Universitas Indonesia Library >> UI - Skripsi Membership

Studi Interaksi Berbagai New Psychoactive Substances (NPS) Terhadap Reseptor 5-hidroksitriptamin2B Secara In silico = Interaction Study Of Various New Psychoactive Substances (NPS) On 5-hydroxytriptamin2B 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 dengana AutoDock digunakan untuk memprediksi interaksi senyawa serta dapat memberikan informasi simulasi aktivitas suatu senyawa. Situs aktif yang ada pada makromolekul 5-HT2B 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 molekuler 5-HT2B dengan ligan ergotamin adalah gridbox 50x50x50 titik dengan jarak 0,375 A dengan jumlah maksimum evaluasi energi medium = 2.500.000, menunjukan energi ikatan -15,61 kkal/mol dan nilai RMSD yaitu 0,31567 Å. Penambatan molekul golongan NPS pada 5-HT2B menunjukan 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-HT2B tidak hanya beribteraksi dengan fenetilamin sebagai ligan yang sudah diketahui sebagai agonis tetapi juga dipengaruhi oleh fentanil dan kanabinoid.