

**EVALUASI STRUKTUR KRISTAL 4H3X SEBAGAI TARGET VIRTUAL  
ENZIM MATRIX METALLOPROTEINASE 9 PADA PENAPISAN  
VIRTUAL BERBASIS STRUKTUR**

**Yolanda Tyas Prameswari**

Fakultas Farmasi, Universitas Sanata Dharma, Yogyakarta, Indonesia

**ABSTRAK**

*Diabetic foot ulcer* (DFU) merupakan luka kronis pada kaki yang dialami oleh para penderita diabetes mellitus (DM) sebagai komplikasi dari DM. Pada DFU, diketahui aktivitas MMP-9 meningkat sehingga menyebabkan degradasi matriks ekstraseluler menjadi tidak terkendali. Intervensi terhadap MMP-9 menjadi salah satu target dalam penemuan obat untuk penyembuhan luka pada DFU karena terbukti berperan dalam fase penyembuhan luka. Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi kapabilitas dan validitas 4H3X yang terkristal pada MMP-9 sehingga dapat digunakan sebagai target virtual pada penapisan virtual berbasis struktur berdasarkan kemampuan penambatan ulang ko-kristal ligan CC27, mengetahui pose CC27 dalam kantung ikatan MMP-9 dan RMSD yang dihasilkan setelah dilakukan penambatan ulang. Kemampuan penambatan ulang ko-kristal ligan CC27 diuji dengan protokol yang telah dikembangkan oleh Anita *et al.* (2012). Analisis hasil dilakukan dengan visualisasi dan pengukuran RMSD menggunakan PyMOL. Dari hasil penelitian ini didapatkan RMSD yang lebih besar secara statistik dari 2,0 Å dengan taraf kepercayaan 95%, sehingga struktur kristal 4H3X, tidak dapat digunakan sebagai target virtual berbasis struktur berdasarkan kemampuan penambatan ulang ko-kristal ligan CC27 dengan menggunakan perangkat lunak PLANTS 1.2 dan konfigurasi yang telah dikembangkan oleh Anita *et al.* (2012).

Kata kunci: *diabetic foot ulcer*, 4H3X, MMP-9, penyembuhan luka, penambatan ulang

## ABSTRACT

Diabetic foot ulcer (DFU) is a chronic wound occurs in foot of patients with diabetes mellitus (DM) as a complication of diabetes. In DFU, it is known that the activity of MMP-9 causing increased degradation of extracellular matrix in an uncontrolled manner so that delays the wound healing process. This study aimed to evaluate the capability and validity of 4H3X co-crystalized with MMP-9 can be used as one of structure based virtual screening on its ability to be re-docked by ligand CC27, to evaluate the pose of CC27 in the binding site of MMP-9 and its RMSD. The ability of the CC27 was evaluated using protocols that have been developed by Anita et al. (2012). Analysis of the results is done using PyMOL and R statistical software which performing one sample t-test with 95% of confidence level to determine RMSD should not be greater than 2.0 Å. The results of this study shows that the crystal structure 4H3X is unsuitable used as the virtual target on structure based virtual screening based on the ability of re-docking by co-crystal ligand CC27 using PLANTS 1.2 as molecular docking software and configuration that have been developed by Anita et al (2012).

Keywords: diabetic foot ulcer, 4WZV, MMP-9, wound healing, re-docking

