

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

**Catharina Rency Anggita Siena**

Fakultas Farmasi, Universitas Sanata Dharma, Yogyakarta, Indonesia

**ABSTRAK**

Diabetes merupakan penyakit metabolism yang ditandai adanya hiperglikemia. Salah satu komplikasi utama dari diabetes adalah *diabetic foot ulcer* (DFU). Pada penderita DFU terjadi kelainan fase penyembuhan luka ditandai dengan adanya peningkatan jumlah *matrix metalloproteinase 9* (MMP-9). Penyembuhan luka pada penderita DFU memerlukan senyawa yang dapat berperan sebagai inhibitor MMP-9, yang di dalam ilmu rancangan senyawa obat disebut ligan. EN140 adalah *N-isopropoxy- arylsulfonamide hydroxamates* yang mengalami ko-kristalisasi dengan struktur MMP-9 (kode PDB: 4WZV) berperan sebagai ligan. Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi kapabilitas struktur kristal 4WZV dapat digunakan sebagai target virtual dalam penapisan virtual berbasis struktur (PVBS) yang diindikasikan dengan posenya serta nilai *root mean square distance* (RMSD) dari penambatan ulang ligan EN140 dengan MMP-9. Evaluasi struktur kristal 4WZV dilakukan dengan penambatan molekuler menggunakan konfigurasi yang dikembangkan oleh Anita *et al.* (2012) dan PLANTS sebagai perangkat lunak. Hasil penambatan pada penelitian ini menghasilkan pose dengan nilai RMSD lebih besar dari 2,0 Å. Maka hasil penelitian ini menunjukkan bahwa struktur kristal 4WZV tidak dapat digunakan sebagai target virtual berbasis struktur berdasarkan kemampuan penambatan ulang ko-kristal ligan EN140 dengan menggunakan konfigurasi yang dikembangkan oleh Anita *et al.* (2012) dan PLANTS sebagai perangkat lunak.

Kata kunci: *diabetic foot ulcer*, 4WZV, MMP-9, *wound healing*, *docking*

## ABSTRACT

Diabetes is a metabolic diseases characterized by hyperglycemia. One of the major complications of diabetes is diabetic foot ulcer (DFU). Patients with DFU suffer abnormalities in wound healing processes marked with an increase in the level of matrix metalloproteinase 9 (MMP-9). Wound healing in patients wih DFU needs compounds that can act as a ligand. EN140 is N-isopropoxy-arylsulfonamide hydroxamates co-crystallized with MMP-9's structure acts as a ligand (PDB code: 4WZV). This study aimed to evaluate the capability of 4WZV crystal structure can be used as a virtual target in structure-based virtual screening (SBVS) indicated by the pose and the root mean square distance (RMSD) from docking the ligand EN140 with the MMP-9. 4WZV crystal structure evaluation is carried out using the molecular docking configuration developed by Anita et al. (2012) and using PLANTS software. The result shows that RMSD value is larger than 2,0 Å. Therefore, 4WZV crystal structure is unsuitable as structure-based virtual target due to the inability of co-crystal ligand EN140 docked to the active site of MMP-9 the molecular docking configuration developed by Anita et al. (2012) and using PLANTS software.

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

