

表八 MDDR database screening其 排名在前44名的化合物與登革熱NS3 protease的氫鍵作用位置

Rank	Title	HB	34	35	36	51	101	129	130	131	132	133	135	151	152	153	157	163
1	dengue_NS2A/2B	7HB				51				131*2		133			152*2			163
2	mddr_225762.mol2	6HB			36	51		129			132	133	135					
3	mddr_234412.mol2	5HB			36					131		133	135	151				
4	mddr_280859.mol2	3HB		35							132	133						
5	mddr_167797.mol2	5HB			36					131		133	135		152			
6	mddr_189261.mol2	5HB								131*2		133*2				153		
7	mddr_316264.mol2	3HB		35*2										151				
8	mddr_242858.mol2	5HB										133	135*3	151				
9	mddr_167892.mol2	1HB						129										
10	1dy9_BOC	8HB			36*2					131*3			135*2	151				
11	mddr_285718.mol2	5HB			36*2					131		133				153		
12	mddr_264855.mol2	5HB			36		101				132*2	133						
13	mddr_148160.mol2	7HB	34		36*2					131			135	151	152			
14	mddr_173208.mol2	7HB	34		36*2					131		133*2		151				
15	mddr_202390.mol2	3HB			36					131		133						
16	mddr_262623.mol2	4HB		35				129		131				151				
17	mddr_229836.mol2	5HB			36*2					131*2						153		
18	mddr_170576.mol2	8HB								131*2		133	135*3	151	152			
19	mddr_161758.mol2	3HB			36					131		133						
20	mddr_291486.mol2	2HB			36											153		
21	mddr_222257.mol2	7HB			36					131*2		133	135		152	153		
22	mddr_161339.mol2	4HB			36	51						133	135					
23	mddr_180670.mol2	5HB	34		36					131		133	135					
24	mddr_183474.mol2	3HB			36							133	135					
25	mddr_198225.mol2	2HB			36							133						
26	mddr_312334.mol2	3HB								131*2			135					
27	mddr_185536.mol2	5HB			36*2							133	135					163
28	mddr_137476.mol2	4HB	34		36							133	135					
29	mddr_197001.mol2	3HB			36					131			135					
30	mddr_192717.mol2	5HB								131*2		133	135*2					
31	mddr_295598.mol2	1HB										133						
32	MbBBI	4HB											135	151			157	163
33	mddr_312091.mol2	2HB	34									133						
34	mddr_260052.mol2	3HB						129*2				133						
35	mddr_267618.mol2	4HB	34							131*2		133						
36	mddr_184169.mol2	2HB								131*2								
37	mddr_205693.mol2	5HB								131			135	151		153*2		
38	mddr_206204.mol2	1HB												151				
39	mddr_267887.mol2	2HB			36							133						
40	mddr_204694.mol2	4HB								131*2		133			152			
41	mddr_235390.mol2	3HB			36	51								151				
42	mddr_210779.mol2	2HB								131		133						
43	mddr_226782.mol2	2HB										133	135					
44	1dy8_CBZ	4HB			36					131		133				153		