



UNIVERSITAS INDONESIA

**PERANCANGAN PEPTIDA SIKLIS SEBAGAI INHIBITOR
ENZIM NS5 METILTRANSFERASE VIRUS DENGUE**

SKRIPSI

AHMAD ARDILLA ZUBAIDI

0706262975

**FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
PROGRAM STUDI KIMIA
DEPOK
JANUARI 2012**



UNIVERSITAS INDONESIA

**PERANCANGAN PEPTIDA SIKLIS SEBAGAI INHIBITOR
ENZIM NS5 METILTRANSFERASE VIRUS DENGUE**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar sarjana

AHMAD ARDILLA ZUBAIDI

0706262975

**FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
PROGRAM STUDI KIMIA
DEPOK
JANUARI 2012**

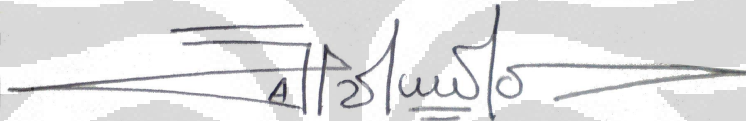
HALAMAN PERNYATAAN ORISINALITAS

Skripsi ini adalah hasil karya saya sendiri,
dan semua sumber baik yang dikutip maupun dirujuk
telah saya nyatakan dengan benar.

Nama : Ahmad Ardilla Zubaidi

NPM : 0706262975

Tanda Tangan :



Tanggal : 9 Januari 2012

HALAMAN PENGESAHAN

Skripsi ini diajukan oleh :
Nama : Ahmad Ardilla Zubaidi
NPM : 0706262975
Program Studi : Kimia
Judul Skripsi : Perancangan Peptida Siklis Sebagai Inhibitor Enzim NS5
Metiltransferase Virus Dengue

Telah berhasil dipertahankan di hadapan Dewan Penguji dan diterima sebagai bagian persyaratan yang diperlukan untuk memperoleh gelar Sarjana Sains pada Program Studi Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Indonesia

DEWAN PENGUJI

Pembimbing : Prof. Dr. Usman Sumo FT

Penguji : Dr. Herry Cahyana

Penguji : Dr. Endang Saepudin

Penguji : Prof. Dr. Maksum Radji

Ditetapkan di : Depok
Tanggal : 9 Januari 2012

KATA PENGANTAR

Alhamdulillah, segala puji hanya milik Allah Rabb semesta alam yang telah memberikan kekuatan dan rahmat-Nya sehingga penelitian dan penulisan skripsi ini dapat terselesaikan. Skripsi ini disusun sebagai bagian dari syarat untuk mencapai gelar Sarjana Sains pada jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Indonesia.

Keberhasilan penulis menyelesaikan penelitian dan penulisan skripsi ini tak lepas dari bantuan berbagai pihak. Hambatan dan rintangan yang dihadapi tidak lain adalah proses pembelajaran yang merupakan pengalaman berharga bagi penulis.

Dari lubuk hati yang terdalam, penulis ingin mengucapkan terima kasih kepada setiap pihak yang telah membantu proses penelitian dan penulisan skripsi ini. Setiap bantuan dan dukungan serta doa yang diberikan, semoga Allah membalas dengan kebaikan yang berlimpah. Terima kasih terutama kepada :

1. Prof. Usman Sumo Friend Tambunan selaku pembimbing penelitian yang telah memberikan banyak nasihat dan pelajaran berharga yang sangat bermanfaat bagi penulis, serta rasa kekeluargaan yang ditanamkan selama berada pada ruangan penelitian.
2. Ayah tercinta atas segala contoh baik yang ditunjukkan, Ibu tersayang yang telah lebih dulu mendapatkan gelar sarjananya dan menjadi motivasi bagi penulis, juga Nabila dengan candanya yang cerdas.
3. Dr. Ridla Bakri selaku ketua Departemen Kimia FMIPA UI, atas nasihat-nasihatnya.
4. Dr. Ivandini Tribidasari Anggraningrum selaku pembimbing akademis dengan diskusi, nasihat dan pengarahan yang telah diberikan.
5. Prof. Sumi Hudyono PWS selaku Ketua KBI Biokimia atas ilmu yang diberikan, Ir. Widyastuti Samadi selaku Koordinator Pendidikan atas diskusi-diskusinya yang seru, Dra. Tresye Utari selaku Koordinator Penelitian serta seluruh dosen di Departemen Kimia FMIPA UI atas pengajaran dan diskusi yang sangat menyenangkan.
6. Kak Firman, Kak Hanum dan Adi atas waktu dan perjuangan yang telah dilewati bersama, berbagi canda dan ketegangan mahasiswa tingkat akhir. Pak Idrus, Kak Arli (Johnkecops) atas masukan yang diberikan, Kak Randy dengan diskusi-diskusi ilmu bioinformatik yang seru, juga Kak William Chua atas diskusi kita yang sering berakhir dengan debat.

7. Kimia angkatan 2007, Prita Belinda, Tyas, Iki, Johannes atas dukungan dan masukannya. Adit, Wahyu, Rafi, Ari, Tyo, Yomi, Widi, Rifan, Muchtar, Tegar, Widya, Sabil, Fitriana, Rani, Savitri, Sisil, Ikor, Nisa, Mita atas kebersamaan, keceriaan dan cerita seru angkatan kita yang tak lekang dimakan waktu. Kakak dan adik rekan-rekan kimia angkatan 2006, 2008, 2009, 2010 dan 2011 yang memberikan kesan yang mendalam selama penulis menjalani kehidupan sebagai mahasiswa.
8. Keluarga HMD Kimia 2009, Evi yang rajin, Ika N yang cerewet, Zetry yang galak, Atur yang suka ngelawak tanpa sebab yang telah meminjamkan laptopnya untuk penulis, Ari, Awe, Riri, Niar, Gisha dan seluruh pengurus lainnya atas kontribusi besarnya. Keluarga MII dan Bem MIPA serta Ikahimki, Yosi dari UNPAK, Arman dan Rika UIN, Wangsa dan Nida UNPAD, Fazri ITB, Arya dan Abdul UPI atas semangat dan keceriaan yang diberikan.
9. Seluruh karyawan Departemen Kimia, Pak Tris PerpusKim, Pak Sukiri, Pak Hedi, Pak Mardji dan Pak Hadi, juga Pak Yaya fotokopi.
10. Dan semua pihak yang tak bisa saya sebutkan satu persatu atas segala kontribusi, kebaikan dan pelajaran yang telah diberikan sehingga membentuk kematangan diri penulis.

Semoga Allah SWT membalas budi dan jasa semua pihak yang telah membantu terwujudnya penulisan Tugas Akhir ini. Penulis menyadari masih banyak kekurangan sehubungan dengan terbatasnya waktu, kemampuan, dan pengetahuan yang penulis miliki. Oleh karena itu, penulis mengharapkan adanya saran dan kritik yang bersifat membangun demi perbaikan di masa yang akan datang.

Akhir kata besar harapan semoga penulisan ini bermanfaat bagi banyak orang.

Jakarta, Januari 2012

Penulis

**HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI
TUGAS AKHIR UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS**

Sebagai sivitas akademik Universitas Indonesia, saya yang bertanda tangan dibawah ini :

Nama : Ahmad Ardilla Zubaidi
NPM : 0706262975
Departemen : Kimia
Fakultas : Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Jenis Karya : Skripsi

demi pengembangan ilmu pengetahuan, menyetujui untuk memberikan kepada Universitas Indonesia Hak Bebas Royalti Noneksklusif (Non-exclusive Royalty-Free Right) atas karya ilmiah saya yang berjudul :

PERANCANGAN PEPTIDA SIKLIS SEBAGAI INHIBITOR ENZIM NS5 METILTRANSFERASE VIRUS DENGUE

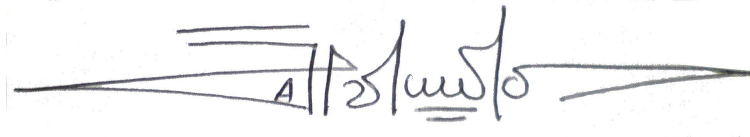
beserta perangkat yang ada (jika diperlukan). Dengan Hak Bebas Royalti Noneksklusif ini Universitas Indonesia berhak menyimpan, mengalihmedia/formatkan, mengelola dalam bentuk pangkalan data (database), merawat, dan memublikasikan tugas akhir saya selama tetap mencantumkan nama saya sebagai penulis/pencipta dan sebagai pemilik Hak Cipta.

Demikian Pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya.

Dibuat di : Depok

Pada Tanggal : 9 Januari 2012

Yang menyatakan



(Ahmad Ardilla Zubaidi)

ABSTRAK

Nama : Ahmad Ardilla Zubaidi
Program Studi : Kimia
Judul : Perancangan Peptida Siklis Sebagai Inhibitor Enzim NS5
Metiltransferase Virus Dengue

Penyakit demam berdarah merupakan ancaman serius bagi permasalahan kesehatan dunia. Sekitar 100 negara merupakan wilayah endemik bagi demam berdarah dengue dan sekitar 2,5 milyar penduduk dunia memiliki resiko terjangkit penyakit ini. Hingga saat ini masih belum ada pengobatan yang efektif untuk penyakit ini. Pada penelitian ini dilakukan perancangan ligan peptida siklis sebagai inhibitor enzim NS5 metiltransferase virus dengue secara *in silico*. Dilakukan penyejajaran terhadap sekuen NS5 metiltransferase yang terdapat pada NCBI dan diperoleh struktur tiga dimensi enzim dari Protein Data Bank dengan kode 2P41. Perancangan ligan menghasilkan sebanyak 1635 ligan peptida siklis untuk target sisi ikatan SAM dan 736 ligan peptida siklis untuk target sisi ikatan RNA-cap. *Docking* oleh ligan dan standar untuk masing-masing sisi ikatan dilakukan terhadap enzim NS5 metiltransferase. Didapatkan sebanyak delapan ligan terbaik dengan empat ligan untuk masing-masing target sisi ikatan SAM dan RNA-cap. Delapan ligan ini memiliki afinitas ikatan dan potensi inhibisi yang lebih baik dibandingkan ligan standar. Berdasarkan prediksi toksisitas dan *drug scan*, kedelapan ligan peptida siklis memiliki sifat farmakologi yang lebih baik daripada ligan standar.

Kata Kunci : Dengue, NS5 Metiltransferase, *Molecular Docking*
xiv+153 halaman: 19 gambar; 8 tabel
Daftar Pustaka : 60 (1990-2011)

ABSTRACT

Name : Ahmad Ardilla Zubaidi
Study Program : Chemistry
Topic : Designing Cyclic Peptide Inhibitor of Enzyme NS5
Methyltransferase Dengue Virus

Dengue is a dangerous disease facing the world. About 100 countries are endemic for dengue fever and about 2.5 billion people are at risk of contracting this disease. To date, there is currently no effective treatment for this disease. This study conducted designing of cyclic peptide ligands as enzyme inhibitors of dengue virus NS5 methyltransferase by *in silico*. Multiple sequence alignment is performed on the NS5 methyltransferase collected from NCBI and three dimensional structure of the enzyme obtained from the Protein Data Bank with the code 2P41. The design produced 1635 cyclic peptide ligands of SAM binding site and 736 ligands of RNA-cap binding site. Docking by the ligand and standards for each binding site performed to the NS5 methyltransferase enzyme. It is obtained eight best ligands, four ligands for each binding site of SAM and RNA-cap. All of eight ligands have a better binding affinity and inhibitory potency. Based on prediction of toxicity and drug scans, eight cyclic peptide ligands have better pharmacological properties than standard ligands.

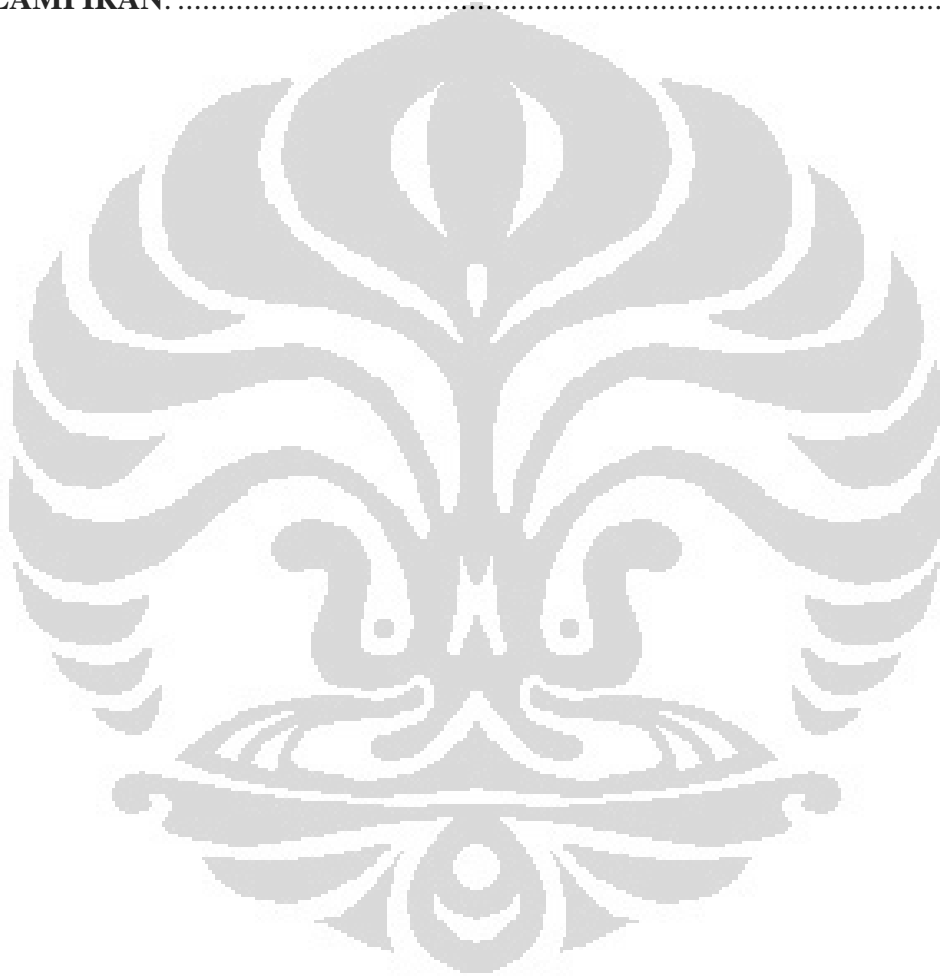
Keyword : Dengue, NS5 Methyltransferase, Molecular Docking
xiv+153 pages: 19 pictures; 8 tables
Bibliography : 60 (1990-2011)

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PERNYATAAN ORISINALITAS	ii
LEMBAR PENGESAHAN.....	iii
KATA PENGANTAR	iv
LEMBAR PERSETUJUAN PUBLIKASI KARYA ILMIAH	vi
ABSTRAK	vii
DAFTAR ISI	ix
DAFTAR GAMBAR	xii
DAFTAR TABEL	xiii
DAFTAR LAMPIRAN.....	xiv
1. PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Tujuan Penelitian	3
2. TINJAUAN PUSTAKA	4
2.1 Demam Berdarah	4
2.2 Virus Dengue	4
2.2.1 Pemetaan Genom Virus	5
2.2.2 Replikasi Virus Dengue	7
2.3 Protein NS5	8
2.3.1 Enzim NS5 Metiltransferase	9
2.4 <i>Drug Discovery & Drug Design</i>	10
2.4.1 <i>Drug Discovery</i>	10
2.4.2 <i>Drug Design</i>	10
2.5 Peptida Sebagai Drug	11
2.6 Bioinformatika	12
2.6.1 Definisi	12
2.6.2 <i>Database</i>	12
2.6.3 <i>Multiple Sequence Alignment</i>	13
2.6.4 Protein Data Bank	13
2.6.5 <i>Molecular Modelling</i>	14
2.6.6 <i>Molecular Docking</i>	14
2.7 Prediksi Toksisitas Secara <i>In Silico</i>	15

3. METODE PENELITIAN	16
3.1 Preparasi Enzim NS5 Metiltransferase Virus Dengue	16
3.1.1. Pencarian Sekuen Enzim NS5 Metiltransferase Virus	16
3.1.2 <i>Multiple Sequence Alignment</i>	16
3.1.3 Pencarian Data PDB Struktur 3D Enzim NS5 Metiltransferase.....	16
3.1.4 Optimasi Geometri dan Minimasi Energi Enzim NS5 Metiltransferase	16
3.2 Preparasi Peptida Siklis	17
3.2.1 Perancangan Struktur 3D Ligan Peptida Siklis.....	17
3.2.2 Optimasi Geometri dan Minimasi Energi Ligan Peptida Siklis	17
3.3 <i>Docking</i> antara Ligan Dengan Enzim NS Metiltransferase.....	17
3.4 Analisis Hasil <i>Docking</i>	17
3.4.1 Energi Ikatan dan Konstanta Inhibisi	17
3.4.2 Ikatan Hidrogen	18
3.4.3 Kontak Residu.....	18
3.5 Prediksi Toksisitas.....	18
4. HASIL DAN PEMBAHASAN.....	19
4.1 Preparasi Enzim Metiltransferase	19
4.1.1 Pencarian Sekuen Enzim NS5 Metiltransferase	19
4.1.2 <i>Multiple Sequence Alignment</i>	19
4.1.3 Pencarian Data PDB Struktur 3D Enzim NS5 Metiltransferase	19
4.1.4 Visualisasi Sisi Ikatan Enzim NS5 Metiltransferase.....	20
4.1.5 Optimasi Geometri dan Minimisasi Energi Enzim NS5 Metiltransferase.....	22
4.2 Preparasi Ligan Peptida Siklis	23
4.2.1 Pemilihan Asam Amino Ligan Peptida Siklis Sisi Ikatan SAM.....	23
4.2.2 Pemilihan Asam Amino Ligan Peptida Siklis Sisi Ikatan RNA- <i>cap</i> ..	23
4.2.3 Perancangan Struktur 3D Ligan Peptida Siklis.....	23
4.2.4 Optimasi Geometri dan Minimisasi Energi Ligan Peptida Siklis ...	24
4.3 <i>Docking</i> antara Ligan Peptida Siklis Dengan Enzim NS Metiltransferase ..	25
4.4 Analisis Hasil <i>Docking</i>	26
4.4.1 Energi Bebas Ikatan ($\Delta G_{binding}$) dan Konstanta Inhibisi	28
4.4.2 Ikatan Hidrogen dan Kontak Residu	30
4.5 Prediksi Toksisitas.....	40

5. KESIMPULAN DAN SARAN	44
5.1 Kesimpulan	44
5.2 Saran.....	44
 DAFTAR REFERENSI	 45
 LAMPIRAN	 52

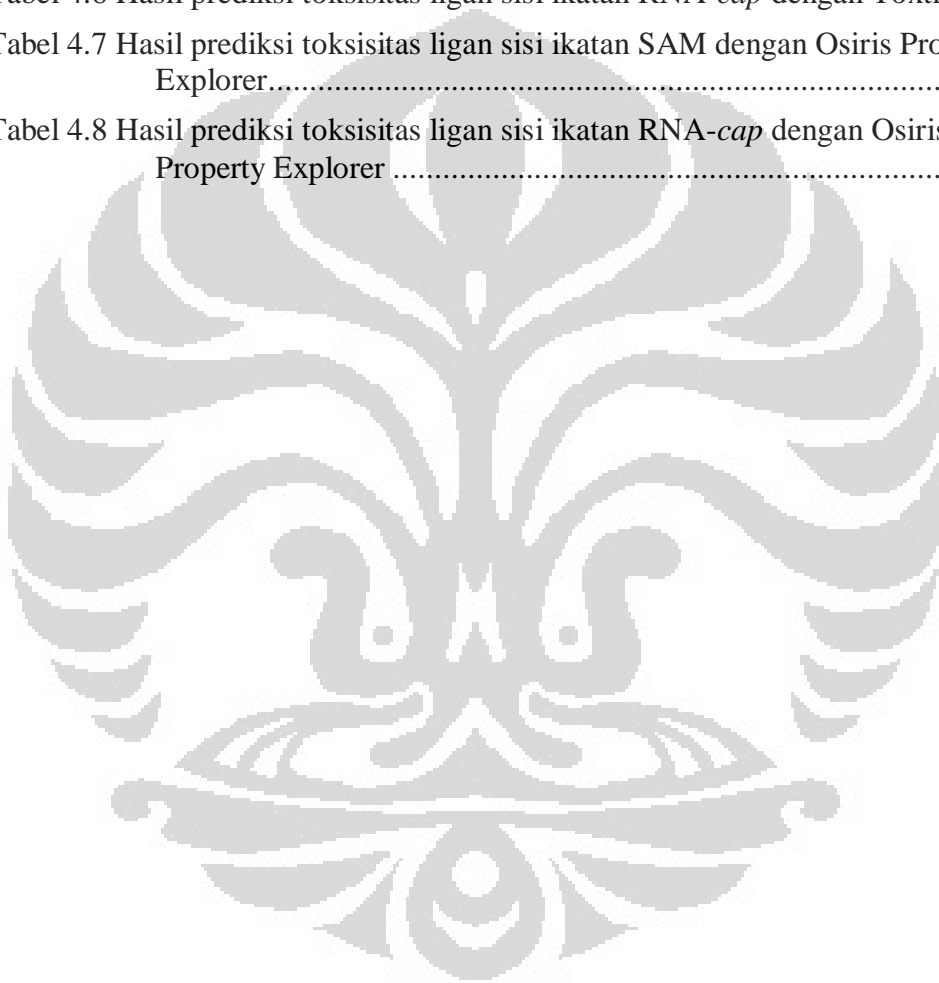


DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Partikel virus dengue	5
Gambar 2.2 Pemetaan genom virus dengue	6
Gambar 2.3 Replikasi virus dengue	8
Gambar 2.4 Proses transfer gugus metil oleh enzim NS5 metiltransferase	9
Gambar 2.5 Tahapan <i>drug development</i>	10
Gambar 4.1 Struktur kristal tiga dimensi NS5 metiltransferase.....	20
Gambar 4.2 Visualisasi sisi ikatan enzim NS5 metiltransferase	21
Gambar 4.3 Susunan rancangan peptida siklis	24
Gambar 4.4 Visualisasi interaksi ligan TWY dengan sisi ikatan SAM.....	33
Gambar 4.5 Visualisasi interaksi ligan YWH dengan sisi ikatan SAM	33
Gambar 4.6 Visualisasi interaksi ligan YDH dengan sisi ikatan SAM	34
Gambar 4.7 Visualisasi interaksi ligan TRY dengan sisi ikatan SAM	34
Gambar 4.8 Visualisasi interaksi ligan standar SAM dengan sisi ikatan SAM	15
Gambar 4.9 Visualisasi interaksi ligan standar SAH dengan sisi ikatan SAM.....	35
Gambar 4.10 Visualisasi interaksi ligan YEF dengan sisi ikatan RNA- <i>cap</i>	37
Gambar 4.11 Visualisasi interaksi ligan YDH dengan sisi ikatan RNA- <i>cap</i>	38
Gambar 4.12 Visualisasi interaksi ligan YQN dengan sisi ikatan RNA- <i>cap</i>	38
Gambar 4.13 Visualisasi interaksi ligan TNY dengan sisi ikatan RNA- <i>cap</i>	39
Gambar 4.14 Visualisasi interaksi ligan standar RTP dengan sisi ikatan RNA- <i>cap</i>	39

DAFTAR TABEL

Tabel 4.1 Data energi bebas ikatan dan kontanta inhibisi sisi ikatan SAM.....	29
Tabel 4.2 Data energi bebas ikatan dan kontanta inhibisi sisi ikatan RNA- <i>cap</i> ...	29
Tabel 4.3 Interaksi ligan dengan enzim NS5 metiltransferase sisi ikatan SAM ...	31
Tabel 4.4 Interaksi ligan dengan enzim NS5 metiltransferase sisi ikatan RNA- <i>cap</i> .	36
Tabel 4.5 Hasil prediksi toksisitas ligan sisi ikatan SAM dengan Toxtree.....	41
Tabel 4.6 Hasil prediksi toksisitas ligan sisi ikatan RNA- <i>cap</i> dengan Toxtree....	41
Tabel 4.7 Hasil prediksi toksisitas ligan sisi ikatan SAM dengan Osiris Property Explorer.....	42
Tabel 4.8 Hasil prediksi toksisitas ligan sisi ikatan RNA- <i>cap</i> dengan Osiris Property Explorer	42



DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1	Bagan kerja penelitian.....	52
Lampiran 2	Hasil pencarian sekuen enzim NS5 metiltransferase virus dengue ..	53
Lampiran 3	<i>Multiple alignment</i> dengan clustalW2	54
Lampiran 4	Hasil <i>multiple sequence alignment</i> enzim NS5 metiltransferase.....	55
Lampiran 5	Data sekuen enzim NS5 metiltransferase virus dengue	58
Lampiran 6	Data <i>screening</i> 1635 ligan target sisi ikatan SAM.....	59
Lampiran 7	Data <i>screening</i> 736 ligan target sisi ikatan RNA- <i>cap</i>	98
Lampiran 8	Data <i>screening</i> 164 ligan target sisi ikatan SAM	116
Lampiran 9	Data <i>screening</i> 74 ligan target sisi ikatan RNA- <i>cap</i>	120
Lampiran 10	Data <i>screening</i> 15 ligan dan standar target sisi ikatan SAM.....	122
Lampiran 11	Data <i>screening</i> 15 ligan dan standar target sisi ikatan RNA- <i>cap</i> .	123
Lampiran 12	Ligan standar S-Adenosil-Metionin (SAM), S-Adenosil-Homosistein (SAH) dan ribavirin triposfat (RTP)	124
Lampiran 13	Interaksi 15 ligan terbaik target sisi ikatan SAM.....	125
Lampiran 14	Interaksi 15 ligan terbaik target sisi ikatan RNA- <i>cap</i>	128
Lampiran 15	Data interaksi ligan TWY dengan sisi ikatan SAM	131
Lampiran 16	Data interaksi ligan YWH dengan sisi ikatan SAM	133
Lampiran 17	Data interaksi ligan YDH dengan sisi ikatan SAM	135
Lampiran 18	Data interaksi ligan TRY dengan sisi ikatan SAM	137
Lampiran 19	Data interaksi ligan standar SAM dengan sisi ikatan SAM	140
Lampiran 20	Data interaksi ligan standar SAH dengan sisi ikatan SAM	142
Lampiran 21	Data interaksi ligan YEF dengan sisi ikatan RNA- <i>cap</i>	144
Lampiran 22	Data interaksi ligan YDF dengan sisi ikatan RNA- <i>cap</i>	146
Lampiran 23	Data interaksi ligan YQN dengan sisi ikatan RNA- <i>cap</i>	148
Lampiran 24	Data interaksi ligan TNY dengan sisi ikatan RNA- <i>cap</i>	150
Lampiran 25	Data interaksi ligan standar RTP dengan sisi ikatan RNA- <i>cap</i>	152

BAB 1

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Penyakit demam berdarah merupakan ancaman serius bagi permasalahan kesehatan dunia. Distribusi geografis penyakit ini telah mengalami perluasan yang sangat besar selama 30 tahun terakhir. Hal ini terjadi karena meningkatnya kondisi yang potensial bagi perkembangan populasi *Aedes aegypti*, spesies nyamuk yang merupakan pembawa virus dengue penyebab penyakit demam berdarah (WHO, 2007).

Sebagian infeksi virus dengue menunjukkan gejala demam ringan yang dikenal juga sebagai *dengue fever* (DF), sedangkan beberapa pasien menunjukkan tingkat keparahan yang lebih lanjut, yang secara potensial dapat membahayakan kesehatan. Tingkat selanjutnya ini disebut dengan *dengue hemorrhagic fever* (DHF) yang dicirikan dengan pecahnya pembuluh kapiler darah dan *thrombocytopenia*. Pada kasus yang lebih parah lagi, pasien dapat mengalami *shock hipovolemia* yang biasa disebut dengan *dengue shock syndrome* (DSS) dengan tingkat kematian 5-10 % per kasus (Tomlinson et al., 2009).

Sekitar 100 negara merupakan wilayah endemik bagi demam berdarah dengue dan 40% dari populasi dunia atau sekitar 2,5 milyar penduduk dunia pada daerah tropis dan sub-tropis memiliki resiko terjangkit penyakit ini. Lebih dari 50 juta infeksi demam ringan dengan 400.000 kasus demam berdarah dengue dilaporkan tiap tahunnya dimana penyakit ini telah menyebabkan banyak kasus kematian pada anak-anak di beberapa negara di benua asia (Guglani and Kabra., 2005).

Indonesia sendiri merupakan salah satu negara yang keseluruhan daerahnya merupakan daerah dengan epidemi dengue (Raekiansyah et al., 2004). Departemen Kesehatan menunjukkan jumlah pasien demam berdarah dengue pada tahun 2007 mencapai 156.767 orang dengan jumlah yang meninggal 1.570 orang. Dalam dua bulan pertama tahun 2008, jumlah penderita demam berdarah dengue di Indonesia mencapai 12.266 orang, dan yang meninggal 97 orang; di DKI

Jakarta tercatat 5.093 penderita demam berdarah dengue dan di Jawa Tengah 2.557 orang (litbang.deptan.go.id, 2008).

Virus dengue memiliki empat serotipe yaitu DENV-1, DENV-2, DENV-3, dan DENV-4. Klasifikasi tersebut didasarkan pada jenis antibodi yang dihasilkan di dalam tubuh manusia setelah terinfeksi. Keempat serotipe ini memiliki morfologi dan genom yang sama tetapi menunjukkan antigen yang berbeda sehingga seseorang bisa terinfeksi virus ini lebih dari satu kali karena tidak adanya proteksi silang yang lengkap (Lindenbach., 2007).

Sejauh ini terdapat beberapa vaksin untuk demam berdarah dengue yang sedang memasuki tahapan uji klinis. namun pengobatan yang efektif terhadap infeksi virus dengue masih belum tersedia (Sanchez et al., 2009). Pengembangan vaksin virus dengue cukup sulit karena patogenitas virus dengue, oleh karena itu dibutuhkan suatu pengobatan baru yang bersifat antiviral yang dapat menghambat aktivitas enzim yang berperan dalam replikasi di dalam tubuh (Geiss et al., 2009).

Penemuan obat merupakan sebuah proses yang melibatkan banyak disiplin ilmu. Sebelumnya, para peneliti melakukan metode *trial and error* secara *in vitro* untuk menemukan senyawa yang dapat berperan sebagai inhibitor yang dalam perjalanannya membutuhkan waktu yang lama dan biaya yang sangat besar. Saat ini dengan adanya bantuan komputer, perancangan obat dapat menjadi lebih efisien (Kirsten, 2008).

Salah satu metode yang dapat digunakan adalah *molecular docking*. Metode ini digunakan untuk memprediksikan orientasi ikatan antara inhibitor dengan enzim target sehingga dapat diketahui afinitas dari rancangan inhibitor tersebut. Untuk melakukan *molecular docking*, dibutuhkan struktur tiga dimensi dari inhibitor dan enzim target yang dapat diperoleh dari *database* maupun melalui teknik *molecular modelling* (Lucientes, 2004).

Enzim nonstruktural (NS) seperti NS3 protease dengan kofaktor NS2B, NS3 helikase/nukleosida triposfatase (NTPase)/ RNA 5' triposfatase (RTPase), NS5 metiltransferase (Mtase), dan NS5 RNA-dependen RNA polimerase (RdRp) diketahui memiliki peran yang penting pada replikasi virus dengue (Khan et al., 2008). Saat ini, protein NS3 dan NS5 merupakan enzim dari virus dengue yang

paling dipahami mekanismenya, menjadikan enzim ini sebagai target yang ideal untuk pembuatan antiviral virus dengue (Noble et al., 2010).

Beberapa penelitian terkait inhibisi enzim yang merupakan target potensial pada virus dengue telah dilakukan sebelumnya. Pada tahun 2009, Karimah melakukan perancangan peptida siklis sebagai inhibitor bagi enzim NS5 RNA-dependen RNA polimerase dan menghasilkan ligan CDEEC sebagai ligan terbaik. Tambunan et al., (2010) melakukan perancangan peptida siklis KRK sebagai inhibitor potensial enzim NS2B-NS3 protease. Tambunan et al., (2011) juga merancang sebanyak 49 peptida siklis berdasar pada asam amino yang dapat dikenali oleh sisi aktif NS2-NS3 protease dan menghasilkan ligan terbaik RKR. Pada tahun 2010, Podvinec et al, menggunakan S-Adenosil-Homosistein (SAH), ribavirin triposfat dan sinefungin sebagai inhibitor analog bagi enzim NS5 metiltransferase, tetapi kemudian diketahui bahwa SAH memiliki permasalahan kestabilan dan menunjukkan sifat toksisitas, ribavirin memiliki aktivitas yang rendah, sedangkan sinefungin memiliki spesifitas yang rendah dan permasalahan nefrotoksitas.

Seiring dengan banyaknya pencarian senyawa baru untuk dapat digunakan sebagai inhibitor, peptida menjadi salah satu pilihan yang banyak dikembangkan dalam *drug design*. Peptida dapat disintesis dari produk alami maupun disintesis secara kimia. Walaupun molekul peptida memiliki kestabilan yang rendah tetapi peptida lebih disukai karena peptida memiliki aktivitas dan spesifitas yang tinggi (Sehgal, 2006).

Saat ini, penelitian mengenai peptida untuk perancangan dan penemuan obat merupakan bidang yang paling menjanjikan dalam pengembangan obat baru. Lebih dari 140 peptida digunakan sebagai obat dan lebih dari 400 peptida memasuki fase praklinis dunia dengan rerata pertumbuhan dalam setahun lebih dari 15% (Hutcher & Dietrich, 2007).

1.2 Tujuan Penelitian

Tujuan penelitian ini adalah untuk merancang peptida siklis bagi dua *binding pocket* enzim NS5 metiltransferase virus dengue berdasarkan sisi aktifnya sehingga dapat digunakan sebagai inhibitor dari NS5 metiltransferase virus dengue melalui studi *in silico* menggunakan metode *molecular docking*.

BAB 2

TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Demam Berdarah

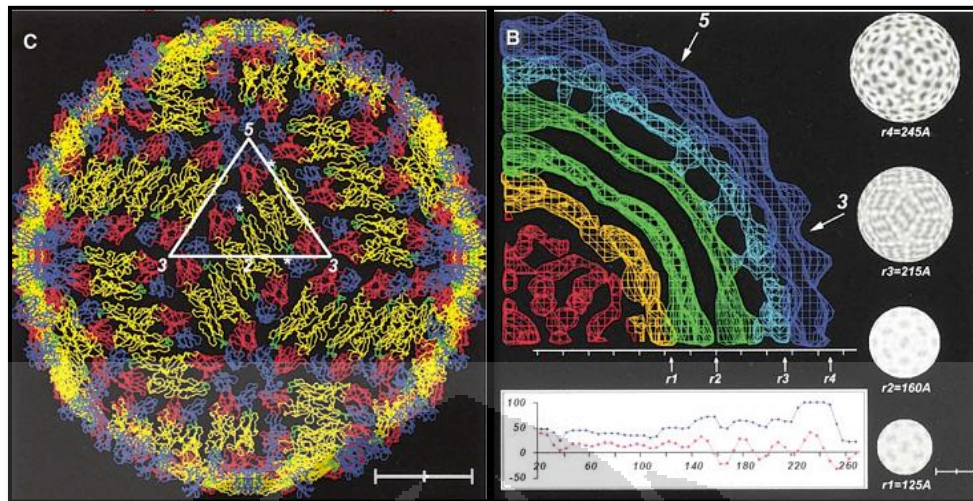
Demam berdarah merupakan salah satu penyakit menular yang disebabkan oleh infeksi virus dengue. Penyakit ini sering menimbulkan wabah dan menyebabkan kematian terutama pada anak, khususnya di daerah tropis dan subtropis. Vektor pembantu penyebaran virus dengue adalah nyamuk *Aedes aegypti* dan *Aedes albopictus*, kedua jenis nyamuk ini terdapat hampir diseluruh pelosok Indonesia, kecuali ditempat-tempat yang mempunyai ketinggian lebih dari 1000 meter diatas permukaan laut (Hiswani, 2003).

Demam berdarah telah berkembang sejak lama di dunia, pertama kali dikenali pada tahun 1779 di Kairo. Wabah demam berdarah dengue di Indonesia yang menyebabkan banyak kematian terjadi untuk pertama kalinya pada tahun 1968 di kota Jakarta dan Surabaya, akan tetapi konfirmasi viologisnya baru didapatkan pada tahun 1972. Sejak saat itu penyakit ini menyebar ke berbagai daerah, sehingga sampai tahun 1980 penyebarannya mencakup seluruh propinsi di Indonesia kecuali Timor-Timur dan menimbulkan kejadian luar biasa (KLB) (Suroso 2003).

2.2 Virus Dengue

Virus dengue merupakan virus RNA untai tunggal positif yang termasuk dalam genus *flavivirus* keluarga Flaviviridae (Zhang et al., 2003). Virus ini adalah anggota dari group arbovirus yaitu suatu kelompok besar virus yang memiliki siklus biologis yang melibatkan arthropoda dan vertebrata sebagai inang untuk mereplikasikan diri (Vazquez et al., 2009).

Virus dengue tersusun atas tiga protein struktural serta tujuh protein non struktural (Khan et al., 2008). Pada resolusi 2,4 Å struktur tersebut menunjukkan bentuk ikosahedral simetris yang terdiri dari 90 dimer protein E (*envelope*) membentuk lapisan protein halus yang menutupi secara sempurna membran virus (Kuhn et al., 2002).



Gambar 2.1 Partikel virus dengue

[Sumber: Kuhn et al., 2002]

Virus dengue memiliki empat serotipe yaitu DENV-1, DENV-2, DENV-3, dan DENV-4. Klasifikasi tersebut didasarkan pada jenis antibodi yang dihasilkan di dalam tubuh manusia setelah terinfeksi. Keempat serotipe ini memiliki morfologi dan genom yang sama tetapi menunjukkan antigen yang berbeda sehingga seseorang bisa terinfeksi virus ini lebih dari satu kali karena tidak adanya proteksi silang yang lengkap (Lindenbach, 2007). Infeksi oleh salah satu serotipe dapat meningkatkan patogenitas dari infeksi selanjutnya oleh ketiga serotipe lainnya (Lescar et al., 2008).

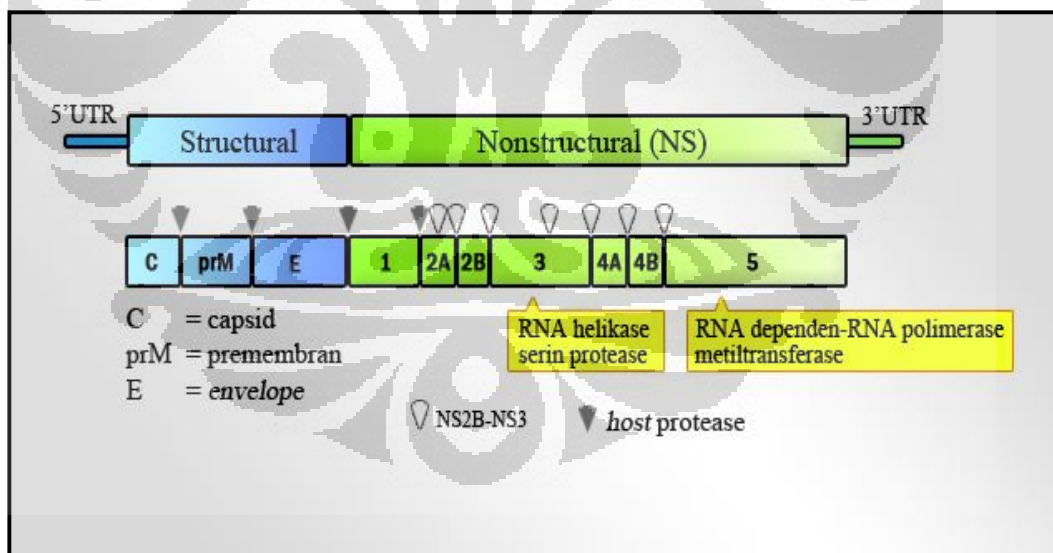
2.2.1 Pemetaan Genom Virus

Genom virus dengue merupakan *open reading frame* (ORF) dari sebuah *ribonucleic acid* (RNA) positif untai tunggal (Umareddy et al., 2007). *Open reading frame* ini mengandung 10.723 nukleotida dan mengkode satu poliprotein yang terdiri dari 3.391 residu asam amino yang terbagi atas tiga protein struktural, C (*capsid*), prM (*premembrane*), dan E (*envelope*) serta tujuh protein nonstruktural NS1, NS2A, NS2B, NS3, NS4A, NS4B, dan NS5 (Zuo et al., 2008) (**Gambar 2.2**).

Protein struktural merupakan protein yang berperan dalam bentuk dan morfologi virus, sedangkan protein non-struktural merupakan enzim-enzim yang berperan dalam proses replikasi virus. Pada ujung-ujung ORF terdapat

kode 5'UTR dan 3'UTR yang berperan penting dalam proses inisiasi dan regulasi pada proses translasi, transkripsi dan replikasi virus (Chiu et al., 2005).

Virion virus terdiri dari protein E (*envelope*) yang berperan dalam penempelan virus ke reseptor inang, dan protein prM (*premembrane*) yang merupakan glikoprotein struktural. Sedangkan protein C (*capsid*) membentuk struktur ikosahedral dan mengikat genom RNA virus (Melino et al., 2007). Ketujuh protein non-struktural memiliki peran yang penting dalam siklus replikasi virus. Glikoprotein NS1 terbentuk di permukaan sel inang saat infeksi terjadi dan berperan juga dalam replikasi RNA virus. NS2A, NS4A dan NS4B merupakan protein hidrofobik yang membantu proses replikasi di retikulum endoplasma (RE). Sintesis RNA virus dibantu oleh enzim RNA-dependent RNA polymerase (RdRp) yang terdapat pada protein NS5. Pemotongan unit-unit fungsional dari untaian poliprotein hasil translasi dikatalisis oleh serin protease yang terdapat pada protein NS3 yang pada prosesnya dibantu oleh NS2B sebagai kofaktor (Zuo et al., 2008).



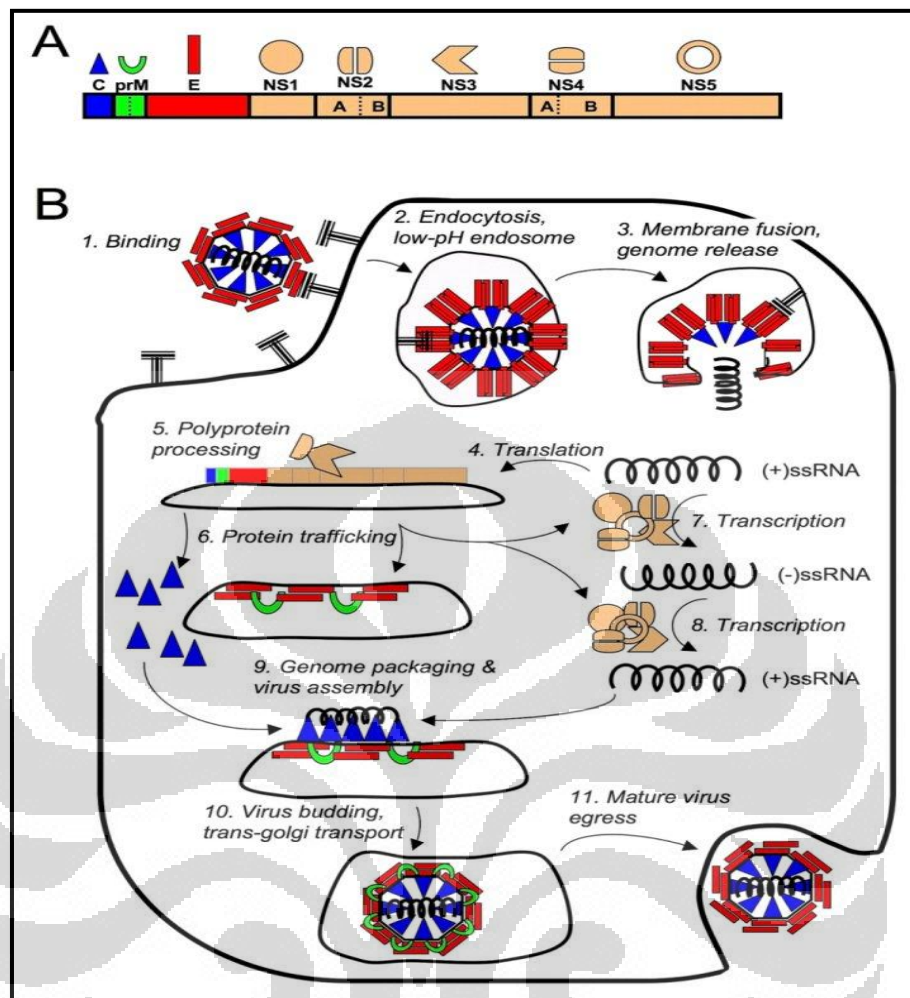
Gambar 2.2 Pemetaan genom virus dengue

2.2.2 Replikasi Virus Dengue

Proses infeksi virus dengue dimulai ketika terjadi interaksi antara protein *envelope* (E) virus dengan reseptor permukaan sel inang. Partikel virus kemudian masuk ke dalam sel dengan cara endositosis. Ketika gelembung endositosis memiliki kadar asam yang sesuai melalui proses *acidification*, nukleokapsid akan masuk ke dalam sitoplasma dimana genom virus kemudian akan dilepaskan. Virus dengue yang merupakan RNA untai tunggal positif kemudian dapat langsung mengalami translasi menjadi suatu poliprotein tunggal. Proses *co-translation* dan *post translation* terjadi dengan menggunakan organel-organel sel inang untuk memproduksi komponen-komponen virus yang penting untuk replikasi (Tomlinson et al., 2009).

Komponen virus yang telah diproduksi kemudian dibawa ke retikulum endoplasma dan kemudian terjadi perakitan partikel virus baru menghasilkan satu untaian poliprotein yang akan diproses menjadi unit-unit protein fungsional bagi virus. Pemotongan pada sisi NS1-NS2A langsung terjadi setelah poliprotein terbentuk oleh protease yang belum teridentifikasi yang terdapat pada RE. Selanjutnya terjadi pemotongan pada konjugasi C-prM, prM-E, E-NS1 dan NS4A-NS4B oleh peptidase retikulum endoplasma inang, dan pemotongan pada NS2A-NS2B, NS2B-NS3, NS3-NS4A dan NS4B-NS5 oleh protease virus (Zuo et al., 2008)

Setelah unit protein fungsional terbentuk, RNA virus akan mengalami replikasi dan mensintesis RNA untai negatif sebagai cetakan untuk pembentukan RNA untai positif virus. Kemudian RNA ini akan berasosiasi dengan protein capsid (C) hasil translasi awal dan membentuk virion *immature* di permukaan RE. Virion ini ditransportasikan menuju badan golgi untuk proses pematangan dalam jumlah besar yang kemudian akan menyebabkan sel inang mengalami lisis dan virion *mature* keluar dari sel inang melalui eksositosis (Zuo et al., 2008)



Gambar 2.3 Replikasi virus dengue

[Sumber: Tomlinson et al., 2009]

2.3 Protein NS5

Protein NS5 merupakan protein virus dengue terbesar dengan massa molekul 104 kDa (Yap et al., 2007). Protein ini juga merupakan protein paling dipertahankan pada virus dengue karena terdapat paling tidak 67% sekuen asam amino yang sama yang terdapat pada keempat serotipe virus dengue (Moren et al., 2008).

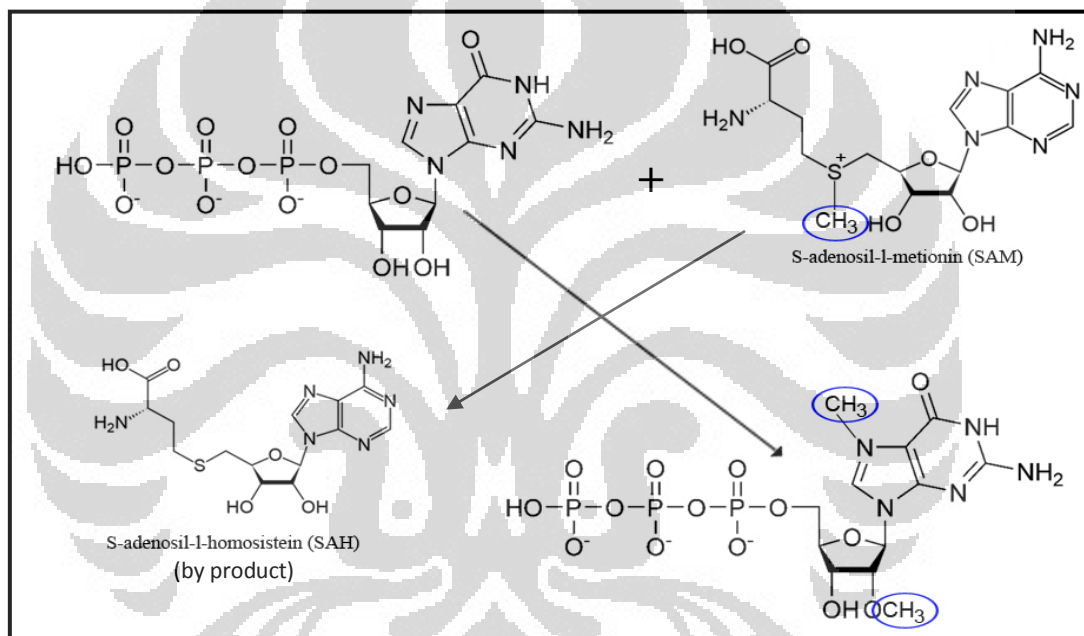
NS5 mengandung RNA metiltransferase (Mtase) pada ujung N dan RNA dependen-RNA polimerase (RdRp) pada ujung C. Bagian C-terminal NS5 pada posisi residu 420-900 yang merupakan RNA-dependen RNA polimerase (RdRp) bertanggung jawab untuk sintesis dari *template* RNA intermediet untuk replikasi selanjutnya dari genom RNA untai positif (Qi. *et al*, 2008). NS5 metiltransferase

Universitas Indonesia

yang berada pada ujung N berfungsi dalam proses *capping* RNA yang baru terbentuk (Noble et al., 2010).

2.3.1 Enzim NS5 Metiltransferase

Enzim NS5 metiltransferase merupakan enzim yang berperan dalam proses *capping* RNA yang baru saja terbentuk. Enzim ini berperan dalam proses *capping* mRNA dengan cara melakukan transfer gugus metil dari kofaktor S-adenosil-1-metionin (SAM/AdoMet) kepada atom N7 dari basa guanin RNA dan kepada gugus 2'OH dari ribosa RNA (Zhou et al., 2007).



Gambar 2.5 Transfer gugus metil oleh enzim NS5 metiltransferase

Enzim NS5 metiltransferase memiliki dua sisi ikatan yang terhubung oleh celah Y-shaped. Sisi ikatan pertama adalah sisi ikatan SAM (donor gugus metil) dan yang kedua adalah sisi ikatan RNA-*cap* yang cenderung dangkal dan lebih kecil ukurannya (Lim et al., 2008)

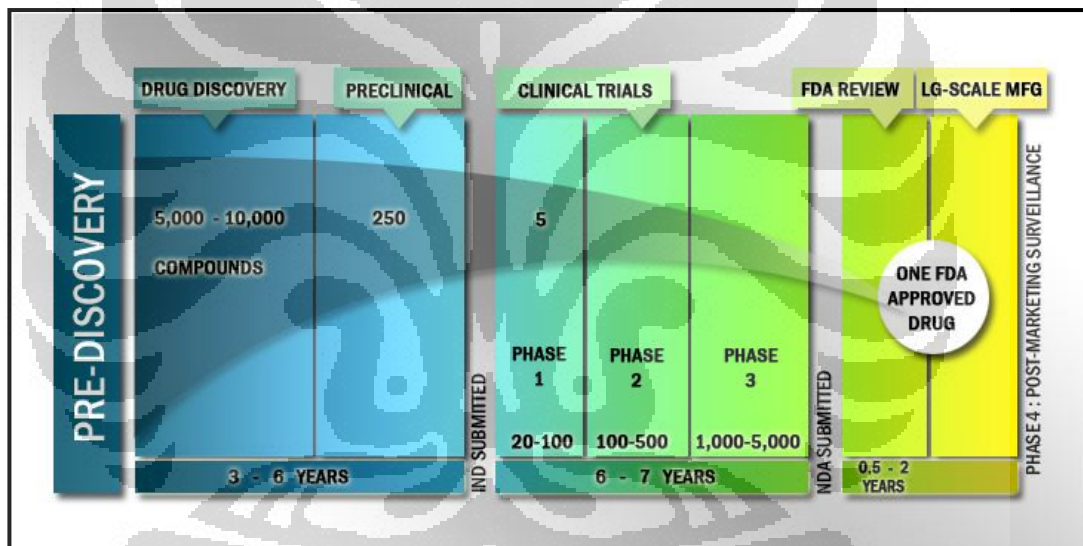
Enzim ini memiliki dua proses metilasi yaitu penyerahan gugus metil kepada sisi ikatan SAM dan kemudian transfer gugus metil tersebut kepada basa guanin RNA. Walaupun enzim NS5 metiltransferase ini memiliki dua proses metilasi namun proses tersebut terjadi pada tempat yang sama (Courageot et al.,

2000). Substrat RNA diperkirakan mengalami perubahan posisi untuk dapat menerima gugus metil pada daerah sisi ikatan SAM (Lim et al., 2008).

2.4 Drug Discovery dan Drug Design

2.4.1 Drug Discovery

Drug discovery dan *drug development* memerlukan biaya yang sangat mahal dan waktu proses yang panjang. Proses tersebut biasanya memakan waktu rata-rata 12-15 tahun. Secara konvensional, yang dilakukan adalah mensintesis turunan dan analog suatu senyawa dan diujikan langsung pada enzim sampai ditemukan beberapa senyawa yang sangat potensial untuk dikembangkan sebagai obat (Apriyanti, 2010).



Keterangan : telah diolah kembali

Gambar 2 Tahapan drug development

[Sumber: Nash, 2008]

2.4.2 Drug Design

Drug design adalah suatu metode perancangan obat yang didasarkan pada analisis biologis dan fisik dari targetnya. Targetnya merupakan molekul-molekul atau bagian dari makromolekul yang berperan vital dalam proses metabolik dari kondisi patologis seseorang akibat penyakit yang disebabkan oleh mikroba patogen. Umumnya obat dirancang untuk menghambat atau menghentikan aktivitas makromolekul tersebut dengan cara membentuk ikatan terhadap sisi

katalitik dari molekul-molekul tersebut sehingga molekul obat berperan sebagai inhibitor. Hal yang harus dipertimbangkan dalam merancang inhibitor sebagai *drug*, antara lain adalah spesifitas dan potensi inhibisinya. Spesifitas dan potensi inhibisi yang tinggi akan mengurangi efek samping dan tingkat toksisitasnya (Gubernur, 1998).

Saat ini telah banyak dilakukan pengembangan *drug design* dengan menggunakan metode komputasi yang lebih rasional dan efisien yang disebut *computer-aided drug design*. Metode ini digunakan untuk menemukan, memperbaiki atau mempelajari obat-obatan dan molekul aktif biologis yang terkait secara *in silico*. Tujuan mendasar dari metode ini adalah memprediksi apakah molekul tersebut mengikat target dan seberapa kuat molekul tersebut mengikatnya. Hal tersebut akan memberikan informasi pada desain ligan molekul kecil yang akan memblokir atau mengaktifkan fungsi normal target dan dapat dikembangkan sebagai obat (Singh et al., 2006).

2.5 Peptida Sebagai Drug

Peptida merupakan gabungan dari dua atau lebih molekul asam amino yang dapat berikatan secara kovalen melalui ikatan amida (ikatan peptida). Ikatan peptida ini terjadi akibat reaksi kondensasi hilangnya molekul air yang berasal dari gugus karboksil satu asam amino dan gugus asam amino lain (Lehninger 2004).

Obat-obatan yang berbasis peptida mempunyai keunggulan dimana, aktivitasnya lebih tinggi dan bekerja dengan lebih spesifik. Interaksi antara obat dengan obat lainnya juga lebih minim dan tingkat toksisitasnya rendah karena tidak terakumulasi dalam jaringan tubuh (Ayoub M. & Scheidegger D., 2006).

Penelitian mengenai peptida untuk perancangan dan penemuan obat merupakan bidang yang paling menjanjikan dalam pengembangan obat baru. Lebih dari 140 peptida digunakan saat ini dan lebih dari 400 peptida memasuki fase praklinis dunia dengan rata-rata pertumbuhan dalam setahun lebih dari 15% (Hutcher & Dietrich, 2007).

2.6 Bioinformatika

2.6.1 Definisi

Bioinformatika berasal dari kata bio dan informatika yang merupakan gabungan dari ilmu biologi dan teknik informasi, teknologi bioinformatika ini bertujuan untuk mengaplikasikan data dari alat komputasi melalui suatu analisa untuk menangkap dan menginterpretasikan data-data biologis yang terkandung dibalik sistem nyata yang ada di setiap makhluk hidup. Bioinformatika digolongkan sebagai disiplin ilmu baru yang mencakup tak hanya ilmu komputer dan biologi sebagai dasar dunia kedokteran, namun juga matematika dan fisika yang secara bersama-sama diintegrasikan pada suatu aplikasi dalam membuka aspek-aspek yang belum terjelaskan dalam ilmu terapi konvensional. Rujukan terbesar bioinformatika merupakan bentuk terkecil dari makhluk hidup yang dikenal sebagai gen, yang meliputi DNA dan RNA sebagai protein yang membentuk sel makhluk hidup itu sendiri (Ahmadi, 2009).

Pesatnya perkembangan teknologi informasi dan peningkatan ilmu komputer khususnya pada bidang biologi molekuler, menjadikan bioinformatika sebagai ilmu yang membuka sudut pandang baru dalam menyelesaikan persoalan biologi molekuler (Baxevanis dan Oullette, 2005). Dalam hubungannya dengan *drug design*, bioinformatika berperan besar untuk mereduksi jumlah senyawa yang diusulkan secara rasional dan diharapkan lebih efektif serta membantu memahami interaksi *drug* dengan targetnya (Geldenhuis, 2006).

2.6.2 Database

Database adalah kumpulan data yang diatur sedemikian rupa untuk memudahkan penggunaannya. Pada *database* bioinformatika, data yang diatur merupakan data sekuen DNA atau protein yang didapat melalui percobaan laboratorium yang biasanya disimpan dalam *file* komputer. Setiap *file* dari suatu sekuen berisi informasi mengenai asal organisme, nama sekuen, dan juga nomor akses yang digunakan untuk mengidentifikasi sekuen tersebut (Mount, 2004).

Dalam analisis bioinformatika, keberadaan *database* merupakan syarat utama. *Database* DNA yang utama adalah GenBank di Amerika Serikat, sedangkan *database* untuk protein dapat ditemukan di SWISS-PROT, *Protein*

Information Resource (PIR) dan *Protein Data Bank* (PDB) (Baxevanis dan Ouellette, 2005).

2.6.3 Multiple Sequence Alignment

Pencarian *database* umumnya berdasar hasil *sequence alignment*, baik sekuen DNA maupun protein. Metode ini digunakan berdasar kenyataan bahwa sekuen DNA/protein bisa berbeda sedikit tetapi memiliki fungsi yang sama. Kegunaan dari pencarian ini adalah ketika mendapatkan suatu sekuen DNA/protein yang belum diketahui fungsinya maka dengan membandingkannya dengan yang ada dalam *database* bisa diperkirakan fungsi dari sekuen tersebut. Algoritma untuk *pattern recognition* seperti *Neural Network*, *Genetic Algorithm* dan lain lain telah dipakai dengan sukses untuk pencarian *database* ini. Salah satu *software* pencari *database* yang paling berhasil dan bisa dikatakan menjadi standar sekarang adalah BLAST (Basic Local Alignment Search Tool) (Woodsmall and Benson, 1993). *Software* ini telah diadaptasi untuk melakukan *alignment* terhadap berbagai sekuen seperti DNA (blastn), protein (blastp). Baru-baru versi yang fleksibel untuk dapat beradaptasi dengan *database* yang lebih variatif telah dikembangkan dan disebut Gapped BLAST serta PSI (Position Specific Iterated) (Altschul, 1990). Sementara itu *software* yang digunakan untuk melakukan *alignment* terhadap sekuen terbatas di antaranya yang lazim digunakan adalah clustalX dan clustalW dengan menggunakan algoritma HMM (*Hidden Markov Model*) (Altschul, 1997).

2.6.4 Protein Data Bank

Sumber utama untuk data struktur protein adalah Protein Data Bank (PDB) yang tersedia pada situs <http://www.pdb.org/>. Situs ini adalah arsip data struktural tunggal tingkat dunia yang dibuat oleh Research Collaboratory for Structural Bioinformatics (RCSB.), di Universitas New Jersey di Rutgers (Westhead et al., 2001).

PDB merupakan data yang berisi koleksi struktur tiga dimensi protein, DNA dan molekul kompleks lainnya yang telah dipublikasikan dan ditentukan secara eksperimen dengan menggunakan *X-ray crystallography* atau *NMR spectroscopy*. Pada *X-ray crystallography*, sinar-X dipancarkan kepada kristal

yang mengandung jutaan salinan suatu molekul. Sinar-X kemudian akan didifraksikan oleh kristal dan membentuk suatu pola yang bila dianalisis secara matematis akan menunjukkan posisi tiap atom dalam molekul. *NMR spectroscopy* menggunakan molekul dalam larutan dan akan memperlihatkan orientasi atom dalam medan magnetik (Baxevanis dan Ouellette, 2005).

Format PDB merupakan format yang dapat dimengerti baik oleh komputer maupun manusia (*machine-human-readable*), dimana di dalam format ini ditampilkan informasi tentang sumber, sekuens, struktur sekunder dan juga koordinat tiga dimensi protein (Baxevanis dan Ouellette, 2005).

2.6.5 Molecular Modelling

Molecular modelling merupakan suatu metode untuk merancang dan menganalisis struktur dan sifat-sifat molekul tertentu dengan menggunakan teknik kimia komputasional dan teknik visualisasi grafis yang bertujuan untuk menyediakan struktur geometri tiga dimensi yang sesuai dengan parameter kondisi yang telah ditentukan. *Molecular modelling* merupakan gabungan dari data empiris dan teknik komputasional untuk menirukan dan memodelkan perilaku molekul sehingga dapat digunakan untuk mempelajari sistem molekular tertentu (Leach, 2001).

Salah satu kunci utama dari *molecular modelling* adalah penghitungan energi konformasi dan interaksi. Energi ini dapat dihitung dengan berbagai metode mulai dari penghitungan mekanika kuantum hingga fungsi empiris energi (Teodoro et al., 2001). Energi total molekul tersebut berhubungan dengan energi internal sistem atau energi potensial. Molekul berada dalam keadaan atau konformasi paling stabil ketika energi potensialnya mencapai nilai paling minimum. Keadaan ini mempengaruhi karakter molekul dalam peranannya pada proses kimia dan biologi (Leach, 2001).

2.6.6 Molecular Docking

Molecular docking adalah metode untuk memprediksi orientasi yang disukai dari suatu molekul ke molekul lain saat berikatan satu sama lain untuk membentuk kompleks yang stabil (Achsanuddin, 2008). *Molecular docking* banyak dimanfaatkan dalam mencari ligan yang dapat terikat dengan baik secara

geometris dan energisitas terhadap *binding site* dari sebuah protein (Teodoro et al., 2001).

Saat ini *molecular docking* banyak diaplikasikan di dalam *drug design* untuk memprediksikan orientasi ikatan antara kandidat molekul *drug* dengan protein target sehingga dapat diketahui afinitas dari molekul *drug* tersebut. Untuk melakukan *molecular docking*, hal pertama yang dibutuhkan adalah struktur tiga dimensi dari ligan (*drug*) dan protein target. Struktur tiga dimensi ligan dapat dimodelkan dengan menggunakan teknik *molecular modeling* sedangkan struktur tiga dimensi protein target dapat ditentukan secara empiris dengan menggunakan teknik *NMR spectroscopy* dan *x-ray crystallography* yang terdapat pada *database* Protein Data Bank dan secara *in silico* dengan teknik *homology modelling* (Lucientes, 2004).

2.7 Prediksi Toksisitas Secara *In Silico*

Banyak penelitian kemoinformatika memusatkan perhatian pada analisis dan prediksi senyawa yang berpotensi dalam hal karakteristik ADME-Tox (Wulandari, 2010). Analisa terhadap sifat karsinogenisitas dan mutagenisitas perlu dilakukan untuk menghindari sintesis senyawa yang memiliki efek buruk bagi sistem tubuh. Terdapat banyak *software* yang dikembangkan untuk membantu prediksi toksisitas suatu senyawa dan kemiripannya sebagai obat.

Kalkulasi nilai *Drug-likeness* atau kemiripan suatu senyawa terhadap obat dan toksisitas suatu senyawa oleh *software* biasanya mengacu pada kemiripan senyawa tersebut dengan gugus fungsi yang diketahui sifatnya maupun obat yang sudah tersedia dipasaran. *Software* Toxtree dan Osiris Property Explorer merupakan perangkat yang dapat digunakan untuk membantu prediksi toksisitas suatu senyawa.

BAB 3

METODE PENELITIAN

3.1 Preparasi Enzim NS5 Metiltransferase Virus Dengue

3.1.1 Pencarian Sekuen Enzim NS5 Metiltransferase

Pencarian data sekuen enzim NS5 metiltransferase virus dengue dilakukan melalui *database* pada situs National Center for Biotechnology Information (NCBI). Halaman NCBI ini dapat diakses pada alamat <http://ncbi.nlm.nih.gov>. Sekuen enzim NS5 metiltransferase virus dengue di simpan dalam format FASTA.

3.1.2 *Multiple Sequence Alignment*

Seluruh sekuen enzim NS5 metiltransferase virus dengue yang didapat dari *database* dimasukkan sebagai input ke dalam server clustalW2 pada situs European Bioinformatics Institute (EBI). Halaman clustalW2 ini dapat diakses pada alamat <http://www.ebi.ac.uk/Tools/clustalw2>. Pada server ini dilakukan penyejajaran antara setiap enzim NS5 metiltransferase virus dengue. Sekuen enzim NS5 metiltransferase dengan nilai kesamaan tertinggi akan digunakan untuk memperoleh struktur tiga dimensinya.

3.1.3 Pencarian Data PDB Struktur 3D Enzim NS5 Metiltransferase

Struktur tiga dimensi enzim NS5 metiltransferase dapat diunduh dari *database* PDB yang terdapat pada Research Collaboratory for Structural Bioinformatics Protein Data Bank melalui alamat <http://www.rcsb.org/pdb>.

3.1.4 Optimasi Geometri dan Minimasi Energi Enzim NS5 Metiltransferase

Optimasi geometri dan minimasi energy enzim NS5 metiltransferase dilakukan dengan menggunakan *software* Molecular Operating Environment (MOE).

3.2 Preparasi Ligan Peptida Siklis

3.2.1 Perancangan Struktur 3D Ligan Peptida siklis

Ligan peptida yang akan digunakan sebagai inhibitor enzim NS5 metiltransferase digambar dengan menggunakan ChemSketch ACDLabs. Peptida dibuat dari kombinasi asam amino yang masing-masing ujungnya terikat dengan asam amino sistein untuk membentuk jembatan disulfida. Ligan yang digambar kemudian diubah ke dalam bentuk tiga dimensinya.

3.2.2 Optimasi Geometri dan Minimasi Energi Ligan Peptida Siklis

Optimasi geometri dan struktur ligan dilakukan dengan menggunakan *software* MOE dengan menggunakan algoritma *conjugate gradient Polak-Ribiere* dengan batas konvergensi gradient RMS 0,001 kcal/Å dan parameter kalkulasi *force field* MMFF94x.

3.3 Docking Antara Ligan Dengan Enzim NS5 Metiltransferase

Proses *docking* dimulai dengan preparasi file *docking* dengan menggunakan bagian *Dock* yang terdapat dalam *software* MOE. Ligan dan enzim yang akan digunakan ditambahkan hidrogen dan muatan *forcefield*. Kalkulasi *docking* dijalankan dengan parameter algoritma *Lamarckian Genetic Algorithm* (LGA). Proses *docking* kemudian dijalankan dengan menggunakan *software* MOE.

3.4 Analisis Hasil Docking

Hasil kalkulasi *docking* dilihat pada *output* dalam format .mdb. Hasil yang didapatkan kemudian dianalisa dengan beberapa parameter seperti $\Delta G_{\text{binding}}$, ikatan hidrogen, dan kontak residu.

3.4.1 Energi Ikatan dan Konstanta Inhibisi (K_i)

Energi ikatan dan konstanta inhibisi hasil *docking* dilihat pada *output* dalam format *notepad*. Kompleks enzim-ligan yang dipilih adalah kompleks yang memiliki nilai energi ikatan dan konstanta inhibisi terkecil untuk kemudian dilakukan analisis lebih lanjut.

3.4.2 Ikatan Hidrogen

Ikatan hidrogen yang terjadi pada kompleks enzim-ligan terbaik hasil *docking* diidentifikasi dengan menggunakan *software* MOE dengan *file input* dalam format .mdb. Ikatan hidrogen dilihat dengan menggunakan menu *report* pada bagian *ligand interaction*.

3.4.3 Kontak Residu

Kontak residu kompleks enzim-ligan hasil *docking* diidentifikasi dengan menggunakan *software* MOE dengan memperhatikan ligan yang memiliki interaksi yang paling baik terhadap sisi aktif. Kontak residu dilihat dengan menggunakan menu *report* pada bagian *ligand interaction*.

3.5 Prediksi Toksisitas

Analisa terhadap toksisitas dari ligan dilakukan terhadap ligan terbaik. Parameter yang akan dilihat dari ligan adalah sifat karsinogenisitas dan mutagenisitas. Analisis ini dilakukan dengan menggunakan *software* ToxTree dan Osiris Property Explorer.

BAB 4

HASIL DAN PEMBAHASAN

4.1 Preparasi Enzim NS5 Metiltransferase

4.1.1 Pencarian Sekuen Enzim NS5 Metiltransferase Virus Dengue

Seluruh sekuen enzim NS5 metiltransferase virus dengue yang akan dijadikan sebagai target dicari pada database pada situs resmi National Center for Biotechnology Information (NCBI) pada alamat <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/> dengan kata kunci “dengue methyltransferase” pada sekuen protein. Dari pencarian ini didapatkan 12 sekuen enzim NS5 metiltransferase *chain A* virus dengue (**Lampiran 2**). Seluruh sekuen yang didapatkan telah memiliki struktur tiga dimensi, ditandai dengan adanya kode PDB pada masing-masing enzim.

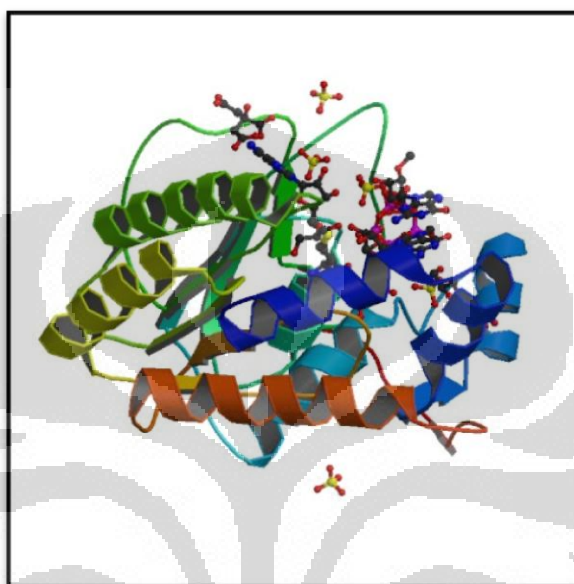
4.1.2 *Multiple Sequence Alignment*

Seluruh sekuen enzim NS5 metiltransferase yang didapatkan dari situs NCBI dilakukan pensejajaran untuk kemudian ditentukan satu sekuen yang paling mewakili keseluruhan sekuen lainnya. Sekuen yang terpilih akan digunakan sebagai target pada penelitian ini. Pensejajaran sekuen dilakukan dengan menggunakan *software online* clustalW2 dari situs resmi EBI dengan melihat nilai kesamaan dari setiap perbandingan antar sekuen dengan nilai tertinggi adalah 100 (**Lampiran 3**). Sekuen yang dipilih adalah sekuen dengan nilai kesamaan tertinggi paling banyak diantara yang lainnya. Dari penentuan ini tujuh sekuen memiliki nilai kesamaan yang sama tinggi yaitu sekuen dengan kode gi|158429299|pdb|2P41| , gi|158429298|pdb|2P40|, gi|158429295|pdb|2P3Q|, gi|158429294|pdb|2P3O|, gi|158429292|pdb|2P3L|, gi|145580412|pdb|2P1D|, gi|29726395|pdb|1L9K| (**Lampiran 4**).

4.1.3 Pencarian Data PDB Struktur 3D Enzim NS5 Metiltransferase

Dari hasil pensejajaran, tujuh sekuen memiliki nilai kesamaan yang sama besar. Untuk menentukan sekuen yang akan dijadikan target pada penelitian ini kode PDB dari ketujuh sekuen tersebut kemudian digunakan sebagai input pada RSCB Protein Data Bank pada alamat <http://www.pdb.org> untuk melihat struktur

tiga dimensinya. Sekuen dengan kode pada NCBI gi|158429299|pdb|2P41 dan kode pada PDB 2P41 dipilih karena memiliki resolusi yang paling baik yaitu 1.80 Å. Sekuen tersebut tersusun atas 305 residu asam amino dan struktur kristalnya didapat dari DENV-2 dengan metode *x-ray diffraction* oleh Egloff et al pada tahun 2007 (**Lampiran 5**).

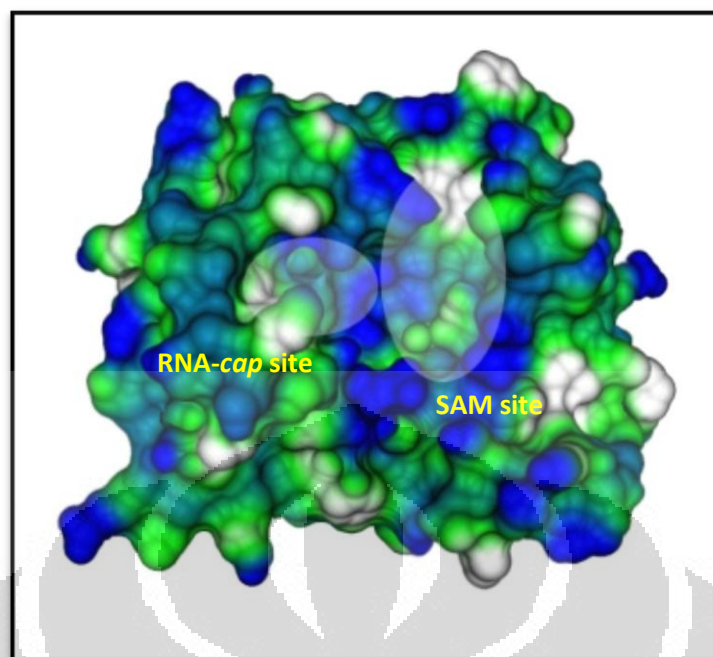


Gambar 4.1 Struktur kristal tiga dimensi enzim NS5 metiltransferase

[Sumber: http://www.pdb.org/pdb/images/2p41_bio_r_500.jpg, diakses November 2011]

4.1.4 Visualisasi Sisi Ikatan Enzim NS5 Metiltransferase

Enzim NS5 metiltransferase virus dengue memiliki dua sisi ikatan yang berperan dalam proses penyerahan gugus metil dari S-Adenosil-Metionin (SAM) dan metilasi RNA virus dengue. Sisi ikatan enzim NS5 metiltransferase kemudian divisualisasikan dengan struktur yang didapatkan dari RSCB Protein Data Bank menggunakan software Molecular Operating Environment (MOE) dengan menu *Surface and Maps* pada bagian *Compute*. Tipe visualisasi permukaan enzim yang dipilih adalah *Conolly (analytic)* dengan pemilihan pewarnaan residu berdasarkan lipofilisitas pada bagian *lipophilicity*. Residu yang berwarna biru merupakan residu yang bersifat hidrofilik, residu yang berwarna hijau merupakan residu hidrofobik dan residu yang ditandai dengan warna putih merupakan residu netral (**Gambar 4.2**).



Gambar 4.2 Visualisasi sisi ikatan enzim NS5 metiltransferase

Podvinec et al (2010), dalam publikasinya menggambarkan sisi ikatan bagi S-adenosil metionin (SAM) dan RNA-*cap*. Residu yang berada pada sisi ikatan bagi SAM adalah Ser 56, Lys 61, Cys 82, Gly 86, Trp 87, Thr 104, Lys 105, Asp 131, Val 132, Phe 133, Asp 146, Ile 147, Lys 181 dan Glu 217 sedangkan untuk RNA-*cap* adalah Lys 14, Leu 17, Asn 18, Leu 20, Lys 22, Phe 25, Lys 29, Ser 150 dan Ser 151.

Residu Lys 61, Asp 146, Lys 181 dan Glu 217 diketahui merupakan empat residu yang memiliki peran penting pada daerah sisi aktif SAM, selain itu keempat residu tersebut merupakan motif yang terdapat pada *flavivirus* lainnya. Benarroch et al, (2004) yang melakukan studi terhadap RNA-*cap* dari dengue metiltransferase menyatakan residu yang memiliki peran signifikan pada sisi ikatan RNA-*cap* yaitu Lys 14, Leu 17, Asn 18, Leu 20, Phe 25, Lys 29, Ser 150 dan Ser 151.

4.1.5 Optimasi Geometri dan Minimasi Energi Enzim NS5 Metiltransferase

Optimasi geometri dan minimasi energi enzim NS5 metiltransferase dilakukan dengan menggunakan *software* Molecular Operating Environment MOE. Tahapan pertama adalah dengan melakukan protonasi terhadap enzim menggunakan menu *protonate 3D*. Protonasi dengan *protonate 3D* akan mengubah enzim dalam tingkat ionisasi sekaligus menampilkan posisi atom hidrogen pada struktur kristal. Hal ini dilakukan karena pada struktur yang terdapat pada *database* tidak memuat atom hidrogen. Setelah dilakukan protonasi terhadap enzim, selanjutnya dilakukan penambahan muatan (*partial charge*) dengan metode yang digunakan adalah *current forcefield. Hydrogen fix* diaplikasikan untuk memperbaiki enzim apabila terdapat hidrogen yang hilang. Kemudian penambahan muatan parsial dilakukan dengan tujuan untuk memastikan bahwa muatan protein telah terprotonasi dengan tepat sesuai dengan kondisi alaminya

Tahapan selanjutnya adalah melakukan minimisasi energi (*Energy Minimize*) pada enzim. Solvasi dipilih dengan disesuaikan terhadap kebutuhan untuk melakukan *docking*. Jenis solvasi yang dipilih yaitu *gas phase*, karena pada tahapan *molecular docking* enzim dibuat dalam keadaan rigid maka perlu dilakukan penghilangan energi solvasi. Selanjutnya minimisasi energi dilakukan dengan pengaturan pada aplikasi potential setup dengan parameter yang digunakan adalah *forcefield. Forcefield* yang digunakan adalah MMFF94x (Merk Molecular Force Field 94x) yang dikembangkan oleh Halgren yang sesuai untuk peptida, protein, DNA dan *drug-like molecule*. Forcefield MMFF94x saat ini banyak digunakan dalam *computational biology* karena penggunaannya yang lebih luas dibandingkan *forcefield* lain, selain itu memiliki keakuratan dalam penempatan posisi atom hidrogen (Panigrahi & Desiraju, 2007). Koordinat awal suatu molekul umumnya diperoleh dari hasil kristalografi sinar-x atau pemodelan struktur tiga dimesnsi yang jarak antara satu atom dengan yang lainnya sangat dekat ataupun sengat jauh dari posisi kesetimbangan. Adanya ketidaksesuaian geometri tersebut menyebabkan terjadinya interaksi yang tidak disukai maupun efek-efek sterik berenergi tinggi yang dapat mengakibatkan system yang disimulasikan menjadi tidak stabil. Maka setelah parameter simulasi disesuaikan

hingga mendekati keadaan nyata, dilakukan proses minimasi sehingga posisi geometri atom yang tidak sesuai dapat dikembalikan sehingga dihasilkan energi potensial terendah bagi sistem (Nurbaiti 2009). Minimisasi energi pada enzim dilakukan dengan menggunakan nilai gradien RMS yang sesuai untuk protein yaitu 0.05 kkal/Å.

4.2 Preparasi Ligan Peptida Siklis

4.2.1 Pemilihan Asam Amino Ligan Peptida Siklis Sisi Ikatan SAM

Residu yang berada pada sisi aktif SAM terdiri dari asam amino bermuatan positif dan negatif, asam amino polar tak bermuatan serta asam amino non polar. Residu tersebut adalah serin, lisin, sistein, glisin, triptofan, treonin, asam aspartat, valin, fenilalanin, isoleusin dan asam glutamat. Asam amino polar, polar bermuatan dan asam amino non polar digunakan untuk dikombinasikan sebagai peptida siklis.

4.2.2 Pemilihan Asam Amino Ligan Peptida Siklis Sisi Ikatan RNA-cap

Residu yang berada pada daerah *pocket* RNA-cap terdiri dari lisin, leusin, asparagin dan fenilalanin. Residu tersebut merupakan asam amino non polar (leusin dan fenilalanin), polar tak bermuatan (asparagin), serta asam amino bermuatan positif (lisin). Asam amino polar, polar bermuatan negatif dan asam amino non polar digunakan untuk dikombinasikan sebagai peptida siklis.

4.2.3 Perancangan Struktur Tiga Dimensi Peptida Siklis Sebagai Inhibitor

Peptida siklis yang dipilih adalah peptida dengan lima asam amino penyusun (pentapeptida) dengan ikatan disulfida yang terbentuk dari asam amino sistein pada bagian ujungnya. Pemilihan pentapeptida dilakukan karena inhibitor dalam bentuk dipeptida dan tripeptida menunjukkan aktivitas mikromolar yang rendah (Yin et al, 2005). Tetrapeptida siklis juga tidak digunakan karena memiliki faktor sterik yang dapat menyebabkannya menjadi tidak stabil dan dapat mengalami kristalisasi pada saat di sintesis (Binghe et al, 2005). Alasan digunakannya ikatan disulfida pada peptida siklis karena ikatan ini dapat menstabilkan protein hingga diatas temperatur 100°C dengan menurunkan efek entropi (Nurbaiti, 2009).

Rancangan inhibitor pentapeptida siklis ini akan terdiri dari dua sistein pada bagian ujung dan tiga asam amino lain yang dikombinasikan pada bagian tengah (**Gambar 4.3**).



Gambar 4.3 Susunan rancangan peptida siklis

Dari hasil kombinasi, peptida siklis yang akan digunakan sebagai inhibitor pada sisi SAM adalah 1635 buah ligan sedangkan untuk sisi RNA-*cap* didapatkan sebanyak 736 buah ligan yang akan digunakan sebagai inhibitor.

Desain struktur tiga dimensi pentapeptida siklis yang akan digunakan sebagai inhibitor dalam *molecular docking* dilakukan dengan menggunakan *software* Chems sketch ACDLabs. Peptida dimodelkan dalam bentuk *zwitter ion* karena gugus karboksilat dan amina di dalam darah dan jaringan lain di dalam tubuh akan mengalami ionisasi (Murray, et al). Pemodelan dalam bentuk *zwitter ion* juga bertujuan agar gugus-gugus peptida dapat berinteraksi dengan asam amino dari enzim (Wuriyani, 2009). Kandidat ligan digambarkan secara dua dimensi kemudian diubah menjadi struktur tiga dimensi dengan menggunakan menu *3D Structure Optimization*. Hasil desain ligan disimpan dalam format MDLmolfile dan kemudian dikonversi ke dalam format MDLmol dengan menggunakan *software* Vega ZZ. Perlakuan tersebut dilakukan dengan tujuan agar nama dari rancangan ligan dapat dikenali oleh *software* MOE pada proses *molecular docking*.

4.2.4 Optimasi Geometri dan Minimisasi Energi Ligan Peptida Siklis

Ligan yang telah dibuat kemudian dibuka dengan *software* MOE dengan menampilkannya dalam *database viewer*. Tahapan pertama dalam optimasi geometri ligan adalah dengan melakukan *wash* dengan tujuan untuk memperbaiki struktur ligan dan mengoreksi posisi atom hidrogen yang kurang tepat. Selanjutnya, ligan di optimasi dengan menggunakan *forcefield* yang sama dengan

enzim yaitu MMFF94x. Kemudian *partial charge* dilakukan untuk pengaturan muatan parsial ligan dengan *forcefield* MMFF94x yang sesuai untuk peptida. Tahapan selanjutnya adalah melakukan minimisasi energi untuk menghilangkan adanya interaksi-interaksi yang tidak diinginkan pada struktur ligan. Minimisasi ini dilakukan dengan nilai RMS gradien 0,001 kkal/Å (Singh et al., 2007).

4.3 Docking Antara Ligan Peptida Siklis Dengan Enzim NS5

Metiltransferase

Enzim NS5 metiltransferase dan ligan yang telah di optimasi dipersiapkan untuk *molecular docking*. Proses ini dilakukan dengan menggunakan aplikasi dock pada software MOE. *Molecular docking* dilakukan untuk memprediksi orientasi ikatan ligan atau molekul kecil dengan target proteinnya serta mengetahui afinitas dan aktivitas molekul kecil (Wulandari., 2010). Proses docking juga dimanfaatkan untuk menyaring sejumlah kandidat inhibitor sehingga diperoleh inhibitor terbaik (Teodore et al., 2001).

Proses *docking* dilakukan antara enzim NS5 metiltransferase virus dengue dengan ligan yang telah dibuat. Docking ini dilakukan terhadap dua target yang merupakan *pocket* dari substrat alami dari NS5 metiltransferase virus dengue. Target pertama adalah daerah sisi ikatan S-Adenosil Metionin (SAM), dengan target residu yang dipilih pada *sequence editor* adalah Ser 56, Lys 61, Cys 82, Gly 86, Trp 87, Thr 104, Lys 105, Asp 131, Val 132, Phe 133, Asp 146, Ile 147, Lys 181 dan Glu 217. Target kedua adalah daerah sisi aktif RNA-*cap* dengan residu yang akan dijadikan target adalah Lys14, Leu17, Asn18, Leu20, Lys22, Phe25, Lys29, Ser 150, dan Ser 151. Dalam proses docking ini enzim NS5 metiltransferase virus dengue dibuat dalam keadaan *rigid* sedangkan ligan dalam keadaan fleksibel sehingga dapat bebas bergerak maupun berotasi (Rachmania, 2010).

Parameter yang diatur dalam proses *docking* meliputi pengaturan fungsi meliputi pengaturan fungsi *scoring* menggunakan London dG. Fungsi *scoring* akan mengukur aktifitas biologi berdasarkan ikatan dan interaksi yang terjadi antara ligan dengan target protein. Fungsi *scoring* pada MOE adalah perhitungan berbasis *forcefield* yang biasanya menghitung dua energi, yaitu energi interaksi ligan reseptor dan energi internal ligan (Nylander., 2007). Fungsi *scoring* London

dG dilakukan dengan menggunakan pengaturan *retain* (tampilan) sebesar 100 tanpa duplikasi (Mazur et al., 2009). *Retain* berfungsi untuk mengatur jumlah konformasi terbaik ligan yang diinginkan (Harganingtyas., 2010). London dG mengukur besarnya energi bebas ikatan ($\Delta G_{\text{binding}}$) dari tiap pose ligan terhadap enzim dengan perhitungan:

$$\Delta G = c + E_{flex} + \sum_{h-bonds} c_{HB} f_{HB} + \sum_{m-lig} c_M f_M + \sum_{atom\ i} \Delta D_i$$

dengan c adalah rerata entropi rotasi dan translasi yang didapat atau dilepaskan, E_{flex} = energi yang menyatakan berkurangnya fleksibilitas dari ligan, c_{HB} = energi dari ikatan hidrogen ideal, f_{HB} = ukuran ketidaksempurnaan geometri dari ikatan hidrogen, c_M = energi dari *ideal metal ligation*, f_M = ukuran ketidaksempurnaan geometri dari *metal ligations*, dan D_i = energi desolvasi atom ke- i (MOE tutorial, 2008).

Parameter lain yang dilakukan pada MOE adalah *triangle matcher*. *Triangle matcher* merupakan *placement method* yang merupakan pengaturan *default* pada *software* MOE 2008. Metode ini digunakan untuk menunjukkan gerak acak ligan dalam sisi aktif enzim untuk menghasilkan orientasi ikatan yang paling baik berdasarkan *charge group* dan *spatial fit* (Cook et al., 2009). *Triangle matcher* diatur dengan banyaknya jumlah *pose default* dari program MOE yaitu 1000 (Feher & William, 2009). Tahapan *refinement* juga disertakan untuk melakukan perbaikan lebih lanjut. *Refinement* dilakukan dengan menggunakan *forcefield* dengan alasan hasil yang diperoleh akan lebih akurat dibandingkan dengan GridMI yang menggunakan kalkulasi elektrostatik pada proses minimisasi (MOE, 2008). Pengaturan dari *refinement forcefield* menggunakan *default* dari *software* dengan *pocket cut off* 6Å, yaitu jarak reseptor yang diikutsertakan pada proses *docking* (Feher et al., 2009). Setelah itu, *retain* (tampilan) terakhir hasil *refinement* diatur dengan jumlah satu sehingga hanya diperoleh satu konformasi yang paling baik dari tiap ligan (Rachmania, 2010).

4.4 Analisis Hasil Docking

Proses *docking* dapat menghasilkan tiga hal, pertama yaitu orientasi dan posisi yang dihasilkan suatu ligan sebagai inhibitor terhadap enzim. Kemudian

yang kedua adalah identifikasi senyawa yang memiliki afinitas terhadap protein dari *database* senyawa yang tersedia serta yang ketiga adalah prediksi afinitas suatu molekul terhadap enzim yang dijadikan target (Rachmania, 2010).

Dalam proses docking ligan terhadap NS5 metiltransferase dilakukan sejumlah tahapan *screening* untuk menyaring kandidat ligan terbaik. *Screening* pertama dilakukan terhadap 1635 ligan peptida siklis untuk target sisi ikatan SAM dan 736 ligan peptida siklis untuk target sisi ikatan RNA-*cap* (**Lampiran 6 , 7**). Dari data yang dihasilkan kemudian dipilih 10% ligan terbaik berdasarkan pada parameter nilai energi bebas ikatan ($\Delta G_{\text{binding}}$). Ligan dengan target sisi ikatan SAM diperoleh 164 ligan sedangkan ligan dengan target sisi ikatan RNA-*cap* diambil sebanyak 74 ligan.

Ligan hasil *screening* pertama kemudian di *docking* ulang terhadap NS5 metiltransferase sesuai dengan targetnya masing-masing, 164 ligan untuk sisi aktif SAM dan 74 ligan untuk sisi aktif RNA-*cap* (**Lampiran 8, 9**). Data yang dihasilkan kemudian dianalisa dan ditentukan 15 ligan terbaik untuk sisi ikatan SAM dan 15 ligan terbaik untuk sisi aktif RNA-*cap* berdasarkan pada parameter energi bebas ikatan ($\Delta G_{\text{binding}}$) dan interaksi yang baik dengan reseptor (**Lampiran 13, 14**). Ligan terbaik yang dihasilkan kemudian di *docking* ulang dengan menyertakan standar (**Lampiran 10, 11**). Standar yang digunakan untuk sisi ikatan SAM adalah SAM (S-Adenosil-Metionin) yaitu substrat alami sisi ikatan ini dan SAH (S-Adenosil-Homosistein) yang merupakan *by product* dari SAM sekaligus senyawa analog yang digunakan Podvinec et al (2010) sebagai inhibitor sisi ikatan ini. Untuk sisi ikatan RNA-*cap*, standar yang digunakan yaitu RTP (Ribavirin Triposfat) yang merupakan senyawa analog yang juga digunakan oleh Podvinec et al (2010) (**Lampiran 12**).

Data hasil *screening* yang diperoleh kemudian dianalisa dengan parameter yang sama yaitu energi ikatan ($\Delta G_{\text{binding}}$), interaksi dengan reseptor dan logaritma konstanta inhibisi yang paling tinggi. Ligan terbaik berdasarkan parameter yang telah ditentukan tersebut diambil sebanyak 4 buah ligan untuk masing-masing sisi ikatan SAM maupun RNA-*cap*. Ligan ini kemudian di *docking* satu persatu terhadap enzim target.

4.4.1 Energi Bebas Ikatan dan Konstanta Inhibisi (K_i)

Energi bebas ikatan ($\Delta G_{\text{binding}}$) yang dihasilkan pada proses docking merupakan nilai dari afinitas ligan terhadap enzim dalam keadaan kesetimbangan saat keduanya membentuk kompleks protein-ligan. Afinitas yang tinggi dari suatu ligan terhadap protein dihasilkan dari gaya intermolekular yang besar antara ligan dan protein sedangkan afinitas yang rendah muncul ketika hanya ada gaya intermolekular yang kecil antara ligan dan protein (Harganingtyas, 2010).

Nilai energi bebas ikatan ($\Delta G_{\text{binding}}$) terkuantifikasi oleh konstanta aktivitas biologis K_A dengan asumsi dalam keadaan kondisi termodinamika yang setimbang untuk formasi kompleks protein-ligan [EI] (Kitchen et al., 2004). Hubungan antara nilai energi bebas ikatan ($\Delta G_{\text{binding}}$) dengan konstanta inhibisi (K_i) dinyatakan dengan persamaan termodinamika berikut:

$$\Delta G^\circ = -RT \ln K_A \quad K_A = K_i^{-1} = \frac{[EI]}{[E][I]}$$

Dengan R dan T berturut-turut adalah tetapan gas ideal dan suhu dalam Kelvin, E adalah enzim, L adalah ligan dan EL adalah kompleks enzim-ligan yang terbentuk. Persamaan termodinamika diatas menggambarkan bahwa semakin kuat ikatan pada kompleks protein-ligan yang terbentuk maka akan semakin rendah harga energi bebas ikatan ($\Delta G_{\text{binding}}$). Hal ini juga menandakan bahwa konformasi ligan yang terbentuk pada kompleks tersebut berada pada konformasi yang paling disukai.

Nilai energi bebas ikatan ($\Delta G_{\text{binding}}$) pada *software* MOE dilambangkan dengan S yang menunjukkan jumlah akhir perhitungan dari tahapan *docking*. Nilai energi bebas ikatan ($\Delta G_{\text{binding}}$) ini memiliki nilai yang sama dengan E_{refine} yang merupakan energy total dari ikatan kompleks *docking*. Kompleks protein-ligan dapat dikatakan memiliki afinitas ikatan yang baik apabila memiliki nilai K_i yang berada pada skala mikromolar. Pada *software* MOE nilai K_i ditampilkan sebagai nilai pK_i dengan skala mikromolar. Semakin besar nilai pK_i yang dimiliki ligan terhadap enzim menunjukkan nilai K_i yang semakin kecil. Semakin kecil nilai K_i yang dimiliki oleh ligan menggambarkan kesetimbangan reaksi yang cenderung kearah pembentukan kompleks enzim-ligan. Nilai pK_i dapat digunakan untuk mengetahui tingkat kestabilan dalam pembentukan kompleks enzim dan ligan.

Secara tidak langsung, nilai pKi berkaitan pula dengan banyaknya ikatan hidrogen yang terbentuk dengan residu, semakin banyak dan kuat ikatan hidrogen yang terbentuk antara ligan dengan enzim maka nilai pKi akan semakin besar. Data hasil *docking* empat buah ligan terbaik untuk masing-masing sisi ikatan ditampilkan pada **Tabel 4.1** dan **Tabel 4.2**

Tabel 4.1 Data energi bebas ikatan dan konstanta inhibisi sisi ikatan SAM

Ligan	$\Delta G_{\text{binding}}$ (kkal/mol)	pKi
TWY	-30,7216	13,687
YWH	-29,9735	13,972
YDH	-24,9373	15,175
TRY	-22,1155	11,787
Standar SAM*	-17,8521	11,298
Standar SAH *	-15,1564	11,102

Keterangan: * standar

Tabel diatas menampilkan data energi bebas ikatan ($\Delta G_{\text{binding}}$) dan pKi empat ligan terbaik untuk sisi ikatan SAM hasil *screening* sebelumnya. Keempat ligan tersebut memiliki energi bebas ikatan ($\Delta G_{\text{binding}}$) yang lebih negatif dari standar. Untuk ligan standar sendiri, SAM yang merupakan substrat alami diketahui memiliki energi bebas ikatan ($\Delta G_{\text{binding}}$) dan afinitas yang lebih baik dibandingkan dengan *by product* nya yaitu SAH. SAM memiliki nilai energi bebas ikatan ($\Delta G_{\text{binding}}$) sebesar -17,8521 dan nilai pKi sebesar 11,298 sedangkan SAH memiliki nilai $\Delta G_{\text{binding}}$ sebesar -15,1564 dan pKi sebesar 11,102. Hal ini menunjukkan bahwa SAM berinteraksi lebih baik daripada SAH yang merupakan *by product* dan SAH dapat dikatakan memiliki daya inhibisi yang lebih lemah daripada substrat alaminya. Untuk ligan peptida, diketahui ligan YDH memiliki nilai pKi yang paling besar diantara ligan lainnya yaitu sebesar 15,175. Nilai ini menunjukkan bahwa diantara ligan peptida lainnya yang memiliki nilai energi bebas ikatan ($\Delta G_{\text{binding}}$) yang lebih rendah daripada ligan standar, ligan YDH memiliki afinitas yang lebih baik dan berinteraksi lebih kuat dalam membentuk kompleks dengan enzim NS5 metiltransferase.

Tabel 4.2 Data energi bebas ikatan dan konstanta inhibisi sisi ikatan RNA-*cap*

Ligan	$\Delta G_{\text{binding}}$ (kkal/mol)	pKi
YEF	-22,8976	13,385
YDF	-22,5276	11,667
YQN	-20,9224	11,176
TNY	-18,4686	9,361
Standar RTP*	-14,4011	14,343

Keterangan: * standar

Tabel diatas menampilkan data empat ligan terbaik sisi ikatan RNA-*cap* hasil *screening* sebelumnya yang memiliki energi bebas ikatan ($\Delta G_{\text{binding}}$) yang lebih negatif dari ligan standar. Dari tabel diatas terlihat bahwa semua ligan peptida ternyata memiliki nilai konstanta inhibisi yang lebih rendah daripada standar. Hal ini menandakan bahwa ligan standar memiliki afinitas yang lebih kuat terhadap ligan daripada ligan peptida siklis.

4.4.2 Ikatan Hidrogen dan Kontak Residu

Selain nilai energi bebas ikatan ($\Delta G_{\text{binding}}$) dan konstanta inhibisi (Ki), parameter yang dapat dilihat dalam proses *docking* yaitu interaksi antara protein dan ligan yang terbentuk. Salah satu interaksinya yaitu ikatan hidrogen. Ikatan hidrogen didefinisikan sebagai gaya intermolekul atau intramolekul yang terjadi antara atom yang memiliki keelektronegatifan tinggi dengan atom hidrogen yang terikat secara kovalen pada suatu atom elektronegatif (Nurbaiti, 2009). Interaksi yang terjadi antara ligan dan enzim diamati dengan menggunakan menu *ligand interaction* pada *software* MOE. Interaksi yang dapat diamati pada *software* adalah sesuai dengan pengaturan *pocket cut off* yaitu interaksi pada rentang jarak reseptor sebesar 6Å. Ikatan hidrogen sendiri terjadi dengan kriteria jarak antara hidrogen dengan atom elektronegatif berada dalam rentang 2,5 – 3,5 Å. Ikatan hidrogen memberikan kontribusi terhadap afinitas ligan dengan enzim, karena terjadinya interaksi elektrostatik antara atom oksigen atau nitrogen milik ligan dengan atom hidrogen residu asam amino enzim atau sebaliknya (Rachmania 2010). Ikatan hidrogen yang terjadi ditampilkan pada **Tabel 4.3** dan **Tabel 4.4**.

Tabel 4.3 Interaksi ligan dengan enzim NS5 metiltransferase sisi ikatan SAM

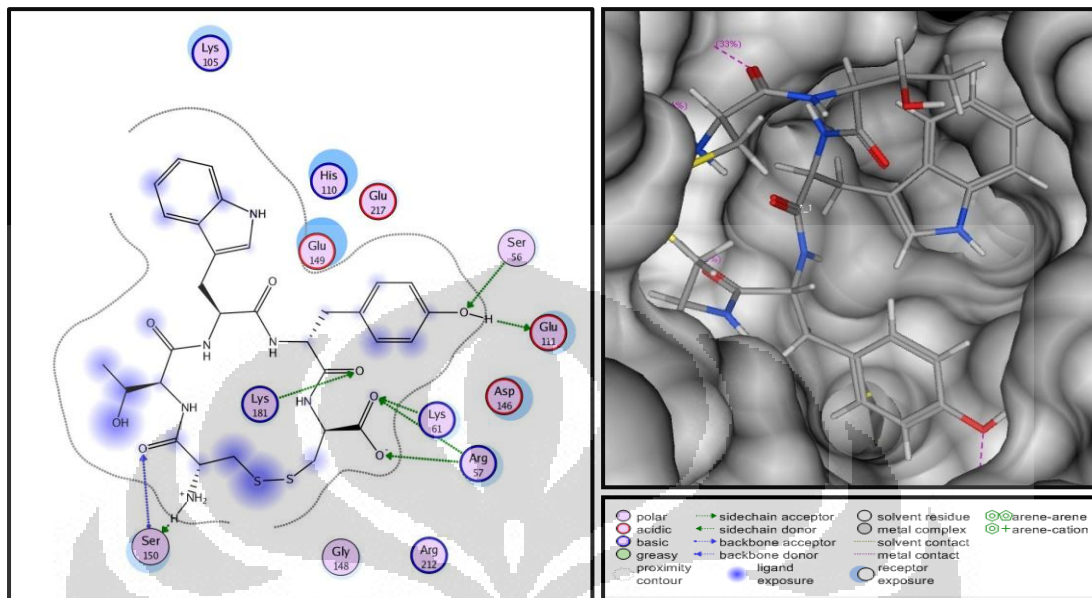
Ligan	Ikatan Hidrogen dengan enzim NS5 metiltransferase	Kontak residu dengan enzim NS5 metiltransferase
TWY	Ser 56, Glu 111, Ser 150, Ser 56, Arg 57, Lys 61 , Ser 150, Lys 181	Ser 56, Arg 57, Lys 61 , Lys 105, His 110, Glu 111, Asp 146 , Gly 148, Glu 149, Ser 150, Lys 181
YWH	Thr 104, Glu 111, Glu 149, Arg 57, Arg 57, Lys 61 , Lys 181	Arg 57, Lys 61 , Gly 81, Gly 83, Arg 84, Thr 104, Lys 105, Glu 111, Gly 148, Glu 149, Lys 181 , Glu 217
YDH	Asp 146 , Glu 217 , Ser 56, Arg 57, Arg 57, Arg 57, Lys 61 , Lys 181 , Arg 212	Lys 42, Ser 56, Arg 57, Gly 58, Lys 61 , Arg 84, Glu 111, Asp 146 , Lys 181, Ser 211, Arg 212, Thr 215, Glu 217
TRY	Gly 109, Asp 146 , Glu 149, Glu 217 , His 110, Lys 181	Lys 81, Trp 87, Gly 109, His 110, Glu 111, Asp 146 , Gly 148, Glu 149, Gly 181 , Thr 215, Glu 217
Standar SAM*	Asp 146 , Arg 57, Arg 57, Lys 61 , His 110,	Arg 57, Lys 61 , Gly 81, Thr 104, Lys 105, His 110, Glu 111, Asp 146 , Ile 147, Glu 149
Standar SAH *	Asp 146 , Arg 57, Arg 57, Lys 61 , His 110,	Arg 57, Lys 61 , Gly 81, Gly 83, Thr 104, Lys 105, His 110

Ket: * standar ; residu yang dicetak merah merupakan residu katalitik

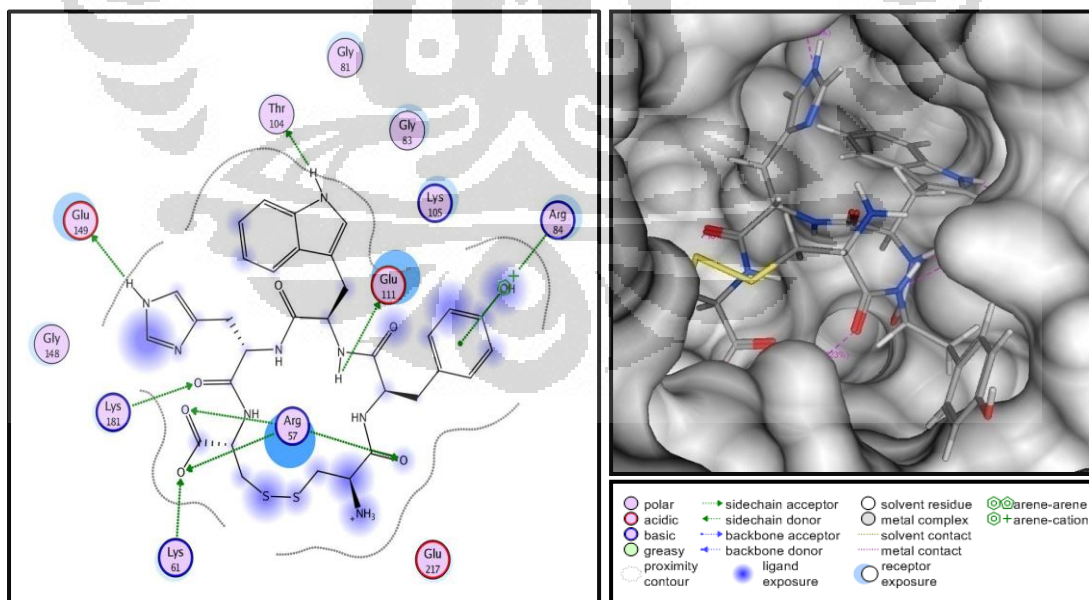
Dari tabel diatas dapat terlihat interaksi yang terjadi antara ligan dan sisi ikatan SAM. Ligan TWY, YWH, YDH dan TRY membentuk masing-masing 8, 7, 6 dan 5 ikatan hidrogen dengan residu enzim NS5 metiltransferase, sedangkan standar SAM dan SAH hanya membentuk 5 ikatan hidrogen dengan residu yang sama. Dari interaksi tersebut, keempat ligan tersebut membentuk ikatan hidrogen dengan katalitik tetrad (Lys 61, Lys 181, Asp 146, dan Glu 217) masing-masing sebanyak 2, 3, 4, 3 ikatan hidrogen. Dari keempat ligan, ligan YDH memiliki ikatan hidrogen yang lebih banyak daripada ligan lainnya, selain itu ikatan hidrogen terjadi tepat pada empat residu katalitik enzim. Motif katalitik tetrad ini juga diketahui terdapat pada kebanyakan *flavivirus* dan memiliki peran dalam membantu proses metilasi oleh enzim NS5 metiltransferase (Zhou et al., 2007).

Selain interaksi ikatan hidrogen, analisis hasil *docking* juga dapat dilihat dari kontak residu antara protein dengan ligan. Interaksi non-kovalen atau non-ikatan (*non-bonded interaction*) yang terjadi antara protein dan ligan dapat meningkatkan afinitas ligan terhadap protein. Interaksi non-ikatan merepresentasikan interaksi fleksibel di antara pasangan atom dan partikel. Dua jenis interaksi non-ikatan paling umum yang dapat mengakibatkan perubahan energi potensial adalah interaksi elektrostatik dan interaksi van der Waals (Harganingtyas, 2010).

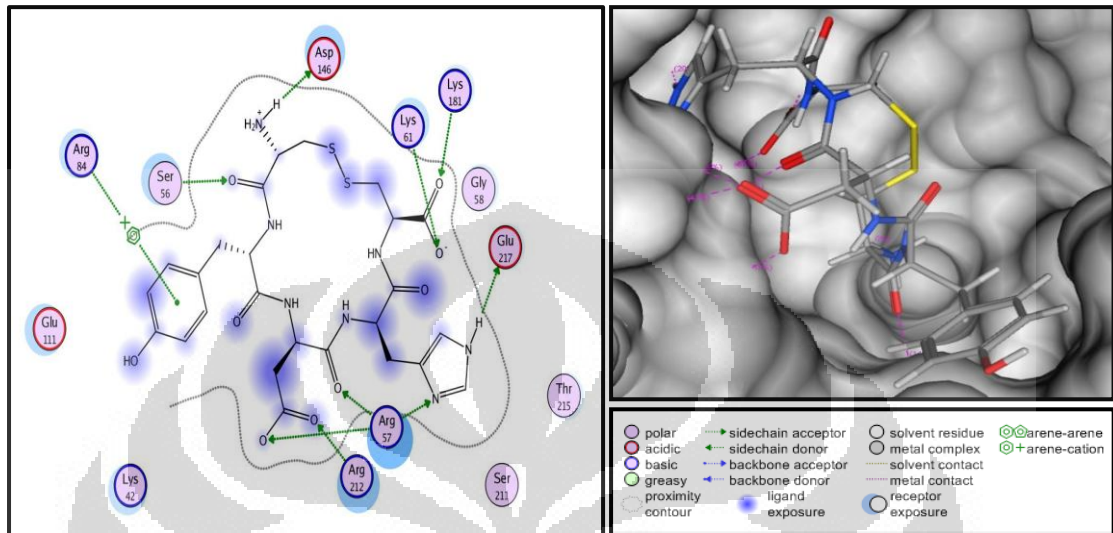
Ligan TWY, YWH, YDH dan TRY masing-masing memiliki kontak residu sebanyak 11, 12, 13 dan 11 buah. Dari kontak residu tersebut, semua ligan memiliki tiga atau lebih interaksi dengan residu yang merupakan residu katalitik. Ligan standar SAM memiliki kontak residu sebanyak 10 buah termasuk 2 didalamnya merupakan residu katalitik sedangkan SAH hanya memiliki kontak dengan 7 residu dan hanya terdapat 1 residu katalitik didalamnya, keempat ligan TWY, YWH, YDH dan TRY dapat dinyatakan memiliki interaksi yang lebih baik (**Lampiran 15-20**). Berikut ini adalah visualisasi interaksi antara ligan dengan enzim NS5 metiltransferase virus dengue.



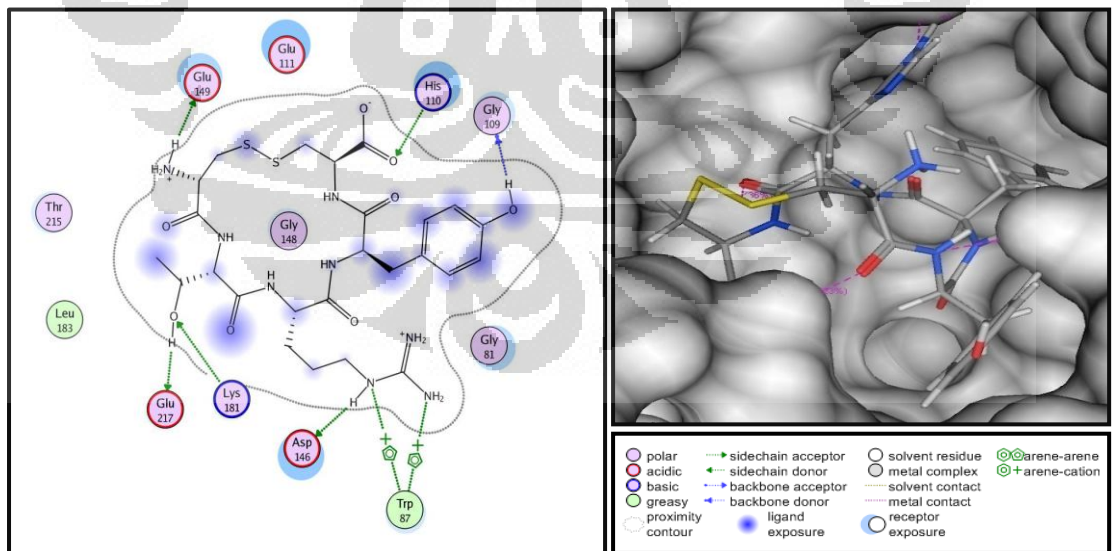
Gambar 4.4 Visualisasi interaksi ligan TWY dengan sisi ikatan SAM



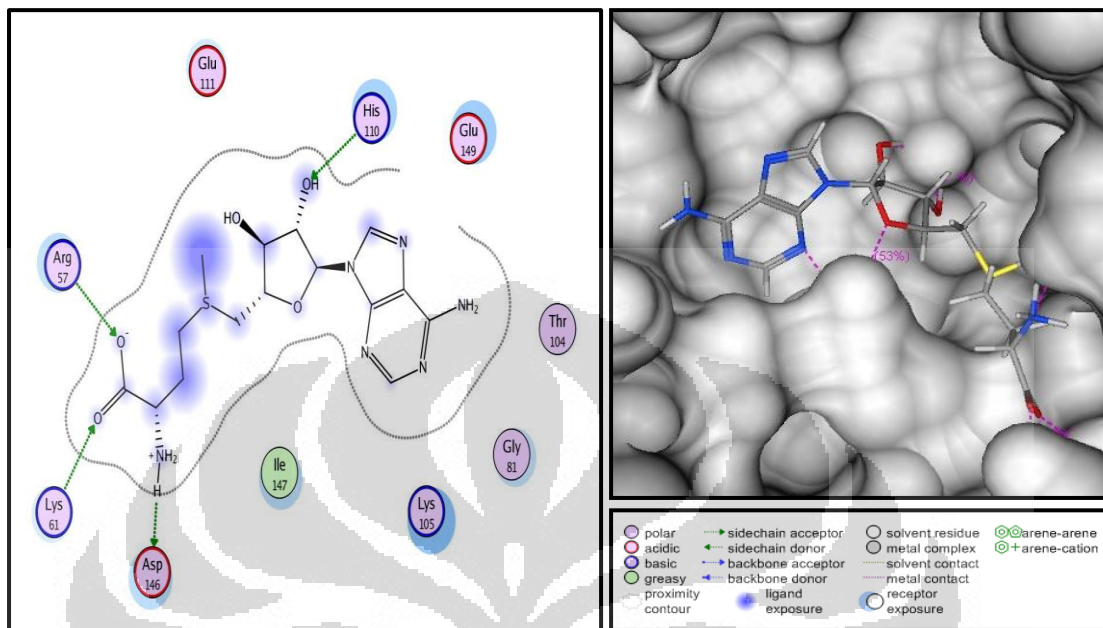
Gambar 4.5 Visualisasi interaksi ligan YWH dengan sisi ikatan SAM



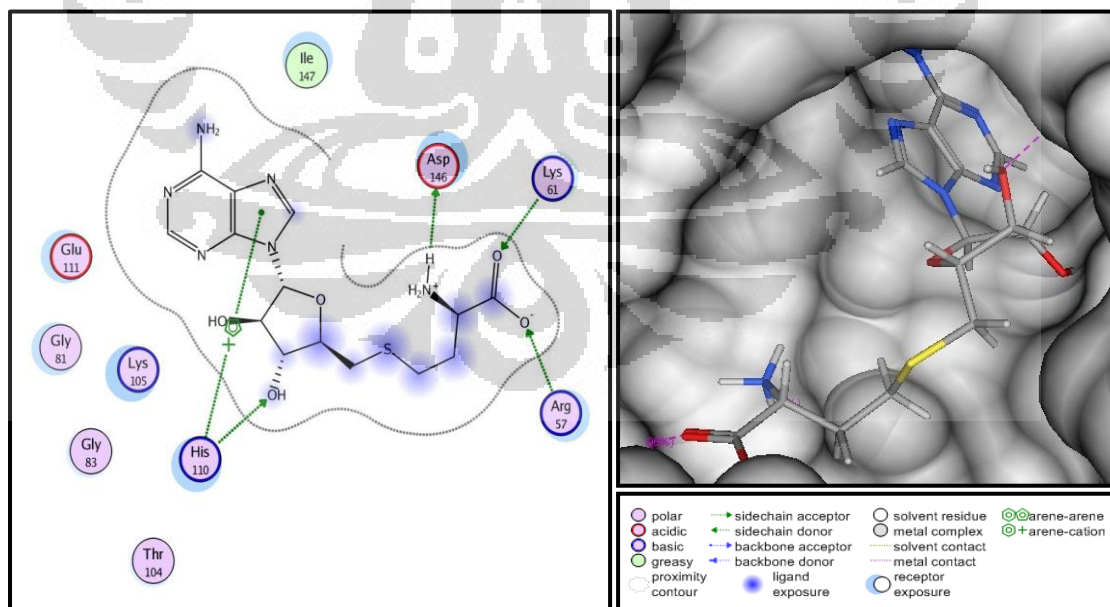
Gambar 4.6 Visualisasi interaksi ligan YDH dengan sisi ikatan SAM



Gambar 4.7 Visualisasi interaksi ligan TRY dengan sisi ikatan SAM



Gambar 4.8 Visualisasi interaksi ligan standar SAM dengan sisi ikatan SAM



Gambar 4.9 Visualisasi interaksi ligan standar SAH dengan sisi ikatan SAM

Tabel 4.4 Interaksi ligan dengan enzim NS5 metiltransferase sisi ikatan RNA-*cap*

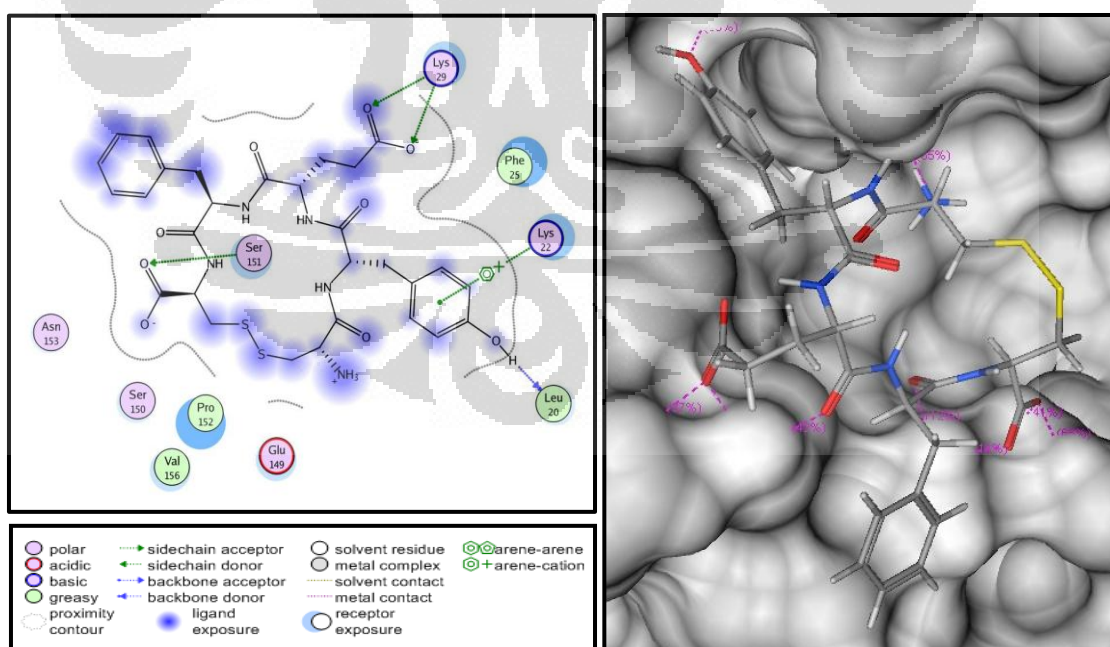
Ligan	Ikatan Hidrogen dengan enzim NS5 metiltransferase	Kontak residu dengan enzim NS5 metiltransferase
YEF	Leu 20, Lys 29, Lys 29, Ser 150	Leu 20 , Lys 22, Phe 25, Lys 29 , Glu 149, Ser 150, Ser 151 , Pro 152, Asn 153, Val 156
YDF	Asn 18, Lys 14 , Lys 22, Gln 26, Lys 29	Lys 14, Leu 17, Asn 18 , Lys 22, Phe 25 , Gln 26, Lys 29, Ser 150, Ser 151 , Pro 152, Ser 214
YQN	Asn 18, Leu 20 , Lys 22, Lys 29, Ser 151	Leu 17, Asn 18, Leu 20, Phe 25, Lys 29, Ser 150, Ser 151 , Pro 152, Ser 214
TNY	Leu 20 , Glu 149, Ser 150, Lys 29	Leu 20 , Gly 21, Lys 22, Phe 25, Lys 29 , Glu 149, Ser 150, Ser 151 , Pro 152,
Standar RTP*	Ser 214, Lys 29, Lys 29 , Arg 57, Arg 57, Lys 61, Lys 61, Lys 181, Arg 212, Arg 212, Ser 214	Lys 29 , Arg 57, Lys 61, Ser 150 , Lys 181, Ser 211, Arg 212, Ser 214, Thr 215, Glu 217

Ket: * standar residu yang dicetak merah merupakan residu penting

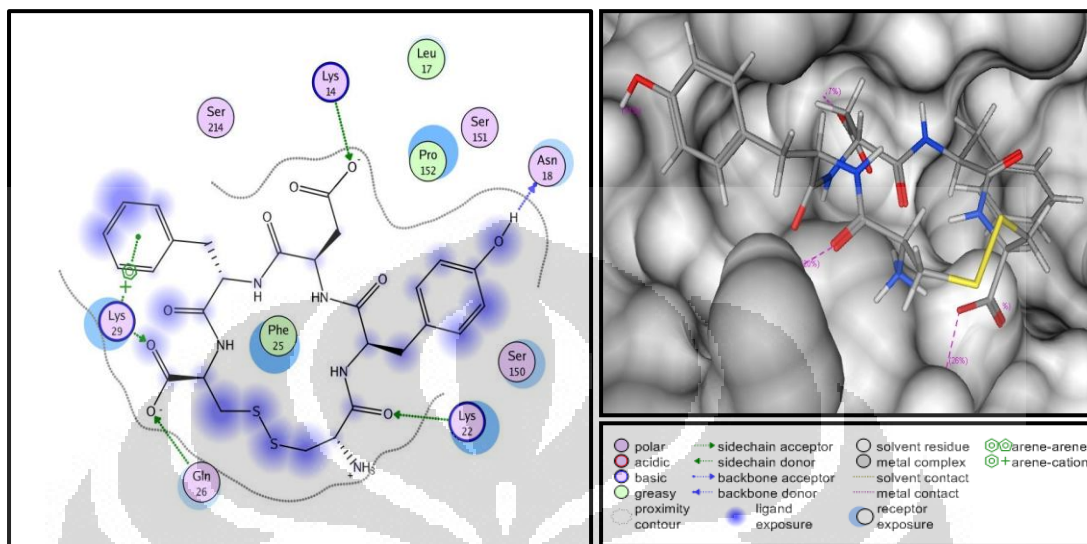
Dari tabel interaksi ligan dengan enzim metiltransferase sisi ikatan RNA-*cap* diatas dapat dilihat bahwa semua ligan peptida memiliki ikatan hidrogen dengan sisi ikatan RNA-*cap*, selain itu semua ligan juga memiliki ikatan hidrogen dengan residu yang memiliki peran penting. Ligan YEF, YDF, YQN dan TNY masing-masing memiliki ikatan hidrogen dengan residu penting sebanyak 4, 3, 4, 3 ikatan. Jumlah ikatan hidrogen yang lebih sedikit pada ligan peptida dibandingkan ligan standar kemungkinan besar karena *pocket* dari sisi ikatan RNA-*cap* memiliki ukuran yang lebih kecil daripada *pocket* SAM, selain itu

bentuk pocket *RNA-cap* juga cenderung datar sehingga tidak banyak interaksi terjadi antara peptida siklis dengan residu disekitar sisi ikatan enzim. Jumlah ikatan hidrogen dengan residu penting antara ligan peptida dengan enzim NS5 metiltransferase diketahui lebih banyak daripada ikatan yang dimiliki ligan standar RTP. Ligan standar RTP hanya memiliki sebanyak 2 ikatan hidrogen dengan residu penting yaitu dua ikatan hidrogen dengan Lys 29. Ligan standar RTP cenderung membentuk ikatan hidrogen dengan banyak residu lainnya diluar residu penting, yaitu sebanyak 9 ikatan hidrogen.

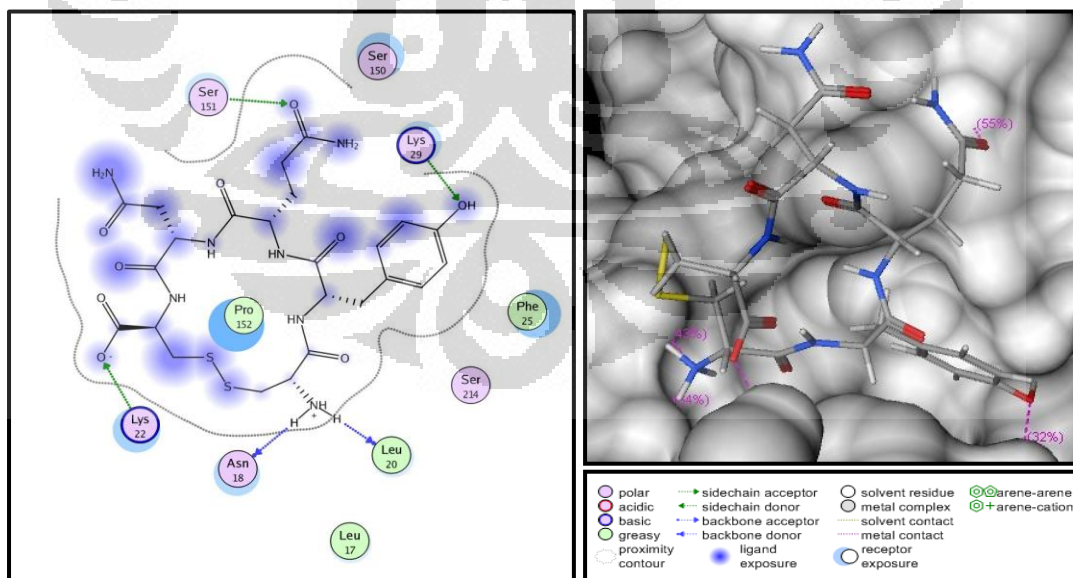
Keempat ligan TWY, YDF, YQN dan TNY memiliki kontak residu sebanyak masing-masing 11, 10, 9 dan 10 buah kontak dengan residu, sedangkan ligan standar RTP memiliki 10 kontak residu. Kontak residu yang terjadi antara ligan dengan enzim NS5 metiltransferase hampir sama jumlahnya dengan kontak residu oleh ligan standar SAH, namun ligan TWY, YDF, YQN dan TNY memiliki kontak dengan residu-residu penting sebanyak 5 buah atau lebih, jumlah ini lebih banyak dibandingkan ligan standar SAH yang hanya memiliki 2 buah kontak dengan residu penting (**Lampiran 21-25**). Visualisasi interaksi antara ligan dengan target sisi ikatan *RNA-cap* ditampilkan pada gambar berikut.



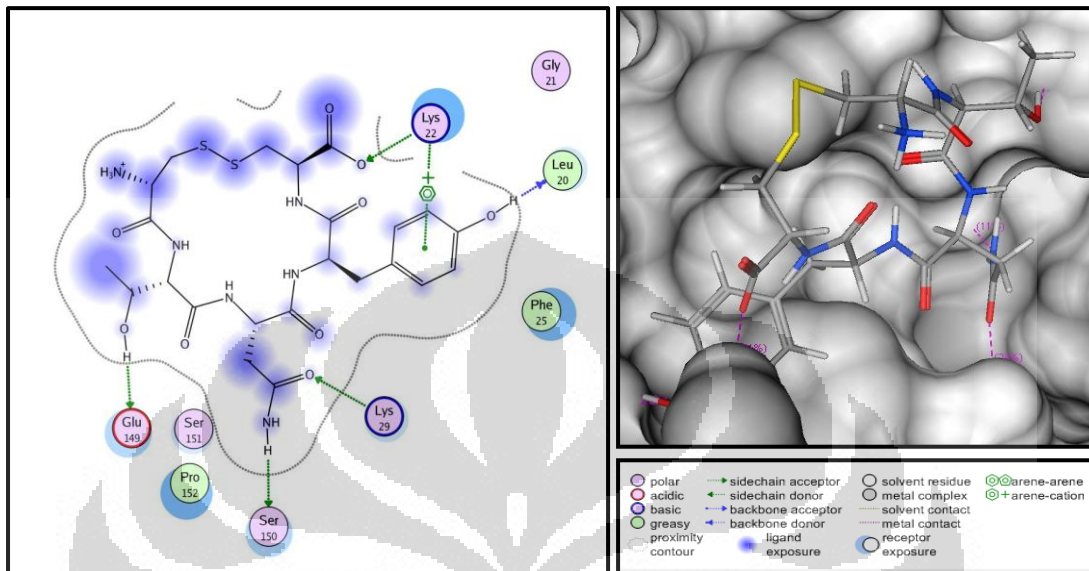
Gambar 4.10 Visualisasi interaksi ligan YEF dengan sisi ikatan *RNA-cap*



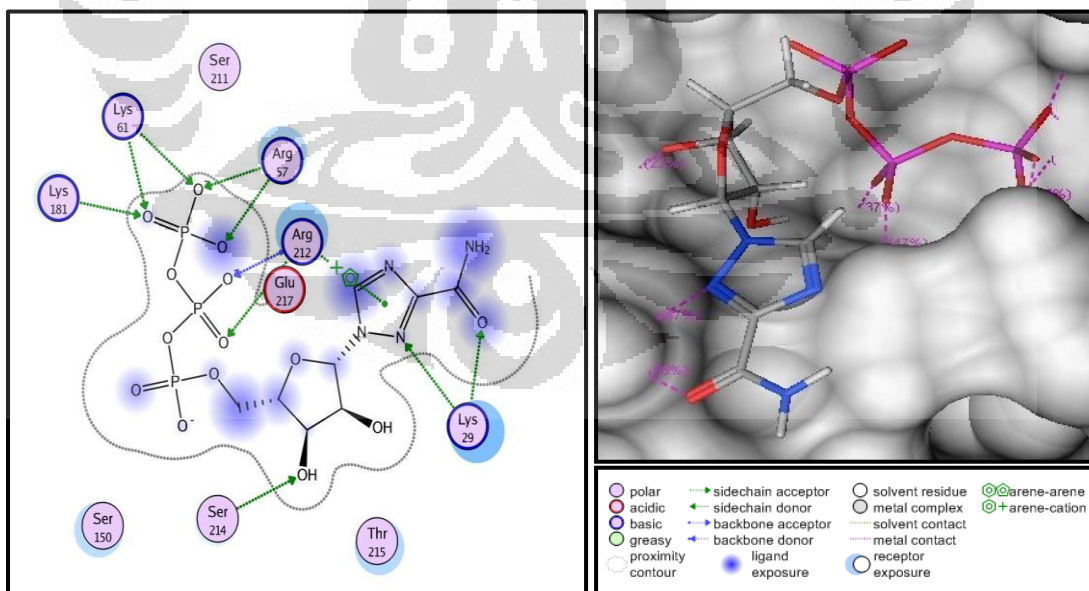
Gambar 4.11 Visualisasi interaksi ligan YDF dengan sisi ikatan RNA-cap



Gambar 4.12 Visualisasi interaksi ligan YQN dengan sisi ikatan RNA-cap



Gambar 4.13 Visualisasi interaksi ligan TNY dengan sisi ikatan RNA-cap



Gambar 4.14 Visualisasi interaksi ligan standar RTP dengan sisi ikatan RNA-cap

4.5 Prediksi Toksisitas

Dalam desain suatu obat, penentuan sifat toksikologi dalam suatu desain obat perlu dilakukan. Hal ini bertujuan untuk memprediksi efek yang merugikan bagi suatu spesies makhluk hidup. Studi dengan menggunakan hewan memiliki banyak keterbatasan seperti misalnya waktu dan dana yang dibutuhkan terlalu besar, terbatasnya laboratorium yang memadai dan mampu untuk melakukan studi tersebut serta adanya masalah tentang etika dalam penggunaan hewan sebagai bahan uji (Antonio et al., 2009). Untuk membantu keterbatasan tersebut telah dikembangkan metode penentuan sifat toksikologi dengan menggunakan *software*. Penentuan sifat toksikologi ini menggunakan metode yang disebut dengan *Qualitative or Quantitative Structure-Activity-Relationship* atau dapat disebut QSARs. Penggunaan *software* ini dapat membantu penentuan sifat toksikologi secara lebih cepat dan murah walaupun tidak menjamin kelengkapan dari seluruh data toksikologi yang dibutuhkan.

Ligan terbaik hasil akhir *screening* dan *docking* dianalisa sifat toksikologinya dengan menggunakan *software* Toxtree v2.1.0 dan Osiris Property Explorer. *Software* Toxtree melakukan analisa toksikologi berdasarkan aturan *Benigni/Bossa rulebase* untuk *carcinogenicity* dan *mutagenicity* yang dikembangkan oleh Romualdo Benigni dan Cecilia Bossa dari Instituto Superiore di Sanita, Rome, Italy dan disetujui oleh European Chemical Bureau, Institute for Health and Consumers Protection, European Commission-Joint Research Centre (JRC) pada tahun 2008. Toxtree memperhatikan hal terkait sifat toksikologi antara lain dengan pertimbangan ada atau tidaknya suatu *structural alerts* (SAs) yang bersifat *genotoxic* maupun *nongenotoxic* dan penentuan secara QSARs (Harganingtyas, 2010). Aturan Benigni dan Bossa ini melihat toksisitasnya berdasarkan keberadaan gugus-gugus yang berpotensi mengandung sifat mutagenik dan karsinogenik dalam senyawa uji tersebut (Nindyapati, 2010).

Tabel 4.5 Hasil prediksi toksisitas ligan sisi ikatan SAM menggunakan Toxtree

	SAM*	SAH*	TWY	YWH	YDH	TRY
<i>Structural alert for genotoxic carcinogenicity</i>	Yes	Yes	No	No	No	No
<i>Structural alert for nongenotoxic carcinogenicity</i>	No	No	No	No	No	No
<i>Potential carcinogen based on QSAR</i>	No	No	No	No	No	No
<i>Potential S.typhimurium TAI100 mutagen based on QSAR</i>	No	No	No	No	No	No
<i>Negative for genotoxic carcinogenicity</i>	No	No	Yes	Yes	Yes	Yes
<i>Negative for nongenotoxic carcinogenicity</i>	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes

Keterangan: * ligan standar

Tabel 4.6 Hasil prediksi toksisitas ligan sisi ikatan RNA-cap menggunakan Toxtree

	RTP*	YEF	YDF	YQN	TNY
<i>Structural alert for genotoxic carcinogenicity</i>	No	No	No	No	No
<i>Structural alert for nongenotoxic carcinogenicity</i>	No	No	No	No	No
<i>Potential carcinogen based on QSAR</i>	No	No	No	No	No
<i>Potential S.typhimurium TAI100 mutagen based on QSAR</i>	No	No	No	No	No
<i>Negative for genotoxic carcinogenicity</i>	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes
<i>Negative for nongenotoxic carcinogenicity</i>	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes

Keterangan: *ligan standar

Dari hasil *toxicological prediction* menggunakan *software* Toxtree terlihat semua ligan peptida baik target SAM maupun RNA-*cap* tidak memiliki *structural alerts* (SAs) yang bersifat *genotoxic* maupun *nongenotoxic* dan juga dengan pendekatan QSARs, semua ligan tidak bersifat mutagenik maupun karsinogenik. Hal yang sama juga terjadi pada ligan standar untuk target RNA-*cap* yaitu RTP. RTP tidak memiliki *structural alerts* (SAs) yang bersifat *genotoxic* maupun *nongenotoxic* sedangkan ligan standar untuk target SAM yaitu SAH diketahui memiliki *structural alerts* (SAs) yang bersifat *nongenotoxic* dan memiliki potensi sebagai senyawa karsinogen.

Analisa toksisitas berikutnya dilakukan dengan menggunakan Osiris Property Explorer. Prediksi dengan menggunakan Osiris Property Explorer, ditunjukkan dengan kode warna. Hasil analisa toksisitas dan *drug property* dari ligan target SAM dan target RNA-*cap* ditunjukkan pada tabel berikut.

Tabel 4.7 Hasil prediksi toksisitas ligan sisi ikatan SAM menggunakan Osiris Property Explorer

	SAM*	SAH*	TWY	YWH	YDH	TRY
<i>Mutagenic</i>	Kuning	Kuning	Hijau	Hijau	Hijau	Hijau
<i>Tumorigenic</i>	Hijau	Hijau	Hijau	Hijau	Hijau	Hijau
<i>Irritant</i>	Hijau	Hijau	Hijau	Hijau	Hijau	Hijau
<i>Reproductive effective</i>	Kuning	Kuning	Hijau	Hijau	Hijau	Hijau
<i>Druglikeness</i>	-13,82	-13,57	-0,70	-0,09	-0,74	-0,77
<i>Drug Score</i>	0,25	0,27	0,38	0,40	0,38	0,38

Keterangan: * ligan standar

Tabel 4.8 Hasil prediksi toksisitas ligan sisi ikatan RNA-*cap* menggunakan Osiris Property Explorer

	RTP*	YEF	YDF	YQN	TNY
<i>Mutagenic</i>	Hijau	Hijau	Hijau	Hijau	Hijau
<i>Tumorigenic</i>	Hijau	Hijau	Hijau	Hijau	Hijau
<i>Irritant</i>	Hijau	Hijau	Hijau	Hijau	Hijau
<i>Reproductive effective</i>	Kuning	Hijau	Hijau	Hijau	Hijau
<i>Druglikeness</i>	-27,98	0,20	0,31	-1,22	1,46
<i>Drug Score</i>	0,32	0,47	0,45	0,36	0,56

Keterangan: * ligan standar

Warna hijau menunjukkan kecenderungan yang tinggi untuk parameter *mutagenic*, *tumorigenic*, *irritant* dan *reproductive effective*, sedangkan warna merah menunjukkan kecenderungan yang tinggi. Ligan standar SAM dan SAH memiliki kecenderungan yang lebih tinggi terhadap sifat *mutagenic* dan *reproductive effective* sedangkan ligan standar RTP tidak memiliki permasalahan baik pada sifat *mutagenic* maupun *tumorigenic*, namun memiliki permasalahan pada *reproductive effective*. Semua ligan peptida, baik untuk target sisi ikatan SAM ataupun RNA-*cap* tidak memiliki kecenderungan terhadap sifat toksisitas. Untuk parameter *drugscore*, penentuannya adalah berdasarkan kalkulasi dari aturan-aturan seperti *Lipinsky rule of five* dan *Veber's rule*.

Untuk parameter *druglikeness* pada *software* Osiris Property Explorer, nilai yang dihasilkan ditentukan dengan melihat kemiripan suatu senyawa baru berdasarkan pada fragmen dari senyawa-senyawa yang sudah ada yang telah dipasarkan sebagai obat. Pada parameter *druglikeness* dan *drug score*, diketahui semua ligan peptida baik untuk target SAM maupun RNA-*cap* memiliki nilai yang lebih baik daripada ligan standar.

BAB 5

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Pada penelitian ini dilakukan perancangan peptida siklis dilakukan untuk mencari inhibitor potensial untuk enzim NS5 metiltransferase virus dengue. Perancangan peptide siklis menghasilkan 1635 ligan untuk sisi aktif SAM dan 736 ligan untuk sisi aktif RNA-*cap*. *Screening* dilakukan sebanyak dengan menggunakan proses *docking* sampai didapatkan 4 kandidat ligan terbaik dibandingkan dengan ligan standar. Kandidat ligan terbaik ini dilakukan analisis dengan membandingkan nilai $\Delta G_{\text{binding}}$, untuk melihat kestabilan kompleks yang terbentuk antara ligan dengan enzim. Ligan TWY, YWH, YDH dan TRY merupakan ligan terbaik yang didapatkan untuk sisi aktif SAM berdasarkan parameter $\Delta G_{\text{binding}}$, interaksi dengan residu serta nilai konstanta inhibisi. Untuk sisi aktif RNA-*cap* diketahui empat ligan terbaik yaitu YEF, YDF, YQN, TNY memiliki nilai inhibisi yang lebih rendah namun memiliki $\Delta G_{\text{binding}}$ dan interaksi dengan residu penting yang lebih baik dibandingkan dengan ligan standar RTP. Sifat toksikologi semua ligan secara keseluruhan diprediksi tidak memiliki toksisitas yang membahayakan.

5.2 Saran

Perlu dilakukan *molecular dynamic simulation* terhadap kandidat ligan terbaik untuk melihat pengaruh dari pelarut dan suhu pada interaksi ligan dengan enzim NS5 metiltransferase. Selain itu dapat pula dibuat rancangan peptida baru yang diharapkan dapat menginhibisi sisi aktif RNA-*cap* dengan lebih baik.

DAFTAR REFERENSI

- Achsanuddin.(2008). *Introduction to molecular docking: A very brief and general overview*
- Ahmadi, Maftuhatul Jannah. (2009). *Peran Bioinformatika Dalam Kedokteran*.Malang
- Apriyanti, Nissia. (2010). Karya utama sarjana Kimia UI. *Simulasi dinamika molekul kompleks nS3-NS2B protease virus dengue dengan inhibitor potensial peptide siklis disulfida*. Departemen Kimia FMIPA-UI.
- Ayoub M, Scheidegger D. (2006). *Peptide Drug,Overcoming The Challenges, Growing Business*. Chem Today 24: 46-48.
- Altschul, S.F. (1990). *Basic Local Alignment Search Tool*. Journal of Molecular Biology. 215:403-410.
- Altschul, S.F. (1997). Gapped-BLAST and PSI-BLAST: *a new generation of protein database search programs*. *Nucleic Acid Research*. 25: 3389-3402
- Baxevanis, A.D., and Oulette, B.F.F. (2005). *Bioinformatics: A Practical Guide to the Analysis of Genes and Prootein 2nd Edition*. Willey InterScience. USA.
- Benarroch D, et al. (2004) *A structural basis for the inhibition of the NS5 dengue virus mRNA 2'-Omethyltransferase domain by ribavirin 5'-triphosphate*. J Biol Chem 2004,279(34):35638-35643
- Chiu WW, Kinney RM & Dreher TW .(2005). *Control of Translation by the 5- and 3-Terminal Regions of the Dengue Virus Genome*. J. Virol. 79, 8303–8315.

- Cook, I.T et al. (2009). Structural rearrangement of SULT2A1: effects on dehydroepiandrosterone and raloxifene sulfation. *Horm Mol Biol Clin Invest* 2010;1;(2):81-87
- Feher, M. & William, C. I. (2009). *Effect of input differences on the result of docking calculations*. J. Chem. Model., 49, 1704 – 1714
- Funkhouser, T. (2007). Lecture: *Protein-ligand docking methods*. Princeton University.
- Geiss, B.J., et al. (2011). *A High-throughput Screening Assay For The Identification of Flavivirus NS5 Capping Enzyme GTP-binding Inhibitors: Implications For Antiviral Drug Development*. J Biomol Screen. 2011 Sep;16(8):852-61.
- Geldenhuis, W.J., et al. (2006). *Optimizing the Use of Open-Source Software Applications in Drug Discovery*. Drug Discovery Today (3/4): 127-132
- Gubernator, J. (1998). *Modification of The Captured Volume and The Stability of Liposomes As Drug Carriers by Resorcinolic Lipids and Their Derivatives*. PhD Thesis, Department of Lipids and Liposomes, University of Wroclaw, Wroclaw.
- Guglani, L. and S.K Kabra.(2005). *T-cell immunopathogenesis of dengue virus infection*. Dengue Bull., 29: 58-69
- Harganingtyas, Rahayu. (2010). Karya utama sarjana Kimia UI : Modifikasi (1R,2R,3R,5S)-(-)-Isopinocampheylamine sebagai Inhibitor M2 Proton Channel pada Virus Influenza A Subtipe H1N1 secara *in silico*. Departemen Kimia FMIPA-UI.
- Hiswani. (2003). *Pencegahan dan Pemberantasan Demam Berdarah Dengue*. USU Digital Library
- Huther, A dan Dietrich, U. (2007). *The Emergence of Peptide as Therapeutic Drug for The Inhibition of HIV-1*. AIDS: Rev. 2007;9:208-17

- Kitchen DB, Decornez H, Furr JR, Bajorath J. 2004. *Docking and Scoring in Virtual Screening for Drug Discovery: Methods and Applications*. Nature Reviews :Drug discovery 3 (11): 935–49
- Kirsten, Guido. (2008). *Concept of Pharmacophores and Their Application in Computer Aided Drug Design*. ICS UNIDO Workshop. Trieste, Italy
- Kuhn R.J., et al. (2002). *Structure of dengue virus: implications for flavivirus organization, maturation, and fusion*. Cell 2002;108:717–725.
- Leach, A.R. (2001) *Molecular Modelling: Principles and Applications*, ISBN 0-582-38210-6.
- Lehninger. (2004). *Biochemistry* (4th edition). New York: W.H Freeman and Company.
- Lescar, J., Luo, D., et al.(2008). *Towards the design of antiviral inhibitors against flaviviruses: The case for the multifunctional NS3 protein from Dengue virus as a target*. Antiviral Research 80: 94-101
- Lim S.P., et al. (2008). *A scintillation proximity assay for dengue virus NS5 2'-O-methyltransferase-kinetic and inhibition analyses*. Antiviral Res 2008, 80(3):360-369.
- Lindenbach BD & Rice CM . (2007). *Flaviviridae: The Viruses and Their Replication: In Fundamental Virology* (Knipe DM & Howley PM, eds), pp. 991 1041. Lippincott
- Lucientes, Maria Teresa Gil. (2004). *Protein Docking and Interactions Modeling*
- Melino, Sonia & Paci, Maurizio. (2007). *Progress for Dengue Virus Diseases Towards The NS2B–NS3pro Inhibition for A Therapeutic-Based Approach*. *FEBS Jour.*,: 2986-3002
- MOE tutorial. 2008. Quebec. Canada

- Morens, D. M., Fauci, A. S.(2008). Dengue and hemorrhagic fever: *A Potential threat to public health in the United States*. JAMA, J. Am. Med. Assoc. 2008, 299 (2), 214–216.
- Mount, D.W.(2004). *Bioinformatics: Sequence and genome analysis*. Edisi kedua. New York: CSHL Press.
- Murray, Robert K., Daryl K. Granner, MD., Joe C. Peter A. 2003. *Harper's Illustrated Biochemistry*. McGraw-Hill Companies, Inc. United States of America
- Nash, David B. (2008) Pharmaceutical Research and Manufacturers of America's (PhRMA's) annual review.
- Nindyapati, Bramantya. (2010). *Modifikasi Suberoylanilide hydroxamic acid (SAHA) sebagai inhibitor potensial Histone Deacetylase (HDAC) Kelas II secara in silico*. Departemen Kimia FMIPA UI. Depok
- Noble, et al.(2010). *Strategies for Development of Dengue Virus Inhibitors*. Antiviral Research 85 (2010) 450-462
- Nurbaiti, Santi. (2009). *The Role of Interface Domain Interactions on Thermal Stability of DNA polymerase I ITB-1*. The Open Structural Journal Biology;
- Nylander, Eva. (2007). *Dock Control: a New Integrated Software for Design of Experiments and Molecular Docking: Application to HIV-Protease Inhibitors*. Sweden
- Panigrahi S.K., Desiraju G.R, (2007). *Strong and Weak Hydrogen Bonds in the Protein-ligan Interface*. School of Chemistry, University of Hyderabad, Hyderabad 500 046, India
- Podvinec, et al.(2010). *Novel Inhibitors of Dengue Methyltransferase: Discovery by in Vitro-Driven Virtual Screening on a Computer Desktop Grid*. J Med Chem

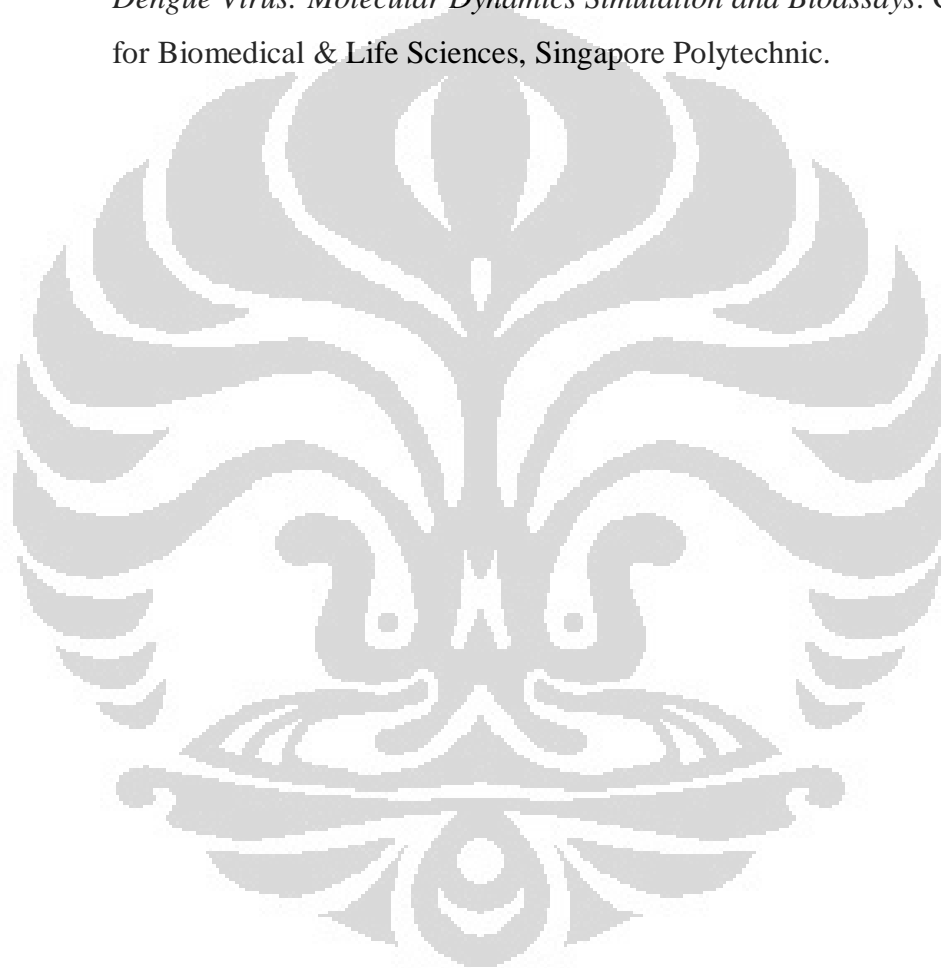
- Qi,Rui-Feng, Ling Zhang, Cheng Wu Chi. (2007). *Biological Characteristics of Dengue Virus and Potential Targets for Drug Design*. Acta Biochimica et Biophysica Sinica.2008; 40: 91-101
- Rachmania, R. A.(2010). Tesis: *Modifikasi Oseltamivir sebagai Penghambat Neuraminidase Virus Influenza A Subtipe H1N1 melalui Docking dan Simulasi Dinamika Molekul*. Depok: Departemen Kimia-FMIPA UI.
- Raekiansyah, M, T.Mirawati Sudiro.(2004). *Genetic Variation Among Dengue Virus that Correlate with Pathogenesis*. Medical Journal of Indonesia;13:190-4
- Sanchez-Vargas., Irma, et al. (2009). *Dengue Virus Type 2 infection of Aedes aegypti Are Modulated by the Mosquito's RNA Interference Pathway*. BMC Microbiol
- Sehgal, Anil. (2006). *New Applications in Discovery, Manufacturing, and Therapeutics*. Tracy Beaudoin
- Singh, S, et al.(2006) . *Molecular Drug Targets and Struktire Based Drug Design: A Holistic Approach*. Biomedical Informatics Publishing Group.
- Suroso, Thomas, Hadinegoro, Wuryadi, S. (2003). *Pencegahan dan Penanggulangan Penyakit Demam Berdarah Dengue*. Depkes RI, Jakarta.
- Tambunan, U.S.F., et al. (2009). *In Silico Analysis of Envelope Dengue Virus-2 and Envelope Dengue Virus-3 Protein as the Backbone of Dengue Virus Tetravalent Vaccine by Using Homology Modeling Method*. OnLine Journal of Biological Sciences 9 (1): 6-16, 2009
- Tambunan, U.S.F., et al. (2010). *Designing Cylic Peptide Inhibitors of NS3-NS2B protease dengue virus*.

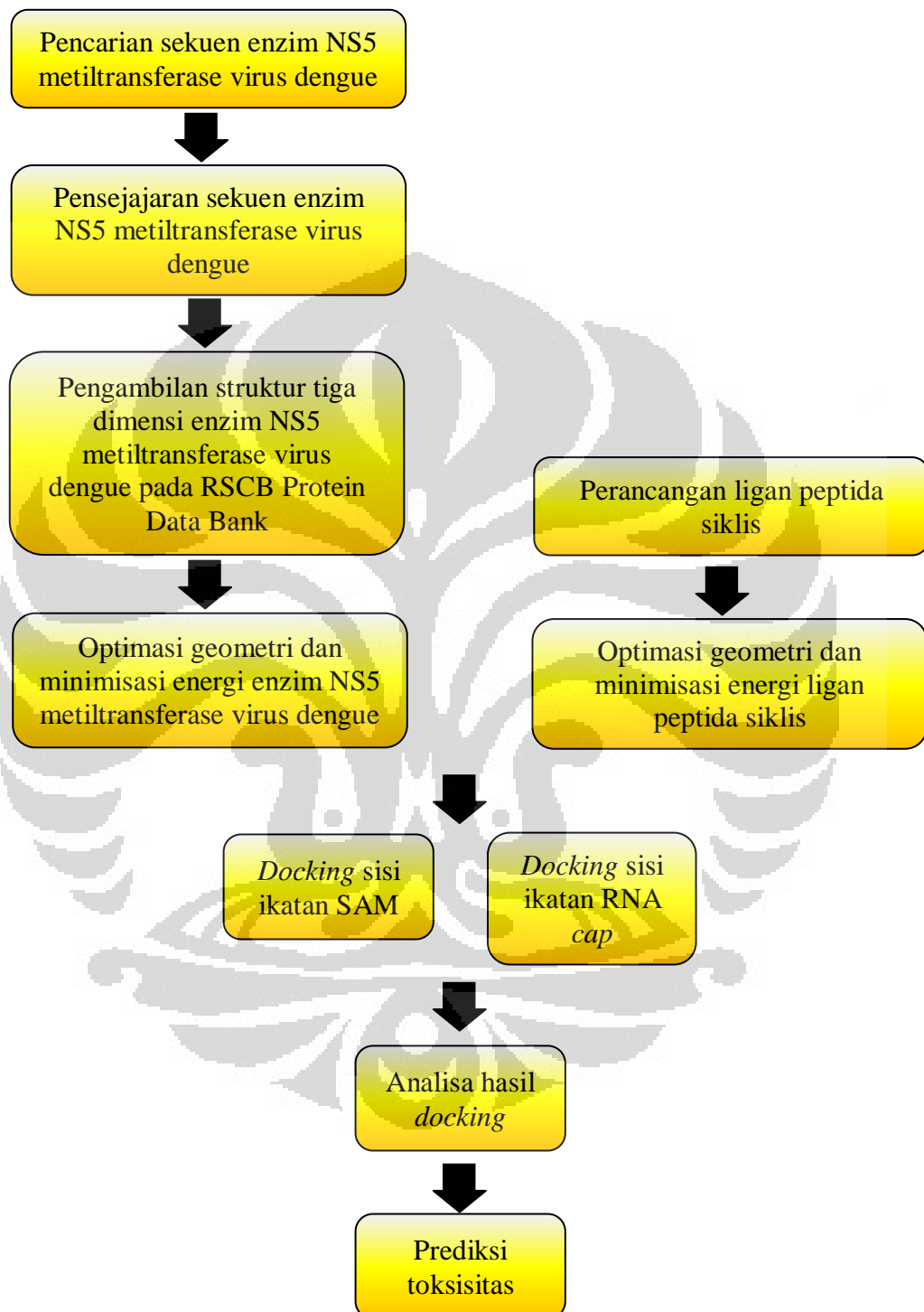
- Teodoro, Miguel L., Phillips, G.N. & Kavraki, L.E. (2001). *Molecular docking: A problem with thousands of degrees of freedom*. IEEE International Conference on Robotics and Automation.
- Tomlinson, S. M., Malmstorm, R. D. & Watowich, S. J. (2009). *New Approaches to Structure-Based Discovery of Dengue Protease Inhibitors*. Infection Disorders-Drug Targets: 000-000.
- Tomlinson, S.M. Watowich, S.J. (2010). *Anthracene-based Inhibitors of Dengue Virus NS2B-NS3 Protease*. Elsevier Antiviral Research
- Umareddy, I., et al.(2007). *Dengue Virus Serotype Infection Specifies the Activation of the Unfolded Protein Response*. Virology Journal. Doi:10.1186/1743-422X-4-91.
- Vazquez et al. (2009). *Monoclonal Antibody to Dengue Capsid Protein. Its Application in Dengue Studies*. Departement of virology; PAHO/WHO Collaborating Center for the study of Dengue and its Vector; “Pedro Kouri” Tropical Medicine Institute; Habana, Cuba.
- WHO. (2007). SEARO WHO report
- Wulandari, Evi Kristin. (2010). *Karya Pascasarjana Kimia : Analisis Interaksi Histone Deacetylase (HDAC) Kelas II Homo Sapiens Dengan Suberoyllanilide Hydroxamic Acids (SAHA) dan Trichostantin A (TSA)*. Depok: Departemen Kimia FMIPA UI.
- Yin, J et al. (2005). *Genetically Encoded Short Peptide Tag for Versatile Protein Labeling by Sfp Phosphopantetheinyl Transferase*. Proc. Natl. Acad. Sci. U SA .102, 15815-20.

Zhang W, et al. (2003). *Visualization of Membrane Protein Domains by Cryo-Electron Microscopy of Dengue Virus*. *Nat Struct Biol*. Nov. Epub 2003 Oct 5. 2003; 10(11):907–912.

Zhou, Y., et al. (2007). *Structure and Function of Flavivirus NS5 methyltransferase*. *J Virol* 81, 3891–3903.

Zuo, Z., et al. (2008). *Mechanism of NS2B-Mediated Activation of NS3pro in Dengue Virus: Molecular Dynamics Simulation and Bioassays*. Centre for Biomedical & Life Sciences, Singapore Polytechnic.



Lampiran 1. Bagan Kerja Penelitian

Lampiran 2. Hasil pencarian sekuen enzim NS5 metiltransferase virus dengue

The screenshot shows a web browser window displaying the NCBI Protein database search results for the query "dengue methyltransferase". The search results are sorted by default order and show 162 results. The first five results are listed below:

- Chain A, Structure Of The Dengue Virus 2'0 Methyltransferase In Complex With S-Adenosyl Homocysteine And Ribavirin 5' Triphosphate**
295 aa protein
Accession: 1R6A_A GI: 55669630
[GenPept](#) [FASTA](#) [Graphics](#) [Related Sequences](#)
- Chain A, Crystal Structure Of Dengue Methyltransferase In Complex With 7megpppg2'ome And S-Adenosyl-L-Homocysteine**
305 aa protein
Accession: 2P41_A GI: 158429299
[GenPept](#) [FASTA](#) [Graphics](#) [Related Sequences](#) [Identical Proteins](#)
- Chain A, Crystal Structure Of Dengue Methyltransferase In Complex With 7megpppg**
305 aa protein
Accession: 2P40_A GI: 158429298
[GenPept](#) [FASTA](#) [Graphics](#) [Related Sequences](#) [Identical Proteins](#)
- Chain A, Crystal Structure Of Dengue Methyltransferase In Complex With Gpppg And S-Adenosyl-L-Homocysteine**
305 aa protein
Accession: 2P3Q_A GI: 158429295
[GenPept](#) [FASTA](#) [Graphics](#) [Related Sequences](#) [Identical Proteins](#)
- Chain A, Crystal Structure Of Dengue Methyltransferase In Complex With 7megpppa And S-Adenosyl-L-Homocysteine**
305 aa protein

The search details section shows the query: `dengue[All Fields] AND methyltransferase[All Fields]`. The filter your results section shows 162 total results, with 0 Bacteria, 154 Related Structures, and 4 RefSeqs. The top organisms section lists: Dengue virus (136), Dengue virus 4 (99), Dengue virus 2 (21), Dengue virus 3 (9), Yellow fever virus 17D (6), and All other taxa (33).

Lampiran 3. Multiple sequence alignment dengan clustalW2

Firefox

Align Sequences using ClustalW2 | EBI

http://www.ebi.ac.uk/Tools/msa/clustalw2/

EMBL-EBI

Enter Text Here Find

Databases Tools Research Training Industry About Us Help Site Index

EBI Tools Multiple Sequence Alignment ClustalW2

ClustalW2 - Multiple Sequence Alignment

ClustalW2 is a general purpose multiple sequence alignment program for DNA or proteins.

New version! Clustal Omega is now available for protein sequences - give it a try!

Use this tool

STEP 1 - Enter your input sequences

Enter or paste a set of Protein sequences in any supported format:

```
>g1|55669630|pdb|1R6A|A
Chain A, Structure Of The Dengue Virus 2'0 Methyltransferase In
Complex
With S-Adenosyl Homocysteine And Ribavirin 5' Triphosphate
GSNIGETLGEKWKSRNALGKSEFOIYKKSIGIQEVDRTILAKEGIKRGETDHHAVSRGSAKLRWFVERNL
VIFEGKVVDLGCGRGGWSYYCGGLKNVREVKGLIKGGPGHEEPIPMSTYGNLVLRLQSGVDVFFIPPERC
D
```

Or, upload a file:

STEP 2 - Set your Pairwise Alignment Options

Alignment Type: Slow Fast

The default settings will fulfill the needs of most users and, for that reason, are not visible.

(Click here, if you want to view or change the default settings.)

The default settings will fulfill the needs of most users and, for that reason, are not visible.

(Click here, if you want to view or change the default settings.)

STEP 3 - Set your Multiple Sequence Alignment Options

The default settings will fulfill the needs of most users and, for that reason, are not visible.

(Click here, if you want to view or change the default settings.)

Clustal related literature

Search for Clustal related literature in Medline... [more](#)

Lampiran 4. Hasil *multiple sequence alignment* enzim NS5 metiltransferase

SeqA	Name	Length	SeqB	Name	Length	Score
1	gi 55669630 pdb 1R6A A	295	2	gi 158429299 pdb 2P41 A	305	99.0
1	gi 55669630 pdb 1R6A A	295	3	gi 158429298 pdb 2P40 A	305	99.0
1	gi 55669630 pdb 1R6A A	295	4	gi 158429295 pdb 2P3Q A	305	99.0
1	gi 55669630 pdb 1R6A A	295	5	gi 158429294 pdb 2P3O A	305	99.0
1	gi 55669630 pdb 1R6A A	295	6	gi 158429292 pdb 2P3L A	305	99.0
1	gi 55669630 pdb 1R6A A	295	7	gi 145580412 pdb 2P1D A	305	99.0
1	gi 55669630 pdb 1R6A A	295	8	gi 29726395 pdb 1L9K A	305	99.0
1	gi 55669630 pdb 1R6A A	295	9	gi 307776287 pdb 2XBM A	263	76.0
1	gi 55669630 pdb 1R6A A	295	10	gi 313754536 pdb 3P97 A	267	74.0
1	gi 55669630 pdb 1R6A A	295	11	gi 313754534 pdb 3P8Z A	267	74.0
1	gi 55669630 pdb 1R6A A	295	12	gi 219689243 pdb 3EVG A	275	93.0
2	gi 158429299 pdb 2P41 A	305	3	gi 158429298 pdb 2P40 A	305	100.0
2	gi 158429299 pdb 2P41 A	305	4	gi 158429295 pdb 2P3Q A	305	100.0
2	gi 158429299 pdb 2P41 A	305	5	gi 158429294 pdb 2P3O A	305	100.0
2	gi 158429299 pdb 2P41 A	305	6	gi 158429292 pdb 2P3L A	305	100.0
2	gi 158429299 pdb 2P41 A	305	7	gi 145580412 pdb 2P1D A	305	100.0
2	gi 158429299 pdb 2P41 A	305	8	gi 29726395 pdb 1L9K A	305	100.0
2	gi 158429299 pdb 2P41 A	305	9	gi 307776287 pdb 2XBM A	263	75.0
2	gi 158429299 pdb 2P41 A	305	10	gi 313754536 pdb 3P97 A	267	74.0
2	gi 158429299 pdb 2P41 A	305	11	gi 313754534 pdb 3P8Z A	267	74.0
2	gi 158429299 pdb 2P41 A	305	12	gi 219689243 pdb 3EVG A	275	93.0
3	gi 158429298 pdb 2P40 A	305	4	gi 158429295 pdb 2P3Q A	305	100.0
3	gi 158429298 pdb 2P40 A	305	5	gi 158429294 pdb 2P3O A	305	100.0
3	gi 158429298 pdb 2P40 A	305	6	gi 158429292 pdb 2P3L A	305	100.0
3	gi 158429298 pdb 2P40 A	305	7	gi 145580412 pdb 2P1D A	305	100.0
3	gi 158429298 pdb 2P40 A	305	8	gi 29726395 pdb 1L9K A	305	100.0
3	gi 158429298 pdb 2P40 A	305	9	gi 307776287 pdb 2XBM A	263	75.0
3	gi 158429298 pdb 2P40 A	305	10	gi 313754536 pdb 3P97 A	267	74.0
3	gi 158429298 pdb 2P40 A	305	11	gi 313754534 pdb 3P8Z A	267	74.0

(lanjutan)

3	gi 158429298 pdb 2P40 A	305	12	gi 219689243 pdb 3EVG A	275	93.0
4	gi 158429295 pdb 2P3Q A	305	5	gi 158429294 pdb 2P3O A	305	100.0
4	gi 158429295 pdb 2P3Q A	305	6	gi 158429292 pdb 2P3L A	305	100.0
4	gi 158429295 pdb 2P3Q A	305	7	gi 145580412 pdb 2P1D A	305	100.0
4	gi 158429295 pdb 2P3Q A	305	8	gi 29726395 pdb 1L9K A	305	100.0
4	gi 158429295 pdb 2P3Q A	305	9	gi 307776287 pdb 2XBM A	263	75.0
4	gi 158429295 pdb 2P3Q A	305	10	gi 313754536 pdb 3P97 A	267	74.0
4	gi 158429295 pdb 2P3Q A	305	11	gi 313754534 pdb 3P8Z A	267	74.0
4	gi 158429295 pdb 2P3Q A	305	12	gi 219689243 pdb 3EVG A	275	93.0
5	gi 158429294 pdb 2P3O A	305	6	gi 158429292 pdb 2P3L A	305	100.0
5	gi 158429294 pdb 2P3O A	305	7	gi 145580412 pdb 2P1D A	305	100.0
5	gi 158429294 pdb 2P3O A	305	8	gi 29726395 pdb 1L9K A	305	100.0
5	gi 158429294 pdb 2P3O A	305	9	gi 307776287 pdb 2XBM A	263	75.0
5	gi 158429294 pdb 2P3O A	305	10	gi 313754536 pdb 3P97 A	267	74.0
5	gi 158429294 pdb 2P3O A	305	11	gi 313754534 pdb 3P8Z A	267	74.0
5	gi 158429294 pdb 2P3O A	305	12	gi 219689243 pdb 3EVG A	275	93.0
6	gi 158429292 pdb 2P3L A	305	7	gi 145580412 pdb 2P1D A	305	100.0
6	gi 158429292 pdb 2P3L A	305	8	gi 29726395 pdb 1L9K A	305	100.0
6	gi 158429292 pdb 2P3L A	305	9	gi 307776287 pdb 2XBM A	263	75.0
6	gi 158429292 pdb 2P3L A	305	10	gi 313754536 pdb 3P97 A	267	74.0
6	gi 158429292 pdb 2P3L A	305	11	gi 313754534 pdb 3P8Z A	267	74.0
6	gi 158429292 pdb 2P3L A	305	12	gi 219689243 pdb 3EVG A	275	93.0
7	gi 145580412 pdb 2P1D A	305	8	gi 29726395 pdb 1L9K A	305	100.0
7	gi 145580412 pdb 2P1D A	305	9	gi 307776287 pdb 2XBM A	263	75.0
7	gi 145580412 pdb 2P1D A	305	10	gi 313754536 pdb 3P97 A	267	74.0
7	gi 145580412 pdb 2P1D A	305	11	gi 313754534 pdb 3P8Z A	267	74.0
7	gi 145580412 pdb 2P1D A	305	12	gi 219689243 pdb 3EVG A	275	93.0
8	gi 29726395 pdb 1L9K A	305	9	gi 307776287 pdb 2XBM A	263	75.0
8	gi 29726395 pdb 1L9K A	305	10	gi 313754536 pdb 3P97 A	267	74.0

(lanjutan)

8	gi 29726395 pdb 1L9K A	305	11	gi 313754534 pdb 3P8Z A	267	74.0
8	gi 29726395 pdb 1L9K A	305	12	gi 219689243 pdb 3EVG A	275	93.0
9	gi 307776287 pdb 2XBM A	263	10	gi 313754536 pdb 3P97 A	267	99.0
9	gi 307776287 pdb 2XBM A	263	11	gi 313754534 pdb 3P8Z A	267	99.0
9	gi 307776287 pdb 2XBM A	263	12	gi 219689243 pdb 3EVG A	275	77.0
10	gi 313754536 pdb 3P97 A	267	11	gi 313754534 pdb 3P8Z A	267	100.0
10	gi 313754536 pdb 3P97 A	267	12	gi 219689243 pdb 3EVG A	275	76.0
11	gi 313754534 pdb 3P8Z A	267	12	gi 219689243 pdb 3EVG A	275	76.0



Lampiran 5. Data sekuen NS5 metiltransferase virus dengue

Chain A, Crystal Structure Of Dengue Methyltransferase In Complex With 7megpppg2'ome And S-Adenosyl-L-Homocysteine

PDB: 2P41_A
[FASTA](#) [Graphics](#)

[Go to:](#)

LOCUS 2P41_A 305 aa linear VRL 24-SEP-2008
 DEFINITION Chain A, Crystal Structure Of Dengue Methyltransferase In Complex With 7megpppg2'ome And S-Adenosyl-L-Homocysteine.
 ACCESSION 2P41_A
 VERSION 2P41_A GI:158429299
 DBSOURCE pdb; molecule 2P41, chain 65, release Nov 16, 2007; deposition: Mar 11, 2007; class: Viral Protein,Transferase; source: Mol_id: 1; Organism_scientific: Dengue Virus Type 2; Organism_common: Virus; Strain: Type 2 New Guinea; Gene: Nsp5; Expression_system: Escherichia Coli; Expression_system_strain: Rosetta Plyss; Expression_system_vector_type: Plasmid; Expression_system_plasmid: Pqe30; Exp. method: X-Ray Diffraction.

KEYWORDS .
 SOURCE Dengue virus 2
 ORGANISM [Dengue virus 2](#)
 Viruses; ssRNA positive-strand viruses, no DNA stage; Flaviviridae; Flavivirus; Dengue virus group.

REFERENCE 1 (residues 1 to 305)
 AUTHORS Egloff,M.P., Decroly,E., Malet,H., Selisko,B., Benarroch,D., Ferron,F. and Canard,B.
 TITLE Structural and functional analysis of methylation and 5'-RNA

[SecStr](#) /note="strand 7"
 225..231
 /sec_str_type="sheet"
[SecStr](#) /note="strand 8"
 237..251
 /sec_str_type="helix"
[SecStr](#) /note="helix 8"
 257..263
 /sec_str_type="sheet"
[Region](#) /note="strand 9"
 260..>305
 /region_name="Flavi_NS5"
 /note="Flavivirus RNA-directed RNA polymerase; pfam00972"
 /db_xref="CDD:110005"

ORIGIN
 1 mrgshhhhh gsnigetlge kwksrlnalg ksefqiyyks giqevdrtla kegikrgtd
 61 hhavrgsak lrwfvnrlv tpegkvvdig cgrgswayyc gglknvrevk gltkggpghe
 121 epipmstygw nlvrlqsgvd vffipperod tllodigess pnptveagrt lrVlnlvenw
 181 lsntqfcvk vlnpymssvi ekmealqrkh ggalvrnpls rnsthemyv w snasgnives
 241 vmiarmlin rftmrhkkat yepdvdlgsg trngieset pnddiigkri ekikqehets
 301 whydq
 //

You are here: [NCBI](#) > [Proteins](#) > [Protein Database](#) [Write to the Help Desk](#)

Lampiran 6. Data screening 1635 ligan target sisi ikatan SAM

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
1	TVR.mol	1,543	-35.5281	3.5293	-64.7520	-14.1742	-35.5281
2	YYN.mol	249	-32.4998	0.5744	-63.0487	-12.6784	-32.4998
3	NWH.mol	819	-32.4695	1.2000	-47.3949	-16.6633	-32.4695
4	KKV.mol	575	-31.8404	3.4001	-19.6032	-15.8229	-31.8404
5	GRY.mol	371	-31.6744	3.8000	-74.4211	-15.4201	-31.6744
6	HHW.mol	437	-31.1007	4.0143	-53.4565	-14.5267	-31.1007
7	YWR.mol	229	-30.7982	4.5494	-50.8001	-12.5481	-30.7982
8	YDN.mol	1,586	-30.1763	1.8000	-63.1732	-15.8261	-30.1763
9	YDY.mol	1,591	-29.9271	1.5705	-90.9334	-16.8836	-29.9271
10	TKY.mol	1,452	-29.8660	1.8010	40.3472	-17.7016	-29.8660
11	YFN.mol	1,610	-29.7097	3.3141	-67.0643	-14.1068	-29.7097
12	YFR.mol	1,612	-29.6613	3.4131	-48.6750	-14.9642	-29.6613
13	TAR.mol	1,363	-29.5288	3.2559	17.1718	-14.2267	-29.5288
14	ERA.mol	272	-29.5155	4.0127	-31.6398	-16.4599	-29.5155
15	RNH.mol	1,063	-29.4922	3.2000	-49.9342	-13.6185	-29.4922
16	ERE.mol	273	-29.0217	3.8001	-61.3128	-18.6380	-29.0217
17	YWN.mol	225	-28.9677	3.3075	-52.5864	-12.9061	-28.9677
18	TWY.mol	1,554	-28.9429	1.5820	-53.7675	-14.3526	-28.9429
19	YKE.mol	21	-28.8602	3.5693	-61.9136	-15.3994	-28.8602
20	YKK.mol	29	-28.4096	2.8081	-48.4666	-17.3133	-28.4096
21	YGK.mol	1,617	-28.3633	1.2003	0.0528	-15.1054	-28.3633
22	YDD.mol	1,579	-28.3114	2.4616	15.2107	-16.8194	-28.3114
23	QQH.mol	931	-28.2724	4.0000	-71.2946	-13.6368	-28.2724
24	YYY.mol	259	-28.2405	4.2092	-49.4159	-12.6620	-28.2405
25	YVN.mol	209	-28.1238	2.0043	-39.3837	-12.2096	-28.1238
26	NHR.mol	715	-28.0339	2.0980	-84.1861	-13.9788	-28.0339
27	SEW.mol	1,167	-27.7464	2.1503	9.5992	-16.9250	-27.7464
28	YLH.mol	49	-27.6932	1.0586	-15.5689	-12.7616	-27.6932
29	QRW.mol	950	-27.6493	2.6000	21.0898	-19.4391	-27.6493
30	SRW.mol	1,287	-27.5661	3.4000	-82.1761	-17.0695	-27.5661
31	THF.mol	1,417	-27.4486	1.6000	-105.029	-13.1547	-27.4486
32	NQH.mol	762	-27.3889	1.8000	-49.0800	-13.5110	-27.3889
33	GER.mol	318	-27.3525	3.6001	-49.9367	-15.2535	-27.3525
34	QQA.mol	927	-27.3174	1.6000	-61.4035	-14.2893	-27.3174
35	YKV.mol	39	-27.2295	2.3075	-8.5331	-13.7854	-27.2295
36	HRW.mol	479	-27.2091	3.7575	-55.6756	-13.1167	-27.2091
37	TQY.mol	1,491	-27.1513	2.9102	-119.788	-17.1244	-27.1513
38	KDI.mol	523	-27.1215	2.1973	-36.2459	-16.1675	-27.1215
39	DWD.mol	169	-27.0570	4.0053	-6.2857	-17.3003	-27.0570
40	QNW.mol	926	-27.0385	2.7443	-66.2430	-16.4506	-27.0385
41	DRI.mol	125	-27.0210	3.0086	7.1156	-14.9499	-27.0210
42	YEA.mol	1,592	-27.0066	3.2000	-33.2719	-15.9102	-27.0066

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
43	HSF.mol	483	-26.9778	1.1975	-7.0769	-14.5843	-26.9778
44	HTW.mol	497	-26.8776	2.2000	-89.3616	-13.0160	-26.8776
45	YKH.mol	25	-26.7335	3.8866	57.3358	-13.5189	-26.7335
46	KWK.mol	645	-26.7194	3.8000	-21.8397	-14.1070	-26.7194
47	YQL.mol	103	-26.6877	1.8000	-44.2094	-12.3066	-26.6877
48	RRV.mol	1,087	-26.6214	3.4068	-25.9818	-14.1233	-26.6214
49	SHF.mol	1,192	-26.6130	2.0958	-88.9213	-13.9000	-26.6130
50	HTF.mol	492	-26.5387	0.6270	-78.5737	-14.1097	-26.5387
51	SYT.mol	1,353	-26.5343	1.5956	-48.3280	-16.2639	-26.5343
52	RYD.mol	1,118	-26.4971	4.0118	-56.0802	-16.4494	-26.4971
53	QWD.mol	981	-26.4798	3.6000	-3.0814	-17.1982	-26.4798
54	YYW.mol	257	-26.4338	2.2000	-49.9928	-13.0867	-26.4338
55	SFR.mol	1,175	-26.3635	2.0000	-34.0682	-14.3911	-26.3635
56	YYF.mol	239	-26.3576	1.1339	-36.3243	-12.4725	-26.3576
57	ETE.mol	287	-26.2892	2.0000	30.6554	-20.1200	-26.2892
58	HFD.mol	423	-26.2744	3.4943	-32.5685	-15.1318	-26.2744
59	YKA.mol	17	-26.2112	1.9164	-59.6351	-18.2865	-26.2112
60	HQD.mol	463	-26.1924	2.8818	-73.6877	-16.6174	-26.1924
61	YTK.mol	185	-26.1753	2.9974	-65.0558	-13.6982	-26.1753
62	TRI.mol	1,497	-26.1446	2.7508	-8.4128	-14.1370	-26.1446
63	GYV.mol	401	-26.1184	3.0000	-71.2704	-16.9532	-26.1184
64	GDH.mol	304	-26.0547	3.2004	-30.1865	-14.7983	-26.0547
65	QRQ.mol	947	-25.9867	2.8152	-32.8096	-14.2934	-25.9867
66	YHE.mol	1,624	-25.9334	2.0000	-43.7527	-14.9200	-25.9334
67	YVY.mol	215	-25.8991	1.7981	-66.7686	-13.1794	-25.8991
68	KDH.mol	522	-25.8392	4.5615	-79.0503	-15.8269	-25.8392
69	DYI.mol	181	-25.8349	0.4000	-18.9704	-21.6644	-25.8349
70	GRK.mol	365	-25.8075	2.6000	-34.5635	-15.9781	-25.8075
71	YRL.mol	131	-25.7760	1.2012	-46.0757	-14.7584	-25.7760
72	EKF.mol	243	-25.7299	3.3343	-78.4187	-17.5464	-25.7299
73	YRQ.mol	135	-25.7121	3.2000	-125.530	-14.0822	-25.7121
74	YKY.mol	43	-25.6140	4.4926	-15.2718	-14.3844	-25.6140
75	YKL.mol	31	-25.5870	4.7305	-26.4122	-18.2095	-25.5870
76	NLH.mol	740	-25.5824	1.7999	-47.4513	-13.7449	-25.5824
77	NTN.mol	805	-25.5715	1.1805	-72.2530	-14.5936	-25.5715
78	SRY.mol	1,288	-25.5385	3.0000	-63.7754	-14.8878	-25.5385
79	NRA.mol	771	-25.4933	2.0000	-20.6097	-14.5923	-25.4933
80	NWE.mol	818	-25.4602	3.0195	-89.1478	-13.9868	-25.4602
81	YHN.mol	1,630	-25.4065	4.1775	-50.7497	-14.4605	-25.4065
82	YDH.mol	1,582	-25.4024	3.1766	-24.0746	-15.5425	-25.4024
83	YSY.mol	171	-25.3644	3.3243	-32.0170	-14.6019	-25.3644
84	NFQ.mol	696	-25.3643	3.0014	-37.2944	-15.3623	-25.3643

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
85	YSF.mol	151	-25.3240	1.2731	-48.7422	-12.7967	-25.3240
86	YAQ.mol	1,575	-25.3183	3.2271	-8.4268	-14.1601	-25.3183
87	QSV.mol	961	-25.3075	1.6000	-43.8781	-15.5825	-25.3075
88	QEH.mol	859	-25.2842	4.7989	-53.6759	-15.5412	-25.2842
89	KQD.mol	594	-25.2766	2.7997	-72.7023	-15.6660	-25.2766
90	RKF.mol	1,048	-25.2723	4.7905	-55.7330	-15.4657	-25.2723
91	HAH.mol	404	-25.2448	3.0000	-79.6184	-12.7691	-25.2448
92	YEL.mol	1,597	-25.2409	2.0529	-56.0668	-17.9510	-25.2409
93	HSV.mol	487	-25.2309	2.7976	13.6018	-13.6375	-25.2309
94	YNI.mol	71	-25.2219	1.1738	-40.7384	-12.6946	-25.2219
95	HRD.mol	472	-25.2160	2.1443	-65.0907	-16.1357	-25.2160
96	TRY.mol	1,506	-25.2105	3.5158	-64.6358	-14.4779	-25.2105
97	TEL.mol	1,388	-25.1956	0.8000	-55.0008	-14.8509	-25.1956
98	NRV.mol	782	-25.1851	2.7997	-97.5226	-15.4683	-25.1851
99	HVE.mol	499	-25.1751	2.8031	111.9393	-15.0955	-25.1751
100	TYF.mol	1,558	-25.1667	4.4428	9.7087	-15.2350	-25.1667
101	THL.mol	1,421	-25.1183	1.4232	-81.2121	-13.1643	-25.1183
102	YQW.mol	113	-25.0720	1.8151	-54.2602	-13.2520	-25.0720
103	YRF.mol	123	-25.0718	3.3974	-52.9937	-14.0530	-25.0718
104	ETF.mol	288	-25.0636	3.0456	-48.0723	-15.5188	-25.0636
105	KNE.mol	584	-25.0558	3.4000	-88.7101	-15.6222	-25.0558
106	RKH.mol	1,049	-25.0053	2.8850	-46.4409	-16.1045	-25.0053
107	YYL.mol	247	-24.9946	1.2000	-83.0419	-16.3403	-24.9946
108	YKW.mol	41	-24.9862	4.5841	-46.9092	-15.0669	-24.9862
109	YLE.mol	47	-24.8974	3.7425	-66.6033	-14.9446	-24.8974
110	YDQ.mol	1,587	-24.8677	3.8030	-66.7276	-15.5939	-24.8677
111	YSQ.mol	163	-24.8102	0.6000	-71.8616	-13.3684	-24.8102
112	HKL.mol	447	-24.7884	2.6834	-95.7111	-14.1774	-24.7884
113	YNY.mol	87	-24.7875	2.8633	-68.6873	-12.6564	-24.7875
114	TRV.mol	1,504	-24.7852	1.4894	-28.5835	-15.6083	-24.7852
115	KSW.mol	625	-24.7174	3.5621	-17.4234	-14.1101	-24.7174
116	SIY.mol	1,214	-24.6937	2.7052	-84.8107	-14.1277	-24.6937
117	RVD.mol	1,109	-24.6657	2.5159	-60.9501	-15.2381	-24.6657
118	NRW.mol	783	-24.6637	2.6290	-74.9694	-13.6544	-24.6637
119	HSL.mol	486	-24.6458	2.8000	-67.5590	-13.5053	-24.6458
120	RWD.mol	1,113	-24.6421	3.3952	-56.6775	-16.8005	-24.6421
121	YTH.mol	182	-24.6381	1.3224	-79.3592	-13.7510	-24.6381
122	RTW.mol	1,108	-24.6156	2.6000	-26.8636	-13.4567	-24.6156
123	TNL.mol	1,469	-24.5991	2.0018	-54.2858	-16.5075	-24.5991
124	SWR.mol	1,337	-24.5734	2.0000	-49.1400	-13.4945	-24.5734
125	YSL.mol	159	-24.5730	3.9669	-52.4650	-12.9344	-24.5730
126	YNL.mol	75	-24.5702	2.9691	-47.9353	-15.7857	-24.5702

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
127	YTY.mol	199	-24.5486	3.1063	-37.8985	-12.2528	-24.5486
128	YRK.mol	129	-24.5428	3.2362	-47.6013	-14.7895	-24.5428
129	HNF.mol	456	-24.5425	2.7979	-30.1121	-14.9451	-24.5425
130	HSH.mol	484	-24.5355	1.1990	-69.2958	-15.5550	-24.5355
131	GRD.mol	362	-24.5320	3.3998	-32.7543	-16.6110	-24.5320
132	NRR.mol	781	-24.4824	3.2808	-53.6132	-16.4648	-24.4824
133	YWH.mol	221	-24.4770	2.4065	-51.5941	-12.0629	-24.4770
134	SHL.mol	1,196	-24.4703	3.4823	-57.2890	-13.6292	-24.4703
135	YLD.mol	45	-24.4575	2.0324	-52.8712	-15.2517	-24.4575
136	EHE.mol	226	-24.4435	4.9713	24.9363	-18.7784	-24.4435
137	DSF.mol	139	-24.4027	3.7297	-58.6271	-16.7547	-24.4027
138	KNH.mol	586	-24.3999	3.5888	-108.467	-14.5706	-24.3999
139	SQK.mol	1,263	-24.3978	3.0000	-29.9398	-14.8981	-24.3978
140	DQW.mol	115	-24.3952	3.7301	-61.2505	-17.2210	-24.3952
141	TNW.mol	1,475	-24.3882	2.8692	-44.2508	-13.0765	-24.3882
142	YDL.mol	1,585	-24.3860	2.6869	-65.3134	-15.1213	-24.3860
143	HYF.mol	507	-24.3814	1.3244	-57.0724	-13.8517	-24.3814
144	HHA.mol	429	-24.3778	0.6000	-73.9712	-13.4087	-24.3778
145	SIK.mol	1,208	-24.3724	0.9153	9.8929	-16.0654	-24.3724
146	QEW.mol	866	-24.3618	2.5935	-86.1687	-17.7012	-24.3618
147	KGR.mol	549	-24.3536	3.1953	-82.2687	-14.3826	-24.3536
148	KKF.mol	569	-24.3463	3.8000	-38.1026	-15.4011	-24.3463
149	RTI.mol	1,104	-24.3439	2.1993	-36.7247	-14.8589	-24.3439
150	SYH.mol	1,345	-24.3379	2.2320	-76.9129	-14.5508	-24.3379
151	RQV.mol	1,077	-24.3378	2.0289	5.2118	-14.5326	-24.3378
152	YTF.mol	179	-24.3254	2.3770	-38.0392	-14.4669	-24.3254
153	HHD.mol	430	-24.3197	3.7403	-76.8001	-15.2662	-24.3197
154	YQV.mol	111	-24.3180	1.0257	-72.0068	-13.5460	-24.3180
155	HHE.mol	431	-24.3094	3.4215	-87.4009	-17.6768	-24.3094
156	DHE.mol	50	-24.2863	1.8000	-55.6281	-19.0799	-24.2863
157	YAY.mol	1,577	-24.2701	3.4245	-68.6888	-14.3801	-24.2701
158	KRH.mol	608	-24.2634	3.0000	-13.7833	-13.4569	-24.2634
159	SQW.mol	1,271	-24.2048	1.1906	-63.9491	-13.2758	-24.2048
160	RKW.mol	1,054	-24.1721	2.2830	-114.273	-17.0890	-24.1721
161	YDW.mol	1,590	-24.1379	1.6020	-66.5387	-15.0681	-24.1379
162	QNA.mol	915	-24.1331	2.2000	-48.1972	-14.6392	-24.1331
163	NGN.mol	702	-24.1001	1.8789	-57.5574	-13.8520	-24.1001
164	YTV.mol	195	-24.0737	1.3884	-81.2297	-16.4861	-24.0737
165	RER.mol	1,020	-23.9965	3.8000	-79.4155	-16.1499	-23.9965
166	NKI.mol	730	-23.9941	1.2000	-22.7740	-14.2092	-23.9941
167	YWY.mol	231	-23.9931	1.6291	-65.8682	-13.6860	-23.9931
168	THQ.mol	1,423	-23.9716	3.5619	-72.3221	-13.7195	-23.9716

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
169	RHW.mol	1,040	-23.9599	1.8147	-84.6317	-14.2009	-23.9599
170	RTR.mol	1,106	-23.9520	2.8040	-35.6296	-14.3588	-23.9520
171	YKQ.mol	35	-23.9478	4.4804	-73.4588	-15.5510	-23.9478
172	KEW.mol	539	-23.9375	3.5501	-70.9965	-15.6989	-23.9375
173	QTL.mol	970	-23.9242	2.2099	-43.5231	-13.7856	-23.9242
174	SEL.mol	1,160	-23.9204	2.6000	26.5394	-15.7812	-23.9204
175	SGK.mol	1,182	-23.9144	1.4000	30.2631	-15.2138	-23.9144
176	KHI.mol	555	-23.9052	2.3954	-70.0678	-16.0354	-23.9052
177	QWR.mol	986	-23.9014	3.8000	-58.3910	-16.9982	-23.9014
178	THH.mol	1,418	-23.9003	2.3684	-68.3480	-13.6460	-23.9003
179	YNF.mol	67	-23.8973	2.8000	-78.5910	-12.5769	-23.8973
180	REV.mol	1,021	-23.8896	2.2000	-63.9069	-14.8792	-23.8896
181	HDW.mol	413	-23.8690	3.6969	-39.5802	-14.5006	-23.8690
182	TYW.mol	1,568	-23.8646	2.8000	-105.345	-17.0656	-23.8646
183	QTV.mol	973	-23.8539	1.6000	-56.2903	-14.5242	-23.8539
184	SDF.mol	1,140	-23.8380	2.6063	-69.5121	-14.2821	-23.8380
185	KEV.mol	538	-23.8358	3.9544	-10.9655	-15.4762	-23.8358
186	HSW.mol	488	-23.8348	1.9730	-51.7726	-14.2590	-23.8348
187	KWD.mol	642	-23.8258	1.0000	-42.0540	-15.9816	-23.8258
188	YLY.mol	59	-23.8161	3.0962	8.6786	-12.8868	-23.8161
189	YKD.mol	19	-23.8157	3.1893	65.4135	-15.8260	-23.8157
190	HWD.mol	501	-23.7995	2.2000	-11.5051	-15.7757	-23.7995
191	QYR.mol	996	-23.7989	3.2010	-50.6915	-14.4341	-23.7989
192	SYL.mol	1,348	-23.7819	3.7508	-74.0000	-15.0714	-23.7819
193	YAR.mol	1,576	-23.7712	1.8530	-53.2220	-15.1872	-23.7712
194	TQR.mol	1,487	-23.7691	2.4223	-69.6390	-14.6072	-23.7691
195	SYI.mol	1,346	-23.7459	2.3533	-50.9784	-13.4825	-23.7459
196	DNW.mol	99	-23.7448	4.0788	-70.0233	-14.3654	-23.7448
197	NVE.mol	811	-23.7411	2.4092	-69.4556	-17.1423	-23.7411
198	RNL.mol	1,065	-23.7236	2.9404	-26.1794	-13.4449	-23.7236
199	YHY.mol	1,635	-23.7040	3.9312	-6.3110	-16.2879	-23.7040
200	SEH.mol	1,157	-23.6935	3.5555	22.3349	-14.7945	-23.6935
201	RDW.mol	1,012	-23.6876	2.2279	-45.8730	-14.1448	-23.6876
202	GRR.mol	368	-23.6807	2.6000	-29.3990	-14.1962	-23.6807
203	QWH.mol	983	-23.6511	1.2000	-17.1804	-13.2761	-23.6511
204	YIN.mol	9	-23.6496	1.7778	-71.8013	-14.6966	-23.6496
205	KIK.mol	564	-23.6486	3.3996	-82.3925	-15.4915	-23.6486
206	SYF.mol	1,344	-23.6438	2.2000	-34.3586	-14.7582	-23.6438
207	KHR.mol	558	-23.6415	4.0000	-43.8628	-15.1734	-23.6415
208	RTL.mol	1,105	-23.6347	2.4787	-65.6822	-14.4341	-23.6347
209	QIQ.mol	895	-23.6270	0.6000	14.2183	-13.8468	-23.6270
210	TDF.mol	1,369	-23.6154	3.3717	-55.6322	-15.0359	-23.6154

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
211	KWE.mol	643	-23.5946	2.6668	-59.5232	-16.7157	-23.5946
212	YNH.mol	69	-23.5875	3.2104	-105.926	-12.9425	-23.5875
213	DEF.mol	27	-23.5777	2.4947	1.9299	-18.3991	-23.5777
214	YGD.mol	1,614	-23.5715	3.2000	-42.6817	-16.5595	-23.5715
215	HNE.mol	455	-23.5566	3.1999	-53.8627	-14.7458	-23.5566
216	NQW.mol	770	-23.5515	2.9187	-61.6183	-14.1881	-23.5515
217	QEI.mol	860	-23.5467	2.5251	-25.0060	-14.3728	-23.5467
218	GTY.mol	391	-23.5373	0.6035	-53.7380	-15.7749	-23.5373
219	SDS.mol	1,148	-23.5339	2.4076	-62.0995	-17.5849	-23.5339
220	YQN.mol	105	-23.5222	1.2691	-49.6242	-18.3620	-23.5222
221	NHQ.mol	714	-23.5221	3.3882	-62.0215	-14.9936	-23.5221
222	YAE.mol	1,571	-23.5193	3.1600	-47.7063	-16.3383	-23.5193
223	YKF.mol	23	-23.5026	2.5187	-51.7329	-16.1046	-23.5026
224	TKV.mol	1,450	-23.5020	1.8004	-77.8226	-16.5922	-23.5020
225	QEQ.mol	863	-23.4930	2.2000	-46.7263	-14.7887	-23.4930
226	KYH.mol	651	-23.4853	2.0000	-58.3512	-13.6286	-23.4853
227	HRI.mol	476	-23.4823	2.0771	-67.8579	-17.2768	-23.4823
228	YYD.mol	235	-23.4746	3.6024	13.3368	-16.4657	-23.4746
229	QHE.mol	881	-23.4705	4.8317	-38.5200	-14.7196	-23.4705
230	YYK.mol	245	-23.4689	3.2565	20.5364	-14.6865	-23.4689
231	KFR.mol	544	-23.4650	3.6047	-49.8066	-15.4490	-23.4650
232	TER.mol	1,391	-23.4595	2.8012	-52.6481	-16.6492	-23.4595
233	REL.mol	1,019	-23.4573	3.2173	-45.3840	-15.4504	-23.4573
234	HHL.mol	435	-23.4523	3.0211	-79.1148	-13.8557	-23.4523
235	RYI.mol	1,122	-23.4516	2.1940	-51.3347	-15.1461	-23.4516
236	YHW.mol	1,634	-23.4312	4.0048	-47.0637	-17.4442	-23.4312
237	EQW.mol	271	-23.4281	3.5621	-47.5872	-14.7589	-23.4281
238	YSK.mol	157	-23.4203	2.5959	-35.1745	-13.7342	-23.4203
239	GYQ.mol	397	-23.4178	3.4378	-73.8597	-14.6679	-23.4178
240	DEW.mol	36	-23.4035	2.6015	-58.2055	-16.2400	-23.4035
241	YWE.mol	219	-23.3939	3.2149	-73.6161	-14.3865	-23.3939
242	SAK.mol	1,130	-23.3880	3.2000	-84.1212	-15.2139	-23.3880
243	GKH.mol	334	-23.3824	1.2000	45.7909	-17.6988	-23.3824
244	SRR.mol	1,283	-23.3816	2.4000	-11.0139	-16.3736	-23.3816
245	SKF.mol	1,218	-23.3798	3.6244	-27.7972	-16.6804	-23.3798
246	EHL.mol	232	-23.3758	3.4352	-23.1701	-16.9907	-23.3758
247	NEE.mol	680	-23.3718	2.4000	-86.7840	-16.2541	-23.3718
248	YHL.mol	1,629	-23.3702	2.1933	-91.9976	-14.2399	-23.3702
249	KEE.mol	531	-23.3670	3.2000	-51.5763	-16.8536	-23.3670
250	DDW.mol	20	-23.3643	4.2924	-77.4735	-16.9086	-23.3643
251	SGY.mol	1,188	-23.3593	2.3931	-62.6744	-16.2340	-23.3593
252	YTN.mol	189	-23.3442	2.2913	-61.8060	-14.7333	-23.3442

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
253	TKL.mol	1,445	-23.3302	2.8121	-35.6072	-13.3057	-23.3302
254	SQY.mol	1,272	-23.3209	2.4722	-60.7747	-18.3647	-23.3209
255	YRN.mol	133	-23.3181	3.6000	6.2735	-13.2147	-23.3181
256	HYL.mol	509	-23.3111	2.2000	-71.1898	-15.3047	-23.3111
257	EHF.mol	227	-23.2961	3.4108	-42.6302	-15.5708	-23.2961
258	YNN.mol	77	-23.2753	1.7445	-75.3247	-13.6943	-23.2753
259	KHA.mol	550	-23.2700	3.4000	-51.7807	-16.2634	-23.2700
260	SAS.mol	1,134	-23.2624	1.2000	-14.5021	-13.5228	-23.2624
261	SHK.mol	1,195	-23.2444	2.3660	-25.6509	-14.9881	-23.2444
262	NQL.mol	765	-23.2437	2.0644	-85.9805	-15.2969	-23.2437
263	KYR.mol	655	-23.2433	3.8000	35.1058	-14.0411	-23.2433
264	QKA.mol	897	-23.2382	2.6000	-5.1023	-15.9135	-23.2382
265	RFH.mol	1,025	-23.2378	2.5033	-45.0262	-13.2198	-23.2378
266	HEL.mol	420	-23.2262	3.9973	-71.0854	-15.4107	-23.2262
267	HLE.mol	451	-23.2236	2.2000	-85.7430	-17.3497	-23.2236
268	QQF.mol	930	-23.2147	2.8528	-52.0952	-15.6597	-23.2147
269	YQA.mol	89	-23.2125	3.1302	-94.2842	-13.4561	-23.2125
270	ENL.mol	262	-23.2072	3.0954	-50.3585	-14.3677	-23.2072
271	QFQ.mol	871	-23.2068	2.9256	-73.9945	-14.0538	-23.2068
272	TWK.mol	1,549	-23.1992	3.9275	-24.0225	-14.5364	-23.1992
273	SVQ.mol	1,326	-23.1954	1.6013	-83.2406	-13.8766	-23.1954
274	TEN.mol	1,389	-23.1761	3.2049	-20.3540	-15.8171	-23.1761
275	HLD.mol	450	-23.1731	1.4000	-51.4947	-15.8846	-23.1731
276	NHN.mol	713	-23.1421	1.8652	-65.0480	-13.5986	-23.1421
277	YFK.mol	1,609	-23.1353	3.2096	-4.8640	-16.8279	-23.1353
278	QLR.mol	914	-23.1323	4.8462	-36.1369	-15.9193	-23.1323
279	HKH.mol	445	-23.1221	3.2548	-111.714	-15.0996	-23.1221
280	RHL.mol	1,037	-23.0868	1.2056	-57.8928	-13.5585	-23.0868
281	TNH.mol	1,466	-23.0669	1.8308	-49.8102	-13.2479	-23.0669
282	SKW.mol	1,229	-23.0586	3.3976	13.9227	-15.0344	-23.0586
283	SWY.mol	1,340	-23.0584	4.0249	-30.1284	-13.8168	-23.0584
284	HNV.mol	460	-23.0552	3.3967	-53.5438	-14.1720	-23.0552
285	ETW.mol	292	-23.0531	3.1128	-71.3546	-15.0587	-23.0531
286	YNR.mol	81	-23.0480	2.5896	-10.3844	-13.0143	-23.0480
287	TRD.mol	1,493	-23.0463	2.9650	-41.8950	-16.2824	-23.0463
288	HSD.mol	481	-23.0339	1.0541	-87.8220	-15.9301	-23.0339
289	YAN.mol	1,574	-23.0219	2.3576	-84.2300	-17.5965	-23.0219
290	YHQ.mol	1,631	-23.0185	3.3959	-62.3686	-15.2883	-23.0185
291	DKW.mol	79	-23.0131	2.6000	-55.3329	-16.1197	-23.0131
292	RDR.mol	1,010	-22.9912	3.3468	39.0183	-17.1809	-22.9912
293	SYW.mol	1,355	-22.9904	3.4000	-59.9233	-13.3482	-22.9904
294	SFE.mol	1,170	-22.9860	1.2129	-64.1784	-18.2697	-22.9860

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
295	YYE.mol	237	-22.9751	4.4602	-75.2867	-14.5527	-22.9751
296	QRR.mol	948	-22.9679	3.0000	-60.8621	-14.1430	-22.9679
297	SIQ.mol	1,210	-22.9673	1.0001	-57.2773	-13.8866	-22.9673
298	SFH.mol	1,171	-22.9610	4.2799	12.5995	-14.7707	-22.9610
299	QID.mol	891	-22.9445	3.4000	11.0847	-17.4149	-22.9445
300	DYW.mol	187	-22.9385	2.7999	-63.1473	-15.6506	-22.9385
301	EQF.mol	267	-22.9334	3.7741	-13.3443	-15.8324	-22.9334
302	SRV.mol	1,286	-22.9172	3.0000	-35.7890	-15.3634	-22.9172
303	SDH.mol	1,141	-22.9048	3.0000	-54.1430	-16.1999	-22.9048
304	QRE.mol	941	-22.9022	3.8000	-66.5890	-16.8400	-22.9022
305	TYV.mol	1,567	-22.8969	1.9717	-76.9536	-14.8961	-22.8969
306	HDL.mol	411	-22.8927	2.7741	-60.5586	-17.0654	-22.8927
307	YSV.mol	167	-22.8917	2.2059	-48.8732	-12.9457	-22.8917
308	KIH.mol	563	-22.8906	3.3401	-57.1723	-13.2381	-22.8906
309	GYT.mol	400	-22.8715	2.0567	-98.2675	-16.3137	-22.8715
310	DHW.mol	60	-22.8591	3.6753	-78.4566	-15.4407	-22.8591
311	TFT.mol	1,403	-22.8578	2.0159	-34.6145	-14.9947	-22.8578
312	YRA.mol	117	-22.8349	3.0576	-47.9849	-15.3476	-22.8349
313	KKE.mol	568	-22.8326	3.7163	-63.6142	-16.4968	-22.8326
314	YIR.mol	13	-22.8291	3.1871	-108.097	-13.1646	-22.8291
315	QHR.mol	888	-22.8029	3.2665	-53.0673	-14.0720	-22.8029
316	RDV.mol	1,011	-22.7942	2.3671	-3.7297	-17.1312	-22.7942
317	YLR.mol	57	-22.7640	3.0416	-61.0434	-12.9048	-22.7640
318	YEW.mol	1,604	-22.7616	2.5342	-26.3537	-14.8728	-22.7616
319	TSR.mol	1,517	-22.7597	3.8000	-0.6534	-13.7860	-22.7597
320	TFR.mol	1,402	-22.7538	2.2035	-94.0790	-13.7349	-22.7538
321	THV.mol	1,426	-22.7477	3.3867	-71.6672	-13.8485	-22.7477
322	HTV.mol	496	-22.7308	2.7217	-56.5016	-14.9065	-22.7308
323	NFH.mol	693	-22.7222	3.0096	-58.9896	-12.4749	-22.7222
324	YLK.mol	51	-22.7009	3.5682	-21.1148	-18.4871	-22.7009
325	EHW.mol	236	-22.6997	3.0691	18.9315	-14.1358	-22.6997
326	TYN.mol	1,563	-22.6926	3.0677	-32.4097	-13.8405	-22.6926
327	ELE.mol	253	-22.6771	3.8000	-26.6661	-16.4825	-22.6771
328	HRV.mol	478	-22.6641	1.2932	-94.1965	-15.3792	-22.6641
329	NRQ.mol	780	-22.6561	1.2000	-67.7876	-14.3159	-22.6561
330	YTL.mol	188	-22.6522	2.0827	-67.2613	-13.2410	-22.6522
331	GNR.mol	348	-22.6511	3.2018	-65.7350	-14.6904	-22.6511
332	SHW.mol	1,203	-22.6335	2.3526	-68.8885	-13.0929	-22.6335
333	RKD.mol	1,046	-22.6300	1.9997	-14.9371	-18.2036	-22.6300
334	SYQ.mol	1,350	-22.6134	2.0286	-82.1189	-15.0871	-22.6134
335	SKL.mol	1,222	-22.6061	2.2000	-50.0070	-13.8862	-22.6061
336	QFE.mol	868	-22.6046	2.3993	-62.0256	-15.8329	-22.6046

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
337	HQV.mol	469	-22.6031	1.2016	-53.9253	-14.1826	-22.6031
338	SRL.mol	1,280	-22.5992	4.0117	-54.2167	-17.0188	-22.5992
339	RYL.mol	1,123	-22.5951	2.2870	40.4621	-15.7352	-22.5951
340	KND.mol	583	-22.5875	3.0970	-65.9799	-17.0597	-22.5875
341	DIE.mol	63	-22.5832	3.4000	-2.7547	-17.5132	-22.5832
342	SHH.mol	1,193	-22.5720	2.8243	16.9435	-13.5342	-22.5720
343	GYE.mol	393	-22.5389	2.6000	-50.4379	-16.6523	-22.5389
344	HLH.mol	452	-22.5331	2.8425	-64.1790	-12.7433	-22.5331
345	YKI.mol	28	-22.5196	2.3937	-20.9978	-14.6936	-22.5196
346	TYE.mol	1,557	-22.5170	1.8975	-74.2871	-15.4898	-22.5170
347	QYV.mol	997	-22.5154	2.5709	-72.6121	-15.2979	-22.5154
348	NTH.mol	801	-22.5144	2.1720	-97.3431	-13.9708	-22.5144
349	NKW.mol	737	-22.5005	1.8010	-55.3106	-14.5759	-22.5005
350	TQW.mol	1,490	-22.5003	2.0584	-25.9796	-13.4452	-22.5003
351	RNV.mol	1,067	-22.4910	2.0049	-34.4839	-13.8586	-22.4910
352	YEF.mol	1,595	-22.4900	3.9685	-48.1569	-15.7635	-22.4900
353	RNW.mol	1,068	-22.4533	1.2000	-64.9379	-13.7753	-22.4533
354	RAH.mol	1,001	-22.4478	3.2000	-28.5020	-18.7139	-22.4478
355	SWQ.mol	1,336	-22.4440	1.2000	-65.0165	-14.4973	-22.4440
356	HYW.mol	512	-22.4366	2.4000	-102.839	-13.1281	-22.4366
357	KSD.mol	616	-22.4324	3.0000	57.9034	-17.0280	-22.4324
358	QAR.mol	842	-22.4251	4.0881	-60.9112	-15.8044	-22.4251
359	QIE.mol	892	-22.4078	3.4000	-70.9203	-15.4733	-22.4078
360	SYV.mol	1,354	-22.3894	2.8999	-69.1297	-14.0767	-22.3894
361	YSW.mol	170	-22.3704	3.7998	-6.9915	-13.1176	-22.3704
362	YTQ.mol	191	-22.3513	0.5982	-91.2371	-13.9786	-22.3513
363	TNN.mol	1,470	-22.3511	1.7117	-71.3476	-15.2321	-22.3511
364	EEF.mol	207	-22.3505	3.8990	-82.6736	-16.3050	-22.3505
365	HTI.mol	494	-22.3420	3.2078	-76.5688	-13.6323	-22.3420
366	SWH.mol	1,333	-22.3411	3.4355	-68.6951	-13.9664	-22.3411
367	ESW.mol	285	-22.3250	1.6000	-29.9774	-17.8576	-22.3250
368	SYA.mol	1,341	-22.3225	1.6348	-19.2158	-14.0467	-22.3225
369	QVE.mol	976	-22.3212	3.2000	-31.1052	-15.8193	-22.3212
370	YYI.mol	244	-22.3082	2.7878	-4.7285	-17.8813	-22.3082
371	RDF.mol	1,006	-22.2976	1.4133	-71.6994	-15.1624	-22.2976
372	HTH.mol	493	-22.2906	2.7809	-47.8238	-15.0326	-22.2906
373	HTE.mol	491	-22.2788	2.9093	-40.1527	-16.2808	-22.2788
374	QTE.mol	965	-22.2752	4.1390	-54.3014	-17.4680	-22.2752
375	NHK.mol	711	-22.2732	4.2554	-91.7012	-15.1087	-22.2732
376	HYV.mol	511	-22.2619	2.9122	-52.5658	-14.2379	-22.2619
377	RTE.mol	1,101	-22.2576	2.1998	-20.5914	-15.1795	-22.2576
378	KYK.mol	653	-22.2333	3.8412	-53.1414	-15.7471	-22.2333

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
379	HND.mol	454	-22.2330	3.7149	-119.167	-15.7774	-22.2330
380	GSR.mol	378	-22.2269	4.0102	-6.8172	-14.2020	-22.2269
381	YEE.mol	1,594	-22.2266	3.8000	-45.8105	-17.6402	-22.2266
382	HQL.mol	468	-22.2226	3.5352	-55.5815	-14.0219	-22.2226
383	TYL.mol	1,562	-22.2215	3.4495	-40.1417	-14.6097	-22.2215
384	HFE.mol	424	-22.2200	3.4000	-28.1426	-14.9493	-22.2200
385	YYQ.mol	251	-22.2167	2.4777	-82.6009	-12.2759	-22.2167
386	QWK.mol	984	-22.2025	3.5967	-63.6135	-14.0003	-22.2025
387	NDR.mol	675	-22.1957	3.8290	-82.0829	-19.2472	-22.1957
388	NSH.mol	788	-22.1818	0.6000	-70.8759	-13.5125	-22.1818
389	GSQ.mol	377	-22.1777	3.2607	-11.4931	-16.2925	-22.1777
390	RDD.mol	1,004	-22.1602	3.0506	-15.4020	-19.1603	-22.1602
391	NVH.mol	812	-22.1465	0.6000	-75.1311	-15.3945	-22.1465
392	NYW.mol	836	-22.1413	3.4094	-77.4890	-14.2371	-22.1413
393	NYR.mol	834	-22.1292	2.8000	-61.4456	-14.2808	-22.1292
394	RQR.mol	1,076	-22.1266	3.6267	-0.3029	-14.7311	-22.1266
395	NFK.mol	694	-22.1181	3.8079	-80.1595	-15.3848	-22.1181
396	HRL.mol	477	-22.1178	2.6233	22.1895	-13.3580	-22.1178
397	HYE.mol	506	-22.1131	3.6572	-46.1925	-17.9101	-22.1131
398	QLE.mol	910	-22.1033	3.6000	-64.4492	-15.5324	-22.1033
399	RWE.mol	1,114	-22.1027	2.6533	-45.8468	-14.8929	-22.1027
400	ETL.mol	290	-22.1013	2.4152	-13.6379	-15.7003	-22.1013
401	KQV.mol	602	-22.0992	3.3998	-48.7388	-14.3584	-22.0992
402	QRH.mol	943	-22.0861	1.7806	-51.4587	-12.9551	-22.0861
403	NQN.mol	766	-22.0827	1.2687	-78.7504	-14.1515	-22.0827
404	KQK.mol	599	-22.0801	2.8000	-64.2778	-16.2658	-22.0801
405	EDI.mol	197	-22.0698	3.0304	-49.6944	-16.9579	-22.0698
406	GYH.mol	394	-22.0650	3.9898	-90.4351	-14.3168	-22.0650
407	SKI.mol	1,220	-22.0622	2.6027	-44.1659	-14.6023	-22.0622
408	TFQ.mol	1,401	-22.0507	1.0789	-25.9540	-13.5653	-22.0507
409	YRR.mol	137	-22.0456	2.6793	-62.0777	-13.2586	-22.0456
410	TFE.mol	1,397	-22.0370	3.6000	-31.3560	-14.3726	-22.0370
411	SRI.mol	1,278	-22.0345	2.6003	-98.6082	-14.6571	-22.0345
412	SLK.mol	1,234	-22.0276	3.6000	-27.4317	-17.5091	-22.0276
413	GNQ.mol	347	-22.0191	2.2000	-37.2735	-13.9917	-22.0191
414	HRF.mol	474	-22.0119	2.6909	-67.5917	-13.2084	-22.0119
415	DLD.mol	82	-22.0112	3.8171	-63.3365	-19.5425	-22.0112
416	TQE.mol	1,479	-22.0106	1.4160	-52.7974	-14.6357	-22.0106
417	YYR.mol	254	-22.0105	2.7844	-75.8664	-13.7762	-22.0105
418	RNF.mol	1,062	-22.0078	3.1999	-43.9190	-15.1229	-22.0078
419	NNW.mol	757	-21.9967	1.7842	-88.3884	-14.1414	-21.9967
420	DVE.mol	168	-21.9823	3.0030	-30.8649	-18.2178	-21.9823

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
421	TQT.mol	1,488	-21.9702	1.5989	-77.7530	-13.7793	-21.9702
422	YYA.mol	233	-21.9662	0.5802	-84.1108	-14.1167	-21.9662
423	YGN.mol	1,618	-21.9632	2.3998	-61.7371	-15.9157	-21.9632
424	KEI.mol	534	-21.9563	3.2241	-11.7407	-15.4247	-21.9563
425	NTE.mol	799	-21.9517	1.2000	-83.0673	-17.4916	-21.9517
426	RGE.mol	1,028	-21.9419	2.4000	-49.8121	-15.7945	-21.9419
427	YDR.mol	1,588	-21.9328	1.6000	-67.8081	-14.8164	-21.9328
428	NLE.mol	739	-21.9133	2.0000	-63.6589	-15.5231	-21.9133
429	THW.mol	1,427	-21.9125	1.2000	-38.7198	-14.1414	-21.9125
430	RHV.mol	1,039	-21.9107	2.5686	-67.1251	-14.2643	-21.9107
431	QYL.mol	994	-21.8970	2.3947	-57.6376	-13.3433	-21.8970
432	DSW.mol	147	-21.8960	2.6000	-46.4360	-14.6747	-21.8960
433	SRH.mol	1,277	-21.8937	3.6937	-40.6026	-14.5373	-21.8937
434	DSE.mol	138	-21.8925	2.8000	-61.0536	-17.7221	-21.8925
435	STW.mol	1,319	-21.8909	1.6114	-53.3528	-12.8934	-21.8909
436	YDF.mol	1,581	-21.8894	3.5026	-51.7464	-14.9035	-21.8894
437	YTL.mol	183	-21.8888	1.5606	-46.9593	-12.7967	-21.8888
438	SRT.mol	1,285	-21.8839	3.1685	-75.4522	-15.2744	-21.8839
439	THY.mol	1,428	-21.8759	3.0323	-61.2540	-14.6246	-21.8759
440	SFN.mol	1,173	-21.8732	3.3817	-98.4495	-14.4363	-21.8732
441	TRR.mol	1,502	-21.8729	1.4058	-8.5571	-14.2893	-21.8729
442	NYI.mol	829	-21.8690	1.8039	44.1768	-14.3347	-21.8690
443	SLY.mol	1,240	-21.8651	1.6000	-66.9552	-14.7883	-21.8651
444	TEY.mol	1,395	-21.8497	2.2002	-84.1128	-17.6662	-21.8497
445	NYH.mol	828	-21.8322	2.0643	2.0502	-13.7080	-21.8322
446	QDF.mol	846	-21.8211	2.4000	25.0246	-15.9704	-21.8211
447	NDF.mol	668	-21.8101	1.2000	-15.0303	-12.8748	-21.8101
448	HAE.mol	403	-21.8024	2.5526	-55.0454	-16.0069	-21.8024
449	YND.mol	64	-21.7960	0.4000	-82.0980	-14.9652	-21.7960
450	EYI.mol	298	-21.7958	2.3203	-16.2686	-16.5001	-21.7958
451	EHV.mol	234	-21.7868	1.2488	-45.9028	-17.5544	-21.7868
452	GQD.mol	352	-21.7760	1.5580	-52.7497	-16.9154	-21.7760
453	YHD.mol	1,623	-21.7471	2.7999	-87.9565	-18.9486	-21.7471
454	KRV.mol	613	-21.7413	2.5390	-41.8572	-14.6492	-21.7413
455	STL.mol	1,312	-21.7369	2.2047	-72.1808	-14.7865	-21.7369
456	KTL.mol	633	-21.7360	2.2000	-10.0893	-14.6143	-21.7360
457	SVY.mol	1,330	-21.7293	1.0000	-41.1608	-13.9322	-21.7293
458	EFE.mol	220	-21.7263	3.3870	-60.3701	-15.8673	-21.7263
459	QTW.mol	974	-21.7234	1.6180	-121.951	-16.9960	-21.7234
460	HDD.mol	406	-21.7162	3.5931	12.9089	-17.8817	-21.7162
461	SKH.mol	1,219	-21.6831	1.8000	-68.6112	-15.3517	-21.6831
462	TRL.mol	1,499	-21.6812	1.8384	-12.9875	-14.2929	-21.6812

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
463	RSW.mol	1,098	-21.6738	2.2000	-105.672	-14.9972	-21.6738
464	HQW.mol	470	-21.6713	1.9342	-79.3256	-12.8746	-21.6713
465	QYF.mol	990	-21.6582	4.0057	-69.1149	-14.4244	-21.6582
466	QHL.mol	884	-21.6531	2.4819	-22.1433	-14.1902	-21.6531
467	GNK.mol	345	-21.6367	3.0000	-65.3747	-15.9308	-21.6367
468	TSE.mol	1,509	-21.6317	1.4000	-0.5466	-15.4147	-21.6317
469	SNQ.mol	1,250	-21.6048	1.2000	-60.2389	-14.3937	-21.6048
470	GSK.mol	375	-21.6027	3.2449	-18.7514	-15.1563	-21.6027
471	TQK.mol	1,483	-21.6005	1.3998	-70.1018	-15.4235	-21.6005
472	TYD.mol	1,556	-21.5933	2.6000	-82.4423	-15.6356	-21.5933
473	TNV.mol	1,474	-21.5692	2.6624	-51.3772	-12.4977	-21.5692
474	TSV.mol	1,519	-21.5668	1.2000	-19.8780	-13.9026	-21.5668
475	HYA.mol	504	-21.5614	2.8000	-72.6789	-14.4826	-21.5614
476	HKL.mol	446	-21.5590	3.0007	-41.8526	-13.5837	-21.5590
477	TIK.mol	1,432	-21.5509	2.0000	22.6649	-13.6045	-21.5509
478	SQN.mol	1,265	-21.5508	1.7902	-82.7096	-14.6523	-21.5508
479	HFH.mol	425	-21.5457	3.4086	-28.8034	-12.5056	-21.5457
480	DEE.mol	26	-21.5280	4.0201	-49.5832	-19.1463	-21.5280
481	THL.mol	1,419	-21.5247	1.2340	-88.5644	-13.1478	-21.5247
482	RVH.mol	1,111	-21.5161	2.6006	-73.7696	-15.7028	-21.5161
483	YQY.mol	116	-21.5151	3.9981	-18.6866	-13.4265	-21.5151
484	TGR.mol	1,411	-21.5142	4.0000	-67.5760	-14.6584	-21.5142
485	QHL.mol	886	-21.5138	2.2181	-42.4643	-13.5107	-21.5138
486	RLH.mol	1,057	-21.5021	3.9920	-4.8630	-14.3844	-21.5021
487	KED.mol	530	-21.4910	4.3085	-23.7023	-17.2963	-21.4910
488	QNF.mol	918	-21.4868	2.3435	19.2291	-14.4706	-21.4868
489	SWK.mol	1,334	-21.4743	2.4000	26.2487	-16.2505	-21.4743
490	YNW.mol	85	-21.4729	2.8000	-51.6780	-14.4771	-21.4729
491	YSI.mol	155	-21.4704	2.6130	-79.8693	-12.7741	-21.4704
492	REE.mol	1,015	-21.4685	1.6000	-26.5472	-16.2953	-21.4685
493	REF.mol	1,016	-21.4632	4.1946	-58.0145	-14.8502	-21.4632
494	QNI.mol	920	-21.4542	2.2067	-68.6768	-14.2171	-21.4542
495	YEK.mol	1,598	-21.4400	3.6641	-55.3961	-17.1011	-21.4400
496	QRI.mol	944	-21.4390	4.0033	-19.6248	-13.8290	-21.4390
497	YFY.mol	1,613	-21.4354	4.0945	-20.7112	-13.8210	-21.4354
498	SYI.mol	1,356	-21.4301	3.7279	-96.1894	-16.5310	-21.4301
499	SHL.mol	1,194	-21.4140	3.8018	-34.8818	-13.1161	-21.4140
500	SYR.mol	1,351	-21.4068	2.8103	-83.1428	-15.5899	-21.4068
501	KWH.mol	644	-21.4003	2.8030	-43.0023	-17.8107	-21.4003
502	HSI.mol	485	-21.3971	2.9713	-21.4078	-13.1877	-21.3971
503	SQF.mol	1,260	-21.3856	0.6000	-16.2908	-15.3768	-21.3856
504	NNR.mol	755	-21.3767	3.2788	-70.5968	-14.2906	-21.3767

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
505	SLE.mol	1,232	-21.3722	3.2377	-56.3699	-15.4325	-21.3722
506	YSH.mol	153	-21.3682	2.3348	-60.1765	-12.8922	-21.3682
507	QDA.mol	843	-21.3590	2.2000	-84.9664	-15.2286	-21.3590
508	NYN.mol	832	-21.3484	1.7994	-74.2632	-13.9594	-21.3484
509	STH.mol	1,309	-21.3482	2.7144	-63.6339	-13.6014	-21.3482
510	SWT.mol	1,339	-21.3414	0.0000	-56.1596	-14.3333	-21.3414
511	TTV.mol	1,534	-21.3158	2.0000	-37.1534	-12.3313	-21.3158
512	SSN.mol	1,297	-21.3131	1.2000	-40.4876	-16.2955	-21.3131
513	YIY.mol	15	-21.2955	2.4281	24.6070	-12.4480	-21.2955
514	HAD.mol	402	-21.2937	3.6000	-20.3704	-16.1311	-21.2937
515	GHQ.mol	327	-21.2933	2.9900	-46.0717	-15.8245	-21.2933
516	YEY.mol	1,605	-21.2929	2.1408	-71.6708	-19.1220	-21.2929
517	NYE.mol	826	-21.2919	2.4220	-39.8117	-15.1859	-21.2919
518	QYA.mol	987	-21.2911	4.0215	36.0872	-13.9302	-21.2911
519	QYK.mol	993	-21.2839	1.6811	-81.1379	-16.6729	-21.2839
520	DYV.mol	186	-21.2704	3.1497	19.9568	-18.7711	-21.2704
521	QVR.mol	980	-21.2668	4.4175	8.8659	-15.1971	-21.2668
522	GNH.mol	344	-21.2617	1.8000	-2.3847	-15.8189	-21.2617
523	TKH.mol	1,442	-21.2542	3.0000	-16.0110	-14.6212	-21.2542
524	GEY.mol	321	-21.2411	4.0378	-29.3484	-16.2955	-21.2411
525	TWR.mol	1,552	-21.2386	2.0900	-13.9152	-15.7953	-21.2386
526	HIH.mol	440	-21.2161	2.6000	-58.2907	-13.6831	-21.2161
527	GQK.mol	355	-21.2036	2.8415	-62.5030	-14.2043	-21.2036
528	YNQ.mol	80	-21.1930	0.6000	-59.5890	-14.1580	-21.1930
529	YWQ.mol	228	-21.1909	1.8000	-90.4122	-12.0388	-21.1909
530	RHD.mol	1,032	-21.1824	3.2001	-26.6144	-17.4805	-21.1824
531	EYL.mol	299	-21.1735	3.1483	-33.7786	-16.0759	-21.1735
532	QDE.mol	845	-21.1601	3.2278	27.1103	-18.7791	-21.1601
533	NDW.mol	677	-21.1546	1.7861	-38.9486	-15.5788	-21.1546
534	TRA.mol	1,492	-21.1525	2.0042	-80.1032	-16.0211	-21.1525
535	EYW.mol	301	-21.1490	3.7829	-47.9410	-15.1800	-21.1490
536	HDF.mol	408	-21.1479	1.4689	-60.8049	-14.5170	-21.1479
537	SKV.mol	1,228	-21.1417	3.2315	-44.6661	-15.5819	-21.1417
538	QVD.mol	975	-21.1401	3.4045	-53.1211	-16.0355	-21.1401
539	DDF.mol	11	-21.1397	1.4000	-61.3598	-15.8483	-21.1397
540	KHK.mol	556	-21.1396	3.6105	-71.9720	-14.1923	-21.1396
541	GYD.mol	392	-21.1312	3.9287	-56.4366	-14.9429	-21.1312
542	TYQ.mol	1,564	-21.1245	1.2102	-80.9404	-13.9722	-21.1245
543	KRK.mol	610	-21.1117	3.4000	-66.4588	-17.7373	-21.1117
544	TVQ.mol	1,542	-21.1115	2.5764	-46.5566	-12.0235	-21.1115
545	HYL.mol	510	-21.1109	2.7517	-41.4760	-12.5708	-21.1109
546	TIN.mol	1,433	-21.1047	1.5170	-69.7109	-13.3066	-21.1047

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
547	TGY.mol	1,413	-21.1038	3.1209	-76.6672	-15.8930	-21.1038
548	HQL.mol	467	-21.1020	3.0491	-45.2273	-13.3822	-21.1020
549	DND.mol	88	-21.0980	3.2017	-63.0427	-17.3321	-21.0980
550	HEW.mol	422	-21.0941	1.9894	-60.8411	-14.3939	-21.0941
551	TY Y.mol	1,569	-21.0909	4.3075	3.9721	-15.0674	-21.0909
552	SFQ.mol	1,174	-21.0751	3.5504	-89.7865	-13.3530	-21.0751
553	QIR.mol	896	-21.0726	2.4002	-77.9444	-14.6654	-21.0726
554	TRF.mol	1,495	-21.0721	4.1794	-50.2321	-13.5285	-21.0721
555	QRV.mol	949	-21.0720	2.0000	23.7131	-13.8372	-21.0720
556	HRA.mol	471	-21.0662	2.6557	-47.2499	-14.3525	-21.0662
557	YWK.mol	223	-21.0593	3.7991	14.7209	-13.5910	-21.0593
558	YIK.mol	7	-21.0564	3.2942	-65.0234	-14.8321	-21.0564
559	YQI.mol	100	-21.0431	0.7179	-62.7827	-12.6700	-21.0431
560	TVH.mol	1,539	-21.0190	1.6017	-37.1348	-13.3574	-21.0190
561	TWH.mol	1,548	-21.0128	1.6000	-67.5967	-12.8351	-21.0128
562	HKE.mol	443	-21.0080	3.8335	-74.6542	-16.0064	-21.0080
563	SRA.mol	1,273	-21.0025	1.2000	6.9491	-14.6349	-21.0025
564	NSV.mol	795	-21.0017	1.2000	-86.1318	-14.2265	-21.0017
565	NLD.mol	738	-20.9937	2.8057	-31.8321	-16.6274	-20.9937
566	YVR.mol	213	-20.9809	3.5938	-27.9516	-14.2450	-20.9809
567	GYR.mol	398	-20.9778	1.8565	-28.5749	-14.5719	-20.9778
568	DRF.mol	124	-20.9707	2.6471	-80.9200	-17.2008	-20.9707
569	SNY.mol	1,256	-20.9673	2.4002	-88.9041	-16.2487	-20.9673
570	QNL.mol	922	-20.9612	2.7418	-57.8510	-15.3560	-20.9612
571	RRR.mol	1,086	-20.9606	3.3923	-40.8337	-14.6830	-20.9606
572	NHW.mol	717	-20.9468	2.1872	-80.6913	-13.2402	-20.9468
573	QGE.mol	874	-20.9467	2.8000	-74.8712	-15.5713	-20.9467
574	YYH.mol	241	-20.9367	3.6064	-89.2759	-15.0673	-20.9367
575	TEI.mol	1,386	-20.9355	2.0000	-45.9425	-15.2287	-20.9355
576	KTR.mol	634	-20.9341	2.0461	-24.6061	-15.7667	-20.9341
577	RYF.mol	1,120	-20.9210	3.2994	-43.7027	-15.1178	-20.9210
578	NNA.mol	745	-20.9001	0.6027	29.0222	-15.3859	-20.9001
579	KYL.mol	654	-20.8906	3.0000	-0.1183	-14.2757	-20.8906
580	SGE.mol	1,180	-20.8879	3.9238	37.0369	-16.9733	-20.8879
581	ESE.mol	280	-20.8844	3.2000	-36.7287	-17.8233	-20.8844
582	NED.mol	679	-20.8801	1.5711	-50.5843	-16.7417	-20.8801
583	HHH.mol	433	-20.8546	3.0702	10.9613	-14.1468	-20.8546
584	KRF.mol	607	-20.8506	3.2000	-5.2060	-14.1371	-20.8506
585	QQD.mol	928	-20.8497	1.1999	-64.5736	-16.5838	-20.8497
586	Q GK.mol	876	-20.8495	3.2000	-41.9467	-14.8912	-20.8495
587	SKN.mol	1,223	-20.8482	2.9794	6.4146	-16.8886	-20.8482
588	NRK.mol	777	-20.8470	3.2000	15.9002	-14.7291	-20.8470

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
589	NWK.mol	820	-20.8287	3.6000	77.1361	-17.5336	-20.8287
590	KDE.mol	520	-20.8280	2.8000	-28.0423	-17.4511	-20.8280
591	SHT.mol	1,201	-20.8195	2.1370	-72.5592	-13.1523	-20.8195
592	DSV.mol	145	-20.8191	3.4136	-38.1529	-14.8514	-20.8191
593	RNA.mol	1,059	-20.8142	3.1303	-34.4742	-14.6107	-20.8142
594	TWT.mol	1,553	-20.8133	1.0000	-3.3084	-13.2910	-20.8133
595	TTT.mol	1,533	-20.7951	1.4000	-34.1058	-15.1512	-20.7951
596	RHF.mol	1,034	-20.7807	2.5249	-74.6959	-13.1018	-20.7807
597	EKW.mol	252	-20.7755	4.0102	13.7388	-17.6274	-20.7755
598	KKL.mol	573	-20.7725	4.0000	-12.1348	-17.7179	-20.7725
599	TLN.mol	1,457	-20.7653	1.2035	-63.5881	-15.8403	-20.7653
600	NIN.mol	722	-20.7626	1.9999	-76.6208	-14.1690	-20.7626
601	KHV.mol	559	-20.7570	3.3424	-13.4887	-14.3856	-20.7570
602	QND.mol	916	-20.7553	1.1987	-87.4846	-15.7083	-20.7553
603	SFT.mol	1,177	-20.7495	1.1997	-66.7597	-16.1153	-20.7495
604	KYW.mol	657	-20.7414	4.5063	-47.4560	-13.0722	-20.7414
605	RQW.mol	1,078	-20.7413	3.4018	-38.9966	-15.4895	-20.7413
606	TYA.mol	1,555	-20.7409	3.0011	-42.4601	-13.7473	-20.7409
607	QKF.mol	900	-20.7393	3.2475	-77.4407	-14.6273	-20.7393
608	KDF.mol	521	-20.7323	3.2355	-49.8710	-16.0430	-20.7323
609	THD.mol	1,415	-20.7213	2.0001	-16.5137	-15.9824	-20.7213
610	YRH.mol	126	-20.7190	2.0190	-61.3239	-13.0756	-20.7190
611	SSV.mol	1,302	-20.7117	0.6000	-2.6115	-14.9761	-20.7117
612	TTY.mol	1,536	-20.7081	2.2000	-76.4920	-14.4866	-20.7081
613	HSE.mol	482	-20.7061	3.7996	24.3364	-14.7395	-20.7061
614	KHE.mol	552	-20.7007	2.0011	10.0103	-18.2500	-20.7007
615	RHE.mol	1,033	-20.6966	1.4000	-63.6607	-16.4019	-20.6966
616	SNA.mol	1,241	-20.6943	2.2000	-53.4396	-15.0598	-20.6943
617	SSF.mol	1,292	-20.6750	3.0000	-44.4212	-15.1709	-20.6750
618	SNW.mol	1,255	-20.6644	2.5322	-31.7978	-15.3953	-20.6644
619	NRE.mol	773	-20.6578	3.1760	-53.1115	-15.7855	-20.6578
620	GTR.mol	388	-20.6555	2.7520	23.2579	-13.4159	-20.6555
621	TLY.mol	1,461	-20.6539	1.6000	-59.1243	-15.1891	-20.6539
622	KDR.mol	526	-20.6482	1.8000	-60.1248	-18.9529	-20.6482
623	KYI.mol	652	-20.6477	1.1839	9.6179	-15.3442	-20.6477
624	SKY.mol	1,230	-20.6423	3.5447	-17.9609	-14.6607	-20.6423
625	KSV.mol	624	-20.6337	3.4000	-55.1559	-14.7332	-20.6337
626	HQF.mol	465	-20.6278	1.8835	-60.2197	-14.1544	-20.6278
627	NKK.mol	731	-20.6203	2.3511	-3.6122	-16.1592	-20.6203
628	NKL.mol	732	-20.6191	3.7248	-90.8586	-14.2280	-20.6191
629	HEL.mol	419	-20.6106	2.4001	-43.7709	-14.7307	-20.6106
630	YVE.mol	203	-20.6033	3.5466	-77.8747	-16.6735	-20.6033

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
631	SNL.mol	1,246	-20.5936	2.3499	-60.8807	-13.3973	-20.5936
632	GRE.mol	363	-20.5927	3.3284	-56.4887	-16.1543	-20.5927
633	GHK.mol	325	-20.5880	3.6000	-49.4572	-14.2207	-20.5880
634	GNY.mol	351	-20.5855	3.5230	-30.5423	-15.9680	-20.5855
635	QHF.mol	882	-20.5838	3.4027	-73.8642	-13.4825	-20.5838
636	SWS.mol	1,338	-20.5819	3.4594	-29.4640	-14.5128	-20.5819
637	RSF.mol	1,092	-20.5703	3.3896	-104.136	-14.5556	-20.5703
638	KSL.mol	622	-20.5659	0.4000	-46.3180	-14.8612	-20.5659
639	HHL.mol	434	-20.5589	1.5951	-63.7081	-14.2077	-20.5589
640	SSY.mol	1,304	-20.5575	1.6511	-2.3078	-13.7399	-20.5575
641	TTH.mol	1,526	-20.5572	3.2009	-78.8882	-13.4034	-20.5572
642	HEF.mol	417	-20.5559	2.0991	-14.8442	-14.9765	-20.5559
643	EQE.mol	266	-20.5502	3.4000	-59.9774	-16.7093	-20.5502
644	RRF.mol	1,082	-20.5442	2.9449	-50.6209	-14.6727	-20.5442
645	SHQ.mol	1,198	-20.5434	1.1997	-92.8266	-13.9785	-20.5434
646	NGH.mol	700	-20.5421	2.4000	-46.4936	-13.8690	-20.5421
647	RVE.mol	1,110	-20.5405	2.8307	-69.9762	-13.9290	-20.5405
648	KYF.mol	650	-20.5383	4.1537	28.1420	-14.0640	-20.5383
649	TST.mol	1,518	-20.5371	2.0000	-14.8182	-13.9579	-20.5371
650	TDV.mol	1,378	-20.5249	2.0678	-0.1237	-16.3116	-20.5249
651	SQE.mol	1,259	-20.5228	2.3273	-27.9426	-17.0467	-20.5228
652	QHK.mol	885	-20.5148	4.6168	-23.1905	-14.1431	-20.5148
653	TRE.mol	1,494	-20.5113	3.7574	-19.4370	-15.6732	-20.5113
654	HEA.mol	414	-20.5044	2.5856	-48.5030	-14.5182	-20.5044
655	NAK.mol	661	-20.5021	2.8999	-45.0477	-14.6816	-20.5021
656	HNL.mol	458	-20.4924	1.8004	-77.8856	-14.4656	-20.4924
657	SSA.mol	1,289	-20.4915	0.6000	-23.5500	-14.9514	-20.4915
658	RRI.mol	1,084	-20.4831	2.4000	-92.4352	-14.7399	-20.4831
659	GHE.mol	323	-20.4796	2.2354	-129.530	-16.2558	-20.4796
660	SEY.mol	1,168	-20.4704	2.3993	-60.5905	-17.5620	-20.4704
661	GEQ.mol	317	-20.4697	1.8001	-62.6429	-15.1781	-20.4697
662	QSW.mol	962	-20.4688	1.8134	-73.5534	-14.0191	-20.4688
663	SRN.mol	1,281	-20.4673	2.7974	-97.9338	-14.6980	-20.4673
664	TYI.mol	1,560	-20.4646	1.8004	-81.4743	-16.4626	-20.4646
665	RYW.mol	1,126	-20.4533	3.0546	-69.9737	-15.6784	-20.4533
666	HNL.mol	459	-20.4514	1.2018	-66.3881	-13.6693	-20.4514
667	SFK.mol	1,172	-20.4509	2.7054	-41.6176	-14.4102	-20.4509
668	TRQ.mol	1,501	-20.4490	2.6029	-50.9533	-13.9656	-20.4490
669	GDT.mol	310	-20.4445	2.6000	-42.8140	-14.4811	-20.4445
670	SQL.mol	1,264	-20.4421	2.8032	-36.3549	-13.9191	-20.4421
671	GQY.mol	361	-20.4354	1.2000	8.3290	-19.5843	-20.4354
672	ENE.mol	258	-20.4334	1.3812	-64.6280	-18.5549	-20.4334

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
673	YHF.mol	1,625	-20.4169	2.9953	-74.5481	-13.9316	-20.4169
674	QLQ.mol	913	-20.3893	1.2000	-58.2411	-12.9796	-20.3893
675	QKE.mol	899	-20.3881	4.0000	1.8664	-15.1890	-20.3881
676	GRT.mol	370	-20.3835	1.8000	-57.8554	-14.0392	-20.3835
677	REW.mol	1,022	-20.3798	4.0994	-52.6980	-15.7320	-20.3798
678	SKK.mol	1,221	-20.3702	3.4000	-3.7124	-15.1648	-20.3702
679	NYF.mol	827	-20.3649	2.3947	-67.1703	-13.4351	-20.3649
680	THA.mol	1,414	-20.3637	0.6283	-40.3132	-12.7410	-20.3637
681	YEL.mol	1,599	-20.3611	2.9257	-44.9390	-15.3491	-20.3611
682	SYE.mol	1,343	-20.3561	4.0257	-63.1841	-16.5955	-20.3561
683	THN.mol	1,422	-20.3495	1.7938	-54.4469	-13.8422	-20.3495
684	YTW.mol	198	-20.3313	2.7406	-67.0373	-13.9523	-20.3313
685	RVR.mol	1,112	-20.3214	4.1007	-82.3389	-14.0810	-20.3214
686	TGQ.mol	1,410	-20.3198	0.6016	-34.9324	-13.4407	-20.3198
687	DQF.mol	107	-20.3088	3.2994	-73.4053	-16.1106	-20.3088
688	TDY.mol	1,380	-20.3031	2.3901	-45.0225	-15.8730	-20.3031
689	TFY.mol	1,404	-20.2930	2.2848	-34.7023	-12.9728	-20.2930
690	TGH.mol	1,407	-20.2798	3.0000	-62.4400	-14.6095	-20.2798
691	ETA.mol	286	-20.2763	1.8000	-37.6678	-15.0911	-20.2763
692	TQQ.mol	1,486	-20.2763	1.6061	-97.7746	-15.0649	-20.2763
693	QHW.mol	890	-20.2679	4.1374	-44.0300	-14.9803	-20.2679
694	SQL.mol	1,262	-20.2659	2.6043	-46.7236	-13.9771	-20.2659
695	SDI.mol	1,142	-20.2536	2.7779	-52.6930	-14.2221	-20.2536
696	HGH.mol	428	-20.2489	2.7977	3.2402	-13.3698	-20.2489
697	TEW.mol	1,394	-20.2448	2.0004	-54.4330	-14.7386	-20.2448
698	NFN.mol	695	-20.2431	2.4018	-49.6953	-13.1448	-20.2431
699	TRK.mol	1,498	-20.2425	2.4026	-58.8466	-15.4490	-20.2425
700	HNW.mol	461	-20.2413	3.0069	-74.8366	-14.4931	-20.2413
701	SLS.mol	1,238	-20.2328	1.2000	-38.5368	-13.5655	-20.2328
702	DFE.mol	40	-20.2308	2.4096	-25.8086	-16.2207	-20.2308
703	ERI.mol	275	-20.2296	3.6000	-20.3184	-16.0538	-20.2296
704	QYQ.mol	995	-20.2292	1.8000	-82.3208	-13.9842	-20.2292
705	HYH.mol	508	-20.2252	0.5973	-55.6015	-16.3842	-20.2252
706	TIR.mol	1,435	-20.2210	1.8008	-60.0071	-14.5151	-20.2210
707	QTK.mol	969	-20.2091	2.2957	-71.4269	-15.7349	-20.2091
708	NRF.mol	774	-20.2090	2.0052	-73.9549	-14.7927	-20.2090
709	QWQ.mol	985	-20.1905	2.6211	-62.3446	-13.2535	-20.1905
710	YER.mol	1,602	-20.1900	2.5518	35.7729	-16.9588	-20.1900
711	RSV.mol	1,097	-20.1791	2.2697	-55.3831	-15.8876	-20.1791
712	YNE.mol	65	-20.1769	2.1760	-54.1856	-14.4428	-20.1769
713	RHH.mol	1,035	-20.1687	2.6484	-84.2447	-15.3415	-20.1687
714	QQR.mol	936	-20.1660	2.2002	-42.4730	-13.6962	-20.1660

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
715	YLN.mol	53	-20.1585	3.6720	-38.4450	-12.0856	-20.1585
716	YAH.mol	1,572	-20.1569	4.0057	-98.3835	-15.8525	-20.1569
717	TNF.mol	1,465	-20.1558	3.6000	-74.1834	-13.4099	-20.1558
718	NNN.mol	753	-20.1549	1.8672	-75.0214	-14.4664	-20.1549
719	QIH.mol	893	-20.1394	2.6203	-23.2000	-14.6141	-20.1394
720	NYL.mol	831	-20.1238	3.8000	-46.5283	-13.3812	-20.1238
721	GDE.mol	303	-20.1211	3.9631	-39.1367	-16.0037	-20.1211
722	KRL.mol	611	-20.1063	1.8000	11.4479	-15.1659	-20.1063
723	QIK.mol	894	-20.0993	2.6530	-40.8508	-16.1664	-20.0993
724	KQF.mol	596	-20.0972	1.7757	-1.2401	-13.9123	-20.0972
725	QDK.mol	849	-20.0962	4.0000	-69.5839	-15.8087	-20.0962
726	EGE.mol	222	-20.0748	4.0000	-38.2769	-16.7880	-20.0748
727	YFQ.mol	1,611	-20.0677	4.0809	-42.3117	-17.3033	-20.0677
728	GTD.mol	382	-20.0668	2.6000	26.6814	-14.7900	-20.0668
729	KRI.mol	609	-20.0616	4.2662	-67.8867	-16.1747	-20.0616
730	QSD.mol	952	-20.0541	3.6000	22.6302	-16.4207	-20.0541
731	DQD.mol	104	-20.0535	4.0008	-84.8558	-17.0976	-20.0535
732	YVH.mol	205	-20.0459	0.0000	-74.2353	-12.6729	-20.0459
733	RKL.mol	1,050	-20.0280	2.8000	-73.4109	-14.8998	-20.0280
734	KER.mol	537	-20.0255	1.8281	-57.3817	-15.9731	-20.0255
735	TKF.mol	1,441	-20.0239	1.5914	-45.8165	-14.9293	-20.0239
736	TSW.mol	1,520	-20.0210	1.3279	-6.0130	-13.0422	-20.0210
737	QEF.mol	858	-20.0120	3.6314	-23.5857	-16.8264	-20.0120
738	RQD.mol	1,070	-20.0059	2.5814	-98.1603	-17.5265	-20.0059
739	QYE.mol	989	-19.9920	2.2243	-77.9698	-15.4568	-19.9920
740	SFY.mol	1,178	-19.9868	3.5852	-48.1488	-13.7449	-19.9868
741	EYF.mol	297	-19.9839	2.4000	-65.8706	-16.8256	-19.9839
742	GSE.mol	373	-19.9835	3.0000	-62.8558	-15.7269	-19.9835
743	NHD.mol	706	-19.9709	2.7932	-59.5371	-17.0974	-19.9709
744	RYE.mol	1,119	-19.9679	3.7130	-62.7719	-20.3388	-19.9679
745	YHR.mol	1,632	-19.9632	3.9941	-29.4071	-17.8052	-19.9632
746	TQH.mol	1,481	-19.9603	1.8000	-103.879	-13.5358	-19.9603
747	NKE.mol	727	-19.9489	2.1173	22.8625	-19.5940	-19.9489
748	GRS.mol	369	-19.9436	2.6000	3.4923	-14.6792	-19.9436
749	GQS.mol	359	-19.9330	1.7167	-17.3682	-14.2275	-19.9330
750	HRH.mol	475	-19.9307	3.8883	-43.9509	-14.3772	-19.9307
751	QFR.mol	872	-19.9241	3.5372	-45.1038	-16.2194	-19.9241
752	HQH.mol	466	-19.9228	1.2020	-56.7723	-13.8056	-19.9228
753	RFE.mol	1,024	-19.9198	1.2000	3.0367	-16.5607	-19.9198
754	DYF.mol	180	-19.9129	3.9891	-35.1526	-14.6015	-19.9129
755	GEH.mol	314	-19.9106	2.4000	-83.9457	-16.8731	-19.9106
756	KKA.mol	566	-19.9084	2.8000	13.7822	-15.7433	-19.9084

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
757	SYN.mol	1,349	-19.9043	3.2121	-65.0247	-14.3016	-19.9043
758	TKE.mol	1,440	-19.9006	2.9982	23.7772	-19.1951	-19.9006
759	GYK.mol	395	-19.8862	1.7948	-63.6163	-17.1783	-19.8862
760	TNY.mol	1,476	-19.8844	2.6334	-45.1176	-12.9586	-19.8844
761	YGR.mol	1,620	-19.8731	0.0000	-84.4448	-16.4325	-19.8731
762	TTL.mol	1,527	-19.8469	0.6009	-72.0312	-14.8980	-19.8469
763	YHA.mol	1,622	-19.8427	1.8319	46.9298	-14.1124	-19.8427
764	NYA.mol	824	-19.8419	2.7991	-72.8361	-14.2332	-19.8419
765	NEK.mol	684	-19.8312	4.3401	-5.0184	-15.6533	-19.8312
766	YIE.mol	3	-19.8298	3.5960	-67.0419	-15.5037	-19.8298
767	RRH.mol	1,083	-19.8218	3.6763	-39.6540	-13.9223	-19.8218
768	RQI.mol	1,074	-19.8202	4.2567	-69.2057	-14.1755	-19.8202
769	GHY.mol	331	-19.8199	1.8527	-5.6769	-13.2606	-19.8199
770	NSW.mol	796	-19.8157	2.8679	-31.0750	-13.5955	-19.8157
771	NGD.mol	698	-19.8115	1.8540	-66.8110	-16.7933	-19.8115
772	TFK.mol	1,399	-19.8107	2.5570	-15.4476	-15.1255	-19.8107
773	ESA.mol	279	-19.8079	4.0911	-95.0195	-16.1254	-19.8079
774	KLE.mol	578	-19.7942	3.8010	-32.5699	-15.5931	-19.7942
775	TGE.mol	1,406	-19.7901	1.6007	-51.4763	-15.8881	-19.7901
776	QKV.mol	907	-19.7867	1.8000	-32.3313	-14.5687	-19.7867
777	KTE.mol	628	-19.7865	5.6977	-36.2041	-15.7229	-19.7865
778	HIE.mol	439	-19.7854	3.8469	24.3060	-16.3750	-19.7854
779	HGD.mol	426	-19.7828	3.5569	-52.3954	-15.8655	-19.7828
780	TLQ.mol	1,458	-19.7733	2.2132	-21.0760	-14.5882	-19.7733
781	YRD.mol	119	-19.7729	4.0106	-52.9302	-15.1052	-19.7729
782	TNK.mol	1,468	-19.7669	1.2046	-50.6970	-13.6950	-19.7669
783	TWD.mol	1,546	-19.7652	4.0000	-32.7521	-14.3694	-19.7652
784	SKQ.mol	1,224	-19.7602	2.4075	-35.4193	-14.4309	-19.7602
785	TWQ.mol	1,551	-19.7437	0.7115	-60.0128	-13.4390	-19.7437
786	QWE.mol	982	-19.7435	3.6131	-59.8416	-15.5700	-19.7435
787	KEA.mol	529	-19.7368	1.6000	-20.5821	-17.9172	-19.7368
788	NKH.mol	729	-19.7281	3.2197	-110.429	-14.2909	-19.7281
789	QYD.mol	988	-19.7222	2.8000	-54.1574	-14.9203	-19.7222
790	NVQ.mol	815	-19.7210	1.6000	-36.3464	-14.4312	-19.7210
791	YNA.mol	61	-19.7191	3.3659	-92.9240	-12.6216	-19.7191
792	QTQ.mol	971	-19.7038	1.2220	-19.1087	-12.8079	-19.7038
793	STN.mol	1,313	-19.6917	1.2000	-47.8897	-14.0358	-19.6917
794	HQA.mol	462	-19.6889	2.2405	-66.2858	-15.3903	-19.6889
795	NRL.mol	778	-19.6745	2.0749	-35.5191	-14.2501	-19.6745
796	HKD.mol	442	-19.6719	3.6576	-57.0544	-15.8958	-19.6719
797	KEH.mol	533	-19.6573	2.5396	-35.2767	-16.5150	-19.6573
798	KRA.mol	604	-19.6552	1.8000	-57.4880	-17.8572	-19.6552

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
799	NTF.mol	800	-19.6503	3.6003	-21.0945	-14.1488	-19.6503
800	KFE.mol	541	-19.6398	2.2000	-24.0314	-15.0029	-19.6398
801	RDL.mol	1,009	-19.6267	3.1715	-41.8880	-17.6989	-19.6267
802	REI.mol	1,018	-19.6171	3.6048	-52.6923	-16.6177	-79.6171
803	QYH.mol	991	-19.6150	1.8000	-47.1160	-13.5748	-19.6150
804	KLH.mol	579	-19.6086	2.8002	39.9066	-15.3001	-19.6086
805	TQF.mol	1,480	-19.6036	3.7550	-59.9747	-12.8784	-19.6036
806	GDR.mol	308	-19.6001	2.3634	-62.4453	-15.4272	-19.6001
807	TAQ.mol	1,362	-19.5986	3.2118	-55.5259	-15.6446	-19.5986
808	NFE.mol	692	-19.5860	2.6378	-50.4375	-14.9643	-19.5860
809	SNS.mol	1,252	-19.5801	0.6052	-25.4110	-17.0819	-19.5801
810	KTD.mol	627	-19.5793	2.8518	-8.5028	-16.1721	-19.5793
811	SEN.mol	1,161	-19.5697	2.5919	-66.3729	-16.0933	-19.5697
812	YTA.mol	173	-19.5660	3.4093	-41.0362	-13.5361	-19.5660
813	SQR.mol	1,267	-19.5596	3.2002	-59.2356	-17.0304	-19.5596
814	YTD.mol	175	-19.5500	2.1039	-23.9160	-13.7258	-19.5500
815	TYR.mol	1,565	-19.5496	3.3462	-55.3565	-14.6339	-19.5496
816	NDH.mol	669	-19.5439	4.0484	-124.413	-15.6264	-19.5439
817	RAE.mol	1,000	-19.5218	2.4000	26.7928	-15.9169	-19.5218
818	HQE.mol	464	-19.5217	1.8003	-68.9852	-18.1202	-19.5217
819	KHL.mol	557	-19.5216	3.0000	-47.6455	-13.7666	-19.5216
820	SHS.mol	1,200	-19.5113	1.8960	-17.8125	-15.4899	-19.5113
821	QAH.mol	839	-19.5065	2.4000	-10.8697	-15.2125	-19.5065
822	KIE.mol	562	-19.5027	2.4101	-27.6808	-15.9445	-19.5027
823	TQL.mol	1,484	-19.5016	2.9968	-52.1545	-12.8563	-19.5016
824	SVR.mol	1,327	-19.4891	3.4200	-37.9420	-14.3154	-19.4891
825	SYK.mol	1,347	-19.4828	0.6000	-52.2513	-15.3753	-19.4828
826	ETI.mol	289	-19.4764	0.0000	-63.7078	-17.9591	-19.4764
827	NHL.mol	710	-19.4728	1.8777	-42.3600	-13.3200	-19.4728
828	QQL.mol	934	-19.4672	1.6000	-20.5907	-13.4064	-19.4672
829	SVK.mol	1,324	-19.4606	1.8000	-47.0471	-17.7096	-19.4606
830	GYN.mol	396	-19.4554	1.2000	-41.2301	-14.6787	-19.4554
831	YRV.mol	140	-19.4546	1.9263	-54.8930	-14.4232	-19.4546
832	QED.mol	856	-19.4422	3.3162	-64.4291	-17.9531	-19.4422
833	HKW.mol	449	-19.4258	4.0423	-79.6081	-13.6502	-19.4258
834	YLQ.mol	55	-19.4204	4.1984	-69.2549	-12.5891	-19.4204
835	KRD.mol	605	-19.4139	2.4384	62.9397	-16.9305	-19.4139
836	ERF.mol	274	-19.4128	3.2054	-23.8175	-17.6824	-19.4128
837	NVN.mol	814	-19.3987	1.4758	-47.7201	-13.3286	-19.3987
838	TEH.mol	1,385	-19.3862	1.8000	-33.0260	-14.7794	-19.3862
839	YIH.mol	5	-19.3731	1.8000	-36.5241	-12.5041	-19.3731
840	QSE.mol	953	-19.3703	1.9933	-22.0577	-14.8967	-19.3703

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
841	STF.mol	1,308	-19.3702	1.6834	-46.1139	-13.0545	-19.3702
842	YQH.mol	97	-19.3701	3.9313	-27.3930	-13.6027	-19.3701
843	NIQ.mol	723	-19.3678	3.7996	-62.5240	-13.8346	-19.3678
844	NHV.mol	716	-19.3654	0.6580	-19.0386	-14.9763	-19.3654
845	QSK.mol	957	-19.3631	1.4000	28.5591	-20.2559	-19.3631
846	QLH.mol	911	-19.3620	1.1902	-83.9323	-13.3167	-19.3620
847	SHR.mol	1,199	-19.3519	2.3621	-69.5847	-16.4593	-19.3519
848	TIT.mol	1,436	-19.3477	1.4000	-62.2261	-12.7047	-19.3477
849	EHA.mol	224	-19.3476	2.6009	-38.0244	-15.6048	-19.3476
850	ERW.mol	278	-19.3461	3.8000	82.2524	-14.8257	-19.3461
851	TSN.mol	1,515	-19.3399	1.8011	20.8725	-12.8945	-19.3399
852	YVQ.mol	211	-19.3391	2.5635	4.7105	-13.7332	-19.3391
853	QFD.mol	867	-19.3386	3.6932	-57.1645	-15.6312	-19.3386
854	NSL.mol	791	-19.3371	1.3027	-6.1735	-12.7994	-19.3371
855	RRL.mol	1,085	-19.3342	2.0000	-50.0255	-14.0662	-19.3342
856	NVR.mol	816	-19.3331	3.6733	-28.6635	-13.6388	-19.3331
857	SWN.mol	1,335	-19.3326	2.2649	-71.9521	-13.1709	-19.3326
858	RHR.mol	1,038	-19.3300	4.4533	-28.6447	-14.7817	-19.3300
859	SHV.mol	1,202	-19.3257	1.7961	-75.0412	-13.5657	-19.3257
860	QNH.mol	919	-19.3246	2.0489	-45.6234	-13.2263	-19.3246
861	TSH.mol	1,511	-19.3245	2.1885	-79.2456	-13.5879	-19.3245
862	SQD.mol	1,258	-19.3174	3.1372	-75.9746	-17.4569	-19.3174
863	NSF.mol	787	-19.3159	0.9981	-34.9183	-13.4722	-19.3159
864	DRL.mol	127	-19.3144	2.6000	21.6491	-17.0116	-19.3144
865	TNI.mol	1,467	-19.3132	1.4000	-6.0112	-16.3765	-19.3132
866	HDV.mol	412	-19.3040	2.1738	-51.1422	-15.8026	-19.3040
867	HDE.mol	407	-19.3026	3.0584	-67.7470	-17.0436	-19.3026
868	GKD.mol	332	-19.3020	2.9700	9.8026	-16.8820	-19.3020
869	SSW.mol	1,303	-19.3010	3.4000	-33.7804	-13.3991	-19.3010
870	NSA.mol	784	-19.3003	0.0000	-50.8173	-13.7786	-19.3003
871	NLN.mol	742	-19.3001	0.6000	-45.8634	-12.8464	-19.3001
872	SIR.mol	1,211	-19.2975	2.4000	-39.6432	-14.0526	-19.2975
873	EQL.mol	269	-19.2910	2.0000	-43.8601	-15.0836	-19.2910
874	QTH.mol	967	-19.2886	2.2000	-89.3373	-14.3181	-19.2886
875	GTT.mol	390	-19.2852	1.0000	33.4954	-13.6918	-19.2852
876	SSK.mol	1,295	-19.2634	2.8000	-41.5930	-15.1795	-19.2634
877	GKN.mol	336	-19.2580	2.4000	-29.5656	-18.4901	-19.2580
878	TQV.mol	1,489	-19.2564	4.2206	-39.6808	-13.6691	-19.2564
879	YAD.mol	1,570	-19.2389	2.4173	-76.5830	-16.2519	-19.2389
880	RID.mol	1,041	-19.2203	3.0000	-47.1873	-15.7350	-19.2203
881	GRH.mol	364	-19.2181	3.2269	-50.9824	-14.7475	-19.2181
882	NLQ.mol	743	-19.2047	2.2015	-53.9541	-12.8184	-19.2047

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
883	TLD.mol	1,453	-19.2037	3.7541	-32.3759	-17.4075	-19.2037
884	NQQ.mol	767	-19.2020	2.8000	18.3817	-16.0211	-19.2020
885	KNI.mol	587	-19.2017	3.4000	-17.2989	-15.3337	-19.2017
886	HKF.mol	444	-19.2010	4.0478	-75.2364	-16.1590	-19.2010
887	THE.mol	1,416	-19.1950	2.3110	-19.9797	-16.7976	-19.1950
888	TGK.mol	1,408	-19.1889	3.4045	-27.3201	-13.7592	-19.1889
889	DKE.mol	70	-19.1818	4.1282	-40.3614	-18.9099	-19.1818
890	KNR.mol	590	-19.1665	3.8686	29.6876	-14.3956	-19.1665
891	NEL.mol	685	-19.1638	1.6060	-13.1574	-16.3238	-19.1638
892	HDI.mol	410	-19.1529	2.0834	-44.2122	-15.0129	-19.1529
893	YRI.mol	128	-19.1459	2.0013	-37.9211	-16.8041	-19.1459
894	QHH.mol	883	-19.1433	2.4353	-65.4959	-13.2220	-19.1433
895	TAH.mol	1,359	-19.1415	1.8000	23.3262	-14.8033	-19.1415
896	NTW.mol	809	-19.1376	3.1228	-41.1111	-14.3236	-19.1376
897	YQF.mol	95	-19.1365	3.3933	-28.3506	-14.9609	-19.1365
898	QTI.mol	968	-19.1315	1.6000	-75.8740	-13.1019	-19.1315
899	HDH.mol	409	-19.1062	1.5860	-111.614	-16.9597	-19.1062
900	YQE.mol	93	-19.1038	3.5572	-64.0828	-15.3595	-19.1038
901	SHA.mol	1,189	-19.1008	3.7937	-46.4546	-13.8598	-19.1008
902	YEV.mol	1,603	-19.0960	1.0000	-41.6306	-15.3853	-19.0960
903	RTF.mol	1,102	-19.0952	3.9158	-48.6529	-14.1538	-19.0952
904	YTR.mol	193	-19.0743	3.9967	-53.4975	-14.5630	-19.0743
905	NNK.mol	751	-19.0717	2.0025	-36.2226	-17.5025	-19.0717
906	DHF.mol	52	-19.0703	3.9100	4.7995	-14.8708	-19.0703
907	QGQ.mol	877	-19.0701	2.2474	-45.8315	-13.5942	-19.0701
908	ESV.mol	284	-19.0535	2.5735	-47.5426	-16.2827	-19.0535
909	TDQ.mol	1,375	-19.0523	3.0078	36.6231	-16.3900	-19.0523
910	SSL.mol	1,296	-19.0506	0.6000	-60.1866	-13.0461	-19.0506
911	TTQ.mol	1,531	-19.0360	2.7570	-66.9459	-13.1650	-19.0360
912	SHE.mol	1,191	-19.0352	1.0000	-22.5484	-16.1947	-19.0352
913	REH.mol	1,017	-19.0326	3.3461	-57.2031	-16.2141	-19.0326
914	QNV.mol	925	-19.0262	2.2838	-64.2211	-15.3378	-19.0262
915	HHV.mol	436	-19.0244	1.7825	-2.9880	-15.3420	-19.0244
916	TLR.mol	1,459	-19.0122	2.4000	-41.3818	-14.2573	-19.0122
917	NSI.mol	789	-19.0105	1.6917	-24.4139	-13.1682	-19.0105
918	STD.mol	1,306	-18.9994	2.2000	-44.3992	-15.6810	-18.9994
919	QGH.mol	875	-18.9988	1.7997	60.7221	-13.8566	-18.9988
920	RFD.mol	1,023	-18.9956	3.5718	94.5761	-15.4599	-18.9956
921	SFD.mol	1,169	-18.9953	4.0580	-73.2762	-15.8138	-18.9953
922	SFS.mol	1,176	-18.9808	2.5747	-54.9913	-13.7711	-18.9808
923	SGS.mol	1,186	-18.9800	1.2000	4.9199	-13.1078	-18.9800
924	SES.mol	1,164	-18.9785	3.2000	-46.9878	-15.7267	-18.9785

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
925	SAH.mol	1,129	-18.9777	3.4000	-32.5085	-14.8620	-18.9777
926	KQH.mol	597	-18.9735	2.2000	-2.6641	-16.3501	-18.9735
927	YYV.mol	255	-18.9624	3.7977	-64.5192	-15.0897	-18.9624
928	NNL.mol	752	-18.9562	1.9432	-98.9031	-14.1314	-18.9562
929	QQQ.mol	935	-18.9505	3.4002	-85.9825	-12.9070	-18.9505
930	ENV.mol	263	-18.9476	2.4000	-70.0061	-16.1988	-18.9476
931	GQQ.mol	357	-18.9375	1.8000	-52.9969	-13.1854	-18.9375
932	NYV.mol	835	-18.9296	1.1991	-43.6054	-13.6697	-18.9296
933	SYD.mol	1,342	-18.9223	3.7919	-104.222	-18.6915	-18.9223
934	SLT.mol	1,239	-18.9134	1.6118	-39.1562	-13.3734	-18.9134
935	NIR.mol	724	-18.9034	2.8024	-46.3344	-14.1140	-18.9034
936	RWH.mol	1,115	-18.8873	3.6484	-77.3631	-13.9769	-18.8873
937	QRD.mol	940	-18.8869	2.4935	39.9599	-17.6331	-18.8869
938	HID.mol	438	-18.8828	1.6000	-45.7048	-14.7021	-18.8828
939	NSE.mol	786	-18.8819	2.4006	-26.9983	-16.4403	-18.8819
940	YNK.mol	73	-18.8803	1.3506	-31.9108	-13.1709	-18.8803
941	HSA.mol	480	-18.8777	2.2000	-42.1542	-16.7204	-18.8777
942	EVE.mol	293	-18.8749	1.8000	-28.0469	-16.6784	-18.8749
943	HHF.mol	432	-18.8691	4.2693	24.9607	-12.9709	-18.8691
944	KEF.mol	532	-18.8610	3.5095	-4.0030	-15.7598	-18.8610
945	QDW.mol	854	-18.8513	1.4000	-53.7313	-17.8661	-18.8513
946	TNE.mol	1,464	-18.8397	3.3967	-91.6052	-15.5325	-18.8397
947	EYV.mol	300	-18.8385	1.3986	-25.3398	-16.0276	-18.8385
948	ENA.mol	256	-18.8357	2.8696	-6.2886	-14.9924	-18.8357
949	YHI.mol	1,627	-18.8349	3.7566	69.7416	-13.4197	-18.8349
950	TSF.mol	1,510	-18.8318	2.8000	-54.5027	-13.2745	-18.8318
951	SKE.mol	1,217	-18.8282	3.8000	-45.5037	-20.6338	-18.8282
952	NWQ.mol	822	-18.8184	2.7257	-75.4861	-12.7009	-18.8184
953	SQT.mol	1,269	-18.8065	1.6000	-30.6721	-14.8178	-18.8065
954	SNF.mol	1,244	-18.7940	1.9277	-43.3040	-13.4856	-18.7940
955	DDL.mol	16	-18.7910	3.8001	-33.4945	-16.8169	-18.7910
956	SQS.mol	1,268	-18.7885	2.8008	-0.4981	-13.8579	-18.7885
957	RTH.mol	1,103	-18.7866	2.6245	-105.840	-14.6350	-18.7866
958	NFR.mol	697	-18.7839	2.6018	22.5382	-15.2780	-18.7839
959	EHI.mol	230	-18.7747	2.2939	-94.6519	-15.7377	-18.7747
960	GYS.mol	399	-18.7700	1.7844	-51.3902	-14.0228	-18.7700
961	DSL.mol	143	-18.7668	4.0000	-39.0557	-16.0465	-18.7668
962	DRV.mol	130	-18.7656	2.4000	-29.7828	-16.6563	-18.7656
963	KWR.mol	646	-18.7607	3.1627	10.0108	-15.2544	-18.7607
964	RWR.mol	1,116	-18.7593	2.8231	-4.0459	-13.1211	-18.7593
965	DNA.mol	86	-18.7510	2.0009	-27.4729	-14.8333	-18.7510
966	SEQ.mol	1,162	-18.7485	1.8776	-9.1228	-18.0597	-18.7485

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
967	NTI.mol	802	-18.7455	0.6482	4.9037	-12.8579	-18.7455
968	RNR.mol	1,066	-18.7439	4.0000	6.1802	-14.7090	-18.7439
969	QLK.mol	912	-18.7311	3.8563	-8.9354	-13.2262	-18.7311
970	KKW.mol	576	-18.7200	2.0000	-31.8641	-13.9004	-18.7200
971	ESF.mol	281	-18.7178	2.6000	26.0644	-14.9835	-18.7178
972	DAD.mol	1	-18.7170	3.2000	46.0802	-16.2056	-18.7170
973	TKR.mol	1,448	-18.7168	2.4000	-71.4062	-15.3830	-18.7168
974	YNV.mol	83	-18.7113	1.7697	-51.3604	-12.8073	-18.7113
975	HNH.mol	457	-18.7072	2.3009	-64.9192	-16.0057	-18.7072
976	GRQ.mol	367	-18.7038	1.6000	10.9231	-16.9371	-18.7038
977	RHA.mol	1,031	-18.7030	3.6580	-50.5028	-14.1043	-18.7030
978	QVK.mol	978	-18.6918	2.8000	-22.3852	-18.0852	-18.6918
979	YEQ.mol	1,601	-18.6910	0.9691	-64.9308	-16.7769	-18.6910
980	TET.mol	1,392	-18.6833	2.3980	0.1126	-17.9886	-18.6833
981	THR.mol	1,424	-18.6819	2.9761	-27.2326	-13.9478	-18.6819
982	SLN.mol	1,235	-18.6760	1.2348	37.9792	-16.0096	-18.6760
983	QHA.mol	879	-18.6678	2.2000	-74.3192	-15.6791	-18.6678
984	KQA.mol	593	-18.6674	2.0000	-42.9190	-17.4307	-18.6674
985	KSF.mol	618	-18.6572	4.0042	9.2777	-13.5591	-18.6572
986	TDK.mol	1,372	-18.6472	3.6000	48.9393	-16.6370	-18.6472
987	SNT.mol	1,253	-18.6469	3.2000	-59.1893	-14.0783	-18.6469
988	KQW.mol	603	-18.6396	3.0000	-84.5462	-16.7737	-18.6396
989	YQR.mol	109	-18.6349	3.8142	-66.2818	-12.1964	-18.6349
990	RNE.mol	1,061	-18.6264	4.3084	-17.2617	-16.1122	-18.6264
991	TKT.mol	1,449	-18.6201	2.7564	-46.0746	-15.4383	-18.6201
992	RAD.mol	999	-18.6158	1.6000	-51.5179	-16.6939	-18.6158
993	KAD.mol	513	-18.6121	3.0640	-57.7923	-17.0131	-18.6121
994	HYD.mol	505	-18.5922	3.1949	-89.5641	-15.5450	-18.5922
995	REA.mol	1,013	-18.5902	3.8173	5.4403	-15.5479	-18.5902
996	SNV.mol	1,254	-18.5873	1.6000	-53.6172	-15.2593	-18.5873
997	HED.mol	415	-18.5848	2.6560	-103.098	-16.9798	-18.5848
998	EEW.mol	217	-18.5692	3.1795	-57.6728	-17.1058	-18.5692
999	SLH.mol	1,233	-18.5690	0.6207	-40.5238	-13.7369	-18.5690
1,000	NEN.mol	686	-18.5668	3.2589	12.0870	-17.5737	-18.5668
1,001	GKY.mol	341	-18.5642	3.0000	-27.3411	-16.0373	-18.5642
1,002	DQI.mol	110	-18.5541	3.3198	-36.8262	-16.3100	-18.5541
1,003	YQD.mol	91	-18.5531	3.9685	-46.6699	-13.6163	-18.5531
1,004	KDW.mol	528	-18.5513	3.2240	-45.5097	-17.7985	-18.5513
1,005	NEV.mol	689	-18.5512	1.6000	-52.1300	-18.0243	-18.5512
1,006	TAD.mol	1,357	-18.5490	1.4000	-4.1314	-15.3805	-18.5490
1,007	NKD.mol	726	-18.5475	1.6070	-51.2039	-16.7136	-18.5475
1,008	QHV.mol	889	-18.5463	1.7260	-1.9849	-16.5920	-18.5463
1,009	TRN.mol	1,500	-18.5460	1.8011	-79.9105	-13.8151	-18.5460
1,010	QHQ.mol	887	-18.5376	2.2095	-65.2965	-13.1855	-18.5376

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
1,011	SET.mol	1,165	-18.5371	2.4000	-28.7093	-14.0369	-18.5371
1,012	NAN.mol	662	-18.5275	0.6000	-49.7925	-13.4833	-18.5275
1,013	TNQ.mol	1,471	-18.5243	1.2533	34.6615	-13.8673	-18.5243
1,014	YTE.mol	177	-18.5175	3.5705	-51.4261	-15.5231	-18.5175
1,015	TSD.mol	1,508	-18.5101	1.2000	-47.3356	-17.9489	-18.5101
1,016	QTR.mol	972	-18.5092	2.8776	-40.4637	-12.5994	-18.5092
1,017	NWN.mol	821	-18.5048	2.8000	-52.8710	-13.6792	-18.5048
1,018	DHV.mol	58	-18.5041	2.6011	-21.5712	-15.8409	-18.5041
1,019	QKD.mol	898	-18.5041	2.6111	-45.4011	-17.3189	-18.5041
1,020	QTA.mol	963	-18.5041	2.2000	-62.8341	-13.5605	-18.5041
1,021	DKV.mol	78	-18.5029	2.8013	-78.8569	-18.3895	-18.5029
1,022	DYL.mol	184	-18.4991	3.3452	-22.2058	-17.9690	-18.4991
1,023	KNA.mol	582	-18.4970	2.4649	-46.9120	-16.2157	-18.4970
1,024	TKW.mol	1,451	-18.4962	2.3883	-51.8530	-15.0979	-18.4962
1,025	YFD.mol	1,606	-18.4697	1.3316	-64.7402	-16.0050	-18.4697
1,026	NDQ.mol	674	-18.4629	3.8790	-87.7882	-15.2333	-18.4629
1,027	DKL.mol	76	-18.4597	4.0240	-46.8856	-16.1190	-18.4597
1,028	RDE.mol	1,005	-18.4434	4.0398	-48.3144	-17.3184	-18.4434
1,029	TKI.mol	1,443	-18.4418	2.6199	-33.6618	-14.3790	-18.4418
1,030	RIR.mol	1,044	-18.4337	3.4162	-59.3275	-14.1077	-18.4337
1,031	RYR.mol	1,124	-18.4199	3.0216	-58.0781	-15.0825	-18.4199
1,032	SQV.mol	1,270	-18.4198	2.0324	-55.1161	-13.6572	-18.4198
1,033	RQF.mol	1,072	-18.4179	3.5718	-18.9497	-13.6248	-18.4179
1,034	KQR.mol	601	-18.4175	4.0000	-36.9922	-17.0097	-18.4175
1,035	DEV.mol	33	-18.4160	1.8000	-23.6454	-17.0591	-18.4160
1,036	NHH.mol	709	-18.3977	1.8331	-22.7632	-13.1648	-18.3977
1,037	YGY.mol	1,621	-18.3851	1.6063	-99.0089	-14.2365	-18.3851
1,038	DSA.mol	134	-18.3836	1.6000	-85.5102	-16.9342	-18.3836
1,039	EYA.mol	295	-18.3773	2.1925	-27.5086	-16.7631	-18.3773
1,040	KNK.mol	588	-18.3624	3.1992	24.4398	-15.0932	-18.3624
1,041	TAK.mol	1,360	-18.3587	2.6659	16.7412	-14.4579	-18.3587
1,042	YQK.mol	101	-18.3545	3.4000	-43.4949	-13.7461	-18.3545
1,043	YKN.mol	34	-18.3478	3.8869	-72.7819	-14.2274	-18.3478
1,044	HGE.mol	427	-18.3436	3.1125	-66.1023	-16.1352	-18.3436
1,045	NRI.mol	776	-18.3408	2.0002	-65.9170	-15.7365	-18.3408
1,046	RRD.mol	1,080	-18.3240	3.4010	-50.6945	-17.7600	-18.3240
1,047	KDV.mol	527	-18.3237	1.8000	-15.5456	-18.5080	-18.3237
1,048	SAD.mol	1,127	-18.3157	2.0000	-28.8504	-15.5780	-18.3157
1,049	SGR.mol	1,185	-18.3114	4.5562	-10.7294	-14.7390	-18.3114
1,050	TTF.mol	1,525	-18.3077	1.9470	-38.8212	-14.1181	-18.3077
1,051	QVH.mol	977	-18.3019	1.1999	-91.6490	-14.8007	-18.3019
1,052	GQN.mol	356	-18.2965	2.2000	-58.3230	-16.2609	-18.2965

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
1,053	TTD.mol	1,523	-18.2964	2.8065	-64.9996	-14.6971	-18.2964
1,054	QFH.mol	869	-18.2941	2.9348	25.5337	-12.8762	-18.2941
1,055	DED.mol	24	-18.2860	3.2004	-29.3654	-18.0075	-18.2860
1,056	TSY.mol	1,521	-18.2848	4.0063	-23.2649	-14.0466	-18.2848
1,057	EES.mol	214	-18.2773	3.8000	-43.2737	-17.3970	-18.2773
1,058	RNI.mol	1,064	-18.2626	2.2000	-86.3876	-13.6538	-18.2626
1,059	QDR.mol	852	-18.2568	3.0000	-25.5266	-16.3716	-18.2568
1,060	RSD.mol	1,090	-18.2528	3.6050	-8.2900	-16.3816	-18.2528
1,061	SAN.mol	1,131	-18.2527	0.6000	-70.5429	-14.4944	-18.2527
1,062	RLD.mol	1,055	-18.2453	3.8777	-47.8327	-15.9251	-18.2453
1,063	SRF.mol	1,276	-18.2385	3.2221	-75.6655	-15.3604	-18.2385
1,064	KTW.mol	636	-18.2319	3.2195	12.1700	-14.4904	-18.2319
1,065	ENF.mol	260	-18.2246	2.2000	-36.4322	-15.2594	-18.2246
1,066	KTA.mol	626	-18.2100	3.0000	-62.2320	-15.0590	-18.2100
1,067	YDV.mol	1,589	-18.2099	2.7868	69.6370	-16.3905	-18.2099
1,068	QQW.mol	938	-18.2080	1.8048	-17.9680	-14.2281	-18.2080
1,069	TTN.mol	1,530	-18.2062	2.2030	-23.3298	-13.3366	-18.2062
1,070	SDV.mol	1,150	-18.2027	2.0000	-59.3391	-17.0620	-18.2027
1,071	NLR.mol	744	-18.1941	3.1204	-61.5655	-15.0422	-18.1941
1,072	NGR.mol	704	-18.1930	3.4289	-54.7230	-13.7403	-18.1930
1,073	TLE.mol	1,454	-18.1804	1.8000	-58.1432	-14.4413	-18.1804
1,074	EWE.mol	294	-18.1767	4.4157	-44.8574	-16.0829	-18.1767
1,075	KTF.mol	629	-18.1731	2.7755	-46.8466	-17.9677	-18.1731
1,076	HRE.mol	473	-18.1538	3.2150	-94.4959	-15.5346	-18.1538
1,077	SNH.mol	1,245	-18.1522	3.4000	-70.7674	-14.7691	-18.1522
1,078	NAH.mol	660	-18.1449	2.7175	-71.6983	-13.1171	-18.1449
1,079	SSS.mol	1,300	-18.1325	2.8000	-68.0612	-13.8986	-18.1325
1,080	NSK.mol	790	-18.1210	3.1579	22.4883	-14.5712	-18.1210
1,081	DLE.mol	84	-18.1068	1.8458	-5.3598	-16.7074	-18.1068
1,082	QSA.mol	951	-18.1028	2.2000	-27.8138	-17.1450	-18.1028
1,083	TSL.mol	1,514	-18.0765	1.2803	-42.5283	-12.4128	-18.0765
1,084	TVD.mol	1,537	-18.0751	1.0000	-10.9491	-14.9458	-18.0751
1,085	TEV.mol	1,393	-18.0584	3.8025	-58.3035	-14.5647	-18.0584
1,086	NYK.mol	830	-18.0569	1.8000	-0.0434	-14.5507	-18.0569
1,087	EYE.mol	296	-18.0520	3.0969	-59.4289	-17.1129	-18.0520
1,088	QSL.mol	958	-18.0460	2.6000	-27.2805	-13.8953	-18.0460
1,089	SHN.mol	1,197	-18.0377	1.8060	34.8959	-15.9202	-18.0377
1,090	RHI.mol	1,036	-18.0316	2.8495	-58.3791	-14.9256	-18.0316
1,091	NRH.mol	775	-18.0200	4.5916	-88.5459	-13.9722	-18.0200
1,092	RED.mol	1,014	-18.0179	3.4000	-41.2137	-18.6097	-18.0179
1,093	YHH.mol	1,626	-18.0126	3.5717	-31.4423	-13.7115	-18.0126
1,094	GKR.mol	338	-18.0091	4.0851	-40.4394	-14.4422	-18.0091

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
1,095	GSD.mol	372	-18.0030	1.7556	-47.6045	-17.8035	-18.0030
1,096	SWE.mol	1,332	-18.0001	3.1032	-90.9523	-17.1575	-18.0001
1,097	KVK.mol	640	-17.9990	3.6021	-26.1002	-14.9242	-17.9990
1,098	TYH.mol	1,559	-17.9988	2.2000	25.6602	-15.2743	-17.9988
1,099	SNR.mol	1,251	-17.9979	2.4681	-82.6040	-14.2373	-17.9979
1,100	NTD.mol	798	-17.9960	2.6000	-74.0936	-16.3094	-17.9960
1,101	NAD.mol	658	-17.9936	2.0006	-104.105	-15.9568	-17.9936
1,102	QKI.mol	902	-17.9882	1.0000	-79.1025	-20.3197	-17.9882
1,103	SNN.mol	1,249	-17.9877	1.8000	-63.3742	-15.1410	-17.9877
1,104	TYT.mol	1,566	-17.9850	2.7982	6.4810	-13.6417	-17.9850
1,105	KGE.mol	546	-17.9806	3.9887	-33.6786	-16.3827	-17.9806
1,106	GEN.mol	316	-17.9712	3.6000	-50.9741	-14.8551	-17.9712
1,107	HTL.mol	495	-17.9705	1.4001	-49.1808	-12.6283	-17.9705
1,108	RRA.mol	1,079	-17.9656	4.0556	-25.3408	-14.6034	-17.9656
1,109	QQL.mol	932	-17.9513	3.1018	-46.9392	-14.5136	-17.9513
1,110	NTK.mol	803	-17.9412	3.2053	10.5406	-14.7194	-17.9412
1,111	NEF.mol	681	-17.9369	3.1914	23.4725	-18.9163	-17.9369
1,112	KGH.mol	547	-17.9258	2.9789	-39.4636	-14.8563	-17.9258
1,113	NDA.mol	665	-17.9221	1.6000	-75.9998	-15.8735	-17.9221
1,114	SSH.mol	1,293	-17.9160	2.7749	-65.6339	-13.5659	-17.9160
1,115	KGK.mol	548	-17.9147	3.0034	-58.7771	-17.0087	-17.9147
1,116	GTE.mol	383	-17.9134	2.4000	-53.4543	-17.8896	-17.9134
1,117	EEL.mol	212	-17.9112	4.0000	-43.5156	-16.9843	-17.9112
1,118	TDE.mol	1,368	-17.8770	2.2000	-83.7862	-17.5380	-17.8770
1,119	GHT.mol	330	-17.8754	2.2000	-32.2832	-13.1315	-17.8754
1,120	SNE.mol	1,243	-17.8731	1.8263	-74.2984	-17.3784	-17.8731
1,121	SVH.mol	1,323	-17.8708	1.7914	-28.5783	-14.3365	-17.8708
1,122	RSR.mol	1,096	-17.8661	3.4000	-42.7397	-15.1995	-17.8661
1,123	DDV.mol	18	-17.8602	3.9657	3.7955	-17.6509	-17.8602
1,124	TIH.mol	1,431	-17.8512	2.0015	-105.146	-13.6367	-17.8512
1,125	QAE.mol	838	-17.8398	3.2000	-29.7399	-16.7111	-17.8398
1,126	EEV.mol	216	-17.8383	3.4452	-61.3424	-19.7003	-17.8383
1,127	YSA.mol	146	-17.8302	3.4000	-84.4224	-13.4498	-17.8302
1,128	QGR.mol	878	-17.8232	1.4000	-98.8798	-14.7867	-17.8232
1,129	DTA.mol	149	-17.8226	2.4000	-59.1245	-15.4069	-17.8226
1,130	RIE.mol	1,042	-17.8217	2.0000	-14.4947	-16.2676	-17.8217
1,131	RKE.mol	1,047	-17.8211	3.7221	-37.5029	-16.8334	-17.8211
1,132	DKF.mol	72	-17.8187	4.0202	-68.6335	-15.9132	-17.8187
1,133	HWE.mol	502	-17.8117	2.4608	-26.3470	-14.1700	-17.8117
1,134	NNV.mol	756	-17.7976	1.2000	11.4737	-15.5847	-17.7976
1,135	QKQ.mol	905	-17.7846	2.4542	-12.7869	-15.0346	-17.7846
1,136	YHK.mol	1,628	-17.7797	2.9939	-62.6841	-15.9826	-17.7797

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
1,137	KTH.mol	630	-17.7794	1.8000	-40.4807	-19.2456	-17.7794
1,138	DHA.mol	46	-17.7711	2.0002	-67.3529	-15.9761	-17.7711
1,139	ENI.mol	261	-17.7695	2.8283	-55.2367	-15.9705	-17.7695
1,140	YHV.mol	1,633	-17.7670	3.9736	-56.3442	-13.2465	-17.7670
1,141	NNI.mol	750	-17.7632	3.4763	-27.9664	-14.5735	-17.7632
1,142	TVY.mol	1,545	-17.7619	1.0000	-44.3004	-15.1353	-17.7619
1,143	KEL.mol	536	-17.7613	3.2000	-38.1225	-16.7457	-17.7613
1,144	SYS.mol	1,352	-17.7597	1.7816	-34.0675	-14.5838	-17.7597
1,145	YFH.mol	1,608	-17.7529	1.4215	-29.5388	-16.0038	-17.7529
1,146	SVS.mol	1,328	-17.7177	2.2000	41.0610	-13.7857	-17.7177
1,147	RAR.mol	1,002	-17.7125	3.4000	-76.0765	-16.3044	-17.7125
1,148	YGE.mol	1,615	-17.7042	2.8000	-87.1861	-15.3720	-17.7042
1,149	DTV.mol	161	-17.7014	1.0000	68.7403	-14.9645	-17.7014
1,150	DNV.mol	98	-17.7003	3.4000	-70.0451	-15.0329	-17.7003
1,151	SHD.mol	1,190	-17.6677	3.8029	-59.4290	-16.3101	-17.6677
1,152	GSS.mol	379	-17.6665	1.2000	-82.7044	-15.0512	-17.6665
1,153	NVK.mol	813	-17.6639	1.4642	0.6049	-19.3634	-17.6639
1,154	YIQ.mol	12	-17.6538	1.6000	-35.8703	-11.6757	-17.6538
1,155	NDN.mol	673	-17.6535	2.8000	-48.1843	-15.4147	-17.6535
1,156	STY.mol	1,320	-17.6477	0.5990	-20.8144	-14.3866	-17.6477
1,157	GKQ.mol	337	-17.6462	1.2000	-23.7110	-14.7176	-17.6462
1,158	GEK.mol	315	-17.6389	3.2516	-51.7920	-16.3285	-17.6389
1,159	YFE.mol	1,607	-17.6317	1.0742	-46.5981	-16.0244	-17.6317
1,160	EQA.mol	265	-17.6211	2.2207	-14.0008	-18.5818	-17.6211
1,161	YRY.mol	144	-17.5916	3.2942	-5.3441	-14.3570	-17.5916
1,162	QQV.mol	937	-17.5876	1.1760	-18.9007	-14.1036	-17.5876
1,163	TTL.mol	1,529	-17.5838	1.4094	-71.1328	-14.6097	-17.5838
1,164	DYE.mol	178	-17.5755	2.6611	-103.523	-18.9149	-17.5755
1,165	HEV.mol	421	-17.5702	3.0340	-18.7894	-14.8993	-17.5702
1,166	GTH.mol	384	-17.5686	2.2000	11.6284	-18.3419	-17.5686
1,167	SED.mol	1,154	-17.5665	1.2000	-43.4960	-17.4840	-17.5665
1,168	KQL.mol	600	-17.5649	3.4519	-56.5611	-14.1011	-17.5649
1,169	YVK.mol	208	-17.5569	3.3794	-78.1680	-12.3941	-17.5569
1,170	EQV.mol	270	-17.5505	1.4000	-18.3975	-15.5648	-17.5505
1,171	KNF.mol	585	-17.5454	2.3998	-30.1213	-16.9530	-17.5454
1,172	YED.mol	1,593	-17.5429	2.4632	-67.3497	-17.4407	-17.5429
1,173	DVD.mol	165	-17.5409	3.4000	-50.4273	-16.5983	-17.5409
1,174	SKA.mol	1,215	-17.5376	2.0000	-22.8546	-16.5957	-17.5376
1,175	TVN.mol	1,541	-17.5324	0.6016	-65.1835	-12.3304	-17.5324
1,176	NTL.mol	804	-17.5311	2.6000	-69.6484	-15.4528	-17.5311
1,177	YQQ.mol	108	-17.5277	3.8980	-56.6946	-12.0020	-17.5277
1,178	KYA.mol	647	-17.5274	3.6414	0.8420	-14.7264	-17.5274

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
1,179	YRW.mol	141	-17.5273	2.7725	12.5272	-13.8702	-17.5273
1,180	RSE.mol	1,091	-17.5185	3.0000	-58.1251	-15.9423	-17.5185
1,181	RDH.mol	1,007	-17.5144	3.2092	-46.5417	-16.4061	-17.5144
1,182	GKE.mol	333	-17.5102	2.4000	-63.4809	-16.6199	-17.5102
1,183	YKR.mol	37	-17.5011	2.3992	-56.4766	-15.9786	-17.5011
1,184	QGD.mol	873	-17.4945	2.1165	-84.0276	-16.2922	-17.4945
1,185	SQH.mol	1,261	-17.4778	2.3974	-51.5090	-14.3015	-17.4778
1,186	NWD.mol	817	-17.4529	2.4000	-25.7062	-17.4430	-17.4529
1,187	SEI.mol	1,158	-17.4471	2.4000	-52.9789	-15.3986	-17.4471
1,188	QEL.mol	862	-17.4319	2.1494	-65.5639	-15.2970	-17.4319
1,189	QSI.mol	956	-17.4305	2.0000	-19.5663	-14.2725	-17.4305
1,190	QSF.mol	954	-17.4247	1.8015	-38.5895	-13.5766	-17.4247
1,191	KTI.mol	631	-17.3980	1.4000	-72.8589	-14.6651	-17.3980
1,192	ERL.mol	276	-17.3966	1.8000	-31.0611	-16.1467	-17.3966
1,193	SVT.mol	1,329	-17.3925	2.5999	-26.2517	-13.7660	-17.3925
1,194	QHD.mol	880	-17.3596	3.5926	-75.7417	-15.8866	-17.3596
1,195	GHR.mol	328	-17.3592	2.6000	-47.3177	-13.8952	-17.3592
1,196	SLQ.mol	1,236	-17.3588	2.9483	-19.9300	-14.2365	-17.3588
1,197	KHH.mol	554	-17.3570	2.6155	-102.065	-13.5815	-17.3570
1,198	QEV.mol	865	-17.3486	3.6294	-60.8549	-15.2885	-17.3486
1,199	NTQ.mol	806	-17.3453	2.8139	-61.0337	-15.3438	-17.3453
1,200	SIS.mol	1,212	-17.3443	2.6618	-93.5821	-13.7997	-17.3443
1,201	DRA.mol	118	-17.3441	3.6000	-92.5582	-15.8189	-17.3441
1,202	KHD.mol	551	-17.3411	2.6000	12.1865	-16.7959	-17.3411
1,203	RSL.mol	1,095	-17.3171	2.2916	-16.8533	-14.5249	-17.3171
1,204	STV.mol	1,318	-17.3099	0.6000	-45.7777	-13.9218	-17.3099
1,205	GKS.mol	339	-17.3032	0.8000	-49.8934	-13.8873	-17.3032
1,206	NQE.mol	760	-17.2989	2.7997	-48.2938	-17.2570	-17.2989
1,207	QDQ.mol	851	-17.2939	2.6000	3.5090	-19.5561	-17.2939
1,208	GNT.mol	350	-17.2914	0.6000	-67.4756	-13.6721	-17.2914
1,209	QTF.mol	966	-17.2891	2.2348	-91.4653	-13.3203	-17.2891
1,210	NIH.mol	720	-17.2838	1.0074	-88.1163	-15.6377	-17.2838
1,211	GHN.mol	326	-17.2783	2.8000	-35.7012	-14.6764	-17.2783
1,212	NRN.mol	779	-17.2636	2.6000	-56.5673	-14.0150	-17.2636
1,213	GNE.mol	343	-17.2627	3.6000	-57.0398	-17.3083	-17.2627
1,214	SEV.mol	1,166	-17.2585	2.6000	-65.9979	-15.0765	-17.2585
1,215	TQN.mol	1,485	-17.2577	3.2000	-5.0121	-12.8978	-17.2577
1,216	RTA.mol	1,099	-17.2504	2.2097	-81.8271	-17.2800	-17.2504
1,217	NFD.mol	691	-17.2231	1.8116	-55.6914	-16.6283	-17.2231
1,218	GNN.mol	346	-17.2209	1.2182	-42.7112	-15.2264	-17.2209
1,219	GSH.mol	374	-17.2089	0.6000	-74.6361	-13.5213	-17.2089
1,220	TTW.mol	1,535	-17.2036	3.4948	-23.4966	-14.1082	-17.2036

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
1,221	KAE.mol	514	-17.2026	3.4000	-81.0837	-17.4333	-17.2026
1,222	SQQ.mol	1,266	-17.1871	2.4000	-51.1329	-13.5773	-17.1871
1,223	QFK.mol	870	-17.1846	1.8000	-45.5127	-13.7766	-17.1846
1,224	HWH.mol	503	-17.1627	1.1091	-69.8366	-14.6798	-17.1627
1,225	QDL.mol	850	-17.1447	2.5883	-58.7929	-14.8609	-17.1447
1,226	GET.mol	320	-17.1282	3.0000	-12.0441	-16.2429	-17.1282
1,227	RYA.mol	1,117	-17.1233	3.4410	-70.3877	-15.6443	-17.1233
1,228	GNS.mol	349	-17.0783	1.2000	-18.9481	-13.7665	-17.0783
1,229	GTS.mol	389	-17.0618	1.6000	-37.9651	-13.4090	-17.0618
1,230	EKI.mol	246	-17.0578	0.2025	-73.3464	-16.8460	-17.0578
1,231	GED.mol	312	-17.0511	2.6005	-60.7008	-16.9944	-17.0511
1,232	TTR.mol	1,532	-17.0451	1.2000	-49.2128	-13.7224	-17.0451
1,233	TEF.mol	1,384	-17.0382	4.3645	-40.7570	-14.7710	-17.0382
1,234	SLR.mol	1,237	-17.0371	3.0035	-32.3918	-13.7192	-17.0371
1,235	TSI.mol	1,512	-17.0362	1.4005	-52.2642	-13.8153	-17.0362
1,236	NYQ.mol	833	-17.0298	3.4186	-34.0370	-14.2689	-17.0298
1,237	EEL.mol	210	-17.0283	2.9980	52.3294	-19.3781	-17.0283
1,238	RKL.mol	1,051	-17.0267	2.8000	96.4167	-14.2580	-17.0267
1,239	KTV.mol	635	-17.0204	0.8000	-3.2230	-15.3034	-17.0204
1,240	GTK.mol	385	-17.0164	2.6000	-69.5733	-14.6619	-17.0164
1,241	QER.mol	864	-17.0114	2.2000	-27.4393	-15.5621	-17.0114
1,242	NHL.mol	712	-17.0044	3.4561	-24.8137	-14.2684	-17.0044
1,243	YDE.mol	1,580	-16.9989	4.2141	-76.1300	-17.5771	-16.9989
1,244	KLR.mol	581	-16.9922	4.0053	54.1979	-14.5657	-16.9922
1,245	NDI.mol	670	-16.9889	3.0000	2.8516	-14.5959	-16.9889
1,246	TRH.mol	1,496	-16.9706	1.5978	-80.7640	-15.2612	-16.9706
1,247	KYE.mol	649	-16.9656	1.4000	-68.1523	-15.4084	-16.9656
1,248	TKN.mol	1,446	-16.9625	1.7971	-101.677	-15.8711	-16.9625
1,249	EDW.mol	204	-16.9520	2.6000	34.0009	-16.2296	-16.9520
1,250	KLD.mol	577	-16.9506	3.0134	-58.9716	-18.1668	-16.9506
1,251	NEA.mol	678	-16.9497	4.5302	-63.2820	-14.3790	-16.9497
1,252	NTV.mol	808	-16.9492	2.2042	-44.8562	-13.2365	-16.9492
1,253	RGD.mol	1,027	-16.9433	1.8257	-73.5617	-15.6721	-16.9433
1,254	RND.mol	1,060	-16.9416	3.2000	11.3228	-17.6410	-16.9416
1,255	TDW.mol	1,379	-16.9396	3.7155	-51.0631	-14.7433	-16.9396
1,256	EDV.mol	201	-16.9381	4.0000	-86.4954	-17.1289	-16.9381
1,257	NEW.mol	690	-16.9311	2.6054	-60.6028	-14.3113	-16.9311
1,258	QAK.mol	840	-16.9265	2.3693	-53.1726	-15.5853	-16.9265
1,259	TNT.mol	1,473	-16.9173	2.0032	-67.0603	-13.4336	-16.9173
1,260	TSK.mol	1,513	-16.9148	2.3968	6.8551	-14.5487	-16.9148
1,261	GDS.mol	309	-16.9066	2.4000	33.1342	-15.0147	-16.9066
1,262	HVH.mol	500	-16.9019	3.0000	-76.1915	-14.5512	-16.9019

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
1,263	KSA.mol	615	-16.9010	3.0000	-36.9826	-14.7909	-16.9010
1,264	DID.mol	62	-16.9004	1.8000	16.8284	-16.7052	-16.9004
1,265	QNQ.mol	923	-16.8963	3.3332	-73.6788	-13.9296	-16.8963
1,266	QRA.mol	939	-16.8790	1.8000	-43.6035	-15.1364	-16.8790
1,267	SRS.mol	1,284	-16.8790	2.5988	-89.9180	-15.0700	-16.8790
1,268	KFK.mol	543	-16.8788	2.2441	-24.9912	-15.1513	-16.8788
1,269	TAN.mol	1,361	-16.8777	1.0000	-77.0187	-13.0979	-16.8777
1,270	HTD.mol	490	-16.8731	1.7871	-68.7169	-16.0776	-16.8731
1,271	QYI.mol	992	-16.8714	1.8000	23.5120	-15.1154	-16.8714
1,272	QAD.mol	837	-16.8713	3.8219	-69.3986	-17.1426	-16.8713
1,273	NGE.mol	699	-16.8662	2.7339	-52.6661	-15.9356	-16.8662
1,274	TQA.mol	1,477	-16.8543	1.0503	-59.3408	-14.0181	-16.8543
1,275	YEN.mol	1,600	-16.8528	3.5921	49.8442	-17.0807	-16.8528
1,276	SSE.mol	1,291	-16.8502	2.9465	18.9619	-15.3701	-16.8502
1,277	RDA.mol	1,003	-16.8494	2.6288	-27.1926	-15.6939	-16.8494
1,278	NYD.mol	825	-16.8430	4.0050	-26.3484	-16.3728	-16.8430
1,279	NKN.mol	733	-16.8378	2.9617	-81.8935	-15.7588	-16.8378
1,280	DSI.mol	142	-16.8344	3.5185	-16.8975	-15.1696	-16.8344
1,281	TLK.mol	1,456	-16.8293	2.5675	-3.0063	-14.8325	-16.8293
1,282	RYH.mol	1,121	-16.8144	3.4397	-34.7743	-15.0785	-16.8144
1,283	HTA.mol	489	-16.8035	3.5471	29.9271	-14.0107	-16.8035
1,284	TDR.mol	1,376	-16.8032	1.8000	-52.7071	-15.6997	-16.8032
1,285	STA.mol	1,305	-16.7851	0.6000	-41.7343	-14.8618	-16.7851
1,286	GSY.mol	381	-16.7658	2.9933	-67.7454	-14.1586	-16.7658
1,287	DNI.mol	94	-16.7650	3.0035	-1.9672	-19.1500	-16.7650
1,288	EKV.mol	250	-16.7475	3.4000	-13.8620	-15.8001	-16.7475
1,289	TFH.mol	1,398	-16.7422	3.8843	23.1384	-13.9585	-16.7422
1,290	GQR.mol	358	-16.7388	3.4474	-77.4813	-14.7127	-16.7388
1,291	GES.mol	319	-16.7378	2.4000	-94.7873	-14.7397	-16.7378
1,292	EDA.mol	192	-16.7336	3.2000	-27.9422	-15.9393	-16.7336
1,293	SNL.mol	1,248	-16.7323	3.0088	-49.6641	-13.1496	-16.7323
1,294	RRW.mol	1,088	-16.7271	0.8015	-27.3626	-17.1330	-16.7271
1,295	NDL.mol	672	-16.7231	2.2670	-57.4223	-15.6080	-16.7231
1,296	YRE.mol	121	-16.7230	3.4000	-19.5925	-16.4418	-16.7230
1,297	STI.mol	1,310	-16.7068	2.0000	-74.7154	-13.3158	-16.7068
1,298	RQH.mol	1,073	-16.6665	3.1246	16.6863	-13.7113	-16.6665
1,299	RSI.mol	1,094	-16.6641	2.6000	-26.1298	-14.6959	-16.6641
1,300	SRD.mol	1,274	-16.6535	2.5987	-31.6708	-16.1244	-16.6535
1,301	SEF.mol	1,156	-16.6530	2.7581	-78.8777	-15.2326	-16.6530
1,302	SDQ.mol	1,146	-16.6517	3.0000	2.5285	-15.8120	-16.6517
1,303	QEA.mol	855	-16.6482	3.0093	7.9697	-16.2073	-16.6482
1,304	YAK.mol	1,573	-16.6087	3.3874	-69.4849	-15.9250	-16.6087

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
1,305	KHW.mol	560	-16.5882	3.3858	-65.6368	-14.3943	-16.5882
1,306	TDL.mol	1,373	-16.5739	1.4000	-60.7922	-15.4957	-16.5739
1,307	SIH.mol	1,207	-16.5711	1.6000	-8.5356	-14.0212	-16.5711
1,308	RGH.mol	1,029	-16.5621	3.3924	-36.7134	-14.1424	-16.5621
1,309	GQH.mol	354	-16.5573	2.8000	-70.5819	-14.6519	-16.5573
1,310	QYW.mol	998	-16.5397	1.6138	-12.5739	-13.3078	-16.5397
1,311	STS.mol	1,316	-16.5307	2.7999	-56.4190	-12.9654	-16.5307
1,312	DTF.mol	156	-16.5214	1.9865	-15.9469	-15.2838	-16.5214
1,313	KSK.mol	621	-16.5150	1.6000	-53.9236	-15.5887	-16.5150
1,314	SIN.mol	1,209	-16.4991	2.6179	-63.1371	-13.3550	-16.4991
1,315	TKA.mol	1,438	-16.4884	3.2000	36.1266	-16.6605	-16.4884
1,316	KKH.mol	570	-16.4862	4.2085	20.8472	-16.6766	-16.4862
1,317	NNF.mol	748	-16.4811	0.5945	-31.0819	-14.9621	-16.4811
1,318	YDI.mol	1,583	-16.4774	0.5943	-54.5832	-16.3183	-16.4774
1,319	DDI.mol	14	-16.4761	1.8173	10.3904	-15.9874	-16.4761
1,320	SEK.mol	1,159	-16.4649	3.7974	30.3616	-16.4079	-16.4649
1,321	QKR.mol	906	-16.4613	4.5063	-122.383	-17.1834	-16.4613
1,322	QAQ.mol	841	-16.4570	1.9937	-74.6538	-14.1230	-16.4570
1,323	NAR.mol	664	-16.4558	1.8000	-11.6767	-14.0007	-16.4558
1,324	QRK.mol	945	-16.4517	2.2000	-58.9554	-14.2362	-16.4517
1,325	TTK.mol	1,528	-16.4443	3.3855	-34.9108	-15.3331	-16.4443
1,326	TTA.mol	1,522	-16.4285	0.0000	-37.6434	-12.8825	-16.4285
1,327	RQE.mol	1,071	-16.4152	1.2000	-62.6615	-16.6077	-16.4152
1,328	SVN.mol	1,325	-16.4146	2.1745	-52.5724	-13.4478	-16.4146
1,329	QRF.mol	942	-16.3879	3.8758	-56.8838	-13.1321	-16.3879
1,330	NQF.mol	761	-16.3865	3.4048	-48.5920	-13.6509	-16.3865
1,331	HDA.mol	405	-16.3810	4.1085	0.1694	-15.2289	-16.3810
1,332	GEE.mol	313	-16.3754	4.2381	31.9250	-18.8674	-16.3754
1,333	NNH.mol	749	-16.3726	0.0000	-70.3497	-15.2374	-16.3726
1,334	TIE.mol	1,430	-16.3576	3.2000	-10.6503	-14.0460	-16.3576
1,335	ETV.mol	291	-16.3238	2.0000	-19.8412	-16.8238	-16.3238
1,336	YDK.mol	1,584	-16.3228	3.3103	-45.8494	-18.7885	-16.3228
1,337	KNV.mol	591	-16.3203	1.8726	-55.0961	-14.9798	-16.3203
1,338	SVE.mol	1,322	-16.3112	2.2030	30.0296	-14.1583	-16.3112
1,339	THT.mol	1,425	-16.3089	3.2000	-60.4808	-13.5952	-16.3089
1,340	KDK.mol	524	-16.3003	4.1147	-37.8143	-18.3249	-16.3003
1,341	YSR.mol	166	-16.2918	2.8983	-5.2117	-14.2900	-16.2918
1,342	QVQ.mol	979	-16.2745	1.6225	-68.9103	-12.5659	-16.2745
1,343	NWR.mol	823	-16.2741	4.0847	-36.6946	-13.5772	-16.2741
1,344	TYK.mol	1,561	-16.2688	3.8010	-72.2227	-15.0379	-16.2688
1,345	TNA.mol	1,462	-16.2434	2.2000	9.1279	-14.3882	-16.2434
1,346	KRR.mol	612	-16.2423	3.8000	-26.2322	-14.7743	-16.2423

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
1,347	DNE.mol	90	-16.2333	4.2452	5.8127	-20.4974	-16.2333
1,348	KVE.mol	638	-16.2303	1.6000	-34.5712	-15.5927	-16.2303
1,349	ENW.mol	264	-16.2289	2.8744	-25.9822	-15.2022	-16.2289
1,350	NEQ.mol	687	-16.2261	1.8204	-58.7700	-16.9361	-16.2261
1,351	NDD.mol	666	-16.2119	2.2794	-36.9675	-17.5209	-16.2119
1,352	DRW.mol	132	-16.1785	2.9402	-75.7575	-15.1783	-16.1785
1,353	NQI.mol	763	-16.1660	1.0816	-19.4862	-13.8111	-16.1660
1,354	SWD.mol	1,331	-16.1397	1.4000	-36.4295	-16.7895	-16.1397
1,355	EIE.mol	238	-16.1252	4.3485	-76.7734	-16.3936	-16.1252
1,356	DWE.mol	172	-16.1110	3.6226	-71.4596	-17.0376	-16.1110
1,357	TQD.mol	1,478	-16.1064	2.1863	-76.4432	-15.2923	-16.1064
1,358	DTL.mol	160	-16.0942	1.0000	29.4118	-15.2297	-16.0942
1,359	QNR.mol	924	-16.0875	2.1001	1.7754	-14.9981	-16.0875
1,360	KHF.mol	553	-16.0866	3.6000	-25.4898	-14.4990	-16.0866
1,361	KDL.mol	525	-16.0776	2.6112	-28.8743	-15.8602	-16.0776
1,362	NDV.mol	676	-16.0728	3.4000	-0.1442	-15.0394	-16.0728
1,363	DQL.mol	112	-16.0644	1.0052	-63.6998	-14.8609	-16.0644
1,364	TRW.mol	1,505	-16.0617	3.6270	-37.3609	-14.5723	-16.0617
1,365	QKH.mol	901	-16.0576	3.7201	-61.3043	-15.4799	-16.0576
1,366	DHL.mol	56	-16.0371	3.4538	-17.1169	-15.2420	-16.0371
1,367	RSH.mol	1,093	-16.0281	3.7137	-32.3351	-13.5470	-16.0281
1,368	DYA.mol	174	-16.0242	3.7888	-23.6106	-18.5461	-16.0242
1,369	GHD.mol	322	-16.0203	2.4319	-103.757	-14.3068	-16.0203
1,370	RLR.mol	1,058	-16.0162	2.7998	36.8296	-13.8321	-16.0162
1,371	NAQ.mol	663	-16.0119	1.8000	-51.3405	-13.0839	-16.0119
1,372	QDV.mol	853	-16.0047	2.2000	-58.0220	-15.4983	-16.0047
1,373	HKV.mol	448	-15.9908	3.1674	-80.0567	-17.1417	-15.9908
1,374	RLE.mol	1,056	-15.9906	4.1052	-30.6133	-15.7156	-15.9906
1,375	KFH.mol	542	-15.9867	2.4000	-17.2455	-15.9166	-15.9867
1,376	RDI.mol	1,008	-15.9825	2.8000	-56.2850	-16.1204	-15.9825
1,377	NHA.mol	705	-15.9813	1.2968	-26.7120	-15.4394	-15.9813
1,378	SRE.mol	1,275	-15.9786	4.0000	18.2506	-16.1455	-15.9786
1,379	HEH.mol	418	-15.9720	2.8377	-27.8391	-16.1667	-15.9720
1,380	YGQ.mol	1,619	-15.9619	4.3535	-57.1166	-14.3007	-15.9619
1,381	NKV.mol	736	-15.9579	2.4703	-10.3962	-14.2543	-15.9579
1,382	TDI.mol	1,371	-15.9473	2.4005	-50.3445	-15.4372	-15.9473
1,383	NGQ.mol	703	-15.9136	1.6566	-42.4092	-13.6615	-15.9136
1,384	SSR.mol	1,299	-15.9131	2.8030	-26.8941	-14.8575	-15.9131
1,385	GND.mol	342	-15.9062	2.8000	-63.1126	-15.2189	-15.9062
1,386	DTW.mol	164	-15.8852	1.2000	-8.7731	-14.4285	-15.8852
1,387	STE.mol	1,307	-15.8769	2.4001	-43.0777	-15.6278	-15.8769
1,388	YVD.mol	202	-15.8656	3.0319	-17.0131	-15.7842	-15.8656

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
1,389	KKR.mol	574	-15.8644	2.9742	-23.6045	-17.4471	-15.8644
1,390	SER.mol	1,163	-15.8579	2.2112	-12.1014	-15.7043	-15.8579
1,391	HEE.mol	416	-15.8383	3.2221	-44.1889	-19.2033	-15.8383
1,392	NVD.mol	810	-15.8342	3.2023	-46.2366	-15.7405	-15.8342
1,393	QRL.mol	946	-15.8246	2.6076	-59.1978	-13.7579	-15.8246
1,394	SHY.mol	1,204	-15.8183	1.5543	-63.1868	-14.1175	-15.8183
1,395	QKW.mol	908	-15.8008	3.8910	19.4332	-13.7619	-15.8008
1,396	KSE.mol	617	-15.7976	2.8415	-82.0184	-16.6147	-15.7976
1,397	SND.mol	1,242	-15.7857	2.9981	-35.0119	-16.1462	-15.7857
1,398	NNQ.mol	754	-15.7856	2.9507	-70.5928	-16.8672	-15.7856
1,399	KNL.mol	589	-15.7848	1.0006	-75.2304	-13.9093	-15.7848
1,400	YSE.mol	150	-15.7816	3.5703	-109.172	-15.7259	-15.7816
1,401	SAQ.mol	1,132	-15.7792	2.2000	-57.8923	-13.7383	-15.7792
1,402	SAT.mol	1,135	-15.7673	1.0062	-51.9150	-13.2611	-15.7673
1,403	TRT.mol	1,503	-15.7628	2.2019	-49.6616	-14.1853	-15.7628
1,404	GSN.mol	376	-15.7584	2.8000	-34.7953	-15.2552	-15.7584
1,405	SDA.mol	1,137	-15.7465	0.8000	-59.6246	-15.9069	-15.7465
1,406	DRE.mol	122	-15.7396	3.6100	-100.006	-16.8973	-15.7396
1,407	QSQ.mol	959	-15.7363	3.8101	-31.5715	-13.5258	-15.7363
1,408	KKI.mol	571	-15.7208	2.8000	0.7902	-16.8496	-15.7208
1,409	SID.mol	1,205	-15.7138	1.6006	19.5785	-14.9348	-15.7138
1,410	TLT.mol	1,460	-15.6884	1.5773	-8.5838	-12.9233	-15.6884
1,411	YWD.mol	218	-15.6841	1.7599	-48.5839	-13.2378	-15.6841
1,412	GHH.mol	324	-15.6793	1.7946	38.7160	-13.7115	-15.6793
1,413	SNK.mol	1,247	-15.6480	1.5964	-29.9791	-15.2878	-15.6480
1,414	GQT.mol	360	-15.6419	1.6340	-25.1082	-13.4363	-15.6419
1,415	SKS.mol	1,226	-15.5478	1.8171	-24.1771	-14.6665	-15.5478
1,416	TFN.mol	1,400	-15.5459	2.1996	-46.8076	-13.0681	-15.5459
1,417	TVE.mol	1,538	-15.5414	3.0000	-80.1287	-17.1694	-15.5414
1,418	YEH.mol	1,596	-15.5391	2.4068	-67.4832	-16.4720	-15.5391
1,419	NSN.mol	792	-15.5321	2.3999	-30.4360	-13.3577	-15.5321
1,420	NKQ.mol	734	-15.5309	3.2337	-40.1840	-14.9565	-15.5309
1,421	DQV.mol	114	-15.5218	3.0082	-1.4932	-16.2285	-15.5218
1,422	NER.mol	688	-15.4877	1.8000	-68.5345	-14.6389	-15.4877
1,423	NKR.mol	735	-15.4676	3.7811	-66.1901	-17.5940	-15.4676
1,424	RKR.mol	1,052	-15.4594	4.2000	-58.1439	-16.7254	-15.4594
1,425	SKR.mol	1,225	-15.4572	2.6000	6.2579	-17.8776	-15.4572
1,426	KVR.mol	641	-15.4545	3.0000	-62.6516	-15.3188	-15.4545
1,427	TFD.mol	1,396	-15.4359	3.8844	-55.1269	-15.4246	-15.4359
1,428	SDN.mol	1,145	-15.4248	2.8210	-60.0049	-16.6950	-15.4248
1,429	RIH.mol	1,043	-15.4225	3.7367	-71.0501	-14.5200	-15.4225
1,430	TIQ.mol	1,434	-15.4056	2.0012	-49.4613	-14.1714	-15.4056

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
1,431	TSA.mol	1,507	-15.3904	1.2010	-11.5616	-13.4669	-15.3904
1,432	KRE.mol	606	-15.3739	3.8000	-18.1089	-16.3672	-15.3739
1,433	YGH.mol	1,616	-15.3579	3.3968	-74.0944	-18.7878	-15.3579
1,434	SDK.mol	1,143	-15.3558	2.4013	2.0378	-21.6579	-15.3558
1,435	QNE.mol	917	-15.3489	2.9321	-9.3143	-15.4210	-15.3489
1,436	GQE.mol	353	-15.3033	2.0034	-37.7232	-15.9930	-15.3033
1,437	DKI.mol	74	-15.2560	3.2060	-44.9774	-16.6062	-15.2560
1,438	TGD.mol	1,405	-15.2504	0.6000	-18.1491	-15.2490	-15.2504
1,439	QKK.mol	903	-15.2461	4.7910	56.5983	-14.7938	-15.2461
1,440	SGN.mol	1,183	-15.2399	1.2000	-67.2621	-12.9180	-15.2399
1,441	KVH.mol	639	-15.2336	1.2000	-25.2233	-14.1499	-15.2336
1,442	TGN.mol	1,409	-15.2220	0.4001	-55.5449	-12.4485	-15.2220
1,443	TTE.mol	1,524	-15.1977	1.8075	-31.4652	-15.3981	-15.1977
1,444	GDK.mol	305	-15.1822	1.6000	-63.1601	-15.6836	-15.1822
1,445	KIR.mol	565	-15.1779	3.4129	-67.5015	-14.3769	-15.1779
1,446	KVD.mol	637	-15.1651	3.6619	-50.4419	-16.0532	-15.1651
1,447	YSN.mol	162	-15.1587	1.1458	-20.2627	-13.1010	-15.1587
1,448	DSD.mol	136	-15.1554	3.0000	-10.3970	-17.2990	-15.1554
1,449	EQL.mol	268	-15.1262	3.9112	9.3194	-15.2859	-15.1262
1,450	TKK.mol	1,444	-15.1178	3.5976	-40.7125	-15.1782	-15.1178
1,451	KFD.mol	540	-15.1171	3.5135	-10.3191	-15.4162	-15.1171
1,452	RYV.mol	1,125	-15.1146	4.0462	-44.2399	-13.5606	-15.1146
1,453	RSA.mol	1,089	-15.1014	3.0530	-19.7910	-14.4468	-15.1014
1,454	EKL.mol	248	-15.0797	1.8330	-68.3028	-19.2434	-15.0797
1,455	RKV.mol	1,053	-15.0705	2.9248	-72.1076	-15.9751	-15.0705
1,456	GHS.mol	329	-15.0558	3.7931	-50.8048	-14.4231	-15.0558
1,457	TWE.mol	1,547	-15.0380	2.0000	-9.6059	-15.3543	-15.0380
1,458	NHE.mol	707	-15.0358	2.2510	-87.7502	-15.7197	-15.0358
1,459	RQL.mol	1,075	-15.0246	2.6000	-76.6458	-13.7282	-15.0246
1,460	DKA.mol	66	-15.0166	4.0088	-53.0302	-15.8484	-15.0166
1,461	RQA.mol	1,069	-15.0051	2.7361	-59.7780	-14.2007	-15.0051
1,462	SGT.mol	1,187	-14.9704	0.6000	-65.4256	-13.1771	-14.9704
1,463	DTE.mol	154	-14.9679	4.0000	-33.1263	-17.0893	-14.9679
1,464	HNA.mol	453	-14.9649	2.7901	-81.6609	-15.3217	-14.9649
1,465	DQA.mol	102	-14.9558	2.9010	-63.0191	-18.7611	-14.9558
1,466	TQI.mol	1,482	-14.9548	1.0005	-25.0183	-13.4312	-14.9548
1,467	SQA.mol	1,257	-14.9527	0.6000	-37.2228	-13.7243	-14.9527
1,468	NDK.mol	671	-14.8759	4.0352	-73.5113	-16.8349	-14.8759
1,469	NEI.mol	683	-14.8696	2.3822	-28.4880	-14.6328	-14.8696
1,470	DEI.mol	30	-14.8598	2.2667	-44.2557	-17.5718	-14.8598
1,471	KRW.mol	614	-14.8344	3.1989	-3.9981	-14.4572	-14.8344
1,472	TID.mol	1,429	-14.8064	2.9352	-34.3811	-15.9469	-14.8064

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
1,473	KDA.mol	518	-14.8017	4.0000	-35.3449	-17.1125	-14.8017
1,474	ERV.mol	277	-14.7690	3.4000	-17.7711	-14.9227	-14.7690
1,475	KYV.mol	656	-14.7644	2.0000	-38.9634	-15.8985	-14.7644
1,476	DHI.mol	54	-14.7642	2.8000	-31.9866	-15.0807	-14.7642
1,477	TAT.mol	1,364	-14.7604	0.0000	-28.2635	-13.4632	-14.7604
1,478	SRK.mol	1,279	-14.7317	3.4125	5.5241	-16.2237	-14.7317
1,479	DGD.mol	42	-14.7306	1.8000	-46.6209	-16.9207	-14.7306
1,480	KAR.mol	517	-14.7153	3.6000	-51.6131	-14.8245	-14.7153
1,481	KQI.mol	598	-14.7021	2.3611	-29.7770	-15.8209	-14.7021
1,482	KNW.mol	592	-14.7009	2.6516	25.9299	-15.5750	-14.7009
1,483	NLK.mol	741	-14.6868	3.2064	-34.1255	-15.0298	-14.6868
1,484	DNF.mol	92	-14.6777	3.4000	-43.6521	-15.0558	-14.6777
1,485	DHD.mol	48	-14.6609	1.6000	-97.8816	-17.3195	-14.6609
1,486	SGQ.mol	1,184	-14.6581	1.6003	-80.4280	-13.4482	-14.6581
1,487	TVT.mol	1,544	-14.5936	1.0000	-57.5926	-13.1351	-14.5936
1,488	SSI.mol	1,294	-14.5914	0.0000	-87.1270	-15.9617	-14.5914
1,489	NQD.mol	759	-14.5857	3.8523	-64.1618	-15.6672	-14.5857
1,490	YSD.mol	148	-14.5710	3.3675	-33.0085	-15.5556	-14.5710
1,491	SEE.mol	1,155	-14.5393	2.3999	-79.1032	-16.6211	-14.5393
1,492	NQR.mol	768	-14.5293	3.8000	-36.4027	-14.5291	-14.5293
1,493	KEK.mol	535	-14.5271	1.9994	4.7858	-17.0260	-14.5271
1,494	QDH.mol	847	-14.5159	1.7999	14.6262	-15.1625	-14.5159
1,495	SAY.mol	1,136	-14.5095	2.1987	-72.5166	-14.1182	-14.5095
1,496	SDR.mol	1,147	-14.4555	2.5982	-14.3567	-17.6325	-14.4555
1,497	GDY.mol	311	-14.4291	3.5797	-67.1258	-15.1096	-14.4291
1,498	SST.mol	1,301	-14.4118	1.0000	-63.7908	-14.2978	-14.4118
1,499	TND.mol	1,463	-14.4102	2.6080	-91.7943	-19.6043	-14.4102
1,500	QQK.mol	933	-14.4030	2.8000	-77.9342	-15.9294	-14.4030
1,501	NTA.mol	797	-14.4027	1.0119	-71.3047	-14.2426	-14.4027
1,502	KSR.mol	623	-14.4007	4.4000	-47.3399	-15.4343	-14.4007
1,503	NND.mol	746	-14.3577	1.2203	-100.506	-15.7323	-14.3577
1,504	NGK.mol	701	-14.3546	0.6000	-20.8419	-16.4952	-14.3546
1,505	KKD.mol	567	-14.3302	4.0000	-16.3373	-17.5556	-14.3302
1,506	SIE.mol	1,206	-14.3261	3.2289	-57.6032	-16.2399	-14.3261
1,507	TEA.mol	1,381	-14.2746	2.4000	13.2548	-16.1515	-14.2746
1,508	TGT.mol	1,412	-14.2513	0.6049	-82.5822	-13.0855	-14.2513
1,509	EDL.mol	200	-14.2489	2.2506	77.9508	-19.1053	-14.2489
1,510	STT.mol	1,317	-14.2342	0.0000	-53.7517	-13.3444	-14.2342
1,511	KLK.mol	580	-14.2332	1.8000	-2.5907	-15.0477	-14.2332
1,512	STK.mol	1,311	-14.2281	2.8767	21.7099	-14.9979	-14.2281
1,513	SLD.mol	1,231	-14.2273	2.7885	-13.8853	-18.0765	-14.2273
1,514	SDL.mol	1,144	-14.2101	3.0293	-72.6087	-14.9063	-14.2101

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
1,515	TNR.mol	1,472	-14.2029	1.4000	-16.5862	-16.2784	-14.2029
1,516	TIY.mol	1,437	-14.2017	2.0000	-24.9116	-14.4395	-14.2017
1,517	RRE.mol	1,081	-14.1787	2.8000	-44.7624	-16.1733	-14.1787
1,518	SSD.mol	1,290	-14.1632	1.8000	-26.2629	-15.8297	-14.1632
1,519	SDW.mol	1,151	-14.1550	3.2590	80.8031	-14.7757	-14.1550
1,520	GTN.mol	386	-14.1525	2.6000	-38.4299	-13.6991	-14.1525
1,521	YID.mol	2	-14.1335	3.8391	-76.4953	-14.1360	-14.1335
1,522	SEA.mol	1,153	-14.1327	3.0000	-33.4666	-16.3718	-14.1327
1,523	EEE.mol	206	-14.1278	2.2000	5.3566	-17.3472	-14.1278
1,524	NHF.mol	708	-14.1267	4.1456	-46.6084	-14.1590	-14.1267
1,525	QDD.mol	844	-14.1242	2.8307	-16.0453	-18.0296	-14.1242
1,526	KKK.mol	572	-14.0999	3.0684	73.3627	-15.8453	-14.0999
1,527	TVK.mol	1,540	-14.0714	2.4520	-47.1295	-14.0892	-14.0714
1,528	TEK.mol	1,387	-14.0597	2.6000	-68.9122	-16.1518	-14.0597
1,529	ESL.mol	283	-14.0594	1.0000	-13.4457	-16.2238	-14.0594
1,530	SAR.mol	1,133	-14.0450	2.8272	-33.6296	-14.1533	-14.0450
1,531	NID.mol	718	-14.0381	1.2008	-78.0500	-16.4600	-14.0381
1,532	QLD.mol	909	-14.0237	1.8586	-80.5835	-18.4298	-14.0237
1,533	NKA.mol	725	-14.0182	2.4000	-36.8948	-14.2114	-14.0182
1,534	QTD.mol	964	-14.0154	2.6425	-71.7402	-18.8203	-14.0154
1,535	GKT.mol	340	-14.0041	1.6000	-1.6848	-15.5136	-14.0041
1,536	RTV.mol	1,107	-13.9750	3.2441	-22.7211	-15.3880	-13.9750
1,537	KQE.mol	595	-13.9733	4.2014	-20.1413	-15.5331	-13.9733
1,538	TDH.mol	1,370	-13.9661	2.1937	-84.6213	-15.1493	-13.9661
1,539	RFR.mol	1,026	-13.9623	3.6108	-55.7222	-15.4511	-13.9623
1,540	SSQ.mol	1,298	-13.9316	2.2010	-51.4030	-14.0610	-13.9316
1,541	TAE.mol	1,358	-13.9259	2.8000	-62.5723	-17.0771	-13.9259
1,542	GDQ.mol	307	-13.9252	3.2000	-22.6088	-17.9055	-13.9252
1,543	THK.mol	1,420	-13.8957	3.7573	-23.3152	-15.1632	-13.8957
1,544	TWN.mol	1,550	-13.8476	1.6006	48.0456	-13.9615	-13.8476
1,545	HVD.mol	498	-13.8405	2.1989	-27.9904	-19.0175	-13.8405
1,546	SIT.mol	1,213	-13.8094	0.0000	-9.9686	-13.7702	-13.8094
1,547	NTR.mol	807	-13.7934	1.8000	-5.5072	-13.9362	-13.7934
1,548	EKA.mol	240	-13.7841	4.1370	-50.4592	-17.1461	-13.7841
1,549	GST.mol	380	-13.7773	0.0000	-51.2605	-13.8729	-13.7773
1,550	DDE.mol	10	-13.7351	3.4000	-58.0689	-18.2649	-13.7351
1,551	GRN.mol	366	-13.6846	2.5988	39.7892	-14.0325	-13.6846
1,552	SAE.mol	1,128	-13.6707	3.4000	8.6291	-15.5833	-13.6707
1,553	SGH.mol	1,181	-13.6151	1.6000	-62.4418	-15.8915	-13.6151
1,554	SDT.mol	1,149	-13.5620	2.4000	-67.2704	-16.1825	-13.5620
1,555	GTQ.mol	387	-13.4618	2.1574	-58.1312	-12.9170	-13.4618
1,556	NIK.mol	721	-13.4579	3.1329	-14.9307	-13.9021	-13.4579

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
1,557	NSD.mol	785	-13.4351	2.4000	-0.5547	-15.3590	-13.4351
1,558	KGD.mol	545	-13.4311	3.0000	44.8644	-17.9955	-13.4311
1,559	DKD.mol	68	-13.4308	3.6028	-34.5546	-17.7962	-13.4308
1,560	QDI.mol	848	-13.4113	1.9996	-88.4528	-16.0543	-13.4113
1,561	QSR.mol	960	-13.3947	1.4200	-44.2437	-14.3687	-13.3947
1,562	YDA.mol	1,578	-13.3925	2.9987	-37.8852	-15.4555	-13.3925
1,563	STQ.mol	1,314	-13.3811	0.9999	-56.4116	-12.7909	-13.3811
1,564	QSH.mol	955	-13.3241	2.4269	-52.2717	-13.9496	-13.3241
1,565	DEL.mol	32	-13.2896	2.6002	-51.7159	-15.7017	-13.2896
1,566	DFD.mol	38	-13.2335	2.7657	-31.8648	-17.0831	-13.2335
1,567	DYD.mol	176	-13.2159	2.8228	-72.4768	-18.2341	-13.2159
1,568	EKE.mol	242	-13.2144	1.8000	-58.9404	-19.6137	-13.2144
1,569	NEH.mol	682	-13.1632	3.3984	-20.9856	-15.4716	-13.1632
1,570	SDY.mol	1,152	-13.1437	3.9241	16.6618	-16.3907	-13.1437
1,571	QEK.mol	861	-13.0908	3.2560	-82.4166	-17.8094	-13.0908
1,572	EDF.mol	196	-13.0540	3.3985	-15.5702	-17.6994	-13.0540
1,573	SKT.mol	1,227	-13.0503	1.8000	28.6269	-16.7081	-13.0503
1,574	NSR.mol	794	-13.0426	4.1323	-57.6056	-15.0650	-13.0426
1,575	TEQ.mol	1,390	-13.0413	1.4000	-61.5135	-15.1133	-13.0413
1,576	TKQ.mol	1,447	-12.9468	3.3983	-16.3012	-16.1156	-12.9468
1,577	STR.mol	1,315	-12.9308	2.6000	17.0032	-13.8261	-12.9308
1,578	DTI.mol	158	-12.9189	3.0000	-72.5987	-15.5103	-12.9189
1,579	TDT.mol	1,377	-12.8697	2.4000	40.2439	-14.3904	-12.8697
1,580	TLH.mol	1,455	-12.8666	3.1907	-77.1875	-14.6779	-12.8666
1,581	TKD.mol	1,439	-12.8162	2.6061	-58.7198	-18.9974	-12.8162
1,582	NQA.mol	758	-12.8110	2.8464	-0.2436	-13.2430	-12.8110
1,583	KAH.mol	515	-12.8088	4.0000	-58.2659	-15.0663	-12.8088
1,584	NAE.mol	659	-12.7293	3.1607	-81.4806	-15.5834	-12.7293
1,585	KDD.mol	519	-12.6327	1.9873	-42.9050	-18.3788	-12.6327
1,586	EAE.mol	190	-12.5859	3.6018	-44.5048	-19.5312	-12.5859
1,587	SVD.mol	1,321	-12.5842	2.4000	-44.6203	-17.1879	-12.5842
1,588	DNL.mol	96	-12.5342	2.8331	5.4370	-14.6951	-12.5342
1,589	GDD.mol	302	-12.4892	2.8002	40.6601	-17.1483	-12.4892
1,590	RGR.mol	1,030	-12.4714	4.0022	-59.7859	-15.7321	-12.4714
1,591	NIE.mol	719	-12.3854	3.1999	-39.5869	-15.9810	-12.3854
1,592	DQE.mol	106	-12.3450	3.2178	-84.6340	-17.1148	-12.3450
1,593	EDE.mol	194	-12.2988	2.8026	-52.6704	-18.2046	-12.2988
1,594	TDN.mol	1,374	-12.2791	1.4215	-87.9793	-15.0565	-12.2791
1,595	TAY.mol	1,365	-12.2577	1.2798	-23.0623	-17.6355	-12.2577
1,596	GKK.mol	335	-12.1993	2.6024	20.2920	-14.8665	-12.1993
1,597	HKA.mol	441	-12.1164	1.7955	-65.6621	-14.4691	-12.1164
1,598	NKF.mol	728	-12.0763	3.9993	-22.4967	-14.8355	-12.0763

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
1,599	NDE.mol	667	-12.0360	2.8806	-56.5281	-16.1646	-12.0360
1,600	SDE.mol	1,139	-12.0229	1.6003	-67.5106	-18.1390	-12.0229
1,601	GDN.mol	306	-11.8773	1.8024	-67.1850	-15.8553	-11.8773
1,602	KSH.mol	619	-11.7211	2.6158	-20.9808	-15.5737	-11.7211
1,603	SDD.mol	1,138	-11.6884	3.8041	-76.5532	-17.2019	-11.6884
1,604	TSQ.mol	1,516	-11.6526	2.0000	-42.6171	-13.2493	-11.6526
1,605	NQV.mol	769	-11.6093	3.2359	-44.5723	-14.3013	-11.6093
1,606	DRD.mol	120	-11.5592	2.3918	-82.9445	-17.8549	-11.5592
1,607	TED.mol	1,382	-11.4860	3.2000	57.9074	-17.6634	-11.4860
1,608	DTD.mol	152	-11.2429	1.4924	-32.5844	-16.5956	-11.2429
1,609	DAE.mol	4	-11.2082	2.6000	-42.7229	-18.3434	-11.2082
1,610	SRQ.mol	1,282	-11.1442	1.8000	-64.7914	-15.8654	-11.1442
1,611	NNE.mol	747	-11.0797	2.2832	-32.8190	-14.9046	-11.0797
1,612	TDD.mol	1,367	-11.0516	1.3442	-51.7254	-17.4433	-11.0516
1,613	RKA.mol	1,045	-11.0052	3.0000	-41.3272	-14.6619	-11.0052
1,614	NQK.mol	764	-10.9905	3.0000	-37.7719	-14.3639	-10.9905
1,615	QQE.mol	929	-10.9788	2.0000	-72.7738	-16.0429	-10.9788
1,616	KSI.mol	620	-10.9424	3.4000	11.4416	-15.0934	-10.9424
1,617	ESI.mol	282	-10.8848	2.4000	-107.892	-15.3047	-10.8848
1,618	NRD.mol	772	-10.7765	2.4000	-29.2607	-19.0298	-10.7765
1,619	QNK.mol	921	-10.7567	2.6000	-65.6621	-14.5200	-10.7567
1,620	SGD.mol	1,179	-10.6435	2.0000	-9.2350	-19.0464	-10.6435
1,621	TEE.mol	1,383	-10.5964	4.3201	6.5583	-16.4744	-10.5964
1,622	DDD.mol	8	-10.5843	3.2027	-8.8705	-18.0815	-10.5843
1,623	SKD.mol	1,216	-10.4739	2.6000	23.9988	-17.8688	-10.4739
1,624	TDA.mol	1,366	-10.3484	0.8000	-65.5468	-14.6631	-10.3484
1,625	QKL.mol	904	-10.2465	2.2271	-22.1999	-15.3203	-10.2465
1,626	NSQ.mol	793	-10.1983	1.2000	-28.8917	-13.3906	-10.1983
1,627	DDA.mol	6	-10.1373	1.8285	-48.4472	-17.2356	-10.1373
1,628	RTD.mol	1,100	-10.1104	2.2000	18.0845	-20.3717	-10.1104
1,629	KYD.mol	648	-9.7884	3.2010	-83.8241	-16.0751	-9.7884
1,630	KID.mol	561	-9.4287	2.5952	46.8608	-17.2184	-9.4287
1,631	DEA.mol	22	-9.4022	2.4000	-34.0333	-18.5819	-9.4022
1,632	QEE.mol	857	-9.2113	1.6615	-12.1183	-17.7778	-9.2113
1,633	DGE.mol	44	-9.1261	3.0231	-54.5322	-17.4120	-9.1261
1,634	KAK.mol	516	-8.3482	2.8127	-25.9227	-14.8397	-8.3482
1,635	KTK.mol	632	-8.2751	2.3615	5.4654	-17.8012	-8.2751

Lampiran 7. Data screening 736 ligan target sisi ikatan RNA-cap

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
1	YGE.mol	658	-26.9550	3.7124	29.3038	-10.2285	-26.9550
2	EYF.mol	122	-25.2365	2.2282	-22.6550	-9.3241	-25.2365
3	YWE.mol	722	-23.9088	3.4000	16.6604	-9.4245	-23.9088
4	DDF.mol	6	-23.4917	2.6866	-27.3128	-12.3873	-23.4917
5	GQQ.mol	151	-23.4916	1.2003	-11.3985	-12.3585	-23.4916
6	GYD.mol	169	-23.4311	3.1277	-17.8031	-9.2278	-23.4311
7	YWN.mol	723	-23.2742	2.2646	-90.3001	-10.9102	-23.2742
8	YFY.mol	656	-22.9939	3.4931	-22.8011	-12.1194	-22.9939
9	QFQ.mol	297	-22.7353	2.6490	45.9026	-9.3550	-22.7353
10	TYQ.mol	620	-22.7272	3.2000	-49.7574	-11.9362	-22.7272
11	SYW.mol	497	-22.6513	3.8000	-31.1763	-11.3807	-22.6513
12	TYN.mol	619	-22.5516	0.9988	-75.9242	-10.8290	-22.5516
13	YIN.mol	664	-22.4480	0.9848	29.1832	-10.0585	-22.4480
14	YAN.mol	627	-22.3899	3.7853	-5.8603	-10.8692	-22.3899
15	NWE.mol	261	-22.3548	2.0330	-46.5948	-10.2556	-22.3548
16	SSW.mol	456	-22.3423	3.8000	-65.2529	-9.8157	-22.3423
17	YLD.mol	667	-22.1935	1.9813	-54.4065	-9.9154	-22.1935
18	DVE.mol	60	-22.1562	4.0000	23.0692	-11.3378	-22.1562
19	YDE.mol	632	-22.0156	3.8000	6.4163	-14.1537	-22.0156
20	YEF.mol	644	-22.0037	3.5270	18.6273	-9.3220	-22.0037
21	DWE.mol	62	-21.8896	3.4178	-27.9410	-11.0010	-21.8896
22	YFY.mol	651	-21.8723	4.2079	-32.0896	-9.6717	-21.8723
23	DYE.mol	65	-21.8461	3.5960	-64.1518	-12.5735	-21.8461
24	TQF.mol	568	-21.8091	1.8615	-50.3151	-8.6378	-21.8091
25	SSL.mol	450	-21.7583	1.2879	-8.0083	-9.0858	-21.7583
26	YDD.mol	631	-21.7249	2.6000	-28.1567	-13.9585	-21.7249
27	EYA.mol	120	-21.6747	3.5500	28.9461	-11.7625	-21.6747
28	YYY.mol	736	-21.6536	2.3208	-68.1021	-10.5377	-21.6536
29	TNY.mol	564	-21.6332	1.8291	-15.2086	-8.7357	-21.6332
30	GYI.mol	175	-21.5578	3.6000	4.7331	-13.2110	-21.5578
31	YDF.mol	633	-21.5513	3.2431	-6.2885	-8.6701	-21.5513
32	SSV.mol	455	-21.5230	1.8000	-3.7599	-10.6062	-21.5230
33	SDS.mol	373	-21.4876	4.0073	63.6458	-13.1627	-21.4876
34	GQY.mol	154	-21.4503	2.2553	82.5992	-8.5849	-21.4503
35	GYT.mol	174	-21.4354	3.0206	48.8286	-9.1996	-21.4354
36	SFD.mol	391	-21.4169	3.3757	-12.7300	-9.0596	-21.4169
37	YAY.mol	629	-21.3791	2.7990	-13.0362	-9.1271	-21.3791
38	GND.mol	141	-21.3767	3.0282	-39.9132	-11.5188	-21.3767
39	YYA.mol	726	-21.3137	2.3759	-48.8120	-9.4380	-21.3137
40	GYQ.mol	172	-21.2675	3.8160	0.0620	-11.1292	-21.2675
41	YQN.mol	689	-21.0486	3.4734	-44.1219	-9.2287	-21.0486
42	YAQ.mol	628	-21.0383	3.3957	-40.1189	-9.3032	-21.0383

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
43	GQT.mol	153	-21.0083	1.0000	-59.5201	-9.9338	-21.0083
44	EGE.mol	87	-20.9841	3.8000	-23.7072	-12.1467	-20.9841
45	YIY.mol	666	-20.9499	1.8067	-42.0056	-9.3392	-20.9499
46	SYF.mol	489	-20.8105	2.9683	-24.8682	-9.7756	-20.8105
47	SNE.mol	421	-20.7372	1.6000	-54.9965	-9.5718	-20.7372
48	YTY.mol	715	-20.7235	3.2584	12.2996	-11.8696	-20.7235
49	NYE.mol	266	-20.7155	1.4228	-50.4933	-15.3657	-20.7155
50	SAE.mol	359	-20.7065	2.4000	-60.1973	-11.8960	-20.7065
51	TFT.mol	533	-20.7043	2.9984	-68.3256	-9.4389	-20.7043
52	TTY.mol	600	-20.6763	1.8000	-65.4731	-9.2450	-20.6763
53	DTE.mol	53	-20.6611	3.4000	-12.8485	-10.5584	-20.6611
54	DEE.mol	13	-20.6264	4.5392	-20.2105	-14.5406	-20.6264
55	YEW.mol	650	-20.6131	3.5943	-43.1508	-9.8492	-20.6131
56	TVE.mol	602	-20.5986	3.6000	-36.4815	-9.0000	-20.5986
57	ENE.mol	91	-20.5894	2.4000	8.4622	-12.2840	-20.5894
58	SLN.mol	414	-20.5873	3.2305	-45.0106	-10.2179	-20.5873
59	TAE.mol	500	-20.5507	4.0000	-46.2184	-11.1050	-20.5507
60	YDI.mol	634	-20.5409	1.8054	0.5453	-10.9586	-20.5409
61	YNQ.mol	679	-20.4967	2.0545	-80.5249	-11.8304	-20.4967
62	SYS.mol	494	-20.4786	3.4034	-52.2668	-12.9791	-20.4786
63	YWY.mol	725	-20.4683	2.0656	-75.6223	-9.3225	-20.4683
64	SYY.mol	498	-20.4628	3.2373	-2.1742	-8.4669	-20.4628
65	NTD.mol	247	-20.4559	2.6099	4.0018	-9.3398	-20.4559
66	TTE.mol	591	-20.4489	2.2008	-14.1492	-11.9713	-20.4489
67	YSE.mol	696	-20.4093	3.7304	-11.2003	-13.8690	-20.4093
68	DSW.mol	50	-20.4004	3.8307	-18.4459	-10.0146	-20.4004
69	DID.mol	23	-20.3888	2.0000	5.6647	-11.7119	-20.3888
70	TDF.mol	508	-20.3699	2.0000	112.0049	-11.8674	-20.3699
71	NYW.mol	273	-20.3398	1.8000	-75.4095	-9.1289	-20.3398
72	QNE.mol	309	-20.3273	2.6000	11.0120	-9.6100	-20.3273
73	YEE.mol	643	-20.2853	2.7446	-11.7021	-10.6433	-20.2853
74	NYI.mol	268	-20.2845	2.1857	-65.7172	-9.9309	-20.2845
75	NQW.mol	235	-20.2323	1.2000	48.1077	-7.9475	-20.2323
76	QYE.mol	351	-20.2321	3.6240	-21.6703	-9.9675	-20.2321
77	NFE.mol	201	-20.2296	3.2212	-9.8943	-10.8438	-20.2296
78	YEL.mol	646	-20.2176	3.3247	-36.1127	-8.8964	-20.2176
79	SSY.mol	457	-20.1891	3.4000	-25.8448	-9.5148	-20.1891
80	SGY.mol	404	-20.1651	0.0000	76.5755	-8.8215	-20.1651
81	TYF.mol	616	-20.1343	2.1095	-46.7467	-8.3924	-20.1343
82	QTF.mol	337	-20.1182	2.8633	13.8108	-7.5375	-20.1182
83	QEW.mol	294	-20.0915	3.1855	55.9905	-9.2135	-20.0915
84	DYI.mol	67	-20.0595	1.0000	-30.0635	-9.1120	-20.0595

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
85	EFE.mol	86	-20.0364	3.0000	37.7103	-11.8682	-20.0364
86	QYI.mol	353	-19.9896	2.8000	-39.7778	-9.7699	-19.9896
87	NNW.mol	225	-19.9826	1.6442	-42.4277	-8.9893	-19.9826
88	TEQ.mol	524	-19.9719	3.7054	-13.3778	-9.2450	-19.9719
89	TFE.mol	530	-19.9648	2.4002	-3.5032	-9.0915	-19.9648
90	YYL.mol	731	-19.9386	1.8000	-59.5807	-10.1930	-19.9386
91	NSD.mol	237	-19.9226	1.2000	-17.0554	-11.1199	-19.9226
92	NWD.mol	260	-19.9155	2.0110	105.1445	-9.3513	-19.9155
93	NFQ.mol	203	-19.9060	1.2002	-41.5097	-9.5582	-19.9060
94	YSL.mol	699	-19.8470	2.8000	5.2895	-10.4606	-19.8470
95	EYW.mol	126	-19.8307	4.5817	-57.3236	-9.1536	-19.8307
96	SDW.mol	376	-19.8241	2.6905	0.4997	-9.8867	-19.8241
97	QID.mol	301	-19.8141	0.6000	4.8962	-11.6194	-19.8141
98	GYE.mol	170	-19.8122	2.8004	-75.9775	-10.5722	-19.8122
99	TYE.mol	615	-19.8111	2.4114	-5.6163	-9.7029	-19.8111
100	QND.mol	308	-19.7783	3.1790	-27.1492	-11.3082	-19.7783
101	QYD.mol	350	-19.7638	3.6103	-23.1793	-10.3742	-19.7638
102	QYL.mol	354	-19.7302	3.1310	-61.2400	-9.0388	-19.7302
103	NDF.mol	183	-19.7258	2.8950	-15.1522	-8.9773	-19.7258
104	ESL.mol	108	-19.7229	3.0039	-36.5351	-10.5910	-19.7229
105	TSV.mol	586	-19.6851	0.6000	-48.6101	-8.8823	-19.6851
106	DQW.mol	42	-19.6743	2.8177	-44.3954	-10.0511	-19.6743
107	QFD.mol	295	-19.6291	1.8007	-24.3523	-10.7778	-19.6291
108	QQE.mol	318	-19.6245	2.6000	-23.3894	-11.5611	-19.6245
109	EQL.mol	101	-19.5879	3.4597	-55.6905	-9.3521	-19.5879
110	NQV.mol	234	-19.5827	1.2000	-70.8762	-8.9919	-19.5827
111	YSQ.mol	701	-19.5593	1.8000	-63.5924	-10.0596	-19.5593
112	YVE.mol	717	-19.5263	3.3436	-25.9000	-9.6220	-19.5263
113	QAD.mol	274	-19.5197	2.6000	8.2665	-11.0727	-19.5197
114	YQI.mol	687	-19.5159	2.2050	-78.4484	-8.6225	-19.5159
115	EYE.mol	121	-19.5043	3.1889	-18.2393	-10.0421	-19.5043
116	EQE.mol	98	-19.4902	2.0000	-7.8315	-11.0275	-19.4902
117	SVE.mol	472	-19.4820	0.4000	15.0980	-9.0607	-19.4820
118	ENW.mol	96	-19.4721	3.3784	-44.6294	-10.9203	-19.4721
119	QAE.mol	275	-19.4602	1.4000	72.1693	-9.2421	-19.4602
120	DYL.mol	68	-19.4249	2.0223	-12.6661	-9.5475	-19.4249
121	YNN.mol	678	-19.4163	1.8709	-36.4251	-9.5716	-19.4163
122	QDF.mol	280	-19.3628	3.2811	-38.0765	-10.5012	-19.3628
123	NYQ.mol	271	-19.3402	2.7997	-59.9787	-8.8401	-19.3402
124	SQW.mol	443	-19.3376	1.7903	-84.8756	-8.3473	-19.3376
125	QDI.mol	281	-19.3261	1.4000	-18.5980	-8.3416	-19.3261
126	SQF.mol	435	-19.3229	1.2000	-14.3111	-8.8166	-19.3229

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
127	GDT.mol	132	-19.3162	2.8000	-6.5691	-10.3897	-19.3162
128	QYA.mol	349	-19.2711	3.1841	-37.0961	-9.9811	-19.2711
129	QTV.mol	341	-19.2663	4.0024	-56.9244	-9.9274	-19.2663
130	TQY.mol	576	-19.2451	1.8000	-58.1972	-9.2513	-19.2451
131	YFE.mol	653	-19.2424	1.8910	-16.9907	-9.2803	-19.2424
132	SID.mol	405	-19.2256	3.0029	-86.2029	-11.0770	-19.2256
133	YFN.mol	654	-19.2248	2.9269	-16.6432	-8.2885	-19.2248
134	NTE.mol	248	-19.1900	2.1160	-28.5704	-11.3845	-19.1900
135	NGN.mol	206	-19.1360	0.6000	-72.4600	-9.4834	-19.1360
136	QNL.mol	312	-19.1339	1.4136	6.0054	-9.9739	-19.1339
137	SIN.mol	407	-19.1222	1.5902	-53.3772	-11.8524	-19.1222
138	EDE.mol	73	-19.1120	3.0000	-13.7672	-10.2173	-19.1120
139	YDW.mol	639	-19.0764	2.9216	-37.0289	-10.7498	-19.0764
140	DQF.mol	38	-19.0713	3.2628	-51.1280	-9.6822	-19.0713
141	YEI.mol	645	-19.0634	3.5679	-33.9566	-12.8235	-19.0634
142	QYW.mol	357	-19.0500	3.5998	-25.3609	-9.2523	-19.0500
143	YWQ.mol	724	-19.0444	2.4138	-47.3696	-8.9126	-19.0444
144	SQV.mol	442	-19.0190	1.0000	-38.1574	-8.3169	-19.0190
145	DNV.mol	33	-19.0134	2.0088	-54.3220	-9.6864	-19.0134
146	GYN.mol	171	-19.0028	3.4000	-49.6401	-11.9734	-19.0028
147	EVE.mol	118	-18.9819	3.2006	-31.3895	-12.5064	-18.9819
148	QWE.mol	347	-18.9575	1.4000	-6.1011	-9.6472	-18.9575
149	YVN.mol	718	-18.9545	2.7855	-95.5780	-9.3942	-18.9545
150	QEF.mol	289	-18.9231	4.0302	-10.2980	-10.8358	-18.9231
151	TND.mol	554	-18.9164	1.6001	-51.6442	-10.1909	-18.9164
152	TLN.mol	549	-18.8988	1.3121	-36.7864	-7.6254	-18.8988
153	DYV.mol	69	-18.8867	3.1498	-18.0717	-8.7155	-18.8867
154	SEY.mol	390	-18.8538	3.4249	-32.3635	-14.3711	-18.8538
155	DLD.mol	25	-18.8424	3.6000	-39.1787	-10.8555	-18.8424
156	ESF.mol	106	-18.8409	3.2956	-8.2952	-9.3782	-18.8409
157	ELE.mol	89	-18.8201	2.4000	44.2985	-11.4557	-18.8201
158	SWS.mol	483	-18.8026	1.6000	-35.2265	-11.4475	-18.8026
159	SST.mol	454	-18.7920	2.0000	-38.5922	-10.4029	-18.7920
160	NDV.mol	188	-18.7907	2.6680	-53.8858	-9.0149	-18.7907
161	TYV.mol	624	-18.7619	4.0000	10.6940	-9.4960	-18.7619
162	SSE.mol	447	-18.7601	3.0000	-35.0851	-9.8239	-18.7601
163	YNE.mol	674	-18.7595	2.7684	-35.8831	-12.7620	-18.7595
164	NDQ.mol	187	-18.7270	1.0000	-9.0209	-11.4236	-18.7270
165	NLD.mol	212	-18.7199	3.2000	5.3252	-9.1106	-18.7199
166	TID.mol	541	-18.7030	2.4000	-6.8630	-8.6329	-18.7030
167	GTU.mol	168	-18.6787	0.8286	-57.2527	-10.8687	-18.6787
168	DAD.mol	1	-18.6736	1.8000	-5.6861	-10.7340	-18.6736

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
169	YND.mol	673	-18.6575	1.2395	-32.3016	-13.0046	-18.6575
170	NNQ.mol	223	-18.6549	1.2038	-52.7872	-10.0369	-18.6549
171	QDW.mol	285	-18.6540	1.2000	-16.8147	-11.0496	-18.6540
172	NSW.mol	245	-18.6481	3.6357	15.5547	-10.1664	-18.6481
173	YFQ.mol	655	-18.6384	3.3943	-17.8885	-8.5459	-18.6384
174	SQT.mol	441	-18.6042	2.0000	-30.6869	-8.4395	-18.6042
175	STE.mol	460	-18.5835	2.6000	-50.6886	-11.4945	-18.5835
176	NYN.mol	270	-18.5784	1.8027	-51.4092	-8.2057	-18.5784
177	YAD.mol	625	-18.5689	3.8358	-7.4291	-12.1920	-18.5689
178	SWY.mol	485	-18.5460	2.8000	-74.6320	-8.3961	-18.5460
179	NVN.mol	258	-18.5457	2.1874	25.8875	-10.5051	-18.5457
180	GEE.mol	135	-18.5452	1.4000	-19.1310	-11.3934	-18.5452
181	SEW.mol	389	-18.5317	3.8773	-22.3742	-9.1702	-18.5317
182	NTN.mol	252	-18.5268	1.1588	-26.1804	-10.2390	-18.5268
183	ETA.mol	111	-18.5205	2.4000	-5.8780	-10.0785	-18.5205
184	SQN.mol	438	-18.5162	2.3375	-15.2349	-9.9004	-18.5162
185	TEY.mol	528	-18.5160	2.9951	-46.3627	-12.7582	-18.5160
186	TTT.mol	597	-18.5072	0.8000	-20.8825	-10.9421	-18.5072
187	YYE.mol	728	-18.4835	2.3363	-64.1705	-9.8639	-18.4835
188	EDW.mol	78	-18.4596	1.4000	-20.9730	-11.0271	-18.4596
189	TSL.mol	582	-18.4381	2.2791	43.6715	-10.6838	-18.4381
190	NYD.mol	265	-18.4354	3.0000	-52.8615	-10.6971	-18.4354
191	SDF.mol	368	-18.4331	2.2000	28.1264	-9.1537	-18.4331
192	GTN.mol	164	-18.4070	1.2000	-1.5138	-9.3084	-18.4070
193	SQY.mol	444	-18.4021	2.4000	-68.8869	-10.0796	-18.4021
194	NEW.mol	199	-18.3984	3.4217	-44.1620	-10.4822	-18.3984
195	YEQ.mol	648	-18.3948	4.6846	-8.5604	-8.6019	-18.3948
196	SSQ.mol	452	-18.3818	2.2105	-3.4267	-8.8848	-18.3818
197	STQ.mol	465	-18.3754	0.6000	-15.3515	-8.4363	-18.3754
198	SIQ.mol	408	-18.3532	1.2000	-24.7026	-8.2845	-18.3532
199	DDE.mol	5	-18.3197	3.6000	-43.2730	-12.9903	-18.3197
200	YSL.mol	698	-18.3045	1.8860	-22.2482	-11.0298	-18.3045
201	QSF.mol	328	-18.3040	1.8128	-18.1664	-8.8907	-18.3040
202	TYW.mol	623	-18.3011	2.8112	-68.2521	-9.8733	-18.3011
203	NFN.mol	202	-18.3009	1.8079	-37.2512	-10.3714	-18.3009
204	YTN.mol	711	-18.3006	1.0916	-40.2156	-9.4918	-18.3006
205	YEV.mol	649	-18.2974	2.1130	64.1271	-8.9734	-18.2974
206	TWD.mol	607	-18.2903	2.8943	-51.0925	-8.8918	-18.2903
207	EDV.mol	77	-18.2854	3.4000	-26.9102	-11.5699	-18.2854
208	QSW.mol	333	-18.2816	0.6000	-45.6844	-10.5417	-18.2816
209	SFS.mol	395	-18.2775	2.9694	9.5035	-12.8025	-18.2775
210	YEA.mol	641	-18.2661	2.8000	-5.2910	-9.1675	-18.2661

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
211	YQY.mol	693	-18.2632	3.9982	-4.0826	-9.6268	-18.2632
212	TTQ.mol	596	-18.2502	1.7054	-55.7100	-8.4503	-18.2502
213	SDD.mol	366	-18.2491	1.8000	-39.8670	-10.1726	-18.2491
214	GEN.mol	136	-18.2471	3.0000	38.0849	-12.4363	-18.2471
215	TEV.mol	526	-18.2410	1.0003	28.5649	-9.5305	-18.2410
216	YDQ.mol	637	-18.2244	3.8860	-25.4776	-10.6344	-18.2244
217	TDD.mol	506	-18.2021	3.4278	-37.5674	-11.1582	-18.2021
218	QDD.mol	278	-18.1920	2.0000	-51.2210	-10.9198	-18.1920
219	QEV.mol	293	-18.1769	4.5611	-59.9265	-8.7316	-18.1769
220	QDV.mol	284	-18.1756	2.6392	-5.4256	-11.9514	-18.1756
221	QIE.mol	302	-18.1675	2.0781	14.0651	-10.6637	-18.1675
222	EDL.mol	76	-18.1404	3.6008	64.7153	-11.7825	-18.1404
223	YDL.mol	635	-18.1372	2.2037	-66.4793	-9.9036	-18.1372
224	QDQ.mol	283	-18.1168	3.2000	-48.7903	-11.9109	-18.1168
225	YLN.mol	669	-18.1075	0.8723	-87.8372	-10.8929	-18.1075
226	YNY.mol	682	-18.1042	4.1394	-71.3512	-10.1555	-18.1042
227	SDN.mol	371	-18.1033	0.5963	-6.3874	-11.1277	-18.1033
228	QLE.mol	305	-18.1024	1.8018	-1.9902	-11.1594	-18.1024
229	TDE.mol	507	-18.1007	2.2000	0.5896	-10.5846	-18.1007
230	NNF.mol	219	-18.0887	2.4232	-51.3169	-9.0984	-18.0887
231	NYF.mol	267	-18.0878	3.0900	-18.2416	-10.0880	-18.0878
232	QWQ.mol	348	-18.0742	3.6245	-30.5952	-8.6733	-18.0742
233	QEE.mol	288	-18.0618	2.2000	-36.2387	-11.1561	-18.0618
234	QFE.mol	296	-18.0612	3.1997	-1.9017	-8.7706	-18.0612
235	YTE.mol	707	-18.0536	2.8399	-65.2209	-10.9581	-18.0536
236	NVD.mol	256	-18.0423	2.0000	0.3156	-9.3537	-18.0423
237	YQL.mol	688	-18.0366	2.8000	-64.6194	-9.0883	-18.0366
238	NWN.mol	262	-18.0310	3.5171	-63.3306	-9.3037	-18.0310
239	SAY.mol	364	-18.0222	2.8008	-25.1132	-8.8435	-18.0222
240	STL.mol	463	-18.0197	1.0000	-30.6829	-8.6277	-18.0197
241	ESW.mol	110	-17.9943	2.6407	-52.5648	-10.0163	-17.9943
242	QSL.mol	330	-17.9706	2.0000	-21.0628	-9.0086	-17.9706
243	NFD.mol	200	-17.9682	2.2968	-32.7376	-10.4398	-17.9682
244	NQN.mol	232	-17.9673	2.0483	-24.5705	-9.4698	-17.9673
245	QNF.mol	310	-17.9643	1.6014	-55.1452	-9.0643	-17.9643
246	NVE.mol	257	-17.9269	2.0025	14.6511	-10.3738	-17.9269
247	DYA.mol	63	-17.9196	2.8000	-76.3197	-9.6344	-17.9196
248	NTL.mol	251	-17.9175	2.2092	-60.7849	-8.0316	-17.9175
249	YSW.mol	703	-17.9168	3.0009	-1.9082	-8.9170	-17.9168
250	ESV.mol	109	-17.9159	1.8000	3.4056	-10.1113	-17.9159
251	QEA.mol	286	-17.9077	3.8413	-30.4121	-9.7211	-17.9077
252	NSQ.mol	243	-17.8874	2.2000	-19.4552	-7.9531	-17.8874

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
253	YSY.mol	704	-17.8856	4.8378	-44.0439	-10.2549	-17.8856
254	YGN.mol	659	-17.8603	1.7998	-81.7631	-8.8726	-17.8603
255	YNI.mol	676	-17.8571	2.5742	-71.6215	-10.6805	-17.8571
256	DIE.mol	24	-17.8521	3.4026	31.6205	-9.6150	-17.8521
257	YDY.mol	640	-17.8291	3.6582	-74.6409	-10.7541	-17.8291
258	NTW.mol	255	-17.8142	4.1232	42.1458	-8.6737	-17.8142
259	QYF.mol	352	-17.7954	3.4058	-36.4774	-8.5987	-17.7954
260	QGQ.mol	300	-17.7925	1.2000	-27.3645	-9.2003	-17.7925
261	DTL.mol	56	-17.7902	3.0000	-31.5676	-9.4048	-17.7902
262	YQQ.mol	690	-17.7630	3.4453	8.3630	-8.5945	-17.7630
263	NNI.mol	220	-17.7556	0.8000	36.2050	-12.0364	-17.7556
264	GQS.mol	152	-17.7545	2.2055	12.3973	-8.9732	-17.7545
265	DNF.mol	30	-17.7445	3.3420	-37.9018	-10.1341	-17.7445
266	TNL.mol	558	-17.7284	1.2014	-44.7989	-8.2532	-17.7284
267	ENI.mol	93	-17.7250	2.4000	-19.9134	-13.0266	-17.7250
268	NDA.mol	180	-17.7247	1.4000	9.3510	-9.8272	-17.7247
269	NQF.mol	229	-17.7063	1.5831	-67.4376	-9.1480	-17.7063
270	SEL.mol	383	-17.6970	3.0000	-49.8220	-9.4851	-17.6970
271	SEV.mol	388	-17.6947	3.6000	-34.2498	-8.9745	-17.6947
272	QTD.mol	335	-17.6910	1.0009	12.7163	-11.3541	-17.6910
273	QAQ.mol	276	-17.6848	4.1917	-42.9868	-10.6681	-17.6848
274	YTD.mol	706	-17.6554	2.8029	-76.6187	-9.5396	-17.6554
275	SNL.mol	424	-17.6425	1.6000	37.9938	-8.5774	-17.6425
276	TWY.mol	612	-17.6421	3.7786	-18.0470	-9.1143	-17.6421
277	TYA.mol	613	-17.6362	1.7999	-50.8030	-9.9823	-17.6362
278	DNI.mol	31	-17.6320	2.0035	-67.9421	-10.8797	-17.6320
279	DSV.mol	49	-17.6156	1.8000	-6.2579	-9.2250	-17.6156
280	YQV.mol	691	-17.6072	2.0226	-60.5214	-9.0104	-17.6072
281	TQT.mol	573	-17.6057	2.5998	-33.0941	-9.5650	-17.6057
282	YVY.mol	720	-17.5960	2.4111	-43.6560	-9.7605	-17.5960
283	EYV.mol	125	-17.5947	1.8011	-36.5384	-9.7751	-17.5947
284	YVD.mol	716	-17.5603	3.0156	-40.6060	-11.6039	-17.5603
285	SEE.mol	380	-17.5602	2.8263	3.1162	-14.5353	-17.5602
286	YYF.mol	729	-17.5519	2.7169	-68.6127	-9.5976	-17.5519
287	TTL.mol	593	-17.5200	2.4009	-26.3962	-9.6837	-17.5200
288	NQQ.mol	233	-17.5185	1.8048	16.7193	-8.2734	-17.5185
289	YQA.mol	683	-17.5165	1.3288	-37.6396	-9.4156	-17.5165
290	EEL.mol	82	-17.5157	3.4000	-13.3876	-15.4938	-17.5157
291	SYV.mol	496	-17.5131	2.6944	-30.1933	-8.1737	-17.5131
292	EWE.mol	119	-17.5113	3.8014	-34.3180	-11.9328	-17.5113
293	TST.mol	585	-17.5067	2.0000	-32.2639	-8.8843	-17.5067
294	EQL.mol	100	-17.5066	2.9107	-39.1433	-11.5733	-17.5066

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
295	DFD.mol	19	-17.5013	2.1891	12.0204	-9.9893	-17.5013
296	YQF.mol	686	-17.4930	1.8407	9.9424	-8.7831	-17.4930
297	SQD.mol	433	-17.4872	1.8000	-53.8555	-9.4885	-17.4872
298	GDE.mol	128	-17.4842	2.0016	-43.8917	-11.4195	-17.4842
299	YDV.mol	638	-17.4815	3.7872	-7.9244	-11.0183	-17.4815
300	SYL.mol	491	-17.4752	3.5051	-22.1859	-9.4449	-17.4752
301	SFT.mol	396	-17.4689	3.7997	-32.1217	-8.1217	-17.4689
302	TEI.mol	521	-17.4640	3.2409	-14.5583	-8.6266	-17.4640
303	YYQ.mol	733	-17.4570	2.3757	-76.0098	-10.2750	-17.4570
304	GDY.mol	133	-17.4554	2.7624	9.9312	-10.0018	-17.4554
305	GEY.mol	140	-17.4464	4.0227	-34.4260	-9.4156	-17.4464
306	QTE.mol	336	-17.4301	2.6498	21.5598	-9.3014	-17.4301
307	SVH.mol	473	-17.4290	0.6029	-84.0800	-9.1449	-17.4290
308	TSE.mol	579	-17.4259	3.4010	-58.6215	-10.5025	-17.4259
309	SSD.mol	446	-17.4207	1.0000	-42.1815	-13.3411	-17.4207
310	TFD.mol	529	-17.4130	2.4464	-8.7847	-9.7260	-17.4130
311	TIE.mol	542	-17.3935	1.0000	58.8532	-10.1408	-17.3935
312	NGD.mol	204	-17.3796	2.0547	-35.6895	-10.1629	-17.3796
313	YIE.mol	663	-17.3511	1.7779	-48.3360	-10.1218	-17.3511
314	SAD.mol	358	-17.3494	2.6000	-31.7379	-8.5338	-17.3494
315	NDI.mol	184	-17.3487	1.0000	7.1088	-12.1857	-17.3487
316	QQQ.mol	322	-17.3475	2.2321	-20.8755	-10.1904	-17.3475
317	GNN.mol	143	-17.3384	3.1230	-44.2410	-8.9188	-17.3384
318	DYD.mol	64	-17.3295	3.2034	-45.0335	-12.3980	-17.3295
319	NLE.mol	213	-17.3147	2.6000	-60.2012	-8.6977	-17.3147
320	NTI.mol	250	-17.3035	3.0000	-64.4839	-9.1803	-17.3035
321	TWQ.mol	610	-17.2886	3.2000	-19.4878	-8.8209	-17.2886
322	SYQ.mol	493	-17.2828	2.4091	-58.2568	-8.5154	-17.2828
323	QVE.mol	344	-17.2823	3.4000	-56.2609	-8.6959	-17.2823
324	QDL.mol	282	-17.2703	3.0829	-33.4984	-11.0881	-17.2703
325	NDE.mol	182	-17.2654	1.2000	-5.5972	-10.6866	-17.2654
326	TFY.mol	534	-17.2606	3.5524	-17.9000	-9.2650	-17.2606
327	NNL.mol	221	-17.2517	1.7994	-40.9137	-8.7920	-17.2517
328	DSL.mol	48	-17.2197	3.0000	-49.3675	-11.0315	-17.2197
329	QYQ.mol	355	-17.2083	1.8000	-51.8328	-10.2332	-17.2083
330	SLQ.mol	415	-17.2070	1.6000	-59.7411	-9.5639	-17.2070
331	QSQ.mol	331	-17.1966	0.6000	44.5057	-8.6444	-17.1966
332	SEQ.mol	385	-17.1930	1.8000	9.3111	-9.0773	-17.1930
333	NAD.mol	176	-17.1915	3.0062	-37.7053	-11.9147	-17.1915
334	SIY.mol	411	-17.1908	2.4023	-15.3927	-8.9767	-17.1908
335	TGD.mol	535	-17.1862	0.0000	-34.9176	-10.0263	-17.1862
336	TNT.mol	561	-17.1839	1.0000	-26.1475	-8.1410	-17.1839

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
337	QSD.mol	326	-17.1825	2.2000	42.6056	-10.3044	-17.1825
338	TTA.mol	589	-17.1718	1.0000	-5.8186	-8.2531	-17.1718
339	YLE.mol	668	-17.1684	3.9646	-73.9192	-9.5422	-17.1684
340	DYW.mol	70	-17.1647	2.6034	-53.6622	-8.7774	-17.1647
341	QED.mol	287	-17.1643	2.0000	-60.6529	-11.6365	-17.1643
342	ENF.mol	92	-17.1556	3.2000	-45.3483	-9.3080	-17.1556
343	SQQ.mol	439	-17.1522	1.6012	-44.9132	-8.4603	-17.1522
344	TDL.mol	510	-17.1393	2.2883	-36.9283	-8.4800	-17.1393
345	SWQ.mol	482	-17.1285	1.8000	-50.7845	-8.8383	-17.1285
346	TEL.mol	522	-17.1266	2.4246	-43.9381	-9.3503	-17.1266
347	SLY.mol	418	-17.1248	3.5270	-42.8745	-11.7829	-17.1248
348	TSN.mol	583	-17.1224	1.2000	-55.5969	-7.7560	-17.1224
349	SNI.mol	423	-17.1195	1.0000	-35.1186	-8.5900	-17.1195
350	TTL.mol	594	-17.1147	2.6093	1.7406	-11.1075	-17.1147
351	QQI.mol	320	-17.1034	2.6097	-36.6455	-10.4697	-17.1034
352	QVQ.mol	345	-17.0762	2.6726	-20.0645	-9.5456	-17.0762
353	NVQ.mol	259	-17.0673	2.2000	-30.3489	-9.2311	-17.0673
354	SFN.mol	393	-17.0588	1.7893	-6.4660	-7.8559	-17.0588
355	TTF.mol	592	-17.0568	1.7932	-51.7013	-10.0247	-17.0568
356	DEF.mol	14	-17.0488	3.8225	-51.5708	-10.3188	-17.0488
357	EQW.mol	103	-17.0321	3.4475	-24.4593	-10.3757	-17.0321
358	SGD.mol	398	-17.0304	1.2000	-15.5592	-9.8116	-17.0304
359	STV.mol	468	-17.0248	0.6004	-46.7471	-9.1295	-17.0248
360	SEN.mol	384	-17.0214	2.5920	-10.9576	-11.8747	-17.0214
361	SDE.mol	367	-17.0086	3.2347	-54.7186	-11.4085	-17.0086
362	NEL.mol	195	-17.0063	2.0000	-70.9912	-13.1181	-17.0063
363	DQE.mol	37	-17.0025	3.4000	-62.8209	-10.0808	-17.0025
364	SET.mol	387	-16.9991	2.5999	-18.4863	-12.8862	-16.9991
365	NIN.mol	210	-16.9799	2.6001	-21.8839	-8.9025	-16.9799
366	YSN.mol	700	-16.9715	3.6063	-4.9254	-9.9014	-16.9715
367	DEA.mol	11	-16.9712	3.6001	-68.7920	-10.0555	-16.9712
368	QLQ.mol	306	-16.9702	3.4000	-63.5864	-11.0527	-16.9702
369	EYL.mol	124	-16.9700	4.0208	13.1660	-10.8549	-16.9700
370	DTF.mol	54	-16.9688	2.9516	-72.4978	-9.4833	-16.9688
371	STY.mol	470	-16.9662	2.7991	-22.1502	-9.5041	-16.9662
372	GTS.mol	166	-16.9357	1.6000	-86.6732	-9.3436	-16.9357
373	SWD.mol	479	-16.9281	1.6000	-28.0312	-9.7717	-16.9281
374	QVD.mol	343	-16.9280	3.4303	8.1345	-9.9528	-16.9280
375	QNI.mol	311	-16.9232	2.1896	-31.3582	-8.5940	-16.9232
376	SQE.mol	434	-16.9194	1.6000	-63.7562	-13.8723	-16.9194
377	QEI.mol	290	-16.9191	1.6000	-28.3009	-10.9615	-16.9191
378	NYA.mol	264	-16.9114	1.8167	-35.8755	-11.2919	-16.9114

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
379	TAD.mol	499	-16.8884	1.0000	-21.2717	-10.5640	-16.8884
380	QTL.mol	339	-16.8873	2.6015	-31.8618	-9.4320	-16.8873
381	EQF.mol	99	-16.8871	2.7573	-45.9347	-10.2097	-16.8871
382	GQE.mol	149	-16.8871	1.0000	-42.2656	-10.0696	-16.8871
383	TLT.mol	551	-16.8870	2.5869	-39.2526	-9.5770	-16.8870
384	SLD.mol	412	-16.8793	1.7163	-57.6620	-11.5631	-16.8793
385	TYL.mol	618	-16.8661	2.0346	-60.6062	-8.2693	-16.8661
386	TSD.mol	578	-16.8624	3.0000	-35.2375	-9.9772	-16.8624
387	SSF.mol	448	-16.8540	2.8000	-17.2763	-8.5281	-16.8540
388	SNW.mol	430	-16.8499	1.2206	-74.5719	-7.9278	-16.8499
389	SNV.mol	429	-16.8457	1.6000	-10.7814	-10.7769	-16.8457
390	STD.mol	459	-16.8334	2.6000	-9.3816	-8.8495	-16.8334
391	NEQ.mol	197	-16.8319	2.6691	-42.4586	-9.4954	-16.8319
392	STW.mol	469	-16.8315	0.7018	-59.2633	-8.0329	-16.8315
393	SVY.mol	478	-16.8308	2.4000	-30.5523	-8.8726	-16.8308
394	NDN.mol	186	-16.8155	3.2000	48.3984	-10.5681	-16.8155
395	GET.mol	139	-16.8057	2.0000	-8.1723	-9.5775	-16.8057
396	TYD.mol	614	-16.7997	4.0077	-38.1805	-9.1791	-16.7997
397	DND.mol	28	-16.7905	3.0498	-28.5127	-11.6726	-16.7905
398	SNF.mol	422	-16.7890	0.8509	-45.9089	-12.9254	-16.7890
399	SIT.mol	410	-16.7844	0.6000	-26.9327	-12.0375	-16.7844
400	YQD.mol	684	-16.7788	3.1973	-37.0102	-10.2693	-16.7788
401	EAE.mol	71	-16.7731	2.4046	-15.8529	-10.5051	-16.7731
402	EDL.mol	75	-16.7534	3.4000	-7.1527	-9.9960	-16.7534
403	SLT.mol	417	-16.7530	1.2000	-59.5430	-10.0875	-16.7530
404	TSY.mol	588	-16.7499	0.6151	-34.3317	-8.4604	-16.7499
405	YSF.mol	697	-16.7401	1.8000	-0.1796	-10.7108	-16.7401
406	SDY.mol	377	-16.7379	2.0018	-31.1683	-10.9036	-16.7379
407	TVQ.mol	604	-16.7318	2.8887	-13.8299	-9.1171	-16.7318
408	STF.mol	461	-16.7197	0.9368	-14.1905	-9.2301	-16.7197
409	YTI.mol	709	-16.7176	3.7847	-30.6378	-11.1507	-16.7176
410	DGD.mol	21	-16.7122	3.0000	-65.9778	-11.3023	-16.7122
411	GQN.mol	150	-16.7107	1.8000	-42.8239	-9.2315	-16.7107
412	DSA.mol	43	-16.7019	1.9224	-12.4644	-9.2728	-16.7019
413	YWD.mol	721	-16.6956	2.7945	-30.5645	-10.0841	-16.6956
414	YQW.mol	692	-16.6875	3.6965	-71.3178	-10.4562	-16.6875
415	EYI.mol	123	-16.6868	1.8000	-33.6051	-9.9162	-16.6868
416	TSI.mol	581	-16.6825	1.4000	23.2952	-7.8532	-16.6825
417	DEV.mol	17	-16.6795	3.0532	2.6695	-10.1831	-16.6795
418	GES.mol	138	-16.6749	1.0000	-66.9880	-10.0566	-16.6749
419	SSS.mol	453	-16.6584	0.6000	-10.4047	-11.3770	-16.6584
420	GEQ.mol	137	-16.6531	2.0001	-52.9766	-10.0265	-16.6531

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
421	NEI.mol	194	-16.6178	3.7997	-3.9301	-9.0466	-16.6178
422	EEW.mol	85	-16.6148	2.6393	-25.7925	-11.5079	-16.6148
423	TFN.mol	531	-16.6141	1.5994	-27.5615	-12.4901	-16.6141
424	SVD.mol	471	-16.6130	2.6000	-53.0674	-9.7831	-16.6130
425	QQW.mol	324	-16.6101	2.1544	-41.3073	-8.1098	-16.6101
426	QTL.mol	338	-16.6096	1.1692	-64.0062	-9.9583	-16.6096
427	SDQ.mol	372	-16.5881	2.4071	-58.4590	-9.5122	-16.5881
428	TGE.mol	536	-16.5823	2.2000	-43.7120	-9.9909	-16.5823
429	TSW.mol	587	-16.5638	3.2429	-16.6931	-8.5749	-16.5638
430	DTW.mol	58	-16.5595	2.0034	-42.0278	-9.8237	-16.5595
431	NYL.mol	269	-16.5436	3.4307	-80.7303	-8.5467	-16.5436
432	YGQ.mol	660	-16.5380	2.7873	-66.7934	-11.0116	-16.5380
433	SNN.mol	425	-16.5318	1.2000	-56.2052	-8.3844	-16.5318
434	QTW.mol	342	-16.5316	1.0000	-42.0074	-8.3306	-16.5316
435	TLY.mol	552	-16.5296	2.8000	-21.5578	-8.6821	-16.5296
436	YTF.mol	708	-16.5227	3.5063	-53.7908	-8.7752	-16.5227
437	DYF.mol	66	-16.5206	2.9753	-83.2792	-10.4918	-16.5206
438	YTV.mol	713	-16.5176	2.3968	-52.7499	-10.3108	-16.5176
439	SFE.mol	392	-16.5164	2.3951	-58.8445	-8.6774	-16.5164
440	TSF.mol	580	-16.5100	3.4000	34.7341	-8.5692	-16.5100
441	SFQ.mol	394	-16.5016	3.5495	-30.2386	-8.1029	-16.5016
442	YNL.mol	677	-16.4836	2.3324	-56.7518	-10.0017	-16.4836
443	QDE.mol	279	-16.4831	3.6000	2.8717	-11.1079	-16.4831
444	DEW.mol	18	-16.4816	2.6589	-83.1740	-11.0323	-16.4816
445	SIS.mol	409	-16.4789	2.8000	-17.9011	-9.5483	-16.4789
446	GNY.mol	147	-16.4740	2.4818	-45.0668	-9.3282	-16.4740
447	QTA.mol	334	-16.4679	2.6000	-3.1470	-8.7277	-16.4679
448	YNV.mol	680	-16.4504	2.9615	-40.0954	-9.3177	-16.4504
449	DGE.mol	22	-16.4457	3.8000	9.6907	-14.0597	-16.4457
450	STL.mol	462	-16.4428	1.2000	-59.5962	-9.2761	-16.4428
451	QWD.mol	346	-16.4302	1.4000	-8.7168	-9.2034	-16.4302
452	SYA.mol	486	-16.4231	2.2000	20.8496	-9.0260	-16.4231
453	DFE.mol	20	-16.3920	2.8000	33.6795	-10.8096	-16.3920
454	TDW.mol	515	-16.3880	2.0685	22.9008	-8.7776	-16.3880
455	GST.mol	160	-16.3789	0.6000	-28.4072	-9.1540	-16.3789
456	NGE.mol	205	-16.3754	2.4000	-33.2964	-11.0856	-16.3754
457	YGY.mol	661	-16.3658	2.9284	-23.6102	-10.7737	-16.3658
458	GQD.mol	148	-16.3617	1.6000	-70.4550	-12.6851	-16.3617
459	TYL.mol	617	-16.3369	2.5982	-42.9630	-8.1932	-16.3369
460	TGN.mol	537	-16.3332	0.6041	-25.5496	-7.9837	-16.3332
461	YNA.mol	672	-16.3321	1.8456	-28.1089	-9.2874	-16.3321
462	YYV.mol	734	-16.3262	2.7665	-51.1107	-9.2675	-16.3262

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
463	DLE.mol	26	-16.3176	4.0000	-21.6555	-10.2247	-16.3176
464	TDY.mol	516	-16.2855	3.7878	-57.4086	-11.7330	-16.2855
465	TGQ.mol	538	-16.2847	1.0000	-39.7301	-10.0635	-16.2847
466	YDA.mol	630	-16.2665	2.6000	-24.4585	-9.5145	-16.2665
467	EEF.mol	80	-16.2292	3.2758	-40.4573	-10.7645	-16.2292
468	TEA.mol	517	-16.2232	3.0000	-30.3511	-9.8970	-16.2232
469	GTE.mol	163	-16.2021	1.7193	-40.9042	-9.6610	-16.2021
470	TYV.mol	622	-16.1978	3.1716	-29.9610	-8.2586	-16.1978
471	YNW.mol	681	-16.1878	0.6000	-70.0472	-9.3317	-16.1878
472	YLQ.mol	670	-16.1756	4.0023	-27.3160	-9.3816	-16.1756
473	QLD.mol	304	-16.1717	2.8149	-35.6342	-9.5547	-16.1717
474	YVQ.mol	719	-16.1633	2.1632	-25.3867	-10.0653	-16.1633
475	GSY.mol	161	-16.1612	3.5935	-59.0110	-9.2978	-16.1612
476	TNQ.mol	560	-16.1535	1.2045	-21.7755	-8.6731	-16.1535
477	QSA.mol	325	-16.1519	1.2000	-23.5635	-8.8795	-16.1519
478	SWN.mol	481	-16.1484	2.2000	5.4052	-8.2660	-16.1484
479	TNE.mol	555	-16.1446	3.6342	-0.8815	-9.3477	-16.1446
480	NDD.mol	181	-16.1295	2.8729	22.6057	-12.1357	-16.1295
481	YAE.mol	626	-16.1062	2.5599	27.1054	-11.1012	-16.1062
482	NNN.mol	222	-16.1054	1.3614	-76.3435	-11.3412	-16.1054
483	SVT.mol	477	-16.0861	1.0007	-21.2867	-8.3437	-16.0861
484	EQV.mol	102	-16.0770	3.1533	-23.6265	-9.5309	-16.0770
485	TDN.mol	511	-16.0764	3.6090	-33.3750	-9.3043	-16.0764
486	QEL.mol	291	-16.0726	4.7981	-27.1568	-11.2655	-16.0726
487	DTA.mol	51	-16.0723	1.8000	13.6099	-9.0681	-16.0723
488	SSN.mol	451	-16.0634	1.8000	-13.6838	-8.5049	-16.0634
489	TAY.mol	504	-16.0586	1.5898	-11.3646	-9.1068	-16.0586
490	TQV.mol	574	-16.0571	1.0001	14.4545	-8.1184	-16.0571
491	SYN.mol	492	-16.0487	1.2000	-72.4685	-9.6995	-16.0487
492	YLY.mol	671	-16.0349	1.7010	-46.3078	-9.3989	-16.0349
493	NSL.mol	241	-16.0059	2.2000	-44.9720	-9.0250	-16.0059
494	YTQ.mol	712	-15.9817	0.6000	-42.5578	-9.5340	-15.9817
495	SGE.mol	399	-15.9770	1.8000	-39.6047	-9.1041	-15.9770
496	YTL.mol	710	-15.9747	1.9768	-13.6652	-10.0896	-15.9747
497	NQL.mol	231	-15.9684	2.6069	-6.2894	-8.6478	-15.9684
498	GSS.mol	159	-15.9653	1.2000	-2.4053	-9.3147	-15.9653
499	TNI.mol	557	-15.9647	3.0000	59.2834	-9.7182	-15.9647
500	YIQ.mol	665	-15.9600	1.7804	-70.5173	-9.4692	-15.9600
501	TQA.mol	565	-15.9514	2.2000	-61.7198	-10.0362	-15.9514
502	SQL.mol	437	-15.9394	1.8033	-52.0533	-9.2458	-15.9394
503	SYI.mol	490	-15.9286	2.8682	-9.6388	-8.4840	-15.9286
504	NNA.mol	216	-15.9159	1.2027	-11.9076	-8.6001	-15.9159

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
505	DDI.mol	7	-15.9030	2.0129	-17.1518	-10.5995	-15.9030
506	SWE.mol	480	-15.9002	3.5510	-18.7390	-9.2083	-15.9002
507	TNV.mol	562	-15.8948	1.0770	-60.3054	-8.0179	-15.8948
508	QQF.mol	319	-15.8864	3.3345	-57.5298	-9.1877	-15.8864
509	NSF.mol	239	-15.8844	2.2112	-6.6149	-9.0678	-15.8844
510	TLE.mol	548	-15.8815	2.6313	-62.8128	-7.9613	-15.8815
511	TYT.mol	621	-15.8806	3.7991	-63.4458	-10.0183	-15.8806
512	YED.mol	642	-15.8771	4.1978	-34.7487	-12.9106	-15.8771
513	TSA.mol	577	-15.8632	1.0000	-6.2148	-7.8623	-15.8632
514	QYV.mol	356	-15.8580	1.9594	-47.4956	-8.8932	-15.8580
515	GSD.mol	155	-15.8465	3.1558	-11.8319	-8.7951	-15.8465
516	QNQ.mol	313	-15.8314	1.8000	-50.6935	-8.4030	-15.8314
517	NTV.mol	254	-15.8110	2.6066	-10.8305	-8.8638	-15.8110
518	NEN.mol	196	-15.7978	3.8163	-43.8197	-12.3031	-15.7978
519	NSI.mol	240	-15.7879	1.7167	-55.4854	-8.5232	-15.7879
520	DEL.mol	16	-15.7863	3.6064	-22.1988	-14.1907	-15.7863
521	DWD.mol	61	-15.7773	2.4000	-36.8125	-10.6734	-15.7773
522	DQL.mol	40	-15.7754	2.4735	-49.3378	-9.2340	-15.7754
523	GED.mol	134	-15.7741	2.3864	-11.0855	-11.3129	-15.7741
524	YFD.mol	652	-15.7666	2.2921	36.9829	-10.4206	-15.7666
525	TIN.mol	543	-15.7599	1.6125	-26.7114	-8.3781	-15.7599
526	DSI.mol	47	-15.7514	0.8000	12.3211	-11.1652	-15.7514
527	ETI.mol	114	-15.7339	3.2000	-38.8061	-10.8479	-15.7339
528	TQL.mol	569	-15.7234	2.0022	-53.4556	-7.8768	-15.7234
529	NDW.mol	189	-15.7093	0.6127	-72.3504	-10.6085	-15.7093
530	QSE.mol	327	-15.7044	2.2289	64.2776	-12.8090	-15.7044
531	SFY.mol	397	-15.6960	2.6226	-32.4761	-8.4338	-15.6960
532	NSN.mol	242	-15.6768	1.8302	-61.5041	-9.2883	-15.6768
533	EEE.mol	79	-15.6502	3.2606	-39.0774	-12.1050	-15.6502
534	NWQ.mol	263	-15.6388	0.6000	-42.5023	-8.3506	-15.6388
535	QTQ.mol	340	-15.6321	1.2000	-26.8705	-8.4966	-15.6321
536	STS.mol	466	-15.6285	1.8148	-29.1137	-8.2766	-15.6285
537	SVN.mol	474	-15.6230	1.2108	-39.5267	-9.0247	-15.6230
538	NLQ.mol	215	-15.6225	2.4809	-27.8338	-8.4031	-15.6225
539	YEN.mol	647	-15.6168	3.6573	-23.1841	-10.7106	-15.6168
540	SSI.mol	449	-15.6155	3.0000	-70.5958	-8.5168	-15.6155
541	SLE.mol	413	-15.6048	2.1844	-13.6284	-10.3984	-15.6048
542	DQV.mol	41	-15.6045	2.0000	-72.8002	-10.6255	-15.6045
543	GNQ.mol	144	-15.5874	1.6394	-64.3347	-8.2181	-15.5874
544	GTQ.mol	165	-15.5830	1.2000	67.7383	-8.8624	-15.5830
545	TAQ.mol	502	-15.5830	1.6000	16.0366	-8.4496	-15.5830
546	TVY.mol	606	-15.5672	3.4665	-92.3899	-9.5676	-15.5672

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
547	NSE.mol	238	-15.5588	1.5996	-50.8366	-10.0146	-15.5588
548	ESA.mol	104	-15.5478	4.0000	28.0551	-10.3949	-15.5478
549	YID.mol	662	-15.5285	3.4016	-52.0725	-11.0040	-15.5285
550	QNA.mol	307	-15.5131	2.8002	-46.7903	-8.9034	-15.5131
551	SIE.mol	406	-15.5116	1.3938	-35.8791	-8.2844	-15.5116
552	GNT.mol	146	-15.5047	0.6000	-21.6265	-8.6731	-15.5047
553	NAN.mol	178	-15.4958	1.8000	-11.3309	-9.5382	-15.4958
554	TTW.mol	599	-15.4954	2.2000	56.7042	-7.9928	-15.4954
555	NYV.mol	272	-15.4747	2.9990	-11.6908	-10.9825	-15.4747
556	TNN.mol	559	-15.4728	1.6264	-30.8467	-8.3666	-15.4728
557	NEE.mol	192	-15.4656	2.5530	-13.2214	-12.1062	-15.4656
558	QGD.mol	298	-15.4640	3.0536	20.9609	-12.7777	-15.4640
559	TWN.mol	609	-15.4606	1.4014	-54.4022	-7.9307	-15.4606
560	TNW.mol	563	-15.4596	3.7999	-36.1588	-6.9352	-15.4596
561	YYI.mol	730	-15.4562	3.8791	-65.4946	-9.3392	-15.4562
562	SYE.mol	488	-15.4373	3.2629	-30.0627	-13.9556	-15.4373
563	TNA.mol	553	-15.4302	2.6203	4.7764	-14.1121	-15.4302
564	DQD.mol	36	-15.4210	4.8430	-46.7058	-10.2593	-15.4210
565	TED.mol	518	-15.4132	1.8000	17.5953	-11.0017	-15.4132
566	YSV.mol	702	-15.3844	2.5989	-12.3578	-9.6202	-15.3844
567	GYS.mol	173	-15.3827	1.7844	-15.9290	-9.7530	-15.3827
568	EEL.mol	81	-15.3779	3.4000	-24.6558	-10.7530	-15.3779
569	DAE.mol	2	-15.3766	2.8000	10.4064	-11.5970	-15.3766
570	TQL.mol	570	-15.3765	2.2000	-57.2000	-10.1556	-15.3765
571	TSQ.mol	584	-15.3243	0.0000	0.8958	-8.6406	-15.3243
572	TVT.mol	605	-15.3157	2.0460	-33.4025	-7.5978	-15.3157
573	SQS.mol	440	-15.2960	2.2660	-49.9258	-9.0867	-15.2960
574	TTN.mol	595	-15.2758	1.2027	-72.9200	-9.8394	-15.2758
575	SED.mol	379	-15.2699	3.4000	65.7959	-10.4895	-15.2699
576	GNE.mol	142	-15.2687	4.0904	-29.6409	-10.6658	-15.2687
577	NQI.mol	230	-15.2639	1.0000	-29.5031	-9.3563	-15.2639
578	SEF.mol	381	-15.2485	2.5588	36.1420	-9.6622	-15.2485
579	TDV.mol	514	-15.2140	2.4358	-13.1605	-9.9644	-15.2140
580	TGY.mol	540	-15.2085	2.1998	-56.4952	-9.1958	-15.2085
581	DSF.mol	46	-15.2041	2.8041	-60.4273	-9.4559	-15.2041
582	GTT.mol	167	-15.2000	2.4000	-48.1855	-8.9648	-15.2000
583	QNV.mol	314	-15.1708	1.8000	-45.7783	-8.2614	-15.1708
584	NED.mol	191	-15.1521	1.6891	-63.0178	-11.0025	-15.1521
585	TDA.mol	505	-15.1376	0.4000	3.7257	-9.4627	-15.1376
586	YDN.mol	636	-15.1375	3.2759	-3.6010	-10.1611	-15.1375
587	QSV.mol	332	-15.1267	2.2000	-4.3702	-9.1662	-15.1267
588	SDA.mol	365	-15.1199	1.0000	-61.2235	-11.1056	-15.1199

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
589	GSQ.mol	158	-15.1107	1.6536	-37.3774	-9.2630	-15.1107
590	QIQ.mol	303	-15.0973	2.5964	-19.0924	-9.3157	-15.0973
591	ETW.mol	117	-15.0945	2.4189	-59.0297	-10.0669	-15.0945
592	TWE.mol	608	-15.0828	2.2154	12.1800	-9.0226	-15.0828
593	SYD.mol	487	-15.0813	1.3922	-4.0801	-10.2459	-15.0813
594	NTF.mol	249	-15.0772	2.6050	-40.5272	-8.0942	-15.0772
595	YYN.mol	732	-15.0747	2.3828	5.8121	-9.7580	-15.0747
596	NTQ.mol	253	-15.0602	1.5998	-16.0843	-9.2242	-15.0602
597	YQE.mol	685	-15.0452	1.7966	2.1429	-12.0084	-15.0452
598	SEA.mol	378	-15.0429	3.4000	-27.9284	-13.3720	-15.0429
599	EQA.mol	97	-15.0404	2.2000	-27.2947	-10.2515	-15.0404
600	DSD.mol	44	-15.0212	3.0000	-13.4582	-12.1028	-15.0212
601	ENL.mol	94	-15.0105	3.3752	-11.8695	-8.3044	-15.0105
602	TEW.mol	527	-15.0088	2.6828	-55.9468	-9.8628	-15.0088
603	QQV.mol	323	-14.9902	3.7767	-44.8655	-9.3896	-14.9902
604	NLN.mol	214	-14.9604	1.8006	-63.4314	-9.5451	-14.9604
605	SNT.mol	428	-14.9341	1.0001	-34.6564	-8.7266	-14.9341
606	NQD.mol	227	-14.9195	1.6000	8.2207	-12.0288	-14.9195
607	YTA.mol	705	-14.9132	2.7988	-3.4263	-10.1133	-14.9132
608	TWT.mol	611	-14.9068	2.7239	-57.4520	-8.3825	-14.9068
609	QNW.mol	315	-14.8988	2.4007	-75.2139	-8.3535	-14.8988
610	NQE.mol	228	-14.8898	3.4002	-25.0774	-9.5992	-14.8898
611	SDL.mol	370	-14.8776	2.0047	-43.7368	-9.5465	-14.8776
612	TLQ.mol	550	-14.8738	1.8000	18.5688	-10.1680	-14.8738
613	YGD.mol	657	-14.8623	3.6000	49.1922	-10.7973	-14.8623
614	NIE.mol	209	-14.8460	3.2179	-27.5642	-9.3481	-14.8460
615	DNA.mol	27	-14.8312	1.4000	-37.1600	-10.0009	-14.8312
616	YSA.mol	694	-14.8282	0.6000	-12.8555	-9.0463	-14.8282
617	QDA.mol	277	-14.8206	2.9609	63.7304	-11.7610	-14.8206
618	DDA.mol	3	-14.8178	2.7283	-42.1150	-13.9645	-14.8178
619	DDV.mol	9	-14.8102	3.8000	11.7866	-10.4302	-14.8102
620	NAE.mol	177	-14.8014	4.0678	-19.3551	-8.7102	-14.8014
621	EDF.mol	74	-14.7720	2.2000	-36.7402	-11.2458	-14.7720
622	DEI.mol	15	-14.7616	3.9940	24.0164	-10.2243	-14.7616
623	ETE.mol	112	-14.7335	4.1562	-55.0633	-11.0445	-14.7335
624	STN.mol	464	-14.7236	2.8000	-59.8593	-8.5200	-14.7236
625	STA.mol	458	-14.7198	1.0000	-33.8810	-8.8982	-14.7198
626	ETF.mol	113	-14.7167	0.8000	10.3058	-10.1413	-14.7167
627	DDW.mol	10	-14.7059	2.4000	-51.7247	-12.0490	-14.7059
628	ENV.mol	95	-14.6971	1.8000	19.4313	-9.4519	-14.6971
629	NID.mol	208	-14.6953	2.6042	-60.3594	-9.7942	-14.6953
630	TDQ.mol	512	-14.6840	3.6517	-72.3000	-9.9378	-14.6840

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
631	YSD.mol	695	-14.6803	3.2960	-19.2801	-10.5011	-14.6803
632	QQA.mol	316	-14.6609	2.2025	10.5137	-8.8932	-14.6609
633	TTD.mol	590	-14.6575	2.8000	-10.5951	-9.0188	-14.6575
634	NND.mol	217	-14.6184	2.7326	-40.3836	-9.7204	-14.6184
635	DTD.mol	52	-14.6037	2.4022	-10.8603	-10.0147	-14.6037
636	SNQ.mol	426	-14.5980	2.2059	-78.4199	-9.3148	-14.5980
637	SGN.mol	400	-14.5918	2.2000	-52.5942	-8.2157	-14.5918
638	TFQ.mol	532	-14.5859	0.0030	-48.7558	-8.6153	-14.5859
639	TQD.mol	566	-14.5848	3.3322	4.0047	-9.9129	-14.5848
640	NIQ.mol	211	-14.5722	1.6016	-46.1708	-8.4356	-14.5722
641	SVS.mol	476	-14.5628	0.6000	-33.7240	-8.0343	-14.5628
642	SES.mol	386	-14.5431	3.0330	-10.5765	-10.7243	-14.5431
643	YTW.mol	714	-14.5287	3.3995	-56.0296	-12.0516	-14.5287
644	SGQ.mol	401	-14.5283	2.8000	-69.3441	-8.2496	-14.5283
645	SDT.mol	374	-14.5255	0.8000	-30.1250	-9.1232	-14.5255
646	DDD.mol	4	-14.5090	3.2002	-45.0108	-12.5030	-14.5090
647	SSA.mol	445	-14.5074	0.6000	-43.3523	-9.6922	-14.5074
648	SWT.mol	484	-14.4966	2.8166	8.8102	-8.3070	-14.4966
649	TIY.mol	546	-14.4903	4.1501	-45.1612	-8.9689	-14.4903
650	SAQ.mol	361	-14.4702	2.2000	-63.2714	-9.1330	-14.4702
651	TAN.mol	501	-14.4332	2.2018	-45.5391	-8.2558	-14.4332
652	DTV.mol	57	-14.4183	2.0000	-5.6394	-10.1611	-14.4183
653	NDL.mol	185	-14.3845	0.6000	-35.5722	-10.7286	-14.3845
654	DTL.mol	55	-14.3843	2.4851	-63.5928	-9.7810	-14.3843
655	TIT.mol	545	-14.3760	0.8000	-52.1851	-7.4243	-14.3760
656	YYW.mol	735	-14.3736	1.8004	-19.7188	-8.9041	-14.3736
657	NSV.mol	244	-14.3694	2.2000	-33.0208	-8.7805	-14.3694
658	SAN.mol	360	-14.3604	1.8000	-63.1226	-9.0656	-14.3604
659	NTA.mol	246	-14.3531	1.2311	28.1350	-11.0985	-14.3531
660	TNF.mol	556	-14.3431	3.8955	-61.2839	-8.3173	-14.3431
661	ETL.mol	115	-14.3236	1.2000	-34.2824	-9.7977	-14.3236
662	SNY.mol	431	-14.3037	1.2000	-18.2522	-9.4740	-14.3037
663	TQW.mol	575	-14.3012	2.5420	-52.1611	-8.1138	-14.3012
664	EDA.mol	72	-14.2908	1.8000	-41.9364	-12.8888	-14.2908
665	TQQ.mol	572	-14.2878	2.3651	-17.8678	-9.5811	-14.2878
666	NNV.mol	224	-14.2781	1.2027	-8.9781	-8.2774	-14.2781
667	DNW.mol	34	-14.2536	3.2723	14.5738	-8.7360	-14.2536
668	TDT.mol	513	-14.2457	1.6078	-24.8917	-9.7680	-14.2457
669	DSE.mol	45	-14.2437	3.0005	-8.2014	-10.5455	-14.2437
670	TIQ.mol	544	-14.2412	2.2000	-11.5844	-9.3186	-14.2412
671	ESE.mol	105	-14.2193	2.6371	63.4144	-11.2502	-14.2193
672	TLD.mol	547	-14.2193	3.4000	-5.5777	-9.7443	-14.2193

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
673	DVD.mol	59	-14.1970	3.0030	-18.0663	-10.6866	-14.1970
674	GNS.mol	145	-14.1820	1.2000	-1.8727	-8.7524	-14.1820
675	SYT.mol	495	-14.1789	3.0113	-51.7323	-9.3620	-14.1789
676	DNL.mol	32	-14.1454	1.4327	73.5338	-10.7966	-14.1454
677	QSI.mol	329	-14.1296	2.0000	-53.4960	-8.3183	-14.1296
678	TEF.mol	520	-14.0716	3.2648	-38.4360	-9.2466	-14.0716
679	GDD.mol	127	-14.0667	3.3003	-6.4176	-11.0023	-14.0667
680	TEN.mol	523	-14.0547	1.0002	-60.9654	-9.4332	-14.0547
681	NEF.mol	193	-14.0457	3.0000	-63.7549	-9.7024	-14.0457
682	STT.mol	467	-14.0332	2.6823	-56.8896	-8.7985	-14.0332
683	SNS.mol	427	-14.0237	0.6334	-14.7724	-9.3274	-14.0237
684	QEQ.mol	292	-14.0070	2.2000	13.5518	-8.8834	-14.0070
685	NSA.mol	236	-14.0019	0.1084	-31.1594	-9.3063	-14.0019
686	TAT.mol	503	-13.9979	0.6000	61.9483	-9.0496	-13.9979
687	TQN.mol	571	-13.9684	3.8000	-19.4899	-9.0800	-13.9684
688	ESI.mol	107	-13.9670	3.2006	-2.1640	-10.1015	-13.9670
689	NEV.mol	198	-13.9523	3.0096	-45.4585	-10.1045	-13.9523
690	SNA.mol	419	-13.8952	1.2000	-3.4138	-7.9673	-13.8952
691	TTV.mol	598	-13.8895	1.0000	-29.1806	-9.1443	-13.8895
692	DED.mol	12	-13.8671	4.2033	-10.2799	-16.5548	-13.8671
693	SEI.mol	382	-13.8243	2.4147	-14.1867	-11.3476	-13.8243
694	SDV.mol	375	-13.8177	2.0000	-63.0719	-11.0470	-13.8177
695	NQA.mol	226	-13.8123	2.2375	-62.0347	-8.4630	-13.8123
696	TGT.mol	539	-13.7484	0.4051	-65.0204	-9.6169	-13.7484
697	QQL.mol	321	-13.7354	2.8000	-84.5491	-10.4556	-13.7354
698	GTD.mol	162	-13.6367	3.0000	-30.9473	-10.7992	-13.6367
699	SLS.mol	416	-13.6225	0.6132	-36.8606	-10.1687	-13.6225
700	SDI.mol	369	-13.5630	2.4012	-77.7679	-9.1071	-13.5630
701	DQA.mol	35	-13.5524	3.0014	-26.5859	-8.7814	-13.5524
702	SQL.mol	436	-13.5049	0.0000	-19.7871	-8.3004	-13.5049
703	NGQ.mol	207	-13.4980	1.8260	-68.8723	-10.1186	-13.4980
704	SQA.mol	432	-13.4664	0.0000	-60.6990	-8.5097	-13.4664
705	YNF.mol	675	-13.4636	2.3746	-69.4812	-9.2036	-13.4636
706	TVN.mol	603	-13.4250	2.5994	-62.2285	-8.0671	-13.4250
707	SAS.mol	362	-13.3831	1.2000	2.6471	-8.6706	-13.3831
708	SGT.mol	403	-13.3293	1.0000	-54.7183	-8.9999	-13.3293
709	ENA.mol	90	-13.2334	4.5834	-31.3817	-9.8999	-13.2334
710	EES.mol	83	-13.1900	1.0000	-33.2136	-16.8037	-13.1900
711	EEV.mol	84	-13.0721	3.2009	-24.7276	-10.1997	-13.0721
712	TQE.mol	567	-13.0621	1.6001	7.9783	-8.5835	-13.0621
713	NAQ.mol	179	-12.9897	2.2077	-43.7062	-10.0168	-12.9897
714	GSE.mol	156	-12.9604	2.4000	-21.4320	-10.7246	-12.9604

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
715	ETV.mol	116	-12.9543	0.6000	17.3358	-10.8437	-12.9543
716	QQD.mol	317	-12.9273	3.5766	-23.6815	-9.0759	-12.9273
717	DDL.mol	8	-12.8990	2.6493	-69.6184	-12.0820	-12.8990
718	NNE.mol	218	-12.8559	3.8718	-26.6296	-11.7508	-12.8559
719	DQI.mol	39	-12.8430	3.5793	-22.0365	-9.5225	-12.8430
720	QGE.mol	299	-12.8371	2.6000	-45.3313	-9.5317	-12.8371
721	SVQ.mol	475	-12.7782	3.6000	12.6429	-9.2736	-12.7782
722	GSN.mol	157	-12.7699	2.2000	-26.9251	-8.4963	-12.7699
723	GDQ.mol	130	-12.7240	1.4000	-56.1231	-8.6956	-12.7240
724	SAT.mol	363	-12.6053	0.6060	1.3982	-9.0588	-12.6053
725	SGS.mol	402	-12.5608	1.6000	-28.8017	-8.7857	-12.5608
726	TVD.mol	601	-12.5605	1.6001	-39.5957	-8.9981	-12.5605
727	TET.mol	525	-12.5444	2.1061	-52.7085	-10.0368	-12.5444
728	GDS.mol	131	-12.4659	1.4124	-10.3424	-9.5614	-12.4659
729	EIE.mol	88	-12.4120	2.8000	-25.9951	-9.0057	-12.4120
730	TDI.mol	509	-12.3765	2.4000	-20.1531	-10.3285	-12.3765
731	NEA.mol	190	-12.2467	2.2903	29.1463	-9.4438	-12.2467
732	SND.mol	420	-12.1788	2.9981	-7.4792	-9.3852	-12.1788
733	TEE.mol	519	-11.8491	2.2000	-49.1623	-10.3972	-11.8491
734	DNE.mol	29	-11.6864	1.8441	-37.5323	-10.3894	-11.6864
735	GDN.mol	129	-11.2401	1.9091	31.4670	-9.4107	-11.2401
736	YYD.mol	727	-11.0307	3.4483	-62.7477	-10.0121	-11.0307

Lampiran 8. Data screening 164 ligan target sisi ikatan SAM

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
1	TRY.mol	107	-29.7939	1.3263	-38.6701	-12.2701	-29.7939
2	HHD.mol	22	-28.2397	4.2659	-59.5130	-13.4826	-28.2397
3	DYI.mol	6	-28.0576	3.4062	-40.8373	-17.1737	-28.0576
4	KKF.mol	41	-27.7677	1.8000	-42.4343	-12.8234	-27.7677
5	YDY.mol	119	-27.6843	3.8233	29.8549	-14.4346	-27.6843
6	KGR.mol	40	-27.5002	3.7378	-7.0071	-13.8129	-27.5002
7	YTY.mol	154	-26.9914	3.7999	-29.8901	-13.1511	-26.9914
8	YWH.mol	157	-26.9854	1.8032	-80.1544	-16.1310	-26.9854
9	YYY.mol	164	-26.8857	1.1547	-10.2146	-12.7548	-26.8857
10	TWY.mol	109	-26.8704	2.9823	-49.0000	-10.5464	-26.8704
11	HNF.mol	26	-26.5684	2.8090	-70.8287	-11.2983	-26.5684
12	GRY.mol	17	-26.5606	2.4000	-26.0328	-14.2712	-26.5606
13	YNY.mol	139	-26.4991	0.0000	12.4780	-12.9865	-23.4991
14	YKV.mol	131	-26.4934	2.8367	-94.7719	-12.5204	-26.4934
15	HSH.mol	31	-26.4559	1.1990	-19.9042	-12.9751	-26.4559
16	YWR.mol	159	-26.4373	2.0000	11.5788	-11.6641	-26.4373
17	YYW.mol	163	-26.4148	1.2000	-51.5416	-10.9368	-26.4148
18	YDH.mol	114	-26.4076	2.9793	19.8547	-13.6541	-26.4076
19	YQV.mol	141	-26.3029	3.4204	-39.7120	-11.7270	-26.3029
20	SIK.mol	88	-26.2378	2.7160	-43.6499	-12.4432	-26.2378
21	YTK.mol	153	-26.1827	3.2100	-18.1869	-14.5335	-26.1827
22	RKH.mol	74	-26.1485	2.2000	-45.8764	-12.4135	-26.1485
23	YYL.mol	161	-26.0410	3.0000	-58.8952	-13.0589	-26.0410
24	TQY.mol	104	-25.9735	1.8000	122.945	-14.9868	-25.9735
25	YDD.mol	113	-25.9343	2.7988	-37.9789	-15.2624	-25.9343
26	YKY.mol	133	-25.8573	3.5760	-10.9265	-12.5354	-25.8573
27	YEA.mol	120	-25.6239	3.4372	-37.7135	-14.9497	-25.6239
28	YRK.mol	144	-25.4836	3.6016	-50.1611	-13.9140	-25.4836
29	KQD.mol	45	-25.4699	2.3999	-68.0649	-13.0845	-25.4699
30	DQW.mol	2	-25.2089	2.8000	-56.1329	-13.1342	-25.2089
31	YDQ.mol	117	-25.1331	3.2000	-76.4155	-14.2782	-25.1331
32	YLH.mol	136	-25.1316	2.0081	-76.8541	-11.8255	-25.1316
33	HYF.mol	37	-25.0316	3.5459	-34.7040	-12.9232	-25.0316
34	YHE.mol	125	-25.0189	3.9957	-68.7693	-13.3874	-25.0189
35	YGK.mol	124	-24.9936	3.2089	31.1516	-14.2969	-24.9936
36	YRF.mol	143	-24.8153	4.2298	-5.4625	-12.3840	-24.8153
37	NRR.mol	56	-24.6317	1.4002	-11.2588	-12.0094	-24.6317
38	HHW.mol	24	-24.6122	2.9377	-55.5148	-12.4954	-24.6122
39	YLD.mol	134	-24.3426	3.0542	-90.1105	-14.2114	-24.3426
40	YYF.mol	160	-24.3135	3.5275	-57.0494	-11.5751	-24.3135
41	TYF.mol	110	-24.3115	1.1086	-51.4882	-10.7945	-24.3115
42	YKK.mol	129	-24.0468	3.3706	-71.4615	-13.8442	-24.0468

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
43	ETF.mol	12	-24.0360	2.6536	-65.5674	-13.5484	-24.0360
44	DWD.mol	5	-24.0164	2.4000	-72.1489	-15.2054	-24.0164
45	DHE.mol	1	-23.9925	4.1437	-24.9640	-15.6967	-23.9925
46	KSW.mol	47	-23.9705	1.2001	-70.7697	-12.2858	-23.9705
47	NWH.mol	61	-23.8830	2.6781	11.7129	-10.8173	-23.8830
48	YVY.mol	156	-23.8495	2.4058	-84.5603	-11.9634	-23.8495
49	SQW.mol	91	-23.8109	2.2182	21.6814	-11.6228	-23.8109
50	YDN.mol	116	-23.7442	2.4023	-50.8326	-16.6399	-23.7442
51	YQW.mol	142	-23.6477	2.3965	-43.6102	-10.6665	-23.6477
52	YKE.mol	127	-23.5739	2.2543	-53.0674	-13.9727	-23.5739
53	TNW.mol	103	-23.5174	2.2004	-59.5580	-13.1024	-23.5174
54	YRL.mol	145	-23.4930	3.0012	-39.8611	-11.6873	-23.4930
55	YWN.mol	158	-23.4657	1.7825	-10.8472	-12.0282	-23.4657
56	GRD.mol	15	-23.4245	3.8341	-49.8643	-13.6840	-23.4245
57	QEH.mol	62	-23.3431	2.4000	7.7194	-13.8573	-23.3431
58	SHF.mol	86	-23.3168	1.1620	-52.1657	-12.1583	-23.3168
59	YRQ.mol	146	-23.3143	2.6000	-72.9637	-13.4385	-23.3143
60	RQV.mol	77	-23.3052	3.0065	-73.5890	-13.6195	-23.3052
61	SFR.mol	85	-23.3040	1.4265	-74.0695	-13.1168	-23.3040
62	YTH.mol	152	-23.1849	1.0000	-9.3743	-12.3367	-23.1849
63	YKL.mol	130	-23.1126	4.0155	3.1601	-14.3351	-23.1126
64	ERE.mol	10	-23.0802	2.8000	-53.7635	-15.7322	-23.0802
65	YSL.mol	148	-23.0261	2.9384	-71.8418	-11.7364	-23.0261
66	NWE.mol	60	-23.0148	2.0000	-39.2985	-12.4961	-23.0148
67	HFD.mol	20	-22.9801	3.0009	-79.4971	-13.2493	-22.9801
68	YKW.mol	132	-22.9721	3.2548	-12.0675	-11.2551	-22.9721
69	QQH.mol	67	-22.8620	2.8000	-46.4689	-13.5153	-22.8620
70	HQD.mol	27	-22.8164	2.1999	-44.2573	-15.5981	-22.8164
71	YNL.mol	138	-22.7770	3.0000	-6.6650	-12.7277	-22.7770
72	YSF.mol	147	-22.6203	2.8966	-67.2540	-10.9113	-22.6203
73	SEW.mol	84	-22.5958	3.9791	-49.4822	-16.7238	-22.5958
74	RYD.mol	83	-22.3550	2.4190	-40.3113	-14.6059	-22.3550
75	NLH.mol	52	-22.2964	3.3999	-23.0973	-11.2385	-22.2964
76	YTF.mol	151	-22.2222	2.3735	-18.4076	-14.1888	-22.2222
77	QEW.mol	63	-22.2150	3.7600	-69.8617	-14.3176	-22.2150
78	DRI.mol	3	-22.1973	2.9749	-48.4373	-12.8672	-22.1973
79	KRH.mol	46	-22.1920	2.2190	-21.7178	-15.1557	-22.1920
80	YYN.mol	162	-22.0227	4.2002	-13.4852	-13.7126	-22.0227
81	SYH.mol	95	-22.0109	3.6937	-98.8462	-11.8185	-22.0109
82	GER.mol	14	-21.9794	2.6000	-34.6062	-15.4541	-21.9794
83	YNI.mol	137	-21.9636	1.7737	-73.3197	-12.1433	-21.9636
84	KNH.mol	44	-21.9599	3.7821	-37.5335	-12.5034	-21.9599

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
85	YFN.mol	122	-21.7130	2.0557	-35.1326	-13.2035	-21.7130
86	SRW.mol	92	-21.6357	2.0000	5.6438	-12.3436	-31.6357
87	NGN.mol	50	-21.5450	0.7348	-6.6656	-17.0439	-21.5450
88	YLE.mol	135	-21.4857	1.4000	7.3552	-13.8512	-21.4857
89	YQL.mol	140	-21.4406	2.2359	-79.3268	-11.0954	-21.4406
90	QNW.mol	65	-21.3982	2.2000	-49.8992	-11.5839	-21.3982
91	SQK.mol	90	-21.3109	2.6000	-33.2766	-13.4633	-21.3109
92	HTW.mol	35	-21.2413	0.6338	-85.2794	-11.6304	-21.2413
93	HSL.mol	32	-21.2305	3.0119	-62.0744	-11.3875	-21.2305
94	DSF.mol	4	-21.1681	3.6215	-57.6065	-12.6105	-21.1681
95	TEL.mol	98	-21.0273	2.2695	-17.6471	-12.2504	-21.0273
96	YEL.mol	121	-20.7345	2.2501	-40.5492	-15.4079	-20.7345
97	QQA.mol	66	-20.7288	2.9189	-41.4828	-12.4177	-20.7288
98	YDL.mol	115	-20.7216	3.8078	-61.9822	-14.4474	-20.7216
99	REL.mol	72	-20.6285	2.9969	-86.6210	-11.9660	-20.6285
100	GYG.mol	18	-20.6101	4.0014	-39.3881	-11.7597	-20.6101
101	THF.mol	99	-20.5974	3.8176	7.5307	-13.2244	-20.5974
102	YSY.mol	150	-20.4055	3.8544	-39.3965	-12.4040	-20.4055
103	HVE.mol	36	-20.4016	3.2007	-49.1148	-16.8740	-20.4016
104	HSF.mol	30	-20.3225	2.3922	-48.6377	-12.5687	-20.3225
105	KDI.mol	39	-20.3189	3.1986	-22.5482	-13.0711	-20.3189
106	GDH.mol	13	-20.2018	3.2005	22.5831	-15.3110	-20.2018
107	EKF.mol	8	-20.1665	2.3361	-22.4787	-14.0609	-20.1665
108	SHL.mol	87	-20.1344	3.0658	-89.3754	-11.9560	-20.1344
109	ERA.mol	9	-20.1201	2.8000	-89.4881	-15.8297	-20.1201
110	HHA.mol	21	-20.1161	1.8133	-52.9025	-11.3954	-20.1161
111	SYT.mol	96	-20.1159	1.2000	-84.0343	-11.8700	-20.1159
112	ETE.mol	11	-20.1018	1.6000	-70.6314	-14.6184	-20.1018
113	YSQ.mol	149	-20.0784	2.2000	-54.3044	-11.5415	-20.0784
114	RWD.mol	82	-20.0543	2.4151	-52.4576	-13.0421	-20.0543
115	HTF.mol	34	-19.9566	3.8295	15.1848	-11.3780	-19.9566
116	RVD.mol	81	-19.9402	3.2162	-69.8178	-13.5910	-19.9402
117	RTW.mol	80	-19.8338	1.9999	113.6150	-12.9096	-19.8338
118	RKF.mol	73	-19.7836	3.9785	-74.8259	-16.4214	-29.7836
119	QWD.mol	71	-19.7718	3.3659	-17.4924	-12.3779	-19.7718
120	RTI.mol	79	-19.7172	1.7993	-29.4009	-12.5849	-19.7172
121	YDW.mol	118	-19.7023	3.7991	-55.7658	-12.0206	-19.7023
122	QNA.mol	64	-19.6896	0.6000	-74.1218	-11.9007	-19.6896
123	EHE.mol	7	-19.6199	4.2000	-25.4131	-15.0710	-19.6199
124	YAY.mol	112	-19.4828	3.4848	37.9445	-11.8888	-19.4828
125	QRQ.mol	68	-19.3143	3.8424	-62.6131	-13.0536	-19.3143
126	NRW.mol	58	-19.2990	2.2886	-91.1487	-11.6359	-19.2990

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
127	HRD.mol	28	-19.2596	2.5948	-66.5535	-15.5387	-19.2596
128	NFQ.mol	49	-19.1690	1.8000	-60.4695	-12.0576	-19.1690
129	KDH.mol	38	-19.1682	2.7774	-103.320	-16.0446	-19.1682
130	YFR.mol	123	-18.9384	3.8648	-40.6637	-11.7541	-18.9384
131	TRV.mol	106	-18.8913	2.8542	-59.9881	-13.2261	-18.8913
132	QRW.mol	69	-18.7514	4.0328	-14.9833	-14.3710	-18.7514
133	HRW.mol	29	-18.7364	3.5999	12.3552	-14.0335	-18.7364
134	YAQ.mol	111	-18.6824	2.2066	-30.9302	-12.4493	-18.6824
135	KWK.mol	48	-18.6683	3.0000	-31.7150	-14.5130	-18.6683
136	SRY.mol	93	-18.3626	1.8003	-76.0885	-12.9337	-18.3626
137	TRL.mol	105	-18.3369	2.4853	-83.3133	-13.0454	-18.3369
138	RKW.mol	75	-18.3321	4.2522	-66.7322	-13.1431	-18.3321
139	YKH.mol	128	-18.2544	4.1767	-78.0712	-12.5455	-18.2544
140	TNL.mol	102	-18.0285	2.2058	-72.9776	-13.4142	-18.0285
141	KNE.mol	43	-17.9671	3.7656	-20.2437	-15.5437	-17.9671
142	RRV.mol	78	-17.9339	1.2761	-97.5068	-13.7504	-17.9339
143	YVN.mol	155	-17.9189	3.6029	-67.4171	-11.4997	-17.9189
144	TVR.mol	108	-17.8116	2.8000	-43.5652	-12.3802	-17.8116
145	NQH.mol	54	-17.7867	2.8027	-63.7139	-10.5698	-17.7867
146	HSV.mol	33	-17.7843	3.1977	-78.6059	-12.1609	-17.7843
147	RNH.mol	76	-17.7352	3.8000	-68.1855	-12.4278	-17.7352
148	YKA.mol	126	-17.7166	3.7181	-70.3104	-13.8013	-17.7166
149	HHE.mol	23	-17.4312	2.9338	-113.382	-18.8144	-17.4312
150	NRV.mol	57	-17.2939	3.8062	-12.6011	-11.2284	-17.2939
151	GRK.mol	16	-17.2899	3.8000	6.1526	-15.1265	-17.2899
152	HAH.mol	19	-17.1411	2.4190	-55.4205	-11.0829	-17.1411
153	SWR.mol	94	-17.1134	2.6000	-53.9983	-15.4363	-17.1134
154	HKL.mol	25	-17.0206	3.3290	-62.0319	-13.6266	-17.0206
155	NTN.mol	59	-16.9235	2.3045	-31.0831	-16.3677	-16.9235
156	NQA.mol	53	-16.8942	2.8014	-8.5650	-11.2271	-16.8942
157	THL.mol	100	-16.6195	2.3909	-60.1555	-11.5153	-16.6195
158	TKY.mol	101	-16.5032	2.6000	-116.889	-15.5144	-16.5032
159	SIY.mol	89	-16.1726	2.0960	-43.9607	-11.9929	-16.1726
160	QSV.mol	70	-15.9098	3.6826	-59.3839	-11.9090	-15.9098
161	TAR.mol	97	-14.8152	2.6000	-35.9456	-12.3677	-14.8152
162	NHR.mol	51	-13.6436	4.1351	-71.2786	-12.8597	-13.6436
163	KKV.mol	42	-13.1788	4.0000	7.4406	-13.3251	-13.1788
164	NRA.mol	55	-12.8546	3.4599	-56.1638	-12.2131	-12.8546

Lampiran 9. Data screening 74 ligan target sisi ikatan RNA-cap

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
1	SYX.mol	39	-22.0441	3.1836	-73.6615	-9.7127	-22.0441
3	YEF.mol	58	-20.6697	2.5895	1.9400	-11.0360	-20.6697
4	YWY.mol	72	-20.2323	2.3813	-37.8493	-9.0383	-20.2323
5	YDI.mol	56	-19.5276	1.8281	-53.3816	-11.9800	-19.5276
6	YQN.mol	67	-19.4995	2.3878	-34.7501	-10.1135	-19.4995
7	SYS.mol	37	-19.4032	3.7823	-56.6255	-10.1677	-19.4032
2	EYA.mol	11	-19.2919	3.7505	-56.7882	-10.7145	-19.2919
8	YIN.mol	63	-19.1855	1.9676	-40.5032	-8.4603	-19.1855
9	YNQ.mol	66	-19.1079	1.7522	-16.8562	-9.5091	-19.1079
10	YYY.mol	74	-19.0824	2.7024	-64.3208	-9.2042	-19.0824
11	YAY.mol	52	-19.0689	3.3989	-41.8838	-10.8953	-19.0689
12	QFQ.mol	26	-18.9298	2.9187	-48.8777	-8.1447	-18.9298
13	DWE.mol	7	-18.9210	1.2000	-91.4318	-14.0165	-18.9210
14	YWN.mol	71	-18.4888	1.7151	18.9453	-9.6442	-14.4888
15	DEE.mol	2	-18.4262	1.8000	-13.7716	-13.1613	-18.4262
16	DDF.mol	1	-18.4160	2.5827	7.7693	-10.2881	-18.4160
17	YFY.mol	61	-18.2825	3.9621	-46.6609	-8.4564	-18.2825
18	SFD.mol	30	-18.0387	2.5750	-59.5574	-10.7362	-18.0387
19	GYQ.mol	18	-17.7502	4.5100	-51.7387	-12.6061	-17.7502
20	TYN.mol	48	-17.6083	1.6543	-66.2424	-10.0599	-17.6083
21	YDF.mol	55	-17.4450	3.2693	-70.0049	-11.9144	-17.4450
22	YAN.mol	50	-17.2464	3.3575	-37.9925	-9.8456	-17.2464
23	YTY.mol	69	-16.9497	3.7984	-75.5071	-10.0732	-16.9497
24	GYX.mol	20	-16.7229	3.4000	-59.3585	-12.1476	-16.7229
25	SYW.mol	38	-16.6861	3.8093	-54.6820	-9.1040	-16.6861
26	SSV.mol	34	-16.6352	1.0000	-49.4200	-9.8494	-16.6352
27	YYA.mol	73	-16.6003	1.9426	-41.7339	-10.7423	-16.6003
28	NTD.mol	21	-16.4245	2.4000	-51.3781	-11.8532	-16.4245
29	NYE.mol	23	-16.3988	3.6981	-15.9938	-10.4025	-16.3988
30	NYW.mol	25	-16.2349	2.4000	-35.1197	-8.4073	-16.2349
31	TTE.mol	45	-16.1390	2.2684	-15.1599	-11.4674	-16.1390
32	YDD.mol	53	-16.1025	3.5167	67.5745	-14.9255	-16.1025
33	GYD.mol	17	-16.0779	1.0256	-39.0198	-10.2052	-16.0779
34	YIY.mol	64	-16.0489	3.9235	-59.6155	-11.2732	-16.0489
35	SSL.mol	33	-15.8696	1.6000	-60.3098	-8.8173	-15.8696
36	DYE.mol	8	-15.7742	4.2687	-50.1009	-12.7844	-15.7742
37	YLD.mol	65	-15.7636	3.2753	-59.7953	-9.4556	-15.7636
38	YSE.mol	68	-15.6047	2.5711	-32.8845	-12.5518	-15.6047
39	TDF.mol	41	-15.5991	3.4006	-72.4981	-10.3449	-15.5991
40	GQQ.mol	14	-15.5264	1.8003	-50.8371	-9.2249	-15.5264
41	YDE.mol	54	-15.3903	4.6383	-0.0037	-11.1697	-15.3903
42	TTY.mol	46	-15.3211	3.2000	-47.2433	-9.4625	-15.3211

(lanjutan)

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
43	YGE.mol	62	-15.2917	2.6137	-26.8623	-9.6906	-15.2917
44	SSW.mol	35	-15.2817	0.6007	-79.9586	-9.8340	-15.2817
45	YEY.mol	60	-15.2379	3.8032	-51.7050	-9.3702	-15.2379
46	SYF.mol	36	-15.1564	3.6217	-1.7874	-8.8947	-15.1564
47	YWE.mol	70	-15.0827	2.1994	-16.2215	-9.6924	-15.0827
48	GYT.mol	19	-15.0694	2.3860	-63.3135	-9.6820	-15.0694
49	YEW.mol	59	-14.8872	1.8477	-33.7386	-9.0208	-14.8872
50	NWE.mol	22	-14.8747	1.8000	-52.3129	-10.4142	-14.8747
51	SNE.mol	32	-14.8743	2.4161	13.2057	-9.8972	-14.8743
52	TNY.mol	43	-14.7697	3.6350	-50.0907	-9.1191	-14.7697
53	YAQ.mol	51	-14.5947	3.5922	-44.2384	-10.1719	-14.5947
54	EYF.mol	12	-14.5181	2.4009	-52.4227	-10.9614	-14.5181
55	TQF.mol	44	-14.2082	1.2627	-46.0750	-8.9120	-14.2082
57	DVE.mol	6	-13.8155	2.8000	-39.5364	-10.6797	-13.8155
58	SAE.mol	28	-13.7307	1.4000	-54.5501	-10.6973	-13.7307
59	TFT.mol	42	-13.6779	3.2061	-25.2017	-11.9585	-13.6779
60	TAE.mol	40	-13.5023	2.0000	-23.0163	-10.3625	-13.5023
61	GQY.mol	16	-13.4969	3.2922	-24.3329	-9.6355	-13.4969
62	YEE.mol	57	-13.4262	2.9435	-52.3457	-11.8738	-13.4262
63	ENE.mol	10	-13.3772	3.4001	-12.6892	-12.6712	-13.3772
64	SDS.mol	29	-13.2370	1.6000	-39.1993	-10.3887	-13.2370
65	DTE.mol	5	-13.0181	2.0000	-47.8127	-10.5857	-13.0181
66	DSW.mol	4	-12.8492	3.4009	-1.4485	-9.7201	-12.8492
67	SLN.mol	31	-12.1717	2.2755	-59.0507	-11.6838	-12.1717
68	NYI.mol	24	-11.8705	1.0198	-45.5298	-8.9466	-11.8705
69	GQT.mol	15	-11.8580	1.0000	-63.3745	-9.2204	-11.8580
70	DID.mol	3	-11.4238	2.4000	-51.1088	-10.9113	-11.4238
71	GND.mol	13	-11.3687	1.0499	-33.0903	-11.4250	-11.3687
72	EGE.mol	9	-11.3127	4.4000	-28.4443	-11.1805	-11.3127
73	TVE.mol	47	-11.2033	2.6000	-38.1866	-8.8593	-11.2033
74	QNE.mol	27	-10.2062	3.9018	-33.5029	-9.9142	-10.2062

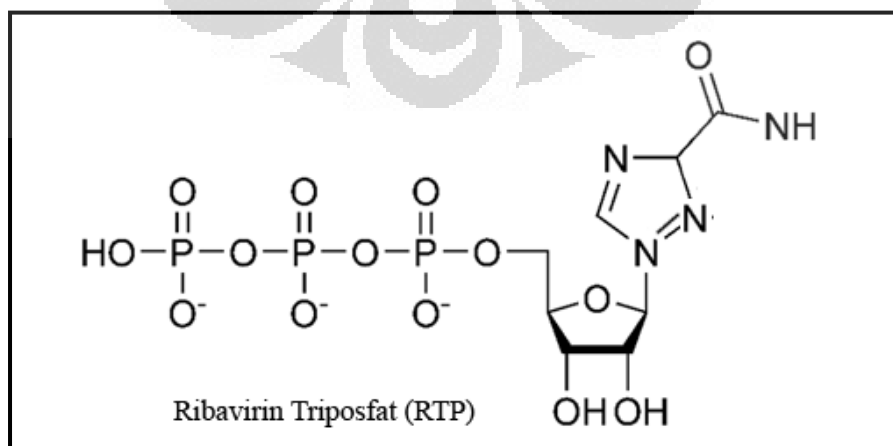
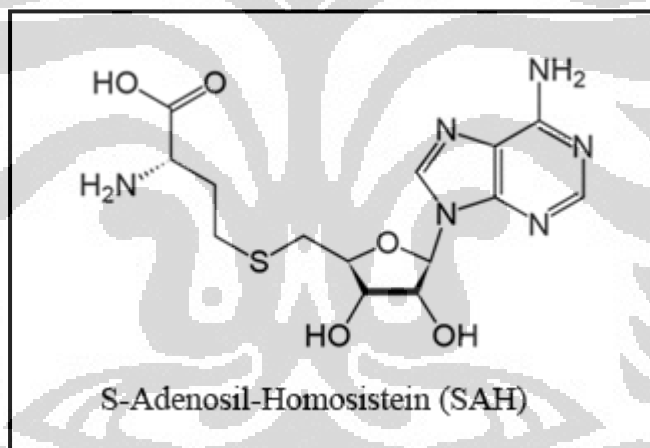
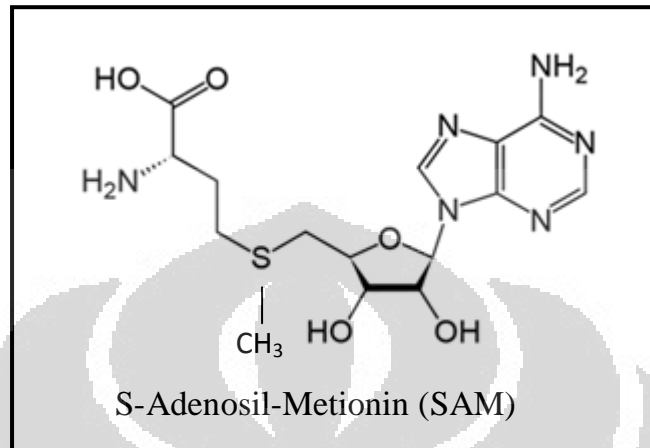
Lampiran 10. Data *screening* 15 ligan dan standar target sisi ikatan SAM

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
1	YWH.mol	13	-29.2978	2.4030	-67.7995	-13.7504	-29.2978
2	TWY.mol	15	-27.4054	4.0351	-49.6330	-13.0964	-27.4054
3	TRY.mol	12	-26.9385	3.1984	-85.3812	-12.6403	-26.9385
4	YDH.mol	8	-26.6169	2.4865	-5.4737	-12.2504	-26.6169
5	YYW.mol	9	-26.2817	4.2924	-74.5180	-13.7555	-26.2817
6	YNY.mol	11	-26.1229	3.9943	-37.6073	-15.4544	-26.1229
7	YTY.mol	7	-24.7259	4.0802	-84.9291	-13.5656	-24.7259
8	HHD.mol	2	-24.0006	3.5628	-61.9250	-15.6940	-24.0006
9	HSH.mol	4	-23.7000	0.6000	-49.3271	-15.9079	-23.7000
10	HNF.mol	3	-23.6085	1.8554	-83.5919	-11.4822	-23.6085
11	YKV.mol	10	-22.9521	1.5075	-12.6781	-12.8337	-22.9521
12	DYI.mol	1	-22.8299	2.5433	-72.5464	-13.1294	-22.8299
13	YWR.mol	14	-22.4453	1.7944	-25.6735	-11.8096	-22.4453
14	KKF.mol	6	-22.1132	2.3149	-56.4670	-13.1669	-22.1132
15	standar SAH.mol	16	-15.4053	1.6000	-75.5960	-12.7994	-15.4053
16	KGR.mol	5	-14.1259	3.9825	-78.1411	-13.5515	-14.1259

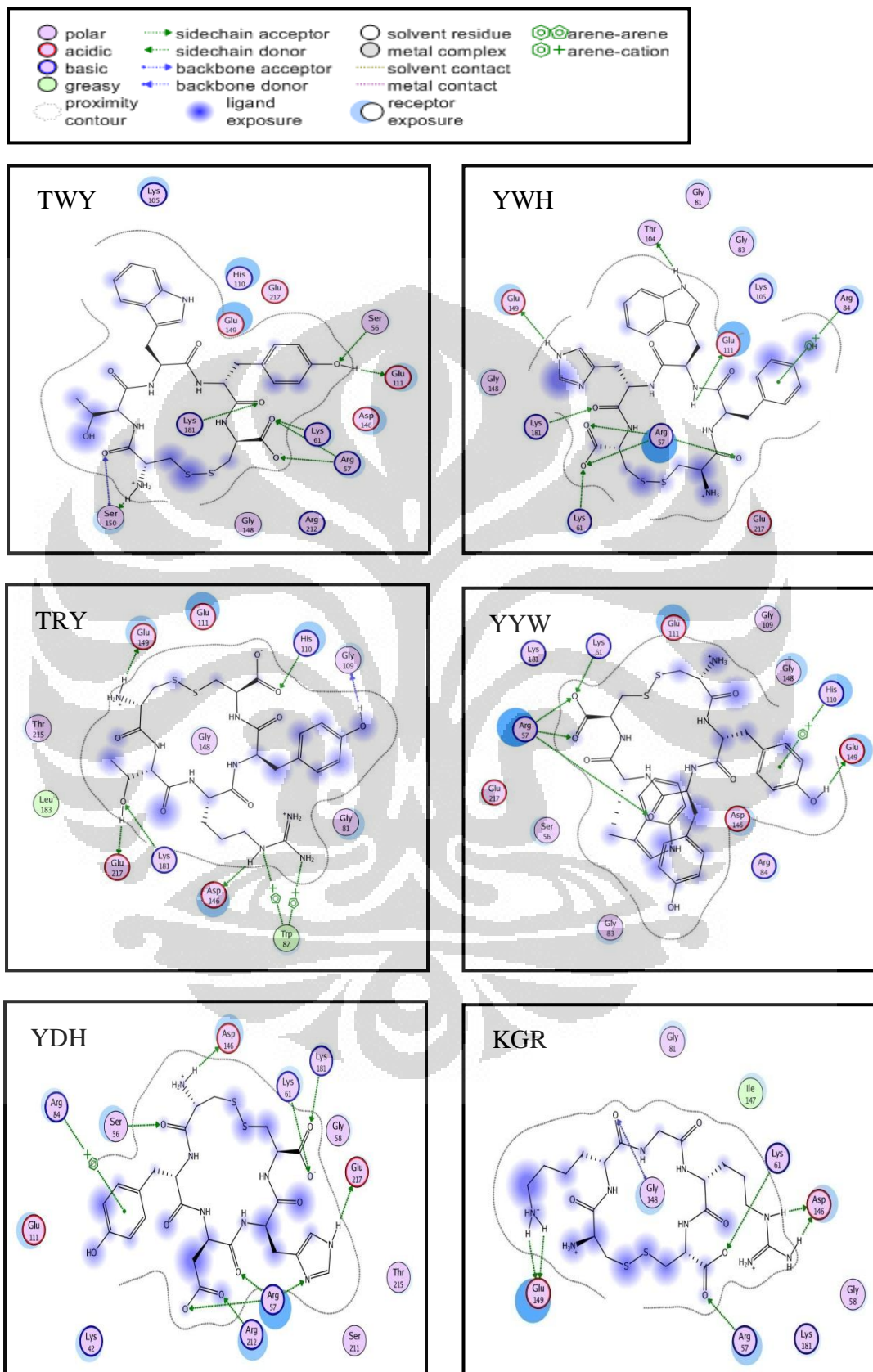
Lampiran 11. Data *screening* 15 ligan dan standar target sisi ikatan RNA-cap

	mol	mseq	S	E_conf	E_place	E_score	E_refine
1	YEF.mol	11	-22.8976	2.5297	-70.2918	-10.2127	-22.8976
2	YDF.mol	10	-22.5276	2.6178	-48.0382	-11.7123	-22.5276
3	TNY.mol	7	-21.4686	0.7132	-5.6039	-9.3585	-21.4686
4	YIN.mol	12	-21.2955	1.1890	-49.2118	-10.7137	-21.2955
5	YQN.mol	13	-20.9224	2.9874	-9.9307	-11.0504	-20.9224
6	YWY.mol	15	-20.8638	3.2858	-2.2886	-9.1513	-20.8638
7	NYW.mol	3	-20.4447	3.4022	-63.0221	-9.3187	-20.4447
8	SYS.mol	5	-18.2475	2.7962	-28.2011	-10.7720	-18.2475
9	SFD.mol	4	-18.1968	2.3760	-42.4033	-11.1496	-18.1968
10	YAY.mol	9	-17.2963	3.6537	-19.7870	-9.8575	-17.2963
11	SYY.mol	6	-16.9041	3.2430	-39.8459	-9.5708	-16.9041
12	YWN.mol	14	-16.2189	1.6776	-29.8562	-11.0411	-16.2189
13	DEE.mol	2	-16.1039	1.4000	-21.2996	-11.7938	-16.1039
14	TTE.mol	8	-14.9962	1.4000	-42.4035	-11.5084	-14.9962
15	DDF.mol	1	-13.7663	3.7829	-26.9249	-11.0330	-13.7663
16	standar RTP.mol	16	-12.4885	3.0426	-68.5037	-12.7960	-12.4885

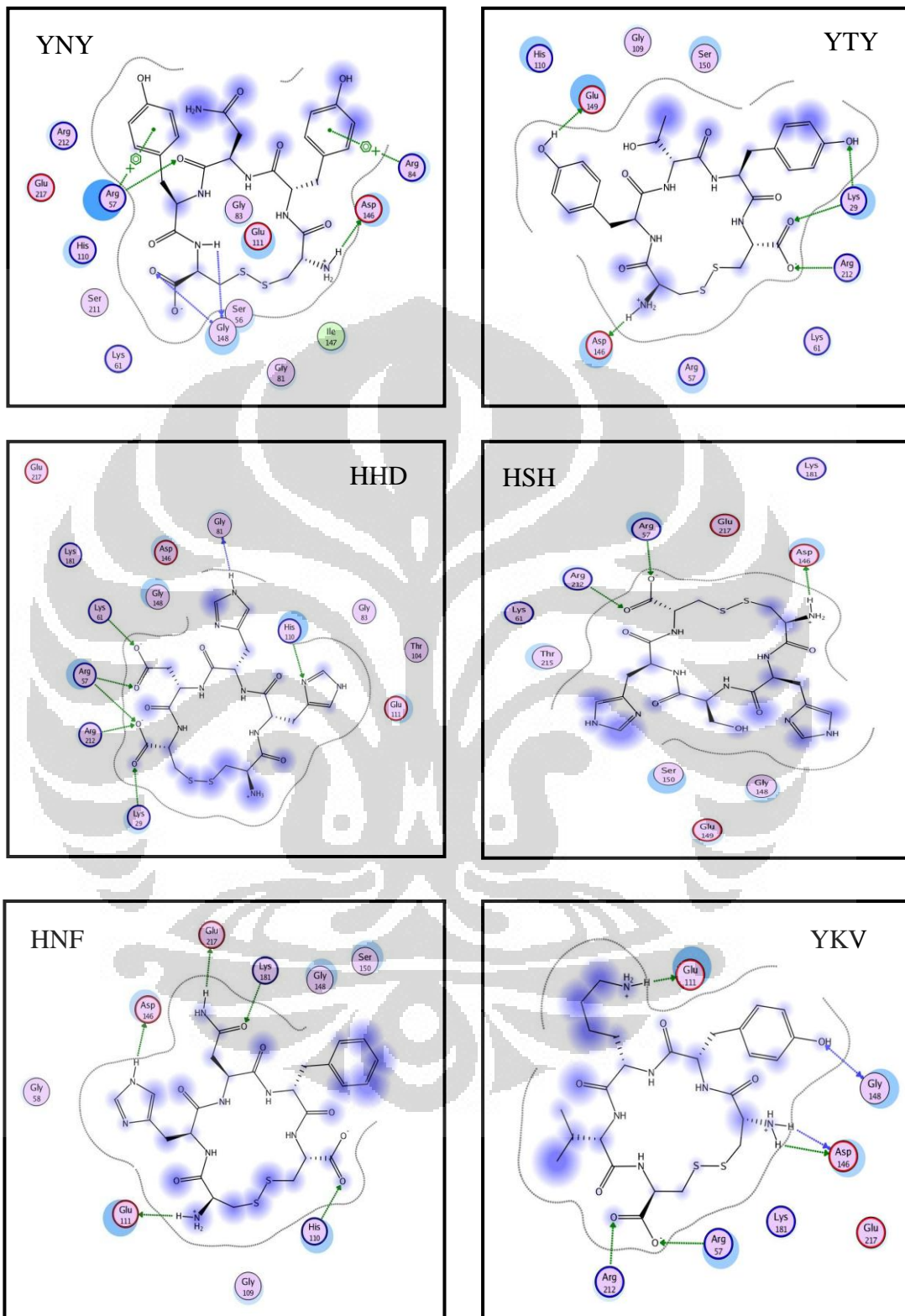
Lampiran 12. Ligan standar S-Adenosil-Metionin (SAM), S-Adenosil-Homosistein (SAH) dan ribavirin triposfat (RTP)



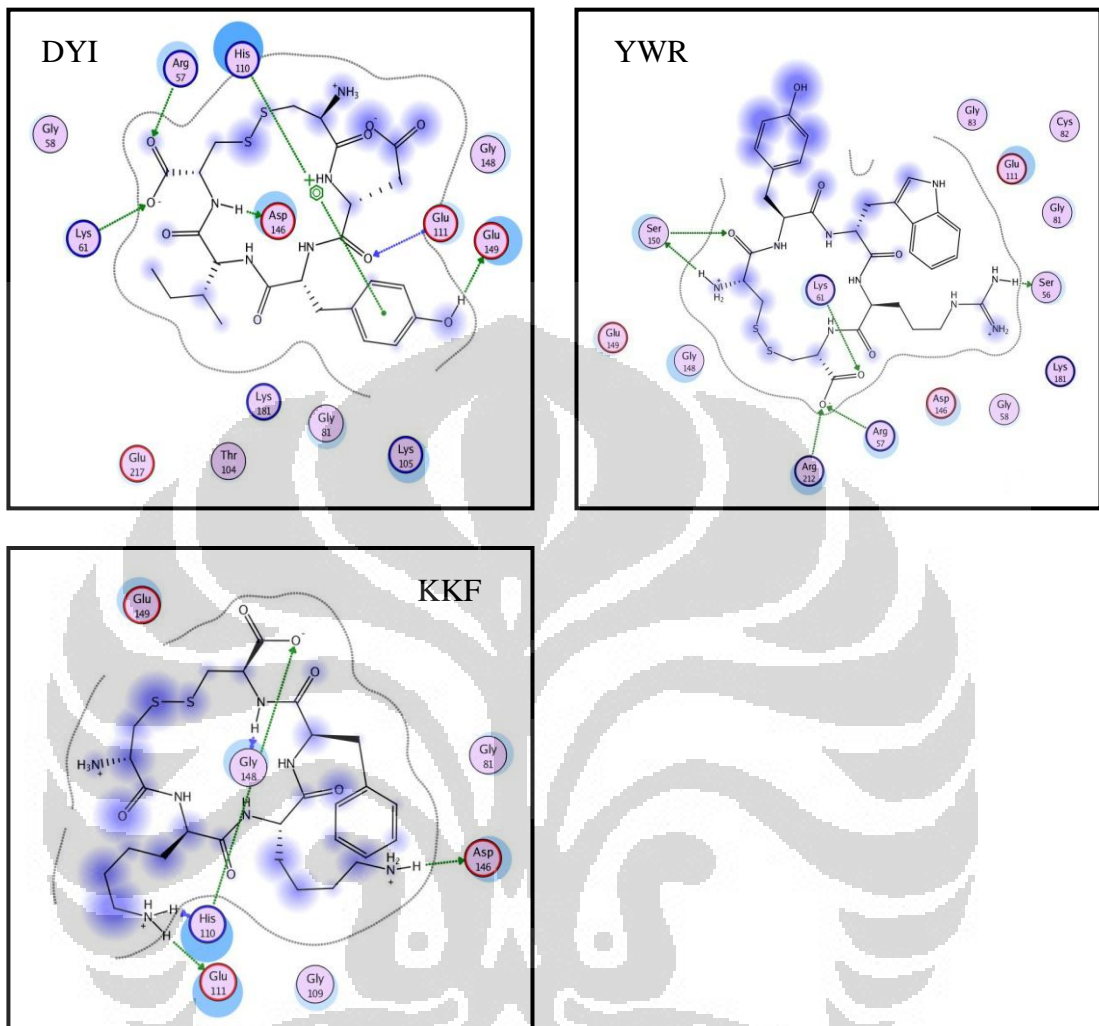
Lampiran 13. Interaksi 15 ligan terbaik target sisi ikatan SAM



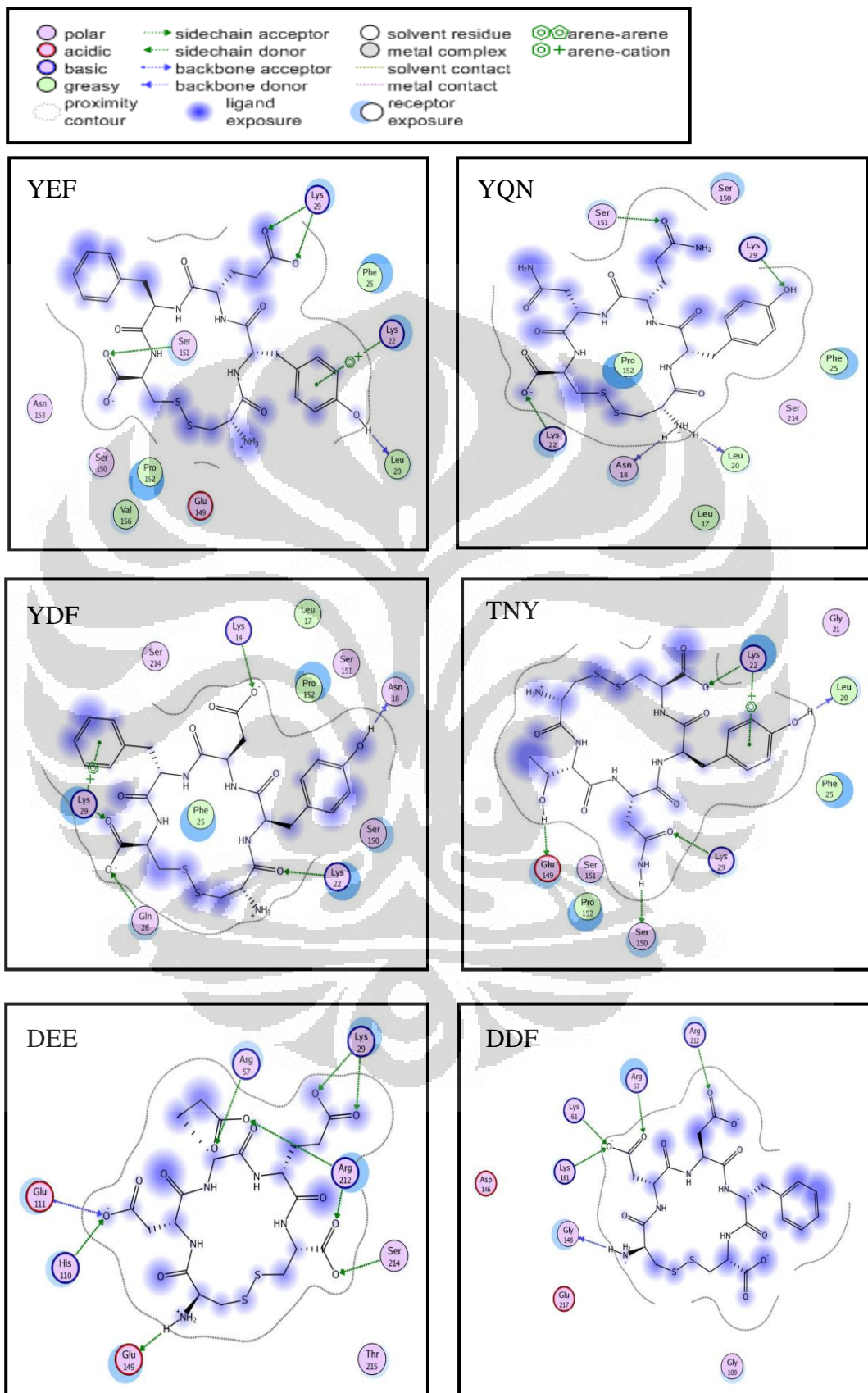
(lanjutan)



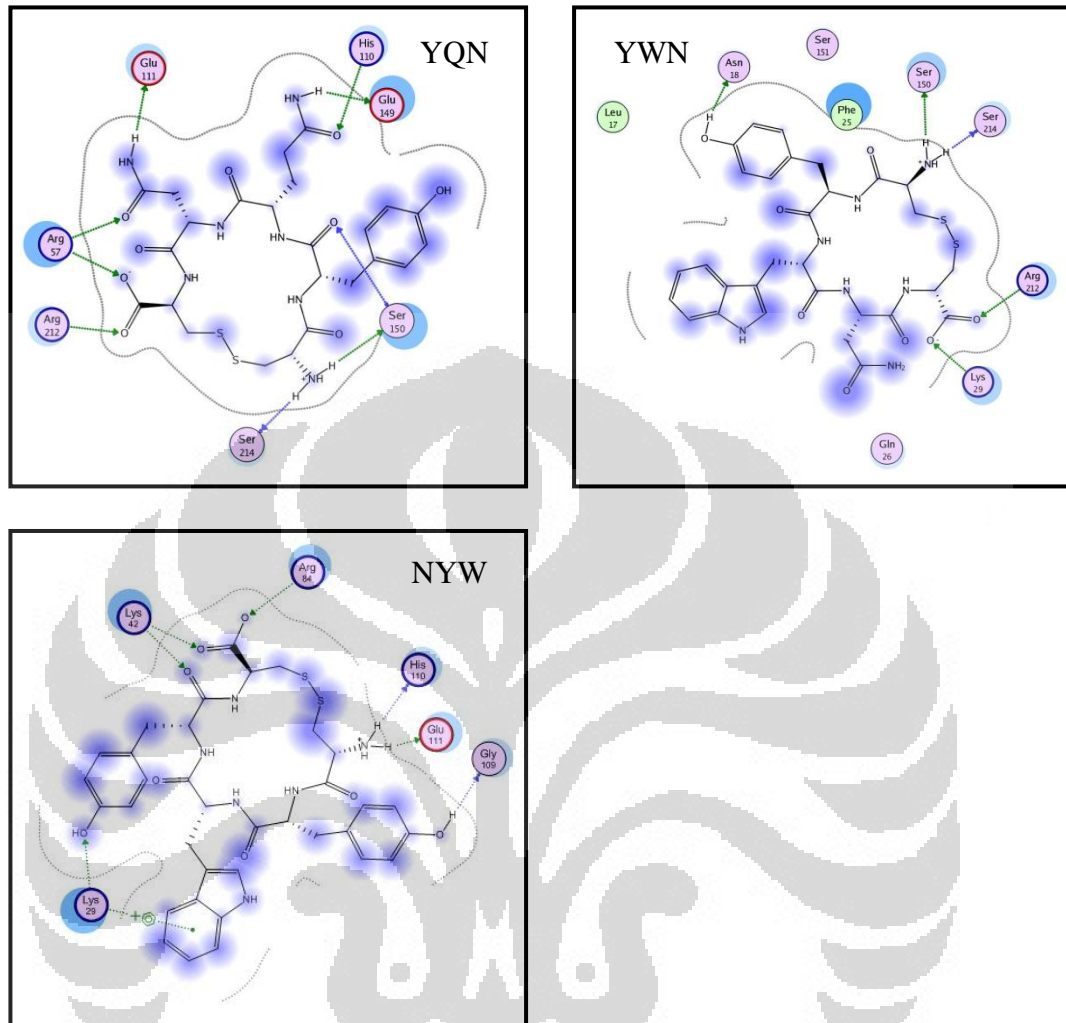
(lanjutan)



Lampiran 14. Interaksi 15 ligan terbaik target sisi ikatan RNA-cap



(lanjutan)



Lampiran 15. Data interaksi ligan TWY dengan sisi ikatan SAM

Interaction Data

Ligand: :
 Receptor: 2P41: VIRAL PROTEIN, TRANSFERASE

Heavy atoms: ligand = 46, receptor = 2027

ligand	receptor	residue	chain	type	score	distance
O 4059	OG 813	SER 56	2P41 1	H-don	35.1%	2.90
H 4105	OE 1656	GLU 111	2P41 1	H-don	23.8%	1.52
H 4140	OG 2259	SER 150	2P41 1	H-don	10.9%	2.55
O 4059	OG 813	SER 56	2P41 1	H-acc	35.1%	2.90
O 4081	NH 833	ARG 57	2P41 1	H-acc	27.4%	2.52
O 4082	NH 836	ARG 57	2P41 1	H-acc	36.7%	2.78
O 4082	NZ 885	LYS 61	2P41 1	H-acc	70.5%	2.62
O 4088	N 2250	SER 150	2P41 1	H-acc	33.4%	2.92
O 4068	NZ 2748	LYS 181	2P41 1	H-acc	38.7%	2.58
O 4059	CB 810	SER 56	2P41 1	weak	0.0%	3.47
C 4063	OG 813	SER 56	2P41 1	weak	0.0%	3.76
C 4065	OG 813	SER 56	2P41 1	weak	0.0%	3.83
C 4079	NH 833	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.26
O 4081	NH 836	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.11
O 4081	CZ 832	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.22
O 4082	NH 833	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.52
O 4082	CZ 832	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.57
C 4083	NH 836	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.28
C 4083	NH 833	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.19
C 4083	CZ 832	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.69
C 4084	NH 833	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.20
O 4068	NZ 885	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	4.42
C 4069	NZ 885	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	4.32
N 4080	NZ 885	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	3.81
O 4082	CE 882	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	3.37
O 4082	CD 879	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	3.94
C 4083	NZ 885	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	3.57
C 4083	CE 882	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	4.50
C 4084	NZ 885	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	3.86
C 4103	CG 1577	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	3.90
C 4103	CB 1574	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	3.70
C 4104	CB 1574	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	3.91
C 4072	CE 1639	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	3.95
C 4072	ND 1635	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	3.82
C 4102	CE 1639	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	3.89
C 4102	ND 1635	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	3.76
C 4103	NE 1641	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	4.26
C 4103	CE 1639	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	3.64
C 4103	CD 1637	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	4.30
C 4103	ND 1635	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	3.15
C 4103	CG 1634	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	3.67
C 4103	CB 1631	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	4.20
C 4104	ND 1635	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	3.64
C 4104	CG 1634	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	3.99
C 4104	CB 1631	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	4.02
O 4059	CD 1655	GLU 111	2P41 1	weak	0.0%	3.75
C 4061	OE 1656	GLU 111	2P41 1	weak	0.0%	3.33
C 4061	CD 1655	GLU 111	2P41 1	weak	0.0%	4.11
C 4063	OE 1656	GLU 111	2P41 1	weak	0.0%	3.32
C 4062	OD 2208	ASP 146	2P41 1	weak	0.0%	3.94
C 4064	OD 2208	ASP 146	2P41 1	weak	0.0%	3.49
C 4066	OD 2208	ASP 146	2P41 1	weak	0.0%	3.33

(lanjutan)

C	4066	OD	2207	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	4.42
C	4066	CG	2206	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.85
C	4066	CB	2203	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	4.50
C	4066	O	2202	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	4.28
N	4067	O	2202	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.99
O	4068	O	2202	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	4.17
O	4068	O	2234	GLY	148	2P41	1	weak	0.0%	4.20
N	4087	O	2234	GLY	148	2P41	1	weak	0.0%	4.09
O	4088	O	2234	GLY	148	2P41	1	weak	0.0%	4.48
C	4097	O	2234	GLY	148	2P41	1	weak	0.0%	4.15
C	4097	N	2228	GLY	148	2P41	1	weak	0.0%	4.30
N	4098	O	2234	GLY	148	2P41	1	weak	0.0%	4.07
C	4099	O	2234	GLY	148	2P41	1	weak	0.0%	3.44
C	4099	C	2233	GLY	148	2P41	1	weak	0.0%	4.20
O	4100	O	2234	GLY	148	2P41	1	weak	0.0%	4.05
C	4101	O	2234	GLY	148	2P41	1	weak	0.0%	3.87
C	4077	CG	2244	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	4.36
O	4088	CG	2244	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	3.55
O	4088	CB	2241	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	3.89
O	4088	C	2239	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	3.65
O	4088	CA	2237	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	3.37
C	4089	CA	2237	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	4.49
C	4091	OE	2249	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	3.54
N	4098	OE	2249	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	4.38
N	4098	CG	2244	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	3.97
N	4098	CB	2241	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	3.94
N	4098	CA	2237	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	4.07
C	4099	CB	2241	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	4.45
C	4099	CA	2237	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	4.41
C	4102	OE	2249	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	3.86
N	4087	CB	2256	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	4.34
N	4087	N	2250	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	4.45
O	4088	OG	2259	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	3.54
O	4088	CB	2256	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	3.81
O	4088	CA	2252	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	3.95
C	4089	OG	2259	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	3.91
C	4089	CB	2256	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	4.36
C	4089	N	2250	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	4.01
C	4090	OG	2259	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	3.32
C	4090	CB	2256	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	4.10
C	4090	N	2250	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	4.48
N	4067	NZ	2748	LYS	181	2P41	1	weak	0.0%	3.98
O	4068	CE	2745	LYS	181	2P41	1	weak	0.0%	3.81
O	4068	CD	2742	LYS	181	2P41	1	weak	0.0%	4.26
C	4069	NZ	2748	LYS	181	2P41	1	weak	0.0%	3.65
C	4101	NZ	2748	LYS	181	2P41	1	weak	0.0%	4.21
O	4081	NH	3247	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	3.46
O	4068	OE	3324	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	4.47
O	4068	OE	3323	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	3.77
O	4068	CD	3322	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	4.43
S	4078	OE	3323	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	4.21
O	4082	OE	3324	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	3.76
C	4083	OE	3324	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	4.00
C	4084	OE	3324	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	3.96
C	4084	OE	3323	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	3.90
C	4084	CD	3322	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	4.31

Lampiran 16. Data interaksi ligan YWH dengan sisi ikatan SAM

Interaction Data

Ligand: :
 Receptor: 2P41: VIRAL PROTEIN, TRANSFERASE

Heavy atoms: ligand = 49, receptor = 2027

ligand	receptor	residue	chain	type	score	distance
H 4135	OG 1562	THR 104	2P41 1	H-don	20.3%	1.86
H 4138	OE 1657	GLU 111	2P41 1	H-don	49.7%	1.67
H 4109	OE 2249	GLU 149	2P41 1	H-don	51.4%	1.79
O 4084	NH 836	ARG 57	2P41 1	H-acc	45.9%	2.90
O 4085	NH 833	ARG 57	2P41 1	H-acc	37.9%	2.44
O 4091	NH 833	ARG 57	2P41 1	H-acc	25.1%	2.52
O 4084	NZ 885	LYS 61	2P41 1	H-acc	64.6%	2.59
O 4066	NZ 2748	LYS 181	2P41 1	H-acc	38.3%	2.65
C 4070	NH 833	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.45
C 4070	NE 830	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.15
C 4070	CG 824	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.27
C 4071	NE 830	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.22
N 4077	NH 833	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.24
C 4080	NH 833	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.24
O 4084	NH 833	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.70
O 4084	CZ 832	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.75
O 4085	NH 836	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.16
O 4085	CZ 832	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.18
O 4085	NE 830	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.44
C 4086	NH 836	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.38
C 4086	NH 833	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.33
C 4086	CZ 832	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.82
S 4088	NH 833	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.45
C 4089	NH 833	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.20
O 4091	CZ 832	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.63
O 4091	NE 830	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.97
C 4092	NH 833	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.44
C 4093	NH 833	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.30
O 4084	CE 882	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	3.38
O 4084	CD 879	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	3.75
C 4086	NZ 885	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	3.52
C 4087	NZ 885	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	3.82
C 4096	O 1221	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	4.44
C 4098	O 1221	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	4.08
C 4098	C 1220	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	4.41
C 4098	CA 1217	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	4.38
N 4099	O 1221	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	4.36
C 4106	CA 1217	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	4.04
C 4107	O 1221	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	4.15
C 4107	C 1220	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	4.20
C 4107	CA 1217	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	3.69
O 4078	CA 1235	GLY 83	2P41 1	weak	0.0%	4.17
C 4095	CA 1235	GLY 83	2P41 1	weak	0.0%	4.25
C 4097	O 1239	GLY 83	2P41 1	weak	0.0%	3.73
C 4097	C 1238	GLY 83	2P41 1	weak	0.0%	3.97
C 4097	CA 1235	GLY 83	2P41 1	weak	0.0%	3.63
C 4097	N 1233	GLY 83	2P41 1	weak	0.0%	4.20
N 4099	O 1239	GLY 83	2P41 1	weak	0.0%	3.70
N 4099	C 1238	GLY 83	2P41 1	weak	0.0%	4.20
N 4099	CA 1235	GLY 83	2P41 1	weak	0.0%	3.93
N 4099	N 1233	GLY 83	2P41 1	weak	0.0%	4.07
C 4072	NH 1261	ARG 84	2P41 1	weak	0.0%	3.80
C 4072	CZ 1257	ARG 84	2P41 1	weak	0.0%	4.21

(lanjutan)

C	4074	NH	1261	ARG	84	2P41	1	weak	0.0%	3.34
C	4074	CZ	1257	ARG	84	2P41	1	weak	0.0%	4.17
C	4075	NH	1261	ARG	84	2P41	1	weak	0.0%	3.84
C	4076	NH	1261	ARG	84	2P41	1	weak	0.0%	4.14
C	4076	CZ	1257	ARG	84	2P41	1	weak	0.0%	4.30
C	4076	NE	1255	ARG	84	2P41	1	weak	0.0%	4.34
C	4097	OG	1562	THR	104	2P41	1	weak	0.0%	3.86
C	4098	OG	1562	THR	104	2P41	1	weak	0.0%	3.76
C	4107	OG	1562	THR	104	2P41	1	weak	0.0%	4.01
N	4099	N	1568	LYS	105	2P41	1	weak	0.0%	4.26
C	4106	CG	1577	LYS	105	2P41	1	weak	0.0%	3.98
C	4107	CG	1577	LYS	105	2P41	1	weak	0.0%	3.72
C	4107	CB	1574	LYS	105	2P41	1	weak	0.0%	4.02
C	4107	N	1568	LYS	105	2P41	1	weak	0.0%	4.04
C	4072	OE	1657	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.05
C	4072	OE	1656	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.24
C	4072	CD	1655	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.43
N	4077	CD	1655	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.31
O	4078	OE	1657	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.49
C	4079	OE	1657	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	3.44
C	4079	CD	1655	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.05
C	4079	CG	1652	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.34
C	4080	OE	1657	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	3.48
C	4080	CD	1655	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.22
N	4090	OE	1657	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.23
C	4092	OE	1657	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.38
C	4095	CG	1652	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.09
C	4097	CG	1652	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	3.66
C	4097	CB	1649	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.09
C	4097	O	1648	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.44
C	4097	N	1643	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.09
C	4100	CD	1655	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.32
C	4100	CG	1652	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	3.73
N	4101	OE	1656	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.43
N	4101	CD	1655	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	3.41
N	4101	CG	1652	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	3.51
C	4102	OE	1657	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	3.75
C	4102	CD	1655	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.42
C	4102	CG	1652	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.12
O	4103	OE	1657	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.12
C	4104	OE	1657	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.43
C	4062	O	2234	GLY	148	2P41	1	weak	0.0%	3.52
C	4063	O	2234	GLY	148	2P41	1	weak	0.0%	3.60
C	4064	O	2234	GLY	148	2P41	1	weak	0.0%	2.98
C	4064	C	2233	GLY	148	2P41	1	weak	0.0%	4.17
O	4066	O	2234	GLY	148	2P41	1	weak	0.0%	3.77
C	4068	O	2234	GLY	148	2P41	1	weak	0.0%	4.27
C	4060	OE	2249	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	3.84
C	4060	CG	2244	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	4.36
N	4061	CD	2247	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	3.52
N	4061	CG	2244	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	3.46
N	4061	CB	2241	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	4.01
C	4062	OE	2249	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	3.39
C	4062	CA	2237	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	4.09
C	4063	CG	2244	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	4.49
C	4063	CB	2241	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	4.49
O	4066	CE	2745	LYS	181	2P41	1	weak	0.0%	3.82
C	4067	NZ	2748	LYS	181	2P41	1	weak	0.0%	3.53
C	4082	OE	3324	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	4.19
C	4082	OE	3323	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	3.52
C	4082	CD	3322	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	4.22
O	4084	OE	3324	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	3.99
C	4087	OE	3323	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	4.12

Lampiran 17. Data interaksi ligan YDH dengan sisi ikatan SAM

Interaction Data

Ligand: :
 Receptor: 2P41: VIRAL PROTEIN, TRANSFERASE

Heavy atoms: ligand = 43, receptor = 2027

ligand	receptor	residue	chain	type	score	distance
H 4109	OD 2208	ASP 146	2P41 1	H-don	29.4%	1.38
H 4125	OE 3323	GLU 217	2P41 1	H-don	22.8%	1.98
O 4069	OG 813	SER 56	2P41 1	H-acc	13.2%	2.84
O 4084	NE 830	ARG 57	2P41 1	H-acc	51.8%	2.48
O 4089	NH 833	ARG 57	2P41 1	H-acc	28.3%	2.67
N 4092	NH 833	ARG 57	2P41 1	H-acc	22.9%	2.84
O 4062	NZ 885	LYS 61	2P41 1	H-acc	67.2%	2.66
O 4063	NZ 2748	LYS 181	2P41 1	H-acc	35.4%	2.44
O 4085	NH 3250	ARG 212	2P41 1	H-acc	46.9%	2.76
O 4085	NH 3247	ARG 212	2P41 1	H-acc	34.4%	2.49
O 4072	NZ 603	LYS 42	2P41 1	weak	0.0%	3.14
O 4072	CE 600	LYS 42	2P41 1	weak	0.0%	3.78
O 4069	CB 810	SER 56	2P41 1	weak	0.0%	3.55
C 4070	OG 813	SER 56	2P41 1	weak	0.0%	4.07
C 4073	CB 810	SER 56	2P41 1	weak	0.0%	3.85
C 4075	CB 810	SER 56	2P41 1	weak	0.0%	4.08
C 4079	OG 813	SER 56	2P41 1	weak	0.0%	4.36
C 4079	CB 810	SER 56	2P41 1	weak	0.0%	3.88
C 4073	N 815	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.45
O 4084	NH 833	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.24
O 4084	CZ 832	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.26
O 4084	CD 827	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.41
O 4084	CG 824	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.14
O 4085	NH 833	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.60
O 4085	CZ 832	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.05
O 4085	NE 830	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.88
C 4086	NH 833	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.60
C 4086	CZ 832	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.95
C 4086	NE 830	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.49
N 4088	NE 830	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.40
O 4089	CZ 832	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.75
O 4089	NE 830	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.01
C 4090	NH 833	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.77
N 4092	NH 836	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.48
N 4092	CZ 832	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.06
C 4093	NH 833	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.49
C 4096	NH 833	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.91
C 4097	NH 833	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.31
O 4069	CA 841	GLY 58	2P41 1	weak	0.0%	3.52
O 4069	N 839	GLY 58	2P41 1	weak	0.0%	3.53
O 4062	CE 882	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	3.75
O 4063	NZ 885	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	3.35
C 4064	NZ 885	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	3.35
C 4093	NZ 885	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	4.30
N 4094	NZ 885	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	4.30
C 4076	NH 1261	ARG 84	2P41 1	weak	0.0%	4.32
C 4077	NH 1261	ARG 84	2P41 1	weak	0.0%	3.65
C 4077	CZ 1257	ARG 84	2P41 1	weak	0.0%	4.11
C 4077	NE 1255	ARG 84	2P41 1	weak	0.0%	4.26
C 4078	NH 1261	ARG 84	2P41 1	weak	0.0%	3.56
C 4078	CZ 1257	ARG 84	2P41 1	weak	0.0%	4.26
C 4077	OE 1657	GLU 111	2P41 1	weak	0.0%	3.99
C 4077	OE 1656	GLU 111	2P41 1	weak	0.0%	3.55

(lanjutan)

C	4077	CD 1655	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	3.80
O	4063	OD 2208	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	4.46
O	4063	OD 2207	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	4.06
O	4063	CG 2206	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	4.39
O	4063	O 2202	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.96
S	4066	OD 2208	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.94
C	4067	OD 2208	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.22
C	4067	CG 2206	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	4.17
N	4068	CG 2206	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.67
N	4068	CB 2203	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	4.29
C	4071	OD 2208	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.11
C	4071	CG 2206	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	4.33
C	4060	NZ 2748	LYS	181	2P41	1	weak	0.0%	4.13
O	4063	CE 2745	LYS	181	2P41	1	weak	0.0%	3.49
O	4063	CD 2742	LYS	181	2P41	1	weak	0.0%	3.69
C	4064	NZ 2748	LYS	181	2P41	1	weak	0.0%	3.65
C	4093	OG 3227	SER	211	2P41	1	weak	0.0%	4.06
C	4093	CA 3220	SER	211	2P41	1	weak	0.0%	3.99
O	4084	NH 3250	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	3.98
O	4084	NH 3247	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	4.05
O	4084	CZ 3246	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	4.37
O	4085	CZ 3246	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	3.03
O	4085	NE 3244	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	4.35
C	4086	NH 3250	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	3.71
C	4086	NH 3247	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	3.50
C	4086	CZ 3246	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	4.04
O	4089	NH 3247	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	3.87
C	4090	NH 3247	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	4.35
N	4092	NH 3247	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	3.34
N	4092	CZ 3246	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	4.26
N	4092	NE 3244	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	4.45
N	4092	CD 3241	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	3.83
N	4092	CG 3238	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	4.31
N	4092	CB 3235	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	4.45
N	4092	N 3229	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	4.24
C	4093	CD 3241	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	4.46
C	4093	N 3229	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	4.01
C	4096	NH 3247	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	3.86
C	4097	NH 3247	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	3.61
C	4093	CG 3288	THR	215	2P41	1	weak	0.0%	4.17
N	4094	CG 3288	THR	215	2P41	1	weak	0.0%	3.45
C	4095	CG 3288	THR	215	2P41	1	weak	0.0%	3.64
C	4095	CB 3284	THR	215	2P41	1	weak	0.0%	4.14
O	4062	OE 3324	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	3.95
O	4062	OE 3323	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	4.34
O	4063	OE 3324	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	4.11
O	4063	OE 3323	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	3.93
O	4063	CD 3322	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	4.27
C	4064	OE 3324	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	4.22
C	4064	OE 3323	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	4.06
C	4064	CD 3322	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	4.49
C	4093	OE 3324	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	3.94
C	4093	OE 3323	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	4.08
C	4093	CD 3322	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	4.32
N	4094	OE 3324	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	3.47
N	4094	CD 3322	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	3.49
C	4095	OE 3323	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	3.70

Lampiran 18. Data interaksi ligan TRY dengan sisi ikatan SAM

Interaction Data

Ligand: :
 Receptor: 2P41: VIRAL PROTEIN, TRANSFERASE

Heavy atoms: ligand = 43, receptor = 1323

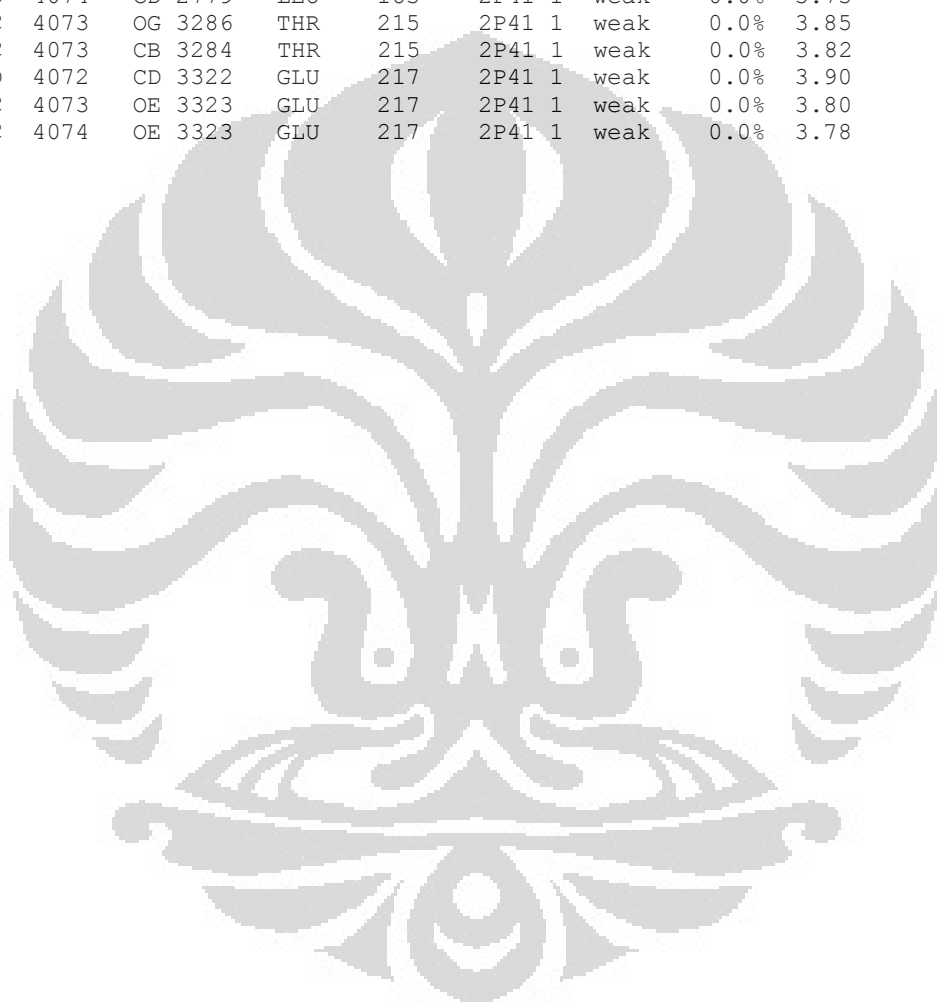
ligand	receptor	residue	chain	type	score	distance
H 4130	O 1624	GLY 109	2P41 1	H-don	16.3%	1.82
H 4121	OD 2207	ASP 146	2P41 1	H-don	16.9%	1.65
H 4139	OE 2249	GLU 149	2P41 1	H-don	43.7%	1.44
H 4111	OE 3323	GLU 217	2P41 1	H-don	29.0%	1.81
O 4063	ND 1635	HIS 110	2P41 1	H-acc	88.7%	2.51
O 4072	NZ 2748	LYS 181	2P41 1	H-acc	28.7%	2.58
S 4059	O 1221	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	4.05
C 4060	O 1221	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	3.87
C 4060	C 1220	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	4.40
C 4060	CA 1217	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	4.49
N 4079	O 1221	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	2.62
N 4079	C 1220	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	3.85
N 4080	O 1221	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	3.20
N 4080	C 1220	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	4.22
C 4081	O 1221	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	3.32
N 4080	CZ 1298	TRP 87	2P41 1	weak	0.0%	4.43
N 4080	CZ 1296	TRP 87	2P41 1	weak	0.0%	4.39
N 4080	CE 1294	TRP 87	2P41 1	weak	0.0%	3.86
N 4080	CE 1293	TRP 87	2P41 1	weak	0.0%	3.78
N 4080	NE 1291	TRP 87	2P41 1	weak	0.0%	4.07
N 4080	CD 1290	TRP 87	2P41 1	weak	0.0%	3.54
N 4080	CD 1288	TRP 87	2P41 1	weak	0.0%	4.04
N 4080	CG 1287	TRP 87	2P41 1	weak	0.0%	3.82
N 4082	NE 1291	TRP 87	2P41 1	weak	0.0%	4.35
O 4090	C 1623	GLY 109	2P41 1	weak	0.0%	4.01
C 4094	O 1624	GLY 109	2P41 1	weak	0.0%	3.52
C 4096	O 1624	GLY 109	2P41 1	weak	0.0%	3.38
O 4062	CE 1639	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	3.59
O 4062	ND 1635	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	3.36
O 4063	CE 1639	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	3.53
O 4063	CG 1634	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	3.36
O 4063	CB 1631	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	3.41
O 4063	C 1629	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	4.03
O 4063	CA 1627	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	3.61
C 4064	CE 1639	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	3.96
C 4064	ND 1635	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	3.29
C 4064	CG 1634	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	4.39
O 4090	NE 1641	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	4.30
O 4090	CE 1639	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	3.66
O 4090	ND 1635	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	3.84
O 4090	CG 1634	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	4.49
C 4094	CE 1639	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	4.43
C 4094	ND 1635	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	4.31
C 4096	C 1629	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	4.42
C 4096	CA 1627	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	3.99
N 4061	CG 1652	GLU 111	2P41 1	weak	0.0%	4.16
O 4063	CB 1649	GLU 111	2P41 1	weak	0.0%	4.38
O 4063	CA 1645	GLU 111	2P41 1	weak	0.0%	4.40
O 4063	N 1643	GLU 111	2P41 1	weak	0.0%	3.34
C 4064	N 1643	GLU 111	2P41 1	weak	0.0%	4.41
C 4065	CB 1649	GLU 111	2P41 1	weak	0.0%	4.38
C 4093	CG 1652	GLU 111	2P41 1	weak	0.0%	4.19
C 4095	CG 1652	GLU 111	2P41 1	weak	0.0%	3.56

(lanjutan)

C	4095	N	1643	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.43
C	4096	CG	1652	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.45
C	4096	N	1643	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.36
C	4097	OE	1657	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.25
C	4097	CD	1655	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.36
C	4097	CG	1652	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	3.99
O	4099	OE	1657	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	3.93
O	4099	CG	1652	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.05
O	4099	CB	1649	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.27
C	4100	OE	1657	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.07
C	4100	CD	1655	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.45
C	4100	CG	1652	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	3.80
C	4100	CB	1649	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.32
C	4101	OE	1657	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	3.95
C	4101	CD	1655	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.41
C	4101	CG	1652	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.10
S	4059	O	2202	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.95
S	4066	O	2202	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.83
S	4066	C	2201	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	4.48
C	4067	O	2202	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.84
N	4079	CB	2203	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	4.43
N	4080	OD	2207	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.42
N	4080	CG	2206	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.72
N	4080	CB	2203	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.16
N	4080	CA	2199	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	4.45
C	4081	OD	2207	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.38
C	4081	CG	2206	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.70
C	4081	CB	2203	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.53
N	4082	OD	2208	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	4.04
N	4082	CG	2206	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.23
N	4082	CB	2203	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.63
C	4083	OD	2207	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.56
C	4083	CG	2206	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	4.11
C	4084	OD	2208	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	4.15
C	4084	OD	2207	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.42
C	4084	CG	2206	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.99
C	4085	OD	2208	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.31
C	4085	OD	2207	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.50
C	4085	CG	2206	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.59
N	4086	OD	2208	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	4.39
C	4089	OD	2208	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	4.49
C	4067	O	2234	GLY	148	2P41	1	weak	0.0%	3.49
C	4067	C	2233	GLY	148	2P41	1	weak	0.0%	4.25
C	4067	N	2228	GLY	148	2P41	1	weak	0.0%	4.32
C	4070	O	2234	GLY	148	2P41	1	weak	0.0%	3.98
C	4071	O	2234	GLY	148	2P41	1	weak	0.0%	4.29
O	4072	O	2234	GLY	148	2P41	1	weak	0.0%	3.07
O	4072	C	2233	GLY	148	2P41	1	weak	0.0%	4.04
C	4074	O	2234	GLY	148	2P41	1	weak	0.0%	3.56
C	4074	C	2233	GLY	148	2P41	1	weak	0.0%	4.49
N	4075	O	2234	GLY	148	2P41	1	weak	0.0%	3.09
N	4075	C	2233	GLY	148	2P41	1	weak	0.0%	4.21
C	4078	O	2234	GLY	148	2P41	1	weak	0.0%	3.93
O	4062	OE	2249	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	4.49
C	4067	OE	2249	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	3.62
C	4067	CD	2247	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	4.49
C	4067	CB	2241	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	4.41
N	4068	CD	2247	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	3.66
N	4068	CG	2244	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	4.16
O	4069	OE	2249	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	3.95
O	4069	CG	2244	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	4.16
C	4070	OE	2249	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	3.80
C	4070	CD	2247	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	4.48

(lanjutan)

C	4070	CG	2244	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	4.07
C	4071	OE	2249	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	3.38
C	4071	CD	2247	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	4.37
C	4071	CG	2244	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	4.43
C	4074	CA	2237	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	4.48
N	4075	CG	2244	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	4.42
N	4075	CA	2237	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	4.25
O	4072	CE	2745	LYS	181	2P41	1	weak	0.0%	3.66
C	4074	NZ	2748	LYS	181	2P41	1	weak	0.0%	3.98
N	4086	NZ	2748	LYS	181	2P41	1	weak	0.0%	3.93
O	4072	CD	2779	LEU	183	2P41	1	weak	0.0%	3.48
C	4074	CD	2779	LEU	183	2P41	1	weak	0.0%	3.73
C	4073	OG	3286	THR	215	2P41	1	weak	0.0%	3.85
C	4073	CB	3284	THR	215	2P41	1	weak	0.0%	3.82
O	4072	CD	3322	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	3.90
C	4073	OE	3323	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	3.80
C	4074	OE	3323	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	3.78



Lampiran 19. Data interaksi standar SAM dengan sisi ikatan SAM

Interaction Data

Ligand: :
 Receptor: 2P41: VIRAL PROTEIN, TRANSFERASE

Heavy atoms: ligand = 27, receptor = 2027

ligand	receptor	residue	chain	type	score	distance
H 4090	OD 2208	ASP 146	2P41 1	H-don	39.9%	1.41
O 4065	NH 836	ARG 57	2P41 1	H-acc	22.3%	2.58
O 4065	NH 833	ARG 57	2P41 1	H-acc	13.6%	2.53
O 4068	NZ 885	LYS 61	2P41 1	H-acc	43.1%	2.51
O 4060	ND 1635	HIS 110	2P41 1	H-acc	87.5%	2.62
O 4065	CZ 832	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	2.94
O 4065	NE 830	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.24
C 4067	NH 836	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.69
C 4067	NH 833	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.76
C 4067	CZ 832	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.19
O 4068	NH 836	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.36
C 4069	NH 833	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.43
O 4065	NZ 885	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	4.25
C 4067	NZ 885	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	3.61
C 4067	CE 882	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	4.29
C 4067	CD 879	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	4.25
O 4068	CE 882	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	3.47
O 4068	CD 879	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	3.72
N 4059	CA 1217	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	4.11
C 4083	CA 1217	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	3.93
N 4084	O 1221	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	4.41
N 4084	C 1220	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	4.16
N 4084	CA 1217	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	3.34
N 4084	N 1215	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	4.39
C 4085	O 1221	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	4.18
C 4085	C 1220	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	4.21
C 4085	CA 1217	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	3.87
N 4084	OG 1562	THR 104	2P41 1	weak	0.0%	3.93
N 4084	CA 1556	THR 104	2P41 1	weak	0.0%	4.17
C 4085	OG 1562	THR 104	2P41 1	weak	0.0%	3.44
N 4059	CE 1583	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	3.91
N 4059	CD 1580	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	4.40
N 4059	CG 1577	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	3.70
N 4079	CE 1583	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	4.40
N 4079	CG 1577	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	4.47
C 4080	CE 1583	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	4.44
C 4080	CG 1577	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	3.81
C 4081	CG 1577	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	4.24
N 4082	CG 1577	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	4.37
C 4083	CE 1583	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	4.26
C 4083	CD 1580	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	4.47
C 4083	CG 1577	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	3.40
C 4083	CB 1574	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	4.37
N 4084	CG 1577	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	3.46
N 4084	CB 1574	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	4.00
N 4084	CA 1570	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	4.37
N 4084	N 1568	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	3.61
C 4085	CG 1577	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	3.94
C 4085	CB 1574	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	4.09
C 4085	N 1568	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	3.80
O 4060	CE 1639	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	3.35
O 4060	CG 1634	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	3.75
O 4060	CB 1631	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	4.15

O	4060	CA 1627	HIS	110	2P41	1	weak	0.0%	4.29
O	4061	CB 1631	HIS	110	2P41	1	weak	0.0%	4.47
O	4061	CA 1627	HIS	110	2P41	1	weak	0.0%	4.26
C	4075	CE 1639	HIS	110	2P41	1	weak	0.0%	4.41
C	4075	ND 1635	HIS	110	2P41	1	weak	0.0%	3.53
C	4075	CG 1634	HIS	110	2P41	1	weak	0.0%	4.44
O	4061	CG 1652	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	3.82
O	4061	N 1643	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	3.70
N	4063	OD 2207	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.84
N	4063	CG 2206	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.26
N	4063	CB 2203	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	4.20
N	4063	O 2202	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.97
C	4066	OD 2208	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.52
C	4067	OD 2208	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	4.16
O	4068	OD 2208	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.84
O	4068	OD 2207	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	4.29
O	4068	CG 2206	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	4.44
N	4059	CD 2224	ILE	147	2P41	1	weak	0.0%	3.46
N	4059	CG 2217	ILE	147	2P41	1	weak	0.0%	3.84
N	4079	CG 2220	ILE	147	2P41	1	weak	0.0%	4.00
C	4076	OE 2249	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	3.99
N	4077	OE 2249	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	4.02
C	4078	OE 2249	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	3.35



Lampiran 20. Data interaksi standar SAH dengan sisi ikatan SAM

Interaction Data

Ligand: :
 Receptor: 2P41: VIRAL PROTEIN, TRANSFERASE

Heavy atoms: ligand = 26, receptor = 1184

ligand	receptor	residue	chain	type	score	distance
H 4104	OD 2208	ASP 146	2P41 1	H-don	32.5%	1.45
O 4064	NH 836	ARG 57	2P41 1	H-acc	35.6%	2.60
O 4064	NH 833	ARG 57	2P41 1	H-acc	10.6%	2.54
O 4067	NZ 885	LYS 61	2P41 1	H-acc	25.8%	2.47
O 4061	ND 1635	HIS 110	2P41 1	H-acc	68.9%	2.66
O 4064	CZ 832	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	2.97
O 4064	NE 830	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.30
C 4066	NH 836	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.60
C 4066	NH 833	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.79
C 4066	CZ 832	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.19
O 4067	NH 836	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.02
C 4066	NZ 885	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	3.70
C 4066	CD 879	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	4.37
O 4067	CE 882	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	3.42
O 4067	CD 879	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	3.56
C 4075	O 1221	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	4.00
C 4080	CA 1217	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	4.21
N 4081	CA 1217	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	3.50
C 4084	CA 1217	GLY 81	2P41 1	weak	0.0%	3.83
O 4060	CA 1235	GLY 83	2P41 1	weak	0.0%	3.56
O 4060	OG 1562	THR 104	2P41 1	weak	0.0%	3.32
N 4059	CE 1583	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	3.79
N 4081	CG 1577	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	4.05
N 4081	N 1568	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	4.21
C 4082	CE 1583	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	3.88
C 4082	CG 1577	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	4.23
N 4083	CE 1583	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	3.57
N 4083	CD 1580	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	4.20
N 4083	CG 1577	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	3.59
C 4084	CE 1583	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	4.35
C 4084	CG 1577	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	3.52
C 4084	N 1568	LYS 105	2P41 1	weak	0.0%	4.07
O 4060	CB 1631	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	4.16
O 4060	C 1629	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	4.36
O 4060	CA 1627	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	4.39
O 4061	CE 1639	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	3.49
O 4061	CG 1634	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	3.69
O 4061	CB 1631	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	4.00
O 4061	CA 1627	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	4.13
C 4073	ND 1635	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	3.62
C 4073	CG 1634	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	4.29
C 4073	CB 1631	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	4.09
C 4073	CA 1627	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	4.05
C 4074	ND 1635	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	3.91
C 4074	CG 1634	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	4.44
C 4074	CB 1631	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	4.11
C 4074	CA 1627	HIS 110	2P41 1	weak	0.0%	4.49
O 4060	CG 1652	GLU 111	2P41 1	weak	0.0%	4.28
O 4060	CB 1649	GLU 111	2P41 1	weak	0.0%	3.82
O 4060	O 1648	GLU 111	2P41 1	weak	0.0%	3.80
O 4060	C 1647	GLU 111	2P41 1	weak	0.0%	4.37
O 4060	CA 1645	GLU 111	2P41 1	weak	0.0%	4.03
O 4060	N 1643	GLU 111	2P41 1	weak	0.0%	3.34

(lanjutan)

C	4071	CG 1652	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	3.68
C	4071	CB 1649	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.37
C	4073	N 1643	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.10
C	4074	N 1643	GLU	111	2P41	1	weak	0.0%	4.18
N	4063	OD 2207	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.24
N	4063	CG 2206	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	2.99
N	4063	CB 2203	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	4.09
N	4063	O 2202	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.32
N	4063	C 2201	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	4.34
C	4065	OD 2208	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.54
C	4065	CG 2206	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	4.35
C	4066	OD 2208	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	4.20
O	4067	OD 2208	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	4.04
O	4067	OD 2207	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	4.30
C	4068	OD 2208	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	3.68
C	4069	OD 2208	ASP	146	2P41	1	weak	0.0%	4.38
N	4059	CD 2224	ILE	147	2P41	1	weak	0.0%	4.30
N	4059	CG 2220	ILE	147	2P41	1	weak	0.0%	3.53
N	4059	CG 2217	ILE	147	2P41	1	weak	0.0%	4.50
N	4078	CG 2220	ILE	147	2P41	1	weak	0.0%	3.89
N	4078	CA 2211	ILE	147	2P41	1	weak	0.0%	4.49
C	4079	CG 2220	ILE	147	2P41	1	weak	0.0%	3.92
C	4079	CG 2217	ILE	147	2P41	1	weak	0.0%	4.06
C	4079	CB 2215	ILE	147	2P41	1	weak	0.0%	4.45
C	4080	CG 2217	ILE	147	2P41	1	weak	0.0%	4.29
N	4081	CG 2217	ILE	147	2P41	1	weak	0.0%	4.50
C	4082	CD 2224	ILE	147	2P41	1	weak	0.0%	3.99
C	4082	CG 2220	ILE	147	2P41	1	weak	0.0%	3.79
C	4082	CG 2217	ILE	147	2P41	1	weak	0.0%	4.03
N	4083	CD 2224	ILE	147	2P41	1	weak	0.0%	3.80
N	4083	CG 2217	ILE	147	2P41	1	weak	0.0%	4.17
C	4084	CD 2224	ILE	147	2P41	1	weak	0.0%	4.14
C	4084	CG 2217	ILE	147	2P41	1	weak	0.0%	4.32

Lampiran 21. Data interaksi ligan YEF dengan sisi ikatan RNA-*cap*

Interaction Data

Ligand: :
 Receptor: 2P41: TRANSFERASE

Heavy atoms: ligand = 45, receptor = 2049

ligand	receptor	residue	chain	type	score	distance
H 4165	O 224	LEU 20	2P41 1	H-don	37.7%	1.63
O 4142	NZ 388	LYS 29	2P41 1	H-acc	40.3%	2.54
O 4143	NZ 388	LYS 29	2P41 1	H-acc	43.6%	2.50
O 4115	OG 2262	SER 151	2P41 1	H-acc	45.7%	2.55
O 4124	C 223	LEU 20	2P41 1	weak	0.0%	3.73
C 4128	O 224	LEU 20	2P41 1	weak	0.0%	3.43
C 4130	O 224	LEU 20	2P41 1	weak	0.0%	3.92
O 4121	NZ 263	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	4.43
O 4124	NZ 263	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	3.06
O 4124	CE 260	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	4.12
O 4124	CD 257	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	4.30
O 4124	CG 254	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	3.46
O 4124	CA 247	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	4.30
O 4124	N 245	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	3.97
C 4125	NZ 263	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	4.10
C 4126	NZ 263	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	3.39
C 4126	CD 257	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	4.49
C 4126	CG 254	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	4.07
C 4128	NZ 263	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	3.16
C 4128	CE 260	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	4.47
C 4128	CG 254	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	4.19
C 4129	NZ 263	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	4.39
C 4130	NZ 263	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	3.74
C 4125	CZ 311	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	3.92
C 4125	CE 309	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.18
C 4125	CE 307	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	3.87
C 4125	CD 305	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.38
C 4125	CD 303	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.09
C 4125	CG 302	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.34
C 4126	CE 307	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.18
C 4126	CD 305	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.36
C 4126	CD 303	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	3.92
C 4126	CG 302	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.01
C 4126	CB 299	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.42
C 4127	CE 307	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.39
O 4142	CZ 311	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	3.93
O 4142	CE 309	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	3.55
C 4141	NZ 388	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	4.31
O 4142	CE 385	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	3.55
O 4142	CD 382	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	4.22
O 4143	CE 385	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	3.56
C 4144	NZ 388	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	2.85
C 4144	CE 385	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	3.99
C 4145	OE 2240	GLU 149	2P41 1	weak	0.0%	3.68
O 4138	O 2247	SER 150	2P41 1	weak	0.0%	3.43
O 4138	C 2246	SER 150	2P41 1	weak	0.0%	3.85
N 4113	OG 2262	SER 151	2P41 1	weak	0.0%	3.09
N 4113	CB 2259	SER 151	2P41 1	weak	0.0%	4.17
N 4113	CA 2255	SER 151	2P41 1	weak	0.0%	4.45
O 4114	OG 2262	SER 151	2P41 1	weak	0.0%	4.37
O 4115	CB 2259	SER 151	2P41 1	weak	0.0%	3.24
O 4115	CA 2255	SER 151	2P41 1	weak	0.0%	4.29
C 4116	OG 2262	SER 151	2P41 1	weak	0.0%	3.41

(lanjutan)

C	4116	CB	2259	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	4.01
C	4117	OG	2262	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	3.83
O	4138	CA	2255	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	4.07
O	4138	N	2253	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	4.12
C	4145	OG	2262	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	3.42
C	4146	OG	2262	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	3.64
C	4147	OG	2262	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	3.90
C	4148	OG	2262	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	4.28
C	4151	OG	2262	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	4.45
C	4154	OG	2262	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	3.86
C	4155	OG	2262	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	3.81
N	4113	CD	2275	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	3.46
N	4113	CG	2272	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.27
O	4114	CD	2275	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	3.68
O	4114	CG	2272	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	3.89
O	4114	CB	2269	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	3.64
O	4114	C	2267	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.21
O	4114	CA	2265	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.21
O	4114	N	2264	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.08
O	4115	CD	2275	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.01
O	4115	N	2264	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.34
C	4116	CD	2275	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	3.57
C	4116	CG	2272	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.15
C	4116	CB	2269	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.29
C	4116	N	2264	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.15
C	4117	CD	2275	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	3.57
C	4117	CG	2272	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.02
C	4131	CG	2272	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.21
N	4132	CG	2272	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.46
O	4153	CD	2275	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	3.76
O	4153	CG	2272	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.01
C	4154	CD	2275	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	3.59
C	4154	CG	2272	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.28
C	4155	CD	2275	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.32
O	4114	CB	2284	ASN	153	2P41	1	weak	0.0%	3.34
O	4114	CA	2280	ASN	153	2P41	1	weak	0.0%	4.00
O	4114	N	2278	ASN	153	2P41	1	weak	0.0%	3.36
O	4115	CB	2284	ASN	153	2P41	1	weak	0.0%	4.08
O	4115	N	2278	ASN	153	2P41	1	weak	0.0%	4.16
C	4116	CB	2284	ASN	153	2P41	1	weak	0.0%	4.07
C	4116	N	2278	ASN	153	2P41	1	weak	0.0%	4.02
O	4115	CG	2332	VAL	156	2P41	1	weak	0.0%	3.79
O	4115	CB	2326	VAL	156	2P41	1	weak	0.0%	4.06

Lampiran 22. Data interaksi ligan YDF dengan sisi ikatan RNA-cap

Interaction Data

Ligand: :
 Receptor: 2P41: TRANSFERASE

Heavy atoms: ligand = 44, receptor = 2049

ligand	receptor	residue	chain	type	score	distance
H 4164	O 200	ASN 18	2P41 1	H-don	71.8%	1.73
O 4136	NZ 137	LYS 14	2P41 1	H-acc	17.1%	2.57
O 4121	NZ 263	LYS 22	2P41 1	H-acc	20.5%	2.68
O 4114	NE 326	GLN 26	2P41 1	H-acc	26.3%	3.01
O 4115	NZ 388	LYS 29	2P41 1	H-acc	31.6%	2.43
O 4136	CE 134	LYS 14	2P41 1	weak	0.0%	3.57
C 4138	NZ 137	LYS 14	2P41 1	weak	0.0%	3.82
O 4136	CD 191	LEU 17	2P41 1	weak	0.0%	3.67
O 4124	CB 201	ASN 18	2P41 1	weak	0.0%	4.01
O 4124	C 199	ASN 18	2P41 1	weak	0.0%	3.71
O 4124	CA 197	ASN 18	2P41 1	weak	0.0%	4.08
C 4128	O 200	ASN 18	2P41 1	weak	0.0%	3.37
C 4128	C 199	ASN 18	2P41 1	weak	0.0%	4.26
C 4128	CA 197	ASN 18	2P41 1	weak	0.0%	4.49
C 4130	O 200	ASN 18	2P41 1	weak	0.0%	3.22
C 4130	C 199	ASN 18	2P41 1	weak	0.0%	3.90
C 4130	CA 197	ASN 18	2P41 1	weak	0.0%	4.19
O 4121	CE 260	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	3.57
O 4121	CD 257	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	3.99
C 4122	NZ 263	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	3.89
C 4131	NZ 263	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	3.78
O 4133	NZ 263	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	4.10
O 4114	CE 309	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.10
N 4120	CZ 311	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.12
N 4120	CE 309	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	3.63
N 4120	CD 305	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.25
O 4133	CZ 311	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.03
O 4133	CE 309	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.48
O 4133	CE 307	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	3.82
O 4133	CD 303	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.11
C 4134	CZ 311	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.30
C 4134	CE 307	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.27
O 4137	CZ 311	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	3.57
O 4137	CE 307	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	3.92
N 4140	CZ 311	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	3.64
N 4140	CE 307	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	3.74
O 4141	CZ 311	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	3.45
O 4141	CE 309	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	3.82
O 4141	CE 307	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.44
C 4142	CZ 311	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.00
C 4143	CZ 311	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.35
O 4114	OE 329	GLN 26	2P41 1	weak	0.0%	4.32
O 4114	CD 325	GLN 26	2P41 1	weak	0.0%	4.08
O 4115	OE 329	GLN 26	2P41 1	weak	0.0%	4.11
O 4115	NE 326	GLN 26	2P41 1	weak	0.0%	3.86
C 4116	NE 326	GLN 26	2P41 1	weak	0.0%	3.76
N 4120	NE 326	GLN 26	2P41 1	weak	0.0%	4.13
N 4113	NZ 388	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	3.72
O 4114	NZ 388	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	3.97
O 4115	CE 385	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	3.51
O 4115	CD 382	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	3.80
C 4116	NZ 388	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	3.22
C 4116	CE 385	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	4.48

(lanjutan)

C	4117	NZ	388	LYS	29	2P41	1	weak	0.0%	3.74
C	4144	NZ	388	LYS	29	2P41	1	weak	0.0%	3.73
C	4144	CE	385	LYS	29	2P41	1	weak	0.0%	4.10
C	4145	NZ	388	LYS	29	2P41	1	weak	0.0%	3.75
C	4145	CE	385	LYS	29	2P41	1	weak	0.0%	3.74
C	4146	NZ	388	LYS	29	2P41	1	weak	0.0%	4.04
C	4147	NZ	388	LYS	29	2P41	1	weak	0.0%	4.07
C	4147	CE	385	LYS	29	2P41	1	weak	0.0%	4.16
C	4148	NZ	388	LYS	29	2P41	1	weak	0.0%	4.33
C	4149	NZ	388	LYS	29	2P41	1	weak	0.0%	4.35
C	4153	NZ	388	LYS	29	2P41	1	weak	0.0%	4.16
C	4154	NZ	388	LYS	29	2P41	1	weak	0.0%	4.17
O	4136	OG	2251	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	3.53
O	4136	CB	2248	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	3.55
O	4136	O	2247	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	3.88
O	4136	C	2246	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	3.65
O	4136	CA	2244	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	4.22
O	4137	OG	2251	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	3.49
O	4137	CB	2248	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	4.33
O	4137	O	2247	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	4.24
C	4138	OG	2251	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	3.65
C	4138	CB	2248	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	4.09
C	4138	O	2247	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	3.76
C	4138	C	2246	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	3.93
C	4139	O	2247	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	3.72
C	4139	C	2246	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	4.15
C	4142	O	2247	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	4.38
C	4143	O	2247	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	4.47
C	4144	OG	2251	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	3.35
C	4145	OG	2251	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	4.37
C	4146	OG	2251	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	3.81
C	4150	OG	2251	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	3.55
C	4150	C	2246	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	4.23
C	4150	CA	2244	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	4.50
C	4150	N	2242	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	4.15
N	4151	OG	2251	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	4.47
N	4151	O	2247	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	3.35
N	4151	C	2246	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	4.39
C	4154	OG	2251	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	4.40
C	4154	O	2247	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	3.92
O	4136	O	2258	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	3.68
O	4136	C	2257	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	3.68
O	4136	CA	2255	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	4.04
O	4136	N	2253	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	3.58
C	4138	C	2257	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	4.31
C	4138	CA	2255	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	4.45
C	4138	N	2253	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	4.15
C	4139	C	2257	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	3.90
C	4139	CA	2255	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	4.00
C	4139	N	2253	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	4.19
O	4124	CB	2269	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.50
C	4125	CB	2269	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.43
C	4126	CB	2269	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.01
C	4127	CG	2272	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.28
C	4128	CG	2272	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.38
C	4128	CB	2269	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.27
O	4136	CA	2265	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.42
O	4136	N	2264	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.12
C	4139	CG	2272	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.05
C	4139	CA	2265	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.34
O	4137	C	3267	SER	214	2P41	1	weak	0.0%	4.38
C	4138	O	3268	SER	214	2P41	1	weak	0.0%	4.14
C	4145	OG	3272	SER	214	2P41	1	weak	0.0%	4.17

Lampiran 23. Data interaksi ligan YQN dengan sisi ikatan RNA-cap

Interaction Data

Ligand: :
 Receptor: 2P41: TRANSFERASE

Heavy atoms: ligand = 42, receptor = 2049

ligand	receptor	residue	chain	type	score	distance
H 4185	O 200	ASN 18	2P41 1	H-don	43.3%	1.66
H 4160	O 224	LEU 20	2P41 1	H-don	64.3%	1.62
O 4114	NZ 263	LYS 22	2P41 1	H-acc	55.8%	2.39
O 4124	NZ 388	LYS 29	2P41 1	H-acc	32.8%	2.86
O 4137	OG 2262	SER 151	2P41 1	H-acc	54.7%	2.80
N 4120	O 181	LEU 17	2P41 1	weak	0.0%	3.23
O 4121	O 181	LEU 17	2P41 1	weak	0.0%	3.76
S 4118	O 200	ASN 18	2P41 1	weak	0.0%	3.38
C 4119	O 200	ASN 18	2P41 1	weak	0.0%	3.22
C 4119	C 199	ASN 18	2P41 1	weak	0.0%	4.30
N 4120	C 199	ASN 18	2P41 1	weak	0.0%	3.39
N 4120	CA 197	ASN 18	2P41 1	weak	0.0%	4.00
C 4123	O 200	ASN 18	2P41 1	weak	0.0%	3.51
N 4120	C 223	LEU 20	2P41 1	weak	0.0%	3.68
N 4120	CA 221	LEU 20	2P41 1	weak	0.0%	4.14
N 4120	N 219	LEU 20	2P41 1	weak	0.0%	3.68
C 4123	O 224	LEU 20	2P41 1	weak	0.0%	3.70
O 4114	CE 260	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	3.36
O 4115	NZ 263	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	3.83
C 4116	NZ 263	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	3.40
O 4121	CZ 311	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.19
O 4121	CE 307	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	3.40
O 4121	CD 303	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	3.68
C 4122	CE 307	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.33
C 4125	CZ 311	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	3.94
C 4126	CZ 311	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.16
C 4127	CZ 311	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	3.64
C 4127	CE 307	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	3.97
C 4128	CZ 311	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.10
C 4129	CZ 311	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	3.62
C 4129	CE 307	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	3.71
C 4130	CZ 311	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	3.85
C 4130	CE 307	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.17
C 4131	CZ 311	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.22
C 4131	CE 307	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.25
C 4135	CZ 311	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.19
C 4135	CE 307	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.36
O 4124	CE 385	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	3.61
C 4126	NZ 388	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	3.55
C 4128	NZ 388	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	3.27
C 4130	NZ 388	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	4.13
O 4124	OG 2251	SER 150	2P41 1	weak	0.0%	2.86
O 4124	CB 2248	SER 150	2P41 1	weak	0.0%	4.22
O 4124	O 2247	SER 150	2P41 1	weak	0.0%	4.37
C 4125	O 2247	SER 150	2P41 1	weak	0.0%	4.22
C 4126	OG 2251	SER 150	2P41 1	weak	0.0%	4.18
C 4126	O 2247	SER 150	2P41 1	weak	0.0%	4.09
C 4127	O 2247	SER 150	2P41 1	weak	0.0%	4.07
C 4128	OG 2251	SER 150	2P41 1	weak	0.0%	3.17
C 4128	CB 2248	SER 150	2P41 1	weak	0.0%	4.34
C 4128	O 2247	SER 150	2P41 1	weak	0.0%	3.77
C 4129	OG 2251	SER 150	2P41 1	weak	0.0%	4.25
C 4129	O 2247	SER 150	2P41 1	weak	0.0%	3.69

(lanjutan)

C	4130	OG	2251	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	3.19
C	4130	CB	2248	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	3.99
C	4130	O	2247	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	3.56
N	4136	OG	2262	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	3.88
O	4137	CB	2259	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	3.70
O	4137	CA	2255	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	3.83
C	4138	OG	2262	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	3.69
C	4131	CG	2272	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.34
N	4136	CD	2275	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	3.93
N	4136	CG	2272	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.40
O	4137	CD	2275	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	3.43
O	4137	CG	2272	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.41
O	4137	N	2264	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.49
C	4138	CD	2275	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	3.70
C	4138	CG	2272	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.31
C	4139	CD	2275	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.47
C	4140	CD	2275	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	3.94
C	4140	CG	2272	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	3.86
N	4141	CG	2272	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.14
O	4142	CD	2275	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.43
O	4142	CG	2272	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	3.38
O	4142	CB	2269	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.47
C	4143	CG	2272	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.17
C	4144	CG	2272	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.35
C	4130	O	3268	SER	214	2P41	1	weak	0.0%	3.60

Lampiran 24. Data interaksi ligan TNY dengan sisi ikatan RNA-cap

Interaction Data

Ligand: :
 Receptor: 2P41: TRANSFERASE

Heavy atoms: ligand = 40, receptor = 2049

ligand	receptor	residue	chain	type	score	distance
H 4173	O 224	LEU 20	2P41 1	H-don	50.3%	1.60
H 4160	OE 2240	GLU 149	2P41 1	H-don	51.7%	1.73
H 4167	OG 2251	SER 150	2P41 1	H-don	11.5%	2.42
O 4114	NZ 263	LYS 22	2P41 1	H-acc	31.3%	2.38
O 4132	NZ 388	LYS 29	2P41 1	H-acc	24.5%	2.57
O 4139	C 223	LEU 20	2P41 1	weak	0.0%	3.60
C 4141	O 224	LEU 20	2P41 1	weak	0.0%	3.62
C 4143	O 224	LEU 20	2P41 1	weak	0.0%	3.36
O 4139	C 243	GLY 21	2P41 1	weak	0.0%	3.52
O 4139	CA 240	GLY 21	2P41 1	weak	0.0%	3.74
N 4113	NZ 263	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	4.41
O 4114	CE 260	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	3.39
O 4115	NZ 263	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	4.31
C 4116	NZ 263	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	3.60
C 4116	CE 260	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	4.39
O 4139	NZ 263	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	3.41
O 4139	CE 260	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	4.37
O 4139	CD 257	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	4.40
O 4139	CG 254	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	3.36
O 4139	CB 251	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	4.24
O 4139	CA 247	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	3.85
O 4139	N 245	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	3.52
C 4140	NZ 263	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	4.45
C 4141	NZ 263	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	3.88
C 4143	NZ 263	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	3.35
C 4143	CG 254	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	4.06
C 4144	NZ 263	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	4.13
C 4145	NZ 263	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	3.51
C 4145	CG 254	LYS 22	2P41 1	weak	0.0%	4.02
O 4136	CZ 311	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	3.96
O 4136	CE 309	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.04
C 4142	CZ 311	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.37
C 4142	CE 307	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.27
C 4143	CD 303	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.48
C 4144	CZ 311	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	3.78
C 4144	CE 309	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	3.93
C 4144	CE 307	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	3.83
C 4144	CD 305	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.12
C 4144	CD 303	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.02
C 4144	CG 302	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.16
C 4145	CZ 311	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.42
C 4145	CE 309	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.35
C 4145	CE 307	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.20
C 4145	CD 305	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.08
C 4145	CD 303	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	3.91
C 4145	CG 302	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	3.83
C 4145	CB 299	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.20
C 4146	CZ 311	PHE 25	2P41 1	weak	0.0%	4.47
O 4132	CE 385	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	3.52
C 4133	NZ 388	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	3.77
O 4124	OE 2241	GLU 149	2P41 1	weak	0.0%	4.43
O 4124	CD 2239	GLU 149	2P41 1	weak	0.0%	3.31
O 4124	CG 2236	GLU 149	2P41 1	weak	0.0%	3.32

(lanjutan)

C	4125	OE	2240	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	3.45
C	4125	CD	2239	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	4.35
C	4126	OE	2240	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	3.57
C	4126	CD	2239	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	4.42
C	4130	OE	2240	GLU	149	2P41	1	weak	0.0%	4.20
O	4124	O	2247	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	4.38
O	4128	O	2247	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	3.46
O	4128	C	2246	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	4.37
C	4129	O	2247	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	3.57
C	4129	C	2246	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	4.47
C	4130	O	2247	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	4.29
N	4131	CB	2248	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	4.31
N	4131	O	2247	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	3.50
N	4131	C	2246	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	4.44
C	4133	OG	2251	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	4.25
C	4133	O	2247	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	4.46
N	4135	O	2247	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	3.92
C	4138	O	2247	SER	150	2P41	1	weak	0.0%	3.98
N	4127	OG	2262	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	3.72
O	4128	OG	2262	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	4.34
O	4128	C	2257	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	4.11
O	4128	CA	2255	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	3.74
C	4129	OG	2262	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	4.48
C	4129	CA	2255	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	4.13
C	4130	OG	2262	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	3.70
C	4130	CB	2259	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	4.45
C	4130	CA	2255	SER	151	2P41	1	weak	0.0%	4.12
C	4119	CD	2275	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.27
C	4119	CG	2272	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.02
N	4127	CD	2275	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	4.22
O	4128	CD	2275	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	3.46
O	4128	CG	2272	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	3.84
O	4128	N	2264	PRO	152	2P41	1	weak	0.0%	3.99

Lampiran 25. Data interaksi standar RTP dengan sisi ikatan RNA-*cap*

Interaction Data

Ligand: :
 Receptor: 2P41: VIRAL PROTEIN, TRANSFERASE

Heavy atoms: ligand = 29, receptor = 2027

ligand	receptor	residue	chain	type	score	distance
O 4064	OG 3276	SER 214	2P41 1	H-don	22.3%	3.01
N 4085	NZ 395	LYS 29	2P41 1	H-acc	46.9%	2.94
O 4087	NZ 395	LYS 29	2P41 1	H-acc	94.6%	2.67
O 4069	NH 833	ARG 57	2P41 1	H-acc	67.4%	2.37
O 4070	NH 836	ARG 57	2P41 1	H-acc	94.3%	2.45
O 4068	NZ 885	LYS 61	2P41 1	H-acc	83.3%	2.45
O 4070	NZ 885	LYS 61	2P41 1	H-acc	12.5%	3.11
O 4068	NZ 2748	LYS 181	2P41 1	H-acc	46.6%	2.54
O 4066	NH 3247	ARG 212	2P41 1	H-acc	46.9%	2.62
O 4067	N 3229	ARG 212	2P41 1	H-acc	37.4%	2.64
O 4064	OG 3276	SER 214	2P41 1	H-acc	22.3%	3.01
N 4062	NZ 395	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	4.16
N 4062	CE 392	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	4.49
N 4062	CD 389	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	3.98
O 4063	CD 389	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	3.47
O 4063	CG 386	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	3.51
O 4064	CD 389	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	4.28
C 4082	CD 389	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	3.84
C 4083	CD 389	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	4.18
C 4084	NZ 395	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	3.62
C 4084	CE 392	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	4.21
C 4084	CD 389	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	4.43
N 4085	CE 392	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	3.48
N 4085	CD 389	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	3.39
C 4086	NZ 395	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	3.48
C 4086	CE 392	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	4.20
O 4087	CE 392	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	3.45
O 4087	CD 389	LYS 29	2P41 1	weak	0.0%	4.46
O 4066	NH 836	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.26
O 4066	NH 833	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.49
O 4066	CZ 832	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.09
O 4069	NH 836	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.21
O 4069	CZ 832	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.15
O 4069	NE 830	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.42
O 4070	NH 833	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.48
O 4070	CZ 832	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.36
P 4071	NH 836	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.41
P 4071	NH 833	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.43
P 4071	CZ 832	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	3.86
O 4072	NH 836	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.33
O 4072	NH 833	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.04
P 4073	NH 833	ARG 57	2P41 1	weak	0.0%	4.31
O 4068	CE 882	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	3.57
O 4068	CD 879	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	4.09
O 4070	CE 882	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	3.28
O 4070	CD 879	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	3.84
P 4071	NZ 885	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	3.34
P 4071	CE 882	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	4.07
O 4072	NZ 885	LYS 61	2P41 1	weak	0.0%	4.21
O 4076	OG 2259	SER 150	2P41 1	weak	0.0%	3.20
O 4076	CB 2256	SER 150	2P41 1	weak	0.0%	3.94
C 4078	OG 2259	SER 150	2P41 1	weak	0.0%	4.01
O 4068	CE 2745	LYS 181	2P41 1	weak	0.0%	3.51

(lanjutan)

O	4067	CB 3224	SER	211	2P41	1	weak	0.0%	3.20
O	4067	C 3222	SER	211	2P41	1	weak	0.0%	3.46
O	4067	CA 3220	SER	211	2P41	1	weak	0.0%	3.31
O	4070	CB 3224	SER	211	2P41	1	weak	0.0%	3.61
O	4070	CA 3220	SER	211	2P41	1	weak	0.0%	3.87
O	4072	CB 3224	SER	211	2P41	1	weak	0.0%	4.20
P	4073	CB 3224	SER	211	2P41	1	weak	0.0%	4.30
N	4060	NH 3247	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	4.20
C	4061	NH 3247	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	3.99
N	4062	NH 3247	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	4.37
O	4063	NH 3247	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	3.61
O	4063	CZ 3246	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	4.27
O	4063	NE 3244	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	4.44
O	4063	CD 3241	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	3.98
O	4063	CG 3238	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	3.27
O	4063	CB 3235	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	3.37
O	4066	CZ 3246	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	3.76
O	4066	NE 3244	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	4.19
O	4066	CD 3241	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	3.77
O	4066	CG 3238	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	4.26
O	4067	NH 3247	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	4.35
O	4067	CD 3241	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	3.55
O	4067	CG 3238	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	3.97
O	4067	CB 3235	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	3.54
O	4067	O 3234	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	4.12
O	4067	C 3233	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	4.30
O	4067	CA 3231	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	3.60
P	4073	NH 3247	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	4.00
P	4073	CD 3241	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	4.30
P	4073	N 3229	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	4.12
C	4083	NH 3247	ARG	212	2P41	1	weak	0.0%	4.13
O	4064	CB 3273	SER	214	2P41	1	weak	0.0%	3.85
O	4067	CG 3288	THR	215	2P41	1	weak	0.0%	3.03
O	4067	CB 3284	THR	215	2P41	1	weak	0.0%	4.37
O	4072	CG 3288	THR	215	2P41	1	weak	0.0%	4.29
P	4073	CG 3288	THR	215	2P41	1	weak	0.0%	3.73
O	4074	CG 3288	THR	215	2P41	1	weak	0.0%	3.20
O	4074	OG 3286	THR	215	2P41	1	weak	0.0%	4.43
O	4074	CB 3284	THR	215	2P41	1	weak	0.0%	3.73
P	4075	CG 3288	THR	215	2P41	1	weak	0.0%	4.23
P	4075	CB 3284	THR	215	2P41	1	weak	0.0%	4.24
O	4076	CG 3288	THR	215	2P41	1	weak	0.0%	4.19
O	4076	OG 3286	THR	215	2P41	1	weak	0.0%	4.25
O	4076	CB 3284	THR	215	2P41	1	weak	0.0%	3.70
O	4068	OE 3323	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	3.39
O	4072	OE 3323	GLU	217	2P41	1	weak	0.0%	3.94