

Studi Interaksi New Psychoactive Substances terhadap Reseptor Alfa 2A Adrenergik dengan Penambatan Molekul Menggunakan AutoDock dan AutoDock vina = Interaction Study of New Psychoactive Substances on Alpha 2A Adrenergic Receptors with Molecular Docking Using AutoDock and AutoDock vina

Abiyyu Ghulam, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920555449&lokasi=lokal>

Abstrak

New Psychoactive Substance (NPS) merupakan senyawa psikoaktif baru yang memiliki kemungkinan untuk disalahgunakan. Senyawa tersebut belum masuk ke dalam perundang-undangan. NPS dapat berinteraksi dengan berbagai reseptor yang berada di sistem saraf pusat, salah satu reseptornya adalah reseptor alfa 2A adrenergik. NPS yang berinteraksi dengan reseptor alfa 2A adrenergik yang berada di sistem saraf pusat dapat menghasilkan efek psikoaktif seperti euphoria. Efek samping yang dapat muncul dari reseptor alfa 2A adrenergik adalah ansietas, depresi, mudah tersinggung, dan paranoia. Penelitian ini melihat interaksi antara NPS dengan reseptor alfa 2A adrenergik yang dapat memberikan informasi untuk digunakan sebagai data pendukung dalam penyusunan peraturan terkait pelarangan NPS. Metode penelitian yang digunakan untuk melihat interaksi yang terjadi antara NPS dengan reseptor alfa 2A adrenergik adalah penambatan molekuler. Penambatan molekuler dilakukan dengan menggunakan program AutoDock dan AutoDock vina yang dibantu dengan PyRx. Parameter optimal yang digunakan untuk penambatan molekuler NPS dengan reseptor alfa 2A adrenergik, yaitu grid box dengan ukuran 78x78x78 pts (spasi 0,375 Å) dan waktu komputasi short. Hasil penambatan molekul didapatkan golongan yang memiliki frekuensi terbanyak senyawa dengan energi ikatan -5,00 sampai -7,49 kkal/mol adalah aminoindanes, fenetilamin, fensiklidin dan ketamin, katinon sintetik, piperazin, triptamin, dan barbiturat, sedangkan golongan yang memiliki frekuensi terbanyak senyawa dengan energi ikatan -7,5 sampai -10,00 kkal/mol adalah kanabinoid sintetik, other substance, plant based, benzodiazepin, fentanil, dan opioid. Berdasarkan hasil yang didapatkan, semua golongan NPS menghasilkan afinitas jika berinteraksi dengan reseptor alfa 2A adrenergik.

.....New Psychoactive Substance (NPS) is a new psychoactive compound that has the possibility to be abused. These compounds have not yet entered into legislation. NPS can interact with various receptors in the central nervous system, one of which is the alpha 2A adrenergic receptor. NPS that interact with alpha 2A adrenergic receptors located in the central nervous system can produce psychoactive effects such as euphoria. Side effects that can appear from alpha 2A adrenergic receptors are anxiety, depression, irritability, and paranoia. This study aims to look the interaction between NPS and alpha 2A adrenergic receptors which can provide information to be used as supporting data in drafting regulations related to the prohibition of NPS. The research method used to see the interactions that occur between NPS and alpha 2A adrenergic receptors is molecular docking. Molecular docking was carried out using the AutoDock and AutoDock vina assisted by PyRx. The optimal parameter used for molecular docking of NPS with alpha 2A adrenergic receptors was a grid box with a size of 78x78x78 pts (space 0.375 Å) and short computational time. The results of molecular docking showed that the groups that had the highest frequency of compounds with bond energies of -5.00 to -7.49 kcal/mol are aminoindanes, phenethylamine, phenylclidine and ketamine, synthetic cathinones, piperazine, tryptamine, and barbiturates, while the group with the highest

frequency compounds with bond energies of -7.5 to -10.00 kcal/mol are synthetic cannabinoids, other substances, plant based, benzodiazepines, fentanyl, and opioids. Based on the results obtained, all groups of NPS produce affinity when interacting with alpha 2A adrenergic receptors.