

UNIVERSIDAD  
**NACIONAL**  
DE COLOMBIA

**Estudio *in silico* e *in vitro* de  
compuestos inhibidores de la enzima  
lipasa pancreática: una contribución  
al reposicionamiento de fármacos  
antiobesidad**

**Irvyng Patrick Lancho Barrios**

Universidad Nacional de Colombia  
Facultad de Ciencias, Departamento de Química  
Bogotá, Colombia  
2016



# **Estudio *in silico* e *in vitro* de compuestos inhibidores de la enzima lipasa pancreática: una contribución al reposicionamiento de fármacos antiobesidad**

**Irvyng Patrick Lancho Barrios**

Tesis presentada como requisito parcial para optar al título de:

**Magister en Ciencias - Química**

Director (a):

Ph.D., Químico, Fabián Harvey López Vallejo

Línea de Investigación:

Productos Naturales Vegetales

Grupo de Investigación:

Estudio Químico y de Actividad Biológica de Rutaceae y Myristicaceae Colombianas

Universidad Nacional de Colombia

Facultad de Ciencias, Departamento de Química

Bogotá, Colombia

2016



*A mis padres y mi hermana*



## Agradecimientos

En este caminar de inmensos y satisfactorios aprendizajes han estado presentes muchísimas personas que con sus enseñanzas y apoyo han permitido que este documento sea hoy una realidad. Por ello en estas cortas líneas quiero dejar plasmado mis más sinceros agradecimientos:

En primer lugar, a Dios nuestro amadísimo Padre, quien en todo momento ha estado conmigo guiándome, ayudándome y fortaleciéndome conforme a su inmenso amor y misericordia para continuar y valorar esta hermosa oportunidad de formación. Solo puedo decir como el salmista ¿cómo pagaré al Señor todo el bien que me ha hecho? También quiero agradecerle a la Virgencita María nuestra madre cuya protección e intercesión amorosa animan mi caminar.

A mi papi Edixón Lancho y mi mami Martha Barrios, dos luchadores incansables que siempre tendrán una palabra que anima el corazón y roba una sonrisa. Sus sacrificios, su comprensión, su compañía en noches de estudio, su paciencia, sus cuidados y su gran amor son cosas por las que siempre permaneceré en deuda con ellos. Son los mejores.

A mi hermanita y amiga Betsy Lancho, ejemplo de mujer. A lo largo de estos días ha brillado muchísimo más su paciencia, comprensión y ayuda; sus aportes y gestión me vuelven a recordar el inmenso regalo de Dios al concederme la mejor hermanita.

Al Dr. Fabián Harvey López Vallejo. Fue un privilegio y un honor tenerlo por director. Fueron varias las tardes en las que con paciencia, didáctica y amabilidad fue compartiéndome la riqueza de su conocimiento y el maravilloso mundo de la química medicinal. Su gran dedicación, deseo innovador y amor por lo que hace, ponen de manifiesto el gran profesional que es, pero sobre todo su inmensa calidad humana, su optimismo y alegría

reconfortaban en horas de cansancio e incertidumbre. Mil gracias por todo lo que me enseñó, pero sobre todo por su amistad y voto de confianza.

Al profesor Luis Enrique Cuca Suarez por su acogida, enseñanzas y apoyo dentro del grupo de investigación que él con sabiduría, compromiso y dedicación bien dirige.

A todos los profesores y compañeros del grupo de investigación en productos naturales vegetales. Dios les pague por sus enseñanzas, pero sobre todo por su amistad.

A Jorge y Sonia, por su amistad, generosidad y ayuda incondicional.

A todos los docentes de la maestría en Química.

A la Universidad Nacional de Colombia por permitirme crecer en mi formación profesional y humana.

A la Universidad Distrital Francisco José de Caldas por brindarme las herramientas de formación para seguir construyendo caminos de formación y conocimiento

A la Secretaría de Educación Distrital de Bogotá.

A todos y cada una de las personas que con su ayuda me permitieron llegar a la consecución de este gran sueño. Dios los bendiga.



## Resumen

La obesidad es una enfermedad que afecta a más de 650 millones de personas en el mundo. Se origina por la acumulación excesiva de grasa en el organismo. Aunque su tratamiento farmacológico es una de las alternativas más promisorias, la disponibilidad comercial de medicamentos es bastante escasa. El reposicionamiento de fármacos es un campo de investigación del diseño de fármacos asistido por computadora (DiFAC) en el cual se busca proponer nuevos usos terapéuticos a fármacos que ya han sido aprobados para el tratamiento de otras enfermedades. La lipasa pancreática (LP) es una de las dianas terapéuticas para el diseño de fármacos en el tratamiento de la obesidad.

En la presente investigación se hizo la búsqueda de potenciales inhibidores de la enzima LP a través del cribado virtual basado en la estructura usando tres programas de acoplamiento molecular Autodock 4.2, AutoDock Vina 1.1.2 y Dock6 v6.7. Al terminar el cribado virtual, las moléculas fueron ordenadas de acuerdo al valor de su energía de unión al receptor y se aplicaron métodos de consenso a partir de los resultados de los tres programas de acoplamiento molecular, obteniendo un nuevo valor de puntuación.

Se obtuvieron tres potenciales inhibidores de la enzima lipasa pancreática identificados como nevimolol, vemurafenib y etexilato de dabigatran, con valores de  $IC_{50}$  de 25,330  $\mu$ M, 55,887  $\mu$ M y 77,166  $\mu$ M respectivamente. Esto constituye un aporte al estudio y reposicionamiento de fármacos para el tratamiento de la obesidad ya que hasta la fecha de elaboración del presente documento no se tenían reportes oficiales sobre la inhibición de la enzima lipasa pancreática por parte de alguno de ellos.

**Palabras clave:** obesidad, reposicionamiento de fármacos, lipasa pancreática, acoplamiento molecular, puntuación consenso, fármacos.

## Abstract

Obesity is a disease that affects more than 650 million people in the world. It is caused by excessive accumulation of body fat. There are currently few pharmacological alternatives for its treatment. In this regard, drug repurposing, an area of research in computer-aided rational drug design (CADD), is intended to propose new therapeutic applications of drugs currently used in the treatment of other diseases. Pancreatic lipase enzyme (PL) is one of the therapeutic targets for drug design for the treatment of obesity. In this research, the search for potential PL inhibitors was conducted through structure-based virtual screening by using three molecular docking programs. Autodock 4.2, AutoDock Vina 1.1.2 and Dock6 v6.7. At the end of the virtual screening, the molecules were sorted according to the value of their receptor binding energy and applied consensus methods from the results of the three docking programs, obtaining a consensus scoring value.

Three potential inhibitors of the pancreatic lipase enzyme identified as neviranolol, vemurafenib and dabigatran etexilate were obtained with IC<sub>50</sub> values of 25,330 μM, 55,887 μM and 77,166 μM respectively. This is a study and repositioning of drugs for the treatment of obesity on the inhibition of the pancreatic lipase enzyme by any of them.

**Keywords:** obesity, drug repositioning, pancreatic lipase, molecular coupling, consensus score, drugs

# Contenido

	Pág.
Resumen .....	IX
Lista de figuras .....	XIII
Lista de tablas .....	XV
Lista de Símbolos y abreviaturas .....	XVI
Introducción .....	1
Hipótesis .....	3
Objetivos .....	4
<b>1. Capítulo 1. Estado del arte .....</b>	<b>5</b>
1.1 Definición y clasificación de la obesidad .....	5
1.1.1 Causas de la obesidad .....	6
1.1.2 Consecuencias de la obesidad .....	7
1.1.3 Tratamiento farmacológico de la obesidad .....	9
1.2 La enzima lipasa pancreática como diana terapéutica .....	16
1.2.1 Generalidades de metabolismo de lípidos .....	16
1.2.2 Generalidades de la lipasa pancreática (LP) .....	16
1.3 Reposicionamiento de fármacos .....	20
1.3.1 Definición .....	20
1.3.2 Cribado virtual .....	21
1.3.3 Aplicaciones exitosas del cribado virtual en el diseño y reposicionamiento de fármacos .....	24
1.3.4 Antecedentes de estudios <i>in silico</i> de la enzima lipasa pancreática .....	26
<b>2. Capítulo 2. Metodología .....</b>	<b>31</b>
2.1 Fase 1. Identificación computacional .....	31
2.1.1 Preparación de la proteína .....	32
2.1.2 Construcción de la librería .....	33
2.1.3 Consenso y acoplamiento molecular (docking) .....	33
2.2 Fase 2. Estudios <i>in vitro</i> .....	34
2.2.1 Determinación de la actividad inhibitoria de los fármacos (medicamentos) seleccionados .....	34

2.3	Fase 3. Elaboración del modelo del farmacóforo cualitativo .....	36
<b>3.</b>	<b>Capítulo 3 Resultados y discusión.....</b>	<b>37</b>
3.1	Preparación de la enzima y curado de las librerías .....	37
3.2	Reproducción del modo de unión y validación de los programas de acoplamiento molecular .....	45
3.3	Consenso de la base de datos fármacos LP.....	48
3.4	Consenso de la base de datos de productos naturales LP.....	54
3.5	Determinación de la actividad inhibitoria (IC <sub>50</sub> ) .....	57
3.6	Propuesta de modelo farmacofórico.....	63
<b>4.</b>	<b>Conclusiones y recomendaciones .....</b>	<b>65</b>
4.1	Conclusiones.....	65
4.2	Recomendaciones .....	66
	<b>Anexo A Script de búsqueda optimizada para la lectura de archivos con formato .dlg, .txt y .out.....</b>	<b>66</b>
	<b>Anexo B Ligandos utilizados de la base de datos ChEMBL para la curva ROC. ....</b>	<b>68</b>
	<b>Anexo C Datos estadísticos inhibición en GraphPad Prism7.....</b>	<b>71</b>
	<b>Anexo D Resultados cribado virtual de la base de datos de fármacos .....</b>	<b>72</b>
	<b>Bibliografía .....</b>	<b>165</b>

## Lista de figuras

	Pág.
<b>Figura 1-1:</b> Riesgo de enfermedades generadas por la obesidad. ....	9
<b>Figura 1-2:</b> Estructura química del orlistat (tetrahidrolipstatina). ....	13
<b>Figura 1-3:</b> Esquema general del modo de acción de los fármacos antiobesidad durante largos periodos de tiempo. ....	14
<b>Figura 1-4:</b> Estrategias terapéuticas en la búsqueda de fármacos para el tratamiento de la obesidad. ....	14
<b>Figura 1-5:</b> Proceso de digestión de los lípidos provenientes de la dieta. ....	17
<b>Figura 1-6:</b> Estructura tridimensional de la enzima lipasa pancreática (LP). ....	19
<b>Figura 1-7:</b> Mecanismo de reacción de la enzima lipasa pancreática sobre los TAG. ....	20
<b>Figura 1-8:</b> Diagrama general para la obtención de candidatos a fármacos usando el cribado virtual (CV) ....	24
<b>Figura 1-9:</b> Casos de éxito de la DiFAC. ....	26
<b>Figura 1-10:</b> Polifenoles que presentan acción inhibitoria sobre la enzima lipasa pancreática. ....	27
<b>Figura 1-11:</b> Modelo de inhibición del acteosido y el EGCG. ....	28
<b>Figura 1-12:</b> Modo de unión de la isoliquirigenina con la LP. ....	28
<b>Figura 1-13:</b> Acoplamiento molecular entre el ácido-3-cafeoilquínico y la LPP. ....	29
<b>Figura 1-14:</b> Acoplamiento molecular de alcaloides isoquinolínicos con la LP. ....	29
<b>Figura 1-15:</b> Acoplamiento molecular del ginkgolido A con la LP. ....	30
<b>Figura 2-1:</b> Diagrama general de la metodología aplicada en el estudio. ....	31
<b>Figura 3-1:</b> Comparación del archivo de la enzima LP. ....	37
<b>Figura 3-2:</b> Distribución de la masa molecular en la base de datos creadas. ....	39
<b>Figura 3-3:</b> Distribución del log P en las bases de datos de fármacos y productos naturales. ....	40
<b>Figura 3-4:</b> Capacidad de formación de enlaces de hidrógeno. ....	42
<b>Figura 3-5:</b> Distribución del área topológica superficial polar en las bases de datos. ....	43
<b>Figura 3-6:</b> Distribución del número de enlaces rotables en las bases de datos evaluadas. ....	44
<b>Figura 3-7:</b> Reproducción del modo de unión MUP-LP. ....	46
<b>Figura 3-8:</b> Curva ROC para los tres programas de acoplamiento molecular usados. ....	47
<b>Figura 3-9:</b> Diagrama de interacción 2D del complejo exatecan-LP e irinotecan-LP. ....	49
<b>Figura 3-10:</b> Diagrama 2D del complejo ditercalinium-LP y mosapramina-LP. ....	50
<b>Figura 3-11:</b> Diagrama 2D del complejo ZINC03830369-LP, atrimustina-LP y tirilazad-LP. ....	51

<b>Figura 3-12:</b> Diagrama 2D del complejo ZINC08552001-LP, laniquidar-LP y amesergide-LP .....	53
<b>Figura 3-13:</b> Diagrama 2D del complejo ZINC04098621-LP .....	55
<b>Figura 3-14:</b> Diagrama 2D del complejo ZINC85542831-LP, ZINC85542639-LP. ....	56
<b>Figura 3-15:</b> Diagrama 2D del complejo ZINC85542633-LP .....	56
<b>Figura 3-16:</b> Diagrama 2D del complejo ZINC85542633-LP .....	57
<b>Figura 3-17:</b> Bioautografía para la selección de posibles inhibidores de la LP .....	59
<b>Figura 3-18:</b> Comparación de las curvas de inhibición .....	60
<b>Figura 3-19:</b> Diagrama 2D y 3D del complejo neбиволol-LP .....	61
<b>Figura 3-20:</b> Diagrama 2D y 3D del complejo vemurafenib-LP .....	62
<b>Figura 3-21:</b> Diagrama 2D y 3D del complejo dabigatran-LP .....	62
<b>Figura 3-22:</b> Modelo farmacofórico obtenido de los complejos activos contra LP .....	63
<b>Figura 3-23:</b> Propuesta de modelo farmacofórico .....	64

## Lista de tablas

	Pág.
<b>Tabla 1-1:</b> Grado de obesidad a partir del IMC .....	6
<b>Tabla 1-2:</b> Tipos de tratamiento para el sobrepeso y la obesidad en adultos (Informe del NHLBI en 2013) .....	9
<b>Tabla 1-3:</b> Medicamentos antiobesidad aprobados hasta el 2016 por la FDA .....	11
<b>Tabla 3-1:</b> Valores de energía obtenidos para el complejo MUP-LP en AD, ADV y Dock6 .....	45
<b>Tabla 3-2:</b> Compuestos seleccionados del CV ordenados por su PPAE. ....	48
<b>Tabla 3-3:</b> Posición de los compuestos seleccionados del CV de la base de datos de productos naturales. . ....	55
<b>Tabla 3-4:</b> Medicamentos seleccionados del consenso de la base de datos de fármacos LP. ....	58
<b>Tabla 3-5:</b> Valores de IC <sub>50</sub> contra la enzima LP de los fármacos seleccionados del ensayo autobiográfico.....	60

# Lista de Símbolos y abreviaturas

## Abreviaturas

<b>Abreviatura</b>	<b>Término</b>
<i>Ae</i>	Autoescalado (valor)
<i>AD</i>	AutoDock 4.2
<i>ADME/T</i>	Absorción, Distribución, Metabolismo, Eliminación/ Toxicidad
<i>ADV</i>	Autodock Vina
<i>Arg</i>	Arginina
<i>Asp</i>	Aspartato
<i>CV</i>	Cribado virtual
<i>CVBS</i>	Cribado virtual basado en la estructura
<i>CVBL</i>	Cribado virtual basado en el ligando
<i>DiFAC</i>	Diseño de Fármacos Asistido por Computadora
<i>ER</i>	Enlace rotatable
<i>HBA</i>	Aceptor de enlace de hidrógeno
<i>HBD</i>	Dador de enlace de hidrógeno
<i>FDA</i>	Administración de Medicamentos y Alimentos de los Estados Unidos
<i>His</i>	Histidina
<i>IMC</i>	Índice de masa corporal
<i>Leu</i>	Leucina
<i>LogP</i>	Coefficiente de partición octanol / agua
<i>LP</i>	Lipasa pancreática humana
<i>LPP</i>	Lipasa pancreática porcina
<i>Md</i>	Mediana
<i>mm</i>	Masa molecular
<i>MUP</i>	Ácido metoxiundecilfosfínico
<i>OMS</i>	Organización Mundial de la Salud
<i>Phe</i>	Fenilalanina
<i>PPAE</i>	Promedio de puntuación de autoescalado
<i>Ser</i>	Serina
<i>TPSA</i>	Área topológica superficial polar
<i>TAG</i>	Triacilgliceroles
<i>Tyr</i>	Tirosina







# Introducción

La obesidad es uno de los problemas de salud pública que afecta a más de 650 millones de personas en el mundo (entre niños y adultos) siendo catalogada como la pandemia del siglo XXI (OMS, 2015; Rajmil et al., 2016). Se estima que la prevalencia del sobrepeso y la obesidad aumentó en un 27,5 % en adultos y en un 47,1 % de los niños para el periodo comprendido entre 1980 y 2013 por tanto, el número de personas con sobrepeso y obesidad pasó de 857 millones en 1980 a 2.000 millones en el año 2013 (Ng et al., 2014). En Colombia, estudios realizados en el año 2010 mostraron que la obesidad alcanzó el 16,5 % de la población y el sobrepeso el 51,2 % (Acosta, 2013). La obesidad día a día aumenta y con ella el desarrollo de otras patologías tales como la diabetes tipo 2, enfermedades cardiovasculares, artritis, osteoporosis, desórdenes mentales y el cáncer entre otras (Xuea & Ideraabdullah, 2016).

Entre las principales causas de la obesidad se destacan los malos hábitos alimenticios, el estilo de vida de la población, algunos factores psicológicos, factores genéticos y algunos medicamentos. El exceso de grasa acumulada en el tejido adiposo desencadena alteraciones metabólicas, razón por la cual se considera a la obesidad como una enfermedad (Allison et al., 2008). A pesar de que son diversos los factores que contribuyen a la obesidad, los malos hábitos alimenticios de la población siguen siendo la principal causa de la obesidad lo cual se ve reflejado en el alto consumo de alimentos hipercalóricos (Vandevijvere, Chow, Hall, & Swinburn, 2015).

La mayor parte de los lípidos consumidos en la dieta son difícilmente absorbidos en el intestino, sin embargo, la enzima lipasa pancreática se encarga de su hidrólisis permitiendo su digestión y absorción en el organismo para la obtención de energía. La inhibición de la enzima lipasa pancreática, se ha convertido en un motivo de estudio dado su papel clave en el metabolismo de los lípidos para el diseño de fármacos antiobesidad. En la actualidad, solamente el orlistat está aprobado como fármaco inhibidor de la enzima lipasa pancreática, pero sus efectos adversos como la esteatorrea, la incontinencia fecal, las

flatulencias y dispepsias limitan su uso. Por otra parte, algunos medicamentos usados como agentes antiobesidad tales como la fenfluramina, la dexfenfluramina y la sibutramina fueron retirados del mercado debido a los efectos colaterales sobre el sistema cardiovascular y la hipertensión pulmonar; otros medicamentos de carácter noradrenérgico también fueron retirados por el alto riesgo de producir adicción.

El tratamiento farmacológico de la obesidad permite no solo controlar el peso en los individuos, sino además mantenerlo estable en el tiempo. Sin embargo, el número de fármacos antiobesidad aprobados para uso durante un largo periodo de tiempo es muy reducido. Hasta el 2015, la Administración de Medicamentos y Alimentos de los Estados Unidos (FDA, por sus siglas en inglés), había aprobado tan solo 5 medicamentos: Belviq®, Qsymia®, Contrave®, Saxenda® y Xenical® (Daneschvar, Aronson, & Smetana, 2016). Por tanto, obtener moléculas activas, potenciales inhibidores de la enzima lipasa pancreática que sean prometedores fármacos antiobesidad es una necesidad urgente.

El diseño de fármacos convencional demanda altas cantidades de tiempo, recursos y dinero, acompañado en la mayoría de ocasiones de bajas tasas de éxito. No obstante, en las últimas décadas, ha surgido un nuevo campo de investigación conocido como diseño de fármacos asistido por computadora (DiFAC), el cual, hace uso del cribado virtual de grandes librerías de compuestos químicos, para acelerar la búsqueda y descubrimiento de nuevas moléculas con actividad biológica. Uno de los enfoques de la investigación del DiFAC es el reposicionamiento de fármacos. Con este enfoque, se buscan proponer nuevos usos terapéuticos a fármacos que ya han sido aprobados para el tratamiento de otras enfermedades. Varios estudios, han demostrado el éxito de este enfoque de investigación para el tratamiento de diversas enfermedades (López-Vallejo, Peppard, Medina-Franco, & Martínez-Mayorga, 2011; Mendez-Lucio, Medina-Franco, Meurice, & Muller, 2014; Zheng et al., 2013).

Los estudios *in silico* realizados en el presente trabajo de investigación tuvieron como objetivo identificar moléculas activas y fármacos, los cuales fueron verificados experimentalmente en pruebas *in vitro* evaluando su acción inhibitoria sobre la enzima lipasa pancreática, y así, contribuir a la búsqueda de compuestos que ayuden a mejorar los tratamientos para la obesidad.

## Hipótesis

A partir del cribado virtual de librerías de origen natural y sintético, será posible encontrar moléculas activas y fármacos aprobados, que sean capaces de inhibir la actividad de la enzima lipasa pancreática, contribuyendo de esta manera a los estudios de reposicionamiento de fármacos y moléculas antiobesidad.

## Objetivos

### Objetivo general

Identificar moléculas con potencial actividad inhibitoria de la enzima lipasa pancreática a partir del cribado virtual de bases de datos y de su validación experimental.

### Objetivos específicos

- Crear una base de datos de moléculas, tomando diversas librerías de origen natural y sintético alojadas en la base de datos ZINC.
- Seleccionar mediante el método de acoplamiento molecular (*docking*) compuestos con alta afinidad por el sitio activo de la enzima lipasa pancreática.
- Contribuir al reposicionamiento de fármacos antiobesidad a partir de la identificación de moléculas que presenten actividad *in vitro*.
- Proponer un modelo farmacofórico (cualitativo) que permita explicar las relaciones estructura-actividad.

# 1. Capítulo 1. Estado del arte

## 1.1 Definición y clasificación de la obesidad

La obesidad y el sobrepeso se definen como la acumulación anormal y excesiva de grasa en el tejido adiposo que deterioran el estado de salud del ser humano (OMS, 2015). En general, son la expresión del desequilibrio que existe entre la ingesta energética (proveniente de los alimentos) y el gasto energético que realiza el individuo, lo que lleva al aumento progresivo de energía almacenada. El exceso de grasa acumulada en el tejido adiposo, genera que el número y el tamaño de los adipocitos se eleve, produciendo el aumento del peso corporal y alteraciones en el metabolismo, ya que los adipocitos producen secreciones que actúan como factores endocrinos y paracrinos sobre otras células (Allison et al., 2008).

Para el diagnóstico y clasificación de la obesidad, la Organización Mundial de la Salud (OMS) ha establecido como criterio práctico el empleo del índice de masa corporal, IMC, el cual correlaciona el peso del individuo (expresado en kilogramos) dividido entre su altura (expresada en metros) elevada al cuadrado (OMS, 2000). A partir del IMC, se ha establecido la clasificación de la obesidad como se observa en la tabla 1-1; a medida que el IMC se acerca a valores iguales o superiores a  $30 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-2}$ , el individuo presentará uno de los estados de obesidad.

Sin embargo, el IMC no siempre refleja con precisión el grado de obesidad que presenta un individuo e incluso no indica en qué lugar del cuerpo se está presentando el exceso de grasa. Es por ello que, además de considerar el IMC, la medición del perímetro de la cintura proporciona una evaluación más precisa del riesgo al que se ve expuesto la persona por la obesidad, dado que el aumento de la grasa intraabdominal se asocia con una mayor morbilidad que la acumulación de grasa periférica o subcutánea (Wyatt, 2013).

**Tabla 1-1:** Grado de obesidad a partir del IMC

Categoría	IMC
Insuficiencia ponderal	< 18,4
Normal	18,5 - 24,9
Sobrepeso	25,0 - 29,9
Obesidad tipo I	30,0 - 34,9
Obesidad tipo II	35,0 - 39,9
Obesidad tipo III	≥ 40

Los datos recogidos en numerosos estudios utilizando como referencia el IMC de la población en diferentes lugares del planeta, ponen en evidencia que la obesidad se ha convertido en una epidemia mundial (Malik, Willett, & Hu, 2013). Un estudio realizado por el Instituto de Métrica y Evaluación en Salud de la Universidad de Washington reveló que la tasa de sobrepeso y obesidad pasó de 857 millones de personas en 1980 a 2.100 millones de personas en 2013. La proporción de hombres con IMC de 25 kg·m<sup>-2</sup> o superior aumentó del 28,8 % al 36,9 %, mientras que en el caso de las mujeres paso del 29,8 % al 38,0 % (Ng et al., 2014).

### 1.1.1 Causas de la obesidad

La obesidad es el producto de diversos factores que contribuyen con el desequilibrio entre la ingesta (o síntesis) de las grasas, su oxidación y almacenamiento (Gardner, Shoback, 2008). Entre las principales causas se encuentran:

Hábitos alimenticios. El mal estado nutricional que se presenta en la población se debe en gran medida al bajo consumo de frutas y verduras y el alto consumo de alimentos ricos en grasas y carbohidratos, como bebidas azucaradas y comidas “rápidas”, cuyo aporte calórico contribuye a la ganancia de peso en niños y adultos (Frank, 2016).

El estilo de vida de la población. El alto grado de sedentarismo que presenta la población se ve reflejado en la poca actividad física que realiza, que sumado al



consumo de cigarrillo y alcohol favorecen alteraciones metabólicas que desencadenan problemas de obesidad y otras comorbilidades (Arita et al., 2006).

Factores genéticos. Los síndromes de Prader Williy y Bardet-Biedl asociados con anormalidades cromosómicas y monogénicas. También se han identificado algunas mutaciones en el gen de la leptina, su receptor la pro-opiomelanocortina (POMC) y en los receptores de la melanocortina (MC), siendo la forma 4 (MC4R) la más afectada (Loos, 2013). La vía de la leptina-melanocortina, es muy importante ya que integra las señales que regulan tanto el apetito como el consumo de energía (Tejero, 2008).

Medicamentos. Los corticosteroides, sulfonilúreas, anticonceptivos orales y algunos anticonvulsivantes favorecen la ganancia de peso (Bujjirao & Kumar, 2013).

Alteraciones metabólicas y homeostáticas asociadas a la acción hormonal sobre el apetito. La leptina es un péptido que actúa en receptores específicos en el núcleo arqueado del hipotálamo, para controlar la producción y liberación de otros péptidos asociados con la regulación de la ingesta de alimentos y del apetito. La leptina inhibe la producción del neuropéptido-Y (NPY) y de la proteína r-Agouti (AGRP, por sus siglas en inglés), los cuales aumentan el consumo de alimentos. Por otro lado, la leptina mejora la producción del péptido POMC, precursor de la hormona estimulante del melanocito ( $\alpha$ -MSH), la cual reduce la ingesta de alimentos, la regulación del apetito y la conservación de la homeostasis del peso (Calzada León, 2003; Linné & Rössner, 2004). Otros sistemas de péptidos que actúan sobre el cerebro, diferentes a la leptina, para el control de la ingesta de alimentos son la orexina y los endocannabinoides, que estimulan el apetito; mientras que la hormona concentradora de melanina (MCH) favorece su disminución. Algunos péptidos intestinales como la colecistoquinina, el polipéptido pancreático, el polipéptido YY y la enterostatina contribuyen a la disminución de la ingesta de alimentos, mientras que la grelina, una hormona gástrica, produce el efecto contrario (Arita et al., 2006).

### **1.1.2 Consecuencias de la obesidad**

La obesidad es una enfermedad crónica, y está asociada con el riesgo de sufrir otras enfermedades (figura 1-1) que comprometen la vida del individuo tales como:

Diabetes tipo II. Es un desorden metabólico asociado con la resistencia a la insulina y la inadecuada señalización intercelular. Se estima que el 90% de los individuos con esta enfermedad son obesos (Platt, Beckett, Kohler, Niedowicz, & Murphy, 2015).

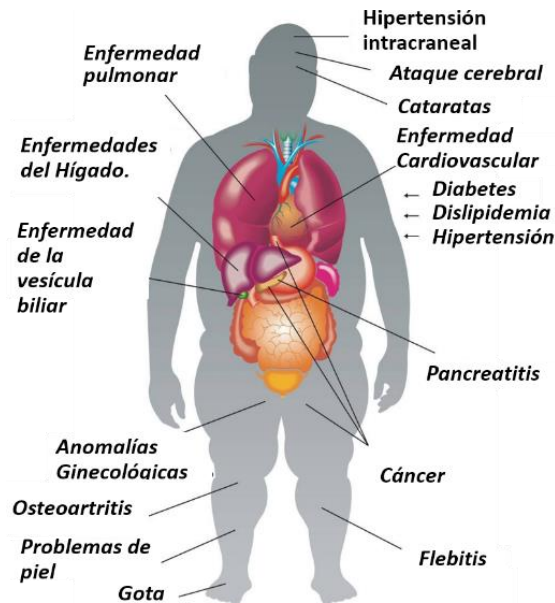
Enfermedades cardiovasculares. La obesidad agrava los principales factores de riesgo cardiovascular como son el perfil lipídico sanguíneo, la presión arterial (hipertensión), la glicemia, la inflamación y supone una carga "pesada" en el corazón, lo que afecta negativamente la estructura de los ventrículos y su función sistólica y diastólica (Lavie, McAuley, Church, Milani, & Blair, 2014).

Hiperlipidemia. Al aumentar la ingestión de ácidos grasos se genera la sobreproducción de lipoproteínas de muy baja densidad afectando su tasa de eliminación (Charlton, 2009).

Cáncer. Estudios epidemiológicos han demostrado que la obesidad está asociada con un mayor riesgo de desarrollar varios tipos de cáncer, como el de colon, endometrio, mama, riñón, esófago, páncreas, vesícula biliar, hígado y cáncer hematológico. Aunque no es claro el mecanismo, al parecer las adipoquinas (leptina y adiponectina) secretadas por el tejido adiposo, podrían estar relacionadas en el desarrollo del cáncer (Vucenik & Stains, 2012).

Alteraciones psicológicas. El mayor impacto de la obesidad está sobre el funcionamiento fisiológico y motriz de la persona, lo cual afecta directamente su calidad de vida y su normal desarrollo social. Esto conduce a que el individuo obeso desarrolle estados de frustración, autorreproche y depresión ante los intentos fallidos por adelgazar (Godoy, 2014).

**Figura 1-1:** Riesgo de enfermedades generadas por la obesidad.



Fuente: <http://familiascondiabetes.org/>

### 1.1.3 Tratamiento farmacológico de la obesidad

En el 2013, el grupo de expertos del Instituto Nacional del Corazón, los Pulmones y la Sangre (NHLBI, por su sigla en inglés), establecieron las guías de práctica clínica sobre la identificación, evaluación y tratamiento del sobrepeso y la obesidad en adultos (Jensen et al., 2014), para lo cual, utilizaron como criterio de selección del posible tratamiento el IMC como se puede observar en la tabla 1-2.

**Tabla 1-2:** Tipos de tratamiento para el sobrepeso y la obesidad en adultos (Informe del NHLBI en 2013)

Tratamiento	Riesgo	Intervalo de IMC del individuo (kg·m <sup>-2</sup> )				
		25 - 26,9	27 - 29,9	30 - 34,9	35 - 39,9	≥40
Cambio en el estilo de vida. (Dieta y ejercicio)	Bajo	+	+	+	+	+
Farmacoterapia	Medio		+ c	+	+	+
Cirugía bariátrica	Alto				+ c	+

+: Se recomienda usar. + c: usar en caso de comorbilidad.

El cambio en el estilo de vida es la mejor opción para el tratamiento de la obesidad. Una dieta baja en calorías, el aumento de la actividad física aeróbica y el acompañamiento de profesionales calificados (psicólogos, nutricionistas y preparadores físicos), contribuyen a fortalecer el programa de pérdida de peso (Salas-Salvadó, Rubio, Barbany, & Moreno, 2007). Lamentablemente este enfoque de tratamiento no es el que mejor resultados arroja debido a la falta de constancia y compromiso de los individuos obesos.

En cuanto a la cirugía bariátrica está indicada para individuos que tenga un IMC superior a 40 kg·m<sup>-2</sup>. Es una técnica invasiva en la que se pueden identificar tres procedimientos: la banda gástrica ajustable laparoscópica; la gastrectomía vertical en manga y el bypass gástrico. Los resultados demuestran la pérdida de peso entre el 25 – 30% y efectos positivos sobre la diabetes y la hipertensión (Haslam & James, 2005). Aunque los resultados son alentadores, los altos costos que tienen estos procedimientos sumado a los riesgos propios de cualquier cirugía y la falta de garantía sobre el no volver a recuperar el peso retirado, disminuyen su impacto en el tratamiento de la obesidad.

Los avances más interesantes en el tratamiento de la obesidad están en la terapia farmacológica, la cual, al combinarse con el mejoramiento del estilo de vida del individuo favorece la disminución de peso significativamente. Su indicación está restringida a personas con un IMC mayor a 30 kg·m<sup>-2</sup> o de 27 kg·m<sup>-2</sup> si presenta comorbilidades.

Los efectos secundarios que presentan los fármacos antiobesidad son el principal inconveniente para su uso confiable en las terapias de control de peso. Es así, como varios medicamentos contra la obesidad han sido retirados del mercado, inclusive, habiendo sido aprobados en años anteriores como la fenfluramina y la dexfenfluramina los cuales actuaban como supresores del apetito; sin embargo, sus efectos colaterales empezaron a estar relacionados con la enfermedad valvular cardiaca y la hipertensión pulmonar (Kang & Park, 2012). La sibutramina, un inhibidor de la recaptación de serotonina y noradrenalina, también fue suspendida debido a sus efectos nocivos sobre el sistema cardiovascular. En el 2008, el rimonabant perdió su licencia; este antagonista de los receptores de endocannabinoides, no fue aprobado en los Estados Unidos debido a sus graves efectos secundarios psiquiátricos con episodios de suicidio (Londoño-lemos, 2012).

En la actualidad, los fármacos antiobesidad aprobados por la Administración de Medicamentos y Alimentos de los Estados Unidos (FDA, por sus siglas en inglés) se clasifican en dos grupos:

- Fármacos supresores del apetito.
- Fármacos que disminuyen la absorción de grasas en el ser humano

De los cinco fármacos aprobados por la FDA para el tratamiento de la obesidad durante largos periodos de tiempo, cuatro actúan sobre receptores cerebrales que controlan el apetito y solamente uno reduce la absorción de grasas en el individuo. En la tabla 1-3 se muestran los fármacos antiobesidad actualmente aprobados por la FDA junto a sus modos de acción y sus efectos secundarios (Daneschvar et al., 2016).

La locaserina es un agonista selectivo del receptor 5-HT<sub>2C</sub> de la serotonina. Actúa reduciendo la ingesta de alimentos y, por tanto, ayuda a disminuir el peso corporal. Los efectos colaterales más frecuentes son fatiga, dolor de cabeza, mareos y sequedad en la boca (Kang & Park, 2012).

**Tabla 1-3:** Medicamentos antiobesidad aprobados hasta el 2016 por la FDA

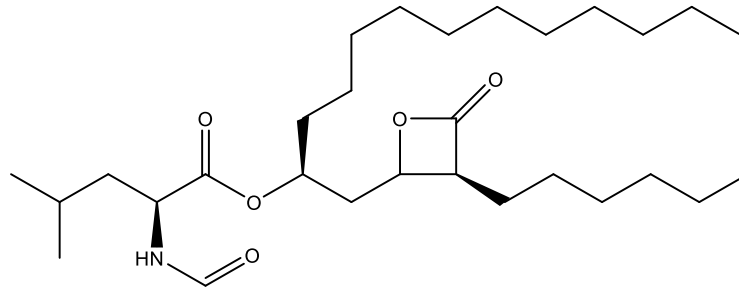
Nombre genérico	Nombre (s) comercial (es)	Mecanismo de acción	Reacciones adversas comunes
Lorcaserina	Belviq®	Agonista del receptor 5-HT <sub>2C</sub> de serotonina	Dolor de cabeza, mareos, fatiga, náuseas, sequedad de boca, tos, estreñimiento, tos e hipoglicemia
Fentermina/ Topiramato	Qsymia®	Simpatomimético/Bloquea los canales de sodio, receptores de glutamato y aumenta la actividad de GABA	Parestesias, mareos, insomnio, estreñimiento, sequedad de boca, elevación de la frecuencia cardíaca
Naltrexona/ bupropion	Contrave®	Antagonista de opioides/ Aumenta la actividad de la proopiomelanocortina	Náusea, mareo, visión borrosa, desánimo, mareo, nerviosismo, dolor de cabeza, irritabilidad, pérdida del interés
Liraglutida	Saxenda®	Agonista del receptor 1-GLP	Mareo, náusea, diarrea, aumento de lipasa, urgencia urinaria
Orlistat	Xenical® Alli®	Inhibidor de la lipasa pancreática	Esteatorrea, urgencia fecal, heces grasosas, incontinencia fecal, flatulencia

En la combinación fentermina / topiramato, la fentermina induce la liberación sináptica de la noradrenalina y la serotonina, promoviendo la disminución del apetito. Por otro lado, el topiramato, bloquea los canales de sodio, inhibe los receptores de glutamato y de la anhidrasa carbónica y aumenta la actividad del ácido  $\gamma$ -aminobutírico; sin embargo, no es claro el mecanismo por el cual promueve la pérdida de peso (Wyatt, 2013).

Otro fármaco combinado es la naltrexona / bupropion. La naltrexona es un antagonista de los receptores opioides, mientras que el bupropion es un inhibidor selectivo de la recaptación de dopamina y noradrenalina a la vez que aumenta la actividad de la POMC. Esta combinación produce la disminución del apetito y del hambre sin que tenga efecto sobre el metabolismo (Daneschvar et al., 2016). Sus efectos secundarios son principalmente náusea, dolor de cabeza, mareos, vómito, resequedad en la boca y episodios de depresión.

La liraglutida es un agonista del receptor del péptido similar al glucagón tipo 1 (GLP-1). Este péptido envía información al sistema nervioso central, lo que aumenta la saciedad y contribuye con la reducción de la ingesta de alimentos y el peso corporal (Van Bloemendaal, Ten Kulve, La Fleur, Ljzerman, & Diamant, 2014). Los principales efectos secundarios que presenta son náusea, hipoglicemia, diarrea, vómito, dolor de cabeza, estreñimiento, mareo y aumento de la lipasa.

El orlistat, (figura 1-2) es el único fármaco antiobesidad que incide sobre la absorción de las grasas provenientes de la dieta humana, por lo cual reduce la ingesta calórica al organismo. Se obtuvo como derivado la lipstatina aislada de la bacteria *Streptomyces toxytricini* (Ballinger & Peikin, 2002). Actúa en el tracto gastrointestinal inhibiendo la enzima lipasa pancreática y otras lipasas (lingual, gástrica) responsables de la hidrólisis de los triacilglicerolos (TAG) ingeridos en la alimentación para obtener ácidos grasos, di y mono acilglicerolos.

**Figura 1-2:** Estructura química del orlistat (tetrahidrolipstatina).

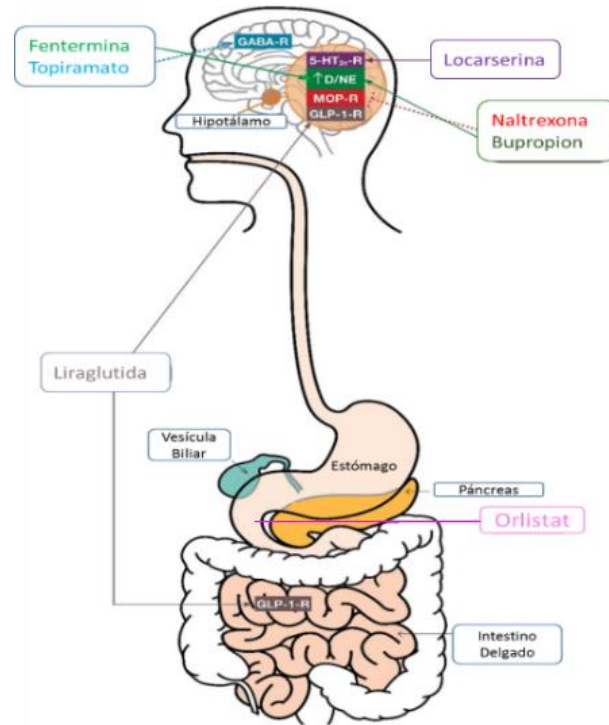
El orlistat se une covalentemente a la Ser152 en el sitio activo de la lipasa pancreática y forma un complejo estable, que inactiva la enzima haciéndola incapaz de hidrolizar los TAG y, por tanto, las grasas no absorbidas serán expulsadas en las heces fecales (Al-Suwailem, Al-Tamimi, Al-Omar & Al-Suhibani, 2006). Se estima que cerca del 30 al 40% de las grasas no son absorbidas (Yanovski & Yanovski, 2013). Los efectos colaterales que presenta son menos peligrosos que los fármacos comúnmente usados en terapias de largos periodos de tiempo; sin embargo, son incómodos ya que se presenta esteatorrea, incontinencia fecal, flatulencias y dispepsias. Puede haber insuficiencia de vitamina A, D, E y K, razón por la cual se suministra un complemento vitamínico. Todos estos síntomas pueden ser manejados por el individuo en la medida que disminuya la ingesta de comidas altamente grasosas (Kang & Park, 2012).

En la figura 1-3 se observa el resumen del modo de acción y la diana terapéutica a los que están dirigidos los principales fármacos antiobesidad aprobados para uso durante largos periodos de tiempo.

Las actuales investigaciones farmacológicas buscan el desarrollo y diseño de fármacos a partir de la identificación de nuevas dianas terapéuticas, con el objetivo de reducir los efectos secundarios, optimizar el modo de acción y desarrollar nuevas estrategias en el tratamiento de la obesidad (figura 1-4).

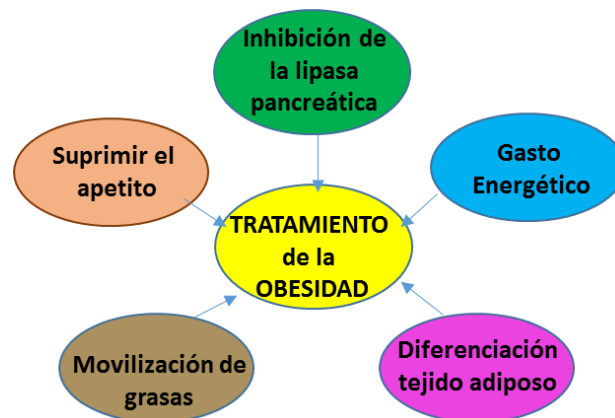
**Figura 1-3:** Esquema general del modo de acción de los fármacos antiobesidad durante largos periodos de tiempo.

(Las flechas indican el receptor u órgano sobre el cual actúan los fármacos).



Fuente: Patel, 2015.

**Figura 1-4:** Estrategias terapéuticas en la búsqueda de fármacos para el tratamiento de la obesidad.





Los actuales enfoques en la investigación farmacológica para el tratamiento de la obesidad son: suprimir el apetito y aumentar la saciedad. Búsqueda de agentes antagonistas de los receptores: canabinoides, grelina, hormona concentradora de melanina (MCH) y el neuropéptido Y (NPY), así como agonistas selectivos de los receptores de: leptina, colecistoquinina (CCK), hormona estimulante de melanocitos ( $\alpha$ MSH), 5HT<sub>2C</sub>, melanocortina (MC4); además, incrementar la disponibilidad de neurotransmisores anorexígenos como la noradrenalina, serotonina y dopamina en el sistema nervioso (Chakrabarti, 2009).

Inhibidores de la lipasa pancreática. Como se mencionó en párrafos anteriores, bloquear la absorción de grasas en el organismo a través de la inhibición de la enzima lipasa pancreática resulta una estrategia importante y eficaz para el control de la ingesta energética (Balaji et al., 2015).

Gasto de energía. Diariamente el gasto de energía se debe a tres aspectos: el metabolismo basal, el gasto inducido por el alimento y la actividad física. El tejido adiposo marrón (BAT, por sus siglas en inglés), regula el gasto energético y la disipación de calor por termogénesis gracias a la acción de la proteína desacoplante -1 (UCP-1, por sus siglas en inglés). Se estima que los agonistas UCP-1 contribuyen a la reducción del tejido adiposo (Yoon et al., 2008).

Diferenciación del tejido adiposo. La obesidad se caracteriza por el agrandamiento del tejido adiposo debido a la hiperplasia e hipertrofia que sufren los adipocitos. Los adipocitos se originan de las células llamadas preadipocitos mediante el proceso de adipogénesis. Este proceso está mediado por la expresión de dos factores de transcripción: la proteína de unión a CCAAT/*enhancer*  $\beta$  (C/EBP  $\beta$ ) y el receptor activado de proliferadores peroxisomales  $\gamma$  (PPAR $\gamma$ ). La búsqueda de inhibidores de estos factores de transcripción, puede inducir apoptosis, con lo cual disminuiría la masa del tejido adiposo (Hu, Tao, Wang, Xiao, & Wang, 2016).

Aumento de la lipólisis. La lipasa sensible a hormonas (LSH) realiza la hidrólisis de los TAG almacenados en el tejido adiposo produciendo la liberación de ácidos grasos (Lafontan & Langin, 2009). Este proceso bioquímico incide en la disminución del tejido adiposo y por tanto de la obesidad. La búsqueda de agentes terapéuticos que estimulen la actividad de la LSH e incrementen la oxidación de los ácidos grasos se complementa con el desarrollo de los agonistas  $\beta$ 3-adrenérgicos (Londoño-Lemos, 2012).

## 1.2 La enzima lipasa pancreática como diana terapéutica

La lipasa pancreática (LP) es una enzima gastrointestinal clave en el ingreso de los lípidos al metabolismo ya que hidroliza los TAG que componen las grasas que se consumen en la alimentación. Por lo tanto, inhibir la LP se traduce en la disminución del suministro calórico al individuo disminuyendo la disposición a desarrollar obesidad.

### 1.2.1 Generalidades del metabolismo de lípidos

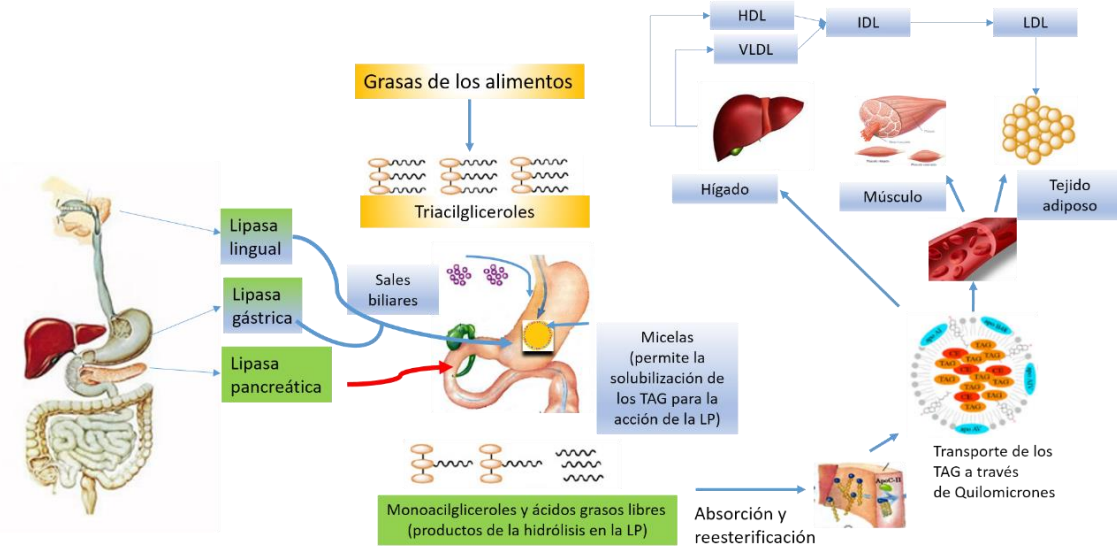
La mayor parte de los lípidos de la dieta se ingieren como TAG. El proceso de absorción de los lípidos (figura 1-5) inicia en el estómago y en el intestino delgado cuando se solubilizan por la acción de las sales biliares, las cuales generan una emulsión convirtiendo las grasas en micelas mixtas accesibles a la acción hidrolítica de las lipasas (que son hidrosolubles), quienes convierten los TAG a diacilgliceroles, monoacilgliceroles, ácidos grasos y glicerol.

Los productos de la hidrólisis de las lipasas difunden hacia el interior del enterocito, donde son convertidos de nuevo en TAG y son incorporados a las lipoproteínas para ser transportados a los tejidos diana (tejido muscular y tejido adiposo) (Mu & Høy, 2004). Las lipoproteínas remanentes (quilomicrones) son enviadas al hígado donde se asimilan por endocitosis. Cuando hay un exceso de TAG, el hígado los empaca en lipoproteínas de muy baja densidad (VLDL, por sus siglas en inglés) y los envía a los adipocitos para ser almacenados (Lehninger, 2009). La repetición de este proceso empieza a desencadenar la obesidad y otras enfermedades crónicas.

### 1.2.2 Generalidades de la lipasa pancreática (LP)

Las lipasas, son enzimas que pertenecen a la familia de las carboxil éster hidrolasa (3.1.1.3). Su función biológica es hidrolizar los enlaces éster de los TAG, produciendo la liberación de monoacilgliceroles, diacilgliceroles, ácidos grasos y glicerol. Se caracterizan por tener una triada catalítica, en donde uno de los residuos que la compone es la serina, de ahí que se les denomine serina hidrolasas, muy parecidas a las serina proteasas (Long & Cravatt, 2012).

**Figura 1-5:** Proceso de digestión de los lípidos provenientes de la dieta.



Fuente: Lehninger, 2009.

Las lipasas presentan un dominio estructural canónico compuesto por ocho cadenas  $\beta$  que forman una hoja  $\beta$ , estas cadenas están conectadas por hélices  $\alpha$ , que quedan empaquetadas a ambos lados de la hoja  $\beta$ . Este núcleo central es el responsable directo de la actividad catalítica y define el plegamiento  $\alpha/\beta$ -hidrolasa, común para muchas hidrolasas de origen filogenético y funciones catalíticas diferentes (González-Bacero, Hernández, & Martínez, 2010).

A diferencia de otras hidrolasas, el sitio activo de las lipasas está usualmente cubierto por un bucle (*loop*) conformado por una hélice- $\alpha$  de carácter anfipático, el cual se ubica sobre el sitio activo a manera de tapa (*lid*). Cuando la tapa está sobre el sitio activo, la región hidrofóbica de la hélice interactúa con los residuos hidrofóbicos de la cavidad del sitio activo, de tal manera que la enzima permanece inactiva e inaccesible al sustrato (Aloulou et al., 2006). Debido a la activación interfacial que sufre la enzima, la tapa, cambia su orientación de tal forma que la región hidrofóbica de la hélice queda ahora en contacto con la interfaz lípido/agua, creando una superficie hidrofóbica que deja expuesto el sitio activo y por tanto accesible al sustrato (Dridi et al., 2013; Khedidja & Abderrahman, 2011).

En el ser humano las lipasas se clasifican en dos grupos: las pre-duodenales, compuestas por la lipasa gástrica y la lipasa lingual, cuya actividad de hidrólisis no supera el 30 % (Birari & Bhutani, 2007); el segundo grupo se compone de las lipasas extra-duodenales que incluyen: la lipasa pancreática, la lipasa hepática, la lipoproteína lipasa, la lipoproteína endotelial y lipasa sensible a la acción hormonal, entre otras (Mukherjee, 2003; Long & Cravatt, 2012). La lipasa pancreática, es la enzima más activa en la hidrólisis de TAG, alcanzando valores del 50 – 70 % sobre los lípidos de la dieta.

#### ▪ Estructura de la lipasa pancreática

La LP humana, también llamada triacilglicerol acil hidrolasa, es sintetizada y secretada por las células acinares del páncreas. Su producción es estimulada por la colecistocinina, la secretina y el péptido liberador de gastrina, mientras que la somatostatina y los polipéptidos pancreáticos (Y y YY) la inhiben (Sastre & Sabater, 2005).

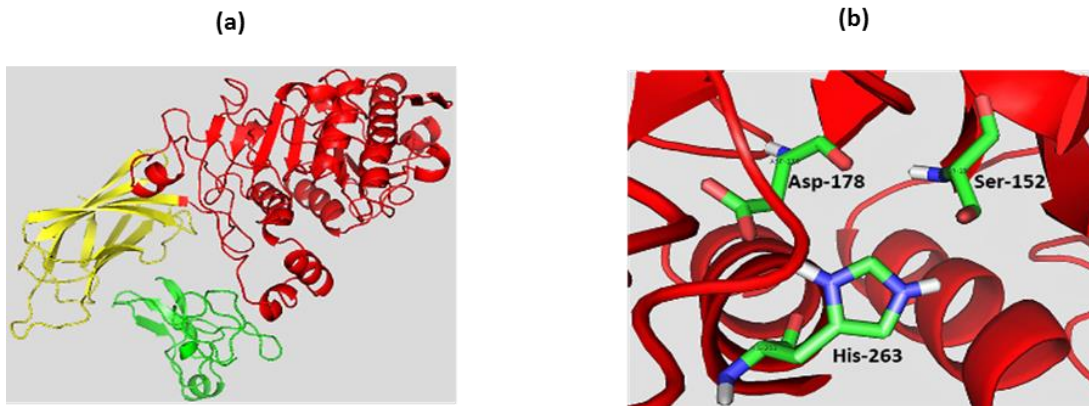
Su estructura tridimensional fue determinada por cristalografía de rayos X en 1990 por Winkler con una resolución de 2.46 Å (Winkler, D'Arcy, & Hunziker, 1990). Está constituida por dos dominios: El dominio N-terminal y el dominio C-terminal (figura 1-6a).

El dominio N-terminal comprende los residuos de los aminoácidos 1 al 336; se le conoce como el dominio catalítico ya que allí se encuentra el sitio activo de la enzima. Este sitio está compuesto por la triada de aminoácidos Ser152, Asp176 e His263 (figura 1-6b) (Colin, Deprez-Beauclair, Allouche, et al., 2008).

El dominio C-terminal contiene los residuos de los aminoácidos 337 al 449. Este dominio está unido a la colipasa, que es una subunidad requerida para la actividad enzimática de la lipasa. La colipasa impide la inhibición ejercida por la fosfatidilcolina en la superficie del complejo lipasa-sustrato y ayuda a estabilizar la conformación activa de la lipasa aumentando la hidrofobicidad del sitio de unión. (Aloulou et al., 2006; Van Tilbeurgh, Bezzine, Cambillau, Verger, & Carrière, 1999)

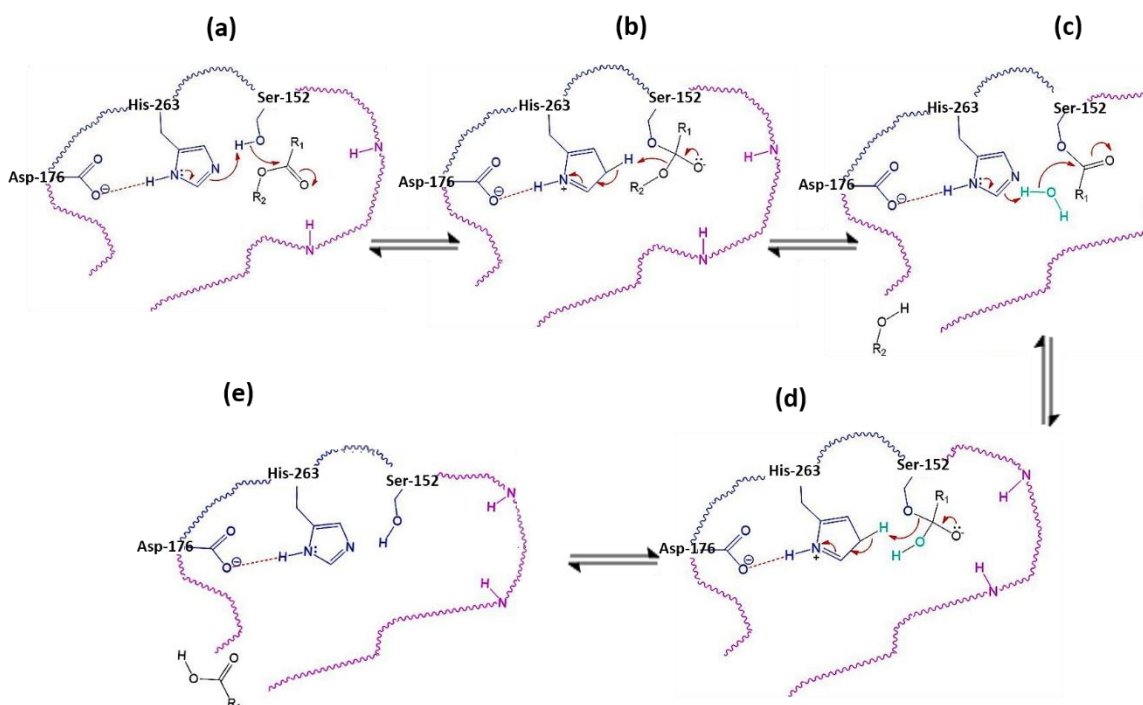
**Figura 1-6.** Estructura tridimensional de la enzima lipasa pancreática (LP).

(a) Dominios de la enzima LP: en rojo el dominio N-terminal (residuos 1 - 336); en amarillo el dominio C-terminal (residuos 337 - 449); en verde la colipasa (cofactor). (b) Triada catalítica de la LP: Asp178, Ser152, His263 (Código PDB: 1LPB).



El mecanismo de hidrólisis de la LP sobre los TAG se ilustra en la figura 1-7. En primer lugar, el sustrato es fijado en la cavidad hidrofóbica de la enzima. Inmediatamente, la Ser152 es activada por la desprotonación de su grupo hidroxilo por la His263 que funciona como catalizador básico; el Asp176 estabiliza la carga positiva resultante en la His263. La Ser152 ataca al TAG (figura. 1-7a). Se forma un intermediario tetraédrico, que genera un ligero cambio conformacional en la proteína para permitir que el sustrato se ubique en la cavidad del oxianión en donde los residuos Phe77 y Leu153 estabilizan mediante puentes de hidrógeno la carga negativa alojada en el átomo del oxígeno carbonílico (Miled et al., 2000) (figura. 1-7b). El intermediario tetraédrico colapsa reestableciendo el doble enlace carbono – oxígeno del sustrato y es expulsado el diacilglicerol. Este paso se favorece por la His263 que actúa ahora como un catalizador ácido. De esta manera se forma el complejo acil-enzima (figura. 1-7c). Posteriormente ingresa una molécula de agua, que realiza un ataque nucleofílico sobre el complejo acil-enzima (figura 1-7c) dando como resultado la expulsión del ácido graso y la regeneración de la enzima (figura 1-7e).

La capacidad de buen grupo saliente de la Ser-152 en la reacción, se ve aumentada por la acción catalítica de la His263 (Reis, Holmberg, Watzke, Leser, & Miller, 2009).

**Figura 1-7.** Mecanismo de reacción de la enzima lipasa pancreática sobre los TAG.

## 1.3 Reposicionamiento de fármacos

### 1.3.1 Definición

El ciclo típico para el descubrimiento de un nuevo fármaco, desde la identificación del compuesto bioactivo hasta culminar los ensayos clínicos, puede tomar aproximadamente de 15 a 17 años y su costo llegar a más de 2000 millones de dólares (Cerqueira et al., 2015). Por tanto, es necesario diseñar y aplicar estrategias que, sin afectar la seguridad y calidad de los nuevos fármacos, optimicen el tiempo de descubrimiento y desarrollo y disminuyan los costos económicos.

El reposicionamiento de fármacos es un campo de investigación en el que se busca encontrar nuevas acciones terapéuticas para un fármaco existente, y para este fin resulta de gran utilidad el uso de las técnicas del cribado virtual del diseño de fármacos asistido por computadora (DiFAC) (Zheng et al., 2013). El reposicionamiento, además de hallar nuevas dianas farmacológicas, reduce significativamente las fallas asociadas con el

desarrollo inicial de fármacos y facilita que los compuestos reposicionados ingresen a las fases clínicas con menos inversión económica y más rápidamente (Boguski, Mandl, & Sukhatme, 2009).

El reposicionamiento puede ser: centrado en el fármaco, cuando el interés del estudio es hallar nuevas indicaciones para el medicamento; centrado en la enfermedad, cuando el objetivo es identificar fármacos eficaces contra una enfermedad específica (Liu et al., 2013).

### 1.3.2 Cribado virtual

El diseño de fármacos asistido por computadora (DiFAC) surgió hacia los años 80 como una estrategia que complementaba las pruebas de cribado experimentales a partir del estudio de grandes librerías de compuestos generadas por la química combinatoria (Lombardino & Lowe, 2004). Hacia 1997 se integró a la DiFAC uno de los protocolos computacionales más importantes: el Cribado Virtual (CV) (en inglés *Virtual Screening*, VS). El objetivo fundamental del CV es evaluar computacionalmente las bases de datos en donde se alojan miles de compuestos químicos para identificar y seleccionar moléculas activas con propiedades farmacológicas (en inglés *hits*) para luego ser evaluadas experimentalmente (Kapetanovic, 2008). Los compuestos que logran superar las pruebas biológicas entran en la etapa de optimización y desarrollo siendo denominados compuestos cabeza de serie (en inglés *leads*) (Kortagere & Ekins, 2010).

El cribado virtual se puede dividir en dos grandes categorías: cribado virtual basado en la estructura (CVBE) y cribado virtual basado en el ligando (CVBL) (Lavecchia & Di Giovanni, 2013).

- **Cribado virtual basado en la estructura (CVBE)**

Es utilizado cuando existe conocimiento de la estructura tridimensional de la diana biológica (receptor). Esta estructura se puede obtener de bases de datos de biomacromoléculas, como el banco de datos de proteínas (PDB, por sus siglas en inglés). El objetivo del CVBE es evaluar el modo de unión entre el ligando (molécula activa) y el

receptor (Enzimas, receptores de membrana, ADN, etc.) (Danishuddin & Khan, 2015).

Existen dos métodos de CVBE:

- Diseño de novo. Consiste en la construcción directa del ligando en el sitio de unión de la proteína (Medina-Franco, Lopez-Vallejo, & Castillo, 2006).
  - Acoplamiento molecular (*docking* en inglés). Permite establecer la conformación más adecuada del ligando dentro el sitio de unión del receptor. Para indicar el grado de afinidad y predecir el mejor modo de unión ligando – receptor, se utiliza una función matemática denominada función de puntuación (*scoring function*), el cual determina la energía libre de unión ( $\Delta G$ ) como la suma de las interacciones de van der Waals, electrostáticas, hidrofóbicas y de puentes de hidrógeno (Lavecchia & Di Giovanni, 2013), estas funciones se conocen como campos de fuerza. Los resultados obtenidos por el acoplamiento son organizados de acuerdo a la función puntuación (*docking score*, en inglés).
- 
- **Cribado virtual basado en el ligando (CVBL)**

El cribado virtual basado en el ligando (CVBL) es útil cuando no se conoce la estructura de la diana biológica. Se utiliza un grupo de ligandos que presenten actividad biológica sobre el mismo receptor para inferir la estructura del ligando activo (Hung & Chen, 2014). En general se busca por similitud una subestructura común o farmacóforo entre los compuestos consultados. Los métodos del CVBL son:

- a) Métodos cuantitativos de relación estructura-actividad (QSAR por sus siglas en inglés). Busca establecer la correlación matemática entre los descriptores estructurales y fisicoquímicos de un grupo de compuestos con su función biológica y su potencia. El resultado es la construcción de un modelo estadístico para predecir la actividad de nuevos compuestos y realizar estudios de relación estructura actividad (SAR, en inglés) (Drwal & Griffith, 2013).
- b) Búsqueda por similitud. Permite recuperar compuestos con características similares a ligandos conocidos. Estas características se codifican como descriptores de dos o tres dimensiones (por ejemplo, los descriptores topológicos) en términos de huellas dactilares (*fingerprints*) (Agarwal & Fishwick, 2010).
- c) Farmacóforo. Es un modelo abstracto que se construye a partir del estudio de las interacciones moleculares que presenta un grupo de ligandos activos hacia su diana



terapéutica (interacciones: electrostáticas, hidrofóbicas, aromáticas pi - pi, puentes de hidrógeno, etc.). El farmacóforo se puede considerar como el común denominador compartido por un conjunto de moléculas activas (Rodrigues & Schneider, 2015).

- **Criterios para el curado de las librerías usadas en el CV**

Los filtros que se utilizan en la selección de moléculas activas buscan encontrar estructuras que posean un tipo de propiedades determinadas, por ejemplo: propiedades de fármacos (en inglés *drug-like*). Para ello, se sigue la “regla de los cinco” dada por Christopher Lipinski (Lipinski, 2004), la cual considera que, para que una molécula sea biodisponible oralmente no debe romper más de una de las siguientes reglas empíricas:

- Masa molecular inferior a  $500 \text{ g mol}^{-1}$ .
- Lipofilia expresada en función del coeficiente de partición octanol/agua (Log P) no mayor a 5.
- Número de puentes de hidrógeno (dadores) no mayor a 5.
- Número de puentes de hidrógeno (aceptores) no mayor a 10.

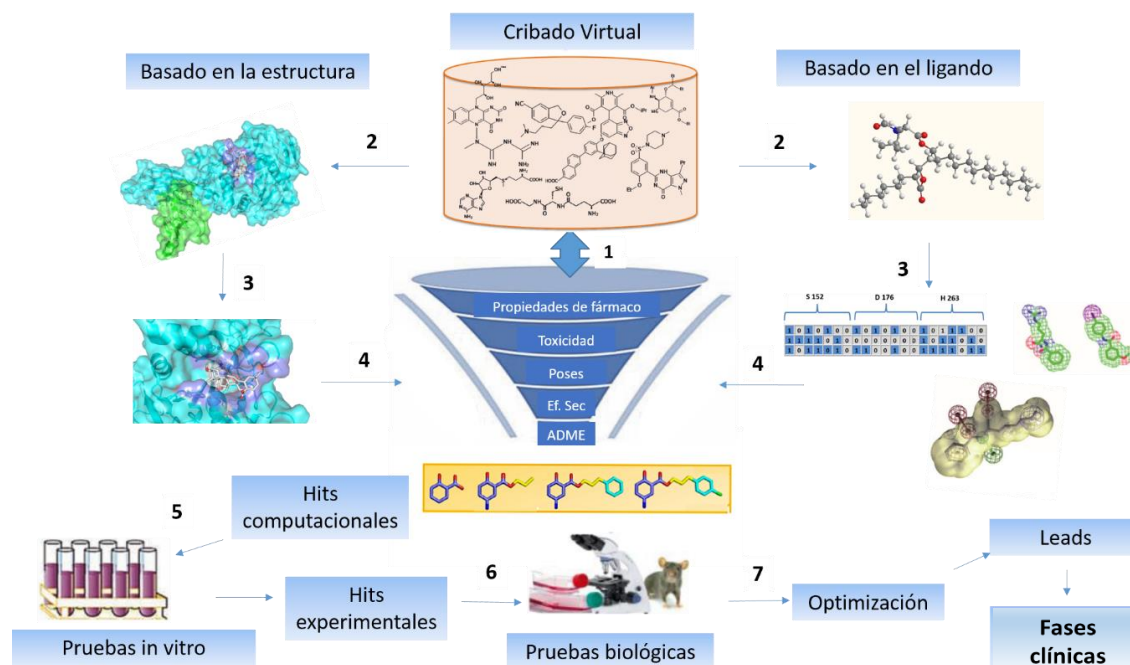
Sin embargo, muchos fármacos no cumplen con las reglas de Lipinski, particularmente los compuestos de origen natural. razón por la cual se han establecido los siguientes criterios con el fin de mejorar la biodisponibilidad oral del fármaco (Cerqueira et al., 2015):

- Log P entre -0,4 y 5,6.
- Masa molecular entre 160 y  $480 \text{ g mol}^{-1}$ .
- Número de átomos entre 20 y 70.
- Área superficial polar menor a  $140 \text{ \AA}^2$ .
- Refractividad molar entre 40 y 130.
- Número de enlaces rotables menor a 7

La inclusión de la predicción de propiedades ADME/T (Absorción, Distribución, Metabolismo, Eliminación y Toxicidad), en las etapas del CV, son un intento por optimizar la potencia y la farmacocinética de los ligandos (Kortagere & Ekins, 2010). La figura 1-8 resume el proceso general del cribado virtual basado en la estructura y el cribado virtual basado en el ligando.

**Figura 1-8.** Diagrama general para la obtención de candidatos a fármacos usando el cribado virtual (CV)

1. La base de datos es curada de acuerdo a las propiedades farmacocinéticas, toxicidad, fisicoquímicas etc. 2. Si se conoce el receptor se hace CVBE, sino se realiza CVBL. 3. Por CVBE, se obtendrán los valores de afinidad ligando-receptor; para el caso de CVBL se obtendrá un modelo de relación estructura- actividad. 4. El conjunto de biomoléculas es de nuevo evaluado considerando las propiedades farmacológicas para obtener posibles moléculas activas (*hits*). 5 Los compuestos seleccionados computacionalmente son evaluados experimentalmente. Los resultados de mejor actividad son considerados hits. 6 Posteriormente se realizan estudios de actividad biológica esperando alta actividad (< 100µM). 7 Los mejores resultados son optimizados estructuralmente con el fin de mejorar su potencia y ser modelo para el diseño (*leads*).



### 1.3.3 Aplicaciones exitosas del cribado virtual en el diseño y reposicionamiento de fármacos

El CVBE es una de las técnicas más utilizadas en los estudios *in silico*. Liu et al, utilizando CVBS descubrió dos inhibidores potenciales contra el receptor del factor de crecimiento insulínico tipo 1 (IGF-1R), el cual pertenece a la familia de tirosina quinasa y juega un papel fundamental en la vía de señalización que implica el crecimiento celular, la proliferación y la apoptosis (Liu et al., 2010).

La enzima Nueva Delhi metalo-β-lactamasa-1 (NDM-1), hace que las bacterias sean resistentes a casi todos los antibióticos betalactámicos. Utilizando el protocolo de

acoplamiento flexible de la proteína, Shen et al. estableció un modelo de interacción para la NDM-1 y ácido 3-tiofenocarboxílico. Los resultados revelaron que los átomos de azufre del ligando podrían interferir en el sitio activo de la NDM-1, proporcionando ideas útiles para el diseño racional de inhibidores contra la NDM-1 (Shen et al., 2013).

Algunos de los ejemplos más sobresalientes de la aplicación de técnicas computacionales en el descubrimiento de nuevos fármacos son (Medina-Franco, 2007; Sliwoski, Kothiwale, Meiler, & Lowe, 2014):

- La dorzolamida, un inhibidor de la anhidrasa carbónica, para la prevención del glaucoma, fue aprobado in 1995.
- El captopril, inhibidor de la enzima convertidora de angiotensina (ECA), el cual se obtuvo siguiendo el diseño de análogo activo. Fue aprobado en 1981 como fármaco antihipertensivo (figura 1-9a).
- El relenza, se puede considerar el único fármaco, hasta el momento, producto del DiFaC. Se aprobó para su uso clínico en 1999 con el nombre de zanamivir® contra el virus de la influenza (figura 1-9b).
- El saquinavir, (aprobado en 1995), ritonavir e indinavir (aprobados en 1996) y el tipranavir (aprobado en el 2005) (figura 1-9c) para el tratamiento de del virus de inmunodeficiencia humana (VIH).
- El tirofiban, un antagonista del fibrinógeno.

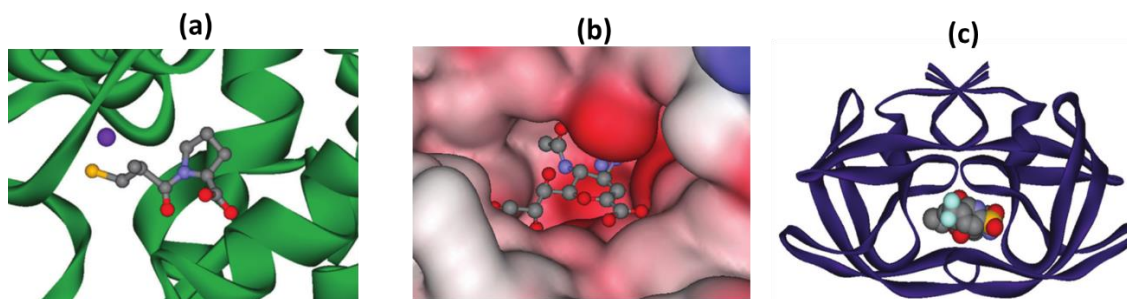
En cuanto al reposicionamiento de fármacos, Kinnings, empleando CVBE encontró que la entacapona, un fármaco inhibidor de la enzima catecol-O-metil transferasa (COMT) para el tratamiento de la enfermedad del Parkinson, podía ser utilizada en el tratamiento de la tuberculosis multirresistente (MDR) (Dudley, Deshpande, & Butte, 2011). Otro ejemplo de reposicionamiento de fármacos mediante técnicas computacionales es la cinanserina, un fármaco aprobado y usado como antagonista de la serotonina; obtuvo una nueva indicación como inhibidor potencial de la proteasa 3CL del coronavirus, el cual causa el SARs (síndrome respiratorio agudo grave). Dado que es un medicamento antiguo, su costo económico es bajo y tiene alto grado de seguridad (Zheng et al., 2013).

En el 2014, Méndez et al., haciendo uso de las técnicas de cribado virtual por similitud molecular, encontraron que la olsalazina, un fármaco usado como anti-inflamatorio,

presenta acción hipometilantes en el ADN, razón por la cual fue reportado como nuevo agente anticancerígeno (Mendez-Lucio, Tran, Medina-Franco, Meurice, & Muller, 2014). Ahora es comercializado bajo este nuevo uso terapéutico.

### Figura 1-9. Casos de éxito de la DiFAC

(a) Captopril – ECA (código PDB: 1UZP); (b) zanamavir – salidiasa (código PDB: 1A4G); (c) tripanavir – proteasa VIH (código PDB: 1D4S) (CV).



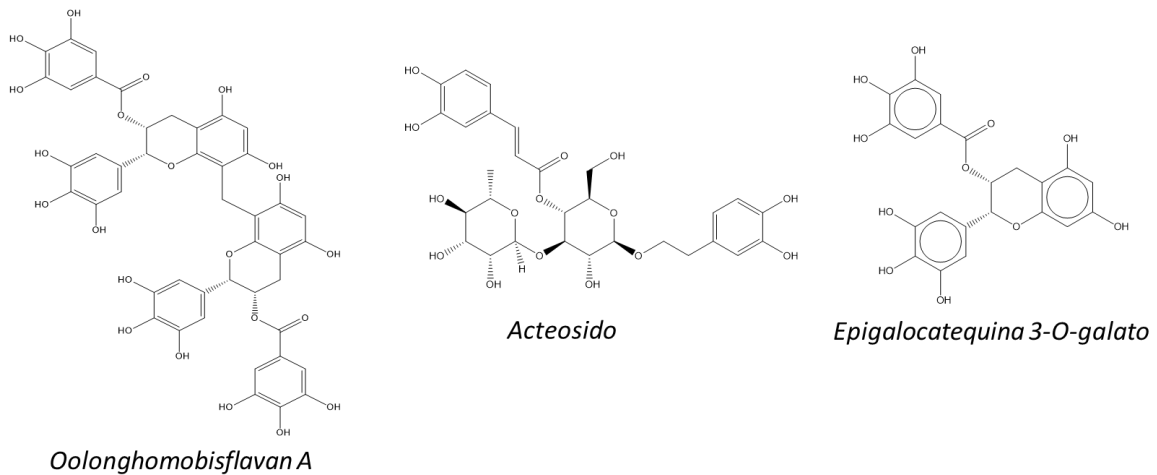
### 1.3.4 Antecedentes de estudios *in silico* de la enzima lipasa pancreática

Existe la necesidad de desarrollar nuevos agentes terapéuticos que permitan tratar la obesidad por largos periodos de tiempo, sin tener la preocupación de los efectos adversos que presentan la mayoría de fármacos antiobesidad. Los compuestos naturales identificados a partir de plantas medicinales tradicionales proporcionan una enorme cantidad de inhibidores de la LP, que posiblemente puedan convertirse en candidatos a fármacos (Bustanji, Al-Masri, et al., 2011).

Estudios realizados con extractos vegetales y con diferentes metabolitos secundarios aislados muestran alto grado de inhibición contra la enzima LP (Sharma, Sharma, & Seo, 2005; Birari & Bhutani, 2007; Yun, 2010; Nguyen et al., 2012; Sukhdev & Singh, 2013; Balaji et al., 2015). Es evidente que, dentro del grupo de metabolitos secundarios identificados de diferentes especies vegetales, los polifenoles representan el tipo de metabolitos secundarios con más reportes de inhibición sobre la enzima LP (Lunagariya et al., 2014; Mendoza M. & Medina V., 2015; Rahim et al., 2015). El alto número de grupos hidroxilo que poseen los polifenoles en su estructura les permite formar puentes de

hidrógeno e interacciones hidrofóbicas con el sitio activo o con sitios alostéricos de la enzima. Algunos ejemplos de polifenoles activos contra la LP están en la figura 1-10.

**Figura 1-10.** Polifenoles que presentan acción inhibitoria sobre la enzima lipasa pancreática.



Teniendo en cuenta las investigaciones hechas en el campo de los productos naturales, los estudios *in silico* han partido del análisis específico de ciertos compuestos hacia la LP. Es así como el acteósido (figura 1-11a), principal componente del té kudingcha (*Ligustrum purpurascens*) y la epigallocatequina-3-galato (EGCG) (figura 1-11b), el más potente constituyente del té verde, mostraron alta afinidad por la LP mediante interacciones no covalente de carácter hidrofóbico y puentes de hidrógeno mediante los cuales se explicaba la alta afinidad de unión del complejo polifenol – LP.

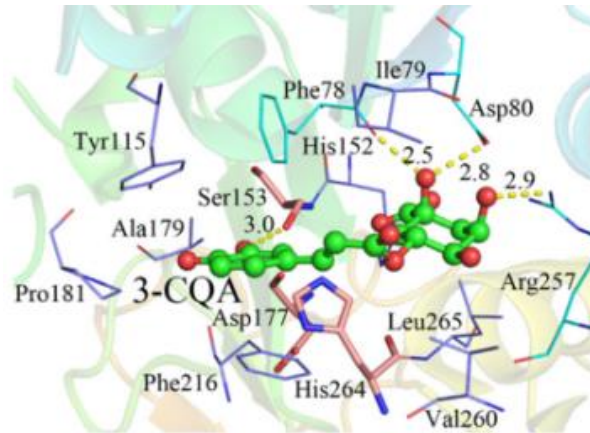
La interacción que presentan estos dos polifenoles con la enzima no es en el sitio activo sino en una región hidrofóbica de la enzima. Los resultados hallados por el acoplamiento molecular fueron coherentes con los resultados experimentales como espectrofotometría de fluorescencia y dicroísmo circular (Wu et al., 2013, 2014).

Otro estudio reporta la combinación de métodos *in silico* y métodos experimentales para evaluar la concentración inhibitoria 50 (IC<sub>50</sub>) de 12 chalconas aisladas de *Glycyrrhiza glabra* sobre lipasa pancreática porcina (LPP). Se encontró que la isoliquirigenina y el licurosido presentaban buenos resultados de IC<sub>50</sub> y de función de puntuación debido a las fuertes interacciones por puentes de hidrógeno entre las chalconas y los residuos de la triada



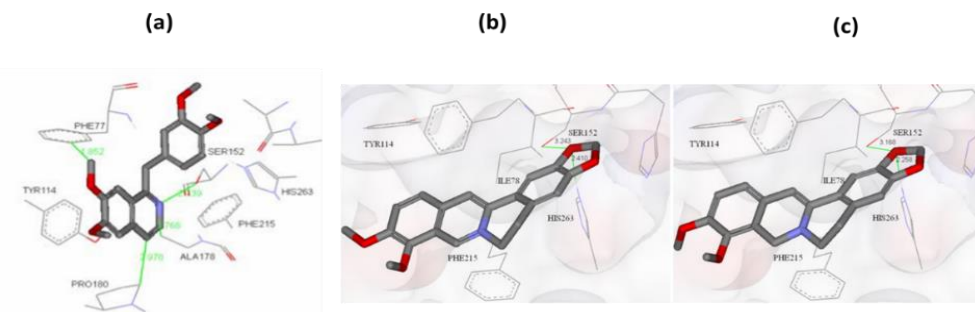
catalítico; también se destacan las interacciones aromáticas pi-pi con los residuos Phe78, Tyr115 y Phe216 (figura 1-13) (Hu, B. et al., 2015).

**Figura 1-13.** Acoplamiento molecular entre el ácido-3-cafeoilquínico y la LPP.



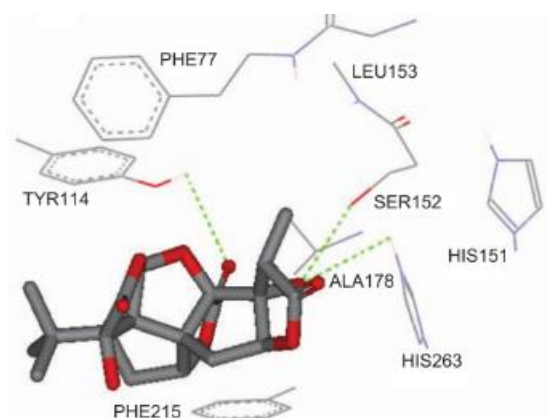
Los alcaloides isoquinolínicos también presentan bastante interés. La papaverina (Al-Masri, 2013), la dihidroberberina y la berberina (Mohammad, Al-Masri, Issa, Khdair, & Bustanji, 2013) fueron evaluadas *in silico* e *in vitro* hallando características muy similares (figura 1-14). La formación de puentes de hidrógeno ocurre con los mismos residuos (Ser152 e His263) que pertenecen a la triada catalítica; mientras que las interacciones aromáticas ocurren con los residuos clave Phe77 y Tyr114. La única diferencia evidente es el menor grado de inhibición que presenta la berberina debido a la presencia permanente de un centro catiónico en su estructura (Al-Masri, 2013).

**Figura 1-14.** Acoplamiento molecular de alcaloides isoquinolínicos con la LP. (a) papaverina; (b) berberina; (c) dihidroberberina.



Estudios reportan que las hojas de *Gingo biloba* tienen acción hipolipidémica. Su evaluación *in silico* mediante técnicas de acoplamiento molecular y, su posterior evaluación *in vitro* permitieron confirmar que los compuestos ginkgolidos A (figura 1-15), B, y bilobalido presentan actividad inhibitoria sobre la LP. El acoplamiento molecular mostró que hay fuerte interacción hidrofóbica con Phe215, Phe77 y Tyr114. También la formación de puentes de hidrógeno con Ser152, His263 y Tyr114 estabilizan el complejo ligando-LP (Bustanji, Al-Masri, et al., 2011).

**Figura 1-15.** Acoplamiento molecular del ginkgolido A con la LP.



Se reportan en la literatura dos estudios en los que se hace cribado virtual de bases de datos en busca de potenciales inhibidores de la enzima LP. En el primero, se realizó un estudio de CV a la base de datos de la medicina tradicional china (TCM, por sus siglas en inglés) de la cual se obtuvieron tres compuestos más activos que el orlistat: Aurantiamida, Cnidiadina y el ácido 2-hexadecenoico, todos ellos tuvieron bastante afinidad por la LP.

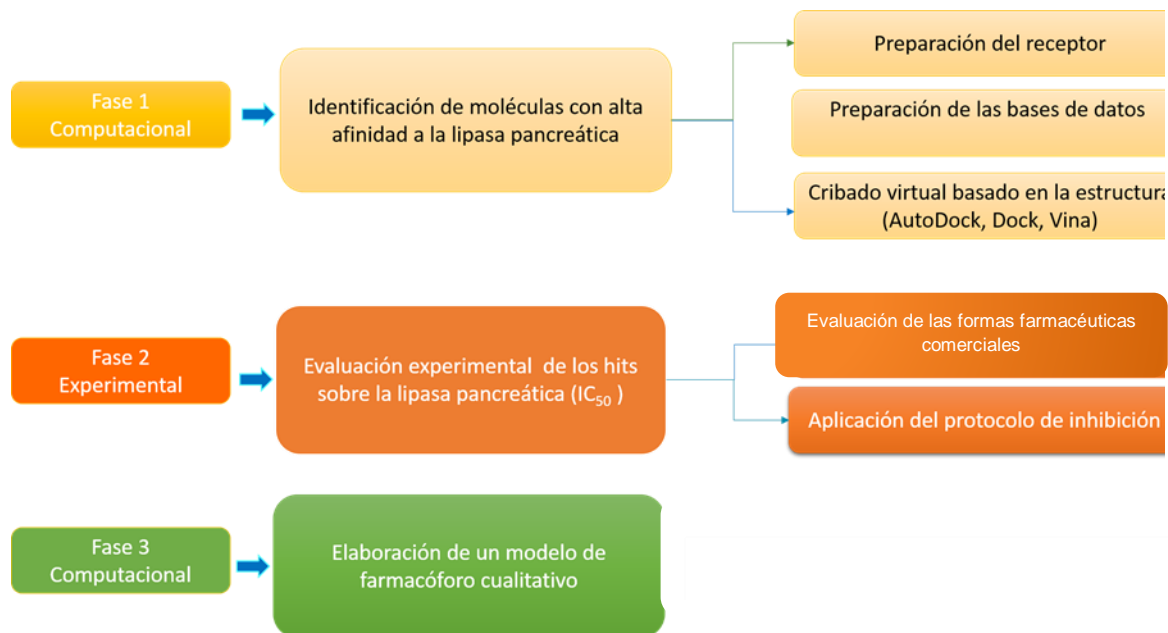
Se encontró que las principales interacciones son la formación de puentes de hidrogeno con His280, Arg128 y Phe94 (K. Y. Chen, Chang, & Chen, 2012). En el segundo estudio se realizó el CV a un grupo de moléculas de la base de datos de ZINC, mediante modelado del farmacóforo y acoplamiento molecular. Como resultado encontraron que la molécula ZINC85893731 fue la más estable en el sitio de unión producto de las interacciones por puentes de hidrógeno con la Ser152. Posteriormente optimizaron sus propiedades ADME/T dejando el compuesto como un *lead* para el diseño de inhibidores contra la lipasa pancreática (Veeramachaneni, Raj, Chalasani, Bondili, & Talluri, 2015).



## 2. Capítulo 2. Metodología

En el presente estudio se dividió en tres fases como se ilustra en la figura 2-1.

**Figura 2-1.** Diagrama general de la metodología aplicada en el estudio.



### 2.1 Fase 1. Identificación computacional

El estudio de cribado virtual se realizó con tres programas de acoplamiento molecular: AutoDock 4.2.6 (AD) (Cosconati et al., 2010; Morris et al., 2010), AutoDock Vina (ADV) (Trott & Olson, 2010) y Dock 6.7 (Kuntz, Blaney, Oatley, Langridge, & Ferrin, 1982; Lang, Brozell, Mukherjee, & Pettersen, 2009). Tanto AD como ADV utilizan un algoritmo genético para la búsqueda conformacional, mientras que Dock 6 utiliza algoritmos de construcción incremental para seleccionar la mejor orientación de los ligandos en el sitio de unión con la proteína. Cabe señalar que los tres programas son de distribución libre, sin embargo,

DOCK 6.7, solo está disponible de manera gratuita para instituciones académicas y su licencia es otorgada por la Universidad de California.

Todos los programas de acoplamiento molecular se ejecutaron en una estación de trabajo de 16 núcleos, con procesadores Intel Xeon bajo el sistema operativo Linux, Ubuntu 14.04.

### 2.1.1 Preparación de la proteína

La estructura cristalográfica de la enzima lipasa pancreática de homo sapiens fue obtenida del *Protein Data Bank* (PDB) (PDB Id: 1LPB) con una resolución de 2,46Å. Para el cribado virtual con AD y ADV, la preparación de la enzima se hizo con el programa AutoDockTools (ADT), para ello se realizó la adición de hidrógenos, asignación de órdenes de enlace, adición de cargas atómicas parciales (usando el modelo de Gasteiger), eliminación de átomos de oxígeno (correspondientes a moléculas de agua) y otros ligandos. Al final se obtuvo el archivo de preparación de la enzima en formato PDBQT. Se usó AutoGrid para preparar los mapas de energía y la rejilla (*grid*) se situó alrededor de la triada catalítica: Ser152, His263 y Asp176; sus dimensiones fueron 15,0 x 22,5 x 22,5 Å.

En el caso del programa de acoplamiento DOCK 6.7, se procesó el archivo .PDB de la enzima LP con el módulo Dock Prep del visualizador UCSF Chimera (Pettersen et al., 2004). La interfaz gráfica permitió realizar las mismas acciones que se mencionaron con ADT. Al final se obtuvo el archivo de preparación de la enzima en formato mol2. La superficie molecular fue generada con la herramienta dms, incluida en DOCK 6; Sphgen se usó para generar las esferas utilizando el archivo de salida dms y los ajustes por defecto. El sitio activo de la proteína se definió usando la herramienta sphere selector, para ello se utilizó el ligando cristalográfico, el enantiómero S del ácido metoxiundecilfosfónico (MUP). Para definir el tamaño de la rejilla alrededor del complejo enzima-MUP se utilizó la herramienta showbox estableciendo un valor de 10 Å, asegurando que toda el área del sitio activo quedara cubierta y disponible para evaluar las interacciones durante el cribado virtual. Los demás parámetros del acoplamiento fueron aceptados por defecto.

En los tres programas de acoplamiento la estructura de la proteína se mantuvo rígida y los ligandos flexibles.

### 2.1.2 Construcción de la librería

Se usaron siete librerías de compuestos comerciales obtenidas de la base de datos ZINC (Irwin & Shoichet, 2005), a saber: Banco de Fármacos (DrugBank) Banco de Fármacos y Nutraceúticos (DrugBank-N) (Law et al., 2014), Instituto Europeo de Bioinformática (ChEMBL DrugStore) (Bento et al., 2014), Fármacos aprobados por la FDA (FDA-approved drugs) (<http://www.epa.gov/nheerl/dsstox/>), Colección Internacional de Fármacos (International Drug Collection) (<http://www.msdiscovery.com>), Instituto Nacional del Cáncer de los Estados Unidos (NCI) (National Cancer Institute Diversity 3) (<http://dtp.nci.nih.gov>) y la Medicina Tradicional China (TCM) (C. Y. C. Chen, 2011).

Se construyeron dos bases de datos. La primera llamada fármacos LP, compuesta por Las bases de datos correspondientes a fármacos (DrugBank, DrugBank-N, ChEMBL DrugStore, FDA-approved drugs, International Drug Collection), con un total de 16102 compuestos. La segunda base se llamó productos naturales LP, constituida por las bases de datos de TCM y NCI con un total de 59257 compuestos. Las librerías fueron procesadas con el programa Chimera. Se generaron los tautómeros y los estados de ionización se fijaron a pH 7.0 ( $\pm 2$ ); la quiralidad fue retenida.

Luego de la preparación de los ligandos, la base de datos de fármacos LP quedó compuesta por 30009 ligandos, mientras que la base de datos de productos naturales LP quedó compuesta por 59260 ligandos.

### 2.1.3 Consenso y acoplamiento molecular (docking)

Las funciones de puntuación (*scoring function*) de AD y DOCK están basados en el campo de fuerza Amber, mientras que ADV tiene utiliza una función de puntuación híbrida (empírica – basada en el conocimiento).

Se utilizó como molécula de referencia para establecer los mejores valores de afinidad ligando-enzima el enantiómero S del ácido metoxiundecilfosfónico (MUP). Se realizó su acoplamiento molecular en AD, ADV y Dock 6. El valor de afinidad del complejo MUP–LP sirvió como valor de referencia para descartar los modelos de unión cuyos valores fueron menores. Los mejores modos de unión ligando–LP en cada uno de los programas se ordenaron de acuerdo a sus valores de afinidad (*docking score*).

Posteriormente se realizó el cribado virtual en cada programa. Los datos fueron obtenidos y exportados a un documento .csv mediante un script desarrollado bajo la asesoría de la Ingeniera de Sistemas Betsy Lancho. (Anexo A)

Posteriormente, los valores obtenidos en cada uno de los programas de acoplamiento fueron normalizados y clasificados por el método del promedio de la puntuación de autoescalado (PPAE) propuesto por Oda (Oda, Tsuchida, Takakura, Yamaotsu, & Hirono, 2006). Se aplicó la normalización de los datos de afinidad del complejo ligando-LP de manera independiente usando la ecuación 1

$$x_e = (x - x_{min}) / (x_{max} - x_{min}) \quad (1)$$

Donde,  $x_e$  es el valor de afinidad escalado obtenido en cada programa,  $x_{min}$  y  $x_{max}$  son los valores menor y mayor de afinidad en cada programa.

Posteriormente, se halló el valor consenso para cada molécula a partir de la PPAE aplicando la ecuación 2.

$$x_{PPAE} = \frac{x_{eAD} + x_{eADV} + x_{eDock6}}{n} \quad (2)$$

Donde  $x_{PPAE}$  es el valor de afinidad promedio,  $x_e$  es valor escalado en el respectivo programa AD, ADV y Dock 6; n es el número de programas usados (n=3).

Finalmente, los datos obtenidos se exportaron en archivo .csv y .xls para su correspondiente análisis.

## 2.2 Fase 2. Estudios *in vitro*

### 2.2.1 Determinación de la actividad inhibitoria de los fármacos (medicamentos) seleccionados

Los fármacos seleccionados dentro del consenso fueron evaluados contra la enzima lipasa pancreática con el objetivo de determinar la concentración necesaria para inhibir la actividad de la enzima en un 50 % (IC<sub>50</sub>). Debido a la restricción (o ausencia) de muchos

de los fármacos identificados en el consenso, no fue posible determinar el  $IC_{50}$  a los mejores resultados del cribado virtual. Sin embargo, se seleccionaron 20 fármacos alojados en las moléculas consenso con buenos valores de afinidad por la enzima. Los fármacos fueron adquiridos en la unidad de servicios de salud de la Universidad Nacional de Colombia (UNISALUD) y mediante una campaña de recolección. Los compuestos fueron sometidos a ensayos preliminares mediante bioautografía y posteriormente se determinó su  $IC_{50}$

### **Ensayo de Bioautografía**

20 compuestos obtenidos del consenso fueron evaluados contra la lipasa pancreática por bioautografía siguiendo el protocolo propuesto por Hassan (Hassan, 2012).

Dos tabletas de cada medicamento fueron maceradas para realizar la extracción sólido-liquido con cloroformo; se filtró, centrifugó y se llevó a sequedad. Posteriormente se tomó 1.0 mg del sólido y se disolvió en 0,5 mL de acetonitrilo obteniendo una solución patrón de 2000  $\mu\text{g/mL}$ . A partir de la solución anterior se realizaron seis siembras en una placa de sílica gel 60 (Merck) de 20 x 20 cm. La cantidad de soluto de cada fármaco que se colocó en la siembra fue de 100  $\mu\text{g}$ , 50  $\mu\text{g}$ , 20  $\mu\text{g}$ , 10  $\mu\text{g}$ , 5  $\mu\text{g}$  y 1  $\mu\text{g}$  respectivamente. La placa se asperjó con la lipasa pancreática porcina (Sigma Aldrich L3125-100G) 200U/mL. El sustrato utilizado fue el acetato de  $\alpha$ -naftilo. Se dejó incubar por 30 minutos a una temperatura de 37 °C. Finalmente, la placa se reveló con la sal de *fast blue*. El ensayo es positivo para la inhibición cuando se forma un halo blanco sobre la muestra evaluada. Se usó como control positivo de inhibición el fármaco orlistat en los seis rangos de concentración utilizadas en el ensayo.

### **Determinación del $IC_{50}$**

Para los compuestos seleccionados del ensayo bioautográfico se determinó el  $IC_{50}$ . Se preparó un patrón de 1000  $\mu\text{g/mL}$ , de cada compuesto a partir de su forma farmacéutica. La tableta fue pesada, macerada y disuelta en 1.0 mL de DMSO. Posteriormente se filtró al vacío y se recuperó el volumen usado en el filtrado. De la solución patrón se prepararon tres diluciones en serie cuyas concentraciones finales fueron de 500  $\mu\text{g/mL}$ , 200  $\mu\text{g/mL}$ , 100  $\mu\text{g/mL}$ .

La lipasa pancreática porcina se preparó disolviendo 13 mg en 10 mL de buffer fosfatos (pH=7,4); se adicionaron 13 mg de BSA (Albumina de Suero Bovino, Sigma Aldrich) para

estabilizar la enzima. El patrón de orlistat (Sigma Aldrich) se preparó a una concentración de 1000 µg/mL y se utilizó como control positivo de inhibición sobre la enzima LP. De manera similar al procedimiento realizado con los fármacos, se prepararon diluciones sucesivas obteniendo concentraciones finales de 500 µg/mL, 200 µg/mL y 100 µg/mL. Se usó como sustrato el p-nitrofenildodecanoato (Sigma Aldrich), el cual se preparó disolviendo 3,23 mg en 10 mL de acetonitrilo.

Los ensayos se llevaron a cabo en placas de 96 pozos. Se colocaron en reacción 175 µL de buffer fosfatos, 25 µL de cada solución de fármaco preparada (1000 µg/mL, 500 µg/mL, 200 µg/mL y 100 µg/mL), 25 µL de enzima y 25 µL de sustrato. Se incubó por 20 minutos y se tomaron las lecturas de absorbancia a 420 nm. El blanco estuvo compuesto por 25 µL de sustrato, 25 µL de enzima y 200 µL de buffer. Todos los ensayos se realizaron por triplicado.

Para hallar el porcentaje de inhibición se aplicó la ecuación 3:

$$\%Inh = \frac{Abs_{Blanco} - Abs_{muestra}}{Abs_{Blanco}} \times 100\% \quad (3)$$

### **2.3 Fase 3. Elaboración del modelo del farmacóforo cualitativo**

El modelo farmacofórico cualitativo propuesto en el presente estudio se elaboró a partir de los modelos farmacofóricos basados en la estructura de cada uno de los complejos obtenidos del acoplamiento molecular para las moléculas que presentaron mayor actividad en los ensayos de inhibición enzimática. Para esto, se usaron los diferentes visualizadores gráficos (Pymol, Chimera, Maestro y ADT), los mapas de interacción molecular en dos dimensiones (2D) obtenidos mediante el programa Maestro y el programa LiganScout 3.1, versión de prueba (Wolber, Langer, 2005; Wolber, Dornhofer, Langer, 2007). Las interacciones moleculares se determinaron a distancias menores a 5.0 Å.

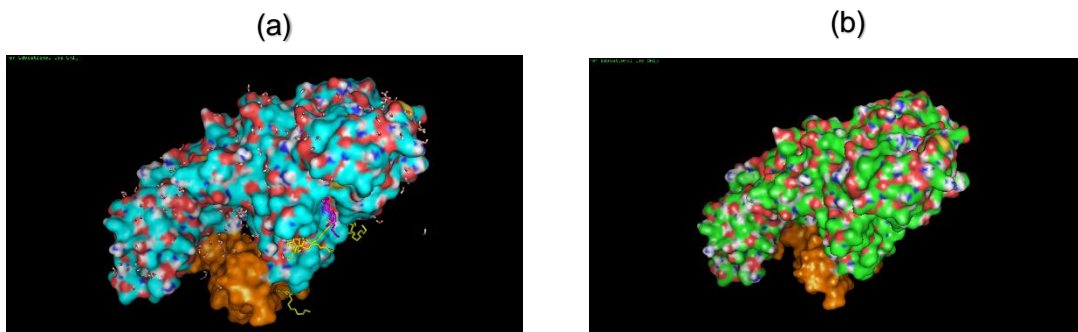
## 3. Capítulo 3 Resultados y discusión

### 3.1 Preparación de la enzima y curado de las librerías

La preparación del archivo de la enzima lipasa pancreática no tuvo inconvenientes ya que la totalidad de sus residuos se encuentran correctamente en el formato .pdb. En la figura 3-1 se puede observar el archivo sin preparar y el archivo luego de eliminar los ligandos cristalográficos, los átomos de oxígeno que corresponden a moléculas de agua provenientes de la cristalización y haber agregado los átomos de hidrógeno, tanto polares como no-polares, a la totalidad de los residuos. Si este procedimiento se hubiera realizado de manera errónea se verían afectados los resultados de afinidad enzima-ligando. Por ejemplo, la ausencia de hidrógenos polares afectaría la capacidad de formar enlaces de hidrogeno con los ligandos usados en el CV. Sin embargo, como se observa en la figura 3-1b el archivo quedó correcto para su uso en el CV.

**Figura 3-1.** Comparación del archivo de la enzima LP

(a) LP sin preparar (b) LP preparada.



Posteriormente, fueron preparadas las bases de datos definiendo sus formas tautoméricas y estados de protonación lo cual generó que el número de estructuras fuera mayor que el número original. Este procedimiento fue necesario dentro del CV ya que garantiza que las interacciones ligando-enzima sean las adecuadas a las condiciones de pH fisiológico que

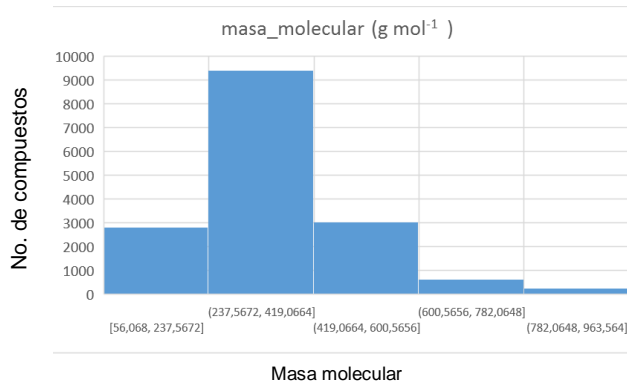
se simulan computacionalmente. Cuando se realiza el CV de una base de datos sin fijar previamente sus estados de ionización y los tautómeros, se podría incurrir en graves errores de manera que los resultados de sus interacciones podrían ser incorrectas y por tanto afectar también los valores de puntuación obtenidos durante el acoplamiento molecular. Mientras que una molécula protonada sólo puede hacer enlaces de hidrógeno, una estructura desprotonada puede hacer enlaces de hidrógeno y formar interacciones de tipo electrostático (que son más fuertes que los enlaces de hidrógeno y tienen la ventaja de no ser direccionales). Es decir, la magnitud de la interacción de un enlace de hidrógeno depende tanto de la distancia como del ángulo. El enlace de hidrógeno es una interacción anisotrópica, es decir, que depende del ángulo de interacción. En cambio, una interacción electrostática solo depende de la distancia, eso quiere decir que es isotrópica, no depende del ángulo.

Por otro lado, el curado de las bases de datos se realizó a partir del estudio de las propiedades moleculares consideradas por Lipinski en la “regla de los 5” (Lipinski, 2004), considerando además el área topológica superficial polar y el número de enlaces rotables.

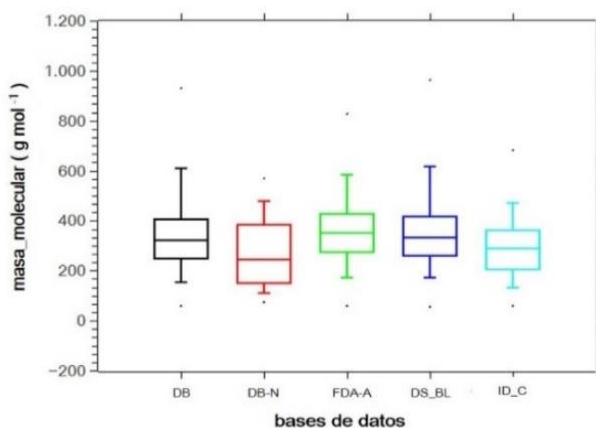
Con respecto a la masa molecular (figura 3-2), al comparar las bases de datos de fármacos se encontró que un alto número de compuestos está en el rango de 237 g mol<sup>-1</sup> a 419 g mol<sup>-1</sup>, lo que equivale a más del 75 % de los compuestos de cada base de datos. Además, presentan una distribución simétrica (figura 3-2b), a excepción de la base de datos del DrugBank-N la cual presenta un ligero sesgo positivo y, por tanto, mayor dispersión de sus datos. Sin embargo, la distribución encontrada permite inferir que los fármacos tienen buena disponibilidad oral. Con respecto a la base de productos naturales (figura 3-2c) se encontró que la distribución de los compuestos esta sesgada a la izquierda ( $\bar{X}$ =581,335; Md=596,673) lo cual indica que un alto número de compuestos se encuentra por encima del promedio superando el valor límite establecido por Lipinski de 500 g mol<sup>-1</sup>, sin embargo esto no incide negativamente dentro de la base de datos creada puesto que la biodisponibilidad oral de los productos naturales en muchas ocasiones no se ajusta a las reglas de Lipinski.



**Figura 3-2.** Distribución de la masa molecular en las bases de datos creadas  
 (a) histograma para las bases de datos de fármacos (b) diagrama de caja de cada una de las bases de datos de fármacos usadas c) histograma para la base de productos naturales

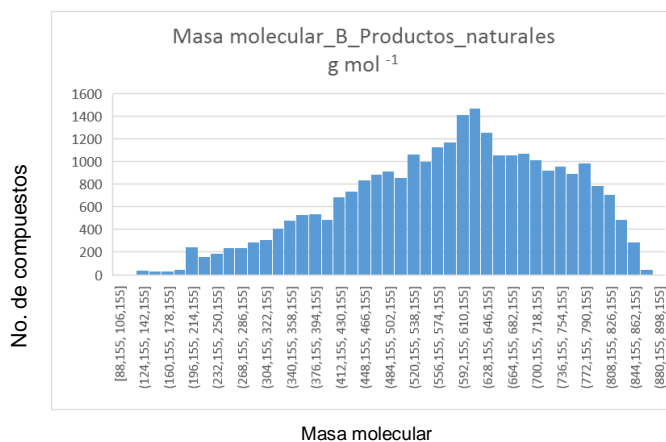


(a)



**DB:** DrugBank.  
**DB-N:** DrugBank-nutraceuticos.  
**FDA-A:** Fármacos aprobados por la FDA.  
**DS\_BL:** DrugStore ChEMBL.  
**ID\_C:** International Drug Collection

(b)

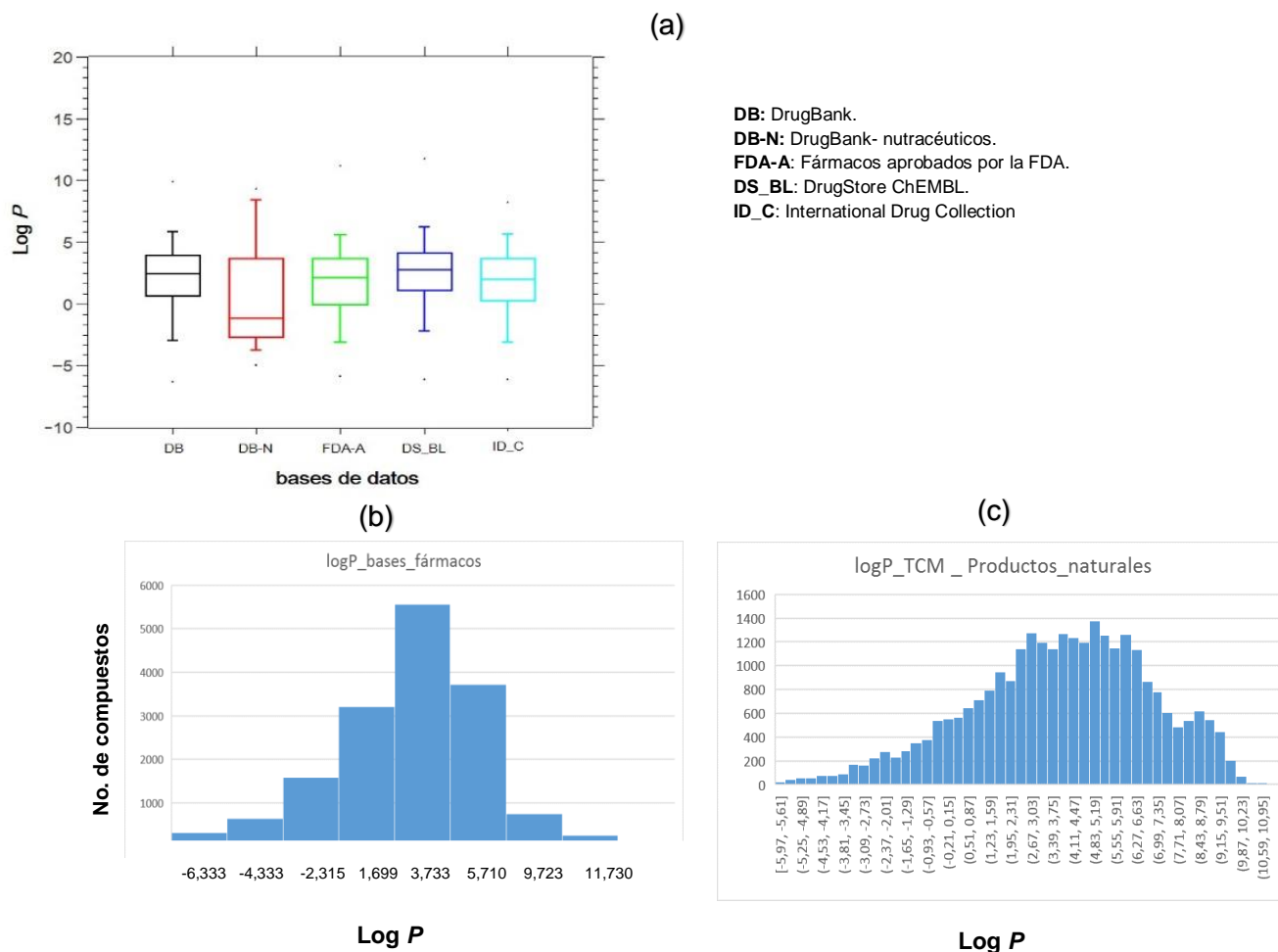


(c)

En cuanto al coeficiente de partición octanol/agua ( $\log P$ ) (figura 3-3a), se encontró que cerca del 75 % de los compuestos de las bases de datos estaban dentro del rango de Lipinski; sin embargo, la distribución de los compuestos en la base de datos creada muestra que hay gran cantidad de moléculas entre los valores de  $\log P$  de 1,697 y 3,730 en donde prevalecen moléculas de bajo carácter lipofílico (figura 3-3b). A diferencia de la base de datos de fármacos, la de productos naturales tiene un gran número de moléculas con elevados valores de  $\log P$  (figura 3-3c). Esta situación era de esperarse debido a la presencia de compuestos con estructuras más voluminosas, cadenas hidrocarbonadas saturadas más largas y mayores sustituyentes alquílicos entre otros factores que aumentan la lipofilia de las moléculas.

**Figura 3-3.** Distribución del  $\log P$  en las bases de datos de fármacos y productos naturales

(a) diagrama de caja (b) histograma (c) histograma productos naturales.



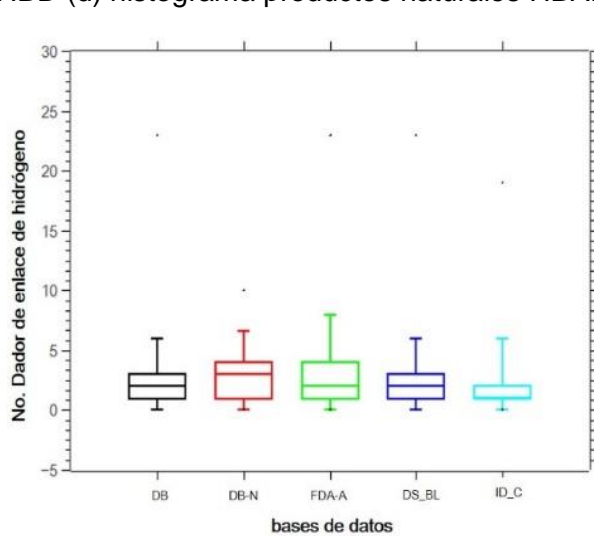
Por otro lado, la cantidad de moléculas que por lo menos pueden formar un enlace de hidrógeno (dadores), alcanza el 75% en cada base de datos (figura 3-4a) y presentan poca dispersión. Las moléculas que son aceptores de por lo menos 4 enlaces hidrógeno (figura 3-4b) alcanzan el 50 % de los compuestos en cada base de datos. Este indicador garantizó que varias de las moléculas encontradas en la formación del complejo ligando-LP pudieran formar puentes de hidrógeno intermoleculares, sobre todo, con los residuos de la triada catalítica. En el caso de la base de datos de productos naturales se desbordaron los límites de Lipinski tanto en capacidad aceptora (figura 3-4c) como donadora (figura 3-4d) debido a la presencia de grupos que tienen átomos electronegativos (O y N) en su estructura. A pesar de ello, cerca de la mitad de las moléculas de estudio de la base de datos creada está dentro de los rangos normales establecidos por Lipinski (donadores: Md=5; aceptores: Md=9).

Con el análisis del área topológica superficial polar (TPSA) se pudo verificar que cerca del 50% de los compuestos alojados en las bases de datos de fármacos tienen menos de 67 Å<sup>2</sup> (figura 3-5a), presentando un ligero sesgo positivo ( $\bar{X}=78,959$ , Md=67) (figura 3-5b) que confirma la agrupación de los datos por debajo de 67 Å<sup>2</sup>. Este dato favoreció la búsqueda de moléculas pequeñas y con poca superficie polar que permitiera la interacción con los residuos de la cavidad hidrofóbica de la LP. En el caso de la base de datos de productos naturales se observó (figura 3-5c) que la distribución de compuestos es bastante dispersa, siendo el rango de 68 a 206,58 Å<sup>2</sup> donde se encuentran la mayoría de compuestos.

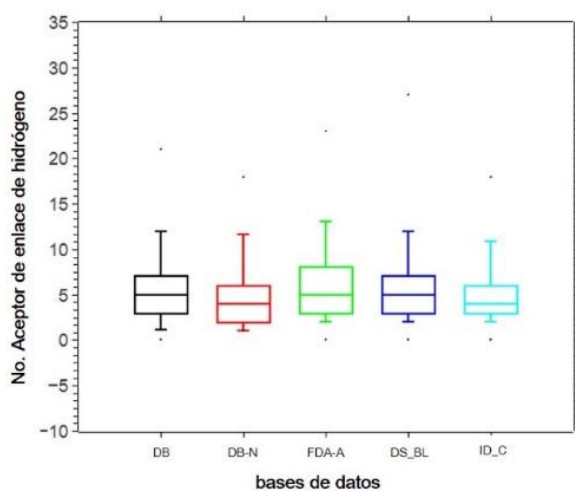
En cuanto al número de enlaces rotables (ER), se observó (figura 3-6a-b) tanto en el histograma como en el diagrama de caja que la mayor cantidad de compuestos están entre 1 y 9 enlaces rotables. En el caso de la base de datos de productos naturales (figura 3-6c) se observó un comportamiento similar obteniendo el 50% de los compuestos por debajo de los 9 enlaces rotables. Esto permitió encontrar moléculas dentro de los límites permitidos y favorecer un buen número de evaluaciones conformacionales en los compuestos (elemento que incidió en el alto gasto computacional y el elevado tiempo de evaluación que se consumió durante el cribado virtual). Se ha demostrado que la complejidad molecular en términos de la fracción de carbonos sp<sup>3</sup> (parámetro relacionado directamente con ER) de una molécula está relacionada con la especificidad por sus dianas terapéuticas y esto hace que disminuya el grado de promiscuidad molecular y por ende los efectos adversos.

**Figura 3-4.** Capacidad de formación de enlaces de hidrógeno.

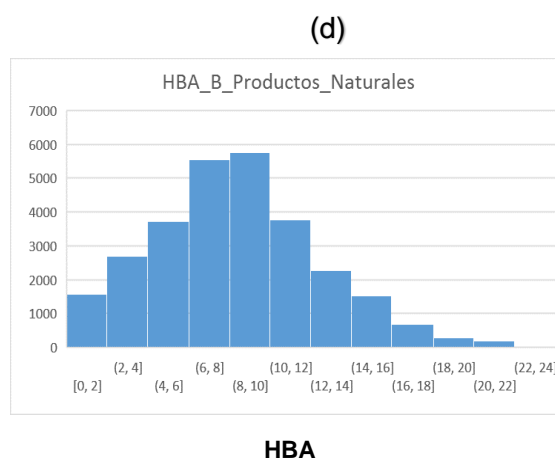
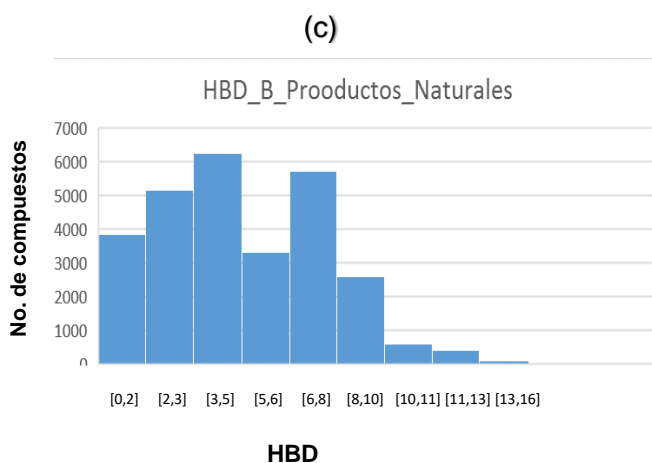
a) diagrama de caja HBD (b) diagrama de caja HBA (c) histograma productos naturales HBD (d) histograma productos naturales HBA.



DB: DrugBank.  
 DB-N: DrugBank- nutracéuticos.  
 FDA-A: Fármacos aprobados por la FDA.  
 DS\_BL: DrugStore ChEMBL.  
 ID\_C: International Drug Collection

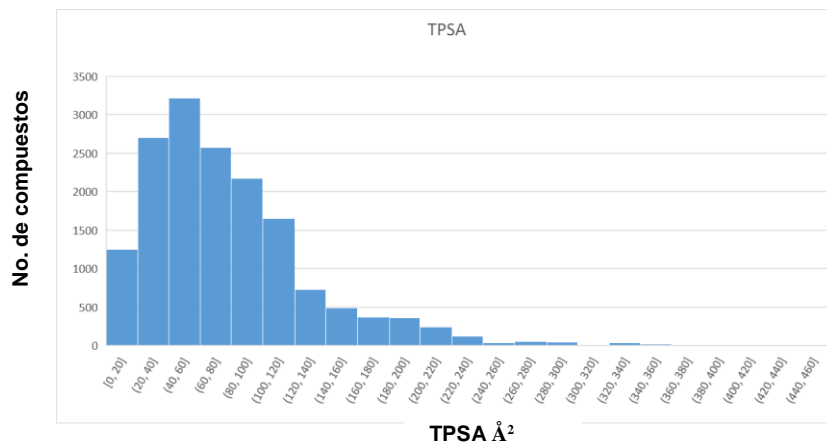


DB: DrugBank.  
 DB-N: DrugBank- nutracéuticos.  
 FDA-A: Fármacos aprobados por la FDA.  
 DS\_BL: DrugStore ChEMBL.  
 ID\_C: International Drug Collection

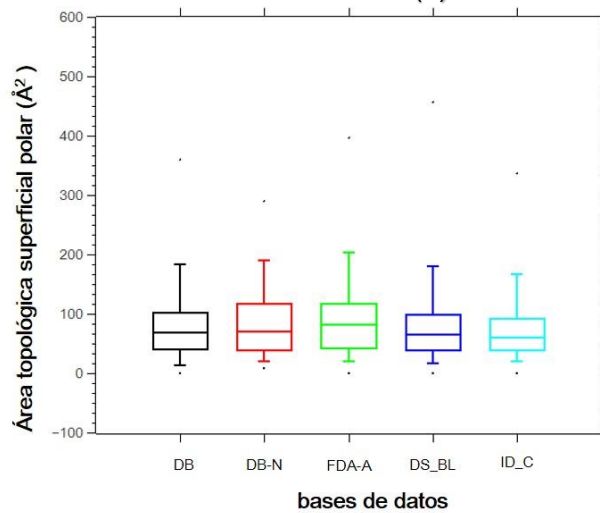


**Figura 3-5.** Distribución del área topológica superficial polar en las bases de datos

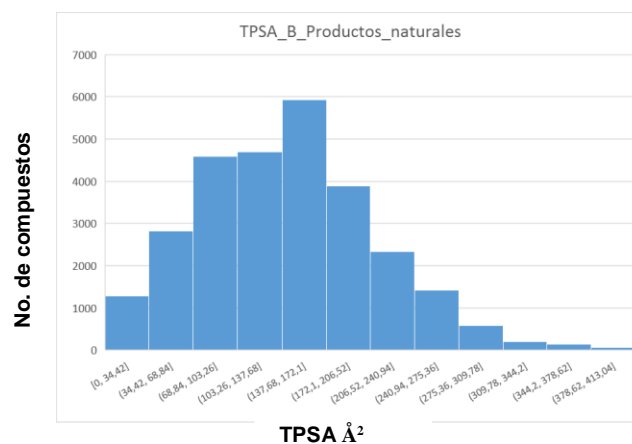
(a) histograma base de datos de fármacos, (b) diagrama de caja (c) histograma de la base de productos naturales



(b)

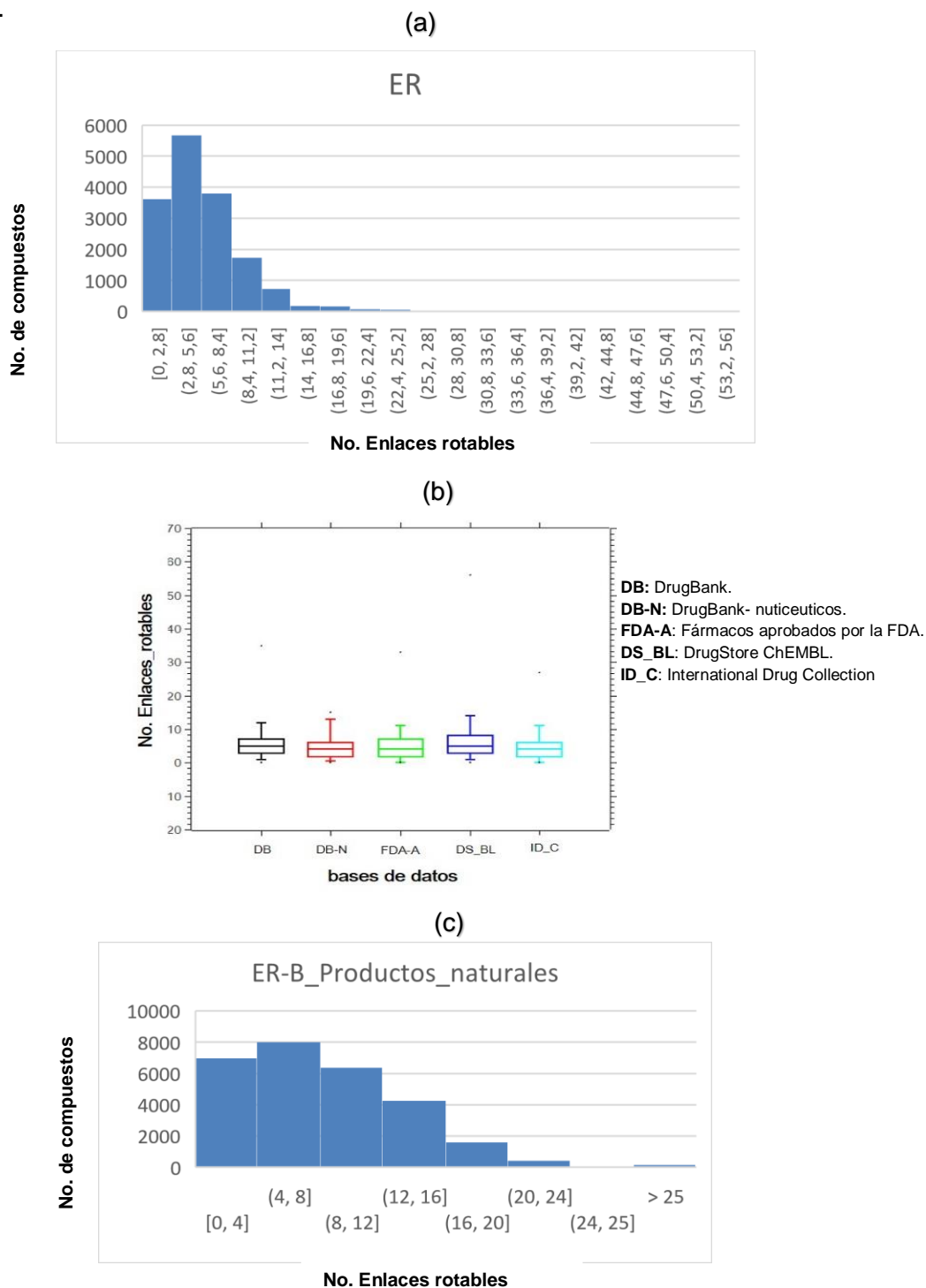


(c)



**Figura 3-6.** Distribución del número de enlaces rotables en las bases de datos evaluadas

(a) histograma B fármacos (b) diagrama de caja B fármacos (c) histograma productos naturales.



## 3.2 Reproducción del modo de unión y validación de los programas de acoplamiento molecular

En el proceso de reproducción del modo unión del complejo MUP-LP se observó que la energía de afinidad del complejo en los tres programas fue alta como se puede ver en la tabla 3-1. Es de aclarar que los datos que se obtienen en Dock 6 son mayores debido a que su función de evaluación genera un valor de puntuación no expresado en  $\Delta G$ .

**Tabla 3-1:** Valores de energía obtenidos para el complejo MUP-LP en AD, ADV y Dock6

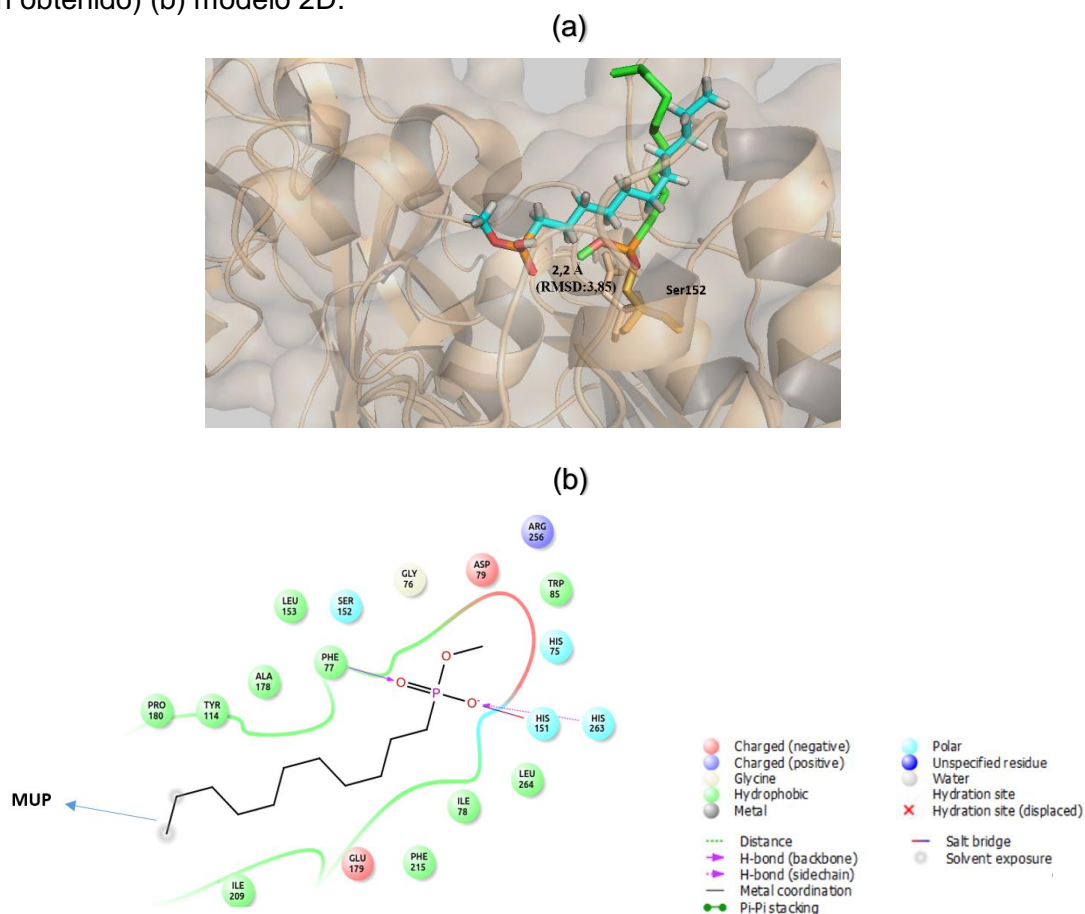
Molécula	AD (kcal/mol)	ADV (kcal/mol)	Dock 6	RMSD (Å)
MUP	-6,390	-5,900	-43,920	3,85

Su inspección visual (figura 3-6a) mostró un alejamiento de 2,2 Å con respecto al enlace Ser152-ligando cristalográfico, lo cual se evidenció en el alto valor obtenido de RMSD (3,85Å). Es de considerar que el ligando cristalográfico se encuentra unido covalentemente a la LP y, el modelo de acoplamiento aquí realizado es de carácter no covalente, lo cual incide en el valor del RMSD. Además, el MUP cuenta con 11 enlaces rotables en su cadena alquílica permitiéndole mayor flexibilidad e interacción con los residuos de la LP, lo que hace mucho más difícil poder reproducir las coordenadas atómicas de la cadena.

El modelo de acoplamiento (figura 3-7b) evidenció la interacción del MUP con residuos clave de la LP. Es así como, Phe77 e His263 forman enlaces de hidrógeno con el MUP. La cadena alquílica del MUP tiene interacciones de van de Waals con Ala178, Phe215, Pro180, Tyr114 en el bolsillo hidrofóbico. Con lo anterior se confirma que el modelo de reproducción del modo de unión MUP-LP fue adecuado, además, permitió eliminar moléculas cuyo valor de  $\Delta G$  fuera menor al obtenido para el complejo MUP-LP (-6,43 kcal mol<sup>-1</sup>), ya que se consideraron con poca afinidad por la enzima LP. Con esto se creó el primer “filtro” de selección dentro de cada uno de los programas usados, pasando de 30009 compuestos a, 23873 en AD, 22640 en ADV y 10478 en Dock6.

**Figura 3-7.** Reproducción del modo de unión MUP-LP

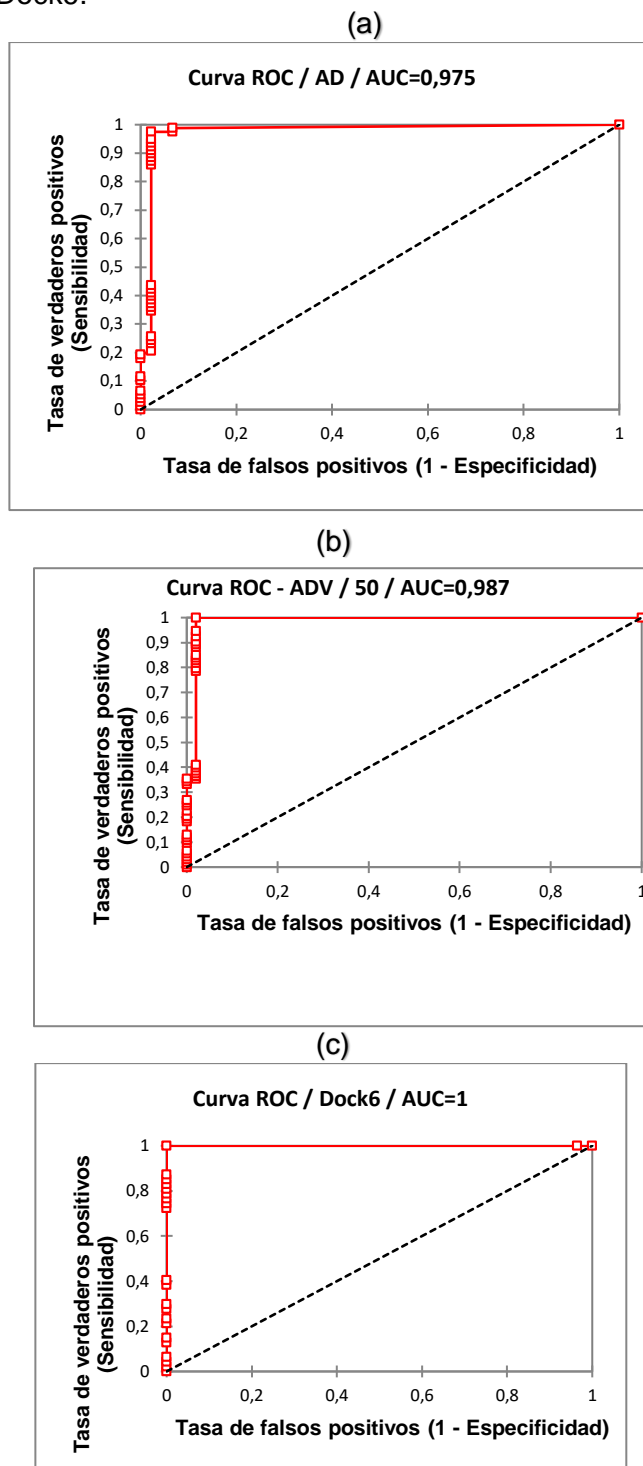
(a) modelo 3D (en color verde está el ligando cristalográfico, en color cian el modelo de unión obtenido) (b) modelo 2D.



Para verificar que los programas de acoplamiento hubieran realizado la selección adecuada de los compuestos activos, se hizo una curva ROC (acrónimo de Receiver Operating Characteristic, o Característica Operativa del Receptor) (figura 3-8 a-c) usando la base de datos de ChEMBL (Anexo B). Se emplearon 18 compuestos activos (definidos como inhibidores), 23 no activos y 36 compuestos señuelo. Con AD se pudo determinar que la probabilidad de identificar un compuesto activo está dada por una sensibilidad de 0,974, una especificidad del 0,975 y una prevalencia del 63 %. En ADV esta probabilidad aumentó ligeramente al tener una sensibilidad de 0,987, una especificidad de 1,00 y una prevalencia del 65%. Finalmente, Dock6 presentó los mejores resultados al tener una sensibilidad de 1,00, una especificidad de 1,00 y una prevalencia del 62%. Estos resultados permitieron garantizar que los programas usados fueran óptimos para obtener modelos de acoplamiento molecular con buenas tazas de precisión.



**Figura 3-8.** Curva ROC para los tres programas de acoplamiento molecular usados. (a) AD (b) ADV (c) Dock6.



### 3.3 Consenso de la base de datos fármacos LP

La puntuación consenso permitió combinar y mejorar la predicción de los modos de unión ligando-LP de los tres programas de acoplamiento con funciones de puntuación distintas, como lo afirma Houston (Houston & Walkinshaw, 2013). Al aplicar el método de Oda (Oda et al., 2006), los datos fueron normalizados disminuyendo la dispersión y agrupándolos en un rango de valores comprendidos entre cero y uno.

Luego de calcular el promedio de la puntuación de autoescalado, PPAE, (consenso) la base de datos de fármacos LP se redujo a 3916 compuestos (Anexo D), de los cuales se seleccionaron los diez mejores (tabla 3-2) para explicar con detalle las interacciones fármaco–receptor.

**Tabla 3-2:** Compuestos seleccionados del CV ordenados por su PPAE.

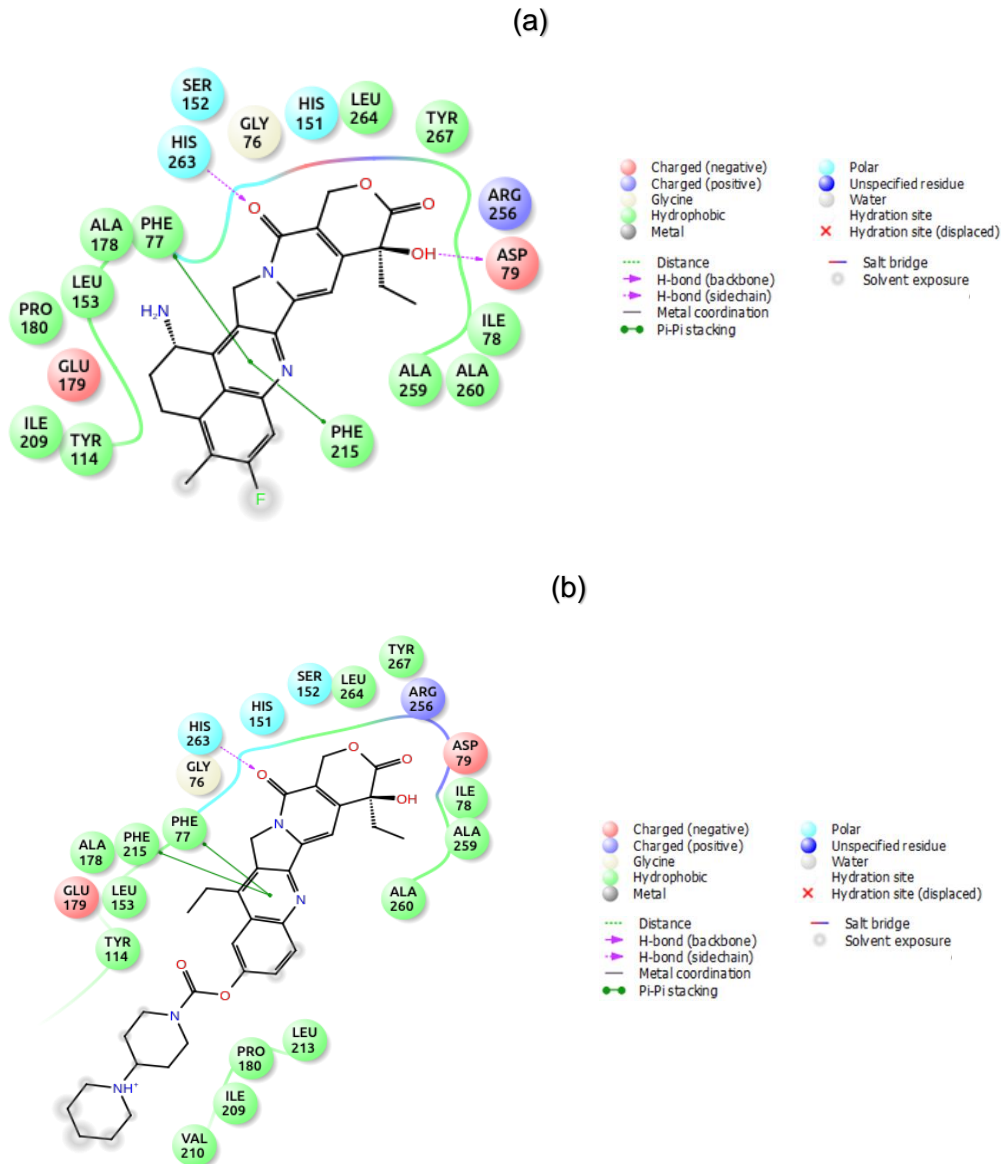
Pos PPAE	ZINC_ID	AD $\Delta G$ (kcal/mol)	Ae AD	ADV $\Delta G$ (kcal/mol)	Ae ADV	Dock6	Ae Dock6	Promedio	PPAE
1	ZINC03800855	-11,900	0,571	-13,000	1,000	-52,702	0,171	-25,867	0,581
2	ZINC01612996	-12,590	0,643	-11,000	0,714	-61,426	0,340	-28,339	0,566
3	ZINC04215707	-10,650	0,441	-10,700	0,671	-68,394	0,475	-29,915	0,529
4	ZINC56898800	-13,770	0,765	-11,100	0,729	-48,283	0,085	-24,384	0,526
5	ZINC03830369	-14,180	0,808	-9,700	0,529	-56,351	0,241	-26,744	0,526
6	ZINC04214893	-12,410	0,624	-9,300	0,471	-68,689	0,481	-30,133	0,526
7	ZINC43133316	-12,870	0,672	-10,500	0,643	-57,138	0,257	-26,836	0,524
8	ZINC08552001	-15,030	0,896	-10,500	0,643	-44,950	0,020	-23,493	0,520
9	ZINC03937143	-11,070	0,485	-11,400	0,771	-58,016	0,274	-26,829	0,510
10	ZINC03784373	-13,430	0,730	-11,100	0,729	-46,840	0,057	-23,790	0,505

Pos: Posición.  $\Delta G$ : energía. Ae: Valor de autoescalado. Prom: promedio. PPAE: Puntuación promedio de autoescalado (valor consenso de cada compuesto).

Las dos primeras moléculas con código ZINC03800855 y ZINC01612996 fueron clasificadas como 1 y 2 respectivamente e identificadas como exatecan (figura 3-9a) e

irinotecan (figura 3-9b). Ambas moléculas son utilizadas en tratamientos antineoplásicos. El exatecan es un derivado semisintético de la camptotecina el cual inhibe la actividad de la topoisomerasa I y por tanto inhibe la replicación del ADN. Por su parte, el irinotecan es usado en quimioterapia para el tratamiento del cáncer de colon y de recto.

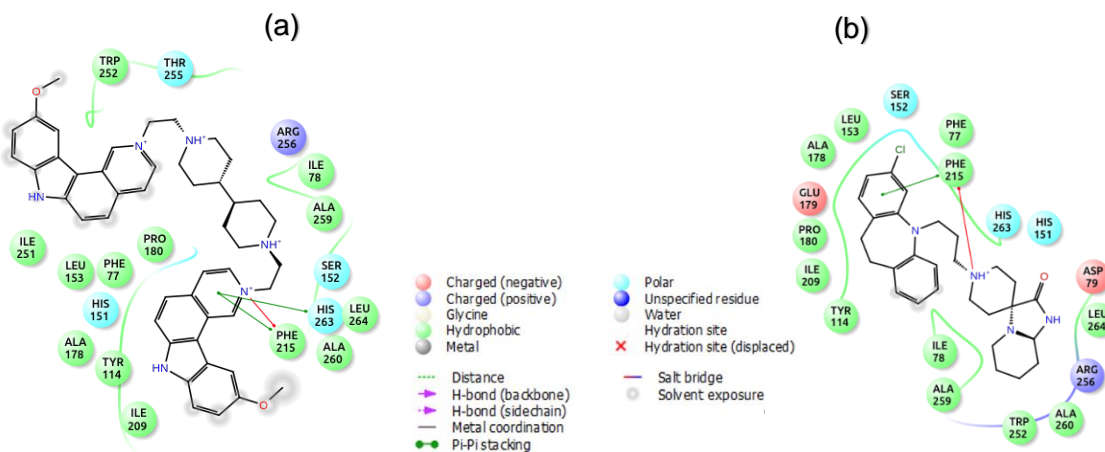
**Figura 3-9:** Diagrama de interacción 2D del complejo exatecan-LP(a), e irinotecan-LP (b)



Se pudo observar en el diagrama 2D que ambas moléculas forman interacciones similares con la enzima LP. Un importante puente de hidrógeno tuvo lugar entre el grupo carbonilo en ambos compuestos y la His263, residuo clave, cuya acción catalítica se da sobre la Ser152 durante el proceso de hidrólisis del sustrato. También existen interacciones de apilamiento pi-pi con Phe77 y Phe215, residuos clave en la estabilización del oxianión y de la cadena lateral del sustrato durante la hidrólisis (Egloff, Marie-Perre, Merguet Frank, Buono Gerard, Verger Robert, Cambillau Christian Tilbeurgh, 1995). También se observó la formación de un segundo puente de hidrógeno entre el Asp79 y el grupo hidroxilo del exatecan. Esta última interacción no estuvo presente en el irinotecan. Esto explicaría por qué el complejo exatecan-LP tiene mayor afinidad que el formado por el irinotecan.

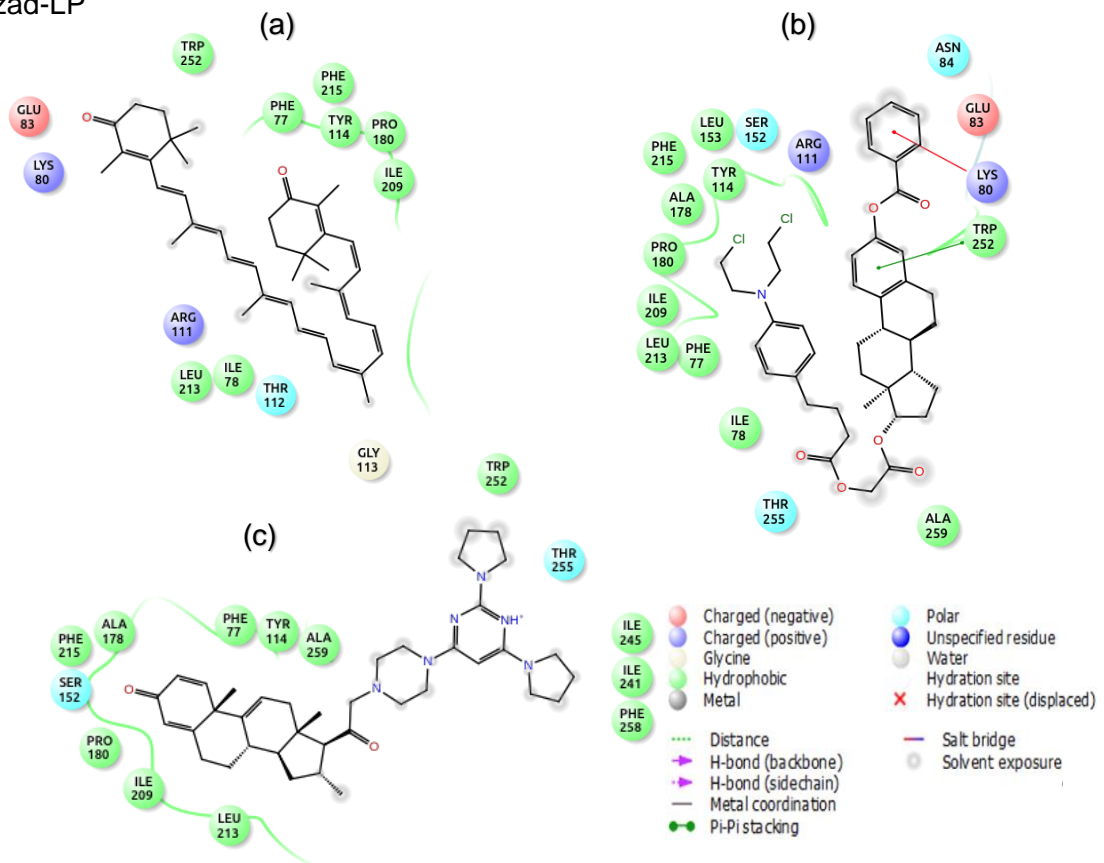
Las moléculas 3 y 4 con códigos ZINC04215707 y ZINC56898800 fueron identificadas como clorhidrato de ditercalinium y clorhidrato de mosapramina respectivamente. El clorhidrato de ditercalinium es un agente quimioterapéutico que actúa como intercalador a nivel del ADN, mientras que, el clorhidrato de mosapramina es un agente antisicótico, antagonista de la dopamina. Ambas moléculas presentaron una fuerte interacción pi-cación con la LP, como se puede observar en su diagrama de interacciones 2D (figura 3-10a-b). Esta interacción se presentó con Phe215 que hace parte de la cavidad hidrofóbica en donde se estabiliza la cadena acídica del sustrato. Esta interacción se ve reforzada por otra de tipo apilamiento aromático. El ditercalinium estabiliza de mejor manera el complejo gracias a la formación de otra interacción de apilamiento con His263.

**Figura 3-10:** Diagrama 2D del complejo ditercalinium-LP (a) y mosapramina-LP (b)



Las moléculas 5, 6 y 7 con códigos ZINC03830369, ZINC04214893, ZINC43133316 respectivamente, fueron identificadas como 2,4,4-trimetil-3-[3,7,12,16-tetrametil-18-(2,6,6-trimetil-3-oxo-1-ciclohexenil)-octadeca-1,3,5,7 (figura 3-11a), la atrimustina (figura 3-11b) y tirilazad (figura 3-11c). La atrimustina es un fármaco antineoplásico alquilante usado en Japón para el tratamiento de cáncer de mama y el linfoma no Hodgkins. El tirilazad es un amino-esteroide, inhibidor de la peroxidación de membrana que ha mostrado resultados prometedores contra la isquemia cerebral en modelos animales. Las interacciones que predominaron en este grupo de moléculas fueron de van de Waals en la cavidad hidrofóbica de la enzima. Estas interacciones, aunque son débiles, retardarían el ingreso del sustrato a la enzima ya que se dan sobre la entrada a la cavidad hidrofóbica de la proteína. En el caso de la atrimustina se observa una interacción pi-cación con Lys80 bastante lejano de la triada catalítica y de zonas importantes de la enzima, sin embargo, podría incidir en un cambio conformacional en la enzima que impida la interacción adecuada con el sustrato.

**Figura 3-11:** Diagrama 2D del complejo (a) ZINC03830369-LP, (b) atrimustina-LP y (c) tirilazad-LP

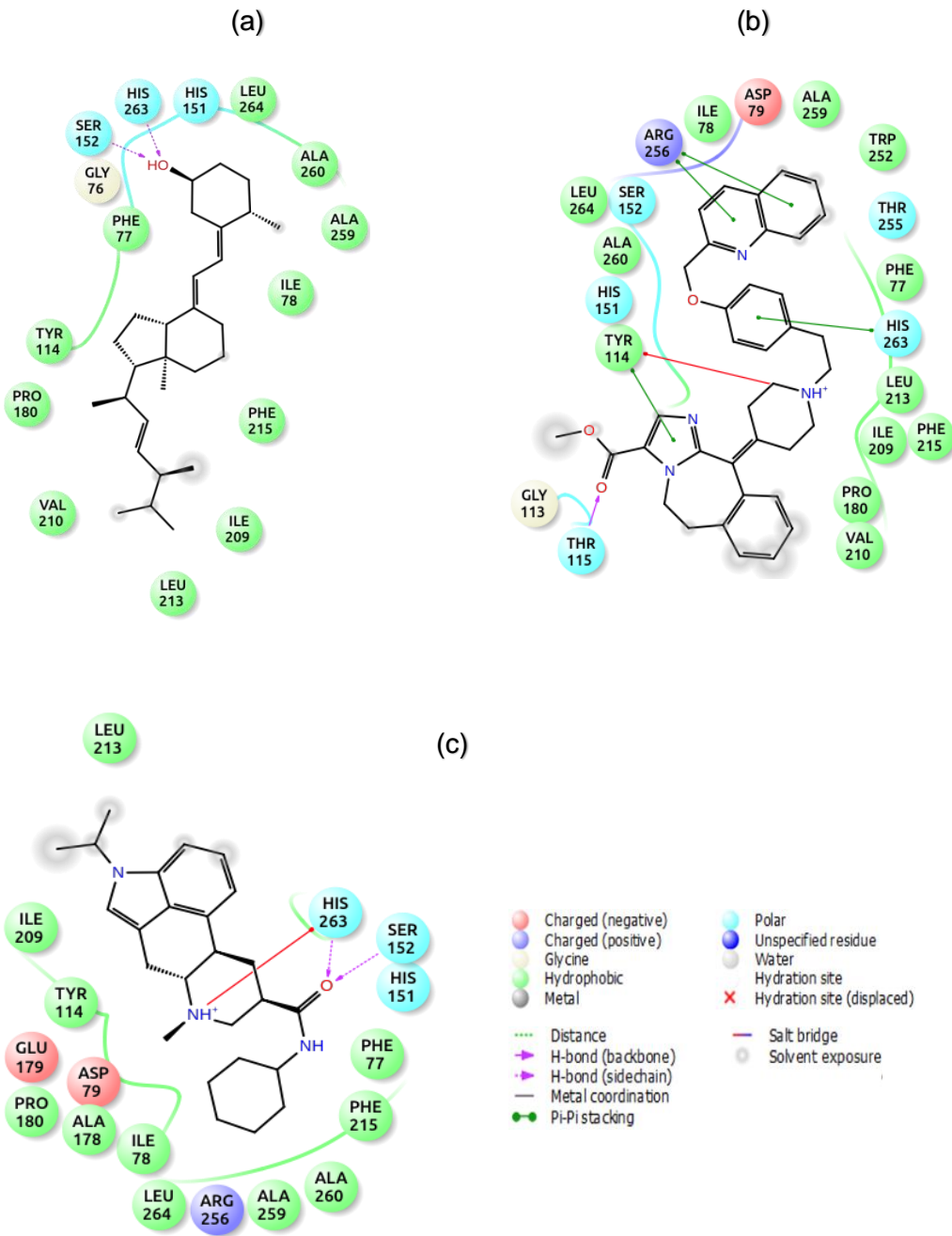


Las moléculas 8, 9 y 10 con código ZINC08552001, ZINC03937143 y ZINC03784373 respectivamente e identificadas como 3-[2-[7a-methyl-1-(1,4,5-trimethylhex-2-enyl)-2,3,3a,5,6,7-hexahydro-1H-inden-4-ylidene]ethylidene]- (figura 3-12a), laniquidar (figura 3-12b) y amesergide (figura 3-12c). El laniquidar es un inhibidor de la glicoproteína P y se encuentra bajo estudios para el tratamiento de la leucemia mieloide aguda y el síndrome mielodisplástico. El amesergide es un antagonista del receptor 5-HT<sub>1C/2</sub> desarrollado para el tratamiento de la depresión.

En la interacción LP-ZINC08552001 se observó la formación de un puente de hidrógeno entre el grupo hidroxilo del ligando y los residuos Ser152 e His263. Por su parte el amesergide presenta dos puentes de hidrógeno, uno con His263 y otro con Ser152. Estas dos moléculas, presentan interacciones con los residuos clave que pertenecen a la triada catalítica y, teóricamente competirían con el sustrato por el sitio de unión. Además, el amesergide presenta una fuerte interacción pi-cación entre el grupo amino del ligando (perteneciente a la piperidina) y la His263, debido a la alta densidad electrónica que se aloja sobre este aminoácido.

El laniquidar presenta un mayor número de interacciones dentro de la cavidad de la enzima; se observó la formación de cuatro interacciones por apilamiento pi-pi entre el ligando y los residuos aminoacídicos Arg256, His263 y Tyr114; esta interacción se debe al solapamiento de los orbitales p del doble enlace de la Arg256 e His263 con los anillos aromáticos del ligando, además de que estos dos aminoácidos al pH de la enzima se encuentran protonados. También se observó una fuerte interacción pi-cación entre el ligando y la Tyr114, residuo fundamental en la interacción hidrofóbica de la enzima y el triacilglicerol durante la orientación del sustrato en la cavidad enzimática.

**Figura 3-12:** Diagrama 2D del complejo (a) ZINC08552001-LP, (b) laniquidar-LP y (c) amesergide-LP



### 3.4 Consenso de la base de datos de productos naturales LP

Varios y diferentes compuestos de fuentes naturales con actividad inhibitoria sobre la enzima LP han sido reportados en la literatura (Birari & Bhutani, 2007; Bustanji, Mohammad, et al., 2011; X. Hu et al., 2016; Lunagariya et al., 2014; Yun, 2010). La cultura china ha reportado, desde la dinastía Han, síntomas, mecanismos y factores de riesgo vinculados a la obesidad, así como el uso de plantas, acupuntura y prácticas de vida para controlar el exceso de peso (Sui et al., 2012). A nivel mundial, la base de datos de TCM cobra gran importancia por ser una de las más grandes (Chen, 2011) ya que se ha encargado de recopilar las estructuras químicas de metabolitos aislados e identificados de productos naturales de esta cultura milenaria y los ha colocado a disposición de la comunidad científica para usarlos en la búsqueda de compuestos líderes contra diversas dianas moleculares a través del cribado virtual.

Luego de haber realizado el cribado virtual de la librería de TCM y haber obtenido el consenso de los compuestos con mejor clasificación se procedió a determinar sus interacciones con la LP. Los resultados para los 5 mejores compuestos se encuentran en la tabla 3-3. De manera general, las moléculas encontradas con alta afinidad por la enzima son de tipo polifenol como se reporta en la literatura (Birari & Bhutani, 2007; Bujjirao & Kumar, 2013; Grove, Sae-tan, Kennett, & Lambert, 2012; He, Lv, & Yao, 2006; X. Hu et al., 2016; Wu et al., 2013, 2014)

La molécula ZINC04098621 (figura 3-13) clasificada como 1 mostró dos puentes de hidrógeno con los residuos His263 y Ser152 que explica la alta afinidad ligando-enzima, además presenta tres interacciones de apilamiento pi-pi, uno con Phe215, residuo clave en la estabilización de la cadena acílica. El segundo apilamiento se da con Phe77, residuo clave en la estabilización del intermediario tetraédrico; el tercer apilamiento se da con His263, residuo catalítico clave en el proceso de hidrólisis del triacilglicerol. La estabilidad de este complejo puede ser debida a la alta densidad electrónica entre los anillos aromáticos y el elevado número de grupos donadores de electrones como lo son los grupos hidroxilo unidos a ellos.

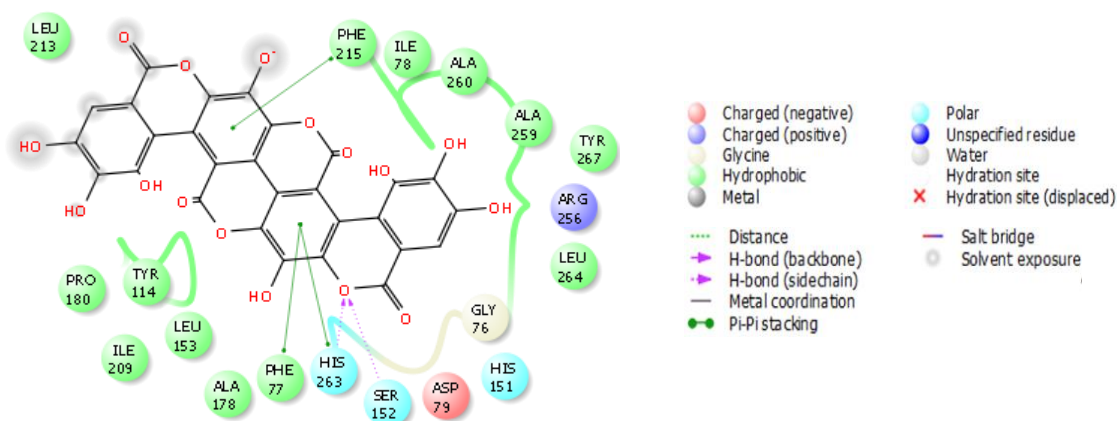


**Tabla 3-3:** Posición de los compuestos seleccionados del CV de la base de datos de productos naturales. Se encuentran ordenados de acuerdo a su PPAE.

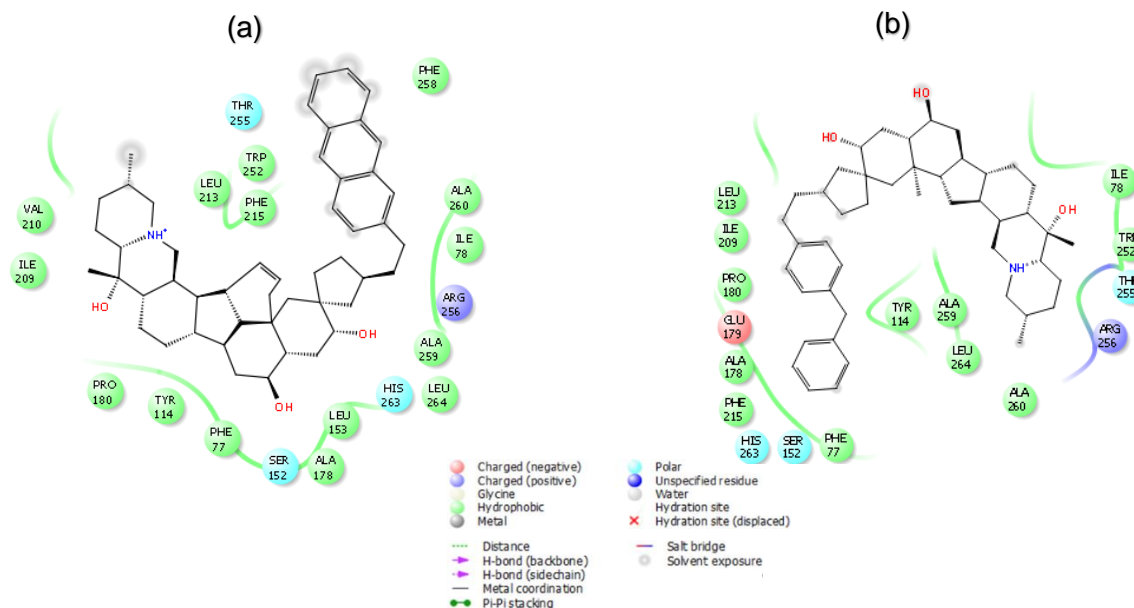
Pos PPAE	ZINC_ID	AD $\Delta G$ (kcal/mol)	Ae AD	ADV $\Delta G$ (kcal/mol)	Ae ADV	Dock6 $\Delta G$ (kcal/mol)	Ae Dock6	Prom_E (kcal/mol)	PPAE
1	ZINC04098621	-13,400	0,609	-12,000	0,714	-71,114	0,506	-32,171	0,610
2	ZINC85542831	-14,760	0,728	-12,500	0,774	-57,443	0,251	-28,234	0,584
3	ZINC85542633	-15,620	0,802	-13,600	0,905	-45,966	0,037	-25,062	0,581
4	ZINC85542639	-15,450	0,788	-12,100	0,726	-55,573	0,216	-27,708	0,577
5	ZINC85542636	-16,380	0,869	-12,500	0,774	-46,648	0,049	-25,176	0,564

Pos: Posición.  $\Delta G$  : energía. Ae: Valor de autoescalado. Prom: promedio. PPAE: Puntuación promedio de autoescalado (valor consenso de cada compuesto).

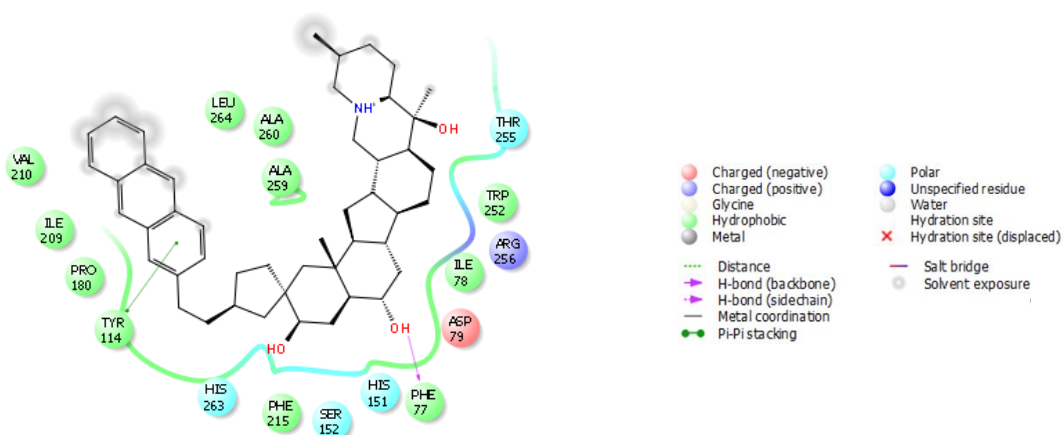
**Figura 3-13:** Diagrama 2D del complejo ZINC04098621-LP



Las moléculas ZINC85542831 (figura 3-14a) y ZINC85542639 (figura 3-14b) clasificadas como 2 y 4 respectivamente, presentaron sólo interacciones de van der Waals con residuos apolares en la cavidad hidrofóbica. La conformación que las moléculas asumieron al interior de la enzima permite ver que cubren el espacio contiguo al de la triada catalítica lo cual se podría utilizar como elemento de bloqueo del ingreso del sustrato a la enzima.

**Figura 3-14:** Diagrama 2D del complejo (a) ZINC85542831-LP, (b) ZINC85542639-LP.

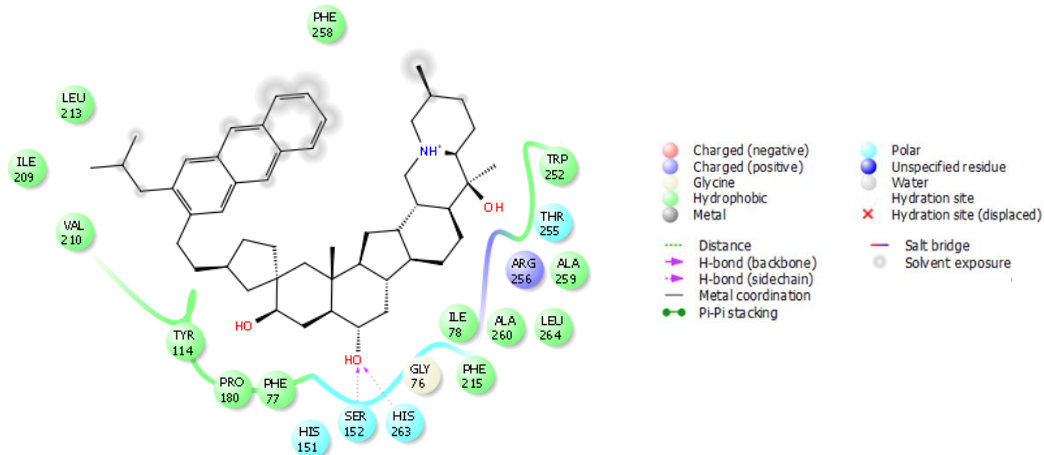
La molécula ZINC85542633 (figura 3-15) clasificada como 3 mostró un puente de hidrógeno con Phe77 y un apilamiento pi-pi con Tyr114. Estas interacciones sumadas a la conformación que asume el ligando en la cavidad cubren la región hidrofóbica lo que impediría la correcta orientación de la cadena acílica del sustrato durante su hidrólisis.

**Figura 3-15:** Diagrama 2D del complejo ZINC85542633-LP.

La molécula ZINC85542636 clasificada como número 5 (figura 3-16), presentó interacciones de puente de hidrógeno con los residuos de la triada catalítica Ser152 e

His263, que como ya se ha mencionado en otros casos, impediría la hidrólisis del triacilglicerol y por tanto sería un potencial inhibidor de la enzima lipasa pancreática.

**Figura 3-16:** Diagrama 2D del complejo ZINC85542636-LP



### 3.5 Determinación de la actividad inhibitoria ( $IC_{50}$ )

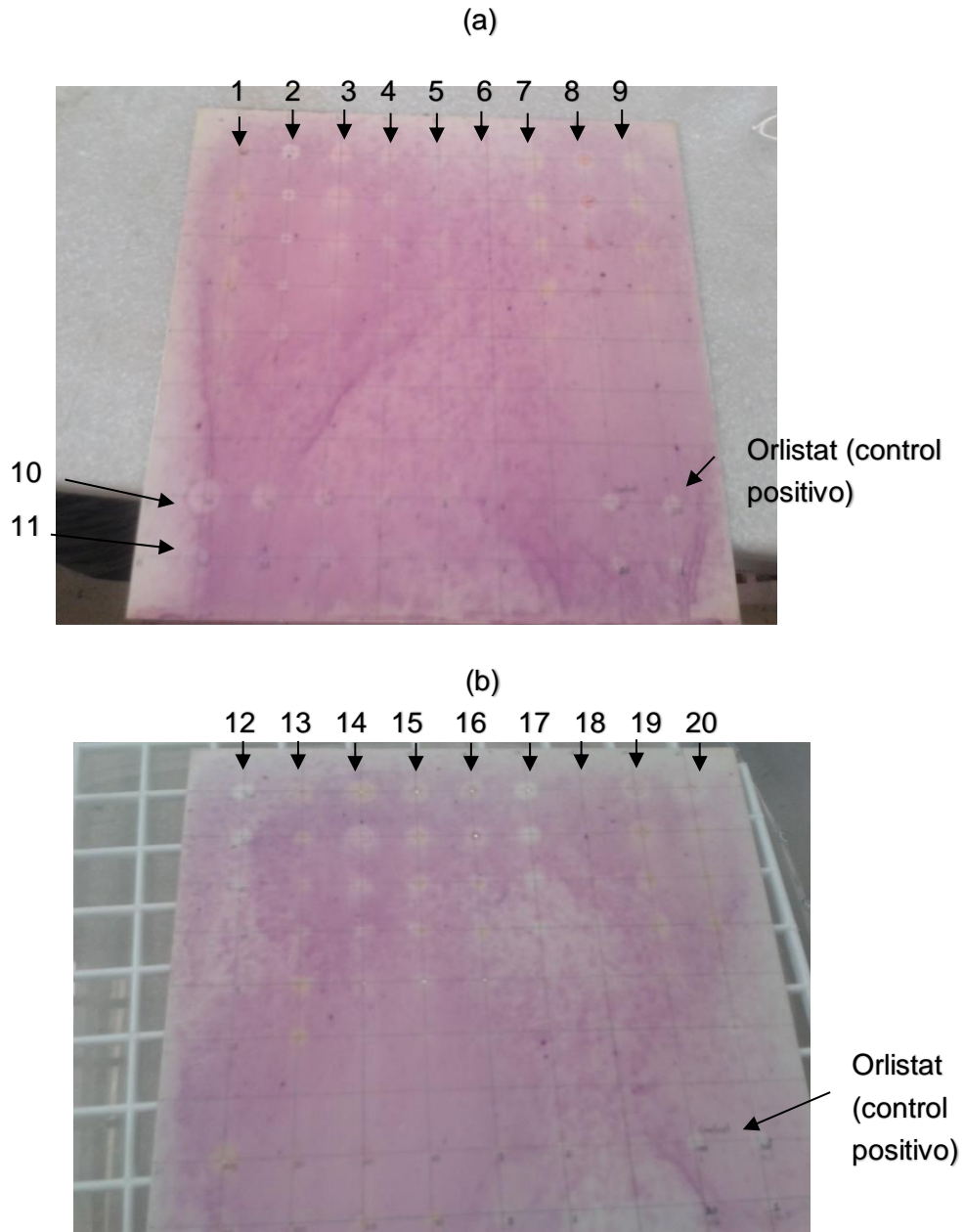
Los fármacos con mejores PPAE fueron seleccionados para determinar sus  $IC_{50}$ . Sin embargo, muchos de ellos presentan restricciones en su comercialización debido a que son en su mayoría anticancerígenos, factor que además incide en sus elevados costos o en su baja disponibilidad al interior del país. Por esta situación fue necesario evaluar los fármacos que, habiendo quedado dentro del consenso estaban disponibles en las farmacias de la ciudad de Bogotá, que fueron donados por UNISALUD o colectados a través de la campaña de recolección. Los fármacos seleccionados se encuentran en la tabla 3-4.

Los resultados obtenidos por la Bioautografía (figura 3-17a-b) permitieron seleccionar los compuestos que presentaban mejor actividad inhibitoria sobre la enzima LP. Este método de acuerdo con Hassan (Hassan, 2012) presentó buena sensibilidad en la identificación de inhibidores de la lipasa pancreática en placa para cromatografía en capa delgada, alcanzando a detectar cantidades de 10  $\mu\text{g}$  de fármaco (según Hassan, el método está diseñado para detectar hasta 0,01 $\mu\text{g}$  del inhibidor).

**Tabla 3-4:** Medicamentos seleccionados del consenso de la base de datos de fármacos LP. Se encuentran ordenados de acuerdo a su PPAE

No. fármaco	Pos_PPAE	ZINC_ID	PPAE (kcal/mol)	Nombre	Cantidad en tableta (mg)
1	74	ZINC00538312	0,435	Risperidona	5
2	185	ZINC00601242	0,401	Doxazosin	4
3	191	ZINC03831008	0,399	Lovastatina	20
4	201	ZINC05844788	0,397	Nebivolol	5
5	221	ZINC03831151	0,393	Montelukast	10
6	296	ZINC52955754	0,379	Ergotamina	1
7	361	ZINC03964126	0,370	Rivaroxaban	10
8	402	ZINC33359785	0,364	Dihidroergotoxina	4,5
9	414	ZINC00537805	0,363	Glibenclamida	5
10	481	ZINC52509366	0,352	Vemurafenib	240
11	645	ZINC01552174	0,335	Cilostazol	50
12	789	ZINC03943279	0,321	Dabigatran etexilato	110
13	991	ZINC00601305	0,304	Indapamida	1,5
14	1554	ZINC03920719	0,262	Atorvastatina	20
15	2006	ZINC01530751	0,235	Oxibutinina	5
16	2942	ZINC03871832	0,180	Verapamilo	200
17	2316	ZINC03830212	0,217	Amiodarona	120
18	3357	ZINC01530694	0,152	Tamsulosina	0,4
19	3459	ZINC08214685	0,142	Teclozan	500
20	3895	ZINC19632713	0,061	Nimodipino	30

**Figura 3-17:** Bioautografía para la selección de posibles inhibidores de la LP  
(a) fármacos del 1 al 10 (b) fármacos del 10 al 20. Los fármacos 2, 4, 7, 9, 10  
12 y 17 presentaron mejor halo de inhibición sobre la enzima LP.



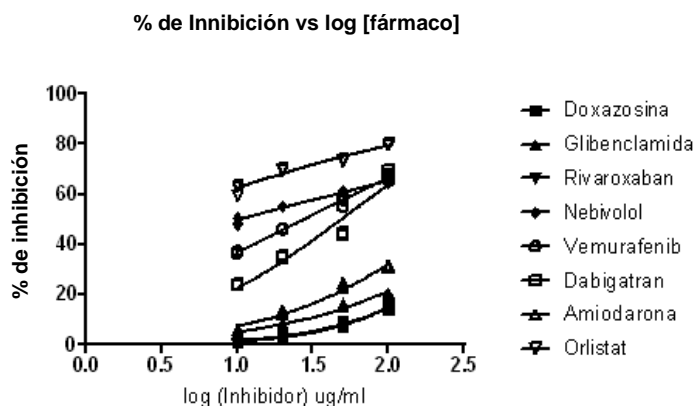
Los fármacos que mostraron mejor perfil de inhibición sobre la enzima fueron: mesilato de doxazosina (usado para la hiperplasia prostática), nebivolol ( $\beta$  bloqueador), rivaroxabán (anticoagulante), glibenclamida (hipoglucemiante), vemurafenib (antineoplásico), etexilato de dabigatrán (anticoagulante) y clorhidrato de amiodarona (antiarrítmico).

Se determinó el IC<sub>50</sub> de los siete compuestos seleccionados, los valores obtenidos se encuentran en la tabla 3-5 cuyos valores fueron procesados en el paquete estadístico GraphPad Prism7 versión de prueba. Todos los datos fueron calculados con una confiabilidad del 95% y correlación ( $r^2$ ) calculada mediante regresión no lineal (Anexo C). Los IC<sub>50</sub> mostraron menores valores de inhibición que el alcanzado por el orlistat (figura 3-18). Sin embargo, se destacan tres fármacos con resultados promisorios, ellos fueron: nebivolol, vemurafenib y dabigatran. Sus modelos de acoplamiento molecular permiten explicar por qué presentaron mejores resultados que los demás compuestos evaluados.

**Tabla 3-5:** Valores de IC<sub>50</sub> contra la enzima LP de los fármacos seleccionados del ensayo autobiográfico. Se destacan en negrita los más activos

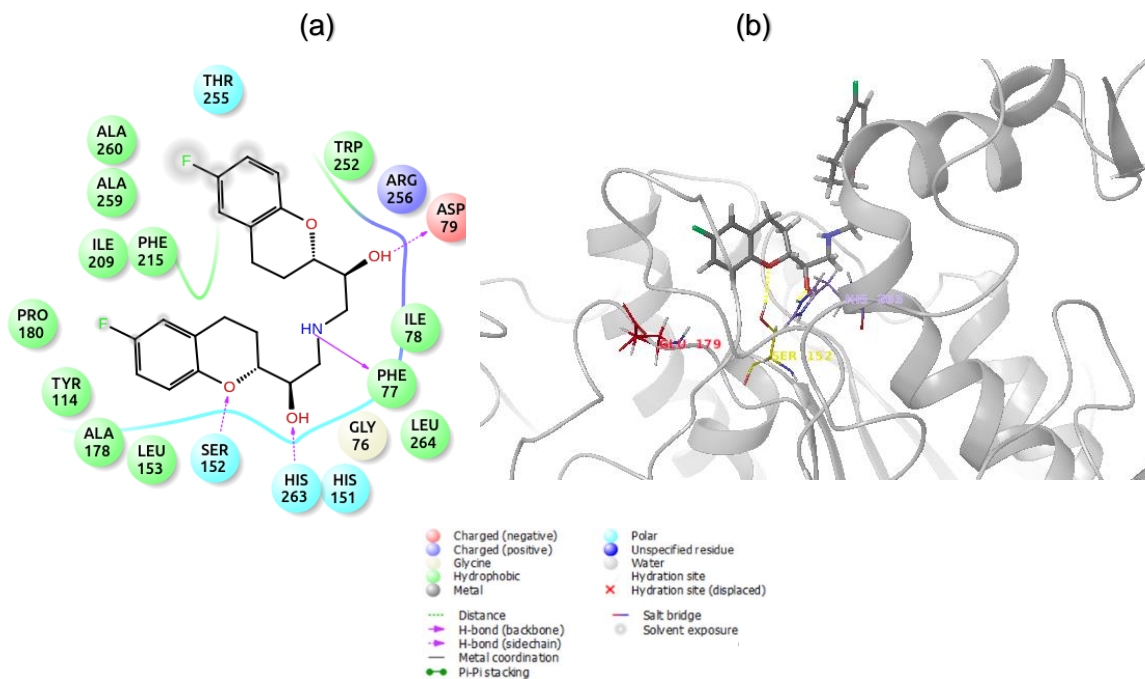
Compuesto	IC <sub>50</sub> (ug/mL)	IC <sub>50</sub> (μM)	R <sup>2</sup>
Doxazosina	497,300	1101,500	0,993
<b>Nebivolol</b>	<b>10,270</b>	<b>25,330</b>	0,977
Rivaroxaban	576,500	1322,606	0,970
Glibenclamida	631,700	1278,730	0,954
<b>Vemurafenib</b>	<b>27,380</b>	<b>55,887</b>	0,993
<b>Dabigatran</b>	<b>48,440</b>	<b>77,166</b>	0,937
Amiodarona	260,700	415,303	0,966
Orlistat	2,452	4,946	0,948

**Figura 3-18:** comparación de las curvas de inhibición de los fármacos seleccionados

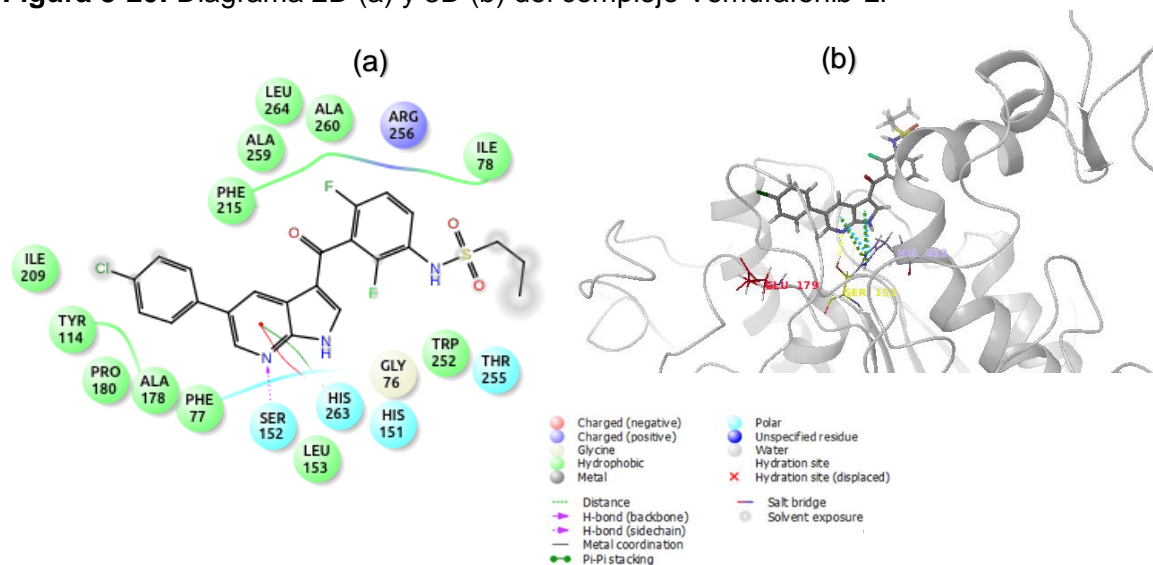


Para el neбивolol (figura 3-19) se observó en su modelo de acoplamiento molecular la presencia de un puente de hidrógeno clave entre el oxígeno del benzopirano con la Ser152. Los dos grupos hidroxilo del ligando forman un puente de hidrógeno independiente con la His263 y Phe77. Estas interacciones están directamente relacionadas con la actividad catalítica del sitio activo de la enzima (Ser152 e His263) y con estabilización del intermediario tetraédrico (Phe77), lo cual posiblemente favorezca su competencia con el sustrato. También se observó un puente de hidrógeno entre el grupo amino con Asp79, lo cual podría incidir en la mayor estabilidad al complejo formado con la enzima. Lo anterior podría explicar el buen resultado que se obtuvo de su IC<sub>50</sub>

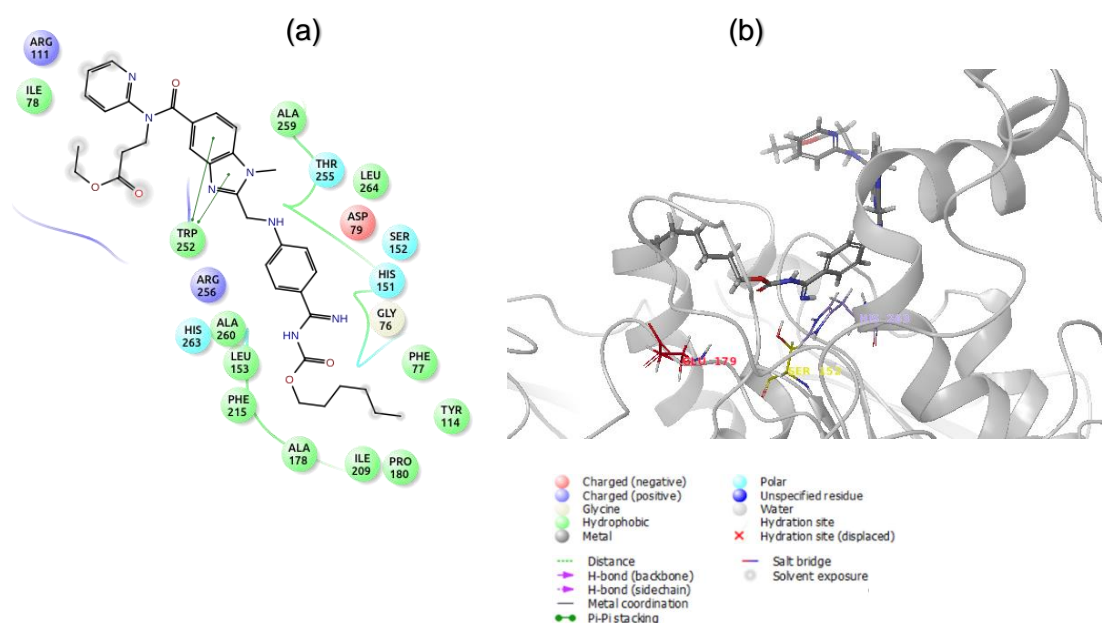
**Figura 3-19:** Diagrama 2D (a) y 3D (b) del complejo Nebivolol-LP



Del modelo de unión del vemurafenib (figura 3-20) se identificó la formación de un enlace de hidrógeno entre la Ser152 y el nitrógeno de la piridina. Además, se observó la interacción fuerte pi-cación entre la His263 y el anillo deficiente de electrones de la piridina. Este complejo, aunque presenta menos interacciones que el neбивolol, tiene contacto con residuos clave de la traída catalítica favoreciendo su posible competencia con el sustrato y generando por tanto la inhibición de la enzima.

**Figura 3-20:** Diagrama 2D (a) y 3D (b) del complejo Vemurafenib-LP

En el caso del dabigatran (figura 3-21) se encontraron dos interacciones de apilamiento pi-pi entre el residuo aromático Trp252 y el heterociclo benzimidazol. Aunque no hay interacción con los residuos de la triada catalítica, se observa que la orientación del ligando cubre el sitio activo, generando un posible bloqueo en la entrada de la enzima lo cual retarda el ingreso del sustrato y, de esta manera causar la inhibición parcial de la enzima.

**Figura 3-21:** Diagrama 2D (a) y 3D (b) del complejo Dabigatran etexilato-LP.



### 3.6 Propuesta de modelo farmacofórico

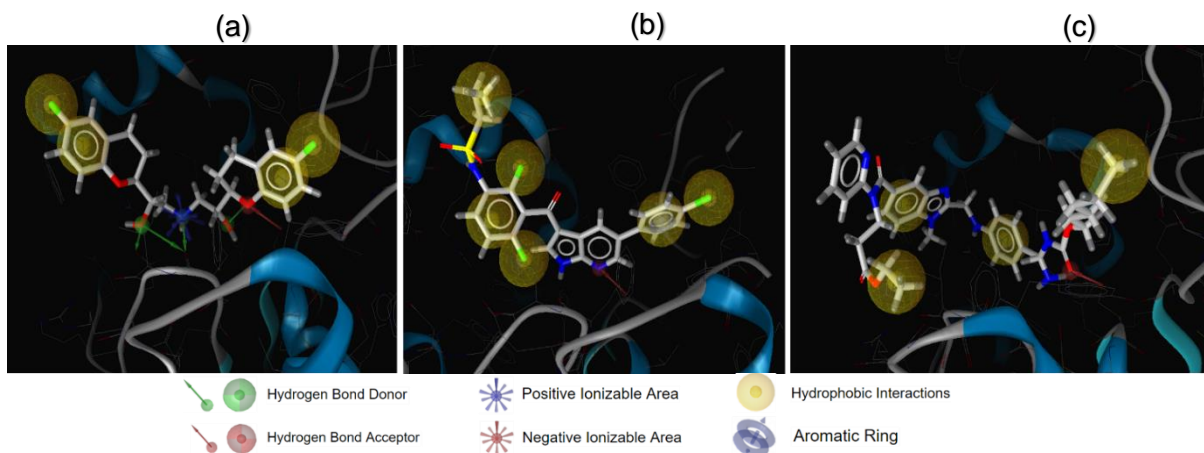
El modelo farmacofórico se elaboró a partir del alineamiento de los modelos de farmacóforo basados en la estructura de cada uno de los complejos de mayor actividad inhibitoria: nebivolol-LP, vemurafenib-LP y dabigatran-LP (figura 3-22).

Para el modelo farmacofórico del complejo nebivolol-LP se encontraron diez características farmacofóricas divididas así: cuatro regiones hidrofóbicas que tienen interacciones con los residuos Trp252, Ile78, Ala178, Ile209, Phe215 y Tyr114; un enlace de hidrógeno tipo aceptor con Ser152; cuatro enlaces de hidrógeno donador con His263, Asp79 y Phe77; una región de baja densidad electrónica que interacciona con Asp79.

Del complejo vemurafenib-LP se obtuvo un modelo farmacofórico compuesto por ocho características farmacofóricas, a saber: seis regiones hidrofóbicas que tienen interacción con los residuos Tyr114, Ile209, Phe215, Phe77, Ile78, Trp252, Ala259, Ala260 y Thr255; una interacción por apilamiento pi-pi con Tyr114. Finalmente, un enlace de hidrógeno aceptor con el residuo Ser152.

Con respecto al modelo farmacofórico generado del complejo dabigatran-LP se identificaron cinco características: cuatro corresponden a interacciones de tipo hidrofóbico con los residuos Phe77, Ile78, Ala260, Leu264, Ile209 y Tyr114. Por otro lado, hay una interacción tipo enlace de hidrógeno aceptor con Ser152.

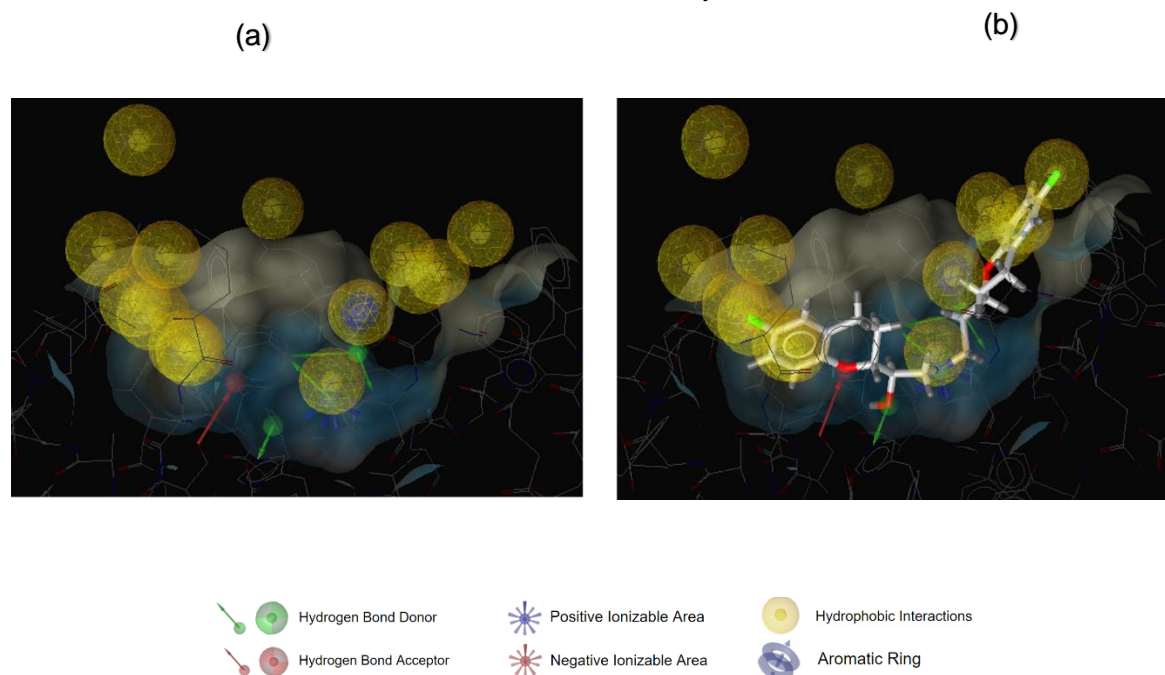
**Figura 3-22:** Modelo farmacofórico obtenido de los complejos activos contra LP: (a) nebivolol-LP (b) vemurafenib-LP (c) Dabigatran-LP.



A partir del alineamiento de los modelos farmacofóricos de los compuestos activos en los ensayos de inhibición, se determinó el modelo general de farmacóforo compuesto por 21 características farmacofóricas (figura 3-23a). La primera característica corresponde a regiones hidrofóbicas siendo en total 14 interacciones de este tipo con residuos clave de la cavidad de la enzima como Phe77, Tyr114, Ile78, Ala178, Ile209, Ala259, Ala260, Phe215, Trp252 y Leu264. La segunda característica corresponde a una interacción de apilamiento pi-pi con Tyr 114. La tercera característica hace referencia a un enlace de hidrógeno aceptor con Ser152. En la cuarta característica se observan 4 regiones de enlace de hidrógeno donador con His263, Asp79 y Phe77. La quinta característica corresponde a una región de baja densidad electrónica que interacciona con Asp79.

En general, el modelo farmacofórico ocupa un amplio volumen dentro de la cavidad hidrofóbica y tiene interacciones con residuos clave de la triada catalítica lo cual permite suponer que, las moléculas que se ajusten a este modelo tengan buena afinidad por la LP. Finalmente se realizó el alineamiento entre el modelo farmacofórico y el nebivolol (figura 3-23b) que fue la molécula más activa, encontrando que su estructura se ajusta al modelo hallado y, por tanto, en futuros estudios podría ser un *scaffold* (núcleo base) para el diseño de nuevos compuestos antiobesidad.

**Figura 3-23:** Propuesta de modelo farmacofórico (a) características farmacofóricas; (b) (c) alineamiento entre el modelo farmacofórico obtenido y el nebivolol.



## 4. Conclusiones y recomendaciones

### 4.1 Conclusiones

Se elaboró una base de datos que permitió evaluar 75359 estructuras de origen natural y sintético contra la enzima lipasa pancreática. Se determinó que sus propiedades moleculares los hacían adecuados para su uso en el cribado virtual al cumplir en más del 50 % con las reglas de Lipinski.

El modelo de acoplamiento molecular utilizado en cada programa fue capaz de reproducir la orientación del ligando cristalográfico en la enzima LP. Además, mediante la elaboración de la curva roc para cada programa, se determinó que el nivel de especificidad y sensibilidad del método de acoplamiento molecular fue el óptimo presentando valores entre 0,97 y 1,00 con confiabilidad del 95% en los resultados obtenidos para cada uno de los programas de acoplamiento molecular utilizados.

El método del promedio de la puntuación de auto escalado permitió utilizar tres programas de acoplamiento molecular para obtener potenciales inhibidores de la enzima lipasa pancreática.

A partir del enfoque del cribado virtual basado en la estructura se obtuvieron tres potenciales inhibidores de la enzima lipasa pancreática identificados como nebivolol, vemurafenib y etexilato de dabigatran, con valores de  $IC_{50}$  de 25,330  $\mu$ M, 55,887  $\mu$ M y 77,166  $\mu$ M respectivamente. Esto constituye un aporte al estudio y reposicionamiento de

fármacos para el tratamiento de la obesidad ya que hasta la fecha de elaboración del presente documento no se tenían reportes oficiales sobre la inhibición de la enzima lipasa pancreática por parte de alguno de ellos.

Considerando que los compuestos evaluados presentaron valores de inhibición contra la enzima, se espera que los fármacos con valores más altos de puntuación consenso presenten buenos valores de inhibición.

Se propuso un modelo farmacofórico cualitativo que consta de 20 regiones: catorce hidrofóbicas, una de aceptor de enlaces de hidrógeno, cuatro de donadores de puente de hidrógeno, una de apilamiento pi-pi y una región electrostática. Se espera que este modelo sirva a la identificación de nuevas estructuras capaces de inhibir la enzima lipasa pancreática y al desarrollo de nuevos fármacos antiobesidad.

## 4.2 Recomendaciones

Se recomienda continuar los estudios de inhibición *in vitro* para los fármacos evaluados durante el cribado virtual, en especial, aquellos que están clasificados en las mejores posiciones del consenso.

Determinar la actividad *in vitro* a los fármacos que se evaluaron en sus formas farmacéuticas.

Realizar el corrimiento de los programas de acoplamiento molecular en paralelo explorando la posibilidad de hacerlo con una tarjeta de video que facilite la diagramación y lectura de modelos 3D y, por otro lado, optimizar el tiempo de evaluación conformacional.

Evaluar la actividad *in vitro* contra la enzima LP de los compuestos identificados en la base de datos de productos naturales.

Realizar el cribado virtual de otras librerías de compuestos naturales y sintéticos usando el modelo farmacofórico identificado en el presente estudio, con el fin de enriquecer la biblioteca de moléculas potenciales inhibidores de la enzima lipasa pancreática.

## A. Anexo: Script de búsqueda optimizada para la lectura de archivos con formato. dlg, .txt y .out

Sub archivos

```
Dim ruta,oDoc,oSheet,Dname,Col,Row,archivo, posicionIni, posicionIni2, numArchivo,
encuentro, cierre As Integer, tamaño As Long, VarTexto as string
```

```
oDoc = ThisComponent
```

```
oSheet = oDoc.Sheets(0) 'Sheet1
```

```
' Pregunta al usuario el nombre del archivo que desea abrir.
```

```
ruta = InputBox ("Directorio de las carpetas: Ejemplo/Directorio")
```

```
' Carpeta escogida
```

```
' Comprueba el botón Cancelar.
```

```
If ruta = False Then Exit Sub
```

```
'Sección 2: Ajustes necesarios a ruta
```

```
If ruta = "" Then
```

```
Exit Sub
```

```
Elseif Right(ruta, 1) <> "" Then
```

```
ruta = ruta & ""
```

```
End If
```

```
InitialCell:
```

```
oCell = oSheet.getCellRangeByName("A2")
```

```
ruta = ruta & "/"
```

```
Col = oCell.CellAddress.Column
```

```
Row = oCell.CellAddress.Row
```

```
Dname = Dir(ruta,16)
```

```
'ciclo para recorrer todos los directorios de la carpeta
```

```
Do While Dname <> ""
```

```

If Dname <> "." And Dname <> ".." And Dname <> "maps" then
    oCell = oSheet.GetCellByPosition(Col,Row)
    oCell.String = Dname & ".dlg"
    ' Para abrir archivo
        archivo=ruta & Dname & "/" & Dname & ".dlg"
        tamaño = FileLen(archivo)
numArchivo = FreeFile
encuentro=0      cierre=0
    Open archivo For input As numArchivo
    Do While not eof(numArchivo)
        Line input #numArchivo, VarTexto
        posicionIni = InStr(1, VarTexto, "Number of distinct")
        if posicionIni>0 then
            oCell = oSheet.GetCellByPosition(Col+1,Row)
                oCell.String = VarTexto
                encuentro=1
        end if
        if encuentro>0 then
            posicionIni = InStr(1, VarTexto, " 1 |")
            if posicionIni>0 then
                oCell = oSheet.GetCellByPosition(Col+2,Row)
                oCell.String = VarTexto
                Exit Do
            end if
        end if
    Loop
    Close numArchivo
    Row = Row + 1
EndIf
Dname = Dir
Loop
MsgBox "Se leyeron: " & Row & " archivo(s)"      End
End Sub

```

## B. Anexo: Ligandos utilizados de la base de datos ChEMBL para la curva ROC

Actividad	Cod_ChEMBL	Pos PPAE	AD $\Delta G$ (kcal/mol)	Ae AD	ADV $\Delta G$ (kcal/mol)	Ae ADV	Dock6	Ae Dock6	PPAE
Señuelo	CHEMBL2022681	1	-9,600	0,574	-10,100	1,000	-63,783	0,343	0,639
No activo	CHEMBL2392403	2	-11,300	0,879	-10,000	0,976	-45,545	0,026	0,627
Señuelo	CHEMBL184238	3	-10,340	0,707	-10,100	1,000	-45,331	0,022	0,576
Activo	CHEMBL2022485	4	-10,040	0,653	-8,800	0,690	-65,757	0,378	0,574
Activo	CHEMBL2022487	5	-10,010	0,647	-8,700	0,667	-65,866	0,380	0,565
Señuelo	CHEMBL606201	6	-9,850	0,619	-10,000	0,976	-47,969	0,068	0,554
Activo	CHEMBL2022488	7	-8,540	0,383	-9,500	0,857	-67,371	0,406	0,549
Activo	CHEMBL2022674	8	-9,410	0,540	-8,800	0,690	-67,057	0,400	0,543
No activo	CHEMBL2022680	9	-9,310	0,522	-8,900	0,714	-61,418	0,302	0,513
Señuelo	CHEMBL2022678	10	-9,570	0,568	-8,900	0,714	-58,209	0,246	0,510
Activo	CHEMBL502517	11	-9,970	0,640	-8,200	0,548	-62,794	0,326	0,505
Activo	CHEMBL2022489	12	-9,070	0,478	-8,700	0,667	-65,019	0,365	0,503
Activo	CHEMBL2022484	13	-8,920	0,451	-8,700	0,667	-64,072	0,348	0,489
Señuelo	CHEMBL576786	14	-9,250	0,511	-9,500	0,857	-48,006	0,069	0,479
No activo	CHEMBL2022677	15	-9,090	0,482	-8,500	0,619	-61,382	0,302	0,468
Señuelo	CHEMBL507957	16	-8,360	0,351	-8,800	0,690	-64,010	0,347	0,463
No activo	CHEMBL238787	17	-9,000	0,466	-9,500	0,857	-47,264	0,056	0,460
No activo	CHEMBL449535	18	-8,190	0,320	-7,800	0,452	-78,881	0,606	0,459
Activo	CHEMBL2022673	19	-8,170	0,317	-8,700	0,667	-63,920	0,346	0,443
Señuelo	CHEMBL447549	20	-8,550	0,385	-8,300	0,571	-64,546	0,357	0,438
Activo	CHEMBL2022486	21	-8,310	0,342	-8,500	0,619	-64,174	0,350	0,437
Señuelo	CHEMBL339297	22	-8,860	0,441	-9,200	0,786	-48,022	0,069	0,432
Señuelo	CHEMBL2022676	23	-8,070	0,299	-8,300	0,571	-66,110	0,384	0,418
Señuelo	CHEMBL158897	24	-10,200	0,682	-7,600	0,405	-52,932	0,155	0,414
Señuelo	CHEMBL253780	25	-9,140	0,491	-8,200	0,548	-55,213	0,194	0,411
Señuelo	CHEMBL2022679	26	-8,100	0,304	-8,500	0,619	-61,860	0,310	0,411

No activo	CHEMBL2392399	27	-9,410	0,540	-8,700	0,667	-44,778	0,013	0,406
No activo	CHEMBL238994	28	-8,950	0,457	-9,000	0,738	-45,063	0,018	0,404
Señuelo	CHEMBL263831	29	-8,770	0,424	-8,300	0,571	-56,366	0,214	0,403
No activo	CHEMBL1171250	30	-9,160	0,495	-7,700	0,429	-59,961	0,277	0,400
Activo	CHEMBL2022675	31	-7,770	0,245	-8,500	0,619	-61,613	0,306	0,390
No activo	CHEMBL2392478	32	-9,580	0,570	-8,300	0,571	-44,617	0,010	0,384
No activo	CHEMBL2179366	33	-10,250	0,691	-6,700	0,190	-58,906	0,259	0,380
Señuelo	CHEMBL2172447	34	-9,270	0,514	-7,200	0,310	-61,687	0,307	0,377
Señuelo	CHEMBL501058	35	-7,510	0,198	-8,300	0,571	-63,760	0,343	0,371
Señuelo	CHEMBL133897	36	-8,030	0,291	-9,200	0,786	-45,442	0,024	0,367
No activo	CHEMBL2179364	37	-9,950	0,637	-6,900	0,238	-56,745	0,221	0,365
Señuelo	CHEMBL25276	38	-9,810	0,612	-7,300	0,333	-52,459	0,146	0,364
Señuelo	CHEMBL254196	39	-8,650	0,403	-8,100	0,524	-53,050	0,157	0,361
Señuelo	CHEMBL116438	40	-9,090	0,482	-8,100	0,524	-47,959	0,068	0,358
Muy Activo	CHEMBL360443	41	-9,310	0,522	-6,900	0,238	-60,514	0,286	0,349
No activo	CHEMBL2179368	42	-9,620	0,577	-7,200	0,310	-52,937	0,155	0,347
No activo	CHEMBL2179363	43	-9,670	0,586	-6,800	0,214	-57,512	0,234	0,345
Señuelo	CHEMBL507632	44	-7,670	0,227	-7,800	0,452	-64,498	0,356	0,345
No activo	CHEMBL2392476	45	-7,030	0,112	-9,200	0,786	-50,866	0,119	0,339
Señuelo	CHEMBL2172450	46	-8,620	0,397	-7,000	0,262	-63,527	0,339	0,333
No activo	CHEMBL2179370	47	-9,820	0,613	-7,100	0,286	-49,671	0,098	0,332
Señuelo	CHEMBL2172449	48	-8,540	0,383	-6,900	0,238	-64,127	0,349	0,324
No activo	CHEMBL250450	49	-6,740	0,059	-9,300	0,810	-48,564	0,079	0,316
No activo	CHEMBL233930	50	-6,760	0,063	-9,100	0,762	-48,253	0,073	0,299
Señuelo	CHEMBL2172451	51	-8,440	0,365	-7,000	0,262	-59,452	0,268	0,298
Señuelo	CHEMBL2172448	52	-8,240	0,329	-7,000	0,262	-61,416	0,302	0,298
Muy Activo	CHEMBL175247	53	-8,450	0,367	-6,800	0,214	-61,807	0,309	0,297
Señuelo	CHEMBL2152044	54	-6,410	0,000	-8,800	0,690	-54,106	0,175	0,289
Activo	CHEMBL206555	55	-7,600	0,214	-8,500	0,619	-45,085	0,018	0,284
No activo	CHEMBL2179372	56	-9,520	0,559	-6,900	0,238	-46,960	0,051	0,283
Señuelo	CHEMBL452890	57	-6,450	0,007	-7,800	0,452	-66,234	0,386	0,282
Activo	CHEMBL451529	58	-7,370	0,173	-8,000	0,500	-53,287	0,161	0,278
No activo	CHEMBL444421	59	-8,160	0,315	-6,500	0,143	-65,611	0,375	0,278
No activo	CHEMBL506880	60	-6,950	0,097	-7,300	0,333	-58,653	0,254	0,228
Señuelo	CHEMBL25045	61	-8,810	0,432	-6,500	0,143	-49,634	0,097	0,224
Señuelo	CHEMBL118722	62	-7,020	0,110	-6,300	0,095	-45,927	0,033	0,079





## D. Anexo: Resultados cribado virtual de fármacos

Pos PPAE	ZINC_ID	ADAG (kcal/mol)	Ae AD	ADV ΔG (kcal/mol)	Ae ADV	Dock6 ΔG (kcal/mol)	Ae Dock6	PPAE
1	ZINC03800855	-11,900	0,571	-13,000	1,000	-52,702	0,171	0,581
2	ZINC01612996	-12,590	0,643	-11,000	0,714	-61,426	0,340	0,566
3	ZINC04215707	-10,650	0,441	-10,700	0,671	-68,394	0,475	0,529
4	ZINC56898800	-13,770	0,765	-11,100	0,729	-48,283	0,085	0,526
5	ZINC03830369	-14,180	0,808	-9,700	0,529	-56,351	0,241	0,526
6	ZINC04214893	-12,410	0,624	-9,300	0,471	-68,689	0,481	0,526
7	ZINC43133316	-12,870	0,672	-10,500	0,643	-57,138	0,257	0,524
8	ZINC08552001	-15,030	0,896	-10,500	0,643	-44,950	0,020	0,520
9	ZINC73224787	-12,980	0,683	-10,500	0,643	-55,021	0,216	0,514
10	ZINC03937143	-11,070	0,485	-11,400	0,771	-58,016	0,274	0,510
11	ZINC03784373	-13,430	0,730	-11,100	0,729	-46,840	0,057	0,505
12	ZINC03914596	-12,570	0,641	-9,400	0,486	-63,492	0,380	0,502
13	ZINC03915436	-11,430	0,522	-10,800	0,686	-58,930	0,292	0,500
14	ZINC72123798	-10,730	0,450	-10,000	0,571	-68,401	0,476	0,499
15	ZINC03778403	-13,570	0,745	-10,200	0,600	-51,673	0,151	0,498
16	ZINC03922432	-10,710	0,448	-10,600	0,657	-63,020	0,371	0,492
17	ZINC04097470	-12,860	0,671	-10,400	0,629	-52,810	0,173	0,491
18	ZINC84758481	-11,500	0,530	-10,800	0,686	-57,116	0,256	0,491
19	ZINC08552002	-14,230	0,813	-10,300	0,614	-45,741	0,035	0,488
20	ZINC08552003	-14,650	0,857	-9,900	0,557	-45,693	0,034	0,483
21	ZINC84668739	-10,910	0,468	-10,600	0,657	-59,889	0,310	0,479
22	ZINC98214845	-10,280	0,403	-9,700	0,529	-69,494	0,497	0,476
23	ZINC04214098	-13,000	0,685	-11,100	0,729	-44,481	0,011	0,475
24	ZINC72266864	-14,130	0,803	-10,200	0,600	-44,844	0,018	0,474
25	ZINC01482077	-11,470	0,526	-10,500	0,643	-56,757	0,249	0,473
26	ZINC95564635	-11,480	0,528	-10,700	0,671	-55,001	0,215	0,471
27	ZINC04215464	-12,560	0,640	-11,000	0,714	-46,776	0,055	0,470

28	ZINC03990418	-11,030	0,481	-11,100	0,729	-54,006	0,196	0,468
29	ZINC98215047	-10,370	0,412	-9,400	0,486	-70,009	0,507	0,468
30	ZINC43194300	-10,930	0,470	-11,700	0,814	-49,898	0,116	0,467
31	ZINC25782826	-10,630	0,439	-11,800	0,829	-50,645	0,131	0,466
32	ZINC13831151	-12,440	0,627	-9,700	0,529	-55,974	0,234	0,463
33	ZINC22851754	-12,030	0,585	-9,400	0,486	-60,364	0,319	0,463
34	ZINC22005792	-12,360	0,619	-10,900	0,700	-47,489	0,069	0,463
35	ZINC04213937	-13,240	0,710	-9,200	0,457	-55,015	0,215	0,461
36	ZINC36701290	-11,570	0,537	-10,700	0,671	-52,693	0,170	0,460
37	ZINC04214319	-13,950	0,784	-10,100	0,586	-44,308	0,007	0,459
38	ZINC01566899	-11,260	0,505	-10,500	0,643	-55,498	0,225	0,457
39	ZINC04217469	-11,840	0,565	-10,300	0,614	-53,691	0,190	0,456
40	ZINC68267814	-11,810	0,562	-10,600	0,657	-51,511	0,147	0,455
41	ZINC04214512	-11,050	0,483	-11,000	0,714	-52,596	0,168	0,455
42	ZINC08101076	-12,390	0,622	-10,300	0,614	-50,440	0,127	0,454
43	ZINC22443609	-12,290	0,612	-9,900	0,557	-53,894	0,194	0,454
44	ZINC03995809	-11,080	0,486	-9,200	0,457	-65,331	0,416	0,453
45	ZINC22940637	-10,790	0,456	-10,100	0,586	-60,119	0,315	0,452
46	ZINC08214466	-13,780	0,766	-8,700	0,386	-54,387	0,203	0,452
47	ZINC85536995	-10,010	0,375	-10,500	0,643	-61,212	0,336	0,451
48	ZINC72266958	-12,910	0,676	-9,900	0,557	-50,019	0,118	0,451
49	ZINC38139947	-12,300	0,613	-10,600	0,657	-47,905	0,077	0,449
50	ZINC04217054	-12,920	0,677	-10,200	0,600	-47,346	0,066	0,448
51	ZINC00577115	-11,820	0,563	-11,200	0,743	-45,872	0,038	0,448
52	ZINC08214482	-12,310	0,614	-9,500	0,500	-55,714	0,229	0,448
53	ZINC56897620	-13,970	0,786	-8,700	0,386	-52,618	0,169	0,447
54	ZINC08101051	-12,550	0,639	-9,800	0,543	-52,076	0,158	0,447
55	ZINC95564636	-11,490	0,529	-10,200	0,600	-54,590	0,207	0,445
56	ZINC01482077	-11,420	0,521	-10,300	0,614	-54,110	0,198	0,444
57	ZINC30690938	-13,820	0,771	-9,500	0,500	-47,162	0,063	0,444
58	ZINC13831150	-11,680	0,548	-9,600	0,514	-57,847	0,271	0,444
59	ZINC08101101	-11,930	0,574	-8,800	0,400	-62,373	0,358	0,444
60	ZINC01846459	-10,700	0,447	-11,100	0,729	-51,978	0,156	0,444
61	ZINC43195317	-10,560	0,432	-9,500	0,500	-64,355	0,397	0,443
62	ZINC03925861	-11,780	0,559	-10,000	0,571	-53,757	0,191	0,440
63	ZINC03922699	-12,880	0,673	-9,900	0,557	-48,593	0,091	0,440
64	ZINC03995811	-11,850	0,566	-9,000	0,429	-60,638	0,325	0,440
65	ZINC53073961	-9,880	0,361	-10,900	0,700	-57,149	0,257	0,439
66	ZINC03926298	-10,320	0,407	-9,500	0,500	-64,967	0,409	0,439
67	ZINC84759257	-12,740	0,658	-10,400	0,629	-45,362	0,028	0,438
68	ZINC26664090	-10,640	0,440	-9,700	0,529	-61,659	0,345	0,438
69	ZINC01533883	-11,330	0,512	-10,700	0,671	-50,569	0,129	0,437
70	ZINC03812975	-11,190	0,497	-10,700	0,671	-51,170	0,141	0,437

71	ZINC08101103	-11,690	0,549	-9,100	0,443	-60,234	0,317	0,436
72	ZINC39953729	-13,960	0,785	-9,600	0,514	-44,393	0,009	0,436
73	ZINC03925433	-13,310	0,718	-9,100	0,443	-51,456	0,146	0,436
74	ZINC00538312	-11,060	0,484	-11,000	0,714	-49,509	0,108	0,436
75	ZINC19632618	-10,150	0,389	-10,600	0,657	-57,306	0,260	0,436
76	ZINC12153175	-13,670	0,755	-9,600	0,514	-45,710	0,035	0,435
77	ZINC08101078	-12,110	0,593	-10,200	0,600	-49,635	0,111	0,435
78	ZINC59676426	-10,770	0,454	-10,800	0,686	-52,320	0,163	0,434
79	ZINC56897621	-13,330	0,720	-8,700	0,386	-54,040	0,197	0,434
80	ZINC06096074	-11,670	0,547	-10,100	0,586	-52,599	0,169	0,434
81	ZINC15848208	-13,620	0,750	-9,500	0,500	-46,504	0,050	0,433
82	ZINC35826853	-11,660	0,546	-11,000	0,714	-45,948	0,039	0,433
83	ZINC04213678	-13,280	0,714	-9,500	0,500	-48,308	0,085	0,433
84	ZINC00538333	-12,160	0,598	-10,300	0,614	-48,370	0,086	0,433
85	ZINC04214173	-10,890	0,466	-9,800	0,543	-58,817	0,289	0,433
86	ZINC84758243	-10,480	0,424	-11,200	0,743	-50,645	0,131	0,432
87	ZINC00537799	-10,290	0,404	-10,300	0,614	-58,219	0,278	0,432
88	ZINC00598255	-11,930	0,574	-10,200	0,600	-50,146	0,121	0,432
89	ZINC67828548	-13,520	0,739	-8,700	0,386	-52,674	0,170	0,432
90	ZINC33990650	-12,480	0,631	-10,000	0,571	-48,609	0,091	0,431
91	ZINC43204048	-9,910	0,364	-9,300	0,471	-67,445	0,457	0,431
92	ZINC29416466	-11,380	0,517	-9,100	0,443	-60,876	0,329	0,430
93	ZINC03802222	-12,010	0,583	-10,100	0,586	-49,982	0,118	0,429
94	ZINC11726212	-11,190	0,497	-10,000	0,571	-55,081	0,217	0,429
95	ZINC08101077	-10,940	0,471	-10,300	0,614	-54,146	0,199	0,428
96	ZINC27990463	-11,200	0,498	-9,300	0,471	-60,045	0,313	0,428
97	ZINC00608088	-9,980	0,372	-11,300	0,757	-51,806	0,153	0,427
98	ZINC03812598	-11,310	0,510	-10,800	0,686	-48,289	0,085	0,427
99	ZINC26251015	-11,250	0,504	-10,200	0,600	-53,009	0,176	0,427
100	ZINC03822014	-10,960	0,474	-10,800	0,686	-50,141	0,121	0,427
101	ZINC03973276	-11,340	0,513	-9,300	0,471	-59,114	0,295	0,427
102	ZINC29747110	-10,880	0,465	-9,900	0,557	-57,152	0,257	0,426
103	ZINC04214704	-10,000	0,374	-9,700	0,529	-63,305	0,377	0,426
104	ZINC04215004	-10,940	0,471	-10,600	0,657	-51,503	0,147	0,425
105	ZINC11677911	-11,270	0,506	-10,000	0,571	-54,106	0,198	0,425
106	ZINC04215062	-12,050	0,587	-10,200	0,600	-48,439	0,088	0,425
107	ZINC03954654	-9,930	0,367	-11,300	0,757	-51,655	0,150	0,425
108	ZINC04215745	-12,230	0,605	-9,900	0,557	-49,646	0,111	0,425
109	ZINC11592569	-13,170	0,703	-9,500	0,500	-47,452	0,069	0,424
110	ZINC03988502	-10,510	0,427	-10,000	0,571	-57,861	0,271	0,423
111	ZINC11679756	-9,530	0,325	-11,700	0,814	-50,469	0,127	0,422
112	ZINC00896717	-10,860	0,463	-9,500	0,500	-59,526	0,303	0,422
113	ZINC06716957	-10,580	0,434	-10,600	0,657	-52,936	0,175	0,422

114	ZINC03831508	-12,170	0,599	-9,600	0,514	-51,655	0,150	0,421
115	ZINC03785445	-11,300	0,509	-10,800	0,686	-47,428	0,068	0,421
116	ZINC34953150	-9,910	0,364	-10,900	0,700	-53,997	0,196	0,420
117	ZINC04214397	-12,100	0,592	-10,200	0,600	-47,427	0,068	0,420
118	ZINC04214700	-10,640	0,440	-10,700	0,671	-51,510	0,147	0,420
119	ZINC26892598	-9,700	0,343	-11,600	0,800	-49,843	0,115	0,419
120	ZINC40163160	-13,670	0,755	-8,700	0,386	-49,901	0,116	0,419
121	ZINC03915126	-9,000	0,270	-9,100	0,443	-71,737	0,540	0,418
122	ZINC56898810	-10,740	0,451	-11,200	0,743	-46,940	0,059	0,417
123	ZINC00538290	-11,210	0,499	-10,700	0,671	-48,093	0,081	0,417
124	ZINC40163159	-13,830	0,772	-8,700	0,386	-48,752	0,094	0,417
125	ZINC29399503	-10,040	0,378	-10,000	0,571	-59,432	0,301	0,417
126	ZINC95564682	-11,680	0,548	-8,000	0,286	-65,301	0,415	0,416
127	ZINC72266819	-11,610	0,541	-9,500	0,500	-54,445	0,204	0,415
128	ZINC04791689	-12,460	0,629	-9,900	0,557	-46,904	0,058	0,415
129	ZINC01534968	-10,970	0,475	-10,600	0,657	-49,716	0,112	0,415
130	ZINC08101055	-10,100	0,384	-9,800	0,543	-60,166	0,316	0,414
131	ZINC96927633	-10,020	0,376	-11,400	0,771	-48,757	0,094	0,414
132	ZINC03995616	-11,320	0,511	-10,000	0,571	-52,088	0,159	0,414
133	ZINC00537755	-10,410	0,416	-11,300	0,757	-47,247	0,065	0,413
134	ZINC04216779	-11,230	0,502	-10,300	0,614	-50,206	0,122	0,413
135	ZINC72266853	-11,740	0,555	-8,400	0,343	-61,361	0,339	0,412
136	ZINC84758239	-10,890	0,466	-10,400	0,629	-51,185	0,141	0,412
137	ZINC03944646	-10,870	0,464	-10,000	0,571	-54,232	0,200	0,412
138	ZINC01544617	-11,980	0,579	-10,300	0,614	-46,037	0,041	0,412
139	ZINC03874199	-11,760	0,557	-9,200	0,457	-55,247	0,220	0,411
140	ZINC11678715	-9,910	0,364	-12,000	0,857	-44,519	0,012	0,411
141	ZINC63933734	-10,720	0,449	-10,200	0,600	-53,393	0,184	0,411
142	ZINC01481956	-10,550	0,431	-10,700	0,671	-50,606	0,130	0,411
143	ZINC13883244	-10,100	0,384	-11,000	0,714	-50,775	0,133	0,411
144	ZINC95598447	-10,680	0,444	-10,400	0,629	-52,051	0,158	0,410
145	ZINC40163132	-10,710	0,448	-10,800	0,686	-48,911	0,097	0,410
146	ZINC01915508	-11,510	0,531	-10,100	0,586	-49,720	0,113	0,410
147	ZINC19796084	-11,100	0,488	-10,300	0,614	-50,414	0,126	0,409
148	ZINC03831359	-10,440	0,420	-9,600	0,514	-59,076	0,294	0,409
149	ZINC03978005	-11,050	0,483	-10,200	0,600	-51,375	0,145	0,409
150	ZINC00537848	-10,960	0,474	-10,600	0,657	-48,846	0,096	0,409
151	ZINC96941866	-9,420	0,314	-8,800	0,400	-70,250	0,512	0,408
152	ZINC60184491	-12,070	0,589	-8,600	0,371	-57,514	0,264	0,408
153	ZINC00538314	-12,100	0,592	-10,000	0,571	-47,028	0,060	0,408
154	ZINC68151119	-10,100	0,384	-7,700	0,243	-74,576	0,596	0,408
155	ZINC08101056	-10,130	0,387	-9,600	0,514	-60,426	0,321	0,407
156	ZINC40163133	-10,500	0,426	-10,900	0,700	-48,885	0,096	0,407

157	ZINC85540268	-9,970	0,371	-10,000	0,571	-58,295	0,279	0,407
158	ZINC53261548	-9,150	0,286	-9,500	0,500	-66,339	0,436	0,407
159	ZINC98214882	-11,010	0,479	-10,100	0,586	-51,949	0,156	0,407
160	ZINC27558006	-11,870	0,568	-10,200	0,600	-46,606	0,052	0,407
161	ZINC04215428	-11,330	0,512	-10,500	0,643	-47,260	0,065	0,407
162	ZINC19367677	-11,380	0,517	-9,800	0,543	-52,109	0,159	0,406
163	ZINC68246816	-12,270	0,610	-9,500	0,500	-49,557	0,109	0,406
164	ZINC08214619	-13,690	0,757	-9,000	0,429	-45,581	0,032	0,406
165	ZINC84457721	-8,950	0,265	-10,200	0,600	-62,078	0,353	0,406
166	ZINC31261395	-11,420	0,521	-10,200	0,600	-48,789	0,094	0,405
167	ZINC22001688	-9,750	0,348	-10,000	0,571	-59,172	0,296	0,405
168	ZINC03831233	-10,640	0,440	-9,400	0,486	-58,768	0,288	0,405
169	ZINC22463301	-11,330	0,512	-9,100	0,443	-57,282	0,260	0,405
170	ZINC11592647	-10,590	0,435	-10,700	0,671	-49,473	0,108	0,405
171	ZINC04217507	-12,000	0,582	-10,000	0,571	-47,085	0,061	0,405
172	ZINC03791229	-12,380	0,621	-9,300	0,471	-50,197	0,122	0,405
173	ZINC68151121	-9,400	0,312	-8,300	0,329	-73,471	0,574	0,405
174	ZINC84758966	-10,080	0,382	-9,500	0,500	-60,994	0,332	0,405
175	ZINC40163161	-12,720	0,656	-9,100	0,443	-49,801	0,114	0,404
176	ZINC08101102	-10,410	0,416	-8,400	0,343	-67,274	0,454	0,404
177	ZINC64622552	-11,810	0,562	-9,700	0,529	-50,047	0,119	0,403
178	ZINC00538119	-10,640	0,440	-11,000	0,714	-46,688	0,054	0,403
179	ZINC53682947	-11,210	0,499	-9,400	0,486	-55,368	0,222	0,403
180	ZINC08101127	-10,160	0,390	-9,700	0,529	-58,740	0,288	0,402
181	ZINC22463090	-9,800	0,353	-9,800	0,543	-59,804	0,309	0,401
182	ZINC04215193	-10,730	0,450	-9,700	0,529	-55,565	0,226	0,401
183	ZINC11726225	-11,000	0,478	-10,600	0,657	-47,462	0,069	0,401
184	ZINC08101105	-12,580	0,642	-9,100	0,443	-50,030	0,119	0,401
185	ZINC00601242	-10,980	0,476	-9,800	0,543	-53,433	0,185	0,401
186	ZINC04099008	-12,050	0,587	-9,400	0,486	-50,645	0,131	0,401
187	ZINC29206760	-9,220	0,293	-10,300	0,614	-59,065	0,294	0,400
188	ZINC95598448	-11,040	0,482	-9,700	0,529	-53,738	0,191	0,400
189	ZINC98214854	-10,440	0,420	-8,900	0,414	-62,727	0,365	0,400
190	ZINC53149862	-11,170	0,495	-10,000	0,571	-50,733	0,132	0,400
191	ZINC03831008	-12,900	0,675	-9,500	0,500	-45,155	0,024	0,400
192	ZINC72266851	-11,000	0,478	-8,400	0,343	-63,374	0,378	0,399
193	ZINC39716290	-10,170	0,391	-8,800	0,400	-64,863	0,407	0,399
194	ZINC39949130	-12,130	0,595	-10,000	0,571	-45,378	0,028	0,398
195	ZINC00896717	-9,830	0,356	-9,800	0,543	-59,127	0,295	0,398
196	ZINC21983255	-9,770	0,350	-9,800	0,543	-59,393	0,301	0,398
197	ZINC03831362	-10,880	0,465	-9,100	0,443	-58,601	0,285	0,398
198	ZINC98208212	-12,380	0,621	-9,400	0,486	-48,360	0,086	0,398
199	ZINC13890908	-11,370	0,516	-10,600	0,657	-44,894	0,019	0,397

200	ZINC85537113	-8,320	0,199	-10,200	0,600	-64,123	0,392	0,397
201	ZINC05844788	-10,460	0,422	-10,700	0,671	-49,009	0,099	0,397
202	ZINC04216401	-9,820	0,355	-9,000	0,429	-64,818	0,406	0,397
203	ZINC03816482	-10,150	0,389	-10,700	0,671	-50,550	0,129	0,397
204	ZINC95598450	-10,430	0,418	-11,300	0,757	-44,641	0,014	0,397
205	ZINC84757020	-11,130	0,491	-10,500	0,643	-46,758	0,055	0,396
206	ZINC05766249	-9,750	0,348	-11,000	0,714	-50,436	0,127	0,396
207	ZINC13911941	-13,210	0,707	-9,300	0,471	-44,442	0,010	0,396
208	ZINC03831150	-10,190	0,394	-9,500	0,500	-59,099	0,295	0,396
209	ZINC40430143	-10,020	0,376	-10,400	0,629	-53,246	0,181	0,395
210	ZINC03830354	-12,650	0,649	-9,700	0,529	-44,308	0,007	0,395
211	ZINC08101052	-10,840	0,461	-9,900	0,557	-52,445	0,166	0,395
212	ZINC12914519	-10,810	0,458	-10,200	0,600	-50,359	0,125	0,394
213	ZINC22445948	-11,290	0,508	-9,800	0,543	-50,735	0,132	0,394
214	ZINC26671872	-11,400	0,519	-9,800	0,543	-50,142	0,121	0,394
215	ZINC96928979	-10,750	0,452	-9,400	0,486	-56,551	0,245	0,394
216	ZINC08101050	-10,900	0,467	-9,800	0,543	-52,723	0,171	0,394
217	ZINC03831360	-11,100	0,488	-9,100	0,443	-56,800	0,250	0,394
218	ZINC08214520	-9,570	0,329	-7,100	0,157	-79,656	0,694	0,394
219	ZINC35902440	-10,180	0,393	-10,700	0,671	-49,925	0,117	0,394
220	ZINC98214846	-12,610	0,645	-9,400	0,486	-46,496	0,050	0,393
221	ZINC03831151	-10,000	0,374	-9,400	0,486	-60,395	0,320	0,393
222	ZINC14879972	-12,160	0,598	-9,000	0,429	-51,763	0,152	0,393
223	ZINC38228051	-10,090	0,383	-10,100	0,586	-54,729	0,210	0,393
224	ZINC08101079	-10,780	0,455	-10,200	0,600	-50,299	0,124	0,393
225	ZINC03830187	-13,480	0,735	-9,000	0,429	-44,692	0,015	0,393
226	ZINC00537741	-10,540	0,430	-10,400	0,629	-50,098	0,120	0,393
227	ZINC30691091	-12,010	0,583	-8,700	0,386	-54,730	0,210	0,393
228	ZINC03830928	-10,720	0,449	-8,900	0,414	-60,146	0,315	0,393
229	ZINC72266905	-11,790	0,560	-9,600	0,514	-49,255	0,104	0,393
230	ZINC26985532	-9,410	0,313	-9,600	0,514	-61,958	0,350	0,392
231	ZINC03922429	-9,790	0,352	-10,800	0,686	-51,083	0,139	0,392
232	ZINC31555620	-10,540	0,430	-10,000	0,571	-52,950	0,175	0,392
233	ZINC22034381	-10,190	0,394	-10,100	0,586	-54,055	0,197	0,392
234	ZINC96174226	-12,490	0,632	-8,400	0,343	-54,211	0,200	0,392
235	ZINC38424543	-11,020	0,480	-10,400	0,629	-47,353	0,067	0,392
236	ZINC59587281	-10,980	0,476	-10,000	0,571	-50,451	0,127	0,391
237	ZINC27643330	-10,310	0,406	-9,500	0,500	-57,692	0,268	0,391
238	ZINC56897624	-12,310	0,614	-8,700	0,386	-52,839	0,173	0,391
239	ZINC40163158	-12,490	0,632	-9,000	0,429	-49,656	0,111	0,391
240	ZINC31297681	-12,250	0,607	-9,900	0,557	-44,213	0,006	0,390
241	ZINC56897626	-12,160	0,598	-8,600	0,371	-54,048	0,197	0,389
242	ZINC00537791	-10,030	0,377	-9,300	0,471	-60,258	0,317	0,389

243	ZINC00643153	-10,870	0,464	-9,300	0,471	-55,656	0,228	0,388
244	ZINC58581064	-10,510	0,427	-10,700	0,671	-47,243	0,064	0,388
245	ZINC08101145	-13,390	0,726	-8,900	0,414	-45,083	0,022	0,388
246	ZINC64622553	-12,690	0,653	-9,100	0,443	-47,334	0,066	0,387
247	ZINC33854752	-10,230	0,398	-10,500	0,643	-50,149	0,121	0,387
248	ZINC03830747	-11,690	0,549	-9,000	0,429	-53,307	0,182	0,387
249	ZINC72266312	-10,560	0,432	-9,400	0,486	-56,336	0,241	0,386
250	ZINC95564798	-10,820	0,459	-8,800	0,400	-59,344	0,300	0,386
251	ZINC13775871	-8,900	0,260	-10,800	0,686	-54,798	0,211	0,386
252	ZINC04214317	-9,340	0,305	-10,700	0,671	-53,172	0,180	0,385
253	ZINC01494900	-11,610	0,541	-9,900	0,557	-46,852	0,057	0,385
254	ZINC98214869	-8,870	0,256	-8,700	0,386	-70,248	0,512	0,385
255	ZINC08214690	-12,690	0,653	-8,800	0,400	-49,075	0,100	0,384
256	ZINC08214689	-11,780	0,559	-9,100	0,443	-51,714	0,151	0,384
257	ZINC02016009	-10,550	0,431	-10,800	0,686	-45,784	0,036	0,384
258	ZINC03830779	-12,230	0,605	-9,800	0,543	-44,137	0,004	0,384
259	ZINC03831009	-12,330	0,616	-9,700	0,529	-44,319	0,008	0,384
260	ZINC30691106	-11,750	0,556	-9,400	0,486	-49,597	0,110	0,384
261	ZINC13775871	-9,270	0,298	-10,600	0,657	-54,007	0,196	0,384
262	ZINC72266772	-9,240	0,295	-9,900	0,557	-59,309	0,299	0,384
263	ZINC24811973	-11,220	0,501	-9,200	0,457	-53,868	0,193	0,384
264	ZINC04214532	-12,380	0,621	-9,500	0,500	-45,392	0,028	0,383
265	ZINC22001688	-9,320	0,303	-10,000	0,571	-58,030	0,274	0,383
266	ZINC43153645	-11,830	0,564	-10,000	0,571	-44,540	0,012	0,382
267	ZINC84758957	-8,390	0,207	-10,300	0,614	-60,709	0,326	0,382
268	ZINC00608277	-11,300	0,509	-9,400	0,486	-51,764	0,152	0,382
269	ZINC08214706	-10,240	0,399	-7,300	0,186	-72,858	0,562	0,382
270	ZINC22043131	-10,960	0,474	-10,300	0,614	-46,948	0,059	0,382
271	ZINC01851142	-11,300	0,509	-10,200	0,600	-45,863	0,038	0,382
272	ZINC03938686	-10,350	0,410	-10,200	0,600	-50,935	0,136	0,382
273	ZINC03948997	-10,510	0,427	-10,400	0,629	-48,608	0,091	0,382
274	ZINC08101146	-13,280	0,714	-9,000	0,429	-44,073	0,003	0,382
275	ZINC04214652	-10,580	0,434	-10,600	0,657	-46,711	0,054	0,382
276	ZINC03820043	-10,970	0,475	-9,800	0,543	-50,506	0,128	0,382
277	ZINC30691096	-12,160	0,598	-8,900	0,414	-50,738	0,132	0,382
278	ZINC85537129	-8,980	0,268	-9,700	0,529	-61,811	0,348	0,381
279	ZINC00601282	-10,390	0,414	-10,200	0,600	-50,598	0,130	0,381
280	ZINC00597400	-10,360	0,411	-10,500	0,643	-48,546	0,090	0,381
281	ZINC11616099	-11,390	0,518	-9,600	0,514	-49,631	0,111	0,381
282	ZINC45329780	-11,860	0,567	-8,600	0,371	-54,450	0,205	0,381
283	ZINC14880002	-10,420	0,417	-10,200	0,600	-50,381	0,125	0,381
284	ZINC22010625	-11,640	0,544	-9,700	0,529	-47,527	0,070	0,381
285	ZINC30691085	-12,380	0,621	-8,400	0,343	-53,117	0,179	0,381



286	ZINC00537940	-10,460	0,422	-10,600	0,657	-47,195	0,064	0,381
287	ZINC76945632	-9,740	0,347	-9,200	0,457	-61,310	0,338	0,381
288	ZINC08214551	-9,400	0,312	-8,100	0,300	-71,204	0,530	0,381
289	ZINC03831507	-11,120	0,490	-9,300	0,471	-53,104	0,178	0,380
290	ZINC13831150	-11,190	0,497	-9,000	0,429	-54,925	0,214	0,380
291	ZINC34953149	-9,330	0,304	-10,500	0,643	-53,837	0,193	0,380
292	ZINC26892592	-10,450	0,421	-10,000	0,571	-51,519	0,148	0,380
293	ZINC72190218	-10,720	0,449	-8,200	0,314	-63,307	0,377	0,380
294	ZINC95564685	-11,110	0,489	-8,400	0,343	-59,722	0,307	0,380
295	ZINC03796141	-10,780	0,455	-9,500	0,500	-53,398	0,184	0,380
296	ZINC52955754	-10,960	0,474	-9,600	0,514	-51,674	0,151	0,379
297	ZINC00537877	-10,230	0,398	-10,300	0,614	-50,429	0,126	0,379
298	ZINC59498704	-11,140	0,492	-9,000	0,429	-55,120	0,218	0,379
299	ZINC66251205	-10,640	0,440	-9,600	0,514	-53,345	0,183	0,379
300	ZINC13980035	-8,910	0,261	-10,300	0,614	-57,356	0,261	0,379
301	ZINC31291765	-10,110	0,385	-10,800	0,686	-47,249	0,065	0,379
302	ZINC58568865	-12,570	0,641	-8,600	0,371	-50,263	0,123	0,378
303	ZINC49590112	-11,070	0,485	-10,100	0,586	-47,226	0,064	0,378
304	ZINC03938684	-11,100	0,488	-10,200	0,600	-46,322	0,047	0,378
305	ZINC02036758	-10,490	0,425	-10,500	0,643	-47,357	0,067	0,378
306	ZINC33827894	-10,990	0,477	-10,300	0,614	-46,141	0,043	0,378
307	ZINC13580622	-9,070	0,277	-11,100	0,729	-50,497	0,128	0,378
308	ZINC84758478	-10,520	0,428	-8,500	0,357	-61,848	0,348	0,378
309	ZINC01903948	-10,250	0,400	-11,100	0,729	-44,175	0,005	0,378
310	ZINC04654818	-10,190	0,394	-10,400	0,629	-49,584	0,110	0,377
311	ZINC01851149	-10,850	0,462	-10,000	0,571	-48,948	0,098	0,377
312	ZINC34641109	-9,960	0,370	-11,300	0,757	-44,147	0,004	0,377
313	ZINC11592573	-12,540	0,638	-9,100	0,443	-46,497	0,050	0,377
314	ZINC03950115	-12,620	0,646	-9,200	0,457	-45,332	0,027	0,377
315	ZINC68245097	-10,620	0,438	-10,000	0,571	-50,019	0,118	0,376
316	ZINC04217252	-11,240	0,503	-9,700	0,529	-48,896	0,097	0,376
317	ZINC11679938	-12,110	0,593	-9,400	0,486	-46,390	0,048	0,376
318	ZINC49888583	-11,120	0,490	-10,000	0,571	-47,246	0,064	0,375
319	ZINC95564683	-10,530	0,429	-8,500	0,357	-61,412	0,340	0,375
320	ZINC22463073	-10,020	0,376	-9,300	0,471	-58,238	0,278	0,375
321	ZINC43133326	-10,580	0,434	-10,500	0,643	-46,368	0,047	0,375
322	ZINC19899628	-10,960	0,474	-9,700	0,529	-50,198	0,122	0,375
323	ZINC24044436	-10,570	0,433	-9,400	0,486	-54,483	0,205	0,375
324	ZINC00538067	-10,580	0,434	-10,600	0,657	-45,605	0,033	0,375
325	ZINC19796080	-10,130	0,387	-10,200	0,600	-50,910	0,136	0,374
326	ZINC04474609	-12,300	0,613	-9,100	0,443	-47,364	0,067	0,374
327	ZINC03831361	-11,020	0,480	-8,900	0,414	-55,665	0,228	0,374
328	ZINC08214421	-10,570	0,433	-10,100	0,586	-49,244	0,103	0,374

329	ZINC04213356	-11,910	0,572	-9,800	0,543	-44,278	0,007	0,374
330	ZINC59586817	-10,150	0,389	-10,100	0,586	-51,474	0,147	0,374
331	ZINC38545381	-10,240	0,399	-10,000	0,571	-51,718	0,151	0,374
332	ZINC31622717	-11,350	0,514	-9,900	0,557	-46,513	0,050	0,374
333	ZINC72266934	-10,040	0,378	-9,600	0,514	-55,681	0,228	0,374
334	ZINC26174383	-10,420	0,417	-9,900	0,557	-51,370	0,145	0,373
335	ZINC22449469	-9,820	0,355	-9,800	0,543	-55,297	0,221	0,373
336	ZINC72266933	-9,610	0,333	-9,400	0,486	-59,358	0,300	0,373
337	ZINC30690442	-11,740	0,555	-8,800	0,400	-52,383	0,164	0,373
338	ZINC08214658	-8,140	0,181	-7,600	0,229	-80,393	0,709	0,373
339	ZINC11592927	-10,660	0,442	-9,800	0,543	-50,715	0,132	0,372
340	ZINC04215812	-11,260	0,505	-9,700	0,529	-48,212	0,083	0,372
341	ZINC28771591	-11,340	0,513	-9,100	0,443	-52,153	0,160	0,372
342	ZINC95564684	-10,920	0,469	-7,800	0,257	-63,949	0,389	0,372
343	ZINC84757336	-10,400	0,415	-10,100	0,586	-49,803	0,114	0,372
344	ZINC04098968	-10,720	0,449	-10,500	0,643	-45,133	0,023	0,372
345	ZINC11679768	-12,470	0,630	-8,900	0,414	-47,542	0,070	0,372
346	ZINC25782828	-10,210	0,396	-10,100	0,586	-50,792	0,133	0,372
347	ZINC29058869	-11,390	0,518	-8,700	0,386	-54,774	0,211	0,372
348	ZINC01552379	-10,080	0,382	-9,800	0,543	-53,685	0,190	0,372
349	ZINC52971454	-10,310	0,406	-10,800	0,686	-45,089	0,023	0,371
350	ZINC13828184	-11,070	0,485	-9,600	0,514	-49,827	0,115	0,371
351	ZINC68199992	-10,320	0,407	-9,100	0,443	-57,508	0,264	0,371
352	ZINC03938713	-10,950	0,472	-9,400	0,486	-51,932	0,156	0,371
353	ZINC30691102	-12,360	0,619	-8,200	0,314	-53,218	0,181	0,371
354	ZINC72266771	-10,050	0,379	-9,100	0,443	-58,933	0,292	0,371
355	ZINC03917708	-11,710	0,551	-9,400	0,486	-47,842	0,076	0,371
356	ZINC00597013	-11,660	0,546	-9,600	0,514	-46,638	0,053	0,371
357	ZINC03948085	-9,620	0,334	-9,800	0,543	-56,064	0,236	0,371
358	ZINC22463226	-10,690	0,445	-10,300	0,614	-46,619	0,052	0,371
359	ZINC96006018	-11,390	0,518	-8,900	0,414	-53,153	0,179	0,371
360	ZINC68202099	-10,580	0,434	-10,200	0,600	-47,922	0,078	0,371
361	ZINC03964126	-10,170	0,391	-9,800	0,543	-53,006	0,176	0,370
362	ZINC13813280	-10,830	0,460	-10,300	0,614	-45,798	0,036	0,370
363	ZINC14191207	-9,090	0,279	-9,400	0,486	-61,694	0,345	0,370
364	ZINC01999349	-10,580	0,434	-9,700	0,529	-51,520	0,148	0,370
365	ZINC72266870	-10,740	0,451	-8,400	0,343	-60,158	0,315	0,370
366	ZINC08101054	-9,250	0,296	-9,400	0,486	-60,751	0,327	0,370
367	ZINC03929609	-10,350	0,410	-8,700	0,386	-60,010	0,313	0,369
368	ZINC00601242	-10,830	0,460	-9,800	0,543	-49,354	0,105	0,369
369	ZINC01481831	-9,590	0,331	-10,000	0,571	-54,496	0,205	0,369
370	ZINC04424091	-10,170	0,391	-9,100	0,443	-58,010	0,274	0,369
371	ZINC85537011	-12,850	0,670	-8,000	0,286	-51,759	0,152	0,369

372	ZINC03938676	-9,180	0,289	-10,700	0,671	-51,493	0,147	0,369
373	ZINC34850365	-10,820	0,459	-9,700	0,529	-50,040	0,119	0,369
374	ZINC03995807	-10,390	0,414	-8,600	0,371	-60,355	0,319	0,368
375	ZINC01481822	-8,190	0,186	-10,300	0,614	-59,557	0,304	0,368
376	ZINC22463231	-9,760	0,349	-9,400	0,486	-57,769	0,269	0,368
377	ZINC12503187	-10,330	0,408	-10,500	0,643	-46,609	0,052	0,368
378	ZINC28262151	-8,470	0,215	-7,900	0,271	-75,643	0,616	0,368
379	ZINC84758827	-8,250	0,192	-8,700	0,386	-70,932	0,525	0,368
380	ZINC44709687	-10,100	0,384	-10,900	0,700	-44,872	0,018	0,368
381	ZINC00537997	-10,480	0,424	-10,300	0,614	-47,195	0,064	0,367
382	ZINC08214558	-12,420	0,625	-8,900	0,414	-47,083	0,061	0,367
383	ZINC04624126	-10,580	0,434	-9,500	0,500	-52,460	0,166	0,367
384	ZINC04098965	-9,990	0,373	-10,500	0,643	-48,245	0,084	0,367
385	ZINC31291768	-10,330	0,408	-10,300	0,614	-47,883	0,077	0,366
386	ZINC03830746	-11,980	0,579	-9,100	0,443	-47,882	0,077	0,366
387	ZINC03973279	-9,140	0,285	-9,700	0,529	-58,635	0,286	0,366
388	ZINC04098792	-11,770	0,558	-9,500	0,500	-46,021	0,041	0,366
389	ZINC02016001	-9,390	0,310	-10,900	0,700	-48,399	0,087	0,366
390	ZINC84756991	-11,550	0,535	-8,700	0,386	-53,014	0,177	0,366
391	ZINC00608199	-10,010	0,375	-9,900	0,557	-52,397	0,165	0,366
392	ZINC40454366	-9,260	0,297	-8,900	0,414	-63,749	0,385	0,365
393	ZINC03920020	-11,510	0,531	-9,400	0,486	-48,048	0,080	0,365
394	ZINC33956088	-10,850	0,462	-8,400	0,343	-58,906	0,291	0,365
395	ZINC26180140	-9,480	0,320	-10,200	0,600	-52,972	0,176	0,365
396	ZINC72266881	-10,700	0,447	-9,800	0,543	-49,381	0,106	0,365
397	ZINC00537818	-10,230	0,398	-10,300	0,614	-48,209	0,083	0,365
398	ZINC01481851	-9,630	0,335	-9,300	0,471	-58,764	0,288	0,365
399	ZINC03831439	-10,690	0,445	-9,500	0,500	-51,624	0,150	0,365
400	ZINC00538412	-9,350	0,306	-10,600	0,657	-50,685	0,131	0,365
401	ZINC72266932	-10,000	0,374	-9,400	0,486	-55,986	0,234	0,365
402	ZINC33359785	-10,790	0,456	-10,000	0,571	-47,351	0,067	0,365
403	ZINC72266852	-10,550	0,431	-8,200	0,314	-61,859	0,348	0,365
404	ZINC04213869	-10,630	0,439	-10,000	0,571	-48,145	0,082	0,364
405	ZINC03966243	-9,350	0,306	-9,200	0,457	-60,857	0,329	0,364
406	ZINC34375693	-9,760	0,349	-10,000	0,571	-52,729	0,171	0,364
407	ZINC51943622	-10,960	0,474	-8,800	0,400	-55,117	0,217	0,364
408	ZINC19368434	-9,690	0,342	-10,600	0,657	-48,649	0,092	0,364
409	ZINC27420245	-10,080	0,382	-8,900	0,414	-59,044	0,294	0,363
410	ZINC00538633	-10,450	0,421	-9,700	0,529	-51,180	0,141	0,363
411	ZINC27305632	-8,290	0,196	-10,100	0,586	-59,772	0,308	0,363
412	ZINC17110312	-9,710	0,344	-8,500	0,357	-63,934	0,389	0,363
413	ZINC04215770	-10,460	0,422	-9,800	0,543	-50,339	0,125	0,363
414	ZINC00537805	-8,890	0,259	-10,000	0,571	-57,228	0,258	0,363

415	ZINC01550477	-9,040	0,274	-9,600	0,514	-59,364	0,300	0,363
416	ZINC64033452	-9,860	0,359	-10,900	0,700	-45,419	0,029	0,363
417	ZINC15668997	-9,690	0,342	-10,500	0,643	-49,252	0,103	0,363
418	ZINC01532934	-9,210	0,292	-9,900	0,557	-56,200	0,239	0,362
419	ZINC84758479	-10,110	0,385	-10,200	0,600	-49,136	0,101	0,362
420	ZINC01853834	-10,820	0,459	-9,900	0,557	-47,523	0,070	0,362
421	ZINC49918330	-9,600	0,332	-9,300	0,471	-58,437	0,282	0,362
422	ZINC05957963	-9,740	0,347	-10,300	0,614	-50,333	0,124	0,362
423	ZINC33852267	-10,220	0,397	-9,500	0,500	-53,595	0,188	0,362
424	ZINC05934263	-10,640	0,440	-10,400	0,629	-44,722	0,015	0,361
425	ZINC00537797	-9,530	0,325	-9,400	0,486	-57,974	0,273	0,361
426	ZINC04214262	-10,820	0,459	-8,600	0,371	-56,905	0,252	0,361
427	ZINC40163364	-9,160	0,287	-8,500	0,357	-66,489	0,438	0,361
428	ZINC03831234	-9,910	0,364	-8,900	0,414	-59,520	0,303	0,361
429	ZINC85536943	-8,060	0,172	-9,700	0,529	-63,503	0,380	0,360
430	ZINC03993519	-10,170	0,391	-10,000	0,571	-49,942	0,117	0,360
431	ZINC12466745	-9,560	0,328	-8,900	0,414	-61,277	0,337	0,360
432	ZINC03921872	-11,600	0,540	-9,600	0,514	-45,212	0,025	0,360
433	ZINC03842924	-10,170	0,391	-9,200	0,457	-55,747	0,230	0,359
434	ZINC04214281	-10,460	0,422	-9,800	0,543	-49,737	0,113	0,359
435	ZINC08101100	-10,090	0,383	-8,400	0,343	-61,996	0,351	0,359
436	ZINC64633852	-10,680	0,444	-8,500	0,357	-58,097	0,275	0,359
437	ZINC19144237	-10,100	0,384	-10,200	0,600	-48,699	0,093	0,359
438	ZINC11682492	-10,640	0,440	-9,500	0,500	-50,955	0,137	0,359
439	ZINC03775733	-10,100	0,384	-9,600	0,514	-53,103	0,178	0,359
440	ZINC00537804	-9,550	0,327	-9,800	0,543	-54,561	0,207	0,359
441	ZINC29249103	-11,660	0,546	-8,700	0,386	-51,372	0,145	0,359
442	ZINC00537804	-9,300	0,301	-9,700	0,529	-56,628	0,247	0,359
443	ZINC53683151	-11,540	0,534	-9,000	0,429	-49,799	0,114	0,359
444	ZINC03913915	-10,030	0,377	-8,300	0,329	-62,999	0,371	0,359
445	ZINC27556351	-11,060	0,484	-9,300	0,471	-50,019	0,118	0,358
446	ZINC00538194	-10,130	0,387	-10,200	0,600	-48,361	0,086	0,358
447	ZINC03833846	-11,210	0,499	-8,800	0,400	-52,879	0,174	0,358
448	ZINC13986542	-10,160	0,390	-9,800	0,543	-51,115	0,140	0,358
449	ZINC03872177	-10,190	0,394	-10,200	0,600	-47,993	0,079	0,358
450	ZINC01914818	-10,660	0,442	-9,400	0,486	-51,357	0,144	0,357
451	ZINC05957953	-10,060	0,380	-10,300	0,614	-47,894	0,077	0,357
452	ZINC72266850	-11,180	0,496	-7,900	0,271	-59,540	0,303	0,357
453	ZINC01533241	-11,740	0,555	-9,600	0,514	-44,047	0,002	0,357
454	ZINC36487556	-8,840	0,253	-10,700	0,671	-51,447	0,146	0,357
455	ZINC98052868	-10,410	0,416	-7,700	0,243	-65,094	0,411	0,357
456	ZINC40379938	-9,070	0,277	-10,400	0,629	-52,392	0,165	0,357
457	ZINC22446649	-10,750	0,452	-8,400	0,343	-58,100	0,275	0,357

458	ZINC03598305	-11,160	0,494	-9,700	0,529	-46,306	0,046	0,356
459	ZINC03831232	-10,060	0,380	-8,600	0,371	-60,260	0,317	0,356
460	ZINC33973056	-10,710	0,448	-9,800	0,543	-47,912	0,077	0,356
461	ZINC13892582	-11,030	0,481	-8,600	0,371	-54,977	0,215	0,356
462	ZINC84759272	-9,860	0,359	-9,700	0,529	-53,072	0,178	0,355
463	ZINC04212030	-10,100	0,384	-10,500	0,643	-45,878	0,038	0,355
464	ZINC00896512	-10,700	0,447	-9,400	0,486	-50,708	0,132	0,355
465	ZINC30691635	-10,500	0,426	-9,700	0,529	-49,568	0,110	0,355
466	ZINC04098969	-10,020	0,376	-10,300	0,614	-47,721	0,074	0,355
467	ZINC49590110	-10,630	0,439	-9,900	0,557	-47,399	0,067	0,355
468	ZINC03784127	-9,770	0,350	-8,800	0,400	-60,002	0,312	0,354
469	ZINC16052714	-10,040	0,378	-9,400	0,486	-54,128	0,198	0,354
470	ZINC03914240	-10,100	0,384	-9,500	0,500	-53,069	0,178	0,354
471	ZINC00538150	-10,050	0,379	-10,400	0,629	-46,702	0,054	0,354
472	ZINC03936474	-8,820	0,251	-9,000	0,429	-63,523	0,381	0,354
473	ZINC96272772	-9,880	0,361	-9,500	0,500	-54,169	0,199	0,353
474	ZINC66322939	-10,610	0,437	-9,700	0,529	-48,792	0,095	0,353
475	ZINC03817234	-10,800	0,457	-9,900	0,557	-46,246	0,045	0,353
476	ZINC33854782	-9,270	0,298	-9,800	0,543	-55,111	0,217	0,353
477	ZINC00537793	-9,340	0,305	-9,600	0,514	-56,194	0,238	0,353
478	ZINC00607900	-10,120	0,386	-9,500	0,500	-52,748	0,171	0,353
479	ZINC04212452	-10,450	0,421	-10,200	0,600	-45,836	0,037	0,353
480	ZINC08101049	-9,720	0,345	-9,900	0,557	-51,936	0,156	0,353
481	ZINC52509366	-10,000	0,374	-10,000	0,571	-49,668	0,112	0,352
482	ZINC01542113	-9,810	0,354	-9,600	0,514	-53,621	0,188	0,352
483	ZINC31983000	-10,120	0,386	-10,100	0,586	-48,259	0,084	0,352
484	ZINC05844792	-9,550	0,327	-10,400	0,629	-49,088	0,100	0,352
485	ZINC18098320	-9,260	0,297	-8,900	0,414	-61,645	0,344	0,352
486	ZINC85536946	-8,570	0,225	-8,500	0,357	-68,226	0,472	0,352
487	ZINC52509463	-11,240	0,503	-9,800	0,543	-44,349	0,008	0,351
488	ZINC19632603	-9,710	0,344	-10,200	0,600	-49,581	0,110	0,351
489	ZINC56898757	-10,240	0,399	-10,300	0,614	-46,013	0,041	0,351
490	ZINC03826691	-10,430	0,418	-9,600	0,514	-50,130	0,121	0,351
491	ZINC00607915	-9,480	0,320	-9,600	0,514	-55,195	0,219	0,351
492	ZINC14879987	-10,070	0,381	-9,700	0,529	-51,285	0,143	0,351
493	ZINC72266270	-10,780	0,455	-9,800	0,543	-46,744	0,055	0,351
494	ZINC00968279	-9,910	0,364	-9,800	0,543	-51,323	0,144	0,350
495	ZINC05933614	-10,140	0,388	-10,200	0,600	-47,141	0,062	0,350
496	ZINC29562299	-7,580	0,123	-8,400	0,343	-74,039	0,585	0,350
497	ZINC38545380	-9,990	0,373	-9,800	0,543	-50,859	0,135	0,350
498	ZINC03873936	-10,250	0,400	-9,400	0,486	-52,358	0,164	0,350
499	ZINC04216843	-11,210	0,499	-9,200	0,457	-48,696	0,093	0,350
500	ZINC04215591	-8,820	0,251	-9,500	0,500	-59,254	0,298	0,350

501	ZINC03830778	-11,750	0,556	-9,400	0,486	-44,325	0,008	0,350
502	ZINC72266895	-11,740	0,555	-8,200	0,314	-53,199	0,180	0,350
503	ZINC14879999	-9,510	0,323	-8,800	0,400	-60,701	0,326	0,350
504	ZINC11592907	-11,190	0,497	-8,300	0,329	-55,383	0,223	0,350
505	ZINC05317406	-10,840	0,461	-9,700	0,529	-46,938	0,059	0,349
506	ZINC04215442	-10,960	0,474	-9,700	0,529	-46,256	0,045	0,349
507	ZINC03784397	-9,350	0,306	-9,000	0,429	-59,999	0,312	0,349
508	ZINC03831332	-10,820	0,459	-8,500	0,357	-55,816	0,231	0,349
509	ZINC56898864	-12,100	0,592	-8,900	0,414	-46,035	0,041	0,349
510	ZINC03989258	-10,110	0,385	-9,700	0,529	-50,777	0,133	0,349
511	ZINC27439698	-9,870	0,360	-8,900	0,414	-57,936	0,272	0,349
512	ZINC04423231	-10,410	0,416	-10,200	0,600	-45,465	0,030	0,349
513	ZINC05049216	-9,550	0,327	-10,400	0,629	-48,584	0,091	0,349
514	ZINC45396211	-10,410	0,416	-9,700	0,529	-49,123	0,101	0,349
515	ZINC03830923	-10,180	0,393	-10,300	0,614	-45,936	0,039	0,349
516	ZINC03776441	-10,820	0,459	-10,100	0,586	-43,964	0,001	0,348
517	ZINC03992480	-10,410	0,416	-8,200	0,314	-60,121	0,315	0,348
518	ZINC43200832	-10,060	0,380	-9,200	0,457	-54,641	0,208	0,348
519	ZINC06117407	-10,230	0,398	-10,100	0,586	-47,106	0,062	0,348
520	ZINC72266872	-10,330	0,408	-8,100	0,300	-61,256	0,337	0,348
521	ZINC34033127	-10,410	0,416	-9,900	0,557	-47,591	0,071	0,348
522	ZINC03830634	-10,050	0,379	-10,000	0,571	-48,755	0,094	0,348
523	ZINC22816725	-9,530	0,325	-8,300	0,329	-64,016	0,390	0,348
524	ZINC00537737	-10,160	0,390	-9,900	0,557	-48,878	0,096	0,348
525	ZINC14693677	-12,630	0,647	-8,600	0,371	-45,232	0,025	0,348
526	ZINC02013778	-10,240	0,399	-10,200	0,600	-46,192	0,044	0,348
527	ZINC40899447	-10,170	0,391	-10,200	0,600	-46,565	0,051	0,348
528	ZINC85537047	-11,310	0,510	-8,700	0,386	-51,459	0,146	0,347
529	ZINC00537802	-9,130	0,283	-9,600	0,514	-56,475	0,244	0,347
530	ZINC03834198	-9,570	0,329	-10,200	0,600	-49,631	0,111	0,347
531	ZINC95627831	-10,450	0,421	-9,300	0,471	-51,541	0,148	0,347
532	ZINC03831123	-11,080	0,486	-8,700	0,386	-52,573	0,168	0,347
533	ZINC03635820	-10,620	0,438	-9,100	0,443	-52,086	0,159	0,347
534	ZINC01548097	-9,640	0,336	-9,900	0,557	-51,442	0,146	0,347
535	ZINC31597122	-11,180	0,496	-8,900	0,414	-50,552	0,129	0,346
536	ZINC26683062	-9,210	0,292	-9,700	0,529	-55,191	0,219	0,346
537	ZINC00537795	-9,450	0,317	-9,300	0,471	-56,844	0,251	0,346
538	ZINC03801505	-9,670	0,340	-10,000	0,571	-50,472	0,127	0,346
539	ZINC31291778	-10,890	0,466	-9,900	0,557	-44,666	0,014	0,346
540	ZINC04214295	-9,670	0,340	-9,100	0,443	-57,061	0,255	0,346
541	ZINC08101104	-11,530	0,533	-8,700	0,386	-50,024	0,118	0,346
542	ZINC19685792	-9,760	0,349	-9,400	0,486	-54,320	0,202	0,346
543	ZINC85540165	-10,150	0,389	-8,300	0,329	-60,314	0,318	0,345

544	ZINC03873817	-10,160	0,390	-9,800	0,543	-49,216	0,103	0,345
545	ZINC03982657	-10,010	0,375	-9,800	0,543	-50,005	0,118	0,345
546	ZINC04215044	-11,360	0,515	-8,900	0,414	-49,393	0,106	0,345
547	ZINC00537750	-10,080	0,382	-9,400	0,486	-52,552	0,168	0,345
548	ZINC43171220	-9,770	0,350	-9,700	0,529	-51,973	0,156	0,345
549	ZINC35018256	-9,950	0,369	-10,000	0,571	-48,767	0,094	0,345
550	ZINC43208634	-9,560	0,328	-10,800	0,686	-44,929	0,019	0,344
551	ZINC34951302	-9,140	0,285	-10,200	0,600	-51,572	0,149	0,344
552	ZINC02526765	-10,130	0,387	-10,200	0,600	-46,271	0,046	0,344
553	ZINC96006024	-12,840	0,669	-8,000	0,286	-47,950	0,078	0,344
554	ZINC11679877	-8,700	0,239	-9,700	0,529	-57,574	0,265	0,344
555	ZINC00896512	-10,660	0,442	-9,400	0,486	-49,279	0,104	0,344
556	ZINC22463051	-11,260	0,505	-8,900	0,414	-49,747	0,113	0,344
557	ZINC30690682	-11,660	0,546	-9,200	0,457	-45,369	0,028	0,344
558	ZINC98214888	-7,850	0,151	-7,900	0,271	-75,253	0,609	0,344
559	ZINC04099032	-11,780	0,559	-9,200	0,457	-44,691	0,015	0,344
560	ZINC40163252	-9,830	0,356	-8,200	0,314	-62,457	0,360	0,344
561	ZINC22463155	-9,720	0,345	-9,300	0,471	-54,944	0,214	0,343
562	ZINC26671872	-10,960	0,474	-9,100	0,443	-49,770	0,114	0,343
563	ZINC26683062	-9,540	0,326	-9,400	0,486	-55,112	0,217	0,343
564	ZINC00537738	-9,570	0,329	-9,900	0,557	-51,245	0,142	0,343
565	ZINC19364169	-10,190	0,394	-9,300	0,471	-52,342	0,164	0,343
566	ZINC84616673	-11,000	0,478	-9,600	0,514	-45,797	0,036	0,343
567	ZINC37866151	-9,840	0,357	-10,300	0,614	-46,849	0,057	0,343
568	ZINC04213752	-10,400	0,415	-9,000	0,429	-53,407	0,184	0,343
569	ZINC04172332	-11,990	0,580	-8,600	0,371	-47,849	0,076	0,343
570	ZINC11617039	-8,470	0,215	-10,300	0,614	-54,154	0,199	0,343
571	ZINC01482144	-10,400	0,415	-10,200	0,600	-44,562	0,012	0,343
572	ZINC06030342	-10,260	0,401	-9,800	0,543	-48,240	0,084	0,343
573	ZINC17653974	-9,930	0,367	-10,200	0,600	-47,051	0,061	0,342
574	ZINC34999931	-8,730	0,242	-9,900	0,557	-55,652	0,228	0,342
575	ZINC03976838	-9,180	0,289	-9,300	0,471	-57,643	0,267	0,342
576	ZINC01542929	-10,070	0,381	-9,600	0,514	-50,670	0,131	0,342
577	ZINC00538430	-11,210	0,499	-9,400	0,486	-45,996	0,040	0,342
578	ZINC22463271	-11,210	0,499	-8,900	0,414	-49,654	0,111	0,342
579	ZINC43100810	-9,380	0,309	-9,600	0,514	-54,255	0,201	0,341
580	ZINC00601275	-9,460	0,318	-10,500	0,643	-47,184	0,063	0,341
581	ZINC08214500	-8,680	0,237	-9,500	0,500	-58,697	0,287	0,341
582	ZINC03800366	-10,050	0,379	-9,500	0,500	-51,361	0,144	0,341
583	ZINC35968991	-10,380	0,413	-9,800	0,543	-47,388	0,067	0,341
584	ZINC00538229	-9,740	0,347	-9,800	0,543	-50,806	0,134	0,341
585	ZINC85540148	-10,750	0,452	-9,000	0,429	-51,284	0,143	0,341
586	ZINC85536974	-7,940	0,160	-9,800	0,543	-60,407	0,320	0,341

587	ZINC03830430	-8,810	0,250	-8,700	0,386	-63,842	0,387	0,341
588	ZINC11678567	-10,830	0,460	-9,500	0,500	-47,096	0,062	0,341
589	ZINC01853032	-10,380	0,413	-10,200	0,600	-44,342	0,008	0,340
590	ZINC00607904	-10,860	0,463	-9,300	0,471	-48,358	0,086	0,340
591	ZINC96902557	-8,670	0,236	-8,100	0,300	-68,878	0,485	0,340
592	ZINC49783788	-9,750	0,348	-8,300	0,329	-61,628	0,344	0,340
593	ZINC33956087	-10,440	0,420	-8,300	0,329	-57,923	0,272	0,340
594	ZINC11592963	-10,440	0,420	-9,600	0,514	-48,357	0,086	0,340
595	ZINC03812841	-11,750	0,556	-9,100	0,443	-45,023	0,021	0,340
596	ZINC89224231	-10,550	0,431	-9,700	0,529	-47,015	0,060	0,340
597	ZINC13652236	-8,680	0,237	-10,200	0,600	-53,323	0,183	0,340
598	ZINC03828539	-10,240	0,399	-9,200	0,457	-52,321	0,163	0,340
599	ZINC03807172	-9,180	0,289	-8,900	0,414	-60,187	0,316	0,340
600	ZINC03984042	-11,940	0,575	-9,100	0,443	-43,945	0,000	0,339
601	ZINC13831151	-10,470	0,423	-8,700	0,386	-54,723	0,210	0,339
602	ZINC02019989	-9,680	0,341	-9,900	0,557	-50,112	0,120	0,339
603	ZINC19632896	-10,230	0,398	-9,800	0,543	-47,894	0,077	0,339
604	ZINC22449528	-9,160	0,287	-9,800	0,543	-53,595	0,188	0,339
605	ZINC03831493	-10,340	0,409	-8,800	0,400	-54,635	0,208	0,339
606	ZINC03831231	-9,580	0,330	-8,700	0,386	-59,421	0,301	0,339
607	ZINC01550499	-10,020	0,376	-10,000	0,571	-47,507	0,070	0,339
608	ZINC03780122	-10,610	0,437	-9,000	0,429	-51,694	0,151	0,339
609	ZINC01731588	-10,110	0,385	-9,800	0,543	-48,470	0,088	0,339
610	ZINC95564895	-8,830	0,252	-8,100	0,300	-67,800	0,464	0,339
611	ZINC01851105	-9,690	0,342	-9,900	0,557	-49,916	0,116	0,338
612	ZINC84425463	-9,250	0,296	-10,000	0,571	-51,514	0,147	0,338
613	ZINC29134440	-9,460	0,318	-8,900	0,414	-58,476	0,283	0,338
614	ZINC26994433	-11,140	0,492	-8,500	0,357	-52,423	0,165	0,338
615	ZINC49746312	-8,880	0,258	-9,700	0,529	-55,611	0,227	0,338
616	ZINC01542393	-10,240	0,399	-9,200	0,457	-52,007	0,157	0,338
617	ZINC03831110	-10,060	0,380	-9,800	0,543	-48,551	0,090	0,338
618	ZINC68208039	-9,720	0,345	-9,600	0,514	-51,832	0,154	0,338
619	ZINC01844627	-8,900	0,260	-10,700	0,671	-48,127	0,082	0,338
620	ZINC01530866	-10,630	0,439	-9,100	0,443	-50,622	0,130	0,337
621	ZINC08101106	-12,230	0,605	-8,800	0,400	-44,276	0,007	0,337
622	ZINC59587241	-10,770	0,454	-8,800	0,400	-52,072	0,158	0,337
623	ZINC14974931	-9,750	0,348	-9,900	0,557	-49,427	0,107	0,337
624	ZINC01483899	-8,710	0,240	-9,900	0,557	-54,978	0,215	0,337
625	ZINC03827362	-9,170	0,288	-10,700	0,671	-46,629	0,053	0,337
626	ZINC00538006	-9,740	0,347	-9,900	0,557	-49,457	0,107	0,337
627	ZINC03826253	-11,260	0,505	-9,200	0,457	-46,478	0,050	0,337
628	ZINC03818355	-9,810	0,354	-10,100	0,586	-47,598	0,071	0,337
629	ZINC04099009	-12,190	0,601	-8,400	0,343	-47,360	0,067	0,337



630	ZINC00537734	-9,750	0,348	-9,700	0,529	-50,838	0,134	0,337
631	ZINC98214887	-9,760	0,349	-10,300	0,614	-46,366	0,047	0,337
632	ZINC72267022	-8,390	0,207	-10,000	0,571	-55,889	0,232	0,337
633	ZINC04214476	-8,590	0,227	-8,100	0,300	-68,774	0,483	0,337
634	ZINC00001509	-9,960	0,370	-10,300	0,614	-45,244	0,026	0,337
635	ZINC03927341	-10,080	0,382	-10,100	0,586	-46,064	0,042	0,336
636	ZINC05647776	-10,470	0,423	-8,900	0,414	-52,764	0,172	0,336
637	ZINC84758829	-8,360	0,204	-8,500	0,357	-66,979	0,448	0,336
638	ZINC01536786	-10,940	0,471	-9,300	0,471	-47,303	0,066	0,336
639	ZINC84757890	-11,230	0,502	-9,100	0,443	-47,214	0,064	0,336
640	ZINC03830633	-10,150	0,389	-9,700	0,529	-48,529	0,089	0,336
641	ZINC08101108	-9,550	0,327	-8,400	0,343	-61,252	0,337	0,336
642	ZINC72266894	-11,210	0,499	-8,300	0,329	-53,088	0,178	0,335
643	ZINC38309313	-11,610	0,541	-8,800	0,400	-47,255	0,065	0,335
644	ZINC04214527	-10,140	0,388	-9,200	0,457	-52,163	0,160	0,335
645	ZINC01552174	-9,870	0,360	-9,700	0,529	-49,918	0,116	0,335
646	ZINC03991642	-9,560	0,328	-10,200	0,600	-47,870	0,077	0,335
647	ZINC52956332	-10,620	0,438	-9,700	0,529	-45,881	0,038	0,335
648	ZINC01537633	-10,210	0,396	-9,500	0,500	-49,535	0,109	0,335
649	ZINC95564630	-10,580	0,434	-9,300	0,471	-49,004	0,099	0,335
650	ZINC01892462	-10,870	0,464	-9,300	0,471	-47,451	0,068	0,335
651	ZINC02570819	-10,170	0,391	-10,100	0,586	-45,305	0,027	0,335
652	ZINC72266936	-8,180	0,185	-8,100	0,300	-70,616	0,519	0,335
653	ZINC19862646	-8,910	0,261	-9,200	0,457	-58,624	0,286	0,334
654	ZINC04213831	-9,050	0,275	-8,900	0,414	-60,074	0,314	0,334
655	ZINC03830731	-9,710	0,344	-9,700	0,529	-50,657	0,131	0,334
656	ZINC14822915	-10,550	0,431	-8,200	0,314	-57,187	0,258	0,334
657	ZINC00538363	-11,200	0,498	-9,300	0,471	-45,616	0,033	0,334
658	ZINC01482088	-10,870	0,464	-9,700	0,529	-44,439	0,010	0,334
659	ZINC84759271	-9,980	0,372	-9,500	0,500	-50,647	0,131	0,334
660	ZINC03777540	-10,250	0,400	-8,700	0,386	-55,071	0,217	0,334
661	ZINC02018994	-10,470	0,423	-9,900	0,557	-45,062	0,022	0,334
662	ZINC59868006	-10,280	0,403	-9,900	0,557	-46,076	0,042	0,334
663	ZINC00001509	-10,030	0,377	-10,300	0,614	-44,447	0,010	0,334
664	ZINC35328014	-9,610	0,333	-10,300	0,614	-46,663	0,053	0,334
665	ZINC03822702	-9,820	0,355	-9,300	0,471	-52,888	0,174	0,334
666	ZINC04213150	-10,780	0,455	-9,100	0,443	-49,225	0,103	0,334
667	ZINC00643138	-10,060	0,380	-9,200	0,457	-52,327	0,163	0,333
668	ZINC84758234	-9,020	0,272	-8,100	0,300	-65,966	0,428	0,333
669	ZINC00538339	-10,350	0,410	-9,600	0,514	-47,827	0,076	0,333
670	ZINC04215520	-10,350	0,410	-9,800	0,543	-46,353	0,047	0,333
671	ZINC03872994	-10,790	0,456	-8,600	0,371	-52,821	0,173	0,333
672	ZINC00538065	-9,410	0,313	-9,000	0,429	-57,247	0,259	0,333

673	ZINC06165906	-10,800	0,457	-9,200	0,457	-48,349	0,086	0,333
674	ZINC06745272	-9,300	0,301	-9,800	0,543	-51,938	0,156	0,333
675	ZINC38811251	-10,510	0,427	-9,700	0,529	-46,203	0,044	0,333
676	ZINC28827350	-10,350	0,410	-9,400	0,486	-49,260	0,104	0,333
677	ZINC14255250	-9,910	0,364	-8,400	0,343	-58,938	0,292	0,333
678	ZINC72266828	-10,210	0,396	-9,200	0,457	-51,441	0,146	0,333
679	ZINC03920266	-10,450	0,421	-9,900	0,557	-45,003	0,021	0,333
680	ZINC31545115	-9,980	0,372	-9,800	0,543	-48,234	0,084	0,333
681	ZINC33956089	-9,750	0,348	-8,500	0,357	-58,944	0,292	0,332
682	ZINC33854754	-9,480	0,320	-9,900	0,557	-50,083	0,120	0,332
683	ZINC00538335	-10,580	0,434	-9,700	0,529	-45,669	0,034	0,332
684	ZINC40163033	-10,530	0,429	-9,200	0,457	-49,606	0,110	0,332
685	ZINC43204002	-9,810	0,354	-8,400	0,343	-59,314	0,299	0,332
686	ZINC04212085	-10,810	0,458	-9,700	0,529	-44,412	0,009	0,332
687	ZINC22463214	-10,580	0,434	-8,800	0,400	-52,230	0,161	0,332
688	ZINC85537014	-6,760	0,037	-8,600	0,371	-74,092	0,586	0,332
689	ZINC11677837	-10,600	0,436	-9,500	0,500	-46,945	0,059	0,332
690	ZINC15848209	-12,390	0,622	-8,600	0,371	-43,990	0,001	0,332
691	ZINC08214528	-8,000	0,166	-8,600	0,371	-67,402	0,456	0,331
692	ZINC85540119	-7,800	0,145	-8,600	0,371	-68,441	0,476	0,331
693	ZINC53256507	-8,330	0,200	-8,800	0,400	-64,133	0,393	0,331
694	ZINC04213946	-9,330	0,304	-10,100	0,586	-49,230	0,103	0,331
695	ZINC31982616	-10,160	0,390	-9,900	0,557	-46,242	0,045	0,331
696	ZINC01532099	-9,430	0,315	-10,200	0,600	-47,924	0,078	0,331
697	ZINC22463149	-10,260	0,401	-9,100	0,443	-51,570	0,149	0,331
698	ZINC04214891	-11,100	0,488	-8,900	0,414	-48,549	0,090	0,331
699	ZINC08101070	-9,610	0,333	-8,200	0,314	-61,642	0,344	0,331
700	ZINC08101107	-11,340	0,513	-8,800	0,400	-47,974	0,079	0,331
701	ZINC00538550	-9,870	0,360	-10,100	0,586	-46,260	0,045	0,330
702	ZINC04214735	-10,660	0,442	-9,800	0,543	-44,211	0,006	0,330
703	ZINC22448696	-8,830	0,252	-9,100	0,443	-59,107	0,295	0,330
704	ZINC03875528	-11,560	0,536	-7,900	0,271	-53,310	0,182	0,330
705	ZINC03975663	-9,200	0,291	-9,300	0,471	-55,625	0,227	0,330
706	ZINC21297287	-10,160	0,390	-9,800	0,543	-46,816	0,056	0,330
707	ZINC38562120	-9,720	0,345	-9,700	0,529	-49,878	0,116	0,330
708	ZINC00968277	-9,910	0,364	-9,800	0,543	-48,127	0,082	0,330
709	ZINC03775812	-10,150	0,389	-10,000	0,571	-45,338	0,027	0,329
710	ZINC00001567	-9,990	0,373	-9,800	0,543	-47,641	0,072	0,329
711	ZINC43199890	-9,020	0,272	-9,900	0,557	-52,080	0,158	0,329
712	ZINC11680531	-9,770	0,350	-8,900	0,414	-55,396	0,223	0,329
713	ZINC00598193	-9,390	0,310	-10,700	0,671	-44,176	0,005	0,329
714	ZINC14768533	-11,240	0,503	-8,500	0,357	-50,452	0,127	0,329
715	ZINC01567316	-10,060	0,380	-9,700	0,529	-47,908	0,077	0,329

716	ZINC66097848	-10,620	0,438	-9,200	0,457	-48,575	0,090	0,329
717	ZINC33956090	-9,660	0,339	-8,500	0,357	-58,848	0,290	0,329
718	ZINC04215401	-9,440	0,316	-9,800	0,543	-50,416	0,126	0,328
719	ZINC03823475	-10,240	0,399	-9,400	0,486	-49,061	0,100	0,328
720	ZINC34026954	-9,920	0,366	-8,900	0,414	-54,437	0,204	0,328
721	ZINC04097472	-10,810	0,458	-9,300	0,471	-46,730	0,054	0,328
722	ZINC03938759	-10,580	0,434	-9,100	0,443	-49,402	0,106	0,328
723	ZINC04214155	-11,010	0,479	-8,700	0,386	-50,024	0,118	0,328
724	ZINC04217422	-9,350	0,306	-9,900	0,557	-50,071	0,119	0,328
725	ZINC00897251	-10,520	0,428	-9,500	0,500	-46,758	0,055	0,328
726	ZINC03831462	-8,490	0,217	-9,500	0,500	-57,594	0,266	0,328
727	ZINC13207499	-10,450	0,421	-9,900	0,557	-44,173	0,005	0,327
728	ZINC04214938	-8,990	0,269	-9,600	0,514	-54,174	0,199	0,327
729	ZINC00538505	-9,950	0,369	-10,100	0,586	-45,357	0,028	0,327
730	ZINC40454370	-9,910	0,364	-8,500	0,357	-57,311	0,260	0,327
731	ZINC03944422	-7,380	0,102	-8,100	0,300	-73,761	0,580	0,327
732	ZINC03913909	-9,320	0,303	-9,400	0,486	-53,830	0,192	0,327
733	ZINC03927238	-8,780	0,247	-9,300	0,471	-57,443	0,263	0,327
734	ZINC01553281	-9,460	0,318	-9,500	0,500	-52,317	0,163	0,327
735	ZINC01532094	-10,000	0,374	-9,900	0,557	-46,484	0,050	0,327
736	ZINC11679942	-11,130	0,491	-8,800	0,400	-48,488	0,089	0,327
737	ZINC72266835	-9,420	0,314	-9,500	0,500	-52,476	0,166	0,327
738	ZINC01493454	-10,020	0,376	-9,600	0,514	-48,524	0,089	0,327
739	ZINC14210642	-8,900	0,260	-9,600	0,514	-54,475	0,205	0,326
740	ZINC03882897	-9,980	0,372	-9,200	0,457	-51,635	0,150	0,326
741	ZINC05599842	-10,030	0,377	-9,800	0,543	-46,952	0,059	0,326
742	ZINC03827732	-10,610	0,437	-9,500	0,500	-46,010	0,040	0,326
743	ZINC30691168	-9,850	0,358	-9,600	0,514	-49,323	0,105	0,326
744	ZINC96941868	-7,770	0,142	-9,200	0,457	-63,349	0,377	0,326
745	ZINC22058279	-9,750	0,348	-9,600	0,514	-49,829	0,115	0,326
746	ZINC04217449	-8,770	0,246	-9,100	0,443	-58,734	0,288	0,326
747	ZINC00537994	-9,940	0,368	-9,000	0,429	-53,200	0,180	0,325
748	ZINC04214612	-8,850	0,254	-9,200	0,457	-57,549	0,265	0,325
749	ZINC02033589	-9,080	0,278	-9,900	0,557	-51,174	0,141	0,325
750	ZINC06037520	-10,790	0,456	-8,800	0,400	-50,120	0,120	0,325
751	ZINC13986811	-8,350	0,202	-10,400	0,629	-51,386	0,145	0,325
752	ZINC04212159	-11,020	0,480	-8,700	0,386	-49,588	0,110	0,325
753	ZINC56898737	-10,070	0,381	-9,600	0,514	-48,010	0,079	0,325
754	ZINC11680536	-9,720	0,345	-8,800	0,400	-55,760	0,230	0,325
755	ZINC43205655	-9,720	0,345	-9,200	0,457	-52,819	0,173	0,325
756	ZINC00643143	-9,920	0,366	-9,100	0,443	-52,478	0,166	0,325
757	ZINC03981882	-8,880	0,258	-9,400	0,486	-55,792	0,231	0,325
758	ZINC22448983	-9,620	0,334	-8,800	0,400	-56,229	0,239	0,324

759	ZINC05933664	-9,390	0,310	-10,300	0,614	-46,389	0,048	0,324
760	ZINC30160243	-10,660	0,442	-8,000	0,286	-56,500	0,244	0,324
761	ZINC72190226	-9,930	0,367	-8,400	0,343	-57,456	0,263	0,324
762	ZINC03831511	-10,250	0,400	-8,800	0,400	-52,805	0,173	0,324
763	ZINC13883416	-9,470	0,319	-9,400	0,486	-52,547	0,168	0,324
764	ZINC16159083	-10,140	0,388	-9,100	0,443	-51,144	0,140	0,324
765	ZINC19685795	-9,250	0,296	-8,900	0,414	-57,346	0,261	0,324
766	ZINC11592789	-9,280	0,299	-10,100	0,586	-48,363	0,086	0,324
767	ZINC23118515	-10,070	0,381	-9,500	0,500	-48,546	0,090	0,324
768	ZINC85536940	-9,210	0,292	-8,900	0,414	-57,547	0,265	0,324
769	ZINC04097427	-9,700	0,343	-8,500	0,357	-57,851	0,271	0,323
770	ZINC03831495	-10,080	0,382	-8,700	0,386	-54,346	0,202	0,323
771	ZINC00607963	-10,270	0,402	-9,200	0,457	-49,636	0,111	0,323
772	ZINC68245097	-9,730	0,346	-9,500	0,500	-50,315	0,124	0,323
773	ZINC27084753	-8,950	0,265	-8,300	0,329	-63,254	0,376	0,323
774	ZINC04212651	-10,520	0,428	-9,400	0,486	-46,740	0,055	0,323
775	ZINC05442107	-9,870	0,360	-8,700	0,386	-55,341	0,222	0,323
776	ZINC03830826	-9,680	0,341	-10,200	0,600	-45,320	0,027	0,323
777	ZINC03918087	-10,760	0,453	-8,900	0,414	-49,092	0,100	0,322
778	ZINC03831002	-10,520	0,428	-9,400	0,486	-46,666	0,053	0,322
779	ZINC03831331	-9,990	0,373	-8,400	0,343	-56,835	0,251	0,322
780	ZINC05318621	-10,060	0,380	-9,300	0,471	-49,839	0,115	0,322
781	ZINC04212197	-10,760	0,453	-8,500	0,357	-51,957	0,156	0,322
782	ZINC72266261	-10,790	0,456	-9,000	0,429	-48,116	0,081	0,322
783	ZINC01846209	-7,980	0,164	-10,500	0,643	-52,086	0,159	0,322
784	ZINC27093989	-9,390	0,310	-9,300	0,471	-53,360	0,183	0,322
785	ZINC00897408	-9,750	0,348	-10,000	0,571	-46,254	0,045	0,322
786	ZINC01481925	-9,960	0,370	-9,700	0,529	-47,309	0,066	0,321
787	ZINC38545379	-9,780	0,351	-9,200	0,457	-51,912	0,155	0,321
788	ZINC00607849	-9,890	0,362	-9,800	0,543	-46,905	0,058	0,321
789	ZINC03943279	-7,240	0,087	-8,000	0,286	-74,296	0,590	0,321
790	ZINC01999423	-10,410	0,416	-9,500	0,500	-46,315	0,046	0,321
791	ZINC53230370	-9,410	0,313	-8,500	0,357	-58,971	0,292	0,321
792	ZINC72266938	-8,070	0,173	-8,100	0,300	-69,064	0,489	0,321
793	ZINC96015174	-9,110	0,281	-9,800	0,543	-50,977	0,137	0,320
794	ZINC15821733	-10,840	0,461	-8,300	0,329	-52,746	0,171	0,320
795	ZINC03830925	-9,300	0,301	-10,300	0,614	-46,273	0,046	0,320
796	ZINC05736145	-10,600	0,436	-9,500	0,500	-45,200	0,025	0,320
797	ZINC03831105	-8,560	0,224	-8,900	0,414	-60,507	0,322	0,320
798	ZINC03830632	-9,230	0,294	-10,000	0,571	-48,838	0,095	0,320
799	ZINC03872178	-9,880	0,361	-10,000	0,571	-45,354	0,028	0,320
800	ZINC31425112	-9,240	0,295	-10,300	0,614	-46,552	0,051	0,320
801	ZINC01552489	-9,860	0,359	-9,200	0,457	-51,310	0,143	0,320

802	ZINC03831067	-10,250	0,400	-9,600	0,514	-46,274	0,046	0,320
803	ZINC02018996	-10,360	0,411	-9,800	0,543	-44,200	0,005	0,320
804	ZINC01544683	-10,270	0,402	-9,100	0,443	-49,814	0,114	0,320
805	ZINC72266832	-9,480	0,320	-8,800	0,400	-56,229	0,239	0,320
806	ZINC04217536	-8,090	0,175	-8,400	0,343	-66,587	0,440	0,320
807	ZINC01481979	-10,190	0,394	-9,400	0,486	-48,009	0,079	0,320
808	ZINC03796258	-10,360	0,411	-8,600	0,371	-52,975	0,176	0,319
809	ZINC22588434	-10,960	0,474	-8,700	0,386	-49,019	0,099	0,319
810	ZINC03922701	-10,940	0,471	-8,400	0,343	-51,314	0,144	0,319
811	ZINC66322943	-10,360	0,411	-9,500	0,500	-46,280	0,046	0,319
812	ZINC03830564	-10,350	0,410	-8,400	0,343	-54,385	0,203	0,319
813	ZINC11678088	-9,910	0,364	-9,400	0,486	-49,371	0,106	0,319
814	ZINC08214431	-11,300	0,509	-8,000	0,286	-52,230	0,161	0,319
815	ZINC31477128	-10,240	0,399	-9,100	0,443	-49,806	0,114	0,319
816	ZINC04214146	-8,120	0,179	-8,100	0,300	-68,469	0,477	0,319
817	ZINC04213101	-10,010	0,375	-9,600	0,514	-47,331	0,066	0,318
818	ZINC03830924	-9,700	0,343	-10,000	0,571	-46,040	0,041	0,318
819	ZINC11617004	-11,150	0,493	-8,700	0,386	-47,835	0,076	0,318
820	ZINC84759447	-9,280	0,299	-8,600	0,371	-58,550	0,284	0,318
821	ZINC11616328	-10,780	0,455	-9,000	0,429	-47,589	0,071	0,318
822	ZINC04213888	-9,520	0,324	-8,200	0,314	-60,193	0,316	0,318
823	ZINC01846081	-10,800	0,457	-8,800	0,400	-48,941	0,097	0,318
824	ZINC43207238	-9,830	0,356	-9,600	0,514	-48,230	0,084	0,318
825	ZINC43859231	-9,640	0,336	-9,700	0,529	-48,489	0,089	0,318
826	ZINC00900663	-10,080	0,382	-9,400	0,486	-48,340	0,086	0,318
827	ZINC03830861	-9,510	0,323	-8,500	0,357	-57,956	0,273	0,318
828	ZINC03830401	-9,370	0,308	-9,000	0,429	-55,002	0,215	0,317
829	ZINC04212118	-10,990	0,477	-9,300	0,471	-44,117	0,004	0,317
830	ZINC03830929	-8,920	0,262	-9,000	0,429	-57,370	0,261	0,317
831	ZINC22462882	-11,360	0,515	-8,500	0,357	-48,001	0,079	0,317
832	ZINC02566164	-9,450	0,317	-9,700	0,529	-49,357	0,106	0,317
833	ZINC19360739	-10,750	0,452	-9,200	0,457	-46,079	0,042	0,317
834	ZINC05550642	-10,040	0,378	-9,500	0,500	-47,659	0,073	0,317
835	ZINC85537084	-9,930	0,367	-8,800	0,400	-53,371	0,184	0,317
836	ZINC03955058	-9,520	0,324	-9,600	0,514	-49,679	0,112	0,317
837	ZINC03800008	-10,190	0,394	-8,400	0,343	-54,903	0,213	0,317
838	ZINC03816287	-9,290	0,300	-10,100	0,586	-47,196	0,064	0,316
839	ZINC00643233	-9,700	0,343	-10,100	0,586	-44,998	0,021	0,316
840	ZINC03816287	-9,420	0,314	-10,200	0,600	-45,748	0,035	0,316
841	ZINC03831068	-9,950	0,369	-9,700	0,529	-46,588	0,052	0,316
842	ZINC26384919	-9,530	0,325	-8,300	0,329	-59,115	0,295	0,316
843	ZINC13671573	-10,120	0,386	-9,100	0,443	-50,073	0,119	0,316
844	ZINC05933666	-9,540	0,326	-10,300	0,614	-44,349	0,008	0,316

845	ZINC22463277	-10,240	0,399	-9,000	0,429	-50,150	0,121	0,316
846	ZINC39995635	-8,840	0,253	-9,500	0,500	-53,946	0,195	0,316
847	ZINC72266997	-7,130	0,076	-8,400	0,343	-71,154	0,529	0,316
848	ZINC04214363	-9,800	0,353	-8,200	0,314	-58,356	0,280	0,316
849	ZINC08214430	-9,800	0,353	-8,200	0,314	-58,327	0,280	0,316
850	ZINC27428713	-10,040	0,378	-9,900	0,557	-44,543	0,012	0,316
851	ZINC11726779	-10,090	0,383	-9,400	0,486	-47,922	0,078	0,316
852	ZINC01895505	-10,280	0,403	-9,300	0,471	-47,602	0,071	0,315
853	ZINC21981303	-10,330	0,408	-9,200	0,457	-48,067	0,080	0,315
854	ZINC49757291	-8,970	0,267	-8,900	0,414	-57,502	0,264	0,315
855	ZINC00538476	-9,960	0,370	-9,600	0,514	-47,057	0,061	0,315
856	ZINC11592964	-8,910	0,261	-10,200	0,600	-48,251	0,084	0,315
857	ZINC04213094	-11,320	0,511	-8,900	0,414	-44,917	0,019	0,315
858	ZINC01547675	-10,830	0,460	-8,700	0,386	-48,980	0,098	0,315
859	ZINC95551509	-10,340	0,409	-8,300	0,329	-54,534	0,206	0,315
860	ZINC53230301	-10,530	0,429	-8,400	0,343	-52,776	0,172	0,315
861	ZINC28240499	-9,430	0,315	-10,000	0,571	-46,888	0,058	0,315
862	ZINC00538285	-9,460	0,318	-9,800	0,543	-48,174	0,083	0,314
863	ZINC03831622	-9,750	0,348	-8,400	0,343	-56,915	0,252	0,314
864	ZINC00538337	-10,940	0,471	-8,900	0,414	-46,869	0,057	0,314
865	ZINC00597290	-9,480	0,320	-9,500	0,500	-50,240	0,123	0,314
866	ZINC02038404	-9,970	0,371	-9,700	0,529	-46,152	0,043	0,314
867	ZINC03781952	-10,190	0,394	-8,700	0,386	-52,306	0,163	0,314
868	ZINC00537887	-9,880	0,361	-9,600	0,514	-47,328	0,066	0,314
869	ZINC84758825	-10,320	0,407	-9,100	0,443	-48,649	0,092	0,314
870	ZINC03830732	-8,920	0,262	-9,700	0,529	-51,715	0,151	0,314
871	ZINC00601274	-10,100	0,384	-8,900	0,414	-51,287	0,143	0,314
872	ZINC03964747	-9,610	0,333	-9,600	0,514	-48,754	0,094	0,314
873	ZINC11592962	-9,380	0,309	-9,800	0,543	-48,481	0,088	0,314
874	ZINC04214849	-10,160	0,390	-9,500	0,500	-46,509	0,050	0,314
875	ZINC05196905	-10,390	0,414	-9,500	0,500	-45,277	0,026	0,314
876	ZINC04217531	-9,830	0,356	-8,600	0,371	-54,882	0,213	0,314
877	ZINC53046001	-11,020	0,480	-9,100	0,443	-44,831	0,018	0,313
878	ZINC72266920	-6,480	0,008	-9,000	0,429	-69,775	0,502	0,313
879	ZINC00538227	-9,640	0,336	-9,900	0,557	-46,270	0,046	0,313
880	ZINC19338446	-10,940	0,471	-9,200	0,457	-44,464	0,010	0,313
881	ZINC34001955	-10,450	0,421	-9,500	0,500	-44,865	0,018	0,313
882	ZINC03831104	-8,710	0,240	-8,700	0,386	-60,009	0,313	0,313
883	ZINC03842798	-8,240	0,191	-9,200	0,457	-58,832	0,290	0,313
884	ZINC04217406	-8,720	0,241	-8,300	0,329	-62,875	0,368	0,313
885	ZINC04217431	-10,740	0,451	-9,200	0,457	-45,460	0,030	0,313
886	ZINC30690433	-10,730	0,450	-8,800	0,400	-48,453	0,088	0,313
887	ZINC31483558	-10,150	0,389	-9,400	0,486	-47,137	0,062	0,313

888	ZINC11678097	-9,040	0,274	-10,000	0,571	-48,643	0,092	0,312
889	ZINC04098264	-10,700	0,447	-8,700	0,386	-49,328	0,105	0,312
890	ZINC85537091	-7,270	0,090	-7,600	0,229	-75,727	0,618	0,312
891	ZINC04216989	-9,810	0,354	-8,900	0,414	-52,585	0,168	0,312
892	ZINC22463197	-9,170	0,288	-9,100	0,443	-54,526	0,206	0,312
893	ZINC00606503	-9,220	0,293	-9,500	0,500	-51,299	0,143	0,312
894	ZINC01843602	-9,810	0,354	-9,900	0,557	-45,172	0,024	0,312
895	ZINC01530571	-10,940	0,471	-8,700	0,386	-47,947	0,078	0,312
896	ZINC03612878	-9,600	0,332	-9,100	0,443	-52,150	0,160	0,312
897	ZINC04172337	-11,180	0,496	-8,000	0,286	-51,790	0,153	0,312
898	ZINC33858308	-9,810	0,354	-9,700	0,529	-46,612	0,052	0,312
899	ZINC31291705	-9,580	0,330	-10,100	0,586	-44,891	0,019	0,312
900	ZINC01533114	-9,310	0,302	-9,700	0,529	-49,259	0,104	0,311
901	ZINC03873781	-9,830	0,356	-9,600	0,514	-47,210	0,064	0,311
902	ZINC00537753	-9,420	0,314	-10,200	0,600	-44,969	0,020	0,311
903	ZINC04099024	-9,010	0,271	-8,700	0,386	-58,182	0,277	0,311
904	ZINC85537142	-9,810	0,354	-8,600	0,371	-54,591	0,207	0,311
905	ZINC03964325	-9,590	0,331	-9,200	0,457	-51,352	0,144	0,311
906	ZINC72266833	-9,460	0,318	-8,700	0,386	-55,713	0,229	0,311
907	ZINC85205445	-8,280	0,195	-10,700	0,671	-47,287	0,065	0,311
908	ZINC04215333	-9,720	0,345	-9,100	0,443	-51,344	0,144	0,311
909	ZINC22463067	-9,120	0,282	-8,100	0,300	-61,900	0,349	0,311
910	ZINC04098966	-9,700	0,343	-9,900	0,557	-45,559	0,032	0,311
911	ZINC00896452	-9,020	0,272	-9,700	0,529	-50,659	0,131	0,310
912	ZINC14210455	-9,920	0,366	-8,900	0,414	-51,716	0,151	0,310
913	ZINC58660702	-8,480	0,216	-10,000	0,571	-51,311	0,143	0,310
914	ZINC00607726	-9,610	0,333	-9,900	0,557	-45,995	0,040	0,310
915	ZINC02007605	-10,760	0,453	-8,800	0,400	-47,926	0,078	0,310
916	ZINC01531027	-10,570	0,433	-8,200	0,314	-53,340	0,183	0,310
917	ZINC35801098	-9,380	0,309	-9,800	0,543	-47,929	0,078	0,310
918	ZINC38381027	-10,630	0,439	-9,200	0,457	-45,650	0,033	0,310
919	ZINC01481955	-9,030	0,273	-10,400	0,629	-45,358	0,028	0,310
920	ZINC03784096	-10,270	0,402	-9,400	0,486	-46,082	0,042	0,310
921	ZINC03831506	-10,180	0,393	-8,600	0,371	-52,442	0,165	0,310
922	ZINC84425466	-10,350	0,410	-9,200	0,457	-47,101	0,062	0,310
923	ZINC03784384	-10,840	0,461	-8,600	0,371	-48,885	0,096	0,310
924	ZINC36378558	-9,140	0,285	-10,200	0,600	-46,189	0,044	0,309
925	ZINC04216454	-10,500	0,426	-7,400	0,200	-59,498	0,303	0,309
926	ZINC03831329	-10,860	0,463	-7,900	0,271	-53,889	0,194	0,309
927	ZINC72266896	-11,200	0,498	-8,000	0,286	-51,322	0,144	0,309
928	ZINC03830386	-9,150	0,286	-10,100	0,586	-46,838	0,057	0,309
929	ZINC03812892	-10,040	0,378	-8,800	0,400	-51,629	0,150	0,309
930	ZINC49918329	-9,020	0,272	-9,000	0,429	-55,567	0,226	0,309

931	ZINC22059680	-9,510	0,323	-9,400	0,486	-49,997	0,118	0,309
932	ZINC03830384	-9,180	0,289	-10,100	0,586	-46,610	0,052	0,309
933	ZINC08214544	-10,420	0,417	-9,400	0,486	-45,129	0,023	0,309
934	ZINC00579168	-9,450	0,317	-9,500	0,500	-49,576	0,110	0,309
935	ZINC03830432	-8,510	0,219	-8,000	0,286	-65,619	0,422	0,309
936	ZINC03963096	-9,880	0,361	-8,500	0,357	-54,622	0,208	0,309
937	ZINC03830350	-10,310	0,406	-8,700	0,386	-50,853	0,135	0,309
938	ZINC05374518	-9,360	0,307	-8,600	0,371	-56,646	0,247	0,309
939	ZINC35902489	-10,080	0,382	-9,600	0,514	-45,435	0,029	0,309
940	ZINC38467831	-9,940	0,368	-9,500	0,500	-46,918	0,058	0,309
941	ZINC84759263	-11,140	0,492	-9,000	0,429	-44,155	0,004	0,308
942	ZINC40711796	-9,220	0,293	-9,400	0,486	-51,450	0,146	0,308
943	ZINC72266808	-9,320	0,303	-6,900	0,129	-69,278	0,493	0,308
944	ZINC01843672	-9,630	0,335	-9,800	0,543	-46,293	0,046	0,308
945	ZINC00004041	-9,940	0,368	-9,600	0,514	-46,104	0,042	0,308
946	ZINC11677656	-10,330	0,408	-8,900	0,414	-49,163	0,102	0,308
947	ZINC03831330	-10,310	0,406	-8,000	0,286	-55,855	0,232	0,308
948	ZINC00340372	-9,700	0,343	-9,900	0,557	-45,137	0,024	0,308
949	ZINC52716421	-9,610	0,333	-9,800	0,543	-46,327	0,047	0,308
950	ZINC11592643	-9,940	0,368	-9,200	0,457	-48,931	0,097	0,307
951	ZINC00001624	-9,960	0,370	-9,600	0,514	-45,860	0,038	0,307
952	ZINC03966397	-9,560	0,328	-8,600	0,371	-55,338	0,222	0,307
953	ZINC31392373	-10,950	0,472	-8,600	0,371	-47,891	0,077	0,307
954	ZINC04217339	-7,800	0,145	-10,100	0,586	-53,674	0,189	0,307
955	ZINC01493057	-9,780	0,351	-9,100	0,443	-50,444	0,127	0,307
956	ZINC03921862	-7,440	0,108	-7,700	0,243	-73,185	0,569	0,306
957	ZINC56898778	-10,540	0,430	-8,400	0,343	-51,466	0,147	0,306
958	ZINC33954104	-9,880	0,361	-8,700	0,386	-52,774	0,172	0,306
959	ZINC03798772	-10,040	0,378	-9,500	0,500	-46,028	0,041	0,306
960	ZINC85537149	-9,140	0,285	-8,500	0,357	-58,180	0,277	0,306
961	ZINC04212454	-10,900	0,467	-9,100	0,443	-44,357	0,008	0,306
962	ZINC00538403	-10,950	0,472	-8,800	0,400	-46,294	0,046	0,306
963	ZINC03830730	-8,950	0,265	-9,700	0,529	-50,356	0,125	0,306
964	ZINC36093059	-9,360	0,307	-9,700	0,529	-48,100	0,081	0,306
965	ZINC08101147	-12,570	0,641	-7,900	0,271	-44,169	0,005	0,306
966	ZINC04212735	-10,590	0,435	-8,600	0,371	-49,601	0,110	0,306
967	ZINC01554197	-8,730	0,242	-9,500	0,500	-52,911	0,175	0,306
968	ZINC72266871	-8,690	0,238	-8,500	0,357	-60,467	0,321	0,305
969	ZINC03776592	-10,210	0,396	-8,900	0,414	-49,387	0,106	0,305
970	ZINC03977814	-8,630	0,232	-9,300	0,471	-54,887	0,213	0,305
971	ZINC01542915	-8,110	0,178	-9,300	0,471	-57,658	0,267	0,305
972	ZINC11678081	-9,260	0,297	-9,600	0,514	-49,307	0,105	0,305
973	ZINC13719916	-9,520	0,324	-9,400	0,486	-49,380	0,106	0,305



974	ZINC01846193	-8,010	0,167	-9,100	0,443	-59,653	0,306	0,305
975	ZINC00601293	-10,410	0,416	-8,900	0,414	-48,276	0,085	0,305
976	ZINC68247071	-9,230	0,294	-9,200	0,457	-52,360	0,164	0,305
977	ZINC05688398	-10,760	0,453	-9,000	0,429	-45,653	0,034	0,305
978	ZINC05439974	-9,890	0,362	-9,700	0,529	-45,154	0,024	0,305
979	ZINC05513064	-10,630	0,439	-8,000	0,286	-53,681	0,190	0,305
980	ZINC08101053	-8,370	0,205	-9,100	0,443	-57,666	0,267	0,305
981	ZINC95564687	-10,100	0,384	-9,300	0,471	-46,947	0,059	0,305
982	ZINC05157863	-10,390	0,414	-8,600	0,371	-50,514	0,128	0,305
983	ZINC03830323	-8,850	0,254	-9,900	0,557	-49,179	0,102	0,305
984	ZINC03830870	-9,570	0,329	-8,600	0,371	-54,884	0,213	0,305
985	ZINC13883250	-9,730	0,346	-9,100	0,443	-50,345	0,125	0,304
986	ZINC03831449	-8,770	0,246	-9,800	0,543	-50,315	0,124	0,304
987	ZINC03881478	-9,510	0,323	-9,600	0,514	-47,821	0,076	0,304
988	ZINC00643114	-9,670	0,340	-9,800	0,543	-45,495	0,030	0,304
989	ZINC03830325	-9,820	0,355	-9,200	0,457	-49,089	0,100	0,304
990	ZINC04213834	-10,300	0,405	-8,700	0,386	-50,198	0,122	0,304
991	ZINC00601305	-9,780	0,351	-9,800	0,543	-44,847	0,018	0,304
992	ZINC31298006	-10,250	0,400	-9,200	0,457	-46,742	0,055	0,304
993	ZINC33754357	-10,070	0,381	-9,100	0,443	-48,431	0,088	0,304
994	ZINC01655706	-9,640	0,336	-8,600	0,371	-54,365	0,203	0,304
995	ZINC95598446	-9,030	0,273	-8,800	0,400	-56,142	0,237	0,303
996	ZINC22942298	-9,350	0,306	-8,800	0,400	-54,429	0,204	0,303
997	ZINC04217573	-10,100	0,384	-9,600	0,514	-44,533	0,012	0,303
998	ZINC02014159	-10,580	0,434	-9,200	0,457	-44,888	0,019	0,303
999	ZINC03830631	-9,370	0,308	-9,600	0,514	-48,400	0,087	0,303
1000	ZINC03875529	-10,750	0,452	-7,800	0,257	-54,242	0,200	0,303
1001	ZINC04654795	-8,630	0,232	-8,800	0,400	-58,214	0,278	0,303
1002	ZINC03830352	-11,040	0,482	-8,000	0,286	-51,206	0,141	0,303
1003	ZINC01489816	-8,860	0,255	-10,200	0,600	-46,657	0,053	0,303
1004	ZINC03598320	-10,190	0,394	-8,700	0,386	-50,527	0,128	0,303
1005	ZINC00156831	-9,880	0,361	-9,800	0,543	-44,089	0,003	0,302
1006	ZINC03831436	-10,550	0,431	-8,600	0,371	-49,320	0,105	0,302
1007	ZINC00608210	-10,030	0,377	-9,300	0,471	-46,917	0,058	0,302
1008	ZINC03774999	-10,380	0,413	-8,300	0,329	-52,380	0,164	0,302
1009	ZINC19361072	-8,940	0,264	-8,900	0,414	-55,656	0,228	0,302
1010	ZINC85537131	-8,510	0,219	-8,800	0,400	-58,688	0,287	0,302
1011	ZINC01698105	-9,660	0,339	-9,000	0,429	-51,066	0,139	0,302
1012	ZINC03633839	-9,300	0,301	-8,800	0,400	-54,458	0,205	0,302
1013	ZINC85427689	-7,990	0,165	-7,200	0,171	-73,212	0,569	0,302
1014	ZINC01552136	-9,120	0,282	-8,400	0,343	-58,351	0,280	0,302
1015	ZINC56897521	-9,430	0,315	-8,600	0,371	-55,220	0,219	0,302
1016	ZINC22034135	-9,920	0,366	-8,900	0,414	-50,381	0,125	0,302

1017	ZINC72266869	-8,930	0,263	-8,300	0,329	-60,076	0,314	0,302
1018	ZINC01554274	-8,770	0,246	-10,200	0,600	-46,933	0,058	0,302
1019	ZINC38253214	-9,330	0,304	-9,100	0,443	-52,020	0,157	0,301
1020	ZINC05318265	-9,560	0,328	-9,500	0,500	-47,831	0,076	0,301
1021	ZINC31290966	-9,730	0,346	-9,800	0,543	-44,710	0,015	0,301
1022	ZINC95565134	-10,520	0,428	-8,600	0,371	-49,280	0,104	0,301
1023	ZINC00588684	-9,700	0,343	-9,500	0,500	-47,011	0,060	0,301
1024	ZINC00021067	-9,290	0,300	-10,200	0,600	-44,032	0,002	0,301
1025	ZINC03917478	-9,130	0,283	-7,700	0,243	-63,244	0,375	0,301
1026	ZINC04475353	-9,950	0,369	-9,600	0,514	-44,881	0,019	0,300
1027	ZINC05513072	-10,560	0,432	-8,200	0,314	-51,895	0,155	0,300
1028	ZINC11681740	-9,620	0,334	-9,100	0,443	-50,293	0,124	0,300
1029	ZINC03811419	-9,700	0,343	-9,600	0,514	-46,177	0,044	0,300
1030	ZINC01532098	-9,930	0,367	-9,200	0,457	-47,885	0,077	0,300
1031	ZINC04214137	-9,400	0,312	-9,800	0,543	-46,301	0,046	0,300
1032	ZINC03977816	-8,790	0,248	-9,300	0,471	-53,231	0,181	0,300
1033	ZINC01581743	-9,110	0,281	-9,400	0,486	-50,753	0,133	0,300
1034	ZINC03830974	-10,120	0,386	-8,200	0,314	-54,155	0,199	0,300
1035	ZINC19364226	-10,330	0,408	-9,300	0,471	-44,942	0,020	0,300
1036	ZINC98214859	-8,750	0,244	-8,900	0,414	-56,322	0,241	0,300
1037	ZINC03873778	-9,980	0,372	-9,600	0,514	-44,603	0,013	0,300
1038	ZINC00538275	-10,100	0,384	-9,100	0,443	-47,634	0,072	0,300
1039	ZINC00596748	-9,480	0,320	-9,400	0,486	-48,740	0,094	0,300
1040	ZINC22463208	-10,090	0,383	-9,200	0,457	-46,945	0,059	0,300
1041	ZINC85537089	-6,500	0,010	-7,700	0,243	-77,122	0,645	0,299
1042	ZINC04212157	-8,560	0,224	-8,900	0,414	-57,293	0,260	0,299
1043	ZINC00607879	-8,860	0,255	-9,800	0,543	-49,052	0,100	0,299
1044	ZINC08552267	-9,600	0,332	-8,900	0,414	-51,704	0,151	0,299
1045	ZINC04217095	-9,430	0,315	-9,600	0,514	-47,456	0,069	0,299
1046	ZINC01494443	-8,790	0,248	-10,100	0,586	-47,195	0,064	0,299
1047	ZINC01493878	-8,870	0,256	-9,700	0,529	-49,697	0,112	0,299
1048	ZINC04217596	-10,890	0,466	-7,900	0,271	-52,112	0,159	0,299
1049	ZINC08536342	-9,300	0,301	-9,300	0,471	-50,300	0,124	0,299
1050	ZINC21981220	-9,110	0,281	-9,400	0,486	-50,560	0,129	0,299
1051	ZINC01540003	-8,890	0,259	-9,300	0,471	-52,457	0,166	0,299
1052	ZINC22851028	-9,140	0,285	-8,900	0,414	-54,059	0,197	0,299
1053	ZINC04215426	-9,610	0,333	-9,600	0,514	-46,388	0,048	0,298
1054	ZINC04097309	-9,080	0,278	-8,400	0,343	-58,040	0,274	0,298
1055	ZINC04217615	-8,520	0,220	-9,000	0,429	-56,612	0,247	0,298
1056	ZINC04212860	-8,430	0,211	-8,500	0,357	-60,760	0,327	0,298
1057	ZINC98214883	-7,070	0,070	-7,000	0,143	-79,051	0,683	0,298
1058	ZINC03872566	-9,340	0,305	-8,800	0,400	-53,675	0,189	0,298
1059	ZINC04214585	-9,870	0,360	-8,900	0,414	-50,094	0,120	0,298

1060	ZINC00608300	-9,620	0,334	-9,100	0,443	-49,955	0,117	0,298
1061	ZINC02020508	-9,460	0,318	-9,200	0,457	-50,070	0,119	0,298
1062	ZINC21982951	-9,370	0,308	-8,800	0,400	-53,475	0,186	0,298
1063	ZINC04474682	-8,860	0,255	-8,600	0,371	-57,650	0,267	0,298
1064	ZINC03830332	-7,000	0,062	-9,900	0,557	-58,026	0,274	0,298
1065	ZINC03920355	-9,450	0,317	-8,200	0,314	-57,427	0,262	0,298
1066	ZINC00608032	-9,590	0,331	-9,400	0,486	-47,853	0,076	0,298
1067	ZINC01481805	-8,500	0,218	-10,300	0,614	-47,060	0,061	0,298
1068	ZINC01530908	-10,410	0,416	-9,300	0,471	-44,198	0,005	0,298
1069	ZINC03830922	-9,310	0,302	-9,900	0,557	-45,661	0,034	0,298
1070	ZINC00968278	-9,850	0,358	-9,300	0,471	-47,168	0,063	0,298
1071	ZINC34098123	-9,260	0,297	-9,300	0,471	-50,296	0,124	0,297
1072	ZINC64622550	-11,650	0,545	-8,400	0,343	-44,126	0,004	0,297
1073	ZINC84687636	-9,170	0,288	-9,500	0,500	-49,273	0,104	0,297
1074	ZINC01842744	-9,490	0,321	-9,400	0,486	-48,277	0,085	0,297
1075	ZINC01548439	-9,510	0,323	-9,600	0,514	-46,700	0,054	0,297
1076	ZINC01492464	-8,690	0,238	-9,800	0,543	-49,608	0,110	0,297
1077	ZINC72266847	-8,940	0,264	-10,000	0,571	-46,787	0,056	0,297
1078	ZINC02015244	-10,430	0,418	-8,900	0,414	-46,867	0,057	0,297
1079	ZINC72317283	-9,060	0,276	-9,900	0,557	-46,832	0,056	0,297
1080	ZINC03977787	-8,310	0,198	-10,100	0,586	-49,368	0,106	0,297
1081	ZINC00587541	-9,900	0,363	-9,300	0,471	-46,750	0,055	0,297
1082	ZINC72266937	-7,840	0,150	-8,000	0,286	-67,286	0,454	0,296
1083	ZINC03946578	-9,750	0,348	-7,700	0,243	-59,285	0,298	0,296
1084	ZINC04172322	-9,970	0,371	-9,400	0,486	-45,607	0,033	0,296
1085	ZINC01543566	-9,110	0,281	-10,000	0,571	-45,791	0,036	0,296
1086	ZINC35953249	-8,940	0,264	-8,900	0,414	-54,769	0,211	0,296
1087	ZINC19366089	-10,190	0,394	-9,000	0,429	-47,343	0,066	0,296
1088	ZINC03803377	-9,430	0,315	-8,700	0,386	-53,603	0,188	0,296
1089	ZINC00608382	-10,590	0,435	-8,800	0,400	-46,626	0,052	0,296
1090	ZINC59587299	-9,630	0,335	-9,300	0,471	-48,077	0,081	0,296
1091	ZINC03830326	-9,960	0,370	-8,500	0,357	-52,111	0,159	0,295
1092	ZINC02032615	-9,670	0,340	-9,300	0,471	-47,775	0,075	0,295
1093	ZINC03872532	-9,930	0,367	-9,100	0,443	-47,854	0,076	0,295
1094	ZINC03830327	-10,750	0,452	-8,400	0,343	-48,605	0,091	0,295
1095	ZINC03802769	-9,380	0,309	-9,200	0,457	-50,041	0,119	0,295
1096	ZINC03977815	-8,120	0,179	-9,000	0,429	-58,202	0,277	0,295
1097	ZINC04393014	-10,890	0,466	-8,800	0,400	-44,864	0,018	0,295
1098	ZINC28569498	-8,380	0,206	-7,600	0,229	-67,058	0,450	0,295
1099	ZINC38609780	-9,910	0,364	-9,100	0,443	-47,853	0,076	0,295
1100	ZINC00538183	-10,770	0,454	-8,600	0,371	-46,911	0,058	0,294
1101	ZINC30691655	-9,890	0,362	-9,500	0,500	-44,971	0,020	0,294
1102	ZINC08214494	-9,850	0,358	-7,100	0,157	-62,809	0,367	0,294

1103	ZINC19418959	-10,320	0,407	-9,000	0,429	-46,311	0,046	0,294
1104	ZINC19685788	-8,490	0,217	-9,000	0,429	-56,071	0,236	0,294
1105	ZINC84759541	-8,880	0,258	-9,300	0,471	-51,777	0,153	0,294
1106	ZINC00598598	-10,070	0,381	-9,000	0,429	-47,615	0,072	0,294
1107	ZINC03994903	-9,560	0,328	-9,500	0,500	-46,654	0,053	0,294
1108	ZINC00538564	-8,920	0,262	-9,900	0,557	-47,118	0,062	0,294
1109	ZINC02013188	-9,440	0,316	-9,500	0,500	-47,267	0,065	0,294
1110	ZINC03935841	-8,860	0,255	-8,700	0,386	-56,240	0,239	0,293
1111	ZINC03831565	-9,080	0,278	-9,400	0,486	-49,914	0,116	0,293
1112	ZINC04217430	-9,190	0,290	-8,300	0,329	-57,407	0,262	0,293
1113	ZINC49757175	-8,440	0,212	-8,500	0,357	-59,935	0,311	0,293
1114	ZINC19632822	-9,370	0,308	-9,600	0,514	-46,876	0,057	0,293
1115	ZINC03927469	-8,000	0,166	-8,300	0,329	-63,725	0,385	0,293
1116	ZINC03954923	-9,700	0,343	-8,800	0,400	-50,960	0,137	0,293
1117	ZINC03976764	-9,060	0,276	-8,000	0,286	-60,238	0,317	0,293
1118	ZINC00593414	-9,370	0,308	-9,100	0,443	-50,494	0,128	0,293
1119	ZINC11592906	-10,630	0,439	-8,600	0,371	-47,423	0,068	0,293
1120	ZINC59587089	-9,760	0,349	-8,800	0,400	-50,596	0,130	0,293
1121	ZINC00538465	-10,260	0,401	-8,900	0,414	-47,186	0,063	0,293
1122	ZINC11592965	-9,020	0,272	-9,900	0,557	-46,454	0,049	0,293
1123	ZINC03778441	-10,060	0,380	-8,500	0,357	-51,169	0,141	0,293
1124	ZINC03779985	-10,880	0,465	-8,800	0,400	-44,579	0,013	0,293
1125	ZINC03831004	-9,700	0,343	-9,700	0,529	-44,256	0,006	0,293
1126	ZINC03830729	-8,360	0,204	-9,800	0,543	-50,669	0,131	0,292
1127	ZINC03922077	-9,040	0,274	-9,100	0,443	-52,150	0,160	0,292
1128	ZINC00896650	-10,410	0,416	-8,900	0,414	-46,290	0,046	0,292
1129	ZINC03805578	-9,850	0,358	-9,000	0,429	-48,524	0,089	0,292
1130	ZINC38141483	-9,560	0,328	-9,800	0,543	-44,192	0,005	0,292
1131	ZINC84759273	-9,120	0,282	-7,800	0,257	-61,216	0,336	0,292
1132	ZINC40664618	-9,720	0,345	-9,100	0,443	-48,454	0,088	0,292
1133	ZINC05316843	-10,410	0,416	-8,600	0,371	-48,440	0,088	0,292
1134	ZINC03830425	-8,110	0,178	-8,600	0,371	-60,714	0,326	0,292
1135	ZINC03831448	-8,830	0,252	-9,800	0,543	-48,043	0,080	0,292
1136	ZINC00606383	-9,170	0,288	-9,600	0,514	-47,695	0,073	0,292
1137	ZINC04181896	-10,060	0,380	-9,100	0,443	-46,605	0,052	0,292
1138	ZINC00538656	-9,000	0,270	-9,900	0,557	-46,373	0,048	0,292
1139	ZINC01851251	-9,510	0,323	-9,700	0,529	-45,101	0,023	0,291
1140	ZINC03830431	-8,920	0,262	-8,000	0,286	-60,737	0,327	0,291
1141	ZINC03882238	-9,750	0,348	-8,600	0,371	-51,879	0,155	0,291
1142	ZINC01842746	-9,610	0,333	-9,500	0,500	-45,999	0,040	0,291
1143	ZINC03831125	-9,320	0,303	-8,800	0,400	-52,679	0,170	0,291
1144	ZINC03087481	-9,680	0,341	-9,700	0,529	-44,123	0,004	0,291
1145	ZINC22463171	-10,080	0,382	-8,700	0,386	-49,319	0,105	0,291

1146	ZINC02014160	-10,030	0,377	-9,400	0,486	-44,436	0,010	0,291
1147	ZINC40163183	-10,620	0,438	-9,000	0,429	-44,218	0,006	0,291
1148	ZINC08214712	-10,090	0,383	-7,700	0,243	-56,571	0,246	0,291
1149	ZINC01996306	-9,620	0,334	-9,600	0,514	-45,113	0,023	0,291
1150	ZINC03781738	-9,460	0,318	-9,800	0,543	-44,496	0,011	0,291
1151	ZINC03830383	-8,990	0,269	-9,800	0,543	-46,990	0,060	0,290
1152	ZINC03927605	-10,480	0,424	-8,400	0,343	-49,318	0,105	0,290
1153	ZINC01850374	-9,520	0,324	-9,300	0,471	-47,826	0,076	0,290
1154	ZINC13985547	-9,780	0,351	-9,600	0,514	-44,230	0,006	0,290
1155	ZINC19203912	-9,930	0,367	-8,800	0,400	-49,293	0,104	0,290
1156	ZINC98215048	-9,560	0,328	-7,700	0,243	-59,355	0,300	0,290
1157	ZINC00538062	-9,640	0,336	-9,600	0,514	-44,952	0,020	0,290
1158	ZINC17173834	-8,510	0,219	-10,300	0,614	-45,829	0,037	0,290
1159	ZINC28111193	-8,960	0,266	-9,200	0,457	-51,483	0,147	0,290
1160	ZINC00000132	-10,780	0,455	-8,500	0,357	-46,902	0,058	0,290
1161	ZINC03831345	-8,950	0,265	-9,000	0,429	-53,004	0,176	0,290
1162	ZINC11726780	-9,570	0,329	-9,200	0,457	-48,210	0,083	0,290
1163	ZINC03781682	-8,740	0,243	-8,500	0,357	-57,788	0,269	0,290
1164	ZINC03830751	-10,140	0,388	-9,100	0,443	-45,889	0,038	0,290
1165	ZINC00607401	-9,500	0,322	-9,600	0,514	-45,632	0,033	0,290
1166	ZINC53229721	-10,010	0,375	-9,200	0,457	-45,844	0,037	0,290
1167	ZINC22462814	-10,430	0,418	-8,500	0,357	-48,731	0,093	0,290
1168	ZINC96006017	-13,470	0,734	-6,900	0,129	-44,247	0,006	0,290
1169	ZINC02555404	-7,610	0,126	-9,300	0,471	-57,909	0,272	0,290
1170	ZINC00009689	-9,120	0,282	-9,600	0,514	-47,626	0,072	0,290
1171	ZINC00607970	-9,590	0,331	-8,300	0,329	-54,666	0,209	0,290
1172	ZINC00538316	-8,450	0,213	-10,100	0,586	-47,524	0,070	0,289
1173	ZINC04215208	-9,460	0,318	-9,500	0,500	-46,516	0,050	0,289
1174	ZINC04217391	-9,300	0,301	-8,200	0,314	-56,920	0,253	0,289
1175	ZINC19801839	-8,720	0,241	-8,400	0,343	-58,545	0,284	0,289
1176	ZINC11592905	-10,240	0,399	-8,000	0,286	-53,362	0,183	0,289
1177	ZINC03961849	-10,290	0,404	-8,900	0,414	-46,478	0,050	0,289
1178	ZINC02013189	-9,330	0,304	-9,700	0,529	-45,721	0,035	0,289
1179	ZINC29563177	-10,280	0,403	-8,900	0,414	-46,517	0,050	0,289
1180	ZINC03785505	-10,140	0,388	-9,000	0,429	-46,518	0,050	0,289
1181	ZINC03831625	-9,140	0,285	-8,400	0,343	-56,272	0,240	0,289
1182	ZINC05374522	-9,570	0,329	-8,900	0,414	-50,289	0,124	0,289
1183	ZINC98214886	-9,860	0,359	-7,800	0,257	-56,792	0,250	0,289
1184	ZINC98214879	-7,710	0,136	-9,700	0,529	-54,307	0,202	0,289
1185	ZINC00607764	-10,450	0,421	-9,000	0,429	-44,805	0,017	0,289
1186	ZINC03915259	-7,550	0,119	-9,300	0,471	-58,088	0,275	0,289
1187	ZINC06716350	-9,380	0,309	-9,500	0,500	-46,826	0,056	0,289
1188	ZINC59587086	-9,220	0,293	-9,500	0,500	-47,677	0,073	0,289

1189	ZINC01640527	-9,920	0,366	-9,300	0,471	-45,406	0,029	0,289
1190	ZINC31297729	-7,870	0,153	-8,800	0,400	-60,033	0,313	0,289
1191	ZINC01554851	-9,730	0,346	-9,300	0,471	-46,412	0,048	0,289
1192	ZINC12341529	-9,440	0,316	-9,700	0,529	-45,016	0,021	0,288
1193	ZINC98214847	-6,600	0,021	-8,300	0,329	-70,481	0,516	0,288
1194	ZINC11686640	-9,000	0,270	-8,900	0,414	-53,198	0,180	0,288
1195	ZINC00601270	-9,640	0,336	-9,500	0,500	-45,359	0,028	0,288
1196	ZINC06069082	-8,290	0,196	-9,900	0,557	-49,599	0,110	0,288
1197	ZINC14210457	-9,460	0,318	-8,900	0,414	-50,698	0,132	0,288
1198	ZINC33872449	-10,010	0,375	-9,100	0,443	-46,282	0,046	0,288
1199	ZINC03982517	-9,120	0,282	-9,300	0,471	-49,561	0,109	0,288
1200	ZINC03831624	-9,410	0,313	-8,400	0,343	-54,602	0,207	0,288
1201	ZINC03950898	-9,260	0,297	-8,800	0,400	-52,459	0,166	0,288
1202	ZINC22065909	-10,520	0,428	-8,100	0,300	-50,805	0,134	0,287
1203	ZINC03776970	-9,750	0,348	-9,100	0,443	-47,555	0,070	0,287
1204	ZINC04216874	-9,890	0,362	-9,300	0,471	-45,311	0,027	0,287
1205	ZINC04095858	-10,800	0,457	-7,900	0,271	-50,732	0,132	0,287
1206	ZINC13587680	-9,940	0,368	-8,500	0,357	-50,912	0,136	0,287
1207	ZINC03812940	-9,990	0,373	-8,800	0,400	-48,422	0,087	0,287
1208	ZINC03831042	-10,340	0,409	-8,800	0,400	-46,548	0,051	0,287
1209	ZINC03643459	-9,690	0,342	-8,500	0,357	-52,189	0,161	0,286
1210	ZINC00007460	-8,720	0,241	-10,000	0,571	-46,335	0,047	0,286
1211	ZINC22463220	-8,480	0,216	-7,100	0,157	-68,915	0,486	0,286
1212	ZINC00537748	-10,030	0,377	-8,600	0,371	-49,599	0,110	0,286
1213	ZINC11525628	-9,750	0,348	-8,900	0,414	-48,870	0,096	0,286
1214	ZINC03938704	-8,450	0,213	-9,700	0,529	-49,924	0,117	0,286
1215	ZINC03919581	-9,280	0,299	-8,800	0,400	-52,100	0,159	0,286
1216	ZINC03872076	-9,940	0,368	-9,400	0,486	-44,159	0,005	0,286
1217	ZINC03830402	-8,500	0,218	-8,400	0,343	-59,197	0,297	0,286
1218	ZINC00001763	-8,270	0,194	-10,400	0,629	-45,723	0,035	0,286
1219	ZINC53006885	-8,440	0,212	-8,800	0,400	-56,572	0,246	0,286
1220	ZINC03993831	-9,000	0,270	-8,700	0,386	-54,314	0,202	0,286
1221	ZINC11592928	-9,220	0,293	-9,600	0,514	-46,520	0,050	0,286
1222	ZINC15848216	-9,500	0,322	-8,900	0,414	-50,166	0,121	0,286
1223	ZINC53257919	-9,590	0,331	-9,100	0,443	-48,204	0,083	0,286
1224	ZINC05161047	-8,790	0,248	-9,500	0,500	-49,533	0,109	0,286
1225	ZINC00538124	-9,470	0,319	-9,200	0,457	-48,100	0,081	0,286
1226	ZINC28701758	-8,350	0,202	-10,200	0,600	-46,667	0,053	0,285
1227	ZINC14208575	-8,550	0,223	-7,800	0,257	-63,238	0,375	0,285
1228	ZINC03809827	-9,030	0,273	-9,200	0,457	-50,379	0,125	0,285
1229	ZINC03951740	-7,830	0,148	-9,100	0,443	-57,516	0,264	0,285
1230	ZINC22463332	-9,870	0,360	-8,200	0,314	-53,207	0,180	0,285
1231	ZINC11592930	-9,490	0,321	-9,300	0,471	-47,148	0,063	0,285

1232	ZINC04676386	-8,170	0,184	-8,300	0,329	-61,546	0,342	0,285
1233	ZINC49841054	-7,460	0,110	-8,100	0,300	-66,806	0,445	0,285
1234	ZINC03831102	-9,370	0,308	-7,600	0,229	-60,260	0,317	0,285
1235	ZINC00000342	-8,970	0,267	-10,100	0,586	-44,016	0,002	0,285
1236	ZINC04216419	-8,310	0,198	-8,600	0,371	-58,568	0,285	0,285
1237	ZINC72266913	-10,030	0,377	-9,100	0,443	-45,690	0,034	0,285
1238	ZINC35952535	-10,170	0,391	-9,200	0,457	-44,202	0,005	0,285
1239	ZINC39297512	-10,310	0,406	-8,100	0,300	-51,532	0,148	0,285
1240	ZINC04215249	-9,650	0,337	-8,800	0,400	-49,884	0,116	0,284
1241	ZINC08214687	-7,990	0,165	-9,300	0,471	-55,076	0,217	0,284
1242	ZINC22943152	-8,440	0,212	-8,800	0,400	-56,340	0,241	0,284
1243	ZINC04217728	-9,140	0,285	-9,000	0,429	-51,129	0,140	0,284
1244	ZINC00602799	-9,890	0,362	-9,200	0,457	-45,633	0,033	0,284
1245	ZINC01530695	-10,420	0,417	-8,800	0,400	-45,736	0,035	0,284
1246	ZINC30690842	-7,700	0,135	-9,800	0,543	-52,917	0,175	0,284
1247	ZINC72266838	-8,820	0,251	-8,500	0,357	-56,480	0,244	0,284
1248	ZINC03820029	-10,740	0,451	-8,700	0,386	-44,746	0,016	0,284
1249	ZINC03831623	-9,180	0,289	-8,500	0,357	-54,543	0,206	0,284
1250	ZINC02033588	-8,810	0,250	-9,700	0,529	-47,690	0,073	0,284
1251	ZINC01490475	-9,600	0,332	-8,600	0,371	-51,554	0,148	0,284
1252	ZINC43205516	-10,260	0,401	-8,700	0,386	-47,282	0,065	0,284
1253	ZINC31297732	-7,720	0,137	-8,900	0,414	-59,381	0,300	0,284
1254	ZINC00600547	-8,480	0,216	-10,000	0,571	-47,219	0,064	0,284
1255	ZINC84756650	-9,350	0,306	-8,400	0,343	-54,303	0,202	0,284
1256	ZINC11678102	-8,990	0,269	-9,700	0,529	-46,670	0,053	0,284
1257	ZINC98214876	-9,030	0,273	-9,700	0,529	-46,455	0,049	0,284
1258	ZINC03830871	-9,410	0,313	-8,400	0,343	-53,968	0,195	0,284
1259	ZINC00537996	-9,770	0,350	-8,900	0,414	-48,363	0,086	0,283
1260	ZINC22447381	-8,620	0,231	-8,400	0,343	-58,177	0,277	0,283
1261	ZINC31601260	-9,490	0,321	-8,600	0,371	-52,058	0,158	0,283
1262	ZINC05699073	-9,160	0,287	-9,400	0,486	-47,936	0,078	0,283
1263	ZINC00537853	-8,830	0,252	-9,800	0,543	-46,757	0,055	0,283
1264	ZINC59586938	-8,950	0,265	-9,600	0,514	-47,581	0,071	0,283
1265	ZINC03816292	-9,090	0,279	-9,300	0,471	-49,025	0,099	0,283
1266	ZINC05513434	-9,830	0,356	-8,400	0,343	-51,673	0,151	0,283
1267	ZINC13684256	-8,110	0,178	-9,700	0,529	-51,304	0,143	0,283
1268	ZINC72186735	-10,760	0,453	-8,700	0,386	-44,482	0,011	0,283
1269	ZINC11616775	-8,900	0,260	-8,700	0,386	-54,388	0,203	0,283
1270	ZINC04216818	-9,390	0,310	-9,400	0,486	-46,622	0,052	0,283
1271	ZINC01757652	-8,790	0,248	-9,300	0,471	-50,563	0,129	0,283
1272	ZINC11592731	-8,590	0,227	-8,900	0,414	-54,538	0,206	0,283
1273	ZINC84462508	-8,440	0,212	-10,000	0,571	-47,236	0,064	0,283
1274	ZINC03831174	-9,170	0,288	-9,000	0,429	-50,658	0,131	0,282

1275	ZINC00537944	-9,470	0,319	-9,100	0,443	-48,285	0,085	0,282
1276	ZINC03802899	-9,380	0,309	-8,900	0,414	-50,214	0,122	0,282
1277	ZINC03633833	-8,680	0,237	-10,200	0,600	-44,383	0,009	0,282
1278	ZINC00001873	-9,700	0,343	-9,500	0,500	-44,063	0,003	0,282
1279	ZINC43024000	-8,630	0,232	-8,900	0,414	-54,190	0,199	0,282
1280	ZINC72266906	-9,780	0,351	-8,700	0,386	-49,515	0,109	0,282
1281	ZINC00584203	-8,620	0,231	-9,000	0,429	-53,505	0,186	0,282
1282	ZINC13916432	-9,140	0,285	-7,700	0,243	-60,275	0,318	0,282
1283	ZINC04213781	-10,280	0,403	-8,800	0,400	-46,090	0,042	0,282
1284	ZINC02002237	-8,310	0,198	-8,700	0,386	-57,332	0,261	0,282
1285	ZINC53682947	-10,490	0,425	-8,200	0,314	-49,357	0,106	0,282
1286	ZINC08143568	-7,500	0,114	-9,300	0,471	-57,246	0,259	0,281
1287	ZINC01532100	-9,700	0,343	-9,300	0,471	-45,453	0,030	0,281
1288	ZINC03938708	-8,560	0,224	-9,000	0,429	-53,728	0,190	0,281
1289	ZINC03963010	-10,520	0,428	-8,400	0,343	-47,655	0,072	0,281
1290	ZINC01567521	-9,610	0,333	-8,400	0,343	-52,509	0,167	0,281
1291	ZINC03821131	-9,150	0,286	-9,000	0,429	-50,551	0,129	0,281
1292	ZINC04097310	-9,210	0,292	-8,400	0,343	-54,637	0,208	0,281
1293	ZINC13900201	-9,440	0,316	-9,400	0,486	-46,055	0,041	0,281
1294	ZINC01554077	-10,200	0,395	-9,000	0,429	-44,919	0,019	0,281
1295	ZINC03830396	-8,590	0,227	-8,500	0,357	-57,196	0,258	0,281
1296	ZINC01482008	-10,390	0,414	-8,900	0,414	-44,636	0,014	0,281
1297	ZINC02016037	-9,730	0,346	-8,900	0,414	-48,149	0,082	0,281
1298	ZINC00538156	-9,270	0,298	-9,500	0,500	-46,174	0,044	0,281
1299	ZINC23477086	-10,120	0,386	-9,100	0,443	-44,567	0,012	0,281
1300	ZINC03604385	-9,450	0,317	-8,600	0,371	-51,821	0,153	0,281
1301	ZINC02019918	-9,630	0,335	-8,600	0,371	-50,841	0,134	0,280
1302	ZINC03873395	-9,140	0,285	-8,800	0,400	-51,983	0,157	0,280
1303	ZINC02020011	-10,260	0,401	-8,900	0,414	-45,247	0,026	0,280
1304	ZINC00607878	-9,080	0,278	-8,800	0,400	-52,276	0,162	0,280
1305	ZINC72266810	-8,720	0,241	-6,800	0,114	-68,893	0,485	0,280
1306	ZINC04214152	-10,630	0,439	-7,900	0,271	-50,597	0,130	0,280
1307	ZINC03943279	-6,620	0,023	-8,000	0,286	-71,287	0,532	0,280
1308	ZINC84758235	-8,750	0,244	-9,200	0,457	-51,080	0,139	0,280
1309	ZINC23118517	-10,040	0,378	-9,000	0,429	-45,645	0,033	0,280
1310	ZINC31495028	-9,990	0,373	-9,000	0,429	-45,898	0,038	0,280
1311	ZINC03812548	-9,450	0,317	-9,100	0,443	-48,029	0,080	0,280
1312	ZINC00608085	-10,470	0,423	-8,900	0,414	-44,047	0,002	0,280
1313	ZINC04217305	-9,590	0,331	-9,500	0,500	-44,314	0,008	0,280
1314	ZINC03977764	-8,700	0,239	-8,500	0,357	-56,420	0,243	0,280
1315	ZINC85537008	-10,610	0,437	-7,900	0,271	-50,617	0,130	0,280
1316	ZINC00900673	-8,750	0,244	-9,700	0,529	-47,319	0,066	0,280
1317	ZINC08552266	-8,760	0,245	-9,300	0,471	-50,205	0,122	0,279



1318	ZINC01908051	-8,980	0,268	-9,200	0,457	-49,745	0,113	0,279
1319	ZINC04212184	-9,540	0,326	-9,500	0,500	-44,547	0,012	0,279
1320	ZINC04773670	-10,650	0,441	-8,700	0,386	-44,481	0,011	0,279
1321	ZINC19368884	-10,080	0,382	-8,500	0,357	-48,988	0,098	0,279
1322	ZINC84759446	-8,520	0,220	-8,900	0,414	-54,370	0,203	0,279
1323	ZINC84759251	-9,920	0,366	-8,200	0,314	-52,031	0,157	0,279
1324	ZINC00538159	-10,030	0,377	-8,600	0,371	-48,476	0,088	0,279
1325	ZINC21992076	-9,750	0,348	-8,300	0,329	-52,175	0,160	0,279
1326	ZINC11616581	-9,530	0,325	-9,500	0,500	-44,523	0,012	0,279
1327	ZINC22943158	-9,210	0,292	-8,000	0,286	-57,255	0,259	0,279
1328	ZINC04213738	-8,940	0,264	-9,100	0,443	-50,598	0,130	0,279
1329	ZINC95565133	-10,220	0,397	-8,600	0,371	-47,400	0,067	0,279
1330	ZINC01841488	-10,120	0,386	-9,000	0,429	-44,985	0,021	0,278
1331	ZINC03930629	-8,340	0,201	-9,200	0,457	-53,011	0,177	0,278
1332	ZINC04214668	-9,130	0,283	-9,500	0,500	-46,580	0,052	0,278
1333	ZINC03830429	-8,400	0,208	-8,100	0,300	-60,755	0,327	0,278
1334	ZINC03830394	-8,630	0,232	-8,800	0,400	-54,372	0,203	0,278
1335	ZINC03831041	-10,320	0,407	-8,800	0,400	-45,313	0,027	0,278
1336	ZINC01537480	-9,160	0,287	-9,600	0,514	-45,616	0,033	0,278
1337	ZINC03916214	-7,910	0,157	-8,700	0,386	-58,863	0,290	0,278
1338	ZINC04214135	-9,970	0,371	-8,700	0,386	-47,849	0,076	0,278
1339	ZINC01999500	-8,090	0,175	-9,800	0,543	-49,799	0,114	0,277
1340	ZINC36487260	-9,470	0,319	-8,400	0,343	-52,697	0,170	0,277
1341	ZINC06716700	-8,100	0,177	-9,200	0,457	-54,123	0,198	0,277
1342	ZINC03830461	-9,490	0,321	-8,900	0,414	-48,858	0,096	0,277
1343	ZINC00537772	-9,470	0,319	-9,400	0,486	-45,273	0,026	0,277
1344	ZINC03784120	-9,990	0,373	-8,400	0,343	-49,845	0,115	0,277
1345	ZINC01530909	-10,640	0,440	-8,700	0,386	-44,163	0,005	0,277
1346	ZINC01489478	-9,110	0,281	-9,600	0,514	-45,715	0,035	0,277
1347	ZINC04824235	-9,610	0,333	-8,200	0,314	-53,334	0,183	0,277
1348	ZINC38655326	-9,980	0,372	-8,900	0,414	-46,193	0,044	0,277
1349	ZINC03779694	-8,800	0,249	-9,600	0,514	-47,340	0,066	0,277
1350	ZINC08101149	-10,840	0,461	-8,500	0,357	-44,523	0,012	0,277
1351	ZINC03830847	-8,450	0,213	-10,300	0,614	-44,057	0,003	0,277
1352	ZINC95564686	-9,980	0,372	-9,000	0,429	-45,434	0,029	0,277
1353	ZINC72266916	-9,230	0,294	-8,800	0,400	-50,832	0,134	0,276
1354	ZINC64527030	-8,890	0,259	-8,800	0,400	-52,643	0,169	0,276
1355	ZINC85537061	-10,660	0,442	-7,800	0,257	-50,536	0,128	0,276
1356	ZINC19364228	-10,400	0,415	-8,700	0,386	-45,288	0,026	0,276
1357	ZINC01846218	-9,680	0,341	-9,100	0,443	-46,191	0,044	0,276
1358	ZINC70466416	-8,810	0,250	-8,700	0,386	-53,778	0,191	0,276
1359	ZINC03805768	-9,380	0,309	-7,900	0,271	-56,613	0,247	0,276
1360	ZINC03882239	-9,780	0,351	-8,500	0,357	-50,052	0,119	0,276

1361	ZINC68153186	-9,000	0,270	-9,700	0,529	-45,393	0,028	0,276
1362	ZINC01545064	-8,350	0,202	-9,300	0,471	-51,804	0,153	0,276
1363	ZINC01846320	-9,290	0,300	-9,200	0,457	-47,513	0,070	0,276
1364	ZINC22032147	-8,170	0,184	-7,600	0,229	-65,253	0,414	0,276
1365	ZINC19632700	-8,920	0,262	-9,500	0,500	-47,277	0,065	0,276
1366	ZINC03871889	-9,550	0,327	-8,900	0,414	-48,319	0,085	0,276
1367	ZINC03871023	-10,390	0,414	-8,400	0,343	-47,505	0,070	0,276
1368	ZINC11592929	-9,340	0,305	-9,300	0,471	-46,493	0,050	0,276
1369	ZINC19801842	-8,240	0,191	-8,400	0,343	-58,979	0,293	0,275
1370	ZINC04215115	-9,180	0,289	-8,400	0,343	-53,940	0,195	0,275
1371	ZINC03830847	-8,460	0,214	-10,200	0,600	-44,552	0,012	0,275
1372	ZINC01547848	-9,490	0,321	-8,900	0,414	-48,604	0,091	0,275
1373	ZINC36486826	-9,160	0,287	-8,300	0,329	-54,740	0,210	0,275
1374	ZINC03830385	-8,480	0,216	-9,800	0,543	-47,331	0,066	0,275
1375	ZINC28241301	-8,760	0,245	-8,800	0,400	-53,172	0,180	0,275
1376	ZINC03830426	-7,270	0,090	-8,400	0,343	-64,074	0,392	0,275
1377	ZINC00587097	-9,900	0,363	-8,700	0,386	-47,799	0,075	0,275
1378	ZINC56897575	-9,510	0,323	-9,300	0,471	-45,469	0,030	0,275
1379	ZINC00608139	-8,960	0,266	-9,800	0,543	-44,727	0,016	0,275
1380	ZINC72266921	-6,830	0,045	-7,800	0,257	-70,805	0,522	0,275
1381	ZINC03811327	-10,200	0,395	-8,700	0,386	-46,177	0,044	0,275
1382	ZINC03830328	-9,270	0,298	-9,000	0,429	-48,931	0,097	0,275
1383	ZINC01850377	-9,330	0,304	-9,600	0,514	-44,189	0,005	0,275
1384	ZINC14300255	-8,910	0,261	-8,600	0,371	-53,780	0,191	0,275
1385	ZINC02559943	-9,280	0,299	-9,500	0,500	-45,173	0,024	0,274
1386	ZINC04213537	-9,350	0,306	-8,200	0,314	-54,353	0,203	0,274
1387	ZINC04214414	-8,490	0,217	-7,900	0,271	-61,154	0,335	0,274
1388	ZINC13984697	-10,320	0,407	-7,200	0,171	-56,521	0,245	0,274
1389	ZINC03830445	-8,130	0,180	-7,800	0,257	-63,794	0,386	0,274
1390	ZINC00608150	-9,360	0,307	-9,500	0,500	-44,723	0,015	0,274
1391	ZINC04214307	-8,200	0,187	-8,300	0,329	-59,734	0,307	0,274
1392	ZINC04214717	-9,980	0,372	-8,900	0,414	-45,803	0,036	0,274
1393	ZINC01849911	-8,700	0,239	-9,900	0,557	-45,283	0,026	0,274
1394	ZINC84489132	-9,500	0,322	-9,400	0,486	-44,683	0,015	0,274
1395	ZINC38609782	-9,410	0,313	-9,100	0,443	-47,367	0,067	0,274
1396	ZINC72266848	-9,260	0,297	-7,100	0,157	-62,839	0,368	0,274
1397	ZINC13831130	-7,960	0,162	-9,500	0,500	-52,140	0,160	0,274
1398	ZINC33649607	-8,820	0,251	-8,600	0,371	-54,150	0,199	0,274
1399	ZINC04217561	-9,240	0,295	-8,800	0,400	-50,429	0,126	0,274
1400	ZINC43100953	-8,310	0,198	-9,900	0,557	-47,303	0,066	0,274
1401	ZINC04102194	-8,900	0,260	-7,400	0,200	-62,526	0,361	0,274
1402	ZINC38139973	-9,090	0,279	-8,900	0,414	-50,483	0,127	0,274
1403	ZINC20444132	-9,790	0,352	-8,900	0,414	-46,740	0,055	0,274

1404	ZINC02021295	-10,140	0,388	-8,900	0,414	-44,862	0,018	0,274
1405	ZINC85537073	-6,480	0,008	-7,600	0,229	-73,958	0,584	0,273
1406	ZINC01538600	-7,950	0,161	-9,400	0,486	-52,870	0,174	0,273
1407	ZINC03831437	-10,420	0,417	-8,500	0,357	-46,281	0,046	0,273
1408	ZINC13831810	-9,850	0,358	-9,000	0,429	-45,642	0,033	0,273
1409	ZINC00537860	-9,220	0,293	-8,700	0,386	-51,202	0,141	0,273
1410	ZINC00538152	-8,090	0,175	-10,400	0,629	-44,709	0,015	0,273
1411	ZINC03831153	-10,060	0,380	-8,400	0,343	-48,878	0,096	0,273
1412	ZINC38192493	-9,270	0,298	-8,400	0,343	-53,089	0,178	0,273
1413	ZINC03830423	-8,050	0,171	-8,100	0,300	-61,791	0,347	0,273
1414	ZINC95641922	-9,830	0,356	-8,800	0,400	-47,114	0,062	0,273
1415	ZINC21984082	-8,670	0,236	-9,000	0,429	-51,808	0,153	0,272
1416	ZINC01915509	-10,980	0,476	-8,000	0,286	-46,802	0,056	0,272
1417	ZINC00538483	-9,290	0,300	-9,200	0,457	-47,004	0,060	0,272
1418	ZINC19362721	-9,610	0,333	-8,700	0,386	-48,962	0,098	0,272
1419	ZINC59587009	-7,500	0,114	-9,600	0,514	-53,588	0,188	0,272
1420	ZINC30691542	-9,670	0,340	-8,700	0,386	-48,603	0,091	0,272
1421	ZINC01539347	-9,560	0,328	-9,100	0,443	-46,238	0,045	0,272
1422	ZINC03795937	-10,910	0,468	-8,300	0,329	-44,891	0,019	0,272
1423	ZINC03830820	-9,930	0,367	-8,600	0,371	-47,918	0,078	0,272
1424	ZINC26573040	-9,240	0,295	-8,700	0,386	-50,870	0,135	0,272
1425	ZINC00597379	-9,720	0,345	-8,300	0,329	-51,244	0,142	0,272
1426	ZINC21289577	-8,300	0,197	-9,000	0,429	-53,667	0,189	0,272
1427	ZINC00527386	-9,700	0,343	-9,300	0,471	-43,956	0,001	0,272
1428	ZINC11616841	-9,670	0,340	-9,300	0,471	-44,101	0,003	0,271
1429	ZINC13125756	-8,470	0,215	-8,800	0,400	-54,177	0,199	0,271
1430	ZINC00607950	-9,250	0,296	-9,000	0,429	-48,527	0,089	0,271
1431	ZINC72266837	-8,600	0,228	-8,300	0,329	-57,141	0,257	0,271
1432	ZINC15848224	-10,020	0,376	-8,700	0,386	-46,611	0,052	0,271
1433	ZINC43203642	-9,480	0,320	-9,400	0,486	-44,340	0,008	0,271
1434	ZINC00538243	-8,380	0,206	-9,900	0,557	-46,486	0,050	0,271
1435	ZINC43197676	-9,550	0,327	-9,000	0,429	-46,847	0,057	0,271
1436	ZINC04214827	-9,780	0,351	-9,000	0,429	-45,603	0,033	0,271
1437	ZINC68151111	-9,140	0,285	-7,800	0,257	-57,842	0,270	0,271
1438	ZINC08144430	-7,880	0,154	-9,000	0,429	-55,752	0,230	0,271
1439	ZINC11676975	-8,840	0,253	-8,200	0,314	-56,476	0,244	0,271
1440	ZINC01530586	-8,360	0,204	-9,000	0,429	-53,159	0,179	0,271
1441	ZINC56897520	-9,000	0,270	-8,900	0,414	-50,439	0,127	0,270
1442	ZINC82125620	-8,520	0,220	-8,900	0,414	-53,002	0,176	0,270
1443	ZINC04212371	-8,560	0,224	-7,700	0,243	-61,609	0,344	0,270
1444	ZINC01999501	-7,810	0,146	-9,700	0,529	-50,910	0,136	0,270
1445	ZINC01543181	-9,900	0,363	-8,500	0,357	-48,557	0,090	0,270
1446	ZINC01545034	-9,800	0,353	-8,700	0,386	-47,617	0,072	0,270

1447	ZINC00538069	-10,410	0,416	-8,200	0,314	-48,029	0,080	0,270
1448	ZINC03977803	-7,180	0,081	-9,400	0,486	-56,459	0,244	0,270
1449	ZINC43450326	-9,240	0,295	-8,400	0,343	-52,797	0,172	0,270
1450	ZINC05374509	-9,300	0,301	-8,300	0,329	-53,208	0,180	0,270
1451	ZINC03830582	-9,510	0,323	-8,200	0,314	-52,816	0,173	0,270
1452	ZINC84489131	-9,810	0,354	-9,000	0,429	-45,315	0,027	0,270
1453	ZINC59587047	-9,840	0,357	-8,700	0,386	-47,358	0,067	0,270
1454	ZINC04215067	-9,950	0,369	-8,700	0,386	-46,770	0,055	0,270
1455	ZINC13883251	-8,850	0,254	-9,000	0,429	-50,434	0,126	0,270
1456	ZINC11592641	-8,660	0,235	-9,400	0,486	-48,500	0,089	0,270
1457	ZINC26892447	-8,320	0,199	-9,300	0,471	-51,049	0,138	0,270
1458	ZINC03830399	-8,630	0,232	-8,600	0,371	-54,518	0,206	0,270
1459	ZINC01481885	-8,180	0,185	-9,500	0,500	-50,304	0,124	0,270
1460	ZINC72266809	-9,080	0,278	-6,700	0,100	-66,068	0,430	0,270
1461	ZINC00005042	-8,640	0,233	-9,900	0,557	-44,884	0,019	0,269
1462	ZINC43772267	-8,970	0,267	-8,600	0,371	-52,668	0,170	0,269
1463	ZINC37869058	-8,810	0,250	-8,300	0,329	-55,691	0,229	0,269
1464	ZINC03807298	-7,510	0,115	-9,400	0,486	-54,537	0,206	0,269
1465	ZINC35395414	-9,560	0,328	-8,800	0,400	-47,985	0,079	0,269
1466	ZINC14128264	-9,070	0,277	-7,700	0,243	-58,681	0,287	0,269
1467	ZINC03830505	-9,040	0,274	-8,500	0,357	-52,949	0,175	0,269
1468	ZINC00537822	-9,020	0,272	-9,600	0,514	-44,959	0,020	0,269
1469	ZINC04213008	-9,580	0,330	-8,700	0,386	-48,580	0,090	0,269
1470	ZINC12503277	-10,120	0,386	-8,400	0,343	-47,897	0,077	0,269
1471	ZINC03830872	-8,750	0,244	-7,900	0,271	-58,860	0,290	0,269
1472	ZINC01583682	-10,140	0,388	-8,900	0,414	-44,080	0,003	0,269
1473	ZINC03872668	-10,000	0,374	-7,700	0,243	-53,643	0,189	0,269
1474	ZINC01545445	-10,720	0,449	-8,000	0,286	-47,567	0,071	0,268
1475	ZINC03797383	-8,410	0,209	-9,900	0,557	-45,943	0,039	0,268
1476	ZINC19366479	-10,010	0,375	-8,600	0,371	-46,921	0,058	0,268
1477	ZINC19632614	-8,630	0,232	-8,700	0,386	-53,558	0,187	0,268
1478	ZINC49833385	-9,730	0,346	-7,000	0,143	-60,171	0,316	0,268
1479	ZINC00537780	-9,550	0,327	-8,900	0,414	-47,157	0,063	0,268
1480	ZINC04217603	-7,340	0,098	-8,700	0,386	-60,424	0,321	0,268
1481	ZINC01541366	-8,920	0,262	-9,000	0,429	-49,771	0,114	0,268
1482	ZINC00523926	-9,030	0,273	-9,700	0,529	-44,019	0,002	0,268
1483	ZINC01481940	-9,930	0,367	-8,900	0,414	-45,062	0,022	0,268
1484	ZINC22463111	-9,480	0,320	-8,600	0,371	-49,667	0,112	0,268
1485	ZINC04213144	-8,770	0,246	-8,600	0,371	-53,447	0,185	0,268
1486	ZINC42893657	-9,260	0,297	-9,000	0,429	-47,887	0,077	0,268
1487	ZINC01842766	-9,270	0,298	-9,300	0,471	-45,623	0,033	0,267
1488	ZINC04215260	-9,230	0,294	-9,200	0,457	-46,570	0,051	0,267
1489	ZINC03920549	-9,410	0,313	-8,000	0,286	-54,427	0,204	0,267

1490	ZINC04215257	-8,060	0,172	-8,200	0,314	-60,166	0,316	0,267
1491	ZINC28957444	-6,920	0,054	-9,200	0,457	-58,900	0,291	0,267
1492	ZINC01914641	-7,790	0,144	-8,600	0,371	-58,659	0,286	0,267
1493	ZINC03938482	-8,980	0,268	-8,400	0,343	-53,750	0,191	0,267
1494	ZINC30690847	-7,290	0,092	-9,600	0,514	-53,958	0,195	0,267
1495	ZINC04198841	-9,640	0,336	-8,500	0,357	-49,484	0,108	0,267
1496	ZINC11616774	-8,420	0,210	-8,400	0,343	-56,736	0,249	0,267
1497	ZINC26384924	-9,350	0,306	-7,700	0,243	-56,909	0,252	0,267
1498	ZINC00523925	-8,860	0,255	-9,700	0,529	-44,814	0,017	0,267
1499	ZINC08214574	-8,900	0,260	-8,300	0,329	-54,873	0,213	0,267
1500	ZINC05139696	-9,910	0,364	-8,700	0,386	-46,535	0,051	0,267
1501	ZINC84756647	-8,820	0,251	-8,700	0,386	-52,347	0,164	0,267
1502	ZINC09302280	-9,820	0,355	-8,600	0,371	-47,734	0,074	0,267
1503	ZINC04019705	-7,370	0,101	-8,800	0,400	-59,354	0,300	0,267
1504	ZINC31284167	-10,070	0,381	-8,300	0,329	-48,551	0,090	0,267
1505	ZINC03802417	-8,920	0,262	-9,500	0,500	-45,864	0,038	0,266
1506	ZINC01488870	-8,250	0,192	-9,600	0,514	-48,691	0,093	0,266
1507	ZINC00523926	-8,930	0,263	-9,700	0,529	-44,295	0,007	0,266
1508	ZINC01530585	-8,150	0,182	-8,600	0,371	-56,519	0,245	0,266
1509	ZINC31297724	-7,770	0,142	-8,500	0,357	-59,284	0,298	0,266
1510	ZINC18710082	-8,450	0,213	-9,400	0,486	-49,013	0,099	0,266
1511	ZINC05632016	-9,770	0,350	-8,500	0,357	-48,572	0,090	0,266
1512	ZINC03830421	-7,890	0,155	-8,300	0,329	-60,086	0,314	0,266
1513	ZINC22462888	-10,040	0,378	-8,700	0,386	-45,609	0,033	0,265
1514	ZINC00538544	-9,190	0,290	-8,100	0,300	-54,541	0,206	0,265
1515	ZINC03875531	-10,400	0,415	-7,400	0,200	-53,205	0,180	0,265
1516	ZINC33872443	-9,570	0,329	-8,700	0,386	-48,081	0,081	0,265
1517	ZINC00608025	-9,290	0,300	-9,100	0,443	-46,605	0,052	0,265
1518	ZINC82117893	-8,030	0,169	-6,600	0,086	-71,705	0,540	0,265
1519	ZINC13883249	-8,710	0,240	-8,800	0,400	-51,887	0,155	0,265
1520	ZINC02038733	-10,030	0,377	-8,900	0,414	-44,085	0,003	0,265
1521	ZINC03805079	-9,520	0,324	-8,900	0,414	-46,806	0,056	0,265
1522	ZINC03831172	-8,880	0,258	-8,900	0,414	-50,216	0,122	0,265
1523	ZINC71754993	-10,050	0,379	-8,700	0,386	-45,409	0,029	0,265
1524	ZINC00601312	-9,920	0,366	-8,900	0,414	-44,614	0,013	0,264
1525	ZINC04214064	-9,340	0,305	-8,900	0,414	-47,709	0,073	0,264
1526	ZINC01482019	-9,280	0,299	-9,400	0,486	-44,352	0,008	0,264
1527	ZINC02033590	-8,500	0,218	-9,300	0,471	-49,243	0,103	0,264
1528	ZINC04213334	-9,250	0,296	-8,800	0,400	-48,899	0,097	0,264
1529	ZINC31297727	-7,450	0,109	-8,800	0,400	-58,509	0,283	0,264
1530	ZINC03824921	-8,560	0,224	-8,800	0,400	-52,565	0,168	0,264
1531	ZINC59586748	-9,310	0,302	-9,400	0,486	-44,120	0,004	0,264
1532	ZINC84758639	-9,950	0,369	-7,500	0,214	-54,657	0,209	0,264

1533	ZINC33971176	-8,330	0,200	-8,900	0,414	-53,022	0,177	0,264
1534	ZINC33940852	-9,280	0,299	-9,000	0,429	-47,209	0,064	0,264
1535	ZINC00608223	-8,740	0,243	-9,500	0,500	-46,410	0,048	0,264
1536	ZINC85540329	-6,960	0,058	-7,200	0,171	-72,791	0,561	0,264
1537	ZINC08214598	-8,060	0,172	-8,500	0,357	-57,355	0,261	0,263
1538	ZINC04217610	-9,040	0,274	-7,700	0,243	-57,995	0,273	0,263
1539	ZINC00586739	-9,920	0,366	-8,200	0,314	-49,601	0,110	0,263
1540	ZINC34853956	-8,730	0,242	-9,100	0,443	-49,343	0,105	0,263
1541	ZINC00608014	-9,170	0,288	-9,300	0,471	-45,516	0,031	0,263
1542	ZINC00608172	-8,900	0,260	-9,000	0,429	-49,162	0,102	0,263
1543	ZINC00596925	-9,850	0,358	-9,000	0,429	-44,080	0,003	0,263
1544	ZINC32709485	-8,680	0,237	-9,000	0,429	-50,328	0,124	0,263
1545	ZINC01481982	-8,680	0,237	-9,700	0,529	-45,136	0,023	0,263
1546	ZINC22446685	-10,240	0,399	-7,900	0,271	-50,022	0,118	0,263
1547	ZINC72283740	-7,890	0,155	-8,000	0,286	-61,842	0,348	0,263
1548	ZINC04216287	-8,980	0,268	-9,400	0,486	-45,723	0,035	0,263
1549	ZINC11677432	-8,560	0,224	-9,300	0,471	-48,687	0,093	0,263
1550	ZINC00602486	-9,020	0,272	-9,100	0,443	-47,687	0,073	0,263
1551	ZINC03775162	-9,610	0,333	-8,900	0,414	-46,001	0,040	0,263
1552	ZINC00596929	-8,410	0,209	-9,100	0,443	-50,925	0,136	0,263
1553	ZINC01530732	-8,610	0,229	-9,800	0,543	-44,685	0,015	0,262
1554	ZINC03920719	-8,870	0,256	-9,000	0,429	-49,173	0,102	0,262
1555	ZINC19632696	-8,930	0,263	-9,300	0,471	-46,646	0,053	0,262
1556	ZINC30691771	-9,760	0,349	-8,100	0,300	-51,026	0,138	0,262
1557	ZINC95564729	-9,400	0,312	-8,700	0,386	-48,520	0,089	0,262
1558	ZINC00538186	-10,170	0,391	-8,300	0,329	-47,343	0,066	0,262
1559	ZINC85537127	-8,140	0,181	-7,500	0,214	-64,069	0,391	0,262
1560	ZINC38941844	-9,570	0,329	-8,400	0,343	-49,800	0,114	0,262
1561	ZINC21297660	-8,420	0,210	-8,400	0,343	-55,945	0,234	0,262
1562	ZINC43450324	-8,840	0,253	-8,500	0,357	-52,963	0,176	0,262
1563	ZINC22463243	-9,950	0,369	-8,900	0,414	-44,083	0,003	0,262
1564	ZINC21983537	-9,920	0,366	-8,900	0,414	-44,216	0,006	0,262
1565	ZINC00538026	-8,960	0,266	-9,500	0,500	-44,934	0,020	0,262
1566	ZINC26892453	-8,710	0,240	-9,000	0,429	-49,933	0,117	0,262
1567	ZINC30691661	-8,640	0,233	-9,600	0,514	-45,897	0,038	0,262
1568	ZINC01849659	-9,990	0,373	-8,800	0,400	-44,563	0,012	0,262
1569	ZINC01489430	-9,310	0,302	-8,700	0,386	-48,919	0,097	0,262
1570	ZINC03793091	-8,770	0,246	-8,900	0,414	-50,326	0,124	0,262
1571	ZINC22463265	-8,900	0,260	-8,500	0,357	-52,571	0,168	0,262
1572	ZINC23118511	-9,950	0,369	-8,700	0,386	-45,464	0,030	0,261
1573	ZINC04215990	-7,930	0,159	-8,300	0,329	-59,194	0,297	0,261
1574	ZINC00608024	-9,030	0,273	-9,500	0,500	-44,494	0,011	0,261
1575	ZINC49832995	-7,380	0,102	-9,200	0,457	-55,493	0,225	0,261

1576	ZINC04215523	-9,290	0,300	-7,100	0,157	-60,714	0,326	0,261
1577	ZINC02019965	-9,660	0,339	-9,100	0,443	-44,025	0,002	0,261
1578	ZINC59586755	-10,190	0,394	-8,600	0,371	-44,845	0,018	0,261
1579	ZINC03831483	-8,510	0,219	-9,600	0,514	-46,448	0,049	0,261
1580	ZINC02558051	-9,060	0,276	-9,500	0,500	-44,243	0,006	0,261
1581	ZINC13884221	-8,480	0,216	-9,600	0,514	-46,588	0,052	0,261
1582	ZINC03800475	-9,740	0,347	-8,200	0,314	-50,142	0,121	0,261
1583	ZINC31561759	-8,560	0,224	-9,000	0,429	-50,554	0,129	0,261
1584	ZINC01996117	-9,330	0,304	-9,100	0,443	-45,692	0,034	0,260
1585	ZINC31601255	-8,880	0,258	-8,700	0,386	-51,020	0,138	0,260
1586	ZINC03918453	-8,610	0,229	-9,100	0,443	-49,515	0,109	0,260
1587	ZINC04214489	-8,930	0,263	-9,500	0,500	-44,856	0,018	0,260
1588	ZINC18456286	-7,990	0,165	-8,600	0,371	-56,481	0,244	0,260
1589	ZINC27090461	-8,210	0,188	-9,000	0,429	-52,365	0,164	0,260
1590	ZINC03874963	-8,680	0,237	-8,700	0,386	-52,035	0,158	0,260
1591	ZINC06013444	-9,420	0,314	-8,100	0,300	-52,492	0,166	0,260
1592	ZINC00000722	-10,040	0,378	-8,700	0,386	-44,760	0,016	0,260
1593	ZINC01537619	-9,090	0,279	-9,000	0,429	-47,607	0,072	0,260
1594	ZINC59697694	-7,090	0,072	-9,000	0,429	-58,292	0,279	0,260
1595	ZINC36520252	-8,890	0,259	-9,000	0,429	-48,667	0,092	0,260
1596	ZINC85540328	-6,720	0,033	-7,100	0,157	-74,222	0,589	0,260
1597	ZINC30727788	-11,170	0,495	-7,900	0,271	-44,529	0,012	0,259
1598	ZINC04217575	-8,640	0,233	-9,000	0,429	-49,960	0,117	0,259
1599	ZINC38945666	-7,770	0,142	-8,100	0,300	-61,219	0,336	0,259
1600	ZINC01530788	-8,300	0,197	-9,200	0,457	-50,298	0,124	0,259
1601	ZINC11681591	-8,990	0,269	-8,500	0,357	-51,757	0,152	0,259
1602	ZINC04212175	-8,250	0,192	-8,000	0,286	-59,382	0,300	0,259
1603	ZINC03775281	-8,960	0,266	-8,900	0,414	-48,971	0,098	0,259
1604	ZINC31297954	-9,300	0,301	-8,900	0,414	-47,151	0,063	0,259
1605	ZINC03873399	-8,830	0,252	-8,700	0,386	-51,108	0,140	0,259
1606	ZINC01846111	-8,660	0,235	-9,200	0,457	-48,332	0,086	0,259
1607	ZINC03830351	-9,350	0,306	-7,700	0,243	-55,660	0,228	0,259
1608	ZINC08214507	-10,190	0,394	-7,500	0,214	-52,640	0,169	0,259
1609	ZINC03797401	-8,630	0,232	-8,900	0,414	-50,674	0,131	0,259
1610	ZINC00006152	-9,490	0,321	-8,700	0,386	-47,544	0,070	0,259
1611	ZINC04217732	-9,490	0,321	-8,400	0,343	-49,737	0,113	0,259
1612	ZINC43197674	-9,480	0,320	-9,100	0,443	-44,639	0,014	0,259
1613	ZINC31540242	-9,250	0,296	-9,100	0,443	-45,838	0,037	0,259
1614	ZINC01533706	-8,570	0,225	-8,600	0,371	-53,144	0,179	0,259
1615	ZINC05784191	-9,720	0,345	-8,800	0,400	-45,520	0,031	0,259
1616	ZINC11592733	-9,370	0,308	-8,300	0,329	-51,061	0,139	0,259
1617	ZINC35836133	-8,860	0,255	-8,700	0,386	-50,844	0,134	0,259
1618	ZINC31284338	-9,620	0,334	-8,400	0,343	-48,984	0,098	0,258

1619	ZINC03873295	-9,180	0,289	-8,900	0,414	-47,657	0,072	0,258
1620	ZINC03830424	-8,320	0,199	-7,700	0,243	-61,063	0,333	0,258
1621	ZINC72266794	-7,290	0,092	-7,900	0,271	-65,096	0,411	0,258
1622	ZINC14175498	-7,610	0,126	-8,500	0,357	-58,968	0,292	0,258
1623	ZINC01547346	-7,420	0,106	-10,000	0,571	-48,947	0,098	0,258
1624	ZINC59586678	-9,320	0,303	-8,700	0,386	-48,339	0,086	0,258
1625	ZINC04213867	-8,550	0,223	-9,400	0,486	-47,285	0,065	0,258
1626	ZINC03779887	-9,380	0,309	-9,100	0,443	-45,042	0,022	0,258
1627	ZINC03830752	-9,460	0,318	-8,900	0,414	-46,083	0,042	0,258
1628	ZINC01485983	-8,450	0,213	-8,700	0,386	-52,950	0,175	0,258
1629	ZINC03798387	-9,610	0,333	-8,400	0,343	-48,952	0,098	0,258
1630	ZINC03798537	-9,510	0,323	-8,400	0,343	-49,481	0,108	0,258
1631	ZINC00607853	-8,660	0,235	-8,500	0,357	-53,281	0,182	0,258
1632	ZINC19367492	-10,080	0,382	-8,700	0,386	-44,215	0,006	0,258
1633	ZINC04215916	-9,920	0,366	-8,400	0,343	-47,268	0,065	0,258
1634	ZINC01842993	-8,650	0,234	-8,700	0,386	-51,841	0,154	0,258
1635	ZINC03830863	-9,170	0,288	-9,100	0,443	-46,117	0,043	0,258
1636	ZINC22851029	-8,440	0,212	-8,500	0,357	-54,423	0,204	0,258
1637	ZINC06199094	-8,080	0,174	-9,300	0,471	-50,465	0,127	0,258
1638	ZINC19632891	-9,800	0,353	-8,800	0,400	-44,948	0,020	0,258
1639	ZINC53683271	-11,400	0,519	-7,400	0,200	-46,681	0,054	0,258
1640	ZINC03925617	-9,850	0,358	-7,800	0,257	-52,022	0,157	0,258
1641	ZINC17042238	-10,340	0,409	-8,400	0,343	-44,985	0,021	0,258
1642	ZINC01846466	-8,660	0,235	-8,900	0,414	-50,280	0,123	0,257
1643	ZINC03989268	-7,600	0,125	-7,900	0,271	-63,284	0,376	0,257
1644	ZINC01481958	-7,820	0,147	-9,500	0,500	-50,326	0,124	0,257
1645	ZINC03830815	-9,590	0,331	-8,500	0,357	-48,215	0,083	0,257
1646	ZINC02021499	-10,430	0,418	-8,300	0,329	-45,196	0,025	0,257
1647	ZINC03806120	-9,720	0,345	-8,900	0,414	-44,566	0,012	0,257
1648	ZINC31297957	-9,200	0,291	-8,800	0,400	-48,043	0,080	0,257
1649	ZINC00602803	-8,730	0,242	-8,600	0,371	-51,988	0,157	0,257
1650	ZINC31702482	-9,260	0,297	-8,500	0,357	-49,889	0,116	0,257
1651	ZINC03800980	-9,850	0,358	-8,700	0,386	-45,258	0,026	0,257
1652	ZINC00538362	-10,080	0,382	-8,400	0,343	-46,233	0,045	0,257
1653	ZINC03875842	-10,000	0,374	-8,500	0,357	-45,923	0,039	0,257
1654	ZINC04098512	-6,690	0,030	-9,500	0,500	-56,187	0,238	0,256
1655	ZINC03874192	-9,410	0,313	-7,400	0,200	-57,088	0,256	0,256
1656	ZINC00597817	-9,300	0,301	-9,100	0,443	-45,159	0,024	0,256
1657	ZINC08214445	-7,620	0,127	-7,700	0,243	-64,419	0,398	0,256
1658	ZINC03993530	-8,650	0,234	-8,300	0,329	-54,501	0,205	0,256
1659	ZINC03830433	-7,410	0,105	-8,500	0,357	-59,648	0,306	0,256
1660	ZINC08214592	-9,130	0,283	-7,700	0,243	-56,325	0,241	0,256
1661	ZINC03831562	-8,610	0,229	-8,700	0,386	-51,728	0,152	0,256



1662	ZINC04214305	-10,030	0,377	-8,100	0,300	-48,541	0,090	0,256
1663	ZINC18456284	-7,150	0,078	-8,800	0,400	-58,773	0,289	0,255
1664	ZINC11686514	-9,960	0,370	-7,900	0,271	-50,368	0,125	0,255
1665	ZINC26892050	-8,670	0,236	-8,400	0,343	-53,582	0,188	0,255
1666	ZINC26973408	-7,640	0,129	-8,900	0,414	-55,397	0,223	0,255
1667	ZINC03830398	-8,260	0,193	-8,600	0,371	-54,279	0,201	0,255
1668	ZINC03830428	-7,370	0,101	-8,400	0,343	-60,504	0,322	0,255
1669	ZINC33650031	-7,030	0,065	-8,800	0,400	-59,380	0,300	0,255
1670	ZINC03830447	-8,020	0,168	-7,700	0,243	-62,157	0,354	0,255
1671	ZINC01846100	-9,560	0,328	-8,700	0,386	-46,565	0,051	0,255
1672	ZINC72266295	-8,170	0,184	-8,900	0,414	-52,512	0,167	0,255
1673	ZINC03800054	-9,450	0,317	-8,800	0,400	-46,393	0,048	0,255
1674	ZINC30691425	-9,390	0,310	-9,100	0,443	-44,472	0,011	0,255
1675	ZINC03831155	-9,460	0,318	-8,500	0,357	-48,488	0,089	0,255
1676	ZINC01849669	-9,510	0,323	-8,800	0,400	-46,014	0,041	0,255
1677	ZINC01570644	-8,570	0,225	-8,800	0,400	-51,017	0,138	0,254
1678	ZINC72266834	-8,380	0,206	-8,600	0,371	-53,490	0,186	0,254
1679	ZINC85536937	-7,280	0,091	-8,400	0,343	-60,834	0,329	0,254
1680	ZINC04212663	-8,490	0,217	-8,200	0,314	-55,836	0,231	0,254
1681	ZINC13209484	-7,860	0,152	-9,200	0,457	-51,847	0,154	0,254
1682	ZINC03831356	-10,010	0,375	-8,500	0,357	-45,489	0,030	0,254
1683	ZINC34167971	-9,710	0,344	-8,900	0,414	-44,148	0,004	0,254
1684	ZINC01853521	-9,010	0,271	-8,900	0,414	-47,884	0,077	0,254
1685	ZINC01583683	-9,860	0,359	-8,800	0,400	-44,068	0,003	0,254
1686	ZINC01530974	-9,110	0,281	-8,900	0,414	-47,339	0,066	0,254
1687	ZINC19228902	-9,700	0,343	-8,200	0,314	-49,323	0,105	0,254
1688	ZINC34636383	-9,020	0,272	-9,000	0,429	-47,053	0,061	0,254
1689	ZINC03964493	-7,650	0,130	-8,400	0,343	-58,762	0,288	0,254
1690	ZINC20621755	-9,210	0,292	-8,500	0,357	-49,681	0,112	0,254
1691	ZINC20621758	-8,940	0,264	-8,700	0,386	-49,645	0,111	0,254
1692	ZINC22446680	-9,550	0,327	-8,200	0,314	-50,057	0,119	0,254
1693	ZINC00608131	-7,820	0,147	-10,100	0,586	-45,328	0,027	0,253
1694	ZINC03831173	-8,890	0,259	-8,700	0,386	-49,902	0,116	0,253
1695	ZINC04215204	-9,380	0,309	-8,900	0,414	-45,808	0,037	0,253
1696	ZINC59697695	-7,640	0,129	-8,600	0,371	-57,285	0,260	0,253
1697	ZINC08214554	-6,460	0,006	-7,300	0,186	-73,135	0,568	0,253
1698	ZINC43201232	-9,630	0,335	-8,700	0,386	-45,900	0,038	0,253
1699	ZINC84759270	-9,250	0,296	-7,700	0,243	-55,281	0,221	0,253
1700	ZINC72266918	-8,310	0,198	-8,200	0,314	-56,624	0,247	0,253
1701	ZINC04214702	-7,820	0,147	-9,500	0,500	-49,678	0,112	0,253
1702	ZINC05316998	-9,240	0,295	-9,000	0,429	-45,764	0,036	0,253
1703	ZINC49694463	-7,880	0,154	-8,000	0,286	-60,331	0,319	0,253
1704	ZINC00967787	-9,630	0,335	-8,800	0,400	-45,097	0,023	0,253

1705	ZINC03831171	-9,120	0,282	-8,700	0,386	-48,548	0,090	0,253
1706	ZINC00608304	-9,040	0,274	-9,300	0,471	-44,555	0,012	0,253
1707	ZINC00607859	-9,130	0,283	-8,600	0,371	-49,203	0,103	0,252
1708	ZINC03830400	-7,870	0,153	-8,300	0,329	-58,135	0,276	0,252
1709	ZINC38910715	-8,620	0,231	-8,900	0,414	-49,717	0,113	0,252
1710	ZINC04214776	-9,160	0,287	-8,500	0,357	-49,759	0,113	0,252
1711	ZINC02008866	-9,880	0,361	-8,600	0,371	-45,176	0,024	0,252
1712	ZINC22943164	-8,590	0,227	-8,200	0,314	-55,004	0,215	0,252
1713	ZINC03831528	-10,050	0,379	-7,900	0,271	-49,407	0,106	0,252
1714	ZINC03830551	-9,500	0,322	-8,800	0,400	-45,729	0,035	0,252
1715	ZINC03830271	-8,610	0,229	-8,600	0,371	-51,954	0,156	0,252
1716	ZINC56898798	-6,610	0,022	-9,000	0,429	-59,700	0,307	0,252
1717	ZINC43206238	-8,900	0,260	-8,600	0,371	-50,390	0,126	0,252
1718	ZINC12500925	-8,260	0,193	-9,100	0,443	-50,119	0,120	0,252
1719	ZINC04216093	-8,940	0,264	-8,500	0,357	-50,896	0,135	0,252
1720	ZINC38811048	-8,690	0,238	-9,400	0,486	-45,613	0,033	0,252
1721	ZINC03830495	-8,620	0,231	-7,700	0,243	-58,477	0,283	0,252
1722	ZINC03830404	-8,490	0,217	-8,500	0,357	-53,287	0,182	0,252
1723	ZINC84759274	-10,660	0,442	-7,500	0,214	-49,033	0,099	0,252
1724	ZINC02019919	-9,110	0,281	-8,800	0,400	-47,755	0,074	0,252
1725	ZINC03941496	-7,250	0,088	-7,700	0,243	-65,775	0,425	0,252
1726	ZINC11616776	-8,090	0,175	-8,200	0,314	-57,609	0,266	0,252
1727	ZINC30690729	-8,470	0,215	-9,400	0,486	-46,726	0,054	0,252
1728	ZINC38338242	-8,760	0,245	-9,300	0,471	-45,908	0,038	0,252
1729	ZINC03776633	-9,900	0,363	-8,500	0,357	-45,695	0,034	0,252
1730	ZINC00538447	-9,480	0,320	-8,300	0,329	-49,406	0,106	0,252
1731	ZINC72266880	-8,560	0,224	-8,400	0,343	-53,581	0,188	0,252
1732	ZINC00000162	-10,490	0,425	-8,300	0,329	-43,991	0,001	0,252
1733	ZINC29571072	-6,630	0,024	-8,000	0,286	-66,812	0,445	0,251
1734	ZINC08214371	-7,860	0,152	-6,900	0,129	-68,324	0,474	0,251
1735	ZINC33956557	-8,790	0,248	-8,200	0,314	-53,786	0,192	0,251
1736	ZINC02572278	-9,250	0,296	-8,800	0,400	-46,889	0,058	0,251
1737	ZINC00607798	-9,140	0,285	-8,900	0,414	-46,736	0,055	0,251
1738	ZINC38141549	-9,690	0,342	-7,200	0,171	-56,283	0,240	0,251
1739	ZINC03977786	-8,070	0,173	-9,500	0,500	-48,028	0,080	0,251
1740	ZINC00538438	-8,900	0,260	-8,800	0,400	-48,738	0,093	0,251
1741	ZINC02167075	-9,450	0,317	-8,100	0,300	-50,942	0,136	0,251
1742	ZINC95942439	-8,660	0,235	-9,300	0,471	-46,333	0,047	0,251
1743	ZINC43195697	-10,450	0,421	-8,000	0,286	-46,320	0,046	0,251
1744	ZINC19796018	-10,270	0,402	-8,400	0,343	-44,325	0,008	0,251
1745	ZINC01530581	-9,380	0,309	-9,000	0,429	-44,641	0,014	0,251
1746	ZINC30690488	-9,280	0,299	-8,900	0,414	-45,905	0,038	0,251
1747	ZINC02016004	-7,700	0,135	-9,300	0,471	-51,404	0,145	0,251

1748	ZINC05735012	-8,500	0,218	-8,700	0,386	-51,535	0,148	0,251
1749	ZINC03831344	-8,680	0,237	-8,600	0,371	-51,284	0,143	0,250
1750	ZINC04098355	-10,670	0,443	-8,000	0,286	-45,048	0,022	0,250
1751	ZINC03782807	-9,060	0,276	-9,000	0,429	-46,297	0,046	0,250
1752	ZINC11592805	-8,150	0,182	-8,600	0,371	-54,097	0,198	0,250
1753	ZINC03830446	-7,710	0,136	-7,800	0,257	-62,324	0,358	0,250
1754	ZINC00000293	-8,450	0,213	-8,900	0,414	-50,280	0,123	0,250
1755	ZINC02009222	-8,900	0,260	-8,700	0,386	-49,334	0,105	0,250
1756	ZINC85537056	-9,220	0,293	-8,200	0,314	-51,290	0,143	0,250
1757	ZINC85537120	-9,660	0,339	-7,400	0,200	-54,806	0,211	0,250
1758	ZINC38913962	-9,640	0,336	-8,200	0,314	-49,026	0,099	0,250
1759	ZINC03820336	-9,460	0,318	-8,900	0,414	-44,830	0,018	0,250
1760	ZINC04172316	-8,680	0,237	-8,000	0,286	-55,609	0,227	0,250
1761	ZINC04097293	-8,090	0,175	-8,600	0,371	-54,338	0,202	0,250
1762	ZINC03819138	-9,350	0,306	-8,700	0,386	-46,862	0,057	0,250
1763	ZINC03804921	-9,080	0,278	-8,400	0,343	-50,510	0,128	0,250
1764	ZINC01842995	-8,250	0,192	-8,700	0,386	-52,738	0,171	0,250
1765	ZINC12402847	-9,650	0,337	-8,600	0,371	-45,978	0,040	0,250
1766	ZINC01853392	-7,980	0,164	-8,600	0,371	-54,895	0,213	0,250
1767	ZINC59587040	-7,330	0,097	-9,400	0,486	-52,484	0,166	0,250
1768	ZINC01853520	-8,860	0,255	-8,700	0,386	-49,440	0,107	0,249
1769	ZINC03830494	-9,230	0,294	-7,400	0,200	-57,019	0,254	0,249
1770	ZINC00538394	-9,080	0,278	-8,900	0,414	-46,789	0,056	0,249
1771	ZINC02019959	-8,590	0,227	-8,900	0,414	-49,369	0,106	0,249
1772	ZINC04097715	-6,750	0,036	-9,200	0,457	-56,994	0,254	0,249
1773	ZINC03994828	-8,280	0,195	-7,500	0,214	-61,312	0,338	0,249
1774	ZINC08035451	-8,180	0,185	-8,700	0,386	-53,007	0,176	0,249
1775	ZINC42832287	-9,020	0,272	-8,700	0,386	-48,506	0,089	0,249
1776	ZINC01843102	-8,160	0,183	-8,500	0,357	-54,554	0,207	0,249
1777	ZINC01530591	-8,050	0,171	-8,500	0,357	-55,141	0,218	0,249
1778	ZINC08144601	-7,380	0,102	-8,900	0,414	-55,780	0,230	0,249
1779	ZINC19795961	-9,560	0,328	-8,900	0,414	-44,114	0,004	0,249
1780	ZINC30691809	-8,800	0,249	-8,600	0,371	-50,371	0,125	0,249
1781	ZINC03929810	-7,280	0,091	-8,100	0,300	-62,158	0,354	0,249
1782	ZINC08552019	-8,410	0,209	-9,000	0,429	-49,498	0,108	0,249
1783	ZINC04215367	-9,170	0,288	-8,300	0,329	-50,579	0,129	0,248
1784	ZINC03831154	-9,380	0,309	-8,300	0,329	-49,454	0,107	0,248
1785	ZINC38896576	-8,490	0,217	-8,700	0,386	-51,263	0,143	0,248
1786	ZINC01628132	-9,930	0,367	-8,600	0,371	-44,304	0,007	0,248
1787	ZINC01530945	-8,380	0,206	-8,200	0,314	-55,519	0,225	0,248
1788	ZINC03830988	-7,100	0,073	-8,800	0,400	-57,942	0,272	0,248
1789	ZINC03784432	-9,230	0,294	-8,900	0,414	-45,820	0,037	0,248
1790	ZINC01843091	-8,860	0,255	-9,400	0,486	-44,116	0,004	0,248

1791	ZINC78234683	-9,890	0,362	-7,900	0,271	-49,638	0,111	0,248
1792	ZINC22033882	-9,170	0,288	-8,600	0,371	-48,324	0,085	0,248
1793	ZINC03955219	-9,040	0,274	-7,800	0,257	-54,878	0,213	0,248
1794	ZINC56134943	-8,970	0,267	-8,900	0,414	-47,151	0,063	0,248
1795	ZINC23118513	-9,690	0,342	-8,700	0,386	-44,763	0,016	0,248
1796	ZINC11616777	-8,550	0,223	-8,400	0,343	-53,050	0,177	0,248
1797	ZINC01530582	-9,140	0,285	-8,600	0,371	-48,413	0,087	0,248
1798	ZINC00968276	-9,020	0,272	-9,000	0,429	-46,113	0,042	0,248
1799	ZINC08214661	-8,830	0,252	-6,400	0,057	-66,239	0,434	0,248
1800	ZINC72267001	-8,760	0,245	-8,400	0,343	-51,900	0,155	0,248
1801	ZINC04215972	-9,610	0,333	-8,600	0,371	-45,886	0,038	0,248
1802	ZINC03803111	-8,310	0,198	-9,100	0,443	-49,151	0,102	0,248
1803	ZINC22446639	-9,680	0,341	-8,300	0,329	-47,702	0,073	0,248
1804	ZINC08036019	-8,440	0,212	-7,400	0,200	-60,938	0,331	0,247
1805	ZINC00000911	-7,860	0,152	-10,000	0,571	-44,908	0,019	0,247
1806	ZINC03932652	-7,510	0,115	-8,900	0,414	-54,860	0,212	0,247
1807	ZINC01530899	-8,850	0,254	-8,600	0,371	-49,893	0,116	0,247
1808	ZINC01530562	-8,700	0,239	-8,700	0,386	-49,958	0,117	0,247
1809	ZINC01842990	-8,610	0,229	-9,200	0,457	-46,761	0,055	0,247
1810	ZINC03830397	-7,850	0,151	-8,400	0,343	-56,692	0,248	0,247
1811	ZINC00538160	-9,630	0,335	-8,200	0,314	-48,647	0,092	0,247
1812	ZINC00600434	-8,600	0,228	-8,100	0,300	-54,872	0,213	0,247
1813	ZINC01995748	-8,440	0,212	-9,400	0,486	-46,145	0,043	0,247
1814	ZINC33953220	-9,810	0,354	-7,400	0,200	-53,521	0,186	0,247
1815	ZINC59586720	-8,120	0,179	-9,300	0,471	-48,582	0,090	0,247
1816	ZINC03810794	-9,760	0,349	-8,700	0,386	-44,207	0,005	0,247
1817	ZINC03830306	-10,720	0,449	-7,900	0,271	-44,958	0,020	0,247
1818	ZINC59587052	-7,210	0,084	-10,200	0,600	-46,796	0,056	0,247
1819	ZINC05273679	-9,240	0,295	-8,100	0,300	-51,378	0,145	0,247
1820	ZINC00538444	-8,720	0,241	-9,200	0,457	-46,068	0,042	0,247
1821	ZINC01849658	-9,580	0,330	-8,700	0,386	-45,142	0,024	0,247
1822	ZINC14300255	-8,950	0,265	-8,300	0,329	-51,446	0,146	0,247
1823	ZINC01891034	-9,740	0,347	-7,900	0,271	-50,158	0,121	0,246
1824	ZINC35920376	-9,060	0,276	-8,400	0,343	-50,107	0,120	0,246
1825	ZINC03871923	-8,130	0,180	-8,400	0,343	-55,025	0,216	0,246
1826	ZINC22440925	-8,620	0,231	-8,800	0,400	-49,446	0,107	0,246
1827	ZINC00607731	-8,720	0,241	-9,300	0,471	-45,231	0,025	0,246
1828	ZINC03647770	-9,340	0,305	-8,700	0,386	-46,317	0,046	0,246
1829	ZINC84756644	-8,270	0,194	-8,400	0,343	-54,240	0,200	0,246
1830	ZINC00601265	-8,760	0,245	-8,700	0,386	-49,397	0,106	0,246
1831	ZINC01851195	-8,900	0,260	-9,300	0,471	-44,237	0,006	0,246
1832	ZINC01271441	-8,920	0,262	-8,900	0,414	-47,059	0,061	0,246
1833	ZINC03989599	-7,860	0,152	-9,200	0,457	-50,515	0,128	0,246

1834	ZINC19362693	-9,460	0,318	-8,200	0,314	-49,310	0,105	0,246
1835	ZINC38192533	-7,700	0,135	-8,300	0,329	-57,969	0,273	0,245
1836	ZINC00601304	-8,690	0,238	-9,200	0,457	-46,058	0,041	0,245
1837	ZINC03796046	-9,680	0,341	-8,400	0,343	-46,636	0,053	0,245
1838	ZINC03917722	-8,750	0,244	-8,400	0,343	-51,581	0,149	0,245
1839	ZINC01841490	-9,580	0,330	-8,600	0,371	-45,667	0,034	0,245
1840	ZINC05751321	-8,860	0,255	-8,500	0,357	-50,235	0,123	0,245
1841	ZINC59586814	-6,830	0,045	-9,400	0,486	-54,450	0,204	0,245
1842	ZINC00538202	-9,320	0,303	-8,700	0,386	-46,286	0,046	0,245
1843	ZINC40939534	-8,290	0,196	-9,500	0,500	-45,901	0,038	0,245
1844	ZINC03798734	-9,610	0,333	-8,800	0,400	-43,987	0,001	0,245
1845	ZINC01846182	-8,630	0,232	-8,600	0,371	-50,691	0,131	0,245
1846	ZINC04215163	-9,510	0,323	-7,600	0,229	-53,335	0,183	0,245
1847	ZINC85540282	-10,510	0,427	-7,700	0,243	-47,234	0,064	0,245
1848	ZINC04215341	-8,780	0,247	-9,100	0,443	-46,184	0,044	0,245
1849	ZINC72266858	-6,470	0,007	-8,600	0,371	-62,201	0,355	0,245
1850	ZINC01573374	-8,570	0,225	-9,400	0,486	-45,086	0,023	0,245
1851	ZINC14263648	-9,130	0,283	-7,300	0,186	-57,516	0,264	0,244
1852	ZINC03871946	-7,490	0,113	-8,800	0,400	-55,246	0,220	0,244
1853	ZINC01538134	-8,080	0,174	-9,200	0,457	-49,152	0,102	0,244
1854	ZINC02021474	-9,880	0,361	-8,200	0,314	-46,882	0,057	0,244
1855	ZINC71789089	-8,020	0,168	-7,700	0,243	-60,494	0,322	0,244
1856	ZINC21999791	-8,450	0,213	-9,100	0,443	-47,899	0,077	0,244
1857	ZINC31297717	-9,140	0,285	-8,900	0,414	-45,682	0,034	0,244
1858	ZINC03923823	-8,400	0,208	-9,000	0,429	-48,900	0,097	0,244
1859	ZINC01481729	-9,690	0,342	-8,600	0,371	-44,938	0,020	0,244
1860	ZINC03819466	-9,120	0,282	-8,900	0,414	-45,777	0,036	0,244
1861	ZINC20444127	-9,140	0,285	-8,700	0,386	-47,139	0,062	0,244
1862	ZINC53267872	-9,620	0,334	-8,400	0,343	-46,760	0,055	0,244
1863	ZINC00538461	-9,060	0,276	-8,000	0,286	-52,655	0,170	0,244
1864	ZINC00601252	-8,260	0,193	-8,700	0,386	-51,784	0,153	0,244
1865	ZINC01570645	-8,170	0,184	-9,100	0,443	-49,320	0,105	0,244
1866	ZINC03202698	-9,140	0,285	-8,200	0,314	-50,752	0,133	0,244
1867	ZINC53226676	-8,350	0,202	-7,400	0,200	-60,815	0,328	0,244
1868	ZINC03830246	-9,030	0,273	-8,300	0,329	-50,555	0,129	0,243
1869	ZINC05651424	-9,060	0,276	-9,000	0,429	-45,238	0,025	0,243
1870	ZINC04215219	-8,230	0,190	-8,900	0,414	-50,401	0,126	0,243
1871	ZINC03831103	-7,180	0,081	-8,400	0,343	-59,685	0,306	0,243
1872	ZINC03775140	-8,900	0,260	-8,200	0,314	-51,961	0,156	0,243
1873	ZINC01851382	-9,470	0,319	-8,800	0,400	-44,504	0,011	0,243
1874	ZINC19327965	-10,830	0,460	-7,200	0,171	-48,998	0,099	0,243
1875	ZINC00537790	-8,640	0,233	-8,600	0,371	-50,399	0,126	0,243
1876	ZINC38609581	-8,010	0,167	-8,900	0,414	-51,542	0,148	0,243

1877	ZINC01532185	-9,610	0,333	-8,500	0,357	-45,926	0,039	0,243
1878	ZINC02012860	-8,360	0,204	-9,500	0,500	-45,245	0,026	0,243
1879	ZINC13912394	-9,060	0,276	-8,000	0,286	-52,525	0,167	0,243
1880	ZINC85537124	-7,600	0,125	-8,000	0,286	-60,324	0,319	0,243
1881	ZINC03830906	-8,240	0,191	-9,200	0,457	-48,075	0,081	0,243
1882	ZINC05512694	-9,000	0,270	-8,100	0,300	-52,097	0,159	0,243
1883	ZINC01854671	-9,110	0,281	-9,100	0,443	-44,159	0,005	0,243
1884	ZINC12503149	-8,780	0,247	-9,100	0,443	-45,892	0,038	0,243
1885	ZINC85540254	-9,510	0,323	-7,900	0,271	-50,810	0,134	0,243
1886	ZINC38811045	-8,550	0,223	-9,400	0,486	-44,877	0,018	0,242
1887	ZINC00020256	-9,570	0,329	-8,600	0,371	-45,303	0,027	0,242
1888	ZINC72266800	-7,710	0,136	-7,800	0,257	-61,101	0,334	0,242
1889	ZINC31561753	-7,830	0,148	-8,200	0,314	-57,517	0,264	0,242
1890	ZINC00607971	-9,460	0,318	-8,700	0,386	-45,123	0,023	0,242
1891	ZINC31291708	-8,670	0,236	-8,400	0,343	-51,544	0,148	0,242
1892	ZINC00538582	-9,190	0,290	-7,900	0,271	-52,426	0,165	0,242
1893	ZINC01535101	-9,340	0,305	-8,300	0,329	-48,682	0,092	0,242
1894	ZINC42834847	-7,780	0,143	-9,200	0,457	-50,379	0,125	0,242
1895	ZINC04217399	-8,330	0,200	-9,200	0,457	-47,424	0,068	0,242
1896	ZINC05765093	-9,350	0,306	-8,700	0,386	-45,646	0,033	0,242
1897	ZINC36126886	-9,940	0,368	-7,100	0,157	-54,234	0,200	0,242
1898	ZINC05651187	-9,020	0,272	-8,300	0,329	-50,317	0,124	0,242
1899	ZINC13547730	-6,940	0,056	-10,000	0,571	-48,932	0,097	0,242
1900	ZINC00004007	-9,630	0,335	-8,400	0,343	-46,308	0,046	0,242
1901	ZINC05632014	-9,310	0,302	-8,300	0,329	-48,751	0,094	0,241
1902	ZINC21289577	-7,630	0,128	-9,000	0,429	-52,572	0,168	0,241
1903	ZINC04846117	-7,550	0,119	-8,600	0,371	-55,939	0,233	0,241
1904	ZINC22463084	-8,760	0,245	-7,600	0,229	-56,816	0,250	0,241
1905	ZINC04214288	-9,090	0,279	-8,700	0,386	-46,964	0,059	0,241
1906	ZINC03831563	-9,120	0,282	-8,500	0,357	-48,272	0,084	0,241
1907	ZINC71789090	-7,470	0,111	-6,600	0,086	-71,048	0,527	0,241
1908	ZINC04212188	-8,780	0,247	-8,300	0,329	-51,506	0,147	0,241
1909	ZINC04215267	-7,910	0,157	-8,400	0,343	-55,407	0,223	0,241
1910	ZINC02020008	-9,930	0,367	-8,400	0,343	-44,613	0,013	0,241
1911	ZINC00597672	-9,480	0,320	-8,000	0,286	-49,957	0,117	0,241
1912	ZINC84759253	-9,320	0,303	-7,800	0,257	-52,274	0,162	0,241
1913	ZINC04212143	-9,540	0,326	-8,600	0,371	-45,211	0,025	0,241
1914	ZINC01530603	-8,740	0,243	-9,200	0,457	-45,057	0,022	0,241
1915	ZINC04474587	-8,080	0,174	-8,600	0,371	-52,987	0,176	0,241
1916	ZINC71257465	-7,560	0,120	-9,700	0,529	-47,668	0,073	0,241
1917	ZINC01888486	-8,580	0,226	-8,800	0,400	-48,803	0,095	0,240
1918	ZINC00968327	-8,210	0,188	-8,800	0,400	-50,744	0,132	0,240
1919	ZINC13883222	-9,470	0,319	-8,400	0,343	-46,936	0,058	0,240

1920	ZINC00599734	-8,960	0,266	-9,000	0,429	-45,247	0,026	0,240
1921	ZINC01999479	-8,730	0,242	-8,500	0,357	-50,151	0,121	0,240
1922	ZINC22033872	-9,280	0,299	-8,500	0,357	-47,212	0,064	0,240
1923	ZINC02019973	-8,820	0,251	-8,200	0,314	-51,875	0,154	0,240
1924	ZINC00002199	-8,900	0,260	-9,100	0,443	-44,829	0,018	0,240
1925	ZINC03992513	-8,680	0,237	-7,900	0,271	-54,822	0,212	0,240
1926	ZINC30691722	-9,220	0,293	-8,400	0,343	-48,255	0,084	0,240
1927	ZINC04099102	-7,860	0,152	-9,000	0,429	-51,094	0,139	0,240
1928	ZINC12495062	-10,020	0,376	-7,800	0,257	-48,374	0,086	0,240
1929	ZINC04213051	-9,100	0,280	-9,000	0,429	-44,461	0,010	0,240
1930	ZINC03871698	-8,630	0,232	-8,500	0,357	-50,643	0,131	0,240
1931	ZINC01530747	-8,760	0,245	-9,100	0,443	-45,531	0,031	0,240
1932	ZINC13542778	-8,330	0,200	-8,700	0,386	-50,760	0,133	0,240
1933	ZINC03935839	-7,660	0,131	-8,600	0,371	-55,064	0,216	0,240
1934	ZINC01552562	-7,820	0,147	-9,400	0,486	-48,328	0,086	0,240
1935	ZINC03830758	-10,160	0,390	-7,500	0,214	-49,784	0,114	0,240
1936	ZINC03635554	-9,740	0,347	-8,600	0,371	-43,935	0,000	0,239
1937	ZINC00576842	-8,960	0,266	-8,300	0,329	-50,305	0,124	0,239
1938	ZINC03782856	-8,370	0,205	-9,400	0,486	-45,366	0,028	0,239
1939	ZINC05305555	-9,180	0,289	-9,000	0,429	-43,958	0,001	0,239
1940	ZINC04245665	-9,520	0,324	-8,100	0,300	-48,756	0,094	0,239
1941	ZINC04215999	-8,130	0,180	-8,600	0,371	-52,501	0,167	0,239
1942	ZINC03810825	-9,860	0,359	-8,500	0,357	-43,990	0,001	0,239
1943	ZINC01271441	-8,990	0,269	-8,800	0,400	-46,427	0,049	0,239
1944	ZINC01530580	-7,680	0,133	-8,900	0,414	-52,683	0,170	0,239
1945	ZINC03914055	-8,130	0,180	-8,700	0,386	-51,713	0,151	0,239
1946	ZINC43150941	-7,280	0,091	-8,800	0,400	-55,515	0,225	0,239
1947	ZINC02040826	-9,170	0,288	-8,200	0,314	-49,821	0,115	0,239
1948	ZINC03979756	-8,110	0,178	-8,200	0,314	-55,474	0,224	0,239
1949	ZINC00000416	-8,820	0,251	-8,700	0,386	-47,987	0,079	0,239
1950	ZINC04214134	-9,090	0,279	-8,300	0,329	-49,480	0,108	0,239
1951	ZINC38322087	-7,390	0,103	-9,000	0,429	-53,414	0,184	0,239
1952	ZINC95598449	-8,240	0,191	-7,600	0,229	-59,161	0,296	0,239
1953	ZINC11687804	-7,960	0,162	-9,300	0,471	-48,156	0,082	0,239
1954	ZINC15848243	-9,880	0,361	-8,000	0,286	-47,446	0,068	0,238
1955	ZINC01544509	-9,120	0,282	-8,800	0,400	-45,618	0,033	0,238
1956	ZINC00537749	-8,690	0,238	-9,000	0,429	-46,441	0,049	0,238
1957	ZINC08214564	-9,740	0,347	-7,800	0,257	-49,612	0,110	0,238
1958	ZINC01541062	-10,100	0,384	-8,300	0,329	-44,005	0,002	0,238
1959	ZINC04215078	-9,370	0,308	-8,200	0,314	-48,636	0,092	0,238
1960	ZINC03830504	-8,870	0,256	-8,100	0,300	-52,035	0,158	0,238
1961	ZINC03812893	-9,490	0,321	-7,600	0,229	-52,393	0,165	0,238
1962	ZINC01910616	-7,950	0,161	-8,600	0,371	-53,265	0,181	0,238

1963	ZINC00608261	-9,260	0,297	-8,600	0,371	-46,260	0,045	0,238
1964	ZINC03830283	-9,310	0,302	-8,100	0,300	-49,658	0,111	0,238
1965	ZINC03919807	-8,530	0,221	-7,800	0,257	-56,015	0,235	0,238
1966	ZINC19362722	-9,270	0,298	-8,200	0,314	-49,114	0,101	0,238
1967	ZINC00598034	-8,700	0,239	-8,600	0,371	-49,212	0,103	0,238
1968	ZINC03830503	-8,830	0,252	-8,800	0,400	-47,043	0,061	0,238
1969	ZINC00001973	-9,010	0,271	-9,000	0,429	-44,600	0,013	0,238
1970	ZINC04216393	-9,470	0,319	-7,700	0,243	-51,688	0,151	0,237
1971	ZINC04212898	-9,180	0,289	-8,500	0,357	-47,355	0,067	0,237
1972	ZINC98215041	-10,160	0,390	-7,600	0,229	-48,731	0,093	0,237
1973	ZINC22463185	-9,410	0,313	-8,300	0,329	-47,592	0,071	0,237
1974	ZINC01481850	-8,990	0,269	-9,100	0,443	-43,952	0,000	0,237
1975	ZINC01530991	-9,520	0,324	-8,500	0,357	-45,526	0,031	0,237
1976	ZINC03830422	-7,790	0,144	-7,600	0,229	-61,382	0,339	0,237
1977	ZINC22010910	-10,060	0,380	-8,000	0,286	-46,299	0,046	0,237
1978	ZINC03830280	-9,830	0,356	-7,500	0,214	-51,203	0,141	0,237
1979	ZINC03935475	-10,300	0,405	-8,000	0,286	-45,000	0,021	0,237
1980	ZINC03791563	-10,060	0,380	-7,300	0,186	-51,426	0,146	0,237
1981	ZINC31291689	-7,400	0,104	-9,200	0,457	-51,648	0,150	0,237
1982	ZINC03872327	-7,820	0,147	-7,700	0,243	-60,400	0,320	0,237
1983	ZINC27619849	-8,480	0,216	-9,200	0,457	-45,826	0,037	0,237
1984	ZINC40651199	-9,680	0,341	-7,900	0,271	-48,969	0,098	0,237
1985	ZINC00608235	-8,690	0,238	-8,700	0,386	-48,361	0,086	0,237
1986	ZINC04474405	-8,710	0,240	-8,100	0,300	-52,661	0,170	0,237
1987	ZINC03830443	-8,450	0,213	-7,400	0,200	-59,184	0,297	0,236
1988	ZINC03831410	-8,350	0,202	-9,300	0,471	-45,738	0,035	0,236
1989	ZINC84759252	-9,230	0,294	-7,900	0,271	-51,324	0,144	0,236
1990	ZINC03830262	-9,970	0,371	-8,000	0,286	-46,621	0,052	0,236
1991	ZINC04213302	-8,840	0,253	-8,600	0,371	-48,245	0,084	0,236
1992	ZINC03950327	-7,730	0,138	-9,100	0,443	-50,500	0,128	0,236
1993	ZINC03916953	-8,140	0,181	-8,700	0,386	-51,245	0,142	0,236
1994	ZINC03792417	-7,880	0,154	-9,300	0,471	-48,217	0,083	0,236
1995	ZINC00607872	-7,740	0,139	-9,200	0,457	-49,677	0,112	0,236
1996	ZINC15848225	-9,300	0,301	-8,200	0,314	-48,686	0,092	0,236
1997	ZINC13888259	-10,060	0,380	-8,200	0,314	-44,599	0,013	0,236
1998	ZINC01999529	-8,730	0,242	-8,800	0,400	-47,294	0,065	0,236
1999	ZINC00538144	-9,160	0,287	-8,500	0,357	-47,199	0,064	0,236
2000	ZINC36378574	-8,890	0,259	-8,400	0,343	-49,376	0,106	0,236
2001	ZINC33820103	-9,480	0,320	-7,400	0,200	-53,574	0,187	0,236
2002	ZINC00601301	-9,220	0,293	-8,800	0,400	-44,649	0,014	0,236
2003	ZINC03796820	-7,920	0,158	-7,600	0,229	-60,399	0,320	0,236
2004	ZINC03830301	-10,540	0,430	-7,700	0,243	-45,659	0,034	0,235
2005	ZINC85536935	-8,900	0,260	-8,400	0,343	-49,258	0,104	0,235



2006	ZINC01530751	-9,040	0,274	-8,400	0,343	-48,500	0,089	0,235
2007	ZINC00004092	-9,320	0,303	-8,800	0,400	-44,055	0,002	0,235
2008	ZINC00598965	-9,720	0,345	-8,400	0,343	-44,847	0,018	0,235
2009	ZINC11677807	-8,890	0,259	-7,900	0,271	-52,946	0,175	0,235
2010	ZINC84758832	-8,250	0,192	-8,300	0,329	-53,403	0,184	0,235
2011	ZINC84394807	-7,590	0,124	-8,700	0,386	-53,986	0,195	0,235
2012	ZINC04215234	-8,300	0,197	-8,100	0,300	-54,602	0,207	0,235
2013	ZINC04213979	-8,590	0,227	-8,600	0,371	-49,372	0,106	0,235
2014	ZINC04214773	-8,740	0,243	-8,900	0,414	-46,349	0,047	0,235
2015	ZINC18279672	-7,020	0,064	-8,900	0,414	-55,517	0,225	0,235
2016	ZINC13155108	-7,990	0,165	-7,200	0,171	-62,828	0,367	0,235
2017	ZINC13319954	-6,870	0,049	-9,900	0,557	-48,962	0,098	0,235
2018	ZINC02559936	-9,800	0,353	-8,000	0,286	-47,273	0,065	0,235
2019	ZINC29325083	-8,720	0,241	-8,800	0,400	-47,154	0,063	0,235
2020	ZINC43207851	-8,430	0,211	-9,200	0,457	-45,763	0,036	0,235
2021	ZINC04214640	-9,860	0,359	-7,200	0,171	-52,822	0,173	0,235
2022	ZINC01570643	-7,940	0,160	-9,200	0,457	-48,379	0,087	0,235
2023	ZINC11592639	-9,010	0,271	-8,800	0,400	-45,601	0,033	0,235
2024	ZINC04474564	-9,200	0,291	-7,900	0,271	-51,196	0,141	0,234
2025	ZINC01842745	-8,990	0,269	-8,700	0,386	-46,429	0,049	0,234
2026	ZINC31490237	-9,490	0,321	-8,400	0,343	-45,956	0,039	0,234
2027	ZINC72266919	-8,900	0,260	-7,500	0,214	-55,711	0,229	0,234
2028	ZINC05423188	-9,800	0,353	-7,900	0,271	-47,954	0,078	0,234
2029	ZINC70466463	-9,340	0,305	-8,400	0,343	-46,706	0,054	0,234
2030	ZINC03831411	-8,750	0,244	-8,900	0,414	-46,180	0,044	0,234
2031	ZINC53204616	-8,190	0,186	-8,600	0,371	-51,376	0,145	0,234
2032	ZINC28467879	-7,750	0,140	-8,200	0,314	-56,651	0,247	0,234
2033	ZINC01849660	-9,360	0,307	-8,500	0,357	-45,843	0,037	0,234
2034	ZINC03939598	-7,980	0,164	-9,100	0,443	-48,806	0,095	0,234
2035	ZINC19632933	-9,270	0,298	-8,800	0,400	-44,109	0,004	0,234
2036	ZINC38144600	-6,490	0,009	-7,700	0,243	-67,048	0,449	0,234
2037	ZINC02007020	-9,380	0,309	-8,000	0,286	-49,400	0,106	0,234
2038	ZINC00598034	-8,790	0,248	-8,600	0,371	-48,126	0,082	0,234
2039	ZINC04217313	-9,500	0,322	-7,900	0,271	-49,467	0,108	0,234
2040	ZINC03952725	-8,340	0,201	-8,700	0,386	-49,784	0,114	0,234
2041	ZINC72129967	-7,990	0,165	-8,800	0,400	-50,914	0,136	0,234
2042	ZINC43130908	-8,440	0,212	-8,700	0,386	-49,238	0,103	0,234
2043	ZINC00602904	-8,580	0,226	-8,900	0,414	-47,020	0,060	0,234
2044	ZINC04212934	-8,410	0,209	-9,000	0,429	-47,183	0,063	0,234
2045	ZINC00403011	-8,100	0,177	-9,100	0,443	-48,101	0,081	0,234
2046	ZINC00607971	-9,210	0,292	-8,700	0,386	-45,106	0,023	0,233
2047	ZINC04211966	-9,290	0,300	-8,500	0,357	-46,143	0,043	0,233
2048	ZINC03871842	-7,440	0,108	-9,000	0,429	-52,333	0,163	0,233

2049	ZINC84758357	-8,160	0,183	-8,300	0,329	-53,624	0,188	0,233
2050	ZINC14235259	-8,670	0,236	-7,300	0,186	-58,223	0,278	0,233
2051	ZINC01996784	-7,820	0,147	-8,600	0,371	-53,192	0,180	0,233
2052	ZINC00004319	-8,330	0,200	-8,900	0,414	-48,240	0,084	0,233
2053	ZINC08214680	-8,830	0,252	-7,100	0,157	-58,784	0,289	0,233
2054	ZINC00608152	-8,460	0,214	-8,800	0,400	-48,222	0,083	0,232
2055	ZINC04215229	-7,650	0,130	-7,400	0,200	-62,837	0,367	0,232
2056	ZINC00607988	-8,600	0,228	-8,600	0,371	-48,933	0,097	0,232
2057	ZINC03830873	-8,200	0,187	-7,700	0,243	-57,684	0,267	0,232
2058	ZINC01481808	-8,490	0,217	-9,300	0,471	-44,371	0,009	0,232
2059	ZINC11592711	-8,830	0,252	-7,500	0,214	-55,746	0,230	0,232
2060	ZINC01714738	-8,480	0,216	-8,900	0,414	-47,316	0,066	0,232
2061	ZINC00538015	-8,370	0,205	-9,200	0,457	-45,688	0,034	0,232
2062	ZINC01542894	-8,610	0,229	-8,700	0,386	-48,076	0,081	0,232
2063	ZINC38300503	-7,470	0,111	-8,300	0,329	-57,100	0,256	0,232
2064	ZINC13451116	-6,760	0,037	-9,300	0,471	-53,542	0,187	0,232
2065	ZINC85536950	-6,630	0,024	-8,500	0,357	-60,112	0,315	0,232
2066	ZINC53683872	-7,140	0,077	-8,000	0,286	-61,049	0,333	0,232
2067	ZINC03609272	-9,380	0,309	-8,500	0,357	-45,401	0,029	0,232
2068	ZINC03830403	-8,520	0,220	-7,900	0,271	-54,385	0,203	0,232
2069	ZINC68057502	-6,460	0,006	-8,200	0,314	-63,182	0,374	0,232
2070	ZINC00538442	-10,440	0,420	-7,700	0,243	-45,582	0,032	0,232
2071	ZINC03830467	-7,510	0,115	-8,500	0,357	-55,345	0,222	0,231
2072	ZINC09084028	-7,920	0,158	-9,500	0,500	-45,780	0,036	0,231
2073	ZINC01843099	-7,810	0,146	-8,800	0,400	-51,509	0,147	0,231
2074	ZINC05385675	-8,740	0,243	-8,500	0,357	-48,744	0,094	0,231
2075	ZINC13451121	-6,780	0,039	-9,100	0,443	-54,797	0,211	0,231
2076	ZINC03812842	-8,780	0,247	-9,000	0,429	-44,818	0,017	0,231
2077	ZINC13900167	-8,280	0,195	-9,000	0,429	-47,472	0,069	0,231
2078	ZINC30690901	-9,120	0,282	-7,600	0,229	-53,266	0,181	0,231
2079	ZINC00607814	-9,550	0,327	-8,100	0,300	-47,285	0,065	0,231
2080	ZINC08214657	-9,260	0,297	-8,000	0,286	-49,568	0,110	0,231
2081	ZINC12406189	-8,410	0,209	-8,400	0,343	-51,159	0,141	0,231
2082	ZINC19685790	-8,870	0,256	-8,000	0,286	-51,617	0,149	0,231
2083	ZINC35567145	-8,680	0,237	-7,800	0,257	-54,102	0,198	0,231
2084	ZINC16678033	-6,800	0,042	-8,800	0,400	-56,793	0,250	0,231
2085	ZINC03946372	-7,770	0,142	-8,900	0,414	-50,867	0,135	0,230
2086	ZINC03830466	-7,630	0,128	-8,400	0,343	-55,287	0,221	0,230
2087	ZINC02014976	-7,510	0,115	-9,200	0,457	-50,034	0,119	0,230
2088	ZINC00538538	-8,750	0,244	-8,900	0,414	-45,602	0,033	0,230
2089	ZINC02598638	-7,580	0,123	-9,400	0,486	-48,173	0,083	0,230
2090	ZINC04217556	-6,960	0,058	-7,100	0,157	-68,388	0,475	0,230
2091	ZINC01531365	-7,900	0,156	-9,100	0,443	-48,637	0,092	0,230

2092	ZINC00601272	-8,770	0,246	-9,000	0,429	-44,716	0,015	0,230
2093	ZINC72266912	-8,550	0,223	-8,700	0,386	-48,096	0,081	0,230
2094	ZINC13298316	-9,400	0,312	-7,800	0,257	-50,165	0,121	0,230
2095	ZINC72266962	-6,620	0,023	-8,100	0,300	-62,813	0,367	0,230
2096	ZINC59586704	-7,080	0,071	-9,400	0,486	-50,766	0,133	0,230
2097	ZINC01552570	-8,940	0,264	-8,400	0,343	-48,178	0,083	0,230
2098	ZINC03831108	-9,340	0,305	-8,600	0,371	-44,570	0,012	0,230
2099	ZINC03783566	-8,180	0,185	-8,800	0,400	-49,291	0,104	0,230
2100	ZINC03873396	-8,800	0,249	-8,300	0,329	-49,640	0,111	0,230
2101	ZINC59587137	-8,680	0,237	-8,700	0,386	-47,308	0,066	0,229
2102	ZINC04536411	-8,690	0,238	-9,100	0,443	-44,314	0,008	0,229
2103	ZINC43197496	-8,810	0,250	-7,500	0,214	-55,417	0,223	0,229
2104	ZINC40163352	-8,700	0,239	-8,700	0,386	-47,184	0,063	0,229
2105	ZINC00073661	-7,920	0,158	-9,500	0,500	-45,470	0,030	0,229
2106	ZINC72206342	-7,680	0,133	-8,800	0,400	-51,895	0,155	0,229
2107	ZINC00538210	-8,800	0,249	-8,900	0,414	-45,159	0,024	0,229
2108	ZINC03831119	-8,060	0,172	-8,300	0,329	-53,516	0,186	0,229
2109	ZINC59587273	-8,720	0,241	-8,500	0,357	-48,517	0,089	0,229
2110	ZINC04215339	-8,050	0,171	-9,200	0,457	-46,942	0,059	0,229
2111	ZINC05763250	-8,500	0,218	-8,800	0,400	-47,475	0,069	0,229
2112	ZINC00001342	-8,400	0,208	-9,300	0,471	-44,333	0,008	0,229
2113	ZINC06021137	-8,640	0,233	-8,900	0,414	-45,976	0,040	0,229
2114	ZINC03831347	-9,440	0,316	-8,100	0,300	-47,560	0,071	0,229
2115	ZINC03831358	-9,350	0,306	-8,300	0,329	-46,552	0,051	0,229
2116	ZINC03875376	-8,660	0,235	-7,300	0,186	-57,584	0,265	0,229
2117	ZINC43772272	-8,350	0,202	-8,200	0,314	-52,620	0,169	0,229
2118	ZINC04536236	-8,340	0,201	-8,400	0,343	-51,200	0,141	0,229
2119	ZINC72266764	-8,390	0,207	-8,900	0,414	-47,257	0,065	0,229
2120	ZINC14951267	-8,110	0,178	-8,500	0,357	-51,689	0,151	0,229
2121	ZINC03831157	-8,320	0,199	-7,900	0,271	-54,974	0,215	0,228
2122	ZINC01843075	-8,920	0,262	-8,800	0,400	-45,133	0,023	0,228
2123	ZINC02019916	-9,890	0,362	-8,000	0,286	-45,827	0,037	0,228
2124	ZINC04213409	-9,380	0,309	-8,400	0,343	-45,577	0,032	0,228
2125	ZINC36268680	-7,670	0,132	-7,900	0,271	-58,388	0,281	0,228
2126	ZINC02016010	-8,360	0,204	-8,600	0,371	-49,547	0,109	0,228
2127	ZINC49888891	-8,180	0,185	-8,500	0,357	-51,239	0,142	0,228
2128	ZINC03830519	-8,710	0,240	-8,700	0,386	-46,917	0,058	0,228
2129	ZINC15848242	-9,600	0,332	-7,800	0,257	-48,766	0,094	0,228
2130	ZINC38732770	-8,000	0,166	-8,900	0,414	-49,215	0,103	0,228
2131	ZINC03830448	-7,330	0,097	-7,700	0,243	-61,613	0,344	0,228
2132	ZINC03831235	-8,540	0,222	-8,900	0,414	-46,317	0,046	0,228
2133	ZINC26892442	-8,000	0,166	-9,000	0,429	-48,450	0,088	0,228
2134	ZINC08214635	-8,260	0,193	-7,200	0,171	-60,288	0,318	0,228

2135	ZINC06031004	-8,860	0,255	-8,800	0,400	-45,310	0,027	0,227
2136	ZINC03830247	-8,420	0,210	-8,400	0,343	-50,600	0,130	0,227
2137	ZINC33953223	-9,620	0,334	-7,900	0,271	-47,858	0,076	0,227
2138	ZINC00538349	-8,620	0,231	-8,500	0,357	-48,750	0,094	0,227
2139	ZINC04215135	-8,830	0,252	-8,300	0,329	-49,095	0,100	0,227
2140	ZINC04556355	-7,140	0,077	-8,500	0,357	-56,652	0,247	0,227
2141	ZINC56898867	-6,910	0,053	-6,700	0,100	-71,111	0,528	0,227
2142	ZINC03945596	-7,970	0,163	-8,100	0,300	-55,154	0,218	0,227
2143	ZINC40163259	-8,590	0,227	-8,400	0,343	-49,627	0,111	0,227
2144	ZINC00537914	-8,190	0,186	-9,400	0,486	-44,413	0,009	0,227
2145	ZINC05514291	-9,310	0,302	-7,600	0,229	-51,660	0,150	0,227
2146	ZINC34837502	-7,420	0,106	-8,100	0,300	-58,082	0,275	0,227
2147	ZINC04097458	-9,050	0,275	-7,400	0,200	-54,511	0,206	0,227
2148	ZINC34962220	-9,200	0,291	-8,400	0,343	-46,346	0,047	0,227
2149	ZINC03831355	-8,900	0,260	-8,300	0,329	-48,679	0,092	0,227
2150	ZINC22462965	-8,570	0,225	-8,700	0,386	-47,497	0,069	0,227
2151	ZINC22010649	-8,290	0,196	-9,000	0,429	-46,780	0,055	0,227
2152	ZINC00004076	-8,790	0,248	-8,500	0,357	-47,768	0,075	0,227
2153	ZINC03916973	-8,170	0,184	-7,700	0,243	-56,946	0,253	0,227
2154	ZINC03830393	-8,860	0,255	-8,500	0,357	-47,376	0,067	0,227
2155	ZINC03831156	-9,070	0,277	-8,400	0,343	-46,972	0,059	0,226
2156	ZINC03831118	-8,520	0,220	-8,100	0,300	-52,116	0,159	0,226
2157	ZINC22034312	-8,490	0,217	-8,700	0,386	-47,834	0,076	0,226
2158	ZINC72266829	-9,030	0,273	-7,500	0,214	-53,766	0,191	0,226
2159	ZINC03831408	-9,220	0,293	-8,200	0,314	-47,604	0,071	0,226
2160	ZINC03875530	-9,770	0,350	-7,400	0,200	-50,542	0,129	0,226
2161	ZINC09294040	-8,550	0,223	-8,300	0,329	-50,444	0,127	0,226
2162	ZINC22446644	-9,370	0,308	-8,100	0,300	-47,532	0,070	0,226
2163	ZINC03830975	-9,790	0,352	-7,100	0,157	-52,637	0,169	0,226
2164	ZINC03830506	-8,490	0,217	-8,100	0,300	-52,226	0,161	0,226
2165	ZINC02032320	-8,870	0,256	-8,400	0,343	-47,988	0,079	0,226
2166	ZINC04217342	-9,880	0,361	-8,000	0,286	-45,511	0,031	0,226
2167	ZINC02015922	-8,500	0,218	-8,900	0,414	-46,267	0,045	0,226
2168	ZINC04212590	-9,140	0,285	-7,700	0,243	-51,656	0,150	0,226
2169	ZINC03874491	-8,850	0,254	-8,600	0,371	-46,573	0,051	0,226
2170	ZINC05763217	-7,870	0,153	-8,800	0,400	-50,319	0,124	0,226
2171	ZINC01532186	-9,210	0,292	-8,600	0,371	-44,624	0,014	0,226
2172	ZINC42856596	-9,230	0,294	-8,400	0,343	-45,982	0,040	0,226
2173	ZINC03830444	-8,170	0,184	-7,700	0,243	-56,789	0,250	0,226
2174	ZINC00000149	-8,220	0,189	-9,100	0,443	-46,203	0,044	0,225
2175	ZINC96941867	-8,150	0,182	-9,100	0,443	-46,577	0,051	0,225
2176	ZINC31495045	-8,340	0,201	-8,900	0,414	-47,027	0,060	0,225
2177	ZINC03873398	-8,930	0,263	-7,900	0,271	-51,222	0,142	0,225

2178	ZINC01532097	-9,160	0,287	-8,700	0,386	-44,101	0,003	0,225
2179	ZINC19632839	-8,460	0,214	-9,000	0,429	-45,628	0,033	0,225
2180	ZINC04216707	-8,320	0,199	-8,200	0,314	-52,250	0,162	0,225
2181	ZINC00601263	-9,140	0,285	-8,300	0,329	-47,126	0,062	0,225
2182	ZINC01538857	-7,830	0,148	-8,000	0,286	-56,321	0,241	0,225
2183	ZINC03943279	-6,600	0,021	-7,000	0,143	-70,228	0,511	0,225
2184	ZINC03940680	-8,640	0,233	-7,800	0,257	-53,438	0,185	0,225
2185	ZINC00538207	-9,240	0,295	-8,400	0,343	-45,797	0,036	0,225
2186	ZINC03995599	-7,580	0,123	-7,500	0,214	-61,283	0,337	0,225
2187	ZINC04215145	-9,120	0,282	-7,400	0,200	-53,788	0,192	0,225
2188	ZINC01481844	-8,970	0,267	-8,800	0,400	-44,291	0,007	0,225
2189	ZINC03871960	-7,110	0,074	-8,200	0,314	-58,622	0,286	0,225
2190	ZINC04213714	-8,720	0,241	-8,500	0,357	-47,806	0,075	0,224
2191	ZINC01530639	-8,800	0,249	-8,800	0,400	-45,171	0,024	0,224
2192	ZINC03803415	-9,570	0,329	-7,800	0,257	-48,400	0,087	0,224
2193	ZINC96941865	-9,890	0,362	-7,600	0,229	-48,157	0,082	0,224
2194	ZINC05650525	-9,140	0,285	-8,500	0,357	-45,529	0,031	0,224
2195	ZINC00608229	-9,900	0,363	-7,800	0,257	-46,613	0,052	0,224
2196	ZINC01481830	-8,100	0,177	-9,000	0,429	-47,404	0,068	0,224
2197	ZINC00596743	-8,760	0,245	-8,300	0,329	-49,023	0,099	0,224
2198	ZINC11616353	-8,990	0,269	-8,700	0,386	-44,827	0,017	0,224
2199	ZINC04097457	-7,840	0,150	-8,000	0,286	-56,113	0,237	0,224
2200	ZINC30691803	-9,380	0,309	-8,100	0,300	-47,131	0,062	0,224
2201	ZINC03830986	-8,450	0,213	-9,100	0,443	-44,748	0,016	0,224
2202	ZINC01846283	-8,300	0,197	-8,200	0,314	-52,164	0,160	0,224
2203	ZINC03830520	-8,720	0,241	-8,500	0,357	-47,697	0,073	0,224
2204	ZINC25968445	-9,120	0,282	-7,600	0,229	-52,166	0,160	0,224
2205	ZINC03813328	-8,720	0,241	-8,700	0,386	-46,214	0,044	0,224
2206	ZINC23118509	-9,570	0,329	-8,000	0,286	-46,815	0,056	0,224
2207	ZINC03831158	-6,690	0,030	-8,400	0,343	-59,261	0,298	0,224
2208	ZINC43772621	-8,280	0,195	-8,300	0,329	-51,494	0,147	0,224
2209	ZINC00968326	-7,960	0,162	-8,900	0,414	-48,788	0,094	0,224
2210	ZINC04213864	-8,740	0,243	-8,500	0,357	-47,559	0,071	0,224
2211	ZINC33965376	-7,510	0,115	-7,600	0,229	-60,713	0,326	0,223
2212	ZINC01494905	-7,380	0,102	-8,700	0,386	-53,321	0,183	0,223
2213	ZINC14823928	-9,300	0,301	-8,400	0,343	-45,252	0,026	0,223
2214	ZINC03978028	-8,880	0,258	-7,700	0,243	-52,641	0,169	0,223
2215	ZINC08214358	-8,490	0,217	-6,900	0,129	-60,606	0,324	0,223
2216	ZINC19796168	-8,590	0,227	-8,500	0,357	-48,307	0,085	0,223
2217	ZINC14114502	-7,440	0,108	-7,300	0,186	-63,267	0,376	0,223
2218	ZINC03813024	-8,900	0,260	-8,300	0,329	-48,109	0,081	0,223
2219	ZINC22463259	-9,310	0,302	-8,000	0,286	-48,107	0,081	0,223
2220	ZINC96006022	-6,530	0,013	-8,500	0,357	-59,280	0,298	0,223

2221	ZINC38141547	-9,110	0,281	-7,000	0,143	-56,521	0,245	0,223
2222	ZINC01999478	-8,350	0,202	-8,600	0,371	-48,819	0,095	0,223
2223	ZINC04216100	-9,490	0,321	-7,400	0,200	-51,548	0,148	0,223
2224	ZINC02016058	-8,910	0,261	-8,000	0,286	-50,217	0,122	0,223
2225	ZINC03830427	-6,760	0,037	-8,300	0,329	-59,487	0,302	0,223
2226	ZINC00608370	-7,680	0,133	-8,300	0,329	-54,563	0,207	0,223
2227	ZINC00403010	-8,130	0,180	-8,800	0,400	-48,480	0,088	0,223
2228	ZINC00538192	-8,490	0,217	-8,400	0,343	-49,496	0,108	0,223
2229	ZINC03882444	-9,630	0,335	-8,300	0,329	-44,129	0,004	0,223
2230	ZINC00538102	-8,410	0,209	-8,500	0,357	-49,162	0,102	0,223
2231	ZINC38612108	-8,510	0,219	-8,000	0,286	-52,301	0,163	0,223
2232	ZINC01999437	-8,840	0,253	-8,400	0,343	-47,585	0,071	0,222
2233	ZINC85540141	-9,080	0,278	-7,700	0,243	-51,409	0,145	0,222
2234	ZINC04216929	-6,620	0,023	-9,800	0,543	-49,113	0,101	0,222
2235	ZINC03839138	-8,870	0,256	-8,200	0,314	-48,851	0,096	0,222
2236	ZINC72266854	-8,600	0,228	-8,400	0,343	-48,820	0,095	0,222
2237	ZINC38144597	-9,230	0,294	-8,500	0,357	-44,713	0,015	0,222
2238	ZINC03989041	-9,120	0,282	-8,300	0,329	-46,756	0,055	0,222
2239	ZINC01999505	-9,050	0,275	-8,300	0,329	-47,126	0,062	0,222
2240	ZINC03830407	-8,090	0,175	-8,200	0,314	-52,988	0,176	0,222
2241	ZINC01546066	-7,140	0,077	-8,700	0,386	-54,372	0,203	0,222
2242	ZINC59587102	-7,590	0,124	-9,000	0,429	-49,759	0,113	0,222
2243	ZINC03813087	-8,410	0,209	-7,600	0,229	-55,665	0,228	0,222
2244	ZINC01530877	-6,990	0,061	-9,600	0,514	-48,544	0,090	0,222
2245	ZINC04212291	-7,800	0,145	-8,600	0,371	-51,556	0,148	0,222
2246	ZINC14294279	-8,020	0,168	-8,800	0,400	-48,904	0,097	0,222
2247	ZINC28712571	-8,480	0,216	-8,100	0,300	-51,587	0,149	0,222
2248	ZINC04654889	-9,120	0,282	-8,200	0,314	-47,427	0,068	0,222
2249	ZINC11592778	-8,940	0,264	-8,800	0,400	-43,942	0,000	0,221
2250	ZINC26892437	-7,970	0,163	-8,600	0,371	-50,574	0,129	0,221
2251	ZINC04213120	-8,930	0,263	-7,700	0,243	-52,049	0,158	0,221
2252	ZINC84758826	-8,770	0,246	-8,200	0,314	-49,227	0,103	0,221
2253	ZINC72266887	-6,570	0,018	-8,200	0,314	-60,962	0,331	0,221
2254	ZINC04245652	-8,910	0,261	-8,500	0,357	-46,253	0,045	0,221
2255	ZINC01866283	-8,600	0,228	-8,400	0,343	-48,641	0,092	0,221
2256	ZINC03799319	-8,550	0,223	-8,800	0,400	-45,966	0,040	0,221
2257	ZINC22463167	-9,450	0,317	-8,000	0,286	-47,036	0,060	0,221
2258	ZINC96006023	-7,290	0,092	-7,500	0,214	-62,246	0,356	0,221
2259	ZINC02015953	-7,980	0,164	-8,700	0,386	-49,701	0,112	0,221
2260	ZINC64348912	-8,210	0,188	-8,900	0,414	-46,997	0,060	0,221
2261	ZINC59586899	-8,740	0,243	-8,900	0,414	-44,142	0,004	0,220
2262	ZINC30691625	-8,590	0,227	-8,100	0,300	-50,806	0,134	0,220
2263	ZINC08214636	-8,220	0,189	-7,400	0,200	-57,924	0,272	0,220

2264	ZINC01759150	-8,730	0,242	-8,800	0,400	-44,903	0,019	0,220
2265	ZINC21984084	-7,940	0,160	-8,400	0,343	-52,044	0,158	0,220
2266	ZINC01635640	-8,350	0,202	-8,700	0,386	-47,640	0,072	0,220
2267	ZINC26892432	-9,210	0,292	-8,400	0,343	-45,234	0,025	0,220
2268	ZINC19367106	-8,450	0,213	-8,700	0,386	-47,055	0,061	0,220
2269	ZINC14879963	-7,460	0,110	-8,100	0,300	-56,734	0,249	0,220
2270	ZINC00596881	-9,070	0,277	-8,600	0,371	-44,451	0,010	0,220
2271	ZINC03831137	-8,820	0,251	-7,700	0,243	-52,388	0,164	0,220
2272	ZINC84759254	-8,690	0,238	-8,000	0,286	-50,854	0,135	0,219
2273	ZINC08551993	-9,930	0,367	-7,300	0,186	-49,317	0,105	0,219
2274	ZINC03777328	-8,150	0,182	-7,700	0,243	-55,887	0,232	0,219
2275	ZINC22027602	-8,330	0,200	-8,600	0,371	-48,309	0,085	0,219
2276	ZINC72266885	-6,450	0,005	-8,000	0,286	-62,762	0,366	0,219
2277	ZINC04213442	-6,420	0,002	-8,600	0,371	-58,498	0,283	0,219
2278	ZINC03830492	-7,880	0,154	-7,500	0,214	-58,782	0,289	0,219
2279	ZINC03780014	-7,080	0,071	-9,300	0,471	-49,806	0,114	0,219
2280	ZINC59299137	-8,810	0,250	-8,700	0,386	-44,970	0,020	0,219
2281	ZINC01999497	-8,990	0,269	-8,700	0,386	-43,987	0,001	0,219
2282	ZINC01842330	-8,280	0,195	-8,900	0,414	-46,305	0,046	0,219
2283	ZINC01650377	-8,980	0,268	-8,200	0,314	-47,703	0,073	0,219
2284	ZINC49583080	-7,160	0,079	-8,500	0,357	-55,210	0,219	0,218
2285	ZINC95932268	-8,490	0,217	-8,100	0,300	-51,040	0,138	0,218
2286	ZINC02015986	-6,860	0,048	-8,800	0,400	-54,597	0,207	0,218
2287	ZINC00599598	-8,970	0,267	-8,700	0,386	-44,046	0,002	0,218
2288	ZINC04213325	-9,120	0,282	-8,600	0,371	-43,964	0,001	0,218
2289	ZINC13547732	-7,200	0,083	-9,500	0,500	-47,596	0,071	0,218
2290	ZINC04213960	-8,820	0,251	-8,700	0,386	-44,809	0,017	0,218
2291	ZINC06482036	-8,260	0,193	-8,700	0,386	-47,801	0,075	0,218
2292	ZINC02020068	-9,140	0,285	-8,300	0,329	-46,034	0,041	0,218
2293	ZINC03831407	-8,260	0,193	-8,600	0,371	-48,523	0,089	0,218
2294	ZINC04544883	-8,330	0,200	-8,400	0,343	-49,619	0,111	0,218
2295	ZINC23118507	-9,320	0,303	-8,000	0,286	-47,265	0,065	0,218
2296	ZINC05423187	-9,540	0,326	-8,000	0,286	-46,089	0,042	0,218
2297	ZINC05374514	-8,790	0,248	-8,100	0,300	-49,357	0,106	0,218
2298	ZINC03831494	-9,090	0,279	-7,300	0,186	-53,618	0,188	0,218
2299	ZINC95564788	-8,930	0,263	-7,800	0,257	-50,792	0,133	0,218
2300	ZINC03789797	-7,780	0,143	-9,400	0,486	-45,163	0,024	0,218
2301	ZINC09293860	-8,830	0,252	-8,500	0,357	-46,167	0,044	0,218
2302	ZINC06036932	-8,830	0,252	-8,600	0,371	-45,429	0,029	0,218
2303	ZINC03813078	-9,660	0,339	-7,500	0,214	-49,070	0,100	0,218
2304	ZINC05502399	-7,280	0,091	-8,800	0,400	-52,224	0,161	0,218
2305	ZINC04217526	-8,210	0,188	-8,000	0,286	-53,135	0,179	0,218
2306	ZINC08767800	-8,210	0,188	-8,400	0,343	-50,185	0,122	0,217

2307	ZINC03871933	-7,750	0,140	-7,500	0,214	-59,255	0,298	0,217
2308	ZINC12504524	-8,490	0,217	-7,200	0,171	-57,506	0,264	0,217
2309	ZINC04217387	-7,410	0,105	-9,000	0,429	-50,039	0,119	0,217
2310	ZINC18324776	-9,110	0,281	-7,800	0,257	-49,768	0,114	0,217
2311	ZINC71325806	-9,000	0,270	-7,900	0,271	-49,614	0,111	0,217
2312	ZINC72266311	-7,300	0,093	-9,000	0,429	-50,612	0,130	0,217
2313	ZINC03989256	-9,540	0,326	-7,300	0,186	-51,111	0,140	0,217
2314	ZINC03830555	-7,440	0,108	-9,300	0,471	-47,627	0,072	0,217
2315	ZINC03861742	-8,190	0,186	-8,300	0,329	-50,963	0,137	0,217
2316	ZINC03830212	-9,360	0,307	-7,300	0,186	-52,055	0,158	0,217
2317	ZINC03813639	-8,050	0,171	-9,100	0,443	-45,814	0,037	0,217
2318	ZINC64348909	-8,010	0,167	-8,800	0,400	-48,201	0,083	0,217
2319	ZINC03785475	-8,200	0,187	-8,500	0,357	-49,390	0,106	0,217
2320	ZINC07997876	-9,540	0,326	-8,200	0,314	-44,428	0,010	0,217
2321	ZINC84758824	-8,480	0,216	-7,700	0,243	-53,767	0,191	0,217
2322	ZINC04212081	-8,330	0,200	-8,700	0,386	-47,205	0,064	0,217
2323	ZINC08101161	-7,600	0,125	-7,000	0,143	-63,591	0,382	0,217
2324	ZINC11592732	-8,560	0,224	-7,900	0,271	-51,845	0,154	0,217
2325	ZINC03830488	-8,870	0,256	-7,400	0,200	-53,858	0,193	0,216
2326	ZINC01530584	-8,390	0,207	-8,900	0,414	-45,389	0,028	0,216
2327	ZINC13986943	-9,010	0,271	-8,300	0,329	-46,477	0,050	0,216
2328	ZINC13298439	-8,490	0,217	-8,700	0,386	-46,304	0,046	0,216
2329	ZINC03982483	-8,270	0,194	-8,200	0,314	-51,134	0,140	0,216
2330	ZINC04215221	-8,380	0,206	-8,600	0,371	-47,593	0,071	0,216
2331	ZINC84758972	-8,420	0,210	-8,600	0,371	-47,367	0,067	0,216
2332	ZINC01889603	-9,260	0,297	-7,800	0,257	-48,713	0,093	0,216
2333	ZINC03775048	-9,270	0,298	-8,000	0,286	-47,160	0,063	0,216
2334	ZINC03830581	-9,060	0,276	-7,200	0,171	-54,146	0,199	0,215
2335	ZINC03830864	-8,810	0,250	-8,500	0,357	-45,925	0,039	0,215
2336	ZINC00001032	-8,320	0,199	-8,900	0,414	-45,584	0,032	0,215
2337	ZINC03782835	-8,480	0,216	-8,500	0,357	-47,660	0,073	0,215
2338	ZINC17130448	-7,860	0,152	-9,300	0,471	-45,089	0,023	0,215
2339	ZINC01530752	-8,960	0,266	-8,500	0,357	-45,092	0,023	0,215
2340	ZINC30691329	-9,400	0,312	-7,200	0,171	-52,290	0,163	0,215
2341	ZINC02040279	-9,170	0,288	-8,400	0,343	-44,694	0,015	0,215
2342	ZINC05141698	-8,570	0,225	-8,600	0,371	-46,428	0,049	0,215
2343	ZINC14951255	-8,150	0,182	-8,400	0,343	-50,130	0,121	0,215
2344	ZINC73069247	-7,720	0,137	-8,800	0,400	-49,485	0,108	0,215
2345	ZINC36046324	-8,900	0,260	-8,500	0,357	-45,385	0,028	0,215
2346	ZINC03913937	-8,320	0,199	-8,200	0,314	-50,667	0,131	0,215
2347	ZINC04213874	-8,810	0,250	-8,200	0,314	-48,031	0,080	0,215
2348	ZINC11615996	-8,090	0,175	-8,100	0,300	-52,601	0,169	0,215
2349	ZINC04214019	-8,910	0,261	-8,200	0,314	-47,478	0,069	0,215



2350	ZINC03830973	-7,670	0,132	-7,800	0,257	-57,027	0,255	0,215
2351	ZINC00600699	-9,420	0,314	-8,000	0,286	-46,202	0,044	0,215
2352	ZINC00608154	-9,230	0,294	-8,000	0,286	-47,212	0,064	0,214
2353	ZINC43200381	-8,170	0,184	-8,000	0,286	-52,869	0,174	0,214
2354	ZINC00538174	-7,530	0,117	-8,900	0,414	-49,666	0,112	0,214
2355	ZINC29124639	-6,600	0,021	-8,800	0,400	-55,365	0,222	0,214
2356	ZINC04217200	-8,740	0,243	-8,300	0,329	-47,599	0,071	0,214
2357	ZINC08143466	-10,130	0,387	-7,700	0,243	-44,582	0,013	0,214
2358	ZINC04217570	-9,480	0,320	-8,000	0,286	-45,843	0,037	0,214
2359	ZINC04215124	-7,640	0,129	-9,300	0,471	-46,108	0,042	0,214
2360	ZINC19594535	-9,150	0,286	-8,300	0,329	-45,389	0,028	0,214
2361	ZINC68204862	-7,740	0,139	-8,500	0,357	-51,447	0,146	0,214
2362	ZINC01530761	-9,270	0,298	-8,300	0,329	-44,735	0,016	0,214
2363	ZINC00601298	-8,950	0,265	-7,800	0,257	-50,115	0,120	0,214
2364	ZINC04523477	-7,290	0,092	-6,800	0,114	-66,323	0,435	0,214
2365	ZINC01546844	-7,660	0,131	-8,800	0,400	-49,624	0,111	0,214
2366	ZINC31561742	-7,340	0,098	-8,200	0,314	-55,743	0,230	0,214
2367	ZINC03830471	-7,770	0,142	-7,800	0,257	-56,385	0,242	0,214
2368	ZINC00000398	-8,980	0,268	-8,000	0,286	-48,445	0,088	0,214
2369	ZINC43202141	-7,560	0,120	-7,800	0,257	-57,495	0,264	0,214
2370	ZINC04624576	-7,600	0,125	-8,900	0,414	-49,159	0,102	0,214
2371	ZINC02019895	-8,410	0,209	-8,000	0,286	-51,441	0,146	0,213
2372	ZINC08214481	-9,280	0,299	-7,400	0,200	-51,201	0,141	0,213
2373	ZINC00537777	-7,670	0,132	-9,100	0,443	-47,304	0,066	0,213
2374	ZINC38192494	-7,810	0,146	-9,400	0,486	-44,325	0,008	0,213
2375	ZINC00005823	-7,770	0,142	-8,700	0,386	-49,682	0,112	0,213
2376	ZINC03990451	-7,280	0,091	-8,500	0,357	-53,767	0,191	0,213
2377	ZINC03785276	-9,490	0,321	-7,200	0,171	-51,514	0,147	0,213
2378	ZINC03831109	-8,990	0,269	-8,400	0,343	-45,359	0,028	0,213
2379	ZINC03830759	-9,540	0,326	-7,500	0,214	-49,030	0,099	0,213
2380	ZINC95564600	-8,160	0,183	-8,400	0,343	-49,787	0,114	0,213
2381	ZINC00643055	-8,790	0,248	-8,700	0,386	-44,215	0,006	0,213
2382	ZINC20357002	-8,490	0,217	-8,900	0,414	-44,335	0,008	0,213
2383	ZINC59587172	-7,060	0,069	-9,000	0,429	-51,234	0,142	0,213
2384	ZINC04215343	-7,690	0,134	-9,100	0,443	-47,122	0,062	0,213
2385	ZINC01869701	-9,310	0,302	-8,100	0,300	-45,815	0,037	0,213
2386	ZINC89401131	-7,770	0,142	-9,300	0,471	-45,212	0,025	0,213
2387	ZINC03789437	-8,250	0,192	-7,900	0,271	-52,936	0,175	0,213
2388	ZINC03956919	-8,100	0,177	-9,200	0,457	-44,173	0,005	0,213
2389	ZINC01846112	-8,910	0,261	-8,600	0,371	-44,247	0,006	0,213
2390	ZINC04212360	-8,510	0,219	-8,300	0,329	-48,580	0,090	0,213
2391	ZINC03830490	-8,160	0,183	-7,700	0,243	-54,852	0,212	0,213
2392	ZINC11616761	-8,530	0,221	-8,100	0,300	-49,933	0,117	0,213

2393	ZINC64526913	-7,640	0,129	-8,100	0,300	-54,687	0,209	0,213
2394	ZINC04215166	-9,480	0,320	-8,100	0,300	-44,849	0,018	0,213
2395	ZINC03830712	-8,670	0,236	-7,900	0,271	-50,645	0,131	0,213
2396	ZINC00607740	-8,820	0,251	-8,500	0,357	-45,399	0,029	0,212
2397	ZINC03812908	-8,160	0,183	-8,100	0,300	-51,852	0,154	0,212
2398	ZINC02015040	-8,400	0,208	-8,900	0,414	-44,689	0,015	0,212
2399	ZINC04214782	-8,300	0,197	-8,800	0,400	-45,958	0,039	0,212
2400	ZINC00001301	-7,500	0,114	-9,400	0,486	-45,813	0,037	0,212
2401	ZINC01530589	-8,110	0,178	-8,300	0,329	-50,631	0,130	0,212
2402	ZINC30731451	-8,710	0,240	-8,100	0,300	-48,876	0,096	0,212
2403	ZINC08034263	-9,140	0,285	-8,300	0,329	-45,071	0,022	0,212
2404	ZINC95617679	-8,180	0,185	-7,900	0,271	-53,137	0,179	0,212
2405	ZINC03776950	-7,870	0,153	-8,300	0,329	-51,835	0,154	0,212
2406	ZINC72209394	-6,660	0,027	-6,100	0,014	-74,470	0,594	0,212
2407	ZINC01491485	-7,170	0,080	-8,800	0,400	-51,885	0,155	0,212
2408	ZINC59586869	-8,480	0,216	-8,600	0,371	-46,343	0,047	0,211
2409	ZINC03830493	-8,020	0,168	-7,300	0,186	-58,346	0,280	0,211
2410	ZINC22463283	-9,130	0,283	-8,000	0,286	-47,258	0,065	0,211
2411	ZINC02019981	-8,020	0,168	-8,600	0,371	-48,773	0,094	0,211
2412	ZINC85540178	-9,030	0,273	-7,700	0,243	-49,991	0,118	0,211
2413	ZINC04676376	-7,720	0,137	-7,600	0,229	-57,722	0,268	0,211
2414	ZINC03809192	-8,220	0,189	-7,900	0,271	-52,841	0,173	0,211
2415	ZINC01529669	-7,230	0,086	-8,300	0,329	-55,189	0,219	0,211
2416	ZINC84759448	-7,000	0,062	-8,300	0,329	-56,396	0,242	0,211
2417	ZINC72266863	-8,590	0,227	-8,100	0,300	-49,362	0,106	0,211
2418	ZINC30691369	-7,810	0,146	-9,000	0,429	-46,914	0,058	0,211
2419	ZINC01542901	-8,870	0,256	-8,300	0,329	-46,389	0,048	0,211
2420	ZINC00608336	-7,500	0,114	-8,800	0,400	-50,024	0,118	0,211
2421	ZINC27086668	-8,680	0,237	-7,600	0,229	-52,536	0,167	0,211
2422	ZINC01530749	-7,880	0,154	-8,800	0,400	-47,988	0,079	0,211
2423	ZINC01530992	-9,010	0,271	-8,200	0,314	-46,360	0,047	0,211
2424	ZINC34778499	-9,770	0,350	-7,300	0,186	-48,909	0,097	0,211
2425	ZINC38144596	-8,780	0,247	-8,600	0,371	-44,623	0,014	0,211
2426	ZINC04215999	-7,480	0,112	-8,300	0,329	-53,762	0,191	0,211
2427	ZINC38300502	-6,720	0,033	-8,500	0,357	-56,352	0,241	0,211
2428	ZINC84756656	-8,470	0,215	-7,800	0,257	-52,140	0,160	0,211
2429	ZINC30691727	-9,240	0,295	-7,400	0,200	-50,957	0,137	0,211
2430	ZINC12468792	-7,500	0,114	-8,400	0,343	-52,897	0,174	0,210
2431	ZINC72266795	-7,000	0,062	-7,500	0,214	-62,184	0,355	0,210
2432	ZINC03789196	-7,340	0,098	-8,700	0,386	-51,544	0,148	0,210
2433	ZINC00601250	-8,750	0,244	-8,500	0,357	-45,477	0,030	0,210
2434	ZINC43772271	-8,000	0,166	-8,100	0,300	-52,407	0,165	0,210
2435	ZINC00608327	-8,390	0,207	-8,500	0,357	-47,365	0,067	0,210

2436	ZINC05298979	-8,600	0,228	-8,800	0,400	-44,031	0,002	0,210
2437	ZINC13220176	-6,680	0,029	-8,700	0,386	-55,016	0,216	0,210
2438	ZINC04214101	-10,090	0,383	-7,600	0,229	-44,875	0,018	0,210
2439	ZINC00005823	-7,830	0,148	-8,600	0,371	-49,590	0,110	0,210
2440	ZINC00002016	-9,080	0,278	-8,400	0,343	-44,373	0,009	0,210
2441	ZINC22446634	-9,040	0,274	-8,000	0,286	-47,511	0,070	0,210
2442	ZINC03830260	-7,960	0,162	-8,700	0,386	-48,136	0,082	0,210
2443	ZINC03806063	-7,860	0,152	-7,700	0,243	-56,000	0,235	0,210
2444	ZINC43006861	-8,010	0,167	-8,900	0,414	-46,377	0,048	0,210
2445	ZINC03831509	-9,010	0,271	-7,600	0,229	-50,582	0,129	0,210
2446	ZINC11616901	-8,270	0,194	-7,900	0,271	-52,330	0,163	0,210
2447	ZINC03830491	-8,400	0,208	-7,200	0,171	-56,768	0,250	0,210
2448	ZINC05735014	-7,430	0,107	-8,700	0,386	-50,923	0,136	0,210
2449	ZINC72267023	-8,280	0,195	-8,000	0,286	-51,526	0,148	0,210
2450	ZINC59224388	-8,940	0,264	-8,000	0,286	-47,997	0,079	0,210
2451	ZINC02019917	-9,220	0,293	-8,100	0,300	-45,760	0,036	0,209
2452	ZINC03801094	-8,710	0,240	-7,900	0,271	-49,948	0,117	0,209
2453	ZINC26143524	-7,140	0,077	-8,400	0,343	-54,652	0,208	0,209
2454	ZINC02012859	-7,820	0,147	-9,300	0,471	-44,401	0,009	0,209
2455	ZINC40741211	-7,840	0,150	-8,400	0,343	-50,877	0,135	0,209
2456	ZINC04217577	-8,580	0,226	-8,400	0,343	-46,920	0,058	0,209
2457	ZINC03831564	-8,230	0,190	-9,000	0,429	-44,374	0,009	0,209
2458	ZINC29042296	-8,130	0,180	-8,600	0,371	-47,840	0,076	0,209
2459	ZINC15449314	-8,320	0,199	-8,100	0,300	-50,494	0,128	0,209
2460	ZINC00538351	-8,710	0,240	-8,600	0,371	-44,728	0,016	0,209
2461	ZINC22862000	-7,970	0,163	-8,600	0,371	-48,677	0,092	0,209
2462	ZINC40863182	-7,130	0,076	-9,800	0,543	-44,327	0,008	0,209
2463	ZINC08035268	-6,690	0,030	-7,300	0,186	-65,019	0,410	0,209
2464	ZINC03875439	-8,940	0,264	-8,500	0,357	-44,160	0,005	0,208
2465	ZINC15848261	-8,650	0,234	-7,600	0,229	-52,314	0,163	0,208
2466	ZINC04097344	-7,960	0,162	-8,000	0,286	-53,056	0,177	0,208
2467	ZINC00188746	-8,760	0,245	-8,500	0,357	-45,103	0,023	0,208
2468	ZINC01846215	-8,130	0,180	-9,000	0,429	-44,785	0,017	0,208
2469	ZINC04474615	-8,370	0,205	-7,900	0,271	-51,581	0,149	0,208
2470	ZINC95598451	-7,840	0,150	-8,900	0,414	-47,056	0,061	0,208
2471	ZINC27308265	-8,540	0,222	-7,500	0,214	-53,596	0,188	0,208
2472	ZINC00018087	-8,420	0,210	-8,500	0,357	-46,883	0,057	0,208
2473	ZINC04217257	-9,000	0,270	-8,100	0,300	-46,714	0,054	0,208
2474	ZINC00537831	-7,870	0,153	-8,400	0,343	-50,527	0,128	0,208
2475	ZINC01693742	-9,070	0,277	-7,900	0,271	-47,787	0,075	0,208
2476	ZINC02009579	-8,510	0,219	-8,100	0,300	-49,309	0,105	0,208
2477	ZINC01481819	-7,930	0,159	-9,200	0,457	-44,306	0,007	0,208
2478	ZINC84758834	-7,200	0,083	-8,900	0,414	-50,410	0,126	0,208

2479	ZINC56898790	-9,320	0,303	-6,800	0,114	-54,500	0,205	0,208
2480	ZINC72266830	-8,420	0,210	-7,500	0,214	-54,162	0,199	0,208
2481	ZINC01547156	-7,770	0,142	-8,900	0,414	-47,340	0,066	0,208
2482	ZINC01530601	-8,780	0,247	-8,400	0,343	-45,617	0,033	0,208
2483	ZINC13760709	-8,170	0,184	-9,000	0,429	-44,461	0,010	0,208
2484	ZINC72266818	-8,440	0,212	-8,600	0,371	-45,952	0,039	0,208
2485	ZINC00897236	-9,250	0,296	-8,100	0,300	-45,292	0,027	0,207
2486	ZINC03812859	-7,830	0,148	-8,000	0,286	-53,609	0,188	0,207
2487	ZINC30691754	-8,040	0,170	-8,500	0,357	-48,810	0,095	0,207
2488	ZINC03830557	-7,210	0,084	-9,300	0,471	-47,358	0,067	0,207
2489	ZINC09084028	-7,260	0,089	-9,500	0,500	-45,610	0,033	0,207
2490	ZINC01546843	-7,320	0,096	-9,000	0,429	-48,954	0,098	0,207
2491	ZINC04213047	-8,620	0,231	-7,800	0,257	-50,822	0,134	0,207
2492	ZINC04213597	-9,450	0,317	-7,800	0,257	-46,385	0,048	0,207
2493	ZINC05647774	-9,310	0,302	-7,900	0,271	-46,391	0,048	0,207
2494	ZINC22942024	-8,490	0,217	-8,300	0,329	-47,831	0,076	0,207
2495	ZINC27641478	-9,070	0,277	-7,600	0,229	-49,874	0,116	0,207
2496	ZINC02018339	-7,970	0,163	-8,700	0,386	-47,635	0,072	0,207
2497	ZINC00538328	-8,730	0,242	-8,600	0,371	-44,307	0,007	0,207
2498	ZINC39283879	-9,380	0,309	-7,400	0,200	-49,640	0,111	0,207
2499	ZINC89630354	-7,680	0,133	-8,500	0,357	-50,612	0,130	0,207
2500	ZINC02014836	-8,270	0,194	-8,900	0,414	-44,510	0,011	0,207
2501	ZINC03806413	-7,400	0,104	-9,000	0,429	-48,407	0,087	0,206
2502	ZINC11330186	-8,530	0,221	-8,400	0,343	-46,750	0,055	0,206
2503	ZINC84756658	-8,720	0,241	-7,700	0,243	-50,870	0,135	0,206
2504	ZINC84756655	-8,560	0,224	-7,500	0,214	-53,164	0,180	0,206
2505	ZINC04217320	-8,080	0,174	-8,300	0,329	-49,845	0,115	0,206
2506	ZINC13209487	-7,390	0,103	-8,800	0,400	-49,831	0,115	0,206
2507	ZINC38664632	-8,000	0,166	-8,000	0,286	-52,430	0,165	0,206
2508	ZINC38300504	-7,500	0,114	-8,100	0,300	-54,354	0,203	0,206
2509	ZINC15111010	-8,610	0,229	-7,800	0,257	-50,605	0,130	0,205
2510	ZINC03831143	-7,870	0,153	-7,900	0,271	-53,823	0,192	0,205
2511	ZINC03798720	-7,650	0,130	-8,000	0,286	-54,254	0,201	0,205
2512	ZINC08214682	-7,700	0,135	-7,700	0,243	-56,174	0,238	0,205
2513	ZINC03830201	-8,540	0,222	-7,700	0,243	-51,667	0,150	0,205
2514	ZINC00607681	-8,300	0,197	-8,900	0,414	-44,124	0,004	0,205
2515	ZINC00005823	-7,880	0,154	-8,500	0,357	-49,301	0,104	0,205
2516	ZINC64624931	-9,380	0,309	-7,800	0,257	-46,428	0,049	0,205
2517	ZINC03813639	-7,650	0,130	-9,200	0,457	-45,372	0,028	0,205
2518	ZINC01842862	-8,340	0,201	-8,600	0,371	-46,092	0,042	0,205
2519	ZINC00968330	-7,440	0,108	-8,700	0,386	-50,164	0,121	0,205
2520	ZINC03604395	-7,610	0,126	-9,300	0,471	-44,840	0,018	0,205
2521	ZINC05821059	-9,170	0,288	-7,200	0,171	-51,940	0,156	0,205

2522	ZINC03830460	-8,230	0,190	-7,000	0,143	-58,392	0,281	0,205
2523	ZINC04213975	-7,520	0,116	-8,500	0,357	-51,154	0,140	0,205
2524	ZINC40454300	-8,450	0,213	-8,300	0,329	-47,652	0,072	0,205
2525	ZINC03874585	-8,000	0,166	-7,900	0,271	-52,993	0,176	0,205
2526	ZINC04213065	-8,000	0,166	-7,100	0,157	-58,872	0,290	0,205
2527	ZINC66251385	-7,990	0,165	-7,500	0,214	-55,983	0,234	0,205
2528	ZINC22593681	-8,120	0,179	-7,500	0,214	-55,287	0,221	0,205
2529	ZINC01846300	-8,350	0,202	-8,600	0,371	-45,956	0,039	0,204
2530	ZINC43202140	-6,940	0,056	-8,600	0,371	-53,484	0,186	0,204
2531	ZINC03913952	-6,920	0,054	-7,700	0,243	-60,187	0,316	0,204
2532	ZINC04212206	-8,500	0,218	-8,700	0,386	-44,383	0,009	0,204
2533	ZINC08214597	-8,110	0,178	-7,600	0,229	-54,552	0,206	0,204
2534	ZINC00607772	-8,520	0,220	-8,000	0,286	-49,420	0,107	0,204
2535	ZINC03974200	-7,460	0,110	-8,500	0,357	-51,400	0,145	0,204
2536	ZINC04213388	-8,130	0,180	-7,600	0,229	-54,412	0,204	0,204
2537	ZINC04215319	-8,370	0,205	-8,000	0,286	-50,187	0,122	0,204
2538	ZINC04215843	-8,800	0,249	-8,200	0,314	-46,417	0,048	0,204
2539	ZINC04102191	-8,270	0,194	-8,500	0,357	-47,037	0,060	0,204
2540	ZINC03803976	-9,450	0,317	-7,600	0,229	-47,343	0,066	0,204
2541	ZINC02015725	-8,250	0,192	-8,900	0,414	-44,168	0,005	0,204
2542	ZINC37623980	-7,010	0,063	-8,700	0,386	-52,264	0,162	0,204
2543	ZINC01542912	-8,430	0,211	-8,800	0,400	-43,938	0,000	0,204
2544	ZINC22059926	-8,550	0,223	-8,300	0,329	-46,966	0,059	0,204
2545	ZINC27640100	-9,030	0,273	-7,700	0,243	-48,808	0,095	0,204
2546	ZINC30690552	-7,030	0,065	-8,700	0,386	-52,131	0,159	0,204
2547	ZINC01532377	-8,040	0,170	-8,000	0,286	-51,873	0,154	0,203
2548	ZINC04214012	-8,560	0,224	-7,900	0,271	-49,825	0,115	0,203
2549	ZINC27308260	-8,670	0,236	-7,200	0,171	-54,374	0,203	0,203
2550	ZINC00607941	-9,510	0,323	-8,000	0,286	-43,997	0,001	0,203
2551	ZINC95564787	-8,660	0,235	-7,800	0,257	-50,002	0,118	0,203
2552	ZINC04097292	-8,890	0,259	-8,100	0,300	-46,564	0,051	0,203
2553	ZINC39283882	-9,160	0,287	-7,400	0,200	-50,263	0,123	0,203
2554	ZINC01576167	-7,610	0,126	-8,600	0,371	-49,711	0,112	0,203
2555	ZINC04214347	-8,510	0,219	-8,400	0,343	-46,370	0,047	0,203
2556	ZINC38792087	-7,130	0,076	-8,500	0,357	-52,988	0,176	0,203
2557	ZINC85537118	-8,600	0,228	-7,600	0,229	-51,745	0,152	0,203
2558	ZINC34035805	-8,320	0,199	-8,700	0,386	-45,155	0,024	0,203
2559	ZINC04216741	-8,970	0,267	-7,500	0,214	-50,499	0,128	0,203
2560	ZINC52955714	-8,300	0,197	-8,400	0,343	-47,462	0,069	0,203
2561	ZINC08552293	-9,140	0,285	-7,700	0,243	-48,112	0,081	0,203
2562	ZINC03830390	-9,020	0,272	-8,300	0,329	-44,323	0,008	0,203
2563	ZINC42835885	-9,590	0,331	-7,400	0,200	-47,876	0,077	0,203
2564	ZINC01999558	-8,430	0,211	-8,000	0,286	-49,659	0,111	0,203

2565	ZINC00005076	-8,680	0,237	-8,300	0,329	-46,116	0,043	0,203
2566	ZINC11616354	-8,540	0,222	-8,500	0,357	-45,390	0,028	0,203
2567	ZINC01999340	-8,080	0,174	-8,800	0,400	-45,636	0,033	0,203
2568	ZINC03806104	-7,580	0,123	-7,600	0,229	-57,120	0,256	0,202
2569	ZINC01530759	-7,340	0,098	-8,700	0,386	-50,305	0,124	0,202
2570	ZINC01700363	-8,550	0,223	-8,000	0,286	-48,977	0,098	0,202
2571	ZINC04215129	-8,630	0,232	-7,600	0,229	-51,476	0,147	0,202
2572	ZINC01542392	-7,120	0,075	-8,600	0,371	-52,190	0,161	0,202
2573	ZINC01536693	-8,510	0,219	-8,600	0,371	-44,730	0,016	0,202
2574	ZINC39375686	-8,280	0,195	-8,200	0,314	-48,899	0,097	0,202
2575	ZINC13540266	-7,250	0,088	-8,800	0,400	-49,992	0,118	0,202
2576	ZINC01675361	-9,330	0,304	-8,000	0,286	-44,751	0,016	0,202
2577	ZINC04214970	-8,510	0,219	-7,900	0,271	-49,867	0,115	0,202
2578	ZINC97943452	-6,560	0,017	-8,900	0,414	-52,935	0,175	0,202
2579	ZINC04217500	-8,080	0,174	-8,100	0,300	-50,689	0,131	0,202
2580	ZINC03830556	-7,010	0,063	-9,500	0,500	-46,112	0,042	0,202
2581	ZINC01843074	-7,680	0,133	-9,100	0,443	-45,463	0,030	0,202
2582	ZINC30691792	-7,400	0,104	-8,400	0,343	-52,090	0,159	0,202
2583	ZINC00599734	-7,670	0,132	-9,100	0,443	-45,500	0,031	0,202
2584	ZINC03775143	-8,360	0,204	-8,400	0,343	-46,958	0,059	0,202
2585	ZINC13209512	-7,680	0,133	-8,400	0,343	-50,578	0,129	0,202
2586	ZINC72266884	-6,910	0,053	-7,300	0,186	-62,774	0,366	0,202
2587	ZINC03830761	-9,100	0,280	-7,700	0,243	-48,128	0,082	0,202
2588	ZINC87496429	-9,590	0,331	-7,800	0,257	-44,760	0,016	0,202
2589	ZINC08143541	-8,700	0,239	-7,300	0,186	-53,188	0,180	0,202
2590	ZINC01532335	-9,000	0,270	-7,600	0,229	-49,379	0,106	0,202
2591	ZINC85540240	-7,910	0,157	-8,000	0,286	-52,247	0,162	0,201
2592	ZINC00597588	-8,790	0,248	-7,500	0,214	-51,215	0,142	0,201
2593	ZINC04194719	-6,960	0,058	-8,600	0,371	-52,903	0,174	0,201
2594	ZINC04215263	-8,110	0,178	-7,800	0,257	-52,633	0,169	0,201
2595	ZINC03831120	-8,130	0,180	-8,200	0,314	-49,578	0,110	0,201
2596	ZINC03649787	-8,370	0,205	-8,600	0,371	-45,336	0,027	0,201
2597	ZINC03800479	-9,570	0,329	-7,600	0,229	-46,269	0,046	0,201
2598	ZINC01567835	-8,390	0,207	-8,600	0,371	-45,210	0,025	0,201
2599	ZINC03831138	-8,610	0,229	-7,400	0,200	-52,855	0,173	0,201
2600	ZINC03830916	-9,290	0,300	-7,900	0,271	-45,543	0,031	0,201
2601	ZINC04214178	-7,930	0,159	-8,600	0,371	-47,660	0,073	0,201
2602	ZINC04217460	-7,600	0,125	-8,700	0,386	-48,688	0,093	0,201
2603	ZINC11617052	-7,250	0,088	-9,300	0,471	-46,133	0,043	0,201
2604	ZINC03798525	-7,370	0,101	-8,800	0,400	-49,160	0,102	0,201
2605	ZINC03830261	-8,780	0,247	-8,100	0,300	-46,752	0,055	0,201
2606	ZINC59587075	-8,890	0,259	-8,200	0,314	-45,429	0,029	0,201
2607	ZINC04097283	-8,840	0,253	-7,300	0,186	-52,308	0,163	0,201

2608	ZINC03202700	-8,010	0,167	-8,700	0,386	-46,448	0,049	0,201
2609	ZINC08214378	-8,510	0,219	-6,900	0,129	-57,001	0,254	0,201
2610	ZINC31773258	-7,970	0,163	-9,000	0,429	-44,447	0,010	0,201
2611	ZINC38192483	-9,330	0,304	-7,600	0,229	-47,469	0,069	0,201
2612	ZINC31291735	-8,120	0,179	-7,700	0,243	-53,178	0,180	0,200
2613	ZINC04213558	-8,110	0,178	-8,200	0,314	-49,545	0,109	0,200
2614	ZINC12503206	-7,190	0,082	-8,400	0,343	-52,984	0,176	0,200
2615	ZINC34035806	-7,990	0,165	-9,000	0,429	-44,272	0,007	0,200
2616	ZINC11592548	-8,770	0,246	-7,600	0,229	-50,379	0,125	0,200
2617	ZINC01530760	-7,490	0,113	-8,700	0,386	-49,111	0,101	0,200
2618	ZINC00896740	-8,880	0,258	-8,200	0,314	-45,347	0,028	0,200
2619	ZINC01536109	-6,870	0,049	-8,500	0,357	-53,869	0,193	0,200
2620	ZINC04217303	-8,960	0,266	-7,900	0,271	-47,109	0,062	0,200
2621	ZINC00608359	-8,290	0,196	-8,000	0,286	-49,951	0,117	0,200
2622	ZINC34326129	-8,220	0,189	-7,800	0,257	-51,773	0,152	0,200
2623	ZINC25693373	-6,520	0,012	-9,000	0,429	-52,035	0,158	0,200
2624	ZINC04626622	-9,100	0,280	-7,700	0,243	-47,800	0,075	0,199
2625	ZINC04216543	-7,450	0,109	-8,900	0,414	-47,793	0,075	0,199
2626	ZINC01532361	-8,330	0,200	-7,900	0,271	-50,406	0,126	0,199
2627	ZINC03831260	-8,900	0,260	-7,900	0,271	-47,359	0,067	0,199
2628	ZINC01530579	-7,190	0,082	-8,600	0,371	-51,335	0,144	0,199
2629	ZINC03977807	-7,980	0,164	-7,900	0,271	-52,242	0,162	0,199
2630	ZINC11592713	-8,840	0,253	-7,400	0,200	-51,295	0,143	0,199
2631	ZINC22861995	-8,130	0,180	-8,300	0,329	-48,468	0,088	0,199
2632	ZINC03830405	-7,680	0,133	-8,000	0,286	-53,060	0,177	0,199
2633	ZINC03830464	-8,610	0,229	-8,300	0,329	-45,884	0,038	0,199
2634	ZINC04217569	-8,830	0,252	-7,500	0,214	-50,585	0,129	0,199
2635	ZINC59586894	-7,460	0,110	-9,000	0,429	-46,844	0,057	0,198
2636	ZINC03948981	-7,190	0,082	-8,000	0,286	-55,635	0,228	0,198
2637	ZINC03830408	-7,460	0,110	-8,100	0,300	-53,450	0,185	0,198
2638	ZINC03808259	-9,650	0,337	-7,700	0,243	-44,686	0,015	0,198
2639	ZINC00608240	-8,710	0,240	-8,100	0,300	-46,758	0,055	0,198
2640	ZINC02021768	-8,400	0,208	-7,600	0,229	-52,070	0,158	0,198
2641	ZINC59586861	-8,670	0,236	-8,400	0,343	-44,734	0,016	0,198
2642	ZINC13675264	-8,300	0,197	-8,700	0,386	-44,504	0,011	0,198
2643	ZINC04214964	-8,800	0,249	-7,900	0,271	-47,695	0,073	0,198
2644	ZINC28631694	-7,470	0,111	-8,000	0,286	-54,033	0,196	0,198
2645	ZINC03873296	-8,750	0,244	-7,900	0,271	-47,928	0,078	0,198
2646	ZINC05764777	-8,470	0,215	-8,300	0,329	-46,483	0,050	0,198
2647	ZINC03831490	-7,130	0,076	-8,800	0,400	-49,962	0,117	0,198
2648	ZINC08214550	-8,340	0,201	-7,100	0,157	-55,982	0,234	0,198
2649	ZINC59587191	-7,210	0,084	-9,500	0,500	-44,347	0,008	0,197
2650	ZINC03830501	-8,870	0,256	-8,300	0,329	-44,295	0,007	0,197

2651	ZINC02008250	-8,110	0,178	-8,400	0,343	-47,617	0,072	0,197
2652	ZINC00394206	-8,170	0,184	-8,600	0,371	-45,817	0,037	0,197
2653	ZINC01530460	-8,450	0,213	-8,200	0,314	-47,247	0,065	0,197
2654	ZINC03830441	-7,730	0,138	-7,200	0,171	-58,442	0,282	0,197
2655	ZINC00066304	-8,920	0,262	-8,200	0,314	-44,730	0,016	0,197
2656	ZINC03830513	-8,000	0,166	-7,900	0,271	-51,834	0,154	0,197
2657	ZINC00008826	-8,380	0,206	-8,600	0,371	-44,652	0,014	0,197
2658	ZINC04213962	-9,020	0,272	-7,600	0,229	-48,581	0,090	0,197
2659	ZINC38300505	-7,930	0,159	-7,900	0,271	-52,183	0,160	0,197
2660	ZINC00607910	-7,500	0,114	-8,900	0,414	-47,110	0,062	0,197
2661	ZINC03952167	-7,470	0,111	-8,000	0,286	-53,870	0,193	0,197
2662	ZINC04654835	-8,670	0,236	-8,000	0,286	-47,455	0,069	0,197
2663	ZINC00897234	-9,200	0,291	-7,900	0,271	-45,346	0,028	0,197
2664	ZINC02019896	-7,590	0,124	-8,400	0,343	-50,274	0,123	0,197
2665	ZINC03830714	-8,580	0,226	-7,800	0,257	-49,383	0,106	0,197
2666	ZINC34228435	-7,790	0,144	-9,100	0,443	-44,043	0,002	0,196
2667	ZINC03872313	-9,420	0,314	-7,000	0,143	-50,756	0,133	0,196
2668	ZINC04245609	-8,970	0,267	-7,400	0,200	-50,216	0,122	0,196
2669	ZINC01541804	-7,680	0,133	-8,900	0,414	-46,075	0,042	0,196
2670	ZINC01530932	-9,000	0,270	-8,000	0,286	-45,634	0,033	0,196
2671	ZINC03831140	-7,420	0,106	-8,900	0,414	-47,451	0,068	0,196
2672	ZINC40429571	-8,340	0,201	-8,200	0,314	-47,677	0,073	0,196
2673	ZINC03778847	-7,810	0,146	-8,000	0,286	-51,954	0,156	0,196
2674	ZINC03812888	-8,300	0,197	-7,400	0,200	-53,740	0,191	0,196
2675	ZINC00597112	-8,120	0,179	-8,500	0,357	-46,613	0,052	0,196
2676	ZINC00600748	-7,630	0,128	-9,200	0,457	-44,084	0,003	0,196
2677	ZINC31297707	-8,240	0,191	-8,600	0,371	-45,235	0,025	0,196
2678	ZINC03831159	-7,510	0,115	-7,500	0,214	-57,221	0,258	0,196
2679	ZINC03831136	-8,340	0,201	-7,500	0,214	-52,776	0,172	0,196
2680	ZINC01530597	-8,870	0,256	-8,000	0,286	-46,267	0,045	0,196
2681	ZINC03941829	-7,390	0,103	-7,700	0,243	-56,362	0,242	0,196
2682	ZINC19632834	-8,270	0,194	-8,600	0,371	-45,040	0,022	0,196
2683	ZINC03812918	-9,000	0,270	-7,600	0,229	-48,482	0,089	0,196
2684	ZINC03831166	-8,730	0,242	-8,300	0,329	-44,777	0,017	0,196
2685	ZINC02019839	-7,110	0,074	-8,200	0,314	-54,168	0,199	0,196
2686	ZINC03830760	-9,110	0,281	-7,600	0,229	-47,888	0,077	0,196
2687	ZINC04216310	-7,550	0,119	-8,000	0,286	-53,276	0,182	0,196
2688	ZINC01571009	-8,890	0,259	-7,800	0,257	-47,569	0,071	0,195
2689	ZINC08214460	-7,620	0,127	-7,100	0,157	-59,500	0,303	0,195
2690	ZINC03978029	-8,830	0,252	-7,600	0,229	-49,358	0,106	0,195
2691	ZINC05978194	-8,620	0,231	-7,400	0,200	-51,936	0,156	0,195
2692	ZINC05458371	-9,130	0,283	-8,000	0,286	-44,797	0,017	0,195
2693	ZINC00004028	-8,940	0,264	-8,100	0,300	-45,073	0,022	0,195



2694	ZINC03830395	-6,970	0,059	-8,600	0,371	-51,923	0,155	0,195
2695	ZINC01530935	-7,610	0,126	-8,400	0,343	-49,970	0,117	0,195
2696	ZINC31570064	-8,310	0,198	-7,300	0,186	-54,313	0,202	0,195
2697	ZINC04213081	-7,600	0,125	-8,800	0,400	-47,074	0,061	0,195
2698	ZINC03830415	-8,000	0,166	-7,400	0,200	-55,222	0,220	0,195
2699	ZINC04215243	-8,500	0,218	-7,400	0,200	-52,550	0,168	0,195
2700	ZINC00608106	-9,320	0,303	-7,900	0,271	-44,490	0,011	0,195
2701	ZINC17426658	-7,130	0,076	-8,900	0,414	-48,836	0,095	0,195
2702	ZINC04975824	-8,740	0,243	-8,000	0,286	-46,848	0,057	0,195
2703	ZINC14090000	-7,580	0,123	-7,500	0,214	-56,705	0,248	0,195
2704	ZINC40721761	-7,730	0,138	-9,100	0,443	-44,134	0,004	0,195
2705	ZINC04214436	-8,980	0,268	-8,200	0,314	-44,070	0,003	0,195
2706	ZINC11616352	-7,990	0,165	-8,700	0,386	-45,680	0,034	0,195
2707	ZINC02522770	-9,180	0,289	-7,900	0,271	-45,196	0,025	0,195
2708	ZINC03830472	-7,590	0,124	-7,900	0,271	-53,688	0,190	0,195
2709	ZINC04626639	-9,040	0,274	-7,900	0,271	-45,935	0,039	0,195
2710	ZINC03831121	-8,800	0,249	-7,900	0,271	-47,213	0,064	0,195
2711	ZINC00000424	-7,870	0,153	-8,900	0,414	-44,826	0,017	0,195
2712	ZINC31983330	-7,720	0,137	-9,100	0,443	-44,155	0,004	0,195
2713	ZINC09230244	-8,780	0,247	-8,100	0,300	-45,842	0,037	0,195
2714	ZINC33755640	-8,690	0,238	-8,400	0,343	-44,113	0,004	0,195
2715	ZINC84759450	-6,820	0,044	-8,300	0,329	-54,821	0,212	0,195
2716	ZINC05141553	-8,150	0,182	-8,100	0,300	-49,183	0,102	0,195
2717	ZINC03813069	-8,000	0,166	-7,700	0,243	-52,919	0,175	0,195
2718	ZINC05514885	-9,020	0,272	-6,900	0,129	-53,325	0,183	0,194
2719	ZINC08101160	-7,590	0,124	-6,800	0,114	-61,694	0,345	0,194
2720	ZINC03831198	-8,870	0,256	-8,200	0,314	-44,556	0,012	0,194
2721	ZINC64526913	-7,310	0,094	-8,200	0,314	-52,886	0,174	0,194
2722	ZINC03830997	-8,490	0,217	-7,800	0,257	-49,505	0,108	0,194
2723	ZINC08214458	-7,630	0,128	-7,000	0,143	-59,970	0,312	0,194
2724	ZINC72266964	-8,520	0,220	-7,000	0,143	-55,213	0,219	0,194
2725	ZINC06069570	-9,280	0,299	-7,800	0,257	-45,269	0,026	0,194
2726	ZINC09574770	-8,270	0,194	-7,000	0,143	-56,546	0,245	0,194
2727	ZINC15848222	-8,110	0,178	-7,800	0,257	-51,520	0,148	0,194
2728	ZINC08214643	-8,690	0,238	-7,200	0,171	-52,795	0,172	0,194
2729	ZINC04213854	-8,270	0,194	-7,400	0,200	-53,545	0,187	0,194
2730	ZINC02018341	-8,280	0,195	-8,700	0,386	-43,935	0,000	0,194
2731	ZINC22065943	-8,150	0,182	-8,400	0,343	-46,832	0,056	0,194
2732	ZINC72266815	-8,290	0,196	-8,200	0,314	-47,548	0,070	0,194
2733	ZINC28248877	-9,050	0,275	-7,800	0,257	-46,422	0,048	0,194
2734	ZINC01544805	-8,610	0,229	-8,000	0,286	-47,295	0,065	0,194
2735	ZINC11726787	-7,980	0,164	-7,800	0,257	-52,128	0,159	0,194
2736	ZINC00608072	-7,860	0,152	-8,700	0,386	-46,112	0,042	0,193

2737	ZINC00002103	-7,420	0,106	-9,000	0,429	-46,252	0,045	0,193
2738	ZINC03819392	-7,360	0,100	-8,600	0,371	-49,512	0,109	0,193
2739	ZINC19313075	-8,950	0,265	-8,100	0,300	-44,675	0,015	0,193
2740	ZINC03831001	-9,090	0,279	-7,900	0,271	-45,393	0,028	0,193
2741	ZINC42893318	-9,350	0,306	-7,700	0,243	-45,459	0,030	0,193
2742	ZINC00608048	-10,190	0,394	-7,100	0,157	-45,379	0,028	0,193
2743	ZINC01545414	-8,810	0,250	-7,900	0,271	-46,867	0,057	0,193
2744	ZINC03789440	-7,250	0,088	-7,800	0,257	-55,929	0,233	0,193
2745	ZINC03650334	-7,960	0,162	-8,400	0,343	-47,719	0,074	0,193
2746	ZINC34633488	-6,620	0,023	-8,400	0,343	-54,873	0,213	0,193
2747	ZINC34114400	-9,260	0,297	-7,600	0,229	-46,614	0,052	0,193
2748	ZINC01545003	-8,790	0,248	-8,300	0,329	-43,976	0,001	0,193
2749	ZINC00896543	-9,030	0,273	-8,000	0,286	-44,892	0,019	0,193
2750	ZINC01565851	-7,610	0,126	-8,900	0,414	-45,862	0,038	0,193
2751	ZINC03831238	-8,200	0,187	-8,500	0,357	-45,608	0,033	0,192
2752	ZINC04217208	-8,250	0,192	-8,000	0,286	-49,014	0,099	0,192
2753	ZINC04213806	-8,790	0,248	-7,500	0,214	-49,802	0,114	0,192
2754	ZINC01532376	-7,790	0,144	-8,200	0,314	-49,959	0,117	0,192
2755	ZINC00000285	-8,930	0,263	-8,000	0,286	-45,335	0,027	0,192
2756	ZINC31284341	-7,570	0,121	-8,400	0,343	-49,658	0,111	0,192
2757	ZINC95564582	-8,330	0,200	-7,700	0,243	-50,738	0,132	0,192
2758	ZINC09164421	-6,520	0,012	-7,400	0,200	-62,605	0,363	0,192
2759	ZINC01999563	-7,970	0,163	-8,400	0,343	-47,504	0,070	0,192
2760	ZINC98214856	-8,770	0,246	-6,800	0,114	-54,984	0,215	0,192
2761	ZINC03786875	-8,190	0,186	-7,700	0,243	-51,466	0,147	0,192
2762	ZINC04097343	-6,410	0,001	-7,300	0,186	-63,916	0,388	0,192
2763	ZINC03872687	-7,600	0,125	-8,700	0,386	-47,266	0,065	0,192
2764	ZINC31561755	-6,510	0,011	-8,000	0,286	-58,218	0,278	0,192
2765	ZINC03623570	-8,060	0,172	-8,300	0,329	-47,730	0,074	0,192
2766	ZINC04217230	-9,070	0,277	-7,400	0,200	-48,948	0,098	0,192
2767	ZINC04214672	-8,090	0,175	-8,500	0,357	-46,093	0,042	0,192
2768	ZINC04474603	-8,730	0,242	-7,700	0,243	-48,553	0,090	0,192
2769	ZINC39283881	-9,270	0,298	-7,100	0,157	-50,064	0,119	0,191
2770	ZINC04212179	-9,210	0,292	-7,700	0,243	-45,936	0,039	0,191
2771	ZINC84758842	-7,390	0,103	-8,200	0,314	-51,985	0,157	0,191
2772	ZINC00607934	-9,310	0,302	-7,900	0,271	-43,931	0,000	0,191
2773	ZINC03831236	-7,650	0,130	-8,700	0,386	-46,918	0,058	0,191
2774	ZINC02021839	-7,490	0,113	-8,700	0,386	-47,768	0,075	0,191
2775	ZINC01704227	-7,670	0,132	-8,600	0,371	-47,514	0,070	0,191
2776	ZINC15848221	-7,960	0,162	-7,900	0,271	-51,108	0,140	0,191
2777	ZINC03830514	-7,660	0,131	-8,200	0,314	-50,484	0,127	0,191
2778	ZINC04016817	-8,750	0,244	-7,900	0,271	-46,864	0,057	0,191
2779	ZINC40454298	-8,730	0,242	-7,900	0,271	-46,971	0,059	0,191

2780	ZINC31291726	-7,120	0,075	-9,000	0,429	-47,477	0,069	0,191
2781	ZINC33838847	-8,080	0,174	-7,400	0,200	-54,098	0,198	0,191
2782	ZINC39283880	-9,200	0,291	-7,200	0,171	-49,582	0,110	0,191
2783	ZINC03830583	-9,050	0,275	-7,100	0,157	-51,111	0,140	0,191
2784	ZINC12503300	-8,820	0,251	-7,700	0,243	-47,906	0,077	0,190
2785	ZINC72266831	-8,150	0,182	-8,000	0,286	-49,266	0,104	0,190
2786	ZINC12504524	-8,280	0,195	-7,000	0,143	-55,917	0,233	0,190
2787	ZINC03830986	-7,600	0,125	-9,100	0,443	-44,111	0,004	0,190
2788	ZINC03797810	-9,180	0,289	-7,800	0,257	-45,205	0,025	0,190
2789	ZINC03830414	-7,020	0,064	-7,800	0,257	-56,745	0,249	0,190
2790	ZINC72266817	-8,480	0,216	-8,300	0,329	-45,263	0,026	0,190
2791	ZINC02019939	-8,010	0,167	-8,200	0,314	-48,499	0,089	0,190
2792	ZINC05821056	-8,540	0,222	-7,500	0,214	-50,808	0,134	0,190
2793	ZINC00002103	-7,430	0,107	-8,900	0,414	-46,442	0,049	0,190
2794	ZINC72266770	-6,650	0,026	-7,600	0,229	-60,140	0,315	0,190
2795	ZINC03775000	-8,330	0,200	-7,800	0,257	-49,680	0,112	0,190
2796	ZINC01850017	-8,600	0,228	-8,300	0,329	-44,558	0,012	0,190
2797	ZINC30691732	-7,850	0,151	-8,900	0,414	-44,148	0,004	0,190
2798	ZINC03939175	-8,450	0,213	-7,500	0,214	-51,233	0,142	0,190
2799	ZINC03814199	-8,260	0,193	-8,500	0,357	-44,887	0,019	0,190
2800	ZINC34894449	-8,860	0,255	-8,000	0,286	-45,343	0,028	0,190
2801	ZINC49625414	-6,710	0,032	-8,500	0,357	-53,150	0,179	0,190
2802	ZINC01844844	-9,130	0,283	-7,800	0,257	-45,361	0,028	0,189
2803	ZINC01843003	-6,700	0,031	-8,600	0,371	-52,463	0,166	0,189
2804	ZINC03782486	-8,320	0,199	-7,400	0,200	-52,622	0,169	0,189
2805	ZINC05442135	-8,260	0,193	-8,000	0,286	-48,495	0,089	0,189
2806	ZINC03831572	-8,510	0,219	-7,900	0,271	-47,890	0,077	0,189
2807	ZINC00000582	-9,060	0,276	-8,000	0,286	-44,213	0,006	0,189
2808	ZINC08575811	-8,330	0,200	-8,500	0,357	-44,415	0,009	0,189
2809	ZINC01845185	-7,710	0,136	-9,000	0,429	-43,997	0,001	0,189
2810	ZINC33865799	-8,520	0,220	-8,200	0,314	-45,533	0,031	0,189
2811	ZINC03831167	-8,190	0,186	-8,400	0,343	-45,822	0,037	0,189
2812	ZINC72266758	-9,220	0,293	-7,900	0,271	-43,994	0,001	0,189
2813	ZINC31291729	-7,580	0,123	-8,800	0,400	-46,132	0,043	0,188
2814	ZINC00537807	-7,840	0,150	-8,900	0,414	-44,000	0,001	0,188
2815	ZINC00896449	-9,180	0,289	-7,200	0,171	-49,334	0,105	0,188
2816	ZINC09213043	-8,840	0,253	-7,900	0,271	-45,980	0,040	0,188
2817	ZINC00601249	-8,830	0,252	-8,000	0,286	-45,296	0,027	0,188
2818	ZINC08214467	-8,250	0,192	-7,500	0,214	-52,071	0,158	0,188
2819	ZINC22861991	-7,970	0,163	-8,200	0,314	-48,419	0,087	0,188
2820	ZINC03830487	-8,010	0,167	-7,800	0,257	-51,140	0,140	0,188
2821	ZINC71325805	-8,700	0,239	-7,900	0,271	-46,704	0,054	0,188
2822	ZINC22861998	-7,780	0,143	-8,500	0,357	-47,193	0,063	0,188

2823	ZINC01846145	-8,570	0,225	-8,100	0,300	-45,900	0,038	0,188
2824	ZINC03830202	-8,520	0,220	-7,400	0,200	-51,294	0,143	0,188
2825	ZINC00016154	-7,850	0,151	-8,800	0,400	-44,583	0,013	0,188
2826	ZINC01618702	-6,420	0,002	-8,500	0,357	-54,421	0,204	0,188
2827	ZINC04213280	-7,970	0,163	-7,800	0,257	-51,282	0,143	0,188
2828	ZINC01844846	-8,330	0,200	-8,100	0,300	-47,142	0,062	0,188
2829	ZINC01849661	-7,900	0,156	-8,800	0,400	-44,291	0,007	0,188
2830	ZINC01529186	-8,480	0,216	-8,100	0,300	-46,319	0,046	0,187
2831	ZINC04214649	-8,800	0,249	-8,000	0,286	-45,343	0,028	0,187
2832	ZINC03830580	-8,860	0,255	-7,200	0,171	-50,894	0,135	0,187
2833	ZINC08214369	-9,100	0,280	-6,900	0,129	-51,814	0,153	0,187
2834	ZINC56897612	-8,640	0,233	-6,700	0,100	-55,729	0,229	0,187
2835	ZINC22059930	-8,730	0,242	-7,800	0,257	-47,157	0,063	0,187
2836	ZINC30691787	-8,310	0,198	-8,500	0,357	-44,242	0,006	0,187
2837	ZINC00601255	-8,390	0,207	-7,600	0,229	-50,429	0,126	0,187
2838	ZINC06852897	-8,510	0,219	-7,400	0,200	-51,252	0,142	0,187
2839	ZINC26403974	-8,360	0,204	-8,200	0,314	-46,157	0,043	0,187
2840	ZINC53084692	-8,210	0,188	-8,600	0,371	-43,991	0,001	0,187
2841	ZINC04393164	-6,540	0,015	-7,600	0,229	-60,262	0,317	0,187
2842	ZINC03830469	-6,860	0,048	-7,600	0,229	-58,542	0,284	0,187
2843	ZINC00538552	-8,970	0,267	-7,400	0,200	-48,729	0,093	0,187
2844	ZINC03830416	-6,930	0,055	-7,900	0,271	-55,948	0,234	0,187
2845	ZINC59586892	-8,420	0,210	-8,100	0,300	-46,511	0,050	0,187
2846	ZINC09574677	-8,200	0,187	-8,300	0,329	-46,189	0,044	0,186
2847	ZINC03831570	-7,740	0,139	-7,800	0,257	-52,317	0,163	0,186
2848	ZINC05751319	-7,560	0,120	-8,400	0,343	-48,862	0,096	0,186
2849	ZINC03830509	-8,290	0,196	-7,900	0,271	-48,634	0,091	0,186
2850	ZINC04102192	-8,010	0,167	-8,600	0,371	-44,983	0,021	0,186
2851	ZINC00538042	-9,090	0,279	-7,700	0,243	-45,800	0,036	0,186
2852	ZINC53229452	-7,970	0,163	-8,300	0,329	-47,347	0,066	0,186
2853	ZINC03812925	-8,190	0,186	-7,500	0,214	-52,051	0,158	0,186
2854	ZINC04626804	-8,460	0,214	-8,400	0,343	-43,991	0,001	0,186
2855	ZINC43006859	-7,810	0,146	-8,500	0,357	-46,718	0,054	0,186
2856	ZINC00200489	-8,790	0,248	-7,900	0,271	-45,874	0,038	0,186
2857	ZINC03966291	-9,410	0,313	-7,700	0,243	-44,027	0,002	0,186
2858	ZINC35653009	-8,560	0,224	-8,200	0,314	-44,886	0,019	0,186
2859	ZINC26186622	-8,270	0,194	-8,100	0,300	-47,163	0,063	0,186
2860	ZINC03830713	-8,810	0,250	-7,300	0,186	-50,139	0,121	0,186
2861	ZINC19319125	-9,800	0,353	-6,900	0,129	-47,767	0,075	0,185
2862	ZINC00608204	-7,270	0,090	-8,800	0,400	-47,316	0,066	0,185
2863	ZINC33650026	-8,130	0,180	-8,300	0,329	-46,395	0,048	0,185
2864	ZINC03830842	-8,690	0,238	-8,100	0,300	-44,867	0,018	0,185
2865	ZINC84758135	-8,760	0,245	-7,400	0,200	-49,638	0,111	0,185

2866	ZINC04217562	-8,050	0,171	-8,400	0,343	-46,079	0,042	0,185
2867	ZINC02001884	-7,590	0,124	-8,000	0,286	-51,449	0,146	0,185
2868	ZINC00599915	-7,900	0,156	-7,600	0,229	-52,732	0,171	0,185
2869	ZINC04211998	-9,110	0,281	-7,400	0,200	-47,711	0,074	0,185
2870	ZINC33854766	-8,110	0,178	-8,300	0,329	-46,426	0,049	0,185
2871	ZINC03830516	-8,540	0,222	-8,300	0,329	-44,123	0,004	0,185
2872	ZINC03647660	-8,340	0,201	-7,900	0,271	-48,122	0,082	0,185
2873	ZINC03831203	-6,740	0,035	-8,000	0,286	-55,929	0,233	0,185
2874	ZINC72266816	-8,100	0,177	-8,200	0,314	-47,174	0,063	0,185
2875	ZINC03830473	-7,920	0,158	-7,700	0,243	-51,811	0,153	0,185
2876	ZINC26026420	-6,860	0,048	-8,000	0,286	-55,267	0,220	0,185
2877	ZINC38609700	-7,350	0,099	-8,700	0,386	-47,499	0,069	0,185
2878	ZINC04098336	-9,110	0,281	-7,800	0,257	-44,690	0,015	0,184
2879	ZINC03796407	-8,010	0,167	-7,400	0,200	-53,505	0,186	0,184
2880	ZINC38141548	-8,550	0,223	-6,800	0,114	-55,021	0,216	0,184
2881	ZINC03831141	-7,680	0,133	-8,200	0,314	-49,356	0,106	0,184
2882	ZINC01494627	-7,360	0,100	-8,300	0,329	-50,323	0,124	0,184
2883	ZINC03874934	-7,070	0,070	-8,000	0,286	-54,075	0,197	0,184
2884	ZINC19865692	-8,340	0,201	-8,400	0,343	-44,345	0,008	0,184
2885	ZINC00001376	-8,250	0,192	-7,900	0,271	-48,497	0,089	0,184
2886	ZINC00004088	-7,970	0,163	-8,700	0,386	-44,108	0,004	0,184
2887	ZINC95564581	-8,190	0,186	-7,900	0,271	-48,795	0,095	0,184
2888	ZINC03830459	-8,000	0,166	-6,600	0,086	-59,360	0,300	0,184
2889	ZINC00000745	-7,340	0,098	-9,100	0,443	-44,492	0,011	0,184
2890	ZINC03830484	-7,830	0,148	-8,000	0,286	-49,954	0,117	0,184
2891	ZINC31291794	-7,940	0,160	-8,200	0,314	-47,892	0,077	0,184
2892	ZINC22441789	-7,860	0,152	-7,600	0,229	-52,714	0,171	0,184
2893	ZINC01532351	-7,800	0,145	-8,200	0,314	-48,612	0,091	0,184
2894	ZINC00000856	-7,710	0,136	-8,300	0,329	-48,356	0,086	0,184
2895	ZINC14209416	-8,600	0,228	-8,200	0,314	-44,334	0,008	0,184
2896	ZINC04214336	-8,430	0,211	-7,700	0,243	-48,907	0,097	0,183
2897	ZINC17107946	-8,230	0,190	-6,900	0,129	-55,839	0,231	0,183
2898	ZINC01846070	-7,690	0,134	-8,900	0,414	-44,016	0,002	0,183
2899	ZINC01842868	-8,280	0,195	-8,300	0,329	-45,271	0,026	0,183
2900	ZINC03830558	-7,220	0,085	-8,600	0,371	-48,725	0,093	0,183
2901	ZINC15848260	-8,650	0,234	-6,900	0,129	-53,579	0,188	0,183
2902	ZINC03830457	-7,740	0,139	-7,000	0,143	-57,697	0,268	0,183
2903	ZINC00001135	-9,460	0,318	-7,500	0,214	-44,831	0,018	0,183
2904	ZINC72266909	-6,850	0,047	-7,000	0,143	-62,437	0,360	0,183
2905	ZINC03799072	-6,860	0,048	-7,700	0,243	-57,231	0,259	0,183
2906	ZINC00538068	-8,960	0,266	-7,700	0,243	-45,973	0,040	0,183
2907	ZINC43219582	-8,070	0,173	-7,000	0,143	-55,865	0,232	0,183
2908	ZINC64633719	-7,450	0,109	-7,600	0,229	-54,764	0,211	0,183

2909	ZINC00001166	-7,730	0,138	-8,800	0,400	-44,444	0,010	0,183
2910	ZINC00601249	-8,710	0,240	-7,900	0,271	-45,793	0,036	0,183
2911	ZINC14880004	-8,690	0,238	-7,200	0,171	-51,043	0,138	0,183
2912	ZINC05820943	-8,850	0,254	-7,300	0,186	-49,441	0,107	0,182
2913	ZINC02040878	-8,830	0,252	-7,500	0,214	-48,062	0,080	0,182
2914	ZINC84756660	-7,790	0,144	-7,900	0,271	-50,672	0,131	0,182
2915	ZINC03831402	-8,320	0,199	-8,200	0,314	-45,611	0,033	0,182
2916	ZINC03630870	-8,850	0,254	-8,000	0,286	-44,241	0,006	0,182
2917	ZINC00000677	-7,180	0,081	-8,800	0,400	-47,279	0,065	0,182
2918	ZINC12504524	-8,220	0,189	-7,100	0,157	-54,198	0,200	0,182
2919	ZINC19796087	-7,290	0,092	-8,000	0,286	-52,540	0,167	0,182
2920	ZINC03831201	-6,510	0,011	-8,400	0,343	-53,762	0,191	0,182
2921	ZINC04215275	-7,360	0,100	-7,500	0,214	-55,811	0,231	0,182
2922	ZINC59586736	-7,520	0,116	-8,300	0,329	-49,072	0,100	0,182
2923	ZINC03871967	-7,700	0,135	-8,100	0,300	-49,537	0,109	0,181
2924	ZINC03830995	-8,400	0,208	-7,300	0,186	-51,677	0,151	0,181
2925	ZINC01999280	-7,090	0,072	-8,500	0,357	-49,851	0,115	0,181
2926	ZINC03831520	-8,390	0,207	-7,700	0,243	-48,778	0,094	0,181
2927	ZINC22860107	-9,460	0,318	-7,100	0,157	-47,461	0,069	0,181
2928	ZINC01550769	-7,550	0,119	-8,300	0,329	-48,836	0,095	0,181
2929	ZINC03830382	-8,550	0,223	-7,300	0,186	-50,827	0,134	0,181
2930	ZINC00537874	-7,960	0,162	-8,000	0,286	-48,833	0,095	0,181
2931	ZINC02040879	-8,580	0,226	-7,500	0,214	-49,181	0,102	0,181
2932	ZINC34016204	-8,320	0,199	-7,800	0,257	-48,362	0,086	0,181
2933	ZINC31298029	-7,620	0,127	-8,000	0,286	-50,617	0,130	0,181
2934	ZINC22001641	-8,740	0,243	-6,900	0,129	-52,690	0,170	0,181
2935	ZINC00000919	-8,300	0,197	-7,500	0,214	-50,590	0,129	0,180
2936	ZINC36378575	-7,920	0,158	-8,300	0,329	-46,738	0,055	0,180
2937	ZINC02018342	-7,710	0,136	-8,600	0,371	-45,648	0,033	0,180
2938	ZINC11592715	-8,570	0,225	-8,200	0,314	-43,991	0,001	0,180
2939	ZINC30690809	-8,520	0,220	-7,700	0,243	-47,925	0,078	0,180
2940	ZINC02021769	-8,480	0,216	-7,600	0,229	-48,850	0,096	0,180
2941	ZINC72266939	-7,300	0,093	-7,400	0,200	-56,619	0,247	0,180
2942	ZINC03871832	-7,550	0,119	-7,500	0,214	-54,524	0,206	0,180
2943	ZINC04214464	-8,320	0,199	-8,200	0,314	-45,249	0,026	0,180
2944	ZINC04468778	-6,790	0,040	-8,000	0,286	-54,893	0,213	0,180
2945	ZINC34064386	-8,390	0,207	-7,300	0,186	-51,476	0,147	0,180
2946	ZINC01583637	-7,170	0,080	-8,000	0,286	-52,845	0,173	0,180
2947	ZINC02003425	-8,090	0,175	-7,700	0,243	-50,132	0,121	0,180
2948	ZINC03830200	-8,330	0,200	-7,500	0,214	-50,320	0,124	0,180
2949	ZINC49769733	-6,410	0,001	-7,800	0,257	-58,351	0,280	0,179
2950	ZINC01842686	-8,910	0,261	-7,600	0,229	-46,461	0,049	0,179
2951	ZINC38139853	-8,050	0,171	-7,200	0,171	-53,993	0,196	0,179

2952	ZINC04217386	-7,070	0,070	-9,100	0,443	-45,258	0,026	0,179
2953	ZINC00156792	-8,400	0,208	-7,700	0,243	-48,426	0,087	0,179
2954	ZINC02021380	-8,020	0,168	-7,900	0,271	-48,962	0,098	0,179
2955	ZINC03803921	-7,990	0,165	-8,500	0,357	-44,686	0,015	0,179
2956	ZINC72103632	-8,620	0,231	-7,700	0,243	-47,197	0,064	0,179
2957	ZINC05141554	-7,800	0,145	-8,100	0,300	-48,638	0,092	0,179
2958	ZINC03875039	-8,390	0,207	-7,900	0,271	-46,955	0,059	0,179
2959	ZINC33955170	-8,980	0,268	-7,000	0,143	-50,412	0,126	0,179
2960	ZINC03830750	-7,740	0,139	-8,400	0,343	-46,746	0,055	0,179
2961	ZINC03830865	-9,370	0,308	-7,300	0,186	-46,121	0,043	0,179
2962	ZINC30730317	-8,780	0,247	-7,200	0,171	-49,977	0,118	0,179
2963	ZINC11565587	-6,600	0,021	-9,200	0,457	-46,903	0,058	0,179
2964	ZINC03830512	-7,970	0,163	-7,800	0,257	-49,873	0,116	0,179
2965	ZINC03830406	-7,300	0,093	-8,000	0,286	-51,968	0,156	0,178
2966	ZINC31490235	-8,370	0,205	-8,200	0,314	-44,779	0,017	0,178
2967	ZINC02019983	-7,250	0,088	-8,400	0,343	-49,291	0,104	0,178
2968	ZINC08101162	-7,230	0,086	-6,800	0,114	-61,148	0,335	0,178
2969	ZINC72266246	-7,210	0,084	-7,900	0,271	-53,148	0,179	0,178
2970	ZINC59586745	-6,580	0,019	-7,900	0,271	-56,469	0,244	0,178
2971	ZINC03830470	-7,480	0,112	-7,400	0,200	-55,328	0,222	0,178
2972	ZINC04211961	-8,330	0,200	-7,800	0,257	-47,844	0,076	0,178
2973	ZINC03830413	-6,930	0,055	-7,700	0,243	-56,041	0,235	0,178
2974	ZINC00608049	-8,310	0,198	-7,700	0,243	-48,650	0,092	0,178
2975	ZINC00640548	-8,730	0,242	-7,500	0,214	-47,872	0,077	0,178
2976	ZINC35307932	-8,880	0,258	-7,600	0,229	-46,335	0,047	0,178
2977	ZINC03831357	-8,220	0,189	-8,400	0,343	-43,976	0,001	0,178
2978	ZINC20230700	-6,550	0,016	-8,100	0,300	-55,103	0,217	0,178
2979	ZINC01846088	-8,750	0,244	-7,400	0,200	-48,474	0,088	0,177
2980	ZINC01851122	-8,370	0,205	-7,900	0,271	-46,800	0,056	0,177
2981	ZINC15848219	-8,280	0,195	-7,600	0,229	-49,476	0,108	0,177
2982	ZINC95564789	-8,410	0,209	-7,800	0,257	-47,309	0,066	0,177
2983	ZINC00001292	-7,940	0,160	-7,900	0,271	-49,084	0,100	0,177
2984	ZINC15111061	-8,190	0,186	-7,400	0,200	-51,423	0,146	0,177
2985	ZINC08214517	-8,500	0,218	-7,000	0,143	-52,676	0,170	0,177
2986	ZINC03831024	-7,490	0,113	-7,800	0,257	-52,184	0,160	0,177
2987	ZINC04212343	-8,620	0,231	-7,500	0,214	-48,349	0,086	0,177
2988	ZINC00597057	-8,110	0,178	-7,800	0,257	-48,851	0,096	0,177
2989	ZINC01530939	-8,150	0,182	-7,700	0,243	-49,373	0,106	0,177
2990	ZINC00002082	-7,300	0,093	-8,900	0,414	-45,091	0,023	0,177
2991	ZINC49593130	-7,960	0,162	-7,400	0,200	-52,582	0,168	0,177
2992	ZINC00001473	-7,120	0,075	-9,100	0,443	-44,572	0,013	0,177
2993	ZINC12503303	-8,540	0,222	-7,700	0,243	-47,270	0,065	0,177
2994	ZINC02032151	-7,390	0,103	-8,800	0,400	-45,327	0,027	0,177

2995	ZINC03780173	-8,660	0,235	-7,400	0,200	-48,829	0,095	0,177
2996	ZINC03831346	-8,820	0,251	-7,700	0,243	-45,761	0,036	0,177
2997	ZINC08552290	-8,320	0,199	-7,600	0,229	-49,157	0,102	0,177
2998	ZINC03977822	-8,180	0,185	-8,400	0,343	-44,023	0,002	0,177
2999	ZINC04654847	-8,410	0,209	-7,500	0,214	-49,396	0,106	0,176
3000	ZINC18046611	-7,960	0,162	-8,400	0,343	-45,184	0,024	0,176
3001	ZINC03783932	-7,980	0,164	-8,400	0,343	-45,076	0,022	0,176
3002	ZINC72266856	-9,240	0,295	-7,400	0,200	-45,685	0,034	0,176
3003	ZINC02007885	-7,480	0,112	-8,500	0,357	-46,981	0,059	0,176
3004	ZINC31539999	-7,000	0,062	-7,600	0,229	-56,159	0,238	0,176
3005	ZINC01530654	-8,390	0,207	-7,800	0,257	-47,244	0,064	0,176
3006	ZINC03830392	-8,240	0,191	-8,200	0,314	-45,103	0,023	0,176
3007	ZINC22860096	-9,140	0,285	-7,300	0,186	-46,905	0,058	0,176
3008	ZINC15848220	-8,100	0,177	-7,600	0,229	-50,246	0,123	0,176
3009	ZINC03813088	-8,470	0,215	-7,300	0,186	-50,443	0,127	0,176
3010	ZINC03097990	-8,490	0,217	-7,500	0,214	-48,864	0,096	0,176
3011	ZINC13207386	-6,820	0,044	-8,300	0,329	-51,904	0,155	0,176
3012	ZINC08214653	-7,550	0,119	-6,700	0,100	-59,759	0,308	0,176
3013	ZINC04217494	-7,160	0,079	-7,100	0,157	-58,896	0,291	0,176
3014	ZINC31291792	-9,490	0,321	-6,900	0,129	-47,916	0,078	0,176
3015	ZINC04215231	-7,770	0,142	-7,500	0,214	-52,694	0,170	0,176
3016	ZINC01530583	-8,340	0,201	-7,800	0,257	-47,418	0,068	0,175
3017	ZINC03830465	-8,180	0,185	-7,800	0,257	-48,271	0,084	0,175
3018	ZINC33940853	-6,960	0,058	-8,300	0,329	-51,092	0,139	0,175
3019	ZINC66251386	-7,360	0,100	-7,900	0,271	-51,893	0,155	0,175
3020	ZINC09212278	-7,890	0,155	-8,500	0,357	-44,642	0,014	0,175
3021	ZINC11616355	-7,790	0,144	-8,500	0,357	-45,173	0,024	0,175
3022	ZINC05847577	-7,970	0,163	-8,000	0,286	-47,856	0,076	0,175
3023	ZINC63298074	-7,910	0,157	-7,100	0,157	-54,792	0,211	0,175
3024	ZINC15111008	-8,380	0,206	-7,500	0,214	-49,337	0,105	0,175
3025	ZINC03830510	-7,540	0,118	-8,300	0,329	-47,940	0,078	0,175
3026	ZINC03830411	-6,760	0,037	-8,300	0,329	-52,100	0,159	0,175
3027	ZINC02010639	-9,050	0,275	-7,500	0,214	-45,734	0,035	0,175
3028	ZINC00538089	-7,640	0,129	-8,400	0,343	-46,647	0,053	0,175
3029	ZINC52981502	-8,040	0,170	-7,000	0,143	-54,796	0,211	0,175
3030	ZINC00057278	-7,550	0,119	-8,500	0,357	-46,383	0,048	0,175
3031	ZINC49625988	-6,770	0,038	-8,000	0,286	-54,220	0,200	0,175
3032	ZINC03830379	-8,360	0,204	-7,300	0,186	-50,859	0,135	0,175
3033	ZINC67957558	-8,190	0,186	-7,300	0,186	-51,766	0,152	0,175
3034	ZINC27641461	-8,610	0,229	-7,100	0,157	-50,986	0,137	0,175
3035	ZINC08101062	-7,730	0,138	-8,300	0,329	-46,815	0,056	0,174
3036	ZINC04212261	-8,070	0,173	-8,200	0,314	-45,720	0,035	0,174
3037	ZINC14210876	-7,890	0,155	-7,300	0,186	-53,282	0,182	0,174



3038	ZINC14234780	-8,390	0,207	-7,200	0,171	-51,312	0,144	0,174
3039	ZINC05512692	-8,020	0,168	-7,500	0,214	-51,078	0,139	0,174
3040	ZINC00600360	-7,440	0,108	-8,300	0,329	-48,289	0,085	0,174
3041	ZINC08551996	-8,990	0,269	-7,000	0,143	-49,560	0,109	0,174
3042	ZINC04214775	-6,520	0,012	-9,400	0,486	-45,114	0,023	0,174
3043	ZINC03830971	-7,680	0,133	-8,600	0,371	-44,793	0,017	0,174
3044	ZINC38825822	-7,640	0,129	-8,100	0,300	-48,679	0,092	0,174
3045	ZINC29319828	-7,570	0,121	-8,100	0,300	-49,052	0,100	0,174
3046	ZINC38190907	-8,720	0,241	-7,300	0,186	-48,783	0,094	0,174
3047	ZINC31539986	-6,820	0,044	-7,600	0,229	-56,726	0,249	0,174
3048	ZINC04214462	-8,580	0,226	-7,400	0,200	-48,787	0,094	0,174
3049	ZINC53682936	-7,250	0,088	-7,600	0,229	-54,422	0,204	0,174
3050	ZINC03871995	-7,970	0,163	-7,500	0,214	-51,284	0,143	0,173
3051	ZINC19203852	-7,890	0,155	-8,200	0,314	-46,558	0,051	0,173
3052	ZINC00005986	-8,330	0,200	-8,200	0,314	-44,206	0,005	0,173
3053	ZINC03812898	-8,060	0,172	-7,700	0,243	-49,304	0,104	0,173
3054	ZINC03830174	-7,790	0,144	-8,400	0,343	-45,598	0,032	0,173
3055	ZINC00968328	-6,860	0,048	-8,600	0,371	-49,093	0,100	0,173
3056	ZINC03873374	-6,980	0,060	-9,100	0,443	-44,771	0,016	0,173
3057	ZINC56898865	-8,070	0,173	-7,500	0,214	-50,694	0,132	0,173
3058	ZINC05518903	-8,270	0,194	-7,900	0,271	-46,675	0,053	0,173
3059	ZINC43154039	-8,220	0,189	-8,200	0,314	-44,718	0,015	0,173
3060	ZINC22463320	-8,360	0,204	-7,400	0,200	-49,850	0,115	0,173
3061	ZINC38141550	-8,800	0,249	-6,600	0,086	-53,379	0,184	0,173
3062	ZINC38190908	-8,730	0,242	-7,400	0,200	-47,843	0,076	0,173
3063	ZINC01542931	-6,750	0,036	-8,000	0,286	-53,997	0,196	0,173
3064	ZINC06852908	-7,980	0,164	-7,500	0,214	-51,090	0,139	0,173
3065	ZINC02019951	-7,920	0,158	-8,200	0,314	-46,258	0,045	0,172
3066	ZINC01530594	-8,150	0,182	-8,000	0,286	-46,491	0,050	0,172
3067	ZINC01596412	-7,880	0,154	-7,700	0,243	-50,136	0,121	0,172
3068	ZINC04212836	-7,970	0,163	-7,700	0,243	-49,637	0,111	0,172
3069	ZINC01530861	-8,920	0,262	-7,600	0,229	-45,284	0,026	0,172
3070	ZINC05352932	-8,700	0,239	-7,800	0,257	-44,977	0,020	0,172
3071	ZINC01530596	-8,350	0,202	-7,900	0,271	-46,093	0,042	0,172
3072	ZINC71318230	-7,370	0,101	-8,200	0,314	-49,117	0,101	0,172
3073	ZINC00967922	-8,730	0,242	-7,500	0,214	-46,988	0,059	0,172
3074	ZINC72266846	-7,350	0,099	-8,900	0,414	-44,068	0,003	0,172
3075	ZINC95565006	-8,300	0,197	-7,200	0,171	-51,479	0,147	0,172
3076	ZINC13907153	-7,430	0,107	-7,200	0,171	-56,127	0,237	0,172
3077	ZINC03830474	-7,160	0,079	-7,800	0,257	-53,151	0,179	0,172
3078	ZINC03830489	-7,990	0,165	-7,100	0,157	-53,854	0,193	0,172
3079	ZINC03922770	-7,260	0,089	-8,300	0,329	-48,920	0,097	0,172
3080	ZINC04468780	-7,650	0,130	-7,600	0,229	-51,979	0,156	0,172

3081	ZINC84758960	-7,610	0,126	-8,500	0,357	-45,575	0,032	0,172
3082	ZINC11616140	-7,250	0,088	-7,300	0,186	-56,307	0,241	0,172
3083	ZINC04217736	-8,550	0,223	-7,200	0,171	-50,095	0,120	0,172
3084	ZINC04216325	-7,650	0,130	-7,600	0,229	-51,961	0,156	0,171
3085	ZINC03780994	-8,070	0,173	-7,800	0,257	-48,239	0,084	0,171
3086	ZINC05514225	-8,380	0,206	-7,600	0,229	-48,026	0,080	0,171
3087	ZINC03831398	-8,160	0,183	-8,000	0,286	-46,238	0,045	0,171
3088	ZINC04216409	-7,130	0,076	-7,300	0,186	-56,876	0,252	0,171
3089	ZINC03812851	-7,250	0,088	-8,600	0,371	-46,674	0,053	0,171
3090	ZINC00389149	-8,750	0,244	-7,600	0,229	-46,005	0,040	0,171
3091	ZINC03831571	-7,710	0,136	-7,600	0,229	-51,550	0,148	0,171
3092	ZINC02039262	-8,340	0,201	-7,600	0,229	-48,178	0,083	0,171
3093	ZINC98214894	-6,570	0,018	-7,500	0,214	-58,355	0,280	0,171
3094	ZINC00000599	-9,350	0,306	-7,300	0,186	-44,970	0,020	0,171
3095	ZINC03830996	-7,710	0,136	-7,300	0,186	-53,725	0,190	0,171
3096	ZINC56898792	-8,680	0,237	-6,700	0,100	-52,952	0,175	0,171
3097	ZINC02561289	-8,400	0,208	-7,400	0,200	-49,291	0,104	0,171
3098	ZINC03649831	-8,130	0,180	-7,600	0,229	-49,260	0,104	0,171
3099	ZINC01846178	-7,100	0,073	-8,200	0,314	-50,319	0,124	0,170
3100	ZINC11615998	-7,650	0,130	-7,800	0,257	-50,295	0,124	0,170
3101	ZINC08101179	-7,720	0,137	-7,000	0,143	-55,797	0,231	0,170
3102	ZINC08383234	-7,580	0,123	-7,900	0,271	-49,915	0,116	0,170
3103	ZINC03804917	-9,310	0,302	-7,400	0,200	-44,334	0,008	0,170
3104	ZINC04212620	-8,400	0,208	-7,900	0,271	-45,514	0,031	0,170
3105	ZINC27849754	-8,570	0,225	-7,900	0,271	-44,604	0,013	0,170
3106	ZINC85540085	-9,880	0,361	-6,800	0,114	-45,679	0,034	0,170
3107	ZINC22588438	-7,670	0,132	-7,400	0,200	-53,076	0,178	0,170
3108	ZINC00538010	-7,250	0,088	-8,600	0,371	-46,498	0,050	0,170
3109	ZINC03914644	-6,500	0,010	-7,700	0,243	-57,114	0,256	0,170
3110	ZINC03798745	-7,580	0,123	-7,800	0,257	-50,601	0,130	0,170
3111	ZINC00000397	-7,520	0,116	-8,400	0,343	-46,511	0,050	0,170
3112	ZINC85540202	-7,060	0,069	-7,200	0,171	-57,788	0,269	0,170
3113	ZINC11726796	-7,690	0,134	-8,400	0,343	-45,581	0,032	0,170
3114	ZINC05514233	-7,620	0,127	-7,900	0,271	-49,607	0,110	0,169
3115	ZINC03830458	-7,550	0,119	-6,800	0,114	-58,056	0,275	0,169
3116	ZINC08214392	-8,590	0,227	-6,900	0,129	-51,761	0,152	0,169
3117	ZINC02019982	-7,070	0,070	-8,400	0,343	-48,847	0,096	0,169
3118	ZINC01844848	-8,750	0,244	-7,800	0,257	-44,264	0,007	0,169
3119	ZINC03782183	-7,960	0,162	-7,200	0,171	-52,891	0,174	0,169
3120	ZINC03830438	-7,580	0,123	-7,500	0,214	-52,701	0,171	0,169
3121	ZINC04215678	-6,840	0,046	-8,400	0,343	-50,038	0,119	0,169
3122	ZINC03830216	-7,970	0,163	-8,400	0,343	-43,985	0,001	0,169
3123	ZINC73305254	-8,730	0,242	-6,900	0,129	-50,939	0,136	0,169

3124	ZINC02039680	-8,340	0,201	-7,600	0,229	-47,865	0,077	0,169
3125	ZINC04217317	-6,730	0,034	-8,500	0,357	-49,850	0,115	0,169
3126	ZINC03830478	-7,630	0,128	-8,100	0,300	-47,975	0,079	0,169
3127	ZINC00000705	-7,190	0,082	-8,400	0,343	-48,102	0,081	0,169
3128	ZINC11592626	-8,220	0,189	-7,300	0,186	-50,680	0,131	0,169
3129	ZINC02020819	-8,380	0,206	-7,800	0,257	-46,149	0,043	0,169
3130	ZINC42835461	-7,460	0,110	-7,000	0,143	-56,941	0,253	0,169
3131	ZINC12496506	-7,140	0,077	-8,200	0,314	-49,816	0,114	0,169
3132	ZINC04215226	-7,630	0,128	-7,500	0,214	-52,332	0,163	0,168
3133	ZINC03830217	-7,690	0,134	-8,500	0,357	-44,650	0,014	0,168
3134	ZINC03830708	-8,140	0,181	-7,600	0,229	-48,838	0,095	0,168
3135	ZINC01842859	-7,860	0,152	-8,200	0,314	-45,906	0,038	0,168
3136	ZINC14278466	-7,780	0,143	-6,600	0,086	-58,092	0,275	0,168
3137	ZINC19632657	-7,710	0,136	-7,500	0,214	-51,850	0,154	0,168
3138	ZINC31539994	-6,580	0,019	-8,000	0,286	-54,203	0,200	0,168
3139	ZINC19796104	-8,410	0,209	-7,700	0,243	-46,613	0,052	0,168
3140	ZINC06145655	-8,160	0,183	-7,900	0,271	-46,469	0,049	0,168
3141	ZINC03831423	-6,600	0,021	-8,800	0,400	-48,158	0,082	0,168
3142	ZINC03831569	-7,680	0,133	-7,900	0,271	-48,993	0,098	0,168
3143	ZINC04213726	-7,930	0,159	-8,100	0,300	-46,184	0,044	0,168
3144	ZINC03830507	-8,280	0,195	-7,700	0,243	-47,220	0,064	0,167
3145	ZINC95565004	-7,970	0,163	-7,300	0,186	-51,808	0,153	0,167
3146	ZINC30691438	-8,380	0,206	-8,000	0,286	-44,470	0,011	0,167
3147	ZINC02026775	-8,090	0,175	-8,200	0,314	-44,534	0,012	0,167
3148	ZINC40163078	-7,580	0,123	-7,000	0,143	-56,063	0,236	0,167
3149	ZINC03623392	-7,640	0,129	-8,200	0,314	-46,915	0,058	0,167
3150	ZINC98214889	-7,300	0,093	-7,200	0,171	-56,082	0,236	0,167
3151	ZINC03916663	-6,580	0,019	-8,800	0,400	-48,147	0,082	0,167
3152	ZINC02018340	-7,430	0,107	-8,700	0,386	-44,327	0,008	0,167
3153	ZINC01536934	-7,320	0,096	-8,600	0,371	-45,650	0,033	0,167
3154	ZINC04214355	-8,250	0,192	-7,800	0,257	-46,560	0,051	0,167
3155	ZINC00608191	-7,690	0,134	-7,700	0,243	-50,286	0,124	0,167
3156	ZINC01532360	-6,660	0,027	-8,400	0,343	-50,640	0,130	0,167
3157	ZINC05141742	-7,470	0,111	-8,200	0,314	-47,775	0,075	0,167
3158	ZINC33852253	-7,180	0,081	-8,500	0,357	-47,109	0,062	0,167
3159	ZINC26011099	-8,430	0,211	-7,900	0,271	-44,834	0,018	0,167
3160	ZINC02016061	-9,010	0,271	-7,300	0,186	-46,140	0,043	0,167
3161	ZINC01530940	-8,330	0,200	-7,700	0,243	-46,826	0,056	0,167
3162	ZINC03951736	-8,040	0,170	-7,700	0,243	-48,355	0,086	0,166
3163	ZINC02016057	-8,550	0,223	-7,000	0,143	-50,771	0,133	0,166
3164	ZINC08214607	-7,960	0,162	-7,300	0,186	-51,701	0,151	0,166
3165	ZINC04217571	-7,850	0,151	-7,300	0,186	-52,286	0,162	0,166
3166	ZINC08214501	-8,210	0,188	-7,000	0,143	-52,561	0,168	0,166

3167	ZINC03830380	-8,530	0,221	-7,300	0,186	-48,643	0,092	0,166
3168	ZINC00005423	-7,900	0,156	-8,200	0,314	-45,393	0,028	0,166
3169	ZINC02020030	-7,310	0,094	-8,400	0,343	-47,068	0,061	0,166
3170	ZINC04215138	-7,890	0,155	-7,200	0,171	-52,752	0,172	0,166
3171	ZINC01542890	-9,180	0,289	-7,100	0,157	-46,586	0,052	0,166
3172	ZINC03801027	-6,880	0,050	-7,700	0,243	-54,462	0,205	0,166
3173	ZINC01812122	-8,680	0,237	-7,700	0,243	-44,815	0,017	0,166
3174	ZINC56898783	-8,920	0,262	-7,600	0,229	-44,265	0,007	0,166
3175	ZINC03830485	-7,240	0,087	-7,900	0,271	-51,035	0,138	0,166
3176	ZINC01707475	-7,430	0,107	-8,700	0,386	-44,124	0,004	0,166
3177	ZINC11592628	-8,790	0,248	-7,100	0,157	-48,618	0,091	0,165
3178	ZINC19203855	-7,950	0,161	-8,000	0,286	-46,448	0,049	0,165
3179	ZINC01538288	-8,670	0,236	-7,300	0,186	-47,745	0,074	0,165
3180	ZINC22001643	-8,250	0,192	-7,200	0,171	-50,720	0,132	0,165
3181	ZINC05735278	-6,850	0,047	-8,300	0,329	-50,111	0,120	0,165
3182	ZINC25962889	-7,940	0,160	-8,300	0,329	-44,282	0,007	0,165
3183	ZINC04214359	-7,850	0,151	-8,200	0,314	-45,443	0,029	0,165
3184	ZINC98215033	-9,530	0,325	-6,200	0,029	-51,163	0,141	0,165
3185	ZINC00057008	-8,390	0,207	-7,800	0,257	-45,480	0,030	0,165
3186	ZINC00000100	-7,320	0,096	-8,500	0,357	-46,022	0,041	0,164
3187	ZINC05700822	-8,190	0,186	-7,500	0,214	-48,722	0,093	0,164
3188	ZINC01846274	-7,710	0,136	-8,500	0,357	-43,927	0,000	0,164
3189	ZINC03806644	-8,990	0,269	-7,200	0,171	-46,631	0,053	0,164
3190	ZINC11592808	-8,080	0,174	-7,200	0,171	-51,492	0,147	0,164
3191	ZINC02014184	-7,410	0,105	-8,600	0,371	-44,774	0,016	0,164
3192	ZINC05821060	-8,810	0,250	-6,800	0,114	-50,523	0,128	0,164
3193	ZINC03977882	-7,920	0,158	-7,400	0,200	-50,862	0,135	0,164
3194	ZINC02029677	-7,480	0,112	-8,600	0,371	-44,379	0,009	0,164
3195	ZINC08214640	-7,440	0,108	-6,700	0,100	-58,557	0,284	0,164
3196	ZINC02040877	-8,360	0,204	-7,600	0,229	-47,025	0,060	0,164
3197	ZINC29334414	-8,420	0,210	-7,400	0,200	-48,171	0,082	0,164
3198	ZINC03831142	-7,310	0,094	-7,900	0,271	-50,416	0,126	0,164
3199	ZINC03830970	-7,040	0,066	-8,700	0,386	-45,971	0,040	0,164
3200	ZINC01719652	-7,640	0,129	-8,100	0,300	-47,171	0,063	0,164
3201	ZINC04676424	-7,340	0,098	-8,400	0,343	-46,535	0,051	0,164
3202	ZINC00896773	-7,950	0,161	-8,100	0,300	-45,473	0,030	0,164
3203	ZINC95565005	-7,980	0,164	-7,700	0,243	-48,248	0,084	0,164
3204	ZINC21297271	-7,500	0,114	-8,500	0,357	-44,920	0,019	0,164
3205	ZINC03927198	-7,430	0,107	-8,000	0,286	-48,949	0,098	0,163
3206	ZINC59817146	-6,430	0,003	-7,400	0,200	-58,700	0,287	0,163
3207	ZINC12503177	-8,350	0,202	-7,300	0,186	-49,162	0,102	0,163
3208	ZINC08035369	-8,370	0,205	-7,200	0,171	-49,774	0,114	0,163
3209	ZINC95565266	-7,050	0,067	-7,900	0,271	-51,669	0,150	0,163

3210	ZINC08214540	-8,040	0,170	-7,600	0,229	-48,568	0,090	0,163
3211	ZINC01713761	-6,940	0,056	-8,900	0,414	-44,882	0,019	0,163
3212	ZINC05514227	-8,080	0,174	-7,500	0,214	-49,079	0,100	0,163
3213	ZINC01535967	-7,630	0,128	-7,800	0,257	-49,274	0,104	0,163
3214	ZINC22463289	-7,920	0,158	-7,600	0,229	-49,181	0,102	0,163
3215	ZINC03830463	-8,340	0,201	-7,900	0,271	-44,706	0,015	0,163
3216	ZINC84400879	-8,080	0,174	-7,500	0,214	-49,031	0,099	0,163
3217	ZINC59587070	-7,390	0,103	-8,200	0,314	-47,568	0,071	0,163
3218	ZINC04215423	-8,350	0,202	-7,500	0,214	-47,580	0,071	0,163
3219	ZINC09574731	-8,390	0,207	-7,900	0,271	-44,423	0,010	0,163
3220	ZINC02039679	-8,080	0,174	-7,800	0,257	-46,811	0,056	0,163
3221	ZINC72266878	-9,020	0,272	-7,400	0,200	-44,724	0,015	0,163
3222	ZINC00057490	-7,190	0,082	-8,700	0,386	-44,930	0,019	0,162
3223	ZINC03830391	-7,890	0,155	-8,300	0,329	-44,112	0,004	0,162
3224	ZINC04214338	-7,720	0,137	-7,900	0,271	-47,928	0,078	0,162
3225	ZINC08214703	-7,920	0,158	-7,400	0,200	-50,521	0,128	0,162
3226	ZINC01532364	-7,500	0,114	-7,700	0,243	-50,533	0,128	0,162
3227	ZINC98214857	-8,030	0,169	-7,000	0,143	-52,836	0,173	0,162
3228	ZINC03924220	-7,820	0,147	-8,300	0,329	-44,395	0,009	0,162
3229	ZINC03830707	-8,200	0,187	-7,300	0,186	-49,716	0,112	0,162
3230	ZINC04212927	-7,250	0,088	-7,100	0,157	-56,257	0,240	0,162
3231	ZINC01999471	-8,040	0,170	-7,500	0,214	-49,093	0,100	0,162
3232	ZINC84758959	-7,720	0,137	-8,200	0,314	-45,655	0,034	0,162
3233	ZINC00001758	-7,130	0,076	-8,600	0,371	-45,843	0,037	0,161
3234	ZINC04213731	-7,900	0,156	-7,700	0,243	-48,337	0,086	0,161
3235	ZINC03830866	-9,160	0,287	-7,300	0,186	-44,511	0,011	0,161
3236	ZINC00000529	-7,490	0,113	-8,200	0,314	-46,797	0,056	0,161
3237	ZINC03874580	-8,600	0,228	-7,500	0,214	-46,008	0,040	0,161
3238	ZINC00601278	-8,330	0,200	-7,300	0,186	-48,910	0,097	0,161
3239	ZINC02036061	-8,400	0,208	-7,900	0,271	-44,122	0,004	0,161
3240	ZINC01481966	-8,150	0,182	-8,100	0,300	-43,973	0,001	0,161
3241	ZINC01997240	-9,170	0,288	-7,300	0,186	-44,395	0,009	0,161
3242	ZINC01530652	-8,310	0,198	-7,600	0,229	-46,781	0,055	0,161
3243	ZINC33852252	-6,530	0,013	-9,000	0,429	-45,996	0,040	0,161
3244	ZINC03830711	-8,100	0,177	-7,300	0,186	-50,102	0,120	0,161
3245	ZINC13298653	-6,810	0,043	-7,900	0,271	-52,558	0,168	0,161
3246	ZINC38613795	-7,480	0,112	-7,700	0,243	-50,447	0,127	0,161
3247	ZINC08551995	-8,470	0,215	-7,200	0,171	-48,829	0,095	0,161
3248	ZINC12503208	-7,060	0,069	-8,000	0,286	-50,475	0,127	0,161
3249	ZINC01846137	-7,940	0,160	-7,900	0,271	-46,480	0,050	0,160
3250	ZINC03952532	-7,590	0,124	-7,900	0,271	-48,335	0,086	0,160
3251	ZINC49949635	-8,500	0,218	-7,500	0,214	-46,395	0,048	0,160
3252	ZINC01846388	-7,970	0,163	-8,200	0,314	-44,077	0,003	0,160

3253	ZINC01769096	-7,180	0,081	-8,600	0,371	-45,355	0,028	0,160
3254	ZINC03604145	-8,030	0,169	-7,900	0,271	-45,950	0,039	0,160
3255	ZINC03991624	-7,020	0,064	-7,000	0,143	-57,957	0,273	0,160
3256	ZINC38807192	-7,830	0,148	-8,100	0,300	-45,541	0,031	0,160
3257	ZINC16343305	-8,110	0,178	-7,200	0,171	-50,637	0,130	0,160
3258	ZINC03623387	-7,300	0,093	-8,200	0,314	-47,606	0,071	0,160
3259	ZINC03776953	-7,840	0,150	-8,000	0,286	-46,181	0,044	0,160
3260	ZINC00602128	-8,440	0,212	-7,800	0,257	-44,442	0,010	0,160
3261	ZINC31561744	-6,410	0,001	-7,900	0,271	-54,536	0,206	0,160
3262	ZINC01530774	-7,400	0,104	-8,600	0,371	-44,053	0,002	0,159
3263	ZINC04214158	-8,250	0,192	-7,400	0,200	-48,327	0,086	0,159
3264	ZINC01537048	-9,340	0,305	-6,800	0,114	-46,909	0,058	0,159
3265	ZINC19318917	-9,150	0,286	-6,800	0,114	-47,920	0,078	0,159
3266	ZINC03830969	-7,190	0,082	-8,400	0,343	-46,630	0,053	0,159
3267	ZINC13451112	-6,420	0,002	-8,400	0,343	-50,736	0,132	0,159
3268	ZINC01551785	-7,480	0,112	-8,500	0,357	-44,333	0,008	0,159
3269	ZINC04629861	-8,470	0,215	-7,300	0,186	-47,852	0,076	0,159
3270	ZINC00000918	-8,220	0,189	-7,800	0,257	-45,506	0,031	0,159
3271	ZINC03202703	-8,310	0,198	-7,900	0,271	-44,279	0,007	0,159
3272	ZINC03871703	-8,050	0,171	-8,000	0,286	-44,922	0,019	0,159
3273	ZINC03830508	-8,300	0,197	-7,500	0,214	-47,258	0,065	0,159
3274	ZINC03830710	-8,070	0,173	-7,500	0,214	-48,438	0,088	0,158
3275	ZINC31539990	-6,710	0,032	-7,400	0,200	-56,434	0,243	0,158
3276	ZINC03794149	-7,650	0,130	-7,600	0,229	-49,938	0,117	0,158
3277	ZINC01854337	-7,930	0,159	-8,200	0,314	-44,008	0,002	0,158
3278	ZINC13914293	-7,420	0,106	-8,100	0,300	-47,468	0,069	0,158
3279	ZINC04214157	-8,450	0,213	-7,100	0,157	-49,262	0,104	0,158
3280	ZINC01698104	-7,970	0,163	-8,100	0,300	-44,466	0,010	0,158
3281	ZINC04216054	-7,940	0,160	-8,100	0,300	-44,612	0,013	0,158
3282	ZINC00057466	-7,860	0,152	-8,200	0,314	-44,283	0,007	0,158
3283	ZINC33827949	-7,330	0,097	-8,100	0,300	-47,844	0,076	0,158
3284	ZINC01846197	-7,020	0,064	-8,200	0,314	-48,765	0,094	0,158
3285	ZINC04217251	-7,990	0,165	-8,000	0,286	-45,032	0,021	0,157
3286	ZINC22860106	-8,460	0,214	-7,300	0,186	-47,665	0,073	0,157
3287	ZINC00538132	-8,770	0,246	-7,400	0,200	-45,268	0,026	0,157
3288	ZINC00004753	-6,550	0,016	-8,700	0,386	-47,547	0,070	0,157
3289	ZINC03830475	-7,040	0,066	-7,700	0,243	-52,273	0,162	0,157
3290	ZINC33956911	-8,450	0,213	-7,200	0,171	-48,396	0,087	0,157
3291	ZINC03830375	-7,780	0,143	-7,800	0,257	-47,534	0,070	0,157
3292	ZINC04212489	-7,620	0,127	-8,400	0,343	-43,976	0,001	0,157
3293	ZINC04212236	-7,740	0,139	-8,300	0,329	-44,018	0,002	0,156
3294	ZINC03830410	-7,260	0,089	-7,400	0,200	-53,194	0,180	0,156
3295	ZINC00057319	-7,500	0,114	-8,200	0,314	-46,018	0,041	0,156

3296	ZINC00000731	-8,140	0,181	-7,700	0,243	-46,258	0,045	0,156
3297	ZINC04097459	-7,060	0,069	-7,200	0,171	-55,701	0,229	0,156
3298	ZINC28965775	-7,210	0,084	-7,900	0,271	-49,750	0,113	0,156
3299	ZINC00001960	-7,570	0,121	-8,400	0,343	-44,144	0,004	0,156
3300	ZINC84758361	-7,540	0,118	-8,100	0,300	-46,488	0,050	0,156
3301	ZINC02020083	-8,240	0,191	-7,800	0,257	-44,952	0,020	0,156
3302	ZINC85540195	-8,770	0,246	-7,100	0,157	-47,264	0,065	0,156
3303	ZINC04214444	-8,030	0,169	-7,600	0,229	-47,531	0,070	0,156
3304	ZINC98215032	-8,620	0,231	-7,300	0,186	-46,572	0,051	0,156
3305	ZINC08552291	-7,450	0,109	-7,800	0,257	-49,145	0,101	0,156
3306	ZINC22463045	-8,230	0,190	-7,300	0,186	-48,633	0,091	0,156
3307	ZINC04213231	-7,740	0,139	-7,900	0,271	-46,829	0,056	0,156
3308	ZINC01915505	-7,460	0,110	-8,000	0,286	-47,583	0,071	0,156
3309	ZINC03812913	-8,120	0,179	-6,900	0,129	-52,141	0,160	0,156
3310	ZINC31291738	-7,740	0,139	-7,800	0,257	-47,539	0,070	0,155
3311	ZINC03871994	-7,460	0,110	-7,400	0,200	-51,962	0,156	0,155
3312	ZINC98215035	-8,720	0,241	-6,500	0,071	-51,820	0,153	0,155
3313	ZINC03780841	-8,110	0,178	-7,700	0,243	-46,258	0,045	0,155
3314	ZINC00020229	-7,940	0,160	-7,600	0,229	-47,889	0,077	0,155
3315	ZINC15111006	-7,900	0,156	-7,400	0,200	-49,565	0,110	0,155
3316	ZINC72266811	-7,870	0,153	-7,800	0,257	-46,773	0,055	0,155
3317	ZINC04534031	-8,250	0,192	-7,700	0,243	-45,462	0,030	0,155
3318	ZINC00897258	-7,200	0,083	-8,100	0,300	-48,121	0,082	0,155
3319	ZINC03623553	-8,370	0,205	-7,800	0,257	-44,072	0,003	0,155
3320	ZINC04099200	-7,180	0,081	-8,600	0,371	-44,534	0,012	0,155
3321	ZINC03830722	-7,240	0,087	-6,900	0,129	-56,707	0,248	0,155
3322	ZINC03818726	-7,300	0,093	-8,500	0,357	-44,623	0,014	0,155
3323	ZINC04213610	-8,040	0,170	-7,700	0,243	-46,549	0,051	0,155
3324	ZINC01581128	-7,340	0,098	-7,500	0,214	-51,759	0,152	0,155
3325	ZINC64633718	-6,460	0,006	-7,700	0,243	-54,987	0,215	0,155
3326	ZINC72266862	-9,740	0,347	-6,600	0,086	-45,543	0,031	0,155
3327	ZINC01532358	-8,330	0,200	-7,400	0,200	-47,162	0,063	0,154
3328	ZINC72266893	-8,780	0,247	-6,700	0,100	-49,890	0,116	0,154
3329	ZINC05735280	-7,350	0,099	-8,300	0,329	-45,759	0,036	0,154
3330	ZINC00607703	-7,930	0,159	-7,400	0,200	-49,254	0,104	0,154
3331	ZINC33940854	-6,940	0,056	-8,000	0,286	-50,118	0,120	0,154
3332	ZINC00896507	-8,220	0,189	-7,900	0,271	-44,013	0,002	0,154
3333	ZINC21985528	-7,730	0,138	-8,200	0,314	-44,411	0,009	0,154
3334	ZINC03830748	-7,020	0,064	-8,100	0,300	-48,929	0,097	0,154
3335	ZINC03798763	-8,130	0,180	-7,600	0,229	-46,671	0,053	0,154
3336	ZINC01673409	-8,560	0,224	-7,500	0,214	-45,093	0,023	0,154
3337	ZINC08551994	-8,620	0,231	-7,300	0,186	-46,242	0,045	0,154
3338	ZINC03830586	-8,360	0,204	-7,800	0,257	-43,942	0,000	0,154

3339	ZINC85537058	-7,830	0,148	-7,300	0,186	-50,433	0,126	0,154
3340	ZINC02034509	-7,610	0,126	-8,200	0,314	-44,982	0,021	0,153
3341	ZINC00196692	-7,240	0,087	-8,500	0,357	-44,748	0,016	0,153
3342	ZINC00000406	-7,610	0,126	-7,800	0,257	-47,880	0,077	0,153
3343	ZINC03830381	-7,790	0,144	-7,400	0,200	-49,857	0,115	0,153
3344	ZINC00968255	-7,280	0,091	-7,700	0,243	-50,371	0,125	0,153
3345	ZINC72266953	-6,670	0,028	-7,100	0,157	-58,028	0,274	0,153
3346	ZINC04217559	-7,090	0,072	-7,200	0,171	-55,045	0,216	0,153
3347	ZINC04217451	-7,030	0,065	-7,900	0,271	-50,208	0,122	0,153
3348	ZINC01535009	-7,720	0,137	-7,400	0,200	-50,196	0,122	0,153
3349	ZINC05316700	-8,260	0,193	-7,200	0,171	-48,778	0,094	0,153
3350	ZINC01843038	-8,560	0,224	-7,400	0,200	-45,690	0,034	0,153
3351	ZINC04073414	-6,400	0,000	-9,200	0,457	-43,998	0,001	0,153
3352	ZINC52538853	-8,070	0,173	-7,800	0,257	-45,360	0,028	0,153
3353	ZINC02037170	-8,130	0,180	-7,300	0,186	-48,714	0,093	0,153
3354	ZINC15848223	-7,780	0,143	-7,500	0,214	-49,096	0,100	0,153
3355	ZINC27640192	-8,710	0,240	-7,000	0,143	-47,790	0,075	0,153
3356	ZINC00601302	-8,290	0,196	-7,800	0,257	-44,114	0,004	0,152
3357	ZINC01530694	-7,100	0,073	-7,800	0,257	-50,455	0,127	0,152
3358	ZINC59817074	-6,690	0,030	-7,000	0,143	-58,525	0,284	0,152
3359	ZINC03830955	-8,470	0,215	-7,300	0,186	-46,794	0,056	0,152
3360	ZINC31540238	-7,290	0,092	-7,700	0,243	-50,152	0,121	0,152
3361	ZINC19364229	-8,070	0,173	-7,900	0,271	-44,502	0,011	0,152
3362	ZINC00000127	-7,660	0,131	-7,500	0,214	-49,632	0,111	0,152
3363	ZINC05273673	-7,890	0,155	-8,100	0,300	-43,964	0,001	0,152
3364	ZINC03812974	-8,090	0,175	-7,800	0,257	-45,073	0,022	0,152
3365	ZINC72266836	-7,630	0,128	-8,200	0,314	-44,589	0,013	0,152
3366	ZINC01530860	-8,510	0,219	-7,500	0,214	-44,994	0,021	0,151
3367	ZINC01999561	-7,380	0,102	-7,600	0,229	-50,273	0,123	0,151
3368	ZINC04214327	-8,440	0,212	-7,600	0,229	-44,589	0,013	0,151
3369	ZINC31570061	-7,300	0,093	-6,900	0,129	-55,784	0,230	0,151
3370	ZINC08214496	-7,650	0,130	-8,100	0,300	-45,086	0,023	0,151
3371	ZINC00000876	-7,970	0,163	-8,000	0,286	-44,091	0,003	0,151
3372	ZINC01842864	-7,620	0,127	-8,100	0,300	-45,193	0,025	0,150
3373	ZINC01846400	-7,580	0,123	-8,000	0,286	-46,110	0,042	0,150
3374	ZINC56898731	-7,930	0,159	-7,200	0,171	-50,034	0,119	0,150
3375	ZINC03830379	-7,880	0,154	-7,200	0,171	-50,279	0,123	0,150
3376	ZINC08552292	-8,070	0,173	-7,300	0,186	-48,483	0,089	0,149
3377	ZINC08214450	-7,480	0,112	-6,900	0,129	-54,555	0,207	0,149
3378	ZINC03830439	-7,660	0,131	-7,100	0,157	-52,088	0,159	0,149
3379	ZINC04212377	-7,110	0,074	-6,700	0,100	-57,904	0,272	0,148
3380	ZINC03831200	-6,780	0,039	-7,600	0,229	-52,992	0,176	0,148
3381	ZINC08101159	-6,680	0,029	-7,200	0,171	-56,443	0,243	0,148



3382	ZINC84758823	-8,140	0,181	-6,600	0,086	-53,048	0,177	0,148
3383	ZINC05820739	-7,250	0,088	-7,700	0,243	-49,711	0,112	0,148
3384	ZINC02031042	-7,900	0,156	-7,500	0,214	-47,698	0,073	0,148
3385	ZINC03830956	-8,400	0,208	-7,600	0,229	-44,289	0,007	0,148
3386	ZINC01649227	-8,930	0,263	-7,200	0,171	-44,395	0,009	0,148
3387	ZINC03830453	-7,400	0,104	-7,500	0,214	-50,363	0,125	0,148
3388	ZINC00004779	-7,360	0,100	-7,500	0,214	-50,572	0,129	0,148
3389	ZINC72266891	-8,010	0,167	-7,300	0,186	-48,566	0,090	0,148
3390	ZINC96006016	-8,430	0,211	-6,800	0,114	-49,994	0,118	0,148
3391	ZINC01573408	-7,810	0,146	-7,700	0,243	-46,683	0,054	0,148
3392	ZINC11592768	-7,630	0,128	-7,300	0,186	-50,585	0,129	0,148
3393	ZINC02038310	-8,640	0,233	-7,000	0,143	-47,379	0,067	0,148
3394	ZINC22463019	-7,300	0,093	-7,900	0,271	-47,921	0,078	0,147
3395	ZINC02037169	-7,970	0,163	-7,400	0,200	-48,012	0,079	0,147
3396	ZINC00580328	-8,100	0,177	-7,800	0,257	-44,330	0,008	0,147
3397	ZINC01530702	-7,040	0,066	-8,300	0,329	-46,291	0,046	0,147
3398	ZINC01999365	-8,860	0,255	-7,200	0,171	-44,638	0,014	0,147
3399	ZINC05820788	-8,510	0,219	-6,900	0,129	-48,699	0,093	0,147
3400	ZINC08214486	-7,620	0,127	-7,200	0,171	-51,242	0,142	0,147
3401	ZINC56898789	-8,540	0,222	-6,500	0,071	-51,439	0,146	0,147
3402	ZINC01548562	-7,140	0,077	-8,200	0,314	-46,394	0,048	0,146
3403	ZINC56898781	-8,520	0,220	-7,300	0,186	-45,633	0,033	0,146
3404	ZINC03623549	-8,040	0,170	-7,800	0,257	-44,505	0,011	0,146
3405	ZINC16940528	-7,560	0,120	-8,200	0,314	-44,123	0,004	0,146
3406	ZINC04215006	-8,230	0,190	-7,300	0,186	-47,143	0,062	0,146
3407	ZINC02016021	-6,900	0,052	-7,800	0,257	-50,563	0,129	0,146
3408	ZINC01532363	-6,720	0,033	-8,600	0,371	-45,614	0,033	0,146
3409	ZINC01530575	-8,340	0,201	-7,600	0,229	-44,291	0,007	0,146
3410	ZINC03830455	-7,380	0,102	-7,500	0,214	-50,144	0,121	0,146
3411	ZINC03872328	-7,400	0,104	-7,500	0,214	-50,034	0,119	0,146
3412	ZINC03830440	-7,010	0,063	-7,400	0,200	-52,839	0,173	0,146
3413	ZINC00601281	-9,290	0,300	-6,900	0,129	-44,331	0,008	0,146
3414	ZINC59587254	-7,930	0,159	-7,800	0,257	-44,969	0,020	0,145
3415	ZINC04217268	-8,450	0,213	-7,500	0,214	-44,395	0,009	0,145
3416	ZINC13907151	-8,340	0,201	-7,600	0,229	-44,240	0,006	0,145
3417	ZINC03831199	-6,560	0,017	-7,800	0,257	-52,271	0,162	0,145
3418	ZINC03830456	-7,120	0,075	-7,600	0,229	-50,745	0,133	0,145
3419	ZINC01546931	-7,590	0,124	-7,300	0,186	-50,397	0,126	0,145
3420	ZINC04676424	-7,010	0,063	-8,400	0,343	-45,402	0,029	0,145
3421	ZINC03946361	-6,750	0,036	-7,200	0,171	-55,610	0,227	0,145
3422	ZINC04215237	-7,450	0,109	-7,900	0,271	-46,722	0,054	0,145
3423	ZINC72266267	-7,590	0,124	-7,400	0,200	-49,589	0,110	0,145
3424	ZINC00003911	-7,380	0,102	-8,300	0,329	-44,091	0,003	0,145

3425	ZINC03830976	-7,440	0,108	-7,200	0,171	-51,851	0,154	0,144
3426	ZINC04194762	-6,890	0,051	-7,900	0,271	-49,617	0,111	0,144
3427	ZINC04742520	-7,040	0,066	-7,600	0,229	-51,014	0,138	0,144
3428	ZINC85536958	-9,340	0,305	-6,800	0,114	-44,600	0,013	0,144
3429	ZINC03831165	-8,460	0,214	-7,500	0,214	-44,124	0,004	0,144
3430	ZINC15449257	-7,210	0,084	-6,900	0,129	-55,189	0,219	0,144
3431	ZINC87496183	-9,730	0,346	-6,600	0,086	-43,929	0,000	0,144
3432	ZINC03830952	-8,490	0,217	-7,500	0,214	-43,930	0,000	0,144
3433	ZINC03789788	-7,050	0,067	-8,000	0,286	-47,941	0,078	0,144
3434	ZINC05651730	-9,230	0,294	-6,600	0,086	-46,574	0,051	0,144
3435	ZINC85537070	-8,510	0,219	-7,100	0,157	-46,738	0,055	0,144
3436	ZINC31477045	-9,400	0,312	-6,800	0,114	-44,186	0,005	0,144
3437	ZINC03942646	-6,690	0,030	-7,600	0,229	-52,777	0,172	0,144
3438	ZINC00538134	-8,100	0,177	-7,000	0,143	-49,653	0,111	0,144
3439	ZINC01649340	-7,160	0,079	-8,300	0,329	-45,113	0,023	0,144
3440	ZINC04214220	-7,590	0,124	-7,100	0,157	-51,630	0,150	0,143
3441	ZINC28757816	-6,790	0,040	-7,500	0,214	-52,945	0,175	0,143
3442	ZINC00607930	-8,310	0,198	-7,400	0,200	-45,538	0,031	0,143
3443	ZINC03830486	-7,120	0,075	-7,600	0,229	-50,419	0,126	0,143
3444	ZINC05442134	-7,590	0,124	-7,800	0,257	-46,436	0,049	0,143
3445	ZINC59587064	-7,310	0,094	-8,100	0,300	-45,720	0,035	0,143
3446	ZINC03812911	-7,310	0,094	-7,900	0,271	-47,180	0,063	0,143
3447	ZINC00002064	-7,620	0,127	-7,900	0,271	-45,519	0,031	0,143
3448	ZINC04626696	-8,370	0,205	-7,500	0,214	-44,450	0,010	0,143
3449	ZINC01704226	-7,290	0,092	-8,100	0,300	-45,805	0,037	0,143
3450	ZINC03824412	-8,140	0,181	-7,300	0,186	-47,117	0,062	0,143
3451	ZINC05442195	-7,830	0,148	-7,600	0,229	-46,532	0,051	0,143
3452	ZINC05785445	-7,570	0,121	-8,100	0,300	-44,244	0,006	0,143
3453	ZINC01704228	-7,060	0,069	-8,100	0,300	-46,966	0,059	0,143
3454	ZINC30691445	-7,620	0,127	-8,000	0,286	-44,694	0,015	0,142
3455	ZINC04214329	-6,950	0,057	-7,700	0,243	-50,477	0,127	0,142
3456	ZINC84757004	-6,710	0,032	-6,500	0,071	-60,578	0,324	0,142
3457	ZINC05700825	-7,740	0,139	-7,300	0,186	-49,177	0,102	0,142
3458	ZINC03830511	-7,400	0,104	-7,600	0,229	-48,787	0,094	0,142
3459	ZINC08214685	-8,580	0,226	-6,400	0,057	-51,301	0,143	0,142
3460	ZINC02040211	-8,200	0,187	-7,100	0,157	-48,178	0,083	0,142
3461	ZINC02506688	-7,940	0,160	-7,400	0,200	-47,299	0,066	0,142
3462	ZINC00537957	-6,430	0,003	-8,400	0,343	-47,972	0,079	0,142
3463	ZINC03830479	-7,880	0,154	-7,500	0,214	-46,826	0,056	0,141
3464	ZINC02040876	-7,790	0,144	-7,500	0,214	-47,297	0,065	0,141
3465	ZINC42881625	-7,420	0,106	-8,000	0,286	-45,559	0,032	0,141
3466	ZINC03830419	-6,620	0,023	-7,400	0,200	-54,233	0,200	0,141
3467	ZINC11677473	-7,600	0,125	-7,800	0,257	-46,039	0,041	0,141

3468	ZINC03201958	-7,310	0,094	-8,000	0,286	-46,111	0,042	0,141
3469	ZINC00000412	-8,250	0,192	-7,600	0,229	-44,028	0,002	0,141
3470	ZINC15848218	-7,550	0,119	-7,700	0,243	-47,010	0,060	0,141
3471	ZINC02003628	-7,210	0,084	-7,900	0,271	-47,348	0,066	0,141
3472	ZINC98214870	-7,070	0,070	-7,000	0,143	-54,710	0,210	0,141
3473	ZINC02017624	-7,070	0,070	-8,200	0,314	-45,881	0,038	0,141
3474	ZINC04099200	-6,980	0,060	-8,500	0,357	-44,137	0,004	0,140
3475	ZINC01996070	-8,110	0,178	-7,400	0,200	-46,173	0,044	0,140
3476	ZINC02039588	-7,150	0,078	-7,300	0,186	-52,010	0,157	0,140
3477	ZINC03830437	-6,790	0,040	-7,800	0,257	-50,258	0,123	0,140
3478	ZINC03830451	-7,000	0,062	-8,000	0,286	-47,661	0,073	0,140
3479	ZINC00000101	-8,150	0,182	-7,200	0,171	-47,390	0,067	0,140
3480	ZINC11592563	-8,130	0,180	-7,400	0,200	-46,012	0,041	0,140
3481	ZINC01846131	-8,480	0,216	-7,200	0,171	-45,590	0,032	0,140
3482	ZINC04214881	-6,540	0,015	-8,200	0,314	-48,601	0,091	0,140
3483	ZINC85537146	-9,140	0,285	-6,900	0,129	-44,257	0,006	0,140
3484	ZINC03812144	-8,440	0,212	-7,100	0,157	-46,523	0,050	0,140
3485	ZINC84757002	-7,900	0,156	-7,000	0,143	-50,115	0,120	0,140
3486	ZINC00608263	-7,200	0,083	-8,100	0,300	-45,766	0,036	0,140
3487	ZINC04097299	-7,220	0,085	-7,000	0,143	-53,732	0,191	0,140
3488	ZINC14233334	-8,260	0,193	-6,500	0,071	-51,815	0,153	0,139
3489	ZINC01543773	-6,970	0,059	-8,500	0,357	-43,986	0,001	0,139
3490	ZINC70669866	-6,630	0,024	-6,900	0,129	-57,545	0,265	0,139
3491	ZINC72266956	-6,650	0,026	-6,900	0,129	-57,431	0,262	0,139
3492	ZINC01655461	-7,750	0,140	-7,500	0,214	-47,135	0,062	0,139
3493	ZINC02019929	-7,720	0,137	-7,900	0,271	-44,327	0,008	0,139
3494	ZINC72266266	-7,440	0,108	-7,600	0,229	-48,001	0,079	0,139
3495	ZINC17719775	-6,760	0,037	-7,100	0,157	-55,301	0,221	0,139
3496	ZINC01538986	-7,550	0,119	-7,200	0,171	-50,304	0,124	0,138
3497	ZINC01536782	-7,910	0,157	-7,800	0,257	-43,950	0,000	0,138
3498	ZINC01999464	-6,920	0,054	-7,800	0,257	-49,233	0,103	0,138
3499	ZINC01538987	-7,110	0,074	-7,300	0,186	-51,872	0,154	0,138
3500	ZINC19321450	-8,970	0,267	-6,600	0,086	-47,058	0,061	0,138
3501	ZINC01542891	-7,070	0,070	-7,800	0,257	-48,374	0,086	0,138
3502	ZINC11592801	-7,830	0,148	-7,800	0,257	-44,286	0,007	0,138
3503	ZINC31261650	-7,250	0,088	-8,100	0,300	-45,168	0,024	0,137
3504	ZINC04215585	-8,210	0,188	-7,300	0,186	-45,914	0,039	0,137
3505	ZINC56870809	-7,840	0,150	-6,800	0,114	-51,497	0,147	0,137
3506	ZINC98214884	-7,280	0,091	-6,700	0,100	-55,194	0,219	0,137
3507	ZINC03830953	-8,420	0,210	-7,200	0,171	-45,423	0,029	0,137
3508	ZINC08214612	-7,870	0,153	-6,700	0,100	-52,022	0,157	0,137
3509	ZINC05820738	-7,020	0,064	-7,900	0,271	-47,729	0,074	0,137
3510	ZINC01679422	-7,610	0,126	-7,300	0,186	-48,935	0,097	0,136

3511	ZINC11726800	-7,120	0,075	-7,800	0,257	-47,877	0,077	0,136
3512	ZINC43194409	-7,350	0,099	-7,400	0,200	-49,586	0,110	0,136
3513	ZINC03872347	-6,730	0,034	-7,200	0,171	-54,364	0,203	0,136
3514	ZINC04216378	-7,420	0,106	-7,900	0,271	-45,526	0,031	0,136
3515	ZINC00000494	-7,850	0,151	-7,600	0,229	-45,431	0,029	0,136
3516	ZINC02599970	-6,600	0,021	-8,200	0,314	-47,692	0,073	0,136
3517	ZINC02034516	-6,700	0,031	-8,300	0,329	-46,416	0,048	0,136
3518	ZINC03830420	-6,680	0,029	-7,500	0,214	-52,374	0,164	0,136
3519	ZINC04213576	-8,090	0,175	-7,400	0,200	-45,556	0,032	0,136
3520	ZINC04217208	-6,690	0,030	-8,000	0,286	-48,619	0,091	0,136
3521	ZINC01530776	-7,110	0,074	-8,100	0,300	-45,626	0,033	0,136
3522	ZINC01542905	-7,660	0,131	-7,100	0,157	-50,031	0,119	0,136
3523	ZINC00538301	-8,220	0,189	-7,100	0,157	-47,013	0,060	0,135
3524	ZINC01843033	-7,720	0,137	-7,700	0,243	-45,258	0,026	0,135
3525	ZINC01999492	-9,350	0,306	-6,600	0,086	-44,631	0,014	0,135
3526	ZINC01532365	-6,640	0,025	-7,800	0,257	-50,274	0,123	0,135
3527	ZINC01846151	-7,650	0,130	-7,100	0,157	-49,995	0,118	0,135
3528	ZINC01530910	-7,640	0,129	-7,800	0,257	-44,885	0,019	0,135
3529	ZINC02019996	-6,540	0,015	-8,000	0,286	-49,291	0,104	0,135
3530	ZINC64622556	-7,940	0,160	-6,700	0,100	-51,341	0,144	0,135
3531	ZINC06845992	-8,280	0,195	-6,900	0,129	-48,023	0,080	0,134
3532	ZINC00000586	-7,780	0,143	-7,300	0,186	-47,747	0,074	0,134
3533	ZINC11592627	-8,040	0,170	-6,900	0,129	-49,294	0,104	0,134
3534	ZINC03977881	-7,200	0,083	-7,100	0,157	-52,281	0,162	0,134
3535	ZINC08214536	-7,670	0,132	-7,100	0,157	-49,748	0,113	0,134
3536	ZINC03831424	-6,880	0,050	-8,200	0,314	-45,846	0,037	0,134
3537	ZINC04216358	-7,120	0,075	-7,800	0,257	-47,502	0,069	0,134
3538	ZINC04468952	-7,640	0,129	-7,900	0,271	-43,986	0,001	0,134
3539	ZINC03919155	-7,020	0,064	-7,700	0,243	-48,733	0,093	0,134
3540	ZINC56897710	-7,710	0,136	-6,700	0,100	-52,381	0,164	0,133
3541	ZINC83326387	-7,180	0,081	-7,400	0,200	-50,065	0,119	0,133
3542	ZINC03831298	-7,970	0,163	-7,300	0,186	-46,576	0,051	0,133
3543	ZINC31477117	-7,200	0,083	-8,000	0,286	-45,526	0,031	0,133
3544	ZINC08214383	-7,420	0,106	-7,200	0,171	-50,212	0,122	0,133
3545	ZINC01678301	-8,260	0,193	-7,300	0,186	-44,980	0,020	0,133
3546	ZINC03831492	-6,490	0,009	-6,900	0,129	-57,326	0,260	0,133
3547	ZINC98214878	-6,530	0,013	-7,800	0,257	-50,490	0,128	0,133
3548	ZINC83326382	-7,200	0,083	-7,300	0,186	-50,583	0,129	0,133
3549	ZINC11677894	-7,580	0,123	-6,700	0,100	-52,955	0,175	0,133
3550	ZINC03636211	-6,770	0,038	-7,700	0,243	-49,916	0,116	0,133
3551	ZINC22462747	-7,000	0,062	-7,200	0,171	-52,357	0,164	0,133
3552	ZINC17921108	-7,560	0,120	-7,800	0,257	-44,951	0,020	0,132
3553	ZINC98215034	-9,600	0,332	-6,300	0,043	-45,061	0,022	0,132

3554	ZINC00897256	-7,110	0,074	-7,500	0,214	-49,542	0,109	0,132
3555	ZINC03875502	-7,940	0,160	-7,600	0,229	-44,371	0,009	0,132
3556	ZINC00057321	-6,940	0,056	-8,200	0,314	-45,273	0,026	0,132
3557	ZINC03830381	-8,290	0,196	-7,200	0,171	-45,400	0,029	0,132
3558	ZINC01846356	-8,080	0,174	-7,200	0,171	-46,496	0,050	0,132
3559	ZINC98214851	-7,880	0,154	-7,200	0,171	-47,562	0,071	0,132
3560	ZINC02002230	-7,330	0,097	-7,600	0,229	-47,534	0,070	0,132
3561	ZINC03830442	-6,670	0,028	-6,800	0,114	-56,925	0,253	0,132
3562	ZINC19632663	-7,430	0,107	-7,500	0,214	-47,718	0,074	0,132
3563	ZINC01843040	-8,070	0,173	-7,400	0,200	-45,020	0,021	0,132
3564	ZINC11677890	-6,580	0,019	-7,200	0,171	-54,448	0,204	0,132
3565	ZINC01846054	-7,320	0,096	-7,800	0,257	-46,078	0,042	0,131
3566	ZINC00001963	-6,900	0,052	-8,300	0,329	-44,635	0,014	0,131
3567	ZINC01999465	-6,790	0,040	-7,800	0,257	-48,884	0,096	0,131
3568	ZINC01529178	-7,850	0,151	-7,600	0,229	-44,675	0,015	0,131
3569	ZINC59586828	-6,520	0,012	-8,600	0,371	-44,411	0,009	0,131
3570	ZINC03871978	-6,900	0,052	-7,600	0,229	-49,724	0,113	0,131
3571	ZINC05513458	-7,870	0,153	-7,100	0,157	-48,215	0,083	0,131
3572	ZINC04217400	-7,340	0,098	-7,600	0,229	-47,304	0,066	0,131
3573	ZINC12503147	-7,180	0,081	-6,900	0,129	-53,276	0,182	0,130
3574	ZINC05424098	-7,000	0,062	-8,200	0,314	-44,665	0,014	0,130
3575	ZINC31291723	-7,140	0,077	-8,000	0,286	-45,385	0,028	0,130
3576	ZINC01873651	-8,020	0,168	-7,300	0,186	-45,825	0,037	0,130
3577	ZINC43207237	-6,610	0,022	-7,700	0,243	-50,397	0,126	0,130
3578	ZINC04214270	-7,830	0,148	-7,000	0,143	-48,989	0,098	0,130
3579	ZINC03831299	-7,680	0,133	-7,500	0,214	-46,098	0,042	0,130
3580	ZINC01692389	-7,440	0,108	-7,900	0,271	-44,367	0,009	0,129
3581	ZINC08214422	-8,020	0,168	-6,100	0,014	-54,482	0,205	0,129
3582	ZINC05457090	-7,230	0,086	-7,400	0,200	-49,137	0,101	0,129
3583	ZINC04097301	-7,090	0,072	-6,800	0,114	-54,274	0,201	0,129
3584	ZINC04521470	-8,000	0,166	-6,700	0,100	-50,137	0,121	0,129
3585	ZINC40163272	-7,040	0,066	-7,500	0,214	-49,354	0,105	0,129
3586	ZINC02027006	-7,510	0,115	-7,200	0,171	-49,028	0,099	0,129
3587	ZINC08101178	-8,370	0,205	-7,000	0,143	-45,875	0,038	0,128
3588	ZINC01576406	-6,790	0,040	-8,300	0,329	-44,740	0,016	0,128
3589	ZINC03831519	-6,990	0,061	-7,600	0,229	-48,753	0,094	0,128
3590	ZINC04213122	-7,200	0,083	-7,800	0,257	-46,152	0,043	0,128
3591	ZINC72266269	-7,810	0,146	-7,200	0,171	-47,284	0,065	0,128
3592	ZINC03830256	-7,180	0,081	-7,700	0,243	-46,928	0,058	0,127
3593	ZINC08214660	-7,770	0,142	-6,800	0,114	-50,379	0,125	0,127
3594	ZINC01530565	-6,990	0,061	-8,200	0,314	-44,232	0,006	0,127
3595	ZINC19368427	-8,110	0,178	-7,300	0,186	-44,859	0,018	0,127
3596	ZINC59586795	-6,570	0,018	-6,200	0,029	-61,170	0,335	0,127

3597	ZINC08214735	-8,600	0,228	-6,700	0,100	-46,645	0,053	0,127
3598	ZINC00003986	-7,300	0,093	-7,500	0,214	-47,704	0,073	0,127
3599	ZINC01851109	-7,990	0,165	-7,500	0,214	-44,014	0,002	0,127
3600	ZINC03644825	-7,700	0,135	-7,500	0,214	-45,524	0,031	0,127
3601	ZINC04557101	-7,360	0,100	-7,000	0,143	-51,015	0,138	0,127
3602	ZINC38141586	-8,260	0,193	-6,600	0,086	-49,129	0,101	0,127
3603	ZINC04214712	-6,680	0,029	-7,100	0,157	-53,861	0,193	0,126
3604	ZINC30691193	-8,570	0,225	-6,900	0,129	-45,229	0,025	0,126
3605	ZINC01846065	-8,270	0,194	-7,100	0,157	-45,361	0,028	0,126
3606	ZINC03914981	-6,720	0,033	-8,400	0,343	-44,076	0,003	0,126
3607	ZINC84758843	-6,810	0,043	-7,800	0,257	-48,004	0,079	0,126
3608	ZINC02031038	-7,110	0,074	-7,500	0,214	-48,605	0,091	0,126
3609	ZINC00608086	-8,200	0,187	-7,300	0,186	-44,250	0,006	0,126
3610	ZINC04096261	-7,620	0,127	-7,600	0,229	-45,142	0,024	0,126
3611	ZINC03604324	-6,400	0,000	-8,200	0,314	-47,232	0,064	0,126
3612	ZINC00001581	-8,450	0,213	-7,000	0,143	-45,094	0,023	0,126
3613	ZINC04215856	-8,380	0,206	-6,700	0,100	-47,638	0,072	0,126
3614	ZINC03831397	-7,810	0,146	-7,500	0,214	-44,802	0,017	0,126
3615	ZINC13298738	-7,240	0,087	-7,600	0,229	-47,105	0,062	0,126
3616	ZINC44418292	-8,140	0,181	-7,100	0,157	-45,969	0,040	0,126
3617	ZINC03830720	-6,740	0,035	-7,000	0,143	-54,119	0,198	0,125
3618	ZINC01532336	-6,790	0,040	-8,000	0,286	-46,496	0,050	0,125
3619	ZINC02017416	-7,380	0,102	-7,600	0,229	-46,230	0,045	0,125
3620	ZINC03804057	-7,290	0,092	-7,700	0,243	-45,975	0,040	0,125
3621	ZINC02021799	-8,700	0,239	-6,900	0,129	-44,298	0,007	0,125
3622	ZINC01846741	-6,570	0,018	-7,700	0,243	-49,792	0,114	0,125
3623	ZINC03874214	-7,370	0,101	-7,800	0,257	-44,778	0,017	0,125
3624	ZINC33955230	-7,300	0,093	-7,300	0,186	-48,772	0,094	0,124
3625	ZINC00020252	-6,990	0,061	-8,100	0,300	-44,529	0,012	0,124
3626	ZINC00967940	-7,210	0,084	-7,500	0,214	-47,706	0,073	0,124
3627	ZINC02041344	-8,430	0,211	-6,900	0,129	-45,588	0,032	0,124
3628	ZINC03871513	-6,920	0,054	-7,000	0,143	-52,920	0,175	0,124
3629	ZINC03830954	-8,440	0,212	-7,100	0,157	-44,041	0,002	0,124
3630	ZINC03831160	-6,540	0,015	-7,400	0,200	-51,978	0,156	0,124
3631	ZINC03831396	-6,740	0,035	-8,200	0,314	-44,987	0,021	0,123
3632	ZINC08214591	-7,110	0,074	-7,100	0,157	-51,080	0,139	0,123
3633	ZINC00607834	-8,380	0,206	-7,100	0,157	-44,292	0,007	0,123
3634	ZINC00000211	-7,540	0,118	-7,700	0,243	-44,350	0,008	0,123
3635	ZINC03831485	-6,730	0,034	-8,300	0,329	-44,258	0,006	0,123
3636	ZINC04215199	-8,020	0,168	-7,100	0,157	-46,118	0,043	0,123
3637	ZINC18268128	-6,680	0,029	-8,200	0,314	-45,167	0,024	0,122
3638	ZINC08402806	-7,400	0,104	-7,000	0,143	-50,140	0,121	0,122
3639	ZINC02017625	-6,420	0,002	-8,500	0,357	-44,340	0,008	0,122

3640	ZINC03812863	-6,460	0,006	-7,900	0,271	-48,528	0,089	0,122
3641	ZINC00000263	-6,640	0,025	-8,100	0,300	-46,056	0,041	0,122
3642	ZINC98214852	-7,990	0,165	-7,000	0,143	-46,924	0,058	0,122
3643	ZINC19368425	-8,310	0,198	-7,100	0,157	-44,426	0,010	0,122
3644	ZINC05353020	-7,230	0,086	-7,600	0,229	-46,515	0,050	0,122
3645	ZINC01851155	-7,220	0,085	-7,500	0,214	-47,267	0,065	0,121
3646	ZINC09575047	-6,500	0,010	-6,900	0,129	-55,512	0,225	0,121
3647	ZINC02007883	-6,840	0,046	-7,900	0,271	-46,333	0,047	0,121
3648	ZINC13545097	-7,290	0,092	-7,600	0,229	-46,102	0,042	0,121
3649	ZINC03830709	-7,200	0,083	-7,300	0,186	-48,771	0,094	0,121
3650	ZINC03630866	-7,030	0,065	-7,800	0,257	-45,991	0,040	0,121
3651	ZINC04097300	-6,440	0,004	-6,800	0,114	-56,494	0,244	0,121
3652	ZINC04099012	-6,590	0,020	-8,100	0,300	-46,120	0,043	0,121
3653	ZINC08214548	-7,920	0,158	-6,800	0,114	-48,545	0,090	0,121
3654	ZINC04216050	-7,570	0,121	-6,400	0,057	-53,344	0,183	0,121
3655	ZINC11592629	-7,470	0,111	-7,100	0,157	-48,729	0,093	0,121
3656	ZINC33650038	-7,540	0,118	-7,500	0,214	-45,411	0,029	0,121
3657	ZINC01576166	-6,620	0,023	-8,200	0,314	-45,096	0,023	0,120
3658	ZINC08214459	-6,780	0,039	-6,800	0,114	-54,516	0,206	0,120
3659	ZINC05341498	-7,800	0,145	-7,200	0,171	-46,112	0,042	0,120
3660	ZINC00057480	-6,940	0,056	-8,100	0,300	-44,072	0,003	0,120
3661	ZINC03831595	-8,580	0,226	-6,500	0,071	-47,054	0,061	0,120
3662	ZINC04215003	-6,720	0,033	-7,100	0,157	-52,535	0,167	0,119
3663	ZINC03802189	-7,910	0,157	-7,100	0,157	-46,144	0,043	0,119
3664	ZINC11616526	-6,770	0,038	-8,200	0,314	-44,124	0,004	0,119
3665	ZINC08214457	-6,880	0,050	-7,300	0,186	-50,147	0,121	0,119
3666	ZINC08101128	-8,110	0,178	-6,300	0,043	-50,914	0,136	0,119
3667	ZINC02032621	-7,410	0,105	-7,400	0,200	-46,559	0,051	0,119
3668	ZINC24219062	-6,670	0,028	-7,800	0,257	-47,571	0,071	0,119
3669	ZINC03871610	-6,430	0,003	-7,500	0,214	-51,054	0,139	0,119
3670	ZINC00000171	-6,420	0,002	-8,300	0,329	-45,200	0,025	0,118
3671	ZINC00608114	-7,690	0,134	-7,400	0,200	-45,011	0,021	0,118
3672	ZINC04214955	-7,650	0,130	-7,000	0,143	-48,163	0,082	0,118
3673	ZINC08214585	-6,460	0,006	-7,000	0,143	-54,513	0,206	0,118
3674	ZINC08214692	-7,070	0,070	-7,100	0,157	-50,516	0,128	0,118
3675	ZINC12503265	-6,590	0,020	-8,300	0,329	-44,258	0,006	0,118
3676	ZINC03831395	-7,420	0,106	-7,000	0,143	-49,350	0,105	0,118
3677	ZINC02016257	-7,850	0,151	-7,400	0,200	-44,102	0,003	0,118
3678	ZINC01887263	-6,930	0,055	-7,800	0,257	-46,073	0,042	0,118
3679	ZINC01842716	-7,270	0,090	-7,300	0,186	-47,913	0,077	0,118
3680	ZINC43219582	-6,430	0,003	-7,000	0,143	-54,598	0,207	0,118
3681	ZINC08035458	-8,550	0,223	-6,900	0,129	-43,985	0,001	0,118
3682	ZINC00538096	-6,830	0,045	-7,800	0,257	-46,543	0,051	0,118

3683	ZINC35328439	-7,780	0,143	-7,000	0,143	-47,238	0,064	0,117
3684	ZINC03830998	-7,860	0,152	-6,800	0,114	-48,272	0,084	0,117
3685	ZINC03831113	-7,820	0,147	-7,000	0,143	-46,979	0,059	0,117
3686	ZINC02004497	-7,040	0,066	-7,800	0,257	-45,262	0,026	0,117
3687	ZINC00000430	-7,840	0,150	-7,100	0,157	-46,131	0,043	0,116
3688	ZINC11677144	-7,120	0,075	-7,100	0,157	-49,963	0,117	0,116
3689	ZINC03830417	-6,940	0,056	-6,600	0,086	-54,538	0,206	0,116
3690	ZINC04213461	-8,120	0,179	-6,700	0,100	-47,478	0,069	0,116
3691	ZINC13118883	-7,270	0,090	-7,500	0,214	-46,099	0,042	0,116
3692	ZINC03926191	-6,580	0,019	-7,500	0,214	-49,744	0,113	0,115
3693	ZINC03830477	-7,380	0,102	-7,500	0,214	-45,455	0,030	0,115
3694	ZINC12503268	-6,640	0,025	-8,200	0,314	-44,258	0,006	0,115
3695	ZINC00004390	-6,930	0,055	-7,900	0,271	-44,909	0,019	0,115
3696	ZINC02018952	-7,810	0,146	-6,900	0,129	-47,544	0,070	0,115
3697	ZINC72266773	-8,170	0,184	-6,200	0,029	-50,735	0,132	0,115
3698	ZINC01530713	-6,640	0,025	-7,600	0,229	-48,597	0,091	0,115
3699	ZINC01846353	-7,580	0,123	-7,200	0,171	-46,510	0,050	0,115
3700	ZINC03830499	-7,430	0,107	-7,400	0,200	-45,827	0,037	0,115
3701	ZINC04674533	-6,460	0,006	-8,300	0,329	-44,392	0,009	0,115
3702	ZINC04474575	-8,110	0,178	-6,500	0,071	-48,799	0,095	0,115
3703	ZINC01633925	-8,320	0,199	-6,900	0,129	-44,634	0,014	0,114
3704	ZINC01841829	-8,200	0,187	-7,000	0,143	-44,536	0,012	0,114
3705	ZINC30690638	-6,460	0,006	-8,300	0,329	-44,258	0,006	0,114
3706	ZINC01851920	-7,890	0,155	-6,900	0,129	-46,884	0,057	0,114
3707	ZINC32839026	-7,410	0,105	-6,500	0,071	-52,386	0,164	0,114
3708	ZINC11616644	-7,900	0,156	-6,500	0,071	-49,737	0,113	0,113
3709	ZINC33505730	-7,960	0,162	-7,100	0,157	-44,995	0,021	0,113
3710	ZINC14115731	-6,780	0,039	-6,400	0,057	-56,427	0,243	0,113
3711	ZINC02033840	-6,970	0,059	-7,900	0,271	-44,382	0,009	0,113
3712	ZINC85536932	-6,770	0,038	-7,000	0,143	-52,032	0,158	0,113
3713	ZINC01641299	-6,570	0,018	-8,200	0,314	-44,258	0,006	0,113
3714	ZINC01530570	-7,110	0,074	-6,900	0,129	-50,898	0,135	0,113
3715	ZINC03830418	-7,040	0,066	-6,800	0,114	-51,996	0,157	0,113
3716	ZINC01547604	-7,640	0,129	-7,300	0,186	-45,110	0,023	0,112
3717	ZINC08214590	-6,400	0,000	-7,200	0,171	-52,468	0,166	0,112
3718	ZINC00001271	-7,620	0,127	-7,100	0,157	-46,684	0,054	0,112
3719	ZINC03913912	-7,290	0,092	-7,200	0,171	-47,702	0,073	0,112
3720	ZINC00598590	-7,020	0,064	-7,700	0,243	-45,464	0,030	0,112
3721	ZINC03830454	-7,230	0,086	-7,000	0,143	-49,455	0,107	0,112
3722	ZINC01542002	-7,260	0,089	-7,300	0,186	-47,071	0,061	0,112
3723	ZINC01844982	-6,730	0,034	-8,000	0,286	-44,720	0,015	0,112
3724	ZINC30690629	-6,530	0,013	-8,200	0,314	-44,258	0,006	0,111
3725	ZINC27526646	-6,560	0,017	-6,500	0,071	-56,568	0,246	0,111



3726	ZINC00005191	-8,440	0,212	-6,800	0,114	-44,294	0,007	0,111
3727	ZINC03623390	-6,560	0,017	-8,100	0,300	-44,686	0,015	0,110
3728	ZINC31261645	-7,070	0,070	-7,600	0,229	-45,595	0,032	0,110
3729	ZINC08101135	-6,760	0,037	-6,900	0,129	-52,395	0,165	0,110
3730	ZINC03830498	-7,700	0,135	-7,100	0,157	-45,886	0,038	0,110
3731	ZINC02017415	-7,160	0,079	-7,400	0,200	-46,537	0,051	0,110
3732	ZINC04213380	-7,810	0,146	-6,700	0,100	-48,202	0,083	0,110
3733	ZINC03830749	-7,330	0,097	-7,400	0,200	-45,599	0,032	0,110
3734	ZINC08101130	-7,800	0,145	-6,200	0,029	-51,892	0,155	0,110
3735	ZINC28571311	-7,770	0,142	-7,300	0,186	-43,948	0,000	0,109
3736	ZINC01530567	-7,190	0,082	-7,100	0,157	-48,481	0,089	0,109
3737	ZINC56898863	-8,280	0,195	-6,200	0,029	-49,263	0,104	0,109
3738	ZINC01957899	-8,010	0,167	-7,100	0,157	-44,087	0,003	0,109
3739	ZINC03875342	-7,390	0,103	-6,900	0,129	-48,839	0,095	0,109
3740	ZINC01665651	-7,250	0,088	-7,600	0,229	-44,412	0,009	0,109
3741	ZINC98214850	-8,230	0,190	-6,200	0,029	-49,463	0,108	0,109
3742	ZINC72266963	-7,660	0,131	-7,200	0,171	-45,097	0,023	0,108
3743	ZINC04215778	-6,400	0,000	-7,900	0,271	-46,679	0,053	0,108
3744	ZINC59587269	-7,470	0,111	-7,200	0,171	-46,060	0,041	0,108
3745	ZINC01851921	-7,250	0,088	-7,100	0,157	-47,910	0,077	0,108
3746	ZINC00608201	-8,280	0,195	-6,700	0,100	-45,332	0,027	0,108
3747	ZINC04215615	-8,040	0,170	-6,800	0,114	-45,836	0,037	0,107
3748	ZINC40163207	-7,800	0,145	-7,200	0,171	-44,174	0,005	0,107
3749	ZINC08143723	-7,070	0,070	-7,300	0,186	-47,335	0,066	0,107
3750	ZINC04213578	-7,550	0,119	-6,800	0,114	-48,429	0,087	0,107
3751	ZINC08214560	-8,120	0,179	-6,500	0,071	-47,583	0,071	0,107
3752	ZINC73305257	-7,080	0,071	-7,300	0,186	-47,245	0,064	0,107
3753	ZINC01542927	-7,910	0,157	-6,900	0,129	-45,699	0,034	0,107
3754	ZINC19594594	-7,660	0,131	-7,200	0,171	-44,818	0,017	0,107
3755	ZINC56897660	-8,590	0,227	-6,300	0,043	-46,461	0,049	0,107
3756	ZINC03830719	-6,640	0,025	-6,900	0,129	-52,425	0,165	0,106
3757	ZINC03872605	-7,440	0,108	-7,400	0,200	-44,447	0,010	0,106
3758	ZINC01534254	-7,140	0,077	-6,700	0,100	-51,153	0,140	0,106
3759	ZINC08214614	-6,480	0,008	-6,200	0,029	-58,343	0,280	0,106
3760	ZINC03830452	-6,860	0,048	-7,200	0,171	-48,948	0,098	0,106
3761	ZINC01999404	-7,150	0,078	-7,500	0,214	-45,190	0,025	0,106
3762	ZINC31283197	-7,580	0,123	-7,000	0,143	-46,527	0,051	0,105
3763	ZINC05934092	-6,710	0,032	-7,900	0,271	-44,481	0,011	0,105
3764	ZINC38141462	-8,110	0,178	-6,700	0,100	-45,820	0,037	0,105
3765	ZINC02015997	-7,850	0,151	-7,000	0,143	-44,985	0,021	0,105
3766	ZINC19369227	-7,840	0,150	-6,900	0,129	-45,767	0,036	0,105
3767	ZINC04217102	-6,530	0,013	-7,600	0,229	-47,615	0,072	0,105
3768	ZINC19364698	-8,110	0,178	-6,900	0,129	-44,315	0,008	0,105

3769	ZINC38141554	-8,200	0,187	-6,200	0,029	-48,975	0,098	0,105
3770	ZINC03830449	-6,760	0,037	-7,400	0,200	-47,846	0,076	0,105
3771	ZINC01633926	-7,680	0,133	-7,200	0,171	-44,343	0,008	0,104
3772	ZINC00014360	-7,340	0,098	-7,400	0,200	-44,628	0,014	0,104
3773	ZINC00000039	-7,070	0,070	-7,300	0,186	-46,795	0,056	0,104
3774	ZINC14087743	-6,830	0,045	-6,000	0,000	-57,608	0,266	0,104
3775	ZINC06507052	-6,770	0,038	-7,200	0,171	-49,068	0,100	0,103
3776	ZINC04216581	-8,520	0,220	-6,500	0,071	-44,853	0,018	0,103
3777	ZINC98214885	-8,140	0,181	-6,500	0,071	-46,876	0,057	0,103
3778	ZINC01905201	-6,870	0,049	-7,600	0,229	-45,471	0,030	0,102
3779	ZINC00001377	-7,230	0,086	-7,300	0,186	-45,733	0,035	0,102
3780	ZINC01633928	-7,680	0,133	-6,900	0,129	-46,172	0,044	0,102
3781	ZINC33647139	-8,220	0,189	-6,800	0,114	-44,008	0,002	0,102
3782	ZINC15848211	-6,940	0,056	-7,300	0,186	-47,147	0,063	0,101
3783	ZINC08214447	-7,510	0,115	-6,400	0,057	-50,643	0,131	0,101
3784	ZINC00000257	-7,050	0,067	-7,400	0,200	-45,736	0,035	0,101
3785	ZINC03830881	-6,830	0,045	-7,000	0,143	-49,839	0,115	0,101
3786	ZINC01541080	-6,890	0,051	-7,000	0,143	-49,498	0,108	0,101
3787	ZINC43335055	-6,490	0,009	-6,400	0,057	-56,005	0,235	0,100
3788	ZINC08469359	-6,940	0,056	-7,000	0,143	-49,147	0,101	0,100
3789	ZINC03843198	-7,530	0,117	-7,200	0,171	-44,465	0,010	0,100
3790	ZINC01851171	-7,510	0,115	-7,200	0,171	-44,527	0,012	0,099
3791	ZINC04214908	-7,160	0,079	-7,400	0,200	-44,925	0,019	0,099
3792	ZINC02016029	-7,740	0,139	-7,100	0,157	-44,024	0,002	0,099
3793	ZINC01693431	-7,160	0,079	-7,500	0,214	-44,120	0,004	0,099
3794	ZINC22463132	-7,510	0,115	-6,700	0,100	-48,125	0,082	0,099
3795	ZINC04215955	-7,120	0,075	-7,100	0,157	-47,249	0,065	0,099
3796	ZINC03830266	-6,640	0,025	-7,400	0,200	-47,570	0,071	0,099
3797	ZINC06920384	-8,430	0,211	-6,100	0,014	-47,554	0,070	0,099
3798	ZINC03780931	-6,510	0,011	-6,700	0,100	-53,318	0,182	0,098
3799	ZINC32840903	-6,880	0,050	-6,500	0,071	-52,698	0,170	0,097
3800	ZINC03830994	-7,380	0,102	-7,100	0,157	-45,564	0,032	0,097
3801	ZINC08214615	-8,180	0,185	-6,700	0,100	-44,213	0,006	0,097
3802	ZINC08214469	-6,980	0,060	-6,900	0,129	-49,122	0,101	0,097
3803	ZINC04214369	-8,080	0,174	-6,600	0,086	-45,404	0,029	0,096
3804	ZINC40163208	-7,660	0,131	-6,900	0,129	-45,429	0,029	0,096
3805	ZINC72266268	-7,110	0,074	-7,100	0,157	-46,867	0,057	0,096
3806	ZINC00896523	-7,240	0,087	-7,100	0,157	-46,164	0,043	0,096
3807	ZINC01846354	-7,730	0,138	-6,800	0,114	-45,736	0,035	0,096
3808	ZINC18046611	-7,340	0,098	-7,200	0,171	-44,756	0,016	0,095
3809	ZINC31283194	-7,750	0,140	-7,000	0,143	-44,018	0,002	0,095
3810	ZINC72266940	-7,180	0,081	-6,400	0,057	-51,467	0,147	0,095
3811	ZINC01530568	-6,970	0,059	-7,000	0,143	-48,175	0,083	0,095

3812	ZINC19369230	-7,250	0,088	-6,900	0,129	-47,289	0,065	0,094
3813	ZINC06845963	-8,370	0,205	-6,500	0,071	-44,186	0,005	0,094
3814	ZINC08214605	-8,330	0,200	-6,000	0,000	-48,008	0,079	0,093
3815	ZINC03623574	-8,100	0,177	-6,500	0,071	-45,561	0,032	0,093
3816	ZINC08214395	-7,080	0,071	-6,500	0,071	-51,004	0,138	0,093
3817	ZINC01734034	-6,910	0,053	-7,500	0,214	-44,550	0,012	0,093
3818	ZINC60291131	-6,400	0,000	-7,100	0,157	-50,103	0,120	0,092
3819	ZINC11680721	-7,350	0,099	-6,600	0,086	-48,641	0,092	0,092
3820	ZINC04216500	-6,950	0,057	-7,500	0,214	-44,153	0,004	0,092
3821	ZINC85540089	-6,450	0,005	-6,800	0,114	-51,862	0,154	0,091
3822	ZINC03830993	-7,200	0,083	-7,200	0,171	-44,842	0,018	0,091
3823	ZINC08214428	-6,750	0,036	-6,800	0,114	-50,187	0,122	0,091
3824	ZINC01537504	-6,780	0,039	-7,200	0,171	-47,085	0,061	0,091
3825	ZINC06845860	-7,660	0,131	-6,600	0,086	-46,777	0,055	0,091
3826	ZINC00000843	-6,670	0,028	-7,200	0,171	-47,644	0,072	0,091
3827	ZINC08101121	-6,900	0,052	-7,300	0,186	-45,642	0,033	0,090
3828	ZINC03820443	-6,700	0,031	-7,100	0,157	-48,122	0,082	0,090
3829	ZINC08101120	-7,540	0,118	-7,000	0,143	-44,364	0,008	0,090
3830	ZINC04215711	-7,300	0,093	-6,000	0,000	-52,979	0,176	0,090
3831	ZINC82149515	-6,580	0,019	-7,200	0,171	-47,933	0,078	0,089
3832	ZINC00005895	-6,910	0,053	-7,500	0,214	-43,931	0,000	0,089
3833	ZINC84759259	-6,740	0,035	-7,000	0,143	-48,499	0,089	0,089
3834	ZINC14952437	-6,690	0,030	-6,900	0,129	-49,259	0,104	0,087
3835	ZINC01530718	-7,400	0,104	-7,100	0,157	-43,975	0,001	0,087
3836	ZINC84703963	-7,200	0,083	-6,000	0,000	-53,065	0,178	0,087
3837	ZINC03831538	-6,430	0,003	-7,600	0,229	-45,249	0,026	0,086
3838	ZINC49708066	-6,800	0,042	-6,800	0,114	-48,970	0,098	0,085
3839	ZINC17108685	-6,840	0,046	-6,900	0,129	-47,967	0,079	0,084
3840	ZINC08101131	-6,910	0,053	-6,500	0,071	-50,497	0,128	0,084
3841	ZINC72266892	-7,990	0,165	-6,400	0,057	-45,438	0,029	0,084
3842	ZINC72266774	-7,540	0,118	-6,000	0,000	-50,679	0,131	0,083
3843	ZINC04214996	-6,850	0,047	-7,200	0,171	-45,529	0,031	0,083
3844	ZINC04214291	-6,760	0,037	-7,300	0,186	-45,197	0,025	0,083
3845	ZINC98215046	-6,480	0,008	-6,900	0,129	-49,617	0,111	0,082
3846	ZINC02024936	-6,960	0,058	-7,300	0,186	-43,964	0,001	0,082
3847	ZINC85540244	-7,230	0,086	-7,100	0,157	-43,963	0,001	0,081
3848	ZINC04216603	-7,250	0,088	-6,900	0,129	-45,234	0,025	0,081
3849	ZINC02019492	-7,610	0,126	-6,500	0,071	-46,222	0,045	0,081
3850	ZINC04213574	-7,520	0,116	-6,600	0,086	-45,967	0,040	0,081
3851	ZINC38141554	-7,500	0,114	-6,400	0,057	-47,462	0,069	0,080
3852	ZINC98215031	-6,450	0,005	-6,700	0,100	-50,825	0,134	0,080
3853	ZINC84759258	-6,530	0,013	-7,200	0,171	-46,708	0,054	0,080
3854	ZINC11616645	-7,500	0,114	-6,200	0,029	-48,823	0,095	0,079

3855	ZINC04214503	-7,380	0,102	-6,800	0,114	-45,021	0,021	0,079
3856	ZINC72266775	-7,360	0,100	-6,100	0,014	-50,208	0,122	0,079
3857	ZINC03630864	-6,450	0,005	-7,400	0,200	-45,514	0,031	0,079
3858	ZINC11616646	-7,480	0,112	-6,200	0,029	-48,827	0,095	0,079
3859	ZINC84758844	-7,010	0,063	-6,300	0,043	-50,578	0,129	0,078
3860	ZINC84758845	-7,310	0,094	-6,300	0,043	-48,933	0,097	0,078
3861	ZINC01552175	-6,420	0,002	-7,500	0,214	-44,786	0,017	0,078
3862	ZINC01999510	-7,030	0,065	-7,100	0,157	-44,450	0,010	0,078
3863	ZINC02036734	-7,190	0,082	-7,000	0,143	-44,313	0,007	0,077
3864	ZINC02020087	-6,430	0,003	-7,200	0,171	-46,863	0,057	0,077
3865	ZINC01530942	-7,420	0,106	-6,700	0,100	-45,200	0,025	0,077
3866	ZINC11616643	-7,410	0,105	-6,100	0,014	-49,607	0,110	0,077
3867	ZINC04212476	-6,530	0,013	-6,800	0,114	-49,112	0,101	0,076
3868	ZINC01596184	-7,610	0,126	-6,600	0,086	-44,721	0,015	0,076
3869	ZINC36338586	-7,650	0,130	-6,200	0,029	-47,323	0,066	0,075
3870	ZINC08214426	-7,460	0,110	-6,400	0,057	-46,837	0,057	0,075
3871	ZINC00002176	-7,600	0,125	-6,500	0,071	-45,350	0,028	0,075
3872	ZINC03649806	-6,800	0,042	-7,200	0,171	-44,371	0,009	0,074
3873	ZINC17654112	-7,380	0,102	-6,300	0,043	-47,828	0,076	0,073
3874	ZINC01530762	-6,890	0,051	-6,800	0,114	-46,572	0,051	0,072
3875	ZINC05765543	-6,700	0,031	-7,200	0,171	-44,615	0,013	0,072
3876	ZINC01842971	-6,760	0,037	-7,000	0,143	-45,518	0,031	0,070
3877	ZINC08035017	-7,200	0,083	-6,500	0,071	-46,691	0,054	0,069
3878	ZINC08101117	-7,620	0,127	-6,400	0,057	-45,062	0,022	0,069
3879	ZINC08101193	-6,940	0,056	-6,500	0,071	-47,897	0,077	0,068
3880	ZINC33754376	-7,480	0,112	-6,400	0,057	-45,733	0,035	0,068
3881	ZINC02018421	-6,940	0,056	-6,700	0,100	-46,400	0,048	0,068
3882	ZINC03872006	-6,590	0,020	-6,500	0,071	-49,722	0,113	0,068
3883	ZINC00000131	-6,870	0,049	-6,900	0,129	-45,134	0,023	0,067
3884	ZINC08214589	-7,910	0,157	-6,000	0,000	-45,983	0,040	0,066
3885	ZINC08214408	-6,940	0,056	-6,200	0,029	-49,613	0,110	0,065
3886	ZINC84756674	-7,220	0,085	-6,400	0,057	-46,557	0,051	0,064
3887	ZINC04978673	-7,360	0,100	-6,500	0,071	-44,982	0,021	0,064
3888	ZINC01846265	-6,940	0,056	-6,900	0,129	-44,277	0,007	0,064
3889	ZINC00089652	-6,590	0,020	-7,200	0,171	-43,941	0,000	0,064
3890	ZINC31291669	-6,580	0,019	-7,000	0,143	-45,426	0,029	0,064
3891	ZINC03830947	-6,580	0,019	-6,200	0,029	-51,291	0,143	0,063
3892	ZINC08214416	-6,810	0,043	-6,500	0,071	-47,792	0,075	0,063
3893	ZINC32840901	-6,620	0,023	-6,300	0,043	-50,234	0,123	0,063
3894	ZINC03813061	-6,540	0,015	-6,900	0,129	-46,245	0,045	0,063
3895	ZINC19632713	-6,670	0,028	-7,000	0,143	-44,620	0,013	0,061
3896	ZINC02037736	-7,410	0,105	-6,500	0,071	-44,241	0,006	0,061
3897	ZINC08214516	-6,450	0,005	-6,600	0,086	-48,563	0,090	0,060

3898	ZINC03812866	-6,580	0,019	-7,000	0,143	-44,837	0,018	0,060
3899	ZINC08214965	-6,610	0,022	-6,300	0,043	-49,580	0,110	0,058
3900	ZINC08214499	-6,440	0,004	-6,500	0,071	-48,781	0,094	0,057
3901	ZINC01565547	-6,550	0,016	-7,000	0,143	-44,140	0,004	0,054
3902	ZINC01541061	-6,420	0,002	-7,000	0,143	-44,826	0,017	0,054
3903	ZINC02037735	-7,030	0,065	-6,600	0,086	-44,397	0,009	0,053
3904	ZINC53226638	-6,570	0,018	-6,500	0,071	-47,557	0,071	0,053
3905	ZINC30691250	-7,160	0,079	-6,500	0,071	-44,210	0,006	0,052
3906	ZINC03831114	-6,850	0,047	-6,200	0,029	-47,924	0,078	0,051
3907	ZINC18193448	-7,000	0,062	-6,300	0,043	-46,074	0,042	0,049
3908	ZINC02037958	-6,810	0,043	-6,600	0,086	-44,644	0,014	0,047
3909	ZINC03875764	-7,060	0,069	-6,100	0,014	-46,843	0,057	0,046
3910	ZINC36338585	-7,060	0,069	-6,400	0,057	-44,322	0,008	0,044
3911	ZINC00403609	-6,640	0,025	-6,600	0,086	-45,032	0,021	0,044
3912	ZINC08101181	-7,120	0,075	-6,200	0,029	-45,348	0,028	0,044
3913	ZINC31418152	-6,720	0,033	-6,200	0,029	-46,107	0,042	0,035
3914	ZINC04216585	-6,960	0,058	-6,000	0,000	-46,033	0,041	0,033
3915	ZINC02040984	-6,920	0,054	-6,200	0,029	-44,288	0,007	0,030
3916	ZINC26160335	-6,530	0,013	-6,100	0,014	-46,875	0,057	0,028



## Bibliografía

Acosta, K. (2013). La obesidad y su concentración según nivel socioeconómico en Colombia. *Revista de Economía Del Rosario*, 16(2), 171–200.

Agarwal, A. K., Fishwick, C. W. G. (2010). Structure-based design of anti-infectives. *Annals of the New York Academy of Sciences*, 1213(1), 20–45. <http://doi.org/10.1111/j.1749-6632.2010.05859.x>

Allison, D. B., Downey, M., Atkinson, R. L., Billington, C. J., Bray, G. a, Eckel, R. H., Tremblay, A. (2008). Obesity as a disease: a white paper on evidence and arguments commissioned by the Council of the Obesity Society. *Obesity (Silver Spring, Md.)*, 16(6), 1161–1177. <http://doi.org/10.1038/oby.2008.231>

Al-Masri, I. M. (2013). Pancreatic lipase inhibition by papaverine: Investigation by simulated molecular docking and subsequent *in vitro* evaluation. *Jordan Journal of Pharmaceutical Sciences*, 6(3), 271–279. <http://doi.org/10.12816/0001505>

Aloulou, A., Rodriguez, J. A., Fernandez, S., van Oosterhout, D., Puccinelli, D., Carrière, F. (2006). Exploring the specific features of interfacial enzymology based on lipase studies. *Biochimica et Biophysica Acta - Molecular and Cell Biology of Lipids*, 1761(9), 995–1013. <http://doi.org/10.1016/j.bbali.2006.06.009>

Al-Suwailem, A. K., Al-Tamimi, a. S., Al-Omar, M. A., Al-Suhibani, M. S. (2006). Safety and Mechanism of Action of Orlistat ( Tetrahydrolipstatin ) as the First Local Antiobesity Drug. *Journal of Applied Sciences Research*, 2(4), 205–208. Retrieved from <http://repository.ksu.edu.sa/jspui/handle/123456789/2280>

Arita, Y., Kihara, S. ., Ouchi, N., Takahashi, M., Bray, G. A., Eringa, E. C., Wolf, G. (2006). Obesity: The disease. *Journal of Medicinal Chemistry*, 49(257), 4001–4007. <http://doi.org/10.1021/jm0680124>

Balaji, M., Ganjyai, M. S., Hanuma Kumar, G. E. N., Parim, B. N., Mopuri, R., Dasari, S. (2015). A review on possible therapeutic targets to contain obesity: The role of phytochemicals. *Obesity Research and Clinical Practice*. <http://doi.org/10.1016/j.orcp.2015.12.004>

Ballinger, A., Peikin, S. R. (2002). Orlistat: Its current status as an anti-obesity drug. *European Journal of Pharmacology*, 440(2-3), 109–117. [http://doi.org/10.1016/S0014-2999\(02\)01422-X](http://doi.org/10.1016/S0014-2999(02)01422-X)

Bento, A. P., Gaulton, A., Hersey, A., Bellis, L. J., Chambers, J., Davies, M., Overington, J. P. (2014). The ChEMBL bioactivity database: An update. *Nucleic Acids Research*, 42(D1), 1083–1090.

<http://doi.org/10.1093/nar/gkt1031>

- Birari, R. B., Bhutani, K. K. (2007). Pancreatic lipase inhibitors from natural sources: unexplored potential. *Drug Discovery Today*, 12(19-20), 879–889. <http://doi.org/10.1016/j.drudis.2007.07.024>
- Birari, R. B., Gupta, S., Mohan, C. G., Bhutani, K. K. (2011). Antiobesity and lipid lowering effects of Glycyrrhiza chalcones: Experimental and computational studies. *Phytomedicine*, 18(8-9), 795–801. <http://doi.org/10.1016/j.phymed.2011.01.002>
- Boguski, M. S., Mandl, K. D., Sukhatme, V. P. (2009). Drug discovery. Repurposing with a difference. *Science (New York, N.Y.)*, 324(5933), 1394–1395. <http://doi.org/10.1126/science.1169920>
- Bujjirao, G., Kumar, P. K. R. (2013). Anti-Obese Therapeutics From Medicinal Plants-a Review. *International Journal of Bioassays*, 02(10), 1399–1406.
- Bustanji, Y., Al-Masri, I. M., Mohammad, M., Hudaib, M., Tawaha, K., Tarazi, H., Alkhatib, H. S. (2011). Pancreatic lipase inhibition activity of trilactone terpenes of Ginkgo biloba. *Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry*, 26(4), 453–459. <http://doi.org/10.3109/14756366.2010.525509>
- Calzada León, R. (2003). *Obesidad en niños y adolescentes*. Editores de textos mexicanos S.A, Ed., 1a edición., México, D.F. 220 pp.
- Cerqueira, N. M. F. S. A., Gesto, D., Oliveira, E. F., Santos-Martins, D., Bras, N. F., Sousa, S. F., Ramos, M. J. (2015). Receptor-based virtual screening protocol for drug discovery. *Archives of Biochemistry and Biophysics*, 582, 56–67. <http://doi.org/10.1016/j.abb.2015.05.011>
- Chakrabarti, R. (2009). Pharmacotherapy of obesity: emerging drugs and targets. *Expert Opinion Therapeutic Targets*, 13(2), 319–324. <http://doi.org/10.1016/j.clindermatol.2004.01.008>
- Charlton, M. (2009). Obesity, Hyperlipidemia, and Metabolic Syndrome. *Liver Transplantation*, 15(11), 83 – 89. <http://doi.org/10.1002/lt>.
- Chen, K. Y., Chang, S. Sen, Chen, C. Y. C. (2011). TCM Database@Taiwan: The world's largest traditional Chinese medicine database for drug screening *In Silico*. *PLoS ONE*, 6(1), 1–5. <http://doi.org/10.1371/journal.pone.0015939>
- Chen, K. Y., Chang, S. Sen, Chen, C. Y. C. (2012). *In Silico* Identification of Potent Pancreatic Triacylglycerol Lipase Inhibitors from Traditional Chinese Medicine. *PLoS ONE*, 7(9), 1–11. <http://doi.org/10.1371/journal.pone.0043932>
- Colin, D. Y., Deprez-Beauclair, P., Allouche, M., Brasseur, R., Kerfelec, B. (2008). Exploring the active site cavity of human pancreatic lipase. *Biochemical and Biophysical Research Communications*, 370(3), 394–398. <http://doi.org/10.1016/j.bbrc.2008.03.043>
- Cosconati, S., Forli, S., Perryman, A. L., Harris, R., Goodsell, D. S., Olson, A. J. (2010). Virtual



- Screening with AutoDock: Theory and Practice. *Expert Opinion on Drug Discovery*, 5(6), 597–607. <http://doi.org/10.1517/17460441.2010.484460>
- Daneschvar, H. L., Aronson, M. D., Smetana, G. W. (2016). FDA Approved Anti-obesity Drugs in the United States. *The American Journal of Medicine*. <http://doi.org/10.1016/j.amjmed.2016.02.009>
- Danishuddin, M., Khan, A. U. (2015). Structure based virtual screening to discover putative drug candidates: Necessary considerations and successful case studies. *Methods*, 71(C), 135–145. <http://doi.org/10.1016/j.ymeth.2014.10.019>
- Dridi, K., Amara, S., Bezzine, S., Rodriguez, J. A., Carrière, F., Gaussier, H. (2013). Partial deletion of  $\beta$ 9 loop in pancreatic lipase-related protein 2 reduces enzyme activity with a larger effect on long acyl chain substrates. *Biochimica et Biophysica Acta - Molecular and Cell Biology of Lipids*, 1831(7), 1293–1301. <http://doi.org/10.1016/j.bbalip.2013.04.010>
- Drwal, M. N., Griffith, R. (2013). Combination of ligand- and structure-based methods in virtual screening. *Drug Discovery Today: Technologies*, 10(3), e395–e401. <http://doi.org/10.1016/j.ddtec.2013.02.002>
- Dudley, J. T., Deshpande, T., Butte, A. J. (2011). Exploiting drug-disease relationships for computational drug repositioning. *Briefings in Bioinformatics*, 12(4), 303–311. <http://doi.org/10.1093/bib/bbr013>
- Egloff, M.-P., Merguet F., Buono G., Verger R., Cambillau C., Tilbeurgh, H. Van. (1995). A Resolution Structure of the Pancreatic Lipase-Colipase Complex Inhibited by C11 Alkyl Phosphonate. *Biochemistry*, 34, 2751 – 2762.
- Ewing, T. J. A., Makino, S., Skillman, A. G., Kuntz, I. D. (2001). DOCK 4.0: Search strategies for automated molecular docking of flexible molecule databases. *Journal of Computer-Aided Molecular Design*, 15(5), 411–428. <http://doi.org/10.1023/A:1011115820450>
- Frank, J. (2016). Origins of the obesity pandemic can be analysed. *Nature*, 532, (7598):149. <http://doi.org/10.1038/532149a>
- Gardner, D.G., Shoback, D. (2008). *Endocrinología básica y clínica de Greenspan*. Editorial El Manual Moderno., 7a ed., México D.F. 890 pp.
- Godoy, F. A. (2014). Sintomatología de depresión, ansiedad y baja autoestima en mujeres obesas con trastorno del comedor compulsivo. *Revista Chilena de Nutrición*, 41(5), 260–263. <http://doi.org/10.4067/S0717-75182014000300005>
- González-Bacerio, J., Hernández, J. R., Martínez, A. del M. (2010). Las lipasas: enzimas con potencial para el desarrollo de biocatalizadores inmovilizados por adsorción interfacial. *Revista Colombiana de Biotecnología*, 12(1), 124–140. Retrieved from <http://www.revistas.unal.edu.co/index.php/biotecnologia/article/view/15574/38075>
- Grove, K. a., Sae-tan, S., Kennett, M. J., Lambert, J. D. (2012). (–)-Epigallocatechin-3-gallate Inhibits Pancreatic Lipase and Reduces Body Weight Gain in High Fat-Fed Obese Mice. *Obesity*, 20(11),

2311–2313. <http://doi.org/10.1038/oby.2011.139>

Haslam, D. W., James, W. P. T. (2005). Obesity. *Lancet*, 366(9492), 1197–1209. [http://doi.org/10.1016/S0140-6736\(05\)67483-1](http://doi.org/10.1016/S0140-6736(05)67483-1)

Hassan, A. M. S. (2012). TLC bioautographic method for detecting lipase inhibitors. *Phytochemical Analysis*, 23(4), 405–407. <http://doi.org/10.1002/pca.1372>

He, Q., Lv, Y., Yao, K. (2006). Effects of tea polyphenols on the activities of  $\alpha$ -amylase, pepsin, trypsin and lipase. *Food Chemistry*, 101(3), 1178–1182. <http://doi.org/10.1016/j.foodchem.2006.03.020>

Houston, D. R., Walkinshaw, M. D. (2013). Consensus docking: Improving the reliability of docking in a virtual screening context. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 53(2), 384–390. <http://doi.org/10.1021/ci300399w>

Hu, B., Cui, F., Yin, F., Zeng, X., Sun, Y., Li, Y. (2015). Caffeoylquinic acids competitively inhibit pancreatic lipase through binding to the catalytic triad. *International Journal of Biological Macromolecules*, 80, 529–535. <http://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2015.07.031>

Hu, X., Tao, N., Wang, X., Xiao, J., & Wang, M. (2016). Marine-derived bioactive compounds with anti-obesity effect: A review. *Journal of Functional Foods*, 21, 372–387. <http://doi.org/10.1016/j.jff.2015.12.006>

Hung, C.-L., Chen, C.-C. (2014). Computational approaches for drug discovery. *Drug Development Research*, 75(6), 412–8. <http://doi.org/10.1002/ddr.21222>

Irwin, J. J., Shoichet, B. K. (2005). ZINC - A free database of commercially available compounds for virtual screening. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 45(1), 177–182. <http://doi.org/10.1021/ci049714+>

Jensen, M. D., Ryan, D. H., Apovian, C. M., Ard, J. D., Comuzzie, A. G., Donato, K. A., Yanovski, S. Z. (2014). Guideline for the management of overweight and obesity in adults: A report of the American college of cardiology/American heart association task force on practice guidelines and the obesity society. *Journal of the American College of Cardiology*, 63(25 PART B), 2985–3023. <http://doi.org/10.1016/j.jacc.2013.11.004>

Kang, J. G., Park, C.-Y. (2012). Anti-Obesity Drugs: A Review about Their Effects and Safety. *Diabetes & Metabolism Journal*, 36(1), 13. <http://doi.org/10.4093/dmj.2012.36.1.13>

Kapetanovic, I. M. (2008). Computer-aided drug discovery and development (CADD): *In silico*-chemico-biological approach. *Chemico-Biological Interactions*, 171(2), 165–176. <http://doi.org/10.1016/j.cbi.2006.12.006>

Khedidja, B., Abderrahman, L. (2011). Selection of orlistat as a potential inhibitor for lipase from *Candida* species. *Hypothesis Bioinformation*, 7(73), 973–2063. <http://doi.org/10.6026/97320630007125>

- Kortagere, S., Ekins, S. (2010). Troubleshooting computational methods in drug discovery. *Journal of Pharmacological and Toxicological Methods*, 61(2), 67–75. <http://doi.org/10.1016/j.vascn.2010.02.005>
- Kuntz, I. D., Blaney, J. M., Oatley, S. J., Langridge, R., Ferrin, T. E. (1982). A geometric approach to macromolecule-ligand interactions. *Journal of Molecular Biology*, 161(2), 269–288. [http://doi.org/10.1016/0022-2836\(82\)90153-X](http://doi.org/10.1016/0022-2836(82)90153-X)
- Lafontan, M., Langin, D. (2009). Lipolysis and lipid mobilization in human adipose tissue. *Progress in Lipid Research*, 48(5), 275–297. <http://doi.org/10.1016/j.plipres.2009.05.001>
- Lang, P., Brozell, S., Mukherjee, S., Pettersen, E. (2009). DOCK 6: Combining techniques to model RNA–small molecule complexes. *RNA*, 1219–1230. <http://doi.org/10.1261/rna.1563609.HIV>
- Lavecchia, A., Di Giovanni, C. (2013). Virtual screening strategies in drug discovery: A critical review. *Current Medicinal Chemistry*, 20, 2839–2860. <http://doi.org/10.2174/09298673113209990001>
- Lavie, C. J., McAuley, P. A., Church, T. S., Milani, R. V., Blair, S. N. (2014). Obesity and cardiovascular diseases: Implications regarding fitness, fatness, and severity in the obesity paradox. *Journal of the American College of Cardiology*, 63(14), 1345–1354. <http://doi.org/10.1016/j.jacc.2014.01.022>
- Law, V., Knox, C., Djoumbou, Y., Jewison, T., Guo, A. C., Liu, Y., Wishart, D. S. (2014). DrugBank 4.0: Shedding new light on drug metabolism. *Nucleic Acids Research*, 42(D1), 1091–1097. <http://doi.org/10.1093/nar/gkt1068>
- Lehninger A., Nelson, D., Cox., D. (2009). *Principios de bioquímica*. Ediciones Omega. 5 a Edición., Barcelona 1241 pp.
- Lipinski, C. A. (2004). Lead- and drug-like compounds: The rule-of-five revolution. *Drug Discovery Today: Technologies*, 1(4), 337–341. <http://doi.org/10.1016/j.ddtec.2004.11.007>
- Liu, X., Xie, H., Luo, C., Tong, L., Wang, Y., Peng, T., Li, H. (2010). Discovery and SAR of thiazolidine-2,4-dione analogues as insulin-like growth factor-1 receptor (IGF-IR) inhibitors via hierarchical virtual screening. *Journal of Medicinal Chemistry*, 53(6), 2661–2665. <http://doi.org/10.1021/jm901798e>
- Liu, Z., Fang, H., Reagan, K., Xu, X., Mendrick, D. L., Slikker, W., & Tong, W. (2013). *In silico* drug repositioning-what we need to know. *Drug Discovery Today*, 18(3-4), 110–115. <http://doi.org/10.1016/j.drudis.2012.08.005>
- Lombardino, J. G., & Lowe 3rd, J. A. (2004). The role of the medicinal chemist in drug discovery--then and now. *Nature Reviews Drug Discovery*, 3(10), 853–862. <http://doi.org/10.1038/nrd1523>
- Londoño-Lemos, M. E. (2012). Tratamiento farmacológico contra la obesidad. *Revista Colombiana Ciencias Químico-Farmacéuticas*, 41(2), 217–261.

- Long, J., Cravatt, B. (2012). The Metabolic Serine Hydrolases and Their Functions in Mammalian Physiology and Disease. *Chemical Reviews*, 111(10), 6022–6063. <http://doi.org/10.1021/cr200075y>.
- Loos, R. J. F. (2013). *Obesity: Genetic Factors*. *Encyclopedia of Human Nutrition* (Vol. 3). Elsevier Ltd. <http://doi.org/10.1016/B978-0-12-375083-9.00215-4>
- López-Vallejo, F., Peppard, T. L., Medina-Franco, J. L., Martínez-Mayorga, K. (2011). Computational methods for the discovery of mood disorder therapies. *Expert Opinion on Drug Discovery*, 6(12), 1227–45. <http://doi.org/10.1517/17460441.2011.637106>
- Lunagariya, N. A., Patel, N. K., Jagtap, S. C., Bhutani, K. K. (2014). Inhibitors of pancreatic lipase: State of the art and clinical perspectives. *EXCLI Journal*, 13, 897–921.
- Malik, V. S., Willett, W. C., Hu, F. B. (2013). Global obesity: trends, risk factors and policy implications. *Nature Reviews. Endocrinology*, 9(1), 13–27. <http://doi.org/10.1038/nrendo.2012.199>
- Medina-Franco, J. L., Lopez-Vallejo, F., Castillo, R. (2006). Diseño de Fármacos Asistido por Computadora. *Educación Química*, 17(4), 452–457.
- Medina-Franco, J.-L. (2007). Aplicaciones exitosas. *Ciencia*, 1–8.
- Mendez-Lucio, O., Tran, J., Medina-Franco, J. L., Meurice, N., Muller, M. (2014). Toward drug repurposing in epigenetics: Olsalazine as a hypomethylating compound active in a cellular context. *ChemMedChem*, 9(3), 560–565. <http://doi.org/10.1002/cmdc.201300555>
- Mendoza Meza, L. D., & Medina Valdés, R. (2015). Inhibición *in vitro* de las enzimas alfa-amilasa y lipasa pancreática por fracciones fenólicas de extractos etanólicos de hojas de Yacón (*Smallanthus sonchifolius* Poepp. & Endl). *Avances en Química*, 10(1), 33–40.
- Mignani, S., Huber, S., Tomás, H., Rodrigues, J., Majoral, J.-P. (2016). Compound high-quality criteria: A new vision to guide the development of drugs, current situation. *Drug Discovery Today*, 00(00), 1–12. <http://doi.org/10.1016/j.drudis.2016.01.005>
- Miled, N., Canaan, S., Dupuis, L., Roussel, A., Rivière, M., Carrière, F., Verger, R. (2000). Digestive lipases: From three-dimensional structure of physiology. *Biochimie*, 82(11), 973–986. [http://doi.org/10.1016/S0300-9084\(00\)01179-2](http://doi.org/10.1016/S0300-9084(00)01179-2)
- Mohammad, M., Al-Masri, I. M., Issa, A., Khair, A., Bustanji, Y. (2013). Inhibition of pancreatic lipase by berberine and dihydroberberine: An investigation by docking simulation and experimental validation. *Medicinal Chemistry Research*, 22(5), 2273–2278. <http://doi.org/10.1007/s00044-012-0221-9>
- Morris, G. M., Huey, R., Lindstrom, W., Sanner, M. F., Belew, R. K., Goodsell, D. S., Olson, A. (2010). AutoDock4 and AutoDockTools4: Automated Docking with Selective Receptor Flexibility. *Journal of Computational Chemistry*, 30(16), 2785–2791. <http://doi.org/10.1002/jcc.21256>

- Mu, H., Høy, C. E. (2004). The digestion of dietary triacylglycerols. *Progress in Lipid Research*, 43(2), 105–133. [http://doi.org/10.1016/S0163-7827\(03\)00050-X](http://doi.org/10.1016/S0163-7827(03)00050-X)
- Mukherjee, M. (2003). Human digestive and metabolic lipases - A brief review. *Journal of Molecular Catalysis B: Enzymatic*, 22(5-6), 369–376. [http://doi.org/10.1016/S1381-1177\(03\)00052-3](http://doi.org/10.1016/S1381-1177(03)00052-3)
- Ng, M., Fleming, T., Robinson, M., Thomson, B., Graetz, N., Margono, C., Gakidou, E. (2014). Global, regional, and national prevalence of overweight and obesity in children and adults during 1980-2013: A systematic analysis for the Global Burden of Disease Study 2013. *The Lancet*, 384(9945), 766–781. [http://doi.org/10.1016/S0140-6736\(14\)60460-8](http://doi.org/10.1016/S0140-6736(14)60460-8)
- Nguyen, H., Do, T., Truong, V., Thai, K., Tran, N., Tran, T. (2012). Design , Synthesis and Biological Evaluation of some Chalcone Derivatives as Potential Pancreatic Lipase Inhibitors, *The 17th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry*, 1–7. <http://doi.org/10.3390/ecsoc-17-b021>
- Oda, A., Tsuchida, K., Takakura, T., Yamaotsu, N., Hirono, S. (2006). Comparison of consensus scoring strategies for evaluating computational models of protein-ligand complexes. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 46(1), 380–391. <http://doi.org/10.1021/ci050283k>.
- OMS, Organización Mundial de Salud (2000). Obesity: Preventing and Managing the Global Epidemic: Report of a WHO Consultation. Geneva: *Technical Report Series.*, No. 894.
- OMS, Organización Mundial de la Salud (2015). OMS | Obesidad y sobrepeso. 311. Ginebra. Retrieved from <http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs311/es/>
- Patel, D. (2015). Pharmacotherapy for the management of obesity. *Metabolism: Clinical and Experimental*, 64(11), 1376–1385. <http://doi.org/10.1016/j.metabol.2015.08.001>
- Pettersen, E. F., Goddard, T. D., Huang, C. C., Couch, G. S., Greenblatt, D. M., Meng, E. C., Ferrin, T. E. (2004). UCSF Chimera - A visualization system for exploratory research and analysis. *Journal of Computational Chemistry*, 25(13), 1605–1612. <http://doi.org/10.1002/jcc.20084>
- Platt, T. L., Beckett, T. L., Kohler, K., Niedowicz, D. M., Murphy, M. P. (2015). Obesity, diabetes, and leptin resistance promote tau pathology in a mouse model of disease. *Neuroscience*, 315, 162–174. <http://doi.org/10.1016/j.neuroscience.2015.12.011>
- Rahim, A. T. M. A., Takahashi, Y., Yamaki, K. (2015). Mode of pancreatic lipase inhibition activity *in vitro* by some flavonoids and non-flavonoid polyphenols. *Food Research International*, 75, 289–294. <http://doi.org/10.1016/j.foodres.2015.05.017>
- Rajmil, L., Bel, J., Clofent, R., Cabezas, C., Castell, C., Espallargues, M. (2016). Intervenciones clínicas en sobrepeso y obesidad: revisión sistemática de la literatura 2009-2014. *Anales de Pediatría*, (XX). <http://doi.org/10.1016/j.anpedi.2016.03.012>
- Reis, P., Holmberg, K., Watzke, H., Leser, M. E., Miller, R. (2009). Lipases at interfaces: A review. *Advances in Colloid and Interface Science*, 147-148(C), 237–250. <http://doi.org/10.1016/j.cis.2008.06.001>

- Rodrigues, T., Schneider, G. (2015). *In Silico Screening: Hit Finding from Database Mining. The Practice of Medicinal Chemistry: Fourth Edition*. Elsevier Ltd. <http://doi.org/10.1016/B978-0-12-417205-0.00006-7>
- Salas-Salvadó, J., Rubio, M. a., Barbany, M., Moreno, B. (2007). Consenso SEEDO 2007 para la evaluación del sobrepeso y la obesidad y el establecimiento de criterios de intervención terapéutica. *Medicina Clínica*, 128(5), 184–196. [http://doi.org/10.1016/S0025-7753\(07\)72531-9](http://doi.org/10.1016/S0025-7753(07)72531-9)
- Sastre, J., & Sabater, L. (2005). Fisiología de la secreción pancreática., *Gastroenterol Hepatol* 28(Supl 2), 3–9.
- Sharma, N., Sharma, V. K., Seo, S. Y. (2005). Screening of some medicinal plants for anti-lipase activity. *Journal of Ethnopharmacology*, 97(3), 453–456. <http://doi.org/10.1016/j.jep.2004.11.009>
- Shen, B., Yu, Y., Chen, H., Cao, X., Lao, X., Fang, Y., Zheng, H. (2013). Inhibitor Discovery of Full-Length New Delhi Metallo-Lactamase-1 (NDM-1). *PLoS ONE*, 8(5), 1–10. <http://doi.org/10.1371/journal.pone.0062955>
- Sliwoski, G., Kothiwale, S., Meiler, J., Lowe, E. W. (2014). Computational Methods in Drug Discovery,, 334–395. *Pharmacology Review* 66:334–395 <http://dx.doi.org/10.1124/pr.112.007336>
- Sui, Y., Zhao, H. L., Wong, V. C. W., Brown, N., Li, X. L., Kwan, A. K. L., Chan, J. C. N. (2012). A systematic review on use of chinese medicine and acupuncture for treatment of obesity. *Obesity Reviews*, 13(5), 409–430. <http://doi.org/10.1111/j.1467-789X.2011.00979.x>
- Sukhdev, S., Singh, K. S. (2013). Therapeutic Role of Phytomedicines on Obesity: Importance of Herbal Pancreatic lipase Inhibitors. *International Research Journal of Medical Sciencies*, 1(9), 15–26.
- Tejero, M. E. (2008). Genética de la Obesidad. *Boletín Médico Del Hospital Infantil de México*, 65(6), 441–450.
- Trott, O., Olson, A. (2010). Software News and Update AutoDock Vina: Improving the Speed and Accuracy of Docking with a New Scoring Function, Efficient Optimization, and Multithreading. *Journal of Computational Chemistry*, 31(02), 455–461. <http://doi.org/10.1002/jcc.21334>
- Van Bloemendaal, L., ten Kulve, J. S., La Fleur, S. E., Ijzerman, R. G., Diamant, M. (2014). Effects of glucagon-like peptide 1 on appetite and body weight: Focus on the CNS. *Journal of Endocrinology*, 221(1). <http://doi.org/10.1530/JOE-13-0414>
- Van Tilbeurgh, H., Bezzine, S., Cambillau, C., Verger, R., Carrière, F. (1999). Colipase: Structure and interaction with pancreatic lipase. *Biochimica et Biophysica Acta - Molecular and Cell Biology of Lipids*, 1441(2-3), 173–184. [http://doi.org/10.1016/S1388-1981\(99\)00149-3](http://doi.org/10.1016/S1388-1981(99)00149-3)

- Vandevijvere, S., Chow, C. C., Hall, K. D., Swinburn, B. A. (2015). Increased food energy supply as a major driver of the obesity epidemic : a global analysis. *Bull World Health Organ*, 93, 446–456. <http://doi.org/http://dx.doi.org/10.2471/BLT.14.150565>
- Veeramachaneni, G. K., Raj, K. K., Chalasani, L. M., Bondili, J. S., Talluri, V. R. (2015). High-throughput virtual screening with e-pharmacophore and molecular simulations study in the designing of pancreatic lipase inhibitors. *Drug Design, Development and Therapy*, 9, 4397–4412. <http://doi.org/10.2147/DDDT.S84052>
- Vucenik, I., Stains, J. P. (2012). Obesity and cancer risk: Evidence, mechanisms, and recommendations. *Annals of the New York Academy of Sciences*, 1271(1), 37–43. <http://doi.org/10.1111/j.1749-6632.2012.06750.x>
- Winkler, F.K., D'Arcy, A., Hunziker, W. (1990) Structure of human pancreatic lipase. *Nature* 343, 771-774.
- Wolber, G., Dornhofer, A. A., Langer, T. (2007) Efficient overlay of small organic molecules using 3D pharmacophores. *Journal of Computer-Aided Molecular Design*, 20(12); 773-788
- Wolber, G., Langer, T. (2005) LigandScout: 3-D derived from protein-bound ligands and their use as virtual screening filters. *Journal of chemical information and modeling*, 45(1), 160-169. <http://doi.org/10.1021/ci049885e>
- Wu, X., He, W., Yao, L., Zhang, H., Liu, Z., Wang, W., Cao, J. (2013). Characterization of binding interactions of (-)-epigallocatechin-3-gallate from green tea and lipase. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 61(37), 8829–8835. <http://doi.org/10.1021/jf401779z>
- Wu, X., He, W., Zhang, H., Li, Y., Liu, Z., He, Z. (2014). Acteoside: A lipase inhibitor from the Chinese tea *Ligustrum purpurascens* kudingcha. *Food Chemistry*, 142, 306–310. <http://doi.org/10.1016/j.foodchem.2013.07.071>
- Wyatt, H. R. (2013). Update on treatment strategies for obesity. *The Journal of Clinical Endocrinology and Metabolism*, 98(4), 1299–306. <http://doi.org/10.1210/jc.2012-3115>
- Xuea J., F. Y. Ideraabdullaha (2015) An assessment of molecular pathways of obesity susceptible to nutrient, toxicant and genetically induced epigenetic perturbation. *Journal of Nutritional Biochemistry*, 30, 1–13 <https://doi.org/10.1016/j.jnutbio.2015.09.002>
- Yanovski, S. Z., & Yanovski, J. a. (2013). Long-term Drug Treatment for Obesity. *Jama*, 1–13. <http://doi.org/10.1001/jama.2013.281361>
- Yoon, S. S., Rhee, Y. H., Lee, H. J., Lee, E. O., Lee, M. H., Ahn, K. S., Kim, S. H. (2008). Uncoupled protein 3 and p38 signal pathways are involved in anti-obesity activity of *Solanum tuberosum* L. cv. Bora Valley. *Journal of Ethnopharmacology*, 118(3), 396–404. <http://doi.org/10.1016/j.jep.2008.05.014>
- Yun, J. W. (2010). Possible anti-obesity therapeutics from nature - A review. *Phytochemistry*, 71(14-15), 1625–1641. <http://doi.org/10.1016/j.phytochem.2010.07.011>

Zheng, C., Duan, J., Gao, J., Ruan, Z. (2010). Screening for anti-lipase properties of 37 traditional chinese medicinal herbs. *Journal of the Chinese Medical Association*, 73(6), 319–324. [http://dx.doi.org/10.1016/S1726-4901\(10\)70068-X](http://dx.doi.org/10.1016/S1726-4901(10)70068-X)

Zheng, M., Liu, X., Xu, Y., Li, H., Luo, C., Jiang, H. (2013). Computational methods for drug design and discovery: Focus on China. *Trends in Pharmacological Sciences*, 34(10), 549–559. <http://doi.org/10.1016/j.tips.2013.08.004>