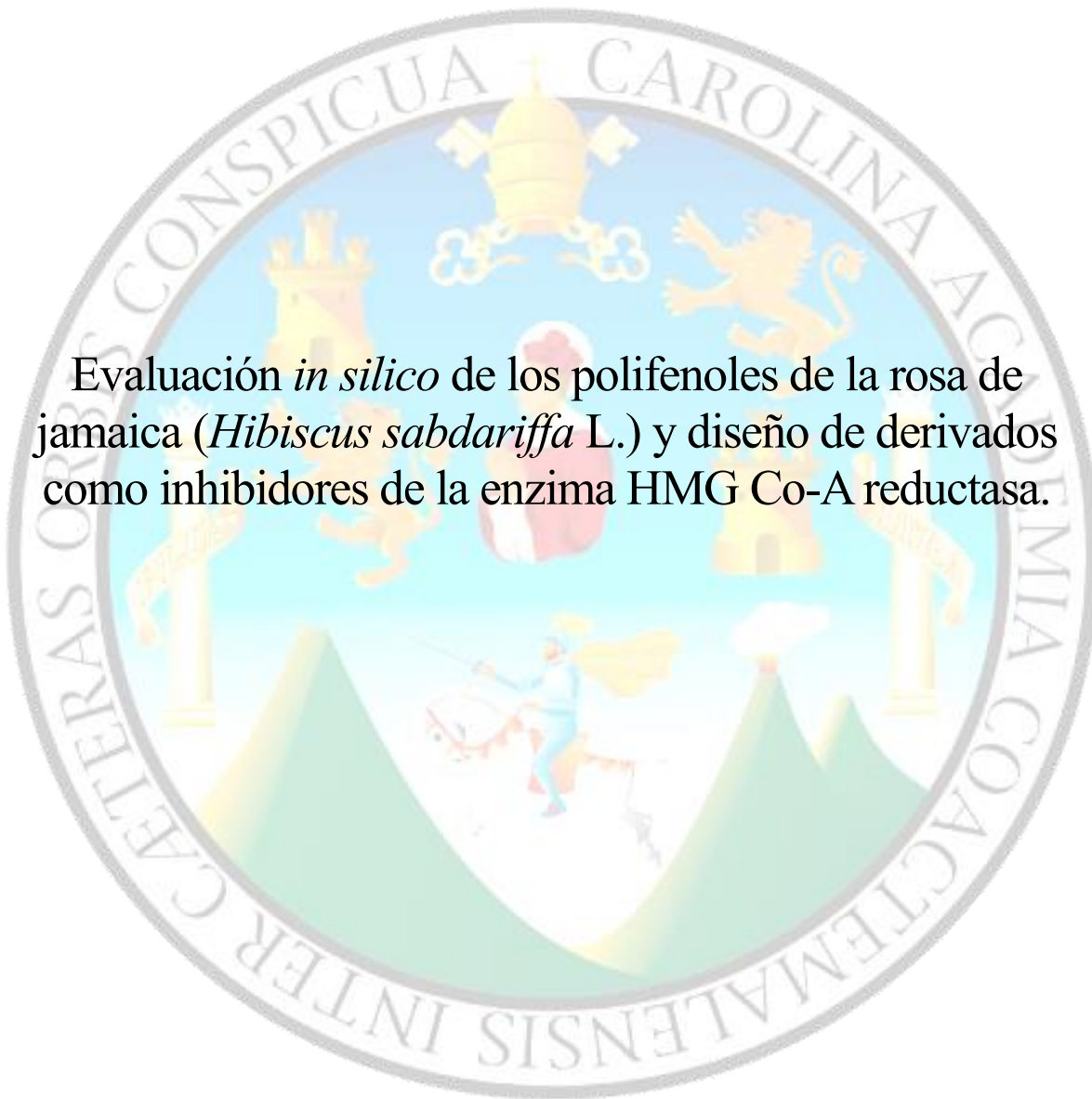


UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS Y FARMACIA

The seal of the University of San Carlos of Guatemala is a circular emblem. It features a central shield with a blue background. On the shield, there is a golden crown at the top, a golden lion rampant on the right, and a golden castle on the left. Below the shield, a figure in a blue and white outfit is riding a white horse. The shield is flanked by two golden pillars. The entire emblem is surrounded by a circular border containing the Latin text "ACADEMIA COACTEMALENSIS INTER CAETERAS ORBIS CONSPICUA CAROLINA" in a serif font.

Evaluación *in silico* de los polifenoles de la rosa de jamaica (*Hibiscus sabdariffa* L.) y diseño de derivados como inhibidores de la enzima HMG Co-A reductasa.

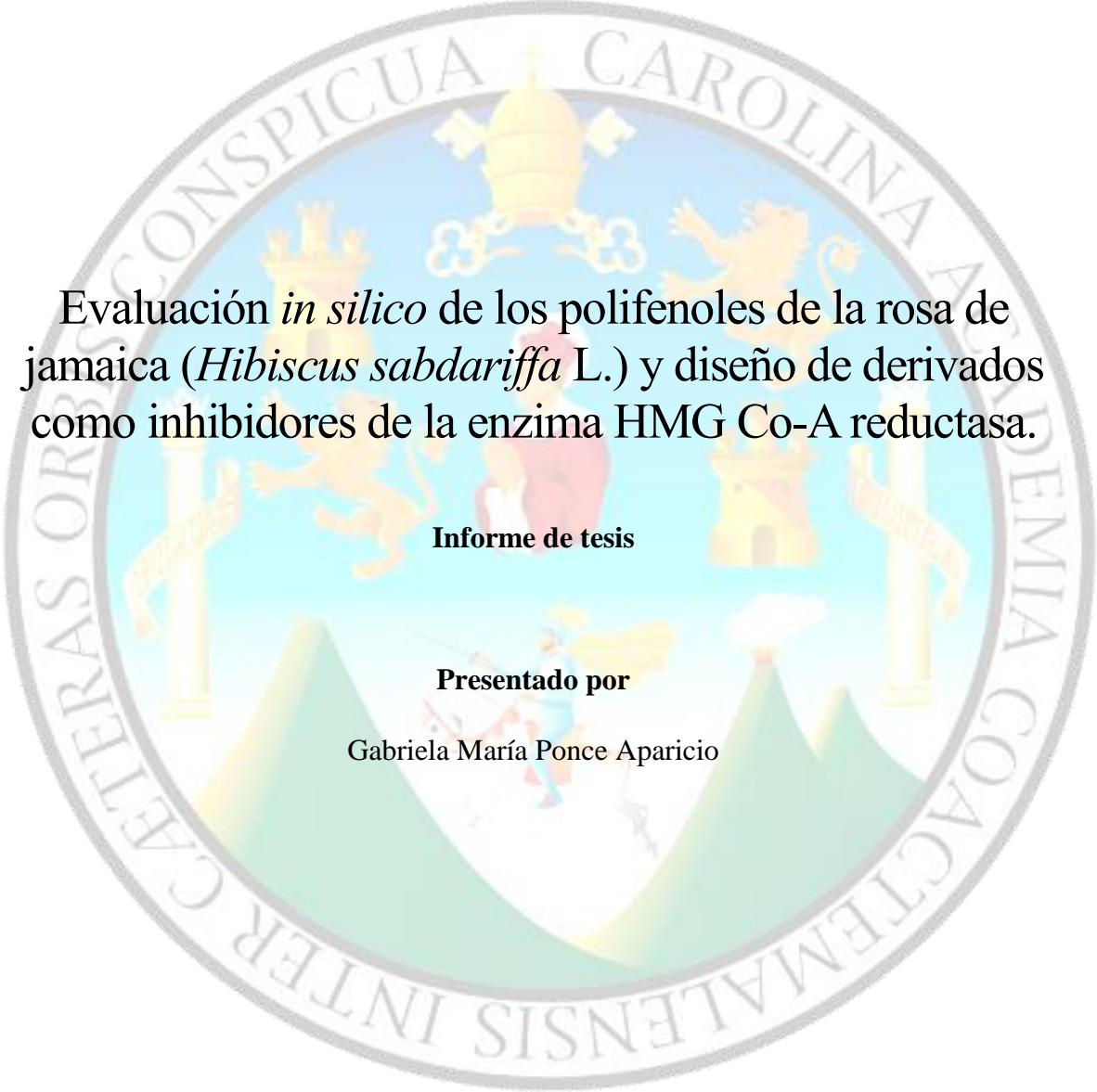
Gabriela María Ponce Aparicio

Química Farmacéutica

Guatemala, octubre de 2019

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS Y FARMACIA

The seal of the University of San Carlos of Guatemala is a circular emblem. It features a central shield with a golden crown at the top, a red and white figure in the center, and a blue figure at the bottom. The shield is flanked by two golden lions. The shield is set against a background of green hills and a blue sky. The seal is surrounded by a circular border containing the Latin text "ACADEMIA COACTEMALENSIS INTER CÆTERAS ORBIS CONSPICUA CAROLINA".

Evaluación *in silico* de los polifenoles de la rosa de jamaica (*Hibiscus sabdariffa* L.) y diseño de derivados como inhibidores de la enzima HMG Co-A reductasa.

Informe de tesis

Presentado por

Gabriela María Ponce Aparicio

Para optar al título de

Química Farmacéutica

Guatemala, octubre de 2019

JUNTA DIRECTIVA

M.A. Pablo Ernesto Oliva Soto	Decano
Licda. Miriam Roxana Marroquín Leiva	Secretaria
Dr. Juan Francisco Pérez Sabino	Vocal I
Dr. Roberto Enrique Flores Arzú	Vocal II
Lic. Carlos Manuel Maldonado Aguilera	Vocal III
Br. Byron Enrique Pérez Díaz	Vocal IV
Br. Pamela Carolina Ortega Jiménez	Vocal V

AGRADECIMIENTOS

A la Universidad de San Carlos de Guatemala

Por ser una institución excelente, que me permitió crecer como profesional, como persona y a desarrollar talentos y habilidades nuevas.

A la Facultad de Ciencias Químicas y Farmacia

Por abrirme las puertas a un mundo que no conocía porqué en esos tres edificios T10, T11 y T12, pase momentos inolvidables, me desarrollé como persona, como profesional, y siempre llevaré en mi corazón a mí amada Facultad.

A la Unidad de Química Computacional de la Escuela de Química

Por permitirme utilizar el equipo de cómputo el cual fue pieza clave para lograr obtener los resultados de la presente investigación.

A mi asesora

M.A. Lucrecia Peralta de Madriz por sus consejos, interés, orientación y apoyo en la elaboración de mi tesis, por ser una excelente persona y por ser parte de mi formación profesional.

A mi revisor

PhD. Rodrigo Castañeda Molina por sus consejos, interés y apoyo en la elaboración de mi tesis aún desde el otro lado del mundo, por ser mi profesor y mi amigo, lo aprecio mucho.

A Rony Letona

Por enseñarme sobre el área de Química Computacional y lo importante que es para las carreras científicas, y por su apoyo a lo largo de mi tesis.

A mi profesor

Lic. Allan Vásquez por su paciencia y apoyo en la elaboración del protocolo de mi tesis.

A mi mejor amigo

Charlie Torres, por ayudarme siempre con su sabiduría de químico y estar en las buenas y en las malas conmigo, gracias por todo.

A mis amigos

Especialmente a Victoria Galicia, Noelia Medina, Andrés de León, Jorge Morán, Michelle Calito, Marilíss Alvizuris y a todos los que cerraron pensum conmigo, por apoyarme incluso en los momentos más difíciles, por todos esos buenos momentos a lo largo de la carrera, los aprecio con todo mi corazón.

DEDICATORIA

A Dios

Por brindarme los conocimientos, las habilidades, los recursos y por permitirme conocer a todas las personas que han hecho de mi vida algo especial.

A mis padres

Miguel Ángel Ponce Chavarría y Verónica Aparicio Rivera de Ponce, por todo su esfuerzo, paciencia, consejos y apoyo durante toda mi vida, por ayudarme a cumplir mis sueños.

A mis hermanos

Miguel Ángel Ponce Aparicio y Héctor Augusto Ponce Aparicio, por su apoyo incondicional, paciencia y por ser mis mejores amigos siempre.

A mi abuela

Carmen Yolanda Chavarría Argueta de Ponce por todo su apoyo y consejos a lo largo de mi vida, siempre estará en mi corazón.

A mi familia y amigos

Por su apoyo en las diferentes etapas de mi vida, por los buenos momentos y su cariño incondicional.

A mis profesores

Por su enseñanza y guía a lo largo de mi carrera, por ayudarme y apoyarme a lo largo de mi formación profesional.

ÍNDICE

I. RESUMEN.....	1
II. INTRODUCCIÓN	3
III. ANTECEDENTES	5
IV. JUSTIFICACIÓN.....	9
V. OBJETIVOS	10
VI. HIPÓTESIS	11
VII. MATERIALES Y MÉTODOS	12
VIII. RESULTADOS	16
IX. DISCUSIÓN	36
X. CONCLUSIONES.....	42
XI. RECOMENDACIONES.....	43
XII. REFERENCIAS	44
XIII. ANEXOS	51

I. RESUMEN

Las enfermedades cardiovasculares constituyen las principales causas de mortalidad y morbilidad a nivel mundial. Los medicamentos que se utilizan para el tratamiento de la hipercolesterolemia pueden presentar resultados negativos asociados a la medicación y no ser de fácil acceso. En busca de sustancias que presenten una acción más potente, con menores efectos adversos se presenta la siguiente investigación de los polifenoles de rosa de jamaica que mostraron un efecto hipocolesterolémico en estudios previos. Al aplicar la química computacional en estudios como el presente, se abre la puerta a un mayor entendimiento del mecanismo de acción y las propiedades medicinales de los metabolitos de las plantas y el desarrollo de nuevas moléculas.

Los resultados sugieren que los polifenoles de la rosa de jamaica fueron capaces de inhibir el sitio activo de la enzima HMG Co-A reductasa. A través de estudios computacionales de acoplamiento molecular, utilizando softwares como Autodock Tools, UCSF Chimera, entre otros. Se obtuvieron como resultado bajas energías de enlace (-8.3 a -9.3 kcal/mol).

Al evaluar los descriptores moleculares de absorción, distribución y toxicidad, mediante la página de PreADMET, los polifenoles de la rosa de jamaica presentaron resultados no tóxicos con respecto al descriptor de carcinogenicidad en ratones y un perfil toxicológico seguro para la inhibición de los canales de potasio del corazón lo que significa que presentan bajo riesgo de causar arritmias. Dichas moléculas mostraron bajos valores de absorción intestinal (1.86 - 63.2%) y una distribución plasmática alta (72.6-88.5%).

Asimismo, utilizando como base la estructura de los polifenoles se modificaron los grupos del núcleo cromaneona de intercambiándolos por grupos funcionales con actividad farmacológica conocida, se crearon 2500 estructuras moleculares diferentes entre sí, por medio de comandos computacionales. Posteriormente, se realizaron acoplamientos moleculares en el sitio activo de la enzima HMG Co-A reductasa para cada molécula de las 2500 estructuras. Se seleccionaron como candidatos a las moléculas que

presentaron menores energías de enlace dando como resultado energías de -9.6 a -10.4 kcal/mol.

Se evaluaron descriptores moleculares de absorción, distribución y toxicidad de los candidatos que exhibieron un mejor potencial para su futuro desarrollo farmacoterapéutico siendo las moléculas 2335 y 2268 las más prometedoras. En el caso de la primera molécula se obtuvo una energía de enlace baja (-10.2 kcal/mol), un porcentaje de absorción intestinal alto (66.9%) y una alta distribución plasmática (69.3%). Sin embargo, presentó resultado tóxico al descriptor de carcinogenicidad en ratones y a la inhibición de los canales de potasio del corazón. No obstante, los medicamentos comerciales atorvastatina y fluvastatina también presentaron resultados similares en toxicidad.

Por otro lado, la molécula 2268 tuvo una energía de enlace baja (-9.8 kcal/mol), un porcentaje de absorción intestinal bajo (12.1%) y una alta distribución plasmática (61.7%). Dicha molécula, mostró un perfil de toxicidad seguro dado que presentó resultados no tóxicos para los descriptores de carcinogenicidad en ratones y la inhibición de los canales de potasio del corazón. Por lo tanto, se considera que dicha molécula exhibe un alto potencial farmacoterapéutico.

En conclusión, los resultados proponen que los polifenoles de la rosa de jamaica tienen la capacidad de inhibir la enzima HMG CoA-reductasa, siendo la hibiscetina 3-glucósido el metabolito de origen natural que presentó la menor energía de enlace (-9.3 kcal/mol). Asimismo, los polifenoles de la rosa de jamaica presentaron un perfil de toxicidad seguro. Se encontró que los candidatos creados por medio de diseño guiado que exhibieron un alto potencial para su futuro desarrollo farmacoterapéutico fueron las moléculas 2335 y 2268, debido a que mostraron resultados favorables con respecto a sus propiedades farmacológicas.

II. INTRODUCCIÓN

En la última década, las enfermedades cardiovasculares constituyen las principales causas de mortalidad, morbilidad y discapacidad en los países desarrollados y en vías de desarrollo. Estas enfermedades cobran más de 17 millones de vidas cada año en todo el mundo, la hipercolesterolemia pertenece a ese grupo y mundialmente se ha encontrado que la mayoría de pacientes quienes padecen dicha enfermedad no están recibiendo el tratamiento que necesitan para reducir su riesgo de problemas cardiovasculares, como infartos de miocardio y ataques apopléticos (OMS, 2011) (Gómez Quiroa, y otros, 2010).

Asimismo, los medicamentos que se utilizan para el tratamiento de la hipercolesterolemia, tales como los inhibidores de la enzima HMG Co-A reductasa pueden presentar resultados negativos asociados a la medicación y no ser de fácil acceso para la población en países en vías de desarrollo. Dejando a los pacientes que no tienen los recursos económicos para su tratamiento con riesgo de sufrir complicaciones cardiovasculares. Sin embargo, la utilización de las plantas medicinales se presenta como una alternativa de menor costo y mayor accesibilidad para el tratamiento de diversas enfermedades, pero es de vital importancia validar la actividad terapéutica de dichas plantas (Prieto, 2011) (Duangia, Ingkaninan, & Limpeanchob, 2011).

La determinación de la toxicidad de las moléculas es necesaria para identificar sus efectos dañinos en humanos y es uno de los pasos clave en el diseño de medicamentos. Los inhibidores de la enzima HMG CoA-Reductasa (estatinas), son los medicamentos de primera línea para tratar la hiperlipidemia desde hace décadas. Sin embargo, el uso prologando de estos medicamentos puede provocar efectos adversos como miopatías, enfermedades hepáticas, entre otros (MacDonald & Halleck, 2004), (Newman, y otros, 2019), (Keutz & Schlüter, 1998). Nuevas alternativas se han ido explorando como remplazo para estos medicamentos. La mayoría de las investigaciones se centran en compuestos bioactivos de fuentes naturales como los polifenoles de la rosa de jamaica (Syed & Nighat, 2015).

En adición, herramientas como la química computacional abren la puerta a un mayor entendimiento del mecanismo de acción y las propiedades medicinales de los metabolitos de las plantas y el desarrollo de nuevas moléculas (Carrascoza, Vargas, & Cobar, 2010).

El presente estudio se basó en los metabolitos activos presentes en la rosa de jamaica (*Hibiscus sabdariffa* L.) debido a que es una planta de fácil acceso para la población guatemalteca cuyo consumo se ha mantenido a lo largo del tiempo y presenta una gran aceptación, dicha planta ha presentado varios estudios tanto *in vivo* como *in vitro* sobre su actividad para bajar los niveles de triglicéridos en sangre. Sin embargo, debe considerarse que estos compuestos activos son susceptibles de degradación durante la preparación y almacenamiento, debido a esto se realizó el diseño de nuevas moléculas basadas en los polifenoles, las cuales podrían presentar mejores propiedades fisicoquímicas y farmacológicas y de esta manera generar información valiosa para el desarrollo de nuevos fármacos (Pérez, Castaño, Ramírez, Rocha, & Reynoso, 2015) (Duangia, Ingkaninan, & Limpeanchob, 2011).

En la actualidad no existen estudios *in silico* que analicen la actividad hipotrigliceridémica de *Hibiscus sabdariffa* L. La incorporación de la química computacional en el estudio de los metabolitos de las plantas medicinales y en el diseño de fármacos presenta diversas ventajas al ser una herramienta predictiva y rentable. Guatemala, no debe quedar atrás en esta rama de la ciencia que crece día con día.

El presente trabajo de investigación tuvo como objetivo realizar un análisis *in silico* de los metabolitos polifenólicos presentes en el cáliz de la flor de la rosa de jamaica como inhibidores de la enzima HMG Co-A reductasa y la evaluación de posibles derivados con actividad farmacológica en base a la estructura de los metabolitos. Para de esta manera validar con un nuevo enfoque la actividad hipotrigliceridémica que ha sido evaluada *in vivo e in vitro* en estudios anteriores.

III. ANTECEDENTES

3.1 Estudios *in silico*

En Guatemala, en el estudio presentado por Carrascoza, Vargas y Cobar se realizó una elucidación del sitio de reacción de calyxaminas a y b en la acetilcolinesterasa y diseño de un fármaco derivado de calyxaminas a y b potencialmente activo contra el alzheimer, por medio de nanotecnología computacional, por J. Carrascoza, R. Vargas y O. Cobar, el objetivo del trabajo fue diseñar un nuevo fármaco que inhiba exitosamente la acetilcolinesterasa, tomando como base para el diseño, las propiedades farmacofóricas de las calyxaminas A y B y su sitio de enlace a la acetilcolinesterasa, utilizando la técnica de la nanotecnología computacional para el mismo.

Al final de esta investigación se obtuvo un fármaco como candidato líder que posee una afinidad de enlace mayor con la acetilcolinesterasa, de la que poseen las calyxaminas A y B, y se conoce con exactitud cuál es el sitio en el que se enlazan la calyxaminas A y B en la acetilcolinesterasa, mediante un método que ha sido llamado “diseño inteligente de drogas” (Carrascoza, Vargas, & Cobar, 2010).

3.2 Estudios *in vivo*

En el estudio realizado por Castañeda. Cruz y Cáceres se demostró la actividad hipotrigliceridémica del extracto de rosa de jamaica. Castañeda, R. en su informe de tesis realizó una evaluación de la actividad hipotrigliceridémica de un extracto de rosa de jamaica (*Hibiscus sabdariffa* L.) en pacientes con triglicéridos superiores a 150 mg/dL, al administrarse antes y durante las comidas. al recibir una dosis de 15 mg de antocianinas totales al día, dividida en tres veces, por un período de dos meses para establecer su influencia, dependiendo del momento de su administración, un grupo recibíendola antes de la comida y otro durante la misma (Castañeda, Cruz, & Cáceres, 2015).

El extracto de *H. sabdariffa* mostró un efecto hipotrigliceridémico significativo ($p = 0.034$), al finalizar el tratamiento, únicamente al administrar el mismo antes de las comidas. No se observó alteración en los niveles de colesterol total, colesterol contenido

en las lipoproteínas de baja densidad y colesterol contenido en las proteínas de alta densidad en ninguno de los dos grupos evaluados. Los resultados sugieren que los extractos acuosos de *H. sabdariffa* podrían ser utilizados para ejercer una acción en los triglicéridos plasmáticos, dependiente del consumo de alimentos, y del momento de la administración (Castañeda, Cruz, & Cáceres, 2015).

En el estudio de Chang, y otros en 2003 se reportó que el extracto de *Hibiscus sabdariffa* L., presentó efectos hipolipidémicos y antiateroscleróticos en conejos con aterosclerosis inducida. Los conejos blancos de Nueva Zelanda fueron alimentados con una dieta normal y una con colesterol alto, a un grupo se le administró extracto de *Hibiscus sabdariffa* durante 10 semanas.

Los niveles de triglicéridos, colesterol y colesterol de lipoproteínas de baja densidad (LDL) en sangre disminuyeron en el grupo al que se le administró el extracto, dando como resultado una reducción de la arterosclerosis severa en la aorta, la evaluación histopatológica mostró que el extracto redujo la formación de células espumosas e inhibió la calcificación de los vasos sanguíneos de los conejos. Los resultados sugieren que el extracto de *Hibiscus sabdariffa* inhibe el aumento de lípidos sanguíneos y muestra actividad antiaterosclerótica (Chang , y otros, 2003).

En una investigación realizada por Vilasinee y otros en 2006, se comprobó el efecto antioxidante e hipolipidemiante del extracto de *Hibiscus sabdariffa* L., con énfasis en la protección de la oxidación de LDL *in vivo* y *ex vivo* en ratas hipercolesterolémicas por la administración continua de colesterol, se administró el extracto de los cálices secos de la rosa de jamaica a dosis de 500 y 1000 mg/kg por seis semanas demostrándose una disminución de los niveles de colesterol en sangre en un 22 y 26%. Las evidencias encontradas sugieren que el extracto acuoso de los cálices secos de la rosa de jamaica posee efectos antioxidantes e hipolipidémicos *in vivo* (Vilasinee, y otros, 2006).

Con respecto a la toxicidad del extracto de la rosa de jamaica, Akindahunsi y Olaleye en 2003 realizaron una investigación toxicológica del extracto acuoso-metanólico de los cálices de *Hibiscus sabdariffa* L. probándose el extracto en ratas albinas wistar

recibiendo dosis de 250mg/kg varias veces al día (15 veces máximo), respectivamente. Los resultados del estudio mostraron que los niveles en sangre de la aspartato aminotransferasa y la alanina amino transferasa fueron incrementados en comparación con el grupo control. En adición, se encontró que el uso prolongado del extracto (15 dosis de 250mg/kg al día) puede causar daño hepático (Akindahunsi & Olaleye, 2003).

En relación a los inhibidores de la enzima HMG CoA-reductasa (estatinas), en una revisión realizada por Shitara y Sugiyama, se investigaron los aspectos farmacocinéticos y las propiedades fisicoquímicas de las estatinas para comprender el mecanismo que puede llevar a las alteraciones farmacocinéticas. Las estatinas son ampliamente usadas para el tratamiento de la hipercolesterolemia, su eficacia en la prevención de problemas cardiovasculares se ha mostrado en numerosos ensayos clínicos. Sin embargo, estos medicamentos presentan efectos miotóxicos algunas veces severos, incluyendo miopatía y rabdomiólisis (Shitara & Sugiyama, 2006).

En algunos casos, dicha toxicidad está asociada a alteraciones farmacocinéticas. Entre las estatinas se encuentran la simvastatina, lovastatina y atorvastatina las cuales son metabolizadas por el citocromo P450 3A4 (CYP3A4) mientras que la fluvastatina es metabolizada por el CYP2C9. La cerivastatina está sujeta a dos mecanismos metabólicos mediados por el CYP2C8 y 3A4. Las alteraciones farmacocinéticas de las estatinas pueden ser predichas siguiendo la coadministración de otros medicamentos y es posible realizar un análisis cuantitativo de efecto de algunos factores (Shitara & Sugiyama, 2006).

3.3 Estudios *in vitro*

En el estudio realizado por Pérez, Castaño, Ramírez, Rocha y Reynoso en 2015, se tuvo como objetivo evaluar el efecto de la estevia y el ácido cítrico en la estabilidad de los compuestos fenólicos, la capacidad antioxidante y la inhibición de la enzima carbohidrato-hidroxilasa en las bebidas de rosa de jamaica durante su almacenamiento. Las condiciones óptimas de extracción de los compuestos polifenólicos de la rosa de jamaica fueron de 95°C/60 minutos.

Se encontró que la incorporación de estevia aumentó la estabilidad del color y algunos polifenoles, como la quercitina, el ácido gálico y el ácido rosmarínico, durante el almacenamiento. En adición, la estevia disminuyó la pérdida de la capacidad antioxidante, la incorporación de ácido cítrico no mostró efecto por lo que, estos resultados pueden contribuir al mejoramiento de los procesos tecnológicos para la elaboración de bebidas hipocalóricas (Pérez, Castaño, Ramírez, Rocha, & Reynoso, 2015).

En una investigación realizada por A. Duangia, K. Ingkaninan y N. Limpeanchob, se evaluó el potencial mecanismo del efecto hipocolesterolemia de extractos de 12 plantas seleccionadas *Hibiscus sabdariffa* L., *Moringa oleifera* Lam., *Cucurbita moschata* Duchesne, *Ananas comosus* (L.) Merr., *Zingiber officinale*, *Morus alba* L., *Camellia sinensis* (L.) Kuntze, *Piper nigrum* L., *Alpinia galanga* (L.) Willd., *Curcuma zedoaria* Rose, *Bacopa monnieri* (L.) Wettst., y *Piper retrofractum* Vahl., las cuales son especias e ingredientes ampliamente utilizadas en la comida tailandesa.

Se encontró que el extracto de *P. nigrum* a $100\mu\text{g ml}^{-1}$ fue el inhibidor más eficaz de absorción de colesterol, en cambio los extractos de *A. galanga* y *C. sinensis* inhibieron efectivamente la actividad de la lipasa pancreática. La potencia de los extractos de *H. sabdariffa*, *M. oleifera* and *C. moschata* a $100\mu\text{g ml}^{-1}$ fue similar a $0.40\mu\text{g ml}^{-1}$ de pravastatina inhibiendo la enzima HMG-CoA reductasa y posiblemente reduciendo la biosíntesis de colesterol (Duangia, Ingkaninan, & Limpeanchob, 2011).

En el estudio de Chen y otros, se investigó el efecto antiesterosclerótico del extracto polifenólico de las hojas de *Hibiscus sabdariffa* L., el cual es rico en flavonoides. El efecto inhibitorio del extracto en la oxidación y peroxidación de lípidos de LDL fue definido *in vitro*, el extracto mostró potencial para reducir la formación de células espuma y la acumulación intracelular de lípidos. El extracto tuvo estas propiedades por su posible interacción con el receptor LXRA/ABCA1 en el hígado, el cual retrasa la arterosclerosis, estos resultados sugieren que el extracto de las hojas de *Hibiscus sabdariffa* L. podría ser desarrollado como un agente antiesterosclerótico (Chen, y otros, 2013).

IV. JUSTIFICACIÓN

La presente investigación tuvo como finalidad aportar información nueva sobre la actividad hipocolesterolemia de la rosa de jamaica, específicamente sobre las propiedades fisicoquímicas y farmacológicas de sus metabolitos polifenólicos, lo cual ayudará a validar los efectos terapéuticos que han reportado sobre esta planta.

La evaluación *in silico* permitió investigar con un nuevo enfoque y que actualmente no se ha investigado, la actividad de los metabolitos polifenólicos de la rosa de jamaica y su posible papel como inhibidores de la enzima HMG Co-A reductasa, lo cual es de gran importancia debido a que hasta el momento se desconoce el mecanismo por el cual el extracto acuoso de dicha planta contribuye a la disminución de los niveles de triglicéridos en sangre demostrado en estudios *in vivo*.

En adición, el diseño de nuevos candidatos con posible actividad farmacológica dio como resultado el hallazgo de nuevas moléculas que podrían presentar mejores propiedades terapéuticas en comparación con los metabolitos originales y menor toxicidad que los medicamentos actuales.

La incorporación de la química computacional en el estudio de los metabolitos de las plantas medicinales y en el diseño de fármacos presenta diversas ventajas al ser una herramienta predictiva y rentable. Guatemala no debe quedar atrás en esta rama de la ciencia que crece día con día.

V. OBJETIVOS

5.1 Objetivo General

Analizar la interacción de los polifenoles de la rosa de jamaica (*Hibiscus sabdariffa* L.) con la enzima HMG Co-A reductasa y evaluar derivados con posible actividad farmacológica por medio de simulación *in silico*.

5.2 Objetivos Específicos

- 5.2.1 Evaluar las interacciones químicas de los metabolitos polifenólicos de la rosa de jamaica sobre la enzima HMG Co-A reductasa, mediante la interacción molecular en el sitio activo molecular.
- 5.2.2 Obtener nuevas moléculas derivadas de los polifenoles de la rosa de jamaica, a través del diseño guiado para mejorar las interacciones encontradas.
- 5.2.3 Evaluar las propiedades farmacológicas de los polifenoles de la rosa de jamaica y de los mejores derivados, con la obtención de descriptores moleculares de toxicidad, absorción y distribución.

VI. HIPÓTESIS

Los metabolitos polifenólicos de la rosa de jamaica (*Hibiscus sabdariffa* L.) presentan interacciones con la enzima HMG Co-A reductasa y afinidad similares a las de los fármacos inhibidores de dicha enzima con actividad hipocolesterolemia.

VII. MATERIALES Y MÉTODOS

7.1 Universo de Trabajo

Metabolitos polifenólicos de la rosa de jamaica (*Hibiscus sabdariffa* L.)

7.2 Muestra

7.2.1 Metabolitos polifenólicos de la rosa de jamaica

No.	Metabolitos	PubChem CID
1	Quercetina	5280343
2	Gossipentina	5280647
3	Hibiscetina	15559735
4	Hibiscetina 3-glucósido	44259992
5	Delfinidina 3-sambubiosido	44256884
6	Cianidina-3-sambubiosido	6602304

Fuente: (PubChem, 2018), (Nara Insitute of Science and Technology, 2007).

7.2.2 Enzima HMG CoA-Reductasa

No.	Enzima	Organismo	Protein Data Bank ID
1	HMG CoA- Reductasa	<i>Homo sapiens</i>	3CCT

Fuente: (PDB, 2017), (Katzung, 2013), (Sarver, y otros, 2008).

7.2.3 Fármacos inhibidores de la enzima HMG Co-A reductasa

No.	Fármacos	PubChem CID
1	Simvastatina	54454
2	Lovastatina	53232
3	Atorvastatina	60823

Fuente: (PubChem, 2018), (Katzung, 2013).

7.3 Recursos Humanos

7.3.1 Autor: Gabriela María Ponce Aparicio.

7.3.2 Asesor: M.A. Lucrecia Margarita Peralta de Madriz.

7.3.3 Revisor: PhD. Rodrigo Castañeda Molina

7.4 Recursos Materiales

- 7.4.1 Hardware: Computadoras de alto rendimiento con procesador AMD FX-8350 8-Core 4.0GHz, 8GB de RAM. Tarjeta de video Nvidia GTX 770 1536CC, y tarjeta madre ASUS SABERTOOTH R2.0 AM3+AMD.
- 7.4.2 Software: Avogadro 1.1.1, Openbabel 2.3.1, UCSF Chimera 1.7, AutoDock 4.2, AutoDock Tools 4.2, AutoDock Vina 1.1.2, 2.0, KNIME 2.7.2., Discovery Studio v16.1.0.15350, Raccoon v1.0b y PreADME online (Pettersen, y otros, 2004), (Berthold, y otros, 2007), (Trott & Olson, 2010) (O'Boyle & Banck, 2011) (Forli, Huey, Sanner, Goodsell, & Olson, 2016) (Lee, y otros, 2003), (Hanwell, y otros, 2012) y (Dassault Systèmes BIOVIA, 2015) .

7.5 Método

- 7.5.1. **Obtención de moléculas:** Se buscó cada molécula por nombre en la página de PubChem y se descargó el conformero tridimensional en formato SDF (PubChem, 2018). Posteriormente se buscó la proteína HMG Co-A reductasa por su nombre en inglés para el organismo humano y se descargó el archivo en formato PDB de la página de Protein Data Bank (PDB, 2017), (Sarver, y otros, 2008).
- 7.5.2. **Transformación de moléculas:** Las moléculas fueron optimizadas utilizando el programa Avogadro para obtener la conformación más estable con menor impedimento estérico (Hanwell, y otros, 2012). Se utilizó el programa OpenBabel para transformar las moléculas del formato SDF a formato MOL2 y a formato PDBQT (O'Boyle & Banck, 2011).
- 7.5.3. **Interacción molecular en el sitio activo:**
- 7.5.3.1. La proteína HMG Co-A reductasa se preparó con el programa Autodock vina y UCSF Chimera, los residuos no estándares como las moléculas de agua y otros

diferentes fueron eliminados (Trott & Olson, 2010) y (Pettersen, y otros, 2004).

- 7.5.3.2. El sitio activo de la proteína fue identificado mediante interacciones moleculares exploratorias, que dieron como resultado el planteamiento una caja de coordenadas la cual comprendió al sitio activo en ella, las dimensiones fueron: $x=17$, $y=-24$, $z=14$, altura=20, ancho=20 y largo= 20 (Pettersen, y otros, 2004) (Trott & Olson, 2010) (Figura 1).
- 7.5.3.3. Se eligió el ligante y se corrió el acoplamiento molecular en el sitio activo con las moléculas que conforman la muestra (Pettersen, y otros, 2004) (Trott & Olson, 2010).
- 7.5.3.4. Se compararon las energías de enlace entre las moléculas de los medicamentos y las de los metabolitos polifenólicos de la rosa de jamaica (Pettersen, y otros, 2004) (Trott & Olson, 2010).
- 7.5.3.5. Se identificaron los aminoácidos del sitio activo que interaccionan con las moléculas (Dassault Systèmes BIOVIA, 2015).
- 7.5.3.6. ADME Tox: Se evaluaron como descriptores moleculares la absorción, distribución y toxicidad de los polifenoles de la rosa de jamaica utilizando la página PreADMET (<https://preadmet.bmdrc.kr/>) (Lee, y otros, 2003).

7.5.4. Diseño de nuevos derivados:

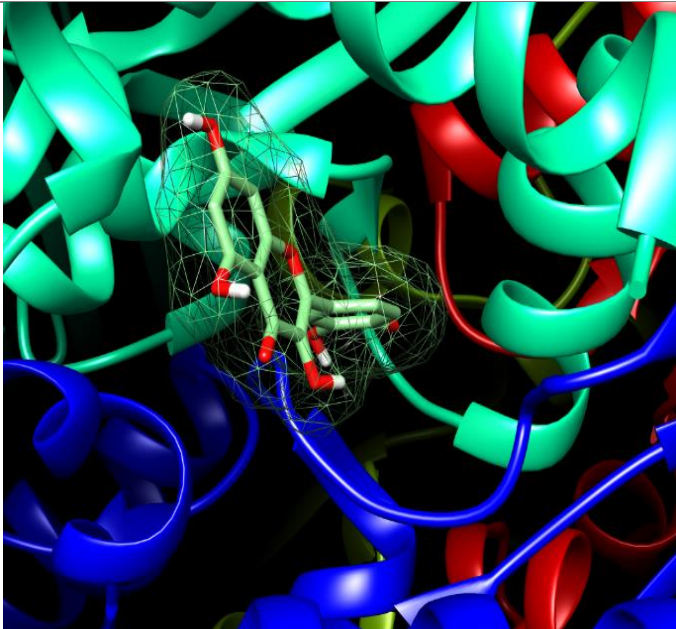
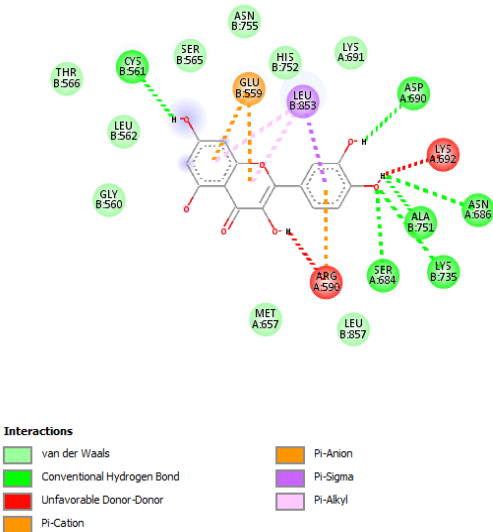
- 7.5.4.1. A partir de los resultados obtenidos se analizaron que estructuras presentan menores energías de enlace con la enzima y en base a ellas se diseñaron nuevos derivados con grupos funcionales que mejoraron las propiedades farmacológicas, los grupos utilizados fueron flúor, metil-etil, etoxi y metoxi (McKenney, 2003), (da Costa, y otros, 2012), (Cuadro 1).
- 7.5.4.2. Se utilizó el programa OpenBabel y Raccoon para transformar las moléculas del formato SDF a formato MOL2 y a formato PDBQT (O'Boyle & Banck, 2011) (Forli, Huey, Sanner, Goodsell, & Olson, 2016).
- 7.5.4.3. Se realizó el acoplamiento molecular en el sitio activo utilizando el programa Autodock vina, con la proteína HMG Co-A reductasa, elegir el ligando y correr la interacción molecular en el sitio activo automatizado con las moléculas que conforman la muestra de nuevos derivados, comparar las energías de enlace entre los resultados obtenidos anteriormente y elegir los 10 mejores candidatos (Trott & Olson, 2010) (Pettersen, y otros, 2004), (PDB, 2017).
- 7.5.4.4. Se identificaron los aminoácidos del sitio activo que interaccionan con los 10 mejores candidatos (Dassault Systèmes BIOVIA, 2015).
- 7.5.4.5. Se evaluó la absorción, distribución y toxicidad de los mejores candidatos utilizando la página PreADMET (<https://preadmet.bmdrc.kr/>) (Lee, y otros, 2003).

VIII. RESULTADOS

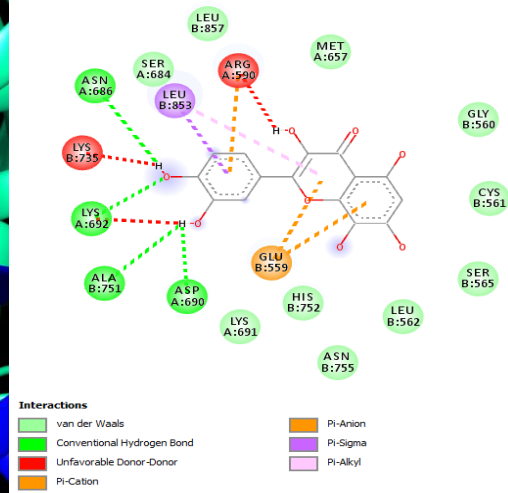
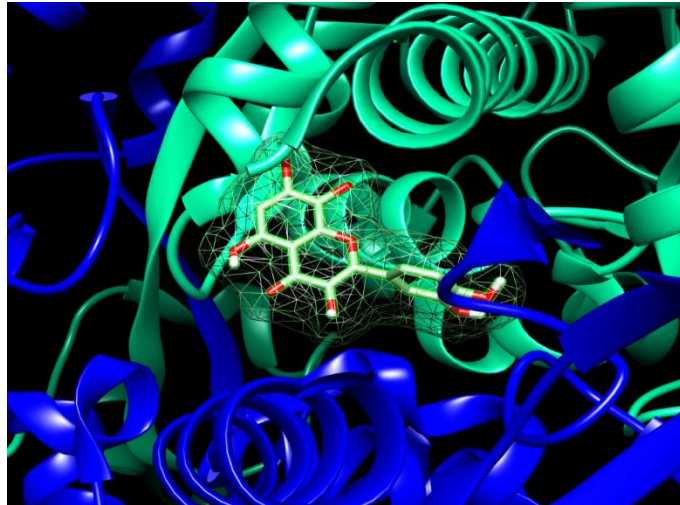
El mínimo de energía de unión determinado, indicó que la enzima HMG Co-A reductasa tuvo interacciones moleculares en el sitio activo exitosas debido a que se presentaron bajas energías de enlace. Por lo tanto, los polifenoles de la rosa de jamaica y las moléculas con modificaciones estructurales mostraron uniones favorables al sitio activo de la enzima; los posibles aminoácidos de unión de las moléculas evaluadas fueron LYS A:692, LYS B:735, SER A:684, ARG A:590, ASP A:690, GLU B:559, ASN A:658, HIS B:752, ASP A:767, LEU B:853, GLU A:665 y LEU B:562 (PDB, 2017), (Pettersen, y otros, 2004), (Dassault Systèmes BIOVIA, 2015), (Deeb, Rosales, Gomez, Garduño, & Correa, 2010) (Tabla No. 1 y 2) (Figura 1 y 2).

La hibiscetina 3-glucósido, la quercetina y la cianidina 3-sambubiosido fueron los metabolitos que presentaron menores energías de enlace, siendo la hibiscetina 3-glucósido el metabolito que presentó una mejor interacción. En comparación, con los medicamentos la hibiscetina 3-glucósido tuvo menor energía de unión (-9.3kcal/mol) que la lovastatina (-7.8 kcal/mol) y simvastatina (9.2 kcal/mol), por lo tanto, dicho metabolito de la rosa de jamaica es la molécula de origen natural que mejor interaccionó con la enzima HMG Co-A reductasa (Tabla No. 1 y 3).

Tabla No.1 Interacción molecular de los polifenoles de la rosa de jamaica en el sitio activo de la enzima HMG CoA-Reductasa.

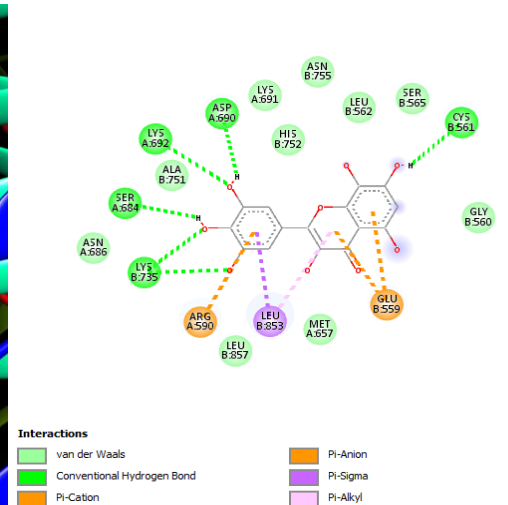
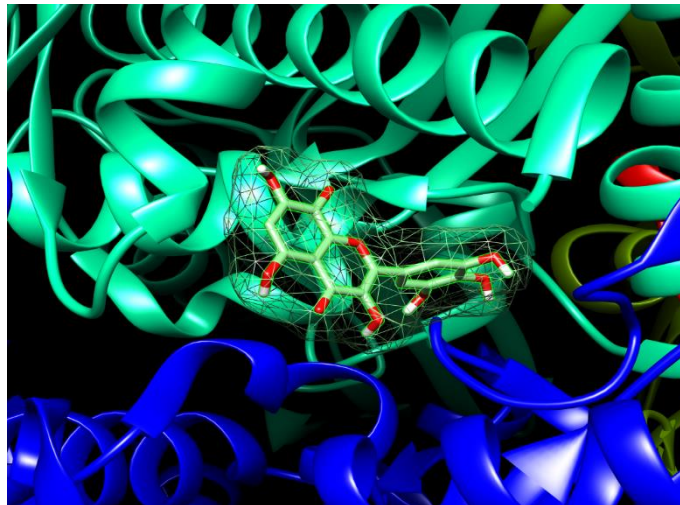
Molécula	Interacción molecular en el sitio activo	Aminoácidos que interaccionan con el ligando	Energía de enlace (kcal/mol)
Quercetina		 <p>Interactions</p> <ul style="list-style-type: none"> van der Waals Conventional Hydrogen Bond Unfavorable Donor-Donor Pi-Cation Pi-Anion Pi-Sigma Pi-Alkyl 	-9.2

Gossipentina



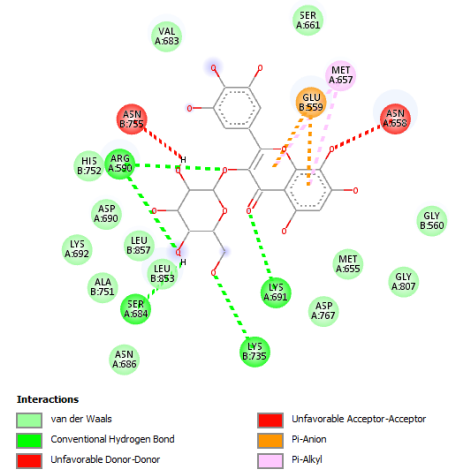
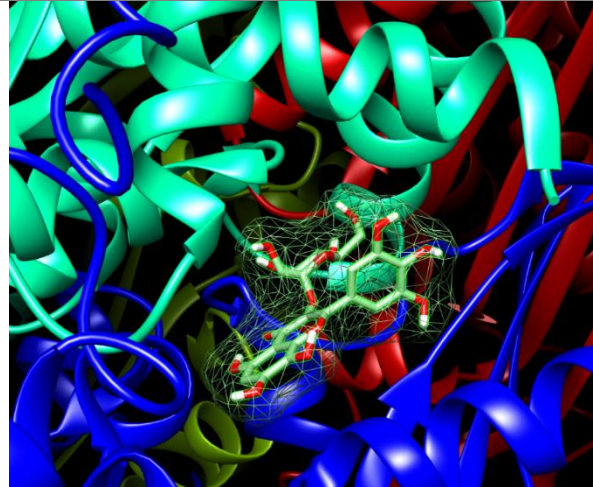
-8.5

Hibiscetina



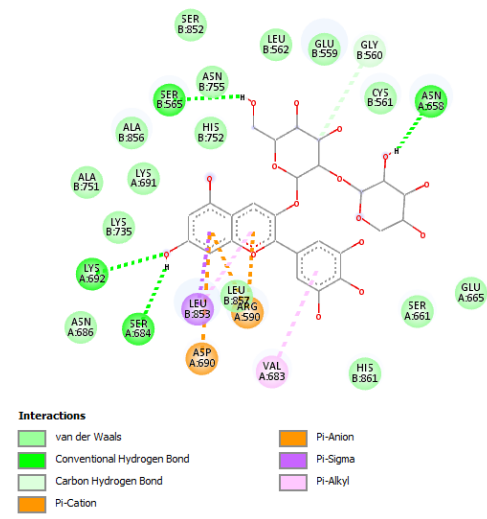
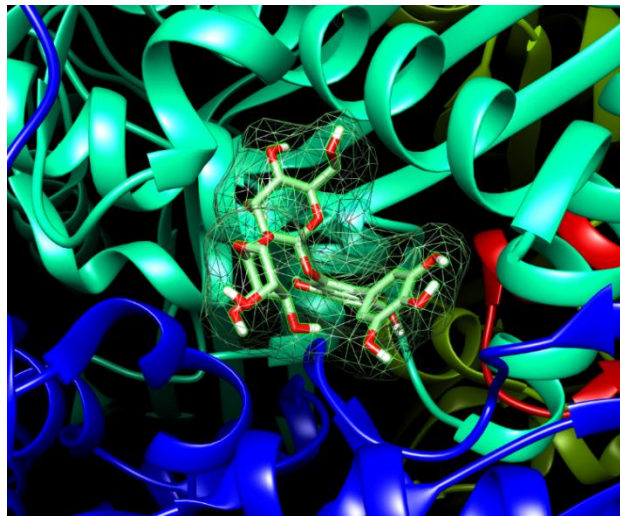
-8.3

Hibiscetina 3-glucósido



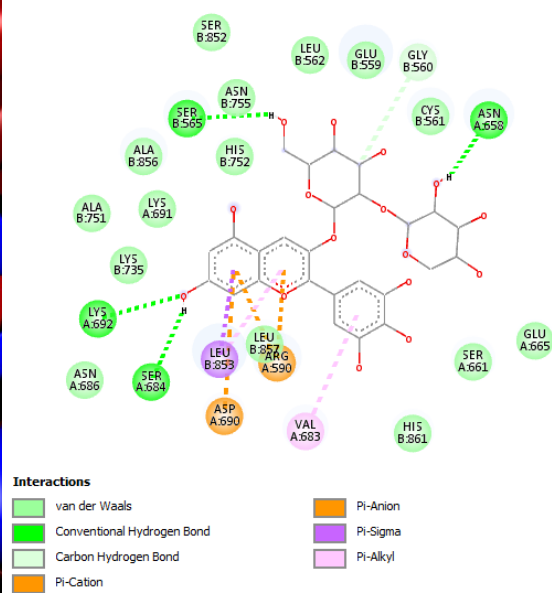
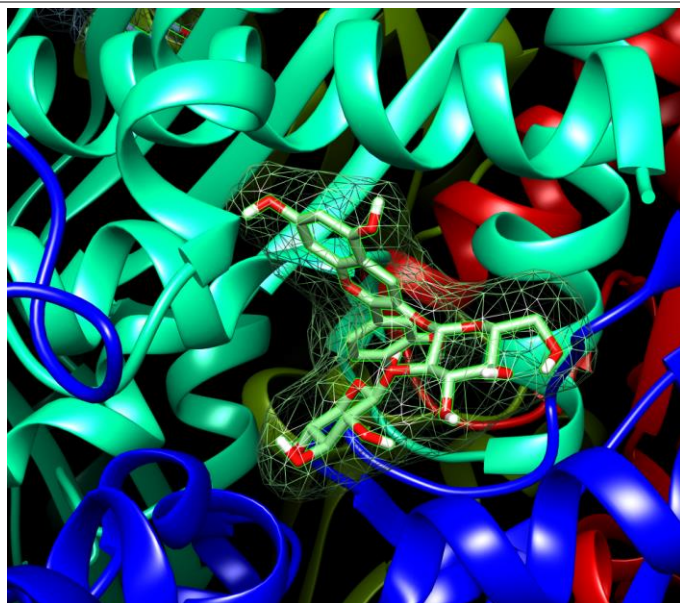
-9.3

Delfinidina 3-sambubiosido



-8.9

**Cianidina 3-
sambubiosido**

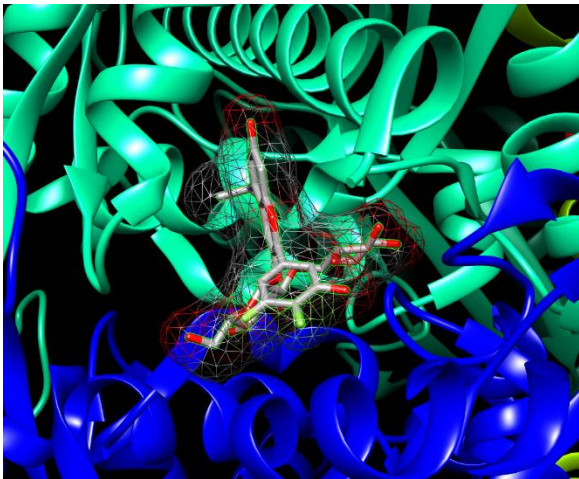
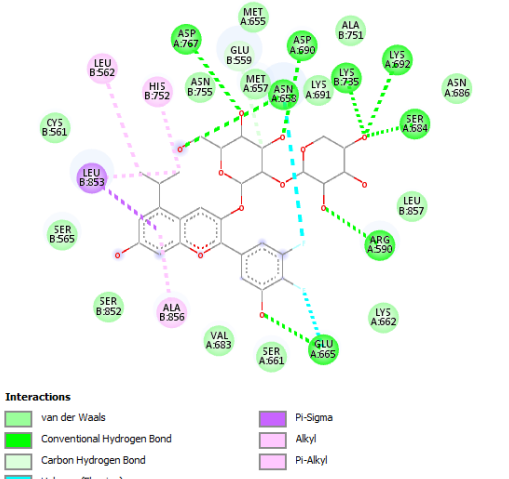


-9.1

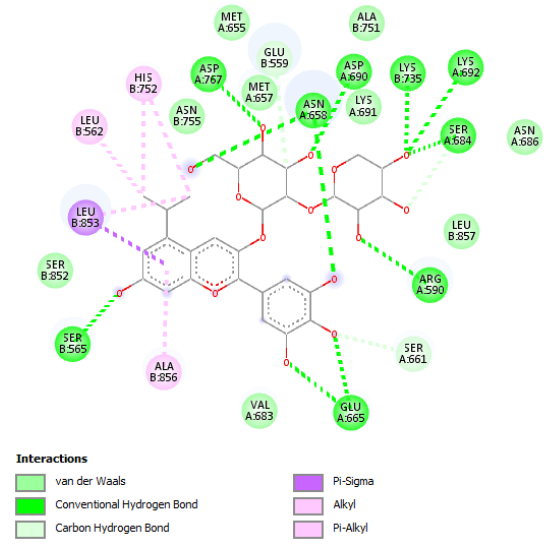
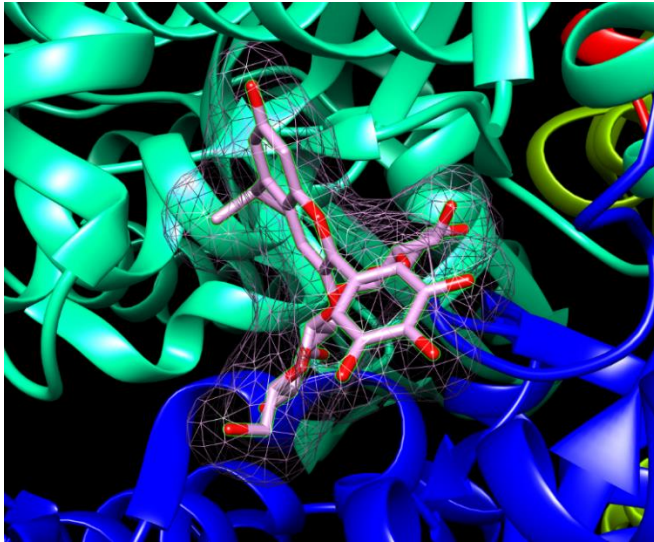
Fuente: Datos experimentales obtenidos en la Unidad de Química Computacional, edificio T-10, USAC (Dassault Systèmes BIOVIA, 2015), (Trott & Olson, 2010) (Pettersen, y otros, 2004) (PDB, 2017) y (PubChem, 2018).

Con relación a las moléculas que presentan la estructura base de los metabolitos de la rosa de jamaica, pero que fueron modificadas para mejorar sus propiedades farmacológicas (candidatos), la molécula 2277 tuvo la mejor interacción molecular en el sitio activo de la enzima HMG Co-A reductasa, con una energía de enlace (-10.4 kcal/mol) mucho menor a las energías de enlace presentadas por los medicamentos lovastatina (-7.8 kcal/mol), simvastatina (-9.2 kcal/mol) y atorvastatina (-9.7 kcal/mol), (Tabla No. 2, 3 y 4).

Tabla No. 2 Interacción molecular de los mejores 10 candidatos en el sitio activo de la enzima HMG CoA-Reductasa.

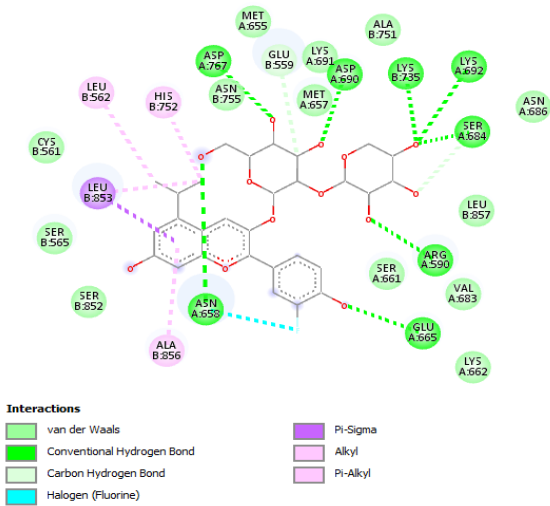
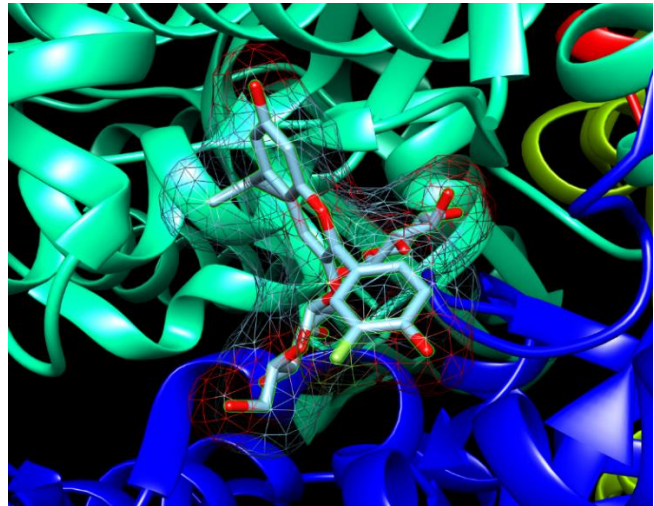
Molécula	Interacción molecular en el sitio activo	Aminoácidos que interaccionan con el ligando	Energía de enlace (kcal/mol)
2277			-10.4

2272



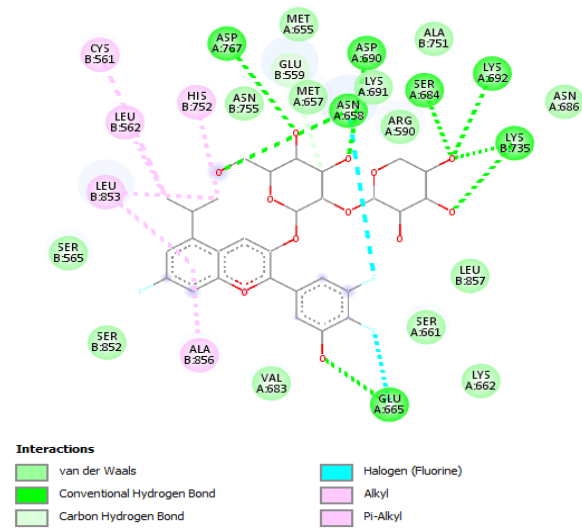
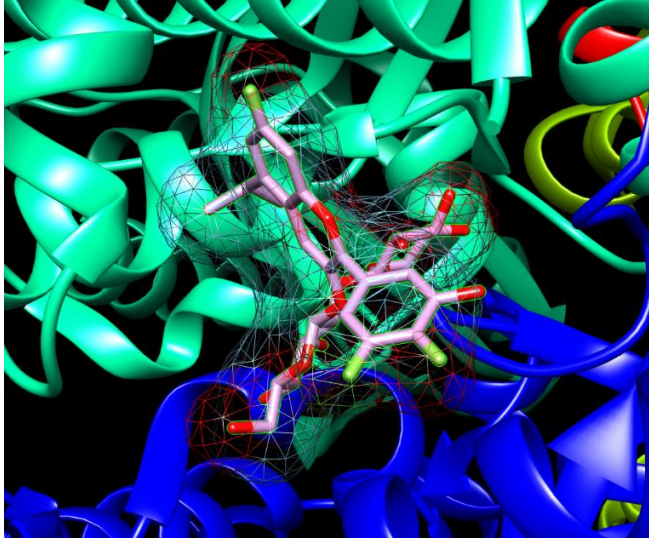
-10.3

2269



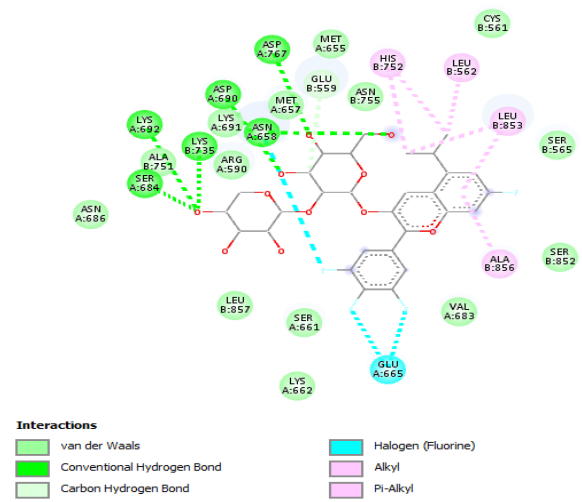
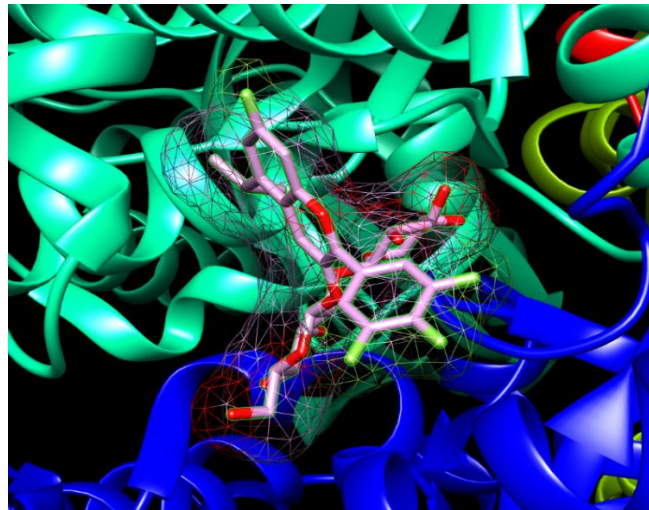
-10.2

2333



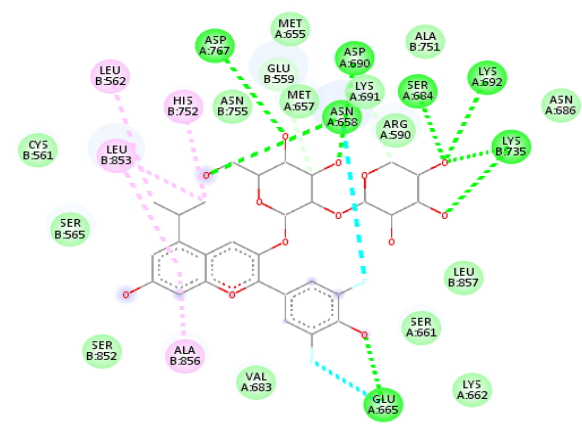
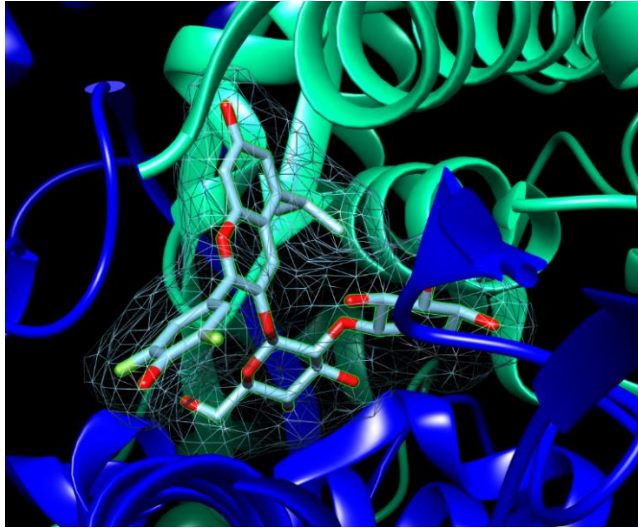
-10.2

2335



-10.2

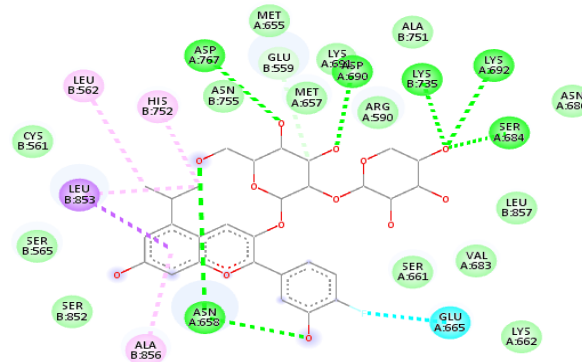
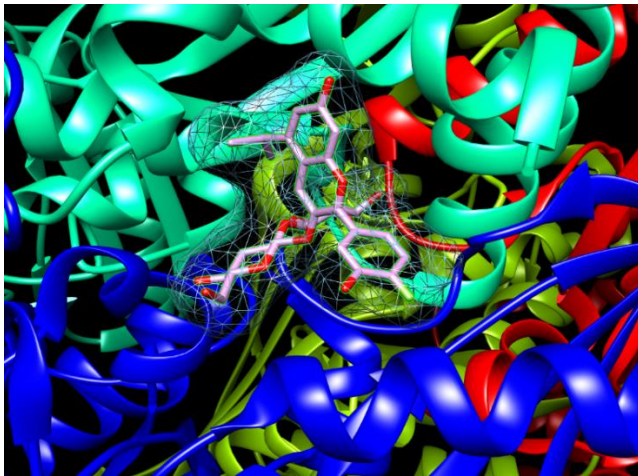
2278



- Interactions**
- van der Waals
 - Conventional Hydrogen Bond
 - Carbon Hydrogen Bond
 - Halogen (Fluorine)
 - Alkyl
 - Pi-Alkyl

-10.2

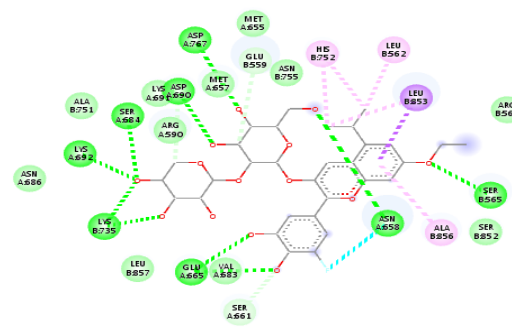
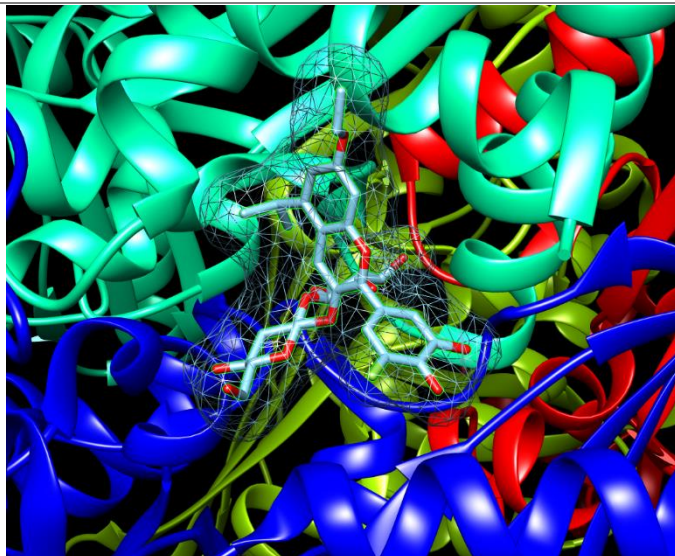
2270



- Interactions**
- van der Waals
 - Conventional Hydrogen Bond
 - Carbon Hydrogen Bond
 - Halogen (Fluorine)
 - Pi-Sigma
 - Alkyl
 - Pi-Alkyl

-10.2

2303

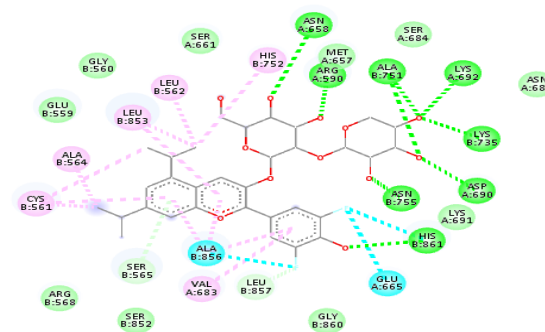
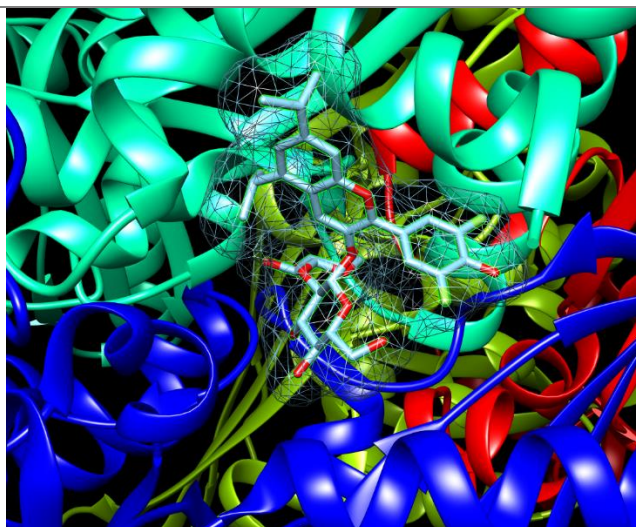


-10.1

Interactions

- van der Waals
- Conventional Hydrogen Bond
- Carbon Hydrogen Bond
- Halogen (Fluorine)
- Pi-Sigma
- Alkyl
- Pi-Alkyl

2320

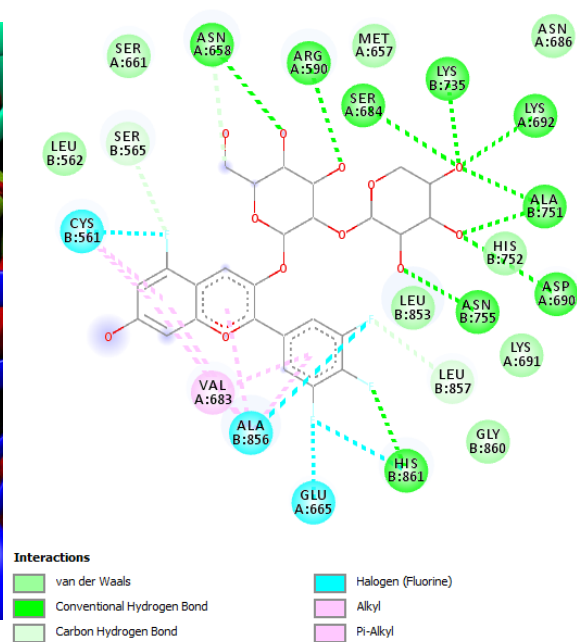
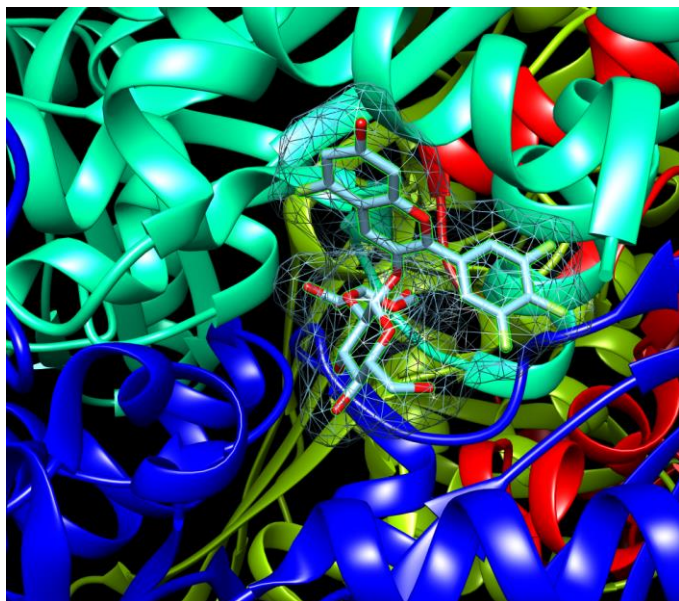


-10.1

Interactions

- van der Waals
- Conventional Hydrogen Bond
- Carbon Hydrogen Bond
- Halogen (Fluorine)
- Pi-Donor Hydrogen Bond
- Alkyl
- Pi-Alkyl

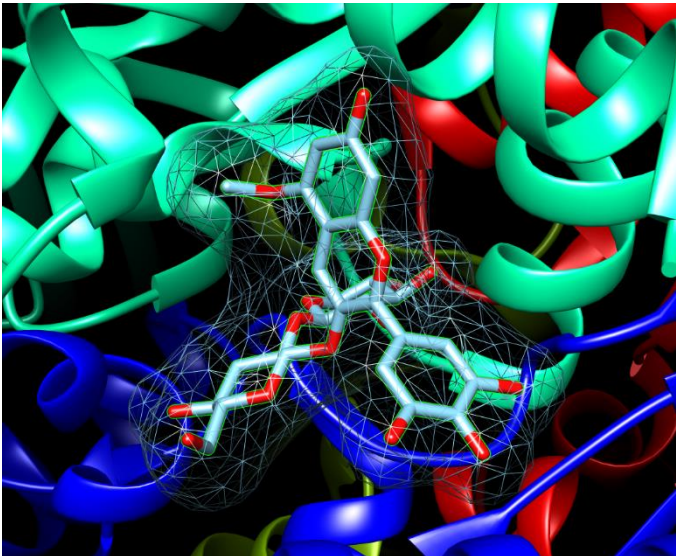
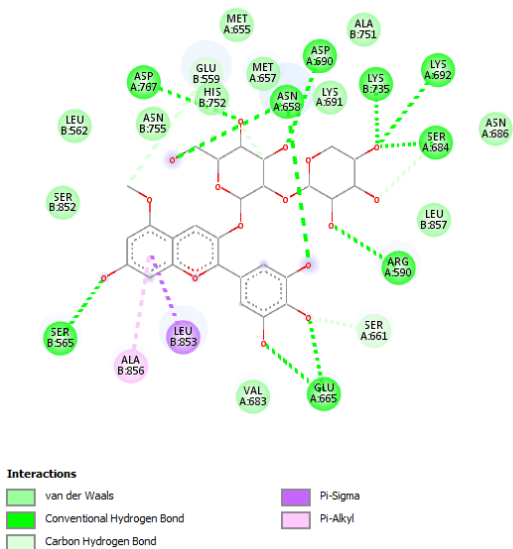
2363



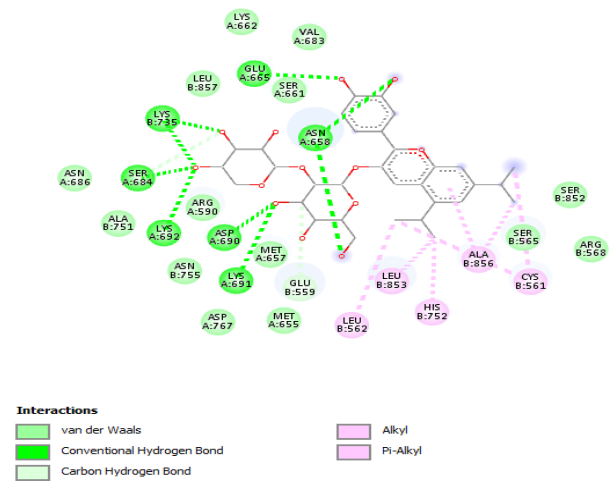
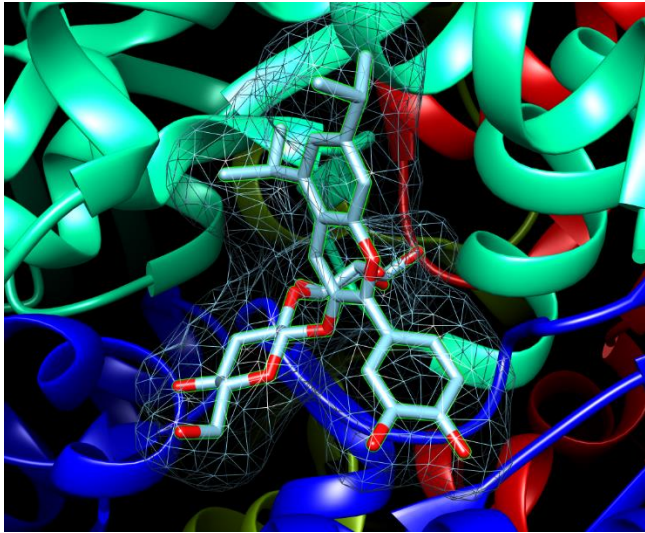
-10.1

Fuente: Datos experimentales obtenidos en la Unidad de Química Computacional, edificio T-10, USAC (Dassault Systèmes BIOVIA, 2015), (Trott & Olson, 2010), (Pettersen, y otros, 2004) y (PDB, 2017).

Tabla No. 3 Interacción molecular de los mejores candidatos sin grupo funcional flúor en el sitio activo de la enzima HMG CoA-Reductasa.

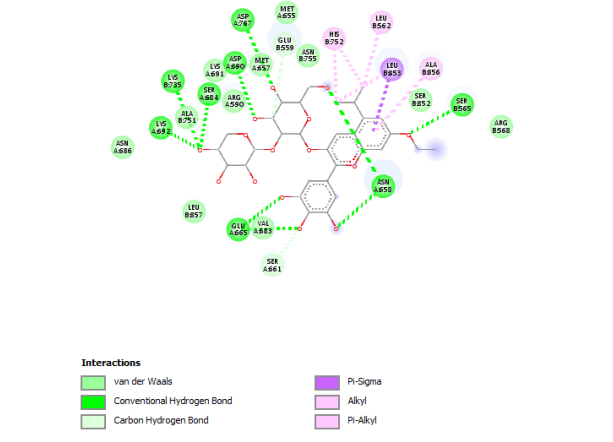
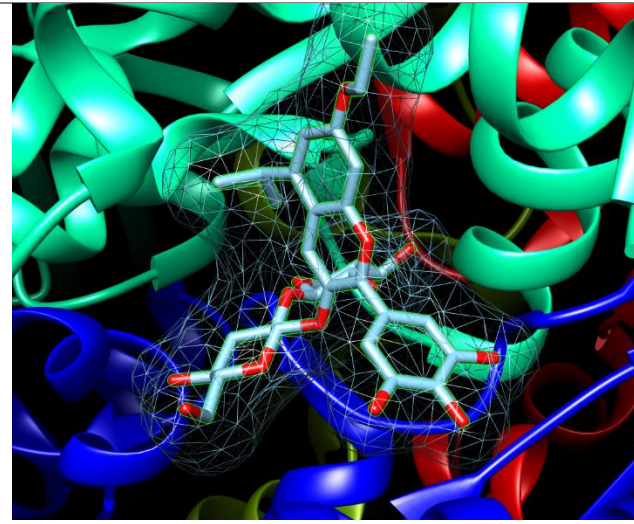
Molécula	Interacción molecular en el sitio activo	Aminoácidos que interaccionan con el ligando	Energía de enlace (kcal/mol)
2104		 <p>Interactions</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ van der Waals ■ Conventional Hydrogen Bond ■ Pi-Sigma ■ Carbon Hydrogen Bond ■ Pi-Alkyl 	-10.0

2310



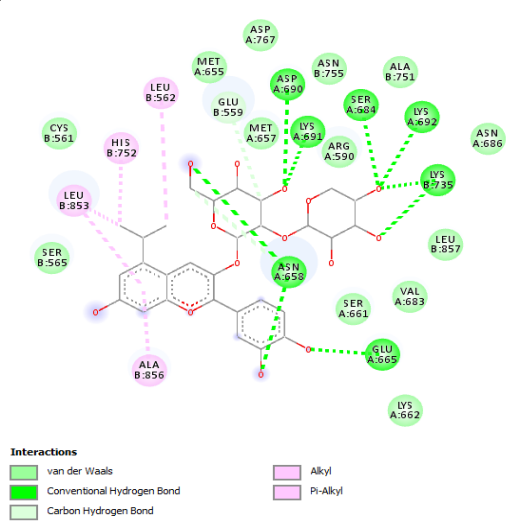
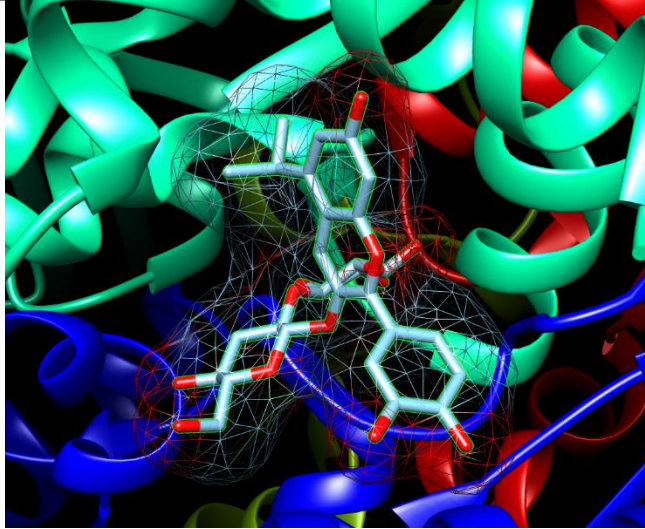
-9.9

2300



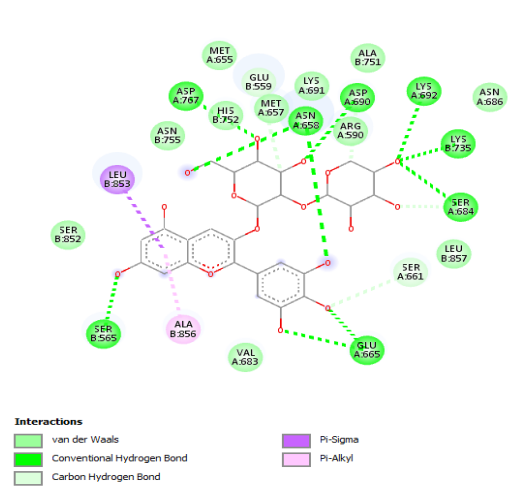
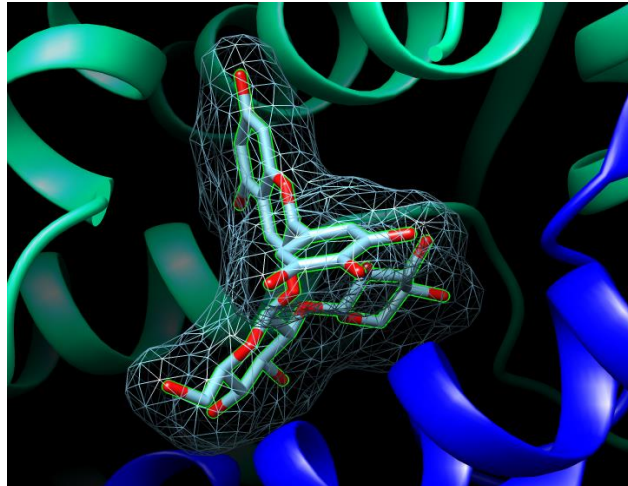
-9.9

2268



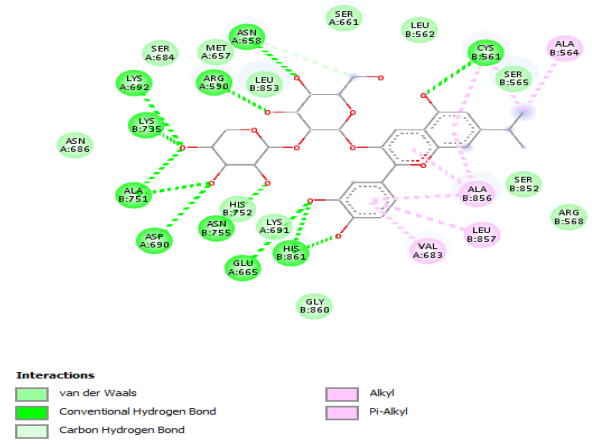
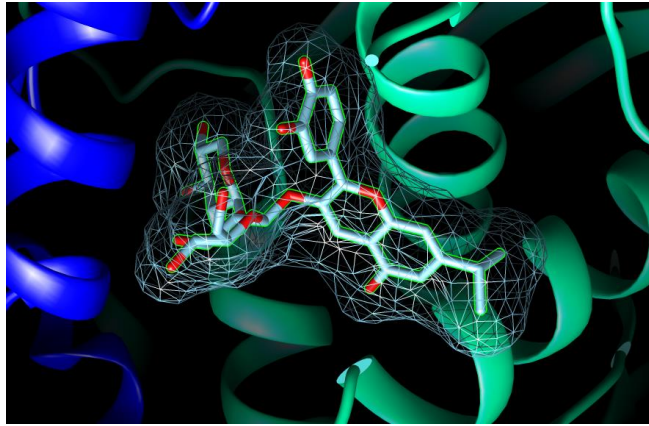
-9.8

2020



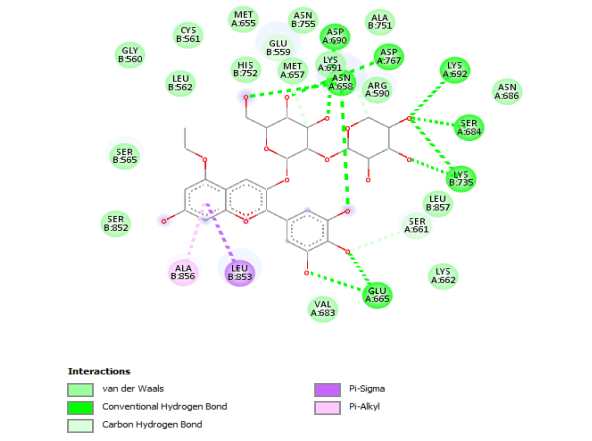
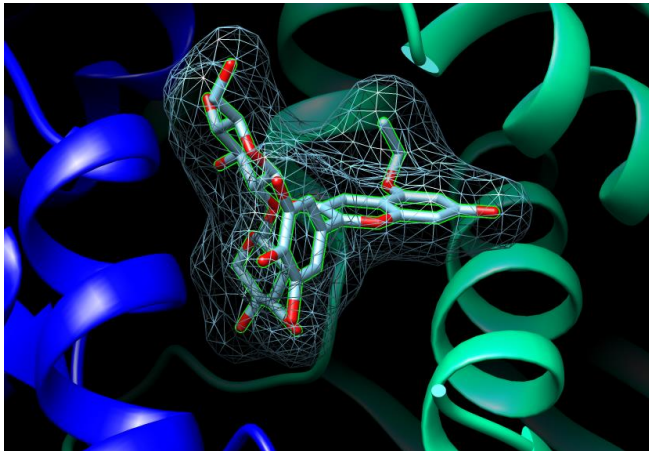
-9.8

2058



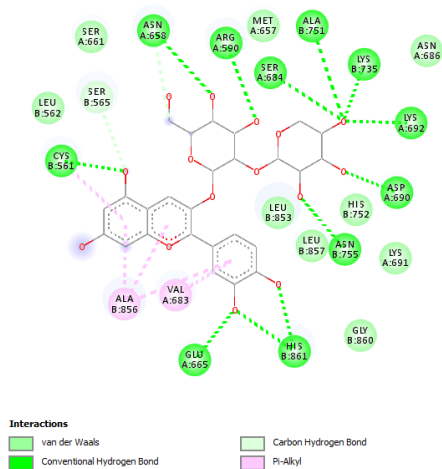
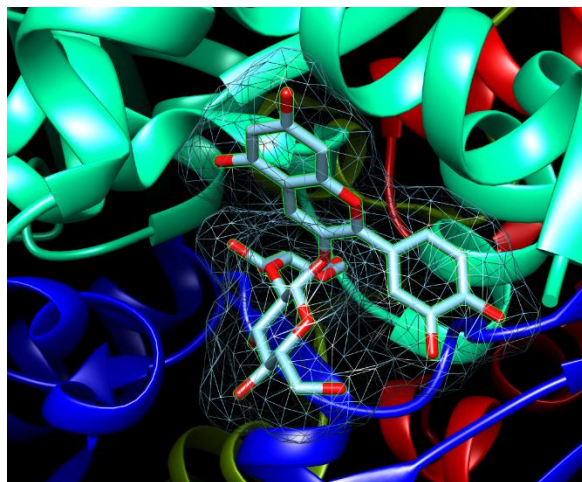
-9.7

2188



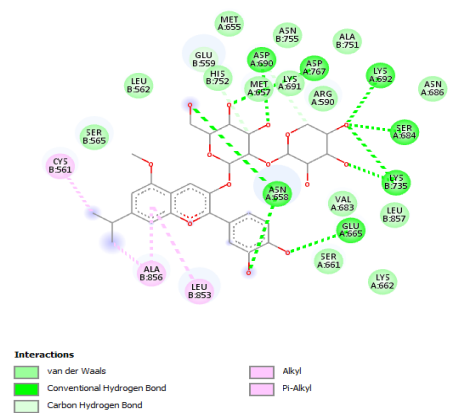
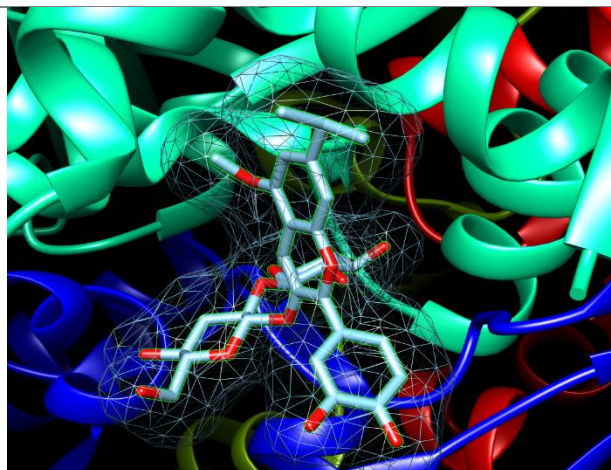
-9.6

2016



-9.6

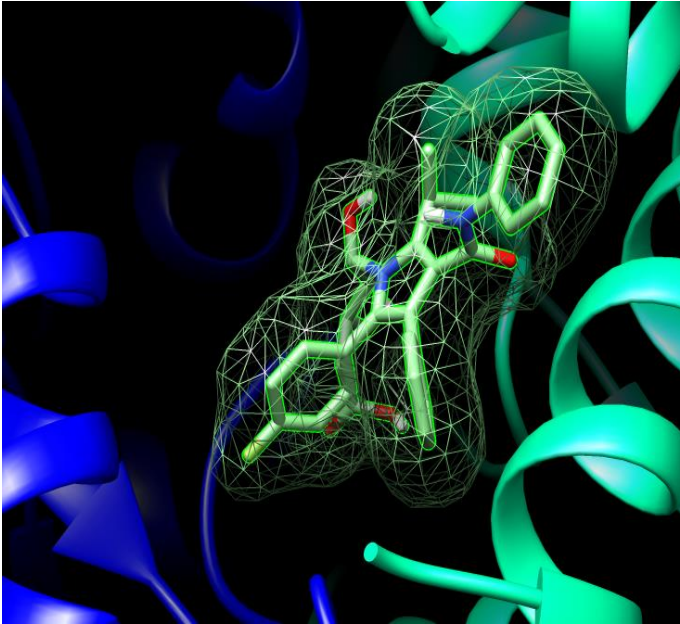
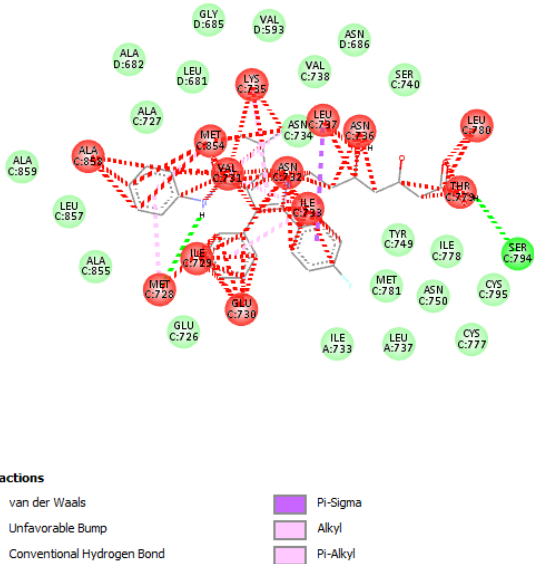
2142



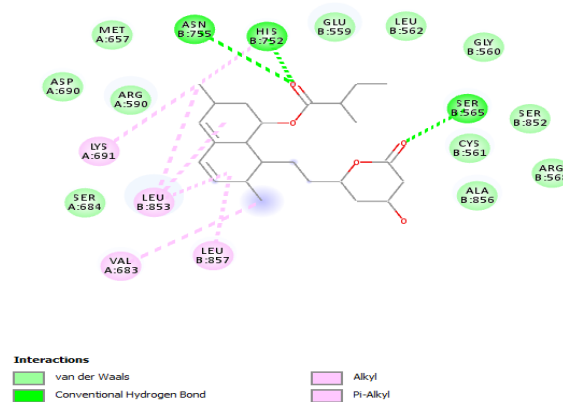
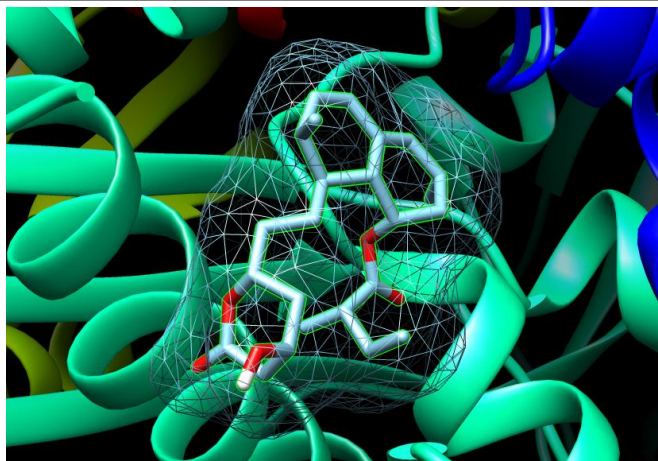
-9.6

Fuente: Datos experimentales obtenidos en la Unidad de Química Computacional, edificio T-10, USAC (Dassault Systèmes BIOVIA, 2015), (Trott & Olson, 2010), (Pettersen, y otros, 2004) y (PDB, 2017).

Tabla No. 4 Interacción molecular de medicamentos comerciales en el sitio activo de la enzima HMG CoA-Reductasa.

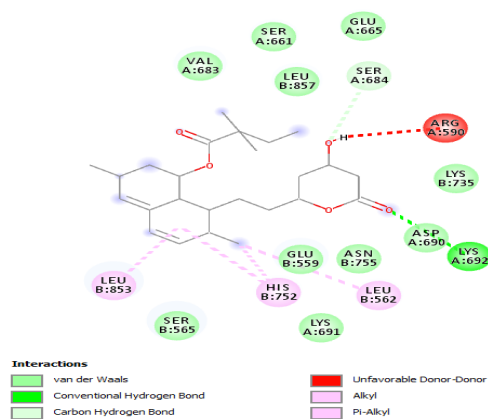
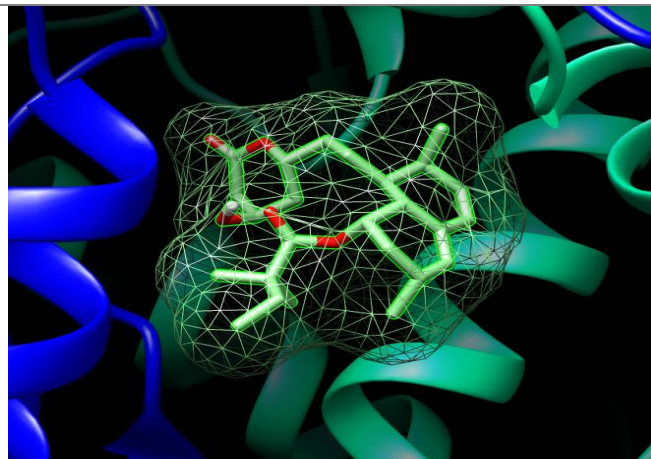
Molécula	Interacción molecular en el sitio activo	Aminoácidos que interaccionan con el ligando	Energía de enlace (kcal/mol)
Atorvastatina		 <p>Interactions</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ van der Waals ■ Unfavorable Bump ■ Conventional Hydrogen Bond ■ Pi-Sigma ■ Alkyl ■ Pi-Alkyl 	-9.7

Lovastatina



-7.8

Simvastatina

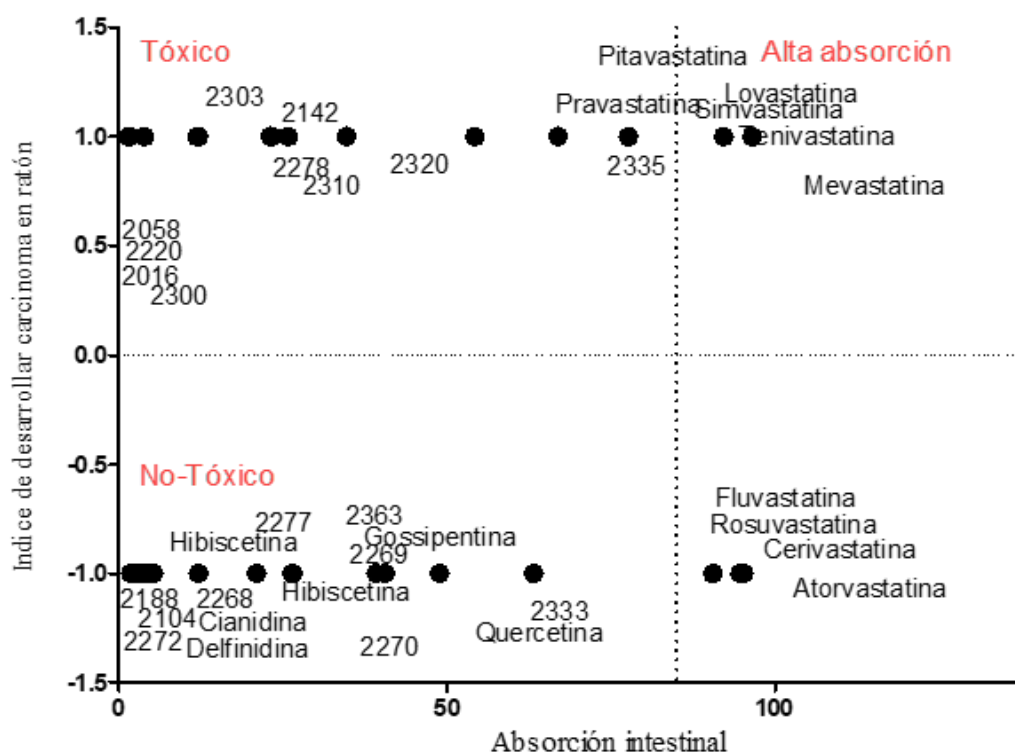


-9.2

Fuente: Datos experimentales obtenidos en la Unidad de Química Computacional, edificio T-10, USAC (Dassault Systèmes BIOVIA, 2015), (Trott & Olson, 2010), (Pettersen, y otros, 2004), (PubChem, 2018), (PDB, 2017).

Se evaluaron los descriptores moleculares de absorción intestinal e índice de desarrollar carcinoma en ratón, se encontró que los polifenoles de la rosa de jamaica presentaron una baja absorción intestinal a excepción de la quercetina. Con respecto, a la toxicidad los polifenoles de la rosa de jamaica tuvieron un resultado no tóxico. En comparación, los candidatos presentaron una mayor absorción. Sin embargo, hubo candidatos que presentaron resultado tóxico en el índice de desarrollar carcinoma en ratón, al igual que los medicamentos que presentaron un muy alto porcentaje de absorción intestinal y un resultado tóxico (Gráfica No. 1).

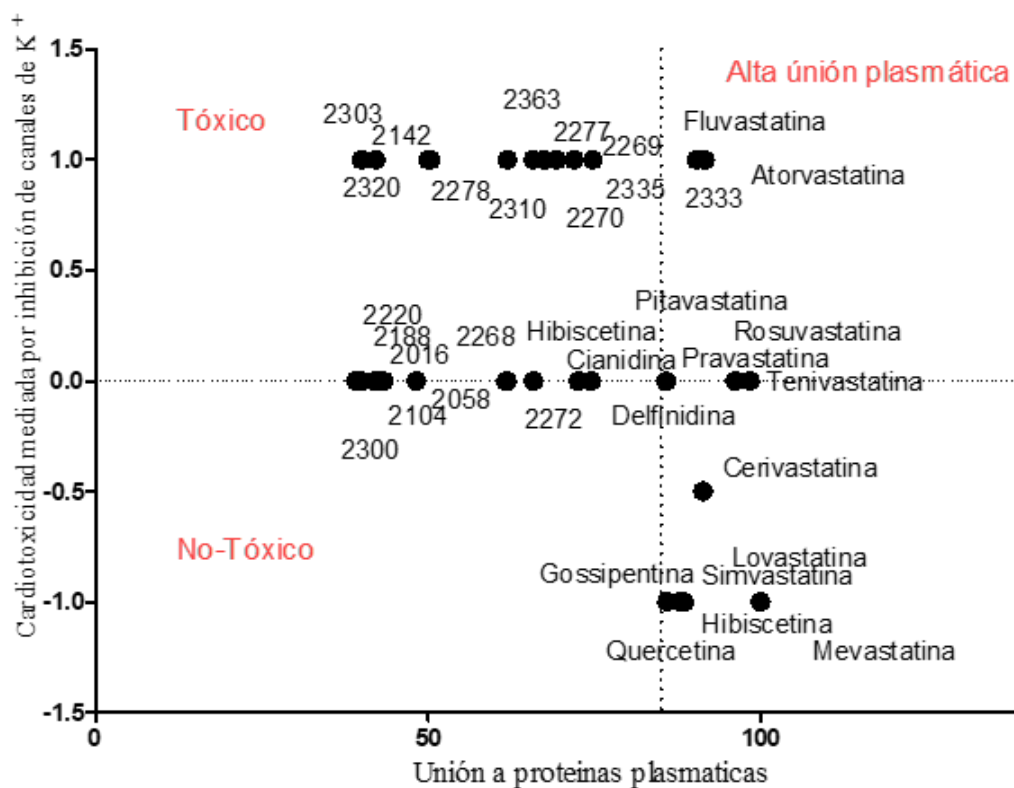
Gráfica No. 1 Absorción y toxicidad de las moléculas evaluadas.



Fuente: Datos experimentales obtenidos en la Unidad de Química Computacional, edificio T-10, USAC (Dassault Systèmes BIOVIA, 2015), (Trott & Olson, 2010), (Pettersen, y otros, 2004), (PubChem, 2018) y (PDB, 2017).

Se encontró que los polifenoles de la rosa de jamaica presentaron una alta unión plasmática y un resultado no tóxico en la cardiotoxicidad mediada por inhibición de canales de potasio, lo que significa que dichas moléculas presentarían una alta distribución plasmática y un bajo potencial de causar arritmias cardíacas. En comparación, los candidatos que presentaron el átomo de flúor en su estructura y los medicamentos atorvastatina y fluvastatina mostraron una alta unión plasmática y un resultado tóxico en la cardiotoxicidad mediada por inhibición de canales de potasio (Gráfica No. 2).

Gráfica No. 2 Distribución y toxicidad de las moléculas evaluadas.



Fuente: Datos experimentales obtenidos en la Unidad de Química Computacional, edificio T-10, USAC (Dassault Systèmes BIOVIA, 2015), (Trott & Olson, 2010), (Pettersen, y otros, 2004), (PubChem, 2018), (Lee, y otros, 2003) y (PDB, 2017).

IX. DISCUSIÓN

La hipercolesterolemia es un factor de riesgo para el desarrollo de arterosclerosis y enfermedades coronarias del corazón. Los medicamentos para tratar dicha enfermedad pueden ser de difícil acceso para la población. Sin embargo, el uso de plantas medicinales que han demostrado su actividad hipocolesterolemizante en diversos estudios como la rosa de jamaica se presenta como una alternativa para disminuir los niveles de colesterol (Acharaporn, Kornkanok, & Nanteetip, 2011). El presente estudio tuvo como finalidad realizar un análisis *in silico* de los polifenoles de la rosa de jamaica (*Hibiscus sabdariffa* L.) como inhibidores de la enzima HMG Co-A reductasa y diseño de posibles derivados con actividad farmacológica, los mismos se diseñaron con el objetivo de buscar la forma de mejorar las propiedades de las moléculas de origen natural y proponer la forma de desarrollar medicamentos seguros y eficaces.

Las interacciones moleculares en el sitio activo de la enzima son ampliamente usadas en el descubrimiento de medicamentos para ayudar a entender las interacciones involucradas en la unión proteína-ligando. Una baja energía de unión sugiere que dicha molécula muestra una mejor interacción y posiblemente una mejor actividad inhibidora. En el presente trabajo, los polifenoles de la rosa de jamaica y los mejores candidatos tuvieron energías de enlace aceptables. Por lo tanto, puede predecirse una posible actividad farmacológica en la disminución del colesterol en sangre (Meng, Zhang, Mezei, & Cui, 2011), (Deeb, Rosales, Gomez, Garduño, & Correa, 2010).

La predicción de la absorción intestinal es un objetivo importante para el diseño, optimización y selección de candidatos para el desarrollo de medicamentos orales (Wessel, Jurs, Tolan, & Muskal, 1998). Los polifenoles de la rosa de jamaica presentaron un bajo porcentaje de absorción intestinal, la quercetina fue la única molécula de origen natural que presentó un resultado aceptable, seguido por la gossipentina y la hibiscetina. Asimismo, el candidato con mejor absorción fue la molécula 2335 seguido por la 2320 (Klopman, Stefan, & Saikhov, 2002).

En contraste con los medicamentos, tanto los polifenoles de la rosa de jamaica como los candidatos mostraron un bajo porcentaje de absorción intestinal, esto se debe a que la hidrofobicidad está relacionada con la habilidad de un compuesto para ser absorbido a través de una membrana. Los polifenoles de la rosa de jamaica y los candidatos presentan una estructura hidrofílica con una gran presencia de grupos polares especialmente grupos hidroxilos, la presencia de estos grupos facilita la formación de puentes de hidrógeno y disminuye la absorción intestinal (Agatonovic-Kustrin, Beresford, & Yusof, 2001).

Sin embargo, es importante mencionar que los modelos de absorción intestinal basados en descriptores generalmente solo exponen las propiedades que son relevantes para el transporte transcelular pasivo a través del epitelio intestinal. Esta ruta es considerada como predominante para la absorción, pero investigaciones en mecanismos de transporte de medicamentos indican que una gran cantidad de medicamentos son sustratos para varios transportadores activos y sistemas de flujo en el epitelio intestinal. Por lo tanto, a pesar que las moléculas de origen natural y los candidatos hayan presentado un bajo valor de absorción, existe la posibilidad que puedan tener una mejor absorción a través de transportadores activos. En adición, la formulación de una determinada forma farmacéutica podría mejorar las propiedades, tales como cápsulas o comprimidos (Stenberg, Luthman, & Artursson, 2000), (Colabufo, Berardi, Contino, Niso, & Perrone, 2009), (Varma, y otros, 2010).

La unión plasmática a proteínas es un parámetro importante para la farmacocinética de los medicamentos, la predicción de la fracción libre de una sustancia en tejidos y en el plasma es de interés en el descubrimiento y desarrollo de medicamentos (Zhivkova & Doytchinova, 2012). Los polifenoles de la rosa de jamaica presentaron un alto porcentaje de unión plasmática a proteínas, siendo la gossipentina la molécula con mejor resultado, seguida por la hibiscetina y luego por la quercetina y la hibiscetina 3-glucósido. En comparación, con los medicamentos (porcentaje de unión plasmática a proteínas entre 85-100%) los metabolitos de la rosa de jamaica mostraron resultados aceptables debido a que tuvieron un porcentaje entre (72-87%) de unión plasmática a

proteínas, al igual que los candidatos, la molécula que presentó el mejor resultado fue la 2277 (72%) seguida por la molécula 2335 (69%), (Ghafourian & Amin, 2013).

Ninguno de los candidatos ni las moléculas de origen natural presentaron porcentajes de unión plasmática a proteínas del 100% en comparación con los medicamentos, lo cual se esperaba debido a que la lipofilicidad es un aspecto determinante para la afinidad en la unión a proteínas plasmáticas, y al ser las moléculas estudiadas hidrofílicas iban por lo tanto a presentar bajos valores (Kratochwil, Huber, Müller, Kansy, & Gerber, 2002), (Zhivkova & Doytchinova, 2012).

Sin embargo, esto no presenta ningún inconveniente debido a que solo la fracción libre de las moléculas es capaz de pasar a través de las membranas celulares y mientras exista una mayor fracción de la droga unida a las proteínas plasmáticas, existirá un menor efecto terapéutico, las consecuencias de una unión a proteínas alta son mayores debido a que los medicamentos presentan un margen terapéutico más estrecho ya que al encontrarse en mayor concentración en sangre pueden presentar efectos adversos (Zhivkova & Doytchinova, 2012). Por lo tanto, los candidatos y las moléculas de origen natural tendrían teóricamente un margen terapéutico más alto ya que tuvieron un porcentaje de distribución aceptable.

La determinación de la toxicidad de las moléculas es importante para identificar sus efectos potenciales en humanos y es uno de los pasos clave en el diseño de medicamentos. La prueba de carcinogenicidad en ratones es de crucial importancia para el descubrimiento de medicamentos y para el desarrollo de un sistema de alerta para el potencial cancerígeno y teratogénico (Raies & Bajic, 2016), (Hansen, y otros, 2009). Asimismo, la toxicidad relacionada con los bloqueadores de los canales de potasio en el corazón es un descriptor relevante, debido a que la muerte súbita puede ser un efecto adverso de la acción de medicamentos no antiarrítmicos, y por lo tanto es un aspecto de seguridad farmacológica tomado en cuenta por las autoridades regulatorias y la industria farmacéutica (Aronov, 2005). Fue posible predecir dichos parámetros toxicológicos mediante el uso de programas computacionales (Lee, y otros, 2003).

Los polifenoles de la rosa de jamaica presentaron resultados no tóxicos al descriptor de carcinogenicidad en ratones. En contraste, con los medicamentos las moléculas evaluadas demostraron una inocuidad aceptable, debido a que la gran mayoría tuvo un resultado negativo, se conoce que los medicamentos inhibidores de la enzima HMG CoA-reductasa, en altas dosis han demostrado en estudios *in vivo*, promueven el crecimiento de tumores en roedores particularmente en el hígado. Es importante mencionar que los resultados obtenidos por medio del descriptor de carcinogenicidad en ratones con respecto a los medicamentos concordaron con estudios *in vivo*. Dado que medicamentos como lovastatina, pravastatina y simvastatina en estudios preclínicos de toxicidad aguda han presentado reportes de formación de adenomas y carcinomas en hígado de ratones (Keutz & Schlüter, 1998), (MacDonald & Halleck, 2004), (Newman, y otros, 2019).

Asimismo, los candidatos exhibieron resultados variados en relación a dicho descriptor debido a que algunas moléculas tuvieron un valor tóxico, lo que pudo deberse a que al diseñar los candidatos se tomó como base grupos funcionales con actividad previamente comprobada, por lo tanto es posible que la carcinogenicidad en ratones esté directamente relacionada con grupos funcionales específicos (da Costa, y otros, 2012), (Raies & Bajic, 2016), (Wang, Lai, & Tang, 1999).

Los metabolitos de la rosa de jamaica mostraron resultados de bajo riesgo para este descriptor de carcinogenicidad en ratones lo cual es de gran relevancia porque según dicho resultado y lo evaluado anteriormente se puede inferir que los polifenoles de la rosa de jamaica son capaces de inhibir la enzima HMG CoA-reductasa presentando bajas energías de enlace y son moléculas seguras según los descriptores toxicológicos evaluados, siendo el mejor metabolito en cuanto a interacción con la enzima, absorción, distribución y toxicidad la hibiscetina 3-glucósido. En contraste con los medicamentos, los polifenoles de la rosa de jamaica presentaron una mejor inocuidad.

Por otro lado, los mejores 10 candidatos presentaron un alto riesgo de bloquear los canales de potasio en el corazón, lo cual es inconveniente debido a que la actividad

bloqueadora reduce el valor intrínseco de una molécula ya que incrementa su riesgo de falla clínica (Aronov, 2005).

Sin embargo, los medicamentos fluvastatina y atorvastatina también presentan alto riesgo en dicho descriptor y son medicamentos usados ampliamente, es posible que la actividad bloqueadora de los canales de potasio esté relacionada con la presencia de flúor en la estructura de las moléculas, debido a que ambos medicamentos y los candidatos que poseían flúor en la estructura presentaron alto riesgo. Debido a esto se decidió seleccionar de los 2500 candidatos los 10 que tuvieran una mejor energía de enlace con la enzima pero que no presentaran flúor en su estructura, para evaluar si en alto riesgo se debía a dicho grupo funcional (da Costa, y otros, 2012).

En efecto, los mejores candidatos sin flúor presentaron una menor energía de enlace debido a que el flúor maximiza la interacción en el sitio activo (da Costa, y otros, 2012). En cambio, presentaron un resultado no tóxico en la inhibición de los canales de potasio, por lo tanto se puede inferir que la presencia de flúor en el caso de las moléculas evaluadas puede interferir en el bloqueo de canales de potasio en el corazón (Raies & Bajic, 2016), (Lee, y otros, 2003).

Finalmente, se considera que de los candidatos evaluados la molécula 2335 fue el mejor candidato, tomando en consideración los resultados obtenidos de energía de enlace, ya que presentó una energía de -10.2 kcal/mol. Por lo tanto, tuvo una excelente interacción en el sitio activo de la enzima. Con respecto a la absorción intestinal, dicha molécula presentó el mayor porcentaje (66.9%), considerando que la molécula base para su desarrollo fue la hibiscetina (20.9%), es posible afirmar que mediante la modificación de grupos funcionales se mejoraron las propiedades farmacológicas. En adición, el candidato 2335 presentó un elevado porcentaje de unión plasmática a proteínas (69.3%), lo que significa que posiblemente se tendrá una distribución aceptable. Sin embargo, la molécula exhibió como limitantes su resultado tóxico en carcinoma de ratón y en la inhibición a los canales de potasio, es importante mencionar el hecho que los medicamentos usados en la actualidad también poseen resultados similares en dichos descriptores de toxicidad.

Asimismo, la molécula 2268 también se considera una molécula con alto potencial para su posterior investigación, ya que presentó resultados aceptables en la energía de enlace, distribución y presentó la mejor inocuidad respecto a los descriptores de toxicidad ya que mostró un mejor perfil de seguridad que los medicamentos, teniendo como única limitante su baja absorción intestinal, por lo tanto se considera importante a la hora de estudios posteriores buscar formas farmacéuticas como comprimidos o cápsulas que puedan ayudar a mejorar la absorción intestinal de dicha molécula.

Los estudios *in silico* presentan diversas ventajas como la predicción de factores importantes entre los que destacan, la interacción molecular con enzimas y descriptores de toxicidad. Sin embargo, presentan limitantes relacionadas con el tratamiento estático o semiflexible de los ligantes y proteínas blanco, ellos también omiten la solvatación y los efectos entrópicos, lo cual puede limitar su poder predictivo. Por lo tanto se recomiendan estudios *in vitro* e *in vivo*, posteriores para comprobar los resultados obtenidos en el presente estudio (Gioia, Bertazzo, Recanatini, Masetti, & Cavalli, 2017), (Korb, y otros, 2012).

X. CONCLUSIONES

Los estudios de interacción molecular de los polifenoles de la rosa de jamaica en la enzima HMG CoA-reductasa presentaron energías de enlace favorables como son energías bajas de -8.3 a -9.3 kcal/mol. De esta forma, inhiben dicha enzima y logran disminuir los niveles de colesterol en sangre.

Respecto a las propiedades farmacológicas, los polifenoles de la rosa de jamaica mostraron un porcentaje elevado de unión plasmática a proteínas (65.9 a 87.9%), lo que significa que se distribuyen favorablemente en sangre y tejidos. Además, presentaron un perfil de toxicidad seguro, dado que las moléculas evaluadas exhibieron resultados no tóxicos en los descriptores moleculares de carcinogenicidad en ratones y en inhibición de los canales de potasio en corazón.

Se encontró que la hibiscetina 3-glucósido fue el polifenol de la rosa de jamaica que presentó mejores propiedades farmacológicas respecto a los otros metabolitos evaluados. Debido a que, dicha molécula tuvo como resultado la menor energía de enlace (-9.3 kcal/mol) en la interacción molecular en el sitio activo inhibiendo la enzima HMG CoA-reductasa. Por otro lado, mostró una unión plasmática a proteínas aceptable (65.9%) y un perfil farmacológico seguro por sus resultados no tóxicos en los descriptores moleculares de carcinogenicidad en ratones y en inhibición de los canales de potasio en corazón.

Los candidatos que exhibieron un mejor potencial para su futuro desarrollo farmacoterapéutico fueron las moléculas 2335 y 2268. Dado que se encontró que dichas moléculas tuvieron como resultado energías de enlace de -10.3 y -9.8 kcal/mol respectivamente en la interacción molecular en el sitio activo inhibiendo la enzima HMG CoA-reductasa. Asimismo, la molécula 2335 fue el candidato que presentó el mayor porcentaje de absorción intestinal (66.9%), por lo que se considera que sería la que presentaría mayores ventajas al ser administrada oralmente.

La molécula 2268 fue el candidato que presentó el perfil farmacológico seguro por sus resultados no tóxicos en los descriptores moleculares de carcinogenicidad en ratones y en inhibición de los canales de potasio en corazón.

XI. RECOMENDACIONES

Se recomienda dar seguimiento a esta investigación realizando la síntesis de los candidatos 2335 y 2268 para realizar estudios *in vitro* e *in vivo*, para determinar su potencial farmacoterapéutico y para demostrar la eficacia y seguridad de los mismos.

Utilizar otro halógeno como el bromo en lugar del flúor para evaluar una mejora en el perfil de seguridad de las moléculas.

Purificar el metabolito hibiscetina 3-glucosido para realizar estudios específicos sobre su acción como inhibidor de la enzima HMG CoA-reductasa.

Identificar formas farmacéuticas que puedan ayudar a mejorar la absorción intestinal de los polifenoles de la rosa de jamaica.

Realizar estudios de correlación entre el estudio *in silico* en comparación con estudios *in vitro* e *in vivo*.

XII. REFERENCIAS

- Acharaporn, D., Kornkanok, I., & Nanteetip, L. (2011). Potential mechanisms of hypocholesterolaemic effect of Thai spices/dietary extracts. *Natural Product Research*, 25(4), 341-352. doi:10.1080/14786411003754249
- Agatonovic-Kustrin, S., Beresford, R., & Yusof, A. (2001). Theoretically-derived molecular descriptors important in human intestinal absorption. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, 25(2), 227-237. doi:10.1016/s0731-7085(00)00492-1
- Akindahunsi, A., & Olaleye, M. (2003). Toxicological investigation of aqueous-methanolic extract of the calyces of Hibiscus sabdariffa L. *Journal of Ethnopharmacology*(89), 161-164. doi:https://doi.org/10.1016/S0378-8741(03)00276-9
- Aronov, A. (2005). Predictive in silico modeling for hERG channel blockers. *Drug Discovery Today*, 10(2), 149-155. doi:10.1016/s1359-6446(04)03278-7
- Berthold, M., Cebron, N., Dill, F., Kotter, T., Kotter, G., Kotter, T., . . . Wiswedel, B. (2007). *KNIME The Konstanz Information Miner*. USA: Springer.
- Carrascoza, J., Vargas, R., & Cobar, O. (2010). *Elucidación del sitio de reacción de Calyxaminas A y B en la acetilcolinesterasa y diseño de un fármaco derivado de Calyxaminas A y B potencialmente activo contral el Alzheimer, por medio de nanotenología computacional*. Guatemala: Universidad de San Carlos.
- Castañeda, R., Cruz, S., & Cáceres, A. (2015). Actividad hipotrigliceridémica de un extracto de rosa de Jamaica (Hibiscus sabdariffa L.) al administrarse antes y durante las comidas. *Ciencia, Tecnología y Salud*, 2(2), 2409-3459.
- Chang , C., Jeng, H., San, W., Huei, C., Mon, Y., Erl, K., . . . Chau, W. (2003). Hibiscus sabdariffa Extract Inhibits the Development of Atherosclerosis in Cholesterol-Fed Rabbits. *Agricultural and Food Chemistry*, 51, 5472-5477. doi:10.1021/jf030065w

- Chen, J., Wang, C., Wang, C., Sheu, J., Lin, C., & Lin, H. (2013). Hibiscus sabdariffa leaf polyphenolic extract inhibits LDL oxidation and foam cell formation involving up-regulation of LXRA/ABCA1 pathway. *Food Chemistry*, *141*, 397 - 406. doi:<http://dx.doi.org/10.1016/j.foodchem.2013.03.026>
- Colabufo, N., Berardi, F., Contino, M., Niso, M., & Perrone, R. (2009). ABC Pumps and Their Role in Active Drug Transport. *Current Topics in Medicinal Chemistry*, *9*(2), 119-129. doi:10.2174/156802609787521553
- da Costa, R., Freire, V., Bezerra, E., Cavada, B., Caetano, E., Lima, J., & Albuquerque, E. (2012). Explaining statin inhibition effectiveness of HMG-CoA reductase by quantum biochemistry computations. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, *14*, 1389-1398. doi:10.1039/clcp22824b
- Da-Costa-Rocha, I., Bonnlaender, B., Sievers, H., Pischel, I., & Heinrich, M. (2014). Hibiscus sabdariffa L. – A phytochemical and pharmacological review. *Food Chemistry*, *165*, 424-443. doi:<https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2014.05.002>
- Dassault Systèmes BIOVIA. (2015). *Discovery Studio Visualizer v16.1.0.15350*. Obtenido de <http://www.3dsbiovia.com/products/collaborative-science/biovia-discovery-studio/visualization-download.php>
- Deeb, O., Rosales, M., Gomez, C., Garduño, R., & Correa, J. (2010). Exploration of human serum albumin binding sites by docking and molecular dynamics flexible ligand-protein interactions. *Biopolymers*, *46*(6), 2674-2683. doi:10.1002/bip.21314
- Duangia, A., Ingkaninan, K., & Limpeanchob, N. (2011). Potential mechanisms of hypocholesterolaemic effect of Thai spices/dietary extracts. *Natural product research*, *25*(4), 341-352. doi:10.1080/14786411003754249
- Forli, S., Huey, R., Sanner, M., Goodsell, D., & Olson, A. (2016). Computational protein-ligand docking and virtual drug screening with the AutoDock suite. *Nature Protocols*, *11*(5), 905-919.

- Ghafourian, T., & Amin, Z. (2013). QSAR Models for the Prediction of Plasma Protein Binding. *BioImpacts*, 3(1), 21-27. doi:10.5681/bi.2013.011
- Gioia, D., Bertazzo, M., Recanatini, M., Masetti, M., & Cavalli, A. (2017). Dynamic Docking: A Paradigm Shift in Computational Drug Discovery. *Molecules*, 22, 1-21. doi:10.3390/molecules22112029
- Gómez Quiroa, D. A., Rudine, A. P., Morataya Lemuz, C. L., Sandoval, M. A., Bran, B. E., Heredia, R., . . . Agustín, L. F. (2010). *Prevalencia de factores de riesgo cardiovascular en la población de Guatemala*. Guatemala: USAC.
- Guyton, A., & Hall, J. (2008). *Tratado de Fisiología Médica 12ª Edición*. España: Elsevier.
- Hansen, K., Mika, S., Schoeter, T., Sutter, A., ter Laak, A., Steger-Hartmann, T., & Müller, K. (2009). Benchmark Data Set for in silico prediction of AMES Mutagenicity. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 49(9), 2077-2081. doi:10.1021/ci900161g
- Hanwell, M., Curtis, D., Lonie, D., Vandermeersch, T., Zurek, E., & Hutchinson, G. (2012). Avogadro: an advanced sematic chemical editor, visualization, and analysis platform. *Journal of Cheminformatics*(4). doi:https://doi.org/10.1186/1758-2946-4-17
- Katzung, B. (2013). *Farmacología básica y clínica 12a edición*. México: McGraw Hill.
- Keutz, E., & Schlüter, G. (1998). Preclinical safety evaluation of cerivastatin, a novel HMG-CoA reductase inhibitor. *The American Journal of Cardiology*, 82(4), 11J-17J. doi:10.1016/s0002-9149(98)00424-x
- Klopman, G., Stefan, L., & Saikhov, R. (2002). ADME evaluation 2. A computer model for the prediction of intestinal absorption in humans. *European Journal of Pharmaceutical Sciences*, 17(4-5), 253-263. doi:10.1016/s0928-0987(02)00219-1

- Korb, O., Olsson, T., Bowden, S., Hall, R., Verdonk, M., Liebeschuetz, J., & Cole, J. (2012). Potential and Limitations of Ensemble Docking. *J. Chem. Inf. Model*, 52(5), 1262-1274. doi:10.1021/ci2005934
- Kratochwil, N., Huber, W., Müller, F., Kansy, M., & Gerber, P. (2002). Predicting plasma protein binding of drugs: a new approach. *Biochemical Pharmacology*, 64(9), 1355-1374. doi:10.1016/s0006-2952(02)01074-2
- Lee, S., Lee, I., Kim, H., Chang, G., Chung, J., & No, K. (2003). The PreADME Approach: Web-based program for rapid prediction of physico-chemical, drug absorption and drug-like properties. *EuroQSAR*, 418-420. Obtenido de preadmet.bmdrc.kr
- López, E., Sosa, M., Labrousse, M., & Paulo, N. (2007). Síndrome Metabólico. *Revista de Posgrado de la Via Cátedra de Medicina*(174), 12-15. Obtenido de http://med.unne.edu.ar/revista/revista174/3_174.pdf
- MacDonald, J., & Halleck, M. (2004). The Toxicology of HMG-CoA Reductase Inhibitors: Prediction of Human Risk. *Toxicologic Pathology*, 32(2), 26-41. doi: 10.1080/01926230490462057
- McKenney, J. (2003). Pharmacologic Characteristics of Statins. *Clin. Cardiol*, III-32-III-38.
- Meng, X., Zhang, H., Mezei, M., & Cui, M. (2011). Molecular docking: a powerful approach for structure-based drug discovery. *Current computer-aided drug design*, 7(2), 146-157.
- Nara Institute of Science and Technology. (2007). *Hibiscus sabdariffa*. Obtenido de http://kanaya.naist.jp/knapsack_jsp/result.jsp?sname=organism&word=hibiscus%20sabdarriffa
- Newman, C., Preiss, D., Torbert, J., Jacobson, T., Page, R., Goldstein, L., . . . Braun, L. (2019). Statin Safety and Associated Adverse Events a Scientific Statement From

- the American Heart Association. *Arterioscler Thromb Vasc Biol*, 39, e38-e81. doi:10.1161/ATV.0000000000000073
- O'Boyle, N., & Banck, M. (2011). Open Babel: An open chemical toolbox. *J Cheminf.*, 3(33). doi:10.1186/1758-2946-3-33
- OMS. (2011). *El colesterol alto, un problema mal controlado*. Obtenido de http://www.who.int/mediacentre/news/notes/2011/cholesterol_20110201/es/
- PDB. (2017). *3CCT Thermodynamic and structure guided design of statin hmg-coa reductase inhibitors*. Obtenido de <http://www.rcsb.org/structure/3CCT>
- Pérez, I., Castaño, E., Ramírez, J., Rocha, N., & Reynoso, R. (2015). Effect of stevia and citric acid on the stability of phenolic compounds and in vitro antioxidant and antidiabetic capacity of a roselle (*Hibiscus sabdariffa* L.) beverage. *Food Chemistry*, 172, 885- 892. doi:<https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2014.09.126>
- Pettersen, E., Goldard, T., Huang, C., Couch, G., Greenbaltt, D., Meng, E., & Ferrin, T. (2004). UCSF Chimera--a visualization system for exploratory research and analysis. *J Comput Chem*, 25(13), 1605-1602.
- Prieto, J. C. (2011). El perfil de seguridad de las estatinas. *Revista médica de Chile*, 129(11), 1237-1240. doi:<https://dx.doi.org/10.4067/S0034-98872001001100001>
- PubChem. (2018). *Open chemistry data base*. Obtenido de <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/search/#collection=compounds>
- Raies, A., & Bajic, V. (2016). In silico toxicology: computational methods for the prediction of chemical toxicity. *Computational Molecular Science*, 6, 147-172. doi:10.1002/wcms.1240
- Sarver, R., Bills, E., Bolton, G., Bratton, L., Caspers, N., Dunbar, J., . . . Bainbridge, G. (2008). Thermodynamic and Structure Guided Desing of Statin Based Inhibitors of 3-Hydroxy-3-Methylglutaryl Coenzyme A Reductase. *J. Med. Chem*, 51(13), 3804-3813. doi:<https://doi.org/10.1021/jm7015057>

- Shitara, Y., & Sugiyama, Y. (2006). Pharmacokinetic and pharmacodynamic alterations of 3-hydroxy-3-methylglutaryl coenzyme A (HMG-CoA) reductase inhibitors: Drug– drug interactions and interindividual differences in transporter and metabolic enzyme functions. *Pharmacology & Therapeutics*, *112*, 71 - 105. doi:10.1016/j.pharmthera.2006.03.003
- Stenberg, P., Luthman, K., & Artursson, P. (2000). Virtual screening of intestinal drug permeability. *Journal of Controlled Release*, *65*(1-2), 231-243. doi:10.1016/s0168-3659(99)00239-4
- Syed, M., & Nighat, F. (2015). In silico analysis and molecular docking studies of potential angiotensin-converting enzyme inhibitor using quercetin glycosides. *Pharmacognosy Magazine*, *11*(42), 123-126. doi:10.4103/0973-1296.157712
- Trott, O., & Olson, J. (2010). AutoDock Vina: Improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization and multithreading. *Journal of Computational Chemistry*(31), 455-461.
- Varma, V., Ambler, M., Ullah, M., Rotter, J., Sun, C., Litchfield, H., & El-Kattan, F. (2010). Targeting Intestinal Transporters for Optimizing Oral Drug Absorption. *Current Drug Metabolism*, *11*(9), 730-742. doi:10.2174/138920010794328850
- Vilasinee, H., Anocha, U., Morales, N., Nuntavan, B., Sato, H., Herunsale, A., & Suthisisang, C. (2006). Hypocholesterolemic and antioxidant effects of aqueous extracts from the dried calyx of *Hibiscus sabdariffa* L. in hypercholesterolemic rats. *Journal of Ethnopharmacology*, *103*, 252-260. doi:https://doi.org/10.1016/j.jep.2005.08.033
- Wang, J., Lai, L., & Tang, Y. (1999). Structural Features of Toxic Chemicals for Specific Toxicity. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, *39*(6), 1173-1189. doi:10.1021/ci990039r

- Wessel, M., Jurs, P., Tolan, J., & Muskal, S. (1998). Prediction of Human Intestinal Absorption of Drug Compounds from Molecular Structure. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, 38(4), 726-735. doi:10.1021/ci980029a
- Yuliana, D., Bahtiar, F., & Najib, A. (2013). In Silico Screening of Chemical Compounds from Roselle (Hibiscus Sabdariffa) as Angiotensin-I Converting Enzyme Inhibitor Used PyRx Program. *ARPJN Journal of Science and Technology*, 3(12), 1158-1160.
- Zhivkova, Z., & Doytchinova, I. (2012). Quantitative structure-plasma protein binding relationships of acidic drugs. *Journal of Pharmaceutical Sciences*, 101(12), 4627-4641. doi:10.1002/jps.23303

XIII. ANEXOS

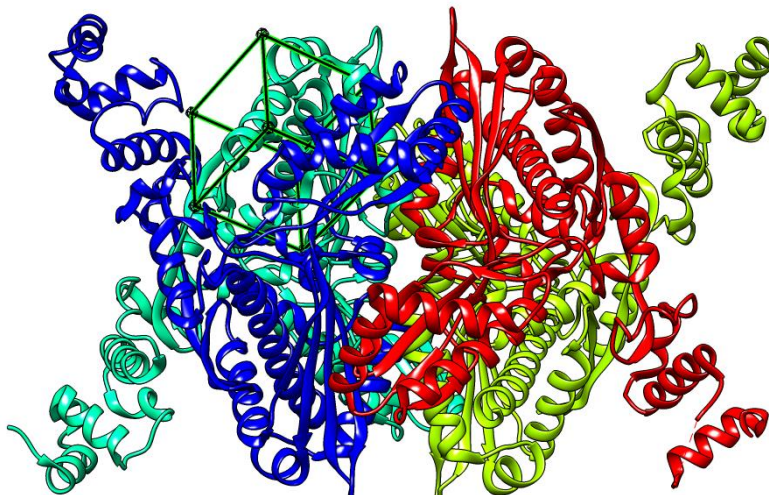


Figura 1 Enzima HMG CoA-reductasa

La figura muestra a la enzima HMG CoA-reductasa (3cct) con la caja de interacción molecular en coordenadas $x=17$, $y=-24$, $z=15$ tamaño alto=20, largo=20 y ancho=20 (PDB, 2017) y (Pettersen, y otros, 2004).

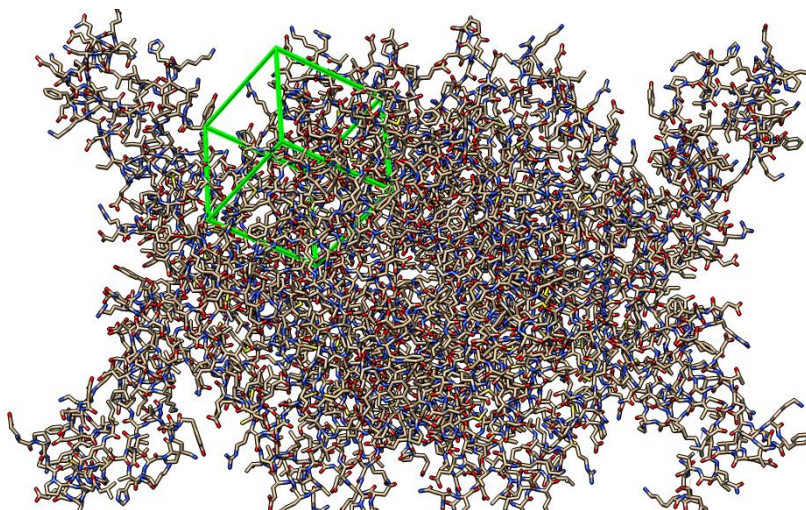


Figura 2 Enzima HMG CoA-reductasa

La figura muestra a la enzima HMG CoA-reductasa (3cct) con la caja de interacción molecular en coordenadas $x=17$, $y=-24$, $z=15$ tamaño alto=20, largo=20 y ancho=20 (PDB, 2017) y (Pettersen, y otros, 2004).

Cuadro No. 1 Estructuras generadas en el diseño de los candidatos en código SMILES

No.	SMILES	No.	SMILES
1	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2cc(O)cc(O)c12</chem>	51	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2cc(O)cc(C(C)C)c12</chem>
2	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2cc(O)cc(O)c12</chem>	52	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2cc(O)cc(C(C)C)c12</chem>
3	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2cc(O)cc(O)c12</chem>	53	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cc(O)cc(C(C)C)c12</chem>
4	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2cc(O)cc(O)c12</chem>	54	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2cc(O)cc(C(C)C)c12</chem>
5	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2cc(O)cc(O)c12</chem>	55	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O))oc2cc(O)cc(C(C)C)c12</chem>
6	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2cc(O)cc(O)c12</chem>	56	<chem>O=c1c(O)ccc2cc(O)cc(C(C)C)c12</chem>
7	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2cc(O)cc(O)c12</chem>	57	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2cc(O)cc(F)c12</chem>
8	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2cc(O)cc(O)c12</chem>	58	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2cc(O)cc(F)c12</chem>
9	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2cc(O)cc(O)c12</chem>	59	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2cc(O)cc(F)c12</chem>
10	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2cc(O)cc(O)c12</chem>	60	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2cc(O)cc(F)c12</chem>
11	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cc(O)cc(O)c12</chem>	61	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2cc(O)cc(F)c12</chem>
12	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2cc(O)cc(O)c12</chem>	62	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2cc(O)cc(F)c12</chem>
13	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O))oc2cc(O)cc(O)c12</chem>	63	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2cc(O)cc(F)c12</chem>
14	<chem>O=c1c(O)ccc2cc(O)cc(O)c12</chem>	64	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2cc(O)cc(F)c12</chem>
15	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2cc(O)cc(OC)c12</chem>	65	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2cc(O)cc(F)c12</chem>
16	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2cc(O)cc(OC)c12</chem>	66	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2cc(O)cc(F)c12</chem>
17	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2cc(O)cc(OC)c12</chem>	67	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cc(O)cc(F)c12</chem>
18	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2cc(O)cc(OC)c12</chem>	68	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2cc(O)cc(F)c12</chem>
19	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2cc(O)cc(OC)c12</chem>	69	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O))oc2cc(O)cc(F)c12</chem>
20	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2cc(O)cc(OC)c12</chem>	70	<chem>O=c1c(O)ccc2cc(O)cc(F)c12</chem>
21	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2cc(O)cc(OC)c12</chem>	71	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2cc(O)ccc12</chem>
22	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2cc(O)cc(OC)c12</chem>	72	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2cc(O)ccc12</chem>
23	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2cc(O)cc(OC)c12</chem>	73	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2cc(O)ccc12</chem>
24	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2cc(O)cc(OC)c12</chem>	74	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2cc(O)ccc12</chem>
25	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cc(O)cc(OC)c12</chem>	75	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2cc(O)ccc12</chem>
26	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2cc(O)cc(OC)c12</chem>	76	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2cc(O)ccc12</chem>
27	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O))oc2cc(O)cc(OC)c12</chem>	77	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2cc(O)ccc12</chem>
28	<chem>O=c1c(O)ccc2cc(O)cc(OC)c12</chem>	78	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2cc(O)ccc12</chem>
29	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2cc(O)cc(OC)c12</chem>	79	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2cc(O)ccc12</chem>
30	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2cc(O)cc(OC)c12</chem>	80	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2cc(O)ccc12</chem>
31	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2cc(O)cc(OC)c12</chem>	81	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cc(O)ccc12</chem>
32	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2cc(O)cc(OC)c12</chem>	82	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2cc(O)ccc12</chem>
33	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2cc(O)cc(OC)c12</chem>	83	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O))oc2cc(O)ccc12</chem>
34	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2cc(O)cc(OC)c12</chem>	84	<chem>O=c1c(O)ccc2cc(O)ccc12</chem>
35	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2cc(O)cc(OC)c12</chem>	85	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2cc(OC)cc(O)c12</chem>
36	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2cc(O)cc(OC)c12</chem>	86	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2cc(OC)cc(O)c12</chem>
37	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2cc(O)cc(OC)c12</chem>	87	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2cc(OC)cc(O)c12</chem>
38	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cc(O)cc(OC)c12</chem>	88	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2cc(OC)cc(O)c12</chem>
39	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cc(O)cc(OC)c12</chem>	89	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2cc(OC)cc(O)c12</chem>
40	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2cc(O)cc(OC)c12</chem>	90	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2cc(OC)cc(O)c12</chem>
41	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O))oc2cc(O)cc(OC)c12</chem>	91	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2cc(OC)cc(O)c12</chem>
42	<chem>O=c1c(O)ccc2cc(O)cc(OC)c12</chem>	92	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2cc(OC)cc(O)c12</chem>
43	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2cc(O)cc(C(C)C)c12</chem>	93	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2cc(OC)cc(O)c12</chem>
44	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2cc(O)cc(C(C)C)c12</chem>	94	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2cc(OC)cc(O)c12</chem>
45	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2cc(O)cc(C(C)C)c12</chem>	95	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cc(OC)cc(O)c12</chem>
46	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2cc(O)cc(C(C)C)c12</chem>	96	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2cc(OC)cc(O)c12</chem>
47	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2cc(O)cc(C(C)C)c12</chem>	97	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O))oc2cc(OC)cc(O)c12</chem>
48	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2cc(O)cc(C(C)C)c12</chem>	98	<chem>O=c1c(O)ccc2cc(OC)cc(O)c12</chem>
49	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2cc(O)cc(C(C)C)c12</chem>	99	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2cc(OC)cc(OC)c12</chem>
50	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2cc(O)cc(C(C)C)c12</chem>	100	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2cc(OC)cc(OC)c12</chem>

No.	SMILES	No.	SMILES
101	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2cc(OC)cc(OC)c12</chem>	151	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cc(OC)cc(F)c12</chem>
102	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2cc(OC)cc(OC)c12</chem>	152	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2cc(OC)cc(F)c12</chem>
103	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2cc(OC)cc(OC)c12</chem>	153	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2cc(OC)cc(F)c12</chem>
104	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2cc(OC)cc(OC)c12</chem>	154	<chem>O=c1c(O)coc2cc(OC)cc(F)c12</chem>
105	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2cc(OC)cc(OC)c12</chem>	155	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2cc(OC)ccc12</chem>
106	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2cc(OC)cc(OC)c12</chem>	156	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2cc(OC)ccc12</chem>
107	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2cc(OC)cc(OC)c12</chem>	157	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2cc(OC)ccc12</chem>
108	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2cc(OC)cc(OC)c12</chem>	158	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2cc(OC)ccc12</chem>
109	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cc(OC)cc(OC)c12</chem>	159	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2cc(OC)ccc12</chem>
110	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2cc(OC)cc(OC)c12</chem>	160	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2cc(OC)ccc12</chem>
111	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2cc(OC)cc(OC)c12</chem>	161	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2cc(OC)ccc12</chem>
112	<chem>O=c1c(O)coc2cc(OC)cc(OC)c12</chem>	162	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2cc(OC)ccc12</chem>
113	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2cc(OC)cc(OCC)c12</chem>	163	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2cc(OC)ccc12</chem>
114	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2cc(OC)cc(OCC)c12</chem>	164	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2cc(OC)ccc12</chem>
115	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2cc(OC)cc(OCC)c12</chem>	165	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cc(OC)ccc12</chem>
116	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2cc(OC)cc(OCC)c12</chem>	166	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2cc(OC)ccc12</chem>
117	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2cc(OC)cc(OCC)c12</chem>	167	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2cc(OC)ccc12</chem>
118	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2cc(OC)cc(OCC)c12</chem>	168	<chem>O=c1c(O)coc2cc(OC)ccc12</chem>
119	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2cc(OC)cc(OCC)c12</chem>	169	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(O)c12</chem>
120	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2cc(OC)cc(OCC)c12</chem>	170	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(O)c12</chem>
121	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2cc(OC)cc(OCC)c12</chem>	171	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2cc(OCC)cc(O)c12</chem>
122	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2cc(OC)cc(OCC)c12</chem>	172	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2cc(OCC)cc(O)c12</chem>
123	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cc(OC)cc(OCC)c12</chem>	173	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(O)c12</chem>
124	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2cc(OC)cc(OCC)c12</chem>	174	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(O)c12</chem>
125	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2cc(OC)cc(OCC)c12</chem>	175	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(O)c12</chem>
126	<chem>O=c1c(O)coc2cc(OC)cc(OCC)c12</chem>	176	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2cc(OCC)cc(O)c12</chem>
127	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2cc(OC)cc(C(C)C)c12</chem>	177	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(O)c12</chem>
128	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2cc(OC)cc(C(C)C)c12</chem>	178	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2cc(OCC)cc(O)c12</chem>
129	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2cc(OC)cc(C(C)C)c12</chem>	179	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cc(OCC)cc(O)c12</chem>
130	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2cc(OC)cc(C(C)C)c12</chem>	180	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2cc(OCC)cc(O)c12</chem>
131	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2cc(OC)cc(C(C)C)c12</chem>	181	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2cc(OCC)cc(O)c12</chem>
132	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2cc(OC)cc(C(C)C)c12</chem>	182	<chem>O=c1c(O)coc2cc(OCC)cc(O)c12</chem>
133	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2cc(OC)cc(C(C)C)c12</chem>	183	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(OC)c12</chem>
134	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2cc(OC)cc(C(C)C)c12</chem>	184	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(OC)c12</chem>
135	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2cc(OC)cc(C(C)C)c12</chem>	185	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2cc(OCC)cc(OC)c12</chem>
136	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2cc(OC)cc(C(C)C)c12</chem>	186	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2cc(OCC)cc(OC)c12</chem>
137	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cc(OC)cc(C(C)C)c12</chem>	187	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(OC)c12</chem>
138	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2cc(OC)cc(C(C)C)c12</chem>	188	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(OC)c12</chem>
139	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2cc(OC)cc(C(C)C)c12</chem>	189	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(OC)c12</chem>
140	<chem>O=c1c(O)coc2cc(OC)cc(C(C)C)c12</chem>	190	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2cc(OCC)cc(OC)c12</chem>
141	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2cc(OC)cc(F)c12</chem>	191	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(OC)c12</chem>
142	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2cc(OC)cc(F)c12</chem>	192	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2cc(OCC)cc(OC)c12</chem>
143	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2cc(OC)cc(F)c12</chem>	193	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cc(OCC)cc(OC)c12</chem>
144	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2cc(OC)cc(F)c12</chem>	194	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2cc(OCC)cc(OC)c12</chem>
145	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2cc(OC)cc(F)c12</chem>	195	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2cc(OCC)cc(OC)c12</chem>
146	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2cc(OC)cc(F)c12</chem>	196	<chem>O=c1c(O)coc2cc(OCC)cc(OC)c12</chem>
147	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2cc(OC)cc(F)c12</chem>	197	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(OCC)c12</chem>
148	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2cc(OC)cc(F)c12</chem>	198	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(OCC)c12</chem>
149	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2cc(OC)cc(F)c12</chem>	199	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2cc(OCC)cc(OCC)c12</chem>
150	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2cc(OC)cc(F)c12</chem>	200	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2cc(OCC)cc(OCC)c12</chem>

No.	SMILES	No.	SMILES
201	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(OCC)c12</chem>	251	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2cc(OCC)ccc12</chem>
202	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(OCC)c12</chem>	252	<chem>O=c1c(O)coc2cc(OCC)ccc12</chem>
203	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2cc(OCC)cc(OCC)c12</chem>	253	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)cc(O)c12</chem>
204	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(OCC)c12</chem>	254	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)cc(O)c12</chem>
205	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2cc(OCC)cc(OCC)c12</chem>	255	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)cc(O)c12</chem>
206	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2cc(OCC)cc(OCC)c12</chem>	256	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)cc(O)c12</chem>
207	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(OCC)c12</chem>	257	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)cc(O)c12</chem>
208	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2cc(OCC)cc(OCC)c12</chem>	258	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)cc(O)c12</chem>
209	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2cc(OCC)cc(OCC)c12</chem>	259	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)cc(O)c12</chem>
210	<chem>O=c1c(O)coc2cc(OCC)cc(OCC)c12</chem>	260	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)cc(O)c12</chem>
211	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(C(C)C)c12</chem>	261	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)cc(O)c12</chem>
212	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(C(C)C)c12</chem>	262	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)cc(O)c12</chem>
213	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2cc(OCC)cc(C(C)C)c12</chem>	263	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)cc(O)c12</chem>
214	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2cc(OCC)cc(C(C)C)c12</chem>	264	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)cc(O)c12</chem>
215	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(C(C)C)c12</chem>	265	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2cc(C(C)C)cc(O)c12</chem>
216	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(C(C)C)c12</chem>	266	<chem>O=c1c(O)coc2cc(C(C)C)cc(O)c12</chem>
217	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2cc(OCC)cc(C(C)C)c12</chem>	267	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)cc(OC)c12</chem>
218	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(C(C)C)c12</chem>	268	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)cc(OC)c12</chem>
219	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2cc(OCC)cc(C(C)C)c12</chem>	269	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)cc(OC)c12</chem>
220	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2cc(OCC)cc(C(C)C)c12</chem>	270	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)cc(OC)c12</chem>
221	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(C(C)C)c12</chem>	271	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)cc(OC)c12</chem>
222	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2cc(OCC)cc(C(C)C)c12</chem>	272	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)cc(OC)c12</chem>
223	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2cc(OCC)cc(C(C)C)c12</chem>	273	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)cc(OC)c12</chem>
224	<chem>O=c1c(O)coc2cc(OCC)cc(C(C)C)c12</chem>	274	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)cc(OC)c12</chem>
225	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(F)c12</chem>	275	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)cc(OC)c12</chem>
226	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(F)c12</chem>	276	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)cc(OC)c12</chem>
227	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2cc(OCC)cc(F)c12</chem>	277	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)cc(OC)c12</chem>
228	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2cc(OCC)cc(F)c12</chem>	278	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)cc(OC)c12</chem>
229	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(F)c12</chem>	279	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2cc(C(C)C)cc(OC)c12</chem>
230	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(F)c12</chem>	280	<chem>O=c1c(O)coc2cc(C(C)C)cc(OC)c12</chem>
231	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2cc(OCC)cc(F)c12</chem>	281	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)cc(OCC)c12</chem>
232	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(F)c12</chem>	282	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)cc(OCC)c12</chem>
233	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2cc(OCC)cc(F)c12</chem>	283	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)cc(OCC)c12</chem>
234	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2cc(OCC)cc(F)c12</chem>	284	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)cc(OCC)c12</chem>
235	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2cc(OCC)cc(F)c12</chem>	285	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)cc(OCC)c12</chem>
236	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2cc(OCC)cc(F)c12</chem>	286	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)cc(OCC)c12</chem>
237	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2cc(OCC)cc(F)c12</chem>	287	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)cc(OCC)c12</chem>
238	<chem>O=c1c(O)coc2cc(OCC)cc(F)c12</chem>	288	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)cc(OCC)c12</chem>
239	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2cc(OCC)ccc12</chem>	289	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)cc(OCC)c12</chem>
240	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2cc(OCC)ccc12</chem>	290	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)cc(OCC)c12</chem>
241	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2cc(OCC)ccc12</chem>	291	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)cc(OCC)c12</chem>
242	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2cc(OCC)ccc12</chem>	292	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)cc(OCC)c12</chem>
243	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2cc(OCC)ccc12</chem>	293	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2cc(C(C)C)cc(OCC)c12</chem>
244	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2cc(OCC)ccc12</chem>	294	<chem>O=c1c(O)coc2cc(C(C)C)cc(OCC)c12</chem>
245	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2cc(OCC)ccc12</chem>	295	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)cc(C(C)C)c12</chem>
246	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2cc(OCC)ccc12</chem>	296	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)cc(C(C)C)c12</chem>
247	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2cc(OCC)ccc12</chem>	297	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)cc(C(C)C)c12</chem>
248	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2cc(OCC)ccc12</chem>	298	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)cc(C(C)C)c12</chem>
249	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2cc(OCC)ccc12</chem>	299	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)cc(C(C)C)c12</chem>
250	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2cc(OCC)ccc12</chem>	300	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)cc(C(C)C)c12</chem>

No.	SMILES	No.	SMILES
301	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)cc(C(C)C)c12</chem>	351	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2cc(F)cc(OC)c12</chem>
302	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)cc(C(C)C)c12</chem>	352	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2cc(F)cc(OC)c12</chem>
303	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)cc(C(C)C)c12</chem>	353	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2cc(F)cc(OC)c12</chem>
304	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)cc(C(C)C)c12</chem>	354	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2cc(F)cc(OC)c12</chem>
305	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)cc(C(C)C)c12</chem>	355	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2cc(F)cc(OC)c12</chem>
306	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)cc(C(C)C)c12</chem>	356	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2cc(F)cc(OC)c12</chem>
307	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2cc(C(C)C)cc(C(C)C)c12</chem>	357	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2cc(F)cc(OC)c12</chem>
308	<chem>O=c1c(O)coc2cc(C(C)C)cc(C(C)C)c12</chem>	358	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2cc(F)cc(OC)c12</chem>
309	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2cc(C(C)C)cc(F)c12</chem>	359	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2cc(F)cc(OC)c12</chem>
310	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2cc(C(C)C)cc(F)c12</chem>	360	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2cc(F)cc(OC)c12</chem>
311	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2cc(C(C)C)cc(F)c12</chem>	361	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cc(F)cc(OC)c12</chem>
312	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2cc(C(C)C)cc(F)c12</chem>	362	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2cc(F)cc(OC)c12</chem>
313	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)cc(F)c12</chem>	363	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2cc(F)cc(OC)c12</chem>
314	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)cc(F)c12</chem>	364	<chem>O=c1c(O)coc2cc(F)cc(OC)c12</chem>
315	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)cc(F)c12</chem>	365	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2cc(F)cc(OCC)c12</chem>
316	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)cc(F)c12</chem>	366	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2cc(F)cc(OCC)c12</chem>
317	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)cc(F)c12</chem>	367	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2cc(F)cc(OCC)c12</chem>
318	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)cc(F)c12</chem>	368	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2cc(F)cc(OCC)c12</chem>
319	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)cc(F)c12</chem>	369	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2cc(F)cc(OCC)c12</chem>
320	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)cc(F)c12</chem>	370	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2cc(F)cc(OCC)c12</chem>
321	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2cc(C(C)C)cc(F)c12</chem>	371	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2cc(F)cc(OCC)c12</chem>
322	<chem>O=c1c(O)coc2cc(C(C)C)cc(F)c12</chem>	372	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2cc(F)cc(OCC)c12</chem>
323	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2cc(C(C)C)ccc12</chem>	373	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2cc(F)cc(OCC)c12</chem>
324	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2cc(C(C)C)ccc12</chem>	374	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2cc(F)cc(OCC)c12</chem>
325	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2cc(C(C)C)ccc12</chem>	375	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cc(F)cc(OCC)c12</chem>
326	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2cc(C(C)C)ccc12</chem>	376	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2cc(F)cc(OCC)c12</chem>
327	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)ccc12</chem>	377	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2cc(F)cc(OCC)c12</chem>
328	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)ccc12</chem>	378	<chem>O=c1c(O)coc2cc(F)cc(OCC)c12</chem>
329	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)ccc12</chem>	379	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2cc(F)cc(C(C)C)c12</chem>
330	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)ccc12</chem>	380	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2cc(F)cc(C(C)C)c12</chem>
331	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2cc(C(C)C)ccc12</chem>	381	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2cc(F)cc(C(C)C)c12</chem>
332	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)ccc12</chem>	382	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2cc(F)cc(C(C)C)c12</chem>
333	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)ccc12</chem>	383	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2cc(F)cc(C(C)C)c12</chem>
334	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2cc(C(C)C)ccc12</chem>	384	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2cc(F)cc(C(C)C)c12</chem>
335	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2cc(C(C)C)ccc12</chem>	385	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2cc(F)cc(C(C)C)c12</chem>
336	<chem>O=c1c(O)coc2cc(C(C)C)ccc12</chem>	386	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2cc(F)cc(C(C)C)c12</chem>
337	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2cc(F)cc(O)c12</chem>	387	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2cc(F)cc(C(C)C)c12</chem>
338	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2cc(F)cc(O)c12</chem>	388	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2cc(F)cc(C(C)C)c12</chem>
339	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2cc(F)cc(O)c12</chem>	389	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cc(F)cc(C(C)C)c12</chem>
340	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2cc(F)cc(O)c12</chem>	390	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2cc(F)cc(C(C)C)c12</chem>
341	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2cc(F)cc(O)c12</chem>	391	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2cc(F)cc(C(C)C)c12</chem>
342	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2cc(F)cc(O)c12</chem>	392	<chem>O=c1c(O)coc2cc(F)cc(C(C)C)c12</chem>
343	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2cc(F)cc(O)c12</chem>	393	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2cc(F)cc(F)c12</chem>
344	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2cc(F)cc(O)c12</chem>	394	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2cc(F)cc(F)c12</chem>
345	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2cc(F)cc(O)c12</chem>	395	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2cc(F)cc(F)c12</chem>
346	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2cc(F)cc(O)c12</chem>	396	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2cc(F)cc(F)c12</chem>
347	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cc(F)cc(O)c12</chem>	397	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2cc(F)cc(F)c12</chem>
348	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2cc(F)cc(O)c12</chem>	398	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2cc(F)cc(F)c12</chem>
349	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2cc(F)cc(O)c12</chem>	399	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2cc(F)cc(F)c12</chem>
350	<chem>O=c1c(O)coc2cc(F)cc(O)c12</chem>	400	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2cc(F)cc(F)c12</chem>

No.	SMILES	No.	SMILES
401	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2cc(F)cc(F)c12</chem>	451	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2cccc(OCC)c12</chem>
402	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2cc(F)cc(F)c12</chem>	452	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2cccc(OCC)c12</chem>
403	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cc(F)cc(F)c12</chem>	453	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2cccc(OCC)c12</chem>
404	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2cc(F)cc(F)c12</chem>	454	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2cccc(OCC)c12</chem>
405	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2cc(F)cc(F)c12</chem>	455	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2cccc(OCC)c12</chem>
406	<chem>O=c1c(O)coc2cc(F)cc(F)c12</chem>	456	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2cccc(OCC)c12</chem>
407	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2cc(F)ccc12</chem>	457	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2cccc(OCC)c12</chem>
408	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2cc(F)ccc12</chem>	458	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2cccc(OCC)c12</chem>
409	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2cc(F)ccc12</chem>	459	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cccc(OCC)c12</chem>
410	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2cc(F)ccc12</chem>	460	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2cccc(OCC)c12</chem>
411	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2cc(F)ccc12</chem>	461	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2cccc(OCC)c12</chem>
412	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2cc(F)ccc12</chem>	462	<chem>O=c1c(O)coc2cccc(OCC)c12</chem>
413	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2cc(F)ccc12</chem>	463	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2cccc(C(C)C)c12</chem>
414	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2cc(F)ccc12</chem>	464	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2cccc(C(C)C)c12</chem>
415	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2cc(F)ccc12</chem>	465	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2cccc(C(C)C)c12</chem>
416	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2cc(F)ccc12</chem>	466	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2cccc(C(C)C)c12</chem>
417	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cc(F)ccc12</chem>	467	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2cccc(C(C)C)c12</chem>
418	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2cc(F)ccc12</chem>	468	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2cccc(C(C)C)c12</chem>
419	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2cc(F)ccc12</chem>	469	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2cccc(C(C)C)c12</chem>
420	<chem>O=c1c(O)coc2cc(F)ccc12</chem>	470	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2cccc(C(C)C)c12</chem>
421	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2cccc(O)c12</chem>	471	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2cccc(C(C)C)c12</chem>
422	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2cccc(O)c12</chem>	472	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2cccc(C(C)C)c12</chem>
423	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2cccc(O)c12</chem>	473	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cccc(C(C)C)c12</chem>
424	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2cccc(O)c12</chem>	474	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2cccc(C(C)C)c12</chem>
425	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2cccc(O)c12</chem>	475	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2cccc(C(C)C)c12</chem>
426	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2cccc(O)c12</chem>	476	<chem>O=c1c(O)coc2cccc(C(C)C)c12</chem>
427	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2cccc(O)c12</chem>	477	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2cccc(F)c12</chem>
428	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2cccc(O)c12</chem>	478	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2cccc(F)c12</chem>
429	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2cccc(O)c12</chem>	479	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2cccc(F)c12</chem>
430	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2cccc(O)c12</chem>	480	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2cccc(F)c12</chem>
431	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cccc(O)c12</chem>	481	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2cccc(F)c12</chem>
432	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2cccc(O)c12</chem>	482	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2cccc(F)c12</chem>
433	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2cccc(O)c12</chem>	483	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2cccc(F)c12</chem>
434	<chem>O=c1c(O)coc2cccc(O)c12</chem>	484	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2cccc(F)c12</chem>
435	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2cccc(OC)c12</chem>	485	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2cccc(F)c12</chem>
436	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2cccc(OC)c12</chem>	486	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2cccc(F)c12</chem>
437	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2cccc(OC)c12</chem>	487	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cccc(F)c12</chem>
438	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2cccc(OC)c12</chem>	488	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2cccc(F)c12</chem>
439	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2cccc(OC)c12</chem>	489	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2cccc(F)c12</chem>
440	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2cccc(OC)c12</chem>	490	<chem>O=c1c(O)coc2cccc(F)c12</chem>
441	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2cccc(OC)c12</chem>	491	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2cccc12</chem>
442	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2cccc(OC)c12</chem>	492	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2cccc12</chem>
443	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2cccc(OC)c12</chem>	493	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2cccc12</chem>
444	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2cccc(OC)c12</chem>	494	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2cccc12</chem>
445	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cccc(OC)c12</chem>	495	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2cccc12</chem>
446	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2cccc(OC)c12</chem>	496	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2cccc12</chem>
447	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2cccc(OC)c12</chem>	497	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2cccc12</chem>
448	<chem>O=c1c(O)coc2cccc(OC)c12</chem>	498	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2cccc12</chem>
449	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2cccc(OCC)c12</chem>	499	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2cccc12</chem>
450	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2cccc(OCC)c12</chem>	500	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2cccc12</chem>

No.	SMILES	No.	SMILES
501	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2cccc12</chem>	551	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(O)cc(C(C)C)c12</chem>
502	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2cccc12</chem>	552	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(O)cc(C(C)C)c12</chem>
503	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2cccc12</chem>	553	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(O)cc(C(C)C)c12</chem>
504	<chem>O=c1c(O)coc2cccc12</chem>	554	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(O)cc(C(C)C)c12</chem>
505	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2c(O)c(O)cc(O)c12</chem>	555	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(O)cc(C(C)C)c12</chem>
506	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2c(O)c(O)cc(O)c12</chem>	556	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(O)cc(C(C)C)c12</chem>
507	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2c(O)c(O)cc(O)c12</chem>	557	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(O)cc(C(C)C)c12</chem>
508	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2c(O)c(O)cc(O)c12</chem>	558	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(O)cc(C(C)C)c12</chem>
509	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(O)cc(O)c12</chem>	559	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2c(O)c(O)cc(C(C)C)c12</chem>
510	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(O)cc(O)c12</chem>	560	<chem>O=c1c(O)coc2c(O)c(O)cc(C(C)C)c12</chem>
511	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(O)cc(O)c12</chem>	561	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2c(O)c(O)cc(F)c12</chem>
512	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(O)cc(O)c12</chem>	562	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2c(O)c(O)cc(F)c12</chem>
513	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(O)cc(O)c12</chem>	563	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2c(O)c(O)cc(F)c12</chem>
514	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(O)cc(O)c12</chem>	564	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2c(O)c(O)cc(F)c12</chem>
515	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(O)cc(O)c12</chem>	565	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(O)cc(F)c12</chem>
516	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(O)cc(O)c12</chem>	566	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(O)cc(F)c12</chem>
517	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2c(O)c(O)cc(O)c12</chem>	567	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(O)cc(F)c12</chem>
518	<chem>O=c1c(O)coc2c(O)c(O)cc(O)c12</chem>	568	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(O)cc(F)c12</chem>
519	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2c(O)c(O)cc(OC)c12</chem>	569	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(O)cc(F)c12</chem>
520	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2c(O)c(O)cc(OC)c12</chem>	570	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(O)cc(F)c12</chem>
521	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2c(O)c(O)cc(OC)c12</chem>	571	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(O)cc(F)c12</chem>
522	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2c(O)c(O)cc(OC)c12</chem>	572	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(O)cc(F)c12</chem>
523	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(O)cc(OC)c12</chem>	573	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2c(O)c(O)cc(F)c12</chem>
524	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(O)cc(OC)c12</chem>	574	<chem>O=c1c(O)coc2c(O)c(O)cc(F)c12</chem>
525	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(O)cc(OC)c12</chem>	575	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2c(O)c(O)ccc12</chem>
526	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(O)cc(OC)c12</chem>	576	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2c(O)c(O)ccc12</chem>
527	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(O)cc(OC)c12</chem>	577	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2c(O)c(O)ccc12</chem>
528	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(O)cc(OC)c12</chem>	578	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2c(O)c(O)ccc12</chem>
529	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(O)cc(OC)c12</chem>	579	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(O)ccc12</chem>
530	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(O)cc(OC)c12</chem>	580	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(O)ccc12</chem>
531	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2c(O)c(O)cc(OC)c12</chem>	581	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(O)ccc12</chem>
532	<chem>O=c1c(O)coc2c(O)c(O)cc(OC)c12</chem>	582	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(O)ccc12</chem>
533	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2c(O)c(O)cc(OCC)c12</chem>	583	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(O)ccc12</chem>
534	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2c(O)c(O)cc(OCC)c12</chem>	584	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(O)ccc12</chem>
535	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2c(O)c(O)cc(OCC)c12</chem>	585	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(O)ccc12</chem>
536	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2c(O)c(O)cc(OCC)c12</chem>	586	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(O)ccc12</chem>
537	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(O)cc(OCC)c12</chem>	587	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2c(O)c(O)ccc12</chem>
538	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(O)cc(OCC)c12</chem>	588	<chem>O=c1c(O)coc2c(O)c(O)ccc12</chem>
539	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(O)cc(OCC)c12</chem>	589	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2c(O)c(O)cc(OC)cc(O)c12</chem>
540	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(O)cc(OCC)c12</chem>	590	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2c(O)c(O)cc(OC)cc(O)c12</chem>
541	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(O)cc(OCC)c12</chem>	591	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2c(O)c(O)cc(OC)cc(O)c12</chem>
542	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(O)cc(OCC)c12</chem>	592	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2c(O)c(O)cc(OC)cc(O)c12</chem>
543	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(O)cc(OCC)c12</chem>	593	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(O)cc(OC)cc(O)c12</chem>
544	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(O)cc(OCC)c12</chem>	594	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(O)cc(OC)cc(O)c12</chem>
545	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2c(O)c(O)cc(OCC)c12</chem>	595	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(O)cc(OC)cc(O)c12</chem>
546	<chem>O=c1c(O)coc2c(O)c(O)cc(OCC)c12</chem>	596	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(O)cc(OC)cc(O)c12</chem>
547	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2c(O)c(O)cc(C(C)C)c12</chem>	597	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(O)cc(OC)cc(O)c12</chem>
548	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2c(O)c(O)cc(C(C)C)c12</chem>	598	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(O)cc(OC)cc(O)c12</chem>
549	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2c(O)c(O)cc(C(C)C)c12</chem>	599	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(O)cc(OC)cc(O)c12</chem>
550	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2c(O)c(O)cc(C(C)C)c12</chem>	600	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(O)cc(OC)cc(O)c12</chem>

No.	SMILES	No.	SMILES
601	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(=O)O)oc2c(O)c(OC)cc(O)c12</chem>	651	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(OC)cc(F)c12</chem>
602	<chem>O=c1c(O)c(coc2c(O)c(OC)cc(O)c12</chem>	652	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(F)c12</chem>
603	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2c(O)c(OC)cc(OC)c12</chem>	653	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(OC)cc(F)c12</chem>
604	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2c(O)c(OC)cc(OC)c12</chem>	654	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(F)c12</chem>
605	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(OC)c12</chem>	655	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(F)c12</chem>
606	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(OC)c12</chem>	656	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(F)c12</chem>
607	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2c(O)c(OC)cc(OC)c12</chem>	657	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2c(O)c(OC)cc(F)c12</chem>
608	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2c(O)c(OC)cc(OC)c12</chem>	658	<chem>O=c1c(O)coc2c(O)c(OC)cc(F)c12</chem>
609	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(OC)c12</chem>	659	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2c(O)c(OC)ccc12</chem>
610	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(OC)c12</chem>	660	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2c(O)c(OC)ccc12</chem>
611	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(OC)c12</chem>	661	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)ccc12</chem>
612	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(OC)c12</chem>	662	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)ccc12</chem>
613	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(OC)c12</chem>	663	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2c(O)c(OC)ccc12</chem>
614	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(OC)c12</chem>	664	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2c(O)c(OC)ccc12</chem>
615	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2c(O)c(OC)cc(OC)c12</chem>	665	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)ccc12</chem>
616	<chem>O=c1c(O)coc2c(O)c(OC)cc(OC)c12</chem>	666	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2c(O)c(OC)ccc12</chem>
617	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2c(O)c(OC)cc(OCC)c12</chem>	667	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)ccc12</chem>
618	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2c(O)c(OC)cc(OCC)c12</chem>	668	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)ccc12</chem>
619	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(OCC)c12</chem>	669	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2c(O)c(OC)ccc12</chem>
620	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(OCC)c12</chem>	670	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)ccc12</chem>
621	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2c(O)c(OC)cc(OCC)c12</chem>	671	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2c(O)c(OC)ccc12</chem>
622	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2c(O)c(OC)cc(OCC)c12</chem>	672	<chem>O=c1c(O)coc2c(O)c(OC)ccc12</chem>
623	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(OCC)c12</chem>	673	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(O)c12</chem>
624	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(OCC)c12</chem>	674	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(O)c12</chem>
625	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(OCC)c12</chem>	675	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(O)c12</chem>
626	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(OCC)c12</chem>	676	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(O)c12</chem>
627	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(OCC)c12</chem>	677	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(O)c12</chem>
628	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(OCC)c12</chem>	678	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(O)c12</chem>
629	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2c(O)c(OC)cc(OCC)c12</chem>	679	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(O)c12</chem>
630	<chem>O=c1c(O)coc2c(O)c(OC)cc(OCC)c12</chem>	680	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(O)c12</chem>
631	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2c(O)c(OC)cc(C(C)C)c12</chem>	681	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(O)c12</chem>
632	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2c(O)c(OC)cc(C(C)C)c12</chem>	682	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(O)c12</chem>
633	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(C(C)C)c12</chem>	683	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(O)c12</chem>
634	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(C(C)C)c12</chem>	684	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(O)c12</chem>
635	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2c(O)c(OC)cc(C(C)C)c12</chem>	685	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2c(O)c(OCC)cc(O)c12</chem>
636	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2c(O)c(OC)cc(C(C)C)c12</chem>	686	<chem>O=c1c(O)coc2c(O)c(OCC)cc(O)c12</chem>
637	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(C(C)C)c12</chem>	687	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(OC)c12</chem>
638	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(C(C)C)c12</chem>	688	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(OC)c12</chem>
639	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(C(C)C)c12</chem>	689	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(OC)c12</chem>
640	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(C(C)C)c12</chem>	690	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(OC)c12</chem>
641	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(C(C)C)c12</chem>	691	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(OC)c12</chem>
642	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(C(C)C)c12</chem>	692	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(OC)c12</chem>
643	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2c(O)c(OC)cc(C(C)C)c12</chem>	693	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(OC)c12</chem>
644	<chem>O=c1c(O)coc2c(O)c(OC)cc(C(C)C)c12</chem>	694	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(OC)c12</chem>
645	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2c(O)c(OC)cc(F)c12</chem>	695	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(OC)c12</chem>
646	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2c(O)c(OC)cc(F)c12</chem>	696	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(OC)c12</chem>
647	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(F)c12</chem>	697	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(OC)c12</chem>
648	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OC)cc(F)c12</chem>	698	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(OC)c12</chem>
649	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2c(O)c(OC)cc(F)c12</chem>	699	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2c(O)c(OCC)cc(OC)c12</chem>
650	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c7)oc2c(O)c(OC)cc(F)c12</chem>	700	<chem>O=c1c(O)coc2c(O)c(OCC)cc(OC)c12</chem>

No.	SMILES	No.	SMILES
701	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2c(O)c(OCC)cc(OCC)c12</chem>	751	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(OCC)ccc12</chem>
702	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2c(O)c(OCC)cc(OCC)c12</chem>	752	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OCC)ccc12</chem>
703	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2c(O)c(OCC)cc(OCC)c12</chem>	753	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OCC)ccc12</chem>
704	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2c(O)c(OCC)cc(OCC)c12</chem>	754	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OCC)ccc12</chem>
705	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(OCC)c12</chem>	755	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O))oc2c(O)c(OCC)ccc12</chem>
706	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(OCC)c12</chem>	756	<chem>O=c1c(O)ccoc2c(O)c(OCC)ccc12</chem>
707	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(OCC)c12</chem>	757	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(O)c12</chem>
708	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(OCC)c12</chem>	758	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(O)c12</chem>
709	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(OCC)c12</chem>	759	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(O)c12</chem>
710	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(OCC)c12</chem>	760	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(O)c12</chem>
711	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(OCC)c12</chem>	761	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(O)c12</chem>
712	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(OCC)c12</chem>	762	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(O)c12</chem>
713	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O))oc2c(O)c(OCC)cc(OCC)c12</chem>	763	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(O)c12</chem>
714	<chem>O=c1c(O)ccoc2c(O)c(OCC)cc(OCC)c12</chem>	764	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(O)c12</chem>
715	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2c(O)c(OCC)cc(C(C)C)c12</chem>	765	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(O)c12</chem>
716	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2c(O)c(OCC)cc(C(C)C)c12</chem>	766	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(O)c12</chem>
717	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2c(O)c(OCC)cc(C(C)C)c12</chem>	767	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(O)c12</chem>
718	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2c(O)c(OCC)cc(C(C)C)c12</chem>	768	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(O)c12</chem>
719	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(C(C)C)c12</chem>	769	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O))oc2c(O)c(C(C)C)cc(O)c12</chem>
720	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(C(C)C)c12</chem>	770	<chem>O=c1c(O)ccoc2c(O)c(C(C)C)cc(O)c12</chem>
721	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(C(C)C)c12</chem>	771	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(OC)c12</chem>
722	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(C(C)C)c12</chem>	772	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(OC)c12</chem>
723	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(C(C)C)c12</chem>	773	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(OC)c12</chem>
724	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(C(C)C)c12</chem>	774	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(OC)c12</chem>
725	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(C(C)C)c12</chem>	775	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(OC)c12</chem>
726	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(C(C)C)c12</chem>	776	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(OC)c12</chem>
727	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O))oc2c(O)c(OCC)cc(C(C)C)c12</chem>	777	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(OC)c12</chem>
728	<chem>O=c1c(O)ccoc2c(O)c(OCC)cc(C(C)C)c12</chem>	778	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(OC)c12</chem>
729	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2c(O)c(OCC)cc(F)c12</chem>	779	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(OC)c12</chem>
730	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2c(O)c(OCC)cc(F)c12</chem>	780	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(OC)c12</chem>
731	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2c(O)c(OCC)cc(F)c12</chem>	781	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(OC)c12</chem>
732	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2c(O)c(OCC)cc(F)c12</chem>	782	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(OC)c12</chem>
733	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(F)c12</chem>	783	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O))oc2c(O)c(C(C)C)cc(OC)c12</chem>
734	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(F)c12</chem>	784	<chem>O=c1c(O)ccoc2c(O)c(C(C)C)cc(OC)c12</chem>
735	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(F)c12</chem>	785	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(OCC)c12</chem>
736	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(F)c12</chem>	786	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(OCC)c12</chem>
737	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(F)c12</chem>	787	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(OCC)c12</chem>
738	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(F)c12</chem>	788	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(OCC)c12</chem>
739	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(F)c12</chem>	789	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(OCC)c12</chem>
740	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(OCC)cc(F)c12</chem>	790	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(OCC)c12</chem>
741	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O))oc2c(O)c(OCC)cc(F)c12</chem>	791	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(OCC)c12</chem>
742	<chem>O=c1c(O)ccoc2c(O)c(OCC)cc(F)c12</chem>	792	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(OCC)c12</chem>
743	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2c(O)c(OCC)ccc12</chem>	793	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(OCC)c12</chem>
744	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2c(O)c(OCC)ccc12</chem>	794	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(OCC)c12</chem>
745	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2c(O)c(OCC)ccc12</chem>	795	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(OCC)c12</chem>
746	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2c(O)c(OCC)ccc12</chem>	796	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(OCC)c12</chem>
747	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(OCC)ccc12</chem>	797	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O))oc2c(O)c(C(C)C)cc(OCC)c12</chem>
748	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(OCC)ccc12</chem>	798	<chem>O=c1c(O)ccoc2c(O)c(C(C)C)cc(OCC)c12</chem>
749	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(OCC)ccc12</chem>	799	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(C(C)C)c12</chem>
750	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(OCC)ccc12</chem>	800	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(C(C)C)c12</chem>

No.	SMILES	No.	SMILES
801	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(C(C)C)c12</chem>	851	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(F)cc(O)c12</chem>
802	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(C(C)C)c12</chem>	852	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(F)cc(O)c12</chem>
803	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(C(C)C)c12</chem>	853	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2c(O)c(F)cc(O)c12</chem>
804	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(C(C)C)c12</chem>	854	<chem>O=c1c(O)coc2c(O)c(F)cc(O)c12</chem>
805	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(C(C)C)c12</chem>	855	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2c(O)c(F)cc(OC)c12</chem>
806	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(C(C)C)c12</chem>	856	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2c(O)c(F)cc(OC)c12</chem>
807	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(C(C)C)c12</chem>	857	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2c(O)c(F)cc(OC)c12</chem>
808	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(C(C)C)c12</chem>	858	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2c(O)c(F)cc(OC)c12</chem>
809	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(C(C)C)c12</chem>	859	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(F)cc(OC)c12</chem>
810	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(C(C)C)c12</chem>	860	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(F)cc(OC)c12</chem>
811	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2c(O)c(C(C)C)cc(C(C)C)c12</chem>	861	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(F)cc(OC)c12</chem>
812	<chem>O=c1c(O)coc2c(O)c(C(C)C)cc(C(C)C)c12</chem>	862	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(F)cc(OC)c12</chem>
813	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(F)c12</chem>	863	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(F)cc(OC)c12</chem>
814	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(F)c12</chem>	864	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(F)cc(OC)c12</chem>
815	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(F)c12</chem>	865	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(F)cc(OC)c12</chem>
816	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(F)c12</chem>	866	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(F)cc(OC)c12</chem>
817	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(F)c12</chem>	867	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2c(O)c(F)cc(OC)c12</chem>
818	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(F)c12</chem>	868	<chem>O=c1c(O)coc2c(O)c(F)cc(OC)c12</chem>
819	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(F)c12</chem>	869	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2c(O)c(F)cc(OCC)c12</chem>
820	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(F)c12</chem>	870	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2c(O)c(F)cc(OCC)c12</chem>
821	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(F)c12</chem>	871	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2c(O)c(F)cc(OCC)c12</chem>
822	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(F)c12</chem>	872	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2c(O)c(F)cc(OCC)c12</chem>
823	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(F)c12</chem>	873	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(F)cc(OCC)c12</chem>
824	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(C(C)C)cc(F)c12</chem>	874	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(F)cc(OCC)c12</chem>
825	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2c(O)c(C(C)C)cc(F)c12</chem>	875	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(F)cc(OCC)c12</chem>
826	<chem>O=c1c(O)coc2c(O)c(C(C)C)cc(F)c12</chem>	876	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(F)cc(OCC)c12</chem>
827	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2c(O)c(C(C)C)ccc12</chem>	877	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(F)cc(OCC)c12</chem>
828	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2c(O)c(C(C)C)ccc12</chem>	878	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(F)cc(OCC)c12</chem>
829	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2c(O)c(C(C)C)ccc12</chem>	879	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(F)cc(OCC)c12</chem>
830	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2c(O)c(C(C)C)ccc12</chem>	880	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(F)cc(OCC)c12</chem>
831	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(C(C)C)ccc12</chem>	881	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2c(O)c(F)cc(OCC)c12</chem>
832	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(C(C)C)ccc12</chem>	882	<chem>O=c1c(O)coc2c(O)c(F)cc(OCC)c12</chem>
833	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(C(C)C)ccc12</chem>	883	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2c(O)c(F)cc(C(C)C)c12</chem>
834	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(C(C)C)ccc12</chem>	884	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2c(O)c(F)cc(C(C)C)c12</chem>
835	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(C(C)C)ccc12</chem>	885	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2c(O)c(F)cc(C(C)C)c12</chem>
836	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(C(C)C)ccc12</chem>	886	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2c(O)c(F)cc(C(C)C)c12</chem>
837	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(C(C)C)ccc12</chem>	887	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(F)cc(C(C)C)c12</chem>
838	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(C(C)C)ccc12</chem>	888	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(F)cc(C(C)C)c12</chem>
839	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2c(O)c(C(C)C)ccc12</chem>	889	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(F)cc(C(C)C)c12</chem>
840	<chem>O=c1c(O)coc2c(O)c(C(C)C)ccc12</chem>	890	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(F)cc(C(C)C)c12</chem>
841	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2c(O)c(F)cc(O)c12</chem>	891	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(F)cc(C(C)C)c12</chem>
842	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2c(O)c(F)cc(O)c12</chem>	892	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(F)cc(C(C)C)c12</chem>
843	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2c(O)c(F)cc(O)c12</chem>	893	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(F)cc(C(C)C)c12</chem>
844	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2c(O)c(F)cc(O)c12</chem>	894	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(F)cc(C(C)C)c12</chem>
845	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(F)cc(O)c12</chem>	895	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2c(O)c(F)cc(C(C)C)c12</chem>
846	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(F)cc(O)c12</chem>	896	<chem>O=c1c(O)coc2c(O)c(F)cc(C(C)C)c12</chem>
847	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(F)cc(O)c12</chem>	897	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2c(O)c(F)cc(F)c12</chem>
848	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(F)cc(O)c12</chem>	898	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2c(O)c(F)cc(F)c12</chem>
849	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(F)cc(O)c12</chem>	899	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2c(O)c(F)cc(F)c12</chem>
850	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(F)cc(O)c12</chem>	900	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2c(O)c(F)cc(F)c12</chem>

No.	SMILES	No.	SMILES
901	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(F)cc(F)c12</chem>	951	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2c(O)ccc(OC)c12</chem>
902	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(F)cc(F)c12</chem>	952	<chem>O=c1c(O)coc2c(O)ccc(OC)c12</chem>
903	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(F)cc(F)c12</chem>	953	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2c(O)ccc(OCC)c12</chem>
904	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(F)cc(F)c12</chem>	954	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2c(O)ccc(OCC)c12</chem>
905	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(F)cc(F)c12</chem>	955	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2c(O)ccc(OCC)c12</chem>
906	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(F)cc(F)c12</chem>	956	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2c(O)ccc(OCC)c12</chem>
907	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(F)cc(F)c12</chem>	957	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2c(O)ccc(OCC)c12</chem>
908	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(F)cc(F)c12</chem>	958	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2c(O)ccc(OCC)c12</chem>
909	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2c(O)c(F)cc(F)c12</chem>	959	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2c(O)ccc(OCC)c12</chem>
910	<chem>O=c1c(O)coc2c(O)c(F)cc(F)c12</chem>	960	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)ccc(OCC)c12</chem>
911	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2c(O)c(F)ccc12</chem>	961	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2c(O)ccc(OCC)c12</chem>
912	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2c(O)c(F)ccc12</chem>	962	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)ccc(OCC)c12</chem>
913	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2c(O)c(F)ccc12</chem>	963	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)ccc(OCC)c12</chem>
914	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2c(O)c(F)ccc12</chem>	964	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)ccc(OCC)c12</chem>
915	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(F)ccc12</chem>	965	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2c(O)ccc(OCC)c12</chem>
916	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2c(O)c(F)ccc12</chem>	966	<chem>O=c1c(O)coc2c(O)ccc(OCC)c12</chem>
917	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(F)ccc12</chem>	967	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2c(O)ccc(C(C)C)c12</chem>
918	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(F)ccc12</chem>	968	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2c(O)ccc(C(C)C)c12</chem>
919	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2c(O)c(F)ccc12</chem>	969	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2c(O)ccc(C(C)C)c12</chem>
920	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(F)ccc12</chem>	970	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2c(O)ccc(C(C)C)c12</chem>
921	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)c(F)ccc12</chem>	971	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2c(O)ccc(C(C)C)c12</chem>
922	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)c(F)ccc12</chem>	972	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2c(O)ccc(C(C)C)c12</chem>
923	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2c(O)c(F)ccc12</chem>	973	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2c(O)ccc(C(C)C)c12</chem>
924	<chem>O=c1c(O)coc2c(O)c(F)ccc12</chem>	974	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)ccc(C(C)C)c12</chem>
925	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2c(O)ccc(O)c12</chem>	975	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2c(O)ccc(C(C)C)c12</chem>
926	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2c(O)ccc(O)c12</chem>	976	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)ccc(C(C)C)c12</chem>
927	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2c(O)ccc(O)c12</chem>	977	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)ccc(C(C)C)c12</chem>
928	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2c(O)ccc(O)c12</chem>	978	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)ccc(C(C)C)c12</chem>
929	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2c(O)ccc(O)c12</chem>	979	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2c(O)ccc(C(C)C)c12</chem>
930	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2c(O)ccc(O)c12</chem>	980	<chem>O=c1c(O)coc2c(O)ccc(C(C)C)c12</chem>
931	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2c(O)ccc(O)c12</chem>	981	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2c(O)ccc(F)c12</chem>
932	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)ccc(O)c12</chem>	982	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2c(O)ccc(F)c12</chem>
933	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2c(O)ccc(O)c12</chem>	983	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2c(O)ccc(F)c12</chem>
934	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)ccc(O)c12</chem>	984	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2c(O)ccc(F)c12</chem>
935	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)ccc(O)c12</chem>	985	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2c(O)ccc(F)c12</chem>
936	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)ccc(O)c12</chem>	986	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2c(O)ccc(F)c12</chem>
937	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2c(O)ccc(O)c12</chem>	987	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2c(O)ccc(F)c12</chem>
938	<chem>O=c1c(O)coc2c(O)ccc(O)c12</chem>	988	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)ccc(F)c12</chem>
939	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2c(O)ccc(OC)c12</chem>	989	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2c(O)ccc(F)c12</chem>
940	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2c(O)ccc(OC)c12</chem>	990	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)ccc(F)c12</chem>
941	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2c(O)ccc(OC)c12</chem>	991	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)ccc(F)c12</chem>
942	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2c(O)ccc(OC)c12</chem>	992	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)ccc(F)c12</chem>
943	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2c(O)ccc(OC)c12</chem>	993	<chem>O=c1c(O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc2c(O)ccc(F)c12</chem>
944	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2c(O)ccc(OC)c12</chem>	994	<chem>O=c1c(O)coc2c(O)ccc(F)c12</chem>
945	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc2c(O)ccc(OC)c12</chem>	995	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)cc7)oc2c(O)cccc12</chem>
946	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc2c(O)ccc(OC)c12</chem>	996	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)cc7)oc2c(O)cccc12</chem>
947	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc2c(O)ccc(OC)c12</chem>	997	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc2c(O)cccc12</chem>
948	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc2c(O)ccc(OC)c12</chem>	998	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc2c(O)cccc12</chem>
949	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc2c(O)ccc(OC)c12</chem>	999	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc2c(O)cccc12</chem>
950	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc2c(O)ccc(OC)c12</chem>	1000	<chem>O=c1c(O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc2c(O)cccc12</chem>

No.	SMILES	No.	SMILES
1501	<chem>O=c2c(OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O)c(c7cc(O)c(F)cc7)oc3c(O)cccc23</chem>	1551	<chem>(O)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2</chem>
1502	<chem>O=c2c(OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O)c(c7cc(F)c(F)cc7)oc3c(O)cccc23</chem>	1552	<chem>(O)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2</chem>
1503	<chem>O=c2c(OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O)c(c7cc(O)c(O)c(O)c7)oc3c(O)cccc23</chem>	1553	<chem>(O)c2cc(OCC)c1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2</chem>
1504	<chem>O=c2c(OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O)c(c7cc(F)c(O)c(O)c7)oc3c(O)cccc23</chem>	1554	<chem>(O)c2cc(OCC)c1ccc[o+]c1c2</chem>
1505	<chem>O=c2c(OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O)c(c7cc(O)c(F)c(O)c7)oc3c(O)cccc23</chem>	1555	<chem>(O)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>
1506	<chem>O=c2c(OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O)c(c7cc(O)c(O)c(F)c7)oc3c(O)cccc23</chem>	1556	<chem>(O)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>
1507	<chem>O=c2c(OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O)c(c7cc(F)c(F)c(O)c7)oc3c(O)cccc23</chem>	1557	<chem>(O)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2</chem>
1508	<chem>O=c2c(OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O)c(c7cc(O)c(F)c(F)c7)oc3c(O)cccc23</chem>	1558	<chem>(O)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2</chem>
1509	<chem>O=c2c(OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O)c(c7cc(F)c(O)c(F)c7)oc3c(O)cccc23</chem>	1559	<chem>(O)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>
1510	<chem>O=c2c(OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O)c(c7cc(F)c(F)c(F)c7)oc3c(O)cccc23</chem>	1560	<chem>(O)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>
1511	<chem>O=c2c(OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O)c(C(O)CC(O)CC(=O)O)oc3c(O)cccc23</chem>	1561	<chem>(O)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>
1512	<chem>O=c2c(OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O)ccc3c(O)cccc23</chem>	1562	<chem>(O)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2</chem>
1513	<chem>(O)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>	1563	<chem>(O)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>
1514	<chem>(O)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>	1564	<chem>(O)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2</chem>
1515	<chem>(O)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2</chem>	1565	<chem>(O)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2</chem>
1516	<chem>(O)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2</chem>	1566	<chem>(O)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2</chem>
1517	<chem>(O)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>	1567	<chem>(O)c2cc(C(C)C)c1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2</chem>
1518	<chem>(O)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>	1568	<chem>(O)c2cc(C(C)C)c1ccc[o+]c1c2</chem>
1519	<chem>(O)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>	1569	<chem>(O)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>
1520	<chem>(O)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2</chem>	1570	<chem>(O)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>
1521	<chem>(O)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>	1571	<chem>(O)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2</chem>
1522	<chem>(O)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2</chem>	1572	<chem>(O)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2</chem>
1523	<chem>(O)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2</chem>	1573	<chem>(O)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>
1524	<chem>(O)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2</chem>	1574	<chem>(O)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>
1525	<chem>(O)c2cc(O)c1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2</chem>	1575	<chem>(O)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>
1526	<chem>(O)c2cc(O)c1ccc[o+]c1c2</chem>	1576	<chem>(O)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2</chem>
1527	<chem>(O)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>	1577	<chem>(O)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>
1528	<chem>(O)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>	1578	<chem>(O)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2</chem>
1529	<chem>(O)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2</chem>	1579	<chem>(O)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2</chem>
1530	<chem>(O)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2</chem>	1580	<chem>(O)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2</chem>
1531	<chem>(O)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>	1581	<chem>(O)c2cc(F)c1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2</chem>
1532	<chem>(O)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>	1582	<chem>(O)c2cc(F)c1ccc[o+]c1c2</chem>
1533	<chem>(O)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>	1583	<chem>(O)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>
1534	<chem>(O)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2</chem>	1584	<chem>(O)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>
1535	<chem>(O)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>	1585	<chem>(O)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2</chem>
1536	<chem>(O)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2</chem>	1586	<chem>(O)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2</chem>
1537	<chem>(O)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2</chem>	1587	<chem>(O)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>
1538	<chem>(O)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2</chem>	1588	<chem>(O)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>
1539	<chem>(O)c2cc(OC)c1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2</chem>	1589	<chem>(O)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>
1540	<chem>(O)c2cc(OC)c1ccc[o+]c1c2</chem>	1590	<chem>(O)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2</chem>
1541	<chem>(O)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>	1591	<chem>(O)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>
1542	<chem>(O)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>	1592	<chem>(O)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2</chem>
1543	<chem>(O)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2</chem>	1593	<chem>(O)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2</chem>
1544	<chem>(O)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2</chem>	1594	<chem>(O)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2</chem>
1545	<chem>(O)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>	1595	<chem>(O)c2ccc1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2</chem>
1546	<chem>(O)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>	1596	<chem>(O)c2ccc1ccc[o+]c1c2</chem>
1547	<chem>(O)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>	1597	<chem>(O)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>
1548	<chem>(O)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2</chem>	1598	<chem>(O)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>
1549	<chem>(O)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2</chem>	1599	<chem>(O)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2</chem>
1550	<chem>(O)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2</chem>	1600	<chem>(O)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(F)c7)[o+]c1c2</chem>

No.	SMILES	No.	SMILES
1601	(OC)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2	1651	(OC)c2cc(C(C)C)c1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2
1602	(OC)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2	1652	(OC)c2cc(C(C)C)c1ccc[o+]c1c2
1603	(OC)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2	1653	(OC)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(O)cc7)[o+]c1c2
1604	(OC)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1654	(OC)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(O)cc7)[o+]c1c2
1605	(OC)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2	1655	(OC)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2
1606	(OC)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1656	(OC)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2
1607	(OC)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1657	(OC)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1608	(OC)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1658	(OC)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1609	(OC)c2cc(O)c1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2	1659	(OC)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2
1610	(OC)c2cc(O)c1ccc[o+]c1c2	1660	(OC)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2
1611	(OC)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(O)cc7)[o+]c1c2	1661	(OC)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2
1612	(OC)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(O)cc7)[o+]c1c2	1662	(OC)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2
1613	(OC)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2	1663	(OC)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2
1614	(OC)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2	1664	(OC)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2
1615	(OC)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2	1665	(OC)c2cc(F)c1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2
1616	(OC)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2	1666	(OC)c2cc(F)c1ccc[o+]c1c2
1617	(OC)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2	1667	(OC)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(O)cc7)[o+]c1c2
1618	(OC)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1668	(OC)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(O)cc7)[o+]c1c2
1619	(OC)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2	1669	(OC)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2
1620	(OC)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1670	(OC)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2
1621	(OC)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1671	(OC)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1622	(OC)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1672	(OC)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1623	(OC)c2cc(OC)c1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2	1673	(OC)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2
1624	(OC)c2cc(OC)c1ccc[o+]c1c2	1674	(OC)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2
1625	(OC)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(O)cc7)[o+]c1c2	1675	(OC)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2
1626	(OC)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(O)cc7)[o+]c1c2	1676	(OC)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2
1627	(OC)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2	1677	(OC)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2
1628	(OC)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2	1678	(OC)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2
1629	(OC)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2	1679	(OC)c2ccc1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2
1630	(OC)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2	1680	(OC)c2ccc1ccc[o+]c1c2
1631	(OC)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2	1681	(OCC)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(O)cc7)[o+]c1c2
1632	(OC)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1682	(OCC)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(O)cc7)[o+]c1c2
1633	(OC)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2	1683	(OCC)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2
1634	(OC)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1684	(OCC)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2
1635	(OC)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1685	(OCC)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1636	(OC)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1686	(OCC)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1637	(OC)c2cc(OCC)c1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2	1687	(OCC)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2
1638	(OC)c2cc(OCC)c1ccc[o+]c1c2	1688	(OCC)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2
1639	(OC)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(O)cc7)[o+]c1c2	1689	(OCC)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2
1640	(OC)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(O)cc7)[o+]c1c2	1690	(OCC)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2
1641	(OC)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2	1691	(OCC)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2
1642	(OC)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2	1692	(OCC)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2
1643	(OC)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2	1693	(OCC)c2cc(O)c1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2
1644	(OC)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2	1694	(OCC)c2cc(O)c1ccc[o+]c1c2
1645	(OC)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2	1695	(OCC)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(O)cc7)[o+]c1c2
1646	(OC)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1696	(OCC)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(O)cc7)[o+]c1c2
1647	(OC)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2	1697	(OCC)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2
1648	(OC)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1698	(OCC)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2
1649	(OC)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1699	(OCC)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1650	(OC)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1700	(OCC)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2

No.	SMILES	No.	SMILES
1701	(OCC)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2	1751	(OCC)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(O)cc7)[o+]c1c2
1702	(OCC)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1752	(OCC)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(O)cc7)[o+]c1c2
1703	(OCC)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2	1753	(OCC)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2
1704	(OCC)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1754	(OCC)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2
1705	(OCC)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1755	(OCC)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1706	(OCC)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1756	(OCC)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1707	(OCC)c2cc(OC)c1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2	1757	(OCC)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2
1708	(OCC)c2cc(OC)c1ccc[o+]c1c2	1758	(OCC)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2
1709	(OCC)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(O)cc7)[o+]c1c2	1759	(OCC)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2
1710	(OCC)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(O)cc7)[o+]c1c2	1760	(OCC)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2
1711	(OCC)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2	1761	(OCC)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2
1712	(OCC)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2	1762	(OCC)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2
1713	(OCC)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2	1763	(OCC)c2ccc1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2
1714	(OCC)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2	1764	(OCC)c2ccc1ccc[o+]c1c2
1715	(OCC)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2	1765	(C(C)C)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(O)cc7)[o+]c1c2
1716	(OCC)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1766	(C(C)C)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(O)cc7)[o+]c1c2
1717	(OCC)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2	1767	(C(C)C)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2
1718	(OCC)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1768	(C(C)C)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2
1719	(OCC)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1769	(C(C)C)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1720	(OCC)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1770	(C(C)C)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1721	(OCC)c2cc(OCC)c1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2	1771	(C(C)C)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2
1722	(OCC)c2cc(OCC)c1ccc[o+]c1c2	1772	(C(C)C)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2
1723	(OCC)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(O)cc7)[o+]c1c2	1773	(C(C)C)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2
1724	(OCC)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(O)cc7)[o+]c1c2	1774	(C(C)C)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2
1725	(OCC)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2	1775	(C(C)C)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2
1726	(OCC)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2	1776	(C(C)C)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2
1727	(OCC)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2	1777	(C(C)C)c2cc(O)c1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2
1728	(OCC)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2	1778	(C(C)C)c2cc(O)c1ccc[o+]c1c2
1729	(OCC)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2	1779	(C(C)C)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(O)cc7)[o+]c1c2
1730	(OCC)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1780	(C(C)C)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(O)cc7)[o+]c1c2
1731	(OCC)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2	1781	(C(C)C)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2
1732	(OCC)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1782	(C(C)C)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2
1733	(OCC)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1783	(C(C)C)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1734	(OCC)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1784	(C(C)C)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1735	(OCC)c2cc(C(C)C)c1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2	1785	(C(C)C)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2
1736	(OCC)c2cc(C(C)C)c1ccc[o+]c1c2	1786	(C(C)C)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2
1737	(OCC)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(O)cc7)[o+]c1c2	1787	(C(C)C)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2
1738	(OCC)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(O)cc7)[o+]c1c2	1788	(C(C)C)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2
1739	(OCC)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2	1789	(C(C)C)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2
1740	(OCC)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2	1790	(C(C)C)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2
1741	(OCC)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2	1791	(C(C)C)c2cc(OC)c1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2
1742	(OCC)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2	1792	(C(C)C)c2cc(OC)c1ccc[o+]c1c2
1743	(OCC)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2	1793	(C(C)C)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(O)cc7)[o+]c1c2
1744	(OCC)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1794	(C(C)C)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(O)cc7)[o+]c1c2
1745	(OCC)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2	1795	(C(C)C)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2
1746	(OCC)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1796	(C(C)C)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2
1747	(OCC)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1797	(C(C)C)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1748	(OCC)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1798	(C(C)C)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1749	(OCC)c2cc(F)c1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2	1799	(C(C)C)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2
1750	(OCC)c2cc(F)c1ccc[o+]c1c2	1800	(C(C)C)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2

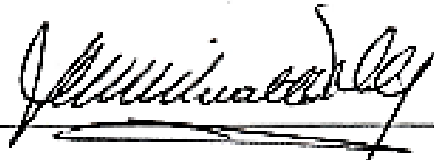
No.	SMILES	No.	SMILES
1801	(C(C)C)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2	1851	(F)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2
1802	(C(C)C)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1852	(F)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2
1803	(C(C)C)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1853	(F)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1804	(C(C)C)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1854	(F)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1805	(C(C)C)c2cc(OCC)c1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2	1855	(F)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2
1806	(C(C)C)c2cc(OCC)c1ccc[o+]c1c2	1856	(F)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2
1807	(C(C)C)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(O)cc7)[o+]c1c2	1857	(F)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2
1808	(C(C)C)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(O)cc7)[o+]c1c2	1858	(F)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2
1809	(C(C)C)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2	1859	(F)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2
1810	(C(C)C)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2	1860	(F)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2
1811	(C(C)C)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2	1861	(F)c2cc(O)c1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2
1812	(C(C)C)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2	1862	(F)c2cc(O)c1ccc[o+]c1c2
1813	(C(C)C)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2	1863	(F)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(O)cc7)[o+]c1c2
1814	(C(C)C)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1864	(F)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(O)cc7)[o+]c1c2
1815	(C(C)C)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2	1865	(F)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2
1816	(C(C)C)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1866	(F)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2
1817	(C(C)C)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1867	(F)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1818	(C(C)C)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1868	(F)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1819	(C(C)C)c2cc(C(C)C)c1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2	1869	(F)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2
1820	(C(C)C)c2cc(C(C)C)c1ccc[o+]c1c2	1870	(F)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2
1821	(C(C)C)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(O)cc7)[o+]c1c2	1871	(F)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2
1822	(C(C)C)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(O)cc7)[o+]c1c2	1872	(F)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2
1823	(C(C)C)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2	1873	(F)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2
1824	(C(C)C)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2	1874	(F)c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2
1825	(C(C)C)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2	1875	(F)c2cc(OC)c1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2
1826	(C(C)C)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2	1876	(F)c2cc(OC)c1ccc[o+]c1c2
1827	(C(C)C)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2	1877	(F)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(O)cc7)[o+]c1c2
1828	(C(C)C)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1878	(F)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(O)cc7)[o+]c1c2
1829	(C(C)C)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2	1879	(F)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2
1830	(C(C)C)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1880	(F)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2
1831	(C(C)C)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1881	(F)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1832	(C(C)C)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1882	(F)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1833	(C(C)C)c2cc(F)c1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2	1883	(F)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2
1834	(C(C)C)c2cc(F)c1ccc[o+]c1c2	1884	(F)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2
1835	(C(C)C)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(O)cc7)[o+]c1c2	1885	(F)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2
1836	(C(C)C)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(O)cc7)[o+]c1c2	1886	(F)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2
1837	(C(C)C)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2	1887	(F)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2
1838	(C(C)C)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2	1888	(F)c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2
1839	(C(C)C)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2	1889	(F)c2cc(OCC)c1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2
1840	(C(C)C)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2	1890	(F)c2cc(OCC)c1ccc[o+]c1c2
1841	(C(C)C)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2	1891	(F)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(O)cc7)[o+]c1c2
1842	(C(C)C)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1892	(F)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(O)cc7)[o+]c1c2
1843	(C(C)C)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2	1893	(F)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2
1844	(C(C)C)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1894	(F)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2
1845	(C(C)C)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1895	(F)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1846	(C(C)C)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1896	(F)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1847	(C(C)C)c2ccc1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2	1897	(F)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2
1848	(C(C)C)c2ccc1ccc[o+]c1c2	1898	(F)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2
1849	(F)c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(O)cc7)[o+]c1c2	1899	(F)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2
1850	(F)c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(O)cc7)[o+]c1c2	1900	(F)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2

No.	SMILES	No.	SMILES
1901	(F)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1951	c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1902	(F)c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1952	c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1903	(F)c2cc(C(C)C)c1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2	1953	c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2
1904	(F)c2cc(C(C)C)c1ccc[o+]c1c2	1954	c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2
1905	(F)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(O)cc7)[o+]c1c2	1955	c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2
1906	(F)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(O)cc7)[o+]c1c2	1956	c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2
1907	(F)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2	1957	c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2
1908	(F)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2	1958	c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2
1909	(F)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2	1959	c2cc(OC)c1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2
1910	(F)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2	1960	c2cc(OC)c1ccc[o+]c1c2
1911	(F)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2	1961	c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(O)cc7)[o+]c1c2
1912	(F)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1962	c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(O)cc7)[o+]c1c2
1913	(F)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2	1963	c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2
1914	(F)c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1964	c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2
1915	(F)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1965	c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1916	(F)c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1966	c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1917	(F)c2cc(F)c1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2	1967	c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2
1918	(F)c2cc(F)c1ccc[o+]c1c2	1968	c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2
1919	(F)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(O)cc7)[o+]c1c2	1969	c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2
1920	(F)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(O)cc7)[o+]c1c2	1970	c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2
1921	(F)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2	1971	c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2
1922	(F)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2	1972	c2cc(OCC)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2
1923	(F)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2	1973	c2cc(OCC)c1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2
1924	(F)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2	1974	c2cc(OCC)c1ccc[o+]c1c2
1925	(F)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2	1975	c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(O)cc7)[o+]c1c2
1926	(F)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1976	c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(O)cc7)[o+]c1c2
1927	(F)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2	1977	c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2
1928	(F)c2ccc1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1978	c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2
1929	(F)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1979	c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1930	(F)c2ccc1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1980	c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1931	(F)c2ccc1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2	1981	c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2
1932	(F)c2ccc1ccc[o+]c1c2	1982	c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2
1933	c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(O)cc7)[o+]c1c2	1983	c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2
1934	c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(O)cc7)[o+]c1c2	1984	c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2
1935	c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2	1985	c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2
1936	c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2	1986	c2cc(C(C)C)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2
1937	c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2	1987	c2cc(C(C)C)c1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2
1938	c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2	1988	c2cc(C(C)C)c1ccc[o+]c1c2
1939	c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2	1989	c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(O)cc7)[o+]c1c2
1940	c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1990	c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(O)cc7)[o+]c1c2
1941	c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2	1991	c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2
1942	c2cc(O)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1992	c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2
1943	c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2	1993	c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1944	c2cc(O)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2	1994	c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(O)c7)[o+]c1c2
1945	c2cc(O)c1ccc(C(O)CC(O)CC(=O)O)[o+]c1c2	1995	c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2
1946	c2cc(O)c1ccc[o+]c1c2	1996	c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2
1947	c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(O)cc7)[o+]c1c2	1997	c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(O)c7)[o+]c1c2
1948	c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(O)cc7)[o+]c1c2	1998	c2cc(F)c1ccc(c7cc(O)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2
1949	c2cc(OC)c1ccc(c7cc(O)c(F)cc7)[o+]c1c2	1999	c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(O)c(F)c7)[o+]c1c2
1950	c2cc(OC)c1ccc(c7cc(F)c(F)cc7)[o+]c1c2	2000	c2cc(F)c1ccc(c7cc(F)c(F)c(F)c7)[o+]c1c2



Gabriela Maria Ponce Aparicio

Estudiante



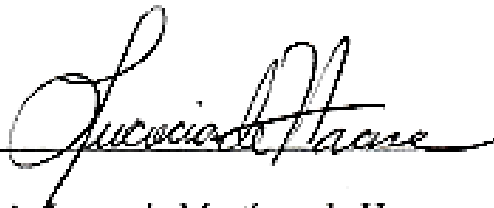
M.A. Lucrecia Peralta de Madriz

Asesora



PhD. Rodrigo Castañeda Molina

Revisor



M.A. Lucrecia Martínez de Haase

Directora de Escuela



M.A. Pablo Ernesto Oliva Soto

Decano