

**VALIDASI DAN OPTIMASI PENAMBATAN SENYAWA KO-KRISTAL
PADA MATRIX METALLOPROTEINASE-9 (4H3X.PDB) MENGGUNAKAN
AUTODOCK 4.0**

Novia Ariella Rangkai

Fakultas Farmasi, Universitas Sanata Dharma, Kampus III Paingan, Maguwoharjo,
Depok, Sleman, Yogyakarta, 55282, Indonesia.

Telp. (0274) 883037, Fax. (0274) 886529

ABSTRAK

Diabetic Foot Ulcer (DFU) merupakan salah satu komplikasi dari diabetes yang berdampak pada kualitas hidup, yang salah satunya penderita memiliki peningkatan risiko amputasi dan kematian. Hal tersebut dipengaruhi ekspresi berlebih dari *matrix metalloproteinase 9* dan penurunan jumlah *Tissue Inhibitor of Metalloproteinase* (TIMP) yang menyebabkan terhambatnya proses penyembuhan luka. *Matrix Metalloproteinase 9* termasuk dalam kelompok *matrix metalloproteinase* (MMPs) yang merupakan *zinc* endopeptidase yang berfungsi mendegradasi semua komponen *extracellular matrix* (ECM) yang memiliki peran dalam proses penyembuhan luka. *N-2-(biphenyl-4-ylsulfonyl)-N-2-(isopropoxy)-acetohydroxamic acid* dengan kode ligan CC27 merupakan ligan aktif yang dapat menghambat aktivitas MMP-9. Oleh karena itu, dilakukan penelitian ini bertujuan untuk mengetahui pose CC27 dalam kantung ikatan MMP-9 dan *Root Mean Square Deviation* (RMSD) dengan langkah awal berupa validasi dan optimasi penambatan ulang ko-kristal CC27 menggunakan software AutoDock 4.0 untuk mendapatkan hasil yang *valid* dengan parameter $\text{RMSD} \leq 2,0 \text{ \AA}$. Berdasarkan hasil uji statistik RMSD menggunakan *one sample t-test* sisi kanan dengan selang kepercayaan 95% didapatkan hasil *p-value* = 1 sehingga dapat dikatakan bahwa pose RMSD yang didapatkan memiliki nilai $\text{RMSD} \leq 2,0 \text{ \AA}$ dan diperoleh 4H3X sebagai target virtual yang *valid*.

Kata Kunci: *Diabetic Foot Ulcer*, MMP-9, 4H3X, Validasi dan optimasi, AutoDock

ABSTRACT

Diabetic Foot Ulcer (DFU) is one of the diabetic complications that has an impact on quality of life. One of those have an increased risk of amputation and death. This is influenced by the overexpression of matrix metalloproteinase 9 and Tissue Inhibitor of Metalloproteinase (TIMP) which caused the wound healing process to be delayed. Matrix metalloproteinase 9 is one of matrix metalloproteinase (MMPs) super family employing zinc endopeptidase having functions to degrade all extracellular matrix (ECM) components that plays a role in wound healing. *N-2-(biphenyl-4-ylsulfonyl)-N-2-(isopropoxy)-acetohydroxamic acid* coded as CC27 ligand is an active ligand that inhibits MMP-9 activity. Therefore, this study aims to determine the pose of CC27 in the MMP-9 binding pocket and Root Mean Square Deviation (RMSD) as a part form of validation and optimization using AutoDock 4.0 utilized to obtain valid results with parameters $RMSD \leq 2,0 \text{ \AA}$. Based on the results of the RMSD statistical test using one t-test on the right side with a 95% confidence interval and $p\text{-value} = 1$, can be said that the RMSD posesobtaine has a $RMSD \leq 2,0 \text{ \AA}$ and 4H3X is obtained as a valid virtual target.

Keywords: Diabetic Foot Ulcer, MMP-9, 4H3X, AutoDock

