Combining Machine Learning with Molecular Docking and Steered Molecular Dynamics to Identify Potent ALK Inhibitors from the EMNPD Database

Nguyen Xuan Ha, Nguyen Hoang Hao, Phan Thi Thuy*

[1]*Institute of Chemistry, Vietnam Academy of Science and Technology (VAST), Hanoi, Vietnam*

[2]*Department of Chemistry, Vinh University, 182 Le Duan, Truong Vinh, Nghean 43000, Vietnam.*

Table S1. List of test dataset of ALK inhibitors from ChemBL database

No.	ID	SMILES	ΔG_{ML}
1	CHEMBL1822515	COc1ccccc1-c1ccc2cnc(Nc3ccc(N4CCN(C)CC4)cc3)nn12	-10.9196
2	CHEMBL1821735	CN1CCN(c2ccc(Nc3ncc4ccc(-c5ccccc5N(C)S(C)(=O)=O)n4n3)cc2)CC1	-11.5663
3	CHEMBL1822525	COc1cc(N2CCN(C[C@H](C)O)CC2)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3N(C)S(C)(=O)=O)n2n1	-11.3466
4	CHEMBL3912968	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(N6CCC(Cc7ccccc7)CC6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.5013
5	CHEMBL454440	Cc1c(O)c(O)cc2oc3cc(O)cc(O)c3c(=O)c12	-8.4512
6	CHEMBL3651828	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(F)F)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C(=O)CN(C)C)CC1	-10.0893
7	CHEMBL3651832	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(F)F)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C(=O)[C@@H]2CCCN2)CC1	-10.5928
8	CHEMBL3651836	CC(C)Oc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C(=O)N(C1CCN(C(=O)[C@@H]3CCCN3)CC1)C2	-10.6908
9	CHEMBL3651838	CC(C)Oc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C(=O)N(C1CCN(C(=O)[C@@H]3CCCN3C)CC1)C2	-10.8335
10	CHEMBL3651840	CC(C)Oc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C(=O)N(C1CCN(C(=O)C3CN(C)C3)CC1)C2	-11.2343
11	CHEMBL3651851	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3c(C)[nH]nc3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C(=O)CN2CCOCC2)CC1	-10.4775
12	CHEMBL3651868	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3c(C)[nH]nc3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C[C@@H](O)C(F)(F)F)CC1	-9.8982
13	CHEMBL3651869	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3c(C)[nH]nc3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C[C@H](O)C(F)(F)F)CC1	-10.014
14	CHEMBL2024000	COc1cc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4cccc(Oc5ccccc5)c4)C3)n2)cc(OC)c1OC	-9.5265
15	CHEMBL2023990	COc1cc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4ccc(OC(F)(F)F)cc4)C3)n2)cc(OC)c1OC	-11.3466
16	CHEMBL4745400	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCC(=O)NCCCCCCNc2cccc3c2C(=O)N(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)CC1	-6.8099

17	CHEMBL4752205	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCC(=O)NCCOCCNc2cccc3c2C(=O)N(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)CC1	-7.0794
18	CHEMBL4784856	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCC(=O)NCCOCCOCCOCCNCC(=O)Nc2cccc3c2C(=O)N(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)CC1	-7.4712
19	CHEMBL2023547	COc1cc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)Nc4ccccc4)C3)n2)cc(OC)c1OC	-8.6225
20	CHEMBL2023546	COc1cc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4ccc(C)cc4)C3)n2)cc(OC)c1	-9.2022
21	CHEMBL3115500	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4nc5cncc(-c6ccc(N7CCN(C)CC7)cc6)n5c4c3)cc2)CC1	-9.5013
22	CHEMBL3093151	Nc1ncc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cc1-c1nc2ccc(N3CCCC3)cc2o1	-9.1745
23	CHEMBL3352867	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)C3CNC3)c2)ncc1Cl	-10.8984
24	CHEMBL1164389	CN1CCN(c2ccc(-c3cnc4c(c3)N(Cc3c(Cl)cccc3C(F)(F)F)CCN4)cn2)CC1	-8.9296
25	CHEMBL1163505	CN1CCN(c2ccc(-c3cnc4c(c3)N(S(=O)(=O)c3cc(F)ccc3F)CCN4)cn2)CC1	-8.9816
26	CHEMBL1165499	CN1CCN(c2ccc(-c3cnc4c(c3)N(Cc3cc(F)ccc3F)CCN4)cn2)CC1	-9.5013
27	CHEMBL3972466	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(Nc6ccccc6[N+](=O)[O-])c5c4c3)cc2)CC1	-8.1146
28	CHEMBL3975454	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C(=C/c6ccccc6)c6ccccc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.3976
29	CHEMBL2442124	C[C@@H](Sc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-9.1585
30	CHEMBL3104853	COCc1c(C)c(O)c(O)c(O)c1C=O	-7.1343
31	CHEMBL1796241	COc1cc(N2CCOCC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(N[C@@H]2CCCC[C@@H]2NS(C)(=O)=O)n1	-9.1928
32	CHEMBL1796244	CCN1CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@@H]4CCCC[C@H]4NS(C)(=O)=O)n3)cc2CC1	-11.4115
33	CHEMBL1822523	COc1cc(N2CCN(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3OC)n2n1	-11.4253
34	CHEMBL1822527	COc1cc(N2CCC(N3CCOCC3)CC2)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3N(C)S(C)(=O)=O)n2n1	-11.5663
35	CHEMBL1642256	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccc(N4CCOCC4)cc3OC)n1)CCN(CC(F)F)CC2	-10.2638
36	CHEMBL1642253	COc1cc(N2CCOCC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCOCC3)cc2OC)n1	-9.816
37	CHEMBL1642261	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccc(C(N)=O)cc3OC)n1)CCN(CC(=O)N(C)C)CC2	-10.1936
38	CHEMBL1642265	COc1ccc(Nc2nc(Nc3cc4c(cc3OC)CCN(CC(=O)N(C)C)CC4)ncc2Cl)c(OC)c1	-10.4927
39	CHEMBL3109402	COc1cc2nc(C)oc2c(C[C@]2(C)[C@@H](C)CC[C@@]3(C)C(C)=CCC[C@@H]23)c1O	-7.7598

40	CHEMBL3116050	C[C@H](Nc1nc(Nc2cn(C)cn2)c2cc[nH]c2n1)c1ncc(F)cn1	-10.3552
41	CHEMBL2418752	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5cccc(F)c5)c4)c3c2)cn1	-9.444
42	CHEMBL2418748	Cc1nn(Cc2cc(F)ccc2F)c(C)c1-c1c[nH]c2ncc(-c3cnn(C)c3)cc12	-9.0327
43	CHEMBL2418760	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5cccc(O)c5)c4)c3c2)cn1	-9.4998
44	CHEMBL2418754	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5cccc(Cl)c5)c4)c3c2)cn1	-9.7079
45	CHEMBL2418754	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5cccc(Cl)c5)c4)c3c2)cn1	-10.6699
46	CHEMBL2418750	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5ccccc5)c4)c3c2)cn1	-9.9932
47	CHEMBL2403828	Cc1cc(Nc2ncc(C)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCO)CC1	-10.207
48	CHEMBL5283671	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccc4c(c3)B(O)OC4)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-11.2552
49	CHEMBL5270423	O=C(Nc1cccc(-n2cc(CNc3ccc(N4CCC(O)CC4)c(C(=O)N4CCCCC4)c3)nn2)c1)c1cc(F)cc(F)c1	-10.9984
50	CHEMBL5280251	O=C(Nc1cccc(-n2cc(CNc3ccc(N4CC(O)C4)c(C(=O)N4CCCCC4)c3)nn2)c1)c1cc(F)cc(F)c1	-11.1897
51	CHEMBL3263972	CCCCC1CN(C)CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4C(=O)NC)n3)cc21	-11.5076
52	CHEMBL3785384	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C(C)(C)/C(=N/N1CCOCC1)CC2	-9.437
53	CHEMBL3922762	C/C(=N\Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1)c1ccc(F)cc1	-10.1749
54	CHEMBL2023556	COc1cc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4cccc(OC(F)(F)F)c4)C3)n2)cc(OC)c1OC	-10.2533
55	CHEMBL1165421	O=C1CNc2ncc(-c3ccc(C(=O)N4CCC[C@H]4CN4CCCC4)cc3)cc2N1Cc1cc(F)ccc1F	-9.6994
56	CHEMBL1164180	CN1CCN(c2ccc(-c3cnc4c(c3)N(Cc3cc(Cl)ccc3C(F)(F)F)CCN4)cn2)CC1	-11.3466
57	CHEMBL2042983	CCN1C(=O)CCCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)c(OC)cc21	-10.6699
58	CHEMBL2023556	COc1cc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4cccc(OC(F)(F)F)c4)C3)n2)cc(OC)c1OC	-11.0571
59	CHEMBL2023545	Cc1ccc(CNC(=O)[C@H]2CCCN(c3ccnc(Nc4ccc5c(c4)OCCO5)n3)C2)cc1	-8.2685
60	CHEMBL2023534	COc1cc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4ccc(C)cc4)C3)n2)cc(OC)c1OC	-9.5871
61	CHEMBL3983644	CN1CCC(N2CCN(c3ccc(-c4ccc5[nH]c6nccc(Nc7ccccc7[N+](=O)[O-])c6c5c4)cc3)CC2)CC1	-7.1917
62	CHEMBL2010872	CC(C)Cn1c2ccc(Nc3ncccn3)cc2c2c3c(c4c(c21)CCc1nn(C)cc1-4)C(=O)NC3	-9.7573
63	CHEMBL5171152	COc1cc(N2CCC3(CCN(C)CC3)CC2)c(Cl)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-12.7649
64	CHEMBL5172847	COc1cc(N2CCC3(CCN(C)CC3)CC2)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-12.4381

65	CHEMBL5173297	COc1cc(N2CCC3(CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2c(F)cccc2P(C)(C)=O)n1	-10.441
66	CHEMBL562943	Clc1nccc2c1-c1[nH]c3ccc(Br)cc3c1CCN2CCc1c[nH]c2ccccc12	-7.1363
67	CHEMBL2418752	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5cccc(F)c5)c4)c3c2)cn1	-9.7276
68	CHEMBL2418753	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5ccc(F)cc5)c4)c3c2)cn1	-7.6694
69	CHEMBL3923844	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(N7CCN(C)CC7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-7.0916
70	CHEMBL3947279	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccccc6NS(C)(=O)=O)c5c4c3)cc2)CC1	-9.294
71	CHEMBL3961377	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(C#Cc6ccc(F)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.7667
72	CHEMBL1940182	CCCc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.7062
73	CHEMBL1940177	CC1(C)c2ccc(N3CCN(C4COC4)CC3)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.1542
74	CHEMBL2418747	Cc1nn(Cc2cccc(F)c2)c(C)c1-c1c[nH]c2ncc(-c3cnn(C)c3)cc12	-10.6497
75	CHEMBL2418758	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5cccc([N+](=O)[O-])c5)c4)c3c2)cn1	-10.148
76	CHEMBL2418757	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5cccc(C(=O)O)c5)c4)c3c2)cn1	-9.9407
77	CHEMBL1946802	COc1cc(N2CCN(C)CC2)c2cc1Nc1ncc(Cl)c(n1)Nc1cccc(c1)CC2	-11.7735
78	CHEMBL1946804	COc1cc(N2CCN(C)CC2)c2cc1Nc1ncc(Cl)c(n1)Nc1cc(ccc1N(C)S(C)(=O)=O)CC2	-13.1797
79	CHEMBL1946804	COc1cc(N2CCN(C)CC2)c2cc1Nc1ncc(Cl)c(n1)Nc1cc(ccc1N(C)S(C)(=O)=O)CC2	-11.3466
80	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.9196
81	CHEMBL2172337	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(Oc4ccccn4)cc32)CC1	-9.8752
82	CHEMBL2024001	COc1cc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4cccc(N5CCOCC5)c4)C3)n2)cc(OC)c1OC	-10.6497
83	CHEMBL2023999	COc1cc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4ccc(-c5ccccc5)cc4)C3)n2)cc(OC)c1OC	-9.7299
84	CHEMBL2023996	COC(=O)c1cccc(CNC(=O)[C@H]2CCCN(c3ccnc(Nc4cc(OC)c(OC)c(OC)c4)n3)C2)c1	-10.2327
85	CHEMBL4067503	CNCc1cc(OC)c(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)cc1C	-12.4381
86	CHEMBL2024002	COc1cc(Nc2nccc(N3CCC[C@@H](C(=O)NCc4ccc(C)cc4)C3)n2)cc(OC)c1OC	-7.6378
87	CHEMBL2023540	COc1cccc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4ccc(C)cc4)C3)n2)c1	-8.4977
88	CHEMBL3608519	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCCNC2=O	-12.0882
89	CHEMBL2403369	COc1ccc2c(c1)/C(=C/c1cc3c([nH]1)CCN(C(=O)N1CCN(C)CC1)C3)C(=O)N2	-8.8782

90	CHEMBL2418747	Cc1nn(Cc2cccc(F)c2)c(C)c1-c1c[nH]c2ncc(-c3cnn(C)c3)cc12	-9.3054
91	CHEMBL3972807	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n2)ccc2c1CCC[C@H](N1CCN(CCO)CC1)C2	-11.6821
92	CHEMBL3943236	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n2)ccc2c1CCC[C@@H](N1CCN(CCO)CC1)C2	-11.6312
93	CHEMBL3961771	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3N(C)S(C)(=O)=O)n2)ccc2c1CCCC(N1CCN(C)CC1)C2	-12.2519
94	CHEMBL3934268	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3N(C)S(C)(=O)=O)n2)ccc2c1CCCC(N1CCN(CCO)CC1)C2	-12.338
95	CHEMBL3934099	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3-n3cccn3)n2)ccc2c1CCCC(N1CCN(CCO)CC1)C2	-12.2519
96	CHEMBL3972653	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(c2OC)CCC[C@@H](N2CCN(CCO)CC2)C3)ncc1Cl	-11.6928
97	CHEMBL3823107	COc1cc(N2CC[C@@H](N(C)C)C2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-13.4478
98	CHEMBL3823256	COc1cc(P(C)(C)=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(C)(=O)=O)n1	-13.4478
99	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-13.0398
100	CHEMBL1922984	Cn1cc(/C=C2\C(=O)NN=C2c2nccs2)c2c(OCc3c(F)cccc3F)cccc21	-11.4115
101	CHEMBL1922969	Cc1nnsc1C1=NNC(=O)/C1=C\c1cn(C)c2cccc(OCc3ccc(F)cc3)c12	-9.0743
102	CHEMBL1922981	Cn1cc(/C=C2\C(=O)NN=C2c2nccs2)c2c(OCc3cccc(F)c3)cccc21	-9.816
103	CHEMBL3890636	COc1cc(N2CCNCC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-12.0882
104	CHEMBL3944539	CCNC(=O)N1CCN(c2ccc(Nc3ncc(C(F)(F)F)c(Nc4ccc(N5CCN(C(C)=O)CC5)cc4OC)n3)c(OC)c2)CC1	-11.6612
105	CHEMBL3896263	CCNC(=O)N1CCN(c2ccc(Nc3ncc(C(F)(F)F)c(Nc4ccc(N5CCN(C(=O)NCC)CC5)cc4OC)n3)c(OC)c2)CC1	-10.9196
106	CHEMBL3974726	COc1cc(N2CCN(C(=O)CO)CC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(=O)CO)CC3)cc2OC)n1	-12.0882
107	CHEMBL2042830	CCN1C(=O)CCCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@H]4[C@@H](C(N)=O)[C@@H]5C=C[C@H]4C5)n3)c(OC)cc21	-11.5663
108	CHEMBL2042827	CCN1C(=O)CCCc2c1ccc(Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3C(=O)NC)n1)c2OC	-9.5013
109	CHEMBL2042830	CCN1C(=O)CCCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@H]4[C@@H](C(N)=O)[C@@H]5C=C[C@H]4C5)n3)c(OC)cc21	-10.4927
110	CHEMBL2042981	CCN1C(=O)CCCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)N(C)C)n3)c(OC)cc21	-10.6699
111	CHEMBL4520341	C=CC(=O)Nc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3P(C)(C)=O)n2)c(OC)cc1N(C)CCN(C)C	-10.4927
112	CHEMBL3980776	CC1(C)c2cc(OC3CCOCC3)c(S(=O)(=O)N3CCOCC3)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.3706
113	CHEMBL3914907	CC1(C)c2cc(N3CCN(C4CCS(=O)(=O)CC4)CC3)c(Br)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-12.6875

114	CHEMBL1823361	CC1(C)c2cc(N3CCN(C4COC4)CC3)c(CCC3CCCC3)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.9111
115	CHEMBL3931742	CC(C)N1CCC(Cc2ccc3c(c2)C(=O)c2c([nH]c4cc(C#N)ccc24)C3(C)C)CC1	-11.2483
116	CHEMBL3736388	CCc1cc2c(cc1C1=CCN(C(=O)C3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.4381
117	CHEMBL3973126	CC1(C)c2cc(OC3CCNCC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)c(F)cc21	-11.6908
118	CHEMBL3948122	COc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1[nH]c3c(N)c(C#N)ccc3c1C2=O	-12.3599
119	CHEMBL2023995	COc1cc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4ccc([N+](=O)[O-])cc4)C3)n2)cc(OC)c1OC	-7.8478
120	CHEMBL3357439	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)CN)c2)ncc1Cl	-12.1531
121	CHEMBL4468747	CCc1cc2c(cc1-c1cccc(S(=O)(=O)F)c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.2879
122	CHEMBL2023555	COc1cc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4cccc(C)c4)C3)n2)cc(OC)c1OC	-10.043
123	CHEMBL2023538	Cc1ccc(CNC(=O)[C@H]2CCCN(c3ccnc(Nc4cccc(Cl)c4)n3)C2)cc1	-8.0799
124	CHEMBL2023998	COc1cc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4cccc(-c5ccccc5)c4)C3)n2)cc(OC)c1OC	-9.4315
125	CHEMBL4066664	FC(F)(F)CNc1nc(Nc2ccc3cn[nH]c3c2)nc2ccoc12	-7.2582
126	CHEMBL2023996	COC(=O)c1cccc(CNC(=O)[C@H]2CCCN(c3ccnc(Nc4cc(OC)c(OC)c(OC)c4)n3)C2)c1	-10.2429
127	CHEMBL3397057	COc1cc([C@@H]2CCNC[C@@H]2O)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3OC)n2n1	-9.816
128	CHEMBL5204689	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(NC(=O)CN4CCCC4)n[nH]c3c2)ncc1Cl	-11.9759
129	CHEMBL5192545	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(NC(=O)CN(C)C)n[nH]c3c2)ncc1Cl	-11.7987
130	CHEMBL458997	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc(N3CCOCC3)cc2OC)ncc1Cl	-11.7735
131	CHEMBL2064722	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n2)ccc2c1CCC(N1CCN(C)CC1)CC2	-12.068
132	CHEMBL2064722	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n2)ccc2c1CCC(N1CCN(C)CC1)CC2	-11.0494
133	CHEMBL3785304	Cc1cc(Nc2ncnc(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1C1CCN(C)CC1	-9.864
134	CHEMBL3787494	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1[C@H]1CC[C@H](NS(C)(=O)=O)CC1	-11.0571
135	CHEMBL3785934	CCN(CC)[C@H]1CC[C@H](c2cc(OC3CC3)c(Nc3ncc(Cl)c(Nc4cn(C)nc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)cc2C)CC1	-11.4115
136	CHEMBL3786002	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-8.6847
137	CHEMBL1642253	COc1cc(N2CCOCC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCOCC3)cc2OC)n1	-11.911
138	CHEMBL1642255	COCCN1CCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccc(N5CCOCC5)cc4OC)n3)c(OC)cc2CC1	-11.5663

139	CHEMBL1642257	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccc(N4CCOCC4)cc3OC)n1)CCN(CCS(C)(=O)=O)CC2	-11.3466
140	CHEMBL1642258	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccc(N4CCOCC4)cc3OC)n1)CCN(CC(=O)N(C)C)CC2	-11.911
141	CHEMBL1642259	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccc(N4CCOCC4)cc3)n1)CCN(CC(=O)N(C)C)CC2	-10.3677
142	CHEMBL1642260	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3OC)n1)CCN(CC(=O)N(C)C)CC2	-11.911
143	CHEMBL1642261	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccc(C(N)=O)cc3OC)n1)CCN(CC(=O)N(C)C)CC2	-11.6612
144	CHEMBL1642265	COc1ccc(Nc2nc(Nc3cc4c(cc3OC)CCN(CC(=O)N(C)C)CC4)ncc2Cl)c(OC)c1	-11.7735
145	CHEMBL1642257	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccc(N4CCOCC4)cc3OC)n1)CCN(CCS(C)(=O)=O)CC2	-9.9283
146	CHEMBL1642260	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3OC)n1)CCN(CC(=O)N(C)C)CC2	-10.1936
147	CHEMBL1642262	CNC(=O)CN1CCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccc(N5CCOCC5)cc4OC)n3)c(OC)cc2CC1	-9.9283
148	CHEMBL3357466	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)Cc3cc4ccccc4[nH]3)c2)ncc1Cl	-9.9579
149	CHEMBL3286830	C[C@H]1Oc2cc(cnc2N)-c2c(nn(C)c2C#N)CN(C)C(=O)c2ccc(F)cc21	-12.6033
150	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-7.8253
151	CHEMBL3128069	Cc1nc([C@](C)(O)CO)sc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)c1	-11.6025
152	CHEMBL3735648	CC1(C)c2cc(C3CCN(CC4CCOCC4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.9266
153	CHEMBL4092174	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCN1CCNCC21	-12.3695
154	CHEMBL4081925	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCN1C(=O)CNCC21	-11.7494
155	CHEMBL4099922	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCC1=NN(C)CCN12	-12.4381
156	CHEMBL4091729	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCc1n[nH]c(C)c1-2	-10.6908
157	CHEMBL4298138	C[C@H]1CNC(=O)c2cnn3ccc(nc23)N[C@H](C)c2cc(F)ccc2O1	-12.1763
158	CHEMBL3916480	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccccc6C(F)(F)F)c5c4c3)cc2)CC1	-9.6388
159	CHEMBL3910396	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(C#Cc6ccccc6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.7667
160	CHEMBL3924528	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(Cc7ccccc7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-10.4927
161	CHEMBL3946847	COc1cc(Cc2ccccc2)c(O)cc1-c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-7.6115
162	CHEMBL388978	CN[C@@H]1C[C@H]2O[C@@](C)([C@@H]1OC)n1c3ccccc3c3c4c(c5c6ccccc6n2c5c31)C(=O)NC4	-11.5576

163	CHEMBL3822645	COc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-12.934
164	CHEMBL3824290	COc1cc(N2CCC(N3CCCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-13.2043
165	CHEMBL3823416	COc1cc(N2CCOCC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-13.644
166	CHEMBL3823549	COc1cc(OCCCN2CCCC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-13.6976
167	CHEMBL3735648	CC1(C)c2cc(C3CCN(CC4CCOCC4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-12.0111
168	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-10.2032
169	CHEMBL2403833	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)N(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C)CC1	-10.7822
170	CHEMBL388978	CN[C@@H]1C[C@H]2O[C@@](C)([C@@H]1OC)n1c3ccccc3c3c4c(c5c6ccccc6n2c5c31)C(=O)NC4	-12.7118
171	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-8.7985
172	CHEMBL3894726	COc1ccc(/C=N/Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)cc1	-10.0505
173	CHEMBL2023993	COc1cc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4ccc(Cl)cc4)C3)n2)cc(OC)c1OC	-9.9599
174	CHEMBL3604631	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-10.9196
175	CHEMBL3651827	COc1cc(C2CCN(C(=O)CN(C)C)CC2)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.484
176	CHEMBL3651837	CC(C)Oc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C(=O)N(C1CCN(C(=O)C3CCCN3C)CC1)C2	-11.7735
177	CHEMBL3651847	COc1cc(C2CCN(C(=O)CN(C)C)CC2)c(C)cc1Nc1nc(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)c2c(C)[nH]nc2n1	-11.7735
178	CHEMBL3651861	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3c(C)[nH]nc3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCS(C)(=O)=O)CC1	-10.8335
179	CHEMBL3651871	COc1cc(C2CCN(CCS(C)(=O)=O)CC2)c(C)cc1Nc1nc(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)c2c(C)[nH]nc2n1	-10.4481
180	CHEMBL3651876	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3c(C)[nH]nc3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C(=O)CCN(C)C)CC1	-10.9845
181	CHEMBL5192545	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(NC(=O)CN(C)C)n[nH]c3c2)ncc1Cl	-12.2005
182	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-9.4426
183	CHEMBL3961377	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(C#Cc6ccc(F)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.5817
184	CHEMBL3958885	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(Oc7ccccc7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.6173
185	CHEMBL3916988	COc1ccccc1/C=C/c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-9.8696
186	CHEMBL3961294	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccc(C(F)(F)F)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.816

187	CHEMBL3964686	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(-c7cccc8ccccc78)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-10.3311
188	CHEMBL3891424	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(Cc7ccccc7)c(C(F)(F)F)c6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.0529
189	CHEMBL3920297	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(COc7cccc(C(F)(F)F)c7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.1566
190	CHEMBL3967225	C/C(=C\c1ccccc1C(F)(F)F)c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-7.2607
191	CHEMBL3967080	CC(C)[Si](C#Cc1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12)(C(C)C)C(C)C	-7.531
192	CHEMBL3913624	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(-c7ccccc7)cc6F)c5c4c3)cc2)CC1	-8.5287
193	CHEMBL1822524	COc1cc(N2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3N(C)S(C)(=O)=O)n2n1	-11.4115
194	CHEMBL3608313	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CN(C1CCOCC1)CCC2	-8.2602
195	CHEMBL3582441	O=C(O)CN1CCN(c2cc(-c3cnc4ccc(N5CCC[C@@H]5c5cccc(F)c5)nn34)ccn2)CC1	-8.0243
196	CHEMBL3604653	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1C(=O)C(C)C	-10.6908
197	CHEMBL3604634	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1C1CCN(C)CC1	-12.338
198	CHEMBL3604637	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(CF)CF)cc1C1CCN(C)CC1	-11.3466
199	CHEMBL1796242	COc1cc(N2CCOCC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(N[C@@H]2CCCC[C@H]2NS(C)(=O)=O)n1	-10.1936
200	CHEMBL1795355	CCN1CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@@H]4CCCC[C@H]4NC(=O)N(C)C)n3)cc2CC1	-9.1224
201	CHEMBL3608641	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCN(CCO)CC2	-7.7935
202	CHEMBL4159769	CCNC(=O)c1noc(-c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)c1-c1ccc(CNCC(=O)Nc2cccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)c2)cc1	-11.3284
203	CHEMBL4754657	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CN(C)CC2	-12.0882
204	CHEMBL4794087	CCN1CCc2cc(OC)c(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)cc2C1	-11.3466
205	CHEMBL4762215	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CC[N+](C)(C)C2.[I-]	-12.0295
206	CHEMBL4765052	CCN1CCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)c(OC)cc2C1	-10.9196
207	CHEMBL4743579	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CNCC2	-13.2568
208	CHEMBL4760438	CN1CCN(Cc2nc3ccc(Nc4ncc(Cl)c(Nc5ccccc5NS(C)(=O)=O)n4)cc3[nH]2)CC1	-11.9759
209	CHEMBL4790721	CN1CCN(Cc2nc3ccc(Nc4ncc(Cl)c(Nc5ccccc5C(=O)N(C)C)n4)cc3[nH]2)CC1	-12.1531
210	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.0484

211	CHEMBL201638	CN1CCN(Cc2ccc(N(C)C(=O)c3cc(-c4ccc5c(c4)OCO5)cnc3O)cc2)CC1	-7.704
212	CHEMBL199723	CN1CCN(CCc2ccc(NC(=O)c3cc(-c4ccc5c(c4)OCO5)cnc3O)cc2)CC1	-9.0743
213	CHEMBL4159909	C=CC(=O)Nc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC)cc1N1CCCN(C)CC1	-11.359
214	CHEMBL4794942	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CN(CCO)CC2	-11.3466
215	CHEMBL4739896	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCN(S(N)(=O)=O)C2	-10.148
216	CHEMBL4782674	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCNC2	-11.3466
217	CHEMBL5176751	COc1cc(N2CCC3(CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(F)cc2P(C)(C)=O)n1	-12.0111
218	CHEMBL4101954	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCC1=NNCCN12	-11.4614
219	CHEMBL3959170	CC1(C)c2cc(OC3COC[C@@H]3O)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(Br)ccc21	-9.3131
220	CHEMBL3983337	CCOc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.2792
221	CHEMBL4165540	Cc1ccc(CNC(=O)c2cccc(C(C)Oc3ccnc(NN4CCN(C)CC4)c3)c2)cc1	-7.3113
222	CHEMBL3115502	COc1ccc(-c2cncc3nc4ccc(-c5ccc(N6CCN(C)CC6)cc5)cc4n23)cc1	-6.8844
223	CHEMBL3115497	COc1ccc(-c2cc3nc4ccc(Br)cc4n3cn2)cc1	-7.1565
224	CHEMBL3115503	COc1ccc(-c2cncc3nc4ccc(/C=C/c5ccccc5)cc4n23)cc1	-7.7383
225	CHEMBL3115499	Clc1cncc2nc3ccc(Br)cc3n12	-8.0243
226	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-8.2204
227	CHEMBL4159909	C=CC(=O)Nc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC)cc1N1CCCN(C)CC1	-13.0899
228	CHEMBL4448434	Cc1cc(-n2ccc3ccc(N[C@@H](C)c4ccc(F)cc4F)nc32)[nH]n1	-11.1393
229	CHEMBL4516124	Cc1cc(-n2cc(S(=O)(=O)C3COC3)c3ccc(N[C@@H](C)c4ccc(F)cn4)nc32)n[nH]1	-10.9196
230	CHEMBL4458269	Cc1cc(-n2cc(C3=CCOCC3)c3ccc(N[C@@H](C)c4ccc(F)cn4)nc32)[nH]n1	-12.3695
231	CHEMBL4849606	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc(C(=O)NCCCCCCCC(=O)NO)cc2)ncc1Cl	-11.8664
232	CHEMBL1823222	CCCc1cc2c(cc1N1CCN(C3COC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.0927
233	CHEMBL1823221	CCc1cc2c(cc1N1CCN(C3COC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.1091
234	CHEMBL3608524	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCNCC2	-12.4754
235	CHEMBL3787494	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1[C@H]1CC[C@H](NS(C)(=O)=O)CC1	-10.9196

236	CHEMBL3787297	Cc1nc(S(=O)(=O)C(C)C)c(Nc2nc(Nc3cc(C)c(C4CCN(C)CC4)cc3OC3CC3)ncc2Cl)s1	-11.6612
237	CHEMBL3786148	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3C#N)n2)c(OC2CC2)cc1C1CCN(C)CC1	-12.0882
238	CHEMBL3604631	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-11.6612
239	CHEMBL1834657	CCN1CCN(c2ccc(Nc3cc(N(C)C(=O)Nc4c(Cl)c(OC)cc(OC)c4Cl)ncn3)cc2)CC1.O=P(O)(O)O	-7.8174
240	CHEMBL3604654	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1S(C)(=O)=O	-11.4115
241	CHEMBL2158522	C[C@H](O)CN1CCN(c2cc(F)c(Nc3ncc4ccc(-c5ccccc5N(C)S(C)(=O)=O)n4n3)cc2F)CC1	-9.9864
242	CHEMBL3735811	CCc1cc2c(cc1NC(=O)N1CCC(C(C)(C)O)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-10.8896
243	CHEMBL3786763	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CC/C(=N\NC(=N)N)C2(C)C	-10.9845
244	CHEMBL3785299	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCC(NC(=O)CN(C)C)C2(C)C	-11.8809
245	CHEMBL3735510	CCc1cc2c(cc1-c1cnn(CC(O)CO)c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.8249
246	CHEMBL4856927	O=C(Nc1ccc(N2CCOCC2)c(C(=O)N2CCSCC2)c1)[C@@H]1CCCN1c1nc(Nc2cc(F)cc(F)c2)ncc1Cl	-11.0197
247	CHEMBL4853913	CN1CCN(c2ccc(NC(=O)[C@@H]3CCCN3c3nc(Nc4cc(F)cc(F)c4)ncc3Cl)cc2C(=O)N(C)C)CC1	-10.6112
248	CHEMBL4855319	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc(NC(=O)CCCCCCC(=O)NO)cc2)ncc1Cl	-12.4381
249	CHEMBL4449858	CCOc1cc(C2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc2c(n1)N(Cc1cc(C)cs1)[C@H](CC)C(=O)N2C	-8.975
250	CHEMBL4075917	Cc1n[nH]c2ccc(-c3cc(N[C@@H](CO)c4ccccc4)cnc3-c3ccc(F)cc3O)cc12	-9.6563
251	CHEMBL3928179	COc1nc(C)ccc1-c1c(CO)sc2cnc(Nc3cc(C)c(N4CCN(C)CC4)cc3OC(C)C)nc12	-11.1393
252	CHEMBL3787367	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C(C)(C)C(=O)CC2	-8.3133
253	CHEMBL3785115	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C(C)(C)/C(=N/NC(N)=O)CC2	-9.947
254	CHEMBL3785538	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CC/C(=N\N1CCOCC1)C2(C)C	-10.4927
255	CHEMBL4172048	COc1ccc(NC(=O)CNC(=O)c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-11.7735
256	CHEMBL3785928	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1[C@H]1CC[C@H](NC(C)C)CC1	-11.4115
257	CHEMBL3786171	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1C1CCOCC1	-10.9512
258	CHEMBL3786714	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C3CC3)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-9.0743
259	CHEMBL3785711	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)CC(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.0882

260	CHEMBL4065208	Oc1ccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-11.2605
261	CHEMBL4065208	Oc1ccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-11.3913
262	CHEMBL4091441	Cc1ccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-9.7166
263	CHEMBL4087615	COc1ccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-9.6583
264	CHEMBL4103197	c1ccc(Nc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-8.1479
265	CHEMBL4104111	c1ccc(Nc2ccnc3cc(-c4ccco4)ccc23)cc1	-7.3
266	CHEMBL4091441	Cc1ccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-7.1278
267	CHEMBL4073257	Fc1ccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-10.47
268	CHEMBL4073990	Fc1ccc(Nc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1F	-9.5628
269	CHEMBL4084608	Fc1ccccc1Nc1ccnc2cc(-c3cnn(C4CCNCC4)c3)ccc12	-9.4454
270	CHEMBL4100102	Fc1ccc(Nc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-8.2672
271	CHEMBL1922980	Cn1cc(/C=C2\C(=O)NN=C2c2nccs2)c2c(OCc3ccccc3F)cccc21	-10.4066
272	CHEMBL3822611	COc1cc(N2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-13.8212
273	CHEMBL3823916	COc1cc(OC2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-13.1445
274	CHEMBL3735650	CCc1cc2c(cc1N1CCN(C(=O)C3CNC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.8958
275	CHEMBL1922967	Cc1nnsc1C1=NNC(=O)/C1=C\c1cn(C)c2cccc(OCc3ccccc3F)c12	-9.0743
276	CHEMBL3735794	CCc1cc2c(cc1N1CCN(C[C@@H]3CCC(=O)N3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.6033
277	CHEMBL3604641	CC(C)S(=O)(=O)c1nn(C)cc1Nc1nc(Nc2ccc(C3CCN(C)CC3)cc2OC2CC2)ncc1Cl	-11.7735
278	CHEMBL3604632	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C)CC1	-11.484
279	CHEMBL3604652	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1CCN(C)C	-12.338
280	CHEMBL3604648	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C)C1	-11.5663
281	CHEMBL3735581	CCc1cc2c(cc1NC(=O)C1CCn3c(nnc3C(F)(F)F)C1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-10.5243
282	CHEMBL3330869	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2nc(C(=O)NCCN3CCOCC3)cs2)ncc1Cl	-9.8108
283	CHEMBL3330853	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2nc3c(s2)CCN(C)CC3)ncc1Cl	-8.6685
284	CHEMBL4089527	COc1cc(CC#N)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-10.8896
285	CHEMBL4778565	COc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2c(F)c1C1CCN(C2CCOCC2)CC1	-12.6033
286	CHEMBL4780297	CCCn1c2cc(N3CCN(C)CC3)c(OC)cc2c(=O)c2c3ccc(C#N)cc3[nH]c21	-11.1617
287	CHEMBL4743579	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CNCC2	-12.6033
288	CHEMBL3735859	CCc1cc2c(cc1-c1cnn(C3CCOC3)c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.2446

289	CHEMBL1172147	N#Cc1c(N)nc(SCC(=O)c2ccc(Cl)cc2)c(C#N)c1-c1ccsc1	-7.1104
290	CHEMBL3397057	COc1cc([C@@H]2CCNC[C@@H]2O)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3OC)n2n1	-11.484
291	CHEMBL4099922	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCC1=NN(C)CCN12	-11.4764
292	CHEMBL3943236	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n2)ccc2c1CCC[C@@H](N1CCN(CCO)CC1)C2	-10.3552
293	CHEMBL3934268	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3N(C)S(C)(=O)=O)n2)ccc2c1CCCC(N1CCN(CCO)CC1)C2	-10.6699
294	CHEMBL3961598	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3-c3nccn3C)n2)ccc2c1CCCC(N1CCN(CCO)CC1)C2	-10.3552
295	CHEMBL3897774	CCc1cc2c(cc1N1CCN(CC3(O)CC(C)OC(C)C3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.2256
296	CHEMBL4562879	Cc1cc(-c2cnc3ccc(N[C@@H](C)c4ccc(F)cc4F)nn23)[nH]n1	-12.338
297	CHEMBL3786976	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C4CC4)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-11.2343
298	CHEMBL3785665	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1[C@H]1CC[C@H](NC2CC2)CC1	-11.4115
299	CHEMBL3786830	CNC(=O)c1nn(C)cc1Nc1nc(Nc2cc(C)c(C3CCN(C)CC3)cc2OC2CC2)ncc1Cl	-11.2343
300	CHEMBL4464582	[2H]C([2H])([2H])Oc1cc(C2CCNCC2)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-10.5439
301	CHEMBL3913363	CC1(C)c2cc(OCCN3CCCCCC3)ccc2C(=O)c2c1oc1ccccc21	-8.6522
302	CHEMBL3961889	CC1(C)c2cc(OCCN3CCNCC3)ccc2C(=O)c2c1oc1ccccc21	-8.9268
303	CHEMBL5208148	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(NC(=O)CN4CCCC4)n[nH]c3c2)ncc1Cl	-12.4754
304	CHEMBL4067503	CNCc1cc(OC)c(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)cc1C	-12.2792
305	CHEMBL5186340	CC1(C)c2cc(OCCN3CCOCC3)ccc2C(=O)c2c1oc1cc(C#Cc3cc(OCC4CC4)ccn3)ccc21	-7.8757
306	CHEMBL4067168	c1ccc(Nc2ccnc3cc(-c4ccccc4)ccc23)cc1	-7.7057
307	CHEMBL4086648	Oc1ccc(Nc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-10.3442
308	CHEMBL4073990	Fc1ccc(Nc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1F	-10.2638
309	CHEMBL4091078	c1ccc(Cc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-9.3839
310	CHEMBL4070113	c1ccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-9.7859
311	CHEMBL3608534	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCCN(CCO)C2	-8.7296
312	CHEMBL5269433	C[C@H]1Nc2ccc3ncc(n3n2)C(=O)NC2(CCC2)COc2ccc(F)cc21	-11.5156
313	CHEMBL5286123	CCN1Cc2cc(F)ccc2OCC(C)(C)NC(=O)c2cnc3ccc1nn23	-10.8609
314	CHEMBL1171912	N#Cc1c(SCc2ccccc2)nc2c(c1-c1cccs1)CCCC2	-8.0529
315	CHEMBL4159104	CCNC(=O)c1noc(-c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)c1-c1ccc(CN2CCN(CC(=O)Nc3ccc(OC)c(Nc4ncc(Cl)c(Nc5ccccc5S(=O)(=O)C(C)C)n4)c3)CC2)cc1	-10.0248

316	CHEMBL4169444	CCNC(=O)c1noc(-c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)c1-c1ccc(CN2CCN(CC(=O)NCC(=O)Nc3ccc(OC)c(Nc4ncc(Cl)c(Nc5ccccc5S(=O)(=O)C(C)C)n4)c3)CC2)cc1	-11.5752
317	CHEMBL4760370	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCN(C)C2	-10.4927
318	CHEMBL4745560	CCC(C)Oc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCNC2	-12.2519
319	CHEMBL4780333	CC(C)COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCNC2	-12.6526
320	CHEMBL560446	C[C@@H](c1ccccc1)N1CCc2c([nH]c3ccc(Br)cc23)-c2c(I)ccnc21	-7.2064
321	CHEMBL3894726	COc1ccc(/C=N/Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)cc1	-11.7987
322	CHEMBL3735064	CC1(C)c2cc(C3CCN(CC4COC4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.4764
323	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-8.5224
324	CHEMBL4755011	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCC(=O)NCCCCNC(=O)COc2cccc3c2C(=O)N(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)CC1	-6.8099
325	CHEMBL4204920	CCCNC(=O)c1cc(Oc2ccc(NC(=O)c3cc4cccnc4n(-c4ccc(F)cc4)c3=O)cc2)ccn1	-9.5453
326	CHEMBL1796254	COCCN1CCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@@H]4CCCC[C@H]4NS(C)(=O)=O)n3)c(OC)cc2CC1	-10.1936
327	CHEMBL496862	CCN(C)C(=O)c1ccc2c(c1)NC(=O)/C2=C(\Nc1ccc(CN2CCCCC2)cc1)c1ccccc1	-7.656
328	CHEMBL4747513	CN(C)Cc1nc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4NS(C)(=O)=O)n3)cc2[nH]1	-11.4688
329	CHEMBL3687214	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCC(N4CCN(C)CC4)CC3)c(C)c2)nc1NC1CCC(O)(C(C)C)CC1	-11.8958
330	CHEMBL4786817	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCC(=O)NCCCCCCCCCNc2cccc3c2C(=O)N(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)CC1	-6.6708
331	CHEMBL4764130	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCC(=O)NCCOCCOCCNCC(=O)Nc2cccc3c2C(=O)N(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)CC1	-7.5437
332	CHEMBL4762634	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCC(=O)NCCCCCCCCCNC(=O)COc2cccc3c2C(=O)N(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)CC1	-7.4712
333	CHEMBL2006765	CCCNC(=O)c1ccc(Nc2nc(NCC(F)(F)F)c3cc[nH]c3n2)cc1	-9.3256
334	CHEMBL3785774	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CC/C(=N\N1CCN(C)CC1)C2(C)C	-13.1919
335	CHEMBL3786831	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C(C)(C)/C(=N/O)CC2	-8.8246
336	CHEMBL3949819	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(N3CCN(CCO)CC3)cc2OC)n1	-11.911
337	CHEMBL3919579	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-10.3677

338	CHEMBL4562805	COc1cc(NC(=O)N2CCOCC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NC(C)=O)n1	-12.3079
339	CHEMBL4468370	COc1cc(NC(=O)N2CCN(CCO)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NC(C)=O)n1	-12.1531
340	CHEMBL4162738	COc1ccc(CNC(=O)c2cccc(C(C)Oc3ccnc(Nc4cnn(C5CCN(C)CC5)c4)c3)c2)cc1OC	-8.1479
341	CHEMBL4165058	Cc1ccc(CNC(=O)c2cccc(C(C)Oc3cccnc3Nn3cnnc3)c2)cc1	-7.1774
342	CHEMBL3925752	CC1(C)c2cc(OC[C@@H](O)CN3CCCCC3)ccc2C(=O)c2c1oc1ccccc21	-8.4192
343	CHEMBL4539723	Oc1ccc(-c2ccc3c(-c4ccc(O)cc4)n[nH]c3n2)cc1	-9.7671
344	CHEMBL4111037	CC1(C)c2cc(OC[C@H](O)CO)c(O)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(Cl)ccc21	-10.4829
345	CHEMBL3894115	CC1(C)c2cc(OCC3CCN(S(C)(=O)=O)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(Br)ccc21	-9.0542
346	CHEMBL4112744	CC1(C)c2cc(OC[C@@H](O)[C@H](O)CO)ccc2C(=O)c2c1n(CC(=O)O)c1cc(Br)ccc21	-7.8728
347	CHEMBL3986700	CCc1cc2c(cc1N1CCN(C(=O)CN(C)C)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-13.3293
348	CHEMBL4107288	CCCC1(N2CCN(c3cc4c(cn3)C(=O)c3c([nH]c5cc(C(N)=O)ccc35)C4(C)C)CC2)CCC1	-9.7082
349	CHEMBL4573193	COc1cc(N2CCN(CC(N)=O)C2=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.1531
350	CHEMBL1230609	COc1cc2c(Oc3ccc(NC(=O)C4(C(=O)Nc5ccc(F)cc5)CC4)cc3F)ccnc2cc1OCCCN1CCOCC1	-7.7973
351	CHEMBL4470581	COc1cc(N2CCN(C)CC2)ccc1Nc1cc(N2CCC[C@H](C(=O)NCc3ccc(OC(F)(F)F)cc3)C2)ccn1	-8.9468
352	CHEMBL4434659	COCc1cn(-c2cc(C)n[nH]2)c2nc(OC(C)c3ccc(F)cn3)ccc12	-7.8757
353	CHEMBL3948073	CC1(C)c2cc(OCCN3CCN(C(=O)CO)CC3)ccc2C(=O)c2c1oc1ccccc21	-7.8815
354	CHEMBL3893252	CN(C)CCCNC(=O)COc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1oc3ccccc3c1C2=O	-7.809
355	CHEMBL4108197	CC1(C)c2cc(OC[C@@H](O)[C@H](O)CO)ccc2C(=O)c2c1oc1cc(OC[C@H](O)CO)ccc21	-9.0443
356	CHEMBL4159909	C=CC(=O)Nc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC)cc1N1CCCN(C)CC1	-12.7649
357	CHEMBL4074115	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)c(=O)[nH]c1ccccc12	-8.901
358	CHEMBL4062803	Cc1n[nH]c2cc(Nc3nc(NC4CC4)c4occc4n3)ccc12	-7.4125
359	CHEMBL3604647	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNC1	-11.911
360	CHEMBL5173501	C[C@H]1CNC(=O)c2cnn3cc(cnc23)N[C@H](C)c2cc(F)cc(c2)O1	-12.6226
361	CHEMBL4791837	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCC(=O)NCCOCCOCCOCCOCCNc2cccc3c2C(=O)N(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)CC1	-7.0109

362	CHEMBL4740690	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCC(=O)NCCOCCOCCOCCNC(=O)COc2cccc3c2C(=O)N(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)CC1	-8.2602
363	CHEMBL3651854	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3c(C)[nH]nc3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C)CC1	-11.911
364	CHEMBL3734798	C[C@@H](Oc1cc(-c2ccn(C3CCNCC3)n2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-11.5663
365	CHEMBL5176898	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(NC(=O)CN(C)C)n[nH]c3c2)ncc1Cl	-11.6025
366	CHEMBL3091723	C[C@@H](Oc1cc(-c2ccc3c(c2)NC(=O)C32CCN(C)CC2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.5083
367	CHEMBL4174031	COc1ccc(NC(=O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-10.0581
368	CHEMBL4172048	COc1ccc(NC(=O)CNC(=O)c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-11.4996
369	CHEMBL4747513	CN(C)Cc1nc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4NS(C)(=O)=O)n3)cc2[nH]1	-11.959
370	CHEMBL4746688	CN(C)C(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3nc(CN4CCCC4)[nH]c3c2)ncc1Cl	-11.7377
371	CHEMBL4790721	CN1CCN(Cc2nc3ccc(Nc4ncc(Cl)c(Nc5ccccc5C(=O)N(C)C)n4)cc3[nH]2)CC1	-11.6928
372	CHEMBL3808519	CCc1cc(NC(=O)Nc2ccc(-c3cc(NC(=O)c4ccc(CN5CCN(C)CC5)cc4)[nH]n3)cc2C)no1	-8.6436
373	CHEMBL3398172	COc1cc(C2CCN(C)CC2O)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3OC)n2n1	-10.6699
374	CHEMBL3398171	COc1cc([C@@]2(O)CCN(CC(N)=O)C[C@@H]2O)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3OC)n2n1	-11.6612
375	CHEMBL3398168	COc1cc([C@@]2(O)CCNC[C@@H]2O)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3N(C)S(C)(=O)=O)n2n1	-11.6612
376	CHEMBL4779307	COc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2c(F)c1N1CCNC(C)(C)C1	-12.1763
377	CHEMBL1823219	Cc1cc2c(cc1N1CCN(C3COC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.3107
378	CHEMBL1822513	CN1CCN(c2ccc(Nc3ncc4ccc(-c5ccccc5)n4n3)cc2)CC1	-10.3804
379	CHEMBL4177227	CC(Oc1ccnc(Nc2cnn(C)c2)c1)c1cccc(C(=O)NCc2ccc(C#N)cc2)c1	-7.3383
380	CHEMBL4176767	COc1ccc(CNC(=O)c2cccc(C(C)Oc3ccnc(Nc4cnn(C)c4)c3)c2)cc1OC	-7.7209
381	CHEMBL4161643	Cc1cnc(Nc2ncccc2OC(C)c2cccc(C(=O)NCc3ccc(F)c(Cl)c3)c2)s1	-7.1845
382	CHEMBL1822521	COc1cc(N2CCN(C[C@@H](C)O)CC2)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3OC)n2n1	-11.9426
383	CHEMBL4752172	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CN(C(=O)CO)CC2	-11.911
384	CHEMBL4794087	CCN1CCc2cc(OC)c(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)cc2C1	-12.7649
385	CHEMBL4083964	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCN1C(N)=NCC21	-11.2879

386	CHEMBL4101954	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCC1=NNCCN12	-13.4478
387	CHEMBL3823218	COc1cc(N2CCC(CN3CCC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-12.8437
388	CHEMBL3951972	COCCNC1CCCc2c(ccc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@H]4[C@@H](C(N)=O)[C@@H]5C=C[C@H]4C5)n3)c2OC)C1	-11.5663
389	CHEMBL3736182	CCc1cc2c(cc1C1=CCN(C(=O)C3CNC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.068
390	CHEMBL3735241	CCc1cc2c(cc1NC(=O)CN1C[C@@H]3C(CO)[C@@H]3C1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-10.8335
391	CHEMBL3786792	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C(C)(C)/C(=N/N1CCN(C)CC1)CC2	-10.434
392	CHEMBL3785480	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CC/C(=N\O)C2(C)C	-9.4654
393	CHEMBL3785497	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CC/C(=N\NC(C)=O)C2(C)C	-10.8896
394	CHEMBL3786431	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C(C)(C)C(N)CC2	-9.9664
395	CHEMBL3786270	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCC(O)C2(C)C	-10.8896
396	CHEMBL3608529	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCCN(C(C)=O)C2	-8.1146
397	CHEMBL3608521	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCNC(=O)C2	-11.7494
398	CHEMBL3608643	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CN(C1CCNCC1)CCC2	-7.9455
399	CHEMBL3608645	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCCN(C1COC1)C2	-8.083
400	CHEMBL4091928	CNCCc1cc(OC)c(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)cc1C	-12.3695
401	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.5152
402	CHEMBL4105099	COc1cc(C(C)(C)N(C)C)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.1307
403	CHEMBL4096452	COc1cc(C(C)(C)NC=O)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.3079
404	CHEMBL3604651	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1C1COC1	-11.3466
405	CHEMBL3604655	CCNC(=O)c1cc(OC2CC2)c(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)cc1C	-11.911
406	CHEMBL2023534	COc1cc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4ccc(C)cc4)C3)n2)cc(OC)c1OC	-9.0995
407	CHEMBL2023549	COc1cc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)NCCc4ccccc4)C3)n2)cc(OC)c1OC	-9.1427
408	CHEMBL3608644	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCCN(C1CCOCC1)C2	-8.3976
409	CHEMBL4174347	COc1cc(-n2cc(CN3CCN(C)CC3)nn2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.0882

410	CHEMBL3398172	COc1cc(C2CCN(C)CC2O)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3OC)n2n1	-12.0882
411	CHEMBL3398169	COc1cc([C@@]2(O)CCNC[C@@H]2O)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3OC)n2n1	-11.911
412	CHEMBL3735648	CC1(C)c2cc(C3CCN(CC4CCOCC4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.4467
413	CHEMBL4747187	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCC(=O)NCCCCCCNCC(=O)Nc2ccccc3c2C(=O)N(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)CC1	-6.0893
414	CHEMBL1808100	COC(=O)c1ccc(OC)cc1Oc1nc[nH]c(=O)c1/C=C/C(C)=O	-7.0806
415	CHEMBL1778721	Cc1cc(-c2ccc(N)cc2)c(/C=C2\C(=O)Nc3ccc(N)cc32)[nH]1	-10.1631
416	CHEMBL3934754	CCc1cc2c(cc1N1CCN(CC(O)(CCC(=O)O)CC(=O)O)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.0161
417	CHEMBL1823361	CC1(C)c2cc(N3CCN(C4COC4)CC3)c(CCC3CCCC3)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-9.546
418	CHEMBL1779202	CC1(C)c2cc(C3CCN(C4COC4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-12.5152
419	CHEMBL3785497	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CC/C(=N\NC(C)=O)C2(C)C	-10.4927
420	CHEMBL1642264	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccc(C#N)cc3OC)n1)CCN(CC(=O)N(C)C)CC2	-10.1936
421	CHEMBL2386794	CN1CCN(Cc2ccc(C(=O)Nc3cc(-c4ccc(NC(=O)Nc5cc(C(C)(C)C)on5)cc4)n[nH]3)cc2)CC1	-8.6028
422	CHEMBL3604637	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(CF)CF)cc1C1CCN(C)CC1	-10.8335
423	CHEMBL3604639	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(C(F)(F)F)cc1C1CCN(C)CC1	-10.8609
424	CHEMBL3397291	Cc1cc(O)cc(-c2nn(CC#N)cc2-c2cc(NCCCCO)nc(-c3cccnc3)n2)c1	-7.6333
425	CHEMBL3330874	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2nc(C(=O)N3CC4CCC(C3)O4)cs2)ncc1Cl	-9.7037
426	CHEMBL3330858	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2nc3c(s2)CCN(CC2CCOCC2)CC3)ncc1Cl	-10.9845
427	CHEMBL4168868	COc1ccc(NC(=O)CNC(=O)c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.2792
428	CHEMBL4168868	COc1ccc(NC(=O)CNC(=O)c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.1531
429	CHEMBL4168868	COc1ccc(NC(=O)CNC(=O)c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.3107
430	CHEMBL4162252	COc1ccc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)cc1NC(=O)CNC(=O)c1cc(C(C)C)c(O)cc1O	-12.1763
431	CHEMBL3608526	CCN1CCCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)c(OC)cc2C1	-8.3027
432	CHEMBL3608643	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CN(C1CCNCC1)CCC2	-7.5973
433	CHEMBL3958173	CCc1cc2c(cc1N1CCN(CC3(O)CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.8809
434	CHEMBL3913728	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(N/N=C/c2ccc(OC(F)(F)F)cc2)ncc1Cl	-10.0735

435	CHEMBL4849206	CCc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCN(C(=O)CNc4cccc5c4CN(C4CCC(=O)NC4=O)C5=O)CC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-5.7348
436	CHEMBL3604652	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1CCN(C)C	-11.7735
437	CHEMBL3604650	COCCc1cc(OC2CC2)c(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)cc1C	-11.5663
438	CHEMBL3604643	CC(C)S(=O)(=O)c1nn(C)cc1Nc1nc(Nc2cc(Cl)c(C3CCN(C)CC3)cc2OC2CC2)ncc1Cl	-11.3466
439	CHEMBL3604639	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(C(F)(F)F)cc1C1CCN(C)CC1	-10.3677
440	CHEMBL3604638	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(F)(F)F)cc1C1CCN(C)CC1	-11.3466
441	CHEMBL3604636	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OCC2CC2)cc1C1CCN(C)CC1	-10.3804
442	CHEMBL3604635	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OCC2CC2)cc1C1CCNCC1	-11.3466
443	CHEMBL3604643	CC(C)S(=O)(=O)c1nn(C)cc1Nc1nc(Nc2cc(Cl)c(C3CCN(C)CC3)cc2OC2CC2)ncc1Cl	-11.911
444	CHEMBL2042983	CCN1C(=O)CCCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)c(OC)cc21	-12.1531
445	CHEMBL2042696	CN1C(=O)CCCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@@H]4CCCC[C@@H]4C(N)=O)n3)ccc21	-8.5099
446	CHEMBL2042828	CCN1C(=O)CCCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4C(=O)NC)n3)c(OC)cc21	-10.4927
447	CHEMBL3823296	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(F)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-13.3449
448	CHEMBL4162661	COc1ccc(NC(=O)CNC(=O)c2cc(C(C)C)c(O)cc2OC)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-10.3804
449	CHEMBL4175908	COc1ccc(NC(=O)CNC(=O)c2ccc(O)c(C(C)C)c2)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.6511
450	CHEMBL4168701	COc1ccc(NC(=O)CNC(=O)c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)cc1Nc1ncnc(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.6033
451	CHEMBL4176561	CC(C)Oc1ccc(NC(=O)CNC(=O)c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)cc1Nc1nccc(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.8809
452	CHEMBL4466920	COc1cc(N2CCN(CCCN)C2=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.7613
453	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.338
454	CHEMBL4519408	COc1cc(N2CCN(CC(=O)N(C)C)C2=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.959
455	CHEMBL4061549	COc1cc(C(C)(C)CNC=O)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.6511
456	CHEMBL4105099	COc1cc(C(C)(C)N(C)C)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.5152
457	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-11.185
458	CHEMBL4755723	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCN(C(C)=O)C2	-12.338

459	CHEMBL4089672	CNCC(C)(C)c1cc(OC)c(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)cc1C	-12.5152
460	CHEMBL3263981	CCC(=O)N1CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4C(=O)NC)n3)cc2C(C)C1	-10.3552
461	CHEMBL4853913	CN1CCN(c2ccc(NC(=O)[C@@H]3CCCN3c3nc(Nc4cc(F)cc(F)c4)ncc3Cl)cc2C(=O)N(C)C)CC1	-11.4467
462	CHEMBL1822519	COc1cc(N2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3OC)n2n1	-11.4115
463	CHEMBL4169444	CCNC(=O)c1noc(-c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)c1-c1ccc(CN2CCN(CC(=O)NCC(=O)Nc3ccc(OC)c(Nc4ncc(Cl)c(Nc5ccccc5S(=O)(=O)C(C)C)n4)c3)CC2)cc1	-10.5508
464	CHEMBL4091441	Cc1ccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-10.5732
465	CHEMBL4087745	c1ccc(Nc2ccnc3cc(-c4cccs4)ccc23)cc1	-7.6216
466	CHEMBL4104111	c1ccc(Nc2ccnc3cc(-c4ccco4)ccc23)cc1	-7.2779
467	CHEMBL4084608	Fc1ccccc1Nc1ccnc2cc(-c3cnn(C4CCNCC4)c3)ccc12	-10.2227
468	CHEMBL4105497	COc1ccc(Nc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-8.4717
469	CHEMBL4100102	Fc1ccc(Nc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-8.4654
470	CHEMBL3785825	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1[C@H]1CC[C@@H](NC(C)C)CC1	-11.3466
471	CHEMBL3604634	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1C1CCN(C)CC1	-11.911
472	CHEMBL3604631	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-11.0571
473	CHEMBL3669138	COc1ccccc1-c1c(C(N)=O)sc2cnc(Nc3cnc(C4CCN(C)CC4)cc3OC(C)C)nc12	-11.5663
474	CHEMBL3669144	COc1ncccc1-c1c(C(N)=O)sc2cnc(Nc3cc(F)c(C4CCN(C)CC4)cc3OC(C)C)nc12	-12.0882
475	CHEMBL3736073	CCc1cc2c(cc1NC(=O)N1CCC(N3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-10.6301
476	CHEMBL3735794	CCc1cc2c(cc1N1CCN(C[C@@H]3CCC(=O)N3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.8384
477	CHEMBL3736021	CCc1cc2c(cc1N1CCN(CC3(CO)COC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.4029
478	CHEMBL3735064	CC1(C)c2cc(C3CCN(CC4COC4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.7037
479	CHEMBL3950479	COc1ccc(/C(C)=N/Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)cc1	-11.786
480	CHEMBL3608642	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCCN(C1CCNCC1)C2	-8.7296
481	CHEMBL3608528	CCN1CCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)c(OC)cc2CC1	-8.5099
482	CHEMBL3608529	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCCN(C(C)=O)C2	-7.8981
483	CHEMBL3608533	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCN(C(=O)CO)CC2	-7.0916
484	CHEMBL3608646	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CN(C1COC1)CCC2	-7.7561

485	CHEMBL1940177	CC1(C)c2ccc(N3CCN(C4COC4)CC3)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.2082
486	CHEMBL3929113	N#Cc1ccc2c3c([nH]c2c1)C1(CCOCC1)c1cc(OCCN2CCOCC2)ccc1C3=O	-10.6162
487	CHEMBL3263973	C=C1CNCCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4C(=O)NC)n3)cc21	-10.9512
488	CHEMBL3940191	CC#Cc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCOCC3)CC1)C1(CCOCC1)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.8298
489	CHEMBL4111072	CC1(C)c2cc(OC[C@H](O)CO)ccc2C(=O)c2c1oc1ccccc21	-8.21
490	CHEMBL4551774	COc1cc(N2CCN(C(C)C)CC2)ccc1-c1n[nH]c2nc(-c3ccc(O)c(F)c3)ccc12	-10.3184
491	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-10.758
492	CHEMBL1822526	COc1cc(N2CCN(C[C@@H](C)O)CC2)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3N(C)S(C)(=O)=O)n2n1	-11.0968
493	CHEMBL4464582	[2H]C([2H])([2H])Oc1cc(C2CCNCC2)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-10.9604
494	CHEMBL1642262	CNC(=O)CN1CCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccc(N5CCOCC5)cc4OC)n3)c(OC)cc2CC1	-11.6612
495	CHEMBL1642263	COCCOc1ccc(Nc2nc(Nc3cc4c(cc3OC)CCN(CC(=O)N(C)C)CC4)ncc2Cl)c(OC)c1	-10.4927
496	CHEMBL3115501	COc1ccc(-c2cncc3nc4ccc(-c5ccc(NC(C)=O)cc5)cc4n23)cc1	-6.7296
497	CHEMBL4523063	COc1cc(N2CCNCC2)ccc1Nc1cc(N2CCC[C@H](C(=O)NCc3ccc(OC(F)(F)F)cc3)C2)ccn1	-9.5871
498	CHEMBL2418748	Cc1nn(Cc2cc(F)ccc2F)c(C)c1-c1c[nH]c2ncc(-c3cnn(C)c3)cc12	-10.2129
499	CHEMBL2418759	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5cccc(N)c5)c4)c3c2)cn1	-10.7124
500	CHEMBL3398170	COc1cc([C@@]2(O)CCN(CC(N)=O)C[C@@H]2O)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3N(C)S(C)(=O)=O)n2n1	-11.0968
501	CHEMBL4162098	Cc1ccc(CNC(=O)c2cccc(C(C)Oc3ccnc(Nc4cn(C)nc4C)c3)c2)cc1	-7.7383
502	CHEMBL2023554	COc1cc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4ccccc4C)C3)n2)cc(OC)c1OC	-9.1726
503	CHEMBL4451065	CCOc1cc(C2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc2c(n1)N(Cc1cccc(Br)c1)[C@H](CC)C(=O)N2C	-9.2724
504	CHEMBL2172332	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(Cn4cncn4)cc32)CC1	-12.338
505	CHEMBL2172323	COC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccccc3)[nH]c3ccc(CN4CCCCC4)cc32)CC1	-12.0882
506	CHEMBL3939763	CC1(C)c2cc(OCCCCCC(=O)O)ccc2C(=O)c2c1oc1ccccc21	-7.413
507	CHEMBL3927296	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC(C)C)n1	-10.6112
508	CHEMBL5290783	CC(C)N1Cc2cc(F)ccc2OCC(C)(C)NC(=O)c2cnc3ccc1nn23	-9.6994
509	CHEMBL3785322	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C(C)(C)C(O)CC2	-9.8752

510	CHEMBL3787262	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C(C)(C)/C(=N/NC(C)=O)CC2	-9.4982
511	CHEMBL4535072	Cc1cc(-n2cc(S(C)(=O)=O)c3ccc(N[C@@H](C)c4ccc(F)cn4)nc32)n[nH]1	-12.0295
512	CHEMBL4437605	Cc1cc(-n2cc(C(=O)N3CCOCC3)c3ccc(N[C@@H](C)c4ccc(F)cn4)nc32)[nH]n1	-12.2005
513	CHEMBL4437605	Cc1cc(-n2cc(C(=O)N3CCOCC3)c3ccc(N[C@@H](C)c4ccc(F)cn4)nc32)[nH]n1	-10.8335
514	CHEMBL4584172	COc1cc(N2CCN(C(C)C)CC2)ccc1-c1n[nH]c2nc(-c3ccc(O)cc3)ccc12	-10.7336
515	CHEMBL4444118	OCC1CCCCN1Cc1ccc(-c2n[nH]c3nc(-c4ccc(O)cc4)ccc23)o1	-8.8584
516	CHEMBL3218860	NC(=O)[C@@H]1[C@H](Nc2c(Br)cnc3[nH]c(-c4ccc(N5CCOCC5)cc4)nc23)[C@H]2C=C[C@@H]1C2	-10.6908
517	CHEMBL4279457	COc1cc2c(Oc3ccc(NC(=O)c4cc5cccnc5n(-c5ccc(F)cc5)c4=O)cc3F)ccnc2cc1OCCCN1CCN(C)CC1	-9.5022
518	CHEMBL2172314	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)c3)[nH]c3ccc(CN4CCC(C(C)(C)O)CC4)cc32)CC1	-12.7649
519	CHEMBL2172309	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(CN4CCC[C@H]4C(C)(C)O)cc32)CC1	-12.1763
520	CHEMBL4519408	COc1cc(N2CCN(CC(=O)N(C)C)C2=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.5933
521	CHEMBL3922369	CC1(C)c2cc(OC[C@@H](O)CO)ccc2C(=O)c2c1oc1ccccc21	-8.06
522	CHEMBL3934533	CC1(C)c2cc(OCC(=O)NCCOCCO)ccc2C(=O)c2c1oc1ccccc21	-7.3074
523	CHEMBL3943525	CC1(C)c2cc(OCC(=O)NCCN(CCO)CCO)ccc2C(=O)c2c1oc1ccccc21	-7.7036
524	CHEMBL3902232	CN(C)CC(=O)NCCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1oc3ccccc3c1C2=O	-7.9341
525	CHEMBL3977582	CCN(CC)CCOc1ccc2c3c(oc2c1)C(C)(C)c1cc(OC)ccc1C3=O	-7.4454
526	CHEMBL4111292	CC1(C)c2cc(OC[C@H](O)CO)ccc2C(=O)c2c1oc1cc(OCC(=O)Nc3ccccc3)ccc21	-6.7482
527	CHEMBL3785322	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C(C)(C)C(O)CC2	-10.5928
528	CHEMBL3786916	Cc1nc(Nc2nc(Nc3cc(C)c(C4CCN(C)CC4)cc3OC3CC3)ncc2Cl)c(S(=O)(=O)C(C)C)s1	-12.0882
529	CHEMBL3604656	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1C1CCCN(C)C1	-11.5663
530	CHEMBL2403377	CC(=O)N1CCc2[nH]c(/C=C3\C(=O)Nc4ccc(C#N)cc43)cc2C1	-8.2204
531	CHEMBL3604633	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1C1CCNCC1	-11.911
532	CHEMBL2403370	COc1ccc2c(c1)/C(=C/c1cc3c([nH]1)CCN(C(=O)N1CCOCC1)C3)C(=O)N2	-8.7659

533	CHEMBL3604641	CC(C)S(=O)(=O)c1nn(C)cc1Nc1nc(Nc2ccc(C3CCN(C)CC3)cc2OC2CC2)ncc1Cl	-12.0882
534	CHEMBL3786148	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3C#N)n2)c(OC2CC2)cc1C1CCN(C)CC1	-11.2879
535	CHEMBL3604646	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CN(C)C1	-12.338
536	CHEMBL1823223	CC(C)c1cc2c(cc1N1CCN(C3COC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-10.1805
537	CHEMBL3128074	Cc1n[nH]cc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)c1	-10.2429
538	CHEMBL3128073	COc1ccc(F)cc1[C@@H](C)Oc1cc(-c2c[nH]nc2C)cnc1N	-10.1568
539	CHEMBL3286823	Cc1nn(C)c2c1-c1cnc(N)c(n1)O[C@H](C)c1cc(F)ccc1C(=O)N(C)C2	-13.7262
540	CHEMBL2418763	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5cc(F)cc(F)c5)c4)c3c2)cn1	-11.6612
541	CHEMBL3398170	COc1cc([C@@]2(O)CCN(CC(N)=O)C[C@@H]2O)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3N(C)S(C)(=O)=O)n2n1	-9.5013
542	CHEMBL3398175	COc1cc([C@H]2CCN(CCO)C[C@@H]2O)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3OC)n2n1	-11.7735
543	CHEMBL3398166	COc1cc([C@@]2(O)CCN(C)C[C@@H]2O)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3OC)n2n1	-12.0882
544	CHEMBL1922962	Cc1nnsc1C1=NNC(=O)/C1=C\c1cn(C)c2cccc(OCc3cccn3)c12	-9.6465
545	CHEMBL1922978	CN(C)c1nnc(C2=NNC(=O)/C2=C\c2cn(C)c3cccc(OCc4ccccc4)c23)s1	-7.5699
546	CHEMBL3357453	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)CN3CCOCC3)c2)ncc1Cl	-10.9914
547	CHEMBL2023541	COc1ccc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4ccc(C)cc4)C3)n2)cc1	-7.813
548	CHEMBL3978878	CC1(C)c2cc(N3CCC(NS(C)(=O)=O)CC3)c(Cl)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-12.3813
549	CHEMBL3397288	COc1cc(C)cc(-c2nn(CC#N)cc2-c2cc(NCCCN3CCOCC3)nc(-c3cccnc3)n2)c1	-7.3841
550	CHEMBL564365	Cc1cc2c(c(=O)[nH]1)-c1[nH]c3ccccc3c1CCN2CCc1ccccc1	-6.7296
551	CHEMBL2172306	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(CN4CCC(C(N)=O)CC4)cc32)CC1	-12.5577
552	CHEMBL2172335	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(CN4CCC(CN)CC4)cc32)CC1	-12.6526
553	CHEMBL3128063	Cc1nc(C(C)(C)O)ccc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)c1	-9.2022
554	CHEMBL4476859	Cc1cc(-n2cc(C(=O)N3CCOCC3)c3ccc(OC(C)c4ccc(F)cn4)nc32)[nH]n1	-11.641
555	CHEMBL4443507	Oc1ccc(-c2ccc3c(-c4ccc(N5CCCCC5)cc4)n[nH]c3n2)cc1	-9.1772
556	CHEMBL4168868	COc1ccc(NC(=O)CNC(=O)c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.7613
557	CHEMBL4177038	CC(C)c1cc(C(=O)NCC(=O)Nc2ccc(F)c(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)c2)c(O)cc1O	-11.0766

558	CHEMBL4167072	COc1cc(-c2nc(CN3CCN(C)CC3)cs2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.2519
559	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.0111
560	CHEMBL4174347	COc1cc(-n2cc(CN3CCN(C)CC3)nn2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.1307
561	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-11.8249
562	CHEMBL3805009	CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3n[nH]c4ccc(Cc5cc(F)cc(F)c5)cc34)c(Nc3ccccc3)c2)CC1	-8.7439
563	CHEMBL3805020	CN1CCC(Nc2cc(N3CCN(C)CC3)ccc2C(=O)Nc2n[nH]c3ccc(Cc4cc(F)cc(F)c4)cc23)CC1	-11.0968
564	CHEMBL198399	Cc1cc(CN2CCN(C)CC2)ccc1NC(=O)c1cc(-c2ccc3c(c2)OCO3)cnc1O	-6.8627
565	CHEMBL3808520	Cc1cc(NC(=O)Nc2ccc(-c3cc(NC(=O)c4ccc(CN5CCN(C)CC5)cc4)[nH]n3)cc2C)no1	-7.4442
566	CHEMBL2418762	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5ccc(F)c(F)c5)c4)c3c2)cn1	-7.7745
567	CHEMBL4855319	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc(NC(=O)CCCCCCC(=O)NO)cc2)ncc1Cl	-12.3079
568	CHEMBL4849606	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc(C(=O)NCCCCCCC(=O)NO)cc2)ncc1Cl	-12.7649
569	CHEMBL1642258	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccc(N4CCOCC4)cc3OC)n1)CCN(CC(=O)N(C)C)CC2	-10.6699
570	CHEMBL3786818	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1[C@H]1CC[C@@H](NC2CC2)CC1	-11.484
571	CHEMBL3786976	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C4CC4)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-11.6612
572	CHEMBL1779195	CC1(C)c2cc(OCCNC(N)=O)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.7533
573	CHEMBL3604649	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1C1CCN(C(C)C)CC1	-12.338
574	CHEMBL2172308	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(CN4CCC(C(C)(C)O)CC4)cc32)CC1	-11.911
575	CHEMBL2172331	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(CN4CCS(=O)(=O)CC4)cc32)CC1	-12.338
576	CHEMBL2172325	CCNC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccccc3)[nH]c3ccc(CN4CCCCC4)cc32)CC1	-12.338
577	CHEMBL563080	Cc1cc(Cl)c2c(n1)N(CCc1ccccc1)CCc1c-2[nH]c2ccccc12	-6.9897
578	CHEMBL556596	C[C@@H](c1ccccc1)N1CCc2c([nH]c3ccc(Br)cc23)-c2c1ccnc2Cl	-7.4272
579	CHEMBL4469087	CCOc1cc(C2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc2c(n1)N(Cc1ccccc1)[C@H](CC)C(=O)N2C	-10.0284
580	CHEMBL3286809	CNC(=O)c1ccc(F)cc1[C@@H](C)Oc1cc(-c2cn(C)nc2C)cnc1N	-8.1959
581	CHEMBL3286825	COc1nn(C)c2c1-c1cnc(N)c(c1)O[C@H](C)c1cc(F)ccc1C(=O)N(C)C2	-12.3079

582	CHEMBL2172305	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3cc c(F)cc3)[nH]c3ccc(CN4CCC(C(=O)O)CC4)cc32)CC1	-12.338
583	CHEMBL3651882	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3c(C)c[nH]c 3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCO)CC1	-11.6612
584	CHEMBL3357437	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)CNC(=O)C3 CCCN3)c2)ncc1Cl	-10.0634
585	CHEMBL3357457	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)CN3C CN(C4COC4)CC3)c2)ncc1Cl	-11.786
586	CHEMBL3357458	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)CN3C CN(C(=O)/C=C/CN(C)C)CC3)c2)ncc1Cl	-12.9846
587	CHEMBL3357460	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)CN3C C4CC3CN4)c2)ncc1Cl	-12.2519
588	CHEMBL3908208	CCc1cc2c(cc1N1CCC(OCCC3CCCCC3)CC1)C(C)(C)c1 [nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-10.8682
589	CHEMBL3981662	CCc1cc2c(cc1N1CCC(NCC3CC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3 cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.8924
590	CHEMBL3914305	CCN(CC)CCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1c(c3ccc([N+](=O)[O-])cc3n1CCN(CC)CC)C2=O	-7.6225
591	CHEMBL2023550	COc1cc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)NCCCc4ccccc4) C3)n2)cc(OC)c1OC	-7.3374
592	CHEMBL2024001	COc1cc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4cccc(N5C COCC5)c4)C3)n2)cc(OC)c1OC	-10.7124
593	CHEMBL2042695	CN1C(=O)CCCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@H]4[C@@H](C (N)=O)[C@@H]5C=C[C@H]4C5)n3)ccc21	-9.9283
594	CHEMBL3896252	CC1(C)c2ccc(C3=CCNCC3)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C# N)ccc21	-12.8797
595	CHEMBL4112041	COCCCCOc1ccc2c3c(oc2c1)C(C)(C)c1cc(OC[C@@H](O)[C@H](O)CO)ccc1C3=O	-8.0243
596	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(O C(C)C)cc1C1CCNCC1	-10.9196
597	CHEMBL1822511	COc1cc(Nc2ncc3ccc(-c4ccccc4)n3n2)cc(OC)c1OC	-9.4654
598	CHEMBL4081925	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C) n1)CCN1C(=O)CNCC21	-11.959
599	CHEMBL3809934	CC(C)(C)c1cc(NC(=O)Nc2ccc(- c3cc(NC(=O)c4ccc(OCCCN5CCCC5)cc4)[nH]n3)cc2)no 1	-8.3976
600	CHEMBL4070113	c1ccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-9.8263
601	CHEMBL4091441	Cc1ccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-9.6426
602	CHEMBL3104852	COC1OC(=O)c2c(O)c(O)c(O)c(C)c21	-7.1066
603	CHEMBL3694578	Clc1cnc2nc1NCc1cccc(c1)OCCc1cccc(c1)N2	-8.248
604	CHEMBL2042697	CN1C(=O)CCCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@@H]4CCCC[C @H]4C(N)=O)n3)ccc21	-8.0416
605	CHEMBL1946612	CN1CCN(c2ccc3cc2CCc2cccc(c2)Nc2nc(ncc2Cl)N3)CC 1	-9.9796
606	CHEMBL3893810	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(N/N=C/c2ccc(C(F)(F)F)cc2)ncc1Cl	-11.9759
607	CHEMBL3934594	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(N/N=C/c2cccc(C(F)(F) F)c2)ncc1Cl	-10.1568

608	CHEMBL1940179	CCc1cc2c(cc1N1CCN(C3CCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.2256
609	CHEMBL3786763	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CC/C(=N\NC(=N)N)C2(C)C	-10.5407
610	CHEMBL3785093	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C(C)(C)/C(=N/NC(=N)N)CC2	-11.0571
611	CHEMBL1796245	COCCN1CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@@H]4CCCC[C@H]4NS(C)(=O)=O)n3)cc2CC1	-10.1221
612	CHEMBL3921664	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(N/N=C/c2ccc(F)cc2)ncc1Cl	-10.4201
613	CHEMBL3913823	CCc1cc2c(cc1N1CCN(CC3(O)CCCCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.5663
614	CHEMBL3925858	CCc1cc2c(cc1N1CCN(CC3(O)CCNCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.5577
615	CHEMBL2418754	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5cccc(Cl)c5)c4)c3c2)cn1	-8.5189
616	CHEMBL2418752	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5cccc(F)c5)c4)c3c2)cn1	-11.7037
617	CHEMBL4099660	COc1cc(CCN(C)C)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.5577
618	CHEMBL4091928	CNCCc1cc(OC)c(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)cc1C	-12.5152
619	CHEMBL4061549	COc1cc(C(C)(C)CNC=O)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.4996
620	CHEMBL2172327	NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccccc3)[nH]c3ccc(CN4CCCCC4)cc32)CC1	-10.9845
621	CHEMBL2172324	CCOC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccccc3)[nH]c3ccc(CN4CCCCC4)cc32)CC1	-12.7649
622	CHEMBL2403376	CC(=O)N1CCc2[nH]c(/C=C3\C(=O)Nc4ccc(C(F)(F)F)cc43)cc2C1	-7.1232
623	CHEMBL2172316	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccncc3)[nH]c3ccc(CN4CCC(C(C)(C)O)CC4)cc32)CC1	-12.7649
624	CHEMBL2172312	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(CN4CC(C(C)(C)O)C4)cc32)CC1	-12.5152
625	CHEMBL2172308	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(CN4CCC(C(C)(C)O)CC4)cc32)CC1	-12.7649
626	CHEMBL3785722	Cc1cc(Nc2ncc(C)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1C1CCN(C)CC1	-11.6612
627	CHEMBL3786171	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1C1CCOCC1	-11.4115
628	CHEMBL3330852	CC(=O)N1CCc2nc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)sc2CC1	-9.9345
629	CHEMBL3604634	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1C1CCN(C)CC1	-12.7649
630	CHEMBL3787103	CCn1cc(Nc2nc(Nc3cc(C)c(C4CCNCC4)cc3OC(C)C)ncc2Cl)c(S(=O)(=O)C(C)C)n1	-10.9196
631	CHEMBL1922976	Cn1cc(/C=C2\C(=O)NN=C2c2nccs2)c2c(OCc3ccccc3)cccc21	-10.4066
632	CHEMBL1922961	Cc1nnsc1C1=NNC(=O)/C1=C\c1cn(C)c2cccc(OCc3ccccc3)c12	-8.7753

633	CHEMBL1922972	Cc1nnsc1C1=NNC(=O)/C1=C\c1cn(C)c2cccc(OCc3c(F)ccc3Cl)c12	-9.5013
634	CHEMBL1922973	Cc1nnsc1C1=NNC(=O)/C1=C\c1cn(C)c2cccc(OCc3c(F)cc(F)c3Cl)c12	-9.2516
635	CHEMBL1922984	Cn1cc(/C=C2\C(=O)NN=C2c2nccs2)c2c(OCc3c(F)cccc3F)cccc21	-9.9283
636	CHEMBL1922961	Cc1nnsc1C1=NNC(=O)/C1=C\c1cn(C)c2cccc(OCc3ccccc3)c12	-10.8335
637	CHEMBL1779187	CCN(CC)CCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1oc3cc(Cl)ccc3c1C2=O	-8.7659
638	CHEMBL1779188	CCN(CC)CCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1oc3cc(C(F)(F)F)ccc3c1C2=O	-7.7436
639	CHEMBL1796245	COCCN1CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@@H]4CCCC[C@H]4NS(C)(=O)=O)n3)cc2CC1	-11.4115
640	CHEMBL1796247	COCCN1CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@@H]4CCCC[C@H]4NC(=O)C(F)(F)F)n3)cc2CC1	-9.9283
641	CHEMBL1796250	COCCN1CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@@H]4CCCC[C@H]4NS(=O)(=O)C(C)C)n3)cc2CC1	-9.7667
642	CHEMBL1796253	CCN1CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@@H]4CCCC[C@H]4NC(C)=O)n3)cc2CC1	-10.1936
643	CHEMBL2042693	CNC(=O)c1cccc(Nc2nc(Nc3ccc4c(c3)CCCC(=O)N4C)ncc2Cl)c1	-8.8584
644	CHEMBL3263975	C/C=C1\CN(C)CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4C(=O)NC)n3)cc21	-11.0197
645	CHEMBL3263979	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(c2)C(C)CNCC3)ncc1Cl	-11.4918
646	CHEMBL3263980	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(c2)C(C)CN(CC(=O)N(C)C)CC3)ncc1Cl	-10.5243
647	CHEMBL3263990	CC1CN(C)CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)cc21	-11.9932
648	CHEMBL3735784	CC1(C)c2cc(-c3cnn(C4CCOCC4)c3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.4881
649	CHEMBL3965090	CCN(CC)CCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1c(c3ccc(NC(=O)Cc4ccccc4)cc3n1C)C2=O	-6.6256
650	CHEMBL4754109	COc1cc(S(=O)(=O)CC(=O)N2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.4918
651	CHEMBL3932266	CCN(CC)CCOc1cc2c(cc1C(C)=O)C(=O)c1c([nH]c3cc(C#N)ccc13)C2(C)C	-13.156
652	CHEMBL3604644	CC(C)S(=O)(=O)c1nn(C)cc1Nc1nc(Nc2cc(C#N)c(C3CCN(C)CC3)cc2OC2CC2)ncc1Cl	-11.185
653	CHEMBL3913728	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(N/N=C/c2ccc(OC(F)(F)F)cc2)ncc1Cl	-11.7148
654	CHEMBL4465558	COc1cc(N2CCNC2=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.5404
655	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.2519
656	CHEMBL4464571	COc1cc(N2CCN(CC(=O)N3CCC(=O)CC3)C2=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.0727

657	CHEMBL2386792	CC(C)(C)c1cc(NC(=O)Nc2ccc(-c3cc(NC(=O)c4ccc(OCCN5CCCC5)cc4)[nH]n3)cc2)no1	-8.8682
658	CHEMBL3810070	CC(C)c1cc(NC(=O)Nc2ccc(-c3cc(NC(=O)c4ccc(CN5CCN(C)CC5)cc4)[nH]n3)cc2)no1	-8.6064
659	CHEMBL5172782	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(C(=O)N(C)C)c(C)[nH]c3c2)ncc1Cl	-12.1091
660	CHEMBL2023991	COc1cc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4ccccc4Cl)C3)n2)cc(OC)c1OC	-8.8381
661	CHEMBL3608527	CCN1CCCc2cc(OC)c(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)cc2C1	-8.083
662	CHEMBL4081656	COc1cc(CCN)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.1531
663	CHEMBL4099660	COc1cc(CCN(C)C)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-13.3293
664	CHEMBL4084168	COc1cc(C(C)(C)CN(C)C)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.2792
665	CHEMBL4088751	COc1cc(CNC=O)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.8117
666	CHEMBL2403836	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCO)CC1	-11.4764
667	CHEMBL2403829	COCCN1CCC(c2cc(OC(C)C)c(Nc3ncc(C)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)cc2C)CC1	-10.434
668	CHEMBL4070217	COc1cc(CN)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.3695
669	CHEMBL2403847	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C3CCC3)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-10.5226
670	CHEMBL4758571	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc(-n3cccc3C(=O)NCCO)cc2OC)ncc1Cl	-11.1663
671	CHEMBL3805741	CN(C)CCN(C)C(=O)c1ccc(C(=O)Nc2n[nH]c3ccc(Cc4cc(F)cc(F)c4)cc23)c(NC2CCOCC2)c1	-11.0968
672	CHEMBL1778707	Cc1[nH]c(/C=C2\C(=O)Nc3ccc(F)cc32)c(C)c1C(=O)O	-8.568
673	CHEMBL4470529	COc1cc(N2CCN(CCN(C)C)C2=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.9588
674	CHEMBL1922983	CC(Oc1cccc2c1c(/C=C1\C(=O)NN=C1c1nccs1)cn2C)c1ccccc1	-10.4626
675	CHEMBL1922986	Cn1cc(/C=C2\C(=O)NN=C2c2nccs2)c2c(OCc3cccc(F)c3F)cccc21	-9.9932
676	CHEMBL1922224	Cc1ccc(O)cc1CC[C@@H]1[C@@H](O)CC[C@]2(C)[C@@H]([C@H](C)/C=C/CC(C)C)CC[C@@H]12	-7.1343
677	CHEMBL5198349	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-7.6408
678	CHEMBL1923569	C[C@H](O)CN1CCN(c2ccc(Nc3ncc4ccc(-c5ccccc5N(C)S(C)(=O)=O)n4n3)cc2)CC1	-10.6699
679	CHEMBL1922966	Cc1nnsc1C1=NNC(=O)/C1=C\c1cn(C)c2cccc(OCCN(C)C)c12	-9.2703
680	CHEMBL1922969	Cc1nnsc1C1=NNC(=O)/C1=C\c1cn(C)c2cccc(OCc3ccc(F)cc3)c12	-11.2343

681	CHEMBL3669149	COc1ncccc1-c1c(C(N)=O)sc2cnc(Nc3cccc(N4CCN(C)CC4)c3OC(C)C)nc12	-10.4481
682	CHEMBL3104851	Cc1c(O)c(O)c2c(c1C=O)[C@@H]1O[C@H](O2)c2c(C)c(O)c(O)c(O)c2C1=O	-9.5662
683	CHEMBL4750810	CCN1CCN(CCS(=O)(=O)c2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)c(OC)c2)CC1	-11.185
684	CHEMBL385872	CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3n[nH]c4c3CN(C(=O)[C@H](O)c3ccccc3)C4)cc2)CC1	-9.9864
685	CHEMBL4447747	COc1cc(N2CCN(CC(=O)N3CCN(C)CC3)C2=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.3284
686	CHEMBL3357449	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)CCN)c2)ncc1Cl	-12.068
687	CHEMBL5173501	C[C@H]1CNC(=O)c2cnn3cc(cnc23)N[C@H](C)c2cc(F)cc(c2)O1	-12.7175
688	CHEMBL3330850	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2nc3c(s2)CCNCC3)ncc1Cl	-10.2247
689	CHEMBL3824301	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2C(C)=O)n1	-12.4793
690	CHEMBL3823078	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)c(F)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-12.7467
691	CHEMBL3824130	COc1cc(N2CCCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-12.9673
692	CHEMBL3824304	COc1cc(P(C)(C)=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-13.4863
693	CHEMBL4096452	COc1cc(C(C)(C)NC=O)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.2005
694	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.5577
695	CHEMBL3805002	CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3n[nH]c4ccc(Cc5cccc(F)c5)cc34)c(NC3CCOCC3)c2)CC1	-10.6699
696	CHEMBL2172309	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(CN4CCC[C@H]4C(C)(C)O)cc32)CC1	-11.185
697	CHEMBL2418753	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5ccc(F)cc5)c4)c3c2)cn1	-10.148
698	CHEMBL2403368	COc1ccc2c(c1)/C(=C/c1cc3c([nH]1)CCN(C(=O)c1cnoc1C)C3)C(=O)N2	-8.3027
699	CHEMBL398610	CCOc1cccc2c1c(/C=C1\C(=O)NN=C1c1snnc1C)cn2C	-9.2516
700	CHEMBL1922970	Cc1nnsc1C1=NNC(=O)/C1=C\c1cn(C)c2cccc(OCc3c(F)ccc3F)c12	-11.2343
701	CHEMBL1922973	Cc1nnsc1C1=NNC(=O)/C1=C\c1cn(C)c2cccc(OCc3c(F)cc(F)c3Cl)c12	-11.1393
702	CHEMBL1922985	Cn1cc(/C=C2\C(=O)NN=C2c2nccs2)c2c(OCc3c(F)cccc3Cl)cccc21	-11.185
703	CHEMBL1922971	Cc1nnsc1C1=NNC(=O)/C1=C\c1cn(C)c2cccc(OCc3ccc(F)cc3F)c12	-9.5013
704	CHEMBL1922987	Cn1cc(/C=C2\C(=O)NN=C2c2nccs2)c2c(OCc3cc(F)ccc3F)cccc21	-9.5013
705	CHEMBL3104854	Cc1c(O)c(O)c(O)c2c1COC2=O	-7.5161

706	CHEMBL3357444	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)[C@H](C)N)c2)ncc1Cl	-12.4029
707	CHEMBL1922981	Cn1cc(/C=C2\C(=O)NN=C2c2nccs2)c2c(OCc3cccc(F)c3)cccc21	-10.7822
708	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.5838
709	CHEMBL1922977	Cn1cc(/C=C2\C(=O)NN=C2c2nc(C(F)(F)F)cs2)c2c(OCc3ccccc3)cccc21	-7.0916
710	CHEMBL3735386	CCc1cc2c(cc1C1=CCN(CC3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.2768
711	CHEMBL3735980	CCc1cc2c(cc1-c1cnn(CC(N)=O)c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-10.7325
712	CHEMBL3128069	Cc1nc([C@](C)(O)CO)sc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)c1	-11.4115
713	CHEMBL3128067	Cc1nc(C2(O)CCOC2)sc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)c1	-10.2638
714	CHEMBL5182390	COc1cc(CN2CCN(c3ccc(-c4ccc5[nH]c6nccc(-c7ccc(Cc8ccccc8)cc7)c6c5c4)cc3)CC2)cc(OC)c1OC	-7.1232
715	CHEMBL3608533	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCN(C(=O)CO)CC2	-8.0529
716	CHEMBL3608645	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCCN(C1COC1)C2	-7.9707
717	CHEMBL3734938	CCc1cc2c(cc1N1CCN(C(=O)C3COCCN3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.9024
718	CHEMBL5174132	Cc1[nH]c2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4NS(C)(=O)=O)n3)ccc2c1C(=O)N1CCOCC1	-11.6025
719	CHEMBL4168868	COc1ccc(NC(=O)CNC(=O)c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.4381
720	CHEMBL4172925	COc1ccc(NC(=O)C(C)NC(=O)c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.9846
721	CHEMBL4168049	COc1ccc(NC(=O)CNC(=O)c2cc(C(C)C)ccc2O)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.9846
722	CHEMBL1796247	COCCN1CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@@H]4CCCC[C@H]4NC(=O)C(F)(F)F)n3)cc2CC1	-10.8609
723	CHEMBL3917178	C[C@@H]1CN(c2cc3c(cc2Br)C(=O)c2c([nH]c4cc(C#N)ccc24)C3(C)C)C[C@H](C)N1C1CCC1	-13.5065
724	CHEMBL1778724	Cc1[nH]c(/C=C2\C(=O)Nc3ccccc32)c(C)c1-c1cccc(NCCN)c1	-8.82
725	CHEMBL1778717	CC1CN(Cc2c(-c3cccs3)[nH]c3ncccc23)CC(C)O1	-7.137
726	CHEMBL1778711	COc1cc(-c2nc3cc(C)ccn3c2/N=C/c2cc(Cl)ccc2O)ccc1O	-7.9707
727	CHEMBL1642263	COCCOc1ccc(Nc2nc(Nc3cc4c(cc3OC)CCN(CC(=O)N(C)C)CC4)ncc2Cl)c(OC)c1	-11.911
728	CHEMBL2172329	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccccc32)CC1	-9.691
729	CHEMBL2172326	CCN(CC)C(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccccc3)[nH]c3ccc(CN4CCCCC4)cc32)CC1	-8.8649
730	CHEMBL3806280	CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3n[nH]c4ccc(Cc5cc(F)cc(F)c5)cc34)c(NCC3CN(C)C3)c2)CC1	-10.1749

731	CHEMBL2172326	CCN(CC)C(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccccc3)[nH]c3ccc(CN4CCCCC4)cc32)CC1	-10.8073
732	CHEMBL2158516	COc1cc(C2CCN(CC(N)=O)CC2)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3N(C)S(C)(=O)=O)n2n1	-11.0968
733	CHEMBL2172307	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(CN4CCC[C@H]4C(N)=O)cc32)CC1	-12.338
734	CHEMBL4087615	COc1ccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-10.6001
735	CHEMBL4102556	Fc1ccccc1Oc1ccnc2cc(-c3cnn(C4CCNCC4)c3)ccc12	-10.5679
736	CHEMBL4095317	N#Cc1ccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-9.4125
737	CHEMBL4067908	N#Cc1ccc(Nc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-8.5573
738	CHEMBL4087615	COc1ccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-10.7036
739	CHEMBL2172327	NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccccc3)[nH]c3ccc(CN4CCCCC4)cc32)CC1	-10.434
740	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-7.8541
741	CHEMBL4281394	COc1nc(N2CC(O)C2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(C)(=O)=O)n1	-7.4944
742	CHEMBL3961414	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2)n1	-10.2032
743	CHEMBL3916647	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2Cl)n1	-11.5663
744	CHEMBL3925957	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCNCC3)cc2OC)n1	-10.4481
745	CHEMBL2172312	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(CN4CC(C(C)(C)O)C4)cc32)CC1	-12.338
746	CHEMBL2172307	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(CN4CCC[C@H]4C(N)=O)cc32)CC1	-11.484
747	CHEMBL2172330	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(CN4CCCCC4)cc32)CC1	-11.911
748	CHEMBL2403373	CN1CCC(Nc2ccc3c(c2)/C(=C/c2cc4c([nH]2)CCN(C(=O)N2CCOCC2)C4)C(=O)N3)CC1	-10.0973
749	CHEMBL4461630	CC(C)N1CCN(c2ccc(-c3n[nH]c4nc(-c5ccc(O)cc5)ccc34)cc2)CC1	-10.3881
750	CHEMBL5197072	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(C(=O)N4CCC(O)CC4)c(C)[nH]c3c2)ncc1Cl	-11.3344
751	CHEMBL3128069	Cc1nc([C@](C)(O)CO)sc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)c1	-13.7563
752	CHEMBL3128061	COc1ncccc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)c1	-9.3492
753	CHEMBL4476089	[2H]C([2H])([2H])C([2H])(Oc1cc(C2CCNCC2)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1)C([2H])([2H])[2H]	-9.6021
754	CHEMBL3357452	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)C3CN(C(=O)CCCN(C)C)C3)c2)ncc1Cl	-12.9024
755	CHEMBL2064664	COCCNC1CCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@H]4[C@@H](C(N)=O)[C@@H]5C=C[C@H]4C5)n3)c(OC)cc2CC1	-10.1936
756	CHEMBL1642258	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccc(N4CCOCC4)cc3OC)n1)CCN(CC(=O)N(C)C)CC2	-11.911

757	CHEMBL3948508	CCN(CC)C(=O)COc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1oc3ccccc3c1C2=O	-7.2451
758	CHEMBL4111239	COCn1ccnc1-c1ccc2c3c([nH]c2c1)C(C)(C)c1cc(OC[C@H](O)CO)ccc1C3=O	-8.1479
759	CHEMBL3894804	CC1(C)c2ccc(C3=CCN(C4CC4)CC3)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.9172
760	CHEMBL3939011	CCN(CC)CCOc1ccc2c(c1)C1(CCOCC1)c1oc3ccccc3c1C2=O	-8.6849
761	CHEMBL3608534	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCCN(CCO)C2	-8.8246
762	CHEMBL3823016	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2C(=O)N(C)C)n1	-11.8026
763	CHEMBL3823224	CC(C)Oc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-13.0025
764	CHEMBL3823872	CNC(=O)CN1CCN(c2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4P(C)(C)=O)n3)c(OC)c2)CC1	-12.068
765	CHEMBL3736182	CCc1cc2c(cc1C1=CCN(C(=O)C3CNC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.7649
766	CHEMBL3735386	CCc1cc2c(cc1C1=CCN(CC3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.2519
767	CHEMBL2403834	CCN1CCC(c2cc(OC(C)C)c(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)cc2C)CC1	-10.6282
768	CHEMBL2403845	CC(C)Oc1cc(C2CCNCC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.3107
769	CHEMBL1946614	COc1ccc2cc1Nc1nc(ncc1Cl)Nc1ccc(N3CCN(C)CC3)c(c1)CC2	-12.068
770	CHEMBL1947001	COc1cc(N2CCN(C)CC2)c2cc1Nc1ncc(Cl)c(n1)Nc1cc(ccc1N(C)S(C)(=O)=O)/C=C\2	-11.5663
771	CHEMBL3609312	CC[C@@H]1C(=O)N(C)c2cnc(Nc3ccc(C(=O)NC4CCN(C)CC4)cc3OCC(C)C)nc2N1C1CCCC1	-8.1831
772	CHEMBL4448214	CCOc1cc(C2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc2c(n1)N(Cc1cccc(Cl)c1)[C@H](CC)C(=O)N2C	-9.4713
773	CHEMBL4097778	CN1C(=O)[C@@H](N2CCc3cn(CC4CCS(=O)(=O)CC4)nc3C2=O)COc2ccccc21	-8.5099
774	CHEMBL3953362	CCc1cc2c(cc1N1CCOCC1)C(C)(C)c1[nH]c3nc(C(=O)N4CCOCC4)ccc3c1C2=O	-9.1997
775	CHEMBL3582439	Fc1cccc([C@H]2CCCN2c2ccc3ncc(-c4ccccn4)n3n2)c1	-7.3762
776	CHEMBL4111362	N#Cc1ccc2c3c([nH]c2c1)C1(CCCC1)c1cc(OC[C@H](O)CO)ccc1C3=O	-11.6473
777	CHEMBL1778720	Cc1cc(-c2cccc(N)c2)c(/C=C2\C(=O)Nc3ccc(N)cc32)[nH]1	-10.3454
778	CHEMBL1779183	CCN(CC)CCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1oc3cc(OC)ccc3c1C2=O	-8.0588
779	CHEMBL1779184	CCCOc1ccc2c3c(oc2c1)C(C)(C)c1cc(OCCN(CC)CC)ccc1C3=O	-7.953
780	CHEMBL3115496	Brc1ccc2nc3cc(Nc4ccccc4)ncn3c2c1	-5.9019
781	CHEMBL3115492	c1ccc(Nc2cc3nc4ccccc4n3cn2)cc1	-7.0916
782	CHEMBL3115497	COc1ccc(-c2cc3nc4ccc(Br)cc4n3cn2)cc1	-7.0916

783	CHEMBL564679	Oc1ccc(CCN2CCc3c([nH]c4ccc(Br)cc34)-c3c2ccnc3Cl)cc1	-7.3026
784	CHEMBL1779186	CCN(CC)CCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1oc3cc(Br)ccc3c1C2=O	-8.6709
785	CHEMBL3906824	CCNC(=O)N1CCN(c2ccc(Nc3nc(Nc4ccc(N5CCN(C(C)=O)CC5)cc4OC)ncc3F)c(OC)c2)CC1	-10.6497
786	CHEMBL3958376	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(F)c(Nc2ccc(N3CCN(S(C)(=O)=O)CC3)cc2OC(F)F)n1	-10.6908
787	CHEMBL3981035	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(=O)CO)CC3)cc2OC)n1	-10.6497
788	CHEMBL3948834	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(F)c(Nc2ccc(N3CCNCC3)cc2OC(F)F)n1	-10.3677
789	CHEMBL3913998	COc1cc(N2CCN(C(=O)OC(C)(C)C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-8.8782
790	CHEMBL3959161	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2F)n1	-9.294
791	CHEMBL3899182	COC(=O)N1CCN(c2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccc(N5CCN(C(C)=O)CC5)cc4OC)n3)c(OC)c2)CC1	-9.9664
792	CHEMBL3969585	COC(=O)N1CCN(c2ccc(Nc3ncc(C(F)(F)F)c(Nc4ccc(N5CCN(C(=O)OC)CC5)cc4OC)n3)c(OC)c2)CC1	-9.6388
793	CHEMBL3973750	COc1cc(N2CCN(CCO)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-12.338
794	CHEMBL3917284	COc1cc(N2CCN(S(C)(=O)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-11.3466
795	CHEMBL3917268	CCOc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1nc(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2)ncc1Cl	-9.3713
796	CHEMBL3735648	CC1(C)c2cc(C3CCN(CC4CCOCC4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.959
797	CHEMBL3961598	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3-c3nccn3C)n2)ccc2c1CCCC(N1CCN(CCO)CC1)C2	-11.7735
798	CHEMBL1796251	COCCN1CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@@H]4CCCC[C@H]4NS(=O)(=O)CC(F)(F)F)n3)cc2CC1	-10.6497
799	CHEMBL1684800	COc1ccc(Cn2ncc(NC(=O)c3cc(NC(=O)Nc4ccc(Cl)c(C(F)(F)F)c4)ccc3C)c2N)cc1	-12.1508
800	CHEMBL3785825	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1[C@H]1CC[C@@H](NC(C)C)CC1	-11.7735
801	CHEMBL3785607	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1C1CCS(=O)(=O)CC1	-12.0882
802	CHEMBL3787638	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)N(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-7.3399
803	CHEMBL3787598	Cc1cc(Nc2ncc(F)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1C1CCN(C)CC1	-12.338
804	CHEMBL3785665	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1[C@H]1CC[C@H](NC2CC2)CC1	-10.9845
805	CHEMBL4173466	CC(Oc1ccnc(NN2CCN(C)CC2)c1)c1cccc(C(=O)NCc2ccc(Cl)c(C(F)(F)F)c2)c1	-7.1104
806	CHEMBL4078406	CNC(C)(C)c1cc(OC)c(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)cc1C	-12.6526
807	CHEMBL4081656	COc1cc(CCN)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.4381

808	CHEMBL1163567	COC1CCN(C(=O)c2ccc(-c3cnc4c(c3)N(Cc3cc(Cl)ccc3C(F)(F)F)CCN4)cc2)CC1	-10.4927
809	CHEMBL1796257	COCCN1CCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@@H]4CCCC[C@H]4N(C)S(C)(=O)=O)n3)c(OC)cc2CC1	-11.0968
810	CHEMBL1796260	COCCN1CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@H]4CC[C@@H](NS(C)(=O)=O)CC4)n3)cc2CC1	-9.4426
811	CHEMBL4543331	CCOc1cc(C2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc2c(n1)N(Cc1sccc1C)[C@H](CC)C(=O)N2C	-10.2129
812	CHEMBL2172336	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(CN4CCCCC4C(=O)O)cc32)CC1	-9.7037
813	CHEMBL5204689	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(NC(=O)CN4CCCC4)n[nH]c3c2)ncc1Cl	-11.8523
814	CHEMBL5176898	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(NC(=O)CN(C)C)n[nH]c3c2)ncc1Cl	-12.2005
815	CHEMBL5204689	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(NC(=O)CN4CCCC4)n[nH]c3c2)ncc1Cl	-12.3079
816	CHEMBL4448400	COc1cc(NC(=O)N2CCCC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NC(C)=O)n1	-11.959
817	CHEMBL5183055	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(C(=O)OC)c(C)[nH]c3c2)ncc1Cl	-12.0882
818	CHEMBL5202722	Cc1[nH]c2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4NS(C)(=O)=O)n3)ccc2c1C(=O)N1CCC(C)CC1	-11.4614
819	CHEMBL5183055	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(C(=O)OC)c(C)[nH]c3c2)ncc1Cl	-11.6312
820	CHEMBL5196885	C[N+]1(C)CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(C#Cc6ccccc6C(F)(F)F)c5c4c3)cc2)CC1	-8.5287
821	CHEMBL5203625	COc1ccc(-c2ccc3[nH]c4nccc(/C=C/c5ccccc5)c4c3c2)cc1	-8.4512
822	CHEMBL5268149	COc1cc(N2CCC(N(C)C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2cccc(B(O)O)c2)n1	-9.6575
823	CHEMBL5268149	COc1cc(N2CCC(N(C)C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2cccc(B(O)O)c2)n1	-11.0234
824	CHEMBL5269028	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2cccc3c2B(O)OC3)n1	-11.4047
825	CHEMBL4448434	Cc1cc(-n2ccc3ccc(N[C@@H](C)c4ccc(F)cc4F)nc32)[nH]n1	-9.721
826	CHEMBL3747525	CCc1cc2c(cc1N1CCNCC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-9.2118
827	CHEMBL4753933	C=CC(=O)NCCOCCNC(=O)CCN1CCC(c2cc(OC(C)C)c(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)cc2C)CC1	-12.5577
828	CHEMBL5185835	COc1cc(N2CCC3(CCN(C)CC3)CC2)c(F)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-12.338
829	CHEMBL5200942	CN1CCC2(CC1)CCN(c1ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4P(C)(C)=O)n3)c(OC(F)F)c1)CC2	-11.9266
830	CHEMBL5200942	CN1CCC2(CC1)CCN(c1ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4P(C)(C)=O)n3)c(OC(F)F)c1)CC2	-12.338
831	CHEMBL4516287	C=CC(=O)Nc1cc(Nc2nccc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC)cc1N(C)CCN(C)C	-9.9101
832	CHEMBL5268953	COc1cc(N2CCC(N(C)C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2cccc3c2B(O)OC3)n1	-11.7261

833	CHEMBL4277936	COc1nc(N2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(C)(=O)=O)n1	-8.0529
834	CHEMBL4285785	COc1nc(N2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(=O)(=O)C2CC2)n1	-7.6716
835	CHEMBL4279793	CC(C)Oc1nc(N2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(C)(=O)=O)n1	-7.626
836	CHEMBL3950830	CCCC(=O)N(C)c1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1nc(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)ncc1Cl	-7.5835
837	CHEMBL3975774	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(N3CCN(C)CC3)cc2OC)n1	-11.5663
838	CHEMBL3959706	COc1cc(N2CCN(C(=O)OC(C)(C)C)CC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-10.6497
839	CHEMBL3961414	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2)n1	-9.1992
840	CHEMBL3962445	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(S(C)(=O)=O)CC3)cc2OC)n1	-9.853
841	CHEMBL3909864	CC1(C)c2cc(N3CCC(N4CCCC4)CC3)c(S(=O)(=O)N3CCCC3)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.4286
842	CHEMBL3916287	CN(C)S(=O)(=O)c1cc2c(cc1N1CCN(CCO)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.7612
843	CHEMBL3983750	CC1(C)c2cc(C(=O)NC3CCS(=O)(=O)C3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.7382
844	CHEMBL3651850	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3c(C)[nH]nc3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C(=O)Cn2ccnc2)CC1	-10.6908
845	CHEMBL3651865	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3c(C)[nH]nc3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCC(=O)N2CCC2)CC1	-10.8896
846	CHEMBL3357439	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)CN)c2)ncc1Cl	-12.1531
847	CHEMBL1922982	Cn1cc(/C=C2\C(=O)NN=C2c2nccs2)c2c(OCc3ccc(F)cc3)cccc21	-10.2129
848	CHEMBL2042694	CNS(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(c2)CCCC(=O)N3C)ncc1Cl	-12.7649
849	CHEMBL2042696	CN1C(=O)CCCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@@H]4CCCC[C@@H]4C(N)=O)n3)ccc21	-9.5662
850	CHEMBL2042828	CCN1C(=O)CCCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4C(=O)NC)n3)c(OC)cc21	-11.7735
851	CHEMBL602074	Cc1cc(C)c(/C=C2\C(=O)Nc3ccc(-c4cccnc4)cc32)[nH]1	-7.6876
852	CHEMBL4577227	CC(C)N1CCN(c2ccc(-c3n[nH]c4nc(-c5ccc(O)c(F)c5)ccc34)cc2)CC1	-12.4832
853	CHEMBL4087745	c1ccc(Nc2ccnc3cc(-c4cccs4)ccc23)cc1	-7.686
854	CHEMBL4075012	CCn1nccc1-c1ccc2c(Nc3ccccc3)ccnc2c1	-6.5732
855	CHEMBL4091441	Cc1ccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-10.3528
856	CHEMBL4064669	Fc1cccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)c1	-10.2554
857	CHEMBL5286123	CCN1Cc2cc(F)ccc2OCC(C)(C)NC(=O)c2cnc3ccc1nn23	-10.7348
858	CHEMBL5291345	C[C@H]1Nc2ccc3ncc(n3n2)C(=O)NC2(CC2)COc2ccccc21	-9.9407
859	CHEMBL5287224	CCC[C@H]1Nc2ccc3ncc(n3n2)C(=O)NC2(CC2)COc2ccc(F)cc21	-8.5099

860	CHEMBL5279319	C=CC[C@H]1Nc2ccc3ncc(n3n2)C(=O)NC2(CC2)COc2ccc(F)cc21	-10.2032
861	CHEMBL5274362	Cc1cc2ncc3n2nc1N[C@H](C)c1cc(F)ccc1OCC1(CC1)NC3=O	-10.3933
862	CHEMBL5267527	CC1(C)COc2ccc(F)cc2CN(C2CCC2)c2ccc3ncc(n3n2)C(=O)N1	-9.5013
863	CHEMBL4160182	CC(Oc1cccnc1Nc1cnn(C)c1)c1cccc(C(=O)NCc2ccc(F)c(Cl)c2)c1	-7.1232
864	CHEMBL4163543	COc1cccc(CNC(=O)c2cccc(C(C)Oc3cccnc3Nc3cnn(C)c3)c2)c1	-7.1845
865	CHEMBL2064667	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n1)CCC(N1CCOCC1)CC2	-10.4927
866	CHEMBL4456099	CC[C@@H]1C(=O)N(C)c2cnc(Nc3ccc(C4CCN(C)CC4)cc3OC)nc2N1C1CCCC1	-9.2724
867	CHEMBL5291435	COc1cc(N2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc3c(c2)B(O)OC3)n1	-10.8866
868	CHEMBL3651843	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C(=O)N(C1CN(C(=O)[C@@H]3CCCN3C)C1)C2	-11.7735
869	CHEMBL3651858	COCCN1CCC(c2cc(OC(C)C)c(Nc3nc(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)c4c(C)[nH]nc4n3)cc2C)CC1	-11.2343
870	CHEMBL3651866	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3c(C)[nH]nc3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCC(=O)N(C)C)CC1	-11.0968
871	CHEMBL3651874	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3c(C)[nH]nc3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN([C@@H]2CCS(=O)(=O)C2)CC1	-10.9845
872	CHEMBL1172697	N#Cc1c(SCc2ccc(F)cc2)nc2c(c1-c1cccs1)CCCC2	-7.656
873	CHEMBL5170703	COc1cc(N2CCC3(CCNCC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-11.6511
874	CHEMBL5195006	COc1cc(N2CCC3(CC2)CNC3)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-11.9266
875	CHEMBL5280251	O=C(Nc1cccc(-n2cc(CNc3ccc(N4CC(O)C4)c(C(=O)N4CCCCC4)c3)nn2)c1)c1cc(F)cc(F)c1	-11.6821
876	CHEMBL4440381	Cc1cc(-n2cc(C(=O)N3CCO[C@@H](C)C3)c3ccc(O[C@@H](C)c4ccc(F)cn4)nc32)n[nH]1	-10.7348
877	CHEMBL4536955	COc1cc(N2CCCNC2=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NC(C)=O)n1	-11.8117
878	CHEMBL4174347	COc1cc(-n2cc(CN3CCN(C)CC3)nn2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.8249
879	CHEMBL4468370	COc1cc(NC(=O)N2CCN(CCO)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NC(C)=O)n1	-11.6312
880	CHEMBL4083663	Fc1ccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1F	-10.751
881	CHEMBL4079865	Nc1ccc(-c2ccc3c(Nc4ccccc4)ccnc3c2)cn1	-7.8981
882	CHEMBL1779202	CC1(C)c2cc(C3CCN(C4COC4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-12.5152
883	CHEMBL388978	CN[C@@H]1C[C@H]2O[C@@](C)([C@@H]1OC)n1c3ccccc3c3c4c(c5c6ccccc6n2c5c31)C(=O)NC4	-12.4754

884	CHEMBL1796248	COCCN1CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@@H]4CCCC[C@H]4N)n3)cc2CC1	-8.7475
885	CHEMBL1796249	CCS(=O)(=O)N[C@@H]1CCCC[C@H]1Nc1nc(Nc2ccc3c(c2)CCN(CCOC)CC3)ncc1Cl	-10.3552
886	CHEMBL5177248	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(C(=O)N4CCC(C)CC4)c(C)[nH]c3c2)ncc1Cl	-11.9266
887	CHEMBL3356906	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)CN)c2)ncc1Cl	-10.6149
888	CHEMBL1808093	CC(=O)/C=C/c1c(Oc2ccc(NC(C)=O)cc2)nc[nH]c1=O	-7.3438
889	CHEMBL1822514	COCCN1CCc2ccc(Nc3ncc4ccc(-c5ccccc5)n4n3)cc2CC1	-10.5243
890	CHEMBL1822518	CN1CCN(c2ccc(Nc3ncc4ccc(-c5ccccc5NS(C)(=O)=O)n4n3)cc2)CC1	-9.3397
891	CHEMBL3397287	COc1cc(C)cc(-c2nn(CC#N)cc2-c2cc(NCCN3CCOCC3)nc(-c3cccnc3)n2)c1	-7.0794
892	CHEMBL3398168	COc1cc([C@@]2(O)CCNC[C@@H]2O)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3N(C)S(C)(=O)=O)n2n1	-8.9369
893	CHEMBL1940178	CCc1cc2c(cc1N1CCN(C3CC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.7494
894	CHEMBL5200942	CN1CCC2(CC1)CCN(c1ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4P(C)(C)=O)n3)c(OC(F)F)c1)CC2	-12.2005
895	CHEMBL5179104	COc1cc(C2CCC3(CC2)CCN(C)CC3)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-11.8809
896	CHEMBL1922967	Cc1nnsc1C1=NNC(=O)/C1=C\c1cn(C)c2cccc(OCc3ccccc3F)c12	-11.185
897	CHEMBL1922964	Cc1nnsc1C1=NNC(=O)/C1=C\c1cn(C)c2cccc(OCc3ccncc3)c12	-8.2204
898	CHEMBL1922965	Cc1nc(COc2cccc3c2c(/C=C2\C(=O)NN=C2c2snnc2C)cn3C)cs1	-7.8334
899	CHEMBL4466920	COc1cc(N2CCN(CCCN)C2=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.2394
900	CHEMBL4849206	CCc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCN(C(=O)CNc4cccc5c4CN(C4CCC(=O)NC4=O)C5=O)CC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-7.5567
901	CHEMBL2158517	COc1cc(C2CCN(CC(N)=O)CC2)ccc1Nc1ncc2c(O)cc(-c3ccccc3N(C)S(C)(=O)=O)n2n1	-11.2879
902	CHEMBL2158511	CNC(=O)CN1CCC(c2ccc(Nc3ncc4ccc(-c5ccccc5OC)n4n3)c(OC)c2)CC1	-11.3466
903	CHEMBL3286820	Cc1nn(C)c2c1-c1cnc(N)c(c1)O[C@H](C)c1cc(F)ccc1C(=O)N(C)C2	-12.9846
904	CHEMBL4791950	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCC(=O)NCCCCNc2cccc3c2C(=O)N(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)CC1	-6.6866
905	CHEMBL4741115	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCC(=O)NCCCCNCC(=O)Nc2cccc3c2C(=O)N(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)CC1	-7.2064
906	CHEMBL4787978	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCC(=O)NCCOCCNCC(=O)Nc2cccc3c2C(=O)N(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)CC1	-7.5699

907	CHEMBL4785681	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCC(=O)NCCOCCNCCC(=O)Nc2ccc3c2C(=O)N(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)CC1	-8.3027
908	CHEMBL3985471	COC(=O)N1CCN(c2ccc(Nc3nc(Nc4ccc(N5CCN(C(C)=O)CC5)cc4OC)ncc3F)c(OC)c2)CC1	-10.9512
909	CHEMBL4091729	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCc1n[nH]c(C)c1-2	-9.6014
910	CHEMBL3980825	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n2)ccc2c1CCC[C@@H](N1CCN(C)CC1)C2	-11.4115
911	CHEMBL2403831	CC(C)Oc1nc(C2CCNCC2)ncc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-10.5508
912	CHEMBL3823836	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-12.8578
913	CHEMBL1778712	Oc1ccc(Nc2ncnc3ccc(Br)cc23)cc1	-7.8648
914	CHEMBL2403837	COCCN1CCC(c2cc(OC(C)C)c(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)cc2C)CC1	-10.441
915	CHEMBL4079865	Nc1ccc(-c2ccc3c(Nc4ccccc4)ccnc3c2)cn1	-7.8353
916	CHEMBL4088426	c1ccc(Nc2ccnc3cc(-c4ccncc4)ccc23)cc1	-7.3485
917	CHEMBL4087615	COc1ccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-7.1627
918	CHEMBL4086648	Oc1ccc(Nc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-10.7486
919	CHEMBL3263974	C=C1CN(C)CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4C(=O)NC)n3)cc21	-10.2429
920	CHEMBL4084421	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C1CNCCN1CC2	-11.7987
921	CHEMBL1822516	CN1CCN(c2ccc(Nc3ncc4ccc(-c5ccccc5C(N)=O)n4n3)cc2)CC1	-8.7072
922	CHEMBL3929368	CCN(CCO)CCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1oc3ccccc3c1C2=O	-8.653
923	CHEMBL3906889	CC1(C)c2cc(OC3CCCNC3)ccc2C(=O)c2c1oc1ccccc21	-9.4831
924	CHEMBL3952250	N#Cc1ccc2c3c([nH]c2c1)C1(CCOCC1)c1cc(N2CCN(C4CCC4)CC2)c(F)cc1C3=O	-11.865
925	CHEMBL3931121	CCc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(NC(=O)c4ccccc4)ccc3c1C2=O	-9.0372
926	CHEMBL3972807	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n2)ccc2c1CCC[C@H](N1CCN(CCO)CC1)C2	-10.6699
927	CHEMBL4166436	COc1cc(-n2cc(CN3C[C@@H](C)N[C@@H](C)C3)nn2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.0882
928	CHEMBL1778715	Oc1ccccc1-c1nc(Nc2ccc(Cl)cc2)c2ccccc2n1	-7.3608
929	CHEMBL4537507	C[C@@H](Oc1cc(-c2ccn(Cc3ccccc3)c(=O)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.4481
930	CHEMBL1946608	COc1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc(N3CCN(C)CC3)cc2)ncc1Cl	-10.8609
931	CHEMBL1946799	CNC(=O)c1ccc2cc1Nc1nc(ncc1Cl)Nc1ccc(N3CCN(C)CC3)c(c1)CC2	-8.3976
932	CHEMBL4065208	Oc1ccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-11.0494
933	CHEMBL4067168	c1ccc(Nc2ccnc3cc(-c4ccccc4)ccc23)cc1	-7.9027
934	CHEMBL4092349	Fc1cccc(Nc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)c1	-8.932

935	CHEMBL1946799	CNC(=O)c1ccc2cc1Nc1nc(ncc1Cl)Nc1ccc(N3CCN(C)CC3)c(c1)CC2	-10.5749
936	CHEMBL3651834	CC(C)Oc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C3CCCCC3)n1)C(=O)N(C1CCN(C(=O)CN(C)C)CC1)C2	-10.6112
937	CHEMBL1922974	Cc1nnsc1C1=NNC(=O)/C1=C\c1cn(C)c2cccc(OCc3c(F)ccc(Cl)c3F)c12	-11.7735
938	CHEMBL1922987	Cn1cc(/C=C2\C(=O)NN=C2c2nccs2)c2c(OCc3cc(F)ccc3F)cccc21	-11.0197
939	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.2005
940	CHEMBL4559485	C[C@@H](Oc1cc(-c2ccn(CCN(C)C)c(=O)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.4201
941	CHEMBL4559485	C[C@@H](Oc1cc(-c2ccn(CCN(C)C)c(=O)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.8609
942	CHEMBL4586704	C[C@@H](Oc1cc(-c2ccn(C)c(=O)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.8896
943	CHEMBL5283829	COc1cc(Nc2nc(Nc3ccc(N4CCC(N(C)C)CC4)cc3OC)ncc2Cl)cc(B(O)O)c1	-10.0965
944	CHEMBL4875115	CCc1cc2c(cc1N1CCN(C(=O)CNc3cccc4c3C(=O)N(C3CCC(=O)NC3=O)C4=O)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-6.9009
945	CHEMBL3945332	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n2)ccc2c1CCC[C@H](N1CCOCC1)C2	-11.5663
946	CHEMBL4536955	COc1cc(N2CCCNC2=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NC(C)=O)n1	-11.7613
947	CHEMBL4067908	N#Cc1ccc(Nc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-8.1963
948	CHEMBL3889838	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(OC)c(N3CCN(C)CC3)c2)nc1N[C@H]1CC[C@H](O)CC1	-13.6702
949	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.7822
950	CHEMBL3934099	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3-n3cccn3)n2)ccc2c1CCCC(N1CCN(CCO)CC1)C2	-10.9196
951	CHEMBL3545311	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-11.786
952	CHEMBL3974835	CCCc1cc2c(cc1N1CCN(C3CCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.4132
953	CHEMBL3945435	CC1(C)c2cc(N3CCC(N4CCCC4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1ncccc21	-10.6549
954	CHEMBL3890509	CCc1cc2c(cc1N1CCN(C3CCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3nc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.3903
955	CHEMBL3963168	CC1(C)c2cc(OCC(=O)N3CCNCC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.9932
956	CHEMBL3687205	CC(C)c1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCC(N4CCN(C)CC4)CC3)c(C(F)(F)F)c2)nc1N[C@H]1CC[C@H](O)CC1	-13.8564
957	CHEMBL3687208	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCN(C4CC4)CC3)c(C(F)(F)F)c2)nc1N[C@H]1CC[C@H](O)CC1	-12.803
958	CHEMBL4208852	CNc1ncc2c(-c3ccc(N4CCN(C)CC4)nc3)nn(CC3CCCC3)c2n1	-9.5329

959	CHEMBL1796242	COc1cc(N2CCOCC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(N[C@@H]2CCCC[C@H]2NS(C)(=O)=O)n1	-11.3466
960	CHEMBL1779195	CC1(C)c2cc(OCCNC(N)=O)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.7538
961	CHEMBL3903395	CC1(C)c2cc(OCC(=O)NCCC#N)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.0307
962	CHEMBL3934973	CN(C)S(=O)(=O)Oc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-10.3418
963	CHEMBL1796257	COCCN1CCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@@H]4CCCC[C@H]4N(C)S(C)(=O)=O)n3)c(OC)cc2CC1	-12.0882
964	CHEMBL1779097	CCOc1ccc2c3c(oc2c1)C(C)(C)c1cc(OCCN(CC)CC)ccc1C3=O	-8.3297
965	CHEMBL1778718	Cc1cc(-c2cccc(N)c2)c(/C=C2\C(=O)Nc3ccccc32)[nH]1	-10.2247
966	CHEMBL2158523	COc1ccc(N2CCN(C)CC2)cc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3N(C)S(C)(=O)=O)n2n1	-10.7124
967	CHEMBL1779192	CCN(CC)CCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.484
968	CHEMBL5171152	COc1cc(N2CCC3(CCN(C)CC3)CC2)c(Cl)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-12.5152
969	CHEMBL2403840	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CC(=O)O)CC1	-10.0007
970	CHEMBL2403367	COc1ccc2c(c1)/C(=C/c1cc3c([nH]1)CCN(C(C)=O)C3)C(=O)N2	-8.2602
971	CHEMBL4790721	CN1CCN(Cc2nc3ccc(Nc4ncc(Cl)c(Nc5ccccc5C(=O)N(C)C)n4)cc3[nH]2)CC1	-11.9426
972	CHEMBL4760756	CCC(C)n1c2cc(N3CCN(C)CC3)c(OC)cc2c(=O)c2c3ccc(C#N)cc3[nH]c21	-11.7377
973	CHEMBL3115500	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4nc5cncc(-c6ccc(N7CCN(C)CC7)cc6)n5c4c3)cc2)CC1	-6.4358
974	CHEMBL4748361	COc1cc(OCC2CCCO2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(C)(=O)=O)n1	-12.0882
975	CHEMBL3822499	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2C(C)O)n1	-12.7711
976	CHEMBL3823864	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2C#N)n1	-12.3827
977	CHEMBL3823603	COc1cc(OC2CCN(C)C2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-13.4478
978	CHEMBL3822973	COc1ccccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.3079
979	CHEMBL3823268	COc1cc(P(C)(C)=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2C(N)=O)n1	-13.0025
980	CHEMBL4103197	c1ccc(Nc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-8.408
981	CHEMBL4095442	Cn1cc(-c2ccc3c(Nc4ccccc4)ccnc3c2)cn1	-7.3981
982	CHEMBL4076799	Cc1ccc(Nc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-9.4982
983	CHEMBL3785999	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(C)(=O)=O)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-9.9664
984	CHEMBL3785304	Cc1cc(Nc2ncnc(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1C1CCN(C)CC1	-10.5576
985	CHEMBL3785607	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1C1CCS(=O)(=O)CC1	-11.4115

986	CHEMBL3786892	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCC(N)C2(C)C	-12.5152
987	CHEMBL4087615	COc1ccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-10.4597
988	CHEMBL4085274	c1ccc(Nc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCOCC5)c4)ccc23)cc1	-7.8958
989	CHEMBL4065208	Oc1ccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-11.7494
990	CHEMBL4065208	Oc1ccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-11.5576
991	CHEMBL4066413	c1ccc(Nc2ccnc3cc(-c4cn[nH]c4)ccc23)cc1	-7.1697
992	CHEMBL4075012	CCn1nccc1-c1ccc2c(Nc3ccccc3)ccnc2c1	-6.4487
993	CHEMBL4102556	Fc1ccccc1Oc1ccnc2cc(-c3cnn(C4CCNCC4)c3)ccc12	-10.6557
994	CHEMBL4750810	CCN1CCN(CCS(=O)(=O)c2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)c(OC)c2)CC1	-10.9845
995	CHEMBL4748361	COc1cc(OCC2CCCO2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(C)(=O)=O)n1	-12.0295
996	CHEMBL4852786	CN1CCN(C(=O)c2cc(NC(=O)[C@@H]3CCCN3c3nc(Nc4cc(F)cc(F)c4)ncc3Cl)ccc2N2CCOCC2)CC1	-10.2429
997	CHEMBL3218851	CN1CCN(c2ccc(-c3nc4c(N[C@H]5[C@@H](C(N)=O)[C@@H]6C=C[C@H]5C6)c(Cl)cnc4[nH]3)cc2)CC1	-11.911
998	CHEMBL5178030	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C(=O)SCC(=S)N2CCN(CCO)CC2)CC1	-11.6119
999	CHEMBL3651835	CC(C)Oc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C3CCC3)n1)C(=O)N(C1CCN(C(=O)CN(C)C)CC1)C2	-12.338
1000	CHEMBL1946608	COc1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc(N3CCN(C)CC3)cc2)ncc1Cl	-9.9283
1001	CHEMBL3687213	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCC(N4CCN(C)CC4)CC3)c(C)c2)nc1NC1CCC(O)(CC)CC1	-12.068
1002	CHEMBL4516801	Cc1cc(-n2cc(C(=O)N(C)C)c3ccc(N[C@@H](C)c4ccc(F)cn4)nc32)[nH]n1	-12.4029
1003	CHEMBL4586773	Cc1cc(-n2cc(C(=O)N3CCN(C)CC3)c3ccc(N[C@@H](C)c4ccc(F)cn4)nc32)[nH]n1	-10.5407
1004	CHEMBL4756825	CC(C)Cc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2cc1N1CCN(C)CC1	-12.2005
1005	CHEMBL4741676	CC(C)n1c2cc(N3CCN(C)CC3)ccc2c(=O)c2c3ccc(C#N)cc3[nH]c21	-10.8808
1006	CHEMBL4748562	CC(C)n1c2cc(N3CCC(N4CCOCC4)CC3)ccc2c(=O)c2c3ccc(C#N)cc3[nH]c21	-10.6993
1007	CHEMBL4785020	CC(C)n1c2[nH]c3cc(C#N)ccc3c2c(=O)c2cc(F)c(N3CCN(C)CC3)c(F)c21	-11.6025
1008	CHEMBL5095068	COc1cc(N2CCC3(CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-12.4381
1009	CHEMBL5178402	COc1cc(N2CCC3(CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=S)n1	-12.2256
1010	CHEMBL5285159	O=C(Nc1cccc(-n2cc(CNc3ccc(N4CCC(O)CC4)c(C(=O)N4CCCC4)c3)nn2)c1)c1cc(F)cc(F)c1	-11.959

1011	CHEMBL5285159	O=C(Nc1cccc(-n2cc(CNc3ccc(N4CCC(O)CC4)c(C(=O)N4CCCC4)c3)nn2)c1)c1cc(F)cc(F)c1	-11.5841
1012	CHEMBL3218846	COc1ccc(-c2nc3c(N[C@H]4[C@@H](C(N)=O)[C@@H]5C=C[C@H]4C5)c(Cl)cnc3[nH]2)cc1	-9.5044
1013	CHEMBL3218857	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1-c1nc2c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)c(Cl)cnc2[nH]1	-12.934
1014	CHEMBL3218855	COc1cc(N2CCN(C)CC2)ccc1-c1nc2c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)c(Cl)cnc2[nH]1	-11.484
1015	CHEMBL4099660	COc1cc(CCN(C)C)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-13.1221
1016	CHEMBL4794675	CCNC(=O)N1CCc2cc(OC)c(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)cc2C1	-11.3466
1017	CHEMBL4765021	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCN(CCO)C2	-11.3466
1018	CHEMBL4760370	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCN(C)C2	-8.7209
1019	CHEMBL4743579	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CNCC2	-13.644
1020	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-9.8459
1021	CHEMBL3822672	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)N(C)C)n1	-12.9421
1022	CHEMBL3824185	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2)n1	-11.3528
1023	CHEMBL4066413	c1ccc(Nc2ccnc3cc(-c4cn[nH]c4)ccc23)cc1	-7.0734
1024	CHEMBL3651848	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3c(C)[nH]nc3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C(=O)CN(C)C)CC1	-11.5663
1025	CHEMBL3651867	CNC(=O)CCN1CCC(c2cc(OC(C)C)c(Nc3nc(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)c4c(C)[nH]nc4n3)cc2C)CC1	-10.7822
1026	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-10.014
1027	CHEMBL5198409	C#CCN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(Cc7ccccc7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-7.3861
1028	CHEMBL3286832	C[C@H]1Oc2nc(cnc2N)-c2c(nc3ccc(C#N)cn23)CN(C)C(=O)c2ccc(F)cc21	-10.4201
1029	CHEMBL3263977	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cc3c(cc2OC)CCN(C)CCCCC3)ncc1Cl	-11.0197
1030	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-6.32
1031	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-5.7314
1032	CHEMBL4279793	CC(C)Oc1nc(N2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(C)(=O)=O)n1	-7.5437
1033	CHEMBL4291608	COc1nc(N2CCN(CCO)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(C)(=O)=O)n1	-7.7935

1034	CHEMBL3582427	N#Cc1ccc(-c2cnc3ccc(NCc4ccccc4)nn23)cc1	-7.5437
1035	CHEMBL4581316	C=CC(=O)Nc1cc(Nc2ncc(I)c(Nc3ccccc3P(C)(C)=O)n2)c(OC)cc1N(C)CCN(C)C	-10.4775
1036	CHEMBL1642255	COCCN1CCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccc(N5CCOCC5)cc4OC)n3)c(OC)cc2CC1	-9.6785
1037	CHEMBL4095442	Cn1cc(-c2ccc3c(Nc4ccccc4)ccnc3c2)cn1	-7.5515
1038	CHEMBL1796256	COCCN1CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(NC4CCCCC4)n3)cc2CC1	-10.0813
1039	CHEMBL1164181	CN1CCN(c2ccc(-c3cnc4c(c3)N(Cc3cc(Cl)ccc3Cl)CCN4)cn2)CC1	-11.2879
1040	CHEMBL1163567	COC1CCN(C(=O)c2ccc(-c3cnc4c(c3)N(Cc3cc(Cl)ccc3C(F)(F)F)CCN4)cc2)CC1	-9.0018
1041	CHEMBL4854103	CN1CCN(c2ccc(NC(=O)[C@@H]3CCCN3c3nc(Nc4cc(F)cc(F)c4)ncc3Cl)cc2C(=O)N2CCSCC2)CC1	-10.5243
1042	CHEMBL4794942	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CN(CCO)CC2	-12.338
1043	CHEMBL4780333	CC(C)COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCNC2	-12.6526
1044	CHEMBL4782674	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCNC2	-12.7649
1045	CHEMBL4758611	CC(C)Oc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCNC2	-11.185
1046	CHEMBL4746688	CN(C)C(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3nc(CN4CCCC4)[nH]c3c2)ncc1Cl	-11.1709
1047	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-9.5942
1048	CHEMBL4851806	CCc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCN(CCCC#Cc4cccc5c4CN(C4CCC(=O)NC4=O)C5=O)CC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-5.7075
1049	CHEMBL4781279	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CN(CCN(C)C)CC2	-11.0571
1050	CHEMBL4762215	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CC[N+](C)(C)C2.[I-]	-12.5152
1051	CHEMBL4752172	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CN(C(=O)CO)CC2	-10.6699
1052	CHEMBL4782674	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCNC2	-12.4381
1053	CHEMBL3890564	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(c2OC)CCCC(N2CCN(CCO)CC2)C3)ncc1Cl	-12.0111
1054	CHEMBL4795124	CC(C)Oc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2cc1N1CCN(C)CC1	-11.6821
1055	CHEMBL514873	COc1cc2c(cc1Nc1nc(Nc3ccsc3C(N)=O)c3cc[nH]c3n1)N(C(=O)CN(C)C)CC2	-13.3293
1056	CHEMBL4088426	c1ccc(Nc2ccnc3cc(-c4ccncc4)ccc23)cc1	-7.8627
1057	CHEMBL4073635	Brc1ccc2c(Nc3ccccc3)ccnc2c1	-5.932
1058	CHEMBL3687224	CC(C)c1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCN(C)CC3)cc2)nc1NC1CCOCC1	-11.8384
1059	CHEMBL3651831	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C(=O)[C@@H]2CCCN2)CC1	-11.185

1060	CHEMBL3805214	C[C@@H](c1cc(F)cc(F)c1)c1ccc2[nH]nc(NC(=O)c3ccc(N4CCN(C)CC4)cc3NC3CCOCC3)c2c1	-10.9512
1061	CHEMBL2042831	CCN1C(=O)CCCc2c1ccc(Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)N(C)C)n1)c2OC	-10.1936
1062	CHEMBL3398174	COc1cc([C@@H]2CCN(CCO)C[C@@H]2O)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3OC)n2n1	-12.0882
1063	CHEMBL3398173	COc1cc([C@@H]2CCN(CC(N)=O)C[C@@H]2O)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3OC)n2n1	-11.0968
1064	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-10.5749
1065	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-9.9864
1066	CHEMBL4174347	COc1cc(-n2cc(CN3CCN(C)CC3)nn2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.4324
1067	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-7.0916
1068	CHEMBL4170674	COc1cc(Nc2cc(OC(C)c3cccc(C(=O)NCc4ccc(C)cc4)c3)ccn2)cc(OC)c1OC	-7.1774
1069	CHEMBL3263982	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(c2)C(C)CN(C(C)=O)CC3)ncc1Cl	-10.3193
1070	CHEMBL4170026	Cc1ccc(CNC(=O)c2cccc(C(C)Oc3ccnc(NN4CCOCC4)c3)c2)cc1	-7.3292
1071	CHEMBL4160169	CC(Oc1ccnc(Nc2cnn(C)c2)c1)c1cccc(C(=O)NCc2cc(F)cc(F)c2)c1	-7.5567
1072	CHEMBL4160581	CC(C)Oc1cc(-c2nc(CN3CCN(CCO)CC3)cs2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.911
1073	CHEMBL4739938	Cc1cc(Nc2cc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)nc3[nH]ccc23)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C)CC1	-9.546
1074	CHEMBL4762861	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3c(C)n[nH]c3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-11.7735
1075	CHEMBL4743188	CS(=O)(=O)Nc1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3nc(CN4CCCCC4)[nH]c3c2)ncc1Cl	-11.454
1076	CHEMBL4762173	CCNC(=O)N1CCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)c(OC)cc2C1	-12.338
1077	CHEMBL4782674	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCNC2	-11.6716
1078	CHEMBL4743579	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CNCC2	-13.2432
1079	CHEMBL4782674	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCNC2	-12.3079
1080	CHEMBL3286816	Cn1ncc2c1-c1cnc(N)c(c1)OCc1cc(F)ccc1OCCC2	-10.0212
1081	CHEMBL3286817	Cn1ncc2c1-c1cnc(N)c(c1)OCc1cc(F)ccc1OCCCC2	-8.908
1082	CHEMBL3286826	COc1nn(C)c2c1-c1cnc(N)c(n1)O[C@H](C)c1cc(F)ccc1C(=O)N(C)C2	-14.1245
1083	CHEMBL3286808	COc1ccc(F)cc1[C@@H](C)Oc1cc(-c2cnnn2C)cnc1N	-7.7935
1084	CHEMBL3286817	Cn1ncc2c1-c1cnc(N)c(c1)OCc1cc(F)ccc1OCCCC2	-7.7116

1085	CHEMBL3286822	Cc1nn(C)c2c1-c1cnc(N)c(c1)OCc1cc(F)ccc1C(=O)N(C)C2	-9.947
1086	CHEMBL4757036	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCN(C(=O)CO)C2	-11.3466
1087	CHEMBL4755723	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCN(C(C)=O)C2	-10.6699
1088	CHEMBL1947001	COc1cc(N2CCN(C)CC2)c2cc1Nc1ncc(Cl)c(n1)Nc1cc(cc1N(C)S(C)(=O)=O)/C=C\2	-9.816
1089	CHEMBL1822520	COc1cc(N2CCN(C[C@H](C)O)CC2)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3OC)n2n1	-11.7735
1090	CHEMBL1779193	CC1(C)c2cc(OCCN3CCS(=O)(=O)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.959
1091	CHEMBL1779197	CC1(C)c2cc(N3CCOCC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.9677
1092	CHEMBL1940176	CC1(C)c2ccc(N3CCN(C4CC4)CC3)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-9.4072
1093	CHEMBL1778722	Cc1cc(-c2cccc(NCCN)c2)c(/C=C2\C(=O)Nc3ccccc32)[nH]1	-9.9994
1094	CHEMBL1779199	CC1(C)c2cc(N3CCN(S(C)(=O)=O)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.5341
1095	CHEMBL2403842	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C(=O)CN(C)C)CC1	-10.7628
1096	CHEMBL3785774	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CC/C(=N\N1CCN(C)CC1)C2(C)C	-11.454
1097	CHEMBL3735531	CCc1cc2c(cc1N1CCC(N(C)C3COC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.3782
1098	CHEMBL3735314	CCc1cc2c(cc1C1=CCN(C(=O)C3COCCN3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.9426
1099	CHEMBL3286819	C[C@H]1Oc2cc(cnc2N)-c2c(nn(C)c2C#N)CCCOc2ccc(F)cc21	-12.8298
1100	CHEMBL3286822	Cc1nn(C)c2c1-c1cnc(N)c(c1)OCc1cc(F)ccc1C(=O)N(C)C2	-11.6215
1101	CHEMBL3263970	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(c2)C(c2ccccc2)CN(C)CC3)ncc1Cl	-11.1393
1102	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.338
1103	CHEMBL2042827	CCN1C(=O)CCCc2c1ccc(Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3C(=O)NC)n1)c2OC	-11.2879
1104	CHEMBL3426891	CN1CCN(c2ccc(Nc3ncc(Cl)c(NC[C@H]4CCCO4)n3)cc2)CC1	-9.7079
1105	CHEMBL3218856	COc1cc(N2CCC(N3CCOCC3)CC2)ccc1-c1nc2c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)c(Cl)cnc2[nH]1	-13.4863
1106	CHEMBL3735384	CCc1cc2c(cc1N1CCN(CC3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.8384
1107	CHEMBL4753667	CN(C)Cc1nc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4C(=O)N(C)C)n3)cc2[nH]1	-11.5752
1108	CHEMBL4743188	CS(=O)(=O)Nc1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3nc(CN4CCCCC4)[nH]c3c2)ncc1Cl	-11.5576

1109	CHEMBL4745560	CCC(C)Oc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCNC2	-12.6526
1110	CHEMBL4757036	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCN(C(=O)CO)C2	-12.7649
1111	CHEMBL4764866	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CN(C(C)=O)CC2	-10.3552
1112	CHEMBL4756562	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCN(CCN(C)C)C2	-8.408
1113	CHEMBL4782674	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCNC2	-12.0882
1114	CHEMBL3357442	CN(c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)CN)c2)ncc1Cl)S(C)(=O)=O	-11.5076
1115	CHEMBL3357447	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)C(C)(C)N)c2)ncc1Cl	-11.7148
1116	CHEMBL3917455	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n2)ccc2c1CC(N1CCOCC1)CCC2	-10.5083
1117	CHEMBL3953048	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3NS(C)(=O)=O)n2)ccc2c1CCCC(N1CCN(CCO)CC1)C2	-10.9845
1118	CHEMBL3895817	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(=O)CO)CC3)cc2OC)n1	-11.0571
1119	CHEMBL3971353	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(F)c(Nc2ccc(N3CCN(CCO)CC3)cc2OC)n1	-11.2879
1120	CHEMBL3904285	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1nc(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2)ncc1Cl	-9.4801
1121	CHEMBL3898320	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(=O)OC(C)(C)C)CC3)cc2OC)n1	-9.2495
1122	CHEMBL3958866	CCOc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1nc(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)ncc1Cl	-10.7822
1123	CHEMBL3949131	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OCc2ccccc2)n1	-8.5099
1124	CHEMBL3911373	CC(=O)N1CCN(c2ccc(Nc3ncc(C(F)(F)F)c(Nc4ccc(N5CCN(C(C)=O)CC5)cc4OC(F)F)n3)c(OC(F)F)c2)CC1	-10.2638
1125	CHEMBL3973750	COc1cc(N2CCN(CCO)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-10.8896
1126	CHEMBL3899182	COC(=O)N1CCN(c2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccc(N5CCN(C(C)=O)CC5)cc4OC)n3)c(OC)c2)CC1	-11.3466
1127	CHEMBL3953919	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(=O)CO)CC3)cc2OC(F)F)n1	-11.911
1128	CHEMBL3890271	CCN(CC)CCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1c(c3ccccc3n1S(C)(=O)=O)C2=O	-9.6322
1129	CHEMBL4784162	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCC(=O)O)CC1	-7.6716
1130	CHEMBL4279793	CC(C)Oc1nc(N2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2cccc2NS(C)(=O)=O)n1	-7.1297
1131	CHEMBL4105497	COc1ccc(Nc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-8.8816
1132	CHEMBL4067871	OC[C@H](Nc1cnc(-c2cc(Cl)ccc2O)c(-c2ccc3cnccc3c2)c1)c1ccccc1	-9.967
1133	CHEMBL4074115	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)c(=O)[nH]c1ccccc12	-9.2314

1134	CHEMBL4062738	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)c(=O)n(OC)c1ccccc21	-9.5329
1135	CHEMBL4747624	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CN(S(N)(=O)=O)CC2	-10.3552
1136	CHEMBL4764107	CCc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2cc1N1CCN(C)CC1	-12.3079
1137	CHEMBL4755960	COc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2cc1N1CCN(C)CC1	-11.7987
1138	CHEMBL4741967	COc1cc(SCc2ccc(CN3CCCC3)o2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(C)(=O)=O)n1	-12.0111
1139	CHEMBL1796258	CCN([C@@H]1CCCC[C@H]1Nc1nc(Nc2cc3c(cc2OC)CCN(CCOC)CC3)ncc1Cl)S(C)(=O)=O	-9.6785
1140	CHEMBL549826	Brc1ccc2[nH]c3c(c2c1)CCN(CC(c1ccccc1)c1ccccc1)c1nccc(I)c1-3	-7.5186
1141	CHEMBL557491	Oc1ccc(CCN2CCc3c([nH]c4ccc(Br)cc34)-c3c(I)ccnc32)cc1	-7.3861
1142	CHEMBL1922975	Cn1cc(/C=C2\C(=O)NN=C2c2cccnc2)c2c(OCc3ccccc3)ccccc21	-10.3078
1143	CHEMBL2172328	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccccc3)[nH]c3ccc(CN4CCCCC4)cc32)CC1	-11.7735
1144	CHEMBL4779513	COc1cc(-n2cccc2C(=O)N2CCSCC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(C)(=O)=O)n1	-11.8384
1145	CHEMBL4778125	COc1cc(-n2cccc2C(=O)NCCO)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(C)(=O)=O)n1	-12.068
1146	CHEMBL4562805	COc1cc(NC(=O)N2CCOCC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NC(C)=O)n1	-12.823
1147	CHEMBL1946800	CC(C)S(=O)(=O)c1ccc2cc1Nc1nc(ncc1Cl)Nc1ccc(N3CCN(C)CC3)c(c1)CC2	-11.959
1148	CHEMBL3938910	CCN(CC)CCOc1ccc2c(n1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.6145
1149	CHEMBL3978315	CCN(CC)CCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)c(Br)cc3c1C2=O	-9.9412
1150	CHEMBL3902372	CC1(C)c2cc(OCCNS(N)(=O)=O)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.5116
1151	CHEMBL3964940	CC1(C)c2cc(N3CCN(C4CCCC4)CC3=O)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.1254
1152	CHEMBL3939371	CC1(C)c2cc(CC3CCN(S(N)(=O)=O)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.5423
1153	CHEMBL3937469	CC1(C)c2cc(C(=O)N3CCN(C(C)(C)C)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.661
1154	CHEMBL3892880	CC1(C)c2cc(N3CCC(N)CC3)c(Br)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-13.8637
1155	CHEMBL3937655	CC1(C)c2cc(N3CCC(N4CCCC4)CC3)c(C3=CCNCC3)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-12.4104
1156	CHEMBL3924077	CCCc1cc2c(cc1N1CCN(CCCCO)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.7101
1157	CHEMBL3902757	CCc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCN(C)CC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.9846

1158	CHEMBL4115599	CC1(C)c2cc(OC[C@@H](O)[C@H](O)CO)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C(=O)OCCO)ccc21	-8.8508
1159	CHEMBL4168473	COc1cc(-n2cc(CN3CCC(C)CC3)nn2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.9266
1160	CHEMBL4465103	C=CC(=O)Nc1cc(Nc2nccc(Nc3ccccc3P(C)(C)=O)n2)c(OC)cc1N(C)CCN(C)C	-8.7341
1161	CHEMBL4531697	C=CC(=O)Nc1cc(Nc2ncc(I)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC)cc1N(C)CCN(C)C	-9.9864
1162	CHEMBL3128064	Cc1nc(C(C)(C)O)sc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)c1	-10.7348
1163	CHEMBL4522012	Cc1cc(NC2CCN(C)CC2)ccc1-c1cc2c(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4ccc(OC(F)(F)F)cc4)C3)ncnc2[nH]1	-11.8103
1164	CHEMBL4523063	COc1cc(N2CCNCC2)ccc1Nc1cc(N2CCC[C@H](C(=O)NCc3ccc(OC(F)(F)F)cc3)C2)ccn1	-10.473
1165	CHEMBL2418751	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5ccccc5F)c4)c3c2)cn1	-9.4343
1166	CHEMBL4559485	C[C@@H](Oc1cc(-c2ccn(CCN(C)C)c(=O)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.9512
1167	CHEMBL4546844	COc1cc(NC(=O)NC2CCC(=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NC(C)=O)n1	-11.3913
1168	CHEMBL2403844	CC(C)Oc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-10.7871
1169	CHEMBL3950987	COc1cc(N2CCN(CCO)CC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-12.0882
1170	CHEMBL3902089	COc1cc(N2CCN(S(C)(=O)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(S(C)(=O)=O)CC3)cc2OC)n1	-10.9196
1171	CHEMBL3927296	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC(C)C)n1	-9.1375
1172	CHEMBL4849606	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc(C(=O)NCCCCCCCC(=O)NO)cc2)ncc1Cl	-12.2256
1173	CHEMBL3398166	COc1cc([C@@]2(O)CCN(C)C[C@@H]2O)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3OC)n2n1	-10.6699
1174	CHEMBL3398169	COc1cc([C@@]2(O)CCNC[C@@H]2O)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3OC)n2n1	-10.4927
1175	CHEMBL3397285	COc1cc(C)cc(-c2nn(CC#N)cc2-c2cc(NCCCO)nc(-c3cccnc3)n2)c1	-7.6086
1176	CHEMBL560733	Cc1cc(O)cc(-c2nn(CC#N)cc2-c2cc(NC[C@H](C)O)nc(-c3cccnc3)n2)c1	-13.0796
1177	CHEMBL3330859	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2nc3c(s2)CCN(C(=O)C2CCOCC2)CC3)ncc1Cl	-10.8073
1178	CHEMBL3330871	CCN(CC)C(=O)c1csc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)n1	-8.9737
1179	CHEMBL3330860	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2nc3c(s2)CCN(CCN2CCOCC2)CC3)ncc1Cl	-10.1676
1180	CHEMBL4291608	COc1nc(N2CCN(CCO)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(C)(=O)=O)n1	-7.2447
1181	CHEMBL3961212	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ccnc(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-8.6863

1182	CHEMBL3263971	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(c2)C(C)CN(C)CC3)ncc1Cl	-10.8073
1183	CHEMBL3263971	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(c2)C(C)CN(C)CC3)ncc1Cl	-11.0968
1184	CHEMBL4071105	COc1cc(CCNC=O)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.911
1185	CHEMBL4061375	COc1cc(C(C)(C)C#N)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-8.8562
1186	CHEMBL4063965	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCc1nn(C(=O)CO)c(C)c1-2	-10.8896
1187	CHEMBL4514558	Oc1ccc(-c2ccc3c(-c4ccc(CN5CCCC5)o4)n[nH]c3n2)cc1	-9.3561
1188	CHEMBL3357451	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)C3CCN3)c2)ncc1Cl	-10.4312
1189	CHEMBL3357461	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)CN3CC4CCC(C3)O4)c2)ncc1Cl	-10.3394
1190	CHEMBL4065208	Oc1ccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-10.6781
1191	CHEMBL4087615	COc1ccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-9.6623
1192	CHEMBL4065208	Oc1ccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-7.5904
1193	CHEMBL4092349	Fc1cccc(Nc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)c1	-9.1108
1194	CHEMBL2418763	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5cc(F)cc(F)c5)c4)c3c2)cn1	-10.3933
1195	CHEMBL2418756	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5cccc(C(F)(F)F)c5)c4)c3c2)cn1	-8.9811
1196	CHEMBL2418762	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5ccc(F)c(F)c5)c4)c3c2)cn1	-8.5189
1197	CHEMBL2418762	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5ccc(F)c(F)c5)c4)c3c2)cn1	-9.1076
1198	CHEMBL2172317	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(C#N)cc3)[nH]c3ccc(CN4CCC(C(C)(C)O)CC4)cc32)CC1	-12.7649
1199	CHEMBL199298	CN1CCN(Cc2ccc(NC(=O)c3cc(-c4ccc5c(c4)OCO5)cnc3Cl)cc2)CC1	-6.4844
1200	CHEMBL1946607	CN1CCN(c2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4)n3)cc2)CC1	-10.1749
1201	CHEMBL1946999	CN1CCN(c2ccc3cc2/C=C\c2cccc(c2)Nc2nc(ncc2Cl)N3)CC1	-9.0868
1202	CHEMBL1946614	COc1ccc2cc1Nc1nc(ncc1Cl)Nc1ccc(N3CCN(C)CC3)c(c1)CC2	-9.6785
1203	CHEMBL1940175	CC1(C)c2ccc(C3CCN(C4COC4)CC3)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.1749
1204	CHEMBL2158527	COc1cc(C2CCNCC2)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3N(C)S(C)(=O)=O)n2n1	-11.3466
1205	CHEMBL2158526	COc1cc(C2CCN(C[C@@H](C)O)CC2)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3N(C)S(C)(=O)=O)n2n1	-11.6612
1206	CHEMBL2158530	COc1cc(C2CCN(CC(O)CF)CC2)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3OC)n2n1	-12.0882
1207	CHEMBL4855319	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc(NC(=O)CCCCCCC(=O)NO)cc2)ncc1Cl	-13.3293
1208	CHEMBL1940180	CC1(C)c2cc(N3CCC(N4CCOCC4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.0571

1209	CHEMBL2064723	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n1)CCC(N1CCN(C)CC1)CC2	-9.6785
1210	CHEMBL2064667	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n1)CCC(N1CCOCC1)CC2	-11.6612
1211	CHEMBL1642254	CCN1C(=O)CCCc2c1ccc(Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccc(N4CCOCC4)cc3OC)n1)c2OC	-9.5836
1212	CHEMBL4476089	[2H]C([2H])([2H])C([2H])(Oc1cc(C2CCNCC2)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1)C([2H])([2H])[2H]	-10.2088
1213	CHEMBL3687214	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCC(N4CCN(C)CC4)CC3)c(C)c2)nc1NC1CCC(O)(C(C)C)CC1	-12.1763
1214	CHEMBL3956794	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(F)c(Nc2ccc(N3CCN(S(C)(=O)=O)CC3)cc2OC)n1	-10.8609
1215	CHEMBL3981035	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(=O)CO)CC3)cc2OC)n1	-11.3466
1216	CHEMBL3786792	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C(C)(C)/C(=N/N1CCN(C)CC1)CC2	-9.5013
1217	CHEMBL3897963	CCN(CC)CCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1sc3ccccc3c1C2=O	-9.9674
1218	CHEMBL3286820	Cc1nn(C)c2c1-c1cnc(N)c(c1)O[C@H](C)c1cc(F)ccc1C(=O)N(C)C2	-11.1393
1219	CHEMBL3263978	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cc3c(cc2OC)CCN(C)CCC3)ncc1Cl	-10.5576
1220	CHEMBL3263991	CC1CN(C)CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C4CC4)n3)cc21	-11.5576
1221	CHEMBL4546844	COc1cc(NC(=O)NC2CCC(=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NC(C)=O)n1	-12.2005
1222	CHEMBL4448400	COc1cc(NC(=O)N2CCCC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NC(C)=O)n1	-11.7613
1223	CHEMBL3806122	CN1CCC(Oc2ccc(C(=O)Nc3n[nH]c4ccc(Cc5cc(F)cc(F)c5)cc34)c(NC3CCOCC3)c2)CC1	-11.4115
1224	CHEMBL3804988	C[C@H](c1cc(F)cc(F)c1)c1ccc2[nH]nc(NC(=O)c3ccc(N4CCN(C)CC4)cc3NC3CCOCC3)c2c1	-10.2533
1225	CHEMBL4097392	COc1cc(CN(C)C)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.3079
1226	CHEMBL4078406	CNC(C)(C)c1cc(OC)c(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)cc1C	-12.5577
1227	CHEMBL4173409	Cc1ccc(CNC(=O)c2cccc(C(C)Oc3ccnc(Nc4cnn(C5CCN(C)CC5)c4)c3)c2)cc1	-7.813
1228	CHEMBL4753667	CN(C)Cc1nc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4C(=O)N(C)C)n3)cc2[nH]1	-12.0484
1229	CHEMBL4476089	[2H]C([2H])([2H])C([2H])(Oc1cc(C2CCNCC2)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1)C([2H])([2H])[2H]	-9.8735
1230	CHEMBL4166575	COc1ccc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)cc1NC(=O)CNC(=O)c1noc(-c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)c1-c1ccc(CN2CCOCC2)cc1	-8.5364
1231	CHEMBL4518979	Oc1ccc(-c2ccc3c(-c4ccc(F)cc4)n[nH]c3n2)cc1	-9.181

1232	CHEMBL3651830	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C[C@H](O)C(F)(F)F)CC1	-10.4481
1233	CHEMBL3651839	CC(C)Oc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C(=O)N(C1CCN(C(=O)C3CNC3)CC1)C2	-10.014
1234	CHEMBL3651841	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C(=O)N(C1CN(C(=O)CN(C)C)C1)C2	-11.6612
1235	CHEMBL3651855	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3c(C)[nH]nc3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CC(N)=O)CC1	-11.1393
1236	CHEMBL3651870	Cc1[nH]nc2nc(Nc3ccc(C4CCNCC4)cc3)nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c12	-11.0197
1237	CHEMBL4753667	CN(C)Cc1nc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4C(=O)N(C)C)n3)cc2[nH]1	-11.9426
1238	CHEMBL4747624	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CN(S(N)(=O)=O)CC2	-11.484
1239	CHEMBL4440381	Cc1cc(-n2cc(C(=O)N3CCO[C@@H](C)C3)c3ccc(O[C@@H](C)c4ccc(F)cn4)nc32)n[nH]1	-12.1091
1240	CHEMBL4435574	Cc1cc(-n2cc(S(=O)(=O)C(C)C)c3ccc(N[C@@H](C)c4ccc(F)cn4)nc32)n[nH]1	-9.3165
1241	CHEMBL3786006	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3c[nH]nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-10.7124
1242	CHEMBL1779189	CCN(CC)CCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(Br)ccc3c1C2=O	-9.9283
1243	CHEMBL1779194	CC(=O)NCCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.2552
1244	CHEMBL1779196	CC1(C)c2cc(N3CCCCC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.6037
1245	CHEMBL1779198	CC1(C)c2cc(N3CCC(O)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.2659
1246	CHEMBL201639	COc1cc(CN2CCN(C)CC2)ccc1NC(=O)c1cc(-c2ccc3c(c2)OCO3)cnc1O	-6.8932
1247	CHEMBL2012519	COc1cc(O)c2c(c1)CCC[C@H](O)[C@H](O)C(=O)/C=C\C[C@H](C)OC2=O	-8.6766
1248	CHEMBL3735349	CC1(C)c2cc(-c3cnn(C4CCNCC4)c3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.3193
1249	CHEMBL4168903	COc1cc(CNC(=O)c2cccc(C(C)Oc3ccnc(Nc4cnn(C)c4)c3)c2)cc(OC)c1OC	-7.9969
1250	CHEMBL4562879	Cc1cc(-c2cnc3ccc(N[C@@H](C)c4ccc(F)cc4F)nn23)[nH]n1	-11.6612
1251	CHEMBL3397293	Cc1cc(O)cc(-c2nn(CC#N)cc2-c2cc(NCCCN3CCOCC3)nc(-c3cccnc3)n2)c1	-6.7434
1252	CHEMBL3263976	C/C=C1/CN(C)CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4C(=O)NC)n3)cc21	-11.185
1253	CHEMBL3115492	c1ccc(Nc2cc3nc4ccccc4n3cn2)cc1	-6.0761
1254	CHEMBL3115503	COc1ccc(-c2cncc3nc4ccc(/C=C/c5ccccc5)cc4n23)cc1	-7.5835
1255	CHEMBL3115504	COc1ccc(-c2ccc3nc4cncc(/C=C/c5ccccc5)n4c3c2)cc1	-8.7753

1256	CHEMBL3962445	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(S(C)(=O)=O)CC3)cc2OC)n1	-10.7822
1257	CHEMBL3927081	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(S(N)(=O)=O)CC3)cc2OC)n1	-11.2343
1258	CHEMBL3735587	CC1(C)c2cc(C3CCN(C(=O)C4COCCN4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.0766
1259	CHEMBL4167999	COc1ccc(NC(=O)CN2CCN(Cc3ccc4c(c3)CN(C(=O)c3cc(C(C)C)c(O)cc3O)C4)CC2)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.359
1260	CHEMBL2172335	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(CN4CCC(CN)CC4)cc32)CC1	-11.484
1261	CHEMBL1778723	Cc1cc(-c2ccc(NCCN)cc2)c(/C=C2\C(=O)Nc3ccccc32)[nH]1	-9.6814
1262	CHEMBL2172322	C=CCNS(=O)(=O)c1cccc(C(=O)/N=c2\[nH]c3cc(CN4CCCCC4)ccc3n2[C@H]2CC[C@@H](CO)CC2)c1	-11.7735
1263	CHEMBL2172334	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(CN4CCNC(=O)C4)cc32)CC1	-11.6612
1264	CHEMBL2172324	CCOC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccccc3)[nH]c3ccc(CN4CCCCC4)cc32)CC1	-10.9845
1265	CHEMBL2172310	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(CN4CCC(C(C)(C)O)C4)cc32)CC1	-11.484
1266	CHEMBL3694590	Clc1cnc2nc1NCc1cc(ccc1Br)OCCCc1cccc(c1)N2	-7.2139
1267	CHEMBL461140	CN(C)CCOc1ccc(/C=C/c2cc(-c3cc4c(=O)[nH]cnc4[nH]3)ccn2)cc1	-7.6408
1268	CHEMBL4277936	COc1nc(N2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(C)(=O)=O)n1	-7.6716
1269	CHEMBL3357465	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)Cc3ccco3)c2)ncc1Cl	-10.632
1270	CHEMBL2418750	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5ccccc5)c4)c3c2)cn1	-9.7166
1271	CHEMBL4071105	COc1cc(CCNC=O)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.8523
1272	CHEMBL2403366	COc1ccc2c(c1)/C(=C/c1cc3c([nH]1)CCN(C(=O)CCN)C3)C(=O)N2	-9.1224
1273	CHEMBL1163565	CC(=O)N1CCN(c2cc(-c3cnc4c(c3)N(Cc3cc(Cl)ccc3C(F)(F)F)CCN4)ccn2)CC1	-9.3639
1274	CHEMBL1163518	O=C(c1ccc(-c2cnc3c(c2)N(Cc2cc(Cl)ccc2C(F)(F)F)CCN3)cc1)N1CCCCC1	-9.8108
1275	CHEMBL1163565	CC(=O)N1CCN(c2cc(-c3cnc4c(c3)N(Cc3cc(Cl)ccc3C(F)(F)F)CCN4)ccn2)CC1	-11.0197
1276	CHEMBL3824308	CCP(=O)(CC)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc(N3CCC(N4CCN(C)CC4)CC3)cc2OC)ncc1Cl	-14.0709
1277	CHEMBL3823577	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(C)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-13.2993
1278	CHEMBL3823243	COc1cc(N2CCC(N3CCCCC3)C2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-12.8437
1279	CHEMBL1808094	CC(=O)/C=C/c1c(Oc2cccc(C(C)=O)c2)nc[nH]c1=O	-7.3811
1280	CHEMBL3357459	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)CN3CCN(C(=O)CO)CC3)c2)ncc1Cl	-11.4115

1281	CHEMBL2158520	COc1c(Nc2ncc3ccc(-c4ccccc4N(C)S(C)(=O)=O)n3n2)ccc(N2CCN(C[C@H](C)O)CC2)c1F	-10.2854
1282	CHEMBL4469087	CCOc1cc(C2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc2c(n1)N(Cc1ccccc1)[C@H](CC)C(=O)N2C	-8.2052
1283	CHEMBL3980452	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(F)c(Nc2ccc(N3CCNCC3)cc2OC)n1	-11.0968
1284	CHEMBL4177038	CC(C)c1cc(C(=O)NCC(=O)Nc2ccc(F)c(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)c2)c(O)cc1O	-11.1393
1285	CHEMBL4162295	CC(C)c1cc(C(=O)NCC(=O)Nc2cccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)c2)c(O)cc1O	-12.9024
1286	CHEMBL3915577	CC(C)(C)N1CCN(c2cc3c(cc2Br)C(=O)c2c([nH]c4cc(C#N)ccc24)C32CCOCC2)CC1	-13.4668
1287	CHEMBL4108907	O=C1c2ccc(OC[C@@H](O)[C@H](O)CO)cc2C2(CCCCC2)c2oc3ccccc3c21	-9.973
1288	CHEMBL3893584	CC1(C)c2cc(OCCNS(C)(=O)=O)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.7806
1289	CHEMBL4174101	COc1ccc(CNC(=O)c2cccc(C(C)Oc3ccnc(Nc4nccn4)c3)c2)cc1OC	-7.8757
1290	CHEMBL4171478	Cc1ccc(CNC(=O)c2cccc(C(C)Oc3ccnc(NN4CCCCC4)c3)c2)cc1	-7.5567
1291	CHEMBL4166604	Cc1ccc(CNC(=O)c2cccc(C(C)Oc3ccnc(Nc4cnn(C)c4)c3)c2)cc1	-7.3383
1292	CHEMBL551570	COc1nc(C)cc2c1-c1[nH]c3cc(N4CCN(C)CC4)ccc3c1CCN2CCc1ccccc1	-7.5064
1293	CHEMBL1796251	COCCN1CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@@H]4CCCC[C@H]4NS(=O)(=O)CC(F)(F)F)n3)cc2CC1	-9.2516
1294	CHEMBL1170563	N#Cc1c(SCC(=O)c2ccccc2)nc2c(c1-c1ccsc1)CCCC2	-6.32
1295	CHEMBL3905284	COc1cccc(/C=N/Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c1	-10.0212
1296	CHEMBL4168868	COc1ccc(NC(=O)CNC(=O)c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.9932
1297	CHEMBL4159104	CCNC(=O)c1noc(-c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)c1-c1ccc(CN2CCN(CC(=O)Nc3ccc(OC)c(Nc4ncc(Cl)c(Nc5ccccc5S(=O)(=O)C(C)C)n4)c3)CC2)cc1	-11.009
1298	CHEMBL4169444	CCNC(=O)c1noc(-c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)c1-c1ccc(CN2CCN(CC(=O)NCC(=O)Nc3ccc(OC)c(Nc4ncc(Cl)c(Nc5ccccc5S(=O)(=O)C(C)C)n4)c3)CC2)cc1	-11.4324
1299	CHEMBL4174031	COc1ccc(NC(=O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-10.1936
1300	CHEMBL4175908	COc1ccc(NC(=O)CNC(=O)c2ccc(O)c(C(C)C)c2)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.5577
1301	CHEMBL2403830	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNC(=O)C1	-10.3765
1302	CHEMBL3357462	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)CN3CC4CC3CC4O)c2)ncc1Cl	-12.0882
1303	CHEMBL1796246	CCN1CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@@H]4CCCC[C@H]4NC(=O)C(F)(F)F)n3)cc2CC1	-9.5013
1304	CHEMBL3824318	CCOc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-12.9421

1305	CHEMBL3109404	COC(=O)c1cc(O)c(O)c(C[C@]2(C)[C@@H](C)CC[C@@]3(C)C(C)=CCC[C@@H]23)c1	-8.0271
1306	CHEMBL3115504	COc1ccc(-c2ccc3nc4cncc(/C=C/c5ccccc5)n4c3c2)cc1	-8.2602
1307	CHEMBL3907916	CC1(C)c2cc(OCCN3CCN(S(C)(=O)=O)CC3)ccc2C(=O)c2c1oc1ccccc21	-8.0017
1308	CHEMBL4111382	CC1(C)c2cc(OCCNC[C@@H](O)CO)ccc2C(=O)c2c1oc1ccccc21	-8.4561
1309	CHEMBL3912386	CC1(C)c2cc(OCCN3CCCC(O)C3)ccc2C(=O)c2c1oc1ccccc21	-8.4749
1310	CHEMBL4165486	CC(Oc1ccnc(Nc2cnn(C3CCN(C)CC3)c2)c1)c1cccc(C(=O)NCc2ccc(Cl)c(C(F)(F)F)c2)c1	-7.143
1311	CHEMBL4172265	COc1cccc(CNC(=O)c2cccc(C(C)Oc3ccnc(Nc4cnn(C)c4)c3)c2)c1	-7.3961
1312	CHEMBL3787112	Nc1ncnc2c1c(-c1cccc(O)c1)cn2[C@H]1C[C@@H](CN2CCC2)C1	-8.679
1313	CHEMBL3735314	CCc1cc2c(cc1C1=CCN(C(=O)C3COCCN3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.3079
1314	CHEMBL3736021	CCc1cc2c(cc1N1CCN(CC3(CO)COC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.5752
1315	CHEMBL3734855	CCc1cc2c(cc1N1CC3CC1CN3CC1CCOCC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.6025
1316	CHEMBL3735384	CCc1cc2c(cc1N1CCN(CC3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.3079
1317	CHEMBL3397286	COc1cc(C)cc(-c2nn(CC#N)cc2-c2cc(NCCCCO)nc(-c3cccnc3)n2)c1	-8.1081
1318	CHEMBL3397292	Cc1cc(O)cc(-c2nn(CC#N)cc2-c2cc(NCCN3CCOCC3)nc(-c3cccnc3)n2)c1	-6.6647
1319	CHEMBL4162078	CCNC(=O)c1noc(-c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)c1-c1ccc(C(=O)N2CCN(CC(=O)Nc3cccc(Nc4ncc(Cl)c(Nc5ccccc5S(=O)(=O)C(C)C)n4)c3)CC2)cc1	-10.8362
1320	CHEMBL4162888	CC(C)c1cc(-c2onc(C(=O)NCC(=O)Nc3cccc(Nc4ncc(Cl)c(Nc5ccccc5S(=O)(=O)C(C)C)n4)c3)c2-c2ccc(CN3CCOCC3)cc2)c(O)cc1O	-10.3112
1321	CHEMBL2403835	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C(C)C)CC1	-10.6719
1322	CHEMBL4176820	CC(Oc1ccnc(Nc2cnn(CC(C)(C)O)c2)c1)c1cccc(C(=O)NCc2ccc(Cl)c(C(F)(F)F)c2)c1	-7.1168
1323	CHEMBL4168623	CC(Oc1cccnc1Nc1cnn(C)c1)c1cccc(C(=O)NCc2ccc(F)cc2)c1	-7.2214
1324	CHEMBL2158518	COc1cc(C2CCN(CC(N)=O)CC2)ccc1Nc1ncc2c(C)cc(-c3ccccc3N(C)S(C)(=O)=O)n2n1	-11.6612
1325	CHEMBL4159909	C=CC(=O)Nc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC)cc1N1CCCN(C)CC1	-12.8163
1326	CHEMBL3824246	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2C(N)=O)n1	-12.9024
1327	CHEMBL3823045	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2OC)n1	-12.3761
1328	CHEMBL3824007	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-13.0899

1329	CHEMBL3961771	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3N(C)S(C)(=O)=O)n2)ccc2c1CCCC(N1CCN(C)CC1)C2	-10.4927
1330	CHEMBL4217325	COc1cc(N2CCN(CCOCCOCCNC(=O)CNc3cccc4c3C(=O)N(C3CCC(=O)NC3=O)C4=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-10.3552
1331	CHEMBL4516124	Cc1cc(-n2cc(S(=O)(=O)C3COC3)c3ccc(N[C@@H](C)c4ccc(F)cn4)nc32)n[nH]1	-10.2429
1332	CHEMBL3286816	Cn1ncc2c1-c1cnc(N)c(c1)OCc1cc(F)ccc1OCCC2	-8.7715
1333	CHEMBL4471142	COc1cc(N2CCCC2=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NC(C)=O)n1	-11.641
1334	CHEMBL4562805	COc1cc(NC(=O)N2CCOCC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NC(C)=O)n1	-11.8664
1335	CHEMBL4536955	COc1cc(N2CCCNC2=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NC(C)=O)n1	-11.3344
1336	CHEMBL4462528	COc1cc(NC(=O)C2CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NC(C)=O)n1	-11.2605
1337	CHEMBL4753933	C=CC(=O)NCCOCCNC(=O)CCN1CCC(c2cc(OC(C)C)c(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)cc2C)CC1	-13.1919
1338	CHEMBL2158587	COc1cc(C2CCN(C(=O)C3CCN3)CC2)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3OC)n2n1	-11.2879
1339	CHEMBL3935006	COc1cc2c(cc1CCC(C)(C)O)C(=O)c1c([nH]c3cc(C#N)ccc13)C2(C)C	-11.4754
1340	CHEMBL1940181	Cc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.7062
1341	CHEMBL1946802	COc1cc(N2CCN(C)CC2)c2cc1Nc1ncc(Cl)c(n1)Nc1cccc(c1)CC2	-8.6474
1342	CHEMBL3787658	CC(=O)N1CCN([C@H]2CC[C@H](c3cc(OC4CC4)c(Nc4ncc(Cl)c(Nc5cn(C)nc5S(=O)(=O)C(C)C)n4)cc3C)CC2)CC1	-10.9845
1343	CHEMBL3786818	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1[C@H]1CC[C@@H](NC2CC2)CC1	-10.9196
1344	CHEMBL3787658	CC(=O)N1CCN([C@H]2CC[C@H](c3cc(OC4CC4)c(Nc4ncc(Cl)c(Nc5cn(C)nc5S(=O)(=O)C(C)C)n4)cc3C)CC2)CC1	-11.5663
1345	CHEMBL4080869	COc1cc(C(C)(C)N)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.4754
1346	CHEMBL4088751	COc1cc(CNC=O)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.1307
1347	CHEMBL4099660	COc1cc(CCN(C)C)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.7062
1348	CHEMBL4754849	COc1cc2cnccc2cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-9.7667
1349	CHEMBL4765021	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCN(CCO)C2	-12.7649
1350	CHEMBL4777614	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCN=C2	-10.5083
1351	CHEMBL4777614	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCN=C2	-11.4996

1352	CHEMBL4097392	COc1cc(CN(C)C)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.0111
1353	CHEMBL1796258	CCN([C@@H]1CCCC[C@H]1Nc1nc(Nc2cc3c(cc2OC)CCN(CCOC)CC3)ncc1Cl)S(C)(=O)=O	-10.9196
1354	CHEMBL3944539	CCNC(=O)N1CCN(c2ccc(Nc3ncc(C(F)(F)F)c(Nc4ccc(N5CCN(C(C)=O)CC5)cc4OC)n3)c(OC)c2)CC1	-11.484
1355	CHEMBL4537507	C[C@@H](Oc1cc(-c2ccn(Cc3ccccc3)c(=O)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-9.0852
1356	CHEMBL4516801	Cc1cc(-n2cc(C(=O)N(C)C)c3ccc(N[C@@H](C)c4ccc(F)cn4)nc32)[nH]n1	-11.0571
1357	CHEMBL4529040	Cc1cc(-c2cnc3ccc(N[C@H](C)c4ccc(F)cc4F)nn23)[nH]n1	-8.5099
1358	CHEMBL1778725	Cc1[nH]c(/C=C2\C(=O)Nc3ccccc32)c(C)c1-c1ccc(NCCN)cc1	-9.0512
1359	CHEMBL3917268	CCOc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1nc(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2)ncc1Cl	-10.1936
1360	CHEMBL3944300	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(CCO)CC3)cc2OC)n1	-11.1393
1361	CHEMBL3972422	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(=O)C(C)(C)C)CC3)cc2OC)n1	-10.8335
1362	CHEMBL3973022	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(F)c(Nc2ccc(N3CCN(C)CC3)cc2OC(F)F)n1	-9.8696
1363	CHEMBL3924733	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(=O)CO)CC3)cc2OC(F)F)n1	-10.5576
1364	CHEMBL3970685	CCNC(=O)N1CCN(c2ccc(Nc3nc(Nc4ccc(N5CCN(C(C)=O)CC5)cc4OC)ncc3C(F)(F)F)c(OC)c2)CC1	-12.338
1365	CHEMBL3939589	CC1(C)c2cc(OC[C@@H](O)CO)ccc2C(=O)c2c1oc1cc(OCC(=O)Nc3ccccc3)ccc21	-6.7482
1366	CHEMBL3908581	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(=O)CO)CC3)cc2OC)n1	-12.338
1367	CHEMBL3945000	CC(C)N1CCC(c2ccc3c(c2)C(C)(C)c2[nH]c4cc(C#N)ccc4c2C3=O)CC1	-12.8723
1368	CHEMBL4457809	CCOc1cc(C(=O)NC2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc2c(n1)N(Cc1ccccc1)[C@H](CC)C(=O)N2C	-9.0156
1369	CHEMBL4588843	CCOc1cc(C2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc2c(n1)N(Cc1cccc(C#N)c1)[C@H](CC)C(=O)N2C	-9.1224
1370	CHEMBL3951811	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(c2OC)CCC[C@H](N2CCN(CCO)CC2)C3)ncc1Cl	-9.5836
1371	CHEMBL4174239	CC(Oc1cccnc1Nc1cnn(C)c1)c1cccc(C(=O)NCc2ccc(OC(F)(F)F)cc2)c1	-7.1634
1372	CHEMBL3945738	CC(=O)N1CCN(CCOc2ccc3c(c2)C(C)(C)c2oc4ccccc4c2C3=O)CC1	-8.1133
1373	CHEMBL3916650	CC1(C)c2cc(OCC(=O)N3CCN(C4COC4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(Br)ccc21	-9.6315
1374	CHEMBL3931176	CC(C)(C)OC(=O)N1CCC2(CC1)OCCC2Oc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(Br)ccc3c1C2=O	-10.9349
1375	CHEMBL3958668	CC1(C)c2cc(OC3CCOC34CCN(C3COC3)CC4)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(Br)ccc21	-10.0703

1376	CHEMBL3929615	CCc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCC(O)CC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-13.5065
1377	CHEMBL3939751	CCc1cc2c(cc1N1CCC(NCCCO)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-13.0796
1378	CHEMBL3945830	CC1(C)c2cc(OCC(=O)NCCc3ccncc3)ccc2C(=O)c2c1oc1ccccc21	-7.6419
1379	CHEMBL3936443	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n2)ccc2c1CCC[C@H](N1CCN(C)CC1)C2	-11.4115
1380	CHEMBL4518092	COc1cc(N2CCC(N3CCOCC3)CC2)ccc1Nc1cc(N2CCC[C@@H](C(=O)NCc3ccc(OC(F)(F)F)cc3)C2)ccn1	-7.7916
1381	CHEMBL4281394	COc1nc(N2CC(O)C2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(C)(=O)=O)n1	-8.083
1382	CHEMBL4536896	CN1CCN(Cc2ccc(-c3n[nH]c4nc(-c5ccc(O)cc5)ccc34)o2)CC1	-9.5189
1383	CHEMBL4062466	COc1cc(C(C)(C)CN)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.0111
1384	CHEMBL4758571	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc(-n3cccc3C(=O)NCCO)cc2OC)ncc1Cl	-11.3717
1385	CHEMBL3786002	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-7.6708
1386	CHEMBL3785232	CCC(C)S(=O)(=O)c1nn(C)cc1Nc1nc(Nc2cc(C)c(C3CCNCC3)cc2OC(C)C)ncc1Cl	-11.484
1387	CHEMBL3785999	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(C)(=O)=O)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-10.2854
1388	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.1531
1389	CHEMBL4468370	COc1cc(NC(=O)N2CCN(CCO)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NC(C)=O)n1	-11.6312
1390	CHEMBL2172304	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(C#N)c(F)c3)[nH]c3ccc(CN4CCC(C(C)(C)O)CC4)cc32)CC1	-12.7649
1391	CHEMBL2172333	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(CN4CCNCC4)cc32)CC1	-12.4754
1392	CHEMBL3954721	COC(=O)N1CCN(c2ccc(Nc3nc(Nc4ccc(N5CCN(C(C)=O)CC5)cc4OC)ncc3Cl)c(OC)c2)CC1	-9.7667
1393	CHEMBL3943505	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(=O)OC(C)(C)C)CC3)cc2OC(F)F)n1	-9.1566
1394	CHEMBL3962401	CC1(C)c2cc(OCCNS(=O)(=O)N3CCOCC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.0571
1395	CHEMBL3893380	CC1(C)c2cc(OCC3CCN(C4COC4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-12.1091
1396	CHEMBL3969437	CC1(C)c2cc(OCC(=O)NCC(O)CO)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.0019
1397	CHEMBL2418761	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5cc(F)ccc5F)c4)c3c2)cn1	-8.2235
1398	CHEMBL3218854	COc1cc(N2CCOCC2)ccc1-c1nc2c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)c(Cl)cnc2[nH]1	-11.5663

1399	CHEMBL3985471	COC(=O)N1CCN(c2ccc(Nc3nc(Nc4ccc(N5CCN(C(C)=O)CC5)cc4OC)ncc3F)c(OC)c2)CC1	-8.8594
1400	CHEMBL3896672	CCOc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1nc(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)ncc1F	-8.7314
1401	CHEMBL3890636	COc1cc(N2CCNCC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-12.0882
1402	CHEMBL3908581	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(=O)CO)CC3)cc2OC)n1	-11.911
1403	CHEMBL4159909	C=CC(=O)Nc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC)cc1N1CCCN(C)CC1	-12.8871
1404	CHEMBL1165334	O=C(c1ccc(-c2cnc3c(c2)N(Cc2c(Cl)cccc2Cl)CCN3)cc1)N1CCC[C@H]1CN1CCCC1	-10.7348
1405	CHEMBL1165318	O=C(c1ccc(-c2cnc3c(c2)N(Cc2cc(F)ccc2F)CCN3)cc1)N1CCC[C@H]1CN1CCCC1	-11.0968
1406	CHEMBL1164267	CN1CCN(c2ccc(-c3cnc4c(c3)C(Cc3cc(F)ccc3F)CCN4)cn2)CC1	-8.2448
1407	CHEMBL1163559	O=C(c1ccc(-c2cnc3c(c2)N(Cc2cc(Cl)ccc2C(F)(F)F)CCN3)cc1)N1CCC(N2CCCC2)CC1	-9.3639
1408	CHEMBL1163559	O=C(c1ccc(-c2cnc3c(c2)N(Cc2cc(Cl)ccc2C(F)(F)F)CCN3)cc1)N1CCC(N2CCCC2)CC1	-11.3466
1409	CHEMBL4109150	CNC(=O)c1ccc2c3c([nH]c2c1)C(C)(C)c1cc(OC[C@@H](O)[C@H](O)CO)ccc1C3=O	-7.4712
1410	CHEMBL4108270	CC1(C)c2cc(OC[C@@H](O)[C@H](O)CO)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C(=O)O)ccc21	-8.5748
1411	CHEMBL4113311	CC1(C)c2cc(OC[C@@H](O)[C@H](O)CO)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C(=O)NS(=O)(=O)c3ccccc3)ccc21	-7.5382
1412	CHEMBL4170816	CC(Oc1cccnc1Nc1cnn(C)c1)c1cccc(C(=O)NCc2ccc(Cl)c(C(F)(F)F)c2)c1	-7.4166
1413	CHEMBL4454858	CCn1ccc(-c2cnc(N)c(O[C@H](C)c3c(Cl)ccc(F)c3Cl)c2)cc1=O	-10.8896
1414	CHEMBL4437893	C[C@@H](Oc1cc(-c2cc[nH]c(=O)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.1842
1415	CHEMBL3128069	Cc1nc([C@](C)(O)CO)sc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)c1	-11.9932
1416	CHEMBL3128069	Cc1nc([C@](C)(O)CO)sc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)c1	-11.6025
1417	CHEMBL4174347	COc1cc(-n2cc(CN3CCN(C)CC3)nn2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.5577
1418	CHEMBL3286819	C[C@H]1Oc2cc(cnc2N)-c2c(nn(C)c2C#N)CCCOc2ccc(F)cc21	-10.8896
1419	CHEMBL4166038	COc1cc(-n2cc(CN3CCNCC3)nn2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.8664
1420	CHEMBL4756562	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCN(CCN(C)C)C2	-10.9845

1421	CHEMBL4765052	CCN1CCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)c(OC)cc2C1	-12.0882
1422	CHEMBL4781279	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CN(CCN(C)C)CC2	-10.1306
1423	CHEMBL2403838	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C2CCN(C)CC2)CC1	-9.3435
1424	CHEMBL2172302	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(Cl)c3)[nH]c3ccc(CN4CCC(C(C)(C)O)CC4)cc32)CC1	-12.338
1425	CHEMBL2172301	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3cc(F)cc(Cl)c3)[nH]c3ccc(CN4CCC(C(C)(C)O)CC4)cc32)CC1	-12.0882
1426	CHEMBL2172311	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(CNCC(C)(C)O)cc32)CC1	-12.7649
1427	CHEMBL2172310	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(CN4CCC(C(C)(C)O)C4)cc32)CC1	-12.3695
1428	CHEMBL2172334	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(CN4CCNC(=O)C4)cc32)CC1	-12.338
1429	CHEMBL2172337	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(Oc4ccccn4)cc32)CC1	-11.4614
1430	CHEMBL2418754	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5cccc(Cl)c5)c4)c3c2)cn1	-7.8089
1431	CHEMBL2418751	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5ccccc5F)c4)c3c2)cn1	-10.0284
1432	CHEMBL4787426	COc1cc(NC(=O)/C=C/CN2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.359
1433	CHEMBL2403846	Cc1cc(Nc2ncc(C)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-10.4835
1434	CHEMBL4105329	Cc1n[nH]c2ccc(-c3cc(N[C@@H](CO)c4ccccc4)cnc3-c3cc(Cl)ccc3O)cc12	-9.4123
1435	CHEMBL427188	COc1ncc(-c2ccc3c(c2)OCO3)cc1C(=O)Nc1ccc(CN2CCN(C)CC2)cc1	-6.6555
1436	CHEMBL370800	CN1CCN(Cc2ccc(NC(=O)c3cc(-c4ccc5c(c4)OCO5)cnc3O)cc2)CC1	-8.5748
1437	CHEMBL4749215	CCN1CCN(C(=O)CS(=O)(=O)c2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)c(OC)c2)CC1	-11.4184
1438	CHEMBL3397290	Cc1cc(O)cc(-c2nn(CC#N)cc2-c2cc(NCCCO)nc(-c3cccnc3)n2)c1	-7.1091
1439	CHEMBL3934738	COc1cc(N2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-12.0882
1440	CHEMBL3974726	COc1cc(N2CCN(C(=O)CO)CC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(=O)CO)CC3)cc2OC)n1	-11.7735
1441	CHEMBL3899531	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(N3CCNCC3)cc2OC)n1	-11.911
1442	CHEMBL3806196	CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3n[nH]c4ccc(Cc5ccccc5)cc34)c(NC3CCOCC3)c2)CC1	-9.8924
1443	CHEMBL3805516	CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3n[nH]c4ccc(Cc5cc(F)cc(F)c5)cc34)c(N)c2)CC1	-10.1749
1444	CHEMBL5269028	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2cccc3c2B(O)OC3)n1	-11.3224

1445	CHEMBL3651877	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3c(C)[nH]nc3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C(=O)CCN2CCC2)CC1	-10.4066
1446	CHEMBL3286826	COc1nn(C)c2c1-c1cnc(N)c(n1)O[C@H](C)c1cc(F)ccc1C(=O)N(C)C2	-12.9421
1447	CHEMBL3286824	Cc1nn(C)c2c1-c1cnc(N)c(n1)O[C@@H](C)c1cc(F)ccc1C(=O)N(C)C2	-9.6544
1448	CHEMBL2418753	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5ccc(F)cc5)c4)c3c2)cn1	-7.831
1449	CHEMBL4780490	Cc1cc2c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)nc(Nc3cc(C)c(C4CCNCC4)cc3OC(C)C)nc2[nH]1	-7.6751
1450	CHEMBL4114864	CN(C)C(=O)c1ccc2c3c(n(C)c2c1)C(C)(C)c1cc(OC[C@@H](O)[C@H](O)CO)ccc1C3=O	-6.9314
1451	CHEMBL3109401	CC1=CCC[C@H]2[C@](C)(CC3=C(O)C(=O)C=C(NCCC(C)C)C3=O)[C@@H](C)CC[C@@]12C	-8.5287
1452	CHEMBL1796259	COCCN1CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@H]4CC[C@H](NS(C)(=O)=O)CC4)n3)cc2CC1	-9.9283
1453	CHEMBL3608641	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCN(CCO)CC2	-7.0329
1454	CHEMBL3604649	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1C1CCN(C(C)C)CC1	-11.7735
1455	CHEMBL3604645	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CNC1	-11.185
1456	CHEMBL3604651	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1C1COC1	-11.3466
1457	CHEMBL3604632	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C)CC1	-11.911
1458	CHEMBL1163510	O=C(O)c1ccc(-c2cnc3c(c2)N(Cc2cc(Cl)ccc2C(F)(F)F)CCN3)cc1	-8.3474
1459	CHEMBL3824327	COc1cc(N2CCN(C3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-13.549
1460	CHEMBL3823031	COc1cc(N2CCC(N3CCCC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-13.156
1461	CHEMBL3822475	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(C)(=O)=O)n1	-13.0899
1462	CHEMBL3286814	N#Cc1[nH]nc2c1-c1cnc(N)c(c1)OCc1cc(F)ccc1OCC2	-9.9221
1463	CHEMBL3286815	N#Cc1[nH]nc2c1-c1cnc(N)c(c1)OCc1cc(F)ccc1OCCC2	-9.8585
1464	CHEMBL3356908	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)CNC(=O)N3CCCC3)c2)ncc1Cl	-9.294
1465	CHEMBL3357441	CS(=O)(=O)Nc1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)CN)c2)ncc1Cl	-9.9631
1466	CHEMBL3357450	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)CCCN)c2)ncc1Cl	-10.948
1467	CHEMBL3357456	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)CN3CCN(C)CC3)c2)ncc1Cl	-12.4381
1468	CHEMBL5268953	COc1cc(N2CCC(N(C)C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2cccc3c2B(O)OC3)n1	-11.3979
1469	CHEMBL3901838	CC1(C)c2cc(C(=O)NC3COC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.8311
1470	CHEMBL3916798	CC(C)(CO)NCCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.9767

1471	CHEMBL3924929	CN(C)S(=O)(=O)N1CCN(c2ccc3c(c2)C(C)(C)c2c(c4ccc(C#N)cc4n2C)C3=O)CC1	-10.2051
1472	CHEMBL3984781	CC1(C)c2cc(C(=O)N(CCO)CCO)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-9.3111
1473	CHEMBL3694592	Clc1cnc2nc1NCc1cc(Br)cc(c1)OCCCc1cccc(c1)N2	-9.294
1474	CHEMBL3968909	CC(C)N1CCC(Cc2ccc3c(c2)C(C)(C)c2[nH]c4cc(C#N)ccc4c2C3=O)CC1	-12.2572
1475	CHEMBL1822522	COc1cc(N2CCN(N3CCOCC3)CC2)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3OC)n2n1	-11.4115
1476	CHEMBL1644799	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(c2)CCCC(=O)N3C)ncc1Cl	-11.0968
1477	CHEMBL2042831	CCN1C(=O)CCCc2c1ccc(Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)N(C)C)n1)c2OC	-11.484
1478	CHEMBL4169998	CCNC(=O)c1noc(-c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)c1-c1ccc(C(=O)NCC(=O)Nc2ccc(OC)c(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)c2)cc1	-10.0416
1479	CHEMBL3608520	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C(=O)NCCC2	-11.2343
1480	CHEMBL3608532	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CN(C(=O)CO)CCC2	-6.3378
1481	CHEMBL3286811	COc1ncccc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)n1	-11.3653
1482	CHEMBL3286828	C[C@H]1Oc2nc(cnc2N)-c2cc(S(C)(=O)=O)ccc2CN(C)C(=O)c2ccc(F)cc21	-12.3695
1483	CHEMBL3608532	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CN(C(=O)CO)CCC2	-7.5835
1484	CHEMBL3608521	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCNC(=O)C2	-11.0968
1485	CHEMBL3604644	CC(C)S(=O)(=O)c1nn(C)cc1Nc1nc(Nc2cc(C#N)c(C3CCN(C)CC3)cc2OC2CC2)ncc1Cl	-11.484
1486	CHEMBL4799217	COc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2c(F)c1C1CCN(CCO)CC1	-13.0594
1487	CHEMBL4776403	COc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2c(F)c1C1CCN(C2COC2)CC1	-11.7148
1488	CHEMBL4790570	COc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2c(F)c1C1CCN(C)CC1	-13.2043
1489	CHEMBL2418762	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5ccc(F)c(F)c5)c4)c3c2)cn1	-10.0357
1490	CHEMBL4749215	CCN1CCN(C(=O)CS(=O)(=O)c2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)c(OC)c2)CC1	-11.959
1491	CHEMBL1940174	CC1(C)c2ccc(C3CCN(C4CC4)CC3)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.434
1492	CHEMBL1922971	Cc1nnsc1C1=NNC(=O)/C1=C\c1cn(C)c2cccc(OCc3ccc(F)cc3F)c12	-11.2343
1493	CHEMBL1922986	Cn1cc(/C=C2\C(=O)NN=C2c2nccs2)c2c(OCc3cccc(F)c3F)cccc21	-11.1393
1494	CHEMBL1922963	Cc1nnsc1C1=NNC(=O)/C1=C\c1cn(C)c2cccc(OCc3cccnc3)c12	-7.9455
1495	CHEMBL1922968	Cc1nnsc1C1=NNC(=O)/C1=C\c1cn(C)c2cccc(OCc3cccc(F)c3)c12	-8.5099

1496	CHEMBL1922985	Cn1cc(/C=C2\C(=O)NN=C2c2nccs2)c2c(OCc3c(F)cccc3Cl)cccc21	-9.5013
1497	CHEMBL3128075	Cc1nn(C)cc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)c1	-9.58
1498	CHEMBL5273109	C[C@H]1Nc2ccc3ncc(n3n2)C(=O)NC2(CC2)COc2ccc(F)cc21	-11.8809
1499	CHEMBL5279068	C[C@@H]1Nc2ccc3ncc(n3n2)C(=O)NC2(CC2)COc2ccc(F)cc21	-8.9595
1500	CHEMBL5279319	C=CC[C@H]1Nc2ccc3ncc(n3n2)C(=O)NC2(CC2)COc2ccc(F)cc21	-11.3653
1501	CHEMBL5290783	CC(C)N1Cc2cc(F)ccc2OCC(C)(C)NC(=O)c2cnc3ccc1nn23	-9.9345
1502	CHEMBL5284909	CC1(C)COc2ccc(F)cc2CN(C2CC2)c2ccc3ncc(n3n2)C(=O)N1	-10.0893
1503	CHEMBL5267527	CC1(C)COc2ccc(F)cc2CN(C2CCC2)c2ccc3ncc(n3n2)C(=O)N1	-9.6426
1504	CHEMBL5273109	C[C@H]1Nc2ccc3ncc(n3n2)C(=O)NC2(CC2)COc2ccc(F)cc21	-11.484
1505	CHEMBL5284765	C[C@H]1Nc2ccc3ncc(n3n2)C(=O)NC(C)(C)COc2ccc(F)cc21	-11.6215
1506	CHEMBL5270672	CC[C@H]1Nc2ccc3ncc(n3n2)C(=O)NC2(CC2)COc2ccc(F)cc21	-10.8335
1507	CHEMBL5281719	CC1(C)COc2ccc(F)cc2CNc2ccc3ncc(n3n2)C(=O)N1	-10.9196
1508	CHEMBL3735587	CC1(C)c2cc(C3CCN(C(=O)C4COCCN4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.027
1509	CHEMBL3735650	CCc1cc2c(cc1N1CCN(C(=O)C3CNC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.1307
1510	CHEMBL3735113	CC1(C)c2cc(N3CCN(C(=O)C4CNC4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.3224
1511	CHEMBL3734844	CCc1cc2c(cc1-c1cnn(C3CCOCC3)c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.2768
1512	CHEMBL3735452	CCc1cc2c(cc1NC(=O)N1C[C@@H]3C(CO)[C@@H]3C1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-9.5594
1513	CHEMBL3734938	CCc1cc2c(cc1N1CCN(C(=O)C3COCCN3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.8664
1514	CHEMBL5092606	CN(C)C(=O)c1ccc(Nc2ncc(C(F)(F)F)c(N[C@H]3CC[C@@H](N)CC3)n2)cc1	-7.9946
1515	CHEMBL1738797	CCc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.9266
1516	CHEMBL4764610	COc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2c(F)c1N1C[C@@H](C)N(C)[C@@H](C)C1	-11.4184
1517	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-8.4706
1518	CHEMBL5286011	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc3c(c2)B(O)OC3)n1	-10.9014
1519	CHEMBL3651884	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3c(C)c[nH]c3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C[C@H](O)C(F)(F)F)CC1	-9.9161
1520	CHEMBL3651886	CCN1CCC(c2cc(OC(C)C)c(Nc3nc(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)c4[nH]nnc4n3)cc2C)CC1	-10.5083

1521	CHEMBL2158586	COc1cc(C2CCN(C(=O)C(C)(C)N)CC2)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3OC)n2n1	-11.5663
1522	CHEMBL3128059	C[C@@H](Oc1cc(-c2ccnn2C)cnc1N)c1cc(F)ccc1-n1nccn1	-8.7502
1523	CHEMBL4764610	COc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2c(F)c1N1C[C@@H](C)N(C)[C@@H](C)C1	-11.4253
1524	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-11.3653
1525	CHEMBL3622821	CC[C@@H]1CN(C(=O)NCC(F)(F)F)C[C@@H]1c1cnc2cnc3[nH]ccc3n12	-7.4599
1526	CHEMBL5178187	C[N+]1(CC(=O)O)CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(Cc7ccccc7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.2602
1527	CHEMBL3115504	COc1ccc(-c2ccc3nc4cncc(/C=C/c5ccccc5)n4c3c2)cc1	-8.663
1528	CHEMBL5084695	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C(=O)CNc4cccc5c4C(=O)N(C4CCC(=O)NC4=O)C5=O)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-12.2005
1529	CHEMBL3961470	CC1(C)c2cc(C(=O)NCCNS(N)(=O)=O)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-12.3035
1530	CHEMBL3604640	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(C(C)C)cc1C1CCN(C)CC1	-10.7124
1531	CHEMBL3604635	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OCC2CC2)cc1C1CCNCC1	-11.0197
1532	CHEMBL3604656	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1C1CCCN(C)C1	-12.0882
1533	CHEMBL3604633	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1C1CCNCC1	-12.338
1534	CHEMBL3604638	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(F)(F)F)cc1C1CCN(C)CC1	-11.6612
1535	CHEMBL3608524	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCNCC2	-12.4029
1536	CHEMBL3608525	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CNCCO2	-11.6821
1537	CHEMBL3286812	CNC(=O)c1ccc(F)cc1[C@@H](C)Oc1nc(-c2cccnc2OC)cnc1N	-11.0571
1538	CHEMBL3286814	N#Cc1[nH]nc2c1-c1cnc(N)c(c1)OCc1cc(F)ccc1OCC2	-10.8609
1539	CHEMBL3286815	N#Cc1[nH]nc2c1-c1cnc(N)c(c1)OCc1cc(F)ccc1OCCC2	-11.0968
1540	CHEMBL3286818	C[C@H]1Oc2cc(cnc2N)-c2c(nn(C)c2C#N)CCOc2ccc(F)cc21	-12.7649
1541	CHEMBL3286811	COc1ncccc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)n1	-10.3193
1542	CHEMBL3286812	CNC(=O)c1ccc(F)cc1[C@@H](C)Oc1nc(-c2cccnc2OC)cnc1N	-9.2274
1543	CHEMBL5178187	C[N+]1(CC(=O)O)CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(Cc7ccccc7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.1479
1544	CHEMBL5196885	C[N+]1(C)CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(C#Cc6ccccc6C(F)(F)F)c5c4c3)cc2)CC1	-7.8332
1545	CHEMBL2064662	COCCN[C@H]1CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@H]4[C@@H](C(N)=O)[C@@H]5C=C[C@H]4C5)n3)c(OC)c2CC1	-10.1936

1546	CHEMBL1644799	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(c2)CCCC(=O)N3C)ncc1Cl	-10.6699
1547	CHEMBL2042694	CNS(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(c2)CCCC(=O)N3C)ncc1Cl	-10.9196
1548	CHEMBL1642255	COCCN1CCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccc(N5CCOCC5)cc4OC)n3)c(OC)cc2CC1	-11.5663
1549	CHEMBL1922225	C=C(CC[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2[C@H](CCc3cc(O)ccc3C)C(=O)CC[C@]12C)C(C)C	-7.6029
1550	CHEMBL1235786	COc1cc(N2CCC(O)CC2)ccc1Nc1cc(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)c2cc[nH]c2n1	-10.8896
1551	CHEMBL2064663	COCCN[C@@H]1CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@H]4[C@@H](C(N)=O)[C@@H]5C=C[C@H]4C5)n3)c(OC)c2CC1	-11.4115
1552	CHEMBL513909	CC[C@@H]1C(=O)N(C)c2cnc(Nc3ccc(C(=O)NC4CCN(C)CC4)cc3OC)nc2N1C1CCCC1	-9.5329
1553	CHEMBL5177248	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(C(=O)N4CCC(C)CC4)c(C)[nH]c3c2)ncc1Cl	-11.7987
1554	CHEMBL1165317	O=C1CNc2ncc(-c3ccc(C(=O)N4CCC[C@H]4CN4CCCC4)cc3)cc2N1Cc1c(Cl)cccc1Cl	-9.2985
1555	CHEMBL1922988	Cn1cc(/C=C2\C(=O)NN=C2c2nccs2)c2c(OCc3ccc(F)cc3F)cccc21	-9.4179
1556	CHEMBL1922980	Cn1cc(/C=C2\C(=O)NN=C2c2nccs2)c2c(OCc3ccccc3F)ccc21	-9.0743
1557	CHEMBL2403832	Cc1cc(Nc2cc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c(Cl)cn2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C)CC1	-7.6201
1558	CHEMBL1823220	C#Cc1cc2c(cc1N1CCN(C3COC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.1531
1559	CHEMBL1947000	COc1ccc2cc1Nc1nc(ncc1Cl)Nc1ccc(N3CCN(C)CC3)c(c1)/C=C\2	-9.3421
1560	CHEMBL1779185	CCN(CC)CCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1oc3cc(F)ccc3c1C2=O	-8.61
1561	CHEMBL1779190	CCN(CC)CCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc([N+](=O)[O-])ccc3c1C2=O	-10.0657
1562	CHEMBL1779191	CCN(CC)CCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(Cl)ccc3c1C2=O	-10.4927
1563	CHEMBL1778716	O=[N+]([O-])c1ccc2ncnc(Nc3ccc(O)cc3)c2c1	-7.1802
1564	CHEMBL382706	CCc1nc(C)c(/C=C2\C(=O)Nc3ccccc32)[nH]1	-8.3115
1565	CHEMBL1778713	CCOC(=O)c1ccc(Nc2nc(Nc3ccc(Cl)cc3)c3nccnc3n2)cc1	-7.7436
1566	CHEMBL3785934	CCN(CC)[C@H]1CC[C@H](c2cc(OC3CC3)c(Nc3ncc(Cl)c(Nc4cn(C)nc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)cc2C)CC1	-11.2343
1567	CHEMBL4175678	Cc1ccc(CNC(=O)c2cccc(C(C)Oc3cccnc3Nc3nncs3)c2)cc1	-7.2607
1568	CHEMBL4166182	COc1ccc(CNC(=O)c2cccc(C(C)Oc3ccnc(Nc4cnn(C5CCNCC5)c4)c3)c2)cc1OC	-7.5835
1569	CHEMBL4159094	Cc1ccc(CNC(=O)c2cccc(C(C)Oc3cccnc3Nc3nccs3)c2)cc1	-7.2291
1570	CHEMBL3918616	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)N(C)C)n2)ccc2c1CCCC(N1CCN(CCO)CC1)C2	-11.911

1571	CHEMBL3943066	COc1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(c2OC)CCCC(N2CCN(CCO)CC2)C3)ncc1Cl	-10.434
1572	CHEMBL1796254	COCCN1CCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@@H]4CCCC[C@H]4NS(C)(=O)=O)n3)c(OC)cc2CC1	-11.6612
1573	CHEMBL1796244	CCN1CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@@H]4CCCC[C@H]4NS(C)(=O)=O)n3)cc2CC1	-10.2429
1574	CHEMBL1796252	COCCN1CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@@H]4CCCC[C@H]4NS(=O)(=O)C4CC4)n3)cc2CC1	-9.8696
1575	CHEMBL1779201	CC1(C)c2cc(N3CCN(C4COC4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.7348
1576	CHEMBL2042695	CN1C(=O)CCCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@H]4[C@@H](C(N)=O)[C@@H]5C=C[C@H]4C5)n3)ccc21	-10.9845
1577	CHEMBL2042981	CCN1C(=O)CCCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)N(C)C)n3)c(OC)cc21	-11.911
1578	CHEMBL2401832	C[C@@H](Oc1c(N)ncc2c(C3=CCN(C(N)=O)CC3)coc12)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.4927
1579	CHEMBL3286831	Cc1cnc2nc3c(n2c1)-c1cnc(N)c(c1)O[C@H](C)c1cc(F)ccc1C(=O)N(C)C3	-9.1308
1580	CHEMBL3286825	COc1nn(C)c2c1-c1cnc(N)c(c1)O[C@H](C)c1cc(F)ccc1C(=O)N(C)C2	-13.8212
1581	CHEMBL3286827	C[C@H]1Oc2cc(cnc2N)-c2cc(S(C)(=O)=O)ccc2CN(C)C(=O)c2ccc(F)cc21	-12.6033
1582	CHEMBL3286813	C[C@@H](Oc1cc(-c2cccc(S(C)(=O)=O)c2)cnc1N)c1cc(F)ccc1-n1nccn1	-10.3078
1583	CHEMBL535	CCN(CC)CCNC(=O)c1c(C)[nH]c(/C=C2\C(=O)Nc3ccc(F)cc32)c1C	-7.9969
1584	CHEMBL3969960	CC(C)(C)OC(=O)N1CCN(C(=O)COc2ccc3c(c2)C(C)(C)c2oc4ccccc4c2C3=O)CC1	-7.4745
1585	CHEMBL4114111	CN(C(=O)Oc1ccc2c3c(oc2c1)C(C)(C)c1cc(OC[C@@H](O)[C@H](O)CO)ccc1C3=O)c1ccccc1	-7.8201
1586	CHEMBL4109094	Cc1c(C#N)ccc2c3c([nH]c12)C(C)(C)c1cc(OC[C@H](O)CO)ccc1C3=O	-11.6571
1587	CHEMBL3911685	CCc1cc2c(cc1N1CCC(NC3CCCCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.3725
1588	CHEMBL4470529	COc1cc(N2CCN(CCN(C)C)C2=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.5933
1589	CHEMBL1944658	COc1ccc2cc1Nc1nc(ncc1Cl)Nc1cccc(c1)CC2	-9.1392
1590	CHEMBL4168049	COc1ccc(NC(=O)CNC(=O)c2cc(C(C)C)ccc2O)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.0846
1591	CHEMBL4161453	CC(C)c1cc(C(=O)NCC(=O)Nc2cccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4cc(S(=O)(=O)C(C)C)nn4C)n3)c2)c(O)cc1O	-9.335
1592	CHEMBL1946801	CN1CCN(c2ccc3cc2CCc2ccc(N(C)S(C)(=O)=O)c(c2)Nc2nc(ncc2Cl)N3)CC1	-12.0111
1593	CHEMBL1946803	COc1cc(N2CCN(C)CC2)c2cc1Nc1ncc(Cl)c(n1)Nc1cc(ccc1S(=O)(=O)C(C)C)CC2	-12.5152
1594	CHEMBL1946800	CC(C)S(=O)(=O)c1ccc2cc1Nc1nc(ncc1Cl)Nc1ccc(N3CCN(C)CC3)c(c1)CC2	-10.148
1595	CHEMBL2418757	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5cccc(C(=O)O)c5)c4)c3c2)cn1	-8.639

1596	CHEMBL2418749	Cc1nn(Cc2cc(F)cc(F)c2)c(C)c1-c1c[nH]c2ncc(-c3cnn(C)c3)cc12	-10.758
1597	CHEMBL2418746	Cc1nn(Cc2cccc(F)c2)cc1-c1c[nH]c2ncc(-c3cnn(C)c3)cc12	-11.6612
1598	CHEMBL1946611	Clc1cnc2nc1Nc1cccc(c1)CCc1cc(ccc1OCCN1CCCC1)N2	-9.2875
1599	CHEMBL1946803	COc1cc(N2CCN(C)CC2)c2cc1Nc1ncc(Cl)c(n1)Nc1cc(ccc1S(=O)(=O)C(C)C)CC2	-10.6699
1600	CHEMBL2418749	Cc1nn(Cc2cc(F)cc(F)c2)c(C)c1-c1c[nH]c2ncc(-c3cnn(C)c3)cc12	-9.231
1601	CHEMBL2418753	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5ccc(F)cc5)c4)c3c2)cn1	-9.3483
1602	CHEMBL2418760	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5cccc(O)c5)c4)c3c2)cn1	-10.4775
1603	CHEMBL2418755	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5cccc(C#N)c5)c4)c3c2)cn1	-9.6785
1604	CHEMBL2418746	Cc1nn(Cc2cccc(F)c2)cc1-c1c[nH]c2ncc(-c3cnn(C)c3)cc12	-10.2854
1605	CHEMBL2418752	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5cccc(F)c5)c4)c3c2)cn1	-10.5749
1606	CHEMBL2403849	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C)CC1	-11.2605
1607	CHEMBL4443942	COc1cc(NC(=O)NCCc2cccnc2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCOCC3)c(OC)c2)n1	-8.4822
1608	CHEMBL1822525	COc1cc(N2CCN(C[C@H](C)O)CC2)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3N(C)S(C)(=O)=O)n2n1	-11.4115
1609	CHEMBL2418761	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5cc(F)ccc5F)c4)c3c2)cn1	-8.5748
1610	CHEMBL3128068	Cc1nc(C2(O)CCS(=O)(=O)C2)sc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)c1	-10.9512
1611	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-11.5321
1612	CHEMBL3128072	Cc1n[nH]cc1-c1cnc(N)c(O[C@@H](C)c2cc(F)ccc2C#N)c1	-8.6436
1613	CHEMBL3128070	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1cc(F)ccc1Cl	-9.0947
1614	CHEMBL3694585	Clc1cnc2nc1NCCc1cccc(c1)OCCc1cccc(c1)N2	-8.3824
1615	CHEMBL2172319	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)c(F)c3)[nH]c3ccc(CN4CCC(C(C)(C)O)CC4)cc32)CC1	-12.338
1616	CHEMBL2172329	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccccc32)CC1	-11.5663
1617	CHEMBL2172328	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccccc3)[nH]c3ccc(CN4CCCCC4)cc32)CC1	-12.338
1618	CHEMBL3330855	CCOC(=O)N1CCc2nc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)sc2CC1	-9.5731
1619	CHEMBL3357463	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)CN3CCC4CNCC43)c2)ncc1Cl	-12.2519
1620	CHEMBL3357440	CNC(=O)[C@@H]1[C@H](Nc2nc(Nc3cccc(NC(=O)CN)c3)ncc2Cl)[C@H]2C=C[C@@H]1C2	-9.864
1621	CHEMBL3357446	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)C3(N)CC3)c2)ncc1Cl	-10.3454

1622	CHEMBL3357448	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)[C@@H](N)Cc3c[nH]cn3)c2)ncc1Cl	-10.7124
1623	CHEMBL3357454	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)CN3C[C@@H](C)O[C@@H](C)C3)c2)ncc1Cl	-10.77
1624	CHEMBL3357455	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)CN3CCNCC3)c2)ncc1Cl	-12.2005
1625	CHEMBL3952558	CC(C)N(CCSc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1oc3ccccc3c1C2=O)C(C)C	-9.043
1626	CHEMBL3651852	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3c(C)[nH]nc3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C(=O)C2CCNCC2)CC1	-9.853
1627	CHEMBL3651859	COCCN1CCC(c2cc(OC(C)C)c(Nc3nc(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)c4c(-c5ccccc5)[nH]nc4n3)cc2C)CC1	-8.8465
1628	CHEMBL3651860	CCc1[nH]nc2nc(Nc3cc(C)c(C4CCN(CCOC)CC4)cc3OC(C)C)nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c12	-9.5628
1629	CHEMBL3608313	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CN(C1CCOCC1)CCC2	-7.2855
1630	CHEMBL3672894	CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3n[nH]c4ccc(Cc5cc(F)cc(F)c5)cc34)cc2)CC1	-9.4801
1631	CHEMBL3949819	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(N3CCN(CCO)CC3)cc2OC)n1	-11.2879
1632	CHEMBL4113894	COC(=O)Cn1c2c(c3ccc(Br)cc31)C(=O)c1ccc(OC[C@@H](O)[C@H](O)CO)cc1C2(C)C	-8.8423
1633	CHEMBL4110481	CC1(C)c2cc(OC[C@H](O)CO)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1c(C3CC3)c(C#N)ccc21	-12.1763
1634	CHEMBL1779200	CC(C)N1CCN(c2ccc3c(c2)C(C)(C)c2[nH]c4cc(C#N)ccc4c2C3=O)CC1	-12.4029
1635	CHEMBL4169529	COc1ccc(NC(=O)C2(NC(=O)c3cc(C(C)C)c(O)cc3O)CC2)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-9.7667
1636	CHEMBL4170592	COc1ccc(NC(=O)CNC(=O)c2cc(C(C)C)c(OC)cc2O)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.3165
1637	CHEMBL4172048	COc1ccc(NC(=O)CNC(=O)c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-12.5152
1638	CHEMBL4084168	COc1cc(C(C)(C)CN(C)C)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.9759
1639	CHEMBL4089672	CNCC(C)(C)c1cc(OC)c(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)cc1C	-12.4381
1640	CHEMBL4099660	COc1cc(CCN(C)C)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.4029
1641	CHEMBL2172320	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3cc(F)cc(C#N)c3)[nH]c3ccc(CN4CCC(C(C)(C)O)CC4)cc32)CC1	-12.0882
1642	CHEMBL1796253	CCN1CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@@H]4CCCC[C@H]4NC(C)=O)n3)cc2CC1	-11.4115
1643	CHEMBL3948141	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1nc(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2)ncc1F	-8.613
1644	CHEMBL3978871	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(N3CCN(S(C)(=O)=O)CC3)cc2OC)n1	-12.0882
1645	CHEMBL3959706	COc1cc(N2CCN(C(=O)OC(C)(C)C)CC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-10.6112

1646	CHEMBL3922740	COc1cc(N2CCNCC2)ccc1Nc1ncc(F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC(F)F)n1	-11.185
1647	CHEMBL3672896	CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3n[nH]c4ccc(Cc5cc(F)cc(F)c5)cc34)c(NC3CCCCC3)c2)CC1	-8.1579
1648	CHEMBL3913523	CCN(CC)CCOc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.2446
1649	CHEMBL3945084	CCc1cc2c(cc1N1CCN(C(=O)C3CCCCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.5238
1650	CHEMBL3895149	CCN(CC)CCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(NC(=O)Nc4ccccc4)ccc3c1C2=O	-7.8385
1651	CHEMBL4112112	CC1(C)c2cc(OC[C@@H](O)[C@H](O)CO)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C(=O)NCc3ccccc3)ccc21	-7.704
1652	CHEMBL4110292	CC1(C)c2cc(OC[C@@H](O)[C@H](O)CO)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C(=O)NCCc3ccccc3)ccc21	-8.685
1653	CHEMBL4115198	Cn1c2c(c3ccc(OC4COC4)cc31)C(=O)c1ccc(OC[C@H](O)CO)cc1C2(C)C	-8.5546
1654	CHEMBL4764610	COc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2c(F)c1N1C[C@@H](C)N(C)[C@@H](C)C1	-12.6526
1655	CHEMBL3735988	CC1(C)c2cc(C3CCN(CC4CCOC4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.6112
1656	CHEMBL2158514	COc1cc(C2CCN(CC(N)=O)CC2)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ncccc3OC)n2n1	-8.4735
1657	CHEMBL2158513	COc1cc(C2CCN(CC(N)=O)CC2)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3C#N)n2n1	-10.9512
1658	CHEMBL2158521	COc1cc(N2CCN(C[C@H](C)O)CC2)c(F)cc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3N(C)S(C)(=O)=O)n2n1	-11.1393
1659	CHEMBL2158512	COc1ccc(-c2ccc3cnc(Nc4ccc(C5CCN(CC(N)=O)CC5)cc4OC)nn23)c(OC)c1	-11.2343
1660	CHEMBL2158519	COc1cc(C2CCN(CC(N)=O)CC2)ccc1Nc1ncc2c(Cl)cc(-c3ccccc3N(C)S(C)(=O)=O)n2n1	-11.8117
1661	CHEMBL4558227	C=CC(=O)Nc1cc(Nc2ncc(F)c(Nc3ccccc3P(C)(C)=O)n2)c(OC)cc1N(C)CCN(C)C	-9.8007
1662	CHEMBL4473365	C=CC(=O)Nc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC)cc1N(C)CCN(C)C	-10.9845
1663	CHEMBL4747513	CN(C)Cc1nc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4NS(C)(=O)=O)n3)cc2[nH]1	-11.911
1664	CHEMBL4746688	CN(C)C(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3nc(CN4CCCC4)[nH]c3c2)ncc1Cl	-12.0111
1665	CHEMBL4760438	CN1CCN(Cc2nc3ccc(Nc4ncc(Cl)c(Nc5ccccc5NS(C)(=O)=O)n4)cc3[nH]2)CC1	-11.5663
1666	CHEMBL2172321	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(C#N)c3)[nH]c3ccc(CN4CCC(C(C)(C)O)CC4)cc32)CC1	-12.7649
1667	CHEMBL4748604	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCC(=O)NCCOCCOCCNCCC(=O)Nc2cccc3c2C(=O)N(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)CC1	-8.1146
1668	CHEMBL4787351	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCC(=O)NCCCCCCCCCNCCC(=O)Nc2cccc3c2C(=O)N(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)CC1	-7.2139

1669	CHEMBL4741360	COc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2c(F)c1N1CCN(C)[C@@H](C)C1	-11.7987
1670	CHEMBL3263971	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(c2)C(C)CN(C)CC3)ncc1Cl	-11.4115
1671	CHEMBL3263970	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(c2)C(c2ccccc2)CN(C)CC3)ncc1Cl	-10.5083
1672	CHEMBL1796246	CCN1CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@@H]4CCCC[C@H]4NC(=O)C(F)(F)F)n3)cc2CC1	-10.758
1673	CHEMBL3357464	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)CN3CC4CNCC4C3)c2)ncc1Cl	-11.7148
1674	CHEMBL3608642	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCCN(C1CCNCC1)C2	-8.5099
1675	CHEMBL3805462	CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3n[nH]c4ccc(Cc5cc(F)ccc5F)cc34)c(NC3CCOCC3)c2)CC1	-10.5243
1676	CHEMBL3805129	CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3n[nH]c4ccc(Cc5cc(F)cc(F)c5)cc34)c(N[C@H]3CC[C@@H](O)CC3)c2)CC1	-9.9407
1677	CHEMBL1822517	CN1CCN(c2ccc(Nc3ncc4ccc(-c5ccccc5S(C)(=O)=O)n4n3)cc2)CC1	-8.5866
1678	CHEMBL4787426	COc1cc(NC(=O)/C=C/CN2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.5321
1679	CHEMBL3785722	Cc1cc(Nc2ncc(C)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1C1CCN(C)CC1	-12.7649
1680	CHEMBL3786006	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3c[nH]nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-10.8609
1681	CHEMBL2403839	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CC(F)F)CC1	-9.24
1682	CHEMBL4062738	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)c(=O)n(OC)c1ccccc21	-9.1059
1683	CHEMBL3218848	COc1ccccc1-c1nc2c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)c(Cl)cnc2[nH]1	-9.5013
1684	CHEMBL3941123	C#Cc1cc2c(cc1OC1CCN(C3COC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.4659
1685	CHEMBL3917881	CC1(C)c2ccc(N3CCC(N4CCCC4)CC3)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.085
1686	CHEMBL3982727	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Br)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-10.0212
1687	CHEMBL3951932	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(F)c(Nc2ccc(N3CCN(CCO)CC3)cc2OC(F)F)n1	-9.721
1688	CHEMBL3945192	COc1cc(N2CCN(S(N)(=O)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-9.9864
1689	CHEMBL4111137	CC1(C)c2cc(OC[C@@H](O)[C@H](O)CO)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(Cl)c(Cl)cc21	-8.8729
1690	CHEMBL3918268	CCN(CC)CCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1c(c3ccc(C)cc3n1C)C2=O	-7.4117
1691	CHEMBL4174347	COc1cc(-n2cc(CN3CCN(C)CC3)nn2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.2519
1692	CHEMBL4088216	CN1C(=O)[C@@H](N2CCc3cn(Cc4ccccc4)nc3C2=O)COc2ccccc21	-8.5099

1693	CHEMBL4764866	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CN(C(C)=O)CC2	-11.7735
1694	CHEMBL4777397	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CN(CC(=O)N(C)C)CC2	-12.0882
1695	CHEMBL4743579	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CNCC2	-12.7649
1696	CHEMBL4758611	CC(C)Oc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCNC2	-13.1445
1697	CHEMBL4739896	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCN(S(N)(=O)=O)C2	-11.5663
1698	CHEMBL4740616	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCN(CC(=O)N(C)C)C2	-12.0882
1699	CHEMBL4777397	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CN(CC(=O)N(C)C)CC2	-10.5928
1700	CHEMBL4743579	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CNCC2	-11.5663
1701	CHEMBL4762173	CCNC(=O)N1CCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)c(OC)cc2C1	-10.3552
1702	CHEMBL4740616	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCN(CC(=O)N(C)C)C2	-10.3078
1703	CHEMBL4540442	C=CC(=O)Nc1cc(Nc2nccc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)N(C)C)n2)c(OC)cc1N(C)CCN(C)C	-10.6497
1704	CHEMBL2172323	COC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccccc3)[nH]c3ccc(CN4CCCCC4)cc32)CC1	-12.0882
1705	CHEMBL4797642	COc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2c(F)c1N1CCN[C@@H](C)C1	-11.786
1706	CHEMBL4787453	COc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2c(F)c1C1CCN(C(C)C)CC1	-12.2005
1707	CHEMBL4788534	COc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C3CCCC3)c2cc1N1CCN(C)CC1	-11.7494
1708	CHEMBL4753546	CCCC(C)n1c2cc(N3CCN(C)CC3)c(OC)cc2c(=O)c2c3ccc(C#N)cc3[nH]c21	-11.4688
1709	CHEMBL4749002	CCCOc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2cc1N1CCN(C)CC1	-11.959
1710	CHEMBL3398167	COc1cc([C@@]2(O)CCN(C(=O)OC(C)(C)C)C[C@@H]2O)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3OC)n2n1	-10.2745
1711	CHEMBL4762256	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3cc[nH]c3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C)CC1	-11.484
1712	CHEMBL3895881	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(C#Cc6ccccc6F)c5c4c3)cc2)CC1	-8.4512
1713	CHEMBL388978	CN[C@@H]1C[C@H]2O[C@@](C)([C@@H]1OC)n1c3ccccc3c3c4c(c5c6ccccc6n2c5c31)C(=O)NC4	-12.236
1714	CHEMBL3286828	C[C@H]1Oc2nc(cnc2N)-c2cc(S(C)(=O)=O)ccc2CN(C)C(=O)c2ccc(F)cc21	-13.4294
1715	CHEMBL3897705	CCN(CC)CCS(=O)(=O)c1cc2c(cc1OC)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.5856
1716	CHEMBL3940406	CC1(C)c2cc(OCCOCCOCCO)ccc2C(=O)c2c1oc1ccccc21	-7.778
1717	CHEMBL3955911	CC1(C)c2cc(OCCN3CC[N+](C)(C)CC3=O)ccc2C(=O)c2c1oc1ccccc21	-8.3682

1718	CHEMBL4107978	CC1(C)c2cc(OC[C@@H](O)[C@H](O)CO)ccc2C(=O)c2c1oc1cc(OC(=O)NCc3ccccc3)ccc21	-10.7124
1719	CHEMBL4108305	CC(C)(C)c1ccc(NC(=O)Oc2ccc3c4c(oc3c2)C(C)(C)c2cc(OC[C@H](O)CO)ccc2C4=O)cc1	-8.9247
1720	CHEMBL3651833	CC(C)Oc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C(=O)N(C1CCN(C(=O)CN(C)C)CC1)C2	-11.6612
1721	CHEMBL3651878	CCS(=O)(=O)N1CCC(c2cc(OC(C)C)c(Nc3nc(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)c4c(C)[nH]nc4n3)cc2C)CC1	-9.9796
1722	CHEMBL2064663	COCCN[C@@H]1CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@H]4[C@@H](C(N)=O)[C@@H]5C=C[C@H]4C5)n3)c(OC)c2CC1	-10.6699
1723	CHEMBL2064723	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n1)CCC(N1CCN(C)CC1)CC2	-11.0197
1724	CHEMBL2042982	CCN1C(=O)CCCc2c1ccc(Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)c2OC	-11.7735
1725	CHEMBL3787262	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C(C)(C)/C(=N/NC(C)=O)CC2	-10.3311
1726	CHEMBL3785538	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CC/C(=N\N1CCOCC1)C2(C)C	-10.4927
1727	CHEMBL3786402	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCC(NC(=O)CO)C2(C)C	-11.6511
1728	CHEMBL3787539	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCC(=O)C2(C)C	-9.4801
1729	CHEMBL2023997	COC(=O)c1ccc(CNC(=O)[C@H]2CCCN(c3ccnc(Nc4cc(OC)c(OC)c(OC)c4)n3)C2)cc1	-8.1831
1730	CHEMBL2023553	COc1cc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)N[C@H](C)c4ccccc4)C3)n2)cc(OC)c1OC	-8.0799
1731	CHEMBL2023548	COc1cc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4ccccc4)C3)n2)cc(OC)c1OC	-9.1324
1732	CHEMBL2023992	COc1cc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4cccc(Cl)c4)C3)n2)cc(OC)c1OC	-9.426
1733	CHEMBL4760438	CN1CCN(Cc2nc3ccc(Nc4ncc(Cl)c(Nc5ccccc5NS(C)(=O)=O)n4)cc3[nH]2)CC1	-11.786
1734	CHEMBL4794675	CCNC(=O)N1CCc2cc(OC)c(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)cc2C1	-9.6785
1735	CHEMBL3963519	CCC(=O)N(C)c1cc(N2CCNCC2)ccc1Nc1nc(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)ncc1Cl	-8.679
1736	CHEMBL3920829	COc1cc(N2CCNCC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCNCC3)cc2OC)n1	-12.0882
1737	CHEMBL3983190	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCNCC3)cc2F)n1	-11.0197
1738	CHEMBL3785232	CCC(C)S(=O)(=O)c1nn(C)cc1Nc1nc(Nc2cc(C)c(C3CCNCC3)cc2OC(C)C)ncc1Cl	-11.2343
1739	CHEMBL3787103	CCn1cc(Nc2nc(Nc3cc(C)c(C4CCNCC4)cc3OC(C)C)ncc2Cl)c(S(=O)(=O)C(C)C)n1	-10.7124
1740	CHEMBL3787422	COc1ccc(Cn2cc(Nc3nc(Nc4cc(C)c(C5CCNCC5)cc4OC(C)C)ncc3Cl)c(S(=O)(=O)C(C)C)n2)cc1	-9.7714
1741	CHEMBL5205937	C[C@@H]1COc2cn3ncc4c3nc2N1Cc1ccc(F)cc1OCC(C)(C)NC4=O	-11.6044

1742	CHEMBL3330876	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2nc(C(=O)N3C[C@H]4CN(C)C[C@H]4C3)cs2)ncc1Cl	-9.748
1743	CHEMBL3330854	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2nc3c(s2)CCN(C(=O)CO)CC3)ncc1Cl	-9.5978
1744	CHEMBL2172318	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccccnc3)[nH]c3ccc(CN4CCC(C(C)(C)O)CC4)cc32)CC1	-11.6612
1745	CHEMBL381738	CN1CCN(CCCc2ccc(NC(=O)c3cc(-c4ccc5c(c4)OCO5)cnc3O)cc2)CC1	-8.3483
1746	CHEMBL4754109	COc1cc(S(=O)(=O)CC(=O)N2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-10.3933
1747	CHEMBL4754109	COc1cc(S(=O)(=O)CC(=O)N2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.3466
1748	CHEMBL1922968	Cc1nnsc1C1=NNC(=O)/C1=C\c1cn(C)c2cccc(OCc3cccc(F)c3)c12	-10.9196
1749	CHEMBL1922972	Cc1nnsc1C1=NNC(=O)/C1=C\c1cn(C)c2cccc(OCc3c(F)cccc3Cl)c12	-10.8896
1750	CHEMBL1642255	COCCN1CCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccc(N5CCOCC5)cc4OC)n3)c(OC)cc2CC1	-9.6785
1751	CHEMBL4743188	CS(=O)(=O)Nc1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3nc(CN4CCCCC4)[nH]c3c2)ncc1Cl	-11.7377
1752	CHEMBL3916883	COc1cc(N2CCN(C(=O)CO)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(=O)CO)CC3)cc2OC)n1	-11.6612
1753	CHEMBL4106475	CC1(C)c2ccc(OC[C@@H](O)[C@H](O)CO)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(Br)ccc21	-10.691
1754	CHEMBL3909267	CC1(C)c2ccc(OCc3ccccc3)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(Br)ccc21	-8.9459
1755	CHEMBL3928036	N#Cc1ccc2c3c([nH]c2c1)C1(CCOCC1)c1cc(OCCN2CCS(=O)(=O)CC2)ccc1C3=O	-10.7382
1756	CHEMBL3899020	C=COc1cc2c(cc1OC(C)C)C(=O)c1c([nH]c3cc(C#N)ccc13)C2(C)C	-10.8309
1757	CHEMBL4110334	CN(C)C(=O)c1ccc2c3c([nH]c2c1)C(C)(C)c1cc(OC[C@@H](O)[C@H](O)CO)ccc1C3=O	-6.9314
1758	CHEMBL4106671	CC1(C)c2cc(OC[C@H](O)CO)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(-c3ccn[nH]3)ccc21	-8.6709
1759	CHEMBL3128058	C[C@@H](Oc1cc(-c2cn(C)nc2C#N)cnc1N)c1cc(F)ccc1-n1nccn1	-9.8982
1760	CHEMBL3128071	Cc1n[nH]cc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2F)c1	-8.3705
1761	CHEMBL5178402	COc1cc(N2CCC3(CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=S)n1	-12.338
1762	CHEMBL5170703	COc1cc(N2CCC3(CCNCC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-11.5933
1763	CHEMBL4779513	COc1cc(-n2cccc2C(=O)N2CCSCC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(C)(=O)=O)n1	-11.4614
1764	CHEMBL1779192	CCN(CC)CCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.5156
1765	CHEMBL3128074	Cc1n[nH]cc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)c1	-10.2429
1766	CHEMBL4436406	C[C@H]1Oc2cc(cnc2N)Cc2c(nn(C)c2C#N)CN(C)C(=O)c2ccc(F)cc21	-10.0893

1767	CHEMBL5202722	Cc1[nH]c2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4NS(C)(=O)=O)n3)ccc2c1C(=O)N1CCC(C)CC1	-11.1994
1768	CHEMBL3357445	CC(C)[C@H](N)C(=O)Nc1cccc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c1	-11.101
1769	CHEMBL3330863	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2nc3c(s2)CN(CC(=O)N2CCOCC2)CC3)ncc1Cl	-8.6669
1770	CHEMBL3545311	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-12.6526
1771	CHEMBL4756753	CCN1CCN(C(=O)c2cccn2-c2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4NS(C)(=O)=O)n3)c(OC)c2)CC1	-11.2499
1772	CHEMBL1922970	Cc1nnsc1C1=NNC(=O)/C1=C\c1cn(C)c2cccc(OCc3c(F)cccc3F)c12	-9.2516
1773	CHEMBL3218854	COc1cc(N2CCOCC2)ccc1-c1nc2c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)c(Cl)cnc2[nH]1	-10.4927
1774	CHEMBL3218847	COc1cccc(-c2nc3c(N[C@H]4[C@@H](C(N)=O)[C@@H]5C=C[C@H]4C5)c(Cl)cnc3[nH]2)c1	-9.4654
1775	CHEMBL3218859	COc1cc(CN2CCN(C)CC2)ccc1-c1nc2c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)c(Cl)cnc2[nH]1	-11.484
1776	CHEMBL4787021	COc1cc(NCC2CCCO2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(C)(=O)=O)n1	-12.0484
1777	CHEMBL5178402	COc1cc(N2CCC3(CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=S)n1	-11.9426
1778	CHEMBL3916883	COc1cc(N2CCN(C(=O)CO)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(=O)CO)CC3)cc2OC)n1	-11.2879
1779	CHEMBL3958866	CCOc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1nc(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)ncc1Cl	-10.8229
1780	CHEMBL3944300	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(CCO)CC3)cc2OC)n1	-10.2854
1781	CHEMBL3942803	CCC(=O)N1CCN(c2ccc(Nc3nc(Nc4ccc(N5CCN(C(C)=O)CC5)cc4OC)ncc3Cl)c(OC)c2)CC1	-11.3466
1782	CHEMBL3897359	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(=O)OC(C)(C)C)CC3)cc2OC)n1	-9.4713
1783	CHEMBL3981192	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(=O)OC(C)(C)C)CC3)cc2OC(F)F)n1	-8.8562
1784	CHEMBL3972422	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(=O)C(C)(C)C)CC3)cc2OC)n1	-9.556
1785	CHEMBL3582442	OC1CCN(c2cc(-c3cnc4ccc(N5CCC[C@@H]5c5cccc(F)c5)nn34)ccn2)CC1	-7.8332
1786	CHEMBL4795530	Cc1cc(NC2=NC3NCCCC3C(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)=N2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-9.4654
1787	CHEMBL4092174	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCN1CCNCC21	-12.338
1788	CHEMBL3907048	CC1(C)c2cc(OC3CCN(S(C)(=O)=O)CC3)c(Br)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.7669

1789	CHEMBL3922720	CC(C)CCC#Cc1cc2c(cc1N1CCN(C3COC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.2206
1790	CHEMBL3891393	CC1(C)c2ccc(N3CCC[C@H]3CN3CCCC3)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-12.4871
1791	CHEMBL3971353	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(F)c(Nc2ccc(N3CCN(CCO)CC3)cc2OC)n1	-9.605
1792	CHEMBL3909538	CCC(CC)Oc1cc2c(cc1N1CCN(C3CCC3)CC1)C(C)(C)c1c(c3ccc(C#N)cc3n1C)C2=O	-9.7114
1793	CHEMBL3930736	CCc1cc2c(cc1N1CCC(O)(C3CC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.1306
1794	CHEMBL3916733	CC(C)C1(N2CCOCC2)CCN(c2cc3c(cn2)C(=O)c2c([nH]c4cc(C#N)ccc24)C3(C)C)CC1	-11.3867
1795	CHEMBL560245	Cc1cc2c(c(Cl)n1)-c1[nH]c3ccccc3c1CCN2CCc1ccccc1	-6.6259
1796	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-9.4982
1797	CHEMBL4466920	COc1cc(N2CCN(CCCN)C2=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2cccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.8117
1798	CHEMBL4787021	COc1cc(NCC2CCCO2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(C)(=O)=O)n1	-11.6821
1799	CHEMBL4748361	COc1cc(OCC2CCCO2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(C)(=O)=O)n1	-12.3079
1800	CHEMBL4753590	COc1cc(SCc2ccc(CN(C)C)o2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(C)(=O)=O)n1	-11.9426
1801	CHEMBL4756753	CCN1CCN(C(=O)c2cccn2-c2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4NS(C)(=O)=O)n3)c(OC)c2)CC1	-11.4467
1802	CHEMBL4445283	COc1cc(NC(=O)NCc2cccnc2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C)CC3)cc2)n1	-8.6814
1803	CHEMBL597181	Cc1cc(C)c(/C=C2\C(=O)Nc3ccc(N)cc32)[nH]1	-7.5437
1804	CHEMBL232144	Nc1ccc2c(c1)/C(=C/c1ccc[nH]1)C(=O)N2	-7.0329
1805	CHEMBL1202141	O=C(O)C(F)(F)F.O=C(c1ccc(-c2cnc3c(c2)N(Cc2ccccc2)CCN3)cc1)N1CCC[C@H]1CN1CCCC1	-9.3492
1806	CHEMBL1163566	FC(F)(F)c1ccc(Cl)cc1CN1CCNc2ncc(-c3ccnc(N4CCNCC4)c3)cc21	-9.6785
1807	CHEMBL5284741	CN1CCN(c2ccc(NCc3cn(-c4cccc(NC(=O)c5cc(F)cc(F)c5)c4)nn3)cc2)CC1	-10.2965
1808	CHEMBL3286823	Cc1nn(C)c2c1-c1cnc(N)c(n1)O[C@H](C)c1cc(F)ccc1C(=O)N(C)C2	-12.5577
1809	CHEMBL3286824	Cc1nn(C)c2c1-c1cnc(N)c(n1)O[C@@H](C)c1cc(F)ccc1C(=O)N(C)C2	-8.3824
1810	CHEMBL3286827	C[C@H]1Oc2cc(cnc2N)-c2cc(S(C)(=O)=O)ccc2CN(C)C(=O)c2ccc(F)cc21	-10.8896
1811	CHEMBL3286813	C[C@@H](Oc1cc(-c2cccc(S(C)(=O)=O)c2)cnc1N)c1cc(F)ccc1-n1nccn1	-11.8249
1812	CHEMBL2042829	CCN1C(=O)CCCc2c1ccc(Nc1ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n1)c2OC	-11.1393
1813	CHEMBL5192545	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(NC(=O)CN(C)C)n[nH]c3c2)ncc1Cl	-11.9426

1814	CHEMBL3786173	CCN(CC)[C@H]1CC[C@@H](c2cc(OC3CC3)c(Nc3ncc(Cl)c(Nc4cn(C)nc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)cc2C)CC1	-11.484
1815	CHEMBL3787297	Cc1nc(S(=O)(=O)C(C)C)c(Nc2nc(Nc3cc(C)c(C4CCN(C)CC4)cc3OC3CC3)ncc2Cl)s1	-10.8609
1816	CHEMBL3806112	O=C(Nc1n[nH]c2ccc(Cc3cc(F)cc(F)c3)cc12)c1ccc(CN2CCCCC2)cc1NC1CCOCC1	-10.9845
1817	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-9.8809
1818	CHEMBL3582427	N#Cc1ccc(-c2cnc3ccc(NCc4ccccc4)nn23)cc1	-7.813
1819	CHEMBL2172306	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(CN4CCC(C(N)=O)CC4)cc32)CC1	-11.911
1820	CHEMBL1823221	CCc1cc2c(cc1N1CCN(C3COC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.1091
1821	CHEMBL1642254	CCN1C(=O)CCCc2c1ccc(Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccc(N4CCOCC4)cc3OC)n1)c2OC	-10.5928
1822	CHEMBL1642264	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccc(C#N)cc3OC)n1)CCN(CC(=O)N(C)C)CC2	-11.5663
1823	CHEMBL1946801	CN1CCN(c2ccc3cc2CCc2ccc(N(C)S(C)(=O)=O)c(c2)Nc2nc(ncc2Cl)N3)CC1	-9.816
1824	CHEMBL1922963	Cc1nnsc1C1=NNC(=O)/C1=C\c1cn(C)c2cccc(OCc3cccnc3)c12	-10.5928
1825	CHEMBL4218175	CNc1ncc2c(-c3ccc(N4CCN(C)CC4)cc3)nn(CC3CCCC3)c2n1	-10.3552
1826	CHEMBL4571241	CCc1ccc2c(c1)c(=O)c(C(=O)Nc1ccc(Oc3ncnc4cc(OC)c(OC)cc34)c(F)c1)c(C)n2C	-11.7835
1827	CHEMBL2172311	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(CNCC(C)(C)O)cc32)CC1	-12.4754
1828	CHEMBL2172332	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(Cn4cncn4)cc32)CC1	-11.911
1829	CHEMBL5177576	COC(=O)c1c(C)[nH]c2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4NS(C)(=O)=O)n3)ccc12	-11.4184
1830	CHEMBL5080010	O=C1NC2(CC2)COc2ncc(F)cc2[C@H]2COCCN2c2ccn3ncc1c3n2	-9.5594
1831	CHEMBL3687221	CC(C)c1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCC(N4CCN(C)CC4)CC3)cc2)nc1NC1CCOCC1	-12.3079
1832	CHEMBL2042982	CCN1C(=O)CCCc2c1ccc(Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)c2OC	-10.3552
1833	CHEMBL2023992	COc1cc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4cccc(Cl)c4)C3)n2)cc(OC)c1OC	-10.0657
1834	CHEMBL2023544	COc1ccc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4ccc(C)cc4)C3)n2)cc1OC	-8.1723
1835	CHEMBL2172322	C=CCNS(=O)(=O)c1cccc(C(=O)/N=c2\[nH]c3cc(CN4CCCCC4)ccc3n2[C@H]2CC[C@@H](CO)CC2)c1	-10.3804
1836	CHEMBL1822525	COc1cc(N2CCN(C[C@H](C)O)CC2)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3N(C)S(C)(=O)=O)n2n1	-11.3466
1837	CHEMBL2158515	COc1cc(C2CCN(CC(N)=O)CC2)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccncc3OC)n2n1	-11.4115
1838	CHEMBL2158529	COc1cc(C2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3OC)n2n1	-11.6612

1839	CHEMBL2158525	COc1cc(C2CCN(CCO)CC2)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3N(C)S(C)(=O)=O)n2n1	-11.6612
1840	CHEMBL2158528	COc1cc(C2CCN(C[C@@H](C)O)CC2)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3OC)n2n1	-12.0111
1841	CHEMBL5289155	C[C@H]1Nc2ccc3ncc(n3n2)C(=O)NC2(CC2)COc2ccc(Cl)cc21	-10.6908
1842	CHEMBL3968459	CCN(CC)CCOc1ccc2c(n1)C(C)(C)c1c(c3ccc(C#N)cc3n1CCN(CC)CC)C2=O	-9.25
1843	CHEMBL3924183	C#CC(C)(C)N1CCN(c2cc3c(cc2C(C)=O)C(=O)c2c([nH]c4cc(C#N)ccc24)C3(C)C)CC1	-12.1712
1844	CHEMBL3915862	CCN(CC)CCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1oc3cccc(F)c3c1C2=O	-7.4317
1845	CHEMBL1778719	Cc1cc(-c2ccc(N)cc2)c(/C=C2\C(=O)Nc3ccccc32)[nH]1	-9.1264
1846	CHEMBL3979310	COc1cc(-c2ccnc3[nH]c4ccc(-c5ccc(N6CCN(C)CC6)cc5)cc4c23)c(OC)cc1Cc1ccccc1	-10.8609
1847	CHEMBL3983825	COc1cc(-c2ccnc3[nH]c4ccc(-c5ccc(N6CCN(C)CC6)cc5)cc4c23)cc(OC)c1Cc1ccccc1	-6.6963
1848	CHEMBL3986372	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccccc6)c5c4c3)cn2)CC1	-9.1566
1849	CHEMBL4085274	c1ccc(Nc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCOCC5)c4)ccc23)cc1	-7.7454
1850	CHEMBL3669143	COc1ccccc1-c1c(C(N)=O)sc2cnc(Nc3ccc(-c4cnn(C)c4)cc3OC(C)C)nc12	-10.4481
1851	CHEMBL3961537	CN1CCC(Oc2cc3c(cc2N)C(=O)c2c([nH]c4cc(C#N)ccc24)C3(C)C)CC1	-11.9738
1852	CHEMBL3920411	CC1(C)c2cc(N3CCN(C4COC4)CC3)c(C#CCN3CCN(C4COC4)CC3)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-12.7674
1853	CHEMBL3943362	COC(=O)N[C@@H](C(=O)N[C@@H](c1ccc([C@H](CO)N(CCC(C)(C)C)S(=O)(=O)c2ccc3[nH]ccc3c2)s1)C(F)(F)F)C(c1ccccc1)c1ccccc1	-7.5993
1854	CHEMBL3934879	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(-c7ccc(F)cc7)nc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.1479
1855	CHEMBL3916988	COc1ccccc1/C=C/c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-9.8696
1856	CHEMBL5172782	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(C(=O)N(C)C)c(C)[nH]c3c2)ncc1Cl	-11.959
1857	CHEMBL3941724	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-11.2343
1858	CHEMBL2151321	CC(C)Oc1cc(-n2cnc3ccc(N[C@@H](C)c4ccc(F)cn4)nc32)n[nH]1	-10.591
1859	CHEMBL3916238	CC1(C)c2cc(O[C@H]3CCOC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(Br)ccc21	-9.0258
1860	CHEMBL3943314	CC1(C)c2cc(OC3CCN(C(=O)C(F)(F)F)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(Br)ccc21	-8.8103
1861	CHEMBL4174347	COc1cc(-n2cc(CN3CCN(C)CC3)nn2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.068
1862	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-9.8058

1863	CHEMBL4170213	CC(C)Oc1ccc(NC(=O)CNC(=O)c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.0295
1864	CHEMBL509032	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.0882
1865	CHEMBL3920829	COc1cc(N2CCNCC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCNCC3)cc2OC)n1	-11.911
1866	CHEMBL3902089	COc1cc(N2CCN(S(C)(=O)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(S(C)(=O)=O)CC3)cc2OC)n1	-10.2032
1867	CHEMBL3954637	COc1cc(N2CCN(C(=O)CO)CC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-11.5663
1868	CHEMBL3895817	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(=O)CO)CC3)cc2OC)n1	-10.2129
1869	CHEMBL1940181	Cc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.1737
1870	CHEMBL3967479	CC(C)(O)C#Cc1ccc2c(c1)C(=O)c1c([nH]c3cc(C#N)ccc13)C2(C)C	-12.6677
1871	CHEMBL3921449	N#Cc1ccc2c3c([nH]c2c1)C1(CCOCC1)c1cc(N2CCC(N4CCCC4)CC2)c(C#N)cc1C3=O	-12.8578
1872	CHEMBL3938280	CC1(C)c2cc(O)c(-c3nn[nH]n3)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(Cl)ccc21	-13.2486
1873	CHEMBL3986413	CC(C)S(=O)(=O)N1CCN(C(=O)COc2ccc3c(c2)C(C)(C)c2[nH]c4cc(Br)ccc4c2C3=O)CC1	-9.6079
1874	CHEMBL4115197	CC1(C)c2cc(OC[C@@H](O)[C@H](O)CO)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(I)ccc21	-10.0416
1875	CHEMBL4114136	CC1(C)c2cc(OC[C@H](O)CO)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1c(C(=O)O)c(C#N)ccc21	-9.1397
1876	CHEMBL3961467	CC1(C)c2cc(N3CCN(C(=O)C4CC4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.8809
1877	CHEMBL4115036	COCCNC(=O)c1ccc2c3c([nH]c2c1)C(C)(C)c1cc(OC[C@@H](O)[C@H](O)CO)ccc1C3=O	-7.6716
1878	CHEMBL4108561	CC1(C)c2cc(OC[C@@H](O)[C@H](O)CO)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C(=O)Nc3ccccn3)ccc21	-8.286
1879	CHEMBL4112408	CC1(C)c2cc(OC[C@H](O)CO)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(-c3cccs3)ccc21	-9.1084
1880	CHEMBL3735414	CCc1cc2c(cc1NC(=O)N1CC(N3CCOCC3)C1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-9.1043
1881	CHEMBL3735510	CCc1cc2c(cc1-c1cnn(CC(O)CO)c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-10.317
1882	CHEMBL5197072	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(C(=O)N4CCC(O)CC4)c(C)[nH]c3c2)ncc1Cl	-11.1527
1883	CHEMBL5170990	C(=C/c1ccnc2[nH]c3ccccc3c12)\c1ccccc1	-8.3027
1884	CHEMBL5172307	CN1CCN(C(=O)c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccccc6)c5c4c3)cc2)CC1	-7.9969
1885	CHEMBL3672895	COCCNc1cc(N2CCN(C)CC2)ccc1C(=O)Nc1n[nH]c2ccc(Cc3cc(F)cc(F)c3)cc12	-9.4713
1886	CHEMBL3806013	COCCCNc1cc(N2CCN(C)CC2)ccc1C(=O)Nc1n[nH]c2ccc(Cc3cc(F)cc(F)c3)cc12	-9.7434
1887	CHEMBL3805899	CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3n[nH]c4ccc(Cc5cc(F)cc(F)c5)cc34)c(NCCF)c2)CC1	-11.1393

1888	CHEMBL3672896	CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3n[nH]c4ccc(Cc5cc(F)cc(F)c5)cc34)c(NC3CCCCC3)c2)CC1	-8.8671
1889	CHEMBL518060	Cc1ccc(O)cc1CC[C@@H]1C(=O)CC[C@]2(C)[C@@H]([C@H](C)/C=C/CC(C)C)CC[C@@H]12	-7.6319
1890	CHEMBL456936	Cc1ccc(O)cc1CC[C@@H]1C(=O)CC[C@]2(C)[C@@H]([C@H](C)CCCC(C)C)CC[C@@H]12	-7.5528
1891	CHEMBL1922964	Cc1nnsc1C1=NNC(=O)/C1=C\c1cn(C)c2cccc(OCc3ccncc3)c12	-10.2965
1892	CHEMBL1922979	Cn1cc(/C=C2\C(=O)NN=C2c2cccs2)c2c(OCc3ccccc3)cccc21	-9.9041
1893	CHEMBL1922976	Cn1cc(/C=C2\C(=O)NN=C2c2nccs2)c2c(OCc3ccccc3)cccc21	-9.2516
1894	CHEMBL1922983	CC(Oc1cccc2c1c(/C=C1\C(=O)NN=C1c1nccs1)cn2C)c1ccccc1	-8.9369
1895	CHEMBL4114282	CO[C@H]1O[C@H](COc2ccc3c(c2)C(C)(C)c2[nH]c4cc(Br)ccc4c2C3=O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]1O	-9.6614
1896	CHEMBL2158531	COc1cc(C2CCN(C[C@H](O)CO)CC2)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3OC)n2n1	-12.1091
1897	CHEMBL517956	Cc1ccc(O)cc1CC[C@@H]1[C@H](O)CC[C@]2(C)[C@@H]([C@H](C)CCCC(C)C)CC[C@@H]12	-7.2647
1898	CHEMBL3218855	COc1cc(N2CCN(C)CC2)ccc1-c1nc2c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)c(Cl)cnc2[nH]1	-12.9935
1899	CHEMBL3785384	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C(C)(C)/C(=N/N1CCOCC1)CC2	-9.8058
1900	CHEMBL3786127	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CC/C(=N\NC(N)=O)C2(C)C	-10.6908
1901	CHEMBL3787422	COc1ccc(Cn2cc(Nc3nc(Nc4cc(C)c(C5CCNCC5)cc4OC(C)C)ncc3Cl)c(S(=O)(=O)C(C)C)n2)cc1	-9.6504
1902	CHEMBL3330877	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2nc(CC(=O)N3C[C@H]4CN(C)C[C@H]4C3)cs2)ncc1Cl	-9.3813
1903	CHEMBL3330859	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2nc3c(s2)CCN(C(=O)C2CCOCC2)CC3)ncc1Cl	-11.2141
1904	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-8.5274
1905	CHEMBL201553	Cc1nc2cc(-c3cnc(O)c(C(=O)Nc4ccc(CN5CCN(C)CC5)cc4)c3)ccc2s1	-7.6876
1906	CHEMBL2172325	CCNC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccccc3)[nH]c3ccc(CN4CCCCC4)cc32)CC1	-11.5663
1907	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-9.6868
1908	CHEMBL202831	COc1cc(-c2cnc(O)c(C(=O)Nc3ccc(CN4CCN(C)CC4)cc3)c2)cc(OC)c1OC	-7.2688
1909	CHEMBL5394454	CCc1ccc2c(c1)c(=O)c(C(=O)Nc1ccc(Oc3ncnc4cc(OCCCCCC(=O)Nc5ccc6c(c5)CN(C5CCC(=O)NC5=O)C6=O)c(OC)cc34)c(F)c1)c(C)n2C	-11.781
1910	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.0111

1911	CHEMBL3651829	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C[C@@H](O)C(F)(F)F)CC1	-10.007
1912	CHEMBL3218848	COc1ccccc1-c1nc2c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)c(Cl)cnc2[nH]1	-11.0571
1913	CHEMBL4470301	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1cc(N2CCC[C@H](C(=O)NCc3ccc(OC(F)(F)F)cc3)C2)ccn1	-9.0546
1914	CHEMBL4464826	CCOc1cc(C(=O)NC2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc2c(n1)N(C1CCCC1)[C@H](CC)C(=O)N2C	-9.1059
1915	CHEMBL4436006	CCOc1cc(C(=O)NC2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc2c(n1)N(C1CCCC1)CC(=O)N2C	-8.9127
1916	CHEMBL3604655	CCNC(=O)c1cc(OC2CC2)c(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)cc1C	-11.6612
1917	CHEMBL3604647	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNC1	-11.7735
1918	CHEMBL3604646	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CN(C)C1	-11.7735
1919	CHEMBL3604642	CC(C)S(=O)(=O)c1nn(C)cc1Nc1nc(Nc2cc(F)c(C3CCN(C)CC3)cc2OC2CC2)ncc1Cl	-11.911
1920	CHEMBL3604650	COCCc1cc(OC2CC2)c(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)cc1C	-11.911
1921	CHEMBL3604636	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OCC2CC2)cc1C1CCN(C)CC1	-11.0968
1922	CHEMBL3604640	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(C(C)C)cc1C1CCN(C)CC1	-11.2343
1923	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-13.6188
1924	CHEMBL3263993	CC1CN(C)CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@H]4[C@@H](C(N)=O)[C@@H]5C=C[C@H]4C5)n3)cc21	-10.3677
1925	CHEMBL3128066	Cc1nc(C2(O)CN(C)C2)sc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)c1	-10.3311
1926	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.0657
1927	CHEMBL3218851	CN1CCN(c2ccc(-c3nc4c(N[C@H]5[C@@H](C(N)=O)[C@@H]6C=C[C@H]5C6)c(Cl)cnc4[nH]3)cc2)CC1	-10.6699
1928	CHEMBL2172333	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(CN4CCNCC4)cc32)CC1	-11.7735
1929	CHEMBL3286808	COc1ccc(F)cc1[C@@H](C)Oc1cc(-c2cnnn2C)cnc1N	-9.9599
1930	CHEMBL3128060	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnnn2C)cnc1N)c1cc(F)ccc1-n1nccn1	-9.3663
1931	CHEMBL3286809	CNC(=O)c1ccc(F)cc1[C@@H](C)Oc1cc(-c2cn(C)nc2C)cnc1N	-9.8368
1932	CHEMBL3286818	C[C@H]1Oc2cc(cnc2N)-c2c(nn(C)c2C#N)CCOc2ccc(F)cc21	-10.9196
1933	CHEMBL3582442	OC1CCN(c2cc(-c3cnc4ccc(N5CCC[C@@H]5c5cccc(F)c5)nn34)ccn2)CC1	-7.6716

1934	CHEMBL3582441	O=C(O)CN1CCN(c2cc(-c3cnc4ccc(N5CCC[C@@H]5c5cccc(F)c5)nn34)ccn2)CC1	-8.3976
1935	CHEMBL4177038	CC(C)c1cc(C(=O)NCC(=O)Nc2ccc(F)c(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)c2)c(O)cc1O	-12.7649
1936	CHEMBL3651864	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3c(C)[nH]nc3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCC(N)=O)CC1	-10.9845
1937	CHEMBL3651881	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3c(C)c[nH]c3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C)CC1	-11.4115
1938	CHEMBL5180262	CCN(CC)CC(=O)Nc1n[nH]c2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)ccc12	-12.0295
1939	CHEMBL3786173	CCN(CC)[C@H]1CC[C@@H](c2cc(OC3CC3)c(Nc3ncc(Cl)c(Nc4cn(C)nc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)cc2C)CC1	-11.0197
1940	CHEMBL3785890	Cc1cc(Nc2ncc(C#N)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1C1CCN(C)CC1	-11.911
1941	CHEMBL3787598	Cc1cc(Nc2ncc(F)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1C1CCN(C)CC1	-10.9845
1942	CHEMBL3785928	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1[C@H]1CC[C@H](NC(C)C)CC1	-11.7735
1943	CHEMBL3786830	CNC(=O)c1nn(C)cc1Nc1nc(Nc2cc(C)c(C3CCN(C)CC3)cc2OC2CC2)ncc1Cl	-10.8073
1944	CHEMBL2064722	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n2)ccc2c1CCC(N1CCN(C)CC1)CC2	-10.9196
1945	CHEMBL2064722	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n2)ccc2c1CCC(N1CCN(C)CC1)CC2	-9.5013
1946	CHEMBL2064667	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n1)CCC(N1CCOCC1)CC2	-9.816
1947	CHEMBL2064665	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n2)ccc2c1CC[C@H](N1CCOCC1)CC2	-9.816
1948	CHEMBL2064664	COCCNC1CCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@H]4[C@@H](C(N)=O)[C@@H]5C=C[C@H]4C5)n3)c(OC)cc2CC1	-10.4927
1949	CHEMBL2064666	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n2)ccc2c1CC[C@@H](N1CCOCC1)CC2	-12.3695
1950	CHEMBL2064665	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n2)ccc2c1CC[C@H](N1CCOCC1)CC2	-10.5749
1951	CHEMBL2064662	COCCN[C@H]1CCc2ccc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@H]4[C@@H](C(N)=O)[C@@H]5C=C[C@H]4C5)n3)c(OC)c2CC1	-10.8896
1952	CHEMBL3286829	C[C@H]1Oc2cc(cnc2N)-c2c(C3CC3)nn(C)c2CN(C)C(=O)c2ccc(F)cc21	-11.6821
1953	CHEMBL3397300	COc1cc(N2CCC(N(C)C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-13.0594
1954	CHEMBL5268953	COc1cc(N2CCC(N(C)C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2cccc3c2B(O)OC3)n1	-11.0419
1955	CHEMBL3263992	CNS(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(c2)C(C)CN(C)CC3)ncc1Cl	-12.6033
1956	CHEMBL3263970	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(c2)C(c2ccccc2)CN(C)CC3)ncc1Cl	-11.1393

1957	CHEMBL4061375	COc1cc(C(C)(C)C#N)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-9.5013
1958	CHEMBL4070217	COc1cc(CN)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.3079
1959	CHEMBL3823190	COc1cc(C2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-13.3609
1960	CHEMBL3823017	COc1cc(N2CCC(O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-13.3942
1961	CHEMBL3823165	COc1cc(P(C)(C)=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-12.729
1962	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-10.482
1963	CHEMBL3736388	CCc1cc2c(cc1C1=CCN(C(=O)C3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-9.7859
1964	CHEMBL3608519	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCCNC2=O	-12.1531
1965	CHEMBL3608535	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CN(CCO)CCC2	-6.32
1966	CHEMBL3735802	CCc1cc2c(cc1NC(=O)CN1CC3CN(C)CC3C1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-10.8073
1967	CHEMBL4747806	COc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2c(F)c1N1CCN(C)[C@H](C)C1	-12.2792
1968	CHEMBL4744640	COc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C3CC3)c2cc1N1CCN(C)CC1	-11.0381
1969	CHEMBL4796970	CC(C)c1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2cc1N1CCN(C)CC1	-10.485
1970	CHEMBL4754012	CCCc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2cc1N1CCN(C)CC1	-12.7649
1971	CHEMBL1980297	Nc1ncc(-c2cnn(CCO)c2)c2scc(-c3ccc(NC(=O)Nc4cccc(F)c4)cc3)c12	-9.1341
1972	CHEMBL197652	CN1CCN(Cc2ccc(NC(=O)c3cc(-c4ccncc4)cnc3O)cc2)CC1	-6.6803
1973	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.2792
1974	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-13.7563
1975	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-9.6198
1976	CHEMBL3128069	Cc1nc([C@](C)(O)CO)sc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)c1	-10.8073
1977	CHEMBL4167999	COc1ccc(NC(=O)CN2CCN(Cc3ccc4c(c3)CN(C(=O)c3cc(C(C)C)c(O)cc3O)C4)CC2)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.6612
1978	CHEMBL4751009	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCC(=O)NCOCCOCCOCCNc2cccc3c2C(=O)N(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)CC1	-8.2204
1979	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-9.1513
1980	CHEMBL4757631	CCC(=O)NCCOCCNC(=O)CCN1CCC(c2cc(OC(C)C)c(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)cc2C)CC1	-11.1756

1981	CHEMBL4217325	COc1cc(N2CCN(CCOCCOCCNC(=O)CNc3cccc4c3C(=O)N(C3CCC(=O)NC3=O)C4=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.3466
1982	CHEMBL4217325	COc1cc(N2CCN(CCOCCOCCNC(=O)CNc3cccc4c3C(=O)N(C3CCC(=O)NC3=O)C4=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-9.5662
1983	CHEMBL4170411	CCNC(=O)c1noc(-c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)c1-c1ccc(CNCC(=O)Nc2ccc(OC)c(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)c2)cc1	-10.8022
1984	CHEMBL4159104	CCNC(=O)c1noc(-c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)c1-c1ccc(CN2CCN(CC(=O)Nc3ccc(OC)c(Nc4ncc(Cl)c(Nc5ccccc5S(=O)(=O)C(C)C)n4)c3)CC2)cc1	-11.641
1985	CHEMBL3984417	CC(=O)N1CCC(Oc2ccc3c(c2)C(C)(C)c2c(c4ccc(Br)cc4n2C)C3=O)CC1	-9.1719
1986	CHEMBL3908067	CC1(C)c2cc(N3CCN(C4CCC4)CC3)c(OC3CCOCC3)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-12.5152
1987	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-11.1527
1988	CHEMBL3124972	Cc1nc([C@@](C)(O)CO)sc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)c1	-10.2965
1989	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-11.1393
1990	CHEMBL4062466	COc1cc(C(C)(C)CN)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.786
1991	CHEMBL4080869	COc1cc(C(C)(C)N)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.5152
1992	CHEMBL4099660	COc1cc(CCN(C)C)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.6033
1993	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.7124
1994	CHEMBL3805786	COC[C@@H](C)Nc1cc(N2CCN(C)CC2)ccc1C(=O)Nc1n[nH]c2ccc(Cc3cc(F)cc(F)c3)cc12	-10.1306
1995	CHEMBL3806043	CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3n[nH]c4ccc(Cc5cc(F)cc(F)c5)cc34)c(NCc3ccccc3)c2)CC1	-9.1092
1996	CHEMBL4472823	Cc1ccc(-c2n[nH]c3nc(-c4ccc(O)cc4)ccc23)o1	-10.3084
1997	CHEMBL3734855	CCc1cc2c(cc1N1CC3CC1CN3CC1CCOCC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.8117
1998	CHEMBL4076799	Cc1ccc(Nc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-9.7714
1999	CHEMBL4073257	Fc1ccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-9.3492
2000	CHEMBL4091078	c1ccc(Cc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-9.2767
2001	CHEMBL1934334	COc1cc(C2CCN(CC(N)=O)CC2)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3OC)n2n1	-11.6612
2002	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-11.0571
2003	CHEMBL3810133	Cc1cc(-c2cc(NC(=O)c3ccc(CN4CCN(C)CC4)cc3)[nH]n2)ccc1NC(=O)Nc1cc(C(C)C)on1	-9.0713
2004	CHEMBL3978376	Cc1ccc(Cn2cc(-c3ccnc4[nH]c5ccc(-c6ccc(N7CCN(C)CC7)cc6)cc5c34)nn2)cc1	-8.0243

2005	CHEMBL3950181	COc1cc(-c2ccnc3[nH]c4ccc(-c5ccc(N6CCN(C)CC6)cc5)cc4c23)c(OC)cc1C(=O)c1ccccc1	-7.9969
2006	CHEMBL3949340	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccc(F)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.9864
2007	CHEMBL3948834	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(F)c(Nc2ccc(N3CCNCC3)cc2OC(F)F)n1	-11.2343
2008	CHEMBL3934535	COC(=O)N1CCN(c2ccc(Nc3nc(Nc4ccc(N5CCN(C(C)=O)CC5)cc4OC)ncc3F)c(OC(F)F)c2)CC1	-10.1221
2009	CHEMBL3931692	COc1cc(N2CCN(C(=O)CO)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-10.7348
2010	CHEMBL3924733	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(=O)CO)CC3)cc2OC(F)F)n1	-11.484
2011	CHEMBL3939640	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC(F)F)n1	-11.3466
2012	CHEMBL3899531	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(N3CCNCC3)cc2OC)n1	-11.911
2013	CHEMBL3978871	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(N3CCN(S(C)(=O)=O)CC3)cc2OC)n1	-11.3466
2014	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.0111
2015	CHEMBL509032	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.4754
2016	CHEMBL3128075	Cc1nn(C)cc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)c1	-11.1393
2017	CHEMBL4111854	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CC4(CNC4)C3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-12.2765
2018	CHEMBL4109336	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCC4(CC3)CNC4)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-11.865
2019	CHEMBL3262356	N[C@H]1CCCC[C@H]1Nc1cc2nc[nH]c(=O)c2c(Nc2ccc3cc[nH]c23)n1	-10.148
2020	CHEMBL3920297	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(COc7cccc(C(F)(F)F)c7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.1566
2021	CHEMBL3956055	COc1ccccc1C#Cc1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-9.2724
2022	CHEMBL3669145	COc1ncccc1-c1c(C(N)=O)sc2cnc(Nc3cc(C)c(-n4ccnc4C)cc3OC(C)C)nc12	-11.0197
2023	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.2256
2024	CHEMBL3953919	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(=O)CO)CC3)cc2OC(F)F)n1	-10.7348
2025	CHEMBL3934738	COc1cc(N2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-11.6612
2026	CHEMBL3892892	COc1cc(N2CCNCC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(N3CCNCC3)cc2OC)n1	-12.0882
2027	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.7062
2028	CHEMBL3946370	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-10.6908

2029	CHEMBL3919579	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-11.4115
2030	CHEMBL3954637	COc1cc(N2CCN(C(=O)CO)CC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-12.0882
2031	CHEMBL3896263	CCNC(=O)N1CCN(c2ccc(Nc3ncc(C(F)(F)F)c(Nc4ccc(N5CCN(C(=O)NCC)CC5)cc4OC)n3)c(OC)c2)CC1	-10.4066
2032	CHEMBL4778125	COc1cc(-n2cccc2C(=O)NCCO)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(C)(=O)=O)n1	-12.3695
2033	CHEMBL3931540	COc1cc(C(O)c2ccccc2)c(OC)cc1-c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-6.7296
2034	CHEMBL3904008	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6cccc(F)c6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.2118
2035	CHEMBL3916480	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccccc6C(F)(F)F)c5c4c3)cc2)CC1	-9.6388
2036	CHEMBL3913624	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(-c7ccccc7)cc6F)c5c4c3)cc2)CC1	-9.0899
2037	CHEMBL3939548	CN1CCC(N2CCN(c3ccc(-c4ccc5[nH]c6nccc(-c7ccc(Cc8ccccc8)cc7)c6c5c4)cc3)CC2)CC1	-8.7296
2038	CHEMBL3902568	CN1CCC(N2CCN(c3ccc(-c4ccc5[nH]c6nccc(/C=C/c7ccccc7C(F)(F)F)c6c5c4)cc3)CC2)CC1	-8.5887
2039	CHEMBL3910295	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(C(O)c7ccccc7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.4152
2040	CHEMBL3958885	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(Oc7ccccc7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-7.294
2041	CHEMBL3946847	COc1cc(Cc2ccccc2)c(O)cc1-c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-8.3483
2042	CHEMBL2172303	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)c(Cl)c3)[nH]c3ccc(CN4CCC(C(C)(C)O)CC4)cc32)CC1	-12.0882
2043	CHEMBL3651849	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3c(C)[nH]nc3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C(=O)Cn2cccn2)CC1	-10.8609
2044	CHEMBL5395301	COc1cc(C2CCN(CC3CN(c4ccc5c(c4)C(=O)N(C4CCC(=O)NC4=O)C5=O)C3)CC2)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2cccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-9.0759
2045	CHEMBL4473820	CN1CCC(Nc2ccc(C(=O)Nc3cc(-c4cc(C#N)cs4)n[nH]3)cc2)CC1	-7.5171
2046	CHEMBL1793896	C=Cn1nc(C(N)=O)c2c1-c1nc(Nc3cc(N4CCN(C)CC4)ccc3OC(F)(F)F)ncc1CC2	-7.9771
2047	CHEMBL3970685	CCNC(=O)N1CCN(c2ccc(Nc3nc(Nc4ccc(N5CCN(C(C)=O)CC5)cc4OC)ncc3C(F)(F)F)c(OC)c2)CC1	-12.0882
2048	CHEMBL1165499	CN1CCN(c2ccc(-c3cnc4c(c3)N(Cc3cc(F)ccc3F)CCN4)cn2)CC1	-10.6112
2049	CHEMBL1171960	N#Cc1c(N)nc(SCC(=O)c2ccccc2)c(C#N)c1-c1ccsc1	-8.1831
2050	CHEMBL4462528	COc1cc(NC(=O)C2CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NC(C)=O)n1	-11.8958
2051	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.068

2052	CHEMBL4471142	COc1cc(N2CCCC2=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NC(C)=O)n1	-11.0687
2053	CHEMBL3128069	Cc1nc([C@](C)(O)CO)sc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)c1	-11.8384
2054	CHEMBL3133821	Oc1cccc(Nc2ccnc3[nH]c4ccccc4c23)c1	-9.4426
2055	CHEMBL3669150	COc1ccccc1-c1c(C(N)=O)sc2cnc(Nc3cc4c(cc3OC(C)C)N(C)C(=O)CCC4)nc12	-9.0385
2056	CHEMBL3904008	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6cccc(F)c6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.3639
2057	CHEMBL3956515	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccccc6F)c5c4c3)cc2)CC1	-8.9883
2058	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.8177
2059	CHEMBL3735401	CCc1cc2c(cc1-c1cnn(CC(=O)N(C)C)c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.4764
2060	CHEMBL1983268	CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3n[nH]c4ccc(Cc5cc(F)cc(F)c5)cc34)c(NC3CCOCC3)c2)CC1	-10.2965
2061	CHEMBL3672895	COCCNc1cc(N2CCN(C)CC2)ccc1C(=O)Nc1n[nH]c2ccc(Cc3cc(F)cc(F)c3)cc12	-9.0576
2062	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.2256
2063	CHEMBL4083964	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCN1C(N)=NCC21	-11.7377
2064	CHEMBL4071384	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C1CNCC(=O)N1CC2	-11.7377
2065	CHEMBL3975069	COc1cc(N2CCN(S(C)(=O)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-11.1393
2066	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-8.244
2067	CHEMBL388978	CN[C@@H]1C[C@H]2O[C@@](C)([C@@H]1OC)n1c3ccccc3c3c4c(c5c6ccccc6n2c5c31)C(=O)NC4	-12.0882
2068	CHEMBL5284780	C=CC(=O)Nc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)NC3CC3)n2)c(OC)cc1N(C)CCN(C)C	-12.0276
2069	CHEMBL605003	CN(C)S(=O)(=O)c1ccc2c(c1)/C(=C/c1cc3c([nH]1)CCCC3)C(=O)N2	-6.7296
2070	CHEMBL2023998	COc1cc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4cccc(-c5ccccc5)c4)C3)n2)cc(OC)c1OC	-10.9512
2071	CHEMBL2023539	Cc1ccc(CNC(=O)[C@H]2CCCN(c3ccnc(Nc4ccc(Cl)cc4)n3)C2)cc1	-7.3762
2072	CHEMBL2023536	Cc1ccc(CNC(=O)[C@H]2CCCN(c3ccnc(Nc4ccccc4)n3)C2)cc1	-7.9916
2073	CHEMBL5183055	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(C(=O)OC)c(C)[nH]c3c2)ncc1Cl	-12.0111
2074	CHEMBL5093999	O=C1NC2(CC2)COc2ncc(F)cc2[C@H]2CCCCN2c2ccn3ncc1c3n2	-10.9677
2075	CHEMBL3966723	COc1ccccc1/C=C(\C)c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-8.1479

2076	CHEMBL3982473	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6cccc(-c7ccccc7)c6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.721
2077	CHEMBL3128075	Cc1nn(C)cc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)c1	-9.58
2078	CHEMBL4285785	COc1nc(N2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(=O)(=O)C2CC2)n1	-7.6716
2079	CHEMBL5173501	C[C@H]1CNC(=O)c2cnn3cc(cnc23)N[C@H](C)c2cc(F)cc(c2)O1	-12.7588
2080	CHEMBL5209011	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C(=O)SCC(=S)N(C)C)CC1	-11.8249
2081	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-10.6908
2082	CHEMBL4465558	COc1cc(N2CCNC2=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.8809
2083	CHEMBL4464571	COc1cc(N2CCN(CC(=O)N3CCC(=O)CC3)C2=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.1531
2084	CHEMBL4519408	COc1cc(N2CCN(CC(=O)N(C)C)C2=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-10.8229
2085	CHEMBL3736388	CCc1cc2c(cc1C1=CCN(C(=O)C3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-10.9845
2086	CHEMBL3977662	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccccc6Cl)c5c4c3)cc2)CC1	-8.5887
2087	CHEMBL3947279	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccccc6NS(C)(=O)=O)c5c4c3)cc2)CC1	-9.6388
2088	CHEMBL3967080	CC(C)[Si](C#Cc1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12)(C(C)C)C(C)C	-7.531
2089	CHEMBL3922458	COc1cc(C(=O)c2ccccc2)c(O)cc1-c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-7.8757
2090	CHEMBL5425306	COc1cc(C2CCN(CCCC#Cc3cccc4c3CN(C3CCC(=O)NC3=O)C4=O)CC2)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-8.8872
2091	CHEMBL1779202	CC1(C)c2cc(C3CCN(C4COC4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-12.5152
2092	CHEMBL3669148	COc1ncc(F)cc1-c1c(C(N)=O)sc2cnc(Nc3cc(C4CCOCC4)nn3C(C)C)nc12	-11.484
2093	CHEMBL3651842	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C(=O)N(C1CN(C(=O)[C@@H]3CCCN3)C1)C2	-11.2343
2094	CHEMBL3651844	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3c[nH]nc3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C(=O)CN(C)C)CC1	-11.185
2095	CHEMBL3651845	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3c[nH]nc3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C[C@@H](O)C(F)(F)F)CC1	-10.6908
2096	CHEMBL3651853	Cc1cc(Nc2cc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3c(C)n[nH]c3c2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-10.5243
2097	CHEMBL3651856	CNC(=O)CN1CCC(c2cc(OC(C)C)c(Nc3nc(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)c4c(C)[nH]nc4n3)cc2C)CC1	-10.8896
2098	CHEMBL3651862	COc1cc(C2CCN(C)CC2)c(C)cc1Nc1nc(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)c2c(C)[nH]nc2n1	-12.338

2099	CHEMBL3651873	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3c(C)[nH]nc3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN([C@H]2CCS(=O)(=O)C2)CC1	-10.9512
2100	CHEMBL3651875	COc1cc(C2CCOCC2)c(C)cc1Nc1nc(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)c2c(C)[nH]nc2n1	-11.6612
2101	CHEMBL3651880	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3c(C)c[nH]c3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CC(N)=O)CC1	-11.5663
2102	CHEMBL3651883	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3c(C)c[nH]c3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C[C@@H](O)C(F)(F)F)CC1	-9.6273
2103	CHEMBL3892892	COc1cc(N2CCNCC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(N3CCNCC3)cc2OC)n1	-11.911
2104	CHEMBL3945192	COc1cc(N2CCN(S(N)(=O)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-11.4115
2105	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.134
2106	CHEMBL1807757	COC(=O)c1cccc(Oc2nc[nH]c(=O)c2/C=C/C(C)=O)c1	-7.8271
2107	CHEMBL1808095	CC(=O)/C=C/c1c(Oc2ccc(O)cc2)nc[nH]c1=O	-7.2631
2108	CHEMBL1808097	COc1cc(Oc2nc[nH]c(=O)c2/C=C/C(C)=O)c(C(C)=O)cc1OC	-7.2655
2109	CHEMBL1808107	CC(=O)/C=C/c1c(Oc2cc(C(F)(F)F)ccc2Cl)nc[nH]c1=O	-7.0997
2110	CHEMBL1806514	COC(=O)c1cccc(Oc2nc[nH]c(=O)c2C2CC(C)=NN2C(C)=O)c1	-7.1565
2111	CHEMBL4550250	CC(C)N1CCN(Cc2ccc(-c3n[nH]c4nc(-c5ccc(O)cc5)ccc34)o2)CC1	-9.9073
2112	CHEMBL1922974	Cc1nnsc1C1=NNC(=O)/C1=C\c1cn(C)c2cccc(OCc3c(F)ccc(Cl)c3F)c12	-9.0743
2113	CHEMBL3985396	CC(=O)N1CCN(c2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccc(N5CCN(C(C)=O)CC5)cc4Cl)n3)c(Cl)c2)CC1	-9.3397
2114	CHEMBL3922740	COc1cc(N2CCNCC2)ccc1Nc1ncc(F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC(F)F)n1	-9.6014
2115	CHEMBL1779097	CCOc1ccc2c3c(oc2c1)C(C)(C)c1cc(OCCN(CC)CC)ccc1C3=O	-8.3315
2116	CHEMBL3128069	Cc1nc([C@](C)(O)CO)sc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)c1	-12.9024
2117	CHEMBL3128069	Cc1nc([C@](C)(O)CO)sc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)c1	-13.7563
2118	CHEMBL3735401	CCc1cc2c(cc1-c1cnn(CC(=O)N(C)C)c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.338
2119	CHEMBL4466561	Cc1cc(NC2CCN(C)CC2)ccc1-c1cc2c(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4ccc(Cl)cc4)C3)ncnc2[nH]1	-12.8578
2120	CHEMBL4537938	Cc1cc(NC2CCN(C)CC2)ccc1-c1cc2c(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4cccc(OC(F)(F)F)c4)C3)ncnc2[nH]1	-13.0398
2121	CHEMBL4588120	Cc1cc(NC2CCN(C)CC2)ccc1-c1cc2c(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4ccc(S(F)(F)F)cc4)C3)ncnc2[nH]1	-13.0796

2122	CHEMBL4522012	Cc1cc(NC2CCN(C)CC2)ccc1-c1cc2c(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4ccc(OC(F)(F)F)cc4)C3)ncnc2[nH]1	-11.523
2123	CHEMBL3286830	C[C@H]1Oc2cc(cnc2N)-c2c(nn(C)c2C#N)CN(C)C(=O)c2ccc(F)cc21	-11.0968
2124	CHEMBL2172313	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccccc3)[nH]c3ccc(CN4CCC(C(C)(C)O)CC4)cc32)CC1	-12.338
2125	CHEMBL2172336	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(CN4CCCCC4C(=O)O)cc32)CC1	-12.0882
2126	CHEMBL2172330	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(CN4CCCCC4)cc32)CC1	-12.4754
2127	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-10.9196
2128	CHEMBL1738797	CCc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.5152
2129	CHEMBL3735648	CC1(C)c2cc(C3CCN(CC4CCOCC4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.5156
2130	CHEMBL3925372	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3N3CCCS3(=O)=O)n2)ccc2c1CCCC(N1CCN(CCO)CC1)C2	-10.2429
2131	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-11.9932
2132	CHEMBL4469756	CCOc1cc(C(=O)NC2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc2c(n1)N(Cc1cccc(Br)c1)[C@H](CC)C(=O)N2C	-8.9493
2133	CHEMBL2403843	Cc1cc(Nc2ncc(C)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C)CC1	-11.1135
2134	CHEMBL2401832	C[C@@H](Oc1c(N)ncc2c(C3=CCN(C(N)=O)CC3)coc12)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-8.9369
2135	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.1091
2136	CHEMBL3398171	COc1cc([C@@]2(O)CCN(CC(N)=O)C[C@@H]2O)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3OC)n2n1	-10.2429
2137	CHEMBL3357439	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)CN)c2)ncc1Cl	-11.0846
2138	CHEMBL509032	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-10.2854
2139	CHEMBL3115493	O=[N+]([O-])c1cccc(Nc2cc3nc4ccccc4n3cn2)c1	-7.0916
2140	CHEMBL3128062	COc1ncncc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)c1	-8.6693
2141	CHEMBL3133821	Oc1cccc(Nc2ccnc3[nH]c4ccccc4c23)c1	-8.0243
2142	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-9.3397
2143	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-11.9203
2144	CHEMBL4522012	Cc1cc(NC2CCN(C)CC2)ccc1-c1cc2c(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4ccc(OC(F)(F)F)cc4)C3)ncnc2[nH]1	-13.5714
2145	CHEMBL3608535	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CN(CCO)CCC2	-8.1831

2146	CHEMBL3608531	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCCN(C(=O)CO)C2	-8.5099
2147	CHEMBL3608530	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CN(C(C)=O)CCC2	-8.6474
2148	CHEMBL3608523	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CNCCC2	-12.4754
2149	CHEMBL3608520	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C(=O)NCCC2	-11.8523
2150	CHEMBL3608522	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCCNC2	-12.1531
2151	CHEMBL3608523	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CNCCC2	-12.0111
2152	CHEMBL3608527	CCN1CCCc2cc(OC)c(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)cc2C1	-7.294
2153	CHEMBL3608528	CCN1CCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)c(OC)cc2CC1	-7.3961
2154	CHEMBL3608530	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CN(C(C)=O)CCC2	-7.2607
2155	CHEMBL3608531	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCCN(C(=O)CO)C2	-8.3483
2156	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-10.6908
2157	CHEMBL2403827	CCN1CCC(c2cc(OC(C)C)c(Nc3ncc(C)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)cc2C)CC1	-10.6823
2158	CHEMBL4518526	COc1cc(Nc2cc(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4ccc(C)cc4)C3)ccn2)cc(OC)c1OC	-7.6058
2159	CHEMBL4298138	C[C@H]1CNC(=O)c2cnn3ccc(nc23)N[C@H](C)c2cc(F)ccc2O1	-12.7588
2160	CHEMBL4459025	CCOc1cc(C2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc2c(n1)N(Cc1ccc(Br)cc1)[C@H](CC)C(=O)N2C	-8.7475
2161	CHEMBL4449858	CCOc1cc(C2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc2c(n1)N(Cc1cc(C)cs1)[C@H](CC)C(=O)N2C	-11.0197
2162	CHEMBL4519103	CCOc1cc(C2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc2c(n1)N(Cc1ccc(C)s1)[C@H](CC)C(=O)N2C	-9.4426
2163	CHEMBL1163566	FC(F)(F)c1ccc(Cl)cc1CN1CCNc2ncc(-c3ccnc(N4CCNCC4)c3)cc21	-11.3466
2164	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-11.7721
2165	CHEMBL4113977	CC1(C)c2cc(OC[C@H](O)CO)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1c(C(N)=O)c(C#N)ccc21	-8.6109
2166	CHEMBL4111677	COc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1[nH]c3c(OC[C@H](O)CO)c(C#N)ccc3c1C2=O	-8.8758
2167	CHEMBL3218861	CN1CCN(c2ccc(-c3nc4c(N[C@H]5[C@@H](C(N)=O)[C@@H]6C=C[C@H]5C6)c(Br)cnc4[nH]3)cc2)CC1	-12.1531
2168	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-8.4887
2169	CHEMBL3922786	CC1(C)c2ccc(OCc3cccnc3)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.5582

2170	CHEMBL4107738	CC1(C)c2ccc(OC[C@H](O)CO)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.861
2171	CHEMBL4108355	Cc1cc2c3c([nH]c2cc1Cl)C(C)(C)c1cc(OC[C@@H](O)[C@H](O)CO)ccc1C3=O	-8.196
2172	CHEMBL3128064	Cc1nc(C(C)(C)O)sc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)c1	-10.7348
2173	CHEMBL388978	CN[C@@H]1C[C@H]2O[C@@](C)([C@@H]1OC)n1c3ccccc3c3c4c(c5c6ccccc6n2c5c31)C(=O)NC4	-10.6699
2174	CHEMBL4546844	COc1cc(NC(=O)NC2CCC(=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NC(C)=O)n1	-11.9266
2175	CHEMBL3975258	Cc1cc(OCc2ccc(-c3ccnc4[nH]c5ccc(-c6ccc(N7CCN(C)CC7)cc6)cc5c34)cc2)ccc1Cl	-9.8696
2176	CHEMBL4471142	COc1cc(N2CCCC2=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NC(C)=O)n1	-12.1091
2177	CHEMBL4851806	CCc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCN(CCCC#Cc4cccc5c4CN(C4CCC(=O)NC4=O)C5=O)CC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-7.7745
2178	CHEMBL3735648	CC1(C)c2cc(C3CCN(CC4CCOCC4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-12.0111
2179	CHEMBL3736273	CCc1cc2c(cc1-c1cnn(C3CCNCC3)c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.8298
2180	CHEMBL5177576	COC(=O)c1c(C)[nH]c2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4NS(C)(=O)=O)n3)ccc12	-11.9426
2181	CHEMBL4106737	CC(C)Oc1cc2c(cc1O[C@@H]1CCN(C3CCC3)C1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.4754
2182	CHEMBL3960260	CC(C)N1CCN(c2ccc3c(c2)C(C)(C)c2[nH]c4c(F)c(C#N)ccc4c2C3=O)CC1	-12.9259
2183	CHEMBL4111723	CC1(C)c2cc(OC[C@@H](O)[C@H](O)CO)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1ccc(C#N)cc21	-8.5761
2184	CHEMBL5401769	COc1ccc2nc(-c3cc4ccc(N5CCOCC5)cc4oc3=O)sc2c1	-9.3165
2185	CHEMBL1983268	CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3n[nH]c4ccc(Cc5cc(F)cc(F)c5)cc34)c(NC3CCOCC3)c2)CC1	-11.2343
2186	CHEMBL4449858	CCOc1cc(C2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc2c(n1)N(Cc1cc(C)cs1)[C@H](CC)C(=O)N2C	-8.2602
2187	CHEMBL3986775	CN1CCC(Oc2cc3c(cc2[N+](=O)[O-])C(=O)c2c([nH]c4cc(C#N)ccc24)C3(C)C)CC1	-12.7705
2188	CHEMBL3976640	CC1(C)c2cc(N3CCN(C4CCC4)CC3)c(Br)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-12.3082
2189	CHEMBL3905916	C#Cc1cc2c(cc1N1CCOCC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.2293
2190	CHEMBL3904875	CC1(C)c2cc(N3CCOCC3)c(C#CCN3CCOCC3)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-12.1823
2191	CHEMBL3936548	CC(C)OCC#Cc1cc2c(cc1N1CCN(C3COC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-13.3293
2192	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.3695
2193	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-10.0735

2194	CHEMBL3915056	CC1(C)c2cc(N3CCN(C4CCC4)CC3)c(C#CC3CCC3)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-13.1004
2195	CHEMBL3900241	CC1(C)c2ccc(OCCOCCC(=O)O)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.8285
2196	CHEMBL4451829	[2H]C([2H])([2H])C([2H])([2H])Oc1cc(C2CCNCC2)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-10.3356
2197	CHEMBL5070835	O=C1NC2(CC2)COc2ncc(F)cc2[C@H]2CNCCN2c2ccn3ncc1c3n2	-10.0007
2198	CHEMBL3735386	CCc1cc2c(cc1C1=CCN(CC3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-10.3677
2199	CHEMBL3735648	CC1(C)c2cc(C3CCN(CC4CCOCC4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.9266
2200	CHEMBL4470529	COc1cc(N2CCN(CCN(C)C)C2=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.6526
2201	CHEMBL4447747	COc1cc(N2CCN(CC(=O)N3CCN(C)CC3)C2=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.8507
2202	CHEMBL5199005	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C(=S)SCC(=O)N(C)C)CC1	-11.0571
2203	CHEMBL5178030	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C(=O)SCC(=S)N2CCN(CCO)CC2)CC1	-12.0295
2204	CHEMBL4437893	C[C@@H](Oc1cc(-c2cc[nH]c(=O)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-11.2343
2205	CHEMBL3669147	COc1ccccc1-c1c(C(N)=O)sc2cnc(Nc3ccc(NC4CCOCC4)cc3OC(C)C)nc12	-10.2745
2206	CHEMBL4451829	[2H]C([2H])([2H])C([2H])([2H])Oc1cc(C2CCNCC2)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-9.8906
2207	CHEMBL5169496	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(Nc6cccc([N+](=O)[O-])c6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.1479
2208	CHEMBL4859551	CCc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCNCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-9.2724
2209	CHEMBL5170703	COc1cc(N2CCC3(CCNCC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-11.6821
2210	CHEMBL5195006	COc1cc(N2CCC3(CC2)CNC3)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-11.9932
2211	CHEMBL5172119	COc1cc(N2CCC3(CNC3)C2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-11.6025
2212	CHEMBL4464582	[2H]C([2H])([2H])Oc1cc(C2CCNCC2)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-10.1392
2213	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-10.0657
2214	CHEMBL4750810	CCN1CCN(CCS(=O)(=O)c2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)c(OC)c2)CC1	-11.8664
2215	CHEMBL4749215	CCN1CCN(C(=O)CS(=O)(=O)c2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)c(OC)c2)CC1	-12.2519
2216	CHEMBL4787426	COc1cc(NC(=O)/C=C/CN2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.911

2217	CHEMBL4747053	COc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2c(F)c1N1C[C@@H](C)N[C@@H](C)C1	-12.1763
2218	CHEMBL4586704	C[C@@H](Oc1cc(-c2ccn(C)c(=O)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.0284
2219	CHEMBL2418756	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5cccc(C(F)(F)F)c5)c4)c3c2)cn1	-9.3713
2220	CHEMBL2418755	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5cccc(C#N)c5)c4)c3c2)cn1	-10.6301
2221	CHEMBL5202722	Cc1[nH]c2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4NS(C)(=O)=O)n3)ccc2c1C(=O)N1CCC(C)CC1	-11.6119
2222	CHEMBL5178203	C[C@@H]1COc2cn3ncc4c3nc2N1Cc1ccc(F)cc1O[C@@H](C)CNC4=O	-9.1566
2223	CHEMBL5184310	COc1cc(N2CCC3(CCNC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2cccccc2P(C)(C)=O)n1	-11.3344
2224	CHEMBL5173297	COc1cc(N2CCC3(CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2c(F)cccc2P(C)(C)=O)n1	-10.4201
2225	CHEMBL5095068	COc1cc(N2CCC3(CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-12.4754
2226	CHEMBL5185835	COc1cc(N2CCC3(CCN(C)CC3)CC2)c(F)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-11.3979
2227	CHEMBL86943	CCOC(=O)c1c(C)[nH]c(/C=C2\C(=O)Nc3ccccc32)c1C	-7.4712
2228	CHEMBL2403375	CC(=O)N1CCc2[nH]c(/C=C3\C(=O)Nc4ccc(OC(C)C)cc43)cc2C1	-7.7745
2229	CHEMBL2403374	CC(=O)Nc1ccc2c(c1)/C(=C/c1cc3c([nH]1)CCN(C(=O)N1CCOCC1)C3)C(=O)N2	-9.4713
2230	CHEMBL2023994	COc1cc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4cccc([N+](=O)[O-])c4)C3)n2)cc(OC)c1OC	-10.148
2231	CHEMBL2023552	COc1cc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)N[C@@H](C)c4ccccc4)C3)n2)cc(OC)c1OC	-7.9214
2232	CHEMBL2023551	COc1cc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)NCC(=O)c4ccccc4)C3)n2)cc(OC)c1OC	-7.8457
2233	CHEMBL2023542	CCc1cccc(Nc2nccc(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4ccc(C)cc4)C3)n2)c1	-8.5667
2234	CHEMBL405130	COc1cc2ncnc(Nc3ccc(O)cc3)c2cc1OC	-7.9707
2235	CHEMBL5421566	CC(Oc1cc(-c2cnn(C3CCN(CC4CN(c5ccc6c(c5)C(=O)N(C5CCC(=O)NC5=O)C6=O)C4)CC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-7.4712
2236	CHEMBL3904285	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1nc(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2)ncc1Cl	-10.9845
2237	CHEMBL3975069	COc1cc(N2CCN(S(C)(=O)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-10.5083
2238	CHEMBL3983190	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCNCC3)cc2F)n1	-9.7667
2239	CHEMBL3917284	COc1cc(N2CCN(S(C)(=O)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-10.3193
2240	CHEMBL3983806	CCC(=O)N(C)c1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1nc(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)ncc1C(F)(F)F	-8.5161
2241	CHEMBL3747406	CCc1cc2c(cc1-c1cnn(C)c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-10.8896

2242	CHEMBL3982473	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6cccc(-c7ccccc7)c6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.4713
2243	CHEMBL3920323	C/C(=C\c1ccccc1)c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-9.3165
2244	CHEMBL3972466	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(Nc6ccccc6[N+](=O)[O-])c5c4c3)cc2)CC1	-8.8671
2245	CHEMBL3972466	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(Nc6ccccc6[N+](=O)[O-])c5c4c3)cc2)CC1	-7.7745
2246	CHEMBL3913619	COc1ccc(Cc2ccc(-c3ccnc4[nH]c5ccc(-c6ccc(N7CCN(C)CC7)cc6)cc5c34)cc2)c(OC)c1	-8.8349
2247	CHEMBL5195006	COc1cc(N2CCC3(CC2)CNC3)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-12.0882
2248	CHEMBL3822557	COc1cc(N2CCC(N3CCOCC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-13.2043
2249	CHEMBL3822664	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2I)n1	-12.5755
2250	CHEMBL3822589	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(C(C)=O)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-9.2703
2251	CHEMBL3822524	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(C2CC2)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-12.0427
2252	CHEMBL3978523	CN1CCC(Oc2cc3c(cc2NS(C)(=O)=O)C(=O)c2c([nH]c4cc(C#N)ccc24)C3(C)C)CC1	-11.6331
2253	CHEMBL3934077	CC1(C)c2cc(N3CCN(C4CC4)CC3)c(-c3ccccc3)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.1043
2254	CHEMBL2037226	Cc1ccc(NC(=O)Nc2cc(C(F)(F)F)ccc2F)cc1Nc1ccc2c(c1)NC(=O)/C2=C\c1ccc[nH]1	-7.7561
2255	CHEMBL1738797	CCc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.3695
2256	CHEMBL5172119	COc1cc(N2CCC3(CNC3)C2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-11.3847
2257	CHEMBL5095068	COc1cc(N2CCC3(CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-12.4029
2258	CHEMBL5176751	COc1cc(N2CCC3(CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(F)cc2P(C)(C)=O)n1	-11.8249
2259	CHEMBL4298138	C[C@H]1CNC(=O)c2cnn3ccc(nc23)N[C@H](C)c2cc(F)ccc2O1	-11.4918
2260	CHEMBL3218850	NC(=O)[C@@H]1[C@H](Nc2c(Cl)cnc3[nH]c(-c4ccc(N5CCOCC5)cc4)nc23)[C@H]2C=C[C@@H]1C2	-9.8108
2261	CHEMBL3218857	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1-c1nc2c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)c(Cl)cnc2[nH]1	-11.3466
2262	CHEMBL2172305	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(CN4CCC(C(=O)O)CC4)cc32)CC1	-9.1655
2263	CHEMBL2172331	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(CN4CCS(=O)(=O)CC4)cc32)CC1	-11.484
2264	CHEMBL2172323	COC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccccc3)[nH]c3ccc(CN4CCCCC4)cc32)CC1	-10.3078

2265	CHEMBL3948141	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1nc(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2)ncc1F	-10.1749
2266	CHEMBL3902647	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2NC(C)(C)C)n1	-8.8455
2267	CHEMBL3735648	CC1(C)c2cc(C3CCN(CC4CCOCC4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.988
2268	CHEMBL1651521	COc1cc(O)c2c(c1)CCC[C@H](O)CC(=O)/C=C\C[C@H](C)OC2=O	-8.6766
2269	CHEMBL5174132	Cc1[nH]c2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4NS(C)(=O)=O)n3)ccc2c1C(=O)N1CCOCC1	-11.6716
2270	CHEMBL2158524	COc1ccc(N2CCN(C)CC2)cc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3OC)n2n1	-9.5427
2271	CHEMBL3903725	Nc1ccc(-c2ccc3ncc4c(=O)[nH]c(=O)n(-c5cccc(C(F)(F)F)c5)c4c3n2)cn1	-8.4132
2272	CHEMBL3931540	COc1cc(C(O)c2ccccc2)c(OC)cc1-c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-7.1774
2273	CHEMBL4089527	COc1cc(CC#N)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-10.5576
2274	CHEMBL3218849	NC(=O)[C@@H]1[C@H](Nc2c(Cl)cnc3[nH]c(-c4cccc(N5CCOCC5)c4)nc23)[C@H]2C=C[C@@H]1C2	-10.0284
2275	CHEMBL3218858	COc1cc(CN2CCOCC2)ccc1-c1nc2c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)c(Cl)cnc2[nH]1	-10.2429
2276	CHEMBL3604654	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1S(C)(=O)=O	-11.2879
2277	CHEMBL3604653	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1C(=O)C(C)C	-10.758
2278	CHEMBL4522012	Cc1cc(NC2CCN(C)CC2)ccc1-c1cc2c(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4ccc(OC(F)(F)F)cc4)C3)ncnc2[nH]1	-11.3584
2279	CHEMBL3822982	COc1cc(P(C)(C)=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2OC)n1	-12.7901
2280	CHEMBL4483645	Oc1ccc(-c2ccc3c(-c4ccc(CN5CCOCC5)o4)n[nH]c3n2)cc1	-9.966
2281	CHEMBL4441874	Cc1nn(C)cc1Nc1cc(N2CCC[C@H](C(=O)NCc3ccc(OC(F)(F)F)cc3)C2)ccn1	-8.6474
2282	CHEMBL3787539	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCC(=O)C2(C)C	-10.4481
2283	CHEMBL3786892	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCC(N)C2(C)C	-12.9846
2284	CHEMBL3787367	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C(C)(C)C(=O)CC2	-9.1708
2285	CHEMBL3786127	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CC/C(=N\NC(N)=O)C2(C)C	-10.4626
2286	CHEMBL3786402	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCC(NC(=O)CO)C2(C)C	-11.3528
2287	CHEMBL3785299	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCC(NC(=O)CN(C)C)C2(C)C	-11.9759
2288	CHEMBL3785711	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)CC(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-11.5663

2289	CHEMBL3785890	Cc1cc(Nc2ncc(C#N)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1C1CCN(C)CC1	-12.338
2290	CHEMBL3786916	Cc1nc(Nc2nc(Nc3cc(C)c(C4CCN(C)CC4)cc3OC3CC3)ncc2Cl)c(S(=O)(=O)C(C)C)s1	-10.9512
2291	CHEMBL5176898	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(NC(=O)CN(C)C)n[nH]c3c2)ncc1Cl	-11.959
2292	CHEMBL5208148	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(NC(=O)CN4CCCC4)n[nH]c3c2)ncc1Cl	-12.6033
2293	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-9.8809
2294	CHEMBL3949427	COc1cc2c(cc1SC(C)C)C(=O)c1c([nH]c3cc(C#N)ccc13)C2(C)C	-11.3814
2295	CHEMBL3786270	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCC(O)C2(C)C	-10.2854
2296	CHEMBL3785093	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C(C)(C)/C(=N/NC(=N)N)CC2	-9.9283
2297	CHEMBL4539309	COc1ccc(-c2n[nH]c3nc(-c4ccc(O)cc4)ccc23)cc1	-9.3903
2298	CHEMBL4551421	CCOc1cc(C(=O)NC2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc2c(n1)N(C1CCCC1)[C@@H](CC)C(=O)N2C	-7.7561
2299	CHEMBL3286830	C[C@H]1Oc2cc(cnc2N)-c2c(nn(C)c2C#N)CN(C)C(=O)c2ccc(F)cc21	-11.4115
2300	CHEMBL3921664	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(N/N=C/c2ccc(F)cc2)ncc1Cl	-12.2519
2301	CHEMBL4284800	COc1nc(N2CCSCC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(C)(=O)=O)n1	-7.8757
2302	CHEMBL4285785	COc1nc(N2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(=O)(=O)C2CC2)n1	-7.4063
2303	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-13.7563
2304	CHEMBL3357439	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)CN)c2)ncc1Cl	-12.1531
2305	CHEMBL2037226	Cc1ccc(NC(=O)Nc2cc(C(F)(F)F)ccc2F)cc1Nc1ccc2c(c1)NC(=O)/C2=C\c1ccc[nH]1	-7.3292
2306	CHEMBL5425607	COc1cc(C2CCN(CCCCCC#Cc3cccc4c3CN(C3CCC(=O)NC3=O)C4=O)CC2)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-9.281
2307	CHEMBL5407877	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CC2CN(c3ccc4c(c3)C(=O)N(C3CCC(=O)NC3=O)C4=O)C2)CC1	-8.209
2308	CHEMBL2042829	CCN1C(=O)CCCc2c1ccc(Nc1ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n1)c2OC	-10.4201
2309	CHEMBL5404186	CCc1cc2c(cc1N1CCN(CC3CN(c4ccc5c(c4)C(=O)N(C4CCC(=O)NC4=O)C5=O)C3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-7.8735
2310	CHEMBL4473820	CN1CCC(Nc2ccc(C(=O)Nc3cc(-c4cc(C#N)cs4)n[nH]3)cc2)CC1	-7.5018
2311	CHEMBL4465558	COc1cc(N2CCNC2=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-10.9166
2312	CHEMBL4447747	COc1cc(N2CCN(CC(=O)N3CCN(C)CC3)C2=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.3079

2313	CHEMBL3545311	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-11.8958
2314	CHEMBL5084695	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C(=O)CNc4cccc5c4C(=O)N(C4CCC(=O)NC4=O)C5=O)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-11.6025
2315	CHEMBL3805749	CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3n[nH]c4ccc(Cc5cc(F)cc(F)c5)cc34)c(NCCO)c2)CC1	-10.758
2316	CHEMBL3806045	Cc1ccc(F)cc1Cc1ccc2[nH]nc(NC(=O)c3ccc(N4CCN(C)CC4)cc3NC3CCOCC3)c2c1	-9.5628
2317	CHEMBL3805643	O=C(Nc1n[nH]c2ccc(Cc3cc(F)cc(F)c3)cc12)c1ccc(N2CCNCC2)cc1NC1CCOCC1	-12.0882
2318	CHEMBL3805254	COCC(COC)Nc1cc(N2CCN(C)CC2)ccc1C(=O)Nc1n[nH]c2ccc(Cc3cc(F)cc(F)c3)cc12	-9.9345
2319	CHEMBL3805123	CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3n[nH]c4ccc(Cc5cc(F)cc(F)c5)cc34)c(N[C@H]3CC[C@H](O)CC3)c2)CC1	-11.3466
2320	CHEMBL4762929	COc1ccc2nc(Nc3cc(C)c(C4CCN(C)CC4)cc3OC(C)C)nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c2c1	-8.1049
2321	CHEMBL3935752	CCN(CC)CCOc1ccc2c(c1)C1(CCNCC1)c1[nH]c3ccccc3c1C2=O	-8.7406
2322	CHEMBL3951557	Cn1cc(-c2ccc3c(c2)C(C)(C)c2[nH]c4cc(C#N)ccc4c2C3=O)cn1	-11.7219
2323	CHEMBL3961322	CC1(C)c2cc(N3CCN(S(N)(=O)=O)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-12.0515
2324	CHEMBL3921085	CC1(C)c2cc(OC3COC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.9945
2325	CHEMBL3894226	CC1(C)c2cc(OCC(=O)O)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.4071
2326	CHEMBL3943227	CC1(C)c2cc(N3CCC(N4CCC(F)(F)CC4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-12.445
2327	CHEMBL3977388	C=Cc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.1034
2328	CHEMBL3930379	CC1(C)c2cc(C(=O)O)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.2467
2329	CHEMBL3901433	CC1(C)c2cc(C(=O)N3CCOCC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.6672
2330	CHEMBL3972539	CC1(C)c2cc(C(=O)N3CCN(S(C)(=O)=O)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.7275
2331	CHEMBL3929985	CC1(C)c2cc(CN3CCS(=O)(=O)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.5857
2332	CHEMBL3965185	CC1(C)c2cc(CN3CCN(S(C)(=O)=O)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.998
2333	CHEMBL3972824	CCNC(=O)N1CCC(c2ccc3c(c2)C(C)(C)c2[nH]c4cc(C#N)ccc4c2C3=O)CC1	-12.3376
2334	CHEMBL3918496	CCCOc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1nc(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2)ncc1Cl	-9.6785
2335	CHEMBL3961212	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ccnc(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-9.816
2336	CHEMBL3977453	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(F)c(Nc2ccc(N3CCN(C)CC3)cc2OC)n1	-11.1393
2337	CHEMBL3973022	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(F)c(Nc2ccc(N3CCN(C)CC3)cc2OC(F)F)n1	-11.0197

2338	CHEMBL3669134	COc1cc(N2CCN(C(C)C)CC2)ccc1Nc1ncc2sc(C(N)=O)c(-c3ccccc3)c2n1	-10.7124
2339	CHEMBL3669135	COc1cc(C2CCN(C)CC2)c(C)cc1Nc1ncc2sc(C(N)=O)c(-c3ccccc3)c2n1	-11.1393
2340	CHEMBL3925204	CCCC(=O)N(C)c1cc(N2CCNCC2)ccc1Nc1nc(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)ncc1Cl	-8.3976
2341	CHEMBL3913998	COc1cc(N2CCN(C(=O)OC(C)(C)C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-10.7822
2342	CHEMBL3985396	CC(=O)N1CCN(c2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccc(N5CCN(C(C)=O)CC5)cc4Cl)n3)c(Cl)c2)CC1	-10.4927
2343	CHEMBL3906824	CCNC(=O)N1CCN(c2ccc(Nc3nc(Nc4ccc(N5CCN(C(C)=O)CC5)cc4OC)ncc3F)c(OC)c2)CC1	-9.0837
2344	CHEMBL3905284	COc1cccc(/C=N/Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c1	-11.641
2345	CHEMBL2403841	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CC(N)=O)CC1	-11.0381
2346	CHEMBL4753590	COc1cc(SCc2ccc(CN(C)C)o2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2cccc2NS(C)(=O)=O)n1	-12.1307
2347	CHEMBL3218858	COc1cc(CN2CCOCC2)ccc1-c1nc2c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)c(Cl)cnc2[nH]1	-11.5933
2348	CHEMBL3398174	COc1cc([C@@H]2CCN(CCO)C[C@@H]2O)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3OC)n2n1	-10.2429
2349	CHEMBL3218853	NC(=O)[C@@H]1[C@H](Nc2c(Cl)cnc3[nH]c(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)nc23)[C@H]2C=C[C@@H]1C2	-10.4626
2350	CHEMBL3218859	COc1cc(CN2CCN(C)CC2)ccc1-c1nc2c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)c(Cl)cnc2[nH]1	-13.0303
2351	CHEMBL4464571	COc1cc(N2CCN(CC(=O)N3CCC(=O)CC3)C2=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.7377
2352	CHEMBL4573193	COc1cc(N2CCN(CC(N)=O)C2=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.7965
2353	CHEMBL4741967	COc1cc(SCc2ccc(CN3CCCC3)o2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(C)(=O)=O)n1	-12.1307
2354	CHEMBL4741967	COc1cc(SCc2ccc(CN3CCCC3)o2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(C)(=O)=O)n1	-11.9266
2355	CHEMBL3944913	C#Cc1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-6.1932
2356	CHEMBL3983174	COc1ccccc1C#Cc1ccnc2c1c1cc(-c3ccc(N4CCN(C)CC4)cc3)ccc1n2C	-8.568
2357	CHEMBL3934879	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(-c7ccc(F)cc7)nc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.5613
2358	CHEMBL3922458	COc1cc(C(=O)c2ccccc2)c(O)cc1-c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-8.6247
2359	CHEMBL3891424	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(Cc7ccccc7)c(C(F)(F)F)c6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.0529
2360	CHEMBL4743068	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCC(=O)NCCOCCOCCNc2cccc3c2C(=O)N(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)CC1	-7.9969

2361	CHEMBL4797636	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCC(=O)NCCCCCCCCCNCC(=O)Nc2cccc3c2C(=O)N(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)CC1	-6.9396
2362	CHEMBL4789495	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCC(=O)NCCCCCCCNCCC(=O)Nc2cccc3c2C(=O)N(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)CC1	-6.9493
2363	CHEMBL4754307	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCC(=O)NCCOCCOCCNC(=O)COc2cccc3c2C(=O)N(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)CC1	-8.1146
2364	CHEMBL2172315	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3cc(F)cc(F)c3)[nH]c3ccc(CN4CCC(C(C)(C)O)CC4)cc32)CC1	-12.7649
2365	CHEMBL4573293	Cc1nn(C)c2c1Cc1cnc(N)c(c1)O[C@H](C)c1cc(F)ccc1C(=O)N(C)C2	-11.6025
2366	CHEMBL3925372	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3N3CCCS3(=O)=O)n2)ccc2c1CCCC(N1CCN(CCO)CC1)C2	-11.6511
2367	CHEMBL3908493	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n2)ccc2c1CCC[C@@H](N1CCOCC1)C2	-12.5152
2368	CHEMBL3936443	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n2)ccc2c1CCC[C@H](N1CCN(C)CC1)C2	-9.5013
2369	CHEMBL3980825	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n2)ccc2c1CCC[C@@H](N1CCN(C)CC1)C2	-9.5013
2370	CHEMBL3963068	CC1(C)c2cc(OC3CCN(CCO)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-12.5585
2371	CHEMBL3931796	CC1(C)OCC(CNC(=O)COc2ccc3c(c2)C(C)(C)c2[nH]c4cc(C#N)ccc4c2C3=O)O1	-10.3416
2372	CHEMBL1779200	CC(C)N1CCN(c2ccc3c(c2)C(C)(C)c2[nH]c4cc(C#N)ccc4c2C3=O)CC1	-10.6006
2373	CHEMBL3942730	CC1(C)c2cc(C(O)CO)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.24
2374	CHEMBL3910490	CC1(C)c2cc(C(=O)NCCS(C)(=O)=O)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.3242
2375	CHEMBL4455547	Oc1ccc(-c2ccc3c(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)n[nH]c3n2)cc1	-11.15
2376	CHEMBL4573505	Cc1cc(-n2cc(C(=O)N3CCO[C@H](C)C3)c3ccc(O[C@H](C)c4ccc(F)cn4)nc32)[nH]n1	-11.8249
2377	CHEMBL4535072	Cc1cc(-n2cc(S(C)(=O)=O)c3ccc(N[C@@H](C)c4ccc(F)cn4)nc32)n[nH]1	-11.185
2378	CHEMBL4476859	Cc1cc(-n2cc(C(=O)N3CCOCC3)c3ccc(OC(C)c4ccc(F)cn4)nc32)[nH]n1	-10.1568
2379	CHEMBL5291435	COc1cc(N2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc3c(c2)B(O)OC3)n1	-10.4368
2380	CHEMBL4451829	[2H]C([2H])([2H])C([2H])([2H])Oc1cc(C2CCNCC2)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-10.541

2381	CHEMBL4063965	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCc1nn(C(=O)CO)c(C)c1-2	-9.7667
2382	CHEMBL4084421	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C1CNCCN1CC2	-11.2343
2383	CHEMBL4071384	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C1CNCC(=O)N1CC2	-11.8664
2384	CHEMBL3823198	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(OC)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-12.6578
2385	CHEMBL3823235	COc1cc(N2CCN(CCO)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-13.8212
2386	CHEMBL3824326	COc1cc(P(C)(C)=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2C(C)=O)n1	-12.9101
2387	CHEMBL3786831	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C(C)(C)/C(=N/O)CC2	-9.0385
2388	CHEMBL3785115	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C(C)(C)/C(=N/NC(N)=O)CC2	-11.0571
2389	CHEMBL3786431	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)C(C)(C)C(N)CC2	-10.7348
2390	CHEMBL4277936	COc1nc(N2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(C)(=O)=O)n1	-8.3483
2391	CHEMBL4284800	COc1nc(N2CCSCC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(C)(=O)=O)n1	-8.2204
2392	CHEMBL3934856	CCOC(=O)COc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-10.6809
2393	CHEMBL3892306	CC(C)(C)NCCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.5905
2394	CHEMBL3982627	CC1(C)c2cc(N3CCS(=O)(=O)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.5015
2395	CHEMBL3952637	CC(C)N(CCS(=O)(=O)c1ccc2c(c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O)C(C)C	-11.1001
2396	CHEMBL3967160	CC1(C)c2cc(C(=O)N3CCN(CCO)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.4571
2397	CHEMBL3976418	CC1(C)c2cc(OCC(=O)NCCN3CCNCC3)ccc2C(=O)c2c1oc1ccccc21	-7.7666
2398	CHEMBL3901426	CC1(C)c2cc(OCCNC3(CO)CCCC3)ccc2C(=O)c2c1oc1ccccc21	-8.5739
2399	CHEMBL3938417	CC1(C)c2cc(OCC3CC(O)CN3)ccc2C(=O)c2c1oc1ccccc21	-9.226
2400	CHEMBL3928314	CCN(CC)CCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1oc3cc(O)ccc3c1C2=O	-9.0909
2401	CHEMBL3961544	CC1(C)c2cc(OC[C@@H](O)[C@H](O)CO)ccc2C(=O)c2c1oc1cc(OC[C@@H](O)CO)ccc21	-8.9369
2402	CHEMBL3898031	CCN(CC)CCOc1ccc2c(c1)C(=O)c1c(oc3ccccc13)C2(C)C	-9.0518
2403	CHEMBL3941724	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-11.2343
2404	CHEMBL4443254	CCS(=O)(=O)c1cn(-c2cc(C)[nH]n2)c2nc(N[C@@H](C)c3ccc(F)cn3)ccc12	-11.3717
2405	CHEMBL4460367	Cc1cc(-n2cc(S(C)(=O)=O)c3ccc(N[C@@H](C)c4ccc(F)cc4F)nc32)n[nH]1	-10.7348

2406	CHEMBL4443254	CCS(=O)(=O)c1cn(-c2cc(C)[nH]n2)c2nc(N[C@@H](C)c3ccc(F)cn3)ccc12	-10.5407
2407	CHEMBL4458269	Cc1cc(-n2cc(C3=CCOCC3)c3ccc(N[C@@H](C)c4ccc(F)cn4)nc32)[nH]n1	-11.3847
2408	CHEMBL4573505	Cc1cc(-n2cc(C(=O)N3CCO[C@H](C)C3)c3ccc(O[C@H](C)c4ccc(F)cn4)nc32)[nH]n1	-10.4626
2409	CHEMBL2064664	COCCNC1CCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@H]4[C@@H](C(N)=O)[C@@H]5C=C[C@H]4C5)n3)c(OC)cc2CC1	-11.2879
2410	CHEMBL3669142	CCN1CCC(c2cc(Nc3ncc4sc(C(N)=O)c(-c5ccccc5OC(F)(F)F)c4n3)n(C(C)C)n2)CC1	-13.1919
2411	CHEMBL3669147	COc1ccccc1-c1c(C(N)=O)sc2cnc(Nc3ccc(NC4CCOCC4)cc3OC(C)C)nc12	-10.5749
2412	CHEMBL3669152	COc1cc(N2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc2sc(C(C)(C)O)c(-c3ccccc3OC)c2n1	-9.7667
2413	CHEMBL3669144	COc1ncccc1-c1c(C(N)=O)sc2cnc(Nc3cc(F)c(C4CCN(C)CC4)cc3OC(C)C)nc12	-12.7649
2414	CHEMBL3944715	CC1(C)c2cc(N3CCC(N4CCOCC4)CC3)c(Cl)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-13.3433
2415	CHEMBL3892424	C=Cc1cc2c(cc1N1CCOCC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.3221
2416	CHEMBL3982473	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6cccc(-c7ccccc7)c6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.4713
2417	CHEMBL4798441	COc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C3CCCCC3)c2cc1N1CCN(C)CC1	-12.4754
2418	CHEMBL4777376	COc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2c(F)c1N1CCC(N2CCOCC2)CC1	-11.911
2419	CHEMBL4789803	CCn1c2cc(N3CCN(C)CC3)c(OC)cc2c(=O)c2c3ccc(C#N)cc3[nH]c21	-10.9014
2420	CHEMBL4781855	CCCCOc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2cc1N1CCN(C)CC1	-11.7261
2421	CHEMBL4764610	COc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2c(F)c1N1C[C@@H](C)N(C)[C@@H](C)C1	-11.7037
2422	CHEMBL4764610	COc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2c(F)c1N1C[C@@H](C)N(C)[C@@H](C)C1	-11.7987
2423	CHEMBL3687219	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCN(C)CC3)cc2)nc1NC1CCOCC1	-11.2879
2424	CHEMBL509032	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-13.9335
2425	CHEMBL4852786	CN1CCN(C(=O)c2cc(NC(=O)[C@@H]3CCCN3c3nc(Nc4cc(F)cc(F)c4)ncc3Cl)ccc2N2CCOCC2)CC1	-10.8335
2426	CHEMBL4854103	CN1CCN(c2ccc(NC(=O)[C@@H]3CCCN3c3nc(Nc4cc(F)cc(F)c4)ncc3Cl)cc2C(=O)N2CCSCC2)CC1	-11.3913
2427	CHEMBL4856927	O=C(Nc1ccc(N2CCOCC2)c(C(=O)N2CCSCC2)c1)[C@@H]1CCCN1c1nc(Nc2cc(F)cc(F)c2)ncc1Cl	-10.3193
2428	CHEMBL3694581	Clc1cnc2nc1NCc1cccc(c1)OCCCc1cccc(c1)N2	-8.7244

2429	CHEMBL3694583	Clc1cnc2nc1NCc1cccc(c1)OCCOc1cccc(c1)N2	-8.0678
2430	CHEMBL3960479	CCCCCc1cc2c(cc1N1CCN(C3COC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.0948
2431	CHEMBL3945766	CC(C)N1CCN(c2ccc3c(c2)C(=O)c2c([nH]c4cc(C#N)ccc24)C3(C)C)CC1	-11.8208
2432	CHEMBL3943814	CCN(C)CCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)C1Oc3cc(F)ccc3C1C2=O	-8.6071
2433	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-10.482
2434	CHEMBL3982727	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Br)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-11.2879
2435	CHEMBL3972028	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCNCC3)cc2OC(F)F)n1	-11.3466
2436	CHEMBL3975774	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(N3CCN(C)CC3)cc2OC)n1	-12.0882
2437	CHEMBL3977731	CCNC(=O)N1CCN(c2ccc(Nc3nc(Nc4ccc(N5CCN(C(C)=O)CC5)cc4OC)ncc3F)c(OC(F)F)c2)CC1	-10.6301
2438	CHEMBL3926626	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(=O)OC(C)(C)C)CC3)cc2OC)n1	-9.816
2439	CHEMBL3931692	COc1cc(N2CCN(C(=O)CO)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-11.911
2440	CHEMBL3923931	CCCOc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1nc(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)ncc1Cl	-9.1324
2441	CHEMBL3901152	N#Cc1ccc2c3c([nH]c2c1)C1(CCOCC1)c1cc(OC2CCNCC2)ccc1C3=O	-11.9255
2442	CHEMBL3218852	Cn1cc(-c2nc3c(N[C@H]4[C@@H](C(N)=O)[C@@H]5C=C[C@H]4C5)c(Cl)cnc3[nH]2)cn1	-9.3165
2443	CHEMBL4573293	Cc1nn(C)c2c1Cc1cnc(N)c(c1)O[C@H](C)c1cc(F)ccc1C(=O)N(C)C2	-11.1393
2444	CHEMBL4461100	CN1CCN(C(=O)c2ccc(-c3cc4c(N5CCC[C@H](C(=O)NCc6ccc(OC(F)(F)F)cc6)C5)ncnc4[nH]3)cc2)CC1	-13.0796
2445	CHEMBL4522012	Cc1cc(NC2CCN(C)CC2)ccc1-c1cc2c(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4ccc(OC(F)(F)F)cc4)C3)ncnc2[nH]1	-12.1554
2446	CHEMBL3923931	CCCOc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1nc(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)ncc1Cl	-10.5243
2447	CHEMBL3687209	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCC(N(C)C)C3)c(C(F)(F)F)c2)nc1N[C@H]1CC[C@H](O)CC1	-13.4294
2448	CHEMBL436509	CN1CCN(c2ccc(NC(=O)c3cc(-c4ccc5c(c4)OCO5)cnc3O)cc2)CC1	-8.7296
2449	CHEMBL4472747	CC(C)N1CCN(c2ccc(-c3n[nH]c4nc(-c5cc(F)c(O)c(F)c5)ccc34)cc2)CC1	-8.7766
2450	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.8073
2451	CHEMBL3286830	C[C@H]1Oc2cc(cnc2N)-c2c(nn(C)c2C#N)CN(C)C(=O)c2ccc(F)cc21	-11.8809
2452	CHEMBL3736267	CC1(C)c2cc(C3CCN(CC4(O)CCOCC4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.0419

2453	CHEMBL1738797	CCc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.0887
2454	CHEMBL3949340	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccc(F)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.1224
2455	CHEMBL3961294	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccc(C(F)(F)F)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.294
2456	CHEMBL3902568	CN1CCC(N2CCN(c3ccc(-c4ccc5[nH]c6nccc(/C=C/c7ccccc7C(F)(F)F)c6c5c4)cc3)CC2)CC1	-7.8541
2457	CHEMBL3963627	CC/C=C(\c1ccccc1)c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-8.5099
2458	CHEMBL4745824	COc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2c(F)c1N1CCN[C@H](C)C1	-11.9266
2459	CHEMBL4795844	COc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2c(F)c1N1CCC(N(C)C)CC1	-11.6821
2460	CHEMBL4744052	COc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C3CCC3)c2cc1N1CCN(C)CC1	-11.1994
2461	CHEMBL4764610	COc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2c(F)c1N1C[C@@H](C)N(C)[C@@H](C)C1	-12.2792
2462	CHEMBL3687193	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCC(N4CCN(C)CC4)CC3)c(OC)c2)nc1N[C@H]1CC[C@H](O)CC1	-13.3773
2463	CHEMBL3975354	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2cccc(N3CCN(C)CC3)c2)nc1N[C@H]1CC[C@H](O)CC1	-12.4381
2464	CHEMBL3687215	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCC(N4CCN(C)CC4)CC3)c(C)c2)nc1NC1CCOCC1	-12.5152
2465	CHEMBL3953243	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(OCc7ccccc7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.5748
2466	CHEMBL3916988	COc1ccccc1/C=C/c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-9.2516
2467	CHEMBL4448107	C=CC(=O)Nc1cc(Nc2ncc(F)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC)cc1N(C)CCN(C)C	-11.0197
2468	CHEMBL3983644	CN1CCC(N2CCN(c3ccc(-c4ccc5[nH]c6nccc(Nc7ccccc7[N+](=O)[O-])c6c5c4)cc3)CC2)CC1	-8.5817
2469	CHEMBL3669141	COc1ccccc1-c1c(C(N)=O)sc2cnc(Nc3cc(C)c(N4CCC(N(C)C)C4)cc3OC(C)C)nc12	-12.338
2470	CHEMBL3218856	COc1cc(N2CCC(N3CCOCC3)CC2)ccc1-c1nc2c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)c(Cl)cnc2[nH]1	-11.911
2471	CHEMBL3218861	CN1CCN(c2ccc(-c3nc4c(N[C@H]5[C@@H](C(N)=O)[C@@H]6C=C[C@H]5C6)c(Br)cnc4[nH]3)cc2)CC1	-10.4927
2472	CHEMBL5176307	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C(=S)SCCN(C)C)CC1	-10.1055
2473	CHEMBL5179806	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C(=O)SCC(=S)N2CCS(=O)(=O)CC2)CC1	-11.8262

2474	CHEMBL5177576	COC(=O)c1c(C)[nH]c2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4NS(C)(=O)=O)n3)ccc12	-12.0484
2475	CHEMBL3735401	CCc1cc2c(cc1-c1cnn(CC(=O)N(C)C)c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.338
2476	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.068
2477	CHEMBL4586635	Oc1ccc(-c2ccc3c(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)n[nH]c3n2)cc1F	-10.4982
2478	CHEMBL4588073	CC(C)N1CCN(c2ccc(-c3n[nH]c4nc(-c5ccc(N)cc5)ccc34)cc2)CC1	-9.447
2479	CHEMBL4456479	Oc1ccc(-c2ccc3c(-c4ccc(CN5CCCCC5)o4)n[nH]c3n2)cc1	-9.0834
2480	CHEMBL4448493	Oc1ccc(-c2ccc3c(-c4ccc(N5CCOCC5)cc4)n[nH]c3n2)cc1	-9.0365
2481	CHEMBL4538313	Oc1ccc(-c2ccc3c(-c4ccccc4)n[nH]c3n2)cc1	-9.3615
2482	CHEMBL3951779	CC1(C)c2cc(N3CCN(C4CCC4)CC3)c(C3CC3)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.313
2483	CHEMBL3969707	CC1(C)c2cc(N3CCC(N4CCCCC4)CC3)ncc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-13.1996
2484	CHEMBL3962220	CC1(C)c2cc(CNCC(F)(F)F)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.2415
2485	CHEMBL3963805	COc1cc2c(cc1S(=O)(=O)N1CCN(C)CC1)C(=O)c1c([nH]c3cc(Br)ccc13)C2(C)C	-9.9526
2486	CHEMBL4213986	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCOCCOCCNC(=O)CNc2cccc3c2C(=O)N(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)CC1	-8.5281
2487	CHEMBL5405062	COc1cc(CCNCCCCCC#Cc2cccc3c2CN(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-8.8827
2488	CHEMBL3608522	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCCNC2	-12.4381
2489	CHEMBL3608644	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CCCN(C1CCOCC1)C2	-8.6474
2490	CHEMBL3608646	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CN(C1COC1)CCC2	-7.7209
2491	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-10.6908
2492	CHEMBL5169860	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C(=S)SCCN2CCCC2)CC1	-10.343
2493	CHEMBL5169760	Cc1nc(-c2ccccc2Nc2nc(Nc3ccc(CN4CCN(C)CC4)cc3)ncc2Cl)n[nH]1	-8.9369
2494	CHEMBL3928499	CC1(C)c2cc(C(=O)NOCCO)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.974
2495	CHEMBL3953243	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(OCc7ccccc7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.0243
2496	CHEMBL3938221	CC(C)[Si](/C=C/c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12)(C(C)C)C(C)C	-7.7935

2497	CHEMBL3944913	C#Cc1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-6.4358
2498	CHEMBL3983174	COc1ccccc1C#Cc1ccnc2c1c1cc(-c3ccc(N4CCN(C)CC4)cc3)ccc1n2C	-7.6876
2499	CHEMBL3910396	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(C#Cc6ccccc6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.7667
2500	CHEMBL3912968	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(N6CCC(Cc7ccccc7)CC6)c5c4c3)cc2)CC1	-10.6301
2501	CHEMBL3115494	COc1cccc(Nc2cc3nc4ccccc4n3cn2)c1	-6.0881
2502	CHEMBL3115496	Brc1ccc2nc3cc(Nc4ccccc4)ncn3c2c1	-6.1127
2503	CHEMBL3115493	O=[N+]([O-])c1cccc(Nc2cc3nc4ccccc4n3cn2)c1	-6.8844
2504	CHEMBL3669149	COc1ncccc1-c1c(C(N)=O)sc2cnc(Nc3cccc(N4CCN(C)CC4)c3OC(C)C)nc12	-10.8335
2505	CHEMBL5179104	COc1cc(C2CCC3(CC2)CCN(C)CC3)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-11.6119
2506	CHEMBL5176751	COc1cc(N2CCC3(CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(F)cc2P(C)(C)=O)n1	-11.9426
2507	CHEMBL5172119	COc1cc(N2CCC3(CNC3)C2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-11.3913
2508	CHEMBL5184310	COc1cc(N2CCC3(CCNC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-11.2241
2509	CHEMBL5172847	COc1cc(N2CCC3(CCN(C)CC3)CC2)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-11.9932
2510	CHEMBL5171152	COc1cc(N2CCC3(CCN(C)CC3)CC2)c(Cl)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-12.3695
2511	CHEMBL5172847	COc1cc(N2CCC3(CCN(C)CC3)CC2)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-12.0111
2512	CHEMBL5178030	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C(=O)SCC(=S)N2CCN(CCO)CC2)CC1	-11.4115
2513	CHEMBL3608526	CCN1CCCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)c(OC)cc2C1	-9.0899
2514	CHEMBL3608525	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CNCCO2	-12.5152
2515	CHEMBL1983268	CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3n[nH]c4ccc(Cc5cc(F)cc(F)c5)cc34)c(NC3CCOCC3)c2)CC1	-10.2965
2516	CHEMBL3672894	CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3n[nH]c4ccc(Cc5cc(F)cc(F)c5)cc34)cc2)CC1	-9.4801
2517	CHEMBL3922741	CC1(C)c2cc(OCCN3CCNC3=O)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.6451
2518	CHEMBL3898277	CC1(C)c2cc(OCCN)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.4833
2519	CHEMBL3924288	CC1(C)c2cc(OC3CCN(CCF)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-12.0001
2520	CHEMBL3981666	C[C@H]1CN(C2CCC2)CCN1c1ccc2c(c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.7767
2521	CHEMBL3918298	CC1(C)c2cc(S(=O)(=O)CCC(=O)O)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.1385

2522	CHEMBL3604648	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C)C1	-11.911
2523	CHEMBL3604645	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CNC1	-11.911
2524	CHEMBL3604642	CC(C)S(=O)(=O)c1nn(C)cc1Nc1nc(Nc2cc(F)c(C3CCN(C)CC3)cc2OC2CC2)ncc1Cl	-12.0882
2525	CHEMBL4476002	Cc1cc(Nc2cc(N3CCC[C@@H](C(=O)NCc4ccc(OC(F)(F)F)cc4)C3)ccn2)ccc1NC1CCN(C)CC1	-7.6172
2526	CHEMBL4113696	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CC4(CCNCC4)C3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-12.4029
2527	CHEMBL4455502	COc1cc(N2CCC(N3CCOCC3)CC2)ccc1Nc1cc(N2CCC[C@H](C(=O)NCc3ccc(OC(F)(F)F)cc3)C2)ccn1	-8.8693
2528	CHEMBL4574554	Cc1cc(Nc2cc(N3CCC[C@H](C(=O)NCc4ccc(OC(F)(F)F)cc4)C3)ccn2)ccc1NC1CCN(C)CC1	-8.0799
2529	CHEMBL4459365	Cc1nn(C)cc1Nc1cc(N2CCC[C@@H](C(=O)NCc3ccc(OC(F)(F)F)cc3)C2)ccn1	-7.9505
2530	CHEMBL3669137	CC(C)Oc1cc(C2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc2sc(C(N)=O)c(-c3ccccc3OC(F)(F)F)c2n1	-13.1919
2531	CHEMBL3669139	COc1ncccc1-c1c(C(N)=O)sc2cnc(Nc3cc(C)c(N4CCN(C)CC4)cc3OC(C)C)nc12	-12.0882
2532	CHEMBL3669146	COc1ccccc1-c1c(C(N)=O)sc2cnc(Nc3ccc(CN4CCN(C)CC4)cc3OC(C)C)nc12	-11.911
2533	CHEMBL3669139	COc1ncccc1-c1c(C(N)=O)sc2cnc(Nc3cc(C)c(N4CCN(C)CC4)cc3OC(C)C)nc12	-12.0882
2534	CHEMBL4113696	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CC4(CCNCC4)C3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-12.5577
2535	CHEMBL388978	CN[C@@H]1C[C@H]2O[C@@](C)([C@@H]1OC)n1c3ccccc3c3c4c(c5c6ccccc6n2c5c31)C(=O)NC4	-12.9504
2536	CHEMBL3672896	CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3n[nH]c4ccc(Cc5cc(F)cc(F)c5)cc34)c(NC3CCCCC3)c2)CC1	-8.1579
2537	CHEMBL388978	CN[C@@H]1C[C@H]2O[C@@](C)([C@@H]1OC)n1c3ccccc3c3c4c(c5c6ccccc6n2c5c31)C(=O)NC4	-13.0116
2538	CHEMBL1644358	c1ccc(Nc2ccnc3ccccc23)cc1	-5.6035
2539	CHEMBL5267265	Fc1ccc(Cl)c(Sc2n[nH]c3ncc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)cc23)c1Cl	-9.7434
2540	CHEMBL5267265	Fc1ccc(Cl)c(Sc2n[nH]c3ncc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)cc23)c1Cl	-8.7743
2541	CHEMBL3687192	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc3cnn(C)c3c2)nc1N[C@H]1CC[C@H](O)CC1	-10.0973
2542	CHEMBL3687199	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCOCC3)cc2)nc1N[C@H]1CC[C@H](O)CC1	-11.0197
2543	CHEMBL3301622	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCC(N4CCN(C)CC4)CC3)c(OC)c2)nc1NC1CCOCC1	-12.5152
2544	CHEMBL5291435	COc1cc(N2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc3c(c2)B(O)OC3)n1	-10.0877
2545	CHEMBL5266396	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cccc4c3B(O)OC4)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-11.6025

2546	CHEMBL5286542	COc1cc(N2CCC(N(C)C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2cc(B(O)O)ccc2OC)n1	-10.961
2547	CHEMBL3651885	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3[nH]nnc3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C)CC1	-10.3804
2548	CHEMBL5286011	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc3c(c2)B(O)OC3)n1	-10.948
2549	CHEMBL5271682	COc1cc(N2CCC(N(C)C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc3c(c2)B(O)OC3)n1	-11.2713
2550	CHEMBL5266396	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cccc4c3B(O)OC4)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-10.8955
2551	CHEMBL3923844	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(N7CCN(C)CC7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.5748
2552	CHEMBL3895881	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(C#Cc6ccccc6F)c5c4c3)cc2)CC1	-9.721
2553	CHEMBL3904080	CCN(CC)CCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(NC(=O)c4cccc(C(F)(F)F)c4)ccc3c1C2=O	-7.7935
2554	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-12.7062
2555	CHEMBL509032	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.911
2556	CHEMBL1164265	CN1CCN(c2ccc(-c3cnc4c(c3)N(Cc3c(F)ccc(F)c3Cl)CCN4)cn2)CC1	-11.2879
2557	CHEMBL3958173	CCc1cc2c(cc1N1CCN(CC3(O)CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.5152
2558	CHEMBL3286830	C[C@H]1Oc2cc(cnc2N)-c2c(nn(C)c2C#N)CN(C)C(=O)c2ccc(F)cc21	-12.6033
2559	CHEMBL3669146	COc1ccccc1-c1c(C(N)=O)sc2cnc(Nc3ccc(CN4CCN(C)CC4)cc3OC(C)C)nc12	-11.4115
2560	CHEMBL3669151	COc1ccc(F)cc1-c1c(CO)sc2cnc(Nc3ccc(N4CCN(C)CC4)cc3OC(C)C)nc12	-10.6908
2561	CHEMBL3128060	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnnn2C)cnc1N)c1cc(F)ccc1-n1nccn1	-7.9096
2562	CHEMBL3972653	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(c2OC)CCC[C@@H](N2CCN(CCO)CC2)C3)ncc1Cl	-10.3552
2563	CHEMBL1808096	CC(=O)/C=C/c1c(Oc2ccc(C#N)cc2)nc[nH]c1=O	-7.3193
2564	CHEMBL1808102	CCOC(=O)c1ccccc1Oc1nc[nH]c(=O)c1/C=C/C(C)=O	-7.2655
2565	CHEMBL1778714	Cc1ccc(NC2=NC(=O)/C(=C3\C(=O)Nc4ccccc43)S2)cc1	-7.6958
2566	CHEMBL4778853	COc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2c(F)c1N1CCN(C)C(C)(C)C1	-12.5152
2567	CHEMBL4781439	COc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2c(F)c1N1CCN(C)CC1	-11.4184
2568	CHEMBL3977837	CC1(C)c2cc(OCC(N)=O)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.0143
2569	CHEMBL4739968	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCC(=O)NCCCCNCCC(=O)Nc2cccc3c2C(=O)N(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)CC1	-8.2602

2570	CHEMBL3687201	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCN(C)CC3)c(C)c2)nc1N[C@H]1CC[C@H](O)CC1	-13.644
2571	CHEMBL3669136	COc1ccccc1-c1c(C(N)=O)sc2cnc(Nc3ccc(C4CCN(C)CC4)cc3OC(C)C)nc12	-11.5663
2572	CHEMBL3669141	COc1ccccc1-c1c(C(N)=O)sc2cnc(Nc3cc(C)c(N4CCC(N(C)C)C4)cc3OC(C)C)nc12	-12.338
2573	CHEMBL5283671	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccc4c(c3)B(O)OC4)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-10.9352
2574	CHEMBL4467561	C=CC(=O)Nc1cc(Nc2ncc(I)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)N(C)C)n2)c(OC)cc1N(C)CCN(C)C	-10.5243
2575	CHEMBL3946847	COc1cc(Cc2ccccc2)c(O)cc1-c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-7.6115
2576	CHEMBL3891424	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(Cc7ccccc7)c(C(F)(F)F)c6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.0243
2577	CHEMBL3967225	C/C(=C\c1ccccc1C(F)(F)F)c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-7.3665
2578	CHEMBL3951811	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(c2OC)CCC[C@H](N2CCN(CCO)CC2)C3)ncc1Cl	-10.8609
2579	CHEMBL3937542	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccccc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.9369
2580	CHEMBL3920297	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(COc7cccc(C(F)(F)F)c7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.1831
2581	CHEMBL3672894	CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3n[nH]c4ccc(Cc5cc(F)cc(F)c5)cc34)cc2)CC1	-10.1221
2582	CHEMBL4549667	CN1C(=O)[C@@H](N2CCc3c(nn(Cc4ccccc4)c3Br)C2=O)COc2ccccc21	-8.5099
2583	CHEMBL388978	CN[C@@H]1C[C@H]2O[C@@](C)([C@@H]1OC)n1c3ccccc3c3c4c(c5c6ccccc6n2c5c31)C(=O)NC4	-12.4381
2584	CHEMBL202830	CN1CCN(Cc2ccc(NC(=O)c3cc(-c4ccc5nccnc5c4)cnc3O)cc2)CC1	-7.4599
2585	CHEMBL4586773	Cc1cc(-n2cc(C(=O)N3CCN(C)CC3)c3ccc(N[C@@H](C)c4ccc(F)cn4)nc32)[nH]n1	-11.6511
2586	CHEMBL3948508	CCN(CC)C(=O)COc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1oc3ccccc3c1C2=O	-7.2451
2587	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-12.1763
2588	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-11.2343
2589	CHEMBL4454858	CCn1ccc(-c2cnc(N)c(O[C@H](C)c3c(Cl)ccc(F)c3Cl)c2)cc1=O	-9.7389
2590	CHEMBL4586704	C[C@@H](Oc1cc(-c2ccn(C)c(=O)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.434
2591	CHEMBL398610	CCOc1cccc2c1c(/C=C1\C(=O)NN=C1c1snnc1C)cn2C	-10.3933
2592	CHEMBL3735401	CCc1cc2c(cc1-c1cnn(CC(=O)N(C)C)c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.009

2593	CHEMBL3923002	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(Cc7ccccc7)cc6C(F)(F)F)c5c4c3)cc2)CC1	-7.7935
2594	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-11.1393
2595	CHEMBL3687197	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCN(C)CC3)c(C(F)(F)F)c2)nc1N[C@H]1CC[C@H](O)CC1	-12.9259
2596	CHEMBL4284800	COc1nc(N2CCSCC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(C)(=O)=O)n1	-7.2368
2597	CHEMBL388978	CN[C@@H]1C[C@H]2O[C@@](C)([C@@H]1OC)n1c3ccccc3c3c4c(c5c6ccccc6n2c5c31)C(=O)NC4	-12.1091
2598	CHEMBL5286011	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc3c(c2)B(O)OC3)n1	-10.7168
2599	CHEMBL5271682	COc1cc(N2CCC(N(C)C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc3c(c2)B(O)OC3)n1	-11.454
2600	CHEMBL3927036	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(C(=O)c7ccccc7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.6785
2601	CHEMBL3986372	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccccc6)c5c4c3)cn2)CC1	-9.1566
2602	CHEMBL3977662	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccccc6Cl)c5c4c3)cc2)CC1	-9.2118
2603	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-11.3165
2604	CHEMBL2418761	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5cc(F)ccc5F)c4)c3c2)cn1	-10.6908
2605	CHEMBL5179806	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C(=O)SCC(=S)N2CCS(=O)(=O)CC2)CC1	-12.3168
2606	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-11.9932
2607	CHEMBL3979310	COc1cc(-c2ccnc3[nH]c4ccc(-c5ccc(N6CCN(C)CC6)cc5)cc4c23)c(OC)cc1Cc1ccccc1	-9.2314
2608	CHEMBL4462528	COc1cc(NC(=O)C2CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NC(C)=O)n1	-11.6025
2609	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-9.5106
2610	CHEMBL3952772	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(Cl)c5c4c3)cc2)CC1	-8.0529
2611	CHEMBL3967225	C/C(=C\c1ccccc1C(F)(F)F)c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-7.2607
2612	CHEMBL3956055	COc1ccccc1C#Cc1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-8.6871
2613	CHEMBL3937361	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(C#Cc6ccccc6Cl)c5c4c3)cc2)CC1	-8.3976
2614	CHEMBL3978376	Cc1ccc(Cn2cc(-c3ccnc4[nH]c5ccc(-c6ccc(N7CCN(C)CC7)cc6)cc5c34)nn2)cc1	-7.3292
2615	CHEMBL3958614	CCc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(NC(C)=O)ccc3c1C2=O	-7.9711
2616	CHEMBL4113691	CC1(C)c2cc(OC[C@H](O)CO)c(Br)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(OC(F)(F)F)ccc21	-9.2724
2617	CHEMBL3966467	CCN(CC)CCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(NC(=O)Cc4ccccc4)ccc3c1C2=O	-6.6256

2618	CHEMBL3978144	CCN(CC)CCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(NC(=O)Oc4ccccc4)ccc3c1C2=O	-8.3742
2619	CHEMBL3920323	C/C(=C\c1ccccc1)c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-9.6388
2620	CHEMBL3963627	CC/C=C(\c1ccccc1)c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-7.9969
2621	CHEMBL3958885	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(Oc7ccccc7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.6173
2622	CHEMBL3983825	COc1cc(-c2ccnc3[nH]c4ccc(-c5ccc(N6CCN(C)CC6)cc5)cc4c23)cc(OC)c1Cc1ccccc1	-7.2368
2623	CHEMBL3937361	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(C#Cc6ccccc6Cl)c5c4c3)cc2)CC1	-9.2724
2624	CHEMBL3950479	COc1ccc(/C(C)=N/Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)cc1	-10.0657
2625	CHEMBL5286542	COc1cc(N2CCC(N(C)C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2cc(B(O)O)ccc2OC)n1	-11.027
2626	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-11.0115
2627	CHEMBL5209011	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C(=O)SCC(=S)N(C)C)CC1	-11.2879
2628	CHEMBL3669142	CCN1CCC(c2cc(Nc3ncc4sc(C(N)=O)c(-c5ccccc5OC(F)(F)F)c4n3)n(C(C)C)n2)CC1	-11.911
2629	CHEMBL3669143	COc1ccccc1-c1c(C(N)=O)sc2cnc(Nc3ccc(-c4cnn(C)c4)cc3OC(C)C)nc12	-10.3078
2630	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.0484
2631	CHEMBL5198349	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-7.5973
2632	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.5576
2633	CHEMBL5169496	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(Nc6cccc([N+](=O)[O-])c6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.1146
2634	CHEMBL3687210	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)C)CC3)c(C)c2)nc1N[C@H]1CC[C@H](O)CC1	-13.2043
2635	CHEMBL3920323	C/C(=C\c1ccccc1)c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-9.3165
2636	CHEMBL3890564	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(c2OC)CCCC(N2CCN(CCO)CC2)C3)ncc1Cl	-10.4927
2637	CHEMBL3907560	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(-c7ccccc7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.7659
2638	CHEMBL3964686	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(-c7cccc8ccccc78)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-10.3311
2639	CHEMBL3963627	CC/C=C(\c1ccccc1)c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-8.2602
2640	CHEMBL3937361	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(C#Cc6ccccc6Cl)c5c4c3)cc2)CC1	-8.5481
2641	CHEMBL4448400	COc1cc(NC(=O)N2CCCC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NC(C)=O)n1	-11.5576

2642	CHEMBL3669140	Cc1occc1-c1c(C(N)=O)sc2cnc(Nc3ccc(C4CCN(C)CC4)cc3OC(C)C)nc12	-11.185
2643	CHEMBL3669150	COc1ccccc1-c1c(C(N)=O)sc2cnc(Nc3cc4c(cc3OC(C)C)N(C)C(=O)CCC4)nc12	-9.2314
2644	CHEMBL509032	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.959
2645	CHEMBL3736267	CC1(C)c2cc(C3CCN(CC4(O)CCOCC4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.0419
2646	CHEMBL3128069	Cc1nc([C@](C)(O)CO)sc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)c1	-13.0796
2647	CHEMBL4436406	C[C@H]1Oc2cc(cnc2N)Cc2c(nn(C)c2C#N)CN(C)C(=O)c2ccc(F)cc21	-12.7588
2648	CHEMBL2042829	CCN1C(=O)CCCc2c1ccc(Nc1ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n1)c2OC	-11.1393
2649	CHEMBL4436406	C[C@H]1Oc2cc(cnc2N)Cc2c(nn(C)c2C#N)CN(C)C(=O)c2ccc(F)cc21	-10.8896
2650	CHEMBL4436406	C[C@H]1Oc2cc(cnc2N)Cc2c(nn(C)c2C#N)CN(C)C(=O)c2ccc(F)cc21	-12.9846
2651	CHEMBL4764610	COc1cc2c(=O)c3c4ccc(C#N)cc4[nH]c3n(C(C)C)c2c(F)c1N1C[C@@H](C)N(C)[C@@H](C)C1	-11.6312
2652	CHEMBL4177203	COc1ccc(NC(=O)CNC(=O)c2noc(-c3cc(C(C)C)c(O)cc3O)c2-c2ccc(CN3CCOCC3)cc2)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-9.8809
2653	CHEMBL4175858	COc1ccc(NC(=O)CNC(=O)CN2CCN(Cc3ccc4c(c3)CN(C(=O)c3cc(C(C)C)c(O)cc3O)C4)CC2)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.8958
2654	CHEMBL5289573	C[C@H]1Nc2ccc3ncc(n3n2)C(=O)NC2(CC2)COc2cc(F)ccc21	-9.1174
2655	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.6301
2656	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-9.3373
2657	CHEMBL2064666	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n2)ccc2c1CC[C@@H](N1CCOCC1)CC2	-12.3695
2658	CHEMBL3937418	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(N6CCN(Cc7ccccc7)CC6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.7385
2659	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-6.3713
2660	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-11.1393
2661	CHEMBL4298138	C[C@H]1CNC(=O)c2cnn3ccc(nc23)N[C@H](C)c2cc(F)ccc2O1	-12.7175
2662	CHEMBL3931695	CC1(C)c2cc(Oc3ncccn3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.6611

2663	CHEMBL3936470	CC1(C)c2cc(N3CCC(S(C)(=O)=O)C3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.0483
2664	CHEMBL3983398	CCN(CC)CCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C(F)(F)F)ccc3c1C2=O	-8.4609
2665	CHEMBL4108286	COc1ccc2c3c(n(C)c2c1)C(C)(C)c1cc(OC[C@H](O)CO)ccc1C3=O	-8.2122
2666	CHEMBL4115062	CC1(C)c2cc(OC[C@H](O)CO)c(Br)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cccc(Cl)c21	-9.9041
2667	CHEMBL4110008	CC1(C)c2cc(OC[C@@H](O)[C@H](O)CO)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C(=O)Nc3ccccc3)ccc21	-6.9323
2668	CHEMBL4106507	CC(C)Oc1ccc2c3c(oc2c1)C(C)(C)c1cc(OC[C@@H](O)[C@H](O)CO)ccc1C3=O	-8.7296
2669	CHEMBL4114948	CC(C)(C)c1ccccc1NC(=O)Oc1ccc2c3c(oc2c1)C(C)(C)c1cc(OC[C@H](O)CO)ccc1C3=O	-8.8895
2670	CHEMBL3967916	CCC(O)(CC)CCNC(=O)COc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(Br)ccc3c1C2=O	-9.6307
2671	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-9.4426
2672	CHEMBL3669148	COc1ncc(F)cc1-c1c(C(N)=O)sc2cnc(Nc3cc(C4CCOCC4)nn3C(C)C)nc12	-11.185
2673	CHEMBL3952772	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(Cl)c5c4c3)cc2)CC1	-8.5099
2674	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.6699
2675	CHEMBL3946496	C#Cc1cc2c(cc1N1CCN(C3CCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-13.4668
2676	CHEMBL5268149	COc1cc(N2CCC(N(C)C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2cccc(B(O)O)c2)n1	-10.5982
2677	CHEMBL2403842	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C(=O)CN(C)C)CC1	-10.758
2678	CHEMBL3651846	COc1cc(C2CCN(C[C@H](O)C(F)(F)F)CC2)c(C)cc1Nc1nc(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)c2c[nH]nc2n1	-10.3804
2679	CHEMBL3651872	CCN1CCC(c2ccc(Nc3nc(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)c4c(C)[nH]nc4n3)cc2)C1	-11.3466
2680	CHEMBL3735648	CC1(C)c2cc(C3CCN(CC4CCOCC4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.4764
2681	CHEMBL4476742	CNC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccccc3)[nH]c3ccc(CN4CCCCC4)cc32)CC1	-12.338
2682	CHEMBL3929912	C[S+]([O-])CCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.3314
2683	CHEMBL1823221	CCc1cc2c(cc1N1CCN(C3COC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.1091
2684	CHEMBL3939763	CC1(C)c2cc(OCCCCCC(=O)O)ccc2C(=O)c2c1oc1ccccc21	-7.413
2685	CHEMBL3934533	CC1(C)c2cc(OCC(=O)NCCOCCO)ccc2C(=O)c2c1oc1ccccc21	-7.3074
2686	CHEMBL4108699	Cn1c2c(c3ccc(C(=O)Nc4ccccc4)cc31)C(=O)c1ccc(OC[C@@H](O)[C@H](O)CO)cc1C2(C)C	-6.9323
2687	CHEMBL3809888	Cc1cc(-c2cc(NC(=O)c3ccc(CN4CCN(C)CC4)cc3)[nH]n2)ccc1NC(=O)Nc1cccc(F)c1	-7.3858

2688	CHEMBL3918616	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)N(C)C)n2)ccc2c1CCCC(N1CCN(CCO)CC1)C2	-10.4927
2689	CHEMBL2064666	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n2)ccc2c1CC[C@@H](N1CCOCC1)CC2	-10.9196
2690	CHEMBL3128069	Cc1nc([C@](C)(O)CO)sc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)c1	-10.8896
2691	CHEMBL3669151	COc1ccc(F)cc1-c1c(CO)sc2cnc(Nc3ccc(N4CCN(C)CC4)cc3OC(C)C)nc12	-10.7348
2692	CHEMBL3128069	Cc1nc([C@](C)(O)CO)sc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)c1	-12.6033
2693	CHEMBL3941724	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-10.1055
2694	CHEMBL4761644	CC(C)n1c2cc(N3CCN(C)CC3)c(Br)cc2c(=O)c2c3ccc(C#N)cc3[nH]c21	-12.6033
2695	CHEMBL4453984	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1cc(N2CCC[C@@H](C(=O)NCc3ccc(OC(F)(F)F)cc3)C2)ccn1	-8.0384
2696	CHEMBL3983559	CC(C)(C)OC(=O)N1CCC(Oc2ccc3c(c2)C(C)(C)c2[nH]c4cc(C#N)ccc4c2C3=O)CC1	-10.3227
2697	CHEMBL3904008	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6cccc(F)c6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.2118
2698	CHEMBL3984671	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(C#Cc6ccccc6C(F)(F)F)c5c4c3)cc2)CC1	-8.4512
2699	CHEMBL3983644	CN1CCC(N2CCN(c3ccc(-c4ccc5[nH]c6nccc(Nc7ccccc7[N+](=O)[O-])c6c5c4)cc3)CC2)CC1	-7.1917
2700	CHEMBL4109403	CC1(C)c2cc(OC[C@@H](O)[C@H](O)CO)ccc2C(=O)c2c1oc1cc(OCCCCO)ccc21	-9.65
2701	CHEMBL3967044	CCCn1c2c(c3ccccc31)C(=O)c1ccc(OCCN(CC)CC)cc1C2(C)C	-8.3364
2702	CHEMBL3918268	CCN(CC)CCOc1ccc2c(c1)C(C)(C)c1c(c3ccc(C)cc3n1C)C2=O	-7.4117
2703	CHEMBL3736273	CCc1cc2c(cc1-c1cnn(C3CCNCC3)c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.0766
2704	CHEMBL3907560	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(-c7ccccc7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.9247
2705	CHEMBL3912968	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(N6CCC(Cc7ccccc7)CC6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.5013
2706	CHEMBL4753590	COc1cc(SCc2ccc(CN(C)C)o2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2cccc2NS(C)(=O)=O)n1	-12.1763
2707	CHEMBL4787021	COc1cc(NCC2CCCO2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(C)(=O)=O)n1	-11.8384
2708	CHEMBL4783455	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCC(=O)NCCCCCCNC(=O)COc2ccc3c2C(=O)N(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)CC1	-8.0529

2709	CHEMBL4748837	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCC(=O)NCCOCCNC(=O)COc2cccc3c2C(=O)N(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)CC1	-7.7209
2710	CHEMBL5401769	COc1ccc2nc(-c3cc4ccc(N5CCOCC5)cc4oc3=O)sc2c1	-8.8349
2711	CHEMBL3922510	COCCOc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1c(c3ccc(C#N)cc3n1CCOC)C2=O	-11.4467
2712	CHEMBL3943601	C[C@@H]1CN(C2CCN(c3cc4c(cn3)C(=O)c3c([nH]c5cc(C(N)=O)ccc35)C4(C)C)CC2)C[C@H](C)O1	-9.848
2713	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.3311
2714	CHEMBL4437893	C[C@@H](Oc1cc(-c2cc[nH]c(=O)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.4481
2715	CHEMBL4459183	COc1cc(N2CCNCC2)ccc1Nc1cc(N2CCC[C@@H](C(=O)NCc3ccc(OC(F)(F)F)cc3)C2)ccn1	-8.8671
2716	CHEMBL4549308	CCOc1cc(C2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc2c(n1)N(Cc1scnc1C)[C@H](CC)C(=O)N2C	-9.1224
2717	CHEMBL3912544	COc1cc2c(cc1C#CC(=O)O)C(=O)c1c([nH]c3cc(C#N)ccc13)C2(C)C	-11.5962
2718	CHEMBL3981472	CC1(C)c2cc(N3CCN(C4COC4)CC3)c(Br)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-12.7952
2719	CHEMBL4113696	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CC4(CCNCC4)C3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-12.6526
2720	CHEMBL513897	CCCN1CCC=C(c2ccc(Nc3nc(Nc4ccccc4C(N)=O)c4cc[nH]c4n3)c(C)c2)C1	-12.7649
2721	CHEMBL3128069	Cc1nc([C@](C)(O)CO)sc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)c1	-12.9024
2722	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-8.4941
2723	CHEMBL3923002	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(Cc7ccccc7)cc6C(F)(F)F)c5c4c3)cc2)CC1	-7.2368
2724	CHEMBL3953243	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(OCc7ccccc7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.5748
2725	CHEMBL3975258	Cc1cc(OCc2ccc(-c3ccnc4[nH]c5ccc(-c6ccc(N7CCN(C)CC7)cc6)cc5c34)cc2)ccc1Cl	-10.3311
2726	CHEMBL3961294	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccc(C(F)(F)F)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.816
2727	CHEMBL3975454	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C(=C/c6ccccc6)c6ccccc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.2204
2728	CHEMBL3938221	CC(C)[Si](/C=C/c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12)(C(C)C)C(C)C	-7.3026
2729	CHEMBL3984671	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(C#Cc6ccccc6C(F)(F)F)c5c4c3)cc2)CC1	-9.3165
2730	CHEMBL3937418	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(N6CCN(Cc7ccccc7)CC6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.7385
2731	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-8.7985

2732	CHEMBL3953811	CC(=O)N1CCN(c2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccc(N5CCN(C(C)=O)CC5)cc4)n3)cc2)CC1	-9.2516
2733	CHEMBL3927081	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(S(N)(=O)=O)CC3)cc2OC)n1	-10.4481
2734	CHEMBL3977453	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(F)c(Nc2ccc(N3CCN(C)CC3)cc2OC)n1	-9.328
2735	CHEMBL3669145	COc1ncccc1-c1c(C(N)=O)sc2cnc(Nc3cc(C)c(-n4ccnc4C)cc3OC(C)C)nc12	-10.1936
2736	CHEMBL203354	COc1ccc(-c2cnc(O)c(C(=O)Nc3ccc(CN4CCN(C)CC4)cc3)c2)cn1	-7.8332
2737	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-11.5156
2738	CHEMBL3920298	CC1(C)c2[nH]c3cc(C#N)ccc3c2C(=O)c2cccc(OC[C@@H](O)CO)c21	-9.7459
2739	CHEMBL4460367	Cc1cc(-n2cc(S(C)(=O)=O)c3ccc(N[C@@H](C)c4ccc(F)cc4F)nc32)n[nH]1	-12.6526
2740	CHEMBL3651857	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3c(C)[nH]nc3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCO)CC1	-11.2879
2741	CHEMBL3651863	COc1cc(C2CCNCC2)c(C)cc1Nc1nc(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)c2c(C)[nH]nc2n1	-11.2343
2742	CHEMBL3651879	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3c(C)c[nH]c3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-9.6583
2743	CHEMBL3975852	CCN(CC)CCOc1ccc2c(n1)C(C)(C)c1oc3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-9.0745
2744	CHEMBL2403848	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CCC2)cc1C1CCNCC1	-11.009
2745	CHEMBL3735648	CC1(C)c2cc(C3CCN(CC4CCOCC4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.5226
2746	CHEMBL4543331	CCOc1cc(C2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc2c(n1)N(Cc1sccc1C)[C@H](CC)C(=O)N2C	-8.4977
2747	CHEMBL4454885	CCOc1cc(C2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc2c(n1)N(Cc1cccc(OC)c1)[C@H](CC)C(=O)N2C	-9.1566
2748	CHEMBL4557730	CCOc1cc(C2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc2c(n1)N(Cc1ccccc1Br)[C@H](CC)C(=O)N2C	-9.6785
2749	CHEMBL3957490	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC(F)F)n1	-11.3466
2750	CHEMBL3957490	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC(F)F)n1	-10.4775
2751	CHEMBL3950987	COc1cc(N2CCN(CCO)CC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-11.7735
2752	CHEMBL3916647	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2Cl)n1	-10.434
2753	CHEMBL3911373	CC(=O)N1CCN(c2ccc(Nc3ncc(C(F)(F)F)c(Nc4ccc(N5CCN(C(C)=O)CC5)cc4OC(F)F)n3)c(OC(F)F)c2)CC1	-11.0571
2754	CHEMBL3946370	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(F)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-9.2414
2755	CHEMBL5177248	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(C(=O)N4CCC(C)CC4)c(C)[nH]c3c2)ncc1Cl	-11.5933

2756	CHEMBL5197072	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(C(=O)N4CCC(O)CC4)c(C)[nH]c3c2)ncc1Cl	-11.7377
2757	CHEMBL4758056	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C(=O)CCCC(=O)N[C@H](C(=O)N2C[C@H](O)C[C@H]2C(=O)NCc2ccc(-c3scnc3C)cc2)C(C)(C)C)CC1	-11.5663
2758	CHEMBL2042829	CCN1C(=O)CCCc2c1ccc(Nc1ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n1)c2OC	-10.4201
2759	CHEMBL3913619	COc1ccc(Cc2ccc(-c3ccnc4[nH]c5ccc(-c6ccc(N7CCN(C)CC7)cc6)cc5c34)cc2)c(OC)c1	-8.9127
2760	CHEMBL3910396	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(C#Cc6ccccc6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.6014
2761	CHEMBL3967080	CC(C)[Si](C#Cc1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12)(C(C)C)C(C)C	-7.3861
2762	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-8.8246
2763	CHEMBL4073635	Brc1ccc2c(Nc3ccccc3)ccnc2c1	-5.9973
2764	CHEMBL4083663	Fc1ccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1F	-9.6868
2765	CHEMBL3964766	CC(=O)N1CC(N2CCC(COc3ccc4c(c3)C(C)(C)c3[nH]c5cc(Br)ccc5c3C4=O)CC2)C1	-9.5354
2766	CHEMBL5436489	COc1cc(CCNCCCCCC#Cc2cccc3c2C(=O)N(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-8.5964
2767	CHEMBL3946847	COc1cc(Cc2ccccc2)c(O)cc1-c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-8.3483
2768	CHEMBL3933100	COc1ccc(/C=C/c2ccnc3[nH]c4ccc(-c5ccc(N6CCN(C)CC6)cc5)cc4c23)cc1	-8.3976
2769	CHEMBL3949340	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccc(F)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.1224
2770	CHEMBL1778710	O=C1Nc2ccccc2/C1=C/c1c[nH]nc1-c1ccccc1	-8.1723
2771	CHEMBL3955465	CC1(C)c2cc(OCCn3ccnc3)ccc2C(=O)c2c1oc1ccccc21	-8.1441
2772	CHEMBL3397300	COc1cc(N2CCC(N(C)C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-14.4029
2773	CHEMBL3942803	CCC(=O)N1CCN(c2ccc(Nc3nc(Nc4ccc(N5CCN(C(C)=O)CC5)cc4OC)ncc3Cl)c(OC)c2)CC1	-9.3468
2774	CHEMBL3956794	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(F)c(Nc2ccc(N3CCN(S(C)(=O)=O)CC3)cc2OC)n1	-9.402
2775	CHEMBL3926221	CCNC(=O)N1CCN(c2ccc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccc(N5CCN(C(=O)NCC)CC5)cc4OC)n3)c(OC)c2)CC1	-10.9845
2776	CHEMBL3959161	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2F)n1	-11.2879
2777	CHEMBL1642258	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccc(N4CCOCC4)cc3OC)n1)CCN(CC(=O)N(C)C)CC2	-10.6699
2778	CHEMBL5269433	C[C@H]1Nc2ccc3ncc(n3n2)C(=O)NC2(CCC2)COc2ccc(F)cc21	-11.8117
2779	CHEMBL4298138	C[C@H]1CNC(=O)c2cnn3ccc(nc23)N[C@H](C)c2cc(F)ccc2O1	-12.6226
2780	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-8.6151

2781	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.1763
2782	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-9.8585
2783	CHEMBL388978	CN[C@@H]1C[C@H]2O[C@@](C)([C@@H]1OC)n1c3ccccc3c3c4c(c5c6ccccc6n2c5c31)C(=O)NC4	-12.0923
2784	CHEMBL4524160	CN(CCO)Cc1ccc(-c2n[nH]c3nc(-c4ccc(O)cc4)ccc23)o1	-10.0419
2785	CHEMBL5287224	CCC[C@H]1Nc2ccc3ncc(n3n2)C(=O)NC2(CC2)COc2ccc(F)cc21	-9.0517
2786	CHEMBL5279068	C[C@@H]1Nc2ccc3ncc(n3n2)C(=O)NC2(CC2)COc2ccc(F)cc21	-8.5099
2787	CHEMBL3984671	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(C#Cc6ccccc6C(F)(F)F)c5c4c3)cc2)CC1	-8.4512
2788	CHEMBL3907560	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(-c7ccccc7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.7475
2789	CHEMBL3933100	COc1ccc(/C=C/c2ccnc3[nH]c4ccc(-c5ccc(N6CCN(C)CC6)cc5)cc4c23)cc1	-9.6014
2790	CHEMBL3956515	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccccc6F)c5c4c3)cc2)CC1	-9.6785
2791	CHEMBL3972466	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(Nc6ccccc6[N+](=O)[O-])c5c4c3)cc2)CC1	-9.5662
2792	CHEMBL4435574	Cc1cc(-n2cc(S(=O)(=O)C(C)C)c3ccc(N[C@@H](C)c4ccc(F)cn4)nc32)n[nH]1	-10.9845
2793	CHEMBL4087615	COc1ccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-10.5178
2794	CHEMBL4091441	Cc1ccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-10.479
2795	CHEMBL4091441	Cc1ccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-12.0295
2796	CHEMBL4095317	N#Cc1ccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)cc1	-9.9697
2797	CHEMBL3927036	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(C(=O)c7ccccc7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.8144
2798	CHEMBL4159161	COc1cc(-c2nc(CN3CCC(C)CC3)cs2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.0882
2799	CHEMBL4163707	CC(C)Oc1cc(-c2nc(CN3CCN(C)CC3)cs2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.0111
2800	CHEMBL4168868	COc1ccc(NC(=O)CNC(=O)c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.4029
2801	CHEMBL4174031	COc1ccc(NC(=O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.4996
2802	CHEMBL5289573	C[C@H]1Nc2ccc3ncc(n3n2)C(=O)NC2(CC2)COc2cc(F)ccc21	-8.5143
2803	CHEMBL5274542	C[C@H]1CNC(=O)c2cnc3ccc(nn23)N[C@H](C)c2cc(F)ccc2O1	-11.7613
2804	CHEMBL5291345	C[C@H]1Nc2ccc3ncc(n3n2)C(=O)NC2(CC2)COc2ccccc21	-10.7348

2805	CHEMBL5274362	Cc1cc2ncc3n2nc1N[C@H](C)c1cc(F)ccc1OCC1(CC1)NC3=O	-10.9845
2806	CHEMBL5269530	C[C@H]1Nc2ccc3ncc(n3n2)C(=O)NCCOc2ccc(F)cc21	-10.7124
2807	CHEMBL5284909	CC1(C)COc2ccc(F)cc2CN(C2CC2)c2ccc3ncc(n3n2)C(=O)N1	-10.0505
2808	CHEMBL5270423	O=C(Nc1cccc(-n2cc(CNc3ccc(N4CCC(O)CC4)c(C(=O)N4CCCCC4)c3)nn2)c1)c1cc(F)cc(F)c1	-11.4395
2809	CHEMBL1738797	CCc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.3695
2810	CHEMBL5179806	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C(=O)SCC(=S)N2CCS(=O)(=O)CC2)CC1	-11.6664
2811	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.1091
2812	CHEMBL3939548	CN1CCC(N2CCN(c3ccc(-c4ccc5[nH]c6nccc(-c7ccc(Cc8ccccc8)cc7)c6c5c4)cc3)CC2)CC1	-8.7209
2813	CHEMBL2064664	COCCNC1CCc2cc(Nc3ncc(Cl)c(N[C@H]4[C@@H](C(N)=O)[C@@H]5C=C[C@H]4C5)n3)c(OC)cc2CC1	-11.911
2814	CHEMBL2172315	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3cc(F)cc(F)c3)[nH]c3ccc(CN4CCC(C(C)(C)O)CC4)cc32)CC1	-12.7649
2815	CHEMBL4573193	COc1cc(N2CCN(CC(N)=O)C2=O)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-11.4467
2816	CHEMBL5286542	COc1cc(N2CCC(N(C)C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2cc(B(O)O)ccc2OC)n1	-9.8274
2817	CHEMBL5283671	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccc4c(c3)B(O)OC4)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-11.6511
2818	CHEMBL3896672	CCOc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1nc(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)ncc1F	-10.0735
2819	CHEMBL3972028	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCNCC3)cc2OC(F)F)n1	-11.7735
2820	CHEMBL3128069	Cc1nc([C@](C)(O)CO)sc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)c1	-12.934
2821	CHEMBL5271682	COc1cc(N2CCC(N(C)C)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc3c(c2)B(O)OC3)n1	-10.8751
2822	CHEMBL5266396	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cccc4c3B(O)OC4)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-10.582
2823	CHEMBL5283829	COc1cc(Nc2nc(Nc3ccc(N4CCC(N(C)C)CC4)cc3OC)ncc2Cl)cc(B(O)O)c1	-10.3346
2824	CHEMBL5209432	CC(C)(C)OC(=O)N1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(Cc7ccccc7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-7.1168
2825	CHEMBL4434659	COCc1cn(-c2cc(C)n[nH]2)c2nc(OC(C)c3ccc(F)cn3)ccc12	-12.0484
2826	CHEMBL3810133	Cc1cc(-c2cc(NC(=O)c3ccc(CN4CCN(C)CC4)cc3)[nH]n2)ccc1NC(=O)Nc1cc(C(C)C)on1	-9.0713
2827	CHEMBL3128069	Cc1nc([C@](C)(O)CO)sc1-c1cnc(N)c(O[C@H](C)c2cc(F)ccc2-n2nccn2)c1	-12.4381

2828	CHEMBL1487936	Oc1ccc(Nc2nc(-c3ccccc3O)nc3ccccc23)cc1	-7.6201
2829	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-8.9646
2830	CHEMBL50	O=c1c(O)c(-c2ccc(O)c(O)c2)oc2cc(O)cc(O)c12	-7.7708
2831	CHEMBL3669140	Cc1occc1-c1c(C(N)=O)sc2cnc(Nc3ccc(C4CCN(C)CC4)cc3OC(C)C)nc12	-11.0197
2832	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.1091
2833	CHEMBL1651523	COc1cc(O)c2c(c1)CCCCCC(=O)/C=C\C[C@H](C)OC2=O	-7.7383
2834	CHEMBL2418761	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5cc(F)ccc5F)c4)c3c2)cn1	-9.7958
2835	CHEMBL2418761	Cn1cc(-c2cnc3[nH]cc(-c4cnn(Cc5cc(F)ccc5F)c4)c3c2)cn1	-10.6908
2836	CHEMBL1983268	CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3n[nH]c4ccc(Cc5cc(F)cc(F)c5)cc34)c(NC3CCOCC3)c2)CC1	-11.2343
2837	CHEMBL3934594	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(N/N=C/c2cccc(C(F)(F)F)c2)ncc1Cl	-11.7148
2838	CHEMBL3922762	C/C(=N\Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1)c1ccc(F)cc1	-12.2005
2839	CHEMBL3893810	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(N/N=C/c2ccc(C(F)(F)F)cc2)ncc1Cl	-10.1221
2840	CHEMBL4107461	CC1(C)c2cc(OC[C@H](O)CCC(=O)O)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(Br)ccc21	-8.6085
2841	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.6301
2842	CHEMBL466154	Cc1cc(O)cc2oc3cc(O)cc(O)c3c(=O)c12	-6.218
2843	CHEMBL3975454	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C(=C/c6ccccc6)c6ccccc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.2204
2844	CHEMBL3687211	CCOc1cc(Nc2nc(N[C@H]3CC[C@H](O)CC3)c(CC)nc2C(N)=O)ccc1N1CCC(N2CCN(C)CC2)CC1	-13.5947
2845	CHEMBL3687218	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCC(N4CCN(C)CC4)CC3)c(C)c2)nc1NC1CCN(C)CC1	-12.3695
2846	CHEMBL2064666	COc1c(Nc2ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n2)ccc2c1CC[C@@H](N1CCOCC1)CC2	-10.9196
2847	CHEMBL1738797	CCc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-8.4917
2848	CHEMBL3925957	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCNCC3)cc2OC)n1	-11.4115
2849	CHEMBL3898320	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(=O)OC(C)(C)C)CC3)cc2OC)n1	-10.0284
2850	CHEMBL3954721	COC(=O)N1CCN(c2ccc(Nc3nc(Nc4ccc(N5CCN(C(C)=O)CC5)cc4OC)ncc3Cl)c(OC)c2)CC1	-8.4507
2851	CHEMBL3951932	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(F)c(Nc2ccc(N3CCN(CCO)CC3)cc2OC(F)F)n1	-11.0571
2852	CHEMBL276711	Cc1cc(C)c(/C=C2\C(=O)Nc3ccccc32)[nH]1	-8.1445

2853	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-8.6151
2854	CHEMBL535	CCN(CC)CCNC(=O)c1c(C)[nH]c(/C=C2\C(=O)Nc3ccc(F)cc32)c1C	-10.3006
2855	CHEMBL5198409	C#CCN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(Cc7ccccc7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-7.7209
2856	CHEMBL4787543	CC(C)n1c2[nH]c3cc(C#N)ccc3c2c(=O)c2ccc(N3CCN(C)CC3)c(F)c21	-10.9258
2857	CHEMBL4743395	Cn1c2cc(N3CCC(N4CCOCC4)CC3)ccc2c(=O)c2c3ccc(C#N)cc3[nH]c21	-7.9448
2858	CHEMBL3966723	COc1ccccc1/C=C(\C)c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-8.2602
2859	CHEMBL3963627	CC/C=C(\c1ccccc1)c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-8.3027
2860	CHEMBL3961377	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(C#Cc6ccc(F)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.5817
2861	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-9.5013
2862	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-8.8014
2863	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.2227
2864	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-8.8195
2865	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-8.581
2866	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.8797
2867	CHEMBL3128060	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnnn2C)cnc1N)c1cc(F)ccc1-n1nccn1	-7.9096
2868	CHEMBL4303155	CC1Oc2cc(cnc2N)-c2c(nn(C)c2C#N)CN(C)C(=O)c2ccc(F)cc21	-12.6033
2869	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-10.6908
2870	CHEMBL3916988	COc1ccccc1/C=C/c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-9.2118
2871	CHEMBL3910295	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(C(O)c7ccccc7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.3027
2872	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-11.1393
2873	CHEMBL5172782	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(C(=O)N(C)C)c(C)[nH]c3c2)ncc1Cl	-12.2519
2874	CHEMBL3922458	COc1cc(C(=O)c2ccccc2)c(O)cc1-c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-8.6247
2875	CHEMBL3916480	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccccc6C(F)(F)F)c5c4c3)cc2)CC1	-9.3397
2876	CHEMBL3933100	COc1ccc(/C=C/c2ccnc3[nH]c4ccc(-c5ccc(N6CCN(C)CC6)cc5)cc4c23)cc1	-9.6014

2877	CHEMBL3956515	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccccc6F)c5c4c3)cc2)CC1	-9.6785
2878	CHEMBL3963627	CC/C=C(\c1ccccc1)c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-8.2602
2879	CHEMBL3895881	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(C#Cc6ccccc6F)c5c4c3)cc2)CC1	-9.721
2880	CHEMBL3972466	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(Nc6ccccc6[N+](=O)[O-])c5c4c3)cc2)CC1	-9.5662
2881	CHEMBL3934879	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(-c7ccc(F)cc7)nc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.5613
2882	CHEMBL3956055	COc1ccccc1C#Cc1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-9.2724
2883	CHEMBL3979310	COc1cc(-c2ccnc3[nH]c4ccc(-c5ccc(N6CCN(C)CC6)cc5)cc4c23)c(OC)cc1Cc1ccccc1	-9.2314
2884	CHEMBL3975258	Cc1cc(OCc2ccc(-c3ccnc4[nH]c5ccc(-c6ccc(N7CCN(C)CC7)cc6)cc5c34)cc2)ccc1Cl	-9.8696
2885	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.0829
2886	CHEMBL3301622	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCC(N4CCN(C)CC4)CC3)c(OC)c2)nc1NC1CCOCC1	-12.6526
2887	CHEMBL3687222	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCN(C)CC3)c(F)c2)nc1NC1CCOCC1	-11.2879
2888	CHEMBL3933100	COc1ccc(/C=C/c2ccnc3[nH]c4ccc(-c5ccc(N6CCN(C)CC6)cc5)cc4c23)cc1	-8.3976
2889	CHEMBL3937418	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(N6CCN(Cc7ccccc7)CC6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.5099
2890	CHEMBL3286830	C[C@H]1Oc2cc(cnc2N)-c2c(nn(C)c2C#N)CN(C)C(=O)c2ccc(F)cc21	-10.5243
2891	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-9.6198
2892	CHEMBL3545311	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-12.4381
2893	CHEMBL1779201	CC1(C)c2cc(N3CCN(C4COC4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-10.7348
2894	CHEMBL3604631	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-11.484
2895	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.5407
2896	CHEMBL605003	CN(C)S(=O)(=O)c1ccc2c(c1)/C(=C/c1cc3c([nH]1)CCCC3)C(=O)N2	-8.61
2897	CHEMBL513909	CC[C@@H]1C(=O)N(C)c2cnc(Nc3ccc(C(=O)NC4CCN(C)CC4)cc3OC)nc2N1C1CCCC1	-8.5817
2898	CHEMBL276711	Cc1cc(C)c(/C=C2\C(=O)Nc3ccccc32)[nH]1	-8.3976
2899	CHEMBL458997	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc(N3CCOCC3)cc2OC)nc1Cl	-10.3552
2900	CHEMBL4754657	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)CN(C)CC2	-10.6699

2901	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.3079
2902	CHEMBL5089164	Cn1ccc2cc(Nc3ncc(C(F)(F)F)c(N[C@H]4CC[C@@H](N)CC4)n3)ccc2c1=O	-7.9854
2903	CHEMBL507625	COc1cc(N2CCN(C(C)C)CC2)ccc1Nc1nc(Nc2cccc(F)c2C(N)=O)c2cc[nH]c2n1	-13.1919
2904	CHEMBL4064669	Fc1cccc(Oc2ccnc3cc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)ccc23)c1	-9.6583
2905	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-9.6752
2906	CHEMBL2178352	CN1CCN(c2ccc(Nc3ncc4nc(Nc5ccccc5)n(C5CCCC5)c4n3)cc2)CC1	-7.9969
2907	CHEMBL2064723	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n1)CCC(N1CCN(C)CC1)CC2	-9.6785
2908	CHEMBL2064723	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n1)CCC(N1CCN(C)CC1)CC2	-11.0968
2909	CHEMBL3398175	COc1cc([C@H]2CCN(CCO)C[C@@H]2O)ccc1Nc1ncc2ccc(-c3ccccc3OC)n2n1	-10.3552
2910	CHEMBL3951811	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(c2OC)CCC[C@H](N2CCN(CCO)CC2)C3)ncc1Cl	-12.068
2911	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-11.1393
2912	CHEMBL388978	CN[C@@H]1C[C@H]2O[C@@](C)([C@@H]1OC)n1c3ccccc3c3c4c(c5c6ccccc6n2c5c31)C(=O)NC4	-12.4381
2913	CHEMBL3651854	Cc1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)c3c(C)[nH]nc3n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C)CC1	-10.9196
2914	CHEMBL3286830	C[C@H]1Oc2cc(cnc2N)-c2c(nn(C)c2C#N)CN(C)C(=O)c2ccc(F)cc21	-13.7563
2915	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-8.9646
2916	CHEMBL3286830	C[C@H]1Oc2cc(cnc2N)-c2c(nn(C)c2C#N)CN(C)C(=O)c2ccc(F)cc21	-12.4754
2917	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-8.8195
2918	CHEMBL5275393	COc1cc(C2CCN(C(=O)CO)CC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(C3CCN(C(=O)CO)CC3)cc2OC)n1	-12.338
2919	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-9.8696
2920	CHEMBL1983268	CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3n[nH]c4ccc(Cc5cc(F)cc(F)c5)cc34)c(NC3CCOCC3)c2)CC1	-9.7958
2921	CHEMBL3951811	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(c2OC)CCC[C@H](N2CCN(CCO)CC2)C3)ncc1Cl	-10.0284
2922	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-10.7348
2923	CHEMBL1738797	CCc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.3695
2924	CHEMBL513909	CC[C@@H]1C(=O)N(C)c2cnc(Nc3ccc(C(=O)NC4CCN(C)CC4)cc3OC)nc2N1C1CCCC1	-9.5662

2925	CHEMBL1738797	CCc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.7901
2926	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-11.1897
2927	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-8.4249
2928	CHEMBL5272293	CNCc1cn(-c2cccc(NC(=O)c3cc(F)cc(F)c3)c2)nn1	-9.3165
2929	CHEMBL3545311	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-12.4381
2930	CHEMBL3687213	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCC(N4CCN(C)CC4)CC3)c(C)c2)nc1NC1CCC(O)(CC)CC1	-12.1307
2931	CHEMBL3687220	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCC(N4CCN(C)CC4)CC3)cc2)nc1NC1CCOCC1	-11.4996
2932	CHEMBL3946088	CC1(C)c2ccc(OCC(=O)O)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(Br)ccc21	-8.6007
2933	CHEMBL3923481	COc1cc2c(cc1Br)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-10.6846
2934	CHEMBL3936102	CC1(C)c2cc(N3CCOCC3)c(OC3CCOC3)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-13.0899
2935	CHEMBL4113969	CC1(C)O[C@H](CO)[C@@H](COc2ccc3c(c2)C(C)(C)c2[nH]c4cc(Br)ccc4c2C3=O)O1	-9.6742
2936	CHEMBL3975525	COCCOc1cc2c(cc1OC(C)C)C(=O)c1c(n(CCOC)c3cc(C#N)ccc13)C2(C)C	-11.3528
2937	CHEMBL3953815	CCc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-13.5065
2938	CHEMBL3919367	CC1(C)c2cc(N3CCN(C4COC4)CC3)c(C#CC3CC3)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-12.843
2939	CHEMBL3897451	CC1(C)c2ccc(N3CCCC3)cc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-11.2338
2940	CHEMBL5281719	CC1(C)COc2ccc(F)cc2CNc2ccc3ncc(n3n2)C(=O)N1	-10.9512
2941	CHEMBL5289155	C[C@H]1Nc2ccc3ncc(n3n2)C(=O)NC2(CC2)COc2ccc(Cl)cc21	-10.2854
2942	CHEMBL5267497	CN1Cc2cc(F)ccc2OCC(C)(C)NC(=O)c2cnc3ccc1nn23	-10.9512
2943	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-8.6188
2944	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-11.3717
2945	CHEMBL1738797	CCc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-13.0899
2946	CHEMBL2064667	COc1cc2c(cc1Nc1ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n1)CCC(N1CCOCC1)CC2	-11.0571
2947	CHEMBL5399967	Cc1ccc(S(=O)(=O)n2cc(Cc3cc(C)c(O)c(C)c3)c3ccccc32)cc1	-7.3113
2948	CHEMBL4113696	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CC4(CCNCC4)C3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-12.5152
2949	CHEMBL1983268	CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3n[nH]c4ccc(Cc5cc(F)cc(F)c5)cc34)c(NC3CCOCC3)c2)CC1	-11.5663
2950	CHEMBL3104855	Cc1c(O)c(O)c(O)c(C=O)c1-c1cc2c(C=O)c(C)c(O)c(O)c2o1	-9.3639

2951	CHEMBL3687191	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCN(C)CC3)cc2)nc1N[C@H]1CC[C@H](O)CC1	-11.7377
2952	CHEMBL3687202	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCC(N4CCN(C)CC4)CC3)c(C)c2)nc1N[C@H]1CC[C@H](O)CC1	-13.5947
2953	CHEMBL3687206	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCN(C)CC3)c(C)c2)nc1N[C@H]1CC[C@@](C)(O)CC1	-13.6976
2954	CHEMBL3687223	COc1cc(Nc2nc(NC3CCOCC3)c(C(C)C)nc2C(N)=O)ccc1N1CCN(C)CC1	-12.5577
2955	CHEMBL3907871	COc1ccc(Sc2ccnc3[nH]c4ccc(-c5ccc(N6CCN(C)CC6)cc5)cc4c23)cc1	-7.0916
2956	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-12.4029
2957	CHEMBL3977662	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccccc6Cl)c5c4c3)cc2)CC1	-8.5887
2958	CHEMBL5180262	CCN(CC)CC(=O)Nc1n[nH]c2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)ccc12	-11.9426
2959	CHEMBL4298138	C[C@H]1CNC(=O)c2cnn3ccc(nc23)N[C@H](C)c2cc(F)ccc2O1	-12.2519
2960	CHEMBL3545311	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-13.3773
2961	CHEMBL4281394	COc1nc(N2CC(O)C2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(C)(=O)=O)n1	-8.3027
2962	CHEMBL4291608	COc1nc(N2CCN(CCO)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2NS(C)(=O)=O)n1	-8.0243
2963	CHEMBL3929315	Cn1cc(-c2cc3c(cc2N2CCOCC2)C(C)(C)c2[nH]c4cc(C#N)ccc4c2C3=O)cn1	-12.8947
2964	CHEMBL3687190	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCC(N4CCN(C)CC4)CC3)cc2OC)nc1N[C@H]1CC[C@H](O)CC1	-11.4184
2965	CHEMBL3687225	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCN(C4CCN(C)CC4)CC3)c(C)c2)nc1NC1CCOCC1	-12.2792
2966	CHEMBL2042829	CCN1C(=O)CCCc2c1ccc(Nc1ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n1)c2OC	-9.4288
2967	CHEMBL3735980	CCc1cc2c(cc1-c1cnn(CC(N)=O)c1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.5576
2968	CHEMBL5270672	CC[C@H]1Nc2ccc3ncc(n3n2)C(=O)NC2(CC2)COc2ccc(F)cc21	-12.1763
2969	CHEMBL5274542	C[C@H]1CNC(=O)c2cnc3ccc(nn23)N[C@H](C)c2cc(F)ccc2O1	-11.2879
2970	CHEMBL2386796	Cc1cc(-c2cc(NC(=O)c3ccc(CN4CCN(C)CC4)cc3)[nH]n2)ccc1NC(=O)Nc1cc(C(C)(C)C)on1	-9.5766
2971	CHEMBL2386803	CN1CCN(Cc2ccc(C(=O)Nc3cc(-c4ccc(CNC(=O)Nc5cc(C(C)(C)C)on5)cc4)n[nH]3)cc2)CC1	-7.5835
2972	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-10.5749
2973	CHEMBL513909	CC[C@@H]1C(=O)N(C)c2cnc(Nc3ccc(C(=O)NC4CCN(C)CC4)cc3OC)nc2N1C1CCCC1	-9.5329

2974	CHEMBL4449391	C=CC(=O)Nc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)N(C)C)n2)c(OC)cc1N(C)CCN(C)C	-11.0197
2975	CHEMBL3975258	Cc1cc(OCc2ccc(-c3ccnc4[nH]c5ccc(-c6ccc(N7CCN(C)CC7)cc6)cc5c34)cc2)ccc1Cl	-10.3311
2976	CHEMBL3923002	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(Cc7ccccc7)cc6C(F)(F)F)c5c4c3)cc2)CC1	-7.7935
2977	CHEMBL3687194	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCC(N4CCN(C)CC4)CC3)cc2)nc1N[C@H]1CC[C@H](O)CC1	-12.1307
2978	CHEMBL3687216	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCC(N4CCN(C)CC4)CC3)c(C)c2)nc1NC1CCNCC1	-12.7649
2979	CHEMBL5269530	C[C@H]1Nc2ccc3ncc(n3n2)C(=O)NCCOc2ccc(F)cc21	-11.185
2980	CHEMBL5284765	C[C@H]1Nc2ccc3ncc(n3n2)C(=O)NC(C)(C)COc2ccc(F)cc21	-11.4614
2981	CHEMBL5267497	CN1Cc2cc(F)ccc2OCC(C)(C)NC(=O)c2cnc3ccc1nn23	-10.7822
2982	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-11.3466
2983	CHEMBL388978	CN[C@@H]1C[C@H]2O[C@@](C)([C@@H]1OC)n1c3ccccc3c3c4c(c5c6ccccc6n2c5c31)C(=O)NC4	-11.5933
2984	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-13.0694
2985	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-11.3284
2986	CHEMBL1852688	CCN1CCN(c2ccc(Nc3cc(N(C)C(=O)Nc4c(Cl)c(OC)cc(OC)c4Cl)ncn3)cc2)CC1	-7.8174
2987	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-12.3079
2988	CHEMBL3672895	COCCNc1cc(N2CCN(C)CC2)ccc1C(=O)Nc1n[nH]c2ccc(Cc3cc(F)cc(F)c3)cc12	-9.0576
2989	CHEMBL4114311	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CC4(CCCNC4)C3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-12.3631
2990	CHEMBL3964686	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(-c7cccc8ccccc78)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-10.3311
2991	CHEMBL3907871	COc1ccc(Sc2ccnc3[nH]c4ccc(-c5ccc(N6CCN(C)CC6)cc5)cc4c23)cc1	-7.4379
2992	CHEMBL3950181	COc1cc(-c2ccnc3[nH]c4ccc(-c5ccc(N6CCN(C)CC6)cc5)cc4c23)c(OC)cc1C(=O)c1ccccc1	-7.2139
2993	CHEMBL5209011	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C(=O)SCC(=S)N(C)C)CC1	-11.2879
2994	CHEMBL3916480	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccccc6C(F)(F)F)c5c4c3)cc2)CC1	-9.3397
2995	CHEMBL3913624	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(-c7ccccc7)cc6F)c5c4c3)cc2)CC1	-8.5287
2996	CHEMBL3924528	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(Cc7ccccc7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.5013
2997	CHEMBL3939548	CN1CCC(N2CCN(c3ccc(-c4ccc5[nH]c6nccc(-c7ccc(Cc8ccccc8)cc7)c6c5c4)cc3)CC2)CC1	-8.2602

2998	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-11.8169
2999	CHEMBL5283829	COc1cc(Nc2nc(Nc3ccc(N4CCC(N(C)C)CC4)cc3OC)ncc2Cl)cc(B(O)O)c1	-8.9993
3000	CHEMBL5269028	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2cccc3c2B(O)OC3)n1	-10.482
3001	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.2519
3002	CHEMBL4062877	Cc1n[nH]c2ccc(-c3cc(N[C@@H](CO)c4ccccc4)cnc3-c3cc(F)ccc3O)cc12	-9.9215
3003	CHEMBL5188519	CCc1cc2c(cc1N1CCN(C(=O)CNc3cccc4c3C(=O)N(C3CCC(=O)N(C)C3=O)C4=O)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-6.4021
3004	CHEMBL5184310	COc1cc(N2CCC3(CCNC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-11.5933
3005	CHEMBL5173297	COc1cc(N2CCC3(CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2c(F)cccc2P(C)(C)=O)n1	-10.674
3006	CHEMBL1229592	C=CC(=O)Nc1cccc(Oc2nc(Nc3ccc(N4CCN(C)CC4)cc3OC)ncc2Cl)c1	-8.5161
3007	CHEMBL2042829	CCN1C(=O)CCCc2c1ccc(Nc1ncc(Cl)c(N[C@H]3[C@@H](C(N)=O)[C@@H]4C=C[C@H]3C4)n1)c2OC	-11.1393
3008	CHEMBL2172308	CC(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@@H](n2/c(=N/C(=O)c3ccc(F)cc3)[nH]c3ccc(CN4CCC(C(C)(C)O)CC4)cc32)CC1	-12.6526
3009	CHEMBL4449858	CCOc1cc(C2CCN(C)CC2)ccc1Nc1ncc2c(n1)N(Cc1cc(C)cs1)[C@H](CC)C(=O)N2C	-11.0197
3010	CHEMBL5174132	Cc1[nH]c2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4NS(C)(=O)=O)n3)ccc2c1C(=O)N1CCOCC1	-11.6928
3011	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-11.8809
3012	CHEMBL1983268	CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3n[nH]c4ccc(Cc5cc(F)cc(F)c5)cc34)c(NC3CCOCC3)c2)CC1	-11.2343
3013	CHEMBL5198499	Cc1cc(-c2cc(C(F)(F)F)ccc2O[C@H]2C[C@@]2(CN)c2ccc(F)cc2F)n[nH]1	-10.9845
3014	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-11.5321
3015	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-11.8384
3016	CHEMBL5189272	Cc1cc(-c2cccnc2)n[nH]1	-5.1876
3017	CHEMBL5208148	CC(C)S(=O)(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(NC(=O)CN4CCCC4)n[nH]c3c2)ncc1Cl	-12.9759
3018	CHEMBL5180262	CCN(CC)CC(=O)Nc1n[nH]c2cc(Nc3ncc(Cl)c(Nc4ccccc4S(=O)(=O)C(C)C)n3)ccc12	-12.4029
3019	CHEMBL3604634	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1C1CCN(C)CC1	-11.911
3020	CHEMBL5203625	COc1ccc(-c2ccc3[nH]c4nccc(/C=C/c5ccccc5)c4c3c2)cc1	-8.6028
3021	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-10.6908

3022	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-8.6397
3023	CHEMBL4082724	COc1cc2c(Oc3ccc(NC(=O)c4nc5ccccc5n(-c5ccc(F)cc5)c4=O)cc3F)ccnc2cc1OCCCN1CCN(C)CC1	-7.8668
3024	CHEMBL4298138	C[C@H]1CNC(=O)c2cnn3ccc(nc23)N[C@H](C)c2cc(F)ccc2O1	-11.8384
3025	CHEMBL1738797	CCc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.491
3026	CHEMBL3924528	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(Cc7ccccc7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-10.4927
3027	CHEMBL3687189	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2cccc(S(C)(=O)=O)c2)nc1N[C@H]1CC[C@](C)(O)CC1	-12.7711
3028	CHEMBL5275393	COc1cc(C2CCN(C(=O)CO)CC2)ccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(Nc2ccc(C3CCN(C(=O)CO)CC3)cc2OC)n1	-12.0882
3029	CHEMBL5393969	COc1cc(C2CCN(CC#Cc3ccc4c(c3)CN(C3CCC(=O)NC3=O)C4=O)CC2)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-8.6717
3030	CHEMBL5430072	COc1cc(C2CCN(CC3CN(c4ccc5c(c4)CN(C4CCC(=O)NC4=O)C5=O)C3)CC2)c(C)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-8.836
3031	CHEMBL3687195	CC(C)c1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCN(C)CC3)cc2)nc1N[C@H]1CC[C@H](O)CC1	-12.3079
3032	CHEMBL3687198	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCN(C)CC3)c(OC)c2)nc1N[C@H]1CC[C@H](O)CC1	-13.4478
3033	CHEMBL5424392	COc1ccc2cc(-c3nc4ccc(OC)cc4s3)c(=O)oc2c1	-9.0018
3034	CHEMBL5401769	COc1ccc2nc(-c3cc4ccc(N5CCOCC5)cc4oc3=O)sc2c1	-9.2516
3035	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.6263
3036	CHEMBL1983268	CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3n[nH]c4ccc(Cc5cc(F)cc(F)c5)cc34)c(NC3CCOCC3)c2)CC1	-11.0968
3037	CHEMBL513909	CC[C@@H]1C(=O)N(C)c2cnc(Nc3ccc(C(=O)NC4CCN(C)CC4)cc3OC)nc2N1C1CCCC1	-9.0899
3038	CHEMBL1983268	CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3n[nH]c4ccc(Cc5cc(F)cc(F)c5)cc34)c(NC3CCOCC3)c2)CC1	-12.4754
3039	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.9196
3040	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.1171
3041	CHEMBL5185835	COc1cc(N2CCC3(CCN(C)CC3)CC2)c(F)cc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-11.7494
3042	CHEMBL5179104	COc1cc(C2CCC3(CC2)CCN(C)CC3)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-11.9426
3043	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.0295
3044	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-9.8316
3045	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.9196

3046	CHEMBL388978	CN[C@@H]1C[C@H]2O[C@@](C)([C@@H]1OC)n1c3ccccc3c3c4c(c5c6ccccc6n2c5c31)C(=O)NC4	-11.6167
3047	CHEMBL3922458	COc1cc(C(=O)c2ccccc2)c(O)cc1-c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-7.8757
3048	CHEMBL3986372	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccccc6)c5c4c3)cn2)CC1	-9.1566
3049	CHEMBL3927036	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(C(=O)c7ccccc7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.721
3050	CHEMBL4565984	C=CC(=O)Nc1cc(Nc2ncc(F)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)N(C)C)n2)c(OC)cc1N(C)CCN(C)C	-11.0968
3051	CHEMBL3687212	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCC(N4CCN(C)CC4)CC3)c(C)c2)nc1N[C@H]1CC[C@](C)(O)CC1	-12.8096
3052	CHEMBL4514156	COc1cc(NC(=O)NCc2cccnc2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCOCC3)c(OC)c2)n1	-8.765
3053	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.8073
3054	CHEMBL1738797	CCc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-10.9512
3055	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-10.3849
3056	CHEMBL3904008	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6cccc(F)c6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.3639
3057	CHEMBL3972466	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(Nc6ccccc6[N+](=O)[O-])c5c4c3)cc2)CC1	-8.8671
3058	CHEMBL3953243	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(OCc7ccccc7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.0243
3059	CHEMBL3961377	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(C#Cc6ccc(F)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.7667
3060	CHEMBL3966723	COc1ccccc1/C=C(\C)c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-8.1479
3061	CHEMBL3952772	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(Cl)c5c4c3)cc2)CC1	-8.5099
3062	CHEMBL1738797	CCc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.2605
3063	CHEMBL3927036	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(C(=O)c7ccccc7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.8895
3064	CHEMBL3545311	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2P(C)(C)=O)n1	-11.786
3065	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.6526
3066	CHEMBL3687200	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCC(N4CCN(C)CC4)CC3)c(C(F)(F)F)c2)nc1N[C@H]1CC[C@H](O)CC1	-13.0303
3067	CHEMBL3687207	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCC(N4CCN(C)CC4)CC3)c(C)c2)nc1N[C@H]1CC[C@@](C)(O)CC1	-13.7262
3068	CHEMBL3687188	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2cccc(S(C)(=O)=O)c2)nc1N[C@H]1CC[C@H](O)CC1	-11.0197
3069	CHEMBL3687204	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(C3CCN(C)CC3)cc2)nc1N[C@H]1CC[C@H](O)CC1	-13.5947

3070	CHEMBL3912968	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(N6CCC(Cc7ccccc7)CC6)c5c4c3)cc2)CC1	-10.6301
3071	CHEMBL3939548	CN1CCC(N2CCN(c3ccc(-c4ccc5[nH]c6nccc(-c7ccc(Cc8ccccc8)cc7)c6c5c4)cc3)CC2)CC1	-8.1831
3072	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-9.1479
3073	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-8.4941
3074	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-9.1291
3075	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-8.6151
3076	CHEMBL3809489	Nc1nc(Nc2ccc3c(c2)CC[C@@H](N2CCCC2)CC3)nn1-c1cc2c(nn1)-c1ccccc1CCC2	-8.901
3077	CHEMBL1738797	CCc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.3695
3078	CHEMBL4298138	C[C@H]1CNC(=O)c2cnn3ccc(nc23)N[C@H](C)c2cc(F)ccc2O1	-12.0258
3079	CHEMBL4298138	C[C@H]1CNC(=O)c2cnn3ccc(nc23)N[C@H](C)c2cc(F)ccc2O1	-12.7588
3080	CHEMBL1644358	c1ccc(Nc2ccnc3ccccc23)cc1	-5.436
3081	CHEMBL3967080	CC(C)[Si](C#Cc1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12)(C(C)C)C(C)C	-7.3861
3082	CHEMBL3938221	CC(C)[Si](/C=C/c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12)(C(C)C)C(C)C	-7.7935
3083	CHEMBL3964686	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(-c7cccc8ccccc78)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-10.3311
3084	CHEMBL3983644	CN1CCC(N2CCN(c3ccc(-c4ccc5[nH]c6nccc(Nc7ccccc7[N+](=O)[O-])c6c5c4)cc3)CC2)CC1	-8.5817
3085	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.7325
3086	CHEMBL3949340	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccc(F)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.9864
3087	CHEMBL3958885	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(Oc7ccccc7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-7.294
3088	CHEMBL3975454	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C(=C/c6ccccc6)c6ccccc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.3976
3089	CHEMBL3966723	COc1ccccc1/C=C(\C)c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-8.2602
3090	CHEMBL3941724	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2OC)n1	-10.1055
3091	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-13.7563
3092	CHEMBL4213986	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCOCCOCCNC(=O)CNc2cccc3c2C(=O)N(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)CC1	-11.3466

3093	CHEMBL4213986	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCOCCOCCNC(=O)CNc2cccc3c2C(=O)N(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)CC1	-10.4927
3094	CHEMBL5267265	Fc1ccc(Cl)c(Sc2n[nH]c3ncc(-c4cnn(C5CCNCC5)c4)cc23)c1Cl	-8.8476
3095	CHEMBL4213986	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(CCOCCOCCNC(=O)CNc2cccc3c2C(=O)N(C2CCC(=O)NC2=O)C3=O)CC1	-10.3552
3096	CHEMBL1738797	CCc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.7377
3097	CHEMBL4075720	CN1CCN(Cc2ccc(NC(=O)c3n[nH]cc3Nc3ncnc4sccc34)cc2)CC1	-9.9657
3098	CHEMBL3952772	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(Cl)c5c4c3)cc2)CC1	-8.0529
3099	CHEMBL3910396	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(C#Cc6ccccc6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.6014
3100	CHEMBL3913624	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(-c7ccccc7)cc6F)c5c4c3)cc2)CC1	-9.2118
3101	CHEMBL3895881	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(C#Cc6ccccc6F)c5c4c3)cc2)CC1	-8.4512
3102	CHEMBL3913619	COc1ccc(Cc2ccc(-c3ccnc4[nH]c5ccc(-c6ccc(N7CCN(C)CC7)cc6)cc5c34)cc2)c(OC)c1	-8.9127
3103	CHEMBL3947279	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccccc6NS(C)(=O)=O)c5c4c3)cc2)CC1	-9.0156
3104	CHEMBL3938221	CC(C)[Si](/C=C/c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12)(C(C)C)C(C)C	-7.3026
3105	CHEMBL3934879	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(-c7ccc(F)cc7)nc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.1479
3106	CHEMBL3977662	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccccc6Cl)c5c4c3)cc2)CC1	-9.2118
3107	CHEMBL3937361	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(C#Cc6ccccc6Cl)c5c4c3)cc2)CC1	-9.2724
3108	CHEMBL3907560	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(-c7ccccc7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.7475
3109	CHEMBL3963627	CC/C=C(\c1ccccc1)c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-8.3027
3110	CHEMBL3902568	CN1CCC(N2CCN(c3ccc(-c4ccc5[nH]c6nccc(/C=C/c7ccccc7C(F)(F)F)c6c5c4)cc3)CC2)CC1	-7.8541
3111	CHEMBL3956055	COc1ccccc1C#Cc1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-8.6871
3112	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-11.5663
3113	CHEMBL3687217	Cc1cc(Nc2nc(N[C@H]3CC[C@H](O)CC3)c(Cl)nc2C(N)=O)ccc1N1CCC(N2CCN(C)CC2)CC1	-12.2519
3114	CHEMBL3937542	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccccc6)c5c4c3)cc2)CC1	-10.0505
3115	CHEMBL3910295	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(C(O)c7ccccc7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.3027

3116	CHEMBL3353410	C=CC(=O)Nc1cc(Nc2nccc(-c3cn(C)c4ccccc34)n2)c(OC)cc1N(C)CCN(C)C	-9.5766
3117	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.4481
3118	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-11.6119
3119	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-11.3284
3120	CHEMBL3982473	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6cccc(-c7ccccc7)c6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.721
3121	CHEMBL3937418	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(N6CCN(Cc7ccccc7)CC6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.5099
3122	CHEMBL3891424	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(Cc7ccccc7)c(C(F)(F)F)c6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.0243
3123	CHEMBL509032	COc1cc(N2CCC(N3CCN(C)CC3)CC2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2S(=O)(=O)C(C)C)n1	-12.0882
3124	CHEMBL3984671	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(C#Cc6ccccc6C(F)(F)F)c5c4c3)cc2)CC1	-9.3165
3125	CHEMBL3910295	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(C(O)c7ccccc7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.4152
3126	CHEMBL3950181	COc1cc(-c2ccnc3[nH]c4ccc(-c5ccc(N6CCN(C)CC6)cc5)cc4c23)c(OC)cc1C(=O)c1ccccc1	-7.2139
3127	CHEMBL3983825	COc1cc(-c2ccnc3[nH]c4ccc(-c5ccc(N6CCN(C)CC6)cc5)cc4c23)cc(OC)c1Cc1ccccc1	-7.2368
3128	CHEMBL513909	CC[C@@H]1C(=O)N(C)c2cnc(Nc3ccc(C(=O)NC4CCN(C)CC4)cc3OC)nc2N1C1CCCC1	-8.5817
3129	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-11.185
3130	CHEMBL1823221	CCc1cc2c(cc1N1CCN(C3COC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-11.5529
3131	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-12.1531
3132	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-9.5075
3133	CHEMBL1825138	CC(Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-8.6474
3134	CHEMBL3950181	COc1cc(-c2ccnc3[nH]c4ccc(-c5ccc(N6CCN(C)CC6)cc5)cc4c23)c(OC)cc1C(=O)c1ccccc1	-7.9969
3135	CHEMBL3931540	COc1cc(C(O)c2ccccc2)c(OC)cc1-c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-7.1774
3136	CHEMBL3924528	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(Cc7ccccc7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.4152
3137	CHEMBL3920297	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(COc7cccc(C(F)(F)F)c7)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-8.1831
3138	CHEMBL3913619	COc1ccc(Cc2ccc(-c3ccnc4[nH]c5ccc(-c6ccc(N7CCN(C)CC7)cc6)cc5c34)cc2)c(OC)c1	-8.8349

3139	CHEMBL3979310	COc1cc(-c2ccnc3[nH]c4ccc(-c5ccc(N6CCN(C)CC6)cc5)cc4c23)c(OC)cc1Cc1ccccc1	-10.8609
3140	CHEMBL3923002	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(-c6ccc(Cc7ccccc7)cc6C(F)(F)F)c5c4c3)cc2)CC1	-7.2368
3141	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-4.851
3142	CHEMBL3937542	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccccc6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.9283
3143	CHEMBL1983268	CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3n[nH]c4ccc(Cc5cc(F)cc(F)c5)cc34)c(NC3CCOCC3)c2)CC1	-11.5663
3144	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-12.2079
3145	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-12.1091
3146	CHEMBL2403108	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCNCC1	-12.4754
3147	CHEMBL3961294	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccc(C(F)(F)F)cc6)c5c4c3)cc2)CC1	-9.294
3148	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.9196
3149	CHEMBL4297627	C[C@@H]1CCc2ncc(F)cc2[C@H]2CCCN2c2ccn3ncc(c3n2)C(=O)N1	-9.3074
3150	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.6699
3151	CHEMBL3967225	C/C(=C\c1ccccc1C(F)(F)F)c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-7.3665
3152	CHEMBL3902568	CN1CCC(N2CCN(c3ccc(-c4ccc5[nH]c6nccc(/C=C/c7ccccc7C(F)(F)F)c6c5c4)cc3)CC2)CC1	-8.5887
3153	CHEMBL3986372	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccccc6)c5c4c3)cn2)CC1	-9.1566
3154	CHEMBL3956515	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccccc6F)c5c4c3)cc2)CC1	-8.9883
3155	CHEMBL3947279	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4[nH]c5nccc(/C=C/c6ccccc6NS(C)(=O)=O)c5c4c3)cc2)CC1	-9.5329
3156	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-12.0239
3157	CHEMBL1779202	CC1(C)c2cc(C3CCN(C4COC4)CC3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(C#N)ccc21	-12.503
3158	CHEMBL3286830	C[C@H]1Oc2cc(cnc2N)-c2c(nn(C)c2C#N)CN(C)C(=O)c2ccc(F)cc21	-10.0893
3159	CHEMBL601719	C[C@@H](Oc1cc(-c2cnn(C3CCNCC3)c2)cnc1N)c1c(Cl)ccc(F)c1Cl	-10.0657
3160	CHEMBL464552	CNC(=O)c1c(F)cccc1Nc1nc(Nc2cc3c(cc2OC)CCN3C(=O)CN(C)C)nc2[nH]ccc12	-13.1919
3161	CHEMBL3301622	CCc1nc(C(N)=O)c(Nc2ccc(N3CCC(N4CCN(C)CC4)CC3)c(OC)c2)nc1NC1CCOCC1	-12.6526

3162	CHEMBL388978	CN[C@@H]1C[C@H]2O[C@@](C)([C@@H]1OC)n1c3ccccc3c3c4c(c5c6ccccc6n2c5c31)C(=O)NC4	-11.5576
3163	CHEMBL3286830	C[C@H]1Oc2cc(cnc2N)-c2c(nn(C)c2C#N)CN(C)C(=O)c2ccc(F)cc21	-10.8896
3164	CHEMBL388978	CN[C@@H]1C[C@H]2O[C@@](C)([C@@H]1OC)n1c3ccccc3c3c4c(c5c6ccccc6n2c5c31)C(=O)NC4	-11.9426
3165	CHEMBL388978	CN[C@@H]1C[C@H]2O[C@@](C)([C@@H]1OC)n1c3ccccc3c3c4c(c5c6ccccc6n2c5c31)C(=O)NC4	-12.2519
3166	CHEMBL3920323	C/C(=C\c1ccccc1)c1ccnc2[nH]c3ccc(-c4ccc(N5CCN(C)CC5)cc4)cc3c12	-9.6388
3167	CHEMBL1738797	CCc1cc2c(cc1N1CCC(N3CCOCC3)CC1)C(C)(C)c1[nH]c3cc(C#N)ccc3c1C2=O	-12.3168
3168	CHEMBL513909	CC[C@@H]1C(=O)N(C)c2cnc(Nc3ccc(C(=O)NC4CCN(C)CC4)cc3OC)nc2N1C1CCCC1	-9.0899

Table S2: List of predicted binding affinities of EMNPD compounds with ALK using the CatBoost machine learning model

ID	**SMILES**	**ΔG_{ML}**
1	CC(C=CC1=C(C)CCCC1(C)C)=CC=CC(C)=CC(=O)NC1=CC=C(O)C=C1	-8.6553
2	C[C@H](CCC(=O)O)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3[C@H](O)C[C@@H]4C[C@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3C[C@H](O)[C@]12C	-10.9834
3	C[C@H]1O[C@@H](O[C@H]2[C@@H](O)C[C@H](O[C@H]3[C@@H](O)C[C@H](O[C@H]4CC[C@@]5(C)[C@H](CC[C@@H]6[C@@H]5C[C@@H](O)[C@]5(C)[C@@H](C7=CC(=O)OC7)CC[C@]65O)C4)O[C@@H]3C)O[C@@H]2C)C[C@H](O)[C@@H]1O	-10.1777
4	COC1=CC(/C=C/C(=O)O[C@H]2CC[C@]34C[C@]35CC[C@]3(C)[C@@H]([C@H](C)CCC=C(C)C)CC[C@@]3(C)[C@@H]5CC[C@H]4C2(C)C)=CC=C1O	-9.6487
5	CC(=O)O[C@H]1C(=O)[C@@]2(C)[C@H]([C@H](OC(=O)C3=CC=CC=C3)[C@]3(O)C[C@H](OC(=O)[C@H](O)[C@@H](NC(=O)C4=CC=CC=C4)C4=CC=CC=C4)C(C)=C1C3(C)C)[C@]1(OC(C)=O)CO[C@@H]1C[C@@H]2O	-8.9559
6	COC1=CC(=O)C[C@@H](C)[C@]12OC1=C(Cl)C(OC)=CC(OC)=C1C2=O	-10.0486
7	COC(=O)[C@H]1[C@H]2C[C@@H]3C4=C(CCN3C[C@H]2C[C@@H](OC(=O)C2=CC(OC)=C(OC)C(OC)=C2)[C@@H]1OC)C1=CC=C(OC)C=C1N4	-9.3374
8	CC[C@]1(O)C[C@@H]2CN(CCC3=C(NC4=CC=CC=C34)[C@@](C(=O)OC)(C3=CC4=C(C=C3OC)N(C)[C@H]3[C@@](O)(C(=O)OC)[C@H](OC(C)=O)[C@]5(CC)C=CCN6CC[C@]43[C@@H]65)C2)C1	-8.2260
9	CC(C)CCC[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CC=C4C[C@@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C	-10.0994

10	C=C[C@H]1CN2CC[C@H]1C[C@H]2[C@H](O)C1=CC=NC2=CC=C(OC)C=C12	-9.7317
11	CC[C@H](CC[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CC=C4C[C@@H](O[C@@H]5O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]5O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C)C(C)C	-10.3931
12	OC[C@H]1O[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]1O	-9.6514
13	C[C@@H]1O[C@@H](OC[C@H]2O[C@@H](OC3=C(C4=CC=C(O)C(O)=C4)OC4=CC(O)=CC(O)=C4C3=O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]2O)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O	-10.8384
14	CC[C@H](C)C(=O)O[C@H]1CCC=C2C=C[C@H](C)[C@H](CC[C@@H]3C[C@@H](O)CC(=O)O3)[C@H]21	-10.6265
15	CC1(C)O[C@@H]2[C@@H](CO[C@@]3(COS(N)(=O)=O)OC(C)(C)O[C@@H]23)O1	-10.3098
16	CCC[C@@H]1C[C@@H](C(=O)N[C@@H]([C@H]2O[C@H](SC)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]2O)[C@H](C)Cl)N(C)C1	-11.2508
17	O[C@@H]1CO[C@H]2[C@@H]1OC[C@@H]2O	-9.7808
18	O=C1C=CNC(=O)N1	-8.6080
19	NC1=NC=NC2=C1N=CN2[C@@H]1O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]1O	-9.6502
20	COC(=O)C[C@](O)(CCCC(C)(C)O)C(=O)O[C@@H]1C(OC)=C[C@]23CCCN2CCC2=CC4=C(C=C2[C@H]13)OCO4	-10.4934
21	CC1=CC2=C(C=C1C)N(C[C@H](O)[C@H](O)[C@H](O)CO)C1=NC(=O)NC(=O)C1=N2	-10.3853
22	CC(=O)O[C@H]1C[C@@]2(C)[C@@H](C[C@@H](O)[C@H]3[C@@]4(C)CC[C@@H](O)[C@@H](C)[C@@H]4CC[C@@]32C)/C1=C(\CCC=C(C)C)C(=O)O	-10.5664
23	C[C@H](CCC(=O)O)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3[C@@H](O)C[C@@H]4C[C@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C	-11.1489
24	C[C@H](CCC(=O)O)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CC[C@@H]4C[C@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3C[C@H](O)[C@]12C	-11.0847
25	C=C1/C(=C\C=C2/CCC[C@]3(C)[C@@H]([C@H](C)CCCC(C)(C)O)CC[C@@H]23)C[C@@H](O)C[C@@H]1O	-10.8677
26	COC1=CC(C2=CC(=O)C3=C(O)C(OC)=C(O)C=C3O2)=CC=C1O	-10.4081
27	COC1=CC=C(CO)C=C1	-9.3664
28	O=CC1=CC=C(O)C=C1	-9.1600
29	CC1=CC(O)=C(C)C(O)=C1C(=O)OC1=C(C)C(C)=C(C(=O)OC2=C(C)C(C)=C(C(=O)O)C(O)=C2C)C(O)=C1C	-9.8374
30	COC1=C(C)C(OC(=O)C2=C(C)C=C(O)C(C)=C2O)=C(C)C(C)=C1C(=O)OC1=CC(C)=C(C(=O)O)C(O)=C1C	-10.0128
31	COC1=C(C)C(OC(=O)C2=C(C)C=C(O)C(C)=C2O)=C(C)C(C)=C1C(=O)OC1=C(C)C(C)=C(C(=O)O)C(O)=C1C	-10.0535
32	O=C(/C=C/C1=CC=C(O)C(O)=C1)O[C@@H]1C[C@](O)(C(=O)O)C[C@@H](O)[C@H]1O	-10.3944

33	O=C1C=C(C2=CC=C(O)C=C2)OC2=C([C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C(O)=CC(O)=C12	-10.4874
34	CC[C@H](CC[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CC=C4C[C@@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C)C(C)C	-10.0298
35	O=C1C(O)=C(C2=CC=C(O)C=C2)OC2=CC(O)=CC(O)=C12	-9.8141
36	O=C1C(O)=C(C2=CC=C(O)C(O)=C2)OC2=CC(O)=CC(O)=C12	-9.9537
37	COC1=CC(C=CC(=O)O)=CC=C1O	-10.0408
38	O=C1C=CC2=CC=C(O)C=C2O1	-9.5079
39	COC1=C2C=COC2=CC2=C1C=CC(=O)O2	-10.0113
40	COC1=CC2=C(C=C1O)OC(=O)C=C2	-10.3025
41	O=C(O)C1=CC(O)=C(O)C(O)=C1	-10.2616
42	COC(=O)C1=CC(O)=C(O)C(O)=C1	-10.5504
43	O=C(O)C=CC1=CC=C(O)C(O)=C1	-9.8228
44	O=C(O)C=CC1=CC=C(O)C=C1	-9.5041
45	OC1=CC(O)=C2C[C@@H](O)[C@@H](C3=CC=C(O)C(O)=C3)OC2=C1	-10.0683
46	CC(C)=CCC[C@@H](C)C1=CC=C(C)C(O)=C1	-9.2902
47	COC1=CC(=O)C2=C(O)C=C(OC)C3=C2[C@]1(O)COC3=O	-10.7468
48	O=C1C=C(C2=CC=C(O)C=C2)OC2=CC(O)=CC(O)=C12	-9.5179
49	OCCC1=CC=C(O)C=C1	-9.4235
50	COC1=CC(O)=CC2=C1C(=O)O[C@@H](C)CCCCCCC2	-10.7432
51	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2C3=CC=C4C[C@@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C	-10.0100
52	COC1=CC(OC)=C2C(O)=C3C(=O)C=C(C)OC3=CC2=C1	-10.6761
53	CC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(O)C=C(O)C=C3C(=O)C2=C1	-10.0799
54	COC(=O)C1=CC=C(O)C=C1	-10.1992
55	CC(=O)C1=CC(C)=C(O)C(C)=C1O	-10.4530
56	CC1=CC(O)=CC(OC(=O)C2=C(C)C=C(O)C=C2O)=C1	-10.0646
57	CCCC[C@H](O[C@@H]1O[C@H](CO)[C@@H](OC)[C@H](O)[C@@H]1O)[C@@H]1CC(OC)=CC(=O)O1	-10.7685
58	COC(=O)C1=C(C)C=C(O)C=C1O	-10.3816
59	CC1=CC(O)=CC(O)=C1	-9.5493
60	C[C@@H]1OC(=O)C2=C(O)C=CC=C2[C@H]1O	-9.9751
61	O=C(O)CC1=CC=C(O)C=C1	-9.6191
62	COC(=O)C1=CC=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(C)C=C1O2	-10.0530
63	COC1=CC=CC2=C1C(=O)O[C@@H](C)C2	-9.4701
64	COC1=CC(=O)[C@H]2O[C@@]2(C)[C@H]1O	-10.0842
65	COC1=CC(=O)C[C@@](C)(O)[C@H]1O	-10.0695
66	C=C1CC[C@H]2O[C@]2(C)CC[C@@H]2[C@@H]1CC2(C)C	-9.8014
67	C=CC(C)(C)[C@]12NC3=C(O)C=CC=C3[C@@]1(O)C[C@H]1C(=O)O[C@@H](CC3=CC=CC=C3)C(=O)N12	-9.0595

68	O=C1C=CC2=CC(O)=C(O)C=C2O1	-10.0218
69	C=CCC1=CC(OC)=C(OC)C(OC)=C1	-10.2990
70	CC[C@@H](C)C(=O)[C@@H](C)C1=CC(O)=C(C)C(O)=C1C=O	-11.1540
71	CC1(C)C=CC2=C(C=CC3=C2NC(=O)[C@@]32C[C@@]34NC(=O)[C@]5(CCCN5C3=O)C[C@H]4C2(C)C)O1	-9.8892
72	O=C1CCC2(OC3=CC=CC4=CC=CC(=C34)O2)C2=CC=CC(O)=C12	-9.0939
73	O=C1CCC2(OC3=CC=CC4=CC=CC(=C34)O2)C2=C(O)C=CC(O)=C12	-9.0648
74	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CCC2=C3C=CC4=CC(=O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@@]21C	-9.7589
75	COC1=CC(=O)[C@@H]2O[C@]2(C)[C@H]1O	-10.2330
76	O=C(O)C1=CC=C(O)C=C1	-10.2368
77	N[C@@H](CC1=CC=CC=C1)C(=O)O	-9.4470
78	O=C(O)C=CC1=CC=CC=C1	-8.8589
79	COC1=CC(C(=O)O)=CC=C1O	-10.6729
80	COC1=CC(C=O)=CC=C1O	-10.1098
81	CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O	-10.1856
82	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	-9.1041
83	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	-9.0257
84	CCCCCCCCCCCCCCCCC=CCCCCCCCCCCCCCCCC	-9.1074
85	COC1=CC(=O)C(O)=C(C)C1=O	-10.3606
86	COC1=C(O)C(=O)C(O)=C(C)C1=O	-10.2848
87	CC[C@H](C)[C@H]1NC(=O)C2=C1N(C)C1=CC=CC=C1C2=O	-9.9444
88	CN1C2=C(C(=O)NC2=O)C(=O)C2=CC=CC=C21	-9.6546
89	O=CC1=CC=CC=C1	-8.3144
90	O=C1C=CC2=CC=CC=C2O1	-9.0429
91	NC(=O)C1=CC=CC=C1	-8.9456
92	O=C(N[C@H](CO)[C@H](O)C1=CC=C([N+](=O)[O-])C=C1)C(Cl)Cl	-10.6804
93	C[C@@H]1C[C@@H]([C@H](O)CC2CC(=O)NC(=O)C2)C(=O)[C@@H](C)C1	-11.1348
94	COC1=CC(C)=CC=C1O	-10.1806
95	CC1=CCC(C(C)C)=CC1	-8.8348
96	CC1=CC=C(C(C)C)CC1	-8.8318
97	CCCCCCC(C)=O	-8.9675
98	COC(=O)C1=CC=CC=C1N	-9.9308
99	CCCCCCCCCO	-8.9088
100	CC(=O)OCCCC1=CC=CC=C1	-9.1516
101	O=C1C(C2=CC=C(O)C=C2)=COC2=CC(O)=CC(O)=C12	-9.7469
102	O=C1C(C2=CC=C(O)C=C2)=COC2=CC(O)=CC=C12	-9.6777

103	OC1=CC(O)=C2C[C@H](O)[C@@H](C3=CC=C(O)C(O)=C3)OC2=C1	-10.2533
104	COC1=CC=C(C2=CC(=O)C3=C(OC)C(OC)=C(OC)C(OC)=C3O2)C=C1OC	-10.2807
105	O=C1C(C2=CC=C(O)C=C2)=COC2=CC(O[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)=CC(O)=C12	-10.5436
106	N[C@@H](CC1=CNC2=CC=CC=C12)C(=O)O	-9.4794
107	CC1=CC=NC(NS(=O)(=O)C2=CC=C(N)C=C2)=N1	-9.8557
108	COC1=CC=C(NS(=O)(=O)C2=CC=C(N)C=C2)N=N1	-9.7689
109	O=C1C=C(C2=CC=C(O)C(O)=C2)OC2=CC(O)=CC(O)=C12	-10.0982
110	COC1=CC=C([C@@H]2CC(=O)C3=C(O)C=C(O)C=C3O2)C=C1O	-10.5308
111	O=C(CCC1=CC=C(O)C=C1)C1=C(O)C=C(O)C=C1O	-9.6870
112	OC1=CC=C(C=CC2=CC(O)=CC(O)=C2)C=C1	-9.2736
113	COC1=CC=C(O)C=C1	-9.6993
114	OCCCCCO	-9.0560
115	CCOC1=CC=C(NC(C)=O)C=C1	-9.0932
116	CCOC(=O)C1=CC=CC=C1C(=O)OCC	-10.3510
117	C1=CNN=C1	-8.0885
118	NC(=O)C1=CC=CC=C1O	-10.0176
119	C=CC1=CN=CC2=C1CCOC2=O	-9.4036
120	CCC=CCC=CCC=CCCCCCCCC(=O)O	-10.2860
121	CCOC(=O)C1=CC=CC=C1	-9.5344
122	CC(=O)C1=CC=CC=C1	-8.5367
123	COC1=CC=C(C(C)=O)C=C1	-9.4216
124	CCC(=O)OCCC(C)C	-9.3445
125	CC(=O)OCC(C)C	-9.2267
126	CC(=O)OCC1=CC=CC=C1	-8.7295
127	CC(=O)OCCC(C)C	-9.2666
128	CC=CC1=CC=C(OC)C(OC)=C1	-9.7680
129	CC(C)=CCCC(C)=CC=O	-9.4135
130	CC(C)=CCCC(C)=CCOC=O	-9.5001
131	OCC=CC1=CC=CC=C1	-8.5284
132	O=CCC1=CC=CC=C1	-8.1833
133	OCCC1=CC=CC=C1	-8.7070
134	CCC1(C2=CCCCC2)C(=O)NC(=O)NC1=O	-10.3755
135	OCC1=CC=CO1	-8.8135
136	CC(=O)C1=CC=CS1	-9.1748
137	C=CC(C)=CCC=C(C)C	-8.6940
138	CC=CC=CC=O	-8.8386
139	COC1=CC=C(C=CC(=O)O)C=C1	-9.8642
140	CC(=O)CCC=C(C)CCC=C(C)CCC=C(C)C	-9.8671
141	CSSSC	-8.7966

142	CC(C)CCO	-8.6664
143	CCCCCC=CCC=CCCCCCCCC(=O)O	-10.3290
144	CC=CC1=CC=C(OC)C=C1	-9.1844
145	O=C(O)C=CC(=O)O	-9.3224
146	CC(C)=CCCC(C)=CCCC(C)=CCCC=C(C)CCC=C(C)CCC=C(C)C	-9.0165
147	CCCCC=CCCCCCCCC(=O)O	-9.7590
148	CCCCCC=CCC=CCC=CCC=CCCCC(=O)O	-9.9107
149	CCCCCO	-8.6354
150	C=CC(C)=CCC=C(C)CCC=C(C)C	-9.1529
151	COC1=CC2=C(OC(=O)C=C2)C(OC)=C1O	-10.7855
152	O=C(O)C1=CNC2=CC=CC=C12	-9.6584
153	COC(=O)C1=CC=CC=C1O	-10.4798
154	CC(=O)C=CC1=C(C)CCCC1(C)C	-9.9775
155	C1CCCCC1	-8.0354
156	C[C@H](N)C(=O)C1=CC=CC=C1	-9.7375
157	C=CCCCCCCCCCCCCCCC	-9.4253
158	OC[C@@H](O)C(O)[C@@H](O)CO	-9.9256
159	CC1=CC=CC=C1O	-8.9017
160	O=C1OC2=C(O)C(O)=CC3=C2C2=C(OC3=O)C(O)=C(O)C=C12	-10.5063
161	CSSC	-8.4268
162	CC1=CC=C(C=O)O1	-9.4609
163	CC1=CC=CC=C1	-8.1955
164	CCCCCCC=CCCCCCCCC(=O)O	-10.2686
165	CCCCCC=CCC=CCCCCCCCC(=O)OC	-10.3270
166	CC1=CN=C(C)C=N1	-9.1801
167	CCCCCCCCCCCCCCCCCCC	-8.8651
168	CCCCCCCCCCCCCCCC	-9.0833
169	CC1=CC=CC=C1C	-8.7880
170	O=C1C[C@@H](C2=CC=C(O)C(O)=C2)OC2=CC(O)=CC(O)=C12	-10.1548
171	O=C(O)C=CC1=CC=CC=C1O	-9.5592
172	CCC=CCC=CCC=CCC=CCC=CCCCC(=O)O	-9.0921
173	CCCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O	-10.0718
174	CCC=CCC=CCC=CCC=CCC=CCC=CCCC(=O)O	-9.3048
175	O=C(O)C1=CC=C(O)C(O)=C1	-10.1875
176	CC(=O)O	-8.7527
177	CC1=C(C=O)C(C)(C)CC=C1	-9.4977
178	CCCCCCCCC=CCCCCCCCC(=O)O	-10.2255
179	C=CCC1=CC=C(O)C=C1	-8.5042
180	CCCCCCCCCCC=O	-8.7517
181	C=C(C)[C@@H]1CCC2=CCC[C@@H](C)[C@]2(C)C1	-9.3715

182	CCOC(C)=O	-9.0678
183	CC1=CC=CC(C)=C1	-8.6226
184	CCCCCCCCCCCCCCCC(N)=O	-10.2298
185	CCC(=O)O	-8.8401
186	O=CO	-8.4055
187	O=C(C=CC=CC1=CC=C2OCOC2=C1)N1CCCCC1	-9.6477
188	CCCCC=CC=CC=CCCCCCCCC(=O)O	-10.3690
189	CC(=O)C(=O)O	-9.1417
190	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O	-9.9546
191	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	-8.9700
192	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	-8.9452
193	CCCCCCCCCCCCCC(=O)O	-9.8262
194	CCCCCCCCC=CCCCCCCCC(=O)OC	-10.2741
195	CCCCCC1=CC=CO1	-8.7645
196	CC1=NC(C)=C(C)S1	-9.7293
197	CCCCCCCCO	-9.0054
198	CC1=CC=C(C(C)C)C=C1	-8.5735
199	OC1=CC=CC=C1	-8.6869
200	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	-8.8455
201	C=CC1=CC=C(O)C(OC)=C1	-10.0539
202	N[C@@H](CCCCN[C@@H](CCC(=O)O)C(=O)O)C(=O)O	-9.8281
203	COC1=CC(O)=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(C)C=C1C2=O	-10.2041
204	CCCCCCCCCCCCCCCCCC	-9.0067
205	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC(C)C	-8.8967
206	CC1=CC=C2C(=C1)[C@H](C(C)C)CC[C@@H]2C	-9.2591
207	CC(C)C1=CC=C(C=O)C=C1	-8.6873
208	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	-8.8982
209	O=C(O)CC1=CC=CC=C1	-9.1750
210	O=C(O)CC(O)(CC(=O)O)C(=O)O	-9.2457
211	O=C(O)CC1=CNC2=CC=CC=C12	-9.2345
212	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	-9.0201
213	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	-9.0184
214	CC1=CC=CC=C1C(C)C	-8.5701
215	CC(=O)OCCC1=CC=CC=C1	-9.0973
216	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	-8.9558
217	O=C(O)CC1=CC=C(O)C(O)=C1	-9.8788
218	O=C(/C=C/C1=CC=C(O)C(O)=C1)O[C@@H]1C[C@@](O)(C(=O)O)C[C@@H](O)[C@@H]1O	-10.4524
219	COC1=CC([C@@H]2C3=CC4=C(C=C3[C@H](O)[C@H]3COC(=O)[C@H]23)OCO4)=CC(OC)=C1OC	-10.3968
220	CCCCCCCC(C)=O	-9.0998
221	CC(C)(C)CC(C)(C)C1=CC=C(O)C=C1	-9.4643
222	CCCCCCCCCC(=O)O	-9.4221

223	COC1=CC(C=O)=CC(OC)=C1O	-10.6302
224	CC1=CC[C@@]23C[C@@H]1C(C)(C)[C@@H]2CC[C@H]3C	-9.5924
225	C[C@H]1CC[C@@H](C(C)(C)O)CC2=C1CC[C@@H]2C	-10.5924
226	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCO	-9.5317
227	CCCCCCCCOC(=O)C1=CC=CC=C1C(=O)OCCCCCCCC	-10.7686
228	CCCCCCCC(=O)O	-9.3494
229	CC[C@H](C)[C@H](N)C(=O)O	-9.8183
230	C1=CC=C2NC=CC2=C1	-7.9972
231	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC3=CC(O)=CC(C)=C3C2=C1	-10.6102
232	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCO	-9.5071
233	CC1=C2[C@H](CC1)[C@H](C)CC[C@@H]1[C@H]2C1(C)C	-9.6296
234	OCC1=CC=CC=C1	-8.4986
235	CCCCCCCCCC(C)=O	-8.9719
236	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	-9.0271
237	CC(C)=CCC[C@]1(C)[C@H]2CC=C(C)[C@@H]1C2	-9.5078
238	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O	-10.0472
239	CCCOC(=O)C1=CC=CC=C1C(=O)OCCC	-10.3921
240	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCO	-9.4209
241	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	-9.0795
242	O=C(O)C1=CC=CC=C1	-9.3046
243	O=CC1=CC=CO1	-8.9771
244	O=C(O)CCC(=O)O	-9.3964
245	C=CCC1=CC=C(O)C(OC)=C1	-9.6613
246	COC1=CC=CC=C1O	-9.7826
247	O=C1C2=CC=CC(O)=C2C(=O)C2=C(O)C=CC=C12	-9.6189
248	CC1=CC(O)=CC2=C1C1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)O2	-10.0721
249	CCCCC(=O)CC	-8.5268
250	COC1=CC=C2C=CC(=O)OC2=C1C[C@@H]1OC1(C)C	-10.1374
251	OCC(O)CO	-9.3600
252	CC1=CC(=O)OC2=CC(N)=CC=C12	-9.2181
253	CC1=CC=C(C(C)C)C=C2C(C)=CC=C12	-9.0186
254	O=C1C(C2=CC=C(O)C=C2)=COC2=CC(O[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)=CC=C12	-9.8315
255	O=C1C2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)C2=C(O)C=C(CO)C=C12	-9.9246
256	CCCCCCCCCCCCCC(C)=O	-9.5994
257	CC1=CC(=O)CC(C)(C)[C@@]1(O)/C=C/[C@@H](C)O	-10.7248
258	C=C(C)[C@@H]1CC[C@@]2(C)CCC=C(C)[C@@H]2C1	-9.2365
259	CC1=CCC(=C(C)C)CC1	-8.7552
260	CC(C)=CCCC1=COC=C1	-8.8847
261	CO	-8.0397
262	O=C(O)C1=CC(O)=CC=C1O	-10.0001

263	C=CCCCCCCCCCCCCC	-9.0433
264	NCCCC[C@H](N)C(=O)O	-9.7871
265	CCCCCCCCCCCC=O	-8.8488
266	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	-8.8770
267	CCCC(=O)O	-8.7568
268	COC(=O)C1=CC=CC=C1	-9.5033
269	CC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(O)C=CC=C3C(=O)C2=C1	-9.7328
270	CC[C@@]1(O)C(=O)OCC2=C1C=C1C3=NC4=CC=CC=C4C=C3CN1C2=O	-8.9009
271	CCC1=CC=CC=C1	-8.0311
272	C[C@@](O)(CCO)CC(=O)O	-10.0126
273	CC1=CC=C(O)C=C1	-8.7923
274	C=CCC1=CC=C(OC)C=C1	-8.6612
275	CC1=CC=C2C(=O)C3=C(O)C=CC(O)=C3C(=O)C2=C1	-9.6696
276	CCCCCCCCCCCC(=O)O	-9.2880
277	CC1=CC(C(C)(C)C)=C(O)C(C(C)(C)C)=C1	-9.6282
278	COC1=CC(C(=O)O)=CC(OC)=C1O	-10.6351
279	CC1=CC=C(C(C)C)C=C1O	-9.2343
280	NC(=O)C1=CC=CN=C1	-8.8268
281	CC1=CC(=O)CC(C)(C)C1	-9.1686
282	CC1=C(C=O)C(C)(C)CCC1	-9.4028
283	CC(=O)CCC=C(C)CCC=C(C)C	-9.6562
284	O[C@H]1[C@H]2C3=CC4=C(C=C3CN3CCC(=C[C@@H]1O)[C@H]23)OCO4	-10.8746
285	CC(C)=CCCC(C)=C1CC=C(C)CC1	-9.0298
286	CCCCCC=CCC=CCCCCCCCC(=O)OCC	-10.0460
287	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC	-10.0875
288	CCCCCCCCC=CCCCCCCCC(=O)OCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	-9.8397
289	CSS(C)(=O)=O	-10.0113
290	O=C1C[C@H](C2=CC=C(O)C=C2)OC2=CC(O)=CC(O)=C12	-9.8386
291	CCCCCCCCCCCCCCCCCCO	-9.4346
292	C[C@H]1CC2=CC=CC(O)=C2C(=O)O1	-9.5903
293	OC1=CC=CC(O)=C1O	-9.5418
294	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC	-9.9923
295	C=C1CC/C=C(/C)CC[C@@H]2[C@@H]1CC2(C)C	-9.2993
296	COC1=C(O)C=C2OC(C3=CC=C(O)C=C3)=CC(=O)C2=C1O	-10.7495
297	CCCCCCCCCC(=O)OC	-9.2986
298	COC(=O)CCCCCCCCCCCC(C)C	-10.0475
299	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(O)C=C(C)C=C3C(=O)C2=C1	-10.0673
300	C[C@@H]1OC(=O)C2=C(O)C=CC=C2[C@@H]1O	-10.0687

301	CC1=CC(O)=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(O)C=C1O2	-10.4138
302	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(O)C=C(C)C=C3OC2=C1	-10.7434
303	CCCCCC[C@H]1C(=O)O[C@H](C)[C@H](NC(=O)C2=CC=CC(NC=O)=C2O)C(=O)O[C@@H](C)[C@@H]1OC(=O)CC(C)C	-9.8671
304	O=C1OC=CC2=CC=CC=C12	-9.0774
305	OC1=CC=CC=C1O	-9.2306
306	CC[C@H](/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CC=C4C[C@@H](O[C@@H]5O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]5O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C)C(C)C	-10.5891
307	CCCC[C@H]1C(=O)O[C@H](C)[C@H](NC(=O)C2=CC=CC(NC=O)=C2O)C(=O)O[C@@H](C)[C@@H]1OC(=O)CC(C)C	-9.8967
308	CC(C)C[C@@H]1NC(=O)[C@H](C)NC1=O	-9.3910
309	COC1=CC(CCO)=CC=C1O	-9.8208
310	CC(=O)N(O)CCCCCNC(=O)CCC(=O)N(O)CCCCCNC(=O)CCC(=O)N(O)CCCCCN	-10.5753
311	O=C(C1=CC=CC=C1)C1=CC=CC=C1	-8.8459
312	OC[C@@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H](O)CO	-9.8654
313	CC1=CC2=CC=CC=C2N1	-8.0700
314	NC(=O)CC1=CC=CC=C1	-8.9380
315	O=CC1=CNC2=CC=CC=C12	-8.2516
316	OCCC1=CNC2=CC=CC=C12	-8.6098
317	O=C(O)CC1=CC=CC=C1O	-9.7451
318	CC1=CC=CC(O)=C1C(=O)O	-9.9967
319	CCCCCCCCOC(=O)CCCCC(=O)OCCCCCCCC	-10.1375
320	CC(=O)NCCC1=CC=CC=C1	-8.6686
321	CC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)O	-10.2453
322	CC(C)C(N)=O	-9.2144
323	CC(=O)NCCC1=CNC2=CC=CC=C12	-8.6011
324	CC(=O)NCCC1=CC=C(O)C=C1	-9.2271
325	CCCCCC(=O)CC	-8.5604
326	O=C1NC(=O)C2=CC=CC(O)=C2O1	-9.9282
327	C=C1[C@@H](C)CC[C@@]2(C)[C@H]1CC=C(C=O)[C@]2(O)C=O	-10.6692
328	COC1=CC(C=CC(=O)N2CCC=CC2=O)=CC(OC)=C1OC	-10.3886
329	CO[C@H]1[C@@H](O)[C@@H](C)O[C@H](O[C@H]2[C@H](OC3=CC=CC4=C(O)C5=C6C(=C34)OC(=O)C3=C(C)C=CC(=C36)OC5=O)O[C@H](C)[C@H](O)[C@@H]2O)[C@@H]1O	-9.8121
330	O=C1N[C@@H](CC2=CC=CC=C2)C(=O)N2CCC[C@@H]12	-9.4808
331	COC1=CC(OC)=C2C(C3=CC=CC=C3)=CC(=O)OC2=C1	-9.5557
332	COC1=CC(C(=O)CO)=CC=C1O	-10.5013
333	O=C1C[C@@H](O)[C@@H](O)C2=CC=CC(O)=C12	-10.2907

334	CC=CC1=C(O)C(=O)C(C(=O)C2=C(OC)C=C(OC)C=C2C(=O)OC)=CO1	-10.4427
335	CC(=O)C=C1C(=O)NC2=C(CC=C(C)C)C=CC=C12	-9.1667
336	COC1=C(C)C(=O)C2=C(C=C(O)C3=C2O[C@H](C)[C@]3(C)[C@H](O)CC=C(C)C)C1=O	-10.7414
337	COC1=CC(CCC(=O)N2CCC=CC2=O)=CC(OC)=C1OC	-10.1653
338	CCCCOC(=O)C1=CC=CC=C1C(=O)OCCCC	-10.2375
339	O=C(O)C1=CC=CO1	-9.4070
340	O=C1CC[C@@H](O)C2=CC=CC(O)=C12	-10.3378
341	COC1=C(C)C(=O)C2=C(C=C(O)C3=C2O[C@H](C)[C@]3(C)[C@H](O)C/C=C(\C)C(=O)O)C1=O	-10.7965
342	C/C=C(\C)[C@H](O)[C@H](C)/C=C(C)/C=C/C/C(C)=C/CC1=C(C)C(=O)C(OC)=C(OC)N1	-8.9424
343	CC(C)C[C@@H]1NC(=O)[C@@H]2CCCN2C1=O	-9.6784
344	O=C1CNC(=O)[C@H](CC2=CNC3=CC=CC=C23)N1	-9.0883
345	CC(=C\C(=O)O)/C=C(\C)C[C@H](C)CCCC[C@H]1OC(=O)[C@@H]1CO	-10.7939
346	CC(C)C[C@@H]1NC(=O)[C@H](CC2=CC=CC=C2)NC1=O	-9.9023
347	COC1=CC(C(=O)O)=CC(OC)=C1C(=O)O	-10.7885
348	O=CCC1=CNC2=CC=CC=C12	-8.2100
349	CC1(C)C=CC2=CC(C(=O)O)=CC=C2O1	-10.3413
350	O=C(O)C1=CC=C(O)C=C1O	-10.0611
351	CC1=C(O)C(=O)C=CO1	-9.8207
352	O=C(O)C1=CC=CN1	-8.9158
353	O=C1CCCO1	-8.6761
354	CNC(=O)OC1=CC=C2C(=C1)[C@]1(C)CCN(C)[C@@H]1N2C	-9.3184
355	O=C(O)C1=CC=CC(C(=O)O)=N1	-8.9989
356	N[C@@H](CCCC(=O)O)C(=O)O	-9.2272
357	O=C(CO)C1=CNC2=CC=CC=C12	-9.1163
358	CC1(C)CCC[C@]2(C)[C@H]3C(=O)OCC3=CC[C@@H]12	-10.3721
359	O=C1CCC(=O)NCCCCCN(O)C(=O)CCC(=O)NCCCCCN(O)C(=O)CCC(=O)NCCCCCN1	-10.5599
360	CC1=CC2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.2093
361	CC1(C)[C@@H](O)CC[C@]2(C)[C@@H]3C(=CC[C@@H]12)CO[C@H]3O	-11.0496
362	O=C(/C=C/C1=CC=C(O)C(O)=C1)O[C@H](CC1=CC=C(O)C(O)=C1)C(=O)O	-9.5378
363	CC1=CC(O)=C(C)C(=O)O1	-10.2499
364	COC1=CC(=O)C[C@@H](C)[C@]12OC1=CC(OC)=CC(OC)=C1C2=O	-10.3227
365	C=C1CC/C=C(/C)CC[C@H]2[C@@H]1CC2(C)C	-9.2956
366	CC(=O)NC[C@H]1CS[C@@H]([C@@H]2COC(C3=CC=CC=C3O)=N2)N1C	-10.3156

367	CC(C)[C@@H]1NC(=O)[C@@H]2CCCN2C1=O	-9.6273
368	CC1=C2NC=C3C4=C5C(=C(C)C(=O)C4=O)NC=C5C(=C23)C(=O)C1=O	-9.3084
369	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC(C[C@@H](O)C(Cl)Cl)=CC2=C1	-11.0417
370	C=CC(C)(C)C1=C(/C=C2\NC(=O)[C@H](C)NC2=O)C2=CC=CC=C2N1	-9.2327
371	CC(C)CCCCCCCCCCCC(=O)O	-9.9117
372	O=C1CCC(=O)N(O)CCCCCNC(=O)CCC(=O)N(O)CCCCCNC(=O)CCC(=O)N(O)CCCCCN1	-10.4944
373	O=C1N[C@@H](CC2=CC=C(O)C=C2)C(=O)N2CCC[C@@H]12	-9.7732
374	O=C1N[C@@H](CC2=CNC3=CC=CC=C23)C(=O)N2CCC[C@@H]12	-9.7729
375	O=C1C=C(O)C2=C(O)C=C(O)C=C2C1=O	-9.9227
376	CC1(C)OC[C@H](CO)O1	-9.6278
377	C[C@H]1CCC[C@@]2(C)CCCC[C@]12O	-10.0759
378	CC(=O)NCC(=O)C1=CNC2=CC=CC=C12	-9.2186
379	CCCC1=CC(=O)C2=C(CC(=O)O)C=CC=C2O1	-9.8669
380	CCCC1=CC(=O)C2=C(CC3=CC(O)=CC(=O)O3)C=CC=C2O1	-9.4539
381	N[C@@H](CC1=CC=C(O)C=C1)C(=O)O	-9.8138
382	CC(=O)C1=CC=C(O)C=C1	-9.2574
383	O=C(O)CCC1=CC=CC=C1	-8.8993
384	CC1=CN([C@H]2C[C@H](O)[C@@H](CO)O2)C(=O)NC1=O	-9.6181
385	CCCCCCCC1=C(O)C=C(CC=C(C)C)C(O)=C1C=O	-10.3882
386	C=CCCCCCCCCCCCCCCCCC	-9.0868
387	O=C(O)[C@H](O)CC1=CNC2=CC=CC=C12	-8.8499
388	CC(=O)C1=NC=CC2=C1NC1=CC=CC=C12	-8.8021
389	COC1=CC=C(C2=CC(=O)OC3=CC(OC)=CC(OC)=C23)C=C1	-9.8812
390	O=C1N[C@@H](CC2=CC=CC=C2)C(=O)N2C[C@H](O)C[C@@H]12	-9.9984
391	CC1(C)CCC[C@]2(C)[C@@H](C=O)C(C=O)=CC[C@@H]12	-10.2167
392	COC1=CC(C2=CC=CC=N2)=NC(CO)=C1SC	-9.3186
393	COC(=O)C1=CC(C)=NC2=C(CCC(C)(C)OC)C=CC=C12	-10.0648
394	COC1=CC(O)=C(C(=O)O)C(C2=CC(O)=C(O)C=C2C)=C1	-10.4799
395	CC[C@H](CC[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CCC4=CC(=O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C)C(C)C	-10.0928
396	CC(C)=CCC1=CC=C2C(CC#N)=CNC2=C1	-9.1457
397	CC[C@@]1(O)C[C@H](O)C2=C(C=C3C(=O)C4=C(O)C=CC(O)=C4C(=O)C3=C2O)[C@H]1C(=O)OC	-10.1281
398	CC1=CC(C)=C(O)C(C(=O)CC2CC(=O)NC(=O)C2)=C1	-10.8285

399	CCCCCCCCCCCCCCCCCC(N)=O	-10.0606
400	CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O	-9.8651
401	CCCCCC1=CC(O)=C(CCCC)C(O)=C1	-9.6772
402	C=CC1=C(C)C(=CC2=C(C)C(CCC(=O)O)=C(CC3=C(CCC(=O)O)C(C)=C(C=C4NC(=O)C(C)=C4C=C)N3)N2)NC1=O	-8.2526
403	CC1=CC(C)=NC(NS(=O)(=O)C2=CC=C(N)C=C2)=N1	-9.6397
404	O=C(O)CCCCCCCC(=O)O	-9.1489
405	COC1=CC(O)=C2C(=O)C=C(C3=CC=CC(O[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O)=C3O)OC2=C1OC	-10.7520
406	CC(=O)OC[C@@]1(C)[C@@H]2C[C@H](OC(C)=O)[C@@]3(C)OC4=C(C(=O)OC(C5=CC=CN=C5)=C4)[C@H](O)[C@@H]3[C@@]2(C)CC[C@@H]1OC(C)=O	-9.4347
407	C=C(C)[C@H]1O[C@H]2CC[C@@]3(C)[C@@](O)(CC[C@H]4[C@@H]5OC(C)(C)[C@H]6C[C@@H]7C(=C)CC8=C(Cl)C=C9NC(=C5C9=C8[C@@]76O)[C@@]43C)[C@]23O[C@@H]3[C@H]1O	-9.1602
408	CC(C)=CCCC(C)=CCCC(C)=CCO	-9.7925
409	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CC[C@@H]2[C@]1(C)CC[C@H]1[C@]23C=C[C@]2(C[C@@H](O)CC[C@]12C)OO3	-10.6287
410	CCCCCC=CCC=CCCCCCCCC(=O)OC(CO)CO	-10.2193
411	CCCCC=CCCCCCCCCCCCC(=O)O	-10.1384
412	CCCCCCCCC=CCCCCCCCC(N)=O	-10.3497
413	CCCCCC=CC=CCCCCCCCCC(=O)O	-10.2031
414	CCCCCCC=CCCCCCCCCCC(=O)O	-10.1849
415	CCCCCCCCC=CCCCCCCCCCCCC(N)=O	-10.3170
416	CCCCCCCCC=CCCCCCCCCCCCC(=O)O	-10.0460
417	CCCCCCC=CCCCCCCCCCC(=O)OC	-10.1876
418	CCCCCCC=CC=CCCCCCCCC(=O)O	-10.2238
419	CCCCCCCCC=CCCCCCCCC(=O)OCC	-10.0321
420	CCCCCC=CCC=CCC=CCCCCC(=O)OC	-10.0927
421	CCCCCCCCCCCC=CCCCCC(=O)O	-10.0976
422	CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCC	-9.9056
423	CCCCCCC=CCCCCCCCC(=O)OC	-10.2662
424	CCCC(=O)C1=C(OC)C=C(O)C(CCO)=C1O	-10.7862
425	CS[C@]1(CO)C(=O)N2[C@H]3C(=CC=C[C@@H]3O)C[C@@]2(SC)C(=O)N1C	-10.2253
426	CNC(=O)ON=C(CSC)C(C)(C)C	-10.1622
427	COC1=C(C)C2=C(C(=O)OC2)C(O)=C1CC=C(C)CCC(=O)O	-10.5899
428	COC1=C(C=CC(C)(C)O)C=CC2=C1C(=O)OCC1=CC(C)=CC(O)=C1O2	-10.2699
429	CC=CC=CC(=O)C1=CC(C)=C(O)C(C)=C1O	-10.3020

430	CC1=CC(=O)C2C(C)(C)CCC[C@]2(C)[C@H]1CC[C@H](C)CC(=O)O	-10.7213
431	COC1=CC(CC(=CNC(C)=O)N(CC(=O)CC2=CC=CC=C2)C(C)=O)=CC2=C1OCO2	-9.4589
432	CC(=O)O[C@H]1C[C@@]2(C)[C@@H](CC[C@H]3[C@@]4(C)C=CC(=O)[C@@H](C)[C@@H]4[C@H](OC(C)=O)C(=O)[C@@]32C)/C1=C(\CCC=C(C)C)C(=O)O	-9.3876
433	C[Si]1(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O1	-9.1998
434	C[Si]1(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O1	-9.3921
435	CC1(C)CC2=C(CC3=CC4=C(C=C23)NC2=C4C[C@@H]3CC[C@@]4(O)C5=CC(=O)C6O[C@@]5(CC[C@]4(C)[C@@]23C)OC6(C)C)C(C)(C)O1	-8.9523
436	C[Si]1(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O1	-8.7455
437	C1=CC=C2C(=C1)NC1=CN=CC=C12	-8.1753
438	CCC[C@@H](O)[C@H](O)C1=CC(OC)=CC(=O)O1	-10.2805
439	CC(=O)C1CC(CC(=O)O)C1(C)C	-9.6465
440	O=C(C=CC1=CC=CC=C1)OCC1=CC=CC=C1	-8.5897
441	COC(=O)[C@]12OC3=CC=C(C4=CC=C5O[C@@]6(C(=O)OC)C(=C(O)C5=C4O)C(=O)C[C@@H](C)[C@@H]6O)C(O)=C3C(O)=C1C(=O)C[C@@H](C)[C@@H]2O	-10.6433
442	O=C1OC(=CC2=CC=C(O)C=C2)C(O)=C1C1=CC=C(O)C=C1	-9.0135
443	C[C@H]1CCC/C=C/[C@@H]2C[C@H](O)C[C@H]2[C@H](O)/C=C/C(=O)O1	-10.5005
444	CC=CC1=CC(OC)=C(OC)C=C1OC	-10.2543
445	CC1=C(O)C(O)=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(O)C=C1O2	-10.6547
446	COC(=O)C1=CC(OC)=CC(O)=C1OC1=CC(C)=CC(O)=C1C(=O)OC	-10.8485
447	CC1=CC2=C(C(=O)C3=C(O)C=C(O)C=C3C2=O)C(O)=C1C(=O)O	-10.1272
448	CC=CC1=C(OC)C(=O)C(C(=O)C2=C(OC)C=C(OC)C=C2C(=O)OC)=CO1	-10.4335
449	CNC(=C[N+](=O)[O-])NCCSCC1=CC=C(CN(C)C)O1	-10.1679
450	CC(=O)N[C@@H](CC1=CC=CC=C1)C(=O)O	-9.5889
451	CC[C@H](C)/C=C(C)/C=C/C1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@](C)(OC(C)=O)C(=O)C2=CN1CCO	-9.5746
452	CC(C)=CCCC(C)=CCCC(C)=CC=O	-9.5547
453	NC1=CC=C(S(=O)(=O)NC2=NC=CC=N2)C=C1	-9.1657
454	C[C@@H]1N[C@H]2N(C1=O)C1=CC=CC=C1[C@@]2(O)C[C@@H]1C(=O)N[C@@H](C)C2=NC3=CC=CC=C3C(=O)N21	-8.8681
455	CC(C)(C)C1=CC(=O)C(C(C)(C)C)=CC1=O	-9.9294
456	C=C(C)[C@]1(O)CC[C@]2(C)[C@H](CC=C(C)[C@]23OC2=C(C(=O)OC(C4=CC=CN=C4)=C2)[C@@H]3O)[C@@]12CCC(=O)OC2	-9.4264

457	CC1=CC(=O)OC[C@]23CCC(C)=C[C@H]2O[C@@H]2C[C@@H](OC(=O)/C=C\C=CC(=O)OCC1)[C@@]3(C)[C@]21CO1	-9.9815
458	COC1=CC(O)=C(C(C)=O)C(OC)=C1	-10.7797
459	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(O)C=C(CO)C=C3C(=O)C2=C1	-10.2838
460	CCOC(=O)C=CC1=CC=C(OC)C=C1	-9.8086
461	CC(C)C(N)C(=O)NC(CCCN=C(N)N)C(=O)O	-10.6005
462	C=C1C[C@]2(O)[C@@]3(C)CCC(=O)C(C)(C)C3=C(O)C(=O)[C@@]2(C)[C@@H]2C(=O)O[C@@](C)(C(=O)OC)C(=O)[C@@]12C	-10.1825
463	COC(=O)C1=CC=CC=C1C(=O)OC	-10.1887
464	COC(=O)C1=CC(O)=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(C)C=C1O2	-10.9081
465	O=C(O)C(CC1=CC=C(O)C=C1)NC(=O)C1CCCN1	-10.4956
466	CC(C)(C)C1=CC(=O)C=C(C(C)(C)C)C1=O	-9.9574
467	COC1=CC(O)=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(CO)C=C1C2=O	-10.3019
468	CCCCCCCCC=CCCCCCCCCCCC(=O)O	-10.1333
469	COC1=CC(C=CC2=CC(O)=CC(O)=C2)=CC=C1O	-9.8918
470	CCCCCCCCCCCCC1=CC=C(S(=O)(=O)O)C=C1	-10.1756
471	COC1=CC(C=CC(=O)C2=CC=C(O)C=C2O)=CC=C1O	-9.8500
472	C[Si]1(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O1	-9.5070
473	CC(C)[C@H]1C(=O)O[C@H](C(C)C)C(=O)N(C)[C@@H](C(C)C)C(=O)O[C@H](C(C)C)C(=O)N(C)[C@@H](C(C)C)C(=O)O[C@H](C(C)C)C(=O)N1C	-9.3003
474	COC1=CC(C)=C(OC2=CC(C)=CC(O)=C2O)C(O)=C1	-10.5359
475	COC1=CC2=C(OC(=O)C=C2)C(O)=C1O	-10.7776
476	CC[C@H](C)/C=C(C)/C=C/C1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@](C)(O)[C@H](OC(C)=O)[C@H]2CO1	-10.2265
477	COC(=O)C1=CC(OC)=CC(OC)=C1C(=O)C1=C(O)C=C(C)C=C1O	-10.9447
478	C[C@]1(OC(=O)/C=C/C2=CC=CC=C2)C[C@@H](O)[C@]2(O)C=CO[C@@H](O[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)[C@@H]21	-9.4688
479	CC(C)[C@H]1CCC(CO)=C[C@@H]1/C=C(\CO)C(=O)O	-10.8297
480	CC1=C2[C@H]3OC(=O)[C@@H](C)[C@@H]3CC[C@@]2(C)C=CC1=O	-10.4999
481	CC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(O)C=C(O)C=C3C(=O)C2=C1O	-10.5736
482	CC1=CC(=O)C2=C(O)C(C)=C(O)C(C)=C2O1	-10.4918
483	CC(C)[C@H]1CC[C@@]2(O)COC(=O)[C@H]2[C@@H]1/C=C(\CO)C(=O)O	-10.8795
484	CCCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC	-10.0459

485	CC(C)CCCCCOC(=O)C1=CC=CC=C1C(=O)OCCCCCC(C)C	-10.5611
486	C/C=C(\C)[C@@H]1C(C)=C[C@@H]2[C@H]([C@@H]1/C=C/C=C/C(=O)O)[C@@H](C)CC[C@@H]2O	-10.2720
487	C[C@H]1CCCC(=O)CCC/C=C/C2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.4497
488	CCCCCCCCCCCCCCCC[C@@H](O)[C@@H](N)CO	-10.2441
489	O=C1NC(=O)C2=C(N1)NC(=O)N2	-9.2500
490	COC1=CC=C2C(=C1)C(CC(=O)O)=C(C)N2C(=O)C1=CC=C(Cl)C=C1	-9.6076
491	CC[C@H](C)/C=C(C)/C=C/C(=O)CC1=CC(O)=C(C)C(O)=C1C=O	-10.6087
492	CCCC[C@H](O)[C@@H]1CC(OC)=CC(=O)O1	-10.1958
493	CCC1=NC=CN=C1C(C)=O	-9.3612
494	COC1=CC(O)=C(C(C)=O)C(CC(=O)O)=C1	-10.5157
495	COC1=CC(O)=CC2=C1C(=O)C(C1=CC=C(O)C=C1)=CO2	-10.0979
496	C[C@@H](O)[C@@]12SS[C@]3(C(=O)N1C)[C@@H](O)[C@]1([C@@]45C6=CC=CC=C6N[C@@H]4N4C(=O)[C@]6([C@@H](C)O)SS[C@]4(C(=O)N6C)[C@H]5O)C4=CC=CC=C4N[C@@H]1N3C2=O	-8.7999
497	CCCCCCC(C)[C@@H]1CC(=O)NCC(=O)N[C@@H](C(C)C)C(=O)N[C@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H](C)C(=O)N[C@@H](CC2=CC=CC=C2)C(=O)O1	-10.6872
498	COC1=CC=C2NC=C(C(=O)C(=O)N3CCCCC3)C2=C1	-10.3529
499	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCOC(=O)CCC1=CC(C(C)(C)C)=C(O)C(C(C)(C)C)=C1	-9.8536
500	COC(=O)[C@]1(CC2=CC=C(O)C(CC=C(C)C)=C2)OC(=O)C(O)=C1C1=CC=C(O)C=C1	-9.5766
501	C=C1C[C@]23C[C@@]1(O)CC[C@H]2[C@@]12C=C[C@H](O)[C@@](C)(C(=O)O1)[C@H]2[C@@H]3C(=O)O	-10.9119
502	COC1=CC(CO)=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(O)C=C1C2=O	-10.1997
503	O=C1NC2=CC=CC=C2C(C2=CC=CC(O)=C2)=C1O	-8.5506
504	CC1=C(O)C(C(=O)O)=C(O)C2=C1[C@H](C)[C@@H](C)OC2=O	-10.4386
505	C[C@H]1CC=C[C@H]2[C@@H]3O[C@]3(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@]32OC(=O)OC=C[C@@](C)(O)C1=O	-8.6981
506	C[C@@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H](O)[C@H](O)C[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C=C3C(=O)NCC3=C1O2	-11.3881
507	CC1=CC2=C(C)C=C(O)C=C2C(=O)O1	-10.5205
508	CCCCCCCCCCCCCC(=O)OC	-9.9482
509	CCCCC1=CC=C(C(=O)O)N=C1	-9.0860
510	CC1=CC[C@]2(C)C(=O)C(O)=C([C@H](C)CO)[C@H]2C/C=C(\C)[C@@H](O)CC/C(C)=C/CC1	-10.3763

511	CC(C)[C@H]1OC(=O)[C@H](CC2=CC=CC=C2)N(C)C(=O)[C@@H](C(C)C)OC(=O)[C@H](CC2=CC=CC=C2)N(C)C(=O)[C@@H](C(C)C)OC(=O)[C@H](CC2=CC=CC=C2)NC1=O	-8.8315
512	CNC(=O)OC1=CC=CC2=C1OC(C)(C)C2	-9.8766
513	C=C1CC[C@H]2C(=C)CC[C@H]3C(=C)C(=O)O[C@@H]3[C@@H]12	-9.9151
514	COC1=CC(O)=C(C(=O)C2=C(C)C=C(O)C=C2OC)C(O)=C1Cl	-10.6595
515	COC(=O)C1=CC(OC)=CC(O)=C1C(=O)C1=C(O)C=C(C)C=C1O	-10.7235
516	COC(=O)C1=CC(O)=CC(OC)=C1C(=O)C1=C(O)C=C(C)C=C1O	-10.7397
517	C#CCCCCCCCCC(=O)O	-9.2474
518	CC1=CC2=NC3=C(N=C2C=C1C)C(=O)NC(=O)N3	-10.0774
519	CCCCCC[C@H](O)[C@@H]1CCC2=C(O1)[C@H](O)CCC2=O	-10.7898
520	CCCCCCCCCCCCC/C=C/[C@@H](O)[C@@H](N)CO	-10.4315
521	COC1=CC(O)=C(C(=O)C2=C(C)C=C(O)C=C2OC)C(O)=C1	-10.5459
522	CC[C@H]1O[C@@H]2O[C@H](/C=C/C=C/C=C/C3=C(C)C(OC)=CC(=O)O3)[C@H](O)[C@]2(C)[C@@]1(C)O	-9.9885
523	COC(=O)C1=CC(O)=CC(OC)=C1OC1=CC(C)=CC(O)=C1C(=O)O	-10.9339
524	O=C1C[C@H](O)[C@@H]2C3=C(C=CC(O)=C13)C1=CC=C(O)C3=C1[C@@]2(O)CCC3=O	-10.6330
525	CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC(CO)CO	-10.2763
526	C=CC(C)(C)C1=C(C[C@@H]2NC(=O)[C@H](C)NC2=O)C2=CC(CC=C(C)C)=CC(CC=C(C)C)=C2N1	-8.8432
527	CC(=O)NC1=C(C)N(C)N(C2=CC=CC=C2)C1=O	-9.3311
528	CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC	-10.0684
529	COC1=CC(C2=CC=C(O)C=C2)=C(OC)C(O)=C1C1=CC=C(O)C=C1	-9.7327
530	COC(=O)C1=CC(O)=CC(OC)=C1OC1=C(Cl)C(C)=C(Cl)C(O)=C1C(=O)OC	-10.5641
531	C=CC(C)(C)C1=C(C[C@@H]2NC(=O)[C@H](C)NC2=O)C2=CC=CC=C2N1	-9.5160
532	COC(=O)C1=CC(O)=CC(OC)=C1C(=O)C1=C(O)C=C(C)C=C1OC	-11.0215
533	CCOC(=O)CC1=CC(O)=CC(O)=C1C(C)=O	-10.5632
534	CC1(C)C=CC2=C(C=CC3=C2N=C2C(C)(C)[C@@H]4C[C@]56CCCN5C(=O)[C@@]4(C[C@]23O)NC6=O)O1	-10.5550
535	C=C1C[C@]23C[C@H]1CC[C@H]2[C@]1(C)CCC[C@@](C)(C(=O)O)[C@H]1[C@@H]3C(=O)O	-10.9101
536	C[C@H]1CCC/C=C\C(=O)C2=C(O)C=C(O)C=C2CC(=O)O1	-10.7310

537	CCCCC(CC)COC(=O)CCCCCCCCC(=O)OCC(CC)CCCC	-10.2121
538	CCCCCCCC1=C(O)C(=O)C2=CC=CC=C2N1	-9.3314
539	CC(=O)OCC=C(C)CCC=C(C)CCC=C(C)C	-9.8569
540	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(C)C=C(O)C=C3OC2=C1	-10.8347
541	CCCCOC(=O)C1=CC=CC=C1C(=O)O	-10.5038
542	CCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCC	-9.9637
543	COC(=O)C1=CC(O)=CC(OC)=C1OC1=CC(C)=CC(O)=C1C(=O)OC	-10.8869
544	COC1=CC=C2C3=C4[C@H](CC(C)(C)OO[C@H](C=C(C)C)N4C2=C1)N1C(=O)[C@@H]2CCCN2C(=O)[C@]1(O)[C@H]3OCC=C(C)C	-9.9576
545	CCC[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H]1CC(OC)=CC(=O)O1	-10.2903
546	CC1=NCCC2=C1NC1=CC(O)=CC=C21	-9.6177
547	COC(=O)CCCCCCCCCCCCC(C)C	-10.0802
548	C=C(C)[C@@H]1CC[C@H](C)C2=C(C1)[C@@H](C)CC2	-9.5502
549	CC=CCCCCCCCCCC	-8.7197
550	CC=CCCCCCCCC	-8.4332
551	CCCCCCCCC=CC=O	-8.7282
552	CCC=CCCCCCCCC(=O)OC	-9.5534
553	CC=C(C=O)C=CC=C(C)C	-8.7869
554	COC1=CC(C)=C2C(OC)=CC(=O)OC2=C1	-10.4928
555	CC1=CC=C(C)C(C=O)=C1	-8.9310
556	CC(=O)O[C@H]1C[C@]2(O)[C@@H]3CC[C@@H]4C[C@@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]2(C)[C@H]1C1=COC(=O)C=C1	-11.2689
557	O=CC1=CC=C(CO)O1	-9.4035
558	CCCCCCCC(=O)OC	-9.2554
559	C=CCCCCCCC=CCCCCCCCC=O	-10.1010
560	COC1=CC(O)=C2C(=O)C(=C3C=C(C)C(=O)O3)COC2=C1	-10.6459
561	CC(C)=CC[C@@H](O)C1=CC(=O)C2=C(O)C=CC(O)=C2C1=O	-10.8199
562	COC1=CC(O)=CC2=C1C(=O)O[C@H](C)CCCCCCC2	-10.7926
563	C=C(C)[C@@H]1CC[C@@H](C)[C@]12CC=C(C)CC2	-9.4447
564	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC=O	-9.5239
565	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	-8.7734
566	C[C@@H]1C(=O)O[C@H](C)[C@H]1CO	-9.8701
567	CCCCCCCCCCCCC(=O)OC	-9.6547
568	O=C1C(O)=C(C2=CC=C(O)C=C2)C(=O)C(O)=C1C1=CC=C(O)C=C1	-9.4039
569	CC1=CCC[C@@]2(C)CC[C@@H]3C[C@]12OC3(C)C	-9.9748
570	CC1(C)CCCC2(C)C1C(=O)C1(C)OC12	-10.2017

571	CC[C@@H](CC[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CC=C4C[C@@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C)C(C)C	-10.2056
572	CCCCCCC=CCCCCCCCC	-9.1013
573	O=C1C=COC=C1	-8.9690
574	CCCCCCCCCC1CC1	-8.3089
575	COC1=CC(=O)C2=C(O)C(C)=C(CC(C)=O)C(O)=C2C1=O	-10.7541
576	CCCCCCCCCCCCCCCO	-9.4819
577	CCCCCCCCC(C)=O	-8.9212
578	CCCCCC=CC=O	-8.3711
579	CCCCCCCCCCCC(C)CCC	-9.0784
580	COC1=CC=C2C=C1OC1=C(O)C=CC(=C1)[C@H](O)[C@]13SSC4(C(=O)N1C)[C@H](O)C1=COC=C[C@H](OC2=O)[C@H]1N4C3=O	-9.3362
581	CCCC=CCCC(=O)OC	-9.4841
582	CCCCCCCC=CCCCCCCCCC(=O)OC	-10.1926
583	O=CC=CC1=CC=CC=C1	-8.1341
584	CC(=O)OCC=CC1=CC=CC=C1	-8.4633
585	CCC=CCCCCCCCCCCCCCCC	-9.1955
586	C[Si]1(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O1	-8.6838
587	C=CC(C)=CCC=C(C)CCC=C(C)C=O	-8.8696
588	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2C3=C(CC[C@]12C)[C@@]1(C)CC[C@H](O)C[C@@]12O[C@H]2[C@H]3O	-11.2556
589	C=C[C@](C)(O)CC[C@@H]1[C@@]2(C)CCCC(C)(C)[C@@H]2CC[C@@]1(C)O	-10.8568
590	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC(C)=CC2=C1	-10.5395
591	CCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC	-10.1223
592	CC(C)COC(=O)C1=CC=CC=C1	-9.9100
593	CCCCOC(=O)CCC	-8.8948
594	CCC1=CC=CC(C(C)=O)=C1	-8.3201
595	CCCCO	-8.3808
596	CCCC(=O)OCCC(C)C	-9.2370
597	CCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O	-10.0533
598	CCCCO[C@@H]1O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]1O	-10.2324
599	C=C[C@]1(C)CC[C@@H](C(=C)C)C[C@H]1C(=C)C	-9.2036
600	CCOC(=O)C(C)C	-9.3102
601	C=CC/C(=N/O)S[C@@H]1O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]1O	-10.2830
602	C=C1C[C@@]23CC[C@H]4C(C)(C)CCC[C@]4(C)[C@H]2CC[C@@H]1C3	-9.5470
603	C=C(CCC=C(C)C)[C@@H]1CC=C(C)CC1	-9.0899
604	OCCC1=CC=CC=C1O	-9.2393

605	CC(=O)OC[C@@]12OC3=CC=C(C4=CC=C5O[C@]6(COC(C)=O)C(=C(O)C[C@H](C)[C@@H]6OC(C)=O)C(=O)C5=C4O)C(O)=C3C(=O)C1=C(O)C[C@H](C)[C@@H]2OC(C)=O	-9.1415
606	CC1=C[C@@H]2[C@H](CC1)C(C)=CC[C@@H]2C(C)C	-9.4519
607	CO[C@@H]1OC(=O)C2=CC(O)=C(C)C(O)=C21	-10.5357
608	CCCCCC(=O)OCC(C)C	-9.4621
609	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	-8.9397
610	CC1=CC=C2C(=C1)[C@@H](C(C)C)CC[C@@H]2C	-9.1069
611	C=CCCCCCCCC	-8.4228
612	C=C1C[C@]23C[C@@]1(O)CC[C@H]2[C@]1(C)CCC[C@@](C)(C(=O)O)[C@H]1[C@@H]3C(=O)O	-10.7588
613	C=C1CC[C@@H]2[C@](C)(CO)[C@H](O)CC[C@@]2(C)[C@@H]1CCC1=CCOC1=O	-10.9805
614	CC(C)[C@H]1C=C[C@@](C)(O)CC1	-9.8372
615	CC[C@H](C)/C=C(C)/C=C/C1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@](C)(OC(C)=O)C(=O)C2=CO1	-9.3695
616	CCCCCCCCCCC	-8.2852
617	C=C(C)C1=CC=C(C)CC1	-8.8750
618	O=C1CCCCCCCCCCCCCO1	-9.6770
619	C=CC(C)(C)[C@@]12NC3=C(C=CC4=C3C=CC(C)(C)O4)[C@]1(O)C[C@H]1C(=O)N3CCC[C@H]3C(=O)N12	-9.5482
620	NC(=O)C1=CC=C(O)C=C1	-9.4881
621	CC1=CC2=C(C(C)C)CC[C@H](C)C2CC1	-9.6364
622	CCCCCCCCCCCC(C)=O	-9.1648
623	C[C@@H]1CC2=CC=CC(O)=C2C(=O)O1	-9.8177
624	CC/C=C\C[C@H]1C(=O)CC[C@@H]1CC(=O)OC	-10.0037
625	O=C1C=C(C2=CC=C(O)C(O)=C2)OC2=C([C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C(O)=CC(O)=C12	-10.8376
626	C[C@H]1CC[C@H]2[C@@H](C=C[C@@](C)(O)[C@]2(C)C(=O)CCO)C1	-11.1213
627	CCCCCCCCCCC(C)C	-8.6070
628	C=C1C[C@]23C[C@H]1CC[C@H]2[C@@]12CC[C@H](O)[C@@](C)(C(=O)O1)[C@H]2[C@@H]3C(=O)O	-11.3095
629	C=C1CCC[C@@]2(C)CC[C@@H]3C[C@]12OC3(C)C	-10.0338
630	CC1=CC2=C(CO1)C(=O)C1=CC(O)=C(O)C=C1O2	-10.8098
631	COC1=CC(C)=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(O)C=C1C2=O	-10.0961
632	CC1=C(C)N=C(C)C(C)=N1	-9.2268
633	C=C(CC[C@H](C)[C@@H]1CC[C@]2(C)C3=C(CC[C@@]12C)[C@@]1(C)CC[C@H](O)C(C)(C)[C@@H]1CC3)C(C)C	-10.2742
634	CC(C)[C@H](C)CC[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CC=C4C[C@@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C	-10.0454
635	O=C1C[C@@H](O)[C@@H](O)C2=CC(O)=CC(O)=C12	-10.3686
636	C=C1C[C@@]23CC[C@@H]1C(C)(C)[C@@H]2CC[C@H]3C	-9.5890

637	CC1=CC=CC(C(C)C)=C1	-8.3728
638	COC1=CC(C2OC[C@@H]3[C@@H](C4=CC=C(O)C(OC)=C4)OC[C@H]23)=CC=C1O	-9.9756
639	CCCCCCCCCC	-8.2829
640	C=CCCCCCCCCC(=O)OC	-9.3841
641	CC[C@H](/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CC=C4C[C@@H](OC(C)=O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C)C(C)C	-9.7855
642	O=C(O)CCl	-8.7547
643	CCC(O)C(C)O	-9.8302
644	CS(C)(=O)=O	-9.4410
645	CSCCC=O	-8.0568
646	CC1=CC[C@H](C(C)C)CC1=O	-9.1837
647	O=C(C=NO)C1=CC=C(O)C=C1	-9.4741
648	CC[C@H](CC[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CC=C4C[C@@H](OC(C)=O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C)C(C)C	-9.7605
649	CCCCCC=CCC=CCCCCCCCC(=O)Cl	-9.7849
650	CC1=C2C3=C(C)CCCC3C2CCC1	-9.6029
651	CCCCCCCCC=O	-8.6580
652	C=CCCCCCCCCCCCCCC	-9.1489
653	COC1=CC(O)=C2C(O)=C3C(=O)C=C(C)OC3=C(C3=C(OC)C=C4C=C5OC(C)=CC(=O)C5=C(O)C4=C3OC)C2=C1	-9.7084
654	CSCCCO	-8.4092
655	CC=C(C)C=CC=C(C)C	-8.6091
656	CCCCCC=CC=CC=O	-8.5199
657	C[C@@H]1CCCCCCCC2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.5278
658	CCC(=O)C1=CC=C(OC)C(OC)=C1	-10.0083
659	CO[C@H]1O[C@H](C)CC2=CC=C3C(=O)C(=C(C)C)OC3=C21	-10.2721
660	C[C@@]1(C(=O)O)CSC(C2=NC=CC=C2O)=N1	-8.9798
661	COC1=CC(O)=CC2=C1C(=O)O[C@@H](C)C[C@H](O)CCCCC2	-11.0402
662	CC1=CC=C([C@]2(C)CCCC2(C)C)C=C1	-9.1239
663	CC=C(C)C(=O)O	-9.5189
664	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	-8.7836
665	C/C=C/C1=CC2=C(CO1)C(=O)[C@]1(C)OC(=O)[C@H](C(=O)CCCCC)[C@H]1C2	-10.1481
666	CCCCCCCCC=CCCCCCCCCCC(=O)OC	-10.1822
667	CC(C)C(=O)C1C(=O)C(C)(C)C(=O)C(C)(C)C1=O	-10.4662
668	CCCCCCC=CC=O	-8.6404
669	CCC=CCCOC(=O)C1=CC=CC=C1	-9.1312
670	CCCCCC(=O)OC	-8.8808
671	C[C@@H](O)[C@@H](C)O	-9.7419

672	CCCC1=CC=CC=C1	-8.2388
673	CC(C)CCCC(C)CCCC(C)CCO	-9.6679
674	CC(=O)OC1=CC=CC=C1C(=O)O	-9.6439
675	CCC1=CC=C(CC)C=C1	-8.1796
676	CCCCCCCCCCC(=O)O	-9.1559
677	C1=CC=C2CCCC2=C1	-7.9858
678	C1=CC=C2C(=C1)OC1=CC=CC=C12	-8.4773
679	COC1=CC(O)=CC=C1NC(C)=O	-9.6612
680	CC(=O)CC1=CC(=O)C2=C(C)C=C(O)C=C2O1	-10.4404
681	C[C@H]1OC(=O)C2=C(O)C=CC=C2[C@@H]1O	-9.9453
682	CC=C(C)CCC=C(C)C	-8.8386
683	CC1=CC[C@H](CC=O)C1(C)C	-8.9208
684	COC1=C(C=CC(C)(C)OC)C=CC2=C1C(=O)OCC1=CC(C)=CC(O)=C1O2	-9.8000
685	COC(=O)CCCCCCCCCCCCCCC(C)C	-10.0235
686	COC(=O)C=C(C)CCC=C(C)C	-9.8898
687	C[C@H]1CCC=C2CCC3C(C3(C)C)[C@@]21C	-9.6244
688	CCCCCCC=CCCCCCCCC=O	-9.7490
689	C=C(C)[C@H]1CC(=O)[C@@]2(C)O[C@H]2C1	-9.4433
690	CCCCCCCCCC=O	-8.5843
691	CCCC(=O)OCC	-8.8172
692	C1=CC=C2C(=C1)CC1=CC=CC=C12	-8.5072
693	CCCCCCCCCCCCCCCCCO	-9.6619
694	CC(C)=C1CC[C@@H](C)CC1=O	-9.1460
695	COC(=O)CC1=CC=C(O)C=C1	-9.9675
696	C#CCCCCCCCCC	-8.3782
697	C[C@@]1(O)CCOC(=O)C1	-9.7826
698	CCCC(=O)C1=C(O)C=CC=C1O	-9.8627
699	C=C(C)[C@@H]1CCC(=C)[C@@H](O)C1	-9.6102
700	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)C1CCC2C3=CC=C4C[C@@H](O)CC[C@]4(C)C3CC[C@@]21C	-10.0756
701	C=CC1=CC=CC=C1C	-8.3482
702	CCCCCCOC(=O)CC(C)C	-9.6802
703	CC(=O)CC(C)C	-8.6204
704	CC1=CC(=O)C2=C(O)C(C)=C(O)C=C2O1	-10.5669
705	C/C1=C/CC/C(C)=C/[C@H]2[C@@H](CC1)C2(C)C	-9.3573
706	O=C1C(O)=C(C2=CC=C(O)C(O)=C2)OC2=C(O[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C(O)=CC(O)=C12	-10.4812
707	CC(=O)CCC[C@@H]1CC2=CC=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.2577
708	CC1=CC=CC2=C1C=CC1=CC(C(C)C)=CC=C12	-8.9278
709	O=C1C=C(O)C2=CC=CC=C2O1	-9.6597
710	C=C(C)C1CC=C2CCC[C@H](C)[C@@]2(C)C1	-9.2697
711	C=CCCO	-8.1626

712	CCC1=CC=CC(C)=C1	-8.3545
713	C=C[C@@]1(C)CC[C@H](C(=C)C)C[C@@H]1C(=C)C	-9.1917
714	COC1=CC=C(C(C)=O)C=C1OC	-9.9542
715	CCCCCCCCCCCCCCCCI	-9.0242
716	CCCCCCCCCCCCCC(CC(CC)CC)CC(CC)CC	-8.9150
717	C[C@@H]1CC2=C(O)C=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.2682
718	C=C[C@@]1(C)C[C@H]2OC(=O)[C@H](C)[C@H]2C[C@@H]1C(=C)C	-9.9862
719	CC[C@@H](O)C[C@@H]1CC[C@@H](O)[C@@H](C)C(=O)O[C@@H](C)C[C@H]2CC[C@H](O2)[C@H](C)C(=O)O1	-11.0120
720	CCCCOCCOCCO	-9.1560
721	COC(=O)C1=CC=C(O)C2=C1C[C@@H](C)OC2=O	-10.8160
722	CC1=CC=CC2=CC=CC=C12	-8.4368
723	CC(=O)C1=C(O)C=C(O)C=C1CC(=O)O	-10.3998
724	CC(=O)C1=C(O)C=CC=C1O	-10.0777
725	CC1=C(C(=O)O)C(O)=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(O)C=C1C2=O	-10.1520
726	COC1=CC=CC2=CC=CC(OC)=C12	-9.5014
727	C[C@@H]1C(=O)OC[C@H]2[C@@H]1CC[C@@H]2C	-9.8881
728	C=C1CC[C@@H]2[C@](C)(CCC[C@]2(C)C(=O)O)[C@H]1CC(=O)O	-11.0395
729	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	-8.9574
730	CCCCCCCCCCCCCC=O	-9.1170
731	C=C1C=CC2=CC=CC=C12	-8.4951
732	C=C(C)[C@@H]1CC[C@@H](C)[C@@]12CC=C(C)CC2	-9.4653
733	C=C[C@]1(C)C=C2C(=O)[C@@]3(O)OC(=O)[C@@]4(CCCC(C)(C)[C@H]34)[C@@]2(O)CC1	-10.7974
734	COC(=O)C1=CC=C(OC)C=C1	-9.8688
735	COC1=CC(C2=CC=C(O)C=C2)=C(OC)C(O)=C1C1=CC=C(O)C(O)=C1	-9.7523
736	CC1=C(O)C(O)=C2O[C@@H]3O[C@@H](C(=O)C4=C(C)C(O)=C(O)C(O)=C43)C2=C1C=O	-10.9242
737	CCCCCCCCCCCCCCCCC	-8.9858
738	COC1=CC2=C(C(O)=C1C)C(=O)C=C(C)O2	-11.0573
739	CC(C)COC(=O)C1=CC=CC=C1C(=O)OCC(C)C	-10.3712
740	CC1=C(O)C(O)=C(O)C2=C1COC2	-10.2626
741	CC[C@H](C)/C=C(C)/C=C/C1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@]3(C)OC(=O)C(C(C)=O)=C3C2=CO1	-9.1522
742	COC(=O)CCC(=O)O	-9.6768
743	C=C[C@]1(C)C=C2C(=O)C[C@H]3C(C)(C)CCC[C@]3(C(=O)O)[C@@]2(O)CC1	-10.8181
744	C[C@@H]1CCCC2=CC(=O)[C@@H]3[C@@H](C3(C)C)[C@]21C	-10.0583

745	COC1=CC(C2=CC=CC=C2)=C(OC)C(O)=C1C1=CC=C(O)C(O)=C1	-9.5186
746	COC1=CC(C2=CC=CC=C2)=C(OC)C(O)=C1C1=CC=C(O)C=C1	-9.4023
747	O=C1C=CC2(OC3=CC=CC4=CC=CC(=C34)O2)C2=CC=CC(O)=C12	-8.9446
748	C=CC(=C)CC[C@H]1C(=C)CC[C@H]2C(C)(C)CCC[C@]12C	-9.4533
749	COC(=O)C1=C(O)C=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=CC=C1O2	-10.5268
750	CCCCCCCCCCCCOC(C)=O	-9.4470
751	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CC=C4C[C@@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C	-10.0497
752	O=C(O)CCCCCCCCCCCC[C@H]1C=CCC1	-10.0680
753	C[C@@H]1C[C@H](O)CCCCCC2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.7481
754	COCC1=C(OC)C=C2OC(C)=CC(=O)C2=C1O	-10.6540
755	O=C1CCC2=CC=CC=C2O1	-9.0517
756	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCl	-8.9980
757	O=C1C=C(CO)OC=C1O	-9.6463
758	CC(=O)C1=CC=CO1	-9.2795
759	CCCCCCCCCCCCCCC	-8.9155
760	CCCCCCCC=CC=O	-8.6628
761	CC[C@H](/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CC=C4C[C@@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C)C(C)C	-10.2381
762	COC1=C(OC)C(OC)=C2C(=C1OC)C(=O)C1=CC=CC=C1N2C	-9.6295
763	CC1=C2C[C@H](C(C)(C)O)CC[C@@]2(C)CCC1=O	-10.9280
764	COC1=CC=C(O)C=C1OC	-9.9752
765	C=C(C)[C@@H]1CC=C(C)CC1	-8.5853
766	CCCCCCCCCCC(C)=O	-8.9490
767	CCCCCCCCCCCO	-8.7751
768	CC1=CC=C(C)C=C1	-8.4474
769	C1=CC=C2C=CC=CC2=C1	-8.2876
770	CCCCCC(C)=O	-8.6279
771	CCCCCC(=O)O	-8.9384
772	CC(C)C(=O)O	-9.4921
773	C=C1CC[C@@H]2[C@](C)(CO)[C@H](O)CC[C@@]2(C)[C@@H]1C/C=C1/C(=O)OC[C@H]1O	-11.1131
774	CCCCCCCCCCCCCC	-8.5755
775	CCCCCCCCC(=O)O	-9.2454
776	CCCCCCCCC	-8.3113
777	CCC=CCC1=C(C)CCC1=O	-9.1612
778	N[C@@H](CC1=CC=C(O)C(O)=C1)C(=O)O	-9.8232

779	C=CC1=CC=CC=C1	-7.8931
780	C=CCCCCCCCCCCCCOC(C)=O	-10.0539
781	C1CCCCCCCCCC1	-8.2648
782	CCC(=O)OCCC1=CC=CC=C1	-9.0219
783	COC1=CC=CC=C1	-9.0750
784	CCCCCCCC(C)C	-8.2882
785	CC=C(C)C=O	-8.8079
786	CCCCCOC(=O)CCCC	-9.2430
787	CC[C@H](CC[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CC=C4C[C@@H](OC(=O)/C=C/C5=CC=C(O)C(OC)=C5)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C)C(C)C	-10.2201
788	CCCCCCCCCC=CC(=O)O	-9.4018
789	CCCCC=CC=O	-8.5176
790	O=CC1=CC=C(CO)N1	-8.9864
791	CC(C)(C)C1=CC=C(OP(=O)(OC2=CC=C(C(C)(C)C)C=C2C(C)(C)C)OC2=CC=C(C(C)(C)C)C=C2C(C)(C)C)C(C)(C)C=C1	-8.6363
792	CCC1=CC(C)=C(C)C=C1O	-9.1408
793	C=C1C=C[C@@H]([C@@H](C)CCC=C(C)C)CC1	-9.1524
794	CCCCCCCC1=CC=CO1	-8.9382
795	CCCCC=CCCCCCCCCCCCC=O	-9.7398
796	CCCCC(C)CCC(C)CCC	-8.8651
797	CCCCCCCCCCCCCCCC(C)C	-9.0417
798	CCCCCCCCC=CCCCCCCCC(=O)OC(CO)CO	-10.3297
799	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCO	-9.5187
800	CCCCCCCCCCCC=CCCCCC(=O)OC	-10.1381
801	CCCCOC(C)=O	-8.9768
802	C=CC(=O)O	-8.9143
803	CCCCCCCCC=CCCCCCCCCCCCC	-9.1003
804	CC=CCCCCCCCCCCCCCC=O	-9.7727
805	CCCCC(C)(CC)CC	-8.7013
806	CC1=CC2=CC=C3C(=O)C(=C(C)C)OC3=C2CO1	-9.8447
807	COC1=CC(C=CC(=O)COC(=O)C=CC2=CC=C(O)C(OC)=C2)=CC=C1O	-9.5657
808	CCCCCCCCCOS(=O)OC(C)C	-10.3148
809	CC1C2OC2C23CC1C(C)(C)C2CCC3C	-9.9853
810	CC(C)=CC1=CC(=O)C(O)=C(Cl)C(=O)N1	-9.5389
811	CC(C)(O)[C@@H]1CC[C@]2(C)[C@H](CC[C@@]3(C)[C@H]2CC[C@H]2CC4=C(NC5=CC=CC=C45)[C@@]23C)O1	-10.7204
812	O=C(C=CC1=CC=CC=C1)OCCC1=CC=CC=C1	-8.8825
813	CC1=C[C@@H]2[C@@H](CC1)[C@](C)(O)CC[C@H]2C(C)C	-10.2019
814	CC1=CC2C(=CC1)[C@@H](C)CC[C@@H]2C(C)C	-9.4233
815	COC1=CC(O)=C2C(=O)O[C@@H](C)CCCCCCCC2=C1	-10.7115

816	O=C(CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H](O)[C@H](O)CO	-9.9109
817	CC1=CC[C@]2(C)CCCC(C)(C)[C@@]23C[C@@H]13	-10.0132
818	CC1=C[C@H](O)[C@@H](C(C)C)CC1	-9.6718
819	CCCCOC(=O)C1=CC=CC=C1C(=O)OCC(CC)CCCC	-10.4915
820	CC(=O)CC1=CC=CC=C1	-8.1171
821	C[C@H](O)CCC[C@@H]1CC2=CC=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.3412
822	CC1=CC=C(O)C(O)=C1	-9.5429
823	CC(C=O)=CC1=CC=CO1	-8.6804
824	C=CCCCCCCCCC	-8.3991
825	CC1=CC[C@@]2(C)CC[C@H](C(C)C)[C@@]2(O)CC1	-10.0642
826	CC1CCC23OC2(C)CCC2C(C13)C2(C)C	-10.0486
827	C=C(C)[C@@H]1CC[C@](C)(O)[C@H]2CC[C@](C)(O)[C@H]2C1	-10.4162
828	CC1(C)C2=CCCC(C)(C)[C@]23CC[C@H]1C3	-9.7513
829	C[C@@H]1CC[C@@H]2[C@@H]1[C@H]1[C@@H](CC[C@@]2(C)O)C1(C)C	-10.2027
830	CC(=O)C1=CC(O)=CC=C1O	-10.2901
831	CC(=O)C=C(C)C	-8.9472
832	C=CCCCCCCCCCCC	-8.5236
833	CC1=CC=CC(C)=C1C	-8.7367
834	CC(C)(O)[C@@H]1CC[C@@]2(C)OC3=C(C[C@@H]12)C(=O)[C@]1(O)CO[C@H]3C1	-11.2807
835	O=C1OC(CO)=CC2=CC(O)=CC(O)=C12	-10.0241
836	CC1=CC(O)=C(C)C2=C1OC1=C(CO)C(O)=CC(C)=C1C(=O)O2	-10.4778
837	CCCCCCCC/C=C\CCCCCCCC(=O)OC1CC[C@@]2(C)C(=CC[C@H]3[C@@H]4CC[C@H]([C@H](C)CC[C@@H](CC)C(C)C)[C@@]4(C)CC[C@@H]32)C1	-9.7779
838	CCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCC	-9.8842
839	COC1=CC(C2=CC=C(O)C(O)=C2)=C(OC)C(O)=C1C1=CC=C(O)C(O)=C1	-10.0390
840	CC(C)=CCC[C@@H](C)[C@@]12CC=C(C)[C@@H]1C2	-9.3319
841	CC(C)(O)[C@@H]1CC[C@](C)([C@H]2[C@@H](O)C[C@@]3(C)[C@@H]4C[C@H](O[C@@H]5O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]5O)[C@H]5C(C)(C)[C@@H](O[C@@H]6OC[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]6O)CC[C@@]56C[C@@]46CC[C@]23C)O1	-10.5731
842	CC1=C[C@H](O)[C@H](C(C)C)CC1	-9.6766
843	CCO	-8.1223
844	CC1=CC[C@@H]2[C@]34CC[C@](O)(OC3)C(C)(C)[C@@H]4CC[C@@]2(C)[C@@]12OC1=C(C(=O)OC(C3=CC=CN=C3)=C1)[C@@H]2O	-9.6630
845	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2C3=CC(=O)[C@@]4(O)C[C@@H](O)CC[C@]4(C)[C@@]3(O)CC[C@]12C	-11.1435

846	COC1=C(C)C(C)=C(OC)C(C)=C1C	-10.3591
847	CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC	-9.9602
848	CCCCCCCCOC(=O)C1=CC=CC=C1C(=O)OCCCC	-10.4770
849	CC1=CCC[C@@H](C)[C@]12CC[C@@H](C(C)(C)O)C2	-10.5200
850	CC1(C)C[C@H]2C=C(CO)[C@]3(O)[C@H](O)C[C@]3(C)[C@H]2C1	-11.4249
851	O=C1C[C@H](O)[C@@H](CO)O1	-9.6943
852	CCOC(=O)CC(C)C	-9.0738
853	C[C@@H]1CC2=C(C(=O)O)C=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.4920
854	CCCCCCCC=O	-8.6388
855	CC1=C(O)C(O)=CC2=C1C1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)O2	-10.4980
856	CCCCCCCCOC(=O)CCCC	-9.4455
857	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC	-9.9764
858	CCCCCCCCCC(C)C	-8.4473
859	NCCC[C@H](N)C(=O)O	-9.8827
860	CC1=C2CC[C@@H](C)[C@H]2[C@H]2[C@@H](CC1=O)C2(C)C	-9.9200
861	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2[C@@]3(O)C=C[C@@]4(O)C[C@@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C	-11.0460
862	CC(C)CCOC(=O)CC(C)C	-9.6382
863	CC(C)(C)C1=CC(O)=CC(C(C)(C)C)=C1O	-9.9920
864	CC(C)(O)[C@H]1O[C@H]2CC[C@@]3(C)[C@@](O)(CC[C@H]4CC5=C(NC6=CC=CC=C56)[C@@]43C)C2=CC1=O	-10.6000
865	CC(C)CCC(=O)O	-9.2430
866	O=C(/C=C/C1=CC=C(O)C(O)=C1)OC1[C@H](O)CC(O)(C(=O)O)C[C@H]1O	-10.3236
867	CC1C=CC2(CC1)C(C(C)C)=CC[C@@H]2C	-9.5754
868	COC(=O)C1=CC=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=CC=C1O2	-10.1893
869	CC(C)(C)C1=CC=C(O)C(C(C)(C)C)=C1	-9.5418
870	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2C3=C[C@@H](O)[C@@]4(O)C[C@@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C	-10.8999
871	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC3=C(O)C(OC)=CC(C)=C3C2=C1	-10.5732
872	CCCCCCCCCCCCC	-8.5475
873	CC1=C(C)C=C(C)C(C)=C1	-9.0021
874	CCC(C)(C)C1=CC=C(O)C=C1	-8.9364
875	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O	-9.7249
876	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCO	-9.3426
877	CCCCCCCCCCCC	-8.4111
878	COC1=CC=C(C(N)=O)C=C1OC	-10.2881
879	C=CCCCCCCCCCC	-8.3505

880	CCC1=CC(C)=CC=C1C	-8.3723
881	CC(C)=CCC[C@](C)(O)[C@H]1CC[C@]2(C)[C@@H]1[C@H](O)C[C@@H]1[C@@]3(C)CC[C@H](O)C(C)(C)[C@@H]3[C@@H](O)C[C@]12C	-11.1121
882	O=C(O)CCO	-9.4882
883	CC1=CC=C(C)C(C)=C1	-8.7704
884	O=CC1=CC=CC=C1O	-9.5075
885	COC1=CC(C)=CC(OC)=C1	-9.4391
886	CCCCCCCCCCCCO	-8.9420
887	C1CCC(C2CCCCC2)CC1	-8.8577
888	C=C1CC[C@@]23C[C@@H]1C(C)(C)[C@@H]2CC[C@H]3C	-9.6151
889	CC1(C)CC(=O)CC(C)(C)N1	-9.5622
890	CC=CCCCCCCCCCCCCC=O	-9.7014
891	C=C(C)[C@H]1CC[C@@](C)(O)[C@H]2CC[C@](C)(O)[C@H]2C1	-10.4218
892	CCCCC=CCCCCCCCCCCC	-9.3102
893	O=C(OCC1=CC=CC=C1)C1=CC=CC=C1	-8.8702
894	C1=CC=C2SC=NC2=C1	-8.6853
895	CCCC[C@H](CC)CO	-9.1195
896	C[Si]1(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O1	-9.0273
897	C=C(C)[C@@H]1CC[C@@H](C)C[C@@H]1O	-9.5834
898	CCCCCCCCCCCCCCCC=CC(=O)O	-10.0760
899	CCC1=NC=CN=C1C	-8.8721
900	CC=CC(=O)OCC	-9.4928
901	CC=C(C)C(=O)OCC	-9.4777
902	CCCC=CC(=O)O	-9.2424
903	C=C(CC1CCCCC1)[N+](=O)[O-]	-9.8543
904	O=C(O)C1=CC=CC=C1C(=O)O	-10.1597
905	CCCCCCC=CC(C)=O	-8.9951
906	CCCCCCCCC=CCCCCCCCCC	-9.1691
907	C=C1C=C2C(CC1)[C@@H](C)CC[C@@H]2C(C)C	-9.6797
908	CCCCCCCCCCCCCCCCC(C)C	-8.8746
909	CC(=O)OC1=CC(C)=CC=C1C(C)C	-9.1145
910	C/C=C/C1=CC2=C(C(=O)[C@@H](O)[C@H](C)O2)C(=O)O1	-10.8189
911	CCCCCCC=CCCCCCCC(=O)OC	-10.1484
912	CC1=CC(=O)C2=C(O)C=CC=C2O1	-9.6746
913	C[Si]1(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O1	-8.6954
914	NC(N)=O	-9.1014
915	CCCC(C)CC(C)C	-8.5671
916	C=C(C)[C@@H]1CCC(C)=C2CC[C@H](C)[C@@H]2C1	-9.5704

917	CCCCCC=CCC=CCCCCCCCCCC(=O)OC	-10.1963
918	CC1=CC(O)=C(C(=O)C2=C(O)C=CC=C2O)C(C(=O)O)=C1	-10.0457
919	CC1=C(C)C2=CC(=O)C3=C(C(O)=C4OC(C)=CC4=C3O)[C@@]2(C)CC1=O	-10.6888
920	C[C@@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H]3C[C@@]12CC[C@]3(C)O	-10.4017
921	CC(C)COC(=O)CC(C)C	-9.2807
922	CC(C)=CCC[C@](C)(O)[C@H]1CC[C@]2(C)[C@@H]1[C@H](O)C[C@@H]1[C@@]3(C)CC[C@H](O[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O)C(C)(C)[C@@H]3CC[C@]12C	-11.4766
923	O=C1OCCC2=C(CO)C=CC=C12	-10.0172
924	CCC(C)CC	-8.0369
925	CC(C)(C)C1=CC(C=O)=CC(C(C)(C)C)=C1O	-10.0845
926	CC1=CC=C2C=C(C)C=CC2=C1	-8.6879
927	OC1=CC=CC2=CC=CC(O)=C12	-9.3408
928	C[C@H](O)CC1=CC2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.2475
929	O=C(CC1=CNC2=CC=CC=C12)CC1=CNC2=CC=CC=C12	-8.7424
930	CC1=CC[C@@H]2[C@@]3(C)CCC(=O)C(C)(C)[C@@H]3CC[C@@]2(C)[C@]12CC1=C(C=C(C3=CC=CN=C3)OC1=O)O2	-9.1285
931	OC[C@@H](O)C1=CC=C(O)C=C1	-10.1440
932	C=C(C)[C@@H]1CC[C@@]2(C)[C@H](O)CC[C@@](C)(O)[C@@H]2C1	-10.6017
933	O=C1CC[C@H](O)C2=CC=CC(O)=C12	-10.3841
934	C/C=C/[C@@H]1OC(=O)C=C[C@@H]1O	-9.6143
935	C=C(CC/C=C(\C)CO)[C@@H]1CC=C(C)CC1	-9.5037
936	CN1C(=O)CC[C@H]1C1=CC=CN=C1	-8.5439
937	CCCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC	-9.9897
938	CCCCCOC(=O)C(C)C	-9.2698
939	CC(C)(C)C1=CC=C(C(C)(C)C)C(O)=C1	-9.5348
940	CC1=C[C@@H]2C(=C(C)CC[C@H]2C(C)C)CC1	-9.6143
941	C[C@H](O)C1=COC(=O)C2=C(O)C=C(O)C(O)=C12	-10.6139
942	C[C@H]1CC2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.1314
943	COC(=O)CC1=CC=CC=C1	-9.2727
944	C=C(C)[C@@H]1CCC(C)=C[C@H]1C1=C(O)C=C(CCCCC)C=C1O	-10.2448
945	COC(=O)CCC(=O)OC	-9.4416
946	COC1=CC(C2=CC=C(O)C(CC=C(C)C)=C2)=C(OC)C(O)=C1C1=CC=C(O)C=C1	-9.0913
947	COC1=CC2=C(C=C1OC)C1=C(OC)C=C(C3=CC=C(O)C(CC=C(C)C)=C3)C(OC)=C1O2	-9.5119
948	CC(C)(C)C1=CC=CC(C(C)(C)C)=C1O	-9.5020

949	C=C[C@@]1(C)CC[C@H]2[C@@](O)(CC[C@H]3C(C)(C)CCC[C@@]32C)C1	-10.0917
950	C=C1CC[C@H]2[C@@H]([C@@H]3[C@@H]1CC[C@@]3(C)O)C2(C)C	-10.2614
951	CCC1=CC=CC=C1C	-8.3404
952	CCOC(=O)C(C)=O	-9.6354
953	COC1=CC(O[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]2O)=CC(OC)=C1O	-10.8128
954	CC1=CC[C@@]2(CC1)C(=C(C)C)CC[C@H]2C	-9.7915
955	CC[C@H](C)CO	-8.3563
956	CC1=C2C[C@H]3CC[C@@H](C)[C@]2(CC1=O)C3(C)C	-10.3347
957	CC1(C)OC2=C(C[C@H]3[C@H]1CC[C@@]3(C)O)C(=O)[C@]1(O)CO[C@H]2C1	-11.2300
958	CCCCC(=O)OCCC(C)C	-9.4200
959	C=CCCCCCCCCCCCC	-8.7198
960	C=C(C)[C@H]1CC[C@]2(C)CCC=C(C)C2C1	-9.2485
961	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCO	-9.3870
962	C=C1CC[C@@H](C(C)C)[C@@H]2C=C(C)CC[C@H]12	-9.6967
963	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC	-9.9802
964	CCCCOC(=O)C1=CC=CC=C1C(=O)OCC(C)C	-10.4752
965	C=C(C)[C@@H]1CC[C@@]2(C)OC3=C(C[C@@H]12)C(=O)[C@@H](OC)C[C@@H]3O	-10.9288
966	CC1=C(O)C2=C(CC(C)(C)C2)C(C)=C1CCO	-10.5377
967	CC1=C(O)C(O)=C(O)C2=C1C(=O)OC2	-10.4729
968	CC(=O)OC/C=C(\C)CCC[C@H](C)CCC[C@H](C)CCCC(C)C	-9.9547
969	OC1CCCC1	-8.4750
970	CC1=C(O)C(O)=C(O)C(C=O)=C1C=O	-10.5238
971	CC1=CC=C(C=O)C(C)=C1	-8.9695
972	COC1=CC(C)=CC=C1C(C)C	-9.3260
973	COC1=C(C2=CC=C(O)C=C2)C=C(OC)C2=C1OC1=CC(O)=C(O)C=C12	-10.0827
974	CC1=CC(O)=C(C(=O)C2=C(O)C=CC=C2C(=O)O)C(O)=C1	-10.0696
975	OC1=CC(Cl)=CC=C1OC1=CC=C(Cl)C=C1Cl	-9.1294
976	COC1=CC2=C(C=C1O)C1=C(OC)C=C(C3=CC=C(O)C(CC=C(C)C)=C3)C(OC)=C1O2	-9.7053
977	COC1=CC(C2=CC=C(O)C(CC=C(C)C)=C2)=C(OC)C(O)=C1C1=CC=C(O)C(O)=C1	-9.1137
978	COC1=CC(C2=CC=C(O)C=C2)=C(OC)C(O)=C1C1=CC=C(O)C(CC=C(C)C)=C1	-9.1060
979	CC(C)=CCC[C@](C)(O)[C@H]1CC=C(C)CC1	-10.1020
980	C=CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	-9.1381
981	CC(C)(C)C1=CC=CC(O)=C1	-8.9439
982	CC(=O)CO	-8.7684

983	CCCC(C)CCCC(C)CC	-8.7150
984	CC(=O)OC[C@@]12OC3=C(C4=CC=C(O)C5=C4O[C@]4(CO)C(=C(O)C[C@H](C)[C@@H]4OC(C)=O)C5=O)C=CC(O)=C3C(=O)C1=C(O)C[C@H](C)[C@@H]2OC(C)=O	-9.1007
985	CCCC[C@H](N)C(=O)O	-9.2965
986	CC(C)=CCC[C@](C)(O[C@@H]1O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]1O)[C@H]1CC[C@]2(C)[C@@H]1[C@H](O)C[C@@H]1[C@@]3(C)CC[C@H](O[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O)C(C)(C)[C@@H]3CC[C@]12C	-11.2455
987	C=C(C)CCO	-8.5558
988	CC(C)=CCC[C@](C)(O)[C@H]1CC[C@]2(C)[C@@H]1[C@H](O)C[C@@H]1[C@@]3(C)CC[C@H](O)C(C)(C)[C@@H]3[C@@H](O[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C[C@]12C	-11.4339
989	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	-8.7361
990	CSSSSC	-8.8055
991	CC(C)CCOC(=O)C(C)C	-9.4893
992	COC(=O)C1=CNC2=CC=CC=C12	-9.4432
993	C[C@@]12CCC[C@]3(C)C4=CC(=O)OCC4=C[C@@H](OC1=O)[C@@H]23	-10.5255
994	C=C1CC[C@H](C(C)C)[C@H]2C=C(C)CC[C@H]12	-9.6972
995	CC1=C(O)C(O)=C(O)C(C=O)=C1C1=CC2=C(C=O)C(C)=C(O)C(O)=C2O1	-10.6614
996	CC(C)=CCC[C@]1(C)[C@@H](O)CC[C@@]2(C)[C@H]1CC[C@H]1CC3=C(NC4=CC=CC=C34)[C@@]12C	-10.1371
997	CCCCCCCC(C)CCC	-8.5423
998	CCCC1=CC(=O)C2=C(O)C=C(O)C=C2O1	-9.9256
999	C=C1CC[C@H]2[C@@H]([C@H]3C(C)CC[C@H]13)C2(C)C	-9.3394
1000	CCCCCCCCCCC(=O)CCCC=CC(C)CCCC	-9.9167
1001	CC1=C[C@@]23CC[C@@H]1C(C)(C)[C@@H]2CC[C@H]3C	-9.6087
1002	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCO	-9.2426
1003	C[C@H]1OC(=O)C2=C(O)C=CC=C2[C@H]1O	-9.9724
1004	CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC(C)C	-9.8158
1005	CN1C=CC=C1C=O	-8.8289
1006	CCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC(C)C	-9.8390
1007	CCCCC1=CC=CO1	-8.6563
1008	CC1=CC[C@@](O)(C(C)C)CC1	-9.7474
1009	C=CCCCCCCCCCCCCCCCC	-9.2023
1010	COC1=C2CN3CC[C@@]4(C2=CC2=C1OCO2)[C@H]1O[C@H]1[C@H](O)C[C@@H]34	-11.3195
1011	CCC=CCCCCCCCCCCC	-9.0924

1012	CC1=CC[C@@]2(C)CCCC(C)(C)[C@]23C[C@H]13	-9.9866
1013	N[C@@H](CC1=CN=CN1)C(=O)O	-9.0983
1014	COC1=CC=C(C2=C(OC)C(=O)C3=C(OC)C=C(OC)C=C3O2)C=C1	-10.2002
1015	C=C1CCCC(C)(C)[C@H]2C=C(C)CC[C@@H]12	-9.4746
1016	CC1=C[C@@H]2[C@H](CC1)C(C)=CC[C@H]2C(C)C	-9.4493
1017	COC1=CC2=C(C(O)=C1CO)C(=O)C=C(C)O2	-10.9599
1018	CCC(C)CCC(C)CCCCC(C)C	-9.1728
1019	CC1=C(C)C2=CC(=O)C3=C(O)C4=C(O[C@@H](C)C4)C(O)=C3[C@@]2(C)CC1	-11.0062
1020	C=C(C)CC(C)=O	-8.7992
1021	CC1=C2C[C@H](C(C)(C)O)CC[C@]2(C)CCC1	-10.3574
1022	CC[C@H](C)[C@H]1C(=O)O[C@H](C(C)C)C(=O)N(C)[C@@H](C(C)C)C(=O)O[C@H](C(C)C)C(=O)N(C)[C@@H](C(C)C)C(=O)O[C@H](C(C)C)C(=O)N1C	-9.4513
1023	CC(=O)OC[C@@]12OC3=C(C4=CC=C(O)C5=C4O[C@]4(COC(C)=O)C(=C(O)C[C@H](C)[C@@H]4OC(C)=O)C5=O)C=CC(O)=C3C(=O)C1=C(O)C[C@H](C)[C@@H]2OC(C)=O	-9.2387
1024	C=C(C)[C@H]1C=C[C@](C)(O)CC1	-9.6172
1025	CCCCCCCCCC(=O)OCC	-9.2354
1026	CC(C)CO	-8.5277
1027	CC(=O)O[C@H]1C[C@H]2[C@H]3[C@H]([C@@H](O)C[C@]2(C)[C@H]1[C@H](C)/C=C/[C@H](C)C(C)C)[C@@]1(C)CC[C@H](O)C[C@@H]1C(=O)[C@@H]3O	-10.9161
1028	CC(C)C1=CC=CC=C1	-8.3321
1029	CC(C)=CCC[C@](C)(O)[C@H]1CC[C@]2(C)[C@@H]1[C@H](O)C[C@@H]1[C@@]3(C)CC[C@H](O[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O)C(C)(C)[C@@H]3CC[C@]12C	-11.3470
1030	CCCC(=O)CC(C)C	-9.0302
1031	CC1=CC=C(C)C(C)=C1C	-9.1204
1032	CC(C)=CCC[C@](C)(O[C@@H]1O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]1O)[C@H]1CC[C@]2(C)[C@@H]1[C@H](O)C[C@@H]1[C@@]3(C)CC[C@H](O)C(C)(C)[C@@H]3[C@@H](O)C[C@]12C	-11.2398
1033	CC(C)=C1C[C@@]2(C)C(=CC1=O)CCC[C@@H]2C	-9.9615
1034	O=C(O)C1=CC=C(CO)O1	-9.8867
1035	C=C(C)[C@@H]1CCC=C(C)C1	-8.6523
1036	CC(C)[C@H]1CC[C@H](C)C[C@@H]1O	-9.5826
1037	CC1=CC=C2C=CC=CC2=C1	-8.4854
1038	C[C@H]1OC2=CC=CC(O)=C2C(=O)[C@@H]1O	-9.9950
1039	O=C(O)C1=CC=CC=N1	-8.9373
1040	C=C1[C@H](O)C[C@H]2C[C@@H]1C2(C)C	-10.2123

1041	C[C@@H]1CC[C@@H](O)CCCCC2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.7224
1042	OC[C@@H](O)[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)CO	-9.8477
1043	C=C(C)[C@@H]1CC[C@@]2(C)CCCC(=C)[C@@H]2C1	-9.4281
1044	CO[C@H]1C[C@H](O)C2=C(C[C@H]3[C@H](C(C)(C)O)CC[C@@]3(C)O2)C1=O	-11.0100
1045	C1CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC1	-8.6404
1046	CC1=CC(=O)OC2=CC(O)=CC=C12	-9.8612
1047	COC1=CC=CC2=CC=CC(O)=C12	-9.8388
1048	CC(C)[C@]12CC[C@](C)(O)C1C2	-9.9584
1049	CC1=CC(C)=CC(C)=C1	-8.7093
1050	C1CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC1	-8.5215
1051	CC(C)[C@H]1C=C[C@](C)(O)CC1	-9.8629
1052	CS	-8.0613
1053	CC(C)CCOC(=O)C1=CC=CC=C1	-9.7370
1054	C[C@@H]1CCCCCC(=O)C2=C(O)C=C(O)C=C2CC(=O)O1	-10.7705
1055	COC1=CC=CC(OC)=C1O	-10.3346
1056	C1=CC=C2C=CC=C2C=C1	-8.3773
1057	C=C(C)[C@@H]1CC[C@@]2(C)OC3=C(C[C@@H]12)C(=O)[C@]1(O)CO[C@H]3C1	-11.0669
1058	C=CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	-8.9568
1059	CCCCCCCCOC=O	-9.0537
1060	C=C(CC[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2C3=C(CC[C@]12C)[C@@]1(C)CC[C@H](O)C[C@@H]1C(=O)O3)C(C)C	-11.0544
1061	CC1=CC=C(O)C2=C1C[C@@H](C)OC2=O	-10.0642
1062	CCCCCCCCCCCC(=O)OC	-9.5072
1063	CCOC(=O)CC	-8.9155
1064	O=C1C[C@@H](O)[C@@H]2C3=CC=C(O)C4=C3[C@@H](C3=C2C1=C(O)C=C3)[C@H](O)CC4=O	-9.8207
1065	CS[C@@]12C[C@H]3C(=O)CC[C@H](O)[C@H]3N1C(=O)[C@]1(SC)C[C@H]3C(=O)CC[C@H](O)[C@H]3N1C2=O	-11.4148
1066	C=C1C[C@]23C[C@H]1CC[C@H]2[C@]1(C=O)CCC[C@@](C)(C(=O)O)[C@H]1[C@@H]3C(=O)O	-10.7751
1067	CC1=CC(=O)OCC1	-9.2473
1068	CC1=CC(CC2=CC(C)=CC(C(C)(C)C)=C2O)=C(O)C(C(C)(C)C)=C1	-9.1357
1069	CC(C)(O)CC1=CC(=O)C(O)=C(Cl)C(=O)N1	-9.8063
1070	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O	-9.8079
1071	C=C[C@@]1(C)CCC(C(C)C)=C[C@@H]1C(=C)C	-9.1786
1072	CSCC[C@@H](N)C(=O)O	-9.4587
1073	CC1=CC(=O)C2=C(C)C=C(O)C=C2O1	-10.5304
1074	CC1=CC=CC(C=O)=C1	-8.2717
1075	COCC1=CC=C(O)C=C1	-9.5411
1076	CC1=CC(=O)C2=C(O)C=C(O)C(C)=C2O1	-10.4451

1077	CCOC1=C2CCCN2C(OCC)=C2CCCN21	-10.0427
1078	COC1=C2CN3CC[C@]4(C=C[C@H](O)C[C@@H]34)C2=CC2=C1OCO2	-11.0757
1079	COC(=O)[C@@]1(O)C2=C(C=C[C@H]1O)OC1=CC=CC(O)=C1C2=O	-10.4769
1080	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(O)C=C(C)C(O)=C3C(=O)C2=C1	-10.7205
1081	CC(=O)O[C@H]1CC[C@@]2(C)C(=CC[C@H]3[C@@H]4CC[C@H]([C@H](C)CCCC(C)C)[C@@]4(C)CC[C@@H]32)C1	-9.7885
1082	CCCCCCCCCCCCCCCCCO	-9.4585
1083	COC1=CC(O)=C2C(=O)C(O)=C(C3=CC=C(OC)C(OC)=C3)OC2=C1	-10.4737
1084	COC1=C(O)C(C)=C2COCC2=C1O	-10.3237
1085	C=CCC1=CC2=C(C=C1OC)OCO2	-9.6480
1086	CC(=O)O[C@H]1C[C@H]2CCC1(C)C2(C)C	-9.7209
1087	CC(C)COC(=O)C(C)C	-9.2367
1088	CN1C(=O)[C@]23CC4=CC=C[C@H](O)[C@H]4N2C(=O)[C@@]1(CO)SS3	-10.1308
1089	CC=CC(=O)C1=C(C)OC(=O)C=C1OC	-10.4788
1090	C[C@@H]1CCC/C=C/[C@H](O)/C=C/[C@H](O)/C=C/C(=O)O1	-10.3454
1091	O=C(NCCCCNCCCNC(=O)C1=CC=C(O)C(O)=C1)C1=CC=C(O)C(O)=C1	-10.1910
1092	C[C@H]1O[C@@H]2OC(=O)[C@]3(C)C[C@@H]4[C@](C)(C(=O)C=C5C(=CC(=O)OC5(C)C)[C@@]45CO5)[C@H](C1=O)[C@H]23	-9.9167
1093	COC1=CC=C2C3=C(NC2=C1)[C@H](C=C(C)C)N1C(=O)[C@@H]2CCCN2C(=O)[C@@H]1C3	-9.7422
1094	CC[C@H](C)C1=C(C)C2=CC(=O)C(C(=O)O)=C(O)C2=CO1	-10.7748
1095	CC1=C(O)C(=O)C(C2=C(O)C(=O)C(C)=C(O)C2=O)=C(O)C1=O	-10.1884
1096	O=C(O)CNC(=O)C=CC1=CC=CC=C1	-9.0832
1097	CC1=CNC(=O)NC1=O	-9.0114
1098	NC1=NC=NC2=C1NC=N2	-9.0012
1099	O=C1C=CN([C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]2O)C(=O)N1	-9.4406
1100	CC(C)C[C@H](N)C(=O)N1CCC[C@H]1C(=O)O	-10.4001
1101	COC(=O)[C@@]12OC3=CC=C(C4=CC=C5O[C@]6(C(=O)OC)C(=C(O)C5=C4O)C(=O)C[C@H](C)[C@@H]6O)C(O)=C3C(O)=C1C(=O)C[C@H](C)[C@H]2O	-10.6189
1102	COC(=O)[C@@]12OC3=CC=C(C4=CC=C5O[C@]6(C(=O)OC)C(=C(O)C5=C4O)C(=O)C[C@H](C)[C@H]6O)C(O)=C3C(O)=C1C(=O)C[C@H](C)[C@H]2O	-10.6189
1103	OCC1=CC=C2OCOC2=C1	-9.5604

1104	COC1=CC2=C(C3=CC=C(N)C(=O)C=C3[C@@H](NC(C)=O)CC2)C(OC)=C1OC	-9.3193
1105	CC1=CC(O)=CC(=O)O1	-10.0948
1106	CC1(C)CCC[C@]2(C)[C@H]3CC(=O)O[C@]3(C)CC[C@@H]12	-10.3520
1107	CC(=O)O[C@@H]1C2=C3C[C@H]4[C@@]5(C)C=CC(=O)C(C)(C)[C@@H]5C[C@H](O)[C@]4(C)OC3=CC(O)=C2C(=O)O[C@@H]1C	-10.9070
1108	C/C=C/[C@@H]1[C@H]2C[C@@H](C)CC[C@@H]2C(C)=C[C@H]1C(=O)C1=C(O)C(C2=CC=C(O)C=C2)=CNC1=O	-8.9660
1109	COC(=O)C=CC1=C(CC=C(C)CO)N(C)C=N1	-10.2543
1110	CC(=CC(=O)O)C1=CC=C(C)C(=O)O1	-10.1100
1111	C=CC(C)(C)C1=C(C=C2NC(=O)C(=C)NC2=O)C2=CC=CC=C2N1	-9.0072
1112	O=C(C=CC1=CC=CC=C1)C1=CC=CC=C1O	-9.1199
1113	COC(=O)C=CC1=C(C=CC(C)(C)O)N(C)C=N1	-10.5331
1114	COC1=CC(C)=C(OC2=CC(C)=CC(O)=C2)C(O)=C1	-10.2548
1115	CN1C(=O)C2=CC=CC=C2NC(=O)C1=CC1=CC=CC=C1	-8.5004
1116	COC1=CNC(=O)C2=CC=CC=C12	-8.9002
1117	CCCCC1=C(C)OC(=O)C=C1OC	-10.2622
1118	C[C@H](O)CC1=C[C@H](O)[C@@H](C)OC1=O	-9.9412
1119	COC(=O)C1=CC(O)=CC(OC)=C1C(=O)C1=C(O)C(Cl)=C(C)C(Cl)=C1O	-10.6394
1120	O=C(O)CCC(=O)CC1=CC=CC=C1	-9.3197
1121	COC1=C(C)C(OCC=C(C)C)=CC(CO)=C1CO	-10.7244
1122	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CCC2[C@]1(C)CC=C1[C@]23C=C[C@]2(C[C@@H](O)CC[C@]12C)OO3	-10.4823
1123	CC1=C(C)C(C(=O)O)=C(O)C(C)=C1O	-10.7038
1124	CC(C)=CCC1=CC(C(=O)O)=CC=C1O	-10.3045
1125	C/C=C(\C)C[C@H](C)C[C@H](C)[C@H]1OC(=O)C=C[C@H]1OC(=O)/C=C/C(C)=C/[C@@H](CO)CCO	-10.6370
1126	CC(=O)CC1=CC(O)=CC(O)=C1	-9.5572
1127	CC1=CC(O)=C(OC2=CC(C)=CC(O)=C2O)C(O)=C1	-10.2512
1128	COC1=CC(C)=C2C(OC)=CC(=O)OC2=C1C1=C(O)C=C(C)C2=C1OC(=O)C=C2OC	-9.9708
1129	COC1=CC(O)=C(C(=O)O)C(C2=C(C)C=C(C(=O)O)OC2=O)=C1	-10.6030
1130	COC1=CC=C([C@@]2(O)C3=C(O)C(CC=C(C)C)=CC=C3NC(=O)[C@@H]2OC)C=C1	-8.6451
1131	C[C@@H]1CC2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.3447
1132	COC(=O)C1=C(O)C=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(CO)C=C1O2	-11.0695
1133	C/C=C/C1=CC(=O)[C@H](O)[C@H]1O	-9.8091
1134	CCCC(=O)C1=C(OC)C=C(O)C(CC)=C1O	-10.6920
1135	CC1(C)NC(=O)C2=CC=CC=C2N1	-9.5446

1136	C=CC(C)(C)C1=C(/C=C2\NC(=O)[C@H](C)NC2=O)C2=CC=C(CC=C(C)C)C=C2N1	-8.8237
1137	CCCCCCCCCCCCCCC/C=C/[C@@H](O)C(=O)N[C@@H](CO[C@@H]1O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]1O)[C@H](O)/C=C/CC/C=C(\C)CCCCCCCCC	-10.6157
1138	CC1=C(C=O)[C@@H]2C(C(=O)O)[C@@]1(C)CC[C@@H]2C(C)C	-10.7513
1139	COC1=CC(O)=C2C(=O)O[C@@]3(C)C[C@H](O)[C@@H](O)C=C3C2=C1	-10.9933
1140	CC1=CC(O)=C(O)C(OC2=CC(C)=CC(O)=C2O)=C1	-10.2851
1141	COC(=O)C1=CC=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(CO)C=C1O2	-10.6380
1142	CCC(C)CCC(CO)C(C)C	-9.5688
1143	CC(=CCCC(C)C)C1=CC=C(CO)C=C1O	-10.2783
1144	CCCC1COC(=O)CCN1CCC	-9.4202
1145	CC=CC=CCCC	-8.4670
1146	CC1(C)[C@@H](O)CC[C@]2(C)[C@H]3CC4=C(O)C=C5C(=O)OCC5=C4O[C@@]3(C)CC[C@@H]12	-11.3984
1147	CC1(C)C(=O)CC[C@]2(C)[C@H]3CC4=C(O)C=C5C(=O)OCC5=C4O[C@@]3(C)CC[C@@H]12	-11.3239
1148	CC(=O)O[C@H]1CC[C@]2(C)[C@H]3CC4=C(O)C=C5C(=O)OCC5=C4O[C@@]3(C)CC[C@H]2C1(C)C	-11.1333
1149	CCC[C@@H](O)CCCCCCCC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)O[C@H](CCC)CCCCCCCC1=CC(O)=CC(O)=C1	-10.3619
1150	COC1=CC(OC)=C2C(=C1)C(C1=C(OC)C=C3C=C4OC(C)=CC(=O)C4=C(O)C3=C1OC)=C(O)C1=C2OC(C)=CC1=O	-9.6272
1151	COC1=C(C)C(=O)OC(C=CC(C)=CC(C)=CC2=CC=CC=C2)=C1	-9.7593
1152	COC1=CC(OC)=C2C(O)=C3CO[C@@H](C)CC3=C(C3=C4C(=C(O)C5=C(OC)C=C(OC)C=C35)CO[C@@H](C)[C@H]4OC(C)=O)C2=C1	-9.8778
1153	CCCCCC=CC1=C(O)C=C(CC=C(C)C)C(O)=C1C=O	-10.2453
1154	CCCC=CC=CC1=C(O)C=C(CC=C(C)C)C(O)=C1C=O	-9.9321
1155	COC1=C([C@@H](O)CC(C)C)C=CC2=C1C(=O)OCC1=CC(C)=CC(O)=C1O2	-10.5746
1156	CC(C)(C)C1=CC2(C=C(C(C)(C)C)C1=O)CCC(=O)O2	-10.1308
1157	CC=CCCCCC	-8.2851
1158	CCCCC(=O)OCC	-8.9383
1159	COC1=CC(OC)=C2C(O)=C3C(=O)CC(C)(O)OC3=C(C3=C(OC)C=C4C=C5OC(C)=CC(=O)C5=C(O)C4=C3OC)C2=C1	-10.0895
1160	O=C1CCCCN1CCCCBr	-8.6533
1161	O=C(O)C=CC=CC(=O)O	-9.4364
1162	CCCC=CC=CC=CCCC1=CC=C(OC(=O)O)O1	-9.4186
1163	CC(C)=C[C@H]1C[C@H](C)[C@]2(CC[C@]3(C)C[C@H]4[C@H](C(=O)C[C@@]4(C)O)/C(C=O)=C\C[C@H]32)O1	-11.5048

1164	CC(C)O[Si](O[Si](C)(C)C)(O[Si](C)(C)C)O[Si](O[Si](C)(C)C)(O[Si](C)(C)C)O[Si](C)(C)C	-9.8151
1165	CCCCCCCCC=CCCCCCCCCCCCCC(=O)OC	-10.0935
1166	CCC=C(C)C1=CC=C(CC)C(=O)O1	-9.3462
1167	CCC(=O)C=CC=CC(C)=CC=CC=CC1=CC=CC=C1	-9.2023
1168	C[C@H]1OC(=O)[C@@H](NC(=O)CNC(=O)C2=CC=CC(O)=C2O)[C@@H](C)OC(=O)[C@@H](NC(=O)CNC(=O)C2=CC=CC(O)=C2O)[C@@H](C)OC(=O)[C@H]1NC(=O)CNC(=O)C1=CC=CC(O)=C1O	-9.1035
1169	CC(C)CCC[C@](C)(O)C1=CC=C(C(=O)O)C=C1O	-11.1150
1170	CCCC(C)(C)CC	-8.6743
1171	C=C(CC(=O)O)C(=O)O	-9.7338
1172	C[C@H]1C(=O)N2C3=CC=CC=C3[C@@]3(O)C[C@@H](N4C=NC5=CC=CC=C5C4=O)C(=O)N1[C@@H]23	-8.9335
1173	CC(=O)NCCCC=O	-8.7753
1174	CC(C)(O)[C@H]1O[C@H]2CC[C@@]3(C)[C@@](O)(CC[C@H]4CC5=C(NC6=CC=CC=C56)[C@@]43C)[C@]23O[C@@H]3[C@@H]1O	-11.0348
1175	CC1=C[C@H]2C=C(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@@]23OC(=O)/C=C\[C@@H](O)C[C@@H](CO)C1	-11.2170
1176	COC1=CC=C2C(C[C@@H]3NC(=O)[C@@H]4CCCN4C3=O)=C(C(=O)C=C(C)C)NC2=C1	-10.0376
1177	CC(C)=C[C@H]1O[C@H]2[C@H]3O[C@@]34[C@H](CC[C@@]3(C)[C@@]4(O)CC[C@H]4CC5=C(NC6=CC=CC=C56)[C@@]43C)O[C@@H]2C(C)(C)O1	-10.3603
1178	O=C(O)CC[N+](=O)[O-]	-9.2158
1179	COC1=CC(O)=CC(OC)=C1	-10.0627
1180	COC(=O)/C(CCC=C(C)C)=C1\[C@@H](OC(C)=O)C[C@@]2(C)[C@H]1CC[C@H]1[C@@]3(C)C=CC(=O)[C@@H](C)[C@@H]3[C@H](OC(C)=O)C(=O)[C@@]12C	-9.2961
1181	C/C=C/C1=C(O)C(=O)C2=C(O1)[C@@H](O)NC2=O	-10.4779
1182	COC1=CC(OC)=C2C(O)=C3C(=O)C=C(C)OC3=C(C3=C(OC)C=C4C=C(O)C5=C(OC(C)=CC5=O)C4=C3OC)C2=C1	-9.4095
1183	COC1=CC(=O)OC([C@H](CC2=CC=CC=C2)N2C=C(C(N)=O)C(=O)C=C2CC2=CC=CC=C2)=C1	-8.8537
1184	COC1=CC(O)=C2C(=O)O[C@H](C)CC2=C1	-10.5037
1185	CC1=CC(O)=C2C(=O)[C@@]3(O)[C@@H](O)CC[C@H](O)[C@]3(C)OC2=C1	-11.2552
1186	CC1(C)CCC(=O)[C@@]2(C)OO[C@H]3C[C@@]12CC[C@]3(O)CO	-11.0355
1187	COC1=CC2=C(C(=O)C3=CC(O)=C(C)C=C3C2=O)C(O)=C1C1=C(OC)C=C(O)C2=C1C(=O)C1=C(C2=O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@](C)(O)[C@@H]1O	-9.9833
1188	COC(=O)C1=C(O)C=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(C)C=C1O2	-10.8447

1189	C[C@@](O)(CCOP(=O)(O)O)CC(=O)O	-9.9718
1190	O=C(O)[C@H](O)COP(=O)(O)O	-9.5746
1191	COC1=C(C2=CC=C(O)C(O)=C2)C=C(O)C2=C1OC1=CC(O)=C(O)C=C12	-10.1837
1192	N[C@@H](CCC(=O)OP(=O)(O)O)C(=O)O	-9.3816
1193	OC1=CC=C2N=C3[C@@H](O)CCN3CC2=C1	-9.7825
1194	CC1=C2CC[C@]2(C)[C@H]2CC(C)(C)C[C@H]2C1	-9.5409
1195	CC[C@H](C)C(=O)C[C@H]1C2=COC(C)=CC2=CC(=O)[C@]1(C)O	-10.5437
1196	CC[C@H](C)C(=O)[C@H]1C(=O)O[C@@]2(C)C(=O)C=C3C=C(C)O[C@H](O)[C@H]3[C@H]12	-10.7575
1197	CCC[C@H]1C[C@H]2OC(=O)C3=C(C=C(OC)C(OC)=C3O)[C@H]2O1	-10.8644
1198	C[C@H]1C=C2C=C[C@H](C)[C@H](CC[C@@H]3C[C@@H](O)CC(=O)O3)[C@H]2CC1	-10.7176
1199	OCC1=CC=CC(O)=C1	-9.3012
1200	C[C@H]1CCCC[C@H]2C(=O)C=C[C@H](O)[C@@H]2CC(=O)O1	-10.5441
1201	CC1=C[C@H]2O[C@@H]3C[C@H]4OC(=O)/C=C\C=CC(=O)OCC[C@@H](C)[C@H](O)C(=O)OC[C@@]2(CC1)[C@]4(C)[C@]31CO1	-10.7866
1202	COC1=C(C2=CC=C(O)C(O)=C2)C=C(O)C(C2=CC=C(O)C(O)=C2)=C1O	-10.1947
1203	O=C1N[C@@H](CC2=CNC3=CC=CC=C23)C(=O)N[C@H]1CC1=CC=CC=C1	-8.7649
1204	COC1=CC(O)=C2C(=O)O[C@@](C)([C@H](C)O)C2=C1C	-10.8593
1205	C[C@@]12OC3=CC(CO)=CC(O)=C3C(=O)[C@@]1(O)[C@@H](O)CC[C@@H]2O	-11.0156
1206	COC1=C(C2=CC=C(O)C=C2)C=C(O)C2=C1OC1=CC(O)=C(O)C=C12	-10.1800
1207	C[C@]1([C@H]2CCC(=O)O2)CC(=O)C2=C(O)C=C(O)C=C2O1	-10.2591
1208	O=C1NC(CC2=CC=C(O)C=C2)=NC2=CC=CC=C12	-9.1451
1209	COC1=CC(=O)[C@@H](O)[C@@]2(O)C(=O)C3=C(O)C=C(C)C=C3O[C@]12C	-10.8692
1210	CC(C)(C)C1=CC=CC(C(C)(C)C)=C1	-8.6370
1211	CCCCCC1=CC=CC(=O)O1	-9.0656
1212	CN(C1=CC=C(C(=O)O)C=C1)C1=CC=CC2=NC3=C(O)C=CC=C3N=C12	-9.0756
1213	CCCC(=O)SC	-8.4468
1214	COC1=CC(OC)=C2C(O)=C3C(=O)C=C(C)OC3=C(C3=C(OC)C=C4C=C5OC(C)=CC(=O)C5=C(O)C4=C3OC)C2=C1	-9.5696
1215	C[C@H]1C=C2C=C[C@H](C)[C@H](CC[C@@H]3C[C@@H](O)CC(=O)O3)[C@H]2[C@@H](O)C1	-10.7984
1216	C[C@@H]1C[C@@H](O)[C@@H](O)/C=C/[C@@H]2O[C@@H]2C(=O)O1	-9.6869

1217	CC[C@H](C)C(=O)[C@H]1C(=O)O[C@@]2(C)C(=O)C=C3C=C(C)OC=C3[C@H]12	-10.3539
1218	COC1=CC=C(C2=CC3=C(C[C@H]4[C@@](C)(CC[C@@]5(O)C(C)(C)C(=O)CC[C@]45C)O3)C(=O)O2)C=C1	-10.6193
1219	COC1=C(C2=CC=C(O)C=C2)C=C(O)C(C2=CC=C(O)C(O)=C2)=C1O	-9.9127
1220	COC1=CC=C2C(=C1)NC(=O)[C@@]21C=C2C(=O)N3CCC[C@H]3C(=O)N2[C@H]1C=C(C)C	-9.2298
1221	COC1=CC(OC)=C2C(=C1)C=C(O)C1=C2OC(C)=CC1=O	-10.6689
1222	C[C@@H]1CC[C@H]2C(=C[C@@H](O)[C@H](C)[C@@H]2CC[C@@H](O)C[C@@H](O)CC(=O)O)C1	-11.0737
1223	CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCCCCCCCC	-9.6638
1224	CC1=CC(O)=C2C[C@@H]3[C@@]4(C)CCC(=O)C(C)(C)[C@@H]4CC[C@]3(C)OC2=C1C=O	-11.3724
1225	CC(=O)NCCCC(=O)O	-9.2453
1226	COC1=CC=C(C)C=C1	-9.1981
1227	COC1=C([C@H](CC(C)C)OC(C)=O)C=CC2=C1C(=O)OCC1=CC(C)=CC(O)=C1O2	-10.3407
1228	C/C=C/C1=CC2=C(CO1)C(=O)[C@](C)(O)[C@H](OC(=O)C1=C(C)C=C(O)C=C1O)C2	-10.1295
1229	CC1(C)CCC(=O)[C@@]2(C)OO[C@H]3C[C@@]12CC[C@H]3O	-10.9903
1230	CC(C)[C@H]1OC(=O)[C@H](CC2=CC=CC=C2)N(C)C1=O	-9.4268
1231	CC1=C[C@@H]2C=CC[C@H](C)C(=O)[C@@H](C)C=COC(=O)O[C@]23C(=O)N[C@@H](CC2=CC=CC=C2)[C@@H]3[C@@H]1C	-9.3739
1232	COC1=C(C2=CC=C(O)C=C2)C=C(O)C(C2=CC=C(O)C=C2)=C1O	-9.5099
1233	C=CC(C)(C)C1=C2C[C@@H]3[C@H](C[C@@H](C)CN3C)C3=C2C(=CC=C3)N1	-8.3533
1234	CCCC1=CC2=C(CO1)C(=O)[C@](C)(OC(=O)C1=C(C)C=C(O)C=C1OC)[C@H](O)C2	-10.8853
1235	CCC[C@H](O)C[C@@H]1CC[C@H](C)CCCCC(=O)N(C)[C@@H](CC2=CC=C(OCCO)C=C2)C(=O)O1	-10.4118
1236	CCCCC[C@@H]1CC[C@H](C)CCCCC(=O)N(C)[C@@H](CC2=CC=C(OCCO)C=C2)C(=O)O1	-10.1792
1237	COC1=CC2=C(C3=C1C(=O)C1=C(O)C=CC=C1O3)[C@@H]1C=CO[C@@H]1O2	-10.2765
1238	O=C1N[C@@H](CC2=CC=CC=C2)C(=O)NC2=CC=CC=C12	-8.5743
1239	C[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)C	-9.1392
1240	CC1=C[C@@H](C)CC=C[C@H]2[C@H](O)C(C)=C(C)[C@H]3[C@H](CC4=CNC5=CC=CC=C45)NC(=O)[C@@]23C(=O)CC[C@H](O)C1=O	-9.7548
1241	COC1=C(C)C(=O)OC(C(C)=CCO)=C1	-10.9023

1242	COC1=C(O)C=CC2=C1OC(=CC1=CC=C(O)C(O)=C1)C2=O	-10.1957
1243	OC1=CC=C(C2OCC3OC3O2)C=C1	-9.8827
1244	COC1=CC(C[C@H](N)C(=O)O)=CC=C1O	-10.4307
1245	CC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)OCC(=O)C[C@H](C)O	-10.6746
1246	CC1=C(O)C(=O)[C@@H]2CC(=O)[C@@]34C(=O)N[C@@H](CC5=CNC6=CC=CC=C56)[C@@H]3[C@H](C)[C@@]3(C)O[C@H]3[C@@H]4C=CC[C@H](C)[C@@H]12	-8.7009
1247	CC=CCCCCC1=C(O)C=C(CC=C(C)C)C(O)=C1C=O	-10.0129
1248	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CNC4=CC=CC=C34)NC(=O)[C@]23C(=O)CCC(=O)[C@H](O)C(C)=C[C@@H](C)CC=C[C@H]3[C@@H]1O	-8.7591
1249	CC1=CC=C2C=CC(C)=C(C)CC(C)C(=O)C(C(=O)O)C3(C)OC(=C1O2)C(O)=C3O	-9.4077
1250	CCCCCCC=CCCO	-8.8685
1251	CCC=C1OC(=O)C2=C1C=C(O)C(O)=C2C	-10.6466
1252	O=C(O)C(=O)COP(=O)(O)O	-9.1466
1253	CC1=CC[C@H]([C@@H](C)C(=O)O)CC1	-9.8380
1254	CC=C(C)C1=CC(OC)=C(C)C(=O)O1	-10.7015
1255	CCC(C)CC(C)(C)CC	-8.9721
1256	CCCCCCC=CCCCCCC	-8.6615
1257	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CNC4=CC=CC=C34)NC(=O)[C@]23C(=O)C[C@H]2C(=O)C(O)=C(C)[C@@H]2[C@@H](C)C/C=C/[C@H]3[C@@H]1O	-8.8190
1258	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CNC4=CC=CC=C34)NC(=O)[C@]23C(=O)CCC(=O)C(=O)C(C)=C[C@@H](C)CC=C[C@H]3[C@@H]1O	-8.6165
1259	CC1=C2OC(=O)C3=C(C)C(Cl)=C(O)C(C=O)=C3OC2=CC2=C1C(=O)CC(C)(C)O2	-11.0181
1260	CC1=C[C@@H](C)CC=C[C@H]2[C@H](O)C(C)=C(C)[C@H]3[C@H](CC4=CNC5=CC=CC=C45)NC(=O)[C@@]23C(=O)/C=C\[C@H](O)[C@@H]1O	-9.7973
1261	CCCCCC(C)(C)CC	-8.7359
1262	C=C(CO)[C@@]12O[C@@H]1[C@@]1(C)C(=CC2=O)[C@H](OC(=O)C(O)(CO)CC(C)CC(C)C(C)O)CC[C@@H]1C	-10.6023
1263	O=CC1=CC(O)=CC=C1O	-9.8949
1264	OCC1=CC(O)=CC=C1O	-9.6999
1265	CC1=CC(O)=C(C=O)C2=C1C(=O)OC1=C(C=C3OC(C)(C)CC(=O)C3=C1C)O2	-10.9967
1266	CC1=C[C@@H](C)CC=C[C@H]2[C@H](O)[C@@](C)(O)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC4=CNC5=CC=CC=C45)NC(=O)[C@]32C(=O)C=CC(=O)[C@@H]1O	-9.1254
1267	CC1=C[C@@H]2C=CC[C@H](C)C=C(C)[C@@H](O)CC=CC(=O)[C@]23C(=O)N[C@@H](CC2=CNC4=CC=CC=C24)[C@@H]3[C@@H]1C	-8.9805

1268	CC1=C[C@@H](C)CC=C[C@H]2C=C(CO)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC4=CNC5=CC=CC=C45)NC(=O)[C@@]23C(=O)CCC(=O)C1=O	-9.0961
1269	CC[C@H](C)/C=C/C1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@@]3(C)O[C@]4(O)[C@H](C)[C@@H](C)OC(=O)[C@@H]4[C@H]3C2=CO1	-10.1080
1270	COC(=O)[C@@]1(O)C2=C(C[C@H](OC)[C@H]1O)OC1=CC=CC(O)=C1C2=O	-10.9725
1271	CC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)OCC(=O)[C@@H](O)[C@H](C)O	-10.3279
1272	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC(C)C	-8.8269
1273	CCCCCCC(=O)CCCCCC/C=C/C[C@@H](O)[C@H](O)[C@@](N)(CO)C(=O)O	-10.7214
1274	C=C(CC[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2C3=CC[C@H]4C[C@@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C)C(C)C	-10.2799
1275	COC[C@H]1OC(=O)C2=COC3=C2[C@@]1(C)C1=C(C3=O)[C@@H]2CCC(=O)[C@@]2(C)C[C@H]1OC(C)=O	-9.7787
1276	C[C@@H]1CCCC2=CC[C@@H]([C@](C)(O)CO)C[C@@]21C	-10.5984
1277	C/C=C(\C)C(=O)C1=C2C3=COC(/C=C/[C@@H](C)CC)=CC3=C(Cl)C(=O)[C@@]2(C)OC1=O	-9.2139
1278	C/C=C(\C)C(=O)[C@@H]1C(=O)O[C@]2(C)C(=O)C(Cl)=C3C=C(/C=C/[C@@H](C)CC)OC=C3[C@H]12	-9.4838
1279	N[C@@H](C[C@@H]1CC[C@@H](O)[C@@H]2O[C@H]12)C(=O)O	-10.0093
1280	COC1=CC=CC(C(=O)O)=C1N	-10.2167
1281	CC1(C)CCC[C@@]23C(=O)O[C@]4([C@@H](O)C(=O)[C@@H]12)[C@H]1[C@H](CO)[C@@]1(C)CC[C@@]43O	-10.8799
1282	CC1=CC(O)=C(C=O)C2=C1C(=O)OC1=C(O)C3=C(C(=O)CC(C)(C)O3)C(C)=C1O2	-11.0429
1283	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC3=C(C2=C1)[C@@](C)(O)C[C@@H](OC)[C@@]31C[C@@H](O)C(=O)O1	-11.2791
1284	COC1=CC(O)=CC2=C1C(=O)OC(C[C@H]1CCC[C@H](C)O1)C2	-10.9690
1285	OCC1=CC=C2C=CC=CC2=C1	-8.6800
1286	C=C[C@]1(C)C=C2[C@](O)(CC1)[C@]13CO[C@@]2(O)C[C@H]1C(C)(C)CC[C@H]3O	-11.2810
1287	C=C[C@]1(C)C=C2[C@H](O)[C@H]3OC(=O)[C@@]4(CCCC(C)(C)[C@H]34)[C@@]2(O)C[C@@H]1O	-10.8595
1288	C=C[C@@]1(C)CC[C@]2(O)C3=C(C(=O)[C@H](O)[C@]2(O)C1)C(C)(C)CC[C@H]3O	-11.2455
1289	C=C[C@@]1(C)CC[C@]2(O)C3=C(C(=O)[C@H](O)[C@]2(O)C1)C(C)(C)CCC3	-11.1510
1290	C=C[C@]1(C)C=C2C(=O)C[C@H]3C(C)(C)[C@@H](O)C[C@@H](O)[C@]3(C)[C@@]2(O)CC1	-11.3191

1291	C=C[C@]1(C)C=C2[C@H](O)[C@H](O)[C@H]3C(C)(C)CC[C@@H](O)[C@]3(C)[C@@]2(O)CC1	-11.1503
1292	C=C[C@]1(C)C=C2C(=O)[C@@]3(O)OC(=O)[C@@]4(CCCC(C)(C)[C@H]34)[C@@]2(O)[C@H](O)C1	-10.7304
1293	C=C[C@@]1(C)C[C@H](O)C2=C([C@H](O)C[C@H]3C(C)(C)CCC[C@]23C)[C@H]1O	-11.0955
1294	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(C(=O)C2=C1)[C@@H](O)[C@](C)(O)[C@H](O)[C@H]3O	-10.7337
1295	C=CC1=CN=CC2=C1C=C1C3=C(CCN1C2=O)C1=CC=CC=C1N3	-8.2879
1296	C[C@H]1C(=O)O[C@@H]2C[C@H]1CC[C@]2(C)O	-10.2331
1297	C[C@@H](N)C(=O)NC1=CC=CC=C1C(=O)N[C@@H](O)CCS	-10.0881
1298	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC3=CC(O)=C(Cl)C(C)=C3C2=C1	-10.7319
1299	C[C@]1(CCOS(=O)(=O)O)CC[C@H]2C(=C[C@H]3OC(=O)[C@@]4(C)CCC[C@@]2(C)[C@@H]34)C1	-11.0476
1300	COC1=CC2=C(C(C)=C1Cl)C1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)O2	-10.7440
1301	C[C@@]12CCC[C@]3(C)C4=CC(=O)OC[C@@]4(O)[C@H](O)[C@@H](OC1=O)[C@@H]23	-10.6576
1302	O=C1C2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)C2=C1C=C1O[C@H]3OCC[C@H]3C1=C2O	-10.6558
1303	COC1=C(O)C2=C(OC3=C(C=O)C(O)=CC(C)=C3C(=O)O2)C(C)=C1C(=O)C=C(C)C	-10.7463
1304	COC1=C(O)C2=C(OC3=C(C=O)C(O)=C(Cl)C(C)=C3C(=O)O2)C(C)=C1C(=O)C=C(C)C	-10.6352
1305	CC(C)=CCC1=C(O)C=C2OC3=C(C=O)C(O)=CC(C)=C3C(=O)OC2=C1C	-9.9873
1306	CC[C@H](C)/C=C(C)/C=C/C1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@](C)(O)[C@@H](CC(C)=O)C2=CO1	-9.6576
1307	NC(=O)NC(NC(N)=O)C(=O)O	-9.3938
1308	C=C(CO)[C@@]12O[C@@H]1[C@@]1(C)C(=CC2=O)[C@H](OC(=O)C(C)CC(C)CC(C)CC)CC[C@@H]1C	-10.8423
1309	CCCCC/C=C/C1=C(CO)[C@@H]2OC(C)(C)[C@@H](O)C[C@@]23O[C@H]3[C@@H]1O	-11.1013
1310	C=C(CO)[C@@]12O[C@@H]1[C@@]1(C)C(=CC2=O)[C@H](O)CC[C@@H]1C	-10.9717
1311	C=C(CO)[C@@]12O[C@@H]1[C@@]1(C)C(=CC2=O)[C@H](OC(=O)C(O)(CO)CC(C)CC(C)CC)CC[C@@H]1C	-10.6161
1312	COC1=CC(O)=C2C(=O)C(OC)=C(C3=CC=CC(Cl)=C3O)OC2=C1OC	-10.5274
1313	C[C@@]12CCC3=C(C=CO3)[C@H]1CC[C@@]13C[C@@H](CC[C@H]12)[C@@](O)(CO)C3	-11.0997
1314	C/C=C(\C)[C@@H]1C=C[C@@H]2C[C@H](C)C[C@H](C)[C@H]2[C@@H]1/C(O)=C1/C(=O)N[C@H](C[C@](C)(O)C(=O)O)C1=O	-10.9107

1315	CC1=C2OC3=C(C=O)C(O)=C(Cl)C(C)=C3C(=O)OC2=C(O)C2=C1C(=O)CC(C)(C)O2	-10.7772
1316	C[C@H]1CCC[C@H](CC2CC3=CC(O)=CC(O)=C3C(=O)O2)O1	-10.7972
1317	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CNC4=CC=CC=C34)NC(=O)[C@]23C(=O)CC[C@H](O)[C@H](O)C(C)=C[C@@H](C)CC=C[C@H]3[C@@H]1O	-9.0819
1318	CC(=O)O[C@H]1C[C@@]2(C)[C@@H](CC[C@H]3[C@@]4(C)C=CC(=O)[C@@H](C)[C@@H]4[C@H](OC(C)=O)C(=O)[C@@]32C)/C1=C(\CCCC(C)(C)O)C(=O)O	-9.4628
1319	C=C[C@]1(C)C=C2C(=O)C[C@H]3C(C)(C)CC[C@@H](O)[C@]3(CO)[C@@]2(O)CC1	-11.4948
1320	O=C1C[C@H](O)[C@@H]2C3=C(C=CC(O)=C13)C1=CC=C(O)C3=C1[C@@]2(O)C=CC3=O	-9.6781
1321	O=C(CC1=CNC2=CC=CC=C12)OCCC1=CC=CC=C1	-8.9156
1322	C=C1C[C@@]2(O)[C@]3(C)CCC(=O)C(C)(C)C3=C(O)C(=O)[C@]2(C)[C@H]2C(=O)O[C@](C)(C(=O)OC)C(=O)[C@]12C	-10.1754
1323	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CNC4=CC=CC=C34)NC(=O)[C@]23C(=O)C=CC(=O)[C@H](O)C(C)=C[C@@H](C)CC=C[C@H]3[C@@H]1O	-8.9873
1324	CC1=C[C@@H](C)CC=C[C@H]2[C@H](O)C(C)=C(C)[C@H]3[C@H](CC4=CNC5=CC=CC=C45)NC(=O)[C@@]23C(=O)CCC(=O)C1=O	-8.9721
1325	C[C@H](/C=C/C1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@@]3(C)O[C@]4(O)[C@H](C)[C@@H](C)OC(=O)[C@@H]4[C@H]3C2=CO1)[C@@H](C)O	-10.3298
1326	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CNC4=CC=CC=C34)NC(=O)[C@]23C(=O)/C=C\[C@H](O)[C@H](O)C(C)=C[C@@H](C)CC=C[C@H]3[C@@H]1O	-8.9953
1327	C[C@@H]1O[C@@H](CC2CC3=CC(O)=CC(O)=C3C(=O)O2)CCC1O	-10.9882
1328	C/C=C/C1=CC2=CC(=O)[C@@](C)(OC(=O)C3=C(C)C=C(O)C=C3O)C(=O)[C@@]2(O)[C@@H](O)O1	-10.0143
1329	O=C1C[C@H](O)[C@H]2C3=CC=C(O)C4=C3[C@H](C3=C2C1=C(O)C=C3)[C@@H](O)CC4=O	-9.8400
1330	CC[C@H](C)/C=C/C1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@@]3(C)OC(=O)C(C(=O)[C@@H](C)[C@@H](C)O)=C3C2=CO1	-9.5321
1331	C/C=C/C=C/C(=O)N1C[C@H](C)N(C)C[C@H]1C	-9.0895
1332	CC(C)C1=C(O)C(=O)C=CC=C1	-9.8114
1333	O=C1NCC(=O)N2CCC[C@@H]12	-9.1280
1334	ClC(Cl)C(Cl)Cl	-8.8796
1335	O=C1CNC(=O)[C@H](CC2=CC=CC=C2)N1	-9.0012
1336	O=C(O)C1=CC=C(C(=O)O)C=C1	-10.1424
1337	C=CCCCCCCCC(=O)O	-9.5322
1338	O=C1C(O)=C(C2=CC=CC=C2)[C@@H]2CCCN12	-9.3148

1339	CC(C)=CCC1=C(O)C=C(O)C(C=O)=C1C(=O)C1=C(O)C(Cl)=C(C)C(Cl)=C1O	-9.9136
1340	C=CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	-9.0616
1341	COC1=CC(=O)OC(C)=C1C(=O)C[C@H](C)OC	-10.6427
1342	COC1=C(C)C(O)=C2C(=O)OCC2=C1C	-10.6553
1343	COC1=CC2=C(C(=O)C3=C(O)C=C(C)C=C3C2=O)C(OC)=C1O	-10.7490
1344	C=C(C)C#CC1=CC(O)=CC=C1O	-10.0019
1345	O=C1CCCCN1	-8.7822
1346	CCCCC=CCCCCCCCCCCCCC(=O)OC	-10.0651
1347	CC=C(C)C1=CC(OC)=CC(=O)O1	-10.5358
1348	CC=C(C)C=C(C)C1=CC(OC)=C(C)C(=O)O1	-10.2335
1349	NC(=O)CC1=CC=C(O)C=C1	-9.6785
1350	COC1=CC(=O)OC(C(C)=CCO)=C1	-10.6846
1351	CCCCCC=CC(=O)C=CCCCCCCCC(=O)O	-10.0700
1352	COC(=O)C=CC1=C(CC=C(C)C)N(C)C=N1	-9.9351
1353	OC1CC(O)C(O)CC1O	-9.5190
1354	O=C1CC[C@H](O)C2=CC=CC=C12	-9.9932
1355	COC1=COC(CO)=CC1=O	-9.9259
1356	CCCCCCCCCCCCCCCCCOC(C)=O	-9.8098
1357	CCCCC/C=C(/C(=O)O)[C@H](C)C(=O)O	-10.0053
1358	O=C1C(O)=C(C2=CC=C(O)C=C2)[C@@H]2CCCN12	-9.7617
1359	CC1=C(O)C(C)=C2COC(=O)C2=C1O	-10.3543
1360	CC(C)CCCCC=CCCCCCCCC(=O)O	-10.1346
1361	CCCCCCC=CCCCCCCCCCCCC(=O)OC	-10.0829
1362	CCOC(=O)CC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)CCCCCCCO	-10.8272
1363	C=C(C)C(=O)C(=CC(=O)O)OC	-10.2077
1364	COC1=C(C)C2=C(C(=O)OC2)C(OC)=C1C	-10.4902
1365	CCOC(CC)OCC	-8.5423
1366	C=C(C)[C@@H]1CC=C(C(=O)OC)CC1	-9.5840
1367	CN1C(=O)C=C(O)C2=CC=CC=C21	-9.3494
1368	CC1=CC(O)=C(C)C(O)=C1C(=O)O	-10.4669
1369	C=C1CC2=CC=C3NC4=C5C3=C2[C@H]2[C@@H]1C[C@@H]2C(C)(C)O[C@H]5[C@@H]1CC[C@@]2(O)C3=C[C@@H](O)[C@@H](C(=C)C)O[C@H]3CC[C@]2(C)[C@@]41C	-9.7557
1370	C=C1CCC[C@]2(C)CC[C@@H](C(C)(C)O)[C@H](O)[C@@H]12	-10.6364
1371	CC(=O)OC/C=C/C1=CC2=C(CO1)C(=O)[C@](C)(O)[C@H](OC(=O)C1=C(C)C=C(O)C=C1O)C2	-10.1480
1372	CC1=C2OC3=C(C(=O)OC2=CC(O)=C1C(=O)O)C(C)=C(O)C(O)=C3	-10.6578
1373	CC1=CC(O)=CC2=C1OC1=CC(O)=CC(C)=C1C(=O)O2	-10.1036

1374	CCCCCC1=C(C=O)[C@H]2OC(C)(C)[C@H](O)C[C@@]2(O)[C@H](Cl)[C@H]1O	-10.9285
1375	C=C(C)[C@@H]1C[C@@]2(C)C(=CC1=O)CC[C@@H](O)[C@@H]2C	-10.8229
1376	COC1=CC=CC2=C(C3=CC=C(O)C4=C(OC)C=CC=C34)C=CC(O)=C12	-9.5721
1377	C/C=C(\C)C(=O)O[C@H]1C=CC(=O)O[C@H]1/C=C/[C@H](O)[C@H](C)O	-10.7060
1378	C[C@]12CCC[C@](C)(C(=O)O)[C@@H]1C=C[C@H]1COC(=O)C[C@@H]12	-10.9609
1379	C[C@@H]1C/C=C/CC/C=C/C(=O)CC2=C(Cl)C(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.2855
1380	CCCCCCCC(=O)C1=C(O)C=C(O)C=C1CC(=O)OCC	-10.8830
1381	COC1=CC(O)=C2C(=C1)C(=O)[C@H]1C[C@](C)(O)[C@H](O)C[C@@H]1[C@H]2O	-11.3029
1382	CC1(C)CCC[C@@]2(C)C3=COC=C3CC[C@H]12	-9.7218
1383	COC1=CC(C)=CC2=C1C(=O)C1=C(C=C(O)C(O)=C1O)C2=O	-10.4163
1384	COC1=CC(=O)C2=C(O)C3=C(C=C(C)OC3)C(O)=C2C1=O	-10.7950
1385	CO[C@@H]1[C@H](OC(=O)/C=C/C=C/C=C/C=C/C(=O)O)CC[C@]2(O)CO[C@](C)([C@H](O)CC=C(C)C)[C@@H]12	-9.4472
1386	CC(C)[C@H]1OC(=O)[C@@H](CC2=CC=CC=C2)N(C)C1=O	-9.4253
1387	C=CC(C)(C)C1=C(C[C@@H]2NC(=O)[C@H](C)NC2=O)C2=CC(CC=C(C)C)=CC=C2N1	-8.9648
1388	O=C(C=CC1=CC(O)=CC(O)=C1)C1=CC=C(O)C=C1O	-9.7486
1389	C=CC(C)(C)C1=C(C[C@@H]2NC(=O)[C@H](C)NC2=O)C2=CC=CC(CC=C(C)C)=C2N1	-8.9137
1390	CC1=CC(O)=CC(OC2=CC(C)=CC(O)=C2)=C1	-9.7332
1391	CC(C)=CCC1=CC=CC2=C1C1=C(N2)[C@@]2(C)[C@@H](CC[C@@]3(O)C4=CC(=O)C5O[C@@]4(CC[C@@]32C)OC5(C)C)C1	-9.2420
1392	CC[C@H](C)C(=O)[C@@H](C)C1=CC(O)=C2C(=O)[C@@H]3[C@@]4(C)CC[C@H](C(C)(C)O)O[C@@H]4CC[C@@]3(C)OC2=C1O	-11.0787
1393	CC(=O)OC[C@@]1(C)[C@@H]2CC[C@@]3(C)OC4=C(C[C@@H]3[C@@]2(C)CC[C@@H]1OC(C)=O)C(=O)OC(C1=CC=CN=C1)=C4	-9.6900
1394	COC(=O)[C@@]12C(=O)C(C)=C(O)[C@]1(C)C(C)=C[C@H]1[C@]3(C)CCC(=O)C(C)(C)[C@H]3CC[C@@]12C	-10.7050
1395	CC(C)=C[C@H]1C2=C(C3=CC=CC=C3N2)[C@H](O)[C@@]2(O)C(=O)N3CCC[C@H]3C(=O)N12	-10.1051
1396	CC(=O)OC1=CC(C)(C)OC2=C(CC=C(C)C)C=C(O)C=C12	-10.4576
1397	C[C@@H]1CN(C)[C@@H]2CC3=CNC4=CC=CC(=C34)[C@H]2[C@H]1O	-9.5912
1398	C[C@H](O)[C@H](O)/C=C/C1=CC=CC(O)=C1C=O	-10.4730

1399	CC=C(C)C(=O)OC1=C(O)C=C(OC)C(C(=O)C=CC2=CC=CC=C2)=C1O	-9.5680
1400	COC1=CC(=O)OC2=C(C3=C(O)C=C(C)C4=C3OC(=O)C=C4OC)C(O)=CC(C)=C12	-10.1191
1401	C=C[C@@]1(C)C=C2CC[C@H]3C(C)(C)CCC[C@]3(C)[C@H]2CC1	-9.4698
1402	COC1=CC(O)=CC2=C1C(=O)O[C@@H](C[C@H]1CCC[C@H](C)O1)C2	-10.9669
1403	COC1=CC=C2C3=C4[C@H](CC(C)(C)OO[C@H](C=C(C)C)N4C2=C1)N1C(=O)[C@@H]2CCCN2C(=O)[C@]1(O)[C@H]3O	-10.2583
1404	CC(C)[C@@]1(O)[C@@H]2CC[C@@]3(C)O[C@H]3C[C@@]2(C)C[C@@H]1O	-10.7489
1405	COC1=CC=C2C(=C1)NC(=O)[C@@]21C[C@H]2C(=O)N3CCC[C@H]3C(=O)N2[C@H]1C=C(C)C	-9.4641
1406	O=CNC=CC1=CC=C(O)C=C1	-9.2360
1407	C[C@@]12CC[C@@H](CO1)C1=C(C=C3C(=O)C4=CC(O)=CC(O)=C4C(=O)C3=C1O)O2	-11.0872
1408	C=CC(C)(C)C1=C(/C=C2/NC(=O)[C@H](C)NC2=O)C2=CC(CC=C(C)C)=CC(CC=C(C)C)=C2N1	-8.9299
1409	CCCCCCCCCC1=CC(OC(=O)C2=C(CCCCCCCCCC)C=C(O)C=C2O[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]2O)=CC(O)=C1C(=O)O	-11.2553
1410	C=CC(C)(C)C1=C(/C=C2\NC(=O)[C@H](C)NC2=O)C2=CC(CC=C(C)C)=CC=C2N1	-8.7965
1411	CC1=CC(O)=C(O)C2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(O)C=C1O2	-10.6327
1412	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(C[C@](C)(O)[C@H](O)C3)C(=O)C2=C1	-11.1409
1413	C=C1C(=O)O[C@H]2CC(C)=C3CC[C@@H](C)[C@@H]3C[C@H]12	-9.9014
1414	CC(C)=CCC1=CC=CC2=C1NC=C2C[C@@H]1NC(=O)[C@H](C)NC1=O	-10.1614
1415	CC1(C)C[C@@]23[C@@H]4CC(=O)[C@@H]2COC(=O)[C@]3(O)CC[C@H]41	-11.2373
1416	CC1=C2CC[C@@H](C)[C@@H]2C[C@H]2[C@H](C1)OC(=O)[C@@H]2C	-10.2856
1417	CC1=CC(=O)C2=C(O1)C1=C(C=C(O)C(O)=C1C(=O)O)OC2	-10.5900
1418	COC1=CC(O)=C2C(=O)[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@@](C)(O)C[C@@H]3[C@@H](O)C2=C1O	-11.0697
1419	CC1=CC(=O)C2=C(O1)C1=CC(O)=C(O)C=C1OC2	-10.4128
1420	CCCCCC[C@@H]1O[C@]23CC[C@H](O)[C@@]4(O)OC5=C(C(=O)[C@H](O)CC5)[C@H](C[C@@H]1O2)[C@H]34	-11.3929
1421	C[C@H]1CCC/C=C/C(=O)C2=C(O)C=C(O)C=C2CC(=O)O1	-10.7383

1422	OC1=CC=CC2=C1[C@@H](O)CCC21OC2=CC=CC3=CC=CC(=C23)O1	-9.0972
1423	CC(=O)O[C@@H]1C=C[C@](C)(O)C[C@@H](C)CC=C[C@H]2C=C(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@@]231	-9.3428
1424	CC(C)=CCC1=CC=C2NC3=C(C[C@@H]4CC[C@@]5(O)C6=CC(=O)C7O[C@@]6(CC[C@]5(C)[C@@]34C)OC7(C)C)C2=C1	-9.2305
1425	COC1=CC=C2C3=C([C@H](C=C(C)C)N4C(=O)[C@@H]5CCCN5C(=O)[C@]4(O)[C@H]3O)N(CC=C(C)C)C2=C1	-10.0698
1426	C[C@H]1C[C@H](C)C(=O)[C@@H]([C@H](O)CC2CC(=O)NC(=O)C2)C1	-10.7878
1427	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(C(=O)C2=C1C1=C(OC)C=C(O)C2=C1C(=O)C1=C(C2=O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@](C)(O)[C@@H]1O)[C@@H](O)[C@](C)(O)[C@H](O)[C@H]3O	-10.2608
1428	C[C@@]12C3=CC(=O)OCC3=C[C@H]3OC(=O)[C@](C)([C@H]31)[C@@H](O)[C@H]1O[C@H]12	-10.6728
1429	CC(C)C1=C2C/C=C(/C=O)[C@@H]3C(=O)[C@@H](O)[C@@H](C)[C@H]3C[C@]2(C)CC1	-10.8189
1430	CC(C)=CC[C@@H]1C[C@H](O)C2=CC=CC=C2C1=O	-10.0610
1431	O=C1OC(C[C@@H](O)C(Cl)Cl)=CC2=CC(O)=CC(O)=C12	-10.3349
1432	COC1=C(C2=CC=C(O)C(O)=C2)OC2=CC3=C(OCO3)C(O)=C2C1=O	-10.4863
1433	O=C1C=C[C@]23OC4=CC=C(O)C5=C4[C@](CCC5=O)(OC4=C2C1=CC=C4)O3	-9.4280
1434	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=CN=C(C)C=C3C(=O)C2=C1O	-10.4755
1435	CC(C)=C1OC2=C(C=CC3=CC(C)=NC=C23)C1=O	-9.4590
1436	COC1=CC(O)=C2C(=O)C(C)=C(CC(C)=O)C(=O)C2=C1O	-10.9981
1437	CS[C@]1(CO)NC(=O)[C@](CC2=CNC3=CC=CC=C23)(SC)NC1=O	-10.3643
1438	CC1(C)CC(=O)C2=C(O1)C1=C[C@@H](C(C)(C)O)O[C@H]1[C@@H](O)C2	-10.9378
1439	COC1=C(C)C(=O)C2=C(C=C(O)C3=C2O[C@H](C)[C@]3(C)[C@H](O)C/C=C(\C)CO)C1=O	-10.8093
1440	O=C1C[C@H]2[C@@H]3CCC(=O)C4=C(O)C=CC(=C43)[C@@]2(O)C2=CC=CC(O)=C12	-9.6752
1441	CC(C)=CCC1=CC(O)=CC2=C1OC(C)(C)CC2=O	-10.7466
1442	O=C(N[C@H](CO)CC1=CC=CC=C1)C1=CC=CC=C1	-9.2447
1443	CC1=CC(O)=CC2=C1C1=C(C)C=C(O)C=C1O2	-10.0732
1444	COC(=O)/C=C/C(=O)N[C@H](CC1=CC=C(O)C(Cl)=C1)C(=O)O	-10.4451
1445	CC(=O)C[C@@H](O)CC1=CC2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.6910

1446	C=C1C[C@H]2[C@@](C)(C(=O)C(O)=C3C(C)(C)C(=O)CC[C@@]32C)[C@@H]2C(=O)O[C@@](C)(C(=O)OC)C(=O)[C@@]12C	-9.7857
1447	COC(=O)[C@@]12C(=O)C(C)=C(O)[C@]1(C)C(C)=C[C@@H]1[C@]34CC[C@H](OC(C)=O)C(C)(C)C3[C@H](C[C@@]12C)OC4=O	-10.0825
1448	OCCC1=C([C@@H](CO)C2=CNC3=CC=CC=C23)NC2=CC=CC=C12	-8.5235
1449	COC1=CC=CC2=C1[C@H](O[C@@H]1C[C@H](C)OC3=CC=CC(OC)=C31)C[C@H](C)O2	-9.3264
1450	CCC(C)[C@@]12OC[C@@H](C(C)C(C)O)[C@@H]1CC1=C(O2)C(C)=C(C)OC1=O	-10.6551
1451	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC=O	-9.2830
1452	CC(C)(O)[C@H]1C[C@]2(O)[C@H](CC3=C(OC(C)(C)[C@@H](O)C3=O)[C@@H]2O)O1	-10.5797
1453	OCCC1=C([C@H](CO)C2=CNC3=CC=CC=C23)NC2=CC=CC=C12	-8.5235
1454	CCCCCC=CC1=C(OC)C=CC(O)=C1C=O	-10.7088
1455	CCC(C)C12OCC(C(C)[C@H](C)O)C1CC1=C(O2)C(C)=C(C)OC1=O	-10.6557
1456	CCCCCC=CC1=C(OC)C=CC(OC)=C1CO	-10.4539
1457	COC1=CC2=C(CO[C@](C)(OC)C2)C(OC)=C1	-10.3856
1458	COC(=O)CNC(=O)C1=CC=C(CC[C@H](C)O)C=N1	-9.9652
1459	COC(=O)C1=CC(OC)=CC(O)=C1C(=O)C1=C(O)C=C(C)C(C2=CC(C)(C)OC3=C(CC=C(C)C)C=C(O)C=C23)=C1O	-9.6504
1460	CC1(C)C=CC2=C(C=CC3=C2NC(=O)[C@@]32[C@H](O)[C@@]34NC(=O)[C@]5(CCCN5C3=O)C[C@H]4C2(C)C)O1	-9.8473
1461	CC1=CC[C@@H]2[C@]34CC[C@](O)(OC3)C(C)(C)[C@@H]4CC[C@@]2(C)[C@]12CC1=C(C=C(C3=CC=CN=C3)OC1=O)O2	-9.4232
1462	CC1=CC2=CC=C3C(=O)C(C)=C(C)OC3=C2C=N1	-9.6616
1463	COC1=CC2=C(OC3=C2C(=O)C=C(C)C3=O)C(C)=C1O	-10.8225
1464	C[C@H]1NC(=O)[C@H]2CCCN2C1=O	-9.2089
1465	COC1=CC(OC)=C2C(=O)C(C)=C(CC(C)=O)C(=O)C2=C1O	-11.0658
1466	CC[C@H](C)[C@@H](OC(C)=O)[C@@H](C)C1=CC(=O)C2=C(O[C@]3(C)CC[C@H]4O[C@@H](C(C)(C)O)CC[C@]4(C)[C@H]3[C@@H]2O)C1=O	-10.5389
1467	COC1=CC(O)=C(C(=O)O)C(C2=C(C)C[C@@H](O)C2=O)=C1	-10.6637
1468	CCCCCC[C@@H](O)[C@H]1CCC2=C(O1)[C@@H](O)CCC2=O	-10.7311
1469	COC1=CC2=C(C=C1O)C1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)O2	-10.8529
1470	CC(C)=CCC1=C(C[C@@H]2NC(=O)[C@@H]3CCCN3C2=O)C2=CC=CC=C2N1	-9.7943

1471	C[C@@H]1CC[C@H]2[C@]3(C)CO[C@]4(C)CC[C@]12C[C@H]34	-9.8699
1472	C[C@@H]1NC(=O)[C@@H](CC2=CNC3=CC=CC=C23)N2C1=NC1=CC=CC=C1C2=O	-9.0423
1473	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=CC(O)=C(C)C=C3C(=O)C2=C1	-10.0809
1474	COC1=CC=C2C=C(NC(=O)C3=NO[C@H]4[C@H](O)C=C[C@@H](O)[C@@]4(O)C3)C(=O)OC2=C1OC	-9.9072
1475	COC1=CC=C(C2=CC(=O)C3=C(O)C4=C(OCO4)C(O)=C3O2)C=C1	-10.1933
1476	CC(C)=CCC[C@@H](C)C1=CC=C(C)CC1	-9.0225
1477	O=C1O[C@H](CC2=CC=CC=C2)C[C@H]1O	-9.3607
1478	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(C(=O)C2=C1C1=C(OC)C=C(O)C2=C1C(=O)C1=CC(C)=C(O)C=C1C2=O)[C@@H](O)[C@](C)(O)[C@H](O)[C@H]3O	-9.7768
1479	CO[C@@H]1CCC[C@H](C)OC(=O)CC2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)C1	-11.0394
1480	C=CCCCCCCCCC[C@@H](O)[C@H](C)N	-9.9905
1481	CN1C(=O)[C@@]23C[C@]4([C@]56C[C@@]78SS[C@@](C)(C(=O)N7[C@H]5NC5=CC=CC=C56)N(C)C8=O)C5=CC=CC=C5N[C@@H]4N2C(=O)[C@]1(C)SS3	-8.6525
1482	CC(=O)O[C@@H]1C=C[C@@](C)(O)C(=O)[C@@H](C)CC=C[C@H]2[C@@H]3O[C@]3(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@@]312	-8.9667
1483	C[C@H]1CCCCC[C@H](O)C(=O)[C@@H](O)CC(=O)O1	-10.3967
1484	CCCCCC(=O)CCC	-8.9700
1485	C[C@H]1CCC[C@@]2(CC3=C(CO2)C(=O)[C@](C)(O)[C@@H](O)C3)O1	-10.7958
1486	C[C@H](O)CCCCC[C@H](O)[C@@H]1C=CC(=O)O1	-9.9874
1487	CC(C)=CCC[C@@](C)(O)[C@@H]1CC[C@@](C)(O)[C@H]1C	-10.5857
1488	CC1=C2C[C@]3(C)[C@@H](C)CC[C@@H]4O[C@@]43C[C@@]2(O)OC1=O	-10.9435
1489	CC=CCCC(=O)C1=CC(C)=C(O)C=C1O	-10.5776
1490	CCCCC/C=C/C1=C(CO)[C@@H](O)[C@H]2O[C@@]2(C/C=C(\C)C(=O)O)C1=O	-10.6070
1491	COC1=CC=C2C3=C(NC2=C1)[C@H](C=C(C)C)N1C(=O)[C@@H]2CCCN2C(=O)[C@]1(O)[C@H]3O	-10.3313
1492	COC1=C2OC=CC2=CC2=C1OC1=C(C3=CC4=C(C=C3OC1)OCO4)C2=O	-10.2002
1493	O=C1C(=CC2=CC=CC=C2)OC2=C1C=CC1=C2C=CO1	-8.7259
1494	C[C@H]1CC=C[C@H]2[C@@H]3O[C@]3(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@]32[C@H](O)[C@@H]2O[C@H]2[C@@](C)(O)C1=O	-9.8945
1495	C=C(C)[C@H]1CC[C@]1(C)CCO	-9.3139

1496	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2C3=C(CC[C@]12C)[C@@]1(C)CC[C@H](O)CC1=CC3=O	-11.1363
1497	C[C@H]1CCC[C@H](C[C@H]2CC3=CC(O)=CC(O)=C3C(=O)O2)O1	-10.8250
1498	CC(C)[C@H]1CC[C@](C)(O)[C@H](O)[C@H]1O	-10.3575
1499	COC1=CC(OC)=C2C(=C1)C(=O)O[C@H]2C1=COC(C)=CC1=O	-10.0988
1500	CON1C(=O)[C@@](CC2=CNC3=CC=CC=C23)(SC)NC(=O)[C@H]1CO	-10.5805
1501	CCCCC[C@@H]1O[C@@H]1CCCCCCCCCCC(=O)OC	-10.1161
1502	CON1C(=O)[C@](CC2=CNC3=CC=CC=C23)(SC)NC(=O)[C@H]1CO	-10.5805
1503	CC(=O)O[C@H]1C2=C(C[C@@H]3O[C@@H](C(C)(C)O)C[C@]31O)C(=O)CC(C)(C)O2	-10.7040
1504	CO[C@]12OC3=C(C)C([C@H](C)C(C)=O)=C(C=O)C(O)=C3C[C@]1(C)C(=O)C(C)=C1C2=CO[C@H](C)[C@H]1C	-10.5891
1505	CCCCCC=CC1=C(CO)[C@H]2OC(C)(C)[C@H](O)C[C@@]2(O)C[C@@H]1O	-10.9859
1506	CC(CO)C1=C[C@]2(C)C(=CCC[C@H]2C)CC1	-9.7729
1507	CON1C(=O)[C@@](CC2=CNC3=CC=CC=C23)(SC)NC(=O)[C@@H]1CO	-10.5805
1508	CON1C(=O)[C@](CC2=CNC3=CC=CC=C23)(SC)NC(=O)[C@@H]1CO	-10.5805
1509	C=CC(C)(C)C1=C(C=C2NC(=O)C(=C)NC2=O)C2=CC=C(CC=C(C)C)C=C2N1	-8.5643
1510	CC1(C)C=CC2=C(C=CC3=C2N(O)C(=O)[C@@]32[C@H](O)[C@@]34NC(=O)[C@]5(CCCN5C3=O)C[C@H]4C2(C)C)O1	-9.9618
1511	CC/C=C\[C@H]1O[C@@H]1C1=C(C)C(=O)[C@]2(O1)C(=O)N[C@@](OC)(C(=O)C1=CC=CC=C1)[C@@H]2O	-9.4222
1512	CCCCCCCCCCCC(N)=O	-9.3591
1513	C=C(C)[C@H]1O[C@H]2CC[C@@]3(C)[C@@](O)(CC[C@H]4[C@@H]5OC(C)(C)[C@H]6C[C@@H]7C(=C)CC8=CC=C9NC(=C5C9=C8[C@@]76O)[C@@]43C)[C@]23O[C@@H]3[C@H]1O	-9.5778
1514	COC1=CC(O)=C2C(=O)O[C@@]3(C)C=C(O)C(=O)C=C3C2=C1	-10.5804
1515	CCCCCC(=O)C1=C(O)C=C2C(=O)C3=CC(O)=CC(O)=C3C(=O)C2=C1O	-10.8789
1516	C/C(=C\CC[C@@](C)(O)[C@@H]1CC[C@@](C)(O)[C@H]1C)CO	-10.6860
1517	CCC(=O)OCC1=CC=CC=C1	-8.7273
1518	C[C@@H]1C[C@H](O)/C=C/[C@@H](O)/C=C\C(=O)O1	-10.1420
1519	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC(C[C@@H](O)CO)=CC2=C1	-10.7735
1520	COC1=CC(C)=C2C(OC)=CC(=O)OC2=C1C1=C(OC)C=C(C)C2=C1OC(=O)C=C2OC	-9.8387

1521	O=C1C2=C(COC3=CC4=C(C=C32)OCO4)OC2=CC3=C(C=CO3)C=C12	-9.4813
1522	CC(C)C1=C(O)C(O)=C2C(=C1O)C(=O)C(O)=C1C(C)(C)CCC[C@@]12C	-10.9228
1523	COC1=CC(O)=C2C(=O)C(OC)=C(C3=CC=CC=C3O)OC2=C1OC	-10.4382
1524	O=C1C=C[C@@H](O)[C@@H]2[C@H]1C[C@]13SS[C@@]4(C[C@H]5C(=O)C=C[C@H](O)[C@H]5N4C1=O)C(=O)N23	-10.6894
1525	CC1=CC(O)=CC(O)=C1OC1=CC(O)=CC(C)=C1C(=O)O	-10.4394
1526	COC1=CC=C2C(C[C@@H]3NC(=O)[C@@H]4CCCN4C3=O)=C(CC=C(C)C)NC2=C1	-10.1035
1527	C=C1OC(=O)[C@]2([C@@H](/C=C/C)C=CC(=O)[C@H]2O)[C@@H]1O	-9.9757
1528	C=CC(C)(C)C1=C2C[C@@H]3[C@@H](C4=C2C(=CC=C4)N1)[C@@H](O)[C@@H](C)CN3C	-9.1986
1529	CC[C@H](O)C1=C(C)C(OC)=CC(=O)O1	-10.9316
1530	CC1(C)CCC[C@@](C)(C2=CC=C(C(=O)O)C=C2O)O1	-11.1190
1531	C=C(C)C=CC1=CC=C2C(C(=O)O)=CNC2=C1	-9.3670
1532	CC[C@H](C)/C=C/C=C(\C)C[C@@H](C)/C=C/C=C/[C@H]1OC(=O)[C@H](O)[C@@H]2O[C@]12C	-10.1030
1533	C[C@H]1C[C@@H](C)C(=O)[C@@H]([C@H](O)CC2CC(=O)NC(=O)C2)C1	-10.7955
1534	CC1=C(O)C(=O)[C@@H]2O[C@@H]2C1=O	-9.6593
1535	C=C1[C@@H]2C(=O)OC[C@H]3[C@@H]2[C@@H](C(C)C)CC[C@@]13C	-10.3407
1536	COC1=C(C2=CC=C(O)C(O)=C2)C=C(OC)C2=C1OC1=CC(O)=C(O)C=C12	-10.3628
1537	COC1=CC(C=CC(=O)N2CCCCC2=O)=CC(OC)=C1OC	-10.4616
1538	C[C@@H]1CC/C=C/[C@@H](O)/C=C\C(=O)O1	-9.9058
1539	CCC(=O)O[C@H]1CC[C@]2(C)[C@H]3CC4=C(C=C(C5=CC=CN=C5)OC4=O)O[C@]3(C)CC[C@H]2C1(C)C	-9.9879
1540	CC(C)=C1OC2=C(C=CC3=C2[C@@H](O)O[C@H](C)C3)C1=O	-10.5879
1541	C/C=C(\C=C(C)\C=C\C=C\C=C(/C)C(=O)[C@H]1C(=O)N[C@]2(O)CCO[C@H]12)C(=O)OC	-9.7052
1542	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(OC)C4=C(C=C3C(=O)C2=C1)O[C@H]1OCC[C@@H]41	-10.9001
1543	COC(=O)[C@]1(CC2=CC=C(O)C(CCC(C)(C)O)=C2)OC(=O)C(O)=C1C1=CC=C(O)C=C1	-9.8021
1544	C=C1[C@@H]2CC[C@@]3(C2)[C@H](CC[C@@H]3C)C1(C)C	-9.3514
1545	COC(=O)[C@]1(CC2=CC=C3OC(C)(C)CCC3=C2)OC(=O)C(O)=C1C1=CC=C(O)C=C1	-9.2965
1546	COC1=CC(C)=CC(C)=C1	-9.5061

1547	COC1=CC(OC)=C(C(=O)C2=C(C)C=C(O)C=C2OC)C(O)=C1Cl	-10.8414
1548	C1=CC=C2OC3=CC=CC=C3CC2=C1	-8.5560
1549	COC(=O)CCCCCCCCCC(C)C	-9.7014
1550	COC(=O)C1=C(O)C=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(O)C=C1O2	-10.8834
1551	C[C@@H]1O[C@@H]2OC1CC1=CC=CC(O)=C12	-9.9219
1552	COC(=O)CC1CCCN(C(=O)C=C(C)CCO)O1	-10.4115
1553	C=CC(C)(C)C1=C(CCNC(=O)CC[C@H](O)C(=O)O)C2=CC=CC=C2N1	-9.7601
1554	CC(C)CCCCCCCCCC[C@@H]1CC(=O)N[C@@H](CC(N)=O)C(=O)N[C@H](CC2=CC=C(O)C=C2)C(=O)N[C@H](CC(N)=O)C(=O)N[C@@H](CCC(N)=O)C(=O)N2CCC[C@H]2C(=O)N[C@H](CC(N)=O)C(=O)N[C@@H](CO)C(=O)N1	-10.5136
1555	CO[C@@H]1C[C@H](C[C@@H](O)CC[C@H](C)/C=C(/C)C(=O)O)O[C@]2(O[C@@](C)([C@@H]3CC[C@@](C)([C@H]4O[C@@H]([C@H]5O[C@@](O)(CO)[C@@H](C)C[C@H]5C)C[C@@H]4C)O3)C[C@@H]2C)[C@H]1C	-10.5249
1556	CCCCCC[C@H](O)[C@@H]1C[C@@H](O)C2=C(O1)[C@H](O)CCC2=O	-10.8186
1557	CC(C)=C/C=C1/C2=C(C[C@H](O)[C@@H]1O)C(=O)CC(C)(C)O2	-10.6150
1558	CC1=C[C@H]2O[C@@H]3C[C@@H](O)[C@](C)([C@@]2(C)CC1)[C@]31CO1	-11.1346
1559	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@]23[C@H](OC(C)=O)[C@@H]2O[C@H]2[C@@](C)(O)C(=O)[C@@H](C)C/C=C/[C@H]3[C@@H]1O	-8.9149
1560	CC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)O[C@@H]1CC2=C(COC(/C=C/CO)=C2)C(=O)[C@]1(C)O	-10.2654
1561	CC(C)=C/C=C1\C2=C(C[C@H](O)[C@@H]1O)C(=O)CC(C)(C)O2	-10.6150
1562	COC1=CC(O)=C2C(=O)[C@H]3C[C@@H](O)[C@@](C)(O)C[C@@H]3[C@@H](O)C2=C1O	-11.3455
1563	OC1=CC=C2C(=C1)C1(OC3=CC=CC4=CC=CC(=C34)O1)[C@@H]1O[C@@H]1[C@@H]2O	-9.2710
1564	CC[C@H](O)C1=C(CO)C(OC)=CC(=O)O1	-10.3948
1565	C=CC(C)(C)C1=C(/C=C2\NC(=O)[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC2=O)N=CN1	-9.1201
1566	COC1=CC2=C(C=CO2)C2=C1C(=O)C(=CC1=CC=CC=C1)O2	-9.6778
1567	CC(=O)O[C@@H]1C=C[C@](C)(O)C[C@@H](C)CC=C[C@H]2[C@H](O)[C@@](C)(O)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@@]312	-9.2668
1568	C[C@H]1[C@H]([C@@]2(C)CC[C@@H](C(C)(C)O)O2)CC[C@@]1(C)O	-10.3088

1569	COC1=CC2=C(C(O)=C1CS(=O)(=O)CCNC(C)=O)C(=O)C=C(C)O2	-11.4465
1570	CC1=C(O)C=C(C[C@H](C)O)OC1=O	-10.4459
1571	C[C@H]1CCC[C@@H](O)CC(=O)C2=C(O)C=C(O)C=C2CC(=O)O1	-10.7586
1572	CC[C@H](C)[C@H](N)C(=O)N1CCC[C@H]1C(=O)N[C@H](C(=O)O)[C@@H](C)CC	-11.0256
1573	CC(C)=C[C@H]1C2=C(C(=O)[C@@]3(O)C(=O)N4CCC[C@H]4C(=O)N13)C1=CC=CC=C1N2	-10.3667
1574	CC(=O)OC[C@]12C[C@H](OC(C)=O)C(C)=C[C@H]1O[C@@H]1[C@H](O)[C@@H](OC(C)=O)[C@@]2(C)[C@]12CO2	-10.6413
1575	CC1(C)C=CC=C(C(=O)O)C=C1	-9.6803
1576	CC1=CCC[C@]2(C)CC[C@@H](C(C)(C)O)[C@H](O)[C@@H]12	-10.5946
1577	CC(C)C1=CC=CC(=O)C(O)=C1O	-10.2596
1578	CC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)O[C@@]1(C)C(=O)C2=C(C=C(/C=C/CO)OC2)C[C@H]1O	-10.3430
1579	C[C@@H]1N[C@@H]2N(C1=O)C1=CC=CC=C1[C@@]21C[C@@H](N2C=NC3=CC=CC=C3C2=O)C(=O)O1	-8.8364
1580	C=C[C@]1(C)CC[C@]2(C)[C@H](C[C@@H](O)C3[C@]4(C)CCC[C@@]32OC4=O)C1	-11.3518
1581	C=C(C)[C@H]1CC=C2CCC[C@H](C)[C@@]2(C)C1	-9.1549
1582	CC[C@H](C)/C=C/C1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@@]3(C)O[C@]4(OC)[C@H](C)[C@@H](C)OC(=O)[C@@H]4[C@H]3C2=CO1	-9.8217
1583	CC[C@@H]1CC[C@@]2(C[C@H](O)[C@@H](CO)CO2)OC1	-10.5854
1584	CC(C)=CC[C@]12O[C@H]1[C@@H](O)CC1=C2OC(C)(C)CC1=O	-10.6483
1585	CC[C@@H]1CC[C@@]2(C[C@H](O)[C@H](CO)CO2)OC1	-10.5854
1586	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(C[C@@](C)(OC)OC3)C(=O)C2=C1O	-10.9972
1587	CC1C[C@@]23OC(=O)/C4=C(\O)[C@H](C)C[C@@](C)(O)C(=O)[C@H]5C(SC[C@](C)(NC(=O)C6=NC=CC=C6O)C(=O)O)C2C(O)[C@@H]1O[C@]453	-10.1876
1588	C=C1CC[C@@]23COC(=O)/C=C4/CCO[C@@](C(C)=O)(CC/C=C\C(=O)O[C@@H]5C[C@H]6O[C@@H]2[C@H]1C[C@@]6(O)[C@]53C)[C@@H]4O	-10.3985
1589	COC1=C(O)C=CC2=C1C(=O)O[C@H](CCCO)C2	-10.5360
1590	CC1=CC2=C(C)C(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.4145
1591	CS[C@@H]1C(=O)N2[C@H]3C(=CC=C[C@@H]3O)C[C@@]2(SC)C(=O)N1C	-10.3298
1592	CC1=CC(C)=C2C(=C1O)C(=O)O[C@H](C)[C@@H]2O	-10.4860
1593	COC1=CC(O)=CC2=C1CO[C@@](C)(OC)[C@@H]2O	-10.7205
1594	COC1=CC(O)=CC2=C1CO[C@](C)(OC)[C@@H]2O	-10.7205

1595	C[C@@]1(C(=O)OCCC2=CC=C(O)C=C2)CSC(C2=NC=CC=C2O)=N1	-8.9690
1596	C#CCCO	-8.0105
1597	COC(=O)C1=CC(OS(=O)(=O)O)=CC(OC)=C1C(=O)C1=C(OC)C=C(C)C=C1OC	-10.8678
1598	COC1=CC(O)=CC2=C1CO[C@@](C)(OC)[C@H]2O	-10.6999
1599	COC1=CC=C(C=CC2=CC=CC=C2)C=C1	-9.1406
1600	C/C1=C/C[C@]2(C)C(=O)C(O)=C([C@H](C)CO)[C@H]2C/C=C(/C)[C@@H]2CC[C@@](C)(O2)[C@@H](O)CC1	-11.1172
1601	CC=CCCC(=O)C1=C(O)[C@]2(C)C(=O)[C@@](C)(O)C1[C@H]([C@]1(C)OC(=O)C(C)=C1O)C2C(=O)CCC=CC	-9.9543
1602	NC(=O)C1=CC=CC=N1	-8.8056
1603	C=C(C(=O)O)[C@H]1CCC2=C[C@H](O)C[C@H](C)[C@@]2(C)C1	-10.9021
1604	C[C@@](CSSC[C@](C)(NC(=O)C1=NC=CC=C1O)C(=O)O)(NC(=O)C1=NC=CC=C1O)C(=O)O	-9.3141
1605	CN1CCC(=O)NC1=O	-9.0979
1606	COC1=CC(OC)=C2C(=O)C3=C(O)C([C@@H]4CCCO4)=C(O)C=C3C(=O)C2=C1	-10.9825
1607	CO[C@H]1OC(=O)C(C2=CC=C(O)C=C2)=C1C(=O)C1=CC=C(O)C(CC=C(C)C)=C1	-9.8846
1608	CO[C@@H]1OC(=O)C(C2=CC=C(O)C=C2)=C1C(=O)C1=CC=C(O)C(CC=C(C)C)=C1	-9.8846
1609	C[C@@H]1CCCCC[C@H](O)C(=O)C[C@H](S[C@H]2CC(=O)[C@@H](O)CCCCC[C@@H](C)OC2=O)C(=O)O1	-10.3323
1610	COC(=O)CC[C@H]1[C@@H](C)C=CC2=C[C@@H](CO)CC[C@@H]21	-10.5055
1611	COC(=O)CCCCC1=CC(O)=C(C=O)C(O)=C1C	-10.6852
1612	COC(=O)CC[C@H]1[C@@H](C)C=CC2=C[C@H](CO)CC[C@@H]21	-10.5055
1613	CC(=O)C[C@@H]1CC(=O)C2=C(O)C=CC=C2[C@H]1OC(C)=O	-10.7837
1614	CC1=C(O)C=CC=C1O	-9.6939
1615	CC1=CC(=O)C2=C(C[C@@H](O)C[C@H]2O)O1	-10.1998
1616	C[C@@H]1CC[C@@]23[C@H](C)CC(=O)[C@@H](C[C@H]2[C@]2(C)CC(=O)[C@H]12)C3(C)C	-10.4805
1617	CC(C)(O)CCCCCC(=O)C1=CN=C(N)N1	-9.7788
1618	COC(=O)[C@@]1(O)C2=C(OC3=CC=CC(O)=C3C2=O)[C@@H](O)C[C@@H]1O	-10.7890
1619	COC(=O)[C@@]12OC3=C(C4=CC=C5O[C@](C(=O)OC)([C@@H]6OC(=O)C[C@@H]6C)CC(=O)C5=C4O)C=CC(O)=C3C(O)=C1C(=O)C[C@H](C)[C@H]2O	-10.2570
1620	C[C@@H]1CC[C@@]2(O)C[C@H]3[C@]4(C)CC[C@@H]4[C@@](C)(O)CC[C@@]13C2(C)C	-10.7522
1621	COC1=C(O)C2=C3C(=C4C(OC)=CC(=O)C5=C4C4=C(C(OC)=C5O)C(C(C)O)C(C(C)O)C1=C43)C(OC)=CC2=O	-10.7761

1622	C=CC1(C)CCC2C(CC2(C)C)C(=C)C1	-9.3722
1623	C[C@@H]1CC(=O)[C@H]2C[C@H]3[C@]4(C)CC[C@@H]4[C@@](C)(O)CC[C@@]13C2(C)C	-11.2745
1624	COC1=CC=C(C=C2NC(=O)[C@@]3(C[C@]4(O)[C@@H](C=C[C@@H](O)[C@@H]4O)S3)NC2=O)C(O)=C1OC	-11.2128
1625	COC1=CC=C(C=C2NC(=O)[C@]3(C[C@]4(O)[C@H](C=C[C@@H](O)[C@@H]4O)S3)NC2=O)C(O)=C1OC	-11.2128
1626	CCCC1=CC(=O)C2=C(C[C@@H](O)C[C@H]2O)O1	-10.2655
1627	COC(=O)C1=CC=C(C(C)=CCO)O1	-10.3759
1628	CC1(C)O[C@@H]1CC1=CC(C(=O)O)=CC=C1O	-10.5954
1629	CCCCC=C(C=O)CCC	-9.0902
1630	CC1=C(O)C=C2O[C@H]([C@@]3([C@@H]4CC=C5CCC[C@H](C)[C@@]5(C)C4)CO3)OC(=O)C2=C1C	-11.1624
1631	C/C=C/C=C/C(=O)C1[C@@H]([C@]2(C)OC(=O)C(C)=C2O)C2C(C(=O)CC/C=C/C)=C(O)[C@]1(C)C(=O)[C@@]2(C)O	-9.2012
1632	CC(C)[C@H]1CC[C@@](C)(O)[C@@H]2CC[C@H](C)C[C@H]12	-9.9928
1633	C[C@@](CSC(=O)C1=NC=CC=C1O)(NC(=O)C1=NC=CC=C1O)C(=O)O	-9.5453
1634	CC(=O)NCCC1=C([C@H](C2=CNC3=CC=CC=C23)[C@H](O)CO)NC2=CC=CC=C12	-9.4040
1635	CCCCCC=CC1=C(CO)[C@H]2OC(C)(C)[C@H](O)C[C@]23O[C@@H]3[C@@H]1OC(C)=O	-10.9717
1636	CC(=O)C[C@@H]1O[C@]2(O)[C@@H](CO)N(C)C(=O)[C@@]23C(=O)[C@@]2(C)[C@H](C(C)=C[C@H]4C[C@@H](C)CC[C@@H]42)[C@@H]13	-10.9822
1637	CC(=O)C=C[C@@H]1[C@H]2C(C)=C[C@H]3C[C@@H](C)CC[C@@H]3[C@@]2(C)C(=O)[C@@]12C(=O)[C@@H](CO)N(C)C2=O	-10.4194
1638	COC	-8.0645
1639	C1=COCCC1	-8.4871
1640	OC1=CC=CC2=C1[C@H](O)[C@@H](O)C[C@H]2O	-10.1194
1641	OC1=CC=CC2=C1[C@H](O)[C@H](O)C[C@H]2O	-10.1184
1642	CC1=C2C(=O)C[C@@]2(C)[C@@H]2C[C@@H]3[C@@H](O)C[C@@H](C)[C@@]2(CC1)C3(C)C	-11.3719
1643	CCCCCCCC(=O)C1=CN=C(N)N1	-9.1392
1644	CON1C(=O)[C@](CC2=CNC3=CC=CC=C23)(OC)NC(=O)[C@@H]1C	-10.0664
1645	CON1C(=O)[C@@](CC2=CNC3=CC=CC=C23)(OC)NC(=O)[C@H]1C	-10.0664
1646	CCCCCCCCC=CCCCCCCCCOCCO	-9.8876
1647	C1CCCCC23CCCCCC45CCCCCCCCC4(CCCCCC2(CCC1)O3)O5	-9.2051
1648	OC1=CC=CC2=C1[C@@H](O)[C@@H](O)C[C@H]2O	-10.1194

1649	[C-]#[N+]C(=CC1=CC=C(O)C=C1)C(=CC1=CC=C2OC(C)(C)CCC2=C1)[N+]#[C-]	-8.8702
1650	COC(=O)CCC1=C([C@H](O)C(=O)OC)C(=O)C2=C(O)C=CC=C2O1	-10.8015
1651	COC1=CC=C(O[C@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]2O)C=C1OC	-10.3632
1652	CCCC1=CC2=C(C(=O)[C@@H](O)[C@H](C)O2)C(=O)O1	-10.4847
1653	CC1=C(O)C(O)=C(O)C2=C1C(=O)N([C@H](C(=O)O)C(C)C)C2	-10.7940
1654	CCCCCC=CC1=CC=CC(O)=C1CO	-9.8978
1655	CC1(C)O[C@@H]1CC1=CC(C=O)=CC=C1O	-10.0100
1656	ClC(Cl)(Cl)C(Cl)(Cl)Cl	-9.2034
1657	COC1=C(C)C(O)=C(C)C(C(=O)O)=C1C	-11.0439
1658	C[C@@H]1CCCCC[C@H](O)C(=O)C[C@H](SC[C@@H](O)C(=O)O)C(=O)O1	-10.7904
1659	CC[C@H](C)[C@@H](OC(C)=O)[C@@H](C)C1=C[C@@]2(O)CO[C@@H]3C2=C(O[C@]2(C)CC[C@H]4O[C@@H](C(C)(C)O)CC[C@]4(C)[C@@H]32)C1=O	-10.8324
1660	C=CCCCCCCCC(C)C	-8.3798
1661	C[C@@H]1C[C@H](O)[C@H]2C[C@H]3[C@]4(C)CC[C@@H]4[C@@](C)(O)CC[C@@]13C2(C)C	-10.6694
1662	CCCCCC1=CC(O)=C(C=O)C(O)=C1C	-10.4128
1663	CC1=C(CCCCC(=O)O)C=C(O)C(C=O)=C1O	-10.7675
1664	O=CC1=CC=C([N+](=O)[O-])C=C1	-9.5115
1665	COC1=CC=C(C=C2C(=O)N[C@]3(C[C@]4(O)[C@@H](C=C[C@@H](O)[C@@H]4O)O3)C(=O)N2C)C(O)=C1OC	-10.8446
1666	COC1=CC=C(C=C2C(=O)N[C@@]3(C[C@]4(O)[C@H](C=C[C@@H](O)[C@@H]4O)O3)C(=O)N2C)C(O)=C1OC	-10.8446
1667	CC(=O)OCCCCCCCCC=O	-9.4619
1668	CCCCCC=CC1=CC=CC(OC)=C1CO	-10.1698
1669	CC1=C(O)C(O)=C(O)C2=C1C(=O)N([C@@H](CC(C)C)C(=O)O)C2	-10.9002
1670	CC1=C(CCC(=O)O)C=C(O)C(C=O)=C1O	-10.3904
1671	COC(=O)[C@@]1(O)C2=C(C[C@@H](S)[C@@H]1O)OC1=CC=CC(O)=C1C2=O	-10.9517
1672	COC1=CC(=O)OCC(C)=C1CO	-10.1479
1673	OC1=C(Cl)C=C(Cl)C2=CC=CN=C12	-9.3801
1674	COC1=CC=C(C=C2NC(=O)[C@]3(C[C@]4(O)[C@H](C=C[C@@H](O)[C@@H]4O)O3)NC2=O)C(O)=C1OC	-11.0570
1675	COC1=CC=C(C=C2NC(=O)[C@@]3(C[C@]4(O)[C@@H](C=C[C@@H](O)[C@@H]4O)O3)NC2=O)C(O)=C1OC	-11.0570
1676	CCCCCCCCCOC(=O)C1=CC=CC=C1C(=O)OCCCCCCCCC	-10.2670
1677	CCC[C@H](O)CC1=CC=C(C=O)O1	-9.8548

1678	CCCCOC(=O)[C@@]1(C(=O)[C@@H](C)CC)O[C@@]12C1=COC(C)=CC1=CC(=O)[C@]2(C)O	-9.9315
1679	C=CC(C)(C)C(=O)NC1=CC=CC=C1C(=O)CCNC(=O)CC[C@H](N)C(=O)O	-10.2812
1680	CCCCCCC(=O)C1=CN=C(N)N1	-9.1196
1681	CC1=C(O)C(O)=C(O)C2=C1C(=O)N([C@@H](CC1=CC=CC=C1)C(=O)O)C2	-9.8348
1682	C[C@]1(O)CCC2=C(C1)C(=O)C1=CC=CC(O)=C1C2=O	-10.7564
1683	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC3=C(C4=C(O)C=C5C(=C4O)C(=O)OC4=CC(O)=CC(C)=C45)C(O)=C(O)C=C3C2=C1	-9.7968
1684	C[C@H](O)CC1=CC(=O)C2=C(O)C=CC=C2C1=O	-10.4493
1685	COC1=C(C)C(C)=CC2=C1OC(C)OC2=O	-10.5653
1686	COC(=O)/C=C/C(C)=C/C(C)=C/[C@H]1C(C[C@H](C)O)=C(C)C=C2C[C@@H](C)C(=O)[C@@H](C)[C@@H]21	-9.7188
1687	CC1=CC(CO)=C2C[C@@H](C)OC(=O)C2=C1O	-10.8141
1688	C=CC(C)(C)C1=C(CCNC(=O)CC[C@H](N)C(=O)O)C2=CC=CC=C2N1	-10.0604
1689	C/C(=C\CC(C)C)[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2C(CCC3=CC(O)=CC=C3C)C(=O)CC[C@]12C	-9.7847
1690	C=C(C)C#CC1=C[C@@H]2O[C@@H](C(C)(C)O)C[C@]2(O)[C@H](O)[C@@H]1O	-10.7051
1691	C=C(C)C1CCC(=C)C2CCC(C)C2C1	-9.3652
1692	O=C1C2=C(O)C=C(O)C=C2CC[C@@H]1O	-10.2124
1693	CCCCCC=CC1=C(CO)[C@H]2OC(C)(C)[C@H](O)C[C@]23O[C@@H]3C1=O	-10.9920
1694	C=CC(C)(C)C1=C(CNC(=O)CC[C@H](N)C(=O)O)C(=O)C2=CC=CC=C2N1	-9.2233
1695	C[C@@H]1CC2=C(Cl)C(O)=C(Cl)C(O)=C2C(=O)O1	-10.2183
1696	COC1=CC=C2C[C@@H](CCC(=O)O)OC(=O)C2=C1O	-10.3679
1697	C=C(C)C#CC1=C[C@H]2O[C@H](C(C)(C)O)C[C@]2(O)[C@H](O)[C@H]1O	-10.6715
1698	CCCCCCCCCC(=O)CC	-8.8085
1699	C=CC(C)(C)[C@H]1NC2=CC=CC=C2C(=O)[C@@H]1CNC(=O)CC[C@H](N)C(=O)O	-9.9441
1700	COC1=CC(OC)=C2C(=O)[C@H]3CO[C@@](C)(OC)C[C@@H]3C(=O)C2=C1	-10.9563
1701	COC1=CC2=C3C4=C5C(=CC(OC)=C6C(OC)=CC(=O)C(=C65)C3C1=O)C(O)=C(O)C(OC)=C4C(C(C)=O)C2(C)O	-10.4469
1702	NC(=O)[C@@H]1CCCN1	-9.3827
1703	CC(C)=CC(=O)C1=C[C@H](O)[C@]2(O)C[C@H](C(C)(C)O)O[C@H]2C1	-10.8284
1704	CC(C)=CC(=O)C1=C[C@@H](O)[C@@]2(O)C[C@H](C(C)(C)O)O[C@H]2C1	-10.8299
1705	CC(C)=CCC1=C(O)C=C(O)C(C=O)=C1C(=O)C1=C(O)C=C(C)C(Cl)=C1O	-9.8839

1706	COC1=CC(C)=C(Cl)C(O)=C1C(=O)C1=C(C=O)C(O)=CC(O)=C1CC=C(C)C	-10.0122
1707	CC=C(C)C(=O)O[C@H]1CCC[C@@H]2[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CCC)O[C@]12O	-10.8922
1708	CC(C)CCCCCC(=O)C1=CN=C(N)N1	-9.3590
1709	CC1=C(O)C=C2O[C@@H]([C@@]3([C@@H]4CCC5=CCC[C@@H](C)[C@]5(C)C4)CO3)OC(=O)C2=C1C	-10.9631
1710	COC1=CC=C2C(=O)C(CC(=O)O)=COC2=C1	-10.1914
1711	CC(C)CCCCC(=O)C1=CN=C(N)N1	-9.2298
1712	C/C=C/C=C/[C@H](O)CC1=CC(O)=C(C)C(=O)O1	-9.8700
1713	COC(=O)C1=C(N[C@@H]2CC3=C(C(=O)C4=C(O)C=CC=C4O3)[C@](O)(C(=O)OC)[C@@H]2O)C=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=CC=C1O2	-9.6420
1714	COC1=CC=C(C=C2NC(=O)[C@@]34C[C@]5(O)[C@@H](C=C[C@@H](O)[C@@H]5ON3C2=O)S4)C(O)=C1OC	-11.1126
1715	O=C(CC1=CNC2=CC=CC=C12)OCCC1=CNC2=CC=CC=C12	-8.9228
1716	C=C(C)C=C=C1C[C@@H]2O[C@@H](C(C)(C)O)C[C@@]2(O)[C@@H](OC(C)=O)[C@@H]1O	-10.7774
1717	CCC(=O)CCC1=CC=CC=C1	-8.3384
1718	CCCC[C@H](O)C1=CC=C(C=O)O1	-9.8789
1719	CC(=O)OCCC1=C([C@H](C2=CNC3=CC=CC=C23)[C@H](O)CO)NC2=CC=CC=C12	-9.4993
1720	CCCCCCCCC=CCCCCCCCCCCCCCCCC	-8.7446
1721	C[C@@H]1[C@@H](C(C)(O)CCCC(C)(C)O)CC[C@]1(C)O	-10.2815
1722	COC1=C(O)C(C)=C2COC(=O)C2=C1O	-10.3094
1723	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@]23[C@H](OC(C)=O)/C=C\C(C)=C/[C@@H](C)C/C=C\[C@H]3[C@@H]1O	-9.0364
1724	CCOC1=CC=CC=C1NC(C)=O	-9.1149
1725	C[C@@H]1CCCCCCC(=O)C[C@H](SC[C@@H](O)C(=O)O)C(=O)O1	-10.4791
1726	CC(C)=CCCC(C)=CCCC(C)=CCCC(C)=CCCC(C)=CCCC(C)=CCCC(C)=CCCC(C)=CCC1=CC(C(=O)O)=CC=C1O	-8.6419
1727	COC(=O)CCCCCCCCCCCCCCC(C)C	-9.6798
1728	O=C1CCC(=O)N1	-8.3762
1729	NC(N)=NCCC[C@H](N)C(=O)O	-9.3944
1730	CN(C)C=O	-8.3715
1731	CC1=C(CCCCCO)C=C(O)C(C=O)=C1O	-10.4171
1732	COC1=CC=C(O)C2=C1OC(CO)=CC2=O	-10.2768
1733	CC(C)CC(N)=O	-8.9104
1734	COC1=CC=CC(C=CC(=O)O)=C1C(C)C	-10.0525
1735	CCC(C)C12OCC(C(C)[C@H](C)O)C1CC1=C(C=C(C)OC1=O)O2	-10.3455

1736	CC[C@H](C)/C=C(C)/C=C/C1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@](C)(O)C(=O)C2=CN1CCO	-9.3090
1737	CC(=O)O[C@@H](C)CCC[C@@H]1CC(=O)C2=C(CC(=O)O)C=C(O)C=C2O1	-10.8091
1738	CCC(C)[C@@]12OC[C@@H](C(C)C(C)O)[C@@H]1CC1=C(C=C(C)OC1=O)O2	-10.3625
1739	C/C=C/C=C/C(=O)C1=C[C@@]2(C)C3/C(=C(O)\C=C\C=C\C)C(O)=C(C)C(=O)[C@@]3(C)O[C@@]2(O)[C@@](C)(O)C1=O	-8.8231
1740	CC1=CC(O)=CC(C)=C1Cl	-9.3107
1741	CC1=CC(O)=C2OC3=C(O)C=CC=C3C(=O)C2=C1	-10.3066
1742	CCCC(=O)C1=CC2=C(OC(=O)C3=C(O)C=CC=C32)C(O)=C1C	-10.2955
1743	CSC(C)=O	-8.2642
1744	CC(C)=CCC1=CC(C(=O)CO)=CC=C1O	-9.8823
1745	C=CC(C)(C)[C@@]1(CCNC(=O)CC[C@H](N)C(=O)O)C(=O)NC2=CC=CC=C21	-9.8499
1746	C=C(C)C=C=C1C[C@@H]2O[C@@H](C(C)(C)O)C[C@@]2(O)[C@@H](O)[C@@H]1O	-10.6402
1747	CC[C@H](C)/C=C(C)/C=C/C1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@](C)(O)[C@H](O)C2=CO1	-9.4032
1748	O=C1OC2=CC(O)=C(O)C=C2C2=CC(O)=CC(O)=C12	-10.1391
1749	COC1=CC=C(CCNC(C)=O)C=C1	-9.1342
1750	C=CC(C)=CC(=O)CC(C)C	-9.1793
1751	CCC(C)CCCCC(C)CC	-8.5728
1752	C[C@@H]1CC(=O)CC(C)(C)[C@@]1(O)/C=C/[C@@H](C)O	-10.8256
1753	COC1=CC=C2C(=C1OC)O[C@]1(C(=O)N[C@@]3(C[C@]4(O)[C@H](C=C[C@@H](O)[C@@H]4O)S3)C(=O)N1C)[C@@H]2SC	-10.4610
1754	C[C@]1(C(=O)O)CC[C@]2(C(=O)O)CC[C@]3(C)C(=CC[C@@H]4[C@@]5(C)CC[C@H](O[C@@H]6O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]6O)[C@@](C)(C(=O)O)[C@@H]5CC[C@]43C)[C@@H]2C1	-10.4133
1755	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CCC2C34C=CC5(C[C@@H](O)CC[C@]5(C)C3CC[C@@]21C)OO4	-10.3875
1756	CCCC=CC(=O)OCC	-9.4529
1757	CC1=CC=CC(C)=C1C=O	-8.9267
1758	CC(=O)O[C@@H]1[C@@H]2O[C@H]2[C@@](C)(O)C(=O)[C@@H](C)C/C=C/[C@H]2[C@H](O)C(C)=C(C)[C@H]3[C@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@@]123	-9.0331
1759	C=C1CC[C@@H]2[C@](C)(CCC[C@]2(C)C(=O)O)[C@H]1CC/C(C)=C/C(=O)O	-10.7991
1760	C[C@@H]1C=CC2=C(O)C=CC=C2O1	-9.6631
1761	OCC=CC1=CC=CC(O)=C1CO	-10.0636
1762	O=C(O)C1=C(C2=CC=CN2)NC2=CC=CC=C2C1=O	-8.8187

1763	CCCCC(C)[C@@H]1CC(=O)NCC(=O)N[C@@H](C(C)C)C(=O)N[C@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H](C)C(=O)N[C@@H](CC2=CC=CC=C2)C(=O)O1	-11.0144
1764	CC(=O)C1=CC(C)=C(O)C(C[C@]23CC4=C(O)C(C(C)=O)=CC(C)=C4O[C@@]2(O)[C@@H](C)OC3=O)=C1O	-10.8265
1765	CC=C(C)C1=C(Cl)C(OC)=C(C)C(O)=C1OC1=C(Cl)C(O)=C(Cl)C(C)=C1C(=O)OC	-10.3940
1766	COC1=CC(CC(C)O)=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(O)C=C1C2=O	-10.3693
1767	CCC(C)CC(C)/C=C(/C=C(C)\C=C\C=C\C=C\C=C\C=C\C1=CC(O)=C([C@@H]2O[C@H](CO)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]2O)C(=O)O1)C(=O)O	-9.9340
1768	C=CC(C)(C)C1=C(C[C@@H]2NC(=O)[C@H](CO)NC2=O)C2=CC(CC=C(C)C)=CC(CC=C(C)C)=C2N1	-9.1612
1769	CC(C)[C@H]1NC(=O)[C@@H]2C[C@]3([C@]45C[C@H]6C(=O)N[C@H](C(C)C)C(=O)N6[C@H]4NC4=CC=CC=C45)C4=CC=CC=C4N[C@@H]3N2C1=O	-8.2790
1770	C=CC(C)(C)[C@@]1(C[C@@H]2NC(=O)C3(O)CCCN3C2=O)C(=O)NC2=C1C=CC1=C2C=CC(C)(C)O1	-9.8922
1771	C/C=C(\C)C(=O)[C@@H]1C(=O)O[C@]2(C)C(=O)C(Cl)=C3C=C(/C=C/[C@@H](C)[C@@H](C)O)OC=C3[C@H]12	-9.6451
1772	CO[C@@H]1C(=O)NC2=CC=C(/C=C/[C@@]3(C)CC[C@H](C(C)(C)O)O3)C(O)=C2[C@@]1(O)C1=CC=CC=C1	-8.8125
1773	C=C(C)[C@H]1CC[C@](C)(/C=C/C2=CC=C3NC(=O)[C@@H](OC)[C@](O)(C4=CC=CC=C4)C3=C2O)O1	-8.7354
1774	CS[C@@]12C[C@@H]3C(=O)CC[C@H](O)[C@@H]3N1C(=O)[C@]1(SC)C[C@H]3C(=O)CC[C@H](O)[C@H]3N1C2=O	-11.4612
1775	CS[C@@]12C[C@@H]3C(=O)CC[C@H](O)[C@@H]3N1C(=O)[C@]1(SC)C[C@H]3C(=O)C=C[C@@H](O)[C@@H]3N1C2=O	-11.4057
1776	CS[C@@]12C[C@H]3[C@@H]([C@@H](O)C=C[C@@H]3O)N1C(=O)[C@]1(SC)C[C@H]3[C@@H]([C@@H](O)C=C[C@@H]3O)N1C2=O	-10.9593
1777	CC(C)=C/C=C\[C@H](C)[C@H]1CC[C@]2(C)C[C@@H]3C(C)=CC(=O)[C@H]3/C(CO)=C\C[C@@H]12	-10.5249
1778	C[C@H](O)[C@H](C)C(=O)C[C@H]1C2=COC(/C=C/[C@@H](C)[C@@H](C)O)=CC2=C(Cl)C(=O)[C@@]1(C)O	-10.2351
1779	CC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)OC(CO)CO	-10.5959
1780	COC1=CC(O)=CC(C)=C1C(=O)O[C@H]1[C@@H](O)[C@H](N2C=CC(=O)NC2=O)O[C@@H]1CO	-9.6440
1781	CC(=O)[C@@]1(O)C(=O)N2C(C)(C)[C@@H]3CC4=CC=CC5=C4[C@@]4(O[C@@]1(O)[C@@]2(O)[C@H]34)C(=O)N5C	-9.6992
1782	CC1=CC(O)=CC(OC2=CC(C)=CC(OCC3=CC=C([C@@](C)(O)CCCC(C)C)C(O)=C3)=C2)=C1	-8.7811
1783	C[C@H]1CCCCC[C@H](O)CC[C@H](O)/C=C/C(=O)O1	-10.3671

1784	CC1=C[C@H]2O[C@@H]3C[C@H]4OC(=O)/C=C\C=C[C@H]([C@@H](C)O)O CCC(CO)=CC(=O)OC[C@@]2(CC1)[C@]4(C)[C@]31CO1	-10.2648
1785	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@]23OC(=O)C=C[C@H](C)[C@H](O)[C@@H](C)CC=C[C@H]3[C@@H]1O	-9.6390
1786	COC1=CC(O)=CC2=C1C(=O)NC2=O	-10.5822
1787	CS[C@@]12CC3=CC=C[C@H](O)[C@H]3N1C(=O)[C@@H]1C[C@@H]3C(=O) CC[C@@H](O)[C@@H]3N1C2=O	-11.0831
1788	CC(=O)O[C@H]1C[C@](C)(O)/C=C\C=C(\CO)[C@H]2CC(C)(C)[C@]12O	-10.8238
1789	COC1=C(O)C=C(O)C2=C1C=C(C)OC2=O	-10.5758
1790	CC1=C(O)C=C(O)C2=C1C(CO)=C(CO)OC2=O	-10.6089
1791	O=C(CC1=CC=C(O)C=C1)OCCC1=CC=C(O)C=C1	-9.2874
1792	CC=CC=CC(=O)C1=C(O)C(C)=CC(C)=C1O	-9.9434
1793	CCCCCC[C@H](O)[C@@H]1C[C@@H](OC)C2=C(O1)[C@H](O)CCC2=O	-10.9532
1794	COC1=C(C(CC(C)C)OC(C)=O)C=CC2=C1OC1=C(O)C=C(C)C=C1COC2=O	-10.0908
1795	C=C(C)CCC[C@](C)(O)C1=CC=C(C(=O)O)C=C1O	-10.7486
1796	C[C@@H]1C=CC(=O)[C@@]2(C)CC[C@@H]3[C@H]4C(C)(C)[C@H](O)C[C@ @]4(C)C[C@@]132	-11.1650
1797	CC(=O)OCC1=CC(=O)OC=C1O	-9.8531
1798	CC1=C(C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@@]2(O)[C@@H](/C=C/ C[C@H](C)C(=O)[C@H](C)O)[C@@H]1O	-9.6570
1799	CC1(C)CCC[C@@](C)(C2=CC=C(CO)C=C2O)O1	-10.7726
1800	C=CC(C)(C)C1=C(/C=C2\NC(=O)[C@@H]3CCCN3C2=O)C2=CC=CC=C2N1	-9.2584
1801	C=CC(C)(C)C1=C(C=C(NC(=O)C(N)=O)C(=O)OC)C2=CC=CC=C2N1	-9.8035
1802	C/C=C(\C)C(=O)C[C@H]1C2=COC(/C=C/[C@@H](C)CC)=CC2=C(Cl)C(=O)[C @@]1(C)O	-9.6567
1803	O=C1C[C@@H](O)[C@H]2C3=C(C=CC(O)=C13)C1=CC=C(O)C3=C1[C@]2(O)[C@@H](O)CC3=O	-10.4337
1804	CC(C)[C@H]1C(=O)N2C3=CC=CC=C3[C@@]3(O)C[C@@H](N4C=NC5=CC=CC=C5C4=O)C(=O)N1[C@@H]23	-8.8944
1805	CC(C)[C@H]1CC[C@@]2(C)CC[C@]3(CO)CC4=C(C(=O)O)CC[C@H]4[C@]4(C)C[C@@H]4[C@H]3[C@H]12	-11.1796
1806	CO[C@@H]1C(=O)NC2=CC=C(O)C=C2[C@@]1(O)C1=CC=CC=C1	-8.3985
1807	CC(C)(O)[C@@H]1CC=C2[C@H](CC[C@@]3(C)[C@H]2CC[C@H]2CC4=C(NC 5=CC=CC=C45)[C@@]23C)O1	-9.9777
1808	CC1=CC(O)=CC2=C1OC1=C(O)C(O)=CC(C)=C1C(=O)O2	-10.2376
1809	CC=CC1=C(OC)C(=O)C(C(=O)C2=C(OC)C=C(OC)C=C2C(=O)OC)=CN1	-9.4317

1810	C[C@]1(O)CC[C@H]2[C@@H](C=C[C@@](C)(O)[C@]2(C)C(=O)CCO)C1	-11.1786
1811	COC1=C[C@](C)(O)C2=C(OC(=O)C3=C(O)C=C(OC)C=C23)C1=O	-11.0616
1812	COC1=C(Cl)[C@](C)(O)C2=C(OC(=O)C3=C(O)C=C(OC)C=C23)C1O	-10.8101
1813	CCCCCC=CC(O)C(O)C=CCCCCCCC(=O)O	-10.3779
1814	C/C=C(\C)C(=O)C[C@H]1C2=COC(/C=C/[C@H](C)[C@@H](C)O)=CC2=C(Cl)C(=O)[C@@]1(C)O	-9.7800
1815	CC(=CCCC(C)(C)O)C1=CC=C(C(=O)O)C=C1O	-11.1856
1816	CC(O)CCCC=CC1=CC=CC(O)=C1C=O	-10.5038
1817	COC1=C(CO)C(=O)OC(C(C)=CC(C)=CC(=O)O)=C1	-10.6346
1818	COCC1=C(OC)C=C(C(C)=CC(C)=CC(=O)O)OC1=O	-10.4955
1819	CC(O)CCC[C@@H]1CCCCC[C@@H](O)C[C@H](O)[C@H](O)/C=C/C(=O)O1	-10.6937
1820	C[C@H](O)[C@H]1OC(=O)C2=C(O)C=C(O)C=C21	-10.2228
1821	C[C@H]1CCC[C@@H](O)/C=C/C=C\C(=O)CCC(=O)O1	-10.3617
1822	C=C1[C@H](O)[C@@H](O)CC(C)(C)[C@]12CC=C(CO)CC2	-11.1681
1823	CC(=O)[C@]1(O)CCC(C)(C)[C@]12CC=C(CO)CC2	-11.0574
1824	COC1=CC=C(/C=C2/C(=O)N3O[C@H]4[C@H](O)C=C[C@@H](O)[C@@]4(O)C[C@@]3(SC)C(=O)N2C)C(O)=C1OC	-10.9501
1825	CCC1=CC(=O)[C@@H](O)[C@@H]1O	-9.8882
1826	CC1=CC(=O)C(C)=C2O[C@@]3(C[C@]12C)[C@@H](C)CC[C@H]1C(C)(C)[C@@H](O)CC[C@@]13C	-11.0789
1827	COC1=CC=C2C3=C(NC2=C1)[C@H](CC(C)(C)O)N1C(=O)[C@@H]2CCCN2C(=O)[C@@]1(O)[C@H]3OC	-10.6977
1828	CC/C=C\[C@H](O)[C@H](O)C1=C(C)C(=O)[C@]2(O1)C(=O)N[C@](OC)(C(=O)C1=CC=CC=C1)[C@H]2O	-9.5403
1829	C[C@H]1O[C@@H]2[C@@H](O)[C@@H]3C(=CCCC34OC3=CC=CC5=CC=CC(=C35)O4)C(=O)[C@@H]2[C@@]12CCC(=O)O2	-9.7111
1830	O=C1C=C[C@@H](O)[C@@H]2C1=CCCC21OC2=CC=CC3=CC=CC(=C23)O1	-9.3043
1831	COC(=O)[C@@H]1C(=O)C(C)=C2O[C@@]3(C[C@]2(C)[C@H]1C)[C@@H](C)[C@@H](O)C[C@H]1C(C)(C)[C@@H](O)CC[C@@]13C	-11.1136
1832	CC1=C2O[C@@]3(C[C@]2(C)C(C)=C(C(=O)O)C1=O)[C@@H](C)CC[C@H]1C(C)(C)C(=O)CC[C@@]13C	-10.8794
1833	C[C@H]1CCC[C@@H](O)/C=C/C=C\[C@H](O)/C=C/C(=O)O1	-10.2461
1834	C=C1[C@H](O)[C@@H](O)CC(C)(C)[C@]12CC=C(C=O)CC2	-11.0317
1835	C=C(C=O)[C@@H]1C[C@@]2(C)C(=CC1=O)[C@H](OC(=O)/C=C/C=C/C(C)CC(C)CC)CC[C@@H]2C(=O)O	-9.5682

1836	C[C@@H]1C[C@H]2C(=C(O)CC[C@H]2O)C(=O)O1	-10.2788
1837	C[C@H]1C/C=C/[C@@H](O)[C@@H](O)CC/C=C/C2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.6654
1838	CC1=C(C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@]23OC(=O)C=C[C@@](C)(O)C[C@@H](C)CC=C[C@H]3[C@@H]1O	-9.5492
1839	CC1=C(C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@]23OC(=O)C=C[C@H](C)[C@H](O)[C@@H](C)CC=C[C@H]3[C@@H]1O	-10.1448
1840	COC1=CC=C2C(=C1OC)O[C@]1(C(=O)N3O[C@@H]4C(=CC=C[C@H]4O)C[C@@]3(SC)C(=O)N1C)[C@@H]2SC	-10.4348
1841	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2C3=CC(=O)O[C@@]3(O)CC[C@]12C	-10.3362
1842	C[C@@H]1C=CC(=O)[C@@]2(C)CC[C@@H]3[C@H]4[C@@](C)(CO)CC[C@@]4(C)C[C@@]132	-11.1003
1843	C[C@@H]1C=CC(=O)[C@@]2(C)C[C@@H](O)[C@@H]3[C@H]4C(C)(C)CC[C@@]4(C)C[C@]312	-11.2290
1844	C[C@@H]1C=CC(=O)[C@@]2(C)CC[C@@H]3[C@H]4C(C)(C)CC[C@@]4(C)C[C@@]132	-10.4046
1845	O=C1C=C(CO)C(O)=CO1	-9.8313
1846	CC[C@H](C)/C=C/C1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@@]3(C)OC4=C(C(=O)O[C@H](C)[C@H]4C)[C@H]3C2=CO1	-9.5308
1847	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC(CO)=C(CO)C2=C1C	-10.7771
1848	O=C1C=C(C2=CC=CN2)NC2=CC=CC=C12	-8.4077
1849	C=C1OC(=O)C2=C(OC)C=C(OC)C(C)=C12	-10.5513
1850	CC(C)=CCC1=CC=C(O)C2=C1OC1=CC(C)=CC(CO)=C1C2=O	-9.5464
1851	CO[C@@H]1C(=O)NC2=CC=CC=C2[C@@]1(O)C1=CC=CC=C1	-8.3622
1852	C[C@@]12NC(=O)[C@@H](CC3=C1NC1=CC=CC=C31)N1C2=NC2=CC=CC=C2C1=O	-8.9944
1853	C[C@]12C(=O)O[C@@H]3C=C4COC(=O)C=C4[C@@](C)(C[C@@H]4O[C@@H]41)[C@@H]32	-10.5502
1854	O=C1NC2=CC=CC=C2[C@@](O)(C2=CC=CC=C2)[C@@H]1O	-7.9379
1855	C[C@]12C3=CC(=O)OCC3=C[C@H]3OC(=O)[C@@](C)(C=C[C@@H]1O)[C@H]32	-10.4440
1856	C=CC(C)(C)C1=C(/C=C2\NC(=O)[C@H](CO)NC2=O)C2=CC=CC=C2N1	-9.9175
1857	CO[C@@H]1C(=O)NC2=CC=C(CC=C(C)C)C(O)=C2[C@@]1(O)C1=CC=CC=C1	-8.6343
1858	C/C=C(\C)C(=O)C[C@H]1C2=COC(/C=C/[C@@H](C)[C@@H](C)O)=CC2=C(Cl)C(=O)[C@@]1(C)O	-9.7592
1859	O=C1NC2=CC=CC=C2[C@@](O)(C2=CC=C(O)C=C2)[C@@H]1O	-8.3179

1860	C[C@@]12CCC[C@]3(C)C4=CC(=O)OC[C@H]4[C@H](O)[C@@H](OC1=O)[C@@H]23	-10.9055
1861	CC1=C(C2=CC(O)=CC(O)=C2)C(=O)[C@@H](O)C1	-10.1469
1862	CC1=CC(O)=C(O)C=C1C1=CC(O)=CC(O)=C1	-9.6842
1863	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC3=C(O)C(OC)=C(Cl)C(C)=C3C2=C1	-10.5143
1864	O=C(O)CCCCN1CC2=C(O)C=C(O)C=C2C1=O	-10.3146
1865	C[C@H]1CC[C@H]2[C@@H](C=C[C@H](C)[C@]2(C)C(=O)CCO)[C@@H]1O	-10.9488
1866	C[C@H]1C=C[C@H]2C[C@@](C)(O)CC[C@@H]2[C@@]1(C)C(=O)CCO	-10.8586
1867	COCC1=C(O)C=C(C)C2=C1OC1=C(C)C=C(O)C=C1OC2=O	-10.4916
1868	C[C@]1(C(=O)CCO)[C@H]2CC[C@@H](CO)C[C@H]2C=C[C@@]1(C)O	-11.0652
1869	C[C@]12C=C[C@H]3C[C@H](CO)CC[C@H]3[C@@]1(C)C(=O)CCO2	-11.0120
1870	C[C@H]1C=C[C@H]2C[C@@H](CO)CC[C@@H]2[C@@]1(C)C(=O)CCO	-10.8312
1871	CS[C@@]12C[C@H]3C(=O)CC[C@H](O)[C@H]3N1C(=O)[C@@H]1C[C@@H]3C(=O)CC[C@H](O)[C@H]3N1C2=O	-11.0649
1872	C=C(C)[C@H](O)[C@@H](O)C1=CC=C2OC3=C(O)C=C(C)C=C3COC(=O)C2=C1OC	-9.7844
1873	C=C(C)[C@H](O)[C@H](O)C1=CC=C2OC3=C(O)C=C(C)C=C3COC(=O)C2=C1OC	-9.7819
1874	C[C@H]1OC(=O)C2=C(O)C=CC(O)=C2[C@@H]1O	-10.1818
1875	CC(CCCC[C@H]1C[C@H](O)CC(=O)O1)CC(C)(O)CC[C@@H](C)O	-10.7870
1876	C[C@@H]1CCC/C=C/[C@@H]2C[C@H](O)C[C@H]2[C@@H](O)/C=C/C(=O)O1	-10.5322
1877	C[C@H]1CCC/C=C/[C@@H]2CC[C@H](O)[C@H]2[C@H](O)/C=C/C(=O)O1	-10.6022
1878	COC(=O)C1=CC(O)=CC(OC)=C1OC1=CC(C)=CC(OC)=C1C(=O)O	-10.8346
1879	CC(=O)CC(=O)N1C(=O)[C@H]2C3=CNC4=CC=CC(=C34)C[C@H]2C1(C)C	-10.3224
1880	C=C1C(=O)N2C(=CC3=CC=CC=C32)C(=O)N1C	-9.1329
1881	O=CC1=CC=C2COC(=O)[C@H](CC3=CC=CC=C3)N12	-9.0639
1882	CC(C)C[C@H]1C(=O)OCC2=CC=C(C=O)N21	-9.8049
1883	CC(=O)C1(O)C=C(O[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]2O)CO1	-10.3086
1884	CN1C(=O)C2=CC=CC=C2NC(=O)[C@@]12O[C@H]2C1=CC=CC(O)=C1	-8.5953
1885	O=C1C[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]2C1=CCCC21OC2=CC=CC3=CC=CC(=C23)O1	-9.8671

1886	O=C1C[C@@H](O)[C@@H](O)[C@@H]2C1=CCCC21OC2=CC=CC3=CC=CC(=C23)O1	-9.8696
1887	CO[C@@H]1CC(=O)C2=CCCC3(OC4=CC=CC5=CC=CC(=C45)O3)[C@@H]2[C@@H]1O	-10.0767
1888	O=C1CC[C@@H](O)[C@@H]2C1=CCCC21OC2=CC=CC3=CC=CC(=C23)O1	-10.0016
1889	COC1=CC(O)=CC(C)=C1C(=O)C1=C(O)C(Cl)=C(OC)C(Cl)=C1OC	-10.7471
1890	CC1=CC(=O)C(C)=C2O[C@@]3(C[C@]12C)[C@@H](C)CC[C@H]1C(C)(C)C(=O)CC[C@@]13C	-10.8599
1891	COC1=CC(OC)=C2C(=O)O[C@@](C)([C@H](C)O)C2=C1C	-10.8911
1892	C[C@H]1CCC(=O)/C=C/C(=O)C2=C(O)C=C(O)C=C2CC(=O)O1	-10.5974
1893	CC(C)C(O)CC[C@](C)(O)C1=CC=C(C(=O)O)C=C1O	-11.0355
1894	O=C(O)CCC1=CC(=O)CC1	-9.0393
1895	CO[C@H]1/C=C\CCC[C@H](C)OC(=O)CCC(=O)/C=C\1	-10.2268
1896	CO[C@H]1/C=C/C=C\C(=O)CCC(=O)O[C@@H](C)CCC1	-10.2782
1897	CC1(C)CCC(=O)[C@](C)(O)[C@@]12CC=C(C=O)CC2	-10.8875
1898	C=C1[C@@H](O)C[C@H](O)C(C)(C)[C@]12CC=C(CO)CC2	-11.0081
1899	C[C@H]1CCC[C@@H](O)/C=C/C=C\[C@@H](O)/C=C/C(=O)O1	-10.2397
1900	CC1=C(O)C(=O)CC(C)(C)[C@]12CC=C(CO)CC2	-10.9299
1901	CC1(C)CC[C@@H](O)[C@](C)(O)[C@@]12CC=C(C=O)CC2	-11.2470
1902	CC1(C)CCC(=O)[C@@]2(C)OO[C@H]3C[C@@]12CC[C@@H]3O	-10.9310
1903	COC(=O)C1=CC(O)=CC2=C1C(=O)C1=C(C[C@H](C)O[C@H]1OC)O2	-11.2822
1904	C[C@@H]1C(=O)CCC(C)(C)[C@]12CC=C(CO)[C@@H](O)C2	-11.3205
1905	COC(=O)C1=CC(OC)=C(O)C2=C1C(=O)C1=C(C[C@@H](C)O[C@@H]1OC)O2	-11.1403
1906	C[C@H]1[C@@H](O)[C@H](O)CC(C)(C)[C@]12CC=C(CO)CC2	-10.8160
1907	CC(C)=CCC1=CC(C[C@@]2(O)OC(=O)C=C2C2=CC=C(O)C=C2)=CC=C1O	-9.3291
1908	CC(=O)[C@]1(O)C[C@H](O)C(C)(C)[C@]12CC=C(CO)CC2	-11.2888
1909	CC1C(=O)CC(O)C(C)(C)[C@]12CC=C(CO)CC2	-11.4464
1910	C[C@H]1C(=O)CCC(C)(C)[C@]12CC=C(CO)[C@@H](O)C2	-11.2190
1911	O=C(O)CC[C@@H]1CC2=CC=C(O)C(O)=C2C(=O)O1	-9.7707
1912	CC1=C[C@]23O[C@@H]4C[C@@H](O)[C@](C)([C@@]2(C)CC1)[C@]4(CO)O3	-11.2162

1913	CC1=CC(O)=C2C(=O)[C@H]3CC[C@H](O)C[C@@H]3[C@@H](O)C2=C1O	-11.4466
1914	COC1=CC=C(O)C(C2=CC(OC)=CC=C2O)=C1	-10.3134
1915	C[C@@H]1CCCC(=O)CCCC2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.7161
1916	C=CC(C)(C)C1=C(C[C@@H]2NC(=O)[C@H](C)NC2=O)C2=CC(CC=C(C)C)=CC(C/C=C(/C)CO)=C2N1	-9.0696
1917	CC(C)C1=CC2=CC=C3C[C@@H](C)OC(=O)C3=C2O1	-9.7745
1918	COC1=CC=CC2=C1O[C@]1(C(=O)N3O[C@H]4[C@H](O)C=C[C@@H](O)[C@@]4(O)C[C@@]3(SC)C(=O)N1C)[C@@H]2SC	-10.6056
1919	C[C@@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H](O)CC[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C=C3C(=O)N(CCCCC(=O)O)CC3=C1O2	-11.1594
1920	C[C@@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H](O)CC[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O[C@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C3C(=O)NCC3=C1O2	-11.4191
1921	C[C@@H]1CC[C@H]2C(C)(C)C(=O)CC[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C=C3C(=O)NCC3=C1O2	-11.2074
1922	C[C@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H](O)[C@H](O)C[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C=C3CNC(=O)C3=C1O2	-11.2106
1923	COC1=C(C)C(=O)OC(C(C)=CC(=O)O)=C1	-10.7582
1924	COC(=O)[C@]1(CC2=CC=CC=C2)OC(=O)C(O)=C1C1=CC=CC=C1	-9.4051
1925	CC1=C[C@@H](C)CC=C[C@H]2C=C(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC4=CNC5=CC=CC=C45)NC(=O)[C@@]23C(=O)CCC(=O)C1	-8.7971
1926	O=C1N2[C@H]3C(=CC=C[C@@H]3O)C[C@]23SS[C@]12C[C@H]1[C@@H]([C@@H](O)C=C[C@@H]1O)N2C3=O	-10.5899
1927	C=C(C)[C@H]1COC2=C(C)C=C3OC4=C([C@@H](O)[C@@H](O)C(C)(C)O)C=CC(O)=C4C(=O)C3=C2[C@@H]1OC(C)=O	-10.4065
1928	COC1=CC=C2C(=C1OC)O[C@]1(C(=O)N3O[C@H]4[C@H](O)C=C[C@@H](Cl)[C@@]4(O)C[C@@]3(SC)C(=O)N1C)[C@@H]2SC	-10.6732
1929	C[C@@H]1C(=O)C=CC2=C[C@]3(O)OC[C@H](C)[C@]3(O)C[C@@]21C	-10.5069
1930	C=CC(C)(C)C1=C(C[C@@H]2NC(=O)[C@H](C)NC2=O)C2=CC(CC=C(C)C)=CC(C/C=C(\C)CO)=C2N1	-9.0708
1931	C=C1[C@H]2C[C@H]3OC(=O)/C=C\C=C[C@H]([C@@H](C)O)OCCC(C)=CC(=O)OC[C@@]4(CCC(C)=C[C@H]4O2)[C@]13C	-9.3377
1932	O=C1OCC(C2=CC=CC=C2)=C1C1=CC=CC=C1	-9.0525
1933	C[C@@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H](O)CC[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C=C3CN(CCO)C(=O)C3=C1O2	-11.4161
1934	C[C@@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H](O)[C@@H](O)C[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C=C3C(=O)NCC3=C1O2	-11.2782

1935	C[C@@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H](O)CC[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C=C3CNC(=O)C3=C1O2	-11.2278
1936	COC1=CC=CC2=C1[C@@H](O)C[C@H](C)O2	-10.1916
1937	C[C@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H](O)CC[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C=C3C(=O)NCC3=C1O2	-11.2110
1938	C[C@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H](O)CC[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C=C3CNC(=O)C3=C1O2	-11.1590
1939	C[C@H]1CCCCC[C@H](O)C(=O)[C@H](O)CC(=O)O1	-10.3444
1940	C[C@H](O)[C@H](O)CCC1=CC=CC(O)=C1CO	-10.0391
1941	C[C@@H]1CCC[C@H](O)CCCC2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.7970
1942	COC1=CC(O)=CC(C2=C(C)C[C@H](O)C2=O)=C1	-10.4276
1943	O=CC1=CC(C=CC2=CC(O)=CC(O)=C2C=O)=CC=C1O	-9.9028
1944	C[C@@H]1CC[C@H]2[C@](C)(CO)[C@H](O)CC[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C=C3C(=O)NCC3=C1O2	-11.4113
1945	O=CC1=CC(C=CC2=CC(O)=CC(O)=C2)=CC=C1O	-9.5893
1946	O=CC1=C(O)C=C(O)C=C1C=CC1=CC=C(O)C=C1	-9.3318
1947	CC(C=CC(=O)O)=CC=CC(C)=CC(C)=CC(=O)O	-8.9471
1948	CC1=CC(O)=CC(C(=O)C2=CC=CC(O)=C2O)=C1O	-10.5528
1949	COC1=CC=CC(C(=O)C2=CC(O)=CC(C)=C2O)=C1O	-10.5474
1950	COC(=O)C=CC(C)=CC=CC(C)=CC(C)=CC(=O)O	-9.4957
1951	CC(C)=C1OC2=C(C=CC3=C2C(=O)O[C@H](C)C3)C1=O	-10.3051
1952	COC1=CC2=C(C(O)=C1O)C(=O)OC(C[C@H](C)O)=C2	-10.6049
1953	COC1=CC(O)=CC2=C1C(=O)O[C@H](C)CCCC(=O)CCC2	-10.8976
1954	C=C(C)[C@H]1O[C@H]2CC[C@@]3(C)[C@@](O)(CC[C@]4(O)O[C@@H]5OC(C)(C)[C@H]6C[C@@H]7C(=C)CC8=C(Cl)C=C9NC(=C5C9=C8[C@@]76O)[C@]34C)[C@]23O[C@@H]3[C@H]1O	-9.3843
1955	CC=C(C)C1=CC(OC)=C(CO)C(=O)O1	-10.4365
1956	C[C@H](O)[C@H](O)CCC1=CC=CC(O)=C1C=O	-10.1450
1957	CC(=O)OCC[C@@H]1OCC2=C(O)C=CC=C21	-10.0708
1958	C=C(C(=O)O)[C@H]1C[C@@H](CCCCCC)OC1=O	-10.2258
1959	CN1C(=O)C2CCCN2C(=O)C1=CC1=CC=CC=C1	-8.8570
1960	CC(=O)OCC1=CC(=O)[C@]2(C/C=C(\C)CC/C=C(\C)CCC=C(C)C)O[C@@H]2C1=O	-9.9221
1961	C[C@@H]1OC(=O)C[C@H](C)OC(=O)/C=C/C[C@H](C)OC(=O)/C=C/[C@H]1O	-10.4859
1962	C[C@@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@@H](O)[C@H](O)C[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C=C3C(=O)NCC3=C1O2	-11.2786
1963	C[C@@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@@H](O)CC[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C=C3CNC(=O)C3=C1O2	-11.2282
1964	OC1=CC=CC2=C1[C@@H](O)C[C@H](O)[C@H]2O	-9.9996
1965	COC1=CC(O)=CC2=C1C(=O)O[C@H](C)CCCCCCCCC(=O)C2	-10.9507

1966	COC1=CC=C2C=C(NC(=O)C3=NO[C@H]4[C@H](O)[C@H](O)C=C[C@@]4(O)C3)C(=O)OC2=C1OC	-9.8723
1967	O=C1CCC2=C3C1=C(O)C=CC3=C1C=C(O)C=C3C1=C2CC[C@H]3O	-10.3107
1968	CC(=O)OC[C@@H](/C=C/[C@@H](C)[C@H]1C[C@H](O)C2=C3C=CC4=CC(=O)CC[C@]4(C)[C@H]3C[C@@H](O)[C@@]21C)C(C)(C)O	-10.3197
1969	C[C@H]1C=C[C@H]2CCCC[C@H]2[C@@H]1C1=CC(N)=C(C=O)C(=O)O1	-9.8745
1970	C[C@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H](O)CC[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C=C3C(=O)N(CCO)CC3=C1O2	-11.4236
1971	C[C@H](O)C[C@@H](O)CC1=CC2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.4936
1972	CC1=CC2=C(C=C1O)C(=O)C1=C(O)C=CC(O)=C1O2	-10.6472
1973	CS[C@@]12CC3=CC=C[C@H](O)[C@H]3N1C(=O)[C@@]1(CC3=CC=CC=C3O1)NC2=O	-9.8720
1974	CC(C)[C@H]1OC2=C(C=CC3=C2C(=O)O[C@H](C)C3)[C@H]1O	-10.5065
1975	CC(C)C(=O)C(=O)C1=CC=C2C[C@@H](C)OC(=O)C2=C1O	-10.6673
1976	CC(C)=C1OC2=C(C=CC3=C2C(=O)OC(C)=C3)C1=O	-9.5676
1977	COC1=CC2=C(C(=O)OCC2)C(O)=C1COCC1=C(OC)C=C2CCOC(=O)C2=C1O	-10.8419
1978	COC1=CC(O)=C2C(=O)O[C@]3(C)CC(=O)C(O)=C3C2=C1	-10.5653
1979	OC1=CC=CC2=C1[C@@H](O)C[C@H](O)[C@@H]2O	-9.9996
1980	COC1=CC(=O)C(=O)C2=C1C(=O)O[C@H](C)CCCCCCC2	-10.6256
1981	C/C=C/[C@H]1CO[C@]2(C)OC3=C(C[C@H]12)C(=O)OC=C3/C(C=O)=C\CC	-10.3159
1982	O=C1N[C@@]2(CC3=CC=CC=C3O2)C(=O)N/C1=C\C1=CC=CC=C1O	-8.8476
1983	O=C(O)C1=CC=CC(O)=C1C(=O)C1=C(O)C=CC=C1O	-9.8064
1984	COC(=O)C1=CC=CC(O)=C1C(=O)C1=C(O)C=CC=C1O	-10.0312
1985	C[C@H](/C=C/[C@H](C)C(C)(C)O)[C@H]1CC[C@H]2C3=CC(=O)O[C@@]3(O)CC[C@]12C	-10.6552
1986	CC(C)CC1=NC=C(C(C)C)NC1=O	-9.0147
1987	COC1=CC=C2C(=C1OC)O[C@]1(C(=O)N3O[C@H]4[C@H](O)C=C[C@@H](O)[C@@]4(O)C[C@@]3(SC)C(=O)N1C)[C@@H]2SC	-10.3351
1988	CC(C)=CCC1=CC=C(O)C2=C1[C@@H](C[C@@H](O)[C@H](C)O)OC2	-10.5917
1989	CC(C)=CCC1=CC=C(O)C2=C1[C@@H](CCOC(=O)[C@H](C)O)OC2	-10.3705
1990	COC(CC1=CC=C(O)C2=C1[C@@H](C[C@@H](O)[C@H](C)O)OC2)C(C)(C)O	-10.6937
1991	CC(C)=CCC1=CC=C(O)C(CO)=C1C1=CC=C(C)O1	-9.3851

1992	C/C(=C\CC1=CC=C(O)C2=C1[C@@H](C[C@@H](O)[C@H](C)O)OC2)CO	-10.7379
1993	C[C@@H]1CC(=O)CCCCCC2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.3790
1994	C[C@H]1C(=O)C=CC2=C[C@]3(O)OC[C@H](C)[C@]3(O)C[C@@]21C	-10.3920
1995	C=CC(C)(C)C1=C([C@@H](O)[C@@H]2NC(=O)[C@H](C)NC2=O)C2=CC=CC=C2N1	-9.8052
1996	COC1=CC(C)=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(O[C@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]3O)C=C1C2=O	-10.3901
1997	C/C(=C\CN1C=C(C[C@@H]2NC(=O)[C@H](C)NC2=O)C2=CC=CC=C21)CO	-10.3638
1998	COC1=CC(O)=CC(C2=C(C)C[C@@H](O)C2=O)=C1	-10.4272
1999	CCCCCCC(O)C(=O)O[C@@H]1[C@@H]2[C@H](CC1(C)C)[C@H](O)C1=C(Cl)C(=O)[C@@](O)(CO)[C@]12C	-10.5314
2000	CC(C)C[C@H]1NC(=O)[C@@H]2C[C@@H](O)CN2C1=O	-10.3838
2001	CO[C@]12C=C3C=CC(=O)[C@@H](C)[C@@]3(C)C[C@@]1(O)[C@H](C)CO2	-10.6486
2002	C/C=C/CCCCC(=O)C(C)C(=O)N1CC[C@H]2[C@@H]3O[C@H](C)[C@@H](C)C4=C(C)C(O)=C(C(=O)O)C(=C43)O[C@H]21	-10.8296
2003	CCOC(=O)C1=C(O)C=C(O)C=C1CCCCCCCC(C)=O	-10.6441
2004	CC(=O)O[C@H]1/C=C\C(=O)O[C@H](C)C[C@H](O)/C=C/1	-10.3575
2005	CC(=O)O[C@@H]1/C=C/[C@@H](O)/C=C\C(=O)O[C@H](C)C1	-10.3407
2006	COC(=O)CCC1=CC=C(C(=O)O)O1	-10.2206
2007	CC(C)=CCC1=CC=C(O)C2=C1[C@@H](C1=CC(C)=CC3=C1O[C@H](C(C)(C)O)CO3)NC2=O	-9.3053
2008	CC1=C[C@@H](C)CC=C[C@H]2C=C(C)[C@@]3(C)C4=C(C[C@@H]5NC(=O)[C@]2(C(=O)CCC(=O)C1=O)[C@H]53)C1=CC=CC=C1N4	-8.4991
2009	COC1=CC2=C(C[C@H]3[C@H](C)CO[C@@]3(C)O2)C2=C1C(=O)O[C@H](C)CCCCCC2	-10.6223
2010	COC1=C(OC)C2=C(C=C1)[C@H]1SS[C@@]34C[C@]5(O)[C@H](O)C=C[C@@H](O)[C@@H]5ON3C(=O)[C@]1(O2)N(C)C4=O	-10.2900
2011	CC1=C(O)C=C(C=CCCCO)OC1=O	-10.5110
2012	CC1=CC[C@]2(C)C[C@@H](O)[C@](O)(C(C)(C)O)[C@H]2CC1	-10.7735
2013	CC1=CC(O)=CC(OC2=CC(O)=CC(C)=C2C[C@@H](O)C(C)(C)O)=C1	-10.3095
2014	C=C(CCCC(C)CO)C1=CC=C(C(=O)O)C=C1O	-11.0950
2015	CC1=CC2=C(O[C@H](C(C)(C)O)CO2)C([C@H]2C3=C(C=O)C(O)=CC=C3C[C@H]2C(C)(C)O)=C1	-9.6227
2016	CC1=CC2=C(O[C@H](C(C)(C)O)CO2)C([C@@H]2C3=C(C=O)C(O)=CC=C3C[C@H]2C(C)(C)O)=C1	-9.6227

2017	CC1=CC2=C(O[C@H](C(C)(C)O)CO2)C([C@H]2C3=C(C=O)C(O)=CC=C3C[C@@H]2C(C)(C)O)=C1	-9.6227
2018	CC(C)=CCC1=CC=C(O)C2=C1[C@@H](C1=CC(C)=CC3=C1O[C@H](C(C)(C)O)CO3)OC2=O	-9.1407
2019	COC(=O)C1=C(O)C=CC(CC=C(C)C)=C1C(=O)C1=CC(C)=CC2=C1O[C@H](C(C)(C)O)CO2	-9.3634
2020	CC1=C[C@]2(C)[C@H](O)C[C@]34C[C@](O)(CC5=CC=C(C=C5)O[C@H]5[C@H]([C@H]2C3=O)[C@@H]1[C@]1(C)C[C@H](C)C[C@H](C)[C@@H]51)NC4=O	-10.6560
2021	COC1=CC2=C(C(C(=O)O)=C1)C1=NC(C)=CC=C1CO2	-10.0383
2022	CC(C)CC(=O)OCC1=C2CC(=O)OC(C)(C)C2=CC(=O)[C@]2(C)[C@@H]3C(=O)[C@@H](C)O[C@@H]4OC(=O)[C@](C)(C[C@@H]12)[C@@H]43	-9.7330
2023	CO[C@@H]1CCC(=O)C2=C([C@@H]3CCC(=O)C4=C(O)C=CC=C43)C=CC(O)=C21	-9.6322
2024	COC1=CC(=O)OC2=CC(OCC=C(C)C)=CC(C)=C12	-10.5675
2025	COC1=C(OC)C2=C(C=C1)C1SSS[C@@]34C[C@]5(O)[C@H](O)C=C[C@@H](O)[C@@H]5ON3C(=O)[C@]1(O2)N(C)C4=O	-10.2990
2026	COC(=O)CCCCN1CC2=C(O)C=C(O)C=C2C1=O	-10.6873
2027	COC1=CC(O)=CC2=C1C(=O)O[C@H](C)C/C=C/CCCC2	-10.7456
2028	CC1=CC(=O)C2=C(O)C3=C(C=C2O1)C(=O)O[C@H]3C	-10.7105
2029	COC(=O)C1=CC(C)=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(OC)C(Cl)=C1O2	-10.9644
2030	CC1=C(O)C=C2C=C(C[C@H](C)O)OC(=O)C2=C1O	-10.6609
2031	CC(C)=CCC1=CC=C(O)C2=C1[C@H](C1=CC(C)=CC3=C1O[C@H](C(C)(C)O)CO3)NC2=O	-9.3036
2032	C=CC(C)(C)C(=O)NC1=CC=CC=C1C(=O)O	-9.7906
2033	C=CC(C)(C)C1=C(C=O)C2=CC=CC=C2N1	-8.7061
2034	COC(=O)C1=CC(OC)=C(OC)C2=C1C(=O)C1=CN=C(C)C=C1O2	-10.7251
2035	COCC1=C(O)C=C(C)C2=C1OC1=C(C)C=C(O)C(C)=C1OC2=O	-10.4224
2036	CC(C)=CCC1=CC=C(O)C(C(=O)O)=C1C(=O)C1=CC(C)=CC2=C1O[C@H](C(C)(C)O)CO2	-9.3794
2037	CC1=C(O)C=C(C=CC=CCO)OC1=O	-10.3084
2038	CC1=C(O)[C@@](C)(O)C[C@@H]([C@@H](O)/C=C/C=C/CO)C1=O	-10.6057
2039	CC1=C[C@@H](O)[C@]2(C)C[C@@H](O)[C@](O)(C(C)C)[C@H]2CC1	-10.7075
2040	C=C1CC[C@H]2[C@](C)(C[C@H]1O)C[C@@H](O)[C@]2(O)C(C)C	-10.8357
2041	CCC(=O)O[C@@H]1C(=O)[C@@]2(C)[C@@H](CC[C@H]3C4=C(CCC=C(C)C)C(=O)O[C@H]4C[C@@]32C)[C@@]2(C)C=CC(=O)[C@@H](C)[C@H]12	-10.0689

2042	CC(=CCC1=C(C)C=C(O)C=C1OC1=CC(C)=CC(O)=C1)C(=O)O	-9.5172
2043	CC(C)(O)[C@H]1CC2=CC(C=O)=CC=C2O1	-10.0438
2044	C[C@]1(C2=CC=C(C(=O)O)C=C2O)CCC(=O)O1	-10.4638
2045	COC1=CC(O)=C([C@@H](CO)[C@H](O)CO)C2=C1C(=O)C1=C(O)C=CC=C1O2	-11.3499
2046	C[C@H](O)[C@H](O)CCC(=O)C1=CC=C(O)C=C1O	-10.4550
2047	CC(=CCCC(C)CO)C1=CC=C(C(=O)O)C=C1O	-11.0232
2048	CC(C)CC1=CN=C(CCC(N)=O)C(=O)N1	-9.5520
2049	COC(=O)C[C@H](C)OC1=CC=CC(O)=C1O	-10.4744
2050	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC(C[C@@]3(C(Cl)Cl)C[C@@H](O)C(=O)O3)=CC2=C1	-10.7633
2051	O=C1C2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)C2=C1C=C(O)C1=C2O[C@@H]2OCC[C@H]12	-10.5259
2052	CC(C)[C@@H]1CC[C@](C)(C2=CC=C(C(=O)O)C=C2O)O1	-10.9184
2053	C[C@H]1CCC[C@](C)(C2=CC=C(C(=O)O)C=C2O)OC1	-10.7730
2054	CC[C@H](C)/C=C(C)/C=C/C1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@]3(C)OC(=O)C(C(C)(OC)OC)=C3C2=CO1	-9.0206
2055	COC(=O)[C@@]12OC3=CC=C(C4=CC=C5O[C@@](C(=O)OC)([C@@H]6OC(=O)C[C@H]6C)CC(=O)C5=C4O)C(O)=C3C(=O)C1=C(O)C[C@H](C)[C@H]2O	-10.0432
2056	COC(=O)C1=CC(O)=CC2=C1C1=NC(C)=CC=C1CO2	-9.9445
2057	CC(=O)OCC1=C2CC(=O)OC(C)(C)C2=CC(=O)[C@]2(C)[C@@H]3C(=O)[C@@H](C)O[C@@H]4OC(=O)[C@](C)(C[C@@H]12)[C@@H]43	-10.0828
2058	COC1=CC(=O)C2=C(C=C(OC)C(C(C)OC)=C2O)C1=O	-10.7556
2059	COC1=CC(C(=O)O)=C2C3=NC(C)=CC=C3COC2=C1O	-10.1323
2060	CO[C@H]1CCC[C@@H](O)C=C[C@H]2[C@@H]3O[C@@H]3[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@]32C(=O)C1	-11.3141
2061	COC1=C(C2=CC=CC=C2)C2=CC=CC(O)=C2NC1=O	-9.0080
2062	CO[C@H]1CCC(=O)C2=C([C@@H]3CCC(=O)C4=C(O)C=CC=C43)C=CC(O)=C21	-9.6389
2063	O=C1CC[C@@H](C2=CC=C(O)C3=C2C(=O)CCC3=O)C2=CC=CC(O)=C12	-9.5934
2064	CC1=C[C@H]2C=C(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@@]23C(=O)C[C@H](O)[C@@H](O)C[C@@H](CO)C1	-11.2143
2065	C=C1[C@@]23C(=O)O[C@H](C)[C@]24O[C@@]2(C(=C)[C@]5(C[C@H](O)C(=O)OC5(C)C)C[C@@H](OC(C)=O)[C@]32C)C(OC(C)=O)[C@@]1(C)OC4=O	-9.9385
2066	COC1=CC(=O)OC2=CC(OC3=CC(C)=C4C(OC)=CC(=O)OC4=C3)=CC(C)=C12	-9.5309

2067	CC(=O)O[C@@H]1[C@@H]2O[C@H]2[C@@](C)(O)C(=O)[C@@H](C)C/C=C/[C@H]2[C@H](O)[C@](C)(O)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@@]312	-9.3723
2068	COC1=C(C2=CC=CC=C2)C=C(OC)C2=C1OC1=CC(O)=C(O)C=C12	-9.9865
2069	O=C1C2=CC(O)=CC(O)=C2CN1CCO	-10.3063
2070	COC1=CC(O)=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(COC(C)=O)C=C1C2=O	-10.1917
2071	COC1=C(OC)C2=C(C=C1)[C@H]1SS[C@@]34C[C@]5(O)[C@H](Cl)C=C[C@@H](O)[C@@H]5ON3C(=O)[C@]1(O2)N(C)C4=O	-10.3385
2072	COC1=C(Cl)C(O)=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(COC(C)=O)C=C1C2=O	-10.2601
2073	COC(=O)C1=CC(OC)=C(OC(C)=O)C2=C1C(=O)C1=CN=C(C)C=C1O2	-10.8054
2074	COC(=O)C1=CC(O)=CC2=C1C(=O)C1=CN=C(CO)C=C1O2	-10.4653
2075	COC(=O)C1=CC(OC)=CC2=C1C(=O)C1=CN=C(C)C=C1O2	-10.4210
2076	CC1=C(O)[C@](C)(CCC(=O)/C=C/C=C/CO)OC1=O	-10.4797
2077	CC(C)[C@@]1(O)[C@H](O)C[C@@]2(C)CC=C(C(=O)O)CC[C@@H]21	-11.0465
2078	C[C@@H]1N[C@H]2N(C1=O)C1=CC=CC=C1[C@@]2(O)C[C@H](C(=O)O)N1C=NC2=CC=CC=C2C1=O	-8.9733
2079	CC(=O)O[C@@H]1C(=O)[C@@]2(C)[C@@H](CC[C@H]3C4=C(CCC=C(C)C)C(=O)O[C@H]4C[C@@]32C)[C@@]2(C)C=CC(=O)[C@@H](C)[C@H]12	-10.1397
2080	COC1=CC=CC(OC)=C1[C@@H]1NC(=O)C2=C(OC)C(CO)=CC(O)=C21	-10.7871
2081	C[C@@H]1OC2=CC=CC(O)=C2[C@@H](O)[C@@H]1O	-10.1295
2082	O=C1O[C@](CC2=CC3=CC(O)=CC(O)=C3C(=O)O2)(C(Cl)Cl)C[C@H]1O	-10.2980
2083	C=C/C=C/[C@@H](O)[C@@H](C)O	-10.0042
2084	C[C@@]1(C2=CC=C(C(=O)O)C=C2O)CCC(=O)O1	-10.5666
2085	CO[C@]1(C2=CC(C)=CC3=C2O[C@H](C(C)(C)O)CO3)NC(=O)C2=C(O)C=CC(CC=C(C)C)=C21	-9.2333
2086	CC(=O)O[C@H]1/C=C\C(=O)O[C@@H](C)C[C@@H](O)/C=C/1	-10.3519
2087	COC1=CC=CC(OC)=C1[C@H]1NC(=O)C2=C(OC)C(CO)=CC(O)=C21	-10.7871
2088	O=C1OC([C@H](O)[C@H](O)C(Cl)Cl)=CC2=CC(O)=CC(O)=C12	-10.0997
2089	CC(C)[C@@H]1CC[C@@](C)(C2=CC=C(C(=O)O)C=C2O)O1	-10.9311
2090	C[C@H]1CCC[C@@](C)(C2=CC=C(C(=O)O)C=C2O)OC1	-10.8081

2091	CC1=CC2=C(O[C@H](C(C)(C)O)CO2)C([C@@H]2C3=C(C=O)C(O)=CC=C3C[C@@H]2C(C)(C)O)=C1	-9.6603
2092	CO[C@H](C)CC(=O)C1=CC(O)=CC=C1O	-10.4410
2093	CO[C@@]1(C2=CC(C)=CC3=C2O[C@H](C(C)(C)O)CO3)NC(=O)C2=C(O)C=CC(CC=C(C)C)=C21	-9.2683
2094	CC1=CC=C2COC3=C(C(C(=O)O)=CC(O)=C3)C2=N1	-9.8095
2095	CCC1=C(OC)C=C2C(=C1O)C(=O)C[C@@H](OC)[C@@H]2O	-11.1211
2096	CC1=CC(O)=CC2=C1OC1=C(CC3=CC=C(O)C=C3)C(O)=CC(C)=C1C(=O)O2	-8.9824
2097	O=C1CC[C@@H](C2=CC=C(O)C3=C2C(=O)CC[C@H]3O)C2=CC=CC(O)=C12	-9.8337
2098	O=C1CC[C@@H](C2=CC=C(O)C3=C2[C@@H](O)CCC3=O)C2=CC=CC(O)=C12	-9.8028
2099	COC1=CC(OC)=C2C3=C(C(=O)CC(C)(O)O3)C(O)=C(C3=C(OC)C=C4C=C(O)C5=C(OC(C)(O)CC5=O)C4=C3OC)C2=C1	-10.7120
2100	CCCCCC[C@H](C)[C@H]1OC(=O)[C@H](C)NC(=O)[C@H](C)NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@H](C(C)C)NC(=O)CNC(=O)[C@@H]1C	-10.6499
2101	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CCC(=O)[C@]23CC(=O)[C@@H]4CC(=O)CC[C@]4(C)[C@H]2CC[C@]13C	-10.7148
2102	CC(C)=C[C@H]1C[C@]2(C)[C@H](CC[C@@]3(C)[C@H]2CC[C@H]2CC(=O)C4=CC=CC=C4NC(=O)[C@@]23C)O1	-9.6737
2103	CC1(C)C=CC2=C3NC4=C(C3=CC=C2O1)[C@H](O)[C@@]12NC(=O)[C@]3(CCCN3C1=O)C[C@H]2C4(C)C	-10.7406
2104	COC(=O)[C@]1(CC2=CC=C(O)C(CC=C(C)C)=C2)OC(=O)C(OC)=C1C1=CC=C(O)C=C1	-9.7131
2105	CS[C@@]12CC3=CC=CC=C3N1C(=O)[C@]1(SC)CC3=CC=C[C@H](OC(C)=O)[C@H]3N1C2=O	-9.4649
2106	COC1=C(C2=CC(O)=C3C(=O)C4=CC(C)=C(O)C=C4C(=O)C3=C2OC)C=C(O)C2=C1C(=O)C1=C(C[C@@H](O)[C@@](C)(O)[C@H]1O)C2=O	-9.6423
2107	C=C(C)CCOC1=CC=C(C[C@@H]2NC(=O)[C@H]([C@@H](C)CC)N(C)C(=O)[C@H](C)NC(=O)[C@@H]3CCCN3C(=O)C(CC3=CC=CC=C3)OC(=O)[C@H](C)N(C)C2=O)C=C1	-9.2724
2108	CC1=C(CO)[C@@]2(C)CCC[C@@](C)(CO)[C@@H]2CC1=O	-11.2825
2109	C/C=C(\C)C(=O)[C@@H](C)C1=CC(=O)C2=C(O[C@@]3(C)CC[C@H]4O[C@@H](C(C)(C)O)C[C@H](O)[C@]4(C)[C@H]3C2)C1=O	-10.8769
2110	C=CC(C)(C)[C@]1(C[C@@H]2NC(=O)[C@@H]3CCCN3C2=O)C(=O)NC2=C1C=CC1=C2C=CC(C)(C)O1	-9.2744
2111	CC1(C)CC2=C([C@H](O)C3=CC4=C(C=C23)NC2=C4C[C@@H]3CC[C@@]4(O)C5=CC(=O)C6O[C@@]5(CC[C@]4(C)[C@@]23C)OC6(C)C)C(C)(C)O1	-9.1457

2112	CC1(C)O[C@]23OC1C(=O)C=C2[C@@H]1CC[C@H]2CC4=C(NC5=CC=CC=C45)[C@]2(C)[C@@]1(C)C[C@H]3O	-10.1993
2113	C=C1[C@@]2(C)C(=O)[C@@]3(O)[C@H](C)OC(=O)[C@@]13[C@]1(C)CC[C@]3(C=CC(=O)OC3(C)C)C(C)=C1[C@H]2OC(C)=O	-9.8290
2114	CCC[C@@]1(O)OC(=O)C2=C1C=C(O)C(O)=C2C	-10.4047
2115	CO[C@@H]1CC(=O)C2=C(O)C(C)=C3C=C(C)OC3=C2[C@@H]1O	-11.0785
2116	COC1=C(C2=CC(O)=C3C(=O)C4=CC(C)=C(O)C=C4C(=O)C3=C2OC)C=C(O)C2=C1C(=O)C1=C(C2=O)[C@@H](O)CC[C@@]1(C)O	-9.6060
2117	CC[C@H](C)[C@@H](C(=O)N[C@@H](CC1=CC=C(OCC=C(C)C)C=C1)C(=O)O)N(C)C(=O)[C@H](CO)NC(=O)[C@@H]1CCCN1C(=O)C(O)CC1=CC=CC=C1	-9.8082
2118	CC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)O[C@]1(C)C(=O)C2=C(C=C(/C=C/C(=O)O)OC2)C[C@H]1O	-10.3885
2119	O=C1OC(CO)=C(CO)C2=CC(O)=CC(O)=C12	-10.3819
2120	COC1=CC(OC)=C2C(O)=C3C(=O)C=C(CO)OC3=CC2=C1	-10.8164
2121	C[C@@H]1[C@H](O)CC(O)=C2C(=O)O[C@H](C)C[C@@H]21	-10.0893
2122	C=C1CC[C@H]2C(C)(C)CCC[C@]2(C)[C@H]1CO	-10.1001
2123	CCC[C@H](O)[C@H](O)/C=C/C1=CC=CC(O)=C1C=O	-10.7827
2124	CC1=CC2=C(C(=O)C[C@@H](O)C2)C(O)=C1C	-10.7170
2125	CC(=O)O[C@@H]1C=C[C@H](C)C(=O)[C@@H](C)CC=C[C@H]2[C@@H]3O[C@]3(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@@]312	-8.7804
2126	CC1=C(CO)[C@@]2(C)CCCC(C)(C)[C@@H]2C[C@H]1O	-10.9076
2127	CC1(C)CCC[C@]2(C)[C@@H](C(=O)O)[C@](C)(O)CC[C@@H]12	-11.0842
2128	CC1=C(CO)[C@@]2(C)C[C@@H](O)CC(C)(C)[C@@H]2CC1=O	-11.3958
2129	CC1=C(CO)[C@@]2(C)CC[C@@H](O)C(C)(C)[C@@H]2CC1=O	-11.3140
2130	CC1=CC[C@@H]2[C@@]3(C)CC[C@H](O)C(C)(C)[C@@H]3CC[C@@]2(C)[C@]12CC1=C(C=C(C3=CC=CN=C3)OC1=O)O2	-9.2376
2131	CC1=CC(O)=CC(OC2=CC(O)=CC(C)=C2CC(=O)C(C)C)=C1	-9.4840
2132	CC(=O)O[C@H]1CC[C@@]2(C)[C@@H](CC[C@H]3CC4=C(NC5=CC=CC=C45)[C@@]32C)[C@]1(C)CCC=C(C)C	-9.7707
2133	COC(=O)C(=CC1=CC=C(O)C(O)=C1)NC=O	-10.5887
2134	CC1=CC[C@@H]2[C@]34CC[C@](O)(OC3)C(C)(C)[C@]4(O)CC[C@@]2(C)[C@@]12OC1=C(C(=O)OC(C3=CC=CN=C3)=C1)[C@@H]2O	-9.6630
2135	COC1=CC(=O)C[C@@H](C)[C@]12OC1=C(Cl)C(OC)=C(Cl)C(OC)=C1C2=O	-10.4298

2136	C[C@@H](O)CC1=CC2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.4260
2137	CC1=C(O)C=C2C(=C1O)C(=O)O[C@@H]2[C@H](C)O	-10.7225
2138	CC(C)(O)/C=C/C[C@]1(C)[C@@H](O)CC[C@@]2(C)[C@H]1CC[C@H]1CC3=C(NC4=CC=CC=C34)[C@@]12C	-9.9254
2139	CCCCCCCCCCCC/C=C/[C@@H](O)C(=O)N[C@@H](CO)[C@H](O)/C=C/CC/C=C(\C)CCCCCCCCCC	-10.1881
2140	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2C3=CC(=O)OC4=CC(=O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C	-9.9343
2141	CCC1=CC=C(C2=C(C)C(=O)[C@]3(O2)C(=O)N[C@@](O)(C(=O)C2=CC=CC=C2)[C@@H]3O)O1	-9.0812
2142	COC1=C(C2=CC(O)=C3C(=O)C4=CC(C)=C(O)C=C4C(=O)C3=C2OC)C=C(O)C2=C1C(=O)C1=C(C[C@@H](O)[C@](C)(O)[C@H]1O)C2=O	-9.6452
2143	CC1(C)C(=O)CC[C@]2(C)[C@@H](CO)[C@](C)(O)CC[C@@]12O	-11.1301
2144	C=C(C)[C@@H]1CC[C@@]2(C)OC3=C(C[C@@H]12)C(=O)[C@@H](O)C[C@@H]3O	-10.7257
2145	COC1=CC(C2=CC=CC=C2)=C(OC)C(O)=C1C1=CC=C(O)C(CC=C(C)C)=C1	-8.9982
2146	COC1=CC(O)=C2C(=O)[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@@](C)(O)C[C@@H]3[C@H](O)C2=C1O	-10.9192
2147	C=C(/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CCC2=C3C=CC4=CC(=O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@@]21C)C(C)C	-9.4575
2148	CCC[C@H]1C[C@H]2OC(=O)C3=C(C=C(O)C(OC)=C3O)[C@H]2O1	-10.8256
2149	CC(C)(O)[C@]12CCC3=C(COC3=O)[C@@]1(C)CCC(=O)O2	-10.8874
2150	COC1=CC(=O)C[C@@H](C)[C@]12OC1=CC(O)=CC(OC)=C1C2=O	-10.4742
2151	C[C@]1(CO)CCC[C@]2(C)[C@@H](CO)[C@](C)(O)CC[C@@H]12	-10.3970
2152	CC1(C)CC(=O)C[C@]2(C)[C@@H](CO)[C@](C)(O)CC[C@@H]12	-11.1748
2153	COC1=CC=C(C2=CC(=O)C3=C(O)C=C(OCC=C(C)C)C=C3O2)C=C1OCC=C(C)C	-9.2687
2154	COC(C)(C)[C@@H](O)CC1=C(C)C=C(O)C=C1OC1=CC(C)=CC(O)=C1	-10.2184
2155	CC1=CC(O)=CC(OC2=CC(O)=CC(C)=C2C[C@H](O)C(C)(C)O)=C1	-10.3514
2156	COC(=O)[C@]1(CC2=CC=C(O)C(C=O)=C2)OC(=O)C(O)=C1C1=CC=C(O)C=C1	-9.9009
2157	CC(C)=CCC1=C(C)C=C(O)C=C1OC1=CC(C)=CC(O)=C1	-9.1236
2158	C=C1CO[C@@]2(O)C=C3C=CC(=O)[C@H](C)[C@@]3(C)C[C@@]12O	-10.4777
2159	C/C=C/[C@@H]1C=CC(=O)[C@H](O)[C@]12C(=O)O[C@H](C)[C@@H]2O	-9.9357

2160	COC1=C(C2=CC=CC(O)=C2)C2=CC=CC=C2NC1=O	-8.8601
2161	CC(=O)C1=C(C)C=C(O)C(CC=C(C)C)=C1O	-10.4415
2162	O=C1CC[C@@H]([C@@H](O)C2=CC=CC=C2)O1	-9.2115
2163	CC1=CC(O)=C2OC3=C(O)C(O)=CC(C)=C3OC2=C1	-10.0109
2164	C=C(C)[C@@H](O)CC1=C(C)C=C(O)C=C1OC1=CC(C)=CC(O)=C1	-9.2491
2165	COC1=C(N)[C@@H](O)[C@@](C)(O)[C@@H](O)C1=O	-10.1789
2166	COC(=O)C1=CC=C2C(=O)C3=C(O)C=C(CO)C(Cl)=C3OC2=C1O	-10.7478
2167	C=C(C)C#C[C@H]1C[C@@H]2OC(C)(C)[C@@H](O)C[C@]23O[C@@H]3[C@@H]1O	-10.9961
2168	C=C(C)C=C=C1C[C@@H]2O[C@@H](C(C)(C)O)C[C@@]2(O)[C@@H](Cl)[C@@H]1O	-10.5208
2169	COC(=O)C1=CC(OC)=C2C(=O)C3=C(C(=O)OC)C(OC)=CC=C3OC2=C1	-10.7110
2170	O=C1O[C@H](CO)CC2=C(O)C=CC(O)=C12	-10.2258
2171	C/C=C/C1=CC2=C(O1)C(=O)[C@](C)(OC(=O)C1=C(C)C=C(O)C=C1O)[C@H](O)C2	-10.0886
2172	COC1=CC(OC)=C2C(O)=C3C(=O)C=C(C)OC3=C(C3=C(O)C=C4C=C5OC(C)(O)CC(=O)C5=C(O)C4=C3OC)C2=C1	-10.0211
2173	OCC1OCOC2C(CO)OCOC12	-9.7584
2174	CCOC(=O)C1=CC=CC=C1N	-9.6516
2175	CCOC(=O)CNC(=O)C1=CC=CC=C1	-9.3083
2176	O=C1C[C@@H](O)[C@H](O)C2=C(O)C=CC=C12	-10.0692
2177	CC(=O)C1=NC=CS1	-9.1462
2178	N#CC1=CC=CC=C1	-8.8048
2179	OCCNCCO	-8.6028
2180	NC1=CC=CC=C1C(=O)OCCC1=CC=CC=C1	-8.9622
2181	C[C@]12CCC[C@H](O1)C1=C(C=C3C(=O)C4=CC(O)=CC(O)=C4C(=O)C3=C1O)O2	-10.8880
2182	COC1=CC=C2C=C(N(C)C(=O)C3=NO[C@H]4[C@H](O)C=C[C@@H](O)[C@@]4(O)C3)C(=O)OC2=C1OC	-9.7674
2183	COC1=CC(C)=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(O)C(Cl)=C1[C@H]2[C@H]1C2=CC(CO)=CC(OC)=C2C(=O)C2=C(O)C=C(O)C(Cl)=C21	-9.2848
2184	COC1=C(O)C(O)=C(O)C2=C1C(=O)C1=C(C)C=C(O)C(OC3=C(O)C=C(C)C4=C3OC3=CC(CO)=CC(O)=C3C4=O)=C1O2	-9.6648
2185	CC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(C(=O)O)C=CC=C3OC2=C1	-10.1615
2186	C=C1NC(=O)C(C)C(CCC(C)C(=O)C=CC(C)=CCCC(C)CCCCCC)OC(=O)C(CCC(N)=O)NC(=O)C(C)CNC1=O	-10.5047
2187	CC=CCC1=C(C)OC(=O)C=C1OC	-9.9728
2188	CC1=C(O)C(O)=C(O)C2=C1COC2=O	-10.1556
2189	CO[C@H]1CCC[C@H](C)OC(=O)CC2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)C1	-10.9873

2190	CC[C@H](C)[C@H]1C(=O)O[C@H](C(C)C)C(=O)N(C)[C@@H]([C@@H](C)CC)C(=O)O[C@H](C(C)C)C(=O)N(C)[C@@H](C(C)C)C(=O)O[C@H](C(C)C)C(=O)N1C	-9.6009
2191	COC1=CC(C)=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(O)C(Cl)=C1C2=O	-10.1627
2192	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(O)C(O)=C(C)C=C3C(=O)C2=C1	-10.4235
2193	COC1=CC(C)=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(O)C(Cl)=C1[C@H]2[C@H]1C2=CC(C)=CC(OC)=C2C(=O)C2=C(O)C=C(O)C(Cl)=C21	-9.0799
2194	CC1=CC[C@H]2[C@@H]3[C@H](C(C)(C)O)CCC2(C)[C@H]13	-10.4013
2195	COC1=CC(O)=C2C(=O)OCC3=CC(O)=C(O)C=C3C2=C1	-10.2948
2196	COC(=O)C1=C(C2=CC=CN2)NC2=CC=CC=C2C1=O	-8.8221
2197	CC(C)(O)CCC[C@](C)(O)C1=CC=C(C(=O)O)C=C1	-10.7978
2198	CC1=CC(O)=CC2=C1OC1=C(C=O)C(O)=CC(C)=C1C(=O)O2	-10.4165
2199	COC(=O)[C@]1(CC2=CC=C3OC(C)(C)[C@@H](O)CC3=C2)OC(=O)C(O)=C1C1=CC=C(O)C=C1	-9.5348
2200	O=C(O)CNC1=CC=CC=C1C(=O)O	-9.3962
2201	C[C@@H](O)C[C@@H](O)CC1=CC2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.6604
2202	COC1=CC(=O)OC(C)=C1CCC(C)=O	-10.2000
2203	COC(=O)C1=C(O)C2=CC3=C(C(O)=C2C(=O)O1)C(=O)C=C(C)O3	-10.7256
2204	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC3=C(O)C(O)=CC(C)=C3C2=C1	-10.6042
2205	COC1OC(=O)C2=C(C)C(O)=C(O)C(O)=C21	-10.3524
2206	O=C1C2=C(NC3=CC=CC=C3C2=O)C2=CC=CN12	-8.5501
2207	CC1(C)CCC[C@](C)(C2=CC=C(C(=O)O)C=C2O)O1	-11.0891
2208	CC1=CC(O)=C(C)C2=C1OC1=C(C=O)C(O)=CC(C)=C1C(=O)O2	-10.3838
2209	CC1=CC(=O)C=C(CC2=CC(O)=CC(O)=C2)O1	-9.3368
2210	COC1=CC(O)=C2C(=O)O[C@]3(C)C[C@H](O)[C@@H](O)CC3C2=C1	-10.8467
2211	C[C@@H]1NC(=O)[C@@H]2CCCN2C1=O	-9.4755
2212	O=C1C2=C(NC3=CC=CC=C3C2=O)[C@@H]2CCCN12	-8.8953
2213	CC[C@@H](C)[C@@H]1NC(=O)[C@@H]2CCCN2C1=O	-9.9293
2214	CC1=CC(O)=CC2=C1OC1=C(CO)C(O)=CC(C)=C1C(=O)O2	-10.4028
2215	COC1=CC(O)=C2C(=O)[C@H]3C[C@@H](O)[C@@](C)(O)C[C@@H]3[C@@H](O)C2=C1	-11.2487
2216	CCC1(O)CC[C@@]2(C)[C@@H](CC[C@@H]3[C@@H]2CC[C@]2(C)C(=O)CC[C@@H]32)C1	-11.1942
2217	COC1=CC(CO)=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(O)C(Cl)=C1C2=O	-10.0615

2218	COC1=CC(O)=C2C(OC)=C3C(=O)C=C(C)OC3=C(C3=C(OC)C=C4C=C5OC(C)=CC(=O)C5=C(OC)C4=C3O)C2=C1	-9.4091
2219	CC(C)(O)[C@H]1O[C@H]2CC[C@@]3(C)C(CC[C@H]4CC5=C(NC6=CC=CC=C56)[C@@]43C)C2=C[C@H]1O	-10.3340
2220	CC(=O)C1=CC=CN1C	-9.0884
2221	CC(=O)OCCC1=CC=C(O)C=C1	-9.7380
2222	COC1=CC(=O)OCC1	-9.5271
2223	CC(=O)OC[C@]12C[C@H](OC(=O)C(C)C)C(C)=C[C@H]1O[C@@H]1[C@H](O)[C@@H](OC(C)=O)[C@@]2(C)[C@]12CO2	-10.6852
2224	OC1=CC=C(O)C2=C1[C@H](O)[C@@H]1O[C@@H]1C21OC2=CC=CC3=CC=CC(=C23)O1	-9.2590
2225	CCC(O)CCCC(O)C1=C(C)C(=O)OC1	-10.2476
2226	CC1=C(Cl)C(O)=CC(O)=C1C(=O)O[C@@H]1C[C@]2(C)[C@H]3CC(C)(C)C[C@@]3(O)C=C(C=O)[C@]12O	-10.9719
2227	COC1=CC(OC)=C2C(O)=C3C(=O)C=C(C)OC3=C(C3=C(OC)C4=C5OC(C)=CC(O)=C5C(O)=CC4=CC3=O)C2=C1	-9.3666
2228	CCC1=C(OC)C=C2C(=O)C(=O)C(C(C)C3=C(OC)C=C4C(=O)C(OC)=CC(=O)C4=C3O)=C(O)C2=C1O	-10.0009
2229	CCC=C[C@H](O)[C@H](O)C1=C(C)C(=O)[C@]2(O1)C(=O)N[C@@](OC)(C(=O)C1=CC=CC=C1)[C@H]2O	-9.5010
2230	CC(=O)[C@@]1(O)[C@H](O)C2=CC3=C(C=C2C[C@@H]1C)[C@H](O)[C@@]1(C)C(=O)N[C@@H](CC2=CC=CC=C2)[C@@H]3[C@H]1C	-9.5638
2231	CC(=O)OC[C@H]1O[C@]23OC4=CC=CC(O)=C4[C@](O)(C4=C(O)C=C(C)C(=C42)OC1(C)C)[C@H]3C	-10.1093
2232	CC1=CC(O)=C2C3=C1OC(C)(C)[C@@H](CCl)O[C@]31OC3=CC=CC(O)=C3[C@@]2(O)[C@H]1C	-10.2976
2233	CC(C)=CCC1=CC(C(O)[C@@H]2NC(=O)CNC(=O)[C@H](C(C)C)NC(=O)CNC(=O)[C@@H]3CCCN3C(=O)[C@H](CC3=CNC4=CC=CC=C34)NC(=O)CNC2=O)=CC=C1O	-9.3223
2234	COC1=CC(=O)OC(C(C)=CCOC(C)=O)=C1	-10.4231
2235	CC[C@H](C)[C@@H]1NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC1=O	-11.1899
2236	CC[C@@]12SS[C@]3(C(=O)N1C)[C@@H](O)[C@]1(C4=CNC5=CC=CC=C45)C4=CC=CC=C4N[C@@H]1N3C2=O	-9.0946
2237	C=C[C@@]1(C)C=C(C)[C@@H]2[C@@H]3[C@H](OC4=CC=C(C=C4)C[C@]4(O)NC(=O)C5(OC54)C(=O)[C@H]31)[C@@H]1[C@@H](C)C[C@@H](C)C[C@]12C	-10.0767
2238	CO[C@@H]1O[C@]2(OCC3=C(C)C(O)=C(O)C(O)=C3C2=O)C2=C(O)C(O)=C(O)C(C)=C21	-10.7711
2239	CC(C)[C@H]1CCC(CO)=C[C@@H]1C=C(CO)C(=O)OC[C@]1(O)CC[C@H](C(C)C)[C@H]2C=C(C(=O)O)COC(=O)[C@@H]21	-10.7290

2240	CC[C@H]1O[C@@H]2O[C@H](/C=C/C=C/C=C/C3=C(C)C(OCC=C(C)C)=CC(=O)O3)[C@H](O)[C@]2(C)[C@@]1(C)O	-9.2190
2241	CCO[C@@H]1O[C@H]([C@H](O)CO[C@@H]2C[C@@H]3[C@@H](C[C@H]([C@@](C)(O)CO)CC[C@@]3(C)O)[C@H]2C)[C@H](O)[C@H]1O	-10.9288
2242	CCO[C@@H]1O[C@H]([C@H](O)CO[C@@H]2C[C@@H]3[C@@H](C[C@H]([C@](C)(O)CO)CC[C@@]3(C)O)[C@H]2C)[C@H](O)[C@H]1O	-10.9288
2243	C=C(C)[C@@H]1CC[C@]23[C@H]([C@H]1C1=CNC4=CC=CC=C14)[C@H](C)CC[C@@]2(C)[C@H](C)CC[C@@H]3O	-10.2056
2244	C=CC(C)(C)C1=C(/C=C2\NC(=O)[C@H](C)NC2=O)C2=CC=CC(CC3OC3(C)CO)=C2N1	-9.7784
2245	CC1(C)C=CC2=C(C=CC3=C2N[C@@]24N5C(=O)[C@@]6(O)CCCN6C(=O)[C@@H]5C[C@@]32O[C@H](CO)C4(C)C)O1	-10.0301
2246	C/C=C(\C)[C@@]1(O)C(/C=C/C=C(C)\C=C\C=C\C(=O)O)[C@@H]2CC=C(C)C[C@H]2[C@@H]2O[C@@H]21	-9.6049
2247	CC=C(C)C(=O)C1=C2C3=CN(CCCC(=O)O)C(C=C[C@@H](C)CC)=CC3=C(Cl)C(=O)[C@@]2(C)OC1=O	-8.8915
2248	CCC(C)CC(C)/C=C(\C)[C@@H]1O[C@H](C2=C3O[C@@H]4CC(=O)CC[C@]4(O)C3=CN(C)C2=O)CC[C@H]1C	-10.3417
2249	CC(C)[C@@H]1NC(=O)[C@@H](C(C)C)NC(=O)[C@@H](NC(=O)CC(O)CCCCCCCCCCCN=C(N)N)[C@@H](C)OC(=O)[C@@H](C)NC(=O)[C@@H](CC(N)=O)NC(=O)[C@@H]([C@@H](C)O)NC1=O	-10.6064
2250	C/C=C(\C=C(C)\C=C\C=C\C=C(/C)C(=O)[C@]12O[C@H]1[C@@](O)(CCO)NC2=O)C(=O)OC	-9.6781
2251	OC1CC[C@@H](O)C23OC12C1(OC2=CC=CC4=CC=CC(=C24)O1)[C@H]1O[C@H]1[C@H]3O	-10.3745
2252	COC1=CC(OC)=C2C(O)=C3C(=O)C=C(C)OC3=C(C3=C(OC)C4=C(O)C5=C(O)C=C(C)OC5=CC4=CC3=O)C2=C1	-9.5489
2253	C/C=C(\C)[C@@H](OC(C)=O)[C@@H](C)C1=CC(=O)C2=C(O[C@]3(C)CC[C@H]4O[C@@H](C(C)(C)O)CC[C@]4(C)[C@H]3[C@@H]2O)C1=O	-10.5423
2254	COC(=O)[C@]1(CC2=CC=C(O)C(C[C@H](O)C(C)(C)O)=C2)OC(=O)C(OC)=C1C1=CC=C(O)C=C1	-10.0810
2255	CC[C@H]1O[C@@H]2O[C@H](/C=C/C=C/C=C/C3=C(C)C(OC/C=C(\C)C(=O)OC)=CC(=O)O3)[C@H](O)[C@]2(C)[C@@]1(C)O	-9.3926
2256	CC1=CC=C2C[C@@H](C)OCC2=C1O	-9.7146
2257	CC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)O[C@@H]1C[C@]2(C)C3C[C@@](C)(CO)C[C@H]3C=C(CO)[C@]12O	-11.1609
2258	C=C(C)[C@H]1C[C@H]2CC[C@@]3(C)[C@@](O)(CC[C@H]4CC5=C(NC6=CC=CC=C56)[C@@]43C)[C@]23O[C@@H]3[C@H]1O	-10.5603

2259	C=C1[C@]23C(=O)O[C@@H](C)[C@@]24O[C@]2(C(=C)[C@@]5(C=CC(=O)OC5(C)C)CC[C@@]32C)C(OC(C)=O)[C@]1(C)OC4=O	-10.0478
2260	C/C(=C\CC/C(C)=C/C[C@]1(O)C(=O)C2=C3C(=C(O)C(C)=C(O)C3=C(C)C=C2O)C1=O)CC/C=C(/CC[C@@H](O)C(C)(C)O)C(=O)O	-9.9297
2261	C[C@H]1O[C@@H]2OC(=O)[C@]3(C)C[C@@H]4[C@@]5(C)C(=C1O[C@H]5C=C1C(=CC(=O)OC1(C)C)[C@@]41CO1)[C@]23O	-10.3844
2262	CC=C(C)[C@H](O[C@@H]1O[C@H](CO[C@H]2O[C@H](CO)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]2O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]1O)[C@H](C)C=C(C)C=CCC(C)=CCC1=C(C)C(=O)C(OC)=C(OC)N1	-8.9265
2263	CC(C)CC1=CNC(CCC(N)=O)C(=O)N1	-9.6683
2264	C/C(=C\C=C\[C@H](O)[C@@H](C)O)[C@H](O)[C@H](C)C(=O)O[C@H]1C[C@H](C)C[C@@H]2C=C[C@H](C)[C@](C)(C(=O)CCO)[C@@H]12	-10.9897
2265	COC1=CC=CC2=C1C(=O)O[C@H](C)C2	-9.6852
2266	CC[C@@H]1C[C@H]2CC[C@H](O2)[C@H](C)C(=O)O[C@H](C)C[C@H]2CC[C@H](O2)[C@H](C)C(=O)O[C@H](C)C[C@H]2CC[C@H](O2)[C@H](C)C(=O)O1	-10.0516
2267	CC(=O)O[C@@H]1[C@@H]2[C@@H](C)CC[C@@]34[C@@H](CC[C@@H]3C)[C@]4(C(=O)O)[C@@]2(O)C[C@H]2[C@@H](C(C)C)CC[C@]12C	-11.2422
2268	CC(C)[C@H]1CC[C@]2(C)[C@@H](O)[C@@H]3[C@@H](C)CC[C@@]45[C@@H](CC[C@@H]4C)[C@]5(C(=O)O)[C@@]3(O)C[C@@H]12	-11.3146
2269	CC(=C[C@@H](C)[C@H]1CCC(=O)[C@]23CC(=O)C4=CC(=O)CC[C@]4(C)[C@H]2CC[C@]13C)[C@H](C)C(C)C	-10.7951
2270	CC(=O)O[C@H]1C[C@H]2[C@@H]3[C@@H](O)[C@@H](O)[C@H]4C[C@@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3[C@@H](O)C[C@]2(C)[C@H]1[C@H](C)/C=C/[C@H](C)C(C)C	-10.6879
2271	CCC(=O)O[C@H]1C[C@@]2(C)[C@@H](CC[C@H]3[C@@]4(C)CCC(=O)[C@@H](C)[C@@H]4[C@H](OC(C)=O)C(=O)[C@@]32C)/C1=C(\CCC=C(C)C)C(=O)O	-9.8668
2272	C=C1C[C@H]2[C@]3(C)CC[C@@H](O)C(C)(C)[C@H]3C(=O)[C@@H](O)[C@]2(C)[C@@H](C(=O)OC)[C@]1(C)C(=O)[C@](C)(O)C(=O)OC	-10.3037
2273	COC1=CC(OC)=C2C(O)=C3C(=O)CC(C)(O)OC3=C(C3=CC(C4=C(CC5=CC=C(O)C(OC)=C5)CNC4=O)=CC=C3O)C2=C1	-9.8821
2274	CC=CC1=C(O)C(=O)C2=C(CNC2=O)O1	-10.2044
2275	COC1=CC(O)=C2C(=O)O[C@@]3(C)C[C@@H](O)[C@H](O)C=C3C2=C1	-10.9741
2276	CCCC1=C(C[C@@]2(C)O[C@@H]2C)COC1=O	-9.9104
2277	CC=CC=CC(=O)OCC1=C(OC)C(CO)=C(C=CCO)OC1=O	-10.0428

2278	C[C@@H]1CCC2=C(COC2=O)[C@H]2CC(C)(C)C[C@H]12	-10.0543
2279	CC1(C)C=CC2=C(C=CC3=C2NC(=O)[C@@]32C[C@]34NC(=O)[C@@]5(CCCN5C3=O)C[C@H]4C2(C)C)O1	-9.6720
2280	C[C@]12CCC[C@](C)(C(=O)O)[C@@H]1C=C[C@]1(CO)OC(=O)C[C@H]21	-10.8601
2281	C[C@@H]1[C@@H]2CC(C)(C)CC2=C(CO)[C@@H](CO)C[C@@H]1O	-10.5883
2282	CO[C@H]1C2=CC3=C(C=C2[C@@H]2[C@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@@]1(C)[C@@H]2C)C(C(C)=O)=C(O)[C@@H](C)C3	-9.2943
2283	CC1=C(O)C=C(O)C2=C1[C@H](C)[C@@H](C)CC2=O	-10.8428
2284	CC[C@H](C)/C=C(C)/C=C/C1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@](C)(O)[C@H](O)[C@H]2CO1	-10.1540
2285	COC1=CC(O)=C2C(=O)O[C@@]3(C)C[C@H](O)[C@H](O)C=C3C2=C1	-10.9741
2286	CC[C@H](C)C(=O)[C@@H](C)C1=CC(=O)C2=C(O[C@]3(C)CC[C@H]4O[C@@H](C(C)(C)O)C[C@H](O)[C@]4(C)[C@H]3C2)C1=O	-10.7502
2287	CO[C@@H]1C2=CC3=C(C=C2[C@H]2[C@@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@]1(C)[C@H]2C)C(C(C)=O)=C(O)[C@@H](C)C3	-9.2943
2288	COC(=O)[C@]1(CC2=CC=C(O)C(CC(O)C(C)(C)O)=C2)OC(=O)C(O)=C1C1=CC=C(O)C=C1	-9.8832
2289	CCCC(O)=C1C(=O)CC(O)CC1=O	-10.0155
2290	CCCC=CC=CC(O)=C1C(=O)[C@H](C[C@@](O)(C(=O)O)C(C)C)N(C)C1=O	-10.0500
2291	O=C1NCC2=C(O)C=C(O)C=C12	-10.0419
2292	CCCC1=C[C@@H](CC(=O)CC)OC1=O	-9.4203
2293	CC(C)=CCCC(C)(O)CCCC(C)(O)CCCC(C)(O)CCCC(C)(O)CCCC(C)(O)CCCC(C)(O)CCCC(C)(O)CCCC(C)=CCCC(C)=CCO	-9.3076
2294	CO[C@H]1O[C@]2(OCC3=C(C)C(O)=C(O)C(O)=C3C2=O)C2=C(O)C(O)=C(O)C(C)=C21	-10.7744
2295	C[C@H]1CC[C@H]2[C@@H](C=C[C@@H]3CO[C@](C)(O)C(=O)[C@@]32C)[C@@H]1O	-10.9281
2296	CC1=C(O)C(=O)[C@@]23CC(=O)C=C[C@@H]2[C@H](C)[C@H]3C1=O	-10.9020
2297	C[C@H]1CCC[C@@]2(O)[C@@H](O)C[C@H]([C@@](C)(O)CO)C[C@]12C	-10.6739
2298	CCCC(O)CC1=C(CO)C(OC)=CC(=O)O1	-10.5537
2299	CC(CC(=O)OC1=CN(CC2=CC=CC=C2)C2=C1C(O)=CO2)C(=O)O	-9.9771
2300	COC1=C(C)C(=O)OC([C@H](C)CCO)=C1	-10.5415
2301	C=CC(C)(C)C1=NC2=CC=CC=C2C1=CC1=C(O)NC(=O)C(=O)N1	-9.3431

2302	CO[C@@H]1C[C@@H](C)OC2=CC=CC(O)=C21	-9.9523
2303	CC1=C(C)[C@H]2[C@H](CC3=CNC4=CC=CC=C34)NC(=O)[C@]23C(=O)/C=C\C(=O)[C@H](O)/C(C)=C\[C@@H](C)C/C=C\[C@H]3[C@@H]1O	-9.9313
2304	C/C=C/C1=CC(=O)C[C@@H]1O	-9.8704
2305	CC(C)(O)CC1=CC(=O)C(O)=CC(=O)N1	-9.6646
2306	CC(=O)OCC/C(C)=C/C(=O)N[C@@]1(C)OC(C)=C(C)C1=O	-10.1208
2307	CC(=O)OCCC(C)=CC(=O)O	-9.6720
2308	CCOC(=O)C=CC=CCCC=CCCCC(C)O	-10.0714
2309	CC1=C2OC(=O)C3=C(C)C=C(O)C(CO)=C3O[C@@H]2[C@](C)(O)[C@H](O)C1=O	-11.0415
2310	CC(C)(O)[C@H]1O[C@@]2(O)CC[C@@]3(C)[C@@H](CC[C@H]4CC5=C(NC6=CC=CC=C56)[C@@]43C)C2=CC1=O	-10.5983
2311	CC1=CC[C@H]2C(C)(C)CCC[C@]2(C)[C@H]1C[C@@]12O[C@@H]1C(=O)C(CO)=C[C@H]2O	-10.9934
2312	CC1=C(Cl)C(O)=CC2=C1C1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)O2	-10.3936
2313	C=C(C)[C@H]1OC2CC[C@@]3(C)C(CC[C@]4(OC)O[C@@H]5OC(C)(C)[C@H]6C[C@@H]7C(=C)CC8=CC=C9NC(=C5C9=C8[C@@]76O)[C@@]43C)[C@]23O[C@@H]3[C@H]1O	-9.4366
2314	C=C(C)[C@H]1C[C@H](C(C)(C)O)[C@H]1C1=CC=CC2=C1C(=O)C[C@@H]1CC[C@@]3(O)C4=C[C@@H](O)[C@@H](C(=C)C)C[C@H]4CC[C@]3(C)[C@@]1(C)C(=O)N2	-9.3842
2315	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(C)C=C(O)C(O)=C3OC2=C1	-10.9526
2316	COC(=O)C1=CC(OC)=CC(OC)=C1C(=O)C1=COC2=C1OC(C)CC2=O	-10.5280
2317	COC1=CC(C=C2OC(=O)C(C3=CC=C(O)C=C3)=C2O)=CC(O)=C1O	-9.8143
2318	C=CC(C)(C)C1=C(C=C2NC(=O)C3(OC)CCCN3C2=O)C2=CC=CC=C2N1	-9.0009
2319	COC1=CC(OC)=C2C(=O)C3=C(C[C@H](C)O[C@H]3OC)C(=O)C2=C1	-10.8019
2320	CCCCCC=CC=CC1=CC=C(O)C(O)=C1C=O	-10.4100
2321	CCCCCC=CC=CC1=CC=CC(O)=C1C=O	-9.8970
2322	CCCC=CC=CC(O)=C1C(=O)NC(CC(O)(C(=O)O)C(C)C)C1=O	-10.2484
2323	C=CC(C)(C)C1=C(C=C2NC(=O)C(C)(O)NC2=O)C2=CC=CC=C2N1	-9.8073
2324	COC(=O)C1=CC(=O)[C@H]2C[C@]1(C)[C@H]1CC[C@]3(C)[C@@H]([C@H](C)[C@@H]4O[C@H]4[C@H](C)C(C)C)CC[C@@]34O[C@@]14[C@@H]2O	-11.1077
2325	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@@]23[C@@H]([C@@H]2[C@H](/C=C(/C)C[C@@H](C)C[C@H]2O)[C@H]3O)[C@@H]1O	-9.5591

2326	CC1=C(CCCCC=CC(=O)O)OC2CCCN2C1=O	-10.4405
2327	C[C@@H]1C[C@@H]2C=C[C@@H]3COC(=O)[C@]3(C)[C@H]2C[C@@H]1O	-10.7259
2328	C=CC(C)(C)C1=C(C(O)[C@@H]2NC(=O)[C@H](C)NC2=O)C2=CC=C(CC=C(C)C)C(CC=C(C)C)=C2N1	-9.4930
2329	CC1=C2C[C@@H](O)CCC2=CC2=C1C(=O)C[C@]1(C)[C@@H]([C@H](C)/C=C/[C@H](C)C(C)C)CC[C@@H]21	-10.8710
2330	COC1=CC=C2C3=C(NC2=C1)[C@H](CC(C)(C)O)N1C(=O)[C@@H]2CCCN2C(=O)[C@@]1(O)[C@H]3O	-10.8975
2331	CC[C@H](C)[C@H]1C(=O)N[C@@H](CC2=CC=C(OCC=C(C)C)C=C2)C(=O)N(C)[C@@H](C)C(=O)O[C@H](CC2=CC=CC=C2)C(=O)N2CCC[C@H]2C(=O)N[C@@H](CO)C(=O)N1C	-9.5019
2332	CC1=CC(O)=C2C3=C1OC(C)(C)[C@H](O)CO[C@]31OC3=CC=CC(O)=C3[C@@]2(O)[C@H]1C	-10.6076
2333	CC1=C[C@@]2(O)[C@@H]([C@]3(C)C[C@H](C)C[C@H](C)C(=O)O3)CC(=O)[C@]23C(=O)N(C)C(=O)[C@@H](C2=CC=CC=C2)[C@@H]3[C@@H]1C	-9.3011
2334	COC1=CC(=O)OC(CCC(=O)O)=C1	-10.3667
2335	COC(=O)C1=C(CCC(=O)O)OC(=O)C=C1OC	-10.3374
2336	CO[C@@H]1C(=O)NC2=CC=CC(O)=C2[C@@]1(O)C1=CC=CC=C1	-8.3948
2337	COC(=O)[C@@]1(CC2=CC=C(O)C(CC=C(C)C)=C2)OC(=O)C(O)=C1C1=CC=C(O)C=C1	-9.6402
2338	CC(C)C1=C(C2=CNC3=CC=CC=C23)[C@@H]2[C@H](C)CC[C@@]3(C)[C@H](C)CC[C@H](O)[C@@]23CC1	-10.5246
2339	CC(=O)OC[C@]12OC3=CC=CC(O)=C3C(O)=C1C(=O)C[C@@H](C)[C@H]2OC(C)=O	-10.7616
2340	CC(/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CCC2=C3C=CC4=CC(=O)CC[C@]4(C)C3CC[C@@]21C)C(C)(C)O	-10.3557
2341	CC(=O)OC[C@@]12OC3=C(C4=CC=C(O)C5=C4O[C@]4(CO)C(=C5O)C(=O)C[C@H](C)[C@@H]4OC(C)=O)C=CC(O)=C3C(O)=C1C(=O)C[C@H](C)[C@@H]2OC(C)=O	-10.0073
2342	CC1=C[C@@H]2C=C(C)[C@H]3C[C@H](O)C[C@@]3(O)[C@]23C(=O)N[C@@H](CC(C)C)[C@@H]3[C@@H]1C	-11.4660
2343	C=C(C)C#CC1=CC(CO)=CC=C1O	-9.6440
2344	COC1=CC(=O)OC2=C1CO[C@@H](C[C@@H](C)O)C2	-10.6006
2345	CC1=C[C@@H]2C[C@@]3(C)OC4C[C@H]3[C@@](O)(C4)[C@]23C(=O)N[C@@H](CC(C)C)[C@@H]3[C@@H]1C	-11.6086
2346	CC[C@H](CO)C1=CC(OC)=C(C)C(=O)O1	-10.6126
2347	COC1=CC(=O)C2=C(C=C(C)C(C3=C(OC)C=C4C=C5C[C@@H](C)OC(=O)C5=C(O)C4=C3O)=C2O)C1=O	-9.9486
2348	COC(=O)[C@]1(CC2=CC=C3OC(C)(C)[C@@H](O)CC3=C2)OC(=O)C(OC)=C1C1=CC=C(O)C=C1	-9.4952
2349	COC1=C(C)C(OC(=O)C2=C(C)C=C(O)C=C2O)=C(C)C(C(=O)OC2=CC(O)=C(C(=O)O)C(C)=C2C)=C1C	-10.1128

2350	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2C3=C[C@@H]4O[C@@]45C[C@@H](O)CC[C@]5(C)[C@H]3CC[C@]12C	-10.8409
2351	CC1=CC[C@H]2[C@](C)(CO)CCC[C@]2(C)[C@H]1C[C@@]12O[C@@H]1C(=O)C(CC1=C(O)C=C(C)OC1=O)=C[C@H]2O	-10.4010
2352	CC(=O)O[C@H]1C[C@@]2(C)[C@@H](CC[C@H]3[C@@]4(C)CCC(=O)[C@@H](C)[C@@H]4[C@H](OC(C)=O)C(=O)[C@@]32C)/C1=C(\CCC=C(C)C)C(=O)O	-9.7769
2353	C=CC[C@H]1OC(=O)CCNC(=O)C(C)N(C)C(=O)C(C(C)CC)N(C)C(=O)C(C(C)CC)NC(=O)[C@@H]2CCCN2C1=O	-9.8223
2354	C=C(C)[C@H]1C[C@H]2CC[C@@]3(C)[C@@](O)(CC[C@H]4[C@H](OC)C5=C(NC6=CC=C7CC(=C)[C@H]8C[C@H](C(C)(C)O)[C@H]8C7=C56)[C@@]43C)[C@]23O[C@@H]3[C@H]1O	-10.0316
2355	CC1=CC(=O)[C@H]2/C(C=O)=C\C[C@H]3[C@@H]([C@@H](C)C4C=CC(C)(C)O4)CC[C@]3(C)C[C@H]12	-10.4350
2356	CC(=O)OC[C@]12OC3=CC=C(C4=CC=C(O)C5=C4O[C@@]4(COC(C)=O)C(=C5O)C(=O)C[C@@H](C)[C@H]4OC(C)=O)C(O)=C3C(O)=C1C(=O)C[C@@H](C)[C@H]2OC(C)=O	-10.6756
2357	C=C[C@@]1(C)CC[C@](C)(C(C)C)C2=CC3=C4C(=CNC4=C21)C[C@@H](CO)NC(=O)[C@H](C(C)C)N3C	-9.7214
2358	C=C(C)[C@H]1OC2CC[C@@]3(C)C(CC[C@]4(OC)O[C@@H]5OC(C)(C)[C@H]6C[C@@H]7C(=C)CC8=C(Cl)C=C9NC(=C5C9=C8[C@@]76O)[C@@]43C)[C@]23O[C@@H]3[C@H]1O	-9.2214
2359	COC1=CC(O)=CC2=C1C(=O)C1=CN=C(C)C=C1C2=O	-9.8721
2360	C[C@@H]1[C@H](O)[C@@H](C)C(=O)O[C@H]1C	-9.9331
2361	C/C=C/C=C/[C@@H]1OC(=O)C=C[C@@H]1O	-9.4000
2362	CC(C)=C/C=C\[C@H](C)[C@H]1CC[C@]2(C)C[C@H]3[C@@H]4/C(=C\C[C@@H]12)C(=O)O[C@]4(O)C[C@@]3(C)O	-10.8423
2363	C=C1C[C@@H]2[C@](C)(C(=O)C(O)=C3C(C)(C)C(=O)CC[C@]32C)[C@@H](C(=O)OC)[C@]1(C)C(=O)[C@](C)(O)C(=O)OC	-9.6564
2364	C/C(=C\CC/C(C)=C/C[C@]1(O)C(=O)C2=C3C(=C(O)C(C)=C(O)C3=C(C)C=C2O)C1=O)CC/C=C(\CC[C@@H](O)C(C)(C)O)C(=O)O	-9.9294
2365	CC(C)=CCC/C(=C/CC/C(C)=C/CC/C(C)=C/C[C@]1(O)C(=O)C2=C3C(=C(O)C(C)=C(O)C3=C(C)C=C2O)C1=O)CO	-9.6791
2366	COC1=CC(C2=C(OC)C=C(C3=CC=C(O)C=C3)C(OC)=C2O)=CC=C1OCC=C(C)C	-9.3772
2367	C/C=C(\C)[C@H](O[C@@H]1O[C@H](CO[C@H]2O[C@H](CO)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]2O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]1O)[C@H](C)/C=C/C=C/C/C(C)=C/CC1=C(C)C(=O)C(OC)=C(OC)N1	-9.0156

2368	CC(=O)/C=C/[C@H]1[C@H](C(=O)N(C)[C@H](CO)C(=O)O)C(=O)[C@@]2(C)[C@@H]1C(C)=C[C@H]1C[C@@H](C)CC[C@@H]12	-10.2446
2369	CC1=C[C@H]2C[C@@H](C)CC[C@@H]2[C@@]2(C)C(=O)[C@@H](C(=O)N(C)[C@H](CO)C(=O)O)[C@H](/C=C/[C@H](C)O)[C@@H]12	-10.5019
2370	C=C(C)[C@H]1O[C@H]2CC[C@@]3(C)[C@@](O)(CC[C@H]4C5=C(C[C@@]43C)NC3=CC=CC=C53)C2=C[C@H]1O	-9.3967
2371	CC[C@@H](O)C[C@H](C)[C@H](O)[C@@](C)(/C=C/C(=O)N[C@H](CO)[C@@H](C)CC)OC	-10.7252
2372	O=C1N[C@H](CC2=CC=C(O)C=C2)C(=O)N2CCC[C@H]12	-9.8085
2373	COC1=CC2=C(C(=O)O[C@@H]3C[C@H](C[C@@H](C)O)O[C@H]23)C(O)=C1OC	-10.9758
2374	CC(=O)CCCC[C@H](O)[C@@H]1CCC2=C(CC[C@H](O)C2=O)O1	-10.5356
2375	O=C1C[C@H](O)[C@H](O)C2=CC=CC(O)=C12	-10.1621
2376	O=C1CC[C@H](C2=CC=C(O)C3=C2C(=O)CC[C@@H]3O)C2=CC=CC(O)=C12	-9.8621
2377	CC(=O)COC(C)CCCC(C)C1=CC[C@]2(C)OC3=C(C[C@H]12)C(=O)[C@@H](O)CC3	-10.6758
2378	CCC(C)C(=O)O[C@]1(C)C(=O)C=C(OC)[C@](C)(O)C1=O	-10.4730
2379	C[C@@]1(O)CC[C@H]2[C@@H](C=C[C@@H]3COC(=O)[C@@]32C)C1	-10.6039
2380	C=C(C)[C@@H]1C[C@H](O)[C@@]2(C)OC3=C(C[C@@H]12)C(=O)[C@]1(O)CO[C@H]3C1	-11.0742
2381	CC1=CC[C@H]2C(C)(C)CCC[C@]2(C)[C@H]1C[C@@]12O[C@@H]1C1=CC(=O)CCC1=C[C@H]2O	-10.8775
2382	O=C1CCC2(OC3=CC=CC4=CC=CC(=C34)O2)[C@H]([C@H]2CCC(=O)O2)C1	-9.9475
2383	CC/C=C\C[C@@H]1C(=O)CC[C@@H]1CC(=O)OC	-9.9755
2384	C[C@@H]1CC[C@H]2C[C@H]3[C@]4(C)CC[C@@H]4[C@](C)(O)CC[C@@]13C2(C)C	-10.1850
2385	CC(C)=CCC[C@H]1C(=O)CC[C@H]2C[C@@](C)(CCC3=C(O)C(C)=C(C)OC3=O)CC[C@@]21C	-10.8430
2386	CC[C@@H](C)[C@@H]1NC(=O)[C@@H](CC2=CC=CC=C2)N2C1=NC1=CC=CC=C1C2=O	-9.2412
2387	CC1=C(O)C=C2C(=C1O)C(=O)O[C@H]2[C@H](C)O	-10.7379
2388	C[C@H]1CCCC[C@@H]2[C@@H](CC(=O)O1)[C@@H](O)CC[C@@H]2O	-10.6556
2389	O=C1CC[C@H]([C@@H]2C[C@@H](O)CCC23OC2=CC=CC4=CC=CC(=C24)O3)O1	-10.6030
2390	COC1=CC(O)=CC2=C(C)C=C(O)C(O)=C2OC(C)=C1	-10.4672
2391	CCC(O)CC[C@H]1CC2=C(C)C(O)=C(C)C(O)=C2C(=O)O1	-10.8582
2392	COC[C@H]1O[C@]23OC4=CC=CC(O)=C4[C@](O)(C4=C(O)C=C(C)C(=C42)OC1(C)C)[C@H]3C	-10.3371

2393	COC(=O)[C@@]1(CC2=CC=CC=C2)OC(=O)C(=CC2=CC=CC=C2)O1	-9.0688
2394	CC1=CC(O)=C(C=O)C2=C1C(=O)OC1=C(C)C3=C(C(=O)OC3)C(O)=C1O2	-10.9584
2395	COC1=CC(O)=C2C(=O)O[C@@]3(C)C[C@H](O)C(=O)C=C3C2=C1	-10.5872
2396	CC(=O)OC[C@]12OC3=CC=C(C4=CC=C5O[C@@]6(COC(C)=O)C(=C(O)C5=C4O)C(=O)C[C@@H](C)[C@H]6OC(C)=O)C(O)=C3C(O)=C1C(=O)C[C@@H](C)[C@H]2OC(C)=O	-10.5672
2397	CCC[C@H]1C[C@H]2OC(=O)C3=C(C=C(OC)C(OC)=C3O)[C@@H]2O1	-10.8503
2398	CC1(C)CC[C@@H](O)[C@](C)(C2=CC=C(C(=O)O)C=C2O)O1	-11.0672
2399	CC[C@H](O)[C@H]1C[C@H]2OC(=O)C3=C(C=C(OC)C(OC)=C3O)[C@H]2O1	-10.9192
2400	O=C(O)C1=COC(CO)=C1	-9.8542
2401	CC1=C(CO)[C@@](C)(O)OC1=O	-10.0683
2402	CC[C@H](C)C=C(C)C=CC1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@](C)(OC)C(=O)C2=CN1CCO	-9.5852
2403	CC(C)C(C)/C=C/C(C)[C@H]1CC[C@H]2/C(=C/C(=O)OC3(C)CCC=CC3=O)C(=O)CC[C@]12C	-10.0958
2404	COC(=O)C1=C(CCCC(=O)O)OC(=O)C=C1OC	-10.4969
2405	CC(=O)OC/C(=C\[C@H]1C=C(CO)CC[C@@H]1C(C)C)C(=O)O	-10.8125
2406	CC(=O)O[C@@H](C)CC1=CC(=O)C2=C(C)C=C(O)C=C2O1	-10.6238
2407	CC[C@H](C)/C=C(C)/C=C/[C@@H]1CC2=CC=CC(O)=C2C(=O)O1	-9.9589
2408	O=C1NC(=O)C2=C(O)C=C(O)C=C12	-10.0163
2409	COC(=O)CCC1=C(C(=O)OC)C(OC)=CC(=O)O1	-10.2797
2410	CO[C@@H]1O[C@]2(OCC3=C(C)C(O)=C(O)C(O)=C32)C(=O)C2=C(O)C(O)=C(O)C(C)=C21	-10.7792
2411	COC(=O)C1=C(CCCCC(=O)O)OC(=O)C=C1OC	-10.5993
2412	CS[C@]1(CC2=CNC3=CC=CC=C23)NC(=O)[C@H](C(C)O)NC1=O	-10.4090
2413	CCN1C(=O)[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@@H]1CCC(=O)O	-10.1242
2414	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@]23C=C2C=C(C)C[C@@H](C)C[C@]2(O)C[C@H]3[C@@H]1O	-9.7595
2415	COC1=CC(O)=C(OC2=CC(C)=CC(O)=C2)C(CO)=C1	-10.0342
2416	CC1=C(CO)C(=O)[C@H](C2=C(C)CCC2=O)C1	-10.1203
2417	COC(=O)/C=C/[C@H](O)[C@@H]1C[C@H](O)C[C@H]1/C=C/CCC[C@H](C)O	-10.7586
2418	C[C@H](O)CCC/C=C/[C@@H]1C[C@@H](O)C[C@H]1[C@@H](O)/C=C/C(=O)O	-10.5575

2419	CCC[C@@H](O)CC1=C(C)C(OC)=CC(=O)O1	-10.5525
2420	COC1=CC(=O)OC2=C1CO[C@@H](CC(C)=O)C2	-10.1712
2421	CC1(C)CCC[C@]2(C)C3=CC4=C(C=C3CC[C@@H]12)C(=O)C(CO)=CC4=O	-10.6124
2422	COC(=O)[C@@]1(O)C(=O)C2=C(O)C=CC=C2C12OC1=CC=CC3=CC=CC(=C13)O2	-9.2884
2423	COC1=C(C=O)C(=O)OC([C@H]2[C@@H]3CCCC[C@@H]3C=C[C@@H]2C)=C1	-10.3613
2424	CN1C(=O)[C@H](CC2=CC=CC=C2)NC(=O)[C@@H]1CC1=CC=C(O)C=C1	-8.7009
2425	COC1=CC(OC)=C2C3=C(C(=O)C=C(C)C3)C(O)=C(C3=C(OC)C4=C5OC(C)=CC(O)=C5C(O)=CC4=CC3=O)C2=C1	-9.5608
2426	COC1=CC=C(C2=CC(O)=C(C3=CC=C(OC)C=C3)C(OC)=C2OC)C=C1	-9.3604
2427	O=C1CC[C@H]([C@@H]2C[C@H](O)C=CC23OC2=CC=CC4=CC=CC(=C24)O3)O1	-10.1030
2428	CC(C)[C@@H](O)C(=O)N(C)[C@H](CC1=CC=CC=C1)C(=O)O	-9.6210
2429	NC(=O)CC1=CC=C(O)C(Cl)=C1	-9.3694
2430	C[C@H]1[C@H](O)CC(=O)[C@]2(C)CC[C@H]3[C@@H]4[C@@](C)(CO)CC[C@]4(C)C[C@]132	-11.3952
2431	COC1=CC(O)=C2C(=O)O[C@]3(C)C[C@@H](OC(C)=O)[C@H](O)C=C3C2=C1	-10.7740
2432	CCOC1=C(C2=CC=C(O)C=C2)[C@](CC2=CC=C(O)C(CC=C(C)C)=C2)(C(=O)OC)OC1=O	-9.7334
2433	C[C@H](CO)C1=C(C2=CNC3=CC=CC=C23)[C@@H]2[C@H](C)C[C@@H](O)[C@@]3(C)[C@H](C)CC[C@H](O)[C@@]23CC1	-10.4882
2434	C/C=C(\C)C(=O)OC(/C=C/[C@H](O)[C@H](C)O)C1C=CC(=O)O1	-10.6710
2435	CCC(O)CCC=CC1=C(CO)[C@@H]2OC(C)(C)[C@@H](O)C[C@@]23O[C@H]3[C@@H]1O	-11.0058
2436	C=C1C[C@H]2C=C(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@]32[C@]2(O)C[C@@H](O)C[C@H]12	-11.3831
2437	CC[C@H](C)C[C@@H](C)/C=C(\C)[C@@H]1O[C@H](C2=C(O)C(C3=CC=C(O)C=C3)=CN(C)C2=O)CC=C1C	-8.8519
2438	CC[C@H](C)C(=O)O[C@]1(C)C(=O)C(C)=C(OC)[C@@H]1O	-10.5931
2439	C[C@H]1C(=O)O[C@@H]2C[C@](C)(O)[C@@H](C)[C@H]3[C@@H](C[C@](C)(O)[C@@H](C)[C@@H]21)OC(=O)[C@@H]3C	-10.3717
2440	CCC[C@@H]1C[C@@H](O)[C@@H](O)/C=C\CCC(=O)O1	-10.2156
2441	CC(=O)[C@@H](C)C1=C(C)C(O)=C(C)C(O)=C1C=O	-10.8908
2442	CC(C)=CCC1=C(O)C=C(O)C2=C1C(=O)C1=C(O)C(Cl)=C(C)C(Cl)=C1OC2	-10.2151

2443	CC(C)(O)[C@H]1O[C@H]2CC[C@@]3(C)[C@@H](CC[C@H]4CC5=C(NC6=CC=CC=C56)[C@@]43C)C2=CC1=O	-10.4609
2444	CC(C)C[C@H]1NC(=O)[C@H]2CCCN2C1=O	-9.7002
2445	COC1=CC(O)=C2C(=O)O[C@@]3(C)C[C@H](OC(C)=O)[C@@H](O)C=C3C2=C1	-10.7740
2446	C[C@@H]1C[C@@H](O)C2=C(O)C=CC=C2O1	-10.1320
2447	CCC(=O)C[C@H](C)C1O[C@]1(C)/C=C/C(=O)N[C@H](CO)[C@@H](C)CC	-10.6871
2448	C[C@@H]1CC(=O)C2=C(O1)O[C@]1(C)CC[C@@]3(O)C(C)(C)C=CC(=O)[C@]3(C)[C@H]1C2	-10.8756
2449	CC1(C)CC(=O)C2=CC(O)=CC(CC(=O)O)=C2O1	-10.8251
2450	CC(C)[C@H]1CC[C@@]2(C)C(CO)=C[C@@H]1[C@@H]2C(O)CO	-10.8479
2451	C[C@H]1CC/C=C\CC(=O)C2=C(O)C=C(O)C=C2CC(=O)O1	-10.6017
2452	CCCCCCCCC[C@H]1C[C@@H](O)[C@H](O)C(=O)O1	-10.5246
2453	C[C@]1(O)CC2=C(CO1)C(=O)C1=CC(O)=C(O)C(C(=O)O)=C1O2	-10.7728
2454	COC1=CC(O)=CC(C)=C1OC1=CC(C)=CC(O)=C1O	-10.4674
2455	CC(CO)[C@H]1CC[C@@](C)(O)[C@H]2CC[C@@H](C)[C@H]2C1	-10.2348
2456	C/C=C/C1=CC2=CC(=O)[C@@](C)(O)[C@@H](OC(=O)C3=C(C)C=C(O)C=C3O)C2=CO1	-9.7385
2457	CC[C@@H](C)C[C@@H](C)/C=C(C)/C=C/C=C/C(=O)C1=C(O)C(C2(O)CCC(O)CC2)=CNC1=O	-8.7657
2458	C=C(CCCC(C)C)C1=CC=C(CO)C=C1O	-10.2389
2459	CC1=C(C[C@H](C)O)[C@H](/C=C(C)/C=C(C)/C=C/C(=O)O)[C@@H]2C(=C1)C[C@@H](C)C(=O)[C@H]2C	-9.4860
2460	CC(=O)CC1=C(C)C=C2C[C@@H](C)C(=O)[C@@H](C)[C@@H]2[C@H]1/C=C(C)/C=C(C)\C=C\C(=O)O	-9.3763
2461	C=C1CC[C@H](OC(C)=O)C(C)(C)[C@@H]1CC/C(C)=C/CC/C(C)=C/CC1=C(O)C=C(C)OC1=O	-9.5386
2462	CC(=O)CC1=C(C)C=C2C[C@@H](C)C(=O)[C@@H](C)[C@@H]2[C@H]1/C=C(C)/C=C(C)/C=C/C(=O)O	-9.3763
2463	CC(=O)CC1=C(C)C=C2C[C@@H](C)[C@@H](O)[C@@H](C)[C@@H]2[C@H]1/C=C(C)/C=C(C)/C=C/C(=O)O	-9.6418
2464	COC(=O)/C=C/C(C)=C/C(C)=C/[C@H]1C(CC(C)=O)=C(C)C=C2C[C@@H](C)C(=O)[C@@H](C)[C@@H]21	-9.2762
2465	CC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)O[C@H]1CC2=C(COC(/C=C/C(=O)O)=C2)C(=O)[C@@]1(C)O	-10.2306
2466	CC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)O[C@H]1CC2=C(CO[C@@](O)(CCC(=O)O)C2)C(=O)[C@@]1(C)O	-10.9504
2467	CC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)O[C@H]1CC2=C(CO[C@](O)(CCC(=O)O)C2)C(=O)[C@@]1(C)O	-10.9790
2468	COC1=CC=C2C=C(NC(=O)[C@@]34C[C@]5(O)[C@@H](C=C[C@@H](O)[C@@H]5ON3)S4)C(=O)OC2=C1OC	-10.2049

2469	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC3=C(C2=C1)[C@@](C)(O)C[C@H](OC)[C@@]31C[C@@H](O)C(=O)O1	-11.0977
2470	COC1=C(N)[C@](C)(O)C2=C(OC(=O)C3=C(O)C=C(OC)C=C23)C1=O	-11.0925
2471	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC3=C(C2=C1)[C@@](C)(O)C(Cl)=C(O)C3=O	-10.4810
2472	C[C@@H]1C[C@H]2C(=C(O)C=C[C@H]2O)C(=O)O1	-10.0715
2473	C[C@@H]1CC2=C(CO)C=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.4999
2474	COC1=C(O)C=C(O)C2=C1C(=O)C1=CC(C)=NC=C1C2=O	-10.3887
2475	CC(C)CC[C@H](O)[C@H]1C[C@@H](CO)OC1=O	-10.4474
2476	O=C1CC[C@]2(O)C3=C(C=CC(O)=C13)C1=CC=C(O)C3=C1[C@H]2[C@H]1O[C@H]1[C@@H]3O	-10.6988
2477	C/C=C(\C)C(=O)OC(/C=C/[C@H](O)[C@H](C)O)C1CCC(=O)O1	-10.8457
2478	COCC1=C2C=C(C)OC=C2[C@H](O)[C@@](C)(O)C1=O	-10.6132
2479	C[C@H]1[C@H]2CC(=O)O[C@H]2C[C@@]1(C)O	-9.9673
2480	C/C(=C\CC/C(C)=C/C[C@]1(O)C(=O)C2=C3C(=C(O)C(C)=C(O)C3=C(C)C=C2O)C1=O)CC/C=C(\CO)CC[C@@H](O)C(C)(C)O	-9.7747
2481	COC(OC)C1CCC(C(C)(C)O)OC1CC/C(C)=C/CC/C(C)=C/C[C@]1(O)C(=O)C2=C(O)C=C(C)C3=C(O)C(C)=C(O)C(=C23)C1=O	-10.2519
2482	C[C@@H]1OC(=O)/C=C\[C@@H](O)[C@H](C)OC(=O)C[C@H](C)OC(=O)/C=C\[C@H]1O	-10.5547
2483	CC1(C)C[C@H](O)C[C@]2(C)[C@@H]3C(=CC[C@@H]12)CO[C@H]3O	-11.0006
2484	C=C(C)C(=O)CC1=C(C)C=C(OC2=CC(CO)=CC(OC)=C2)C=C1OC	-9.4596
2485	COC(=O)/C=C/[C@]1(O)C=CC(=O)C1	-10.0478
2486	CCC[C@H]1OCC2=C([C@@H](O)[C@@H](O)CC2=O)[C@@H]1O	-10.4368
2487	COC(=O)C1=CC(OC)=C(Cl)C(O)=C1C(=O)C1=C(O)C=C(C)C=C1O	-10.5983
2488	C=C(C)C(=O)CC1=C(C)C=C(OC2=CC(O)=CC(CO)=C2)C=C1OC	-9.5406
2489	C=C(C)C(=O)CC1=C(C)C=C(OC2=CC(C)=CC(OC)=C2)C=C1OC	-8.9175
2490	CC/C=C1/C=CC(=O)[C@H](O)[C@]12C(=O)N(OC)[C@](C)(O)[C@@H]2O	-10.4472
2491	CC(C)=CCC1=CC=C(O)C2=C1C(C1=CC(C)=CC3=C1O[C@H](C(C)(C)O)CO3)=NC2=C1N=C(C2=CC(C)=CC3=C2O[C@H](C(C)(C)O)CO3)C2=C(CC=C(C)C)C=CC(O)=C12	-9.4385
2492	CC(C)[C@@]1(C(=O)O)OC(=O)/C(=C/C2=CC=CC=C2)O1	-9.5200
2493	C=C(C)[C@H]1CCC2=CCC[C@@H](C)[C@]2(C)C1	-9.0886
2494	O=C1[C@@H]2C[C@@H](O)CN2C(=O)[C@@H]2CCCN12	-9.7422

2495	O=C(CCC1=CC=C(O)C=C1)NCC1=CC=CC=C1	-8.6278
2496	CCCCOC(=O)C(C)C	-9.1042
2497	CC(=O)C1=CC=C(C(C)=O)C=C1	-9.1721
2498	CCCCOC(=O)CC(CC(=O)OCCCC)(OC(C)=O)C(=O)OCCCC	-9.9495
2499	CCCC(=O)OCC1=CC=CC=C1	-8.7037
2500	N[C@@H](CC1=CC=CC=C1)C(=O)N1CCC[C@H]1C(=O)O	-10.2852
2501	CCCCCCCCC(OC)OC	-8.6528
2502	O=S(O)(O)=S	-8.6933
2503	COC(OC)C1=CC=CC=C1	-8.8324
2504	CC1=CC=CC(C)=N1	-7.9628
2505	CC1(C)C=CC2=C3NC4=C(C(=O)[C@]56NC(=O)[C@@]7(CCCN7C5=O)C[C@@H]6C4(C)C)C3=CC=C2O1	-9.9183
2506	C=CC(C)(C)[C@@]1(C[C@@H](NC(=O)[C@@H](O)CC2=CC=CC=C2)C(=O)OC)C(=O)NC2=C(O)C=CC=C21	-8.9335
2507	C[C@H]1O[C@@H]2OC(=O)[C@]3(C)C[C@@H]4C5C(=C1O[C@H]5C=C1C(=CC(=O)OC1(C)C)[C@@]41CO1)[C@H]23	-9.8626
2508	C=C(CC[C@@H](C)[C@H]1CC=C2C3=C([C@@H](O)[C@H](OC(C)=O)[C@@]21C)[C@@]1(C)C[C@@H](O)[C@H](O)C(C)(C)[C@@H]1CC3)C(C)C	-10.6292
2509	C/C=C/[C@@H]1C(C)=C[C@@H]2C[C@](C)(O)CC[C@H]2[C@]1(C)/C(O)=C1/C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C1=O	-10.9463
2510	COC1=CC(=O)C(Cl)=C(C)C1=O	-9.5475
2511	COC(=O)[C@@]12OC3=C(C4=CC=C5O[C@]6(C(=O)OC)C(=C(O)C5=C4O)C(=O)C[C@H](C)[C@@H]6O)C=CC(O)=C3C(O)=C1C(=O)C[C@H](C)[C@H]2O	-10.6498
2512	CC1(C)CCC(=O)C2OC3C[C@@]21CC=C3CO	-10.7923
2513	CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCC(C)(O)[C@H]1CC[C@@](C)(O)[C@H]2CC[C@@H](C)[C@H]2C1	-10.2779
2514	COC1=CC(O)=C2C(=O)C(C)=C(CC(C)O)C(=O)C2=C1O	-10.9530
2515	CC1OC(=O)[C@@H](C)NC(=O)[C@@H](CC(N)=O)NC(=O)[C@@H]([C@H](C)O)NC(=O)C(CC2=CC=C(O)C=C2)NC(=O)[C@@H](C(C)C)NC(=O)[C@H]1NC(=O)CC(O)CCCCCCCCCCCCN=C(N)N	-10.4413
2516	CS[C@H]1C2=CC=CC=C2O[C@]12C(=O)N1O[C@]3(CCC=CC3=O)[C@@H](O)[C@@]1(SC)C(=O)N2C	-10.2048
2517	CS[C@H]1C2=CC=CC=C2O[C@@]12C(=O)N1O[C@@]3(CCCCC3=O)[C@H](O)[C@]1(SC)C(=O)N2C	-10.5370
2518	COC(=O)C1[C@H](/C=C(\CO)C(=O)O)[C@@H](C(C)C)CC[C@@]1(O)COC(=O)/C(=C/[C@@H]1[C@@H](C(C)C)CC[C@@](O)(CCl)[C@H]1C(=O)OC)CO	-10.2226
2519	CCCCCCC1C(=O)OC(C)C(O)C=CC=CC=CC=CC=C(C)C(O)C(O)C(O)CC(O)CC(O)CC(O)CC(O)CC1O	-9.8671

2520	C/C=C/CCC(=O)C1=C(O)[C@@]2(C)[C@H]3C(C(=O)CC/C=C/C)=C(O)C(C)=C(O)[C@@]3(C)O[C@@]2(O)[C@@](C)(O)C1=O	-9.5271
2521	COC1=CC(O)=C2C(=O)O[C@@]3(C2=C1)[C@H](O)[C@@H](O)C[C@@H]3C	-10.6401
2522	COC1=CC(O)=C2C(=O)O[C@@]3(C)C[C@@]4(O)C[C@@](O)(C(=O)O)O[C@H]4C=C3C2=C1	-11.1127
2523	CO[C@@H]1CC(=O)C23OC2([C@@H](O)[C@H]2O[C@H]2C32OC3=CC=CC4=CC=CC(=C34)O2)[C@H]1O	-10.3138
2524	COC(=O)C(O)CCOC(=O)C1=C(C)C=C(O)C=C1O	-10.4862
2525	CC(C)C(C)(O)C=C[C@@H](C)[C@H]1CCC2=C3C=CC4=CC(=O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@@]21C	-10.4240
2526	CC(C)(O)[C@H](O)[C@H]1O[C@H]2[C@H]3O[C@@]34[C@H](CC[C@@]3(C)[C@@]4(O)CC[C@H]4CC5=C(NC6=CC=CC=C56)[C@@]43C)O[C@@H]2C(C)(C)O1	-10.4594
2527	C=CC(C)(C)C1=NC2=CC=CC=C2C1=CC1=C(O)N(O)C(=O)C(=O)N1O	-9.5740
2528	CC[C@H](C)[C@@H]1NC(=O)[C@@H]2[C@@H](C)CCN2C(=O)[C@@H](CC(C)C)OC(=O)CCNC(=O)[C@H](C)N(C)C(=O)[C@H]([C@@H](C)CC)N(C)C1=O	-10.0567
2529	O=C(O)C1=CC=C(OC[C@H](O)CCO)C=C1	-10.4639
2530	COC(=O)C(=CC1=CC=C(OC=O)C=C1)C(=O)C(C)C	-9.9964
2531	COC1=CC(=O)OC(C(O)CCCCO)=C1	-10.6274
2532	C=C1CC[C@@]2(O)C[C@]1(O)[C@H](C)C(=O)[C@H]2C=C(C)C	-11.1507
2533	COC1=CC2=C(C(O)=C1CC(C)C1=CC=CO1)C(=O)C=C(C)O2	-9.7662
2534	CC=CC=CC(=O)C1=C(C)C(=O)C(=O)C(C)=C1O	-10.0989
2535	CCC(C)CCCCCCCCC1CC(=O)N[C@@H](CC(N)=O)C(=O)N[C@H](CC2=CC=C(O)C=C2)C(=O)N[C@H](CC(N)=O)C(=O)N[C@@H](CCC(N)=O)C(=O)N2CCC[C@H]2C(=O)N[C@H](CC(N)=O)C(=O)N[C@@H](CO)C(=O)N1	-10.5696
2536	C[C@H]1CC[C@@H](O)[C@@]2(O)C[C@H]3OC(=O)C(CO)=C3C[C@]12C	-10.7860
2537	CC1=C(CCOC(=O)C(C)O)SC=N1	-9.8304
2538	NC(=O)C1=CNC2=CC=CC=C2C1=O	-8.4820
2539	COC1=C(C(CC(C)C)OC)C=CC(O)=C1C(=O)C1=C(O)C=C(C)C=C1C=O	-10.1796
2540	COC1=C(C(CC(C)C)OC(C)=O)C=CC(O)=C1C(=O)C1=C(O)C=C(C)C=C1C=O	-10.2778
2541	CCCCC1=CC=C(C(=O)O[C@@H](C)[C@@H](C)O)N=C1	-9.7400
2542	CN1C(=O)[C@@]23SS[C@H]4C5=CC=CC=C5O[C@]41C(=O)N2O[C@]1(CCC=CC1=O)[C@H]3O	-10.1224
2543	O=C1C[C@@H]2[C@@H](OC=C[C@H]2O)O1	-9.6832
2544	C=CC(C)(C)C1=C(C=C2NC(=O)CNC2=O)N=CN1	-10.1064

2545	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(O)C4=C(C=C3C(=O)C2=C1)CC(C)(O)CC4O	-10.6244
2546	C=C(C)C(O)CC1=CC=C2OC3=C(O)C=C(C)C=C3COC(=O)C2=C1OC	-9.6503
2547	COC1=C(C(CO)C(C)C)C=CC2=C1C(=O)OCC1=CC(C)=CC(O)=C1O2	-10.3515
2548	COC1=C(C=CC(C)(CO)OC)C=CC2=C1C(=O)OCC1=CC(C)=CC(O)=C1O2	-10.0943
2549	C=C(C)C(CO)C1=CC=C2OC3=C(O)C=C(C)C=C3COC(=O)C2=C1OC	-9.7146
2550	CC1=C[C@@H]2[C@@H]3[C@H](CC(=O)[C@]24C(=O)N[C@@H](CC(C)C)[C@@H]4[C@@H]1C)[C@H]1C[C@@H](CO)C[C@]3(C)O1	-11.3598
2551	COC1=CC=CC(C=CCO)=C1CO	-9.8855
2552	COC1=C(Cl)C2=C(C[C@H](C)O2)C(C(=O)O)=C1Cl	-10.4574
2553	C[C@@H]1[C@@H](O)[C@]2(C)C(=O)C=CC3=CC(=O)[C@@]1(O)C[C@@]32C	-10.7159
2554	CCCC(=O)C1=C(O)C=CC([C@H]2CC[C@@H](O)C3=CC=CC(OC)=C32)=C1O	-10.0916
2555	CC1=CC2=C(C)C(O)=C3C(=O)CC[C@@H](O)C3=C2O1	-11.1632
2556	CC1=C2[C@](C)(CC1=O)[C@@H](O)[C@H]1CC(C)(C)C[C@@]21O	-11.2171
2557	COC(=O)C(C)COC(CC(OC)C(=O)OC)C1=C(O)C=CC(C(C)=O)=C1O	-10.5706
2558	CC=CC1=CC(=O)C2=C(C)C=C(O)C=C2O1	-10.1950
2559	CC=CC1=CC2=C(C=N1)C(=O)C1(C)OC(=O)C(=C(O)CCCCC)C1=C2	-9.8030
2560	CCCC1CCCCCC(O)CC(=O)NC2CSSCC(NC2=O)C(=O)O1	-10.6992
2561	CC1=C2C(=CC3=C1C(CO)=CS3)C(=O)CC[C@@H]2C	-10.6478
2562	C=C(C)C[C@@H](O)C1=CC(C(=O)O)=CC=C1O	-10.7720
2563	CCOCC1=C(O)C=C(C)C2=C1OC1=CC3=C(C(C)=C1OC2=O)C(O)C(O)C(C)(C)O3	-10.7913
2564	COC1=CC=C(C(=O)O)C=C1CC=C(C)C(=O)O	-10.6066
2565	CCOCC1=C(O)C=C(C)C2=C1OC1=CC3=C(CC(O)C(C)(C)O3)C(C)=C1OC2=O	-10.5526
2566	C=CC(C)(C)C1=C(C=C2NC(=O)C3(O)CCCN3C2=O)C2=CC=CC=C2N1	-9.5742
2567	C=C1C(OC)=CC(=O)[C@]1(C)CO	-9.8507
2568	C=C1C(OC)=CC(=O)[C@@]1(C)CO	-9.8507
2569	C=CC(C)(C)C1=C(C=C2NC(=O)C3=CCCN3C2=O)C2=CC=CC=C2N1	-8.9173
2570	C[C@H]1C=C(CCC(=O)O)C(=O)O[C@H]1/C=C/C=C/C(=O)O	-9.9963
2571	CC(C)[C@H]1NC(=O)[C@H]2CCCN2C1=O	-9.6438
2572	CC(C)[C@@H]1NC(=O)[C@H](CC2=CC=CC=C2)NC1=O	-9.6844
2573	CC1=CC(O)=C2C(=O)OC(O)C3=C2C1=C(O)C(O)=C3O	-10.5888

2574	COC1=CC(O)=C2C3=C(C(=O)OC2O)C(O)=CC(C)=C13	-10.7817
2575	COC1=CC(O)=C2C3=C(C(=O)OC2O)C(O)=C(O)C(C)=C13	-10.8162
2576	CCC(CO)CCC1=CC(=O)C(C(=O)O)=CN1CCO	-10.1226
2577	C/C=C(/C)C(=O)O[C@@H]1[C@@H](O)[C@@H](O[C@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]2OC(=O)/C(C)=C\C)O[C@H](CO)[C@H]1O	-10.7771
2578	CC(C)[C@@H]1N[C@@H](C(C)(O)C[C@@H]2C(=O)N[C@H](C)C3=NC4=CC=CC=C4C(=O)N32)N(C2=CC=CC=C2)C1=O	-8.7271
2579	CS[C@@]1(CO)C(=O)N(C)[C@@](CC2=CN([C@]34C[C@@]56SS[C@@](CO)(C(=O)N5[C@H]3NC3=CC=CC=C34)N(C)C6=O)C3=CC=CC=C23)(SC)C(=O)N1C	-8.7776
2580	COC(=O)C1=CC(OC)=C(O)C2=C1C(=O)C1=C(C[C@@H](C)OC1)O2	-11.1473
2581	C[C@]12C(=O)C(=C(O)C=CC=CCO)[C@H](C[C@H]1C1=CC=CC=C1)[C@@](C)(O)C2=O	-9.0623
2582	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC3=CC(O)=C(O)C(C4=C(O)C(O)=CC5=C4C4=CC(OC)=CC(O)=C4C(=O)O5)=C3C2=C1	-9.9423
2583	C=CC(C)(C)[C@@]1(C[C@@H](NC(=O)[C@@H](O)CC2=CC=CC=C2)C(=O)O)C(=O)NC2=C(O)C=CC=C21	-9.1463
2584	C=C1[C@H](CC2=CNC3=CC=CC=C23)CC[C@H]2[C@](C)(CCC=C(C)C)[C@@H](O)CC[C@]12C	-8.9675
2585	CC1(C)OC(=O)[C@@H](O)[C@@H]1O[C@H]1CC[C@@]2(C)C(CC[C@H]3CC4=C(NC5=CC=CC=C45)[C@@]32C)C1=O	-10.0062
2586	CC(C)(O)[C@H](O)CC1=CC=CC2=C1C1=C(N2)[C@@]2(C)[C@@H](CC[C@@]3(O)[C@@]45O[C@@H]4[C@H](O)[C@@H](C(C)(C)O)O[C@H]5CC[C@@]32C)C1	-10.4727
2587	COC1=CC(O)=CC(C)=C1CC1=C(O)C=C(C)C2=C1OC1=C(C)C=C(O)C(C)=C1OC2=O	-9.3160
2588	CC(C)(O)[C@@H](O)[C@H]1O[C@H]2[C@H]3O[C@@]34[C@H](CC[C@@]3(C)[C@@]4(O)CC[C@H]4CC5=C(NC6=CC=CC=C56)[C@@]43C)O[C@@H]2C(C)(C)O1	-10.4442
2589	CC(C)(O)[C@@H]1C[C@@H](O)[C@]2(C(=O)O)[C@H](CC[C@@]3(C)[C@H]2CC[C@H]2CC4=C(NC5=CC=CC=C45)[C@@]23C)O1	-10.8358
2590	COC1=CC(C)=C(CC2=C(O)C=C(C)C3=C2OC2=C(C)C=C(O)C(C)=C2OC3=O)C(O)=C1	-9.2990
2591	CC(C)=CCOC1=CC=C(C[C@@H]2NC(=O)[C@H](C(C)C)N(C)C(=O)[C@H](CO)NC(=O)[C@@H]3CCCN3C(=O)[C@@H](CC3=CC=CC=C3)OC(=O)[C@H](C)N(C)C2=O)C=C1	-9.4829
2592	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@@]23[C@H]2[C@H]4[C@@H](C[C@H](C)C=C(C)[C@@H]4C[C@H]3O)O[C@H]12	-9.9365

2593	CC(=O)N1C2=CC=CC=C2[C@@]2(N3C=C(C[C@@]45SS[C@@](CO)(C(=O)N4C)N(C)C5=O)C4=CC=CC=C43)C[C@@]34SS[C@@](CO)(C(=O)N3[C@@H]12)N(C)C4=O	-8.6368
2594	C=C/C=C/C=C/[C@@H]1O[C@H](C)CC1=O	-9.4957
2595	C=C/C=C/C=C/[C@H]1O[C@H](C)CC1=O	-9.4877
2596	COC(=O)[C@]1(CC2=CC=C(O)C(C[C@@H](O)C(C)(C)O)=C2)OC(=O)C(OC)=C1C1=CC=C(O)C=C1	-10.0448
2597	CC(C)[C@@H]1CC[C@](O)(CCl)[C@@H]2C(=O)OCC(C(=O)OC[C@@]3(O)CC[C@@H](C(C)C)[C@@H]4C=C(C(=O)O)COC(=O)[C@H]43)=C[C@H]21	-9.9500
2598	CCC(C)CC(C)/C=C(/C=C(C)/C=C/C=C/C=C/C=C/C=C/C=C/C1=CC(O)=C([C@@H]2O[C@H](CO)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]2O)C(=O)O1)C(=O)O	-9.7965
2599	CC(C)=CCC/C(C)=C/CC/C(C)=C/CC12O[C@@H]1C(=O)C(COC(=O)CC(C)(O)CC(=O)O)=CC2=O	-9.7134
2600	CC(C)[C@@H]1N[C@@H](C(C)(O)C[C@@H]2C(=O)N[C@@](C)(O)C3=NC4=CC=CC=C4C(=O)N32)N(C2=CC=CC=C2)C1=O	-8.7006
2601	CC(=O)O[C@H]1C(=O)/C=C\C(=O)[C@@]23C(=O)N[C@@H](CC4=CC=CC=C4)[C@@H]2[C@H](C)[C@@]2(C)O[C@H]2[C@@H]3/C=C\C[C@H](C)/C=C\1C	-8.4825
2602	C[C@@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H](O)[C@H](O)C[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C=C3C(=O)N(CCO)CC3=C1O2	-11.3436
2603	C/C=C1\NC(=O)C(C(=O)[C@]2(C)[C@H](/C=C/C)C(C)=C[C@@H]3C[C@](C)(O)CC[C@H]32)=C1O	-10.7006
2604	CC[C@H](C)C=C(C)C=CC1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@@](C)(OC(C)=O)C(=O)C2=CN1CCCCN1C=C2C(=O)[C@](C)(OC(C)=O)C(=O)C(Cl)=C2C=C1C=CC(C)=C[C@@H](C)CC	-8.4909
2605	CO[C@@H]1[C@@]23NC(=O)[C@]4(CCCN4C2=O)C[C@H]3C(C)(C)[C@@]12NC1=C(C=CC3=C1C=CC(C)(C)O3)C2=O	-9.8979
2606	CC1=CC[C@H]2C(C)(C)CCC[C@]2(C)[C@H]1C[C@@]12O[C@@H]1[C@@H](O)C(CC1=C(O)C=C(C)OC1=O)=C[C@H]2O	-10.3015
2607	COC1=CC=C(C2=CC(OC)=C(C3=CC=C(OC)C=C3)C(O)=C2O[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]2O)C=C1	-9.8903
2608	CO[C@@H]1[C@@]23NC(=O)[C@]4(CCCN4C2=O)C[C@H]3C(C)(C)[C@]12C(=O)NC1=C2C=CC2=C1C=CC(C)(C)O2	-9.7757
2609	C[C@@H](O)CCCCCC[C@@H]1OC(=O)C[C@H]1O	-10.0813
2610	C=C[C@@H](O)C1=CC=C2C[C@H](C(C)(C)O)OC2=C1CO	-10.5360
2611	C=CC(C)(C)C1=C(C=C2NC(=O)[C@@]34[C@@H](CCN3C2=O)[C@@H]2CCN3C(=O)/C(=C/C5=C(C(C)(C)C=C)NC6=CC=CC=C56)NC(=O)[C@@]234)C2=CC=CC=C2N1	-8.6419

2612	C=C(C)[C@@H]1CC[C@]2(C)[C@H](CC=C(C)[C@]23OC2=C(C(=O)OC(C4=CC=CN=C4)=C2)[C@@H]3O)[C@@]12CCC(=O)OC2	-9.2805
2613	C=CC(C)(C)C1=C(C=C2NC(=O)[C@]34[C@H](CCN3C2=O)[C@H]2CCN3C(=O)/C(=C/C5=C(C(C)(C)C=C)NC6=CC=CC=C56)NC(=O)[C@]234)C2=CC=CC=C2N1	-8.6419
2614	COC(=O)C1=C(O)C=C(OC(=O)C2=C(C)C(OC)=C(C)C(OC(=O)C3=C(C)C=C(O)C=C3O)=C2C)C(C)=C1C	-9.8448
2615	C=C(C1=C(CO)C(OC)=CC(=O)O1)[C@@H](C)O	-10.2831
2616	COC(=O)[C@]1(CC2=CC(CC=C(C)C)=C(O)C(OC)=C2)OC(=O)C(O)=C1C1=CC=C(OC)C=C1	-9.7007
2617	CC1=CC(O)=C(C=O)C2=C1C(=O)OC1=C(C=C3OC(C)(C)C=CC3=C1C)O2	-10.7033
2618	CC(C)=CCC1=CC=C(O)C2=C1C(=O)C1=C(OC2)C(C)=CC2=C1O[C@@H](C(C)(C)O)CO2	-9.4511
2619	CC1=CC(O)=C(C)C2=C1OC1=C(CC3=C(C)C4=C(O[C@@]5(C)OC[C@H](C)[C@H]5C4)C(C)=C3O)C(O)=CC(C)=C1C(=O)O2	-9.0008
2620	CC(=O)O[C@H]1C[C@@]2(C)[C@@H](CC[C@H]3[C@@]4(C)C=CC(=O)[C@@H](C)[C@@H]4[C@H](O)C(=O)[C@@]32C)/C1=C(\CCC=C(C)C)C(=O)O	-10.1502
2621	CC(=O)O[C@H]1C[C@H]2[C@@H]3CC=C4C[C@@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3[C@@H](O)C[C@]2(C)[C@H]1[C@H](C)/C=C/[C@H](C)C(C)C	-10.7700
2622	O=C1OCC2=CC(O)=C(O)C=C2C2=CC(O)=CC(O)=C12	-9.9707
2623	COC1=CC(O)=C(Cl)C2=C1C(=O)O[C@H](C)C2	-10.3328
2624	COC(=O)C1=CC(O)=CC2=C1C(=O)C(CO)=C(C[C@H](C)O)O2	-10.7401
2625	CCC[C@H](O)C1=C(C)C(=O)C[C@H]1C	-10.0781
2626	CC1=CC(O)=C(C(=O)O)C2=C1C(=O)OC1=C(C)C3=C(C(=O)OC3)C(O)=C1O2	-10.6899
2627	COC1=CC(=O)OC(C(=O)CC(C)C)=C1	-10.3463
2628	CCCCCC=CC1=C(COC(C)=O)[C@@H]2OC(C)(C)[C@@H](O)C[C@@]23O[C@H]3[C@@H]1O	-10.8917
2629	C[C@@H]1C=CC(=O)[C@@]2(C)CC[C@@H]3[C@@H]4[C@@](C)(CC[C@@]4(C)CO)C[C@@]132	-11.1317
2630	CC1=CC(O)=CC(OC2=CC(C)=CC(O)=C2CC2=C(O)C=C(C)C3=C2OC2=C(C)C=C(O)C(C)=C2OC3=O)=C1	-9.0378
2631	CC(C)=CCOC(C)(C)[C@@H]1C[C@@H](O)[C@]2(C(=O)O)[C@H](CC[C@@]3(C)[C@H]2CC[C@H]2CC4=C(NC5=CC=CC=C45)[C@@]23C)O1	-10.3370
2632	C[C@H]1[C@H]([C@](C)(O)CCC(O)C(C)(C)O)CC[C@@]1(C)O	-10.6046
2633	CO[C@@]1(C)OC(=O)C(C)=C1CO	-9.9846
2634	CC=C[C@H]1CC2=C(CO1)C(=O)[C@@](C)(OC(C)=O)[C@H](OC(=O)C1=C(C)C=C(OC)C=C1O)C2	-10.5320

2635	CC(C)[C@@H]1CC[C@H](C)[C@@]12CC=C(CO)[C@H](O)C2	-10.8849
2636	OC1C=C[C@@H](O)C23OC12C1(OC2=CC=CC4=CC=CC(=C24)O1)[C@H]1O[C@H]1[C@H]3O	-9.5800
2637	COC1=C2C3=CC(OC)=CC(O)=C3C(=O)O[C@]2(C)CC1=O	-10.5997
2638	C[C@@H]1CC(=O)C2=C(O1)O[C@]1(C)CC[C@H]3C(C)(C)[C@H](O)C[C@H](O)[C@]3(C)[C@H]1C2	-11.3056
2639	CC[C@@H](C)C[C@H](O)C1=CC(=O)C(CO)=CO1	-10.1494
2640	CCC[C@@H]1[C@H]2C(=O)OC(=O)[C@@]23CC[C@@]12C(=O)OC(=O)[C@@H]2C[C@H](C)[C@H]3O	-10.2518
2641	CC(C)[C@H]1CCC2=COC3=C2C1=CC(C(=O)O)=C3	-10.8246
2642	CC(C)[C@H]1CC[C@@H](C)[C@]2(O)CCC(C(=O)O)=C[C@H]12	-10.9056
2643	C=C/C=C/C=C/[C@@H]1O[C@H](C)C[C@@H]1O	-9.7321
2644	COCC1=C(O)C=CC2=C1OC=C(C1=CC=C(O)C=C1)C2=O	-10.1495
2645	CCCCCC1=CC(O)=C(CCCC)C(O)=C1[C@@H]1O[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]1O	-10.9500
2646	CC(C)=C1C[C@@]2(C)C(=CC1=O)CC[C@@H](OC(=O)C(C)C(O)/C=C/C=C/CC(C)O)[C@@H]2C	-10.2964
2647	COC1=CC(C)=CC(O)=C1C(=O)C1=C(OC)C=C(O)C=C1C(=O)O	-10.7983
2648	CC(=O)O[C@@H]1C[C@H]2O[C@@H]3C[C@@H](CO)CC[C@]3(C)[C@]1(C)[C@]21CO1	-11.2075
2649	CC1=CC(O)=CC(OC(=O)C2=C(C)C=C(O)C(C)=C2O)=C1	-10.3950
2650	CC(C)[C@H]1CC[C@@](O)(CCl)[C@@H](C(=O)O)[C@@H]1/C=C(\CO)C(=O)O	-10.3961
2651	COC(=O)C[C@H](O)C[C@H](O)CC[C@H]1[C@@H](C)C=CC2=C[C@H](C)CC[C@@H]21	-10.7063
2652	CC1=CC=C(O)C2=C1[C@@H](O)[C@@H](C)OC2=O	-10.3287
2653	CC(C)[C@H]1CC[C@@](O)(COC(=O)/C(=C/[C@@H]2[C@@H](C(C)C)CC[C@@](O)(COC(=O)/C(=C/[C@H]3C4=C(CC[C@@H]3C(C)C)COC4=O)CO)[C@H]2C(=O)O)CO)[C@H]2C(=O)OCC(C(=O)O)=C[C@H]12	-9.5750
2654	COC1=CC(O)=C2C(=O)O[C@@]3(C)C[C@@H](O)[C@H](O)C[C@@H]3C2=C1	-10.8360
2655	CC1=C(C)C2=CC(=O)C3=C(C(=O)C4=C(C=C(C)O4)C3=O)[C@@]2(C)CC1=O	-9.6364
2656	CCC/C=C/[C@H]1C=CC(=O)[C@H](O)[C@H]1C(=O)C(C)O	-10.3311
2657	CCC/C=C/[C@H]1C=CC(=O)[C@H](O)[C@@H]1C(=O)C(C)O	-10.3311
2658	CCCC[C@@H]1OC(=O)C2=C(OC)C=CC=C21	-9.8420
2659	COC1=CC=C(C2=CC3=C(C[C@]4(O)[C@@]5(C)C(=O)C[C@@H](O)C(C)(C)[C@]5(O)CC[C@@]4(C)O3)C(=O)O2)C=C1	-10.4793

2660	CC1=C(O)C(C=O)=C2COC(=O)C2=C1O	-10.4407
2661	C/C=C/CC[C@H](O)CC1=CC(O)=C(C)C(=O)O1	-10.1481
2662	CC[C@H](C)C[C@H](C)/C=C(\C)C1=CC(O)=CC(=O)O1	-10.8352
2663	CC[C@H](C)C[C@H](C)/C=C(\C)C1=CC(=O)C=C(OC)O1	-10.9311
2664	CCCCC1=CC=C(C(=O)O[C@@H](C)[C@H](C)O)N=C1	-9.7560
2665	C[C@@H]1C(=O)C=CC2=CC(=O)[C@H]([C@@H](C)C(=O)O)C[C@@]21C	-10.3712
2666	COC(=O)C1=CC(O)=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(CO)C=C1O2	-10.8980
2667	CC[C@H](C)/C=C(C)/C=C/C1=CC2=C(C=N1)C(=O)[C@](C)(OC(C)=O)C(O)=C2Cl	-9.6024
2668	CC1(C)C=CC2=C(C=CC3=C2N[C@@]24N5C(=O)[C@@H]6CCCN6C(=O)[C@@H]5C[C@@]32O[C@H](CO)C4(C)C)O1	-10.0230
2669	CC1=C2[C@@H]3CC(C)(C)C[C@@H]3[C@H](O)[C@@]2(C)CC1=O	-11.0028
2670	C[C@@H]1[C@@H]([C@](C)(O)C/C=C\C(C)(C)O)CC[C@]1(C)O	-10.4334
2671	C[C@H]1C[C@@H](O)[C@H]2C(=C3CC(C)(C)C[C@H]31)CO[C@H]2O	-10.5806
2672	CCCC1=C[C@H](CO)OC1=O	-9.6876
2673	O=C(O)C1=CC=CC2=C1C=CC1=C2ON=C1CCN1CCOCC1	-10.4435
2674	CCC=CC=C(CO)[C@@H](O)[C@@H]1CC[C@H](CO)O1	-10.2952
2675	C/C(=C\CC/C(C)=C/CC1=C(O)C=C(C)OC1=O)CC/C=C(\C)CC[C@H](O)C(C)(C)O	-9.7713
2676	CCC[C@@H]1C[C@H]2OC(=O)C3=C(C=C(OC)C(OC)=C3O)[C@@H]2O1	-10.8192
2677	CC1=CC(OC(=O)C2=C(C)C=C(O)C=C2O)=C(C)C(O)=C1C	-10.5367
2678	CC(C)=C1NC(=O)C(C(=N)C[C@H](O)C[C@H](C)O)=C1O	-10.8875
2679	CC1=CC(O)=C(C)C(OC(=O)C2=C(C)C=C(OC(=O)C3=C(C)C=C(O)C=C3O)C(C)=C2O)=C1	-9.8492
2680	CC1=CC2=CC=C3C(=O)[C@H](C(C)(C)O)OC3=C2CO1	-10.9582
2681	CC(=O)OCC1=C[C@@H]2[C@H](CCO)[C@@]1(C)CCCC2(C)C	-10.6322
2682	CCCC1=CC=C(O)C(O)=C1CO	-9.9931
2683	CC[C@@H](O)C1=CC=C2C[C@H](C(C)(C)O)OC2=C1CO	-10.8257
2684	C[C@H]1C[C@@H]2C3=C(O)C=CC=C3OC3=C2C(=CC=C3)O1	-9.7191
2685	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(C(=O)C2=C1)[C@H](O)[C@](C)(O)C[C@H]3O	-10.8038
2686	COC1=CC2=C(C=C1OC)C1=C(OC)C=C(C3=CC=C(O)C=C3)C(OC)=C1O2	-9.9582
2687	C/C=C/C=C/[C@@H]1CC2=CC=C(C)C(O)=C2C(=O)O1	-9.6278

2688	CO[C@H]1C2=C(C(=O)O[C@@H](C)[C@H]2O)[C@H]2CCC(=O)[C@H]21	-10.8128
2689	C/C=C/C=C/[C@@H]1CC2=CC(O)=C(C)C=C2CO1	-9.3429
2690	C[C@@]12C[C@H](O)C[C@@]3(C)[C@@H](C1)[C@@](O)(CO)CC[C@@]23C	-10.9599
2691	COC(=O)[C@@H](C[C@@H](O)C1=C(O)C=CC(C(C)=O)=C1O)OC	-10.7672
2692	CCOC(=O)[C@@H](C[C@H](OC)C1=C(O)C=CC(C(C)=O)=C1O)OC	-11.0835
2693	C[C@@]12CCC[C@@]3(C)[C@@H](C1)[C@@](O)(CO)CC[C@@]23C	-10.9414
2694	C[C@H]1OC(=O)C2=C(O)C=C(O)C=C2CCCCCC[C@H]1O	-10.4977
2695	O=C1C2=C(O)C=CC=C2O[C@H]2CC[C@@H](O)[C@@H]12	-10.4435
2696	COC1=CC(O[C@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]2O)=C2C(O)=C3C(=O)C=C(C)OC3=CC2=C1	-10.6399
2697	C=C(C)C(O)CC1=CC=C(O)C2=C1OC1=CC(C)=C3OC[C@@H](C(=C)C)[C@H](OC(C)=O)C3=C1C2=O	-9.8502
2698	CC(=O)N[C@H]1CCCNC(=O)/C=C(/C)CCOC1=O	-10.1563
2699	CC1=CC(O)=C(C)C2=C1OC1=C(COCCC3=CC=CC=C3)C(O)=CC(C)=C1C(=O)O2	-9.1307
2700	COC1=CC(O)=C2C(=O)[C@H]3CO[C@@](C)(O)C[C@H]3[C@@H](O)C2=C1O	-11.1024
2701	COC1=CC(O)=C2C(=O)O[C@]3(C)C[C@@H](O)[C@H](OC(C)=O)C=C3C2=C1	-10.8527
2702	CC(C)[C@@H](O)C(=O)N/C=C\C(=O)O	-9.5797
2703	COC1=CC(O)=C(C(=O)O)C(C2=CC(=O)OC(C(=O)O)=C2C)=C1	-10.4770
2704	OC1=CC=CC2=C1COCC=C2	-9.6033
2705	CC1=CC=C(O)C(COCC2=CC(C)=CC3=C2OC2=CC=C(C)C=C2C3)=C1	-8.8824
2706	CC(=O)OC1C(O)[C@@]2(C)CC[C@@H]1C(C)(C)O2	-10.7678
2707	COC(=O)[C@]1(O)C2=C(C=C(C)[C@@H]1O)OC1=CC=CC(O)=C1C2=O	-10.7142
2708	CCOCC1=C(O)C=C(C)C2=C1OC1=CC(O)=C(CC=C(C)C)C(C)=C1OC2=O	-9.8691
2709	COC1=CC=C(C(=O)O)C=C1CC[C@H](C)C(=O)O	-10.4043
2710	CO[C@H]1C2=C(OC(C)(C)CC2=O)[C@H]2O[C@H]2[C@@H]1O	-10.7071
2711	COC1=CC(C)=CC(OC2=CC(O)=CC(C)=C2CC=C(C)C)=C1	-9.5098
2712	COC1=CC(C)=CC(OC2=CC(C)=CC3=C2C[C@H](C(C)(C)O)O3)=C1	-10.4377
2713	COC1=CC(=O)[C@@](C)(CO)[C@H]1CO	-10.1830
2714	COC1=CC(=O)[C@@]2(C)CO[C@@H](O)[C@@H]12	-10.1418
2715	CCCCCCCC[C@@H](O)/C=C/C1=C(CO)[C@@H](O)[C@@H]2O[C@@H]2[C@@H]1O	-10.7058

2716	CC1=C2C[C@]3(C(=O)O)CC[C@@H](C(C)C)[C@H]3C[C@@H]2[C@@]23CC[C@@H](C)[C@@H]2CC[C@@]13C	-11.0978
2717	C/C=C/C=C/[C@@H]1OC(=O)C(CCC(=O)O)=C[C@@]1(C)O	-10.3295
2718	C[C@H]1C=C(CCC(=O)O)C(=O)O[C@H]1CCC(=O)O	-9.6728
2719	C/C=C/C=C/[C@@H]1OC(=O)C2=CC(C(=O)O)=CC(C3=CC=CC=C3)=C2[C@@H]1C	-9.9363
2720	COC(=O)[C@@]12C(=O)C(C)=C(O)[C@]1(C)C(C)=C[C@H]1[C@]3(C(=O)O)CC[C@H](OC(C)=O)C(C)(C)[C@H]3CC[C@@]12C	-10.1337
2721	CC(C)=C[C@H]1C[C@]2(C)[C@H](CC[C@@]3(C)[C@H]2CC[C@H]2CC4=C(NC5=CC=CC=C45)[C@@]23C)O1	-9.5275
2722	CC1=C(CCC(=O)O)COC1=O	-9.5988
2723	COC(=O)C1=C(N)C(=O)C=C(OC)[C@]12OC(=O)C1=C(O)C=C(C)C=C1O2	-10.6164
2724	CC(C)=CC[C@@]1(C[C@@H]2NC(=O)[C@@H]3CCCN3C2=O)C(=O)NC2=CC(O)=CC=C21	-9.8553
2725	CC[C@@H](C)CCC1=CC(=O)C(CO)=CO1	-9.9458
2726	COC(=O)CCOC(=O)C1=C(C)C=C(O)C=C1O	-10.7889
2727	CC1=C(C)C2=CC(O)=C(C)C(O)=C2C(=O)O1	-10.5759
2728	COC1=CC(=O)C2=CN(CCO)C(O)=C3C(=O)C=C(C)C1=C23	-10.4606
2729	CC1(C)C[C@H]2[C@@H](C1)[C@@]1(C)C(=O)[C@](C)(C[C@@H]1O)[C@H]2O	-11.1310
2730	C[C@@H]1CC[C@H]2[C@@H]1C[C@@H](C(C)(O)CO)CC[C@@]2(C)O	-10.6567
2731	CC[C@H](C)CCCCC(=O)C1=CN=C(N)N1	-9.2617
2732	C[C@H](CO)CCCCCC(=O)C1=CN=C(N)N1	-9.1817
2733	CCCCCC[C@@H](O)[C@@]1(C[C@@H]2C(=O)O[C@@H]3[C@H]2C(=O)O[C@@H]3CCCCCC)OC(=O)C(C)=C1C(=O)OC	-10.3468
2734	C[C@H]1CC[C@H]2[C@@H](C=C[C@H](C)[C@]2(C)C(=O)C2C(=O)[C@H]([C@@H](C)O)N(C)C2=O)C1	-10.5713
2735	C=C(C)[C@@H]1C[C@@]2(CO)C(=CC1=O)CC[C@@H](OC(=O)C(C)C(O)/C=C/C=C/CC(C)O)[C@@H]2C	-9.8996
2736	O=C1N[C@H](CC2=CNC3=CC=CC=C23)C(=O)N[C@H]1CC1=CC=C(O)C=C1	-8.7992
2737	COC(=O)C1=CC(O)=CC(OC)=C1OC1=CC(C)=CC(OC)=C1C(N)=O	-10.9721
2738	CC=CC=CC(O)=C1C(=O)[C@]2(C)C(=O)[C@](C)(O)[C@H]1C[C@H]2C1=CC=CC=C1	-8.9240
2739	O=C1OC(C=CC2=CC=CC(O)=C2)=CC2=C1[C@@H](O)C[C@H](O)O2	-9.7829
2740	CC1(C)C=CC(=O)C(C)(O)[C@]12CC[C@@](O)(CO)C(=O)C2	-10.9610

2741	CC[C@@H](C)C(=O)O[C@H]1C[C@@H](C)C=C2C=C[C@H](C)[C@H](CC[C@@H]3C[C@@H](O)CC(=O)O3)[C@H]21	-10.7118
2742	CCOCC1=C(O)C=C(C)C2=C1OC1=C(C)C=C(O)C(C)=C1OC2=O	-10.4621
2743	CC1=CC(O)=C(C)C2=C1OC1=C(COCC3=C(O)C=C(C)C4=C3OC3=C(C)C=C(O)C(C)=C3OC4=O)C(O)=CC(C)=C1C(=O)O2	-9.2519
2744	CC1=CC(O)=C(C)C2=C1OC1=C3COC(C)(C)OC3=CC(C)=C1C(=O)O2	-10.5510
2745	CC1(C)C[C@@H]1C1=C(C=O)C2=CC=CC=C2N1	-9.0339
2746	CCCCC(=O)C1=C(O)C=CC=C1O	-9.9754
2747	COC1=CC(=O)C=C2C=C(O)C3=C(O)C=C(C)OC3=C12	-10.8131
2748	CC1=C(O)C(CC2=C(O)C=C(C)C3=C2OC2=C(C)C=C(O)C(C)=C2OC3=O)=C(C)C(=O)C1=O	-9.7559
2749	CC1=CC(O)=C(C)C2=C1OC1=C(COC[C@@H]3C(=O)CC[C@H]3C)C(O)=CC(C)=C1C(=O)O2	-10.7226
2750	C[C@@H]1CC(=O)C2=C(O1)O[C@]1(C)CC[C@@]3(O)C(C)(C)[C@@H]4O[C@@H]4C(=O)[C@]3(C)[C@H]1C2	-10.9267
2751	O=C1O[C@@H](C(=O)O)CC2=CC=CC(O)=C12	-9.5472
2752	CC(C)[C@@H]1CC[C@H](C)[C@@]12C=C[C@@](O)(CO)[C@H](O)C2	-11.1470
2753	O=C1CC[C@]2(C[C@@H](O)C(=O)O2)C2=CC=CC(O)=C12	-10.1087
2754	CCCCC[C@H]1CC2=C(C)C(O)=C(C)C(O[C@@H]3O[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]3O)=C2CO1	-11.0312
2755	C[C@@H]1[C@@H]2C[C@H](C(C)(O)CO)CC[C@@](C)(O)[C@@H]2C[C@H]1O	-10.6560
2756	COC1=C2C3=CC(OC)=CC(O)=C3C(=O)O[C@@]2(C)CC1=O	-10.5970
2757	CCCCCCCCCCC[C@H](C)[C@@H]1CC(=O)N[C@H]([C@H](C)O)C(=O)N[C@H](C)C(=O)N[C@H](C)C(=O)N[C@H](CCC(N)=O)C(=O)N[C@H](CC2=CC=C(C)C=C2)C(=O)N[C@H]([C@@H](C)CC)C(=O)O1	-11.0417
2758	CCCCO[C@H]1O[C@H](C)[C@@H](O)C(=O)[C@H]1OC(=O)C1=C(C)C=C(O)C=C1O	-10.6152
2759	C[C@@H](O)C1=CC=C(C(=O)CCC(=O)O)O1	-10.0990
2760	C[C@@H](O)[C@@H]1OC(=O)C2=C(O)C=CC(C(=O)O)=C21	-10.7554
2761	COC1=CC=C(O)C2=C1C(=O)NC=C2C1=CC=CC=C1	-8.9951
2762	C=C1CC[C@@H](C(C)C)[C@@H]2C=C(C(=O)O)CC[C@@H]12	-10.3078
2763	CC[C@@H](C)C[C@@H](O)C1=CC(=O)C(CO)=CO1	-10.1677
2764	CC1=CC(O)=C(C)C(OC(=O)C2=C(C)C(C)=C(OC(=O)C3=C(C)C=C(O)C=C3O)C(C)=C2O)=C1	-9.8547

2765	C=C1CC[C@@H](C(C)C)[C@H]2C=C(C(=O)O)C[C@@H](O)[C@@H]12	-10.7900
2766	C[C@H](CO)[C@H]1CCC2=COC3=C2C1=CC(C(=O)O)=C3	-10.6369
2767	CC(C)[C@H]1CCC(=O)C2=CC(O)=C(C(=O)O)C=C21	-10.6443
2768	CC1(C)C=CC(=O)[C@]2(C)OC3(O)C[C@]12CCC3(O)CO	-10.9641
2769	CC(C)=CCOC1=CC(C)=CC(C(=O)C2=CC=CC(O)=C2C=O)=C1O	-9.7322
2770	CC1(C)CC[C@H](O)[C@](C)(O)[C@@]12CC=C(C=O)CC2	-11.2737
2771	C/C(=C\C=C\[C@H](O)[C@@H](C)O)[C@H](O)[C@H](C)C(=O)O[C@H]1C[C@H](CO)C[C@@H]2C=C[C@H](C)[C@](C)(C(=O)C(O)CO)[C@@H]12	-10.9600
2772	CC1(C)CCC(=O)[C@]2(C)OC3(O)C[C@]12CCC3(O)CO	-11.0782
2773	COC1=C(O)C(O)=CC(OC2=C(C)C(C)=C(OC3=C(C)C=CC=C3Cl)C(C)=C2Cl)=C1Cl	-9.5909
2774	O=C1CC2OC3CC[C@H](O)[C@H]1[C@@H]3C21OC2=CC=CC3=CC=CC(=C23)O1	-10.6080
2775	O=C(CCCCCCO)C[C@@H]1CC2=C(CC[C@H](O)C2=O)O1	-10.1722
2776	CCCCCC[C@H](O)[C@@H]1C[C@@H](OC(C)=O)C2=C(O1)[C@H](O)CCC2=O	-10.6777
2777	COC1=CC(O)=C2C(=O)O[C@@]3(C)C[C@H](O)[C@H](OC(C)=O)C=C3C2=C1	-10.8522
2778	COC(=O)[C@H](O)CS[C@H]1CC(=O)CCCCCC[C@@H](C)OC1=O	-10.4539
2779	CON1C=CC2=C(C1=O)[C@H]1[C@@H](C[C@H](C)C[C@@H]1C)[C@H](C)O2	-10.2242
2780	CC(=O)C1=C(O)C=C2OC3=C(C(N)=O)C(O)=CC(O)=C3[C@@]2(C)C1=O	-10.4437
2781	C/C(=C\C=C\[C@@H]1[C@H]2[C@H](C)[C@@H](O)[C@H](CO)C[C@@H]2C=C[C@@H]1C)C(=O)O	-10.7622
2782	CCCCC[C@H](O)CC1=CC(O)=C(C)C(=O)O1	-10.4193
2783	COC1=CC(C(N)=O)=C(N)C(O)=C1O	-9.9683
2784	CC[C@H](C)/C=C(\C)C1=CC(=O)C2=C(CC(=O)O)C=C(O)C=C2O1	-10.6341
2785	CC[C@H](C)/C=C(\C)C1=CC2=CC3=C(C(=O)[C@](O)(CC(C)=O)C(OC)=C3)C(O)=C2C=N1	-10.4865
2786	CC(=O)O[C@@H]1[C@@H]2O[C@H]2[C@H](C)C(=O)[C@@H](C)C/C=C\C2[C@@H]3O[C@]3(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@@]231	-9.2766
2787	CC[C@H](C)/C=C(\C)C1=CC2=C(C=O)C(O)=C3C(=O)[C@](O)(CC(C)=O)C(OC)=CC3=C2O1	-10.7163
2788	CC[C@H](C)/C=C(\C)C1=CC2=CC3=C(C(=O)[C@](O)(CC(C)=O)C(OC)=C3)C(O)=C2C(=O)O1	-10.3334
2789	CC1=C[C@@H]2C(=O)O[C@@H]3CC[C@H](C1)[C@]23O	-10.3478

2790	CC[C@@H]1C[C@H](C)[C@H](C(C)(O)/C=C/C(=O)N[C@H](CO)[C@@H](C)CC)O1	-11.0104
2791	CCCCC1=CC=C(C(=O)O[C@H](C)[C@@H](C)O)N=C1	-9.7677
2792	C=CC(C)(C)C1=C(C[C@@H]2NC(=O)[C@@H]3CCCN3C2=O)C2=CC=CC=C2N1	-9.5226
2793	C[C@@H]1C2C=CC=CC(O2)[C@@H]1/C=C1\C=CC(=O)O1	-9.7294
2794	C[C@]1(CCOS(=O)(=O)O)CC[C@H]2C(=CC[C@@H]3[C@]2(C)CCC[C@@]3(C)O)C1	-10.9040
2795	CC1=C(CO)C(=O)CC1	-9.6191
2796	CC(C)=CCC1=C(O)C=C2OC3=C(CO)C(O)=CC(C)=C3C(=O)OC2=C1C	-10.1609
2797	CC(=O)OCC1=C[C@H](/C=C(\COC(C)=O)C(=O)O)[C@@H](C(C)C)CC1	-10.6939
2798	C=CC=C[C@H]1OC[C@@H](CCC(=O)OCCCC)[C@@H]1O	-10.4645
2799	COC1=CC(O)=C2C(=O)O[C@@]3(C)C[C@H](O)[C@H](O)C[C@@H]3C2=C1	-10.8177
2800	COC(=O)[C@@]1(O)C(=O)C=C2C3=CC(OC)=CC(O)=C3C(=O)O[C@]21C	-10.7885
2801	COC1=CC(=O)C2=C(O)C3=C(C(O)=C2C1=O)[C@@H](O)[C@](C)(O)[C@H](O)[C@H]3O	-10.4351
2802	CC(=O)O[C@H](C)CCCCCC[C@@H]1OC(=O)C[C@H]1O	-10.4022
2803	CC[C@H](CO)C[C@H](C)C=C(C)C1=CC(=O)C=C(OC)O1	-11.2174
2804	C[C@@H]1[C@@H](C(C)(O)CCC(O)C(C)(C)O)CC[C@]1(C)O	-10.6032
2805	C[C@@H](O)CCCCCC=C1C=CC(=O)O1	-9.6534
2806	CCC(=O)C1=C(OC(C)(C)[C@H]2CO2)C(C)=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=CC=C1O2	-10.8188
2807	C=C(C#CC1=C[C@H](O)[C@H](OC)[C@@H](O)[C@H]1O)CCC=C(C)C	-10.5903
2808	C[C@H](O)CC1=C[C@H]([C@@H](C)O)OC1=O	-10.0511
2809	C=C(C(=O)O)[C@H]1CCC2=CC(=O)C[C@H](C)[C@@]2(C)C1	-10.2780
2810	COC1=CC2=C(C(=O)O[C@@H]3C[C@H](C[C@H](C)O)O[C@H]23)C(O)=C1OC	-10.9518
2811	CO[C@]1(C)OCCC2=C1OC1=CC(O)=C(O)C(C(=O)O)=C1C2=O	-10.9976
2812	CC(=O)C[C@@]1(O)C(=O)C2=C(O)C=CC(O)=C2C12OC1=CC=CC3=CC=CC(=C13)O2	-9.0873
2813	CCCC(=O)C1=C(O)C=CC2=C1OC1=CC=CC(O)=C1[C@@H]2C[C@@H](C)O	-10.3572
2814	CC(C)[C@@H]1NC(=O)C(C(=N)C[C@@H](O)C[C@@H](C)O)=C1O	-10.9004
2815	CCO[C@H](C[C@@H](OC)C(=O)OC)C1=C(O)C=CC(C(C)=O)=C1O	-10.9706

2816	C/C=C/C=C/[C@@H]1CC2=C(CO1)C(=O)[C@](C)(O)[C@@H](O)C2	-10.3060
2817	C[C@H](O)C/C=C/CCCCC1=CC2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.4012
2818	CCCC(=O)C1=CC2=C(C(=O)C(=O)C3=C(O)C=CC=C23)C(O)=C1C	-10.5429
2819	COC(=O)[C@H](O)C[C@H](OC)C1=C(O)C=CC(C(C)=O)=C1O	-10.7912
2820	CC(O)C(O)/C=C/C1=CC2=CC(=O)[C@@](C)(O)[C@H](O)[C@H]2CO1	-10.4649
2821	CC(C)=CCN1C=C(C[C@@H]2NC(=O)[C@@H]3CCCN3C2=O)C2=CC=CC=C21	-9.7463
2822	O=C1C[C@H](O)[C@H]([C@@H]2C[C@H](O)CCC23OC2=CC=CC4=CC=CC(=C24)O3)O1	-10.7186
2823	COC(=O)C1=C(O)C=C(OC(=O)C2=C(C)C(O)=C(C)C(OC)=C2C)C(C)=C1C	-11.3808
2824	CC(=O)CCC1=COC2=CC(O)=C(O)C=C2C1=O	-10.6002
2825	C=C(C)[C@@H]1C[C@@]2(C)C(=CC1=O)CC[C@@H](OC(=O)C(C)C(O)/C=C/C=C/CC(C)OC(C)=O)[C@@H]2C	-9.7179
2826	C=CC1=C([C@@H]2COC(=O)[C@H]2CC(=O)O)CC(C)(C)C1	-10.6911
2827	O=C1CC2(OC3=CC=CC4=CC=CC(=C34)O2)C2=C(O)C=CC(O)=C12	-9.0264
2828	COC1=CC(O)=C2C(=O)O[C@@]3(C)C[C@H](O)[C@@](O)(C[C@H](O)C(=O)O)C=C3C2=C1	-10.9570
2829	C[C@H]1C=CC(=O)[C@]2(C)CC[C@H]3[C@@H]4C(C)(C)C(=O)C[C@]4(C)C[C@]132	-10.5633
2830	C[C@H]1CCCCC[C@H](O)[C@@H](O)C[C@@H](SCCO)C(=O)O1	-10.2787
2831	COC1=CC(=O)C=C2C([C@H]3CC(=O)NC3=O)=C3OC(C)=CC(O)=C3C(O)=C12	-10.9983
2832	CCCCCCCC/C=C/[C@H]1OCC2=C1[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]2O	-10.6323
2833	CC(C)[C@]1(O)CC[C@](C)(O)[C@@H](O)C1	-10.4649
2834	CCCCCCCC[C@H](O)/C=C\C1=C(CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]1O	-10.6677
2835	CC(C)=CCC1=C(C)C=C2OC(C)(C)[C@@H](O)CC2=C1OC1=CC(C)=CC(O)=C1	-9.3884
2836	CCCCCCC[C@H]1OCC2=C(C=CC(O)=C2O)C1=O	-10.5940
2837	CC(=O)C[C@]1(O)C(=O)NC2=CC=C(CC=C(C)C)C=C21	-9.1607
2838	C=C(C)[C@@H]1CC[C@@]2(C)OC3=C(C[C@@H]12)C(=O)[C@@H]1C[C@@]3(O)CO1	-11.0183
2839	CC[C@H](C)C(=O)O[C@H]1CCC=C2C=C[C@H](C)[C@H](CC[C@@H](O)C[C@@H](O)CC(=O)O)[C@H]21	-10.6922
2840	CCCCCCCC[C@H](O)/C=C\C1=C(CO)[C@@H](O)[C@@H]2O[C@@H]2[C@@H]1O	-10.6959

2841	CCCCCCCC/C=C/[C@H]1OCC2=C1[C@@H](O)[C@H]1O[C@H]1[C@@H]2O	-10.6947
2842	COC(=O)C1=C(N)C(OC)=CC(=O)[C@]12OC(=O)C1=C(O)C=C(C)C=C1O2	-10.6849
2843	C/C=C/C=C(/CO)[C@@H](O)[C@@H](O)CCC	-10.1922
2844	C[C@@H]1C(=O)C=C2[C@@]1(C)[C@@H](O)[C@H]1CC(C)(C)C[C@@]21O	-11.0397
2845	COC(=O)NC1=CC=C(COC(=O)C(C)(C)C)C(NC(=O)OC)=C1	-10.1605
2846	C=C1[C@]23C(=O)O[C@@H](C)[C@]2(O)C(=O)O[C@@]1(C)[C@H](OC(C)=O)C1=C(C)[C@@]2(C=CC(=O)OC2(C)C)CC[C@]13C	-9.7718
2847	C=C(COC(C)=O)[C@@H]1CC[C@@]2(C)OC3=C(C[C@@H]12)C(=O)[C@]1(O)CO[C@H]3C1	-11.0457
2848	C/C(=C\C=C\[C@H](O)[C@@H](C)O)[C@H](O)[C@H](C)C(=O)O[C@H]1C[C@H](C)C[C@@H]2C=C[C@H](C)[C@](C)(C(=O)C(O)CO)[C@@H]12	-10.8987
2849	COC1=C(Cl)C(O)=CC2=C1C(=O)O[C@H](C)C2	-10.2270
2850	C[C@H]1C(=O)N2C3=CC=CC=C3[C@@]3(C[C@@H](N4C=NC5=CC=CC=C5C4=O)C(=O)O3)[C@@H]2N1C=O	-8.6649
2851	C/C=C/C1=C(/C=C/C)C(=O)[C@@]2(C1)C[C@@H](O)C(=O)O2	-10.2670
2852	CC1=C2C(=O)C[C@@]2(C)[C@@H]2C[C@@H]3C(=O)C[C@@H](C)[C@@]2(CC1)C3(C)C	-10.9206
2853	COC1=CC=CC2=C1[C@H](O)C[C@@H](C)O2	-10.2364
2854	COC(=O)C1=C[C@@H](C)C[C@H]2CC[C@@H](O)[C@@]12O	-10.4676
2855	CCCCCC1=CC(O)=C(CCCC)C(O)=C1[C@@H]1O[C@H](C)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]1O	-10.9353
2856	CO[C@H]1[C@@H]2[C@@H](O)O[C@]3([C@H](OC(C)=O)C/C(C)=C\[C@@H]1OC)[C@H]2CC3(C)C	-11.2322
2857	CC1=C2C(=O)C[C@@]2(C)[C@@H]2C[C@@H]3CC[C@@H](C)[C@@]2(CC1)C3(C)C	-10.4564
2858	C=C(C)C#CC1=CC(CO)=CC=C1OC	-9.9342
2859	C/C=C/C=C/C(O)=C1/C(=O)[C@@]2(C)C3/C(=C(O)\C=C\C=C\C)C(=O)[C@H]4C1[C@]1(C)O[C@@]4(O)[C@@]3(C)O[C@@]12O	-9.8313
2860	CCCCC1=CC=C(C(=O)O[C@H](C)[C@H](C)O)N=C1	-9.7833
2861	CN1C(=O)[C@@]2(O)NC(=O)[C@]1(C)SS[C@@H]2C1=CNC2=CC=CC=C12	-10.3800
2862	CC1(C)C=CC2=C(C=CC3=C2N[C@@]24N5C(=O)[C@]6(O)CCCN6C(=O)[C@@H]5C[C@@]32O[C@H](CO)C4(C)C)O1	-9.9964
2863	C=C(C(=O)O)[C@@H]1C[C@@H](CCCCCC)OC1=O	-10.2862
2864	C=C1CC[C@H]2[C@@](C)(CO)CCC[C@]2(C)[C@H]1CC1=C(O)C(=O)C(CO)=CC1=O	-10.8748

2865	CCC[C@H](O)C[C@@H](O)CC1=CC2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.7433
2866	CCCC(=O)C1=C(O)C=CC2=C1OC1=CC=CC(O)=C1[C@H]2C[C@@H](C)O	-10.3595
2867	CC(=O)OC(C)C/C=C/C=C/C(O)C(C)C(=O)O[C@@H]1CCC2=CC(=O)C(=C(C)C)C[C@]2(C)[C@H]1C	-10.0331
2868	C=CCC[C@H]1C=C(C(O)CC)C(=O)O1	-9.9309
2869	C=CCC[C@@H]1OC(=O)C2=C(OC)C=CC=C21	-9.7096
2870	CC[C@H](C)C=CC1=CC2=CC(O)=C(C)C(O)=C2C(=O)O1	-10.3962
2871	CCCCCCCC[C@@H](O)/C=C/C1=C(CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]1O	-10.6638
2872	C/C=C/C=C/[C@@H]1OC(=O)C(CCC(=O)O)=C[C@@H]1C	-10.0216
2873	CCCCCCCCC(=O)C[C@H]1OCC2=C1[C@@H](O)[C@H]1O[C@H]1[C@@H]2O	-10.7964
2874	COC1=CC(=O)[C@@](C)(CO)[C@@H]1CO	-10.1612
2875	C/C=C(/C)C(=O)O[C@H]1[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H](O[C@H]2O[C@H](CO)[C@@H](OC(=O)/C(C)=C\C)[C@H](O)[C@H]2O)O[C@@H]1CO	-10.6285
2876	COC1=CC=C(COC=O)C=C1	-9.2085
2877	O=C(O)CCCC1=CC=CN=C1	-8.8171
2878	C1=CC=C(SSC2=CC=CC=C2)C=C1	-8.6794
2879	C=CCOC(=O)CCCC	-8.8292
2880	CC=CC1=CC=C(OCC2=CC=CC=C2)C(OC)=C1	-9.6755
2881	CC1=CC=CN1	-7.5438
2882	O=C(O)CCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O	-9.7594
2883	CCCCCCCC=CC=CC=O	-8.7830
2884	CCCCCCCC=CC(=O)O	-9.3666
2885	NCCC(=O)N[C@@H](CC1=CN=CN1)C(=O)O	-9.5880
2886	CC(C)[C@H](N)C(=O)N[C@@H](CC1=CC=CC=C1)C(=O)O	-10.4918
2887	CC1=CC(=O)[C@H]2/C(CO)=C\C[C@@H]3[C@](C)(CC[C@@]34O[C@@H](/C=C(/C)CO)C[C@@H]4C)C[C@H]12	-11.1278
2888	CC(=CC=C1C[C@@H]2O[C@@H](C(C)(C)O)C[C@]23O[C@@H]3[C@@H]1O)CO	-10.9616
2889	CC1=C[C@H]2C[C@@H](C)CC[C@@H]2[C@@]2(C)C(=O)[C@@]3(C(=O)[C@H](CO)N(C)C3=O)[C@H](C=C[C@H](C)O)[C@@H]12	-10.3900
2890	C[C@H](CCCCCC[C@H](O)C=CC(=O)O)OC(=O)[C@H](O)CS[C@H]1CC(=O)[C@@H](O)CCCCC[C@@H](C)OC1=O	-10.3644
2891	C[C@H](CCCCC[C@H](O)[C@@H]1C=CC(=O)O1)OC(=O)[C@H](O)CS[C@H]1CC(=O)[C@@H](O)CCCCC[C@@H](C)OC1=O	-10.1816
2892	CC[C@H]1NC(=O)CNC(=O)[C@](C)(C(C)=O)NC(=O)[C@H](CC2=CNC3=CC=CC(OC)=C23)NC(=O)C2=CSC(=N2)[C@@H](C)NC(=O)CN(C)C(=O)/C(=C/CO)NC1=O	-9.3353

2893	C[C@H](/C=C/[C@H](C)C(C)(C)O)[C@H]1C[C@H](O)C2=C3C=CC4=CC(=O)CC[C@]4(C)[C@H]3C[C@@H](O)[C@@]21C	-10.7907
2894	C=C(C)[C@@H]1COC2=C(C)C=C3OC4=C(C[C@@H](OC(=O)C5=C(O)C=C(O)C=C5CC/C=C\C=C/CCC)C(C)(C)O)C=CC(O)=C4C(=O)C3=C2[C@H]1O	-9.9233
2895	CO[C@@]1([C@H](C)[C@@H](C)O)C[C@H]2C3=COC(/C=C/[C@@H](C)[C@@H](C)O)=CC3=C(Cl)C(=O)[C@@]2(C)O1	-10.5927
2896	CC1=C(CC2OCC3=C(O)C=CC=C32)OC(C)=C(C2CC3=CC=CC(O)=C3CO2)O1	-8.9783
2897	CC1=C(CC2OCC3=C(O)C=CC=C32)OC(C2CC3=CC=CC(O)=C3CO2)=C(C)O1	-9.0151
2898	CC1=C(CC2OCC3=C(O)C=CC=C32)OC(CC2OCC3=C(O)C=CC=C32)=C(C)O1	-8.8006
2899	CC(C)=CCC[C@@H](C)C1=CC[C@]2(C)C[C@H]3[C@@H](CO)C[C@@]4(O)OC(=O)/C(=C/C[C@@H]12)[C@@H]34	-11.0892
2900	C/C=C(\C=C(C)\C=C\C=C/C=C(\C)C(=O)C1C(=O)N[C@]2(O)CCO[C@H]12)C(=O)OC	-9.5651
2901	COC(=O)C1=CC(OC)=CC(O[C@@H]2O[C@@H](CO)[C@H](O)[C@@H]2O)=C1C(=O)C1=C(O)C=C(C)C=C1O	-10.9616
2902	COC1=CC(OC)=C2C(O)=C3C(=O)C=C(C)OC3=C(C3=C(OC)C=C4C=C5OC(C)(O)CC(=O)C5=C(O)C4=C3O)C2=C1	-9.9806
2903	C/C=C(\C=C(C)/C=C/C=C/C=C(\C)C(=O)C1C(=O)N[C@]2(O)CCO[C@H]12)C(=O)OC	-9.5626
2904	COC1=CC(O)=CC(C)=C1C(=O)C1=C(O)C=C(O)C(CC2=C(OC)C=C(O)C3=C2OC2=CC(O)=CC(C)=C2C3=O)=C1O	-9.8891
2905	COC(=O)CCCC(O)C1=C(C)C(OC)=CC(=O)O1	-10.8344
2906	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC3(C)CC(O)C(OC)C=C3C2=C1	-10.9131
2907	COC1=CC(OC)=C2C(=O)OC(O)(CO)C2=C1C	-10.5558
2908	CCCC=C(C)C1=C(CO)C(=O)OC1	-9.9005
2909	COC(=O)CCCC1=C(C(=O)OC)C(OC)=CC(=O)O1	-10.5602
2910	C/C(=C/CCC(C)(C)O)[C@@H]1CC[C@@]2(C)OC3=C(C[C@@H]12)C(=O)[C@]1(O)CO[C@H]3C1	-11.1125
2911	CO[C@H]1C[C@H](O)C2=C(C[C@H]3[C@H](/C(C)=C\CC(O)C(C)(C)O)CC[C@@]3(C)O2)C1=O	-10.9181
2912	CC(=O)OCC(C)=CCOC1=CC=C(CC(=O)O)C=C1	-10.0779
2913	CCCCC[C@@H](O)CC[C@H](C)CCCCC(=O)N[C@@H](CC1=CC=C(OCC=C(C)C)C=C1)C(=O)O	-10.4379
2914	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC[C@@H](O)[C@@H](O)[C@H](CO)NC(=O)[C@H](O)CCCCCCCCCCC	-10.1764
2915	C=C1C[C@H]2[C@]3(C)CC[C@@H](O)C(C)(C)[C@H]3C(=O)[C@@H](O)[C@]2(C)[C@@H]2C(=O)O[C@](C)(C(=O)OC)C(=O)[C@]12C	-10.1650
2916	C[C@@H]1CC2=CC(O)=C(Cl)C(O)=C2C(=O)O1	-9.8602
2917	CC1=CNC(C(=O)O[C@H](C)CCCC(=O)O)=C1	-10.1362

2918	CC(=O)O[C@@H]1[C@H]2[C@H](C=C3C(=O)[C@H](C)[C@@H](C)[C@H]4[C@H](CC5=CC=CC=C5)NC(=O)[C@@]341)C[C@H](C)[C@@](O)(C(C)=O)[C@@H]2O	-9.3065
2919	CCCCCCC(O)C(=O)O[C@@H]1[C@@H]2[C@H](CC1(C)C)[C@H](O)[C@H]1C(=O)C(=O)[C@@](CO)(OC)[C@@]21C	-10.4622
2920	COC1=C(C)C(=O)OC([C@@H](C)CCOC(C)=O)=C1	-10.3679
2921	CC(C)[C@@H]1NC(=O)N2C(=O)CCC[C@H]12	-9.8593
2922	COC1=C(O)C2=C3C(=C4C(OC)=CC(=O)C5=C4C4=C(C(C(C)=O)=C(C)CC1=C43)C(OC)=C5O)C(OC)=CC2=O	-10.5732
2923	C/C1=C/[C@@H](C)C/C=C\[C@H]2[C@@H]3O[C@]3(C)[C@@H](C)[C@H]3C(CC4=CNC5=CC=CC=C45)NC(=O)[C@@]32C(=O)CCC(=O)[C@@H]1O	-8.4677
2924	CC1=C(O)C(O)=C(O)C2=C1C(O)OC2=O	-10.2180
2925	COC1=CC(=O)[C@@](C)(O)[C@@H](O)[C@H]1C	-10.1109
2926	CC1=C(C(O)CCCCC(C)O)COC1=O	-10.2601
2927	C[C@H]1O[C@@H]2OC(=O)[C@]3(C)C[C@@H]4[C@](C)(C(=O)C=C5C(=CC(=O)OC5(C)C)[C@@]4(O)CO)[C@H](C1=O)[C@H]23	-10.0943
2928	C[C@H]1O[C@@H]2OC(=O)[C@]3(C)C[C@@H]4[C@]5(C)[C@H](C=C6C(=CC(=O)OC6(C)C)[C@@]46CO6)O[C@]14O[C@]45[C@]23O	-10.1079
2929	CC(=O)OC[C@]12OC3=CC=C(C4=CC=C5O[C@@]6(CO)C(=C(O)C5=C4O)C(=O)C[C@@H](C)[C@H]6OC(C)=O)C(O)=C3C(O)=C1C(=O)C[C@@H](C)[C@H]2OC(C)=O	-9.8506
2930	CC(=O)O[C@H]1C[C@@]2(C)[C@@H](CC[C@H]3[C@@]4(C)C=CC(=O)[C@@H](C)[C@@H]4[C@H](O)C(=O)[C@@]32C)/C1=C1\CC[C@@H](C(C)(C)O)OC1=O	-10.0343
2931	C=CC(C)(C)C1=C(/C=C2\NC(=O)[C@H](C)NC2=O)C2=CC=CC(CC=C(C)C)=C2N1	-8.8129
2932	C/C=C/C=C/[C@@H]1C=C[C@@H]2C[C@H](C)CC[C@H]2[C@]1(C)C(O)=C1C(=O)N[C@@H](C(C)O)C1=O	-10.2276
2933	CCC(C)C=C(C)C=CC=CC(N)=O	-9.7719
2934	CC1=C[C@@]2(C)C(=C(C)[C@H]3[C@H]4C[C@@H](C)C[C@@H](C)[C@@H]4[C@@H]4OC5=CC=C(C=C5)CC5(O)NC(=O)[C@@]6(O[C@H]56)C(=O)[C@@H]2[C@H]43)[C@H]1C	-9.7492
2935	C/C=C/C=C/[C@H]1C(C)=C[C@H]2C[C@@H](C)CC[C@@H]2[C@@]1(C)/C(O)=C1/C(=O)[C@@H](CO)N(C)C1=O	-9.9010
2936	COC(=O)[C@]1(CC2=CC=C(O)C(C[C@H](O)C(C)(C)O)=C2)OC(=O)C(O)=C1C1=CC=C(O)C=C1	-9.8320
2937	COC(=O)[C@@]1(O)C2=C(C[C@@H](OC)[C@H]1O)OC1=CC=CC(O)=C1C2=O	-10.7900
2938	CC1=C[C@H]2C[C@@H](C)CC[C@@H]2[C@@]2(C)C(=O)[C@@]3(C(=O)[C@@H](CO)N(C)C3=O)[C@H](C=C[C@@H](C)O)[C@@H]12	-10.3885

2939	OCCC1=C([C@H](C2=CNC3=CC=CC=C23)[C@H](O)CO)NC2=CC=CC=C12	-8.7202
2940	CC=CCCCCC(O)=C(C)C(=O)N1CCCC1=O	-10.3489
2941	O=C(C1=CC=C(O)C=C1O)[C@@H](O)C1=CC=C(O)C=C1	-9.6254
2942	C=CC(C)(C)C1=C(/C=C2\NC(=O)[C@]3(O)[C@H](O)CCN3C2=O)C2=CC=CC=C2N1	-9.5865
2943	C=CC(C)(C)C1=C(/C=C2\NC(=O)[C@@]3(O)[C@@H](O)CCN3C2=O)C2=CC=CC=C2N1	-9.5946
2944	CC(CO)CCC[C@@](C)(O)C1=CC=C(C(=O)O)C=C1O	-10.9953
2945	C=C/C=C/C[C@H](O)C/C=C\C=C\C(C)=O	-9.5137
2946	C=C(C#CC1=C[C@H](OC(C)=O)[C@H](OC)[C@@H](O)[C@H]1O)CCC=C(C)C	-10.7049
2947	CC1=C(O)C=C(CCC(C)C(C)O)OC1=O	-10.3231
2948	C=C(C)[C@@H]1COC2=C(C)C=C3OC4=C(C[C@@H](OC(=O)C5=C(O)C=C(O)C=C5CC/C=C\C=C/CCC)C(C)(C)O)C=CC(O)=C4C(=O)C3=C2[C@@H]1O	-9.9385
2949	CC[C@@H](OC)C1=CC(=O)C[C@@H]1O	-9.8515
2950	C[C@H](CC[C@@H](O)C(C)(C)O)C1=CC[C@]2(C)C[C@H]3[C@@H](CO)C[C@@]4(O)OC(=O)/C(=C/C[C@@H]12)[C@@H]34	-11.2208
2951	C=C(C#CC1=C[C@H](OC(C)=O)[C@H](OC)[C@@H](O)[C@H]1O)CCC(O)C(=C)C	-10.7238
2952	CC(O)C=CC1OCC2=C(O)C=CC=C21	-9.7432
2953	CC[C@H](OC)C1=CC(=O)C[C@@H]1O	-9.8497
2954	COCC1=C(O)C=CC2=C1OC(C(C)=O)CC2=O	-10.7851
2955	C/C=C(\C=O)[C@@H]1C[C@H]2C3=C(C[C@@H](C(=O)O)N2C=C1C(=O)OC)C1=CC=CC=C1N3	-9.4067
2956	CCCCCCCCCC[C@@H](C)[C@@H]1CC(=O)N[C@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](C)C(=O)N[C@H](C)C(=O)N[C@@H](CCC(N)=O)C(=O)N[C@H](CC2=CC=C(O)C=C2)C(=O)N[C@@H](C(C)C)C(=O)O1	-11.0056
2957	COC1=CC(=O)C2=C(O)C(C)=C3CC(CO)OC3=C2C1=O	-10.7183
2958	COC1=C(C)C(O)=CC2=C1C(=O)C=C(C)O2	-10.9385
2959	CC(=O)[C@H](O)[C@H]1[C@H](C)C=CC(=O)[C@@H]1O	-9.6599
2960	CC1=CC=C2OC(C)C(=O)C2=C1	-9.7292
2961	COC1=CC(=O)OC(CCCC(C)O)=C1CO	-10.7618
2962	COC(=O)CCCNC(=O)C=C(C)CCO	-10.0256
2963	COC(=O)CC1(C)OC(=O)C2=C(O)C=C(OC)C=C2C1=O	-10.9171
2964	COC1=CC(OC)=C2C(=O)OC(C)(O)C2=C1C	-10.7679
2965	CCCC=C(C)C(=O)C1=CC=C(O)C(CC)=C1O	-10.6317
2966	C/C(=C\[C@@H](C)[C@H](C)O)[C@@H]1O[C@@]1(C)C1=CC2=CC(=O)[C@@](C)(O)[C@H](O)C2=CO1	-10.6059
2967	CCCCCC1=C(CO)[C@@H](O)[C@H](O)C[C@@H]1O	-10.4155
2968	CC(C)(O)[C@@H]1[C@H](O)C[C@@]2(C)OC3=C(C[C@@H]12)C(=O)[C@]1(O)CO[C@H]3C1	-11.1124

2969	CCC/C=C/C1=C(CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]1O	-10.5067
2970	CC(C)=C1NC(=O)C2=C1O[C@H](C[C@H](C)O)CC2=O	-10.5019
2971	COC1=CC(O)=C2C(=O)C[C@@](O)(C[C@H](C)O)[C@H](O)C2=C1	-10.9041
2972	COC(=O)C1=CC(OC)=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(C)C=C1O2	-11.0489
2973	CC(=CCOC1=CC=C(CC(=O)O)C=C1)CO	-9.9800
2974	CC(=O)/C=C/C=C(/C=C/[C@H](C)O)CO	-9.8417
2975	C=C(C)C#CC1=C[C@H](O)[C@H]2O[C@H]2[C@@H]1O	-9.7810
2976	CC(=CCOC1=CC=C(C(=O)O)C=C1)CO	-10.3307
2977	CC1=C[C@H]2[C@@H]3CC=CC3=CC(=O)[C@@H]2OC1/C=C/CCC(=O)O	-9.7967
2978	CC(=CCOC1=CC=C(C(=O)O)C=C1)C(=O)O	-10.2290
2979	CC1(O)CC2=C3C(=CC(=O)OC3=C3C(O)=CC(O)=CC3=C2)O1	-10.8361
2980	CC(C)=CCC[C@@H](C)[C@H]1C[C@H](O)[C@@]2(C)C3=C(C[C@@H](O)[C@]12C)[C@@]1(C)CCC(=O)C(C)(C)[C@@H]1CC3	-11.2745
2981	CC(C)=CCC1=CC=CC2=C1NC=C2CC(=NO)C(N)=O	-10.1043
2982	CC1=C(CCC[C@H](O)CO)C=C(O)C(C=O)=C1O	-10.8373
2983	COC1=CC(C(=O)O)=C(O)C(CC=C(C)CCC=C(C)CCC=C(C)C)=C1O	-10.2377
2984	CCCCCCC(O)C(=O)O[C@@H]1[C@@H]2[C@H](CC1(C)C)[C@@H](OC)[C@@H](OC)C1=C(O)C(=O)C(=O)[C@@]12C	-10.3819
2985	CC1=CNC(C(=O)O[C@H](C)CC(=O)O)=C1	-9.6165
2986	C[C@H](C[C@@H](O)CC(=O)O)OC(=O)C1=CC=CN1	-9.5484
2987	C[C@H](O)[C@H](C)OC(=O)CC1=CNC2=CC=CC=C12	-9.8031
2988	CCC(=O)CCOC(C)(C=C(C)C(O)C(C)CC)C(=O)O	-10.7738
2989	COC1=CC(O)=C(S(=O)(=O)C2=CC(NC(C)=O)=C(OC)C=C2O)C=C1NC(C)=O	-10.3913
2990	CCOC1=CC(S(=O)(=O)C2=CC(OCC)=C(OC)C=C2O)=C(O)C=C1OC	-11.1197
2991	O=C1CC[C@H]([C@@H]2C[C@H](O)CCC23OC2=CC=CC4=CC=CC(=C24)O3)O1	-10.5723
2992	COC1=C(C)C(=O)OC(C(C)=CCOC(C)=O)=C1	-10.4451
2993	COC1=C(C)C(=O)OC([C@](C)(O)[C@@H](C)O)=C1	-10.6333
2994	CCCCC[C@H]1CC2=C(C)C(O[C@@H]3O[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]3O)=C(C)C(O)=C2CO1	-10.9998
2995	COC1=C(O)C=C(C)NC1=O	-9.7237
2996	C=C1NC(=O)C(C)C(CCC(C)C(=O)C=CC(C)=CCCC(C)CCCCCC)OC(=O)C(CCCC(=O)O)NC(=O)C(C)CNC1=O	-10.2843
2997	COC(=O)C1=CC(OC)=C(O)C2=C1C(=O)C(C)=C(C[C@H](C)O)O2	-11.2962

2998	COC(=O)C1=CC(OC)=C(O)C2=C1C(=O)C(C)=C(C[C@@H](C)O)O2	-11.2962
2999	CC(CO)CCC[C@](C)(O)C1=CC=C(C(=O)O)C=C1	-10.8723
3000	CC(CO)CCC[C@@](C)(O)C1=CC=C(C(=O)O)C=C1	-10.8723
3001	C=CC(C)(C)[C@@]12C=C(O)C(=O)N3/C(=C\C4=CN([C@@H](CC(=O)O)C(=O)N[C@@H](C)C(=O)OC)C=N4)C(=O)N[C@]31N(OC)C1=CC=CC=C12	-9.0551
3002	CC(=O)O[C@@H]1C2=C3C[C@@H]4[C@@]5(C)CCC(=O)C(C)(C)[C@@H]5C[C@H](O)[C@]4(C)OC3=CC(O)=C2C(=O)O[C@@H]1C	-11.2182
3003	C=C(C)[C@@H]1C[C@H](O)[C@@]2(C)OC3=C(C[C@@H]12)C(=O)[C@](O)(CO)C[C@@H]3O	-10.9156
3004	CC(C)(O)[C@@H]1CC[C@@](C)(O)[C@H]2O[C@@H]12	-10.3012
3005	CCC(C)CC(C)CC(C)C1=CC(O)=C(C)C(=O)O1	-10.9529
3006	CCC(C)CC(C)CC(C)C1=CC(OC)=C(C)C(=O)O1	-10.7841
3007	CC(C)=CCCC1=C2[C@H](C[C@@]3(C)[C@H]2CC[C@H]2[C@@]4(C)C=CC(=O)[C@@H](C)[C@@H]4C[C@@H](O)[C@@]23C)OC1=O	-11.0833
3008	CC(=CC1=CC(C2CCC(O)(CO)CC2)=CO1)C(N)=O	-10.9632
3009	C[C@@H]1[C@@H]2C[C@H](C(C)(O)CO)CC[C@@](C)(O)[C@@H]2C[C@@H]1O	-10.6596
3010	CCC(C)C(=O)O[C@]1(C)C(=O)C=C(OC)[C@@](C)(O)C1=O	-10.4476
3011	CC(C)=C1CC(=O)N(C=CC(=O)O)C1=O	-9.9469
3012	CC=CC1=C(CCC(C)=O)COC1=O	-9.8944
3013	CC(O)C1(C(N)=O)CC(=O)OC2=CC=C(O)C=C21	-10.8039
3014	CC1=C(O)C=C2C(=O)OC(C[C@@H](C)O)=CC2=C1C	-10.7309
3015	CC1=CC(=O)C2=C(O)OC(O)=C3C(O)=CC(=O)C1=C32	-10.5836
3016	CC(C)=C[C@H]1C[C@H](C)[C@]2(CC[C@]3(C)C[C@@H]4C(C)=CC(=O)[C@H]4/C(CO)=C\C[C@H]32)O1	-10.7871
3017	C/C(C=O)=C\CCC(C)C1=CC[C@@]2(C)OC3=C(C[C@@H]12)C(=O)C(O)CC3	-10.5459
3018	C/C=C1\NC(=O)[C@@H](CC)NC(=O)CN2C(=O)[C@@](C)(NC(=O)[C@H](CC3=CNC4=CC=CC(OC)=C34)NC(=O)C3=CSC(=N3)[C@@H](C)NC(=O)CN(C)C1=O)C(=O)[C@@H]2O	-9.5209
3019	CO[C@]12CC[C@@]3(C)[C@@H](CC[C@H]4CC5=C(NC6=CC=CC=C56)[C@@]43C)C1=CC(=O)[C@@H](C(C)(C)O)O2	-10.4179
3020	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=C(O)C=C3)NC(=O)[C@@]23[C@H]2[C@H]4[C@@H](C[C@H](C)C=C(C)[C@@H]4C[C@H]3O)O[C@H]12	-10.2562
3021	COC1=CC(CCCO)=CC2=C1C=C(CO)OC2	-10.2085
3022	COC1=CC(CC=C(C)C)=CC2=C1C=C(CO)OC2	-10.1707

3023	COC(=O)C(C)(C)[C@@H]1OC(=O)[C@H](C)[C@@]1(C)/C=C/C=C/C=C(/C)[C@@H]1[C@@H](C)C(=O)[C@@](C)(O)[C@H]1C	-10.6487
3024	C[C@H](CC[C@@H](O)C(C)(C)O)C1=CC[C@]2(C)C[C@H]3[C@@H](C)C[C@@]4(O)OC(=O)/C(=C/C[C@@H]12)[C@@H]34	-10.9694
3025	C=C[C@@H]1C=C[C@H]2[C@@H]3C[C@H](C)C[C@H](C)[C@H]3[C@H]3OC4=CC=C(C=C4)C[C@]4(O)NC(=O)[C@]5(O[C@H]54)C(=O)[C@@H]1[C@H]23	-9.8508
3026	COC1=CC(=O)OC(CCCC(C)=O)=C1CO	-10.6728
3027	CC[C@H](C)[C@@H](O)[C@@H](C)C(=O)O[C@@]1(C)C(=O)C=C2C=C([C@@H]3C(=O)CCC[C@H]3C)OC=C2C1=O	-10.2809
3028	CC[C@H](C)/C=C(\C)[C@@H](O)[C@](C)(O)C1=CC2=CC(=O)[C@@](C)(O)[C@H](O)C2=CO1	-10.2196
3029	CCCCCC1=C(CO)[C@@H](O)[C@H](OC(=O)O)[C@@H](O)[C@H]1O	-10.5324
3030	COC1=C(C2=CC=C(O)C=C2)C(=O)[C@](O)(C2=CC=CC=C2)C1=O	-9.1018
3031	CC[C@@](C)(O)/C=C(\CO)[C@@H]1O[C@@]1(C)C1=CC2=CC(=O)[C@@](C)(O)[C@H](O)C2=CO1	-10.4301
3032	CC(C)=C1NC(=O)C2=C1O[C@@H](C[C@H](C)O)CC2=O	-10.4994
3033	CC[C@H](C)[C@H]1NC(=O)[C@](O)(C2=CC3=C(OC(C)=C(C)C3=O)[C@@](C)(CC)C2=O)C1=O	-10.8101
3034	COC1=CC(=O)OC([C@H](O)CCO)=C1	-10.4960
3035	C=C1CO[C@@]2(O)CC3=CCC(=O)[C@H](C)[C@@]3(C)C[C@@]12O	-10.7096
3036	C/C=C\C(C=O)=C\C=C\[C@@H](O)[C@@H](C)O	-9.9334
3037	CC(C)=CCOC1=CC=C([C@H](O)C(=O)O)C=C1	-10.1767
3038	COC(=O)[C@@]12C(=O)[C@](C)(O)C(=O)[C@]1(C)C(C)=C[C@H]1[C@@H]3CC[C@H](OC(C)=O)C(C)(C)[C@H]3CC[C@@]12C	-10.4603
3039	COC1=CC=C([C@@H]2SS[C@@]34C[C@]5(O)C=C[C@@H](O)[C@@H](O)[C@@H]5ON3C(=O)[C@@H]2NC4=O)C(O)=C1OC	-10.8890
3040	C=C1CO[C@@]2(O)C[C@@H]3C(=O)CC[C@H](C)[C@@]3(C)C[C@@]12O	-10.8377
3041	C[C@@H]1CC2=CC(O)=CC(O)=C2C(C)(C)O1	-10.1312
3042	C[C@H]1CCC(=O)CCCCC2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.5154
3043	C/C=C(\C)C/C(C)=C/[C@@H](C)C1=CC(=O)C(C)=C(OC)O1	-10.3852
3044	CC1=CC=C2C(=C1O)C(=O)O[C@@H](C)[C@]2(C)O	-9.9262
3045	CO[C@H]1C[C@H](O)C2=C3C4=CC=CC(O)=C4C(=O)[C@@H](O)C3C3=C2C1=C(O)C=C3	-10.0158

3046	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@]23C=C2/C=C(/C)C[C@@H](C)C[C@@H](O)[C@@H]2[C@H]3[C@@H]1O	-9.7157
3047	C=C1C[C@@H]2OC(=O)[C@@H](C)[C@H]2[C@@](CC(=O)O)(C(=O)O)[C@H]1CC/C(C)=C/C(=O)OC	-10.1915
3048	C=C[C@@H]1C=C[C@@H]2[C@@H]3C[C@H](C)C[C@H](C)[C@H]3[C@H]3OC4=CC=C(C=C4)C[C@@]4(O)C=C(C(=O)N4)C(=O)[C@H]1[C@H]23	-9.4240
3049	C[C@H]1C[C@H]2[C@@H]3C=C[C@H]4[C@@H]5C(=O)[C@]6(C[C@H]4O)C[C@](O)(CC4=CC=C(C=C4)O[C@H]([C@@H]35)[C@@H]2[C@@H](C)C1)NC6=O	-10.7784
3050	C=C[C@H]1[C@H]2C(=O)[C@@]34O[C@@H]3[C@](O)(CC3=CC=C(C=C3)O[C@H]3[C@H]2C(=C[C@H]1O)[C@@H]1C[C@H](C)C[C@H](C)[C@@H]31)NC4=O	-9.8186
3051	O=C1N[C@H](CC2=CC=CC=C2)C(=O)N[C@H](CC2=CNC3=CC=CC=C23)C(=O)N2CCC[C@H]12	-8.6177
3052	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@@]23[C@@H]([C@@H]2[C@H](/C=C(/C)C[C@@H](C)C[C@H]2O)[C@H]3OC(C)=O)[C@@H]1O	-9.2455
3053	C=C(CCCC(C)(C)O)C1=CC(O)=C(C)C=C1OC	-10.9606
3054	CC(=O)O[C@@H](C)C1=COC(CO)=CC1=O	-10.0221
3055	COC1=CC(O)=C2C(O)=C3C(=O)[C@]4(O)C(O)=C(C(N)=O)C(=O)C[C@]4(O)[C@@H](O)C3=C3C[C@]4(C(C)=CCCC4(C)C)C1=C32	-10.4427
3056	O=C1N[C@@H](CC2=CC=C(O)C=C2)C(=O)N2C[C@H](O)C[C@H]2C(=O)N[C@@H](CC2=CC=CC=C2)C(=O)N2CCC[C@@H]12	-9.1402
3057	CC(=O)OC[C@]12OC3=C(C4=CC=C5O[C@@]6(CO)C(=C(O)C5=C4O)C(=O)C[C@@H](C)[C@H]6OC(C)=O)C=CC(O)=C3C(O)=C1C(=O)C[C@@H](C)[C@H]2OC(C)=O	-10.0720
3058	CC(=O)O[C@H]1C[C@@]2(C)[C@@H](CC[C@H]3[C@@]4(C)CCC(=O)[C@@H](C)[C@@H]4[C@H](OC(C)=O)C(=O)[C@@]32C)/C1=C(\CCCC(C)(C)O)C(=O)O	-9.9773
3059	CO[C@@H]1C(=O)NC2=CC=C(/C=C/[C@]3(C)CCC(=O)[C@@H](C)C3)C(O)=C2[C@@]1(O)C1=CC=CC=C1	-8.3802
3060	COC(=O)[C@]12OC3=C(C(O)=C1C(=O)CC[C@@H]2O)C(O)=CC1=C3[C@@H]2C=C[C@@]3(C1)C(=O)C1=CC(C)=CC(O)=C1C(O)=C3C2=O	-9.7725
3061	C/C=C(\C)[C@@]1(O)C(/C=C/C=C(C)/C=C/C=C/C(=O)O)[C@@H]2CC=C(C)C[C@H]2[C@@H]2O[C@@H]21	-9.5437
3062	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(C[C@](C)(O)C[C@@H]3O)C(=O)C2=C1O	-10.8979
3063	CC1=C(Cl)C(O)=CC(O)=C1C(=O)O[C@@H]1C[C@]2(C)[C@H]3CC(C)(C)C[C@H]3C=C(C=O)[C@]12O	-10.9209
3064	C=CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	-8.8753
3065	COC1=CC(OC)=C2C(=O)C3=C(C[C@H](C)O[C@H]3O)C(=O)C2=C1	-11.1673

3066	CCC[C@H]1CC2=C(CO1)C(OC)=CC(=O)O2	-9.8999
3067	CSC12COCN3C4=CC=CC=C4[C@]4(C[C@]5(SC)C(=O)N(C)[C@@](CO)(SC)C(=O)N5[C@@H]34)N3C=C(C[C@](SC)(C(=O)N1C)N(C)C2=O)C1=CC=CC=C13	-8.9746
3068	C/C=C(\C)[C@H](O[C@@H]1O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]1O)[C@H](C)/C=C(C)/C=C/C/C(C)=C/CC1=C(C)C(=O)C(OC)=C(OC)N1	-9.0712
3069	O=C(O)C1=CC2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.1461
3070	CCCCCC=CC1=C(CO)[C@H]2OC(C)(C)[C@H](O)C[C@]23O[C@@H]3[C@@H]1O	-10.9460
3071	CCCCCC=CC1=C(CO)[C@H]2OC(C)(C)[C@H](O)C[C@@]2(O)[C@@H](O)[C@@H]1O	-10.8993
3072	CC/C(C)=C1\NC(=O)[C@@H](CC2=CC=CC=C2)N2C1=NC1=C(O)C=CC=C1C2=O	-9.2942
3073	CCC[C@@H](O)CC=CC1=C(CO)[C@H]2OC(C)(C)[C@H](O)C[C@]23O[C@@H]3[C@@H]1O	-10.9021
3074	C[C@H](O)CCCC=CC1=C(CO)[C@H]2OC(C)(C)[C@H](O)C[C@]23O[C@@H]3[C@@H]1O	-10.9104
3075	CC/C(C)=C1/NC(=O)[C@@H](CC2=CC=CC=C2)N2C1=NC1=C(O)C=CC=C1C2=O	-9.3028
3076	CC[C@H](C)[C@]1(OC)NC(=O)[C@@H](CC2=CC=CC=C2)N2C1=NC1=CC=CC=C1C2=O	-9.2483
3077	CCC[C@]1(O)CCC2=C(CCCC2=O)O1	-9.9966
3078	C[C@@H]1CC[C@H]2C[C@H]3[C@]4(C)CC[C@@H]4[C@@](C)(O)CC[C@@]13C2(C)C	-10.1774
3079	O=C1N[C@@H]2CC3=C(C(=O)C4=C(O)C=CC=C4O3)[C@@]1(O)[C@@H]2O	-10.5891
3080	COC1=CC(=O)[C@]2(C)CO[C@H](O)[C@H]12	-10.1080
3081	CC1(C)C=CC2=C(C=CC3=C2NC(=O)[C@@]32C[C@@]34NC(=O)[C@]5(CCCN5C3=O)C[C@@H]4C2(C)C)O1	-9.6076
3082	CC(C)=CCC1=CC(C=O)=CC=C1O	-9.2453
3083	C/C=C1\NC(=O)[C@@H](C)NC(=O)CNC(=O)[C@](C)(C(C)=O)NC(=O)[C@H](CC2=CNC3=CC=CC(OC)=C23)NC(=O)C2=CSC(=N2)[C@@H](C)NC(=O)CN(C)C1=O	-9.3364
3084	C/C=C1\NC(=O)[C@@H](CC)NC(=O)CNC(=O)[C@](C)(C(C)=O)NC(=O)[C@H](CC2=CNC3=CC=C(O)C(OC)=C23)NC(=O)C2=CSC(=N2)[C@@H](C)NC(=O)CN(C)C1=O	-9.6196
3085	C=C(CCCC(C)(C)O)C1=CC=C(C(=O)O)C=C1O	-11.2238
3086	OCCC1=C([C@@H](C2=CNC3=CC=CC=C23)[C@H](O)CO)NC2=CC=CC=C12	-8.7432
3087	CC[C@H](C)C(=O)OC1=C2C3=COC(C)=CC3=CC(=O)[C@@]2(C)OC1=O	-9.8961
3088	CC[C@H](C)[C@@H](O)C(=O)[C@H]1C2=COC(C)=CC2=CC(=O)[C@@]1(C)O	-10.6217
3089	COC1=C(O)C2=C(OC3=C(CO)C(O)=CC(C)=C3C(=O)O2)C(C)=C1C(=O)C=C(C)C	-10.9411

3090	COC1=C[C@@]2(OC(=O)C3=CC(C(C)=O)=CC(OC)=C32)C(=O)C(OC)=C1	-10.2870
3091	COC(=O)C1=CC(OC)=C(C(=O)C2=C(O)C=C(C)C=C2OC)C(O)=C1OC	-10.9215
3092	COC1=C(O)C2=C(OC3=C(C=O)C(O)=CC(C)=C3C(=O)O2)C(C)=C1C(=O)CC(C)C	-11.0745
3093	COC1=CC(C)=C2C(=O)C3=C(OC)C=C(O)C=C3OC2=C1	-10.7624
3094	O=C1O[C@@H](CO)C2=C1C=CC(O)=C2O	-10.2951
3095	COC1=CC(C)=CC2=C1C=C(CO)OC2	-9.9795
3096	CO[C@@H]1OCC2=CC[C@H]3C(C)(C)[C@@H](O)CC[C@]3(C)[C@H]21	-10.7525
3097	C/C=C/CCCCC1=C(C)C(=O)N2C(=O)CC[C@H]2N1	-10.2112
3098	COC1=C(O)C2=C(OC3=C(C=O)C(O)=C(Cl)C(C)=C3C(=O)O2)C(C)=C1C(=O)CC(C)C	-10.8370
3099	CCCCCCCC(=O)C1=C(O)C=C(O)C=C1CC(=O)O	-10.7994
3100	CC1=C(C=O)[C@@H]2C(CO)[C@@]1(C)CC[C@@H]2C(C)C	-10.6780
3101	CCC/C=C\C=C/CCC1=CC(O)=C([C@H]2CCC(=O)N2)C(O)=C1	-10.3129
3102	C/C=C/C1=CC(=O)C2=C(C[C@@H](O)C[C@H]2O)O1	-10.2507
3103	COC1=CC=CC2=C1[C@@H](O)C[C@@H](C)O2	-10.2518
3104	C=C(C#CC1=C[C@H](O)[C@H](OC)[C@@H](O)[C@H]1O)CCC(O)C(=C)C	-10.6971
3105	CC1=CC(O)=CC2=C1C1=C(C(=O)O2)C2=C(C(=O)O1)C1=CC=CC=C1N2	-9.4713
3106	C=C(C#CC1=C[C@H](O)[C@H](OC)[C@@H](O)[C@H]1O)CCCC(C)CO	-10.6814
3107	CCC/C=C\C=C/CCC1=CC(O)=CC(O)=C1[C@@H]1CCC(=O)N1	-10.1562
3108	CC1=C(C)[C@]23C[C@@]45COCC4=C(C)[C@](O)(O[C@@]2(O5)C1=O)[C@@H]3O	-11.0678
3109	COC(=O)C1=CC(OC)=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(C(=O)O)C=C1O2	-11.1016
3110	COC(=O)C1=C(CCO)C(OC)=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(C)C=C1O2	-11.1002
3111	CCOC(=O)C1=C(O)C=C(C)C=C1OC1=C(O)C=C(OC)C=C1C(=O)OC	-10.8660
3112	CCC(C)C(O)C(C)/C=C/CC[C@@H](O)C[C@@H](O)C(C)C(=O)O	-10.7109
3113	CC1=CNC(C(=O)O[C@H](C)CCCCCC(=O)O)=C1	-10.0395
3114	C[C@H](CCCCCC(=O)O)OC(=O)C1=CC=CN1	-9.5136
3115	CC[C@@H](C)/C=C/C1=CC2=C(C=N1)[C@H](C(C)=O)[C@H]1C(=O)O[C@H](C)[C@@H](C)[C@]13NC(=O)C2O3	-10.7363
3116	CCCCCC1=C(COC(C)=O)C(OC)=CC(=O)O1	-10.3230
3117	CC(=O)CCC[C@H]1OC(=O)C2=C(O)C=CC=C2[C@@H]1O	-10.1492

3118	CC1=C(O)C2=C3C(=C1O)C(=O)OC[C@@H]3[C@@](O)(CO)OC2	-10.6807
3119	CCC[C@@H](O)[C@H](O)C1=C(C)C(OC)=CC(=O)O1	-10.9576
3120	CCCCC(=O)C1=C(C)C(OC)=CC(=O)O1	-10.4838
3121	COC(=O)C1=C(O)C=C(OC)C=C1C1=CC(O)=C(O)C=C1C	-10.5506
3122	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC1=C(C)C(=O)C=C(OC)C1=O	-9.9239
3123	C/C=C/C[C@H](O)C1=CC=CC(OC)=C1CO	-10.0215
3124	CCN1C(=O)[C@H](CC2=CC=CC=C2)NC(=O)[C@@H]1CCC(=O)O	-9.8218
3125	CC(C)C[C@@H]1NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC1=O	-9.6311
3126	CCC[C@@H]1OCC2=C(COC2=O)[C@]1(C)O	-10.2634
3127	COCC1=C(C(C)=O)COC1=O	-9.6927
3128	COC1=CC(OC)=C2C(=O)O[C@](C)(OC)C2=C1C	-10.6750
3129	C/C(=C\[C@@H](C)CCO)[C@@H]1O[C@@]1(C)C1=CC2=CC(=O)[C@@](C)(O)[C@H](O)C2=CO1	-10.3477
3130	C[C@@H]1CCC2=C(COC2=O)C2=CC(C)(C)C[C@@H]21	-10.0433
3131	COC(=O)CCCCC1=C(C(=O)OC)C(OC)=CC(=O)O1	-10.6734
3132	CC[C@H](C)/C=C(\CO)[C@@H]1O[C@@]1(C)C1=CC2=CC(=O)[C@@](C)(O)[C@H](O)C2=CO1	-10.2917
3133	COC1=CC(OC)=C2C(=O)OC(CO)=C(CO)C2=C1C	-10.9404
3134	CCC[C@@H]1OC/C(=C2/C[C@H](O)[C@@](C)(CC)C2=O)[C@@H]1C	-11.1150
3135	CCC[C@@H]1O[C@@]1(C)C1=C(COC)C(=O)OC1	-9.9691
3136	CC[C@H](C)/C=C(\C)[C@@H]1O[C@@]1(C)C1=CC2=CC(=O)[C@@](C)(O)[C@H](O)C2=CO1	-10.4444
3137	COC1=CC(OC)=C2C(=O)O[C@@](CO)([C@@H](C)O)C2=C1C	-10.9213
3138	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC(C)=C(CO)C2=C1C	-10.9680
3139	CCCCOC(=O)CC1=COC=CC1=O	-9.6192
3140	CC[C@H](C)[C@@H](O)[C@@H](C)C(=O)O[C@@]1(C)C(=O)C=C2C=C([C@@H]3C(=O)C=CC[C@H]3C)OC=C2C1=O	-9.7837
3141	CCC[C@@H]1OC/C(=C2/C[C@H](O)[C@@](C)(CC)C2=O)[C@H]1C	-11.1168
3142	COC1=C(C2=CC=C(O)C=C2)C(=O)[C@@](O)(C2=CC=CC=C2)C1=O	-9.1159
3143	COC1=C(C2=CC=CC=C2)C(=O)[C@](O)(C2=CC=CC=C2)[C@H]1O	-8.9703
3144	COC1=C(C2=CC=CC=C2)C(=O)[C@](O)(C2=CC=CC=C2)[C@@H]1O	-8.9703
3145	CCCCCC1=CC=CC(O[C@H]2O[C@H](CO)C(O)C2O)=C1CO	-10.8544
3146	CCCCCCC1=C(CC(=O)OC)C(=O)OC1=O	-10.2398

3147	COC1=C(C2=CC=CC=C2)C(=O)[C@@](O)(C2=CC=CC=C2)[C@H]1O	-8.9703
3148	CCCCCC1=C(CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]1O	-10.3837
3149	CC(=O)[C@@H]1CC[C@@]2(C)OC3=C(C[C@@H]12)C(=O)[C@]1(O)CO[C@H]3C1	-10.8578
3150	O=C(O)C1=C(CO)NC2=CC=CC=C2C1=O	-9.1655
3151	CN1C2=C(C(=O)N(CCCO)C2=O)C(=O)C2=CC=CC=C21	-9.7067
3152	CC(=O)C[C@@H]1CC(=O)C2=C(O)C=C(O)C=C2[C@H]1O	-10.8376
3153	CCCCCC[C@@H]1O[C@@H](C2=C[C@@H](O)CCC2=O)C[C@@H]1O	-10.7972
3154	C/C=C\C(=C\C=C\[C@H](O)[C@@H](C)O)CO	-10.1863
3155	C=C1CO[C@@]2(O)CC3=CC(=O)C(O)=C(C)[C@@]3(C)C[C@@]12O	-10.5451
3156	CCC[C@@](O)(/C=C/C=C/C(C)=O)CO	-10.1747
3157	CCC[C@@](O)(/C=C/C=C/[C@@H](C)O)CO	-10.2605
3158	C=C(CO)[C@@]1(O)C[C@]2(C)C(=CC1=O)[C@@H](O)CC[C@H]2C	-11.0195
3159	C=C1CO[C@@]2(O)C=C3C(=O)CC[C@H](C)[C@@]3(C)C[C@@]12O	-10.7999
3160	C/C=C\C(=C\C=C\[C@@H](O)[C@@H](C)O)C(=O)O	-10.3914
3161	CC(C)(O)[C@@H](O)COC1=CC=C(CC(=O)O)C=C1	-10.4877
3162	C=C(CO)[C@H]1C[C@]2(C)C(=C[C@H]1O)CCC[C@H]2C	-10.6956
3163	C=C1CO[C@@]2(O)CC3=CC(=O)C[C@H](C)[C@@]3(C)C[C@@]12O	-10.7507
3164	C=C(C(=O)OC)[C@@H]1C[C@@]2(C)C(=CC1=O)C[C@H](O)C[C@@H]2C	-10.6629
3165	C=C1CO[C@@]2(O)CC3=CC[C@H](O)[C@H](C)[C@@]3(C)C[C@@]12O	-11.0440
3166	C[C@H]1C[C@@H]2C3=C(CC(O)CC3=O)OC3=C2C(=CC=C3)O1	-10.6190
3167	CCCCCCC[C@@H](O)CC(=O)OC1=C(C)C(O)=C(O)C(C=O)=C1C	-10.8173
3168	CCOC(=O)C1=C(C)C=C2C(=O)C3=CC(O)=CC(O)=C3C(=O)C2=C1O	-10.3527
3169	CCOC(=O)C1=C(C)C=C2C(=O)C3=CC(OC)=CC(O)=C3C(=O)C2=C1O	-10.4897
3170	CC(C)=CCC1=C(O)C=C(O)C2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(C)C(Cl)=C1OC2	-10.0071
3171	COC(=O)[C@@]12C(=O)[C@](C)(O)C(=O)[C@]1(C)C(C)=C[C@H]1[C@]3(C=O)CC[C@H](OC(C)=O)C(C)(C)[C@H]3CC[C@@]12C	-10.1676
3172	CCC1=C(C)C(=O)[C@@](C)(O)C(=O)/C1=C\NC1=CC=C(C(=O)O)C=C1	-9.2139
3173	CC[C@H]1CCC[C@@](OC)(C2=CC(OC)=CC(=O)O2)O1	-10.4747

3174	CCC1=C(C)C(=O)[C@@](C)(O)C(=O)/C1=C\NC1=CC=CC=C1O	-9.5247
3175	COCC1=C(O)C=C(O)C(CC=C(C)C)=C1C(=O)C1=C(O)C(Cl)=C(C)C(Cl)=C1OC	-10.1341
3176	COC1=C(Cl)C(C)=C(Cl)C2=C1C(=O)C1=C(CC=C(C)C)C(O)=CC(O)=C1CO2	-10.3142
3177	CC(C)=CCC1=C(O)C=C(O)C2=C1C(=O)C1=C(O)C(Cl)=C(C)C(Cl)=C1O2	-10.5132
3178	COC1=CC(=O)OC([C@H](O)CCCO)=C1	-10.5796
3179	C/C=C\C(=C\C=C\[C@@H](O)[C@@H](C)O)CO	-10.1858
3180	COC1=CC(=O)OC([C@@H](O)CC2=CC=CC=C2)=C1	-9.4241
3181	O=C1C=C(CCO)[C@H](O)[C@H]1O	-9.6061
3182	CC(C)C1=C2CC[C@@H](C(=O)O)C3=C(C[C@]2(C)CC1)[C@H](C)[C@H](O)C3=O	-10.8518
3183	CON1C=CC2=C(C1=O)[C@@H]1[C@@H](C)C[C@@H](C)C[C@]1(C)[C@@H](C)O2	-10.3205
3184	C[C@H](CC(=O)O)OC(=O)C1=CC=CN1	-9.5147
3185	C[C@H](CCCC(=O)O)OC(=O)C1=CC=CN1	-9.3896
3186	C[C@H](C1=CC=C(O)C=C1)[C@H](O)C(=O)O	-9.7174
3187	CC1=CC(O)=CC2=C1C(=O)C=C(C[C@@H](O)CC(=O)O)O2	-10.5551
3188	O=C(O)CCC1=CC(=O)OC1	-9.4385
3189	CC(C)=CCOC1=CC=C(C(=O)OC[C@@H](O)[C@H](O)[C@H](O)CO)C=C1	-10.6507
3190	CC1=CC[C@@H]2[C@H]([C@@](C)(O)CO)CC[C@]2(C)[C@H]1C	-10.5762
3191	O=C1C=COC(CC2=CC=CC=C2)=C1	-8.5508
3192	CC(=O)NC1=CNC(C(=O)O[C@H](C)CCCCCC(=O)O)=C1	-9.8345
3193	CC(=O)NC1=CNC(C(=O)O[C@H](C)CCCC(=O)O)=C1	-9.8733
3194	CC1=CNC(C(=O)O[C@H](C)C[C@@H](O)CC(=O)O)=C1	-10.3617
3195	C=C(C)[C@@H]1COC2=C(C)C=C3OC4=CC=C(CC=C(C)C)C(O)=C4C(=O)C3=C2[C@H]1O	-9.5992
3196	CC(=C\C(=O)O)/C=C(\C)CC(C)CCCCC[C@@H](C)[C@H]1OC(=O)[C@@H]1CO	-10.7405
3197	CC[C@H](C)[C@H](NC(C)=O)C1=CC(OC)=CC(=O)O1	-10.5138
3198	CC(=O)O[C@@H]1C[C@H]2C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)N2C1	-10.3745
3199	COC1=C(C)C(=O)OC([C@](C)(O)[C@H](C)O)=C1	-10.6697
3200	C=C1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H](O)CC[C@]2(C)[C@H]1CC1=C(O)C(=O)C(CO)=CC1=O	-10.9253
3201	CC(=O)O[C@H]1C[C@@H]2C(=O)N[C@H](CC3=CC=CC=C3)C(=O)N2C1	-9.8980
3202	COC1=C(C)C(=O)OC([C@@](C)(O)[C@@H](C)O)=C1	-10.6697
3203	C/C=C(\C)[C@@H]1OC(=O)C(C)(C)[C@@H](OC)[C@H]1C	-10.4552

3204	COC(=O)CC1=C(C)C(O)=C(C)C(O)=C1CC(=O)CC1=C(O)C(C)=C(O)C(C)=C1CC(=O)OC	-11.3653
3205	CC1=CC(O)=C2C(=O)C(=O)C(=O)C3=C2C1=C1O[C@@H](C)C(C)(C)C1=C3O	-10.5218
3206	COC1=CC=CC2=C1[C@@H](OC)CC[C@@H]2O	-10.1819
3207	CC1=C(C)C2=C(CO[C@@H](C)[C@H]2C)C(O)=C1O	-10.4780
3208	C[C@H]1CC(=O)O[C@@H]1[C@@]1(CO)CC(=O)C2=C(O)C=CC=C2O1	-10.3494
3209	CC[C@@H]1CC[C@@H]([C@H](O)/C=C(C)/C=C/C(=O)O)O1	-10.3737
3210	CC1=CC2=C(CO1)C(=O)C1=CC(O)=C(O)C(C(=O)O)=C1O2	-10.7300
3211	CC[C@@H]1CC[C@@H]([C@@H](O)/C=C(C)/C=C/C(=O)O)O1	-10.3737
3212	CC1=CC(O)=CC2=C1C(=O)C=C(C[C@@H](C)O)O2	-10.6496
3213	COC1=CC(=O)OC([C@]23CC[C@H](C[C@@H](C)O2)O3)=C1	-10.3071
3214	CCCCCC[C@@H]1OC(=O)C2C(OC)=CC(=O)OC21	-10.3140
3215	C=C1CC[C@@H]2[C@](C)(CC(=O)C[C@]2(C)C(=O)O)[C@H]1CC/C(C)=C/C(=O)O	-10.8568
3216	CCC1=C(OC)C=C2C(=C1O)C(=O)C[C@H](O)[C@H]2O	-10.7076
3217	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(C[C@](C)(O)[C@H](O)[C@H]3O)C(=O)C2=C1	-10.7362
3218	CC[C@H]1CCC=C(C2=CC(OC)=CC(=O)O2)O1	-10.0562
3219	CS[C@@]12CC3=CC=CC(O)=C3N1C(=O)[C@@]1(CC3=CC=CC=C3O1)NC2=O	-9.6870
3220	CCCCOC(=O)C1=C(O)C=C(C)C=C1OC1=C(OC)C=C(O)C=C1C(=O)OC	-10.7806
3221	COC1=CC(C)=CC2=C1C(=O)C1=C(C(=O)O)C(O)=CC=C1O2	-10.9466
3222	C=C(C)C#C[C@@]12O[C@@H]1[C@@H](O)C=CC2=O	-9.4996
3223	COC(=O)C1=CC(OC)=C(O)C2=C1C(=O)C1=C(C[C@H](C)O[C@@H]1O[C@H](C)[C@H](C)O)O2	-11.0872
3224	COC1=CC(O)=C2C(=O)O[C@]3(CC(=O)C[C@H](C)O3)CC2=C1	-10.8271
3225	C=CC(C)(C)C1=C([C@@H](OC)[C@H]2NC(=O)[C@H]3CCCN3C2=O)C2=CC=CC=C2N1	-9.5648
3226	CC1=C(O)C(=O)C2=C(O)C(O)=C(O)C(C)=C2C2=C1COC2	-10.7661
3227	COC1=C(O)C(C)=C2C3=C(COC3)C(C)=C(O)C(=O)C2=C1O	-10.8421
3228	COC(=O)C1=CC(OC)=CC2=C1C(=O)C(C)=C(C[C@H](C)O)O2	-11.2595
3229	CC[C@H](C)C[C@@H](C)/C=C(\C)[C@@H]1O[C@H](C2=C(O)C(C3=CC=CC=C3)=CN(C)C2=O)CC[C@H]1C	-8.8108
3230	COC1=CC(=O)[C@](C)(O)[C@H](O)[C@H]1C	-10.1169

3231	C=CC(C)(C)C1=C([C@@H](O)[C@@H]2NC(=O)[C@@H]3CCCN3C2=O)C2=CC=CC=C2N1	-9.8153
3232	COC1=CC(=O)[C@@](C)(O)[C@@]1(O)C(C)=O	-9.7386
3233	O=C1N[C@@H](O)C2=NC3=CC=CC=C3C(=O)N2[C@H]1CC1=CC=C(O)C=C1	-9.2738
3234	C[C@@]1(CCC(=O)O)OC2=CC=C(C(=O)O)C=C2O1	-10.1672
3235	COC(=O)[C@H](O)/C=C/C1=C(O)C=CC(C(C)=O)=C1O	-10.6835
3236	CCOC1=C(C2=CC=C(O)C=C2)[C@](CC2=CC=C(O)C=C2)(C(=O)OC)OC1=O	-9.7298
3237	C=C(C)[C@@H]1CC[C@@]2(C)OC3=C(C[C@@H]12)C(=O)[C@](O)(CO)C[C@@H]3O	-10.7550
3238	CC1=C(O)C(O)=C2O[C@H]3O[C@H](C(=O)C4=C(O)C(O)=C(O)C(C)=C43)C2=C1C=O	-10.9506
3239	CC(=O)C1=CC(O)=CC(OCC2=CC=CC=C2)=C1	-9.0484
3240	CC(=O)OCC1=CC(=O)C([C@H](C)O)=CO1	-10.2162
3241	CC(O)(CO)CCC[C@]1(C)OC2=CC=C(C(=O)O)C=C2O1	-11.1183
3242	CC(=O)C1=CC(O)=C(CC2=CC=CC=C2)C(OCC2=CC=CC=C2)=C1	-8.7605
3243	C[C@H]1CC(=O)O[C@@H]1[C@]1(CO)CC(=O)C2=C(O)C=CC=C2O1	-10.3481
3244	CC(=O)C1=CC(O)=CC(OCC2=CC=CC=C2)=C1CC1=CC=CC=C1	-8.9085
3245	CO[C@H]1[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](OC2=CC=C(C(C)=O)C=C2)O[C@@H]1CO	-10.2504
3246	C[C@H]1[C@H](O)CC(=O)[C@]2(C)CC[C@H]3[C@@H]4C(C)(C)C[C@@H](O)[C@]4(C)C[C@]132	-11.3781
3247	CC1=C(CCCC(=O)O)COC1=O	-9.7206
3248	C=CC(C)(C)[C@@]12C=C(O)C(=O)N3/C(=C/C4=CN([C@@H](CC(=O)O)C(=O)N[C@@H](C)C(=O)O)C=N4)C(=O)N[C@]31N(OC)C1=CC=CC=C12	-9.0218
3249	O[C@@H]1[C@@H](O)C2(OC3=CC=CC4=CC=CC(=C34)O2)C23OC2([C@@H](O)C=C[C@H]3O)[C@H]1O	-9.5496
3250	C=CC(C)(C)[C@@]12C=C(O)C(=O)N3/C(=C/C4=CN([C@@H](CC(=O)O)C(=O)N[C@@H](C)C(=O)OC)C=N4)C(=O)N[C@]31N(OC)C1=CC=CC=C12	-9.0722
3251	COC(=O)C[C@H](C)[C@@H](O)[C@]1(C(=O)OC)CC(=O)C2=C(C=CC(C3=CC=C4O[C@]5(C(=O)OC)C(=C(O)C4=C3O)C(=O)C[C@H](C)[C@H]5O)=C2O)O1	-10.2830
3252	CCCCC[C@H]1CC2=C(C)C(O)=C(C)C(O[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)=C2CO1	-11.0658
3253	C/C=C\C(C=O)=C/C=C/[C@H](O)[C@@H](C)O	-9.9530
3254	C/C=C(\C)C(=O)[C@@H](C)C1=CC(=O)C2=C(O[C@]3(C)CC[C@H]4O[C@@H](C(C)(C)O)CC[C@]4(C)[C@H]3C2)C1=O	-10.9877
3255	O=C1N[C@@H](O)C2=NC3=CC=CC=C3C(=O)N2[C@H]1CC1=CC=CC=C1	-9.3490

3256	C[C@H]1CC2=C(O1)C(Cl)=C(O)C(Cl)=C2C(=O)O	-10.0582
3257	COC[C@]1(O)CC[C@H](C(C)C)[C@@H](/C=C(\CO)C(=O)O)[C@@H]1C(=O)O	-10.5774
3258	C/C=C/C1=CC2=CC3=C(C(=O)CCCCCCC)C(=O)O[C@@]3(C)C(=O)C2=CO1	-9.3157
3259	COC(=O)C1=CC=C(CCCCCCCCCCC2=CC=C(C(=O)OC)N=C2)C=N1	-8.5512
3260	CC(=O)NC[C@@H]1CS[C@@H]([C@H]2COC(C3=CC=CC=C3O)=N2)N1C	-10.3805
3261	C[C@@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H](O)[C@H](O)C[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C=C3CNC(=O)C3=C1O2	-11.2658
3262	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC3=C(C2=C1)[C@@H](C)C[C@@H]3O	-11.0337
3263	CCCCCCCCC1=C(O)C=C(O)C=C1CC(=O)O	-10.7881
3264	CC(=O)OC1=C2C[C@H](O)C(=O)C(CC=C(C)C)=C2OC(C)(C)C1	-10.2903
3265	CC[C@@H](O)C[C@H](C)C1O[C@]1(C)/C=C/C(=O)N[C@H](CO)[C@@H](C)CC	-11.0393
3266	C=C1CC2=C(Cl)C=C3NC4=C5C3=C2[C@H]2[C@@H]1C[C@@H]2C(C)(C)O[C@H]5[C@@H]1CC[C@@]2(O)[C@@]35O[C@@H]3[C@@H](O)[C@@H](C(=C)C)O[C@H]5CC[C@]2(C)[C@@]41C	-9.3299
3267	C[C@@H]1CC(=O)C2=C(O1)O[C@]1(C)CC[C@H]3C(C)(C)[C@H](O)CC(=O)[C@]3(C)[C@H]1C2	-11.2355
3268	CC(=O)O[C@@H](CC1=C(C)C=C(O)C=C1OC1=CC(C)=CC(O)=C1)C(C)(C)O	-10.3210
3269	CC1=C[C@@H](O)[C@H]2C[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H](C)[C@@H]2[C@H]1/C=C/C=C(\C)C(=O)O	-10.5755
3270	COC1=CC=CC2=CC=C(C3=CC=C4C=CC=C(OC)C4=C3O)C(O)=C12	-9.4179
3271	CC1(C)CC(=O)C2=C(O1)[C@H](O)[C@]1(O)C[C@H](C(C)(C)O)O[C@H]1C2	-10.5951
3272	COC1=CC(O)=C2C(=O)[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@@](C)(O)[C@H](O)[C@@H]3[C@@H](O)C2=C1	-10.7679
3273	CC1=CC(O)=C(C)C(OC(=O)C2=C(C)C(C)=C(OC(=O)C3=C(C)C=C(O)C(C)=C3O)C(C)=C2O)=C1	-10.1547
3274	COC(=O)C1=C(C)C=C(OC2=CC(C)=CC(OC)=C2O)C=C1O	-10.5183
3275	C=C1CCC(=C)C(=C)C1	-8.6733
3276	CCC(=O)OC1CCCCC1	-8.8548
3277	O=C(O)CCC(O)C1=CC=CN=C1	-9.5676
3278	CC(=O)NCCCCCCCCCCCCCC(C)C	-9.8676
3279	CC=CC=CC(=O)OCC	-9.5339
3280	O=C1OCC2=C(O)C=CC=C12	-10.0366
3281	CC(=O)N[C@@H]1[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](CO)O[C@H]1N	-10.0192

3282	CCOC1=NC=CS1	-9.2041
3283	O=C1CC[C@@H](C2=CC=CN=C2)N1CO	-8.8309
3284	CC(C)C(=O)OCC1=CC=CC=C1	-9.2476
3285	COC(=O)C(C)C	-9.5496
3286	CCC1=CC(C)=CC=C1O	-8.8301
3287	CC1=C(C)SC=N1	-9.2658
3288	CCCC(=O)C(O)CCC	-9.7687
3289	CC(C)[C@@H]1N[C@@H]([C@]2(C)C[C@@H]3C(=O)N[C@](C)(O2)C2=NC4=CC=CC=C4C(=O)N23)N(C2=CC=CC=C2)C1=O	-8.3550
3290	CC(C)=CCC[C@]12C3=CC4=C(C=C3CC[C@@]1(C)[C@H](C)CC[C@@H]2O)NC1=CC=CC=C14	-9.1443
3291	C/C=C/[C@@H]1C(C)=C[C@@H]2C[C@H](C)CC[C@H]2[C@]1(C)/C(O)=C1\C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C1=O	-10.7668
3292	O[C@@H]1[C@@H](O)C2(OC3=CC=CC4=CC=CC(=C34)O2)C23OC2([C@@H](O)CC[C@H]3O)[C@H]1O	-10.2170
3293	CC(=O)O[C@H]1CCC(=O)O[C@H]1[C@H]1C2C=CC=CC(O2)[C@H]1C	-10.5664
3294	COC1=CC(OC)=C2C(=C1)C(C1=C(OC)C3=C(O)C4=C(O)C=C(C)OC4=CC3=CC1=O)=C(O)C1=C2OC(C)=CC1=O	-9.6825
3295	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(C(=O)C2=C1)[C@H](O)[C@](C)(O)[C@@H](O)[C@H]3[C@H]1C2=C(C(=O)C3=CC(OC)=CC(O)=C3C2=O)[C@H](O)[C@](C)(O)[C@H]1O	-9.6559
3296	CC(C)=CCC1=C([C@H](O)C2OC2(C)C)C=CC2=C1C1=C(N2)[C@@]2(C)[C@@H](CC[C@@]3(O)C(C)(C)C(=O)CC[C@]23C)C1	-10.3452
3297	COC(=O)C[C@H](C)[C@@H](O)[C@]1(C(=O)OC)CC(=O)C2=C(C=CC(C3=CC=C(O)C4=C3O[C@]3(C(=O)OC)C(=C4O)C(=O)C[C@H](C)[C@H]3O)=C2O)O1	-10.2263
3298	O=C1CCC2(OC3=CC=CC4=CC=CC(=C34)O2)[C@H]2[C@@H]1[C@@H](O)CC[C@H]2O	-10.2595
3299	COC1=CC=C(C2SS[C@@]34C[C@]5(O)[C@H](O)C=C[C@@H](O)[C@@H]5ON3C(=O)[C@@H]2NC4=O)C(O)=C1OC	-10.8768
3300	C/C=C/[C@@H]1C(C)=C[C@@H]2C[C@@H](COC(C)=O)CC[C@H]2[C@]1(C)/C(O)=C1/C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C1=O	-10.8353
3301	CC(=O)O[C@@H]1[C@H](C)CC(=O)C2=C(O)C3=C(C=CC(C4=CC=C5O[C@@]6(CO)C(=C(O)C5=C4O)C(=O)C[C@@H](C)[C@H]6OC(C)=O)=C3O)O[C@@]21CO	-9.8191
3302	COC1CC(=O)[C@@]23C(=O)N[C@@H](CC(C)C)[C@@H]2[C@H](C)C(C)=C[C@@H]3/C=C(/C)CCC(O)C1=O	-10.9645
3303	CCC(=O)[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H](C)C=C(C)C[C@@H](C)[C@H]1OC(=O)CC2=C(CC)C(=O)C(C)(C/C(C)=C\C[C@@H](O)[C@H]1C)O2	-10.2743

3304	C=C(CC[C@H](C)[C@@H]1CC=C2C3=C([C@H](O)[C@@H](OC(C)=O)[C@]21C)[C@]1(C)C[C@H](O)[C@@H](OC(C)=O)C(C)(C)[C@H]1CC3)C(C)C	-10.5472
3305	CCC(C)C(CO)NC(=O)CC(O)CC(C)=O	-10.5270
3306	CCO[C@@H]1C=C2[C@@H]3[C@H](O)C[C@H]([C@H](C)/C=C/[C@H](C)C(C)C)[C@@]3(C)CC[C@@H]2[C@@]2(C)CCC(=O)C[C@]12O	-10.9365
3307	COC(=O)[C@@]12C(=O)C(C)=C(O)[C@]1(C)C(C)=C[C@H]1[C@]3(CO)CC[C@H](OC(C)=O)C(C)(C)[C@H]3CC[C@@]12C	-10.5305
3308	O=C1C=CC2(OC3=CC=CC4=CC=CC(=C34)O2)[C@H]2[C@@H]1[C@@H](O)CC[C@H]2O	-9.3412
3309	CC1=C(O)C(O)=C(O)C2=C1CO[C@H]2[C@H]1OC(O)C2=C(C)C(O)=C(O)C(O)=C21	-10.5858
3310	COC(=O)[C@]12C(=O)[C@@](C)(O)C(=O)[C@](C)(C[C@H]3C(C)=C4CC(=O)OC(C)(C)C4=CC[C@@]31C)[C@]21CO1	-10.6755
3311	COC(C=C[C@H](C)[C@H]1CC[C@]2(C)C[C@@H]3C(C)=CC(=O)[C@H]3/C(C=O)=C\C[C@@H]12)C(C)(C)O	-10.6503
3312	CC1(C)OC1[C@@H]1O[C@H]2[C@@H](O[C@@H]3CC[C@]4(C)[C@](O)(CC[C@@H]5CC6=C(NC7=CC=CC=C67)[C@]54C)[C@@]34O[C@@H]24)C(C)(C)O1	-10.3106
3313	C=C1OC(=O)C2=C(O)C=C(O)C=C2C1O	-10.1517
3314	CC=CC1=C(C=CC(C)O)COC1=O	-9.9272
3315	C[C@@H]1CC(=O)C2=C(O)C=CC=C2O1	-9.9440
3316	CC(=O)OC[C@@]1([C@H]2OC(=O)C[C@@H]2C)CC(=O)C2=C(O)C=CC(C3=CC=C4O[C@@]5(CO)C(=C(O)C4=C3O)C(=O)C[C@@H](C)[C@H]5OC(C)=O)=C2O1	-10.0468
3317	CC=CC1=CC(=O)C(C(=O)C2=C(OC)C=C(OC)C=C2C(=O)OC)=CO1	-9.8997
3318	CC[C@H](C)C(=O)[C@@H](C)C1=CC(=O)C2=C(O[C@]3(C)CC[C@H]4O[C@@H](C(C)(C)O)CC[C@]4(C)C3C2)C1=O	-11.0162
3319	COC1=CC2=C(C(=O)CCC2O)C(O)=C1C=O	-10.8478
3320	C[C@H](O)[C@@H]1OC(=O)C2=C(O)C=C(O)C=C21	-10.2371
3321	CC(=O)CC1=C(C)C(O)=C2C(=C1O)C(=O)CCC2O	-10.9040
3322	CC[C@H](C)[C@@H]1NC(=O)C(C(C)=O)=C1O	-10.0115
3323	CCCCCCCC1(O)CC2=C(O)C3=C(C(=O)C(=O)C(OC)=C3)C(O)=C2CO1	-10.6322
3324	COC1=CC(=O)CC(C)(O)[C@]12OC1=C(Cl)C(OC)=CC(OC)=C1C2=O	-10.4228
3325	CC[C@H](C)[C@@H](O)[C@@H](C)C(=O)O[C@H]1CC(CC(=O)[C@H]2[C@H](C)CCC[C@@H]2O)=C(C)C(=O)[C@@]1(C)O	-10.7955
3326	C[C@@H]1C[C@@H]2CCC[C@H](O)[C@@H]2C(=O)O1	-10.1748

3327	C=C(C)[C@H](O)CC1=CC=C(O)C2=C1OC1=CC(C)=C3OC[C@H](C(=C)C)[C@@H](O)C3=C1C2=O	-10.0593
3328	CCCCCCCC1(O)CC2=C(CO1)C(=O)C1=C(C=C(OC)C(OC)=C1O)C2=O	-10.9985
3329	CC1OC(=O)[C@@H](C)NC(=O)[C@@H](CCC(N)=O)NC(=O)[C@@H]([C@H](C)O)NC(=O)C(CC2=CC=C(O)C=C2)NC(=O)[C@@H](C(C)C)NC(=O)[C@H]1NC(=O)CC(O)CCCCCCCCCCCCCN=C(N)N	-10.6221
3330	O=C1NC(O)=C2C=C3C=CC=CC3=NC2=C1C1=CC=C(CO)O1	-9.0284
3331	COC(C=C[C@H](C)[C@H]1CC[C@]2(C)C[C@H]3[C@@H](C(=O)C[C@@]3(C)O)/C(C=O)=C\C[C@@H]12)C(C)(C)O	-11.1382
3332	COC1=CC=C2C3=C([C@H](C=C(C)C)N4C(=O)[C@@H]5CCCN5C(=O)[C@]4(O)C3=O)N(CC=C(C)C)C2=C1	-10.2087
3333	C[C@@H]1CC2=C(Cl)C(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.0410
3334	O=C1C=CC(=O)C2=C1[C@@H](O)CCC21OC2=CC=CC3=CC=CC(=C23)O1	-8.9352
3335	COC1OC(C)C(O)C(=O)C1OC(=O)C1=C(C)C=C(O)C=C1O	-10.5201
3336	CC[C@H](C)[C@@H](O)[C@@H](C)C(=O)O[C@@]1(C)C(=O)C2=C(C=C(O)C3=C2CCC[C@H]3C)C(C)(O)C1=O	-10.4190
3337	CC[C@H](C)C(=O)C1=C(NCCO)[C@](C)(O)C(=O)C(C)=C1OC	-10.7224
3338	C[C@@H](O)C1C=CC(C2CCC(=O)O2)O1	-9.8255
3339	CC[C@@H](O)[C@H]1C[C@H]2OC(=O)C3=C(C=C(OC)C(OC)=C3O)[C@H]2O1	-10.8919
3340	CCC[C@H]1OCC2=C([C@H](O)[C@H]3O[C@H]3C2=O)[C@@H]1O	-10.4626
3341	CC[C@H](C)/C=C/[C@H]1OC(=O)[C@H](C)[C@H](O)[C@@H]1C	-10.6174
3342	CC1=CC(=O)[C@H]2/C(C=O)=C\C[C@H]3[C@@H]([C@@H](C)/C=C\[C@H](O)C(C)(C)O)CC[C@]3(C)C[C@H]12	-10.7200
3343	C/C=C1\NC(=O)C(C(=O)[C@]2(C)[C@H](/C=C/C)C(C)=C[C@@H]3C[C@@H](COC(C)=O)CC[C@H]32)=C1O	-10.5657
3344	C=C1CC2=CC=C3NC4=C5C3=C2[C@H]2[C@@H]1C[C@@H]2C(C)(C)O[C@H]5[C@@H]1CC[C@@]2(O)[C@@]35O[C@@H]3[C@@H](O)[C@@H](C(=C)C)O[C@H]5CC[C@]2(C)[C@@]41C	-9.6901
3345	CC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)OC[C@@H](O)CO	-10.6288
3346	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CC[C@]2(O)C3=CC(=O)C4=CC(=O)CC[C@]4(C)[C@@]3(O)CC[C@]12C	-10.9141
3347	O=C1C[C@H](O)[C@H](O)C2=C[C@H](O)[C@@H](O)C3(OC4=CC=CC5=CC=CC(=C45)O3)[C@]12O	-9.6656
3348	C[C@@H]1C2C=CC=CC(O2)[C@@H]1[C@H](O)[C@@H]1CCC(=O)O1	-10.4612

3349	COC1=CC=C(C(=O)O[C@H]2C=COC=C3C[C@]45SSSS[C@](CC6=CC=C(O)C=C6)(C(=O)N4[C@@H]32)N(C)C5=O)C=C1O	-9.8382
3350	COC(=O)[C@@]12C(=O)C(C)=C(O)[C@]1(C)C(C)=C[C@H]1[C@]3(C)CC[C@H](OC(C)=O)C(C)(C)[C@H]3CC[C@@]12C	-10.6731
3351	CC(=O)O[C@H]1C=CC(=O)O[C@H]1[C@H]1C2C=CC=CC(O2)[C@H]1C	-10.2924
3352	CC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(O)C(C4=CC(O)=C5C(=O)C6=CC(C)=CC(O)=C6C(=O)C5=C4O)=CC(O)=C3C(=O)C2=C1	-9.4989
3353	COC(=O)C1(O)O[C@]2(C(=O)OC)C3=C(OC4=CC(C)=CC(O)=C4C3=O)[C@@H]3C4=C(C[C@H]1[C@@H]32)OC1=CC(C)=CC(O)=C1C4=O	-9.7885
3354	CC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)O[C@H]1[C@@H]2COC(C=CC(=O)O)=CC2=CC(=O)[C@]1(C)O	-10.1465
3355	C[C@]12CCC(=O)O[C@H]1C1=C[C@H]3OC(=O)[C@@]4(C)CCC[C@@](C)([C@@H]34)[C@]1(O)[C@H]2O	-10.8806
3356	CC[C@H](C)C(=O)[C@@H](C)C1=CC(=O)C2=C(O[C@]3(C)CC[C@H]4O[C@@H](C(C)(C)O)CC[C@]4(C)[C@H]3[C@@H]2O)C1=O	-10.7948
3357	C=CC(C)(C)[C@]12C[C@H]3C(=O)NC4=CC=CC=C4C(=O)N3[C@H]1N(C(C)=O)C1=CC=CC=C12	-8.2947
3358	C[C@@H]1C[C@@H]2C=C[C@@H]3COC(=O)[C@]3(C)[C@H]2C[C@H]1O	-10.7001
3359	C[C@@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H](O)CC[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O2)C2=C(C3=NC(=O)C4=CC(O)=C5C[C@]6(OC5=C34)[C@@H](C)CC[C@@H]3C(C)(C)[C@@H](O)CC[C@]36C)NC(O)=C2C=C1O	-10.2366
3360	C/C=C/C1=C(C[C@H]2O[C@@H]2C)COC1=O	-9.6184
3361	CN1C(=O)[C@@]23C[C@]4(C5=CNC6=CC=CC=C56)C5=CC=CC=C5N[C@@H]4N2C(=O)[C@]1(C)SS3	-9.1525
3362	C[C@H]1OC(=O)C2=C(O)C=C3O[C@@]4(C)[C@@H](O)C[C@H]5C(C)(C)C(=O)C=C[C@]5(C)[C@@H]4CC3=C2[C@H]1O	-10.7930
3363	COC1=C(C)OC=CC1=O	-10.0996
3364	C/C1=C/[C@@H](C)C/C=C\[C@H]2[C@@H]3O[C@]3(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC4=CNC5=CC=CC=C45)NC(=O)[C@]32C2=CC=C(N2)C(=O)C1=O	-8.5849
3365	CC(=O)OC[C@]12OC3=C(C4=CC=C(O)C5=C4O[C@@]4(COC(C)=O)C(=C5O)C(=O)C[C@@H](C)[C@H]4OC(C)=O)C=CC(O)=C3C(O)=C1C(=O)C[C@@H](C)[C@H]2OC(C)=O	-10.6209
3366	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CCC(=O)[C@]23CC(=O)C4=CC(=O)CC[C@]4(C)[C@H]2CC[C@]13C	-10.6824
3367	CC1=CC(O)=C(C)C(OC(=O)C2=C(C)C=C(O)C=C2O)=C1	-10.3210

3368	CCC(C)(O)C=CC1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@@]3(C)O[C@]4(O)[C@H](C)[C@@H](C)OC(=O)[C@@H]4[C@H]3C2=CO1	-10.3677
3369	CC[C@@H]1C(=O)C2(C)C/C(C)=C/C[C@H]([C@H](C)[C@H](O)[C@H](C)CC(C)=C[C@H](C)[C@@H](O)[C@H](C)[C@@H](O)CC)OC(=O)CC1(O)O2	-10.4643
3370	COC1=C(O)C(C)=C2C(=O)OCC2=C1O	-10.5784
3371	CC1=CC(O)=CC2=C1C[C@@H]1[C@H](C)CO[C@]1(C)O2	-10.5211
3372	COC1=CC(O)=CC(C)=C1C=O	-10.2465
3373	C=C1[C@@H](O)C2C=CC[C@H](C)C(=O)[C@](C)(O)[C@@H]3O[C@H]3[C@@H](OC(C)=O)[C@]23C(=O)N[C@@H](CC2=CC=CC=C2)[C@@H]3[C@@H]1C	-8.9128
3374	CCCC1=C(CCC(C)=O)COC1=O	-9.7230
3375	CCCCC[C@H]1CC2=C(Cl)C(O[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)=C(C)C(O)=C2CO1	-10.8412
3376	CC(=O)OCC1=CC(C(=O)O)=CO1	-10.0084
3377	CC1(C)CCC[C@]2(C)C3=C(CC[C@@H]12)CC1(O)C(=O)C(CO)=CC(O)=C1C3	-11.1521
3378	CC(=O)O[C@H]1C2=CC3=C(CO)C(=O)CC[C@@]3(C)CC[C@]2(C)[C@@H](C(C)C)[C@H]1O	-11.0284
3379	C/C=C(\C)C(=O)O[C@H](/C=C/[C@H](O)[C@@H](C)O)[C@H]1CCC(=O)O1	-10.8264
3380	COC1=CC(O)=C2C(=C1)C(=O)[C@@H]1[C@H](C[C@@H](O)[C@@](C)(O)[C@@H]1O)[C@H]2O	-11.0233
3381	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=CN=C(C)C=C3C(=O)C2=C1	-9.9190
3382	CC(=O)N(O)CCC[C@@H]1NC(=O)[C@H](CCCN(O)C(=O)/C=C(\C)CCO)NC1=O	-10.8158
3383	O=C1CCC2(OC3=CC=CC4=CC=CC(=C34)O2)C2=C(Cl)C=CC(O)=C12	-9.3233
3384	O=C1C=CC2(OC3=CC=CC4=CC=CC(=C34)O2)[C@H]([C@H]2CCC(=O)O2)C1	-9.6095
3385	O=C1CC[C@@H](O)[C@@H]2C1=C(O)C=CC21OC2=CC=CC3=CC=CC(=C23)O1	-9.1275
3386	C=C1CC[C@H]2C(C)(C)C(=O)CC[C@]2(C)[C@H]1CC1=C(O)C(=O)C(CO)=CC1=O	-10.7328
3387	COC1=CC(CO)=CC2=C1C(=O)C1=C(C(=O)O)C(O)=CC=C1O2	-11.1309
3388	COC1=C(Cl)C(C)=C(Cl)C(O)=C1C(=O)C1=C(C=O)C(O)=CC(O)=C1CC=C(C)C	-10.1647
3389	CCCOC(=O)[C@]1(CC2=CC=CC=C2)OC(=O)C(O)=C1C1=CC=CC=C1	-9.4101
3390	OC1=CC=C2C3=C1[C@@H](O)[C@@H]1O[C@@H]1[C@H]3C1=CC=C(O)C3=C1[C@H]2[C@H]1O[C@H]1[C@@H]3O	-9.7475
3391	COC1=C(C)C(OCC=C(C)C)=CC(C)=C1CO	-10.6978

3392	CC(C)[C@H]1CCC2=C(C(=O)OC2)[C@@H]1/C=C(\CO)C(=O)O	-10.9439
3393	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC3=C(O)C(OC)=CC(O)=C3C2=C1	-10.8323
3394	COC1=CC(O)=C2C(=O)[C@H]3C[C@@H](O)[C@@](C)(O)[C@H](O)[C@@H]3[C@@H](O)C2=C1	-11.0660
3395	C[C@@]12CCC[C@]3(C)C(=O)O[C@H]([C@H]4O[C@]45COC(=O)C[C@H]15)[C@H]23	-10.9256
3396	C[C@H]1CCC[C@H]2O[C@H]2C(=O)C2=C(O)C=C(O)C=C2CC(=O)O1	-10.8336
3397	OC1=CC=CC2=C1[C@@H](O)[C@@H]1O[C@@H]1C21OC2=CC=CC3=CC=CC(=C23)O1	-9.1015
3398	COC1=CC(O)=C2C(=O)[C@@]34O[C@@]3(CO[C@H]4O)[C@H](O)C2=C1	-10.4919
3399	C[C@H]1[C@H]2C(=O)O[C@H]2C[C@@]1(C)O	-9.7903
3400	C[C@@H](O)CCCCCC[C@H](O)/C=C/C(=O)O	-10.4410
3401	CCOC(=O)C1=C(O)C=C(O)C=C1CCCCCCC[C@H](C)O	-10.8371
3402	CCOC1=C(C=O)C(=O)OC([C@H]2[C@@H]3CCCC[C@@H]3C=C[C@@H]2C)=C1	-10.4752
3403	CC[C@@H](O)C[C@H](C)[C@H](O)[C@](C)(O)/C=C/C(=O)N[C@H](CO)[C@@H](C)CC	-10.8056
3404	CC1=CC2=C(CC3=C(O)C=C(C)OC3=O)C(=O)[C@](C)(O)[C@@H](O)C2=CO1	-9.7706
3405	COC1=CC=CC2=CC=C(C3=CC=C(O)C4=C(OC)C=CC=C34)C(O)=C12	-9.5082
3406	CC[C@@H](O)[C@@H]1C[C@@H]2OC(=O)C3=C(C=C(OC)C(OC)=C3O)[C@@H]2O1	-10.9099
3407	C=C(C)C#CC1=CC=C(O)C2=C1CC(C)(C)O2	-9.7743
3408	CC(O)[C@@]12SS[C@]3(C(=O)N1C)[C@@H](O)[C@]1(C4=CNC5=CC=CC=C45)C4=CC=CC=C4N[C@@H]1N3C2=O	-9.2444
3409	COC1=C(CO)C(=O)OC([C@H]2[C@@H]3CCCC[C@@H]3C=C[C@@H]2C)=C1	-10.5963
3410	CC1=CC[C@]2(C)C[C@@H](O)[C@](O)(C(C)C)C2CC1	-10.4004
3411	CC1=C2C[C@]3(C)[C@@H](C)[C@H](O)C[C@@H]4O[C@@]43C[C@H]2OC1=O	-10.9663
3412	COC(=O)C1=CC(OC)=C(Cl)C2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(C)C=C1O2	-11.0721
3413	CC1=C(O)C(C)=C2C[C@H](CCCC(C)O)OC(=O)C2=C1O	-10.9722
3414	O=C1NC(=O)[C@H](CC2=CC=CC=C2)N2C1=NC1=CC=CC=C1C2=O	-8.8423
3415	CCCC[C@]1(C2=CC(OC)=CC(=O)O2)C[C@@H](O)C(=O)O1	-10.7250
3416	CC(=O)OCC[C@H]1[C@H]2C=C(COC(C)=O)[C@]1(C)CCCC2(C)C	-10.5595

3417	C[C@H]1C=C[C@H]2CCCC[C@H]2[C@@H]1C1=CC(=O)C=CO1	-9.4378
3418	CC1=CC(O)=C(C)C(OC(=O)C2=C(C)C(C)=C(OC(=O)C3=C(C)C=C(O)C=C3O)C(C)=C2O)=C1C	-10.3515
3419	C/C=C/C=C/C(=O)CC(O)[C@]1(C)OC(=O)C(C)=C1O	-10.5249
3420	COC1=CC(O)=C2C(=O)NC3=C(C2=C1)[C@@H](C)CC3=O	-10.4951
3421	C[C@H]1CC2=C(C=C(O)C=C2C(=O)O)O1	-10.2444
3422	COC(=O)[C@@]1(O)C(=O)C2=C(O)C=CC(O)=C2C12OC1=CC=CC3=CC=CC(=C13)O2	-9.3714
3423	COC1=CC(O)=C2C(=O)O[C@@]3(C)C[C@H](O)[C@@H](OC(C)=O)C=C3C2=C1	-10.8795
3424	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC3=CC(O)=C(O)C=C3C2=C1	-10.5751
3425	C[C@@]12CCO[C@@H]1C1=CC[C@@H]3[C@](C)(CCC[C@@]3(C)O)[C@H]1CC2	-10.7608
3426	COCC1=CC(C)=CC2=C1OC1=CC=C(C)C=C1C2	-9.1142
3427	CCC=C[C@H](O)[C@H](O)C1=C(C)C(=O)[C@]2(O1)C(=O)N[C@@](OC)(C(=O)C1=CC=CC=C1)[C@@H]2O	-9.5488
3428	CC[C@H](C)C(=O)O[C@H]1C[C@@H](C)C=C2C=C[C@H](C)[C@H](CC[C@@H](O)C[C@@H](O)CC(=O)OC)[C@H]21	-10.5769
3429	O=C1C[C@H]2C(=C3C4=C2C=CC(O)=C4[C@@H](O)C[C@@H]3O)C2=CC=CC(O)=C12	-9.7264
3430	COC(=O)O[C@@]12C(=O)N[C@@H](CC3=CC=CC=C3)[C@@H]1[C@H](C)[C@@]1(C)O[C@H]1[C@@H]2/C=C/C[C@H](C)C(=O)C(C)(O)CC(OC)OC	-9.4604
3431	C[C@H]1CC2=C(C=CC=C2C(=O)O)O1	-9.9855
3432	C[C@H]1C=C[C@H]2C[C@H](O)CC[C@H]2[C@@H]1C1=CC(=O)CCO1	-10.5567
3433	CC1=CC(O)=C(C)C(O)=C1C=O	-10.4651
3434	O=C1CC2OC3(O)CC[C@@H](O)[C@@H]1[C@H]3C21OC2=CC=CC3=CC=CC(=C23)O1	-10.2965
3435	COC1=C(O)C=CC2=CC=CC(O)=C12	-9.8667
3436	C/C=C/C1=CC2=CC3=C(C(=O)CCCCC)C(=O)O[C@@]3(C)C(=O)C2=CO1	-9.5886
3437	CC1=C[C@]2(C)C(=C(C)[C@@H]3[C@@H]4C[C@H](C)C[C@H](C)[C@H]4[C@H]4OC5=CC=C(C=C5)C[C@@H]5C(=O)NC(=O)[C@H]5C(=O)[C@H]2[C@@H]43)[C@@H]1C	-9.2267
3438	CC(C)=C/C=C\[C@H](C)C1CC[C@]2(C)C[C@H]3[C@H](C(=O)C[C@@]3(C)O)/C(C=O)=C\C[C@@H]12	-10.9348
3439	COC(=O)C1=CC=C2C(=O)C3=C(O)C=C(CO)C=C3OC2=C1O	-10.9374
3440	C[C@H]1CC[C@@H]2[C@H]1C[C@H](C(C)(O)CO)C[C@@H](O)[C@@]2(C)O	-10.6004
3441	CCC(C)/C=C(C)/C=C/C=C/C(=O)N[C@H](CO)[C@](C)(O)C(C)=O	-10.6460

3442	C=C(CC=CC)C(C)C	-8.7922
3443	CC(C)=CCCC(C)CCOC(=O)C1=CC=CC=C1N	-10.1171
3444	CC=CC1=CC=C(OC(=O)CC2=CC=CC=C2)C(OC)=C1	-9.3072
3445	CCC=CCC1=C(C)C(=O)CC1	-9.2440
3446	C=CCCC(=O)O	-9.0962
3447	CCCCC1CCCC(=O)O1	-8.6826
3448	CC(=O)OC(C)(C)[C@H]1O[C@H]2CC[C@@]3(C)[C@@](O)(CC[C@H]4CC5=C(NC6=CC=CC=C56)[C@@]43C)C2=CC1=O	-9.9084
3449	CC[C@H](CC[C@@H](C)C1CCC2C3CCC4=CC(=O)CC[C@]4(C)C3CC[C@@]21C)C(C)C	-9.9368
3450	CC(=CC(=O)O)CCO	-9.8066
3451	O=C1CCC2CCCN12	-8.9070
3452	CC(=O)O[C@H]1CC[C@@]2(C)C(CC[C@@]3(C)OC4=C(CC23)C(=O)OC(C2=CC=CN=C2)=C4)C1(C)C	-9.9776
3453	O=C1OC(=CC2=CC=C(O)C(O)=C2)C(O)=C1C1=CC=C(O)C=C1	-9.3296
3454	O=C(O)CC1=CC=C(O)C(Cl)=C1	-9.7470
3455	CCC1=C(OC)C=C2C(=O)C(OC)=CC(=O)C2=C1O	-10.4631
3456	C=C(C)C#CC1=CC(C(=O)O)=CC=C1O	-10.5839
3457	C=C1C2C(=O)OC[C@H]3[C@@H]2[C@@H](C(C)C)CC[C@@]13C	-10.3297
3458	O=C(CO)C1=CC=CO1	-9.8089
3459	CC(C)=C/C=C\[C@H](C)[C@H]1CC[C@]2(C)C[C@H]3[C@@H](C(=O)C[C@@]3(C)O)/C(C=O)=C\C[C@@H]12	-10.9412
3460	CC1=CC2=C(C=C1O)C(=O)C1=C(O)C=C(O)C=C1C2=O	-10.0392
3461	CC1=CC(O)=C(C)C(O)=C1C	-10.0941
3462	O=C1C[C@@H](O)[C@H](O)C2=CC=CC(O)=C12	-10.1752
3463	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)C1CCC2C34C=CC5(C[C@@H](O)CC[C@]5(C)C3CC[C@]12C)OO4	-10.6167
3464	CCCCCCC/C=C/[C@H](O)CCCCCCCC(=O)O	-10.4658
3465	C[C@@H]1CCCCC[C@H](O)[C@H](O)/C=C/C(=O)O1	-10.3114
3466	C[C@H](O)CCC1=CC=C(C(=O)O)N=C1	-9.5424
3467	O=C(O)C1=CSC(C2=CC=CC=C2O)=N1	-9.9415
3468	CCCCCC1=C(C=O)[C@H]2OC(C)(C)[C@H](O)C[C@]23O[C@@H]3C1=O	-10.9584
3469	C[C@H]1OC(=O)/C=C\C(=O)/C=C/[C@H]2O[C@@H]12	-9.4969
3470	CC(C)=CCC1=C(O)C=C2OC(=O)C3=C(C)C=C(O)C(C=O)=C3OC2=C1C	-10.0645
3471	CC(=O)OCC1O[C@@H](OC2=CC=C(C(=O)/C=C/C3=CC=C(O)C(O)=C3)C(O)=C2O)C(O)[C@@H](O)[C@@H]1O	-10.3680
3472	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(C(=O)C2=C1)[C@@H](O)[C@](C)(O)[C@H](O)C3	-10.7516

3473	CC(=O)OC(C)(C)[C@H]1C[C@H]2CC[C@@]3(C)[C@@H](CC[C@H]4CC5=C(NC6=CC=CC=C56)[C@@]43C)C2=CC1=O	-9.9714
3474	C=C(C)[C@@H]1CC[C@@]2(C)OC3=C(C[C@@H]12)C(=O)[C@H](OC)C[C@@H]3O	-10.8323
3475	CC1=CC(O)=CC(OC2=CC(C)=C(C(N)=O)C(O)=C2)=C1	-10.8083
3476	COC1=CC2=C(C(=O)C[C@H](O)[C@H]2O)C(O)=C1CCO	-10.8477
3477	C[C@H]1C[C@@H](O)C[C@H](C[C@H]2CC3=CC(O)=CC(O)=C3C(=O)O2)O1	-10.8510
3478	CC(C)(C)C1=CC(O)=CC=C1O	-9.5701
3479	COC(=O)C=CC1=C(CO)C(OC)=C(CO)C(=O)O1	-10.3785
3480	CC(C)=CCC1=CC(C=C2OC(=O)C(C3=CC4=C(C=C3O)OC(C)(C)CC4)=C2O)=CC=C1O	-9.2669
3481	CC1=C(O)C(C)=C2C(=C1O)C(=O)OC(C)(O)C2C	-10.5496
3482	CCC1=C(OC)C=C2C(=C1O)C(=O)CC[C@H]2O	-10.8026
3483	C/C=C(\C)C(=O)O[C@H]1C=CC(=O)O[C@H]1/C=C\C(=O)C(C)O	-10.4738
3484	CC1=CC=C(O)C2=C1[C@H](O)[C@@H](C)OC2=O	-10.3607
3485	C=C(C)[C@H]1COC2=C(C)C=C3OC4=C(CC=C(C)C)C=CC(O)=C4C(=O)C3=C2[C@@H]1O	-9.6674
3486	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(C4=C(OC)C=C5C(=O)C6=C(C(=O)C5=C4O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@](C)(O)[C@@H]6O)C(O)=C(C)C=C3C(=O)C2=C1	-9.5576
3487	CC(=O)CC1=C(C)C=C2C(=O)C=CC(=O)C2=C1O	-10.6182
3488	COC1=CC(C2=CC3=C(C[C@]4(O)[C@@]5(C)C(=O)C=CC(C)(C)[C@]5(O)CC[C@@]4(C)O3)C(=O)O2)=CC(OC)=C1O	-10.2508
3489	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC(C[C@H](C)O)=CC2=C1	-10.9149
3490	CC(=O)O[C@@H]1[C@@H]2C3=CC=CC4=C3C(=CN4)C[C@H]2N(C)C[C@H]1C	-9.2599
3491	COC1=CC(=O)C2=CC(C)=C(CC(C)=O)C(O)=C2C1=O	-10.6560
3492	COC1=C(O)C(=O)C(C)=C(O)C1=O	-10.0208
3493	CC1=C(O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)C1=O	-9.8591
3494	O=C1C=C(CO)C(=O)[C@@H]2O[C@H]12	-9.5399
3495	C[C@H]1C=C[C@H]2CCCC[C@H]2[C@@H]1C1=CC(NCCO)=C(C=O)C(=O)O1	-9.9804
3496	CCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)C(O)C(O)CO	-10.6407
3497	COC1=CC(C=C2OC(=O)C(C3=CC=C(O)C=C3)=C2O)=CC(OC)=C1O	-9.8315
3498	CS[C@@]1(CO)C(=O)N(C)[C@@](CC2=CN([C@]34C[C@]5(SC)C(=O)N(C)[C@@](CO)(SC)C(=O)N5[C@H]3NC3=CC=CC=C34)C3=CC=CC=C23)(SC)C(=O)N1C	-9.1438
3499	CC(=O)NC(C)=O	-8.9371
3500	C=C(C)[C@H]1COC2=C(C)C=C3OC4=C([C@H](OC)[C@@H]5OC5(C)C)C=CC(O)=C4C(=O)C3=C2[C@@H]1O	-10.0420

3501	CC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)O[C@@H]1CC2=C(CO[C@](O)(CCC(=O)O)C2)C(=O)[C@]1(C)O	-10.9723
3502	CC1=C(O)C=C(O)C2=C1[C@H](C)[C@](O)(CO)OC2=O	-10.5902
3503	C[C@H]1C=C[C@H]2CCCC[C@H]2[C@@H]1C(=O)C1=C(O)C(C2(O)CCC(O)C3OC32)=CN(O)C1=O	-10.6149
3504	O=C1C(O)=C(O)C(=O)C(O)=C1O	-9.4646
3505	COC1=CC(=O)C2=C(C=C3C[C@](C)(O)[C@H](O)CC3=C2O)C1=O	-10.6834
3506	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CCC2C3CC=C4C[C@@H](O)CC[C@]4(C)C3CC[C@@]21C	-9.8397
3507	C=C1[C@]2(C)C(=O)[C@]3(O)[C@@H](C)OC(=O)[C@]13[C@@]1(C)CC[C@@]3(C=CC(=O)OC3(C)C)C(C)=C1[C@@H]2OC(C)=O	-9.9040
3508	COC1=C(O)C2=C3C(=C4C(OC)=CC(=O)C5=C4C4=C(C(OC)=C5O)C(C(C)O)C(C(C)=O)C1=C43)C(OC)=CC2=O	-10.8881
3509	CC=CCCCCCCCCC	-8.4588
3510	CCCCCC=CC=CCCCCCCCCC(=O)OC	-10.2967
3511	CC(C)CC1C=CCCC1	-8.4677
3512	OC1=CC=C(O)C2=C1C=C[C@@H](O)C21OC2=CC=CC3=CC=CC(=C23)O1	-9.2270
3513	CCCCCCCCC1CC(=O)N[C@@H](CC(N)=O)C(=O)N[C@H](CC2=CC=C(O)C=C2)C(=O)N[C@H](CC(N)=O)C(=O)N2CCC[C@H]2C(=O)N[C@@H](CCC(=O)O)C(=O)N[C@H](CO)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N1	-10.6445
3514	COC1=CC(O)=C2C(=O)C(C)=C(CC(C)=O)C(=O)C2=C1	-10.9448
3515	COC1=CC(O)=C2C(=O)C(CO)=C(C)OC2=C1	-10.9379
3516	CC(=O)NS(=O)(=O)C1=CC=C(N)C=C1	-9.4162
3517	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CCC2C3=C[C@H](O)[C@@]4(O)C[C@@H](O)CC[C@]4(C)C3CC[C@@]21C	-10.6868
3518	COC1=CC(=O)C2=C(O)C(C)=C3C=C(C)OC3=C2C1=O	-10.6671
3519	COC1=CC(=O)C2=C(O)C3=C(C[C@](C)(O)CC3)C(O)=C2C1=O	-10.6606
3520	NN1CCCC1	-8.5605
3521	COC(=O)C1=CC(OC)=C(OC)C(OC)=C1NC(=O)C1=CC=CC=C1NC(=O)C1=CC=CN=C1	-8.5161
3522	CC1=C[C@H]2C=C(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@@]23C(=O)CCC(=O)[C@H](O)CC1	-10.9378
3523	C=C1CC2=CC=C3NC4=C(C[C@@H]5CC[C@@]6(O)C7=C[C@@H](O)[C@@H](C(=C)C)O[C@H]7CC[C@]6(C)[C@@]45C)C3=C2[C@H]2[C@@H]1C[C@@H]2C(C)(C)O	-9.2976
3524	CCCCCCCCCCC(O)CC(=O)OCC	-10.4922
3525	COC1=CC(C=C2OC(=O)C(C3=CC=C(O)C=C3)=C2O)=CC=C1O	-9.6542
3526	CC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)O[C@@H]1CC2=C(CO[C@@](O)(CCCO)C2)C(=O)[C@]1(C)O	-11.1755

3527	C[C@H](O)[C@@H]1C(=O)OC[C@H]1C	-9.7109
3528	COC1=CC(O)=C(C(=O)O)C(C2=C(C)C=C(O)C(O)=C2C2=C(O)C(O)=CC(C)=C2C2=CC(OC)=CC(O)=C2C(=O)O)=C1	-10.0959
3529	CCO[C@H]1C[C@H](O)C2=C3C4=CC=CC(O)=C4C(=O)C[C@@H]3C3=C2C1=C(O)C=C3	-9.9530
3530	O=C1C[C@@H](O)C2(OC3=CC=CC4=CC=CC(=C34)O2)C2=C(O)C=CC(O)=C12	-9.1204
3531	CC(=O)O[C@@H]1C[C@H]2O[C@@H]3C=C(CO)CC[C@]3(C)[C@]1(C)[C@]21CO1	-11.2878
3532	CO[C@H]1/C=C\CCC[C@H](C)OC(=O)/C=C/[C@@H](O)/C=C\1	-10.3517
3533	CC1=C2C(=CO[C@H](C)[C@H]2C)C(=O)C(C(=O)O)=C1O	-10.5525
3534	C[C@H]1CCC/C=C/C(=O)C2=C(O)C(Cl)=C(O)C(Cl)=C2CC(=O)O1	-10.5684
3535	COC1=CC(O)=C2C(=O)C[C@@H](CC(C)=O)[C@H](O)C2=C1	-11.0185
3536	COC1=CC=C(O)C2=C1[C@@H](O)CCC2=O	-10.6138
3537	COC1=CC(=O)C=C(C)[C@]12OC1=C(Cl)C(OC)=CC(OC)=C1C2=O	-10.3195
3538	CC(=O)OCCCCC/C=C(/C(=O)O)[C@H](C)C(=O)O	-10.1679
3539	C[C@@H]1C2=C(C[C@H](C)[C@H]1O)C(=O)C[C@H](C)O2	-10.3116
3540	CC1=CC(O)=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=CC=C1O2	-10.4797
3541	C=C1C=C(COC(C)=O)OC=C1O	-9.4372
3542	C[C@@H]1CC(=O)C2=C(O1)[C@H](C)[C@H](O)[C@@H](C)C2	-10.3015
3543	CC[C@@H]1OC2=C(C=C(C)C(O)=C2C)C1=O	-10.7672
3544	C=C1O[C@H](C)C(O)C2=C(O)C=CC(O)=C12	-10.4554
3545	COC1=CC2=C(C(O)=C1Cl)C(=O)C1=C(C)C=C(O)C=C1O2	-11.0332
3546	CC1=CCC2(CC1)[C@H](C)[C@H](O)C[C@H]2C(C)(C)O	-10.5212
3547	C/C=C(\C)[C@@H](O)[C@@H](C)C1=CC(OC)=C(C)C(=O)O1	-10.9934
3548	C=C1OC(=O)C2=C(C=C3C=C(O)C=C(O)C3=C2O)[C@H]1O	-10.5546
3549	CC1=CC[C@@H]2[C@H](C(C)(C)O)CC[C@@]2(C)C[C@H]1O	-10.2155
3550	CC(O)C/C=C/C=C/C(=O)OC[C@@H](O)[C@@H](O)CO	-10.1779
3551	C/C(=C\C[C@]1(O)C(=O)C2=C(O)C=C(C)C3=C(O)C(C)=C(O)C(=C23)C1=O)CC/C=C(\C)CCC(O)[C@@]1(C)CC[C@@H](C(C)(C)O)O1	-10.6225
3552	COC(=O)CC/C=C/C[C@H](O)C[C@@H](C)O	-10.3045
3553	CCC[C@@H](O)CC1=CC2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.5553
3554	C[C@@H](O)C[C@@H](O)C/C=C/CCC(=O)O[C@H](C)[C@@H](C)O	-10.6897

3555	COC1=C(Cl)C(=O)NC(CC(C)(C)O)=CC1=O	-10.1812
3556	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC(C)=CC2=C1OC	-10.7335
3557	CC(=O)C[C@H](O)CC1=CC2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.7174
3558	CCCCCCCCCCCCCCCCCCI	-9.0243
3559	O=C1C[C@H](O)[C@H](O)C2=CC(O)=CC(O)=C12	-10.2193
3560	C[C@H]1CCC(=O)C2CC(=O)C3=C(C=C(O)C=C3O2)CC(=O)O1	-10.6417
3561	CC[C@H](O)C[C@H](O)C1=CC(OC)=CC(=O)O1	-10.4388
3562	CC1(C)CC(=O)C2=C(O1)[C@H]1O[C@H]1[C@H](O)[C@H]2O	-10.3942
3563	C=CC(C)(C)C1=CNC2=CC=C(CC=C(C)C)C=C12	-8.5145
3564	CCCCOCCOC(C)=O	-9.2593
3565	CC1=CC=C(C)C2=C1CCC(C)C2	-9.0352
3566	CCCCC(CC)C(C)C	-8.6518
3567	C=C1C(C)=C(C)C(C)=C1C	-9.0754
3568	C1#CCCC=CCC1	-8.0187
3569	CCCCC(CCCC)C(C)CC	-8.8171
3570	CCCCC=CCCCCCCC	-8.4209
3571	O=C(O)CCCCCCCCCCS	-9.4234
3572	COC1OC2COC1C(O)C2O	-9.8271
3573	CON=C1CCC(C)CC1	-9.1201
3574	CCCCCCCC(C)CC(C)CCCCCC	-9.1409
3575	COC(=O)C(C)CC(C)CO	-10.1390
3576	CCCCCCCCCCCCCCC(C)CCCC	-8.8843
3577	C[Si](C)(C)OC(=O)C(=O)C1=CC=CC=C1	-9.2011
3578	CCC(C)C1=COCC1	-9.0077
3579	C1CCC2CCC2CC1	-8.3378
3580	CCCCCCCCCCI	-8.3072
3581	C#CCCCCCC#C	-8.1348
3582	CCOC(=O)C(C#N)C1=CC(=O)CC1	-10.0876
3583	COC1CC(=O)C=CC1(OC)OC	-9.7584
3584	C=C(C)CC(C)CC(C)CCC	-8.9284
3585	CCC12C(=O)CCCC1CCCC2=O	-10.1262
3586	CC=C1C=CC2=CC=CC=C12	-8.6749
3587	CC1=CC(=O)C(C)(C)C2(C)C(C)C12C	-10.2885
3588	CCCCCCCCOS(=O)OC(C)CCC	-10.5724
3589	CC1=C(C)C(=O)CC1	-9.0483
3590	CCNC1=NC(N)=NC(Cl)=N1	-8.7500
3591	CCOCCC(OCC)OCC	-9.1279
3592	CCOC(=O)CCCC(C)=O	-9.6785
3593	CCC(C)C(=O)C(C)C	-9.0689
3594	CCC(C)C(=O)C(C)CC	-9.0992
3595	C[Si](C)(C)O[Si](O)(O)O	-10.2043

3596	NCCNCCNCCNCCN	-9.5636
3597	CCCCCCCCCCCCCOC(=O)C1=CC=CC=C1C(=O)OCCCCCCCCCCCCC	-10.1804
3598	CC=CC(C)C	-8.1334
3599	CC1SCCN1N=O	-9.4393
3600	CC1=CC=C(Cl)C=C1C	-8.8083
3601	CPC	-8.2261
3602	NC(=O)C=CC1=CC=C(Cl)C=C1	-8.6194
3603	CCCCCCCC=C(CBr)CCCCCC	-9.5341
3604	COC(=O)CC1=CC=CC=C1OC	-9.7643
3605	CC(=O)OC1CC2CCC1C2	-9.4225
3606	CC(O)C(C)(C)O	-9.7925
3607	CCCC(CC(C)O)C(=O)O	-10.2873
3608	OC1=CC=C(S)C=C1	-8.4683
3609	OCC1(CO)CCCCC1	-9.3490
3610	C=C(C)CCC=CC	-8.1725
3611	O=CC(O)C(O)C(O)C(O)C(O)C(O)CO	-9.5198
3612	O=C(O)C12CCC(CC1)CC2	-9.9628
3613	CCC(C)NC=O	-8.7170
3614	CC(=O)OCC1C(OC(C)=O)C(OC(C)=O)C(N2C=NC3=C(N)N=CN=C32)N1C(C)=O	-9.6894
3615	CC(C)C(C)CCC(C)C(C)C	-9.0958
3616	C=CCC(N)=O	-8.9582
3617	CCCC(CC)CCC(C)C	-8.7083
3618	BrCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC CCCCBr	-9.0242
3619	O=[N+]([O-])CC(O)C(O)C(O)C(O)C(O)CO	-9.3087
3620	O=C1CCC(CCCO)N1	-9.2586
3621	CCC(=O)NC(CC1=CC=CC=C1)C(=O)NC(C(=O)NC(CC(C)C)C(=O)NC(C)C(=O) OC)C(C)C	-10.7373
3622	CC1=CCC(C(=O)O)C(C)C1	-9.8714
3623	CC=C=CCCCCC	-8.2658
3624	CC(=O)C1SCC(O)C1O	-10.2013
3625	C=CC1(O)CC2CC1C2	-9.6089
3626	C1CC2C3CC4OC2C(C1)C4O3	-9.3342
3627	C[Si]1(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O [Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O1	-8.9654
3628	CCCCCCC(C)CC(C)C	-8.7169
3629	C[Si](C)(C)OCCCCCCN	-10.1060
3630	CCCCCC(C)CC(C)C(C)C	-8.8755
3631	C[Si](C)(C)OCCCCCN	-10.2462
3632	CCCCCCC(C)CC=C(C)C	-8.8511
3633	CCC1CCC(C)O1	-8.7640
3634	C=C(C)C(C#CC)=CC	-8.6398

3635	CCC(=O)OCC[N+](=O)[O-]	-9.4458
3636	CCCC[Si](C)(C)OCCC	-9.7240
3637	CC#CC1=CCCCC1	-8.3561
3638	CCCCCCC12CC3CC(CC(C3)C1)C2	-8.8411
3639	C[Si](C)(C)C1=CC([Si](C)(C)C)=CC(=O)C=C1	-10.2137
3640	CCC1COC(C2=CC=CC=C2O)=N1	-10.1694
3641	CC12CC3CC(C)(C1)CC([N+](=O)[O-])(C3)C2	-10.4518
3642	CCOC(=O)C(=C=C(C)C1=CC=CC=C1)CC	-9.3889
3643	CCCCCCCO[Si]1(CC)CCCCC1	-9.7241
3644	CCCCCCCCC/C=C/C=C/C(=O)[C@]1(O)C(=O)N[C@@H](CO)[C@@H]1O	-10.7546
3645	O=C1C[C@H](O)[C@H](O)C23O[C@]12C1(OC2=CC=CC4=CC=CC(=C24)O1)[C@@H]1O[C@@H]1[C@@H]3O	-10.1630
3646	C/C=C/C1=CC2=C(CO1)C(=O)[C@]1(C)OC(=O)[C@H](C(=O)CCCCCCC)[C@H]1C2	-10.2544
3647	COC1=CC(OC)=C2C(O)=C3C(=O)C=C(C)OC3=C(C3=CC(C4=C(CC5=CC=C(O)C=C5)C(O)OC4=O)=CC=C3O)C2=C1	-9.7556
3648	CC(C)[C@@H]1NC(=O)[C@@H](C(C)C)NC(=O)[C@@H](NC(=O)CC(O)CCCCCCCCCCN=C(N)N)[C@@H](C)OC(=O)[C@@H](C)NC(=O)[C@@H](CCC(N)=O)NC(=O)[C@@H]([C@@H](C)O)NC1=O	-10.6613
3649	CC1=C2C(=CO[C@H](C)[C@H]2C)C(=O)C=C1O	-10.1665
3650	COC1=C(C)C(=O)C(C)=C([C@H]2C/C(=C/C(C)=C\C3=CC=C([N+](=O)[O-])C=C3)CO2)O1	-9.4622
3651	CCCCCCCCC=CCCCCCCCC(=O)OCCCOCCCCCCCCCCCCCCCCCC	-10.3287
3652	COC1=CC(OCC2=CC=CC=C2)=CC=C1OCCNCC(O)COC1=CC=CC2=C1C1=CC=CC=C1N2	-9.3835
3653	CC(=O)NC1=CC=C(C2CC(C3=CC=C(C)N=C3)=NN2C2=CC=C(C)C=C2)C=C1	-8.0464
3654	COC1=CC(C)=C(C(=O)O[C@H]2[C@@H](OC(C)=O)[C@H](CN3C=CC(=O)NC3=O)O[C@@H]2CO)C(O)=C1	-9.6633
3655	CC1=C[C@H]2O[C@@H]3C[C@H]4OC(=O)/C=C\C=CC(=O)OCC[C@@]5(C)O[C@@H]5C(=O)OC[C@@]2(CC1)[C@]4(C)[C@]31CO1	-10.6320
3656	COC1=CC=C2C3=C(NC2=C1)[C@H](C(C)(C)O)N1C[C@@H]2CCCN2C[C@@]1(O)[C@H]3O	-10.4413
3657	C[C@@H]1N[C@H]2N(C1=O)C1=CC=CC=C1[C@@]2(O)C[C@@H]1C(=O)N[C@](C)(O)C2=NC3=CC=CC=C3C(=O)N21	-8.8825
3658	COC1=CC(OC)=C2C(=O)C3=C(O)C4=C(C=C3C(=O)C2=C1)O[C@@]1(C)CC[C@H](O)[C@@H]4O1	-10.7296
3659	CC1=CC(O)=C2C(O)=C3C(=O)[C@H]4[C@@H](O)[C@@H]5[C@H]6[C@H](O)C(C(=O)C7=C(O)C8=C(O)C=C(C)C=C8C(=O)[C@@]764)[C@]35C(=O)C2=C1	-9.4803

3660	COC1CC2C3CCC(C(C)C(C=CC(C)C)OC(=O)C(C)(C)C)C3(C)CCC2C2(C)CCC3CC312	-10.4538
3661	C=CC=CC(O)C(C)(C)C	-9.6462
3662	CC(=O)OC1CCC23CC24CCC2(C)C(C(C)C=CC(=O)C5=CC=CC=C5)CCC2(C)C4CCC3C1(C)C	-9.3796
3663	CC(C)C(C)C=CC(C)C1CCC2C3=CC=C4CC(OC(=O)C5=CC=CC=C5)CCC4(C)C3=CCC21C	-8.9145
3664	C#CC=CC#CCCCCC	-8.2550
3665	CCCCCCCCCC(CCC)O[Si](C)C	-9.8083
3666	CCCCCCOS(=O)OCCCC	-10.0643
3667	CC(CCCCCCCCCCC(=O)O)CC(=O)O	-10.1740
3668	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(O)C4=C(C=C3C(=O)C2=C1)C(=O)[C@@](C)(O)[C@@H](OC)[C@@H]4O[C@@H]1O[C@@H](C)[C@H](OC)[C@@H](O)[C@H]1OC	-9.9082
3669	C[C@@H](O)[C@H](O)C1=CC=CC=C1	-9.8047
3670	O=C1C=C[C@H](O)C23O[C@]12C1(OC2=CC=CC4=CC=CC(=C24)O1)[C@@H]1O[C@@H]1[C@@H]3O	-9.6032
3671	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CC[C@@]2(O)C3=CC(=O)C4=CC(=O)CC[C@]4(C)C3=CC[C@]12C	-10.5762
3672	CCCCCC[C@H](O)C1=CC(OC)=C(COCC2=C(OC)C=C([C@@H](O)CCCCCC)OC2=O)C(=O)O1	-10.1601
3673	COC1=CC(=O)OC(/C=C/C=C/C=C/[C@](C)(O)[C@@H]2O[C@]3(C)[C@@H](O)[C@@]2(C)O[C@@H]3C)=C1C	-9.7327
3674	COC1=CC=C(C2=CC3=C(CC4[C@@]5(C)CCC(=O)C(C)(C)C5CC[C@@]4(C)O3)C(=O)O2)C=C1	-10.2181
3675	CC[C@@H](O)[C@H](C)/C=C/C(=O)[C@@H](C)[C@H](O)[C@H](C)[C@H]1OC(=O)C(C)=C/C(C)=C/[C@@H](C)[C@@H](O)[C@@H](C)C/C(C)=C\C=C\[C@@H]1OC	-9.6948
3676	C[C@H]1C/C=C\[C@H]2[C@H](O)[C@](C)(O)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@]32[C@H](O)/C=C\[C@](C)(O)C1	-9.5752
3677	C/C=C(/C=C(C)/C=C/C=C/C=C(\C)C(=O)[C@@]12O[C@@H]1C(O)(CCO)NC2=O)C(=O)OC	-9.7134
3678	CC1=CC2OC3C[C@@H]4OC(=O)C=C/C=C\[C@H]([C@@H](C)O)OCC[C@@H](C)[C@H](O)C(=O)OCC2(CC1)[C@]4(C)[C@@]31CO1	-10.6111
3679	C=C1C2(C=CC(=O)OC2(C)C)C[C@H](OC(C)=O)[C@]2(C)C13OC14C(=O)OC(C)(C(=C)C12C(=O)OC4C)C3OC(C)=O	-9.9560
3680	C=C1C(=O)O[C@@H]2[C@H]3C(C)=C[C@H]4OC(=O)[C@H](C[C@@H](OC(=O)[C@](C)(O)[C@H](C)OC(C)=O)[C@@H]12)[C@@H]34	-10.1876
3681	C[C@H]1CCC[C@]2(C)CC[C@H]3CC12OC3(C)C	-9.4652
3682	C=CCOC(=O)N1CCCC1C(=O)OCCCCCCCCCCCCCCCCC	-10.4286

3683	C/C=C/CCC(O)C1=C(O)[C@@]2(C)[C@H]3C(C(O)CC/C=C/C)=C(O)[C@@]4(C)[C@@H]1[C@]1(C)O[C@@]4(O)[C@@]3(C)O[C@@]12O	-10.6412
3684	CC1=C[C@@H]2/C=C(/C)CC[C@H](O)C(=O)/C=C\C(=O)[C@]23C(=O)N[C@@H](CC(C)C)[C@@H]3[C@@H]1C	-10.9664
3685	C[C@@H](O)[C@@H](O)/C=C/C1=CC=CC(O)=C1CO	-10.5207
3686	CCC[C@@H](CCCCCCCC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)O[C@@H](CCC)CCCCCCCC1=CC(O)=CC(O)=C1)OC(C)=O	-10.2259
3687	CC(=O)O[C@@H]1C2OC2[C@@](C)(O)C(=O)[C@@H](C)C/C=C/[C@H]2[C@H](O)C(C)=C(C)[C@H]3[C@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@@]123	-8.9944
3688	C=C(C)[C@H]1O[C@H]2CC[C@@]3(C)[C@@](O)(CC[C@H]4CC5=C(NC6=CC=C7C(=C56)[C@@H]5[C@@H](C(C)(C)O)C[C@@H]5C7(C)C)[C@@]43C)C2=C[C@H]1O	-9.7884
3689	CC1=CC(=O)OC[C@@]23CC=C(C)[C@H]4C[C@]5(O)[C@@H](C[C@@H](OC(=O)/C=C\C=C[C@H]([C@@H](C)O)OCC1)[C@]25C)O[C@H]43	-10.4045
3690	C=C(C)C=CC1=CC=CC2=C1NC=C2C(=O)O	-9.7484
3691	CC[C@H](C=C[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CC=C4CC(OC(C)=O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C)C(C)C	-9.9262
3692	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@]23[C@H](OC(C)=O)C=C[C@](C)(O)C[C@@H](C)CC=C[C@H]3[C@@H]1OC(C)=O	-8.8432
3693	CC1=CC(=O)C2=C3C1=C1O[C@@H](C)C(C)(C)C1=C(O)C3=C(O)C1=C2O[C@H]2C=C3C(=CC[C@]4(C)[C@@H]([C@H](C)/C=C/[C@H](C)C(C)C)CC[C@@H]34)[C@@]3(C)CC[C@H](O)C[C@]23N1	-9.0564
3694	CC[C@@]12SS[C@]3(C(=O)N1C)[C@@H](O)[C@]1([C@]45C6=CC=CC=C6N[C@@H]4N4C(=O)C6(C)SS[C@]4(C(=O)N6C)[C@H]5O)C4=CC=CC=C4N[C@H]1N3C2=O	-9.1162
3695	C=C1[C@]23C(=O)O[C@@H](C)[C@@]24O[C@]2(C(=C)[C@@]5(C=CC(=O)OC5(C)C)CC[C@@]32C)C(O)[C@]1(C)OC4=O	-10.2533
3696	CC1=C(O)C(=O)[C@H]2[C@]3(O)C(=O)C(O)=C(C)[C@]24COC(=O)[C@@]42COC[C@]123	-10.9747
3697	CC[C@H](C)[C@@H](O)[C@@H](C)C(=O)O[C@H]1CC(CC(=O)[C@@H]2[C@H](C)CCC[C@@H]2O)=C(C)C(=O)[C@@]1(C)O	-10.8750
3698	COC(=O)[C@]1([C@@H]2CCC(=O)O2)CC(=O)C2=C(C=C3C[C@@]45C=C[C@H](C(=O)C4=C(O)C4=C(O)C=C(C)C=C4C5=O)C3=C2O)O1	-9.3151
3699	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CCC2=C3C=CC4=CC(=O)CC[C@]4(C)[C@@]3(O)CC[C@@]21C	-10.4038
3700	COC1=CC2=C(C3=C(C(=O)C2=O)C(C)(C)CC(C)O3)C(C)=C1OC	-10.5213

3701	COC1=C(O)C2=C3C4=C5C(=CC(=O)C6=C5C(=C(C[C@@H](C)O)C(OC)=C6O)C3=C1CC(C)O)OCOC4=CC2=O	-10.6704
3702	CC1(C)CCC2=CC(C3=C(O)C(=CC4=CC5=C(C=C4O)OC(C)(C)CC5)OC3=O)=CC=C2O1	-9.1524
3703	CCCCCCO[Si](C)(C)OCCOC	-10.1219
3704	CCCCC(CC)COC(=O)CCC(=O)OC(CC)C(C)C	-10.6638
3705	CC(C)[C@@H](C)C=C[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2C3=CC(=O)C4(O)CC(O)CC[C@]4(C)[C@@]3(O)CC[C@]12C	-11.1465
3706	CCC=CCCO[Si](C)(C)C(C)(C)C	-9.9314
3707	C/C=C/C=C/C(O)=C1\C(O)=C(C)C(=O)[C@@]2(C)O[C@@]3(O)[C@@](C)(O)C(=O)C(C(=O)CC/C=C/C)=C(O)[C@@]3(C)[C@@H]12	-9.4163
3708	C[C@H]1N[C@@H]2N(C1=O)C1=CC=CC=C1[C@]21CC(N2C=NC3=CC=CC=C3C2=O)=C(O)O1	-8.6148
3709	COC1=CC=C(C2=CC3=C(C[C@H]4[C@@](C)(CC[C@@]5(O)C(C)(C)[C@@H](O)CC(=O)[C@]45C)O3)C(=O)O2)C=C1	-10.3973
3710	CC1=CC2(C)C(=C(C)[C@H]3[C@H]4C[C@@H](C)C[C@@H](C)[C@@H]4[C@@H]4OC5=CC=C(C=C5)C[C@H]5C(=O)NC(=O)[C@@H]5C(=O)[C@H]2[C@H]43)[C@H]1C	-9.2739
3711	O=C1C[C@@H](O)[C@H](O)C23O[C@]12C1(OC2=CC=CC4=CC=CC(=C24)O1)[C@@H]1O[C@@H]1[C@@H]3O	-10.1931
3712	COC1=CC=C2C3=C(NC2=C1)[C@@H](C=C(C)C)N1C(=O)[C@H]2CCCN2C(=O)[C@]1(O)[C@H]3O	-10.3145
3713	CC1=C[C@@H]2/C=C\C[C@H](C)/C=C(/C)[C@@H](O)C(=O)CCC(=O)[C@]23C(=O)N[C@@H](CC2=CNC4=CC=CC=C24)[C@@H]3[C@@H]1C	-8.7830
3714	COC1=CC=C2C3=C(NC2=C1)[C@@H](C=C(C)C)N1C(=O)[C@H]2CCCN2C(=O)[C@]1(O)[C@H]3OC	-10.3168
3715	CC/C=C(\C)C[C@H](C)C[C@H](C)/C(O)=C1\C(=O)N[C@@H]([C@@H](O)C2=CC=C(O)C=C2)C1=O	-10.1024
3716	CC[C@H](C)[C@@H]1NC(=O)[C@@H]2[C@@H](C)CCN2C(=O)[C@@H](CC(C)C)OC(=O)CCNC(=O)[C@H](C)N(C)C(=O)[C@H]([C@@H](C)CC)NC1=O	-10.3197
3717	CC1=CC[C@@H]2[C@H]3C(O)=CC(=O)[C@@H](C)C(=O)O[C@H](C)C=C/C=C\[C@@H](C)[C@H]3C=C[C@H]2C1	-9.3314
3718	C=C1C(C)C2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)C23C(C=CC[C@@H](C)C(=O)[C@@H](C)C=C[C@H]3OC(C)=O)[C@@H]1O	-9.1125
3719	CC(=O)O[C@@H]1[C@@H]2O[C@H]2[C@@](C)(O)C(=O)[C@@H](C)C/C=C/[C@H]2[C@H](O)C(C)=C(C)[C@@H]3[C@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@]132	-9.0983
3720	CC(C)=CCC[C@]1(C=O)[C@H]2CC=C(C)CCC=C(C)CC[C@H]1[C@@]1(CC2)CO1	-10.8743
3721	C=C1[C@H](C)[C@@H]2[C@@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@@]23C(=O)CC[C@@H](C)C[C@H](C)CC=C[C@@H]3[C@H]1O	-9.6011

3722	CO/N=C1/C[C@]2(C[C@H]3C[C@@H](C/C=C(\C)C[C@@H](C)/C=C/C=C4\CO[C@@H]5[C@H](O)C(C)=C[C@@H](C(=O)O3)[C@]45O)O2)O[C@H](/C(C)=C/C(C)C)[C@H]1C	-8.8918
3723	COC(=O)[C@@]12O[C@](O)(C(=O)OC)[C@@H]3CC4=C(C(=O)C5=C(O)C=C(C)C=C5O4)[C@@H](C4=C1C(=O)C1=C(O)C=C(C)C=C1O4)[C@H]32	-9.8502
3724	CCCC(O)CC[C@@H](C)[C@@H](O)[C@H](C)[C@H]1C/C=C/C=C/C=C/C(O)C(=O)/C(C)=C/C=C/C(C)=C/C(O)/C(C)=C/CC(=O)O1	-9.3936
3725	CC1=CCC(=O)O[C@@]23C(=O)N[C@@H](CC4=CC=C(O)C=C4)C2C(C)C(=C(C)C)[C@@H](O)[C@@H]3C=CC[C@H](C)C1=O	-9.1137
3726	CC1=C[C@@H](C)CC=C[C@H]2CC[C@@]3(C)C4=C(C[C@@H]5NC(=O)[C@]2(C(=O)/C=C\C(=O)[C@@H]1O)[C@]53C)C1=CC=CC=C1N4	-8.8533
3727	CC1=C(O)C(=C(O)/C=C/C=C/CO)[C@@H]2[C@]3(C)C(=O)C(=C(O)/C=C/C=C/CO)C[C@](C)(O)[C@]3(O)O[C@]2(C)C1=O	-9.5173
3728	C/C=C/C=C/C(O)=C1C[C@](C)(O)[C@]2(O)O[C@]3(C)C(=O)C(C)=C(O)C(=C(O)/C=C/C=C/CO)[C@@H]3[C@]2(C)C1=O	-9.4453
3729	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@]23[C@H](O)C=C[C@@H](C)C[C@@H](CO)CC=C[C@H]3[C@@H]1O	-9.6357
3730	CC1=CC(O)=CC2=C1C=CC(C)O2	-9.8142
3731	COC1=CC2=C(O)OC=C2C=C1C	-10.2931
3732	COC1=C(O)C2=C3C(=C4C(OC)=CC(=O)C5=C4C4=C(C(OC)=C5O)C(C(C)=O)[C@@](C)(O)CC1=C43)C(OC)=CC2=O	-10.8931
3733	CC(C)C(C)C=CC(C)C1CCC2[C@]1(C)CC=C1[C@@]23C=CC2(CC(O)CC[C@]12C)OO3	-10.4032
3734	COC1=CC(=O)[C@@]23OC(=O)C4(O)[C@H]5OC(=O)C([C@H]1[C@@]42C)[C@]53C	-10.7759
3735	CC(=O)O[C@@H]1C=C[C@@](C)(O)C(=O)[C@@H](C)CC=C[C@H]2C=C(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@@]231	-9.4705
3736	C[C@H]1O[C@H](O[C@@H]2C(CO)O[C@H](O[C@@H]3C(CO)O[C@H](O)C(O)C3O)C(O)C2O)C(O)C(O)[C@@H]1N[C@H]1C=C(CO)C(O)C(O)C1O	-11.0366
3737	CCC(C)C1=CC2=C(O)C(=C1)CC1=CC(C(C)CC)=CC(=C1O)CC1=C(O)C(=CC(C(C)CC)=C1)CC1=C(O)C(=CC(C(C)CC)=C1)C2	-8.5995
3738	CC[C@@H]1C[C@H]2CC[C@H](O2)[C@H](C)C(=O)O[C@@H](C)C[C@@H]2CC[C@H](O2)[C@@H](C)C(=O)O[C@H](CC)C[C@H]2CC[C@H](O2)[C@H](C)C(=O)O[C@@H](C)C[C@@H]2CC[C@H](O2)[C@@H](C)C(=O)O1	-9.8692

3739	CC(=CC(=O)N([O-])CCCC1NC(=O)CNC(=O)C(CO)NC(=O)C(CO)NC(=O)C(CCCN([O-])C(=O)C=C(C)CCO)NC(=O)C(CCCN([O-])C(=O)C=C(C)CCO)NC1=O)CCO.[Fe+3]	-10.5098
3740	CC1=C(O)C(=O)[C@@H]2CC(=O)[C@]34C(=O)N[C@@H](CC5=CNC6=CC=CC=C56)[C@@H]3C(C)=C(C)[C@@H](O)[C@@H]4/C=C/C[C@H](C)[C@@H]12	-9.2300
3741	CC[C@@]12COCC1=C(C)C(=O)C1(O)[C@]3(C)C(=O)[C@@](O)(CC(C)=O)C(=O)C(C)=C3CO[C@]12O	-10.8958
3742	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CNC4=CC=CC=C34)NC(=O)[C@]23C(=O)CC[C@H](O)C(=O)/C(C)=C\[C@@H](C)CC=C[C@H]3[C@@H]1O	-8.7884
3743	CC1=C2COC3(O)C4(O)C(=O)C(C)C5COC[C@@]53CC24[C@@H](O)C1=O	-11.0818
3744	CC[C@H]1O[C@H]2O[C@H](/C=C/C=C/C=C/C3=C(C)C4=C(C(=O)O3)C(C)(C)[C@@H](C)O4)[C@H](O)[C@]2(C)[C@@]1(C)O	-9.6772
3745	O[C@H]1C=C[C@H]2OC3C[C@H](O)[C@@H]1[C@@H]2C31OC2=CC=CC3=CC=CC(=C23)O1	-9.8741
3746	C=C(CC[C@@H](C)[C@H]1CC=C2C3=C([C@@H](O)[C@H](OC(C)=O)[C@@]21C)[C@@]1(C)C[C@@H](OC(C)=O)[C@H](OC(C)=O)C(C)(C)[C@@H]1CC3)C(C)C	-10.3666
3747	C=C(CC[C@@H](C)[C@H]1CC=C2C3=C([C@H](O)[C@@H](OC(C)=O)[C@@]21C)[C@@]1(C)C[C@@H](O)[C@H](O)C(C)(C)[C@@H]1CC3)C(C)C	-10.6539
3748	CN1C(=O)[C@@]2(CC3=CN([C@@]45C[C@]67SS[C@](CO)(C(=O)N6[C@@H]4NC4=CC=CC=C45)N(C)C7=O)C4=CC=CC=C34)SS[C@]1(CO)C(=O)N2C	-8.4736
3749	C=C(CC[C@@H](C)[C@H]1CC=C2C3=C([C@@H](O)[C@H](OC(C)=O)[C@@]21C)[C@@]1(C)C[C@@H](O)[C@H](OC(=O)C2=CC=C(O)C=C2)C(C)(C)[C@@H]1CC3)C(C)C	-9.4809
3750	O[C@@H]1C=C[C@H](O)[C@@H]2[C@@H]1C1(CC[C@@H]2O)OC2=CC=CC3=CC=CC(=C23)O1	-9.6418
3751	C/C(O)=C1\C(=O)[C@@H]2[C@H]3C4=CNC5=CC=CC(=C45)C[C@H]3C(C)(C)N2C1=O	-10.4145
3752	CC[C@H](C)[C@@H](OC(C)=O)[C@@H](C)C1=CC(=O)C2=C(OC3C(=C2)[C@@]2(C)CC[C@H](C(C)(C)O)O[C@@H]2C[C@@H]3C)C1=O	-10.4176
3753	C=C(CC[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2C3=CC(=O)C4[C@H](O)[C@@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C)C(C)COC	-11.0613
3754	C/C=C/[C@@H]1C=C[C@@H]2C[C@H](C)CC[C@H]2[C@]1(C)/C(O)=C1/C(=O)N[C@@H](CO)C1=O	-10.5559
3755	C/C=C/C=C/C(O)=C1/C(=O)[C@]2(C)C(=O)C(C)(O)[C@H]1[C@H]([C@]1(C)OC(=O)C(C)=C1O)[C@H]2C(=O)CC/C=C/C	-9.4852

3756	C=C1[C@H](C)[C@@H]2[C@@H](CC3=CC=CC=C3O)NC(=O)[C@]23[C@H](C=CC[C@@H](C)C[C@@H](C)C=C[C@@H]3O)[C@H]1O	-9.6421
3757	NC1=N[C@H](O)[C@H]2[C@H]3O[C@]4(O)O[C@@H](C(O)[C@@]2(N1)[C@@H]4O)[C@@]3(O)CO	-10.7472
3758	CC(C)=CCC[C@]1(C(=O)O)C2C/C=C(\C)CC/C=C(/C)CC[C@H]1[C@@H](C=O)CC2	-10.8823
3759	C/C=C/C=C/C(O)=C1C(=O)[C@@]2(C)C3C(C(=O)CC/C=C/C)=C(O)[C@@]4(C)C1[C@]1(C)O[C@@]4(O)[C@@]3(C)O[C@@]12O	-10.0139
3760	CC(C)=CCC[C@]1(C(=O)O)[C@@H]2CC=C(CO)[C@@H]1CC/C(C)=C\CC/C(C)=C/C2	-10.6777
3761	CC(C)=CCC[C@]1(C(=O)O)[C@H]2CC=C(C)CCC=C(C)CC[C@H]1[C@@]1(CC2)CO1	-11.0475
3762	CC(=O)O[C@@H]1C=C[C@](C)(O)C[C@@H](C)CC=C[C@H]2C=C(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H]([C@@H](O)C4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@@]231	-9.4363
3763	C[C@H](/C=C/[C@H](C)C(C)(C)OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3C(=O)[C@@H](O)[C@@]4(O)C[C@@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C	-10.7914
3764	CC1=C(C)C2=C(C[C@@H]3[C@@H](C)C4=CC(=O)C(C)(C)[C@@]4(O)C(=O)[C@@H](O)[C@@]3(O)O2)C(=O)O1	-10.7895
3765	CC[C@H](C)[C@@H](OC(C)=O)[C@@H](C)C1=CC2=C3C(=C1C)O[C@]1(C)CC[C@H]4O[C@@H](C(C)(C)O)CC[C@]4(C)[C@H]1[C@@H]3OCO2	-11.0522
3766	C=C(CO)[C@]12C[C@H](O)[C@H]3C[C@H](O)C[C@H](C)[C@]3(C)[C@H]1O2	-11.0371
3767	CS[C@@]1(CO)C(=O)N(C)[C@@](CC2=CN([C@@]34C[C@@]5(SC)C(=O)N(C)[C@](CO)(SC)C(=O)N5[C@@H]3NC3=CC=CC=C34)C3=CC=CC=C23)(SC)C(=O)N1C	-9.0619
3768	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)C1CCC2C3=CC(=O)[C@@]4(O)C[C@@H](O)CC[C@]4(C)[C@@]3(O)CC[C@@]21C	-11.1046
3769	CS[C@]1(CO)C(=O)N[C@](O)(CC2=CNC3=CC=CC=C23)C(=O)N1C	-10.1665
3770	C/C=C(\C)[C@H](OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O)[C@H](C)/C=C(C)/C=C/CC(C)(O)/C=C/C1=NC(OC)=C(OC)C(O)=C1C	-9.6775
3771	CC(=O)OCC1=C[C@@H]2C=CC[C@H](C)C[C@H](C)C=C[C@@H](O)[C@]23C(=O)N[C@@H](CC2=CC=C(O)C=C2)[C@@H]3[C@@H]1C	-9.4601
3772	COC1=CC(C2=C(OC)C=C(C3=CC=CC=C3)C(OC)=C2O)=CC=C1OCC=C(C)C	-9.9002
3773	CC(=O)OC[C@@]12OC3=CCC(C4=CC=C5O[C@]6(CO)C(=C(O)C[C@H](C)[C@@H]6OC(C)=O)C(=O)C5=C4O)C(O)=C3C(=O)C1=C(O)C[C@H](C)[C@@H]2O	-9.1801

3774	COC1=CC(O)=C(C(=O)C2=C(C)C=C(O)C=C2O)C(O)=C1CC1=C(OC)C=C(O)C(C(=O)C2=C(C)C=C(O)C=C2OC)=C1O	-10.0542
3775	CCC(C)C1OC(=O)CNC(=O)CNC(=O)[C@@H]([C@H](C)O)NC(=O)C(C)[C@H](O)C[C@H](O)CC/C=C/C1C	-10.5556
3776	CC(=O)O[C@H]1[C@@H](C)CC(O)=C2C(=O)C3=C(O)C=CC(C4=CC=C(O)C5=C4O[C@](CO)([C@H]4OC(=O)C[C@@H]4C)CC5=O)=C3O[C@]21CO	-10.1478
3777	CC(=CCC1=C(C=CC(=O)O)C=NN1C)CO	-10.1568
3778	C=C(CC[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2C3=C([C@H](O)C[C@]12C)[C@@]1(C)CCC(=O)C[C@@H]1CC3=O)C(C)C	-11.2723
3779	CC(=C\C(=O)O)/C=C(\C)C[C@H](C)CCCC[C@@H](O)[C@H](COC(=O)[C@@H](CO)[C@H](O)CCCC[C@@H](C)C/C(C)=C/C(C)=C/C(=O)O)C(=O)O	-9.4993
3780	CC(=C\C(=O)O)/C=C(\C)C[C@H](C)CCCC[C@@H](O)[C@H](C)C(=O)OC[C@H](C(=O)O)[C@H](O)CCCC[C@@H](C)C/C(C)=C/C(C)=C/C(=O)O	-9.5119
3781	CC(=C\C(=O)O)/C=C(\C)C[C@H](C)CCCC[C@@H](O)[C@H](C)C(=O)O[C@@H](CCCC[C@@H](C)C/C(C)=C/C(C)=C/C(=O)O)[C@H](CO)C(=O)O	-9.6130
3782	COC(=O)[C@H](O)/C=C/[C@H]1[C@H]2C(C(=O)O)=C(C)[C@]1(C)CC[C@@H]2C(C)C	-10.7446
3783	CC(=C\C(=O)O)/C=C(\C)C[C@H](C)CCCC[C@H](OC(=O)/C=C(C)/C=C(\C)C[C@H](C)CCCC[C@@H](O)[C@H](C)C(=O)O)[C@H](CO)C(=O)O	-9.5952
3784	CC1=CC[C@]2(C)C(=O)C(O)=C([C@H](C)CO)[C@H]2C/C=C(\C)[C@@H](O)CC[C@](C)(O)/C=C/C1	-10.3793
3785	C/C1=C/C[C@]2(C)C(=O)C(O)=C([C@H](C)CO)[C@H]2C/C=C(/C)[C@H]2CC[C@](C)(O2)[C@H](O)CC1	-11.0197
3786	COC1=CC(C)=C(Cl)C(O)=C1Cl	-10.4030
3787	CC=CC=CC1=C(C)C(=O)C(C)=CN1CCO	-9.6039
3788	CCOC(=O)C1=C(O)C=C(C)C=C1OC1=C(O)C=C(OC)C=C1COC(=O)CCCCCCCCCCCCCCCO	-10.2186
3789	COC(=O)C1=C(OCC=C(C)C)C=CC=C1OC1=C(OCC=C(C)C)C=C(OC)C(CC=C(C)C)=C1CO	-8.9783
3790	CC(C)[C@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CC[C@]23O[C@]24C(=O)CC2=CC(=O)CC[C@]2(C)[C@H]4CC[C@]13C	-10.7962
3791	C/C=C(/C=O)[C@@H]1C[C@H]2C3=C(C[C@H](C(=O)OC)N2C=C1C(=O)O)C1=CC=CC=C1N3	-9.4221
3792	CC(O)CCCCCC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)OC(C)C	-10.9704
3793	CC1=C(C=O)[C@H]2[C@@H](C(C)C)CC[C@]1(C)[C@H]2/C=C/[C@@H](O)C(=O)OC[C@H]1[C@H]2C(C(=O)O)=C(C)[C@]1(C)CC[C@@H]2C(C)C	-10.5681
3794	CCOC(=O)C1=C(O)C=C(C)C=C1OC1=C(O)C=C(OC)C=C1COC(=O)CCCCCCCCC=CCCCCCCCCO	-9.8055
3795	CO[C@]12CCCN1C(=O)C1=C2NC2=CC=CC=C2C1=O	-9.0298

3796	COC1=CC(/C=C2\C=C(C(=O)C3=CC=CN3)[C@@H](CC3=CC=CC=C3)CN2C(C)=O)=CC2=C1OCO2	-8.9290
3797	C/C(=C\C[C@]1(O)C(=O)C2=C(O)C=C(C)C3=C(O)C(C)=C(O)C(=C23)C1=O)CC/C=C(\C)CC[C@@H]1O[C@H](C(C)(C)O)CC[C@@]12O[C@H]2O	-10.6338
3798	COC1=CC=C(CO)C=C1C#C[C@H](C)CO	-10.4602
3799	C/C(=C\CC/C(C)=C/C[C@]1(O)C(=O)C2=C(O)C=C(C)C3=C(O)C(C)=C(O)C(=C23)C1=O)CC/C=C1/CCC(C(C)(C)O)OC1=O	-10.0968
3800	C/C=C/[C@@H](O)[C@](C)(O)[C@H]1CC[C@H]2C3=CC(=O)[C@@]4(O)CC(=CC[C@H](O)C4)[C@H]3CC[C@]12C	-11.1100
3801	C=C1[C@]2(C)CC3=C(C)[C@@]4(C=CC(=O)OC4(C)C)CC[C@@]3(C)[C@]13C(=O)O[C@@H](C)[C@]3(O)C2=O	-10.7054
3802	CC(C)C(C)/C=C/[C@@H](C)C1CCC2C3CC(=O)[C@@]45C[C@@H](O)C[C@@H](C)C4[C@]3(CC[C@@]21C)O5	-11.2659
3803	C/C=C/C(O)[C@](C)(O)C1CC[C@@]2(O)C3=CC(=O)C4CC(=CC[C@H](O)C4)C3CC[C@]12C	-11.2843
3804	CCOC(=O)CC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)CCCCCCCCOC(=O)CC/C=C/C[C@H](O)C[C@@H](C)O	-10.5634
3805	CC(C)=CCC1=CC(CC2=C(C3=CC=C(O)C=C3)[C@](O)(C(=O)O)OC2=O)=CC=C1O	-9.9598
3806	COC(=O)/C(C)=C/COC1=CC(=O)CC(/C=C/C=C/C=C/[C@H]2O[C@@]3(C)O[C@H](C)[C@](C)(O)[C@@]3(C)[C@H]2O)=C1C	-8.8293
3807	C[C@@H](O)C[C@@H](O)C/C=C/CCC(=O)OCCO	-10.5633
3808	CCCCCCC=CC=CCCCCCCCC(=O)OCC(O)COC(=O)CCCCCCCCCCCCCC(C)CC(C)C	-10.2968
3809	O=C(C=CC1=CC=C(O)C=C1)OC1CC2CCC3C4CCC5(C(=O)O)CCCCC5C4=CCC3C2CC1O	-9.6887
3810	C=C1[C@@H](C)C2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@]23[C@H](O)C=C[C@](C)(OC)C[C@@H](C)CC=C[C@@H]3[C@@H]1O	-9.4020
3811	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)C1CCC2C3=CC(=O)OC4=CC(=O)CC[C@]4(C)C3CC[C@@]21C	-10.0108
3812	C=CC(C)(C)C1=C(/C=C2\NC(=O)[C@@H](CCC(=O)O)NC2=O)C2=CC=CC=C2N1	-9.8668
3813	CCC(C)C(=O)NC(=O)CC(C)=O	-9.4567
3814	C=C1C=C(OC)[C@H](C)[C@@H](O)[C@]1(C)O	-10.1809
3815	CC(=CCCC(C)C)C1=CC=C(CC2=C(C)C=C(OC3=CC(C)=CC(O)=C3C)C=C2O)C=C1O	-8.5702
3816	CC(=O)N1CC[C@]2(O)C3=CC=CC=C3N[C@@]12C	-9.3242
3817	CC1(C)C=CC2=C3NC4=C(C3=CC=C2O1)[C@H](O)C12NC(=O)C3(CCCN3C1=O)C[C@H]2C4(C)C	-10.6294
3818	C=C(C)[C@]1(O)CC[C@]2(C)[C@H](CC=C(C)[C@@]23C=C(C(=O)O)/C(=C\C(=O)C2=CC=CN=C2)O3)[C@@]12CCC(=O)OC2	-8.9356

3819	CCC[C@@H]1NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@H](CC2=CC=CC=C2)NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC1=O	-11.2563
3820	C[C@H]1O[C@@H]2OC(=O)[C@]3(C)C[C@H]4C(CO)=C5CC(=O)OC(C)(C)C5=CC(=O)[C@]4(C)[C@H](C1=O)[C@H]23	-9.8824
3821	CCCCCCCCC[C@@H]1C[C@H](O)CC(CO[C@@H]2C[C@H](CO)[C@H](O)[C@H](O)[C@@H]2O)=C1C(=O)O	-10.7805
3822	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)C1CCC2C34C=C[C@@]5(C[C@@H](O)CC[C@]5(C)C3CC[C@]12C)OO4	-10.6425
3823	C[C@@]12OCC(O)[C@@H]1C1=C(C=C3C(=O)C4=CC(O)=CC(O)=C4C(=O)C3=C1O)O2	-11.0678
3824	C[C@H](/C=C/[C@H](CO)C(C)(C)O)[C@H]1C[C@H](O)C2=C3C=CC4=CC(=O)CC[C@]4(C)[C@H]3C[C@@H](O)[C@@]21C	-10.8664
3825	COC12OC1([C@]13O[C@@]1(OC)C(=O)C1=CC4=C(C(O)=C1[C@H]3O)C(=O)C=C(C)O4)[C@H](O)C1=C(C=C3OC(C)=CC(=O)C3=C1O)C2=O	-9.3591
3826	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@]23[C@H](OC(C)=O)C=C(C)C(C)C[C@@H](C)CC=C[C@H]3[C@@H]1O	-9.3230
3827	CC(=O)OCC[C@H]1CC=C(C)[C@@]12CO[C@@]1(OC(=O)[C@@]3(C)O[C@@H]13)[C@@H]2O	-10.4894
3828	C[C@@H](CCCCCCCCCCCCCCCOC1OC(CO)C(O)C(O)CC1O)C(=O)C1=C(O)N(C)[C@@H](C)C1=O	-10.6171
3829	COC(=O)C1=C(O)CC(O)CC1C	-10.2722
3830	CC[C@H](C)C[C@H](C)/C=C(/C=C(C)/C=C/C=C/C=C/C=C/C=C/C1=CC(O)=C(C2OC(CO)C(O)C(O)C2O)C(=O)O1)C(=O)O	-9.7690
3831	COC1=C(O)C(C)=C2C(=C1O)C(=O)O[C@@H]2OC	-10.4484
3832	CC1=C(C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@]23OC(=O)C/C=C(/C)C(=O)[C@@H](C)CC=C[C@H]3[C@@H]1O	-9.4717
3833	CO[C@]12OCCN3C(=O)C4=C5C3=C1[C@](C)(CC[C@]5(C)CCC4=O)[C@@H](C(C)C)[C@H]2O	-11.2836
3834	C=C1[C@@H](O)[C@H]2[C@]3(C=O)CC[C@H](OC(C)=O)C(C)(C)[C@H]3CC[C@]2(C)[C@@]2(C(=O)OC)C(O)=C(C)C(=O)[C@@]12C	-10.2594
3835	CC1=CC[C@H]2[C@@](C)(CCC[C@@]2(C)C(=O)O)[C@@H]1CO	-11.1771
3836	CC(C)(O)[C@H]1C[C@H]2CC[C@@]3(C)[C@@H](CC[C@H]4CC5=C(NC6=CC=CC=C56)[C@@]43C)C2=C[C@H]1O	-10.1190
3837	C=C1O[C@@]2(C)C(=O)C(Cl)=C3C=C(/C=C/C(C)=C/[C@@H](C)CC)O[C@@H]4O[C@]34[C@@]2(O)/C1=C(\C)O	-8.9749
3838	COC1=CC(O)=C2C(=O)O[C@]3(C)C=C(O)C(=O)C(C4=C(O)C(O)=CC(C)=C4C4=CC(OC)=CC(O)=C4C(=O)O)=C3C2=C1	-9.5950

3839	COC1=CC(O)=C2C(=O)O[C@]3(C)C[C@]4(O)OC5=CC(C6=CC(OC)=CC(O)=C6C(=O)O)=C(C)C=C5N=C4C=C3C2=C1	-9.6140
3840	COC(=O)[C@]1(CC2=CC=C(O)C=C2)OC(=O)C(OC)C1C1=CC=C(O)C=C1	-9.5271
3841	CC[C@@H](C)[C@@H]1OC(=O)[C@H](CC(C)C)N(C)C(=O)[C@@H]([C@@H](C)CC)OC(=O)[C@@H](CC(C)C)N(C)C1=O	-9.7416
3842	C=C1[C@@H]2[C@H](O[C@@H]3OC[C@H]4[C@H]5[C@@H]3C(=C)[C@]4(C)CC[C@@H]5C(C)C)OC[C@H]3[C@@H]2[C@@H](C(C)C)CC[C@@]13C	-10.3382
3843	CC(=O)O[C@@H]1C=C[C@H](C)[C@H](O)[C@@H](C)CC=C[C@H]2C=C(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@@]231	-9.3674
3844	CC.CC(=O)O[C@H]1C[C@@]2(C)C(CC[C@H]3[C@@]4(C)C=CC(=O)[C@@H](C)C4[C@H](OC(C)=O)C(=O)[C@@]32C)/C1=C(\CCC=C(C)C)C(=O)O	-9.5529
3845	COC1=CC=C2C(=O)[C@]3(NC2=C1)[C@H](C=C(C)C)N1C(=O)C2CCCN2C(=O)[C@]1(O)[C@H]3O	-9.9657
3846	CC=CC(O)CC1=CC=CC(O)=C1CO	-10.0203
3847	CC[C@H](C[C@@H](O)C1=CC(=O)OC=C1)C(=O)O	-10.4769
3848	CC[C@@H](C)[C@@H]1NC(=O)C2CSSCC(NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@H](C(C)C)NC1=O)C(=O)N2	-11.1135
3849	CC(=O)O[C@@H]1C=C[C@@](C)(O)C(=O)[C@@H](C)CC=C[C@H]2C=C(CO)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@@]231	-9.1588
3850	O=CC1C(=O)CC2=CC=CC=C21	-9.1770
3851	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CCC2[C@]1(C)CC=C1[C@]23C=C[C@]2(C[C@@H](C)CC[C@]12C)OO3	-9.7805
3852	COC(=O)[C@]1(CC2=CC=C(O)C(CCC=C(C)C)=C2)CC(=O)C(O)=C1C1=CC=C(O)C=C1	-9.2766
3853	C=C1C[C@H]2[C@@](C)(C(=O)C(O)=C3C(C)(C)C(=O)CC[C@@]32C)[C@@H]2CO[C@@](C)(C(=O)OC)C(=O)[C@@]12C	-10.0535
3854	CCCCCCCCCC[C@@H](C)[C@@H]1CC(=O)N[C@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](C)C(=O)N[C@H](C)C(=O)N[C@@H](CCC(N)=O)C(=O)N[C@H](CC2=CC=C(O)C=C2)C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)O1	-11.1869
3855	CCCCCCCCCC[C@@H](C)[C@@H]1CC(=O)N[C@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](C)C(=O)N[C@H](C)C(=O)N[C@@H](CCC(N)=O)C(=O)N[C@H](CC2=CC=C(O)C=C2)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)CC)C(O)O1	-11.1810
3856	CC1=C\CC[C@H](O)CC2=NC(=CO2)C(=O)N2CCC=C2C(=O)O[C@H](C(C)C)[C@H](C)/C=C/C(=O)NC\C=C\1	-9.5113
3857	CC(C)=CCC/C(CO)=C1/[C@@H](O)C[C@@]2(C)[C@H]1CC[C@H]1[C@@]3(C)CC[C@@H](O)[C@@H](C)[C@@H]3CC[C@@]12C	-10.9542

3858	COC1=CC(O)=C(C(=O)O)C(C2=C(C)C=C(O)C(O)=C2C2=C(O)C(O)=CC3=C2C2=CC(OC)=CC(O)=C2C(=O)O3)=C1	-10.1285
3859	CC1=C(C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@]23[C@H](O)C=C/C(C)=C\[C@@H](C)CC=C[C@H]3[C@@H]1O	-9.5785
3860	CC1=C(O)C(C)=C2C(=C1O)CO[C@]1(C[C@@]3(C)O[C@H](C)[C@@H](C)C4=C(C)C(O)=C(C(=O)O)C(=C43)O1)[C@H]2C	-10.7674
3861	CC1=C(C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@]23[C@H](O)C=CC(C)C[C@@H](C)CC=C[C@H]3[C@@H]1O	-9.5912
3862	COC(=O)C[C@@]12OC(=O)C[C@@H](C)[C@@H]1OC1=CC=C(C3=CC=C4O[C@H]5[C@H](C)CC(=O)O[C@@]5(CC(=O)OC)C(=O)C4=C3O)C(O)=C1C2=O	-10.1230
3863	COC1=CC(=O)C2=C(C=C(OC)C(C(C)C3=C(O)C(=O)C4=CC(OC)=C(C(C)O)C(O)=C4C3=O)=C2O)C1=O	-9.9482
3864	COC1(OC)CC[C@@]2(C)[C@H](C[C@H](O)[C@@H]3[C@@H]2C[C@@H](O)[C@]2(C)[C@@H](C4=CC(=O)OC4)[C@@H](O)C[C@]32O)C1	-10.8054
3865	C[C@H]1CC=C[C@H]2[C@H](O)[C@@H](C)[C@](C)(O)[C@H]3[C@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@]32[C@H](O)C=C[C@](C)(O)C1	-9.5527
3866	CC(=O)O[C@H]1[C@@H]2C=CC[C@H](C)C[C@@](C)(O)C=C[C@@H](O)[C@]23C(=O)N[C@@H](CC2=CC=CC=C2)[C@@H]3[C@H](C)[C@]1(C)O	-9.2274
3867	C[C@H]1CC=C[C@H]2C(=O)[C@H](C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@]32[C@H](O)C=C[C@](C)(O)C1	-9.5239
3868	C[C@]12CC[C@@H](O)C[C@H]1C[C@H](O)[C@@H]1[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](C3=CC(=O)OC3)[C@@H](O)C[C@]12O	-11.2966
3869	COC1=CC(OC)=C2C(O)=C3C(=O)CC(C)(O)OC3=C(C3=C(OC)C=C4C=C5CC(C)=CC(=O)C5=C(O)C4=C3O)C2=C1	-10.2728
3870	COC1=CC(OC)=C2C(O)=C3C(=O)CC(C)(O)OC3=C(C3=C(O)C=C4C=C(O)C5=C(OC(C)=CC5=O)C4=C3OC)C2=C1	-10.0055
3871	CC(=O)O[C@@H]1[C@@H]2O[C@H]2[C@H](C)C(=O)[C@@H](C)C/C=C/[C@H]2[C@H](O)C(C)=C(C)[C@H]3[C@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@@]123	-9.5802
3872	C/C=C/[C@H]1C(C)=C[C@H]2C[C@@H](C)CC[C@@H]2[C@@]1(C)C/C(O)=C1/C(=O)[C@H](CO)N(C)C1=O	-10.2071
3873	CC[C@@H]1OC2=C(C(=O)NC=C2C2=CC=C(O)C=C2)[C@@H]2[C@@H](C)C[C@@H](C)C[C@@]12C	-9.6949
3874	CC1CC=CCCC=CCCC=CCCC=CCCCCCCC(OP(=O)([O-])OCC[N+](C)(C)C)CC(=O)O1	-9.4278
3875	CC=CC=CC(O)=C1C2CCN(C(=O)C(C)C(=O)CCCCC=CC)C2C2(C)C(=O)C1C(C)(O)C2=O	-9.5569

3876	CC(=O)O[C@H]1C=CC(=O)O[C@H]1[C@@]1(C)C2C=CC=C[C@@](O)(O2)[C@H]1C	-10.2698
3877	CC(=O)O[C@H]([C@@H]1C2C=CC=CC(O2)[C@@H]1C)[C@H]1CCC(=O)O1	-10.5219
3878	CCC(C)CC(/C=C(\C)[C@@H](O)[C@@H](C)/C=C(\C)[C@@H](O)[C@@H](C)/C=C(\C)[C@@H](O)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](O)[C@@H](C)C(=O)O)CC	-10.2326
3879	COC(=O)C[C@H](C)[C@@H](O)[C@]1(C(=O)OC)CC(=O)C2=C(C=CC(C3=CC=C4O[C@](C(=O)OC)([C@@H]5OC(=O)C[C@@H]5C)CC(=O)C4=C3O)=C2O)O1	-10.3011
3880	COC(=O)C[C@H](C)[C@@H](C)[C@]1(C(=O)OC)CC(=O)C2=C(O)C=CC(C3=CC=C4O[C@]5(C(=O)OC)C(=C(O)C[C@H](C)[C@H]5C)C(=O)C4=C3O)=C2O1	-9.8582
3881	C[C@@H](O)C(=O)O[C@@H]1C[C@@]2(C)[C@@H](CC=C3C[C@@](C)(CC(=O)O)CC[C@@H]32)[C@@](C)(C(=O)O)C1	-10.8804
3882	CCOC(=O)C[C@H](C)[C@@H](O)[C@]1(C(=O)OC)CC(=O)C2=C(C=CC(C3=CC=C4O[C@](C(=O)OC)([C@@H]5OC(=O)C[C@@H]5C)CC(=O)C4=C3O)=C2O)O1	-10.2858
3883	COC(=O)C[C@H](C)[C@@H](O)[C@]1(C(=O)OC)CC(=O)C2=C(C=CC(C3=CC=C(O)C4=C3O[C@](C(=O)OC)([C@@H]3OC(=O)C[C@@H]3C)CC4=O)=C2O)O1	-10.1805
3884	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@]23C(=O)C=C[C@](C)(O)C[C@@H](C)CC=C[C@H]3[C@@H]1O	-9.3621
3885	CC(=O)NC1C(OCC2=CC[C@@]3(CC2)[C@H](C)C[C@H](O)[C@@H]3C(C)C)OC(CO)C(O)C1O	-10.9727
3886	C=C[C@@H]1C(O)=C[C@@H]2[C@@H]3C[C@H](C)C[C@H](C)[C@H]3[C@H]3OC4=CC=C(C=C4)C[C@@]4(OC)C[C@](O)(C(=O)N4)C(=O)[C@H]1[C@H]23	-9.7039
3887	COC1=CC(OC)=C2C(O)=C3C(=O)C[C@](C)(O)OC3=C(C3=C(OC)C4=C(O)C5=C(O)C=C(C)OC5=CC4=CC3=O)C2=C1	-10.2076
3888	C/C(=C/CCC(C)C1=CC[C@@]2(C)OC3=C(C[C@@H]12)C(=O)[C@H](O)CC3)CO	-10.7130
3889	C[C@H](/C=C/[C@H](C)C(C)(C)O)[C@@]1(C)CC[C@@]2(C3=C[C@H](O)[C@@H]4C[C@H](O)CC[C@]4(C)C3=O)OC(=O)CC21	-11.1133
3890	C/C(=C/CCC(C)C1=CC[C@@]2(C)OC3=C(C[C@@H]12)C(=O)[C@H](O)CC3)C(=O)O	-10.6441
3891	CC1=C[C@H]2C=C(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@@]23OC(=O)CCC(=O)[C@H](O)CC1	-11.2600
3892	CC(C)=CC/C=C(/C)C1CC[C@@]2(C)OC3=C(C[C@@H]12)C(=O)CC[C@@H]3O	-10.3917
3893	COC1=C(CO)C(=O)OC(C=CC(=O)O)=C1C	-10.8850
3894	COC1=C(C2=CC=C(O)C(CC=C(C)C)=C2)C=C(OC)C2=C1OC1=CC3=C(C=C12)CC(O)C(OC)C3	-9.7863

3895	C=CC(/C=C/C=C/[C@@H](C)O)=C\[C@H](C)O	-9.8276
3896	COC1=CC(C2=CC=C(O)C=C2)=C(OC)C(OC)=C1C1=CC=C(O)C(CC=C(C)C)=C1	-8.9334
3897	CC(=O)OCC12CC(CCCC(=O)O)C(C)=CC1OC1C(O)C(OC(C)=O)C2(C)C12CO2	-10.6835
3898	CC1=C(Cl)C(O)=CC(O)=C1C(=O)O[C@@H]1C[C@]2(C)[C@@H]3CC(C)(C)C[C@H]3C=C(C=O)[C@H]12	-11.1433
3899	C=C1N[C@H](C)C(=C)N2[C@@H]1CC1([C@@]34C[C@@H]5C(=O)N[C@H](C(C)C)C(=C)N5[C@@H]3NC3=CC=CC=C34)C3=CC=CC=C3N[C@@H]21	-8.4093
3900	CNC1=C(C(=O)NC2C(=O)NC(C(C)C)C(=O)N3CCCC3C(=O)N(C)CC(=O)N(C)C(C(C)C)C(O)OC2C)C2=NC3=C(C(=O)NC4C(=O)NC(C(C)C)C(=O)N5CCCC5C(=O)N(C)CC(=O)NC(C(C)C)C(=O)OC4C)C=CC(C)=C3OC2=C(C)C1=O	-9.6379
3901	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(O)C4=C(C=C3C(=O)C2=C1)CC(C)(O)CC4OC1OC(C)C(OC)C(O)C1OC	-10.1043
3902	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(O)C4=C(C=C3C(=O)C2=C1)CC(C)(O)C(OC)C4OC1OC(C)C(OC)C(O)C1(N)OC	-10.3861
3903	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(O)C4=C(C=C3C(=O)C2=C1)C(=O)C(C)(O)CC4OC1OC(C)C(OC)C(O)C1(N)OC	-10.3005
3904	CC[C@H](C)/C=C(C)/C=C/C1=CC2=C(C=N1)C(=O)[C@@](C)(O)[C@@]2(O)C(=O)OC	-10.0893
3905	CC[C@H](C)/C=C(C)/C=C/C1=CC2=C(C=N1)C(=O)[C@@](C)(OC)[C@@]2(O)C(=O)OC	-10.0884
3906	CCCC(=O)C[C@H]1C[C@@]2(CCC(C)=O)[C@@H](C=C1C)O[C@]1(C)[C@H](O)[C@@H](OC(C)=O)[C@@]2(C)[C@]12CO2	-10.9233
3907	CCC(C)(C)/C=C(C)/C=C/C1=CCC(C(=O)C(C)(OC(C)=O)C(=O)CCl)=CN1[C@@H](CC(C)C)C(=O)OC	-9.6393
3908	C=C(C)O[C@@H]1[C@@H]2COC(/C=C/C(C)=C/[C@@H](C)CCOC(C)=O)=CC2=C(Cl)C(=O)[C@]1(C)O	-9.4404
3909	CC[C@H](C)/C=C(C)/C=C/C1=CC2=C(C=N1)C(=O)[C@@](C)(OC(C)=O)[C@@]2(O)C(=O)OC	-9.9725
3910	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2C3=C[C@@H]4O[C@@]45C[C@@H](O)CC[C@]5(C)C3CC[C@]12C	-10.9035
3911	C=C(C)O[C@@H]1CC2=C(CC[C@H]3C(C)(C)C(=O)CC[C@]23C)[C@]2(C)[C@@H](O)C[C@H]([C@H](C)CCC=C(C)C)[C@@]12C	-10.9287
3912	C=C1CC23C4OOC(=O)C2C1(C)[C@@H](OC(C)=O)C(O)[C@]3(C)[C@]1(C)C=CC(=O)C(C)(C)C1[C@H]4OC(C)=O	-9.7320
3913	C=C1[C@]23O[C@@]45C(=O)O[C@](C)(C(=O)[C@@]4(C(=O)O[C@H]5C)[C@]2(C)[C@@H](OC(=O)C2=CC=CC=C2)C[C@]12C=CC(=O)OC2(C)C)C3OC(C)=O	-8.8605
3914	C[C@@H](O)[C@@H]1C(=O)[C@@H]2[C@H]3C4=C[NH+]([O-])C5=CC=CC(=C45)C[C@H]3C(C)(C)N2C1=O	-10.7447
3915	C#CC(C=C)C1=CCOC(=O)C1C(=O)O	-9.7610

3916	C=CC(C)(C)[C@@]12C[C@]3(O)C(=O)N(C)C4=CC=CC=C4C(=O)N3[C@@H]1NC1=CC=CC=C12	-8.1635
3917	COC(=O)CC1([C@@H]2CCC(=O)O2)CC(=O)C2=C(C=C(C)C(C3=CC=C(O)C4=C3O[C@]3(C(=O)OC)C(=C(O)C[C@H](C)[C@@H]3OC(C)=O)C4=O)=C2O)O1	-9.9505
3918	OCC[C@H](O)CC1=CC=C(O)C=C1	-9.7005
3919	COC(=O)C12OC3=CC(C)=C(C4=CC=C(O)C5=C4O[C@]4(C(=O)OC)C(=C(O)C[C@H](C)[C@@H]4OC(C)=O)C5=O)C(O)=C3C(=O)C1=C(O)CC[C@@H]2O	-9.4707
3920	COC(=O)CC12OC3=CC(C)=C(C4=CC=C(O)C5=C4O[C@]4(C(=O)OC)C(=C(O)C[C@H](C)[C@@H]4OC(C)=O)C5=O)C(O)=C3C(=O)C1=C(O)CC[C@@H]2O	-9.4757
3921	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@]23[C@H](O)C=C[C@@H](C)C[C@@H](C)CC=C[C@H]3[C@@H]1O	-9.6373
3922	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CCC2=C3[C@@H](O)C4OC45C[C@@H](OC(=O)[C@@H](N)[C@@H](OS(=O)(=O)O)C(C)C)CC[C@]5(C)[C@H]3CC[C@@]21C(=O)O	-10.9835
3923	COC1=CC=C(N)C(OC)=N1	-8.6748
3924	CCCCCCCCCCCCCC(=O)CCC(=O)CC	-9.8065
3925	COC1=CC2=CC=CC=C2C=C1O	-9.7804
3926	CC(C)=CCC1=CC=CC2=C1C=CN2	-8.0815
3927	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@]23[C@H](O)C=C/C(C)=C\[C@@H](C)CC=C[C@H]3[C@@H]1O	-9.6181
3928	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=C(O)C=C3)NC(=O)[C@]23[C@H](O)C=C[C@@H](C)C[C@@H](C)CC=C[C@H]3[C@@H]1O	-9.6352
3929	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC(O)=C3)NC(=O)[C@]23[C@H](O)C=C[C@@H](C)C[C@@H](C)CC=C[C@H]3[C@@H]1O	-9.5459
3930	CCCCC[C@@H](O)[C@@H]1C(=O)O[C@@H](C)[C@@H](O)/C=C/C=C/C=C/C=C/C=C(\C)[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)C[C@@H](O)C[C@H](O)C[C@H](O)C[C@@H](O)C[C@@H]1O	-9.6492
3931	C=CC(C)(C)[C@@]12C=C(O)C(=O)C3/C(=C\C4=CN(C(C)CC(=O)NC5=CC=CC=C5O)C=N4)C(=O)N[C@]31N(OC)C1=CC=CC=C12	-9.0330
3932	C/C1=C/[C@H](C)C/C=C\C2C3O[C@]3(C)C(C)C3[C@H](CC4=CNC5=CC=CC=C45)NC(=O)C23C(=O)CCC(=O)C1=O	-8.2065
3933	CCCCCCCCCCCCC[C@H](O)CC(=O)O	-10.4909
3934	C=CC1=CC=CC2=C1NC1=CC=CC=C12	-8.5629
3935	CC1=CN=CC(C(C)C)=N1	-9.0904
3936	CC[C@@H](C)CCCCC#CCCCCCCCO	-9.6879

3937	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2C3=CC=C4C[C@@H](OC(=O)C5=CC([N+](=O)[O-])=CC([N+](=O)[O-])=C5)CC[C@]4(C)C3=CC[C@]12C	-8.8299
3938	CC1=CC2=C(C[C@@H]3[C@@H](C)CO[C@]3(C)O2)C2=C1C[C@@H]1[C@@H](C)CO[C@]1(C)O2	-10.7534
3939	CCCC1=CC(=O)C2=CC=CC=C2O1	-9.2214
3940	CCCNC(=S)NN	-9.5444
3941	COC(=O)C[C@@H]1CC2=CC3=C(C4=C(OC)C=C(O)C5=C(O)C6=C(C=C45)C[C@@H](CC(=O)OC)OC6=O)C(OC)=CC(O)=C3C(O)=C2C(=O)O1	-10.7846
3942	O=C1C=C[C@H]2OC3CC(=O)C1[C@@H]2C31OC2=CC=CC3=CC=CC(=C23)O1	-9.5822
3943	CC(C)[C@@H]1OC(=O)[C@@H](CC2=CC=CC=C2)N(C)C(=O)[C@H](C(C)C)OC(=O)[C@@H](CC2=CC=CC=C2)N(C)C(=O)[C@H](C(C)C)OC(=O)[C@@H](CC2=CC=CC=C2)N(C)C1=O	-8.8878
3944	COC(=O)[C@@]12OC3=CC4=C(C(O)=C3C(O)=C1C(=O)CC[C@@H]2O)[C@@H]1C=C[C@@]2(C4)C(=O)C3=CC(C)=CC(O)=C3C(O)=C2C1=O	-9.7609
3945	CC(C)C[C@H](NC(=O)C(C)N)C(=O)O	-10.3615
3946	CC1=C[C@@H](O)CC(=O)CC2=NC(=CO2)C(=O)N2CCC=C2C(=O)O[C@@H](C(C)C)[C@H](C)/C=C\C(=O)NC/C=C\1	-9.6501
3947	CC1=CC=CC2=C1CCCC2	-8.4320
3948	CC[C@@H](/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2C3=CC(O)[C@@]4(O)C[C@@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C)C(C)C	-10.8057
3949	CCCCC#CCC#CCCCCCCCCC(=O)OC	-10.2572
3950	CCC1C(C)=C(C)C(C)=C1C	-9.0938
3951	O=C(O)COC1=CC=C(Cl)C=C1	-9.4056
3952	CCCOC1=CC=C(C(=O)C(C)C)C=C1	-9.8900
3953	O=C1CC[C@H](O)C2=C(O)C=CC=C12	-10.2050
3954	CC(C)(C)C1=CC(O)=C(C(C)(C)C)C=C1O	-9.8400
3955	CC1=NC=C([N+](=O)[O-])N1C	-9.6306
3956	CC(C)CC1CCCCC1	-8.5079
3957	C1CCPC1	-8.0909
3958	CCCCCOCC	-8.3211
3959	C[C@H]1C/C=C/C(=O)O[C@@H](C)CC(=O)O[C@@H](C)C/C=C/C(=O)O1	-9.6098
3960	CCCCCCCCCCCCC1CC(=O)N[C@@H](CC(N)=O)C(=O)N[C@H](CC2=CC=C(O)C=C2)C(=O)N[C@H](CC(N)=O)C(=O)N[C@@H](CCC(N)=O)C(=O)N2CCC[C@H]2C(=O)N[C@H](CC(N)=O)C(=O)N[C@@H](CO)C(=O)N1	-10.6598
3961	CCCCCC[C@H](O)C1=CC(OC)=C(CO)C(=O)O1	-10.7639

3962	COC(=O)[C@@H](O)[C@@H]1[C@@]2(C)[C@H]3CC[C@@]4(C)[C@H](C5=COC=C5)OC(=O)C[C@@]45O[C@@]4(O)C(=O)[C@]1(C)C[C@]2(O)[C@H]4[C@@]35O	-10.4348
3963	C/C=C/C=C/C(=O)[C@]12C(=O)[C@@](C)(O)[C@@H]3/C(=C(O)\C=C\C=C\C)C(=O)[C@@]1(C)[C@@]1(O)[C@@H](C)C(=O)O[C@@]1(C)[C@@H]32	-9.1995
3964	COC1=C(O)C2=C3C(=C4C(OC)=CC(=O)C5=C4C4=C(C(OC)=C5O)[C@@H](C(C)=O)[C@H](C(C)=O)C1=C43)C(OC)=CC2=O	-10.9280
3965	CC1=C(C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@]23[C@H](O)/C=C\[C@](C)(O)C[C@@H](C)C/C=C\[C@H]3[C@@H]1O	-9.5679
3966	CC[C@H](C)[C@@H]1NC(=O)[C@@H](CC(C)C)NC(=O)[C@@H](C(C)C)NC(=O)[C@H]2CSSC[C@@H](NC1=O)C(=O)N2	-11.1665
3967	CN1C(=O)C2=CC=CC=C2NC(=O)[C@]12O[C@H]2C1=CC=CC=C1	-8.2302
3968	C=C[C@H]1C=C(C)[C@@H]2[C@H]3[C@H](OC4=CC=C(C=C4)C[C@@]4(O)C=C(C(=O)N4)C(=O)[C@H]13)[C@@H]1[C@@H](C)C[C@@H](C)C[C@]12C	-9.5570
3969	CC(=O)OCCC1=CC=CC(O)=C1	-9.9395
3970	C[C@@H]1CC[C@@H](C)SC1	-8.8039
3971	C[C@H]1CCC(=O)[C@H]1CO	-9.3174
3972	OCC1=CC(O)=CC(O)=C1O	-10.0868
3973	C/C=C(\C)C(=O)O[C@@H]1[C@@H](O)[C@@H](O[C@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](OC(=O)/C(C)=C/C)[C@H]2O)O[C@H](CO)[C@H]1O	-10.7192
3974	CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC[C@H](O)[C@H]1OC(=O)C(OC(=O)CCCCCCCCCCCCCCC)=C1O	-9.8877
3975	CCCOC(=O)COCC(=O)OCC(CC)CC	-10.3234
3976	CC(C)C12CC1[C@H](C)[C@H](O)C2	-9.8913
3977	CC(=O)O[C@]1(C)C(=O)C2=CN(CCO)C(CCC[C@H](C)O)=CC2=C(C2=C3C=C(CCC[C@H](C)O)N(CCO)C=C3C(=O)[C@@](C)(OC(C)=O)C2=O)C1=O	-8.8809
3978	CC(=O)O[C@@H]1C=C[C@](C)(O)C[C@@H](C)CC=C[C@H]2[C@H](O)[C@](C)(O)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@@]312	-9.2851
3979	CC1=CCC(=O)O[C@@]23C(=O)N[C@@H](CC4=CC=C(O)C=C4)C2C(C)=C(C)[C@@H](O)[C@@H]3C=CC[C@H](C)C1=O	-9.3812
3980	CN1CCOCC1	-8.3614
3981	C=CC(C)(C)[C@]12C[C@@H]3C(=O)NC4=CC=CC=C4C(=O)N3[C@H]1N(C(C)=O)C1=CC=CC=C12	-8.3135
3982	CC(C)=C1CCCCC1	-8.4211
3983	CCSCCN	-8.7357
3984	CCCCCCCCCCN1CCCC1=O	-9.7521

3985	C1=NNC=N1	-7.8645
3986	CC(C)=CC[C@@H]1CC(=O)C2=CC=CC=C2C1=O	-9.6834
3987	CCCCCC#CC(=O)OCC	-9.4585
3988	O=C1CC2=CC=CC=C2O1	-9.1659
3989	CCCCCC1=CCCC1=O	-8.8087
3990	O=[N+]([O-])C1=CN=C(CO)N1CCO	-9.2220
3991	CCCCCCOCCC	-8.5444
3992	O[C@H]1[C@H](O)CN2CCCC[C@H]12	-9.5204
3993	CC1=CC=NC(=O)N1	-9.0104
3994	NC(=O)C1=CC=CC(O)=C1	-9.5615
3995	CCCCCCC(CO)CCCCCC	-9.5284
3996	CCCCCCCCCCCCCCCCOC(=O)CCCCC	-9.8998
3997	C=C1CC(=O)CC1=C	-8.9625
3998	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC CCC	-8.7354
3999	CCCCCCCC(C)(CC)CC	-8.8905
4000	COC1=C(C2=CC=CC=C2)C2=CC=CC=C2NC1=O	-8.5048
4001	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CCC2C3=CC=C4C[C@@H](OC5O C(CO)C(O)C(O)C5O)CC[C@]4(C)C3CC[C@@]21C	-10.6074
4002	CC1=C[C@](C)([C@H](C)O)[C@@H]2C(=O)[C@H]3C[C@](O)(CC4=CC=C(C= C4)O[C@H]4[C@H]2[C@@H]1[C@]1(C)C[C@H](C)C[C@H](C)[C@@H]41)NC 3=O	-10.6190
4003	C[C@@H]1CC(=O)C2=C(O1)[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H](C)C2	-10.3287
4004	CC[C@@H](C)/C=C(C)/C=C/C(=O)C1=CN(O[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](OC)[C@H](O)[C@H]2O)C(=O)C(C2=CC=C(O)C=C2)=C1O	-9.1641
4005	C[C@@H](C/C=C/C(C)(C)O)[C@H]1CC[C@]2(C)C[C@H]3[C@H]4/C(=C\C[C@ @H]12)C(=O)O[C@H]4C[C@@]3(C)O	-10.8946
4006	C=C1C23C(=O)O[C@@H](C)[C@@]24O[C@]2(C(=C)[C@@]5(C=CC(=O)OC5(C)C)CC(O)C32C)C(OC(C)=O)[C@]1(C)OC4=O	-10.5440
4007	CC1=CCC(C)(C)C=CC[C@@]2(C)OC3=CC(O)=CC(C)=C3C[C@@H]2C[C@H]1 O	-10.2160
4008	CC1=CC(O)=C2C(=O)C=C([C@H](C)O)OC2=C1	-10.5011
4009	CC1(C)C=CC2=C(C=CC3=C2[N+]([O-])=C2C3(O)CC34NC(=O)[C@@]5(CCCN5C3=O)C[C@H]4C2(C)C)O1	-10.0623
4010	CC(=O)OC/C(C)=C\CC[C@@H](C)C1=CC[C@]2(C)C[C@@H]3[C@@H]4/C(=C \C[C@@H]12)C(=O)O[C@@H]4C[C@@H]3C	-10.3681
4011	CC1C[C@@H](C)C[C@@H](C)[C@H](O)CC(=O)O[C@@H]([C@H]2CCC[C@ @H]2C(=O)O)C/C=C\C=C(/C#N)[C@@H](O)[C@H](C)C1	-10.7948

4012	C=CC(C)(C)[C@@]12C=C(O)C(=O)N3/C(=C\C4=CNC=N4)C(=O)N[C@]31N(OC)C1=CC=CC=C12	-8.7512
4013	CC1=CC[C@@H]2[C@@]3(O)CC[C@H](O)C(C)(C)[C@@H]3CC[C@@]2(C)[C@]12CC1=C(C=C(C3=CC=CN=C3)OC1=O)O2	-9.6669
4014	COC1=C(C)C(=O)C(C)=C([C@H]2CC(=C/C(C)=C/C3=CC=C([N+](=O)[O-])C=C3)CO2)O1	-9.4563
4015	CN1C(=O)[C@]23SS[C@@]1(C)C(=O)N2[C@H]1NC2=CC=CC=C2C1([C@@]12C4=CC=CC=C4N[C@@H]1N1C(=O)[C@]4(C)SSSS[C@]1(C(=O)N4C)[C@H]2O)[C@@H]3O	-9.1453
4016	CC[C@H](C)C1C(=O)O[C@H](C(C)C)C(=O)N(C)[C@@H]([C@@H](C)CC)C(=O)O[C@H](C(C)C)C(=O)N(C)[C@@H]([C@@H](C)CC)C(=O)O[C@H](C(C)C)C(=O)N1C	-9.9380
4017	CC[C@@](C)(O)/C=C(\C)[C@@H]1O[C@@]1(C)C1CC2=CC(=O)[C@@](C)(O)[C@H](O)C2=CO1	-10.5236
4018	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@]23[C@H](O)C=C[C@](C)(OC)C[C@@H](C)CC=C[C@H]3[C@@H]1O	-9.5117
4019	CCCCOC(=O)COC(=O)C1=CC=CC=C1C(=O)OCCCC	-10.3658
4020	CC(=O)O[C@@H]1C=C[C@](C)(O)[C@H](O)[C@@H](C)CC=C[C@H]2C=C(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@@]231	-9.5587
4021	CCO[C@H]1O[C@H](COC(C)(C)[C@@H]2CC[C@@](C)(O)[C@@H]3CC[C@@](C)(O)[C@@H]3C2)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H]1O	-10.7726
4022	C/C=C(\C)[C@H](OC1OC(COC2OC(CO)C(O)C(O)C2O)C(O)C(O)C1O)[C@H](C)/C=C(C)/C=C/C/C(C)=C/CC1=NC(OC)=C(OC)C(O)=C1C	-9.5387
4023	C/C(=C\C[C@]1(O)C(=O)C2=C(O)C=C(C)C3=C(O)C(C)=C(O)C(=C23)C1=O)CC/C=C(\C)CCC[C@@]1(C)CC[C@@H](C(C)(C)O)O1	-10.5967
4024	CC1(C)C=CC2=C(C=CC3=C2[N+]([O-])=C2C3=CC34NC(=O)[C@@]5(CCCN5C3=O)C[C@H]4C2(C)C)O1	-10.0238
4025	CC1=C2COCC23[C@@]2(O)O[C@@]45OC(C)CC6OCC(=C(C)C(=O)[C@]34O)[C@]65[C@@]2(O)C1=O	-10.9053
4026	C=C(C(=O)O)[C@@H]1C(C)C[C@@H](CO)C2C[C@@H](O)C(C)=CC21	-10.8950
4027	CC(=O)O[C@H]1C[C@@]2(C)[C@@H](CC[C@H](C)[C@]23CC2=C(O)C=C4C(=O)NCC4=C2O3)C(C)(C)[C@@H]1OC(C)=O	-10.7075
4028	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=CC(C)=C(O)C=C3C(=O)C2=C1	-10.1386
4029	C=C(C)[C@@H]1CC(=O)C23C(O)CCC(C)[C@]2(C)CC[C@@H](C)C3C1C1=CNC2=CC=CC=C12	-9.9846

4030	CC(=O)O[C@H]1C[C@@]2(C)[C@@H](CC[C@H]3[C@@]4(C)C=CC(=O)[C@@H](C)[C@@H]4CC(=O)[C@@]32C)/C1=C(\CCC=C(C)C)C(=O)O	-10.3818
4031	C=CC(C)(C)[C@@]12C[C@](O)(C(=O)NC3=CC=CC=C3C)N(C=O)[C@@H]1N(C(C)=O)C1=CC=CC=C12	-8.3984
4032	COC(=O)C[C@H](C)[C@@H](O)[C@]1(C(=O)OC)CC(=O)C2=C(O)C=CC(C3=CC=C(O)C4=C3O[C@](C(=O)OC)([C@@H]3OC(=O)C[C@@H]3C)CC4=O)=C2O1	-10.2197
4033	CO[C@@H]1C[C@@H](C[C@@H](O)CC[C@@H](C)/C=C(\C)C(=O)O)O[C@]2(O[C@](C)([C@H]3CC[C@@](C)([C@@H]4O[C@@H]([C@H]5O[C@](CO)(OC)[C@H](C)C[C@@H]5C)C[C@@H]4C)O3)C[C@H]2C)[C@@H]1C	-10.2059
4034	CC(C)C(C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CCC2C3=CC=C4C[C@@H](C)CC[C@]4(C)C3CC[C@@]21C	-9.0929
4035	CC1=CC(=O)C(O)=CC(O)=C1C=O	-10.4498
4036	COC(=O)[C@@]1([C@H](O)[C@@H](C)CC(=O)O)CC(=O)C2=C(C=CC(C3=CC=C4O[C@](C(=O)OC)([C@@H]5OC(=O)C[C@@H]5C)CC(=O)C4=C3O)=C2O)O1	-10.3790
4037	CC1=C[C@H]2C[C@@H](C)CC[C@@H]2[C@@]2(C)C(=O)[C@]3(C(=O)[C@H](CO)N(C)C3=O)[C@H](/C=C/[C@H](C)O)[C@@H]12	-10.4330
4038	CC[C@H](C)C(=O)[C@@H](C)C1=C(O)C2=C(C3=C1SCC(=O)N3)[C@@H](O)[C@@H]1[C@@]3(C)CC[C@H](C(C)(C)O)O[C@@H]3CC[C@@]1(C)O2	-10.2940
4039	CO[C@@H]1O[C@@]23[C@@H](OC(C)=O)CC(C)=C[C@@H](OC)[C@H](OC)[C@@H]1[C@H]2CC3(C)C	-10.8258
4040	CCC/C=C/C1=C(CO)C(=O)C[C@H](O)[C@@H]1O	-10.3378
4041	CC[C@H](C)C(=O)[C@@H](C)C1=CC(=O)C2=C(O[C@]3(C)CC[C@H]4O[C@@H](C(C)(C)O)CC[C@]4(C)C3=C2)C1=O	-10.8378
4042	CCCCCCCCCCCCCCC/C=C/[C@@H](O)C(=O)NC(COC1OC(CO)C(O)C(O)C1O)[C@H](O)/C=C/CC/C=C(\C)CCCCCCCCC	-10.7882
4043	C=COC(=O)C1=C(C)C=C(O)C=C1O	-10.5651
4044	COC(=O)CCCCCCCC(C)=O	-9.6778
4045	CCC[C@@H]1C[C@H](O)[C@@H](O)/C=C/C=C\C(=O)O1	-10.1943
4046	COC(=O)C(C)(C)O	-10.0407
4047	CC(C)(C)C1=CC(=O)C(=O)C(C(C)(C)C)=C1	-10.0174
4048	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCBr	-9.1949
4049	ClCC1=CC=CC=C1	-7.9088
4050	NC1=NSC2=CC=CC=C12	-8.4993
4051	NC(=O)OC1=CC=C(CC2=CC=CC=C2)C=C1	-9.3000
4052	CC1=C2C(=O)C[C@]2(C)[C@@H]2CC(C)(C)C[C@H]2[C@@H]1O	-11.2039
4053	COC1(O)C(=O)C2(O)[C@@H](C)OC(=O)C=C[C@]2(C)C2CCC3(C)C(C4=COCC4)OC(=O)C4OC43[C@@]21C	-10.6842

4054	CCC(C)C(=O)C[C@H]1C[C@@]2(CCC(C)=O)[C@@H](C=C1C)O[C@@H]1[C@H](O)[C@@H](OC(C)=O)[C@@]2(C)[C@]12CO2	-11.0223
4055	CC(=O)O[C@H]1[C@H]2O[C@@]23C(CC[C@@]2(C)[C@@]3(O)CCC3CC4=C(NC5=CC6=C(C=C45)CC4C6=CC(C)(C)OC4(C)C)[C@@]32C)O[C@@H]1C(C)(C)O	-9.9555
4056	CC[C@H](C)[C@@H]1NC(=O)[C@@H]2CCCN2C(=O)[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@@H]2CCCCN2C(=O)[C@H](CC2=CNC3=CC=CC=C23)NC(=O)CCNC1=O	-9.9436
4057	COC1=CC2=C(C=C1O)C(=O)C(CO)=C(CC(C)C)O2	-10.9614
4058	CC1=CC=CC2=C1C(=O)[C@@H](O)C[C@H]2O	-10.1941
4059	CC(=O)O[C@H]1CC[C@@]2(C)[C@@]3(C1)O[C@@]21CC[C@@]2(C)C(CC[C@@H]2[C@H](C)/C=C/[C@H](C)C(C)C)C1=CC3=O	-10.8397
4060	CC1=CC=CC2=C1C(=O)CC[C@H]2O	-10.0020
4061	C=C1[C@]23C(=O)O[C@@H](C)[C@@]24O[C@]2(C(=C)[C@@]5(C=CC(=O)OC5(C)C)C[C@H](OC(=O)/C(C)=C/C)[C@@]32C)C(OC(C)=O)[C@]1(C)OC4=O	-9.4646
4062	CN1CCCN(C)C1=O	-9.0670
4063	CCCCC1=CC=C(CC2=CC=CC=C2)C=C1	-8.6849
4064	C=CCNCCCCCCCCCC	-8.9950
4065	CCCCCCCCCCCCCCN(C)C	-9.0662
4066	CCCCCCCCCCCCC(CCCCCCCCC)CCCCCCCC	-8.6740
4067	C=CCCN(C)C1CCCCC1	-8.7008
4068	CC(C)(C)CC(C)(C)C1=CC=C(OCCOCCCl)C=C1	-9.8141
4069	CCCCCCCCCCC(=O)CCCCCCC	-9.8209
4070	C=CCC1(C(=O)O)CC1	-9.7472
4071	C=CCCC=C1CCCC1	-8.3474
4072	CCCCCCCCOCCCCCC	-8.9952
4073	CC(C)CCCCCCC(C)C	-8.6217
4074	CC(=O)OCCO	-9.1538
4075	CCCCCC#CCC(=O)O	-9.2259
4076	C1=C[C@H]2[C@H]3CC[C@H](C3)[C@H]2C1	-8.6614
4077	CCCCCCCCCCCCN(C)C	-9.0574
4078	CCCN(CCC)CCC	-8.5957
4079	CCC(C)CC(C)=O	-8.9247
4080	CCCCCCOCCCCCC	-8.6188
4081	NC1=CC=C(O)C(C(=O)O)=C1	-9.3861
4082	O=C(O)C1=CC(=O)C2=CC=CC(O)=C2N1	-9.3796
4083	CCC(CO)[N+](=O)[O-]	-9.3598
4084	CCCCCCCCCCCCC(CCCCCCCCC)C1CCCCC1	-8.8388
4085	CP(=O)(O)O	-9.5014
4086	CN(C)N=NC1=CC=CC=C1	-9.3007
4087	CC(CC(C)(C)C(C)(C)C)C(C)(C)C	-9.0123

4088	C[Si](C)(O)O	-9.2261
4089	CCCCC(C)CCC(C)C	-8.6726
4090	CCCCCCCCCCCCCCCCC(CCC)C1=CC=CC=C1	-8.6653
4091	CCCCC(CC)COC(=O)CCCCC(=O)O	-10.4519
4092	CCCCCCCCCC(N)=O	-9.3591
4093	CCCCCCCCCCCCCCCOCCCCCCCCCCCCCC	-9.2361
4094	C1=CCC2=C(C1)CCC2	-8.3999
4095	O=C1N=CC2=C(N=CN2)N1	-9.0832
4096	C[Si](C)(C)NC1=CC=CC=C1	-8.5539
4097	C=CCC(C)(O)C(C)C	-9.4751
4098	CCCCOC(=O)CN=C=O	-9.4468
4099	CCC(C)CCC(C)CC	-8.5101
4100	OC1CCC2OC1CCC2O	-9.4755
4101	C=CC(=O)OCC(CC)CCCC	-9.6807
4102	CCCCCCCCCCCCCCCCCCC[Si](Cl)(Cl)Cl	-9.3486
4103	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(C(=O)C2=C1C1=C(OC)C=C(O)C2=C1C(=O)C1=CC(C)=C(O)C=C1C2=O)[C@@H](O)[C@@](C)(O)[C@H](O)[C@H]3O	-9.6608
4104	CC1=CC=CC=C1C1CO1	-9.1356
4105	CCCCCCCCCCCCC(O)CC(=O)OC	-10.4185
4106	C=C1[C@H]2CN(CCO)C[C@@H]3[C@H]2[C@H](C(C)C)CC[C@@]13C	-10.2039
4107	CC(=O)NC1=CC=CC(C)=C1	-8.2817
4108	CCO[Si](C)(C)CCCOCC1CO1	-10.2055
4109	OC(CNC1=CC=CC=N1)C1=CC=CC=C1	-8.1254
4110	CC(=O)OCCCCCCCCCCCC=CC1CO1	-10.2868
4111	CCC(C)CCCCC(C)(C)CC	-9.1423
4112	CC(C)N=C=O	-9.3974
4113	CCCCOCCOCCOC(C)=O	-9.5247
4114	C=COC(=O)C(CC)CCCC	-9.8537
4115	CCN(CC)C1=CC=C(C=O)C=C1	-8.4159
4116	O=C1C=CC=CO1	-8.8970
4117	CCCCCCCCCCC=CCCCCCC(=O)OC	-10.2016
4118	CCC=CCCCCCCCCC	-8.4833
4119	CCCCCCCCCCCC=CCCCCC(C)C	-9.0166
4120	C=CC1(C(C)CCC)C(=O)NC(=O)NC1=O	-9.8663
4121	CCCCCCC(O)C#CCCCCCCCCC(=O)O	-10.4555
4122	CCCCCCCCC=CCCCCCCCC(=O)OCCCO	-10.5147
4123	NC(=S)NN=C(C1=CC=CC=C1)C12CC3CC(CC(C3)C1)C2	-10.5662
4124	CCCCCCCCC=CCCCCCCCC(=O)OCC1CO1	-10.4989
4125	CCC=CCC=CCC=CCCCCCCCCC(=O)OC(CO[Si](C)(C)C)CO[Si](C)(C)C	-9.9389
4126	CCC=CCCCC(Br)C(Br)CCCCCOC(C)=O	-10.0118
4127	CCCCCCCCC=CCCCCCCCCC	-9.0845

4128	NCCN1CC1	-8.3729
4129	CC1=CC=CC(CO)=C1OCC(C)N	-10.1930
4130	CCCCCCCCC=CCCCCCCCC(=O)Cl	-9.7546
4131	CCCCC=CCCCCCCCCCCCCC	-9.0680
4132	OC1CC2C=CC1C2	-8.9253
4133	CCCCCC=CCCCCC	-8.4211
4134	CCCCCCCCCC=CCCCCCCCCCC	-9.0312
4135	OC1=CC=C(C=CC2=CC=CC=C2)C=C1	-8.9437
4136	CC=CCCCCCC(=O)OC	-9.4121
4137	COC1OC2COC(C3=CC=CC=C3)OC2C2OC12	-9.8082
4138	CC1=CC=C2OC3CC(=O)C=CC3(C)C2=C1	-9.3945
4139	CC(C=O)=CCC1C(C)=CCCC1(C)C	-9.7641
4140	OC1CCCCCCCCCCCCCC1	-9.4449
4141	CN(CC1=CC=CC=C1)CC(O)CO	-9.1205
4142	CCCC(C(=O)O)C(O)CC	-10.2992
4143	CCCCCCCCCCCCCCCCC(Br)C=O	-9.8154
4144	CC1C=C(CO)C(=O)O1	-9.8045
4145	CCC(C)OC(=O)C1=CC=CC=C1C(=O)OC(C)CC	-10.4765
4146	CC(=O)NCC(O)C1=CC=CC=C1	-9.5380
4147	COC(=O)CCCCC(C)=O	-9.6065
4148	C=CC(CC)CCCCC	-8.5787
4149	CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCC1CO1	-10.2117
4150	CCOC(=O)C(C)(C)C(C)O	-9.9349
4151	CCCCCCCCCC(CC)(CCCCCCC)CCCCCCCC	-8.7827
4152	COC1=CC=C(C(N)=O)C=C1O	-10.4023
4153	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(O)C4=C(C=C3C(=O)C2=C1)C(=O)C(C)(O)C(OC)C4	-10.3141
4154	CC1(CCC#N)CSCC(CCC#N)C1=O	-10.5903
4155	C=C(CC)C(C)C(C)=O	-9.1551
4156	CC(=O)NC(CO)C1OC(C)(C)OC1C1COC(C)(C)O1	-10.9679
4157	CCC(C)OCCC(C)=O	-9.2296
4158	CCC(=O)C(C)C(CC)CC	-9.2894
4159	CCCCCCCCCSCC(O)C(O)C(O)C(O)CO	-10.4028
4160	CCCCC(CCC)CC(C)CC	-8.8029
4161	CCCCC(C)CC(C)CC(C)C	-8.8348
4162	CC(C)OCC(N)C(=O)O	-10.0212
4163	CCC(C)CCCCCCCCCCCOC	-9.3052
4164	COCOCC(C)C(OC(C)=O)C(C)CO	-10.5640
4165	COC1OC(C(C)OC(C)=O)C(O)C1O	-10.0244
4166	O=C1NC(=O)C2(CCOC2)N1	-9.3880
4167	CC1OC(C)C(C)CS1	-9.5096
4168	O=C1OC(CO)C(O)CC1O	-9.6630

4169	CC1=CC(C)=NC(NS(=O)(=O)C2=CC=C(N=CC3=CC=C([N+](=O)[O-])C=C3)C=C2)=N1	-9.0088
4170	C=CC(=O)OC(CCC)CCCCCCCCCCC	-9.8617
4171	CCCC1OC(C(C)(C)C)OC1=O	-9.5738
4172	C=COCCOC1CCCCC1O	-9.7741
4173	CCCC(C)O[Si](C)(C)C	-9.7846
4174	C=CCCCCCC(C)CC	-8.5078
4175	C[Si](C)(C)NC1=C(C(=N)O[Si](C)(C)C)N=CN1[Si](C)(C)C	-9.6228
4176	CC(C)C1CCC2(C)NC2C1	-9.1775
4177	C[Si](C)(C)C1=CC([Si](C)(C)C)C=CC1[Si](C)(C)C	-9.8350
4178	C=C(C)C1CCCC(O)C1C	-9.4018
4179	C=C(CO)C1CCC2(C)CC(=O)CC(C)=C2C1	-10.6064
4180	CCCCCC1CC1CC1CC1CC1CC1CC1CC1CCCC(=O)OC	-10.1539
4181	C=CC1(C)CC(=C)CCC2C1CC2(C)C	-9.2018
4182	CC1=CC(C)=CC(O[Si](C)(C)C2CCCCC2)=C1	-9.5069
4183	C=C1C2COCC3C2C(C(C)C)CCC13C	-9.4524
4184	C[Si](C)(C)OC1=CC(O[Si](C)(C)C)=CC(O[Si](C)(C)C)=C1	-9.8194
4185	CCCCC(C)CC(C)CCCC	-8.7099
4186	CC=C1[C@H]2C=C(C)C[C@]1(N)C1=C(C2)NC(=O)C=C1	-9.0830
4187	CCCCCCC(CC)CCC	-8.5048
4188	CCCCC(C)CCC(C)CC	-8.7115
4189	C[Si](C)(C)OC(=O)C1=CC=C(O[Si](C)(C)C)C=C1O[Si](C)(C)C	-9.6624
4190	CCCCCCC(C)CC(C)CC	-8.7632
4191	COC1=C2CCCCC2CCC1=O	-9.6725
4192	CCC(C)C(C)C(C)C(C)CC	-8.9574
4193	COC1=CC=C(CCO[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](OC(=O)/C=C/C3=CC=C(O)C(OC)=C3)[C@@H](O[C@@H]3O[C@@H](C)[C@@H](O)[C@@H](O)[C@H]3O)[C@H]2O)C=C1O	-10.2676
4194	CCCCCCCCCCCCCCCCC(O)C(O)C(=O)O	-10.5454
4195	CC(=O)OC1CC(C)C2CC1C2(C)C	-9.8201
4196	C[Si](C)(C)OC(=O)C1=C(O[Si](C)(C)C)C=CC=C1O[Si](C)(C)C	-9.4890
4197	CCCCC(C)CC(C)CCC	-8.7249
4198	CC1(C)CCC[C@]2(C)[C@H]3CC[C@]2(C)[C@@H](O)[C@@H]31	-10.2755
4199	CCCCCCCCCCCCCCCCC(O[Si](C)(C)C)C(=O)OC	-10.1931
4200	COC1=CC(C(CO[Si](C)(C)C)O[Si](C)(C)C)=CC=C1O[Si](C)(C)C	-10.1290
4201	C[C@H]1CCC/C=C/[C@@H]2C[C@@H](O)C[C@H]2[C@H](O)/C=C/C(=O)O1	-10.6412
4202	CC(C)(C)CC(C)(C)C1=CC=C(O[Si](C)(C)C)C=C1	-9.0745
4203	COC1=CC(OC)=C2OC=CC(C)C2=C1	-10.0538

4204	CCCC=C(C)C(=O)O	-9.5296
4205	CO[Si](C)(OC)C1CCCCC1	-9.3829
4206	C[C@@H]1C(=O)C[C@]2(C)CCCC(C)(C)[C@@]23C[C@@H]13	-10.2319
4207	CC1=CN=C(C)C(C=CC2=CC=CC=C2)=N1	-8.7840
4208	CC[C@H](/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CC=C4C=CCC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C)C(C)C	-9.2636
4209	CC#CC(C)=C=C(C)C	-8.5828
4210	CCCCCCCCCCCC(C)OC(=O)CC1=CC=CS1	-10.1481
4211	CC1=C(C)C(O)=C(C)C(=O)C1=O	-10.1541
4212	CCCC[Si](C)(C)OC(C)CC	-9.7974
4213	CC1CCC2=CC=CC=C2C1O	-9.0938
4214	CCC=CCCCCC=CCCCCCCCC(=O)OC	-10.1825
4215	CC(C[N+](=O)[O-])C(C)C(=O)N1CCCC1	-9.8929
4216	CC(C)C/C=C/[C@@H](C)C(C)C	-8.9619
4217	O=C1CCC2C3=C(C=CC(O)=C13)C1=CC=C(O)C3=C1C2(O)C(O)CC3=O	-10.5947
4218	CCCCCCCC(C)CCCC(C)C#N	-9.9674
4219	CCC12CCC(C)CC1(C)CCCC2(C)C	-8.9765
4220	COCC1CC(=C(C)C)CC1C(=O)OC	-10.3383
4221	NC1=CC=CC=C1CC(=O)O	-8.9129
4222	CC1(C)OC12CCCCC2=O	-9.6183
4223	CCN1C(C)=NC(C)=CC1=O	-9.1612
4224	NC1=NC(C2CCC(=O)O2)=CS1	-8.7069
4225	CC(=O)OCC1C=CC2=CC=CC=C21	-8.9149
4226	CC1=C(C(=O)O)[C@H]2[C@@H](C(C)C)CC[C@]1(C)[C@H]2CO	-10.7779
4227	CC1CC2C(CC(=O)O)C1(C)CCCC2(C)C	-10.4584
4228	CC(O)C1=CC=CC=C1CO	-9.5561
4229	CC(C)C1=CCC(C(=O)O)C(C(=O)O)C1	-10.1775
4230	CC1C(=O)N(C)C2=CC=C(O)C=C21	-9.0469
4231	CCCCCCCCCCCCCC(CCC)OC(=O)C1=CC=C(Cl)C=C1	-9.8282
4232	[N-]=[N+]=NC1(N=[N+]=[N-])C2=CC=CC=C2C2=CC=CC=C21	-8.4578
4233	CCOC(=O)C(OCC)C1=CC=C(O[Si](C)(C)C)C(OC)=C1	-10.1910
4234	COC(=O)C1=CC2=C3C=CC=CC3=C2C=C1COC(C)=O	-9.4605
4235	CCCCCCCC(=O)O[Si]1(C)CCCC1	-9.1875
4236	N#CC1=CC=CC=C1C1=CC=CC=N1	-8.5436
4237	COC(=O)C1OC1C1=CC(OC)=C(OC)C(OC)=C1	-10.4213
4238	CC(=O)C=C(O)C(C)(C)C	-9.9796
4239	CCCCCCCCCCCCCC(CCC)OC(=O)CCCCCBr	-9.7085
4240	CNC(=O)CC12CC3CC(CC(C3)C1)C2	-10.3599
4241	C1=CC=C2C(=C1)C1=CC=CC3=C1C2COC3	-8.7121

4242	C[Si](C)(C)OC(C1=CC=CC=C1)C(O[Si](C)(C)C)C1=CC=CC=C1	-9.2127
4243	CC(=O)N[C@H](CO)C(=O)O	-9.7060
4244	CC(C)=CCCC1(C)OC2(C)CCC1CC2=O	-10.1585
4245	CCCCCCCCCCCCCCCC[C@@H](O)[C@H](CO)NC(=O)C(O)CCCCCCCCCCCCCCCC	-10.2434
4246	CC1=C2C[C@]3(C)[C@@H](C)CC[C@@H](O)[C@@]3(O)C[C@@]2(O)OC1=O	-11.0488
4247	CCN(CC)C1=CC=C(N=NC2=[N+](C)N(C)C(C3=CC=CC=C3)=C2)C(C)=C1	-8.3449
4248	CC1=C2CC[C@H](C)[C@@H]2C[C@H](C(C)C)CC1	-9.2718
4249	O=S(=O)(NC1=CC=C(O)C=C1)C1=CN=C(Cl)C(Br)=C1	-9.4660
4250	COC(=O)CNC(C1=CC=CC=C1)C1=CC(Br)=CC=C1NC(=O)C1=CC=C(OC)C=C1	-9.0528
4251	O=C[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)CO	-9.5634
4252	CCCCCCCCCCCCCCCCC=CC(=O)OCC	-9.9604
4253	CC(=O)O[C@@H]1/C=C\[C@](C)(O)C[C@@H](C)C/C=C\[C@H]2[C@H](O)C(C)=C(C)[C@H]3[C@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@@]123	-9.3776
4254	[C-]#[N+]C1=CC2(OC2C)[C@@H]2OC12	-9.5006
4255	CC(=O)O[C@@H]1/C=C\[C@](C)(O)C[C@@H](C)CC=C[C@H]2[C@@H]3O[C@]3(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@@]312	-9.3755
4256	C[Si](C)(C)OC(=O)CP(=O)(O[Si](C)(C)C)O[Si](C)(C)C	-9.9855
4257	CCCCC(CC)C(CCCC)OC(=O)C1=CC=CC=C1C(=O)O	-11.3134
4258	COC1=CC2=C(C3=CC=C(OC)C(=O)C=C3C(N(CO)C(C)=O)CC2)C(OC)=C1OC	-10.4475
4259	NC(=O)C[C@H](NC(=O)[C@@H](N)CCCN=C(N)N)C(=O)O	-10.3291
4260	O=C1C=C(NCCCN2CCOCC2)C(=O)C=C1NCCCN1CCOCC1	-10.1035
4261	CCC(C)C1=C(C)C(=O)C2=CC=C(O)C(C)=C2O1	-10.9716
4262	CC1=C[C@@H]2C=CC[C@H](C)C=C(C)[C@@H](O)[C@@H](O)C=CC(=O)[C@]23C(=O)N[C@@H](CC2=CNC4=CC=CC=C24)[C@@H]3[C@@H]1C	-9.1977
4263	CC1(C)CCC[C@@]2(C)C1CC[C@@]13C[C@@H](CCC12)[C@](C)(O)C3	-10.0332
4264	CCOC(=O)OC1=CC=CC(O)=C1	-10.4323
4265	C[C@H]1OC(=O)C2=C(O)C=CC=C2C1O	-9.9485
4266	O=C(S)C1=CC=C(Br)C=C1	-8.5054
4267	O=C1C2=C(CCC2O)OC2=CC=CC(O)=C12	-10.3871
4268	C[C@@H]1C[C@@H](O)[C@@H](O)/C=C/C=C\C(=O)O1	-10.1271
4269	[Si]O[Si]O[Si]O[Si]O[Si]O[Si]O[Si]O[Si]	-8.7991
4270	CCCCCCC(CC)C(C)=O	-9.2582

4271	C=C(C)C1=CC(C)CCC1	-8.5920
4272	C[C@H]1CC=C[C@H]2[C@@H]3O[C@]3(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@]32OC(=O)C=C[C@H](O)CCC1	-9.5612
4273	CCCCCCCCCC=CCCCCCCCCC(=O)OCC1COC(C2=CC=CC=C2)O1	-9.4532
4274	C=C(C)[C@@H]1CC[C@@H]2[C@]3(CC[C@]4(C)[C@@H]([C@H](C)CC/C=C(\C)C(=O)O)CC[C@@]24C)C[C@]13CCC(=O)O	-10.6452
4275	CCC(C)OC[C@H]1O[C@@H](OC)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]1O	-10.4832
4276	CC1(C)[C@@H](O)CC[C@]2(C)C3=C(CC[C@@H]12)C(=O)OC3	-11.0694
4277	CCCCCCCCC(C)OC=O	-9.2297
4278	CC1=C[C@@H](O)CC(=O)CC2=NC(=CO2)C(=O)N2CCC[C@@H]2C(=O)O[C@H](C(C)C)[C@H](C)/C=C\C(=O)NC/C=C\1	-10.1942
4279	CC1(C)[C@@H](Cl)CC[C@]2(C)[C@@H](C(=O)O)[C@](C)(O)C[C@@H]3O[C@]312	-11.4067
4280	CCC=C(C=O)CCC	-9.1002
4281	COC1=CC=CC2=C1C(=O)CC[C@@H]2O	-10.4114
4282	CC=CC(=O)C1=CC(C)=CC=C1C	-8.8818
4283	NC1=NC(C2=CNC3=CC=CC=C23)C=NN1	-9.1301
4284	CCC(=O)C=C(C)CC	-8.9390
4285	CC(C)C=C1CCCCCC1=O	-9.1880
4286	CC(=O)O[C@H]1/C=C/[C@@H]2O[C@@H]2C(=O)O[C@H](C)C[C@H]1O	-10.0744
4287	CC=CC(C)C(C)CCCCCC	-8.8233
4288	CCCCCCCCC=CCC=CCCCCCCC(=O)OC	-10.2713
4289	C1=CCC=CCC=C1	-7.8206
4290	C=C1C=CC=CCCC1	-8.2216
4291	CC=CCCC1=CC=CC=C1	-8.2524
4292	CC(=CCC1=C(C)CCCC1(C)C)CO	-9.9041
4293	CC1C(=O)OC(=CC(=O)OC(C)(C)C)C1C	-10.3582
4294	C=COC(=O)C=CC=CC	-9.1638
4295	O=CC(Br)=CC1=CC=CC=C1	-8.5261
4296	CC1(C)CC(C)(C2=CC=CC=C2)OC(=S)N1	-9.4940
4297	C[Si](C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)C	-9.1491
4298	CC1=CCC2C(=C(C)CCC1)CC2(C)C	-9.4071
4299	C(=CC1=CC=C(C=CC2=CC=C(C=CC3=CC=CC=C3)C=C2)C=C1)C1=CC=CC=C1	-9.3364
4300	CCCCCCCCCCOS(=O)OC(C)C	-10.3421
4301	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCOS(=O)OC(C)C	-10.3538

4302	C[Si](C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)C	-9.3534
4303	CC(C)(C)[Si](OCC1CCCO1)C(C)(C)C	-9.8624
4304	COC(=O)C=C(C)CCCC(C)CCCC(C)C	-10.2684
4305	CC1CCCC(=NNC(=O)C2CC2C2=CC=CC=C2)C1	-10.3122
4306	CC(C)C[C@H](N)C(=O)N[C@@H](CC1=CN=CN1)C(=O)O	-10.6084
4307	CCCCCCCCOS(=O)OCCCCCCC	-10.3731
4308	CCCCCCCCCCCCCCOS(=O)OC(C)C	-10.2992
4309	C[Si](C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)C	-9.7713
4310	CC(=O)OC[C@@H]1CC[C@@H]2C[C@H]1C2(C)C	-9.9461
4311	CCC(=O)[C@H]1C[C@H](C(C)C)CC=C1C	-9.8034
4312	COC(=NO)C1=CC=CC=C1	-9.4540
4313	C/C1=C/CC(C)(C)C=CC[C@@]2(C)OC3=CC(O)=CC(C)=C3C[C@@H]2C[C@H]1O	-10.2339
4314	CC(C)CCCCCCCCCC1CC(=O)N[C@@H](CCC(=O)O)C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)N[C@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H](C(C)C)C(=O)N[C@@H](CC(=O)O)C(=O)N[C@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)O1	-10.3679
4315	CCCOC(=O)C1=CC=CC=C1C(=O)OCCC(C)CCOC	-10.5928
4316	O=C1C=CCCCCCCCO1	-9.2258
4317	C=C[C@@](C)(O)CC/C=C(\C)CC[C@@H](O)C(C)(C)O	-10.5943
4318	CN1C(=O)C2=CC=CC=C2NC(=O)[C@H]1CC1=CC=CC=C1	-8.4588
4319	COC1=CC=C(C(C)=C(Cl)C#N)C=C1	-9.7619
4320	CCCCCC[C@H](O)C1=CC(OC)=C(COCC2=C(C)CCC2=O)C(=O)O1	-11.0042
4321	CCCCCC[C@H](O)[C@@H]1C[C@@H](O)C2=C(CC[C@@H](O)C2=O)O1	-10.8432
4322	C=C(C)[C@@H]1CC/C(C)=C\CC/C(C)=C\C[C@H](C(=C)C)C1	-8.8173
4323	C[C@H]1CCC=C(C=O)[C@]12CCC(C(C)(C)O)C2	-10.7463
4324	CCCC(C)OC(=O)C1=CC=CC=C1C(=O)OC	-10.4389
4325	CC1=C(O)[C@H](O)[C@H]2O[C@H]2C1=O	-9.8250
4326	CCCCCC=CCC=CCCCCCCCC(=O)OCCCC	-10.0772
4327	C=C(C)C1=CC2[C@H](C)CCC[C@@]2(C)CC1	-9.2866
4328	CCCCC(CCC)OC(=O)C1=CC=CC=C1C(=O)OCC(C)C	-10.5565
4329	CCCCCCCCCCCC=CC1CC(=O)OC1=O	-10.4328
4330	CC[C@H](C)/C=C(C)/C=C/C1=CC2=CC(=O)[C@](C)(O)[C@H](O)[C@H]2CO1	-10.0540
4331	CC(C)=CCC1=CC=C(O)C(C=O)=C1CC=CCCC(C)O	-10.4675
4332	CCC=CC=CC1(C)OC(OC)=C(CCCCC)C1=O	-10.2256
4333	CCCCC=CCC1=C(CC(O)C(C)(C)O)C=CC(O)=C1CO	-10.6691

4334	CC[C@H](CC[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CC(=O)C4CC(=O)CC[C@]4(C)[C@@H]3CC[C@]12C)C(C)C	-10.4069
4335	COC1OCC2=CC[C@@H]3C(C)(C)CCC[C@]3(C)[C@H]21	-10.0578
4336	CCCCC=CCC1=C(CC=C(C)C)C=CC(O)=C1CO	-10.0959
4337	CCCCC(=O)OCC(=O)[C@]1(O)CC2=C(O)C3=C(C(=O)C4=C(OC)C=CC=C4C3=O)C(O)=C2[C@@H](OC2CC(NCC3=CC=CC=C3)C(O)C(C)O2)C1	-9.0560
4338	CCCCCCC=CCCCCCCCC(N)=O	-10.2887
4339	CC(=O)OC(O)CC(C)CCC=C(C)C	-10.3158
4340	CCC(C)CC(C)/C=C(\C)C1OC(C2=C(O)C([C@]3(O)CCC(=O)C[C@@H]3O)=CN(C)C2=O)CC[C@@H]1C	-10.5156
4341	CCCC[C@@]1(O)O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]1O	-9.8628
4342	CC[C@H](C=C[C@@H](C)[C@H]1CCC2=C3C=CC4=CC(=O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@@]21C)C(C)C	-9.7115
4343	CC(O)[C@@]12SS[C@]3(C(=O)N1C)[C@@H](O)[C@]1([C@]45C6=CC=CC=C6N[C@@H]4N4C(=O)C6(C)SS[C@]4(C(=O)N6C)[C@H]5O)C4=CC=CC=C4N[C@H]1N3C2=O	-9.0240
4344	COC1=CC(OC)=C2C(=O)OC(CC(O)CO)=CC2=C1	-11.0063
4345	CCC(CC)(C(=O)OC)C(=O)C1=CO[C@@H](OC)C1[C@@H](C)C(C)=O	-10.8082
4346	COC(=O)C1=C(O)C=C(C=CC2=CC=C(O)C(O)=C2)OC1=O	-10.1408
4347	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@]23[C@H](OC(C)=O)C=C[C@](C)(O)C[C@@H](C)C/C=C\[C@H]3[C@@H]1O	-9.4115
4348	CC=CC(=O)C1=CC(O)=CC=C1O	-10.3971
4349	S=S1NC=CO1	-8.4552
4350	CCC(O)C[C@H](O)[C@@H]1CC(OC)=CC(=O)O1	-10.3208
4351	COC(=O)C1=C(C)C=C(OC2=CC(C)=CC(O)=C2)C=C1O	-10.3860
4352	C/C=C/[C@@H]1OC(=O)CCC1O	-9.6978
4353	CCCC(=O)C1=C(O)C=CC=C1OC1=CC=CC(O)=C1C(O)=CC(C)=O	-9.8345
4354	CCOCCO[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)OCCOCC	-9.8571
4355	C[C@@H]1O[C@@H](C[C@H]2CC3=CC(O)=CC(O)=C3C(=O)O2)CCC1O	-10.9829
4356	C=CCOC(=O)C=CC(=O)OCCCCCCCCCCC	-10.3062
4357	CCCCCCCCCCCCCCOC(=O)C1CCCN1C(=O)CCCC	-10.2882
4358	CC1O[C@H]2OC[C@H](O)[C@H]2O1	-9.9428
4359	C[Si](C)(C)SCC1=CC=CC=C1CS	-8.8503
4360	CCCCCC=CC(C)CCCCCCCCCC(=O)OC	-10.1060
4361	CCCCC(CCC)OC(=O)C(CC)(CC)C(=O)Cl	-10.2640
4362	CC(C)CCC(C)OC(=O)C1=CC=CC=C1C(=O)OCC(C)C	-10.5828
4363	CCCCCCCCCCCCOC(=O)C1CCCN1C(=O)CCCC	-10.4390

4364	CCO[C@H]1O[C@@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H]1O	-9.7424
4365	CCCCCCCCCCCCCCCCCC=CCCC=CCCCC(=O)OC(C)C	-9.8594
4366	C=C(CCC=C(C)C)[C@@H]1CC=C(CO)CC1	-9.5338
4367	CCCCCCCCCCCCCCCCCOC(=O)C(CC(C)C)NC(=O)C1CC1	-10.5529
4368	C=C1CC(O)C23CC(C)CC2C(C)(C)C1C3	-10.1367
4369	CC1=CC2C(C(C)=CC[C@@H]2C(C)C)C(O)C1	-10.2149
4370	CC1(C)CCCC2(C)CC[C@@](C)(O)C3CC312	-10.1775
4371	COC(=O)C1=CC(OC)=CC(=O)C12OC(=O)C1=C(O)C=C(C)C=C1O2	-10.7722
4372	COC(=O)C1=CC=C(O)C2=C1[C@@H](O)[C@@H](C)OC2=O	-10.7864
4373	CC(C)(O)[C@H]1CC[C@]2(C)CCC(CO)=CC[C@@H]12	-10.2059
4374	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CC[C@@]2(O)C3=CC(=O)C4=CC(=O)CC[C@]4(C)[C@@]3(O)CC[C@]12C	-10.9697
4375	COC1=CC(O)=C2C(=O)O[C@]3(C)C[C@@H](O)[C@H](O)C=C3C2=C1	-10.9852
4376	O=C1N[C@@H](CC2=CC=C(O)C=C2)C(=O)N[C@H]1CC1=CC=CC=C1	-9.2931
4377	COC1=CC(=O)C=C(C)[C@@]12OC1=CC(OC)=CC(OC)=C1C2=O	-10.3781
4378	COC1=CC2=C(C=C1O)CN1CC[C@]23C=C[C@@H](OC)C[C@@H]13	-10.5365
4379	CC[C@@H](C)C1=C(C)C2=CC(O)=C(C(=O)O)C(O)=C2C=[N+]1CCO	-10.6141
4380	CC(C)=CCC[C@]1(C(=O)O)C2C/C=C(\C)CC/C=C(/C)CC[C@H]1[C@H](C=O)CC2	-10.8582
4381	CCC1=C2CC(=O)O[C@@H]([C@H](C)[C@H](O)[C@H](C)CC(C)=C[C@H](C)[C@@H](O)[C@H](C)[C@@H](O)CC)C/C=C(\C)CC(C)(O2)C1=O	-11.1105
4382	CCCC=C1OC1=CC1=CC=C(CC=C(C)C)C(O)=C1C=O	-9.7116
4383	CCC(=O)[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H](C)C=C(C)C[C@@H](C)[C@@H](O)[C@@H](C)[C@H]1C/C=C(\C)CC2(C)OC(=C(CC)C2=O)CC(=O)O1	-10.3939
4384	CC1=CC2C=C(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC(C)C)NC(=O)C23C(=O)C=C[C@H](O)[C@H](O)CC1	-11.0720
4385	C=CC(C)CC=C(CCC(C)CCCC(C)C)C(C)CCCC(C)C	-8.7500
4386	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@@]23[C@H](O)C=C[C@](C)(O)C[C@@H](C)CC=C[C@H]3[C@@H]1O	-9.6129
4387	CCC(=O)[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H](C)C=C(C)C[C@@H](C)[C@@H](O)[C@@H](C)[C@H]1C/C=C(\C)CC2(C)OC(O)(CC(=O)O1)[C@H](CC)C2=O	-10.3061

4388	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@]23[C@H](O)[C@H](O)[C@H]2C(C)=C[C@@H](C)CC4O[C@H]1[C@@H]3C42	-9.8251
4389	C/C1=C/C(=O)OC[C@]23CCC(C(=O)O)=C[C@H]2O[C@@H]2C[C@H](OC(=O)/C=C\C=C[C@H]([C@H](C)O)OCC1)[C@@]3(C)[C@]21CO1	-10.4806
4390	C/C=C\C(O)CC[C@@H](C)[C@@H](O)[C@H](C)[C@H]1C/C=C/C=C/C=C/C(O)C(=O)/C(C)=C/C=C/C(C)=C/C(O)/C(C)=C/CC(=O)O1	-9.4783
4391	CC(=O)N=CC1=C(O)OC(CO)=C1	-10.0131
4392	CC(C)[C@H]1CC[C@@](O)(COC(=O)C2=C[C@@H]3[C@@H](C(C)C)CC[C@@](O)(COC(=O)/C(=C/[C@H]4C5=C(CC[C@H]4C(C)C)COC5=O)CO)[C@H]3C(=O)OC2)[C@H]2C(=O)OCC(C(=O)O)=C[C@H]12	-9.6266
4393	CC(=O)O[C@H]1CCC(O)=C2C(=O)C3=C(O)C=CC(C4=CC=C(O)C5=C4O[C@]4(CO)C(=C(O)C[C@H](C)[C@@H]4OC(C)=O)C5=O)=C3O[C@]21CO	-9.5583
4394	C[C@@H]1C/C=C/CC[C@H](O)CCCC(=O)O1	-10.0752
4395	CC1=CC(C(=O)O)=CC([C@H](C)O)=N1	-10.2934
4396	C=C1C(C)C2C(CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@]23C(OC(C)=O)/C=C\[C@@](C)(O)C(=O)C(C)C/C=C\C3C1O	-9.0565
4397	CC1=C[C@H]2C=C(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@@]23C(=O)[C@H](S[C@@H]2CC(=O)[C@H](O)CCC(C)=C[C@H]3C=C(C)[C@@H](C)[C@H]4[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@@]34C2=O)CC(=O)[C@H](O)CC1	-10.6877
4398	CCCCCCCCCCCCCCC=CC(O)C(N)C(O)C1(O)OC(CO)C(O)C(O)C1O	-10.8456
4399	COC1=CC(=O)[C@]23OC(=O)C4(O)[C@@H]5OC(=O)C([C@@H]1[C@]42C)[C@@]53C	-10.7374
4400	CC[C@H]1OC(=O)[C@H](C)[C@@H](O[C@H]2C[C@@](C)(OC)[C@@H](O)[C@H](C)O2)[C@H](C)[C@@H](O[C@@H]2OC(C)C[C@H](N(C)C)[C@H]2O)[C@](C)(O)C[C@@H](C)[C@@H]2N[C@@H](COCCOC)O[C@H]([C@H]2C)[C@]1(C)O	-10.1195
4401	CC1=C[C@H]2C=C(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@@]23C(=O)[C@H](S[C@@H]2CC(=O)[C@H](O)CCC(C)=C[C@H]3C(OO)C(C)=C(C)[C@H]4[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@@]34C2=O)CC(=O)[C@H](O)CC1	-10.3446
4402	CC12CC(=O)CCC1CC1CNCC1N2	-10.2896
4403	COC1=CC=C2C(=O)C(C)=C(C(C)C(C)O)OC2=C1C	-11.1150
4404	C[C@H](CCCC[C@@H]1C[C@@H](O)CC(=O)O1)C[C@@H](C)CC[C@@H](C)O	-10.8745
4405	CC(=O)CCNC(CC1=CC=C(O)C=C1)C(=O)O	-10.2505
4406	CC1CC=CC(=O)OC(C)C(C=CC(=O)O)OC(C)C(C=CC(=O)O)O1	-9.9769

4407	C=CC(C)(C)[C@@]12C(C3=CC=CC=C3N)=C(O)C(=O)N3/C(=C\C4=CNC=N4)C(=O)N[C@]31N(OC)C1=CC=CC=C12	-9.2094
4408	C/C(=C/C=C/C=C/C(C)C(=O)O)NC(=O)CC(O)/C(C)=C\C=C/C=C(C)/C=C/C=C\C=C\CNC(=O)C(CC(C)C)O[C@@H]1O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]1O	-9.9649
4409	COC(=O)[C@]12C(=O)C(C)C(=O)[C@@]1(C)C(C)=C[C@@H]1[C@@]3(C=O)CC[C@@H](OC(C)=O)C(C)(C)[C@@H]3CC[C@]12C	-9.9565
4410	CC[C@@H](/C=C/[C@H](C)[C@@H]1CC[C@@H]2[C@H]3CCC4=CC(=O)CC[C@@]4(C)[C@@H]3CC[C@]21C)C(C)C	-10.1902
4411	C=C1CC2=C(Cl)C=C3NC4=C5C3=C2[C@H]2[C@@H]1C[C@@H]2C(C)(C)O[C@H]5[C@@H]1CC[C@@]2(O)C3=C[C@@H](O)[C@@H](C(=C)C)O[C@@H]3CC[C@]2(C)[C@@]41C	-9.4938
4412	C[C@@H](O)C[C@@H](O)C/C=C/CCC(=O)O	-10.3473
4413	C[C@H](O)C(=O)/C=C/C1=CC=CC(=O)O1	-9.6705
4414	O=C1C=C2CCC(=O)CC2=CC1	-9.1763
4415	C=C[C@@]1(C)CC2=C(C(=O)C1C(=C)C)C(C)=CO2	-9.6546
4416	CCCC=CC=CC=CCCC1=CC=C(O)O1	-9.2274
4417	C=C1[C@H](CO)[C@H]2[C@@H](C(C)C)CC[C@]1(C)[C@H]2CO	-10.4413
4418	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)C1CCC2=C3C(CC[C@@]21C(=O)O)[C@@]1(C)CC[C@H](OC(=O)[C@@H](N)[C@@H](OS(=O)(=O)O)C(C)C)C[C@@]12OC2[C@@H]3O	-10.9996
4419	C/C=C(/C=O)[C@@H]1C[C@H]2C3=C(C[C@@H](C(=O)O)N2C=C1C(=O)OC)C1=CC=CC=C1N3	-9.4321
4420	CCCCC(C)C1=C(COC)C(=O)OC1	-10.0690
4421	C=C1[C@@]23C(=O)O[C@H](C)[C@]24O[C@@]2(C(=C)[C@@](CCC)(C(C)(C)OC=O)C[C@@H](OC(=O)/C(C)=C\C)[C@]32C)C(OC(C)=O)[C@@]1(C)OC4=O	-10.2130
4422	CCC[C@@H]1CC(=O)C2=CC=C(O)C(CC)=C2O1	-10.6520
4423	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(O)C4=C(C=C3C(=O)C2=C1)O[C@@]1(C)CCC[C@H]4O1	-11.0969
4424	C=C1C(CC2=CC=CC(O)=C2COC)=C(C)OC1(C)OC	-9.8709
4425	CC1=NC2(C=CC3=CC=CC(O)=C3CO2)C2C3=CC=CC(O)=C3COCC12	-9.2150
4426	CCC/C=C/[C@H]1C=C[C@H](O)[C@H](O)[C@@H]1C(=O)C(C)O	-10.7005
4427	COC1=CC(C)=C2C(=O)O[C@@]3(C)CC(=O)O[C@H]3C2=C1	-10.5412
4428	C=C1[C@@]23C(=O)O[C@H](C)[C@]24O[C@@]2(C(=C)[C@@](/C=C\C)(C(C)(C)OC=O)C[C@@H](OC(C)=O)[C@]32C)C(OC(C)=O)[C@@]1(C)OC4=O	-10.3620
4429	CC(O)C(=O)OCCC1=CC=CC=C1	-9.6894

4430	C[C@H]1CCC/C=C/[C@@H]2CC[C@@H](O)[C@H]2[C@@H](O)/C=C/C(=O)O1	-10.6600
4431	CC(C)(C)OC(=O)NCCCNC(=O)C=CC1=CC=CC=C1	-9.8593
4432	CC(O)[C@]12SS[C@@]3(C[C@]4([C@]56C[C@@]78SS[C@@](C)(C(=O)N7[C@H]5NC5=CC=CC=C56)N(C)C8=O)C5=CC=CC=C5N[C@@H]4N3C1=O)C(=O)N2C	-9.0479
4433	CC(=O)C1=CC(C)=C2O[C@]3(C[C@@H](O)C[C@@H](C)O3)[C@@H](C)CC2=C1O	-10.9259
4434	CC1=CC[C@@]2(C[C@@H]1O)[C@H](C(C)C)[C@@H](O)C[C@@H]2C	-10.7539
4435	COC1=CC(C)=CC2=C1C[C@@H]1[C@@H](C)CO[C@]1(C)O2	-10.4432
4436	O=C1OC(C2=CC=CC=C2)CC1O	-9.2957
4437	COC(=O)/C=C/[C@@]12CC(C#N)=C[C@@H]1O2	-9.7488
4438	CC(C)C(C)/C=C/[C@](C)(O)C1CCC2=C3C=CC4=CC(=O)CC[C@]4(C)C3CC[C@@]21C	-10.4110
4439	CN1C(=O)C2=CC=CC=C2NC(=O)[C@@H](CC2=CC=CC=C2)N(C)C(=O)C2=CC=CC=C2NC(=O)[C@H]1CC1=CC=CC=C1	-8.4559
4440	CC=CC(=O)C1=CC(C)=C(O)C(C)=C1O	-10.7883
4441	CCO[C@@]12C[C@H](C)C(=O)C(C)=C1O[C@H](C)C[C@@H]2O	-10.8012
4442	C/C(=C\C=C\[C@]1(C)OC(=O)[C@@H](C)[C@@H]1O)[C@H](C)O	-10.5166
4443	COC(=O)C(=CC(=O)O)C(=O)C1=CC(O)=C(OC)C=C1O	-10.2758
4444	C=C1O[C@H](C)CC2=C(O)C=CC(O)=C12	-9.9273
4445	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@]23[C@H](O)C=C[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H](C)CC=C[C@H]3[C@@H]1O	-10.4094
4446	C[C@H]1CC=C[C@H]2C=C(CO)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC4=CC=C(O)C=C4)NC(=O)[C@@]23[C@H](O)C=C[C@@H](C)C1	-9.6820
4447	C[C@@H]1CCCCC[C@H](O)CC[C@H](O)/C=C/C(=O)O1	-10.5987
4448	CC=C(C)C(O)C(C)C=C(C)C(O)C(C)C=C(C)C=O	-10.6140
4449	C=CC(C)(C)C1=C(C[C@@H]2NC(=O)C(=C)NC2=O)C2=CC(CCC=C(C)C)=CC(CCC=C(C)C)=C2N1	-8.6264
4450	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC3=C(C2=C1)[C@@](C)(O)C[C@@H](OC)[C@@H]3O	-11.1814
4451	COC(C)(C)/C=C/C[C@H](C)[C@H]1CC[C@]2(C)C[C@@H]3C(C)=CC(=O)[C@H]3/C(CO)=C\C[C@@H]12	-10.9364
4452	C[C@@H](CO)C1=CC2=CC(CO)=CC=C2O1	-9.6597
4453	CO[C@]1(C)OC(=O)C2=C(O)C=CC(O)=C21	-10.3396
4454	C/C1=C\C(=O)C/C(CO)=C/CC(C)(C)C(=O)[C@@H](O)C1	-10.7790
4455	CC1=CC(=O)[C@H]2/C(CO)=C\C[C@H]3[C@@H]([C@@H](C)C/C=C/C(C)(C)O)CC[C@]3(C)C[C@H]12	-10.8053
4456	COC1=CC=C(O)C2=C1C(=O)O[C@@]2(C)OC	-10.5500

4457	COC(=O)C=CC1=C(C=CC(C)=O)N(C)N=C1	-9.6129
4458	C[C@@H]1CCCCCCCC(=O)CC2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.9093
4459	CO[C@@H]1O[C@@]23[C@@H](OC(C)=O)CC(C)=C[C@@H](OC)[C@H](OC)C1[C@H]2CC3(C)C	-10.8073
4460	CCC(C)C1=C(C)C(=O)C2=CC=C(OC)C(C)=C2O1	-10.8635
4461	C=C(CO)[C@@H]1CC[C@@]2(O)CCC[C@H](C)[C@@]2(C)C1	-10.5138
4462	CCC(C)C1=C(C)C(=O)C2=CC(O)=CC(C)=C2O1	-10.9607
4463	CC1CCC/C=C/[C@@H]2C[C@@H](O)C[C@H]2[C@H](O)/C=C/C(=O)O1	-10.7000
4464	C[C@H]1[C@H]([C@@]2(C)CCC(=O)O2)CC[C@@]1(C)O	-10.4309
4465	O=C1N[C@@H](CC2=CC=C(O)C=C2)C(=O)N2CCCC12	-9.8122
4466	COC1=CC(=O)C2=C(O)C3=C(CC(C)(C=O)OC3)C(O)=C2C1=O	-10.6278
4467	CN1N=CC(C=CC(=O)O)=C1C=CC(C)(C)O	-10.0249
4468	COC(=O)C=CC1=C(C=CC(C)(C)O)N(C)C(=O)N1	-10.1587
4469	CC(C)=CCC1=C(C=CC(=O)O)N=CN1C	-9.7189
4470	COC(=O)C=CC1(CC=C(C)C)NC(=O)N(C)C1=O	-10.0606
4471	CC=CC1=C(O)C(OC)=C(Cl)C(OC)=C1Cl	-10.2528
4472	COC(=O)C=CC1=C(C=CC(C)(C)OC)N(C)N=C1	-9.9087
4473	C[C@H](CO)CCC[C@](C)(O)C1=CC=C(C(=O)O)C=C1O	-10.7375
4474	COC(=O)C=CC1=C(CC=C(C)C(=O)O)N(C)N=C1	-10.1121
4475	COC(=O)C=CC1=C(CC=C(C)C(=O)OC)N(C)N=C1	-9.5589
4476	CC=CC1=CC(O)=C(Cl)C(OC)=C1OC	-10.5122
4477	CC1=CC2=C(C(O)=C1OC(C)(C)[C@H]1CO1)[C@@H](C1=C(O)C=CC=C1O)OC2=O	-10.4115
4478	CNC(=O)[C@](/C=C/C(=O)OC)(CC=C(C)C)NC=O	-9.9767
4479	CC1=C(C=O)[C@H]2[C@@H](C(C)C)CC[C@]1(C)[C@H]2/C=C/[C@@H](O)C(=O)OC[C@H]1[C@H]2C(C=O)=C(C)[C@]1(C)CC[C@@H]2C(C)C	-10.4928
4480	COC1=CC=C(CO)C=C1C=C=CC(C)CO	-10.2167
4481	CC1=CC2=C3C(=C1O)OC1=CC=CC(OCC(O)C(C)(C)O)=C1[C@@H]3OC2=O	-10.6284
4482	CC=C(C)C(=O)OC1C=CC(=O)OC1C(CC(=O)C(C)O)OC	-10.5859
4483	CC1=C(C=O)[C@H]2[C@@H](C(C)C)CC[C@]1(C)[C@H]2/C=C/[C@@H](O)C(=O)O	-10.6438
4484	CC=CC=CC(=O)C1=CC=C(O)C=C1O	-10.2844
4485	CC(=O)N[C@H](C(=O)O)[C@@H](C)C1=CNC2=CC=CC=C12	-9.7423
4486	CC1=CC(=O)[C@]2(C)CC[C@@H](C(C)(C)O)[C@H]2CC1	-10.7658
4487	COC(=O)C(CO)NC(=O)C=C(C)C=C(C)C1=CC(OC)=C(C)C(=O)O1	-10.9158
4488	CC1=CC[C@@H]2[C@H](C(C)(C)O)CC[C@@]2(C)[C@H](O)C1=O	-10.8652

4489	COC1=C(C)C(=O)OC([C@H](C)[C@@H]2OC(=O)C=C2C)=C1	-10.4619
4490	COC1=C(C)C(=O)OC([C@H](C)[C@H]2OC(=O)C=C2C)=C1	-10.4619
4491	C=C1CC[C@@H]2[C@H](C(C)(C)O)CC[C@@]2(C)C[C@H]1O	-10.2507
4492	COC1=C(C)C(=O)OC(/C(C)=C/[C@@H](C)CCO)=C1	-10.9340
4493	CC(C)OC(=O)C1=C(O)C=C(O)C=C1CCCCCC(O)CO	-10.7868
4494	C=C[C@@H]1C=C(C)[C@H]2[C@@H]3[C@H](OC4=CC=C(C=C4)C[C@@]4(OC)C[C@H](C(=O)N4)C(=O)[C@@H]13)[C@@H]1[C@@H](C)C[C@@H](C)C[C@]12C	-9.8519
4495	CCCCCCCC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)OC(C)C	-10.8646
4496	CC1(C)CCC[C@@]2(C)C1=CC[C@@](C)(O)[C@@H]2C(=O)O	-11.2021
4497	CC(C)COC(=O)C1=C(O)C=C(O)C=C1CCCCCCC[C@H](C)O	-10.7288
4498	O=C(O)C1=CC=CC=C1NC[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H](O)CO	-9.6294
4499	CN1C2=C(C(=O)N3CCC[C@]23O)C(=O)C2=CC=CC=C21	-9.4901
4500	C=C(C(=O)O)[C@@H]1C(C)C[C@@H](C)C2CCC(C(=O)O)=CC21	-10.3720
4501	CC(C)[C@@]1(C(=O)O[C@H](C)[C@H](C)O)OC(=O)/C(=C/C2=CC=CC=C2)O1	-10.0975
4502	C=C(C(=O)O)[C@@H]1C(C)C[C@@H](CO)C2CC(=O)C(C)=CC21	-10.6086
4503	CC1=CC(O)=CC2=C1C(=O)C=C(C[C@H](O)CC(=O)O)O2	-10.6144
4504	CN1C(=O)C2=CC=CC=C2NC(=O)C1=CC1=CC=CC(O)=C1	-8.9003
4505	O=C(C=CC(=O)NC1=CC=CC=C1C(=O)O)NC1=CC=CC=C1C(=O)O	-8.7029
4506	CO[C@]1(C)OCC2=C(O)C(C)=C(O)C3=C2[C@@H]1COC3=O	-10.9824
4507	CC1=C[C@@]2(C)C(=C(C)[C@H]3[C@@H]4C[C@H](C)C[C@H](C)[C@H]4[C@H]4OC5=CC=C(C=C5)C[C@]5(O)NC(=O)C(=C(O)[C@@H]2[C@@H]43)C5NC2=NC=NC3=C2N=CN3[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]2O)[C@H]1C	-8.7355
4508	COC1=CC(OC)=C2C(=O)[C@@H]3O[C@H](C2=C1O)[C@H]3CC(C)=O	-10.8869
4509	COC1=CC(=O)C2=C(O)C(C)=C(C[C@H](C)O)C(O)=C2C1=O	-10.7883
4510	C=C1O[C@H](C)C[C@H]2C1=C(O)C[C@@H](O)[C@H]2C	-10.2775
4511	C/C(=C\CC/C(C)=C/C[C@]1(O)C(=O)C2=C(O)C=C(C)C3=C(O)C(C)=C(O)C(=C23)C1=O)CC/C=C(\C)CCC1OC(C)(C)OC1(C)C	-9.4594

4512	CO[C@H]1CCC(=O)O[C@H](C)C[C@@H](OC(C)=O)C(=O)C1	-10.2866
4513	CC1=C[C@@]2(C)C(=C(C)[C@H]3[C@@H]4C[C@H](C)C[C@H](C)[C@H]4[C@H]4OC5=CC=C(C=C5)C[C@]5(O)NC(=O)[C@]6(OC65)C(=O)[C@@H]2[C@@H]43)[C@H]1C	-9.8938
4514	C[C@@H](O)C[C@@H](O)C/C=C/CCCCC(=O)O	-10.5965
4515	CC[C@H](C)C(=O)C1=C2C3=COC(C)=CC3=CC(=O)[C@]2(C)OC1=O	-10.1016
4516	CC1OCC(O)C(O)C1OC1OC(C)C(OC2OC(CO)C(OC3OC(CO)C(O)C(O)C3O)C(O)C2O)C(O)C1O	-10.7833
4517	CCC[C@H](C)C1=C(C)C(=O)[C@@H](C)C1	-9.4292
4518	COC1=C(C)C(=O)OC([C@@H](C)[C@@H](C)O)=C1	-10.6346
4519	CC1CC(=O)C2=C(O)C=C(O[C@H]3O[C@H](CO)C(O)[C@H]3O)C=C2O1	-10.7540
4520	C=CCC1=CC=C2C[C@H](C(C)(C)O)OC2=C1CO	-10.3694
4521	CC[C@H](C)C1=C(C)C2=CC(=O)C(C(=O)O)=C(O)C2=CN1	-10.2937
4522	C/C1=C/C[C@@](C)(C(=O)O)/C=C\C[C@@]2(C)O[C@]2(C)C[C@H]1O	-10.6276
4523	O=C1CC[C@@H]2C3CC[C@H]4CCCC[C@@H]4C3CC[C@H]12	-9.7910
4524	C=CC(C)(C)C1=C(/C=C2\NC(=O)[C@@H](CCCO)NC2=O)C2=CC=CC=C2N1	-9.5653
4525	CO[C@@H]1C23NC(=O)[C@]4(CCCN4C2=O)C[C@H]3C(C)(C)C2=[N+]([O-])C3=C(C=CC4=C3C=CC(C)(C)O4)[C@]21O	-9.9453
4526	COC(=O)C1=CC(OC)=C(O)C2=C1C(=O)C1=C(CC(C)(O)OC1)O2	-11.2228
4527	CC[C@H](C)/C=C(C)/C=C/[C@H](O)CC1=CC(O)=C(C)C(=O)O1	-10.2173
4528	CC[C@H](C)C(=O)O[C@@]1(C)C(=O)C(C)=C(OC)C[C@H]1OC	-10.6214
4529	CC[C@@H](C)[C@@H]1NC(=O)[C@H]([C@@H](C)O)OC1=O	-10.1674
4530	COC1=CC2=C(C(=O)O[C@@H](C)[C@@H]2O)C(OC)=C1C	-11.0305
4531	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)C1CCC2C3=CCC4C[C@@H](O)CC[C@]4(C)C3=CC[C@@]21C	-10.1730
4532	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC([C@H](O)[C@H](O)C(Cl)Cl)=CC2=C1	-10.8053
4533	C[C@H]1CC[C@@H]2[C@H]1C[C@H]([C@@](C)(O)CO)CC[C@@]2(C)O	-10.5073
4534	C[C@H]1CC[C@@H]2[C@@]1(O)C[C@H]([C@](C)(O)CO)CC[C@@]2(C)O	-10.4665
4535	C[C@H](/C=C/[C@H](CO)C(C)(C)O)[C@H]1CCC2=C3C=CC4=CC(=O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@@]21C	-10.6941

4536	CCC1=CC(O)=C(C)C(O)=C1C(=O)OC[C@@H](O)[C@@H](O)CO	-10.4274
4537	C/C=C(\C)[C@H]1O[C@@](O)([C@@H]2C[C@H](CC(C)O)NC2=O)C[C@H]2CC=C(C)C[C@@H]21	-11.0569
4538	CO[C@@H]1O[C@@]2(OC(=O)[C@@]3(C)O[C@@H]23)[C@H](O)C12C1CC=C(C)C2C1	-11.1430
4539	CC1=C(O)C(=O)C2(O)C3(C)C(=O)C(O)=C(C)C24COCC42C(=O)OCC132	-11.1175
4540	COC(=O)C1(O)C(CC2=CC=C(O)C=C2)=CC2=CC=C(CC=C(C)C)C(O)=C21	-9.2304
4541	CC1=C(O)C=C2C(=C1O)C(=O)O[C@@H]2[C@@H](C)O	-10.7789
4542	C[C@]1([C@H]2C[C@@H](O)[C@@](C)(O)[C@H](O)C2)CCC(=O)O1	-10.7585
4543	C[C@@H]1CC(=O)C2=C(O)C=C(O[C@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]3O)C=C2O1	-10.6638
4544	CO[C@H]1C[C@H](C)OC2=CC=CC(O)=C21	-9.9285
4545	C=C/C=C1\C=CC(=O)[C@H](O)[C@]12C(=O)N(OC)C1=C(O)C(=O)C[C@H]12	-10.0098
4546	CC(=CCO)CCC=C(C)CC(O)C(O)C(C)(C)O	-10.7091
4547	C[C@@H]1C[C@H](O)C2=C(O)C=CC=C2O1	-10.1109
4548	CC1=C2[C@H](C=O)C[C@]2(C)[C@H]2C[C@H]3C(=O)C[C@H](C)C2(CC1)C3(C)C	-10.9890
4549	COC1=C(O)C(C)=C2C(=C1O)C(=O)O[C@H]2OC	-10.4143
4550	CC1=C[C@H]2[C@H](C(C)C)CC[C@@](C)(O)[C@H]2C[C@H]1O	-10.3041
4551	C[C@]1(O)CC(=O)C2=C(O)C=CC=C2O1	-9.9098
4552	CO[C@]12OC[C@@H](C)[C@H]1C[C@]1(C)[C@@H](C)CC[C@H](O)[C@@]13O[C@@H]23	-11.2256
4553	COC1=CC=C2COC(CO)=CC2=C1CC=C(C)CO	-10.4410
4554	CCC[C@@H](O)C/C=C(/C(=O)O)[C@@H](C)C(=O)OC	-10.5011
4555	COC1=CC=C2COC(C)=CC2=C1CC=C(C)C	-9.6924
4556	COC1=CC(O)=C(C(=O)O)C(C2=C(C)C=C(O)C3=C2C2=C(O3)C(=O)C=C(C)[C@@]23OC(=O)C2=C(O)C=C(OC)C=C23)=C1	-9.5937
4557	C[C@@H]1CO[C@@]2(O)[C@@H]1C[C@]1(C)[C@@H](C)CC[C@H](O)[C@@]13O[C@@H]23	-11.1480
4558	CC[C@H]1C[C@H](C2=CC(=O)CCO2)OC1=O	-9.7626
4559	NC(OC=CC(O)=C(O)O)C(O)C(O)C(O)CO	-9.7773
4560	CC(C)C(C)/C=C/[C@@H](C)C1CCC2C3=C[C@H](O)[C@@]4(O)CC(O)CCC4(C)C3CCC21C	-10.6714
4561	C[C@H]1C(=O)N(C)[C@@H](CC2=CC=C3OC(C(C)(C)O)CC3=C2)[C@@H]1O	-9.9051
4562	NC(OC=C(O)C(O)=CO)C(O)C(O)C(O)CO	-9.6853
4563	CC[C@H](C)[C@@H]1NC(=O)[C@@H]2CCCN2C1=O	-9.9267
4564	COC1=CC=C2C(=O)[C@]3(NC2=C1)[C@H](CC=C(C)C)C1C(=O)[C@@H]2CCCN2C(=O)[C@]1(O)[C@H]3O	-9.8921

4565	C/C=C/C=C/C(O)=C1\C[C@]2(C)O[C@]3(O)[C@H](C)C(=O)/C(=C(O)/C=C/C=C/C)[C@H]4[C@]3(C)O[C@]2(O)[C@@]4(C)C1=O	-9.8865
4566	C[C@H]1CCC/C=C/C(=O)C2=C(C=C(O)C(Cl)=C2O)CC(=O)O1	-10.5185
4567	C[C@@H]1OC(=O)C2=C(C=CC(CO)=C2O)[C@@]1(O)CO	-10.2767
4568	COC1=CC(O)=C(C(=O)O)C(C2=C(C)C=C(O)C3=C2C2=C(C4=CC(OC)=CC(O)=C4C(=O)O)C(C)=CC(O)=C2O3)=C1	-9.8675
4569	CCCCCCC(=O)C[C@@H]1CC2=C(O1)[C@H](O)CCC2=O	-10.4495
4570	CCC(C)C=CC=CC1=CC(O)=C(C)C(O)=C1C=O	-10.9281
4571	C[C@H]1CCC/C=C\[C@H](O)/C=C\[C@H](O)/C=C/C(=O)O1	-10.2139
4572	COC(=O)O[C@@]12C(=O)N[C@@H](CC3=CC=CC=C3)[C@@H]1[C@H](C)[C@@]1(C)O[C@H]1[C@@H]2/C=C/C[C@H](C)C(=O)[C@](C)(O)CC=O	-9.3607
4573	CC[C@@H](C)[C@H]1NC(=O)[C@@H](C(C)C)N2C1=NC1=C(O)C=C(OC)C=C1C2=O	-10.6589
4574	CC(=O)O[C@@H]1C=C[C@H](C)C(=O)[C@@H](C)CC=C[C@H]2C=C(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@@]231	-9.3052
4575	CCCC1(O)CC(=O)CC(=CC=CCCC2=CC(=O)C=C(O)O2)O1	-10.1017
4576	COC1=CC(O)=C2C(=O)O[C@]3(C)C=C(O)C(=O)C(C4=C5C6=CC(OC)=CC(O)=C6C(=O)O[C@@]5(C)C=C(O)C4=O)=C3C2=C1	-9.5850
4577	CC[C@H](C[C@@H](O)C1=CC(=O)OC=C1)C(=O)OC	-10.6310
4578	CC(=O)OCC[C@H]1[C@H]2C=C(CO)[C@]1(C)CCCC2(C)C	-10.7891
4579	CC(C)CC1NC(=O)C(CC2=CNC3=CC=CC=C23)N(C)C1=O	-9.3288
4580	CC(/C=C/C1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@](C)(O)[C@H](O)C2=CO1)=C\[C@@H](C)CCO	-9.3724
4581	O=C1C(CC2=CNC3=CC=CC=C23)N(CC2=CC=CC=C2)C(=O)C2CCCN12	-8.9992
4582	OC1=CC=C2CCOC(O)C2=C1	-9.8030
4583	CC1(C)C[C@H](O)C[C@]2(C)[C@H]3[C@H](O)OC[C@]34O[C@@H]4C[C@@H]12	-10.9480
4584	CCCCCCCCCC[C@@H](C)[C@@H]1CC(=O)N[C@H](CO)C(=O)N[C@@H](C)C(=O)N[C@H](C)C(=O)N[C@@H](CCC(N)=O)C(=O)N[C@H](CC2=CC=C(O)C=C2)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)CC)C(=O)O1	-11.2855
4585	COC1=CC(O)=C2C(=O)[C@@]34O[C@@]3(CO[C@H]4O)C(=O)C2=C1	-10.2671
4586	O=C1N[C@@H](CCO)C(=O)N2CC(O)C[C@@H]12	-9.5292
4587	O=C1N[C@@H](CC2=CC=CC=C2)C(=O)N2CCCC12	-9.4416
4588	CC(O)CCCC[C@H](O)[C@@H]1CCC2=C(CC[C@H](O)C2=O)O1	-10.8173

4589	CC1=C[C@@H]2C=CC[C@H](C)C=C(C)[C@@H](O)[C@@H](O)CCC(=O)[C@]23C(=O)N[C@@H](CC2=CNC4=CC=CC=C24)[C@@H]3[C@@H]1C	-9.1432
4590	COC1=CC(O)=C2C(=O)[C@]34COC[C@]3(O4)C(=O)C2=C1	-11.0185
4591	CO[C@@H](C)C1=CC=C(C2CCC(=O)O2)O1	-9.4186
4592	O=C(O)C1C(C(=O)O)C(C2=CC=C(O)C=C2)C1C1=CC=C(O)C=C1	-8.8590
4593	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC3(CC(=O)C(O)=C3C)C2=C1	-10.7044
4594	C[C@H](O)C1=CC=C(C2CCC(=O)O2)O1	-9.6067
4595	CC(C)[C@@H]1NC(=O)[C@H](CC2=CC=C(O)C=C2)NC1=O	-10.1682
4596	CC(C)=CCOC1=CC=C(CC2NC(=O)CNC2=O)C=C1	-9.6611
4597	C/C(=C\[C@@H](C)C1CCC2C3=CC=C4C[C@@H](O)CC[C@]4(C)C3CC[C@@]21C)[C@H](C)C(C)C	-10.4210
4598	CC(C)=CCCC(C)(O)C1=CC[C@@]2(C)[C@H]1CC[C@H]1[C@@]3(C)CC[C@H](O)[C@](C)(C(=O)O)[C@@H]3CC[C@@]12C	-11.2439
4599	COC(=O)C1=CC(OC)=CC2=C1C(=O)CCO2	-10.4848
4600	C[C@@H]1CC(=O)C2=C(O1)C1=CC(O)=C(O)C=C1OC2	-10.5605
4601	COC1=CC(O)=C2C(=O)C(C)=C(C[C@H](C)O)C(=O)C2=C1	-11.1668
4602	CC(=C\[C@H](C)[C@H](C)O)/C=C(\C)C1=C(C)C(O)=C(C)C(=O)O1	-10.9714
4603	C=C1C[C@@H](O)[C@@H](O)C2=CC=CC(O)=C12	-10.1026
4604	CCC[C@@H]1OCC2=C([C@H]1O)[C@@H](O)[C@@H](O)CC2=O	-10.4713
4605	COC1=CC(=O)C2=C(O)C3=C(CC(C)OC3)C(O)=C2C1=O	-10.6850
4606	CCC(C)CC(C)/C=C(C)/C=C/CC(C)C(O)C(C)/C=C(C)/C=C/C(O)C(C)(C)C1=CC(O)=C([C@H]2O[C@@H](CO)C[C@@H](O)[C@@H]2O)C(=O)O1	-9.7251
4607	COC1=CC2=C(C(=O)OC2C)C(OC)=C1C	-10.5651
4608	C=C(C)C(O)C1=C(C)C(=O)CCC1(C)C	-10.5322
4609	CC1=CC(O)=CC2=C1C=C(C[C@@H](C)O)OC2=O	-10.4920
4610	C[C@]12CC[C@@H](O)C[C@H]1CC[C@@H]1[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](C3=CC(=O)OC3)[C@@H](O)C[C@]12O	-11.1439
4611	C=C(C)[C@@H]1CCC23C(O)CCC(C)[C@]2(C)[C@@H](O)C[C@@H](C)[C@H]3C1C1=CNC2=CC=CC=C12	-10.0100
4612	COC1=CC(O)C2=C(O)C(CO)=C3CC(C)OC3=C2C1=O	-10.8608
4613	CC(C)=CCC1=CC(O)=C(C=CC(O)C=CC(C)O)C(C=O)=C1O	-10.6308
4614	COC1=CC(=O)C2=C(C)C(C)=C(C[C@@H](C)O)C(O)=C2C1=O	-11.0380

4615	C[C@]12CCC(=O)C[C@H]1C[C@H](O)[C@@H]1[C@@H]2C[C@@H](O)[C@]2(C)[C@@H](C3=CC(=O)OC3)[C@@H](O)C[C@]12O	-11.0995
4616	COC1=C(O)C=C(O)C2=C1C=C(C[C@H](C)O)OC2=O	-10.7624
4617	COC1=CC(=O)O[C@@H](CO)C1	-9.6933
4618	CC1=CC(O)=CC2=C1C(=O)C[C@@H](C)O2	-10.5332
4619	CCC(=O)CCC=CC(C)=O	-8.9551
4620	C=C1NC(=O)CC(CC(=O)C2=CC(C)=CC(C)=C2O)C1O	-10.9760
4621	C[C@H](O)[C@]1(O)C=C[C@@H]2OC(=O)C=C[C@@H]2O1	-9.6347
4622	COC(=O)[C@@]1([C@@H]2OC(=O)C[C@@H]2C)CC(=O)C2=C(C=CC(C3=CC=C4O[C@](C(=O)OC)([C@@H]5OC(=O)C[C@@H]5C)CC(=O)C4=C3O)=C2O)O1	-10.2371
4623	COC1=CC=CC2=C1[C@@H](O)CC[C@@H]2O	-10.1789
4624	COC1=CC(O)=CC2=C1C(=O)O[C@@H](CCCCCCC[C@@H](C)O)C2	-10.8695
4625	CC1(O)C#CC2=CC(C(=O)O)=CC=C2OC1	-10.3200
4626	COC(=O)C[C@H](C)[C@@H](C)[C@]1(C(=O)OC)CC(=O)C2=C(O)C=CC(C3=CC=C4O[C@](C(=O)OC)([C@@H]5OC(=O)C[C@@H]5C)CC(=O)C4=C3O)=C2O1	-10.1122
4627	C=C[C@@H]1C=C[C@H]2[C@@H]3C[C@H](C)C[C@H](C)[C@H]3[C@H]3OC4=CC=C(C=C4)C[C@@]4(O)C[C@H](C(=O)N4)C(=O)[C@@H]1[C@H]23	-9.9379
4628	CC=CC(=O)CCCCCC1=CC(O)=CC(OC)=C1	-10.0660
4629	C[C@H](O)C(=O)O[C@@H](C)C(=O)OCCC1=CC=C(O)C=C1	-10.3173
4630	COC1=CC(O)=CC(CCCCCC(=O)CC(C)OC)=C1	-10.4417
4631	CC(=O)/C=C/[C@@H]1[C@H]2C(C)=C[C@H]3C[C@@H](C)CC[C@@H]3[C@@]2(C)C(=O)[C@@]12C(=O)[C@@H](CO)N(C)C2=O	-10.3691
4632	COC1=CC(O)=CC2=CC3=C(C(=O)CC(C)C3)C(O)=C12	-10.6440
4633	COC1=CC(O)=CC(CCCCCC(=O)CC(C)N2C=NC3=C(N)N=CN=C32)=C1	-10.0648
4634	C[C@@H](O)C(=O)OCCC1=CC=C(O)C=C1	-10.2454
4635	CO[C@@H]1C2=C(C)C[C@H](OC(C)=O)[C@]34O[C@H]2[C@H]([C@H]1O)[C@H]3CC4(C)C	-11.1850
4636	C[C@H](OC(=O)[C@@H](C)O)C(=O)OCCC1=CC=C(O)C=C1	-10.3222
4637	CCCCCC[C@H](OC(C)=O)[C@@H]1CCC2=C(CC[C@@H](O)C2=O)O1	-10.6509
4638	O=C1CCC(C(=O)OCCC2=CC=C(O)C=C2)N1	-9.9714
4639	CCC(C=C(C)C=CC=C(C)C1OC2=C(C(=O)N(OC)C=C2)C(O)C1C)C(=O)O	-8.9168
4640	CCCCC.C[C@H](O)[C@@H]1C[C@@H](O[C@H](C)[C@@H](C)O)C2=C(O1)[C@H](O)CCC2=O	-10.7132

4641	CC1=C2C(=O)OC[C@]2(C)[C@H]2CC(C)(C)C[C@H]2[C@@H]1O	-10.8945
4642	O=C(OCCC1=CC=C(O)C=C1)C1CC2=CC=NC2C1=O	-9.5784
4643	CCC(C)CC(C)C=C(C)C1CC(C2=C(O)C(C3(O)CCC(O)CC3O)=CN(C)C2=O)CCC1C	-10.3797
4644	CCCCC(O)CCC[C@H]1OC(=O)CC[C@H](O)/C=C/[C@H](O)[C@@H]1O	-10.7468
4645	CC(=O)CC/C=C(/C=C/[C@H](C)O)CO	-10.2279
4646	COC(=O)C=CC1=C(COC(C)=O)C(OC)=C(COC(C)=O)C(=O)O1	-10.4484
4647	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(O)C4=C(C=C3C(=O)C2=C1)C(=O)C(C)(O)CC4	-10.5745
4648	CCCC=CC1CC(=O)C2=CC(O)=CC(O)=C2C1O	-10.6907
4649	COC(=O)C=CC(OC=O)=C(CO)C(=CCOC(C)=O)OC	-10.0574
4650	CCC[C@@H]1C[C@H](O)[C@@H](OC)/C=C/C=C\C(=O)O1	-10.4819
4651	COC(=O)C=CC1=C(COC(C)=O)C(OC)=C(CO)C(=O)O1	-10.3305
4652	COC1=C(C)C(=O)OC(C=CC(=O)O)=C1C	-10.8333
4653	CC(=O)O[C@@H]1[C@H]2O[C@@H]2[C@@](C)(O)C(=O)[C@@H](C)C/C=C/[C@H]2[C@H](O)[C@@H](C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@@]312	-9.6027
4654	CC[C@@H](O)CCC[C@H](O)[C@@H]1CCC2=C(CC[C@@H](O)C2=O)O1	-10.8152
4655	CC1=CCC=CC1	-8.1888
4656	CC(C)(O)[C@H]1OC2CC[C@]23O[C@@H]3[C@@H]1O	-10.1236
4657	C=C1C(=O)C2CCC1C2(C)C	-9.3653
4658	CC(=O)C1CCCCC1(C)C	-9.0607
4659	CC=CC(O)C(O)C=CC=CC(=O)O	-9.6779
4660	C[C@H](O)[C@@H](O)/C=C\[C@@H]1OC(=O)C=C[C@@H]1O	-9.9388
4661	CC(=O)OCC12CC(CCC(=O)O)C(C)=CC1OC1C(O)C(OC(C)=O)C2(C)C12CO2	-10.7317
4662	C[N+](C)(C)CC(=O)NC(CO)C(=O)O	-9.3976
4663	CC1(C)CCC2(C)CCC3(C)C(=CCC4C5(C)CCC(=[O+]C(=O)O)C(C)(C)C5CCC43C)C2C1	-10.8846
4664	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(O)C4=C(C=C3C(=O)C2=C1)CC(C)(O)C(OC)C4	-10.3515
4665	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(C(=O)C2=C1O)C(C)(C)C(O)OC3	-10.8993
4666	C/C(=C\C=C\[C@@H]1[C@H]2[C@H](C)[C@@H](O)[C@H](C)C[C@@H]2C=C[C@@H]1C)C(=O)O	-10.6595
4667	CCC(C=C(C)C=CC=C(C)C1OC2=C(C(=O)N(OC)C=C2)C(O)C1C)CO	-8.9780
4668	CO[C@H]1CCC2(OC3=CC=CC4=CC=CC(=C34)O2)C2=CC=CC(O)=C21	-9.2188
4669	CCCCCCCC1C(O)C2CCCC(O)C2C1O	-10.3122

4670	CC(=O)CC1(O)C(=O)C2=CC=CC(O)=C2C1=O	-10.3367
4671	CC[C@H](C)C(=O)O[C@H]1C[C@@H](C)C=C2C=C[C@H](C)[C@H](CC[C@@H]3CCCC(=O)O3)[C@H]21	-10.2996
4672	C/C=C/CCCCC1=C(C)C(=O)N2CCC[C@H]2O1	-9.8590
4673	COC1=CC(O)=C2C(=O)C[C@@H](O)[C@H](O)C2=C1	-10.3778
4674	CC1=CC(C(=O)O)=C(C2=CC=CC(O)=C2C(=O)O)OC1=O	-9.7452
4675	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@@]23[C@H]2[C@H]4[C@@H](C[C@H](C)C=C(C)[C@@H]4C[C@H]3OC(C)=O)O[C@H]12	-9.5597
4676	CC[C@H](C)/C=C(C)/C=C/C1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@](C)(OC(C)=O)C(=O)C2=CN1CC(=O)O	-9.2766
4677	CC[C@H](C)/C=C(C)/C=C/C=C/C1=C(Cl)C(=O)[C@](C)(OC(C)=O)C(=O)/C1=C/N	-9.6412
4678	O=C1C[C@H](O)[C@H](O)C2=CC(O)=CC=C12	-10.2405
4679	CC[C@H](C)/C=C(C)/C=C/C1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@](C)(O)C(=O)C2=CN1CCCC(=O)O	-9.4552
4680	CCCCCCC(O)C(=O)OC1[C@@H]2[C@@H](C=CC3=C(O)C(=O)C(=O)[C@@]32C)CC1(C)C	-10.3570
4681	CC=C1COC(O)C2=C1CCOC2=O	-10.0809
4682	CCCC1=CC=C2C[C@H](C(C)(C)C)OC2=C1CO	-10.3310
4683	COC(O)=C1C(=O)NC(C)(C)[C@@H]2CC3=CC=CC4=C3C(=CN4)[C@@H]2C1=O	-10.1447
4684	C=CC(C(=O)O)C1=CCOC(=O)C1C=O	-9.9080
4685	COC(=O)CC[C@@H](O)[C@@]1(C(=O)OC)CC(=O)C2=C(C=C(C)C(C3=CC=C(O)C4=C3O[C@]3(C(=O)OC)C(=C(O)C[C@H](C)[C@@H]3OC(C)=O)C4=O)=C2O)O1	-9.9476
4686	C=C(C)C=CC1=CC=C2OC3=C(O)C=C(C)C=C3COC(=O)C2=C1	-9.2495
4687	O=C1CC[C@H](O)C2=CC(O)=CC=C12	-10.2217
4688	O=C1C=C2CCCC2=NN1	-9.1578
4689	COC(=O)CCCCCCCCCCCCCCCCCC(C)C	-10.0868
4690	C=C1CC[C@H](C(C)(C)O)C[C@H]2C(C)=CC[C@H]12	-9.9521
4691	CC=C1C=C(C(C)(C)C)C(=O)C(C(C)(C)C)=C1	-9.9731
4692	CCCCCC(=O)NC1=CC=C(C(=O)OC)C=C1	-9.6007
4693	COC(=O)CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC	-10.3058
4694	CC1=CC(=O)NC2=CC=C([N+](=O)[O-])C=C12	-9.0518
4695	CNC1=CC=C(N(C)C)C=C1	-8.3936
4696	CCCCC(NC1=NC=CS1)NC1=NC=CS1	-9.2265
4697	CC1=CC2=CC=CC(C3=CC=CC=C3)=C2N1	-8.6942
4698	CCN(CC)C1=CC=C2C(N)=CC(=O)OC2=C1	-9.5753
4699	CC(C)(C)C1=CC(=O)CC(C(C)(C)C)=C1O	-10.2952
4700	CCCCCCCCCCCCCC(=O)N1CC(=O)NC(=O)C1	-10.0231
4701	C=C1C[C@]2(C)CCCC23[C@H](C)CC[C@@]13C	-9.7360
4702	CC(=O)O[C@H]1CC[C@]2(C)C3=C(CC[C@H]2C1(C)C)[C@]1(C)CC[C@H]([C@H](C)CCC=C(C)C)[C@@]1(C)CC3	-10.0107

4703	C=C1CCC=CC2C1CC[C@]2(C)O	-9.7355
4704	CC1=CCC([C@H](C)CC/C=C(/C)CO)=CC1	-9.6984
4705	C=C(C)C1=C[C@@]2(CC1)C(C)=CCC[C@H]2C	-9.2917
4706	C=C(C)C#CC1=C[C@H](O)[C@H]2O[C@H]2C1=O	-9.7953
4707	COC(=O)C1=C(OC)C=CC2=C1C(=O)C1=C(OC)C=C(C)C=C1O2	-10.5540
4708	C=C[C@@]1(C)CC[C@H](C(C)=O)O1	-9.3771
4709	O=C(O)C1=COC(C(=O)O)=C1	-9.9635
4710	COC(=O)C1=CC=CC=C1C(=O)OC1=CC=CC=C1	-9.5768
4711	CCCCCCCCOC(=O)C1=CC=CC=C1C(=O)OCC(C)C	-10.5348
4712	C=C1CC[C@]23C[C@H]1C(C)(C)[C@@H]2CC[C@@H]3C	-9.4486
4713	CC(=O)[C@@]12CC/C=C/C(=O)O[C@H]3C[C@@H]4O[C@H]5C=C(C)CC[C@@]5(COC(=O)C=C(CCO1)[C@H]2O)[C@@]3(C)[C@@]41CO1	-10.6358
4714	C[C@H]1CC[C@@H]2[C@H](C=C[C@@H]3[C@H](C)/C=C/C[C@]4(C)C=C(CO)[C@H](C[C@@H](C)O)C[C@]45OC(=O)/C(=C(\O)[C@]32C)C5=O)C1	-10.1664
4715	CCCCCCCCCCCCCCCC/C=C/C(=O)N(O)CCCC[C@H](NC(=O)[C@@H]1COC(C2=CC=CC=C2O)=N1)C(=O)O[C@@H](C)CC(=O)N[C@H]1CCCCN(O)C1=O	-11.1787
4716	C=C1C(=O)OC12CCCCC2	-9.3478
4717	CC[C@H](C)[C@@H]1OC(=O)[C@H](CC2=CNC3=CC=CC=C23)NC(=O)CNC(=O)[C@H]([C@@H](C)CC)NC(=O)[C@H]1C	-9.7218
4718	CC(=O)O[C@@H]1C=C[C@@H](C)C(=O)[C@@](C)(O)CC=C[C@H]2C=C(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@@]231	-9.3107
4719	CC(C)(O)[C@H]1O[C@H]2CC[C@@]3(C)[C@@H](CC[C@H]4CC5=C(NC6=CC=CC=C56)[C@@]43C)C2=CC1O	-10.1789
4720	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@]23OC(=O)[C@H]2[C@H](C(=O)CCC[C@@H](C)CC=C[C@H]3[C@@H]1O)[C@H]1C[C@H]([C@H](C)/C=C/[C@H](C)C(C)C)[C@@]3(C)CCC4C(=C13)[C@H]2C=C1C[C@@H](O)CC[C@@]14C	-8.8095
4721	CO[C@H]1C2O[C@@]3(C)C[C@H](OC(C)=O)[C@]45O[C@@H](C2[C@H]4CC5(C)C)[C@@H]13	-11.2040
4722	CCCCCCCCCI	-8.1400
4723	ClCCCCC(Cl)(Cl)Cl	-8.7144
4724	C[C@@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H](O)CC[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C=C3C(=O)N(CCO)CC3=C1O2	-11.2767
4725	CCCCC/C=C/C/C=C/CCCCCCCC(=O)OC[C@@H](O)COP(=O)(O)OC1[C@H](O)[C@H](O)C(O)[C@H](O)[C@H]1O	-10.8324
4726	CC1=CC(O)=C(C(C)(C)C)C=C1C(C)(C)C	-9.6392
4727	O=C1C=C[C@H](O)C23O[C@]12C1(OC2=CC=CC4=CC=CC(=C24)O1)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]3O	-9.6610
4728	CC(=O)NC1CCC(=O)CC1	-9.0855

4729	C=CCOCC1=CC=CC=C1	-8.3524
4730	C=C(C)CC(C)(C)CO	-9.0767
4731	CCCCC(=O)CC(=O)OC	-9.4021
4732	COC1=CC(O)=C2C(=O)C(C)=C(C)OC2=C1	-10.9345
4733	CCCCCCCCCCCCCCOC(=O)CCCC	-9.9204
4734	CCCCCCCCCCCCCI	-8.9489
4735	COC(=O)C(C)=O	-9.4474
4736	COC1=CC(C(N)=O)=CC=C1O	-10.3831
4737	C1CCCCCCCCCCC1	-8.3281
4738	COC1=CC=CC(O)=C1NC(C)=O	-9.5626
4739	CCOC(=O)C(=O)OCCCC(C)C	-10.1216
4740	C[C@@H](O)[C@@H](O)C1=CC=CC=C1	-9.7670
4741	CC/C=C/C=C/[C@@]1(C)OC(C)=C(C(=O)OC)C1=O	-10.0684
4742	CCCCCCCCC(CC)(CC)CCCC	-9.0978
4743	CC(C)CCCCCCC[C@@H]1CC(=O)N[C@@H](CCC(=O)O)C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)N[C@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H](C(C)C)C(=O)N[C@@H](CC(=O)O)C(=O)N[C@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)O1	-10.4760
4744	CC(C)=C/C=C\[C@@H](C)[C@H]1CC[C@]2(C)C[C@@H]3C(C)=CC(=O)[C@H]3/C(C=O)=C\C[C@@H]12	-10.2144
4745	CCC(C)/C=C(\C)C=CC1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@@](C)(OC(=O)/C=C(\C)CC(=O)O)C(=O)C2=CN1CCO	-9.0701
4746	C[C@@H]1O[C@@H](O[C@H]2[C@H](O[C@H]3CC[C@@]4(C)[C@@H](CC[C@]5(C)[C@@H]4CC=C4C6CC(C)(C)CC[C@]6(C(=O)O)CC[C@]45C)[C@]3(C)CO)OC[C@H](O)[C@@H]2O)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O	-11.4225
4747	C=CC(C)(C)[C@@]12C=C(OC)C(=O)N3/C(=C/C4=CN=CN4)C(=O)N[C@]31N(OC)C1=CC=CC=C12	-8.6596
4748	O=C1C[C@H](O)[C@@H](O)C2=CC(O)=CC(O)=C12	-10.1756
4749	CC(C)=C[C@H]1C[C@H](C)[C@]2(CC[C@]3(C)C[C@H]4[C@H]5/C(=C\C[C@H]32)C(=O)OC5C[C@@]4(C)O)O1	-10.9972
4750	COC(=O)N[C@H]1[C@@H](C)O[C@@H](O[C@H]2CC=C(C)[C@@H]3C=C[C@@H]4[C@@H](O)[C@@H](C)C[C@H](C)[C@H]4[C@]3(C)/C(O)=C3/C(=O)O[C@]4(C[C@@H](C)C(CO)=C[C@H]4/C=C/2C)C3=O)C[C@]1(C)N	-9.9237
4751	CC1=C[C@@]2(C)[C@H](O)C[C@@H]3[C@@H](C)CC[C@@]32C1C	-10.6194
4752	CC(=O)OC1[C@H](O)C[C@@]2(C)C(CC[C@@H](C)C23CC2=C(O)C=C4C(=O)NCC4=C2O3)C1(C)C	-11.1902
4753	CCC(C)CCCCCCCCC1CC(=O)N[C@H](CC(N)=O)C(=O)N[C@H](CC2=CC=C(O)C=C2)C(=O)N[C@@H](CC(N)=O)C(=O)N[C@@H](CCC(N)=O)C(=O)N2CCC[C@H]2C(=O)N[C@@H](CC(N)=O)C(=O)N[C@@H](CC(N)=O)C(=O)N1	-10.4616
4754	CCCCCCC(=O)C=CCCCC/C=C/C[C@@H](O)[C@H](O)[C@@](N)(CO)C(=O)O	-10.8429

4755	CC[C@H](C)C[C@@H](C)/C=C(/C)[C@@H]1O[C@H](C2=C(O)C(C3=CC=C(O)C=C3)=CN(C)C2=O)CC[C@H]1C	-9.1909
4756	C/C=C(\C)[C@@H](OC(C)=O)[C@@H](C)C1=CC(=O)C2=C(O[C@]3(C)CC[C@H]4O[C@@H](C(C)(C)O)CC[C@]4(C)[C@H]3C2)C1=O	-10.4123
4757	O=C1C[C@@H](O)CC2=CC(O)=C(O)C=C12	-10.0253
4758	C=C1C(O)=C(C)C(=O)[C@H]2[C@H](C)[C@@H]3C=CC(=O)C[C@@]132	-10.5573
4759	CC(C)[C@@H](C)[C@H](OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O)[C@H](O)[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2C3=C[C@H](O)[C@@]4(O)COC(=O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C	-10.8056
4760	CCOC(=O)C1=C(O)C=C(O)C=C1CCCCC(=O)OC	-10.9028
4761	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)C1C[C@@H](O)C2=C3C(=O)C=C4C[C@@H](O)CC[C@]4(C)C3CC[C@@]21C	-11.1508
4762	C/C(=C\CC[C@H](C)[C@H]1C[C@@H](O)[C@]2(C)/C=C3/[C@H](C)CC[C@@H]3/C(C(=O)O)=C\C[C@@H]12)C(=O)O	-10.6430
4763	C[C@@H](O)CC1CC2=CC=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.2772
4764	COC(=O)C1=C(OCC=C(C)C)C=C(C)C=C1OC1=C(CO)C=C(OC)C=C1OCC=C(C)C	-8.9925
4765	C[C@@H]1C[C@@H](O)C/C=C/CCC(=O)O1	-9.8123
4766	COC1=CC2=C(C(=O)O[C@H]3C[C@@H](C[C@H](C)O)O[C@@H]23)C(O)=C1OC	-10.8899
4767	CC1=CC[C@]2(C)[C@H](O)[C@H](O)[C@@H]([C@H](C)CO)[C@H]2C/C=C(\C)[C@@H](O)CC/C(C)=C/CC1	-10.3689
4768	C/C(=C\[C@@H](C)[C@H]1CCC2[C@@]34C=C[C@]5(C[C@@H](O)CC[C@]5(C)C3CC[C@@]21C)OO4)[C@H](C)C(C)C	-10.5389
4769	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(C)C=C(O)C=C3OC2=C1Cl	-11.0251
4770	CC(C)=CCC[C@H](C)C1=C[C@@H](O)[C@]2(C)C[C@H]3[C@H]4/C(=C\C[C@@H]12)C(=O)O[C@H]4C[C@@]3(C)O	-10.9027
4771	CC1=C(C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@]23[C@H](O)C=C[C@@H](C)C[C@@H](C)CC=C[C@H]3[C@@H]1O	-9.5457
4772	CC1=C(O)C(C)=C2C(C)=C(CO)OC(=O)C2=C1O	-10.6105
4773	CC1=CC(=O)[C@H]2/C(CO)=C\C[C@H]3C([C@@H](C)C/C=C/C(C)(C)O)=CC[C@@]3(C)C[C@H]12	-10.4174
4774	C[C@H]1CC[C@@H]2[C@H](C(C)(C)O)CC[C@@]2(C)CC1=O	-10.6962
4775	CC(=O)O[C@H]1[C@@H](C)CC(O)=C2C(=O)C3=C(C=CC(C4=CC=C5O[C@]6(CO)C(=C(O)C[C@H](C)[C@@H]6O)C(=O)C5=C4O)=C3O)O[C@]21CO	-9.6194
4776	CCC(=O)C1=CC(C)=CC(O)=C1C(=O)C1=C(O)C=CC=C1O	-10.3188
4777	CC(C)CC1=CC(=O)C(O)=CC(=O)N1	-9.5367

4778	C/C=C(\C)C(=O)C1=C2C3=CN(CCCC(N)=O)C(/C=C/[C@H](C)CC)=CC3=C(Cl)C(=O)[C@@]2(C)OC1=O	-9.3167
4779	CCCCCC1=CC(O)=C(C)C(=O)O1	-10.2775
4780	COC1=C(Cl)C(O)=C(Cl)C2=C1OC(C)=C2	-10.0601
4781	COC1=C(O)C(O)=CC2=C1C(=O)OC2	-10.4169
4782	C[C@]1(O)CC2=C(C(=O)C3=C(O)C=C(O)C=C3C2=O)[C@H](O)[C@H]1O	-10.2982
4783	C/C=C(\C)C(=O)C1=C2[C@](C)(OC1=O)C(=O)C(Cl)=C1C=C(/C=C/[C@@H](C)CC)O[C@H](OC)[C@@]12O	-9.2429
4784	CC(=O)O[C@@H]1C23NC(=O)[C@]4(CCCN4C2=O)C[C@H]3C(C)(C)[C@]12C(=O)NC1=C2C=CC2=C1C=CC(C)(C)O2	-9.1815
4785	COC1=CC(O)=C2C(=O)O[C@]3(CC(=O)O[C@]3(C)CC(=O)O)C2=C1	-10.3614
4786	C/C=C(\C)C(=O)C1=C2C3=CN(CCO)C(/C=C/[C@H](C)CC)=CC3=C(Cl)C(=O)[C@@]2(C)OC1=O	-9.0353
4787	CCCCCCCCCC[C@@H](C)[C@@H]1CC(=O)N[C@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](C)C(=O)N[C@H](C)C(=O)N[C@@H](CCC(N)=O)C(=O)N[C@H](CC2=CC=C(O)C(O)=C2)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)CC)C(=O)O1	-10.8856
4788	C=C/C=C1\C=CC(=O)[C@@H](O)[C@]12C(=O)N(OC)C1=C(O)C(=O)C[C@H]12	-10.0228
4789	CC1=C[C@H]2[C@H](C(C)C)CC[C@@](C)(O)[C@H]2CC1=O	-10.7716
4790	CO[C@@H]1/C=C(/C)C[C@H](OC(C)=O)[C@]2(O)[C@H]3/C(=C\1)C(=O)O[C@H]3C2(C)C	-11.0187
4791	CCC(C)(C)/C=C(C)/C=C/C1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@](C)(OC(C)=O)C(=O)C2=CN1[C@H](C(=O)OC)C(C)C	-8.9223
4792	CC1=C[C@H]2[C@H](O)C(C)=C(C)[C@H]3[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@@]23OC(=O)C=C[C@H](O)[C@H](O)CC1	-10.9742
4793	CCOC(=O)[C@@]1(O)C2=CC(/C=C/C(C)=C/[C@@H](C)CC)=NC=C2C(=O)[C@@]1(C)OC(C)=O	-9.8645
4794	C[C@H]1[C@H](C)CC[C@]2(C(=O)OCC3=CC=CC=C3)CC[C@]3(C)C(=CC(=O)[C@@H]4[C@@]5(C)CCC(=O)C(C)(C)C5CC[C@]43C)[C@@H]12	-9.4549
4795	CC1=C[C@@H](C)CC=C[C@H]2[C@@H]3O[C@]3(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC4=CNC5=CC=CC=C45)NC(O)[C@]32C(=O)C=CC(=O)[C@@H]1O	-8.9648
4796	COC1=CC=C(O)C2=C1OC(C)=CC2=O	-10.5030
4797	CCCC[C@@H]1NC(=O)[C@H]2C[C@@H](C)CN2C1=O	-9.8003
4798	C[C@H](O)[C@@H](O)C/C=C/C=C/C(=O)O[C@@H]1C=C2COC(=O)[C@]2(O)[C@@]2(C)CCC(C)(C)C[C@H]12	-10.8384
4799	CC(C)=CCC/C(C(=O)O)=C1/[C@@H](O)C[C@@]2(C)[C@H]1C[C@@H](O)[C@H]1[C@@]3(C)CC[C@@H](O)[C@@H](C)[C@@H]3CC[C@@]12C	-11.0568

4800	CC1=C[C@@H]2/C=C(\C)CC[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H]3O[C@@H]3C(=O)[C@]23C(=O)N[C@@H](CC(C)C)[C@@H]3[C@@H]1C	-11.1455
4801	COC(=O)[C@@]1([C@@H]2OC(=O)C[C@@H]2C)CC(=O)C2=C(O)C=CC(C3=CC=C(O)C4=C3O[C@](C(=O)OC)([C@@H]3OC(=O)C[C@@H]3C)CC4=O)=C2O1	-10.2479
4802	C/C=C(\C)C(=O)[C@@H](C)C1=CC(O)=C2C(=O)[C@@H]3[C@@]4(C)CC[C@H](C(C)(C)O)O[C@@H]4CC[C@@]3(C)OC2=C1O	-11.0518
4803	COC1=C(CO)C(=O)OC(C2[C@H](C(=O)OC)C(C3=C(CO)C(OC)=C(CO)C(=O)O3)[C@@H]2C(=O)OC)=C1CO	-9.7995
4804	CC(/C=C/C1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@](C)(O)[C@H](O)C2=CO1)=C\[C@@H](C)C(C)O	-9.4316
4805	C=C(C)[C@H]1CC2(C(=O)C3(C(=O)C4=CC=CC=C4)C(=O)[C@](C/C=C(\C)CCC=C(C)C)(C2=O)C(C)(C)[C@@H](C)C3(C)C)C(C)(C)C1(C)C	-8.8702
4806	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@]23[C@H](OC(C)=O)C=C/C(C)=C\[C@@H](C)CC=C[C@H]3[C@@H]1O	-9.3333
4807	CCOCCC(=O)O	-9.7293
4808	C[C@]12CCC(=O)C[C@H]1C[C@H](O)[C@@H]1[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](C3=CC(=O)OC3)[C@@H](O)C[C@]12O	-11.0835
4809	COC1=CC=CC2=C1[C@@H](O)CCC2=O	-10.2170
4810	O=C(O)C1CCC[C@@H]2N[C@H]3C(CCC4C5C(O)C(C[C@H]6N[C@@H]7CCCC(O)C7NC56)C43)NC12	-11.2521
4811	COC(=O)C[C@H](C)[C@@H](O)[C@]1(C(=O)OC)CC(=O)C2=C(C=CC(C3=CC=C4O[C@](C(=O)OC)([C@H](O)[C@@H](C)CC(=O)OC)CC(=O)C4=C3O)=C2O)O1	-10.1599
4812	C/C(=C\C=C\[C@H]1[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]2C[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H](C)[C@H]12)C(=O)O	-11.2586
4813	CCCCCCCCCCCCCCCCCCS	-9.0735
4814	CCCCCCCCCCOC(=O)C1=CC=CC=C1C(=O)OCCCC	-10.3738
4815	CC(=O)NNC(=O)C1=CC=CC=N1	-8.8767
4816	CN(C)CCCOC1=NN(CC2=CC=CC=C2)C2=CC=CC=C12	-9.4551
4817	CN(CC1=CC(Br)=CC(Br)=C1N)C1CCCCC1	-9.8327
4818	CC1=CC(C)=C(N)C(C)=C1N	-9.4229
4819	CN1C(C2=CC=CC=C2)=CC2=CC=CC=C21	-8.8454
4820	OCCC1=CC=CC(O)=C1	-9.1895
4821	C=C1C2=CC=CC=C2C2=CC=CC=C12	-8.6628
4822	CCOC(=O)C1=CC=C(OCC)C=C1	-10.2017
4823	COCCCCO	-8.4939
4824	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC(C)C	-8.8749
4825	O=C(N[C@@H](CO)[C@@H](O)C1=CC=C([N+](=O)[O-])C=C1)C(Cl)Cl	-10.1585

4826	CCCCCCCCCCON	-9.1007
4827	N[C@@H](CC1=CN=CN1)C(=O)N1CCC[C@H]1C(=O)O	-9.6419
4828	CCC1=CC=CC=C1CC	-8.2022
4829	C1CCCCCCCCC1	-7.9138
4830	C=CCCCCCCCCOC(C)=O	-9.4051
4831	NC1=NC=NC(N)=N1	-8.0231
4832	CCCC(CCC)COC(=O)C1=CC=CC=C1C(=O)OCC(CCC)CCC	-10.4824
4833	COC(=O)CCC1=CC(C(C)(C)C)=C(O)C(C(C)(C)C)=C1	-10.8630
4834	CC(C)(C)C1=CC(O)=CC(C(C)(C)C)=C1	-9.4547
4835	CCCCCCCOO	-9.1694
4836	C1=CC=C2OCOCC2=C1	-8.7386
4837	CC(C)(C)NC[C@H](O)COC1=NSN=C1N1CCOCC1	-9.7009
4838	CCCCCCCC(N)=O	-9.2369
4839	CCCCCCCCCOCCC	-8.5723
4840	CC(=O)C1=CC=C(N)C=C1O	-9.8650
4841	CCCCC(C)(CCC)CCCC	-8.6957
4842	C[C@H]1CCC[C@@H](C2=C(O)C=C3C(=O)C4=CC(O)=CC(O)=C4C(=O)C3=C2O)O1	-10.8845
4843	C1=CC=C2C(=C1)C=C1C3=CC=CC4=C5C=CC=CC5=C5C=CC6=CC=C2C1=C6C5=C43	-9.2444
4844	CCCCCCCCCCCCCOCCOCCOCCOCCOCCOCCOCCOCCO	-9.2535
4845	C1=CC=C(C2=CC(C3=CC=CC=C3)=NC(C3=CC=CC=C3)=C2)C=C1	-8.5991
4846	C1=CC2=CSC=C2C=C1	-7.9263
4847	CCOC(=O)CCCC(C)C	-9.4233
4848	CN[C@]1(CC(C)C)OC(=O)[C@](O)(CC2=CC=CC=C2)NC1=O	-9.8357
4849	CC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)O[C@@H]1C[C@@]2(C)[C@@H]1C(C=O)=C[C@@H]1CC(C)(C)C[C@@H]12	-10.9130
4850	C1=CC=C2C(OC3=CC=CC4=CC=CC=C34)=CC=CC2=C1	-8.4710
4851	CCCCCCCCCCCC(=O)CCCCCC	-9.8405
4852	O=C(CCCCCl)N1CCOCC1	-8.7812
4853	NNC(=O)C1=NON=C1N	-8.7484
4854	CC1CCN(C)CC1	-8.3690
4855	CCOC(=O)C(C)(C)CCC(=O)CC	-10.0380
4856	CC(C)=C1C=NNC1(C)C	-9.7710
4857	CC(=O)O[C@H]1CC[C@@]2(CO)C(=CC[C@@H]3[C@@H]2CC[C@]2(C)C(=O)CC[C@@H]32)C1	-11.1053
4858	O=C1C=C[C@]2(O)C3=C(C=CC(O)=C13)C1=CC=C(O)C3=C1[C@H]2C1OC1C3=O	-9.5839
4859	C=CCC1=CC(OC)=CC=C1O	-9.5600
4860	CCCCC(CCCC)CCCC	-8.3783
4861	CCCCCCCCCCCCCCCCCCOC(=O)CCCl	-9.8002

4862	CC[C@H](C)[C@H](N)C(=O)N1CCC[C@H]1C(=O)O	-10.4210
4863	OCC(CO)C1COCCOCCOCCOC1	-9.6509
4864	CCCCC(C)(C)CCCC(C)C	-8.9323
4865	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCl	-9.0216
4866	C=C(C)[C@H]1C[C@@]2(C)C(=CC1=O)CC[C@@H](OC(=O)/C=C/SC)[C@@H]2C	-10.1519
4867	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC(C)C	-8.8835
4868	CCC(C)(C)CCCC(C)C	-8.8375
4869	CCOC(=O)CCCCCCCCCCC=O	-9.7733
4870	CCCCCCCCCCCCC1=CC(=O)OC1=O	-10.0971
4871	CC(C)C[C@H]1NC(=O)[C@@H](CC(C)C)NC1=O	-9.6462
4872	CC(C)[C@]12C[C@@H](O)[C@H](C)[C@H]1C2	-9.7137
4873	C[C@]12CC[C@@H]3C4=CC=CC=C4CC[C@H]3[C@@H]1CC[C@H]2O	-10.0185
4874	CCCCCCCCCCCCCCCCCOC(=O)C(Cl)(Cl)Cl	-9.4793
4875	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=CC=C(C)C=C3C(=O)C2=C1O	-9.8585
4876	CCCC(=O)C1=CC=CC=C1OC	-9.6545
4877	O=C1CC2=C(O)C=CC=C2O1	-9.7608
4878	COC(=O)CC1=CC=C(CO)C=C1	-9.9123
4879	COC(=O)CC1=CC=C(O)C(O)=C1	-10.2614
4880	CCCCCCCCC1(C#N)C=CCC=C1	-9.9392
4881	O=C(O)CCCCCC(=O)CCCCC(=O)O	-9.7733
4882	CC1=CC(OCC2=CC=C(C(=O)O)O2)=CC=C1Cl	-9.2977
4883	CC(=O)OC1=CC=C(CCO)C=C1	-9.4540
4884	CC1=CC=CC2=CC=C(C)N12	-8.4826
4885	CC(=O)C1=C(O)C=C(O)C(C)=C1C	-10.8318
4886	COC1=CC=C2C(=C1)N=C(SCC(=O)C1=CC=CC=C1)N2C	-9.7553
4887	CCCCCCCCCCCCCCN(C)CC1=CC=CC=C1	-9.0198
4888	CN1CCC(C2=CC=C(O)C(O)=C2)CC1	-9.9323
4889	O=C(O)C1=CC([N+](=O)[O-])=CC=C1OC1=CC=C(Cl)C=C1	-9.0581
4890	O=C(NC1=CC=C(Br)C=N1)C1=CC=CC2=CC=CC=C12	-8.5762
4891	O=C1C=C(N2CCCC2)CN1	-9.2534
4892	CCC(=O)C1=CC=CC=C1C(=O)OC	-9.8859
4893	COC1=C(O)C2=C3C(=C(O)C=C(O)C3=C1O)C(C)=CC2=O	-10.7842
4894	C[C@H]1[C@H](O)C[C@H](O)[C@]2(C)CC[C@H]3[C@@H]4C(C)(C)CC[C@]4(C)C[C@]132	-10.5959
4895	COC1=CC=CC2=C1C(C)(C)C(=O)N2O	-9.4136
4896	CC(C)(C)C1=CC([N+](=O)[O-])=C(O)C(C(C)(C)C)=C1	-10.5458
4897	CC1=CC=CC(NC(=O)CSC2=NC=C(C3=CC=CC=C3)N2)=C1C	-8.7385
4898	COC1=CC(OC)=C(C(C)=O)C(C)=C1C	-10.6526
4899	O=C1CCC=C1C1=CC=CC=C1	-8.6474

4900	CC1=CC=C(OC(=O)C2=CC(C(C)(C)C)=CC(C(C)(C)C)=C2)C=C1C	-9.0738
4901	CC1=CC(C(C)(C)C)=C(OC(=O)C2(O)CC2)C(C(C)(C)C)=C1	-10.5932
4902	CC1=CC=C2C(=C1)[C@H](C(C)C)CC[C@@]2(C)O	-9.6776
4903	CC[C@H](/C=C/C(=O)[C@@H](C)[C@H](O)[C@H](C)[C@H]1OC(=O)/C=C/C=C/C(C)[C@@H]([C@@H](C)[C@@H](O)[C@H](C)C(=O)/C=C/[C@@H](CC)[C@@H](C)O)OC(=O)/C=C/C=CC1C)[C@@H](C)O	-8.5371
4904	COC(=O)C1=C[C@@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)C1	-10.0418
4905	COC1=CC(=O)C2=C(O)C3=C(C[C@@](C)(O)C[C@@H]3O)C(O)=C2C1=O	-10.7114
4906	CO[C@@]12CC(=O)C(C(C)=O)=C(O)[C@]1(C)C1=C(O)C(C)=C(O)C(C(C)=O)=C1O2	-10.6448
4907	CCCCCCCCC1OC[C@H]2O[C@H](OC)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]2O1	-10.6342
4908	C1=CC=C(CC2=NC(C3=CC=CS3)=NO2)C=C1	-9.0883
4909	C[C@@H]1CCCCCCCCCC2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.7167
4910	O=C1N=C(N2CCCCC2)N=C2OCCN21	-8.8233
4911	C1=CC2=CC=CC=C2C=CC1	-8.4350
4912	O=[N+]([O-])C1=CC=CC=C1C(=S)N(C1=CC=CC=C1)C1=CC=CC=C1	-9.0678
4913	C=C(C)[C@H]1CC=C(C)[C@@H](OC(=O)CC)C1	-9.6319
4914	O=C(O)C1=CC2=CC=CC=CC2=C1C(=O)O	-9.2490
4915	O=C(OCC(=O)C1=CC=C(Cl)C=C1Cl)C1=CC=C2OCCCOC2=C1	-9.4658
4916	C[C@@H]1CC[C@@H]2C(C)(C)C[C@]3(C)CC=C[C@]123	-9.6623
4917	CNC[C@H]1O[C@@H](N2C=NC3=C(N)N=CN=C32)[C@H](O)[C@@H]1O	-9.7290
4918	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)C1CCC2C3=CCC4=CC(=O)CCC4(C)C3CCC21C	-9.8718
4919	O=C1OC2=CC(O)=CC(O)=C2C=C1O	-10.1325
4920	CC(C)[C@@H]1CC[C@@H](C)C[C@H]1OC(=O)[C@H](C)O	-10.4304
4921	C=C(C)[C@H]1COC2=C(C)C=C3OC4=C(C[C@H](O)C(C)(C)OC)C=CC(O)=C4C(=O)C3=C2[C@@H]1O	-10.2626
4922	CCCCCCCCCCCCCCCCCO[Si](C(C)(C)C)C(C)(C)C	-9.4398
4923	C=CCO[Si](C(C)(C)C)C(C)(C)C	-10.0644
4924	O=C1CC[C@@]2(O)[C@H]3CC4=CC=C(O)C5=C4[C@@]2(CCN3)[C@H]1O5	-10.8988
4925	C[C@@H]1C[C@H]2O[C@@H]2/C=C/C=C/C(=O)CC2=C(Cl)C(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.6172
4926	CC(=O)O[C@@H]1C[C@@H](C)OC(=O)[C@H]2O[C@H]2/C=C/[C@@H]1O	-9.9626
4927	COC1=CC(=O)C[C@H](C)[C@@]12OC1=CC(OC)=CC(OC)=C1C2=O	-10.1645

4928	C=C1CC[C@@H]2[C@H]3C(C(C)C)CC[C@]2(C)C13	-9.5566
4929	C=C/C(C)=C/CC1[C@@](C)(O)CC[C@@H]2C(C)(C)CCC[C@@]12C	-9.9765
4930	COC1=CC(C)=C2C[C@@H]3[C@@H](C)CO[C@]3(C)OC2=C1	-10.3470
4931	CC1(C)CCC[C@@]2(C)[C@@H]3C[C@H]4[C@@H](C31)[C@]42C	-9.3713
4932	CCCCC/C=C\C[C@@H](O)[C@H](O)CCCCCCCC(=O)O	-10.6100
4933	CCCCCCCCCC1=CC(OC(=O)C2=C(O)C=C(O)C=C2CCCCCCCCC)=CC(O)=C1C(=O)O	-10.3273
4934	CC1=CC2=C(C=O)C(=O)[C@@](C)(O)[C@H](O)C2=CO1	-10.3441
4935	CCCCCC[C@H](O)C1=CC(OC)=C(COC)C(=O)O1	-10.9958
4936	CN1C(=O)[C@]23SS[C@@]1(C)C(=O)N2[C@H]1NC2=CC=CC=C2C1([C@@]12C4=CC=CC=C4N[C@@H]1N1C(=O)[C@]4(C)SS[C@]1(C(=O)N4C)[C@H]2O)[C@@H]3O	-9.0108
4937	CC(C)(O)CCC[C@](C)(O)C1=CC=C(C(=O)O)C=C1O	-11.1785
4938	C[C@@H]1CC[C@@]2(O)C(C)(C)[C@H]3C[C@@]12CC[C@@H]3C	-10.2321
4939	C[C@H]1C2C=CC=CC(O2)[C@H]1[C@H]1OC(=O)C=C[C@H]1O	-10.0239
4940	C/C(=C/C(C)CC(C)C(=O)O)[C@@H]1CC[C@@](C)(C(C)O)O1	-11.0969
4941	COC(=O)[C@@]1(CC2=CC=C(O)C=C2)OC(=O)C(O)=C1C1=CC=C(O)C=C1	-9.8182
4942	CC(C)(O)[C@H]1CC2=CC(C(=O)O)=CC=C2O1	-10.5296
4943	C=CC(C)(C)[C@]12C[C@@H]3C(=O)NC4=CC=CC=C4C(=O)N3[C@H]1NC1=CC=CC=C12	-8.5364
4944	C[C@@H]1C[C@@H](O)/C=C/[C@H](O)CCC(=O)CC2=C(Cl)C(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.6776
4945	CC1=C[C@H]2OC3CC(=O)[C@@](C)(C34CO4)[C@@]2(C)CC1	-11.1942
4946	C=C1[C@H]2CC[C@H](C2)[C@]1(C)CC/C=C(\C)COC(C)=O	-10.1276
4947	O=C1CC[C@@H](O)C23O[C@]12C1(OC2=CC=CC4=CC=CC(=C24)O1)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]3O	-10.2607
4948	CC1=C[C@H]2C[C@@H](C)C[C@@H](C)[C@@H]2[C@@](C)(C(=O)CCO)[C@H]1C(=O)O	-11.2290
4949	CC(C)=CCOC1=CC(O)=C2C(O)=C3N[C@]45C[C@@H](O)CC[C@]4(C)C4=CC[C@]6(C)[C@@H]([C@H](C)/C=C/[C@H](C)C(C)C)CC[C@H]6C4=C[C@@H]5OC3=C3C(=O)C=C(C)C1=C32	-8.9354
4950	CC(=O)O[C@@H]1[C@@H]2O[C@@H]2[C@@](C)(O)C(=O)[C@@H](C)CC=C[C@H]2[C@@H]3O[C@]3(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@@]312	-9.5082
4951	CCOC(=O)CC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)CCCCC[C@@H](C)O	-10.8295

4952	C[C@H]1CCC/C=C/[C@@H]2CC(=O)C[C@H]2[C@H](O)/C=C/C(=O)O1	-10.5492
4953	CC1=C[C@H]2O[C@@H]3C[C@@H](OC(=O)/C=C\C=C\[C@H](O)[C@@H](C)O)[C@](C)([C@@]2(CO)CC1)[C@]31CO1	-11.3657
4954	C[C@@H]1[C@H]2CC[C@@H](O)C3C(=O)[C@]1(C)C(=O)[C@@](C)(O)[C@H]32	-10.8702
4955	C[C@]1(C(=O)O)CCC[C@]2(C)C3CC(=O)O[C@@]3(CO)CC[C@@H]12	-10.9139
4956	CCCCC/C=C/C/C=C\C[C@@H]1O[C@@H]1C/C=C\CCCC(=O)O	-10.2279
4957	C/C=C(\C)[C@H]1OC(=O)C(C)(C)[C@H](O)[C@@H]1C	-10.7037
4958	CC(=O)O[C@](C)(CCC=C(C)C)[C@H]1CC=C(C)CC1	-10.1967
4959	CCCCCC1=C(C=O)[C@H]2OC(C)(C)[C@H](O)C[C@]23O[C@@H]3[C@H]1O	-10.9720
4960	C=C(C)[C@@H]1C=CC[C@@H](C)C1	-8.5653
4961	CC1(C)[C@H]2CC[C@](C)(O)[C@@H]1C2	-10.0183
4962	C=C(C)C1CCC2(C)CCC3(C)C(CCC4C5(C)CC[C@@H](OC(C)=O)C(C)(C)C5CCC43C)C12	-10.0107
4963	C=C1[C@@]2(C)C[C@H]3[C@]4(C)C=CC(=O)OC(C)(C)[C@H]4CC[C@]3(C)[C@]1(C(=O)OC)C(=O)[C@@](C)(O)C2=O	-10.3041
4964	CN(C)[C@@H]1C(=O)C(C(N)=O)=C(O)[C@@]2(O)C(=O)C3=C(O)C4=C(C=CC(N)=C4O)C[C@H]3C[C@@H]12	-10.1553
4965	CC1(C)C=CC2=C(O1)C(C)(C)C(=O)C(C)(C)C2=O	-10.3816
4966	CC(C)CCCCCCCCCC[C@@H](O)CC(=O)O	-10.6162
4967	CC1=CC(=O)C2=C(CO)C=C(O)C=C2O1	-10.3203
4968	O=C1CC[C@@H](O)C2=CC(O)=CC(O)=C12	-10.3870
4969	COC(=O)C1=COC(OC2OC(CO)C(O)C(O)C2O)[C@H]2C(CO)=CC[C@@H]12	-10.5207
4970	C[C@H]1CCC/C=C/CC/C=C/C=C/C(=O)O1	-9.3615
4971	C=C1[C@@H](O)C[C@@H]2[C@](C)(CCC[C@]2(C)C(=O)O)[C@H]1CC(=O)O	-11.0549
4972	CC(=O)OC1[C@H](C(C)(C)O)CC[C@@]2(C)CCC=C(C)[C@@H]12	-10.8882
4973	COC(C[C@@H](OC)[C@@H]1O[C@@H]1C(C)O)C1C=CCO1	-10.3123
4974	CC[C@H](C)C(=O)O[C@H]1C[C@@H](C)C=C2C=C[C@H](C)[C@H](CC[C@@H]3CC=CC(=O)O3)[C@H]21	-10.1740
4975	COC1=CC=CC2=C1C(OC)=CC1=C2OC(=O)C(C)=C1	-9.9957
4976	CO[C@H]1C[C@H](O)C2=C3C4=CC=CC(O)=C4C(=O)C[C@@H]3C3=C2C1=C(O)C=C3	-9.9260
4977	COC1=CC=CC2=C1C(O)=CC1=C2OC(=O)C(C)=C1	-10.2291
4978	COC1=CC(O)=C(Cl)C2=C1C(=O)O[C@H](C)CCC(=O)CC/C=C/C(=O)C2	-10.5217

4979	CC(CO)[C@@H](C)C=C[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2C3=CC=C4CCCC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C	-10.0186
4980	C[C@@]12C[C@@H](O)C[C@]3(C)C4=CC(=O)OCC4=C[C@@H](OC1=O)[C@@H]23	-10.7698
4981	COC1=CC2=C(C(O)=C1OC)[C@]13CC[C@@H](OC)C[C@H]1N(CC3)C2	-11.1568
4982	CCCC1=CC=CC(O)=C1CO	-9.7232
4983	C/C=C(\Cl)C1=CC(=O)[C@@]23C[C@@H]2C(C)(C)O[C@@]3(O)C1=O	-10.9542
4984	CC(C)CCCCCCCCCCC[C@@H](O)CC(=O)O	-10.6459
4985	CC(=O)[C@H]1CC[C@@H]2C1C(C(C)C)CC[C@@]2(C)O	-10.8334
4986	C[C@@H]1CCC[C@]2(C)CC[C@@H]3C[C@]12OC3(C)C	-9.5110
4987	CCCC(O)C/C=C/C1=C(CO)[C@@H]2OC(C)(C)[C@@H](O)C[C@@]23O[C@H]3[C@@H]1O	-10.8941
4988	O=C(O)CCCC1=C2C=CC=CC2=CO1	-9.3295
4989	C[C@@H]1CC[C@H]2C[C@]3(C)CCC4C3[C@]1(CC[C@]4(C)O)C2(C)C	-10.1043
4990	CC(=O)OC[C@H]1O[C@@H](O)[C@@H](O)[C@@H](O)[C@@H]1O	-9.7381
4991	CCCCCCCCCC(CCCCCCCCC)COC(=O)CC	-10.0614
4992	CC1CCC2C1[C@H]1[C@@H](CCC2(C)C)[C@@]1(C)CO	-9.9866
4993	CC(=O)OCC12C[C@@H](O)C(C)=CC1OC1[C@H](O)[C@@H](OC(C)=O)C2(C)C12CO2	-10.8233
4994	CCCCCCCCOC(=O)CCCCCCCCCC(=O)OCC(CCC)CCC	-10.1289
4995	O=C[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)CO	-9.6006
4996	C[C@@H]1C=C2C(=O)O[C@@H]3CC[C@H](C1)[C@]23O	-10.6906
4997	C=CC1(C)CC[C@@H]([C@H]2O[C@@H](C(=C)C)CC2=O)O1	-10.2441
4998	C[C@H]1C2CC[C@](C)(O)[C@H]3C1CCC(C)(C)C23	-10.0911
4999	CC(C)C[C@@H](C)[C@H]1C(=O)C[C@H]2[C@@H]3CC[C@H]4CCCC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C	-10.3289
5000	CC1=CC[C@@H]2[C@]34CC[C@](O)(OC3)C(C)(C)[C@]4(O)CC[C@@]2(C)[C@]12CC1=C(C=C(C3=CC=CN=C3)OC1=O)O2	-9.4920
5001	NCCCC[C@H](NC(=O)[C@@H]1CCCN1C(=O)[C@@H](N)CC1=CC=CC=C1)C(=O)O	-10.8760
5002	CC(C)CCCCCCCCC1CC(=O)N[C@@H](CC(N)=O)C(=O)N[C@H](CC2=CC=C(O)C=C2)C(=O)N[C@H](CC(N)=O)C(=O)N[C@@H](CCC(N)=O)C(=O)N2CCC[C@H]2C(=O)N[C@H](CC(N)=O)C(=O)N[C@@H](CO)C(=O)N1	-10.7945
5003	O=C1C=CN=N1	-8.9827
5004	C[C@H]1CCC[C@@H](C[C@H]2CC3=CC(O)=CC(O)=C3C(=O)O2)O1	-10.7976
5005	C[C@H]1CCCCC[C@H](O)[C@@H](O)/C=C\C(=O)O1	-10.1359

5006	C/C=C/C=C/C(=O)[C@@H]1[C@@H]([C@@]2(C)OC(=O)C(C)=C2O)[C@H]2C(=C(O)/C=C/C=C/C)C(=O)[C@]1(C)C(=O)[C@@]2(C)O	-9.2313
5007	COC(=O)[C@]1(C(C)C)OC(=O)/C(=C/C2=CC=CC=C2)O1	-9.9919
5008	CC(=O)O[C@@H]1CC2OC3C=C(C)CC[C@]3(C)[C@]1(C)C21CO1	-11.0399
5009	C=C(C#CC1=C[C@@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H]1O)CCC=C(C)C	-10.5992
5010	COC1=CC(O)=CC(C)=C1CC(=O)O	-10.3802
5011	C=C(C)[C@H]1CC[C@@]1(C)[C@@H]1CC=C(C)CC1	-9.3305
5012	CCCCCCCC[C@H]1OC(=O)C2=C1[C@@H](O)[C@@H]1O[C@@H]1[C@@H]2O	-10.7602
5013	C=C1CC[C@@H]2C(C)(C)CCC[C@@]2(C)[C@@H]1CC1=C(O)C(=O)C(CO)=CC1=O	-10.8639
5014	O=C1C[C@H](O)[C@@H]2C3=C(C=CC(O)=C13)C1=CC=C(O)C3=C1[C@@]2(O)[C@@H](O)CC3=O	-10.3617
5015	CCC(C)C1NC(=O)[C@H](CC2=CC=CC=C2)N2C1=NC1=C(C=CC=CO1)C2=O	-8.9950
5016	CCC(=O)O[C@H]1C[C@@]2(COC(C)=O)C(C=C1C)OC1[C@H](O)[C@@H](OC(C)=O)C2(C)C12CO2	-10.6843
5017	CC1=NC=C2C(O)=C(C)C(O)=CC2=C1C	-10.4207
5018	CC1=C(C)C(=O)C2=CC(O)=CC=C2C1=O	-10.2617
5019	CC1=CC2=CC(=O)[C@](C)(O)C(=O)C2=CO1	-10.3564
5020	CC(C)[C@H]1C2C(=O)OC1[C@H]1N(C)C[C@H]3CC[C@@H]2[C@]31C	-10.2674
5021	CC=CC1C=CC2CC(C)CCC2[C@@]1(C)C(O)=C1C(=O)C(CO)N(C)C1=O	-10.1053
5022	C[C@@]12CC(C3=COC=C3)OC(=O)C1CC[C@]1(C)C2C2C=C[C@@]1(O)C(=O)O2	-10.9362
5023	CC(C)C(C)C=CC(C)C1CCC2=C3C=CC4=CC(=O)CC[C@]4(C)C3CC[C@@]21C	-9.5734
5024	CC1=CC2C(CC1)C(C)CC[C@@]2(O)C(C)C	-10.0164
5025	CC(=O)O[C@@H]1C=C[C@@](C)(O)C(=O)[C@@H](C)CC=C[C@H]2[C@H](O)C(C)=C(C)[C@H]3[C@H](CC4=CC=CC=C4)NC(=O)[C@]123	-9.0815
5026	CC1=C[C@@]2(O)O[C@@]3(CC2=C(C)C)C(C)CCC13	-10.8078
5027	CC1=C[C@H]2C=C(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@@]23C(=O)C[C@H]2C[C@]3(O)O[C@H](CC1)[C@H]2OC(=O)[C@@]12C(=O)N[C@@H](CC(C)C)[C@@H]1[C@H](C)C(C)=C[C@@H]2/C=C(\C)CCCC3=O	-9.1222
5028	C[C@@H]1C/C=C/CC[C@@H](O)CCCC(=O)O1	-10.1355
5029	CC(C)CC1=CC(=O)C(O)=C(Cl)C(=O)N1	-9.6636
5030	CC1=C[C@@]2(O)C(=O)[C@]34COC[C@]3(C(=O)C(O)=C4C)[C@@H](C)[C@@]2(O)O1	-10.8091
5031	COCC1=CN(CCC2=CC=CC=C2)C=C1C(C)=O	-8.9120
5032	COC(=O)CCCN1C=C(CO)C(C(C)=O)=C1	-10.4168

5033	CC(=O)C1=CN(CCC2=CC=CC=C2)C=C1CO	-8.9516
5034	C/C1=C/[C@@H](C)CC=C[C@H]2[C@@H]3O[C@]3(C)[C@@H](C)[C@H]3C(CC4=CNC5=CC=CC=C45)NC(=O)[C@]32C(=O)C=CC(=O)[C@@H]1O	-8.6291
5035	CC1=CC2C=C(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC(C)C)NC(=O)C23C(=O)CC[C@H](O)C(=O)CC1	-10.9108
5036	CC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)O[C@@H]1CC2=C(CO[C@](O)(CCCO)C2)C(=O)[C@]1(C)O	-11.1473
5037	CC[C@H](C)[C@@H](O)[C@](C)(O)/C=C/C1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@](C)(O)[C@H](O)[C@H]2CO1	-10.4067
5038	CC(C)=C[C@H]1C2=C(C[C@@]3(O)C(=O)N4CCC[C@H]4C(=O)N13)C1=CC=CC=C1N2	-9.9815
5039	COC1=CC(O)=CC(C(=O)C2=CC(OC)=C(O)C(OC)=C2)=C1	-10.1579
5040	CC1CC[C@H](O)/C=C/C(=O)O[C@H](C)CC[C@H](O)/C=C/C(=O)O1	-10.8048
5041	C[C@H]1CCC/C=C/[C@H](O)[C@H]2O[C@H]2[C@H](O)/C=C/C(=O)O1	-10.3203
5042	C=C[C@@]1(C)C=C(C)[C@@H]2[C@@H]3[C@H](OC4=CC=C(C=C4)C[C@@H]4C(=O)NC(=O)[C@H]4C(=O)[C@H]31)[C@@H]1[C@@H](C)C[C@@H](C)C[C@]12C	-9.4519
5043	CC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)O[C@@H]1CC2=C(COC(CCC(=O)O)=C2)C(=O)[C@@H]1C	-10.8871
5044	COC1=CC(C)=C2C(=C1)OC(=O)C1=C(O)C=C(OC)C=C12	-10.6559
5045	C[C@@H]1O[C@@H]1C1=C[C@H](O)[C@@H](C)OC1=O	-10.0456
5046	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(C[C@](C)(O)[C@H](O)C3)C(=O)C2=C1O	-10.8570
5047	C/C1=C/CC/C(C)=C/C[C@]2(C(C)C)CC[C@@](C)(O2)[C@@H](O)CC1	-10.4826
5048	CC[C@H](C)[C@@H](OC(C)=O)[C@@H](C)C1=CC(=O)C2=C(OC3CC[C@H]4O[C@@H](C(C)(C)O)CC[C@]4(C)[C@H]3C2)C1=O	-10.5942
5049	C/C1=C/C[C@]2(C)C(=O)C(O)=C([C@H](C)CO)[C@H]2C/C=C(\C)[C@@H](O)CC/C(C)=C\CC1	-10.5187
5050	CC[C@@H](O)/C=C(C)/C(COC)=C(/C=O)CO	-10.5085
5051	COC(=O)C1=C(CCCCOC(C)=O)OC(=O)C=C1OC	-10.6602
5052	COC1=C(O)C(O)=C(C)C2=C1C(=O)OC2	-10.4925
5053	CC(C)=CCC1=C(O)C=C(O)C(C=O)=C1C(=O)C1=C(O)C=C(C)C=C1O	-9.8971
5054	C/C(=C\[C@](C)(O)C1=CC2=CC(=O)[C@@](C)(O)[C@H](O)C2=CO1)[C@H]1OCC[C@@H]1C	-10.7835
5055	CC1=C(O)C(=O)C2=C(O)C=CC=C2O1	-10.2989
5056	C=C(C#CC1=C[C@H](O)[C@H](OC)[C@@H](O)[C@H]1O)C/C=C/C(C)(C)O	-10.6730
5057	COC1=CC(=O)C=C(/C(C)=C/[C@@H](C)C[C@H](C)CCO)O1	-11.2402

5058	COC(=O)C1=CC(C)=CC(O)=C1C(=O)C1=C(O)C=C(OC)C=C1OC	-11.0026
5059	COC(=O)C1=CC(C)=CC(O)=C1CC(=O)CC1=C(O)C=C(OC)C(Cl)=C1OC	-10.7219
5060	C=C(C#CC1=C[C@H](OC(C)=O)[C@H](OC)[C@@H](O)[C@H]1O)C/C=C/C(C)(C)O	-10.7140
5061	C=C1[C@@]23C(=O)O[C@H](C)[C@]24O[C@@]2(C(=C)[C@@](CCC)(C(C)(C)OC=O)C[C@@H](OC(C)=O)[C@]32C)C(OC(C)=O)[C@@]1(C)OC4=O	-10.3777
5062	CN1C(=O)[C@](C)(O)C(=O)[C@H]1CC1=CC=C(O)C=C1	-9.7631
5063	C=C(CO)[C@@]1(O)C[C@@]2(C)[C@H](CCC[C@@H]2C)C[C@H]1O	-11.2354
5064	CC1=CC(O)=C2C[C@@H]3[C@@H](C)CO[C@]3(C)OC2=C1	-10.4832
5065	CC(=O)C1=CC(C)=C(OCC=C(C)C)C(C)=C1O	-11.0036
5066	CCCCCCCCCC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)OCC	-10.6859
5067	C=C[C@@]1(C)C=C(C)[C@@H]2[C@@H]3[C@H](OC4=CC=C(C=C4)C[C@@]4(O)C[C@H](C(=O)N4)C(=O)[C@H]31)[C@@H]1[C@@H](C)C[C@@H](C)C[C@]12C	-9.8578
5068	CC[C@H](C)[C@@H](O)/C(C)=C/[C@](C)(O)C1=CC2=CC(=O)[C@@](C)(O)[C@H](O)C2=CO1	-10.4552
5069	COC1=CC=CC(OC)=C1C1=C(O)C=CC=C1O	-10.4990
5070	CS[C@@]1(CO)C(=O)N/C(=C\C2=CNC3=CC=CC=C23)C(=O)N1C	-9.6199
5071	CC1=CC[C@@]2(C[C@@H]1O)[C@H](C(C)C)C[C@@H](O)[C@@H]2C	-10.7923
5072	CCC/C=C/[C@H]1C=C[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]1C(=O)C(C)O	-10.8003
5073	CC1(C)CCC[C@@]2(C)C(CO)=C[C@@H]1[C@@H]2CCO	-10.4779
5074	COC1=CC(CC2=C(O)C(C)=CC(C(C)=O)=C2O)=C(OC)C=C1O	-10.6804
5075	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)C1CCC2CCCC3C[C@@H](O)CC[C@]3(C)CCC[C@@]21C	-9.6867
5076	CS[C@]1(C)NC(=O)[C@](CC2=CNC3=CC=CC=C23)(SC)NC1=O	-9.6684
5077	CC1(C)/C=C/C[C@](C)(O)[C@@H](O)C[C@@H](O)[C@]2(C)O[C@@H]2C1	-10.4349
5078	C[C@H]1CC(=O)C2=C(O1)[C@H](C)[C@H](O)[C@@H](C)C2	-10.1575
5079	CC[C@@H]1OC2=C(C[C@H](C)[C@@H](O)[C@@H]2C)C1=O	-10.3170
5080	CC(=O)O[C@H]1C[C@H]2O[C@]2(C)C[C@@H]2O[C@H]2C(C)(C)C/C=C\1C	-10.7124
5081	CC(=O)O[C@H]1C[C@@H](O)[C@]2(C)C[C@H]2[C@H](O)C(C)(C)C/C=C\1C	-11.0026
5082	CC(=O)C1=CC=C(C2=CC=C(O)C=C2O)O1	-10.1607

5083	CC(=O)O[C@@H](C)/C(C)=C/C=C/[C@@]1(C)OC(=O)[C@H](C)[C@H]1O	-10.7644
5084	C/C1=C/C(=O)/C=C(/CO)[C@H]2C[C@@](C)(CO)[C@@H]2CC1	-11.2612
5085	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CCC2C34C=CC5(C[C@@H](O)CC[C@]5(C)C3=CC[C@@]21C)OO4	-10.4262
5086	CO[C@@H]1/C(C=O)=C\CC(C)(C)C(=O)[C@@H](OC(C)=O)CC(C)=C[C@H]1OC	-10.4988
5087	COC1=CC(O)=CC(C)=C1CC1=C(C(=O)O)C=C(C[C@@H](C)O)O1	-10.9344
5088	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@]23[C@H](O)C=C[C@@H](C)C[C@](C)(O)CC=C[C@H]3[C@@H]1O	-9.7903
5089	C=C1O[C@@](C)(O)CC2=CC=CC(O)=C12	-9.8780
5090	COC1=CC(C2=CC=C(O)C=C2)=C(O)C(O)=C1C1=CC=C(O)C=C1	-9.4626
5091	COC1=CC(C2=CC=CC=C2)=C(OC)C(OC)=C1C1=CC=C(O)C=C1	-9.1465
5092	C=C1C=CC(=O)[C@]1(CO)CC1=C(C)C=C(O)C=C1OC	-10.4845
5093	C/C(=C/[C@H](O)[C@H](C)C(C)C)[C@H]1CCC2=C3C=CC4=CC(=O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@@]21C	-10.6322
5094	CC(=O)O[C@H]1[C@@H](C)CC(O)=C2C(=O)C3=C(O)C=CC=C3OC[C@]21O	-10.4866
5095	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC3=C(C2=C1)[C@@](C)(O)C[C@@H](O)[C@@H]3O	-11.0154
5096	CC(C)(O)CCC[C@]1(C)OC2=CC=C(C(=O)O)C=C2O1	-10.9744
5097	COC1=CC(O)=CC(C)=C1CC1=C(C(=O)O)C=C(C)O1	-10.4423
5098	C/C=C/C=C/C(=O)[C@H](OC)C1=CC(O)=C(C)C(O)=C1C	-10.5548
5099	C=C[C@]1(C)CC[C@@H]2C(=C[C@H]3OC(=O)[C@@]4(C)C(=O)C[C@@H](O)[C@@]2(C)[C@@H]34)C1	-11.0749
5100	CC(=O)O[C@H]1C/C(C)=C\C(=O)C/C(C=O)=C\CC(C)(C)C1=O	-10.5505
5101	CC1=CC(C)=C(C(=O)O[C@@H]2[C@H](O)[C@@H](CO)O[C@H]2N2C=CC(=O)NC2=O)C(O)=C1	-9.3305
5102	C/C=C(\C)C(=O)O[C@H]1C=CC(=O)O[C@H]1C(O)CC(=O)C(C)O	-10.7053
5103	C/C=C/C=C/C(=O)[C@H](O)C1=CC(O)=C(C)C(O)=C1C	-10.6771
5104	OC[C@H]1O[C@H](OCCC2=CC=CC=C2)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]1O	-9.8953
5105	CC(=O)N1C2=CC=CC=C2[C@]2(O)CCO[C@H]12	-9.2518
5106	CCOC(=O)C1=C(O)C=C(O)C=C1CCC(=O)O	-10.7721
5107	CC1=CC2=C(C(O)=C1OC(C)(C)[C@H]1CO1)[C@@H](C1=C(O)C=CC=C1O)OC2	-10.4370
5108	CC(=O)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2[C@H]3CC=C4C[C@@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C	-10.9842

5109	CC1=C(C=O)[C@H]2[C@@H](C(C)C)CC[C@]1(C)[C@H]2/C=C/C(=O)O	-10.5526
5110	CC(=C\C(=O)O)/C=C(\C)C[C@H](C)CCCC[C@H](O)[C@H](C)C(=O)O	-10.6897
5111	CC(C)[C@@H]1CC[C@](O)(CCl)[C@]2(C)C(=O)OCC(C(=O)O)=C[C@@H]12	-10.9968
5112	O=C1C2=C(NC3=CC=CC=C3C2=O)[C@H]2CCCN12	-8.9879
5113	CC[C@@H](C)C(=O)[C@@H](C)C1=CC(O)=C(C)C2=C1C=CC(=O)O2	-10.5337
5114	C[C@H]1CCC[C@H]2CC(=O)C3=C(C=C(O)C=C3O2)CC(=O)O1	-10.8475
5115	COC1=CC=CC2=CC=C(CO)C(O)=C12	-9.6454
5116	CC1=CC2=C3C(=C1O)OC1=CC=CC(OCC(O)C(C)(C)O)=C1[C@H]3OC2=O	-10.6613
5117	C=C(C)C#CC1=CC([C@@H](O)[C@@H](C)O)=CC=C1OC	-10.6870
5118	COC1=CC=C(CO)C=C1C#CC(C)=O	-10.2147
5119	CC1=CC2=C(C(O)=C1OC(C)(C)[C@H]1CO1)[C@H](C1=C(O)C=CC=C1O)OC2=O	-10.4399
5120	COC1=C(C)C(=O)OC([C@@H](C)[C@H]2OC(=O)C=C2C)=C1	-10.5026
5121	CC1=CC2=C(C(O)=C1OC(C)(C)[C@H]1CO1)[C@H](C1=C(O)C=CC=C1O)OC2	-10.4405
5122	CC/C(C)=C1/NC(=O)[C@@H](CC2=CC=CC=C2)N2C1=NC1=CC=CC=C1C2=O	-9.2007
5123	CCCCCCCCCCC(CC)(CC)CCCC	-9.0876
5124	C=C[C@@H]1C[C@@](C)(CO)C/C1=C(\CO)[C@@H](CO)CC(=O)O	-11.1354
5125	CC(=O)OC[C@H](C(=O)O)[C@H](O)CCCC[C@@H](C)C/C(C)=C/C(C)=C/C(=O)O	-10.4657
5126	COC(=O)[C@H](O)/C=C/[C@H]1[C@H]2C(C=O)=C(C)[C@]1(C)CC[C@@H]2C(C)C	-10.7986
5127	C=CC(C)(C)[C@@]1(O)C(=O)NC2=C1C=CC1=C2C=CC(C)(C)O1	-9.5274
5128	COC(=O)C1=C(OC2=C(CO)C=C(OC)C=C2OC)C=C(C)C(CC=C(C)C)=C1O	-9.9198
5129	COC(=O)[C@]12[C@@H](C(C)=O)OC(CC(=O)[C@@H]1O)[C@H]2C	-10.4787
5130	CCC(=O)/C=C/[C@H]1[C@H]2C(C=O)=C(C)[C@]1(C)CC[C@@H]2C(C)C	-10.5556
5131	C[C@@H]1[C@@H](O)C[C@@H]2C(=O)OCC2=C2C[C@@](C)(CO)C[C@@H]21	-10.8990
5132	CC1=C[C@@H](O)[C@]2(C)CC[C@@H](C(C)(C)O)[C@H]2CC1	-10.5141
5133	CC[C@@H](/C=C(\C)C1=CC(OC)=C(C)C(=O)O1)CO	-11.0560

5134	C=C1[C@]2(C)C(=O)/C(=C(\O)CC/C=C/C)C([C@@H](/C(O)=C3/C(=O)[C@@]4(C)C5/C(=C(/O)CC/C=C/C)C(=O)C6(C)[C@@H]3[C@]3(C)O[C@@]6(O)[C@@]5(C)O[C@]43O)C2/C=C/C)[C@]1(C)O	-9.2748
5135	CC1=CC[C@@]2(C)[C@H](CC1)[C@H](C(C)(C)O)C[C@@H]2O	-10.5212
5136	CC(C)[C@H]1NC(=O)[C@H](CC2=CC=CC=C2)N2C1=NC1=C(O)C=CC=C1C2=O	-9.5019
5137	COC1=C(C)C(=O)OC([C@@](C)(O)/C=C(\C)[C@H](C)O)=C1	-11.2259
5138	CC(C)/C=C1\NC(=O)[C@@H](CC2=CC=CC=C2)N2C1=NC1=CC=CC=C1C2=O	-9.7589
5139	C/C=C/CCC(=O)[C@@H]1CC(=O)[C@H](/C=C/C)C[C@@H]1[C@@]1(C)OC(=O)C(C)=C1O	-10.7613
5140	CC1=CC(C(=O)CC[C@H](O)[C@H](C)O)=C(O)C=C1O	-11.1358
5141	C=C(C(=O)O)[C@@H]1C(C)C[C@@H](C)C2CC(=O)C(CO)=CC21	-10.9244
5142	CC/C(C)=C1\NC(=O)[C@@H](CC2=CC=CC=C2)N2C1=NC1=CC=CC=C1C2=O	-9.1964
5143	O=C1C2=C(NC3=CC=CC=C3C2=O)[C@]2(O)CCCN12	-9.2384
5144	COC1=C(C)C(O)OC([C@@H](C)[C@@H]2OC(=O)C=C2C)=C1	-10.5893
5145	CC[C@H](/C=C(\C)C1=CC(OC)=C(C)C(=O)O1)CO	-11.0400
5146	COC(=O)C1=C(OCC=C(C)C)C=C(C)C=C1OC1=C(CO)C=C(OC)C=C1OC	-10.0065
5147	C=C(C)[C@@H]1C[C@@]2(C)C(=C[C@H]1O)CC[C@@H](OC(=O)[C@@H](C)[C@@H](O)/C=C/C=C/C[C@@H](C)O)[C@@H]2C	-10.2806
5148	CC(C)=CCC1=CC=C(O)C2=C1C(C[C@@H](O)[C@H](C)O)OC2=O	-10.7042
5149	COC1=CC=C(C=O)C=C1C#CC(C)=O	-9.9918
5150	COC(=O)C1=C(O)C=C(C)C=C1OC1=C(CO)C=C(OC)C=C1OCC=C(C)C	-9.8731
5151	C[C@H]1CCC/C=C/[C@@H]2C[C@H](O)[C@H](O)[C@H]2[C@H](O)/C=C/C(=O)O1	-10.7822
5152	COC1=CC2=C(OC3=CC(C)=CC(OC)=C3C(=O)OC2)C(OC)=C1	-10.0735
5153	CC1(C)C2=CC[C@@](C)(O)[C@H](C(=O)O)[C@@]2(C)CC[C@@H]1O	-11.1427
5154	CC(C)OC(=O)C1=C(O)C=C(O)C=C1CCCCCCCO	-10.8482
5155	C=C(C(=O)O)[C@H]1C2=CC(C(=O)O)=CC=C2[C@H](C)CC1C	-10.6120
5156	COC1=CC(C2=CC=CC=N2)=NC(C(OC)OC)=C1SC	-8.8470
5157	CC(C)[C@H]1CC[C@]2(C)C(=O)CC[C@](C)(O)[C@H]2[C@@H]1O	-11.3965

5158	CC(=O)/C=C/[C@](C)(O)C1CC[C@H]2C3=CC(=O)C4CC(=CC[C@H](O)C4)C3CC[C@]12C	-10.9385
5159	C=C1C2=C(C=O)C(O)=C(C)C(O)=C2C(=O)O[C@H]1CO	-10.7644
5160	CCOC(=O)C1=C(O)C=C(O)C=C1CCCCCCCO	-10.7082
5161	CO[C@]12CCCN1C(=O)C1=C2N(C)C2=CC=CC=C2C1=O	-9.2959
5162	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CC[C@@]2(O)C3=CC(=O)C4=CC(=O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C	-10.9490
5163	CC1(C)[C@@H](Cl)CC[C@]2(C)C(C(=O)O)[C@](C)(O)CC[C@@]12O	-11.1600
5164	C=C1OC(=O)[C@H](C)/C1=C\CCCCC	-9.7146
5165	CCC(C)(C)[C@]1(O)NC(=O)[C@@H](CC2=CC=CC=C2)N2C1=NC1=CC=CC=C1C2=O	-9.1274
5166	CO[C@@]12CCCN1C(=O)C1=C2NC2=CC=CC=C2C1=O	-9.0699
5167	CCCC(=O)C1=CC=C2OC(OC)=CC2=C1O	-10.5441
5168	C=C1C23C(=O)O[C@@H](C)[C@@]24O[C@]2(C(=C)[C@@]5(C=CC(=O)OC5(C)C)CC(OC(C)=O)C32C)C(OC(C)=O)[C@]1(C)OC4=O	-10.1484
5169	O=C1[C@H](O)[C@H](C2=CC=CC=C2)[C@@H]2CCCN12	-9.6639
5170	CC1=C(O)C=C2C(C)=C(CO)OC(=O)C2=C1O	-10.6211
5171	CO[C@@]12CCCN1C(=O)C1=C2N(C)C2=CC=CC=C2C1=O	-9.3317
5172	O=C1C2=C(NC3=CC=CC=C3C2=O)[C@@]2(O)CCCN12	-9.2732
5173	CN1C2=C(C(=O)N3CCC[C@@]23O)C(=O)C2=CC=CC=C21	-9.5088
5174	CCCCC/C=C(/C(=O)O)[C@@H](C)C(=O)O	-10.1689
5175	C=C(C(=O)O)[C@@H]1CC[C@@H](C)C2C[C@@H](O)C(C)=CC21	-11.0504
5176	O=C1O[C@H](O)C[C@@H](O)/C=C/[C@@H](O)C[C@H]1O	-9.6857
5177	COC1=C2N3CCC[C@@H]3O[C@]2(C)C2=C(CC(=O)C3=C(O)C=C(OC)C=C23)C1=O	-10.9946
5178	CO[C@@H]1C2(O)C(=[N+]([O-])C3=C2C=CC2=C3C=CC(C)(C)O2)C(C)(C)[C@@H]2C[C@@]34CCCN3C(=O)C12NC4=O	-10.0641
5179	COC1=CC(N2C(=O)CC[C@@H]2C)=C(C(=O)O)C(OC)=C1OC	-10.0489
5180	CC(=O)O[C@@]1(CO)CC[C@H](C(C)C)[C@H]2C=C(C(=O)O)COC(=O)[C@@H]21	-10.9669
5181	O=C(O)C1=CC2=CC3=CC(O)=CC(O)=C3C(O)=C2C(=O)O1	-10.2345
5182	C[C@H](O)C(O)C=CC1=CC=CC(O)=C1CO	-10.3159
5183	CC1=CC(O)=C(C(=O)C2=C(C(=O)O)C=C(O)C(O)=C2O)C(O)=C1	-10.6453
5184	CC1=CC2=C(C)C(O)=C(O)C(O)=C2C(=O)O1	-10.5199

5185	CC[C@@H](C)C(=O)[C@@]1(C)OC(=O)C2=C1C=C(O)C(C)=C2O	-10.5962
5186	CC1O[C@@H](C/C=C/CCC(=O)O)C[C@@H](C)O1	-10.0386
5187	CC/C=C\C=C\[C@@]1(C)O[C@@H](CCCCC)[C@@H](C(=O)OC)C1=O	-10.4390
5188	C=C1C[C@](C)(O)[C@]2(C)C[C@]12C(C)C	-10.5605
5189	CC(C)(O)CCC1=CC(CC2=C(C3=CC=C(O)C=C3)[C@H](O)OC2=O)=CC=C1O	-9.6668
5190	C=CCCC/C=C(/C(=O)O)[C@H](C)C(=O)O	-10.2892
5191	CC/C=C\C=C\[C@@]1(C)OC(C)=C(C(=O)OC)C1=O	-10.2314
5192	C[C@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H](O)CC[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C=C3C(=O)N(C(CC4=CC=CC=C4)C(=O)O)CC3=C1O2	-10.0241
5193	COC1=CC(C2=CC=CC=N2)=NC(CO)=C1[S@@+](C)[O-]	-9.0611
5194	CCOC(=O)CC/C=C/C[C@H](O)C[C@@H](C)O	-10.6441
5195	COC(=O)C1=CC(OC)=C(O)C2=C1C(=O)[C@H]([C@@H](O)CC(C)=O)CO2	-10.9829
5196	CC/C=C\C=C\[C@@]1(C)OC(/C=C/CCC)=C(C(=O)OC)C1=O	-9.8334
5197	CC[C@@H]1CC[C@@]2(C[C@@H](O)CCO2)OC1	-10.4534
5198	COC(=O)C1=CC(OC)=C(O)C2=C1C(=O)[C@@H]([C@@H](O)CC(C)=O)CO2	-10.9845
5199	C[C@H]1CC[C@]2(O)[C@H]1C[C@H]([C@@](C)(O)CO)CC[C@@]2(C)O	-10.7013
5200	COC(=O)C1=CC(OC)=C(O)C2=C1C(=O)C1=CN=C(C)C=C1O2	-10.9762
5201	C=C(C)C=C=C1C[C@@H]2O[C@H](C(C)(C)O)C[C@]23O[C@@H]3[C@@H]1O	-10.8021
5202	CC1=C(O)C=C2C(=C1O)C(=O)O[C@@H](C)[C@@H]2O	-10.4331
5203	C=CC(C)(C)C1=C(/C=C2\NC(=O)[C@@H]3C[C@H](O)CN3C2=O)C2=CC=CC=C2N1	-9.7117
5204	CC1=C2C(=O)C[C@@]2(C)[C@@H]2C[C@]3(O)CC[C@@H](C)[C@@]2(CC1)C3(C)C	-11.4477
5205	CC1(C)CCC(=O)[C@]2(C)OOC3CC12CCC3(O)CO	-11.1539
5206	COC1=CC(O)=CC2=C1C(=O)O[C@H](C)CC(=O)CCCCC2	-10.8260
5207	C=C(C)COC(=O)C1=CC=CC=C1C(=O)OCC(C)C	-10.1548
5208	C/C=C/[C@@H]1OC2=C(C(=O)NC=C2C2=CC=CC=C2)[C@@H]2[C@H]1CCC[C@H]2C	-8.4573
5209	C/C=C/[C@@H]1OC(CC2=CC=CC=C2)=C(C)[C@@H]2[C@H]1CCC[C@H]2C	-8.7246
5210	CC(C)(O)[C@@H]1C[C@@H](O)[C@]2(C)C(CC[C@@]3(C)[C@H]2CC[C@H]2CC4=C(NC5=CC=CC=C45)[C@@]23C)O1	-10.9069
5211	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)C1CCC2=C3C=CC4=C[C@@H](O)CC[C@]4(C)C3CC[C@@]21C	-9.9172
5212	COC1=CC(=O)OC[C@@H]1[C@H](C)CO	-9.9479

5213	COC(=O)C1=CSC(C2=NC=CC=C2O)=N1	-9.4770
5214	COC1=C(O)C(=O)C=C(CC(C)(C)O)NC1=O	-10.1292
5215	C[C@H](O)[C@@H](O)/C=C/C1=CC=CC(=O)O1	-10.3006
5216	CC/C=C1/C=CC(=O)[C@@H](O)[C@]12C(=O)N(C=O)[C@](C)(O)[C@@H]2O	-10.3318
5217	COC1=C(O)C(C)=C2COC(=O)C2=C1OC	-10.5226
5218	C[C@H]1C[C@H](O)C2=CC=CC=C2O1	-9.6827
5219	CC1(C)C=CC(=O)[C@]2(C)OOC3CC12CCC3O	-11.0159
5220	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)C1CCC2=C3C=CC4=CC(=O)CC[C@]4(C)C3CC[C@@]21C	-9.6239
5221	C[C@H]1CC[C@@H]2[C@H]1C[C@H]([C@](C)(O)CO)CC[C@@]2(C)O	-10.6704
5222	CC1=C(CO)C(=O)C2=C(O)C=C(O)C=C2O1	-10.5339
5223	C[C@H]1CC[C@]2(O)[C@H]1C[C@H]([C@](C)(O)CO)CC[C@@]2(C)O	-10.7129
5224	C[C@H]1CC(=O)C2=CC=CC=C2O1	-9.3395
5225	CC(C)=CCC[C@@](C)(O)[C@H]1CC=C(CO)CC1	-10.4719
5226	CC(C)[C@H]1NC(=O)[C@H](CC2=CNC3=CC=CC=C23)NC1=O	-9.8243
5227	CC1=CC2=C(C(=O)C[C@@H](O)[C@@H]2O)C(O)=C1C	-11.1913
5228	C[C@H]1CC[C@@H]2[C@@]1(O)C[C@H](C(C)(O)CO)CC[C@@]2(C)O	-10.6932
5229	COC(=O)C1=CC(=O)C2=C(C)C=C(O)C=C2O1	-10.6500
5230	COC1=CC(=O)OC[C@@H]1[C@@H](C)CO	-10.0012
5231	CC1=CC(=O)C2=C(O)C=C(O[C@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]3O)C=C2O1	-10.6263
5232	COC1=CC2=C(C(O)=C1C)C(=O)OC(CO)=C2	-10.9263
5233	COC1=CC2=C(C(=O)O[C@@H]2[C@@H](C)O)C(OC)=C1C	-10.9835
5234	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)C1CCC2C3=CCC4C[C@@H](O)CC[C@]4(C)C3CC[C@@]21C	-10.1437
5235	COC1=C(O)C=C2COC(C)=CC2=C1CC=C(C)C	-10.5846
5236	CC1=C[C@H]2[C@H](C(C)C)CC[C@@](C)(O)[C@H]2C[C@@H]1O	-10.5675
5237	CO[C@H](C)CC(=O)C1=C(O)C=CC=C1O	-10.4005
5238	CCCCCC1=C(O)C=CC(O[C@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]2O)=C1CO	-11.2505
5239	CC(=O)OCC1=CCC2CC1C21CO[C@@]2(OC(=O)[C@@]3(C)O[C@@H]23)[C@@H]1O	-10.6955
5240	COC1=CC(=O)OC([C@H](C)CC(=O)O)=C1	-10.4021
5241	CC1=C2C[C@@]3(C)C(=CC(=O)C[C@@H]3C)C[C@H]2OC1=O	-10.2460
5242	COC(=O)[C@H](C)/C(=C\CCCOC(C)=O)C(=O)O	-10.5331
5243	COC1C(CO)OC(CO[C@@H]2CCC(=O)C3=C(O)C=CC=C32)C(O)C1O	-10.7899

5244	CCCC(=O)C1=C(C)OC(=O)C=C1OC	-10.5074
5245	CC(C)C1=C(O)C(=O)C2=C3C4=C(C(=O)CC[C@@]4(C)CC[C@@]21C)C(=O)N3CCO	-10.9002
5246	COC(=O)C1=C(OC)C=C(OC)C=C1OC1=C(C)C=C(OC)C=C1OC	-10.1564
5247	COC1=C(C2=CC=CC=C2)C2=CC(O)=CC=C2NC1=O	-8.8866
5248	CC1=C2[C@H](O)C[C@]2(C)[C@H]2C[C@H]3C(=O)C[C@H](C)C2(CC1)C3(C)C	-11.6119
5249	COC(=O)C1=C(OC)C=C(OC)C=C1OC1=C(C)C=C(O)C=C1OC	-10.4995
5250	CC(C)[C@@H]1NC(=O)[C@@H]2CC3=C(CN2C1=O)NC1=CC=CC=C31	-10.1363
5251	COC(=O)C1=C(OC)C=C(OC)C(Cl)=C1OC1=C(C)C=C(O)C=C1OC	-10.5106
5252	COC(=O)C1=C(OC)C=C(OC)C(Cl)=C1OC1=C(C)C=C(OC)C=C1OC	-10.1006
5253	CC1=CC(O)=C(C=O)C2=C1C(=O)OC1=C(C=C(O)C(C(=O)CC(C)C)=C1C)O2	-10.9326
5254	C/C=C/[C@@H]1C=C[C@H](O)[C@H](O)[C@]12C(=O)OC(C)[C@@H]2O	-10.2928
5255	CCC(=O)CNCCC1=CC=C2C=CNC2=C1	-9.2172
5256	COC(=O)[C@]1(C)C(OC)=C(O)C(=O)[C@@]1(C)O	-10.0582
5257	CC1=C(COO)COC1=O	-9.7350
5258	CC1(C)C[C@H](O)C[C@]2(C)[C@H]3[C@H](O)OC[C@@]3(O)C=C[C@@H]12	-11.1187
5259	COC(=O)C1=CC(=O)C=C(OC)[C@@]12OC1=CC(C)=CC(OC)=C1C2=O	-10.5177
5260	CC[C@@H]1C[C@H](C2=CC(=O)OC=C2)OC1=O	-9.6346
5261	CC(=O)CC1=CC2=C(CCCO)C=C(O)C=C2C(=O)O1	-10.6942
5262	COC1=CC(O)=CC(C(=O)O)=C1OC1=CC(C)=CC(O)=C1C(=O)O	-10.7282
5263	COC1C(=O)O[C@H](CC2=CC=C(O)C=C2)C1C1=CC=C(O)C=C1	-9.2684
5264	O=C1O[C@H](CC2=CC=C(O)C=C2)C(C2=CC=C(O)C=C2)C1O	-9.0665
5265	CC(=O)OC1=CC(O)=C2C(=O)O[C@@H](C[C@H]3CC[C@H](OC(C)=O)[C@H](C)O3)CC2=C1	-10.8869
5266	CC(/C=C/C1=CC2=CC(=O)[C@](C)(O)[C@H](O)[C@H]2CO1)=C\[C@@H](C)CCO	-10.1703
5267	CC(C)C[C@@H]1NC(=O)[C@@H]2CC3=C(CN2C1=O)NC1=CC=CC=C31	-10.2190
5268	CCCC1=C(CC(=O)OC(=O)NC(=O)CC(=O)O)CCC1	-10.7597
5269	C[C@@H]1NC(=O)[C@@H]2CC(O)CN2C1=O	-9.9213
5270	O=C1N[C@@H](CC2=CC=CC=C2)C(=O)N2CC3=C(C[C@@H]12)C1=CC=CC=C1N3	-9.0388
5271	C[C@H](O)C(=O)OCCC1=CC=C(O)C=C1	-10.2562

5272	C[C@H]1CCO[C@@H]1[C@](C)(O)/C=C/C1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@](C)(O)[C@H](O)[C@@H]2CO1	-10.4700
5273	CCC(O)CCC/C=C/[C@@H]1CC2=C(CC[C@H](O)C2=O)O1	-10.6715
5274	CC(/C=C/C1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@](C)(O)[C@H](O)[C@@H]2CO1)=C\[C@@H](C)CCO	-10.2960
5275	C=C1[C@@H]2[C@H](OC)OC[C@H]3[C@@H]2[C@@H](C(C)C)CC[C@@]13C	-10.1046
5276	CC1(C)[C@H](O)CC[C@]2(C)[C@H]3C(=O)OCC3=CC[C@@H]12	-11.2824
5277	COC(=O)CCC1=CNC(C(C)=O)=C1CC(=O)OC	-10.0678
5278	CC(/C=C/C1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@](C)(O)[C@H](O)[C@@H]2CO1)=C\[C@@H](C)[C@H](C)O	-10.2323
5279	CC[C@@H](/C=C(C)/C=C/C1=CC2=CC(=O)[C@](C)(O)[C@H](O)[C@H]2CO1)CO	-10.1073
5280	CCC(C)[C@]1(O)NC(=O)[C@H](C(C)C)N2C1=NC1=CC=C(OC)C=C1C2=O	-10.7178
5281	C/C=C/[C@@H]1CC2=C(CO1)C(=O)[C@](C)(O)[C@H](OC(=O)C1=C(C)C=C(O)C=C1O)C2	-10.7900
5282	C[C@H](O)C1=CC=C(C(=O)CCC(=O)O)O1	-10.0112
5283	CC(C)CC[C@@H]1NC(=O)[C@@H]2CC(O)CN2C1=O	-10.5667
5284	COC(=O)CCCC1=CC(=O)C2=C(OC)C=C(OC)C=C2O1	-10.7972
5285	CO[C@@]1(C)C=C[C@@H](O)[C@@]23C(=O)N[C@@H](CC4=CC=CC=C4)[C@@H]2C(C)=C(C)[C@@H](O)[C@@H]3C=CC[C@H](C)C1	-9.3305
5286	C[C@H]1CCO[C@@H]1[C@@](C)(O)/C=C/C1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@](C)(O)[C@H](O)[C@@H]2CO1	-10.4997
5287	CC1=C\[C@@H](O)C[C@@H](O)CC2=NC(=CO2)C(=O)N2CCC=C2C(=O)O[C@H](C(C)C)[C@H](C)/C=C/C(=O)NC\C=C\1	-9.7730
5288	OC1=CC=C(OC2=C3C(=NN2C2=CC=CC=C2)C=CC2=CC=CC=C23)C=C1	-9.2137
5289	COCC1=CC=C(C=O)N1CCCCC(=O)OC	-9.9521
5290	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)C1CCC2C3=C[C@@H](O)[C@@]4(O)C[C@@H](O)C[C@@H](C)C4C3CC[C@@]21C	-11.1276
5291	COC1=CC(O)=C2C(=O)[C@@H](C[C@@H](O)C(C)(C)O)C[C@@H](O)C2=C1O	-11.2965
5292	COC1=CC(C)=CC(OC2=CC(C)=C(O)C(CCCO)=C2)=C1	-10.2984
5293	CCCCCC[C@H](O)[C@@H]1C[C@@H](OC)C2=C(CC[C@H](O)C2=O)O1	-10.9269
5294	C[C@@H]1CC[C@H]2[C@@H](C=C[C@@](C)(O)[C@]2(C)C(=O)CCO)[C@H]1O	-11.4339
5295	CC[C@H](C)/C=C/C1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@@]3(C)OC[C@@]4(O)[C@H](C(=O)O[C@@H](C)[C@@H]4C)[C@H]3C2=CC1	-10.7089

5296	CC1(C)CCC[C@]2(C)C3=COC=C3C[C@H](O)[C@@H]12	-10.6820
5297	CCCCCCCC[C@@H](C)[C@@H]1CC(=O)NCC(=O)N[C@@H](C)C(=O)N[C@H](C)C(=O)N[C@@H](CCC(N)=O)C(=O)N[C@H](CC2=CC=C(O)C=C2)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)CC)C(=O)O1	-11.7310
5298	O=C1N[C@@H](CCO)C(=O)N2CCC[C@@H]12	-9.4265
5299	CC(=C/[C@@H](C)CCO)/C=C/C1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@](C)(O)[C@H](O)C2=CO1	-9.4858
5300	CC(=O)N[C@@H](CC1=CC=C(OCC=C(C)C)C=C1)C(=O)O	-10.4165
5301	CC1=CC(O)=CC(OC2=CC(C)=C(O)C(CCO)=C2)=C1	-10.0583
5302	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC(C[C@@H](C)O)=CC2=C1	-10.8281
5303	CC[C@@H](CC[C@@H](C)C1CCC2C3CCC4=CC(=O)CC[C@]4(C)C3CC[C@@]21C)C(C)C	-10.1656
5304	CC[C@@H](/C=C/[C@@H](C)C1CCC2C3=CC=C4CC(O)CC[C@]4(C)C3CC[C@@]21C)C(C)C	-10.3618
5305	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC(C[C@@]3(C(Cl)Cl)C[C@H](O)C(=O)O3)=CC2=C1	-10.7648
5306	C[C@@]12CCC[C@]3(C)C(=O)C[C@H](C=C4COC(=O)C[C@@H]41)[C@H]23	-10.8141
5307	CCC[C@@H](O)[C@H](O)C1CC(OC)=CC(=O)O1	-10.2057
5308	C[C@@H]1C=C(C[C@@H](O)[C@H](C)O)C(=O)O1	-10.2116
5309	CC1=CC[C@]2(C)[C@@H](O)[C@@H](O)[C@](O)(C(C)C)[C@H]2CC1	-10.8929
5310	O=C1CCC2=C3C1=C(O)C=CC3=C1C=CC(O)=C3C(=O)CCC2=C31	-9.9899
5311	CC(C)[C@@]1(O)[C@H](O)C[C@@]2(C)CC=C(CO)CC[C@@H]21	-10.8639
5312	CC1=C[C@@H](C)C[C@H]2O[C@H]3C(C)=C(N)[C@H]4[C@H](CC5=CC=CC=C5)NC(=O)[C@@]45[C@H]3[C@@H]2[C@H]1C[C@H]5O	-10.2358
5313	COC1=CC(C)=CC(OC2=CC(C)=C(O)C(CCO)=C2)=C1	-10.3085
5314	O=C1CCC2=C3C1=CC=CC3=C1C=CC=C3C(=O)CCC2=C31	-9.1131
5315	CC(C)[C@@]1(O)[C@H](O)C[C@@]2(C)CC(=O)[C@@H](C)CC[C@@H]21	-11.2065
5316	C/C=C/[C@H]1C(C)=C[C@H]2C[C@@H](C)CC[C@@H]2[C@@]1(C)C/C(O)=C1/C(=O)[C@@H](CO)N(C)C1=O	-10.2745
5317	CCC(C)CC(/C=C(\C)[C@@H](O)[C@@H](C)/C=C(\C)[C@@H](O)[C@@H](C)/C=C(\C)[C@@H](O)[C@@H](C)C(=O)OC[C@@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H](O)CO)CO	-10.4595
5318	COC(=O)C[C@H](C)[C@@H](O)[C@]1(C(=O)OC)CC(=O)C2=C(C=CC(C3=CC=C(O)C4=C3O[C@](C(=O)OC)([C@H](O)[C@@H](C)CC(=O)OC)CC4=O)=C2O)O1	-10.4014
5319	C[C@@H](O)[C@@H](O)C1=CC2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)O1	-10.6826

5320	CCCCC[C@@H]1CC[C@H](C)CCCCC(=O)N[C@@H](CC2=CC=C(OCC=C(C)C)C=C2)C(=O)O1	-10.2099
5321	O=C1C[C@H](O)CC2=C(O)C(O)=CC(O)=C12	-10.1617
5322	CC1=CC[C@]2(C)C[C@@H](O)[C@](O)(C(C)C)[C@H]2C=C1	-10.6150
5323	CCC(C)CC(/C=C(\C)[C@@H](O)[C@@H](C)/C=C(\C)[C@@H](O)[C@@H](C)/C=C(\C)[C@@H](O)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](O)[C@@H](C)C(=O)O[C@@H]([C@H](O)[C@H](O)CO)[C@H](O)CO)CC	-10.1958
5324	COC(=O)CC1=C[C@@H](C)OC1=O	-9.9424
5325	CC1=C(C2(C)O[C@@H](C)[C@H](C)O2)C(=O)CC1	-10.3114
5326	CC[C@@H]1OC2=C(C(=O)N(OC)C=C2)[C@@H]2[C@@H](C)C[C@@H](C)[C@H](O)[C@@]12C	-10.8254
5327	CC[C@H](C)C1=C(C)C2=C(N1)C(=O)C1=C(O[C@]3(C)CC[C@H]4O[C@@H](C(C)(C)O)CC[C@]4(C)[C@H]3[C@@H]1O)C2=O	-10.8500
5328	C[C@]12CCC(=O)C[C@H]1CC[C@@H]1[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](C3=CC(=O)OC3)[C@@H](O)C[C@]12O	-11.3612
5329	COC1=C(Cl)C(C)=C(Cl)C(O)=C1Cl	-10.3899
5330	C[C@]12CCC(=O)C[C@H]1CC[C@@H]1[C@@H]2C[C@@H](O)[C@]2(C)[C@@H](C3=CC(=O)OC3)[C@@H](O)C[C@]12O	-11.2936
5331	C[C@@H](C#CC1=CC(C(=O)O)=CC=C1O)CO	-10.8188
5332	C[C@]12CC[C@@H](O)C[C@H]1CC[C@@H]1[C@@H]2C[C@@H](O)[C@]2(C)[C@@H](C3=CC(=O)OC3)[C@@H](O)C[C@]12O	-11.2801
5333	CC1=C[C@@H](C)C[C@H]2O[C@H]3C(C)=C(N)[C@H]4[C@H](CC5=CC=CC=C5)NC(=O)[C@@]45[C@H]3[C@@H]2[C@H]1[C@@H](O)[C@H]5O	-10.1386
5334	COC1=C(C)C(=O)OC([C@@H](O)[C@@H](C)/C(C)=C/[C@@H](C)/C=C(\C)[C@@H](C)O)=C1	-10.5640
5335	CC(=O)[C@@H](C)CCCCCCCCC(=O)C(C)(C)CO	-10.7477
5336	COC1=CC(O)=C2C(=O)C[C@@]3(CC2=C1)C[C@@H](O)C[C@H](C)O3	-10.9815
5337	C=C1[C@H]2O[C@@H]3C[C@H](C)C/C(C)=C\[C@H]4[C@H]3[C@@H]2[C@@]2(C(=O)N[C@@H](CC3=CC=CC=C3)[C@]2(C)[C@@H]1C)[C@@H]4O	-10.0018
5338	C=C(C)C[C@@]1(O)C(=O)C2=C(C=C1OC)C=C1C=C(/C(C)=C/[C@@H](C)CC)CCC1=C2O	-9.8070
5339	C=C1[C@@]2(C)CC3=C(C)[C@]4(C=CC(=O)OC4(C)C)CC[C@]3(C)[C@@]13C(=O)O[C@H](C)[C@@]3(O)C2=O	-10.7800
5340	C[C@]1(CC(=O)O)CC[C@H]2C(=CC[C@H]3[C@](O)(CO)CCC[C@]23C)C1	-11.1839
5341	CC1=C([C@@]2(C)OC[C@H]3[C@@H](C)CC[C@H]3O2)C(=O)CC1	-10.7495
5342	COC1=CC(O)=CC2=C(OC)C=C(C)C=C12	-9.9857

5343	CO[C@@H]1/C=C(/C)C[C@H](O)[C@]2(O)[C@H](C[C@]2(C)COC(C)=O)/C(COC(C)=O)=C\1	-11.2664
5344	C[C@@H]1C/C(=C\CC2CC(=O)NC(=O)C2)C(=O)[C@@H](C)C1	-10.6316
5345	C[C@H]1CCCCCCCCC(=O)C(C)(C)CO[C@@H]1C	-10.4960
5346	CC(=O)O[C@H]1C[C@]2(C)C(O)C=C[C@]2(CO)[C@H]2CC(C)(C)[C@]12O	-11.1706
5347	C[C@@H]1C/C(=C\CC2CC(=O)NC(=O)C2)C(=O)[C@H](C)C1	-10.6316
5348	C[C@]1(CC(=O)O)CC[C@H]2C(=CC[C@@H]3[C@]2(C)C[C@@H](O)C[C@]3(C)C(=O)O)C1	-10.8822
5349	CC1=CC(O)=CC(OC2=CC(O)=CC(C)=C2CC[C@H](O)C(C)(C)O)=C1	-10.3952
5350	C[C@]1(CCO)CC[C@H]2C(=CC[C@@H]3[C@]2(C)C[C@@H](O)C[C@]3(C)C(=O)O)C1	-11.1903
5351	C/C(C=O)=C\CCC(C)C1=CC[C@@]2(C)OC3=C(C[C@@H]12)C(=O)CC[C@@H]3O	-10.8670
5352	CC[C@@H](O)C[C@H]1CC[C@@H]([C@H](C)C(=O)O[C@@H](C)C[C@@H]2CC[C@H]([C@@H](C)C(=O)OC)O2)O1	-10.8864
5353	CCC1=C(COC(C)=O)C(=O)C2=C(O)C=C(OC)C=C2O1	-10.9329
5354	CCC(=O)OCC[C@@]1(C)CC[C@H]2C(=CC[C@@H]3[C@]2(C)C[C@@H](O)C[C@]3(C)C(=O)O)C1	-11.2953
5355	CCCCC[C@H]1OC(=O)CC[C@H](O)/C=C/[C@H](O)[C@@H]1O	-10.8220
5356	COC1=CC(C2=CC=C(O)C=C2)=C(OC)C(OC)=C1C1=CC=C(O)C=C1	-9.3343
5357	CC(=O)OC/C1=C\CC(C)(C)C(=O)[C@@H](C)C/C(C)=C/C(=O)C1	-10.6111
5358	CCCCCC[C@H](O)[C@@H]1C[C@@H](OC)C2=C(CC[C@@H](O)C2=O)O1	-10.9002
5359	CCCCCCCCCCCCCCC(O)C(O)C(N)CO[C@H]1OC(CO)[C@@H](O)C(O)[C@@H]1O	-10.6481
5360	CC1=CC(C(=O)CCCCCO)=C(O)C=C1O[C@@H]1O[C@H](CO)[C@H](O)[C@@H]1O	-11.3069
5361	CC[C@H](C)/C=C/C1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@@](C)(O)[C@@H](CC(=O)[C@H](C)[C@@H](C)O)C2=CO1	-10.4351
5362	COC1=CC(O)=C2C(=O)C(CO)=C(CO)OC2=C1	-10.7789
5363	COC1C=C[C@]2(CO)[C@H]3CC(C)(C)[C@]3(O)[C@@H](OC(C)=O)C[C@]12C	-11.6836
5364	COC1=CC(C2=CC=C(O)C=C2)=C(OC)C(O)=C1C1=CC=C2OC(C)(C)C=CC2=C1	-9.4898
5365	CC(=O)C1=CC=C(O[C@@H]2O[C@H](CO)[C@H](O)[C@@H]2O)C(C)=C1O	-10.9589
5366	C[C@H](O)/C=C/C(=C/C=C/[C@@H](C)O)CO	-10.1823

5367	COC1=CC(C2=CC=C3OC(C)(C)C=CC3=C2)=C(OC)C(O)=C1C1=CC=C(O)C=C1	-9.4857
5368	CC1(C)C[C@H]2C=C(CO)[C@]3(O)[C@@H](O)C[C@@]3(C)[C@H]2[C@H]1O	-11.2879
5369	C/C=C\C(=C/C=C/[C@H](O)[C@@H](C)O)C(=O)O	-10.6070
5370	C/C(=C\CC[C@@]1(C)O[C@H]2CC[C@@H]1[C@H]2C)CO	-10.5161
5371	CCCCCC[C@H]1O[C@]23OC1CC[C@H]2[C@@H](O)CC[C@H]3O	-10.9920
5372	C[C@@H](O)[C@H]1C=C[C@@H](O)[C@@H](/C=C\C(N)=O)O1	-10.2270
5373	CC(C)(O)[C@@H](O)C1=CC([C@H]2CC=C(C(=O)O)CC2)=CO1	-10.9025
5374	CSC12CC3=CC=CC(O)=C3N1C(=O)[C@@](CO)(SC)N(C)C2=O	-10.2808
5375	CCCCCC[C@H](O)[C@@H]1C[C@@H](OCCC2=CC=C(O)C=C2)C2=C(O1)[C@H](O)CCC2=O	-10.8964
5376	COC1=CC=C(C2=C(OC)C=C(C3=CC=C(O)C=C3)C(OC)=C2O)C=C1CC=C(C)C	-9.4639
5377	COC1=CC=C(C2=CC(OC)=C(C3=CC=C(O)C=C3)C(O)=C2OC)C=C1	-9.7470
5378	CC(C)=C[C@H]1C[C@@]2(C)[C@@H]3CC[C@H]4CC5(O)C6=CC=CC=C6N5C(=O)[C@]4(C)[C@@]3(C)CC[C@]2(C)O1	-10.2686
5379	O=C(O)CC1=CC=CC=C1OC1O[C@@H](O)C(O)[C@H](O)[C@H]1O	-10.1333
5380	COC1=CC=C(C2=C(OC)C=C(C3=CC=C(O)C=C3)C(OC)=C2O)C=C1	-9.7182
5381	CC[C@H]1[C@@H](O)CC[C@@H](O)[C@]1(O)OC[C@@H](O)CCCC[C@H](C)O	-11.0187
5382	CCC[C@H]1OC(=O)/C=C\C=C\[C@H](O)[C@@H](O)C1[C@H](C)COC(=O)C1=CC=C(O)C=C1	-10.5648
5383	CC1=C(O)C=C2C(=O)[C@]3(CCCO3)OCC2=C1O	-10.9528
5384	C=C1[C@@H](C)[C@H]2[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@]23[C@H](OC(C)=O)[C@H]2O[C@@H]2[C@@](C)(O)C(=O)[C@@H](C)C/C=C/[C@H]3[C@@H]1O	-9.1276
5385	CC(C)CCCCCCCCCC[C@@H](O)C(=O)O	-10.8937
5386	CS[C@@H]1C(=O)N2C3C(=CC=C[C@@H]3O)C[C@@]2(SC)C(=O)N1C	-10.6654
5387	CC[C@H](C)/C=C/C1=CC2=C(Cl)C(=O)[C@@](C)(O)[C@@H](CC(=O)[C@@H](C)[C@H](C)O)C2=CO1	-10.7459
5388	COC1=CC(O)=CC2=C1C(=O)OC(C)=C2	-10.8470
5389	CC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)OC[C@@H](O)[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)CO	-10.5538
5390	C[C@@]1(CO)C[C@H]2CC(C(=O)O)=C3CC[C@@]3(C)[C@H]2C1	-11.0392

5391	CCC(=O)CCC[C@H](O)[C@@H]1CCC2=C(CC[C@@H](O)C2=O)O1	-10.9279
5392	CC1(C)C[C@@H]2[C@H](C1)[C@@]1(C)C[C@@]3(O)OC[C@](O)([C@@H]13)[C@H]2O	-11.4160
5393	O=C1CCC2(OC3=CC=CC4=CC=CC(=C34)O2)[C@H]2C1=CCC[C@H]2O	-10.0817
5394	CC[C@@H](O)CCC[C@H](O)[C@@H]1CCC2=C(O1)[C@H](O)CCC2=O	-11.1841
5395	C=C1[C@H](O)C[C@@H]2[C@](C)(CCC[C@]2(C)C(=O)O)[C@H]1CC(=O)O	-11.3315
5396	C[C@H]1CC[C@]2(C)C3[C@@]1(C)OC(C)(C)[C@]3(C)CC[C@@]2(C)O	-10.9381
5397	CC[C@H](C)/C=C(C)/C=C/C1=CC2=C(CO1)C(=O)[C@@]1(C)OC(=O)[C@@H](C(C)=O)[C@H]1C2	-10.3349
5398	COC1=C(O)C=C2C[C@@H](C)OC(=O)C2=C1O	-10.5288
5399	CO[C@@H]1CCC2(OC3=CC=CC4=CC=CC(=C34)O2)C2=CC=CC(O)=C21	-9.3713
5400	CCCCC[C@@H]1CCCCC[C@@H](O)C[C@H](O)[C@H](O)/C=C/C(=O)O1	-11.0590
5401	CC(=O)O[C@H]1[C@H]2O[C@]23CCC3O[C@@H]1C(C)(C)OCN=C(C)C	-10.8976
5402	C=C(C)O[C@@H]1[C@@H]2COC(/C=C/C(C)=C/[C@@H](C)CCO)=CC2=C(Cl)C(=O)[C@]1(C)O	-10.0618
5403	CC(C)=NCOC(C)(C)[C@H]1OC2CC[C@]23O[C@@H]3[C@@H]1O	-11.1128
5404	C/C=C/C(=O)C[C@@H]1[C@H](OC(=O)/C=C/C)[C@H](O)C(=O)/C=C\C(=O)[C@@H]1O	-10.5935
5405	CC(C)=N[C@H]1O[C@H]2[C@H]3O[C@]34CCC4O[C@@H]2C(C)(C)O1	-10.8878
5406	CC1=CC=CC2=C1C(=O)[C@H](O)C[C@H]2O	-10.3226
5407	C/C(=C\C=C\[C@@H]1[C@H]2[C@H](C)[C@@H](O)[C@@](C)(O)C[C@@H]2C=C[C@@H]1C)C(=O)O	-11.1356
5408	COC(=O)C1([C@@H]2CCC(=O)O2)CC(=O)C2=C(C=C(C)C(C3=CC=C(O)C4=C3O[C@]3(C(=O)OC)C(=C(O)C[C@H](C)[C@@H]3OC(C)=O)C4=O)=C2O)O1	-10.1607
5409	CC[C@@H](C)C1=CC(O)=C(C)C(=O)O1	-10.8495
5410	CC1=CC(=O)[C@H]2C[C@@H]1[C@]2(C)CCC(O)C(C)(C)O	-11.6477
5411	COC1=CC(O)=C2C(=O)C[C@@H](CO)[C@H](O)C2=C1	-10.8061
5412	C[C@@H]1OC=C2C(=O)OCC=C2[C@H]1CO	-10.2744
5413	C=CC(C)(C)C1=C2C[C@@H]3[C@H](C[C@H](C)CN3C)C3=C2C(=CC=C3)N1	-8.5578
5414	O=C1C[C@@H](O)[C@H](O)C2=CC(O)=CC(O)=C12	-10.3192
5415	COC1=CC(OC)=C2C(=O)C3=C(C[C@H](C)O[C@H]3OC)C(=O)C2=C1O	-11.1430

5416	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3(CO)OC3(CO)[C@@H](O)C2=C1	-10.5266
5417	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CCCC2C3=CC(=O)O[C@@]3(O)CC[C@@]21C	-11.0149
5418	COC1=CC(OC)=C2C(=O)C3=C(C[C@H](C)OC3)C(=O)C2=C1O	-11.3130
5419	CCOC(=O)C1=CC(=O)C(O)=CO1	-10.4882
5420	C[C@@H]1OC=C2C(=O)OCC=C2[C@@H]1CO	-10.2824
5421	CC1=CC[C@]2(C)C(=O)C(O)=C([C@H](C)CO[C@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)[C@H]2C/C=C(\C)[C@@H](O)CC/C(C)=C/CC1	-10.5818
5422	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3(CO)OC3(CO)[C@H](O)C2=C1	-10.5266
5423	CC(=O)O[C@@H]1C[C@@]2(C)O[C@@H]3C=C(C)CC[C@]3(C)[C@]1(C)[C@@]21CO1	-11.4088

Table S3: Binding affinities of selected compounds with ALK protein from docking simulations.

ID	SMILES	ΔG_{dock}
1	CCCCCCCC[C@@H](C)[C@@H]1CC(=O)NCC(=O)N[C@@H](C)C(=O)N[C@H](C)C(=O)N[C@@H](CCC(N)=O)C(=O)N[C@H](CC2=CC=C(O)C=C2)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)CC)C(=O)O1	-7.347
2	COC1C=C[C@]2(CO)[C@H]3CC(C)(C)[C@]3(O)[C@@H](OC(C)=O)C[C@]12C	-5.604
3	CC1=CC(=O)[C@H]2C[C@@H]1[C@]2(C)CCC(O)C(C)(C)O	-5.688
4	CC1=C2[C@H](O)C[C@]2(C)[C@H]2C[C@H]3C(=O)C[C@H](C)C2(CC1)C3(C)C	-8.052
5	CC1=C[C@@H]2C[C@@]3(C)OC4C[C@H]3[C@@](O)(C4)[C@]23C(=O)N[C@@H](CC(C)C)[C@@H]3[C@@H]1C	-7.047
6	CC(C)=C[C@H]1C[C@H](C)[C@]2(CC[C@]3(C)C[C@H]4[C@H](C(=O)C[C@@]4(C)O)/C(C=O)=C\C[C@H]32)O1	-7.456
7	C=C[C@]1(C)C=C2C(=O)C[C@H]3C(C)(C)CC[C@@H](O)[C@]3(CO)[C@@]2(O)CC1	-6.161
8	CC(C)=CCC[C@](C)(O)[C@H]1CC[C@]2(C)[C@@H]1[C@H](O)C[C@@H]1[C@@]3(C)CC[C@H](O[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O)C(C)(C)[C@@H]3CC[C@]12C	-6.272
9	CC1=C[C@@H]2C=C(C)[C@H]3C[C@H](O)C[C@@]3(O)[C@]23C(=O)N[C@@H](CC(C)C)[C@@H]3[C@@H]1C	-7.244
10	CS[C@@]12C[C@@H]3C(=O)CC[C@H](O)[C@@H]3N1C(=O)[C@]1(SC)C[C@H]3C(=O)CC[C@H](O)[C@H]3N1C2=O	-7.43
11	CC1=C2C(=O)C[C@@]2(C)[C@@H]2C[C@]3(O)CC[C@@H](C)[C@@]2(CC1)C3(C)C	-8.162
12	CC1=CC(O)=C2C(=O)[C@H]3CC[C@H](O)C[C@@H]3[C@@H](O)C2=C1O	-7.783
13	COC1=CC2=C(C(O)=C1CS(=O)(=O)CCNC(C)=O)C(=O)C=C(C)O2	-6.631
14	CC1C(=O)CC(O)C(C)(C)[C@]12CC=C(CO)CC2	-6.632

15	C[C@@H]1CC[C@H]2[C@@H](C=C[C@@](C)(O)[C@]2(C)C(=O)CCO)[C@H]1O	-5.753
16	CC(C)=CCC[C@](C)(O)[C@H]1CC[C@]2(C)[C@@H]1[C@H](O)C[C@@H]1[C@@]3(C)CC[C@H](O)C(C)(C)[C@@H]3[C@@H](O[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C[C@]12C	-6.828
17	CC1(C)C[C@H]2C=C(CO)[C@]3(O)[C@H](O)C[C@]3(C)[C@H]2C1	-6.129
18	C[C@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H](O)CC[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C=C3C(=O)N(CCO)CC3=C1O2	-7.09
19	C[C@@H]1O[C@@H](O[C@H]2[C@H](O[C@H]3CC[C@@]4(C)[C@@H](CC[C@]5(C)[C@@H]4CC=C4C6CC(C)(C)CC[C@]6(C(=O)O)CC[C@]45C)[C@]3(C)CO)OC[C@H](O)[C@@H]2O)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O	-7.585
20	C[C@@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H](O)CC[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O[C@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C3C(=O)NCC3=C1O2	-8.04
21	C[C@@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H](O)CC[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C=C3CN(CCO)C(=O)C3=C1O2	-7.362
22	CC1(C)C[C@@H]2[C@H](C1)[C@@]1(C)C[C@@]3(O)OC[C@](O)([C@@H]13)[C@H]2O	-6.753
23	CS[C@@]12C[C@H]3C(=O)CC[C@H](O)[C@H]3N1C(=O)[C@]1(SC)C[C@H]3C(=O)CC[C@H](O)[C@H]3N1C2=O	-6.783
24	C[C@@H]1CC[C@H]2[C@](C)(CO)[C@H](O)CC[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C=C3C(=O)NCC3=C1O2	-6.735
25	CC(=O)O[C@@H]1C[C@@]2(C)O[C@@H]3C=C(C)CC[C@]3(C)[C@]1(C)[C@@]21CO1	-6.105
26	CC1(C)[C@@H](Cl)CC[C@]2(C)[C@@H](C(=O)O)[C@](C)(O)C[C@@H]3O[C@]312	-6.512
27	CS[C@@]12C[C@@H]3C(=O)CC[C@H](O)[C@@H]3N1C(=O)[C@]1(SC)C[C@H]3C(=O)C=C[C@@H](O)[C@@H]3N1C2=O	-6.861
28	CC1(C)[C@@H](O)CC[C@]2(C)[C@H]3CC4=C(O)C=C5C(=O)OCC5=C4O[C@@]3(C)CC[C@@H]12	-8.807
29	CC(C)[C@H]1CC[C@]2(C)C(=O)CC[C@](C)(O)[C@H]2[C@@H]1O	-6.445
30	CC1=C(CO)[C@@]2(C)C[C@@H](O)CC(C)(C)[C@@H]2CC1=O	-6.03
31	C[C@H]1[C@H](O)CC(=O)[C@]2(C)CC[C@H]3[C@@H]4[C@@](C)(CO)CC[C@]4(C)C[C@]132	-6.689
32	CCCCCC[C@@H]1O[C@]23CC[C@H](O)[C@@]4(O)OC5=C(C(=O)[C@H](O)CC5)[C@H](C[C@@H]1O2)[C@H]34	-7.239
33	C[C@@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H](O)[C@H](O)C[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C=C3C(=O)NCC3=C1O2	-7.122
34	C=C1C[C@H]2C=C(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@]32[C@]2(O)C[C@@H](O)C[C@H]12	-6.705
35	COC(=O)C1=C(O)C=C(OC(=O)C2=C(C)C(O)=C(C)C(OC)=C2C)C(C)=C1C	-7.29
36	C[C@H]1[C@H](O)CC(=O)[C@]2(C)CC[C@H]3[C@@H]4C(C)(C)C[C@@H](O)[C@]4(C)C[C@]132	-7.126
37	CC1=CC(O)=C2C[C@@H]3[C@@]4(C)CCC(=O)C(C)(C)[C@@H]4CC[C@]3(C)OC2=C1C=O	-7.806
38	CC1=C2C(=O)C[C@@]2(C)[C@@H]2C[C@@H]3[C@@H](O)C[C@@H](C)[C@@]2(CC1)C3(C)C	-7.804

39	CC1=C[C@H]2O[C@@H]3C[C@@H](OC(=O)/C=C\C=C\[C@H](O)[C@@H](C)O)[C@](C)([C@@]2(CO)CC1)[C@]31CO1	-6.659
40	COC(=O)CC1=C(C)C(O)=C(C)C(O)=C1CC(=O)CC1=C(O)C(C)=C(O)C(C)=C1CC(=O)OC	-6.868
41	C[C@]12CCC(=O)C[C@H]1CC[C@@H]1[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](C3=CC(=O)OC3)[C@@H](O)C[C@]12O	-6.925
42	CC1=C[C@@H]2[C@@H]3[C@H](CC(=O)[C@]24C(=O)N[C@@H](CC(C)C)[C@@H]4[C@@H]1C)[C@H]1C[C@@H](CO)C[C@]3(C)O1	-7.572
43	C=C[C@]1(C)CC[C@]2(C)[C@H](C[C@@H](O)C3[C@]4(C)CCC[C@@]32OC4=O)C1	-7.4
44	COC1=CC(O)=C([C@@H](CO)[C@H](O)CO)C2=C1C(=O)C1=C(O)C=CC=C1O2	-6.694
45	CC(C)=CCC[C@](C)(O)[C@H]1CC[C@]2(C)[C@@H]1[C@H](O)C[C@@H]1[C@@]3(C)CC[C@H](O[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O)C(C)(C)[C@@H]3CC[C@]12C	-6.902
46	COC1=CC(O)=C2C(=O)[C@H]3C[C@@H](O)[C@@](C)(O)C[C@@H]3[C@@H](O)C2=C1O	-7.063
47	C[C@@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H](O)[C@H](O)C[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C=C3C(=O)N(CCO)CC3=C1O2	-6.997
48	C=C1[C@H](O)C[C@@H]2[C@](C)(CCC[C@]2(C)C(=O)O)[C@H]1CC(=O)O	-6.541
49	CC1(C)C(=O)CC[C@]2(C)[C@H]3CC4=C(O)C=C5C(=O)OCC5=C4O[C@@]3(C)CC[C@@H]12	-8.233
50	C[C@@H]1C(=O)CCC(C)(C)[C@]12CC=C(CO)[C@@H](O)C2	-6.517
51	COC1=C2CN3CC[C@@]4(C2=CC2=C1OCO2)[C@H]1O[C@H]1[C@H](O)C[C@@H]34	-6.977
52	C=C[C@]1(C)C=C2C(=O)C[C@H]3C(C)(C)[C@@H](O)C[C@@H](O)[C@]3(C)[C@@]2(O)CC1	-6.613
53	CC(C)[C@H]1CC[C@]2(C)[C@@H](O)[C@@H]3[C@@H](C)CC[C@@]45[C@@H](CC[C@@H]4C)[C@]5(C(=O)O)[C@@]3(O)C[C@@H]12	-7.386
54	CO[C@H]1CCC[C@@H](O)C=C[C@H]2[C@@H]3O[C@@H]3[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@]32C(=O)C1	-7.139
55	CC1=C(CO)[C@@]2(C)CC[C@@H](O)C(C)(C)[C@@H]2CC1=O	-6.164
56	CCCCC(CC)C(CCCC)OC(=O)C1=CC=CC=C1C(=O)O	-5.411
57	COC1=CC(OC)=C2C(=O)C3=C(C[C@H](C)OC3)C(=O)C2=C1O	-7.299
58	C=C1C[C@]23C[C@H]1CC[C@H]2[C@@]12CC[C@H](O)[C@@](C)(C(=O)O1)[C@H]2[C@@H]3C(=O)O	-7.452
59	CC1=CC(C(=O)CCCCCO)=C(O)C=C1O[C@@H]1O[C@H](CO)[C@H](O)[C@@H]1O	-5.901
60	C[C@@H]1CC(=O)C2=C(O1)O[C@]1(C)CC[C@H]3C(C)(C)[C@H](O)C[C@H](O)[C@]3(C)[C@H]1C2	-7.19
61	COC1=CC(O)=C2C(=C1)C(=O)[C@H]1C[C@](C)(O)[C@H](O)C[C@@H]1[C@H]2O	-7.179
62	C[C@]12CC[C@@H](O)C[C@H]1C[C@H](O)[C@@H]1[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](C3=CC(=O)OC3)[C@@H](O)C[C@]12O	-6.866
63	COC1=CC(O)=C2C(=O)[C@@H](C[C@@H](O)C(C)(C)O)C[C@@H](O)C2=C1O	-7.039
64	COC(=O)C1=CC(OC)=C(O)C2=C1C(=O)C(C)=C(C[C@H](C)O)O2	-6.315
65	COC(=O)C1=CC(OC)=C(O)C2=C1C(=O)C(C)=C(C[C@@H](C)O)O2	-6.595

66	CCC(=O)OCC[C@@]1(C)CC[C@H]2C(=CC[C@@H]3[C@]2(C)C[C@@H](O)C[C@]3(C)C(=O)O)C1	-6.697
67	C[C@]12CCC(=O)C[C@H]1CC[C@@H]1[C@@H]2C[C@@H](O)[C@]2(C)[C@@H](C3=CC(=O)OC3)[C@@H](O)C[C@]12O	-8.056
68	CC(=O)[C@]1(O)C[C@H](O)C(C)(C)[C@]12CC=C(CO)CC2	-5.669
69	CC1(C)C[C@H]2C=C(CO)[C@]3(O)[C@@H](O)C[C@@]3(C)[C@H]2[C@H]1O	-5.84
70	CC(=O)O[C@@H]1C[C@H]2O[C@@H]3C=C(CO)CC[C@]3(C)[C@]1(C)[C@]21CO1	-6.333
71	CCCCCCCCCC[C@@H](C)[C@@H]1CC(=O)N[C@H](CO)C(=O)N[C@@H](C)C(=O)N[C@H](C)C(=O)N[C@@H](CCC(N)=O)C(=O)N[C@H](CC2=CC=C(O)C=C2)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)CC)C(=O)O1	-6.332
72	C/C=C/C(O)[C@](C)(O)C1CC[C@@]2(O)C3=CC(=O)C4CC(=CC[C@H](O)C4)C3CC[C@]12C	-7.642
73	CO[C@]12OCCN3C(=O)C4=C5C3=C1[C@](C)(CC[C@]5(C)CCC4=O)[C@@H](C(C)C)[C@H]2O	-7.066
74	CC1=C(CO)[C@@]2(C)CCC[C@@](C)(CO)[C@@H]2CC1=O	-5.866
75	CC1(C)[C@H](O)CC[C@]2(C)[C@H]3C(=O)OCC3=CC[C@@H]12	-6.607
76	COC(=O)C1=CC(O)=CC2=C1C(=O)C1=C(C[C@H](C)O[C@H]1OC)O2	-6.585
77	C=C[C@]1(C)C=C2[C@](O)(CC1)[C@]13CO[C@@]2(O)C[C@H]1C(C)(C)CC[C@H]3O	-7.022
78	CC(C)(O)[C@@H]1CC[C@@]2(C)OC3=C(C[C@@H]12)C(=O)[C@]1(O)CO[C@H]3C1	-6.771
79	C[C@]12CC[C@@H](O)C[C@H]1CC[C@@H]1[C@@H]2C[C@@H](O)[C@]2(C)[C@@H](C3=CC(=O)OC3)[C@@H](O)C[C@]12O	-6.521
80	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC3=C(C2=C1)[C@@](C)(O)C[C@@H](OC)[C@@]31C[C@@H](O)C(=O)O1	-7.888
81	C[C@@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@@H](O)[C@H](O)C[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C=C3C(=O)NCC3=C1O2	-7.676
82	C[C@@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H](O)[C@@H](O)C[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C=C3C(=O)NCC3=C1O2	-7.163
83	C[C@@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H](O)CC[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C=C3C(=O)N(CCO)CC3=C1O2	-7.282
84	C[C@@H]1CC(=O)[C@H]2C[C@H]3[C@]4(C)CC[C@@H]4[C@@](C)(O)CC[C@@]13C2(C)C	-6.557
85	CC(C)=CCC[C@@H](C)[C@H]1C[C@H](O)[C@@]2(C)C3=C(C[C@@H](O)[C@]12C)[C@@]1(C)CCC(=O)C(C)(C)[C@@H]1CC3	-7.865
86	CC1(C)CC[C@H](O)[C@](C)(O)[C@@]12CC=C(C=O)CC2	-5.882
87	C=C(CC[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2C3=C([C@H](O)C[C@]12C)[C@@]1(C)CCC(=O)C[C@@H]1CC3=O)C(C)C	-8.166
88	CC(=O)O[C@H]1C[C@]2(O)[C@@H]3CC[C@@H]4C[C@@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]2(C)[C@H]1C1=COC(=O)C=C1	-6.776
89	CO[C@@H]1/C=C(/C)C[C@H](O)[C@]2(O)[C@H](C[C@]2(C)COC(C)=O)/C(COC(C)=O)=C\1	-6.007
90	CC(C)C(C)/C=C/[C@@H](C)C1CCC2C3CC(=O)[C@@]45C[C@@H](O)C[C@@H](C)C4[C@]3(CC[C@@]21C)O5	-7.734
91	C[C@@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H](O)[C@H](O)C[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C=C3CNC(=O)C3=C1O2	-7.5
92	C/C1=C/C(=O)/C=C(/CO)[C@H]2C[C@@](C)(CO)[C@@H]2CC1	-6.617

93	CC1=C[C@H]2C=C(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@@]23OC(=O)CCC(=O)[C@H](O)CC1	-6.919
94	COC(=O)C1=CC(OC)=CC2=C1C(=O)C(C)=C(C[C@H](C)O)O2	-6.118
95	C/C(=C\C=C\[C@H]1[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]2C[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H](C)[C@H]12)C(=O)O	-6.488
96	CCC[C@@H]1NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@H](CC2=CC=CC=C2)NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC1=O	-7.187
97	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2C3=C(CC[C@]12C)[C@@]1(C)CC[C@H](O)C[C@@]12O[C@H]2[C@H]3O	-7.887
98	CCCCCCCCCC1=CC(OC(=O)C2=C(CCCCCCCCCC)C=C(O)C=C2O[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]2O)=CC(O)=C1C(=O)O	-6.144
99	CC1=CC(O)=C2C(=O)[C@@]3(O)[C@@H](O)CC[C@H](O)[C@]3(C)OC2=C1	-7.084
100	O=C(O)C1CCC[C@@H]2N[C@H]3C(CCC4C5C(O)C(C[C@H]6N[C@@H]7CCCC(O)C7NC56)C43)NC12	-9.182
101	CCC[C@@H]1C[C@@H](C(=O)N[C@@H]([C@H]2O[C@H](SC)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]2O)[C@H](C)Cl)N(C)C1	-5.609
102	CCCCCC1=C(O)C=CC(O[C@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]2O)=C1CO	-5.626
103	COC1=CC(O)=C2C(=O)[C@H]3C[C@@H](O)[C@@](C)(O)C[C@@H]3[C@@H](O)C2=C1	-7.26
104	CC1(C)CC[C@@H](O)[C@](C)(O)[C@@]12CC=C(C=O)CC2	-6.095
105	CC(C)=CCC[C@](C)(O[C@@H]1O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]1O)[C@H]1CC[C@]2(C)[C@@H]1[C@H](O)C[C@@H]1[C@@]3(C)CC[C@H](O[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O)C(C)(C)[C@@H]3CC[C@]12C	-7.701
106	C=C[C@@]1(C)CC[C@]2(O)C3=C(C(=O)[C@H](O)[C@]2(O)C1)C(C)(C)CC[C@H]3O	-6.605
107	CC(C)=CCCC(C)(O)C1=CC[C@@]2(C)[C@H]1CC[C@H]1[C@@]3(C)CC[C@H](O)[C@](C)(C(=O)O)[C@@H]3CC[C@@]12C	-7.668
108	CC(=O)O[C@@H]1[C@@H]2[C@@H](C)CC[C@@]34[C@@H](CC[C@@H]3C)[C@]4(C(=O)O)[C@@]2(O)C[C@H]2[C@@H](C(C)C)CC[C@]12C	-7.342
109	COC1=CC(=O)C=C(/C(C)=C/[C@@H](C)C[C@H](C)CCO)O1	-6.492
110	CC(C)=CCC[C@](C)(O[C@@H]1O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]1O)[C@H]1CC[C@]2(C)[C@@H]1[C@H](O)C[C@@H]1[C@@]3(C)CC[C@H](O)C(C)(C)[C@@H]3[C@@H](O)C[C@]12C	-7.203
111	CC1(C)C[C@@]23[C@@H]4CC(=O)[C@@H]2COC(=O)[C@]3(O)CC[C@H]41	-6.906
112	C[C@@H]1CC(=O)C2=C(O1)O[C@]1(C)CC[C@H]3C(C)(C)[C@H](O)CC(=O)[C@]3(C)[C@H]1C2	-7.609
113	C=C(CO)[C@@]1(O)C[C@@]2(C)[C@H](CCC[C@@H]2C)C[C@H]1O	-5.711
114	CO[C@H]1[C@@H]2[C@@H](O)O[C@]3([C@H](OC(C)=O)C/C(C)=C\[C@@H]1OC)[C@H]2CC3(C)C	-6.821
115	CC1(C)OC2=C(C[C@H]3[C@H]1CC[C@@]3(C)O)C(=O)[C@]1(O)CO[C@H]2C1	-7.311
116	C[C@@H]1C=CC(=O)[C@@]2(C)C[C@@H](O)[C@@H]3[C@H]4C(C)(C)CC[C@@]4(C)C[C@]312	-7.052

117	CC1=C[C@H]2C[C@@H](C)C[C@@H](C)[C@@H]2[C@@](C)(C(=O)C CO)[C@H]1C(=O)O	-6.551
118	C[C@@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@@H](O)CC[C@]2(C)[C@@]12CC1=C (O)C=C3CNC(=O)C3=C1O2	-7.685
119	C[C@@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H](O)CC[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C=C3CNC(=O)C3=C1O2	-7.12
120	COC1=C(C)C(=O)OC([C@@](C)(O)/C=C(\C)[C@H](C)O)=C1	-6.267
121	CO[C@]12OC[C@@H](C)[C@H]1C[C@]1(C)[C@@H](C)CC[C@H](O)[C @@]13O[C@@H]23	-6.326
122	C=C(CCCC(C)(C)O)C1=CC=C(C(=O)O)C=C1O	-6.485
123	COC(=O)C1=CC(OC)=C(O)C2=C1C(=O)C1=C(CC(C)(O)OC1)O2	-6.29
124	C[C@H](CC[C@@H](O)C(C)(C)O)C1=CC[C@]2(C)C[C@H]3[C@@H](C O)C[C@@]4(O)OC(=O)/C(=C/C[C@@H]12)[C@@H]34	-7.61
125	C[C@H]1C(=O)CCC(C)(C)[C@]12CC=C(CO)[C@@H](O)C2	-5.707
126	CC(=O)O[C@@H]1C2=C3C[C@@H]4[C@@]5(C)CCC(=O)C(C)(C)[C@ @H]5C[C@H](O)[C@]4(C)OC3=CC(O)=C2C(=O)O[C@@H]1C	-8.141
127	CC[C@H](CO)C[C@H](C)C=C(C)C1=CC(=O)C=C(OC)O1	-5.981
128	CC1=C2[C@](C)(CC1=O)[C@@H](O)[C@H]1CC(C)(C)C[C@@]21O	-6.638
129	CC1=C[C@H]2C=C(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@ @]23OC(=O)/C=C\[C@@H](O)C[C@@H](CO)C1	-7.107
130	CC1=C[C@]23O[C@@H]4C[C@@H](O)[C@](C)([C@@]2(C)CC1)[C@]4 (CO)O3	-6.144
131	CC1=C[C@H]2C=C(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@ @]23C(=O)C[C@H](O)[C@@H](O)C[C@@H](CO)C1	-7.249
132	COC1=CC=C(C=C2NC(=O)[C@@]3(C[C@]4(O)[C@@H](C=C[C@@H](O)[C@@H]4O)S3)NC2=O)C(O)=C1OC	-6.837
133	COC1=CC=C(C=C2NC(=O)[C@]3(C[C@]4(O)[C@H](C=C[C@@H](O)[C @@H]4O)S3)NC2=O)C(O)=C1OC	-6.985
134	C[C@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H](O)CC[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C =C3C(=O)NCC3=C1O2	-8.495
135	C[C@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H](O)[C@H](O)C[C@]2(C)[C@@]12CC 1=C(O)C=C3CNC(=O)C3=C1O2	-7.371
136	CC(=O)O[C@@H]1C[C@H]2O[C@@H]3C[C@@H](CO)CC[C@]3(C)[C @]1(C)[C@]21CO1	-5.742
137	C[C@@H]1CC[C@H]2C(C)(C)C(=O)CC[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C= C3C(=O)NCC3=C1O2	-6.899
138	CC(C)[C@@]1(O)[C@H](O)C[C@@]2(C)CC(=O)[C@@H](C)CC[C@@H]21	-6.442
139	CO[C@H]1C2O[C@@]3(C)C[C@H](OC(C)=O)[C@]45O[C@@H](C2[C@ H]4CC5(C)C)[C@@H]13	-6.294
140	CC1=C2C(=O)C[C@]2(C)[C@@H]2CC(C)(C)C[C@H]2[C@@H]1O	-7.358
141	CC1(C)CCC[C@@]2(C)C1=CC[C@@](C)(O)[C@@H]2C(=O)O	-6.45
142	CCC1(O)CC[C@@]2(C)[C@@H](CC[C@@H]3[C@@H]2CC[C@]2(C)C(=O)CC[C@@H]32)C1	-7.938
143	CC1=C[C@H]2OC3CC(=O)[C@@](C)(C34CO4)[C@@]2(C)CC1	-6.74
144	CC1=CC2=C(C(=O)C[C@@H](O)[C@@H]2O)C(O)=C1C	-6.261
145	C[C@]1(CCO)CC[C@H]2C(=CC[C@@H]3[C@]2(C)C[C@@H](O)C[C@] 3(C)C(=O)O)C1	-6.586

146	CC(=O)OC1[C@H](O)C[C@@]2(C)C(CC[C@@H](C)C23CC2=C(O)C=C4C(=O)NCC4=C2O3)C1(C)C	-7.425
147	CC[C@H](C)[C@@H]1NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC1=O	-6.131
148	CCCCCCCCCC[C@@H](C)[C@@H]1CC(=O)N[C@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](C)C(=O)N[C@H](C)C(=O)N[C@@H](CCC(N)=O)C(=O)N[C@H](CC2=CC=C(O)C=C2)C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)O1	-7.189
149	CC(=CCCC(C)(C)O)C1=CC=C(C(=O)O)C=C1O	-6.167
150	CO[C@@H]1C2=C(C)C[C@H](OC(C)=O)[C@]34O[C@H]2[C@H]([C@H]1O)[C@H]3CC4(C)C	-6.022
151	CC[C@@H](O)CCC[C@H](O)[C@@H]1CCC2=C(O1)[C@H](O)CCC2=O	-5.899
152	C[C@]1(CC(=O)O)CC[C@H]2C(=CC[C@H]3[C@](O)(CO)CCC[C@]23C)C1	-6.743
153	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC3=C(C2=C1)[C@@](C)(O)C[C@@H](OC)[C@@H]3O	-7.227
154	CCCCCCCCCC[C@@H](C)[C@@H]1CC(=O)N[C@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](C)C(=O)N[C@H](C)C(=O)N[C@@H](CCC(N)=O)C(=O)N[C@H](CC2=CC=C(O)C=C2)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)CC)C(O)O1	-5.473
155	CC(C)[C@H]1CC[C@@]2(C)CC[C@]3(CO)CC4=C(C(=O)O)CC[C@H]4[C@]4(C)C[C@@H]4[C@H]3[C@H]12	-7.863
156	CCCCCCCCCCCCCCC/C=C/C(=O)N(O)CCCC[C@H](NC(=O)[C@@H]1COC(C2=CC=CC=C2O)=N1)C(=O)O[C@@H](C)CC(=O)N[C@H]1CCCCN(O)C1=O	-5.67
157	C[C@]1(O)CC[C@H]2[C@@H](C=C[C@@](C)(O)[C@]2(C)C(=O)CCO)C1	-6.059
158	CC(C)(O)CCC[C@](C)(O)C1=CC=C(C(=O)O)C=C1O	-5.588
159	CC1=CC[C@H]2[C@@](C)(CCC[C@@]2(C)C(=O)O)[C@@H]1CO	-6.329
160	CC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)O[C@@H]1CC2=C(CO[C@@](O)(CCCO)C2)C(=O)[C@]1(C)O	-6.803
161	CC1(C)CC(=O)C[C@]2(C)[C@@H](CO)[C@](C)(O)CC[C@@H]12	-6.136
162	CC(=O)O[C@H]1C[C@]2(C)C(O)C=C[C@]2(CO)[C@H]2CC(C)(C)[C@]12O	-5.881
163	C=C1[C@H](O)[C@@H](O)CC(C)(C)[C@]12CC=C(CO)CC2	-5.774
164	COC1=CC(OC)=C2C(=O)C3=C(C[C@H](C)O[C@H]3O)C(=O)C2=C1	-7.01
165	COC1=CC(O)=C2C(=O)C(C)=C(C[C@H](C)O)C(=O)C2=C1	-6.937
166	CC[C@H](C)[C@@H]1NC(=O)[C@@H](CC(C)C)NC(=O)[C@@H](C(C)C)NC(=O)[C@H]2CSSC[C@@H](NC1=O)C(=O)N2	-7.43
167	C[C@@H]1C=CC(=O)[C@@]2(C)CC[C@@H]3[C@H]4C(C)(C)[C@H](O)C[C@@]4(C)C[C@@]132	-7.685
168	CC1=CC2=C(C)C(O)=C3C(=O)CC[C@@H](O)C3=C2O1	-7.293
169	CC1=C(O)C=C2O[C@H]([C@@]3([C@@H]4CC=C5CCC[C@H](C)[C@@]5(C)C4)CO3)OC(=O)C2=C1C	-8.008
170	CC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)O[C@@H]1C[C@]2(C)C3C[C@@](C)(CO)C[C@H]3C=C(CO)[C@]12O	-6.592
171	CC1(C)[C@@H](Cl)CC[C@]2(C)C(C(=O)O)[C@](C)(O)CC[C@@]12O	-5.83
172	C[C@@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H](O)CC[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C=C3C(=O)N(CCCCC(=O)O)CC3=C1O2	-7.736

173	C[C@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H](O)CC[C@]2(C)[C@@]12CC1=C(O)C=C3CNC(=O)C3=C1O2	-7.752
174	COC1=CC2=C(C(O)=C1OC)[C@]13CC[C@@H](OC)C[C@H]1N(CC3)C2	-6.159
175	CC[C@@H](C)C(=O)[C@@H](C)C1=CC(O)=C(C)C(O)=C1C=O	-6.305
176	CC1(C)CCC(=O)[C@]2(C)OOC3CC12CCC3(O)CO	-6.168
177	CC1(C)CCC[C@]2(C)C3=C(CC[C@@H]12)CC1(O)C(=O)C(CO)=CC(O)=C1C3	-7.34
178	C=C[C@@]1(C)CC[C@]2(O)C3=C(C(=O)[C@H](O)[C@]2(O)C1)C(C)(C)CCC3	-6.272
179	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)C1C[C@@H](O)C2=C3C(=O)C=C4C[C@@H](O)CC[C@]4(C)C3CC[C@@]21C	-7.909
180	C=C1CC[C@@]2(O)C[C@]1(O)[C@H](C)C(=O)[C@H]2C=C(C)C	-6.174
181	C=C[C@]1(C)C=C2[C@H](O)[C@H](O)[C@H]3C(C)(C)CC[C@@H](O)[C@]3(C)[C@@]2(O)CC1	-6.546
182	C[C@H](CCC(=O)O)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3[C@@H](O)C[C@@H]4C[C@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C	-8.027
183	C[C@@H]1CO[C@@]2(O)[C@@H]1C[C@]1(C)[C@@H](C)CC[C@H](O)[C@@]13O[C@@H]23	-6.404
184	COC(=O)C1=CC(OC)=C(O)C2=C1C(=O)C1=C(C[C@@H](C)OC1)O2	-6.429
185	CC1=CC(O)=CC(O)=C1C(=O)O[C@@H]1CC2=C(CO[C@](O)(CCCO)C2)C(=O)[C@]1(C)O	-6.768
186	CC(C)[C@@H]1CC[C@H](C)[C@@]12C=C[C@@](O)(CO)[C@H](O)C2	-6.178
187	CC(C)[C@@H](C)C=C[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2C3=CC(=O)C4(O)CC(O)CC[C@]4(C)[C@@]3(O)CC[C@]12C	-7.887
188	CC1=C[C@@H]2/C=C(\C)CC[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H]3O[C@@H]3C(=O)[C@]23C(=O)N[C@@H](CC(C)C)[C@@H]3[C@@H]1C	-7.412
189	C[C@]12CC[C@@H](O)C[C@H]1CC[C@@H]1[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](C3=CC(=O)OC3)[C@@H](O)C[C@]12O	-6.482
190	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2C3=CC(=O)[C@@]4(O)C[C@@H](O)CC[C@]4(C)[C@@]3(O)CC[C@]12C	-7.848
191	CC1=C(Cl)C(O)=CC(O)=C1C(=O)O[C@@H]1C[C@]2(C)[C@@H]3CC(C)(C)C[C@H]3C=C(C=O)[C@H]12	-8.514
192	CO[C@@H]1O[C@@]2(OC(=O)[C@@]3(C)O[C@@H]23)[C@H](O)C12C1CC=C(C)C2C1	-6.714
193	COC1=CC(OC)=C2C(=O)C3=C(C[C@H](C)O[C@H]3OC)C(=O)C2=C1O	-6.833
194	CC1(C)C2=CC[C@@](C)(O)[C@H](C(=O)O)[C@@]2(C)CC[C@@H]1O	-6.082
195	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(C[C@](C)(O)[C@H](O)C3)C(=O)C2=C1	-7.921
196	COC(=O)C1=CC(OC)=C(O)C2=C1C(=O)C1=C(C[C@@H](C)O[C@@H]1OC)O2	-6.643
197	COC(C=C[C@H](C)[C@H]1CC[C@]2(C)C[C@H]3[C@@H](C(=O)C[C@@]3(C)O)/C(C=O)=C\C[C@@H]12)C(C)(C)O	-6.647
198	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2C3=C(CC[C@]12C)[C@@]1(C)CC[C@H](O)CC1=CC3=O	-8.458
199	CC1=CC(C(=O)CC[C@H](O)[C@H](C)O)=C(O)C=C1O	-6.141
200	C/C(=C\C=C\[C@@H]1[C@H]2[C@H](C)[C@@H](O)[C@@](C)(O)C[C@@H]2C=C[C@@H]1C)C(=O)O	-7.245
201	C=C[C@@H]1C[C@@](C)(CO)C/C1=C(\CO)[C@@H](CO)CC(=O)O	-5.821

202	C[C@@H]1C[C@@H]([C@H](O)CC2CC(=O)NC(=O)C2)C(=O)[C@@H](C)C1	-7.02
203	CC1=C[C@H]2O[C@@H]3C[C@@H](O)[C@](C)([C@@]2(C)CC1)[C@]31CO1	-6.692
204	CC(=O)O[C@H]1CC[C@]2(C)[C@H]3CC4=C(O)C=C5C(=O)OCC5=C4O[C@@]3(C)CC[C@H]2C1(C)C	-8.51
205	C[C@@H]1C=CC(=O)[C@@]2(C)CC[C@@H]3[C@@H]4[C@@](C)(CC[C@@]4(C)CO)C[C@@]132	-7.064
206	CC1(C)C[C@H]2[C@@H](C1)[C@@]1(C)C(=O)[C@](C)(C[C@@H]1O)[C@H]2O	-6.105
207	COC1=CC(CO)=CC2=C1C(=O)C1=C(C(=O)O)C(O)=CC=C1O2	-7.03
208	CC1(C)C(=O)CC[C@]2(C)[C@@H](CO)[C@](C)(O)CC[C@@]12O	-6.137
209	CC1=CC(=O)[C@H]2/C(CO)=C\C[C@@H]3[C@](C)(CC[C@@]34O[C@@H](/C=C(/C)CO)C[C@@H]4C)C[C@H]12	-7.894
210	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)C1CCC2C3=C[C@@H](O)[C@@]4(O)C[C@@H](O)C[C@@H](C)C4C3CC[C@@]21C	-8.648
211	C[C@H]1CC[C@H]2[C@@H](C=C[C@@](C)(O)[C@]2(C)C(=O)CCO)C1	-6.606
212	CCC1=C(OC)C=C2C(=C1O)C(=O)C[C@@H](OC)[C@@H]2O	-6.466
213	CCOC1=CC(S(=O)(=O)C2=CC(OCC)=C(OC)C=C2O)=C(O)C=C1OC	-5.385
214	CC1(C)CCC[C@@](C)(C2=CC=C(C(=O)O)C=C2O)O1	-6.876
215	CC1(C)C[C@H](O)C[C@]2(C)[C@H]3[C@H](O)OC[C@@]3(O)C=C[C@@H]12	-5.836
216	CC(O)(CO)CCC[C@]1(C)OC2=CC=C(C(=O)O)C=C2O1	-6.246
217	CC1=C(O)C(=O)C2(O)C3(C)C(=O)C(O)=C(C)C24COCC42C(=O)OCC132	-6.128
218	C/C1=C/C[C@]2(C)C(=O)C(O)=C([C@H](C)CO)[C@H]2C/C=C(/C)[C@@H]2CC[C@@](C)(O2)[C@@H](O)CC1	-7.234
219	CCC[C@@H]1OC/C(=C2/C[C@H](O)[C@@](C)(CC)C2=O)[C@H]1C	-6.059
220	CC(C)CCC[C@](C)(O)C1=CC=C(C(=O)O)C=C1O	-5.863
221	COC1=CC=C2C(=O)C(C)=C(C(C)C(C)O)OC2=C1C	-6.363
222	CCC[C@@H]1OC/C(=C2/C[C@H](O)[C@@](C)(CC)C2=O)[C@@H]1C	-6.763
223	COC(=O)[C@@H]1C(=O)C(C)=C2O[C@@]3(C[C@]2(C)[C@H]1C)[C@@H](C)[C@@H](O)C[C@H]1C(C)(C)[C@@H](O)CC[C@@]13C	-7.104
224	CC[C@@H](C)[C@@H]1NC(=O)C2CSSCC(NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC(=O)[C@H](C(C)C)NC1=O)C(=O)N2	-6.892
225	C[C@H](/C=C/[C@H](C)C(C)(C)O)[C@@]1(C)CC[C@@]2(C3=C[C@H](O)[C@@H]4C[C@H](O)CC[C@]4(C)C3=O)OC(=O)CC21	-7.948
226	C=C1CC[C@@H]2[C@](C)(CO)[C@H](O)CC[C@@]2(C)[C@@H]1C/C=C1/C(=O)OC[C@H]1O	-7.007
227	CC(C)=NCOC(C)(C)[C@H]1OC2CC[C@]23O[C@@H]3[C@@H]1O	-5.864
228	COC1=CC(O)=C2C(=O)O[C@@]3(C)C[C@@]4(O)C[C@@](O)(C(=O)O)O[C@H]4C=C3C2=C1	-7.007
229	COC1=CC=C(C=C2NC(=O)[C@@]34C[C@]5(O)[C@@H](C=C[C@@H](O)[C@@H]5ON3C2=O)S4)C(O)=C1OC	-7.546
230	C/C(=C/CCC(C)(C)O)[C@@H]1CC[C@@]2(C)OC3=C(C[C@@H]12)C(=O)[C@]1(O)CO[C@H]3C1	-7.821
231	CC(C)(O)[C@@H]1[C@H](O)C[C@@]2(C)OC3=C(C[C@@H]12)C(=O)[C@]1(O)CO[C@H]3C1	-6.589

232	CC(C)=CCC[C@](C)(O)[C@H]1CC[C@]2(C)[C@@H]1[C@H](O)C[C@@H]1[C@@]3(C)CC[C@H](O)C(C)(C)[C@@H]3[C@@H](O)C[C@]12C	-7.644
233	CCC1=C2CC(=O)O[C@@H]([C@H](C)[C@H](O)[C@H](C)CC(C)=C[C@H](C)[C@@H](O)[C@H](C)[C@@H](O)CC)C/C=C(\C)CC(C)(O2)C1=O	-6.986
234	C/C=C/[C@@H](O)[C@](C)(O)[C@H]1CC[C@H]2C3=CC(=O)[C@@]4(O)CC(=CC[C@H](O)C4)[C@H]3CC[C@]12C	-7.573
235	COC(=O)C1=CC(=O)[C@H]2C[C@]1(C)[C@H]1CC[C@]3(C)[C@@H]([C@H](C)[C@@H]4O[C@H]4[C@H](C)C(C)C)CC[C@@]34O[C@@]14[C@@H]2O	-7.138
236	CC(=O)O[C@H]1CC[C@@]2(CO)C(=CC[C@@H]3[C@@H]2CC[C@]2(C)C(=O)CC[C@@H]32)C1	-7.521
237	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)C1CCC2C3=CC(=O)[C@@]4(O)C[C@@H](O)CC[C@]4(C)[C@@]3(O)CC[C@@]21C	-7.088
238	COC1=CC(O)=C2C(=O)[C@H]3CO[C@@](C)(O)C[C@H]3[C@@H](O)C2=C1O	-6.355
239	COC(=O)C1=CC(OC)=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(C(=O)O)C=C1O2	-7.108
240	CCCCC/C=C/C1=C(CO)[C@@H]2OC(C)(C)[C@@H](O)C[C@@]23O[C@H]3[C@@H]1O	-6.291
241	C[C@@H]1C=CC(=O)[C@@]2(C)CC[C@@H]3[C@H]4[C@@](C)(CO)CC[C@@]4(C)C[C@@]132	-6.755
242	COC(=O)C1=C(CCO)C(OC)=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(C)C=C1O2	-6.72
243	C[C@@]12CCC3=C(C=CO3)[C@H]1CC[C@@]13C[C@@H](CC[C@H]12)[C@@](O)(CO)C3	-7.689
244	C[C@]12CCC(=O)C[C@H]1C[C@H](O)[C@@H]1[C@@H]2C[C@@H](O)[C@]2(C)[C@@H](C3=CC(=O)OC3)[C@@H](O)C[C@]12O	-6.869
245	CC1=C2C[C@]3(C(=O)O)CC[C@@H](C(C)C)[C@H]3C[C@@H]2[C@@]23CC[C@@H](C)[C@@H]2CC[C@@]13C	-7.174
246	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC3=C(C2=C1)[C@@](C)(O)C[C@H](OC)[C@@]31C[C@@H](O)C(=O)O1	-7.561
247	C/C(=C/C(C)CC(C)C(=O)O)[C@@H]1CC[C@@](C)(C(C)O)O1	-6.023
248	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(O)C4=C(C=C3C(=O)C2=C1)O[C@@]1(C)CCC[C@H]4O1	-9.335
249	C=C[C@@]1(C)C[C@H](O)C2=C([C@H](O)C[C@H]3C(C)(C)CCC[C@]23C)[C@H]1O	-7.15
250	C=C(CCCC(C)CO)C1=CC=C(C(=O)O)C=C1O	-6.106
251	COC1=C(N)[C@](C)(O)C2=C(OC(=O)C3=C(O)C=C(OC)C=C23)C1=O	-7.375
252	CC(C)=CCC[C@@H](C)C1=CC[C@]2(C)C[C@H]3[C@@H](CO)C[C@@]4(O)OC(=O)/C(=C/C[C@@H]12)[C@@H]34	-7.073
253	CC1(C)CCC[C@](C)(C2=CC=C(C(=O)O)C=C2O)O1	-6.461
254	C[C@@]12CC[C@@H](CO1)C1=C(C=C3C(=O)C4=CC(O)=CC(O)=C4C(=O)C3=C1O)O2	-9.488
255	COC(=O)C1=CC(OC)=C(O)C2=C1C(=O)C1=C(C[C@H](C)O[C@@H]1O[C@H](C)[C@H](C)O)O2	-6.534
256	C[C@H](CCC(=O)O)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CC[C@@H]4C[C@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3C[C@H](O)[C@]12C	-7.522
257	CC1(C)CCC[C@]2(C)[C@@H](C(=O)O)[C@](C)(O)CC[C@@H]12	-6.302
258	CCOC(=O)[C@@H](C[C@H](OC)C1=C(O)C=CC(C(C)=O)=C1O)OC	-5.147

259	C[C@]12CCC(=O)C[C@H]1C[C@H](O)[C@@H]1[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](C3=CC(=O)OC3)[C@@H](O)C[C@]12O	-7.42
260	CC(C)=CCCC1=C2[C@H](C[C@@]3(C)[C@H]2CC[C@H]2[C@@]4(C)C=CC(=O)[C@@H](C)[C@@H]4C[C@@H](O)[C@@]23C)OC1=O	-8.576
261	CS[C@@]12CC3=CC=C[C@H](O)[C@H]3N1C(=O)[C@@H]1C[C@@H]3C(=O)CC[C@@H](O)[C@@H]3N1C2=O	-6.774
262	CC1=C2COC3(O)C4(O)C(=O)C(C)C5COC[C@@]53CC24[C@@H](O)C1=O	-6.535
263	CC1=CC(=O)C(C)=C2O[C@@]3(C[C@]12C)[C@@H](C)CC[C@H]1C(C)(C)[C@@H](O)CC[C@@]13C	-7.68
264	CC[C@H](C)C(=O)[C@@H](C)C1=CC(O)=C2C(=O)[C@@H]3[C@@]4(C)CC[C@H](C(C)(C)O)O[C@@H]4CC[C@@]3(C)OC2=C1O	-7.137
265	CO[C@@H]1CC(=O)C2=C(O)C(C)=C3C=C(C)OC3=C2[C@@H]1O	-6.589
266	CC1(C)CCC(=O)[C@]2(C)OC3(O)C[C@]12CCC3(O)CO	-6.052
267	COC1=C2CN3CC[C@]4(C=C[C@H](O)C[C@@H]34)C2=CC2=C1OCO2	-7.376
268	C=C[C@]1(C)CC[C@@H]2C(=C[C@H]3OC(=O)[C@@]4(C)C(=O)C[C@@H](O)[C@@]2(C)[C@@H]34)C1	-7.591
269	COC1=C(O)C2=C(OC3=C(C=O)C(O)=CC(C)=C3C(=O)O2)C(C)=C1C(=O)CC(C)C	-6.835
270	C=C(C)[C@@H]1C[C@H](O)[C@@]2(C)OC3=C(C[C@@H]12)C(=O)[C@]1(O)CO[C@H]3C1	-7.678
271	C[C@@H]1CC[C@H]2C(=C[C@@H](O)[C@H](C)[C@@H]2CC[C@@H](O)C[C@@H](O)CC(=O)O)C1	-5.971
272	COC(=O)C1=CC(OC)=C(Cl)C2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(C)C=C1O2	-7.122
273	CC1=CC2C=C(C)[C@@H](C)[C@H]3[C@H](CC(C)C)NC(=O)C23C(=O)C=C[C@H](O)[C@H](O)CC1	-7.74
274	COC1=CC(O)=C2C(=O)[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@@](C)(O)C[C@@H]3[C@@H](O)C2=C1O	-6.621
275	COC(=O)C1=C(O)C=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(CO)C=C1O2	-7.286
276	CC1(C)[C@@H](O)CC[C@]2(C)C3=C(CC[C@@H]12)C(=O)OC3	-7.125
277	C[C@@]12OCC(O)[C@@H]1C1=C(C=C3C(=O)C4=CC(O)=CC(O)=C4C(=O)C3=C1O)O2	-9.479
278	CC1=C(C)[C@]23C[C@@]45COCC4=C(C)[C@](O)(O[C@@]2(O5)C1=O)[C@@H]3O	-6.757
279	CC1(C)CC[C@@H](O)[C@](C)(C2=CC=C(C(=O)O)C=C2O)O1	-6.315
280	C=C(C)[C@@H]1CC[C@@]2(C)OC3=C(C[C@@H]12)C(=O)[C@]1(O)CO[C@H]3C1	-7.377
281	COC1=CC(O)=C2C(=O)[C@H]3C[C@@H](O)[C@@](C)(O)[C@H](O)[C@@H]3[C@@H](O)C2=C1	-7.442
282	CCCCC[C@H]1CC2=C(C)C(O)=C(C)C(O[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)=C2CO1	-7.329
283	COC1=CC(OC)=C2C(=O)C(C)=C(CC(C)=O)C(=O)C2=C1O	-7.073
284	C[C@]1(C(=O)CCO)[C@H]2CC[C@@H](CO)C[C@H]2C=C[C@@]1(C)O	-5.953
285	CS[C@@]12C[C@H]3C(=O)CC[C@H](O)[C@H]3N1C(=O)[C@@H]1C[C@@H]3C(=O)CC[C@H](O)[C@H]3N1C2=O	-6.936
286	COC1=C[C@](C)(O)C2=C(OC(=O)C3=C(O)C=C(OC)C=C23)C1=O	-7.562
287	C=C(CC[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2C3=CC(=O)C4[C@H](O)[C@@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C)C(C)COC	-7.402

288	CCCCC[C@@H]1CCCCC[C@@H](O)C[C@H](O)[C@H](O)/C=C/C(=O)O1	-6.754
289	CC(=O)[C@]1(O)CCC(C)(C)[C@]12CC=C(CO)CC2	-5.801
290	COC1=CC2=C(C(O)=C1C)C(=O)C=C(C)O2	-6.293
291	COC1=CC=C(C=C2NC(=O)[C@]3(C[C@]4(O)[C@H](C=C[C@@H](O)[C@@H]4O)O3)NC2=O)C(O)=C1OC	-6.877
292	COC1=CC=C(C=C2NC(=O)[C@@]3(C[C@]4(O)[C@@H](C=C[C@@H](O)[C@@H]4O)O3)NC2=O)C(O)=C1OC	-7.286
293	C/C=C(\C)[C@H]1O[C@@](O)([C@@H]2C[C@H](CC(C)O)NC2=O)C[C@H]2CC=C(C)C[C@@H]21	-6.801
294	CC(C)=CCC/C(C(=O)O)=C1/[C@@H](O)C[C@@]2(C)[C@H]1C[C@@H](O)[C@H]1[C@@]3(C)CC[C@@H](O)[C@@H](C)[C@@H]3CC[C@@]12C	-7.513
295	CC[C@@H](/C=C(\C)C1=CC(OC)=C(C)C(=O)O1)CO	-6.117
296	C=C1[C@@H](O)C[C@@H]2[C@](C)(CCC[C@]2(C)C(=O)O)[C@H]1CC(=O)O	-6.452
297	C=C(CC[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2C3=C(CC[C@]12C)[C@@]1(C)CC[C@H](O)C[C@@H]1C(=O)O3)C(C)C	-8.17
298	CC[C@H](C)[C@@H](OC(C)=O)[C@@H](C)C1=CC2=C3C(=C1C)O[C@]1(C)CC[C@H]4O[C@@H](C(C)(C)O)CC[C@]4(C)[C@H]1[C@@H]3OCO2	-7.213
299	C/C=C(\C)C(=O)[C@@H](C)C1=CC(O)=C2C(=O)[C@@H]3[C@@]4(C)CC[C@H](C(C)(C)O)O[C@@H]4CC[C@@]3(C)OC2=C1O	-7.758
300	C=C(C(=O)O)[C@@H]1CC[C@@H](C)C2C[C@@H](O)C(C)=CC21	-6.948
301	CC1(C)[C@@H](O)CC[C@]2(C)[C@@H]3C(=CC[C@@H]12)CO[C@H]3O	-6.872
302	COC(=O)C1=CC(OC)=CC2=C1C(=O)C1=C(O)C=C(C)C=C1O2	-6.999
303	CC1=C2C[C@]3(C)[C@@H](C)CC[C@@H](O)[C@@]3(O)C[C@@]2(O)OC1=O	-7.229
304	C[C@]1(CCOS(=O)(=O)O)CC[C@H]2C(=C[C@H]3OC(=O)[C@@]4(C)CCC[C@@]2(C)[C@@H]34)C1	-6.908
305	CC(C)=CCC[C@]1(C(=O)O)[C@H]2CC=C(C)CCC=C(C)CC[C@H]1[C@@]1(CC2)CO1	-6.807
306	CC(C)[C@@]1(O)[C@H](O)C[C@@]2(C)CC=C(C(=O)O)CC[C@@H]21	-6.66
307	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2[C@@]3(O)C=C[C@@]4(O)C[C@@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C	-9.103
308	C=C(COC(C)=O)[C@@H]1CC[C@@]2(C)OC3=C(C[C@@H]12)C(=O)[C@]1(O)CO[C@H]3C1	-6.834
309	C=C1CO[C@@]2(O)CC3=CC[C@H](O)[C@H](C)[C@@]3(C)C[C@@]12O	-5.848
310	COC1=C(C)C(O)=C(C)C(C(=O)O)=C1C	-5.676
311	CC1=CC(O)=C(C=O)C2=C1C(=O)OC1=C(O)C3=C(C(=O)CC(C)(C)O3)C(C)=C1O2	-7.787
312	CCCCCCCCCCCC[C@H](C)[C@@H]1CC(=O)N[C@H]([C@H](C)O)C(=O)N[C@H](C)C(=O)N[C@H](C)C(=O)N[C@H](CCC(N)=O)C(=O)N[C@H](CC2=CC=C(C)C=C2)C(=O)N[C@H]([C@@H](C)CC)C(=O)O1	-6.349
313	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC(C[C@@H](O)C(Cl)Cl)=CC2=C1	-7.085
314	CC1=C2OC(=O)C3=C(C)C=C(O)C(CO)=C3O[C@@H]2[C@](C)(O)[C@H](O)C1=O	-7.35

315	COC1=CC(O)=CC2=C1C(=O)O[C@@H](C)C[C@H](O)CCCCC2	-7.683
316	CC[C@H](/C=C(\C)C1=CC(OC)=C(C)C(=O)O1)CO	-6.197
317	CC(=O)O[C@@H]1CC2OC3C=C(C)CC[C@]3(C)[C@]1(C)C21CO1	-6.183
318	C[C@@H]1C(=O)C=C2[C@@]1(C)[C@@H](O)[C@H]1CC(C)(C)C[C@@]21O	-6.348
319	C=C1CC[C@@H]2[C@](C)(CCC[C@]2(C)C(=O)O)[C@H]1CC(=O)O	-6.479
320	CO[C@@H]1CCC[C@H](C)OC(=O)CC2=CC(O)=CC(O)=C2C(=O)C1	-5.751
321	CC[C@@H](O)C[C@H](C)C1O[C@]1(C)/C=C/C(=O)N[C@H](CO)[C@@ H](C)CC	-5.172
322	C[C@@]1(CO)C[C@H]2CC(C(=O)O)=C3CC[C@@]3(C)[C@H]2C1	-6.881
323	COC1=CC(=O)C2=C(C)C(C)=C(C[C@@H](C)O)C(O)=C2C1=O	-6.719
324	C=C(CO)[C@]12C[C@H](O)[C@H]3C[C@H](O)C[C@H](C)[C@]3(C)[C @H]1O2	-5.91
325	C[C@H]1O[C@H](O[C@@H]2C(CO)O[C@H](O[C@@H]3C(CO)O[C@H](O)C(O)C3O)C(O)C2O)C(O)C(O)[C@@H]1N[C@H]1C=C(CO)C(O)C(O) C1O	-6.958
326	CC(C)C(O)CC[C@](C)(O)C1=CC=C(C(=O)O)C=C1O	-6.542
327	CC1(C)CCC(=O)[C@@]2(C)OO[C@H]3C[C@@]12CC[C@]3(O)CO	-5.93
328	CC(C)(O)[C@H]1O[C@H]2CC[C@@]3(C)[C@@](O)(CC[C@H]4CC5=C(NC6=CC=CC=C56)[C@@]43C)[C@]23O[C@@H]3[C@@H]1O	-7.509
329	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC3=C(C2=C1)[C@@H](C)C[C@@H]3O	-7.274
330	COC1=CC2=C(C(O)=C1Cl)C(=O)C1=C(C)C=C(O)C=C1O2	-7.389
331	C=C1[C@H](O)[C@@H](O)CC(C)(C)[C@]12CC=C(C=O)CC2	-6.188
332	CCCCC[C@H]1CC2=C(C)C(O)=C(C)C(O[C@@H]3O[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]3O)=C2CO1	-7.252
333	COC1=CC2=C(C(=O)O[C@@H](C)[C@@H]2O)C(OC)=C1C	-6.14
334	CC(=O)O[C@H]1C2=CC3=C(CO)C(=O)CC[C@@]3(C)CC[C@]2(C)[C@ @H](C(C)C)[C@H]1O	-5.767
335	CC[C@H](C)[C@H](N)C(=O)N1CCC[C@H]1C(=O)N[C@H](C(=O)O)[C @@H](C)CC	-5.592
336	COC1=CC(O)=C2C(=O)C3=C(C)C=C(O)C=C3OC2=C1Cl	-7.354
337	COC1=CC(O)=C2C(=C1)C(=O)[C@@H]1[C@H](C[C@@H](O)[C@@](C) (O)[C@@H]1O)[C@H]2O	-7.55
338	CC(=CCCC(C)CO)C1=CC=C(C(=O)O)C=C1O	-6.456
339	CCC(C)C(=O)C[C@H]1C[C@@]2(CCC(C)=O)[C@@H](C=C1C)O[C@@ H]1[C@H](O)[C@@H](OC(C)=O)[C@@]2(C)[C@]12CO2	-6.204
340	COC(=O)C1=CC(O)=CC(OC)=C1C(=O)C1=C(O)C=C(C)C=C1OC	-6.163
341	C/C1=C/C[C@]2(C)C(=O)C(O)=C([C@H](C)CO)[C@H]2C/C=C(/C)[C@H]2CC[C@](C)(O2)[C@H](O)CC1	-7.047
342	C=C(CO)[C@@]1(O)C[C@]2(C)C(=CC1=O)[C@@H](O)CC[C@H]2C	-5.57
343	CO[C@@H]1/C=C(/C)C[C@H](OC(C)=O)[C@]2(O)[C@H]3/C(=C\1)C(=O)O[C@H]3C2(C)C	-6.863
344	CC[C@H]1[C@@H](O)CC[C@@H](O)[C@]1(O)OC[C@@H](O)CCCC[C @H](C)O	-5.16
345	COC1=CC(O)=C2C(=O)C[C@@H](CC(C)=O)[C@H](O)C2=C1	-7.028
346	COC1=CC(O)=C2C(=O)[C@]34COC[C@]3(O4)C(=O)C2=C1	-6.877

347	C=C(C)[C@@H]1CC[C@@]2(C)OC3=C(C[C@@H]12)C(=O)[C@@H]1C[C@@]3(O)CO1	-6.729
348	CC1=C2OC(=O)C3=C(C)C(Cl)=C(O)C(C=O)=C3OC2=CC2=C1C(=O)CC(C)(C)O2	-8.308
349	CC[C@H](C)C(=O)[C@@H](C)C1=CC(=O)C2=C(O[C@]3(C)CC[C@H]4O[C@@H](C(C)(C)O)CC[C@]4(C)C3C2)C1=O	-7.206
350	CC1(C)C=CC(=O)[C@]2(C)OOC3CC12CCC3O	-6.821
351	C[C@@]12OC3=CC(CO)=CC(O)=C3C(=O)[C@@]1(O)[C@@H](O)CC[C@@H]2O	-6.68
352	COC1=CC(O)=C2C(=O)OC3=C(C2=C1)[C@@](C)(O)C[C@@H](O)[C@@H]3O	-7.313
353	CC(C)[C@@H](C)/C=C/[C@@H](C)[C@H]1CCCC2C3=CC(=O)O[C@@]3(O)CC[C@@]21C	-7.393
354	CCCCC(C)[C@@H]1CC(=O)NCC(=O)N[C@@H](C(C)C)C(=O)N[C@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H](C)C(=O)N[C@@H](CC2=CC=CC=C2)C(=O)O1	-7.435
355	CC[C@@H](O)C[C@@H]1CC[C@@H](O)[C@@H](C)C(=O)O[C@@H](C)C[C@H]2CC[C@H](O2)[C@H](C)C(=O)O1	-6.468
356	C[C@]12C=C[C@H]3C[C@H](CO)CC[C@H]3[C@@]1(C)C(=O)CCO2	-6.884
357	CC[C@@H]1C[C@H](C)[C@H](C(C)(O)/C=C/C(=O)N[C@H](CO)[C@@H](C)CC)O1	-5.988
358	CO[C@H]1C[C@H](O)C2=C(C[C@H]3[C@H](C(C)(C)O)CC[C@@]3(C)O2)C1=O	-6.933
359	C=C1[C@@H](O)C[C@H](O)C(C)(C)[C@]12CC=C(CO)CC2	-6.599
360	COC1=CC(OC)=C2C(=O)OC(CC(O)CO)=CC2=C1	-5.532
361	CC1=C(C)C2=CC(=O)C3=C(O)C4=C(O[C@@H](C)C4)C(O)=C3[C@@]2(C)CC1	-8.529
362	CCC(O)CCC=CC1=C(CO)[C@@H]2OC(C)(C)[C@@H](O)C[C@@]23O[C@H]3[C@@H]1O	-6.24
363	CCCCCCCCCC[C@@H](C)[C@@H]1CC(=O)N[C@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](C)C(=O)N[C@H](C)C(=O)N[C@@H](CCC(N)=O)C(=O)N[C@H](CC2=CC=C(O)C=C2)C(=O)N[C@@H](C(C)C)C(=O)O1	-7.141
364	CCCCCC[C@H](O)C1=CC(OC)=C(COCC2=C(C)CCC2=O)C(=O)O1	-5.928
365	CC(=O)C1=CC(C)=C(OCC=C(C)C)C(C)=C1O	-5.958
366	CC1=C2[C@@H]3CC(C)(C)C[C@@H]3[C@H](O)[C@@]2(C)CC1=O	-6.456
367	COC(=O)C1=CC(C)=CC(O)=C1C(=O)C1=C(O)C=C(OC)C=C1OC	-5.577
368	CC(=O)O[C@H]1C[C@@H](O)[C@]2(C)C[C@H]2[C@H](O)C(C)(C)C/C=C\1C	-5.598
369	CC1(C)C[C@H](O)C[C@]2(C)[C@@H]3C(=CC[C@@H]12)CO[C@H]3O	-7.055

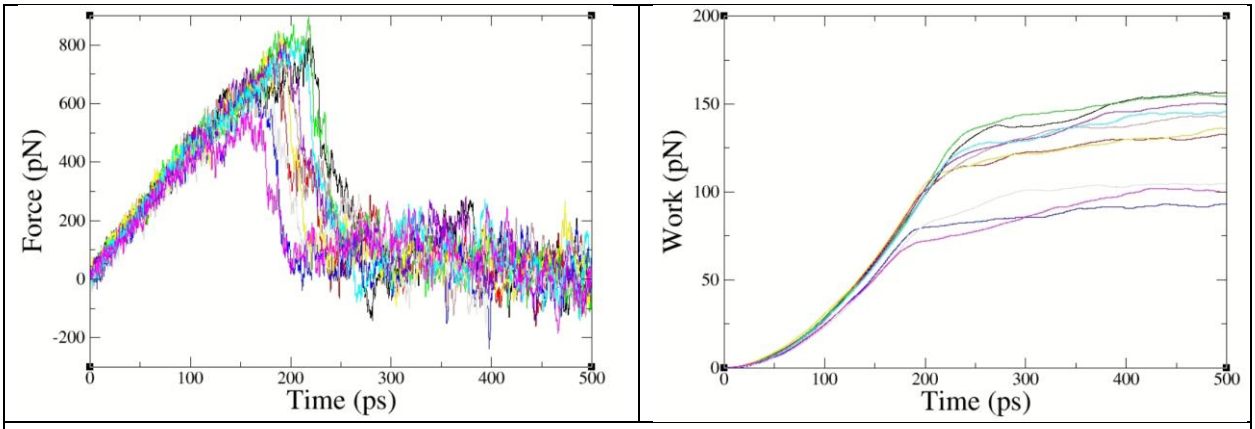
Table S4. Steered molecular dynamics results for co-crystallized ALK ligands: average pulling work (kcal/mol), experimental IC_{50} (μM), and corresponding experimental binding free energy (ΔG_{exp}, kcal/mol).

PDB IDs	The co-crystallized ligand	Average Work (kcal/mol)	$IC_{50,\ exp}$	ΔG_{exp}
4ANS	3-[(1R)-1-(2,6-dichloro-3-fluorophenyl)ethoxy]-5-(1-piperidin-4-yl-1H-pyrazol-4-yl)pyridin-2-amine	156.4976	0.64	-10.2429
4CCB	3-[(1R)-1-[5-fluoranyl-2-(1,2,3-triazol-2-yl)phenyl]ethoxy]-5-(3-methyl-1H-pyrazol-4-yl)pyridin-2-amine	177.9176	60	-10.7348
4CCU	2-(5-(6-amino-5-((R)-1-(5-fluoro-2-(2H-1,2,3-triazol-2-yl)phenyl)ethoxy)pyridin-3-yl)-4-methylthiazol-2-yl)propan-2-ol	150.7011	27	-11.0571
4CMO	2-[(1R)-1-{[3-amino-6-(2-methoxypyridin-3-yl)pyrazin-2-yl]oxy}ethyl]-4-fluoro-N-methylbenzamide	192.3206	16	-12.9846
4CTC	(10R)-7-amino-3-cyclopropyl-12-fluoro-1,10,16-trimethyl-16,17-dihydro-1H-8,4-(metheno)pyrazolo[4,3-h][2,5,11]benzoxadiazacyclotetradecin-15(10H)-one	195.9077	5.8	-11.7735
4FOB	N-{1-[cis-4-(hydroxymethyl)cyclohexyl]-5-(piperidin-1-ylmethyl)-1H-benzimidazol-2-yl}-3-(prop-2-en-1-ylsulfamoyl)benzamide	150.2736	5	-12.0882
4FOC	methyl cis-4-[2-(benzoylamino)-6-(piperidin-1-ylmethyl)-1H-benzimidazol-1-yl]cyclohexanecarboxylate	229.1187	3	-13.7563
5AAC	3-[(1R)-1-(2,6-dichloro-3-fluorophenyl)ethoxy]-5-(1-piperidin-4-yl-1H-pyrazol-4-yl)pyridin-2-amine	187.3371	0.64	-12.4754
5FTO	Entrectinib	166.2761	1.6	-11.3466
5FTQ	N-[5-(3,5-difluorobenzyl)-1H-indazol-3-yl]-2-[(4-hydroxycyclohexyl)amino]-4-(4-methylpiperazin-1-yl) benzamide	195.5729	10	-11.911

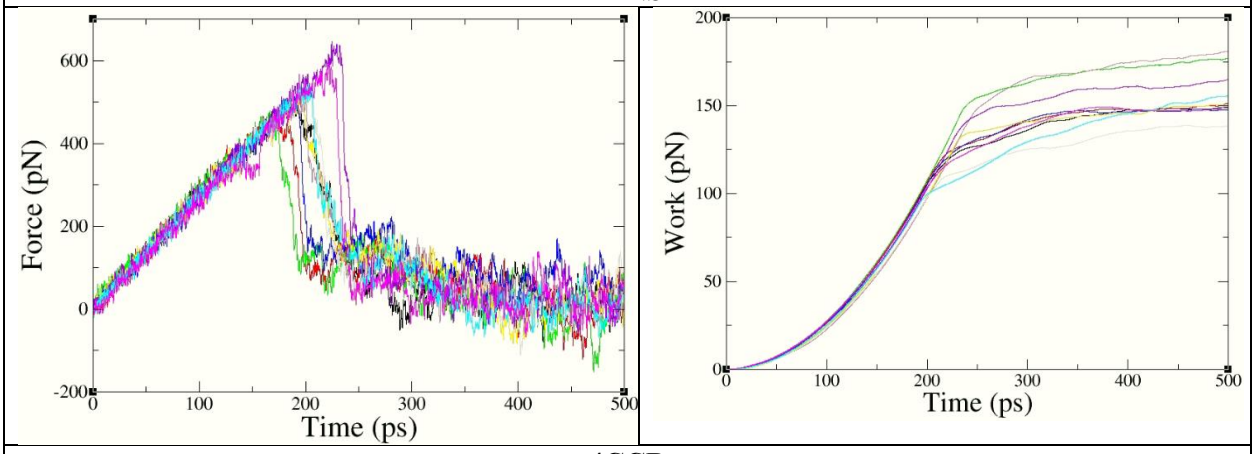
Table S5. Hydrogen bond interactions between studied compounds and ALK protein residues during MD simulations (% occupancy).

Amino acid	**100**	**248**	**254**	**277**	**307**
ARG1253	53.08	0	-	42.75	4.07
ASP1203	45.84	1.57	18.84	68.84	0.3
LEU1256	33.12	2.2	4.67	12.05	0.07
VAL1130	10.86	3.48	2.91	2.44	0.08
LYS1150	8.45	4.49	0.2	0.96	0.82
LEU1122	4.18	19.97	18.92	13.05	7.22
ASN1254	1.67	-	-	0.98	0.01
GLY1123	1.1	0.1	16.46	5.18	0.26
ASP1270	0.73	0.23	0.02	4	0.1
GLY1128	0.28	0.05	5.91	4.16	26.88
GLY1202	0.28	12.24	15.29	-	0.28
GLY1269	0.04	1.68	3.59	0.11	0.09
SER1206	0.03	0.01	0.01	-	0.17
GLU1129	0.02	0.28	-	-	0.09
LYS1205	0.01	-	-	-	-
MET1199	0.01	102.47	62.75	-	14.75
ALA1148	0.01	1.15	2.13	-	0.34
LEU1198	0.01	30.54	8.68	-	0.03
LEU1196	0.01	8.19	5.6	0.06	0.05
MET1328	0	-	-	-	-
ARG1209	0	-	-	-	0
VAL1180	0	0.66	2.49	-	-
GLU1197	-	74	16.64	-	2.01
ALA1200	-	16.67	22.76	-	4.86
ARG1120	-	0.16	0.67	-	43.41
GLU1132	-	0.09	3.15	-	0.83
GLY1201	-	0.04	-	-	0.49
GLY1121	-	0	-	-	0.18
GLU1210	-	0	-	-	0.85
VAL1149	-	-	0	-	0
GLN1146	-	-	-	-	-
GLN1217	-	-	-	-	2.94
PRO1260	-	-	-	-	2.46
ARG1264	-	-	-	-	1.22
SER1219	-	-	-	-	0.93
PRO1262	-	-	-	-	0.77
SER1220	-	-	-	-	0.75
GLY1261	-	-	-	-	0.23
SER1216	-	-	-	-	0.14

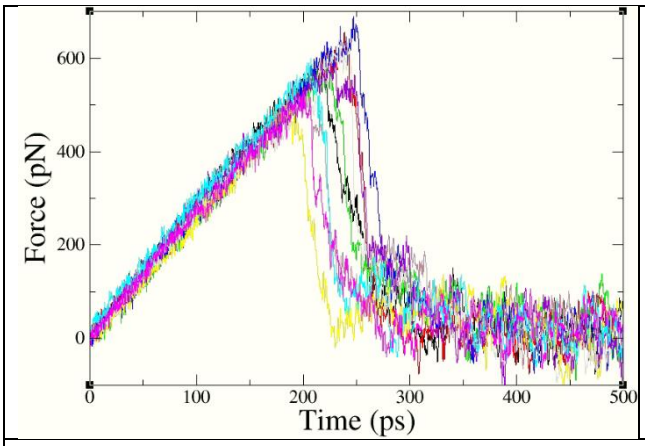
PRO1153	-	-	-	-	0.12
THR1211	-	-	-	-	0.1
THR1151	-	-	-	-	0.08
PHE1207	-	-	-	-	0.06
PHE1164	-	-	-	-	0.03
VAL1155	-	-	-	-	0.01
ASP1160	-	-	-	-	0

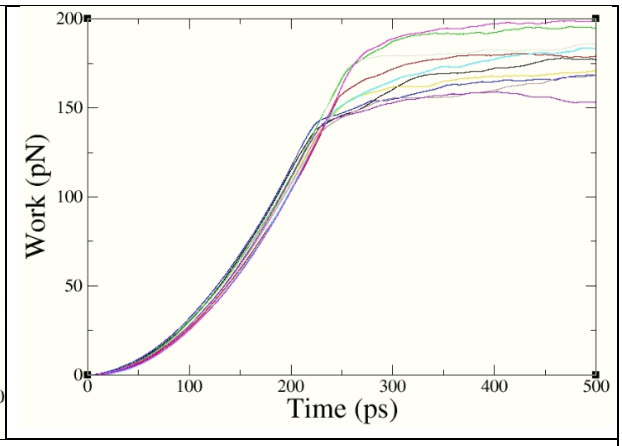


4ANS

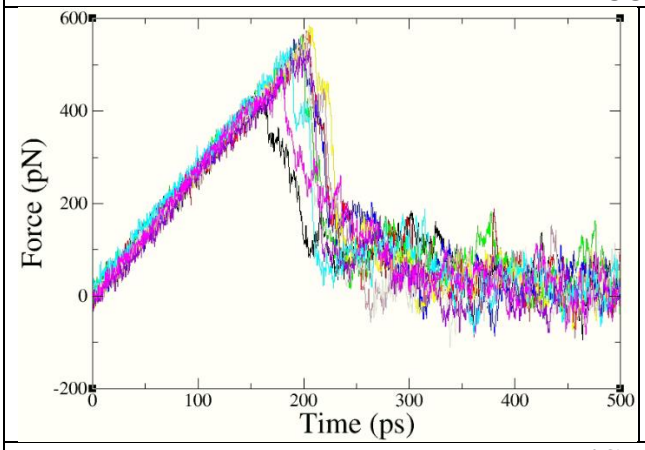


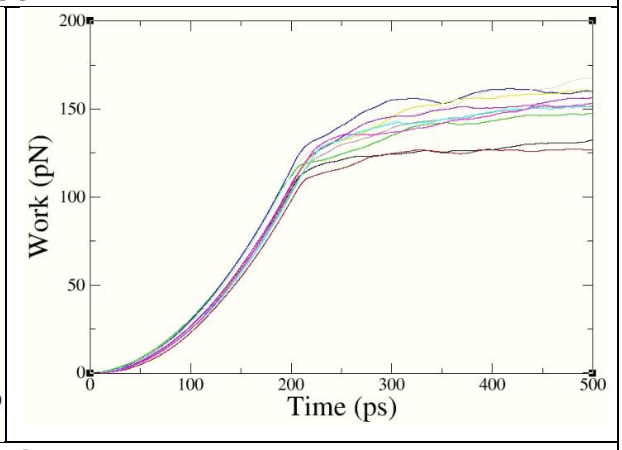
4CCB



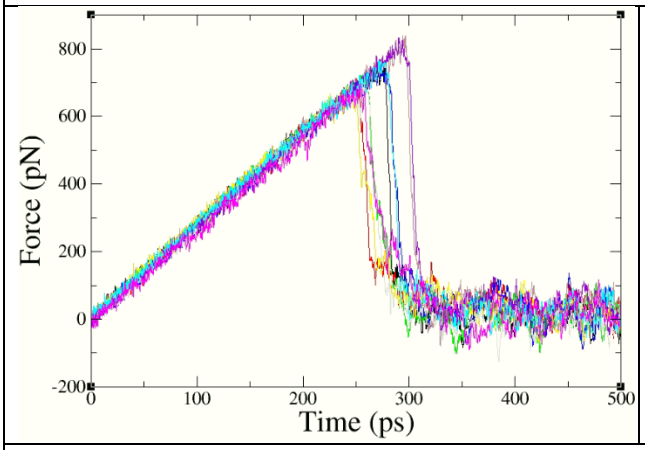


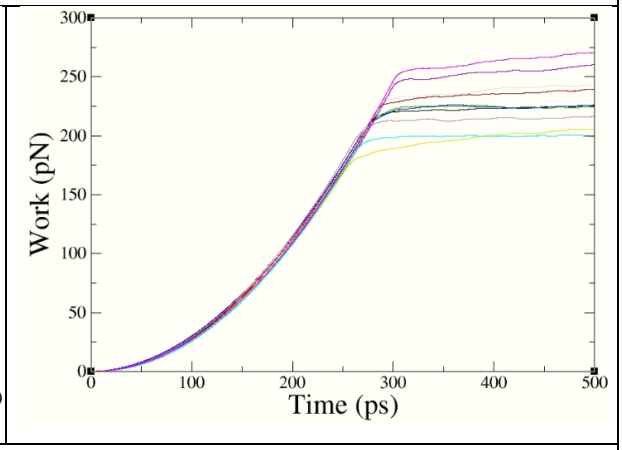
4CCU



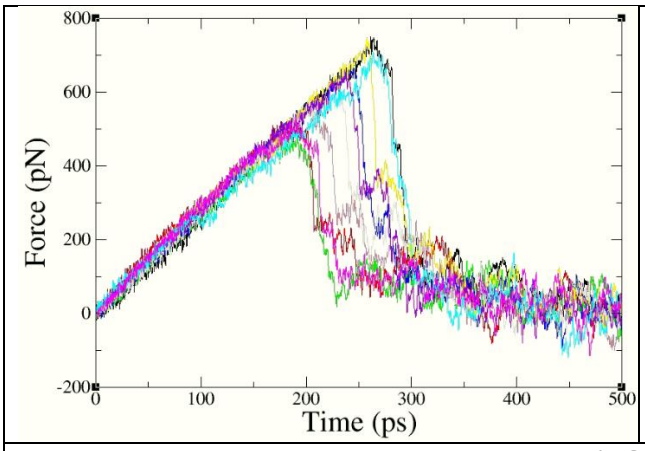


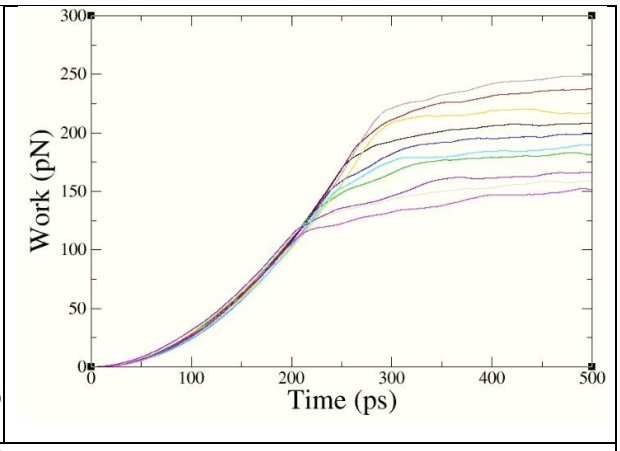
4CMO



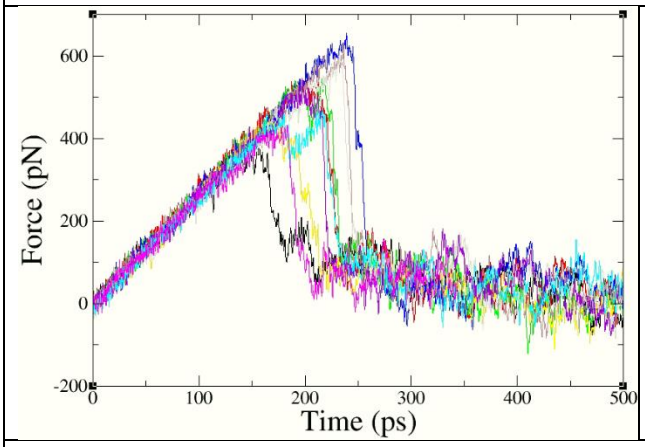


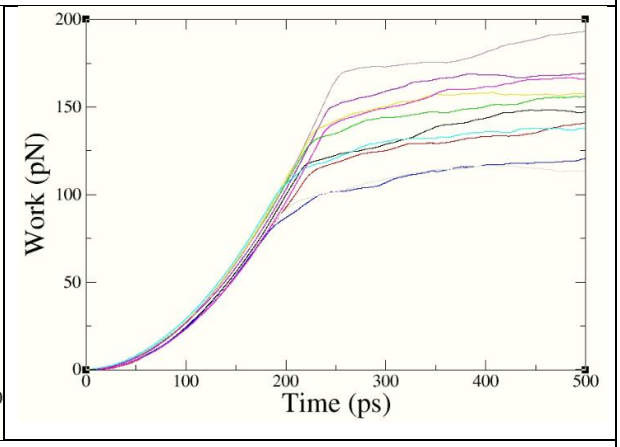
4CTC



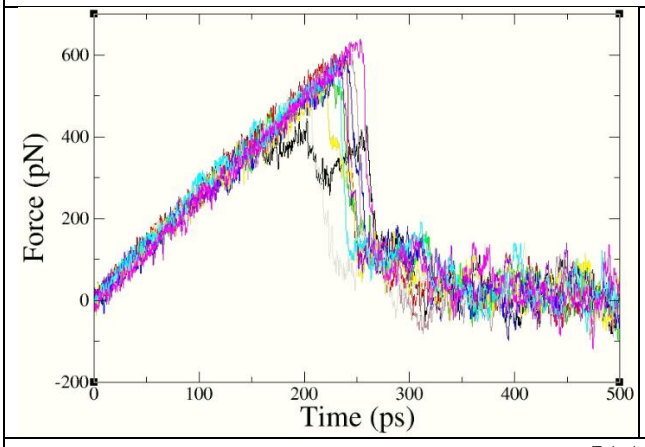


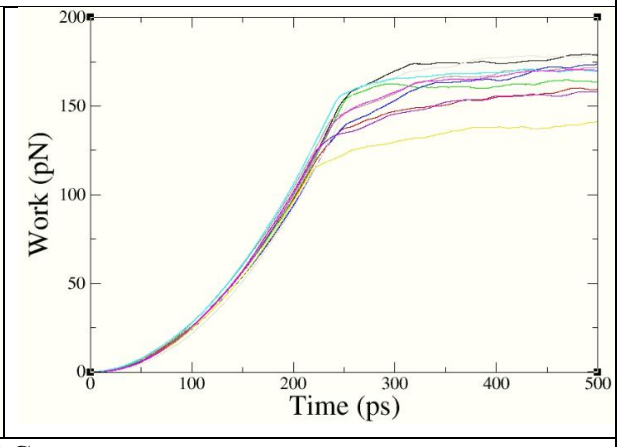
4FOB





4FOC





5AAC

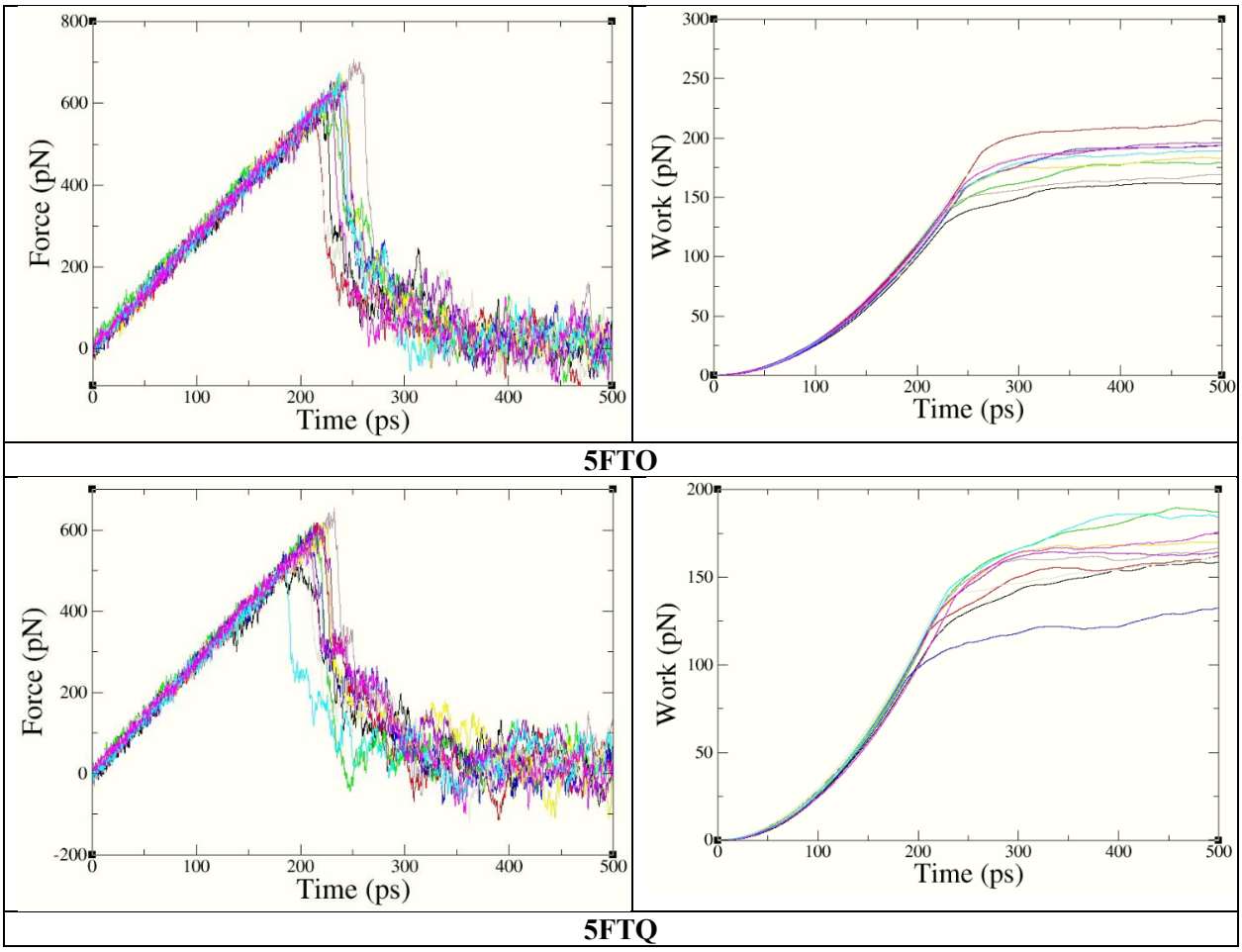
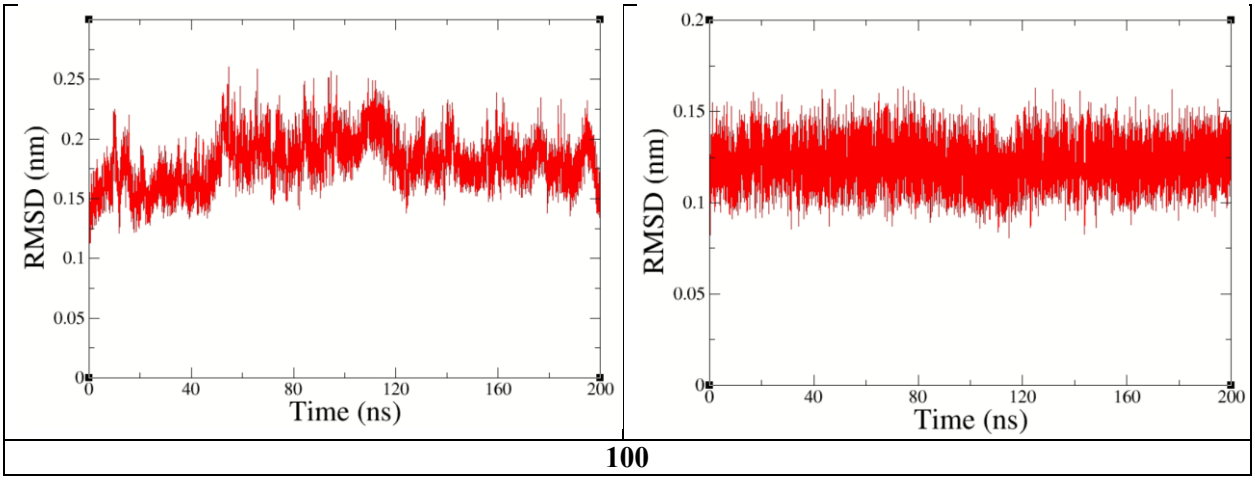
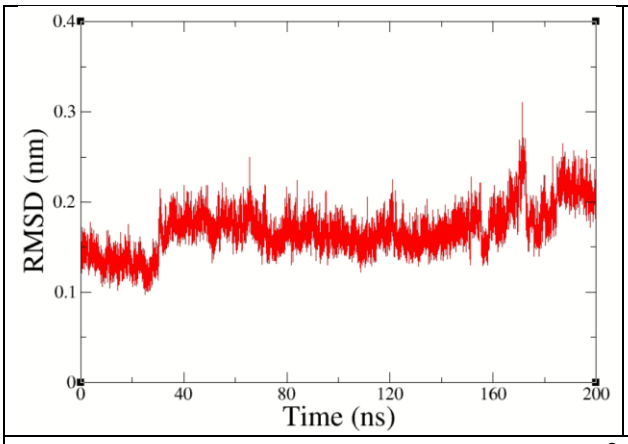
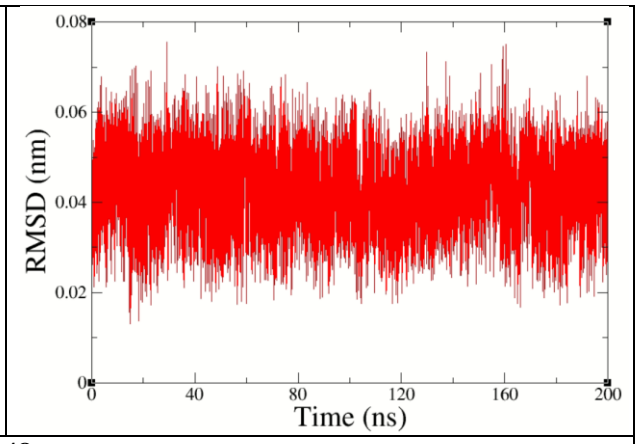


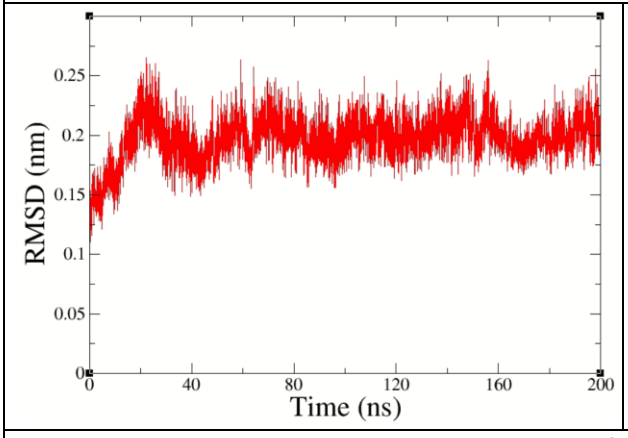
Figure S1. Steered molecular dynamics analysis of ALK–ligand complexes: average pulling max force (left) and pulling work (right) profiles of co-crystallized ligands along the dissociation pathway.

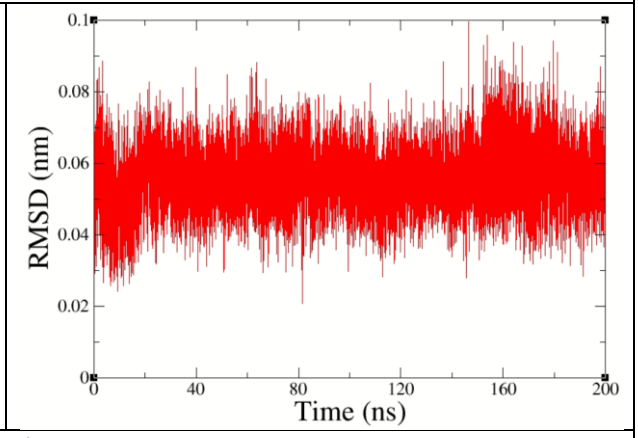



RMSD (nm)
Time (ns)
0
0.1
0.2
0.3
0.4
40
80
120
160
200

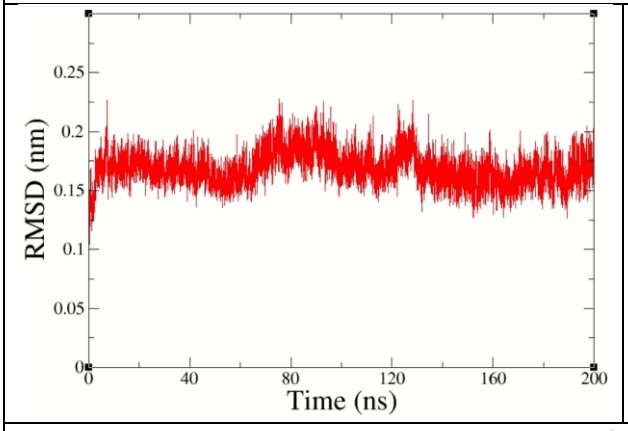

RMSD (nm)
Time (ns)
0
0.02
0.04
0.06
0.08
40
80
120
160
200

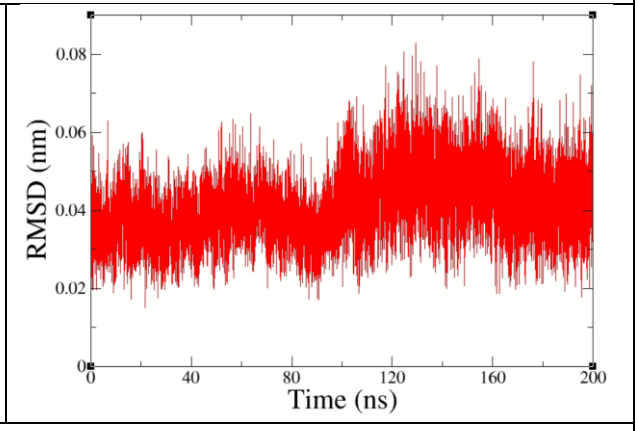
248


RMSD (nm)
Time (ns)
0
0.05
0.1
0.15
0.2
0.25
40
80
120
160
200

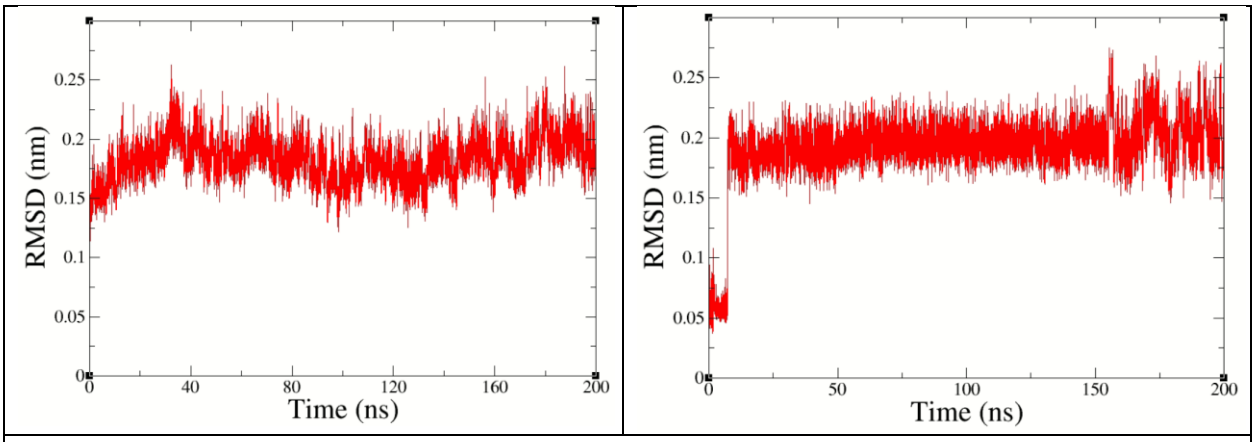

RMSD (nm)
Time (ns)
0
0.02
0.04
0.06
0.08
0.1
40
80
120
160
200

254


RMSD (nm)
Time (ns)
0
0.05
0.1
0.15
0.2
0.25
40
80
120
160
200

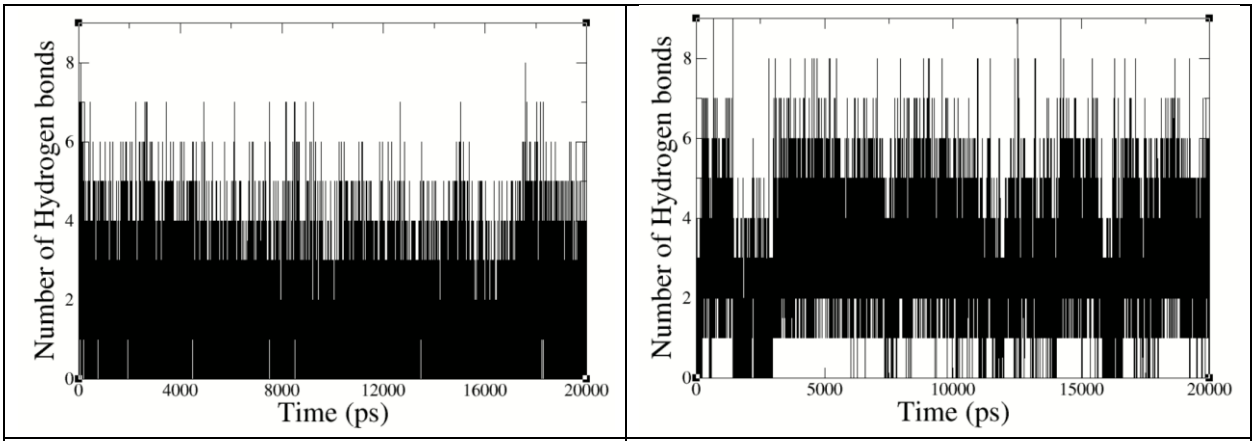

RMSD (nm)
Time (ns)
0
0.02
0.04
0.06
0.08
40
80
120
160
200

277

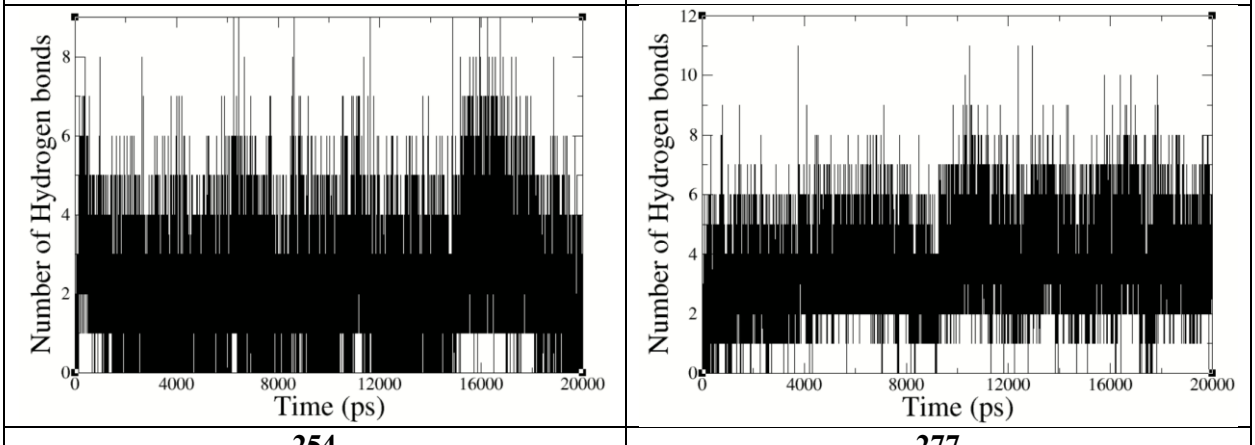


307

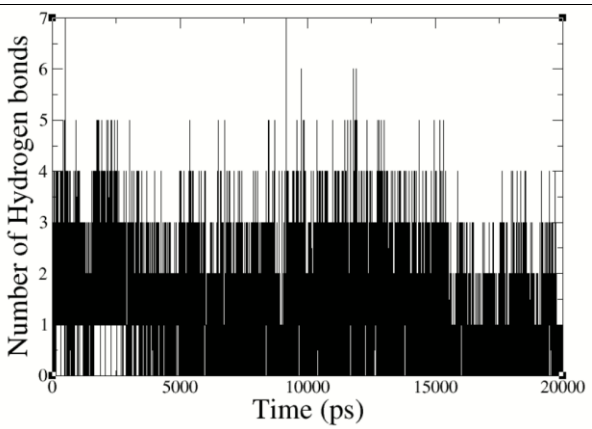
Figure S2. Plots of RMSD of the protein backbone (left) and ligand (right) in studied complexes



100 **248**

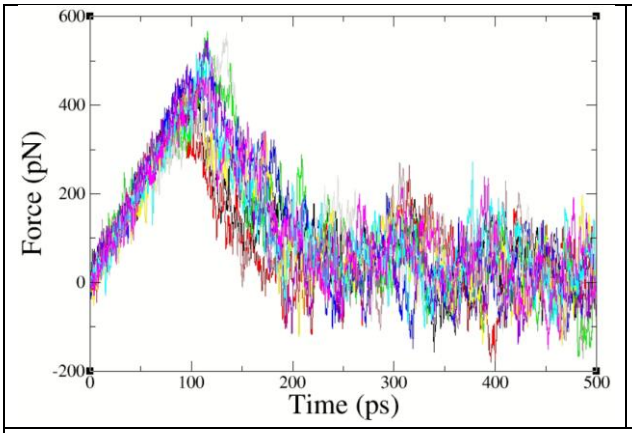


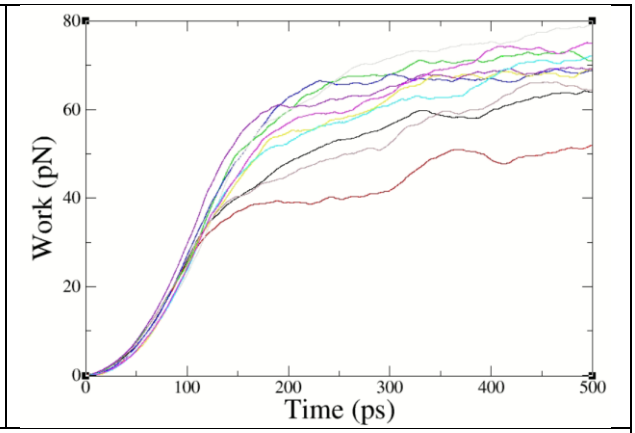
254 **277**



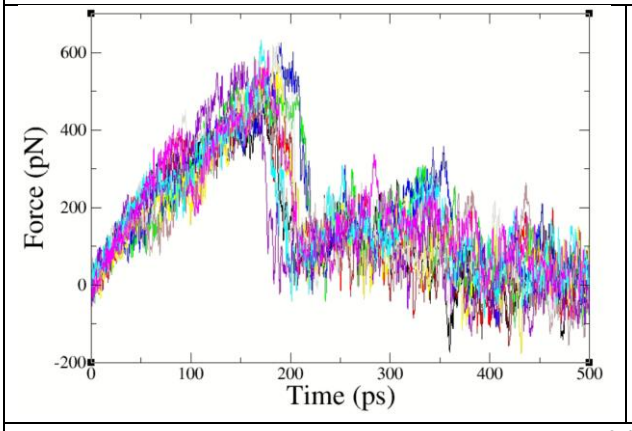
307

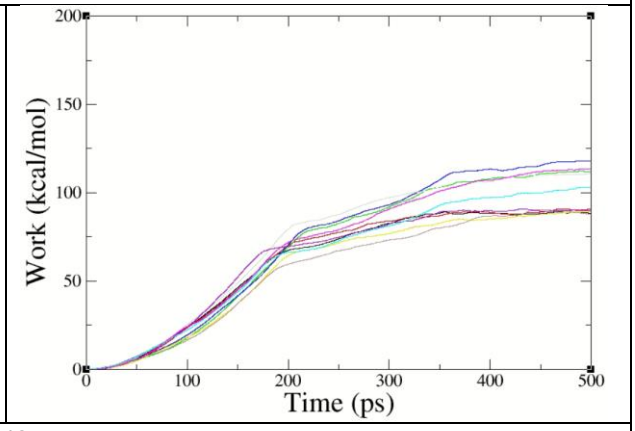
Figure S3. Number of hydrogen bonds in studied complexes





100





248

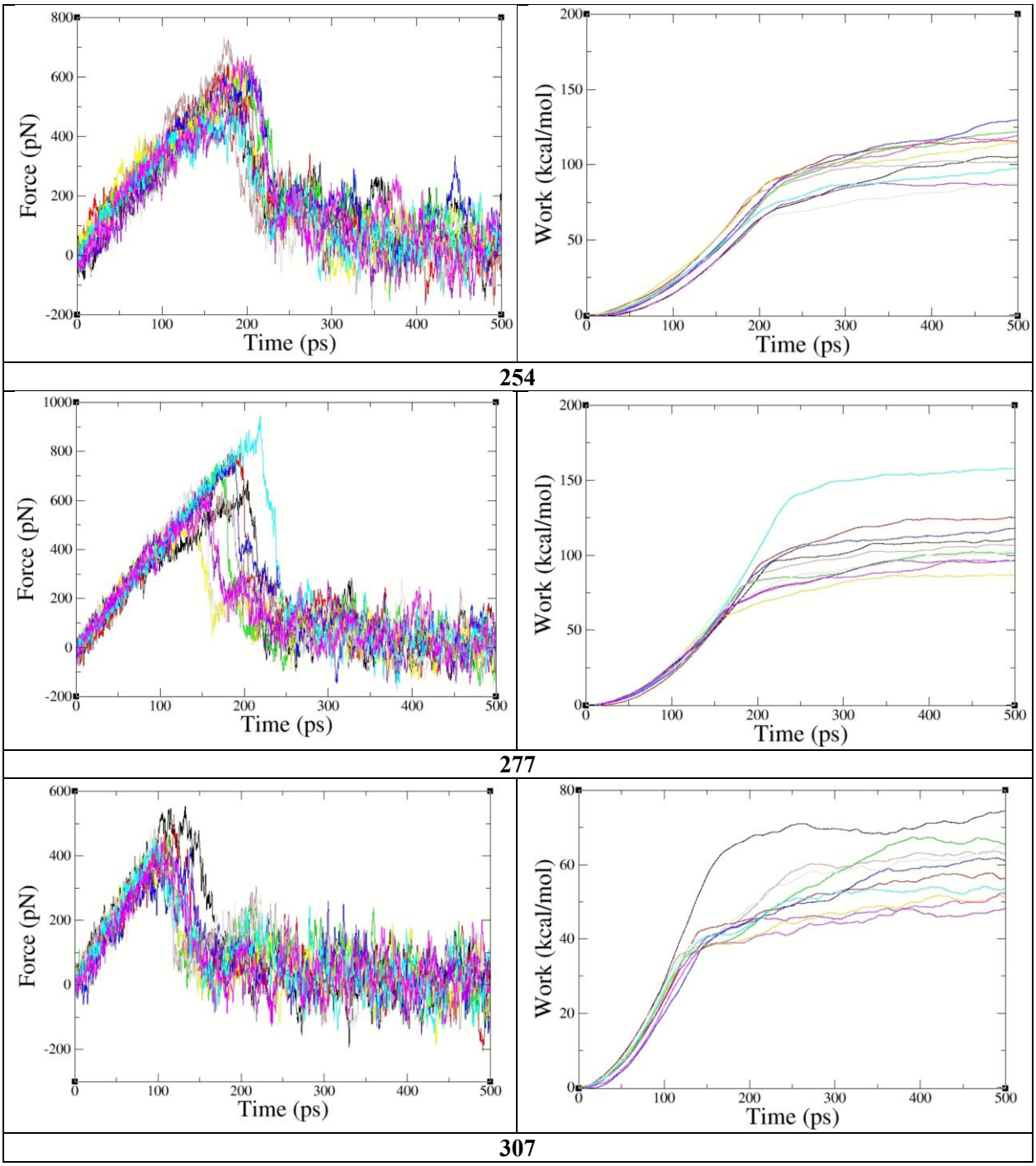


Figure S4. Steered molecular dynamics analysis of ALK–ligand complexes: average pulling max force (left) and pulling work (right) profiles of studied compounds along the dissociation pathway.

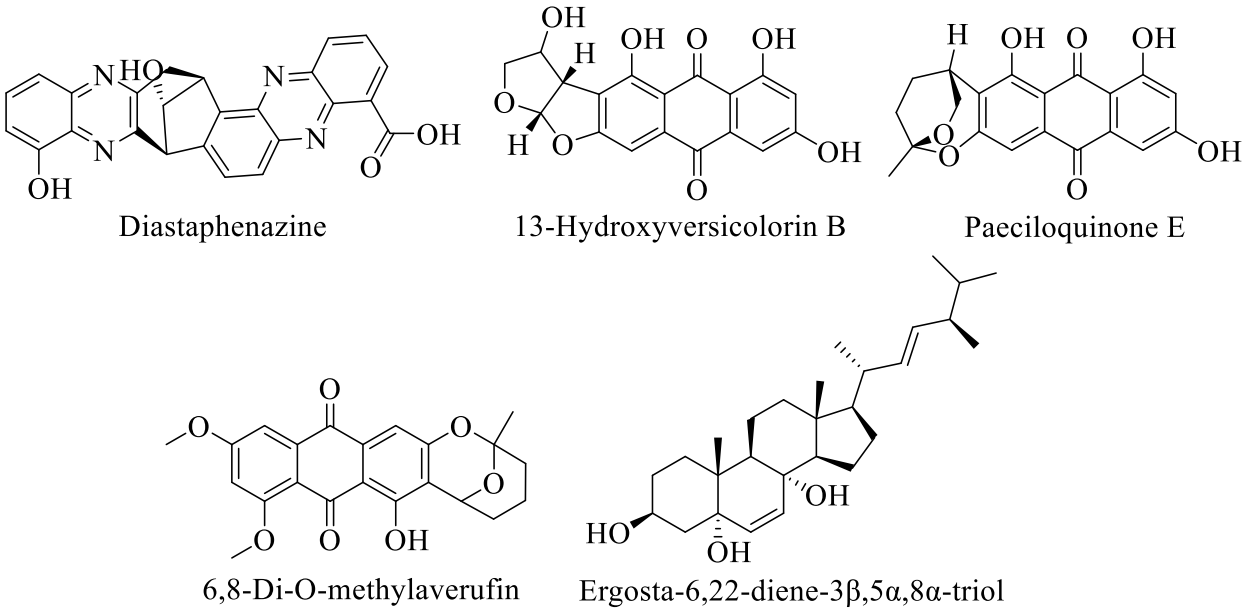
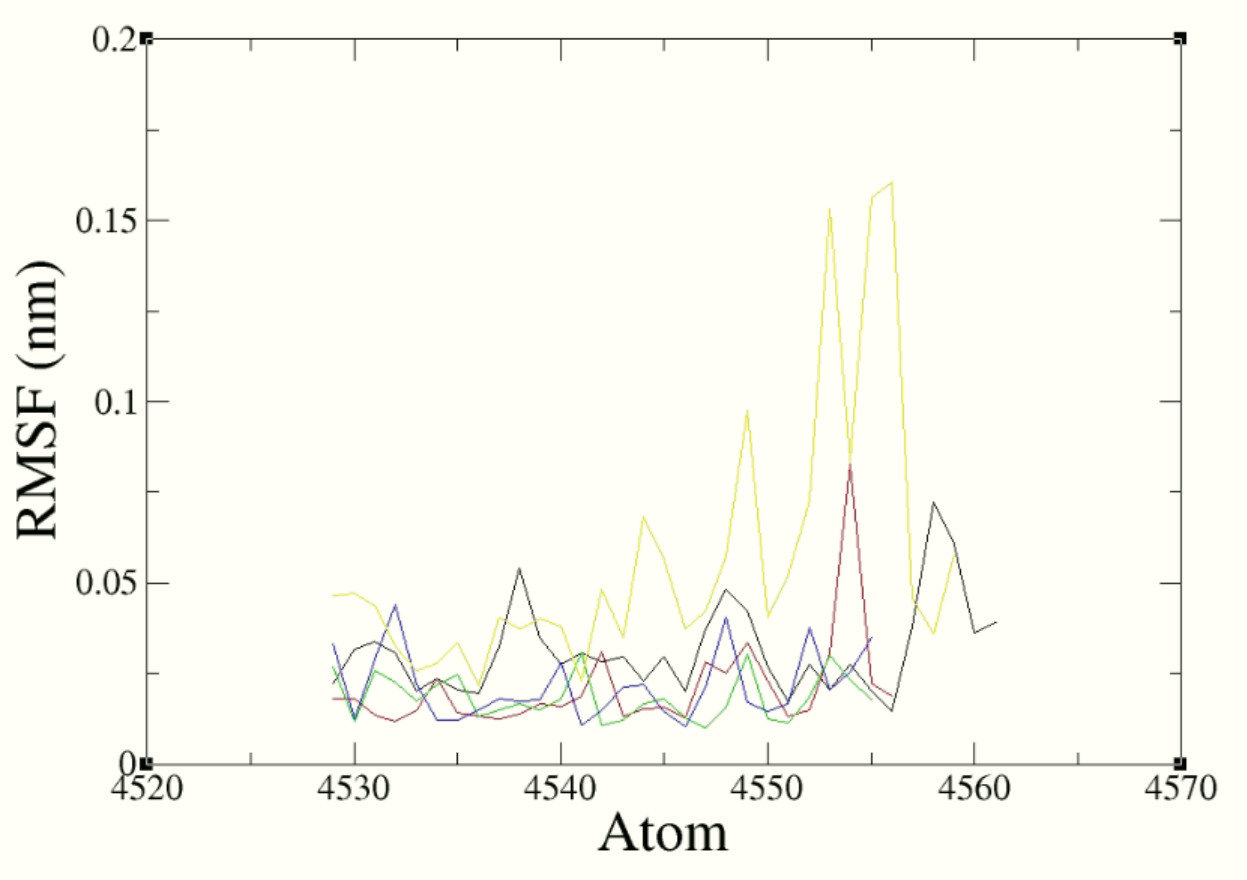


Figure S5. The structural information of the five screened potential compounds



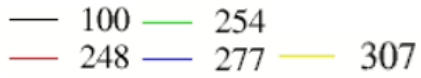
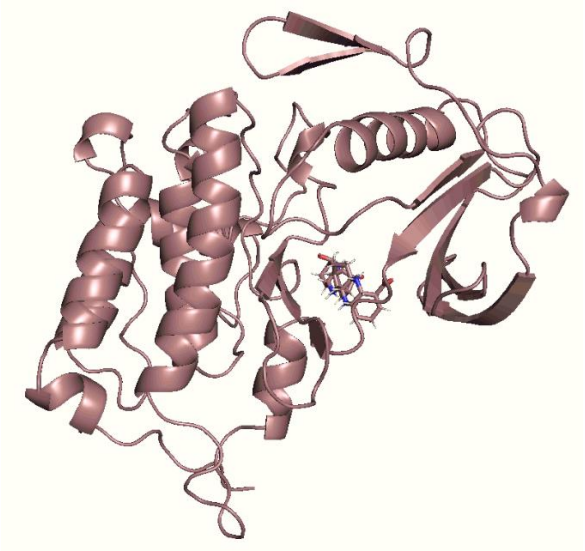
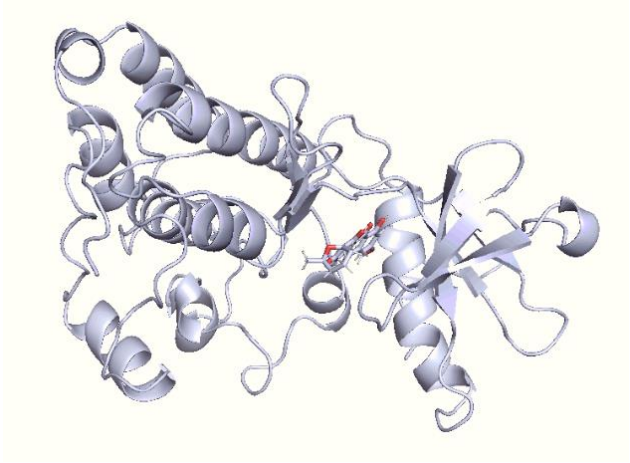


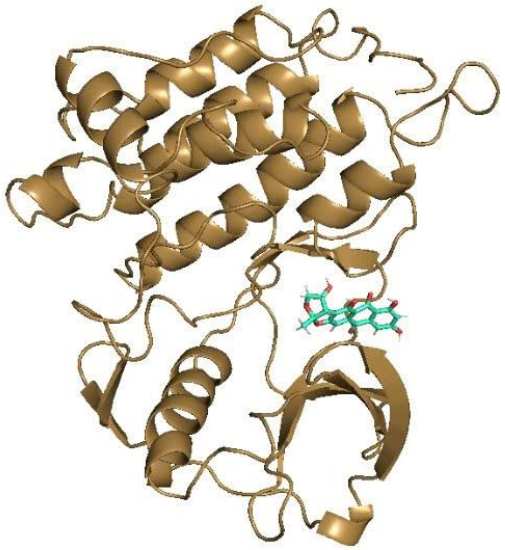
Figure S6. Plot of RMSF of the heavy-atoms of ligand in studied complexes



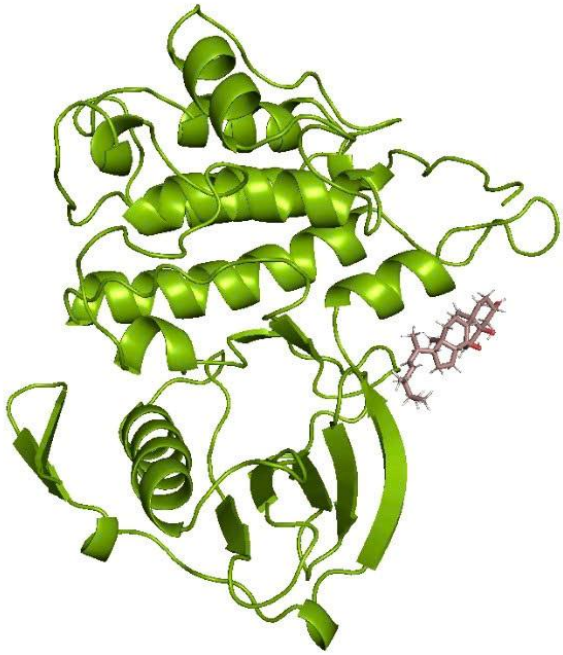
100



248



277



307

Figure S7. Three-dimensional binding modes of MD-refined structures of candidate molecules with potential ALK inhibitory activity after 200 ns molecular dynamics simulations