Supporting Information

In Silico Prediction of Human Intravenous Pharmacokinetic Parameters with Improved Accuracy

Yuchen Wang[a,1], *Haichun Liu*[a,1], *Yuanrong Fan*[a], *Xingye Chen*[a], *Yan Yang*[a], *Lu Zhu*[a], *Junnan Zhao*[a], *Yadong Chen*[a,*] *and Yanmin Zhang*[a,*]

[a] School of Science, China Pharmaceutical University, 639 Longmian Avenue, Nanjing, Jiangsu 211198, China.

[1] The authors contributed equally to this work and should be considered as co first authors

*corresponding authors: *ydchen@cpu.edu.cn; yanminzhang@cpu.edu.cn*

Table S1. Experimental and Predicted Human VD_{ss}, CL, $t_{1/2}$, and f_u of the Whole Dataset Consisted of 1270 compounds

no.	original SMILES[a]	final SMILES[b]	exp VD_{ss} (L/kg)	pred VD_{ss} (L/kg)	exp CL (mL/min/kg)	pred CL (mL/min/kg)	exp $t_{1/2}$ (h)	pred $t_{1/2}$ (h)	exp f_u	pred f_u	exp logVD_{ss}	pred logVD_{ss}	exp logCL	pred logCL	exp log$t_{1/2}$	pred log$t_{1/2}$	exp logf_u	pred logf_u
1	NC1=NC(=O)N(C=C1)[C@H]2CO[C@@H](CO)S2	NC1=NC(=O)N(C=C1)[C@H]2CO[C@@H](CO)S2	1.18	0.78	3	3.68	19.2	8.67			0.07	-0.11	0.48	0.57	1.28	0.94		
2	NC1=NC(=O)N(C=C1)[C@@H]2CO[C@H](CO)S2	NC1=NC(=O)N(C=C1)[C@@H]2CO[C@H](CO)S2	0.84	0.79	3.9	4.05	8.92	8.17			0.08	-0.10	0.59	0.61	0.95	0.91		
3	O[C@@H]1C[C@@](C[C@@H](OC(=O)C=CC2=CC=C(O)C(=C2)O)[C@@H]1O)(OC(=O)C=CC3=CC=C(O)C(=C3)O)C(O)=O	O[C@@H]1C[C@@](C[C@@H](OC(=O)\C=C\C2=CC(=C(O)C=C2)O)[C@@H]1O)(OC(=O)\C=C/C3=CC(=C(O)C=C3)O)C([O-])=O	0.79	1.01	8.7	13.11	1.37	1.43			0.10	0.00	0.94	1.12	0.14	0.16		
4	C[C@@H]1O[C@H](C[C@@H](O)[C@H]1O)O[C@@H]2[C@H](O)C[C@@H](O[C@H]2C)O[C@@H]3[C@H](O)C[C@@H](O[C@H]3C)O[C@@H]4CCO[C@@H]4CC[C@]5(C)[C@@H](CC[C@H]6[C@H]5CC[C@@H]7(C)[C@H]([C@H](C[C@@]67O)OC(C)=O)C8=CC(=O)OC8)C4	C[C@@H]1O[C@@H](C[C@@H](O)[C@@H]1O)O[C@H]2[C@H](O)C[C@@H](O[C@H]2C)O[C@@H]3[C@@H](O)C[C@@H](O[C@H]3C)O[C@@H]4CC[C@]5(C)[C@@H](CC[C@H]6[C@@H]5CC[C@]7(C)[C@H]([C@H](C[C@@]67O)OC(C)=O)C8=CC(=O)OC8)C4	0.78	0.98	0.18	0.35	51.6	36.06	0.07	0.10	0.11	-0.01	-0.74	-0.45	1.71	1.56	-1.15	-1.02
5	NC1(CC1)C(O)=O	[NH3+]C1(CC1)C([O-])=O	0.73	0.50	1.5	2.02	5.9	4.52			0.14	-0.30	0.18	0.31	0.77	0.66		
6	O[C@@H]1C[C@](O)(C[C@@H](OC(=O)C=CC2=CC(=C(O)C=C2)O)[C@@H]1OC(=O)C=CC3=CC(=C(O)C=C3)O)C(O)=O	O[C@H]1C[C@@](O)(C[C@@H](OC(=O)\C=C\C2=CC(=C(O)C=C2)O)[C@@H]1OC(=O)\C=C/C3=CC(=C(O)C=C3)O)C([O-])=O	0.63	0.79	34.58	23.49	0.57	0.96			0.20	-0.10	1.54	1.37	-0.24	-0.02		
7	O[C@H]1[C@@H](C[C@@](O)(C[C@H]1OC(=O)C=CC2=CC=C(O)C(=C2)O)C(O)=O)OC(=O)C=CC3=CC=C(O)C(=C3)O	OC1[C@@H](CC(O)(C[C@H]1OC(=O)\C=C\C2=CC(=C(O)C=C2)O)C([O-])=O)OC(=O)\C=C\C3=CC(=C(O)C=C3)O	4.82	1.43	75.81	29.77	3.17	2.05			0.68	0.16	1.88	1.47	0.50	0.31		
8	C[C@@H](N)[C@H]1CC[C@@H](N)[C@H](O1)O[C@@H]2[C@@H](N)[C@@H](O)[C@@H](O)[C@H]([C@H]2O)N(C)C(=O)CN	C[C@@H]([NH3+])[C@H]1CC[C@@H]([NH3+])[C@H](O1)O[C@@H]2[C@@H]([NH3+])[C@@H](O)[C@@H](O)[C@H]([C@H]2O)N(C)C(=O)C[NH3+]	0.27	0.34	1.37	1.47	2.9	3.24			0.57	-0.47	0.14	0.17	0.46	0.51		
9	CC(C)N(CC[C@H](C1=CC=CC=C1)C2=CC(=CC=C2O)CO)C(C)C	CC(C)[NH+](CC[C@H](C1=CC=CC=C1)C2=C(O)C=CC(=C2)CO)C(C)C	2.41	1.91					0.5	0.27	0.38	0.28					-0.30	-0.57
10	CCC1=NC2=C(N)N=C3C=CC=CC3=C2[N]1CCCCN[S](C)(=O)=O	CCC1=NC2=C([N]1CCCCN[S](C)(=O)=O)C3=CC=CC=C3N=C2N	3.1	2.46	7.7	5.44	7.1	3.89			0.49	0.39	0.89	0.74	0.85	0.59		
11	NC1=NC(=C2N=C[N]([C@@H]3C[C@H](CO)C=C3)C2=N1)NC4CC4	NC1=NC2=C(N=C[N]2[C@@H]3C[C@H](CO)C=C3)C(=N1)NC4CC4	0.84	1.06	13	9.73	1	2.06	0.5	0.47	0.08	0.02	1.11	0.99	0.00	0.31	-0.30	-0.33
12	COC1=CC2=C(CN(CC2)C3=CC(=C4C=C(OC)C(=CC4=N3)OC)N)C=C1OC	COC1=C(OC)C=C2CN(CCC2=C1)C3=[NH+]C4=CC(=C(OC)C=C4C(=C3)N)OC	6.3	5.01	14	10.02	5.9	5.87			0.80	0.70	1.15	1.00	0.77	0.77		
13	CN(C)CC1=C(OC2=CC=CC=C12)C(=O)NCCOC3=CC=C(C=C3)C(=O)NO	C[NH+](C)CC1=C(OC2=C1C=CC=C2)C(=O)NCCOC3=CC=C(C=C3)C(=O)N[O-]	2.6	2.07	16.33	9.02	5.9	5.54			0.41	0.32	1.21	0.96	0.77	0.74		
14	COC(=O)C1(CC1)OC(=O)C2=CN=C[N]2[C@H](C)C3=CC=CC=C3	COC(=O)C1(CC1)OC(=O)C2=CN=C[N]2[C@H](C)C3=CC=CC=C3			50.08	22.60	0.24	0.73					1.70	1.35	-0.62	-0.14		
15	CC(=O)NCCC[S](O)(=O)=O	CC(=O)NCCC[S]([O-])(=O)=O	0.3	0.38	3.75	3.52	3.2	2.48	1	0.83	0.52	-0.42	0.57	0.55	0.51	0.40	0.00	-0.08
16	C[C@H]1O[C@H](O[C@H]2[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O[C@@H]2CO)O[C@H]([C@H](O)CO)[C@H](O)[C@@H](O)C=O)[C@H](O)[C@@H]1N[C@H]3C=C(CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O	C[C@H]1O[C@H](O[C@H]2[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H](O)[C@H](O[C@@H]2CO)O[C@H]([C@H](O)CO)[C@H](O)[C@@H](O)C=O)[C@H](O)[C@@H]1[NH2+][C@H]3C=C(CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O	0.32	0.40	2.2	1.98	2.7	3.06			0.49	-0.40	0.34	0.30	0.43	0.49		
17	CCCC(=O)NC1=CC=C(OCC(O)CNC(C)C)C(=C1)C(C)=O	CCCC(=O)NC1=CC(=C(OC[C@@H](O)C[NH2+]C(C)C)C=C1)C(C)=O	1.7	2.02	10	7.84	3.5	5.13	0.74	0.53	0.23	0.31	1.00	0.89	0.54	0.71	-0.13	-0.28
18	CCN(CC)CCNC(=O)C1=CC=C(NC(C)=O)C=C1	CC[NH+](CC)CCNC(=O)C1=CC=C(NC(C)=O)C=C1	1.9	2.32	4	5.21	6.4	4.55	0.9	0.77	0.28	0.36	0.60	0.72	0.81	0.66	-0.05	-0.11
19	CC(=O)C[C@H](C1=CC=C(C=C1)[N+]([O-])=O)C2=C(O)C3=CC=CC=C3OC2=O	CC(=O)C[C@H](C1=CC=C(C=C1)[N+]([O-])=O)C2=C([O-])C3=C(OC2=O)C=CC=C3	0.24	0.30	1.28	0.86	7.22	6.62	0.02	0.02	0.62	-0.52	0.11	-0.07	0.86	0.82	-1.70	-1.61
20	CC(=O)NC1=CC=C(O)C=C1	CC(=O)NC1=CC=C(O)C=C1	1	0.68	5	6.39	2.5	2.45	0.52	0.56	0.00	-0.17	0.70	0.81	0.40	0.39	-0.28	-0.25
21	CC(=O)NC1=NN=C(S1)[S](N)(=O)=O	CC(=O)NC1=NN=C(S1)[S](N)(=O)=O	0.37	0.47	0.65	1.17	13	7.95	0.04	0.14	0.43	-0.33	-0.19	0.07	1.11	0.90	-1.40	-0.84
22	CC(=O)N[C@@H](CS)C(O)=O	CC(=O)N[C@@H](CS)C([O-])=O	0.55	0.69	3.1	3.02	5.5	4.49	0.17	0.29	0.26	-0.16	0.49	0.48	0.74	0.65	-0.77	-0.53

23	CC[C@H](OC(C)=O)C(C[C@H](C)N(C)C)(C1=CC=CC=C1)C2=CC=CC=C2	CC[C@H](OC(C)=O)C(C[C@H](C)[NH+](C)C)(C1=CC=CC=C1)C2=CC=CC=C2	8.3	4.39	5.4	6.15	18	15.26	0.2	0.14	0.92	0.64	0.73	0.79	1.26	1.18	-0.70	-0.85
24	CC(=O)OC1=CC=CC=C1C(O)=O	CC(=O)OC1=C(C=CC=C1)C([O-])=O	0.22	0.17	12	6.15	0.26	0.55	0.68	0.52	0.66	-0.78	1.08	0.79	-0.59	-0.26	-0.17	-0.28
25	N[C@@H]([C@@H]1CC(=NO1)Cl)C(O)=O	[NH3+][C@@H]([C@@H]1CC(=NO1)Cl)C([O-])=O	0.5	0.50	0.69	1.47	9.9	5.60			0.30	-0.31	-0.16	0.17	1.00	0.75		
26	OC(C(=O)O[C@H]1C[N+]2(CCCOC3=CC=CC=C3)CCC1CC2)(C4=CC=CS4)C5=CC=CS5	OC(C(=O)O[C@H]1C[N+]2(CCCOC3=CC=CC=C3)CC1CC2)(C4=CC=CS4)C5=CC=CS5	4.3	3.42	48.5	21.09					0.63	0.53	1.69	1.32				
27	CC(C)N(CC[C@]1([C@H]2CCCCN2C(=NC1=O)C)C3=CC=CC=C3)C(C)C	CC(C)[NH+](CC[C@]1([C@H]2CCCCN2C(=NC1=O)C)C3=CC=CC=C3)C(C)C	0.58	0.73	6.79	5.49	1.89	3.05	0.7	0.34	0.24	-0.14	0.83	0.74	0.28	0.48	-0.15	-0.47
28	NC1=NC2=C(N=C[N]2COCCO)C(=O)N1	NC1=NC2=C(N=C[N]2COCCO)C(=O)N1	0.71	0.89	4.7	5.85	2.5	3.44	0.85	0.92	0.15	-0.05	0.67	0.77	0.40	0.54	-0.07	-0.04
29	NC1=NC=NC2=C1N=C[N]2CCOC[P](O)(O)=O	NC1=C2N=C[N](CCOC[P]([O-])([O-])=O)C2=NC=N1	0.42	0.37	3.7	3.24	1.6	2.29	0.96	0.86	0.38	-0.43	0.57	0.51	0.20	0.36	-0.02	-0.07
30	CN(C)CC1=NN=C2CN=C(C3=CC=CC=C3)C4=CC(=CC=C4[N]12)Cl	C[NH+](C)CC1=NN=C2CN=C(C3=CC=CC=C3)C4=C(C=CC(=C4)Cl)[N]12	0.98	1.23	6.2	4.60	2.1	3.79	0.31	0.13	0.01	0.09	0.79	0.66	0.32	0.58	-0.51	-0.88
31	CN(CC1=C(C)C2=CC=CC=C2O1)C(=O)C=CC3=CC4=C(NC(=O)CC4)N=C3	CN(CC1=C(C)C2=C(O1)C=CC=C2)C(=O)\C=C\C3=CC4=C(NC(=O)CC4)N=C3	0.43	0.54	0.9	1.23	6.4	5.90			0.37	-0.27	-0.05	0.09	0.81	0.77		
32	CCOC1=C(C=CC(=C1)CC(=O)N[C@@H](CC)C)C2=C(C=CC=C2)N3CCCCC3)C(O)=O	CCOC1=C(C=CC(=C1)CC(=O)N[C@@H](CC(C)C)C2=C(C=CC=C2)N3CCCCC3)C([O-])=O	0.28	0.35	2.04	2.47	2.5	2.22			0.55	-0.45	0.31	0.39	0.40	0.35		
33	CC[C@@H]1[C@@H](O)N2[C@H]3CC1C4[C@@H](O)C5(C[C@H]24)[C@H]3N(C)C6=C5C=CC=C6	CC[C@@H]1[C@@H](O)[NH+]2[C@H]3C[C@H]1[C@H]4[C@@H](O)[C@]5(C[C@@H]24)[C@H]3N(C)C6=C5C=CC=C6	4	3.18	9.8	6.77	7.3	5.82	0.24	0.30	0.60	0.50	0.99	0.83	0.86	0.77	-0.62	-0.52
34	CC(C)(C)NCC(O)C1=CC=C(O)C(=C1)COOCC=C1C[N@@+]2(CC[C@@]34[C@@H]2C[C@@H]1C5=CN6[C@H]7C(=CN([C@H]35)C8=CC=CC=C48)[C@H]9C[C@H]%10[C@@]7(CC[N@@+]%10(CC=C)CC9=CCO)C%11=CC=CC=C6%11)CC=C	CC(C)(C)[NH2+]C[C@H](O)C1=CC(=C(O)C=C1)COOC\C=C1\C[N@@+]2(CC[C@@]34[C@H]2C[C@@H]1\C5=C\N6[C@H]7\C(=C/N([C@H]35)C8=C4C=CC=C8)[C@@H]9C[C@H]%10[C@@]7(CC[N@@+]%10(CC=C)CC9=C\CO)C%11=C6C=CC=C%11)CC=C	0.32	0.40	1.3	1.66	3.6	5.86			0.49	-0.39	0.11	0.22	0.56	0.77		
36	CCC1=CC2=C(C=C1N3CCC(CC3)N4CCOCC4)C(C)(C)C5=C(C2=O)C6=CC=C(C=C6[NH]5)C#N	CCC1=C(C=C2C(=C1)C(=O)C3=C([NH]C4=C3C=CC(=C4)C#N)C2(C)C)N5CCC(CC5)[NH+]6CCOCC6	6.35	5.04	7.69	6.48	11.7	10.60	0.003	0.01	0.80	0.70	0.89	0.81	1.07	1.03	-2.52	-2.27
37	NCCCC(O)([P](O)(O)=O)[P](O)(O)=O	[NH3+]CCCC(O)([P]([O-])([O-])=O)[P]([O-])([O-])=O	0.33	0.56	2.6	2.71	3.1	6.29	0.22	0.31	0.48	-0.25	0.41	0.43	0.49	0.80	-0.66	-0.51
38	CC(C)CCC[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2C(CCC[C@]12C)=CC=C3C[C@@H](O)C[C@H](O)C3=C	CC(C)CCC[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2\C(CCC[C@@]12C)=C\C=C\3C[C@@H](O)C[C@H](O)C3=C			0.82	1.11	48.6	28.57					-0.09	0.05	1.69	1.46		
39	CCN1N=NN(CCN2CCC(CC2)(COC)N(C(=O)CC)C3=CC=CC=C3)C1=O	CCN1N=NN(CC[NH+]2CCC(CC2)(COC)N(C(=O)CC)C3=CC=CC=C3)C1=O	0.45	0.57	3.9	4.61	1.6	2.28	0.086	0.12	0.35	-0.25	0.59	0.66	0.20	0.36	-1.07	-0.92
40	COC1=CC2=NC(=NC(=C2C=C1OC)N)N(C)CCCNC(=O)C3CCCO3	COC1=C(OC)C=C2C(=NC(=NC2=C1)N(C)CCCNC(=O)[C@@H]3CCCO3)N	1.5	1.19	5.9	4.34	4.8	4.25	0.14	0.13	0.18	0.08	0.77	0.64	0.68	0.63	-0.85	-0.88
41	ClC1=CC=CC(=C1N(CC=C)C2=NCCN2)Cl	ClC1=C(N(CC=C)C2=[NH+]CCN2)C(=CC=C1)Cl	2.72	6.40	12	10.52	3.14	4.45	0.4	0.21	0.43	0.81	1.08	1.02	0.50	0.65	-0.40	-0.68
42	COC1=CC2=C([NH]N=N2)C=C1C(=O)NCC3CCCN3CC=C	COC1=CC2=C([NH]N=N2)C=C1C(=O)NC[C@H]3CC[NH+]3CC=C	1.6	2.01	6.6	6.99	2.8	4.47			0.20	0.30	0.82	0.84	0.45	0.65		
43	O=C1NC=NC2=C1C=N[NH]2	O=C1NC=NC2=C1C=N[NH]2	0.58	0.62	11	8.78	0.8	1.06	0.97	0.81	0.24	-0.21	1.04	0.94	-0.10	0.03	-0.01	-0.09
44	FC1=CC=C(C=C1)C(N2CCN(CC2)C3=NC(=NC(=N3)NCC=C)NCC=C)C4=CC=C(F)C=C4	FC1=CC=C(C=C1)C([NH+]2CCN(CC2)C3=NC(=NC(=N3)NCC=C)NCC=C)C4=CC=C(F)C=C4	35.37	28.10	0.97	1.99	1344	176.91	0.01	0.01	1.55	1.45	-0.01	0.30	3.13	2.25	-2.00	-1.88
45	CCC[S@](=O)CCCN(CC)C[C@@H](O)COC1=CC=C(C=C1)C#N	CCC[S@](=O)CCC[NH+](CC)C[C@@H](O)COC1=CC=C(C=C1)C#N	1.8	1.87	11.3	9.51	2.4	2.76			0.26	0.27	1.05	0.98	0.38	0.44		
46	CNC(=O)C(N1CCC2=C(C=C(OC)C(=C2)OC)[C@@H]1CCC3=CC=C(C=C3)C(F)(F)F)C4=CC=CC=C4	CNC(=O)[C@@H]([NH+]1CCC2=C(C=C(OC)C(=C2)OC)[C@@H]1CCC3=CC=C(C=C3)C(F)(F)F)C4=CC=CC=C4	9.75	7.75	10.2	8.38	34.3	23.98			0.99	0.89	1.01	0.92	1.54	1.38		
47	CN(C)CCC1=C[NH]C2=CC=C(C[S](=O)(=O)N3CCCC3)C=C12	C[NH+](C)CCC1=C[NH]C2=C1C=C(C[S](=O)(=O)N3CCCC3)C=C2	2.2	1.63	8.9	9.52	3.4	3.63	0.6	0.51	0.34	0.21	0.95	0.98	0.53	0.56	-0.22	-0.29
48	C[N]1C2=C(C(=O)N(CC2)CC3=C(C)[NH]C=N3)C4=CC=CC=C14	C[N]1C2=C(C(=O)N(CC2)CC3=C(C)[NH]C=N3)C4=C1C=CC=C4	1.1	1.38	8.7	7.79	1.6	2.10	0.18	0.16	0.04	0.14	0.94	0.89	0.20	0.32	-0.74	-0.79
49	CN[S](=O)(=O)C1=CC(=C(OC)C=C1N)C(=O)NC[C@@H]2CCCN2CC=C	CN[S](=O)(=O)C1=C(N)C=C(OC)C(=C1)C(=O)NC[C@@H]2CCC[NH+]2CC=C	2.3	1.83	5.47	4.63	4.8	4.47			0.36	0.26	0.74	0.67	0.68	0.65		
50	CC1=NN=C2CN=C(C3=CC=CC=C3)C4=CC(=	CC1=NN=C2CN=C(C3=CC=CC=C3)C4=C(C=CC(=C	0.8	1.12	0.74	1.02	12	8.12	0.29	0.15	0.10	0.05	-0.13	0.01	1.08	0.91	-0.54	-0.83

	CC=C4[N]12)Cl	4)Cl)[N]12																
51	CC(C)NCC(O)COC1=CC=CC=C1CC=C	CC(C)[NH2+]C[C@H](O)COC1=C(CC=C)C=CC=C1	3.2	1.68	15	12.25	2.5	2.81	0.18	0.32	0.51	0.23	1.18	1.09	0.40	0.45	-0.74	-0.50
52	CCCCC[C@H](O)C=C[C@H]1[C@H](O)CC(=O)[C@@H]1CCCCCCC(O)=O	CCCCC[C@H](O)\C=C/[C@H]1[C@H](O)CC(=O)[C@@H]1CCCCCCC([O-])=O	2.4	1.59	45.4	21.17	1.9	1.83			0.38	0.20	1.66	1.33	0.28	0.26		
53	C[C@H]1CN(CC[C@@]1(C)C2=CC=CC(=C2)O)C[C@H](CC3=CC=CC=C3)C(=O)NCC(O)=O	C[C@H]1C[NH+](CC[C@@]1(C)C2=CC(=CC=C2)O)C[C@H](CC3=CC=CC=C3)C(=O)NCC([O-])=O	0.43	0.54	5.84	4.59	5.3	4.92	0.2	0.14	0.37	-0.27	0.77	0.66	0.72	0.69	-0.70	-0.84
54	N[C]12CC3[CH2][CH](C[CH]([CH2]3)C1)C2	[NH3+][C]12C[CH]3C[CH]([CH2]C([CH2]3)C1)C2	6.6	5.24	4.8	6.01	16	11.48	0.33	0.40	0.82	0.72	0.68	0.78	1.20	1.06	-0.48	-0.40
55	CC1(C)S[C@@H]2[C@H](N=CN3CCCCCC3)C(=O)N2[C@H]1C(O)=O	CC1(C)S[C@@H]2[C@H](N=CN3CCCCCC3)C(=O)N2[C@H]1C([O-])=O	0.37	0.42	6.3	4.33	1.1	1.39	0.9	0.60	0.43	-0.38	0.80	0.64	0.04	0.14	-0.05	-0.23
56	COC1=CC(=CN=[N+]1C2=CC=CC=C2)N	COC1=[N+](N=CC(=C1)N)C2=CC=CC=C2	4	3.18	5.1	8.19	14.1	8.54			0.60	0.50	0.71	0.91	1.15	0.93		
57	CNN1C=C(C(O)=O)C(=O)C2=C1C=C(N3CCN(C)CC3)C(=C2)F	CNN1C=C(C([O-])=O)C(=O)C2=C1C=C(N3CC[NH+](C)CC3)C(=C2)F			4.56	3.52	4.66	6.97					0.66	0.55	0.67	0.84		
58	NCCCNCCS[P](O)(O)=O	[NH3+]CCC[NH2+]CCS[P]([O-])([O-])=O	0.09	0.11	30.65	11.78	0.15	0.54			1.05	-0.95	1.49	1.07	-0.82	-0.27		
59	NCC[C@H](O)C(=O)N[C@@H]1C[C@H](N)[C@@H](O[C@H]2O[C@H](CN)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]2O)[C@H](O)[C@H]1O[C@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](N)[C@H]3O	[NH3+]CC[C@H](O)C(=O)N[C@@H]1C[C@H]([NH3+])[C@@H](O[C@H]2O[C@H](C[NH3+])[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H]2O)[C@H](O)[C@H]1O[C@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]([NH3+])[C@H]3O	0.16	0.20	1.1	1.21	2.4	3.18	0.88	0.80	0.80	-0.70	0.04	0.08	0.38	0.50	-0.06	-0.10
60	CC[C@@]1(O)C(=O)OCC2=C1C=C3N(CC4=CC5=C(N)C=CC=C5N=C34)C2=O	CC[C@]1(O)C(=O)OCC2=C1C=C3N(CC4=C3N=C5C=CC=C(N)C5=C4)C2=O	2.2	1.18	6.5	5.64	7	5.27	0.003	0.01	0.34	0.07	0.81	0.75	0.85	0.72	-2.52	-1.84
61	NCCCCCC(O)=O	[NH3+]CCCCCC([O-])=O	0.39	0.34	2.5	2.52	4.9	3.62	0.92	0.83	0.41	-0.47	0.40	0.40	0.69	0.56	-0.04	-0.08
62	NCC(=O)CCC(O)=O	[NH3+]CC(=O)CCC([O-])=O	0.12	0.15	1.88	2.20	0.83	1.28	0.88	0.78	0.92	-0.82	0.27	0.34	-0.08	0.11	-0.06	-0.11
63	NC1=CC=C(O)C(=C1)C(O)=O	NC1=CC(=C(O)C=C1)C([O-])=O	0.33	0.26	9.3	5.79	0.61	1.08	0.39	0.42	0.48	-0.58	0.97	0.76	-0.21	0.03	-0.41	-0.38
64	CCCCC1=C(C(=O)C2=CC(=C(OCCN(CC)CC)C(=C2)I)I)C3=CC=CC=C3O1	CCCCC1=C(C(=O)C2=CC(=C(OCC[NH+](CC)CC)C(=C2)I)I)C3=C(O1)C=CC=C3	60	21.14	1.9	2.67	820	146.66	0.0002	0.02	1.78	1.33	0.28	0.43	2.91	2.17	-3.70	-1.71
65	CN(C)CCCO[C@H]1[C@H](O[C@@H]2OC(C)(C)O[C@H]12)[C@H](O)CO	C[NH+](C)CCCO[C@H]1[C@H](O[C@@H]2OC(C)(C)O[C@H]12)[C@H](O)CO	1.04	0.83	3.48	3.65	4.07	4.09	0.97	0.85	0.02	-0.08	0.54	0.56	0.61	0.61	-0.01	-0.07
66	CN(C)CCC=C1C2=CC=CC=C2CCC3=CC=CC=C13	C[NH+](C)CCC=C1C2=C(CCC3=C1C=CC=C3)C=CC=C2	8.7	14.17	6.1	9.83	17	19.21	0.07	0.07	0.94	1.15	0.79	0.99	1.23	1.28	-1.15	-1.14
67	CCOC(=O)C1=C(COCCN)NC(=C(C1C2=CC=CC=C2Cl)C(=O)OC)C	CCOC(=O)C1=C(COCC[NH3+])NC(=C([C@@H]1C2=C(Cl)C=CC=C2)C(=O)OC)C	17	11.67	7	7.25	34	14.41	0.005	0.02	1.23	1.07	0.85	0.86	1.53	1.16	-2.30	-1.63
68	CCN(CC)CC1=CC(=CC=C1O)NC2=CC=NC3=C2C=CC(=C3)Cl	CC[NH+](CC)CC1=C(O)C=CC(=C1)NC2=C3C=CC(=CC3=[NH+]C=C2)Cl	17.4	13.82	217	62.20	2.1	5.25			1.24	1.14	2.34	1.79	0.32	0.72		
69	CN(C)CCN1C(=O)C2=CC=CC3=CC(=CC(=C23)C1=O)N	C[NH+](C)CCN1C(=O)C2=C3C(=CC=C2)C=C(N)C=C3C1=O	7.33	5.82	19.32	15.93	4.78	6.04			0.87	0.76	1.29	1.20	0.68	0.78		
70	CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)[C@H](N)C3=CC=C(O)C=C3)C(=O)N2[C@H]1C(O)=O	CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)[C@H]([NH3+])C3=CC=C(O)C=C3)C(=O)N2[C@H]1C([O-])=O	0.25	0.27	3.3	3.05	1.1	1.31	0.85	0.69	0.60	-0.58	0.52	0.48	0.04	0.12	-0.07	-0.16
71	CCNC(=O)[C@H]1C[C@H]([C@H](O)[C@@H]1O)[N]2C=CC3=C(N[C@H](CC)CC4=C(Cl)C=CS4)N=CN=C23	CCNC(=O)[C@H]1C[C@@H]([C@H](O)[C@@H]1O)[N]2C=CC3=C2N=CN=C3N[C@H](CC)CC4=C(Cl)C=CS4	0.84	1.06	12	7.98	1.33	2.38	0.03	0.03	0.08	0.02	1.08	0.90	0.12	0.38	-1.52	-1.48
72	C[C@H](N)CC1=CC=CC=C1	C[C@H]([NH3+])CC1=CC=CC=C1	6.1	4.85	9.7	7.72	7.3	5.95	0.8	0.71	0.79	0.69	0.99	0.89	0.86	0.77	-0.10	-0.15
73	CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)[C@H](N)C3=CC=CC=C3)C(=O)N2[C@H]1C(O)=O	CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)[C@H]([NH3+])C3=CC=CC=C3)C(=O)N2[C@H]1C([O-])=O	0.22	0.27	2.8	3.09	1.4	1.15	0.85	0.69	0.66	-0.57	0.45	0.49	0.15	0.06	-0.07	-0.16
74	NC1=CC(=CNC1=O)C2=CC=NC=C2	NC1=CC(=CNC1=O)C2=CC=NC=C2	1.3	1.03	8.9	7.37	2	2.49	0.89	0.68	0.11	0.01	0.95	0.87	0.30	0.40	-0.05	-0.17
75	COC1=CC(=CC=C1NC2=C3C=CC=CC3=NC4=CC=CC=C24)N[S](C)(=O)=O	COC1=C(NC2=C3C=CC=CC3=[NH+]C4=CC=CC=C24)C=CC(=C1)N[S](C)(=O)=O	1.6	1.27	4.3	3.40	4.7	5.66	0.029	0.02	0.20	0.10	0.63	0.53	0.67	0.75	-1.54	-1.68
76	CNC(=O)C1=CC=CC2=C(NC3=CC=C(N[S](C)(=O)=O)C=C3OC)C4=CC=CC(=C4N=C12)C	CNC(=O)C1=C2[NH+]=C3C(=CC=CC3=C(NC4=C(OC)C=C(N[S](C)(=O)=O)C=C4)C2=CC=C1)C	0.3	0.38	2.6	2.90	2.4	3.96	0.0011	0.0029	0.52	-0.42	0.41	0.46	0.38	0.60	-2.96	-2.53
77	OC[C@H]1O[C@@H](OC[C@H]2O[C@@H](O[C@H](C#N)C3=CC=CC=C3)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]2O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]1O	OC[C@H]1O[C@@H](OC[C@H]2O[C@@H](O[C@H](C#N)C3=CC=CC=C3)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]2O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]1O	0.21	0.26	1.88	2.04	1.23	1.73			0.68	-0.58	0.27	0.31	0.09	0.24		
78	CCC1=C[C@@H]2CN(CCC3=C([NH]C4=CC=CC=C34)[C@@](C2)(C(=O)OC)C5=CC6=C(C	CCC1=C[C@@H]2C[NH+](CCC3=C([NH]C4=C3C=CC=C4)[C@@](C2)(C(=O)OC)C5=C(OC)C=C6N(C)[	12	9.52	12	9.20	18	21.50			1.08	0.98	1.08	0.96	1.26	1.33		

	=C5OC)N(C)[C@H]7[C@](O)([C@H](OC(C)=O)[C@]8(CC)C=CCN9CC[C@]67[C@H]89)C(=O)OC)C1	C@H]7[C@](O)([C@H](OC(C)=O)[C@]8(CC)C=CC[NH+]9CC[C@]7([C@H]89)C6=C5)C(=O)OC)C1																
79	C1CN=C(CN(CC2=CC=CC=C2)C3=CC=CC=C3)N1	C1C[NH+]=C(CN(CC2=CC=CC=C2)C3=CC=CC=C3)N1	3.9	3.36	19.67	15.95	2.29	3.60			0.59	0.53	1.29	1.20	0.36	0.56		
80	CN1N(C(=O)C=C1C)C2=CC=CC=C2	CN1N(C(=O)C=C1C)C2=CC=CC=C2	0.77	0.61	0.64	1.31	12	6.92	0.93	0.61	0.11	-0.21	-0.19	0.12	1.08	0.84	-0.03	-0.21
81	C[C@H]1COC2=C3N1C=C(C(O)=O)C(=O)C3=C(N)C(=C2N4CCN(C)CC4)F	C[C@H]1COC2=C3N1C=C(C([O-])=O)C(=O)C3=C(N)C(=C2N4CC[NH+](C)CC4)F	2.42	2.13	2.2	2.55	20.1	14.33	0.82	0.68	0.38	0.33	0.34	0.41	1.30	1.16	-0.09	-0.17
82	CC1(C)SC2[C@@H](NC(=O)[C@H](NC(=O)C3=CN=C4C=CC=NC4=C3O)C5=CC=CC=C5)C(=O)N2[C@H]1C(O)=O	CC1(C)S[C@@H]2[C@@H](NC(=O)[C@H](NC(=O)C3=C(O)C4=NC=CC=C4N=C3)C5=CC=CC=C5)C(=O)N2[C@H]1C([O-])=O	0.16	0.20	1.9	1.86	1.2	2.30	0.1	0.10	0.80	-0.70	0.28	0.27	0.08	0.36	-1.00	-0.99
83	COC1=CC=C(C=C1)[N]2N=C(C(N)=O)C3=C2C(=O)N(CC3)C4=CC=C(C=C4)N5CCCCC5=O	COC1=CC=C(C=C1)[N]2N=C(C(N)=O)C3=C2C(=O)N(CC3)C4=CC=C(C=C4)N5CCCCC5=O	0.3	0.38	0.8	1.36	12	9.98	0.13	0.08	0.52	-0.42	-0.10	0.13	1.08	1.00	-0.89	-1.10
84	CN1CCC2=CC=CC3=C2[C@H]1CC4=C3C(=C(O)C=C4)O	C[NH+]1CCC2=C3[C@@H]1CC4=CC=C(O)C(=C4C3=CC=C2)O	1.6	1.10	40	32.42	0.68	1.69	0.05	0.09	0.20	0.04	1.60	1.51	-0.17	0.23	-1.30	-1.04
85	CCOC1=CC(=CC=C1OC)[C@@H](C[S](C)(=O)=O)N2C(=O)C3=CC=CC(=C3C2=O)CC(C)=O	CCOC1=C(OC)C=CC(=C1)[C@@H](C[S](C)(=O)=O)N2C(=O)C3=C(C2=O)C(=CC=C3)CC(C)=O			2.38	3.14	6.03	4.91	0.32	0.16			0.38	0.50	0.78	0.69	-0.49	-0.80
86	C[C@@H](O[C@H]1OCCN(CC2=NNC(=O)N2)[C@H]1C3=CC=C(F)C=C3)C4=CC(=CC(=C4)C(F)(F)F)C(F)(F)F	C[C@@H](O[C@H]1OCC[NH+](CC2=N[N-]C(=O)N2)[C@H]1C3=CC=C(F)C=C3)C4=CC(=CC(=C4)C(F)(F)F)C(F)(F)F	0.94	0.75	1	1.69	13	13.41	0.05	0.04	0.03	-0.13	0.00	0.23	1.11	1.13	-1.30	-1.46
87	COC1=CC(=C2C=C(CC3=C([NH]C4=CC=C(Cl)C=C34)C(=O)N(C)C)OC2=C1OC)CC5=CN=C(N)N=C5N	COC1=C(OC)C2=C(C=C(CC3=C([NH]C4=C3C=C(Cl)C=C4)C(=O)N(C)C)O2)C(=C1)CC5=C(N)N=C(N)N=C5	5.06	4.02	7.49	4.92	44.55	22.55			0.70	0.60	0.87	0.69	1.65	1.35		
88	NCC[C@H](O)C(=O)N[C@@H]1C[C@H](N)[C@@H](O[C@H]2O[C@H](CN)CC[C@H]2N)[C@H](O)[C@H]1O[C@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](N)[C@H]3O	[NH3+]CC[C@H](O)C(=O)N[C@@H]1C[C@H]([NH3+])[C@@H](O[C@H]2O[C@H](C[NH3+])CC[C@H]2[NH3+])[C@H](O)[C@H]1O[C@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]([NH3+])[C@H]3O	0.21	0.26	1.28	1.21	2.46	3.29			0.68	-0.58	0.11	0.08	0.39	0.52		
89	C[C@@H]1CCN([C@H](C1)C(O)=O)C(=O)[C@H](CCCNC(N)=N)N[S](=O)(=O)C2=CC=CC3=C2NCC(C)C3	C[C@@H]1CCN([C@H](C1)C([O-])=O)C(=O)[C@H](CCCNC(N)=[NH2+])N[S](=O)(=O)C2=C3NC[C@H](C)CC3=CC=C2	0.17	0.21	5	3.67	0.4	0.97	0.46	0.39	0.77	-0.67	0.70	0.56	-0.40	-0.01	-0.34	-0.41
90	ClC1=CC=CC(=C1Cl)N2CCN(CCCCOC3=CC=C4CCC(=O)NC4=C3)CC2	ClC1=C(Cl)C(=CC=C1)N2CC[NH+](CCCCOC3=CC4=C(CCC(=O)N4)C=C3)CC2	4.9	3.89	0.83	1.42	75	30.47	0.01	0.01	0.69	0.59	-0.08	0.15	1.88	1.48	-2.00	-1.87
91	C[C@@H]1CC[C@H]2[C@@H](C)[C@@H](O[C@@H]3O[C@@]4(C)CC[C@@H]1[C@@]23OO4)OC(=O)CCC(O)=O	C[C@@H]1CC[C@H]2[C@@H](C)[C@@H](O[C@@H]3O[C@]4(C)CC[C@@H]1[C@]23OO4)OC(=O)CCC([O-])=O	15	4.46	1070	103.08	0.22	0.67	0.25	0.20	1.18	0.65	3.03	2.01	-0.66	-0.17	-0.60	-0.70
92	CCCN[C@H](C)C(=O)NC1=C(SC=C1C)C(=O)OC	CCC[NH2+][C@H](C)C(=O)NC1=C(SC=C1C)C(=O)OC	7.7	6.12	126.7	45.15	0.98	1.50	0.46	0.46	0.89	0.79	2.10	1.65	-0.01	0.18	-0.34	-0.33
93	COC1=CC(=C(C=CC)C=C1OC)OC	COC1=C(OC)C=C(\C=C\C)C(=C1)OC	1	1.26	8.8	7.82	3.7	3.43			0.00	0.10	0.94	0.89	0.57	0.54		
94	OC[C@H](O)[C@H]1OC(=O)C(=C1O)O	OC[C@H](O)[C@H]1OC(=O)C(=C1[O-])O	0.35	0.28	1.05	1.66	11.4	5.87	0.26	0.39	0.46	-0.56	0.02	0.22	1.06	0.77	-0.59	-0.41
95	CN1C[C@H]2[C@H](C1)C3=CC(=CC=C3OC4=C2C=CC=C4)Cl	C[NH+]1C[C@H]2[C@H](C1)C3=C(OC4=C2C=CC=C4)C=CC(=C3)Cl	23	4.47	12.4	9.87			0.05	0.09	1.36	0.65	1.09	0.99			-1.30	-1.07
96	CNC(=O)C[C@@H](N)C(=O)N[C@@H](C(=O)N[C@@H]1[C@H]2SC(C)(C)[C@@H](N2C1=O)C(O)=O)C3=CC=C(O)C=C3	CNC(=O)C[C@@H]([NH3+])C(=O)N[C@@H](C(=O)N[C@@H]1[C@H]2SC(C)(C)[C@@H](N2C1=O)C([O-])=O)C3=CC=C(O)C=C3	0.27	0.34	2.82	2.61	1.45	1.53			0.57	-0.47	0.45	0.42	0.16	0.19		
97	CC(C)(O)[C@@H]1CC[C@@](C)(O1)[C@H]2[C@@H](O)C[C@@]3(C)[C@@H]4C[C@H](O[C@@H]5O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]5O)[C@H]6C(C)(C)[C@H](CC[C@@]67C[C@@]47CC[C@]23C)O[C@@H]8OC[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]8O	CC(C)(O)[C@@H]1CC[C@@](C)(O1)[C@H]2[C@@H](O)C[C@]3(C)[C@@H]4C[C@H](O[C@@H]5O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]5O)[C@H]6C(C)(C)[C@H](CC[C@@]67C[C@@]47CC[C@]23C)O[C@@H]8OC[C@H](O)[C@H](O)[C@H]8O	0.12	0.15	0.74	0.83	2.65	4.45	0.14	0.13	0.92	-0.82	-0.13	-0.08	0.42	0.65	-0.85	-0.89
98	CO[C@H]1[C@@H](O)[C@H](N)[C@@H](O[C@H]2O[C@@H](CC[C@H]2N)[C@H](C)N)[C@H](O)[C@H]1N(C)C(=O)CN	CO[C@H]1[C@@H](O)[C@H]([NH3+])[C@@H](O[C@@H]2O[C@@H](CC[C@H]2[NH3+])[C@H](C)[NH3+])[C@H](O)[C@H]1N(C)C(=O)C[NH3+]	0.23	0.35	1.37	1.44	2	3.14			0.64	-0.46	0.14	0.16	0.30	0.50		
99	COC1=CN=C(O[C@@H]2C[C@H](N(C2)C(=	COC1=C2C=CC(=CC2=C(O[C@@H]3C[C@H](N(C3	2.77	2.20	11.78	8.75	20	11.72	0.012	0.02	0.44	0.34	1.07	0.94	1.30	1.07	-1.92	-1.72

	O)[C@@H](NC(=O)OC(C)(C)C)C(C)(C)C)C(=O)N[C@@]3(C[C@H]3C=C)C(=O)N[S](=O)(=O)C4CC4)C5=CC(=CC=C15)Cl	C(=O)[C@@H](NC(=O)OC(C)(C)C)C(C)(C)C)C(=O)N[C@@]4(C[C@@H]4C=C)C(=O)N=[S]([O-])(=O)C5CC5)N=C1)Cl																
100	CC(C)NCC(O)COC1=CC=C(CC(N)=O)C=C1	CC(C)[NH2+]C[C@@H](O)COC1=CC=C(CC(N)=O)C=C1	0.95	1.20	2.5	3.73	6.1	4.85	0.94	0.85	0.02	0.08	0.40	0.57	0.79	0.69	-0.03	-0.07
101	CCC1(CC2=C(C1)C=CC=C2)C3=CN=C[NH]3	CCC1(CC2=C(C1)C=CC=C2)C3=CN=C[NH]3	2.7	2.14	19.6	12.35	1.7	2.58			0.43	0.33	1.29	1.09	0.23	0.41		
102	CNCC[C@@H](OC1=CC=CC=C1C)C2=CC=CC=C2	C[NH2+]CC[C@@H](OC1=C(C)C=CC=C1)C2=CC=CC=C2	0.85	1.63	9.3	9.87	5.2	8.88	0.02	0.15	0.07	0.21	0.97	0.99	0.72	0.95	-1.70	-0.84
103	OC1=C([C@@H]2CC[C@H](CC2)C3=CC=C(Cl)C=C3)C(=O)C4=CC=CC=C4C1=O	[O-]C1=C(C2CCC(CC2)C3=CC=C(Cl)C=C3)C(=O)C4=CC(C=CC=C4)C1=O	0.6	0.76	0.15	0.23	63	28.74	0.001	0.0031	0.22	-0.12	-0.82	-0.64	1.80	1.46	-3.00	-2.51
104	CN1[C@@H]2CC[C@H]1CC(C2)OC(=O)C(CO)C3=CC=CC=C3	C[NH+]1[C@@H]2CC[C@H]1CC(C2)OC(=O)[C@@H](CO)C3=CC=CC=C3	3.3	2.62	7.6	10.38	4.1	2.91	0.61	0.57	0.52	0.42	0.88	1.02	0.61	0.46	-0.21	-0.24
105	COC1=C2N(C=C(C(O)=O)C(=O)C2=CC(=C1N3CCCC(C3)=C(F)CN)F)C4CC4	COC1=C2N(C=C(C([O-])=O)C(=O)C2=CC(=C1N3CCC\C(C3)=C(\F)C[NH3+])F)C4CC4	1.13	1.42	0.78	1.30	19.64	12.44	0.34	0.27	0.05	0.15	-0.11	0.11	1.29	1.09	-0.47	-0.57
106	NC(=O)[C@@H]1CC[C@@H]2CN1C(=O)N2O[S](O)(=O)=O	NC(=O)[C@@H]1CC[C@@H]2CN1C(=O)N2O[S]([O-])(=O)=O	0.24	0.30	2.76	2.79	1.7	1.98	0.93	0.83	0.62	-0.52	0.44	0.45	0.23	0.30	-0.03	-0.08
107	CN[S](=O)(=O)CC1=CC=C2[NH]C=C(CCCN3CCN(CC3)C4=C(OC)C=NC=N4)C2=C1	CN[S](=O)(=O)CC1=CC2=C([NH]C=C2CCC[NH+]3CCN(CC3)C4=C(OC)C=NC=N4)C=C1	0.87	1.09	6.44	7.23	5.26	4.84			0.06	0.04	0.81	0.86	0.72	0.69		
108	COC1=CC=CC=C1OC2=C(OC)N=C(N=C2N[S](=O)(=O)C3=NC=C(C)C=C3)C4=CC=NC=C4	COC1=C(OC2=C(OC)N=C(N=C2N[S](=O)(=O)C3=NC=C(C)C=C3)C4=CC=NC=C4)C=CC=C1	0.27	0.34	0.52	0.82	7.2	5.51			0.57	-0.47	-0.28	-0.08	0.86	0.74		
109	CNC(=O)C1=CC=CC=C1SC2=CC=C3C(=C2)[NH]N=C3C=CC4=CC=CC=N4	CNC(=O)C1=C(SC2=CC3=C(C=C2)C(=N[NH]3)\C=C\C4=NC=CC=C4)C=CC=C1			5	3.08	4.3	5.60	0.004	0.01			0.70	0.49	0.63	0.75	-2.40	-2.21
110	NC1=NC(=O)N(C=N1)[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]2O	NC1=NC(=O)N(C=N1)[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]2O	0.47	0.66	35	22.49	0.36	0.68			0.33	-0.18	1.54	1.35	-0.44	-0.17		
111	CCCC1C(=O)N2N(C1=O)C(=NC3=CC=C(C)C=C23)N(C)C	CCC[C@H]1C(=O)N2N(C1=O)C(=NC3=C2C=C(C)C=C3)N(C)C	0.12	0.15	0.14	0.63	17	12.42	0.004	0.01	0.92	-0.82	-0.85	-0.20	1.23	1.09	-2.40	-1.87
112	CC(C)C(N(CCCN)C(=O)C1=CC=C(C)C=C1)C2=NC3=C(C(=NS3)C)C(=O)N2CC4=CC=CC=C4	CC(C)[C@H](N(CCC[NH3+])C(=O)C1=CC=C(C)C=C1)C2=NC3=C(C(=NS3)C)C(=O)N2CC4=CC=CC=C4	6.74	5.36	5.83	4.47	16.3	13.34			0.83	0.73	0.77	0.65	1.21	1.13		
113	CN1CCCC(CC1)N2N=C(CC3=CC=C(Cl)C=C3)C4=CC=CC=C4C2=O	C[NH+]1CCC[C@H](CC1)N2N=C(CC3=CC=C(Cl)C=C3)C4=C(C=CC=C4)C2=O	15	11.91	9	7.21	22	16.15	0.17	0.10	1.18	1.08	0.95	0.86	1.34	1.21	-0.77	-0.99
114	CN1CCN(CCCCN2C(=O)CN(N=CC3=CC=C(O3)C4=CC=C(Cl)C=C4)C2=O)CC1	C[NH+]1CC[NH+](CCCCN2C(=O)CN(\N=C\C3=CC=C(O3)C4=CC=C(Cl)C=C4)C2=O)CC1	13	10.32	2.4	3.21	79	32.63	0.06	0.07	1.11	1.01	0.38	0.51	1.90	1.51	-1.22	-1.18
115	CC[C@H]1OC(=O)[C@H](C)[C@@H](O[C@H]2C[C@@](C)(OC)[C@@H](O)[C@H](C)O2)[C@H](C)[C@@H](O[C@@H]3O[C@H](C)C[C@@H]([C@H]3O)N(C)C)[C@](C)(O)C[C@@H](C)CN(C)[C@H](C)[C@@H](O)[C@]1(C)O	CC[C@H]1OC(=O)[C@H](C)[C@@H](O[C@H]2C[C@@](C)(OC)[C@@H](O)[C@H](C)O2)[C@H](C)[C@@H](O[C@@H]3O[C@H](C)C[C@@H]([C@H]3O)[NH+](C)C)[C@](C)(O)C[C@@H](C)C[NH+](C)[C@@H](C)[C@@H](O)[C@]1(C)O	33	9.49	10	6.14	69	21.04	0.88	0.45	1.52	0.98	1.00	0.79	1.84	1.32	-0.06	-0.34
116	CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)[C@H](NC(=O)N3CCNC3=O)C4=CC=CC=C4)C(=O)N2[C@H]1C(O)=O	CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)[C@H](NC(=O)N3CCNC3=O)C4=CC=CC=C4)C(=O)N2[C@H]1C([O-])=O	0.26	0.19	2.5	2.29	1.2	1.47	0.65	0.44	0.59	-0.73	0.40	0.36	0.08	0.17	-0.19	-0.35
117	C[C@H]1[C@H](NC(=O)C(=NOC(C)(C)C(O)=O)C2=CSC(=N2)N)C(=O)N1[S](O)(=O)=O	C[C@H]1[C@H](NC(=O)\C(=N/OC(C)(C)C([O-])=O)C2=CSC(=N2)N)C(=O)N1[S]([O-])(=O)=O	0.18	0.38	1.5	1.57	1.5	2.40	0.4	0.39	0.74	-0.41	0.18	0.20	0.18	0.38	-0.40	-0.41
118	CC1=CC=C(C=C1)C(CN)CC(O)=O	CC1=CC=C(C=C1)[C@@H](C[NH3+])CC([O-])=O	0.65	0.55	1.7	2.00	5.24	3.85	0.69	0.70	0.19	-0.26	0.23	0.30	0.72	0.59	-0.16	-0.16
119	CN(C)C(=O)OC1=CC(=CC(=C1)C(O)CNC(C)(C)C)OC(=O)N(C)C	CN(C)C(=O)OC1=CC(=CC(=C1)OC(=O)N(C)C)[C@H](O)C[NH2+]C(C)(C)C	1.6	1.27	18	10.17	2.6	3.18			0.20	0.10	1.26	1.01	0.41	0.50		
120	CC1=NC(=C(C)[N]1C2=CC=C(F)C=C2)C#CC3=CC=NC(=C3)Cl	CC1=NC(=C(C)[N]1C2=CC=C(F)C=C2)C#CC3=CC(=NC=C3)Cl	9.7	7.70	2.8	2.00	78.9	30.42	0.01	0.02	0.99	0.89	0.45	0.30	1.90	1.48	-2.00	-1.81
121	CCN(CC)CCNC(=O)C1=C(O[C@H](C)C(C)=O)C=C(N)C(=C1)Cl	CC[NH+](CC)CCNC(=O)C1=C(O[C@H](C)C(C)=O)C=C(N)C(=C1)Cl	1.5	1.89	9.32	6.22	2.7	3.49	0.46	0.37	0.18	0.28	0.97	0.79	0.43	0.54	-0.34	-0.44
122	NC(=N)NCCC[C@@H]1NC(=O)CCSSC[C@H](NC(=O)[C@@H]2CCCN2C(=O)[C@H](CC3	NC(=[NH2+])NCCCC[C@@H]1NC(=O)CCSSC[C@H](NC(=O)[C@@H]2CCCN2C(=O)[C@H](CC3=C[NH]	0.42	0.33	2.88	2.24	2.12	2.78			0.38	-0.48	0.46	0.35	0.33	0.44		

	=C[NH]C4=C3C=CC=C4)NC(=O)[C@H](CC(O)=O)NC(=O)CNC1=O)C(N)=O	C4=C3C=CC=C4)NC(=O)[C@H](CC([O-])=O)NC(=O)CNC1=O)C(N)=O																
123	CC1=C([N](CC2=CC=C(OCCN3CCCCCC3)C=C2)C4=C1C=C(O)C=C4)C5=CC=C(O)C=C5	CC1=C([N](CC2=CC=C(OCC[NH+]3CCCCCC3)C=C2)C4=C1C=C(O)C=C4)C5=CC=C(O)C=C5	15.4	12.24	6.7	7.91	30	17.46	0.02	0.02	1.19	1.09	0.83	0.90	1.48	1.24	-1.70	-1.67
124	CC(C)(C)[C@H](NC(=O)[C@H](CC1CCCC1)CN(O)C=O)C(=O)N2CCN(CC2)CC3=CC=C4OCOC4=C3	CC(C)(C)[C@H](NC(=O)[C@H](CC1CCCC1)CN([O-])C=O)C(=O)N2CC[NH+](CC2)CC3=CC4=C(OCO4)C=C3	1.1	1.03	3.1	3.79	9.4	7.00	0.2	0.13	0.04	0.01	0.49	0.58	0.97	0.85	-0.70	-0.90
125	CCN(CC)CCN1C(=O)C2=C3C(=C4[N]([C@@H]5O[C@H](CO)[C@@H](OC)[C@H](O)[C@H]5O)C6=C(C=CC=C6Cl)C4=C2C1=O)[NH]C7=C(Cl)C=CC=C37	CC[NH+](CC)CCN1C(=O)C2=C3C(=C4[N]([C@@H]5O[C@H](CO)[C@H](OC)[C@H](O)[C@H]5O)C6=C(C=CC=C6Cl)C4=C2C1=O)[NH]C7=C(Cl)C=CC=C37	8.9	7.08	3.13	3.85	48.9	38.38			0.95	0.85	0.50	0.59	1.69	1.58		
126	COC1=CC=C2C(=C1)[C@@H]3C[C@@]3(C[N]4C5=CC(=CC=C5C(=C24)C6CCCCC6)C(=O)N[S](=O)(=O)N(C)C)C(=O)N7[C@@H]8CC[C@H]7CN(C)C8	COC1=CC2=C(C=C1)C3=C(C4CCCCC4)C5=C(C=C(C=C5)C(=O)N=[S]([O-])(=O)N(C)C)[N]3C[C@]6(C[C@@H]26)C(=O)N7[C@@H]8CC[C@H]7C[NH+](C)C8	0.5	0.63	1.33	2.00	5.38	7.00	0.01	0.02	0.30	-0.20	0.12	0.30	0.73	0.84	-2.00	-1.79
127	CCC(=O)OCC(=O)[C@@]1(OC(=O)CC)[C@@H](C)C[C@H]2[C@@H]3CCC4=CC(=O)C=C[C@]4(C)[C@@]3(Cl)[C@@H](O)C[C@]12C	CCC(=O)OCC(=O)[C@@]1(OC(=O)CC)[C@@H](C)C[C@H]2[C@@H]3CCC4=CC(=O)C=C[C@]4(C)[C@@]3(Cl)[C@@H](O)C[C@]12C	0.29	0.37	36	23.12	0.5	1.10	0.13	0.07	0.54	-0.44	1.56	1.36	-0.30	0.04	-0.89	-1.15
128	ONC(=O)C=CC1=CC=CC(=C1)[S](=O)(=O)NC2=CC=CC=C2	[O-]NC(=O)\C=C\C1=CC(=CC=C1)[S](=O)(=O)NC2=CC=CC=C2	0.8	0.64	23.6	6.03	1.6	2.72	0.06	0.02	0.10	-0.20	1.37	0.78	0.20	0.44	-1.22	-1.79
129	C[N]1C(=NC2=C1C=CC(=C2)N(CCCl)CCCl)CCC(O)=O	C[N]1C(=NC2=C1C=CC(=C2)N(CCCl)CCCl)CCCC([O-])=O	0.22	0.28	4.49	3.19	0.41	0.87	0.05	0.04	0.66	-0.56	0.65	0.50	-0.39	-0.06	-1.30	-1.37
130	FC1=CC=C(C=C1)C(=O)CCCN2CCC(CC2)N3C(=O)NC4=CC=CC=C34	FC1=CC=C(C=C1)C(=O)CCC[NH+]2CCC(CC2)N3C(=O)NC4=C3C=CC=C4	3.8	3.61	8.3	6.97	5.8	5.95			0.58	0.56	0.92	0.84	0.76	0.77		
131	CN(C)CCCOC1=N[N](CC2=CC=CC=C2)C3=C1C=CC=C3	C[NH+](C)CCCOC1=N[N](CC2=CC=CC=C2)C3=CC=CC=C13	1.53	1.92	2.28	3.69	8.1	6.97	0.8	0.33	0.18	0.28	0.36	0.57	0.91	0.84	-0.10	-0.48
132	CC(C)COC[C@@H](CN(CC1=CC=CC=C1)C2=CC=CC=C2)N3CCCC3	CC(C)COC[C@@H](CN(CC1=CC=CC=C1)C2=CC=CC=C2)[NH+]3CCCC3	10.1	8.02	8.7	7.87	14.9	12.82	0.001	0.01	1.00	0.90	0.94	0.90	1.17	1.11	-3.00	-2.21
133	COC1=C2C(=O)C3=C(O)C4=C(C[C@](O)(C[C@@H]4O[C@H]5C[C@H](N)[C@H](OCC6=CC=CC=C6)[C@H](C)O5)C(=O)CO)C(=C3C(=O)C2=CC=C1)O	COC1=C2C(=O)C3=C(C(=C4C[C@](O)(C[C@H](O[C@H]5C[C@H]([NH3+])[C@H](OCC6=CC=CC=C6)[C@H](C)O5)C4=C3O)C(=O)CO)O)C(=O)C2=CC=C1	48	38.10	18.5	16.71	34.6	26.23			1.68	1.58	1.27	1.22	1.54	1.42		
134	C[C@H]1C[C@H]2[C@@H]3CCC4=CC(=O)C=C[C@]4(C)[C@@]3(F)[C@@H](O)C[C@]2(C)[C@@]1(O)C(=O)CO	C[C@@H]1C[C@H]2[C@@H]3CCC4=CC(=O)C=C[C@]4(C)[C@@]3(F)[C@@H](O)C[C@@]2(C)[C@@]1(O)C(=O)CO	1.3	0.90	2.8	3.64	5.6	4.12	0.36	0.27	0.11	-0.04	0.45	0.56	0.75	0.62	-0.44	-0.56
135	OC(=O)CCNC(=O)C1=CC=CC=C1	[O-]C(=O)CCNC(=O)C1=CC=CC=C1	0.28	0.25	9.2	5.17	0.59	0.91	0.17	0.29	0.55	-0.59	0.96	0.71	-0.23	-0.04	-0.77	-0.54
136	CC(C)NCC(O)COC1=CC=C(CCOCC2CC2)C=C1	CC(C)[NH2+]C[C@@H](O)COC1=CC=C(CCOCC2CC2)C=C1	4.8	3.81	3.4	5.20	17	9.54	0.4	0.43	0.68	0.58	0.53	0.72	1.23	0.98	-0.40	-0.36
137	COC1=CC=C(CCNCC(O)COC2=CC=CC(=C2)C)C=C1OC	COC1=C(OC)C=C(CC[NH2+]C[C@H](O)COC2=CC(=CC=C2)C)C=C1	0.67	0.94	5.5	7.06	1.9	3.19	0.015	0.03	0.17	-0.03	0.74	0.85	0.28	0.50	-1.82	-1.48
138	CC[C@H]1N(C2CCCC2)C3=C(C=NC(=N3)NC4=C(OC)C=C(C=C4)C(=O)NC5CCN(C)CC5)N(C)C1=O	CC[C@H]1N(C2CCCC2)C3=C(C=NC(=N3)NC4=C(OC)C=C(C=C4)C(=O)NC5CC[NH+](C)CC5)N(C)C1=O	31.2	24.80	17.1	10.91	40.1	21.60			1.49	1.39	1.23	1.04	1.60	1.33		
139	C[C@@H](O)[C@@H]1[C@H]2[C@@H](CC(=C(N2C1=O)C([O-])=O)SC3C[N]4C=NC=[N+]4C3	C[C@@H](O)[C@@H]1[C@H]2[C@@H](C)C(=C(N2C1=O)C([O-])=O)SC3C[N]4C=NC=[N+]4C3	0.2	0.25	2.5	2.92	1.1	1.31	0.92	0.78	0.70	-0.60	0.40	0.46	0.04	0.12	-0.04	-0.11
140	CC(C)N(CC[C@@](CCN1CCCCC1)(C(N)=O)C2=CC=CC=C2Cl)C(C)=O	CC(C)N(CC[C@@](CC[NH+]1CCCCC1)(C(N)=O)C2=C(Cl)C=CC=C2)C(C)=O	2.6	2.06	5.43	4.80	12	9.41			0.41	0.31	0.73	0.68	1.08	0.97		
141	CCOCC[N]1C(=NC2=C1C=CC=C2)C3CCN(CC3)CCC4=CC=C(C=C4)C(C)(C)C(O)=O	CCOCC[N]1C(=NC2=C1C=CC=C2)C3CC[NH+](CC3)CCC4=CC=C(C=C4)C(C)(C)C([O-])=O	0.61	0.77	2.87	3.48	5.16	4.60	0.13	0.10	0.21	-0.11	0.46	0.54	0.71	0.66	-0.89	-0.98
142	CC(C)(C)C1(O)CC2OC(=O)CC23C(=O)OC4OC(=O)C(O)C134	CC(C)(C)[C@]1(O)C[C@@H]2OC(=O)C[C@@]23C(=O)O[C@@H]4OC(=O)[C@H](O)[C@]134	2.5	1.98	10	6.69	3.2	3.15			0.40	0.30	1.00	0.83	0.51	0.50		
143	CCNC(=O)CCCC=CC[C@H]1[C@@H](O)C[	CCNC(=O)CCC\C=C\C[C@H]1[C@@H](O)C[C@@	0.67	0.84	25	13.72	0.45	0.74	0.12	0.09	0.17	-0.07	1.40	1.14	-0.35	-0.13	-0.92	-1.04

	C@@H](O)[C@@H]1C=C[C@@H](O)CCC2=CC=CC=C2	H](O)[C@@H]1\C=C\[C@H](O)CCC2=CC=CC=C2																
144	NC1=C2N=C[N]([C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]3O)C2=NC(=N1)NN=CC4CCCCC4	NC1=C2N=C[N]([C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]3O)C2=NC(=N1)N\N=C\C4CCCCC4	0.4	0.50	35.8	16.90	12.7	9.27			0.40	-0.30	1.55	1.23	1.10	0.97		
145	OC(CCN1CCCCC1)(C2CC3CC2C=C3)C4=CC=CC=C4	O[C@](CC[NH+]1CCCCC1)([C@H]2C[C@@H]3C[C@H]2C=C3)C4=CC=CC=C4	12	3.22	12	9.32	24	15.13	0.097	0.12	1.08	0.51	1.08	0.97	1.38	1.18	-1.01	-0.92
146	COC1=CC(=CC(=C1OC)OC)C(=O)C(=O)N2CCCC[C@H]2C(=O)OC(CCCC3=CN=CC=C3)CCCC4=CN=CC=C4	COC1=C(OC)C(=CC(=C1)C(=O)C(=O)N2CCCC[C@H]2C(=O)OC(CCCC3=CN=CC=C3)CCCC4=CN=CC=C4)OC	1.34	1.06	8.5	6.02	1.1	2.24			0.13	0.03	0.93	0.78	0.04	0.35		
147	CCN1C[C@H]2CN(C)C[C@@H](C1)C2OC(=O)C3=CC=C(Cl)C=C3	CC[NH+]1C[C@H]2C[NH+](C)C[C@@H](C1)C2OC(=O)C3=CC=C(Cl)C=C3	9	7.15	17	12.04	8.6	4.73			0.95	0.85	1.23	1.08	0.93	0.68		
148	CC(C)NCC(O)COC1=CC=C(COCCOC(C)C)C=C1	CC(C)[NH2+]C[C@@H](O)COC1=CC=C(COCCOC(C)C)C=C1	2.4	1.91	3.7	5.06	10	6.88	0.66	0.49	0.38	0.28	0.57	0.70	1.00	0.84	-0.18	-0.31
149	CC1=C[NH]C2=C1C3=C(C=C2O)N(C[C@H]3CCl)C(=O)C4=CC5=C([NH]4)C=CC(=C5)NC(=O)NC6=CC=C7[NH]C(=CC7=C6)C(=O)N8C[C@@H](CCl)C9=C8C=C(O)C%10=C9C(=C[NH]%10)C	CC1=C[NH]C2=C1C3=C(C=C2O)N(C[C@H]3CCl)C(=O)C4=CC5=C([NH]4)C=CC(=C5)NC(=O)NC6=CC7=C([NH]C(=C7)C(=O)N8C[C@@H](CCl)C9=C%10C(=C[NH]C%10=C(O)C=C89)C)C=C6	0.05	0.06	0.5	0.77	1.6	3.10			1.30	-1.19	-0.30	-0.11	0.20	0.49		
150	CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)[C@H](NC(=O)NC(N)=N)C3=CC=CC=C3)C(=O)N2[C@@H]1C(O)=O	CC1(C)S[C@H]2[C@H](NC(=O)[C@H](NC(=O)NC(N)=N)C3=CC=CC=C3)C(=O)N2[C@@H]1C([O-])=O	0.24	0.30	1.6	1.84	2.09	1.70	0.8	0.57	0.62	-0.52	0.20	0.27	0.32	0.23	-0.10	-0.24
151	O=[S](=O)(N1CC2=CC(=CC=C2N(C[C@H]1CC3=CC=CC=C3)CC4=CN=C[NH]4)C#N)C5=CC=CS5	O=[S](=O)(N1CC2=C(C=CC(=C2)C#N)N(C[C@H]1CC3=CC=CC=C3)CC4=CN=C[NH]4)C5=CC=CS5	0.84	1.03	9.6	5.22	1.6	2.83	0.01	0.01	0.08	0.01	0.98	0.72	0.20	0.45	-2.00	-1.94
152	CC(C)C[C@H](NC(=O)[C@H](CC1=CC=CC=C1)NC(=O)C2=CN=CC=N2)B(O)O	CC(C)C[C@H](NC(=O)[C@H](CC1=CC=CC=C1)NC(=O)C2=NC=CN=C2)B(O)O	10	4.09	19	8.27	18	12.53	0.17	0.12	1.00	0.61	1.28	0.92	1.26	1.10	-0.77	-0.92
153	COC1=CC=CC=C1OC2=C(N[S](=O)(=O)C3=CC=C(C=C3)C(C)(C)C)N=C(N=C2OCCO)C4=NC=CC=N4	COC1=C(OC2=C(OCCO)N=C(N=C2N[S](=O)(=O)C3=CC=C(C=C3)C(C)(C)C)C4=NC=CC=N4)C=CC=C1	0.29	0.36	2.1	2.74	4.1	5.23	0.037	0.03	0.54	-0.44	0.32	0.44	0.61	0.72	-1.43	-1.57
154	O=C1NC2=CC(=CC=C2C=C1)OCCCCN3CCN(CC3)C4=C5C=CSC5=CC=C4	O=C1NC2=C(C=C1)C=CC(=C2)OCCCC[NH+]3CCN(CC3)C4=C5C=CSC5=CC=C4	1.46	1.84	0.34	1.00	54.37	26.42	0.002	0.01	0.16	0.26	-0.47	0.00	1.74	1.42	-2.70	-2.28
155	CCC[C@H]1CN([C@@H](CC)C(N)=O)C(=O)C1	CCC[C@H]1CN([C@@H](CC)C(N)=O)C(=O)C1	0.56	0.99	0.75	1.43	8.98	6.30	0.825	0.72	0.25	0.00	-0.12	0.15	0.95	0.80	-0.08	-0.14
156	BrC1=CC=C2NC(=O)CN=C(C3=CC=CC=N3)C2=C1	BrC1=CC2=C(NC(=O)CN=C2C3=NC=CC=C3)C=C1	0.85	1.48	0.51	0.65	21	12.18	0.48	0.21	0.07	0.17	-0.29	-0.19	1.32	1.09	-0.32	-0.68
157	NC1=C(CC(O)=O)C=CC=C1C(=O)C2=CC=C(Br)C=C2	NC1=C(C=CC=C1CC([O-])=O)C(=O)C2=CC=C(Br)C=C2	0.11	0.09	1.3	1.14	2.6	3.20	0.0011	0.01	0.96	-1.04	0.11	0.06	0.41	0.51	-2.96	-1.98
158	CCN(CC)CCNC(=O)C1=CC(=C(N)C=C1OC)Br	CC[NH+](CC)CCNC(=O)C1=C(OC)C=C(N)C(=C1)Br	3.1	2.58	13	7.50	2.9	3.47	0.6	0.39	0.49	0.41	1.11	0.88	0.46	0.54	-0.22	-0.41
159	COC1=C2OC3=CC=C(C[C@@H]4N(C)CCC5=CC(=C(OC6=C(OC)C(=C(Br)C7=C6[C@H](CC(=C2)C=C1)N(C)CC7)OC)C=C45)OC)C=C3	COC1=C2OC3=CC=C(C[C@@H]4[NH+](C)CCC5=CC(=C(OC6=C(OC)C(=C(Br)C7=C6[C@H](CC(=C2)C=C1)[NH+](C)CC7)OC)C=C45)OC)C=C3	51	5.74	9.6	6.84	59.4	35.30	0.22	0.17	1.71	0.76	0.98	0.84	1.77	1.55	-0.66	-0.77
160	C[N]1C=C(NC(=O)C2=CC(=C[N]2C)NC(=O)C3=CC(=C[N]3C)NC(=O)C4=CC(=C[N]4C)NC(=O)C(Br)=C)C=C1C(=O)NCCN=C(N)N	C[N]1C=C(NC(=O)C2=CC(=C[N]2C)NC(=O)C3=CC(=C[N]3C)NC(=O)C4=CC(=C[N]4C)NC(=O)C(Br)=C)C=C1C(=O)NCC[NH+]=C(N)N	0.36	0.45	5.15	3.40	8.3	7.26			0.44	-0.34	0.71	0.53	0.92	0.86		
161	CC1=NN=C2CN=C(C3=CC=CC=C3Cl)C4=C(SC(=C4)Br)[N]12	CC1=NN=C2CN=C(C3=C(Cl)C=CC=C3)C4=C(SC(=C4)Br)[N]12	0.75	0.94	2	1.69	4.8	5.73	0.092	0.06	0.12	-0.03	0.30	0.23	0.68	0.76	-1.04	-1.21
162	CCCC1O[C@@H]2C[C@H]3[C@@H]4CCC5=CC(=O)C=C[C@]5(C)[C@H]4[C@@H](O)C[C@]3(C)[C@@]2(O1)C(=O)CO	CCC[C@@H]1O[C@@H]2C[C@@H]3[C@@H]4CCC5=CC(=O)C=C[C@]5(C)[C@H]4[C@@H](O)C[C@]3(C)[C@@]2(O1)C(=O)CO	3.9	3.10	20	12.71	2.8	3.00	0.13	0.10	0.59	0.49	1.30	1.10	0.45	0.48	-0.89	-1.00
163	COC1=CC(=C(C(=O)CCCN2CCCC2)C(=C1)OC)OC	COC1=CC(=C(C(=O)CCC[NH+]2CCCC2)C(=C1)OC)OC	1.3	1.37	5.6	7.00	3.3	4.79	0.4	0.37	0.11	0.14	0.75	0.84	0.52	0.68	-0.40	-0.43
164	CCC1=CC=CC2=C1OC(=C2)C(O)CNC(C)(C)	CCC1=C2OC(=CC2=CC=C1)[C@@H](O)C[NH2+]C(	1.7	2.14	8.9	10.20	2.3	3.13	0.19	0.17	0.23	0.33	0.95	1.01	0.36	0.50	-0.72	-0.77

165	CCCCN1CCCC1C(=O)NC2=C(C)C=C(C)C=C2C	C)(C)C CCCC[NH+]1CCC[C@@H]1C(=O)NC2=C(C)C=C(C)C=C2C	1.73	1.37	19.19	11.98	1.58	2.30			0.24	0.14	1.28	1.08	0.20	0.36		
166	CCCCNC1=CC(=CC(=C1OC2=CC=CC=C2)[S](N)(=O)=O)C(O)=O	CCCCNC1=C(OC2=CC=CC=C2)C(=CC(=C1)C([O-])=O)[S](N)(=O)=O	0.16	0.20	2.5	2.32	1.2	1.75	0.031	0.03	0.80	-0.70	0.40	0.37	0.08	0.24	-1.51	-1.49
167	CCCC(=O)N1CCCN(CC1)C2=NC(=C3C=C(OC)C=C3)C(=CC3=N2)OC)N	CCCC(=O)N1CCCN(CC1)C2=NC3=CC(=C(OC)C=C3C(=N2)N)OC	0.72	0.72	4.8	3.92	2	2.49	0.06	0.07	0.14	-0.14	0.68	0.59	0.30	0.40	-1.22	-1.13
168	CCCCN1CCCCC1C(=O)NC2=C(C)C=CC=C2C	CCCC[NH+]1CCCC[C@@H]1C(=O)NC2=C(C)C=CC=C2C	0.84	0.86	4.3	5.79	3.1	1.81	0.056	0.06	0.08	-0.07	0.63	0.76	0.49	0.26	-1.25	-1.25
169	CO[C@]12CC[C@@]3(C[C@@H]1[C@](C)(O)C(C)(C)C)[C@H]4CC5=CC=C(O)C6=C5[C@@]3(CCN4CC7CC7)[C@H]2O6	CO[C@@]12CC[C@]3(C[C@@H]1[C@](C)(O)C(C)(C)C)[C@H]4CC5=C6C(=C(O)C=C5)O[C@H]2[C@@]36CC[NH+]4CC7CC7	4.9	3.89	19	13.88	3.2	4.51	0.04	0.07	0.69	0.59	1.28	1.14	0.51	0.65	-1.40	-1.16
170	C[S](=O)(=O)OCCCCO[S](C)(=O)=O	C[S](=O)(=O)OCCCCO[S](C)(=O)=O	0.55	0.70	2.4	2.71	3.4	2.45	1	0.75	0.26	-0.16	0.38	0.43	0.53	0.39	0.00	-0.12
171	CCCC[S@](=N)(=O)CC[C@H](N)C(O)=O	CCCC[S@](=N)(=O)CC[C@H]([NH3+])C([O-])=O	0.26	0.33	2.28	2.75	1.68	2.00			0.59	-0.48	0.36	0.44	0.23	0.30		
172	OC1=CC=C2C[C@H]3N(CC[C@@]4(CCCC[C@@]34O)C2=C1)CC5CCC5	OC1=CC2=C(C[C@H]3[NH+](CC[C@@]24CCCC[C@]34O)CC5CCC5)C=C1	12	7.66	41	25.25	4.8	5.43	0.17	0.17	1.08	0.88	1.61	1.40	0.68	0.73	-0.77	-0.77
173	CCCCNC(=N)NC(N)=N	CCCCNC(=[NH2+])NC(N)=[NH2+]	1.84	1.46	6.58	6.76	4.62	4.25	0.9	0.81	0.26	0.17	0.82	0.83	0.66	0.63	-0.05	-0.09
174	CO[C@H]1C[C@H]2OC[C@@]2(OC(C)=O)[C@H]3[C@H](OC(=O)C4=CC=CC=C4)[C@]5(O)C[C@H](OC(=O)[C@H](O)[C@@H](NC(=O)OC(C)(C)C)C6=CC=CC=C6)C(=C([C@@H](OC)C(=O)[C@@]13C)C5(C)C)C	CO[C@H]1C[C@@H]2OC[C@]2(OC(C)=O)[C@H]3[C@H](OC(=O)C4=CC=CC=C4)[C@@]5(O)C[C@H](OC(=O)[C@H](O)[C@@H](NC(=O)OC(C)(C)C)C6=CC=CC=C6)C(=C(C[C@H](OC)C(=O)[C@@]13C)C5(C)C)C	48	15.10	11	8.20	74.5	37.38	0.24	0.11	1.68	1.18	1.04	0.91	1.87	1.57	-0.62	-0.94
175	C[C@H]1CN(CCN1)C2=C(F)C=C3C(=O)C(=CN(C4CC4)C3=C2OC(F)F)C(O)=O	C[C@H]1CN(CC[NH2+]1)C2=C(OC(F)F)C3=C(C=C2F)C(=O)C(=CN3C4CC4)C([O-])=O	1.1	1.29	2.7	2.56	5.9	7.21			0.04	0.11	0.43	0.41	0.77	0.86		
176	C[N]1C=NC2=C1C(=O)N(C)C(=O)N2C	C[N]1C=NC2=C1C(=O)N(C)C(=O)N2C	0.63	0.83	1.4	2.05	4.9	3.28	0.64	0.64	0.20	-0.08	0.15	0.31	0.69	0.52	-0.19	-0.19
177	C[C@H](CCCC(C)(C)O)[C@H]1CC[C@H]2C(CCC[C@]12C)=CC=C3C[C@@H](O)C[C@H](O)C3=C	C[C@H](CCCC(C)(C)O)[C@H]1CC[C@H]2\C(CCC[C@]12C)=C\C=C/3C[C@@H](O)C[C@H](O)C3=C	0.25	0.56	0.31	0.61	11	11.08			0.60	-0.25	-0.51	-0.21	1.04	1.04		
178	CC1=CC=C(C=C1CC2=CC=C(S2)C3=CC=C(F)C=C3)[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O	CC1=C(CC2=CC=C(S2)C3=CC=C(F)C=C3)C=C(C=C1)[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O	1.19	1.21	2.74	2.72	10.3	8.88	0.01	0.02	0.08	0.08	0.44	0.43	1.01	0.95	-2.00	-1.82
179	CCOC1=NC2=CC=CC(=C2[N]1CC3=CC=C(C=C3)C4=CC=CC=C4C5=NN=N[NH]5)C(O)=O	CCOC1=NC2=C([N]1CC3=CC=C(C=C3)C4=C(C=CC=C4)C5=NN=N[N-]5)C(=CC=C2)C([O-])=O	0.13	0.16	0.37	0.60	9.7	5.19	0.002	0.01	0.89	-0.79	-0.43	-0.22	0.99	0.72	-2.70	-2.29
180	COCOC[C@H](CCC1(CCCC1)C(=O)NC2CCC(CC2)C(O)=O)C(O)=O	COCOC[C@H](CCC1(CCCC1)C(=O)NC2CCC(CC2)C([O-])=O)C([O-])=O	0.25	0.32	2.3	2.64	16	8.65	0.87	0.53	0.60	-0.50	0.36	0.42	1.20	0.94	-0.06	-0.28
181	CSCCNC1=NC(=NC2=C1N=C[N]2[C@@H]3O[C@H](CO[P](O)(=O)O[P](O)(=O)C(Cl)(Cl)[P](O)(O)=O)[C@@H](O)[C@H]3O)SCCC(F)(F)F	CSCCNC1=C2N=C[N]([C@@H]3O[C@H](CO[P]([O-])(=O)O[P]([O-])(=O)C(Cl)(Cl)[P]([O-])([O-])=O)[C@@H](O)[C@H]3O)C2=NC(=N1)SCCC(F)(F)F	0.04	0.09	8.84	6.16	8.5	6.50	0.02	0.04	1.40	-1.04	0.95	0.79	0.93	0.81	-1.70	-1.42
182	CCCCCC1=CC(=C([C@@H]2C=C(C)CC[C@H]2C(C)=C)C(=C1)O)O	CCCCCC1=CC(=C([C@@H]2C=C(C)CC[C@H]2C(C)=C)C(=C1)O)O	6.69	3.85	13.55	9.90	23.82	19.55			0.83	0.59	1.13	1.00	1.38	1.29		
183	CCCCCC1=CC2=C(C(=C1)O)C3=C(C=CC(=C3)C)C(C)(C)O2	CCCCCC1=CC2=C(C(=C1)O)C3=CC(=CC=C3C(C)(C)O2)C	16.98	13.48	17.85	10.75	25.51	16.03			1.23	1.13	1.25	1.03	1.41	1.20		
184	C[C@H](CS)C(=O)N1CCC[C@H]1C(O)=O	C[C@H](CS)C(=O)N1CCC[C@H]1C([O-])=O	0.75	0.60	12	7.09	2	2.18	0.73	0.69	0.12	-0.22	1.08	0.85	0.30	0.34	-0.14	-0.16
185	CCNC(=O)OC1CCN(CC1)C2=NN=CC3=CC(=C(OC)C=C23)OC	CCNC(=O)OC1CCN(CC1)C2=C3C=C(OC)C(=CC3=NN=N2)OC	0.67	0.84	37.6	14.74	0.25	0.77	0.08	0.09	0.17	-0.07	1.58	1.17	-0.60	-0.11	-1.10	-1.03
186	CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)C(C(O)=O)C3=CC=CC=C3)C(=O)N2[C@H]1C(O)=O	CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)[C@@H](C([O-])=O)C3=CC=CC=C3)C(=O)N2[C@H]1C([O-])=O	0.17	0.20	1.9	1.91	1.1	1.56	0.52	0.37	0.77	-0.69	0.28	0.28	0.04	0.19	-0.28	-0.44
187	N[Pt++]|1(N)|[O-]C(=O)C2(CCC2)C([O-]|1)=O	N[Pt++]1(N)[O-]C(=O)[C]2(C[CH2]C2)C(=O)[O-]1	0.26	0.33	1.5	1.20	2	2.66	1	0.69	0.59	-0.49	0.18	0.08	0.30	0.42	0.00	-0.16
188	CC(C)(C(O)=O)C1=CC=C(C=C1)C(=O)CCCN2CCC(CC2)OC(C3=CC=CC=C3)C4=CC=CC=C4	CC(C)(C([O-])=O)C1=CC=C(C=C1)C(=O)CCC[NH+]2CCC(CC2)OC(C3=CC=CC=C3)C4=CC=CC=C4	0.41	0.52	0.4	0.94	9.8	6.88	0.05	0.03	0.39	-0.29	-0.40	-0.03	0.99	0.84	-1.30	-1.48
189	CC(C)C[C@H](NC(=O)[C@H](CCC1=CC=CC=C1)NC(=O)CN2CCOCC2)C(=O)N[C@@H](CC3=CC=CC=C3)C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C	CC(C)C[C@H](NC(=O)[C@H](CCC1=CC=CC=C1)NC=O)C[NH+]2CCOCC2)C(=O)N[C@@H](CC3=CC=CC=C3)C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)[C@@]4(C)	0.13	0.16	39.5	15.92	1.1	2.51	0.02	0.03	0.89	-0.79	1.60	1.20	0.04	0.40	-1.70	-1.56

	(=O)[C@@]4(C)CO4	CO4															
190	ClCCNC(=O)N(CCCl)N=O	ClCCNC(=O)N(CCCl)N=O	1.2	0.95	78	26.81	0.37	0.81	0.23	0.30	0.08	-0.02	1.89	1.43	-0.43	-0.09	-0.64	-0.52
191	C[N+](C)(C)C[C@H](O)CC([O-])=O	C[N+](C)(C)C[C@H](O)CC([O-])=O	0.4	0.39	1.6	2.11	5	4.46	1	0.79	0.40	-0.41	0.20	0.32	0.70	0.65	0.00	-0.10
192	CNC(=O)NC1=C(OC)C2=C(OC=C2)C(=C1OC CN3CCCC3)OC	CNC(=O)NC1=C(OCC[NH+]2CCCC2)C(=C3OC=CC 3=C1OC)OC	0.8	1.01	3.2	3.89	5	5.23			0.10	0.00	0.51	0.59	0.70	0.72		
193	CC(C(O)=O)C1=CC=C2C(=C1)[NH]C3=CC=C (Cl)C=C23	C[C@H](C([O-])=O)C1=CC2=C(C=C1)C3=CC(=CC=C3[NH]2)Cl	0.22	0.18	0.51	0.53	9.9	6.80	0.001	0.0024	0.66	-0.75	-0.29	-0.27	1.00	0.83	-3.00	-2.62
194	CC(C)(C)NC[C@@H](O)COC1=CC=CC2=C1 CCC(=O)N2	CC(C)(C)[NH2+]C[C@@H](O)COC1=C2CCC(=O)N C2=CC=C1			10.1	7.39	4.7	4.92					1.00	0.87	0.67	0.69		
195	NC(=O)OC[C@@H]1[C@H](NC(=O)C(=NOC C(O)=O)C2=CSC(=N2)N)C(=O)N1[S](O)(=O) =O	NC(=O)OC[C@@H]1[C@H](NC(=O)\C(=N\OCC([O-])=O)C2=CSC(=N2)N)C(=O)N1[S]([O-])(=O)=O	0.18	0.23	1.5	1.71	1.6	1.76	0.72	0.52	0.74	-0.64	0.18	0.23	0.20	0.25	-0.14	-0.28
196	COC1=CC=CC=C1OCCNCC(O)COC2=CC=C C3=C2C4=CC=CC=C4[NH]3	COC1=C(OCC[NH2+]C[C@@H](O)COC2=C3C(=CC =C2)[NH]C4=CC=CC=C34)C=CC=C1	1.3	1.64	7.8	7.06	2.4	3.28	0.02	0.02	0.11	0.21	0.89	0.85	0.38	0.52	-1.70	-1.66
197	CCN(CC)C1=CC2=C(C=C1)C=C(O2)C(=O)N C3=CC=C4[NH]C(=CC4=C3)C(=O)N5C[C@ @H](CCl)C6=C7C(=C[NH]C7=C(OC(=O)NC8 =CC=CC=C8)C=C56)C	CCN(CC)C1=CC2=C(C=C1)C=C(O2)C(=O)NC3=CC4 =C([NH]C(=C4)C(=O)N5C[C@@H](CCl)C6=C7C(=C [NH]C7=C(OC(=O)NC8=CC=CC=C8)C=C56)C)C=C3	0.09	0.11	2.9	2.47	0.48	1.91			1.05	-0.95	0.46	0.39	-0.32	0.28		
198	C[C@@H](N(C)C(=O)N1CC[C@@H](C[C@ @H]1C2=C(C)C=C(F)C=C2)N3CCN(CC3)C(C)=O)C4=CC(=CC(=C4)C(F)(F)F)C(F)(F)F	C[C@@H](N(C)C(=O)N1CC[C@@H](C[C@@H]1C2 =C(C)C=C(F)C=C2)[NH+]3CCN(CC3)C(C)=O)C4=C C(=CC(=C4)C(F)(F)F)C(F)(F)F	2.77	2.20	3.07	3.44	15.6	17.06	1	0.18	0.44	0.34	0.49	0.54	1.19	1.23	0.00	-0.75
199	CN(C)N=NC1=CC=C(C=C1)C(O)=O	CN(C)N=NC1=CC=C(C=C1)C([O-])=O	0.25	0.20	1.3	1.63	2.5	2.04			0.60	-0.70	0.11	0.21	0.40	0.31		
200	OC1=CC2=C(C=C1O)[C@H](CC3=C4C=CC= CC4=CC=C3)NCC2	OC1=C(O)C=C2[C@H](CC3=C4C=CC=CC4=CC=C3)[NH2+]CCC2=C1	1.09	1.37	156	72.84	1.58	2.90			0.04	0.14	2.19	1.86	0.20	0.46		
201	CC1=C(N2[C@H](SC1)[C@H](NC(=O)[C@H] (N)C3=CC=C(O)C=C3)C2=O)C(O)=O	CC1=C(N2[C@@H](SC1)[C@H](NC(=O)[C@H]([N H3+])C3=CC=C(O)C=C3)C2=O)C([O-])=O	0.23	0.23	2.5	2.84	1.1	1.12	0.39	0.57	0.64	-0.64	0.40	0.45	0.04	0.05	-0.41	-0.24
202	C[N]1N=NN=C1SCC2=C(N3[C@H](SC2)[C@ H](NC(=O)[C@H](O)C4=CC=CC=C4)C3=O)C (O)=O	C[N]1N=NN=C1SCC2=C(N3[C@H](SC2)[C@H](NC(=O)[C@H](O)C4=CC=CC=C4)C3=O)C([O-])=O	0.16	0.13	3.6	2.89	0.75	1.01	0.25	0.19	0.80	-0.87	0.56	0.46	-0.12	0.01	-0.60	-0.72
203	N[C@@H](C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C(O)=O)CSC3=C[NH]N=N3)C4=CC =C(O)C=C4	[NH3+][C@@H](C(=O)N[C@@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C([O-])=O)CSC3=C[NH]N=N3)C4=CC=C(O)C=C4	0.22	0.24	3.3	2.77	1.2	1.58	0.4	0.36	0.66	-0.62	0.52	0.44	0.08	0.20	-0.40	-0.45
204	CC1=NN=C(SCC2=C(N3[C@H](SC2)[C@H](NC(=O)CN4C=C(Cl)C(=O)C(=C4)Cl)C3=O)C(O)=O)S1	CC1=NN=C(SCC2=C(N3[C@H](SC2)[C@H](NC(=O) CN4C=C(Cl)C(=O)C(=C4)Cl)C3=O)C([O-])=O)S1	0.13	0.16	0.95	1.09	1.91	1.96			0.89	-0.79	-0.02	0.04	0.28	0.29		
205	CC1=NN=C(SCC2=C(N3[C@H](SC2)[C@H](NC(=O)C[N]4C=NN=N4)C3=O)C(O)=O)S1	CC1=NN=C(SCC2=C(N3[C@H](SC2)[C@H](NC(=O) C[N]4C=NN=N4)C3=O)C([O-])=O)S1	0.12	0.15	0.89	1.54	1.7	1.51	0.18	0.20	0.92	-0.82	-0.05	0.19	0.23	0.18	-0.74	-0.70
206	CCN1CCN(C(=O)N[C@H]([C@H](C)O)C(=O) N[C@@]2(OC)[C@H]3SCC(=C(N3C2=O)C(O)=O)CSC4=NN=N[N]4C)C(=O)C1=O	CCN1CCN(C(=O)N[C@H]([C@H](C)O)C(=O)N[C@ @]2(OC)[C@H]3SCC(=C(N3C2=O)C([O-])=O)CSC4=NN=N[N]4C)C(=O)C1=O	0.19	0.24	1.1	1.42	1.9	1.90			0.72	-0.62	0.04	0.15	0.28	0.28		
207	CC1=NN=C(SCC2=C(N3[C@H](SC2)[C@H](NC(=O)[C@H](O)C4=CC=CC=C4)C3=O)C(O) =O)S1	CC1=NN=C(SCC2=C(N3[C@H](SC2)[C@H](NC(=O) [C@H](O)C4=CC=CC=C4)C3=O)C([O-])=O)S1	0.13	0.16	2.6	2.46	1	1.63			0.89	-0.80	0.41	0.39	0.00	0.21		
208	CON=C(C(=O)N[C@H]1C2SCC(=C(N2C1=O) C(O)=O)C[N+]34CCC(CC3)(CC4)C(N)=O)C5 =NSC(=N5)N	CO\N=C(/C(=O)N[C@H]1[C@@H]2SCC(=C(N2C1= O)C([O-])=O)C[N+]34CCC(CC3)(CC4)C(N)=O)C5=NSC(=N5)N	0.27	0.34	1.7	1.78	2.2	2.44			0.57	-0.47	0.23	0.25	0.34	0.39		
209	CON=C(C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C 1=O)C([O-])=O)C[N+]3(C)CCCC3)C4=CSC(=N4)N	CO\N=C(/C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O) C([O-])=O)C[N+]3(C)CCCC3)C4=CSC(=N4)N	0.28	0.29	2.2	2.32	1.9	2.25	0.78	0.63	0.55	-0.54	0.34	0.37	0.28	0.35	-0.11	-0.20
210	CON=C(C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C 1=O)C(O)=O)C)C3=CSC(=N3)N	CO\N=C(\C(=O)N[C@H]1[C@@H]2SCC(=C(N2C1= O)C([O-])=O)C)C3=CSC(=N3)N	0.28	0.22	1.9	2.18	2.1	1.44	0.78	0.62	0.55	-0.65	0.28	0.34	0.32	0.16	-0.11	-0.21
211	NC1=NC(=CS1)C(=NOCC(O)=O)C(=O)N[C@ H]2[C@H]3SCC(=C(N3C2=O)C(O)=O)C=C	NC1=NC(=CS1)\C(=N/OCC([O-])=O)C(=O)N[C@H]2[C@H]3SCC(=C(N3C2=O)C([O -])=O)C=C	0.24	0.16	1	1.69	3.2	2.81	0.31	0.30	0.62	-0.79	0.00	0.23	0.51	0.45	-0.51	-0.53

212	CON=C(C(=O)N[C@@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C(O)=O)CSC3=NN=N[N]3C)C4=CSC(=N4)N	CO\N=C(\C(=O)N[C@@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C([O-])=O)CSC3=NN=N[N]3C)C4=CSC(=N4)N	0.2	0.13	3.65	2.78	0.89	1.28	0.31	0.26	0.70	-0.88	0.56	0.44	-0.05	0.11	-0.51	-0.58
213	CO[C@]1(NC(=O)CSCC#N)[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C(O)=O)CSC3=NN=N[N]3C	CO[C@]1(NC(=O)CSCC#N)[C@@H]2SCC(=C(N2C1=O)C([O-])=O)CSC3=NN=N[N]3C	0.13	0.16	1.5	1.84	1.5	1.22	0.15	0.19	0.89	-0.79	0.18	0.27	0.18	0.09	-0.82	-0.71
214	CON=C(C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C(O)=O)CSC3=NC(=C(CC(O)=O)S3)C)C4=CSC(=N4)N	CO\N=C(\C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C([O-])=O)CSC3=NC(=C(CC([O-])=O)S3)C)C4=CSC(=N4)N	0.054	0.07	0.61	0.89	4.2	3.28	0.18	0.16	1.27	-1.17	-0.21	-0.05	0.62	0.52	-0.74	-0.81
215	O[C@@H](C(=O)N[C@@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C(O)=O)CSC3=NN=N[N]3C[S](O)(=O)=O)C4=CC=CC=C4	O[C@@H](C(=O)N[C@@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C([O-])=O)CSC3=NN=N[N]3C[S]([O-])(=O)=O)C4=CC=CC=C4	0.14	0.18	0.38	0.72	5.1	3.27	0.02	0.05	0.85	-0.75	-0.42	-0.14	0.71	0.51	-1.70	-1.31
216	CCN1CCN(C(=O)N[C@@H](C(=O)N[C@H]2[C@H]3SCC(=C(N3C2=O)C(O)=O)CSC4=NN=N[N]4C)C5=CC=C(O)C=C5)C(=O)C1=O	CCN1CCN(C(=O)N[C@@H](C(=O)N[C@H]2[C@H]3SCC(=C(N3C2=O)C([O-])=O)CSC4=NN=N[N]4C)C5=CC=C(O)C=C5)C(=O)C1=O	0.17	0.21	1.3	1.35	1.8	2.37	0.07	0.07	0.77	-0.67	0.11	0.13	0.26	0.38	-1.15	-1.13
217	NCC1=CC=CC=C1CC(=O)N[C@H]2[C@H]3SCC(=C(N3C2=O)C(O)=O)CSC4=NN=N[N]4CC(O)=O	[NH3+]CC1=C(CC(=O)N[C@H]2[C@H]3SCC(=C(N3C2=O)C([O-])=O)CSC4=NN=N[N]4CC([O-])=O)C=CC=C1	0.17	0.21	0.66	1.08	3	2.10	0.19	0.21	0.77	-0.67	-0.18	0.03	0.48	0.32	-0.72	-0.67
218	CON=C(C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C([O-])=O)C[N+]3=CC=C(N)[N]3CCO)C4=CSC(=N4)N	CO\N=C(\C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C([O-])=O)C[N+]3=CC=C(N)[N]3CCO)C4=CSC(=N4)N	0.3	0.31	1.77	2.07	2.9	2.51			0.52	-0.51	0.25	0.32	0.46	0.40		
219	CON=C(C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C(O)=O)COC(C)=O)C3=CSC(=N3)N	CO\N=C(/C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C([O-])=O)COC(C)=O)C3=CSC(=N3)N	0.19	0.15	2.7	2.64	1.2	1.76	0.6	0.40	0.72	-0.82	0.43	0.42	0.08	0.25	-0.22	-0.40
220	CO[C@]1(NC(=O)[CH]2S[C](S2)=[C](C(N)=O)C(O)=O)[C@H]3SCC(=C(N3C1=O)C(O)=O)CSC4=NN=N[N]4C	CO[C@@]1(NC(=O)[CH]2S[C](S2)=[C](C(N)=O)C([O-])=O)[C@@H]3SCC(=C(N3C1=O)C([O-])=O)CSC4=NN=N[N]4C	0.13	0.16	0.42	0.65	4.5	3.63	0.15	0.16	0.89	-0.79	-0.38	-0.19	0.65	0.56	-0.82	-0.81
221	CN(C)CC[N]1N=NN=C1SCC2=C(N3[C@H](SC2)[C@H](NC(=O)CC4=CSC(=N4)N)C3=O)C(O)=O	C[NH+](C)CC[N]1N=NN=C1SCC2=C(N3[C@H](SC2)[C@H](NC(=O)CC4=CSC(=N4)N)C3=O)C([O-])=O	0.26	0.30	5.8	4.24	0.84	1.23	0.5	0.36	0.59	-0.52	0.76	0.63	-0.08	0.09	-0.30	-0.44
222	CO[C@]1(NC(=O)CC2=CC=CS2)[C@H]3SCC(=C(N3C1=O)C(O)=O)COC(N)=O	CO[C@]1(NC(=O)CC2=CC=CS2)[C@@H]3SCC(=C(N3C1=O)C([O-])=O)COC(N)=O	0.17	0.16	3.6	3.04	0.81	1.07	0.73	0.53	0.77	-0.80	0.56	0.48	-0.09	0.03	-0.14	-0.27
223	CON=C(C(=O)N[C@@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C(O)=O)CN3C=CN4[N-]C=CC=C34)C5=NSC(=N5)N	CO\N=C(\C(=O)N[C@@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C([O-])=O)CN3C=CN4[N-]C=CC=C34)C5=NSC(=N5)N	0.24	0.30	2.1	2.07	1.7	2.15	0.74	0.45	0.62	-0.52	0.32	0.31	0.23	0.33	-0.13	-0.35
224	OC(=O)C1=C([NH]C=N1)C(=O)N[C@@H](C(=O)N[C@@H]2C3SCC(=C(N3C2=O)C(O)=O)C[N+]4=CC=C(CC[S](O)(=O)=O)C=C4)C5=CC=CC=C5	[O-]C(=O)C1=C([NH]C=N1)C(=O)N[C@@H](C(=O)N[C@@H]2[C@H]3SCC(=C(N3C2=O)C([O-])=O)C[N+]4=CC=C(CC[S]([O-])(=O)=O)C=C4)C5=CC=CC=C5	0.21	0.26	1.7	2.04	1.8	1.90			0.68	-0.58	0.23	0.31	0.26	0.28		
225	C[N]1N=NN=C1SCC2=C(N3[C@H](SC2)[C@H](NC(=O)[C@H](NC(=O)C4=CNC(=CC4=O)C)C5=CC=C(O)C=C5)C3=O)C(O)=O	C[N]1N=NN=C1SCC2=C(N3[C@H](SC2)[C@H](NC(=O)[C@H](NC(=O)C4=CNC(=CC4=O)C)C5=CC=C(O)C=C5)C3=O)C([O-])=O	0.15	0.19	0.48	0.81	5.4	4.12	0.03	0.06	0.82	-0.72	-0.32	-0.09	0.73	0.61	-1.52	-1.25
226	CON=C(C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C([O-])=O)C[N+]3=CC=CC4=C3CCC4)C5=CSC(=N5)N	CO\N=C(\C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C([O-])=O)C[N+]3=C4CCCC4=CC=C3)C5=CSC(=N5)N	0.24	0.30	1.9	2.09	1.7	2.50	0.9	0.58	0.62	-0.53	0.28	0.32	0.23	0.40	-0.05	-0.24
227	CC=CC1=C(N2[C@H](SC1)[C@H](NC(=O)[C@H](N)C3=CC=C(O)C=C3)C2=O)C(O)=O	C\C=C/C1=C(N2[C@H](SC1)[C@H](NC(=O)[C@H]([NH3+])C3=CC=C(O)C=C3)C2=O)C([O-])=O	0.21	0.20	2.9	2.68	1.2	1.23	0.59	0.50	0.68	-0.69	0.46	0.43	0.08	0.09	-0.23	-0.30
228	COC1=C(N2[C@H](SC1)[C@H](NC(=O)[C@H](N)C3=CCC=CC3)C2=O)C(O)=O	COC1=C(N2[C@H](SC1)[C@H](NC(=O)[C@H]([NH3+])C3=CCC=CC3)C2=O)C([O-])=O	0.17	0.21	4.78	4.06	0.74	0.96	0.1	0.24	0.77	-0.67	0.68	0.61	-0.13	-0.02	-1.00	-0.62
229	NC(=O)C1=CC=[N+](CC2=C(N3[C@H](SC2)[C@H](NC(=O)[C@@H](C4=CC=CC=C4)[S](O)(=O)=O)C3=O)C([O-])=O)C=C1	NC(=O)C1=CC=[N+](CC2=C(N3[C@H](SC2)[C@H](NC(=O)[C@@H](C4=CC=CC=C4)[S]([O-])(=O)=O)C3=O)C([O-])=O)C=C1	0.29	0.35	1.96	1.87	1.64	1.94			0.54	-0.46	0.29	0.27	0.21	0.29		
230	CCON=C(C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2	CCO\N=C(\C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=	0.53	0.67	83.6	16.36	0.09	0.39	0.8	0.34	0.28	-0.18	1.92	1.21	-1.05	-0.41	-0.10	-0.47

231	C1=O)C([O-])=O)SC3=NC(=CS3)C4=CC=[N+](C)C=C4)C5=NSC(=N5)N[P](O)(O)=O CC(C)(ON=C(C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C([O-])=O)C[N+]3=CC=CC=C3)C4=CSC(=N4)N)C(O)=O	O)C([O-])=O)SC3=NC(=CS3)C4=CC=[N+](C)C=C4)C5=NSC(=N5)N=[P]([O-])([O-])[O-] CC(C)(O\N=C(/C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C([O-])=O)C[N+]3=CC=CC=C3)C4=CSC(=N4)N)C([O-])=O	0.31	0.25	2.4	2.00	1.8	2.22	0.79	0.52	0.51	-0.61	0.38	0.30	0.26	0.35	-0.10	-0.28
232	OC(=O)C1=C(CS[C@@H]2[C@H](NC(=O)C[N]3C=NN=N3)C(=O)N12)CSC4=NN=CS4	[O-]C(=O)C1=C(CS[C@H]2[C@H](NC(=O)C[N]3C=NN=N3)C(=O)N12)CSC4=NN=CS4			5.37	3.78	0.64	0.84					0.73	0.58	-0.19	-0.07		
233	CON=C(C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC=C(N2C1=O)C(O)=O)C3=CSC(=N3)N	CO\N=C(\C(=O)N[C@H]1[C@@H]2SCC=C(N2C1=O)C([O-])=O)C3=CSC(=N3)N	0.2	0.23	2.1	2.34	1.5	1.55	0.72	0.47	0.70	-0.65	0.32	0.37	0.18	0.19	-0.14	-0.33
234	NC1=NC(=NS1)C(=NO)C(=O)N[C@H]2[C@H]3SCC(=C(N3C2=O)C(O)=O)C=C4CCN([C@@H]5CCNC5)C4=O	NC1=NC(=NS1)\C(=N\O)C(=O)N[C@H]2[C@H]3SCC(=C(N3C2=O)C([O-])=O)\C=C4/CCN([C@@H]5CC[NH2+]C5)C4=O	0.27	0.34	1.5	1.76	3.3	2.91	0.62	0.46	0.57	-0.47	0.18	0.25	0.52	0.46	-0.21	-0.34
235	CN1N(CC2=C(N3[C@H](SC2)[C@H](NC(=O)C(=NOC(C)(C)C(O)=O)C4=NSC(=N4)N)C3=O)C(O)=O)C=C(NC(=O)NCCN)C1=N	CN1N(CC2=C(N3[C@H](SC2)[C@H](NC(=O)\C(=N\OC(C)(C)C([O-])=O)C4=NSC(=N4)N)C3=O)C([O-])=O)C=C(NC(=O)NCC[NH3+])C1=N	0.17	0.21	1.16	1.52	2.58	2.49	0.81	0.48	0.77	-0.67	0.06	0.18	0.41	0.40	-0.09	-0.32
236	CON=C(C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C(O)=O)CSC3=NC(=O)C(=NN3C)O)C4=CSC(=N4)N	CO\N=C(\C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C([O-])=O)CSC3=NC(=O)C(=NN3C)O)C4=CSC(=N4)N	0.12	0.15	0.22	0.59	7.6	4.25	0.1	0.13	0.92	-0.82	-0.66	-0.23	0.88	0.63	-1.00	-0.87
237	CON=C(C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C(O)=O)COC(N)=O)C3=CC=CO3	CO\N=C(/C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C([O-])=O)COC(N)=O)C3=CC=CO3	0.15	0.18	2.2	2.38	1.1	1.43			0.82	-0.75	0.34	0.38	0.04	0.15		
238	CON=C(C(=O)N[C@@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C(O)=O)CSC3=CN=NS3)C4=CSC(=N4)N	CO\N=C(\C(=O)N[C@@H]1[C@@H]2SCC(=C(N2C1=O)C([O-])=O)CSC3=CN=NS3)C4=CSC(=N4)N	0.2	0.16	4.1	2.98	1.14	1.89	0.12	0.15	0.70	-0.80	0.61	0.47	0.06	0.28	-0.92	-0.82
239	CC(C)C[C@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)C1=NC(=CC=C1)C2=CC=CC=C2)[C@@H](C)O)B(O)O	CC(C)C[C@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)C1=NC(=CC=C1)C2=CC=CC=C2)[C@@H](C)O)B(O)O	0.87	1.10	0.29	0.98	42.1	19.47			0.06	0.04	-0.54	-0.01	1.62	1.29		
240	CC(=O)OCC1=C(N2[C@H](SC1)[C@H](NC(=O)CC#N)C2=O)C(O)=O	CC(=O)OCC1=C(N2[C@H](SC1)[C@H](NC(=O)CC#N)C2=O)C([O-])=O	0.49	0.39	3.69	3.87	2.02	1.70			0.31	-0.41	0.57	0.59	0.31	0.23		
241	CC1=C(N2[C@H](SC1)[C@H](NC(=O)[C@H](N)C3=CC=CC=C3)C2=O)C(O)=O	CC1=C(N2[C@H](SC1)[C@H](NC(=O)[C@H]([NH3+])C3=CC=CC=C3)C2=O)C([O-])=O	0.21	0.26	3.9	3.45	0.57	0.78	0.85	0.65	0.68	-0.59	0.59	0.54	-0.24	-0.11	-0.07	-0.19
242	[O-]C(=O)C1=C(CS[C@@H]2[C@H](NC(=O)CC3=CC=CS3)C(=O)N12)C[N+]4=CC=CC=C4	[O-]C(=O)C1=C(CS[C@H]2[C@H](NC(=O)CC3=CC=CS3)C(=O)N12)C[N+]4=CC=CC=C4	0.46	0.37	3.3	3.15	1.5	1.61	0.8	0.43	0.34	-0.44	0.52	0.50	0.18	0.21	-0.10	-0.37
243	CC(=O)OCC1=C(N2[C@H](SC1)[C@H](NC(=O)CC3=CC=CS3)C2=O)C(O)=O	CC(=O)OCC1=C(N2[C@H](SC1)[C@H](NC(=O)CC3=CC=CS3)C2=O)C([O-])=O	0.07	0.09	1.8	2.56	0.95	1.27	0.22	0.28	1.15	-1.06	0.26	0.41	-0.02	0.10	-0.66	-0.56
244	CC(=O)OCC1=C(N2[C@H](SC1)[C@H](NC(=O)CSC3=CC=NC=C3)C2=O)C(O)=O	CC(=O)OCC1=C(N2[C@H](SC1)[C@H](NC(=O)CSC3=CC=NC=C3)C2=O)C([O-])=O	0.13	0.16	2.7	3.01	1.2	1.29	0.55	0.40	0.89	-0.79	0.43	0.48	0.08	0.11	-0.26	-0.40
245	CC1=C(N2[C@H](SC1)[C@H](NC(=O)[C@H](N)C3=CCC=CC3)C2=O)C(O)=O	CC1=C(N2[C@H](SC1)[C@@H](NC(=O)[C@H]([NH3+])C3=CCC=CC3)C2=O)C([O-])=O	0.21	0.24	3.3	3.68	0.85	1.06	0.95	0.70	0.68	-0.63	0.52	0.57	-0.07	0.03	-0.02	-0.16
246	COCC1=C(N=C(C(C)C)C(=C1C2=CC=C(F)C=C2)C=C[C@@H](O)C[C@@H](O)CC(O)=O)C(C)C	COCC1=C(C2=CC=C(F)C=C2)C(=C(N=C1C(C)C)C(C)C)\C=C/[C@@H](O)C[C@@H](O)CC([O-])=O	0.33	0.42	2.9	3.38	1.8	2.69	0.01	0.01	0.48	-0.38	0.46	0.53	0.26	0.43	-2.00	-1.85
247	CN(C)CCCNC(=O)C(COC1=CC=CC2=CC=CC=C12)=CCCCCC(=O)NO	C[NH+](C)CCCNC(=O)\C(COC1=C2C=CC=CC2=CC=C1)=C\CCCCC(=O)N[O-]	0.45	0.57	1.82	2.78	2.1	2.95			0.35	-0.25	0.26	0.44	0.32	0.47		
248	OC(=O)C1=CC=C(NC(=O)NCCN2CCN=C2C3=CC=NC=C3)C=C1	[O-]C(=O)C1=CC=C(NC(=O)NCCN2CCN=C2C3=CC=NC=C3)C=C1	0.35	0.44	1.67	2.18	4.9	4.38			0.46	-0.36	0.22	0.34	0.69	0.64		
249	C[C@@H](O)[C@@H]1[C@H]2SC(=C(N2C1=O)C(O)=O)CN	C[C@@H](O)[C@@H]1[C@H]2SC(=C(N2C1=O)C([O-])=O)C[NH3+]	0.23	0.29	7.67	5.68	0.5	0.80			0.64	-0.54	0.88	0.75	-0.30	-0.09		
250	CCCC[P](O)(=O)CCCN	CCCC[P]([O-])(=O)CCC[NH3+]			1.56	2.23	2.1	2.24					0.19	0.35	0.32	0.35		
251	C[C@H](CCC(O)=O)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3[C@H](O)C[C@@H]4C[C@H](O)CC[C	C[C@H](CCC([O-])=O)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3[C@H](O)C[C@	0.19	0.24	5.7	3.06	1.42	2.03			0.72	-0.62	0.76	0.49	0.15	0.31		

	@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C	@H]4C[C@H](O)CC[C@]4(C)[C@@H]3CC[C@@]12C																
252	OC(=O)CCCC1=CC=C(C=C1)N(CCCl)CCCl	[O-]C(=O)CCCC1=CC=C(C=C1)N(CCCl)CCCl	0.26	0.33	2.8	2.24	1.1	1.77	0.01	0.01	0.59	-0.49	0.45	0.35	0.04	0.25	-2.00	-1.83
253	OC[C@@H](NC(=O)C(Cl)Cl)[C@H](O)C1=CC=C(C=C1)[N](=O)=O	OC[C@@H](NC(=O)C(Cl)Cl)[C@H](O)C1=CC=C(C=C1)[N+]([O-])=O	0.94	0.75	2.4	3.35	4.6	3.09	0.34	0.24	0.03	-0.13	0.38	0.53	0.66	0.49	-0.47	-0.62
254	OC(=O)C1N=C(C2=CC=CC=C2)C3=CC(=CC=C3NC1=O)Cl	[O-]C(=O)[C@H]1N=C(C2=CC=CC=C2)C3=C(NC1=O)C=CC(=C3)Cl	0.2	0.16	1.1	1.03	2.4	3.40			0.70	-0.80	0.04	0.01	0.38	0.53		
255	CNC1=NC2=CC=C(Cl)C=C2C(=[N](=O)C1)C3=CC=CC=C3	CNC1=[NH+]C2=C(C=C(Cl)C=C2)C(=[N+]([O-])C1)C3=CC=CC=C3	0.25	0.37	0.37	1.29	8.3	8.07	0.056	0.04	0.60	-0.43	-0.43	0.11	0.92	0.91	-1.25	-1.37
256	CC1=C(CCCl)SC=N1	CC1=C(CCCl)SC=N1	6.6	5.24	33	14.11	4.5	3.48	0.36	0.33	0.82	0.72	1.52	1.15	0.65	0.54	-0.44	-0.49
257	ClC1=CC=CC(=C1)N2CCNCC2	ClC1=CC(=CC=C1)N2CC[NH2+]CC2	2.5	5.12	6.1	8.22	4.7	5.05			0.40	0.71	0.79	0.91	0.67	0.70		
258	CCN(CC)CCCC(C)NC1=CC=NC2=CC(=CC=C12)Cl	CC[NH+](CC)CCC[C@H](C)NC1=C2C=CC(=CC2=[NH+]C=C1)Cl	140	111.26	4.1	5.94	570	143.68	0.43	0.20	2.15	2.05	0.61	0.77	2.76	2.16	-0.37	-0.70
259	CN(C)CCC(C1=CC=C(Cl)C=C1)C2=CC=CC=N2	C[NH+](C)CC[C@@H](C1=CC=C(Cl)C=C1)C2=NC=CC=C2	3.3	6.51	2.5	4.19	22	16.05	0.7	0.38	0.52	0.81	0.40	0.62	1.34	1.21	-0.15	-0.42
260	CN(C)CCCN1C2=CC=CC=C2SC3=CC=C(Cl)C=C13	C[NH+](C)CCCN1C2=C(SC3=C1C=C(Cl)C=C3)C=CC=C2	10	12.15	16	13.24	11	15.37	0.056	0.05	1.00	1.08	1.20	1.12	1.04	1.19	-1.25	-1.27
261	CCCNC(=O)N[S](=O)(=O)C1=CC=C(Cl)C=C1	CCCNC(=O)N=[S]([O-])(=O)C1=CC=C(Cl)C=C1	0.19	0.21	0.045	0.15	46	34.59	0.03	0.04	0.72	-0.68	-1.35	-0.83	1.66	1.54	-1.52	-1.35
262	CN(C)CCC=C1C2=CC=CC=C2SC3=CC=C(Cl)C=C13	C[NH+](C)CC\C=C1\C2=C(SC3=C1C=C(Cl)C=C3)C=CC=C2	13.7	11.21	11.5	7.86	25.8	17.75			1.14	1.05	1.06	0.90	1.41	1.25		
263	CN(C)[C@H]1[C@@H]2C[C@H]3C(=C(O)[C@]2(O)C(=O)C(=C1O)C(N)=O)C(=O)C4=C(O)C=CC(=C4[C@@]3(C)O)Cl	C[NH+](C)[C@H]1[C@@H]2C[C@H]3C(=C([O-])[C@]2(O)C(=O)C(=C1[O-])C(N)=O)C(=O)C4=C(C(=CC=C4O)Cl)[C@@]3(C)O	0.9	0.97	2	1.60	7	8.15	0.52	0.29	0.05	-0.02	0.30	0.21	0.85	0.91	-0.28	-0.54
264	N[S](=O)(=O)C1=CC(=CC=C1Cl)C2(O)NC(=O)C3=CC=CC=C23	N[S](=O)(=O)C1=C(Cl)C=CC(=C1)[C@]2(O)NC(=O)C3=C2C=CC=C3	3.9	3.10	1.5	1.43	36	17.59	0.24	0.13	0.59	0.49	0.18	0.16	1.56	1.25	-0.62	-0.89
265	C1CN=C(N1)C2CC2(C3=CC=CC=C3)C4=CC=CC=C4	C1C[NH+]=C(N1)[C@@H]2CC2(C3=CC=CC=C3)C4=CC=CC=C4	4.1	3.95	8.6	12.86	7.3	8.13	0.5	0.23	0.61	0.60	0.93	1.11	0.86	0.91	-0.30	-0.64
266	CCC#CC[C@H](C)[C@H](O)C#C[C@H]1[C@H](O)C[C@@H]2CC(C[C@H]12)=CCOCC(O)=O	CCC#CC[C@H](C)[C@H](O)C#C[C@H]1[C@H](O)C[C@@H]2C\C(C[C@H]12)=C/COCC([O-])=O	0.08	0.28	3.8	5.55	1.1	1.08			1.10	-0.55	0.58	0.74	0.04	0.03		
267	CC(C)C(=O)OCC(=O)[C@]12O[C@H](O[C@@H]1C[C@@H]3[C@@H]4CCC5=CC(=O)C=C[C@]5(C)[C@H]4[C@@H](O)C[C@]23C)C6CCCCC6	CC(C)C(=O)OCC(=O)[C@@]12O[C@H](O[C@@H]1C[C@@H]3[C@@H]4CCC5=CC(=O)C=C[C@]5(C)[C@H]4[C@H](O)C[C@]23C)C6CCCCC6	2.9	2.30	33.3	15.54	0.37	1.07	0.01	0.02	0.46	0.36	1.52	1.19	-0.43	0.03	-2.00	-1.74
268	CC(C)[N@+]1(C)[C@H]2CC[C@H]1C[C@@H](C2)OC(=O)[C@@H](C3CCCC3)C4=CC=CC=C4	CC(C)[N+]1(C)[C@H]2CC[C@H]1CC(C2)OC(=O)[C@@H](C3CCCC3)C4=CC=CC=C4	1.25	1.55	8.41	9.40	3.3	4.48			0.10	0.19	0.92	0.97	0.52	0.65		
269	NC1=NC(=O)N(C[C@@H](CO)OC[P](O)(O)=O)C=C1	NC1=NC(=O)N(C[C@@H](CO)OC[P]([O-])([O-])=O)C=C1	0.49	0.39	2.5	3.41	2.6	2.53	1	0.90	0.31	-0.41	0.40	0.53	0.41	0.40	0.00	-0.05
270	CC1(C)C[C@@H]1C(=O)NC(=CCCCCSC[C@H](N)C(O)=O)C(O)=O	CC1(C)C[C@@H]1C(=O)N\C(=C/CCCCSC[C@H]([NH3+])C([O-])=O)C([O-])=O	0.15	0.19	2.3	2.36	0.86	1.30	0.6	0.46	0.82	-0.72	0.36	0.37	-0.07	0.11	-0.22	-0.33
271	OC(=O)[C@H](CCC1=CC=CC=C1)N[C@H]2CCCN3CCC[C@H](N3C2=O)C(O)=O	[O-]C(=O)[C@H](CCC1=CC=CC=C1)[NH2+][C@H]2CCCN3CCC[C@H](N3C2=O)C([O-])=O	3.7	1.77	2.1	2.01	50.6	16.81			0.57	0.25	0.32	0.30	1.70	1.23		
272	CC(C)[C@@H]1N(C)C(=O)[C@@H](CC2=CC=CC=C2)NC(=O)[C@H](CC(O)=O)NC(=O)CNC(=O)[C@H](CCCNC(N)=N)NC1=O	CC(C)[C@@H]1N(C)C(=O)[C@@H](CC2=CC=CC=C2)NC(=O)[C@H](CC([O-])=O)NC(=O)CNC(=O)[C@H](CCCNC(N)=[NH2+])NC1=O	0.26	0.33	1.18	1.79	3.6	2.84			0.59	-0.48	0.07	0.25	0.56	0.45		
273	COC1=CC=C(C=C1OC2CCCC2)[C@@]3(CC[C@H](CC3)C(O)=O)C#N	COC1=C(OC2CCCC2)C=C(C=C1)C3(CCC(CC3)C([O-])=O)C#N	0.23	0.29	0.5	0.98	7.9	6.17	0.006	0.01	0.64	-0.54	-0.30	-0.01	0.90	0.79	-2.22	-1.83
274	CNC(NC#N)=NCCSCC1=C(C)[NH]C=N1	CNC(NC#N)=NCCSCC1=C(C)[NH]C=N1	1.2	1.16	8.1	6.07	2.2	2.33	0.78	0.75	0.08	0.06	0.91	0.78	0.34	0.37	-0.11	-0.13
275	C[N+]1(CC2CC2)[C@@H]3C[C@H](C[C@H]1[C@@H]4O[C@H]34)OC(=O)[C@H](CO)C5=CC=CC=C5	C[N+]1(CC2CC2)[C@@H]3CC(C[C@H]1[C@@H]4O[C@H]34)OC(=O)[C@H](CO)C5=CC=CC=C5	1.12	1.41	25	18.20	0.83	1.29			0.05	0.15	1.40	1.26	-0.08	0.11		

276	C[C@@H](NCCCC1=CC(=CC=C1)C(F)(F)F)CC2=C3C=CC=CC3=CC=C2	C[C@@H]([NH2+]CCCC1=CC(=CC=C1)C(F)(F)F)C2=C3C=CC=CC3=CC=C2	17.6	13.98	18.3	12.33	19.9	20.11	0.05	0.04	1.25	1.15	1.26	1.09	1.30	1.30	-1.30	-1.36
277	OC(=O)CCCCN(CCC1=CC=CC=C1OCC2=CC=C(CCC3=CC=CC=C3)C=C2)CC4=CC=C(C=C4)C(O)=O	[O-]C(=O)CCCC[NH+](CCC1=C(OCC2=CC=C(CCC3=CC=CC=C3)C=C2)C=CC=C1)CC4=CC=C(C=C4)C([O-])=O	0.24	0.30	9	5.13	0.25	0.80			0.62	-0.52	0.95	0.71	-0.60	-0.10		
278	OC(=O)C1=CN(C2CC2)C3=CC(=C(F)C=C3C1=O)N4CCNCC4	[O-]C(=O)C1=CN(C2CC2)C3=C(C=C(F)C(=C3)N4CC[NH2+]CC4)C1=O	2.1	1.21	8.3	6.04	3.8	7.33	0.7	0.58	0.32	0.08	0.92	0.78	0.58	0.87	-0.15	-0.23
279	CN(C)[C@H]([C@H]1CCCC[C@H]1O)C2=CC(=CC=C2)O	C[NH+](C)[C@H]([C@H]1CCCC[C@H]1O)C2=CC(=CC=C2)O			2.2	4.70	3.85	4.23					0.34	0.67	0.59	0.63		
280	CO[C@@H]1CN(CCCOC2=CC=C(F)C=C2)CC[C@@H]1NC(=O)C3=C(OC)C=C(N)C(=C3)Cl	CO[C@@H]1C[NH+](CCCOC2=CC=C(F)C=C2)CC[C@@H]1NC(=O)C3=C(OC)C=C(N)C(=C3)Cl	1.2	1.53	1.5	2.78	11.7	11.31	0.02	0.03	0.08	0.19	0.18	0.44	1.07	1.05	-1.70	-1.57
281	CN(C)CCCC1(OCC2=CC(=CC=C12)C#N)C3=CC=C(F)C=C3	C[NH+](C)CCC[C@]1(OCC2=C1C=CC(=C2)C#N)C3=CC=C(F)C=C3	12	9.53	4.3	5.68	33	18.93	0.2	0.16	1.08	0.98	0.63	0.75	1.52	1.28	-0.70	-0.79
282	NC1=NC(=NC2=C1N=C[N]2[C@H]3C[C@H](O)[C@@H](CO)O3)Cl	NC1=C2N=C[N]([C@@H]3C[C@H](O)[C@@H](CO)O3)C2=NC(=N1)Cl	7.7	3.47	14	9.77	16	8.92	0.79	0.65	0.89	0.54	1.15	0.99	1.20	0.95	-0.10	-0.19
283	CC[C@H]1OC(=O)[C@H](C)[C@@H](O[C@H]2C[C@@](C)(OC)[C@@H](O)[C@H](C)O2)[C@H](C)[C@@H](O[C@@H]3O[C@H](C)C[C@@H]([C@H]3O)N(C)C)[C@@](C)(C[C@@H](C)C(=O)[C@H](C)[C@@H](O)[C@]1(C)O)OC	CC[C@H]1OC(=O)[C@H](C)[C@@H](O[C@H]2C[C@@](C)(OC)[C@@H](O)[C@H](C)O2)[C@H](C)[C@@H](O[C@@H]3O[C@@H](C)C[C@@H]([C@H]3O)[NH+](C)C)[C@@](C)(C[C@@H](C)C(=O)[C@H](C)[C@@H](O)[C@]1(C)O)OC	1.5	1.76	7.3	4.70	2.8	3.30	0.23	0.18	0.18	0.25	0.86	0.67	0.45	0.52	-0.64	-0.74
284	OCC=C1O[C@@H]2CC(=O)N2[C@H]1C(O)=O	OC\C=C1\O[C@@H]2CC(=O)N2[C@H]1C([O-])=O	0.22	0.28	3.1	3.07	0.9	1.33	0.91	0.82	0.66	-0.56	0.49	0.49	-0.05	0.12	-0.04	-0.08
285	COC1=CC=CC=C1OC2=C(N[S](=O)(=O)C3=CC=C(C)C=N3)N=C(N=C2OCCO)C4=CC=NC(=C4)C5=NN=N[NH]5	COC1=C(OC2=C(OCCO)N=C(N=C2N[S](=O)(=O)C3=NC=C(C)C=C3)C4=CC(=NC=C4)C5=NN=N[N-]5)C=CC=C1	0.23	0.29	10.5	6.69	2.6	3.40	0.02	0.02	0.64	-0.54	1.02	0.83	0.41	0.53	-1.70	-1.70
286	COC1=CC=C(C=C1)[C@@H]2SC3=C(C=CC(=C3)Cl)N(CCN(C)C)C(=O)[C@@H]2OC(C)=O	COC1=CC=C(C=C1)[C@@H]2SC3=C(C=CC(=C3)Cl)N(CC[NH+](C)C)C(=O)[C@@H]2OC(C)=O	9.7	3.14	13.7	9.96	10.6	9.68	0.1	0.07	0.99	0.50	1.14	1.00	1.03	0.99	-1.00	-1.17
287	CCCC(=O)OCOC(=O)C1=C(C)NC(=C(C1C2=CC=CC(=C2Cl)Cl)C(=O)OC)C	CCCC(=O)OCOC(=O)C1=C(C)NC(=C([C@H]1C2=C(Cl)C(=CC=C2)Cl)C(=O)OC)C	0.58	0.73	142	43.79	0.3	1.04	0.0038	0.01	0.24	-0.14	2.15	1.64	-0.52	0.02	-2.42	-2.05
288	NC1CCN(C1)C2=C(F)C=C3C(=O)C(=CN(C4CC4)C3=C2Cl)C(O)=O	[NH3+][C@H]1CCN(C1)C2=C(Cl)C3=C(C=C2F)C(=O)C(=CN3C4CC4)C([O-])=O	1.9	1.46	4.7	4.35	5.4	7.43	0.96	0.73	0.28	0.16	0.67	0.64	0.73	0.87	-0.02	-0.14
289	CCC[C@@H]1C[C@H](N(C)C1)C(=O)N[C@H]([C@H](C)Cl)[C@H]2O[C@H](SC)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]2O	CCC[C@@H]1C[C@H]([NH+](C)C1)C(=O)N[C@H]([C@H](C)Cl)[C@H]2O[C@H](SC)[C@H](O)[C@@H]2O	0.79	0.95	4.5	3.66	2.1	2.55	0.06	0.14	0.10	-0.02	0.65	0.56	0.32	0.41	-1.22	-0.84
290	O[P](O)(=O)C(Cl)(Cl)[P](O)(O)=O	[O-][P]([O-])(=O)C(Cl)(Cl)[P]([O-])([O-])=O	0.88	0.81	1.6	1.92	43.2	24.23	0.64	0.50	0.06	-0.09	0.20	0.28	1.64	1.38	-0.19	-0.30
291	NC1=NC(=NC2=C1N=C[N]2[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]3F)Cl	NC1=C2N=C[N]([C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]3F)C2=NC(=N1)Cl	1.75	2.20	7.7	7.57	4	3.92	0.53	0.55	0.24	0.34	0.89	0.88	0.60	0.59	-0.28	-0.26
292	CN(C)CCCN1C2=CC=CC=C2CCC3=CC=C(Cl)C=C13	C[NH+](C)CCCN1C2=C(CCC3=C1C=C(Cl)C=C3)C=CC=C2	13	14.46	8.2	9.80	26	22.05	0.029	0.08	1.11	1.16	0.91	0.99	1.41	1.34	-1.54	-1.12
293	ClC1=CC=CC=C1C2=NCC(=O)NC3=CC=C(C=C23)[N](=O)=O	[O-][N+](=O)C1=CC2=C(NC(=O)CN=C2C3=C(Cl)C=CC=C3)C=C1	2.9	0.97	0.88	0.83	38	23.34	0.15	0.03	0.46	-0.02	-0.06	-0.08	1.58	1.37	-0.82	-1.51
294	ClC1=CC=CC(=C1NC2=NCCN2)Cl	ClC1=C(NC2=[NH+]CCN2)C(=CC=C1)Cl	3.3	4.85	4	5.44	7.6	5.77	0.56	0.26	0.52	0.69	0.60	0.74	0.88	0.76	-0.25	-0.59
295	COC(=O)[C@@H](N1CCC2=C(C1)C=CS2)C3=CC=CC=C3Cl	COC(=O)[C@@H]([NH+]1CCC2=C(C1)C=CS2)C3=C(Cl)C=CC=C3	2.01	2.08	23.65	13.91	5.06	5.26	0.02	0.03	0.30	0.32	1.37	1.14	0.70	0.72	-1.70	-1.54
296	CN1CCN(CC1)C2=NC3=CC(=CC=C3NC4=CC=CC=C24)Cl	C[NH+]1CCN(CC1)C2=NC3=C(NC4=C2C=CC=C4)C=CC(=C3)Cl	1.6	2.01	2.5	4.14	10	10.87	0.055	0.06	0.20	0.30	0.40	0.62	1.00	1.04	-1.26	-1.22
297	OC1(CN(C1)C(=O)C2=C(NC3=C(F)C=C(I)C=C3)C(=C(F)C=C2)F)[C@@H]4CCCCN4	OC1(CN(C1)C(=O)C2=C(NC3=C(F)C=C(I)C=C3)C(=C(F)C=C2)F)[C@@H]4CCCC[NH2+]4	15.4	12.23	2.8	3.01	68.8	44.42	0.05	0.04	1.19	1.09	0.45	0.48	1.84	1.65	-1.30	-1.39
298	CCOC(=O)[C@H]1[C@H](C[C@@H]2CC[C	CCOC(=O)[C@H]1[C@H](C[C@@H]2CC[C@H]1[N	1.6	2.01	13	18.93	1.5	2.02	0.64	0.42	0.20	0.30	1.11	1.28	0.18	0.31	-0.19	-0.37

	@H]1N2C)OC(=O)C3=CC=CC=C3	H+]2C)OC(=O)C3=CC=CC=C3															
299	COC(=O)[C@H]1[C@H](C[C@@H]2CC[C@H]1N2C)OC(=O)C3=CC=CC=C3	COC(=O)[C@H]1[C@H](C[C@@H]2CC[C@H]1[NH+]2C)OC(=O)C3=CC=CC=C3	2	2.25	32	24.95	0.76	1.28	0.12	0.21	0.30	0.35	1.51	1.40	-0.12	0.11	-0.92	-0.68
300	COC1=CC=C2C[C@@H]3[C@@H]4C=C[C@H](O)[C@@H]5OC1=C2[C@]45CCN3C	COC1=C2O[C@H]3[C@@H](O)C=C[C@H]4[C@H]5CC(=C2[C@@]34CC[NH+]5C)C=C1	3.5	1.98	15	12.45	4	3.75	0.7	0.59	0.54	0.30	1.18	1.10	0.60	0.57	-0.15	-0.23
301	COC1=CC=C2C(=CC1=O)[C@H](CCC3=CC(=C(OC)C(=C23)OC)OC)NC(C)=O	COC1=CC=C2C(=CC1=O)[C@H](CCC3=C2C(=C(OC)C(=C3)OC)OC)NC(C)=O	6.1	4.84	2.1	3.20	58	20.77	0.61	0.28	0.79	0.69	0.32	0.50	1.76	1.32	-0.21	-0.56
302	COC1=CC=C(C=CC2=CC(=C(OC)C(=C2)OC)OC)C=C1O[P](O)(O)=O	COC1=C(O[P]([O-])([O-])=O)C=C(C=C1)\C=C/C2=CC(=C(OC)C(=C2)OC)OC	0.11	0.14	5.86	4.26	0.47	1.05	0.23	0.14	0.96	-0.86	0.77	0.63	-0.33	0.02	-0.64	-0.85
303	CC1=NC2=C([NH]1)C3=CC=CC=C3N(CC2)C(=O)C4=CC=C(NC(=O)C5=CC=CC=C5C6=CC=CC=C6)C=C4	CC1=NC2=C([NH]1)C3=C(C=CC=C3)N(CC2)C(=O)C4=CC=C(NC(=O)C5=C(C=CC=C5)C6=CC=CC=C6)C=C4	0.76	0.96	3	2.69	6.7	9.50	0.01	0.01	0.12	-0.02	0.48	0.43	0.83	0.98	-2.00	-2.04
304	COC1=C(OCCCN2CCOCC2)C=CC3=C1N=C(NC(=O)C4=CN=C(N)N=C4)N5CCN=C35	COC1=C2N=C(NC(=O)C3=CN=C(N)N=C3)N4CCN=C4C2=CC=C1OCCC[NH+]5CCOCC5	10.34	8.22	6.42	6.02	25.2	16.62			1.01	0.91	0.81	0.78	1.40	1.22		
305	CC[C@@]1(O)C(=O)OCC2=C1C=C3N(CC4=C3N=C5C=CC=CC5=C4CC[Si](C)(C)C)C2=O	CC[C@@]1(O)C(=O)OCC2=C1C=C3N(CC4=C3N=C5C=CC=CC5=C4CC[Si](C)(C)C)C2=O	3.26	1.84	4.2	3.79	13.2	9.56			0.51	0.26	0.62	0.58	1.12	0.98		
306	CN1[C@@H](CCC1=O)C2=CC=CN=C2	CN1[C@@H](CCC1=O)C2=CN=CC=C2	1.1	0.72	0.89	1.72	17	7.58			0.04	-0.14	-0.05	0.24	1.23	0.88		
307	O=C1OC2=C(C=CC=C2)C=C1	O=C1OC2=C(C=CC=C2)C=C1	1.1	0.87	23.6	13.35	0.8	1.13	0.17	0.20	0.04	-0.06	1.37	1.13	-0.10	0.05	-0.77	-0.70
308	CCCCCCCCC=CCCCCCCCC(=O)OC[C@H]1O[C@H]([C@@H](O)[C@@H]1O)N2C=CC(=NC2=O)N	CCCCCCCC\C=C\CCCCCCCC(=O)OC[C@H]1O[C@H]([C@@H](O)[C@@H]1O)N2C=CC(=NC2=O)N	0.41	0.52	0.36	1.13	0.36	1.03			0.39	-0.29	-0.44	0.05	-0.44	0.01		
309	C[C@@H](O)[C@@H]1[C@@H]2SC(=C(N2C1=O)C([O-])=O)S[C@H]3CC[S@@](=O)C3	C[C@@H](O)[C@H]1[C@@H]2SC(=C(N2C1=O)C([O-])=O)S[C@H]3CC[S@](=O)C3	0.21	0.26	5.1	4.28	0.9	1.08	0.9	0.62	0.68	-0.58	0.71	0.63	-0.05	0.03	-0.05	-0.21
310	C[N]1N=NN=C1SCC2=C(N3[C@H](SC2)[C@H](NC(=O)C(=NOCC(O)=O)C4=N[NH]C=C4)C3=O)C(O)=O	C[N]1N=NN=C1SCC2=C(N3[C@@H](SC2)[C@H](NC(=O)\C(=N\OCC([O-])=O)C4=N[NH]C=C4)C3=O)C([O-])=O	0.22	0.22	1.83	1.49	1.33	1.51			0.66	-0.66	0.26	0.17	0.12	0.18		
311	C[C@@H](OC1=CC(=CN=C1N)C2=C[N](N=C2)C3CCNCC3)C4=C(Cl)C=CC(=C4Cl)F	C[C@@H](OC1=C(N)N=CC(=C1)C2=C[N](N=C2)C3CC[NH2+]CC3)C4=C(Cl)C(=CC=C4Cl)F	22.15	17.60	9.75	7.90	38.9	24.93	0.09	0.06	1.35	1.25	0.99	0.90	1.59	1.40	-1.05	-1.24
312	COC1=CC2=C(C=C1OCCCCCCCC(=O)NO)C(=NC=N2)NC3=CC=CC(=C3)C#C	COC1=C(OCCCCCCCC(=O)N[O-])C=C2C(=NC=NC2=C1)NC3=CC(=CC=C3)C#C	0.56	0.69	11.99	7.08	5.01	6.35			0.25	-0.16	1.08	0.85	0.70	0.80		
313	NC#N	NC#N	0.78	0.62	17	12.98	0.43	0.69			0.11	-0.21	1.23	1.11	-0.37	-0.16		
314	CN1CCN(CC1)C(C2=CC=CC=C2)C3=CC=CC=C3	C[NH+]1CC[NH+](CC1)C(C2=CC=CC=C2)C3=CC=CC=C3	16.5	13.10	14.5	11.80	13.53	11.52			1.22	1.12	1.16	1.07	1.13	1.06		
315	NC1=NC(=O)N(C=C1)[C@@H]2C=C(CO)[C@@H](O)[C@H]2O	NC1=NC(=O)N(C=C1)[C@@H]2C=C(CO)[C@@H](O)[C@H]2O			3.61	4.58							0.56	0.66				
316	ClCCN(CCCl)[P]1(=O)NCCCO1	ClCCN(CCCl)[P@@]1(=O)NCCCO1	0.73	0.85	1.1	1.41	8	4.77	0.87	0.80	0.14	-0.07	0.04	0.15	0.90	0.68	-0.06	-0.10
317	CCC[C@H](NC1=NC(=NC=C1C)C2=CC(=C(NC(=O)NCCC)C=C2)OC)C3=CN=CC=C3	CCC[C@H](NC1=C(C)C=NC(=N1)C2=CC(=C(NC(=O)NCCC)C=C2)OC)C3=CN=CC=C3	3.41	2.71	22.2	10.54	2.9	4.50			0.53	0.43	1.35	1.02	0.46	0.65		
318	NC1=NC(=O)N(C=C1)[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]2O	NC1=NC(=O)N(C=C1)[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]2O	0.67	0.78	41.67	16.79	0.17	0.54	0.87	0.86	0.17	-0.11	1.62	1.22	-0.77	-0.27	-0.06	-0.07
319	C[N]1C(=NC2=CC(=CC=C12)C(=O)N(CCC(O)=O)C3=CC=CC=N3)CNC4=CC=C(C=C4)C(N)=N	C[N]1C(=NC2=C1C=CC(=C2)C(=O)N(CCC([O-])=O)C3=NC=CC=C3)CNC4=CC=C(C=C4)C(N)=[NH2+]	0.85	1.02	1.93	2.25	7.3	5.26	0.65	0.29	0.07	0.01	0.29	0.35	0.86	0.72	-0.19	-0.54
320	CC(C)(C)C1=NC(=C(S1)C2=CC=NC(=N2)N)C3=CC=CC(=C3F)N[S](=O)(=O)C4=C(F)C=CC=C4F	CC(C)(C)C1=NC(=C(S1)C2=NC(=NC=C2)N)C3=C(F)C(=CC=C3)N[S](=O)(=O)C4=C(F)C=CC=C4F	0.65	0.82	2.86	2.19	2.6	5.69	0.003	0.01	0.19	-0.09	0.46	0.34	0.41	0.75	-2.52	-2.29
321	CN(C)N=NC1=C([NH]C=N1)C(N)=O	CN(C)N=NC1=C([NH]C=N1)C(N)=O	1.2	0.95	2.6	3.17	6.2	5.02	1	0.91	0.08	-0.02	0.41	0.50	0.79	0.70	0.00	-0.04
322	OCCN(CCC1=C[NH]C2=CC=CC=C12)CC3=CC=C(C=CC(=O)NO)C=C3	OCC[NH+](CCC1=C[NH]C2=C1C=CC=C2)CC3=CC=C(\C=C/C(=O)N[O-])C=C3	2.17	1.72	7.6	5.37	12.43	8.86	0.23	0.15	0.34	0.24	0.88	0.73	1.09	0.95	-0.64	-0.82
323	COC(=O)N[C@@H](C(C)C)C(=O)N1CCC[C@H]1C2=NC=C([NH]2)C3=CC=C(C=C3)C4=CC=C(C=C4)C5=CN=C([NH]5)[C@@H]6CCCN6C(=O)[C@@H](NC(=O)OC)C(C)C	COC(=O)N[C@@H](C(C)C)C(=O)N1CCC[C@H]1C2=NC=C([NH]2)C3=CC=C(C=C3)C4=CC=C(C=C4)C5=CN=C([NH]5)[C@@H]6CCCN6C(=O)[C@@H](NC(=O)OC)C(C)C	0.67	0.84	1	1.58	13.5	10.64	0.01	0.01	0.17	-0.07	0.00	0.20	1.13	1.03	-2.00	-1.86
324	NC1=CC=NC=C1	NC1=CC=[NH+]C=C1	2.6	2.06	9.3	8.64	3.6	2.30	1	0.81	0.41	0.31	0.97	0.94	0.56	0.36	0.00	-0.09
325	CCN(CC)CC[S](=O)(=O)[C@@H]1CCN2[C@	CC[NH+](CC)CC[S](=O)(=O)[C@@H]1CCN2[C@H]	0.39	0.49	16	11.71	0.74	1.25	0.82	0.34	0.41	-0.31	1.20	1.07	-0.13	0.10	-0.09	-0.47

	H]1C(=O)O[C@@H](C(C)C)[C@H](C)C=CC(=O)NCC=CC(=C[C@@H](O)CC(=O)CC3=NC(=CO3)C2=O)C	1C(=O)O[C@H](C(C)C)[C@H](C)\C=C/C(=O)NC\C=C\C(=C/[C@@H](O)CC(=O)CC3=NC(=CO3)C2=O)C																
326	C[C@]12CC3=C(ON=C3)C=C1CC[C@@H]4[C@@H]2CC[C@@]5(C)[C@H]4CC[C@@]5(O)C#C	C[C@]12CC3=C(ON=C3)C=C1CC[C@@H]4[C@H]2CC[C@@]5(C)[C@@H]4CC[C@@]5(O)C#C	5.18	4.11	15.71	8.60	2.31	3.48			0.71	0.61	1.20	0.93	0.36	0.54		
327	CC(C)(C)OC(=O)N[C@H]1CCCCCC=C[C@@H]2C[C@]2(NC(=O)[C@@H]3C[C@H](CN3C1=O)OC(=O)N4CC5=CC=CC(=C5C4)F)C(=O)N[S](=O)(=O)C6CC6	CC(C)(C)OC(=O)N[C@H]1CCCCC\C=C\[C@@H]2C[C@]2(NC(=O)[C@@H]3C[C@H](CN3C1=O)OC(=O)N4CC5=C(C4)C(=CC=C5)F)C(=O)N=[S]([O-])(=O)C6CC6	0.22	0.28	11.53	9.08	1.81	2.83	0.02	0.03	0.66	-0.56	1.06	0.96	0.26	0.45	-1.70	-1.51
328	O=C1CN(N=CC2=CC=C(O2)C3=CC=C(C=C3)[N](=O)=O)C(=O)N1	[O-][N+](=O)C1=CC=C(C=C1)C2=CC=C(O2)\C=N\N3CC(=O)NC3=O	0.37	0.47	0.43	0.83	10	6.68			0.43	-0.33	-0.37	-0.08	1.00	0.82		
329	CO[C@@H](C(=O)N1CC2=C(C1)C(=N[NH]2)NC(=O)C3=CC=C(C=C3)N4CCN(C)CC4)C5=CC=CC=C5	CO[C@@H](C(=O)N1CC2=C(C1)C(=N[NH]2)NC(=O)C3=CC=C(C=C3)N4CC[NH+](C)CC4)C5=CC=CC=C5	2.5	3.15	6.1	6.55	25	15.17			0.40	0.50	0.79	0.82	1.40	1.18		
330	CCOC1=CC=C(CC2=CC(=CC=C2Cl)C3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C1	CCOC1=CC=C(CC2=C(Cl)C=CC(=C2)[C@H]3O[C@@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C1	1.7	1.35	3	3.48	12.2	8.27	0.09	0.07	0.23	0.13	0.48	0.54	1.09	0.92	-1.05	-1.14
331	NC1=CC=C(C=C1)[S](=O)(=O)C2=CC=C(N)C=C2	NC1=CC=C(C=C1)[S](=O)(=O)C2=CC=C(N)C=C2	0.83	0.90	0.48	0.96	22	10.64	0.25	0.22	0.08	-0.04	-0.32	-0.02	1.34	1.03	-0.60	-0.65
332	CCN(CC)CCN(CC1=CC=C(C=C1)C2=CC=C(C=C2)C(F)(F)F)C(=O)CN3C4=C(CCC4)C(=O)N=C3SCC5=CC=C(F)C=C5	CC[NH+](CC)CCN(CC1=CC=C(C=C1)C2=CC=C(C=C2)C(F)(F)F)C(=O)CN3C(=NC(=O)C4=C3CCC4)SCC5=CC=C(F)C=C5	11.9	9.44	4.11	4.34	40.9	32.60			1.08	0.98	0.61	0.64	1.61	1.51		
333	NC(=O)C([C@@H]1CCN(CCC2=CC=C3OCCC3=C2)C1)(C4=CC=CC=C4)C5=CC=CC=C5	NC(=O)C([C@@H]1CC[NH+](CCC2=CC3=C(OCC3)C=C2)C1)(C4=CC=CC=C4)C5=CC=CC=C5	2.6	2.06	12	8.23	3.6	5.46	0.02	0.02	0.41	0.31	1.08	0.92	0.56	0.74	-1.70	-1.61
334	CC(C)CN(C[C@@H](O)[C@H](CC1=CC=CC=C1)N(=O)O[C@H]2CO[C@H]3OCC[C@@H]23)[S](=O)(=O)C4=CC=C(N)C=C4	CC(C)CN(C[C@@H](O)[C@H](CC1=CC=CC=C1)NC(=O)O[C@H]2CO[C@H]3OCC[C@@H]23)[S](=O)(=O)C4=CC=C(N)C=C4			7.81	6.76	15	9.22	0.05	0.06			0.89	0.83	1.18	0.96	-1.30	-1.25
335	COC1=C(C=C(C=C1C(C)(C)C)N2C=CC(=O)NC2=O)C3=CC=C4C=C(N[S](C)(=O)=O)C=CC4=C3	COC1=C(C=C(C=C1C1=CC3=CC=C(N[S](C)(=O)=O)C=C3C=C2)N4C=CC(=O)NC4=O)C(C)(C)C	2.13	1.69			5.7	6.79	0.005	0.01	0.33	0.23			0.76	0.83	-2.30	-2.05
336	COC1=C2C(=O)C3=C(O)C4=C(C[C@](O)(C[C@@H]4O[C@H]5C[C@H](N)[C@H](O)[C@H](C)O5)C(C)=O)C(=C3C(=O)C2=CC=C1)O	COC1=C2C(=O)C3=C(C(=C4C[C@@](O)(C[C@H](O[C@H]5C[C@H](C)[NH3+])[C@H](O)[C@H](C)O5)C4=C3O)C(C)=O)O)C(=O)C2=CC=C1	32.05	38.61	47.57	28.94	14.24	14.29	0.06	0.09	1.51	1.59	1.68	1.46	1.15	1.16	-1.22	-1.07
337	CC(C)NC[C@@H](O)COC1=C(C)C(=C(O)C(=C1)C)C	CC(C)[NH2+]C[C@@H](O)COC1=C(C)C(=C(O)C(=C1)C)C	3.6	2.86	16.2	14.10	3.1	3.20			0.56	0.46	1.21	1.15	0.49	0.51		
338	NC1=NC(=O)N(C=N1)[C@H]2C[C@H](O)[C@@H](CO)O2	NC1=NC(=O)N(C=N1)[C@H]2C[C@H](O)[C@@H](CO)O2	4.6	1.88	130	37.04	0.58	1.02	1	0.87	0.66	0.27	2.11	1.57	-0.24	0.01	0.00	-0.06
339	OC(=O)C1=CC=C(C=C1)[N]2N=C(N=C2C3=CC=CC=C3O)C4=CC=CC=C4O	OC1=C(C=CC=C1)C2=N[N](C3=CC=C(C=C3)C([O-])=O)C(=N2)C4=C(O)C=CC=C4	0.2	0.17	0.84	0.79	4.05	4.28	0.004	0.01	0.70	-0.76	-0.08	-0.10	0.61	0.63	-2.40	-2.25
340	C[C@@]1(COC(=O)CCC(O)=O)[C@@H](CC[C@]2(C)[C@@H]1CCC(=C)[C@H]2C=CC3=CCOC3=O)OC(=O)CCC(O)=O	C[C@@]1(COC(=O)CCC([O-])=O)[C@@H](CC[C@]2(C)[C@@H]1CCC(=C)[C@H]2\C=C\C3=CCOC3=O)OC(=O)CCC([O-])=O	0.13	0.16	2	2.43	1.9	2.30			0.89	-0.79	0.30	0.39	0.28	0.36		
341	NC1=NC(=C(F)C=C1F)N2C=C(C(O)=O)C(=O)C3=CC(=C(N4CC(O)C4)C(=C23)Cl)F	NC1=C(F)C=C(F)C(=N1)N2C=C(C([O-])=O)C(=O)C3=C2C(=C(N4CC(O)C4)C(=C3)F)Cl	0.35	0.44	2.33	2.24	2.1	3.19	0.16	0.10	0.46	-0.36	0.37	0.35	0.32	0.50	-0.80	-0.99
342	ClC1=CC=C2NC(=O)CN=C(C3=CC=CC=C3Cl)C2=C1	ClC1=CC2=C(NC(=O)CN=C2C3=C(Cl)C=CC=C3)C=C1	2.2	2.20	0.17	0.19	200	72.05	0.051	0.03	0.34	0.34	-0.77	-0.72	2.30	1.86	-1.29	-1.52
343	CN(C)[C@H]1[C@@H]2C[C@@H]3[C@H](O)C4=C(Cl)C=CC(=C4C(=O)C3=C(O)[C@]2(O)C(=O)C(=C1O)C(N)=O)O	C[NH+](C)[C@H]1[C@@H]2C[C@@H]3[C@H](O)C4=C(C(=CC=C4Cl)O)C(=O)C3=C([O-])[C@]2(O)C(=O)C(=C1[O-])C(N)=O	1.3	0.90	1.1	1.28	12	8.99	0.59	0.21	0.11	-0.05	0.04	0.11	1.08	0.95	-0.23	-0.68
344	CCC(CC)COC(C(=O)OCCN(C)C)(C1=CC=CC=C1)C2=CC=CC=C2	CCC(CC)COC(C(=O)OCC[NH+](C)C)(C1=CC=CC=C1)C2=CC=CC=C2	7.1	5.64	5.7	6.13	34	21.42			0.85	0.75	0.76	0.79	1.53	1.33		
345	NC1=NC(=O)N(C=C1F)[C@H]2C[C@H](O)[C@@H](CO)O2	NC1=NC(=O)N(C=C1F)[C@H]2C[C@H](O)[C@H](CO)O2	0.91	1.67	5.09	6.99	0.78	1.10			0.04	0.22	0.71	0.84	-0.11	0.04		

346	CN(C)CCO[C@@]1(C[C@H]2CC[C@]1(C)C2(C)C)C3=CC=CC=C3	C[NH+](C)CCO[C@@]1(C[C@H]2CC[C@]1(C)C2(C)C)C3=CC=CC=C3	7.7	6.12	4.88	7.71	26.6	15.35	0.05	0.06	0.89	0.79	0.69	0.89	1.42	1.19	-1.30	-1.19
347	COC(=O)O[C@@]12CO[C@@H]1C[C@H](O)[C@]3(C)[C@@H]2[C@H](OC(=O)C4=CC=CC=C4)[C@]5(O)C[C@H](OC(=O)[C@H](O)[C@@H](NC(=O)C6=CC=CC=C6)C7=CC=CC=C7)C(=C([C@@H](OC(C)=O)C3=O)C5(C)C)C	COC(=O)O[C@@]12CO[C@@H]1C[C@H](O)[C@@]3(C)[C@@H]2[C@H](OC(=O)C4=CC=CC=C4)[C@@]5(O)C[C@H](OC(=O)[C@H](O)[C@@H](NC(=O)C6=CC=CC=C6)C7=CC=CC=C7)C(=C([C@@H](OC(C)=O)C3=O)C5(C)C)C	6.9	5.48	8.6	6.35	31	20.16			0.84	0.74	0.93	0.80	1.49	1.30		
348	CC(=O)N(O)CCCCCNC(=O)CCC(=O)N(O)CCCCCNC(=O)CCC(=O)N(O)CCCCCN	CC(=O)N([O-])CCCCCNC(=O)CCC(=O)N([O-])CCCCCNC(=O)CCC(=O)N([O-])CCCCC[NH3+]	1.35	1.07	8.33	6.22	3.05	2.97			0.13	0.03	0.92	0.79	0.48	0.47		
349	CNCCCN1C2=CC=CC=C2CCC3=CC=CC=C13	C[NH2+]CCCN1C2=C(CCC3=C1C=CC=C3)C=CC=C2	15	7.23	11	10.44	22	20.05	0.16	0.19	1.18	0.86	1.04	1.02	1.34	1.30	-0.80	-0.72
350	ClC1=CC=C2NC(=O)CN=C(C3=CC=CC=C3)C2=C1	ClC1=CC2=C(NC(=O)CN=C2C3=CC=CC=C3)C=C1	0.45	1.54	0.12	0.20	46	30.12	0.03	0.04	0.35	0.19	-0.92	-0.70	1.66	1.48	-1.52	-1.37
351	CN(C)C[C@H](C1=CC=C(O)C=C1)C2(O)CCCCC2	C[NH+](C)C[C@H](C1=CC=C(O)C=C1)C2(O)CCCCC2	3.5	3.09	4.9	6.82	8.4	6.61	0.7	0.64	0.54	0.49	0.69	0.83	0.92	0.82	-0.15	-0.19
352	C[C@@H]1C[C@H]2[C@@H]3CCC4=CC(=O)C=C[C@]4(C)[C@@]3(F)[C@@H](O)C[C@]2(C)[C@@]1(O)C(=O)CO	C[C@@H]1C[C@@H]2[C@H]3CCC4=CC(=O)C=C[C@]4(C)[C@@]3(F)[C@@H](O)C[C@]2(C)[C@@]1(O)C(=O)CO	0.94	0.86	3.3	4.03	3.7	4.01	0.32	0.24	0.03	-0.07	0.52	0.61	0.57	0.60	-0.49	-0.62
353	CCCCCCC(C)(C)C1=CC(=C2[C@H]3CC(=CC[C@@H]3C(C)(C)OC2=C1)CO)O	CCCCCCC(C)(C)C1=CC2=C([C@H]3CC(=CC[C@@H]3C(C)(C)O2)CO)C(=C1)O	5.06	4.02	21.38	11.66	7.33	9.97			0.70	0.60	1.33	1.07	0.87	1.00		
354	CCN[C@@H](C)CC1=CC=CC(=C1)C(F)(F)F	CC[NH2+][C@@H](C)CC1=CC(=CC=C1)C(F)(F)F	11	8.74	11	8.21	14	8.94	0.66	0.45	1.04	0.94	1.04	0.91	1.15	0.95	-0.18	-0.35
355	CCCCCN(CCCOC)C(=O)[C@@H](CCC(O)=O)NC(=O)C1=CC=C(Cl)C(=C1)Cl	CCCCCN(CCCOC)C(=O)[C@@H](CCC([O-])=O)NC(=O)C1=CC(=C(Cl)C=C1)Cl	0.18	0.31	3.7	3.11	1.2	2.02	0.024	0.05	0.74	-0.51	0.57	0.49	0.08	0.31	-1.62	-1.35
356	C[C@H](C1=C[NH]C=N1)C2=CC=CC(=C2C)C	C[C@H](C1=C[NH]C=N1)C2=C(C)C(=CC=C2)C	1.6	1.72	11	7.68	2.2	3.52	0.06	0.07	0.20	0.24	1.04	0.89	0.34	0.55	-1.22	-1.16
357	COC(=O)[C@@H]([C@H]1CCCCN1)C2=CC=CC=C2	COC(=O)[C@@H]([C@H]1CCCC[NH2+]1)C2=CC=CC=C2	2.65	2.64	6.67	5.49	8	6.20	0.87	0.70	0.42	0.42	0.82	0.74	0.90	0.79	-0.06	-0.15
358	COC(=O)C1=C(C)NC(=C([C@@H]1C2=CC=CC=C2)[N](=O)=O)C(=O)OCCCN3CCC(CC3)(C4=CC=CC=C4)C5=CC=CC=C5)C	COC(=O)C1=C(C)NC(=C([C@@H]1C2=CC(=CC=C2)[N+]([O-])=O)C(=O)OCCC[NH+]3CCC(CC3)(C4=CC=CC=C4)C5=CC=CC=C5)C	8.4	6.67	9.3	8.67	22	14.91			0.92	0.82	0.97	0.94	1.34	1.17		
359	C[C@@H](CN1CC(=O)NC(=O)C1)N2CC(=O)NC(=O)C2	C[C@@H](C[NH+]1CC(=O)NC(=O)C1)[NH+]2CC(=O)NC(=O)C2	0.55	0.69	3.1	3.52	2.5	2.90	1	0.85	0.26	-0.16	0.49	0.55	0.40	0.46	0.00	-0.07
360	C[C@H](CN1CCOCC1)C(C(=O)N2CCCC2)(C3=CC=CC=C3)C4=CC=CC=C4	C[C@H](C[NH+]1CCOCC1)C(C(=O)N2CCCC2)(C3=CC=CC=C3)C4=CC=CC=C4	0.47	0.59	2.19	3.47	3.18	4.46			0.33	-0.23	0.34	0.54	0.50	0.65		
361	C[C@@]12CCCCC[C@@H](CC3=C1C=C(O)C=C3)[C@@H]2N	C[C@]12CCCCC[C@@H](CC3=C1C=C(O)C=C3)[C@@H]2[NH3+]	5.6	4.45	27.5	22.56	3.9	5.64	0.08	0.15	0.75	0.65	1.44	1.35	0.59	0.75	-1.10	-0.84
362	CC(=O)NC1=C(I)C(=C(I)C(=C1I)C(O)=O)NC(C)=O	CC(=O)NC1=C(I)C(=C(I)C(=C1I)NC(C)=O)C([O-])=O	0.26	0.32	1.7	1.70	1.8	2.03	1	0.31	0.59	-0.49	0.23	0.23	0.26	0.31	0.00	-0.51
363	CN1C(=O)CN=C(C2=CC=CC=C2)C3=CC(=CC=C13)Cl	CN1C(=O)CN=C(C2=CC=CC=C2)C3=C1C=CC(=C3)Cl	1	1.22	0.38	0.57	42	20.31	0.023	0.03	0.00	0.09	-0.42	-0.24	1.62	1.31	-1.64	-1.46
364	CC1=N[S](=O)(=O)C2=CC(=CC=C2N1)Cl	CC1=N[S](=O)(=O)C2=C(N1)C=CC(=C2)Cl	0.21	0.26	0.06	0.25	48	20.99	0.06	0.09	0.68	-0.58	-1.22	-0.60	1.68	1.32	-1.22	-1.06
365	NC[C@@H]1CC[C@@H](N)[C@H](O1)O[C@@H]2[C@@H](N)C[C@@H](N)[C@H](O[C@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](N)[C@H]3O)[C@H]2O	[NH3+]C[C@@H]1CC[C@@H]([NH3+])[C@H](O1)O[C@@H]2[C@@H]([NH3+])C[C@@H]([NH3+])[C@H](O[C@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]([NH3+])[C@H]3O)[C@H]2O	0.13	0.16	0.8	0.95	2.4	2.57			0.89	-0.79	-0.10	-0.02	0.38	0.41		
366	OC(=O)C(Cl)Cl	[O-]C(=O)C(Cl)Cl	0.19	0.24	5.3	3.78	0.65	1.06			0.72	-0.62	0.72	0.58	-0.19	0.03		
367	OC(=O)CC1=CC=CC=C1NC2=C(Cl)C=CC=C2Cl	[O-]C(=O)CC1=C(NC2=C(Cl)C=CC=C2Cl)C=CC=C1	0.22	0.25	3.5	2.00	1.4	2.34	0.005	0.01	0.66	-0.60	0.54	0.30	0.15	0.37	-2.30	-2.20
368	CC1=C(C(=O)N[C@H]2[C@H]3SC(C)(C)[C@@H](N3C2=O)C(O)=O)C(=NO1)C4=C(Cl)C=CC=C4Cl	CC1=C(C(=O)N[C@H]2[C@@H]3SC(C)(C)[C@@H](N3C2=O)C([O-])=O)C(=NO1)C4=C(Cl)C=CC=C4Cl	0.11	0.26	2	2.19	0.88	1.06	0.033	0.04	0.96	-0.58	0.30	0.34	-0.06	0.02	-1.48	-1.43
369	OC[C@@H]1CC[C@@H](O1)[N]2C=NC3=C2N=CNC3=O	OC[C@@H]1CC[C@@H](O1)[N]2C=NC3=C2N=CNC3=O	0.77	1.09	11	9.23	1.4	1.86	0.95	0.90	0.11	0.04	1.04	0.97	0.15	0.27	-0.02	-0.04

370	C[C@]12CCC3=C4CCC(=O)C=C4CC[C@H]3[C@@H]1CC[C@@]2(O)CC#N	C[C@]12CCC3=C4CCC(=O)C=C4CC[C@H]3[C@@H]1CC[C@@]2(O)CC#N	0.6	1.08	1.29	2.30	11	5.90	0.1	0.10	0.22	0.03	0.11	0.36	1.04	0.77	-1.00	-1.01
371	CC[C@@]1(O)CC(=O)OCC2=C1C=C3N(CC4=C3N=C5C=C(F)C(=CC5=C4)F)C2=O	CC[C@]1(O)CC(=O)OCC2=C1C=C3N(CC4=C3N=C5C=C(F)C(=CC5=C4)F)C2=O	1.42	1.13	8.42	5.93	3.1	4.36	0.13	0.07	0.15	0.05	0.93	0.77	0.49	0.64	-0.90	-1.13
372	OC(=O)C1=CC(=CC=C1O)C2=CC=C(F)C=C2F	OC1=C(C=C(C=C1)C2=C(F)C=C(F)C=C2)C([O-])=O	0.097	0.12	0.1	0.26	10	7.35	0.0016	0.0039	1.01	-0.91	-1.00	-0.59	1.00	0.87	-2.80	-2.40
373	C[C@H]1O[C@H](C[C@H](O)[C@@H]1O)O[C@H]2[C@@H](O)C[C@@H](O[C@@H]2C)O[C@H]3[C@@H](O)C[C@@H](O[C@@H]3C)O[C@H]4CC[C@@]5(C)[C@H](CC[C@@H]6[C@@H]5CC[C@]7(C)[C@H](CC[C@]67O)C8=CC(=O)OC8)C4	C[C@H]1O[C@H](C[C@H](O)[C@@H]1O)O[C@H]2[C@@H](O)C[C@@H](O[C@@H]2C)O[C@H]3[C@@H](O)C[C@@H](O[C@@H]3C)O[C@H]4CC[C@@]5(C)[C@H](CC[C@@H]6[C@H]5CC[C@]7(C)[C@H](CC[C@]67O)C8=CC(=O)OC8)C4	0.44	0.55	0.043	0.21	180	67.27	0.066	0.09	0.36	-0.26	-1.37	-0.68	2.26	1.83	-1.18	-1.03
374	C[C@H]1O[C@H](C[C@H](O)[C@@H]1O)O[C@H]2[C@@H](O)C[C@@H](O[C@@H]2C)O[C@H]3[C@@H](O)C[C@@H](O[C@@H]3C)O[C@H]4CC[C@@]5(C)[C@H](CC[C@@H]6[C@@H]5C[C@@H](O)[C@]7(C)[C@H](CC[C@]67O)C8=CC(=O)OC8)C4	C[C@H]1O[C@H](C[C@H](O)[C@@H]1O)O[C@H]2[C@@H](O)C[C@@H](O[C@@H]2C)O[C@H]3[C@@H](O)C[C@@H](O[C@@H]3C)O[C@H]4CC[C@@]5(C)[C@H](CC[C@@H]6[C@H]5C[C@@H](O)[C@]7(C)[C@H](CC[C@]67O)C8=CC(=O)OC8)C4	4.1	1.62	1.7	0.92	38	26.79	0.7	0.25	0.61	0.21	0.23	-0.04	1.58	1.43	-0.15	-0.61
375	COC1=C2O[C@H]3[C@@H](O)CC[C@H]4[C@H]5CC(=C2[C@@]34CCN5C)C=C1	COC1=C2O[C@H]3[C@@H](O)CC[C@H]4[C@H]5CC(=C2[C@@]34CC[NH+]5C)C=C1	1.07	1.77	4.21	6.22	3.42	4.93			0.03	0.25	0.62	0.79	0.53	0.69		
376	CC(C)C[C@@H]1N2C(=O)[C@](C)(NC(=O)[C@@H]3C[C@H]4[C@@H](CC5=C[NH]C6=C5C4=CC=C6)N(C)C3)O[C@@]2(O)[C@@H]7CCCN7C1=O	CC(C)C[C@@H]1N2C(=O)[C@](C)(NC(=O)[C@@H]3C[C@H]4[C@@H](CC5=C[NH]C6=C5C4=CC=C6)[NH+](C)C3)O[C@]2(O)[C@@H]7CCCN7C1=O	4.02	3.20	12.85	8.98	8.84	6.58			0.60	0.50	1.11	0.95	0.95	0.82		
377	CN1C[C@@H](C[C@H]2[C@H]1CC3=C[NH]C4=CC=CC2=C34)C(=O)N[C@]5(C)O[C@]6(O)[C@@H]7CCCN7C(=O)[C@H](CC8=CC=CC=C8)N6C5=O	C[NH+]1C[C@@H](C[C@@H]2[C@H]1CC3=C[NH]C4=C3C2=CC=C4)C(=O)N[C@]5(C)O[C@@]6(O)[C@H]7CCCN7C(=O)[C@H](CC8=CC=CC=C8)N6C5=O	0.33	1.29	15.07	11.33	0.55	1.31	0.07	0.06	0.48	0.11	1.18	1.05	-0.26	0.12	-1.15	-1.22
378	CC[C@H]1CN2CC[C@H]1C[C@@H]2[C@@H](O)C3=CC=NC4=CC=C(OC)C=C34	CC[C@H]1C[NH+]2CC[C@H]1C[C@@H]2[C@@H](O)C3=C4C=C(OC)C=CC4=NC=C3	2.8	4.18	4.2	4.71	5.7	7.01	0.22	0.23	0.45	0.62	0.62	0.67	0.76	0.85	-0.66	-0.63
379	C[C@H](CCC1=CC=CC=C1)NC[C@H](O)C2=CC=C(O)C(=C2)C(N)=O	C[C@H](CCC1=CC=CC=C1)[NH2+]C[C@H](O)C2=CC(=C(O)C=C2)C(N)=O	4.8	2.68	29	19.75	3.3	5.95			0.68	0.43	1.46	1.30	0.52	0.77		
380	COC1=CC=C(C=C1)[C@@H]2SC3=CC=CC=C3N(CCN(C)C)C(=O)[C@@H]2OC(C)=O	COC1=CC=C(C=C1)[C@@H]2SC3=C(C=CC=C3)N(CC[NH+](C)C)C(=O)[C@@H]2OC(C)=O	4.1	3.26	13	9.14	5.6	6.07	0.18	0.12	0.61	0.51	1.11	0.96	0.75	0.78	-0.74	-0.92
381	C[C@H](C1=CC=CC=N1)C2=C(CCN(C)C)CC3=C2C=CC=C3	C[C@H](C1=NC=CC=C1)C2=C(CC[NH+](C)C)CC3=C2C=CC=C3	2.16	3.57	4.83	5.55	4.6	6.63			0.33	0.55	0.68	0.74	0.66	0.82		
382	CCC1=C2N=C(C=C(NCC3=C[N](=CC=C3)=O)[N]2N=C1)N4CCCC[C@H]4CCO	CCC1=C2N=C(C=C(NCC3=C[N+](=CC=C3)[O-])[N]2N=C1)N4CCCC[C@@H]4CCO	0.32	0.40	4.65	4.79	2.1	3.08			0.49	-0.39	0.67	0.68	0.32	0.49		
383	CN(C)CCOC(C1=CC=CC=C1)C2=CC=CC=C2	C[NH+](C)CCOC(C1=CC=CC=C1)C2=CC=CC=C2	6.5	3.83	9.8	8.95	9.3	7.99	0.19	0.16	0.81	0.58	0.99	0.95	0.97	0.90	-0.72	-0.80
384	CCC(C)(C)NCC(O)COC1=CC=CC=C1C(=O)CC2=CC=CC=C2	CCC(C)(C)[NH2+]C[C@@H](O)COC1=C(C=CC=C1)C(=O)CCC2=CC=CC=C2	1.2	1.51	11	9.34	1.5	2.37	0.017	0.03	0.08	0.18	1.04	0.97	0.18	0.37	-1.77	-1.54
385	CN1C(=O)N(C)C2=C([N](CC(O)CO)C=N2)C1=O	CN1C(=O)N(C)C2=C([N](C[C@H](O)CO)C=N2)C1=O	0.42	0.53	4.8	4.74	1.7	2.67			0.38	-0.28	0.68	0.68	0.23	0.43		
386	OCCN(CCO)C1=NC2=C(N=C(N=C2N3CCCCC3)N(CCO)CCO)C(=N1)N4CCCCC4	OCCN(CCO)C1=NC2=C(N=C(N=C2C(=N1)N3CCCCC3)N(CCO)CCO)N4CCCCC4	0.82	0.92	2	2.60	13	11.15	0.009	0.03	0.09	-0.04	0.30	0.41	1.11	1.05	-2.05	-1.50
387	CC(C)N(CCC(C(N)=O)(C1=CC=CC=C1)C2=CC=CC=N2)C(C)C	CC(C)[NH+](CC[C@](C(N)=O)(C1=CC=CC=C1)C2=NC=CC=C2)C(C)C	0.52	0.65	0.9	1.84	7	6.75	0.16	0.20	0.28	-0.18	-0.05	0.26	0.85	0.83	-0.80	-0.71
388	CN(CCCCCCN(C)C(=O)OC1=C[N+](=CC=C1)C)C(=O)OC2=C[N+](=CC=C2)C	CN(CCCCCCN(C)C(=O)OC1=C[N+](=CC=C1)C)C(=O)OC2=C[N+](=CC=C2)C	1	1.22	0.2	0.72	59.8	23.34			0.00	0.09	-0.70	-0.14	1.78	1.37		
389	[Na+].[Na+].CC(C)(C)[N+]([O-])=CC1=C(C=C(C=C1)[S]([O-])(=O)=O)[S]([O-])(=O)=O	CC(C)(C)\[N+]([O-])=C/C1=C(C=C(C=C1)[S]([O-])(=O)=O)[S]([O-])(=O)=O	0.18	0.23	1.35	1.47	3.6	3.39	0.6	0.30	0.74	-0.64	0.13	0.17	0.56	0.53	-0.22	-0.52
390	CC(CN1CCN(CCOCCO)CC1)CN2C3=CC=CC=C3SC4=C2C=CC=C4	C[C@@H](CN1C2=C(SC3=C1C=CC=C3)C=CC=C2)C[NH+]4CC[NH+](CCOCCO)CC4	4.06	5.11	16.27	11.65	3.11	4.57			0.61	0.71	1.21	1.07	0.49	0.66		
391	OC1=CC(=C(O)C=C1)[S](O)(=O)=O	OC1=CC(=C(O)C=C1)[S]([O-])(=O)=O	0.12	0.15	0.87	1.59	2.01	2.05			0.92	-0.82	-0.06	0.20	0.30	0.31		

392	C[C@H](CCC1=CC=C(O)C=C1)NCCC2=CC=C(O)C(=C2)O	C[C@H](CCC1=CC=C(O)C=C1)[NH2+]CCC2=CC(=C(O)C=C2)O			115	55.30						2.06	1.74					
393	CC(=O)O[C@@]12CO[C@@H]1C[C@H](O)[C@]3(C)[C@@H]2[C@H](OC(=O)C4=CC=CC=C4)[C@]5(O)C[C@H](OC(=O)[C@H](O)[C@@H](NC(=O)OC(C)(C)C)C6=CC=CC=C6)C(C)(C)C5=C([C@@H](O)C3=O)C5(C)C	CC(=O)O[C@@]12CO[C@@H]1C[C@H](O)[C@@]3(C)[C@@H]2[C@H](OC(=O)C4=CC=CC=C4)[C@]5(O)C[C@H](OC(=O)[C@H](O)[C@@H](NC(=O)OC(C)(C)C)C6=CC=CC=C6)C(=C([C@@H](O)C3=O)C5(C)C)C	2.1	2.64	14	10.28	11	13.91	0.04	0.06	0.32	0.42	1.15	1.01	1.04	1.14	-1.40	-1.24
394	CN(CCOC1=CC=C(N[S](C)(=O)=O)C=C1)CCC2=CC=C(N[S](C)(=O)=O)C=C2	C[NH+](CCOC1=CC=C(N[S](C)(=O)=O)C=C1)CCC2=CC=C(N[S](C)(=O)=O)C=C2	3.3	2.62	5.2	5.62	8.1	6.84	0.36	0.24	0.52	0.42	0.72	0.75	0.91	0.83	-0.44	-0.62
395	O=C1CN2[C@@H]3CC(C[C@H]2CC1C3)OC(=O)C4=C[NH]C5=CC=CC=C45	O=C1C[NH+]2[C@@H]3CC(C[C@H]2CC1C3)OC(=O)C4=C[NH]C5=C4C=CC=C5	2	2.52	180	64.90	0.13	0.49	0.49	0.35	0.30	0.40	2.26	1.81	-0.89	-0.31	-0.31	-0.45
396	ClC1=CC=C2N(C3CCN(CCCN4C(=O)NC5=CC=CC=C45)CC3)C(=O)NC2=C1	ClC1=CC2=C(C=C1)N(C3CC[NH+](CCCN4C(=O)NC5=C4C=CC=C5)CC3)C(=O)N2	3.4	2.70	9.5	7.03	7.5	6.81	0.082	0.06	0.53	0.43	0.98	0.85	0.88	0.83	-1.09	-1.24
397	NCCC1=CC(=C(O)C=C1)O	[NH3+]CCC1=CC(=C(O)C=C1)O	0.74	0.93	65.9	32.24	0.42	0.90	0.87	0.83	0.13	-0.03	1.82	1.51	-0.38	-0.04	-0.06	-0.08
398	C[C@H](O)[C@H]1C2[C@H](C)C(=C(N2C1=O)C(O)=O)S[C@H]3CN[C@H](CN[S](N)(=O)=O)C3	C[C@H](O)[C@H]1[C@H]2[C@H](C)C(=C(N2C1=O)C([O-])=O)S[C@H]3C[NH2+][C@H](CN[S](N)(=O)=O)C3	0.23	0.29	3.26	2.88	1.2	1.68	0.92	0.78	0.64	-0.54	0.51	0.46	0.08	0.23	-0.04	-0.11
399	CCN1CC(CCN2CCOCC2)C(C1=O)(C3=CC=CC=C3)C4=CC=CC=C4	CCN1C[C@@H](CC[NH+]2CCOCC2)C(C1=O)(C3=CC=CC=C3)C4=CC=CC=C4	1.2	1.46	5.3	5.31	4.1	4.86			0.08	0.16	0.72	0.72	0.61	0.69		
400	COC1=CC2=NC(=NC(=C2C=C1OC)N)N3CCN(CC3)C(=O)C4COC5=CC=CC=C5O4	COC1=C(OC)C=C2C(=NC(=NC2=C1)N3CCN(CC3)C(=O)[C@H]4COC5=C(O4)C=CC=C5)N	1.3	0.93	1.6	1.94	10	7.71	0.017	0.03	0.11	-0.03	0.20	0.29	1.00	0.89	-1.77	-1.55
401	CN(C)CCC=C1C2=CC=CC=C2COC3=CC=CC=C13	C[NH+](C)CC\C=C1\C2=C(COC3=C1C=CC=C3)C=CC=C2	12	6.79	14	12.07	15	11.56	0.2	0.17	1.08	0.83	1.15	1.08	1.18	1.06	-0.70	-0.76
402	C[C@H]1O[C@H]([C@H](O)[C@@H]1O)N2C=C(F)C(=O)NC2=O	C[C@H]1O[C@H]([C@H](O)[C@@H]1O)N2C=C(F)C(=O)NC2=O	0.28	0.35	11	7.01	0.35	0.73	0.61	0.70	0.55	-0.45	1.04	0.85	-0.46	-0.14	-0.21	-0.15
403	CN1C(=O)N(C)C2=C([N](CC3OCCO3)C=N2)C1=O	CN1C(=O)N(C)C2=C([N](CC3OCCO3)C=N2)C1=O	1.03	0.85	6.83	6.59	1.66	2.11			0.01	-0.07	0.83	0.82	0.22	0.32		
404	COC1=CC=CC2=C1C(=O)C3=C(O)C4=C(C[C@](O)(C[C@@H]4O[C@H]5C[C@H](N)[C@H](O)[C@H](C)O5)C(=O)CO)C(=C3C2=O)O	COC1=C2C(=O)C3=C(C(=C4C[C@](O)(C[C@H](O[C@H]5C[C@H]([NH3+])[C@H](O)[C@H](C)O5)C4=C3O)C(=O)CO)O)C(=O)C2=CC=C1	22	27.67	15	18.59	32	22.98	0.28	0.19	1.34	1.44	1.18	1.27	1.51	1.36	-0.55	-0.72
405	C[C@@H]1[C@H]2[C@H](O)[C@H]3[C@H](N(C)C)C(=C(C(N)=O)C(=O)[C@@]3(O)C(=C2C(=O)C4=C(O)C=CC=C14)O)O	C[C@H]1[C@H]2[C@H](O)[C@@H]3[C@H]([NH+](C)C)C(=C(C(N)=O)C(=O)[C@@]3(O)C(=C2C(=O)C4=C1C=CC=C4O)[O-])[O-]	0.69	0.87	0.46	0.82	14	11.36	0.12	0.19	0.16	-0.06	-0.34	-0.09	1.15	1.06	-0.92	-0.73
406	CCCCCCCCOCCOC(=O)CN(CC(O)=O)C1=CC=CC=C1OCCOC2=CC=CC=C2N(CC(O)=O)CC(=O)OCCCCCCCCCCC	CCCCCCCCOCCOC(=O)CN(CC([O-])=O)C1=C(OCCOC2=C(C=CC=C2)N(CC([O-])=O)CC(=O)OCCCCCCCCCCC)C=CC=C1	1.1	0.90	14	8.19	3.5	3.30			0.04	-0.04	1.15	0.91	0.54	0.52		
407	CON=C(C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C([O-])=O)C[N+]3=CC=C(C=C3)C4=CN=CO4)C5=CSC(=N5)N	CO\N=C(\C(=O)N[C@H]1[C@@H]2SCC(=C(N2C1=O)C([O-])=O)C[N+]3=CC=C(C=C3)C4=CN=CO4)C5=CSC(=N5)N	0.22	0.28	1.76	2.02	1.78	2.60			0.66	-0.56	0.25	0.30	0.25	0.42		
408	CCCCN(CCCC)CCCOC1=CC=C(C=C1)C(=O)C2=C(CCCC)OC3=C2C=C(N[S](C)(=O)=O)C=C3	CCCC[NH+](CCCC)CCCOC1=CC=C(C=C1)C(=O)C2=C(CCCC)OC3=C2C=C(N[S](C)(=O)=O)C=C3	20	15.89	33.33	15.06	16	10.92	0.02	0.01	1.30	1.20	1.52	1.18	1.20	1.04	-1.70	-1.84
409	FC1=CC=C(C=C1)C(=O)CCCN2CCC(=CC2)N3C(=O)NC4=C3C=CC=C4	FC1=CC=C(C=C1)C(=O)CCC[NH+]2CCC(=CC2)N3C(=O)NC4=C3C=CC=C4	1.41	1.78	8.92	6.67	1.9	3.47			0.15	0.25	0.95	0.82	0.28	0.54		
410	CCOC1=CC=C(C=C2NCCC3=CC(=C(OCC)C=C23)OCC)C=C1OCC	CCOC1=C(OCC)C=C(C=C1)\C=C2\NCCC3=C2C=C(OCC)C(=C3)OCC	1.9	1.51	3.5	4.62	9.3	8.90	0.12	0.07	0.28	0.18	0.54	0.66	0.97	0.95	-0.92	-1.13
411	CNCC[C@H](OC1=CC=CC2=C1C=CC=C2)C3=CC=CS3	C[NH2+]CC[C@H](OC1=C2C=CC=CC2=CC=C1)C3=CC=CS3			8.57	8.24	12	11.80	0.04	0.06			0.93	0.92	1.08	1.07	-1.40	-1.25
412	COC1=CC=CC2=C1[C@H](CO)N3[C@@H](C2)[C@H]4[C@H](C[C@@H]([C@H]3C#N)N4C)C(O)=O	COC1=C2[C@H](CO)[NH+]3[C@@H](CC2=CC=C1)[C@H]4[C@H](C[C@@H]([C@H]3C#N)[NH+]4C)C([O-])=O	0.23	0.29	3.06	3.58	1.52	2.06			0.64	-0.54	0.49	0.55	0.18	0.31		
413	CC(=N)N1CC[C@@H](C1)OC2=CC=C(C=C2)[C@H](CC3=CC=C4C=CC(=CC4=C3)C(N)=N)C(O)=O	CC(=[NH2+])N1CC[C@@H](C1)OC2=CC=C(C=C2)[C@@H](CC3=CC4=CC(=CC=C4C=C3)C(N)=[NH2+])C([O-])=O	1.55	1.45	1.86	2.18	24.02	12.84			0.19	0.16	0.27	0.34	1.38	1.11		

414	CC[C@H](O)[C@@H](C)[C@H]1O[C@@H]1C[C@@](C)(O)C=CC=C(C)[C@H]2OC(=O)C[C@H](O)CC[C@@](C)(O)[C@@H](OC(=O)N3CCN(CC3)C4CCCCC4)C=C[C@@H]2C	CC[C@H](O)[C@@H](C)[C@H]1O[C@@H]1C[C@@](C)(O)\C=C\C=C(\C)[C@H]2OC(=O)C[C@H](O)C[C@@](C)(O)[C@@H](OC(=O)N3CC[NH+](CC3)C4CCCCC4)\C=C/[C@@H]2C	10.1	8.02	47.9	18.52	9.2	9.09			1.00	0.90	1.68	1.27	0.96	0.96		
415	CC(C)[C@@H](C=C(C)C(O)=O)N(C)C(=O)[C@@H](NC(=O)[C@H]1CCCCN1C(C)C)C(C)(C)C	CC(C)[C@@H](\C=C(/C)C([O-])=O)N(C)C(=O)[C@@H](NC(=O)[C@H]1CCCC[NH+]1C(C)C)C(C)(C)C	1.26	1.00	0.97	1.57	17.5	8.99			0.10	0.00	-0.01	0.20	1.24	0.95		
416	CC1=NN(C(=O)C1)C2=CC=CC=C2	CC1=NN(C(=O)C1)C2=CC=CC=C2	0.23	0.46	1.42	1.89	2.36	3.35	0.89	0.63	0.64	-0.33	0.15	0.28	0.37	0.52	-0.05	-0.20
417	OCC(CO)NN1C(=O)C2=C(C1=O)C3=C([N]([C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O)C5=CC(=CC=C35)O)C6=C2C7=CC=C(O)C=C7[NH]6	OCC(CO)NN1C(=O)C2=C3C(=C4[N]([C@@H]5O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H]5O)C6=C(C=CC(=C6)O)C4=C2C1=O)[NH]C7=CC(=CC=C37)O	1.45	1.15	25.3	11.42	4.01	5.66			0.16	0.06	1.40	1.06	0.60	0.75		
418	CN1CCC2=C(C1)SC(=N2)C(=O)N[C@@H]3C[C@H](CC[C@@H]3NC(=O)C(=O)NC4=NC=C(Cl)C=C4)C(=O)N(C)C	CN(C)C(=O)[C@H]1CC[C@H](NC(=O)C(=O)NC2=NC=C(Cl)C=C2)[C@@H](C1)NC(=O)C3=NC4=C(C[NH+](C)CC4)S3	1.53	1.64	5.19	4.93	6.7	6.35	0.5	0.25	0.18	0.21	0.72	0.69	0.83	0.80	-0.30	-0.61
419	CC[N+](C)(C)C1=CC=CC(=C1)O	CC[N+](C)(C)C1=CC(=CC=C1)O	1.1	1.38	9.6	12.36	1.8	3.17			0.04	0.14	0.98	1.09	0.26	0.50		
420	CN1CCC[C@@H]1CC2=C[NH]C3=CC=C(CC[S](=O)(=O)C4=CC=CC=C4)C=C23	C[NH+]1CCC[C@@H]1CC2=C[NH]C3=C2C=C(CC[S](=O)(=O)C4=CC=CC=C4)C=C3	1.6	2.02	5.3	5.91	4.2	4.81	0.15	0.16	0.20	0.30	0.72	0.77	0.62	0.68	-0.82	-0.80
421	CCCCCCCC(=O)N[C@H](CN1CCCC1)[C@H](O)C2=CC=C3OCCOC3=C2	CCCCCCCC(=O)N[C@H](C[NH+]1CCCC1)[C@H](O)C2=CC3=C(OCCO3)C=C2			20.95	12.27	7.7	5.30	0.21	0.16			1.32	1.09	0.89	0.72	-0.68	-0.81
422	O=C1N(CCNCCCNCCN2C(=O)C3=C(C2=O)C4=CC=CC=C4C=C3)C(=O)C5=C1C=CC6=CC=CC=C56	O=C1N(CC[NH2+]CCC[NH2+]CCN2C(=O)C3=C(C2=O)C4=CC=CC=C4C=C3)C(=O)C5=C6C=CC=CC6=CC=C15	12	9.53	5.7	4.23	52.6	35.80			1.08	0.98	0.76	0.63	1.72	1.55		
423	CC(=O)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CC[C@@H]4C[C@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C	CC(=O)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CC[C@@H]4C[C@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C	2	1.59	22	12.45	4.7	5.65	0.01	0.02	0.30	0.20	1.34	1.10	0.67	0.75	-2.00	-1.71
424	C1CN(CCN1)C2=C3OCCOC3=CC=C2	C1CN(CC[NH2+]1)C2=C3OCCOC3=CC=C2	3.6	2.86	8	7.08	8.2	4.56			0.56	0.46	0.90	0.85	0.91	0.66		
425	C[C@H](N[C@@H](CCC1=CC=CC=C1)C(O)=O)C(=O)N2CCC[C@H]2C(O)=O	C[C@H]([NH2+][C@@H](CCC1=CC=CC=C1)C([O-])=O)C(=O)N2CCC[C@H]2C([O-])=O	0.38	0.48	1.6	1.83	39	13.49	0.62	0.49	0.42	-0.32	0.20	0.26	1.59	1.13	-0.21	-0.31
426	COC1=CC=C(C[C@H](NC(=O)CC(C)(C)N)C(=O)N[C@@H](CC2=C[NH]C=N2)C(=O)N[C@@H](CC3CCCCC3)[C@@H](O)[C@@H](O)CC(C)C)C=C1	COC1=CC=C(C[C@H](NC(=O)CC(C)(C)[NH3+])C(=O)N[C@@H](CC2=C[NH]C=N2)C(=O)N[C@@H](CC3CCCCC3)[C@@H](O)[C@@H](O)CC(C)C)C=C1	7.5	5.96	0.45	1.09	1.72	2.42	0.07	0.07	0.88	0.78	-0.35	0.04	0.24	0.38	-1.15	-1.16
427	COC1=CC=C(C=C1)C(=O)NC2=CC=CC=C2CCC3CCCCN3C	COC1=CC=C(C=C1)C(=O)NC2=C(CC[C@H]3CCCC[NH+]3C)C=CC=C2	2.2	2.77	13	9.71	2.6	3.95	0.26	0.18	0.34	0.44	1.11	0.99	0.41	0.60	-0.59	-0.73
428	NN=C1NN=C2CCN(CC2=C1)C(=O)C3=CC=CC=C3	N\N=C1\NN=C2CCN(CC2=C1)C(=O)C3=CC=CC=C3	2.2	1.75	13	10.00	5.6	3.47			0.34	0.24	1.11	1.00	0.75	0.54		
429	CC1=CC(=C(C=C1C(=O)NC(N)=N)[S](C)(=O)=O)[N]2C=CC=C2	CC1=C(C=C(C(=C1)[N]2C=CC=C2)[S](C)(=O)=O)C(=O)NC(N)=N	1.1	0.88	8.2	4.09	2.2	2.78			0.04	-0.05	0.91	0.61	0.34	0.44		
430	CCN1C=C(C(O)=O)C(=O)C2=CC(=C(N=C12)N3CCNCC3)F	CCN1C=C(C([O-])=O)C(=O)C2=C1N=C(N3CC[NH2+]CC3)C(=C2)F	2	1.55	5.4	4.03	5.1	5.54	0.8	0.70	0.30	0.19	0.73	0.60	0.71	0.74	-0.10	-0.16
431	CSC1=CC=C(C=C1)C(=O)C2=C(C)NC(=O)N2	CSC1=CC=C(C=C1)C(=O)C2=C(C)NC(=O)N2	1.48	1.18	19.1	8.96	1.94	2.97	0.3	0.22	0.17	0.07	1.28	0.95	0.29	0.47	-0.52	-0.65
432	CCCN1C(=O)NC(=O)C2=C1[NH]C=N2	CCCN1C(=O)NC(=O)C2=C1[NH]C=N2	0.63	0.82	4	3.65	1.8	2.27	0.55	0.64	0.20	-0.08	0.60	0.56	0.26	0.36	-0.26	-0.19
433	CCN(CC)C(=O)C(=CC1=CC(=C(O)C(=C1)[N](=O)=O)O)C#N	CCN(CC)C(=O)\C(=C/C1=CC(=C(O)C(=C1)O)[N+]([O-])=O)C#N	0.27	0.34	12	7.60	2.4	2.59	0.02	0.04	0.57	-0.47	1.08	0.88	0.38	0.41	-1.70	-1.40
434	CCOC1=CC(=CC(=C1[N]2C=CC=C2)OCC)CC3=C(N)N=C(N)N=C3	CCOC1=C([N]2C=CC=C2)C(=CC(=C1)CC3=C(N)N=C(N)N=C3)OCC	2.5	1.99	3.5	4.18	9.4	6.67	0.12	0.10	0.40	0.30	0.54	0.62	0.97	0.82	-0.92	-1.01
435	COC1=CC=CC2=C1C(=O)C3=C(O)C4=C(C[C@](O)(C[C@@H]4O[C@H]5C[C@H](N)[C@@H](O)[C@H](C)O5)C(=O)CO)C(=C3C2=O)O	COC1=C2C(=O)C3=C(C(=C4C[C@](O)(C[C@H](O[C@H]5C[C@@H]([NH3+])[C@@H](O)[C@H](C)O5)C4=C3O)C(=O)CO)O)C(=O)C2=CC=C1	45	29.98	20	19.57	36	21.66	0.25	0.17	1.65	1.48	1.30	1.29	1.56	1.34	-0.60	-0.76
436	CC(C)(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CC=C4C=C(CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C)C(O)=O	CC(C)(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CC=C4C=C(CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C)C([O-])=O	0.54	0.67	0.33	0.66	27	13.32	0.03	0.03	0.27	-0.17	-0.48	-0.18	1.43	1.12	-1.52	-1.58
437	CCCCC1=NC=C(C=C(CC2=CC=CS2)C(O)=O)	CCCCC1=NC=C(\C=C(/CC2=CC=CS2)C([O-	0.17	0.16	1.9	1.62	2.1	2.63	0.017	0.02	0.77	-0.79	0.28	0.21	0.32	0.42	-1.77	-1.76

	[N]1CC3=CC=C(C=C3)C(O)=O	])=O)[N]1CC3=CC=C(C=C3)C([O-])=O																
438	CCC#CC[C@H](C)[C@H](O)C#C[C@@H]1[C@H](O)C[C@@H]2CC(C[C@H]12)=CCOCCCC(O)=O	CCC#CC[C@H](C)[C@H](O)C#C[C@@H]1[C@H](O)C[C@@H]2C\C(C[C@H]12)=C/COCCCC([O-])=O	2.4	0.73	66.2	21.67	0.41	0.63			0.38	-0.14	1.82	1.34	-0.39	-0.20		
439	NC(=N)NCCCC[C@@H]1NC(=O)CCSSC[C@H](NC(=O)[C@@H]2CCCN2C(=O)C(CC3=C[NH]C4=CC=CC=C34)NC(=O)[C@H](CC(O)=O)NC(=O)CNC1=O)C(N)=O	NC(=[NH2+])NCCCC[C@@H]1NC(=O)CCSSC[C@H](NC(=O)[C@@H]2CCCN2C(=O)[C@@H](CC3=C[NH]C4=C3C=CC=C4)NC(=O)[C@H](CC([O-])=O)NC(=O)CNC1=O)C(N)=O	0.17	0.22	1.2	1.52	4.2	3.04	0.75	0.35	0.77	-0.66	0.08	0.18	0.62	0.48	-0.12	-0.46
440	CN(C)[C@H]1[C@@H]2C[C@@H]3CC4=C(F)C=C(NC(=O)CN5CCCC5)C(=C4C(=O)C3=C(O)[C@]2(O)C(=O)C(=C1O)C(N)=O)O	C[NH+](C)[C@H]1[C@@H]2C[C@@H]3CC4=C(C(=C(NC(=O)C[NH+]5CCCC5)C=C4F)O)C(=O)C3=C([O-])[C@]2(O)C(=O)C(=C1[O-])C(N)=O	2.3	1.83	3.71	3.06			0.18	0.20	0.36	0.26	0.57	0.49			-0.74	-0.71
441	CN1C[C@@H](C=C2[C@H]1CC3=C[NH]C4=CC=CC2=C34)C(=O)N[C@]5(C)O[C@@]6(O)[C@@H]7CCCN7C(=O)[C@H](CC8=CC=CC=C8)N6C5=O	C[NH+]1C[C@@H](C=C2[C@H]1CC3=C[NH]C4=CC3C2=CC=C4)C(=O)N[C@@]5(C)O[C@@]6(O)[C@H]7CCCN7C(=O)[C@@H](CC8=CC=CC=C8)N6C5=O	3.6	2.86	15	11.28	2.1	2.42	0.02	0.03	0.56	0.46	1.18	1.05	0.32	0.38	-1.70	-1.53
442	CO[C@H]1[C@@H](C[C@H](O)CN)O[C@H]2C[C@H]3O[C@@H](CC[C@@H]4O[C@@H](CC[C@@]56C[C@H]7O[C@@H]8[C@@H](O[C@H]9CC[C@H](CC(=O)O[C@H]12)O[C@@H]9[C@@H]8O5)[C@H]7O6)CC4=C)C[C@@H](C)C3=C	CO[C@H]1[C@@H](C[C@H](O)C[NH3+])O[C@H]2C[C@H]3O[C@@H](CC[C@@H]4O[C@H](CC[C@@]56C[C@H]7O[C@@H]8[C@@H](O[C@H]9CC[C@H](CC(=O)O[C@H]12)O[C@@H]9[C@@H]8O5)[C@H]7O6)CC4=C)C[C@@H](C)C3=C	1.46	1.16	0.75	1.38	37.8	17.87	0.43	0.28	0.16	0.06	-0.12	0.14	1.58	1.25	-0.37	-0.55
443	COCCOC1=C(OCCOC)C=C2C(=NC=NC2=C1)NC3=CC(=CC=C3)C#C	COCCOC1=C(OCCOC)C=C2C(=NC=NC2=C1)NC3=CC(=CC=C3)C#C	0.77	0.97	1.69	2.45	6.5	7.17	0.07	0.06	0.11	-0.01	0.23	0.39	0.81	0.86	-1.15	-1.25
444	C[C@@H](O)[C@@H]1[C@H]2[C@@H](CC(=C(N2C1=O)C(O)=O)S[C@@H]3CN[C@@H](C3)C(=O)NC4=CC=CC(=C4)C(O)=O	C[C@@H](O)[C@H]1[C@@H]2[C@@H](C)C(=C(N2C1=O)C([O-])=O)S[C@@H]3C[NH2+][C@@H](C3)C(=O)NC4=CC(=CC=C4)C([O-])=O	0.12	0.15	0.45	0.81	3.8	2.86	0.1	0.15	0.92	-0.82	-0.35	-0.09	0.58	0.46	-1.00	-0.83
445	CC[C@H]1OC(=O)[C@H](C)[C@@H](O[C@H]2C[C@@](C)(OC)[C@@H](O)[C@H](C)O2)[C@H](C)[C@@H](O[C@@H]3O[C@H](C)C[C@@H]([C@H]3O)N(C)C)[C@]2(C)O[C@@H](C)C(=O)[C@H](C)[C@@H](O)[C@]1(C)O	CC[C@H]1OC(=O)[C@H](C)[C@@H](O[C@H]2C[C@@](C)(OC)[C@@H](O)[C@H](C)O2)[C@H](C)[C@@H](O[C@@H]3O[C@H](C)C[C@@H]([C@H]3O)[NH+](C)C)[C@]2(C)O[C@@H](C)C(=O)[C@H](C)[C@@H](O)[C@]1(C)O	0.95	1.70	5.6	4.07	2	2.85	0.1	0.16	0.02	0.23	0.75	0.61	0.30	0.45	-1.00	-0.79
446	COC(=O)CCC1=CC=C(OCC(O)CNC(C)C)C=C1	COC(=O)CCC1=CC=C(OC[C@H](O)C[NH2+]C(C)C)C=C1	1.2	1.51	290	59.63	0.15	0.52	0.59	0.56	0.08	0.18	2.46	1.78	-0.82	-0.29	-0.23	-0.25
447	COC1=CC2=C([NH]C(=N2)[S@](=O)CC3=C(C)C(=C(C)C=N3)OC)C=C1	COC1=CC2=C([NH]C(=N2)[S@](=O)CC3=C(C)C(=C(C)C=N3)OC)C=C1	0.2	0.38	3.85	4.46	0.83	1.05	0.03	0.06	0.70	-0.42	0.59	0.65	-0.08	0.02	-1.52	-1.21
448	C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=CC(=CC=C34)O)[C@@H]1CC[C@@H]2O	C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=C3C=CC(=C4)O)[C@H]1CC[C@@H]2O	1.2	1.72	30	19.36	1.7	2.39	0.016	0.04	0.08	0.24	1.48	1.29	0.23	0.38	-1.80	-1.46
449	C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=CC(=CC=C34)OC(=O)N(CCCl)CCCl)[C@@H]1CC[C@@H]2O[P](O)(O)=O	C[C@@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=C3C=CC(=C4)OC(=O)N(CCCl)CCCl)[C@@H]1CC[C@@H]2O[P]([O-])([O-])=O	0.12	0.15	0.94	1.36	2.4	2.92	0.5	0.13	0.92	-0.82	-0.03	0.13	0.38	0.47	-0.30	-0.88
450	CCC(=C)C(=O)C1=CC=C(OCC(O)=O)C(=C1Cl)Cl	CCC(=C)C(=O)C1=C(Cl)C(=C(OCC([O-])=O)C=C1)Cl	0.26	0.30	8.7	4.11	0.5	1.00			0.59	-0.52	0.94	0.61	-0.30	0.00		
451	CC[C@@H](CO)NCCN[C@@H](CC)CO	CC[C@@H](CO)[NH2+]CC[NH2+][C@@H](CC)CO	1.7	1.35	10	7.95	3.1	3.38	0.18	0.32	0.23	0.13	1.00	0.90	0.49	0.53	-0.74	-0.50
452	CC[N]1C=NC(=C1C(=O)NC)C(=O)NC	CC[N]1C=NC(=C1C(=O)NC)C(=O)NC	0.73	0.92	12.1	7.58	0.83	1.38	0.92	0.78	0.14	-0.04	1.08	0.88	-0.08	0.14	-0.04	-0.11
453	C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=CC(=CC=C34)O)[C@@H]1CC[C@@]2(O)C#C	C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=C3C=CC(=C4)O)[C@@H]1CC[C@@]2(O)C#C	4.3	3.41	7	8.72	9.7	6.75	0.014	0.02	0.63	0.53	0.85	0.94	0.99	0.83	-1.85	-1.70
454	C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=CC(=CC=C34)O)[C@@H]1CC[C@@]2(O[S](O)(=O)=O)C#C	C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=C3C=CC(=C4)O)[C@@H]1CC[C@@]2(O[S]([O-])(=O)=O)C#C	0.61	0.77	1.3	1.69	9.3	5.53			0.21	-0.11	0.11	0.23	0.97	0.74		
455	C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=CC(=CC=C34)O[S](O)(=O)=O)[C@@H]1CC[C@@]2(O)C#C	C[C@@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=C3C=CC(=C4)O[S]([O-])(=O)=O)[C@@H]1CC[C@@]2(O)C#C	2.3	1.83	4.7	2.84	8.4	5.23	0.011	0.01	0.36	0.26	0.67	0.45	0.92	0.72	-1.96	-1.83
456	CCNCC(O)C1=CC=CC(=C1)O	CC[NH2+]C[C@H](O)C1=CC(=CC=C1)O	2.1	2.27	14	14.69	2.2	2.51	0.77	0.79	0.32	0.36	1.15	1.17	0.34	0.40	-0.11	-0.10

457	CCOC(=O)C1=CN=C[N]1[C@H](C)C2=CC=CC=C2	CCOC(=O)C1=CN=C[N]1[C@H](C)C2=CC=CC=C2	2.7	2.14	13	8.72	3.5	2.79	0.23	0.16	0.43	0.33	1.11	0.94	0.54	0.45	-0.64	-0.79
458	CC[C@]12CC(=C)[C@H]3[C@@H](CCC4=CC(=O)CC[C@H]34)[C@@H]1CC[C@@]2(O)C#C	CC[C@]12CC(=C)[C@H]3[C@@H](CCC4=CC(=O)CC[C@H]34)[C@H]1CC[C@@]2(O)C#C	2.87	1.32	2	2.23	25	9.25	0.02	0.03	0.46	0.12	0.30	0.35	1.40	0.97	-1.70	-1.47
459	COC1=CC(=CC(=C1O)OC)[C@H]2[C@@H]3[C@H](COC3=O)[C@H](O[C@@H]4O[C@@H]5CO[C@@H](C)O[C@H]5[C@H](O)[C@H]4O)C6=CC7=C(OCO7)C=C26	COC1=C(O)C(=CC(=C1)[C@H]2[C@H]3[C@H](COC3=O)[C@H](O[C@@H]4O[C@H]5CO[C@@H](C)O[C@H]5[C@H](O)[C@H]4O)C6=C2C=C7OCOC7=C6)OC	0.18	0.23	0.5	0.82	5.7	5.42	0.12	0.08	0.74	-0.64	-0.30	-0.09	0.76	0.73	-0.92	-1.12
460	CC1=CC=C(C=N1)C2=NC=C(Cl)C=C2C3=CC=C(C=C3)[S](C)(=O)=O	CC1=NC=C(C=C1)C2=C(C=C(Cl)C=N2)C3=CC=C(C=C3)[S](C)(=O)=O	1.5	1.19	0.79	0.78	26	17.24	0.081	0.05	0.18	0.08	-0.10	-0.11	1.41	1.24	-1.09	-1.30
461	C[N]1N=NC(=N1)N(CC2=CC(=CC(=C2)C(F)(F)F)C(F)(F)F)[C@H]3CCCN(C[C@@H]4CC[C@H](CC4)C(O)=O)C5=C(C)C=C(C)C=C35	C[N]1N=NC(=N1)N(CC2=CC(=CC(=C2)C(F)(F)F)C(F)(F)F)[C@H]3CCCN(CC4CCC(CC4)C([O-])=O)C5=C3C=C(C)C=C5C	1.82	1.45	0.84	1.07	51.94	29.23	0.001	0.0030	0.26	0.16	-0.08	0.03	1.72	1.47	-3.00	-2.52
462	CC[C@@]1(O)C(=O)OCC2=C1C=C3N(CC4=C5[C@@H](N)CCC6=C(C)C(=CC(=C56)N=C34)F)C2=O	CC[C@@]1(O)C(=O)OCC2=C1C=C3N(CC4=C5[C@@H]([NH3+])CCC6=C(C)C(=CC(=C56)N=C34)F)C2=O	0.44	0.55	0.96	1.95	6.7	7.08			0.36	-0.26	-0.02	0.29	0.83	0.85		
463	CCOC(=O)NC1=C(N)C=C(NCC2=CC=C(F)C=C2)C=C1	CCOC(=O)NC1=C(N)C=C(NCC2=CC=C(F)C=C2)C=C1	2.5	1.99	8.3	6.71	9	7.19	0.2	0.12	0.40	0.30	0.92	0.83	0.95	0.86	-0.70	-0.93
464	COC1=C(OC)C=C(CCN(C)CCCN2CC3=CC(=C(OC)C=C3C2=O)OC)C=C1	COC1=C(OC)C=C(CC[NH+](C)CCCN2CC3=C(C=C(OC)C(=C3)OC)C2=O)C=C1	2.4	2.13	15.71	12.33	2.04	2.64	0.12	0.13	0.38	0.33	1.20	1.09	0.31	0.42	-0.92	-0.89
465	NC(=N)NC1=NC(=CS1)CSCCC(=N)N[S](N)(=O)=O	NC(=[NH2+])NC1=NC(=CS1)CSCCC(=N)N[S](N)(=O)=O	1.2	0.95	6.6	5.65	2.8	3.37	0.84	0.62	0.08	-0.02	0.82	0.75	0.45	0.53	-0.08	-0.21
466	C[C@@H](O)[C@@H]1[C@H]2SC(=C(N2C1=O)C(O)=O)[C@H]3CCCO3	C[C@@H](O)[C@@H]1[C@H]2SC(=C(N2C1=O)C([O-])=O)[C@H]3CCCO3	0.18	0.23	2.23	2.69	1.4	1.37			0.74	-0.64	0.35	0.43	0.15	0.14		
467	O=[S](=O)(N1CCCNCC1)C2=CC=CC3=CN=CC=C23	O=[S](=O)(N1CCC[NH2+]CC1)C2=C3C=CN=CC3=CC=C2	1.22	1.16	77.5	28.76	0.44	1.07			0.09	0.07	1.89	1.46	-0.36	0.03		
468	CCOC(=O)C1=C(C)NC(=C(C1C2=CC=CC(=C2Cl)Cl)C(=O)OC)C	CCOC(=O)C1=C(C)NC(=C([C@H]1C2=C(Cl)C(=CC=C2)Cl)C(=O)OC)C	4.4	3.50	11	11.76	10	7.32	0.0036	0.02	0.64	0.54	1.04	1.07	1.00	0.86	-2.44	-1.65
469	OC1=CC=C(C=C1)[C@H]2CNCCC3=C2C=C(O)C(=C3Cl)O	OC1=CC=C(C=C1)[C@H]2C[NH2+]CCC3=C2C=C(O)C(=C3Cl)O	0.5	0.63	41.5	25.47	1	1.74	0.12	0.14	0.30	-0.20	1.62	1.41	0.00	0.24	-0.92	-0.87
470	C[C@@H](C(O)=O)C1=CC(=CC=C1)OC2=CC=CC=C2	C[C@@H](C([O-])=O)C1=CC(=CC=C1)OC2=CC=CC=C2	0.1	0.12	0.6	0.63	2.24	4.24	0.02	0.02	1.00	-0.91	-0.22	-0.20	0.35	0.63	-1.70	-1.80
471	CC(CC1=CC=C(O)C=C1)NCC(O)C2=CC(=CC(=C2)O)O	C[C@@H](CC1=CC=C(O)C=C1)[NH2+]C[C@@H](O)C2=CC(=CC(=C2)O)O	1.2	1.51	29	23.85	0.87	1.60	0.53	0.26	0.08	0.18	1.46	1.38	-0.06	0.20	-0.28	-0.58
472	O=C1NCC2(CCN(CCC3=CC=CC=C3)CC2)O1	O=C1NCC2(CC[NH+](CCC3=CC=CC=C3)CC2)O1	3	2.69	2.6	4.63	14	8.11			0.48	0.43	0.41	0.67	1.15	0.91		
473	CCC(=O)N(C1CCN(CC1)CCC2=CC=CC=C2)C3=CC=CC=C3	CCC(=O)N(C1CC[NH+](CC1)CCC2=CC=CC=C2)C3=CC=CC=C3	0.89	1.86	4.7	5.99	3	4.20	0.16	0.06	0.05	0.27	0.67	0.78	0.48	0.62	-0.80	-1.22
474	CCCCC1=NC(=C(CC(=S)N(C)C)C(=O)N1CC2=CC=C(C=C2)C3=CC=CC=C3C4=NN=N[NH]4)C	CCCCC1=NC(=C(CC(=S)N(C)C)C(=O)N1CC2=CC=C(C=C2)C3=C(C=CC=C3)C4=NN=N[N-]4)C	0.6	0.76	9.6	4.85	5.5	6.11			0.22	-0.12	0.98	0.69	0.74	0.79		
475	OC(=O)C1=CN(C2CC2)C3=C(C#N)C(=C(F)C=C3C1=O)N4C[C@@H]5NCCO[C@H]5C4	[O-]C(=O)C1=CN(C2CC2)C3=C(C=C(F)C(=C3C#N)N4C[C@@H]5[NH2+]CCO[C@H]5C4)C1=O	1.42	1.30	5.75	4.15	13.42	10.12	0.75	0.57	0.15	0.11	0.76	0.62	1.13	1.01	-0.12	-0.25
476	CC(C)(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CC[C@H]4NC(=O)C=C[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C	CC(C)(C)NC(=O)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CC[C@H]4NC(=O)C=C[C@]4(C)[C@H]3CC[C@@]12C	1.1	0.99	2.4	2.81	6	5.84	0.095	0.07	0.04	0.00	0.38	0.45	0.78	0.77	-1.02	-1.18
477	CCCCCCCCC1=CC=C(CCC(N)(CO)CO)C=C1	CCCCCCCCC1=CC=C(CCC([NH3+])(CO)CO)C=C1	17.3	13.74	1.53	3.25	144	39.32	0.002	0.01	1.24	1.14	0.18	0.51	2.16	1.59	-2.70	-2.14
478	CN1CC[C@@H]([C@H](O)C1)C2=C(O)C=C(O)C3=C2OC(=CC3=O)C4=CC=CC=C4Cl	C[NH+]1CC[C@@H]([C@H](O)C1)C2=C3OC(=CC(=O)C3=C(O)C=C2O)C4=C(Cl)C=CC=C4	1.5	1.62	6.1	7.56	5.2	6.32	0.06	0.07	0.18	0.21	0.79	0.88	0.72	0.80	-1.22	-1.17
479	FC(F)(F)COC1=CC=C(OCC(F)(F)F)C(=C1)C(=O)NCC2CCCCN2	FC(F)(F)COC1=CC(=C(OCC(F)(F)F)C=C1)C(=O)NC[C@H]2CCCC[NH2+]2	6.1	4.85	4.9	5.82	12	8.75	0.52	0.35	0.79	0.69	0.69	0.76	1.08	0.94	-0.28	-0.46
480	CN1CCN(CC1)C2=C(F)C=C3C(=O)C(=CN(CF)C3=C2F)C(O)=O	C[NH+]1CCN(CC1)C2=C(F)C3=C(C=C2F)C(=O)C(=CN3CCF)C([O-])=O	1.6	1.49	2.4	2.59	8.6	7.59	0.73	0.46	0.20	0.17	0.38	0.41	0.93	0.88	-0.14	-0.34
481	CO[C@@]1(NC(=O)CSC(F)F)[C@H]2OCC(=CO[C@@]1(NC(=O)CSC(F)F)[C@H]2OCC(=C(N2C1	0.19	0.24	4.1	3.14	0.6	0.95	0.64	0.45	0.72	-0.62	0.61	0.50	-0.22	-0.02	-0.19	-0.35

	C(N2C1=O)C(O)=O)CSC3=NN=N[N]3CCO	=O)C([O-])=O)CSC3=NN=N[N]3CCO															
482	CC1=C(C(=O)N[C@H]2[C@H]3SC(C)(C)[C@@H](N3C2=O)C(O)=O)C(=NO1)C4=C(F)C=CC=C4Cl	CC1=C(C(=O)N[C@H]2[C@H]3SC(C)(C)[C@@H](N3C2=O)C([O-])=O)C(=NO1)C4=C(Cl)C=CC=C4F	0.19	0.24	2.4	2.18	1.4	1.53	0.043	0.06	0.72	-0.62	0.38	0.34	0.15	0.19	-1.37	-1.25
483	OC(C[N]1C=NC=N1)(C[N]2C=NC=N2)C3=CC=C(F)C=C3F	OC(C[N]1C=NC=N1)(C[N]2C=NC=N2)C3=C(F)C=C(F)C=C3	0.75	0.94	0.31	1.00	30	14.92	0.89	0.47	0.12	-0.03	-0.51	0.00	1.48	1.17	-0.05	-0.32
484	NC1=C(F)C=NC(=O)N1	NC1=C(F)C=NC(=O)N1	0.68	0.54	2	3.54	4.2	2.31	1	0.63	0.17	-0.26	0.30	0.55	0.62	0.36	0.00	-0.20
485	NC1=NC(=NC2=C1N=C[N]2[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]3O)F	NC1=C2N=C[N]([C@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]3O)C2=NC(=N1)F	2.2	2.84	3.2	5.41	11	6.94	0.76	0.75	0.34	0.45	0.51	0.73	1.04	0.84	-0.12	-0.13
486	CCOC(=O)C1=C2CN(C)C(=O)C3=CC(=CC=C3[N]2C=N1)F	CCOC(=O)C1=C2CN(C)C(=O)C3=C(C=CC(=C3)F)[N]2C=N1	0.8	1.01	16	12.73	0.78	1.29	0.58	0.31	0.10	0.00	1.20	1.10	-0.11	0.11	-0.24	-0.51
487	CC1(C)O[C@@H]2C[C@H]3[C@@H]4C[C@H](F)C5=CC(=O)C=C[C@@]5(C)[C@H]4[C@@H](O)C[C@]3(C)[C@@]2(O1)C(=O)CO	CC1(C)O[C@@H]2C[C@H]3[C@H]4C[C@H](F)C5=CC(=O)C=C[C@@]5(C)[C@@H]4[C@@H](O)C[C@@]3(C)[C@@]2(O1)C(=O)CO	1.08	1.79	9.5	8.15	1.68	2.30	0.24	0.13	0.03	0.25	0.98	0.91	0.23	0.36	-0.62	-0.90
488	CN1C(=O)CN=C(C2=CC=CC=C2F)C3=CC(=CC=C13)[N](=O)=O	CN1C(=O)CN=C(C2=C(F)C=CC=C2)C3=C1C=CC(=C3)[N+]([O-])=O	1.9	1.51	1.4	1.33	25	16.09	0.17	0.13	0.28	0.18	0.15	0.12	1.40	1.21	-0.77	-0.88
489	C[C@@H]1C[C@H]2[C@@H]3C[C@H](F)C4=CC(=O)C=C[C@]4(C)[C@H]3[C@@H](O)C[C@]2(C)[C@H]1C(=O)CO	C[C@@H]1C[C@@H]2[C@@H]3C[C@@H](F)C4=CC(=O)C=C[C@]4(C)[C@H]3[C@@H](O)C[C@]2(C)[C@H]1C(=O)CO	0.68	1.09	7	5.87	1.3	2.06	0.04	0.05	0.17	0.04	0.85	0.77	0.11	0.31	-1.40	-1.30
490	OC1=CC=C2C(=C1)OC3=CC(=CC=C3C24OC(=O)C5=CC=CC=C45)O	OC1=CC2=C(C=C1)C3(OC(=O)C4=C3C=CC=C4)C5=C(O2)C=C(O)C=C5	0.14	0.18	1.3	1.48	1.6	3.52	0.11	0.06	0.85	-0.75	0.11	0.17	0.20	0.55	-0.96	-1.25
491	NC1=NC(=O)N(C=C1)[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H]2F	NC1=NC(=O)N(C=C1)[C@@H]2O[C@H](CO)C[C@@H]2F	0.7	1.27	6.1	5.38	1.8	1.89	1	0.91	0.15	0.10	0.79	0.73	0.26	0.28	0.00	-0.04
492	FC1=CNC(=O)NC1=O	FC1=CNC(=O)NC1=O	0.23	0.29	26	10.56	0.12	0.37	0.64	0.61	0.64	-0.54	1.41	1.02	-0.92	-0.43	-0.19	-0.22
493	OCCN1CCN(CCC=C2C3=CC=CC=C3SC4=CC=C(C=C24)C(F)(F)F)CC1	OCC[NH+]1CC[NH+](CC\C=C2/C3=C(SC4=C2C=C(C=C4)C(F)(F)F)C=CC=C3)CC1			4.14	5.96	34.2	25.60					0.62	0.78	1.53	1.41		
494	OCCN1CCN(CCCN2C3=CC=CC=C3SC4=CC=C(C=C24)C(F)(F)F)CC1	OCC[NH+]1CC[NH+](CCCN2C3=C(SC4=C2C=C(C=C4)C(F)(F)F)C=CC=C3)CC1	2.9	3.65	9.7	9.26	12.3	14.78	0.04	0.04	0.46	0.56	0.99	0.97	1.09	1.17	-1.40	-1.35
495	CCOC(=O)NC1=CC=C(NCC2=CC=C(F)C=C2)N=C1N	CCOC(=O)NC1=C(N)N=C(NCC2=CC=C(F)C=C2)C=C1	1.1	1.25	1.6	2.45	8.5	6.34	0.15	0.14	0.04	0.10	0.20	0.39	0.93	0.80	-0.82	-0.86
496	C[C@@H]1C[C@H]2C3C[C@H](F)C4=CC(=O)C=C[C@]4(C)[C@@]3(F)[C@@H](O)C[C@]2(C)[C@@]1(OC(=O)C5=CC=CO5)C(=O)SCF	C[C@H]1C[C@H]2[C@@H]3C[C@H](F)C4=CC(=O)C=C[C@]4(C)[C@@]3(F)[C@@H](O)C[C@]2(C)[C@@]1(OC(=O)C5=CC=CO5)C(=O)SCF	4.95	3.93	13.4	12.18	10.6	7.24			0.69	0.59	1.13	1.09	1.03	0.86		
497	CCC(=O)O[C@@]1([C@H](C)C[C@H]2[C@@H]3C[C@H](F)C4=CC(=O)C=C[C@]4(C)[C@@]3(F)[C@@H](O)C[C@]12C)C(=O)SCF	CCC(=O)O[C@@]1([C@H](C)C[C@H]2[C@H]3C[C@H](F)C4=CC(=O)C=C[C@@]4(C)[C@@]3(F)[C@@H](O)C[C@@]12C)C(=O)SCF	3.6	2.86	17	14.68	6	6.27	0.1	0.08	0.56	0.46	1.23	1.17	0.78	0.80	-1.00	-1.09
498	CC(C)[N]1C2=CC=CC=C2C(=C1C=C[C@H](O)C[C@H](O)CC(O)=O)C3=CC=C(F)C=C3	CC(C)[N]1C2=C(C=CC=C2)C(=C1\C=C/[C@H](O)C[C@H](O)CC([O-])=O)C3=CC=C(F)C=C3	0.42	0.24	16	8.19	0.7	1.57	0.0079	0.01	0.38	-0.61	1.20	0.91	-0.15	0.20	-2.10	-1.99
499	COCCCCC(=NOCCN)C1=CC=C(C=C1)C(F)(F)F	COCCCC\C(=N/OCC[NH3+])C1=CC=C(C=C1)C(F)(F)F	23.5	18.65	31.95	19.29	12.5	8.80	0.2	0.20	1.37	1.27	1.50	1.29	1.10	0.94	-0.70	-0.70
500	NC1=NC(=O)C2=NC(=CN=C2N1)CNC3=CC=C(C=C3)C(=O)N[C@@H](CCC(O)=O)C(O)=O	NC1=NC(=O)C2=C(N1)N=CC(=N2)CNC3=CC=C(C=C3)C(=O)N[C@@H](CCC([O-])=O)C([O-])=O	9.7	2.93	52	14.21	2.6	3.29	0.5	0.36	0.99	0.47	1.72	1.15	0.41	0.52	-0.30	-0.45
501	NC1=NC(=O)C2=C(NCC(CNC3=CC=C(C=C3)C(=O)N[C@@H](CCC(O)=O)C(O)=O)N2C=O)N1	NC1=NC(=O)C2=C(NC[C@@H](CNC3=CC=C(C=C3)C(=O)N[C@@H](CCC([O-])=O)C([O-])=O)N2C=O)N1	0.25	0.38	5.8	4.51	1.3	1.82	0.087	0.16	0.60	-0.42	0.76	0.65	0.11	0.26	-1.06	-0.78
502	CC1=C[NH]N=C1	CC1=C[NH]N=C1	0.35	0.44	0.73	1.89	4.42	3.27			0.46	-0.36	-0.14	0.28	0.65	0.51		
503	OC[C@H]1N[C@H]([C@H](O)[C@@H]1O)C2=C[NH]C3=C2N=CNC3=O	OC[C@H]1[NH2+][C@H]([C@H](O)[C@@H]1O)C2=C[NH]C3=C2N=CNC3=O			1.56	2.52	11.6	6.30					0.19	0.40	1.06	0.80		
504	C[C@@H](O[C@H]1OCCN(CC2=NC(=O)N(N2)[P](O)(O)=O)[C@H]1C3=CC=C(F)C=C3)C4=CC(=CC(=C4)C(F)(F)F)C(F)(F)F	C[C@@H](O[C@H]1OCC[NH+](CC2=NC(=O)N(N2)[P]([O-])([O-])=O)[C@H]1C3=CC=C(F)C=C3)C4=CC(=CC(=C4)C(F)(F)F)C(F)(F)F	0.07	0.10	18.6	8.37	2.2	4.02	0.02	0.03	1.15	-1.00	1.27	0.92	0.34	0.60	-1.70	-1.57
505	OC(=O)[P](O)(O)=O	[O-]C(=O)[P]([O-])([O-])=O	0.5	0.52	2.1	2.13	4.7	3.51	0.85	0.65	0.30	-0.28	0.32	0.33	0.67	0.55	-0.07	-0.19
506	O[P](O)(=O)OC(C[N]1C=NC=N1)(C[N]2C=N	[O-][P]([O-	0.15	0.19	1.3	1.48	2.1	3.55	0.042	0.07	0.82	-0.72	0.11	0.17	0.32	0.55	-1.38	-1.14

	C=N2)C3=CC=C(F)C=C3F	])(=O)OC(C[N]1C=NC=N1)(C[N]2C=NC=N2)C3=C(F)C=C(F)C=C3																
507	C[C@@H]1O[C@@H]1[P](O)(O)=O	C[C@H]1O[C@@H]1[P]([O-])([O-])=O	0.32	0.33	2	2.16	1.9	2.10	1	0.72	0.49	-0.48	0.30	0.33	0.28	0.32	0.00	-0.14
508	OC(=O)[C@@H]1C[C@H](CN1C(=O)C[P](O)(=O)CCCCC2=CC=CC=C2)C3CCCCC3	[O-]C(=O)[C@@H]1C[C@H](CN1C(=O)C[P]([O-])(=O)CCCCC2=CC=CC=C2)C3CCCCC3	0.13	0.16	0.32	0.69	9.4	6.19	0.006	0.01	0.89	-0.79	-0.49	-0.16	0.97	0.79	-2.22	-1.88
509	O[P](O)(=O)OCN1C(=O)NC(C1=O)(C2=CC=CC=C2)C3=CC=CC=C3	[O-][P]([O-])(=O)OCN1C(=O)NC(C1=O)(C2=CC=CC=C2)C3=CC=CC=C3	0.06	0.08	3.5	2.84	9.5	7.32	0.05	0.06	1.22	-1.12	0.54	0.45	0.98	0.86	-1.30	-1.19
510	C[C@@](O)(C=C[C@H]1CC=CC(=O)O1)[C@@H](C[C@@H](O)C=CC=CC=CCO)O[P](O)(O)=O	C[C@](O)(\C=C/[C@H]1CC=CC(=O)O1)[C@@H](C[C@@H](O)\C=C/C=C\C=C\CO)O[P]([O-])([O-])=O	0.086	0.11	1.2	1.97	1.5	1.69			1.07	-0.97	0.08	0.29	0.18	0.23		
511	CCO[P](=O)(OCC)C(C)NC(=O)N(CCCl)N=O	CCO[P](=O)(OCC)[C@H](C)NC(=O)N(CCCl)N=O	0.62	0.78	18.5	11.25	0.38	0.77			0.21	-0.11	1.27	1.05	-0.42	-0.11		
512	CN[C@@H]1CCC2=C(C1)C3=CC(=CC=C3[NH]2)C(N)=O	C[NH2+][C@@H]1CCC2=C(C1)C3=C([NH]2)C=CC(=C3)C(N)=O	3.6	2.86	2.5	4.76	24	11.43	0.85	0.68	0.56	0.46	0.40	0.68	1.38	1.06	-0.07	-0.17
513	C[C@]12CC[C@H]3C([C@@H](CCCCCCCCC[S](=O)CCCC(F)(F)C(F)(F)F)CC4=CC(=CC=C34)O)[C@@H]1CC[C@@H]2O	C[C@]12CC[C@@H]3[C@@H]([C@@H](CCCCCCCCC[S](=O)CCCC(F)(F)C(F)(F)F)CC4=C3C=CC(=C4)O)[C@@H]1CC[C@@H]2O	4.15	3.30	11.8	6.56	16	16.73	0.01	0.02	0.62	0.52	1.07	0.82	1.20	1.22	-2.00	-1.80
514	N[S](=O)(=O)C1=CC(=C(NCC2=CC=CO2)C=C1Cl)C(O)=O	N[S](=O)(=O)C1=C(Cl)C=C(NCC2=CC=CO2)C(=C1)C([O-])=O	0.12	0.27	1.6	1.78	2.5	2.74	0.012	0.03	0.92	-0.57	0.20	0.25	0.40	0.44	-1.92	-1.55
515	C[C@@H]1[C@H](O)CC[C@]2(C)[C@H]1CC[C@]3(C)[C@H]2[C@H](O)C[C@H]4C([C@H](C[C@@]34C)OC(C)=O)=C(CCC=C(C)C)C([O-])=O	C[C@@H]1[C@H](O)CC[C@]2(C)[C@H]1CC[C@@]3(C)[C@H]2[C@H](O)C[C@H]4\C([C@H](C[C@@]34C)OC(C)=O)=C(\CCC=C(C)C)C([O-])=O	0.23	0.29	0.35	1.04	9.8	4.52	0.02	0.02	0.64	-0.54	-0.46	0.02	0.99	0.66	-1.70	-1.66
516	CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)[C@H](NC(=O)N3CCN(N=CC4=CC=CO4)C3=O)C5=CC=C(O)C=C5)C(=O)N2[C@H]1C(O)=O	CC1(C)S[C@H]2[C@H](NC(=O)[C@H](NC(=O)N3CCN(\N=C/C4=CC=CO4)C3=O)C5=CC=C(O)C=C5)C(=O)N2[C@H]1C([O-])=O	0.2	0.25	3.61	2.77	1.3	2.35			0.70	-0.60	0.56	0.44	0.11	0.37		
517	NCC1(CCCCC1)CC(O)=O	[NH3+]CC1(CCCCC1)CC([O-])=O	0.71	0.56	1.7	2.19	5.3	4.72	0.97	0.87	0.15	-0.25	0.23	0.34	0.72	0.67	-0.01	-0.06
518	[Gd+3]|1|2|[N;v4](CC[N;v4]|1(CC([O-])=O)CC([O-])=O)(CC[N;v4]|2(CC([O-])=O)[C@H](COCC3=CC=CC=C3)C([O-])=O)CC([O-])=O	[O-]C(=O)C[N]12CC[N](CC([O-])=O)(CC([O-])=O)[Gd+3]1[N](CC2)(CC([O-])=O)C(COCC3=CC=CC=C3)C([O-])=O	0.21	0.26	1.6	1.36	1.81	1.78	1	0.52	0.68	-0.58	0.20	0.13	0.26	0.25	0.00	-0.29
519	OCC1O[Gd+3]|2|3|4|5|6|7|[O-]C(=O)C[N;v4]8|2CC[N;v4]|3(CC[N;v4]|4(CC[N;v4]|5(CC8)CC([O-]|6)=O)[C@@H]1CO)CC([O-]|7)=O	OC[C@@H]1O[Gd+3]23456[O-]C(=O)C[NH]27CC[NH]3(CC[NH]4(CC[NH]5(CC7)CC(=O)[O-]6)[C@@H]1CO)CC([O-])=O	0.22	0.28	2	1.69	1.3	1.60	1	0.74	0.66	-0.56	0.30	0.23	0.11	0.20	0.00	-0.13
520	[Gd+3]|1|2|3|4|5|6|7|[O-]C(=O)CN|1(CCN|2(CC([O-]|3)=O)CC(=O|4)NC)CCN|5(CC([O-]|6)=O)CC(=O|7)NC	CNC1=[OH][Gd+3]23456[O-]C(=O)C[NH]2(CC[N]3(CC[NH]4(CC(=O)[O-]5)CC(=[OH]6)NC)CC([O-])=O)C1	0.2	0.25	1.79	1.66	1.46	1.67			0.70	-0.60	0.25	0.22	0.16	0.22		
521	[Gd+3]|1|2|3|4|5|6|7|[O-]C(=O)CN|1(CCN|2(CC([O-]|3)=O)CC([O-]|4)=O)CC(CC8=CC=C(OCC)C=C8)N|5(CC([O-]|6)=O)CC([O-]|7)=O	CCOC1=CC=C(C[C@H]2C[N@+]34CC[N@@+]5(CC([O-])=O)CC(=O)[O-][Gd+3]3567([O-]C(=O)C4)[O-]C(=O)C[N+]26CC(=O)[O-]7)C=C1	0.15	0.19	0.1	0.80	16.3	3.52	0.16	0.36	0.82	-0.72	-1.00	-0.10	1.21	0.55	-0.80	-0.45
522	[Gd+3]|1|2|3|4|5|6|7|[O-]C(=O)C[N;v4]|1(CC[N;v4]|2(CC([O-]|3)=O)CC([O-]|4)=O)CC[N;v4]|5(CC([O-]|6)=O)CC([O-]|7)=O	[O-]C(=O)C[N]12CC[N]34CC[N]56CC(=O)[O-][Gd+3]135([O-]C(=O)C4)([O-]C(=O)C2)[O-]C(=O)C6	0.27	0.34	1.94	1.72	1.6	1.60	1	0.70	0.57	-0.47	0.29	0.24	0.20	0.20	0.00	-0.16
523	[Gd+3]|1|2|3|4|5|6|7|[OH;v3]C(C)C[N;v4]8|1CC[N;v4]|2(CC[N;v4]|3(CC[N;v4]|4(CC8)CC([O-]|5)=O)CC([O-]|6)=O)CC([O-]|7)=O	C[C@H]1C[NH]23CC[NH]45CC[NH]6(CC[NH]7(CC2)CC(=O)[O-][Gd+3]3467(O1)[O-]C(=O)C5)CC([O-])=O	0.2	0.25	1.5	1.63	1.6	1.76			0.70	-0.60	0.18	0.21	0.20	0.25		
524	[Gd+3]|1|2|3|4|5|6|7|[O-]C(=O)CN|1(CCN|2(CC([O-]|3)=O)CC(=O|4)NCCOC)CCN|5(CC([O-]|6)=O)CC(=O|7)NCCOC	COCCNC1=[OH][Gd+3]23456[O-]C(=O)C[NH]2(CC[NH]3(CC([O-])=O)C1)CC[NH]4(CC(=O)[O-]5)CC(=[OH]6)NCCOC	0.16	0.20	1.2	1.29	1.7	2.01	1	0.76	0.80	-0.70	0.08	0.11	0.23	0.30	0.00	-0.12
525	[Gd+3]|1|2|3|4|5|6|7|[O-	CCOC1=CC=C(C[C@H]2C[N@+]34CC[N@@+]5(C	0.21	0.19	3.57	0.80	0.95	3.52	0.9	0.36	0.68	-0.72	0.55	-0.10	-0.02	0.55	-0.05	-0.45

	]C(=O)CN|1(CCN|2(CC([O-]|3)=O)CC([O-]|4)=O)CC(CC8=CC=C(OCC)C=C8)N|5(CC([O-]|6)=O)CC([O-]|7)=O	C([O-])=O)CC(=O)[O-][Gd+3]3567([O-]C(=O)C4)[O-]C(=O)C[N+]26CC(=O)[O-]7)C=C1																
526	CCCNC1=NC(=NC(=N1)N(C)OC)NCCC	CCCNC1=NC(=NC(=N1)NCCC)N(C)OC	2.17	1.72	11.9	9.27	5.61	4.67			0.34	0.24	1.08	0.97	0.75	0.67		
527	COC1=CC=C2CN(C)CC[C@@]34C=C[C@H](O)C[C@@H]3OC1=C24	COC1=C2O[C@H]3C[C@@H](O)C=C[C@]34CC[NH+](C)CC(=C24)C=C1	2.3	1.97	5.6	10.72	5.3	5.31	0.83	0.64	0.36	0.29	0.75	1.03	0.72	0.73	-0.08	-0.20
528	CC[N+](CC)(CC)CCOC1=CC=CC(=C1OCC[N+](CC)(CC)CC)OCC[N+](CC)(CC)CC	CC[N+](CC)(CC)CCOC1=C(OCC[N+](CC)(CC)CC)C(=CC=C1)OCC[N+](CC)(CC)CC	0.27	0.34	1.51	2.22	2.52	4.28			0.57	-0.47	0.18	0.35	0.40	0.63		
529	COC1=C(OC)C=C(CCN(C)CCC[C@@](C#N)(C(C)C)C2=CC(=C(OC)C(=C2)OC)OC)C=C1	COC1=C(OC)C=C(CC[NH+](C)CCC[C@@](C#N)(C(C)C)C2=CC(=C(OC)C(=C2)OC)OC)C=C1	1.75	2.07	14.3	10.55	1.8	3.06	0.07	0.05	0.24	0.32	1.16	1.02	0.26	0.49	-1.15	-1.31
530	CC(C)=CCC[C@@]1(C)OC2=C(C=C1)C(=C3C(=O)C4=C[C@@H]5C[C@@H]6C(C)(C)O[C@@](CC=C(C)C(O)=O)(C5=O)[C@@]46OC3=C2CC=C(C)C)O	CC(C)=CCC[C@@]1(C)OC2=C(C=C1)C(=C3C(=O)C4=C[C@@H]5C[C@H]6C(C)(C)O[C@@](C\C=C(\C)C([O-])=O)(C5=O)[C@@]46OC3=C2CC=C(C)C)O	0.99	0.93	1.24	1.41	14.6	10.12			0.00	-0.03	0.09	0.15	1.16	1.01		
531	NC1=NC2=C(N=C[N]2COC(CO)CO)C(=O)N1	NC1=NC2=C(N=C[N]2COC(CO)CO)C(=O)N1	1	1.25	4.6	5.91	3.7	3.62	0.99	0.92	0.00	0.10	0.66	0.77	0.57	0.56	0.00	-0.03
532	C[C@H]1NCC2=CC(=CC=C12)C3=CC=C4C(=O)C(=CN(C5CC5)C4=C3OC(F)F)C(O)=O	C[C@H]1[NH2+]CC2=C1C=CC(=C2)C3=C(OC(F)F)C4=C(C=C3)C(=O)C(=CN4C5CC5)C([O-])=O	1	1.05	1.23	1.46			0.25	0.14	0.00	0.02	0.09	0.16			-0.60	-0.87
533	COC1=C(N2CCNC(C)C2)C(=CC3=C1N(C=C(C(O)=O)C3=O)C4CC4)F	COC1=C2N(C=C(C([O-])=O)C(=O)C2=CC(=C1N3CC[NH2+][C@H](C)C3)F)C4CC4	1.7	1.67	2.8	3.24	10	9.97	0.8	0.68	0.23	0.22	0.45	0.51	1.00	1.00	-0.10	-0.17
534	OC(=O)C1=C(C=CC(=O)NC2=CC=CC=C2)C3=C(Cl)C=C(Cl)C=C3[NH]1	[O-]C(=O)C1=C(\C=C/C(=O)NC2=CC=CC=C2)C3=C([NH]1)C=C(Cl)C=C3Cl	0.12	0.15	0.089	0.25			0.002	0.01	0.92	-0.82	-1.05	-0.60			-2.70	-2.29
535	COC1=CC2=NC=NC(=C2C=C1OCCCN3CCOCC3)NC4=CC=C(F)C(=C4)Cl	COC1=C(OCCC[NH+]2CCOCC2)C=C3C(=NC=NC3=C1)NC4=CC(=C(F)C=C4)Cl	23	18.25	12	9.06	34	21.77	0.089	0.06	1.36	1.26	1.08	0.96	1.53	1.34	-1.05	-1.26
536	NC1=NC(=O)N(C=C1)[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)C2(F)F	NC1=NC(=O)N(C=C1)[C@@H]2O[C@@H](CO)[C@@H](O)C2(F)F	1.5	1.21	32	15.57	1	1.38	1	0.84	0.18	0.08	1.51	1.19	0.00	0.14	0.00	-0.08
537	CON=C1CN(CC1CN)C2=C(F)C=C3C(=O)C(=CN(C4CC4)C3=N2)C(O)=O	CO\N=C1/CN(C[C@@H]1C[NH3+])C2=C(F)C=C3C(=O)C(=CN(C4CC4)C3=N2)C([O-])=O	3.52	2.79	7.2	5.03	8.3	6.89	0.3	0.40	0.55	0.45	0.86	0.70	0.92	0.84	-0.52	-0.39
538	C[C@@H]([C@@](O)(C[N]1C=NC=N1)C2=CC=C(F)C=C2F)[S](C)(=O)=O	C[C@@H]([C@@](O)(C[N]1C=NC=N1)C2=C(F)C=C(F)C=C2)[S](C)(=O)=O	0.62	0.78	0.19	0.65	49	20.52			0.21	-0.11	-0.72	-0.19	1.69	1.31		
539	CN[C@@H]1[C@@H](O)[C@H](OC[C@]1(C)O)O[C@H]2[C@H](N)C[C@H](N)[C@@H](O[C@H]3O[C@@H](CC[C@H]3N)[C@@H](C)N)[C@@H]2O	C[NH2+][C@@H]1[C@@H](O)[C@H](OC[C@]1(C)O)O[C@@H]2[C@H]([NH3+])C[C@H]([NH3+])[C@@H](O[C@H]3O[C@@H](CC[C@H]3[NH3+])[C@@H](C)[NH3+])[C@@H]2O	0.33	0.26	1	1.16	4.7	3.24	1	0.59	0.48	-0.58	0.00	0.06	0.67	0.51	0.00	-0.23
540	CC[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=CC(=O)CC[C@H]34)[C@@H]1C=C[C@@]2(O)C#C	CC[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=CC(=O)CC[C@H]34)[C@@H]1C=C[C@@]2(O)C#C	0.46	1.41	0.8	1.60	10	5.91	0.023	0.03	0.34	0.15	-0.10	0.20	1.00	0.77	-1.64	-1.50
541	C[C@H](NC(=O)[C@@H](CC1=C[NH]C2=C1C=CC=C2)NC(=O)[C@@H](N)CC3=CN=C[NH]3)C(=O)N[C@@H](CC4=C[NH]C5=C4C=CC=C5)C(=O)N[C@@H](CC6=CC=CC=C6)C(=O)N[C@@H](CCCCN)C(N)=O	C[C@H](NC(=O)[C@@H](CC1=C[NH]C2=C1C=CC=C2)NC(=O)[C@@H]([NH3+])CC3=CN=C[NH]3)C(=O)N[C@@H](CC4=C[NH]C5=C4C=CC=C5)C(=O)N[C@H](CC6=CC=CC=C6)C(=O)N[C@@H](CCCC[NH3+])C(N)=O	0.42	0.53	3.1	2.46	2.46	3.01			0.38	-0.28	0.49	0.39	0.39	0.48		
542	C[C@@H]1C(=O)O[C@H]2C[C@@]34[C@H]5C[C@@H](C(C)(C)C)C36[C@@H](O)C(=O)O[C@H]6OC4(C(=O)O5)[C@@]12O	C[C@@H]1C(=O)O[C@H]2C[C@@]34[C@H]5C[C@@H](C(C)(C)C)[C@@]36[C@@H](O)C(=O)O[C@H]6O[C@@]4(C(=O)O5)[C@@]12O	0.62	0.78	2.3	2.90	3.8	3.57			0.21	-0.11	0.36	0.46	0.58	0.55		
543	C[C@@H]1C(=O)O[C@H]2[C@H](O)C34[C@@H]5C[C@@H](C(C)(C)C)C36[C@@H](O)C(=O)O[C@H]6OC4(C(=O)O5)[C@@]12O	C[C@@H]1C(=O)O[C@H]2[C@H](O)[C@]34[C@H]5C[C@@H](C(C)(C)C)C[C@@]36[C@@H](O)C(=O)O[C@H]6O[C@]4(C(=O)O5)[C@@]12O	0.91	0.81	2.3	2.62	5.2	4.86	0.8	0.49	0.04	-0.09	0.36	0.42	0.72	0.69	-0.10	-0.31
544	CCOC1=C(C=C(C=N1)[S](=O)(=O)N2CCN(CC)CC2)C3=NC(=O)C4=N[N](CCOC)C(=C4N3)CC	CCOC1=C(C=C(C=N1)[S](=O)(=O)N2CC[NH+](CC)CC2)C3=NC(=O)C4=N[N](CCOC)C(=C4N3)CC	2.4	1.91	14.3	10.27	4	4.64			0.38	0.28	1.16	1.01	0.60	0.67		
545	CC1=CC=C(C=C1)[S](=O)(=O)NC(=O)N[C@@H]2[C@H](O)[C@]3(C)CC[C@H]2C3(C)C	CC1=CC=C(C=C1)[S]([O-])(=O)=NC(=O)N[C@@H]2[C@H](O)[C@]3(C)CC[C@H]2C3(C)C	0.27	0.33	0.34	0.73	9.2	7.99			0.57	-0.49	-0.47	-0.14	0.96	0.90		
546	CC1=CC=C(C=C1)[S](=O)(=O)NC(=O)NN2C[	CC1=CC=C(C=C1)[S]([O-])(=O)=NC(=O)[N-	0.43	0.54	0.41	0.60	16.4	11.36	0.03	0.05	0.37	-0.27	-0.39	-0.22	1.21	1.06	-1.52	-1.33

	C@H]3CCC[C@@H]3C2	]N2C[C@H]3CCC[C@@H]3C2																
547	CCC1=C(C)CN(C(=O)NCCC2=CC=C(C=C2)[S](=O)(=O)NC(=O)N[C@@H]3CC[C@@H](C)CC3)C1=O	CCC1=C(C)CN(C(=O)NCCC2=CC=C(C=C2)[S]([O-])(=O)=NC(=O)NC3CCC(C)CC3)C1=O	0.19	0.24	0.5	0.86	10	7.99	0.005	0.01	0.72	-0.62	-0.30	-0.07	1.00	0.90	-2.30	-1.96
548	CC1=CN=C(C=N1)C(=O)NCCC2=CC=C(C=C2)[S](=O)(=O)NC(=O)NC3CCCCC3	CC1=NC=C(N=C1)C(=O)NCCC2=CC=C(C=C2)[S]([O-])(=O)=NC(=O)NC3CCCCC3	0.16	0.20	0.56	0.90	3.3	4.26	0.02	0.03	0.80	-0.70	-0.25	-0.04	0.52	0.63	-1.70	-1.56
549	N[C@@H](CCC(=O)N[C@@H](CC1=CC=C(O)C(=C1)O)C(O)=O)C(O)=O	[NH3+][C@@H](CCC(=O)N[C@@H](CC1=CC(=C(O)C=C1)O)C([O-])=O)C([O-])=O	0.21	0.26	4.6	4.04	0.5	0.83			0.68	-0.58	0.66	0.61	-0.30	-0.08		
550	OC[C@H]1O[C@@H](O[P](=O)(NCCCl)NCCCl)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]1O	OC[C@H]1O[C@@H](O[P](=O)(NCCCl)NCCCl)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]1O	0.24	0.30	1.6	2.17	2.37	2.34	0.71	0.66	0.62	-0.52	0.20	0.34	0.37	0.37	-0.15	-0.18
551	COC1=CC=C(Cl)C=C1C(=O)NCCC2=CC=C(C=C2)[S](=O)(=O)NC(=O)NC3CCCCC3	COC1=C(C=C(Cl)C=C1)C(=O)NCCC2=CC=C(C=C2)[S]([O-])(=O)=NC(=O)NC3CCCCC3	0.08	0.10	0.82	1.14	2.2	3.59	0.021	0.01	1.10	-1.00	-0.09	0.06	0.34	0.55	-1.68	-1.89
552	OC[C@@H](O)CO[N+]([O-])=O	OC[C@@H](O)CO[N+]([O-])=O	0.76	0.47	3.63	3.76	2.5	2.31			0.12	-0.33	0.56	0.57	0.40	0.36		
553	[Br-].C[N+]1(C)CCC(C1)OC(=O)C(O)(C2CCCC2)C3=CC=CC=C3	C[N+]1(C)CC[C@H](C1)OC(=O)[C@@](O)(C2CCCC2)C3=CC=CC=C3	0.37	0.56	16.8	11.66	0.65	1.70			0.43	-0.25	1.23	1.07	-0.19	0.23		
554	CC1(C)[C@H](CC[C@@]2(C)[C@H]1CC[C@@]3(C)[C@@H]2C(=O)C=C4[C@@H]5C[C@](C)(CC[C@]5(C)CC[C@]34C)C(O)=O)O[C@H]6O[C@@H]([C@@H](O)[C@H](O)[C@H]6O[C@@H]7O[C@@H]([C@@H](O)[C@H](O)[C@H]7O)C(O)=O)C(O)=O	CC1(C)[C@H](CC[C@@]2(C)[C@H]1CC[C@@]3(C)[C@@H]2C(=O)C=C4[C@@H]5C[C@](C)(CC[C@]5(C)CC[C@]34C)C([O-])=O)O[C@H]6O[C@@H]([C@@H](O)[C@@H](O)[C@H]6O[C@@H]7O[C@@H]([C@@H](O)[C@H](O)[C@H]7O)C([O-])=O)C([O-])=O	0.06	0.15	0.13	0.16	8.83	10.63			1.22	-0.82	-0.89	-0.79	0.95	1.03		
555	COC1=C2C(=N)C3=C(O)C4=C(C[C@](O)(C[C@@H]4O[C@H]5C[C@H](N)[C@H](O)[C@H](C)O5)C(=O)CO)C(=C3C(=O)C2=CC=C1)O	COC1=C2C(=N)C3=C(C(=C4C[C@@](O)(C[C@H](O[C@H]5C[C@H]([NH3+])[C@H](O)[C@H](C)O5)C4=C3O)C(=O)CO)O)C(=O)C2=CC=C1	15.45	12.27	15	12.28	13.8	14.59			1.19	1.09	1.18	1.09	1.14	1.16		
556	CN1[C@@H]2CCC[C@H]1CC(C2)NC(=O)C3=N[N](C)C4=CC=CC=C34	C[N]1N=C(C(=O)NC2C[C@H]3CCC[C@@H](C2)[NH+]3C)C4=CC=CC=C14	3.7	2.94	9.1	8.08	5.2	4.92	0.35	0.33	0.57	0.47	0.96	0.91	0.72	0.69	-0.46	-0.48
557	C[C@@H]1CN(CCN1)C2=C(F)C(=C3C(=O)C(=CN(C4CC4)C3=C2)C(O)=O)C	C[C@@H]1CN(CC[NH2+]1)C2=C(F)C(=C3C(=O)C(=CN(C4CC4)C3=C2)C([O-])=O)C			5.9	4.71	9.2	8.64	0.82	0.65			0.77	0.67	0.96	0.94	-0.09	-0.19
558	CC1=NC(=C(F)C(=N1)NNC(=O)C(CC2CCCC2)CN(O)C=O)N3CCN4CCOCC4C3	CC1=NC(=C(F)C(=N1)NNC(=O)[C@@H](CC2CCCC2)CN([O-])C=O)N3CC[NH+]4CCOC[C@H]4C3	0.75	0.94	5.6	5.17	4.2	4.94			0.12	-0.02	0.75	0.71	0.62	0.69		
559	O=C1C=CC2=C3N1C[C@@H](CN4CCC(CC4)NCC5=CC6=C(OCCC6)C=N5)N3C(=O)C=N2	O=C1C=CC2=C3N1C[C@@H](C[NH+]4CCC(CC4)[NH2+]CC5=NC=C6OCCCC6=C5)N3C(=O)C=N2	2.7	2.68	9.23	5.81	12.6	9.54			0.43	0.43	0.97	0.76	1.10	0.98		
560	COC1=CC=CC2=C1C(=N[N]2CC3=CC=CC(=C3)CNC(=O)C(C)(C)O)N[S](=O)(=O)C4=CC=C(Cl)S4	COC1=C2C(=N[N](CC3=CC(=CC=C3)CNC(=O)C(C)(C)O)C2=CC=C1)N[S](=O)(=O)C4=CC=C(Cl)S4	1.65	1.31	5.1	3.74	13.5	10.91			0.22	0.12	0.71	0.57	1.13	1.04		
561	NC[C@H]1OB(O)C2=C1C=CC=C2OCCCO	[NH3+]C[C@H]1OB(O)C2=C1C=CC=C2OCCCO	2.37	1.88	4.1	5.34	11.6	6.94			0.37	0.27	0.61	0.73	1.06	0.84		
562	OC(=O)C1=CC=CC(=N1)CC2=CC(=CC=C2OCC3=CC=C(Cl)C=C3F)Cl	[O-]C(=O)C1=NC(=CC=C1)CC2=C(OCC3=C(F)C=C(Cl)C=C3)C=CC(=C2)Cl	0.77	0.61	2	1.46	8.15	7.72			0.11	-0.21	0.30	0.16	0.91	0.89		
563	C[C@@H](OC1=C(SC(=C1)[N]2C=NC3=CC=C(CN4CCN(C)CC4)C=C23)C(N)=O)C5=CC=CC=C5C(F)(F)F	C[C@@H](OC1=C(SC(=C1)[N]2C=NC3=C2C=C(C[NH+]4CC[NH+](C)CC4)C=C3)C(N)=O)C5=C(C=CC=C5)C(F)(F)F	12	9.53	20	12.05	10.3	12.57			1.08	0.98	1.30	1.08	1.01	1.10		
564	NC(=N)NC(=O)CC1=C(Cl)C=CC=C1Cl	NC(=N)NC(=O)CC1=C(Cl)C=CC=C1Cl	5.6	4.44	4.5	3.83	15	9.95	0.28	0.22	0.75	0.65	0.65	0.58	1.18	1.00	-0.55	-0.65
565	NC(=N)N[C@@H](CS)C(O)=O	NC(=[NH2+])N[C@H](CS)C([O-])=O	0.25	0.31	2.88	3.03	1.34	1.89			0.60	-0.50	0.46	0.48	0.13	0.28		
566	OC1(CCN(CCCC(=O)C2=CC=C(F)C=C2)CC1)C3=CC=C(Cl)C=C3	OC1(CC[NH+](CCCC(=O)C2=CC=C(F)C=C2)CC1)C3=CC=C(Cl)C=C3	17	17.44	7.8	7.18	35	20.68	0.08	0.06	1.23	1.24	0.89	0.86	1.54	1.32	-1.10	-1.25
567	CC(N)CCCC(C)(C)O	C[C@@H]([NH3+])CCCC(C)(C)O	2.14	2.01	10.72	7.92	2.5	3.50			0.33	0.30	1.03	0.90	0.40	0.54		
568	CN1CC[C@@]23[C@H]4OC5=C2C(=CC=C5OC(C)=O)C[C@@H]1[C@@H]3C=C[C@@H]4OC(C)=O	C[NH+]1CC[C@@]23[C@H]4OC5=C2C(=CC=C5OC(C)=O)C[C@@H]1[C@@H]3C=C[C@@H]4OC(C)=O	1.31	1.42	212.3	56.05	0.062	0.35			0.12	0.15	2.33	1.75	-1.21	-0.46		
569	CN1C(=O)NC(=O)C(C)(C1=O)C2=CCCCC2	CN1C(=O)NC(=O)[C@](C)(C1=O)C2=CCCCC2	1.1	0.87	3.4	2.97	4.9	4.70	0.53	0.44	0.04	-0.06	0.53	0.47	0.69	0.67	-0.28	-0.36
570	COC(=O)C[C@@](O)(CCCC(C)(C)O)C(=O)O[C@H]1[C@H]2C3=C(CCN4CCC[C@]24C=C1OC)C=C5OCOC5=C3	COC(=O)C[C@@](O)(CCCC(C)(C)O)C(=O)O[C@H]1[C@H]2C3=C(CC[NH+]4CCC[C@]24C=C1OC)C=C5OCOC5=C3	1.8	1.48	2.96	4.44	9.8	8.02			0.26	0.17	0.47	0.65	0.99	0.90		

571	NN=C1NN=CC2=CC=CC=C12	N\N=C1\NN=CC2=C1C=CC=C2	1.5	1.19	85	24.81	1	1.54	0.12	0.18	0.18	0.08	1.93	1.39	0.00	0.19	-0.92	-0.74
572	C[C@]12CCC(=O)C=C1CC[C@H]3[C@@H]4CC[C@](O)(C(=O)CO)[C@@]4(C)C[C@H](O)[C@H]23	C[C@]12CCC(=O)C=C1CC[C@@H]3[C@@H]4CC[C@](O)(C(=O)CO)[C@@]4(C)C[C@H](O)[C@H]23	0.38	0.48	5.7	4.18	1.6	2.12	0.2	0.23	0.42	-0.32	0.76	0.62	0.20	0.33	-0.70	-0.65
573	N[S](=O)(=O)C1=CC2=C(NCN[S]2(=O)=O)C=C1C(F)(F)F	N[S](=O)(=O)C1=C(C=C2NCN[S](=O)(=O)C2=C1)C(F)(F)F	2.2	1.75	9.7	6.16	5.2	4.61			0.34	0.24	0.99	0.79	0.72	0.66		
574	CN1CC[C@@]23[C@H]4CCC(=O)[C@@H]2OC5=C(O)C=CC(=C35)C[C@@H]14	C[NH+]1CC[C@@]23[C@H]4CCC(=O)[C@@H]2OC5=C3C(=CC=C5O)C[C@@H]14	4.3	3.42	28	25.72	2.3	3.25	0.86	0.75	0.63	0.53	1.45	1.41	0.36	0.51	-0.07	-0.12
575	CC[C@@]1(O)C(=O)OCC2=C1C=C3N(CC4=C3N=C5C=CC(=CC5=C4)O)C2=O	CC[C@@]1(O)C(=O)OCC2=C1C=C3N(CC4=C3N=C5C=CC(=CC5=C4)O)C2=O	0.22	0.44	2.23	3.13	1.67	2.33			0.66	-0.35	0.35	0.50	0.22	0.37		
576	CCN(CCO)CCCC(C)NC1=CC=NC2=CC(=CC=C12)Cl	CC[NH+](CCO)CCC[C@@H](C)NC1=C2C=CC(=CC2=[NH+]C=C1)Cl	700	137.06	11	8.00	850	94.82	0.57	0.37	2.85	2.14	1.04	0.90	2.93	1.98	-0.24	-0.44
577	CN1[C@@H](C[C@@H](O)C1=O)C2=CC=CN=C2	CN1[C@@H](C[C@@H](O)C1=O)C2=CN=CC=C2	0.85	0.68	1.8	2.16	5.9	4.39			0.07	-0.17	0.26	0.33	0.77	0.64		
578	CC[C@@]1(O)CN2CC[C@H]1C[C@@H]2[C@@H](O)C3=CC=NC4=CC=C(OC)C=C34	CC[C@@]1(O)C[NH+]2CC[C@H]1C[C@@H]2[C@@H](O)C3=C4C=C(OC)C=CC4=NC=C3	6.8	5.40	12	8.46	6.7	5.41	0.47	0.41	0.83	0.73	1.08	0.93	0.83	0.73	-0.33	-0.39
579	CN(C)CCCN1C2=CC=CC=C2CCC3=CC(=CC=C13)O	C[NH+](C)CCCN1C2=C(CCC3=C1C=CC(=C3)O)C=CC=C2	6.6	5.22	9.2	15.88	10	7.80	0.36	0.30	0.82	0.72	0.96	1.20	1.00	0.89	-0.44	-0.53
580	OCC1=NC=C2CN=C(C3=CC=CC=C3F)C4=C(C=CC(=C4)Cl)[N]12	OCC1=NC=C2CN=C(C3=C(F)C=CC=C3)C4=C(C=CC(=C4)Cl)[N]12	0.77	1.28	9.71	5.60	1.1	2.55	0.1	0.05	0.11	0.11	0.99	0.75	0.04	0.41	-1.00	-1.35
581	OC[C@H]1O[C@H]([C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]1O)C2=C(O)[C@@](O)([C@@H]3O[C@@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C(=C(C(=O)C=CC4=CC=C(O)C=C4)C2=O)O	OC[C@H]1O[C@H]([C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]1O)C2=C([O-])[C@@](O)([C@H]3O[C@@H](CO)[C@@H](O)[C@H]3O)C(=C(C(=O)\C=C\C4=CC=C(O)C=C4)C2=O)[O-]	0.2	0.25	1	1.42	2.9	3.96	0.22	0.19	0.70	-0.60	0.00	0.15	0.46	0.60	-0.66	-0.71
582	CN[C@@H]1C[C@H]2OC(C)([C@@H]1OC)[N]3C4=CC=CC=C4C5=C6[C@@H](O)NC(=O)C6=C7C8=CC=CC=C8[N]2C7=C35	C[NH2+][C@@H]1C[C@H]2O[C@](C)([C@@H]1OC)[N]3C4=C(C=CC=C4)C5=C3C6=C(C7=C(C=CC=C7)[N]26)C8=C5[C@@H](O)NC8=O	0.15	0.31	0.0037	0.09	790	142.04	0.0022	0.01	0.82	-0.51	-2.43	-1.03	2.90	2.15	-2.66	-2.25
583	NC(=O)NO	NC(=O)N[O-]	0.52	0.52	1.5	2.17	3.4	1.93	1	0.52	0.28	-0.28	0.18	0.34	0.53	0.29	0.00	-0.29
584	CC1=CC(=C2C(=O)C3=C(O)C=C(O)C4=C5C(=CC(=C6C(=O)C7=C(O)C=C(C)C8=C7C(=C56)C(=C34)C2=C18)O)O)O	CC1=C2C3=C(C)C=C(O)C4=C3C5=C6C2=C(C(=C1)O)C(=O)C7=C6C(=C(O)C=C7O)C8=C5C(=C(O)C=C8O)C4=O	0.25	0.31	0.13	0.33	42	27.03			0.60	-0.50	-0.89	-0.48	1.62	1.43		
585	CCCCCN(C)CCC(O)([P](O)(O)=O)[P](O)(O)=O	CCCCC[NH+](C)CCC(O)([P]([O-])([O-])=O)[P]([O-])([O-])=O	0.55	0.47	1.8	2.26	14	10.96	0.15	0.24	0.26	-0.33	0.26	0.35	1.15	1.04	-0.82	-0.62
586	NC1=NC=NC2=C1C(=N[N]2C3CCCN(C3)C(=O)C=C)C4=CC=C(OC5=CC=CC=C5)C=C4	NC1=C2C(=NC=N1)[N](N=C2C3=CC=C(OC4=CC=CC=C4)C=C3)[C@H]5CCCN(C5)C(=O)C=C	9.75	5.87	16.4	7.68	5	5.49	0.03	0.02	0.99	0.77	1.21	0.89	0.70	0.74	-1.52	-1.66
587	CC(C)CC1=CC=C(C=C1)C(C)C(O)=O	CC(C)CC1=CC=C(C=C1)[C@H](C)C([O-])=O	0.15	0.19	0.82	1.00	1.6	2.26	0.006	0.01	0.82	-0.72	-0.09	0.00	0.20	0.35	-2.22	-2.01
588	CCCCCCCN(CC)CCCC(O)C1=CC=C(N[S](C)(=O)=O)C=C1	CCCCCCC[NH+](CC)CCC[C@@H](O)C1=CC=C(N[S](C)(=O)=O)C=C1	12	9.54	26	14.85	7	5.83	0.6	0.25	1.08	0.98	1.41	1.17	0.85	0.77	-0.22	-0.61
589	C[C@@H]1O[C@H](C[C@H](N)[C@@H]1O)O[C@H]2C[C@@](O)(CC3=C(O)C4=C(C(=C23)O)C(=O)C5=CC=CC=C5C4=O)C(C)=O	C[C@@H]1O[C@H](C[C@H]([NH3+])[C@@H]1O)O[C@H]2C[C@@](O)(CC3=C2C(=C4C(=O)C5=C(C=CC=C5)C(=O)C4=C3O)O)C(C)=O	38	30.16	24	12.71	16	13.24	0.076	0.09	1.58	1.48	1.38	1.10	1.20	1.12	-1.12	-1.03
590	C1CN=C(N1)C2COC3=CC=CC=C3O2	C1C[NH+]=C(N1)[C@H]2COC3=C(O2)C=CC=C3	3.3	1.91	10	10.19	4.2	3.15			0.52	0.28	1.00	1.01	0.62	0.50		
591	CN(CC(=O)NO)C(=O)[C@@H]1CCCC[C@@H]1C(O)=O	CN(CC(=O)N[O-])C(=O)[C@@H]1CCCC[C@@H]1C([O-])=O	1	0.80	6.3	4.68	2.6	2.43	1	0.83	0.00	-0.10	0.80	0.67	0.41	0.39	0.00	-0.08
592	OCCNC(=O)C=CC1=CC=CC=C1	OCCNC(=O)\C=C/C1=CC=CC=C1	0.11	0.21	0.99	2.52	1.35	1.98			0.96	-0.68	0.00	0.40	0.13	0.30		
593	CO[P](=O)(C1=CC(=CC(=C1)C=CC#N)C)C2=C([NH]C3=C2C=C(Cl)C=C3)C(N)=O	CO[P@](=O)(C1=CC(=CC(=C1)C)\C=C/C#N)C2=C([NH]C3=C2C=C(Cl)C=C3)C(N)=O	0.56	0.66	1.71	1.87	4.4	5.75			0.25	-0.18	0.23	0.27	0.64	0.76		
594	CO[P](=O)(C1=CC(=CC(=C1)C=CC#N)C)C2=C([NH]C3=C2C(=C(Cl)C=C3)F)C(N)=O	CO[P@](=O)(C1=CC(=CC(=C1)C)\C=C/C#N)C2=C([NH]C3=C2C(=C(Cl)C=C3)F)C(N)=O	0.97	0.92	1.83	1.95	7.4	7.55			0.01	-0.04	0.26	0.29	0.87	0.88		
595	CC(C(O)C1=CC=C(O)C=C1)N2CCC(CC2)CC3=CC=CC=C3	C[C@@H]([C@@H](O)C1=CC=C(O)C=C1)[NH+]2CCC(CC2)CC3=CC=CC=C3	18.99	14.02	64.57	37.90	4.32	4.80			1.28	1.15	1.81	1.58	0.64	0.68		
596	CCCCCNC(=O)C1=COC(=N1)[C@@H]2[C@H]3CC[C@H](O3)[C@@H]2CC4=CC=CC=C4CCC(O)=O	CCCCCNC(=O)C1=COC(=N1)[C@@H]2[C@H]3CC[C@H](O3)[C@@H]2CC4=C(CCC([O-])=O)C=CC=C4	4.4	2.64	6.4	5.20	22	10.30			0.64	0.42	0.81	0.72	1.34	1.01		

597	ClCCN[P]1(=O)OCCCN1CCCl	ClCCN[P@]1(=O)OCCCN1CCCl	0.62	0.78	1.1	1.41	6.6	3.99	1	0.84	0.21	-0.11	0.04	0.15	0.82	0.60	0.00	-0.08
598	COC1=C(C)C(=NC=C1)C[S](=O)C2=NC3=CC(=CC=C3[NH2])[N]4C=CC=C4	COC1=C(C)C(=NC=C1)C[S](=O)C2=NC3=C([NH2])C=CC(=C3)[N]4C=CC=C4	0.19	0.24	0.73	1.33	3.59	3.12			0.72	-0.62	-0.14	0.13	0.56	0.49		
599	CC#CCC(C)[C@H](O)C=C[C@H]1[C@H](O)C[C@@H]2CC(C[C@H]12)=CCCCC(O)=O	CC#CC[C@H](C)[C@H](O)\C=C/[C@H]1[C@H](O)C[C@@H]2C\C(C[C@H]12)=C\CCCC([O-])=O	0.37	0.31	16	9.96	0.57	0.76	0.4	0.18	0.43	-0.50	1.20	1.00	-0.24	-0.12	-0.40	-0.75
600	CN1CCN(CC1)CC2=CC=C(C=C2)C(=O)NC3=CC=C(C)C(=C3)NC4=NC=CC(=N4)C5=CC=CN=C5	C[NH+]1CC[NH+](CC1)CC2=CC=C(C=C2)C(=O)NC3=CC(=C(C)C=C3)NC4=NC(=CC=N4)C5=CN=CC=C5	3.9	4.91	3.3	4.30	22	10.98	0.05	0.04	0.59	0.69	0.52	0.63	1.34	1.04	-1.30	-1.41
601	CC1=NC=C[N]1CCC(C(N)=O)(C2=CC=CC=C2)C3=CC=CC=C3	CC1=NC=C[N]1CCC(C(N)=O)(C2=CC=CC=C2)C3=CC=CC=C3	1.51	1.20	6.1	4.63	3.2	5.17	0.12	0.09	0.18	0.08	0.79	0.67	0.51	0.71	-0.92	-1.06
602	C[C@@H](O)[C@@H]1[C@H]2CC(=C(N2C1=O)C(O)=O)SCCNC=N	C[C@@H](O)[C@@H]1[C@H]2CC(=C(N2C1=O)C([O-])=O)SCCNC=[NH2+]	0.24	0.28	3	3.67	0.95	1.11	0.86	0.83	0.62	-0.55	0.48	0.56	-0.02	0.05	-0.07	-0.08
603	CN(C)CCCN1C2=CC=CC=C2CCC3=CC=CC=C13	C[NH+](C)CCCN1C2=C(CCC3=C1C=CC=C3)C=CC=C2	12	7.49	13	10.86	16	16.10	0.075	0.18	1.08	0.87	1.11	1.04	1.20	1.21	-1.12	-0.74
604	C[N](C)(=O)CCCN1C2=CC=CC=C2CCC3=CC=CC=C13	C[N+](C)([O-])CCCN1C2=C(CCC3=C1C=CC=C3)C=CC=C2	1.9	1.67	12	8.30	1.8	2.75			0.28	0.22	1.08	0.92	0.26	0.44		
605	O[P](O)(=O)C(NC1CCCCCC1)[P](O)(O)=O	[O-][P]([O-])(=O)C([NH2+]C1CCCCCC1)[P]([O-])([O-])=O	0.24	0.30	2.16	2.78	1.82	3.06	0.9	0.69	0.62	-0.52	0.33	0.44	0.26	0.49	-0.05	-0.16
606	CCC1=CC2=C(CC(C2)NC[C@H](O)C3=CC=C(O)C4=C3C=CC(=O)N4)C=C1CC	CCC1=C(CC)C=C2CC(CC2=C1)[NH2+]C[C@H](O)C3=C4C=CC(=O)NC4=C(O)C=C3	19.4	11.64	4.48	5.79	92.5	30.46	0.05	0.04	1.29	1.07	0.65	0.76	1.97	1.48	-1.30	-1.44
607	CC(C)(C)NC(=O)[C@@H]1CN(CCN1C[C@@H](O)C[C@@H](CC2=CC=CC=C2)C(=O)N[C@@H]3[C@H](O)CC4=CC=CC=C34)CC5=CC=CN=C5	CC(C)(C)NC(=O)[C@@H]1C[NH+](CC[NH+]1C[C@@H](O)C[C@@H](CC2=CC=CC=C2)C(=O)N[C@@H]3[C@H](O)CC4=C3C=CC=C4)CC5=CN=CC=C5	0.82	1.03	18	11.37	1	2.09	0.36	0.17	0.09	0.01	1.26	1.06	0.00	0.32	-0.44	-0.78
608	N[S](=O)(=O)C1=CC=C(C=C1)[S](=O)(=O)NC2=CC=CC3=C2[NH]C=C3Cl	N[S](=O)(=O)C1=CC=C(C=C1)[S](=O)(=O)NC2=C3[NH]C=C(Cl)C3=CC=C2	0.68	0.86	0.72	1.09	20.3	13.33	0.001	0.01	0.17	-0.07	-0.14	0.04	1.31	1.12	-3.00	-2.30
609	CC1(C)C(=CC=CC=CC=C2[N+](CCCC[S]([O-])(=O)=O)C3=CC=C4C=CC=CC4=C3C2(C)C)N(CCCC[S](O)(=O)=O)C5=CC=C6C=CC=CC6=C15	CC1(C)\C(=C\C=C\C=C/C=C\C2=[N+](CCCC[S]([O-])(=O)=O)C3=C(C4=CC=CC=C4C=C3)C2(C)C)N(CCC[S]([O-])(=O)=O)C5=C1C6=CC=CC=C6C=C5	0.035	0.09	6.8	4.23	0.065	0.40	0.05	0.03	1.46	-1.05	0.83	0.63	-1.19	-0.39	-1.30	-1.57
610	COC1=CC=C2[N](C(=C(CC(O)=O)C2=C1)C)C(=O)C3=CC=C(Cl)C=C3	COC1=CC2=C(C=C1)[N](C(=C2CC([O-])=O)C)C(=O)C3=CC=C(Cl)C=C3	0.096	0.12	1.3	1.10	1.4	2.38	0.01	0.01	1.02	-0.92	0.11	0.04	0.15	0.38	-2.00	-1.83
611	CC(C(O)=O)C1=CC=C(C=C1)N2CC3=C(C=CC=C3)C2=O	C[C@H](C([O-])=O)C1=CC=C(C=C1)N2CC3=C(C=CC=C3)C2=O	0.12	0.14	0.65	0.67	2.11	2.71	0.01	0.01	0.92	-0.84	-0.19	-0.18	0.32	0.43	-2.00	-1.98
612	O=C(NC1CCN(CC1)CCC2=C[NH]C3=CC=CC=C23)C4=CC=CC=C4	O=C(NC1CC[NH+](CC1)CCC2=C[NH]C3=C2C=CC=C3)C4=CC=CC=C4	4.9	3.89	20	13.39	4.3	6.30	0.15	0.11	0.69	0.59	1.30	1.13	0.63	0.80	-0.82	-0.94
613	NC(=O)C1=CC(=CC=C1)N	NC(=O)C1=CC(=CC=C1)N	1.9	1.51	7.9	6.07	5	3.59			0.28	0.18	0.90	0.78	0.70	0.55		
614	NC(=N)NCCCNC(=O)[C@@H]1CCCCN1C(=O)[C@@H](CC2CCCCC2)NCC(O)=O	NC(=[NH2+])NCCCNC(=O)[C@@H]1CCCCN1C(=O)[C@@H](CC2CCCCC2)[NH2+]CC([O-])=O	0.26	0.33	6.1	4.80	1	1.53	0.76	0.61	0.59	-0.49	0.79	0.68	0.00	0.19	-0.12	-0.21
615	CN(C)CCCNC1=NC=C(C)C2=C1C3=C4C=CC(=CC4=CC=C3[NH]2)O	C[NH+](C)CCCNC1=C2C(=C(C)C=N1)[NH]C3=CC=C4C=C(O)C=CC4=C23	11	8.74	18	11.46	19	13.67			1.04	0.94	1.26	1.06	1.28	1.14		
616	COC1=CC=CC2=C1C(=O)C3=C(O)C4=C(C[C@](O)(C[C@@H]4O[C@H]5C[C@H](N)[C@H](I)[C@H](C)O5)C(=O)CO)C(=C3C2=O)O	COC1=C2C(=O)C3=C(C(=C4C[C@](O)(C[C@H](O[C@H]5C[C@H]([NH3+])[C@H](I)[C@@H](C)O5)C4=C3O)C(=O)CO)O)C(=O)C2=CC=C1	53.6	42.56	140	47.45	10.3	12.17			1.73	1.63	2.15	1.68	1.01	1.09		
617	CC(=O)N(CC(O)CO)C1=C(I)C(=C(I)C(=C1I)C(=O)NCC(O)CO)C(=O)NCC(O)CO	CC(=O)N(C[C@H](O)CO)C1=C(I)C(=C(I)C(=C1I)C(=O)NC[C@H](O)CO)C(=O)NC[C@H](O)CO	0.16	0.28	2	2.15	1.5	1.99	1	0.36	0.80	-0.55	0.30	0.33	0.18	0.30	0.00	-0.44
618	CN(C(=O)CO)C1=C(I)C(=C(I)C(=C1I)C(=O)NC[C@H](O)CO)C(=O)NC[C@H](O)CO	CN(C(=O)CO)C1=C(I)C(=C(I)C(=C1I)C(=O)NC[C@H](O)CO)C(=O)NC[C@H](O)CO	0.23	0.32	1.4	1.70	2.3	2.31	1	0.32	0.64	-0.50	0.15	0.23	0.36	0.36	0.00	-0.49
619	C[C@H](O)C(=O)NC1=C(I)C(=C(I)C(=C1I)C(=O)NC(CO)CO)C(=O)NC(CO)CO	C[C@H](O)C(=O)NC1=C(I)C(=C(I)C(=C1I)C(=O)NC(CO)CO)C(=O)NC(CO)CO	0.28	0.35	1.9	1.93	2.1	2.73	1	0.51	0.55	-0.45	0.28	0.29	0.32	0.44	0.00	-0.29
620	COC[C@@H](O)CN(C(C)=O)C1=C(I)C(=C(I)C(=C1I)C(=O)NC[C@H](O)CO)C(=O)NC[C@H](O)CO	COC[C@@H](O)CN(C(C)=O)C1=C(I)C(=C(I)C(=C1I)C(=O)NC[C@H](O)CO)C(=O)NC[C@H](O)CO	0.2	0.25	1.27	1.77	2.04	2.29	1	0.33	0.70	-0.60	0.10	0.25	0.31	0.36	0.00	-0.48
621	COCC(=O)NC1=C(I)C(=C(I)C(=C1I)C(=O)N(C	COCC(=O)NC1=C(I)C(=C(I)C(=C1I)C(=O)NC[C@H]	0.22	0.37	1.4	1.71	2.6	2.58	0.99	0.48	0.66	-0.43	0.15	0.23	0.41	0.41	0.00	-0.32

	C)CC(O)CO)C(=O)NCC(O)CO	(O)CO)C(=O)N(C)C[C@H](O)CO																
622	CNC(=O)C1=C(I)C(=C(I)C(=C1I)C(O)=O)NC(C)=O	CNC(=O)C1=C(I)C(=C(I)C(=C1I)NC(C)=O)C([O-])=O	0.17	0.21	2.4	1.90	1.3	1.72	0.98	0.40	0.77	-0.67	0.38	0.28	0.11	0.24	-0.01	-0.40
623	CC(C)[N+]1(C)[C@H]2CC[C@@H]1CC(C2)OC(=O)[C@H](CO)C3=CC=CC=C3	CC(C)[N+]1(C)[C@@H]2CC[C@H]1CC(C2)OC(=O)[C@H](CO)C3=CC=CC=C3	5.1	3.62	31.4	21.20	1.64	1.95	0.95	0.52	0.71	0.56	1.50	1.33	0.21	0.29	-0.02	-0.29
624	CCCCC1=NC2(CCCC2)C(=O)N1CC3=CC=C(C=C3)C4=CC=CC=C4C5=NN=N[NH]5	CCCCC1=NC2(CCCC2)C(=O)N1CC3=CC=C(C=C3)C4=C(C=CC=C4)C5=NN=N[N-]5	0.94	0.75	2.3	2.40	14	8.98	0.1	0.04	0.03	-0.13	0.36	0.38	1.15	0.95	-1.00	-1.35
625	CCC1=C2CN3C(=O)C4=C(C=C3C2=NC5=CC=C(OC(=O)N6CCC(CC6)N7CCCCC7)C=C15)[C@@](O)(CC)C(=O)OC4	CCC1=C2C=C(OC(=O)N3CCC(CC3)[NH+]4CCCCC4)C=CC2=NC5=C1CN6C(=O)C7=C(C=C56)[C@@](O)(CC)C(=O)OC7	3.5	2.78	7	6.36	9	9.45	0.51	0.21	0.54	0.44	0.85	0.80	0.95	0.98	-0.29	-0.68
626	CC1=C(CO)C2=C(C)C3(CC3)[C@@](C)(O)C(=O)C2=C1	CC1=C(CO)C2=C(C)C3(CC3)[C@@](C)(O)C(=O)C2=C1	3.1	2.46	140	35.48	0.3	0.89			0.49	0.39	2.15	1.55	-0.52	-0.05		
627	C[C@@H](C1=NC(=CS1)C2=CC=C(C=C2)C#N)[C@@](O)(C[N]3C=NC=N3)C4=CC(=CC=C4F)F	C[C@@H](C1=NC(=CS1)C2=CC=C(C=C2)C#N)[C@](O)(C[N]3C=NC=N3)C4=C(F)C=CC(=C4)F	5.37	4.26	0.85	1.29	86.9	36.96	0.01	0.01	0.73	0.63	-0.07	0.11	1.94	1.57	-2.00	-1.93
628	CN[C@@H]1[C@@H](O)[C@H](OC[C@]1(CO)O)O[C@@H]2[C@@H](O)[C@H](O[C@H]3O[C@H](CN)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)[C@@H](N)C[C@H]2NC(=O)[C@@H](O)CN	C[NH2+][C@@H]1[C@@H](O)[C@H](OC[C@]1(CO)O)O[C@@H]2[C@@H](O)[C@H](O[C@H]3O[C@H](C[NH3+])[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)[C@@H]([NH3+])C[C@H]2NC(=O)[C@@H](O)C[NH3+]	0.32	0.27	1.3	1.30	24	10.74	0.95	0.85	0.49	-0.57	0.11	0.11	1.38	1.03	-0.02	-0.07
629	CC1(C)[C@@H](CC[C@]2(C)[C@@H]1CC[C@@]3(C)C2C(=O)C=C4[C@H]5C[C@@](C)(CC[C@@]5(C)CC[C@]34C)C(O)=O)O[C@H]6O[C@@H]([C@@H](O)[C@H](O)[C@H]6O[C@@H]7O[C@@H]([C@@H](O)[C@H](O)C@H]7O)C(O)=O)C(O)=O	CC1(C)[C@@H](CC[C@]2(C)[C@@H]1CC[C@@]3(C)C2C(=O)C=C4[C@H]5C[C@@](C)(CC[C@@]5(C)CC[C@@]34C)C([O-])=O)O[C@H]6O[C@@H]([C@@H](O)[C@H](O)[C@H]6O[C@@H]7O[C@@H]([C@@H](O)[C@H](O)C@H]7O)C([O-])=O)C([O-])=O	0.05	0.09	0.05	0.17	23.1	12.75			1.30	-1.04	-1.30	-0.78	1.36	1.11		
630	COC1=CC(=CC=C1C2=NC3=CN=CC=C3[NH]2)[S](C)=O	COC1=C(C=CC(=C1)[S](C)=O)C2=NC3=C([NH]2)C=CN=C3	1.67	1.33	20.7	10.84	1.2	1.48	0.48	0.27	0.22	0.12	1.32	1.03	0.08	0.17	-0.32	-0.57
631	NNC(=O)C1=CC=NC=C1	NNC(=O)C1=CC=NC=C1	0.82	0.97	7.4	6.63	1	1.25	1	0.91	0.09	-0.01	0.87	0.82	0.00	0.10	0.00	-0.04
632	CC(C)NCC(O)C1=CC=C(O)C(=C1)O	CC(C)[NH2+]C[C@H](O)C1=CC(=C(O)C=C1)O	1.5	1.66	56	28.29	0.41	0.84	0.71	0.78	0.18	0.22	1.75	1.45	-0.39	-0.07	-0.15	-0.11
633	O=[N](=O)O[C@H]1CO[C@@H]2[C@@H](CO[C@H]12)O[N](=O)=O	[O-][N+](=O)O[C@H]1CO[C@@H]2[C@@H](CO[C@H]12)O[N+]([O-])=O	1.9	1.51	31	14.97	1.7	2.02	0.72	0.68	0.28	0.18	1.49	1.18	0.23	0.31	-0.14	-0.17
634	O[C@@H]1CO[C@@H]2[C@H](CO[C@H]12)O[N](=O)=O	O[C@@H]1CO[C@@H]2[C@H](CO[C@H]12)O[N+]([O-])=O	0.86	0.72	6.2	4.56	1.9	3.03			0.07	-0.14	0.79	0.66	0.28	0.48		
635	O[C@H]1CO[C@@H]2[C@@H](CO[C@H]12)O[N](=O)=O	O[C@H]1CO[C@@H]2[C@@H](CO[C@H]12)O[N+]([O-])=O	0.7	0.78	2	3.36	4.1	3.07	1	0.78	0.15	-0.11	0.30	0.53	0.61	0.49	0.00	-0.11
636	CN1C(=C(O)C2=CC=CC=C2[S]1(=O)=O)C(=O)NC3=NOC(=C3)C	CN1C(=C([O-])C2=C(C=CC=C2)[S]1(=O)=O)C(=O)NC3=NOC(=C3)C	0.19	0.17	0.07	0.14	33	16.65	0.035	0.03	0.72	-0.77	-1.15	-0.85	1.52	1.22	-1.46	-1.50
637	COC(=O)C1=C(C)NC(=C(C1C2=CC=CC3=NON=C23)C(=O)OC(C)C)C	COC(=O)C1=C(C)NC(=C([C@@H]1C2=CC=CC3=NON=C23)C(=O)OC(C)C)C	1.5	1.89	26	16.33	3.3	3.87	0.04	0.04	0.18	0.28	1.41	1.21	0.52	0.59	-1.40	-1.40
638	CCC(C)N1N=CN(C1=O)C2=CC=C(C=C2)N3CCN(CC3)C4=CC=C(OCC5COC(C[N]6C=NC=N6)(O5)C7=CC=C(Cl)C=C7Cl)C=C4	CC[C@@H](C)N1N=CN(C1=O)C2=CC=C(C=C2)N3CCN(CC3)C4=CC=C(OC[C@@H]5CO[C@](C[N]6C=NC=N6)(O5)C7=C(Cl)C=C(Cl)C=C7)C=C4	7.4	5.88	5.1	3.35	25	18.31	0.002	0.0039	0.87	0.77	0.71	0.53	1.40	1.26	-2.70	-2.41
639	COC1=CC2=C(CC(=O)N(CCCN(C)C[C@H]3CC4=CC(=C(OC)C=C34)OC)CC2)C=C1OC	COC1=C(OC)C=C2CC(=O)N(CCC[NH+](C)C[C@H]3CC4=C3C=C(OC)C(=C4)OC)CCC2=C1	1.66	1.32	10.27	8.05			0.28	0.18	0.22	0.12	1.01	0.91			-0.55	-0.75
640	COC1=CC=C(CN(CCC(O)=O)C(=O)CNC(=O)CC2=CC=C(NC(=O)NC3=CC=CC=C3C)C(=C2)OC)C=C1OC	COC1=C(OC)C=C(CN(CCC([O-])=O)C(=O)CNC(=O)CC2=CC(=C(NC(=O)NC3=C(C)C=CC=C3)C=C2)OC)C=C1	0.25	0.31	11	7.23	1.6	2.54			0.60	-0.50	1.04	0.86	0.20	0.41		
641	C[C@H]1CCC[C@@]2(C)O[C@H]2C[C@H](NC(=O)C[C@H](O)C(C)(C)C(=O)[C@H](C)[C@@H]1O)C(C)=CC3=CSC(=N3)C	C[C@H]1CCC[C@@]2(C)O[C@H]2C[C@H](NC(=O)C[C@H](O)C(C)(C)C(=O)[C@H](C)[C@@H]1O)\C(C)=C\C3=CSC(=N3)C	11	8.74	10	6.19	17	14.94	0.2	0.15	1.04	0.94	1.00	0.79	1.23	1.17	-0.70	-0.83
642	CC(C)C[C@H](NC(=O)CNC(=O)C1=CC(=CC=C1Cl)Cl)B(O)O	CC(C)C[C@H](NC(=O)CNC(=O)C1=C(Cl)C=CC(=C1)Cl)B(O)O	3.61	2.87	0.5	1.14	97	25.49	0.01	0.02	0.56	0.46	-0.30	0.06	1.99	1.41	-2.00	-1.71

643	NC[C@H]1O[C@H](O[C@@H]2[C@@H](N)C[C@@H](N)[C@H](O[C@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](N)[C@H]3O)[C@H]2O)[C@@H](O)[C@@H](O)[C@@H]1O	[NH3+]C[C@H]1O[C@H](O[C@@H]2[C@@H]([NH3+])C[C@@H]([NH3+])[C@H](O[C@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]([NH3+])[C@H]3O)[C@H]2O)[C@@H](O)[C@@H](O)[C@@H]1O	0.26	0.26	1.4	1.39	2.1	2.73	0.99	0.85	0.59	-0.59	0.15	0.14	0.32	0.44	0.00	-0.07
644	CNC1(CCCCC1=O)C2=CC=CC=C2Cl	C[NH2+][C@@]1(CCCCC1=O)C2=C(Cl)C=CC=C2	2.9	2.86	19	13.02	2.8	3.57	0.47	0.35	0.46	0.46	1.28	1.11	0.45	0.55	-0.33	-0.45
645	FC1=CC=C(C=C1)C(=O)C2CCN(CC2)CCN3C(=O)NC4=CC=CC=C4C3=O	FC1=CC=C(C=C1)C(=O)C2CC[NH+](CC2)CCN3C(=O)NC4=C(C=CC=C4)C3=O	3.9	3.10	6.7	6.04	12	7.73	0.055	0.05	0.59	0.49	0.83	0.78	1.08	0.89	-1.26	-1.32
646	CCC(=O)C1(CCN(C)CC1)C2=CC=CC(=C2)O	CCC(=O)C1(CC[NH+](C)CC1)C2=CC(=CC=C2)O	0.48	1.70	9.2	14.91	2.3	3.56			0.32	0.23	0.96	1.17	0.36	0.55		
647	CC(C(O)=O)C1=CC=CC(=C1)C(=O)C2=CC=CC=C2	C[C@@H](C([O-])=O)C1=CC(=CC=C1)C(=O)C2=CC=CC=C2	0.13	0.09	1.6	1.10	2.1	2.66	0.008	0.01	0.89	-1.05	0.20	0.04	0.32	0.42	-2.10	-1.86
648	OC(=O)C1CC[N]2C1=CC=C2C(=O)C3=CC=CC=C3	[O-]C(=O)[C@@H]1CC[N]2C1=CC=C2C(=O)C3=CC=CC=C3	0.11	0.11	0.35	0.53	5.1	4.00	0.0068	0.02	0.96	-0.96	-0.46	-0.27	0.71	0.60	-2.17	-1.80
649	CSC[C@H](NC(=O)COC1=C2C=CN=CC2=CC=C1)C(=O)N[C@@H](CC3=CC=CC=C3)[C@H](O)C(=O)N4CSC[C@H]4C(=O)NC(C)(C)C	CSC[C@H](NC(=O)COC1=C2C=CN=CC2=CC=C1)C(=O)N[C@@H](CC3=CC=CC=C3)[C@H](O)C(=O)N4CSC[C@H]4C(=O)NC(C)(C)C	0.11	0.14	10.5	7.47	0.44	1.23			0.96	-0.86	1.02	0.87	-0.36	0.09		
650	CCCCCCCCCCC=CC=CC(=O)NCC(=O)N[C@@H]1[C@@H](O)[C@@H](O)[C@@H](NC2=C3N=CN=C3N=C[NH2)O[C@H]1[C@@H](O)CO	CCCCCCCCCC\C=C/C=C/C(=O)NCC(=O)N[C@@H]1[C@@H](O)[C@@H](O)[C@@H](NC2=C3N=CN=C3N=C[NH2)O[C@H]1[C@@H](O)CO	0.17	0.21	2.7	3.18	1.3	2.33			0.77	-0.67	0.43	0.50	0.11	0.37		
651	CC[C@@]1(O)C[C@H](O[C@@H]2C[C@@H]([C@H](O)[C@H](C)O2)N3CCOCC3)C4=C(O)C5=C(C(=C4[C@H]1O)O)C(=O)C6=C(C(=CC=C6)O)C5=O	CC[C@@]1(O)C[C@H](O[C@@H]2C[C@@H]([C@H](O)[C@H](C)O2)[NH+]3CCOCC3)C4=C([C@H]1O)C(=C5C(=O)C6=C(C(=CC=C6)O)C(=O)C5=C4O)O	20.9	16.60	42.8	24.35	10.7	12.75	0.09	0.08	1.32	1.22	1.63	1.39	1.03	1.11	-1.05	-1.07
652	NCCCNC1=CC=C2C(=N[N]3C4=C(O)C=CC(=C4C(=O)C1=C23)O)CNCCO	[NH3+]CCCNC1=C2C(=O)C3=C([NH]4N=C(C[NH2+]CCO)C(=C24)C=C1)C(=CC=C3O)O	12	9.52	18	12.94	32	25.44			1.08	0.98	1.26	1.11	1.51	1.41		
653	CCC1=C(O)C=C(O)C(=C1CC(=O)N(CCOC)CCOC)C(=O)C2=CC=C(OCCN3CCOCC3)C(=C2)OC	CCC1=C(CC(=O)N(CCOC)CCOC)C(=C(O)C=C1O)C(=O)C2=CC(=C(OCC[NH+]3CCOCC3)C=C2)OC	1.32	1.13	6.87	6.56	5.94	7.75			0.12	0.05	0.84	0.82	0.77	0.89		
654	N[C@@H](CC1=C[NH]C2=C1C=C(O)C=C2)C(O)=O	[NH3+][C@@H](CC1=C[NH]C2=C1C=C(O)C=C2)C([O-])=O	0.8	0.75	1.72	2.57	6.14	4.35			0.10	-0.12	0.24	0.41	0.79	0.64		
655	CCCC1=C(OCCC[S](=O)(=O)C2=CC=C(C=C2)C(=O)CCC(O)=O)C=CC(=C1O)C(C)=O	CCCC1=C(OCCC[S](=O)(=O)C2=CC=C(C=C2)C(=O)CCC([O-])=O)C=CC(=C1O)C(C)=O			17.44	8.76	0.04	0.29					1.24	0.94	-1.40	-0.54		
656	CC(C)(N)CC(=O)N[C@@H]1CCC2=CC=CC=C2N(CC3=CC=C(C=C3)C4=CC=CC=C4C5=NN=N[NH]5)C1=O	CC(C)([NH3+])CC(=O)N[C@@H]1CCC2=C(C=CC=C2)N(CC3=CC=C(C=C3)C4=C(C=CC=C4)C5=NN=N[N-]5)C1=O	0.2	0.25	3.05	2.93	3.8	4.96	0.06	0.06	0.70	-0.60	0.48	0.47	0.58	0.70	-1.22	-1.26
657	ClC1=CC=CC(=C1)N2CCN(CC2=O)CC3=CN=C[N]3CC4=CC=C(C=C4)C#N	ClC1=CC(=CC=C1)N2CC[NH+](CC2=O)CC3=CN=C[N]3CC4=CC=C(C=C4)C#N	0.8	1.01	3.2	3.63	2.6	3.92			0.10	0.00	0.51	0.56	0.41	0.59		
658	CC(CCC1=CC=CC=C1)NCC(O)C2=CC=C(O)C(=C2)C(N)=O	C[C@H](CCC1=CC=CC=C1)[NH2+]C[C@@H](O)C2=CC(=C(O)C=C2)C(N)=O	4.8	2.89	23	14.76	4.4	5.70	0.5	0.33	0.68	0.46	1.36	1.17	0.64	0.76	-0.30	-0.48
659	COC[C@@H](NC(C)=O)C(=O)NCC1=CC=CC=C1	COC[C@@H](NC(C)=O)C(=O)NCC1=CC=CC=C1	0.58	0.50	17.2	10.31	12.3	6.60	0.85	0.74	0.24	-0.30	1.24	1.01	1.09	0.82	-0.07	-0.13
660	C[C@@H]1O[C@H](C[C@@H]([C@@H]1O[S](C)(=O)=O)N2CC2)O[C@H]3C[C@@](O)(CC4=C3C(=C5C(=O)C6=CC=CC=C6C(=O)C5=C4O)O)C(C)=O	C[C@@H]1O[C@H](C[C@@H]([C@@H]1O[S](C)(=O)=O)[NH+]2CC2)O[C@H]3C[C@@](O)(CC4=C3C(=C5C(=O)C6=C(C=CC=C6)C(=O)C5=C4O)O)C(C)=O	2.95	3.72	23.54	17.69	7.33	6.91	0.006	0.02	0.47	0.57	1.37	1.25	0.87	0.84	-2.22	-1.77
661	NC(=N)C1=CC=C(C=C1)C(=O)N[C@@H](CC2=CC=C(O)C=C2)C(=O)N3CCC(CC3)OCC(O)=O	NC(=[NH2+])C1=CC=C(C=C1)C(=O)N[C@@H](CC2=CC=C(O)C=C2)C(=O)N3CCC(CC3)OCC([O-])=O	0.29	0.36	1.9	2.32	2.1	2.73	0.94	0.58	0.54	-0.44	0.28	0.36	0.32	0.44	-0.03	-0.24
662	NC1=NC(=O)N(C=C1)[C@@H]2CS[C@H](CO)O2	NC1=NC(=O)N(C=C1)[C@@H]2CS[C@@H](CO)O2	1.3	0.96	4.8	4.75	9.1	6.34	0.94	0.88	0.11	-0.02	0.68	0.68	0.96	0.80	-0.03	-0.06
663	NC(CC1=CC=CC=N1)C2=CC=CC=C2	[NH3+][C@@H](CC1=NC=CC=C1)C2=CC=CC=C2	1.62	2.04	1.8	3.19	10.4	7.87			0.21	0.31	0.26	0.50	1.02	0.90		
664	COC(=O)C1=CN=C2[N]1CCC3=CC=CC=C3C2=C4CCN(CC4)CCC5=CC=C(OCC6=CC=C7C	COC(=O)C1=CN=C2[N]1CCC3=C(C=CC=C3)[C]2=[C]4CC[NH+](CC4)CCC5=CC=C(OCC6=NC7=CC=C	6.03	4.79	14.14	8.92	10.6	10.70	0.001	0.0029	0.78	0.68	1.15	0.95	1.03	1.03	-3.00	-2.53

	=CC=CC7=N6)C=C5	C=C7C=C6)C=C5																
665	CC1=C(OCC(F)(F)F)C=CN=C1C[S](=O)C2=NC3=CC=CC=C3[NH]2	CC1=C(C[S](=O)C2=NC3=C([NH]2)C=CC=C3)N=CC=C1OCC(F)(F)F	0.28	0.35	4.4	3.34	1	2.12	0.021	0.04	0.55	-0.45	0.64	0.52	0.00	0.33	-1.68	-1.45
666	CNC(=O)N(N(CCCl)[S](C)(=O)=O)[S](C)(=O)=O	CNC(=O)N(N(CCCl)[S](C)(=O)=O)[S](C)(=O)=O	0.88	0.73	23.1	10.84	0.49	0.84			0.06	-0.14	1.36	1.04	-0.31	-0.08		
667	C[S](=O)(=O)C1=CC(=CC2=C1[N](CC3=CC=C(Cl)C=C3)C4=C2CC[C@@H]4CC(O)=O)F	C[S](=O)(=O)C1=C2[N](CC3=CC=C(Cl)C=C3)C4=C(CC[C@H]4CC([O-])=O)C2=CC(=C1)F	1	0.79	1.21	1.28	11.8	8.33			0.00	-0.10	0.08	0.11	1.07	0.92		
668	CC(=O)OC1C(=O)[C@]23C[C@H]2C[C@H]4OC[C@@]4(OC(C)=O)[C@H]3[C@H](OC(=O)C5=CC=CC=C5)[C@]6(O)C[C@H](OC(=O)[C@@H](O)[C@@H](NC(=O)OC(C)(C)C)C7=CC=CC=C7)C(=C1C6(C)C)C	CC(=O)O[C@H]1C(=O)[C@]23C[C@H]2C[C@H]4OC[C@@]4(OC(C)=O)[C@H]3[C@H](OC(=O)C5=CC=CC=C5)[C@]6(O)C[C@H](OC(=O)[C@H](O)[C@@H](NC(=O)OC(C)(C)C)C7=CC=CC=C7)C(=C1C6(C)C)C	17	13.50	10.8	7.26	33.9	27.38			1.23	1.13	1.03	0.86	1.53	1.44		
669	CC(C)OC(=O)CCCC=CC[C@H]1[C@@H](O)C[C@@H](O)[C@@H]1CC[C@@H](O)CCC2=CC=CC=C2	CC(C)OC(=O)CCC\C=C\C[C@H]1[C@@H](O)C[C@@H](O)[C@@H]1CC[C@@H](O)CCC2=CC=CC=C2			6.7	6.17	0.28	0.66	0.1	0.07			0.83	0.79	-0.55	-0.18	-1.00	-1.17
670	C[C@@H]1CC[C@@]23CCC(=O)[C@H]2[C@]1(C)[C@@H](C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]3C)OC(=O)CS[C@@H]4CC[C@@H](N)C[C@H]4O	C[C@@H]1CC[C@@]23CCC(=O)[C@H]2[C@]1(C)[C@@H](C[C@@](C)(C=C)[C@@H](O)[C@@H]3C)OC(=O)CS[C@H]4CC[C@@H]([NH3+])C[C@H]4O	1.32	1.05	3.96	5.62	6.4	4.91	0.17	0.15	0.12	0.02	0.60	0.75	0.81	0.69	-0.77	-0.82
671	CNCC[C@@H](O)[C@@H]1C[C@@H](CN1)SC2=C(N3[C@H]([C@H]2C)[C@@H]([C@@H](C)O)C3=O)C(O)=O	C[NH2+]CC[C@@H](O)[C@@H]1C[C@@H](C[NH2+]1)SC2=C(N3[C@H]([C@@H]2C)[C@@H]([C@@H](C)O)C3=O)C([O-])=O	0.22	0.37	2.02	2.41	1.48	1.76			0.66	-0.44	0.31	0.38	0.17	0.24		
672	OC(=O)CSC1=NN=C(Br)[N]1C2=CC=C(C3CC3)C4=CC=CC=C24	[O-]C(=O)CSC1=NN=C(Br)[N]1C2=C3C=CC=CC3=C(C=C2)C4CC4	0.29	0.32	1.43	1.30	5	4.97	0.02	0.02	0.54	-0.49	0.16	0.11	0.70	0.70	-1.70	-1.78
673	N#CC1=CC=C(C=C1)C([N]2C=NC=N2)C3=CC=C(C=C3)C#N	N#CC1=CC=C(C=C1)C([N]2C=NC=N2)C3=CC=C(C=C3)C#N	1.9	1.51	0.57	0.92	45	22.32	0.41	0.20	0.28	0.18	-0.24	-0.04	1.65	1.35	-0.39	-0.69
674	CC[C@H](N1CCCC1=O)C(N)=O	CC[C@H](N1CCCC1=O)C(N)=O	0.6	0.76	0.9	1.40	8.23	5.56	0.9	0.86	0.22	-0.12	-0.05	0.15	0.92	0.75	-0.05	-0.07
675	CCCCN1CCCC[C@H]1C(=O)NC2=C(C)C=CC=C2C	CCCC[NH+]1CCCC[C@H]1C(=O)NC2=C(C)C=CC=C2C	0.49	0.83	8.7	6.34	0.79	1.64	0.03	0.05	0.31	-0.08	0.94	0.80	-0.10	0.21	-1.52	-1.29
676	C[C@@H]1CN(CC[C@]1(C(O)=O)C2=CC=C2)C3CCC(CC3)(C#N)C4=CC=C(F)C=C4	C[C@@H]1C[NH+](CC[C@]1(C([O-])=O)C2=CC=CC=C2)C3CCC(CC3)(C#N)C4=CC=C(F)C=C4	1.17	1.31	0.43	0.83	33	18.01	0.453	0.20	0.07	0.12	-0.37	-0.08	1.52	1.26	-0.34	-0.70
677	N[C@@H](CC1=CC=C(O)C(=C1)O)C(O)=O	[NH3+][C@@H](CC1=CC(=C(O)C=C1)O)C([O-])=O	1.7	1.35	23	10.20	1.3	1.51	0.76	0.78	0.23	0.13	1.36	1.01	0.11	0.18	-0.12	-0.11
678	C[C@H]1COC2=C(N3CCN(C)CC3)C(=CC4=C2N1C=C(C(O)=O)C4=O)F	C[C@H]1COC2=C3N1C=C(C([O-])=O)C(=O)C3=CC(=C2N4CC[NH+](C)CC4)F	1.2	1.44	1.9	2.24	8.8	8.26	0.75	0.65	0.08	0.16	0.28	0.35	0.94	0.92	-0.12	-0.19
679	NC1=NC(=O)C2=C(NC[C@H](CNC3=CC=C(C=C3)C(=O)N[C@@H](CCC(O)=O)C(O)=O)N2C=O)N1	NC1=NC(=O)C2=C(NC[C@H](CNC3=CC=C(C=C3)C(=O)N[C@@H](CCC([O-])=O)C([O-])=O)N2C=O)N1	0.27	0.34	4.1	3.79	1.1	1.63			0.57	-0.47	0.61	0.58	0.04	0.21		
680	COC1=CC=C2SC3=CC=CC=C3N(C[C@H](CCN(C)C)C2=C1	COC1=CC2=C(SC3=C(C=CC=C3)N2C[C@H](C)C[NH+](C)C)C=C1	12	6.26	9.9	10.74	30	21.09			1.08	0.80	1.00	1.03	1.48	1.32		
681	CC[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=CC(=O)CC[C@H]34)[C@@H]1CC[C@@]2(O)C#C	CC[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=CC(=O)CC[C@H]34)[C@@H]1CC[C@@]2(O)C#C	1.5	1.36	1.8	2.49	9.4	5.52	0.025	0.03	0.18	0.13	0.26	0.40	0.97	0.74	-1.60	-1.55
682	CNC[C@H](O)CC12CCC(C3=CC=CC=C13)C4=CC=CC=C24	C[NH2+]C[C@H](O)CC12CCC(C3=C1C=CC=C3)C4=C2C=CC=C4	18.8	14.93	14.6	12.88	18.8	16.54			1.27	1.17	1.16	1.11	1.27	1.22		
683	CN1CC[C@]23CCCC[C@H]2[C@H]1CC4=C3C=C(O)C=C4	C[NH+]1CC[C@@]23CCCC[C@H]2[C@H]1CC4=C3C=C(O)C=C4	11.5	5.22	15.7	16.46	13.5	10.12	0.6	0.26	1.06	0.72	1.20	1.22	1.13	1.01	-0.22	-0.59
684	C[C@@H]1CC(=O)NN=C1C2=CC=C(NN=C(C#N)C#N)C=C2	C[C@@H]1CC(=O)NN=C1C2=CC=C(NN=C(C#N)C#N)C=C2	0.24	0.40	3.8	4.32	1.1	2.29	0.02	0.03	0.62	-0.40	0.58	0.64	0.04	0.36	-1.70	-1.51
685	NCCCC[C@H](N[C@H]1CCC2=C(C=CC=C2)N(CC(O)=O)C1=O)C(O)=O	[NH3+]CCCC[C@H]([NH2+][C@H]1CCC2=C(C=CC=C2)N(CC([O-])=O)C1=O)C([O-])=O	1.98	1.57	1.23	1.71					0.30	0.20	0.09	0.23				
686	NC(=O)N1C2=C(CC(O)C3=C1C=CC=C3)C=CC=C2	NC(=O)N1C2=C(C[C@H](O)C3=C1C=CC=C3)C=CC=C2	0.72	0.91	0.88	1.48	9.8	8.70	0.7	0.33	0.14	-0.04	-0.06	0.17	0.99	0.94	-0.15	-0.48
687	CCN(CC)CC(=O)NC1=C(C)C=CC=C1C	CC[NH+](CC)CC(=O)NC1=C(C)C=CC=C1C	1.8	1.58	16	10.89	1.6	2.03	0.33	0.28	0.26	0.20	1.20	1.04	0.20	0.31	-0.48	-0.55
688	CC#CC[N]1C(=NC2=C1C(=O)N(CC3=NC4=C	CC#CC[N]1C(=NC2=C1C(=O)N(CC3=NC4=CC=CC=	16	12.72	1.9	2.85	129	38.43			1.20	1.10	0.28	0.45	2.11	1.58		

	(C=CC=C4)C(=N3)C)C(=O)N2C)N5CCC[C@@H](N)C5	C4C(=N3)C)C(=O)N2C)N5CCC[C@@H]([NH3+])C5																
689	CCC[C@@H]1C[C@H](N(C)C1)C(=O)N[C@H]([C@@H](C)O)[C@H]2O[C@H](SC)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]2O	CCC[C@@H]1C[C@H]([NH+](C)C1)C(=O)N[C@H]([C@@H](C)O)[C@H]2O[C@H](SC)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]2O	1	0.68	2.1	2.69	5.6	4.08			0.00	-0.17	0.32	0.43	0.75	0.61		
690	CC(=O)NC[C@H]1CN(C(=O)O1)C2=CC=C(N3CCOCC3)C(=C2)F	CC(=O)NC[C@H]1CN(C(=O)O1)C2=CC(=C(C=C2)N3CCOCC3)F	0.58	0.68	1.8	2.99	4.5	3.53	0.69	0.55	0.24	-0.16	0.26	0.48	0.65	0.55	-0.16	-0.26
691	OC(=O)CCCC[C@@H]1CCSS1	[O-]C(=O)CCCC[C@@H]1CCSS1	0.1	0.14	11.5	7.96	0.21	0.31			1.00	-0.86	1.06	0.90	-0.68	-0.50		
692	OC(=O)CCCC[C@H]1CCSS1	[O-]C(=O)CCCC[C@H]1CCSS1	0.11	0.14	13.4	8.43	0.21	0.31			0.96	-0.86	1.13	0.93	-0.68	-0.51		
693	C[C@@H](CC1=CC=CC=C1)NC(=O)[C@@H](N)CCCCN	C[C@@H](CC1=CC=CC=C1)NC(=O)[C@@H]([NH3+])CCCC[NH3+]	0.6	0.76	17	13.06	1.2	1.89			0.22	-0.12	1.23	1.12	0.08	0.28		
694	NCCCC[C@H](N[C@@H](CCC1=CC=CC=C1)C(O)=O)C(=O)N2CCC[C@H]2C(O)=O	[NH3+]CCCC[C@H]([NH2+][C@@H](CCC1=CC=CC=C1)C([O-])=O)C(=O)N2CCC[C@H]2C([O-])=O	0.89	0.81	1.2	1.64	42	15.35	1	0.68	0.05	-0.09	0.08	0.22	1.62	1.19	0.00	-0.17
695	CCN(CC)C(=O)N[C@@H]1CN(C)[C@@H]2CC3=C[NH]C4=CC=CC(=C34)C2=C1	CCN(CC)C(=O)N[C@@H]1C[NH+](C)[C@@H]2CC3=C[NH]C4=C3C(=CC=C4)C2=C1	1.73	2.16	13.3	10.05	1.8	2.49			0.24	0.34	1.12	1.00	0.26	0.40		
696	CCN1C=C(C(O)=O)C(=O)C2=CC(=C(N3CCN[C@@H](C)C3)C(=C12)F)F	CCN1C=C(C([O-])=O)C(=O)C2=C1C(=C(N3CC[NH2+][C@@H](C)C3)C(=C2)F)F	2.04	1.62	3.98	3.17	8.1	7.80			0.31	0.21	0.60	0.50	0.91	0.89		
697	NC1=NC(=C2[NH]C=NC2=N1)OCC3=CC(=CS3)Br	NC1=NC2=C([NH]C=N2)C(=N1)OCC3=CC(=CS3)Br			21.55	9.85	2.92	4.08					1.33	0.99	0.47	0.61		
698	FC(F)(F)CNC(=O)C1(CCCCN2CCC(CC2)NC(=O)C3=C(C=CC=C3)C4=CC=C(C=C4)C(F)(F)F)C5=C(C=CC=C5)C6=C1C=CC=C6	FC(F)(F)CNC(=O)C1(CCCC[NH+]2CCC(CC2)NC(=O)C3=C(C=CC=C3)C4=CC=C(C=C4)C(F)(F)F)C5=C(C=CC=C5)C6=C1C=CC=C6	16.3	11.24	8.7	5.35	39.7	33.22	0.002	0.0038	1.21	1.05	0.94	0.73	1.60	1.52	-2.70	-2.42
699	OC1N=C(C2=CC=CC=C2Cl)C3=CC(=CC=C3NC1=O)Cl	O[C@@H]1N=C(C2=C(Cl)C=CC=C2)C3=C(NC1=O)C=CC(=C3)Cl	1.3	1.31	1	1.38	17	14.58	0.09	0.03	0.11	0.12	0.00	0.14	1.23	1.16	-1.05	-1.48
700	CC(C)N1CCC(CC1)N(C(=O)CC2=CC=CC=C2)C3=CC=C(Cl)C=C3	CC(C)[NH+]1CCC(CC1)N(C(=O)CC2=CC=CC=C2)C3=CC=C(Cl)C=C3	6.6	5.24	16	10.50	6.5	9.63	0.15	0.10	0.82	0.72	1.20	1.02	0.81	0.98	-0.82	-1.01
701	CN1C(=O)C(O)N=C(C2=CC=CC=C2Cl)C3=CC(=CC=C13)Cl	CN1C(=O)[C@H](O)N=C(C2=C(Cl)C=CC=C2)C3=C1C=CC(=C3)Cl	1.6	1.18	4	2.87	4.9	6.54	0.12	0.07	0.20	0.07	0.60	0.46	0.69	0.82	-0.92	-1.14
702	CCCCC1=NC(=C(CO)[N]1CC2=CC=C(C=C2)C3=CC=CC=C3C4=NN=N[NH]4)Cl	CCCCC1=NC(=C(CO)[N]1CC2=CC=C(C=C2)C3=C(C=CC=C3)C4=NN=N[N-]4)Cl	0.37	0.47	8.2	4.70	1.8	3.04	0.01	0.01	0.43	-0.33	0.91	0.67	0.26	0.48	-2.00	-1.92
703	CC1=C(C=C(C=C1F)C(=O)NC2CC2)C3=CC=C(C=N3)C(=O)NCC(C)(C)C	CC1=C(C=C(C=C1F)C(=O)NC2CC2)C3=NC=C(C=C3)C(=O)NCC(C)(C)C	1.67	2.10	3.77	3.34	6.95	7.91			0.22	0.32	0.58	0.52	0.84	0.90		
704	CC[C@H](C)C(=O)O[C@H]1C[C@@H](C)C=C2C=C[C@H](C)[C@H](CC[C@@H](O)C[C@@H](O)CC(O)=O)[C@@H]12	CC[C@H](C)C(=O)O[C@H]1C[C@@H](C)C=C2C=C[C@H](C)[C@H](CC[C@@H](O)C[C@@H](O)CC([O-])=O)[C@@H]12	0.87	0.48	7.2	6.44	1.4	1.71	0.043	0.05	0.06	-0.32	0.86	0.81	0.15	0.23	-1.37	-1.26
705	CCCCCN(CCCOC)C(=O)C(CCC(O)=O)NC(=O)C1=CC=C(Cl)C(=C1)Cl	CCCCCN(CCCOC)C(=O)[C@@H](CCC([O-])=O)NC(=O)C1=CC(=C(Cl)C=C1)Cl	0.24	0.30	1	1.74	5.2	2.95			0.62	-0.52	0.00	0.24	0.72	0.47		
706	CN(C1CCN(CC1)C[C@H](O)COC2=CC=C(F)C(=C2)F)C3=NC4=CC=CC=C4S3	CN(C1CC[NH+](CC1)C[C@H](O)COC2=CC(=C(F)C=C2)F)C3=NC4=C(S3)C=CC=C4	2.6	4.35	1.7	2.50	21.6	17.43	0.003	0.01	0.41	0.64	0.23	0.40	1.33	1.24	-2.52	-2.15
707	COC1=CC=C2[NH]C3=C(CCN[C@]34CS[C@H]5[C@H]6[C@@H]7N(C)[C@@H](CC8=C7C(=C(OC)C(=C8)C)O)[C@H](O)N6[C@@H](COC4=O)C9=C5C(=C(C)C%10=C9OCO%10)OC(C)=O)C2=C1	COC1=CC2=C([NH]C3=C2CC[NH2+][C@]34CS[C@H]5[C@H]6[C@H]7[NH+](C)[C@@H](CC8=C7C(=C(OC)C(=C8)C)O)[C@H](O)[NH+]6[C@@H](COC4=O)C9=C5C(=C(C)C%10=C9OCO%10)OC(C)=O)C=C1	7.3	5.80	2.76	3.67	50.68	32.03			0.86	0.76	0.44	0.56	1.70	1.51		
708	CC[C@@]1(O)C(=O)OCC2=C1C=C3N(CC4=C3N=C5C=C6OCCOC6=CC5=C4CN7CCN(CC7)C2=O	CC[C@@]1(O)C(=O)OCC2=C1C=C3N(CC4=C3N=C5C=C6OCCOC6=CC5=C4C[NH+]7CC[NH+](C)CC7)C2=O	4.77	3.79	25.07	13.86	3.54	4.51			0.68	0.58	1.40	1.14	0.55	0.65		
709	FC1=C[C@H]2CN(CCN3C=C(C(=C1)[C@H]23)C4=C(C(=O)NC4=O)C5=C[N]6C=CC=CC6=N5)C(=O)N7CCCCC7	FC1=C[C@H]2CN(CCN3C=C(C(=C1)[C@H]23)C4=C(C(=O)NC4=O)C5=C[N]6C=CC=CC6=N5)C(=O)N7CCCCC7	1.2	1.19	10.3	5.20	2.7	4.15	0.02	0.03	0.08	0.07	1.01	0.72	0.43	0.62	-1.70	-1.53
710	CSCC[C@H](N)C(=O)N[C@]1(C[S](=O)(=O)[C@H]2[C@@H]([C@@H]12)C(O)=O)C(O)=O	CSCC[C@H]([NH3+])C(=O)N[C@@]1(C[S](=O)(=O)[C@H]2[C@@H]([C@@H]12)C([O-])=O)C([O-])=O	0.44	0.42	9.73	5.85	0.84	1.02			0.36	-0.38	0.99	0.77	-0.08	0.01		
711	N[C@]1(C[S](=O)(=O)[C@H]2[C@@H]([C@@H]12)C(O)=O)C(O)=O	[NH3+][C@]1(C[S](=O)(=O)[C@H]2[C@@H]([C@@H]12)C([O-])=O)C([O-])=O	0.21	0.26	2.4	3.01	1.23	1.96			0.68	-0.58	0.38	0.48	0.09	0.29		

712	OC[C@@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H](O)CO	OC[C@@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H](O)CO	0.24	0.43	1.2	1.99	4.7	3.31			0.62	-0.37	0.08	0.30	0.67	0.52		
713	CNCCCC12CCC(C3=CC=CC=C13)C4=CC=CC=C24	C[NH2+]CCCC12CCC(C3=C1C=CC=C3)C4=C2C=CC=C4	45	28.85	14	11.21	51	33.88	0.11	0.07	1.65	1.46	1.15	1.05	1.71	1.53	-0.96	-1.14
714	CC(C)C1=NN=C(C)[N]1C2C[C@@H]3CC[C@H](C2)N3CC[C@@H](NC(=O)C4CCC(F)(F)CC4)C5=CC=CC=C5	CC(C)C1=NN=C(C)[N]1C2C[C@H]3CC[C@H](C2)[NH+]3CC[C@@H](NC(=O)C4CCC(F)(F)CC4)C5=CC=CC=C5	2.3	1.83	9.4	7.36	12.8	10.61	0.25	0.15	0.36	0.26	0.97	0.87	1.11	1.03	-0.60	-0.83
715	COC1=CC=C(Cl)C=C1[C@]2(F)C(=O)NC3=CC(=CC=C23)C(F)(F)F	COC1=C(C=C(Cl)C=C1)[C@@]2(F)C(=O)NC3=C2C=CC(=C3)C(F)(F)F	10	7.94	15	7.68	37	24.94	0.0038	0.01	1.00	0.90	1.18	0.89	1.57	1.40	-2.42	-2.06
716	CC(C)OC1=CC=CC=C1N2CCN(CC2)CC3=CC=CC(=C3)C(=O)N4CCCCC4	CC(C)OC1=C(C=CC=C1)N2CC[NH+](CC2)CC3=CC(=CC=C3)C(=O)N4CCCCC4	1.54	1.85	6.17	4.78	4.6	5.76	0.011	0.01	0.19	0.27	0.79	0.68	0.66	0.76	-1.96	-1.85
717	NC1=NC2=NC=C(CCC3=CC=C(C=C3)C(=O)N[C@@H](CC(=C)C(O)=O)C(O)=O)N=C2C(=N1)N	NC1=NC2=NC=C(CCC3=CC=C(C=C3)C(=O)N[C@@H](CC(=C)C([O-])=O)C([O-])=O)N=C2C(=N1)N	0.7	0.56	3.08	2.46	8.2	5.98			0.15	-0.25	0.49	0.39	0.91	0.78		
718	CC1=C(O)C=CC2=C1OC[C@H]([C@H]2C3=CC=C(O)C=C3)C4=CC=C(O)C=C4	CC1=C2OC[C@H]([C@@H](C3=CC=C(O)C=C3)C2=CC=C1O)C4=CC=C(O)C=C4	1.2	1.25	8.42	7.46	5.3	3.79			0.08	0.10	0.93	0.87	0.72	0.58		
719	COC(=O)NC1=NC2=CC(=CC=C2[NH]1)C(=O)C3=CC=CC=C3	COC(=O)NC1=NC2=C([NH]1)C=CC(=C2)C(=O)C3=CC=CC=C3	1.2	0.95	15	7.52	1.1	2.25	0.086	0.07	0.08	-0.02	1.18	0.88	0.04	0.35	-1.07	-1.16
720	CN(C)CC(OC1=CC=CC=C1)OC2=CC=CC=C2	C[NH+](C)CC(OC1=CC=CC=C1)OC2=CC=CC=C2	2.8	2.42	13.7	11.43	4.4	4.74			0.45	0.38	1.14	1.06	0.64	0.68		
721	CC(CCC1=CC=C2OCOC2=C1)NCC(O)C3=CC=C(O)C(=C3)C(N)=O	C[C@H](CCC1=CC2=C(OCO2)C=C1)[NH2+]C[C@@H](O)C3=CC(=C(O)C=C3)C(N)=O	7.9	6.28	16	9.93	11	8.01			0.90	0.80	1.20	1.00	1.04	0.90		
722	NC(=N)C1=CC=C(CNC(=O)[C@@H]2CCN2C(=O)[C@H](NCC(O)=O)C3CCCCC3)C=C1	NC(=[NH2+])C1=CC=C(CNC(=O)[C@@H]2CCN2C(=O)[C@H]([NH2+]CC([O-])=O)C3CCCCC3)C=C1	0.23	0.29	1.9	2.42	1.6	2.12	0.93	0.66	0.64	-0.54	0.28	0.38	0.20	0.33	-0.03	-0.18
723	COC1=CC2=C([NH]C=C2CCNC(C)=O)C=C1	COC1=CC2=C([NH]C=C2CCNC(C)=O)C=C1	1.1	0.87	16.5	12.93	1.1	1.67	0.39	0.40	0.04	-0.06	1.22	1.11	0.04	0.22	-0.41	-0.40
724	CN1C(=C(O)C2=CC=CC=C2[S]1(=O)=O)C(=O)NC3=NC=C(C)S3	CN1C(=C([O-])C2=C(C=CC=C2)[S]1(=O)=O)C(=O)NC3=NC=C(C)S3	0.15	0.19	0.12	0.15	18	11.12	0.003	0.01	0.82	-0.72	-0.92	-0.82	1.26	1.05	-2.52	-2.06
725	CC1CCN(CCCC(=O)C2=CC=C(F)C=C2)CC1	CC1CC[NH+](CCCC(=O)C2=CC=C(F)C=C2)CC1	14	11.12	46	22.49	3.9	4.57			1.15	1.05	1.66	1.35	0.59	0.66		
726	N[C@@H](CC1=CC=C(C=C1)N(CCCl)CCCl)C(O)=O	[NH3+][C@@H](CC1=CC=C(C=C1)N(CCCl)CCCl)C([O-])=O	0.48	0.60	7	4.96	1	1.41	0.14	0.20	0.32	-0.22	0.85	0.70	0.00	0.15	-0.85	-0.70
727	C[C@@H]1O[C@H](C[C@H](N[C@@H]1O)O[C@@H]2[C@H](C)O[C@H](C[C@@H]2O)O[C@H]3C[C@@](O)(CC4=C(O)C5=C(C(=C34)O)C(=O)C6=CC=CC=C6C5=O)C(=O)CO	C[C@@H]1O[C@H](C[C@H]([NH3+])[C@@H]1O)O[C@@H]2[C@H](C)O[C@H](C[C@H]2O)O[C@H]3C[C@@](O)(CC4=C3C(=C5C(=O)C6=C(C=CC=C6)C(=O)C5=C4O)O)C(=O)CO	2.4	3.02	2.5	4.05	21	13.52			0.38	0.48	0.40	0.61	1.32	1.13		
728	CO[C@@H]1C[C@@](C)(O)CC2=C1C(=C3C(=O)C4=C(O)C=C5C(=C4C(=O)C3=C2)O[C@@H]6O[C@]5(C)[C@@H](O)[C@H]([C@@H]6O)N(C)C)O	CO[C@@H]1C[C@@](C)(O)CC2=C1C(=C3C(=O)C4=C(C(=O)C3=C2)C5=C(C=C4O)[C@@]6(C)O[C@@H](O5)[C@@H](O)[C@@H]([C@@H]6O)[NH+](C)C)O	9.14	7.26	11.61	11.70	13.22	12.59			0.96	0.86	1.06	1.07	1.12	1.10		
729	CCOC(=O)C1(CCN(C)CC1)C2=CC=CC=C2	CCOC(=O)C1(CC[NH+](C)CC1)C2=CC=CC=C2	2.3	2.66	4.9	6.51	7.9	5.94	0.42	0.46	0.36	0.43	0.69	0.81	0.90	0.77	-0.38	-0.34
730	CC(C)NCC(O)COC1=CC=CC2=C1C=C(C)[NH]2	CC(C)[NH2+]C[C@@H](O)COC1=C2C=C(C)[NH]C2=CC=C1	2.17	2.05	5.83	9.60	4.61	4.22	0.51	0.47	0.34	0.31	0.77	0.98	0.66	0.63	-0.29	-0.33
731	CN1CCCCC1C(=O)NC2=C(C)C=CC=C2C	C[NH+]1CCCC[C@@H]1C(=O)NC2=C(C)C=CC=C2C	0.95	1.14	6.8	8.82	2	2.42	0.3	0.35	0.02	0.06	0.83	0.95	0.30	0.38	-0.52	-0.45
732	CCCC(C)(COC(N)=O)COC(N)=O	CCCC(C)(COC(N)=O)COC(N)=O	0.7	0.88	0.6	1.29	14	7.12	1	0.72	0.15	-0.05	-0.22	0.11	1.15	0.85	0.00	-0.14
733	CCC1(CCCCN(C)C1)C2=CC=CC(=C2)O	CC[C@@]1(CCCC[NH+](C)C1)C2=CC(=CC=C2)O	3.3	3.20	28	21.91	1.7	2.55	0.73	0.57	0.52	0.51	1.45	1.34	0.23	0.41	-0.14	-0.24
734	S=C1NC=NC2=C1N=C[NH]2	S=C1NC=NC2=C1N=C[NH]2	1	1.07	15	12.17	1	1.57	0.85	0.67	0.00	0.03	1.18	1.09	0.00	0.20	-0.07	-0.17
735	C[C@@H](O)[C@@H]1[C@H]2[C@@H](CC(=C(N2C1=O)C(O)=O)S[C@@H]3CN[C@@H](C3)C(=O)N(C)C	C[C@@H](O)[C@@H]1[C@H]2[C@@H](C)C(=C(N2C1=O)C([O-])=O)S[C@@H]3C[NH2+][C@@H](C3)C(=O)N(C)C	0.3	0.25	3.9	3.53	1	1.60	0.87	0.77	0.52	-0.60	0.59	0.55	0.00	0.20	-0.06	-0.11
736	O[S](=O)(=O)CCS	[O-][S](=O)(=O)CCS	0.65	0.52	20.5	8.77	0.36	0.70			0.19	-0.29	1.31	0.94	-0.44	-0.16		
737	CC1=C(O)C(=C(CO)C=N1)CO.O=C[C@@H]2CCC(=O)N2	CC1=C(O)C(=C(CO)C=N1)CO	0.66	0.70	7.9	6.98	0.98	1.40			0.18	-0.16	0.90	0.84	-0.01	0.15		
738	CC(C)NCC(O)C1=CC(=CC(=C1)O)O	CC(C)[NH2+]C[C@H](O)C1=CC(=CC(=C1)O)O	6.03	3.14	14.07	15.39	6.41	4.85	0.9	0.83	0.78	0.50	1.15	1.19	0.81	0.69	-0.05	-0.08
739	CO[C@@H](C)C(=O)N1CCN(CC1)C2=NC(=C3C=C(OC)C(=CC3=N2)OC)N	CO[C@@H](C)C(=O)N1CCN(CC1)C2=NC3=CC(=C(OC)C=C3C(=N2)N)OC	0.44	0.64	0.53	1.02					0.36	-0.20	-0.28	0.01				

740	CN1C[C@H](CNC(=O)OCC2=CC=CC=C2)C[C@H]3[C@H]1CC4=C[N](C)C5=CC=CC3=C45	C[N]1C=C2C[C@H]3[C@H](C[C@@H](CNC(=O)OCC4=CC=CC=C4)C[NH+]3C)C5=CC=CC1=C25	0.57	1.91	9.6	6.74	0.93	2.05			0.24	0.28	0.98	0.83	-0.03	0.31		
741	CN(C)C(=N)NC(N)=N	CN(C)C(=[NH2+])NC(N)=[NH2+]	0.64	0.81	7.4	6.79	1.7	2.43	1	0.63	0.19	-0.09	0.87	0.83	0.23	0.39	0.00	-0.20
742	CCC(=O)C(CC(C)N(C)C)(C1=CC=CC=C1)C2=CC=CC=C2	CCC(=O)C(C[C@H](C)[NH+](C)C)(C1=CC=CC=C1)C2=CC=CC=C2	4.4	5.48	1.7	3.58	31	20.02	0.21	0.11	0.64	0.74	0.23	0.55	1.49	1.30	-0.68	-0.97
743	CN[C@@H](C)CC1=CC=CC=C1	C[NH2+][C@@H](C)CC1=CC=CC=C1	4.3	3.41	4.4	5.68	12	11.60	0.85	0.67	0.63	0.53	0.64	0.75	1.08	1.06	-0.07	-0.17
744	COC1=CC=CC(=C1C(=O)N[C@H]2[C@H]3SC(C)(C)[C@@H](N3C2=O)C(O)=O)OC	COC1=C(C(=O)N[C@@H]2[C@H]3SC(C)(C)[C@@H](N3C2=O)C([O-])=O)C(=CC=C1)OC	0.32	0.25	6.6	5.32	0.64	0.88	0.43	0.35	0.49	-0.60	0.82	0.73	-0.19	-0.05	-0.37	-0.45
745	CN1C=CNC1=S	CN1C=CNC1=S	0.86	0.98	3.7	4.57	2.4	2.60			0.07	-0.01	0.57	0.66	0.38	0.41		
746	CCC#CC(C)C1(CC=C)C(=O)NC(=O)N(C)C1=O	CCC#C[C@@H](C)[C@]1(CC=C)C(=O)NC(=O)N(C)C1=O	1.1	0.81	12	6.84	1.6	2.62	0.27	0.21	0.04	-0.09	1.08	0.84	0.20	0.42	-0.57	-0.67
747	CN(CC1=CN=C2N=C(N)N=C(N)C2=N1)C3=CC=C(C=C3)C(=O)N[C@@H](CCC(O)=O)C(O)=O	CN(CC1=NC2=C(N)N=C(N)N=C2N=C1)C3=CC=C(C=C3)C(=O)N[C@@H](CCC([O-])=O)C([O-])=O	0.43	0.54	2.1	2.39	3.9	4.52	0.37	0.30	0.37	-0.27	0.32	0.38	0.59	0.66	-0.43	-0.52
748	COC1=C2OC(=O)C=CC2=CC3=C1OC=C3	COC1=C2OC=CC2=CC3=C1OC(=O)C=C3	0.61	0.77	12	9.28			0.09	0.08	0.21	-0.11	1.08	0.97			-1.05	-1.09
749	C[C@](N)(CC1=CC=C(O)C(=C1)O)C(O)=O	C[C@]([NH3+])(CC1=CC(=C(O)C=C1)O)C([O-])=O	0.69	1.16	3.5	4.58	5.9	4.20	0.85	0.78	0.16	0.06	0.54	0.66	0.77	0.62	-0.07	-0.11
750	CC[C@@H](CO)NC(=O)[C@H]1CN(C)[C@@H]2CC3=C[NH]C4=CC=CC(=C34)C2=C1	CC[C@@H](CO)NC(=O)[C@H]1C[NH+](C)[C@@H]2CC3=C[NH]C4=C3C(=CC=C4)C2=C1	0.96	1.21	7.18	8.21	1.85	2.63			0.02	0.08	0.86	0.91	0.27	0.42		
751	C[N+]1(CC[C@@]23[C@H]4OC5=C(O)C=CC(=C25)C[C@@H]1[C@]3(O)CCC4=O)CC6CC6	C[N@+]1(CC[C@]23[C@H]4OC5=C2C(=CC=C5O)C[C@@H]1[C@]3(O)CCC4=O)CC6CC6	2.6	2.06	22	19.27	2.5	2.93	0.87	0.70	0.41	0.31	1.34	1.28	0.40	0.47	-0.06	-0.15
752	C[C@@H]1CC2=CC(=O)CC[C@@H]2[C@H]3CC[C@]4(C)[C@@H](O)CC[C@H]4[C@H]13	C[C@@H]1CC2=CC(=O)CC[C@@H]2[C@H]3CC[C@@]4(C)[C@H](O)CC[C@H]4[C@H]13	0.8	1.01	20	14.84	0.65	0.93			0.10	0.01	1.30	1.17	-0.19	-0.03		
753	COC(=O)C(C1CCCCN1)C2=CC=CC=C2	COC(=O)[C@@H]([C@@H]1CCCC[NH2+]1)C2=CC=CC=C2	2.2	2.66	0.55	1.86	4.8	6.06	0.85	0.72	0.34	0.42	-0.26	0.27	0.68	0.78	-0.07	-0.14
754	C[C@H]1C[C@H]2[C@@H]3CC[C@](O)(C(=O)CO)[C@@]3(C)C[C@H](O)[C@@H]2[C@@]4(C)C=CC(=O)C=C14	C[C@H]1C[C@H]2[C@@H]3CC[C@@](O)(C(=O)O)[C@@]3(C)C[C@H](O)[C@@H]2[C@@]4(C)C=CC(=O)C=C14	1.2	0.87	6.1	4.62	2.3	2.41	0.23	0.13	0.08	-0.06	0.79	0.66	0.36	0.38	-0.64	-0.89
755	CCN(CC)CCNC(=O)C1=CC(=C(N)C=C1OC)Cl	CC[NH+](CC)CCNC(=O)C1=C(OC)C=C(N)C(=C1)Cl	3.2	2.23	5.7	7.65	7.2	3.87	0.6	0.54	0.51	0.35	0.76	0.88	0.86	0.59	-0.22	-0.27
756	COC1=CC=C2C[C@@H]3C4=C(CC[N+]3(C)C)C=C(OC)C(=C4OC5=CC=C(C[C@H]6C7=CC(=C(OC)C=C7CC[N+]6(C)C)OC1=C2)C=C5)OC	COC1=C2OC3=CC4=C(CC[N+](C)(C)[C@H]4CC5=CC=C(OC6=C7[C@@H](CC(=C2)C=C1)[N+](C)(C)CCC7=CC(=C6OC)OC)C=C5)C=C3OC	0.4	0.50	1.2	2.13	5.1	6.73	0.65	0.30	0.40	-0.30	0.08	0.33	0.71	0.83	-0.19	-0.52
757	CC1NC2=CC(=C(C=C2C(=O)N1C3=CC=CC=C3C)[S](N)(=O)=O)Cl	C[C@@H]1NC2=C(C=C(C(=C2)Cl)[S](N)(=O)=O)C(=O)N1C3=C(C)C=CC=C3	1.6	1.27	1.4	1.41	20	13.79	0.05	0.04	0.20	0.10	0.15	0.15	1.30	1.14	-1.30	-1.45
758	C[S](=O)(=O)C1=CC=C2SC3=CC=CC=C3N(CCCN4CCC(CC4)C(N)=O)C2=C1	C[S](=O)(=O)C1=CC2=C(SC3=C(C=CC=C3)N2CCC[NH+]4CCC(CC4)C(N)=O)C=C1			12.14	8.21	4	4.80					1.08	0.91	0.60	0.68		
759	COCCC1=CC=C(OCC(O)CNC(C)C)C=C1	COCCC1=CC=C(OC[C@@H](O)C[NH2+]C(C)C)C=C1	3.1	1.91	13	10.01	3.6	3.87	0.88	0.74	0.49	0.28	1.11	1.00	0.56	0.59	-0.06	-0.13
760	CN(C(C)=O)C1=C(I)C(=C(I)C(=C1I)C(O)=O)NC(C)=O	CN(C(C)=O)C1=C(I)C(=C(I)C(=C1I)NC(C)=O)C([O-])=O	0.17	0.30	2.7	2.13	1.3	1.73	1	0.35	0.77	-0.52	0.43	0.33	0.11	0.24	0.00	-0.46
761	CC1=NC=C([N]1CCO)[N](=O)=O	CC1=NC=C([N]1CCO)[N+]([O-])=O	0.4	0.50	0.85	1.64	7.1	4.51	0.96	0.84	0.40	-0.30	-0.07	0.22	0.85	0.65	-0.02	-0.08
762	CC(N)COC1=C(C)C=CC=C1C	C[C@H]([NH3+])COC1=C(C)C=CC=C1C	5.9	4.68	8.3	8.08	9.9	6.20	0.36	0.45	0.77	0.67	0.92	0.91	1.00	0.79	-0.44	-0.35
763	CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)[C@H](NC(=O)N3CCN(C3=O)[S](C)(=O)=O)C4=CC=CC=C4)C(=O)N2[C@H]1C(O)=O	CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)[C@H](NC(=O)N3CCN(C3=O)[S](C)(=O)=O)C4=CC=CC=C4)C(=O)N2[C@H]1C([O-])=O	0.09	0.11	2.1	2.15	1.2	1.43	0.7	0.50	1.05	-0.95	0.32	0.33	0.08	0.16	-0.15	-0.30
764	CN1CCN2[C@H](C1)C3=C(CC4=C2C=CC=C4)C=CC=C3	C[NH+]1CCN2[C@H](C1)C3=C(CC4=C2C=CC=C4)C=CC=C3	13.75	8.00	21.9	14.88	9.6	10.87	0.05	0.17	1.14	0.90	1.34	1.17	0.98	1.04	-1.30	-0.78
765	COCC(=O)O[C@]1(CCN(C)CCCC2=NC3=CC=CC=C3[NH]2)CCC4=CC(=CC=C4[C@@H]1C(C)C)F	COCC(=O)O[C@@]1(CC[NH+](C)CCCC2=NC3=C(C=CC=C3[NH]2)C=CC=C3)CCC4=C(C=CC(=C4)F)[C@@H]1C(C)C	3.1	3.91	4	4.87	13	11.23	0.005	0.01	0.49	0.59	0.60	0.69	1.11	1.05	-2.30	-2.02

766	ClC1=CC(=C(COC(C[N]2C=CN=C2)C3=CC=C(Cl)C=C3Cl)C=C1)Cl	ClC1=CC(=C(CO[C@H](C[N]2C=CN=C2)C3=C(Cl)C=C(Cl)C=C3)C=C1)Cl	7.14	5.67	9.48	5.55	19.75	16.71	0.08	0.04	0.85	0.75	0.98	0.74	1.30	1.22	-1.10	-1.35
767	CNC[C@@H]1CC[C@@H](N)[C@H](O1)O[C@H]2[C@@H](N)C[C@@H](N)[C@H](O[C@@H]3OC[C@](C)(O)[C@H](NC)[C@H]3O)[C@H]2O	C[NH2+]C[C@@H]1CC[C@@H]([NH3+])[C@H](O[C@H]2[C@@H]([NH3+])C[C@@H]([NH3+])[C@H](O[C@H]3OC[C@](C)(O)[C@H]([NH2+]C)[C@H]3O)[C@H]2O	0.15	0.18	1.1	1.11	2.1	2.96			0.82	-0.74	0.04	0.05	0.32	0.47		
768	CC1=NC=C2CN=C(C3=CC=CC=C3F)C4=CC(=CC=C4[N]12)Cl	CC1=NC=C2CN=C(C3=C(F)C=CC=C3)C4=C(C=CC(=C4)Cl)[N]12	1.1	1.38	5.3	3.41	3.1	4.88	0.017	0.03	0.04	0.14	0.72	0.53	0.49	0.69	-1.77	-1.53
769	COC1=CC(=C(OC)C=C1)[C@H](O)CNC(=O)CN	COC1=CC(=C(OC)C=C1)[C@H](O)CNC(=O)C[NH3+]	0.67	0.84	27.9	14.58	0.6	1.02	0.7	0.75	0.17	-0.07	1.45	1.16	-0.22	0.01	-0.15	-0.12
770	CC#C[C@]1(O)CC[C@H]2[C@@H]3CCC4=CC(=O)CCC4=C3[C@H](C[C@]12C)C5=CC=C(C=C5)N(C)C	CC#C[C@]1(O)CC[C@H]2[C@@H]3CCC4=CC(=O)CCC4=C3[C@@H](C[C@]12C)C5=CC=C(C=C5)N(C)C	0.45	0.57	0.5	0.99	16.6	12.67	0.02	0.02	0.35	-0.25	-0.30	-0.01	1.22	1.10	-1.70	-1.61
771	OCCN1C[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H]1CO	OCC[NH+]1C[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]1CO	0.28	0.35	1.7	2.49	2.3	2.70	1	0.86	0.55	-0.45	0.23	0.40	0.36	0.43	0.00	-0.07
772	C[N+](C)(C)NCCC([O-])=O	C[N+](C)(C)NCCC([O-])=O	0.7	0.56	2.8	2.52	6.2	4.81			0.15	-0.26	0.45	0.40	0.79	0.68		
773	CCN(CC)C(=O)[C@@]1(C[C@@H]1CN)C2=CC=CC=C2	CCN(CC)C(=O)[C@@]1(C[C@@H]1C[NH3+])C2=CC=CC=C2	4.51	3.59	8.17	9.60	6.48	4.11	0.87	0.69	0.65	0.55	0.91	0.98	0.81	0.61	-0.06	-0.16
774	CC1=C(C=C(C#N)C(=O)N1)C2=CC=NC=C2	CC1=C(C=C(C#N)C(=O)N1)C2=CC=NC=C2	0.25	0.31	6.2	5.55	0.8	1.50	0.035	0.07	0.60	-0.50	0.79	0.74	-0.10	0.18	-1.46	-1.15
775	CN(C)[C@H]1[C@@H]2C[C@@H]3CC4=C(C=CC(=C4C(=O)C3=C(O)[C@]2(O)C(=O)C(=C1O)C(N)=O)O)N(C)C	CN(C)C1=C2C[C@H]3C[C@H]4[C@H]([NH+](C)C)C(=C(C(N)=O)C(=O)[C@@]4(O)C(=C3C(=O)C2=C(O)C=C1)[O-])[O-]	1.6	1.27	1.2	1.49	17	10.82	0.005	0.03	0.20	0.10	0.08	0.17	1.23	1.03	-2.30	-1.46
776	NC1=[N](=O)C(=NC(=C1)N2CCCCC2)N	NC1=[N+]([O-])C(=NC(=C1)N2CCCCC2)N	0.9	1.13	11.5	8.93	1.5	2.22	1	0.87	0.05	0.05	1.06	0.95	0.18	0.35	0.00	-0.06
777	NC1=NC(=CS1)CC(=O)NC2=CC=C(CCNC[C@H](O)C3=CC=CC=C3)C=C2	NC1=NC(=CS1)CC(=O)NC2=CC=C(CC[NH2+]C[C@H](O)C3=CC=CC=C3)C=C2	23.8	16.47	13.6	10.19	50	22.53	0.29	0.19	1.38	1.22	1.13	1.01	1.70	1.35	-0.54	-0.73
778	CN1CCN2C(C1)C3=CC=CC=C3CC4=CC=CN=C24	C[NH+]1CCN2[C@H](C1)C3=C(CC4=C2N=CC=C4)C=CC=C3	4.2	3.47	8	7.74	15	11.37	0.15	0.20	0.62	0.54	0.90	0.89	1.18	1.06	-0.82	-0.70
779	CN(C)CCN1C(=O)C2=C3C(=CC=C2)C=C(C=C3C1=O)[N+]([O-])=O	C[NH+](C)CCN1C(=O)C2=C3C(=CC=C2)C=C(C=C3C1=O)[N+]([O-])=O	11.3	8.97	34.6	16.32	28.7	14.62			1.05	0.95	1.54	1.21	1.46	1.17		
780	OCCNCCNC1=CC=C(NCCNCCO)C2=C1C(=O)C3=C(O)C=CC(=C3C2=O)O	OCC[NH2+]CCNC1=C2C(=O)C3=C(C(=CC=C3O)O)C(=O)C2=C(NCC[NH2+]CCO)C=C1	12	9.53	7.9	6.04	53	28.23	0.25	0.24	1.08	0.98	0.90	0.78	1.72	1.45	-0.60	-0.63
781	CN(C1CCN(CC1)C2=NC3=C(C=CC=C3)[N]2CC4=CC=C(F)C=C4)C5=NC=CC(=O)N5	CN(C1CCN(CC1)C2=NC3=C(C=CC=C3)[N]2CC4=CC=C(F)C=C4)C5=NC=CC(=O)N5	0.38	0.48	1.03	1.64	9.6	9.66			0.42	-0.32	0.01	0.22	0.98	0.98		
782	ClC1=CC=C(C=C1)C(=O)NCCN2CCOCC2	ClC1=CC=C(C=C1)C(=O)NCC[NH+]2CCOCC2	1.1	1.39	10	7.31	1.5	2.12	0.77	0.54	0.04	0.14	1.00	0.86	0.18	0.33	-0.11	-0.27
783	CCOC(=O)[C@H](CCC1=CC=CC=C1)N[C@@H](C)C(=O)N2CC3=C(C[C@H]2C(O)=O)C=C(OC)C(=C3)OC	CCOC(=O)[C@H](CCC1=CC=CC=C1)[NH2+][C@@H](C)C(=O)N2CC3=C(C[C[C@H]2C([O-])=O)C=C(OC)C(=C3)OC			6.3	5.33	1.3	1.85	0.12	0.10			0.80	0.73	0.11	0.27	-0.92	-1.02
784	CCOC(=O)[NH-;v3]C1=C[N+](=NO1)N2CCOCC2	CCOC(=O)[N-]C1=C[N+](=NO1)N2CCOCC2	1.4	1.11	11	7.80	1.6	2.81	1	0.91	0.15	0.05	1.04	0.89	0.20	0.45	0.00	-0.04
785	C[C@@H]1C[C@H]2[C@H]3CCC4=CC(=O)C=C[C@]4(C)[C@@]3(Cl)[C@@H](O)C[C@]2(C)[C@@]1(OC(=O)C5=CC=CO5)C(=O)CCl	C[C@H]1C[C@H]2[C@H]3CCC4=CC(=O)C=C[C@]4(C)[C@@]3(Cl)[C@@H](O)C[C@@]2(C)[C@]1(OC(=O)C5=CC=CO5)C(=O)CCl	2.2	1.75	12.7	10.91	4.4	4.11	0.01	0.01	0.34	0.24	1.10	1.04	0.64	0.61	-2.00	-1.83
786	CC(C)(O)C1=CC=CC=C1CC[C@@H](SCC2(CC2)CC(O)=O)C3=CC=CC(=C3)C=CC4=CC=C5C=CC(=CC5=N4)Cl	CC(C)(O)C1=C(CC[C@@H](SCC2(CC2)CC([O-])=O)C3=CC(=CC=C3)\C=C\C4=NC5=CC(=CC=C5C=C4)Cl)C=CC=C1	0.15	0.19	0.68	0.97	5	5.08	0.002	0.0035	0.82	-0.72	-0.17	-0.01	0.70	0.71	-2.70	-2.46
787	CC1=NC=C([N]1CC(O)CN2CCOCC2)[N+]([O-])=O	CC1=NC=C([N]1C[C@@H](O)C[NH+]2CCOCC2)[N+]([O-])=O	0.75	0.82	1.6	2.48	6.2	5.25			0.12	-0.08	0.20	0.39	0.79	0.72		
788	CN1CC[C@@]23[C@H]4OC5=C(O)C=CC(=C25)C[C@@H]1[C@@H]3C=C[C@@H]4O	C[NH+]1CC[C@]23[C@H]4OC5=C2C(=CC=C5O)C[C@H]1[C@H]3C=C[C@@H]4O	2.3	2.23	26	22.16	2	3.47	0.65	0.63	0.36	0.35	1.41	1.35	0.30	0.54	-0.19	-0.20
789	CN1CC[C@@]23[C@H]4OC5=C(O)C=CC(=C25)C[C@@H]1[C@@H]3C=C[C@@H]4O[C@@H]6O[C@@H]([C@@H](O)[C@H](O)[C@H]6O)C(O)=O	C[NH+]1CC[C@@]23[C@H]4OC5=C2C(=CC=C5O)C[C@@H]1[C@@H]3C=C[C@@H]4O[C@@H]6O[C@@H]([C@@H](O)[C@H](O)[C@H]6O)C([O-])=O	0.12	0.15	2.2	2.78	1.4	2.19	0.67	0.59	0.92	-0.82	0.34	0.44	0.15	0.34	-0.17	-0.23
790	CO[C@]1(NC(=O)[C@H](C(O)=O)C2=CC=C(O)C=C2)[C@H]3OCC(=C(N3C1=O)C(O)=O)C	CO[C@]1(NC(=O)[C@H](C([O-])=O)C2=CC=C(O)C=C2)[C@H]3OCC(=C(N3C1=O)	0.17	0.21	0.72	1.06	2.9	2.30	0.39	0.26	0.77	-0.67	-0.14	0.03	0.46	0.36	-0.41	-0.59

	SC4=NN=N[N]4C	C([O-])=O)CSC4=NN=N[N]4C																
791	COC1=C(N2C[C@@H]3CCCN[C@@H]3C2)C(=CC4=C1N(C=C(C(O)=O)C4=O)C5CC5)F	COC1=C2N(C=C(C([O-])=O)C(=O)C2=CC(=C1N3C[C@@H]4CCC[NH2+][C@@H]4C3)F)C5CC5	1.4	1.93	2.4	3.01	8.2	9.99	0.6	0.54	0.15	0.29	0.38	0.48	0.91	1.00	-0.22	-0.27
792	COC1=NC(=NC(=C1NC2=NCCN2)Cl)C	COC1=C(NC2=[NH+]CCN2)C(=NC(=N1)C)Cl	1.8	2.95	11	7.32	2.2	2.59	0.93	0.83	0.26	0.47	1.04	0.86	0.34	0.41	-0.03	-0.08
793	COC1=C(C)C2=C(C(=C1CC=C(C)CCC(O)=O)O)C(=O)OC2	COC1=C(C\C=C(\C)CCC([O-])=O)C(=C2C(=O)OCC2=C1C)O	0.77	0.79	2.33	2.72	9.7	5.78	0.02	0.04	0.11	-0.10	0.37	0.44	0.99	0.76	-1.70	-1.39
794	CC(C)(C)NCC(O)COC1=CC=CC2=C1CC(O)C(O)C2	CC(C)(C)[NH2+]C[C@H](O)COC1=C2C[C@@H](O)[C@H](O)CC2=CC=C1	1.9	1.75	2.9	4.55	9.2	6.91	0.14	0.27	0.28	0.24	0.46	0.66	0.96	0.84	-0.85	-0.57
795	NC(=N)NC1=CC=C(C=C1)C(=O)OC2=CC=C3C=C(C=CC3=C2)C(N)=N	NC(=[NH2+])NC1=CC=C(C=C1)C(=O)OC2=CC3=CC=C(C=C3C=C2)C(N)=[NH2+]	5.71	4.54	81.96	28.97	1.84	3.28			0.76	0.66	1.91	1.46	0.26	0.52		
796	CCOC1=CC=C2C=CC=CC2=C1C(=O)N[C@H]3[C@H]4SC(C)(C)[C@@H](N4C3=O)C(O)=O	CCOC1=C(C(=O)N[C@H]2[C@H]3SC(C)(C)[C@@H](N3C2=O)C([O-])=O)C4=CC=CC=C4C=C1	0.22	0.22	3.3	3.21	0.7	1.05	0.13	0.09	0.66	-0.66	0.52	0.51	-0.15	0.02	-0.89	-1.03
797	COC1=C(C=CC=C1)N2CCN(CC2)C[C@@H](O)COC3=C4C=CC=CC4=CC=C3	COC1=C(C=CC=C1)N2CC[NH+](CC2)C[C@@H](O)COC3=C4C=CC=CC4=CC=C3			11	7.54	3.3	5.93	0.008	0.02			1.04	0.88	0.52	0.77	-2.10	-1.82
798	O[C@H]1CC[C@@]2(O)[C@H]3CC4=CC=C(O)C5=C4[C@@]2(CCN3CC6CCC6)[C@H]1O5	O[C@H]1CC[C@@]2(O)[C@H]3CC4=C5C(=C(O)C=C4)O[C@@H]1[C@@]25CC[NH+]3CC6CCC6	4.6	3.65	22	20.37	3.7	4.37	0.5	0.44	0.66	0.56	1.34	1.31	0.57	0.64	-0.30	-0.36
799	OC1=CC=C2C[C@H]3N(CC[C@@]45[C@@H](OC1=C24)C(=C)CC[C@@]35O)CC6CC6	OC1=C2O[C@H]3C(=C)CC[C@@]4(O)[C@H]5CC(=C2[C@@]34CC[NH+]5CC6CC6)C=C1	8.2	3.83	15	18.17	8.8	6.76	0.65	0.37	0.91	0.58	1.18	1.26	0.94	0.83	-0.19	-0.44
800	OC1=CC=C2C[C@H]3N(CC[C@@]45[C@@H](OC1=C24)C(=O)CC[C@@]35O)CC=C	OC1=C2O[C@H]3C(=O)CC[C@@]4(O)[C@H]5CC(=C2[C@@]34CC[NH+]5CC=C)C=C1	1.7	3.03	23	19.48	1.1	1.80	0.54	0.56	0.23	0.48	1.36	1.29	0.04	0.26	-0.27	-0.25
801	OC1=CC=C2C[C@H]3N(CC[C@@]45[C@@H](OC1=C24)C(=O)CC[C@@]35O)CC6CC6	OC1=C2O[C@H]3C(=O)CC[C@@]4(O)[C@H]5CC(=C2[C@]34CC[NH+]5CC6CC6)C=C1	7.6	4.38	57	33.30	1.9	3.34	0.79	0.55	0.88	0.64	1.76	1.52	0.28	0.52	-0.10	-0.26
802	CCN(CC)CCOC(=O)C(CC1CCCO1)CC2=CC=CC3=C2C=CC=C3	CC[NH+](CC)CCOC(=O)[C@@H](C[C@@H]1CCCO1)CC2=C3C=CC=CC3=CC=C2	0.98	2.11	10.8	7.62	1.35	2.12	0.2	0.04	0.01	0.32	1.03	0.88	0.13	0.33	-0.70	-1.42
803	COC1=CC2=CC=C(C=C2C=C1)[C@H](C)C(O)=O	COC1=CC2=CC=C(C=C2C=C1)[C@H](C)C([O-])=O	0.09	0.10	0.07	0.22	16.63	7.80	0.002	0.01	1.05	-0.99	-1.15	-0.65	1.22	0.89	-2.70	-2.26
804	NC(=N)N1CCC[C@@H](CNC(=O)C[C@H](N[S](=O)(=O)C2=CC=C3C=CC=CC3=C2)C(=O)N(CC(O)=O)C4CC4)C1	NC(=[NH2+])N1CCC[C@@H](CNC(=O)C[C@H](N[S](=O)(=O)C2=CC3=CC=CC=C3C=C2)C(=O)N(CC([O-])=O)C4CC4)C1	0.36	0.45	6.4	4.83	1.9	2.19	0.55	0.41	0.44	-0.34	0.81	0.68	0.28	0.34	-0.26	-0.39
805	CN[S](=O)(=O)CCC1=CC=C2[NH]C=C(C3CCN(C)CC3)C2=C1	CN[S](=O)(=O)CCC1=CC2=C([NH]C=C2C3CC[NH+](C)CC3)C=C1	2.4	2.28	6.6	7.55	6.6	3.48	0.7	0.49	0.38	0.36	0.82	0.88	0.82	0.54	-0.15	-0.31
806	CC(C)[C@@H]1CC[C@H](CC1)C(=O)N[C@H](CC2=CC=CC=C2)C(O)=O	CC(C)C1CCC(CC1)C(=O)N[C@H](CC2=CC=CC=C2)C([O-])=O	0.15	0.19	1.8	1.89	1.5	1.98	0.029	0.03	0.82	-0.72	0.26	0.28	0.18	0.30	-1.54	-1.55
807	C[C@@H](C1=CC=CC=N1)C2=C(CCN(C)C)SC3=CC=CC=C23	C[C@@H](C1=NC=CC=C1)C2=C(CC[NH+](C)C)SC3=C2C=CC=C3	1.83	2.31	5.31	6.77	9.1	11.73			0.26	0.36	0.73	0.83	0.96	1.07		
808	CN(C)CCC1=C(CC2=CC=CN=N2)C3=CC=C(F)C=C3C1	C[NH+](C)CCC1=C(CC2=NN=CC=C2)C3=C(C1)C=C(F)C=C3	1.11	1.56	2.33	3.92	9	9.03			0.05	0.19	0.37	0.59	0.95	0.96		
809	C[C@@H](C1=CN=CC=N1)C2=C(CCN(C)C)CC3=CC=CC=C23	C[C@@H](C1=NC=CN=C1)C2=C(CC[NH+](C)C)CC3=C2C=CC=C3	1.86	2.32	3.4	4.40	11	8.49			0.27	0.37	0.53	0.64	1.04	0.93		
810	C[C@@H](C1=CC=CN=C1F)C2=C(CCN(C)C)SC3=CC=CC=C23	C[C@@H](C1=C(F)N=CC=C1)C2=C(CC[NH+](C)C)SC3=C2C=CC=C3	5.73	3.49	10.4	7.50	15	12.88			0.76	0.54	1.02	0.88	1.18	1.11		
811	O[C@@H](CNC[C@H](O)[C@H]1CCC2=CC(=CC=C2O1)F)[C@@H]3CCC4=CC(=CC=C4O3)F	O[C@@H](C[NH2+]C[C@H](O)[C@H]1CCC2=C(O1)C=CC(=C2)F)[C@@H]3CCC4=C(O3)C=CC(=C4)F	11	8.74	14	11.19	10	8.35	0.02	0.03	1.04	0.94	1.15	1.05	1.00	0.92	-1.70	-1.47
812	N[Pt]1OCC(=O)O1	N[Pt]1OCC(=O)O1	0.67	0.66	4.05	3.10	2.1	2.34	0.84	0.69	0.17	-0.18	0.61	0.49	0.32	0.37	-0.08	-0.16
813	CCCC1=C2N(CC)C(=CC(=O)C2=CC3=C1OC(=CC3=O)C(O)=O)C(O)=O	CCCC1=C2N(CC)C(=CC(=O)C2=CC3=C1OC(=CC3=O)C([O-])=O)C([O-])=O	0.43	0.54	10.2	4.43	0.9	1.49	0.11	0.08	0.37	-0.27	1.01	0.65	-0.05	0.17	-0.96	-1.08
814	CCC1=NN(CCCN2CCN(CC2)C3=CC=CC(=C3)Cl)C(=O)N1CCOC4=CC=CC=C4	CCC1=NN(CCC[NH+]2CCN(CC2)C3=CC(=CC=C3)Cl)C(=O)N1CCOC4=CC=CC=C4	0.51	0.64	7.5	5.89	1.2	2.60	0.01	0.02	0.29	-0.19	0.88	0.77	0.08	0.41	-2.00	-1.80
815	CN1CCOC(C2=CC=CC=C2)C3=CC=CC=C3C1	C[NH+]1CCO[C@H](C2=CC=CC=C2)C3=C(C1)C=CC=C3	5.6	4.81	12	10.38	5	9.60			0.75	0.68	1.08	1.02	0.70	0.98		
816	COC1=NC(=NC2=C1N=C[N]2[C@@H]3O[C	COC1=C2N=C[N]([C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](	4.9	3.89	81	21.52	0.5	1.11	0.8	0.77	0.69	0.59	1.91	1.33	-0.30	0.05	-0.10	-0.11

	@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]3O)N	O)[C@@H]3O)C2=NC(=N1)N																
817	COC1=C(C=CC2=C1N(C=C(C(O)=O)C2=O)C3CC3)N4C[C@@H](C)C[C@H](N)C4	COC1=C2N(C=C(C([O-])=O)C(=O)C2=CC=C1N3C[C@@H](C)C[C@H]([NH3+])C3)C4CC4	1.9	1.51	3.8	3.28	13.5	10.99	0.84	0.72	0.28	0.18	0.58	0.52	1.13	1.04	-0.08	-0.14
818	CO[C@@H]1CN(CCO1)[C@H]2C[C@@H](O[C@@H](C)[C@H]2O)O[C@H]3C[C@@](O)(CC4=C3C(=C5C(=O)C6=C(C=CC=C6OC)C(=O)C5=C4O)O)C(=O)CO	CO[C@@H]1C[NH+](CCO1)[C@H]2C[C@@H](O[C@@H](C)[C@H]2O)O[C@H]3C[C@@](O)(CC4=C3C(=C5C(=O)C6=C(C=CC=C6OC)C(=O)C5=C4O)O)C(=O)CO	49	30.93	15.32	13.44	49.2	24.24			1.69	1.49	1.19	1.13	1.69	1.38		
819	CN(C)C(=O)OC1=CC=CC(=C1)[N+](C)(C)C	CN(C)C(=O)OC1=CC(=CC=C1)[N+](C)(C)C	0.74	1.20	9.2	7.46	1.3	1.74			0.13	0.08	0.96	0.87	0.11	0.24		
820	CCN[C@@H]1C[C@H](N)[C@@H](O[C@H]2OC(=CC[C@H]2N)CN)[C@H](O)[C@H]1O[C@@H]3OC[C@](C)(O)[C@H](NC)[C@H]3O	CC[NH2+][C@@H]1C[C@H]([NH3+])[C@H](O[C@H]2OC(=CC[C@H]2[NH3+])C[NH3+])[C@H](O)[C@H]1O[C@H]3OC[C@](C)(O)[C@H]([NH2+]C)[C@H]3O	0.073	0.13	0.55	0.85	3.2	3.32	1	0.79	1.14	-0.88	-0.26	-0.07	0.51	0.52	0.00	-0.10
821	CN1CCN(CC1)C2=NC=C(N(C)C(=O)C(C)(C)C3=CC(=CC(=C3)C(F)(F)F)C(F)(F)F)C(=C2)C4=CC=CC=C4C	CN(C(=O)C(C)(C)C1=CC(=CC(=C1)C(F)(F)F)C(F)(F)F)C2=C(C=C(N=C2)N3CC[NH+](C)CC3)C4=C(C)C=CC=C4	5.54	4.40	2.83	3.00	34.28	31.60	0.003	0.01	0.74	0.64	0.45	0.48	1.54	1.50	-2.52	-2.25
822	CC1=CC=NC2=C1NC(=O)C3=CC=CN=C3N2C4CC4	CC1=C2NC(=O)C3=C(N=CC=C3)N(C4CC4)C2=NC=C1	1.3	1.03	0.3	1.00	53	18.56	0.32	0.25	0.11	0.01	-0.52	0.00	1.72	1.27	-0.49	-0.61
823	CC(C)NC[C@@H](O)COC1=CC=CC2=C1N(CCC2)C(=O)C3=CC=CN=C3	CC(C)[NH2+]C[C@@H](O)COC1=C2N(CCCC2=CC=C1)C(=O)C3=CN=CC=C3	0.67	0.99	3.6	4.73	12.4	9.10			0.17	0.00	0.56	0.68	1.09	0.96		
824	COC(=O)C1=C(C)NC(=C(C1C2=CC=CC(=C2)[N](=O)=O)C(=O)OCCN(C)CC3=CC=CC=C3)C	COC(=O)C1=C(C)NC(=C([C@@H]1C2=CC(=CC=C2)[N+]([O-])=O)C(=O)OCC[NH+](C)CC3=CC=CC=C3)C	1	1.26	11	9.05	4.1	5.73	0.01	0.01	0.00	0.10	1.04	0.96	0.61	0.76	-2.00	-1.89
825	[O-][N+](=O)OCCNC(=O)C1=CC=CN=C1	[O-][N+](=O)OCCNC(=O)C1=CN=CC=C1	1.4	1.11	11.5	9.13	0.8	1.00	0.76	0.70	0.15	0.05	1.06	0.96	-0.10	0.00	-0.12	-0.16
826	CN1CCC[C@H]1C2=CC=CN=C2	C[NH+]1CCC[C@H]1C2=CN=CC=C2	2.6	2.06	18	11.74	2	2.96	0.95	0.84	0.41	0.31	1.26	1.07	0.30	0.47	-0.02	-0.07
827	COC(=O)C1=C(C)NC(=C(C1C2=CC=CC=C2[N](=O)=O)C(=O)OC)C	COC(=O)C1=C(C)NC(=C(C1C2=C(C=CC=C2)[N+]([O-])=O)C(=O)OC)C	0.79	1.58	7.3	9.13	1.9	2.55	0.044	0.04	0.10	0.20	0.86	0.96	0.28	0.41	-1.36	-1.37
828	CN1C(=O)C=C(NCCN(CCO)CCCC2=CC=C(C=C2)[N+]([O-])=O)N(C)C1=O	CN1C(=O)C=C(NCC[NH+](CCO)CCCC2=CC=C(C=C2)[N+]([O-])=O)N(C)C1=O	1.96	1.56	20.89	12.75	1.52	2.21	0.09	0.14	0.29	0.19	1.32	1.11	0.18	0.34	-1.05	-0.87
829	COCCOC(=O)C1=C(C)NC(=C(C1C2=CC=CC(=C2)[N](=O)=O)C(=O)OC(C)C)C	COCCOC(=O)C1=C(C)NC(=C([C@H]1C2=CC(=CC=C2)[N+]([O-])=O)C(=O)OC(C)C)C	1.1	4.28	15	11.51	1.3	2.85	0.016	0.02	0.04	0.63	1.18	1.06	0.11	0.45	-1.80	-1.67
830	COC(=O)C1=CC=C2C(=C1)NC(=O)C2=C(NC3=CC=C(C=C3)N(C)C(=O)CN4CCN(C)CC4)C5=CC=CC=C5	COC(=O)C1=CC2=C(C=C1)\C(C(=O)N2)=C(\NC3=CC=C(C=C3)N(C)C(=O)C[NH+]4CC[NH+](C)CC4)C5=CC=CC=C5	15	11.91	19.9	12.30	9.5	9.67	0.02	0.03	1.18	1.08	1.30	1.09	0.98	0.99	-1.70	-1.60
831	COC(=O)C1=C(C)NC(=C(C1C2=CC=CC=C2[N](=O)=O)C(=O)OCC(C)C)C	COC(=O)C1=C(C)NC(=C([C@H]1C2=C(C=CC=C2)[N+]([O-])=O)C(=O)OCC(C)C)C	5.5	4.37	15	12.30	11	8.09	0.003	0.01	0.74	0.64	1.18	1.09	1.04	0.91	-2.52	-2.11
832	O=C1CN=C(C2=CC=CC=C2)C3=CC(=CC=C3N1)[N](=O)=O	[O-][N+](=O)C1=CC2=C(NC(=O)CN=C2C3=CC=CC=C3)C=C1	1.7	0.86	0.86	0.91	26	16.70	0.13	0.07	0.23	-0.07	-0.07	-0.04	1.41	1.22	-0.89	-1.17
833	CCOC(=O)C1=C(C)NC(=C(C1C2=CC=CC(=C2)[N](=O)=O)C(=O)OC)C	CCOC(=O)C1=C(C)NC(=C([C@H]1C2=CC(=CC=C2)[N+]([O-])=O)C(=O)OC)C	6.1	3.28	25	16.86	8.2	5.43	0.02	0.02	0.79	0.52	1.40	1.23	0.91	0.73	-1.70	-1.60
834	O=C1CN(N=CC2=CC=C(O2)[N](=O)=O)C(=O)N1	[O-][N+](=O)C1=CC=C(O1)\C=N/N2CC(=O)NC2=O	0.57	0.56	9.7	6.57	0.97	1.38	0.17	0.20	0.24	-0.25	0.99	0.82	-0.01	0.14	-0.77	-0.69
835	[O-][N+](=O)OCC(CO[N+]([O-])=O)O[N+]([O-])=O	[O-][N+](=O)OCC(CO[N+]([O-])=O)O[N+]([O-])=O			194.3	47.64	4.5	3.15	0.4	0.37			2.29	1.68	0.65	0.50	-0.40	-0.43
836	CNC(NCCSCC1=CSC(=N1)CN(C)C)=C[N](=O)=O	CN\C(NCCSCC1=CSC(=N1)C[NH+](C)C)=C/[N+]([O-])=O	1	1.04	9.8	8.72	1.5	1.90	0.65	0.56	0.00	0.02	0.99	0.94	0.18	0.28	-0.19	-0.25
837	COC1=CC(=CC(=C1O)OC)C2C3C(COC3=O)C(OC4OC5COC(C)OC5C(O)C4N(C)C)C6=CC7=C(OCO7)C=C26	COC1=C(O)C(=CC(=C1)[C@H]2[C@@H]3[C@H](COC3=O)[C@@H](O[C@@H]4O[C@H]5CO[C@H](C)O[C@H]5[C@H](O)[C@@H]4[NH+](C)C)C6=C2C=C7OCOC7=C6)OC	0.3	0.38	0.4	1.16	14	9.83	0.013	0.03	0.52	-0.42	-0.40	0.07	1.15	0.99	-1.89	-1.50
838	CCCCC(C)(C)[C@@H](O)C=C[C@H]1[C@@H](O)C[C@H](Cl)[C@H]1CC=CCCCC(O)=O	CCCCC(C)(C)[C@@H](O)\C=C\[C@H]1[C@@H](O)C[C@H](Cl)[C@H]1C\C=C/CCCC([O-])=O	0.16	0.20	13.2	9.80	0.8	1.24			0.80	-0.70	1.12	0.99	-0.10	0.09		
839	CN1CC(C2=CC=CC=C2)C3=CC=CC(=C3C1)N	C[NH+]1C[C@@H](C2=CC=CC=C2)C3=C(C1)C(=CC=C3)N	6	7.55	22	17.72	6.5	7.66	0.4	0.22	0.78	0.88	1.34	1.25	0.81	0.88	-0.40	-0.65

840	CCN1C=C(C(O)=O)C(=O)C2=C1C=C(N3CCN CC3)C(=C2)F	CCN1C=C(C([O-])=O)C(=O)C2=C1C=C(N3CC[NH2+]CC3)C(=C2)F	1.88	1.35	6.96	5.75	4.45	6.07	0.13	0.26	0.27	0.13	0.84	0.76	0.65	0.78	-0.89	-0.58
841	CCOC(=O)[C@@]1(CCC=C[C@H]1NC)C2=C C=CC=C2	CCOC(=O)[C@@]1(CCC=C[C@@H]1[NH2+]C)C2= CC=CC=C2	2.5	2.06	9.9	11.29	4.4	5.48			0.40	0.31	1.00	1.05	0.64	0.74		
842	CNCCC=C1C2=CC=CC=C2CCC3=CC=CC=C 13	C[NH2+]CCC=C1C2=C(CCC3=C1C=CC=C3)C=CC= C2	22	12.63	10	10.31	30	24.58	0.12	0.09	1.34	1.10	1.00	1.01	1.48	1.39	-0.92	-1.07
843	COC1=CC=C2[C@H](OC(=O)C2=C1OC)[C@ @H]3N(C)CCC4=CC5=C(OCO5)C(=C34)OC	COC1=C(OC)C2=C(C=C1)[C@H](OC2=O)[C@@H]3 [NH+](C)CCC4=C3C(=C5OCOC5=C4)OC	2.3	1.83	16.88	12.43	2.13	3.14			0.36	0.26	1.23	1.09	0.33	0.50		
844	CC(C)(F)C[C@H](N[C@@H](C1=CC=C(C=C 1)C2=CC=C(C=C2)[S](C)(=O)=O)C(F)(F)F)C(=O)NC3(CC3)C#N	CC(C)(F)C[C@H]([NH2+][C@@H](C1=CC=C(C=C1) C2=CC=C(C=C2)[S](C)(=O)=O)C(F)(F)F)C(=O)NC3(CC3)C#N	1.63	1.30	0.19	0.60	108	44.86			0.21	0.11	-0.72	-0.22	2.03	1.65		
845	CC1COC2=C(N3CCN(C)CC3)C(=CC4=C2N1 C=C(C(O)=O)C4=O)F	C[C@H]1COC2=C3N1C=C(C([O-])=O)C(=O)C3=CC(=C2N4CC[NH+](C)CC4)F	1.6	1.47	2.5	2.32	8.9	8.38	0.75	0.68	0.20	0.17	0.40	0.37	0.95	0.92	-0.12	-0.17
846	OC[C@H]1O[C@H]([C@H](O)[C@@H](O)[C @H]1O)N2C=C(F)C(=O)NC2=O	OC[C@H]1O[C@H]([C@H](O)[C@@H](O)[C@H]1 O)N2C=C(F)C(=O)NC2=O	0.33	0.47	1.38	2.21	4.21	3.53			0.48	-0.33	0.14	0.34	0.62	0.55		
847	NCCCC[C@H](NC(=O)[C@@H](CC1=CC(=C (O)C(=C1)Br)Br)NC(=O)N2CCC(CC2)N3CC4 =CC=CC=C4NC3=O)C(=O)N5CCN(CC5)C6= CC=NC=C6	[NH3+]CCCC[C@H](NC(=O)[C@@H](CC1=CC(=C(O)C(=C1)Br)Br)NC(=O)N2CCC(CC2)N3CC4=C(NC3 =O)C=CC=C4)C(=O)N5CCN(CC5)C6=CC=[NH+]C= C6	0.31	0.39	2.6	2.83	2.5	4.52			0.51	-0.41	0.41	0.45	0.40	0.65		
848	CO[C@H]1C[C@H](O[C@@H](C)[C@@H]1 O)O[C@H]2[C@H](C)[C@@H](O[C@H]3O[C@@H](C)C[C@H]([C@H]3O)N(C)C)[C@@ H](C)C[C@]4(CO4)C(=O)[C@H](C)[C@@H](O)[C@@H](C)[C@@H](C)OC(=O)[C@@H]2 C	CO[C@H]1C[C@H](O[C@@H](C)[C@@H]1O)O[C @H]2[C@H](C)[C@@H](O[C@H]3O[C@@H](C)C[C@H]([C@H]3O)[NH+](C)C)[C@@H](C)C[C@]4(C O4)C(=O)[C@H](C)[C@@H](O)[C@@H](C)[C@@H](C)OC(=O)[C@@H]2C	0.77	0.97	9.1	6.79	1.05	1.88	0.4	0.30	0.11	-0.01	0.96	0.83	0.02	0.28	-0.40	-0.52
849	COC1=C(CNCC[C@]2(CCOC3(CCCC3)C2)C4 =CC=CC=N4)SC=C1	COC1=C(C[NH2+]CC[C@@]2(CCOC3(CCCC3)C2)C 4=NC=CC=C4)SC=C1	0.78	0.98	6.89	6.60	1.8	3.46			0.11	-0.01	0.84	0.82	0.26	0.54		
850	CCCC1=NC(=C([N]1CC2=CC=C(C=C2)C3=C (C=CC=C3)C4=NN=N[NH]4)C(O)=O)C(C)(C) O	CCCC1=NC(=C([N]1CC2=CC=C(C=C2)C3=C(C=CC =C3)C4=NN=N[N-]4)C([O-])=O)C(C)(C)O			0.29	0.52	10.8	8.37					-0.54	-0.28	1.03	0.92		
851	COC1=CC=C(CC(C)(C)NC[C@H](O)C2=CC(=CC3=C2OCC(=O)N3)O)C=C1	COC1=CC=C(CC(C)(C)[NH2+]C[C@H](O)C2=C3OC C(=O)NC3=CC(=C2)O)C=C1	15.85	6.75	12.45	8.30	22.1	12.00	0.4	0.25	1.20	0.83	1.10	0.92	1.34	1.08	-0.40	-0.60
852	CC1=C(C=C(C#N)C(=O)N1)C2=C[N]3C=CN= C3C=C2	CC1=C(C=C(C#N)C(=O)N1)C2=C[N]3C=CN=C3C=C 2	0.64	0.51	11	7.01	67.69	17.55			0.19	-0.29	1.04	0.85	1.83	1.24		
853	OC(=O)C1=CC(=CC=C1O)N=NC2=CC=C(O) C(=C2)C(O)=O	OC1=C(C=C(C=C1)N=NC2=CC(=C(O)C=C2)C([O-])=O)C([O-])=O	0.07	0.09	1.2	1.18	0.9	1.43	0.01	0.02	1.15	-1.05	0.08	0.07	-0.05	0.16	-2.00	-1.66
854	CN(C)[C@H]1[C@@H]2C[C@@H]3CC4=C(C=C(CNCC(C)(C)C)C(=C4C(=O)C3=C(O)[C @]2(O)C(=O)C(=C1O)C(N)=O)O)N(C)C	CN(C)C1=C2C[C@H]3C[C@H]4[C@H]([NH+](C)C) C(=C(C(N)=O)C(=O)[C@@]4(O)C(=C3C(=O)C2=C(O)C(=C1)C[NH2+]CC(C)(C)C)[O-])[O-]	2.7	2.14	2.34	2.18	15	14.47			0.43	0.33	0.37	0.34	1.18	1.16		
855	COC(=O)N[C@@H](C(C)C)C(=O)N1CCC[C @H]1C(=O)NC2=CC=C(C=C2)[C@@H]3CC[C@H](N3C4=CC=C(C=C4)C(C)(C)C)C5=CC= C(NC(=O)[C@@H]6CCCN6C(=O)[C@@H](N C(=O)OC)C(C)C)C=C5	COC(=O)N[C@@H](C(C)C)C(=O)N1CCC[C@H]1C(=O)NC2=CC=C(C=C2)[C@@H]3CC[C@H](N3C4=C C=C(C=C4)C(C)(C)C)C5=CC=C(NC(=O)[C@@H]6C CCN6C(=O)[C@@H](NC(=O)OC)C(C)C)C=C5	2.32	1.84	1.68	1.84	28.49	18.16	0.001	0.0042	0.37	0.27	0.23	0.26	1.45	1.26	-3.00	-2.37
856	COC1=C(NC(=O)[C@@H](N)CO)C=C(C=CC 2=CC(=C(OC)C(=C2)OC)OC)C=C1	COC1=C(NC(=O)[C@@H]([NH3+])CO)C=C(\C=C\C 2=CC(=C(OC)C(=C2)OC)OC)C=C1	0.44	0.55	22.6	13.06	0.26	0.91			0.36	-0.26	1.35	1.12	-0.59	-0.04		
857	COC1=CC=C2[NH]C(=NC2=C1)[S](=O)CC3= NC=C(C)C(=C3C)OC	COC1=CC2=C([NH]C(=N2)[S](=O)CC3=C(C)C(=C(C)C=N3)OC)C=C1	0.24	0.30	8.4	6.36	0.58	0.96	0.05	0.06	0.62	-0.52	0.92	0.80	-0.24	-0.02	-1.30	-1.23
858	C[N]1C2=C(C(=O)C(CC2)C[N]3C=CN=C3C)C 4=CC=CC=C14	C[N]1C2=C(C(=O)[C@H](CC2)C[N]3C=CN=C3C)C4 =C1C=CC=C4	1.8	1.89	5.8	5.38	3.4	3.45	0.27	0.17	0.26	0.28	0.76	0.73	0.53	0.54	-0.57	-0.78
859	O[C@@H](CC1=CC=C(F)C=C1)C=C[C@H]2 CCC(=O)N2CCSCCCC(O)=O	O[C@@H](CC1=CC=C(F)C=C1)\C=C/[C@H]2CCC(=O)N2CCSCCCC([O-])=O	0.48	0.38	15.79	8.90	0.38	0.77			0.32	-0.42	1.20	0.95	-0.42	-0.11		
860	C[C@@H]1CC(=O)NN=C1C2=CC=C(NC(C)= O)C=C2	C[C@H]1CC(=O)NN=C1C2=CC=C(NC(C)=O)C=C2	2.38	1.89	0.45	1.04	70	21.43	0.4	0.37	0.38	0.28	-0.35	0.02	1.85	1.33	-0.40	-0.43
861	COC1=CC=CC2=C1[N](CC3CCCCC3)C=C2C	COC1=C2[N](CC3CCCCC3)C=C(C(=O)N4CC[NH+](	1	1.26	3	4.52	4.2	7.34			0.00	0.10	0.48	0.66	0.62	0.87		

	(=O)N4CCN(C)C(C)C4	C)[C@@H](C)C4)C2=CC=C1																
862	CC1=NC=C([N]1C[C@H](O)CCl)[N+]([O-])=O	CC1=NC=C([N]1C[C@H](O)CCl)[N+]([O-])=O	1.16	0.92	1.08	1.71	12	6.89	0.88	0.73	0.06	-0.04	0.03	0.23	1.08	0.84	-0.06	-0.13
863	CC(C)C[C@H](NC(=O)OC(C)(C)C)[C@@H](O)C(=O)O[C@H]1[C@@H]2OC(=O)O[C@@]23[C@@H](OC(=O)C4=CC=CC=C4)[C@H]5[C@@](C)([C@@H](O)C[C@H]6OC[C@@]56OC(C)=O)C(=O)C(=O)[C@H](OC(C)=O)C(=C1C)C3(C)C	CC(C)C[C@H](NC(=O)OC(C)(C)C)[C@@H](O)C(=O)O[C@H]1[C@@H]2OC(=O)O[C@@]23[C@@H](OC(=O)C4=CC=CC=C4)[C@H]5[C@](C)([C@@H](O)C[C@H]6OC[C@@]56OC(C)=O)C(=O)[C@H](OC(C)=O)C(=C1C)C3(C)C	13.83	10.98	8.12	6.06	30.1	24.78			1.14	1.04	0.91	0.78	1.48	1.39		
864	CCC(CC)O[C@@H]1C=C(C[C@H](N)[C@H]1NC(C)=O)C(O)=O	CCC(CC)O[C@@H]1C=C(C[C@H]([NH3+])[C@H]1NC(C)=O)C([O-])=O	0.37	0.47	4.8	4.08	1.8	1.94	0.97	0.85	0.43	-0.33	0.68	0.61	0.26	0.29	-0.01	-0.07
865	COC(=O)[C@H](CC1=CC(=CC=C1)C(N)=N)[C@@H](C)NC(=O)C2=CC=C(C=C2)C3=CC=[N+]([O-])C=C3	COC(=O)[C@H](CC1=CC(=CC=C1)C(N)=[NH2+])[C@@H](C)NC(=O)C2=CC=C(C=C2)C3=CC=[N+]([O-])C=C3	0.89	1.09	7.38	5.62	3	4.48			0.05	0.04	0.87	0.75	0.48	0.65		
866	CC1=C(C(=O)N[C@H]2[C@H]3SC(C)(C)[C@@H](N3C2=O)C(O)=O)C(=NO1)C4=CC=CC=C4	CC1=C(C(=O)N[C@H]2[C@H]3SC(C)(C)[C@@H](N3C2=O)C([O-])=O)C(=NO1)C4=CC=CC=C4	0.19	0.20	6.3	4.29	0.7	1.00	0.07	0.08	0.72	-0.69	0.80	0.63	-0.15	0.00	-1.15	-1.09
867	[O-]1|[Pt++]2(|[O-]C(=O)C1=O)N[C@H]3CCCC[C@@H]3N2	O=C1[O-][Pt++]2(NC3CCCCC3N2)[O-]C1=O	0.5	0.63	0.1	0.40	58.92	17.54	0.13	0.24	0.30	-0.20	-1.00	-0.40	1.77	1.24	-0.89	-0.62
868	OC1N=C(C2=CC=CC=C2)C3=CC(=CC=C3NC1=O)Cl	O[C@@H]1N=C(C2=CC=CC=C2)C3=C(NC1=O)C=CC(=C3)Cl	0.59	0.95	1.1	1.29	6.7	8.18	0.04	0.05	0.23	-0.02	0.04	0.11	0.83	0.91	-1.40	-1.30
869	NC(=O)CN1CC(O)CC1=O	NC(=O)CN1C[C@@H](O)CC1=O	0.55	0.55	1.8	2.19	7.5	4.92			0.26	-0.26	0.26	0.34	0.88	0.69		
870	CC(C)NC[C@@H](O)COC1=C(OCC=C)C=CC=C1	CC(C)[NH2+]C[C@@H](O)COC1=C(OCC=C)C=CC=C1	0.72	0.91	7.7	10.27	1.09	1.66	0.19	0.28	0.14	-0.04	0.89	1.01	0.04	0.22	-0.72	-0.55
871	CCN(CC)CC#CCOC(=O)C(O)(C1CCCCC1)C2=CC=CC=C2	CC[NH+](CC)CC#CCOC(=O)[C@@](O)(C1CCCCC1)C2=CC=CC=C2	0.85	1.07	5.1	5.98	7.2	6.36	0.0034	0.01	0.07	0.03	0.71	0.78	0.86	0.80	-2.47	-2.00
872	COC1=CC=C2C[C@H]3N(C)CC[C@@]45[C@@H](OC1=C24)C(=O)CC[C@@]35O	COC1=C2O[C@H]3C(=O)CC[C@@]4(O)[C@H]5CC(=C2[C@@]34CC[NH+]5C)C=C1	2.5	2.44	6.1	9.57	5.5	3.99	0.55	0.67	0.40	0.39	0.79	0.98	0.74	0.60	-0.26	-0.17
873	[O-][N@+]12CCC[C@H]3CN4[C@H](CCCC4=O)[C@@H](CCC1)[C@@H]23	[O-][N@+]12CCC[C@H]3CN4[C@H](CCCC4=O)[C@@H](CCC1)[C@@H]23	0.61	0.77	7.66	6.47	1.69	2.08			0.21	-0.11	0.88	0.81	0.23	0.32		
874	CN(C)[C@H]1[C@@H]2[C@@H](O)[C@H]3C(=C(O)[C@]2(O)C(=O)C(=C1O)C(N)=O)C(=O)C4=C(O)C=CC=C4[C@@]3(C)O	C[NH+](C)[C@H]1[C@@H]2[C@@H](O)[C@H]3C(=C([O-])[C@]2(O)C(=O)C(=C1[O-])C(N)=O)C(=O)C4=C(C=CC=C4O)[C@@]3(C)O	1.7	0.86	2	1.71	10	9.10	0.9	0.56	0.23	-0.07	0.30	0.23	1.00	0.96	-0.05	-0.25
875	CC(=O)O[C@H]1C(=O)[C@]2(C)[C@@H](O)C[C@H]3OC[C@@]3(OC(C)=O)[C@H]2[C@H](OC(=O)C4=CC=CC=C4)[C@]5(O)C[C@H](OC(=O)[C@H](O)[C@@H](NC(=O)C6=CC=CC=C6)C7=CC=CC=C7)C(=C1C5(C)C)C	CC(=O)O[C@H]1C(=O)[C@]2(C)[C@@H](O)C[C@H]3OC[C@@]3(OC(C)=O)[C@H]2[C@H](OC(=O)C4=CC=CC=C4)[C@]5(O)C[C@H](OC(=O)[C@H](O)[C@@H](NC(=O)C6=CC=CC=C6)C7=CC=CC=C7)C(=C1C5(C)C)C	3	3.28	6.4	5.60	11	12.08	0.12	0.08	0.48	0.52	0.81	0.75	1.04	1.08	-0.92	-1.10
876	C[C@]12C[C@]3(O)O[C@@H](O1)[C@@]4(COC(=O)C5=CC=CC=C5)[C@@H]3C[C@@]24O[C@@H]6O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]6O	C[C@]12C[C@]3(O)O[C@H](O1)[C@@]4(COC(=O)C5=CC=CC=C5)[C@@H]3C[C@@]24O[C@@H]6O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H]6O	0.22	0.28	2.05	2.35	1.49	1.95	0.77	0.53	0.66	-0.56	0.31	0.37	0.17	0.29	-0.11	-0.27
877	CC1=C(CCN2CCC(CC2)C3=NOC4=CC(=CC=C34)F)C(=O)N5CCCC(O)C5=N1	CC1=C(CC[NH+]2CCC(CC2)C3=NOC4=CC(=CC=C34)F)C(=O)N5CCC[C@H](O)C5=N1			1.18	2.42	24.6	13.98	0.24	0.19			0.07	0.38	1.39	1.15	-0.62	-0.72
878	O=C1N(C[C@H]2CCCC3=CC=CC1=C23)[C@@H]4CN5CCC4CC5	O=C1N(C[C@H]2CCCC3=C2C1=CC=C3)[C@@H]4C[NH+]5CCC4CC5	6.3	5.01	2.6	4.30	39	19.32	0.38	0.31	0.80	0.70	0.41	0.63	1.59	1.29	-0.42	-0.51
879	NCCC(O)([P](O)(O)=O)[P](O)(O)=O	[NH3+]CCC(O)([P]([O-])([O-])=O)[P]([O-])([O-])=O	1.8	0.88	2.5	2.56	32	19.39	0.7	0.46	0.26	-0.06	0.40	0.41	1.51	1.29	-0.15	-0.34
880	NC1=C(Cl)C=C(C(=O)NC2CN3CCC2CC3)C(=C1)OCC4CC4	NC1=C(Cl)C=C(C(=O)N[C@@H]2C[NH+]3CCC2CC3)C(=C1)OCC4CC4	3.9	3.66	5.2	6.93	13.5	8.78			0.59	0.56	0.72	0.84	1.13	0.94		
881	CC(=O)O[C@H]1C[C@@H]2CC[C@@H]3[C@H](C@H](CC[C@@]4(C)[C@H]3C[C@@H]([C@@H]4OC(C)=O)[N+]5(C)CCCCC5)[C@@]2(C)C[C@@H]1[N+]6(C)CCCCC6	CC(=O)O[C@H]1C[C@@H]2CC[C@@H]3[C@H](C[C@@]4(C)[C@@H]3C[C@@H]([C@@H]4OC(C)=O)[N+]5(C)CCCCC5)[C@@]2(C)C[C@@H]1[N+]6(C)CCCCC6	0.2	0.25	1.5	2.14	1.9	2.21	0.09	0.13	0.70	-0.60	0.18	0.33	0.28	0.34	-1.05	-0.89
882	C[C@@H](O)[C@@H]1[C@H]2CC(=C(N2C1	C[C@@H](O)[C@@H]1[C@H]2CC(=C(N2C1=O)C([	0.19	0.26	2.6	2.91	0.96	1.47			0.72	-0.58	0.41	0.46	-0.02	0.17		

	=O)C(O)=O)S[C@H]3CCN(C3)C(C)=N	O-])=O)S[C@H]3CCN(C3)C(C)=[NH2+]																
883	CC1=C(CCNCC2=CC=C(C=CC(=O)NO)C=C2)C3=CC=CC=C3[NH]1	CC1=C(CC[NH2+]CC2=CC=C(\C=C\C(=O)N[O-])C=C2)C3=C([NH]1)C=CC=C3			10.2	6.86	13.1	9.25	0.1	0.11			1.01	0.84	1.12	0.97	-1.00	-0.96
884	COC1=CC=NC(=C1OC)C[S](=O)C2=NC3=CC=C(OC(F)F)C=C3[NH]2	COC1=C(OC)C(=NC=C1)C[S](=O)C2=NC3=C([NH]2)C=C(OC(F)F)C=C3	0.17	0.21	2.2	3.19	1.9	2.55	0.02	0.04	0.77	-0.67	0.34	0.50	0.28	0.41	-1.70	-1.39
885	COC1=CC=C(CC2=NC=CC3=CC(=C(OC)C=C23)OC)C=C1OC	COC1=C(OC)C=C(CC2=C3C=C(OC)C(=CC3=CC=N2)OC)C=C1	1	1.26	11	7.75	1.8	2.47	0.073	0.07	0.00	0.10	1.04	0.89	0.26	0.39	-1.14	-1.15
886	C[C@H](C=C[C@H](C)C(C)(C)O)[C@H]1CC[C@H]2C(CCC[C@]12C)=C[CH]=[C]3C[C@@H](O)[CH2][C@H](O)C3	C[C@H](\C=C/[C@H](C)C(C)(C)O)[C@H]1CC[C@]2\C(CCC[C@]12C)=C/[CH]=[C]3C[C@@H](O)[CH2][C@H](O)C3	0.41	0.52	0.89	1.03	5.3	9.02	0.0016	0.01	0.39	-0.29	-0.05	0.01	0.72	0.96	-2.80	-2.21
887	CC1=CN=C(C=N1)C(=O)N[C@H]2CCCCCC=C[C@@H]3C[C@]3(NC(=O)[C@@H]4C[C@@H](CN4C2=O)OC5=C6C=CC=CC6=C7C=CC=CC7=N5)C(=O)N[S](=O)(=O)C8CC8	CC1=NC=C(N=C1)C(=O)N[C@H]2CCCCC\C=C/[C@@H]3C[C@]3(NC(=O)[C@@H]4C[C@H](CN4C2=O)OC5=C6C=CC=CC6=C7C=CC=CC7=N5)C(=O)N=[S]([O-])(=O)C8CC8	1.37	1.09	5.74	4.54	8.71	7.09	0.022	0.02	0.14	0.04	0.76	0.66	0.94	0.85	-1.66	-1.67
888	FC1=CC=C(C=C1)[C@@H]2CCNC[C@H]2COC3=CC=C4OCOC4=C3	FC1=CC=C(C=C1)[C@@H]2CC[NH2+]C[C@H]2COC3=CC4=C(OCO4)C=C3	18	14.29	18	13.48	13	10.01	0.06	0.09	1.26	1.16	1.26	1.13	1.11	1.00	-1.22	-1.03
889	C[C@H]1CCC[C@@]2(C)O[C@H]2C[C@H](OC(=O)C[C@H](O)C(C)(C)C(=O)[C@@H](C)[C@H]1O)C(=C)C3=CSC(=N3)C	C[C@H]1CCC[C@@]2(C)O[C@H]2C[C@H](OC(=O)C[C@H](O)C(C)(C)C(=O)[C@@H](C)[C@H]1O)\C(=C\C3=CSC(=N3)C	14.4	11.44	2.17	3.17	92.3	30.86	0.22	0.16	1.16	1.06	0.34	0.50	1.97	1.49	-0.66	-0.78
890	C[N]1N=C2C=C(C=CC2=C1C)N(C)C3=NC(=NC=C3)NC4=CC=C(C)C(=C4)[S](N)(=O)=O	C[N]1N=C2C=C(C=CC2=C1C)N(C)C3=NC(=NC=C3)NC4=CC(=C(C)C=C4)[S](N)(=O)=O	0.16	0.20	0.06	0.25			0.01	0.02	0.80	-0.70	-1.22	-0.59			-2.00	-1.81
891	C[C@H]1COC2=C3N1C=C(C(O)=O)C(=O)C3=CC(=C2C4(N)CC4)F	C[C@H]1COC2=C(C(=CC3=C2N1C=C(C([O-])=O)C3=O)F)C4([NH3+])CC4	0.68	0.86	4.87	4.32	2.1	3.05	0.79	0.65	0.17	-0.07	0.69	0.64	0.32	0.48	-0.10	-0.19
892	CCN1C=C(C(O)=O)C(=O)C2=CC(=C(C=C12)N3CCN(C)CC3)F	CCN1C=C(C([O-])=O)C(=O)C2=C1C=C(N3CC[NH+](C)CC3)C(=C2)F	1.5	1.32	2	2.48	11	6.95	0.75	0.57	0.18	0.12	0.30	0.39	1.04	0.84	-0.12	-0.24
893	NC1=NC2=C([NH]C=C2CC3=CC=CN=C3)C(=O)N1	NC1=NC2=C([NH]C=C2CC3=CN=CC=C3)C(=O)N1	1.2	1.51	6.2	4.93	3	3.34	0.86	0.59	0.08	0.18	0.79	0.69	0.48	0.52	-0.07	-0.23
894	CC1=NC(=O)C(=C(NCC2=CC=CN=C2)N1)C#N	CC1=NC(=O)C(=C(NCC2=CN=CC=C2)N1)C#N	0.39	0.49	5.8	5.23	0.95	1.49	0.05	0.11	0.41	-0.31	0.76	0.72	-0.02	0.17	-1.30	-0.95
895	NC1=NC2=C(C(=O)N1)C(=C[NH]2)CCC3=CC=C(C=C3)C(=O)N[C@H](CCC(O)=O)C(O)=O	NC1=NC2=C(C(=O)N1)C(=C[NH]2)CCC3=CC=C(C=C3)C(=O)N[C@H](CCC([O-])=O)C([O-])=O	0.15	0.22	1.3	1.83	1.85	2.72	0.19	0.21	0.82	-0.66	0.11	0.26	0.27	0.43	-0.72	-0.68
896	NC1=NC(=O)C2=C(N1)[N](CCC(CO)CO)C=N2	NC1=NC(=O)C2=C(N1)[N](CCC(CO)CO)C=N2	1.1	1.04	8.4	6.32	2.1	3.41	0.84	0.81	0.04	0.02	0.92	0.80	0.32	0.53	-0.08	-0.09
897	COC1=NC(=C(Cl)C(=C1Cl)OC)C(Cl)(Cl)Cl	COC1=C(Cl)C(=C(Cl)C(=N1)C(Cl)(Cl)Cl)OC	9.1	7.23	29.9	11.46	3.8	4.71			0.96	0.86	1.48	1.06	0.58	0.67		
898	O[C@@](CO[C@@H]1CN2CCC1CC2)(C3CCCC3)C4=CC=CC=C4	O[C@@](CO[C@@H]1C[NH+]2CCC1CC2)(C3CCCC3)C4=CC=CC=C4	2.12	2.67	1.99	3.27	15.73	11.22			0.33	0.43	0.30	0.51	1.20	1.05		
899	CC(C)(S)[C@@H](N)C(O)=O	CC(C)(S)[C@@H]([NH3+])C([O-])=O	1.26	1.00	10.65	5.58	3.04	3.20	0.12	0.24	0.10	0.00	1.03	0.75	0.48	0.51	-0.92	-0.62
900	CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)CC3=CC=CC=C3)C(=O)N2[C@H]1C(O)=O	CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)CC3=CC=CC=C3)C(=O)N2[C@H]1C([O-])=O	0.24	0.25	6.9	4.90	0.7	1.26	0.4	0.37	0.62	-0.60	0.84	0.69	-0.15	0.10	-0.40	-0.43
901	NC(=N)C1=CC=C(OCCCCCOC2=CC=C(C=C2)C(N)=N)C=C1	NC(=[NH2+])C1=CC=C(OCCCCCOC2=CC=C(C=C2)C(N)=[NH2+])C=C1	53	19.92	74	30.32	25	12.47	0.09	0.11	1.72	1.30	1.87	1.48	1.40	1.10	-1.05	-0.97
902	CC1[C@@H]2CC3=CC=C(O)C=C3[C@@]1(CC)CCN2CC=C(C)C	CC1[C@@H]1[C@H]2CC3=C(C=C(O)C=C3)[C@@]1(C)CC[NH+]2CC=C(C)C	3.4	4.28	23	16.93	2.5	3.79	0.39	0.16	0.53	0.63	1.36	1.23	0.40	0.58	-0.41	-0.80
903	CCCC(C)C1(CC)C(=O)NC(=O)NC1=O	CCC[C@H](C)C1(CC)C(=O)NC(=O)NC1=O	0.91	0.93	0.47	0.81	22	10.95	0.39	0.23	0.04	-0.03	-0.33	-0.09	1.34	1.04	-0.41	-0.64
904	OC[C@@H]1O[C@H](C[C@H]1O)[N]2C=NC3=C2N=CNC[C@H]3O	OC[C@@H]1O[C@H](C[C@@H]1O)[N]2C=NC3=C2[NH+]=CNC[C@H]3O	0.59	0.74	1.63	2.97	5.3	4.36	0.96	0.89	0.23	-0.13	0.21	0.47	0.72	0.64	-0.02	-0.05
905	C[N]1C=NC2=C1C(=O)N(CCCCC(C)=O)C(=O)N2C	C[N]1C=NC2=C1C(=O)N(CCCCC(C)=O)C(=O)N2C	1.8	1.43	39	16.74	1.2	1.70	0.51	0.50	0.26	0.16	1.59	1.22	0.08	0.23	-0.29	-0.30
906	O=C1N(C=C(C=C1C2=CC=CC=C2C#N)C3=CC=CC=N3)C4=CC=CC=C4	O=C1N(C=C(C=C1C2=C(C=CC=C2)C#N)C3=NC=CC=C3)C4=CC=CC=C4	1.36	1.08	0.1	0.32	183	65.27	0.05	0.03	0.13	0.03	-1.00	-0.50	2.26	1.81	-1.30	-1.48
907	FC(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F	FC(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F	1.6	1.27	590.71	78.98	0.02	0.18			0.20	0.10	2.77	1.90	-1.70	-0.76		
908	CCC[C@H](N[C@@H](C)C(=O)N1[C@H]2CCCC[C@H]2C[C@H]1C(O)=O)C(O)=O	CCC[C@H]([NH2+][C@@H](C)C(=O)N1[C@H]2CCCC[C@H]2C[C@H]1C([O-])=O)C([O-])=O	0.76	0.60	1.7	2.09	29	12.88	0.16	0.22	0.12	-0.22	0.23	0.32	1.46	1.11	-0.80	-0.65
909	OCCN1CCN(CCCN2C3=CC=CC=C3SC4=CC=C(Cl)C=C24)CC1	OCC[NH+]1CC[NH+](CCCN2C3=C(SC4=C2C=C(Cl)C=C4)C=CC=C3)CC1	18	13.17	27	17.03	9.4	10.66	0.07	0.06	1.26	1.12	1.43	1.23	0.97	1.03	-1.15	-1.25

910	N[S](=O)(=O)OC[C@@H]1C[C@H](C[C@@H]1O)[N]2C=CC3=C(N[C@H]4CCC5=CC=CC=C45)N=CN=C23	N[S](=O)(=O)OC[C@@H]1C[C@H](C[C@@H]1O)[N]2C=CC3=C2N=CN=C3N[C@H]4CCC5=C4C=CC=C5	3.02	2.40	8.1	6.03	5.62	5.35			0.48	0.38	0.91	0.78	0.75	0.73		
911	CN(C)C1CCN(CC1)C(=O)C2=CC=C(NC(=O)NC3=CC=C(C=C3)C4=NC(=NC(=N4)N5CCOCC5)N6CCOCC6)C=C2	C[NH+](C)C1CCN(CC1)C(=O)C2=CC=C(NC(=O)NC3=CC=C(C=C3)C4=NC(=NC(=N4)N5CCOCC5)N6CCOCC6)C=C2	2.39	2.33	2.25	2.94	35.8	23.58			0.38	0.37	0.35	0.47	1.55	1.37		
912	COC1=C(C[N]2C=CC3=C2C=NC4=C3CCN(O)C4=O)C=CC(=C1)F	COC1=C(C[N]2C=CC3=C2C=NC4=C3CCN([O-])C4=O)C=CC(=C1)F	5.7	2.54	24	9.22	3.8	4.29	0.08	0.06	0.76	0.40	1.38	0.96	0.58	0.63	-1.10	-1.23
913	CCOC1=CC=C(NC(C)=O)C=C1	CCOC1=CC=C(NC(C)=O)C=C1	1.4	1.11	21	12.12	0.92	1.52	0.47	0.46	0.15	0.05	1.32	1.08	-0.04	0.18	-0.33	-0.33
914	ClC1=C(C=CC=C1)C2=NCC(=O)NC3=C2C=C(Br)C=C3	ClC1=C(C=CC=C1)C2=NCC(=O)NC3=C2C=C(Br)C=C3	6.23	3.14	0.05	0.14	14.88	21.74			0.79	0.50	-1.30	-0.87	1.17	1.34		
915	C1CCN(CC1)C2(CCCCC2)C3=CC=CC=C3	C1CC[NH+](CC1)C2(CCCCC2)C3=CC=CC=C3	6.9	5.48	5.1	6.04	16	13.92	0.35	0.23	0.84	0.74	0.71	0.78	1.20	1.14	-0.46	-0.64
916	CC(OC1=CC=CC=C1)C(=O)N[C@H]2[C@H]3SC(C)(C)[C@@H](N3C2=O)C(O)=O	C[C@@H](OC1=CC=CC=C1)C(=O)N[C@H]2[C@H]3SC(C)(C)[C@@H](N3C2=O)C([O-])=O	0.3	0.28	4.2	3.82	0.91	1.27	0.25	0.34	0.52	-0.55	0.62	0.58	-0.04	0.10	-0.60	-0.47
917	CCC1(C(=O)NC(=O)NC1=O)C2=CC=CC=C2	CCC1(C(=O)NC(=O)NC1=O)C2=CC=CC=C2	0.54	0.63	0.063	0.34	99	27.92	0.49	0.28	0.27	-0.20	-1.20	-0.47	2.00	1.45	-0.31	-0.55
918	CCOC(=O)C1(CCN(CCC(O)C2=CC=CC=C2)CC1)C3=CC=CC=C3	CCOC(=O)C1(CC[NH+](CC[C@@H](O)C2=CC=CC=C2)CC1)C3=CC=CC=C3	5.7	4.52	22	15.23	3.22	4.60			0.76	0.66	1.34	1.18	0.51	0.66		
919	OC1=CC=C(C=C1)C2=CC3=C(OC2)C=C(O)C=C3	OC1=CC=C(C=C1)C2=CC3=C(OC2)C=C(O)C=C3	1.55	1.23	0.59	1.76	0.67	1.33			0.19	0.09	-0.23	0.24	-0.17	0.12		
920	CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)COC3=CC=CC=C3)C(=O)N2[C@H]1C(O)=O	CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)COC3=CC=CC=C3)C(=O)N2[C@H]1C([O-])=O	0.41	0.33	6.8	5.18	0.84	1.13	0.45	0.41	0.39	-0.49	0.83	0.71	-0.08	0.05	-0.35	-0.39
921	CC[C@H](C1=CC=CC=C1)C2=C(O)C3=C(OC2=O)C=CC=C3	CC[C@H](C1=CC=CC=C1)C2=C([O-])C3=C(OC2=O)C=CC=C3	0.2	0.25	0.02	0.08	126	43.63	0.57	0.14	0.70	-0.60	-1.70	-1.12	2.10	1.64	-0.24	-0.85
922	CC1=CC=C(C=C1)N(CC2=NCCN2)C3=CC(=CC=C3)O	CC1=CC=C(C=C1)N(CC2=[NH+]CCN2)C3=CC(=CC=C3)O			42	29.63	2.5	3.00					1.62	1.47	0.40	0.48		
923	O=C1NC(=O)C(N1)(C2=CC=CC=C2)C3=CC=CC=C3	O=C1NC(=O)C(N1)(C2=CC=CC=C2)C3=CC=CC=C3	0.43	0.54	0.37	0.69	16.8	13.54	0.13	0.09	0.37	-0.27	-0.43	-0.16	1.23	1.13	-0.89	-1.05
924	CC(C)CCC[C@@H](C)CCC[C@@H](C)CCCC(C)=CCC1=C(C)C(=O)C2=C(C=CC=C2)C1=O	CC(C)CCC[C@@H](C)CCC[C@@H](C)CCC\C(C)=C\CC1=C(C)C(=O)C2=C(C=CC=C2)C1=O	0.32	0.40	1.6	1.51	7.3	9.27			0.49	-0.39	0.20	0.18	0.86	0.97		
925	CNC(=O)OC1=CC2=C(C=C1)N(C)[C@H]3N(C)CC[C@]23C	CNC(=O)OC1=CC2=C(C=C1)N(C)[C@H]3[NH+](C)CC[C@]23C	3.9	3.10	72	29.82	1	1.60	0.64	0.62	0.59	0.49	1.86	1.47	0.00	0.20	-0.19	-0.21
926	CC1=C(C)C2=CC=C(OCCCN3CCN(CC3)CC4=CC=C(Cl)C=C4)C=C2OC1=O	CC1=C(C)C2=C(OC1=O)C=C(OCCC[NH+]3CC[NH+](CC3)CC4=CC=C(Cl)C=C4)C=C2	1.3	1.64	1.3	2.28	19.2	13.75	0.05	0.04	0.11	0.21	0.11	0.36	1.28	1.14	-1.30	-1.42
927	OC(=O)[C@@H]1CSCN1C(=O)[C@@H]2CCC(=O)N2	[O-]C(=O)[C@@H]1CSCN1C(=O)[C@@H]2CCC(=O)N2	0.31	0.39	1.16	1.89	3.8	2.56	0.96	0.87	0.51	-0.41	0.06	0.28	0.58	0.41	-0.02	-0.06
928	OC[C@@H](O)CNC(=O)C1=C(NC2=C(F)C=C(I)C=C2)C=NC=C1	OC[C@@H](O)CNC(=O)C1=C(NC2=C(F)C=C(I)C=C2)C=NC=C1	1.8	1.43	8.71	6.38	4.59	4.98			0.26	0.16	0.94	0.80	0.66	0.70		
929	COC1=CC=C(C=C1)C2=NC3=CC(=CC=C3[NH]2)C4=NNC(=O)CC4C	COC1=CC=C(C=C1)C2=NC3=C([NH]2)C=CC(=C3)C4=NNC(=O)C[C@@H]4C	2	1.59	14	8.12	1.8	2.68	0.024	0.02	0.30	0.20	1.15	0.91	0.26	0.43	-1.62	-1.67
930	C[C@@H](NC(NC#N)=NC1=CC=NC=C1)C(C)(C)C	C[C@@H](NC(NC#N)=NC1=CC=NC=C1)C(C)(C)C	1.1	1.39	5.68	4.80	2.5	3.08	0.6	0.41	0.04	0.14	0.75	0.68	0.40	0.49	-0.22	-0.39
931	CC(C)NCC(O)COC1=CC=CC2=C1C=C[NH]2	CC(C)[NH2+]C[C@@H](O)COC1=C2C=C[NH]C2=CC=C1	1.2	2.61	7.7	9.25	2.2	3.93	0.58	0.58	0.08	0.42	0.89	0.97	0.34	0.59	-0.24	-0.24
932	OC1=CC(=C2C(=O)C[C@H](OC2=C1)C3=CC=CC=C3)O	OC1=CC2=C(C(=O)C[C@H](O2)C3=CC=CC=C3)C(=C1)O	0.8	0.64	27	11.54	0.7	1.24			0.10	-0.20	1.43	1.06	-0.15	0.09		
933	CC(=O)O[C@H]1C[C@@H]2CC[C@@H]3[C@H](CC[C@@]4(C)[C@H]3C[C@@H]([C@@H]4OC(C)=O)N5CC[N+](C)(C)CC5)[C@@]2(C)C[C@@H]1N6CC[N+](C)(C)CC6	CC(=O)O[C@H]1C[C@@H]2CC[C@H]3[C@@H](CC[C@@]4(C)[C@H]3C[C@@H]([C@@H]4OC(C)=O)N5CC[N+](C)(C)CC5)[C@@]2(C)C[C@@H]1N6CC[N+](C)(C)CC6	0.35	0.44	3	3.07	1.9	2.43	0.98	0.45	0.46	-0.36	0.48	0.49	0.28	0.39	-0.01	-0.35
934	CCN1C=C(C(O)=O)C(=O)C2=C1N=C(N=C2)N3CCNCC3	CCN1C=C(C([O-])=O)C(=O)C2=C1N=C(N=C2)N3CC[NH2+]CC3	0.88	1.11	2.84	3.22	3.69	4.31	0.7	0.65	0.06	0.04	0.45	0.51	0.57	0.63	-0.15	-0.19
935	CCN1CCN(C(=O)N[C@@H](C(=O)N[C@H]2[C@H]3SC(C)(C)[C@@H](N3C2=O)C(O)=O)	CCN1CCN(C(=O)N[C@@H](C(=O)N[C@H]2[C@H]3SC(C)(C)[C@@H](N3C2=O)C([O-	0.27	0.34	4	2.69	0.96	1.36	0.5	0.33	0.57	-0.47	0.60	0.43	-0.02	0.13	-0.30	-0.48

936	C4=CC=CC=C4)C(=O)C1=O CN(CCC(=O)C=CC1=CC=C(O)C=C1)CCC2= CC=C3OCOC3=C2	])=O)C4=CC=CC=C4)C(=O)C1=O C[NH+](CCC(=O)\C=C\C1=CC=C(O)C=C1)CCC2=C C3=C(OCO3)C=C2	2.13	2.68	713	137.18	0.1	0.53			0.33	0.43	2.85	2.14	-1.00	-0.28		
937	COC1=C2C(=O)C3=C(C(=C4C[C@](O)(C[C@ H](O[C@@H]5C[C@H](N)[C@H](O[C@@H] 6CCCCO6)[C@H](C)O5)C4=C3O)C(=O)CO)O)C(=O)C2=CC=C1	COC1=C2C(=O)C3=C(C(=C4C[C@@](O)(C[C@H](O [C@@H]5C[C@H]([NH3+])[C@H](O[C@@H]6CCC CO6)[C@H](C)O5)C4=C3O)C(=O)CO)O)C(=O)C2=C C=C1	43.2	34.32	57.7	28.31	11.1	20.05			1.64	1.54	1.76	1.45	1.05	1.30		
938	CN1CCN(CC1)CC(=O)N2C3=C(C=CC=C3)C(=O)NC4=C2N=CC=C4	C[NH+]1CC[NH+](CC1)CC(=O)N2C3=C(C=CC=C3) C(=O)NC4=C2N=CC=C4	1.71	2.15	2.77	3.73	11.1	8.99			0.23	0.33	0.44	0.57	1.05	0.95		
939	N[S](=O)(=O)C1=CC(=CC(=C1OC2=CC=CC= C2)N3CCCC3)C(O)=O	N[S](=O)(=O)C1=C(OC2=CC=CC=C2)C(=CC(=C1)C([O-])=O)N3CCCC3	0.17	0.18	3.1	2.32	1.3	1.97	0.058	0.06	0.77	-0.75	0.49	0.37	0.11	0.29	-1.24	-1.23
940	NC(=O)C1(CCN(CC1)CCC(C#N)(C2=CC=CC =C2)C3=CC=CC=C3)N4CCCCC4	NC(=O)C1(CC[NH+](CC1)CCC(C#N)(C2=CC=CC=C 2)C3=CC=CC=C3)[NH+]4CCCCC4	4.7	3.74	7.8	6.62	8	7.82	0.061	0.07	0.67	0.57	0.89	0.82	0.90	0.89	-1.21	-1.17
941	C[C@@H]1CCC[C@H](C)N1CCCC(O)(C2=C C=CC=C2)C3=CC=CC=N3	C[C@@H]1CCC[C@@H](C)[NH+]1CCC[C@](O)(C2 =CC=CC=C2)C3=NC=CC=C3	1.4	1.99	1.8	3.00	8.4	7.65	0.13	0.16	0.15	0.30	0.26	0.48	0.92	0.88	-0.89	-0.80
942	CCC1=C(NC(=O)N1)C(=O)C2=CC=NC=C2	CCC1=C(NC(=O)N1)C(=O)C2=CC=NC=C2	0.65	1.05	9.03	7.33	1.32	1.54			0.19	0.02	0.96	0.87	0.12	0.19		
943	O[C@H](C[C@H](O)C=CC1=C(C2=CC=C(F) C=C2)C3=CC=CC=C3N=C1C4CC4)CC(O)=O	O[C@H](C[C@H](O)\C=C\C1=C(C2=CC=C(F)C=C2) C3=CC=CC=C3N=C1C4CC4)CC([O-])=O	0.9	0.71	5.85	4.83	4.6	4.18	0.005	0.01	0.05	-0.15	0.77	0.68	0.66	0.62	-2.30	-2.17
944	NCCNC1=CC=C(NCCN)C2=C1C(=O)C3=C(C =NC=C3)C2=O	[NH3+]CCNC1=C2C(=O)C3=C(C=NC=C3)C(=O)C2= C(NCC[NH3+])C=C1	10.1	8.02	17.7	12.50	13.4	14.18			1.00	0.90	1.25	1.10	1.13	1.15		
945	CC[C@@H](C)N(C)C(=O)C1=CC2=CC=CC= C2C(=N1)C3=C(Cl)C=CC=C3	CC[C@@H](C)N(C)C(=O)C1=NC(=C2C=CC=CC2=C 1)C3=C(Cl)C=CC=C3	1.7	1.66	5.9	4.27	3.7	5.89			0.23	0.22	0.77	0.63	0.57	0.77		
946	CN[C@@H]1[C@@H](O)[C@H](OC[C@]1(C)O)O[C@@H]2[C@@H](O)[C@H](O[C@H]3 OC(=CC[C@H]3N)CNCCO)[C@@H](N)C[C @H]2NC(=O)[C@@H](O)CCN	C[NH2+][C@@H]1[C@@H](O)[C@H](OC[C@]1(C) O)O[C@H]2[C@@H](C[C@H]([NH3+])[C@@H](O[C@H]3OC(=CC[C@H]3[NH3+])C[NH2+]CCO)[C@ @H]2O)NC(=O)[C@@H](O)CC[NH3+]	0.22	0.37	1.14	1.30	3.4	3.78	0.84	0.64	0.66	-0.44	0.06	0.11	0.53	0.58	-0.08	-0.20
947	CC(C)(C)C1=C(C=C2NC(=O)C(NC2=O)=CC3 =CC=CC=C3)N=C[NH]1	CC(C)(C)C1=C(\C=C2/NC(=O)\C(NC2=O)=C/C3=CC =CC=C3)N=C[NH]1	3	2.38	7.4	4.57	6.3	6.65			0.48	0.38	0.87	0.66	0.80	0.82		
948	CCCN=C1SC(=CC2=CC=C(OC[C@H](O)CO) C(=C2)Cl)C(=O)N1C3=CC=CC=C3C	CCCN=C1S\C(=C\C2=CC(=C(OC[C@H](O)CO)C=C 2)Cl)C(=O)N1C3=C(C)C=CC=C3	2.28	1.81	0.9	1.56	32.9	20.47			0.36	0.26	-0.05	0.19	1.52	1.31		
949	CC[C@@H]([C@H](C)O)N1N=CN(C1=O)C2 =CC=C(C=C2)N3CCN(CC3)C4=CC=C(OC[C @H]5CO[C@@](C5)(C[N]6C=NC=N6)C7=C(F)C=C(F)C=C7)C=C4	CC[C@@H]([C@H](C)O)N1N=CN(C1=O)C2=CC=C(C=C2)N3CCN(CC3)C4=CC=C(OC[C@H]5CO[C@@] (C5)(C[N]6C=NC=N6)C7=C(F)C=C(F)C=C7)C=C4	3.8	3.02	4.3	3.84	10.6	15.88	0.013	0.01	0.58	0.48	0.63	0.58	1.03	1.20	-1.89	-1.88
950	C[S](=O)(=O)OCCN(CCBr)C1=C(C=C(C=C1[N](=O)=O)[N](=O)=O)C(=O)NCCO[P](O)(O)= O	C[S](=O)(=O)OCCN(CCBr)C1=C(C=C(C=C1C(=O)N CCO[P]([O-])([O-])=O)[N+]([O-])=O)[N+]([O-])=O	0.86	0.83	44.8	17.17	0.1	0.34			0.07	-0.08	1.65	1.23	-1.00	-0.47		
951	CC(C)NC[C@@H](O)COC1=CC=C(NC(C)=O)C=C1	CC(C)[NH2+]C[C@@H](O)COC1=CC=C(NC(C)=O) C=C1			2.28	3.49	12.2	7.15	0.93	0.81			0.36	0.54	1.09	0.85	-0.03	-0.09
952	NC1=NC2=NC=C(C[C@@H](CC#C)C3=CC= C(C=C3)C(=O)N[C@@H](CCC(O)=O)C(O)=O)N=C2C(=N1)N	NC1=NC2=NC=C(C[C@@H](CC#C)C3=CC=C(C=C3)C(=O)N[C@@H](CCC([O-])=O)C([O-])=O)N=C2C(=N1)N	0.53	1.02	2.7	2.74	15	9.51	0.33	0.25	0.28	0.01	0.43	0.44	1.18	0.98	-0.48	-0.60
953	NC1=NC2=NC=C(C[C@H](CC#C)C3=CC=C(C=C3)C(=O)N[C@@H](CCC(O)=O)C(O)=O) N=C2C(=N1)N	NC1=NC2=NC=C(C[C@H](CC#C)C3=CC=C(C=C3) C(=O)N[C@@H](CCC([O-])=O)C([O-])=O)N=C2C(=N1)N	1.5	1.19	6	4.47	15	9.48	0.33	0.22	0.18	0.08	0.78	0.65	1.18	0.98	-0.48	-0.66
954	C[N+]1=C(C=CC=C1)C=NO	C[N+]1=C(C=CC=C1)\C=N/O	0.8	0.92	9	7.32	1.4	2.22	1	0.85	0.10	-0.04	0.95	0.86	0.15	0.35	0.00	-0.07
955	CCCN[C@H]1CCC2=C(C1)SC(=N2)N	CCC[NH2+][C@H]1CCC2=C(C1)SC(=N2)N	7	5.56	7.2	7.11	12.4	8.30	0.85	0.81	0.85	0.75	0.86	0.85	1.09	0.92	-0.07	-0.09
956	CC[C@H](C)C(=O)O[C@H]1C[C@H](O)C=C 2C=C[C@H](C)[C@H](CC[C@@H](O)C[C@ @H](O)CC(O)=O)[C@@H]12	CC[C@H](C)C(=O)O[C@H]1C[C@H](O)C=C2C=C[C@H](C)[C@H](CC[C@@H](O)C[C@@H](O)CC([O -])=O)[C@H]12	0.46	0.58	14	10.70	0.78	1.12	0.5	0.27	0.34	-0.24	1.15	1.03	-0.11	0.05	-0.30	-0.57
957	COC1=CC2=NC(=NC(=C2C=C1OC)N)N3CC N(CC3)C(=O)C4=CC=CO4	COC1=C(OC)C=C2C(=NC(=NC2=C1)N3CCN(CC3)C (=O)C4=CC=CO4)N	0.73	0.92	4.7	3.89	2	3.16	0.06	0.07	0.14	-0.04	0.67	0.59	0.30	0.50	-1.22	-1.16
958	C[C@]12C[C@H](O)[C@H]3[C@@H](CCC4 =CC(=O)C=C[C@]34C)[C@@H]1CC[C@]2(O)C(=O)CO	C[C@]12C[C@H](O)[C@H]3[C@@H](CCC4=CC(= O)C=C[C@]34C)[C@@H]1CC[C@]2(O)C(=O)CO	0.86	0.68	2.9	3.61	3.4	2.87	0.25	0.21	0.07	-0.17	0.46	0.56	0.53	0.46	-0.60	-0.69

959	C[C@]12CC(=O)[C@H]3[C@@H](CCC4=CC(=O)C=C[C@]34C)[C@@H]1CC[C@]2(O)C(=O)CO	C[C@@]12CC(=O)[C@@H]3[C@@H](CCC4=CC(=O)C=C[C@]34C)[C@@H]1CC[C@]2(O)C(=O)CO	0.57	0.69	2.5	3.56	2.9	2.39	0.27	0.16	0.24	-0.16	0.40	0.55	0.46	0.38	-0.57	-0.80
960	CC(C)NC[C@H](O)COC1=CC=C(O)C=C1	CC(C)[NH2+]C[C@H](O)COC1=CC=C(O)C=C1	4.28	1.63	22.1	15.70	2.85	3.69			0.63	0.21	1.34	1.20	0.45	0.57		
961	COC1=CC=CC(=C1C2=CC(=N[NH]2)NC3=CN=C(C=N3)C#N)OCCCN	COC1=C(C2=CC(=N[NH]2)NC3=NC=C(N=C3)C#N)C(=CC=C1)OCCC[NH3+]	22.75	17.30	34	18.83	12.54	7.29			1.36	1.24	1.53	1.27	1.10	0.86		
962	CC[N+]1(CC)CCC([C@@H]1C)=C(C2=CC=CC=C2)C3=CC=CC=C3	CC[N+]1(CC)CCC([C@@H]1C)=C(C2=CC=CC=C2)C3=CC=CC=C3	1.87	2.36	12.5	10.06	2.13	4.91			0.27	0.37	1.10	1.00	0.33	0.69		
963	CCCNC(C)C(=O)NC1=CC=CC=C1C	CCC[NH2+][C@H](C)C(=O)NC1=C(C)C=CC=C1	3.7	2.69	29	16.24	1.8	2.67	0.72	0.41	0.57	0.43	1.46	1.21	0.26	0.43	-0.14	-0.39
964	COC1=CC(=C2N=CC=CC2=C1)NC(C)CCCN	COC1=CC2=CC=CN=C2C(=C1)N[C@@H](C)CCC[NH3+]	4	5.03	5.8	6.40	7.1	6.68			0.60	0.70	0.76	0.81	0.85	0.82		
965	CCCN(CCC)[S](=O)(=O)C1=CC=C(C=C1)C(O)=O	CCCN(CCC)[S](=O)(=O)C1=CC=C(C=C1)C([O-])=O	0.13	0.16	0.25	0.56	5.9	4.30	0.13	0.13	0.89	-0.79	-0.60	-0.25	0.77	0.63	-0.89	-0.90
966	CCN(CC)CCNC(=O)C1=CC=C(N)C=C1	CC[NH+](CC)CCNC(=O)C1=CC=C(N)C=C1	2.2	2.69	10	9.75	3.1	3.08	0.84	0.68	0.34	0.43	1.00	0.99	0.49	0.49	-0.08	-0.17
967	CN1CCN(CCCN2C3=CC=CC=C3SC4=CC=C(Cl)C=C24)CC1	C[NH+]1CC[NH+](CCCN2C3=C(SC4=C2C=C(Cl)C=C4)C=CC=C3)CC1	22	12.95	16	13.51	9	11.31			1.34	1.11	1.20	1.13	0.95	1.05		
968	OC(CCN1CCCC1)(C2CCCCC2)C3=CC=CC=C3	O[C@](CC[NH+]1CCCC1)(C2CCCCC2)C3=CC=CC=C3	0.74	2.71	0.86	2.30	12	11.86			0.13	0.43	-0.07	0.36	1.08	1.07		
969	CN(C)CCCN1C2=CC=CC=C2SC3=CC=CC=C13	C[NH+](C)CCCN1C2=C(SC3=C1C=CC=C3)C=CC=C2	8.1	7.80	14	12.59	7.9	15.15	0.11	0.11	0.91	0.89	1.15	1.10	0.90	1.18	-0.96	-0.97
970	CC(CN1C2=CC=CC=C2SC3=CC=CC=C13)N(C)C	C[C@H](CN1C2=C(SC3=C1C=CC=C3)C=CC=C2)[NH+](C)C	14	7.94	14	12.51	14	14.51	0.09	0.07	1.15	0.90	1.15	1.10	1.15	1.16	-1.05	-1.13
971	CCCNCC(O)COC1=CC=CC=C1C(=O)CCC2=CC=CC=C2	CCC[NH2+]C[C@H](O)COC1=C(C=CC=C1)C(=O)CC2=CC=CC=C2	2.2	2.41	16	13.45	2.1	2.71	0.038	0.05	0.34	0.38	1.20	1.13	0.32	0.43	-1.42	-1.28
972	CCC(=O)O[C@H](CC([O-])=O)C[N+](C)(C)C	CCC(=O)O[C@H](CC([O-])=O)C[N+](C)(C)C	0.3	0.44	2.33	3.06	1.28	2.16			0.52	-0.35	0.37	0.49	0.11	0.33		
973	CCCOC(C(=O)OC1CCN(C)CC1)(C2=CC=CC=C2)C3=CC=CC=C3	CCCOC(C(=O)OC1CC[NH+](C)CC1)(C2=CC=CC=C2)C3=CC=CC=C3	2.73	3.22	2.94	4.76	15.2	12.90	0.1	0.08	0.44	0.51	0.47	0.68	1.18	1.11	-1.00	-1.09
974	CC(C)C1=CC=CC(=C1O)C(C)C	CC(C)C1=C(O)C(=CC=C1)C(C)C	4.7	3.73	36	17.88	3.2	4.08	0.016	0.03	0.67	0.57	1.56	1.25	0.51	0.61	-1.80	-1.54
975	CCC(=O)O[C@@](CC1=CC=CC=C1)([C@H](C)CN(C)C)C2=CC=CC=C2	CCC(=O)O[C@@](CC1=CC=CC=C1)([C@H](C)C[NH+](C)C)C2=CC=CC=C2	12	9.53	15	10.80	18	14.13	0.24	0.10	1.08	0.98	1.18	1.03	1.26	1.15	-0.62	-1.00
976	CC(C)NCC(O)COC1=CC=CC2=CC=CC=C12	CC(C)[NH2+]C[C@H](O)COC1=C2C=CC=CC2=CC=C1	3.1	1.87	12	11.59	3.4	4.10	0.13	0.16	0.49	0.27	1.08	1.06	0.53	0.61	-0.89	-0.80
977	CCCC1=CC(=O)NC(=S)N1	CCCC1=CC(=O)NC(=S)N1	0.34	0.43	3.1	3.90	1.3	1.89	0.18	0.26	0.47	-0.37	0.49	0.59	0.11	0.28	-0.74	-0.59
978	CC(C)N1C(=O)N=C(C2=CC=CC=C2)C3=C1C=C(C)C=C3	CC(C)N1C(=O)N=C(C2=CC=CC=C2)C3=C1C=C(C)C=C3	0.52	1.24	9.45	4.93	1.27	3.15	0.02	0.05	0.28	0.09	0.98	0.69	0.10	0.50	-1.70	-1.34
979	CC(O)C[N]1C=NC2=C1C(=O)N(C)C(=O)N2C	C[C@@H](O)C[N]1C=NC2=C1C(=O)N(C)C(=O)N2C	0.59	0.67	1.17	1.89	7.8	4.61			0.23	-0.18	0.07	0.28	0.89	0.66		
980	COCCCN1CCC(CC1)NC(=O)C2=CC(=C(N)C3=C2OCC3)Cl	COCCC[NH+]1CCC(CC1)NC(=O)C2=C3OCCC3=C(N)C(=C2)Cl	8.73	6.93	4.55	5.03	22.5	13.58	0.7	0.54	0.94	0.84	0.66	0.70	1.35	1.13	-0.15	-0.27
981	CC1=CC(=C2C(=O)C3=C(O)C=C(O)C4=C5C(=CC(=C6C(=O)C7=C(O)C=C(CO)C8=C7C(=C56)C(=C34)C2=C18)O)O)O	CC1=C2C3=C(CO)C=C(O)C4=C3C5=C6C2=C(C(=C1)O)C(=O)C7=C6C(=C(O)C=C7O)C8=C5C(=C(O)C=C8O)C4=O	0.56	0.70	0.62	0.85	20	20.86			0.25	-0.15	-0.21	-0.07	1.30	1.32		
982	O=NNC1=NC=CN=C1	O=NNC1=NC=CN=C1	0.31	0.39	15.13	9.50	0.38	0.71			0.51	-0.41	1.18	0.98	-0.42	-0.15		
983	CN(C)C(=O)OC1=CC=C[N+](=C1)C	CN(C)C(=O)OC1=C[N+](=CC=C1)C	1.1	1.44	9.6	7.46	1.5	2.22	1	0.82	0.04	0.16	0.98	0.87	0.18	0.35	0.00	-0.09
984	CCC1=NC(=NC(=C1C2=CC=C(Cl)C=C2)N)N	CCC1=C(C(=NC(=N1)N)N)C2=CC=C(Cl)C=C2	0.43	0.92	0.052	0.31	140	42.04	0.095	0.12	0.37	-0.04	-1.28	-0.51	2.15	1.62	-1.02	-0.93
985	OC1=CC(=C2C(=O)C(=C(OC2=C1)C3=CC=C(O)C(=C3)O)O)O	OC1=CC2=C(C(=C1)O)C(=O)C(=C(O2)C3=CC(=C(O)C(=C3)O)O)O	0.12	0.15	11	7.25	0.6	1.12	0.009	0.02	0.92	-0.82	1.04	0.86	-0.22	0.05	-2.05	-1.65
986	CCN(CC)CCCC(C)NC1=C2C=CC(=CC2=NC3=CC=C(OC)C=C13)Cl	CC[NH+](CC)CCC[C@@H](C)NC1=C2C=C(OC)C=CC2=[NH+]C3=CC(=CC=C13)Cl	45	46.60	5.1	5.65	120	57.56	0.13	0.10	1.65	1.67	0.71	0.75	2.08	1.76	-0.89	-0.99
987	C[C@H](N[C@@H](CCC1=CC=CC=C1)C(O)=O)C(=O)N2CC3=CC=CC=C3C[C@H]2C(O)=O	C[C@H]([NH2+][C@@H](CCC1=CC=CC=C1)C([O-])=O)C(=O)N2CC3=C(C[C@H]2C([O-])=O)C=CC=C3	0.13	0.16	0.93	1.36	2.3	2.97	0.32	0.23	0.89	-0.79	-0.03	0.14	0.36	0.47	-0.49	-0.63
988	COC1=CC=C2N=CC=C([C@H](O)[C@H]3C[C@@H]4CCN3C[C@@H]4C=C)C2=C1	COC1=CC2=C(C=CN=C2C=C1)[C@H](O)[C@H]3C[C@H]4CC[NH+]3C[C@@H]4C=C	2.9	4.01	4	4.03	6.6	7.61	0.26	0.31	0.46	0.60	0.60	0.61	0.82	0.88	-0.59	-0.51
989	COC1=CC=C2N=CC=C([C@@H](O)[C@@H]3C[C@@H]4CCN3C[C@@H]4C=C)C2=C1	COC1=CC2=C(C=CN=C2C=C1)[C@@H](O)[C@@H]3C[C@H]4CC[NH+]3C[C@@H]4C=C	1.8	3.92	1.9	3.50	11	7.86	0.3	0.30	0.26	0.59	0.28	0.54	1.04	0.90	-0.52	-0.53

990	C[C@H]1CN2C(=S)NC3=CC(=CC(=C23)CN1CC=C(C)C)Cl	C[C@H]1CN2C(=S)NC3=C2C(=CC(=C3)Cl)C[NH+]1CC=C(C)C	21.98	17.46	10.41	9.16	25.96	16.49			1.34	1.24	1.02	0.96	1.41	1.22		
991	COCCCOC1=CC=NC(=C1C)C[S](=O)C2=NC3=CC=CC=C3[NH]2	COCCCOC1=C(C)C(=NC=C1)C[S](=O)C2=NC3=C([NH]2)C=CC=C3	0.22	0.27	4	4.40	1	1.53	0.037	0.07	0.66	-0.57	0.60	0.64	0.00	0.18	-1.43	-1.14
992	CCN1CCC[C@H]1CNC(=O)C2=C(OC)C(=CC(=C2O)Cl)Cl	CC[NH+]1CCC[C@@H]1CNC(=O)C2=C(OC)C(=CC(=C2O)Cl)Cl	1.1	1.38	1.2	2.65	14	10.29	0.06	0.10	0.04	0.14	0.08	0.42	1.15	1.01	-1.22	-0.98
993	OC1=CC=C(C=C1)C2=C(C(=O)C3=CC=C(OCCN4CCCCC4)C=C3)C5=C(S2)C=C(O)C=C5	OC1=CC=C(C=C1)C2=C(C(=O)C3=CC=C(OCC[NH+]4CCCCC4)C=C3)C5=C(S2)C=C(O)C=C5	7.5	5.96	10.8	9.67	12.1	11.85	0.05	0.03	0.88	0.78	1.03	0.99	1.08	1.07	-1.30	-1.53
994	CN(CC1=CC2=C(NC(=NC2=O)C)C=C1)C3=CC=C(S3)C(=O)N[C@@H](CCC(O)=O)C(O)=O	CN(CC1=CC2=C(NC(=NC2=O)C)C=C1)C3=CC=C(S3)C(=O)N[C@@H](CCC([O-])=O)C([O-])=O	6.57	2.45	0.9	1.24	140	24.82	0.05	0.07	0.82	0.39	-0.05	0.09	2.15	1.39	-1.30	-1.16
995	CCC(=O)NCC[C@@H]1CCC2=CC=C3OCCC3=C12	CCC(=O)NCC[C@H]1CCC2=C1C3=C(OCC3)C=C2	1.05	1.32	13.1	10.72	1.9	2.37	0.2	0.19	0.02	0.12	1.12	1.03	0.28	0.38	-0.70	-0.72
996	CNC(NCCSCC1=CC=C(CN(C)C)O1)=C[N](=O)=O	CN\C(NCCSCC1=CC=C(C[NH+](C)C)O1)=C/[N+]([O-])=O	1.2	1.33	9.6	9.27	2.1	2.20	0.95	0.73	0.08	0.12	0.98	0.97	0.32	0.34	-0.02	-0.14
997	COC1=C(OC[C@H](O)CN2CCN(CC2)CC(=O)NC3=C(C)C=CC=C3C)C=CC=C1	COC1=C(OC[C@H](O)C[NH+]2CC[NH+](CC2)CC(=O)NC3=C(C)C=CC=C3C)C=CC=C1	1.2	1.51	9.5	7.85	1.8	2.95	0.38	0.21	0.08	0.18	0.98	0.90	0.26	0.47	-0.42	-0.68
998	CCOC1=CC=CC=C1O[C@@H]([C@H]2CNCCO2)C3=CC=CC=C3	CCOC1=C(O[C@@H]([C@H]2C[NH2+]CCO2)C3=CC=CC=C3)C=CC=C1	0.65	0.82	0.82	2.20	10	5.42	0.019	0.08	0.19	-0.09	-0.09	0.34	1.00	0.73	-1.72	-1.09
999	CC(C)NCCCNC(=O)NC1=C(C)C=CC=C1C	CC(C)[NH2+]CCCNC(=O)NC1=C(C)C=CC=C1C	1.4	1.76	4.5	5.64	5	3.47	0.86	0.66	0.15	0.25	0.65	0.75	0.70	0.54	-0.07	-0.18
1000	CNC(=O)C1=C[N](N=C1)C2=NC(=C3N=C[N]([C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]4O)C3=N2)N	CNC(=O)C1=C[N](N=C1)C2=NC3=C(N=C[N]3[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]4O)C(=N2)N	0.94	1.12	7.3	6.20	2	2.50	0.7	0.48	0.03	0.05	0.86	0.79	0.30	0.40	-0.15	-0.32
1001	CCC(=O)N(C1=CC=CC=C1)C2(CCN(CCC(=O)OC)CC2)C(=O)OC	CCC(=O)N(C1=CC=CC=C1)C2(CC[NH+](CCC(=O)OC)CC2)C(=O)OC	0.4	0.50	37	19.71	0.8	1.25	0.3	0.24	0.40	-0.30	1.57	1.29	-0.10	0.10	-0.52	-0.62
1002	CC(C)(C)[S](=O)(=O)C[C@H](CC1=CC=CC=C1)C(=O)N[C@@H](CC2=C[NH]C=N2)C(=O)N[C@@H](CC3CCCCC3)[C@@H](O)C(O)C4CC4	CC(C)(C)[S](=O)(=O)C[C@H](CC1=CC=CC=C1)C(=O)N[C@@H](CC2=C[NH]C=N2)C(=O)N[C@@H](CC3CCCCC3)[C@@H](O)[C@@H](O)C4CC4	0.77	0.97	11.6	7.11	5.2	4.71	0.056	0.04	0.11	-0.01	1.06	0.85	0.72	0.67	-1.25	-1.35
1003	COC(=O)CC[C@@H]1N=C(C2=NC=CC=C2)C3=C(C=CC(=C3)Br)[N]4C(=CN=C14)C	COC(=O)CC[C@@H]1N=C(C2=NC=CC=C2)C3=C(C=CC(=C3)Br)[N]4C(=CN=C14)C	0.44	0.55	15.02	8.06	0.75	1.64			0.36	-0.26	1.18	0.91	-0.12	0.21		
1004	CCN1CCC[C@H]1CNC(=O)C2=C(OC)C=CC(=C2OC)Br	CC[NH+]1CCC[C@H]1CNC(=O)C2=C(OC)C(=CC=C2OC)Br	0.65	0.82	1.7	3.00	5.5	5.43	0.16	0.19	0.19	-0.09	0.23	0.48	0.74	0.73	-0.80	-0.71
1005	CCOC1=CC(=CC=C1C(O)=O)CC(=O)N[C@@H](CC(C)C)C2=CC=CC=C2N3CCCCC3	CCOC1=C(C=CC(=C1)CC(=O)N[C@@H](CC(C)C)C2=C(C=CC=C2)N3CCCCC3)C([O-])=O	0.35	0.36	7.8	5.00	0.87	1.92	0.015	0.02	0.46	-0.44	0.89	0.70	-0.06	0.28	-1.82	-1.75
1006	O=C1N(CCCCNC[C@H]2CCC3=CC=CC=C3O2)[S](=O)(=O)C4=CC=CC=C14	O=C1N(CCCC[NH2+]C[C@H]2CCC3=C(O2)C=CC=C3)[S](=O)(=O)C4=C1C=CC=C4	0.21	0.26	2.2	3.12	1.2	2.22			0.68	-0.58	0.34	0.49	0.08	0.35		
1007	COCCN1CCN(CC1)CC2=CC=C(C=C2)C3=N[NH]C4=C3C(=O)C5=C(NC(=O)NN6CCOCC6)C=CC=C45	COCC[NH+]1CC[NH+](CC1)CC2=CC=C(C=C2)C3=N[NH]C4=C3C(=O)C5=C4C=CC=C5NC(=O)[N-]N6CCOCC6	5.9	4.69	11.5	8.58	9.9	9.48			0.77	0.67	1.06	0.93	1.00	0.98		
1008	NC(=O)C1=N[N](C=N1)[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]2O	NC(=O)C1=N[N](C=N1)[C@@H]2O[C@@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]2O	14	4.13	5.2	6.50	45	9.76	1	0.89	1.15	0.62	0.72	0.81	1.65	0.99	0.00	-0.05
1009	NC[C@H]1O[C@H](O[C@@H]2[C@@H](N)C[C@@H](N)[C@H](O)[C@H]2O[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]3O)[C@H](N)[C@@H](O)[C@@H]1O	[NH3+]C[C@@H]1O[C@H](O[C@@H]2[C@@H]([NH3+])C[C@@H]([NH3+])[C@H](O)[C@H]2O[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]3O)[C@H]([NH3+])[C@@H](O)[C@@H]1O	0.25	0.27	1.5	1.48	2.5	3.03			0.60	-0.58	0.18	0.17	0.40	0.48		
1010	OC(=O)CCCCON=C(C1=CC=CN=C1)C2=CC=CC(=C2)C(F)(F)F	[O-]C(=O)CCCCO\N=C(/C1=CN=CC=C1)C2=CC(=CC=C2)C(F)(F)F	0.43	0.41	1.05	1.32	7.54	7.17	0.033	0.02	0.37	-0.38	0.02	0.12	0.88	0.86	-1.48	-1.64
1011	CO[C@H]1C=CO[C@@]2(C)OC3=C(C)C(=C4C(=O)C(=C5NC6(CCN(CC6)CC(C)C)N=C5C4=C3C2=O)NC(=O)C(=CC=C[C@H](C)[C@H](O)[C@@H](C)[C@@H](O)[C@@H](C)[C@@H](OC(C)=O)[C@@H]1C)C)O	CO[C@H]1\C=C/O[C@@]2(C)OC3=C(C2=O)C4=C(C(=C3C)O)C(=O)C(=C5NC6(CC[NH+](CC6)CC(C)C)N=C45)NC(=O)\C(=C\C=C\[C@H](C)[C@H](O)[C@@H](C)[C@@H](O)[C@@H](C)[C@@H](OC(C)=O)[C@@H]1C)C	9.3	7.40	2.4	3.29	37	24.40	0.29	0.18	0.97	0.87	0.38	0.52	1.57	1.39	-0.54	-0.75
1012	CO[C@H]1C=CO[C@@]2(C)OC3=C(C)C(=C4C(=C(NC(=O)C(=CC=C[C@H](C)[C@H](O)[C@@H](C)[C@@H](OC(C)=O)[C@@H]1C)C)O)C4=O)C3=C2C	CO[C@H]1\C=C/O[C@@]2(C)OC3=C(C2=O)C4=C(O)C(=C(NC(=O)\C(=C/C=C/[C@H](C)[C@H](O)[C@@H](C)[C@@H](O)[C@@H](C)[C@@H](OC(C)=O)[C@@H]1C)C)C4=O)C3=C2C	0.97	1.11	3.5	4.15	3.8	6.39	0.2	0.16	0.01	0.05	0.54	0.62	0.58	0.81	-0.70	-0.79

	C@@H](C)[C@@H](O)[C@@H](C)[C@H](OC(C)=O)[C@@H]1C)C)C(=C(O)C4=C3C2=O)C=NN5CCN(C)CC5)O)O	@H](C)[C@@H](O)[C@@H](C)[C@H](OC(C)=O)[C@@H]1C)C)C(=C4C(=C3C)O)O)\C=N\N5CC[NH+](C)CC5																
1013	COC1=CC(=C(C=C[S](=O)(=O)CC2=CC=C(OC)C(=C2)NCC(O)=O)C(=C1)OC)OC	COC1=CC(=C(\C=C\[S](=O)(=O)CC2=CC(=C(OC)C=C2)NCC([O-])=O)C(=C1)OC)OC	0.11	0.14	1.51	1.94	0.95	1.49			0.96	-0.86	0.18	0.29	-0.02	0.17		
1014	C1CN=C(NC(C2CC2)C3CC3)O1	C1CN=C(NC(C2CC2)C3CC3)O1	4.5	3.58	7.1	5.78	8.3	5.68	0.9	0.78	0.65	0.55	0.85	0.76	0.92	0.75	-0.05	-0.11
1015	NC1=NC2=C(S1)C=C(OC(F)(F)F)C=C2	NC1=NC2=C(S1)C=C(OC(F)(F)F)C=C2	3.5	2.78	11.3	6.55			0.04	0.05	0.54	0.44	1.05	0.82			-1.40	-1.26
1016	COC(=O)N(C)C1=C(N)N=C(N=C1N)C2=N[N](CC3=CC=CC=C3F)C4=NC=CC=C24	COC(=O)N(C)C1=C(N)N=C(N=C1N)C2=N[N](CC3=C(F)C=CC=C3)C4=NC=CC=C24	0.44	0.55	0.74	1.23	9.1	8.60			0.36	-0.26	-0.13	0.09	0.96	0.93		
1017	OC(CC1=CC=CN=C1)([P](O)(O)=O)[P](O)(O)=O	OC(CC1=CN=CC=C1)([P]([O-])([O-])=O)[P]([O-])([O-])=O	6.3	1.95	1.5	1.60	200	40.01	0.76	0.59	0.80	0.29	0.18	0.21	2.30	1.60	-0.12	-0.23
1018	CC1=C(CCN2CCC(CC2)C3=NOC4=CC(=CC=C34)F)C(=O)N5CCCCC5=N1	CC1=C(CC[NH+]2CCC(CC2)C3=NOC4=CC(=CC=C34)F)C(=O)N5CCCCC5=N1	1.1	1.38	5.4	4.42	3.2	5.52	0.1	0.09	0.04	0.14	0.73	0.65	0.51	0.74	-1.00	-1.03
1019	CC1=C(CCN2CCC(CC2)=C(C3=CC=C(F)C=C3)C4=CC=C(F)C=C4)C(=O)N5C=CSC5=N1	CC1=C(CC[NH+]2CC[C](CC2)=[C](C3=CC=C(F)C=C3)C4=CC=C(F)C=C4)C(=O)N5C=CSC5=N1	1.41	1.78	0.51	1.07	40	29.24	0.008	0.01	0.15	0.25	-0.29	0.03	1.60	1.47	-2.10	-1.96
1020	[Na+].C[C@@H](O)[C@@H]1[C@H]2SC(=C(N2C1=O)C([O-])=O)COC(N)=O	C[C@@H](O)[C@@H]1[C@H]2SC(=C(N2C1=O)C([O-])=O)COC(N)=O	0.24	0.25	7.55	6.18	0.54	0.81	0.72	0.65	0.62	-0.60	0.88	0.79	-0.27	-0.09	-0.14	-0.19
1021	C[C@@H](NCCC1=CC=C(O)C=C1)[C@@H](O)C2=CC=C(O)C=C2	C[C@@H]([NH2+]CCC1=CC=C(O)C=C1)[C@@H](O)C2=CC=C(O)C=C2	4.4	1.65	31	21.99	2.6	2.83	0.64	0.42	0.64	0.22	1.49	1.34	0.41	0.45	-0.19	-0.38
1022	ClC1=CC=C(S1)C(=O)NC[C@H]2CN(C(=O)O2)C3=CC=C(C=C3)N4CCOCC4=O	ClC1=CC=C(S1)C(=O)NC[C@H]2CN(C(=O)O2)C3=CC=C(C=C3)N4CCOCC4=O	0.7	0.65	2.4	2.80	7	4.93	0.06	0.05	0.15	-0.18	0.38	0.45	0.85	0.69	-1.22	-1.27
1023	CCN(C)C(=O)OC1=CC=CC(=C1)[C@H](C)N(C)C	CCN(C)C(=O)OC1=CC(=CC=C1)[C@H](C)[NH+](C)C	1.3	1.64	12	10.29	1.4	1.83	0.6	0.51	0.11	0.21	1.08	1.01	0.15	0.26	-0.22	-0.29
1024	CN(C)CCC1=C[NH]C2=CC=C(C[N]3C=NC=N3)C=C12	CN(C)CCC1=C[NH+](C)CCC1=C[NH]C2=C1C=C(C[N]3C=NC=N3)C=C2	1.9	4.13	16	11.53	2.2	2.88	0.86	0.61	0.28	0.62	1.20	1.06	0.34	0.46	-0.07	-0.22
1025	CC1=C(C(=CC=C1)Cl)C(=O)N[C@@H](CC2=CC=C(NC(=O)C3=C(Cl)C=NC=C3Cl)C=C2)C(O)=O	CC1=C(C(=CC=C1)Cl)C(=O)N[C@@H](CC2=CC=C(NC(=O)C3=C(Cl)C=NC=C3Cl)C=C2)C([O-])=O	0.3	0.38	3.7	2.49	3.3	3.67	0.1	0.05	0.52	-0.42	0.57	0.40	0.52	0.56	-1.00	-1.35
1026	NC1=NC(=CS1)C(=NO)C(=O)N[C@H]2[C@H]3SCC(=C(N3C2=O)C(O)=O)C=C4CCN(CC(F)(F)F)C4=O	NC1=NC(=CS1)\C(=N/O)C(=O)N[C@H]2[C@H]3SCC(=C(N3C2=O)C([O-])=O)\C=C4\CCN(CC(F)(F)F)C4=O	0.11	0.14	0.38	0.66	3.8	3.58	0.043	0.08	0.96	-0.86	-0.42	-0.18	0.58	0.55	-1.37	-1.10
1027	CC(=O)O[C@H]1[C@H](C[C@H]2[C@@H]3CC[C@H]4C[C@H](O)[C@H](C[C@]4(C)[C@@H]3CC[C@]12C)N5CCOCC5)[N+]6(CCCC6)CC=C	CC(=O)O[C@H]1[C@H](C[C@H]2[C@@H]3CC[C@H]4C[C@H](O)[C@H](C[C@@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C)[NH+]5CCOCC5)[N+]6(CCCC6)CC=C	0.21	0.26	3.7	4.33	1.6	2.17	0.54	0.32	0.68	-0.58	0.57	0.64	0.20	0.34	-0.27	-0.50
1028	C[S](=O)(=O)C1=CC=C(C=C1)C2=C(C(=O)O2)C3=CC=CC=C3	C[S](=O)(=O)C1=CC=C(C=C1)C2=C(C(=O)OC2)C3=CC=CC=C3	1.3	1.03	2	2.06	7.5	6.82	0.13	0.08	0.11	0.01	0.30	0.31	0.88	0.83	-0.89	-1.09
1029	FC(F)OC1=CC=C(C=C1OCC2CC2)C(=O)NC3=C(Cl)C=NC=C3Cl	FC(F)OC1=C(OCC2CC2)C=C(C=C1)C(=O)NC3=C(Cl)C=[NH+]C=C3Cl	1.92	2.42	2.2	3.18	15.1	10.85	0.01	0.01	0.28	0.38	0.34	0.50	1.18	1.04	-2.00	-1.84
1030	C[C@@H](OC[C@]1(CC[C@]2(CCC(=O)N2)CN1)C3=CC=CC=C3)C4=CC(=CC(=C4)C(F)(F)F)C(F)(F)F	C[C@@H](OC[C@]1(CC[C@]2(CCC(=O)N2)C[NH2+]1)C3=CC=CC=C3)C4=CC(=CC(=C4)C(F)(F)F)C(F)(F)F			0.38	1.01	148.5	53.61	0.002	0.01			-0.42	0.01	2.17	1.73	-2.70	-2.22
1031	COC1=C(OC2CCCC2)C=C(C=C1)[C@@H]3CNC(=O)C3	COC1=C(OC2CCCC2)C=C(C=C1)[C@@H]3CNC(=O)C3	0.67	0.75	6.3	8.21	7	5.31	0.11	0.16	0.17	-0.13	0.80	0.91	0.85	0.72	-0.96	-0.80
1032	CN(C)[C@H]1[C@@H]2C[C@H]3C(=C(O)[C@]2(O)C(=O)C(=C1O)C(=O)NCN4CCCC4)C(=O)C5=C(O)C=CC=C5[C@@]3(C)O	C[NH+](C)[C@H]1[C@H]2C[C@H]3C(=C([O-])[C@]2(O)C(=O)C(=C1[O-])C(=O)NC[NH+]4CCCC4)C(=O)C5=C(C=CC=C5O)[C@@]3(C)O	0.54	0.68	0.97	1.37	8.8	9.53	0.5	0.33	0.27	-0.17	-0.01	0.14	0.94	0.98	-0.30	-0.49
1033	CCCN1C(=O)N(CCC)C2=C([NH]C(=N2)[C]34CC5[CH2]C(C[CH]3C5)C4)C1=O	CCCN1C(=O)N(CCC)C2=C([NH]C(=N2)[C]34C[C@@H]5[CH2][C@H](C[CH]3C5)C4)C1=O	4.3	3.42	5	4.57	18.1	12.79			0.63	0.53	0.70	0.66	1.26	1.11		
1034	CC=C1NC(=O)[C@H]2CSSCCC=C[C@H](CC(=O)N[C@H](C(C)C)C(=O)N2)OC(=O)[C@@H](NC1=O)C(C)C	C\C=C1\NC(=O)[C@H]2CSSCC\C=C/[C@H](CC(=O)N[C@H](C(C)C)C(=O)N2)OC(=O)[C@@H](NC1=O)C(C)C	1.2	0.95	7.4	6.00	11	6.24	0.07	0.10	0.08	-0.02	0.87	0.78	1.04	0.79	-1.15	-1.00
1035	CCCN(CCC)CCC1=CC=CC2=C1CC(=O)N2	CCC[NH+](CCC)CCC1=C2CC(=O)NC2=CC=C1	7.7	5.36	30	18.79	6	4.08	0.6	0.50	0.89	0.73	1.48	1.27	0.78	0.61	-0.22	-0.30

1036	CCCN1CCCC[C@H]1C(=O)NC2=C(C)C=CC=C2C	CCC[NH+]1CCCC[C@H]1C(=O)NC2=C(C)C=CC=C2C	0.75	0.93	5.5	6.25	2.2	2.27	0.06	0.13	0.12	-0.03	0.74	0.80	0.34	0.36	-1.22	-0.89
1037	CN(C1=CC=CC=C1)C(=O)C2=C(O)C3=CC=CC=C3N(C)C2=O	CN(C1=CC=CC=C1)C(=O)C2=C([O-])C3=C(C=CC=C3)N(C)C2=O	0.21	0.23	0.082	0.16	31	13.97			0.68	-0.64	-1.09	-0.80	1.49	1.15		
1038	CC[C@H]1OC(=O)C[C@@H](O)[C@H](C)[C@@H](O[C@@H]2O[C@H](C)C[C@@H]([C@@H]2O)N(C)C)[C@@H](CC=O)C[C@@H](C)C(=O)C=C[C@]3(C)O[C@H]3[C@@H]1C	CC[C@H]1OC(=O)C[C@@H](O)[C@H](C)[C@@H](O[C@@H]2O[C@H](C)C[C@@H]([C@@H]2O)[NH+](C)C)[C@@H](CC=O)C[C@@H](C)C(=O)\C=C\[C@@]3(C)O[C@H]3[C@@H]1C	2.83	2.25	13.3	9.65	3.34	3.37			0.45	0.35	1.12	0.98	0.52	0.53		
1039	CN(CCOC1=CC=C(CC2SC(=O)NC2=O)C=C1)C3=CC=CC=N3	CN(CCOC1=CC=C(C[C@@H]2SC(=O)[N-]C2=O)C=C1)C3=NC=CC=C3	0.2	0.25	0.65	1.12	3.9	4.63	0.002	0.01	0.70	-0.60	-0.19	0.05	0.59	0.67	-2.70	-2.14
1040	CC(C)C1=NC(=NC(=C1C=C[C@@H](O)C[C@@H](O)CC(O)=O)C2=CC=C(F)C=C2)N(C)[S](C)(=O)=O	CC(C)C1=C(\C=C/[C@@H](O)C[C@@H](O)CC([O-])=O)C(=NC(=N1)N(C)[S](C)(=O)=O)C2=CC=C(F)C=C2	1.7	1.35	11	6.68	2	2.61	0.12	0.08	0.23	0.13	1.04	0.82	0.30	0.42	-0.92	-1.08
1041	CCCN(CCC1=CC=CS1)[C@H]2CCC3=C(C2)C=CC=C3O	CCC[NH+](CCC1=CC=CS1)[C@H]2CCC3=C(C2)C=CC=C3O	5.7	5.28	37	27.37	4	5.35	0.08	0.16	0.76	0.72	1.57	1.44	0.60	0.73	-1.10	-0.79
1042	CN([C@@H]1CCCC[C@H]1N2CCCC2)C(=O)CC3=CC=CC4=C3C=CS4	CN([C@@H]1CCCC[C@H]1[NH+]2CCCC2)C(=O)CC3=C4C=CSC4=CC=C3	1.1	1.38	3	4.15	5.5	5.72			0.04	0.14	0.48	0.62	0.74	0.76		
1043	CNCC1=CC=C(C=C1)C2=C3CCNC(=O)C4=C3C(=CC(=C4)F)[NH]2	C[NH2+]CC1=CC=C(C=C1)C2=C3CCNC(=O)C4=CC(=CC(=C34)[NH]2)F	3.28	5.45	4.31	6.24	16.6	13.13			0.52	0.74	0.63	0.80	1.22	1.12		
1044	CC1(C)CC[C@@]2(CC[C@]3(COC(=O)C=CC4=C(NC(=O)C=CC(O)=O)C=C(=CC[C@@H]5[C@@]6(C)CCC(=O)C(C)(C)[C@H]6CC[C@@]35C)[C@@H]2C1)C(O)=O	CC1(C)CC[C@]2(CC[C@]3(COC(=O)\C=C\C4=C(NC(=O)\C=C\C([O-])=O)C=CC(=C4)O)C(=CC[C@@H]5[C@@]6(C)CCC(=O)C(C)(C)[C@H]6CC[C@@]35C)[C@H]2C1)C([O-])=O	1.45	1.15	7.6	4.88			0.16	0.06	0.88	0.69				
1045	CN(C1CCN(CC1)C[C@@H](O)COC2=CC=C(F)C=C2)C3=NC4=CC=CC=C4S3	CN(C1CC[NH+](CC1)C[C@@H](O)COC2=CC=C(F)C=C2)C3=NC4=C(S3)C=CC=C4	5.5	4.48	4.05	3.66	18.9	15.64	0.014	0.02	0.74	0.65	0.61	0.56	1.28	1.19	-1.85	-1.79
1046	C[C@H](NCC1=CC=C(OCC2=CC=CC(=C2)F)C=C1)C(N)=O	C[C@H]([NH2+]CC1=CC=C(OCC2=CC(=CC=C2)F)C=C1)C(N)=O	2.19	1.85	1.17	2.70	21.67	13.52			0.34	0.27	0.07	0.43	1.34	1.13		
1047	OC(=O)[C@@H](CC1=CC(=C(O)C=C1)O)OC(=O)C=CC2=CC=C(O)C3=C2[C@@H]([C@H](O)(O3)C4=CC=C(O)C(=C4)O)C(=O)OC(CC5=CC=C(O)C(=C5)O)C(O)=O	OC1=C(O)C=C(C[C@@H](OC(=O)\C=C/C2=CC=C(O)C3=C2[C@@H]([C@H](O3)C4=CC(=C(O)C=C4)O)C(=O)O[C@@H](CC5=CC(=C(O)C=C5)O)C([O-])=O)C=C1	0.14	0.18	7.17	6.52	0.29	0.74	0.08	0.06	0.85	-0.75	0.86	0.81	-0.54	-0.13	-1.10	-1.23
1048	CCCCCCN1CCC(CC1)(C(=O)N(C)CC)C2=CC=CC=C2	CCCCCC[NH+]1CCC(CC1)(C(=O)N(C)CC)C2=CC=CC=C2			24	14.64	3.6	6.06					1.38	1.17	0.56	0.78		
1049	CC(C)(C)NC(=O)[C@@H]1C[C@@H]2CCCC[C@@H]2CN1C[C@@H](O)[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@H](CC(N)=O)NC(=O)C4=CC=C5C=CC=C5C=CC5=N4	CC(C)(C)NC(=O)[C@@H]1C[C@H]2CCCC[C@H]2C[NH+]1C[C@@H](O)[C@H](CC3=CC=CC=C3)NC(=O)[C@H](CC(N)=O)NC(=O)C4=NC5=CC=CC=C5C=C4	3.6	2.86	13	9.20	13	9.25	0.028	0.03	0.56	0.46	1.11	0.96	1.11	0.97	-1.55	-1.49
1050	FC1=CC=C(C=C1)C2=N[N]3C(=NN=C3C=C2)SC4=CC=C5N=C(NC(=O)NCCN6CCOCC6)SC5=C4	FC1=CC=C(C=C1)C2=N[N]3C(=NN=C3C=C2)SC4=CC5=C(C=C4)N=C(NC(=O)NCC[NH+]6CCOCC6)S5	4.1	3.26	8.34	6.57	8.19	10.24			0.61	0.51	0.92	0.82	0.91	1.01		
1051	CN(CC(N)=O)C(=O)N(CCCl)N=O	CN(CC(N)=O)C(=O)N(CCCl)N=O	0.76	0.72	9	7.44	1	1.38			0.12	-0.14	0.95	0.87	0.00	0.14		
1052	NC(=N)NN=C1CCC2=C(C=CC=C12)C(N)=N	NC(=[NH2+])N\N=C1/CCC2=C1C=CC=C2C(N)=[NH2+]	20	15.30	3.2	4.82	65.4	23.27			1.30	1.18	0.51	0.68	1.82	1.37		
1053	CCOC1=CC=C2N(C(=O)[C@]3(CC[C@H](CC3)OCCN4CCOCC4)C2=C1)[S](=O)(=O)C5=C(OC)C=C(C=C5)C(=O)NC(C)(C)C	CCOC1=CC2=C(C=C1)N(C(=O)C23CCC(CC3)OCC[NH+]4CCOCC4)[S](=O)(=O)C5=C(OC)C=C(C=C5)C(=O)NC(C)(C)C	7	5.56	12.3	9.71	10.4	10.76	0.1	0.07	0.85	0.75	1.09	0.99	1.02	1.03	-1.00	-1.13
1054	N[C@@H](C(=O)N1[C@H](CC2C[C@@H]12)C#N)[C]34CC5[CH2]C(C[C](O)(C5)C3)C4	[NH3+][C@@H](C(=O)N1[C@H](C[C@H]2C[C@@H]12)C#N)[C]34C[C@@H]5[CH2][C@H](C[C](O)(C5)C3)C4	1.8	1.43	7.1	5.37	7.5	5.62	1	0.77	0.26	0.16	0.85	0.73	0.88	0.75	0.00	-0.12
1055	C[C@@H](O)[C@@H]1[C@H]2SC(=C(N2C1=O)C(O)=O)SCCOC(N)=O	C[C@@H](O)[C@@H]1[C@H]2SC(=C(N2C1=O)C([O-])=O)SCCOC(N)=O	0.3	0.29	7.5	5.79	0.8	1.15	0.35	0.43	0.52	-0.53	0.88	0.76	-0.10	0.06	-0.46	-0.37
1056	CN1[C@@H]2CC(C[C@H]1[C@@H]3O[C@H]23)OC(=O)[C@H](CO)C4=CC=CC=C4	C[NH+]1[C@@H]2CC(C[C@H]1[C@@H]3O[C@H]23)OC(=O)[C@H](CO)C4=CC=CC=C4	3.1	2.46	16	15.61	4.5	3.21			0.49	0.39	1.20	1.19	0.65	0.51		
1057	O[C@@H]1[C@@H](O)[C@@H](O[C@@H]([C@H]1O[C@@H]1[C@@H](O)[C@H](O[C@@H]([C@H]1	0.88	0.70	46.58	13.78	1.18	1.48	0.1	0.09	0.06	-0.16	1.67	1.14	0.07	0.17	-1.00	-1.06

	[C@H]1O)C(O)=O)OC2=CC3=C(C(=O)C=C(O 3)C4=CC=C(O)C=C4)C(=C2O)O	O)C([O-])=O)OC2=C(O)C(=C3C(=O)C=C(OC3=C2)C4=CC=C (O)C=C4)O																
1058	CC(CC1=CC=CC=C1)N(C)CC#C	C[C@H](CC1=CC=CC=C1)[NH+](C)CC#C	1.9	2.39	20	15.12	1.3	2.08	0.13	0.17	0.28	0.38	1.30	1.18	0.11	0.32	-0.89	-0.78
1059	CCN(CC)CCNC(=O)C1=CC=C(N[S](C)(=O)= O)C=C1	CC[NH+](CC)CCNC(=O)C1=CC=C(N[S](C)(=O)=O) C=C1	0.82	1.03	3.7	4.57	3.8	3.62	0.96	0.74	0.09	0.01	0.57	0.66	0.58	0.56	-0.02	-0.13
1060	CC1=CC(=C([NH]1)C=C2C(=O)NC3=CC=CC =C23)C	CC1=CC(=C([NH]1)\C=C2/C(=O)NC3=C2C=CC=C3) C	0.98	1.23	14	7.48	0.83	1.64	0.008	0.02	0.01	0.09	1.15	0.87	-0.08	0.21	-2.10	-1.63
1061	CC(=O)N[C@@H](CO)C(=O)N[C@@H](CC(O)=O)C(=O)N[C@@H](CCCCN)C(=O)N1CC C[C@H]1C(O)=O	CC(=O)N[C@@H](CO)C(=O)N[C@@H](CC([O-])=O)C(=O)N[C@@H](CCCC[NH3+])C(=O)N1CCC[C@H]1C([O-])=O			18.7	8.25	0.08	0.37					1.27	0.92	-1.10	-0.43		
1062	CC[C@@]1(O)C(=O)OCC2=C1C=C3N(CC4= C(C5=CC(=CC=C5N=C34)O)[Si](C)(C)C(C)(C)C)C2=O	CC[C@@]1(O)C(=O)OCC2=C1C=C3N(CC4=C(C5=C C(=CC=C5N=C34)O)[Si](C)(C)C(C)(C)C)C2=O	0.47	0.59	6	5.03	1.4	2.42			0.33	-0.23	0.78	0.70	0.15	0.38		
1063	CCCC1=N[N](C)C2=C1N=C(NC2=O)C3=C(O CC)C=CC(=C3)[S](=O)(=O)N4CCN(C)CC4	CCCC1=N[N](C)C2=C1N=C(NC2=O)C3=C(OCC)C= CC(=C3)[S](=O)(=O)N4CC[NH+](C)CC4	1.36	1.48	9	7.58	2.2	3.04	0.04	0.05	0.13	0.17	0.95	0.88	0.34	0.48	-1.40	-1.27
1064	C[C@H](CC1=CC(=C2N(CCCO)CCC2=C1)C(N)=O)NCCOC3=C(OCC(F)(F)F)C=CC=C3	C[C@H](CC1=CC(=C2N(CCCO)CCC2=C1)C(N)=O)[NH2+]CCOC3=C(OCC(F)(F)F)C=CC=C3			2.8	3.50	3.6	5.50	0.05	0.06			0.45	0.54	0.56	0.74	-1.30	-1.22
1065	O=C1N(CCO[N](=O)=O)COC2=CC=CC=C12	[O-][N+](=O)OCCN1COC2=C(C=CC=C2)C1=O	0.68	0.85	29.59	16.22	0.38	0.76			0.17	-0.07	1.47	1.21	-0.42	-0.12		
1066	CN1CCN(CC1)C2=NC(=C(C=N2)C3=C(Cl)C(=CC(=C3)Cl)Cl)N	C[NH+]1CCN(CC1)C2=NC(=C(C=N2)C3=C(Cl)C(=C C(=C3)Cl)Cl)N	15.31	12.15	20.9	11.65	10.98	10.11			1.18	1.08	1.32	1.07	1.04	1.00		
1067	CN[C@@H]1[C@@H](O)[C@H](OC[C@]1(C)O)O[C@H]2[C@H](N)C[C@H](N)[C@@H](O[C@H]3OC(=CC[C@H]3N)CN)[C@@H]2O	C[NH2+][C@@H]1[C@@H](O)[C@H](OC[C@]1(C) O)O[C@H]2[C@H]([NH3+])C[C@H]([NH3+])[C@@ H](O[C@H]3OC(=CC[C@H]3[NH3+])C[NH3+])[C@ @H]2O	0.19	0.16	1	1.11	2.4	3.44	0.15	0.33	0.72	-0.80	0.00	0.05	0.38	0.54	-0.82	-0.49
1068	N[C@@H]1CN(CC12CC2)C3=C(F)C=C4C(=O)C(=CN([C@@H]5C[C@@H]5F)C4=C3Cl)C(O)=O	[NH3+][C@@H]1CN(CC12CC2)C3=C(Cl)C4=C(C=C 3F)C(=O)C(=CN4[C@@H]5C[C@@H]5F)C([O-])=O	1.5	1.80	3.7	2.80	6.6	6.68	0.51	0.39	0.18	0.26	0.57	0.45	0.82	0.83	-0.29	-0.40
1069	N[C@@H](CC(=O)N1CC[N]2C(=NN=C2C(F)(F)F)C1)CC3=CC(=C(F)C=C3F)F	[NH3+][C@@H](CC(=O)N1CC[N]2C(=NN=C2C(F)(F)F)C1)CC3=C(F)C=C(F)C(=C3)F	2.8	2.38	6	5.90	12	9.32	0.62	0.39	0.45	0.38	0.78	0.77	1.08	0.97	-0.21	-0.41
1070	CC[C@H](CC[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2 [C@@H]3CC=C4C[C@@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C)C(C)C	CC[C@H](CC[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2[C@@ H]3CC=C4C[C@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@] 12C)C(C)C	0.3	0.38	0.02	0.18	372.4	86.21			0.52	-0.42	-1.70	-0.75	2.57	1.94		
1071	CC(C)(C)C1=CN=C(CSC2=CN=C(NC(=O)C3 CCNCC3)S2)O1	CC(C)(C)C1=CN=C(CSC2=CN=C(NC(=O)C3CC[NH 2+]CC3)S2)O1	5.14	4.09	13	9.70	9.3	6.83			0.71	0.61	1.11	0.99	0.97	0.83		
1072	CC[C@H](C)[C@@H]([C@@H](CC(=O)N1C CC[C@H]1[C@H](OC)[C@@H](C)C(=O)NC CC2=CC=CC=C2)OC)N(C)C(=O)[C@@H](N C(=O)[C@H](C(C)C)N(C)C)C(C)C	CC[C@H](C)[C@@H]([C@H](CC(=O)N1CCC[C@H]1[C@H](OC)[C@@H](C)C(=O)NCCC2=CC=CC=C2)OC)N(C)C(=O)[C@@H](NC(=O)[C@H](C(C)C)[NH +](C)C)C(C)C	0.42	0.53	1.6	3.02	5.67	4.84			0.38	-0.28	0.20	0.48	0.75	0.69		
1073	CC1=CC[C@H](C[C@@H]1O)C(C)(C)O	CC1=CC[C@H](C[C@@H]1O)C(C)(C)O	0.43	0.54	2.7	3.66	1.9	2.49			0.37	-0.27	0.43	0.56	0.28	0.40		
1074	O=C(O[C@H]1CN2CCC1CC2)N3CCC4=CC= CC=C4[C@@H]3C5=CC=CC=C5	O=C(O[C@H]1C[NH+]2CCC1CC2)N3CCC4=C(C=C C=C4)[C@@H]3C5=CC=CC=C5	8.2	6.51	2.1	3.46	52	23.43	0.02	0.08	0.91	0.81	0.32	0.54	1.72	1.37	-1.70	-1.11
1075	CC(C)NCC(O)C1=CC=C(N[S](C)(=O)=O)C=C 1	CC(C)[NH2+]C[C@H](O)C1=CC=C(N[S](C)(=O)=O) C=C1	1.3	1.64	2	3.16	6.3	4.18	0.62	0.63	0.11	0.21	0.30	0.50	0.80	0.62	-0.21	-0.20
1076	C[C@@H]1CN(C[C@H](C)N1)C2=C(F)C(=C 3C(=O)C(=CN(C4CC4)C3=C2F)C(O)=O)N	C[C@@H]1CN(C[C@H](C)[NH2+]1)C2=C(F)C3=C(C(=C2F)N)C(=O)C(=CN3C4CC4)C([O-])=O	3.9	3.10	2.7	3.03	20	14.37	0.55	0.50	0.59	0.49	0.43	0.48	1.30	1.16	-0.26	-0.30
1077	OC(=O)C[C@H](NC(=O)C[P](O)(O)=O)C(O)= O	[O-]C(=O)C[C@H](NC(=O)C[P]([O-])([O-])=O)C([O-])=O	0.33	0.42	1.22	1.51	4.78	6.04			0.48	-0.38	0.09	0.18	0.68	0.78		
1078	CN[C@@H]1[C@H](O)[C@H](NC)[C@H]2O [C@]3(O)[C@@H](O[C@H](C)CC3=O)O[C@ @H]2[C@H]1O	C[NH2+][C@@H]1[C@H](O)[C@H]([NH2+]C)[C@ H]2O[C@@]3(O)[C@@H](O[C@H](C)CC3=O)O[C @@H]2[C@H]1O	0.13	0.25	0.99	1.30	1.8	2.92			0.89	-0.61	0.00	0.11	0.26	0.46		
1079	CO[C@H]1[C@H](O)CC(=O)O[C@H](C)CC= CC=C[C@H](O[C@H]2CC[C@H]([C@H](C) O2)N(C)C)[C@H](C)C[C@H](CC=O)[C@@H]1O[C@@H]3O[C@H](C)[C@@H](O[C@H]4	CO[C@H]1[C@H](O)CC(=O)O[C@H](C)C\C=C/C=C \[C@H](O[C@H]2CC[C@H]([C@H](C)O2)[NH+](C) C)[C@H](C)C[C@H](CC=O)[C@@H]1O[C@@H]3O [C@H](C)[C@@H](O[C@H]4C[C@@](C)(O)[C@@	5.4	4.29	12.8	6.07	5.2	6.06	0.26	0.27	0.73	0.63	1.11	0.78	0.72	0.78	-0.59	-0.57

	C[C@@](C)(O)[C@@H](O)[C@H](C)O4)[C@@H]([C@H]3O)N(C)C	H](O)[C@H](C)O4)[C@@H]([C@H]3O)[NH+](C)C																
1080	CCOC(=O)[C@H](CCC1=CC=CC=C1)N[C@H](C)C(=O)N2CC3(C[C@H]2C(O)=O)SCCS3	CCOC(=O)[C@H](CCC1=CC=CC=C1)[NH2+][C@H](C)C(=O)N2CC3(C[C@H]2C([O-])=O)SCCS3	0.43	0.54	11.9	7.84	8.6	5.17			0.37	-0.27	1.08	0.89	0.93	0.71		
1081	CCCCCCCCCCCCCCC[C@@H](O)[C@H](C)N	CCCCCCCCCCCCCCC[C@@H](O)[C@H](C)[NH3+]	30.7	14.12	57.6	22.63	29.7	19.06			1.49	1.15	1.76	1.35	1.47	1.28		
1082	CC(C)[C@@H](CC[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3[C@H](O)C[C@H]4C[C@H](CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C)NCCCNCCCCN)O[S](O)(=O)=O	CC(C)[C@@H](CC[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3[C@H](O)C[C@H]4C[C@H](CC[C@@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C)[NH2+]CCC[NH2+]CCCC[NH3+])O[S]([O-])(=O)=O	0.23	0.29	1.2	1.97	9.5	7.29			0.64	-0.54	0.08	0.30	0.98	0.86		
1083	CCN(CC)CCNC1=CC=C(CNC=O)C2=C1C(=O)C3=CC(=CC=C3S2)OC	CC[NH+](CC)CCNC1=C2C(=O)C3=C(SC2=C(CNC=O)C=C1)C=CC(=C3)OC	1.01	1.27	3.1	4.27	6.19	7.23			0.00	0.10	0.49	0.63	0.79	0.86		
1084	OC(CNC(=O)C[N]1C=CN=C1[N+]([O-])=O)C(F)(F)F	O[C@@H](CNC(=O)C[N]1C=CN=C1[N+]([O-])=O)C(F)(F)F	0.69	0.62	3	3.84	3.45	2.99			0.16	-0.21	0.48	0.58	0.54	0.48		
1085	CC1=CN([C@@H]2O[C@H](CO)C=C2)C(=O)NC1=O	CC1=CN([C@@H]2O[C@H](CO)C=C2)C(=O)NC1=O	0.67	0.53	8.2	7.14	1.4	1.81	1	0.89	0.17	-0.27	0.91	0.85	0.15	0.26	0.00	-0.05
1086	CN[C@H]1[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](CO)O[C@H]1O[C@H]2[C@@H](O[C@@H](C)[C@]2(O)C=O)O[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](NC(N)=N)[C@@H](O)[C@@H]3NC(N)=N	C[NH2+][C@H]1[C@H](O)[C@H](O)[C@H](CO)O[C@H]1O[C@H]2[C@@H](O[C@@H](C)[C@]2(O)C=O)O[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](NC(N)=[NH2+])[C@H](O)[C@@H]3NC(N)=[NH2+]	0.34	0.43	0.78	1.02	4.3	4.36	0.65	0.63	0.47	-0.37	-0.11	0.01	0.63	0.64	-0.19	-0.20
1087	CCC(=O)N(C1=CC=CC=C1)C2(CCN(CCC3=CC=CS3)CC2)COC	CCC(=O)N(C1=CC=CC=C1)C2(CC[NH+](CCC3=CC=CS3)CC2)COC	9.4	6.03	15	10.14	14	10.21	0.075	0.07	0.97	0.78	1.18	1.01	1.15	1.01	-1.12	-1.18
1088	CC1(C)C(N2C(CC2=O)[S]1(=O)=O)C(O)=O	CC1(C)[C@@H](N2[C@H](CC2=O)[S]1(=O)=O)C([O-])=O	0.32	0.42	5.1	4.61	1.1	1.70	0.62	0.70	0.49	-0.38	0.71	0.66	0.04	0.23	-0.21	-0.15
1089	CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)[C@@H](C3=CC=CC=C3)[S](O)(=O)=O)C(=O)N2[C@H]1C(O)=O	CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)[C@@H](C3=CC=CC=C3)[S]([O-])(=O)=O)C(=O)N2[C@H]1C([O-])=O	0.15	0.19	1.6	1.76	1.2	1.54	0.5	0.42	0.82	-0.72	0.20	0.24	0.08	0.19	-0.30	-0.38
1090	NC1=CC=C(C=C1)[S](=O)(=O)NC2=NC=CC=N2	NC1=CC=C(C=C1)[S](=O)(=O)NC2=NC=CC=N2	0.29	0.37	0.55	1.05	7	6.50	0.44	0.38	0.54	-0.44	-0.26	0.02	0.85	0.81	-0.36	-0.42
1091	CC1=CC(=NO1)N[S](=O)(=O)C2=CC=C(N)C=C2	CC1=CC(=NO1)N=[S]([O-])(=O)C2=CC=C(N)C=C2	0.3	0.18	0.36	0.55	9.8	6.46	0.23	0.19	0.52	-0.75	-0.44	-0.26	0.99	0.81	-0.64	-0.72
1092	OC(=O)C1=C(O)C=CC(=C1)N=NC2=CC=C(C=C2)[S](=O)(=O)NC3=CC=CC=N3	OC1=C(C=C(C=C1)N=NC2=CC=C(C=C2)[S](=O)(=O)NC3=NC=CC=C3)C([O-])=O	0.11	0.14	0.26	0.35	7.6	7.01	0.004	0.01	0.96	-0.86	-0.59	-0.45	0.88	0.85	-2.40	-2.17
1093	O=C1C(CC[S](=O)C2=CC=CC=C2)C(=O)N(N1C3=CC=CC=C3)C4=CC=CC=C4	O=C1C(CC[S](=O)C2=CC=CC=C2)C(=O)N(N1C3=CC=CC=C3)C4=CC=CC=C4	0.12	0.15	0.34	0.63	6.2	6.75	0.017	0.02	0.92	-0.82	-0.47	-0.20	0.79	0.83	-1.77	-1.69
1094	CC1=NOC(=C1C)N[S](=O)(=O)C2=CC=C(N)C=C2	CC1=NOC(=C1C)N=[S]([O-])(=O)C2=CC=C(N)C=C2	0.17	0.21	0.3	0.40	7.4	5.34	0.079	0.09	0.77	-0.67	-0.52	-0.40	0.87	0.73	-1.10	-1.05
1095	COC1=CC(=CC=C1C2=NC3=NC=CC=C3[NH]2)[S](C)=O	COC1=C(C=CC(=C1)[S](C)=O)C2=NC3=C([NH]2)C=CC=N3	0.62	0.78	10	8.11	0.8	1.25	0.41	0.14	0.21	-0.11	1.00	0.91	-0.10	0.10	-0.39	-0.86
1096	CCN1CCC[C@@H]1CNC(=O)C2=C(OC)C=CC(=C2)[S](N)(=O)=O	CC[NH+]1CCC[C@@H]1CNC(=O)C2=C(OC)C=CC(=C2)[S](N)(=O)=O	0.94	1.43	1.9	2.58	6.5	3.89	1	0.76	0.03	0.16	0.28	0.41	0.81	0.59	0.00	-0.12
1097	CN[S](=O)(=O)CC1=CC=C2[NH]C=C(CCN(C)C)C2=C1	CN[S](=O)(=O)CC1=CC2=C([NH]C=C2CC[NH+](C)C)C=C1	1.7	1.30	19	13.42	1.7	2.42	0.83	0.72	0.23	0.11	1.28	1.13	0.23	0.38	-0.08	-0.14
1098	CC(C(O)=O)C1=CC=C(C=C1)C(=O)C2=CC=CS2	C[C@@H](C([O-])=O)C1=CC=C(C=C1)C(=O)C2=CC=CS2	0.04	0.05	0.76	0.71	2.1	2.73	0.006	0.01	1.40	-1.30	-0.12	-0.15	0.32	0.44	-2.22	-1.99
1099	CC1=C(N[S](=O)(=O)C2=CC=C(C=C2)C#CC3=CC=C(O)C(=C3)C(O)=O)N=CC=C1	CC1=C(N[S](=O)(=O)C2=CC=C(C=C2)C#CC3=CC(=C(O)C=C3)C([O-])=O)N=CC=C1	0.1	0.13	0.07	0.22	16	10.59	0.0019	0.0040	1.00	-0.90	-1.15	-0.66	1.20	1.02	-2.72	-2.40
1100	C[C@@H]1CCN(CCN1C(=O)C2=CC(=CC=C2[N]3N=CC=N3)C)C4=NC5=CC(=CC=C5O4)Cl	C[C@H]1CCN(CCN1C(=O)C2=C(C=CC(=C2)C)[N]3N=CC=N3)C4=NC5=C(O4)C=CC(=C5)Cl	0.69	0.87	0.84	1.40	10.37	8.66	0.05	0.03	0.16	-0.06	-0.08	0.15	1.02	0.94	-1.30	-1.49
1101	NC1=C2CCCCC2=NC3=CC=CC=C13	NC1=C2C=CC=CC2=[NH+]C3=C1CCCC3	11	8.74	56	25.43	3.3	4.48	0.25	0.24	1.04	0.94	1.75	1.41	0.52	0.65	-0.60	-0.62
1102	CO[C@@H]1C[C@@H](CC[C@H]1O)C=C(C)[C@H]2OC(=O)[C@@H]3CCCCN3C(=O)C(=O)[C@]4(O)O[C@H]([C@H](C[C@@H](C)CC(=C[C@@H](CC=C)C(=O)C[C@H](O)[C@H	CO[C@@H]1C[C@@H](CC[C@H]1O)\C=C(/C)[C@H]2OC(=O)[C@@H]3CCCCN3C(=O)C(=O)[C@]4(O)O[C@H]([C@H](C[C@@H](C)C\C(=C\[C@@H](CC=C)C(=O)C[C@H](O)[C@H]2C)C)OC)[C@H](C[C@	1.2	1.02	0.7	1.39	26	16.88	0.01	0.02	0.08	0.01	-0.15	0.14	1.41	1.23	-2.00	-1.65

	]2C)C)OC)[C@H](C[C@H]4C)OC	H]4C)OC																
1103	CC(C)(C)NCC(O)COC1=CC=C(NC(=O)NC2CCCCC2)C=C1	CC(C)(C)[NH2+]C[C@@H](O)COC1=CC=C(NC(=O)NC2CCCCC2)C=C1	3.3	2.62	4.9	5.48	11	8.83	0.39	0.36	0.52	0.42	0.69	0.74	1.04	0.95	-0.41	-0.45
1104	CCOC1=CC=CC=C1OCCN[C@H](C)CC2=CC=C(OC)C(=C2)[S](N)(=O)=O	CCOC1=C(OCC[NH2+][C@H](C)CC2=CC(=C(OC)C=C2)[S](N)(=O)=O)C=CC=C1	0.21	0.26	0.62	1.69	6.8	4.77	0.01	0.03	0.68	-0.58	-0.21	0.23	0.83	0.68	-2.00	-1.59
1105	CO[C@H]1C[C@H](C)CC2=C(NCC=C)C(=O)C=C(NC(=O)C(=CC=C[C@H](OC)[C@@H](OC(N)=O)C(=C[C@H](C)[C@H]1O)C)C2=O	CO[C@H]1C[C@H](C)CC2=C(NCC=C)C(=O)C=C(NC(=O)\C(=C\C=C\[C@H](OC)[C@@H](OC(N)=O)\C(=C\[C@@H](C)[C@H]1O)C)C)C2=O	2	1.59	10.18	7.05	3	3.05			0.30	0.20	1.01	0.85	0.48	0.48		
1106	OC(CC1=CC(=C(O)C=C1)O)C(O)=O	O[C@H](CC1=CC(=C(O)C=C1)O)C([O-])=O	0.38	0.32	17.75	9.84	0.37	0.75			0.42	-0.49	1.25	0.99	-0.43	-0.12		
1107	CC[C@H]([C@@H](C)CN(C)C)C1=CC=CC(=C1)O	CC[C@H]([C@@H](C)C[NH+](C)C)C1=CC(=CC=C1)O	4.64	2.95	21.33	17.32	2.39	3.21			0.67	0.47	1.33	1.24	0.38	0.51		
1108	COC1=C(OC)C=C2CN(CCC3=CC=C(NC(=O)C4=C(NC(=O)C5=CC6=CC=CC=C6N=C5)C=C(OC)C(=C4)OC)C=C3)CCC2=C1	COC1=C(OC)C=C2C[NH+](CCC3=CC=C(NC(=O)C4=C(NC(=O)C5=CC6=CC=CC=C6N=C5)C=C(OC)C(=C4)OC)C=C3)CCC2=C1	6.4	5.08	2.8	3.89	29	18.76			0.81	0.71	0.45	0.59	1.46	1.27		
1109	NC1=NC(=O)N(C=C1)[C@H]2O[C@H](CO)[C@](O)(C#C)[C@H]2O	NC1=NC(=O)N(C=C1)[C@H]2O[C@H](CO)[C@](O)(C#C)[C@H]2O	1.1	0.96	1.6	2.99	10.9	5.51			0.04	-0.02	0.20	0.47	1.04	0.74		
1110	Cl.CC(C)[C@H](NC(=O)[C@H](C(C)C)N(C)C(=O)N(C)[C@@H](C(C)C)C(=O)N1CCC[C@H]1C(=O)N2CCC[C@H]2C(=O)NC(C)(C)C	CC(C)[C@H](NC(=O)[C@H](C(C)C)[NH+](C)C)C(=O)N(C)[C@@H](C(C)C)C(=O)N1CCC[C@H]1C(=O)N2CCC[C@H]2C(=O)NC(C)(C)C	0.33	0.42	9.6	6.60	0.57	1.71			0.48	-0.38	0.98	0.82	-0.24	0.23		
1111	CCC(=O)NC[C@@H]1C[C@H]1C2=CC=CC3=C2CCO3	CCC(=O)NC[C@@H]1C[C@H]1C2=C3CCOC3=CC=C2	0.33	0.51	9.04	10.61	0.75	1.24			0.48	-0.29	0.96	1.03	-0.12	0.09		
1112	CCOC(=O)C1=CC=C(N=C1)C#CC2=CC3=C(SCCC3(C)C)C=C2	CCOC(=O)C1=CN=C(C=C1)C#CC2=CC3=C(SCCC3(C)C)C=C2	3.55	2.82	37.2	15.92	6.22	6.65			0.55	0.45	1.57	1.20	0.79	0.82		
1113	C[C@@]1(C[N]2C=CN=N2)[C@@H](N3[C@@H](CC3=O)[S]1(=O)=O)C(O)=O	C[C@]1(C[N]2C=CN=N2)[C@@H](N3[C@@H](CC3=O)[S]1(=O)=O)C([O-])=O	0.26	0.33	4.81	4.23	0.97	1.29	0.7	0.69	0.59	-0.49	0.68	0.63	-0.01	0.11	-0.15	-0.16
1114	CC(C)(C)C1=CC(=CC(=C1O)C(C)(C)C)C(=O)CCCC#C	CC(C)(C)C1=C(O)C(=CC(=C1)C(=O)CCCC#C)C(C)(C)C	12	9.52	8.9	7.88	50.7	25.55			1.08	0.98	0.95	0.90	1.71	1.41		
1115	C[N]1N=NC(=N1)C2=CC=C(C=N2)C3=CC=C(C=C3F)N4C[C@H](CO)OC4=O	C[N]1N=NC(=N1)C2=NC=C(C=C2)C3=C(F)C=C(C=C3)N4C[C@H](CO)OC4=O	0.91	0.90	1.19	1.72	10.16	7.83	0.11	0.10	0.04	-0.04	0.08	0.24	1.01	0.89	-0.96	-1.02
1116	FC1=CN(C2CCCO2)C(=O)NC1=O	FC1=CN([C@@H]2CCCO2)C(=O)NC1=O	0.62	0.43	0.95	1.78	8.69	5.17			0.21	-0.37	-0.02	0.25	0.94	0.71		
1117	CCCCCNC(=N)NN=CC1=C[NH]C2=CC=C(OC)C=C12	CCCCCNC(=[NH2+])N\N=C/C1=C[NH]C2=C1C=C(OC)C=C2	5.3	5.19	18	13.32	11	8.91	0.02	0.05	0.72	0.72	1.26	1.12	1.04	0.95	-1.70	-1.33
1118	FC1=CC=CC(=C1F)[C@@H]2CC[C@@H](NC(=O)N3CCC(CC3)N4C(=O)NC5=C4C=CC=N5)C(=O)N(C2)CC(F)(F)F	FC1=C(F)C(=CC=C1)[C@@H]2CC[C@@H](NC(=O)N3CCC(CC3)N4C(=O)NC5=C4C=CC=N5)C(=O)N(C2)CC(F)(F)F	0.86	1.08	5.8	4.70	8.2	11.53			0.07	0.03	0.76	0.67	0.91	1.06		
1119	CC[C@H]1OC(=O)[C@H](C)C(=O)[C@H](C)[C@@H](O[C@@H]2O[C@H](C)C[C@@H]([C@H]2O)N(C)C)[C@@](C)(C[C@@H](C)C(=O)[C@H](C)[C@H]3N(CCCC[N]4C=NC(=C4)C5=CC=CN=C5)C(=O)O[C@]13C)OC	CC[C@H]1OC(=O)[C@H](C)C(=O)[C@H](C)[C@@H](O[C@@H]2O[C@H](C)C[C@@H]([C@H]2O)N(C)C)[C@@](C)(C[C@@H](C)C(=O)[C@H](C)[C@@H]3N(CCCC[N]4C=NC(=C4)C5=CN=CC=C5)C(=O)O[C@]13C)OC	3	2.38	14	8.80	12	12.71	0.41	0.24	0.48	0.38	1.15	0.94	1.08	1.10	-0.39	-0.62
1120	CCCC1=NC2=C(C)C=C(C=C2[N]1CC3=CC=C(C=C3)C4=CC=CC=C4C(O)=O)C5=NC6=CC=CC=C6[N]5C	CCCC1=NC2=C(C=C(C=C2C)C3=NC4=C(C=CC=C4)[N]3C)[N]1CC5=CC=C(C=C5)C6=C(C=CC=C6)C([O-])=O	5.3	4.21	8.4	4.14	20	13.28	0.004	0.0047	0.72	0.62	0.92	0.62	1.30	1.12	-2.40	-2.33
1121	CO[C@]1(NC(=O)[C@H](C(O)=O)C2=CSC=C2)[C@H]3SC(C)(C)[C@@H](N3C1=O)C(O)=O	CO[C@]1(NC(=O)[C@H](C([O-])=O)C2=CSC=C2)[C@@H]3SC(C)(C)[C@@H](N3C1=O)C([O-])=O	0.11	0.14	0.34	0.74	4.1	2.87	0.21	0.26	0.96	-0.86	-0.47	-0.13	0.61	0.46	-0.68	-0.59
1122	OC1=CC=CC(=C1)C2=C3CCC(=N3)C(=C4[NH]C(=C(C5=CC(=CC=C5)O)C6=NC(=C(C7=CC=C2[NH]7)C8=CC(=CC=C8)O)C=C6)C=C4)C9=CC(=CC=C9)O	OC1=CC=CC(=C1)C2=C3CCC(=N3)C(=C4NC(=C(C5=CC=C([NH]5)C(=C6NC2C=C6)C7=CC(=CC=C7)O)C8=CC(=CC=C8)O)C=C4)C9=CC=CC(=C9)O			0.06	0.23	91.5	37.64	0.14	0.04			-1.22	-0.65	1.96	1.58	-0.85	-1.41
1123	CN1N=NC2=C(N=C[N]2C1=O)C(N)=O	CN1N=NC2=C([NH]C=[NH]2C1=O)C(N)=O	0.5	0.63	3.6	3.55	1.5	2.01			0.30	-0.20	0.56	0.55	0.18	0.30		
1124	NC(=O)N1C(=O)C(=C(O)C2=CC=CS2)C3=CC(=CC=C13)Cl	NC(=O)N1C(=O)\C(=C(\[O-])C2=CC=CS2)C3=C1C=CC(=C3)Cl	0.11	0.14	0.058	0.12	22.7	14.06	0.01	0.01	0.96	-0.86	-1.24	-0.94	1.36	1.15	-2.00	-1.89
1125	COC1=CC(=CC(=C1O)OC)[C@H]2[C@@H]3	COC1=C(O)C(=CC(=C1)[C@H]2[C@@H]3[C@H](C	0.41	0.44	0.19	0.44	16	10.24	0.0044	0.01	0.39	-0.36	-0.72	-0.36	1.20	1.01	-2.36	-1.89

	[C@H](COC3=O)[C@H](O[C@@H]4O[C@@H]5CO[C@H](O[C@H]5[C@H](O)[C@H]4O)C6=CC=CS6)C7=CC8=C(OCO8)C=C27	OC3=O)[C@H](O[C@@H]4O[C@@H]5CO[C@H](O[C@H]5[C@@H](O)[C@H]4O)C6=CC=CS6)C7=C2C=C8OCOC8=C7)OC															
1126	C[C@H](C[N]1C=NC2=C(N)N=CN=C12)OC[P](O)(O)=O	C[C@H](C[N]1C=NC2=C1N=CN=C2N)OC[P]([O-])([O-])=O	0.83	0.37	3.1	3.07	5.8	3.93	0.93	0.77	0.08	-0.43	0.49	0.49	0.76	0.59	-0.03	-0.11
1127	CN1C(=C(O)C2=C(C=CS2)[S]1(=O)=O)C(=O)NC3=CC=CC=N3	CN1C(=C([O-])C2=C(C=CS2)[S]1(=O)=O)C(=O)NC3=NC=CC=C3	0.19	0.27	0.03	0.09	67	23.21	0.0085	0.01	0.72	-0.57	-1.52	-1.05	1.83	1.37	-2.07	-1.83
1128	COC1=CC2=NC(=NC(=C2C=C1OC)N)N3CCN(CC3)C(=O)C4CCCO4	COC1=C(OC)C=C2C(=NC(=NC2=C1)N3CCN(CC3)C(=O)[C@@H]4CCCO4)N	0.98	0.78	1.1	1.41	9	5.66	0.08	0.13	0.01	-0.11	0.04	0.15	0.95	0.75	-1.10	-0.89
1129	CC(C)(C)NCC(O)C1=CC(=CC(=C1O)O)O	CC(C)(C)[NH2+]C[C@H](O)C1=CC(=CC(=C1O)O)O	1.5	3.15	3.4	6.78	15	8.72	0.75	0.73	0.18	0.50	0.53	0.83	1.18	0.94	-0.12	-0.14
1130	CC(O)=C(C#N)C(=O)NC1=CC=C(C=C1)C(F)(F)F	C\C([O-])=C(/C#N)C(=O)NC1=CC=C(C=C1)C(F)(F)F	0.16	0.20	0.007	0.06	350	39.90	0.01	0.02	0.80	-0.70	-2.15	-1.26	2.54	1.60	-2.00	-1.72
1131	CC(CC(C1=CC=CC=C1)C2=CC=CC=C2)NC(C)(C)C	C[C@H](CC(C1=CC=CC=C1)C2=CC=CC=C2)[NH2+]C(C)(C)C	5.1	6.10	1.1	2.61	56	27.42	0.08	0.08	0.71	0.79	0.04	0.42	1.75	1.44	-1.10	-1.10
1132	CCO[C@@H](CC1=CC=C(OCCC2=CC=C(O[S](C)(=O)=O)C=C2)C=C1)C(O)=O	CCO[C@@H](CC1=CC=C(OCCC2=CC=C(O[S](C)(=O)=O)C=C2)C=C1)C([O-])=O	0.13	0.16	0.039	0.31	45	13.21	0.0011	0.01	0.89	-0.79	-1.41	-0.51	1.65	1.12	-2.96	-2.26
1133	C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=CC(=O)CC[C@]34C)[C@@H]1CC[C@@H]2O	C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=CC(=O)CC[C@]34C)[C@@H]1CC[C@@H]2O	0.35	0.92	24.5	16.76	0.17	0.53	0.057	0.04	0.46	-0.04	1.39	1.22	-0.77	-0.28	-1.24	-1.36
1134	CN(C)[C@H]1[C@@H]2C[C@H]3C(=C(O)[C@]2(O)C(=O)C(=C1O)C(N)=O)C(=O)C4=C(O)C=CC=C4[C@@]3(C)O	C[NH+](C)[C@H]1[C@@H]2C[C@H]3C(=C([O-])[C@]2(O)C(=O)C(=C1[O-])C(N)=O)C(=O)C4=C(C=CC=C4O)[C@@]3(C)O	1.2	0.93	1.5	1.47	9.4	9.07	0.78	0.46	0.08	-0.03	0.18	0.17	0.97	0.96	-0.11	-0.34
1135	CCCCCC1=CC(=C2[C@@H]3C=C(C)CC[C@H]3C(C)(C)OC2=C1)O	CCCCCC1=CC2=C([C@@H]3C=C(C)CC[C@H]3C(C)(C)O2)C(=C1)O	8.9	7.07	3.2	5.50	33	22.20	0.05	0.04	0.95	0.85	0.51	0.74	1.52	1.35	-1.30	-1.45
1136	CCCCCC1=CC(=C2[C@@H]3C=C(CC[C@H]3C(C)(C)OC2=C1)C(O)=O)O	CCCCCC1=CC2=C([C@@H]3C=C(CC[C@H]3C(C)(C)O2)C([O-])=O)C(=C1)O	1.28	1.02	1.2	1.55	17.6	11.05			0.11	0.01	0.08	0.19	1.25	1.04		
1137	COC1=CC=CC=C1OC2=C(N[S](=O)(=O)C3=CC=C(C=N3)C(C)C)N=C(N=C2OCCO)C4=CC=NC(=C4)C5=NN=N[NH]5	COC1=C(OC2=C(OCCO)N=C(N=C2N[S](=O)(=O)C3=CC=C(C=N3)C(C)C)N=C(N=C2OCCO)C4=CC=NC=C(C=C3)C(C)C)C4=CC(=NC=C4)C5=NN=N[N-]5)C=CC=C1	0.28	0.36	8.1	6.40	3.8	4.70	0.0085	0.01	0.55	-0.45	0.91	0.81	0.58	0.67	-2.07	-1.89
1138	C[N]1C(=CN=C1[N](=O)=O)CO[P](=O)(NCCBr)NCCBr	C[N]1C(=CN=C1[N+]([O-])=O)CO[P](=O)(NCCBr)NCCBr	0.64	0.76	14.8	8.89	1	1.31			0.19	-0.12	1.17	0.95	0.00	0.12		
1139	O=C1CCC(N2C(=O)C3=CC=CC=C3C2=O)C(=O)N1	O=C1CC[C@H](N2C(=O)C3=C(C=CC=C3)C2=O)C(=O)N1	0.95	1.01	3.4	2.82	4.7	3.94	0.4	0.35	0.02	0.00	0.53	0.45	0.67	0.60	-0.40	-0.46
1140	CN1C(=O)N(C)C2=C(N=C[NH]2)C1=O	CN1C(=O)N(C)C2=C(N=C[NH]2)C1=O	0.51	0.73	0.86	1.70	7.2	4.49	0.61	0.66	0.29	-0.14	-0.07	0.23	0.86	0.65	-0.21	-0.18
1141	C[S](=O)(=O)C1=CC=C(C=C1)[C@@H](O)[C@@H](COC(=O)CN)NC(=O)C(Cl)Cl	C[S](=O)(=O)C1=CC=C(C=C1)[C@@H](O)[C@@H](COC(=O)C[NH3+])NC(=O)C(Cl)Cl	0.13	0.16	9.6	6.08	0.28	0.66	0.27	0.33	0.89	-0.79	0.98	0.78	-0.55	-0.18	-0.57	-0.49
1142	NC1=NC2=C(N=C[NH]2)C(=S)N1	NC1=NC2=C(N=C[NH]2)C(=S)N1	2.89	2.30	15.4	11.10	24.35	11.09			0.46	0.36	1.19	1.05	1.39	1.04		
1143	CN(C)CCN(CC1=CC=CS1)C2=CC=CC=N2	C[NH+](C)CCN(CC1=CC=CS1)C2=NC=CC=C2	3.3	3.24	28	16.63	1.6	2.83			0.52	0.51	1.45	1.22	0.20	0.45		
1144	CCCC(C)C1(CC)C(=O)NC(=S)NC1=O	CCC[C@@H](C)C1(CC)C(=O)NC(=S)NC1=O	1.2	0.99	8.2	4.51	2	2.94	0.14	0.13	0.08	-0.01	0.91	0.65	0.30	0.47	-0.85	-0.89
1145	S=[P](N1CC1)(N2CC2)N3CC3	S=[P](N1CC1)(N2CC2)N3CC3	1.6	1.27	6.7	6.05	2.7	2.83	0.9	0.77	0.20	0.10	0.83	0.78	0.43	0.45	-0.05	-0.11
1146	CC1=C(SC=C1)C(=CCCN2CCC[C@H](C2)C(O)=O)C3=C(C)C=CS3	CC1=C(SC=C1)C(=CCC[NH+]2CCC[C@@H](C2)C([O-])=O)C3=C(C)C=CS3	1.1	0.87	1.6	1.82	10	7.28	0.04	0.04	0.04	-0.06	0.20	0.26	1.00	0.86	-1.40	-1.37
1147	CN1C2=C(C=CC=C2)[C@@H](NCCCCCCC(O)=O)C3=C(C=C(Cl)C=C3)[S]1(=O)=O	CN1C2=C(C=CC=C2)[C@@H]([NH2+]CCCCCCC([O-])=O)C3=C(C=C(Cl)C=C3)[S]1(=O)=O	0.3	0.38	2.8	2.55	1.4	2.45	0.05	0.04	0.52	-0.42	0.45	0.41	0.15	0.39	-1.30	-1.39
1148	CCN(CC)CCNC(=O)C1=C(OC)C=CC(=C1)[S](C)(=O)=O	CC[NH+](CC)CCNC(=O)C1=C(OC)C=CC(=C1)[S](C)(=O)=O	1.1	0.97	4.7	5.34	3.2	2.85			0.04	-0.01	0.67	0.73	0.51	0.46		
1149	C[C@H](C(O)=O)C1=CC=C(S1)C(=O)C2=CC=CC=C2	C[C@H](C([O-])=O)C1=CC=C(S1)C(=O)C2=CC=CC=C2	0.08	0.10	0.62	0.75	2.1	2.54	0.015	0.01	1.10	-1.01	-0.21	-0.13	0.32	0.40	-1.82	-1.93
1150	NC(=O)C1=CSC(=N1)[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]2O	NC(=O)C1=CSC(=N1)[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]2O	1.1	1.39	2.4	3.41	5.9	4.12	0.47	0.60	0.04	0.14	0.38	0.53	0.77	0.61	-0.33	-0.22
1151	OCCO[C@H]1C[C@H]([C@H](O)[C@@H]1O)[N]2N=NC3=C(N[C@@H]4C[C@H]4C5=CC=C(F)C(=C5F)F)N=C(S)N=C23	OCCO[C@H]1C[C@H]([C@H](O)[C@@H]1O)[N]2N=NC3=C2N=C(S)N=C3N[C@@H]4C[C@H]4C5=CC=C(F)C=C5)F	1.25	1.08	3.38	3.41	6.8	6.05	0.002	0.01	0.10	0.03	0.53	0.53	0.83	0.78	-2.70	-2.03
1152	CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)[C@H](C(O)=O)C3=CSC=C3)C(=O)N2[C@H]1C(O)=O	CC1(C)S[C@@H]2[C@@H](NC(=O)[C@H](C([O-])=O)C3=CSC=C3)C(=O)N2[C@H]1C([O-])=O	0.16	0.17	1.8	1.89	1	1.31	0.55	0.44	0.80	-0.76	0.26	0.28	0.00	0.12	-0.26	-0.35
1153	CN(C)[C@H]1[C@@H]2C[C@@H]3CC4=C(C	CN(C)C1=C2C[C@H]3C[C@@H]4[C@H]([NH+](C)	12	7.54	3.8	3.23	48	23.03	0.2	0.19	1.08	0.88	0.58	0.51	1.68	1.36	-0.70	-0.72

	C=C(NC(=O)CNC(C)(C)C)C(=C4C(=O)C3=C(O)[C@]2(O)C(=O)C(=C1O)C(N)=O)O)N(C)C	C)C(=C(C(N)=O)C(=O)[C@]4(O)C(=C3C(=O)C2=C(O)C(=C1)NC(=O)C[NH2+]C(C)(C)C)[O-])[O-]															
1154	CCOC(=O)[C@@]1(CCC=C[C@H]1N(C)C)C2=CC=CC=C2	CCOC(=O)[C@]1(CCC=C[C@H]1[NH+](C)C)C2=CC=CC=C2	4	1.73	16	12.50	5	5.85	0.21	0.21	0.60	0.24	1.20	1.10	0.70	0.77	-0.68	-0.68
1155	O[P](O)(=O)C(SC1=CC=C(Cl)C=C1)[P](O)(O)=O	[O-][P]([O-])(=O)C(SC1=CC=C(Cl)C=C1)[P]([O-])([O-])=O	0.23	0.29	0.4	0.62	7.7	8.20	0.1	0.14	0.64	-0.54	-0.40	-0.20	0.89	0.91	-1.00	-0.87
1156	CC(C)(C)NC[C@H](O)COC1=NSN=C1N2CCOCC2	CC(C)(C)[NH2+]C[C@H](O)COC1=NSN=C1N2CCOCC2	1.5	1.35	8.5	7.07	2.2	2.88	0.9	0.81	0.18	0.13	0.93	0.85	0.34	0.46	-0.05	-0.09
1157	CC[S](=O)(=O)CC[N]1C(=NC=C1[N](=O)=O)C	CC[S](=O)(=O)CC[N]1C(=NC=C1[N+]([O-])=O)C	0.59	0.51	0.6	1.16	13	6.85	0.8	0.69	0.23	-0.29	-0.22	0.06	1.11	0.84	-0.10	-0.16
1158	C[C@H](S)C(=O)NCC(O)=O	C[C@H](S)C(=O)NCC([O-])=O	1.39	1.10	1.48	2.32	55	12.52	0.45	0.42	0.14	0.04	0.17	0.37	1.74	1.10	-0.35	-0.37
1159	C[N+]1(C)[C@@H]2CC(C[C@H]1[C@@H]3O[C@H]23)OC(=O)C(O)(C4=CC=CS4)C5=CC=CS5	C[N+]1(C)[C@@H]2CC(C[C@H]1[C@@H]3O[C@H]23)OC(=O)C(O)(C4=CC=CS4)C5=CC=CS5	32	10.98	12.6	10.73			0.28	0.23	1.51	1.04	1.10	1.03			-0.55	-0.63
1160	C[N]1C=NC=C1[C@@](N)(C2=CC=C(Cl)C=C2)C3=CC=C4N(C)C(=O)C=C(C5=CC=CC(=C5)Cl)C4=C3	C[N]1C=NC=C1[C@@]([NH3+])(C2=CC=C(Cl)C=C2)C3=CC4=C(C=C3)N(C)C(=O)C=C4C5=CC(=CC=C5)Cl	0.93	1.17	5.03	3.39	2.52	4.95	0.006	0.01	0.03	0.07	0.70	0.53	0.40	0.69	-2.22	-2.11
1161	NC1=N[N+](=C2C=CC=CC2=[N+]1[O-])[O-]	NC1=[N+]([O-])C2=CC=CC=C2[N+](=N1)[O-]	0.56	0.71	8.9	7.18	0.78	1.18	0.81	0.56	0.25	-0.15	0.95	0.86	-0.11	0.07	-0.09	-0.25
1162	C[C@@H]1C[C@@H]2[C@@H]3CCC4=CC(=O)C=C[C@]4(C)C3=CC[C@]2(C)[C@H]1C(=O)CN5CCN(CC5)C6=NC(=NC(=C6)N7CCCC7)N8CCCC8	C[C@@H]1C[C@@H]2[C@@H]3CCC4=CC(=O)C=C[C@]4(C)C3=CC[C@]2(C)[C@H]1C(=O)C[NH+]5CCN(CC5)C6=NC(=NC(=C6)N7CCCC7)N8CCCC8	9.8	7.78	7	5.36	49.3	26.01	0.006	0.01	0.99	0.89	0.85	0.73	1.69	1.42	-2.22	-1.95
1163	CCCC[S](=O)(=O)N[C@@H](CC1=CC=C(OCCCCC2CCNCC2)C=C1)C(O)=O	CCCC[S](=O)(=O)N[C@@H](CC1=CC=C(OCCCCC2CC[NH2+]CC2)C=C1)C([O-])=O	0.99	0.79	4.3	3.57	1.6	1.98	0.36	0.30	0.00	-0.10	0.63	0.55	0.20	0.30	-0.44	-0.53
1164	ClC1=C(NC2=NCCN2)C3=NSN=C3C=C1	ClC1=C(NC2=[NH+]CCN2)C3=NSN=C3C=C1	2.4	3.02	11	8.44	2.4	3.04	0.7	0.50	0.38	0.48	1.04	0.93	0.38	0.48	-0.15	-0.30
1165	N[C@@H](CCC(=O)N[C@@H](C[S](=O)(=O)CCO[P](=O)(N(CCCl)CCCl)N(CCCl)CCCl)C(=O)N[C@@H](C(O)=O)C1=CC=CC=C1)C(O)=O	[NH3+][C@@H](CCC(=O)N[C@@H](C[S](=O)(=O)CCO[P](=O)(N(CCCl)CCCl)N(CCCl)CCCl)C(=O)N[C@@H](C([O-])=O)C1=CC=CC=C1)C([O-])=O	0.46	0.58	28.5	12.54	0.28	0.54			0.34	-0.24	1.45	1.10	-0.55	-0.27		
1166	COC1=C(OC)C=C(CNC[C@@H](O)COC2=CC=C3NC(=O)C=CC3=C2)C=C1	COC1=C(OC)C=C(C[NH2+]C[C@@H](O)COC2=CC3=C(NC(=O)C=C3)C=C2)C=C1	1.6	1.27	8.9	7.66	3.3	3.76			0.20	0.10	0.95	0.88	0.52	0.58		
1167	NC[C@H]1O[C@H](O[C@@H]2[C@@H](N)C[C@@H](N)[C@H](O[C@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](N)[C@H]3O)[C@H]2O)[C@H](N)C[C@@H]1O	[NH3+]C[C@H]1O[C@H](O[C@@H]2[C@@H]([NH3+])C[C@@H]([NH3+])[C@H](O[C@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]([NH3+])[C@H]3O)[C@H]2O)[C@H]([NH3+])C[C@@H]1O	0.23	0.24	1.6	1.41	2	2.83	1	0.72	0.64	-0.62	0.20	0.15	0.30	0.45	0.00	-0.14
1168	CC(N)C(=O)NC1=C(C)C=CC=C1C	C[C@H]([NH3+])C(=O)NC1=C(C)C=CC=C1C	1.8	2.28	2.2	3.45	12	6.80	0.87	0.73	0.26	0.36	0.34	0.54	1.08	0.83	-0.06	-0.13
1169	C[C@@H]1CCN(C[C@@H]1N(C)C2=NC=NC3=C2C=C[NH]3)C(=O)CC#N	C[C@@H]1CCN(C[C@@H]1N(C)C2=C3C=C[NH]C3=NC=N2)C(=O)CC#N	1.24	0.99	5.88	5.10			0.6	0.41	0.09	-0.01	0.77	0.71			-0.22	-0.39
1170	CCC1=CC=C(CC2=CC=C3CO[C@]4(O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O)C3=C2)C=C1	CCC1=CC=C(CC2=CC3=C(CO[C@]34O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O)C=C2)C=C1	0.63	0.79	2.07	2.96	4.7	4.82	0.46	0.19	0.20	-0.10	0.32	0.47	0.67	0.68	-0.34	-0.73
1171	CC1=CC=CC=C1OCC(O)CNCCOC2=CC=C(C=C2)C(N)=O	CC1=C(OC[C@H](O)C[NH2+]CCOC2=CC=C(C=C2)C(N)=O)C=CC=C1	4	3.18	14	10.64	2.5	3.96	0.089	0.11	0.60	0.50	1.15	1.03	0.40	0.60	-1.05	-0.96
1172	CCCCNC(=O)N[S](=O)(=O)C1=CC=C(C)C=C1	CCCCNC(=O)N=[S]([O-])(=O)C1=CC=C(C)C=C1	0.12	0.15	0.21	0.34	7	7.74	0.05	0.05	0.92	-0.82	-0.68	-0.46	0.85	0.89	-1.30	-1.28
1173	CC1=CC=C(C=C1)C(=O)C2=CC(=C(O)C(=C2)[N](=O)=O)O	CC1=CC=C(C=C1)C(=O)C2=CC(=C(O)C(=C2)O)[N+]([O-])=O	0.12	0.15	1.9	2.23	1.1	2.03	0.0012	0.0042	0.92	-0.82	0.28	0.35	0.04	0.31	-2.92	-2.38
1174	CC1=C(NC2=CC=CC=C2C(O)=O)C=CC=C1Cl	CC1=C(NC2=C(C=CC=C2)C([O-])=O)C=CC=C1Cl	0.16	0.20	2.37	1.45	2.15	3.04	0.003	0.01	0.80	-0.70	0.37	0.16	0.33	0.48	-2.52	-2.28
1175	CC1=CC=CC(=C1)N2CC(CO)OC2=O	CC1=CC(=CC=C1)N2C[C@H](CO)OC2=O	1.5	1.19	11	8.47	1.6	1.93	0.49	0.50	0.18	0.08	1.04	0.93	0.20	0.29	-0.31	-0.30
1176	CC(C)N(CC[C@H](C1=CC=CC=C1)C2=CC(=CC=C2O)C)C(C)C	CC(C)[NH+](CC[C@H](C1=CC=CC=C1)C2=C(O)C=CC(=C2)C)C(C)C	1.5	2.16	8.4	9.34	2.4	4.24	0.037	0.05	0.18	0.34	0.92	0.97	0.38	0.63	-1.43	-1.34
1177	CC1=C(C=CC=C1)C(=O)NC2=CC=C(C(=C2)C)C(=O)N3CCC[C@H](O)C4=C3C=CC(=C4)Cl	CC1=C(C=CC=C1)C(=O)NC2=CC(=C(C=C2)C(=O)N3CCC[C@@H](O)C4=C3C=CC(=C4)Cl)C	0.5	0.63	2.4	2.30	2.9	5.09	0.01	0.01	0.30	-0.20	0.38	0.36	0.46	0.71	-2.00	-1.93

1178	C[C@@H](O)[C@@H]1[C@H]2[C@@H](C)C(=C(N2C1=O)C(O)=O)S[C@H]3C[C@H](N(C)C3)C(=O)N4CC[C@@H](C4)NC(=O)CNC(N)=N	C[C@@H](O)[C@@H]1[C@H]2[C@H](C)C(=C(N2C1=O)C([O-])=O)S[C@H]3C[C@H]([NH+](C)C3)C(=O)N4CC[C@@H](C4)NC(=O)CNC(N)=[NH2+]	0.23	0.29	1.9	2.39	1.7	1.81	0.91	0.58	0.64	-0.54	0.28	0.38	0.23	0.26	-0.04	-0.24
1179	CCCN1C(=O)N(CCC)C2=C([NH]C(=N2)C34CCC(CCC(=O)O)(CC3)CC4)C1=O	CCCN1C(=O)N(CCC)C2=C([NH]C(=N2)C34CCC(CCC([O-])=O)(CC3)CC4)C1=O	0.76	0.76	1.8	2.05	16	10.34	0.1	0.07	0.12	-0.12	0.26	0.31	1.20	1.01	-1.00	-1.15
1180	CC1(C)O[C@@H]2CO[C@@]3(CO[S](N)(=O)=O)OC(C)(C)O[C@H]3[C@@H]2O1	CC1(C)O[C@@H]2CO[C@@]3(CO[S](N)(=O)=O)OC(C)(C)O[C@H]3[C@@H]2O1	0.8	0.89	0.27	0.77	34.8	12.37	0.72	0.59	0.10	-0.05	-0.57	-0.12	1.54	1.09	-0.14	-0.23
1181	CN(C)CCNC1=CC=C2[N](CCNCCO)N=C3C4=CN=CC=C4C(=O)C1=C23	C[NH+](C)CCNC1=C2C(=O)C3=C(C=NC=C3)C4=N[N](CC[NH2+]CCO)C(=C24)C=C1	57	41.95	27	16.14	45	25.81			1.76	1.62	1.43	1.21	1.65	1.41		
1182	CC[C@@]1(O)C(=O)OCC2=C1C=C3N(CC4=CC5=C(CN(C)C)C(=CC=C5N=C34)O)C2=O	CC[C@@]1(O)C(=O)OCC2=C1C=C3N(CC4=C3N=C5C=CC(=C(C[NH+](C)C)C5=C4)O)C2=O	1.8	1.43	13	9.39	2.3	2.95	0.65	0.35	0.26	0.16	1.11	0.97	0.36	0.47	-0.19	-0.45
1183	CC(C)NC(=O)N[S](=O)(=O)C1=CN=CC=C1NC2=CC=CC(=C2)C	CC(C)NC(=O)N=[S]([O-])(=O)C1=C(NC2=CC(=CC=C2)C)C=C[NH+]=C1	0.21	0.26	0.53	0.86	5.1	6.48	0.01	0.02	0.68	-0.58	-0.28	-0.07	0.71	0.81	-2.00	-1.72
1184	[Cl-;v1].[Cl-;v1].ON=CC1=CC=[N+](COC[N+]2=CC=C(C=C2)C=NO)C=C1	O\N=C/C1=CC=[N+](COC[N+]2=CC=C(C=C2)\C=N\O)C=C1	0.17	0.21	1.9	3.21	1.2	2.02			0.77	-0.67	0.28	0.51	0.08	0.31		
1185	CN1CCN(CC1)C2=NC(=NC(=C2)NC3=N[NH]C(=C3)C)SC4=CC=C(NC(=O)C5CC5)C=C4	C[NH+]1CCN(CC1)C2=NC(=NC(=C2)NC3=N[NH]C(=C3)C)SC4=CC=C(NC(=O)C5CC5)C=C4	5.1	4.05	18.4	10.62	8.4	9.15			0.71	0.61	1.26	1.03	0.92	0.96		
1186	COC1=CC2=C(CCN[C@]23CS[C@H]4[C@H]5[C@@H]6N(C)[C@@H](CC7=CC(=C(OC)C(=C67)O)C)[C@H](O)N5[C@@H](COC3=O)C8=C4O8=C9OCOC9=C(C)C(=C48)OC(C)=O)C=C1O	COC1=C(O)C=C2CC[NH2+][C@]3(CS[C@H]4[C@H]5[C@H]6[NH+](C)[C@@H](CC7=C6C(=C(OC)C(=C7)C)O)[C@H](O)[NH+]5[C@@H](COC3=O)C8=C4C(=C(C)C9=C8OCO9)OC(C)=O)C2=C1	25	12.01	12	7.63	44	29.15	0.06	0.08	1.40	1.08	1.08	0.88	1.64	1.46	-1.22	-1.07
1187	COC1=CC=CC(=C1)[C@@]2(O)CCCC[C@@H]2CN(C)C	COC1=CC(=CC=C1)[C@@]2(O)CCCC[C@@H]2C[NH+](C)C	2.8	2.13	6.5	7.97	5.8	5.95	0.8	0.68	0.45	0.33	0.81	0.90	0.76	0.77	-0.10	-0.17
1188	CN1C(=O)C(=C2N(C(=O)N(C3CC3)C(=O)C2=C1NC4=C(F)C=C(I)C=C4)C5=CC=CC(=C5)NC(C)=O)C	CN1C(=O)C(=C2N(C(=O)N(C3CC3)C(=O)C2=C1NC4=C(F)C=C(I)C=C4)C5=CC(=CC=C5)NC(C)=O)C	13.94	8.12	0.8	1.17	229	79.06	0.03	0.02	1.14	0.91	-0.10	0.07	2.36	1.90	-1.52	-1.62
1189	CCOC(=O)[C@H](CCC1=CC=CC=C1)N[C@@H](C)C(=O)N2[C@@H]3CCCC[C@@H]3C[C@H]2C(O)=O	CCOC(=O)[C@H](CCC1=CC=CC=C1)[NH2+][C@@H](C)C(=O)N2[C@H]3CCCC[C@@H]3C[C@H]2C([O-])=O	0.25	0.31	12.5	7.59	0.26	0.90	0.17	0.13	0.60	-0.50	1.10	0.88	-0.59	-0.04	-0.77	-0.89
1190	NC[C@@H]1CC[C@H](CC1)C(O)=O	[NH3+]CC1CCC(CC1)C([O-])=O	0.38	0.48	2.4	2.46	2.3	3.44	0.97	0.92	0.42	-0.32	0.38	0.39	0.36	0.54	-0.01	-0.03
1191	C[C@@H]([C@@H](O)C1=CC=C(O)C=C1)N2CCC(O)(CC2)C3=CC=CC=C3	C[C@@H]([C@@H](O)C1=CC=C(O)C=C1)[NH+]2CCC(O)(CC2)C3=CC=CC=C3	4.4	5.49	27	19.22	3.7	3.72	0.63	0.38	0.64	0.74	1.43	1.28	0.57	0.57	-0.20	-0.42
1192	ClC1=CC=CC(=C1)N2CCN(CCCN3N=C4C=CC=CN4C3=O)CC2	ClC1=CC(=CC=C1)N2CC[NH+](CCCN3N=C4C=CC=CN4C3=O)CC2	0.52	0.66	1.4	2.55	7.3	6.04	0.08	0.07	0.28	-0.18	0.15	0.41	0.86	0.78	-1.10	-1.15
1193	C[S](=O)(=O)OC[C@H](O)[C@@H](O)CO[S](C)(=O)=O	C[S](=O)(=O)OC[C@H](O)[C@@H](O)CO[S](C)(=O)=O	0.59	0.68	4.9	4.28	1.83	2.14			0.23	-0.17	0.69	0.63	0.26	0.33		
1194	CCCCC[C@@H](O)CC[C@@H]1[C@@H](O)C[C@H]2CC3=C(C[C@@H]12)C=CC=C3OCC(O)=O	CCCCC[C@@H](O)CC[C@H]1[C@@H](O)C[C@H]2CC3=C(OCC([O-])=O)C=CC=C3C[C@@H]12	0.23	0.29	10.7	7.31	0.82	1.50	0.09	0.05	0.64	-0.54	1.03	0.86	-0.09	0.18	-1.05	-1.26
1195	CC1(C)O[C@@H]2C[C@H]3[C@@H]4CCC5=CC(=O)C=C[C@]5(C)[C@@]4(F)[C@@H](O)C[C@]3(C)[C@@]2(O1)C(=O)CO	CC1(C)O[C@@H]2C[C@@H]3[C@H]4CCC5=CC(=O)C=C[C@]5(C)[C@]4(F)[C@@H](O)C[C@]3(C)[C@@]2(O1)C(=O)CO	1.4	1.65	9.4	7.69	2.4	2.81	0.2	0.14	0.15	0.22	0.97	0.89	0.38	0.45	-0.70	-0.87
1196	NC1=NC(=C2N=C(C3=CC=CC=C3)C(=NC2=N1)N)N	NC1=NC2=NC(=C(N=C2C(=N1)N)C3=CC=CC=C3)N	13	6.38	63	14.37	4.3	5.51	0.42	0.32	1.11	0.80	1.80	1.16	0.63	0.74	-0.38	-0.49
1197	NC(=S)NN=CC1=NC=CC=C1N	NC(=S)[N-]\N=C\C1=C(N)C=CC=N1	0.41	0.52	2.65	3.25	1.9	2.17			0.39	-0.29	0.42	0.51	0.28	0.34		
1198	CC1=NN=C2CN=C(C3=CC=CC=C3Cl)C4=CC(=CC=C4[N]12)Cl	CC1=NN=C2CN=C(C3=C(Cl)C=CC=C3)C4=C(C=CC(=C4)Cl)[N]12	0.58	1.22	3	2.05	2.7	4.39	0.1	0.06	0.24	0.09	0.48	0.31	0.43	0.64	-1.00	-1.25
1199	COC1=CC2=C(N)N=C(N=C2C(=C1OC)OC)N3CCN(CC3)C(=O)OCC(C)(C)O	COC1=C(OC)C(=C2N=C(N=C(N)C2=C1)N3CCN(CC3)C(=O)OCC(C)(C)O)OC	0.18	0.23	0.96	1.53	3.1	4.49			0.74	-0.64	-0.02	0.19	0.49	0.65		
1200	COC1=CC(=CC(=C1OC)OC)CC2=CN=C(N)N=C2N	COC1=C(OC)C(=CC(=C1)CC2=C(N)N=C(N)N=C2)OC	1.5	1.19	2.1	2.68	9.6	7.68	0.5	0.36	0.18	0.08	0.32	0.43	0.98	0.89	-0.30	-0.45
1201	COC1=CC(=CC(=C1OC)OC)NCC2=CC=C3N=C(N)N=C(N)C3=C2C	COC1=C(OC)C(=CC(=C1)NCC2=C(C)C3=C(N)N=C(N)N=C3C=C2)OC	0.77	0.97	0.77	1.66	17	12.59	0.05	0.06	0.11	-0.01	-0.11	0.22	1.23	1.10	-1.30	-1.24

1202	CC(CN(C)C)CN1C2=CC=CC=C2CCC3=CC=CC=C13	C[C@H](CN1C2=C(CCC3=C1C=CC=C3)C=CC=C2)C[NH+](C)C	16	7.32	16	12.62	23	18.78	0.051	0.11	1.20	0.86	1.20	1.10	1.36	1.27	-1.29	-0.96
1203	CN1C2CCC1CC(C2)=C3C4=CC=CC=C4CSC5=C3C=CC=C5	C[NH+]1[C@@H]2CC[C@H]1C[C](C2)=[C]3C4=C(CSC5=C3C=CC=C5)C=CC=C4	11.85	9.41	4.98	6.25	29.8	23.56			1.07	0.97	0.70	0.80	1.47	1.37		
1204	CN1[C@@H]2CC[C@H]1CC(C2)OC(=O)C3=C[NH]C4=CC=CC=C34	C[NH+]1[C@@H]2CC[C@H]1CC(C2)OC(=O)C3=C[NH]C4=C3C=CC=C4	9.7	7.71	26	20.46	5.6	4.73			0.99	0.89	1.41	1.31	0.75	0.67		
1205	CCCC[C@@H]1CC(=O)[C@]2(O)O[C@@H]3[C@@H](NC)[C@@H](O)[C@@H](NC)[C@H](O)[C@H]3O[C@@H]2O1	CCCC[C@@H]1CC(=O)[C@]2(O)O[C@@H]3[C@@H]([NH2+]C)[C@@H](O)[C@@H]([NH2+]C)[C@@H](O)[C@@H]3O[C@@H]2O1	0.7	0.56	1.7	1.81	11	7.48	0.65	0.68	0.15	-0.25	0.23	0.26	1.04	0.87	-0.19	-0.17
1206	OC(C(=O)OC1C[C@@H]2CCC(C1)[N+]23CCCC3)(C4=CC=CC=C4)C5=CC=CC=C5	OC(C(=O)OC1C[C@H]2CC[C@@H](C1)[N+]23CCCC3)(C4=CC=CC=C4)C5=CC=CC=C5	5.1	1.44	13.9	12.20	5	5.57	0.33	0.22	0.71	0.16	1.14	1.09	0.70	0.75	-0.48	-0.67
1207	N[C@@H]1[C@H]2CN(C[C@@H]12)C3=NC4=C(C=C3F)C(=O)C(=CN4C5=CC=C(F)C=C5F)C(O)=O	[NH3+]C1[C@H]2CN(C[C@@H]12)C3=C(F)C=C4C(=O)C(=CN(C5=C(F)C=C(F)C=C5)C4=N3)C([O-])=O	1.3	1.22	1.4	1.90	11	8.67	0.24	0.23	0.11	0.09	0.15	0.28	1.04	0.94	-0.62	-0.63
1208	NC1=NC(=O)N(C=C1)[C@@H]2CO[C@H](CO)O2	NC1=NC(=O)N(C=C1)[C@@H]2CO[C@H](CO)O2	1	0.85	2.4	3.33	82	18.82			0.00	-0.07	0.38	0.52	1.91	1.27		
1209	COC1=CC2=C3[C@@H](CC4=CC=C(O)C(=C4)OC5=CC6=C(CCN(C)[C@H]6CC7=CC=C(OC3=C1O)C=C7)C=C5OC)[N+](C)(C)CC2	COC1=C(O)C2=C3[C@@H](CC4=CC(=C(O)C=C4)OC5=C(OC)C=C6CC[NH+](C)[C@@H](CC7=CC=C(O2)C=C7)C6=C5)[N+](C)(C)CCC3=C1	0.45	0.57	3.4	4.39	2	4.65	0.58	0.29	0.35	-0.25	0.53	0.64	0.30	0.67	-0.24	-0.54
1210	C[C@@H]1CN[C@@H](C2CC2)C(=O)N(C)[C@H](C)C(=O)N[C@H](CC3=CC=C(F)C=C3)C(=O)NCCCC4=CC=CC=C4O1	C[C@@H]1C[NH2+][C@@H](C2CC2)C(=O)N(C)[C@H](C)C(=O)N[C@H](CC3=CC=C(F)C=C3)C(=O)NCCCC4=C(O1)C=CC=C4	0.1	0.13	0.1	0.49	11.8	9.70	0.01	0.02	1.00	-0.89	-1.00	-0.31	1.07	0.99	-2.00	-1.68
1211	C[S](=O)(=O)N(CCO)C1=C(Cl)C(=CC2=C1NC(=O)C(=O)N2)Cl	C[S](=O)(=O)N(CCO)C1=C2NC(=O)C(=O)NC2=CC(=C1Cl)Cl	0.8	0.84	6	5.06	1.4	2.14	0.13	0.14	0.10	-0.08	0.78	0.70	0.15	0.33	-0.89	-0.87
1212	OC(C1=CC=CC=C1)(C2=CC=CC=C2)C34CC[N+](CCOCC5=CC=CC=C5)(CC3)CC4	OC(C1=CC=CC=C1)(C2=CC=CC=C2)C34CC[N+](CCOCC5=CC=CC=C5)(CC3)CC4	1.23	1.55	35.95	14.49	19	14.35	0.11	0.07	0.09	0.19	1.56	1.16	1.28	1.16	-0.96	-1.18
1213	COC1=CC=CC=C1N2CCN(CCCNC3=CC(=O)N(C)C(=O)N3C)CC2	COC1=C(C=CC=C1)N2CC[NH+](CCCNC3=CC(=O)N(C)C(=O)N3C)CC2	0.75	0.94	3.1	4.10	3.5	3.52			0.12	-0.02	0.49	0.61	0.54	0.55		
1214	C[C@@H]1CC[C@@]2(CC[C@@]3(C)C(=CC[C@@H]4[C@@]5(C)CC[C@H](O)C(C)(C)[C@@H]5CC[C@@]34C)[C@@H]2[C@H]1C)C(O)=O	C[C@@H]1CC[C@@]2(CC[C@@]3(C)C(=CC[C@@H]4[C@@]5(C)CC[C@H](O)C(C)(C)[C@@H]5CC[C@@]34C)[C@@H]2[C@H]1C)C([O-])=O	0.54	0.58	3.87	2.46	4.8	5.42			0.27	-0.24	0.59	0.39	0.68	0.73		
1215	OB1O[C@@H](CC[C@@H]1NC(=O)CC2=CC=CS2)CC(O)=O	OB1O[C@@H](CC[C@@H]1NC(=O)CC2=CC=CS2)CC([O-])=O	0.29	0.37	2.94	3.81	1.34	1.40	0.67	0.51	0.54	-0.44	0.47	0.58	0.13	0.15	-0.17	-0.29
1216	COC1=C(OC)C=C2[C@H]3C[C@@H](OC(=O)[C@@H](N)C(C)C)[C@H](CC(C)C)CN3CCC2=C1	COC1=C(OC)C=C2[C@H]3C[C@@H](OC(=O)[C@@H]([NH3+])C(C)C)[C@H](CC(C)C)C[NH+]3CCC2=C1	1.31	1.65	1.71	3.28	18	9.96	0.01	0.03	0.12	0.22	0.23	0.52	1.26	1.00	-2.00	-1.57
1217	CC1=C(C2=CC=C(C=C2)[S](N)(=O)=O)C(=NO1)C3=CC=CC=C3	CC1=C(C2=CC=C(C=C2)[S](N)(=O)=O)C(=NO1)C3=CC=CC=C3	0.75	0.80	1.4	1.24	7.4	7.65	0.02	0.02	0.12	-0.10	0.15	0.09	0.87	0.88	-1.70	-1.67
1218	CCCC(CCC)C(O)=O	CCCC(CCC)C([O-])=O	0.14	0.28	0.16	0.58	12	5.89	0.08	0.11	0.85	-0.56	-0.80	-0.24	1.08	0.77	-1.10	-0.96
1219	CCCCC(=O)N(CC1=CC=C(C=C1)C2=CC=CC=C2C3=NN=N[NH]3)[C@@H](C(C)C)C(O)=O	CCCCC(=O)N(CC1=CC=C(C=C1)C2=C(C=CC=C2)C3=NN=N[N-]3)[C@@H](C(C)C)C([O-])=O	0.22	0.28	0.49	0.74	9.5	7.24	0.04	0.03	0.66	-0.56	-0.31	-0.13	0.98	0.86	-1.40	-1.53
1220	CCCC1=NC(=C2[N]1N=C(NC2=O)C3=CC(=CC=C3OCC)[S](=O)(=O)N4CCN(CC)CC4)C	CCCC1=NC(=C2[N]1N=C(NC2=O)C3=C(OCC)C=CC(=C3)[S](=O)(=O)N4CC[NH+](CC)CC4)C	3	1.55	13	9.60	4.5	4.02	0.05	0.04	0.48	0.19	1.11	0.98	0.65	0.60	-1.30	-1.39
1221	CC(=O)O[C@H]1C[C@@H]2CC[C@@H]3[C@H]([C@@H]([C@@]4(C)[C@H]3C[C@@H]4OC(=O)[N+]5(C)CCCCC5)[C@@]2(C)C[C@@H]1N6CCCCC6	CC(=O)O[C@H]1C[C@@H]2CC[C@H]3[C@H](CC[C@@]4(C)[C@H]3C[C@@H]([C@@H]4OC(C)=O)[N+]5(C)CCCCC5)[C@@]2(C)C[C@@H]1[NH+]6CCCCC6	0.3	0.38	4.5	3.86	1.4	2.14	0.25	0.21	0.52	-0.42	0.65	0.59	0.15	0.33	-0.60	-0.68
1222	COC1=CC=C(C=C1)C(CN(C)C)C2(O)CCCCC2	COC1=CC=C(C=C1)[C@@H](C[NH+](C)C)C2(O)CCCCC2	4.4	3.16	14	9.36	5	5.91	0.73	0.59	0.64	0.50	1.15	0.97	0.70	0.77	-0.14	-0.23
1223	COC1=CC=C(CCCN(C)CCCC(C#N)(C(C)C)C2=CC=C(OC)C(=C2)OC)C=C1OC	COC1=C(OC)C=C(CC[NH+](C)CCC[C@@](C#N)(C(C)C)C2=CC(=C(OC)C=C2)OC)C=C1	3.7	3.10	18	13.21	2.8	3.52	0.093	0.05	0.57	0.49	1.26	1.12	0.45	0.55	-1.03	-1.30
1224	CN(C)C(=O)CCS[C@H](SCCC(O)=O)C1=CC=CC(=C1)C=CC2=CC=C3C=CC(=CC3=N2)Cl	CN(C)C(=O)CCS[C@H](SCCC([O-])=O)C1=CC(=CC=C1)\C=C\C2=NC3=CC(=CC=C3C	0.11	0.14	0.68	0.97	2.3	3.00	0.0004	0.0017	0.96	-0.86	-0.17	-0.01	0.36	0.48	-3.40	-2.78

		=C2)Cl																	
1225	COC1=C(OC)C=C(CCO[C@@H]2CCCC[C@H]2N3CC[C@@H](O)C3)C=C1	COC1=C(OC)C=C(CCO[C@@H]2CCCC[C@H]2[NH+]3CC[C@@H](O)C3)C=C1	1.8	1.47	8.29	7.14	3.13	4.30			0.26	0.17	0.92	0.85	0.50	0.63		
1226	COC(=O)CCC1=C(C)C2=NC1=CC3=C(CCC(O)=O)C(=C([NH]3)C=C4N=C(C=C5[NH]C(=C2)[C@]6(C)[C@H](C(=O)OC)C(=CC=C56)C(=O)OC)C(=C4C=C)C)C	COC(=O)CCC1=C2[NH]C(=C1C)C=C3NC(=CC4=NC(=CC5NC(=C2)C(=C5C)CCC([O-])=O)C(=C4C)C=C)C6=CC=C([C@@H](C(=O)OC)[C@]36C)C(=O)OC	0.63	0.79	1.6	1.92	5.6	5.52			0.20	-0.10	0.20	0.28	0.75	0.74		
1227	COC(=O)CCC1=C2[NH]C(=C1C)C=C3N=C(C=C4[NH]C(=CC5=NC(=C2)C(=C5C)CCC(O)=O)[C@]6(C)[C@H](C(=O)OC)C(=CC=C46)C(=O)OC)C(=C3C=C)C	COC(=O)CCC1=C(C)C2NC1=CC3=C(CCC([O-])=O)C(=C([NH]3)C=C4NC(=CC5=NC(=C2)C(=C5C)C=C)C6=CC=C([C@@H](C(=O)OC)[C@@]46C)C(=O)OC)C	0.51	0.81	1.73	1.90	6.06	5.11			0.29	-0.09	0.24	0.28	0.78	0.71		
1228	C[C@@H](N(C)C(=O)N1CCNC[C@@H]1C2=CC=C(F)C=C2C)C3=CC(=CC(=C3)C(F)(F)F)C(F)(F)F	C[C@@H](N(C)C(=O)N1CC[NH2+]C[C@@H]1C2=CC(C)C=C(F)C=C2)C3=CC(=CC(=C3)C(F)(F)F)C(F)(F)F	3.8	3.02	5.09	4.49	10.03	13.55			0.58	0.48	0.71	0.65	1.00	1.13		
1229	OCC1=CC(=CC=C1O)[C@@H](O)CNCCCCCCOCCOCC2=C(Cl)C=CC=C2Cl	OCC1=C(O)C=CC(=C1)[C@@H](O)C[NH2+]CCCCCCOCCOCC2=C(Cl)C=CC=C2Cl	2.38	3.00	25.7	15.67	2.4	3.25	0.06	0.05	0.38	0.48	1.41	1.19	0.38	0.51	-1.22	-1.29
1230	NC(=O)C1=CC2=C(O1)C=CC(=C2)N3CCN(CCCCC4=C[NH]C5=C4C=C(C=C5)C#N)CC3	NC(=O)C1=CC2=C(O1)C=CC(=C2)N3CC[NH+](CCCC4=C[NH]C5=C4C=C(C=C5)C#N)CC3	4.85	5.30	3.76	4.25	15.66	13.14	0.03	0.02	0.69	0.72	0.58	0.63	1.19	1.12	-1.52	-1.73
1231	O[C]12C[C@@H]3[CH2][C@H](C1)C[C](C3)(C2)NCC(=O)N4CCC[C@@H]4C#N	O[C]12C[C@H]3[CH2][C@@H](C1)C[C](C3)(C2)[NH2+]CC(=O)N4CCC[C@@H]4C#N	1.03	1.30	9.9	5.20	1.67	2.56	0.89	0.72	0.01	0.11	1.00	0.72	0.22	0.41	-0.05	-0.15
1232	CCOC1=CC=CC=C1OCC2CNCCO2	CCOC1=C(OC[C@H]2C[NH2+]CCO2)C=CC=C1	0.73	1.06	2.1	3.64	4.1	3.69			0.14	0.02	0.32	0.56	0.61	0.57		
1233	CC[C@]1(O)C[C@@H]2CN(CCC3=C([NH]C4=CC=CC=C34)[C@@](C2)(C(=O)OC)C5=CC6=C(C=C5OC)N(C)[C@H]7[C@](O)([C@H](OC(C)=O)[C@]8(CC)C=CCN9CC[C@]67[C@H]89)C(=O)OC)C1	CC[C@]1(O)C[C@H]2C[NH+](CCC3=C([NH]C4=CC=CC=C4)[C@@](C2)(C(=O)OC)C5=C(OC)C=C6N(C)[C@H]7[C@](O)([C@@H](OC(C)=O)[C@]8(CC)C=CC[NH+]9CC[C@]7([C@H]89)C6=C5)C(=O)OC)C1	28	12.62	3.1	4.02	67	40.09	0.14	0.16	1.45	1.10	0.49	0.60	1.83	1.60	-0.85	-0.79
1234	CC[C@]1(O)C[C@@H]2CN(CCC3=C([NH]C4=CC=CC=C34)[C@@](C2)(C(=O)OC)C5=CC6=C(C=C5OC)N(C=O)[C@H]7[C@](O)([C@H](OC(C)=O)[C@]8(CC)C=CCN9CC[C@]67[C@H]89)C(=O)OC)C1	CC[C@]1(O)C[C@@H]2C[NH+](CCC3=C([NH]C4=C3C=CC=C4)[C@@](C2)(C(=O)OC)C5=C(OC)C=C6N(C=O)[C@H]7[C@](O)([C@H](OC(C)=O)[C@]8(CC)C=CC[NH+]9CC[C@@]7([C@H]89)C6=C5)C(=O)OC)C1	2.4	3.02	2	2.97	23	28.17	0.4	0.25	0.38	0.48	0.30	0.47	1.36	1.45	-0.40	-0.60
1235	CC[C@]1(O)C[C@H]2CN(CCC3=C([NH]C4=CC=CC=C34)[C@@](C2)(C(=O)OC)C5=CC6=C(C=C5OC)N(C)[C@H]7[C@](O)([C@H](O)[C@]8(CC)C=CCN9CC[C@]67[C@H]89)C(N)=O)C1	CC[C@]1(O)C[C@H]2C[NH+](CCC3=C([NH]C4=C3C=CC=C4)[C@@](C2)(C(=O)OC)C5=C(OC)C=C6N(C)[C@H]7[C@](O)([C@H](O)[C@]8(CC)C=CC[NH+]9CC[C@]7([C@H]89)C6=C5)C(N)=O)C1	5	3.97	2.2	2.93	35	24.10			0.70	0.60	0.34	0.47	1.54	1.38		
1236	CCC1=C[C@@H]2CN(C1)CC3=C([NH]C4=CC=CC=C34)[C@@](C2)(C(=O)OC)C5=CC6=C(C=C5OC)N(C)[C@H]7[C@](O)([C@H](OC(C)=O)[C@]8(CC)C=CCN9CC[C@]67[C@H]89)C(=O)OC	CCC1=C[C@@H]2C[NH+](C1)CC3=C([NH]C4=C3C=CC=C4)[C@@](C2)(C(=O)OC)C5=C(OC)C=C6N(C)[C@H]7[C@](O)([C@H](OC(C)=O)[C@@]8(CC)C=CC[NH+]9CC[C@]7([C@H]89)C6=C5)C(=O)OC	23	5.52	20	11.89	26	21.87	0.87	0.36	1.36	0.74	1.30	1.08	1.41	1.34	-0.06	-0.44
1237	CCOC(=O)C1=C[C@]2(CC)CCCN3CCC4=C([C@H]23)[N]1C5=C4C=CC=C5	CCOC(=O)C1=C[C@]2(CC)CCC[NH+]3CCC4=C([C@H]23)[N]1C5=CC=CC=C45	2.08	2.62	6.1	8.11	4.83	5.74	0.02	0.03	0.32	0.42	0.79	0.91	0.68	0.76	-1.70	-1.48
1238	COC1=CC2=C(C=C1)N=CC=C2CCC[C@H]3CCNC[C@H]3C=C	COC1=CC2=C(CCC[C@H]3CC[NH2+]C[C@H]3C=C)C=CN=C2C=C1	24.4	4.41	26	14.36	12.1	10.08			1.39	0.64	1.41	1.16	1.08	1.00		
1239	C[S](=O)(=O)C1=CC(=C(C=C1)C(=O)NC2=CC(=C(Cl)C=C2)C3=CC=CC=N3)Cl	C[S](=O)(=O)C1=CC(=C(C=C1)C(=O)NC2=CC(=C(Cl)C=C2)C3=NC=CC=C3)Cl	0.23	0.29	0.01	0.09	245	58.60	0.01	0.01	0.64	-0.54	-2.00	-1.04	2.39	1.77	-2.00	-1.94
1240	CC[C@H]1N(C(C)C)C2=C(C=NC(=N2)NC3=C(OC)C=C(C(=C3)C(=O)N[C@H]4CC[C@@H](CC4)N5CCN(CC5)CC6CC6)N(C)C1=O	CC[C@H]1N(C(C)C)C2=C(C=NC(=N2)NC3=C(OC)C=C(C=C3)C(=O)NC4CCC(CC4)[NH+]5CC[NH+](CC5)CC6CC6)N(C)C1=O	80.5	35.83	11.6	9.34	113	46.26			1.91	1.55	1.06	0.97	2.05	1.67		
1241	CCOC(=O)N[C@@H]1CC[C@@H]2[C@@H](C1)C[C@@H]3[C@@H]([C@@H](C)OC3=O)[C@H]2C=CC4=CC=C(C=N4)C5=CC=CC(=C5)F	CCOC(=O)N[C@@H]1CC[C@@H]2[C@H](C1)C[C@@H]3[C@@H]([C@@H](C)OC3=O)[C@H]2\C=C/C4=NC=C(C=C4)C5=CC(=CC=C5)F	3.74	2.97	0.34	0.98	149	39.47	0.01	0.01	0.57	0.47	-0.47	-0.01	2.17	1.60	-2.00	-1.88
1242	C[C@@H](C1=NC=NC=C1F)[C@](O)(C[N]2	C[C@@H](C1=C(F)C=NC=N1)[C@](O)(C[N]2C=NC	2.2	1.75	8.3	5.45	5.6	6.57	0.42	0.25	0.34	0.24	0.92	0.74	0.75	0.82	-0.38	-0.60

	C=NC=N2)C3=CC=C(F)C=C3F	=N2)C3=C(F)C=C(F)C=C3															
1243	ONC(=O)CCCCCCC(=O)NC1=CC=CC=C1	[O-]NC(=O)CCCCCCC(=O)NC1=CC=CC=C1	0.5	0.61	28	10.03	0.76	1.39	0.29	0.20	0.30	-0.22	1.45	1.00	-0.12	0.14	-0.54	-0.69
1244	CC1=CC=C(SC2=C(C=CC=C2)N3CCNCC3)C(=C1)C	CC1=CC(=C(SC2=C(C=CC=C2)N3CC[NH2+]CC3)C=C1)C	35.3	16.73	5.8	7.42	72	31.61	0.02	0.03	1.55	1.22	0.76	0.87	1.86	1.50	-1.70	-1.54
1245	CN[C@H]1CN(C[C@@H]1OC)C2=CC=C3C(=O)C(=CN(C4=NC=CS4)C3=N2)C(O)=O	C[NH2+][C@H]1CN(C[C@@H]1OC)C2=NC3=C(C=C2)C(=O)C(=CN3C4=NC=CS4)C([O-])=O	1.46	1.16	0.79	1.36	25.5	13.82			0.16	0.06	-0.10	0.13	1.41	1.14		
1246	CC(=O)CC(C1=CC=CC=C1)C2=C(O)C3=CC=CC=C3OC2=O	CC(=O)C[C@H](C1=CC=CC=C1)C2=C([O-])C3=C(OC2=O)C=CC=C3	0.13	0.16	0.055	0.13	29	17.21	0.015	0.02	0.89	-0.79	-1.26	-0.90	1.46	1.24	-1.82	-1.66
1247	C[C@H]1CCC2=C3N1C=C(C(O)=O)C(=O)C3=CC(=C2N4CCC(O)CC4)F	C[C@H]1CCC2=C3N1C=C(C([O-])=O)C(=O)C3=CC(=C2N4CCC(O)CC4)F	0.25	0.31	0.54	1.07	6.04	5.92			0.60	-0.50	-0.27	0.03	0.78	0.77		
1248	OC(CNCCNC(=O)N1CCOCC1)COC2=CC=C(O)C=C2	O[C@H](C[NH2+]CCNC(=O)N1CCOCC1)COC2=CC=C(O)C=C2	0.64	0.81	3	4.26	7.7	4.78	0.97	0.85	0.19	-0.09	0.48	0.63	0.89	0.68	-0.01	-0.07
1249	CC(OC1=CC=C(OC2=CN=C3C=CC(=CC3=N2)Cl)C=C1)C(O)=O	C[C@@H](OC1=CC=C(OC2=NC3=CC(=CC=C3N=C2)Cl)C=C1)C([O-])=O	0.19	0.24	0.05	0.18	48.2	17.35	0.0036	0.01	0.72	-0.62	-1.30	-0.74	1.68	1.24	-2.44	-2.20
1250	CN(C)CCNC(=O)C1=CC=CC2=C1N=C3C=CC=CC3=C2	C[NH+](C)CCNC(=O)C1=C2N=C3C=CC=CC3=CC2=CC=C1	3.41	3.04	16.31	11.60	2.08	3.19	0.03	0.07	0.53	0.48	1.21	1.06	0.32	0.50	-1.52	-1.19
1251	O[C@@H]1CO[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O	O[C@@H]1CO[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O	0.23	0.29	2.38	2.51	1.2	1.66			0.64	-0.54	0.38	0.40	0.08	0.22		
1252	CC1=CC=C(C=C1C(O)C2=C(C)C=C(C=C2C)C(O)=O)[N]3C=CN=C3	CC1=C(C=C(C=C1)[N]2C=CN=C2)[C@@H](O)C3=C(C)C=C(C=C3C)C([O-])=O	0.37	0.47	2.91	2.14	2.37	3.20			0.43	-0.33	0.46	0.33	0.37	0.51		
1253	C[N]1C=C(C(=O)[C@@H]2CCC3=C(C2)N=C[NH]3)C4=C1C=CC=C4	C[N]1C=C(C(=O)[C@@H]2CCC3=C(C2)N=C[NH]3)C4=C1C=CC=C4	2.65	1.77	7.03	6.89	4.94	4.09			0.42	0.25	0.85	0.84	0.69	0.61		
1254	COCC[N]1C(=[N+](CC2=CN=CC=N2)C3=C1C(=O)C4=CC=CC=C4C3=O)C	COCC[N]1C(=[N+](CC2=NC=CN=C2)C3=C1C(=O)C4=C(C=CC=C4)C3=O)C	23.7	11.20	11.3	8.36	24.8	15.53			1.37	1.05	1.05	0.92	1.39	1.19		
1255	COC(=O)[C@H]1[C@@H](O)CC[C@H]2CN3CCC4=C([NH]C5=CC=CC=C45)[C@@H]3C[C@@H]12	COC(=O)[C@H]1[C@@H](O)CC[C@H]2C[NH+]3CCC4=C([NH]C5=C4C=CC=C5)[C@@H]3C[C@@H]12	0.48	0.60	14.6	10.15	1.5	2.10	0.2	0.24	0.32	-0.22	1.16	1.01	0.18	0.32	-0.70	-0.63
1256	NC1=NC(=O)N(C=C1)[C@H]2CC[C@@H](CO)O2	NC1=NC(=O)N(C=C1)[C@H]2CC[C@@H](CO)O2	0.54	1.29	5.6	4.95	1.2	1.98	0.96	0.94	0.27	0.11	0.75	0.69	0.08	0.30	-0.02	-0.03
1257	CCN(C(C)=O)C1=CC=CC(=C1)C2=CC=NC3=C(C=N[N]23)C#N	CCN(C(C)=O)C1=CC(=CC=C1)C2=CC=NC3=C(C=N[N]23)C#N	1.3	1.03	16	7.40	1.1	1.85	0.4	0.24	0.11	0.01	1.20	0.87	0.04	0.27	-0.40	-0.62
1258	COC1=C(C)C=C2C[C@H]3[C@H](O)N4[C@@H](CC5=C([C@@H]4CNC(=O)C=CC6=CC=CC=C6)C(F)(F)F)C7=C(OCO7)C(=C5OC(C)=O)C)[C@H](N3C)C2=C1O	COC1=C(O)C2=C(C[C@H]3[C@H](O)[NH+]4[C@@H](CC5=C([C@@H]4CNC(=O)\C=C/C6=CC(=CC=C6)C(F)(F)F)C7=C(OCO7)C(=C5OC(C)=O)C)[C@H]2[NH+]3C)C=C1C	12.6	10.01	12	8.86	22.2	20.71			1.10	1.00	1.08	0.95	1.35	1.32		
1259	CC(=O)N[C@@H]1[C@@H](NC(N)=N)C=C(O[C@H]1[C@H](O)[C@H](O)CO)C(O)=O	CC(=O)N[C@@H]1[C@H](NC(N)=[NH2+])C=C(O[C@H]1[C@H](O)[C@H](O)CO)C([O-])=O	0.23	0.29	1.6	1.99	1.7	1.80	0.86	0.80	0.64	-0.54	0.20	0.30	0.23	0.25	-0.07	-0.09
1260	COC1=CC=C(CCN(C)CCCN2CCC3=CC(=C(OC)C=C3CC2=O)OC)C=C1OC	COC1=C(OC)C=C(CC[NH+](C)CCCN2CCC3=C(CC2=O)C=C(OC)C(=C3)OC)C=C1	1.6	1.30	8.4	7.92	2.8	2.97			0.20	0.11	0.92	0.90	0.45	0.47		
1261	CC1=NC(=O)C2=CC(=C(C)C=C2N1)CN(CC#C)C3=CC=C(C(=C3)F)C(=O)N[C@@H](CCC4=NN=N[NH]4)C(O)=O	CC1=NC(=O)C2=C(N1)C=C(C)C(=C2)CN(CC#C)C3=CC(=C(C=C3)C(=O)N[C@@H](CCC4=NN=N[N-]4)C([O-])=O)F	0.53	0.67	0.29	0.62	78.5	28.10	0.01	0.02	0.28	-0.18	-0.54	-0.21	1.89	1.45	-2.00	-1.67
1262	CC1=CN([C@H]2C[C@H](N=[N+]=[N-])[C@@H](CO)O2)C(=O)NC1=O	CC1=CN([C@H]2C[C@H](N=[N+]=[N-])[C@@H](CO)O2)C(=O)NC1=O	1.8	1.43	25	12.74	1.3	1.66	0.8	0.75	0.26	0.16	1.40	1.11	0.11	0.22	-0.10	-0.13
1263	CN(C)CC=C(C1=CC=C(Br)C=C1)C2=CC=CN=C2	C[NH+](C)C\C=C(/C1=CC=C(Br)C=C1)C2=CN=CC=C2	6.8	5.40	13.8	9.85	6.26	7.59	0.086	0.10	0.83	0.73	1.14	0.99	0.80	0.88	-1.07	-1.00
1264	ClC1=CC2=C(CC(=O)N2)C=C1CCN3CCN(CC3)C4=NSC5=CC=CC=C45	ClC1=C(CC[NH+]2CCN(CC2)C3=NSC4=CC=CC=C34)C=C5CC(=O)NC5=C1	1	1.26	5.1	5.37	3.1	5.21	0.0012	0.0046	0.00	0.10	0.71	0.73	0.49	0.72	-2.92	-2.34
1265	OC(C[N]1C=CN=C1)([P](O)(O)=O)[P](O)(O)=O	OC(C[N]1C=CN=C1)([P]([O-])([O-])=O)[P]([O-])([O-])=O	0.6	0.76	2.2	2.01	11	12.98	0.78	0.62	0.22	-0.12	0.34	0.30	1.04	1.11	-0.11	-0.20
1266	CN(C)CCC1=C[NH]C2=CC=C(C[C@H]3COC(=O)N3)C=C12	C[NH+](C)CCC1=C[NH]C2=C1C=C(C[C@H]3COC(=O)N3)C=C2	1.8	2.28	6.7	9.35	3.6	3.58	0.75	0.67	0.26	0.36	0.83	0.97	0.56	0.55	-0.12	-0.17
1267	CN(C)C(=O)CC1=C(N=C2C=CC(=C[N]12)C)C3=CC=C(C)C=C3	CN(C)C(=O)CC1=C(N=C2C=CC(=C[N]12)C)C3=CC=C(C)C=C3	0.54	0.68	4.3	4.13	1.7	2.54	0.08	0.07	0.27	-0.17	0.63	0.62	0.23	0.40	-1.10	-1.13
1268	OC(=O)CN1C(=O)C(=O)NC2=CC(=C(C=C12)[N]3C=CN=C3)[N](=O)=O	[O-]C(=O)CN1C(=O)C(=O)NC2=C1C=C([N]3C=CN=C3)C=C2[N+]([O-])=O	0.19	0.24	5.3	3.45	0.78	1.23			0.72	-0.62	0.72	0.54	-0.11	0.09		

1269	NC(=N)NC(=O)C1=C(C2CC2)[N](N=C1)C3=C4C=CC=NC4=CC=C3	C(=C2)[N+]([O-])=O NC(=N)NC(=O)C1=C(C2CC2)[N](N=C1)C3=C4C=CC=NC4=CC=C3	1.7	1.50	21	10.72	2	3.40	0.34	0.27	0.23	0.18	1.32	1.03	0.30	0.53	-0.47	-0.57
1270	CN1CCN(CC1)C(=O)OC2N(C(=O)C3=NC=CN=C23)C4=CC=C(Cl)C=N4	C[NH+]1CCN(CC1)C(=O)O[C@@H]2N(C(=O)C3=C2N=CC=N3)C4=NC=C(Cl)C=C4	1.3	1.57	3.3	3.84	5.2	7.49	0.2	0.18	0.11	0.20	0.52	0.58	0.72	0.87	-0.70	-0.75

[a] Column 2 lists the original SMILES notations of 1270 drugs, collected by Lombardo et al.[1] and have been standardized using the Online SMILES Translator and Structure File Generator on the National Cancer Institute's website (https://cactus.nci.nih.gov/translate/).

[b] Column 3 displays the final used SMILES notations of 1270 drugs, whose structures have been cleaned up by the molecule wash module in Molecular Operating Environment (MOE)[2] software.

Table S2. Numbers of Compounds Applied for Four Pharmacokinetic Parameters Modeling

parameter	original	null value	final	training set	test set
VD_{ss}	1270	34	1236	988	248
CL	1270	2	1268	1014	254
$t_{1/2}$	1270	17	1253	1002	251
f_u	1270	392	878	702	176

Table S3. Statistical Analysis for 209 Important Variables in VD_{ss} Prediction

class	number	name
2D Molecular Descriptors	**67**	
Physical Properties	6	apol, bpol, FCharge, h_logD, logP(o/w), logS
Hueckel Theroy Descriptors	10	h_ema, h_emd, h_emd_C, h_log_dbo, h_log_pbo, h_logS, h_pKa, h_pKb, h_pstates, h_pstrain
Subdivided Surface Areas	15	SlogP_VSA0, SlogP_VSA1, SlogP_VSA2, SlogP_VSA3, SlogP_VSA4, SlogP_VSA7, SlogP_VSA8, SlogP_VSA9, SMR_VSA0, SMR_VSA1, SMR_VSA2, SMR_VSA3, SMR_VSA4, SMR_VSA5, SMR_VSA7
Atom Counts and Bond Counts	11	a_aro, a_nO, a_nS, b_1rotN, b_double, chiral, lip_acc, lip_don, lip_violation, opr_brigid, opr_nrot
Kier & Hall Connectivity and Kappa Shape Indices	1	KierA3
Adjacency and Distance Matrix Descriptors	3	balabanJ, diameter, GCUT_SLOGP_0
Pharmacophore Feature Descriptors	7	a_acc, a_acid, a_base, a_don, vsa_base, vsa_don, vsa_other
Partial Charge Descriptors	14	PEOE_VSA+1, PEOE_VSA+3, PEOE_VSA+4, PEOE_VSA+6, PEOE_VSA 0, PEOE_VSA 1, PEOE_VSA 2,PEOE_VSA 5, PEOE_VSA 6, PEOE_VSA_NEG, PEOE_VSA_PPOS, Q_VSA_PNEG, PC+, PC
3D Molecular Descriptors	**26**	
Potential Energy Descriptors	1	E_ele
Surface Area, Volume and Shape Descriptors	18	PmiX, pmiY, rgyr, std_dim2, vsurf_CP, vsurf_CW3, vsurf_D1, vsurf_D8, vsurf_IW6, vsurf_IW7, vsurf_IW8, vsurf_W1, vsurf_W4, vsurf_W6, vsurf_W8, vsurf_Wp2, vsurf_Wp3, vsurf_Wp5
Conformation Dependent Charge	7	ASA+, ASA , ASA_H, ASA_P, CASA , DASA, dipole

Descriptors		
Fingerprints	**116**	
CDK fingerprint	4	FP164, FP312, FP415, FP969
CDK extended fingerprint	4	ExtFP12, ExtFP270, ExtFP467, ExtFP776
CDK graph only fingerprint	2	GraphFP353, GraphFP898
MACCS fingerprint	8	MACCSFP82, MACCSFP104, MACCSFP117, MACCSFP123, MACCSFP125, MACCSFP140, MACCSFP146, MACCSFP150
Pubchem fingerprint	8	PubchemFP180, PubchemFP186, PubchemFP192, PubchemFP356, PubchemFP528, PubchemFP643, PubchemFP696, PubchemFP697
Substructure fingerprint	3	SubFP88, SubFP297, SubFP298
Substructure fingerprint count	14	SubFPC1, SubFPC49, SubFPC84, SubFPC88, SubFPC96, SubFPC135, SubFPC136, SubFPC137, SubFPC275, SubFPC287, SubFPC296, SubFPC300, SubFPC303, SubFPC307
Klekota Roth fingerprint	3	KRFP3295, KRFP3328, KRFP3706
Klekota Roth fingerprint count	42	KRFPC20, KRFPC297, KRFPC298, KRFPC383, KRFPC677, KRFPC1147, KRFPC1154, KRFPC2262, KRFPC2548, KRFPC3224, KRFPC3295, KRFPC3302, KRFPC3328, KRFPC3404, KRFPC3408, KRFPC3455, KRFPC3528, KRFPC3574, KRFPC3591, KRFPC3596, KRFPC3598, KRFPC3606, KRFPC3660, KRFPC3671, KRFPC3682, KRFPC3704, KRFPC3710, KRFPC3718, KRFPC3750, KRFPC3751, KRFPC3756, KRFPC3785, KRFPC3786, KRFPC3809, KRFPC3926, KRFPC4080, KRFPC4237, KRFPC4283, KRFPC4293, KRFPC4295, KRFPC4531, KRFPC4826
2D atom pairs	1	AP2D102
2D atom pairs count	27	APC2D1_O_S, APC2D2_N_O, APC2D2_N_S, APC2D2_O_O,APC2D3_C_N, APC2D3_N_O,

APC2D3_N_S, APC2D4_C_C, APC2D4_C_S,
APC2D4_N_O, APC2D4_O_O, APC2D4_O_S,
APC2D5_C_O, APC2D5_C_X, APC2D5_O_O,
APC2D5_O_S, APC2D6_C_F, APC2D6_C_N,
APC2D6_C_S, APC2D6_O_O, APC2D7_C_X,
APC2D7_N_O, APC2D8_C_N, APC2D9_C_O,
APC2D10_C_N, APC2D10_C_X, APC2D10_C_O

Table S4. Statistical Analysis for 162 Important Variables in $t_{1/2}$ Prediction

class	number	name
2D Molecular Descriptors	**114**	
Physical Properties	7	apol, bpol, FCharge, h_logD, logP(o/w), logS, MW,
Hueckel Theroy Descriptors	4	h_ema, h_emd, h_emd_C, h_log_pbo
Subdivided Surface Areas	14	EState_VSA4, EState_VSA5, EState_VSA9, SlogP_VSA 0, SlogP_VSA 1, SlogP_VSA 2, SlogP_VSA 3, SlogP_VSA 4, SlogP_VSA 5, SlogP_VSA 6, SMR_VSA0, SMR_VSA3, SMR_VSA4, SMR_VSA5
Atom Counts and Bond Counts	56	a_aro, a_nO, AATS0d, AATS0dv, AATS0i, AATS0v, AATS0z, AATSli, AATSls, AATSlZ, AATS3s, AATSC0dv, AATSC0i, AATSC0v, AATSC2s, AATSC2Z, AATSC3dv, AATSC3s, AATSC3v, AATSC3Z, ATS0z, ATSC1dv, ATSC1pe, ATSC1s, ATSC1v, ATSC1Z, ATSC2d, ATSC2s, ATSC2Z, ATSC3d, ATSC3dv, ATSC3s, ATSC4dv, ATSC4pe, ATSC4s, ATSC4v, ATSC4Z, ATSC6d, ATSC7d, ATSC7dv, ATSC7p, ATSC7v, b_double, chiral, lip_acc, n6Ring, NaasC, nAcid, NsOH, NssssC, SaasC, SdssC, SssCH2, SsssCH, SssssC, SM1_DzZ
Kier & Hall Connectivity and Kappa Shape Indices	3	C3SP2, ETA_dBeta, MICO
Adjacency and Distance Matrix Descriptors	14	balabanJ, BCUT_PEOE_0, BCUT_SLOGP_0, BCUTd 1h, BCUTdv 1h, BCUTdv 1l, BCUTs 1h, BCUTs 1l, BCUTv 1l, BCUTz 1h, IC1, IC2, VE1_A, VR1_A
Pharmacophore Feature Descriptors	4	a_acc, a_acid, vsa_other, VSA_EState8
Partial Charge Descriptors	12	PEOE_VSA+3, PEOE_VSA+6, PEOE_VSA+7, PEOE_VSA 0, PEOE_VSA 1, PEOE_VSA 2, PEOE_VSA_NEG, PEOE_VSA_PNEG, PEOE_VSA_POL, Q_VSA_PNEG, Xc 5d, Xch 7d
3D Molecular Descriptors	**10**	

Surface Area, Volume and Shape Descriptors	7	dens, pmiY, std_dim2, std_dim3, vsurf_CP, vsurf_CW2, vsurf_Wp3
Conformation Dependent Charge Descriptors	3	ASA , ASA_P, DASA
Fingerprints	**38**	
CDK fingerprint	5	FP5, FP41, FP164, FP521, FP936
CDK extended fingerprint	1	ExtFP397
CDK graph only fingerprint	6	GraphFP123, GraphFP207, GraphFP211, GraphFP306, GraphFP357, GraphFP946
MACCS fingerprint	3	MACCSFP87, MACCSFP123, MACCSFP145
Pubchem fingerprint	3	PubchemFP179, PubchemFP186, PubchemFP697
Substructure fingerprint count	4	SubFPC88, SubFPC136, SubFPC137, SubFPC287
Klekota Roth fingerprint	3	KRFP3756, KRFP3785, KRFP4291
Klekota Roth fingerprint count	4	KRFPC665, KRFPC3710, KRFPC3750, KRFPC3785
2D atom pairs	1	AP2D259
2D atom pairs count	8	APC2D3_C_N, APC2D3_N_O, APC2D4_C_N, APC2D5_O_O, APC2D7_C_F, APC2D7_C_X, APC2D8_C_F, APC2D8_C_X

Table S5. Statistical Analysis for 121 Important Variables in f_u Prediction

class	number	name
2D Molecular Descriptors	**58**	
Physical Properties	6	apol, bpol, FCharge, h_logD, logP(o/w), logS
Hueckel Theroy Descriptors	9	h_ema, h_emd, h_emd_C, h_log_pbo, h_logS, h_pKa, h_pKb, h_pstates, h_pstrain
Subdivided Surface Areas	12	SlogP_VSA0, SlogP_VSA1, SlogP_VSA2, SlogP_VSA4, SlogP_VSA6, SlogP_VSA8, SlogP_VSA9, SMR_VSA0, SMR_VSA1, SMR_VSA3, SMR_VSA5, SMR_VSA7
Atom Counts and Bond Counts	9	a_aro, a_nN, a_nO, ast_violation, b_double, chiral, lip_acc, lip_don, opr_brigid
Kier & Hall Connectivity and Kappa Shape Indices	2	KierA3, KierFlex
Adjacency and Distance Matrix Descriptors	3	balabanJ, diameter, GCUT_SLOGP_0
Pharmacophore Feature Descriptors	4	a_acc, a_base, vsa_don, vsa_other
Partial Charge Descriptors	13	PEOE_VSA+0, PEOE_VSA+1, PEOE_VSA+5, PEOE_VSA+6, PEOE_VSA 0, PEOE_VSA 1, PEOE_VSA 2, PEOE_VSA 6, PEOE_VSA_NEG, PEOE_VSA_PPOS, Q_VSA_PNEG, PC+, PC
3D Molecular Descriptors	**23**	
Surface Area, Volume and Shape Descriptors	16	PmiX, pmiY, rgyr, std_dim2, vsurf_CP, vsurf_CW3, vsurf_D1, vsurf_D8, vsurf_IW8, vsurf_W1, vsurf_W4, vsurf_W6, vsurf_W8, vsurf_Wp2, vsurf_Wp3, vsurf_Wp5
Conformation Dependent Charge Descriptors	7	ASA+, ASA , ASA_H, ASA_P, CASA , DASA, dipole
Fingerprints	**40**	
CDK fingerprint	3	FP143, FP144, FP499

CDK extended fingerprint	2	ExtFP373, ExtFP715
MACCS fingerprint	2	MACCSFP125, MACCSFP145
Pubchem fingerprint	7	PubchemFP12, PubchemFP186, PubchemFP338, PubchemFP356, PubchemFP528, PubchemFP697, PubchemFP712
Substructure fingerprint	1	SubFP298
Substructure fingerprint count	6	SubFPC84, SubFPC88, SubFPC287, SubFPC296, SubFPC300, SubFPC307
Klekota Roth fingerprint	2	KRFP3328, KRFP3937
Klekota Roth fingerprint count	9	KRFPC1566, KRFPC3224, KRFPC3328, KRFPC3402, KRFPC3455, KRFPC3750, KRFPC3937, KRFPC3926, KRFPC4080,
2D atom pairs	1	AP2D336
2D atom pairs count	7	APC2D2_C_N, APC2D3_C_N, APC2D4_C_N APC2D5_C_O, APC2D6_C_N, APC2D8_C_O, APC2D8_C_X

Table S6. Numbers of Compounds and Outliers in the Applicability Domain Evaluation for Four PK Parameters Prediction

parameter	training set		test set	
	outlier	total	outlier	total
VD_{ss}	13	988	27	248
CL	15	1014	36	254
$t_{1/2}$	17	1002	21	251
f_u	7	702	29	176

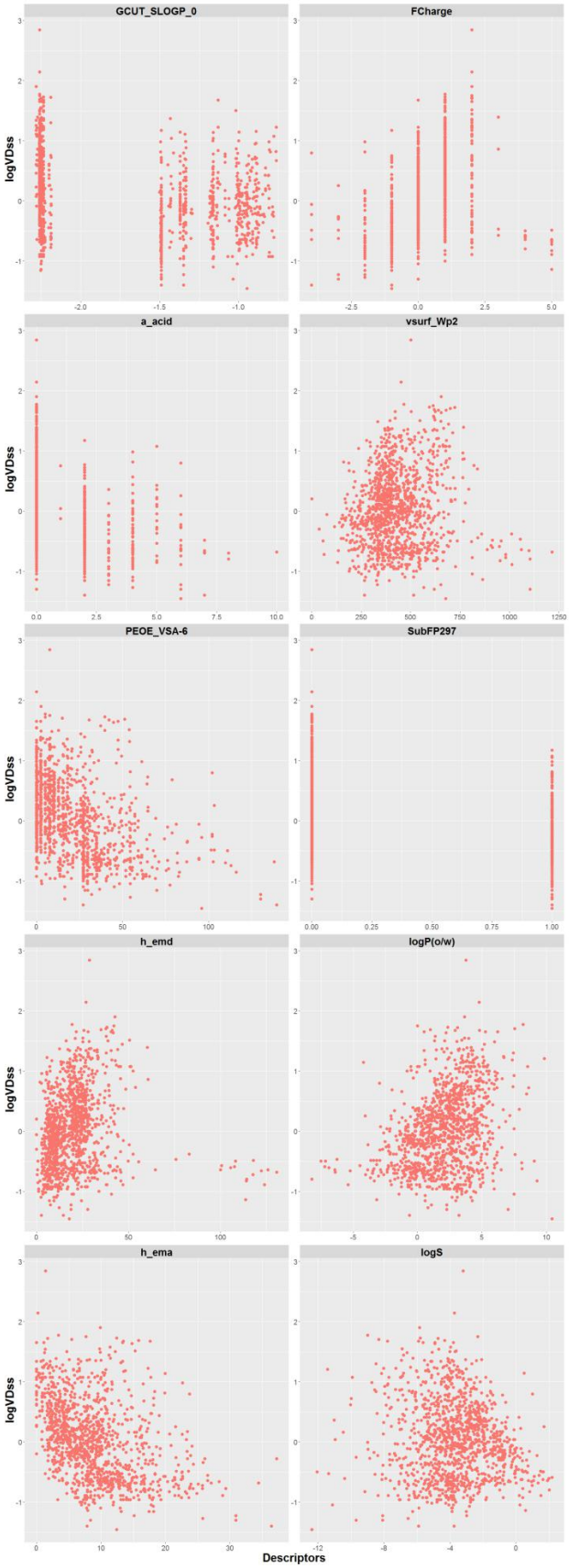

Figure S1. The correlation map of each parameter with the top 10 variables for VD_{ss} modeling.

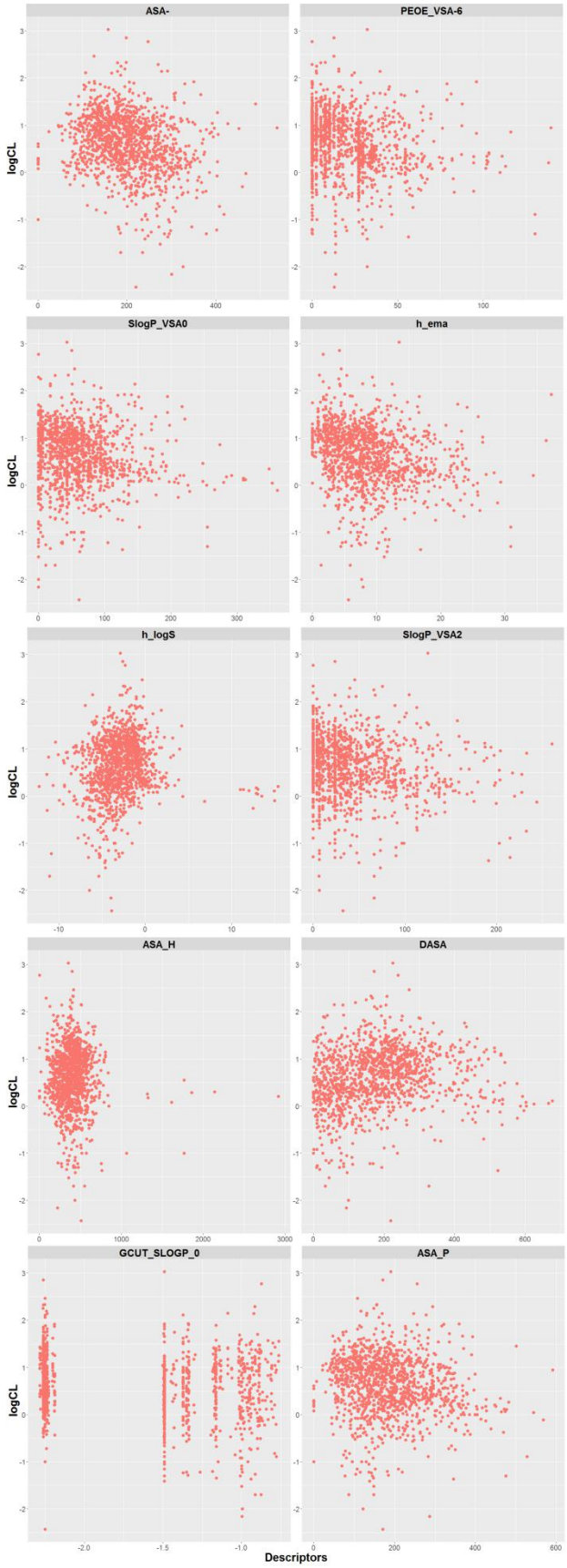

Figure S2. The correlation map of each parameter with the top 10 variables for CL modeling.

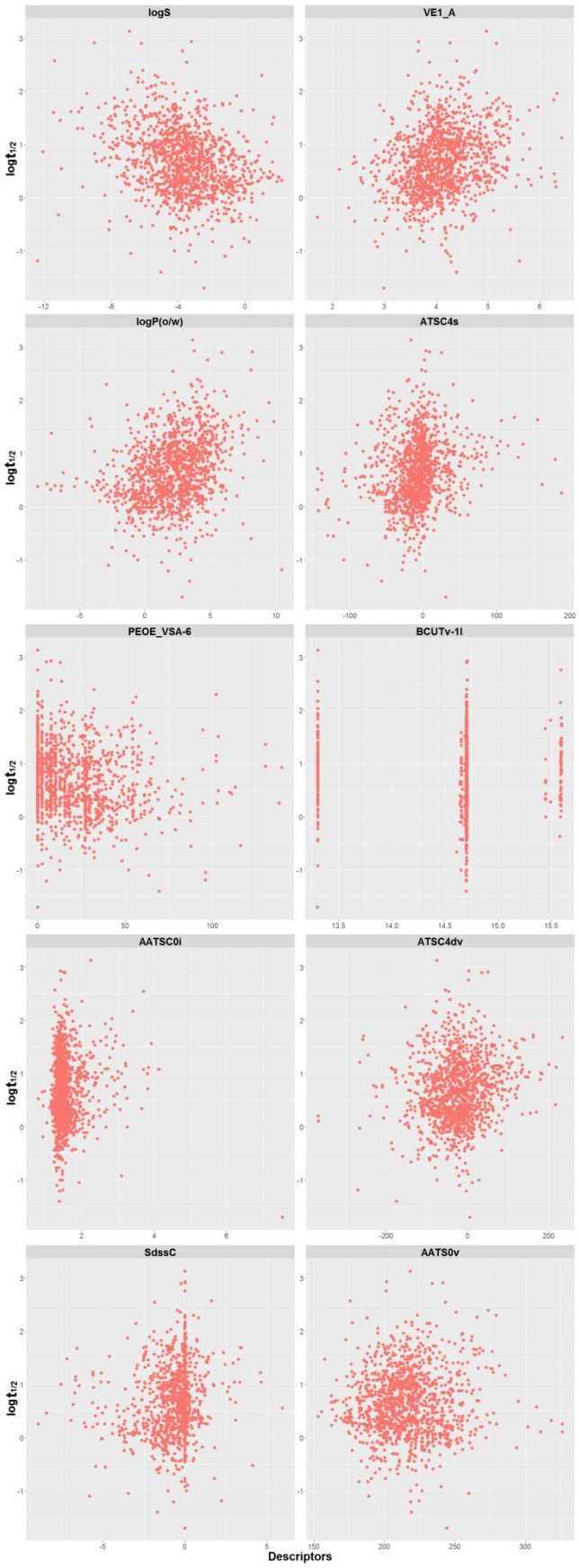

Figure S3. The correlation map of each parameter with the top 10 variables for $t_{1/2}$ modeling.

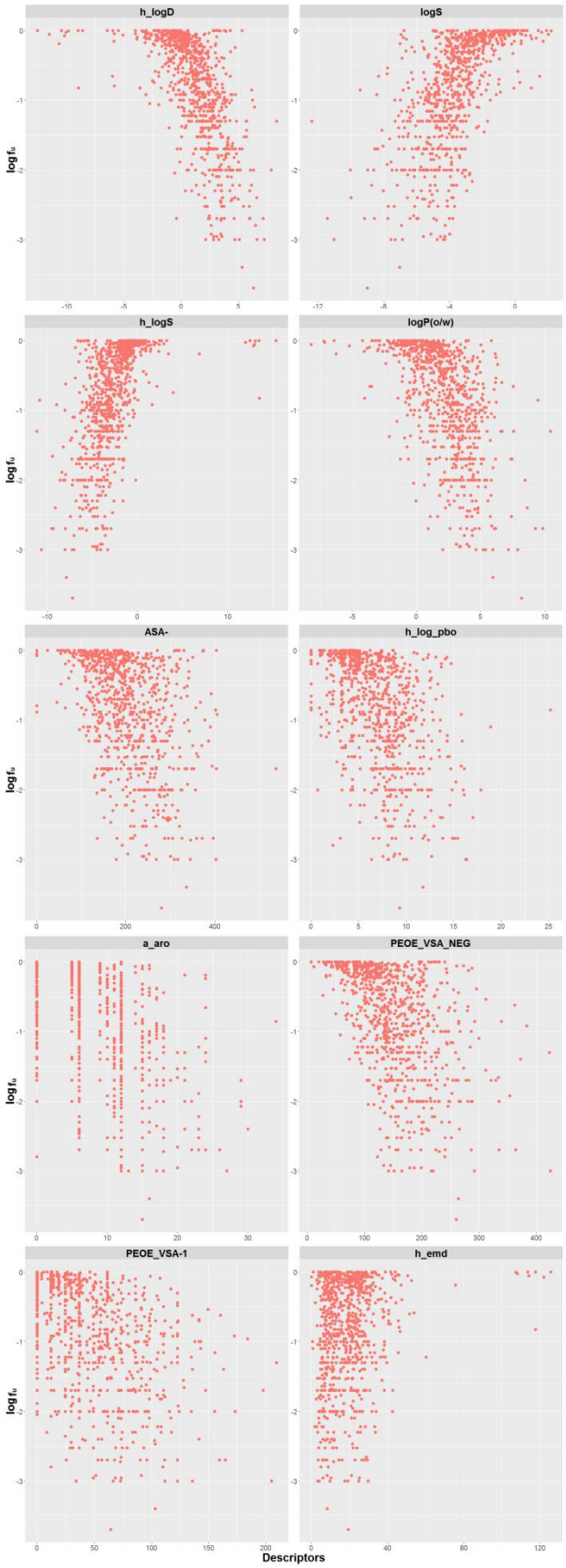

Figure S4. The correlation map of each parameter with the top 10 variables for f_u modeling.

REFERENCES

(1) Lombardo, F.; Berellini, G.; Obach, R. S. Trend Analysis of a Database of Intravenous Pharmacokinetic Parameters in Humans for 1352 Drug Compounds. Drug metab. dispos. **2018**, *46*, 1466-1477.
(2) Vilar, S.; Cozza, G.; Moro, S. Medicinal Chemistry and the Molecular Operating Environment (MOE): Application of QSAR and Molecular Docking to Drug Discovery. *Curr. Top. Med. Chem.* **2008,** *8*, 1555-1572.