

## Supporting Information

# Design and Synthesis of Pleuromutilin Derivatives as Antibacterial Agents Using Quantitative Structure–Activity Relationship Model

Jiaming Zhang <sup>1,2</sup>, Qinqin Liu <sup>1</sup>, Haoxia Zhao <sup>1</sup>, Guiyu Li <sup>1</sup>, Yunpeng Yi <sup>2,\*</sup> and Ruofeng Shang <sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup> Key Laboratory of New Animal Drug Project, Gansu Province/Key Laboratory of Veterinary Pharmaceutical Development, Ministry of Agriculture and Rural Affairs/Lanzhou Institute of Husbandry and Pharmaceutical Sciences of CAAS, Lanzhou 730050, China; jiamingzhang1998@foxmail.com (J.Z.); 118736127157@163.com (Q.L.); haoxiaz0112@163.com (H.Z.); jyly0613@163.com (G.L.)

<sup>2</sup> Shandong Provincial Animal and Poultry Green Health Products Creation Engineering Laboratory, Institute of Poultry Science, Shandong Academy of Agricultural Science, Jinan 250023, China

\* Correspondence: yiyunpeng@saas.ac.cn (Y.Y.); shangruofeng@caas.cn (R.S.); Tel.: +86-531-66655359 (Y.Y.); +86-931-2115253 (R.S.); Fax: +86-531-66655350 (Y.Y.); +86-931-2115951 (R.S.)

**Figure S1.** IR, <sup>1</sup>H NMR and <sup>13</sup>C NMR spectrum of compound **1**.

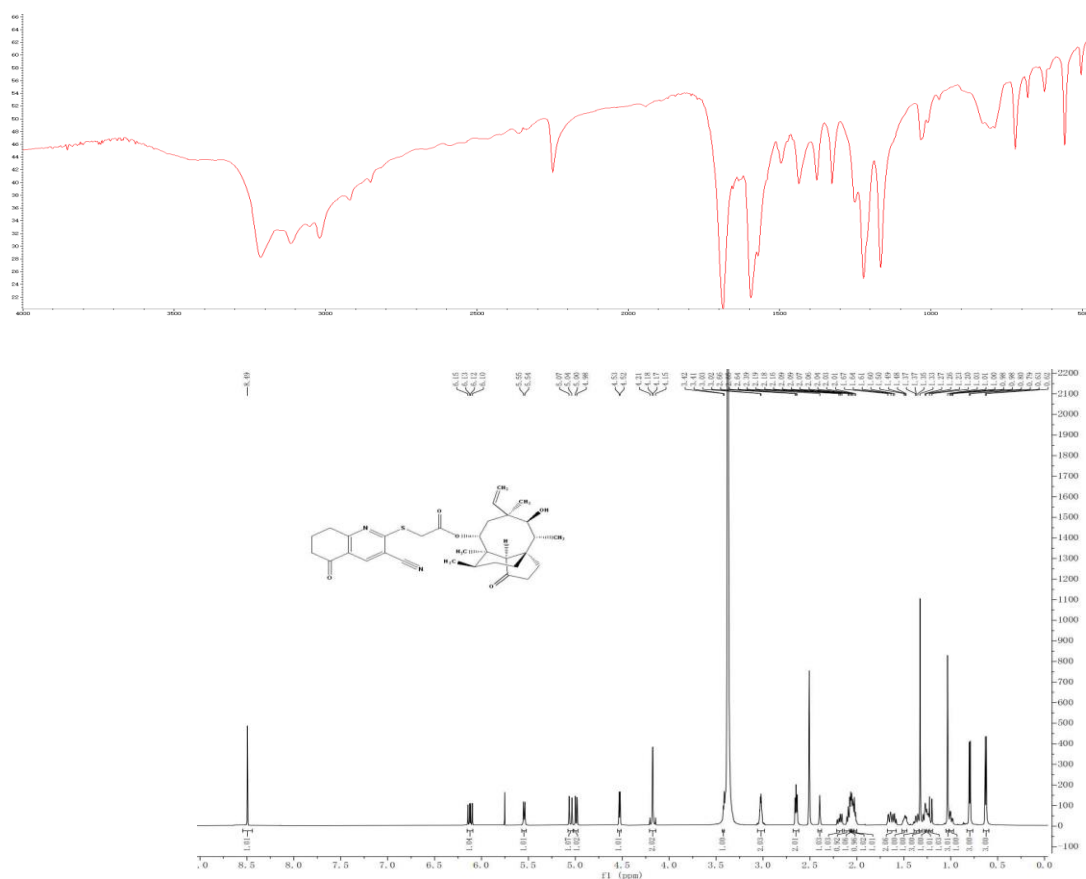
**Figure S2.** IR, <sup>1</sup>H NMR and <sup>13</sup>C NMR spectrum of compound **2**.

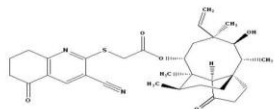
**Table S1.** Summary of crystal data and structural refinement results for compound **1**.

**Table S2.** Summary of 955 small molecules with MIC (pMIC) activity values against MRSA.

**Table S3.** Summary of 51 compounds for 3D-QSAR model construction.

**Table S4** Summary of experimental versus predictive activity(3D-QSAR).





Chemical structure of compound 10 is shown above the spectrum. The structure is a complex polycyclic molecule with a phenyl group, a methine group, and several methyl groups. The spectrum shows peaks from 0.5 to 7.5 ppm. Aromatic protons appear as a multiplet between 7.1 and 7.5 ppm. A singlet at 6.3 ppm corresponds to the phenyl ring protons. A singlet at 5.6 ppm is assigned to the methine proton. A multiplet between 4.9 and 5.2 ppm corresponds to the methylene protons. A singlet at 3.5 ppm is assigned to the methyl group. A multiplet between 0.8 and 1.5 ppm corresponds to the aliphatic protons. The chemical structure of compound 10 is shown above the spectrum.



Table S2. Summary of 955 small molecules with MIC activity values against MRSA.

SMILES	pMIC
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC(C5=CC=NC(=C5)=O)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	8.20
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC(C5=CC=CC(N)=C5)=O)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	7.90
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC(C5=CC=C(N)C=C5)=O)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	7.90
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(C(NC5=CC=C(S(=O)(NC6=CC=CC=N6)=O)C=C5)=O)=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	7.67
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=C([N+])([O-])=O)C=C5)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	7.58
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=CC=C5)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	7.57
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=C(C)C=C5)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	7.57
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(N)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	7.49
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=C(CN6C7=NC=NC(N)=C7N=C6)C=C5)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	7.34
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(C(NC5=CC=C(S(=O)(N)=O)C=C5)=O)=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	7.32
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=CC(C)=C5)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	7.27
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNC4=CC=CC(F)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	7.20
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=C(N)N=C6)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	7.13
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=CN=C6)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	7.12
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=CN=C6N7CCNCC7)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	7.07
<chem>CC1C23C(C(CC3)=O)C(C(CC(C=C)(C)C1O)OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C6=C([N+])([O-])=O)C=CC=C6)CC5)=O)CC4)=O)(C(CC2)C)C</chem>	7.04
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(CO)=CN=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	7.03
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(CO)=NC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	7.03
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=CC(N6C7=NC=NC(N)=C7N=C6)C=C5)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	7.03
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=CC(N6C=NC7=C6N=CN=C7N)=C5)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	7.03
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC(C5=CC=C([N+])([O-])=O)C=C5)=O)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	7.02
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(N)=CN=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	7.02
<chem>O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(NC(C5=C5C(NC(CN(CC)CC)=O)=N4)=O)C[C@@H](C)(C=C)C[C@@H](O)[C@@H]2C</chem>	7.01
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5CCOCC5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	7.01
<chem>O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(NC(C6CCCC6)=O)=N4)=O)C[C@@H](C)(C=C)C[C@@H](O)[C@@H]2C</chem>	7.01
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	7.00
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(NC(CN5CCC(O)CC5)=O)=CN=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	7.00
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(C=C/C5=CC=C([N+])([O-])=O)C=C5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	7.00
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS(SC4=NC5=C(C=CC(OC)=C5)N4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	6.99
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC(C5=CC=CC(C5)=O)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	6.99
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS(SC4=NC(OC)=CC(OC)=N4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	6.99
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS(SC4=NC5=C(C=CC=C5)S4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	6.98
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC(C5=CC=CO5)=O)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	6.98
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(NC([C@@H](N)CC(C)C)=O)=CN=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	6.98
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(C=C/C5=CC=C(N)C=C5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	6.98
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS(SC4=NC(N)=CC(N)=N4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	6.96
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	6.96
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCCNC(C4=CC=C(OC)C=C4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	6.96
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC=C5OC)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	6.96
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=CC=C5[N+])([O-])=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	6.96
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=CC([N+])([O-])=O)C5)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	6.96
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS(SC4=NN=C(C)S4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	6.95
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC=C5F)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	6.95
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC=C5C)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	6.95
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS(SC4=NC=CC=N4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	6.94
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS(SC4=CC=NC=C4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	6.94
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS(SC4=NC=CC=C4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	6.94
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(NC(CN)=O)=CN=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	6.94
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=CC=C5C)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	6.93
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNC4=CC=C(F)C=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	6.90
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CN=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	6.88
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=C(N)N=C6N(C)C)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	6.84
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(NC(CN5CC(CO)CCC5)=O)=CN=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	6.83
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=C(N)N=C6N)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	6.83
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(NC(CN5CC(O)CCC5)=O)=CN=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	6.82
<chem>O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5C=NC(N6)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3</chem>	6.81

O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=CC([N+](O-)=O)C=C7)CC6)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.81
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=CC([N+](O-)=O)C=C7)CC6)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.81
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=C(N)N=C6N7CCN(C)CC7)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.79
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=CN=C6N7CC(N)CCC7)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.78
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=CN=C6N7CC(C7)N)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.77
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=CN=C6N7CC(N)CC7)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.77
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSCC4=CC(C(O)=C(CO)O4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.77
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5CCN(C6=CC=CC(O)=C6)CC5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.75
CC1C23C(C(CCC)=O)C(C(C(C(C=C)C)C1O)OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C6=CC=C([N+](O-)=O)C=C6)CC5)=O)CC4)=O)(C(C2)C)C	6.74
CC1C23C(C(CCC)=O)C(C(C(C(C=C)C)C1O)OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C6=CC=C(C1)C=C6)CC5)=O)CC4)=O)(C(C2)C)C	6.74
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(N(C4)C(C5=C4C=CC(N)=C5)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.73
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSCC4=C5C(NC(CN5CCN(CCO)CC5)=O)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.73
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSCC4=C5C(NC(CN5CCN(CCO)CC5)=O)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.73
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CN4CCN(C(C=C/C5=C(F)C=CC(F)=C5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.73
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=CC(CO)=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.73
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(N4C(C(C=C5N)=C5N)=O)O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.72
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(N4C(C(C=C5N)=C5N)=O)O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.72
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CSC4=NC(N)=CC(NC(CN5CCC[C@H](CO)C5)=O)N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.72
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NC(NC(CN5CCC[C@H](CO)C5)=O)CC(N)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.72
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CSC4=NC(NC=CC5)=C5C(NC(CN6CCCC6)=O)N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.72
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CSC4=NC(N5CC[C@H](O)C5)=CC(C)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.72
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CSC4=NC(N5CCOCC5)=CC(C)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.72
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSCC4=C5C(NC(CN5CCC(O)C5)=O)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.71
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSCC4=C5C(NC(CN5[C@H](CO)CC5)=O)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.71
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CN4CCN(CNCC5=CC=C(C(F)F)C=C5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.71
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=C(N)C=NC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.71
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=CC(N)=NC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.71
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSCC4=C5C(NC(C5=CC=C(OC)C=C5)=O)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.71
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CSC4=NC(N5CCCC5)=CC(C)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.70
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CSC4=NC(N)=CC(NC(CN5CC[C@H](O)C5)=O)N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.70
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NC(NC(CN5C[C@H](O)CC5)=O)CC(N)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.70
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NC=CC=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.70
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=CC(NC(CN5CCC[C@H]5CO)=O)CN=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.70
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=CC=NC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.70
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5CCC(O)C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.70
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=C(CN(C6)=O)C=C(C6)=O)C=C5)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.69
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5CCC(O)C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.69
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=C(NC(C5=CC=CC(F)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.68
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=CC(NC(CN5CCCC5)=O)CN=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.68
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN(C(C5=CC=C(C)C=C5)=O)C(N)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.68
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CN4CCN(C(C=C/C5=CC=C(C)C=C5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.68
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=CC(NC(C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.67
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC([N+](O-)=O)C=C5)O4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.67
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CS(SC4=NC5=C(C=C=CC(C5)O4)=O)O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.67
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC([N+](O-)=O)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.67
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=C(C(N)C=C5)O4)=O)O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.67
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.66
O=C(C(C1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	

O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCCNC(C4=C(C)C=CC=C4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.65
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCCNC(C4=CC=C(C)C=C4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.65
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(F)=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.65
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=C(F)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.65
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNC4=CC=CC(Br)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.65
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNC4=CC=C(Br)C=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.65
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C5O)O4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.65
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=C(O)C=C5)O4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.65
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=C(N)C=C5)O4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.65
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)C=C5)O4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.65
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=C(C)C=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.64
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS(SC4=NC(O)=CC(C)=N4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.64
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CSC4=NC(O)=CC(NC(C)=O)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.64
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=C55)O4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.64
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=NC=C5)O4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.64
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=C(C)C=C5)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.63
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CO5)O4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.63
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=CC=C5)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.62
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(C=NO)=CC=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.61
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC=NC5=C4C=NN5)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.61
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC=NC5=C4C=NN5)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.61
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNC4=CC=CC(Cl)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.61
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNC4=CC=C(Cl)C=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.61
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=C5C(N)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.61
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(N)=CC(O)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.61
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CSC4=NC(N)=CC(N)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.60
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(N)=CC(N)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.60
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(CO)C=CC=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.60
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N4C(C(C=C(F)C=C5)=C5C4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.60
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C/C=C/C5=CC=CC=C5[N+](I(O-))=O)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.60
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC=CC(N)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.59
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC=CC(N)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.59
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N4C(C(C=CC=C5)=C5C4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.58
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=C(N)N=C6N7CCOCC7)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.58
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.57
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=C(N)N=C6NC)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.54
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCCN5C=NC6=C5N=C(N)N=C6)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.53
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(C=CC(N)=C5)=C5N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.53
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C/C=C/N5C=NC6=C5N=C(N)N=C6)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.52
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CC(C(O)=CO4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.52
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C([N+](I(O-))=O)C=CC=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.52
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(NC(CN5CC[C@@H](O)C5)=O)=CN=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.52
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(CO)C=NC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.51
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CN5C=NC6=C5N=CN=C6)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.50
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(NC([C@H]5CCCCN5)=O)=CN=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.50
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=C(N)N=C6N7CCC(N(C)CC7)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.50
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=CC(O)=C7)CC6)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.50
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(O)=CN=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.49
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(NC([C@H]5CCCN5)=O)=CN=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.49
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CSC4=NC(N5CCN(CCO)CC5)=CC(C)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.49
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CSC4=NC(N5CCC(CCO)CC5)=CC(C)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.49
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC(C4)CCN4C(CCN5C=NC6=C5N=C(N)N=C6N7CCNCC7)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.49
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=C(N)N=C6N7CC(C)NCC7)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.49
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=CN=C6N7CC(N(C)CC7)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.49
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=CN=C6N7CCC(NC)CC7)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.49
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(C(NC5=CC=C(S(O)N)C6=NC=C56)=O)C=C5)=O)=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.48

O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=CN=C6N7CCC(N)CC7)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.48
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS[C@H]4CC[C@H](C(OCC)=O)C[C@H]4NS(=O)(C5=CC=C(C(C)=O)C=C5)=O)=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.47
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=CN=C6N7C[C@H](N)CC7)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.47
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=C(CN6C7=NC=NC(N8CCN(C)CC8)=C7N=C6)C=C5)=C4)=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.47
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS[C@H]4CC[C@H](C(OCC)=O)C[C@H]4NS(=O)(C5=CC=C(OC)C=C5)=O)=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.47
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCCCN(C(CCN4C=NC5=C4N=CN=C5N6CCC(N)C6)=O)C=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.46
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(N5CCC[C@H](CO)C5)=CC(C)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.46
O=C(N(CCN1CC(O[C@@H]([C@]2(C)[C@H](C)CC3)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@H](C)[C@@]43[C@@]2([H])C(CC4)=O)=O)[C@H](CC5=CC=C(O)C=C5)NC(OC(C)C)C)=O	6.45
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=C(CN6C7=NC=NC(N(C)CC)=C7N=C6)C=C5)=C4)=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.45
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5N=NC(CN6CCN(C)CC6)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.45
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(N5CCC[C@@H](O)C5)=CC(C)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.45
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(N5CCC(O)CC5)=CC(C)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.45
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C6=CC=CC=C6[N+](O-)=O)CC5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.44
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C6=CC=CC([N+](O-)=O)=C6)CC5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.44
CC1C23C(C(CC3)=O)C(C(CC(C=C)(C)C1O)OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C6=CC([N+](O-)=O)=CC=C6)CC5)=O)CC4)=O)(C(CC2)C)C	6.44
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5CCN(C6=CC=CC=C6)CC5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.44
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C6=CC=C(Cl)C=C6)CC5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.44
CC1C23C(C(CC3)=O)C(C(CC(C=C)(C)C1O)OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C6=CC(Cl)=CC=C6)CC5)=O)CC4)=O)(C(CC2)C)C	6.44
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(NC=C5)=C5C(NC(CN6CCC(CO)CC6)=O)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.44
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5N=NC(CN(C)CC)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.43
CC1C23C(C(CC3)=O)C(C(CC(C=C)(C)C1O)OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C6=CC(OC)=CC=C6)CC5)=O)CC4)=O)(C(CC2)C)C	6.43
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5N=NC(CN6CCCC6)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.43
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(C=C(C5=C(F)C=C(Br)C=C5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.43
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(NC=C5)=C5C(NC(CN6CCC(O)CC6)=O)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.43
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C6=CC=CC(O)=C6)CC5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.42
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=C(CN6C(C(C=CC=C7)=C7C6=O)=O)C=C5)=C4)=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.42
CC1C23C(C(CC3)=O)C(C(CC(C=C)(C)C1O)OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C6=C(C)C=CC=C6)CC5)=O)CC4)=O)(C(CC2)C)C	6.42
CC1C23C(C(CC3)=O)C(C(CC(C=C)(C)C1O)OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C6=CC=C(C)C=C6)CC5)=O)CC4)=O)(C(CC2)C)C	6.42
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC(NC4=CC=C(NCC5=CC=CC=C5)C=C4)=O)=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.42
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C)N4/N=C/C5=CC=C(C6=CC=CC=N6)C=C5)=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.42
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC(C5=CC=CC=C5[N+](O-)=O)=O)=N4)=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.42
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(NC=C5)=C5C(NC(CN6CCOCC6)=O)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.42
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=CC(CN6C7=NC=NC(N)=C7N=C6)C=C5)=C4)=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.42
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5N=NC(CN(C)C)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.42
CC1C23C(C(CC3)=O)C(C(CC(C=C)(C)C1O)OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C6=CC=CC=C6)CC5)=O)CC4)=O)(C(CC2)C)C	6.41
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(N5CCNCC5)=CC(C)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.41
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSCC(NC4=CC=C(NCC5=CC=CC=C5)C=C4)=O)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.41
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(N)=CC(NC(CN5CCC(O)CC5)=O)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.41
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(NC(CN5CCC(O)CC5)=O)=CC(N)=N4)=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.41
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N4CC5=C(C=CC=C5OCCN6C7=CC=CN=C7N=C6)C4=O)=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.41
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC=CN=C4)=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.40
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(N)=CC(NC(CN5CCOCC5)=O)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.40
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(NC(CN5CCOCC5)=O)=CC(N)=N4)=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.40
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(N)=CC(NC(CN5CCCC5)=O)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.40
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(NC(CN5CCCC5)=O)=CC(N)=N4)=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.40
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC(C5=CC=CC=C5)=O)=N4)=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.40
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C(NCC5=CC=C([N+](O-)=O)C=C5)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.40
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(C5=CC=CC(Cl)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.40
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(NC=C5)=C5C(NC(CNC6CC6)=O)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.40
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC(CN(C)CCO)=O)=N4)=O)[C@]2(C)[C@@H](C)CC3	6.40

O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CSC(NC(CN5CCCC5)=O)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.39
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(Br)=C5)O4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.39
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(C(O)=C(CN5CCCCC5)O4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.39
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN(C(C5=CC=CC(CI)=C5)=O)(C(N)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.39
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(NC(C5=CC=CC(N)=C5)=O)S4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.39
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN(C(C5=CC=C(OC)=C5)=O)(C(N)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.39
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN(C(C5=CC=CC(CO)=C5)=O)(C(N)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.39
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN(C(C5=CC=CC(CO)=C5)=O)(C(N)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.39
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(CO)=C5)=O)(C(N)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.38
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(C5=C(C)C)=CC=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.38
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(NC([C@@H](N)[C@@H](C)CC)=O)CN=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.38
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC(C)(C)CNC(C4=CC=C(OC)C=C4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.38
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC(C)(C)CNC(C4=CC=C(OC)C=C4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.38
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1](H)[C@3](C)[C@H](OC(CSCC(NC4=CC=C(NCCO)C=C4)=O)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.38
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1](H)[C@3](C)[C@H](OC(CSCC(NC4=CC=C(NC(C)C)C=C4)=O)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.38
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN(C(C5=CC=CC(F)=C5)=O)(C(N)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.38
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC(C)(C)CNC([C@H](C)C4=CC=CC=C4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.38
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN(C(CN5CCCC5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.38
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C)N4=N/C(C5=CC=C(O)C=C5)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.38
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN(C(C5=CC=CC(C)=C5)=O)(C(N)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.38
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N4C(C(C=C(N5CCC[C@H]5C(O)=O)C=C6=C6C4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.37
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS(S(C4=NC5=C(C=CC=C5)S4)=O)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.37
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(NC(CNCCO)=O)CN=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.37
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1](H)[C@3](C)[C@H](OC(CN4CCN(C(CN5CCCCC5)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.37
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1](H)[C@3](C)[C@H](OC(CSCC(NC4=CC=C(NCCO)C=C4)=O)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.37
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC(C)(C)CNC(C4=CC=C(N)C=C4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.37
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC(C)(C)CNC(C4=C(C)C=CC=C4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.37
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)=C5[N+](O)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.37
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN(C(C5=CC=CC(C)=C5)=O)(C(N)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.37
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC(C)(C)CNC(CN(C)CC)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.36
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCCNC(C4=CC=CC(CI)=C4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.36
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCCNC(C4=CC=C(CI)C=C4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.36
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(CI)=C5)O4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.36
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(NC(CN(CO)=O)C=CC(CO)C=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.36
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(OC)C=C5)O4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.36
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N(C(C4)C(C5=C4C=C(OC)C([N+](O)=O)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.36
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1](H)[C@3](C)[C@H](OC(CN4CCN(C5=CC=CC([N+](O)=O)=O)C5)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.36
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCCNC(C4=CC=CC(F)=C4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.35
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC5(C(C=CC=C5)N4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.35
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1](H)[C@3](C)[C@H](OC(CSCC(NC4=CC=C(N)C=C4)=O)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.35
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCCNC(C4=CC=CC(CO)=C4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.35
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC=C5N)O4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.35
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1](H)[C@3](C)[C@H](OC(CSC4=NC(CO)C=CC(CO)C=C	6.34
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=CC(OC)=C5)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.34
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=C(CO)C=C5)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.34
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1](H)[C@3](C)[C@H](OC(CN4CCN(C5=CC=CC(OC)=C5)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.34
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1](H)[C@3](C)[C@H](OC(CSC4=NC(N(C)C)=CC(C)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.34
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C)=C5)N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.34
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CN=CC=N5)O4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.33
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC=N5)O4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.33
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=CC(OC)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.33
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1](H)[C@3](C)[C@H](OC(CN4CCN(C5=CC=CC(OC)=C5)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.33
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC=C5)O4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.33
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1](H)[C@3](C)[C@H](OC(CSC4=NC(OC)=CC(C)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.33
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=CC(CI)=C5)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.33
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=C(CO)C=C5)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.33
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(C=CC=C5)=C5N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.33
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNC45CC(C(CO)C)CC(C)C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.32
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(C=CC=C5)=C5S4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.32
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(C=CC=C5)=C5S4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.32
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS(SC4=NN=CS4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.32
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(C=CC=C5)=C5N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.31
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(C=CC=C5)=C5N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.31
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(N)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.31
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(N)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.31
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1](H)[C@3](C)[C@H](OC(CSC4=NC(O)=CC(N)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.30
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1](H)[C@3](C)[C@H](OC(CSC4=NC(C)=CC(C)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.30
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(C)C)[C@H](O4)CNC4=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.30
O=C(C(C1)[C@2](H)[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC(C)[C@H](O4)CNC4=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.30



O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N(CC4)C(C5=C4C=CC=C5)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.30
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNCCC4=CC=C54)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.29
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=C(O)C(C=C(CO)O4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.29
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(C[N+](4=CC=C(N(C)C)C=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.29
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCCC(CO)C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.28
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.28
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=C(N)N=C6N7CCCC7)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.28
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=CC=C7[N+](O-)=O)CC6)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.21
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(C[N+](4(CCC(O)C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.27
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CC(C(O)=C(CN(C)C)O4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.27
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=C(CI)C=C7)CC6)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.21
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=CC=C7OC)CC6)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.20
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCC(O)C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.25
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(C[N+](4(CCCC4)C=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.25
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=CC=C7O)CC6)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.20
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=CN=C6N7CC(CNC)CC7)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.19
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=CC=C7)CC6)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.19
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C)C[C@@H](OC(COC(CC4)CCN4C(CCN5C=NC6=C5N=CN=C6N7CCC(C7)N)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.19
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS[C@H]4CC[C@H](C(OCC)=O)C[C@H]4NS(=O)(C5=CC=C(NC(C)=O)C=C5)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.18
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=C(N)N=C6N7CCNCC7)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.18
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=CN=C6N7CC(CN)CC7)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.18
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=CN=C6N7CCC(C7)N)=O)C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.17
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS[C@H]4CC[C@H](C(OCC)=O)C[C@H]4NS(=O)(C5=CC=C(CI)C=C5)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.17
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC(C4)CN4C(CCN5C=NC6=C5N=C(N)N=C6N7CCNCC7)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.17
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCCN(C(CCN5C=NC6=C5N=CN=C6N7CCC(C7)N)=O)C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.17
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=CN=C6N7C[C@@H](N)CC7)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.17
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5N=NC(CN6CCC(CCO)CC6)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.17
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=CC(CN6C7=NC=NC(N8CCN(C)CC8)=C7N=C6)=C5)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.17
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(NC(C5)=C5C(NC(CN6CCC(N7CCCCC7)CC6)=O)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.17
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(NC(C5)=C5C(NC(CN6CCN(C7=CC=CC=C7)CC6)=O)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.16
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=CC=C5CN6C7=NC(N)=NC(N(C)CC)=C7N=C6)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.16
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=CC(CN6C7=NC(N)=NC(N(C)CC)=C7N=C6)=C5)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.16
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5N=NC(CN6CCCC(CO)C6)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.16
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCCN)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.24
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=CN=C6N)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.23
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCCN(C(CCN4C=NC5=C4N=CN=C5N6CCC(N)C6)=O)C=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.15
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS[C@H]4CC[C@H](C(OCC)=O)C[C@H]4NS(=O)(C5=CC=CC=C5)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.15
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=C(C/C=C/C6=CC=C([N+](O-)=O)C=C6)=O)C=C5)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.14
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=C(CN6C7=NC=NC(NCCN)=C7N=C6)C=C5)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.14
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=C(CN6C7=NC=NC(NC(N)=N)=C7N=C6)C=C5)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.14
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5N=NC(CN6CCOCC6)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.14
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(C[N+](C)(C)C=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.23

O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5N=NC(CN6CCCC6)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.14
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(C=NO)=CN=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.22
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN(C)C)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.21
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C6=CC=CC=C6)CC5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.14
CC1C23C(C(CC3)=O)C(C(CC(C=C)(C)C1O)OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C6=C(Cl)C=CC=C6)CC5)=O)CC4)=O)(C(CC2)C)C	6.14
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(C=C/C5=C(OC)C=CC=C5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.21
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC(C5=CC=C(Cl)C=C5Cl)=O=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.13
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C6=CC=C(OC)C=C6)CC5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.13
CC1C23C(C(CC3)=O)C(C(CC(C=C)(C)C1O)OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C6=C(OC)C=CC=C6)CC5)=O)CC4)=O)(C(CC2)C)C	6.13
CC1C23C(C(CC3)=O)C(C(CC(C=C)(C)C1O)OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C6=CC=C(OC)C=C6)CC5)=O)CC4)=O)(C(CC2)C)C	6.13
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C6=CC=C(C(C/C=C/C6=CC=C(N)C=C6)=O)C=C5)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.13
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=C(C(C/C=C/C6=CC=C(N)C=C6)=O)C=C5)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.13
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N4CC5=C(C=CC=C5OCCN6C=NC(C7=CC=CN=C7)=C6)C4=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.13
CC1C23C(C(CC3)=O)C(C(CC(C=C)(C)C1O)OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C6=CC(O)=CC=C6)CC5)=O)CC4)=O)(C(CC2)C)C	6.12
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N4C(C(C=C(NC(CN5CCN(CCO)CC5)=O)C=C6)=C6C4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.12
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C)N4/N=C/C5=CC=C(N6CCOCC6)C=C5)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.12
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C6=CC=CC=C6)CC5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.12
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C6=CC=CC(C)C=C6)CC5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.12
CC1C23C(C(CC3)=O)C(C(CC(C=C)(C)C1O)OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C6=CC(C)=CC=C6)CC5)=O)CC4)=O)(C(CC2)C)C	6.12
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(C=C/C5=CC=CC=C5F)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.20
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC([C@@]([H])(N)CC5=CC=CC=C5)=O=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.12
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(C=C/C5=CC=C(F)C=C5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.20
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=CC=C5CN6C7=NC=NC(N)=C7N=C6)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.12
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N(C(C4)C(C5=C4C=C(OCCCCN6CCOCC6)C=C5)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.11
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N(C(C4)C(C5=C4C=C(OCCCN6CCN(C)CC6)C=C5)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.11
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C6=CC=CC=C6)CC5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.11
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N4C(C(C=C(NC(CCN5CCN(C)CC5)=O)C=C6)=C6C4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.11
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(CN5CCN(C6=CC=C([N+][O-])=O)C=C6)CC5)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.11
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC(CN(CCC)CCC)=O=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.11
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(NCC5=CC=C(C(F)F)C=C5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.11
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC(CN5CCN(C)CC5)=O=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.11
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC(CN5CCN(C)CC5)=O=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.11
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(N5CCC(CO)CC5)=CC(C)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.15
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=C(N6C=N7=C6N=CN=C7N)C=C5)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.11
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=C(N6C7=NC=NC(N)=C7N=C6)C=C5)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.11
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N(C(C4)C(C5=C4C=C(OCCCN6CCOCC6)C=C5)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.11
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N(C(C4)C(C5=C4C=C(OCCN6CCN(C)CC6)C=C5)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.10
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N4C(C(C=C(NC(CCN5CCN(C)CC5)=O)C=C6)=C6C4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.10
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N4C(C(C=C(NC(CN5CCN(C)CC5)=O)C=C6)=C6C4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.10
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC(CN5CCOCC5)=O=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.10
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC(CN5CCCCC5)=O=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.10
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC(C5=CC=CC=C5O)=O=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.10
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5CCN(C)CC5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.10
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(NC([C@H](C)C5=CC=CC=C5)=O)S4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.10
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(NCC5=CC=C([N+][O-])=O)C=C5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.10
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(C5=C(Cl)C=CC=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.10
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(C5=CC=C(Cl)C=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.10
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N(C(C4)C(C5=C4C=C(OCCN6CCOCC6)C=C5)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.09
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C)N4/N=C/C5=CC=C(N(C)C)C=C5)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.09
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N4C(C(C=C(NC(CN5CCOCC5)=O)C=C6)=C6C4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.09
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N(C(C4)C(C5=C4C=C(OCCN6CCCC6)C=C5)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.09
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC(CN(CO)CO)=O=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.09
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CC(C(OC)=CO4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.15

O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(N)=CC(NC(CN(CC)CC)=O)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.09
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(NC(CN(CC)CC)=O)=CC(N)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.09
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN(C(C5=CC=CC=C5Cl)=O)C(N)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.09
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN(C(C5=CC=C(Cl)C=C5)=O)C(N)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.09
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(N)=CC(NC(CN5CCCC5)=O)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.09
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(NC(CN5CCCC5)=O)=CC(N)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.09
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C)N4/N=C/C5=CC=C(Cl)C=C5)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.09
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSCC(NC4=CC=C(NCCCC)C=C4C)=O)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.09
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(NC5=CC=C([N+])([O-])=O)C=C5)=O)CC4=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.09
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS(SC4=NC5=C(C=CC(Cl)=C5)S4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.09
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(NCC5=CC=C(OC)C=C5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.09
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(C5=C(F)C=CC=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.08
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=C(C(F)F)F)C=C5)N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.08
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(NC(N5CCCCC5)=O)S4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.08
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC=C(C)CNC(C4=C(C)C=C=C4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.08
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC(C5CCCN5)=O)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.08
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(C5=CC=C(C)C=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.08
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN(C(C5=CC=C(F)C=C5)=O)C(N)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.08
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSCC(NC4=CC=C(NCC=O)C=C4C)=O)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.08
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C)N4/N=C/C5=CC=CC=C5F)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.08
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C(CNC5=CC=CC(F)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.08
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C)N4/N=C/C5=CC=CC=C5O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.08
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C)N4/N=C/C5=CC=CC(O)=C5)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.08
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C)N4/N=C/C5=CC=CC=C5N+([O-])=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.08
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN(C(C5=CC=CC=C5C)=O)C(N)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.08
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N4C(C(C=CC=C5NC(C(O)=O)C(C)C=C5C4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.08
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C)N4/N=C/C5=CC=CC=C5N+([O-])=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.07
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN(C(C5=CC=CC=C5C)=O)C(N)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.08
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N4C(C(C=CC=C5NC(C(O)=O)C(C)C=C5C4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.07
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(CO)=CC=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.14
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C(CN(CCC)CCC)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.07
CC1C23C(C(C3)=O)C(C(C(C=C(C)C1O)OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C)CC5)=O)CC4)=O)(C(C2)C)C	6.07
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C(NCC5=C([CF3])C=CC=C5)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.07
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(NCC5=CC=CC=C5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.06
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C(CNC5=CC=CC=C5)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.06
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C)N4/N=C/C5=CC=CC=C5)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.06
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C5=CC=C([N+])([O-])=O)C=C5)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.06
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N4C(C(C=C(NC(C)C(O)=O)C=C5)=C5C4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.05
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N4C(C(C=CC(N5CCOCC5)=C6)=C6C4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.05
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C(CN(C)CC)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.05
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS(SC4=NN=C(S)S4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.05
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C(CN5CCCC5)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.05
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=C(O)C(C=CO4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.14
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS(S(C4=NN=C(C)S4)=O)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.05
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=CC=C5OC)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.04
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=C(C)C=C5O4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.04
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(C=NN)=CN=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.14
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(N5CCN(C)CC5)=CC(C)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.13
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=CC=C5O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.03
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C5=CC=CC=C5O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.03
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS(S(C4=NC=CC=C4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.03
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=CC=C5C)C=C5O4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.03
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C(CN(C)C)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.03
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=CC=C5C#N)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.03
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS(SC4=NNC(N)=N4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.02
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N4C(C(C=CC=C5N+([O-])=O)C5C4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.02
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N4C(C(C=C([N+])([O-])=O)C=C5)=C5C4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.02
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C5=CC=CC=C5)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.02
[H][C@]12CC[C@](C)[C@](C1)(SCC(O[C@@]3C[C@@](C=C)([C@@](O)[C@](C)([C@]45CCC([C@]4([C@]3([C@](C)(CC5)[H])C)[H])=O)[H])([H])C)[H])=O)[H])(N2C	6.02
[H]	
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=CC=CC(C(O)=O)=C4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.01
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(C=NN)=CC=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.01
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS(SC4=NNC(N)=N4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.01
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS(SC4=NNC(N)=N4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.01
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CC(C(O)=C(CN5CCCC(O)C5)O4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.10
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSCCN(CC)CC)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.99
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(N)S4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.99
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(C#N)=CC=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	6.12
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNCCC4=CC=C54)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.99
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC=CC(C)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.99
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC=CC(C)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.99
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNCCS=O)(C)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.99

O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNCCC4=CC=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.98
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC=C54)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.98
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC=C54)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.98
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC=CN4C)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.98
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CC=CO4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.98
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC=CN4C)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.98
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CC=CO4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.98
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNCCSC)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.96
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(F)=CN=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.12
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCOCC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.95
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC=C(N)C=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	6.11
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C/C=C/C5=CC=CC=C5Cl)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.91
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C/C=C/C5=CC(Cl)=CC=C5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.91
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=CC=C7Cl)CC6)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.90
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=CC(OC)C=C7)CC6)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.90
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C/C=C/C5=CC(F)=CC=C5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.90
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C/C=C/C5=CC(C)=CC=C5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.90
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=CC=C7F)CC6)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.90
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=CC(F)C=C7)CC6)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.90
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=CC(C)C=C7)CC6)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.89
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=CC(C)C=C7)CC6)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.89
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=CC(C)C=C7)CC6)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.89
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS[C@H]4CC[C@H](C)(OCC)=O)C[C@H]4NS(=O)(C5=CC=C(Br)C=C5)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.89
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(N)C=CC=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.89
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=C([N+](O-))=O)C=C7)CC6)=C5)=O)C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.89
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=C(N)N=C6N7CCC(N)CC7)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.88
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=C(N)N=C6N7CC(N)CCC7)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.88
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=C(N)N=C6N7CC(NC)CC7)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.88
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=C(Cl)C=C7)CC6)=C5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.88
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCCN(C(CCN5C=NC6=C5N=C(N)N=C6N7CCNCC7)=O)C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.88
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=C(N)N=C6N7CC(N)CC7)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.88
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=C(N)N=C6N7CC(NC)C7)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.88
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS[C@H]4CC[C@H](C)(OCC)=O)C[C@H]4NS(=O)(C5=CC=C([N+](O-))=O)C=C5)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.87
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=C(C6NC(N)=NC(C7=CC=CC=C7[N+](O-))=O)C=C5)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.87
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC(C4)CCN4C(CCN5C=NC6=C5N=C(N)N=C6N7CCNCC7)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.87
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS[C@H]4CC[C@H](C)(OCC)=O)C[C@H]4NS(=O)(C5=CC=C(F)C=C5)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.87
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS[C@H]4CC[C@H](C)(OCC)=O)C[C@H]4NS(=O)(C5=CC=C(F)C=C5)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.86
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(NC(C5=C5C(NC(CN6CCN(C7=CC=CC=C7)CC6)=O)N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@H]2C	5.86
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5CCN(C6=CC=CC(Cl)=C6)CC5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.86
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS[C@H]4CC[C@H](C)(OCC)=O)C[C@H]4NS(=O)(C5=CC=C(F)C=C5)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.86
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(NCC5=CC=C(NC(CN6CCOCC6)=O)C=C5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.86

O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS[C@H]4CC[C@H](C(OCC)=O)C[C@H]4NS(=O)(C5=CC=C(C)C=C5)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.86
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=CC=C5CN6C7=NC=NC(N(CC)CC)=C7N=C6)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.85
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=CC(CN6C7=NC=NC(N(CC)CC)=C7N=C6)=C5)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.85
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5N=NC(CN6CCC(O)CC6)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.85
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(CC4)C(CCN5C=NC6=C5N=CN=C6N7CCC(C7)N)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.85
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5CCN(C6=C(O)C=CC=C6)CC5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.85
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5CCN(C6=CC=C(O)C=C6)CC5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.85
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=C(C/C=C/C6=CC=CC([N+])([O-])=O)=C6)=O)C=C5)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.84
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=C(C/C=C/C6=CC=CC=C6[N+])([O-])=O)=O)C=C5)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.84
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=C(C/C=C/C6=CC=C(C=C6)N(C)C)=O)C=C5)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.84
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(NC=C5)=C5C(NC(CN6CCC(N(C)O)CC6)=O)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.84
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N4CC5=C(C=CC=C5OCCCCN6C=NC(C7=CC=CN=C7)=C6)C4=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.84
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(NC5=CC=CC(NC(OC(C)(C)C)=O)=C5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.83
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C6=CC=CC=C6O)CC5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.83
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(N)=CC(NC(CN5CCCC(CCO)C5)=O)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.83
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(NC(CN5CCCC(CCO)CC5)=O)=CC(N)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.83
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN(C(C5=C(F)C(F)=C(F)C(F)=C5F)=O)C(N)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.83
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(NC=C5)=C5C(NC(CN6CCN(C)CC6)=O)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.82
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(NC=C5)=C5C(NC(CN6CCCCC6)=O)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.82
CC1C23C(C(C23)=O)C(C(C(C(C=C)C)C)O)OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C6=C(O)C=CC=C6)CC5)=O)CC4)=O)(C(C22)C)C	5.82
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN(C(C5=CC=C(OC(F)F)C=C5)=O)C(N)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.82
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C/C=C/C5=CC(Br)=CC=C5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.82
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=C5C(NC(CN(CCO)CCO)=O)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.81
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN(C(C5=CC(Cl)=CC(Cl)=C5)=O)C(N)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.81
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(CN5CCN(C6=CC=CC=C6[N+])([O-])=O)CC5)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.81
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN(C(C5=CC=C(C(F)F)C=C5)=O)C(N)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.81
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN(C(C)N4/N=C/C5=CC=C(N6CCCC6)=C5)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.81
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(NCC5=C(C(F)F)C=CC=C5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.81
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(NC5=CC=C(Br)C=N5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.81
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=CC=C5CN(C(N6)=O)C=C(C)C6=O)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.81
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=CC(CN(C6)=O)C=C(C)C6=O)=C5)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.81
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=C5C(NC(CNCC(OC)=O)=O)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.80
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(NC5=CC=CC(C(F)F)C=C5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.80
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN(C(C5=CC=C(F)C=C5Cl)=O)C(N)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.80
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN(C(C5=C(F)C=CC=C5Cl)=O)C(N)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.80
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN(C(NC(C5=C(OC)C=CC=C5)=O)S4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.80
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(NC(CN5CCC[C@H]5CN)=O)=CN=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.80
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS(S(C4=NC5=C(C=CC(Cl)=C5)S4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.80
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=CC(C6=CC=CC(CO)=C6)=C5)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.80
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN(C(C)N4/N=C/C5=CC=CC([N+])([O-])=O)=C5)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.80
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN(C(C)N4/N=C/C5=CC=CC([N+])([O-])=O)=C5)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.80
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=C5C(NC(CNCC(OC)=O)=O)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.79
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(C5=C(OC)C=CC=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.79
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(C5=CC=CC(OC)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.79
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(C5=CC=C(OC)C=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.79
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(CN5CCN(C6=CC=CC=C6)CC5)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.79
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(CN5CCN(C6=CC=CC(C)C=C6)CC5)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.79
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C([C@H](C)NC(OC(C)(C)C)=O)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.79
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(NC5=CC=CC6=C5C=CC=N6)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.79
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN(C(C)N4/N=C/C5=CC=CC=C5Cl)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.79

O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C)N4/N=C/C5=CC=CC(C)=C5=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.79
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC=C5O)=O)C(N)=N4=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.79
N[C@@H](CC1=CC=C(O)C=C1)C(N(CC2)CCN2CC(OC[C@@H]([C@]3(C)[C@H](C)CC4)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@H](C)[C@@]54[C@@]3([H])C(CC5)=O)=O)	5.79
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC(CNCCO)=O)=N4=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.78
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(C5=CC=C(F)C=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.78
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(NC(N5COCC5)=O)S4=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.78
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC([C@@]([H])(N)C(C)C)=O)=N4=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.78
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(C(F)(F)F)=C5)N4=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.78
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC(C)C)CNC(C4=CC=C(Cl)C=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.78
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(C5=CC=CC(C)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.78
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C)N4/N=C/C5=CC=CC(C[N+]#C-)]C5=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.78
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C)N4/N=C/C5=CC=C([N+]#C-)C=C5=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.78
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(/C=C/CN5C(N=CN=C6N)=C6N=C5)=C4=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.78
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(N)=CC(NC([C@H](N)C(C)C)=O)=N4=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.78
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(O)=CC(NC([C@@H](C)C(O)C)=O)=N4=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.78
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC=C5F)=O)C(N)=N4=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.78
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C)N4/N=C/C5=CC=CC(C(F)C=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.78
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS(S(C4=NC(OC)=CC(OC)=N4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.78
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(C=C([Na])C=C5)=C5N4=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3.O=S=O	5.78
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(C=C([Na])C=C5)=C5N4=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3.O=S=O	5.78
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(NC5=CC=C(OC)C=C5)=O)CC4=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.78
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CCC5=CC=C(C)C=C5)=O)CC4=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.77
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(C=CC(C(C)C)=O)C(C)C=C5)=CC4=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.77
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(NCCC5=CC=CC=C5)=O)CC4=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.77
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(OCCN)=CC(C)=N4=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.77
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C)N4/N=C/C5=CC=CC(C5)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.77
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C)N4/N=C/C5=CC=CC(C)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.77
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(C)C=C5=CC=CC(C5)=O)CC4=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.77
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(N)=CC(NC(CN(C)C)=O)=N4=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.77
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(NC(CN(C)C)=O)=CC(N)=N4=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.77
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C)CC5)=O)CC4=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.77
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC(C)C)CNC(C4=C(N)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.77
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC(C)C)CNC(C4=CC(C)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.77
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(NC5=CC=CC(F)=C5)=O)CC4=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.77
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C(NC5=CC=CC(F)=C5)=O)CC4=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.77
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(NC5=CC=CC(N)=N5)=O)CC4=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.76
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(NC5=CC=CC(N)=C5)=O)CC4=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.76
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(NC5=CC=CC(C)=O)CC4=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.76
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS(C4=NC5=C(C)C=CC=C5)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.76
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C(CN5CCCC5)=O)CC4=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.76
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS(S(C4=NC(N)=CC(N)=N4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.75
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(NC5=CC=CC=C5)=O)CC4=O)[C@]2	

O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(/C=C/C5=CC([N+](O-))=O)=CC=C5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.70
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNCCC4=CC=C(C)C=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.70
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNCCC4=C(C)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.70
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNCCCC4=CC=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.70
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(C=CC(NC(C5=CC=CN5)=O)=C6)=C6N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.69
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC=C(CO)N=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.69
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(C[N+](4(CCCC(CO)C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.69
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(C[N+](4=CC=C(N)C=C4Cl)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.69
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(NC(CN5CCCC5)=O)=CN=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.69
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(/C=C/C5=CC=C(C)C=C5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.69
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNCC4=CC=CC=C4F)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.69
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNCC4=CC=CC(F)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.69
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNCCS(=O)(C)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.68
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNCCC4=CC=NC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.68
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNCCC4=CC=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.68
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(C(O)=C(CN5CCCC5)O4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.68
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(C[N+](4=C(CCC5)C5=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.68
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(N)=NN4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.68
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC=C(N)N=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.67
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(N(C)CC)=CC(C)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.09
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCSCC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.67
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNCCSC)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.65
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCOCC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.65
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCNCC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.65
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(C[N+](4=CC=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.64
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(/C=C/C5=CC=CC=C5Br)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.64
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(/C=C/C5=CC=C(Br)C=C5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.64
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(/C=C/C5=CC=C(C(F)(F)F)C=C5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.63
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNCCO)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.62
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC=C([N+](O-))C=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.62
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=CC(C1)=C7)CC6)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.60
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(C#N)C=CC=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.60
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=C(O)C=C7)CC6)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.59
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=C(N)N=C6N7CCC(N)CC7)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.59
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=CC=C7[N+](O-))=O)CC6)=C5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.59
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=CC([N+](O-))=O)=C7)CC6)=C5)=O)C=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.59
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C)C[C@@H](OC(CS(C(CC4)CCN4C(CCN5C=NC6=C5N=CN=C6N7CCC(C7)N)=O)(=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.59
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC(C4)OCCN4C(CCN5C=NC6=C5N=C(N)N=C6N7CCNCC7)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.58
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=C(N)N=C6N7CC(CN)CC7)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.58
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5N=NC(CN6CCN(C7=C(C)C=CC=C7)CC6)=C5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.57
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS[C@@H](C4)CCN4C(CCN5C=NC6=C5N=C(N)N=C6N7CCNCC7)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.57
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C(C(C5=NCN6=C5C=CC=C6)NC(OC(C)(C)C)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.56
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5CCN(C6=CC=C([N+](O-))=O)C=C6)CC5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.56
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(NC=C5)=C5C(NC(CN6CCC(C7=CC=CC=C7)CC6)=O)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.56
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC(C4)CN4C(CCN5C=NC6=C5N=C(N)N=C6N7CCNCC7)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.56
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNC(CC4)CCN4C(CCN5C=NC6=C5N=CN=C6N7CCC(C7)N)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.56
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5CCN(C6=CC=C(OC)C=C6)CC5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.56
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=C(C6CC(C7=CC=CC=C7[N+](O-))=O)=NN6)C=C5)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.55
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5CCN(C6=CC=CC=C6F)CC5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.55
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5CCN(C6=C(C)C=CC=C6)CC5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.55

O=C(N(CC1)CCN1CC(O[C@@H]([C@]2(C)[C@H](C)CC3)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@H](C)[C@@]43[C@@]2([H])C(CC4)=O)=O)[C@H](CC5=CC=CC=C5)NC(OC(C)C)C=O	5.54
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=CC(C6=CC=CC(CN(CC)CC)=C6)=C5)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.53
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C(NC5=CC=CC(NC(OC(C)(C)C)=O)C5)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.53
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N4CC5=C(C=CC=C5OCCCN6C=NC(C7=CC=CN=C7)=C6)C4=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.53
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N4C(C(C=C(NC(CCN5CCN(CCO)CC5)=O)C=C6)=C6C4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.53
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C6=CC=C(O)C=C6)CC5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.52
CC1C23C(C(CC3)=O)C(C(CC(C=C)(C)C1O)OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C6=CC=C(O)C=C6)CC5)=O)CC4)=O)(C(CC2)C)C	5.52
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(CN5CCN(C6=CC=CC([N+])([O-])=O)=C6)CC5)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.51
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN(C(C5=CC=CC=C5C(F)(F)F)=O)C(N)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.51
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C([C@H]([C@@H](C)O)NC(OC(C)(C)C)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.51
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C)N4/N=C/C5=CC=CC(C(F)(F)F)=C5)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.51
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C)N4/N=C/C5=CC=CC(C(F)(F)F)C=C5)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.51
O=C(N(CC1)CCN1CC(O[C@@H]([C@]2(C)[C@H](C)CC3)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@H](C)[C@@]43[C@@]2([H])C(CC4)=O)=O)[C@H](C(C)C)NC(OC(C)(C)C)=O	5.51
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C(NC5=CC=CC(C(F)(F)F)=C5)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.50
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(NC(C5=CC=CC(C5C1)=O)S4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.50
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(NC(C5=CC=CC(COC)C=C5)=O)S4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.50
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=CC=C5CC6=CC=C(OC)C=C6)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.50
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(OC(CCC)=CC(C)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.49
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(NCCC5=CC=CC(OC)=C5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.49
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CNCC5=CC=CC(C)C)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.49
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(CN5CCN(C6=CC=CC=C6F)CC5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.49
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=CC(CN6CCN(C)CC6)=C5)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.49
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C(NC5=C(C=CC=N6)C6=CC=C5)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.49
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(NC(C5=CC=CC(CN)C=C5)=O)S4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.49
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C(NC5=CC=C([N+])([O-])O)C=C5)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.48
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C(NCC5=CC=C(OC)C=C5)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.48
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC(C)(O)CNC(C4=CC(C=CC=C5)=C5N4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.48
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC(C)(O)CNC(CN(CCC)CCO)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.48
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(C5(S(C4=NC5=C(C=CC(OC)=C5)N4)=O)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.48
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(CCCN5C(N=CN=C6N)=C6N=C5)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.48
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(NCCN5CCOCC5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.48
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(NCC5=CC=C(C)C)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.48
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(O)=CC(NC([C@H](C)C(C)C)=O)N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.48
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC(C)(O)CNC(C4=CC(OC)=CC=C4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.48
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC(C)(O)CNC([C@@H](C)C4=CC=CC=C4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.48
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C(NC5=CC=C(OC)C=C5)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.47
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(NCC5=CC=C(C)C=C5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.47
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C(OC(CN5=CC=C(C)C=C5)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.47
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC(C)(O)CNC(CN4CCCCC4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.47
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=CC(CN(CC)CC)=C5)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.47
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(C=C(C)C)C=CC=C5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.47
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N4C(C(C=CC(NC(C(F)(F)F)=O)C5)=C5C4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.47
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC(C)(O)CNC(C4=CC(N)=CC=C4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.47
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N4C(C(C=CC(NCC5=CC=CC=C5)=C6)=C6C4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.47
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(C5(SC4=NN=NN4CCN(C)C)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.46
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(N(C)C5=CC=CC=C5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.46
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C([C@H](CCSC)N)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.46
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(C5(S(C4=NC5=C(C=CC=C5)O4)=O)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.46
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C(CN5CCOCC5)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.46
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC(C)(O)CNC(OC(C)C)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.45
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C(NC5=CC=CC=C5)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.45
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(OC(C)C)=CC(C)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	6.07
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC(C)(O)CNC(CNC(C)C)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.45
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N4C(C(C=CC(N5CCCCC5)=C6)=C6C4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.45
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C5=CC=CC=C5C1)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.44
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C5=CC=C(C)C=C5)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.44
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(C5(S(C4=NN=CS4)=O)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.43
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC=C5)O4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.43
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=CC(CN)=C5)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.43
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=C(CN)C=C5)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.43
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(C5(SC4=NN=NN4C)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	5.42



O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N(CC4)C(C5=C4C=C(OC)C=C5)=O)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.42
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C([C@H](C)N)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.41
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(N)=CC(N4C)=O)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.41
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC(N4C)=NC(N)=CC4=O)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.41
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N4C(C(C=CC=C5OC)=C5C4)=O)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.41
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=CC=C5)=C4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.40
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C(CN)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.40
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNCCC4=CC=C(O)C=C4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.40
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C)CC4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.36
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.36
CC1C23C(C(CC3)=O)C(C(CC(C=C)(C)C1O)OC(CN4CCNCCC4)=O)(C(CC2)C)C	5.35
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(C1N+)=CN(C)C=C4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.35
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNCC(C)C)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.34
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNCCCC)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.34
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCCC4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.33
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C)/C=C/C5=CC=C(OC)C=C5)=O)CC4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.31
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=C(N)N=C6N7CC(CNC)CC7)=O)CC4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.29
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C)/C=C/C5=CC=CC=C5)=O)CC4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.28
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=CC=C7O)CC6)=C5)=O)CC4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.28
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=CC(OC)=C7)CC6)=C5)=O)CC4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.28
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=CC(F)=C7)CC6)=C5)=O)CC4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.27
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=C(F)=C7)CC6)=C5)=O)CC4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.27
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=CC(O)=C7)CC6)=C5)=O)CC4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.27
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC(C)=CC=C7)CC6)=C5)=O)CC4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.27
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5CCN(C6=C([N+])([O-])=O)C=CC=C6)CC5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.26
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5CCN(C6=CC=CC([N+])([O-])=O)C=CC=C6)CC5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.26
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5CCN(C6=CC=CC([N+])([O-])=O)C=CC=C6)CC5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.26
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=CC=C7)CC6)=C5)=O)CC4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.26
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5N=NC(CN6CCN(N(CC)CC)CC6)=C5)=O)CC4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.26
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5N=NC(CN6CCN(N7CCCC7)CC6)=C5)=O)CC4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.26
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C(NCC5=CC=C(NC(CN6CCOCC6)=O)C=C5)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.26
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5CCN(C6=CC(OC)=CC=C6)CC5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.25
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CC(C(O)=CN4C)=O)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.25
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN(C)CCN(C)C(CCN4C=NC5=C4N=CN=C5N6CCC(N)C6)=O)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.25
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5N=NC(CN6CCN(N(C)C)CC6)=C5)=O)CC4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.24
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C(C(C)C)CC)NC(OC(C)(C)C)=O)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.22
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(NC=C5)=C5C(NC(CN6CCNCC6)=O)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.21
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C)N4=N/C=C5=CC=C(N(CC)CC)C=C5)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.21
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C(NC5=CN=C(Br)C=C5)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.21
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(CN5CCN(C6=CC=CC=C6Cl)CC5)=C4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.20
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(CN5CCN(C6=CC=CC(Cl)=C6)CC5)=C4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.20
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(CN5CCN(C6=CC=C(Cl)C=C6)CC5)=C4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.20
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(O)=CC(NC(C5=CC=C(OC)C=C5)=O)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.20
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(N)=CC(NC(C5=CC=C(OC)C=C5)=O)=N4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.20
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(CN5CCN(C6=CC=CC=C6OC)CC5)=C4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.20
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(CN5CCN(C6=CC=CC(OC)=C6)CC5)=C4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.20
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(CN5CCN(C6=CC=C(OC)C=C6)CC5)=C4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.20
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC(CN5CCNCC5)=O)=N4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.20
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(NC(C5=CC=C(Cl)C=C5)=O)S4)=O)[C@2(C)[C@H](C)CC3	5.20
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C(NCCC5=CC(OC)=CC=C5)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.19

O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(CN(C5CCCCC5)C6CCCCC6)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.19
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CN4CCN(C(NC5=CC=CC(NC(C)=O)=C5)=O)CC4)=O)C[C@@]([C](C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.19
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CN4N=NC(CN5CCN(C6=CC=CC(F)=C6)CC5)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.19
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CN4N=NC(CN5CCN(C6=CC=CC(F)=C6)CC5)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.19
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CSC4=NC(O)=CC(NC(C5=CC=C(C)C=C5)=O)=N4)=O)C[C@@]([C](C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.19
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CSC4=NC(N)=CC(NC(C5=CC=C(C)C=C5)=O)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.19
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CN4N=NC(CN5CCN(C6=CC=CC=C6O)CC5)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.19
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CN4N=NC(CN5CCN(C6=CC=CC(O)=C6)CC5)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.19
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=C(C)C=C6)CC5)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.19
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CN4N=NC(CN5CCN(C6=CC=CC(C)C=C6)CC5)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.19
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CSC4=NC(O)=CC(NC([C@@H]5NCCCC5)=O)=N4)=O)C[C@@]([C](C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.19
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CSC4=NC(N)=CC(NC([C@H]5CCCCN5)=O)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.19
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(NC(C5=CC=CC=C5N)=O)S4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.19
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CN4N=NC(CN5CCN(C6=CC=CC=C6)CC5)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.18
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CN4CCN(C(NCC5=CC=CC(C)C=C5)=O)CC4)=O)C[C@@]([C](C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.18
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CN4CCN(C(NCCN5COCOC5)=O)CC4)=O)C[C@@]([C](C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.18
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(NCCN5CCCC5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.18
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CN4CCN(C(NCCN5CCCC5)=O)CC4)=O)C[C@@]([C](C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.18
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CSC(C)(O)CNC(OC4=CC=CC=C4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.18
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(C5(S(C4=NN=NN4CCN(C)C)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.17
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CN4CCN(C(NCC5=CC=CC(C)=O)CC4)=O)C[C@@]([C](C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.17
N[C@@H](CC1=CC=CC=C1)C(N(C2)CCN2CC(O)[C@@H]([C@3](C)[C@H](C)CC4)C[C@@]([C](C=C)[C@@H](O)[C@H](C)[C@@]54[C@@]3([H])C(CC5)=O)=O)=O	5.17
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CSC(C)(O)CNC(CN4CCOCC4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.17
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=C(CN(C)C)C=C5)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.17
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(NC(N5CCCC5)=O)S4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.17
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CNC5CCCC5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.17
N[C@@H](C1CCCC1)C(N(C2)CCN2CC(O)[C@@H]([C@3](C)[C@H](C)CC4)C[C@@]([C](C=C)[C@@H](O)[C@H](C)[C@@]54[C@@]3([H])C(CC5)=O)=O)=O	5.17
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CN4CCN(C(NCC5=CC=CC(C)=O)CC4)=O)C[C@@]([C](C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.16
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CN4CCN(C(NCC5=CC=CC(C)=O)CC4)=O)C[C@@]([C](C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.16
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CSC(C)(O)CNC(CN4CCCC4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.16
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(NC5=CC=NC(C)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.15
N[C@@H](CC(C)C)C(N(C1)CCN1CC(O)[C@@H]([C@2](C)[C@H](C)CC3)C[C@@]([C](C=C)[C@@H](O)[C@H](C)[C@@]43[C@@]2([H])C(CC4)=O)=O)=O	5.15
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CN4CCN(C(C(C)C(C)C)N)=O)CC4)=O)C[C@@]([C](C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.15
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5CCCC5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.14
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CN4CCN(C([C@H]([C@@H](C)O)N)=O)CC4)=O)C[C@@]([C](C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.14
N[C@@H](C(C)C)C(N(C1)CCN1CC(O)[C@@H]([C@2](C)[C@H](C)CC3)C[C@@]([C](C=C)[C@@H](O)[C@H](C)[C@@]43[C@@]2([H])C(CC4)=O)=O)=O	5.13
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CN4CCN(C5=CC=C(C)C=C5)CC4)=O)C[C@@]([C](C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.13
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CN4CCN(C5=CC=C(C)C=C5)CC4)=O)C[C@@]([C](C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	5.13
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=C(C)C=C5)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.13
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CNCC4=CC=C(F)C=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.08
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CN4CCCC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.05
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CNCCCC)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.04
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CNC(C)CC)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.04
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CO)O)C[C@@H](OC(CO)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	5.01
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C4CO4)C[C@@H](OC(CO)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.99
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CN4CCN(C([C@H](CCCCNC(OC(C)C)=O)NC(OC(C)C)=O)=O)CC4)=O)C[C@@]([C](C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	4.99
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CSC4=CC(C(NC5=CC=C(S)=O)(NC6=NC(C)=CC(C)=N6)=O)C=C5)=O)=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.99
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=CC=C7C1)CC6)=C5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.98
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CSC4=CC(C(NC5=CC=C(S)=O)(NC6=NOC(C)=C6)=O)C=C5)=O)=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.97
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=CC=C7F)CC6)=C5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.97
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=CC=C7O)CC6)=C5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.97
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=C(C)C=C7)CC6)=C5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.97
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5CCN(C6=C(C1)C=CC=C6)CC5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.96
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5CCN(C6=CC(C)C=CC=C6)CC5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.94
O=C(N(C1)CCN1CC(O)[C@@H]([C@2](C)[C@H](C)CC3)C[C@@]([C](C=C)[C@@H](O)[C@H](C)[C@@]43[C@@]2([H])C(CC4)=O)=O)[C@H](C5CCCCC5)NC(OC(C)C)=O	4.93
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31][C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=O)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=CC(C6=CC=C(CN(C)C)C=C6)=C5)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.93

O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC(CN(CCCC)CCCC)=O)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.93
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N4CC5=C(C=CC=C5OCCCN6C7=CC=CN=C7N=C6)C4=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.92
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5N=NC(CN6CCN(C)CC6)=C5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.92
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=C(C/C=C/C6=CC=CC(N)=C6)=O)C=C5)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.92
O=C(N(CC1)CCN1CC(O)[C@@H]([C@2](C)[C@H](C)CC3)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@H](C)[C@@43[C@@2]([H])C(CC4)=O)=O)[C@H](CC(C)C)NC(OC(C)C)C=O	4.92
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(NC(C5=CC(OC)=CC=C5)=O)S4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.89
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(NC([C@H](C5=CC=CC=C5)C)=O)S4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.89
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=C(C6=CC=C(OC)C=C6)C=C5)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.89
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(COCCN5C=NC6=C5N=CN=C6N)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.89
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(NC(N5CCN(C)CC5)=O)S4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.89
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(CN5CCN(C6=CC=C(O)C=C6)CC5)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.89
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC(C5=CC=C5)=O)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.89
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CSC4=NC(O)=CC(NC([C@H]5NCCCC5)=O)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	4.89
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(N)=CC(NC([C@@H]5CCCCN5)=O)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.88
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC=C4CCCN5C(N=CN=C6N)=C6N=C5)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.88
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC(C)(C)CNC(C4=CC(Cl)=CC=C4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.88
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CN4CCN(C(NCC5=CC=C(N)C=C5)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	4.87
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(NC(N(CC)CC)=O)S4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.87
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(NC([C@H](C)C)N)=O)S4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.87
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN(CCC)CCC)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.87
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CN4CCN(C(NC5=CC=C(N)=CC=C5)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	4.86
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CN4CCN(C(NC5=CC=C(N)C=C5)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	4.86
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(CN5CCCC(CCO)C5)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.85
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN(CC)CC)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.84
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(CN5CCCC(CO)C5)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.84
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(CN5CCC(O)CC5)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.83
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(CN5CCN(C)CC5)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.83
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(C=CC(NC(C5=CC=C(C=C=CC6)N5)=O)=C7=C7N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.83
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(CN5CCOCC5)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.82
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(CN(CCO)CO)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.81
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(CN(C)C)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.78
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN(CC)CC)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.73
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(C[N+](CC)(CC)C)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.70
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5N=NC(CN6CCN(N7CCC(CCO)CC7)CC6)=C5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.69
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5N=NC(CN6CCN(N7CCCC(CO)C7)CC6)=C5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.69
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(C(NC5=CC=C(S(=O)N)C6=CC(OC)=NC=N6)=O)C=C5)=O)=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.69
CC1C23C(C(C3)=O)C(C(C(C=C)C)C1O)OC(CO)=O)(C(C2)C)C	4.67
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5N=NC(CN6CCN(N7CCC(O)CC7)CC6)=C5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.67
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5CCN(C6=C(OC)C=CC=C6)CC5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.65
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=C(C/C=C/C6=CC=C(NC(C)=O)C=C6)=O)C=C5)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.65
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5CCN(C6=CC=C(C)C=C6)CC5)=O)C=CC=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.64
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CN4CCN(C(C(C5=CN)C6=C5C=CC=C6)N)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	4.60
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=CC(C6=CC=C(OC)C=C6)=C5)=C4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.59
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=C(Br)C=C5)O4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.59
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC(CN5C=CC=C5)=O)=N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.58
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CNC5=CC=CC=C5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.56
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CN4CCN(C(NC5=CC=CC=C5)C)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	4.56
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CN4CCN(C([C@H](CCCCN)N)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	4.56
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5CCOCC5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.55
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC=C5)O4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.55
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=C(C)C=C5)O4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.55
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5CCCC5)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.55
O=C1CC[C@2](CC[C@H]3C)[C@1]([H])[C@3](C)[C@H](OC(CN4CCN(C(NC5=CC=NC=C5)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	4.55
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS(=C4=NC(O)=CC(O)=N4)=O)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.54
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN(C)C)=O)CC4)=O)[C@2](C)[C@H](C)CC3	4.52
O=C(CC1)[C@2]([H])[C@@31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(C=CC(NC(C5=CC=CC(Cl)=C5)=O)=C6)=C6N4)=O)[C@2](C)[C@H](C)C	4.52
C3	

O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(C=CC(NC(C5=CC=C(OC)C=C5)=O)=C6)=C6N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.52
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNCCCCCCCC)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.49
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(C[N+](4)(CCOCC4)C)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.46
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=CO4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.46
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(C[N+](4)(CCCC4)C)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.46
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCCNC(C4=CC=CC(OC)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.36
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N4CC5=C(C=CC=C5OCCCN6C7=CC=CN=C7N=C6)C4=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.31
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(O)=CC(NC(C5=CC=CC(Cl)=C5)=O)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	4.30
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(N)=CC(NC(C5=CC(Cl)=CC=C5)=O)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.30
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC(CN5C=CN=N5)=O)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.28
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC(CN5C=CN=C5)=O)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.28
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNCCCCCCCCCCCCCCC)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.27
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(NC([C@H](C(C)C)N)=O)S4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.27
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C)CC5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.26
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNCCCCCCCCCCCC)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.23
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C(C5N(C(OC(C)C)C)=O)CC5)=O)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	4.23
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS[C@H]4CC[C@H](C(O)=O)C[C@H]4N)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.22
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CC(C(O)=CN4O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.22
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(C=CC(NC(C5=CC=CC=C5Cl)=O)=C6)=C6N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.22
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(C=CC(NC(C5=CC=C(C)C=C5)=O)=C6)=C6N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.22
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(C=CC(NC(C5=CC=CC=C5OC)=O)=C6)=C6N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.22
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(C=CC(NC(C5=CC=CC(OC)=C5)=O)=C6)=C6N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.22
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(C=CC(NC(C5=CC=CC=C5C)=O)=C6)=C6N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.21
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(C=CC(NC(C5=CC=CC(C)C=C5)=O)=C6)=C6N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.21
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(C=CC(NC(C5=CC=C(C)C=C5)=O)=C6)=C6N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.21
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC(C=CC(NC(C5=CC=C(C)C=C5)=O)=C6)=C6N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.21
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CO)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.20
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNC(C)(C)C)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.13
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS[C@H]4CC[C@H](C(OC)=O)C[C@H]4NS(=O)C5=CC=C(C(F)F)C=C5)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.08
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(CC(NC5=CC=C(NCC6=CC=CC=C6)C=C5C)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.04
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(CC(NC5=CC=C(NCCC)C=C5C)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.01
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(CC(NC5=CC=C(NC(C)C=C5C)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.01
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5CCN(C(CCl)=O)CC5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.01
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(CC(NC5=CC=C(NCC=C)C=C5C)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.01
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(CC(NC5=CC=C([N+](O-)=O)C=C5C)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.00
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(CC(NC5=CC=C(NCC)C=C5C)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	4.00
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(CC(NC5=CC=C(NC)C=C5C)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	3.99
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(CC(NC5=CC=C(N)C=C5C)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	3.98
CC1C23C(C(CC3)=O)C(C(C(C=C)C)C1O)OC(CN4CCN(C(CCl)=O)CC4)=O)(C(CC2)C)C	3.91
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=C(C/C=C/C6=CC=C(C=C6)OC)=O)C=C5)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	3.73
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=C(C/C=C/C6=CC=C56)=O)C=C5)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	3.71
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=C(C/C=C/C6=CC=CC=C6)=O)C=C5)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	3.71
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=C(C/C=C/C6=CC=CO6)=O)C=C5)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	3.70
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNCCCCCCCCCCCCCCC)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	3.67
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5CCNCC5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	3.65
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C5=CC=CC=C5OC)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	3.64
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNCCCCCCCCCCCC)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	3.63
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS(S(C4=NNC(N)=N4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	3.63
O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CN4CCN(C5=CC=CC=C5C)CC4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C	3.62
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS(S(C4=NNC=N4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	3.61
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN(CC(C)C)CC(C)C)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	3.58
O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNCCCCCCCC)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3	3.58

Table S3. Summary of 51 compounds for 3D-QSAR model construction.

SMILES	pMIC	3D-QSAR Set
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC(C5=CC=NC=C5)=O)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	8.2	Training
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC(C5=CC=CC(N)=C5)=O)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	7.9	Test
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=C(Cl)C=C5)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	7.57	Test
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(C5=CC=C(CN6C7=NC=NC(N)=C7N=C6)C=C5)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	7.34	Training
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=CC(Cl)=C5)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	7.27	Training
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(CO)=CN=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	7.03	Test
<chem>O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(NC=C5)=C5C(NC(CN6CCCC6)=O)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C</chem>	7.01	Training
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=CC(Cl)=C5)N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	6.96	Training
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS(SC4=NN=C(C)S4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	6.95	Training
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=CC=C5)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	6.93	Training
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(NC(CN5CC(CO)CCC5)=O)=CN=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	6.83	Test
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=C(N)N=C6N)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	6.83	Training
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=C([N+])([O-])=O)C=C7)CC6)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	6.81	Training
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=CC([N+])([O-])=O)C=C7)CC6)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	6.81	Training
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N4C(C(C=C(N)C=C5)=C5C4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	6.72	Training
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=C([N+])([O-])=O)C=C5)N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	6.67	Training
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(C5=CC=C(O)C=C5)O4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	6.65	Training
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C5=CC=C(C)C=C5)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	6.63	Training
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NC=NC5=C4C=NN5)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	6.61	Training
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNC4=CC=CC(Cl)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	6.61	Training
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C([N+])([O-])=O)C=CC=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	6.52	Training
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=CC(NC([C@H]5CCCN5)=O)=CN=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	6.49	Training
<chem>O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(NC=C5)=C5C(NC(CN6CCC(CO)CC6)=O)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C</chem>	6.44	Training
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN(C(C5=CC=C(OC)C=C5)=O)C(N)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	6.39	Training
<chem>O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(N(C)C)=CC(C)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C</chem>	6.34	Training
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=C(NC(CN5N=NC(CN6CCOCC6)=C5)=O)C=CC=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	6.14	Training
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC(CN(CCC)CCC)=O)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	6.11	Training
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N(CC4)C(C5=C4C=C(OCCN6CCCCC6)C=C5)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	6.09	Training
<chem>O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSCC(NC4=CC=C(NCC=C)C=C4C)=O)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]2C</chem>	6.08	Test
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS[C@H]4CC[C@H](C(OCC)=O)C[C@H]4NS)=O)(C5=CC=C(C#N)C=C5)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	5.86	Training

<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS[C@H]4CC[C@H](C(OCC)=O)C[C@H]4NS(=O)(C5=CC=C(C#N)C=C5)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	5.86	Training
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(NC5=CC=CC6=C5C=CC=N6)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	5.79	Training
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(N4C(C(C=C(NC(C(O)=O)C(C)C)C=C5)=C5C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	5.77	Test
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CS[C@H]4CC[C@H](C(OCC)=O)C[C@H]4N)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	5.75	Test
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4N=NC(CCCN5C(N=CN=C6N)=C6N=C5)=C4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	5.48	Training
<chem>O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(O)=CC(NC([C@H](C)C(C)C)=O)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@H](O)[C@@H]2C</chem>	5.48	Training
<chem>O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(N)=CC(N4C)=O)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@H](O)[C@@H]2C</chem>	5.41	Training
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNCC(C)C)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	5.34	Test
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4CCN(C(CCN5C=NC6=C5N=C(N)N=C6N7CC(CNC)CC7)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	5.29	Training
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC(C)=CC=C7)CC6)=C5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	5.27	Training
<chem>O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(O)=CC(NC([C@@H]5NCCCC5)=O)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@H](O)[C@@H]2C</chem>	5.19	Test
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC4=NN=C(NC(C5=CC=CC=C5N)=O)S4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	5.19	Test
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCCC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	5.05	Training
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5N=NC(CN6CCN(C7=CC=C(C)C=C7)CC6)=C5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	4.97	Test
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5N=NC(CN6CCN(C)CC6)=C5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	4.92	Training
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSC(C)(C)CNC(C4=CC(Cl)=CC=C4)=O)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	4.88	Training
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN(CC)CC)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	4.73	Test
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CN4CCN(C(CN5N=NC(CN6CCN(N7CCC(O)CC7)CC6)=C5)=O)CC4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	4.67	Test
<chem>O=C1CC[C@]2(CC[C@H]3C)[C@]1([H])[C@]3(C)[C@H](OC(CSC4=NC(O)=CC(NC(C5=CC=CC(Cl)=C5)=O)=N4)=O)C[C@@](C)(C=C)[C@H](O)[C@@H]2C</chem>	4.3	Training
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CSCC4=CSC(NC(CN5C=CN=N5)=O)=N4)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	4.28	Test
<chem>O=C(CC1)[C@]2([H])[C@@]31[C@@H](C)[C@H](O)[C@](C)(C=C)C[C@@H](OC(CNCCCCCCCCCCC)=O)[C@]2(C)[C@H](C)CC3</chem>	4.23	Test

**Table S4.** Summary of experimental versus predictive activity(3D-QSAR).

Name	Type	Experimental Activity	Predictive Activity	Residual
molec1	Training	8.2	8.28	-0.08
molec2	Test	7.9	7.87	0.03
molec3	Training	7.27	7.16	0.11
molec4	Training	6.95	6.98	-0.03
molec5	Training	6.96	7.08	-0.12
molec6	Training	7.01	7.02	-0.01
molec7	Training	6.72	6.74	-0.02
molec8	Training	6.83	6.97	-0.14
molec9	Test	6.83	7.20	-0.37
molec10	Training	6.61	6.73	-0.12
molec11	Training	6.65	6.51	0.14
molec12	Training	6.61	6.75	-0.14
molec13	Training	6.81	6.74	0.07
molec14	Training	6.81	6.71	0.10
molec15	Training	6.67	6.58	0.09
molec16	Training	6.63	6.64	-0.01
molec17	Training	6.52	6.53	-0.01

---

molec18	Training	6.49	6.62	-0.13
molec19	Training	6.34	6.27	0.07
molec20	Training	6.44	6.46	-0.02
molec21	Training	6.11	6.12	-0.01
molec22	Training	6.14	6.10	0.04
molec23	Training	5.86	5.91	-0.05
molec24	Training	5.86	5.72	0.14
molec25	Test	5.77	6.46	-0.69
molec26	Training	5.48	5.39	0.09
molec27	Training	5.41	5.44	-0.03
molec28	Training	5.05	5.30	-0.25
molec29	Training	5.29	5.23	0.06
molec30	Training	5.27	5.29	-0.02
molec31	Test	4.97	5.67	-0.70
molec32	Training	4.92	5.03	-0.11
molec33	Test	4.73	5.07	-0.34
molec34	Training	6.39	6.33	0.06
molec35	Test	4.28	4.78	-0.50
molec36	Training	4.3	4.46	-0.16
molec37	Test	7.57	7.17	0.40
molec38	Training	7.34	7.32	0.02
molec39	Test	7.03	6.73	0.30
molec40	Training	6.93	6.73	0.20
molec41	Test	6.08	6.24	-0.16
molec42	Training	6.09	5.96	0.13
molec43	Test	5.75	5.85	-0.10
molec44	Training	5.79	5.85	-0.06
molec45	Training	5.48	5.34	0.14
molec46	Test	5.34	6.37	-1.03
molec47	Test	5.19	6.29	-1.10
molec48	Test	5.19	5.84	-0.65
molec49	Training	4.88	4.80	0.08
molec50	Test	4.67	5.22	-0.55
molec51	Test	4.23	5.45	-1.22