kkal/mol adalah kanabinoid (62%), fentanil (70%) dan plant-based substances (50%). Pada rentang -7,00 hingga -9,00 kkal/mol yaitu arilsikloheksilamin (70%). Sedangkan pada rentang -4,00 hingga -7,00 kkal/mol yakni katinon (58%), fenetilamin (84%), piperazin (81%) dan triptamin (64%).

.....New narcotic and psychotropic substances known as New Psychoactive Substances (NPS) have evolved on the market in recent years both in Indonesia and internationally. As many as 27 NPS have been identified among 74 type in Indonesia in 2019 which are cannabinoid derivatives and have been regulated in Ministry of Health Republic of Indonesia Regulation No. 50 of 2018. Prediction of NPS needs to be done and can be done using the method in silico. This study aims to obtain a model of interaction and molecular binding affinity of the New Psychoactive Substances (NPS) on Cannabinoid-1 (CB1) receptor using in silico method. Molecular docking is done using AutoDock in PyRx program and visualize molecular docking interactions using Ligplot and PyMOL. Optimization parameter obtained for molecular docking of CB1 is using 50x50x50 unit grid box with medium energy evaluation (2.500.000). The NPS group included in the binding energy range of -9.00 to -11.00 kcal/mol are cannabinoids (62%), fentanyl (70%) and plant-based substances (50%). In the range of -7.00 to -9.00 kcal/mol, namely arylcyclohexylamine (70%). Whereas in the range of -4.00 to -7.00 kcal/mol are cathinone (58%), phenethylamine (84%), piperazine (81%) and tryptamine (64%).