**Docking results of standard ligands**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **Sl. No.** | **Name**  **(pubchem CID)** | **Molecular weight** | **Binding Energy**  **Kcal/mol** | **Residues interacted** |
| 1. | Penicillin  2349 | 334.4 g/mol | -7.1 | LYS A:211, ASN A: 220, ASN A:76, HIS A:250, HIS A:122, HIS A:189, SER A:217, SER A:251, ZN A:301, ZN A:301, ZN A:302, VAL A:73 |
| 2 | Benzylpenicillin  5904 | 334.4 g/mol | -8.0 | GLY A:219, ALA A:215, LYS A:211, HIS A:250, HIS A:122, HIS A:189, ZN A:301, ZN A:302, VAL A:73 |
| 3 | Mercaptopurine  667490 | 152.1 g/mol | -5.1 | ASN A:76, GLN A:60, THR A:62, TYR A:64, ASP A:212, ASP A:43, ASP A:124, SER A: 251, , ZN A:301, HIS A:250 |
| 4 | Cyclobutanone  14496 | 70.09g/mol | -2.1 | GLN A:60, ASN A:76, TYR A:64, ASP A:124, GLN A:123, ZN A:301 |
| 5 | 1,2,3 -Triazole  67516 | 69.07g/mol | -3.4 | ASN A:76, ALA A:215, THR A:62, ASP A:124, ASP A:212, VAL A:50, HIS A:250, ZN A:301, MET A:154 |
| 6 | Sulfonamide  5333 | 172.2g/mol | -5.8 | HIS A:250, HIS A:122, HIS A:189, LYS A:211, ALA A:74, GLN A:123, ARG A:52, ASN A:220, ASN A:76, GLN A:60, SER A:251, TRP A:93, ASP A: 124, ZN A:301, ZN A:302, THR A:62, ALA A:252 |
| 7 | Ampicillin  6249 | 349.4g/mol | -4.9 | TRP A:93, HIS A:250, HIS A:122, ASN A:220, ASP A:124, GLY A:219, LYS A:211, LYS A:216, VAL A:73, PHE A:70 |
| 8 | Quercitin  5280343 | 302.2g/mol | -7.1 | ZN A:301, LYS A:211, LYS A: 216, SER A:217, ASN A:220, VAL A:73, PHE A:70,ASP A:124, ALA A:215, MET A:67 |