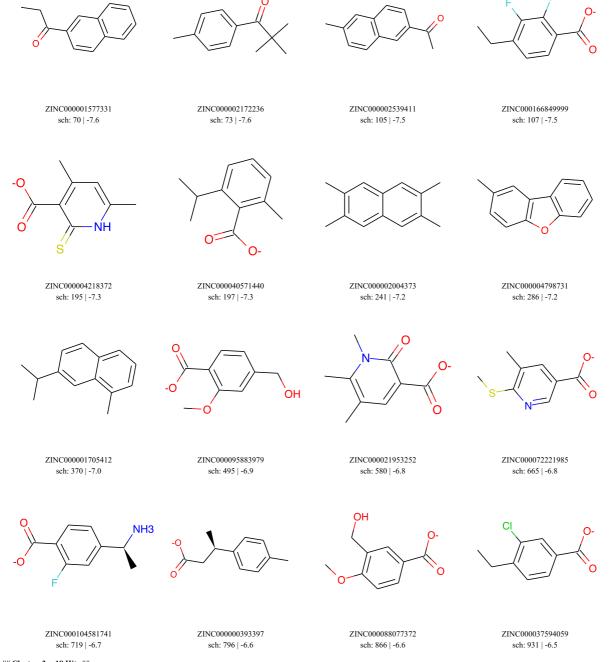
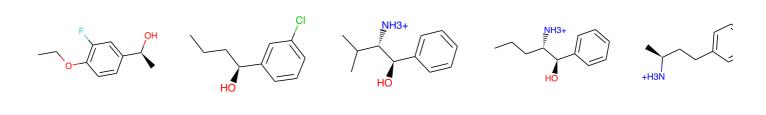


ZINC000002574117 sch: 958 | -6.5



## Cluster: 3 -- 18 Hits ##



ZINC000058819693 sch: 184 | -7.3 ZINC000037464569 sch: 192 | -7.3 ZINC000032007298 sch: 213 | -7.3 ZINC000001707601 sch: 289 | -7.2 ZINC00003740853 sch: 355 | -7.1

ZINC00000039180

sch: 132 | -7.5

ZINC00000033026

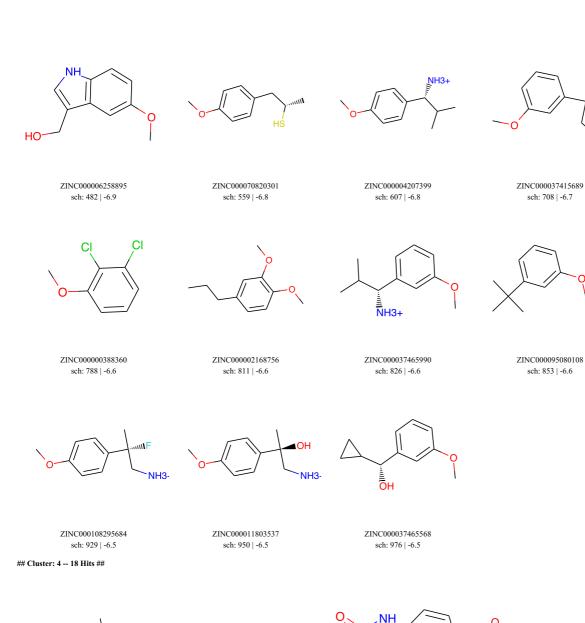
sch: 308 | -7.1

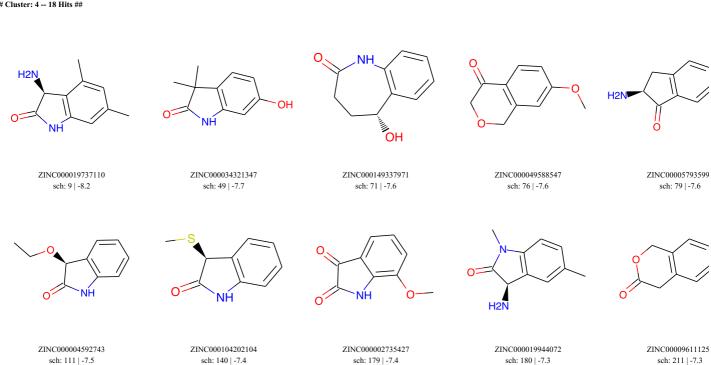
ZINC00000014184

ZINC00003853702

sch: 984 | -6.5

sch:  $669\mid$  -6.8





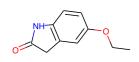
ZINC00003909016

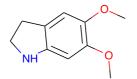
ZINC00003411981 sch: 913 | -6.5

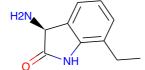
sch: 774 | -6.7

sch: 708 | -6.7

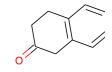
sch: 853 | -6.6



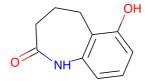


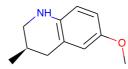






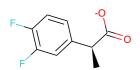
ZINC000015021280 sch: 238 | -7.2 ZINC000026894128 sch: 384 | -7.0 ZINC000100094798 sch: 425 | -7.0 ZINC000104839859 sch: 535 | -6.9 ZINC00000402723 sch: 548 | -6.9

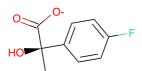


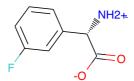


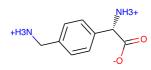
ZINC000096300821 sch: 705 | -6.7 ZINC000107252418 sch: 806 | -6.6 ZINC000011633186 sch: 827 | -6.6

## Cluster: 5 -- 11 Hits ##









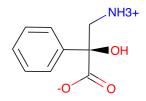


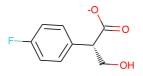
ZINC000036156488

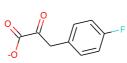
sch: 62 | -7.7

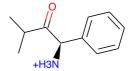
ZINC000002547703 sch: 97 | -7.5 ZINC000037180899 sch: 335 | -7.1 ZINC000144592587 sch: 410 | -7.0

ZINC00001951704 sch: 558 | -6.8



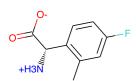




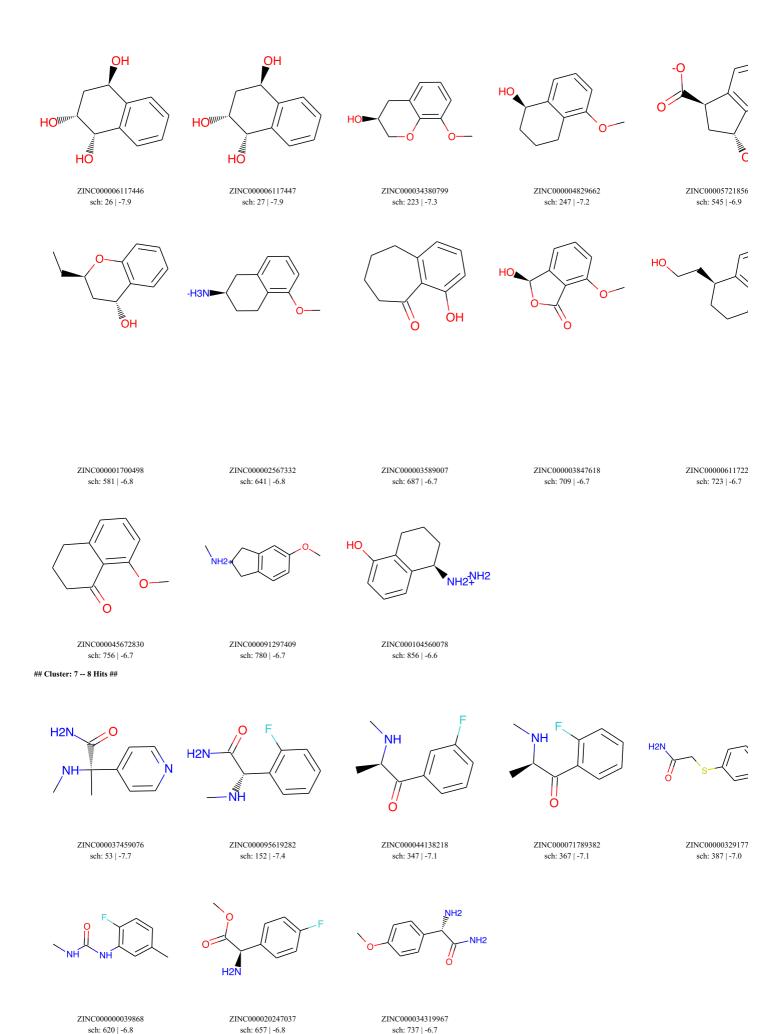


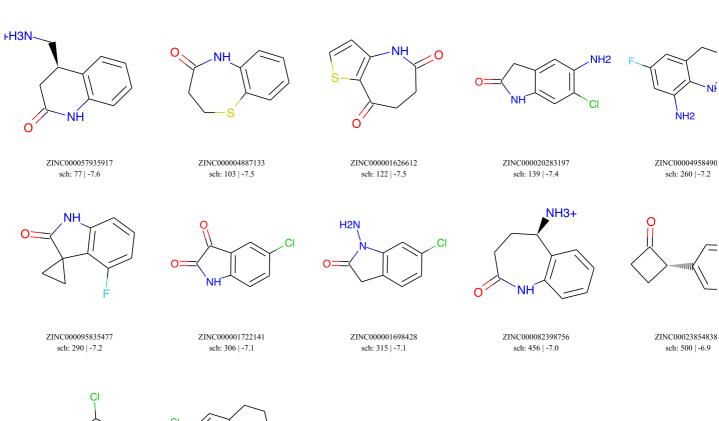


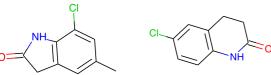
ZINC000140957471 sch: 568 | -6.8 ZINC000017426848 sch: 770 | -6.7 ZINC000013540240 sch: 781 | -6.7 ZINC000034329830 sch: 869 | -6.6 ZINC00003432982 sch: 871 | -6.6



ZINC000002528428 sch: 942 | -6.5

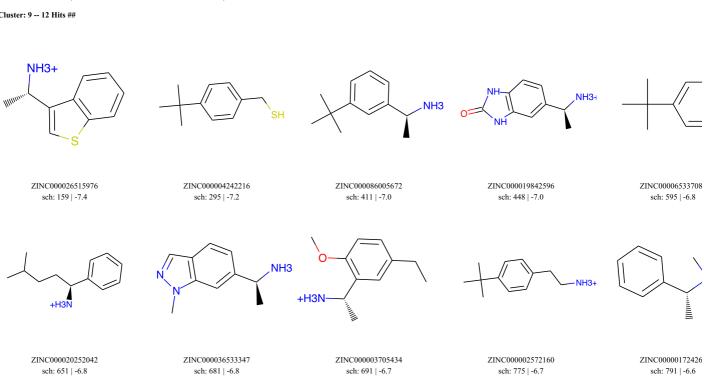






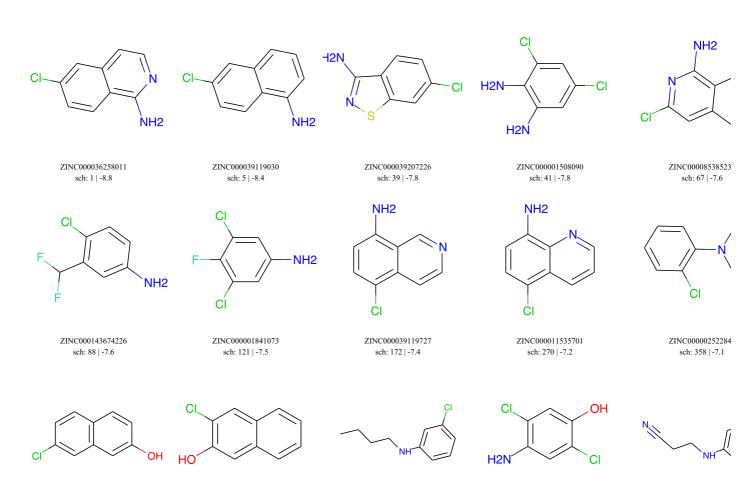
ZINC000079368843 ZINC000022010321 sch: 543 | -6.9 sch: 944 | -6.5

## Cluster: 9 -- 12 Hits ##

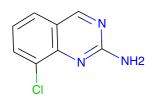


ZINC000029220007 sch: 857 | -6.6 ZINC000004206387 sch: 994 | -6.5

## Cluster: 10 -- 16 Hits ##

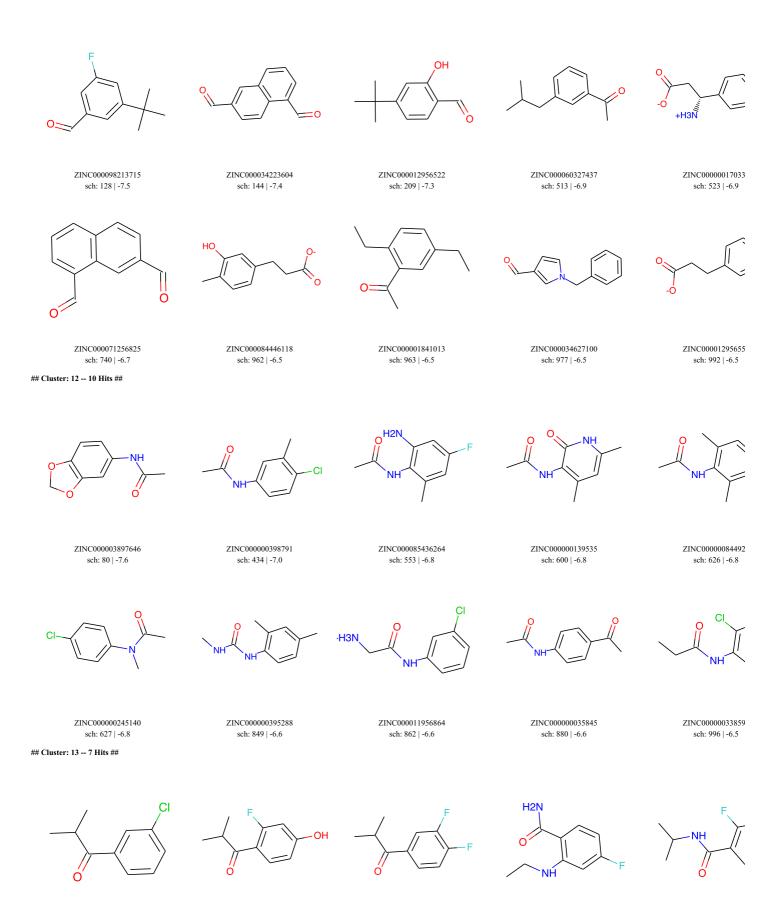


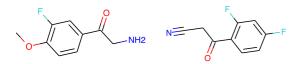
ZINC000001703605 sch: 484 | -6.9 ZINC000001998877 sch: 546 | -6.9 ZINC000019920478 sch: 611 | -6.8 ZINC000022114241 sch: 706 | -6.7 ZINC00000172925 sch: 748 | -6.7



ZINC000035635909 sch: 773 | -6.7

## Cluster: 11 -- 10 Hits ##



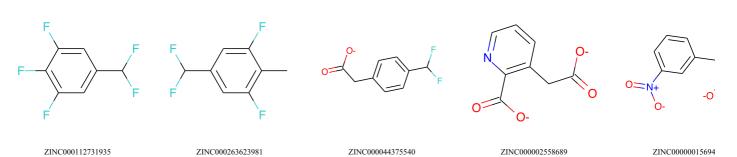


ZINC000036156423 sch: 666 | -6.8 ZINC000002579801 sch: 909 | -6.5

## Cluster: 14 -- 9 Hits ##

CI	HO—CI	CI————————————————————————————————————	CIOH	HO CI
ZINC000238377254 sch: 316   -7.1	ZINC000000406325 sch: 418   -7.0	ZINC000005781226 sch: 421   -7.0	ZINC000038529646 sch: 427   -7.0	ZINC00014860412 sch: 573   -6.8
HO	но	CI OH	HO	
ZINC000001669714 sch: 678   -6.8	ZINC000000393851 sch: 689   -6.7	ZINC000226958951 sch: 825   -6.6	ZINC000001600060 sch: 991   -6.5	

## Cluster: 15 -- 5 Hits ##



sch: 927 | -6.5

## Cluster: 16 -- 10 Hits ##

sch: 808 | -6.6

ZINC000100723056 sch: 245 | -7.2 ZINC000097447182 sch: 304 | -7.1

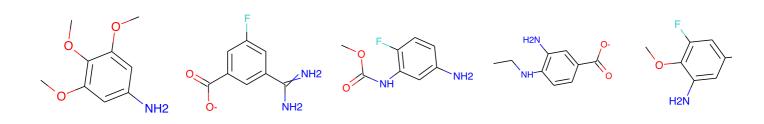
sch: 814 | -6.6

ZINC000044199514 sch: 502 | -6.9 ZINC000071009934 sch: 571 | -6.8

sch: 932 | -6.5

ZINC00006027378 sch: 683 | -6.8

sch: 941 | -6.5



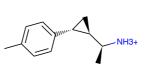
ZINC000000157583 sch: 698 | -6.7 ZINC000075847685 sch: 710 | -6.7 ZINC000019815589 sch: 739 | -6.7 ZINC000000406642 sch: 785 | -6.6 ZINC00006235048 sch: 846 | -6.6

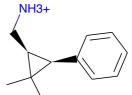
## Cluster: 17 -- 13 Hits ##

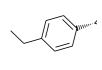
H3N H3N NH3



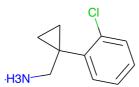
ZINC000020381103 sch: 31 | -7.9 ZINC000033641063 sch: 236 | -7.2 ZINC000003622366 sch: 237 | -7.2 ZINC000068590325 sch: 256 | -7.2 ZINC00006278160 sch: 323 | -7.1







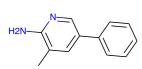
ZINC000041199940 sch: 579 | -6.8 ZINC000054561728 sch: 631 | -6.8 ZINC000020392256 sch: 695 | -6.7 ZINC000076600918 sch: 743 | -6.7 ZINC00004119925 sch: 833 | -6.6

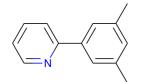


ZINC000071496905 sch: 834 | -6.6

ZINC000074941782 sch: 881 | -6.6 ZINC000013483662 sch: 983 | -6.5

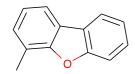
## Cluster: 18 -- 9 Hits ##

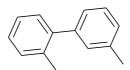


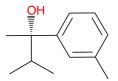




ZINC000006070170 sch: 143 | -7.4 ZINC000004200682 sch: 160 | -7.4 ZINC000032540580 sch: 307 | -7.1 ZINC000078418786 sch: 378 | -7.0 ZINC00000167425 sch: 400 | -7.0







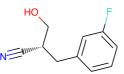
ZINC000004208902 sch: 439 | -7.0

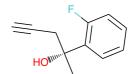
ZINC000078637493 sch: 667 | -6.8

ZINC000001845981 sch: 722 | -6.7

ZINC000037415635 sch: 819 | -6.6

# ## Cluster: 19 -- 6 Hits ##



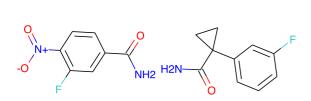


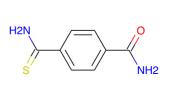


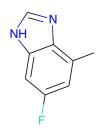
ZINC000043391910 sch: 217 | -7.3 ZINC000037462798 sch: 258 | -7.2 ZINC000063064120 sch: 354 | -7.1 ZINC000063076727 sch: 493 | -6.9 ZINC00003737921 sch: 549 | -6.9

ZINC000037465524 sch: 688 | -6.7

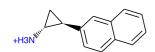
# ## Cluster: 20 -- 8 Hits ##

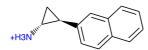


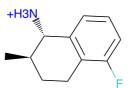


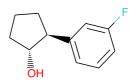


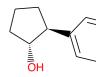
ZINC000034545889 sch: 15 | -8.1 ZINC000064554883 sch: 29 | -7.9 ZINC000082048869 sch: 33 | -7.8 ZINC000019518208 sch: 82 | -7.6 ZINC00022451667 sch: 288 | -7.2





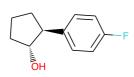


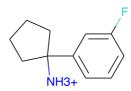




ZINC000037381320 sch: 93 | -7.5 ZINC000037381316 sch: 96 | -7.5 ZINC000071489228 sch: 365 | -7.1 ZINC000015440770 sch: 385 | -7.0 ZINC00001544077 sch: 389 | -7.0

S



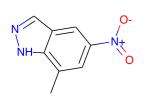


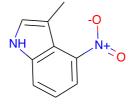
ZINC000004218800 sch: 594 | -6.8

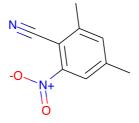
+H3N

ZINC000036448253 sch: 630 | -6.8 ZINC000013564835 sch: 947 | -6.5

## Cluster: 22 -- 10 Hits ##







ZINC000409418594 sch: 207 | -7.3 ZINC000014007526 sch: 717 | -6.7 ZINC000005378558 sch: 234 | -7.3 ZINC000040564744 sch: 724 | -6.7 ZINC000113636088 sch: 522 | -6.9 ZINC000004115620 sch: 863 | -6.6

ZINC000003878253 ZINC000020095032 sch: 542 | -6.9 sch: 617 | -6.8 ZINC000082523369 ZINC000050439717 sch: 888 | -6.5 sch: 946 | -6.5

### ## Cluster: 23 -- 9 Hits ##

ZINC000008672875 ZINC000039255910 ZINC000004897401 ZINC000044560049 ZINC000001757053 sch: 108 | -7.5 sch: 332 | -7.1 sch: 349 | -7.1 sch: 554 | -6.8 sch: 734 | -6.7 ZINC000075422175 ZINC000075422176 ZINC000034288296 ZINC000231397642 sch: 758 | -6.7 sch: 759 | -6.7 sch: 769 | -6.7 sch: 769 | -6.7

# ## Cluster: 24 -- 5 Hits ##

ZINC000001577065 ZINC000019862233 ZINC000004779411 ZINC000001685225 ZINC000034545817 sch: 326 | -7.1 sch: 518 | -6.9 sch: 519 | -6.9 sch: 632 | -6.8 sch: 674 | -6.8

### ## Cluster: 25 -- 12 Hits ##

ZINC000026894682 ZINC000031776792 ZINC000012243736 ZINC000089195814 ZINC000014983754 sch: 6 | -8.2 sch: 60 | -7.7 sch: 78 | -7.6 sch: 101 | -7.5 sch: 221 | -7.3 ZINC000044712840 ZINC000082393410 ZINC000037632885 ZINC000008680041 ZINC000082395564 sch: 231 | -7.3 sch: 232 | -7.3 sch: 299 | -7.2 sch: 587 | -6.8 sch: 623 | -6.8 ZINC000014983410 ZINC000003337379 sch: 633 | -6.8 sch: 677 | -6.8

### ## Cluster: 26 -- 9 Hits ##

ZINC000001595329 ZINC000001706171 ZINC000032914726 ZINC000001233396 ZINC000002560194 sch: 37 | -7.8 sch: 52 | -7.7 sch: 104 | -7.5 sch: 363 | -7.1 sch: 398 | -7.0 ZINC000238603875 ZINC000001706163 ZINC000113225433 ZINC000071255796 sch: 509 | -6.9 sch: 591 | -6.8 sch: 742 | -6.7 sch: 938 | -6.5

## ## Cluster: 27 -- 10 Hits ##

ZINC000011735019 ZINC000011691806 ZINC000014984582 ZINC000006677279 ZINC000067350987 sch: 10 | -8.2 sch: 109 | -7.5 sch: 119 | -7.5 sch: 302 | -7.1 sch: 407 | -7.0 ZINC000019088674 ZINC000072207428 ZINC00008025686 ZINC000015635515 ZINC00008195913 sch: 512 | -6.9 sch: 821 | -6.6 sch: 848 | -6.6 sch: 924 | -6.5 sch: 930 | -6.5

## ## Cluster: 28 -- 7 Hits ##

ZINC000001716992 ZINC000035822600 ZINC000022205112 ZINC000071790068 ZINC000020417368 sch: 2 | -8.4 sch: 81 | -7.6 sch: 98 | -7.5 sch: 148 | -7.4 sch: 249 | -7.2 ZINC00008627856 ZINC000075577065

## Cluster: 29 -- 9 Hits ##

ZINC000013597062 ZINC000012341499 ZINC000020389826 ZINC000003866543 ZINC000096171754 sch: 25 | -8.0 sch: 175 | -7.4 sch: 386 | -7.0 sch: 462 | -6.9 sch: 467 | -6.9 ZINC000021304584 ZINC000000050481 ZINC000000071341 ZINC000026893350 sch: 514 | -6.9 sch: 525 | -6.9 sch: 561 | -6.8 sch: 960 | -6.5

## Cluster: 30 -- 9 Hits ##

ZINC000005275307 ZINC000004271796 ZINC000036459049 ZINC000019916296 ZINC000002149578 sch: 174 | -7.4 sch: 497 | -6.9 sch: 90 | -7.6 sch: 201 | -7.3 sch: 383 | -7.0 ZINC000005225284 ZINC000003651176 ZINC000002540082 ZINC000021950320

## Cluster: 31 -- 3 Hits ##

ZINC000000056469 ZINC000037467379 ZINC000104557767 sch: 967 | -6.5 sch: 892 | -6.5 sch: 896 | -6.5

## Cluster: 32 -- 8 Hits ##

ZINC000040448073 ZINC000085398973 ZINC000203697962 ZINC000026420133 ZINC000091366078 sch: 345 | -7.1 sch: 373 | -7.0 sch: 485 | -6.9 sch: 694 | -6.7 ZINC000104459490 ZINC000033358945 ZINC000040448078 sch: 747 | -6.7 sch: 767 | -6.7 sch: 905 | -6.5

## Cluster: 33 -- 8 Hits ##

ZINC000199794355 ZINC000075422244 ZINC000072406702 ZINC000072406701 ZINC000008575764 sch: 319 | -7.1 sch: 436 | -7.0 sch: 447 | -7.0 sch: 450 | -7.0 sch: 599 | -6.8 ZINC000148559395 ZINC000217615481 ZINC000140502080

sch: 680 | -6.8 sch: 625 | -6.8 sch: 645 | -6.8

## Cluster: 34 -- 5 Hits ##

ZINC000057339676 ZINC000001697921 ZINC000000397788 ZINC000095642730 ZINC000000165870 sch: 125 | -7.5 sch: 576 | -6.8 sch: 602 | -6.8 sch: 757 | -6.7 sch: 893 | -6.5

## Cluster: 35 -- 7 Hits ##

ZINC000026894370 ZINC000202410283 ZINC000096171694 ZINC000014982495 ZINC000039194300 sch: 214 | -7.3 sch: 565 | -6.8 sch: 167 | -7.4 sch: 266 | -7.2 sch: 569 | -6.8 ZINC000039204145 ZINC000033358953

sch: 875 | -6.6 sch: 993 | -6.5

## Cluster: 36 -- 3 Hits ##

ZINC000072207954 ZINC000011629492 ZINC000035677100 sch: 336 | -7.1 sch: 597 | -6.8 sch: 782 | -6.7

## Cluster: 37 -- 9 Hits ##

ZINC000005217883 ZINC000000343488 ZINC000039475479 ZINC000016697943 ZINC000168417901 sch: 210 | -7.3 sch: 297 | -7.2 sch: 300 | -7.1 sch: 22 | -8.0 sch: 371 | -7.0 ZINC000084444360 ZINC000084444358 ZINC000082397118 ZINC000002042563 sch: 843 | -6.6

sch: 516 | -6.9 sch: 517 | -6.9 sch: 836 | -6.6

ZINC000067341844 ZINC000014984586 ZINC000142195603 ZINC000082398519 ZINC000036474086 sch: 198 | -7.3 sch: 282 | -7.2 sch: 652 | -6.8 sch: 844 | -6.6

## Cluster: 39 -- 6 Hits ##

ZINC000078404402 ZINC000210386374 ZINC000409432160 ZINC000004714940 ZINC000050103001 sch: 185 | -7.3 sch: 322 | -7.1 sch: 541 | -6.9 sch: 855 | -6.6 sch: 177 | -7.4 ZINC000039250378 sch: 882 | -6.6

## Cluster: 40 -- 3 Hits ##

ZINC000006345141 ZINC000091692293 ZINC000033505824 sch: 176 | -7.4 sch: 552 | -6.9 sch: 751 | -6.7

## Cluster: 41 -- 4 Hits ##

ZINC000075972652 ZINC000035412297 ZINC000011567869 ZINC000019752662 sch: 831 | -6.6 sch: 277 | -7.2 sch: 465 | -6.9 sch: 508 | -6.9

## Cluster: 42 -- 6 Hits ##

ZINC000041581363 ZINC000034479608 ZINC000071378530 ZINC000071378527 ZINC000071372506 sch: 64 | -7.7 sch: 115 | -7.5 sch: 324 | -7.1 sch: 325 | -7.1 sch: 431 | -7.0 ZINC000071790767

sch: 506 | -6.9

## Cluster: 43 -- 2 Hits ##

ZINC000002164744 ZINC000001494995 sch: 133 | -7.4 sch: 639 | -6.8

## Cluster: 44 -- 3 Hits ##

ZINC000105285071 ZINC000082759536 ZINC000035652493

```
sch: 56 | -7.7
                      sch: 127 | -7.5
                                           sch: 908 | -6.5
## Cluster: 45 -- 7 Hits ##
   sch: 58 | -7.7
                     sch: 112 | -7.5
ZINC000071773653 ZINC000034519116
   sch: 393 | -7.0
                       sch: 922 | -6.5
## Cluster: 46 -- 4 Hits ##
```

ZINC000033494996 ZINC000074284279 ZINC000084179016 ZINC000217548113 ZINC000033494985 sch: 117 | -7.5 sch: 251 | -7.2 sch: 361 | -7.1

ZINC000071491397 ZINC000013782656 ZINC000057935910 ZINC000020470613 sch: 114 | -7.5 sch: 498 | -6.9 sch: 566 | -6.8 sch: 638 | -6.8

## Cluster: 47 -- 4 Hits ##

ZINC000035923586 ZINC000148398759 ZINC000002566046 ZINC000033961824 sch: 366 | -7.1 sch: 679 | -6.8 sch: 829 | -6.6

## Cluster: 48 -- 3 Hits ##

ZINC000005997344 ZINC000002570142 ZINC000004824328 sch: 703 | -6.7 sch: 287 | -7.2 sch: 348 | -7.1

## Cluster: 49 -- 7 Hits ##

ZINC000035570016 ZINC00000239414 ZINC000075871260 ZINC000075871261 ZINC000032222574 sch: 21 | -8.0 sch: 145 | -7.4 sch: 442 | -7.0 sch: 444 | -7.0 sch: 536 | -6.9 ZINC000022200556 ZINC000021985784 sch: 653 | -6.8 sch: 815 | -6.6

## Cluster: 50 -- 3 Hits ##

ZINC000004265118 ZINC000097758439 ZINC000139652465 sch: 644 | -6.8 sch: 138 | -7.4 sch: 186 | -7.3

## Cluster: 51 -- 4 Hits ##

ZINC000013730965 ZINC000072284164 ZINC000039432008 ZINC000032105303 sch: 624 | -6.8 sch: 768 | -6.7 sch: 847 | -6.6 sch: 883 | -6.6

## Cluster: 52 -- 3 Hits ##

ZINC000097758211 ZINC000019088957 ZINC000003869370 sch: 503 | -6.9 sch: 424 | -7.0 sch: 852 | -6.6

## Cluster: 53 -- 4 Hits ##

ZINC000036455983 ZINC000044563563 ZINC000138431440 ZINC000095348347 sch: 390 | -7.0 sch: 486 | -6.9 sch: 4 | -8.4 sch: 1000 | -6.5

## Cluster: 54 -- 2 Hits ##

ZINC00000394413 ZINC000002164141 sch: 123 | -7.5 sch: 124 | -7.5

## Cluster: 55 -- 3 Hits ##

ZINC000001231941 ZINC000001689949 ZINC000020269160 sch: 55 | -7.7 sch: 416 | -7.0 sch: 968 | -6.5

ZINC000011737080 ZINC000065337234 ZINC000001447048 ZINC000000873872 ZINC000002361160 sch: 429 | -7.0 sch: 48 | -7.8 sch: 643 | -6.8 ZINC000223768450 sch: 889 | -6.5

## Cluster: 57 -- 3 Hits ##

ZINC000075934337 ZINC000096024689 ZINC000071790219 sch: 12 | -8.1 sch: 63 | -7.7 sch: 868 | -6.6

## Cluster: 58 -- 6 Hits ##

ZINC000006863177 ZINC000032578132 ZINC000013281488 ZINC000098095551 ZINC000005421962 sch: 106 | -7.5 sch: 360 | -7.1 sch: 417 | -7.0 sch: 690 | -6.7 ZINC000014982642 sch: 952 | -6.5

## Cluster: 59 -- 5 Hits ##

ZINC000037245407 ZINC000063110818 ZINC000039954878 ZINC000003888452 ZINC000329024797 sch: 92 | -7.6 sch: 110 | -7.5 sch: 331 | -7.1 sch: 646 | -6.8 sch: 778 | -6.7

## Cluster: 60 -- 3 Hits ##

ZINC000104522057 ZINC000002041730 ZINC000084444637 sch: 413 | -7.0 sch: 634 | -6.8 sch: 693 | -6.7

## Cluster: 61 -- 6 Hits ##

ZINC000002584295 ZINC000004769438 ZINC000001587763 ZINC000004353136 ZINC000034060865 sch: 11 | -8.1 sch: 151 | -7.4 sch: 275 | -7.2 sch: 276 | -7.2 sch: 501 | -6.9 ZINC000002042050

sch: 606 | -6.8 ## Cluster: 62 -- 3 Hits ##

```
ZINC000585143220 ZINC000585143221 ZINC000011984935
   sch: 483 | -6.9
                     sch: 487 | -6.9
                                        sch: 507 | -6.9
## Cluster: 63 -- 5 Hits ##
ZINC000014684430 ZINC000072210964 ZINC000072210965 ZINC000072221573 ZINC000095081429
   sch: 443 | -7.0
                     sch: 477 | -6.9
                                        sch: 478 | -6.9
                                                          sch: 783 | -6.7
                                                                             sch: 910 | -6.5
## Cluster: 64 -- 4 Hits ##
ZINC000000126971 ZINC000217403385 ZINC000000135566 ZINC000139641385
   sch: 194 | -7.3
                   sch: 271 | -7.2
                                       sch: 405 | -7.0
                                                           sch: 999 | -6.5
## Cluster: 65 -- 6 Hits ##
ZINC000057218918 ZINC000057219141 ZINC000215153933 ZINC000215154028 ZINC000083332805
   sch: 262 | -7.2
                     sch: 269 | -7.2
                                       sch: 337 | -7.1
                                                          sch: 339 | -7.1
                                                                             sch: 664 | -6.8
ZINC000102132562
   sch: 953 | -6.5
## Cluster: 66 -- 2 Hits ##
ZINC000045027949 ZINC000101036832
   sch: 296 | -7.2
                     sch: 975 | -6.5
## Cluster: 67 -- 2 Hits ##
ZINC000014684910 ZINC000006666846
   sch: 51 | -7.7
                   sch: 265 | -7.2
## Cluster: 68 -- 3 Hits ##
ZINC000000332236 ZINC000034500249 ZINC000038865563
                                       sch: 116 | -7.5
   sch: 54 | -7.7
                     sch: 83 | -7.6
## Cluster: 69 -- 5 Hits ##
ZINC000083340283 ZINC000033488662 ZINC000082587850 ZINC000049582186 ZINC000019926718
   sch: 50 | -7.7
                     sch: 134 | -7.4
                                      sch: 196 | -7.3
                                                         sch: 340 | -7.1
                                                                             sch: 391 | -7.0
## Cluster: 70 -- 4 Hits ##
ZINC000040545902 ZINC000071621956 ZINC000039319395 ZINC000085210734
   sch: 45 | -7.8
                     sch: 147 | -7.4
                                      sch: 173 | -7.4
                                                           sch: 420 | -7.0
## Cluster: 71 -- 5 Hits ##
ZINC000070453263 ZINC000071373225 ZINC000020596553 ZINC000020596554 ZINC000020596555
                     sch: 230 | -7.3
   sch: 40 | -7.8
                                       sch: 793 | -6.6
                                                           sch: 794 | -6.6
                                                                             sch: 797 | -6.6
## Cluster: 72 -- 3 Hits ##
ZINC000002155406 ZINC000016698760 ZINC000000134953
   sch: 32 | -7.8
                  sch: 220 | -7.3
                                        sch: 608 | -6.8
## Cluster: 73 -- 2 Hits ##
ZINC000039318233 ZINC000034049713
                    sch: 524 | -6.9
   sch: 13 | -8.1
## Cluster: 74 -- 2 Hits ##
ZINC000018101982 ZINC000005351943
    sch: 8 | -8.2
                     sch: 34 | -7.8
## Cluster: 75 -- 2 Hits ##
ZINC000012370167 ZINC000088187497
                  sch: 980 | -6.5
   sch: 763 | -6.7
## Cluster: 76 -- 2 Hits ##
ZINC000091368502 ZINC000069970759
   sch: 188 | -7.3 sch: 972 | -6.5
## Cluster: 77 -- 2 Hits ##
ZINC000205331231 ZINC000002529101
   sch: 228 | -7.3
                  sch: 914 | -6.5
## Cluster: 78 -- 3 Hits ##
ZINC000019269287 ZINC000082869401 ZINC000012480842
   sch: 284 | -7.2 sch: 733 | -6.7 sch: 738 | -6.7
## Cluster: 79 -- 5 Hits ##
ZINC000238695168 ZINC000001664863 ZINC000096528277 ZINC000017044381 ZINC000020103296
                  sch: 395 | -7.0
                                     sch: 635 | -6.8
                                                         sch: 729 | -6.7
## Cluster: 80 -- 3 Hits ##
ZINC000002182547 ZINC000001679939 ZINC000019615764
   sch: 350 | -7.1
                  sch: 470 | -6.9
                                       sch: 534 | -6.9
## Cluster: 81 -- 3 Hits ##
```

ZINC000003848193 ZINC000067801555 ZINC000095094292

```
sch: 168 | -7.4
                     sch: 437 | -7.0
                                        sch: 614 | -6.8
## Cluster: 82 -- 2 Hits ##
ZINC000039953628 ZINC000001728138
   sch: 310 | -7.1
                  sch: 433 | -7.0
## Cluster: 83 -- 3 Hits ##
ZINC000018156358 ZINC000218389484 ZINC000002567494
   sch: 281 | -7.2
                  sch: 428 | -7.0
                                     sch: 655 | -6.8
## Cluster: 84 -- 4 Hits ##
ZINC000015042503 ZINC000256051490 ZINC000256051491 ZINC000085412792
                  sch: 204 | -7.3 sch: 205 | -7.3
   sch: 17 | -8.1
                                                        sch: 809 | -6.6
## Cluster: 85 -- 4 Hits ##
ZINC000090411079 ZINC000008684184 ZINC000075107602 ZINC000575423545
                  sch: 227 | -7.3 sch: 312 | -7.1
## Cluster: 86 -- 4 Hits ##
ZINC000026547622 ZINC000026439165 ZINC000238496760 ZINC000072209521
   sch: 150 | -7.4 sch: 671 | -6.8 sch: 692 | -6.7
                                                       sch: 995 | -6.5
## Cluster: 87 -- 4 Hits ##
ZINC000096024914 ZINC000085399547 ZINC000685936836 ZINC000685937594
   sch: 401 | -7.0
                  sch: 480 | -6.9
                                     sch: 839 | -6.6
                                                        sch: 951 | -6.5
## Cluster: 88 -- 2 Hits ##
ZINC000000388098 ZINC000001504060
   sch: 334 | -7.1
                  sch: 864 | -6.6
## Cluster: 89 -- 2 Hits ##
ZINC000019168358 ZINC000054441447
   sch: 422 | -7.0
                  sch: 823 | -6.6
## Cluster: 90 -- 2 Hits ##
ZINC000019727490 ZINC000081953085
   sch: 435 | -7.0
                     sch: 702 | -6.7
## Cluster: 91 -- 4 Hits ##
ZINC000071774319 ZINC000002012043 ZINC000040434635 ZINC000039114061
                                       sch: 492 | -6.9
   sch: 46 | -7.8
                     sch: 61 | -7.7
                                                          sch: 661 | -6.8
## Cluster: 92 -- 2 Hits ##
ZINC000000331360 ZINC000307420145
   sch: 556 | -6.8
                    sch: 711 | -6.7
## Cluster: 93 -- 3 Hits ##
ZINC000100477142 ZINC000000969452 ZINC000100836981
   sch: 99 | -7.5
                    sch: 521 | -6.9
                                       sch: 582 | -6.8
## Cluster: 94 -- 3 Hits ##
ZINC000042401115 ZINC000035243251 ZINC000040162968
   sch: 72 | -7.6
                  sch: 254 | -7.2 sch: 481 | -6.9
## Cluster: 95 -- 3 Hits ##
ZINC000085385329 ZINC000059270568 ZINC000051358828
   sch: 402 | -7.0
                     sch: 745 | -6.7
                                      sch: 792 | -6.6
## Cluster: 96 -- 4 Hits ##
ZINC000077010491 ZINC000163690286 ZINC000225797446 ZINC000225797389
                     sch: 327 | -7.1
   sch: 74 | -7.6
                                       sch: 898 | -6.5
                                                          sch: 899 | -6.5
## Cluster: 97 -- 3 Hits ##
ZINC000026440458 ZINC000008715914 ZINC000008665378
   sch: 318 | -7.1
                    sch: 764 | -6.7
                                       sch: 970 | -6.5
## Cluster: 98 -- 3 Hits ##
ZINC000004549213 ZINC000095917952 ZINC000001646675
   sch: 261 | -7.2
                    sch: 396 | -7.0
                                       sch: 816 | -6.6
## Cluster: 99 -- 3 Hits ##
ZINC000031947302 ZINC000039627948 ZINC000019093507
   sch: 225 | -7.3 sch: 268 | -7.2 sch: 563 | -6.8
## Cluster: 100 -- 3 Hits ##
ZINC000004243689 ZINC000409441741 ZINC000409442312
   sch: 224 | -7.3
                     sch: 446 | -7.0
                                       sch: 648 | -6.8
## Cluster: 101 -- 2 Hits ##
```

```
ZINC000013283868 ZINC000005551481
   sch: 183 | -7.3
                    sch: 872 | -6.6
## Cluster: 102 -- 2 Hits ##
ZINC000002524865 ZINC000004277228
   sch: 16 | -8.1
                  sch: 178 | -7.4
## Cluster: 103 -- 2 Hits ##
ZINC000005724454 ZINC000000101099
   sch: 156 | -7.4
                  sch: 157 | -7.4
## Cluster: 104 -- 3 Hits ##
ZINC000047214396 ZINC000047214374 ZINC000008729728
   sch: 130 | -7.5 sch: 955 | -6.5 sch: 989 | -6.5
## Cluster: 105 -- 2 Hits ##
ZINC000036755235 ZINC000084122922
   sch: 95 | -7.5
                   sch: 547 | -6.9
## Cluster: 106 -- 3 Hits ##
ZINC000005282888 ZINC000958528488 ZINC000958528489
   sch: 469 | -6.9
                  sch: 965 | -6.5
                                      sch: 971 | -6.5
## Cluster: 107 -- 3 Hits ##
ZINC000242687661 ZINC000038790893 ZINC000020135873
   sch: 928 | -6.5
                  sch: 934 | -6.5
                                      sch: 936 | -6.5
## Cluster: 108 -- 3 Hits ##
ZINC000225812738 ZINC000225812704 ZINC000020744765
   sch: 163 | -7.4 sch: 164 | -7.4
                                     sch: 920 | -6.5
## Cluster: 109 -- 2 Hits ##
ZINC000252514543 ZINC000058518832
                   sch: 918 | -6.5
   sch: 885 | -6.6
## Cluster: 110 -- 3 Hits ##
ZINC000100010773 ZINC000100964694 ZINC000100707483
                                      sch: 904 | -6.5
   sch: 659 | -6.8
                 sch: 725 | -6.7
## Cluster: 111 -- 3 Hits ##
ZINC000101298733 ZINC000012396782 ZINC000018244383
                                     sch: 895 | -6.5
   sch: 460 | -7.0 sch: 676 | -6.8
## Cluster: 112 -- 2 Hits ##
ZINC000102035122 ZINC000409437728
   sch: 494 | -6.9
                 sch: 894 | -6.5
## Cluster: 113 -- 2 Hits ##
ZINC000045237006 ZINC000002528031
   sch: 455 | -7.0 sch: 854 | -6.6
## Cluster: 114 -- 3 Hits ##
ZINC000105144897 ZINC000100458232 ZINC000158753571
   sch: 206 | -7.3 sch: 592 | -6.8
## Cluster: 115 -- 2 Hits ##
ZINC000004085832 ZINC000253512451
   sch: 560 | -6.8 sch: 804 | -6.6
## Cluster: 116 -- 2 Hits ##
ZINC000037902552 ZINC000104190071
   sch: 802 | -6.6
                 sch: 841 | -6.6
## Cluster: 117 -- 2 Hits ##
ZINC000062520314 ZINC000536958250
   sch: 66 | -7.7 sch: 750 | -6.7
## Cluster: 118 -- 3 Hits ##
ZINC000205619556 ZINC000000967535 ZINC000010231846
   sch: 583 | -6.8 sch: 649 | -6.8
                                     sch: 672 | -6.8
## Cluster: 119 -- 2 Hits ##
ZINC000016942006 ZINC000242718289
   sch: 364 | -7.1 sch: 662 | -6.8
## Cluster: 120 -- 3 Hits ##
ZINC000160417605 ZINC000002522276 ZINC000000165490
                  sch: 215 | -7.3
   sch: 155 | -7.4
                                      sch: 555 | -6.8
```

## Cluster: 121 -- 2 Hits ##

```
ZINC000012362672 ZINC000005381385
                    sch: 479 | -6.9
  sch: 377 | -7.0
## Cluster: 122 -- 3 Hits ##
ZINC000001693652 ZINC000000397444 ZINC000000225822
                  sch: 414 | -7.0
  sch: 372 | -7.0
                                     sch: 926 | -6.5
## Cluster: 123 -- 3 Hits ##
ZINC000000042562 ZINC000000107957 ZINC000000396831
  sch: 171 | -7.4 sch: 208 | -7.3
                                    sch: 454 | -7.0
## Cluster: 124 -- 3 Hits ##
ZINC000145515236 ZINC000019421942 ZINC000000151460
  sch: 146 | -7.4 sch: 449 | -7.0
                                    sch: 986 | -6.5
## Cluster: 125 -- 3 Hits ##
ZINC000148609701 ZINC000307576460 ZINC000000103508
   sch: 43 | -7.8
                 sch: 131 | -7.5 sch: 137 | -7.4
## Cluster: 126 -- 2 Hits ##
ZINC000004343290 ZINC000062718969
  sch: 246 | -7.2
                   sch: 982 | -6.5
## Cluster: 127 -- 2 Hits ##
ZINC000006657983 ZINC000255187779
  sch: 341 | -7.1 sch: 937 | -6.5
## Cluster: 128 -- 2 Hits ##
ZINC000010153174 ZINC000019874130
  sch: 551 | -6.9
                  sch: 923 | -6.5
## Cluster: 129 -- 2 Hits ##
ZINC000002039015 ZINC000004880137
  sch: 412 | -7.0 sch: 917 | -6.5
## Cluster: 130 -- 2 Hits ##
ZINC000002526920 ZINC000002526981
                  sch: 887 | -6.5
  sch: 820 | -6.6
## Cluster: 131 -- 2 Hits ##
ZINC000250514398 ZINC000003864425
  sch: 203 | -7.3 sch: 784 | -6.7
```

## Cluster: 132 -- 2 Hits ##

ZINC000082392287 ZINC000536958911 sch: 321 | -7.1 sch: 777 | -6.7

## Cluster: 133 -- 2 Hits ##

ZINC000107639846 ZINC000107639850 sch: 744 | -6.7 sch: 749 | -6.7

## Cluster: 134 -- 2 Hits ##

ZINC000049453836 ZINC000229427443 sch: 23 | -8.0 sch: 730 | -6.7

## Cluster: 135 -- 2 Hits ##

ZINC000061843879 ZINC000000115211 sch: 505 | -6.9 sch: 716 | -6.7

## Cluster: 136 -- 2 Hits ##

ZINC000409440085 ZINC000000011608 sch: 440 | -7.0 sch: 715 | -6.7

## Cluster: 137 -- 2 Hits ##

ZINC000238445066 ZINC000067642076 sch: 244 | -7.2 sch: 684 | -6.8

## Cluster: 138 -- 2 Hits ##

ZINC000007996755 ZINC000073658660 sch: 242 | -7.2 sch: 673 | -6.8

## Cluster: 139 -- 2 Hits ##

ZINC000002046328 ZINC000001577590 sch: 615 | -6.8 sch: 616 | -6.8

## Cluster: 140 -- 2 Hits ##

ZINC000004262318 ZINC000575423167 sch: 86 | -7.6 sch: 613 | -6.8

## Cluster: 141 -- 2 Hits ##

```
ZINC000001575866 ZINC000019753808
  sch: 375 | -7.0
                     sch: 605 | -6.8
## Cluster: 142 -- 2 Hits ##
ZINC000038973641 ZINC000041200720
  sch: 293 | -7.2
                     sch: 588 | -6.8
## Cluster: 143 -- 2 Hits ##
ZINC000017858938 ZINC000135761952
  sch: 279 | -7.2
                   sch: 586 | -6.8
## Cluster: 144 -- 2 Hits ##
ZINC000217625707 ZINC000217625855
  sch: 562 | -6.8
                  sch: 564 | -6.8
## Cluster: 145 -- 2 Hits ##
ZINC000238452828 ZINC000001385040
  sch: 239 | -7.2
                  sch: 550 | -6.9
## Cluster: 146 -- 2 Hits ##
ZINC000043762827 ZINC000043762839
  sch: 528 | -6.9
                     sch: 529 | -6.9
## Cluster: 147 -- 2 Hits ##
ZINC000053133036 ZINC000052708768
  sch: 329 | -7.1
                  sch: 515 | -6.9
## Cluster: 148 -- 2 Hits ##
ZINC000062719415 ZINC000062719418
  sch: 489 | -6.9
                  sch: 490 | -6.9
## Cluster: 149 -- 2 Hits ##
ZINC000257895848 ZINC000003631558
  sch: 353 | -7.1
                  sch: 376 | -7.0
## Cluster: 150 -- 2 Hits ##
ZINC000043761832 ZINC000043761833
  sch: 283 | -7.2
                   sch: 285 | -7.2
## Cluster: 151 -- 2 Hits ##
ZINC000201088690 ZINC000019928049
   sch: 28 | -7.9
                    sch: 280 | -7.2
## Cluster: 152 -- 2 Hits ##
ZINC000585139430 ZINC000585139431
  sch: 248 | -7.2
                   sch: 250 | -7.2
## Cluster: 153 -- 2 Hits ##
ZINC000012394984 ZINC000006223304
  sch: 135 | -7.4 sch: 229 | -7.3
## Cluster: 154 -- 2 Hits ##
ZINC000059202252 ZINC000045820987
  sch: 126 | -7.5
                     sch: 187 | -7.3
### No Cluster ###
## Cluster: 155 -- 276 Hits ##
ZINC000100019852 ZINC000685937809 ZINC000606348310 ZINC000000347970 ZINC000006480955
                     sch: 14 | -8.1
                                       sch: 19 | -8.0
                                                          sch: 20 | -8.0
    sch: 7 | -8.2
                                                                             sch: 30 | -7.9
ZINC000001415629 ZINC000001705705 ZINC000075337341 ZINC000012396944 ZINC00000367469
                     sch: 36 | -7.8
                                       sch: 38 | -7.8
                                                          sch: 42 | -7.8
   sch: 35 | -7.8
                                                                            sch: 47 | -7.8
ZINC000061965906 ZINC000100020165 ZINC000334138825 ZINC000575425861 ZINC000012336311
   sch: 57 | -7.7
                     sch: 59 | -7.7
                                        sch: 68 | -7.6
                                                           sch: 69 | -7.6
                                                                             sch: 75 | -7.6
ZINC000095631265 ZINC000256052861 ZINC000253536018 ZINC000003322127 ZINC000004532291
   sch: 84 | -7.6
                     sch: 85 | -7.6
                                       sch: 87 | -7.6
                                                          sch: 89 | -7.6
                                                                             sch: 91 | -7.6
ZINC000016957755 ZINC000000161476 ZINC000104238708 ZINC000035269672 ZINC000096868775
                     sch: 102 | -7.5
                                       sch: 118 | -7.5
                                                          sch: 120 | -7.5
  sch: 100 | -7.5
                                                                            sch: 129 | -7.5
ZINC000018203863 ZINC000104572338 ZINC000036243899 ZINC000005503850 ZINC000016958174
  sch: 136 | -7.4
                   sch: 141 | -7.4
                                      sch: 142 | -7.4 sch: 149 | -7.4
                                                                            sch: 153 | -7.4
ZINC000108291988 ZINC000000164643 ZINC000005949506 ZINC000252492241 ZINC000006678542
  sch: 154 | -7.4
                     sch: 158 | -7.4
                                     sch: 161 | -7.4
                                                         sch: 162 | -7.4
                                                                            sch: 165 | -7.4
ZINC000068593395 ZINC000034405783 ZINC000113635882 ZINC000261507104 ZINC000034203956
  sch: 166 | -7.4
                     sch: 169 | -7.4
                                       sch: 170 | -7.4
                                                         sch: 181 | -7.3
                                                                            sch: 182 | -7.3
ZINC000004025132 ZINC000001872881 ZINC000043664758 ZINC000098213765 ZINC00000409433
  sch: 191 | -7.3
                     sch: 199 | -7.3
                                       sch: 200 | -7.3
                                                         sch: 202 | -7.3
                                                                            sch: 212 | -7.3
ZINC000253590903 ZINC000039243821 ZINC000044143949 ZINC000062520097 ZINC000090588163
  sch: 216 | -7.3
                     sch: 218 | -7.3
                                       sch: 222 | -7.3
                                                          sch: 226 | -7.3
                                                                             sch: 233 | -7.3
```

ZINC000014608629 ZINC000001698241 ZINC000005128984 ZINC000002024567 ZINC000006381830

sch: 243 | -7.2

sch: 252 | -7.2

sch: 255 | -7.2

sch: 235 | -7.2

sch: 240 | -7.2

ZINC000039132992 ZINC000074308573 ZINC000095930567 ZINC000139037424 ZINC000575628837 sch: 257 | -7.2 sch: 259 | -7.2 sch: 263 | -7.2 sch: 267 | -7.2 sch: 272 | -7.2 ZINC000085885477 ZINC000085650677 ZINC000575629526 ZINC000107169788 ZINC000071256969 sch: 273 | -7.2 sch: 274 | -7.2 sch: 278 | -7.2 sch: 292 | -7.2 sch: 294 | -7.2 ZINC000008855823 ZINC000088330330 ZINC000040448139 ZINC000015635467 ZINC000016524921 sch: 298 | -7.2 sch: 301 | -7.1 sch: 303 | -7.1 sch: 305 | -7.1 sch: 309 | -7.1 ZINC000216718190 ZINC000100529076 ZINC000225764491 ZINC000001036885 ZINC000001592083 sch: 311 | -7.1 sch: 313 | -7.1 sch: 314 | -7.1 sch: 317 | -7.1 sch: 320 | -7.1 ZINC000035679810 ZINC000258229716 ZINC000100177888 ZINC000038343260 ZINC000001845705 sch: 328 | -7.1 sch: 330 | -7.1 sch: 333 | -7.1 sch: 338 | -7.1 sch: 342 | -7.1 ZINC000035570056 ZINC000037627094 ZINC000045070416 ZINC000034927184 ZINC000014556203 sch: 343 | -7.1 sch: 344 | -7.1 sch: 346 | -7.1 sch: 351 | -7.1 sch: 352 | -7.1 ZINC000242649255 ZINC000001652425 ZINC000238341364 ZINC000675070046 ZINC00003091394 sch: 356 | -7.1 sch: 357 | -7.1 sch: 359 | -7.1 sch: 369 | -7.1 sch: 368 | -7.1 ZINC000062710005 ZINC000001704362 ZINC000255190358 ZINC000015951920 ZINC000048524314 sch: 397 | -7.0 sch: 380 | -7.0 sch: 382 | -7.0 sch: 388 | -7.0 sch: 379 | -7.0 ZINC000247787945 ZINC000257198020 ZINC000168006421 ZINC000146449331 ZINC000077944236 sch: 403 | -7.0 sch: 399 | -7.0 sch: 404 | -7.0 sch: 406 | -7.0 sch: 408 | -7.0 ZINC000329047677 ZINC000085396534 ZINC000002140838 ZINC000036199004 ZINC000015781448 sch: 415 | -7.0 sch: 430 | -7.0 sch: 409 | -7.0 sch: 419 | -7.0 sch: 423 | -7.0 ZINC000019850177 ZINC000032646564 ZINC000038136991 ZINC000004240511 ZINC000000156867 sch: 432 | -7.0 sch: 438 | -7.0 sch: 441 | -7.0 sch: 445 | -7.0 sch: 451 | -7.0 ZINC000003121844 ZINC000000519641 ZINC000005659883 ZINC000001566515 ZINC000071785745 sch: 452 | -7.0 sch: 453 | -7.0 sch: 457 | -7.0 ZINC000039270585 ZINC000005948692 ZINC000033943698 ZINC000080443010 ZINC000103010590 sch: 463 | -6.9 sch: 464 | -6.9 sch: 466 | -6.9 sch: 468 | -6.9 sch: 472 | -6.9 ZINC000071786129 ZINC000000389615 ZINC000258197603 ZINC000100021470 ZINC000057218668 sch: 474 | -6.9 sch: 475 | -6.9 sch: 476 | -6.9 sch: 491 | -6.9 sch: 496 | -6.9 ZINC000084459504 ZINC000409431327 ZINC000002573087 ZINC000063772463 ZINC000072233249 sch: 499 | -6.9 sch: 504 | -6.9 sch: 510 | -6.9 sch: 526 | -6.9 sch: 527 | -6.9 ZINC000039253842 ZINC000005413392 ZINC000034927033 ZINC000306805472 ZINC000090728309 sch: 530 | -6.9 sch: 531 | -6.9 sch: 533 | -6.9 sch: 537 | -6.9 sch: 538 | -6.9 ZINC000045893984 ZINC000409425177 ZINC000096524322 ZINC000003883647 ZINC000059519738 sch: 540 | -6.9 sch: 544 | -6.9 sch: 557 | -6.8 sch: 567 | -6.8 sch: 539 | -6.9 ZINC000199760887 ZINC000061841560 ZINC000035181968 ZINC000169676848 ZINC000095730905 sch: 575 | -6.8 sch: 584 | -6.8 sch: 570 | -6.8 sch: 574 | -6.8 sch: 578 | -6.8 ZINC000199759814 ZINC000170314780 ZINC000071775085 ZINC000003861645 ZINC000004094798 sch: 585 | -6.8 sch: 589 | -6.8 sch: 590 | -6.8 sch: 598 | -6.8 sch: 601 | -6.8 ZINC000021958239 ZINC000002028680 ZINC000004353716 ZINC000001578896 ZINC000038865871 sch: 604 | -6.8 sch: 609 | -6.8 sch: 610 | -6.8 sch: 612 | -6.8 sch: 618 | -6.8 ZINC000066054254 ZINC000005260674 ZINC000004826846 ZINC000034133872 ZINC000104928223 sch: 619 | -6.8 sch: 621 | -6.8 sch: 622 | -6.8 sch: 628 | -6.8 sch: 629 | -6.8 ZINC000002529080 ZINC000019485257 ZINC000001021364 ZINC000044495816 ZINC000238675896 sch: 637 | -6.8 sch: 640 | -6.8 sch: 642 | -6.8 sch: 647 | -6.8 sch: 650 | -6.8 ZINC000002545426 ZINC000003107547 ZINC000067173981 ZINC000225300821 ZINC00000334216 sch: 654 | -6.8 sch: 656 | -6.8 sch: 663 | -6.8 sch: 668 | -6.8 sch: 670 | -6.8 ZINC000585144432 ZINC000020320980 ZINC000029571489 ZINC000016123865 ZINC000008616046 sch: 675 | -6.8 sch: 682 | -6.8 sch: 686 | -6.8 sch: 696 | -6.7 sch: 697 | -6.7 ZINC000118501457 ZINC000012671223 ZINC000034959039 ZINC000240540864 ZINC000049805769 sch: 699 | -6.7 sch: 700 | -6.7 sch: 701 | -6.7 sch: 704 | -6.7 sch: 707 | -6.7 ZINC000409422424 ZINC000037755670 ZINC000000139338 ZINC000011631382 ZINC000005351744 sch: 713 | -6.7 sch: 714 | -6.7 sch: 718 | -6.7 sch: 720 | -6.7 sch: 721 | -6.7 ZINC000090394388 ZINC000104660425 ZINC000072194429 ZINC000070798026 ZINC000107127353 sch: 731 | -6.7 sch: 726 | -6.7 sch: 728 | -6.7 sch: 736 | -6.7 sch: 754 | -6.7 ZINC000000847172 ZINC000003129183 ZINC000034120421 ZINC000068575787 ZINC000045820193 sch: 761 | -6.7 sch: 760 | -6.7 sch: 762 | -6.7 sch: 765 | -6.7 sch: 755 | -6.7 ZINC000042784272 ZINC000004218332 ZINC000002585522 ZINC000045072221 ZINC000072223791 sch: 779 | -6.7 sch: 787 | -6.6 sch: 766 | -6.7 sch: 771 | -6.7 sch: 786 | -6.6 ZINC000005425345 ZINC000536949643 ZINC000034283275 ZINC000100236271 ZINC000045920990 sch: 795 | -6.6 sch: 799 | -6.6 sch: 789 | -6.6 sch: 790 | -6.6 sch: 798 | -6.6 ZINC000003166486 ZINC000072224171 ZINC000005103412 ZINC000085419935 ZINC000009238266 sch: 803 | -6.6 sch: 805 | -6.6 ZINC000095711577 ZINC000170619272 ZINC000000375279 ZINC000040449208 ZINC000058438006 sch: 812 | -6.6 sch: 817 | -6.6 sch: 818 | -6.6 sch: 822 | -6.6 sch: 824 | -6.6 ZINC000083946813 ZINC000098210287 ZINC000054334920 ZINC000000192637 ZINC000041726141 sch: 828 | -6.6 sch: 832 | -6.6 sch: 835 | -6.6 sch: 837 | -6.6 sch: 840 | -6.6 ZINC000104278249 ZINC000035688028 ZINC000040163933 ZINC000000165391 ZINC000085388681 sch: 850 | -6.6 sch: 851 | -6.6 sch: 858 | -6.6 ZINC000575424805 ZINC000035931767 ZINC000001695276 ZINC000002381652 ZINC000104567913 sch: 859 | -6.6 sch: 860 | -6.6 sch: 867 | -6.6 sch: 870 | -6.6 sch: 873 | -6.6 ZINC000004726517 ZINC000040448017 ZINC000000126185 ZINC000034183724 ZINC000002519012 sch: 878 | -6.6 sch: 874 | -6.6 sch: 876 | -6.6 sch: 877 | -6.6 sch: 879 | -6.6 ZINC000012381843 ZINC000000499229 ZINC000103746675 ZINC000047474244 ZINC000306158313 sch: 884 | -6.6 sch: 886 | -6.5 sch: 890 | -6.5 sch: 891 | -6.5 sch: 897 | -6.5 ZINC000047218789 ZINC000238552608 ZINC000076603001 ZINC000004945545 ZINC000261494134 sch: 903 | -6.5 sch: 901 | -6.5 sch: 902 | -6.5 sch: 906 | -6.5 sch: 900 | -6.5 ZINC000061673027 ZINC000005275115 ZINC000003818475 ZINC000134226748 ZINC000089157470 sch: 911 | -6.5 sch: 912 | -6.5 sch: 915 | -6.5 sch: 916 | -6.5 sch: 907 | -6.5 ZINC000044604198 ZINC000021949639 ZINC000004299212 ZINC000256053967 ZINC000002785633 sch: 919 | -6.5 sch: 933 | -6.5 sch: 939 | -6.5 sch: 940 | -6.5 sch: 943 | -6.5

 $ZINC000014983077\ ZINC000057218808\ ZINC000218693696\ ZINC000521396075\ ZINC000016951626$ sch: 945 | -6.5 sch: 948 | -6.5 sch: 949 | -6.5 sch: 954 | -6.5 sch: 956 | -6.5 ZINC000013508949 ZINC000085430406 ZINC000085399963 ZINC000045028150 ZINC000072209007 sch: 957 | -6.5 sch: 959 | -6.5 sch: 961 | -6.5 sch: 964 | -6.5 sch: 966 | -6.5 ZINC000409426432 ZINC000003844527 ZINC000057476741 ZINC000306907677 ZINC000100953939 sch: 973 | -6.5 sch: 974 | -6.5 sch: 978 | -6.5 sch: 979 | -6.5 sch: 969 | -6.5 ZINC000033845154 ZINC000016607202 ZINC000058014739 ZINC000043321513 ZINC000409427579 sch: 987 | -6.5 sch: 988 | -6.5 sch: 997 | -6.5 sch: 981 | -6.5 sch: 985 | -6.5 ZINC000005762788

sch: 998 | -6.5 ## no. of cluster: 155 ##