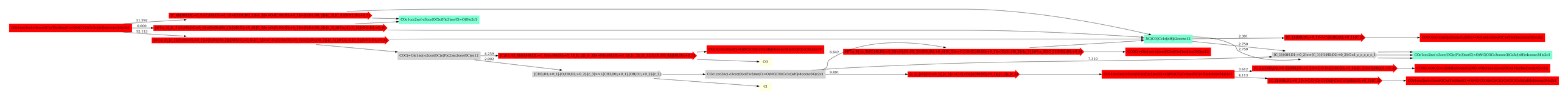
COc1cccc2nc(-c3cccOCncF3c3nc(C(=O)NC)COCC3cfcnH)k4cccnc34k2c1
11.392
0.000
12.113
[C_4](NH2)[C_19_5](C)[C_0](=O)[C_1]=O[C_0](=O)[C_2](c=O)[C_0](=O)[C_18](=O)[C_0](=O)[C_2](c[C_3](C_5)NH2)[C_0]=O
COc1ccc2nc(-c3cccOCncF3c3nc(C)=O)O)c2c1
[#7a_4](c_3)[C_0](=O)[C_0](=O)[C_2](NH2)[C_0](=O)[C_0](=O)[C_18](=O)[C_0](=O)[C_2](c[C_3]([#7a_4](C_5)NH2)C)[C_0]=O
[#7a_4](c_3)[C_0](=O)[C_0](=O)[C_2](NH2)[C_0](=O)[C_0](=O)[C_18](=O)[C_0](=O)[C_2](c[C_3]([#7a_4](C_5)NH2)C)[C_0]=O
COC[=O]c1nc(-c2ccc(OCc2cF)c3nc2ccc(OCccc12
4.259
2.002
[C_0](H2)[C_0](=O)[C_0](=O)[C_2](c[C_3]=>[C_0](H2)[C_0](=O)[C_0](=O)[C_18](=O)[C_0](=O)[C_2](c[C_3]([#7a_4](C_5)NH2)C)[C_0]=O)[C_0](=O)[C_0](=O)[C_18](=O)[C_0](=O)[C_2](c[C_3]([#7a_4](C_5)NH2)C)[C_0]=O
COc1ccc2nc(-c3cccOCncF3c3nc(C)=ONC)COCc3cfcnH)k4cccnc34k2c1
CO
[CH3,D1;+0,1](O)[H0,D2;+0,2](c[C_3])=>[CH3,D1;+0,1](O)[LD1;+0,2](c[C_3])
COc1ccc2nc(-c3cccOCncF3c3nc(C)=ONC)COCc3cfcnH)k4cccnc34k2c1
Cl
6.642
9.491
[#7a_4](c_3)[C_0](=O)[C_0](=O)[C_2](NH2)[C_0](=O)[C_0](=O)[C_18](=O)[C_0](=O)[C_2](c[C_3]([#7a_4](C_5)NH2)C)[C_0]=O
NC(=O)COCc1cfnH)k2cccnc12
COCCC=O(c1nc(-c2ccc(OCccF)c3nc2ccc(OCccc12
7.310
[C_2](H0,D1;+0,1)[C_3]=>[C_0](=O)[C_0](=O)[C_2](c[C_3](H0,D1;+0,1)[C_2])[C_3]
COc1ccc2nc(-c3cccOCncF3c3nc(C)=ONC)COCc3cfcnH)k4cccnc34k2c1
2.391
2.750
2.750
[C_2](H0,D1;+0,1)[C_3]=>[C_0](=O)[C_0](=O)[C_2](c[C_3](H0,D1;+0,1)[C_2])[C_3]
COCCCC(c1cfnH)k2cccnc12NC(=O)c1nc(-c2ccc(OCccF)c3nc2ccc(OCccc12
[C_1](OH,D1;+0,2)[>][C_1](O,H0,D2;+0,2)[C-C=C_c_c_c_c_1]
COc1ccc2nc(-c3cccOCncF3c3nc(C)=ONC)COCc3cccccc3)Cc3cfnH)k4cccnc34k2c1
3.612
4.113
[C_3](CH2,D2;+0,1)(O)[C_0](=O)[C_0](=O)[C_2](c[C_3](H0,D1;+0,1)[C_2])[C_3]
COc1ccc2nc(-c3cccOCncF3c3nc(C)=ONC)COCc3cccccc12NC(=O)c1nc(-c2ccc(OCccF)c3nc2ccc(OCccc12
[C_2](H0,D1;+0,1)[C_3]=>[C_0](=O)[C_0](=O)[C_2](c[C_3](H0,D1;+0,1)[C_2])[C_3]
COc1ccc2nc(-c3cccOCncF3c3nc(C)=ONC)COCc3cfcnH)k4cccnc34k2c1