

Studi Interaksi Berbagai New Psychoactive Substances (NPS) Terhadap Reseptor 5-hidroksitriptamin_{2B} Secara In silico = Interaction Study Of Various New Psychoactive Substances (NPS) On 5-hydroxytryptamin_{2B} Receptor In Silico

Baiq Junjung Pesona Ribeki, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20504331&lokasi=lokal>

Abstrak

Zat-zat psikoaktif baru (NPS) adalah serangkaian obat yang telah dirancang untuk meniru obat-obatan terlarang yang sudah ada, seperti ganja, kokain, ekstasi. Produsen obat-obatan ini mengembangkan bahan kimia baru untuk menggantikan obat-obatan yang dilarang, yang berarti bahwa struktur kimia obat-obatan tersebut terus berubah. Kemunculan NPS telah menghasilkan peningkatan prevalensi dalam kerja obat dalam beberapa tahun terakhir. Penggunaan metode in silico penambatan molekul dengan AutoDock digunakan untuk memprediksi interaksi senyawa serta dapat memberikan informasi simulasi aktivitas suatu senyawa. Situs aktif yang ada pada makromolekul 5-HT_{2B} memiliki residu asam amino Val208, Phe340, Val366, Leu132, Asp135, Phe341, Val136, Leu209, Phe217, Gly221, Ser222, Met218, Val348, Asn344, Leu362, Leu347, Trp131, Trp337, Thr140, Ser139, Ala225, Tyr370, Ile186, Lys221, Gln359, Thr210, Glu363, Ala111. Residu Val136, Gly221, Phe341, Phe217 dan Val366 digunakan untuk penambatan molekul. Parameter optimal yang diperoleh untuk validasi penambatan molekul 5-HT_{2B} dengan ligan ergotamin adalah gridbox 50x50x50 titik dengan jarak 0,375 Å dengan jumlah maksimum evaluasi energi medium = 2.500.000, menunjukkan energi ikatan -15,61 kkal/mol dan nilai RMSD yaitu 0,31567 Å. Penambatan molekul golongan NPS pada 5-HT_{2B} menunjukkan interaksi pada rentang energi ikatan -8,00 hingga -11,00 kkal/mol untuk kanabinoid (80,30%), katinon (6,4%), fenetilamin (7,5%), fentanil (100%), piperazin (6,25%), arilsikloheksilamin (30%), dan plant-based substances (50%). Sedangkan pada rentang -5,00 hingga -7,99 kkal/mol yakni kanabinoid (19,70%), katinon (93,6%), fenetilamin (92,5%), triptamin (100%), piperazin (93,75%), arilsikloheksilamin (70%), dan plant-based substances (50%). Dari hasil penelitian ini 5-HT_{2B} tidak hanya berinteraksi dengan fenetilamin sebagai ligan yang sudah diketahui sebagai agonis tetapi juga dipengaruhi oleh fentanil dan kanabinoid.