

表七 394個 MDDR分子化合物之分子結合的結果

Rank	Title	Lig#	Conf#	Pose#	Score	GScore	E(Cydw)	Eintern	Emodel	Ehbond	Emetal	Eclash	E(Coul)	E(vdW)	RMSD
1	dengue_NS2A/2B	395	174	193	-5.97	-5.97	-53.2	25.9	-104.1	-4	0	0.1	-24.6	-28.5	--
2	mddr_225762.mol2	213	556	376	-6.09	-6.09	-51.5	22.8	-93.2	-3.2	0	0.2	-16.9	-34.7	--
3	mddr_234412.mol2	231	539	70	-6.97	-6.97	-46.4	12.9	-81.1	-4.5	0	0	-13.4	-33.1	--
4	mddr_280859.mol2	331	224	354	-5.73	-5.73	-54.4	10.7	-79.2	-2.4	0	0.8	-19.5	-35	--
5	mddr_167797.mol2	76	70	112	-5.01	-5.01	-51.1	7.9	-77.3	-4	0	0	-15.2	-35.9	--
6	mddr_189261.mol2	137	80	174	-8.4	-8.4	-54.3	5.5	-76.8	-3.4	0	0	-17.1	-37.2	--
7	mddr_316264.mol2	391	640	83	-5.78	-5.78	-50.5	10.2	-75.7	-2.1	0	0.7	-15.3	-35.2	--
8	mddr_242858.mol2	248	32	332	-5.07	-5.07	-61.9	3.7	-73.7	-2.6	0	0	-42.1	-19.9	--
9	mddr_167892.mol2	77	286	116	-7.18	-7.18	-48.7	9.6	-71.7	-0.9	0	0	-6.6	-42.1	--
10	1dy9_BOC	397	225	58	-7.38	-7.38	-50.8	19.1	-69.7	-4.7	0	0.2	-20.1	-30.7	--
11	mddr_285718.mol2	344	38	301	-8.05	-8.05	-51.7	6.9	-69.4	-4.1	0	0.2	-23.5	-28.2	--
12	mddr_264855.mol2	299	60	117	-7.89	-7.89	-49.9	7.7	-68.2	-3	0	0	-13.2	-36.7	--
13	mddr_148160.mol2	26	67	16	-6.4	-6.4	-46.6	17.1	-68.1	-6.4	0	0	-16.6	-30	--
14	mddr_173208.mol2	92	94	217	-5.85	-5.85	-42	9.8	-68.1	-5.9	0	0	-18	-24	--
15	mddr_202390.mol2	172	130	102	-5.69	-5.69	-38.3	6.3	-67.8	-2.5	0	0	-5.8	-32.5	--
16	mddr_262623.mol2	294	545	145	-7.15	-7.15	-45.2	8.9	-67.3	-3.4	0	0	-14.2	-31	--
17	mddr_229836.mol2	223	198	238	-5.76	-5.76	-45.7	14.9	-66.8	-4.4	0	0.3	-12.2	-33.5	--
18	mddr_170576.mol2	87	85	265	-8.99	-8.99	-52.5	13.3	-66.7	-4.9	0	0	-21.2	-31.2	--
19	mddr_161758.mol2	56	68	347	-5.94	-5.94	-44.4	3.1	-66.7	-2.1	0	0	-3.9	-40.5	--
20	mddr_291486.mol2	362	515	18	-7.56	-7.56	-46.3	5.1	-66.5	-1.3	0	0.1	-7.7	-38.7	--
21	mddr_222257.mol2	208	754	349	-4.91	-4.91	-36	17.8	-65.7	-6.3	0	0.1	-18.6	-17.4	--
22	mddr_161339.mol2	54	373	26	-7.87	-7.87	-43	2.3	-65.6	-2.9	0	0	-10.9	-32.1	--
23	mddr_180670.mol2	116	362	157	-5.65	-5.65	-46.5	10.3	-65.3	-3.7	0	0	-13.4	-33.1	--
24	mddr_183474.mol2	124	136	7	-7.4	-7.4	-50.1	11.4	-64.5	-2.4	0	0	-7.8	-42.3	--
25	mddr_198225.mol2	160	150	288	-5.29	-5.29	-38.1	4.6	-64	-1.9	0	0	-7.2	-30.9	--
26	mddr_312334.mol2	382	99	171	-4.76	-4.76	-40.5	1.5	-63	-2	0	0	-6.1	-34.4	--
27	mddr_185536.mol2	131	266	115	-4.99	-4.99	-39.7	13.9	-63	-3.7	0	0	-7.9	-31.8	--
28	mddr_137476.mol2	4	313	248	-4.38	-4.38	-42.2	7	-62.9	-2.6	0	0	-9	-33.1	--
29	mddr_197001.mol2	158	61	335	-6.8	-6.8	-45.7	5.7	-62.4	-2.8	0	0.1	-11.6	-34.1	--
30	mddr_192717.mol2	148	97	189	-3.69	-3.69	-45	6.7	-62.2	-2	0	0	-18.6	-26.4	--
31	mddr_295598.mol2	371	2	106	-4.48	-4.48	-37.9	3.4	-62	-0.9	0	0	-3.2	-34.7	--
32	MbBBI	398	867	135	-5.48	-5.48	-51.2	10.7	-61.7	-2.3	0	0.3	-13.7	-37.5	--
33	mddr_312091.mol2	381	272	393	-4.56	-4.56	-43.1	6	-61.5	-1.4	0	0	-8.7	-34.3	--
34	mddr_260052.mol2	287	152	302	-5.52	-5.52	-41.9	10.1	-61.3	-1.8	0	0	-13.3	-28.6	--
35	mddr_267618.mol2	304	406	336	-4.89	-4.89	-42.6	10.4	-60.7	-3.7	0	0.2	-15.5	-27.1	--
36	mddr_184169.mol2	125	209	201	-3.66	-3.66	-40.8	21.9	-60	-1.2	0	0	-1.8	-39.1	--
37	mddr_205693.mol2	175	59	129	-7.3	-7.3	-46.9	4.5	-59.9	-4	0	0	-20.1	-26.8	--
38	mddr_206204.mol2	177	310	21	-7.31	-7.31	-44.4	6.6	-59.9	-0.6	0	1.3	-8.6	-35.7	--
39	mddr_267887.mol2	305	187	115	-6.2	-6.2	-41.5	8.1	-59.8	-1.9	0	0	-4.7	-36.8	--
40	mddr_204694.mol2	174	165	311	-6.4	-6.4	-39.9	7.2	-59.7	-2.4	0	0	-11.6	-28.4	--
41	mddr_235390.mol2	233	54	236	-6.11	-6.11	-44.9	7	-59.6	-1.1	0	0	-8	-36.9	--
42	mddr_210779.mol2	189	104	367	-4.77	-4.77	-43.7	13.4	-59.4	-1	0	0	-4.7	-39	--
43	mddr_226782.mol2	217	209	240	-7.01	-7.01	-42.7	2.3	-59.4	-1.9	0	0	-6.5	-36.2	--

44	1dy8_CBZ	396	303	374	-6.85	-6.85	-48.5	13.3	-59.1	-3.1	0	0	-10.7	-37.8	--
45	mddr_228838.mol2	222	65	196	-6.58	-6.58	-44.8	6	-59.1	-0.8	0	0	-9.4	-35.4	--
46	mddr_158334.mol2	44	12	319	-5.2	-5.2	-36.9	5.9	-59	-4.7	0	0	-15.3	-21.6	--
47	mddr_289619.mol2	358	262	275	-5.49	-5.49	-36.2	10.8	-58.6	-2.4	0	0	-5	-31.2	--
48	mddr_244040.mol2	253	346	397	-6.17	-6.17	-42.7	7.8	-58.5	-2.8	0	0	-11.3	-31.4	--
49	mddr_231390.mol2	227	77	246	-4.52	-4.52	-37.8	6	-58.5	-2.8	0	0	-8.9	-28.9	--
50	mddr_168500.mol2	81	5	259	-7.75	-7.75	-36.2	2	-58.3	-4.2	0	0	-14	-22.2	--
51	mddr_312849.mol2	387	86	202	-6.14	-6.14	-44	8.1	-57.8	-1	0	0	-6.4	-37.6	--
52	mddr_253114.mol2	276	184	224	-4.72	-4.72	-38.8	6.8	-57.7	-1.7	0	0	-4.9	-34	--
53	mddr_281548.mol2	334	230	148	-7.99	-7.99	-42.3	12.5	-57.5	-1.5	0	0	-6.3	-36	--
54	mddr_313677.mol2	388	184	248	-5.11	-5.11	-41.1	2.7	-57.2	-1.7	0	0	-10.2	-30.9	--
55	mddr_270186.mol2	312	34	322	-6.05	-6.05	-41.3	4.5	-57	-1.9	0	0.2	-10.1	-31.3	--
56	mddr_185723.mol2	132	165	371	-5.11	-5.11	-41.3	13.5	-57	-0.9	0	0	-6.4	-34.9	--
57	mddr_248235.mol2	262	386	54	-5.52	-5.52	-40.8	7.9	-57	-1.1	0	0	-6.6	-34.2	--
58	mddr_175675.mol2	101	268	78	-7.1	-7.1	-36.7	1.7	-57	-3.2	0	0	-8.9	-27.8	--
59	mddr_158390.mol2	45	76	283	-5.99	-5.99	-37	9.3	-56.9	-3.4	0	0	-8.7	-28.3	--
60	mddr_82842.mol2	337	93	330	-6.25	-6.25	-45.2	9.8	-56.8	-2	0	0.1	-11.3	-33.9	--
61	mddr_161761.mol2	57	37	317	-5.49	-5.49	-39.2	7.1	-56.8	-3	0	0	-9.8	-29.4	--
62	mddr_147408.mol2	23	2	105	-4	-4	-39.3	3.6	-56.7	-3.7	0	0	-12	-27.3	--
63	mddr_165258.mol2	68	53	331	-7.4	-7.4	-42.6	6.5	-56.6	-2.4	0	0.1	-16.4	-26.2	--
64	mddr_249347.mol2	263	647	306	-6.02	-6.02	-44.2	6	-56.4	-1.3	0	0	-8.4	-35.8	--
65	mddr-300946.mol2	375	19	219	-6.04	-6.04	-40.3	8.5	-56.4	-1.6	0	0	-8.7	-31.6	--
66	mddr_206814.mol2	180	195	287	-4.66	-4.66	-37	10.9	-56.3	-2.8	0	0	-7.6	-29.4	--
67	mddr_237484.mol2	237	9	86	-5.77	-5.77	-45.5	3.2	-56.1	-2.1	0	0	-16.7	-28.8	--
68	mddr_149187.mol2	28	12	80	-3.23	-3.23	-42.3	5.6	-56	-0.9	0	0	-7	-35.4	--
69	mddr_272830.mol2	316	82	293	-5.91	-5.91	-47.8	22.9	-55.9	-5.8	0	0.1	-30	-17.8	--
70	mddr_313918.mol2	390	14	124	-6.29	-6.29	-41.8	2.9	-55.7	-1	0	0.1	-9.4	-32.4	--
71	mddr_154071.mol2	37	337	59	-4.85	-4.85	-38.7	4.1	-55.5	-2.8	0	0	-13.4	-25.2	--
72	mddr_269979.mol2	311	4	203	-5.82	-5.82	-37.7	4	-55.5	-3.8	0	0	-18.7	-19	--
73	mddr_286517.mol2	348	83	62	-5.11	-5.11	-37.5	2.9	-55.5	-1.8	0	0	-6.5	-31	--
74	mddr_185058.mol2	128	554	80	-7.05	-7.05	-42.1	10.6	-55.3	-1.9	0	0	-7.5	-34.6	--
75	mddr_252619.mol2	274	27	377	-4.11	-4.11	-37	8.6	-55.2	-2.6	0	0	-7	-30	--
76	mddr_261085.mol2	291	130	24	-7.09	-7.09	-42.1	13.6	-55	-3.7	0	0	-10.2	-31.9	--
77	mddr_230818.mol2	225	325	54	-6.4	-6.4	-40.2	4.8	-54.9	-1.9	0	0	-5.1	-35.1	--
78	mddr_268941.mol2	308	98	308	-5.84	-5.84	-36.6	7.1	-54.7	-3.6	0	0	-11	-25.6	--
79	mddr_143242.mol2	11	102	17	-6.15	-6.15	-40.9	5.7	-54.6	-1.6	0	0	-4.3	-36.7	--
80	mddr_270925.mol2	314	101	262	-4.73	-4.73	-39.9	10.3	-54.4	-1.1	0	0	-4.1	-35.9	--
81	mddr_304698.mol2	377	43	213	-5.18	-5.18	-38.7	9	-54.4	-2.1	0	0	-7.3	-31.5	--
82	mddr_194341.mol2	153	175	370	-7.13	-7.13	-40.9	6.9	-54.3	-1.5	0	0	-5.9	-35	--
83	mddr_175682.mol2	102	584	391	-7.88	-7.88	-40.6	6.6	-54.3	-3.5	0	0	-13.8	-26.8	--
84	mddr_245085.mol2	255	144	351	-5.8	-5.8	-43.7	6.4	-54.1	-0.7	0	0	-5.1	-38.6	--
85	mddr_255843.mol2	281	340	106	-5.28	-5.28	-39.7	4	-54	-1.4	0	0	-9.6	-30	--
86	mddr_194108.mol2	150	98	31	-6.95	-6.95	-40.5	6.2	-53.9	-0.9	0	0	-2.1	-38.4	--
87	mddr_250626.mol2	268	63	233	-4.95	-4.95	-36.4	3	-53.9	-2	0	0.6	-10.1	-26.3	--
88	mddr_209367.mol2	187	34	43	-4.57	-4.57	-34.2	5.3	-53.9	-3.5	0	0	-8	-26.1	--
89	mddr_186878.mol2	134	181	165	-4.54	-4.54	-35.2	5.1	-53.6	-3.2	0	0	-7.5	-27.6	--

90	mddr_249427.mol2	264	617	80	-6.23	-6.23	-46.2	11.4	-53.4	-2.9	0	0	-12.3	-33.9	--
91	mddr_238573.mol2	242	100	364	-6.35	-6.35	-39.4	1.1	-53.4	-1.9	0	0	-12.8	-26.5	--
92	mddr_198252.mol2	161	506	385	-6.52	-6.52	-32.2	2.6	-53.4	-3.2	0	0.2	-7.3	-24.9	--
93	mddr_289160.mol2	357	102	380	-5.96	-5.96	-38.8	4.5	-53.3	-1.4	0	0	-6.6	-32.2	--
94	mddr_237055.mol2	235	201	101	-6.8	-6.8	-37.6	1.5	-53.3	-1.5	0	0	-3.1	-34.4	--
95	mddr_162925.mol2	62	9	357	-6.89	-6.89	-40.5	3.1	-53.1	-2.9	0	0	-10.4	-30.2	--
96	mddr_289072.mol2	354	80	116	-6.14	-6.14	-41.8	6.9	-53	-2.8	0	0	-16.5	-25.3	--
97	mddr_156136.mol2	43	11	299	-6.23	-6.23	-40.3	2	-53	-2.5	0	0	-14.8	-25.4	--
98	mddr_155301.mol2	39	328	87	-6.71	-6.71	-38.7	4.9	-53	-1.1	0	0.1	-5	-33.7	--
99	mddr_311157.mol2	380	27	390	-4.28	-4.28	-37.9	3.6	-53	-2.1	0	0	-10.7	-27.1	--
100	mddr_293450.mol2	369	326	170	-7.36	-7.36	-39.7	8.1	-52.9	-1.9	0	0	-3.2	-36.6	--
101	mddr_283541.mol2	340	379	20	-6.19	-6.19	-38.1	11.5	-52.9	-1.6	0	0	-7.9	-30.2	--
102	mddr_316584.mol2	392	40	354	-3.73	-3.73	-39.2	6.9	-52.7	-1.8	0	0	-7.8	-31.4	--
103	mddr_286418.mol2	347	2	176	-4.62	-4.62	-36	1.9	-52.6	-0.9	0	0	-6.6	-29.4	--
104	mddr_225002.mol2	212	8	253	-6.67	-6.67	-34.3	4.1	-52.6	-4.9	0	0	-14.4	-19.9	--
105	mddr_152248.mol2	35	286	15	-7.26	-7.26	-43.7	15.9	-52.5	-0.8	0	0	-4	-39.7	--
106	mddr_267966.mol2	306	395	187	-6.39	-6.39	-39	3.3	-52.5	-3.5	0	0	-12.8	-26.2	--
107	mddr_252091.mol2	273	5	52	-6.66	-6.66	-37.9	1.3	-52.5	-1.9	0	0	-10	-27.9	--
108	mddr_258327.mol2	284	156	387	-5.67	-5.67	-34.4	3.6	-52.5	-2	0	0	-8	-26.5	--
109	mddr_238118.mol2	240	87	286	-6.66	-6.66	-37.7	4.3	-52.3	-0.9	0	0.1	-3.7	-34	--
110	mddr_242387.mol2	245	5	121	-4.17	-4.17	-32.5	1.8	-52.3	-1.5	0	0	-8	-24.4	--
111	mddr_213862.mol2	193	150	286	-6.15	-6.15	-39	7.1	-52.1	-1.6	0	0	-9.6	-29.4	--
112	mddr_143604.mol2	13	6	90	-6.81	-6.81	-41.4	6.3	-51.9	-2.9	0	0	-13.5	-27.8	--
113	mddr_262284.mol2	293	94	16	-4.79	-4.79	-38.9	8.5	-51.9	-1.9	0	0.1	-8.4	-30.5	--
114	mddr_254358.mol2	278	268	277	-7.08	-7.08	-38.1	6.3	-51.6	-2.6	0	0.1	-9.9	-28.2	--
115	mddr_146862.mol2	20	15	93	-6.68	-6.68	-37.6	2.4	-51.3	-1.2	0	0	-5.5	-32.1	--
116	mddr_231744.mol2	228	151	64	-5.06	-5.06	-35.5	0.8	-51.2	-1.9	0	0	-5.5	-29.9	--
117	mddr_281122.mol2	332	13	55	-3.85	-3.85	-35.2	1.6	-51.1	-1.2	0	0	-3.9	-31.4	--
118	mddr_176840.mol2	106	295	91	-5.97	-5.97	-38.6	3.8	-50.9	-2.7	0	0	-11	-27.6	--
119	mddr_211508.mol2	191	500	312	-6.56	-6.56	-38.2	7.7	-50.9	-1.6	0	0	-6.9	-31.3	--
120	mddr_214144.mol2	194	1	221	-7.03	-7.03	-36	2	-50.8	-1.9	0	0	-5.6	-30.5	--
121	mddr_251196.mol2	269	8	3	-6.21	-6.21	-36.2	1.2	-50.7	-0.9	0	0	-2.8	-33.3	--
122	mddr_311035.mol2	379	492	375	-6.51	-6.51	-41.2	12.3	-50.6	-1.3	0	0	-6.3	-34.9	--
123	mddr_201985.mol2	169	15	23	-6.31	-6.31	-37	1.4	-50.6	-0.1	0	0	-2	-35	--
124	mddr_199777.mol2	164	25	38	-5.21	-5.21	-35.5	3.1	-50.6	-1.5	0	0	-7.1	-28.5	--
125	mddr_247564.mol2	260	83	4	-7.63	-7.63	-36.9	5.5	-50.5	-2.7	0	0	-6.9	-30	--
126	mddr_214400.mol2	196	110	117	-5.97	-5.97	-36.6	11.7	-50.5	-3.5	0	0	-13.1	-23.4	--
127	mddr_174772.mol2	97	106	217	-6.41	-6.41	-33.8	2.2	-50	-1.9	0	0	-5	-28.8	--
128	mddr_234736.mol2	232	149	44	-3.5	-3.5	-36.2	4.9	-49.8	-0.9	0	0.3	-9.2	-26.9	--
129	mddr_248117.mol2	261	76	92	-6.02	-6.02	-40.6	5.6	-49.5	-0.9	0	0	-5.7	-34.9	--
130	mddr_277796.mol2	326	70	362	-6.61	-6.61	-37.7	6.2	-49.5	-0.9	0	0	-6.2	-31.5	--
131	mddr_250407.mol2	267	32	71	-6.81	-6.81	-36.6	5.7	-49.5	0	0	0	-0.2	-36.4	--
132	mddr_313870.mol2	389	18	157	-4.57	-4.57	-36	7.1	-49.5	-2.9	0	0	-8.9	-27	--
133	mddr_245874.mol2	256	18	235	-4.36	-4.36	-34.4	2	-49.5	-2	0	0	-17.7	-16.7	--
134	mddr_292276.mol2	365	179	211	-6.31	-6.31	-36.8	4.7	-49.4	-0.9	0	0.1	-3.4	-33.4	--
135	mddr_285314.mol2	342	107	23	-4.68	-4.68	-30.4	5.7	-49.4	-2.9	0	0.1	-8.3	-22.1	--

136	mddr_318208.mol2	394	209	211	-4.69	-4.69	-36.2	7.4	-49.3	-3.1	0	0	-12.3	-23.9	--
137	mddr_244447.mol2	254	305	57	-4.43	-4.43	-33.8	0.6	-49.2	-0.6	0	0	-0.4	-33.3	--
138	mddr_254198.mol2	277	1	176	-4.82	-4.82	-33.2	1.2	-49.2	-2	0	0	-6.5	-26.7	--
139	mddr_201278.mol2	166	6	120	-5.43	-5.43	-37.6	0.2	-49	-0.3	0	0	-4.4	-33.2	--
140	mddr_288972.mol2	353	6	51	-5.77	-5.77	-38.2	3.8	-48.8	-0.4	0	0	-8.6	-29.6	--
141	mddr_275944.mol2	322	19	120	-5.52	-5.52	-38.1	4.5	-48.8	-1.9	0	0.1	-16.6	-21.4	--
142	mddr_195456.mol2	156	4	343	-6.55	-6.55	-36.5	0.8	-48.8	-0.9	0	0	-4.7	-31.8	--
143	mddr_269274.mol2	310	179	3	-5.33	-5.33	-38.8	4.8	-48.7	-0.9	0	0	-7.9	-30.9	--
144	mddr_288177.mol2	352	1	183	-5.98	-5.98	-35.2	0.2	-48.7	-0.4	0	0	-2.5	-32.7	--
145	mddr_194427.mol2	154	296	352	-2.63	-2.63	-19.8	90.4	-48.6	0	0	0	-0.1	-19.7	--
146	mddr_145316.mol2	18	15	228	-4.9	-4.9	-37.8	4.3	-48.5	-2.1	0	0.2	-11.9	-26	--
147	mddr_180387.mol2	114	151	358	-6.35	-6.35	-36.4	5.7	-48.5	-3.6	0	0	-15.8	-20.6	--
148	mddr_219266.mol2	204	20	112	-3.55	-3.55	-31.1	2.6	-48.5	-0.5	0	0	-5.9	-25.2	--
149	mddr_197592.mol2	159	8	198	-6.03	-6.03	-25.9	2	-48.5	-3	0	0.1	-3.7	-22.2	--
150	mddr_227910.mol2	218	3	339	-6.45	-6.45	-35.7	2.3	-48.2	-0.8	0	0	-0.3	-35.4	--
151	mddr_169956.mol2	85	1	158	-5.39	-5.39	-36.9	0.4	-48.1	-0.5	0	0	-2.2	-34.7	--
152	mddr_198749.mol2	162	10	91	-6.09	-6.09	-36.2	0.7	-48.1	-1.5	0	0	-9.6	-26.6	--
153	mddr_206774.mol2	179	51	305	-6.82	-6.82	-34.3	2.3	-47.9	-2.4	0	0	-7.7	-26.6	--
154	mddr_195217.mol2	155	191	103	-6.96	-6.96	-40.1	19.8	-47.7	-0.9	0	0.6	-2.5	-37.6	--
155	mddr_190600.mol2	144	8	385	-6.63	-6.63	-36.8	7.8	-47.6	-1.9	0	0.1	-5.9	-30.9	--
156	mddr_179059.mol2	111	203	21	-6.26	-6.26	-30.9	6.8	-47.6	-2.8	0	0	-7.4	-23.6	--
157	mddr_180479.mol2	115	1	90	-5.59	-5.59	-37	2.4	-47.5	-2.7	0	0	-14	-23	--
158	mddr_194291.mol2	152	33	334	-5.27	-5.27	-38.7	8	-47.4	0	0	0	-1.4	-37.3	--
159	mddr_218135.mol2	202	213	26	-6.63	-6.63	-36.9	8.4	-47.4	-1.7	0	0	-3.5	-33.4	--
160	mddr_163134.mol2	63	6	79	-6.55	-6.55	-37.4	4.6	-47.2	-3.3	0	0	-17.2	-20.2	--
161	mddr_176268.mol2	105	310	192	-5.6	-5.6	-37.7	3.1	-47.1	-0.1	0	0	-3.3	-34.4	--
162	mddr_214364.mol2	195	181	213	-3.8	-3.8	-31.9	12.6	-47.1	-1.7	0	0	-3.4	-28.5	--
163	mddr_251846.mol2	272	441	27	-6.83	-6.83	-36	9	-46.9	-1.1	0	0.2	-6	-30	--
164	mddr_162798.mol2	61	31	142	-7.47	-7.47	-34.5	2.3	-46.8	-1.9	0	0	-6.4	-28.1	--
165	mddr_279854.mol2	329	137	206	-5.88	-5.88	-34.4	11.9	-46.8	0	0	0	-2.2	-32.2	--
166	mddr_172830.mol2	90	53	241	-5.98	-5.98	-36.1	4.5	-46.7	-0.9	0	0	-4.3	-31.8	--
167	mddr_235553.mol2	234	3	236	-5.53	-5.53	-34.9	0.2	-46.6	-2	0	0.2	-15	-19.9	--
168	mddr_190683.mol2	145	15	141	-6.29	-6.29	-33.7	0.2	-46.5	-1.3	0	0	-6.1	-27.6	--
169	mddr_254362.mol2	279	78	287	-6.42	-6.42	-36.9	10.6	-46.4	-1.3	0	0	-4.8	-32.1	--
170	mddr_260729.mol2	289	244	154	-7.11	-7.11	-34.4	3.8	-46.3	-1.8	0	0	-3.6	-30.8	--
171	mddr_276564.mol2	323	427	247	-5.71	-5.71	-39.2	14.2	-46.2	0	0	0	-3.5	-35.8	--
172	mddr_147253.mol2	21	210	74	-3.61	-3.61	-31.2	5.7	-46.2	-2.5	0	0	-8.8	-22.4	--
173	mddr_212619.mol2	192	18	301	-6.89	-6.89	-40.3	19.8	-46.1	-2	0	0	-10.4	-29.9	--
174	mddr_286937.mol2	350	8	345	-6.45	-6.45	-34	2.7	-46.1	-1.2	0	0	-8.8	-25.2	--
175	mddr_161332.mol2	53	338	263	-4.27	-4.27	-27.5	1.8	-46.1	-1.9	0	0.2	-6.2	-21.3	--
176	mddr_174479.mol2	96	72	103	-4.02	-4.02	-36.2	8.9	-46	-0.9	0	0	-6.2	-30	--
177	mddr_173298.mol2	93	17	45	-6.27	-6.27	-34.9	2.1	-45.9	-0.9	0	0	-9.9	-25	--
178	mddr_216428.mol2	200	107	43	-5.62	-5.62	-30.6	7	-45.9	-2.4	0	0	-5.7	-24.8	--
179	mddr_238096.mol2	239	4	39	-3.62	-3.62	-24.7	5.1	-45.9	-2.5	0	0	-2.3	-22.4	--
180	mddr_269245.mol2	309	3	328	-5.81	-5.81	-35.5	5	-45.8	0	0	0	-2.1	-33.4	--
181	mddr_284259.mol2	341	6	335	-4.44	-4.44	-33.7	0.7	-45.8	0	0	0	-0.6	-33.1	--

182	mddr_179143.mol2	112	99	120	-5.97	-5.97	-36.7	5.1	-45.7	-2.2	0	0	-9.1	-27.6	--
183	mddr_232313.mol2	229	206	251	-5.98	-5.98	-39.3	13.1	-45.6	-1.3	0	0	-7.5	-31.7	--
184	mddr_290266.mol2	359	133	400	-6.17	-6.17	-35.9	7.2	-45.4	-2.1	0	0	-10.9	-25.1	--
185	mddr_190815.mol2	146	122	181	-5.31	-5.31	-35.9	4.2	-45.4	-0.2	0	0	-1.2	-34.7	--
186	mddr_289074.mol2	355	6	392	-4.57	-4.57	-37	1.4	-45.2	-1.4	0	0	-14.6	-22.4	--
187	mddr_201047.mol2	165	4	387	-4.29	-4.29	-29.9	2.4	-45.2	-2.3	0	0	-7.7	-22.2	--
188	mddr_281938.mol2	336	23	251	-5.06	-5.06	-32.8	1.3	-45	0	0	0	-3.9	-29	--
189	mddr_168853.mol2	82	270	79	-5.49	-5.49	-38.1	12.2	-44.9	-4.5	0	0.2	-18.1	-20	--
190	mddr_312665.mol2	384	677	141	-4.67	-4.67	-36.1	4	-44.9	-1.2	0	0	-6.7	-29.4	--
191	mddr_191723.mol2	147	45	381	-6.08	-6.08	-37.5	3	-44.8	-3.3	0	0	-21	-16.5	--
192	mddr_278200.mol2	327	36	399	-3.78	-3.78	-33.6	3.3	-44.8	-0.9	0	0	-2.9	-30.7	--
193	mddr_190411.mol2	142	68	169	-6.01	-6.01	-36	7.8	-44.7	-0.7	0	0	-3.7	-32.3	--
194	mddr_257265.mol2	282	243	318	-4.27	-4.27	-34.4	3.1	-44.7	-1.9	0	0	-8.7	-25.7	--
195	mddr_243266.mol2	250	18	392	-6.24	-6.24	-34.3	2.6	-44.7	-0.9	0	0	-3.7	-30.6	--
196	mddr_266154.mol2	301	3	136	-6.15	-6.15	-33.8	0.8	-44.7	-2.6	0	0	-12.7	-21.1	--
197	mddr_272970.mol2	317	10	253	-6.26	-6.26	-33.5	5	-44.7	-1.1	0	0	-4.6	-28.8	--
198	mddr_168389.mol2	80	61	203	-5.4	-5.4	-32.8	8.4	-44.7	-2.4	0	0	-3.6	-29.2	--
199	mddr_190410.mol2	141	24	378	-5.37	-5.37	-31.9	4.9	-44.7	-1.9	0	0	-9.5	-22.5	--
200	mddr_312818.mol2	386	148	219	-4.49	-4.49	-31.9	10.1	-44.7	-3.6	0	0	-7.8	-24.1	--
201	mddr_149963.mol2	30	226	315	-4.06	-4.06	-31.2	7.9	-44.7	-2.5	0	0	-7.7	-23.5	--
202	mddr_210327.mol2	188	108	266	-6.13	-6.13	-33.6	8.6	-44.6	-1.1	0	0.2	-5	-28.6	--
203	mddr_151042.mol2	33	99	113	-5.26	-5.26	-30.6	3.9	-44.6	-2.2	0	0	-6.1	-24.5	--
204	mddr_147820.mol2	24	3	48	-5.84	-5.84	-34.4	0.8	-44.5	-1	0	0	-5.3	-29.1	--
205	mddr_237341.mol2	236	1	282	-5.03	-5.03	-33.6	0.8	-44.5	0	0	0	-1.9	-31.7	--
206	mddr_150600.mol2	32	219	343	-5.59	-5.59	-32.9	5.3	-44.5	-1.2	0	0	-6.5	-26.4	--
207	mddr_173131.mol2	91	3	90	-4.18	-4.18	-30.4	7.8	-44.4	-4	0	0	-12.1	-18.3	--
208	mddr_158989.mol2	48	235	230	-4.68	-4.68	-37.9	19.1	-44.3	-1.4	0	0	-5.1	-32.7	--
209	mddr_175685.mol2	103	2	228	-4.8	-4.8	-34.6	0.1	-44.3	0	0	0	-2.8	-31.7	--
210	mddr_142727.mol2	8	478	62	-6.2	-6.2	-40.2	21.5	-44.2	-0.3	0	0	-0.5	-39.8	--
211	mddr_286842.mol2	349	34	293	-4.37	-4.37	-30.7	1.7	-44.1	-0.9	0	0	-3.3	-27.4	--
212	mddr_264848.mol2	298	2	360	-3.89	-3.89	-31.6	4.2	-44	-2.6	0	0	-9.6	-21.9	--
213	mddr_289159.mol2	356	92	173	-5.51	-5.51	-30.7	7.3	-44	-1.7	0	0	-4.7	-26	--
214	mddr_209295.mol2	186	82	225	-4.5	-4.5	-29.6	4.8	-43.8	-2.1	0	0	-5.3	-24.3	--
215	mddr_230407.mol2	224	99	114	-5.19	-5.19	-35.4	4.6	-43.7	-0.1	0	0	-1.7	-33.7	--
216	mddr_175450.mol2	100	7	129	-6.3	-6.3	-34.3	7.4	-43.7	-0.7	0	0	-1.5	-32.8	--
217	mddr_227931.mol2	219	17	91	-4.74	-4.74	-31.8	2.2	-43.7	-0.9	0	0	-7.1	-24.7	--
218	mddr_090644.mol2	2	101	29	-6.24	-6.24	-29.8	8.5	-43.7	-3.4	0	0	-9.2	-20.6	--
219	mddr_291452.mol2	361	125	51	-5.33	-5.33	-28.3	2.5	-43.7	-0.5	0	0	2.9	-31.2	--
220	mddr_190421.mol2	143	17	46	-6.81	-6.81	-33.7	5.4	-43.6	-2.6	0	0	-6.4	-27.4	--
221	mddr_238120.mol2	241	30	342	-6.07	-6.07	-32.3	4.7	-43.5	-1.5	0	0.6	-6.9	-25.3	--
222	mddr_194136.mol2	151	4	344	-4.9	-4.9	-35.6	1.4	-43.4	-1.9	0	0	-10.4	-25.2	--
223	mddr_251836.mol2	271	48	296	-4.1	-4.1	-33.7	9	-43.4	-1.9	0	0	-9.1	-24.5	--
224	mddr_173772.mol2	95	157	262	-5.95	-5.95	-32.9	6.8	-43.4	-0.9	0	0	-4.7	-28.2	--
225	mddr_283214.mol2	339	427	292	-3.7	-3.7	-30.4	7.2	-43.4	-1.9	0	0	-5.5	-24.8	--
226	mddr_208194.mol2	185	68	116	-3.34	-3.34	-29.5	4.3	-43.4	-2	0	0	-6	-23.6	--
227	mddr_272060.mol2	315	16	98	-6.43	-6.43	-34.8	11.8	-43.3	-1.7	0	0	-6	-28.8	--

228	mddr_274796.mol2	320	75	358	-4.92	-4.92	-34.5	4.8	-43.3	-1.4	0	0	-8.9	-25.6	--
229	mddr_251546.mol2	270	71	56	-5.98	-5.98	-33.6	1.9	-43.3	-1.8	0	0	-7.8	-25.8	--
230	mddr_243386.mol2	251	10	320	-6.08	-6.08	-31.7	1.5	-43.3	-0.9	0	0	-2.2	-29.5	--
231	mddr_205780.mol2	176	1	132	-5.65	-5.65	-33	0.9	-43.2	-1.3	0	0	-9.4	-23.5	--
232	mddr_201980.mol2	168	589	230	-5.52	-5.52	-39.5	17.8	-43.1	-1.2	0	0	-6.2	-33.3	--
233	mddr_162676.mol2	60	52	90	-3.37	-3.37	-27.3	3.3	-43.1	-2.1	0	0	-4.7	-22.6	--
234	mddr_178877.mol2	110	1	300	-6.55	-6.55	-32.5	0.3	-43	-2.6	0	0	-10.9	-21.7	--
235	mddr_262688.mol2	295	1	314	-6.55	-6.55	-29.3	0.8	-43	-0.9	0	0	-3.6	-25.7	--
236	mddr_241801.mol2	243	2	9	-6.25	-6.25	-33	2.1	-42.8	-1.9	0	0	-6.4	-26.6	--
237	mddr_242361.mol2	244	2	376	-6.06	-6.06	-29.3	0.9	-42.8	-1.7	0	0	-5.2	-24.1	--
238	mddr_185263.mol2	130	250	3	-5.24	-5.24	-36.1	9.7	-42.7	-1	0	0	-7.2	-28.9	--
239	mddr_166310.mol2	72	49	237	-5.52	-5.52	-35	3.6	-42.7	-1.2	0	0	-8.7	-26.3	--
240	mddr_183261.mol2	122	1	169	-5.32	-5.32	-34	4.3	-42.7	-4.2	0	0.2	-21.1	-12.9	--
241	mddr_309947.mol2	378	6	283	-4.16	-4.16	-32.3	5.2	-42.6	-1.8	0	0	-5.3	-27	--
242	mddr_166165.mol2	71	32	70	-5.1	-5.1	-32.2	0.9	-42.5	-1.1	0	0	-5.3	-26.8	--
243	mddr_203006.mol2	173	2	155	-5.59	-5.59	-31.9	0.2	-42.5	-0.9	0	0	-4.2	-27.7	--
244	mddr_298771.mol2	374	4	80	-5.71	-5.71	-28.9	0.5	-42.1	-0.9	0	0	-3.6	-25.2	--
245	mddr_142739.mol2	9	194	261	-4.01	-4.01	-31.4	10	-42	-2.3	0	0	-7.2	-24.2	--
246	mddr_149589.mol2	29	129	150	-5.53	-5.53	-36.2	12.1	-41.8	0	0	0	-3.1	-33.1	--
247	mddr_179347.mol2	113	18	59	-4.32	-4.32	-31.3	9.8	-41.8	-1.6	0	0.1	-2.5	-28.8	--
248	mddr_142392.mol2	7	348	317	-5.78	-5.78	-37	13.5	-41.7	-1	0	0	-3.1	-33.8	--
249	mddr_224411.mol2	211	62	113	-6.71	-6.71	-36	12.4	-41.7	-3	0	0	-13.2	-22.8	--
250	mddr_293959.mol2	370	261	79	-5.28	-5.28	-33.9	9.5	-41.7	-2.4	0	0	-6.7	-27.2	--
251	mddr_218167.mol2	203	119	26	-7.02	-7.02	-32.3	1.5	-41.7	-2.6	0	0	-10	-22.3	--
252	mddr_211321.mol2	190	49	54	-3.45	-3.45	-33	9.8	-41.5	-0.1	0	0	-4.6	-28.4	--
253	mddr_183364.mol2	123	152	390	-4.84	-4.84	-31.3	4.2	-41.5	-0.9	0	0	-5	-26.3	--
254	mddr_188228.mol2	135	8	203	-3.64	-3.64	-34.3	13	-41.2	-0.7	0	0	-6.4	-27.9	--
255	mddr_154877.mol2	38	21	259	-4.1	-4.1	-30.3	4.3	-41.1	-1.5	0	0	-7.1	-23.2	--
256	mddr_242623.mol2	246	2	356	-5.84	-5.84	-32.2	4.4	-41	0	0	0	-2.4	-29.9	--
257	mddr_217550.mol2	201	539	37	-3.9	-3.9	-33.5	6.2	-40.9	0	0	0	-5.5	-28	--
258	mddr_183132.mol2	120	296	171	-4.97	-4.97	-36.5	10.2	-40.8	-0.2	0	0	-4	-32.5	--
259	mddr_177300.mol2	107	4	254	-5.15	-5.15	-32.6	0.3	-40.8	-1.3	0	0	-7.8	-24.8	--
260	mddr_292222.mol2	364	19	44	-5.06	-5.06	-31.7	1.2	-40.8	-0.5	0	0	-5.1	-26.7	--
261	mddr_170243.mol2	86	13	246	-4.91	-4.91	-32.1	3.6	-40.6	0	0	0	1.1	-33.2	--
262	mddr_259557.mol2	286	10	300	-6.2	-6.2	-28.2	2.2	-40.4	0	0	0	0.6	-28.7	--
263	mddr_169436.mol2	83	5	378	-5.61	-5.61	-34.2	7.7	-40.3	-0.4	0	0	-6	-28.2	--
264	mddr_261447.mol2	292	90	103	-5.94	-5.94	-33.2	6.3	-40.3	-0.9	0	0	-3.1	-30.1	--
265	mddr_249561.mol2	265	23	267	-5.85	-5.85	-31.3	4.5	-40.2	-1.3	0	0	-7.1	-24.2	--
266	mddr_161818.mol2	58	48	195	-6.1	-6.1	-31.2	4.2	-40.2	-0.9	0	0	-2.3	-28.9	--
267	mddr_263095.mol2	296	37	199	-5.91	-5.91	-31.6	4	-40.1	-0.7	0	0	-2.3	-29.3	--
268	mddr_149978.mol2	31	86	214	-3.66	-3.66	-30.8	5.5	-40.1	-1	0	0	-5.8	-25	--
269	mddr_312515.mol2	383	150	49	-4.45	-4.45	-32.5	0.5	-40	0	0	0	-2	-30.5	--
270	mddr_226584.mol2	216	3	229	-5.2	-5.2	-31	1.3	-40	-1	0	0	-3.1	-27.9	--
271	mddr_182973.mol2	119	3	22	-3.1	-3.1	-30.3	2.9	-40	-1.6	0	0	-9.6	-20.7	--
272	mddr_243774.mol2	252	241	75	-5.82	-5.82	-37.6	15.8	-39.9	-1.8	0	0	-6.7	-30.9	--
273	mddr_172689.mol2	89	877	260	-3.24	-3.24	-36.5	15.9	-39.9	-1	0	0	-5	-31.5	--

274	mddr_214523.mol2	197	43	135	-7.1	-7.1	-32.1	5.1	-39.9	-2.8	0	0	-7.7	-24.4	--
275	mddr_277522.mol2	325	1	152	-6.39	-6.39	-30.6	0.4	-39.9	-2.7	0	0	-8.8	-21.7	--
276	mddr_274788.mol2	319	108	326	-5.15	-5.15	-34.8	10.5	-39.8	-0.9	0	0	-4.3	-30.5	--
277	mddr_215432.mol2	198	58	296	-5.6	-5.6	-31.7	7.2	-39.7	-1.8	0	0	-6.2	-25.5	--
278	mddr_147283.mol2	22	4	53	-4.09	-4.09	-29.9	1	-39.7	-0.9	0	0	-3.8	-26.1	--
279	mddr_207168.mol2	181	38	369	-5.49	-5.49	-30.7	3.7	-39.6	-0.3	0	0	-0.1	-30.6	--
280	mddr_260662.mol2	288	27	98	-5.17	-5.17	-31.1	5.2	-39.5	-1	0	0	-5.6	-25.6	--
281	mddr_184338.mol2	127	171	26	-5.17	-5.17	-35.3	12.4	-39.4	-1.4	0	0.1	-10.7	-24.6	--
282	mddr_249876.mol2	266	266	71	-5.4	-5.4	-31.9	5	-39.4	-0.4	0	0	-3.4	-28.5	--
283	mddr_163171.mol2	64	33	254	-2.7	-2.7	-31.4	2.8	-39.4	0	0	0	-4.4	-27	--
284	mddr_186123.mol2	133	5	190	-3.74	-3.74	-27.7	0.3	-39.4	-1.9	0	0	-8.8	-18.9	--
285	mddr_175729.mol2	104	1	306	-5.01	-5.01	-31	0	-39.2	-0.3	0	0	-8.1	-22.9	--
286	mddr_287267.mol2	351	32	219	-5.27	-5.27	-31.6	3.2	-39.1	0	0	0	-2.4	-29.3	--
287	mddr_145195.mol2	17	20	110	-5.87	-5.87	-31	2.6	-39.1	-1.4	0	0	-4.5	-26.5	--
288	mddr_165553.mol2	69	1	38	-6.18	-6.18	-24.7	0	-39.1	-1.3	0	0.1	-5.3	-19.4	--
289	mddr_228579.mol2	221	68	53	-3.24	-3.24	-34.2	4.9	-39	-1.9	0	0	-17.3	-16.9	--
290	mddr_260916.mol2	290	15	111	-5.71	-5.71	-32.7	8.4	-39	-0.9	0	0	-2.2	-30.5	--
291	mddr_207819.mol2	184	1	349	-5.38	-5.38	-30	0	-39	-0.9	0	0	-7.4	-22.5	--
292	mddr_265416.mol2	300	4	124	-6.16	-6.16	-28.6	0.6	-38.9	-2.4	0	0	-6.8	-21.7	--
293	mddr_304318.mol2	376	219	139	-4.39	-4.39	-33.4	9.4	-38.7	-0.7	0	0	-4	-29.4	--
294	mddr_246561.mol2	258	2	385	-5.52	-5.52	-29.4	6.7	-38.7	-1.2	0	0	-8.2	-21.2	--
295	mddr_143720.mol2	14	60	313	-2.35	-2.35	-23.6	5.2	-38.5	-2.4	0	0.2	-9	-14.6	--
296	mddr_158542.mol2	46	320	41	-3.62	-3.62	-29.5	10	-38.3	-1.8	0	0	-6.6	-22.8	--
297	mddr_189289.mol2	138	128	172	-6.07	-6.07	-31.5	7.8	-38.1	-0.9	0	0	-5.9	-25.6	--
298	mddr_207785.mol2	183	23	33	-4.07	-4.07	-30.2	3.2	-38	-0.9	0	0	-1.6	-28.6	--
299	mddr_246912.mol2	259	89	219	-6.31	-6.31	-29.5	6	-37.9	-0.9	0	0	-4.5	-25	--
300	mddr_292162.mol2	363	4	283	-5.93	-5.93	-28.4	0.2	-37.8	-1.7	0	0	-3.8	-24.6	--
301	mddr_175423.mol2	99	2	205	-5.28	-5.28	-28.9	-0.1	-37.7	-0.9	0	0	-4.6	-24.3	--
302	mddr_166690.mol2	73	8	66	-4.71	-4.71	-32	1.7	-37.6	-0.7	0	0	-6.6	-25.5	--
303	mddr_189321.mol2	139	238	295	-5.33	-5.33	-31	6.8	-37.5	-1.7	0	0	-4.6	-26.5	--
304	mddr_167939.mol2	78	5	111	-5.45	-5.45	-28.2	0.2	-37.4	-0.9	0	0	-2.5	-25.7	--
305	mddr_152072.mol2	34	4	251	-5.84	-5.84	-29.8	3.3	-37.2	-0.9	0	0	-3	-26.8	--
306	mddr_283161.mol2	338	9	260	-5.23	-5.23	-29.7	3.2	-37.2	-1.9	0	0	-7.8	-21.9	--
307	mddr_160829.mol2	51	9	56	-4.13	-4.13	-28.4	2.4	-37.2	-0.9	0	0	-4.2	-24.2	--
308	mddr_153144.mol2	36	1	9	-3.25	-3.25	-28	0.4	-37.2	-0.6	0	0.5	-7.1	-20.9	--
309	mddr_169902.mol2	84	2	175	-5.81	-5.81	-29	0.2	-37.1	-0.1	0	0	-3.6	-25.3	--
310	mddr_231376.mol2	226	2	384	-6.25	-6.25	-27.8	1.1	-36.8	-1.8	0	0.1	-7.1	-20.7	--
311	mddr_164868.mol2	66	114	288	-5.59	-5.59	-25.6	9.4	-36.6	-3.8	0	0	-14.4	-11.2	--
312	mddr_147999.mol2	25	13	302	-5.22	-5.22	-31.4	7.4	-36.5	-0.7	0	0	-6.3	-25.1	--
313	mddr_252753.mol2	275	245	318	-5.7	-5.7	-29.7	4.1	-36.4	-1.9	0	0	-4.6	-25.1	--
314	mddr_292439.mol2	366	317	78	-4.58	-4.58	-30	5.1	-36.3	-0.7	0	0	-3.4	-26.6	--
315	mddr_144291.mol2	15	4	186	-5.34	-5.34	-28.5	0.9	-36.2	-0.9	0	0	-3.7	-24.7	--
316	mddr_298620.mol2	373	1	243	-4.1	-4.1	-27	1.1	-36	-1.3	0	0	-1.7	-25.3	--
317	mddr_160143.mol2	49	2	2	-5.09	-5.09	-29.6	3.7	-35.9	0	0	0	-2	-27.7	--
318	mddr_277221.mol2	324	13	348	-5.83	-5.83	-28.1	3.6	-35.9	-0.9	0	0	-1.7	-26.4	--
319	mddr_233702.mol2	230	44	253	-5.11	-5.11	-29.2	4	-35.8	0	0	0	-2.1	-27.1	--

320	mddr_168226.mol2	79	1	12	-5.26	-5.26	-28.1	0.4	-35.8	-0.9	0	0	-4.7	-23.4	--
321	mddr_281236.mol2	333	1	20	-5.07	-5.07	-27.9	0	-35.8	0	0	0	-2.4	-25.6	--
322	mddr_286149.mol2	345	1	4	-5.83	-5.83	-26.9	0	-35.7	-0.9	0	0	-3.4	-23.5	--
323	mddr_278955.mol2	328	2	267	-5.4	-5.4	-28.3	0.3	-35.6	-0.7	0	0	-3.1	-25.2	--
324	mddr_202154.mol2	170	3	214	-5.08	-5.08	-27.6	1.7	-35.4	0	0	0	-3.5	-24.2	--
325	mddr_145051.mol2	16	15	282	-5.57	-5.57	-26.9	0.5	-35.2	-0.7	0	0	-1.3	-25.6	--
326	mddr_266524.mol2	302	354	354	-5.17	-5.17	-29	14.7	-35	-1.8	0	0.1	-9.3	-19.7	--
327	mddr_221678.mol2	206	1	318	-5.02	-5.02	-27.9	0	-35	-0.2	0	0	-4	-23.9	--
328	mddr_180849.mol2	117	1	165	-4.88	-4.88	-27.4	0	-34.5	0	0	0	0.5	-27.9	--
329	mddr_141858.mol2	6	1	55	-6.45	-6.45	-24.6	0	-34.5	-0.1	0	0.1	-0.4	-24.2	--
330	mddr_259238.mol2	285	160	136	-4.89	-4.89	-29.5	4.4	-34.4	-2.3	0	0	-6.1	-23.3	--
331	mddr_198968.mol2	163	1	150	-5.31	-5.31	-26.6	0.5	-34.4	-1.5	0	0	-5.9	-20.7	--
332	mddr_155503.mol2	40	3	103	-4.63	-4.63	-27.7	0.3	-34.3	-0.6	0	0	-5.9	-21.8	--
333	mddr_280356.mol2	330	3	198	-5.63	-5.63	-27.4	5.1	-34.3	-0.8	0	0	-4.8	-22.6	--
334	mddr_175398.mol2	98	77	357	-2.79	-2.79	-24.5	1.9	-34.3	-0.8	0	0	-1.5	-23	--
335	mddr_155583.mol2	41	3	366	-5.48	-5.48	-26.7	1.2	-34.2	-0.9	0	0.1	-2.9	-23.8	--
336	mddr_270694.mol2	313	13	317	-5.33	-5.33	-27.7	3	-34	-1	0	0	-1.6	-26.2	--
337	mddr_312768.mol2	385	4	374	-5	-5	-27.2	1.5	-34	0	0	0.1	-3.4	-23.7	--
338	mddr_165599.mol2	70	181	222	-4.19	-4.19	-31	7.4	-33.8	-1.1	0	0	-5.2	-25.8	--
339	1rt1_MKC	399	20	395	-5.64	-5.64	-29	4.6	-33.7	-1.7	0	0	-5.4	-23.6	--
340	mddr_142917.mol2	10	2	238	-4.77	-4.77	-26.8	0	-33.7	-1.8	0	0	-9.2	-17.6	--
341	mddr_242859.mol2	249	229	380	-5.04	-5.04	-27.9	4.3	-33.3	-2.2	0	0	-10.5	-17.4	--
342	mddr_160747.mol2	50	406	74	-3.71	-3.71	-24	6	-33.3	-2.5	0	0	-5.4	-18.6	--
343	mddr_165078.mol2	67	4	183	-5	-5	-24.7	2.6	-33.2	-1.9	0	0	-5.1	-19.7	--
344	mddr_254806.mol2	280	96	306	-4.49	-4.49	-28.2	2.8	-33.1	-1.2	0	0	-5.5	-22.7	--
345	mddr_263579.mol2	297	3	103	-4.78	-4.78	-26.3	0.6	-33.1	0	0	0.1	-0.4	-25.9	--
346	mddr_171646.mol2	88	68	98	-5.1	-5.1	-27.6	3.7	-32.9	-2.7	0	0	-10.9	-16.8	--
347	mddr_202244.mol2	171	6	318	-4.84	-4.84	-26.1	0.7	-32.9	-1	0	0	-4.7	-21.4	--
348	mddr_156101.mol2	42	1	134	-4.52	-4.52	-22.8	0.8	-32.7	-0.1	0	0	-2.2	-20.6	--
349	mddr_161390.mol2	55	8	184	-5.31	-5.31	-27.3	4.8	-32.5	-0.9	0	0	-3.6	-23.7	--
350	mddr_281902.mol2	335	58	309	-3.66	-3.66	-24.8	11.7	-32.5	-2.3	0	0	-6	-18.7	--
351	mddr_139667.mol2	5	1	118	-5.35	-5.35	-25.7	2.4	-32.4	-0.5	0	0	-1.3	-24.4	--
352	mddr_182368.mol2	118	7	122	-5.27	-5.27	-25.1	0.5	-32.1	-0.9	0	0	-5.2	-19.8	--
353	mddr_215672.mol2	199	114	369	-3.23	-3.23	-27.8	12.2	-32	0	0	0	-2	-25.8	--
354	mddr_286353.mol2	346	2	109	-5.01	-5.01	-25.3	0.3	-31.6	-0.9	0	0	-4.4	-20.9	--
355	mddr_285351.mol2	343	2	164	-5.27	-5.27	-25.9	4	-31.5	-0.9	0	0	-2.6	-23.3	--
356	mddr_158838.mol2	47	4	342	-3.15	-3.15	-23.7	3.1	-31.5	-0.9	0	0	-4.1	-19.7	--
357	mddr_185250.mol2	129	1032	275	-4.55	-4.55	-30.1	12.5	-30.9	0	0	0	-1.5	-28.6	--
358	mddr_222897.mol2	209	167	243	-5.06	-5.06	-27.3	6.7	-30.4	0	0	0	-2.3	-25	--
359	mddr_160908.mol2	52	2	346	-4.51	-4.51	-25.8	4	-30	-0.7	0	0	-5.1	-20.7	--
360	mddr_266782.mol2	303	163	264	-4.4	-4.4	-24.2	1.4	-29.8	0	0	0	0.2	-24.5	--
361	mddr_206230.mol2	178	12	289	-2.81	-2.81	-22.5	2.1	-29.6	-0.3	0	0	-0.8	-21.7	--
362	mddr_183221.mol2	121	5	160	-5.13	-5.13	-25.7	8	-29.4	-1.3	0	0	-5.2	-20.5	--
363	mddr_177820.mol2	109	3	102	-6.35	-6.35	-21.6	2.3	-29	0	0	0	0.3	-21.9	--
364	mddr_173648.mol2	94	1	25	-4.75	-4.75	-22.4	0.7	-28.7	-0.7	0	0	-2.2	-20.2	--
365	mddr_242640.mol2	247	63	294	-4.14	-4.14	-25.8	7.9	-28.6	-0.2	0	0	-2	-23.8	--

366	mddr_292896.mol2	368	25	376	-2.7	-2.7	-19.8	2.2	-27.1	-0.7	0	0	-1	-18.8	--
367	mddr_196827.mol2	157	11	32	-5.15	-5.15	-23.6	7.6	-26.2	0	0	0	2.1	-25.7	--
368	mddr_290476.mol2	360	9	230	-5.35	-5.35	-21.7	3.3	-25.9	-1.7	0	0	-5.8	-15.9	--
369	mddr_317792.mol2	393	20	259	-4.09	-4.09	-23.3	8	-24.9	-1.9	0	0	-10.5	-12.8	--
370	mddr_223269.mol2	210	72	398	-2.16	-2.16	-17.8	1.9	-23.5	-0.6	0	0	0	-17.7	--
371	mddr_192773.mol2	149	759	361	-2.7	-2.7	-27.7	14.6	-16.6	-0.9	0	0	-7.6	-20.1	--
372	mddr_090235.mol2	1	3	315	-4.15	-4.15	-13.3	0.3	-16	0	0	0	0.2	-13.5	--
373	mddr_201755.mol2	167	50	99	-3.25	-3.25	-16.1	16	-10.7	-0.1	0	0	0.9	-17	--
374	mddr_177582.mol2	108	63	106	-1.54	-1.54	-2.6	15.8	-3.2	-1.8	0	0.3	-3.8	1.2	--
375	mddr_123168.mol2	3	101	77	-3.12	-3.12	-14.3	63.2	13.3	-0.9	0	0.3	-1.1	-13.2	--

