

Studi Interaksi New Psychoactive Substances terhadap Reseptor Dopamin D2 dengan Penambatan Molekul Menggunakan AutoDock dan AutoDock Vina = Interaction Study of New Psychoactive Substances on Dopamine D2 Receptors with Molecular Docking Using AutoDock and AutoDock Vina

Hafidh Deza Baihaqi, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920555504&lokasi=lokal>

Abstrak

New Psychoactive Substance (NPS) adalah serangkaian obat yang dirancang untuk meniru obat-obatan terlarang seperti ganja, kokain, dan ekstasi. Kemunculan NPS yang sangat cepat berkembang mengakibatkan maraknya penyalahgunaan oleh pihak yang tidak bertanggung jawab karena kurangnya informasi dan pengawasan terkait NPS tersebut. NPS dapat berinteraksi dengan berbagai reseptor yang terdapat di sistem saraf pusat, salah satunya yaitu reseptor dopamin D2. Pada penelitian ini dilakukan penambatan molekul antara NPS terhadap reseptor dopamin D2 dengan tujuan untuk memperoleh model interaksi dan afinitas ikatan yang terbentuk. Penambatan molekul dilakukan dengan menggunakan AutoDock melalui program PyRx lalu dilakukan visualisasi interaksi hasil penambatan molekul dengan menggunakan program LigPlot+ dan PyMol. Parameter optimal yang digunakan untuk penambatan molekul NPS dengan reseptor dopamin D2 yaitu grid box dengan ukuran 60x60x60 pts dengan spasi 0,375 Å dan lama waktu komputasi short. Hasil penambatan molekul didapatkan golongan yang menghasilkan frekuensi terbanyak dengan rentang energi ikatan -5,00 sampai -7,49 kkal/mol adalah fenetilamin (60%), fensiklidin dan ketamin (88,89%), katinon sintetik (74,04%), triptamin (75%), barbiturat (100%), benzodiazepin (55%), dan opioid (62,5%), sedangkan golongan yang menghasilkan frekuensi terbanyak dengan rentang energi ikatan -7,5 sampai -10,00 kkal/mol adalah aminoindanes (66,67%), kanabinoid sintetik (71,21%), piperazin (88,89%), plant-based (100%), other substance (60%), dan fentanil (88,73%). Berdasarkan hasil yang didapatkan, semua golongan NPS memiliki afinitas jika berinteraksi dengan reseptor dopamin D2 dan model interaksi dari 13 senyawa tersebut menunjukkan ikatan dengan TM3, TM5, dan TM6 sebagai bagian dari situs aktif reseptor dopamin D2 yang memediasi aktivitas agonisnya.

.....New Psychoactive Substance (NPS) is a range of drugs designed to mimic illicit drugs such as marijuana, cocaine, and ecstasy. The emergence of a very fast growing NPS causing a misuse by some irresponsible people due to the lack of information and supervision related to the NPS. NPS can interact with various receptors in the central nervous system, such as the dopamine D2 receptor. In this study, molecular docking between NPS and dopamine D2 receptors was carried out with the aim of obtaining a model of the interaction and binding affinity. The molecular docking accomplished by AutoDock through the PyRx program and then the visualization of the interaction of the molecular docking results accomplished by using the LigPlot+ and PyMol programs. The optimal parameter used for molecular docking of NPS with dopamine D2 receptors is a grid box with a size of 60x60x60 pts with a spacing of 0.375 Å and a short computation time. The results of the molecular docking showed that the group that produced the highest frequency with a bond energy range of -5.00 to -7.49 kcal/mol were phenethylamine (60%), phencyclidine and ketamine (88.89%), synthetic cathinone (74.04%), tryptamine (75%), barbiturates (100%), benzodiazepines (55%), and opioids (62.5%), while the group that produced the highest frequency

with a bond energy range of -7.5 to -10.00 kcal/mol were aminoindanes (66.67%), synthetic cannabinoids (71.21%), piperazine (88.89%), plant-based (100%), other substances (60%), and fentanyl (88.73%). Based on the results obtained, all NPS groups have affinity when interacting with dopamine D2 receptors and the interaction model of the 13 compounds showed that they were binding to TM3, TM5, and TM6 as part of the active site of the dopamine D2 receptor that mediates their agonist activity.