

Studi Interaksi Berbagai New Psychoactive Substances Terhadap Reseptor Cannabinoid-2 Secara In Silico = In Silico Interaction Study of New Psychoactive Substances on Cannabinoid-2 Receptor

Nadia Rahmani, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20523219&lokasi=lokal>

Abstrak

New Psychoactive Substances (NPS) adalah senyawa baru serupa narkotika dan psikotropika yang belum diatur dalam perundang-undangan sehingga rentan untuk disalahgunakan. NPS dapat berinteraksi dengan berbagai reseptor yang ada di otak, salah satunya reseptor Cannabinoid-2. Penelitian ini dilakukan untuk melihat afinitas dan model interaksi antara NPS dengan reseptor Cannabinoid-2 secara in silico. Metode yang digunakan adalah penambatan molekuler menggunakan program Autodock dengan bantuan PyRx. Parameter optimal yang digunakan untuk penambatan molekuler NPS dengan reseptor Cannabinoid-2 adalah gridbox dengan ukuran 58x58x58 pts dengan spasi 0,375 Å dan lama komputasi short. Energi ikatan yang dihasilkan dari penambatan molekuler NPS terhadap reseptor Cannabinoid-2 berkisar antara -2,58 hingga -11,78 kkal/mol. Golongan yang memiliki frekuensi terbanyak senyawa dengan energi ikatan -5,00 hingga -7,49 kkal/mol adalah aminoindanes, fenetilamin, fensiklidin, katinon sintetik, piperazin, dan triptamin, sedangkan golongan yang memiliki frekuensi terbanyak senyawa dengan energi ikatan -7,50 hingga -10,00 adalah kanabinoid sintetik, fentanil, other substances, dan opioid. Berdasarkan hasil yang didapatkan, semua golongan NPS memiliki afinitas jika berinteraksi dengan reseptor Cannabinoid-2. Interaksi yang dihasilkan dari semua golongan NPS berpotensi menghasilkan aktivitas agonis kecuali pada golongan fenetilamin, fensiklidin, dan piperazin.

.....New Psychoactive Substances (NPS) is a new compound resembling to narcotics and psychotropics which not yet regulated by the law, so NPS has vulnerability to be abused. NPS can interact with various receptors in the brain, such as cannabinoid-2 receptors. This in silico study was conducted to determine binding affinity and model of interaction of NPS on cannabinoid-2 receptor. The method used is molecular docking using AutoDock assisted by PyRx. The optimal parameter used for molecular docking of NPS with cannabinoid-2 receptor is a gridbox with a size of 58x58x58 pts spacing 0,375 Å and maximum number of evaluation short. The binding energy resulting from molecular docking of NPS with cannabinoid-2 receptor ranged from -2,58 to -11,78 kcal/mol. The groups with the highest frequency of compounds with bond energies of -5.00 to -7.49 kcal/mol were aminoindanes, phenethylamine, phenylclidine, synthetic cathinones, piperazine, and tryptamine, while the group with the highest frequency of compounds with bond energies of -7.50 to -10.00 are synthetic cannabinoids, fentanyl, other substances, and opioids. Based on the results obtained, all NPS groups have affinity when interacting with cannabinoid-2 receptors. The interaction resulting from all NPS groups has a potential to mediate agonist activity except for phenethylamine, phencyclidine, and piperazine.