

Electronic Supplementary Information

Identification of natural flavonoids as novel EGFR inhibitors using DFT, molecular docking, and molecular dynamics

Nayim Sepay,^{*a} Rina Mondal,^b Muhanna K. Al-Muhanna,^c Debajjoti Saha^d

^aDepartment of Chemistry, Lady Brabourne College, Kolkata - 700017, India.

^bDepartment of Chemistry, Uluberia College, Howrah, West Bengal 711 315, India.

^cThe Material Science Research Institute, King Abdulaziz City for Science and Technology (KACST), Riyadh, Saudi Arabia – 11442.

^dDepartment of Chemistry, Krishnagar Govt College, Krishnagar, West Bengal 74110, India.

Email: nayimsepay@yahoo.com (N.S.)

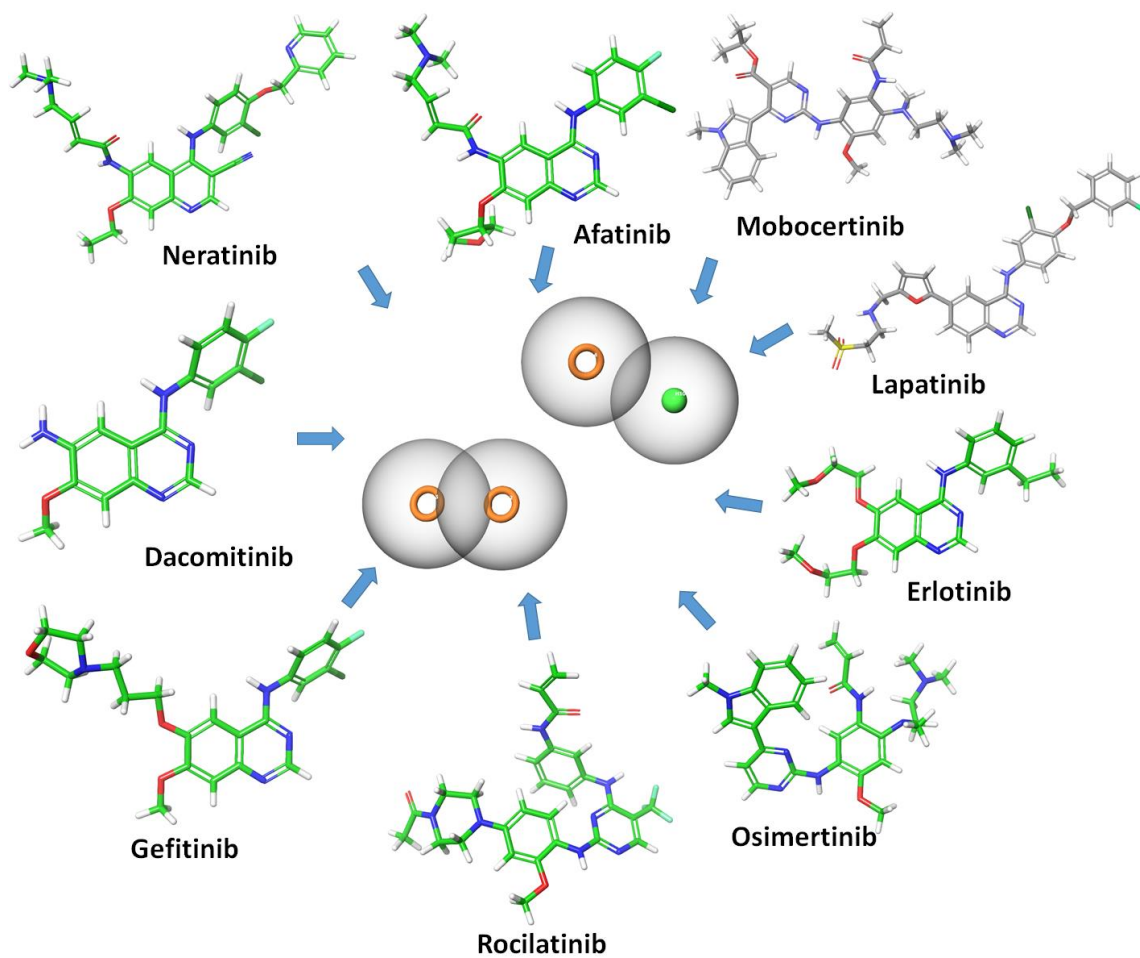


Fig. S1. Pharmacophore model development from EGFR-TKIs.

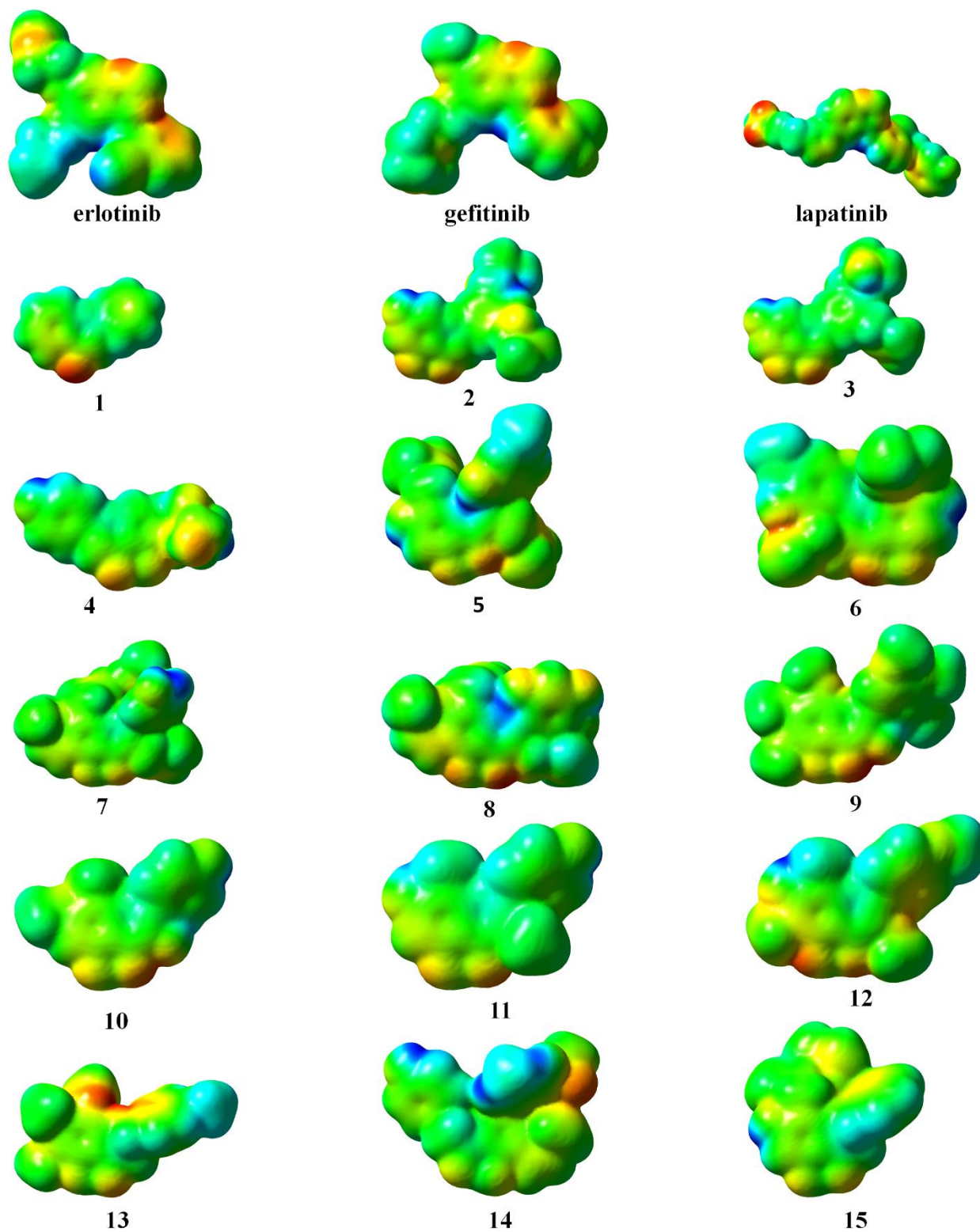


Fig. S2: MEP surface of EGFR inhibitor and selected flavonoids from natural sources **1-15**.

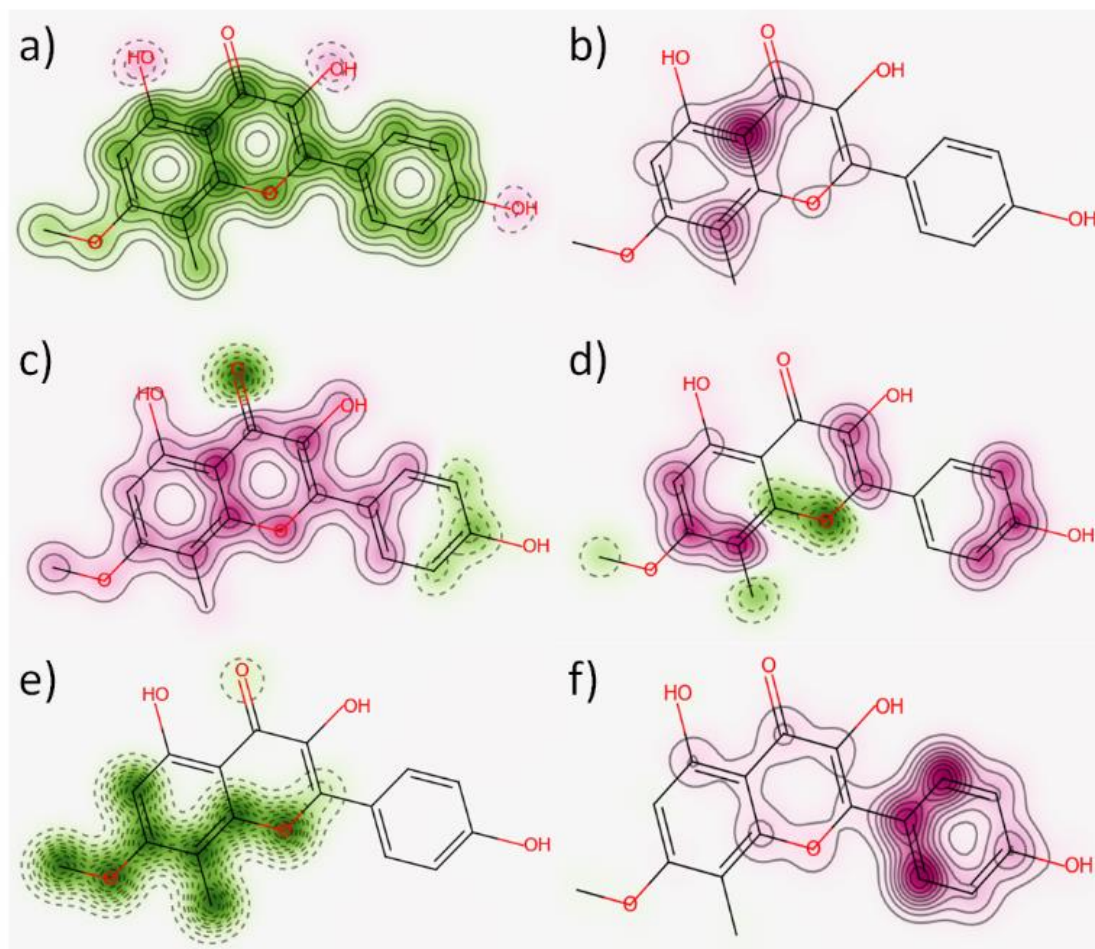


Fig. S3: The probability maps of compound **10** in the response for (a) cardio toxicity, (b) covalent interaction with proteins in the skin, (c) keratinocyte responses, (d) dendritic cells responses, (e) proliferation of antigen-specific T cells and (f) inflammation upon challenge allergen. (Pink and green colours indicates negative and positive contributions respectively)

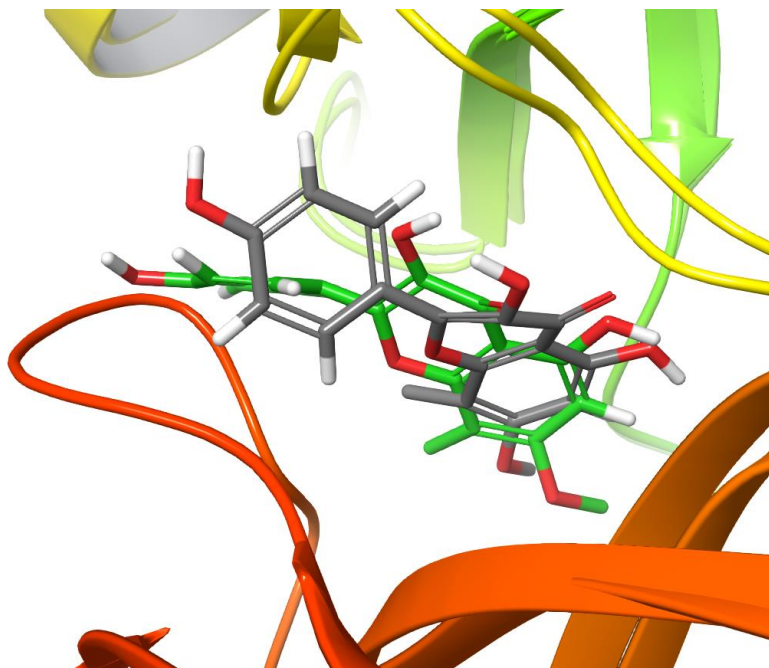


Fig. S4: An overlay of conformation of compound **10** in docking study (grey) and MD study (green).

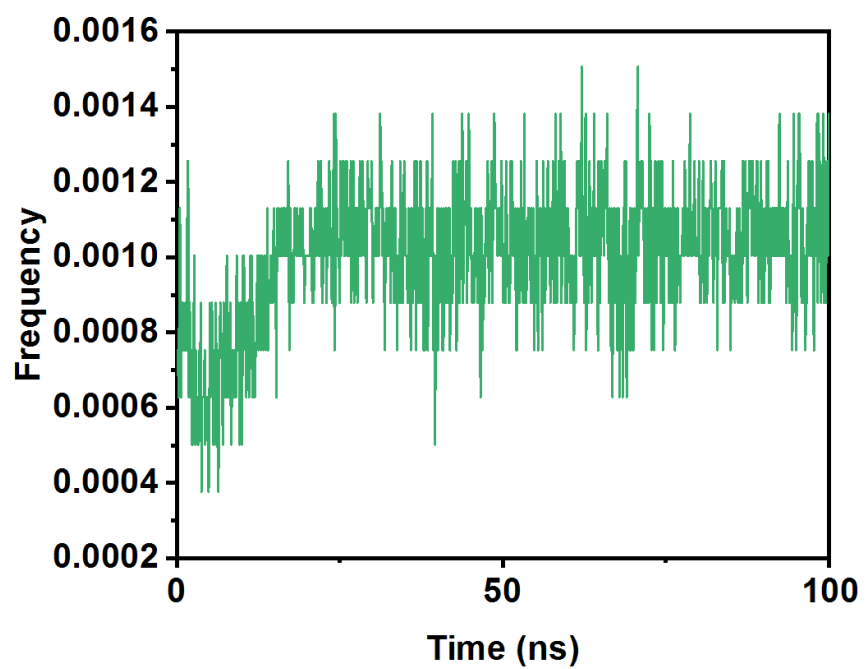


Fig. S5: Plot of the frequency of interactions between active site amino acids and compound **10** against time

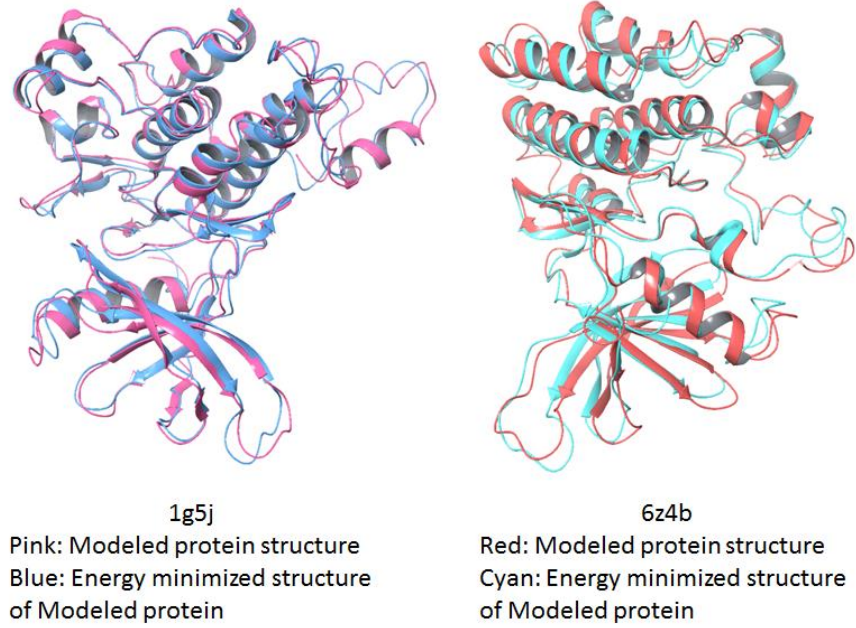
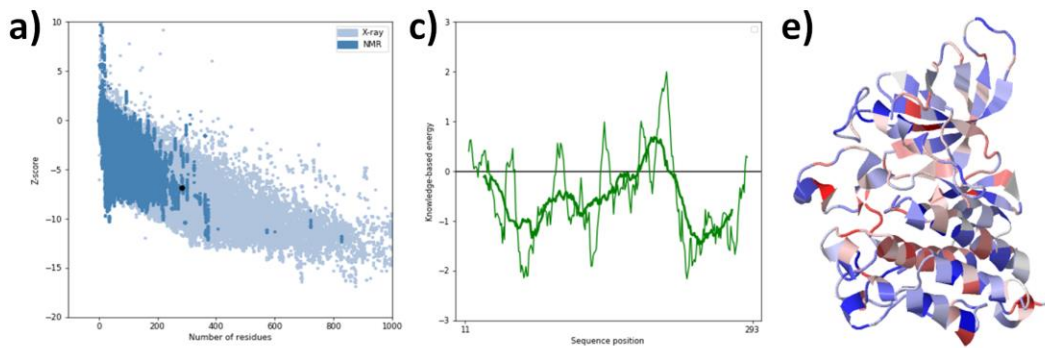


Fig. S6: superimposition of modelled structures and its energy minimized form of proteins.

1g5j: Z-Score: -6.81



6z4b: Z-Score: -6.16

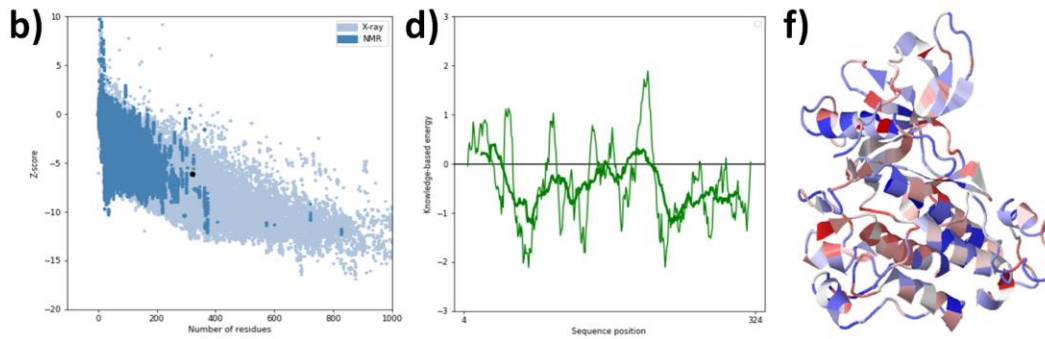


Fig. S7: Z-score plot, energies vs amino acid sequence position i plotting, and 3D protein structure of EGFR proteins 1G5J and 6Z4B.

Table S1: Smiles for 350 Natural flavonoids used to find new EGFR-TKIs

Comp.	Smiles of compounds
1.	<chem>O=C1C2=CC=CC=C2OC(C3=CC=CC=C3)=C1</chem>
2.	<chem>O=C1C2=C(OC)C(O)=CC=C2OC(C3=CC=CC=C3)=C1</chem>
3.	<chem>O=C1C2=C(OC)C(O)=CC=C2OC(C3=CC(OC)=C([H])C([H])=C3OC)=C1</chem>
4.	<chem>O=C1C2=C(OC)C(O)=CC=C2OC(C3=CC([H])=C(OC)C(OC)=C3[H])=C1</chem>
5.	<chem>O=C1C2=C(OC)C(O)=CC=C2OC(C3=CC(OC)=C(OC)C(O)=C3[H])=C1</chem>
6.	<chem>O=C1C2=CC=CC=C2OC(C3=CC(OCO4)=C4C(OC)=C3)=C1</chem>
7.	<chem>O=C1C2=C(O)C=C(OC)C=C2OC(C3=CC=C([H])C(OC)=C3OC)=C1</chem>
8.	<chem>O=C1C2=C(OC)C=C(OC)C=C2OC(C3=CC=C(OC)C(OC)=C3OC)=C1</chem>
9.	<chem>O=C1C2=C(OC)C(OC)=CC=C2OC(C3=C(OC)C=CC(OC)=C3OC)=C1</chem>
10.	<chem>O=C1C2=C(O)C=C(OC)C=C2OC(C3=CC(O)=C(OC)C(O)=C3)=C1</chem>
11.	<chem>O=C1C2=CC=C(OC)C(O)=C2OC(C3=CC(OC)=C(O)C(OC)=C3)=C1</chem>
12.	<chem>O=C1C2=CC=C(OC)C(O)=C2OC(C3=CC(OC)=C(OC)C(OC)=C3)=C1</chem>
13.	<chem>O=C1C2=C(OC)C(OC)=CC=C2OC(C3=C(OC)C(OC)=CC(OC)=C3OC)=C1</chem>
14.	<chem>O=C1C2=C(O)C=C(OC)C(O)=C2OC(C3=CC=C(O)C(OC)=C3OC)=C1</chem>
15.	<chem>O=C1C2=C(O)C(C)=C(OC)C(C)=C2OC(C3=CC(OC)=C(OCO4)C4=C3)=C1</chem>
16.	<chem>O=C1C2=C(O)C/C=C/C(OC)=O=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C=C3)=C1</chem>
17.	<chem>O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(CC(C(C)=C)O)=C(O)C(CC(O)C(C)=C)=C3)=C1</chem>
18.	<chem>O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(C/C=C(C)\C)=C(O[C@H])(C(C)(O)C)[C@H]4O)C4=C3)=C1</chem>
19.	<chem>O=C1C2=C(O)C(CC3C(C)(C)O3)=C(OC)C=C2OC(C4=CC=CC=C4)=C1</chem>
20.	<chem>O=C1C2=C(O)C=C(OC)C(C)=C2OC(C3=CC(C/C=C(C)\C)=C(OCO4)C4=C3)=C1</chem>
21.	<chem>O=C1C2=CC=C(O)C(C/C=C(C)/C)=C2OC(C3=CC=C(O)C(O)=C3)=C1</chem>
22.	<chem>O=C1C2=C3C(C=CC(C)(C)O3)=C(O)C=C2OC(C4=CC=C(O)C=C4)=C1</chem>
23.	<chem>O=C1C2=C(O)C3=C(OC(C)(C)C[C@H]3O)C=C2OC(C4=CC=C(O)C=C4)=C1</chem>
24.	<chem>O=C1C2=C(O)C(C/C=C(C)\C)=C(O)C=C2OC(C3=CC(C/C=C(C)\C)=C(O)C(O)=C3)=C1</chem>
25.	<chem>O=C1C2=C(OC)C(OC)=C3C(CCO3)=C2OC(C4=CC([H])=CC([H])=C4)=C1</chem>
26.	<chem>O=C1C2=C([H])C(OC)=C3C(C=CO3)=C2OC(C4=CC([H])=CC(OC)=C4)=C1</chem>
27.	<chem>O=C1C2=C([H])C([H])=C3C(C=CO3)=C2OC(C4=CC(OC)=CC(OC)=C4)=C1</chem>
28.	<chem>O=C1C2=C([H])C([H])=C3C(C=CO3)=C2OC(C4=CC(OCO5)=C5C=C4OC)=C1</chem>
29.	<chem>O=C1C2=C(O)C3=C(OC=C3)C=C2OC(C4=CC=C(OCO5)C5=C4)=C1</chem>
30.	<chem>O=C1C2=CC3=C(OC=C3)C=C2OC(C4=CC=C(O)C(O)=C4)=C1</chem>
31.	<chem>O=C1C2=CC3=C(OC=C3)C=C2OC(C4=CC=C(O)C(OC)=C4)=C1</chem>
32.	<chem>O=C1C2=C(O)C=C3C(CCC(C)(C)O3)=C2OC4=C1C/C=C(C)\C)OC5=C4C=C(O)C(O)=C5</chem>
33.	<chem>O=C1C2=C(O)C=C(O)C(C/C=C(C)/C)=C2OC3=C1C(/C=C(C)\C)OC4=C3C=C(O)C(O)=C4</chem>
34.	<chem>O=C1C2=C(O)C=C3C(C=CC(C)(C)O3)=C2OC(C4=CC=C(O)C(O)=C4)=C1</chem>
35.	<chem>O=C1C2=C(O)C=C(O)C(C/C=C(C)/C)=C2OC(C3=C(O)C=C(OC)C(O)=C3)=C1C/C=C(C)/C</chem>
36.	<chem>O=C1C2=C(O)C=C(O)C(C/C=C(C)/C)=C2OC3=C1CC(C(C)=C)C4=C3C(O)=CC(O)=C4O</chem>
37.	<chem>O=C1C2=C(O)C3=C(OC(C)(C)C=C3)C(C/C=C(C)/CC/C=C(C)\C)=C2OC(C4=CC(O)=C(O)C=C4O)=C1C/C=C(C)\C</chem>
38.	<chem>O=C1C2=C(O)C3=C(OC(C)(C)C=C3)C(C/C=C(C)/CC/C=C(C)\C)=C2OC(C4=C5C(O)=C(O)C=C4O)=C1CC5C(C)=C</chem>
39.	<chem>O=C1C2=C(O)C3=C(OC(C)(C)C=C3)C=C2OC(C4=C5C(O)=C(O)C=C4O)=C1CC5C(C)=C</chem>
40.	<chem>O=C1C2=C(O)C/C=C\C(C)C=C(O)C=C2OC3=C1C(/C=C(C)/C)OC4=C3C=CC(O)=C4</chem>

41.	O=C1C2=C(O)C3=C(OC(C)(C)C=C3)C=C2OC4=C1C(/C=C(C)/C)OC5=C4C=CC(O)=C5
42.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C(C/C=C(C)/C)=C2OC3=C1CC(C(C)=C)C4=C3C(O)=CC(OC)=C4O
43.	O=C1C2=C(O)C=C(OC(C)(CC/C=C(C)/C)C=C3)C3=C2OC4=C1CC(C(C)=C)C5=C4C(O)=CC(O)=C5O
44.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC3=C1C(/C=C(C)\C)OC4=C3C=C(OC)C(O)=C4
45.	O=C1C2=C(O)C3=C(OC(C)(C)C=C3)C(C/C=C(C)\C)=C2OC(C4=CC(O)=C(O)C=C4O)=C1C(O)/C=C(C)/C
46.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C(C/C=C(C)\C)=C2OC(C3=CC(O)=C(OC)C=C3O)=C1C(O)/C=C(C)/C
47.	O=C1C2=C(O)C(C/C=C(C)/CC/C=C(C)\C)=C(OC(C)(C)C=C3)C3=C2OC4=C1CC5C6=C4C(O)=CC(O)=C6OC5(C)C
48.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC3=C1CC(C(C)=C)C4=C3C(O)=C5C(OC(C)(C)C=C5)=C4O
49.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C(CC(O)C(C)(O)C)=C2OC3=C1C(O)C4C5=C3C(O)=CC(O)=C5OC(C)4C
50.	O=C1C2=C(O)C(C/C=C(C)/C)=C(OC)C=C2OC(C3=CC=C(O)C=C3O)=C1CC(O)C(C)=C
51.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC3=C1CC4C5=C3C(O)=CC(O)=C5OC(O)C4C
52.	O=C1C2=C(O)C=C(OC(C)(C)C=C3)C3=C2OC4=C1CC5C6=C4C(O)=C([H])C(O)=C6OC5(CO)C
53.	O=C1C2=CC=C(O)C(C/C=C(C)/CC/C=C(C)/C)=C2OC(C3=CC=C(O)C(O)=C3)=C1
54.	O=C1C2=CC(C/C=C(C)/C)=C(OC(C)(C)C=C3)C3=C2OC(C4=CC=C(O)C(O)=C4)=C1
55.	O=C1C2=CC3=C(OC(C)(C)C=C3)C(C/C=C(C)/C)=C2OC(C4=CC=C(O)C(O)=C4)=C1
56.	O=C1C2=C(O)C=C(OC(C3=CC=C(O)C=C3)=O)C=C2OC(C4=CC=C(O)C=C4)=C1
57.	O=C1C2=CC=C(O)C=C2OC(C3=CC(OC(C4=CC=CC=C4)=O)=CC=C3O)=C1
58.	O=C1C2=C(O)C(S(=O)(O)=O)=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(OC)C=C3)=C1
59.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3(O)C=CC(O)C=C3)=C1
60.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3(O)C=CC(C=C3)=O)=C1
61.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3(O)C=CC(CC3OC)=O)=C1
62.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(OC)=C(OC(C4=CC=C(O)C(OC)=C4)C(CO)O)C(OC)=C3)=C1
63.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC3=C1C(CO)C(C4=CC(OC)=C(O)C=C4)C5=C(OC)C(O)=C(OC)C=C35
64.	O=C1C2=C(O)C3=C(OCO3)C=C2OC(C4=C(O)C=CC=C4)=C1OC
65.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C=C3[OH]4)=C1O[Ca]45OC6=C(OC(C=C(O)C=C7O)=C7C6=O)C8=C([OH]5)C=C(O)C=C8
66.	O=C1C2=C(OC)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C=C3[OH]4)=C1O[Mg]45OC6=C(OC(C=C(O)C=C7OC)=C7C6=O)C8=C([OH]5)C=C(O)C=C8
67.	O=C1C2=C(OC)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C=C3OC)=C1O
68.	O=C1C2=CC=C(O)C=C2OC(C3=CC(O)=C(OC)C=C3)=C1O
69.	O=C1C2=C([H])C([H])=C(O)C(OC)=C2OC(C3=CC(O)=C(OC)C=C3)=C1OC
70.	O=C1C2=C(OC)C(OC)=C(O)C=C2OC(C3=CC(O)=C(OC)C=C3)=C1O
71.	O=C1C2=C(O)C(OC)=C(OC)C(OC)=C2OC(C3=CC(OC)=C(O)C(OC)=C3)=C1O
72.	O=C1C2=C(O)C=C(OC)C(C)=C2OC(C3=CC=C(O)C=C3)=C1O
73.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C(C)=C2OC(C3=CC=C(O)C=C3)=C1OC
74.	O=C1C2=C(O)C(C)=C(O)C(C)=C2OC(C3=CC=C(OC)C=C3)=C1OC
75.	O=C1C2=C(O)C(OC/C=C(C)/C)=C(OC(C)(C)C=C3)C3=C2OC(C4=CC=CC=C4)=C1OC
76.	O=C1C2=C(O)C=C(OC=C3)C3=C2OC(C4=CC=C(OCO5)C5=C4)=C1O
77.	O=C1C2=CC=C(OC(C)(C)[C@H](OC(C)=O)[C@H]3OC(C)=O)C3=C2OC(C4=CC=CC=C4)=C1OC
78.	O=C1C2=CC=C(OC(C)(C)[C@@H](OC(C)=O)[C@H]3O)C3=C2OC(C4=CC=CC=C4)=C1OC

79.	O=C1C2=CC=C(OC(C)(C)[C@@H](O)[C@H]3OC(C)=O)C3=C2OC(C4=CC=CC=C4)=C1OC
80.	O=C1C2=CC=C(OC(C(C)(O)C)=C3)C3=C2OC(C4=CC=CC=C4)=C1OC
81.	O=C1C2=CC(O)=C(OC=C3)C3=C2OC(C4=CC=CC([H])=C4)=C1OC
82.	O=C1C2=CC([H])=C(OC=C3)C3=C2OC(C4=CC=CC(O)=C4)=C1OC
83.	O=C1C2=CC([H])=C(OC=C3)C3=C2OC(C4=CC(OC)=CC(O)=C4)=C1OC
84.	O=C1C2=CC([H])=C(OC=C3)C3=C2OC(C4=CC(OC)=CC(OC)=C4)=C1OC
85.	O=C1C2=C(O)C([H])=C(O)C(CC(C/C=C(C)/C)C(C)=C)=C2OC(C3=CC=C(O)C=C3)=C1O
86.	O=C1C2=C3C(CCC(C)(C)O3)=C4C(CCC(C)(C)O4)=C2OC(C5=CC=C(O)C=C5)=C1O
87.	O=C1C2=C(OC)C=C3C(CCC(C)(C)O3)=C2OC(C4=CC=C(O)C=C4)=C1O
88.	O=C1C2=C(O)C=C3C(CCC(C)(C)O3)=C2OC(C4=CC=C(OC(C)(C)CC5)C5=C4)=C1O
89.	O=C1C2=CC=C(OC)C=C2OC3=C1OCC4=C3C=C5C(OCO5)=C4
90.	O=C1C2=C(OC)C(OC)=C(O)C=C2OC(C3=CC(CCCCCC(C)COC(C)=O)=C(O)C=C3)=C1O
91.	O=C1C2=C(O)C=C(OC)C(CC3=C(O)C=CC=C3)=C2OC(C4=CC=C(O)C(OC)=C4)=C1OC
92.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C(C(OC)=O)C3=CC(C/C=C(C)/CO)=C(O)C4=C3CCC(C)(C)O4)=C2OC(C5=CC=C(O)C(O)=C5)=C1O
93.	O=C1C2=C(O)C([C@H]3N[C@H](C(O)=O)CC3)=C(O)C=C2OC(C4=CC=C(O)C(O)=C4)=C1O
94.	O=C1C2=C(O)C([C@H]3N[C@H](C(O)=O)CC3)=C(O)C=C2OC(C4=CC=C(O)C(O)=C4)=C1O
95.	O=C1C=C(C2=CC=CC=C2)OC3=C1C(OC)=C(O)[C@H]4[C@@H]([C@H]([C@@H]([C@H](CO)O4)O)O)C=C3
96.	O=C1C2=C(O)C(OC)=C(OC)C(OC)=C2O[C@H](C3=CC(O)=C(OC)C=C3)C1
97.	O=C1C2=C(O)C3=C(OC(C)(C)C=C3)C(CC4=C(O)C(C(C)=O)=C(O)C(C)=C4O)=C2O[C@H](C5=C(C=C(O)C=C5)C1
98.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C(C[C@@](C(C)=C)([H])CCC(C)=C)=C2O[C@H](C3=CC=CC=C3)C1
99.	O=C1C2=C(O)C3=C(O[C@]4([H])[C@@]3([H])C[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]4O)C=C2OC(C5=CC=C(O)C=C5)=C1
100.	O=C1C2=C(O)C=C(O[C@@H]3O[C@H](C(O)=O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C2OC(C4=CC=C(O)C=C4)=C1
101.	O=C1C2=C(O)C=C(O[C@@H]3O[C@H](C(O)=O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C2OC(C4=CC=C(O)C(O)=C4)=C1
102.	OC1=C([C@@H]2C[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]2O)C(O)=C(C(C=C(C3=CC=C(O)C=C3)O4)=O)C4=C1C5OC[C@H](O)[C@H](O)[C@H]5O
103.	OC1=CC(O)=C(C(C(O[C@H]2[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)C(COC/C=C/C3=CC=C(O)C=C3)=O)O2)=C(C4=CC=C(O)C=C4)O5)=O)C5=C1
104.	OC1=CC(O)=C(C(C(O[C@H]2[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)C(CO)O2)=C(C3=CC=C(O)C(O)=C3)O4)=O)C4=C1
105.	OC1=C(C(C(O)=C(C2=CC=C(O)C(O)=C2)O3)=O)C3=CC(O[C@H]4[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O4)=C1
106.	OC1=CC(O[C@H]2[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O2)=C(C(C(O)=C(C3=CC=C(O)C(O)=C3)O4)=O)C4=C1
107.	OC1=C(C(C(O)=C(C2=CC=C(O)C(O)=C2)O3)=O)C3=CC(O[C@H]4[C@H](O)[C@@]5([H])[C@@H](O)[C@](CO)(O)CO5)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O4)=C1
108.	OC1=C(C(C(O)=C(C2=CC=C(OC)C(O)=C2)O3)=O)C3=CC(O[C@H]4[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO[C@H]5[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](C)O5)O4)=C1
109.	OC1=C(C(C(O)=C(C2=CC=C(O)C=C2)O3)=O)C3=CC(O[C@H]4[C@H](O[C@H]5[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](C)O5)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O4)=C1
110.	OC1=C(C(C=C(C2=CC=C(O)C=C2)O3)=O)C3=CC(O[C@H]4[C@@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO[C@H]5[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](C)O5)O4)=C1

111.	OC1=CC(O)=C(C(C=C(C2=CC=C(O)C=C2)O3)=O)C3=C1[C@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O
112.	OC1=CC(O)=C(C(C=C(C2=CC=C(O)C=C2)O3)=O)C3=C1[C@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4OC5[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](C)O5
113.	OC1=CC(O)=C(C(C(O[C@@H]2OC[C@H](O)[C@H](O)[C@H]2O)=C(C3=CC=C(O)C(O)=C3)O4)=O)C4=C1
114.	OC1=CC(O)=C(C(C(O[C@@H]2O[C@H](CO)[C@H](O)[C@H]2O)=C(C3=CC=C(O)C(O)=C3)O4)=O)C4=C1
115.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C(O)=C3)=C1OC4[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](C)O4
116.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C(O)=C3)=C1OC4[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H](O)[C@@H](CO)O4
117.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C(O)=C3)=C1OC4O[C@@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O
118.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(O)=C(O)C(O)=C3)=C1OC4[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](C)O4
119.	O=C1C2=C(O)C(OC)=C(O[C@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C2OC(C4=CC(OC)=C(O)C=C4)=C1OC
120.	O=C1C2=C(O)C(OC)=C(O[C@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C2OC(C4=CC(O)=C(OC)C=C4)=C1OC
121.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C=C3)=C1OC4O[C@H](COC/C=C/C5=CC=C(O)C=C5)=O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O
122.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=CC=C3)=C1OC4[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]5[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](C)O5)O4
123.	O=C1C2=C(O)C=C(O[C@@H]3O[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O[C@H]4[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](C)O4)C=C2OC(C5=CC=C(O)C=C5)=C1O
124.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C(O)=C3)=C1OC4[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO[C@@H]5[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H](O)CO5)O4
125.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C(O)=C3)=C1OC4[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO[C@H]5[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](C)O5)O4
126.	O=C1C2=C(O)C=C(O[C@H]3[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](C)O3)C=C2OC(C4=CC=C(O)C=C4)=C1OC5[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H](O)[C@@H](CO[C@H]6[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](C)O6)O5
127.	O=C1C2=C(O)C=C(O[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O3)C=C2OC(C4=CC=C(O)C=C4)C1
128.	O=C1C2=C(O)C=C(O[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C2OC(C4=CC=C(O)C(O)=C4)C1
129.	O=C1C2=C(O)C=C(O[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](COC4[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](C)O4)O3)C=C2OC(C5=CC=C(OC)C=C5)C1
130.	O=C1C2=C(O)C=C(O[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO[C@H]4[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](C)O4)O3)C=C2OC(C5=CC=C(OC)C(O)=C5)C1
131.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(O)=C(O)C(O)=C3)=C1OC4O[C@H](C)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]4O
132.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C=C3)=C1OC4O[C@H](C)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]4O
133.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C(O)=C3)=C1OC4O[C@H](CO)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]4O

134.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C(O)=C3)=C1OC4O[C@H](C)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]4O
135.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C(O)=C3)=C1OC4O[C@H](CO)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]4O
136.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C(O)=C3)=C1OC4O[C@H](CO[C@@H]5O[C@@H]([C@H](O)[C@H](O)[C@H]5O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]4O
137.	O=C1C2=C(O)[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O[C@@H]4OC[C@](O)(C(O)[C@H]4O)C=C(O)C(C5=CC(N)=CC(O)=C5)=C2OC(C6=CC=C(O)C(OC)=C6)=C1
138.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(OC)C=C3)=C1O[C@@H]4O[C@H](COC(CCCCCCCC)=O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O
139.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2O[C@H](C3=CC=C(O)[C@@H]4OC[C@@](O)(CO)[C@@H]4O)C(O)C=C3)C1
140.	O=C1C2=C(O)C=C(O)[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C2OC(C4=CC=C(O)C=C4)=C1
141.	O=C1C2=C(O)C=C(O)[C@@H]3O[C@H](COC(CC(O)=O)=O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C2OC(C4=CC=C(O)C=C4)=C1
142.	O=C1C2=C(O)C=C(O)[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](OC(C)=O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C2OC(C4=CC=C(O)C=C4)=C1
143.	O=C1C2=C(O)C=C(O)[C@@H]3O[C@H](COC(/C=C/C4=CC=C(O)C(O)=C4)=O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C2OC(C5=CC=C(O)C=C5)=C1
144.	O=C1C2=C(O)C=C(O)[C@@H]3O[C@H](COC(C)=O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C2OC(C4=CC=C(O)C=C4)=C1
145.	O=C1C2=C(O)C=C(O)[C@@H]3O[C@H](COC(CC(O)=O)=O)[C@@H](OC(C)=O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C2OC(C4=CC=C(O)C=C4)=C1
146.	O=C1C2=C(O)C=C(O)[C@@H]3O[C@H](COC(C)=O)[C@@H](OC(C)=O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C2OC(C4=CC=C(O)C=C4)=C1
147.	O=C1C2=C(O)C=C(O)[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](OC(C)=O)[C@H]3O)C=C2OC(C4=CC=C(O)C=C4)=C1
148.	O=C1C2=C(O)C=C(O)[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](OC(C)=O)[C@H]3OC(C)=O)C=C2OC(C4=CC=C(O)C=C4)=C1
149.	O=C1C2=C(O)C=C(O)[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](OC(C)=O)[C@H](OC(C)=O)[C@H]3O)C=C2OC(C4=CC=C(O)C=C4)=C1
150.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)[C@H]4[C@H](OC(/C=C/C5=CC=C(O)C=C5)=O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O4)C=C3)=C1
151.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)[C@H]4[C@H](OC(/C=C/C5=CC=C(O)C=C5)=O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](COC(/C=C/C6=CC=C(O)C=C6)=O)O4)C=C3)=C1
152.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)[C@H]4[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](COC(/C=C/C5=CC=C(O)C=C5)=O)O4)C=C3)=C1
153.	O=C1C2=C(O)C=C(OC)C=C2OC(C3=C(O)[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O)C=CC=C3O)=C1
154.	O=C1C2=C(O)C([C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)=C(O)C(O)=C2OC(C4=CC=C(O)C(OC)=C4)=C1
155.	O=C1C2=C(O)C=C(O)[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](OS(=O)([O-]))=O)[C@H](O)[C@H]3O)C(O)=C2OC(C4=CC=C(O)C(O)=C4)=C1
156.	O=C1C2=C(O)C=C(OC)C(O)=C2OC(C3=C(O)[C@H]4[C@H](OC(C)=O)C(O)[C@H](O)[C@@H](CO)O4)C=CC=C3O)=C1

157.	O=C1C2=C(O)C=C(OC)C(O)=C2OC(C3=C(O[C@H]4[C@H](OC(C)=O)C(O)[C@H](O)[C@@H](COC(C)=O)O4)C=CC=C3O)=C1
158.	O=C1C2=C(O)C=C(OC)C(O)=C2OC(C3=C(O[C@H]4[C@H](O)C(OC(C)=O)[C@H](O)[C@@H](COC(C)=O)O4)C=CC=C3O)=C1
159.	O=C1C2=C(O)C=C(OC)C(O)=C2OC(C3=C(O[C@H]4[C@H](O)C(O)[C@H](O)[C@@H](COC(/C=C/C)=O)O4)C=CC=C3O)=C1
160.	O=C1C2=C(O)C=C(OC)C(O)=C2OC(C3=C(O[C@H]4[C@H](O)C(O)[C@H](O)[C@@H](CO)O4)C=CC=C3O)=C1
161.	O=C1C2=C(OC(C)=O)C=C(OC)C=C2OC(C3=C(O[C@H]4[C@H](OC(C)=O)C(OC(C)=O)[C@H](OC(C)=O)[C@@H](COC(C)=O)O4)C=CC=C3OC(C)=O)=C1
162.	O=C1C2=C(O[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](OC(C)=O)O3)C=C(OC)C=C2OC(C4=C(O)C=CC=C4O)=C1
163.	O=C1C2=C(O)C(OC)=C(O[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](COC(CC(O)(C)CC(O)=O)=O)O3)C(OC)=C2OC(C4=CC=C(O)C=C4)=C1
164.	O=C1C2=C(O)C(O)=C(O[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O[C@H]4[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O4)[C@H](O)[C@@H](CO)O3)C=C2OC(C5=CC=C(O)C(O)=C5)=C1
165.	O=C1C2=C(O)C(O)=C(O[C@H]3[C@H](O[C@H]4[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O4)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O3)C=C2OC(C5=CC=C(O)C(O)=C5)C1
166.	O=C1C2=C(O)C(O)=C(O[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](COC(/C=C/C4=CC(O)=C(O)C=C4)=O)O3)C=C2OC(C5=CC=C(O)C(O)=C5)=C1
167.	O=C1C2=C(O)C(O)=C(O[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](COC(C4=CC(O)=C(O)C=C4)=O)O3)C=C2OC(C5=CC=C(O)C(O)=C5)=C1
168.	O=C1C2=C(O)C(OC)=C(O[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O3)C=C2OC(C4=CC=C(O)C(O)=C4)=C1
169.	O=C1C2=C(O)C=C(O[C@H]3[C@H](O[C@H]4[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](COC(C)=O)O4)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O3)C(O)=C2OC(C5=CC=C(O)C=C5)=C1
170.	O=C1C2=C(O)C(OC)=C(O[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO[C@@H]4[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)CO4)O3)C=C2OC(C5=CC=C(O)C(OC)=C5)=C1
171.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(OC)=C(O[C@H]4[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)CO4)=C(O)C(O)=C3)=C1OC
172.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(OC)=C(O[C@H]4[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O4)C(O)=C3)=C1OC
173.	O=C1C2=C(O)C=C(O[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O3)C=C2OC(C4=C(C(OC)=C(OC)C(OC)=C4)=C1
174.	O=C1C2=C(O)C=C(O[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O3)C=C2OC(C4=C(C=C(O[C@H]5[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](CO)O5)C=C4)=C1
175.	O=C1C2=C(O)C=C(O[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O3)C=C2OC(C4=C(C=C(O[C@H]5O[C@@H](CO)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]5O)C=C4)=C1
176.	O=C1C2=C(O)C=C(O[C@H]3[C@H](O[C@H]4[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](COC(C)=O)O4)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](COC(C)=O)O3)C(O)=C2OC(C5=CC=C(OC)C=C5)=C1
177.	O=C1C2=C(O)C=C(O[C@H]3[C@H](O[C@H]4[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](COC(C)=O)O4)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](COC(C)=O)O3)C(O)=C2OC(C5=CC=C(O)C(O)=C5)=C1
178.	O=C1C2=C(O)C=C(O[C@H]3[C@H](O[C@H]4[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](COC(C)=O)O4)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O3)C(O)=C2OC(C5=CC=C(O)C(O)=C5)=C1
179.	O=C1C2=C(O)C=C(O[C@H]3[C@H](O[C@H]4[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](COC(C)=O)O4)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O3)C(O)=C2OC(C5=CC=C(O)C=C5)=C1

180.	O=C1C2=C(O)C=C(O[C@H]3[C@H](O[C@H]4[C@H](O)[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](COC(C)=O)O4)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O3)C(O)=C2OC(C5=CC=C(OC)C=C5)=C1
181.	O=C1C2=C(O)C=C(OC(/C=C/C3=CC=C(O)C=C3)=O)C=C2OC(C4=CC=C(O[C@H]5O[C@@H](C O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]5O)C=C4)=C1
182.	O=C1C2=C(O)C=C(O[C@@H]3O[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]3O)C=C2OC(C4=CC =C(O)C=C4)=C1O[C@@H]5O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]5O[C@@H]6O[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]6O
183.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C(O)=C3)=C1O[C@@H]4O[C@@H](C)[C@@H](O) [C@@H](O)[C@H]4O
184.	O=C1C2=C(O)C=C(O[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O3)C=C2OC(C4=C C=C(OC)C(OC)=C4)=C1O
185.	O=C1C2=C(O)C=C(O[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O3)C=C2OC(C4=C C=C(O)C(O)=C4)=C1O[C@H]5[C@H](O[C@H]6[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O6)[C@@H](O)[C@@H](O)CO5
186.	O=C1C2=C(O)C=C(O[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O3)C=C2OC(C4=C C=C(O)C(O)=C4)=C1O[C@H]5[C@H](O[C@H]6[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO C(/C=C/C7=CC(O)=C(O)C=C7)=O)O6)[C@@H](O)[C@@H](O)CO5
187.	O=C1C2=C(O)C=C(O[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O3)C=C2OC(C4=C C=C(O)C(O)=C4)=C1O[C@H]5[C@H](O[C@H]6[C@H](OC(/C=C/C7=CC(O)=C(O)C=C7)=O)[C @@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O6)[C@@H](O)[C@@H](O)CO5
188.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C(O)=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O[C@H]5[C@H](O) [C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O5)[C@@H](O)[C@@H](O)CO4
189.	O=C1C2=C(O)C=C(O[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O3)C=C2OC(C4=C C=C(O)C=C4)=C1O[C@H]5[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H](O)CO5
190.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C([H])=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O[H])C(O)[C@H](O)[C@@H](O[H])O4
191.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C(O)=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O[H])C(O)[C@H](O) [C@@H](O[H])O4
192.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C([H])=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O[C@@H]5[C@H]([C@H]([C@@H]([C@@H](C)O5)O)O)C(O)[C@H](O)[C@@H](O[H])O4
193.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C(O)=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O[C@@H]5[C@H]([C@H]([C@@H]([C@@H](C)O5)O)O)C(O)[C@H](O)[C@@H](O[H])O4
194.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C(O)=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O)C(O)[C@H](O)[C @@@H](O[C@@H]5[C@H]([C@H]([C@@H]([C@@H](C)O5)O)O)O4
195.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C([H])=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O)C(O)[C@H](O)[C@@H](O[C@@H]5[C@H]([C@H]([C@@H]([C@@H](C)O5)O)O)O)O4
196.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C([H])=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O[C@@H]5[C@H]([C@H]([C@@H]([C@@H](C)O5)O)O)O)C(O)[C@H](O)[C@@H](O[C@@H]6[C@H]([C@H] ([C@@H]([C@@H](C)O6)O)O)O)O4
197.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C(O)=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O[C@@H]5[C@H]([C@H]([C@@H]([C@@H](C)O5)O)O)O)C(O)[C@H](O)[C@@H](O[C@@H]6[C@H]([C@H]([C@@H]([C@@H](C)O6)O)O)O)O4
198.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C([H])=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O)C(O)[C@H](O)[C@@H](C(O)=O)O4
199.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C(O)=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O)C(O)[C@H](O)[C @@@H](C(O)=O)O4

200.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C([H])=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O[C@@H]5[C@H]([C@H]([C@@H]([C@@H](C)O5)O)O)C(O)[C@H](O)[C@@H](C(O)=O)O4
201.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C(O)=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O[C@H]5[C@H]([C@H]([C@@H]([C@@H](C)O5)O)O)C(O)[C@H](O)[C@@H](C(O)=O)O4
202.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C=C3)=C1O[C@H]4[C@H](OC5[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](C)O5)C(O)[C@H]6[C@H](O)C(O)[C@H](O)[C@@H](CO)O6)[C@H](O)[C@@H](CO)O4
203.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C=C3)=C1O[C@H]4[C@H](OC5[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](C)O5)C(O)[C@H]6[C@H](O)C(O)[C@H](O)[C@@H](CO[C@H]7[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](C)O7)O6)[C@H](O)[C@@H](CO)O4
204.	O=C1C2=C(O)C=C(O)[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O3)C=C2OC(C4=C C=C(O)C=C4)=C1O[C@H]5[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO[C@H]6[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H](O)CO6)O5
205.	O=C1C2=C(O)C=C(O)[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O3)C=C2OC(C4=C C=C(O)C(O)=C4)=C1O[C@H]5[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO[C@H]6[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H](O)CO6)O5
206.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C(O)=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO[C@H]5[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H](O)CO5)O4
207.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO[C@H]5[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H](O)CO5)O4
208.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C([H])=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O)[C@@H](O[H])[C@H](COC(C)=O)O4
209.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C(O)=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O)[C@@H](OC(C)=O)[C@H](COC(C)=O)O4
210.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C(O)=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O)[C@@H](OC(C)=O)[C@H](CO)O4
211.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C=C3)=C1O[C@H]4[C@H](OC(C)=O)[C@H](OC(C)=O)[C@@H](O[H])[C@H](C)O4
212.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C=C3)=C1O[C@H]4[C@H](OC(C)=O)[C@H](OC(C)=O)[C@@H](OC(C)=O)[C@H](C)O4
213.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C=C3)=C1O[C@H]4[C@H](OC(/C=C/C5=CC=C(O)C=C5)=O)[C@H](O)[C@@H](OC(/C=C/C6=CC=C(O)C=C6)=O)[C@H](C)O4
214.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C=C3)=C1O[C@H]4[C@H](OC(/C=C/C5=CC=C(O)C=C5)=O)[C@H](O)[C@@H](OC(/C=C/C6=CC=C(O)C=C6)=O)[C@H](C)O4
215.	O=C1C2=C(O)C=C(O)[C@H]3[C@H](OC(/C=C/C4=CC=C(O)C=C4)=O)[C@H](OC(/C=C/C5=CC=C(O)C=C5)=O)[C@@H](O)[C@H](C)O3)C=C2OC(C6=CC=C(O)C=C6)=C1O
216.	O=C1C2=C(O)C=C(O)[C@H]3[C@H](OC(/C=C/C4=CC=C(O)C=C4)=O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](C)O3)C=C2OC(C5=CC=C(O)C=C5)=C1O
217.	O=C1C2=C(O)C(OC)=C(O)[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O3)C=C2OC(C4=CC=C(O[H])C(O)=C4)=C1O[H]
218.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O[H])C(O)=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O)[C@@H](OC(C)=O)[C@@H](O)CO4
219.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O[H])C(O)=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](OC(C)=O)[C@H](O)O4
220.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O[H])C(O)=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H](OC(C)=O)CO4

221.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O[H])C(O)=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)O4
222.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(O)=C(O[H])C(O)=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O4
223.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(O)=C(O[H])C(O)=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](COC(C5=CC(O)=C(O)C(O)=C5)=O)O4
224.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(O)=C(O[H])C(O)=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O)C(O)[C@@H](O)[C@@H](CO)O4
225.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(O)=C(O[H])C(O)=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O)C(O)[C@@H](O)[C@@H](COC(C)=O)O4
226.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(O)=C(O[H])C(O)=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O)C(O)[C@@H](O)[C@@H](COC(C5=CC(O)=C(O)C(O)=C5)=O)O4
227.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(O)=C(O[H])C(O)=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O)C(O)[C@H](O)CO4
228.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(O)=C(O[H])C(O)=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O)C(O)[C@@H](O)CO4
229.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(O)=C(O[H])C(O)=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O)[C@H]5[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](C)O5)C(O)[C@H](O)[C@@H](CO)O4
230.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC([H])=C(O[H])C(O)=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O)C(O)[C@H](O)[C@@H](CO)O4
231.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(O)=C(O[H])C(O)=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O)[C@H](O)C(OC(C)=O)[C@H](C)O4
232.	OC1=C(C2=CC(O)=C(C/C=C(C)/C)C=C2)OC3=C(C/C=C(C)/C)C(O)=C(C/C=C(C)\C)C(O)=C3C1=O
233.	OC1=C(C2=CC(O)=C(C[C@H](O)C(C)=C)C=C2)OC3=C(C/C=C(C)/C)C(O)=C(C/C=C(C)\C)C(O)=C3C1=O
234.	OC1=C(C2=CC(O)=C([H])C=C2)OC3=C(C/C=C(C)/C)C(O)=C(CCC(C)(C)O4)C4=C3C1=O
235.	OC1=C(C2=CC(O)=C(C[C@H](O)C(C)=C)C=C2)OC3=C(CCC(C)(C)O4)C4=C(C/C=C(C)\C)C(O)=C3C1=O
236.	OC1=C(C2=CC(O)=C(C/C=C(C)/C)C=C2)OC3=C(C/C=C(C)/C)C(O)=C(CCC(C)(C)O4)C4=C3C1=O
237.	OC1=C(C2=CC(O)=C(C/C=C(C)/C)C=C2)OC3=C(CCC(C)(C)O4)C4=C(CCC(C)(C)O5)C5=C3C1=O
238.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC3=C1OC4=C3C(CC5C(C)(C)CCC=C5C)=C(O)C(O)=C4
239.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C4=C3C[C@@]5([H])[C@@](CCCC5(C)(C)O4)=C1O
240.	CC1(C)CC=C[C@]([C@]1([H])C2)(C)OC3=C2C4=C(C=C3O)OC5=C4OC6=CC(O)=CC(O)=C6C5=O
241.	O=C1C2=C(O)C=C(OC)C=C2OC(C3=CC(OC)=C(OC/C=C(C)/C)C=C3)=C1OC
242.	O=C1C2=C([H])C=C(OC)C=C2OC(C3=CC=C([H])C=C3)=C1OC(C)=O
243.	O=C1C2=C(O)C=C(OC)C=C2OC(C3=CC=C(O)C=C3)=C1OC(C)=O
244.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC([H])=C(O)C=C3)=C1OC(/C=C\C4=CC=C(O)C([H])=C4)=O
245.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(O)=C(O)C=C3)=C1OC(/C=C\C4=CC=C(O)C(O)=C4)=O
246.	O=C1C2=C(O)C=C(OC)C=C2OC3=C1OCC4=C3C=CC(O)=C4OC
247.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(O)=C(O)C=C3)(OC4=C5C=C(O)C=C4)C1(O5)O
248.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C(C3CCC(N3)=O)=C2OC(C4=CC(OO)=C(O)C=C4)=C1O
249.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C(C3CCC(N3)=O)=C2OC(C4=CC(OC)=C(O)C=C4)=C1O
250.	O=C1C2=C(OC)C=CC=C2OC(C3=CC(OC)=CC(OC)=C3)=C1

251.	O=C1C2=CC(C)=C(OC)C=C2OC(C3=CC=C(OC)C=C3)=C1
252.	O=C1C2=CC([H])=C(OC)C=C2OC(C3=CC=C(OC)C=C3)=C1
253.	O=C1C2=C(OC)C=C(OC)C=C2OC(C3=C(OC)C=CC(OC)=C3)=C1
254.	O=C1C2=C(OC)C=CC=C2OC(C3=C(OC)C(OC)=C(OC)C=C3)=C1
255.	O=C1C2=CC(O)=CC=C2OC(C3=C(OC)C([H])=C(OC)C(OC)=C3)=C1
256.	O=C1C2=CC(O)=CC=C2OC(C3=C([H])C(OC)=C(OC)C(OC)=C3)=C1
257.	O=C1C2=C(O)C3=C(OC)C=C2OC(C4=CC(OC)=C(O)C=C4)=C1
258.	O=C1C2=C(O)C=C(OC)C(OC)=C2OC(C3=C(OC)C=CC(O)=C3)=C1
259.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=C(O)C=C(O)C(OC)=C3)=C1
260.	O=C1C2=C(OC)C=CC=C2OC(C3=C(OC)C(OC)=C(OC)C(OC)=C3OC)=C1
261.	O=C1C2=C(OC)C(OC)=CC=C2OC(C3=C(OC)C4=C(OCO4)C(OC)=C3OC)=C1
262.	OC(C=C1)=CC=C1C2=CC(C3=C([H])C=C(O)C(OC)=C3O2)=O
263.	OC(C=C1)=CC=C1C2=CC(C3=C(OC)C=C(O)C(O)=C3O2)=O
264.	[H]C(C=C1)=C(O)C(O)=C1C2=CC(C3=CC=C(O)C(O)=C3O2)=O
265.	OC(C=C1)=C([H])C(O)=C1C2=CC(C3=CC=C(O)C(O)=C3O2)=O
266.	OC(C=C1)=C(C)C=C1C2=CC(C3=CC=C(O)C=C3O2)=O
267.	OC(C=C1)=C(O)C(O)=C1C2=CC(C3=C(O)C=C(O)C(/C=C/C(O)=O)=C3O2)=O
268.	O=C1C2=CC=C3C(C=C(C(C)(O)C)O3)=C2OC(C4=CC=CC=C4)=C1
269.	O=C1C2=CC=C3C(C=CC(C)(C)O3)=C2OC(C4=CC=C(OC)C=C4)=C1
270.	O=C1C2=CC=C3C(C=CO3)=C2OC(C4=CC(O)=C(O)C=C4)=C1
271.	O=C1C2=CC=C3C([C@]4(C(OC(C)(C)C4OC(C)=O)=O)CO3)=C2OC(C5=CC=CC=C5)=C1
272.	O=C1C2=C(O)C=C3C(C(C(OC(C)=O)C(C)(O)C)CO3)=C2OC(C4=CC=CC=C4)=C1
273.	O=C1C2=C(O)C=C([H])C=C2OC(C3=CC=CC=C3)=C1C/C=C(C)/C
274.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC=CC=C3)=C1C/C=C(C)/C
275.	O=C1C2=C(O)C=C3C(C=CC(C)(C)O3)=C2OC(C4=C(O)C(C=CC(C)(C)O5)=C5C=C4)=C1
276.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C(C/C=C(C)/C)=C2OC(C3=C(O)C(C=CC(C)(C)O4)=C4C=C3)=C1
277.	O=C1C2=C(O)C(C[C@H]3C(C)=CCCC3(C)C)=C(O)C=C2OC(C4=CC(O)=C(O)C=C4)=C1
278.	O=C1C2=C(O)C(C[C@H]3C([C@@H](O)CCC3(C)C)=C)=C(O)C=C2OC(C4=CC(O)=C(O)C=C4)=C1
279.	O=C1C2=C(O)C(C[C@H]3C(C)(O)CCCC3(C)C)=C(O)C=C2OC(C4=CC(O)=C(O)C=C4)=C1
280.	O=C1C2=C3C(C[C@](C(C)(C)CCC4)([H])[C@]4(C)O3)=C(O)C=C2OC(C5=CC(O)=C(O)C=C5)=C1
281.	O=C1C2=C(O)C3=C(OC(C)C3(C)C)C=C2OC(C4=CC(O)=C(O)C=C4)=C1
282.	O=C1C2=C(O)C(C/C=C(C)/C)=C(O)C(OC)=C2OC(C3=CC(OCO4)=C4C(OC)=C3)=C1
283.	O=C1C2=C(OC)C3=C(OC(C)(C)C=C3)C(OC)=C2OC(C4=CC(OCO5)=C5C(C/C=C(C)/C)=C4)=C1
284.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(OC)=C(OC)C=C3O)=C1C/C=C(C)/C
285.	O=C1C2=C(O)C([H])=C(O)C(C/C=C(C)\C)=C2OC3=C1CC4C5C3C(O)=CC(O)=C5OC4(C)C
286.	O=C1C2=C(O)C=C(OC)C=C2OC3=C1CC4C5C3C(O)=CC(OC)=C5OC4(C)C
287.	O=C1C2=C(O)C(/C=C/C(C)C)=C(OC)C=C2OC3=C1CC(C(C)=C)OC4C3C=CC(O)=C4
288.	O=C1C2=C(O)C(C/C=C(C)\C)=C(O)C(C/C=C(C)\C)=C2OC3=C1C(/C=C(C)/C)OC4=C3C=C(O)C(O)=C4
289.	O=C1C2=C(O)C(C/C=C(C)\C)=C(O)C(C/C=C(C)\C)=C2OC3=C1CC4C5C3C(O)=CC(O)=C5OC4(C)C
290.	O=C1C2=C(O)C3=C(OC(C)(C)C=C3)C(C/C=C(C)\C)=C2OC(C4=CC=C(O)C=C4O)=C1C/C=C(C)/C
291.	OC1=CC(O)=C(C(C(C=C(C(C)=C)C2=C3C(O)=C(C/C=C(C)/C)C(OC)=C2O)=C3O4)=O)C4=C1

292.	OC1=C(C(C(C[C@@]2([H])C3C4C(O)=CC(O)=C3O[C@@H](O)[C@@H]2C)=C4O5)=O)C5=C(C=CC(C)(C)O6)C6=C1
293.	OC1=C(C(C(C/C=C(C)\C)=C(C2CC(O)=C(O)C=C2OC)O3)=O)C3=C(C=CC(C)(C)O4)C4=C1
294.	OC1=C(C(C(C/C=C(C)\C)=C(C2=CC(O)=C(O)C=C2OC)O3)=O)C3=CC4=C1C=CC(C)(C)O4
295.	OC1=C(C(C(C/C=C(C)\C)=C(C2=CC(O)=C(O)C=C2OC)O3)=O)C3=C([H])C(O)=C1C/C=C(C)/C
296.	OC1=C(C(C(C/C=C(C)\C)=C(C2=CC(O)=C(O)C=C2OC)O3)=O)C3=C(C/C=C(C)/C)C(O)=C1[H]
297.	OC1=C(C(C(C/C=C(C)/CO)=C(C2=CC=C(O)C=C2OC)O3)=O)C3=C(C=CC(C)(CO)O4)C4=C1
298.	OC1=C(C(C(C(O)C(C)=C)=C(C2=CC=C(O)C=C2O)O3)=O)C3=C(C/C=C(C)\C)C(O)=C1
299.	OC1=C(C(C(C/C=C(C)\C)=C(C2=CC=C(O)C=C2O)O3)=O)C3=C(CC(O)C(C)=C)C(O)=C1
300.	OC1=C(C(C(C/C=C(C)/CCC(C)(C)O)=C(C2=CC=C(O)C=C2O)O3)=O)C3=CC(O)=C1
301.	[H]C1=C(C(C(C/C=C(C)\C)=C(C2=CC=C(O)C=C2O)O3)=O)C3=C([H])C(O)=C1
302.	O=C(OC1=C(O)C(O)=C(C(C=C(C2=CC=CC=C2)O3)=O)C3=C1)/C=C/C4=CC(O)=C(O)C=C4
303.	OC1=C(O)C(O)=C(C(C=C(C2=CC(O)=C(OC(C(O)C)=O)C=C2)O3)=O)C3=C1
304.	OC1=CC(O)=C(C(C=C(C2(O)CCC(OC)(OC)CC2)O3)=O)C3=C1
305.	OC1=C(C2=CC(C(C)=O)=CC=C2O)C(O)=C(C(C=C(C3=CC=C(O)C=C3)O4)=O)C4=C1
306.	O=C(C=C(C1=CC=CC=C1)O2)C3=C2C(C)(C)C(OC)=C(C)C3=O
307.	OC1=C(C2=CC(C(O)=O)=CC=C2OC)C(O)=C(C(C=C(C3=CC=C(O)C=C3)O4)=O)C4=C1
308.	O=C(C=C(C1=CC([H])=C(C2C(CCC/C=C(C)/C)=CCOC2=O)C=C1)O3)C(C3=C4)=C(OC)C=C4OC
309.	O=C(C=C(C1=CC(OC)=C(C2C(CCC/C=C(C)/C)=CCOC2=O)C=C1)O3)C(C3=C4)=C(OC)C=C4OC
310.	OC1=CC=CC(CO2)=C(O)C(C3=C2C=C(OC)C=C3O)=O)C1
311.	O=C(C(OC)=C(C1=CC=C(O)C=C1O)O2)C3=C2C=C(O)C=C3O
312.	OC1=C(OC)C=CC(CO2)=C(O)C(C3=C2C(O)=C(O)C=C3O)=O)C1
313.	O=C(C(OC)=C(C1=CC([H])=C(OC)C=C1)O2)C3=C2C(O)=C(OC)C(OC)=C3OC
314.	O=C(C(OC)=C(C1=CC(OC)=C(OC)C=C1)O2)C3=C2C(O)=C(OC)C(OC)=C3OC
315.	O=C(C(OC)=C(C1=CC=C(O)C=C1)O2)C3=C2C=CC(O)=C3O
316.	OC1=C(C2=CC(OC)=C(O)C(O)=C2)OC3=C(C1=O)C=CC(O)=C3
317.	OC1=C(C2=CC=C(OC)C=C2)OC3=C(C1=O)C=CC(O)=C3OC
318.	OC1=C(C2=CC([H])=C(O)C=C2)OC3=C(C1=O)C(O)=C(C)C(O)=C3
319.	O=C(C(OC)=C(C1=CC(C)=C(O)C=C1)O2)C3=C2C=C(OC)C(C)=C3O
320.	O=C1C2=C(O)C3=C(OC(C)(C)CC3)C=C2OC(C4=CC=C(O)C=C4)=C1OC
321.	OC1=C(C2=CC=C(OC)C=C2)OC3=C(CC(O)C(C)=C)C(O)=CC(O)=C3C1=O
322.	OC1=C(C2=CC=C(OC)C=C2)OC3=C(C=C(O)C(C)(C)O4)C4=CC(O)=C3C1=O
323.	C/C(C)=C/CC/C(C)=C/CC/C(C)=C/CC1=C(O)C=C2C(C(C(O)=C(C3=CC=C(O)C=C3)O2)=O)C1O
324.	OC1=C(C2=C(C/C=C(C)/CC/C=C(C)/C)C(O)=C(O)C(CC/C=C(C)/C)=C2)OC3=CC(O)=CC(O)=C3C1=O
325.	OC1=C(C2=C(C/C=C(C)/CC/C=C(C)/C)C(O)=C(OC)C([H])=C2)OC3=CC(O)=CC(O)=C3C1=O
326.	OC1=C(C(C(OC/C=C(C)/CC/C=C(C)\C)C2=C3C=C(C/C=C(C)\C)C(O)=C2O)=C3O4)=O)C4=CC(O)=C1
327.	OC1=C(C(C(OC/C=C(C)/CC/C=C(C)\C)C2=C3C=C4C(OC(C)(C)C=C4)=C2O)=C3O5)=O)C5=CC(O)=C1
328.	OC1=C(C(C(O)=C(C2=CC=C(OC)C=C2)O3)=O)C3=C(C/C=C(C)\C)C4=C1C=CC(C)(C)O4
329.	
330.	O=C1C2=CC=C3C(C=CO3)=C2OC(C4=CC(O)=C(O)C=C4)=C1O
331.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(CC(O)C(C)=C)=C(O)C=C3)=C1O
332.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(O)=C(O)C=C3)=C1O[C@H]4[C@H](OC/C=C\C5=CC=C(O)C(O)=C5)=O[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](C)O4

333.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(O)=C(O)C=C3)=C1O[C@H]4[C@H](OC(/C=C\C5=CC=C(O)C(O)=C5)=O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](C)O4
334.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(O)=C(O)C=C3)=C1O[C@H]4[C@H](OC(C5=CC(O)=C(O)C(O)=C5)=O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](C)O4
335.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(O)=C(O)C=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O)[C@H](OC(C5=CC(O)=C(O)C(O)=C5)=O)[C@@H](O)[C@H](C)O4
336.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(O)=C(O)C=C3)=C1O[C@]4([H])O[C@H](CC(C5=CC[C@H](C(C)(O)C)CC5)=O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O
337.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(O)=C(O)C=C3)=C1O[C@]4([H])O[C@H](CC(C5=CC[C@H](C(C)(O)C)CC5)=O)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]4O
338.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(O)=C(O)C=C3)=C1O[C@]4([H])O[C@H](CC(C5CC[C@H](C(C)(O)C)CC5)=O)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]4O
339.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(O)=C(O)C=C3)=C1OC4[C@H](OC(C5=CC(O)=C(O)C(O)=C5)=O)[C@@H](O)[C@@H](O)[C@@H](CO)O4
340.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(O)=C(O)C=C3)=C1OC4[C@H](OC(C5=CC(O)=C(O)C(O)=C5)=O)[C@@H](OC(C6=CC(O)=C(O)C(O)=C6)=O)[C@@H](O)[C@@H](CO)O4
341.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(O[H])=C(O)C=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O)[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H](CO[C@H]5[C@H](OC(C)=O)[C@@H](O)[C@]([H])(O)[C@@H](CO)O5)O4
342.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(O[H])=C(O)C=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O)[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H](CO[C@H]5[C@H](OC(C)=O)[C@@H](O)[C@]([H])(O)[C@@H](COC(C)=O)O5)O4
343.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(OC)=C(O)C=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O)[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H](CO[C@H]5[C@H](OC(C)=O)[C@@H](O)[C@](O)([H])CO5)O4
344.	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2OC(C3=CC(O[H])=C(O)C=C3)=C1O[C@H]4[C@H](O)[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H](CO[C@H]5[C@H](OC(C)=O)[C@@H](O)[C@](O)([H])CO5)O4
345.	O=C1C2=C(O)C(O[H])=C(O[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](COC(/C=C/C4=CC=C(O)C(O)=C4)=O)O3)C=C2OC(C5=CC=C(O[H])C(O)=C5)=C1O[H]
346.	O=C1C2=C(O)C(O[H])=C(O[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](COC(/C=C/C4=CC=C(O)C=C4)=O)O3)C=C2OC(C5=CC=C(O[H])C(O)=C5)=C1O[H]
347.	O=C1C2=C(O)C(O[H])=C(O[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](COC(C4=CC(O)=C(O)C(O)=C4)=O)O3)C=C2OC(C5=CC=C(O[H])C(O)=C5)=C1O[H]
348.	O=C1C2=C(O)C(O[H])=C(O[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](COC(/C=C/C4=CC=C(O)C(O)=C4)=O)O3)C=C2OC(C5=CC=C(O[H])C([H])=C5)=C1O[H]
349.	O=C1C2=C(O)C(OC)=C(O[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O3)C=C2OC(C4=CC=C(OC)C(O)=C4)=C1OC
350.	O=C1C2=C(O)C(O[H])=C(O[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O3)C=C2OC(C4=CC=C(O[H])C(O)=C4)=C1O[H]

Table 2: Binding energy of selected EGFR-TKIs and natural flavonoids obtained from docking

Compounds	Binding energy (ΔG°)
Erlotinib	-4.36
Gefitinib	-4.12
Lapatinib	-3.81
Afatinib	-5.96
Osimertinib	-5.62
1	-6.56
2	-6.26
3	-5.64
4	-5.21
5	-4.24
6	-3.98
7	-4.15
8	-4.27
9	-5.59
10	-8.68
11	-7.78
12	-6.37
13	-5.81
14	-4.92
15	-5.81