

Studi Interaksi Berbagai New Psychoactive Substance (NPS) terhadap Reseptor -opioid Secara In Silico = Study of Various Interactions of New Psychoactive Substance (NPS) on μ -opioid Receptors In Silico

Natasya Nur Faradila Hr, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=999992055588&lokasi=lokal>

Abstrak

New Psychoactive Substances (NPS) adalah kelompok zat yang kompleks dan beragam yang sering dikenal sebagai obat perancang atau sintetis, atau dengan istilah sehari-hari yang lebih populer tetapi menyesatkan yaitu legal highs. Menurut Permenkes No. 5 Tahun 2020, terdapat 78 senyawa NPS yang teridentifikasi. Saat ini salah satu golongan senyawa NPS yang beredar di pasar gelap dan banyak pecandunya karena memiliki aktivitas tinggi adalah Fentanil. Senyawa NPS memiliki 13 golongan yaitu senyawa katinon, kanabinoid, fentanil, piperazin, fenetilamin, ketamine & pheniccyclidine, benzodiazepin, barbiturat, opioid sintetis, aminoindan, triptamin, plant-based substances, other substances. Dilakukan prediksi aktivitas secara in silico senyawa-senyawa NPS terhadap makromolekul μ -opioid reseptor menggunakan AutoDock dengan parameter ukuran gridbox 60x60x60 unit dan energi evaluasi medium (2.500.00). Reseptor μ -opioid digunakan karena reseptor ini memiliki aksi agonis langsung terhadap golongan fentanil dan opioid sintetis sehingga ingin diteliti lagi bagaimana aktivitas reseptor μ -opioid terhadap golongan NPS lainnya. Visualisasi interaksi yang dilakukan dengan program PyMOL dan LigPlot+ terhadap makromolekul μ -opioid reseptor menunjukkan golongan NPS yang memiliki energi ikatan mulai dari afinitas dari -5,00 hingga -14,00 kkal/mol. Berdasarkan hasil, pada golongan katinon sintetik, fenetilamin, triptamin, ketamin & phenicylidine, barbiturat, dan aminoindan. Senyawanya menghasilkan frekuensi terbanyak pada rentang energi -5 sampai -7,49 kkal/mol yang menunjukkan aktivitas sedang. Pada golongan Kanabinoid sintetik, fentanil, opioid sintetis, benzodiazepin, plant-based substance dan other substance. Senyawanya menghasilkan frekuensi terbanyak pada rentang -7,5 sampai -10 kkal/mol yang menunjukkan aktivitas tinggi.

.....(NPS) are complex and diverse group substance often known as either designer or synthetic drugs, or by popular but misleading colloquial term of legal highs. According to Law no. 5 of 2020, there are 78 NPS compounds identified. Currently, there is one class of NPS compounds circulating on the black market, namely Fentanyl. Its availability and ease of accessibility on the black market resulted in many addicts because they have a high activity. NPS compounds have 13 groups, namely cathinones, cannabinoids, fentanyl, piperazine, phenethylamine, ketamine & pheniccyclidine, benzodiazepines, barbiturates, synthetic opioids, aminoindan, tryptamine, plant-based substances, and others. In silico activity prediction of NPS compounds against μ -opioid receptor macromolecules was performed using AutoDock with grid box size parameters 60x60x60 Å and medium evaluation energy (2.500.00). The μ -opioidreceptor is used because this receptor has a direct agonist action against the fentanyl group and synthetic opioids, so it is necessary to further investigate how the μ -opioid receptor activity against other NPS groups. Interaction visualization performed with PyMOL and LigPlot+ programs on μ -opioid receptor macromolecules showed NPS groups with binding energies ranging from -5.00 to -14.00 kcal/mol. As a result, In the synthetic cathinone group, phenethylamine, tryptamine, ketamine & phenicylidine, barbiturates, and aminoindan. The compound produces the highest frequency in the energy range of -5 to -7.49 kcal/mol which indicates moderate

activity. In the synthetic cannabinoids, fentanyl, synthetic opioids, benzodiazepines, plant-based substances and other substances. The compound produces the highest frequency in the range of -7.5 to -10 kcal/mol which shows high activity.