

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET  
POPULAIRE



وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA  
RECHERCHE SCIENTIFIQUE

Université Frères Mentouri Constantine 1  
Faculté des Sciences de la Nature et de la Vie

جامعة الاخوة منتوري قسنطينة 1  
كلية علوم الطبيعة والحياة

قسم الكيمياء الحيوية والبيولوجيا الخلوية والجزيئية

Département de Biochimie et Biologie Cellulaire et Moléculaire

Mémoire présenté en vue de l'obtention du Diplôme de Master

Domaine : Science de la Nature et de la Vie

Filière : Sciences Biologiques

Spécialité : Biochimie Appliquée

### Intitulé

---

## Conception *in silico* de nouveaux inhibiteurs de la Transmembranaire Protéase Sérine 2 (TMPRSS2) pour lutter contre le SARS CoV-2

---

Présenté et soutenu par

Le : 23 / 09/ 2021

- DJEKRIFF Abdelhak
- NOUADRI Yousra

Jury d'évaluation

- **Président du jury** : Mr. BENSEGUENI A. (Professeur à UFM Constantine 1).
- **Encadrant** : Mr. MOKRANI E.H. (Maitre de Conférences B à UFM Constantine 1).
- **Examinatrice** : Mme. TENIOU S. (Maitre assistante A à UFM Constantine 1).

Année universitaire  
2020 – 2021

## « Remerciements »

*Nous tenons tout d'abord à remercier Dieu le tout puissant de nous avoir donnée le courage, la volonté et la patience pour achever ce travail de recherche.*

*La réalisation de ce mémoire a été possible grâce à l'aide de plusieurs personnes à qui nous voudrions témoigner toute notre gratitude.*

*Nos remerciements les plus profonds et les plus vifs vont à notre rapporteur Mr. MOKRANI E.H. (Maitre de Conférences B à UFM Constantine 1) pour ses précieux conseils et de son suivi tout au long de notre parcours. Son sens élevé du devoir, le fait d'être toujours à l'écoute ainsi que sa rigueur scientifique imposent l'estime et le respect.*

*Nous exprimons nos profonds remerciements aux membres de notre jury :*

*Mr. BENSEGUENI A. (Professeur à UFM Constantine 1), nous sommes très honorés de l'avoir comme président du jury de notre mémoire.*

*Mme. TENIOU S. (Maitre assistante A à UFM Constantine 1) pour avoir accepté d'examiner ce travail.*

*Nous adressons nos vifs remerciements à nos chers parents pour leur présence, soutien, aide, et surtout amour.*

*Enfin, nous remercions toutes personnes ayant contribué et aidé de près ou de loin à la réalisation de ce mémoire.*





## *Dédicaces Abdelhak*

J'ai le plaisir de dédier ce modeste travail

**A** Ceux qui sont mon exemple de la réussite, qui m'ont donné de l'amour, de la tendresse, du soutien et de la force, symbole de courage et de la volonté, mes très chers parents Mohamed et Scheherazad que j'ai tant aimé, et qui ont guidé mes pas, et là aujourd'hui, je leurs doit d'être la personne que je suis devenue, que dieu les gardent pour moi.

A mes très chers frères Adel Amir et Ilyes de m'avoir compris et soutenus dans mes moments difficiles.

A ma Sœur, ma petite princesse et l'ange de la famille, Elyna Rym. Merci pour le rayonnement et l'ambiance que tu nous apportes.

A la mémoire de mes grands-parents.

A mes oncles et leurs femmes, mes tantes et leurs époux, mes cousins et cousines et toute la famille.

A tous les enseignants de la faculté des sciences de la nature et de la vie de l'université des frères Mentouri qui ont contribué de près ou de loin à ma formation.

A mon binôme Yousra.

Je ne peux oublier de remercier chaleureusement mes très chers amis et collègues pour leurs soutiens, leurs aides et leurs présences.





## *Dédicaces Yousra*

A mon très cher père TAHAR NOUADRI

Grâce à toi papa j'ai appris le sens du travail et de la responsabilité. Je voudrais te remercier pour ton amour, ta générosité, ta compréhension... Ton soutien fut une lumière dans tout mon parcours. Aucune dédicace ne saurait exprimer l'amour, l'estime et le respect que j'ai toujours eu pour toi.

A la lumière de mes jours, la source de mes efforts, la flamme de mon cœur, ma vie et mon bonheur ; maman que j'adore.

A mes chères sœurs BOUCHRA et MALEK pour leurs encouragements permanents, et leur soutien moral.


A mes chers frères, ALAEDDINE et ABDERRRAOUF pour leurs appui et leurs encouragement.

A tous mes amies que j'ai vécu avec elles des beaux moments qui m'ont toujours encouragé et cru en moi.

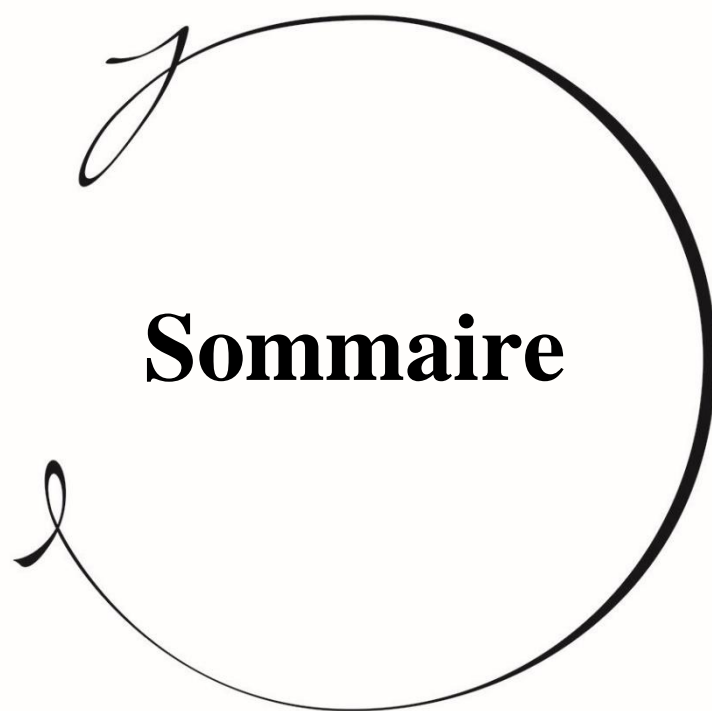
A mon binôme HAKOU

Aux personnes qui m'ont toujours aidé et encouragé, qui étaient toujours à mes côtés, et qui m'ont accompagné durant mon chemin d'études, tous mes aimables amis, collègues d'étude et travail.

A tous ceux qui, par un mot, m'ont donné la force de continuer ....







**Sommaire**

<b>Introduction générale.....</b>	<b>1</b>
-----------------------------------	----------

## **Partie bibliographique**

### **Chapitre I : LA COVID-19**

<b>1. Définition .....</b>	<b>2</b>
<b>2. Epidémiologie.....</b>	<b>3</b>
<b>3. Facteurs de risque .....</b>	<b>4</b>
<b>3.1. Age.....</b>	<b>4</b>
<b>3.2. Tabagisme.....</b>	<b>4</b>
<b>3.3. Comorbidités.....</b>	<b>5</b>
<b>3.4. Sexe.....</b>	<b>5</b>
<b>4. Pénétration et cycle du SARS-CoV-2.....</b>	<b>5</b>
<b>5. Traitement.....</b>	<b>6</b>
<b>5.1. Corticothérapie.....</b>	<b>6</b>
<b>5.2. Inhibiteurs de JAK /STAT dont le Baricitinib.....</b>	<b>6</b>
<b>5.3. Inhibiteur de TMPRSS2 .....</b>	<b>6</b>
<b>5.4. Chloroquine et hydroxychloroquine .....</b>	<b>6</b>
<b>5.5. Inhibition de la protéase du SARS-CoV-2.....</b>	<b>6</b>
<b>5.6. Inhibition de la synthèse de l'ARN viral .....</b>	<b>7</b>
<b>5.6.1. Favipiravir.....</b>	<b>7</b>
<b>5.6.2. Remdesivir.....</b>	<b>7</b>
<b>5.6.3. Ribavirine .....</b>	<b>7</b>
<b>5.7. Inhibiteurs du Système rénine-angiotensine-aldostérone (SRAA).....</b>	<b>7</b>
<b>5.8. Vaccination.....</b>	<b>7</b>
<b>5.8.1. Vaccin Oxford/AstraZeneca Covid-19.....</b>	<b>7</b>
<b>5.8.2. Vaccin Pfizer- BioNTech.....</b>	<b>7</b>
<b>5.8.3. Vaccin Moderna .....</b>	<b>7</b>
<b>5.8.4. Vaccin chinois Sinopharm ou BBIBP-cor V .....</b>	<b>7</b>
<b>5.8.5. Vaccin Gama -COVID-VacouSputnik V.....</b>	<b>7</b>
<b>5.8.6. Vaccin Sinovac.....</b>	<b>7</b>



## **Chapitre II : TRANSMEMBRANAIRE PROTEASE SERINE 2**

<b>1. Introduction .....</b>	<b>8</b>
<b>2. Structure de la transmembranaire protéase serine 2.....</b>	<b>8</b>
<b>3. Site actif.....</b>	<b>9</b>
<b>4. Mécanisme d'action .....</b>	<b>10</b>
<b>5. Relation de la TMPRSS2 avec les coronavirus .....</b>	<b>11</b>
<b>6. Inhibiteur .....</b>	<b>11</b>

## **Chapitre III : LE DOCKING MOLECULAIRE**

<b>1. Introduction.....</b>	<b>13</b>
<b>2. Principe de docking.....</b>	<b>13</b>
<b>2.1. Docking .....</b>	<b>13</b>
<b>2.2. Scoring .....</b>	<b>13</b>
<b>3. Outils du docking moléculaire.....</b>	<b>14</b>
<b>3.1. Ligand.....</b>	<b>14</b>
<b>3.2. Récepteur.....</b>	<b>14</b>
<b>3.3. Programmes.....</b>	<b>15</b>
<b>4. Prédiction des paramètres ADMET.....</b>	<b>15</b>

## **Chapitre IV : MATERIELS ET METHODE**

<b>1. Matériels.....</b>	<b>17</b>
<b>1.1. Ordinateur .....</b>	<b>17</b>
<b>1.2. Programmes.....</b>	<b>17</b>
<b>1.2.1. FlexX version 2.3.2, 2017 .....</b>	<b>17</b>
<b>1.2.2. VMD (Visual Molecular Dynamics) version 1.9.3 .....</b>	<b>18</b>
<b>1.2.3. Open Babel version 2.3.2.....</b>	<b>18</b>
<b>1.3. Banques de données et serveur en ligne.....</b>	<b>19</b>
<b>1.3.1. Protein Data Bank.....</b>	<b>19</b>
<b>1.3.2. PubChem .....</b>	<b>20</b>
<b>1.3.3. pkCSM.....</b>	<b>21</b>
<b>2. Méthode.....</b>	<b>21</b>
<b>2.1. Choix de la cible.....</b>	<b>22</b>
<b>2.2. Préparation de la protéine.....</b>	<b>22</b>

2.3. Préparation de la chimiothèque.....	23
2.4. Criblage virtuel .....	23
3. Test de fiabilité du programme FlexX par RMSD.....	23
4. Prédiction des propriétés ADMET.....	24
4.1. Propriétés physicochimiques.....	24
4.2. Propriétés pharmacocinétiques.....	24
4.3. Tests de toxicité potentielle .....	25

## **Chapitre IIV : RESULTATS ET DISCUSSION**

1. Test de fiabilité du programme de docking moléculaire.....	26
1.1. Test RMSD.....	26
1.2. Analyse visuelle.....	27
2. Etude des interactions impliquées dans l'inhibition de TMPRSS2 par différents composés.....	28
3. Proposition de nouveaux inhibiteurs de la TMPRSS 2 : criblage virtuel.....	29
4. Prédiction des paramètres pharmacologiques.....	36
Conclusion et perspectives.....	38

### **Références bibliographiques**

**Annexes**

**Résumés**



## Liste des Figures

<b><u>Figure N°01</u></b> : Virion du SARS-CoV-2. Le modèle à gros grains composé de protéines S glycosylées, de protéines M, de protéines E et d'une bicouche lipidique.....	<b>2</b>
<b><u>Figure N°02</u></b> : Evolution du nombre de nouveaux cas confirmés et nouveaux décès par COVID-19 du 25 février 2020 au 09 avril 2021 en Algérie .....	<b>4</b>
<b><u>Figure N°03</u></b> : localisation du gène TMPRSS2.....	<b>8</b>
<b><u>Figure N°04</u></b> : Structure tridimensionnelle de transmembranaire protéase sérine 2.....	<b>9</b>
<b><u>Figure N°05</u></b> : Site actif du domaine catalytique de TMPRSS2.....	<b>10</b>
<b><u>Figure N°06</u></b> : Mécanisme d'action de l'hydrolyse par TMPRSS2.....	<b>11</b>
<b><u>Figure N°07</u></b> : Structure des différents inhibiteurs de TMPRSS2.....	<b>12</b>
<b><u>Figure N°08</u></b> : Principe du Docking et Scoring.....	<b>13</b>
<b><u>Figure N°09</u></b> : FlexX Version : 2.3.2.....	<b>17</b>
<b><u>Figure N°10</u></b> : VMD Version : 1.9.3.....	<b>18</b>
<b><u>Figure N°11</u></b> : Open Babel version : 2.3.2. ....	<b>19</b>
<b><u>Figure N°12</u></b> : Protein Data Bank .....	<b>20</b>
<b><u>Figure N°13</u></b> : PubChem.....	<b>20</b>
<b><u>Figure N°14</u></b> : pKCSM.....	<b>21</b>
<b><u>Figure N°15</u></b> : Site actif de la TMPRSS 2 avec son inhibiteur de référence, le GBS.....	<b>22</b>
<b><u>Figure N°16</u></b> : Résultats du test RMSD donnés en pourcentage (%).....	<b>26</b>
<b><u>Figure N°17</u></b> : Superposition de la conformation GBS de l'extraite de 7MEQ (colorée en bleu) avec la conformation la mieux ancrée (colorée en rouge).....	<b>27</b>
<b><u>Figure N°18</u></b> : Structure chimique du GBS : L'acide 4-carbamimidamidobenzoïque.....	<b>28</b>
<b><u>Figure N°19</u></b> : Représentation des interactions du complexe 7MEQ. Les liaisons hydrogène sont représentées en pointillés et les interactions hydrophobes sont représentées en vert.....	<b>29</b>

<b><u>Figure N°20</u></b> : Structure chimique du composé S1 : Acide 4-Azido-3 (diaminométhylidèneamino) benzoïque.....	<b>31</b>
<b><u>Figure N°21</u></b> : Structure chimique du composé S2.....	<b>31</b>
<b><u>Figure N°22</u></b> : Structure chimique du composé S3 : Acide 4-Amino-2-(4- carbamiimidoylphényl) benzoïque.....	<b>32</b>
<b><u>Figure N°23</u></b> : Représentation des interactions du complexe TMPRSS2-S1.....	<b>33</b>
<b><u>Figure N°24</u></b> : Représentation des interactions du complexe TMPRSS2-S2.....	<b>33</b>
<b><u>Figure N°25</u></b> : Représentation des interactions du complexe TMPRSS2-S3.....	<b>34</b>



## Liste des Tableaux

<b><u>Tableau N°01</u></b> : Principaux programmes du docking moléculaire.....	<b>15</b>
<b><u>Tableau N°02</u></b> : Principales plateformes de prédiction des paramètres ADMET .....	<b>16</b>
<b><u>Tableau N°03</u></b> : Classement, numéro d'accession et énergie d'interaction des dix meilleurs inhibiteurs de la TMPRSS 2 issus du criblage virtuel.....	<b>30</b>
<b><u>Tableau N°04</u></b> : Récapitulatif des interactions impliquées dans le site actif de la TMPRSS2 par le composé de départ <b>GBS</b> et les trois meilleurs similaires <b>S1, S2</b> et <b>S3</b> .....	<b>35</b>
<b><u>Tableau N°05</u></b> : Propriétés physicochimiques, pharmacocinétiques et toxicologiques prédites des composés <b>S1, S2</b> et <b>S3</b> ainsi que la Nafamostat.....	<b>36</b>

## Liste des Annexes

**Annexe 01** : Liste des 100 complexes utilisés pour tester la fiabilité du protocole de docking.

**Annexe 02** : Classement par score des 13521 molécules similaires au GBS après le docking moléculaire par FlexX dans la poche du site actif de la Tmprss2.



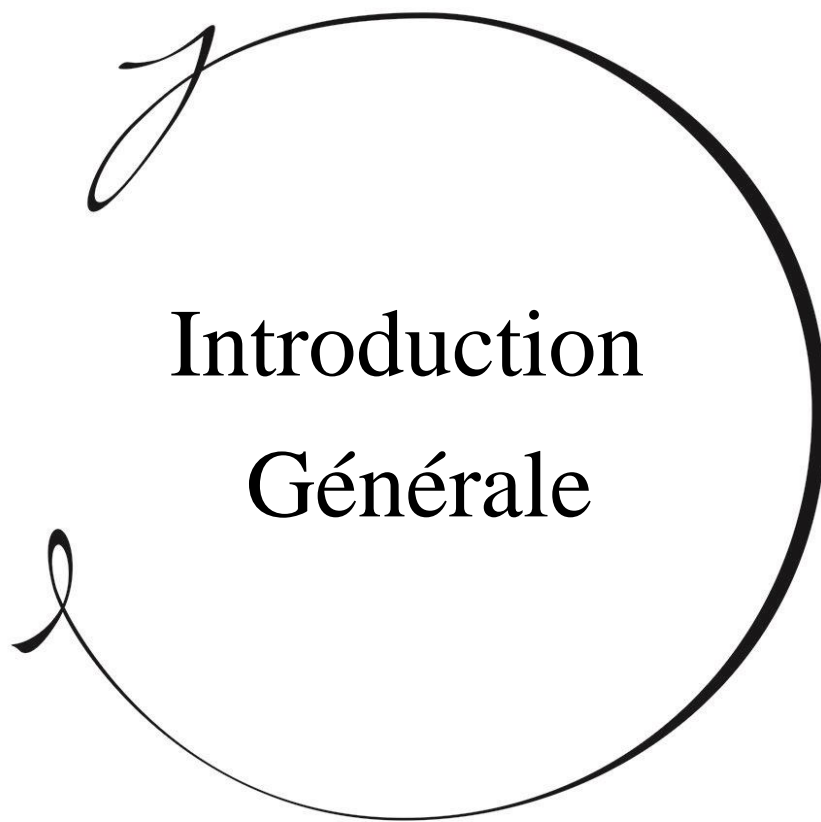
## Liste des abréviations

- **2D** : Deux dimensions.
- **3D** : Trois dimensions.
- **AA** : Acide aminé
- **ACE2** : Enzyme de Conversion de l'Angiotensine 2.
- **ADMET** : Absorption, Distribution, Métabolisme, Elimination et Toxicité.
- **ARN**: Acide Ribonucléique.
- **CACO-2**: Human Colorectal Carcinoma 2 Cell permeability.
- **COVID-19**: Coronavirus Disease of 2019 (Maladie du Coronavirus 2019).
- **CYP1A2**: Cytochrome P450 1A2.
- **CYP2C19**: Cytochrome P450 2C19.
- **CYP2C9**: Cytochrome P450 family 2 subfamily C member 9.
- **CYP2D6**: Cytochrome P450 2D6.
- **CYP2D6**: Cytochrome P450 family 2 subfamily D member 6.
- **CYP3A4**: Cytochrome P450 3A4.
- **GBPA**: Acide 4-guanidinobenzoïque.
- **HCoV-229E**: Human coronavirus 229E.
- **hERG**: human Ether-à-go-go Related Gene.
- **IFN**: interféron.
- **JAK**: Janus Kinase.
- **Kj**: Kilo Jule.
- **LDL**: low density lipoproteins.
- **Log P** : Coefficient de Partage Eau/Octanol.
- **MERS**: Middle East respiratory syndrome.
- **NCBI**: National Center for Biotechnology Information.
- **OMS** : Organisation Mondiale de la Santé.
- **PDB** : Protein Data Bank (banque de donnée protéique).
- **PDBe**: Protein Data Bank in Europe.
- **PDBj**: Protein Data Bank in Japan.
- **RCSB**: Research Collaboratory for Structural Bioinformatics.
- **RMN**: Résonance Magnétique Nucléaire.

- **RMSD: Root Mean Square Deviation.**
- **SARS-COV-2: Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus 2.**
- **SRAA: Système rénine-angiotensine-aldostérone.**
- **STAT: Signal transducers and activators of transcription.**
- **TMPRSS2 : L'enzyme Transmembrane Protease Serine 2.**
- **TPSA : Surface Polaire.**
- **VMD: Visual Molecular Dynamics.**

 **Liste d'acides amines**

- **Arg : Arginine.**
- **Asp: Asparagine.**
- **Cys : Cystéine.**
- **Gln: Glutamine.**
- **Gly: Glycine.**
- **His: Histidine.**
- **Thr: Thréonine.**
- **Trp: Tryptophane**
- **Val: Valine.**



Introduction  
Générale

---

Initialement signalé à la mi-décembre 2019 dans la ville chinoise de Wuhan, le nouveau virus du syndrome respiratoire aigu sévère (SARS CoV-2) est un bêta-coronavirus à ARN simple brin avec un génome de 29 903 nucléotides [1]. Ce virus provoque une maladie grave connue sous le nom de maladie à coronavirus 2019 (COVID-19), qui s'est propagée dans les quatre coins du monde en moins de quatre mois, comptant plus de 226 millions de cas confirmés et plus de 4.66 millions de décès en septembre 2021 [2].

Cette nouvelle maladie a atteint le statut de pandémie mondiale et de grands efforts sont actuellement entrepris pour lutter contre ce virus. A ce titre, la Transmembranaire Protéase Sérine 2 (TMPRSS-2) semble tout indiquée puisque peu de travaux sont dédiés à cette enzyme qui joue un rôle clé dans le processus de pénétration du SARS CoV-2 à l'intérieur des cellules hôtes humaines. Ainsi, l'inhibition de cette enzyme pourrait empêcher la pénétration et la propagation de ce virus [3].

L'objectif essentiel de notre travail est de contribuer au développement de nouveaux inhibiteurs de la TMPRSS-2 par docking moléculaire. Avant de se lancer dans ce travail, nous avons tenté, dans un premier temps, d'évaluer la performance du logiciel de docking moléculaire FlexX utilisé dans le présent travail par RMSD (*Root Mean Square deviation*). Ce test consiste à calculer la déviation en angströms ou RMSD entre la pose du ligand conçue par le logiciel et celle déterminée expérimentalement. Ce test a été suivi par une analyse visuelle afin de vérifier la superposition des modèles de ligands de références vis-à-vis de ceux simulés par le logiciel.

Par la suite, un criblage virtuel d'une collection de 13521 similaires chimiques d'un puissant inhibiteur de la TMPRSS-2 a été mené et ce afin de faire ressortir de nouveaux inhibiteurs plus puissants de cette enzyme. Enfin, les inhibiteurs les plus prometteurs issus de ce criblage virtuel ont fait l'objet d'une étude théorique sur ses propriétés physicochimiques, pharmacocinétiques et de toxicité potentielle afin de vérifier leur profil *druglike*.

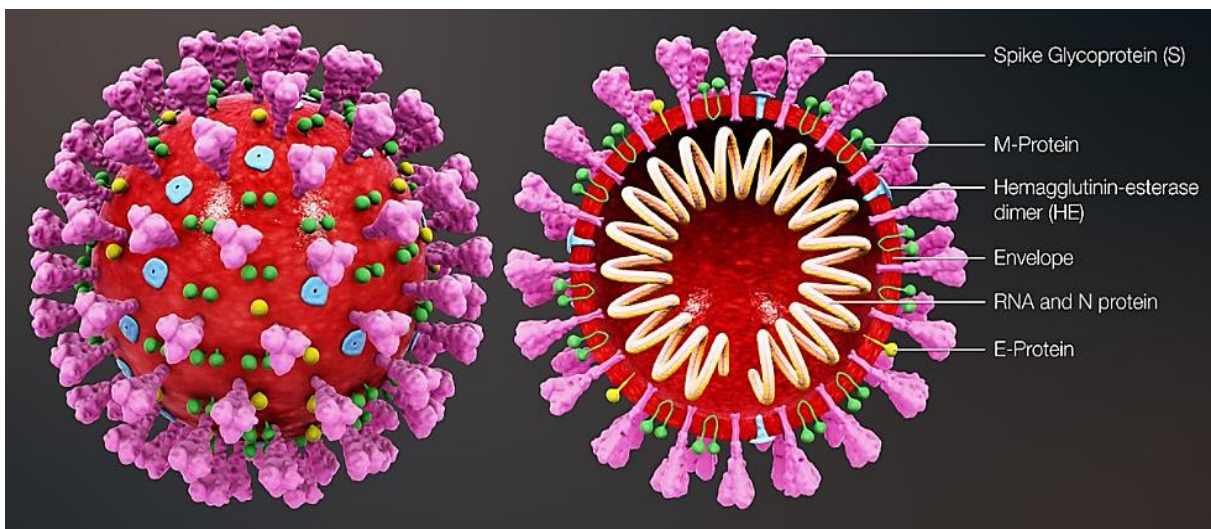




Chapitre I  
**LA COVID-19**

## 1. Définition

La maladie à coronavirus 2019 (COVID-19) est une maladie respiratoire qui peut se propager d'une personne à une autre. Cette maladie infectieuse, causée par le SARS-COV-2 a été identifiée pour la première fois lors d'une enquête sur une épidémie à Wuhan, en Chine, et s'est rapidement propagé à travers le monde. Cette maladie a été nommée COVID-19 par l'OMS, abréviation de « Corona Virus Disease 2019 » [4]. Sur le plan moléculaire, le SARS-COV-2 est un virus à ARN ayant un le plus grand génome de tous les virus à ARN (plus de 29 000 bases) [5]. Il s'agit d'un virus enveloppé, pléomorphe ou sphérique, associées à un ARN simple brin positif, non segmenté, ayant une nucléoprotéine, une capsid, une matrice et une protéine S (figure 01). Au microscope électronique, les virions des coronavirus ont de gros péplomères qui le font ressembler à une couronne, d'où le nom corona, qui signifie «couronne». Les protéines virales importantes sont la protéine nucléocapside (N), la glycoprotéine membranaire (M) et la glycoprotéine de pointe (S) [6].



**Figure N°01** : Virion du SARS-CoV-2. Le modèle à gros grains composé de protéines S glycosylées, de protéines M, de protéines E et d'une bicouche lipidique.

Le mode de transmission essentielle du virus peut être, soit par contact direct avec une muqueuse infectée (transmission directe) soit par contact avec une surface infectée (transmission indirecte). Il est à souligner que les gouttelettes d'un cas positif, peuvent être projetées à plusieurs mètres de distance mais ne persistent pas dans l'air. Les principaux symptômes de la COVID19 sont : fièvre, toux sèche, asthénie, myalgies, angine, diarrhée, conjonctivite, céphalées, anosmie, éruption cutanée ...etc.

Il n'existe aucun symptôme spécifique de la COVID19, et n'importe quel symptôme peut être lié à cette maladie très riche sémiologiquement.

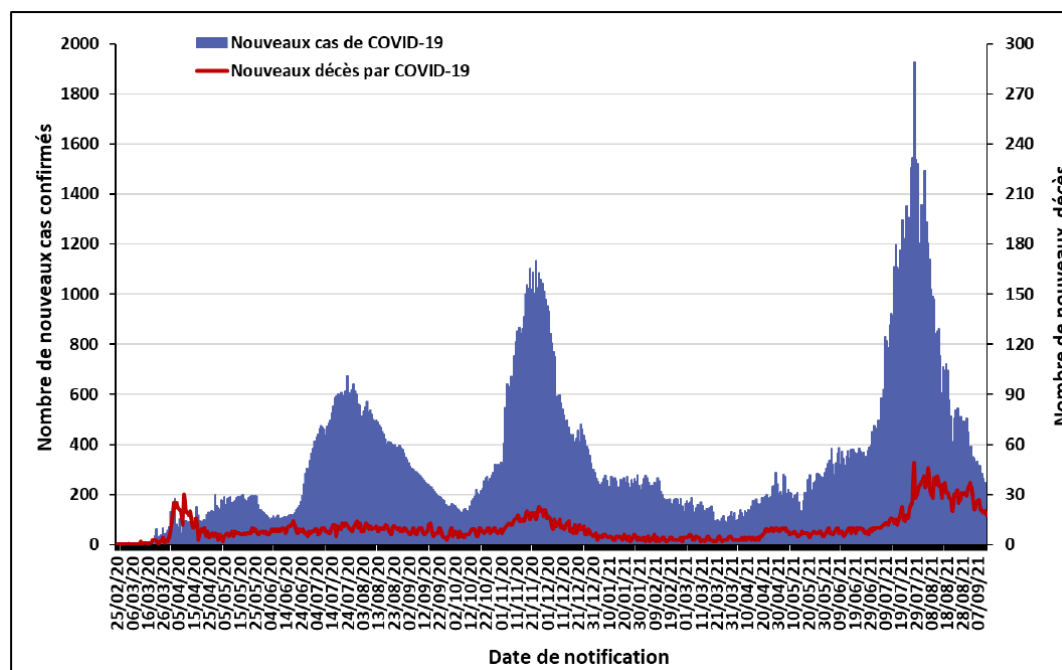
## 2. Epidémiologie

Depuis la fin de l'année 2019, la COVID-19 s'est rapidement devenue un véritable fléau qui ronge la santé publique aux quatre coins du monde. La propagation de cette pandémie peut être divisée en trois phases :

- ✚ Une épidémie locale de pneumonie de cause inconnue dont le centre se situe au grand marché alimentaire à la ville de Wuhan, capitale de la province du Hubei en Chine.
- ✚ La deuxième phase a débuté le 13 janvier, marquée par une expansion et une propagation rapide du virus dans les hôpitaux chinois (infection nosocomiale) et par une transmission familiale (transmission par contact rapproché).
- ✚ La troisième phase a débuté le 26 janvier, marquée par l'augmentation rapide des cas en grappes. Le 30 janvier, le nombre a été multiplié par 240, atteignant 9826 cas confirmés, et l'OMS a officiellement déclaré la COVID-19 comme une pandémie mondiale [7].

En septembre 2021, l'OMS récence plus de 226 millions de cas confirmés et 4.66 millions de décès à cause de la COVID 19 à travers le monde. Encore pire, ces chiffres ne cesseront de croître si rien n'est fait pour enrayer cette pandémie.

En Algérie, la COVID-19 se propage à partir du 25 février 2020 lorsqu'un ressortissant italien est testé positif au SARS-CoV-2. Depuis, des milliers de cas sont ensuite détectés pour atteindre 200 000 cas positifs et 5500 décès en septembre 2021 (figure 02).



**Figure N°02** : Evolution du nombre de nouveaux cas confirmés et nouveaux décès par COVID-19 du 25 février 2020 au 07 septembre 2021 en Algérie [8].

### 3. Facteurs de risque

Les mécanismes physiopathologiques de la COVID-19, étant une nouvelle maladie, restent inconnus. On peut cependant déterminer un certain nombre de circonstances associées statistiquement à cette pathologie. C'est ce qu'on appelle facteur de risque ou facteur favorisant [8], citons à titre d'exemple :

#### 3.1 Age

La COVID-19 est une affection qui touche toutes les catégories d'âge, avec une susceptibilité plus grande chez les personnes âgées et celles souffrant de maladies chroniques pré-existants, quel que soit l'âge.

#### 3.2 Tabagisme

Fléau de santé publique, est reconnu comme facteur de risque et potentiellement de mauvais pronostic au cours des infections respiratoires basses. Les fumeurs représentent donc une population vulnérable. Ce rôle négatif a déjà été mis en exergue au cours de l'infection à la COVID-19 : plus de formes sévères, plus de mortalité chez les fumeurs.



### 3.3 Comorbidités

Comme pour les autres infections respiratoires et autres infections sévères, le rôle prépondérant des comorbidités en tant que facteur de risque. Elles sont représentées par l'hypertension artérielle, les maladies cardiovasculaires, le diabète, les maladies respiratoires chroniques, du foie et des reins [9, 10, 11].

### 3.4 Sexe

Le lien entre sexe et le risque de COVID-19 est difficile à établir. Dans les premières publications, la COVID-19 semblait toucher plus les hommes que les femmes [12].

## 4. Pénétration et cycle du SARS-CoV-2

La protéine S du SARS-CoV-2 utilise le récepteur cellulaire de l'enzyme de conversion de l'angiotensine 2 (ACE2). La liaison de la sous unité de la protéine S1 au niveau de l'ACE2 entraîne une modification conformationnelle de la protéine S permettant l'endocytose puis la fusion membranaire. Cette fusion nécessite l'activation de la protéine S par le clivage au niveau de la jonction S1/S2 et d'un autre site de la protéine S2. Cette fonction est notamment assurée par la protéase membranaire TMPRSS2 (Transmembranaire Protéase Serine 2). Le SARS-CoV-2 pourrait également utiliser d'autres récepteurs cellulaires de la protéine S pour infecter les cellules n'exprimant pas l'ACE2.

Après la fusion et le largage de la nucléocapside dans le cytosol de la cellule hôte, la machinerie cellulaire traduit le gène de la réplicase en deux polyprotéines (pp1a et pp1ab) clivées en nombreuses protéines indispensables au cycle viral (notamment deux protéases virales et une ARN-polymérase ARN-dépendant) s'assemblant en un large complexe de transcription et de réplication. Ce complexe permet d'une part de reproduire l'ARN viral et d'autre part, par le biais de la formation de petits brins d'ARN anti-sens appelés ARN sous-génomiques, la production de protéines de structure des nouveaux virions. Finalement les brins d'ARN synthétisés sont combinés avec la protéine N pour former la nucléocapside et l'assemblage avec les glycoprotéines d'enveloppe permet le bourgeonnement de nouvelles particules virales.

## 5. Traitement

Jusqu'à présent, aucun traitement curatif ne permet de guérir complètement la maladie à la COVID-19. Cependant, quelques stratégies médicamenteuses prometteuses sont proposées, citons à titre d'exemple :

**5.1. Corticothérapie :** Diminue l'inflammation durant la seconde phase de la maladie.

**5.2. Inhibiteurs de JAK (Janus Kinase) /STAT (Signal Transducers and Activators of Transcription) dont le Baricitinib :** Leur utilisation pourrait être une piste prometteuse chez certains patients avec signature interféron (IFN) élevée, et plusieurs molécules sont en cours d'étude.

**5.3. Inhibiteur de TMPRSS2 :** Réduisant significativement l'infection des cellules par le SARS-CoV-2 *in vitro* et fait l'objet de plusieurs essais cliniques. Les inhibiteurs de cette enzyme ; objet de notre étude ; empêchent l'entrée du virus à l'intérieur des cellules.

**5.4. Chloroquine et hydroxychloroquine :** En plus de leurs effets antipaludiques et immunomodulateurs, la chloroquine et l'hydroxychloroquine inhibent la réplication de nombreux virus *in vitro* dont le SARS-CoV-2, il a été montré que ces molécules s'accumulent dans les endosomes et lysosomes et augmentent le pH dans ces organelles, altérant ainsi leur fonctionnement essentiel pour l'endocytose des coronavirus, des données *in vitro* suggèrent que la chloroquine modifie la glycosylation d'ACE2 et inhibe ainsi la fixation du SARS-CoV-1.

**5.5. Inhibition de la protéase du SARS-CoV-2 :** Cette enzyme est essentielle au développement et à la multiplication du virus. Elle coupe effectivement le produit de la traduction de l'ARNm du virus en plusieurs fragments représentant ainsi une protéine du virus. Sans cette enzyme, le virus ne peut pas produire ses protéines à partir de la pro-protéine traduite, ce qui fait de l'inhibition de cette enzyme une cible thérapeutique pour combattre ce virus.

## 5.6. Inhibition de la synthèse de l'ARN viral :

**5.6.1. Favipiravir :** Pro-drogue d'un analogue nucléotidique inhibant l'ARN polymérase virale. Ce composé est actif *in vitro* contre le SARS-CoV-2.

**5.6.2. Remdesivir :** Pro-drogue d'un analogue nucléosidique, inhibant la réplication du SARS-CoV-1 dans un modèle murin et de SARS-CoV-2 *in vitro*.

**5.6.3. Ribavirine :** Un analogue de la guanine inhibant l'ARN-polymérase de nombreux virus à ARN mais avec une efficacité *in vitro* limitée contre le SARS-CoV-2.

**5.7. Inhibiteurs du Système rénine-angiotensine-aldostérone (SRAA) :** Le récepteur du SARS-CoV-1 et du SARS-CoV-2 est l'ACE2. Le SARS-CoV-2 pourrait entraîner une diminution de l'expression d'ACE2 sur les cellules infectées, altérant ainsi la contre-régulation de l'angiotensine II, ce qui pourrait participer à la pathogénie de la COVID-19.

**5.8. Vaccination :** La principale cible antigénique des vaccins à l'heure actuelle est la sous-unité S1 de la protéine Spike. Les efforts exceptionnels de la communauté scientifique a conduit au développement de plus de 300 projets de vaccins. 11 d'entre eux ont terminé la phase III avec des résultats positifs. On cite parmi eux :

**5.8.1. Vaccin Oxford/AstraZeneca Covid-19 :** L'estimation de l'efficacité du vaccin (VE) était de 63,09%

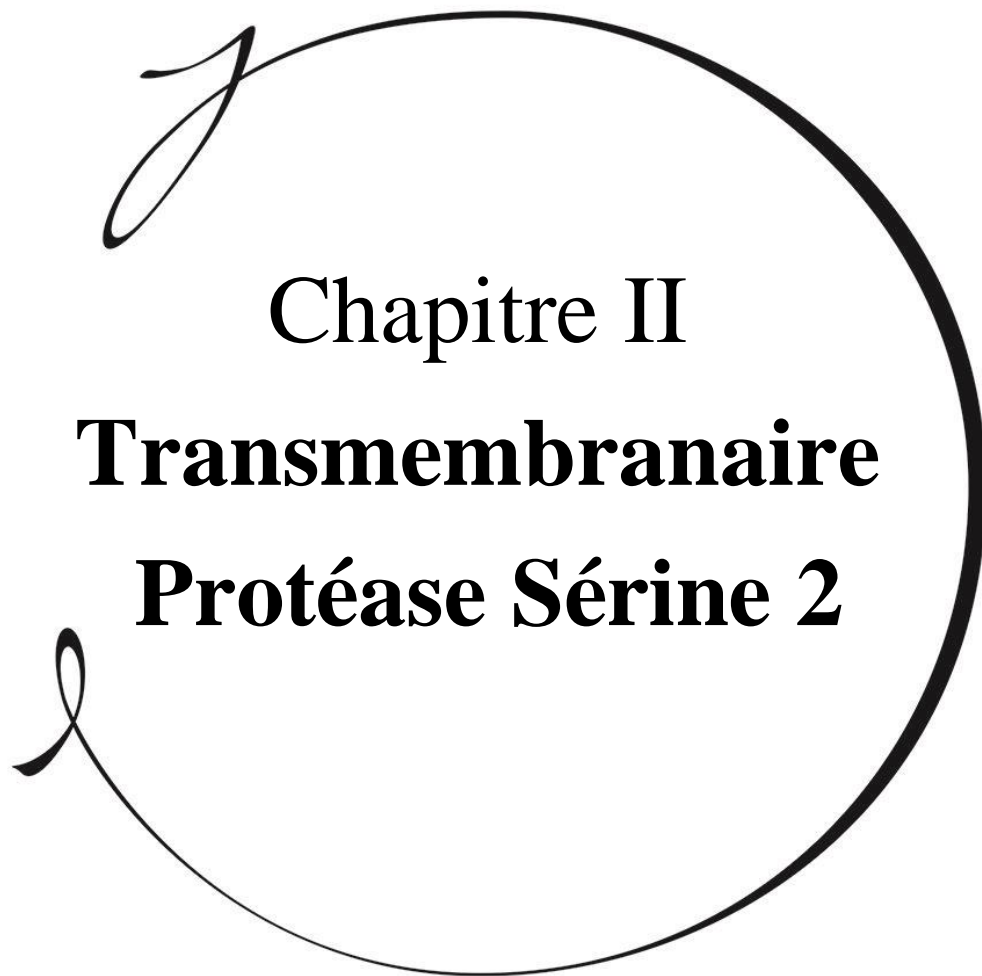
**5.8.2. Vaccin Pfizer- BioNTech :** Son taux d'efficacité comparativement au placebo était de 95,0 %

**5.8.3. Vaccin Moderna :** L'efficacité du vaccin contre la COVID-19 était de 94,1%. L'efficacité du vaccin contre les formes graves de COVID-19 était de 100%.

**5.8.4. Vaccin chinois Sinopharm ou BBIBP-cor V :** Selon l'OMS, le vaccin chinois Sinopharm est sûr et efficace, mais il manque des données sur les personnes âgées et les personnes souffrant d'autres maladies.

**5.8.5. Vaccin Gama -COVID-VacouSputnik V :** Selon les études, l'efficacité du vaccin Sputnik V contre la COVID-19 est de 91,6%.

**5.8.6. Vaccin Sinovac :** Le taux d'efficacité contre les maladies causées par COVID-19 était de 50,65% pour tous les cas, 83,70% pour les cas nécessitant un traitement médical et 100,00% pour les cas hospitalisés, sévères et les cas mortels.



Chapitre II  
**Transmembranaire**  
**Protéase Sérine 2**



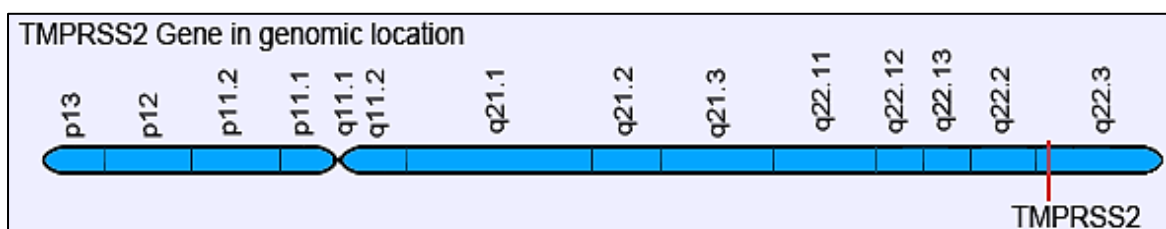
## 1. Introduction

Les protéases à sérine sont une famille de protéases qui clivent des protéines ou des peptides en hydrolysant leurs liaisons peptidiques. Appelées protéases à sérine car leur site actif contient un résidu de sérine. Ces enzymes jouent un rôle essentiel dans de nombreux processus physiologiques et pathologiques, tels que le catabolisme des protéines, la coagulation sanguine (l'inflammation), la croissance tumorale et les métastases [13,14].

Il existe un très grand nombre de protéases à sérine avec des spécificités variées, impliquées dans de multiples processus biologiques parmi lesquelles les protéases à sérine transmembranaires de type II (TTSP). Elles forment une famille d'enzymes protéolytiques nouvellement identifiée, codée par le gène *TMPRSS2*. Ces enzymes, impliquées dans la formation des tissus et leur dérégulation sont reliées à de nombreux types de cancers [15].

Cette protéine facilite également l'entrée des virus dans les cellules hôtes en coupant et en activant les glycoprotéines de l'enveloppe virale. Parmi ces virus utilisant cette protéine nous trouvons : le virus de la grippe, les coronavirus humains HCoV-229E, MERS-CoV, SARS-CoV et SARS-CoV-2 (virus de la COVID-19). Des variants de transcription épissés codant les différentes isoformes ont été trouvés pour ce gène [16].

Le gène *TMPRSS2* s'étend sur environ 43,59 kb de long sur le chromosome 21 dans la région q22.3, contenant 14 exons (Figure 03) [17]. Ce gène est exprimé dans les tissus humains normaux et malades, dans l'intestin grêle, le côlon, l'estomac, les glandes salivaires, et la prostate.



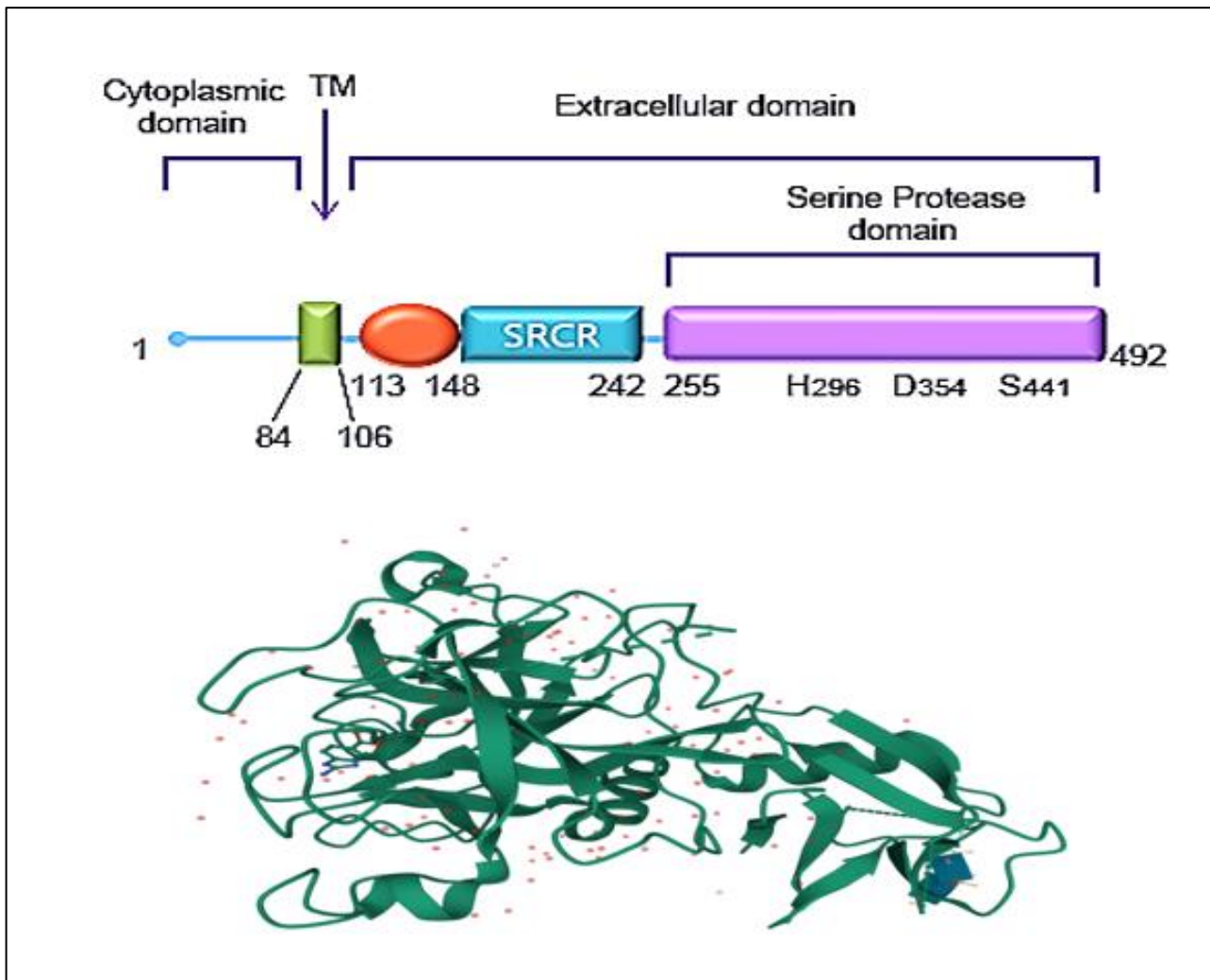
**Figure N°03** : localisation du gène *TMPRSS2*.

## 2. Structure de la transmembranaire protéase sérine 2

La transmembranaire protéase sérine 2, comme son nom l'indique, est une protéine transmembranaire contenant 492 acides aminés avec quatre domaines : (figure 04)

- ✚ Domaine sérine protéase (AA 255-492).
- ✚ Domaine riche en cystéine du récepteur Scavenger (AA 149-242).
- ✚ Domaine du récepteur LDL de classe A (LDLRA, AA 113-148) formant un site de liaison pour le calcium.
- ✚ Domaine transmembranaire (AA 84-106).

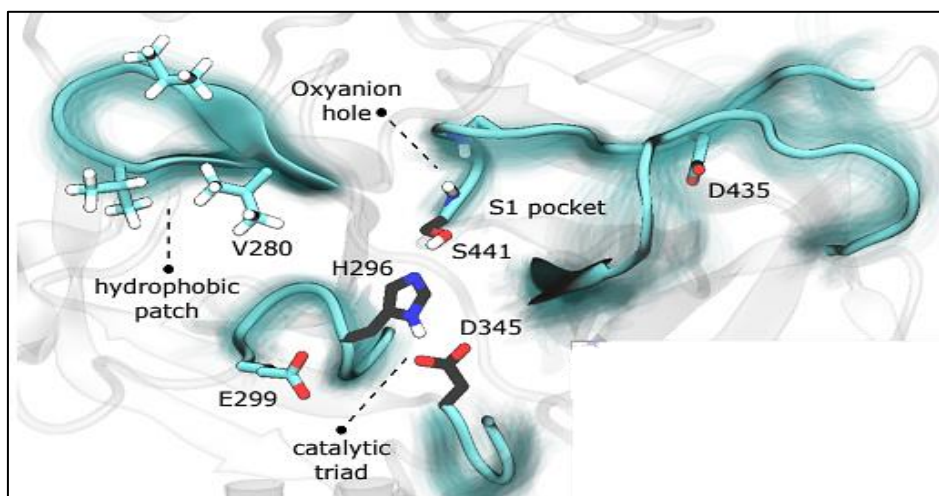
En raison de son emplacement à la surface des cellules, cette enzyme pourrait fonctionner comme un récepteur pour des signaux de médiation de ligands spécifiques.



**Figure N°04** : Structure tridimensionnelle de transmembranaire protéase sérine 2.

### 3. Site actif

Les acides aminés qui forment la poche du site actif de la TMPRSS2 sont les suivants : Asp 435, Ser 436, Cys 437, Gln 438, Gly 439, Ser 441, Thr 459, Ser 460, Trp 461, Gly 462, Gly464, Cys 465, Arg 470, Val 473 et Gly 472. Cependant, certains de ces acides aminés jouent un rôle crucial dans la fonction catalytique de l'enzyme tel que : Ser441, Asp 345 et His 296 alors que les autres sont impliquées dans la formation des interactions avec le substrat (figure 05).



**Figure N°05** : Site actif du domaine catalytique de TMPRSS2.

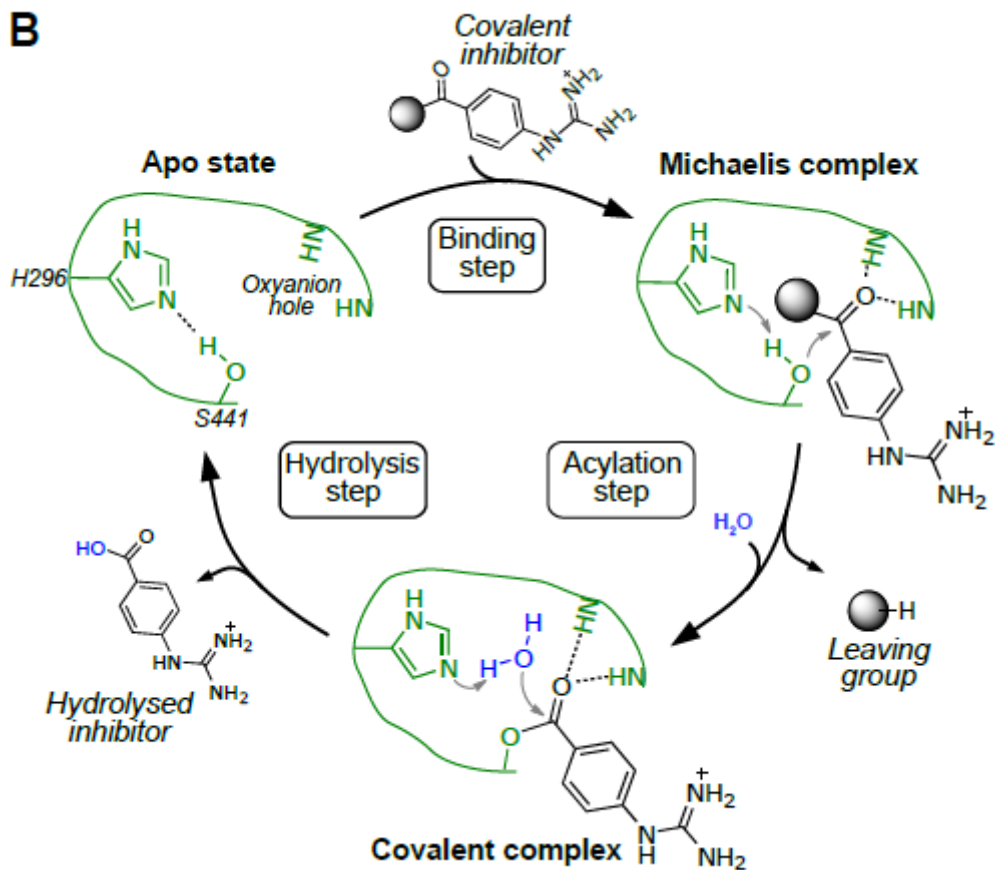
### 4. Mécanisme d'action

La TMPRSS2 clive les liaisons peptidiques en deux étapes catalytiques par une triade catalytique conservée : Asp 345, His 296 et Ser 441 (figure 06).

La première étape implique la formation d'un intermédiaire acyl-enzyme covalent entre le substrat et Ser 441. Au cours de cette étape, le résidu His 296 se comporte comme une base pour déprotoner la Ser 441, puis comme un acide pour protoner le groupement libéré du substrat.

La deuxième étape implique l'hydrolyse de l'acyl-enzyme pour libérer le substrat clivé tout en restaurant la forme active de l'enzyme. Le long de ces deux étapes, le trou oxyanion formé par les NH de squelette de Gly439 et Ser441, aide à activer et stabiliser le carbonyle. Une autre structure importante caractéristique est la poche S1, qui contient un Asp 435 bien conservé qui

est essentiel pour la liaison du substrat et pour sa reconnaissance. Sur le site opposé de la poche S1, une boucle contenant une région hydrophobe délimite la région de liaison des substrats du site actif enzymatique.



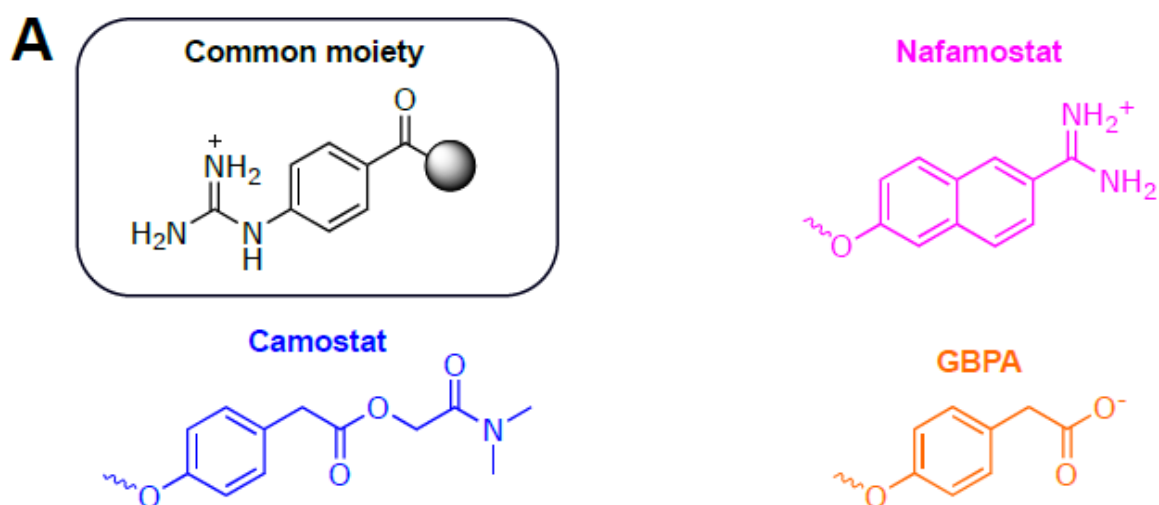
**Figure N°06 :** Mécanisme d'action de l'hydrolyse par TMPRSS2.

## 5. Relation de la TMPRSS2 avec les coronavirus

La liaison du virus à la cellule cible se fait après encrage de la protéine Spik (S) avec son récepteur ACE2. Ainsi, l'entrée du génome virale à travers la membrane se fait après coupure de la protéine S et séparation des deux sous unités S1 et S2 par la TMPRSS2 de l'hôte. L'inhibition de cette dernière empêche l'entrée du génome virale dans les cellules hôtes humaines.

## 6. Inhibiteur

Le camostat et le nafamostat sont des candidats médicaments prometteurs pour une stratégie de traitement contre la COVID-19. Le camostat est déjà commercialisé comme médicament pour le traitement des pancréatites. Aussi, le produit de dégradation du camostat, l'acide 4-guanidinobenzoïque (GBPA), a montré un effet inhibiteur sur la TMPRSS2 (figure 07).



**Figure N°07** : Structure des différents inhibiteurs de TMPRSS2.

Il a été montré que les 3 inhibiteurs agissent directement sur TMPRSS2 et que Nafamostat est plus puissant que le Camostat [18].





Chapitre III  
**LE DOCKING  
MOLECULAIRE**

## 1. Introduction

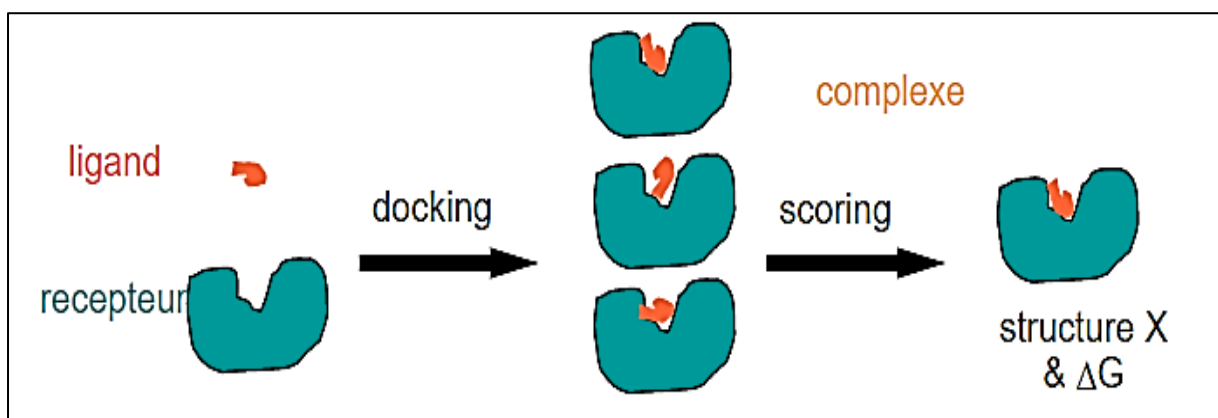
Le développement d'un nouveau médicament est un processus long et coûteux, allant de l'identification d'une cible biologique d'intérêt thérapeutique jusqu'au patient, dans lequel les essais cliniques succèdent au développement préclinique [19]. Avec le développement des outils informatiques dans les 20 dernières années, la modélisation moléculaire et plus précisément le docking moléculaire s'est très vite introduit dans le domaine de la recherche en biologie [20]. En effet, cette approche consiste à simuler l'affinité d'un ligand à l'égard de sa cible ce qui est plus facile à mettre en œuvre pour un coût bien moindre que l'approche expérimentale.

## 2. Principe de docking

Une simulation par docking comprend essentiellement deux étapes complémentaires : le docking et le scoring (figure 08).

2.1. **Docking** : est l'étape de sélection, consistant à placer le ligand dans le site actif de la protéine et à échantillonner les conformations, positions et orientations (poses) possibles, en ne retenant que celles qui représentent les modes d'interactions les plus favorables.

2.2. **Scoring** : est l'étape de classement, qui consiste à évaluer l'affinité entre le Ligand et la protéine et donner un score aux poses obtenues lors de la phase de docking qui permettra de retenir la meilleure pose parmi toutes celles proposées [21].



**Figure N°08** : Principe du Docking et Scoring.

### 3. Outils du docking moléculaire

#### 3.1. Ligand

En biologie, un ligand est une molécule qui se lie de manière réversible à une macromolécule ciblée, protéine ou acide nucléique, jouant en général un rôle fonctionnel : stabilisation structurale, catalyse, modulation d'une activité enzymatique, transmission d'un signal [22].

La structure tridimensionnelle des ligands est obtenue par deux moyens : Le premier consiste à utiliser des ligands de la littérature qu'on peut dessiner, optimiser et enregistrer dans différents formats (pdb, mol, mol2...) grâce à des logiciels de construction moléculaires tels que Titan. Le deuxième : consiste à utiliser des collections de molécules virtuelles appelées chimiothèques comme les la PubChem, Zinc ...etc.

#### 3.2. Récepteur

Les structures 3D des protéines sont accessibles gratuitement via la banque de donnée PDB. Les données structurales sont obtenues par cristallographie aux rayons X, spectroscopie RMN. Elles sont accessibles gratuitement sur internet via des sites Web définis de ses organisations membres dont : RCSB PDB, PDBj, PDBe...etc.

En mois de juin 2021, la PDB compte plus de 179.210 Structures macromoléculaires biologiques permettant des percées dans la recherche et l'éducation.

Les différentes conformations tridimensionnelles sont téléchargeables sous extension pdb lisibles par les logiciels de docking et contenant diverses informations sur la protéine en question. Par exemple : le nom du récepteur, l'équipe qui a résolue la structure, la méthode expérimentale, ...etc. On y retrouve aussi des informations sur la structure primaire, les hétéroatomes, la structure secondaire et les coordonnées atomiques X, Y et Z qui déterminent la position exacte de chaque atome dans une conformation donnée.

Si la cible n'est pas encore déposée au niveau de la banque, et cette dernière contient une protéine avec des séquences similaires, la modélisation par homologie intervient afin de construire la structure 3D de la cible souhaitée [23].

### 3.3 Programmes

A l'heure actuelle, plus de 30 programmes de docking moléculaire sont disponibles. Les plus fréquemment cités sont respectivement : AutoDock, GOLD, FlexX, Surflex et Glide (tableau 01). Ils permettent notamment un criblage rapide de vastes bibliothèques de composés. Ces programmes reposent le plus souvent sur des algorithmes spécifiques (Algorithme génétique, Fragmentation incrémentale...) [19].

**Tableau N°01** : Principaux programmes du docking moléculaire.

Nom	Editeur	Site Internet
<b>AutoDock</b>	Scripps	<a href="http://www.scripps.edu/mb/olson/doc/autodock/">http://www.scripps.edu/mb/olson/doc/autodock/</a>
<b>Dock</b>	UCSF	<a href="http://dock.compbio.ucsf.edu/">http://dock.compbio.ucsf.edu/</a>
<b>FlexX</b>	BioSolveIT	<a href="http://www.biosolveit.de/FlexX/">http://www.biosolveit.de/FlexX/</a>
<b>Fred</b>	OpenEyes	<a href="http://www.eyesopen.com/products/applications/fred.html">http://www.eyesopen.com/products/applications/fred.html</a>
<b>Glide</b>	Schrödinger	<a href="http://www.schrodinger.com/Products/glide.html">http://www.schrodinger.com/Products/glide.html</a>
<b>Gold</b>	CCDC	<a href="http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/life_sciences/gold/">http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/life_sciences/gold/</a>
<b>ICM</b>	Molsoft	<a href="http://www.molsoft.com/products.html">http://www.molsoft.com/products.html</a>
<b>LigandFit</b>	Accelrys	<a href="http://www.accelrys.com/cerius2/c2ligandfit.html">http://www.accelrys.com/cerius2/c2ligandfit.html</a>
<b>Surflex</b>	Biopharmics	<a href="http://www.biopharmics.com/products.htm">http://www.biopharmics.com/products.htm</a>

## 4. Prédiction des paramètres ADMET

Dans les années 1990, les principales raisons de l'échec des candidats médicaments lors des phases cliniques étaient principalement le manque d'efficacité chez l'homme et les mauvaises performances pharmacocinétiques.

Afin de diminuer le taux d'échec lié aux propriétés pharmacocinétiques des candidats médicaments, il est apparu nécessaire l'application d'un certain nombre de filtres (tableau 02) employés pour s'assurer que les molécules possèdent des propriétés compatibles avec une application biologique. En effet, les filtres de type ADMET (Absorption, Distribution, Métabolisme, Elimination et Toxicité) sont désormais largement utilisés afin de réduire le nombre de composés d'une chimiothèque avant tout processus de criblage en ne sélectionnant que ceux les plus aptes à devenir des candidats médicaments.

**Tableau N°02** : Principales plateformes de prédiction des paramètres ADMET.

Nom	Site Internet
<b>SwissADME</b>	<a href="http://www.swissadme.ch/index.php">http://www.swissadme.ch/index.php</a>
<b>ADMETlab 2.0</b>	<a href="https://admetmesh.scbdd.com/">https://admetmesh.scbdd.com/</a>
<b>pkCSM</b>	<a href="http://biosig.unimelb.edu.au/pkcsm/">http://biosig.unimelb.edu.au/pkcsm/</a>
<b>RPBS</b>	<a href="https://bioserv.rpbs.univ-paris-diderot.fr/index.html">https://bioserv.rpbs.univ-paris-diderot.fr/index.html</a>
<b>preADMET</b>	<a href="https://preadmet.bmdrc.kr/">https://preadmet.bmdrc.kr/</a>
<b>admetSAR 2</b>	<a href="http://lmm.d.ecust.edu.cn/admetSar2/">http://lmm.d.ecust.edu.cn/admetSar2/</a>
<b>ProTox 2</b>	<a href="https://tox-new.charite.de/prottox_II/">https://tox-new.charite.de/prottox_II/</a>
<b>QED</b>	<a href="https://webs.iiitd.edu.in/oscadd/qed/virtual.php">https://webs.iiitd.edu.in/oscadd/qed/virtual.php</a>
<b>VnnADMET</b>	<a href="https://vnnadmet.bhsai.org/vnnadmet/home.xhtml">https://vnnadmet.bhsai.org/vnnadmet/home.xhtml</a>
<b>NERDD</b>	<a href="https://nerdd.univie.ac.at/">https://nerdd.univie.ac.at/</a>
<b>Solubilitypredictor</b>	<a href="https://disco.chemaxon.com/calculators/demo/plugins/solubility/">https://disco.chemaxon.com/calculators/demo/plugins/solubility/</a>
<b>chemaxon</b>	<a href="https://chemaxon.com/">https://chemaxon.com/</a>
<b>molinspiration</b>	<a href="https://www.molinspiration.com/cgi-bin/properties">https://www.molinspiration.com/cgi-bin/properties</a>
<b>VirtualRat</b>	<a href="https://virtualrat.cmdm.tw/">https://virtualrat.cmdm.tw/</a>
<b>PerMM</b>	<a href="https://permm.phar.umich.edu/server">https://permm.phar.umich.edu/server</a>
<b>SmartCyp</b>	<a href="https://smartcyp.sund.ku.dk/mol_to_som">https://smartcyp.sund.ku.dk/mol_to_som</a>
<b>eMolTox</b>	<a href="http://xundrug.cn/moltox">http://xundrug.cn/moltox</a>
<b>LabMol-predhERG</b>	<a href="http://predherg.labmol.com.br/">http://predherg.labmol.com.br/</a>
<b>LabMol-predskin</b>	<a href="http://predskin.labmol.com.br/">http://predskin.labmol.com.br/</a>
<b>Endocrine disruptome</b>	<a href="http://endocrinedisruptome.ki.si/prediction.html">http://endocrinedisruptome.ki.si/prediction.html</a>
<b>CypRules</b>	<a href="https://cyprules.cmdm.tw/">https://cyprules.cmdm.tw/</a>
<b>mcul</b>	<a href="https://mcule.com/apps/property-calculator/">https://mcule.com/apps/property-calculator/</a>
<b>DrugMint</b>	<a href="https://webs.iiitd.edu.in/oscadd/drugmint/batch.php">https://webs.iiitd.edu.in/oscadd/drugmint/batch.php</a>
<b>ChemBio 2</b>	<a href="https://chembioserver.vi-seem.eu/Mapping_Tools.php">https://chembioserver.vi-seem.eu/Mapping_Tools.php</a>
<b>molsoft</b>	<a href="http://www.molsoft.com/mprop/">http://www.molsoft.com/mprop/</a>
<b>PassOnline</b>	<a href="http://way2drug.com/PassOnline/predict.php">http://way2drug.com/PassOnline/predict.php</a>
<b>Oscadd</b>	<a href="https://webs.iiitd.edu.in/oscadd/">https://webs.iiitd.edu.in/oscadd/</a>



Chapitre IV  
**MATERIELS ET  
METHODE**

## 1. Matériels

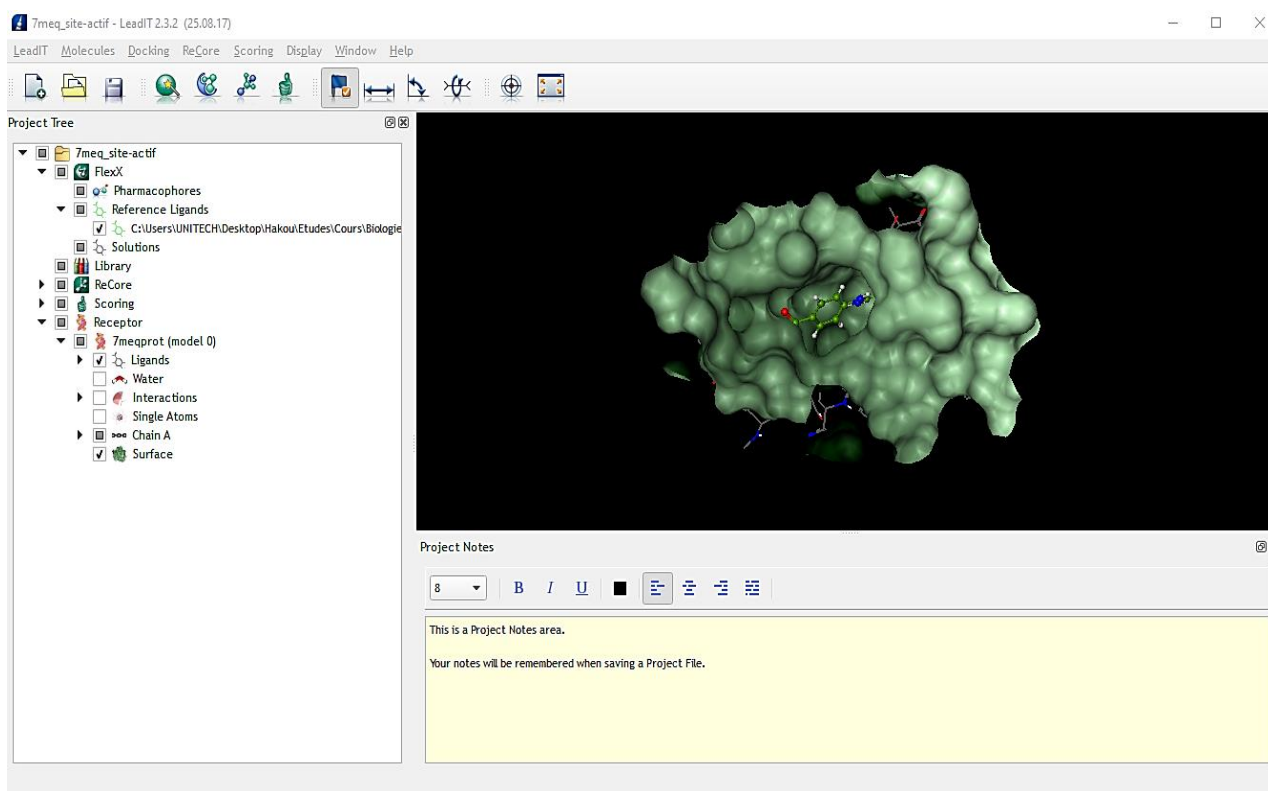
### 1.1.Ordinateur

Dans notre travail, nous avons utilisé un ordinateur avec une mémoire vive de 16 Go et un système d'exploitation 64 bits : Windows 10, sur lequel les programmes utilisés ont été installés.

### 1.2.Programmes

#### 1.2.1. FlexX version 2.3.3, 2017

FlexX est un programme de docking moléculaire basé sur l'approche par fragmentation suivie d'une reconstruction incrémentale du ligand au sein du site actif de la cible (figure 09). C'est un programme précis avec un temps d'exécution très rapide [24].



**Figure N°09** : FlexX Version : 2.3.2.

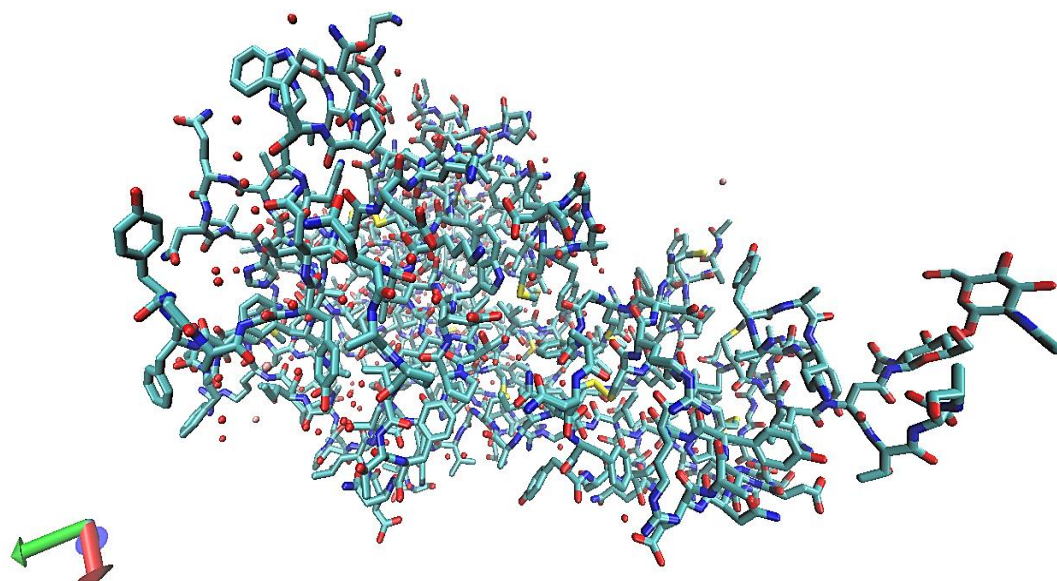


### 1.2.2. VMD (Visual Molecular Dynamics) version 1.9.3

VMD est un programme de visualisation moléculaire permettant d'afficher, animer et analyser des assemblages moléculaires (figure 10). Nous avons utilisé ce programme non seulement pour la préparation des protéines et des ligands étudiés mais aussi pour la visualisation du positionnement des différents ligands au sein de leur cible [25].

VMD 1.9.3 OpenGL Display

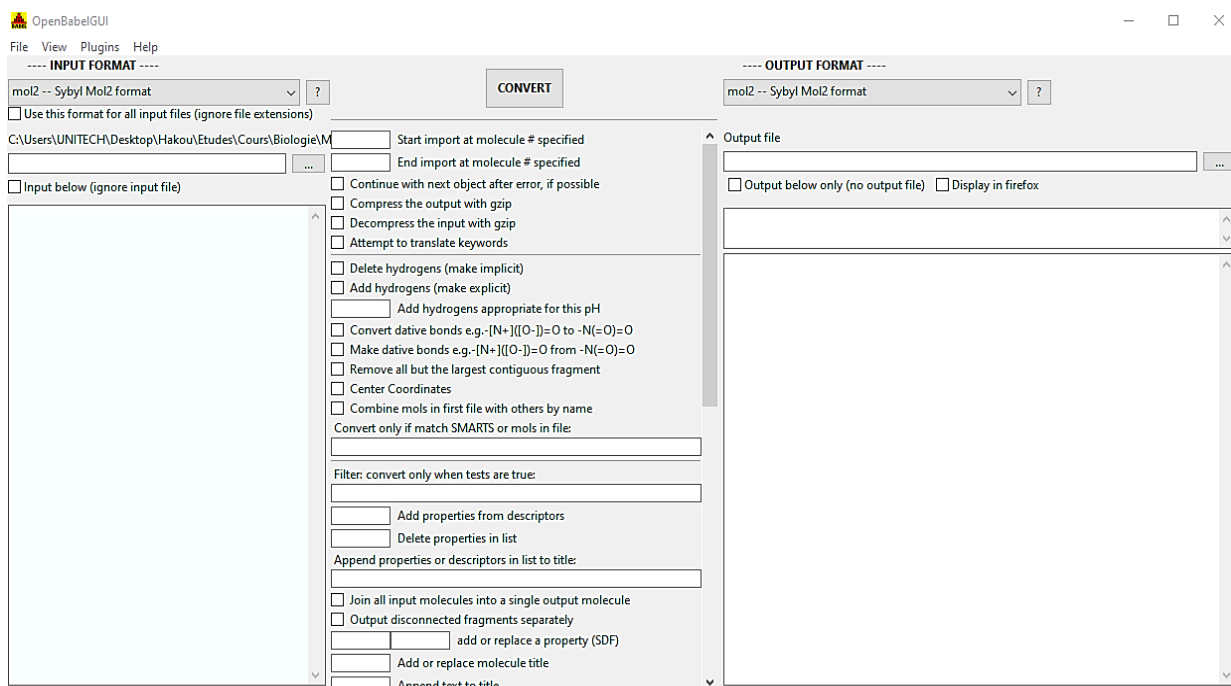
- □ ×



**Figure N°10** : VMD Version : 1.9.3.

### 1.2.3. Open Babel version 2.3.2

Ce programme a été utilisé pour la conversion des différents fichiers d'un format à un autre (sdf, pdb, mol2 ...etc.) et aussi pour séparer et rassembler plusieurs molécules dans un seul fichier (figure 11).



**Figure N°11** : Open Babel version : 2.3.2.

## 1.3. Banques de données et serveur en ligne

### 1.3.1. Protein Data Bank

La PDB (<https://www.rcsb.org/>) est la plus grande base de données de structures 3D de macromolécules biologiques. A partir de cette banque, nous avons téléchargé le fichier contenant la structure 3D de notre enzyme d'intérêt ainsi que les complexes cristallographiques utilisés pour réaliser le test RMSD (figure 12).

**Figure N°12** : Protein Data Bank.

### 1.3.2. PubChem

PubChem (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>) est la plus grande banque de données de molécules chimiques, gérée par le National Center for Biotechnology Information (NCBI) (figure 13). Cette banque de données nous a été utile pour l'obtention de notre chimiothèque faisant l'objet du criblage virtuel.

**Figure N°13** : PubChem.

### 1.3.3. pkCSM

pkCSM (<http://biosig.unimelb.edu.au/pkcsm/>) est un outil Web gratuit qui donne accès à un ensemble de modèles prédictifs rapides pour les propriétés physicochimiques, pharmacocinétiques et de toxicité potentielle d'un composé (figure 14). Nous avons utilisé ce serveur pour la prédiction des propriétés ADMET des inhibiteurs développés.

The screenshot displays the pkCSM web interface. At the top, there is a navigation bar with links for Theory, Help, Contact, Acknowledgements, Related Resources, and License. The main heading is "Pharmacokinetic properties".

**Step 1: Please provide a set of molecules (SMILES format)**

This step includes a "Description" section with two options: "Upload your SMILES file:" and "Provide a SMILES string:". The file upload option has a "Choisir un fichier" button and a message "Aucun fichier choisi". Below it, it states "Files are expected to have headers identifying the columns" with a "File SMILES" link. The string option has a text input field and an "Example: CC(=O)OC1=CC=CC=C1C(=O)O".

**Step 2: Please choose the prediction mode**

This step includes a "Description" section with a "Prediction of pharmacokinetic properties" heading. It features a reCAPTCHA widget with the text "Je ne suis pas un robot". Below the widget are several buttons for prediction modes: Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion, Toxicity, and ADMET.

At the bottom of the page, there are logos for Instituto René Rachou FIOCRUZ MINAS, THE UNIVERSITY OF MELBOURNE, and UNIVERSITY OF CAMBRIDGE. A footer note indicates "Best viewed using Chrome on 1280x1024 resolution and above".

**Figure N°14** : pkCSM.

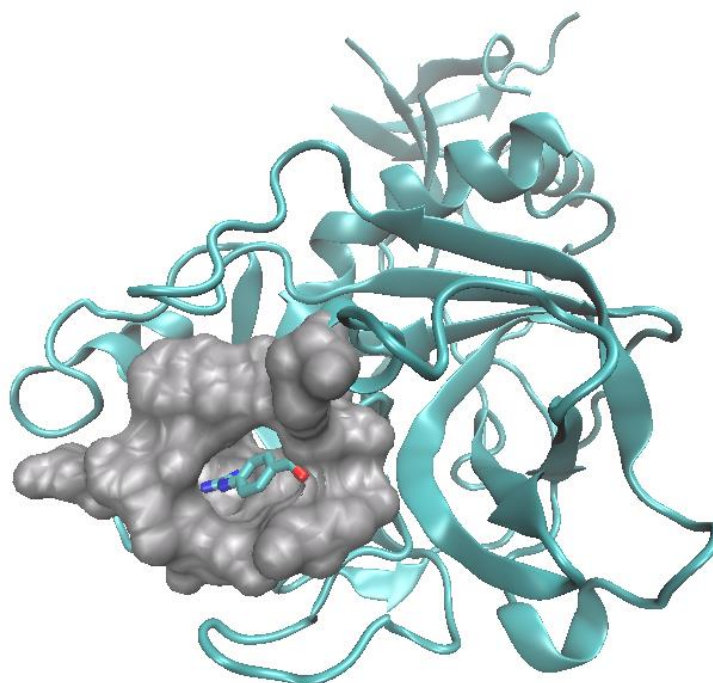
## 2. Méthode

### 2.1.Choix de la cible

La structure tridimensionnelle de notre cible, la TMPRSS2, a été obtenue à partir de la banque de donnée PDB sous le code **7MEQ**. Cette protéine, représentée par une seule chaîne de 395 acides aminés, est liée à un inhibiteur initial portant le code **GBS** qui est l'acide 4 carbamimidamido-benzoïque. Il est à signaler que ce complexe a été résolu par la technique de diffraction aux rayons X avec une résolution de 1,95 Å.

### 2.2.Préparation de la protéine

Avant de procéder au docking moléculaire, le fichier de la protéine doit être préparé en ajoutant les hydrogènes qui manquent et en éliminant les molécules d'eau à l'exception de celles qui se trouvent dans son site actif. Ce dernier a été défini en sélectionnant les acides aminés de la protéine (**7MEQ**) entourant son inhibiteur de référence (GBS) à des distances n'excédant pas 6.5 Å. Ainsi le site actif préparé comprend les acides aminés : Asp 435, Ser 436, Cys 437, Gln 438, Gly 439, Ser 441, Thr 459, Ser 460, Trp 461, Gly 462, Gly 464, Cys 465, Arg 470, Val 473 et Gly 472 (Figure 15). Après la détermination du site actif, nous avons supprimé le ligand de départ en ne gardant que l'enzyme seule avec son site actif libre.



**Figure N°15** : Site actif de la TMPRSS 2 avec son inhibiteur de référence, le GBS.

### 2.3. Préparation de la chimiothèque

Dans cette étape, le composé GBS (l'acide 4-carbamimidamidobenzoïque) a été pris comme structure de départ pour la recherche et la conception d'une chimiothèque de similaires chimiques. Dans cette optique, nous avons fait appel à la banque de données PubChem qui nous a générée 13521 similaires chimique du composé de départ. Ces composés ont été téléchargés dans un seul fichier de format sdf. À l'aide du programme OpenBabel, nous avons séparé ces composés de ces chimiothèques en plusieurs fichiers contenant chacun 1000 composés. Il est à noter que le programme FlexX ne peut pas lancer un criblage virtuel d'une collection dépassant 1000 molécules.

### 2.4. Criblage virtuel

La chimiothèque ainsi préparée a fait l'objet d'un criblage virtuel par docking moléculaire en utilisant le programme FlexX. Ce dernier permet la prédiction des meilleures conformations d'un ligand donné au sein du site actif de l'enzyme étudiée. Les résultats obtenus sont représentés sous forme d'un tableau en classant les molécules par leur score (énergies d'interaction théoriques exprimées en KJ/mol). L'interface graphique de ce logiciel génère aussi une représentation schématique des interactions entre le ligand et les différents acides aminés de l'enzyme.

## 3. Test de fiabilité du programme FlexX par RMSD

Avant d'aborder l'étude de docking moléculaire, il était indispensable de vérifier la fiabilité du programme FlexX par le test RMSD (*Root Mean Square Deviation*). C'est la mesure de la distance moyenne entre les atomes de deux poses d'un ligand. Il est souvent utilisé pour valider le protocole du docking en comparant la conformation d'un ligand conçue par le logiciel du docking par rapport à sa conformation expérimentale de référence.

La prédiction est considérée correcte (fiable), si la valeur du RMSD est inférieure ou égale à 2 Å [26].

Dans notre travail, le test de RMSD a été réalisé sur 100 complexes protéine-ligand pris d'une manière arbitraire de la PDB. Ces complexes ont été téléchargés à partir de la PDB puis préparés en séparant la protéine de son ligand.

L'analyse visuelle faisant suite au test par RMSD est aussi une étape essentielle pour vérifier la fiabilité du logiciel en visualisant la superposition de la conformation du ligand théorique par rapport à sa pose initiale (expérimentale).

#### 4. Prédiction des propriétés ADMET

Les propriétés physicochimiques, pharmacocinétiques et de toxicité potentielle des meilleurs inhibiteurs de la TMPRSS2 issus du criblage virtuel ont été simulées à l'aide du serveur pkCSM (<http://biosig.unimelb.edu.au/pkcsm/>).

##### 4.1. Propriétés physicochimiques

Tous les médicaments potentiels devaient respecter la règle des cinq de Lipinski, qui stipule qu'ils sont probablement actifs par voie orale. Cette règle permet d'évaluer la biodisponibilité d'un composé chimique par voie orale à partir de sa structure bidimensionnelle (2D). Selon cette règle, un composé doit valider au moins deux des quatre (2/4) critères suivants [27] :

- Pas plus de 5 donneurs de liaisons hydrogène.
- Pas plus de 10 accepteurs de liaisons hydrogène.
- Le poids moléculaire inférieur ou égal à 500 g/mol-1
- Le Log P inférieur ou égal à 5.

Avec un objectif similaire, *Veber et Al.* Étendent la règle de Lipinski en ajoutant deux autres critères à savoir : l'aire de la surface polaire (TPSA) qui doit être inférieure à 140 Å<sup>2</sup>, et le nombre de liaisons de rotation qui doit être inférieur ou égal à 10 [26].

##### 4.2. Propriétés pharmacocinétiques

Dans l'organisme humain, il existe plusieurs barrières naturelles qui protègent le milieu intérieur de toutes les substances exogènes, citons à titre d'exemple : la barrière buccale, gastrique, intestinale, pulmonaire, hépatique, rénale, hémato-encéphalique et la peau.

Si le médicament arrive à traverser ces barrières, il peut atteindre sa cible d'action pour exercer son effet biologique. Par la suite, il sera métabolisé au niveau hépatique en faisant

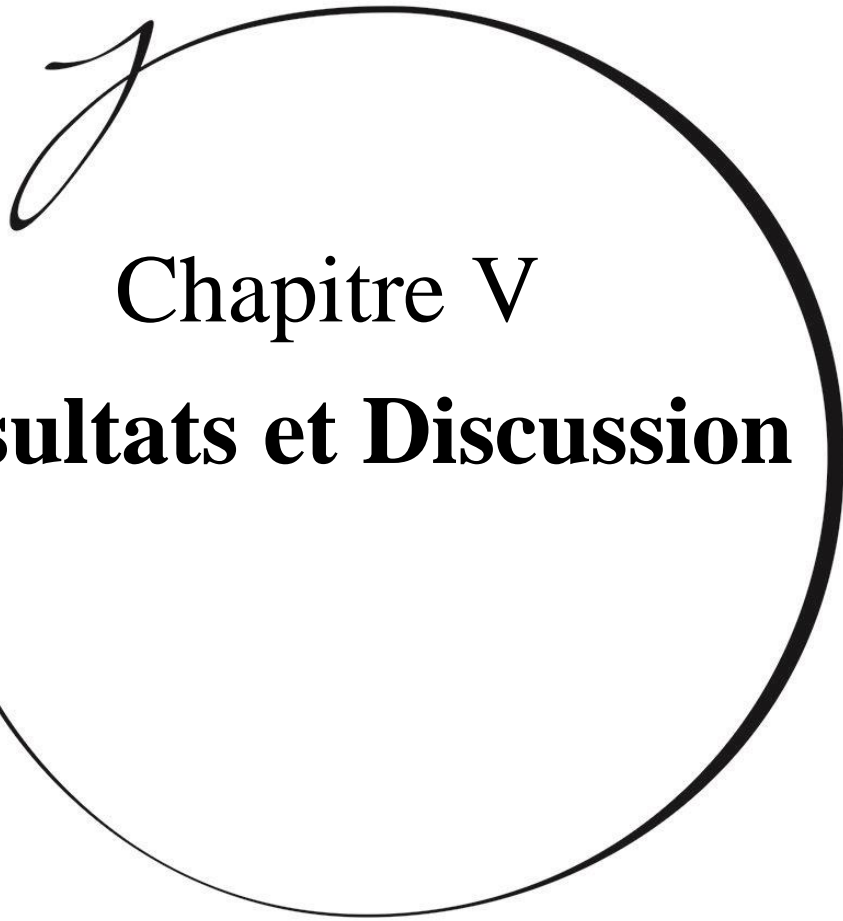
intervenir les différentes isoformes des Cytochromes P450. L'inhibition de ces cytochromes affecte considérablement le métabolisme des autres molécules (essentiellement les autres médicaments) ce qui représente la majeure forme d'interaction médicamenteuse, et qui cause une intoxication au médicament ou au contraire un échec thérapeutique, d'où la nécessité de connaître l'effet de nos inhibiteurs d'intérêt sur ces derniers.

Dans notre travail, le serveur pkCSM a été employé afin de simuler certains critères physicochimiques et pharmacocinétiques de nos inhibiteurs d'intérêt à savoir : leurs poids moléculaires, liaisons rotatives, donneurs de liaison H, accepteurs de liaison H, Log P, TPSA, solubilité dans l'eau, perméabilité au Caco2, absorption intestinale humaine, substrat du CYP3A4 et du CYP2D6, inhibiteur du CYP 450 et de hERG, test de toxicité d'AMES, hépatotoxicité et sensibilisation cutanée.

### **4.3. Tests de toxicité potentielle**

Tout médicament peut causer des effets secondaires allant d'une simple sensation de malaise à un arrêt cardiaque et à la mort. Dans le présent travail, les inhibiteurs les plus prometteurs ont fait l'objet d'une étude prédictive par le serveur pkCSM portant sur la toxicité potentielle de nos composés. Le pouvoir mutagène (test d'Ames), le pouvoir de cancérogénicité ainsi que test de hERG\_inhibition (human Ether-à-go-go Related Gene) ont été particulièrement simulés.





Chapitre V

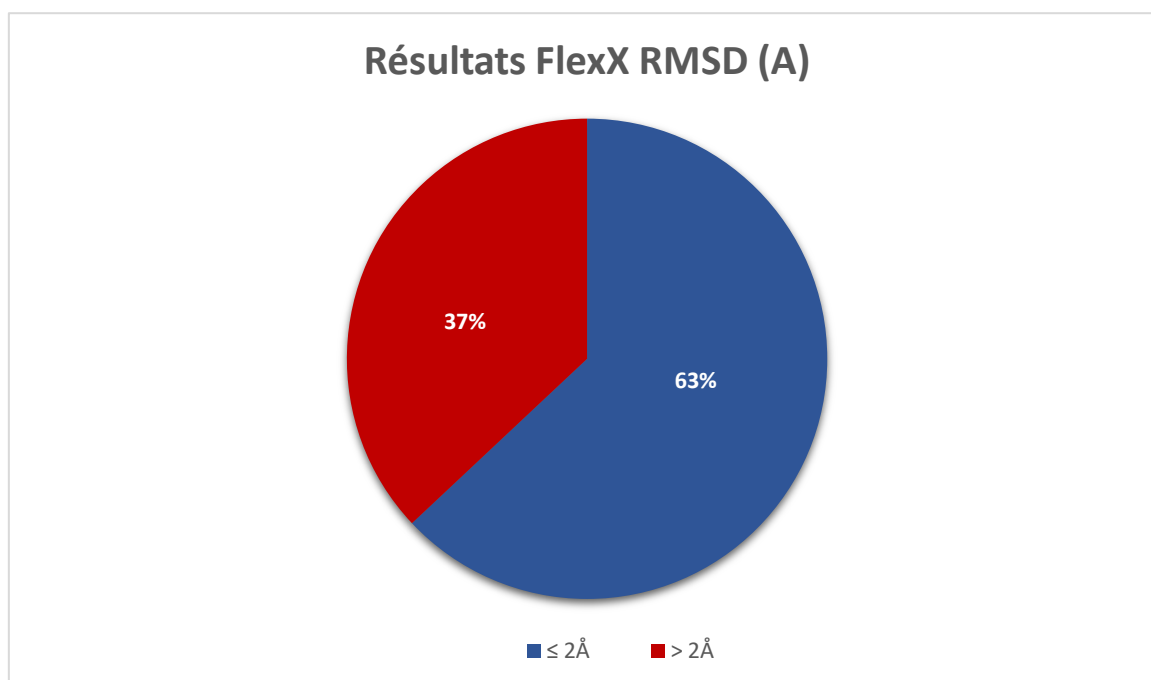
**Résultats et Discussion**

Le présent travail a été réalisé en quatre parties complémentaires. La première partie concerne l'évaluation de la performance du logiciel FlexX afin de valider le protocole de docking qu'on cherche à employer. La deuxième est consacrée à l'étude des interactions intervenant dans l'inhibition de la TMPRSS2. La troisième, quant à elle, est destinée à la proposition de nouveaux inhibiteurs plus puissants de cette cible par criblage virtuel. Dans la dernière partie, les inhibiteurs les plus prometteurs issus de ce criblage feront l'objet d'une étude prédictive de leurs propriétés ADMET.

## 1. Test de fiabilité du programme de docking moléculaire

### 1.1 Test RMSD

Avant de rechercher de nouveaux inhibiteurs de la TMPRSS2 par docking moléculaire, il était indispensable d'évaluer la performance du programme de docking moléculaire par le test RMSD. Il a été réalisé sur 100 complexes protéine-ligand tirés arbitrairement de la PDB. Les codes PDB des complexes utilisés et de leurs ligands ainsi que les valeurs de leurs RMSD obtenues avec AutoDock sont démontrés dans l'Annexe N°1. Les résultats de ce test sont représentés dans la figure 16.

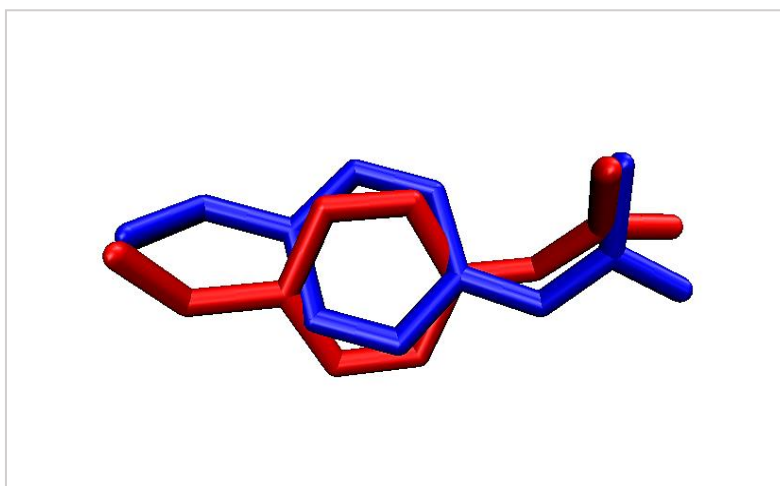


**Figure 16** : Résultats du test RMSD donnés en pourcentage (%).

Il ressort de cette figure que 63% des valeurs RMSD obtenues avec FlexX sont inférieures à 2Å alors que seulement 37% sont supérieures à cette valeur seuil. Conformément à la littérature [28], un programme de docking moléculaire n'est considéré fiable que si la valeur RMSD du modèle conçu par le programme vis-à-vis de la structure cristallographique ne dépasse pas 2Å. Ceci témoigne de la fiabilité du programme FlexX qui peut être utilisé sans trop risque d'erreurs pour prédire le positionnement correct d'un ligand au sein de son site actif.

## 1.2 Analyse visuelle

L'analyse visuelle est une étape indispensable permettant d'apprécier et de visualiser les résultats du test RMSD. Elle, consiste à comparer le positionnement d'un ligand généré par le programme du docking vis-à-vis de celui de référence obtenue à partir de l'expérimentation. Dans notre travail, cette analyse a été réalisée sur le complexe **7MEQ** correspondant à notre cible thérapeutique la TMPRSS2 en complexe avec un puissant inhibiteur (**GBS**). Comme le montre la figure 17 il existe une parfaite superposition entre la pose du ligand simulé par FlexX (colorée en rouge) vis-à-vis de celle de référence (colorée en bleu). Ceci est en accord avec la valeur numérique du RMSD obtenu dans le cas du complexe **7MEQ**, qui est, rappelons-le, égale à 0.84 Å. Ceci renforce la conclusion tirée du test RMSD et confirme davantage la performance de FlexX.

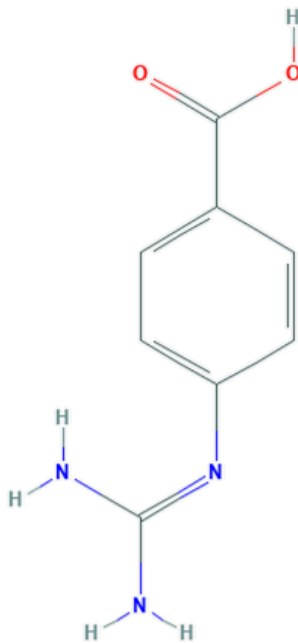


**Figure 17** : Superposition de la conformation **GBS** de l'extraite de **7MEQ** (colorée en bleu) avec la conformation la mieux ancrée (colorée en rouge).

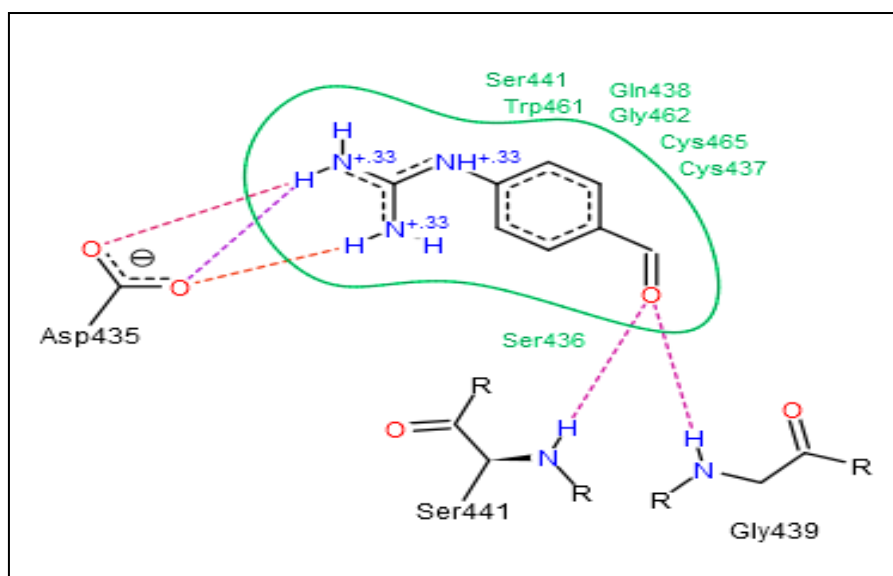
## 2. Etude des interactions impliquées dans l'inhibition de TMPRSS2 par différents composés

L'acide 4-carbamimidamidobenzoïque est un puissant inhibiteur de la TMPRSS2 (voir figure 18). La PDB nous propose la structure 3D de cet inhibiteur (GBS) en complexe avec sa cible sous le code **7MEQ**. La reconstruction de ce complexe par docking moléculaire avec FlexX donne lieu à un score de -24,17 kJ/mol. À l'aide de l'interface graphique LeadIT nous avons pu représenter le nombre et le type des liaisons mises en jeu dans l'interaction entre le GBS et la TMPRSS2 (figure 19). En effet, cinq liaisons hydrogènes sont constatées. Trois d'entre elles sont formées entre les 2 fonctions imine et amine de l'inhibiteur et les deux oxygènes de la fonction carboxyle du résidu Asp435. Les deux autres liaisons hydrogènes sont formées entre le groupement carbonyle de l'inhibiteur et les deux fonctions amines des résidus Gly439 et Ser441.

En plus de ces liaisons hydrogène, ce complexe est stabilisé par de nombreuses interactions hydrophobiques faisant intervenir les résidus : Ser436, Cys437, Gln438, Ser441, Trp461, Gly462 et Cys465.



**Figure 18** : Structure chimique du GBS :  
L'acide 4-carbamimidamidobenzoïque.



**Figure 19** : Représentation des interactions du complexe **7MEQ**. Les liaisons hydrogène sont représentées en pointillés et les interactions hydrophobes sont représentées en vert.

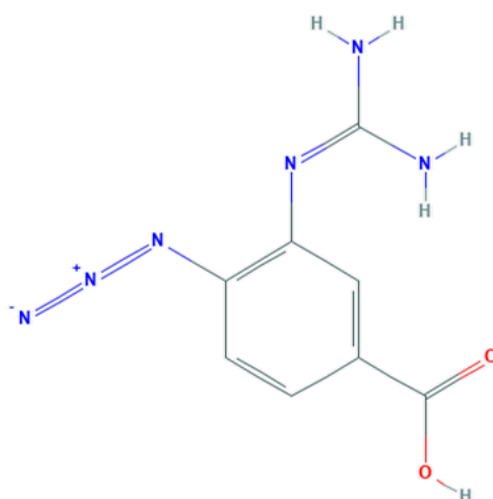
### 3. Proposition de nouveaux inhibiteurs de la TMPRSS 2 : Criblage virtuel

Afin de proposer de nouveaux inhibiteurs plus puissants et sélectifs de la TMPRSS2, le composé **GBS** a été pris comme structure de départ pour le criblage d'une collection de similaires chimiques via la banque de données *PubChem*. Avec un taux de similarité de 80 % cette dernière nous a proposé une collection de 13521 similaires chimique. Le criblage virtuel de cette collection de similaires chimiques envers le site actif étudié fait ressortir 590 composés ayant une énergie d'interaction bien meilleure que celle du composé de départ qui, à titre de rappel, égale à -24,17 kJ/mol. Les résultats des dix meilleurs similaires, classés par leur énergie d'interaction sont représentés dans le tableau N°03. Le numéro d'accèsion, le classement et le score de docking de tous les composés étudiés sont illustrés dans l'Annexe 2.

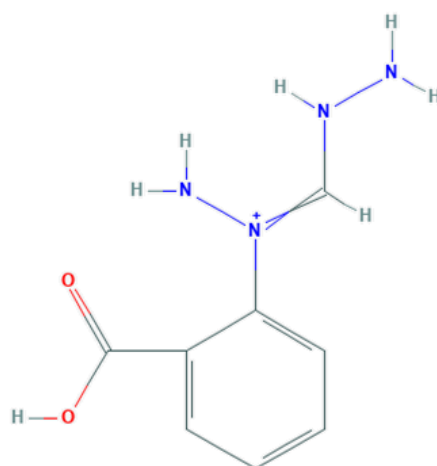
**Tableau N°03** : Classement, numéro d'accession et énergie d'interaction des dix meilleurs inhibiteurs de la TMPRSS 2 issus du criblage virtuel.

N°	Similaire	Numéro d'accession	$\Delta G$ (kJ/mol)
1	S1	151443403	-41.68
2	S2	53781906	-41.58
3	S3	148524656	-38.90
4	S4	44529645	-37.86
5	S5	20070173	-37.69
6	S6	44428312	-37.39
7	S7	148246946	-37.08
8	S8	58589596	-36.64
9	S9	152702443	-36.26
10	S10	141373110	-36.24

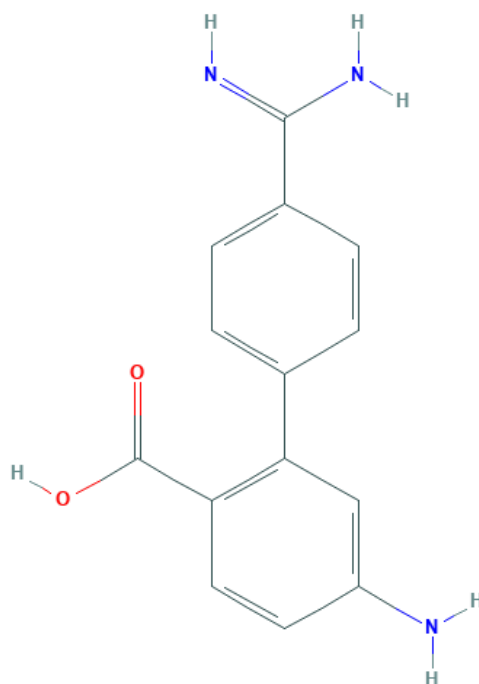
Les composés **S1**, **S2** et **S3** se présentent comme meilleurs inhibiteurs de la TMPRSS2 avec des scores respectifs de -41.68, -41.58 et -38.9 KJ/mol (Figures 20, 21 et 22). L'analyse visuelle du mode d'interaction de ces composés à l'égard du site actif de la TMPRSS2 nous permettra d'élucider les mécanismes mis en jeu dans l'inhibition de cette enzyme.



**Figure 20** : Structure chimique du composé **S1** : Acide 4-Azido-3-(diaminomethylideneamino) benzoïque



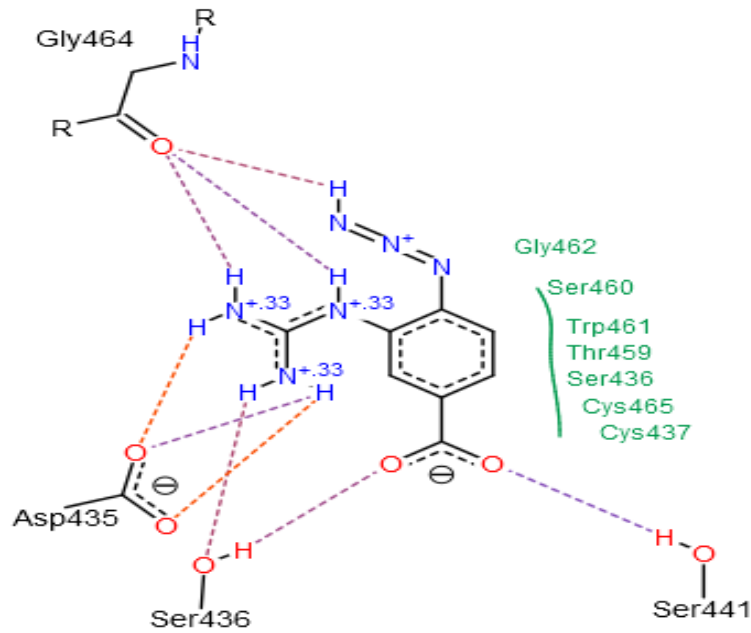
**Figure 21** : Structure chimique du composé **S2**



**Figure 22 :** Structure chimique du composé **S3** :  
Acide 4-Amino-2-(4-carbamimidoylphenyl) benzoïque.

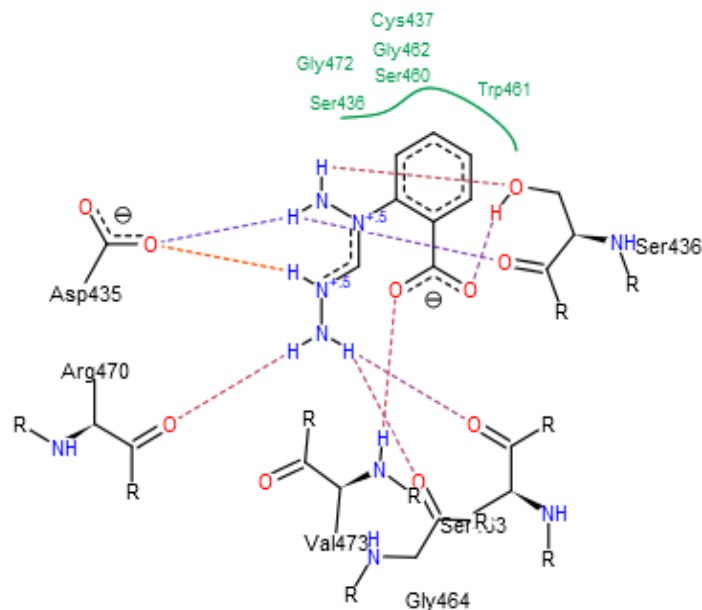
Le composé **S1** se présente comme meilleur inhibiteur de la TMPRSS2 obtenu dans cette étude avec un score de -41.68 kJ/mol. Comme le montre la figure N°22. Ce score s'explique par la présence de 9 liaisons hydrogènes dont 3 avec Asp345 et une avec Ser441. Il est important de souligner que ces deux résidus jouent un rôle crucial dans l'activité de la TMPRSS2 puisqu'ils font partie de la triade catalytique de cette enzyme [18]. Ces quatre liaisons hydrogènes ont été également constatées entre le composé de départ **GBS** et l'enzyme étudiée. La différence d'activité inhibitrice entre la GBS et le composé **S1**, en faveur de ce dernier, peut être expliquée par le nombre plus important de liaisons hydrogènes formées avec le site actif. En effet, le composé **S1** forme cinq autres liaisons hydrogènes dont trois avec Gly464 et deux avec Ser436. On note également l'importance des interactions hydrophobiques qui participent à la stabilité du complexe TMPRSS2-**S1**. Ces interactions font intervenir les résidus Ser436, Cys437, Thr459, Ser460, Trp461, Gly462 et Cys465 de l'enzyme (Figure 23).



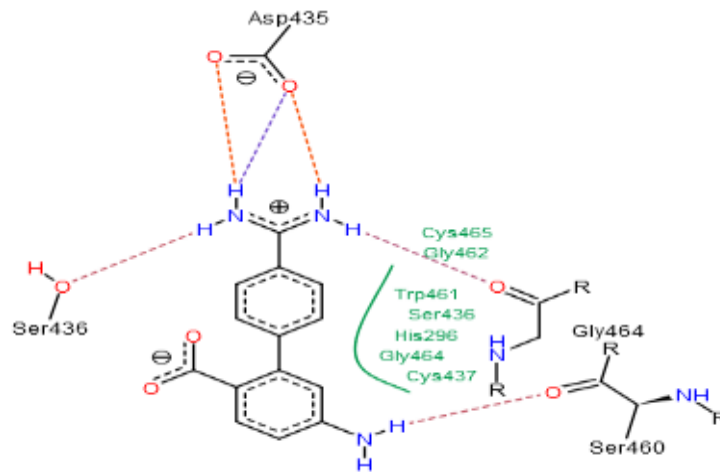


**Figure 23** : Représentation des interactions du complexe TMPRSS2-S1.

Le composé **S2**, à l'instar du composé **S1**, forme 9 liaisons hydrogènes avec le site actif étudié. Ces liaisons sont constatées avec les résidus suivants : 3 avec Ser436, 2 avec Asp435 et 1 liaison avec chacun des 4 résidus Ser463, Gly464, Arg470 et Val473. Le complexe TMPRSS2-S2 est également stabilisé par de nombreuses interactions hydrophobiques impliquant les résidus Ser436, Cys437, Ser460, Trp461, Gly462 et Gly472 (Figure 24).



**Figure 24** : Représentation des interactions du complexe TMPRSS2-S2.



**Figure 25** : Représentation des interactions du complexe TMPRSS2-S3.

Le composé **S3** est le troisième meilleur inhibiteur de la TMPRSS2 issu du criblage virtuel avec un score de -38.90 KJ/mol. L'analyse visuelle de son mode d'interaction avec l'enzyme révèle la présence de 6 liaisons hydrogènes. Trois d'entre elles sont formées avec Asp435 et une avec chacun des résidus Ser436, Ser460 et Gly464. De plus, ce composé forme plusieurs interactions hydrophobiques avec les résidus His296, Ser436, Cys437, Trp461, Gly462, Gly464 et Cys465 (Figure 25).

La nature, le nombre et le lieu des interactions du composé de départ GBS et les meilleurs similaires issus du criblage virtuel (**S1**, **S2** et **S3**) ont été déterminés et regroupés dans le tableau 4 suivant.

**Tableau N°04 :** Récapitulatif des interactions impliquées dans le site actif de la TMPRSS2 par le composé de départ **GBS** et les trois meilleurs similaires **S1**, **S2** et **S3**.

	<b>GBS</b>	<b>SIMILAR1</b> N°151443403	<b>SIMILAR2</b> N°53781906	<b>SIMILAR3</b> N°148524656
<b>Acide Aminé</b>	$\Delta G = - 24,1703$ kJ/mol	$\Delta G = - 41.6807$ kJ/mol	$\Delta G = - 41.5802$ kJ/mol	$\Delta G = - 38.9013$ kJ/mol
His 296				HP
<b>Asp 435</b>	<b>3 H</b>	<b>3 H</b>	<b>2 H</b>	<b>3 H</b>
<b>Ser 436</b>	<b>HP</b>	<b>2 H + HP</b>	<b>3 H + HP</b>	<b>1 H + HP</b>
<b>Cys 437</b>	<b>HP</b>	<b>HP</b>	<b>HP</b>	<b>HP</b>
Gln 438	HP			
Gly 439	1 H			
Ser 441	1 H + HP	1 H		
Thr 459		HP		
Ser 460		HP	HP	1 H
<b>Trp 461</b>	<b>HP</b>	<b>HP</b>	<b>HP</b>	<b>HP</b>
<b>Gly 462</b>	<b>HP</b>	<b>HP</b>	<b>HP</b>	<b>HP</b>
Ser 463			1 H	
<b>Gly 464</b>		<b>3 H</b>	<b>1 H</b>	<b>1 H + HP</b>
Cys 465	HP	HP		HP
Arg 470			1 H	
Gly 472			HP	
Val 473			1 H	
<b>Total</b>	<b>4 H + 7 HP</b>	<b>9 H + 7 HP</b>	<b>9 H + 6 HP</b>	<b>6 H + 7 HP</b>

**H : liaison hydrogène**

**HP : interaction hydrophobique**

Afin de mettre en exergue les éléments susceptibles d'expliquer le potentiel inhibiteur plus élevé que la GBS des composés **S1**, **S2** et **S3** étudiés plus haut, il nous a semblé judicieux de procéder à une étude comparative des interactions impliquées par chaque composé avec le site actif de TMPRSS2 en les regroupant dans le tableau 4 précédent. Il ressort de ce tableau que le composé de départ **GBS** ainsi que les trois meilleurs similaires **S1**, **S2** et **S3** inhibent le site actif de la TMPRSS2 en formant trois liaisons hydrogène particulières avec le résidu Asp435. À titre de rappel, ce dernier est l'un des acides aminés formant la triade catalytique de l'enzyme. On constate également que les résidus Ser 436, Cys 437, Trp 461 et Gly 462 semblent jouer un rôle crucial dans la stabilité des inhibiteurs au sein du site actif de l'enzyme puisque tous les composés étudiés forment des interactions hydrophobiques impliquant les acides aminés précités.

Il se dégage également de ce tableau que relativement à la **GBS**, le nombre plus important de liaisons hydrogènes et d'interactions hydrophobiques qu'impliquent les composés **S1**, **S2** et **S3** à l'égard du site actif leur confère une meilleure stabilité et par conséquent une meilleure activité inhibitrice et un meilleur score de docking bien entendu.

#### 4. Prédiction des paramètres pharmacologiques

Les composés les plus prometteurs de notre travail ont fait l'objet d'une étude prédictive de leurs propriétés physicochimiques, pharmacocinétiques et de toxicité potentielle. À l'aide de pkCSM (<http://biosig.unimelb.edu.au/pkcsm/>). La Nafamostat ; médicament déjà commercialisé comme anticoagulant et pour traiter les pancréatites par inhibition de la TMPRSS 2 [29] ; a été choisi comme standard. Les résultats obtenus sont représentés dans le tableau 5.

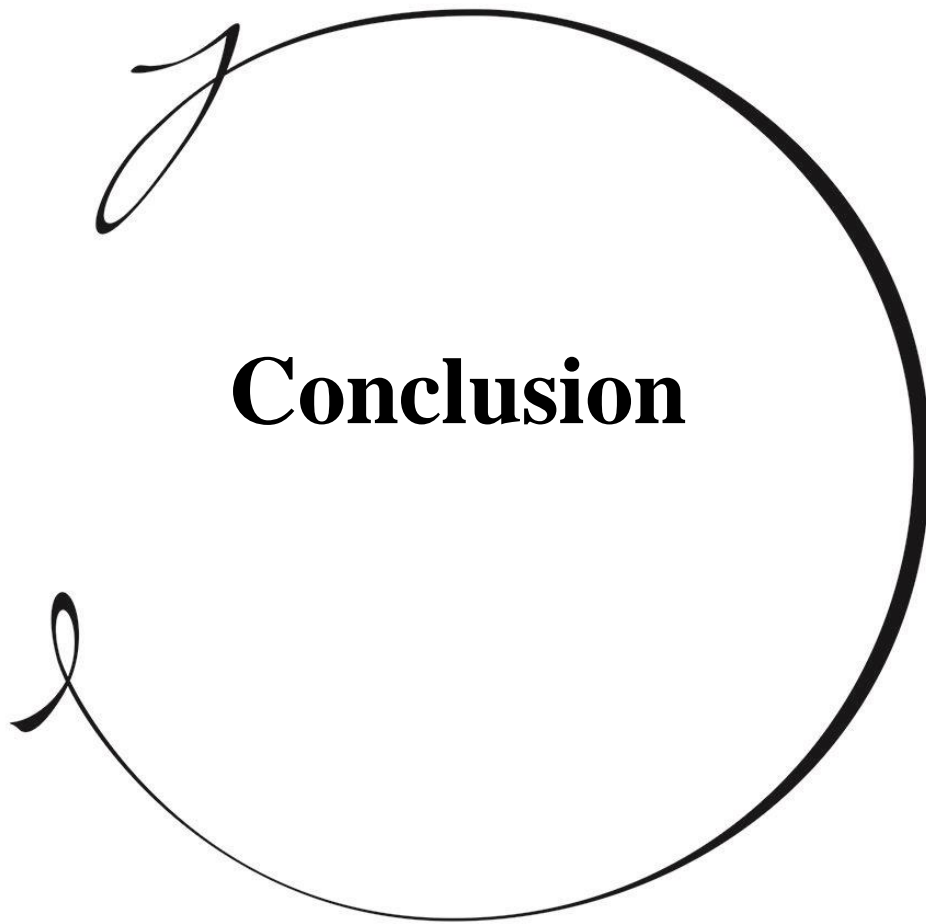
**Tableau N°05 :** Propriétés physicochimiques, pharmacocinétiques et toxicologiques prédites des composés **S1**, **S2** et **S3** ainsi que la Nafamostat.

Propriétés	Nafamostat	S1	S2	S3
Poids moléculaire	347.378	220.192	347.378	195.202
Liaisons flexibles	4	3	4	3
Donneurs d'hydrogènes	4	3	5	4
Accepteur d'hydrogène	4	3	4	3
Log P	2.24797	1.2315	2.39397	-0.6059
TPSA	149.14	89.826	148.821	80.392
Solubilité dans l'eau	-2.973	-2.804	-2.892	-2.005
Absorption intestinale	75.39	53.179	53.069	43.151
Inhibiteur de CYP1A2	Yes	No	No	No
Inhibiteur de CYP2C19	No	No	No	No
Inhibiteur de CYP2C9	No	No	No	No
Inhibiteur de CYP2D6	No	No	No	No
Inhibiteur de CYP3A4	No	No	No	No
Toxicité AMES	Yes	Yes	No	No
Inhibiteur de herg I	No	No	No	No
Inhibiteur de herg II	Yes	No	No	No
Hépatotoxicité	No	No	No	No
Sensibilisation cutanée	No	No	No	No

Il ressort de ce tableau que tous ces composés respectent la règle de Lipinski. De plus, les composés **S1**, **S3** ainsi que le standard respectent également la règle de Veber ce qui indique qu'ils peuvent être administrés par voie orale sans poser de problèmes. De plus, avec des valeurs comparables de leur solubilité dans l'eau et de leur perméabilité gastro-intestinale, les composés **S1**, **S2** et **S3** ainsi que le standard peuvent traverser facilement le tractus gastro-intestinal pour atteindre la circulation sanguine. Ces trois similaires n'ont présenté aucun effet inhibiteur potentiel à l'égard des différents cytochromes P450 et donc pas d'interactions médicamenteuses. Il est utile de souligner que les cytochromes P450 sont responsables du métabolisme de la plupart des médicaments au niveau du foie.

Il se dégage également de ce tableau que les composés **S2** et **S3** n'ont présenté aucun pouvoir mutagène en se basant sur le test d'AMES, ni des effets hépatotoxiques ou de sensibilisation cutanée. De plus, ces composés ne présentent pas un effet sur les gènes hERG dont l'inhibition pourrait provoquer des fibrillations cardiaques.

Il est à souligner que l'effet mutagène potentiel du composé **S1** en se basant sur le test d'AMES peut être corrigé lors de l'optimisation de ce composé.



# **Conclusion**

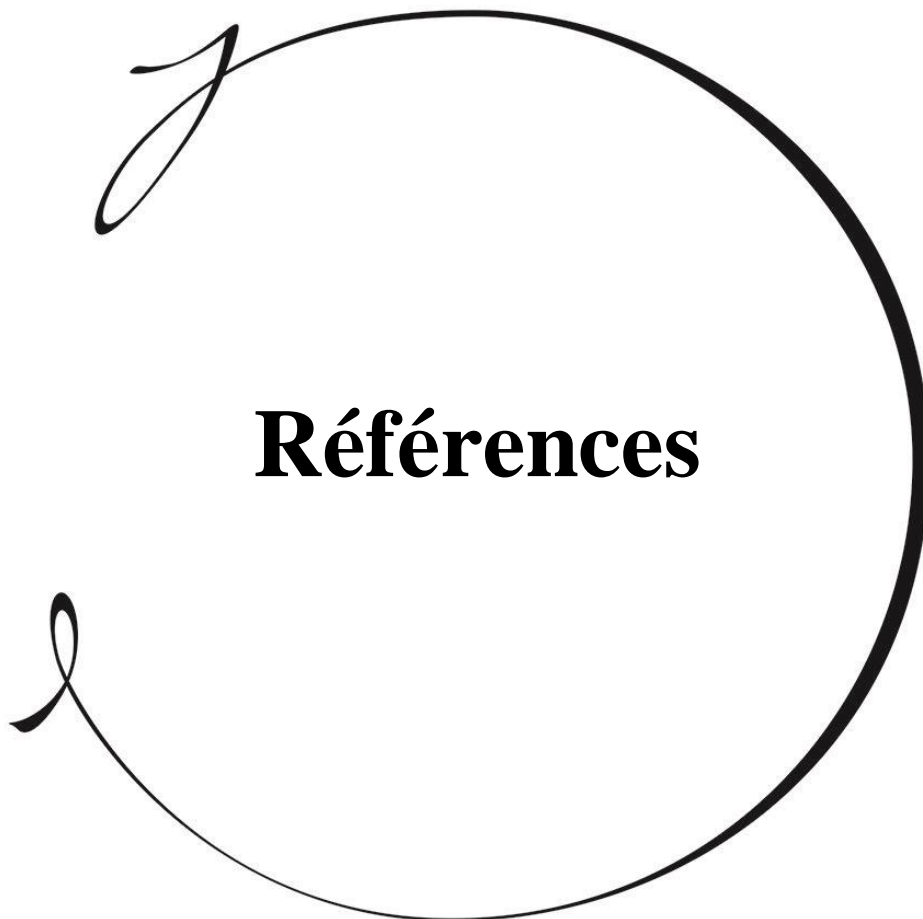
Dans ce travail, notre objectif était la connaissance et la maîtrise des outils essentiels de la bioinformatique en général et du docking moléculaire en particulier et ce afin de proposer de nouveaux inhibiteurs de la TMPRSS2 pour lutter contre la maladie COVID 19.

Au préalable, nous avons commencé par tester la fiabilité du programme FlexX par RMSD. Ce test a été appliqué sur 100 complexes protéine-ligand tirés arbitrairement de la PDB. Ce test a été suivi par une analyse visuelle de la superposition de la pose d'un ligand simulée vis-à-vis de sa conformation expérimentale de référence. Avec 63% des valeurs de RMSD inférieurs à 2Å, ainsi qu'une bonne superposition entre la géométrie du ligand calculée par FlexX et celle obtenue expérimentalement, nous pouvons conclure que ce programme est fiable et peut être utilisé sans trop risque d'erreurs pour étudier *in silico* les mécanismes d'inhibition de la TMPRSS2.

Dans la perspective de proposer nouveaux inhibiteurs plus puissants de la TMPRSS2, le composé **GBS** a été pris comme structure de départ. Avec un taux de similarité de 80 %, la PubChem nous a proposé une collection de 13521 similaires chimiques. Le criblage virtuel de cette collection de similaires chimiques envers le site actif étudié fait ressortir 590 composés ayant une énergie d'interaction bien meilleure que celle du composé de départ soit -24,1703 kJ/mol. Les composés **S1**, **S2** et **S3** se présentent comme meilleurs inhibiteurs de la TMPRSS2 avec des scores respectifs de -41.68, -41.58 et -38.9 KJ/mol. L'analyse visuelle du mode d'interaction de ces composés à l'égard de l'enzyme explique au mieux leur puissant effet inhibiteur. En effet, la formation de trois liaisons hydrogène avec l'Asp435, un des résidus de la triade catalytique de l'enzyme, confère aux composés **S1**, **S2** et **S3** plus de stabilité au sein du site actif et par conséquent une meilleure activité inhibitrice.

Enfin, l'étude des propriétés physicochimiques, pharmacocinétiques et de toxicité potentielle nous renseigne positivement sur les propriétés ADMET de ces composés qui se présentent comme nouveaux inhibiteurs potentiellement actifs vis-à-vis de la TMPRSS2.

Il conviendrait dans les perspectives d'avenir de tester *in vitro* et/ou *in vivo* l'activité biologique des composés **S1**, **S2** et **S3** pour compléter les résultats théoriques et vérifier l'efficacité de l'approche *in silico*.



# **Références**



## Références

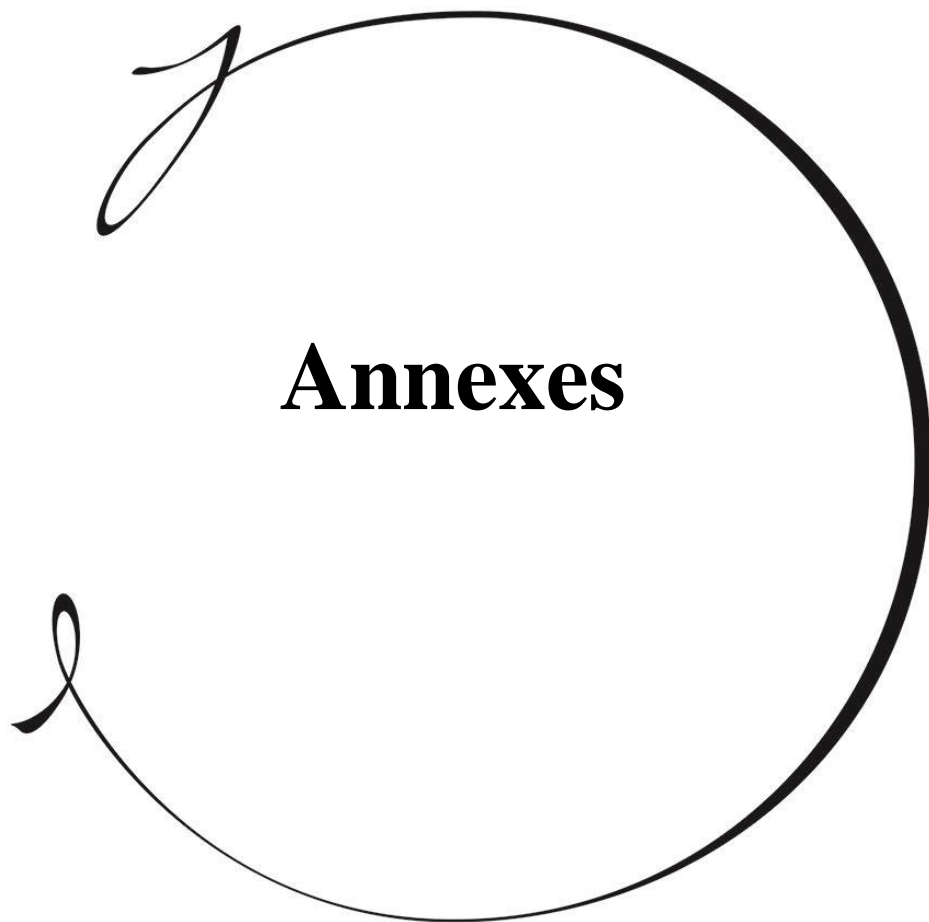
- [1] Adachi S, Koma T, Doi N, Nomaguchi M, Adachi A. Commentary: Origin and evolution of pathogenic coronaviruses. *Front Immunol.* 2020;11:811. doi:10.3389/fimmu.2020.00811
- [2] Site web 1: <https://www.coronavirus-statistiques.com>. Consulté le: [16/09/2021].
- [3] Baughn LB, Sharma N, Elhaik E, Sekulic A, Bryce AH, Fonseca R. Targeting TMPRSS2 in SARS-CoV-2 Infection. *Mayo Clinic Proceedings.* 2020;95(9):1989-1999. doi:10.1016/j.mayocp.2020.06.018
- [4] Ait Addi R, Benksim A, Amine M, Cherkaoui M. COVID-19 Outbreak and Perspective in Morocco. *Electron J Gen Med.* 2020;17(4):em204. doi:10.29333/ejgm/7857
- [5] Xu J, Zhao S, Teng T, et al. Systematic Comparison of Two Animal-to-Human Transmitted Human Coronaviruses: SARS-CoV-2 and SARS-CoV. *Viruses.* 2020;12(2):244. doi:10.3390/v12020244
- [6] Kannan S, Shaik Syed Ali P, Sheeza A, Hemalatha K. COVID-19 (Novel Coronavirus 2019) – recent trends. *European Review for Medical and Pharmacological Sciences.* 2020;24(4):2006-2011. doi:10.26355/eurrev\_202002\_20378
- [7] Sun J, He W-T, Wang L, et al. COVID-19: Epidemiology, Evolution, and Cross-Disciplinary Perspectives. *Trends in Molecular Medicine.* 2020;26(5):483-495. doi:10.1016/j.molmed.2020.02.008
- [8] Site web 2 : <https://www.afro.who.int>. Consulté le: [16/09/2021].
- [9] Huang C, Wang Y, Li X, et al. Clinical features of patients infected with 2019 novel coronavirus in Wuhan, China. *The Lancet.* 2020;395(10223):497-506. doi:10.1016/S0140-6736(20)30183-5
- [10] Guan W, Ni Z, Hu Y, et al. Clinical Characteristics of Coronavirus Disease 2019 in China. *N Engl J Med.* 2020;382(18):1708-1720. doi:10.1056/NEJMoa2002032
- [11] Li Q, Guan X, Wu P, et al. Early Transmission Dynamics in Wuhan, China, of Novel Coronavirus–Infected Pneumonia. *N Engl J Med.* 2020;382(13):1199-1207. doi:10.1056/NEJMoa2001316
- [12] Gebhard C, Regitz-Zagrosek V, Neuhauser HK, Morgan R, Klein SL. Impact of sex and gender on COVID-19 outcomes in Europe. *Biol Sex Differ.* 2020;11(1):29. doi:10.1186/s13293-020-00304-9
- [13] Del Rosso M, Fibbi G, Pucci M, et al. Multiple pathways of cell invasion are regulated by multiple families of serine proteases. *Clin Exp Metastasis.* 2002;19(3):193-207. doi:10.1023/a:1015531321445

- [14] Darmoul D, Gratio V, Devaud H, Lehy T, Laburthe M. Aberrant expression and activation of the thrombin receptor protease-activated receptor-1 induces cell proliferation and motility in human colon cancer cells. *Am J Pathol.* 2003;162(5):1503-1513. doi:10.1016/S0002-9440(10)64283-6
- [15] Hooper JD, Clements JA, Quigley JP, Antalis TM. Type II Transmembrane Serine Proteases. *Journal of Biological Chemistry.* 2001;276(2):857-860. doi:10.1074/jbc.R000020200
- [16] Cocks TM, Moffatt JD. Protease-activated receptors: sentries for inflammation? *Trends Pharmacol Sci.* 2000;21(3):103-108. doi:10.1016/s0165-6147(99)01440-6
- [17] Youngwoo Park, TMPRSS2 (transmembrane protease, serine 2), Therapeutic Antibody Research Center, Korea Research Institute of Bioscience, Biotechnology, Daejeon, Korea, 2010-03
- [18] Hempel T, Raich L, Olsson S, et al. Molecular mechanism of inhibiting the SARS-CoV-2 cell entry facilitator TMPRSS2 with camostat and nafamostat. *Chem Sci.* 2021;12(3):983-992. doi:10.1039/D0SC05064D
- [19] Grosdidier A. Conception d'un logiciel de docking et applications dans la recherche de nouvelles molécules actives. Thèse de doctorat en pharmacie. Grenoble : Université Joseph Fourier. France. 2007. 90 p.
- [20] Boucherit H, Chikhi A, Bensegueni A, Merzoug A, Mokrani EH. L'AMARRAGE MOLECULAIRE : UNE NOUVELLE APPROCHE POUR LUTTER CONTRE LE DEVELOPPEMENT DE LA TUBERCULOSE. 2013;7:18.
- [21] Boucherit H. Etude théorique des interactions intervenant dans l'inhibition de la méthionine aminopeptidase de mycobacteriumtuberculosis par diverses molécules. Thèse de magister en biochimie. Constantine : Université Mentouri Constantine. Algérie. 2012. 71 p.
- [22] Leach A.R. *Molecular modelling:Principles and application.* 2nd ed. Prentice Hall; 2001.582
- [23] Mokrani E. H. Contribution à l'amélioration de l'activité biologique des inhibiteurs de la dipeptidyl-peptidase 4 dans le diabète de type 2 par simulation informatique. Thèse de magister d'université : Technologie des explorations biochimiques. Constantine : Université Mentouri Constantine. Algérie. 2012. 75p.
- [24] Rarey M, Kramer B, Lengauer T, Klebe G. A fast flexible docking method using an incremental construction algorithm. *J Mol Biol.* 1996;261(3):470-489. doi:10.1006/jmbi.1996.0477
- [25] Humphrey W, Dalke A, Schulten K. VMD: Visual molecular dynamics. *Journal of Molecular Graphics.* 1996;14(1):33-38. doi:10.1016/0263-7855(96)00018-5
- [26] Veber DF, Johnson SR, Cheng H-Y, Smith BR, Ward KW, Kopple KD. Molecular properties that influence the oral bioavailability of drug candidates. *J Med Chem.* 2002;45(12):2615-2623. doi:10.1021/jm020017n

[27] Lipinski CA, Lombardo F, Dominy BW, Feeney PJ. Experimental and computational approaches to estimate solubility and permeability in drug discovery and development settings. *Adv Drug Deliv Rev.* 2001;46(1-3):3-26. doi:10.1016/s0169-409x(00)00129-0

[28] Bell EW, Zhang Y. DockRMSD: an open-source tool for atom mapping and RMSD calculation of symmetric molecules through graph isomorphism. *J Cheminform.* 2019;11(1):40. doi:10.1186/s13321-019-0362-7

[29] Site web 3: <https://go.drugbank.com/drugs/DB12598>. Consulté le: [16/09/2021].



# **Annexes**

**Annexe 01** : Liste des 100 complexes utilisés pour tester la fiabilité du protocole de docking.

Enzyme code	Inhibitor code	RMSD (Å)	Enzyme code	Inhibitor code	RMSD (Å)	Enzyme code	Inhibitor code	RMSD (Å)
1AH3	NAP	1.22	2R4B	GW7	1.37	4JIA	1K3	1.35
1AGW	SU2	1.02	2RJP	886	1.48	4LAU	W8X	0.78
1AIM	ZYA	1.13	2RJQ	BAT	2.50	4LB3	M15	0.99
1B6P	P17	3.58	3B8Z	294	1.08	4MP7	PFT	0.51
1BZS	BSI	0.99	3D7D	FBD	1.78	4PNC	7NP	3.21
1DIF	BME	3.36	3E64	5B3	1.68	4R68	W31	2.71
1DTT	FTC	4.21	3E9K	PLP	1.05	4RNV	HBA	1.01
1EB3	ANP	2.21	3EYG	MI1	0.97	4URK	A82	1.10
1EBW	BEI	4.46	3K5G	BJC	2.99	4XRX	42V	7.90
1G36	R11	1.08	3LFQ	A28	1.43	4ZPG	4QF	1.92
1GYM	MYG	3.33	3LJT	LA3	1.73	5BEV	4VG	0.77
1H22	E10	2.66	3NQ1	KOJ	3.47	5EAP	5MO	0.72
1H23	E12	2.24	3PXZ	JWS	0.64	5F0C	5TE	0.96
1IJR	CC0	1.81	3QTU	X44	1.47	5I3A	HQE	0.90
1JS3	PLP	1.46	3QTZ	X42	1.89	5IKQ	JMS	0.80
1K1L	FD3	4.72	3QZF	X66	5.08	5IKQ	JMS	0.63
1K1O	IGN	1.37	3R83	Z14	1.34	5IKR	ID8	0.49
1NDV	FR0	2.83	3R8Z	Z63	4.51	5PZQ	93V	0.98
1PRO	188	3.34	3ROY	22Z	6.87	5TOW	ADN	3.87
1RTI	HEF	1.21	3TIZ	3TI	1.09	5UT3	IK1	3.25
1T40	ID5	0.70	3ULI	1N3	6.42	5WEV	9ZS	0.55
1YK7	NBL	1.26	3VLL	SHA	3.22	5WQK	7NC	0.93
1Z3N	3NA	0.67	3VP2	BPO	1.60	6ESJ	PRM	2.53
1ZS0	EIN	1.43	3WI2	P98	0.50	6IMB	AH9	0.70
2AN5	SAH	0.79	4ACH	KDI	3.06	6MDB	JE4	1.74
2AUX	CT1	5.83	4BBE	3O4	0.66	6OA0	M1D	6.60
2BKZ	SBC	1.39	4EK4	1CK	0.51	6OHS	MJY	1.97
2C69	CT8	1.61	4FKP	LS5	1.01	6Q4H	HGH	1.68
2FGI	PD1	2.36	4GID	OGH	2.74	6Q4I	HGK	1.34
2FS9	C4A	1.79	4GLW	NMN	4.64	6QAB	HUQ	3.08
2IVS	ACK	0.63	4GLX	OX5	0.52	6X80	P8E	5.75
2J5F	DJK	1.51	4IGS	64I	0.61	7MEQ	GBS	0.84
2OPH	277	4.33	4IVA	1J5	4.16			
2PVF	ACP	0.89	4JBS	P52	4.24			





















PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
138334007	-18.2921	63185155	-18.2083	152044662	-18.1035	79841562	-18.0086	14480038	-17.9248
64051823	-18.2908	88234082	-18.2076	150042535	-18.0987	151270913	-18.0084	107796231	-17.9230
54442305	-18.2885	153744750	-18.2038	181825	-18.0985	71748777	-18.0073	153728099	-17.9229
114806260	-18.2852	114002126	-18.2028	40427037	-18.0967	23207405	-18.0040	107795027	-17.9202
146533563	-18.2847	152936908	-18.2019	21191132	-18.0962	18071326	-18.0039	803774	-17.9201
123906107	-18.2845	3811199	-18.2015	145643696	-18.0952	92285089	-18.0037	20413732	-17.9191
19858141	-18.2821	104328468	-18.2004	107793054	-18.0938	60675261	-18.0032	75568	-17.9187
81080521	-18.2816	53834607	-18.1970	90267003	-18.0929	107796229	-18.0031	129142078	-17.9154
80396273	-18.2814	134592540	-18.1963	69979942	-18.0916	10061111	-18.0003	54222371	-17.9099
154142672	-18.2767	114420209	-18.1926	146609536	-18.0894	137270364	-17.9966	150476420	-17.9074
57824512	-18.2765	114805208	-18.1919	117555256	-18.0877	20258191	-17.9959	890959	-17.9059
141650651	-18.2765	103868907	-18.1912	103871821	-18.0859	236021	-17.9946	136791085	-17.9058
140613484	-18.2765	61827410	-18.1896	115872578	-18.0854	21982858	-17.9944	138334622	-17.9049
141650658	-18.2758	113342154	-18.1868	85675833	-18.0830	79838369	-17.9940	67831707	-17.9044
140613485	-18.2758	152308515	-18.1849	5072797	-18.0776	107792971	-17.9939	85555930	-17.9041
134593717	-18.2739	81087876	-18.1840	61713883	-18.0765	103869106	-17.9938	23051743	-17.9039
9877699	-18.2731	18464540	-18.1806	150988871	-18.0720	61157368	-17.9924	141514469	-17.9012
62711286	-18.2731	66696570	-18.1795	54574319	-18.0703	63117125	-17.9902	147207260	-17.8998
154400492	-18.2708	43774364	-18.1757	62705827	-18.0691	55265577	-17.9896	150392823	-17.8991
153552245	-18.2699	18936120	-18.1750	69782636	-18.0679	155722385	-17.9885	82319475	-17.8976
53827976	-18.2691	62232015	-18.1741	152265205	-18.0637	141085386	-17.9874	69594108	-17.8957
148362914	-18.2673	83022548	-18.1730	20273907	-18.0636	107792984	-17.9837	695109	-17.8950
131999244	-18.2669	5325560	-18.1698	66008362	-18.0629	2735910	-17.9821	765581	-17.8948
5368180	-18.2665	116306017	-18.1697	149630481	-18.0626	79837689	-17.9804	68444044	-17.8922
82292989	-18.2652	151467942	-18.1693	154383542	-18.0618	61193848	-17.9802	410067	-17.8919
127258220	-18.2635	84665458	-18.1684	10559683	-18.0611	150441885	-17.9791	67568228	-17.8918
151957673	-18.2633	790073	-18.1681	131024053	-18.0600	88553338	-17.9786	18762618	-17.8904
141475903	-18.2614	5338127	-18.1681	130756650	-18.0598	407230	-17.9785	57053547	-17.8892
138332764	-18.2594	107793164	-18.1641	154495674	-18.0574	23186343	-17.9777	90888772	-17.8877
154079289	-18.2589	76322877	-18.1628	45089770	-18.0566	59595824	-17.9760	20413726	-17.8876
129850994	-18.2565	63189851	-18.1619	151531150	-18.0562	64051407	-17.9735	79840308	-17.8865
139984891	-18.2562	15629939	-18.1617	101154337	-18.0558	86306535	-17.9686	113352853	-17.8861
580851	-18.2498	21032534	-18.1611	61266433	-18.0552	412044	-17.9660	71936328	-17.8837
90106442	-18.2497	67661869	-18.1601	144469289	-18.0532	66690543	-17.9658	103847503	-17.8834
136442061	-18.2482	161267	-18.1598	107795701	-18.0510	136324421	-17.9646	18350499	-17.8818
40462747	-18.2456	130865205	-18.1575	64553876	-18.0504	83955748	-17.9637	9920608	-17.8770
54279489	-18.2443	2735224	-18.1550	82539784	-18.0499	79841660	-17.9609	18795181	-17.8753
69016985	-18.2437	114805209	-18.1459	132196128	-18.0495	151057649	-17.9568	79838068	-17.8719
61254674	-18.2429	6931724	-18.1438	65350214	-18.0459	135589324	-17.9567	28788153	-17.8711
152373693	-18.2394	90980894	-18.1423	132199964	-18.0436	22218853	-17.9561	61323459	-17.8681
57061989	-18.2390	107986421	-18.1423	18173276	-18.0396	151619181	-17.9556	1361836	-17.8660
91407181	-18.2376	322395	-18.1397	14483361	-18.0390	98043476	-17.9552	329629	-17.8588
118007731	-18.2372	68437153	-18.1374	154090026	-18.0384	79811567	-17.9550	108823331	-17.8583
76851362	-18.2366	104934335	-18.1349	12089	-18.0368	135231494	-17.9523	58745300	-17.8567
845997	-18.2363	58851452	-18.1326	116082015	-18.0367	21474878	-17.9503	114805880	-17.8564
84760837	-18.2354	72444009	-18.1326	54047534	-18.0357	23372406	-17.9497	130727936	-17.8561
137068989	-18.2341	129985506	-18.1318	150644753	-18.0354	45089080	-17.9483	121331525	-17.8561
71373102	-18.2328	65970536	-18.1312	4086074	-18.0346	88215459	-17.9464	23055620	-17.8530
10703705	-18.2326	141763522	-18.1279	138332799	-18.0333	63189986	-17.9403	61455841	-17.8529
12314625	-18.2320	88120808	-18.1274	21888751	-18.0332	43358881	-17.9397	11276873	-17.8522
150362945	-18.2303	136791088	-18.1270	89709639	-18.0319	150505842	-17.9382	20413693	-17.8503
3580758	-18.2290	114805879	-18.1207	64688475	-18.0277	152549940	-17.9366	149447051	-17.8495
131066379	-18.2254	82796357	-18.1196	66660447	-18.0259	88821000	-17.9349	67569900	-17.8494
115341272	-18.2248	114461975	-18.1183	82292985	-18.0250	12724725	-17.9322	145801838	-17.8492
23207406	-18.2242	149376423	-18.1170	101991025	-18.0249	81080639	-17.9303	64318409	-17.8470
23616377	-18.2235	147432212	-18.1151	104698603	-18.0188	283841	-17.9302	70363316	-17.8458
130217250	-18.2190	59128732	-18.1132	146831480	-18.0155	130921122	-17.9295	131863592	-17.8456
87558650	-18.2180	66006610	-18.1115	61827613	-18.0143	155587073	-17.9294	152350634	-17.8442
11355852	-18.2140	10610225	-18.1113	136085930	-18.0142	82785687	-17.9266	226575	-17.8426
87694969	-18.2118	66690701	-18.1087	149474700	-18.0123	21140197	-17.9264	63190279	-17.8390
75481662	-18.2110	960135	-18.1071	153905401	-18.0093	116216433	-17.9262	141802681	-17.8354
104698737	-18.2100	134943609	-18.1053	154206081	-18.0090	65464912	-17.9258	88201924	-17.8345

PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
135451377	-17.8338	103791371	-17.7629	44828699	-17.6842	61826427	-17.6010	1483390	-17.5203
85647161	-17.8310	79689799	-17.7622	71151371	-17.6835	63187743	-17.6007	55107984	-17.5196
20976363	-17.8289	110193652	-17.7617	105494729	-17.6831	130642991	-17.5984	82536620	-17.5190
104500846	-17.8274	63189985	-17.7597	135971982	-17.6816	146658526	-17.5977	21830443	-17.5180
129853652	-17.8272	131842766	-17.7574	11184397	-17.6812	18372000	-17.5976	145448964	-17.5157
122211292	-17.8254	6408859	-17.7570	61703961	-17.6759	148642722	-17.5976	142597276	-17.5146
118846201	-17.8254	14332035	-17.7558	86041108	-17.6743	151881553	-17.5934	82182308	-17.5140
23559347	-17.8209	116113189	-17.7540	88539769	-17.6731	12076	-17.5933	134649707	-17.5137
308678	-17.8206	69300211	-17.7522	153711560	-17.6720	137274076	-17.5917	81169522	-17.5128
62710434	-17.8203	88124778	-17.7520	67634342	-17.6718	152110096	-17.5914	103869147	-17.5113
150510197	-17.8189	141559018	-17.7517	990471	-17.6712	117057	-17.5903	43714036	-17.5107
62709578	-17.8165	107795717	-17.7512	114463050	-17.6670	152767170	-17.5897	2343454	-17.5097
103868738	-17.8127	71334175	-17.7509	68214018	-17.6652	5113024	-17.5877	148348050	-17.5095
20390753	-17.8121	21558811	-17.7508	53353091	-17.6643	69326241	-17.5814	88539668	-17.5094
118142803	-17.8113	104698270	-17.7494	87322480	-17.6636	150319114	-17.5807	45089630	-17.5092
19977260	-17.8111	99699780	-17.7494	58768572	-17.6626	134356704	-17.5799	6478577	-17.5083
36689892	-17.8090	70004297	-17.7489	22139973	-17.6623	87390441	-17.5742	82785522	-17.5082
62938722	-17.8044	2755984	-17.7459	11287960	-17.6616	3257941	-17.5731	153577552	-17.5076
63189939	-17.8039	61827409	-17.7457	63212724	-17.6609	45089744	-17.5719	2063509	-17.5066
146077624	-17.8028	94007748	-17.7457	82784889	-17.6602	68274176	-17.5708	9013118	-17.5036
147758547	-17.8019	42220626	-17.7453	63189774	-17.6599	122715616	-17.5702	138332789	-17.5019
146489837	-17.8000	150159436	-17.7431	141526380	-17.6563	749385	-17.5699	53430649	-17.5008
68605061	-17.7986	82785286	-17.7410	148819348	-17.6553	282797	-17.5693	22956764	-17.5007
113636759	-17.7982	86341425	-17.7409	107793178	-17.6551	136324102	-17.5688	87323041	-17.5005
82785864	-17.7979	871516	-17.7408	91497410	-17.6500	135526749	-17.5664	135479143	-17.5003
46912041	-17.7953	66511644	-17.7387	22407017	-17.6493	23524792	-17.5661	89071282	-17.4996
152287218	-17.7948	20258190	-17.7383	86188996	-17.6487	21133442	-17.5659	66386647	-17.4994
88381645	-17.7931	135628028	-17.7370	62230356	-17.6464	21123326	-17.5656	66692931	-17.4992
136416266	-17.7926	135502739	-17.7370	88897395	-17.6411	83410201	-17.5648	144718492	-17.4990
136236058	-17.7926	1133431	-17.7367	2132508	-17.6353	124750318	-17.5612	82862628	-17.4978
82296799	-17.7911	13041370	-17.7345	151266469	-17.6351	142241843	-17.5583	143846014	-17.4974
141305926	-17.7901	2440279	-17.7293	506085	-17.6337	21486333	-17.5563	151337058	-17.4965
152570044	-17.7873	68295034	-17.7290	10013685	-17.6321	107792570	-17.5557	91883893	-17.4959
21941653	-17.7871	106331129	-17.7275	148621064	-17.6317	147955461	-17.5554	818473	-17.4956
765496	-17.7869	137150683	-17.7263	143959719	-17.6309	151274351	-17.5523	89139383	-17.4952
14501377	-17.7853	43164828	-17.7231	20058595	-17.6299	104697996	-17.5519	139684604	-17.4952
55163652	-17.7846	79527632	-17.7201	136085938	-17.6287	121325007	-17.5497	101186324	-17.4904
54562276	-17.7819	82790964	-17.7197	60642989	-17.6253	141107249	-17.5453	118521482	-17.4900
155084299	-17.7808	82796638	-17.7194	88728438	-17.6253	385920	-17.5444	20036906	-17.4899
279183	-17.7806	57130550	-17.7193	18185344	-17.6242	149984913	-17.5436	65350109	-17.4886
7214742	-17.7802	141312191	-17.7178	147618193	-17.6230	151403117	-17.5435	672526	-17.4874
117062032	-17.7779	103869323	-17.7136	144176375	-17.6219	151652511	-17.5405	124298362	-17.4854
141831809	-17.7772	107793481	-17.7127	144368012	-17.6207	56646175	-17.5385	126654063	-17.4845
104698099	-17.7762	64049621	-17.7110	107795988	-17.6189	115022208	-17.5382	117928736	-17.4807
135041279	-17.7756	70372570	-17.7110	82289053	-17.6187	115485214	-17.5378	88129837	-17.4789
21083657	-17.7750	100983476	-17.7108	24729179	-17.6182	154107375	-17.5365	152489324	-17.4788
147889447	-17.7747	137429113	-17.7097	150291367	-17.6175	68656540	-17.5360	12341462	-17.4776
138334566	-17.7745	83382975	-17.7063	228071	-17.6169	84770246	-17.5346	1493817	-17.4760
82011492	-17.7744	121470801	-17.7059	152616982	-17.6167	58894692	-17.5335	131844537	-17.4755
62710608	-17.7738	139984917	-17.7053	6964699	-17.6150	91118606	-17.5324	138333542	-17.4752
30225396	-17.7724	65553186	-17.7040	102868222	-17.6133	138334881	-17.5314	84285071	-17.4747
148633430	-17.7721	80583585	-17.7031	129910194	-17.6126	152250238	-17.5311	561385	-17.4736
3645898	-17.7710	147048514	-17.7024	2309932	-17.6103	70130279	-17.5308	141996933	-17.4702
149964788	-17.7693	103847510	-17.7017	104693390	-17.6093	83016080	-17.5305	120204877	-17.4698
5054735	-17.7690	62938551	-17.7008	53690541	-17.6082	82292995	-17.5301	17915148	-17.4666
139469765	-17.7689	154303412	-17.6980	149836350	-17.6052	101642871	-17.5291	154440258	-17.4662
5617410	-17.7684	137015943	-17.6927	4534242	-17.6044	63187705	-17.5287	113588743	-17.4658
82289046	-17.7681	45073180	-17.6871	53946479	-17.6044	123399522	-17.5261	83955777	-17.4644
142497495	-17.7669	19169913	-17.6862	62711655	-17.6044	728115	-17.5233	62232207	-17.4642
63212640	-17.7660	150063643	-17.6862	53997700	-17.6043	149345809	-17.5221	102122353	-17.4640
79621699	-17.7652	22133422	-17.6852	138332697	-17.6029	53430745	-17.5210	17960296	-17.4632
82292975	-17.7641	151121555	-17.6852	140989171	-17.6012	138333689	-17.5204	58375549	-17.4622



PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
106097053	-17.4617	114002261	-17.3840	135401009	-17.3164	82320889	-17.2427	129652260	-17.1579
154193260	-17.4617	21628870	-17.3827	45089306	-17.3162	82796232	-17.2423	118603706	-17.1575
82320775	-17.4609	154267093	-17.3795	69530656	-17.3155	129675739	-17.2412	139981300	-17.1561
84285029	-17.4608	103791452	-17.3792	62230186	-17.3153	61359525	-17.2410	84673216	-17.1559
137186673	-17.4550	82786747	-17.3784	63116186	-17.3145	82539298	-17.2386	55211443	-17.1558
136230313	-17.4550	45089070	-17.3782	89222331	-17.3142	3055058	-17.2376	21325522	-17.1555
21947046	-17.4510	100983474	-17.3779	63538813	-17.3133	89029308	-17.2373	7045589	-17.1549
106636873	-17.4492	143475317	-17.3752	83017176	-17.3105	83026237	-17.2362	43173032	-17.1548
71335763	-17.4480	149665384	-17.3743	104698690	-17.3091	129406459	-17.2358	83024214	-17.1541
101741925	-17.4480	70621988	-17.3737	279168	-17.3087	14228130	-17.2350	148366379	-17.1531
59595800	-17.4464	115485184	-17.3734	84663202	-17.3072	144002365	-17.2340	139916216	-17.1519
91883365	-17.4458	520686	-17.3722	105551824	-17.3070	960515	-17.2339	53418348	-17.1470
63190191	-17.4450	103869194	-17.3719	85540932	-17.3067	18870667	-17.2338	19736774	-17.1445
63189984	-17.4430	153755429	-17.3713	43736160	-17.3057	138334552	-17.2288	86306391	-17.1413
18656759	-17.4423	61157739	-17.3708	153861600	-17.3053	739243	-17.2275	63116196	-17.1410
107795187	-17.4384	82096363	-17.3699	19699997	-17.3018	16460	-17.2268	103869115	-17.1397
79620012	-17.4367	3716028	-17.3689	135492482	-17.3007	22571866	-17.2237	136367204	-17.1370
150646525	-17.4366	53430245	-17.3669	151370306	-17.2985	59279115	-17.2221	134315771	-17.1359
107792832	-17.4316	20099567	-17.3662	134315770	-17.2965	141169106	-17.2167	54001876	-17.1354
118188615	-17.4305	150697439	-17.3662	135677766	-17.2965	22052443	-17.2148	66713816	-17.1354
67580776	-17.4297	139823774	-17.3644	65332857	-17.2954	80543687	-17.2148	65035080	-17.1353
64090492	-17.4295	16099346	-17.3640	57074924	-17.2935	106096903	-17.2136	131096657	-17.1352
155587069	-17.4292	49875511	-17.3626	104698672	-17.2932	6983491	-17.2111	129415723	-17.1347
129675407	-17.4284	63190427	-17.3624	104698210	-17.2931	138332700	-17.2080	154131329	-17.1328
21220450	-17.4278	23622510	-17.3622	150695942	-17.2930	135960633	-17.2066	68549347	-17.1326
107793187	-17.4277	145222915	-17.3614	57124970	-17.2919	82320456	-17.2058	69988993	-17.1312
87220869	-17.4273	151266470	-17.3595	82292997	-17.2899	61193752	-17.2049	58113753	-17.1298
150129941	-17.4268	87946836	-17.3593	17255353	-17.2881	34883005	-17.2045	137711615	-17.1297
116026587	-17.4255	9013147	-17.3582	43213302	-17.2855	125598017	-17.2045	17964999	-17.1294
115485222	-17.4212	150040493	-17.3576	60829275	-17.2853	149918847	-17.2043	136155793	-17.1265
63190302	-17.4202	43712195	-17.3572	17974662	-17.2846	63189881	-17.2029	82546549	-17.1258
153750102	-17.4199	91883364	-17.3571	18380477	-17.2789	141238710	-17.2004	91883363	-17.1257
83023231	-17.4182	91360493	-17.3570	62939376	-17.2769	61828582	-17.1972	115343508	-17.1257
138334570	-17.4154	57097403	-17.3568	136085928	-17.2767	7319941	-17.1961	69644783	-17.1256
308867	-17.4150	73432823	-17.3559	8191067	-17.2759	81139230	-17.1961	61983310	-17.1250
144229099	-17.4150	43212196	-17.3556	149937681	-17.2751	70183959	-17.1943	17947789	-17.1243
11311504	-17.4149	22313083	-17.3552	148445533	-17.2745	75537157	-17.1942	115407591	-17.1234
143194104	-17.4137	136972402	-17.3532	45089845	-17.2739	87895410	-17.1942	22139978	-17.1212
143194105	-17.4134	140088010	-17.3530	57268831	-17.2708	86340419	-17.1939	115485507	-17.1212
118993515	-17.4124	63949745	-17.3529	61828683	-17.2705	138332971	-17.1929	148851903	-17.1204
70132940	-17.4056	13079680	-17.3517	136315938	-17.2649	64005601	-17.1925	43714046	-17.1200
64049620	-17.4051	18371999	-17.3497	138334851	-17.2647	18965742	-17.1903	138334561	-17.1197
60195793	-17.4047	151942006	-17.3479	51396712	-17.2615	138334829	-17.1897	127502993	-17.1190
67560990	-17.4041	147861954	-17.3429	62922786	-17.2610	148766365	-17.1867	106237781	-17.1171
103847519	-17.4034	91873778	-17.3422	67513947	-17.2610	45072735	-17.1865	103791525	-17.1155
21364342	-17.4032	131238705	-17.3378	43139218	-17.2609	24160099	-17.1862	67514771	-17.1131
43132325	-17.4000	107793055	-17.3351	143641201	-17.2603	82289049	-17.1850	82287937	-17.1115
89881439	-17.3996	137183213	-17.3338	46839430	-17.2578	28783798	-17.1807	106177586	-17.1115
130548108	-17.3992	106345804	-17.3333	115485240	-17.2567	129203234	-17.1741	91883366	-17.1104
148318979	-17.3987	81466326	-17.3327	149623498	-17.2560	138333707	-17.1736	19763930	-17.1103
69425689	-17.3972	4744082	-17.3321	6937272	-17.2547	136908810	-17.1736	4606356	-17.1091
4352737	-17.3970	67621479	-17.3308	104698726	-17.2546	116214841	-17.1710	138334874	-17.1068
12515966	-17.3934	28784377	-17.3265	104698606	-17.2546	69348487	-17.1706	155580371	-17.1012
6951293	-17.3904	14858794	-17.3226	83391228	-17.2544	116026284	-17.1703	151726337	-17.1005
437800	-17.3892	91202779	-17.3206	152251099	-17.2542	83023912	-17.1700	114093920	-17.0994
45089752	-17.3877	64045147	-17.3202	70181812	-17.2535	61707211	-17.1633	154360113	-17.0984
103513282	-17.3871	107795153	-17.3199	17921342	-17.2527	138334603	-17.1620	82796596	-17.0937
103845872	-17.3864	118603737	-17.3199	115485145	-17.2524	2349095	-17.1618	140473962	-17.0926
24696798	-17.3858	152024539	-17.3197	62709962	-17.2521	146534132	-17.1606	10465243	-17.0917
151512579	-17.3850	67790609	-17.3194	82537820	-17.2460	20196154	-17.1599	150617964	-17.0879
61036368	-17.3847	3257942	-17.3173	96706461	-17.2460	141227665	-17.1588	88793601	-17.0850
79837502	-17.3843	19357518	-17.3171	67395503	-17.2441	136085937	-17.1582	38376	-17.0832

PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
54746218	-17.0790	22662656	-17.0202	144631717	-16.9622	137156419	-16.9067	153250191	-16.8459
148153998	-17.0788	107986369	-17.0191	282133	-16.9602	136231379	-16.9067	66713466	-16.8455
150508162	-17.0784	64319732	-17.0154	86593182	-16.9594	135448746	-16.9052	135962660	-16.8445
136452060	-17.0771	113421748	-17.0146	135473410	-16.9594	6413819	-16.9046	152013460	-16.8445
133613500	-17.0740	83024213	-17.0137	88824049	-16.9589	69287241	-16.9031	76973010	-16.8437
22751591	-17.0731	62049350	-17.0122	67629812	-16.9579	61156660	-16.9028	113637901	-16.8424
61575285	-17.0715	12465043	-17.0116	122707214	-16.9572	24704391	-16.8998	79840392	-16.8413
62231540	-17.0703	143148765	-17.0106	118834899	-16.9564	150180604	-16.8973	130713300	-16.8406
23005199	-17.0689	19977286	-17.0104	115485144	-16.9558	123264842	-16.8946	50924534	-16.8397
117876045	-17.0681	45121120	-17.0063	137949025	-16.9529	21702981	-16.8942	19609459	-16.8392
68732425	-17.0677	64090877	-17.0061	138696621	-16.9525	84106607	-16.8940	76973290	-16.8392
131012409	-17.0665	5212347	-17.0060	82289050	-16.9519	61320992	-16.8939	7419	-16.8384
17269937	-17.0649	21402875	-17.0052	63189853	-16.9517	4402087	-16.8931	63190426	-16.8375
61322705	-17.0645	143158506	-17.0037	150818950	-16.9505	152534142	-16.8929	50924536	-16.8369
116216431	-17.0626	20196104	-17.0035	61828192	-16.9490	68967473	-16.8924	151365317	-16.8362
135417399	-17.0616	88747317	-16.9992	150150722	-16.9486	137522417	-16.8914	275743	-16.8357
12515967	-17.0609	91883414	-16.9987	80583655	-16.9483	11231051	-16.8891	140088891	-16.8356
153888356	-17.0603	154166295	-16.9980	62709762	-16.9482	28686753	-16.8886	69167877	-16.8354
88267695	-17.0590	63012243	-16.9944	55163258	-16.9481	64494235	-16.8874	150897051	-16.8354
61845862	-17.0581	85647162	-16.9940	114617473	-16.9475	70342	-16.8856	58497936	-16.8351
413139	-17.0565	4097018	-16.9929	55178099	-16.9471	138334588	-16.8841	19786729	-16.8345
106232994	-17.0545	144390715	-16.9929	823368	-16.9461	54089389	-16.8811	103791469	-16.8345
114807100	-17.0536	3014145	-16.9928	90949260	-16.9451	103869188	-16.8790	54706136	-16.8341
148499446	-17.0536	143214489	-16.9927	20331000	-16.9450	107795012	-16.8790	154001571	-16.8322
135548131	-17.0530	93501072	-16.9921	22443735	-16.9384	73553721	-16.8763	154776241	-16.8306
19292043	-17.0492	3350328	-16.9920	63265137	-16.9377	22631366	-16.8760	112746855	-16.8305
107441738	-17.0486	5800629	-16.9920	5332775	-16.9372	103869153	-16.8754	143673303	-16.8289
20130859	-17.0474	63190425	-16.9913	2797546	-16.9370	115485367	-16.8726	113638010	-16.8286
65553576	-17.0464	21240861	-16.9895	17962918	-16.9365	113442798	-16.8718	82292999	-16.8276
84760583	-17.0459	65554806	-16.9894	152739483	-16.9310	151970404	-16.8684	54926161	-16.8260
152260950	-17.0459	103869107	-16.9881	144216540	-16.9299	69178616	-16.8681	136958898	-16.8252
25335411	-17.0441	28777094	-16.9875	134109228	-16.9289	155297898	-16.8676	107793064	-16.8250
44264162	-17.0437	60989717	-16.9871	79840214	-16.9283	107792875	-16.8668	106178639	-16.8247
104934321	-17.0435	101448738	-16.9871	14501378	-16.9275	149715364	-16.8660	84684764	-16.8242
149492476	-17.0434	148548405	-16.9858	107986976	-16.9265	84220408	-16.8648	79619845	-16.8223
150087542	-17.0430	103791436	-16.9846	113337687	-16.9250	148961567	-16.8637	114805287	-16.8209
103791458	-17.0428	150002871	-16.9813	85925843	-16.9249	660409	-16.8611	79837705	-16.8207
149398499	-17.0427	116030335	-16.9799	20449643	-16.9239	10702493	-16.8607	95888	-16.8202
116193998	-17.0422	6077596	-16.9795	116650578	-16.9238	1237043	-16.8587	863492	-16.8190
153753361	-17.0410	84285070	-16.9790	118428587	-16.9237	12238876	-16.8585	83015959	-16.8189
107935667	-17.0377	898305	-16.9778	83379936	-16.9227	22001401	-16.8580	132200138	-16.8187
11358107	-17.0373	117996809	-16.9774	135962672	-16.9219	20382881	-16.8573	3434119	-16.8171
59846627	-17.0366	53784397	-16.9772	63212768	-16.9200	130769599	-16.8571	75525726	-16.8160
70625614	-17.0363	7912224	-16.9767	68837533	-16.9188	6342952	-16.8553	139823762	-16.8154
79837694	-17.0361	53400903	-16.9756	598058	-16.9183	102440306	-16.8553	82785043	-16.8133
125492355	-17.0345	66509208	-16.9756	18618226	-16.9180	28783806	-16.8538	106239109	-16.8108
21291411	-17.0324	4549261	-16.9752	82785374	-16.9179	84015075	-16.8528	293282	-16.8106
82011687	-17.0324	70139290	-16.9744	116163581	-16.9178	137103691	-16.8527	131075591	-16.8072
67114158	-17.0322	82038983	-16.9740	765494	-16.9172	136230314	-16.8527	116191625	-16.8060
140999554	-17.0318	74115	-16.9716	135831327	-16.9160	82320632	-16.8509	143556669	-16.8030
18865391	-17.0308	54089798	-16.9681	6399174	-16.9145	59996072	-16.8506	103791366	-16.8021
84017291	-17.0306	62232557	-16.9681	20196113	-16.9136	133662990	-16.8506	24416663	-16.7997
50916876	-17.0288	61156839	-16.9652	191815	-16.9126	82320556	-16.8505	114806258	-16.7981
21835788	-17.0266	19883652	-16.9648	57201425	-16.9124	79840397	-16.8502	23970445	-16.7973
22143251	-17.0262	123904450	-16.9645	83779724	-16.9122	141125345	-16.8494	151432987	-16.7960
20151477	-17.0257	114814334	-16.9640	55107927	-16.9118	116373671	-16.8492	21520744	-16.7923
142703241	-17.0257	82784894	-16.9636	107793060	-16.9112	422139	-16.8488	2473275	-16.7913
165344	-17.0250	61827815	-16.9634	64049870	-16.9110	152886167	-16.8488	143527448	-16.7910
147299518	-17.0249	63188322	-16.9634	134648398	-16.9108	82296796	-16.8477	138332922	-16.7906
131976892	-17.0240	23346932	-16.9624	9614284	-16.9098	149811822	-16.8476	22628096	-16.7904
71721409	-17.0239	70578411	-16.9623	20413728	-16.9096	144121369	-16.8461	106232958	-16.7897
154135275	-17.0216	16876472	-16.9622	63188270	-16.9067	82785422	-16.8459	145643695	-16.7895

PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
104698612	-16.7892	90282018	-16.7186	17877589	-16.6579	40488634	-16.5983	129850997	-16.5419
69175083	-16.7870	103847539	-16.7181	70579866	-16.6577	129846769	-16.5981	151822182	-16.5409
149715828	-16.7866	62710102	-16.7167	117925039	-16.6568	23330086	-16.5977	143301404	-16.5405
82796068	-16.7859	57010132	-16.7157	57064972	-16.6562	85605785	-16.5974	70130921	-16.5403
2806123	-16.7849	19358320	-16.7129	146807987	-16.6559	104319001	-16.5973	138334916	-16.5393
63245301	-16.7848	151444276	-16.7123	89233613	-16.6530	62680279	-16.5970	80076887	-16.5382
154423629	-16.7842	43170106	-16.7113	150463004	-16.6504	11481258	-16.5955	13105036	-16.5360
13222182	-16.7822	16772701	-16.7112	63188220	-16.6484	14480037	-16.5911	146019876	-16.5351
10442220	-16.7819	149786502	-16.7089	148729219	-16.6475	130424057	-16.5911	107441318	-16.5293
129845788	-16.7799	102979946	-16.7086	43091743	-16.6474	918430	-16.5899	54425178	-16.5263
143047735	-16.7792	20202061	-16.7075	108823875	-16.6464	11550232	-16.5899	225483	-16.5256
20095940	-16.7763	89285133	-16.7073	143779211	-16.6459	16727902	-16.5890	58235457	-16.5241
99811752	-16.7758	88887060	-16.7061	150453413	-16.6455	84684331	-16.5873	87454799	-16.5233
126804638	-16.7758	57014190	-16.7059	149794	-16.6450	155587039	-16.5844	90258551	-16.5232
63190377	-16.7755	972728	-16.7050	18946820	-16.6450	64051190	-16.5821	70363351	-16.5201
130648717	-16.7751	102995968	-16.7041	12562127	-16.6438	92204087	-16.5802	147830519	-16.5201
132363323	-16.7749	107796342	-16.7019	22143252	-16.6432	2383698	-16.5798	55159439	-16.5195
103791546	-16.7732	135511333	-16.7002	108823494	-16.6421	103869112	-16.5795	148490560	-16.5192
79834880	-16.7722	250653	-16.6985	146807986	-16.6419	138332781	-16.5787	104697917	-16.5182
141046698	-16.7722	87315242	-16.6981	150038953	-16.6418	151370933	-16.5785	21688525	-16.5159
104185456	-16.7706	43200253	-16.6961	76853956	-16.6416	144362955	-16.5764	115485193	-16.5157
137015814	-16.7701	20217439	-16.6959	129850977	-16.6415	135467281	-16.5762	58235463	-16.5154
82299489	-16.7613	136455270	-16.6954	143438385	-16.6407	151656012	-16.5760	81775614	-16.5148
697891	-16.7611	115127549	-16.6936	107795878	-16.6403	107796043	-16.5741	90349206	-16.5148
5222268	-16.7602	103847494	-16.6935	20449642	-16.6399	586323	-16.5721	889304	-16.5121
93600661	-16.7593	138334607	-16.6935	43716895	-16.6383	2186711	-16.5669	89286601	-16.5114
73680022	-16.7589	152531	-16.6903	108823289	-16.6380	75598	-16.5661	53485835	-16.5107
43361391	-16.7569	20646074	-16.6898	57018369	-16.6377	24690297	-16.5655	63119121	-16.5098
55173341	-16.7566	82790346	-16.6876	104934341	-16.6375	140978592	-16.5654	76045231	-16.5095
149584376	-16.7555	61827014	-16.6854	88897396	-16.6363	138651080	-16.5649	130231845	-16.5089
79840310	-16.7550	57119451	-16.6841	13443131	-16.6318	154423628	-16.5638	136217268	-16.5088
104934340	-16.7538	118828997	-16.6835	19133053	-16.6309	114420206	-16.5632	4692617	-16.5083
79837597	-16.7530	79854367	-16.6825	64051822	-16.6307	43736159	-16.5624	6187623	-16.5083
4586967	-16.7528	132187403	-16.6824	55220985	-16.6305	103925770	-16.5624	61828390	-16.5068
115360529	-16.7527	129742360	-16.6824	107793073	-16.6285	126708148	-16.5604	136262958	-16.5062
238645	-16.7524	14613598	-16.6813	104698633	-16.6274	84378264	-16.5597	82409754	-16.5050
113442939	-16.7519	82785734	-16.6803	60708557	-16.6262	149058753	-16.5597	6058221	-16.5043
4345312	-16.7516	6995258	-16.6799	135460615	-16.6261	61708521	-16.5596	135839236	-16.5031
65366911	-16.7500	16775186	-16.6796	114806097	-16.6242	130859521	-16.5590	104697965	-16.5019
65313161	-16.7470	57010402	-16.6772	137763484	-16.6219	114816305	-16.5588	55159250	-16.5000
134108010	-16.7467	107987047	-16.6764	151238044	-16.6211	151215136	-16.5587	79838559	-16.4977
136685898	-16.7457	22084310	-16.6763	107935659	-16.6187	80396272	-16.5582	107935567	-16.4971
151159748	-16.7445	67147961	-16.6760	135596672	-16.6185	82785386	-16.5573	23033112	-16.4964
51394301	-16.7444	103849863	-16.6749	16443479	-16.6184	150067422	-16.5551	17942342	-16.4962
101614364	-16.7442	88102549	-16.6747	136972405	-16.6176	45073211	-16.5549	79837313	-16.4957
64660575	-16.7433	108865809	-16.6730	102589235	-16.6172	132511030	-16.5542	151016644	-16.4954
21426320	-16.7428	107795793	-16.6715	155513542	-16.6171	75088606	-16.5533	50886887	-16.4920
152164600	-16.7421	6950663	-16.6701	134276097	-16.6162	87518459	-16.5532	21446355	-16.4912
12484087	-16.7414	10975964	-16.6681	62711973	-16.6146	2782114	-16.5511	82785693	-16.4908
107935656	-16.7396	22450711	-16.6679	563562	-16.6145	104698683	-16.5508	9859099	-16.4904
149929518	-16.7388	61984462	-16.6673	18996401	-16.6136	151356302	-16.5506	145843493	-16.4896
21836982	-16.7383	17942341	-16.6665	66899734	-16.6134	84288488	-16.5505	117569699	-16.4888
6498467	-16.7381	90388587	-16.6664	136740829	-16.6118	5709570	-16.5504	154217037	-16.4879
134935802	-16.7368	100010632	-16.6654	105647196	-16.6084	103791472	-16.5493	105646163	-16.4866
155023967	-16.7356	10825	-16.6645	149474701	-16.6080	93600659	-16.5480	45072812	-16.4865
753758	-16.7316	113442792	-16.6614	79694848	-16.6065	13489999	-16.5465	72703262	-16.4840
61671695	-16.7314	138334611	-16.6611	107796265	-16.6042	9751474	-16.5457	150558971	-16.4831
4434072	-16.7290	133627921	-16.6605	149849618	-16.6041	40430182	-16.5449	146905719	-16.4820
149749769	-16.7290	6929873	-16.6603	138333723	-16.6018	114806263	-16.5448	149899046	-16.4819
114811411	-16.7286	101776575	-16.6596	82536425	-16.6008	121013781	-16.5435	20836382	-16.4817
69030033	-16.7208	154810814	-16.6588	79834861	-16.5995	62232021	-16.5434	71441179	-16.4797
140221226	-16.7204	6501008	-16.6586	116035846	-16.5989	69921348	-16.5423	4128690	-16.4788

PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
152579014	-16.4775	138975324	-16.4298	104698753	-16.3681	136425703	-16.3132	54192101	-16.2540
5153783	-16.4765	65034910	-16.4289	151605743	-16.3671	114418525	-16.3113	21119576	-16.2516
107793478	-16.4764	58625562	-16.4279	51387384	-16.3669	153702016	-16.3106	79838481	-16.2513
70855752	-16.4762	130956547	-16.4279	21163253	-16.3663	130616344	-16.3102	12209222	-16.2501
150571765	-16.4759	863537	-16.4271	141075266	-16.3660	3485225	-16.3098	82299222	-16.2490
9504129	-16.4746	123871633	-16.4268	142709616	-16.3648	82796517	-16.3097	302680	-16.2489
61825990	-16.4746	103847527	-16.4248	6988045	-16.3633	129990456	-16.3097	22380970	-16.2449
2223782	-16.4737	104698604	-16.4230	148583254	-16.3624	147548849	-16.3097	57077732	-16.2449
79837882	-16.4703	138740935	-16.4227	79837126	-16.3623	4658275	-16.3094	59664067	-16.2436
117559742	-16.4702	69685896	-16.4217	135509944	-16.3612	151162913	-16.3092	83025182	-16.2409
69143387	-16.4699	67513935	-16.4191	151322003	-16.3573	70090727	-16.3087	3786649	-16.2408
82796259	-16.4698	61453601	-16.4183	137320904	-16.3549	62710618	-16.3059	4465519	-16.2392
28787969	-16.4690	63190247	-16.4178	54720836	-16.3531	84657761	-16.3056	107796233	-16.2390
23033111	-16.4689	138332786	-16.4174	58668568	-16.3526	28784307	-16.3047	79837992	-16.2387
107489611	-16.4669	142903813	-16.4151	103791486	-16.3524	68037421	-16.3045	978	-16.2374
67568231	-16.4668	88494128	-16.4137	104698734	-16.3512	115485176	-16.3027	6371668	-16.2374
102458184	-16.4653	137308036	-16.4135	114814882	-16.3511	21836991	-16.3010	144381719	-16.2368
102930818	-16.4640	54562538	-16.4124	104698010	-16.3507	142398142	-16.3001	79797396	-16.2365
61571558	-16.4612	57055567	-16.4122	57925869	-16.3506	67782412	-16.2990	137270423	-16.2363
4050161	-16.4601	129409646	-16.4109	11447760	-16.3504	67888080	-16.2976	83026505	-16.2359
7829944	-16.4600	123303898	-16.4106	2291174	-16.3493	76974509	-16.2957	2754567	-16.2358
142835844	-16.4599	63926895	-16.4101	88376947	-16.3492	141698287	-16.2957	9581514	-16.2358
67634345	-16.4596	110488270	-16.4052	61828745	-16.3486	88251085	-16.2918	148451847	-16.2351
12464009	-16.4592	129793811	-16.4049	65365138	-16.3478	23359101	-16.2874	84665460	-16.2349
49875701	-16.4585	23460485	-16.4042	149192607	-16.3477	7829633	-16.2873	136416267	-16.2337
119084290	-16.4574	103978148	-16.4033	83024403	-16.3471	104318954	-16.2866	79841649	-16.2323
140613486	-16.4566	61701053	-16.4009	28540608	-16.3458	70479419	-16.2843	131140577	-16.2293
151375197	-16.4566	704156	-16.4002	141123587	-16.3444	102572216	-16.2831	138334590	-16.2286
123652393	-16.4564	102364729	-16.3983	18762582	-16.3443	10606850	-16.2829	53649956	-16.2282
141650656	-16.4564	11624167	-16.3969	154333644	-16.3438	136085929	-16.2815	53649955	-16.2282
91237556	-16.4547	105646995	-16.3957	150054033	-16.3417	54511247	-16.2812	101532568	-16.2282
92020875	-16.4544	104698218	-16.3954	67710145	-16.3407	10823018	-16.2808	131709015	-16.2282
62711306	-16.4536	63187579	-16.3941	153997389	-16.3407	107793219	-16.2804	150038954	-16.2274
145494337	-16.4535	726798	-16.3926	134168067	-16.3399	154006126	-16.2802	83092879	-16.2260
108020705	-16.4532	130657765	-16.3914	54502031	-16.3382	86116845	-16.2790	150463857	-16.2253
19612063	-16.4524	135611857	-16.3907	84819673	-16.3369	113442800	-16.2786	11194370	-16.2238
16777691	-16.4521	121271191	-16.3897	104500047	-16.3369	117624226	-16.2774	152130016	-16.2232
17988012	-16.4520	134935049	-16.3896	151683572	-16.3359	114002104	-16.2767	59071498	-16.2229
11159424	-16.4518	113442759	-16.3879	150992204	-16.3358	59781671	-16.2766	138333507	-16.2206
17800972	-16.4510	22731006	-16.3860	28604220	-16.3341	3774771	-16.2757	62638281	-16.2191
89015609	-16.4509	63558656	-16.3860	104698755	-16.3341	15157144	-16.2744	152148440	-16.2186
62679084	-16.4489	22111915	-16.3855	10262010	-16.3338	63189798	-16.2744	235113	-16.2174
81281611	-16.4469	67405920	-16.3847	18380981	-16.3334	226044	-16.2719	154929671	-16.2154
45084823	-16.4468	85859945	-16.3844	15521638	-16.3316	82785534	-16.2719	3387819	-16.2151
13079655	-16.4445	119177793	-16.3841	57318450	-16.3303	69862764	-16.2680	150621386	-16.2129
114805284	-16.4442	87913124	-16.3830	21240891	-16.3294	116364730	-16.2670	113263360	-16.2126
150401870	-16.4441	147077027	-16.3817	63791903	-16.3289	79838365	-16.2667	69144785	-16.2123
145703116	-16.4424	65954135	-16.3816	60709317	-16.3267	43374107	-16.2656	115127579	-16.2114
138333349	-16.4422	110424338	-16.3798	62232374	-16.3249	2916826	-16.2649	55265470	-16.2110
10062465	-16.4410	118514323	-16.3794	82546546	-16.3239	71318838	-16.2644	135711232	-16.2096
62121646	-16.4395	106703589	-16.3785	121271316	-16.3231	4607560	-16.2625	136799325	-16.2090
61703959	-16.4360	91057787	-16.3765	107795037	-16.3227	104698292	-16.2620	10516245	-16.2085
136756073	-16.4354	87274505	-16.3765	103791403	-16.3224	351361	-16.2616	107137212	-16.2084
90694530	-16.4353	3583072	-16.3758	107793072	-16.3224	13948284	-16.2615	63664568	-16.2072
147303349	-16.4336	116133351	-16.3757	81963844	-16.3216	50924373	-16.2615	12209227	-16.2068
21928066	-16.4335	13046565	-16.3738	82538370	-16.3211	4353681	-16.2612	137151002	-16.2064
114217332	-16.4332	6997803	-16.3729	124252426	-16.3195	104516910	-16.2575	135711224	-16.2034
92045462	-16.4330	63949944	-16.3719	145333645	-16.3193	152597298	-16.2572	7319998	-16.2032
68796281	-16.4324	21518850	-16.3715	104319000	-16.3165	16461	-16.2566	82785473	-16.2023
62230353	-16.4318	108020832	-16.3697	46781106	-16.3144	149631530	-16.2565	63183582	-16.2014
138971401	-16.4304	314206	-16.3690	66995528	-16.3139	64349716	-16.2564	13651022	-16.2013
63119001	-16.4299	103791393	-16.3682	238646	-16.3137	81413097	-16.2546	17960321	-16.2004

PubChem ID	ΔG (kj/mol)	PubChem ID	ΔG (kj/mol)	PubChem ID	ΔG (kj/mol)	PubChem ID	ΔG (kj/mol)	PubChem ID	ΔG (kj/mol)
506053	-16.1990	107793078	-16.1540	91883894	-16.0929	20277834	-16.0449	104700446	-15.9817
20196158	-16.1989	64226650	-16.1539	138334553	-16.0928	152756068	-16.0449	109029	-15.9815
106331124	-16.1984	9971	-16.1523	104698703	-16.0925	83025274	-16.0432	28784296	-15.9813
57114874	-16.1970	116280616	-16.1516	89990404	-16.0922	27435348	-16.0431	45089844	-15.9804
93047887	-16.1968	63189806	-16.1506	107793228	-16.0906	62711868	-16.0430	53689516	-15.9801
142644594	-16.1965	138656504	-16.1497	45303449	-16.0884	66108602	-16.0428	55159050	-15.9798
104698110	-16.1949	138486082	-16.1497	152007953	-16.0873	135425320	-16.0427	117745223	-15.9784
82007987	-16.1944	114463051	-16.1484	104696632	-16.0866	51112629	-16.0415	115485137	-15.9781
130231701	-16.1944	92010310	-16.1469	20351839	-16.0843	72055615	-16.0410	4622205	-15.9770
238935	-16.1938	89075922	-16.1462	153438762	-16.0826	79834464	-16.0405	67181418	-15.9765
136324069	-16.1938	82289051	-16.1419	113263364	-16.0820	116364867	-16.0395	18618377	-15.9764
84017413	-16.1937	12761007	-16.1413	129779556	-16.0816	150275156	-16.0375	62711804	-15.9733
116006863	-16.1936	84760744	-16.1404	136972407	-16.0794	6332311	-16.0340	58728213	-15.9720
18453166	-16.1927	146912983	-16.1380	63514354	-16.0792	43308757	-16.0332	24796206	-15.9707
63183806	-16.1926	104318964	-16.1371	83176267	-16.0787	149856858	-16.0321	107793090	-15.9685
105360823	-16.1918	20119319	-16.1370	104698758	-16.0785	58566935	-16.0312	22956763	-15.9673
46780143	-16.1917	136358713	-16.1348	18405678	-16.0779	61157558	-16.0310	1516261	-15.9651
62938721	-16.1917	20210310	-16.1341	112480049	-16.0777	103791444	-16.0304	104698746	-15.9641
21837060	-16.1914	20114203	-16.1340	61827207	-16.0771	62231853	-16.0293	61304110	-15.9634
10057817	-16.1878	145059592	-16.1337	7023624	-16.0759	63023148	-16.0275	149916755	-15.9633
99110250	-16.1871	62230691	-16.1324	153673367	-16.0752	101890318	-16.0274	106177247	-15.9626
20043811	-16.1869	20724698	-16.1320	40424248	-16.0746	55159249	-16.0273	112748900	-15.9616
21259183	-16.1867	149537731	-16.1295	150791950	-16.0724	775679	-16.0245	103869158	-15.9610
143783838	-16.1867	106842731	-16.1293	131851148	-16.0710	79838579	-16.0243	82287944	-15.9603
139631565	-16.1856	907022	-16.1285	2351301	-16.0707	11021705	-16.0235	141225681	-15.9573
90736793	-16.1850	63185161	-16.1273	91130500	-16.0707	62998925	-16.0216	43321656	-15.9571
24433052	-16.1846	96706460	-16.1219	145785160	-16.0695	85715158	-16.0203	130689659	-15.9553
84017423	-16.1840	150251789	-16.1203	65291569	-16.0694	63273705	-16.0185	89202479	-15.9546
93980772	-16.1839	138334587	-16.1181	106213829	-16.0685	106177462	-16.0173	84057551	-15.9543
108053288	-16.1838	135432823	-16.1177	729638	-16.0680	62711308	-16.0171	61724104	-15.9540
39346662	-16.1829	69011186	-16.1167	67843507	-16.0678	134318030	-16.0117	4876	-15.9537
295565	-16.1827	67568226	-16.1156	61195570	-16.0650	54513933	-16.0108	66690192	-15.9536
21807171	-16.1796	63184015	-16.1155	138453840	-16.0633	15619501	-16.0103	43665578	-15.9529
105766715	-16.1794	108823146	-16.1146	114111344	-16.0631	141310646	-16.0097	63188009	-15.9524
145101632	-16.1751	140010903	-16.1135	152573960	-16.0620	12982326	-16.0092	70524969	-15.9519
61703059	-16.1744	79838183	-16.1112	137553718	-16.0619	104698225	-16.0066	138334884	-15.9515
91883416	-16.1730	11073743	-16.1109	64049873	-16.0610	135435800	-16.0063	148387522	-15.9515
17877588	-16.1727	23524793	-16.1104	107795052	-16.0604	99583068	-16.0062	23538086	-15.9510
145790010	-16.1714	143465809	-16.1103	79346403	-16.0587	69870775	-16.0046	150921064	-15.9506
58809862	-16.1706	62711803	-16.1092	2762776	-16.0584	129047074	-16.0042	153089017	-15.9498
114805210	-16.1689	14416933	-16.1090	60123328	-16.0583	67243487	-16.0036	69574608	-15.9495
153197467	-16.1682	116191011	-16.1089	13781267	-16.0571	62710825	-16.0028	69717864	-15.9484
19959294	-16.1672	142938722	-16.1086	69965416	-16.0570	151433142	-16.0015	20196150	-15.9477
151936342	-16.1658	63076690	-16.1071	138738542	-16.0570	82819874	-16.0004	91622774	-15.9460
118343188	-16.1654	19927266	-16.1053	101212719	-16.0568	63189776	-15.9996	140395749	-15.9455
130192570	-16.1653	149984716	-16.1050	116036609	-16.0566	144408098	-15.9979	115408720	-15.9445
21344031	-16.1638	82785198	-16.1047	105766704	-16.0564	67426709	-15.9969	62230520	-15.9441
92134504	-16.1633	137541000	-16.1037	149664797	-16.0556	107854667	-15.9962	108020704	-15.9433
62710828	-16.1628	123881294	-16.1030	55158662	-16.0549	143847599	-15.9962	103791377	-15.9431
105647744	-16.1627	89894611	-16.1020	143148500	-16.0548	64050995	-15.9955	2826599	-15.9427
22884216	-16.1612	82335490	-16.1020	155014731	-16.0545	139035140	-15.9942	58784911	-15.9412
144939715	-16.1599	22303278	-16.1016	64987919	-16.0544	24284792	-15.9937	82287943	-15.9408
61828410	-16.1584	61995598	-16.0991	89529551	-16.0521	63183637	-15.9915	28604160	-15.9378
79840204	-16.1583	68675403	-16.0989	81282417	-16.0519	63118877	-15.9909	39732852	-15.9376
153945492	-16.1581	62709793	-16.0982	104698135	-16.0519	16772855	-15.9896	62711697	-15.9375
114752011	-16.1579	106237836	-16.0982	113230550	-16.0517	58249268	-15.9891	15221722	-15.9372
130722383	-16.1573	60643131	-16.0980	18363677	-16.0508	82785049	-15.9880	147298454	-15.9363
105645692	-16.1572	63185144	-16.0976	105766581	-16.0492	24707038	-15.9848	55136131	-15.9358
79837331	-16.1568	106178651	-16.0964	22111826	-16.0488	81965801	-15.9848	68030170	-15.9331
17211	-16.1552	104698052	-16.0963	19030578	-16.0486	57378117	-15.9837	55102954	-15.9306
63187516	-16.1550	857628	-16.0960	82785714	-16.0485	154477358	-15.9833	14332036	-15.9297
139823765	-16.1546	149921844	-16.0959	123784152	-16.0482	20641437	-15.9817	65364414	-15.9290

PubChem ID	ΔG (kj/mol)	PubChem ID	ΔG (kj/mol)	PubChem ID	ΔG (kj/mol)	PubChem ID	ΔG (kj/mol)	PubChem ID	ΔG (kj/mol)
104698688	-15.9290	23377642	-15.8827	55107452	-15.8338	135801638	-15.7884	57267809	-15.7421
135703881	-15.9272	154312668	-15.8825	5152395	-15.8325	21190823	-15.7878	149252252	-15.7411
113597555	-15.9270	155092745	-15.8817	21558796	-15.8323	152684392	-15.7878	151773701	-15.7404
104697966	-15.9257	60989926	-15.8808	53968276	-15.8314	28333823	-15.7857	115485517	-15.7395
61157738	-15.9256	129159	-15.8802	114093631	-15.8308	79837595	-15.7842	113319783	-15.7391
134120866	-15.9252	13781268	-15.8788	62231862	-15.8301	106633096	-15.7837	63791744	-15.7387
4109153	-15.9245	139217160	-15.8777	61851927	-15.8300	103791512	-15.7837	89393286	-15.7385
149352359	-15.9238	154181702	-15.8773	106844190	-15.8296	103847523	-15.7829	15825587	-15.7381
147836311	-15.9235	653734	-15.8764	54532518	-15.8271	84057161	-15.7825	63190378	-15.7377
91666300	-15.9231	62709413	-15.8738	22360767	-15.8268	113303890	-15.7819	138332980	-15.7364
151644464	-15.9230	609399	-15.8735	135960632	-15.8267	152820302	-15.7812	115970036	-15.7347
71521389	-15.9226	90472278	-15.8728	143223685	-15.8267	3254286	-15.7809	88594155	-15.7346
44828877	-15.9220	71437472	-15.8725	3605118	-15.8248	43716896	-15.7800	63189840	-15.7322
130703486	-15.9206	63831279	-15.8720	144624412	-15.8248	129850978	-15.7800	84010009	-15.7310
82292993	-15.9199	103869165	-15.8717	82784792	-15.8245	135817021	-15.7798	136341461	-15.7310
108894964	-15.9175	152835410	-15.8715	23162504	-15.8229	135497021	-15.7796	62315826	-15.7303
82317303	-15.9171	424339	-15.8712	116149190	-15.8227	137015784	-15.7790	69090833	-15.7300
64349347	-15.9170	121445875	-15.8711	115485132	-15.8223	150689301	-15.7775	84157212	-15.7294
105938883	-15.9166	325340	-15.8708	61988190	-15.8221	89392878	-15.7772	63190376	-15.7292
571807	-15.9165	67717446	-15.8708	107796379	-15.8212	62710942	-15.7746	89785724	-15.7273
151784569	-15.9161	87571072	-15.8704	82335528	-15.8194	63188398	-15.7742	107792748	-15.7273
62938723	-15.9153	82320125	-15.8692	135454680	-15.8194	59928023	-15.7733	2777856	-15.7256
79811676	-15.9147	90281928	-15.8681	90435413	-15.8187	10797207	-15.7716	55134825	-15.7250
138332923	-15.9143	20413729	-15.8677	115485579	-15.8187	13234060	-15.7702	87431616	-15.7244
59984156	-15.9139	107234862	-15.8654	283471	-15.8186	6504201	-15.7688	82785682	-15.7204
79838071	-15.9136	115310285	-15.8635	22111798	-15.8184	91504790	-15.7685	153586480	-15.7200
116676927	-15.9122	5789659	-15.8630	123434737	-15.8171	53430241	-15.7677	67783432	-15.7198
25421988	-15.9121	43200255	-15.8627	107793070	-15.8160	67704625	-15.7665	153223881	-15.7198
67513674	-15.9112	28604156	-15.8626	106190045	-15.8159	114807099	-15.7648	148074532	-15.7191
19968015	-15.9109	104698232	-15.8625	76919203	-15.8157	63190338	-15.7637	155133060	-15.7190
113442803	-15.9109	61196376	-15.8623	53309358	-15.8151	42220628	-15.7634	254857	-15.7187
116021272	-15.9094	59620207	-15.8615	4144410	-15.8150	115306331	-15.7629	63664552	-15.7184
79805777	-15.9091	149993836	-15.8610	61825987	-15.8134	13975078	-15.7613	129031281	-15.7184
45089815	-15.9072	113319814	-15.8607	79805778	-15.8124	20982798	-15.7601	104698223	-15.7180
61174467	-15.9069	2343717	-15.8586	63190382	-15.8111	62669470	-15.7599	249413	-15.7179
61157553	-15.9069	79838162	-15.8586	81965856	-15.8110	108020831	-15.7586	83086253	-15.7174
152735755	-15.9063	138334882	-15.8577	154406991	-15.8100	19434988	-15.7580	153777361	-15.7166
70198162	-15.9051	140396927	-15.8571	107792661	-15.8097	6108	-15.7567	5415837	-15.7163
88879192	-15.9042	118817608	-15.8549	143004159	-15.8096	11182864	-15.7567	138334005	-15.7162
10354404	-15.9011	142859475	-15.8544	62231535	-15.8072	10397231	-15.7563	153099796	-15.7150
103791573	-15.8992	107986602	-15.8524	12750115	-15.8070	146394192	-15.7558	135414676	-15.7149
114002377	-15.8985	21431966	-15.8517	21216170	-15.8051	61704114	-15.7553	62230012	-15.7134
154752986	-15.8984	82179903	-15.8517	790785	-15.8048	54168664	-15.7544	4170871	-15.7125
116150687	-15.8978	107415379	-15.8495	131207598	-15.8047	101532566	-15.7544	17915137	-15.7124
61828768	-15.8965	81721284	-15.8486	116650485	-15.8043	104698209	-15.7538	136629380	-15.7112
69574607	-15.8955	91585986	-15.8485	142468632	-15.8032	87103740	-15.7535	114002123	-15.7103
222020	-15.8954	103791450	-15.8481	55163256	-15.8031	89020205	-15.7533	2733699	-15.7064
82514381	-15.8954	138333006	-15.8481	153796954	-15.8031	66596684	-15.7532	104698731	-15.7063
107854853	-15.8953	90211935	-15.8475	773130	-15.8008	115485162	-15.7531	61828578	-15.7022
153517047	-15.8951	4738992	-15.8470	72417811	-15.7975	141509974	-15.7528	147652008	-15.7021
149276299	-15.8940	116348072	-15.8470	84014311	-15.7972	55134802	-15.7506	16776220	-15.7012
150426367	-15.8930	310559	-15.8465	138334883	-15.7956	62634272	-15.7504	68870718	-15.7008
58929452	-15.8910	84696880	-15.8449	63189025	-15.7950	104044394	-15.7496	154099883	-15.7008
114807101	-15.8892	63190200	-15.8432	151021463	-15.7946	61157193	-15.7479	151163758	-15.7004
43714031	-15.8890	61157557	-15.8423	70144203	-15.7940	61157189	-15.7479	108107808	-15.6996
19099531	-15.8883	61157365	-15.8423	104697949	-15.7935	13048606	-15.7472	141579077	-15.6983
17154	-15.8861	54406690	-15.8414	148588764	-15.7926	10081963	-15.7463	67112639	-15.6972
5354766	-15.8854	62231695	-15.8413	63187517	-15.7923	115485118	-15.7449	152251100	-15.6970
118812121	-15.8847	68475705	-15.8383	135812654	-15.7915	107935672	-15.7448	150104703	-15.6947
146633130	-15.8842	104516907	-15.8369	22718755	-15.7907	106844176	-15.7436	140841654	-15.6944
107795019	-15.8834	62709769	-15.8356	113596359	-15.7898	145843482	-15.7435	116035356	-15.6940
135508218	-15.8829	106222451	-15.8356	19358342	-15.7896	129850970	-15.7424	24706539	-15.6935

PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
91322821	-15.6925	125455660	-15.6391	45103335	-15.5787	91144298	-15.5236	67657604	-15.4801
103791435	-15.6921	79835268	-15.6387	153769123	-15.5771	284564	-15.5224	149631531	-15.4799
152590071	-15.6909	23205169	-15.6376	84660838	-15.5769	153655272	-15.5223	30077	-15.4797
53751574	-15.6907	99441210	-15.6371	75620	-15.5767	20161843	-15.5215	106189786	-15.4788
61358171	-15.6904	65101039	-15.6367	5730931	-15.5765	148514347	-15.5211	104698760	-15.4760
151495297	-15.6902	101621291	-15.6366	53838205	-15.5764	12916144	-15.5194	64008932	-15.4748
118093127	-15.6883	62230364	-15.6363	103791440	-15.5754	2341965	-15.5190	45072724	-15.4744
81282426	-15.6861	151843370	-15.6341	91873790	-15.5750	115485482	-15.5184	116114455	-15.4744
83120686	-15.6844	149899045	-15.6324	103847491	-15.5744	142533831	-15.5184	130866970	-15.4736
92273297	-15.6839	82785941	-15.6323	576800	-15.5723	107795152	-15.5177	55158299	-15.4709
130992647	-15.6818	67395485	-15.6319	150053949	-15.5718	106278061	-15.5168	104934319	-15.4702
61203200	-15.6812	103791408	-15.6287	116149222	-15.5716	104516986	-15.5168	79841269	-15.4700
18694306	-15.6810	76988161	-15.6270	88251086	-15.5714	54127942	-15.5167	138334515	-15.4697
64051630	-15.6794	136549173	-15.6269	152384811	-15.5703	147734029	-15.5157	61157737	-15.4690
79841177	-15.6779	43409786	-15.6268	2938675	-15.5699	153979935	-15.5157	65924400	-15.4689
91688186	-15.6773	103791489	-15.6267	138334596	-15.5699	44280596	-15.5155	63190406	-15.4689
63236545	-15.6742	138332485	-15.6266	116232776	-15.5694	139670822	-15.5145	150322485	-15.4689
151828167	-15.6741	138333971	-15.6261	130232074	-15.5674	64478780	-15.5137	107793203	-15.4686
154254761	-15.6736	80398764	-15.6256	16775228	-15.5619	151766714	-15.5120	28784305	-15.4685
136091366	-15.6733	148651246	-15.6252	138332839	-15.5619	102995947	-15.5115	140426979	-15.4668
81282757	-15.6727	1556483	-15.6237	149827381	-15.5609	521142	-15.5105	150367758	-15.4668
63189768	-15.6701	82538007	-15.6234	63190383	-15.5589	90346945	-15.5104	150869015	-15.4667
115485350	-15.6700	79287502	-15.6229	55265578	-15.5576	2762774	-15.5088	61412270	-15.4666
117964118	-15.6697	104934316	-15.6226	9555102	-15.5574	107792648	-15.5086	116147317	-15.4648
6380951	-15.6691	135711222	-15.6214	6050851	-15.5574	3015948	-15.5081	155272911	-15.4623
6043629	-15.6691	87572111	-15.6208	154131173	-15.5563	18453190	-15.5076	1388243	-15.4614
67469350	-15.6688	146013148	-15.6197	104698719	-15.5556	21903947	-15.5066	121698691	-15.4612
62813737	-15.6686	69115561	-15.6186	20034338	-15.5555	143719740	-15.5058	64080872	-15.4604
18413854	-15.6684	62710474	-15.6182	45073217	-15.5553	152232466	-15.5056	69910942	-15.4602
53424155	-15.6684	58534591	-15.6177	43374105	-15.5551	63189746	-15.5052	118255688	-15.4601
27435350	-15.6682	152277916	-15.6162	61875023	-15.5535	62680810	-15.5052	104700333	-15.4563
141075102	-15.6681	61157394	-15.6154	6947005	-15.5531	36689444	-15.5012	82796102	-15.4554
142991999	-15.6668	154269575	-15.6142	332274	-15.5527	107318141	-15.5003	149940664	-15.4539
62230870	-15.6667	43170128	-15.6130	107793052	-15.5488	69296630	-15.5001	21895749	-15.4535
13609530	-15.6636	62922785	-15.6117	2756355	-15.5483	106294166	-15.4998	6946437	-15.4526
57796774	-15.6619	87273899	-15.6113	24973081	-15.5479	43238510	-15.4990	146510410	-15.4525
64050441	-15.6616	54947881	-15.6106	144825649	-15.5473	107793152	-15.4980	151343331	-15.4525
61453850	-15.6604	45089333	-15.6105	137163253	-15.5443	14154811	-15.4977	89835926	-15.4518
79672488	-15.6598	113442788	-15.6090	68522629	-15.5435	61157741	-15.4971	11309825	-15.4511
2341964	-15.6594	82178020	-15.6085	115407957	-15.5433	61156655	-15.4971	108093507	-15.4498
68623551	-15.6577	18996402	-15.6068	132205017	-15.5421	54307714	-15.4969	138332921	-15.4496
119091388	-15.6560	147743080	-15.6066	105945580	-15.5419	151336317	-15.4966	14704567	-15.4481
104721969	-15.6545	21486330	-15.6050	102165035	-15.5417	63076689	-15.4959	79548739	-15.4468
103791406	-15.6539	20258178	-15.6049	67579596	-15.5414	69641217	-15.4939	135598973	-15.4468
139588435	-15.6539	7079401	-15.6045	144804797	-15.5413	147484809	-15.4929	135483129	-15.4468
58464616	-15.6533	107867001	-15.5953	7016217	-15.5395	103869143	-15.4927	145409745	-15.4463
11622443	-15.6529	21693278	-15.5939	149661696	-15.5389	153863537	-15.4925	63184060	-15.4454
45072807	-15.6506	54486541	-15.5921	79885678	-15.5387	143593788	-15.4912	55107407	-15.4438
58636669	-15.6503	147734028	-15.5918	110204050	-15.5386	153505909	-15.4907	316116	-15.4432
28604458	-15.6477	107795098	-15.5917	20738338	-15.5370	824111	-15.4892	19356	-15.4424
53413236	-15.6475	135617274	-15.5903	280994	-15.5349	129469888	-15.4886	62709316	-15.4419
62709324	-15.6475	107935579	-15.5886	138334793	-15.5349	22995023	-15.4877	87845378	-15.4418
20726490	-15.6467	138334864	-15.5878	83187569	-15.5345	145568138	-15.4861	62231212	-15.4417
114217312	-15.6467	138332771	-15.5862	84015040	-15.5334	64050406	-15.4855	107795119	-15.4414
153102070	-15.6452	64045560	-15.5861	104698679	-15.5318	116342762	-15.4855	139459809	-15.4409
146795718	-15.6431	61458570	-15.5845	154186094	-15.5317	43308756	-15.4853	138334009	-15.4392
5706176	-15.6428	118409393	-15.5843	151322508	-15.5314	142846145	-15.4850	107645108	-15.4389
62232551	-15.6425	130428252	-15.5834	63188321	-15.5309	153728294	-15.4844	11637484	-15.4379
104697972	-15.6410	84551802	-15.5832	63950350	-15.5289	106191525	-15.4839	121271502	-15.4368
99909438	-15.6406	28604336	-15.5820	123647063	-15.5277	117043114	-15.4833	133669094	-15.4366
68861172	-15.6404	62684322	-15.5814	53871559	-15.5276	104698231	-15.4831	63190340	-15.4361
9013089	-15.6401	139253420	-15.5788	64005339	-15.5274	23660972	-15.4830	82335538	-15.4353

PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
4241808	-15.4342	54154498	-15.3862	113527481	-15.3363	18771448	-15.2945	241632	-15.2364
61828006	-15.4337	64049627	-15.3859	69456741	-15.3361	154534415	-15.2938	114617449	-15.2355
107850355	-15.4336	104698141	-15.3849	79837974	-15.3354	79838069	-15.2935	20269880	-15.2354
73037906	-15.4334	117570323	-15.3849	20827810	-15.3345	107796459	-15.2929	51394303	-15.2354
142402691	-15.4334	153438765	-15.3836	147945009	-15.3345	61779610	-15.2879	3249261	-15.2345
1913209	-15.4332	112704330	-15.3816	64085995	-15.3329	40430181	-15.2873	57096070	-15.2341
21903945	-15.4317	134360422	-15.3808	61279651	-15.3317	10420974	-15.2870	135406350	-15.2337
20640328	-15.4317	122209451	-15.3798	138332837	-15.3317	82950604	-15.2862	22265035	-15.2327
2300184	-15.4296	71046914	-15.3760	79838555	-15.3311	79834495	-15.2859	92282395	-15.2327
68225018	-15.4278	21116314	-15.3752	124028399	-15.3309	149366408	-15.2857	55261495	-15.2321
19361540	-15.4271	24433050	-15.3750	70595646	-15.3308	150258204	-15.2832	138333886	-15.2319
147502175	-15.4267	116006855	-15.3746	62709591	-15.3306	606705	-15.2828	147050972	-15.2319
103791568	-15.4266	130727967	-15.3746	115485337	-15.3300	65302301	-15.2825	105938778	-15.2318
62709582	-15.4265	154289325	-15.3723	107865961	-15.3298	149649287	-15.2822	89064739	-15.2314
3027402	-15.4260	99679	-15.3712	134413883	-15.3293	151690140	-15.2811	150792495	-15.2308
86613037	-15.4257	54139097	-15.3712	20520132	-15.3287	114109711	-15.2798	64179323	-15.2301
53805769	-15.4232	103791543	-15.3705	131438687	-15.3287	140792386	-15.2780	104700516	-15.2301
826220	-15.4225	86336442	-15.3697	91873791	-15.3273	67112488	-15.2737	20161846	-15.2297
55159434	-15.4225	67554438	-15.3696	121399069	-15.3267	84016139	-15.2729	54030539	-15.2284
152271034	-15.4223	2917322	-15.3679	79620794	-15.3240	45791948	-15.2719	754194	-15.2278
84687724	-15.4217	136972404	-15.3661	53769882	-15.3229	152783197	-15.2716	103847492	-15.2265
80295775	-15.4202	151089761	-15.3655	43353155	-15.3229	117043152	-15.2713	135708206	-15.2256
54283721	-15.4194	63190134	-15.3652	64049875	-15.3225	89671808	-15.2708	10058143	-15.2243
146222290	-15.4184	10635312	-15.3649	4374549	-15.3216	104934328	-15.2692	87612999	-15.2232
7057885	-15.4172	12769666	-15.3647	22272295	-15.3206	89298458	-15.2691	63189779	-15.2230
18505976	-15.4169	1861236	-15.3640	130001189	-15.3200	135509353	-15.2691	144329087	-15.2225
286160	-15.4166	11587062	-15.3637	135796343	-15.3188	63189866	-15.2682	103869206	-15.2216
63212680	-15.4165	88059484	-15.3624	23579541	-15.3187	82795571	-15.2668	7062454	-15.2204
21752249	-15.4162	81282090	-15.3615	140437119	-15.3181	138334574	-15.2668	67719109	-15.2196
3589387	-15.4160	141325802	-15.3609	131698453	-15.3176	62385015	-15.2661	138332773	-15.2191
1563547	-15.4160	116026332	-15.3600	19266	-15.3174	154477359	-15.2651	114465429	-15.2186
147353941	-15.4150	122215980	-15.3596	20574620	-15.3174	69043064	-15.2638	62085121	-15.2185
56625062	-15.4131	79838462	-15.3591	5726505	-15.3173	25073336	-15.2622	62711517	-15.2175
13017537	-15.4092	62681350	-15.3587	63187923	-15.3162	122392980	-15.2622	143993322	-15.2172
84675300	-15.4052	149925961	-15.3577	22165875	-15.3161	146436466	-15.2598	59531351	-15.2165
64045158	-15.4043	54157678	-15.3576	71312709	-15.3158	73995284	-15.2595	56668520	-15.2156
12623167	-15.4036	138334897	-15.3574	143452116	-15.3158	116214797	-15.2571	43351227	-15.2155
151205144	-15.4036	54032340	-15.3572	67786433	-15.3156	53392644	-15.2560	83015957	-15.2150
105645557	-15.4034	14533	-15.3567	79834876	-15.3153	150325710	-15.2557	84663233	-15.2135
20536417	-15.4021	114002110	-15.3559	61828215	-15.3144	2817691	-15.2553	129770543	-15.2132
150869014	-15.4019	61984652	-15.3555	137021921	-15.3113	54016457	-15.2549	63190216	-15.2117
62938550	-15.4015	20196135	-15.3547	136235061	-15.3113	20413701	-15.2547	65364593	-15.2112
19609465	-15.4014	88313530	-15.3543	12353857	-15.3078	103869191	-15.2543	134648401	-15.2109
152078625	-15.4014	63183538	-15.3537	3275764	-15.3074	82320256	-15.2518	116035566	-15.2099
10331992	-15.4012	151467582	-15.3531	136864746	-15.3058	129687377	-15.2513	68860049	-15.2070
114002382	-15.4000	1563549	-15.3518	142401962	-15.3050	20351876	-15.2499	138334860	-15.2063
89347472	-15.3998	2762775	-15.3517	877470	-15.3041	115669780	-15.2496	43353164	-15.2058
116035307	-15.3985	152457919	-15.3517	149488585	-15.3037	68864947	-15.2472	12750116	-15.2057
113636710	-15.3962	139418726	-15.3513	67105855	-15.3036	147000949	-15.2456	71432807	-15.2057
107319695	-15.3961	151341890	-15.3508	116221593	-15.3031	67426249	-15.2454	135962646	-15.2053
113442796	-15.3960	88611500	-15.3494	116027569	-15.3024	136949934	-15.2454	119177707	-15.2046
152095315	-15.3960	137281948	-15.3491	148242708	-15.3022	142547703	-15.2454	22111818	-15.2043
150164257	-15.3953	152482630	-15.3472	16771644	-15.3016	92299648	-15.2446	138333436	-15.2039
143438384	-15.3939	91177031	-15.3464	61703202	-15.3010	45072753	-15.2435	54989133	-15.2036
10059668	-15.3925	22064450	-15.3424	90447756	-15.3008	89769853	-15.2434	87799536	-15.2030
729792	-15.3908	11054509	-15.3412	63187962	-15.2985	68839733	-15.2423	49851158	-15.2020
305164	-15.3908	92204088	-15.3394	89997554	-15.2977	147308981	-15.2399	54192595	-15.2011
62711316	-15.3889	61798137	-15.3388	119177690	-15.2977	2762777	-15.2391	61702914	-15.2010
91553840	-15.3885	97619358	-15.3388	106178336	-15.2975	68442093	-15.2388	18008788	-15.2008
70375368	-15.3881	125456386	-15.3388	79838067	-15.2966	45072747	-15.2384	21365714	-15.2008
45089281	-15.3873	63897126	-15.3379	106214821	-15.2964	44828705	-15.2384	63536969	-15.2000
61157014	-15.3870	18996403	-15.3373	82785803	-15.2951	17985981	-15.2365	153820239	-15.1999



PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
135498145	-15.1986	68147095	-15.1520	20297964	-15.1006	84866	-15.0577	155437460	-15.0070
62710806	-15.1985	61157552	-15.1519	65685872	-15.1006	82318961	-15.0577	21314102	-15.0058
62382720	-15.1983	62933709	-15.1504	87222360	-15.0994	84760834	-15.0567	138333438	-15.0058
116030707	-15.1981	152452154	-15.1504	103869173	-15.0993	138333968	-15.0567	123827420	-15.0049
54108577	-15.1978	137292307	-15.1498	113400015	-15.0992	151901029	-15.0550	13331473	-15.0045
459057	-15.1977	117043115	-15.1480	3034184	-15.0971	12916139	-15.0546	19166392	-15.0009
82849988	-15.1967	152275798	-15.1480	71313566	-15.0966	63663445	-15.0542	20490175	-14.9980
105634312	-15.1963	117840519	-15.1474	79838472	-15.0964	61320990	-15.0531	75088484	-14.9978
148059930	-15.1962	20027689	-15.1468	139271044	-15.0961	113746164	-15.0527	18360087	-14.9973
82296805	-15.1960	67114620	-15.1468	144556893	-15.0933	87855743	-15.0525	118007713	-14.9971
19700000	-15.1936	135070128	-15.1464	138333093	-15.0896	116468784	-15.0501	18453189	-14.9967
17928231	-15.1927	101692335	-15.1462	21163339	-15.0892	21626	-15.0483	44828711	-14.9965
115453340	-15.1921	11254152	-15.1446	65555015	-15.0889	116232073	-15.0456	121003113	-14.9961
65560899	-15.1920	63184859	-15.1445	106161883	-15.0884	11460292	-15.0452	63187963	-14.9946
63949938	-15.1915	68721339	-15.1435	138334905	-15.0878	105654174	-15.0450	45072713	-14.9942
55158081	-15.1910	22365025	-15.1434	146319229	-15.0872	61828451	-15.0440	152298813	-14.9908
62232191	-15.1896	116365346	-15.1434	71370565	-15.0869	82038982	-15.0428	45073205	-14.9907
61704698	-15.1876	91296945	-15.1433	36691370	-15.0860	153850301	-15.0426	62231530	-14.9905
59313750	-15.1864	143243345	-15.1426	4284849	-15.0857	54069480	-15.0422	7010622	-14.9894
103925757	-15.1851	107415385	-15.1407	141107328	-15.0856	106237758	-15.0419	107796660	-14.9881
142527722	-15.1814	104698280	-15.1390	66696579	-15.0854	141397514	-15.0419	116019406	-14.9857
67935693	-15.1807	106191590	-15.1373	21666052	-15.0840	15569299	-15.0410	150634448	-14.9849
238644	-15.1789	11137507	-15.1365	142742949	-15.0836	89778211	-15.0410	102440305	-14.9846
63537317	-15.1788	20625574	-15.1365	62711335	-15.0834	61826829	-15.0406	22600504	-14.9842
79838466	-15.1783	107539958	-15.1362	151169594	-15.0830	39870216	-15.0401	64051774	-14.9840
107935680	-15.1767	152519106	-15.1360	123554976	-15.0827	69640108	-15.0399	23338274	-14.9839
62682239	-15.1753	66878814	-15.1354	24707443	-15.0805	19099462	-15.0397	138332540	-14.9830
15383890	-15.1744	154067228	-15.1352	138333546	-15.0801	82300977	-15.0386	150870802	-14.9829
26580205	-15.1729	101131908	-15.1349	74790	-15.0800	11275813	-15.0385	16735155	-14.9828
45073198	-15.1713	141140593	-15.1345	21759428	-15.0792	104698217	-15.0373	116139101	-14.9819
82539330	-15.1708	53737076	-15.1341	104698718	-15.0788	82320361	-15.0361	79885265	-14.9807
151674482	-15.1703	103869152	-15.1325	104698593	-15.0788	11459896	-15.0345	140866574	-14.9806
18617591	-15.1698	80295351	-15.1302	150730577	-15.0775	55102882	-15.0328	134413866	-14.9800
63187035	-15.1698	149953521	-15.1297	82791278	-15.0771	21666028	-15.0322	68720408	-14.9798
55479	-15.1693	11023131	-15.1284	62409957	-15.0745	142260570	-15.0321	134248979	-14.9790
63183848	-15.1689	63185113	-15.1273	12383388	-15.0729	145798953	-15.0314	63189974	-14.9781
88570618	-15.1682	101412	-15.1268	51063275	-15.0694	220171	-15.0306	149476612	-14.9772
107796330	-15.1673	62682624	-15.1251	103561014	-15.0692	21037446	-15.0306	80437510	-14.9760
90744202	-15.1672	152482629	-15.1240	4738991	-15.0678	103513121	-15.0301	106003884	-14.9760
142973354	-15.1672	79838184	-15.1222	150937552	-15.0677	113485776	-15.0300	65369335	-14.9756
118150933	-15.1670	134951555	-15.1215	40472796	-15.0676	143047304	-15.0299	79837507	-14.9737
154527221	-15.1658	121427961	-15.1211	88398176	-15.0674	20161848	-15.0296	107793128	-14.9731
140375	-15.1657	13342168	-15.1185	54029417	-15.0668	115031890	-15.0296	45089817	-14.9729
116190992	-15.1652	149837973	-15.1183	55049293	-15.0667	310547	-15.0294	28606678	-14.9724
116082019	-15.1634	149031500	-15.1179	137234053	-15.0666	145798959	-15.0287	45089836	-14.9697
80598724	-15.1625	64080457	-15.1172	92002938	-15.0665	43353195	-15.0285	51669376	-14.9689
45089264	-15.1614	61279871	-15.1153	90470574	-15.0665	1133694	-15.0274	7744486	-14.9687
115485215	-15.1600	4505325	-15.1151	82840117	-15.0659	3359555	-15.0266	101366550	-14.9683
28604322	-15.1597	224856	-15.1145	62232030	-15.0656	731379	-15.0261	84040791	-14.9682
62711703	-15.1597	6918889	-15.1117	89766471	-15.0655	112547683	-15.0238	152451125	-14.9653
105799239	-15.1596	53988761	-15.1115	21881914	-15.0645	146036115	-15.0235	84044233	-14.9646
43353193	-15.1588	89078271	-15.1103	117043107	-15.0622	29031531	-15.0227	66835902	-14.9641
61827594	-15.1583	70464383	-15.1091	20536512	-15.0616	2094512	-15.0208	83016422	-14.9639
135612077	-15.1566	150790	-15.1083	563563	-15.0614	10465535	-15.0205	142838548	-14.9624
55159248	-15.1555	142238966	-15.1069	64051808	-15.0606	65366859	-15.0188	114619128	-14.9613
79812820	-15.1550	57181221	-15.1065	62231206	-15.0604	137249160	-15.0185	149618587	-14.9576
12891860	-15.1547	107795796	-15.1059	21960559	-15.0598	107367725	-15.0176	62709277	-14.9574
45925983	-15.1529	745594	-15.1052	18360082	-15.0588	43361411	-15.0118	136958715	-14.9567
93047886	-15.1529	155272909	-15.1049	60759799	-15.0583	61704110	-15.0118	20527675	-14.9564
54684910	-15.1527	87455790	-15.1040	113991800	-15.0582	83024597	-15.0117	79249747	-14.9550
150201099	-15.1527	136832221	-15.1014	118086421	-15.0582	103791437	-15.0081	116468786	-14.9545
62684321	-15.1522	136676819	-15.1014	45089192	-15.0578	99909439	-15.0072	18453192	-14.9528

PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
13720807	-14.9518	61828012	-14.9028	9742747	-14.8621	117027587	-14.8138	138332588	-14.7703
138334011	-14.9517	54595476	-14.9027	140866575	-14.8620	62681352	-14.8135	116190969	-14.7702
53765376	-14.9516	23973499	-14.9019	10750823	-14.8612	6928219	-14.8133	116182643	-14.7673
79540025	-14.9515	68494	-14.8998	115485179	-14.8611	104697901	-14.8116	104698664	-14.7662
61864728	-14.9493	85798506	-14.8991	138471118	-14.8604	104698212	-14.8114	144753955	-14.7658
135546692	-14.9491	123503441	-14.8990	17604105	-14.8598	115485342	-14.8113	70129860	-14.7657
43139184	-14.9484	152546306	-14.8989	63190224	-14.8596	103871820	-14.8102	116082017	-14.7654
152944091	-14.9482	151054179	-14.8953	50887716	-14.8594	103847495	-14.8091	153991795	-14.7653
64342499	-14.9480	62711498	-14.8950	143301235	-14.8593	70419136	-14.8080	138333651	-14.7641
61156654	-14.9477	1905389	-14.8949	69451987	-14.8592	154106207	-14.8077	140511671	-14.7635
81139557	-14.9477	53430651	-14.8947	114002319	-14.8555	81343	-14.8070	146510695	-14.7630
150356034	-14.9473	88960807	-14.8938	149935983	-14.8530	146565716	-14.8064	23558335	-14.7619
2185083	-14.9472	132187337	-14.8926	18669726	-14.8521	151619941	-14.8057	53421777	-14.7617
103102869	-14.9471	23338316	-14.8921	104698246	-14.8517	28377833	-14.8050	67579595	-14.7607
152159516	-14.9471	23436039	-14.8917	138334893	-14.8517	104698005	-14.8037	79810418	-14.7606
53421778	-14.9445	114169871	-14.8915	152767519	-14.8517	147587007	-14.8032	4294363	-14.7600
105778440	-14.9445	114169874	-14.8906	152835411	-14.8514	57521230	-14.8029	125300075	-14.7571
4556387	-14.9443	88010360	-14.8898	116129452	-14.8509	134648497	-14.8026	21467644	-14.7563
17800973	-14.9426	18342126	-14.8893	20196111	-14.8501	53420329	-14.8003	79355200	-14.7561
104328427	-14.9416	21538794	-14.8893	141471637	-14.8489	155060283	-14.7998	82950513	-14.7545
152617938	-14.9409	138332807	-14.8875	116133338	-14.8487	39732894	-14.7977	104697999	-14.7540
55031553	-14.9402	53985294	-14.8866	90447950	-14.8486	114617428	-14.7973	54533952	-14.7538
107410214	-14.9402	101507171	-14.8861	123350521	-14.8486	138332604	-14.7972	143527447	-14.7534
88936180	-14.9380	12326704	-14.8855	4419940	-14.8468	63190161	-14.7962	59072546	-14.7525
113319735	-14.9379	152840449	-14.8853	4343123	-14.8448	138332885	-14.7947	141820378	-14.7509
84052925	-14.9373	104698038	-14.8845	113342153	-14.8437	13059796	-14.7938	66682085	-14.7485
16773049	-14.9369	79835439	-14.8839	64478781	-14.8427	87521786	-14.7936	115455090	-14.7478
53270879	-14.9365	22129345	-14.8818	82839473	-14.8407	116418900	-14.7933	43321684	-14.7455
153702018	-14.9360	108893539	-14.8816	225999	-14.8402	104698659	-14.7922	104698068	-14.7445
11392891	-14.9352	79834459	-14.8809	105709435	-14.8397	135448714	-14.7920	76853954	-14.7440
114752013	-14.9347	106197924	-14.8809	113481398	-14.8397	114618127	-14.7914	21510766	-14.7419
10015751	-14.9335	115030589	-14.8803	132968284	-14.8381	138333884	-14.7912	104698222	-14.7417
82284133	-14.9329	66836178	-14.8800	3679274	-14.8368	116113199	-14.7905	63645517	-14.7400
113337688	-14.9315	66836177	-14.8800	21263536	-14.8348	116086522	-14.7905	149781814	-14.7397
104698651	-14.9305	129937884	-14.8787	18370	-14.8345	23001768	-14.7879	91873780	-14.7390
82796605	-14.9297	89906522	-14.8784	88029275	-14.8336	63539482	-14.7877	153887072	-14.7386
12833031	-14.9284	153044019	-14.8779	55049630	-14.8334	149635503	-14.7877	28193	-14.7377
57298534	-14.9283	101029192	-14.8756	86085197	-14.8333	3557604	-14.7874	232524	-14.7376
138332878	-14.9272	40596200	-14.8755	119093654	-14.8333	564306	-14.7866	85914910	-14.7365
82938734	-14.9259	107935638	-14.8752	775680	-14.8325	54285474	-14.7849	142306418	-14.7365
89667779	-14.9257	103791576	-14.8740	23244457	-14.8320	57368983	-14.7848	53536765	-14.7351
116365355	-14.9256	154332087	-14.8733	21116313	-14.8316	58668562	-14.7846	1809372	-14.7335
86306155	-14.9253	115031206	-14.8731	5456278	-14.8307	68823859	-14.7838	61995599	-14.7330
70479444	-14.9238	138332925	-14.8730	79838262	-14.8294	63183808	-14.7836	61826208	-14.7327
11310441	-14.9228	17361432	-14.8720	16777270	-14.8293	45089283	-14.7830	23047556	-14.7296
153850302	-14.9214	18988754	-14.8720	89669307	-14.8277	57291420	-14.7824	61065829	-14.7288
82785907	-14.9208	18771449	-14.8717	62682060	-14.8274	106330694	-14.7820	107796464	-14.7283
61984979	-14.9203	3811932	-14.8713	45072783	-14.8273	20667073	-14.7806	107795928	-14.7281
57186397	-14.9199	5475321	-14.8704	63183493	-14.8267	14480035	-14.7803	151011281	-14.7270
150559528	-14.9194	63184144	-14.8702	82317121	-14.8267	60858646	-14.7801	106148725	-14.7269
79672969	-14.9192	116342735	-14.8689	79695585	-14.8235	17058916	-14.7800	150892841	-14.7256
62933104	-14.9188	4408079	-14.8688	187877	-14.8225	154136152	-14.7795	63948315	-14.7246
45089675	-14.9175	44828861	-14.8680	61825804	-14.8216	18002459	-14.7790	135677750	-14.7245
140095159	-14.9172	53419300	-14.8673	114254125	-14.8198	13983474	-14.7788	116027543	-14.7244
22486401	-14.9148	82296807	-14.8665	57229516	-14.8197	141972136	-14.7788	20582465	-14.7239
63190083	-14.9148	22992888	-14.8663	55159818	-14.8188	25732583	-14.7787	65074587	-14.7228
62230184	-14.9119	4777952	-14.8641	63119132	-14.8173	61703362	-14.7749	154523908	-14.7205
104698781	-14.9101	43736007	-14.8635	152160303	-14.8164	799928	-14.7743	21951873	-14.7201
21801570	-14.9089	124504495	-14.8632	61851929	-14.8163	45089748	-14.7743	151371728	-14.7198
149860339	-14.9058	104698768	-14.8627	104185315	-14.8160	15179504	-14.7721	45072825	-14.7197
13720806	-14.9057	136958896	-14.8625	226576	-14.8158	113548817	-14.7710	84667447	-14.7184
23364367	-14.9028	129989536	-14.8622	102013976	-14.8146	63245514	-14.7708	82292976	-14.7177

PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
150078700	-14.7175	103869167	-14.6634	103791478	-14.6110	138334920	-14.5662	116071229	-14.5150
63210020	-14.7155	63537180	-14.6630	146227723	-14.6094	150356033	-14.5662	4157717	-14.5145
141892404	-14.7154	87907694	-14.6628	10214631	-14.6088	67112695	-14.5660	60847723	-14.5132
11470189	-14.7152	62231048	-14.6623	79838176	-14.6088	142178527	-14.5660	87142469	-14.5130
62231203	-14.7151	63184019	-14.6619	152569915	-14.6074	70700170	-14.5654	23338284	-14.5123
18427571	-14.7147	79673579	-14.6596	147687790	-14.6065	21843344	-14.5649	118629840	-14.5115
11172762	-14.7120	134648414	-14.6593	58727995	-14.6064	28604329	-14.5645	57381921	-14.5095
135532640	-14.7099	139984886	-14.6588	84772763	-14.6060	54537106	-14.5637	70603356	-14.5088
135478022	-14.7099	1556730	-14.6583	58123100	-14.6035	88964985	-14.5636	107853553	-14.5086
134414512	-14.7096	63190235	-14.6558	104500224	-14.6033	43139221	-14.5625	83026167	-14.5085
142237826	-14.7079	55049343	-14.6551	16776001	-14.6030	125468525	-14.5625	11379408	-14.5079
83187568	-14.7075	21830455	-14.6513	137185635	-14.6019	68617591	-14.5620	61983461	-14.5079
113506642	-14.7073	104698776	-14.6498	103791538	-14.6003	114516704	-14.5620	55009935	-14.5074
61983503	-14.7062	101565337	-14.6493	61969364	-14.5992	59625922	-14.5614	62710952	-14.5055
113644956	-14.7059	79837505	-14.6489	79689351	-14.5983	88645674	-14.5612	61287560	-14.5046
71501021	-14.7042	114217314	-14.6484	23606	-14.5972	727800	-14.5584	116070188	-14.5038
62230344	-14.7031	80267598	-14.6482	17865884	-14.5967	135922062	-14.5578	5343197	-14.5035
150754606	-14.7014	105647296	-14.6480	70542689	-14.5940	79885669	-14.5574	63189910	-14.5035
137672260	-14.6989	58851484	-14.6479	70542688	-14.5940	140866676	-14.5564	2869213	-14.5030
101164575	-14.6988	139895976	-14.6476	103791456	-14.5940	22064449	-14.5562	4615636	-14.5027
143299973	-14.6968	142924593	-14.6474	21452319	-14.5936	137628278	-14.5556	142776772	-14.5026
114010769	-14.6965	139946113	-14.6471	86925	-14.5926	107793068	-14.5539	61323461	-14.5024
116677838	-14.6960	81281696	-14.6439	88887059	-14.5913	105709463	-14.5535	53471812	-14.5020
139364862	-14.6959	63190038	-14.6423	107935645	-14.5912	118800338	-14.5523	154091853	-14.5015
65656645	-14.6952	55124985	-14.6406	22608425	-14.5889	9604036	-14.5515	19046226	-14.5013
63187688	-14.6930	7949245	-14.6385	9837955	-14.5888	63537014	-14.5505	117640442	-14.4994
107935660	-14.6925	145409753	-14.6385	114002374	-14.5880	116344321	-14.5498	58795617	-14.4987
117603535	-14.6917	104934320	-14.6383	114126371	-14.5875	116194750	-14.5494	150068971	-14.4962
59424830	-14.6914	132892811	-14.6375	125456407	-14.5872	57267705	-14.5483	58375510	-14.4942
11501694	-14.6883	21868232	-14.6370	138332709	-14.5867	50889027	-14.5477	113466650	-14.4934
82318633	-14.6879	53888336	-14.6359	9815216	-14.5856	88887047	-14.5461	10797532	-14.4908
107793050	-14.6866	53816993	-14.6337	63266803	-14.5856	75396	-14.5439	136324132	-14.4886
61320674	-14.6863	79837325	-14.6335	20582508	-14.5854	59595798	-14.5423	10656794	-14.4879
23338307	-14.6861	61988384	-14.6331	79834484	-14.5852	117367516	-14.5406	22064022	-14.4873
83410209	-14.6857	138332714	-14.6325	79200396	-14.5850	145843470	-14.5406	104698634	-14.4858
153834080	-14.6851	67113693	-14.6324	64049679	-14.5848	113442940	-14.5405	107792837	-14.4849
107792623	-14.6843	99441211	-14.6324	53430648	-14.5845	103868905	-14.5395	74868171	-14.4827
110841196	-14.6841	114002067	-14.6311	94007747	-14.5844	56625123	-14.5382	12828283	-14.4802
64051178	-14.6837	63183578	-14.6307	63212209	-14.5836	138334901	-14.5377	150613499	-14.4777
87310536	-14.6836	153839585	-14.6293	138975487	-14.5833	64049486	-14.5373	115485147	-14.4776
104319005	-14.6835	103513089	-14.6292	53414070	-14.5830	82318539	-14.5369	79354889	-14.4770
85596105	-14.6812	131597601	-14.6288	61826209	-14.5828	67600679	-14.5360	136415051	-14.4764
114217270	-14.6809	149723215	-14.6283	145106600	-14.5827	107854700	-14.5350	141913572	-14.4740
83047507	-14.6800	150547310	-14.6273	107795924	-14.5822	80696860	-14.5318	83121256	-14.4733
62681877	-14.6792	115485166	-14.6272	62711965	-14.5820	61198857	-14.5298	106177805	-14.4733
153842940	-14.6787	29553590	-14.6269	138333882	-14.5819	64049461	-14.5297	62649618	-14.4726
40511760	-14.6775	137498271	-14.6252	106178614	-14.5810	43172803	-14.5282	104516911	-14.4719
144124463	-14.6774	61995981	-14.6242	45304437	-14.5804	101692341	-14.5282	138333007	-14.4703
64080454	-14.6772	125451814	-14.6242	62642055	-14.5798	1787883	-14.5280	55118307	-14.4694
88100436	-14.6772	57075885	-14.6239	153778304	-14.5782	12900582	-14.5275	138332793	-14.4694
62680271	-14.6765	685652	-14.6233	115485479	-14.5767	61157013	-14.5273	121425049	-14.4692
62680270	-14.6758	62709794	-14.6233	61704547	-14.5761	63190014	-14.5271	113782852	-14.4664
89704352	-14.6756	143003460	-14.6231	150401563	-14.5755	116494327	-14.5262	107935555	-14.4659
25732492	-14.6689	143565273	-14.6220	154727142	-14.5718	61827398	-14.5218	62410541	-14.4636
227299	-14.6677	65071448	-14.6217	20667022	-14.5709	103869159	-14.5209	106189824	-14.4636
64049487	-14.6665	70376129	-14.6216	21818573	-14.5703	57271506	-14.5207	13534698	-14.4632
11011283	-14.6664	106842372	-14.6208	102067805	-14.5702	90349100	-14.5189	149140364	-14.4613
10954315	-14.6662	53686519	-14.6182	92009069	-14.5691	578067	-14.5185	118447845	-14.4612
55175341	-14.6651	114159524	-14.6170	90476400	-14.5691	134414509	-14.5185	9013116	-14.4585
54320331	-14.6648	79837784	-14.6153	45089275	-14.5676	62230866	-14.5176	18928833	-14.4580
15508802	-14.6644	43139197	-14.6144	5204334	-14.5671	94373364	-14.5176	62381990	-14.4559
138334772	-14.6643	60941575	-14.6119	61196359	-14.5665	121445894	-14.5152	84048082	-14.4545

PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
139752373	-14.4515	138334847	-14.3984	3308552	-14.3613	60094940	-14.3042	130554341	-14.2574
114136460	-14.4509	23382290	-14.3973	6994556	-14.3608	75316	-14.3038	105647398	-14.2569
63184091	-14.4485	151706432	-14.3962	70133143	-14.3599	134648433	-14.3037	151639280	-14.2544
155822461	-14.4483	63266536	-14.3938	90104866	-14.3596	976591	-14.3024	63190380	-14.2537
62710148	-14.4482	62682995	-14.3924	105589935	-14.3590	113319854	-14.3024	21860536	-14.2536
103102814	-14.4482	69822183	-14.3916	129718617	-14.3586	145333536	-14.3016	19609456	-14.2533
107796436	-14.4477	79049507	-14.3905	108019701	-14.3581	63050679	-14.3014	777101	-14.2525
62478678	-14.4470	61457294	-14.3903	63183972	-14.3577	43312808	-14.3011	20196156	-14.2515
116468807	-14.4451	106197914	-14.3896	154134685	-14.3573	136082944	-14.2984	132970649	-14.2513
152723088	-14.4441	125468913	-14.3896	85647163	-14.3570	138334599	-14.2983	62381802	-14.2510
115318215	-14.4423	28242263	-14.3891	81480551	-14.3565	104698221	-14.2975	61863984	-14.2509
138333649	-14.4417	2249731	-14.3886	20196143	-14.3559	107793117	-14.2966	108020703	-14.2503
62231200	-14.4412	106238827	-14.3881	123757875	-14.3549	150768314	-14.2940	270880	-14.2499
79354888	-14.4410	284994	-14.3875	67211161	-14.3548	103791419	-14.2936	63605503	-14.2493
64049817	-14.4405	68680138	-14.3873	134096642	-14.3537	11959056	-14.2925	99110248	-14.2493
138333231	-14.4405	148365894	-14.3870	43242395	-14.3534	61454804	-14.2913	152823639	-14.2468
137940443	-14.4399	55279796	-14.3864	61988958	-14.3522	113442935	-14.2911	129858726	-14.2465
62711292	-14.4398	12159969	-14.3858	62682061	-14.3513	62230347	-14.2910	154366602	-14.2461
115039407	-14.4398	61704552	-14.3857	5127384	-14.3508	43351274	-14.2896	114002378	-14.2430
58055819	-14.4388	82319686	-14.3851	106331105	-14.3503	108239074	-14.2894	143238146	-14.2412
147754647	-14.4384	4346272	-14.3846	50924379	-14.3482	142110572	-14.2876	115485444	-14.2409
145486820	-14.4350	61650147	-14.3845	138333692	-14.3477	93312	-14.2869	143847596	-14.2409
150591859	-14.4343	104698196	-14.3834	104934317	-14.3472	107793075	-14.2866	145843483	-14.2389
9586724	-14.4333	105787149	-14.3831	87595144	-14.3462	23338310	-14.2853	60030413	-14.2354
89202323	-14.4321	154857008	-14.3821	54979433	-14.3455	2903165	-14.2846	114002106	-14.2353
151225797	-14.4314	60046913	-14.3819	138332117	-14.3385	101744043	-14.2843	106331137	-14.2349
106192373	-14.4313	50928565	-14.3801	81282543	-14.3384	43321679	-14.2839	63189887	-14.2345
20475832	-14.4297	138334503	-14.3790	22994625	-14.3380	116070724	-14.2835	54595904	-14.2344
57171116	-14.4292	82294595	-14.3789	23338286	-14.3378	86069399	-14.2828	82796409	-14.2344
106136483	-14.4290	117043116	-14.3789	143364169	-14.3371	53806410	-14.2815	144473337	-14.2341
142971672	-14.4281	3613879	-14.3780	82784835	-14.3358	81801068	-14.2805	79725828	-14.2340
151447570	-14.4276	53419301	-14.3775	154298408	-14.3356	117715072	-14.2783	18371970	-14.2339
145345622	-14.4253	143627289	-14.3770	148972351	-14.3345	62231385	-14.2778	23285121	-14.2311
154810509	-14.4243	19037349	-14.3753	68537305	-14.3340	135590454	-14.2753	115485205	-14.2309
90205273	-14.4241	64477126	-14.3742	116041101	-14.3328	134117631	-14.2734	18979723	-14.2300
138543082	-14.4237	136972403	-14.3742	135400681	-14.3316	105646452	-14.2718	117029319	-14.2295
83024500	-14.4232	78101	-14.3740	150600197	-14.3313	140243933	-14.2713	89684567	-14.2283
13331474	-14.4203	60000138	-14.3738	62229995	-14.3307	116035300	-14.2699	122423282	-14.2257
28777110	-14.4189	152779034	-14.3731	53426403	-14.3305	33756661	-14.2696	506050	-14.2252
110841227	-14.4180	79837312	-14.3724	23338254	-14.3302	91069009	-14.2687	43139168	-14.2248
133618171	-14.4180	75088496	-14.3722	113319732	-14.3257	55049197	-14.2684	131597593	-14.2233
60644260	-14.4178	138332740	-14.3721	83016423	-14.3251	55049340	-14.2675	138332055	-14.2232
148426813	-14.4174	146795960	-14.3717	149837755	-14.3227	62993477	-14.2674	147618192	-14.2226
63078252	-14.4165	72911	-14.3703	107853417	-14.3203	63190259	-14.2673	61575194	-14.2225
57238679	-14.4151	63190346	-14.3703	11075599	-14.3202	61827706	-14.2671	147548598	-14.2222
116344311	-14.4133	4741743	-14.3692	63209977	-14.3202	145843481	-14.2660	149004512	-14.2220
80504157	-14.4111	11482052	-14.3691	80071960	-14.3197	129989632	-14.2653	134109891	-14.2218
64083912	-14.4108	4830452	-14.3690	58717150	-14.3178	91065299	-14.2643	81282432	-14.2200
61845863	-14.4093	45073207	-14.3683	63185068	-14.3173	55158680	-14.2638	227249	-14.2186
89418602	-14.4079	884458	-14.3678	116141459	-14.3169	230653	-14.2631	151901030	-14.2183
123514317	-14.4079	145494344	-14.3675	83026345	-14.3166	57925820	-14.2630	79351173	-14.2178
22141608	-14.4078	143438390	-14.3675	106190021	-14.3162	62680813	-14.2623	62998926	-14.2174
87402607	-14.4066	148083337	-14.3665	57299772	-14.3158	55161129	-14.2613	13734165	-14.2164
20371376	-14.4061	10797343	-14.3659	103925772	-14.3156	61828584	-14.2611	91001262	-14.2156
61703055	-14.4055	736532	-14.3658	43608613	-14.3143	76919230	-14.2611	135582289	-14.2154
92037225	-14.4024	63537860	-14.3657	63994819	-14.3143	81534249	-14.2602	458964	-14.2132
116191050	-14.4019	144374941	-14.3656	79812407	-14.3143	45919249	-14.2601	63668563	-14.2121
135928508	-14.4011	137553717	-14.3651	107795175	-14.3139	61826589	-14.2599	150578395	-14.2109
138334006	-14.4001	107570584	-14.3643	63187498	-14.3137	11390610	-14.2584	62710267	-14.2097
59412425	-14.3997	105787092	-14.3623	22303280	-14.3128	43774324	-14.2583	117651185	-14.2090
9991194	-14.3996	115485481	-14.3621	86032731	-14.3117	121269878	-14.2582	118913885	-14.2081
62812888	-14.3992	113442757	-14.3617	65364296	-14.3082	292331	-14.2574	62230863	-14.2076

PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
45072831	-14.2070	106190088	-14.1538	144801967	-14.1073	68678607	-14.0656	141179004	-14.0295
98776034	-14.2064	350217	-14.1537	79016329	-14.1068	144367260	-14.0654	18504951	-14.0293
79354988	-14.2057	76255	-14.1522	63187689	-14.1059	69217291	-14.0645	107752916	-14.0284
107796281	-14.2050	70650282	-14.1497	46185952	-14.1048	104700459	-14.0644	114516695	-14.0278
517716	-14.2046	16776069	-14.1490	134648402	-14.1041	20555538	-14.0607	63188304	-14.0266
86617210	-14.2036	61705172	-14.1475	107986665	-14.1038	62838878	-14.0600	43308754	-14.0261
225446	-14.2030	43093010	-14.1460	154401966	-14.1003	84658890	-14.0584	22152176	-14.0260
102009930	-14.2029	66345	-14.1453	82317706	-14.1001	87922061	-14.0570	53440587	-14.0240
68417228	-14.2027	16774848	-14.1445	251998	-14.0995	107793051	-14.0561	82319297	-14.0239
64477945	-14.2001	70598732	-14.1444	55049389	-14.0966	45072771	-14.0557	61828601	-14.0238
853546	-14.1997	114032543	-14.1426	94373344	-14.0966	24709167	-14.0552	129657217	-14.0230
152411414	-14.1991	65553043	-14.1421	12423501	-14.0965	43351275	-14.0552	87813617	-14.0227
64061438	-14.1986	130064414	-14.1417	113319841	-14.0963	75088490	-14.0545	15621151	-14.0215
79837695	-14.1982	20336005	-14.1414	3259669	-14.0955	62682441	-14.0541	122362312	-14.0214
63187539	-14.1972	115485355	-14.1392	123382610	-14.0954	9855717	-14.0540	150697433	-14.0201
2323150	-14.1966	88834165	-14.1389	150903787	-14.0952	113410693	-14.0538	141225688	-14.0194
133083404	-14.1964	107796513	-14.1383	120157234	-14.0948	682386	-14.0526	124706980	-14.0189
23801424	-14.1942	141053405	-14.1375	45072741	-14.0947	57607877	-14.0507	134109596	-14.0163
61196834	-14.1942	65678131	-14.1374	581665	-14.0935	82318001	-14.0500	67019195	-14.0160
119177674	-14.1912	105648149	-14.1372	75481679	-14.0931	87858406	-14.0499	138331975	-14.0153
135539248	-14.1902	124705296	-14.1372	13427893	-14.0927	60046914	-14.0493	123607023	-14.0150
135493417	-14.1900	146531	-14.1363	138332748	-14.0927	60046909	-14.0493	7009968	-14.0132
10514620	-14.1899	104328448	-14.1357	138333848	-14.0924	57607881	-14.0493	39732858	-14.0128
133625175	-14.1894	5079209	-14.1355	152780481	-14.0921	106022035	-14.0492	106705735	-14.0124
121201302	-14.1893	61321444	-14.1348	132492019	-14.0907	133188523	-14.0489	134861865	-14.0121
13725714	-14.1873	88509596	-14.1325	20217454	-14.0906	56633119	-14.0488	63077904	-14.0119
116027150	-14.1871	145843486	-14.1325	135501914	-14.0901	71309495	-14.0488	152055397	-14.0110
148181969	-14.1871	116027581	-14.1324	911093	-14.0868	138396184	-14.0488	125468901	-14.0108
143719764	-14.1864	62966834	-14.1320	55049104	-14.0864	50924535	-14.0482	154373616	-14.0097
19017367	-14.1844	142828229	-14.1312	114249950	-14.0858	63190058	-14.0478	62230351	-14.0095
64293834	-14.1844	21163250	-14.1310	116727221	-14.0856	50924537	-14.0477	83841519	-14.0080
89321454	-14.1816	2306645	-14.1265	2775249	-14.0852	153712536	-14.0474	153841927	-14.0075
148337877	-14.1784	107793222	-14.1265	12196194	-14.0851	152961977	-14.0473	110193415	-14.0063
71692777	-14.1772	138334664	-14.1261	63537008	-14.0850	103791381	-14.0461	12084333	-14.0060
58464548	-14.1755	135514911	-14.1254	63511673	-14.0850	153525922	-14.0457	62230524	-14.0054
91901908	-14.1754	19375276	-14.1250	227	-14.0849	87194822	-14.0445	21163246	-14.0043
114410124	-14.1749	28974137	-14.1245	12196191	-14.0849	20449630	-14.0437	114002318	-14.0017
151392329	-14.1742	101321367	-14.1243	11094791	-14.0849	10803376	-14.0429	88611506	-14.0010
55210917	-14.1736	108019702	-14.1242	10562813	-14.0849	19700001	-14.0426	103464877	-14.0006
138333010	-14.1729	79149174	-14.1239	28604441	-14.0849	113442766	-14.0424	104698777	-13.9999
20382889	-14.1723	153227918	-14.1231	55107886	-14.0842	123704059	-14.0422	9899081	-13.9993
59270029	-14.1698	146866639	-14.1230	53927138	-14.0820	6172100	-14.0415	2869356	-13.9971
104700356	-14.1697	62709625	-14.1227	107319685	-14.0815	102698528	-14.0400	62231863	-13.9970
555783	-14.1696	140590364	-14.1226	135711805	-14.0805	9013145	-14.0397	21517596	-13.9961
5906539	-14.1689	13209406	-14.1222	53723755	-14.0796	11074226	-14.0394	116006860	-13.9957
49831867	-14.1682	152692720	-14.1221	54332203	-14.0795	25157564	-14.0391	43139156	-13.9954
91133040	-14.1672	106019740	-14.1199	138975310	-14.0790	67746471	-14.0381	5343218	-13.9946
88611493	-14.1663	136684633	-14.1191	23103948	-14.0787	25558543	-14.0379	23338270	-13.9942
148765856	-14.1662	18453191	-14.1186	61186490	-14.0782	20596257	-14.0378	148860935	-13.9929
62230851	-14.1647	54052936	-14.1170	1864679	-14.0778	23338256	-14.0372	116030067	-13.9928
104934337	-14.1640	148340820	-14.1165	62231202	-14.0778	66757722	-14.0353	117928502	-13.9917
55163453	-14.1633	2759748	-14.1157	141598883	-14.0773	104698635	-14.0342	61703960	-13.9907
153795765	-14.1614	123288657	-14.1153	17172329	-14.0762	61301481	-14.0330	83049570	-13.9907
1506605	-14.1608	112625885	-14.1144	105645994	-14.0749	115485286	-14.0330	64911085	-13.9902
150003189	-14.1605	142616286	-14.1128	64242937	-14.0739	71752749	-14.0314	67822447	-13.9901
9834041	-14.1603	61575541	-14.1116	62070529	-14.0735	108020164	-14.0309	19986955	-13.9899
63699783	-14.1575	64723213	-14.1095	90814615	-14.0727	54286379	-14.0307	18001128	-13.9897
130865637	-14.1567	68656538	-14.1095	142910278	-14.0715	80598848	-14.0305	141322582	-13.9894
65165879	-14.1552	140431896	-14.1093	61828014	-14.0699	139821297	-14.0304	62231702	-13.9891
62682806	-14.1547	61187598	-14.1091	138719601	-14.0676	289074	-14.0298	9013086	-13.9868
2291626	-14.1545	70236733	-14.1090	89684566	-14.0665	10490157	-14.0298	107935716	-13.9838
76988151	-14.1545	154067227	-14.1081	79355827	-14.0664	82296806	-14.0298	9855628	-13.9803

PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
116194759	-13.9797	114136464	-13.9314	138332768	-13.8859	139207814	-13.8293	16227969	-13.7768
68292489	-13.9781	113319777	-13.9309	79840295	-13.8856	104934346	-13.8287	79829028	-13.7765
61995982	-13.9778	55002523	-13.9299	121309385	-13.8849	141245263	-13.8285	134318078	-13.7756
152845421	-13.9773	62680815	-13.9297	3896608	-13.8848	61828214	-13.8278	10589115	-13.7719
3383917	-13.9757	138334890	-13.9296	22157799	-13.8844	62710161	-13.8273	82318436	-13.7714
104700370	-13.9746	151260403	-13.9282	153693196	-13.8844	151745558	-13.8270	54351435	-13.7692
116026754	-13.9738	107796224	-13.9280	88601600	-13.8834	142232859	-13.8269	62041112	-13.7649
29297952	-13.9733	81282013	-13.9268	2351300	-13.8814	82318730	-13.8225	114248595	-13.7636
5810364	-13.9730	121204625	-13.9267	23338297	-13.8801	58467905	-13.8216	140636113	-13.7623
114617722	-13.9693	116012742	-13.9265	2755931	-13.8784	103791391	-13.8214	23274239	-13.7610
88611518	-13.9678	43736096	-13.9262	150511744	-13.8783	81813925	-13.8212	114410095	-13.7591
129867082	-13.9678	61826210	-13.9258	107418944	-13.8764	12437293	-13.8198	64342135	-13.7583
142910286	-13.9677	116043292	-13.9257	55234013	-13.8763	45089265	-13.8196	146583768	-13.7583
138334812	-13.9666	2865252	-13.9245	283505	-13.8760	103791483	-13.8179	146583767	-13.7583
23282442	-13.9665	62682067	-13.9238	103871809	-13.8759	137221293	-13.8166	116030719	-13.7578
64043886	-13.9663	115485206	-13.9238	62232190	-13.8755	136341436	-13.8166	62711024	-13.7572
138334670	-13.9663	116119589	-13.9230	139781885	-13.8731	153219783	-13.8144	135583354	-13.7570
8692	-13.9660	138333357	-13.9218	105634314	-13.8720	81542645	-13.8136	863491	-13.7560
84680878	-13.9660	13238591	-13.9214	103550134	-13.8720	125455544	-13.8129	114002384	-13.7547
57562675	-13.9657	21957875	-13.9212	20388478	-13.8707	88013547	-13.8127	70139758	-13.7542
62680452	-13.9651	70372561	-13.9212	39372108	-13.8694	114002105	-13.8124	137556008	-13.7536
57013682	-13.9639	83024007	-13.9210	54854505	-13.8687	67113318	-13.8121	153553615	-13.7536
43308753	-13.9630	107816613	-13.9192	138332721	-13.8681	20482578	-13.8105	135467629	-13.7530
106223311	-13.9616	83024313	-13.9185	138333614	-13.8675	99770375	-13.8101	87332621	-13.7520
63190320	-13.9613	9834273	-13.9179	6447764	-13.8667	18070191	-13.8098	153734700	-13.7517
63189822	-13.9613	115485150	-13.9179	65279154	-13.8660	82038981	-13.8096	63190219	-13.7509
88162037	-13.9609	43353179	-13.9169	150205689	-13.8660	145542160	-13.8085	57129875	-13.7507
86753967	-13.9609	145809493	-13.9163	138333433	-13.8657	123203056	-13.8072	39058258	-13.7499
82889862	-13.9599	106096951	-13.9157	43139187	-13.8647	129926859	-13.8059	89267695	-13.7464
151629808	-13.9585	43446698	-13.9154	147174098	-13.8643	117603534	-13.8058	139918747	-13.7459
20119173	-13.9571	113263362	-13.9153	151808368	-13.8639	154071852	-13.8057	72698635	-13.7451
11182865	-13.9558	61185745	-13.9125	63184059	-13.8596	63187302	-13.8054	83715279	-13.7449
115485122	-13.9515	123584037	-13.9114	62710091	-13.8595	87470	-13.8044	20382896	-13.7447
2724967	-13.9505	2063510	-13.9102	107795121	-13.8577	20196311	-13.8043	87908320	-13.7431
82318813	-13.9488	129787343	-13.9100	700604	-13.8537	102823283	-13.8037	20196153	-13.7430
105407600	-13.9472	116815995	-13.9092	106177404	-13.8536	43736057	-13.8036	107796250	-13.7426
65883034	-13.9469	104698362	-13.9086	150250319	-13.8535	150615512	-13.8024	116037672	-13.7425
67041756	-13.9463	82317602	-13.9085	17961362	-13.8516	101726213	-13.8018	116191055	-13.7420
3255573	-13.9457	79202956	-13.9059	114002375	-13.8514	135852811	-13.8003	105787129	-13.7414
118976491	-13.9454	44329191	-13.9051	108019605	-13.8513	135510805	-13.8003	2713893	-13.7406
19962303	-13.9444	138333646	-13.9051	90993954	-13.8504	55260240	-13.8002	103925786	-13.7392
45089273	-13.9432	104328530	-13.9040	105502781	-13.8496	1562002	-13.8000	6366789	-13.7390
18778410	-13.9422	137015731	-13.9040	43375087	-13.8486	11507435	-13.7977	129810376	-13.7380
115485442	-13.9414	80493158	-13.9038	78568057	-13.8472	148974284	-13.7965	9813401	-13.7354
83381105	-13.9401	138332037	-13.9035	63190277	-13.8469	117928668	-13.7956	45496799	-13.7354
21353465	-13.9400	106177267	-13.9033	105709395	-13.8441	5254464	-13.7939	65555016	-13.7351
135413645	-13.9398	63190133	-13.8996	115485513	-13.8422	11160640	-13.7928	22761752	-13.7329
79838363	-13.9397	23338300	-13.8988	16773232	-13.8401	302679	-13.7926	113442726	-13.7323
83024889	-13.9389	152614478	-13.8980	231278	-13.8391	141698288	-13.7926	115326122	-13.7321
115485183	-13.9385	69619103	-13.8976	61598471	-13.8385	148136679	-13.7920	138332832	-13.7317
1551532	-13.9381	88611512	-13.8970	22266658	-13.8377	106329957	-13.7917	63537512	-13.7315
153702017	-13.9379	88611511	-13.8970	67106049	-13.8370	105787103	-13.7900	310240	-13.7314
283473	-13.9378	115485251	-13.8960	136324595	-13.8357	138333134	-13.7876	9554960	-13.7314
9977308	-13.9378	63536980	-13.8956	136684892	-13.8355	20351880	-13.7855	89036644	-13.7310
43714034	-13.9374	11807503	-13.8927	22022661	-13.8338	54350771	-13.7846	63245730	-13.7305
61669252	-13.9374	152451126	-13.8925	87502360	-13.8336	14028665	-13.7833	122588665	-13.7298
88789343	-13.9369	152373038	-13.8919	107795034	-13.8334	43774327	-13.7823	114002107	-13.7269
64397628	-13.9358	62681349	-13.8916	104698624	-13.8333	131718401	-13.7819	104700276	-13.7258
609907	-13.9345	153783956	-13.8892	115485213	-13.8329	118828799	-13.7813	103847515	-13.7251
116191948	-13.9333	113319731	-13.8891	63510047	-13.8323	145843484	-13.7786	764960	-13.7249
81683914	-13.9329	138334855	-13.8877	134406977	-13.8312	153122836	-13.7775	23274034	-13.7244
5950415	-13.9314	43361894	-13.8865	53307031	-13.8303	104698580	-13.7770	89359749	-13.7238

PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
134345108	-13.7230	28788155	-13.6789	117185	-13.6267	57925923	-13.5763	55163848	-13.5358
6296684	-13.7227	101717107	-13.6783	83144331	-13.6261	115485220	-13.5755	88428636	-13.5343
116371092	-13.7217	62711457	-13.6762	103791473	-13.6254	24721080	-13.5717	103925756	-13.5333
4738994	-13.7198	108093538	-13.6759	62230699	-13.6249	107796487	-13.5711	107796458	-13.5325
83024494	-13.7194	70625388	-13.6754	3636372	-13.6231	44621386	-13.5707	154880	-13.5319
62710606	-13.7192	82182529	-13.6735	62681168	-13.6202	154133382	-13.5705	57184519	-13.5318
59625850	-13.7191	60941156	-13.6726	85783224	-13.6197	106216747	-13.5704	154095927	-13.5300
6950608	-13.7190	86691109	-13.6708	118168624	-13.6184	86673984	-13.5702	130244290	-13.5290
82319601	-13.7189	152992763	-13.6699	21163369	-13.6183	22439330	-13.5691	61703061	-13.5282
83015610	-13.7179	18360081	-13.6688	68047309	-13.6183	115872557	-13.5689	138334685	-13.5282
138334775	-13.7170	62684320	-13.6688	150226506	-13.6183	104698728	-13.5685	3125310	-13.5279
153184456	-13.7170	135084363	-13.6687	116113162	-13.6179	113976152	-13.5685	1787891	-13.5279
43628486	-13.7168	62710595	-13.6676	113319838	-13.6172	11709136	-13.5675	64760186	-13.5277
107795713	-13.7165	61196033	-13.6674	62681351	-13.6168	152285547	-13.5673	62547133	-13.5275
104698249	-13.7147	259878	-13.6672	10013686	-13.6162	145137629	-13.5672	65291964	-13.5268
81281767	-13.7146	61675144	-13.6654	64767267	-13.6155	79837972	-13.5669	113471798	-13.5243
13008096	-13.7142	116041163	-13.6653	114002128	-13.6154	116174936	-13.5643	115485363	-13.5242
138332790	-13.7142	81107426	-13.6644	20747926	-13.6150	126684070	-13.5638	144549499	-13.5239
139484877	-13.7118	13813859	-13.6635	106189803	-13.6149	142977062	-13.5638	18548302	-13.5225
121904097	-13.7113	79864031	-13.6622	107796032	-13.6148	116019180	-13.5634	81826723	-13.5218
106703601	-13.7108	152008212	-13.6616	146567158	-13.6147	5319539	-13.5611	1583651	-13.5211
106294946	-13.7108	104107299	-13.6612	116645369	-13.6144	138332704	-13.5609	64584232	-13.5204
62122164	-13.7104	81682681	-13.6586	10909734	-13.6140	151863687	-13.5609	63190221	-13.5203
54990661	-13.7097	63362371	-13.6565	63189821	-13.6134	129937890	-13.5602	4777971	-13.5197
89990426	-13.7097	116119625	-13.6565	12082	-13.6123	18996395	-13.5596	4738993	-13.5197
80082522	-13.7087	11030398	-13.6557	54031288	-13.6098	39732882	-13.5591	12716623	-13.5195
1787886	-13.7078	62999452	-13.6554	53699441	-13.6067	81282341	-13.5591	89713223	-13.5185
104934343	-13.7078	12439864	-13.6551	43139165	-13.6035	3478255	-13.5580	66957728	-13.5173
84669861	-13.7070	80264990	-13.6530	62835147	-13.6034	45072801	-13.5579	103847511	-13.5164
63190237	-13.7055	43654961	-13.6527	113342155	-13.6034	106115597	-13.5577	46494792	-13.5132
147665900	-13.7037	21982857	-13.6508	135044049	-13.6027	107796242	-13.5574	44828854	-13.5130
28606809	-13.7007	63236501	-13.6482	116353953	-13.6024	117765833	-13.5561	62680449	-13.5130
138334597	-13.6998	114410069	-13.6477	134822070	-13.6023	62217241	-13.5547	101893138	-13.5097
138333385	-13.6987	131239032	-13.6472	63184863	-13.6001	16770604	-13.5543	113343850	-13.5053
107854798	-13.6983	44828874	-13.6468	62232367	-13.5998	117815161	-13.5532	53845964	-13.5048
7043974	-13.6973	12452091	-13.6466	105407589	-13.5980	64680192	-13.5530	63500945	-13.5047
69347138	-13.6968	44828875	-13.6463	345356	-13.5964	89294982	-13.5523	61827632	-13.5046
104516932	-13.6968	53976687	-13.6452	106314486	-13.5964	19351340	-13.5513	16775896	-13.5040
283474	-13.6957	104963545	-13.6433	56648259	-13.5961	138333226	-13.5503	147840845	-13.5033
148177060	-13.6949	55207610	-13.6430	141018841	-13.5961	153210520	-13.5498	82785170	-13.5027
11555753	-13.6942	107935744	-13.6417	17876714	-13.5956	24711071	-13.5495	61705009	-13.5021
312028	-13.6912	103190553	-13.6412	6997802	-13.5947	45791337	-13.5495	20754300	-13.5007
80080367	-13.6904	152358928	-13.6410	146567155	-13.5943	14473459	-13.5493	3703092	-13.5006
114797942	-13.6899	43321676	-13.6401	62415207	-13.5925	66637150	-13.5484	34487	-13.4993
115485354	-13.6894	62816778	-13.6400	147366043	-13.5919	130485194	-13.5482	22096619	-13.4987
43172022	-13.6887	60085665	-13.6391	139240247	-13.5904	107935570	-13.5468	54268052	-13.4979
53364116	-13.6875	136059790	-13.6380	103791571	-13.5896	116131804	-13.5468	43321655	-13.4976
291289	-13.6872	145843490	-13.6370	105709427	-13.5889	39357405	-13.5462	116036495	-13.4974
9877928	-13.6859	136958413	-13.6369	115485233	-13.5873	313682	-13.5457	55107700	-13.4967
105646279	-13.6856	88958770	-13.6359	135710718	-13.5873	18688030	-13.5447	1180479	-13.4965
65232506	-13.6853	82785334	-13.6356	101380143	-13.5856	70479587	-13.5447	16228622	-13.4963
43353135	-13.6852	61703811	-13.6352	65678334	-13.5849	69045376	-13.5431	61704262	-13.4963
65347961	-13.6843	84760550	-13.6346	136685032	-13.5845	13212869	-13.5418	141339506	-13.4932
150464867	-13.6841	10936027	-13.6330	18371971	-13.5838	65587482	-13.5404	110841225	-13.4911
64042369	-13.6837	4741687	-13.6323	399455	-13.5833	106022072	-13.5398	28983867	-13.4909
103847496	-13.6837	107272932	-13.6317	67083172	-13.5815	82538434	-13.5394	70625613	-13.4899
18687952	-13.6834	84768928	-13.6301	107795184	-13.5798	106703592	-13.5388	61202137	-13.4859
120684656	-13.6825	135450296	-13.6295	153933004	-13.5797	82538065	-13.5386	24782	-13.4839
60167480	-13.6815	64499555	-13.6277	149452930	-13.5790	91303416	-13.5375	115485182	-13.4827
69492845	-13.6813	9013210	-13.6272	62231708	-13.5784	154073897	-13.5371	3703093	-13.4813
62675457	-13.6797	136162735	-13.6271	150671617	-13.5777	60644609	-13.5363	79838173	-13.4789
43210822	-13.6789	154122410	-13.6268	19032249	-13.5768	153644891	-13.5359	11564567	-13.4773

PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
89408187	-13.4771	107795062	-13.4315	80190337	-13.3794	104700482	-13.3333	21413964	-13.2878
138334549	-13.4769	62232195	-13.4312	104700519	-13.3773	17865886	-13.3329	669159	-13.2861
112735288	-13.4761	63279626	-13.4309	134895031	-13.3757	106703606	-13.3321	145106556	-13.2852
103847487	-13.4758	13079658	-13.4295	139977521	-13.3753	113863274	-13.3317	103489190	-13.2846
66613599	-13.4746	151132697	-13.4282	44814802	-13.3722	61974787	-13.3308	63189810	-13.2844
106238964	-13.4746	105766591	-13.4266	62231691	-13.3720	138332816	-13.3306	116147820	-13.2838
152239483	-13.4728	138975384	-13.4263	19852681	-13.3719	153846431	-13.3306	117043136	-13.2831
9013143	-13.4727	62230003	-13.4261	141909526	-13.3719	62388684	-13.3299	132064942	-13.2821
43139172	-13.4712	62811679	-13.4247	43267300	-13.3717	44329187	-13.3285	138332881	-13.2813
50888960	-13.4711	44828868	-13.4244	59116249	-13.3715	55158854	-13.3272	149631781	-13.2806
45089772	-13.4690	106930436	-13.4237	728757	-13.3706	55125027	-13.3271	82536701	-13.2805
28983863	-13.4688	140446185	-13.4234	103925758	-13.3654	151445707	-13.3269	55163653	-13.2804
61247850	-13.4685	60759800	-13.4231	82319017	-13.3643	62710772	-13.3267	9013184	-13.2801
55231855	-13.4680	79050531	-13.4229	4729201	-13.3640	62633884	-13.3257	152213498	-13.2796
616841	-13.4671	116072134	-13.4228	140787461	-13.3640	15622204	-13.3240	45089238	-13.2788
141338447	-13.4666	135697398	-13.4225	60989492	-13.3636	114217258	-13.3239	137245328	-13.2787
106293442	-13.4664	62197384	-13.4202	4374548	-13.3633	23278789	-13.3233	95532004	-13.2768
106315956	-13.4663	23333930	-13.4200	104474771	-13.3629	62681531	-13.3223	135610195	-13.2763
62230174	-13.4653	114411870	-13.4198	103791384	-13.3629	55107458	-13.3212	138333229	-13.2761
141493010	-13.4653	101448736	-13.4194	21163296	-13.3625	153796962	-13.3210	69539511	-13.2751
16774304	-13.4637	114154485	-13.4154	64680815	-13.3622	116214845	-13.3203	115485401	-13.2741
65279206	-13.4634	58375581	-13.4146	84667445	-13.3615	115485375	-13.3190	51394299	-13.2717
139781884	-13.4632	116037685	-13.4139	105698293	-13.3604	44828871	-13.3183	60941683	-13.2714
90739520	-13.4627	138332899	-13.4124	25732511	-13.3599	151906248	-13.3178	146722829	-13.2709
142281140	-13.4623	150001723	-13.4122	85736893	-13.3596	101692338	-13.3176	2750085	-13.2693
116045738	-13.4619	58123125	-13.4121	23338279	-13.3593	45089708	-13.3169	81282837	-13.2682
151156926	-13.4615	147725573	-13.4111	39058264	-13.3590	152876792	-13.3158	60644258	-13.2678
82317806	-13.4611	76919211	-13.4100	139721375	-13.3576	15311270	-13.3151	68691263	-13.2673
121271522	-13.4603	73186698	-13.4094	154396795	-13.3571	149967493	-13.3131	62135953	-13.2652
151343752	-13.4597	89334625	-13.4092	4679218	-13.3567	154473247	-13.3125	13431287	-13.2622
149684227	-13.4591	135485462	-13.4062	62709278	-13.3546	67746453	-13.3112	13079662	-13.2619
150170721	-13.4559	19986954	-13.4058	79837988	-13.3544	91873820	-13.3107	61704115	-13.2618
142991732	-13.4559	107706100	-13.4046	147608243	-13.3539	44828872	-13.3106	76851820	-13.2608
63189780	-13.4539	23451468	-13.4042	70249533	-13.3523	89375713	-13.3099	123145424	-13.2608
69463742	-13.4532	88781586	-13.4028	136269234	-13.3519	113892823	-13.3087	138332755	-13.2604
129850987	-13.4522	66975101	-13.4022	138333437	-13.3508	252597	-13.3079	70512996	-13.2588
149606220	-13.4521	115485153	-13.4006	84760561	-13.3504	6933253	-13.3060	150474707	-13.2583
152167778	-13.4521	116423390	-13.4003	55107357	-13.3496	70130401	-13.3048	129632708	-13.2576
138986331	-13.4508	144469288	-13.3996	562429	-13.3492	106703639	-13.3047	4711771	-13.2570
103993257	-13.4507	12540192	-13.3995	116133312	-13.3480	817188	-13.3039	53406010	-13.2568
152778103	-13.4489	57663468	-13.3981	135019648	-13.3473	116043278	-13.3024	115485473	-13.2559
141417593	-13.4480	138332120	-13.3969	130859293	-13.3468	62682058	-13.3015	131232401	-13.2554
150761223	-13.4476	67265641	-13.3965	123316442	-13.3458	116021285	-13.3010	60643762	-13.2552
50887614	-13.4462	81172865	-13.3960	138332745	-13.3455	113410684	-13.3006	89516884	-13.2548
108814645	-13.4433	11425691	-13.3929	135525675	-13.3440	55157918	-13.3005	138332808	-13.2547
153796961	-13.4424	61184181	-13.3924	143675430	-13.3438	115485464	-13.2999	105755639	-13.2544
116493759	-13.4411	22022653	-13.3921	64359831	-13.3431	6950869	-13.2997	9989603	-13.2539
22045906	-13.4405	63190104	-13.3916	150004102	-13.3425	104830034	-13.2996	83779722	-13.2513
42352921	-13.4393	21520261	-13.3905	68649743	-13.3420	53787500	-13.2987	64035124	-13.2503
104697963	-13.4390	61669790	-13.3901	25021707	-13.3412	1563361	-13.2986	64190635	-13.2489
20382907	-13.4389	116026905	-13.3877	55163452	-13.3411	63212766	-13.2984	154943737	-13.2487
15442757	-13.4385	44280664	-13.3864	62232032	-13.3404	84901197	-13.2981	82294596	-13.2485
139270100	-13.4380	122683376	-13.3861	82839005	-13.3400	9751446	-13.2962	114266650	-13.2471
108910341	-13.4379	63244525	-13.3857	16228241	-13.3391	151290290	-13.2961	55124987	-13.2469
85745578	-13.4362	68945568	-13.3857	21105428	-13.3385	68923432	-13.2958	91068053	-13.2467
151736244	-13.4342	104700402	-13.3849	62681529	-13.3379	116029895	-13.2948	149986700	-13.2454
62682804	-13.4338	67745236	-13.3832	71772493	-13.3369	15257053	-13.2934	62231030	-13.2450
62711974	-13.4333	17604784	-13.3823	103993260	-13.3368	113319816	-13.2934	9013187	-13.2448
60643904	-13.4330	22967425	-13.3818	114257555	-13.3368	53328088	-13.2929	59083881	-13.2440
57944090	-13.4329	115485219	-13.3816	79250308	-13.3366	85824420	-13.2921	9877904	-13.2417
101170325	-13.4323	69968794	-13.3800	65678365	-13.3337	89093912	-13.2912	107796388	-13.2407
61985606	-13.4318	103791541	-13.3798	107282250	-13.3333	43139220	-13.2886	94831147	-13.2382



PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
84680876	-13.2379	151983453	-13.1813	14416930	-13.1366	63185330	-13.0923	116080894	-13.0426
64043690	-13.2372	66801097	-13.1809	107796296	-13.1351	79198752	-13.0922	66696582	-13.0417
39058255	-13.2371	138332298	-13.1791	57611969	-13.1346	680909	-13.0921	62230360	-13.0411
122707267	-13.2371	135617273	-13.1777	23175533	-13.1343	107653111	-13.0918	64349378	-13.0400
89516883	-13.2366	130650581	-13.1776	104097646	-13.1343	139967992	-13.0901	138332099	-13.0399
23338318	-13.2364	107795733	-13.1769	132518981	-13.1338	28627	-13.0895	22724780	-13.0380
7762172	-13.2345	107445199	-13.1754	131869360	-13.1338	148748161	-13.0895	115485141	-13.0373
106703609	-13.2325	137935991	-13.1750	138396185	-13.1338	145843464	-13.0871	131242000	-13.0353
61448692	-13.2317	79401405	-13.1719	255032	-13.1329	76993169	-13.0866	113287883	-13.0350
82363137	-13.2309	63190260	-13.1718	4741685	-13.1328	63538804	-13.0865	151093910	-13.0334
104698741	-13.2308	87880927	-13.1714	53216070	-13.1328	136392263	-13.0860	61704399	-13.0332
150226505	-13.2295	61826353	-13.1710	28604224	-13.1328	104552292	-13.0852	9836603	-13.0331
150226504	-13.2295	20594712	-13.1707	45038201	-13.1327	151221961	-13.0841	13507379	-13.0317
121399108	-13.2286	87175745	-13.1705	107795775	-13.1321	67568832	-13.0830	57064116	-13.0307
58429471	-13.2273	21105497	-13.1701	20315617	-13.1315	102940301	-13.0830	116080892	-13.0302
53924615	-13.2259	23338277	-13.1692	36691340	-13.1308	62232020	-13.0826	138333009	-13.0301
143394211	-13.2250	127562069	-13.1683	68832890	-13.1306	149742914	-13.0819	141174977	-13.0291
63076171	-13.2244	138333236	-13.1683	890550	-13.1284	28511933	-13.0805	147507775	-13.0290
93895388	-13.2221	30700	-13.1678	138332744	-13.1282	79838364	-13.0794	115030587	-13.0287
3884682	-13.2216	88958858	-13.1665	68849540	-13.1253	61150170	-13.0773	10398110	-13.0286
131117772	-13.2210	259834	-13.1661	79837991	-13.1252	129897776	-13.0769	63190121	-13.0275
20036903	-13.2185	680908	-13.1660	69101411	-13.1249	63188259	-13.0768	62516164	-13.0275
82889172	-13.2171	115041997	-13.1653	60643102	-13.1235	103791490	-13.0758	42352924	-13.0273
61703527	-13.2170	151410979	-13.1652	55158486	-13.1223	115485120	-13.0736	79838580	-13.0266
115872166	-13.2168	63961627	-13.1651	155321675	-13.1219	7640321	-13.0725	68728426	-13.0255
154330716	-13.2167	57476484	-13.1644	135443216	-13.1197	116327025	-13.0722	131842701	-13.0254
131286540	-13.2162	115485121	-13.1644	40424247	-13.1189	88328181	-13.0713	138333655	-13.0242
108909405	-13.2160	61703199	-13.1627	150676781	-13.1180	24073342	-13.0711	65656070	-13.0236
754192	-13.2156	87448090	-13.1623	61703954	-13.1177	121391440	-13.0706	21177363	-13.0232
24699828	-13.2145	62232383	-13.1622	152770005	-13.1175	138333063	-13.0695	116375174	-13.0229
151387652	-13.2081	23338260	-13.1618	62680457	-13.1158	113263361	-13.0687	88643368	-13.0224
79840674	-13.2063	116375166	-13.1618	133061897	-13.1152	12696588	-13.0682	63190262	-13.0211
63207769	-13.2058	63187819	-13.1612	151688232	-13.1146	61458366	-13.0681	4999210	-13.0210
18924486	-13.2051	57415443	-13.1606	115485216	-13.1132	110204048	-13.0675	114152215	-13.0209
16776736	-13.2047	76851353	-13.1599	107752932	-13.1126	142143688	-13.0665	107404908	-13.0200
143152414	-13.2019	77231104	-13.1593	100526289	-13.1115	116428997	-13.0659	116294857	-13.0196
115485156	-13.2011	114002265	-13.1568	137060951	-13.1111	62711001	-13.0650	144276484	-13.0194
19177452	-13.2003	104690119	-13.1549	10561845	-13.1093	138958378	-13.0643	79837971	-13.0187
61321941	-13.2000	63190390	-13.1546	104698214	-13.1088	20841768	-13.0638	138333440	-13.0184
138332621	-13.1999	104698132	-13.1540	23278954	-13.1083	138334571	-13.0635	113596730	-13.0168
82317192	-13.1990	63829626	-13.1532	282796	-13.1075	151449083	-13.0633	116348831	-13.0166
150024974	-13.1976	57049420	-13.1531	20382883	-13.1060	104700354	-13.0626	104328447	-13.0161
61828746	-13.1961	104328388	-13.1525	21387793	-13.1059	113835495	-13.0614	9013115	-13.0160
123924296	-13.1951	155297932	-13.1512	107795752	-13.1041	153599071	-13.0586	142124603	-13.0160
88227455	-13.1947	8122187	-13.1504	64227418	-13.1025	83854014	-13.0575	76993027	-13.0158
138332087	-13.1945	68292488	-13.1504	104697922	-13.1012	129375446	-13.0575	114619123	-13.0155
79401258	-13.1941	3308553	-13.1502	145843500	-13.1006	122420	-13.0566	106448493	-13.0151
103791442	-13.1940	61404514	-13.1499	21105411	-13.0997	154810558	-13.0547	107818220	-13.0150
23341015	-13.1938	9012764	-13.1459	62711297	-13.0995	88342158	-13.0544	43200257	-13.0132
63603760	-13.1923	5255576	-13.1448	21313489	-13.0994	121904099	-13.0537	15130373	-13.0123
63528347	-13.1912	147342903	-13.1446	654809	-13.0992	63538024	-13.0534	578041	-13.0120
63684335	-13.1909	71695285	-13.1445	116150674	-13.0985	55159245	-13.0533	61421014	-13.0118
62232016	-13.1899	43167719	-13.1429	107792778	-13.0978	88435649	-13.0512	9013195	-13.0113
64051821	-13.1895	2337	-13.1421	80692169	-13.0977	117781905	-13.0512	129715166	-13.0101
113485828	-13.1892	18996392	-13.1415	283844	-13.0969	138332750	-13.0506	9013130	-13.0090
103791491	-13.1884	62709923	-13.1387	117560225	-13.0968	15789817	-13.0496	88110463	-13.0082
6937273	-13.1869	69639918	-13.1380	116042541	-13.0967	62682994	-13.0489	64767005	-13.0066
151621849	-13.1855	152778498	-13.1380	114063365	-13.0956	84765520	-13.0480	21629098	-13.0065
12270779	-13.1837	61704116	-13.1379	114410155	-13.0954	10500044	-13.0477	82300975	-13.0060
61194976	-13.1828	63223114	-13.1379	21100679	-13.0948	115485126	-13.0446	18996394	-13.0046
45072777	-13.1821	106314481	-13.1379	22006574	-13.0929	112547657	-13.0446	120157216	-13.0044
7949244	-13.1816	71313692	-13.1376	15745480	-13.0926	139786824	-13.0434	135443215	-12.9972

PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
138332986	-12.9964	69609304	-12.9469	10750573	-12.8976	115730017	-12.8447	43774342	-12.7964
8893331	-12.9956	52940093	-12.9462	82841780	-12.8973	10514976	-12.8436	135496924	-12.7951
88957904	-12.9947	3463759	-12.9455	62210233	-12.8956	145843501	-12.8436	150482765	-12.7946
62230362	-12.9945	103791411	-12.9453	70130926	-12.8956	61703964	-12.8429	114933028	-12.7945
59444831	-12.9944	150567228	-12.9434	107935810	-12.8951	9013194	-12.8427	43321675	-12.7939
87447636	-12.9939	3836325	-12.9430	72083733	-12.8942	85527925	-12.8424	108020163	-12.7934
113263373	-12.9939	80072438	-12.9425	21735463	-12.8941	116194733	-12.8417	65418272	-12.7909
150026249	-12.9896	83703133	-12.9425	107935568	-12.8923	21678499	-12.8410	153078139	-12.7903
130762658	-12.9884	88164067	-12.9422	62232028	-12.8920	57609913	-12.8392	277949	-12.7902
138986330	-12.9856	126972562	-12.9420	20449638	-12.8881	112588103	-12.8388	9013221	-12.7900
62969856	-12.9836	106096890	-12.9410	62889986	-12.8878	81281780	-12.8387	118034531	-12.7894
129375447	-12.9834	16489207	-12.9379	87799548	-12.8858	66938284	-12.8380	3485014	-12.7877
2736799	-12.9829	53916316	-12.9374	147495070	-12.8858	107175017	-12.8380	137419780	-12.7872
154491757	-12.9827	76083699	-12.9374	152635152	-12.8857	116327016	-12.8375	140570946	-12.7862
113488844	-12.9826	9013131	-12.9372	116194724	-12.8842	62711660	-12.8372	153718663	-12.7840
63190347	-12.9819	56996306	-12.9353	151906247	-12.8836	329636	-12.8366	71366419	-12.7822
127562090	-12.9812	69285308	-12.9328	114515954	-12.8833	7918735	-12.8363	67894449	-12.7809
106314450	-12.9790	61669253	-12.9325	143301143	-12.8829	21163348	-12.8356	147765093	-12.7807
11615814	-12.9788	5998689	-12.9285	143364171	-12.8822	70417453	-12.8355	145559143	-12.7802
55133716	-12.9786	44558845	-12.9271	106826280	-12.8808	138334811	-12.8343	112547675	-12.7801
62711290	-12.9768	1801342	-12.9269	105778384	-12.8798	114200602	-12.8337	106293267	-12.7796
138333410	-12.9750	17959271	-12.9264	63998388	-12.8787	141488011	-12.8307	115327361	-12.7783
60988487	-12.9714	61703521	-12.9255	145843451	-12.8785	129897775	-12.8299	151199957	-12.7781
23338319	-12.9698	82319848	-12.9235	81282763	-12.8779	104434292	-12.8298	63949746	-12.7777
114002368	-12.9697	149502952	-12.9230	64161590	-12.8768	640700	-12.8296	63189999	-12.7774
148936658	-12.9695	22141612	-12.9229	84692571	-12.8768	53434977	-12.8285	123831684	-12.7771
104097365	-12.9681	44828867	-12.9224	116221594	-12.8750	43736153	-12.8266	106916060	-12.7765
116493768	-12.9675	16777342	-12.9208	84678300	-12.8742	70348937	-12.8256	107795705	-12.7752
82319148	-12.9652	21486320	-12.9194	79314782	-12.8723	24900599	-12.8226	114002376	-12.7745
102282828	-12.9652	141440629	-12.9194	138332124	-12.8715	55158681	-12.8220	79854132	-12.7742
24165449	-12.9640	8893332	-12.9189	43774335	-12.8709	104698704	-12.8210	79838078	-12.7730
43350951	-12.9634	12455982	-12.9188	98488	-12.8704	123559784	-12.8208	3275763	-12.7720
65180403	-12.9631	10655836	-12.9179	103791574	-12.8701	24711012	-12.8207	80390887	-12.7717
26584889	-12.9617	51922247	-12.9177	147440484	-12.8699	43614198	-12.8200	88642350	-12.7717
134879861	-12.9614	24711007	-12.9174	65677718	-12.8690	138333875	-12.8190	127006251	-12.7714
12190407	-12.9604	11959004	-12.9170	80333879	-12.8675	63959823	-12.8189	136933559	-12.7714
43351228	-12.9604	23338265	-12.9165	114411188	-12.8672	63189850	-12.8186	9013140	-12.7709
15132854	-12.9600	138334019	-12.9146	114949878	-12.8670	12143388	-12.8169	24695639	-12.7709
79202669	-12.9592	63695246	-12.9141	62682805	-12.8667	74315162	-12.8162	69257740	-12.7704
104830022	-12.9572	103790220	-12.9132	138333899	-12.8660	57624780	-12.8160	141046707	-12.7702
62230526	-12.9570	114410061	-12.9127	79837690	-12.8659	138333548	-12.8137	115485124	-12.7698
16109083	-12.9565	113442753	-12.9127	151412710	-12.8653	43170110	-12.8136	62680808	-12.7682
71340445	-12.9561	88850511	-12.9124	102863184	-12.8652	9013088	-12.8130	62230682	-12.7677
61705006	-12.9560	20536493	-12.9122	114134293	-12.8636	67977751	-12.8129	20277836	-12.7672
637657	-12.9559	93256991	-12.9119	16286	-12.8635	87553906	-12.8121	54099559	-12.7672
63528662	-12.9544	114093954	-12.9105	63695250	-12.8633	104700411	-12.8106	2795515	-12.7670
61320991	-12.9543	138333551	-12.9099	106214400	-12.8615	28604449	-12.8088	132516842	-12.7661
107795081	-12.9542	103791498	-12.9095	7176	-12.8607	103929474	-12.8079	152433298	-12.7657
23333950	-12.9538	141470053	-12.9089	25732513	-12.8579	116035370	-12.8076	62120597	-12.7652
12781447	-12.9531	79585333	-12.9057	105700933	-12.8567	7079402	-12.8065	927345	-12.7650
21257706	-12.9527	89100602	-12.9046	45089749	-12.8563	136240918	-12.8063	25900498	-12.7648
114154493	-12.9527	85647350	-12.9045	61596652	-12.8545	62682238	-12.8061	67708280	-12.7642
136958895	-12.9527	82839467	-12.9031	64190638	-12.8530	113328104	-12.8047	1266858	-12.7624
151768679	-12.9515	105647925	-12.9031	11594343	-12.8514	104697936	-12.8041	105648570	-12.7611
44828865	-12.9514	7021763	-12.9022	22730410	-12.8513	114192361	-12.8026	5045268	-12.7607
107146521	-12.9503	65083918	-12.9019	104168870	-12.8496	138332552	-12.8015	106223322	-12.7604
104698729	-12.9503	138986332	-12.8997	775676	-12.8478	116326225	-12.8011	138332471	-12.7604
105971218	-12.9501	154200120	-12.8995	61845655	-12.8463	151346316	-12.8011	62232205	-12.7580
55031141	-12.9497	54256007	-12.8993	70002540	-12.8458	70927651	-12.8009	138332286	-12.7578
21864353	-12.9493	144771511	-12.8986	115437661	-12.8456	61828586	-12.7999	63183976	-12.7565
16792442	-12.9486	45072795	-12.8985	23338250	-12.8451	2056227	-12.7974	129960633	-12.7565
24938783	-12.9471	29278382	-12.8978	104425477	-12.8448	149878136	-12.7973	1581094	-12.7558

PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
113517254	-12.7546	9012767	-12.6995	79837323	-12.6547	80598970	-12.6122	116147311	-12.5494
71332043	-12.7516	63565174	-12.6991	138333620	-12.6545	61321636	-12.6120	73055911	-12.5492
107793058	-12.7508	122241068	-12.6984	149991098	-12.6540	60643905	-12.6103	86621019	-12.5476
43139202	-12.7497	23338308	-12.6979	63207727	-12.6536	43209709	-12.6100	13273360	-12.5465
71163561	-12.7493	104648943	-12.6937	80375828	-12.6535	131232827	-12.6076	86178870	-12.5465
23618883	-12.7462	113502884	-12.6934	135183866	-12.6524	3129440	-12.6075	107793061	-12.5454
135939275	-12.7457	116035364	-12.6930	4308285	-12.6523	80398534	-12.6071	79694668	-12.5442
143053945	-12.7437	82300974	-12.6928	61471389	-12.6515	105755775	-12.6046	24692135	-12.5417
53621903	-12.7414	104191265	-12.6921	62710451	-12.6508	138334816	-12.6041	83024008	-12.5417
102914173	-12.7414	61827396	-12.6912	64161391	-12.6489	107795063	-12.6039	117029330	-12.5405
21105494	-12.7401	118823169	-12.6907	138333825	-12.6482	145139196	-12.6035	83016312	-12.5400
63189884	-12.7390	61705173	-12.6895	118569703	-12.6480	149818950	-12.6021	69041769	-12.5392
28604517	-12.7379	40426890	-12.6873	152089861	-12.6469	153176572	-12.6021	43321666	-12.5362
29016731	-12.7377	136276957	-12.6868	13400031	-12.6465	64686655	-12.5976	116113266	-12.5360
64405418	-12.7376	15239185	-12.6855	17889062	-12.6462	4534944	-12.5965	90877743	-12.5345
115522258	-12.7373	14317166	-12.6850	62615083	-12.6458	116026391	-12.5960	79620006	-12.5342
5993509	-12.7363	94007743	-12.6849	132137395	-12.6457	79687046	-12.5952	39357371	-12.5341
65457686	-12.7360	7762221	-12.6847	61828201	-12.6449	106178575	-12.5951	116790249	-12.5335
79686835	-12.7356	56974386	-12.6842	20975536	-12.6448	104762203	-12.5940	9818732	-12.5332
43139228	-12.7355	70357749	-12.6832	19154532	-12.6447	115280380	-12.5923	138333879	-12.5305
64182972	-12.7351	19621388	-12.6812	123692807	-12.6430	113319775	-12.5915	120199517	-12.5294
3600164	-12.7340	152618594	-12.6804	113773084	-12.6427	153242175	-12.5907	116373369	-12.5289
4114789	-12.7332	87532522	-12.6803	53416206	-12.6425	134987987	-12.5896	106035009	-12.5287
43353176	-12.7302	43266630	-12.6794	22426480	-12.6422	4212127	-12.5856	62231533	-12.5285
64051384	-12.7298	63189842	-12.6788	81282288	-12.6405	151137386	-12.5849	153253579	-12.5265
107317945	-12.7260	115485480	-12.6779	114410114	-12.6405	154159695	-12.5838	115485318	-12.5255
138332003	-12.7256	70927649	-12.6776	90041574	-12.6389	100997297	-12.5815	61703198	-12.5252
63189981	-12.7252	138332842	-12.6757	61157555	-12.6384	115485459	-12.5813	115485421	-12.5246
106916156	-12.7246	102226398	-12.6751	115127603	-12.6382	25067388	-12.5804	39354066	-12.5240
18004134	-12.7242	1959658	-12.6750	140714311	-12.6381	140541833	-12.5801	116035313	-12.5236
107175016	-12.7242	113419836	-12.6740	21569607	-12.6378	138334814	-12.5794	103878511	-12.5229
107818174	-12.7236	25732507	-12.6731	61459051	-12.6364	50889062	-12.5786	129798694	-12.5207
148030331	-12.7233	135617275	-12.6730	71370217	-12.6362	141488013	-12.5773	20203328	-12.5191
82318904	-12.7231	117928854	-12.6727	17889061	-12.6356	81282774	-12.5767	61705180	-12.5185
57531302	-12.7223	18783963	-12.6721	73894545	-12.6328	20404655	-12.5759	81608122	-12.5185
121004870	-12.7222	89276619	-12.6718	79838573	-12.6308	51922245	-12.5749	23338282	-12.5178
154537264	-12.7217	149814800	-12.6714	129501364	-12.6288	63189805	-12.5742	79694357	-12.5170
115485577	-12.7215	17608837	-12.6713	121201172	-12.6288	44828850	-12.5728	11424741	-12.5160
145486833	-12.7206	63183891	-12.6705	43614199	-12.6281	62680274	-12.5711	69674880	-12.5134
103462471	-12.7199	11492304	-12.6697	61826586	-12.6281	22096613	-12.5706	61704113	-12.5128
116355897	-12.7193	107935581	-12.6688	64085973	-12.6276	137972074	-12.5701	43139226	-12.5122
54254284	-12.7173	144535066	-12.6684	121200945	-12.6273	79277742	-12.5692	11623498	-12.5113
63190312	-12.7172	16450376	-12.6683	150464068	-12.6269	93256992	-12.5682	6994150	-12.5112
82538309	-12.7169	147237358	-12.6682	765428	-12.6263	62230696	-12.5675	65802890	-12.5110
149413307	-12.7153	50849217	-12.6680	63190409	-12.6260	103925162	-12.5669	107935559	-12.5109
137166136	-12.7142	115485271	-12.6670	16639767	-12.6258	104698216	-12.5638	1801344	-12.5094
117812519	-12.7136	643288	-12.6663	63316476	-12.6250	115047525	-12.5632	151474640	-12.5083
116534182	-12.7135	138333234	-12.6654	138333192	-12.6238	132499209	-12.5632	2312556	-12.5075
62711667	-12.7134	61277050	-12.6652	87201505	-12.6231	2641791	-12.5628	101186327	-12.5067
124908658	-12.7125	104698582	-12.6652	59736656	-12.6229	150473793	-12.5627	39359993	-12.5062
61413311	-12.7123	79840579	-12.6626	9013111	-12.6219	55225092	-12.5617	26871965	-12.5056
152613577	-12.7121	149971379	-12.6621	21486318	-12.6205	125456036	-12.5587	25732509	-12.5042
152108948	-12.7120	62227549	-12.6618	83779730	-12.6190	775678	-12.5582	114411918	-12.5042
25271684	-12.7113	54038951	-12.6604	90089702	-12.6180	1427909	-12.5581	7023548	-12.5033
57869610	-12.7096	71376854	-12.6598	4308284	-12.6177	1427908	-12.5581	93501047	-12.5031
150638758	-12.7087	113319742	-12.6587	115485228	-12.6171	114490292	-12.5570	49757280	-12.5028
57445599	-12.7069	139688055	-12.6584	138333888	-12.6160	149748092	-12.5538	105971209	-12.5016
82318218	-12.7066	118480540	-12.6581	63228124	-12.6154	107935556	-12.5525	20330957	-12.4993
116141472	-12.7053	151997860	-12.6557	10058989	-12.6145	129789773	-12.5513	65081119	-12.4988
20837894	-12.7048	14246356	-12.6555	63219460	-12.6132	55150930	-12.5505	79314270	-12.4971
61826396	-12.7031	139729868	-12.6554	154462538	-12.6131	18504952	-12.5503	155315144	-12.4970
129773530	-12.7019	22503792	-12.6551	151188691	-12.6127	148234187	-12.5499	118603719	-12.4968

PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
19852652	-12.4967	147741514	-12.4482	229840	-12.4006	28604402	-12.3422	60974505	-12.2871
153387490	-12.4966	28550979	-12.4477	62682807	-12.3978	150977119	-12.3422	60990166	-12.2865
17943161	-12.4962	46779095	-12.4475	15437218	-12.3973	138332718	-12.3419	116138635	-12.2853
118806697	-12.4945	140367706	-12.4457	115485266	-12.3970	107795805	-12.3415	104698058	-12.2832
116041160	-12.4935	43321663	-12.4448	40428295	-12.3964	67205165	-12.3389	61185630	-12.2828
62230871	-12.4902	2937103	-12.4445	61277176	-12.3941	7720055	-12.3382	104648939	-12.2810
114102017	-12.4890	116190997	-12.4434	63513469	-12.3928	64566561	-12.3382	104700312	-12.2809
152404024	-12.4878	170806	-12.4429	147502597	-12.3910	43736158	-12.3380	23338321	-12.2803
14412284	-12.4869	107792706	-12.4428	15219931	-12.3898	107706260	-12.3370	115485177	-12.2789
230760	-12.4868	68172476	-12.4424	750095	-12.3879	11205988	-12.3361	131002674	-12.2789
4741720	-12.4834	17604123	-12.4416	116035352	-12.3869	154171180	-12.3361	62682435	-12.2771
4669623	-12.4828	135832717	-12.4413	114410083	-12.3842	12092	-12.3360	154462539	-12.2755
79760463	-12.4823	138334919	-12.4410	17939913	-12.3831	79686308	-12.3332	69161627	-12.2751
113319781	-12.4823	6536148	-12.4399	2343494	-12.3823	23338302	-12.3321	20482541	-12.2726
63623917	-12.4822	92282548	-12.4384	107935563	-12.3819	115485443	-12.3317	113835506	-12.2726
19006138	-12.4815	151370985	-12.4378	116348822	-12.3812	81623081	-12.3303	280454	-12.2724
75426034	-12.4778	81282091	-12.4375	149844402	-12.3809	63227905	-12.3296	63190041	-12.2713
91943174	-12.4778	43624544	-12.4373	13105473	-12.3807	123355291	-12.3296	70130918	-12.2712
78979695	-12.4765	104698449	-12.4368	79840298	-12.3794	2307507	-12.3289	54868375	-12.2711
138333883	-12.4760	105648439	-12.4365	70479418	-12.3780	61226391	-12.3287	132064891	-12.2686
79837884	-12.4745	24835075	-12.4359	54485635	-12.3773	141510403	-12.3264	87488264	-12.2678
65503669	-12.4736	113644927	-12.4347	28604489	-12.3773	23338294	-12.3260	242946	-12.2672
65503469	-12.4736	23001755	-12.4343	79376537	-12.3742	63537482	-12.3243	113319785	-12.2664
90700957	-12.4732	19609468	-12.4330	43139219	-12.3741	89200508	-12.3241	20139216	-12.2648
83854017	-12.4726	88371	-12.4324	131869346	-12.3726	55249297	-12.3235	23274035	-12.2633
129375448	-12.4726	101376452	-12.4314	131701165	-12.3726	143545263	-12.3229	459320	-12.2620
148369127	-12.4715	53413201	-12.4305	131674205	-12.3726	14457387	-12.3186	151736243	-12.2603
117043150	-12.4711	106189858	-12.4305	123347997	-12.3724	19361469	-12.3177	61186996	-12.2569
135019647	-12.4705	120120920	-12.4283	125456366	-12.3703	84675331	-12.3177	80072544	-12.2532
70625386	-12.4695	25900500	-12.4279	62231860	-12.3695	8119230	-12.3166	71370215	-12.2528
117781961	-12.4685	115039483	-12.4252	107795735	-12.3695	151377965	-12.3159	104495466	-12.2512
146136882	-12.4683	135432832	-12.4247	106350325	-12.3692	6183600	-12.3125	70599917	-12.2497
43248020	-12.4682	43624536	-12.4209	138333091	-12.3688	82306554	-12.3104	84682708	-12.2492
79686834	-12.4681	82930115	-12.4206	141715857	-12.3676	22730553	-12.3100	58963744	-12.2488
63190306	-12.4680	154131287	-12.4203	589805	-12.3674	137939534	-12.3087	62993145	-12.2487
101678557	-12.4679	17359123	-12.4199	62232546	-12.3672	43139210	-12.3073	125451889	-12.2476
115872566	-12.4667	57292831	-12.4195	152431577	-12.3670	115485291	-12.3073	61321943	-12.2475
138332818	-12.4643	9013141	-12.4194	116644474	-12.3663	95946	-12.3051	65459765	-12.2471
18996400	-12.4637	20982041	-12.4193	65805904	-12.3659	138333625	-12.3048	2763954	-12.2464
4600722	-12.4636	70898301	-12.4185	116216983	-12.3657	62232019	-12.3044	223138	-12.2464
116035295	-12.4635	145843480	-12.4183	154256307	-12.3656	285600	-12.3038	5706835	-12.2464
22563548	-12.4616	114260396	-12.4174	65502125	-12.3645	53664443	-12.3036	9013212	-12.2436
138332590	-12.4607	114002258	-12.4156	65501925	-12.3645	67762832	-12.3036	143843028	-12.2420
80695631	-12.4606	146737609	-12.4153	55158678	-12.3633	116266182	-12.3035	141598882	-12.2408
107796305	-12.4601	112682974	-12.4152	141509988	-12.3610	65841089	-12.3034	43139179	-12.2399
18369161	-12.4595	90752801	-12.4143	126972563	-12.3565	39368252	-12.3023	63187388	-12.2392
23338289	-12.4584	977898	-12.4133	55158297	-12.3557	63954244	-12.3008	116027556	-12.2391
7174	-12.4581	2953818	-12.4129	114411203	-12.3546	45072718	-12.3000	115485175	-12.2386
39058268	-12.4579	70601469	-12.4126	104700323	-12.3539	138333442	-12.2986	43308752	-12.2383
61827011	-12.4579	106216760	-12.4112	115033831	-12.3534	64049678	-12.2983	18316033	-12.2352
61703962	-12.4575	82785333	-12.4109	647660	-12.3522	101520166	-12.2981	150746671	-12.2350
143217677	-12.4563	8971355	-12.4069	23338269	-12.3495	138333439	-12.2975	62681344	-12.2348
5695973	-12.4560	45036930	-12.4066	82319377	-12.3494	116041118	-12.2967	61157016	-12.2329
126482300	-12.4560	18989910	-12.4065	87890593	-12.3488	23132277	-12.2965	108093357	-12.2329
105484385	-12.4555	65803307	-12.4064	143183013	-12.3488	62231046	-12.2955	43321608	-12.2323
149956783	-12.4549	64356978	-12.4061	45097764	-12.3476	106230983	-12.2929	88029273	-12.2313
79837617	-12.4536	114004413	-12.4055	107935582	-12.3473	9013144	-12.2923	43139198	-12.2310
65666142	-12.4505	107795788	-12.4055	123634729	-12.3470	79766747	-12.2921	68546982	-12.2310
147000756	-12.4502	143394344	-12.4047	101304556	-12.3454	54188347	-12.2902	23338255	-12.2294
62232547	-12.4498	27435322	-12.4037	149642038	-12.3452	12594527	-12.2896	17865883	-12.2286
149004458	-12.4493	79350820	-12.4018	116037647	-12.3447	54988754	-12.2894	63623549	-12.2285
114177020	-12.4487	134448273	-12.4009	67914855	-12.3434	71400962	-12.2885	104485004	-12.2278

PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
61983647	-12.2273	63190016	-12.1753	140186856	-12.1224	138332796	-12.0590	135472681	-12.0081
118491411	-12.2270	61321751	-12.1742	113510231	-12.1221	24689558	-12.0589	5268924	-12.0078
80115099	-12.2266	101321369	-12.1736	138332838	-12.1218	152293194	-12.0578	1400697	-12.0078
105466498	-12.2265	151374211	-12.1735	11357272	-12.1208	149497391	-12.0566	138334834	-12.0056
138333616	-12.2255	119177657	-12.1708	227301	-12.1202	105969633	-12.0561	84664896	-12.0038
43826189	-12.2252	141268597	-12.1669	108892436	-12.1196	53432587	-12.0556	68100771	-12.0035
28604509	-12.2252	60974284	-12.1665	44828857	-12.1186	16790433	-12.0552	764599	-12.0021
79695188	-12.2224	67271045	-12.1660	61203508	-12.1182	121224943	-12.0547	61404302	-12.0021
149385182	-12.2222	107796081	-12.1631	23274247	-12.1178	55103362	-12.0545	23619702	-12.0009
47684	-12.2212	6082767	-12.1616	60989945	-12.1174	116138694	-12.0539	19351173	-12.0002
113352737	-12.2206	104698106	-12.1602	116215963	-12.1162	92003596	-12.0538	114131856	-12.0000
61828775	-12.2201	154179533	-12.1601	154544137	-12.1162	9013209	-12.0518	20801493	-11.9991
65560602	-12.2186	53647584	-12.1582	103848564	-12.1160	80387424	-12.0516	115520080	-11.9961
28604381	-12.2182	63538635	-12.1549	150993987	-12.1148	63538140	-12.0512	5355697	-11.9953
94007744	-12.2175	44828856	-12.1539	62301519	-12.1141	61194492	-12.0497	60643180	-11.9945
43200263	-12.2174	39058262	-12.1533	2883124	-12.1120	9707433	-12.0494	131091000	-11.9935
80112968	-12.2136	28604460	-12.1532	107795916	-12.1085	116129517	-12.0489	62231387	-11.9931
14457385	-12.2099	119240287	-12.1529	11333830	-12.1074	105953962	-12.0461	114125741	-11.9928
9013213	-12.2085	101864876	-12.1508	79840867	-12.1072	20475798	-12.0457	10801382	-11.9921
116325647	-12.2083	43736050	-12.1506	60974386	-12.1064	107796260	-12.0448	542787	-11.9910
136241430	-12.2080	22730168	-12.1497	14227379	-12.1061	54130426	-12.0433	53904375	-11.9906
61704406	-12.2074	16772390	-12.1494	62682066	-12.1061	105766633	-12.0433	114504547	-11.9904
104934324	-12.2073	50889049	-12.1489	81814157	-12.1036	63539149	-12.0431	107144728	-11.9864
136085941	-12.2062	62336225	-12.1487	60643432	-12.1033	104934187	-12.0415	117043149	-11.9860
65537839	-12.2052	106203059	-12.1485	138333653	-12.1006	3112778	-12.0396	53669509	-11.9854
57086624	-12.2027	61971142	-12.1477	104484919	-12.1000	62710850	-12.0392	106232945	-11.9854
14150247	-12.2014	130969026	-12.1469	129501366	-12.0993	28510043	-12.0386	61156659	-11.9846
65074586	-12.2013	115523578	-12.1465	129990018	-12.0966	106191234	-12.0385	17608318	-11.9843
142998844	-12.2012	116498671	-12.1463	79885382	-12.0957	106202792	-12.0383	40789024	-11.9837
152276281	-12.2010	154431712	-12.1450	54354428	-12.0932	115522264	-12.0381	116498675	-11.9830
10420674	-12.1978	56991312	-12.1443	9539350	-12.0930	93633322	-12.0379	11959005	-11.9817
62134252	-12.1951	62682620	-12.1443	107935805	-12.0889	16771399	-12.0374	62711674	-11.9817
148969374	-12.1949	105900610	-12.1441	238997	-12.0888	124251008	-12.0364	116342715	-11.9805
21236546	-12.1937	104425585	-12.1438	82042202	-12.0881	23517577	-12.0362	62682247	-11.9802
43736108	-12.1928	63632310	-12.1424	65043008	-12.0870	63837468	-12.0362	105945675	-11.9796
61809857	-12.1924	107413683	-12.1424	54991809	-12.0840	105896085	-12.0362	115485283	-11.9791
15496166	-12.1921	57099684	-12.1412	105940224	-12.0840	80390630	-12.0315	61196504	-11.9788
63513986	-12.1917	82318158	-12.1409	130968177	-12.0838	62229584	-12.0300	145843475	-11.9769
67357014	-12.1917	11379033	-12.1405	141160527	-12.0838	119177773	-12.0267	143217715	-11.9769
63078254	-12.1915	65291523	-12.1400	152778144	-12.0826	80695790	-12.0264	63840143	-11.9763
5048447	-12.1899	76851366	-12.1389	4370151	-12.0818	9013119	-12.0263	106177393	-11.9755
115485331	-12.1892	107796472	-12.1387	53799998	-12.0812	834060	-12.0255	61831754	-11.9746
4230332	-12.1886	116289548	-12.1373	70555319	-12.0810	54285572	-12.0242	116119604	-11.9744
62210409	-12.1882	81113664	-12.1367	69767126	-12.0782	45084716	-12.0235	82319905	-11.9738
153796960	-12.1882	67396549	-12.1364	65227177	-12.0778	11665613	-12.0234	22094724	-11.9718
13075143	-12.1880	65457471	-12.1362	18970389	-12.0755	138333650	-12.0230	129898134	-11.9714
23338281	-12.1872	104698170	-12.1347	1622610	-12.0753	5048448	-12.0228	20841769	-11.9713
63538370	-12.1871	82800586	-12.1346	104697952	-12.0749	62684319	-12.0215	61704852	-11.9687
63190150	-12.1869	107796480	-12.1341	152081590	-12.0744	89027470	-12.0209	138332982	-11.9684
131168998	-12.1865	107796225	-12.1318	143425630	-12.0737	55208971	-12.0208	687877	-11.9671
138332758	-12.1859	61704411	-12.1316	7059307	-12.0719	150339431	-12.0205	113295	-11.9669
84689741	-12.1858	61421016	-12.1305	61826207	-12.0715	20342308	-12.0197	18996398	-11.9668
138334868	-12.1856	62686232	-12.1299	61157554	-12.0712	154531819	-12.0190	138333003	-11.9666
153741498	-12.1849	107935593	-12.1270	113416248	-12.0698	71338529	-12.0174	117568537	-11.9644
80545144	-12.1848	91560083	-12.1266	745733	-12.0684	138333549	-12.0158	104486423	-11.9634
81282626	-12.1847	115485170	-12.1265	62230346	-12.0672	62332500	-12.0149	138334681	-11.9630
105448716	-12.1846	135516702	-12.1260	1622608	-12.0654	61454685	-12.0138	119177719	-11.9622
136167554	-12.1843	106231069	-12.1253	152136245	-12.0642	124202988	-12.0132	12238915	-11.9608
154239231	-12.1843	143243353	-12.1250	129500832	-12.0638	115485389	-12.0114	66876619	-11.9606
11447411	-12.1837	106203082	-12.1245	121201027	-12.0638	13263369	-12.0113	6994165	-11.9600
91475786	-12.1773	2363110	-12.1227	138332289	-12.0629	61702913	-12.0085	63117530	-11.9593
16787729	-12.1765	303150	-12.1224	84768927	-12.0594	135617276	-12.0081	103925771	-11.9590

PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
64346983	-11.9568	123831885	-11.8913	105781347	-11.8374	82318081	-11.7615	67861440	-11.6940
81801619	-11.9548	118034448	-11.8913	61436837	-11.8370	63926940	-11.7605	113293213	-11.6940
61571429	-11.9529	154292159	-11.8904	116193045	-11.8355	83841161	-11.7603	89418617	-11.6928
114756928	-11.9514	273722	-11.8898	61594797	-11.8336	22900536	-11.7592	132526701	-11.6900
131010168	-11.9512	102979057	-11.8862	107795779	-11.8330	102291801	-11.7591	113319829	-11.6891
20070218	-11.9505	115520624	-11.8847	107200360	-11.8326	107935594	-11.7591	105761377	-11.6882
120120905	-11.9503	115485152	-11.8840	59496963	-11.8304	45089301	-11.7588	63604977	-11.6881
210327	-11.9496	88643362	-11.8838	3441847	-11.8301	88911671	-11.7577	63117414	-11.6871
21555380	-11.9493	6950245	-11.8819	62105525	-11.8285	62135117	-11.7573	3438173	-11.6845
91826535	-11.9490	129500831	-11.8814	129243879	-11.8281	115485264	-11.7542	135455057	-11.6842
2482	-11.9488	68208227	-11.8807	62231857	-11.8275	39058245	-11.7535	43353190	-11.6821
63184858	-11.9487	54988081	-11.8783	65227178	-11.8253	104700454	-11.7530	67978730	-11.6821
63188229	-11.9476	17360543	-11.8779	79725936	-11.8243	103871804	-11.7490	15621153	-11.6801
61669845	-11.9471	106295170	-11.8777	136224218	-11.8224	90349101	-11.7481	65086881	-11.6796
81814478	-11.9465	104698417	-11.8766	138333984	-11.8193	103276174	-11.7476	60730834	-11.6785
43267298	-11.9444	131597580	-11.8766	135756446	-11.8179	115485129	-11.7473	64678176	-11.6785
58347543	-11.9434	40457343	-11.8764	54941583	-11.8178	16778051	-11.7470	107795908	-11.6762
19423188	-11.9430	113485808	-11.8759	101208	-11.8169	79188446	-11.7468	61278483	-11.6751
83387171	-11.9423	107796442	-11.8750	118483591	-11.8162	107935824	-11.7462	227300	-11.6745
116147325	-11.9416	18996399	-11.8748	64599150	-11.8159	104698131	-11.7450	80363068	-11.6745
138332874	-11.9416	138334891	-11.8737	2754851	-11.8145	152139948	-11.7446	62120069	-11.6724
62264530	-11.9388	107935811	-11.8728	11832501	-11.8142	88850512	-11.7440	58057844	-11.6717
62709323	-11.9382	54961707	-11.8706	20058936	-11.8139	79838384	-11.7415	118239367	-11.6710
106330798	-11.9370	62727614	-11.8697	105820404	-11.8122	114490029	-11.7401	55103413	-11.6693
63223115	-11.9369	62230187	-11.8696	121324997	-11.8120	25732495	-11.7388	62122167	-11.6687
18965983	-11.9365	62104781	-11.8688	68113506	-11.8117	91012989	-11.7388	13196036	-11.6667
61226389	-11.9352	82096860	-11.8679	83219025	-11.8093	105698361	-11.7374	9709990	-11.6660
58560759	-11.9304	138332129	-11.8676	3145878	-11.8054	4914	-11.7354	103925172	-11.6655
105938990	-11.9300	115485263	-11.8666	115463285	-11.8054	12314524	-11.7350	63117403	-11.6652
79837140	-11.9296	6908273	-11.8651	140590233	-11.8047	61573564	-11.7327	17865885	-11.6651
135040555	-11.9296	39372110	-11.8634	107595804	-11.8033	106216783	-11.7312	4171414	-11.6630
59112723	-11.9290	23338276	-11.8621	102364731	-11.8018	106216314	-11.7297	23338293	-11.6609
43736105	-11.9288	64917543	-11.8582	116423403	-11.8004	151597717	-11.7295	82300978	-11.6607
17974665	-11.9272	145966098	-11.8558	104698680	-11.7989	91393068	-11.7287	81114032	-11.6601
70298383	-11.9225	62681887	-11.8554	134648459	-11.7988	24807386	-11.7274	63189796	-11.6592
61702916	-11.9218	54299164	-11.8549	86085974	-11.7965	61196449	-11.7268	107796643	-11.6569
28801088	-11.9189	114807103	-11.8540	88642362	-11.7956	62966357	-11.7234	153924614	-11.6569
62812053	-11.9188	86594440	-11.8526	116037659	-11.7952	126495518	-11.7215	79687264	-11.6562
5906492	-11.9186	10466641	-11.8506	63528494	-11.7942	65554592	-11.7184	116301946	-11.6539
63183579	-11.9173	1494032	-11.8505	115485287	-11.7888	13639516	-11.7173	63267003	-11.6522
118447793	-11.9167	115867832	-11.8480	24873884	-11.7886	115453006	-11.7163	138332736	-11.6519
1518727	-11.9140	28604396	-11.8477	70590721	-11.7884	104655391	-11.7157	63562693	-11.6517
104700352	-11.9134	149323069	-11.8477	65598064	-11.7829	107796637	-11.7143	151978464	-11.6507
82851298	-11.9109	104698018	-11.8473	61828193	-11.7826	147551147	-11.7140	1230219	-11.6495
104700288	-11.9098	61344497	-11.8468	114150208	-11.7824	20333681	-11.7139	23338267	-11.6495
81282181	-11.9095	147174153	-11.8459	104700431	-11.7802	61196425	-11.7099	88611481	-11.6483
150242044	-11.9094	113644919	-11.8453	3649509	-11.7801	43541329	-11.7081	3419179	-11.6481
115485169	-11.9093	138333085	-11.8449	29276101	-11.7797	105663990	-11.7081	63187947	-11.6480
62230523	-11.9081	43139214	-11.8448	67896275	-11.7785	39058269	-11.7071	103356392	-11.6479
104698172	-11.9047	79841276	-11.8436	4347604	-11.7781	80367162	-11.7055	53657344	-11.6471
103791481	-11.9025	70305007	-11.8426	106329716	-11.7779	152385151	-11.7034	9856814	-11.6469
107795914	-11.9024	63539336	-11.8423	80694810	-11.7774	16788256	-11.7014	101801002	-11.6468
101376453	-11.8998	3613869	-11.8421	150540313	-11.7761	94373343	-11.7008	138543055	-11.6447
61209713	-11.8961	20382882	-11.8417	138333230	-11.7752	22257327	-11.7007	51922251	-11.6442
1550868	-11.8945	62994000	-11.8416	60703929	-11.7750	82317908	-11.7006	44278802	-11.6439
119240325	-11.8938	103791506	-11.8402	90336011	-11.7734	4135900	-11.7005	43267447	-11.6439
63212765	-11.8935	11438299	-11.8396	45089758	-11.7733	79695822	-11.6998	44828852	-11.6436
63950351	-11.8929	140291853	-11.8394	23338285	-11.7725	5824354	-11.6997	68277182	-11.6421
63189953	-11.8927	20759693	-11.8384	87769163	-11.7715	148443776	-11.6992	69781586	-11.6411
70625376	-11.8919	18996393	-11.8380	62685499	-11.7699	11148629	-11.6981	91738541	-11.6411
114932958	-11.8917	138332815	-11.8376	127125356	-11.7694	22035446	-11.6981	114154302	-11.6407
9012762	-11.8915	13791585	-11.8374	64566967	-11.7691	116193310	-11.6953	61190346	-11.6406

PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
90089636	-11.6405	81114264	-11.5793	61156653	-11.5234	14298263	-11.4727	40789022	-11.4130
78979716	-11.6396	130242838	-11.5779	141242648	-11.5230	115325913	-11.4720	44828862	-11.4123
60989386	-11.6377	57662368	-11.5773	28786067	-11.5229	3485749	-11.4719	104655566	-11.4122
63190280	-11.6367	139631572	-11.5764	62711126	-11.5216	115485366	-11.4712	129870449	-11.4122
10589508	-11.6366	81977401	-11.5748	113337904	-11.5175	79686940	-11.4711	43774336	-11.4079
115730016	-11.6333	55049292	-11.5747	121201661	-11.5175	20838522	-11.4701	129898138	-11.4067
60643087	-11.6316	150072893	-11.5734	9013225	-11.5158	150652605	-11.4692	54956467	-11.4059
107792928	-11.6313	54335375	-11.5730	64002817	-11.5148	4290226	-11.4677	116056088	-11.4042
17974655	-11.6304	28604280	-11.5718	233272	-11.5145	104700457	-11.4676	21613378	-11.4023
68427097	-11.6300	63860041	-11.5708	61325338	-11.5141	138332742	-11.4666	115485483	-11.3993
152145997	-11.6289	68210205	-11.5708	43139182	-11.5138	63603246	-11.4653	124630209	-11.3953
154097510	-11.6274	4474219	-11.5697	20315615	-11.5133	61465744	-11.4645	114002132	-11.3927
63185480	-11.6269	152495478	-11.5692	151302187	-11.5123	114413590	-11.4597	155647608	-11.3880
138333132	-11.6262	138334783	-11.5676	63864820	-11.5122	19577452	-11.4591	148130639	-11.3858
138333652	-11.6261	107796377	-11.5675	117560139	-11.5113	43209922	-11.4590	84379046	-11.3843
22751599	-11.6248	23457833	-11.5645	6391170	-11.5112	577679	-11.4588	63188080	-11.3826
103791513	-11.6246	138332119	-11.5640	88199027	-11.5094	63185341	-11.4588	105778324	-11.3826
153850309	-11.6240	20463803	-11.5629	151956285	-11.5094	129690768	-11.4586	141014625	-11.3817
18996397	-11.6224	64677058	-11.5622	101452826	-11.5078	149569763	-11.4575	113319835	-11.3810
107854872	-11.6214	131869332	-11.5616	65516406	-11.5075	114002370	-11.4568	63996148	-11.3803
88465793	-11.6212	131072132	-11.5612	138334013	-11.5075	60973643	-11.4565	21486329	-11.3782
129375445	-11.6205	132967058	-11.5598	87844409	-11.5073	142682980	-11.4564	65677531	-11.3779
153814088	-11.6191	64416094	-11.5585	62231844	-11.5072	112741401	-11.4557	8119708	-11.3777
81975953	-11.6190	138333666	-11.5557	138334020	-11.5053	227305	-11.4552	17564618	-11.3768
6369224	-11.6185	3648160	-11.5555	101175342	-11.5046	148346390	-11.4550	118684284	-11.3747
90337993	-11.6162	10852010	-11.5543	69089645	-11.5035	58271411	-11.4545	155291893	-11.3733
101572146	-11.6155	398436	-11.5529	61184208	-11.5029	40457345	-11.4534	116416357	-11.3723
62710431	-11.6148	79885580	-11.5522	23274272	-11.5005	62701301	-11.4500	116302739	-11.3678
784638	-11.6144	43569286	-11.5516	21732819	-11.4988	92930064	-11.4486	75046	-11.3674
123720467	-11.6144	63949939	-11.5504	6251785	-11.4979	3793881	-11.4475	120089346	-11.3674
43774333	-11.6134	150180125	-11.5485	15311269	-11.4964	138333092	-11.4472	149787275	-11.3672
61703667	-11.6124	14279811	-11.5453	16228385	-11.4962	1861239	-11.4471	114102031	-11.3671
61277404	-11.6112	115485294	-11.5440	67784531	-11.4948	79841472	-11.4470	107935618	-11.3671
62680987	-11.6111	43321599	-11.5436	117665279	-11.4947	11174464	-11.4458	62264690	-11.3661
103878510	-11.6087	234545489	-11.5434	62230000	-11.4944	43736054	-11.4450	114618007	-11.3658
43139203	-11.6085	62227550	-11.5418	106213751	-11.4944	43266628	-11.4449	64681883	-11.3644
134098331	-11.6035	19852896	-11.5411	12480569	-11.4937	65597126	-11.4413	7025831	-11.3635
105420523	-11.6028	112480029	-11.5408	103464872	-11.4934	107796054	-11.4401	70486351	-11.3634
64005338	-11.6025	776165	-11.5404	137939040	-11.4917	100977252	-11.4387	104328548	-11.3634
61705171	-11.6023	138333663	-11.5400	107796380	-11.4907	104700443	-11.4378	105914260	-11.3625
120121072	-11.6010	82319992	-11.5389	104698215	-11.4905	70131021	-11.4368	82535929	-11.3621
63689150	-11.6000	81815345	-11.5384	89881425	-11.4893	64467817	-11.4358	138333363	-11.3616
17858590	-11.5996	138333624	-11.5384	9013203	-11.4892	63695245	-11.4343	153850310	-11.3595
63564980	-11.5994	115485428	-11.5383	4104649	-11.4888	138333129	-11.4293	23338272	-11.3570
54322902	-11.5993	63687130	-11.5379	4349343	-11.4864	113319849	-11.4292	11716311	-11.3560
112479960	-11.5980	57953895	-11.5377	62231218	-11.4858	22760721	-11.4289	143593026	-11.3547
106329930	-11.5964	146809249	-11.5376	18783992	-11.4845	114411593	-11.4289	152615099	-11.3546
78907962	-11.5924	115485392	-11.5339	64766813	-11.4840	107796658	-11.4289	62682997	-11.3541
104698207	-11.5916	55049198	-11.5328	55134627	-11.4822	81113189	-11.4286	104828580	-11.3524
124745180	-11.5916	63526616	-11.5328	69041608	-11.4820	138333067	-11.4270	43735999	-11.3520
150758912	-11.5909	129898146	-11.5325	64597120	-11.4801	138375786	-11.4252	141339503	-11.3520
154360114	-11.5896	43375095	-11.5321	138333554	-11.4789	9012961	-11.4220	123890140	-11.3509
152747865	-11.5894	151915991	-11.5317	58375495	-11.4785	114172735	-11.4217	28604518	-11.3466
55227732	-11.5882	18996391	-11.5303	107856073	-11.4773	136642908	-11.4213	61200025	-11.3439
42950	-11.5875	145487874	-11.5299	79765924	-11.4771	136958411	-11.4212	151476239	-11.3432
69940341	-11.5857	64001768	-11.5297	46868536	-11.4767	20833878	-11.4211	113581758	-11.3415
23274825	-11.5852	81756783	-11.5293	7918766	-11.4760	138332880	-11.4205	118537556	-11.3411
138333642	-11.5851	101442885	-11.5292	129898136	-11.4757	28604177	-11.4189	9013224	-11.3381
101718097	-11.5835	135711225	-11.5282	9751472	-11.4754	43774334	-11.4179	152934096	-11.3379
17172324	-11.5815	103178637	-11.5260	9013222	-11.4739	106315237	-11.4168	28785875	-11.3372
106232983	-11.5813	115485455	-11.5251	138333885	-11.4733	81976793	-11.4146	79686941	-11.3366
61194521	-11.5801	3016481	-11.5248	967763	-11.4727	154694539	-11.4136	62682623	-11.3347

PubChem ID	$\Delta G$ (kj/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kj/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kj/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kj/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kj/mol)
28801206	-11.3288	138333857	-11.2539	138333857	-11.1818	61206745	-11.1273	118086709	-11.0599
117793650	-11.3288	55225167	-11.2532	55225167	-11.1811	53430427	-11.1257	139823763	-11.0591
58963732	-11.3279	107706125	-11.2511	107706125	-11.1809	115485123	-11.1257	63189973	-11.0589
4587135	-11.3214	142761768	-11.2511	142761768	-11.1808	135516703	-11.1250	58809818	-11.0578
81798244	-11.3212	9013171	-11.2491	9013171	-11.1802	151075500	-11.1234	65892973	-11.0572
43308755	-11.3206	65598070	-11.2485	65598070	-11.1771	76974790	-11.1229	61521520	-11.0552
62838018	-11.3203	115485484	-11.2457	115485484	-11.1766	63188037	-11.1223	2817805	-11.0524
115485135	-11.3190	129137821	-11.2443	129137821	-11.1764	91473467	-11.1218	138333896	-11.0522
63958767	-11.3183	132187336	-11.2421	132187336	-11.1764	116133325	-11.1200	87974122	-11.0517
65228586	-11.3179	106295046	-11.2409	106295046	-11.1761	6031447	-11.1184	63687670	-11.0501
63537025	-11.3174	70625375	-11.2397	70625375	-11.1743	140328381	-11.1178	63187536	-11.0494
105645784	-11.3162	87074565	-11.2387	87074565	-11.1726	23005198	-11.1152	142373415	-11.0487
63076518	-11.3161	43139216	-11.2380	43139216	-11.1724	87561940	-11.1143	23338290	-11.0485
122707255	-11.3155	102979044	-11.2379	102979044	-11.1720	97114	-11.1132	65252155	-11.0474
113270188	-11.3109	114009324	-11.2377	114009324	-11.1718	61605058	-11.1127	21631614	-11.0461
113319788	-11.3106	82319207	-11.2354	82319207	-11.1708	107796652	-11.1123	62365505	-11.0445
115325907	-11.3101	138333387	-11.2353	138333387	-11.1702	63190310	-11.1120	23338312	-11.0441
687887	-11.3094	136665109	-11.2337	136665109	-11.1700	23338263	-11.1119	63190264	-11.0435
121012836	-11.3092	113319782	-11.2315	113319782	-11.1685	105945668	-11.1116	143812344	-11.0421
18070264	-11.3085	61200823	-11.2296	61200823	-11.1679	62231039	-11.1101	63189733	-11.0413
149929347	-11.3083	306355	-11.2292	306355	-11.1674	4856003	-11.1096	138333096	-11.0399
140717972	-11.3066	137365349	-11.2285	137365349	-11.1673	62232545	-11.1090	102602070	-11.0368
115485272	-11.3055	62711148	-11.2272	62711148	-11.1666	138334865	-11.1087	152550923	-11.0368
106713690	-11.3039	55148278	-11.2262	55148278	-11.1660	90784555	-11.1077	79200397	-11.0367
105755909	-11.3029	4097483	-11.2246	4097483	-11.1659	54077984	-11.1076	89519055	-11.0322
138333522	-11.3017	43272271	-11.2245	43272271	-11.1646	43774354	-11.1075	138333139	-11.0321
116498632	-11.2988	138334028	-11.2237	138334028	-11.1637	129042211	-11.1071	11103396	-11.0317
121848822	-11.2979	54997682	-11.2233	54997682	-11.1590	6943553	-11.1045	57847019	-11.0314
92930065	-11.2963	116193080	-11.2219	116193080	-11.1585	121324986	-11.1037	105680533	-11.0289
7762222	-11.2959	22564610	-11.2207	22564610	-11.1563	14425151	-11.1026	62121990	-11.0287
54372908	-11.2951	43264336	-11.2202	43264336	-11.1552	81756841	-11.1023	64824603	-11.0283
4741721	-11.2930	135511334	-11.2188	135511334	-11.1543	20336006	-11.1022	152661041	-11.0283
63219459	-11.2914	4778017	-11.2187	4778017	-11.1537	53731131	-11.1011	6908275	-11.0270
106213922	-11.2906	63514666	-11.2167	63514666	-11.1537	43139227	-11.0984	6908271	-11.0270
53986733	-11.2878	104697943	-11.2167	104697943	-11.1533	60973523	-11.0975	129499531	-11.0254
114217257	-11.2853	67120549	-11.2166	67120549	-11.1517	64824602	-11.0953	121200985	-11.0254
43735994	-11.2819	91596137	-11.2162	91596137	-11.1517	43362901	-11.0950	68382632	-11.0253
142687939	-11.2815	11032776	-11.2161	11032776	-11.1496	61197195	-11.0947	63189736	-11.0231
140590215	-11.2813	82930313	-11.2161	82930313	-11.1478	43774353	-11.0896	116147285	-11.0208
125830	-11.2795	69639919	-11.2156	69639919	-11.1475	59987869	-11.0894	138333051	-11.0190
115485301	-11.2791	53658172	-11.2139	53658172	-11.1467	138333233	-11.0892	62230175	-11.0151
146350180	-11.2771	61451315	-11.2093	61451315	-11.1465	23009482	-11.0890	116020177	-11.0145
81055972	-11.2769	81815097	-11.2083	81815097	-11.1446	45089784	-11.0889	141304574	-11.0142
61479104	-11.2767	43139169	-11.2074	43139169	-11.1439	57062633	-11.0871	113466795	-11.0117
1913213	-11.2744	6467346	-11.2071	6467346	-11.1434	45089234	-11.0858	138332761	-11.0099
61481206	-11.2721	107400137	-11.2064	107400137	-11.1415	80099643	-11.0846	123447953	-11.0095
126615016	-11.2706	65508202	-11.2057	65508202	-11.1414	61206103	-11.0843	563564	-11.0084
101304602	-11.2701	105407510	-11.2036	105407510	-11.1411	107793324	-11.0822	116353286	-11.0079
61251418	-11.2698	104698432	-11.2023	104698432	-11.1387	24445934	-11.0777	61185243	-11.0077
107227692	-11.2692	103925767	-11.2021	103925767	-11.1387	121009865	-11.0763	134087542	-11.0065
146712187	-11.2690	55050452	-11.2010	55050452	-11.1380	61197031	-11.0743	65515215	-11.0053
62682250	-11.2683	43584660	-11.2001	43584660	-11.1379	131190017	-11.0742	87368452	-11.0041
80221827	-11.2670	61513902	-11.1996	61513902	-11.1348	115485409	-11.0709	113319792	-11.0020
23338309	-11.2648	63925962	-11.1955	63925962	-11.1339	152366327	-11.0696	11084981	-11.0003
59376252	-11.2615	86245165	-11.1955	86245165	-11.1328	63076507	-11.0670	154260996	-10.9995
116645396	-11.2611	56828899	-11.1885	56828899	-11.1317	116113129	-11.0648	6477906	-10.9988
9012960	-11.2605	106177234	-11.1868	106177234	-11.1315	671171	-11.0647	119086184	-10.9985
140063962	-11.2589	105709471	-11.1866	105709471	-11.1302	43570252	-11.0623	129898147	-10.9982
82318275	-11.2586	47666	-11.1858	47666	-11.1298	71339628	-11.0620	70072383	-10.9966
114250383	-11.2580	62122350	-11.1857	62122350	-11.1285	154271536	-11.0613	97038447	-10.9925
149975762	-11.2554	55161130	-11.1838	55161130	-11.1279	138334671	-11.0611	21979415	-10.9910
105415360	-11.2545	62711166	-11.1831	62711166	-11.1279	28541046	-11.0602	71340767	-10.9902



PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
10492186	-10.9897	9013192	-10.8982	81800126	-10.8416	296160	-10.7725	61189738	-10.7104
80258755	-10.9886	5028048	-10.8981	151485288	-10.8399	151946644	-10.7722	90358340	-10.7086
61577325	-10.9881	59137798	-10.8980	103586363	-10.8366	62121311	-10.7721	132605019	-10.7044
64354866	-10.9863	114201139	-10.8974	82536518	-10.8341	63189895	-10.7721	106429317	-10.7037
120089400	-10.9803	65074634	-10.8973	61302295	-10.8317	102148921	-10.7711	21182553	-10.7032
2828923	-10.9801	55140651	-10.8924	147358163	-10.8317	70078970	-10.7702	151163415	-10.7016
61194355	-10.9789	83221246	-10.8921	150695185	-10.8312	4281352	-10.7696	150400145	-10.7016
138333450	-10.9738	91619143	-10.8918	65498712	-10.8306	117043153	-10.7678	1556482	-10.6994
9013101	-10.9723	64566769	-10.8915	19621389	-10.8299	65715756	-10.7670	154273076	-10.6976
123885004	-10.9716	108806840	-10.8886	84323053	-10.8275	104698248	-10.7649	129439296	-10.6971
43541331	-10.9714	144976014	-10.8881	150380499	-10.8267	104698291	-10.7633	69424489	-10.6965
61575667	-10.9710	106826129	-10.8878	54075057	-10.8259	43265120	-10.7631	6908269	-10.6958
55158490	-10.9689	115042000	-10.8868	152072602	-10.8258	63189928	-10.7627	6908267	-10.6958
107935814	-10.9683	116303373	-10.8864	107935583	-10.8238	138333206	-10.7620	61592426	-10.6944
76763935	-10.9672	113307657	-10.8861	113328109	-10.8222	4681274	-10.7618	570822	-10.6943
62711301	-10.9653	142627753	-10.8853	20871610	-10.8207	16773910	-10.7615	79007381	-10.6906
80390685	-10.9645	63164457	-10.8849	106177257	-10.8202	115485262	-10.7615	116080929	-10.6891
82930794	-10.9601	63212808	-10.8824	5182775	-10.8187	138334024	-10.7611	28801216	-10.6868
69409046	-10.9573	63003341	-10.8820	63511683	-10.8180	138334022	-10.7597	108020830	-10.6843
71003	-10.9564	3019696	-10.8814	54988798	-10.8146	62680820	-10.7574	20482523	-10.6841
150355585	-10.9556	138002	-10.8814	105698225	-10.8140	45089777	-10.7558	102077168	-10.6836
54526836	-10.9551	142038609	-10.8802	130161767	-10.8135	98869059	-10.7550	80099965	-10.6835
57674752	-10.9534	753759	-10.8788	115485441	-10.8126	28604476	-10.7545	131143799	-10.6817
151600838	-10.9530	153877308	-10.8776	61446479	-10.8124	53422656	-10.7536	63837643	-10.6808
135537972	-10.9529	135748401	-10.8774	23338261	-10.8115	152274403	-10.7516	104495486	-10.6805
114132733	-10.9520	116116137	-10.8765	39732898	-10.8098	115568923	-10.7506	210190	-10.6796
77713898	-10.9513	63189977	-10.8751	148797152	-10.8089	107795725	-10.7490	28604391	-10.6796
134918296	-10.9508	19423189	-10.8750	23274523	-10.8087	154097870	-10.7489	61660967	-10.6791
307737	-10.9506	62135443	-10.8745	18979725	-10.8084	43570277	-10.7486	150764599	-10.6785
62230189	-10.9491	116371101	-10.8742	102379474	-10.8084	20307977	-10.7476	59847705	-10.6761
45320	-10.9488	120120838	-10.8727	105971172	-10.8081	970956	-10.7470	22730783	-10.6758
105944415	-10.9483	22096622	-10.8723	142923883	-10.8071	152687241	-10.7463	138332972	-10.6751
107796290	-10.9453	63513093	-10.8719	9013107	-10.8058	61845861	-10.7447	65165878	-10.6750
61183265	-10.9440	57623943	-10.8718	23338288	-10.8053	61827397	-10.7441	76330746	-10.6744
63514332	-10.9435	61304076	-10.8693	61702926	-10.8021	1913211	-10.7420	61592396	-10.6729
55125584	-10.9417	121354312	-10.8693	28635	-10.8019	137292363	-10.7413	1801348	-10.6704
131709126	-10.9387	138333399	-10.8683	88831559	-10.8016	25558548	-10.7406	63075984	-10.6704
55209656	-10.9385	61204757	-10.8682	9013191	-10.8011	43105074	-10.7404	106213847	-10.6660
3125547	-10.9372	140780781	-10.8669	62033327	-10.8005	153493988	-10.7400	63190102	-10.6640
138333137	-10.9341	103791532	-10.8650	61199162	-10.8003	148709230	-10.7399	21027056	-10.6621
123299543	-10.9338	135711223	-10.8639	54113943	-10.7979	141242653	-10.7396	155139153	-10.6575
299748	-10.9316	113786334	-10.8635	63189926	-10.7969	23193105	-10.7386	9013128	-10.6551
119177753	-10.9298	19959881	-10.8622	152695210	-10.7969	138333627	-10.7337	103339096	-10.6526
65254973	-10.9290	81974619	-10.8612	140291824	-10.7965	139946127	-10.7327	20323913	-10.6516
29777308	-10.9270	154279456	-10.8566	64678175	-10.7954	88388782	-10.7326	91145087	-10.6474
61199121	-10.9270	21538793	-10.8553	150683075	-10.7941	61156834	-10.7310	62888257	-10.6454
66986494	-10.9250	61828543	-10.8553	12428776	-10.7932	57172693	-10.7305	114410174	-10.6454
28604515	-10.9210	117928655	-10.8548	20667055	-10.7930	45426885	-10.7301	62711843	-10.6416
43173508	-10.9180	104017588	-10.8544	63190181	-10.7892	61157556	-10.7276	105698432	-10.6410
136167549	-10.9171	107796638	-10.8529	9013202	-10.7885	9751512	-10.7261	62231848	-10.6406
114217266	-10.9164	138334813	-10.8529	64499554	-10.7875	142489327	-10.7254	25706	-10.6384
7470078	-10.9152	55158491	-10.8528	57869628	-10.7864	39359996	-10.7247	138334889	-10.6371
152072603	-10.9147	107796239	-10.8523	105415378	-10.7847	116191031	-10.7236	3034781	-10.6365
129898135	-10.9141	43735988	-10.8522	43238513	-10.7845	63701164	-10.7227	3973425	-10.6363
82536420	-10.9123	151349016	-10.8519	105945131	-10.7827	6952941	-10.7225	784636	-10.6363
128868	-10.9112	45089674	-10.8501	58985440	-10.7805	101304562	-10.7216	16772684	-10.6353
43139225	-10.9088	107795986	-10.8490	83832808	-10.7798	61190881	-10.7215	43736118	-10.6278
120120922	-10.9075	140063993	-10.8490	62197839	-10.7786	63695252	-10.7185	61465626	-10.6278
14254861	-10.9035	136167553	-10.8477	20077248	-10.7767	81682680	-10.7173	62232566	-10.6273
22730056	-10.9027	99976353	-10.8471	24702751	-10.7759	8971361	-10.7162	63514691	-10.6265
765803	-10.9015	61470920	-10.8456	64678177	-10.7752	57869723	-10.7159	66690700	-10.6246
7066765	-10.8985	87200194	-10.8452	4712246	-10.7736	63995807	-10.7149	81818512	-10.6238

PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
46848967	-10.6187	107935627	-10.5235	57044087	-10.4363	69637685	-10.3627	61302714	-10.2909
88642372	-10.6157	102994607	-10.5212	79687153	-10.4315	103190110	-10.3622	154325011	-10.2908
138333005	-10.6154	23338306	-10.5208	28665906	-10.4301	116288653	-10.3615	61704546	-10.2894
70130140	-10.6115	136167550	-10.5193	63190020	-10.4271	115485469	-10.3580	135537446	-10.2878
23615924	-10.6098	107796645	-10.5186	124384238	-10.4264	115426524	-10.3574	116288279	-10.2873
115485309	-10.6093	1787889	-10.5179	11958986	-10.4261	62231548	-10.3555	105954164	-10.2868
65476715	-10.6068	20549376	-10.5167	7028096	-10.4261	107935586	-10.3551	81945078	-10.2860
114201136	-10.6062	114217256	-10.5160	24155513	-10.4260	43263559	-10.3535	61588510	-10.2856
107480404	-10.6055	121324984	-10.5156	57625919	-10.4243	1471252	-10.3517	61704106	-10.2855
102906546	-10.6034	61566543	-10.5124	140146351	-10.4242	143593767	-10.3517	83220129	-10.2808
53787142	-10.6029	55107322	-10.5110	138333133	-10.4229	61592073	-10.3507	61592162	-10.2800
108823334	-10.6015	66634506	-10.5109	113465846	-10.4219	61604883	-10.3502	107935807	-10.2793
55265437	-10.6013	115485411	-10.5056	154333129	-10.4215	62120430	-10.3488	3063284	-10.2791
61831933	-10.5967	117665270	-10.5011	54043374	-10.4191	107471743	-10.3481	85830448	-10.2772
106148788	-10.5958	138332128	-10.5010	13307867	-10.4177	43789122	-10.3469	227991	-10.2714
50889054	-10.5944	79257615	-10.4967	61198150	-10.4177	43572283	-10.3460	107793524	-10.2710
135494257	-10.5934	142449165	-10.4965	11436614	-10.4166	63117413	-10.3451	135400682	-10.2707
113327247	-10.5923	65042913	-10.4964	97038445	-10.4163	90674696	-10.3447	119177685	-10.2698
116041111	-10.5922	63078255	-10.4960	64766373	-10.4161	44814803	-10.3444	102993991	-10.2696
141339504	-10.5887	61186413	-10.4943	17974656	-10.4154	61156658	-10.3444	977899	-10.2680
55027923	-10.5856	116316348	-10.4937	107935790	-10.4140	143217833	-10.3422	20871602	-10.2678
19754375	-10.5841	20738346	-10.4909	62135104	-10.4130	106216368	-10.3411	39732910	-10.2673
62861682	-10.5840	799929	-10.4881	1758554	-10.4127	113498713	-10.3393	2786766	-10.2655
641997	-10.5815	9013214	-10.4878	55265438	-10.4124	20841630	-10.3390	55107408	-10.2644
123182038	-10.5813	578058	-10.4874	81798270	-10.4122	609906	-10.3379	115485295	-10.2643
113417948	-10.5807	120120854	-10.4873	107795922	-10.4107	55159244	-10.3377	137268653	-10.2609
577542	-10.5797	138334016	-10.4872	63514690	-10.4037	69867905	-10.3376	129106091	-10.2603
103730471	-10.5797	9013218	-10.4864	61594663	-10.4019	116301957	-10.3362	63528341	-10.2602
13079657	-10.5789	69714018	-10.4845	86068016	-10.4018	785682	-10.3359	138333052	-10.2590
63189772	-10.5776	83055387	-10.4820	62121826	-10.3994	28801102	-10.3322	606567	-10.2560
80221381	-10.5768	138333982	-10.4803	20116499	-10.3987	69968798	-10.3281	4127590	-10.2548
100958408	-10.5755	132199945	-10.4793	64009968	-10.3979	10422508	-10.3263	120526234	-10.2536
113327231	-10.5739	81115956	-10.4785	120120967	-10.3968	129499532	-10.3256	152394886	-10.2531
88199028	-10.5724	106330631	-10.4780	104698763	-10.3958	106703097	-10.3245	85884617	-10.2530
9751452	-10.5688	962303	-10.4771	12272380	-10.3956	121904092	-10.3245	20382879	-10.2501
154752238	-10.5688	138332231	-10.4771	21629100	-10.3956	57403380	-10.3229	138333057	-10.2497
82177966	-10.5681	28364126	-10.4758	28604189	-10.3955	63189995	-10.3219	59847677	-10.2492
138333106	-10.5664	61704254	-10.4756	62120074	-10.3953	63844084	-10.3216	103586368	-10.2478
61660917	-10.5638	90033167	-10.4738	107935671	-10.3952	107399111	-10.3215	23130852	-10.2471
104160578	-10.5612	23333892	-10.4722	107796646	-10.3938	61828622	-10.3196	140328725	-10.2454
61884194	-10.5601	21027051	-10.4702	43265118	-10.3936	106178521	-10.3138	120157248	-10.2435
4742056	-10.5589	119177650	-10.4697	829443	-10.3924	16776670	-10.3134	61404876	-10.2423
106216552	-10.5581	150688547	-10.4697	43586166	-10.3920	25220162	-10.3129	22730098	-10.2395
55055822	-10.5562	65560661	-10.4691	76893970	-10.3903	14246359	-10.3127	116215891	-10.2393
81368109	-10.5537	106042880	-10.4643	113319860	-10.3901	12160379	-10.3126	133083640	-10.2377
82949651	-10.5488	63537989	-10.4642	43263558	-10.3883	83840699	-10.3119	140573492	-10.2367
136415050	-10.5454	122108112	-10.4596	4999211	-10.3877	138333371	-10.3118	20871608	-10.2360
107935565	-10.5449	139755429	-10.4588	89516885	-10.3876	44138696	-10.3117	13307865	-10.2358
62120779	-10.5444	43274707	-10.4586	62120252	-10.3873	56687877	-10.3109	23274270	-10.2350
154313814	-10.5408	90356126	-10.4560	144088183	-10.3873	1758556	-10.3102	962280	-10.2347
114017935	-10.5392	62122169	-10.4547	124423547	-10.3851	129748084	-10.3095	44828848	-10.2347
138333202	-10.5390	15294633	-10.4520	135883474	-10.3823	62229595	-10.3083	64034467	-10.2334
120157229	-10.5379	23338257	-10.4481	114102034	-10.3815	138333102	-10.3074	54291623	-10.2333
57194871	-10.5341	107792795	-10.4479	23338280	-10.3780	105418574	-10.3068	137273999	-10.2298
17341394	-10.5318	117043138	-10.4460	13655810	-10.3777	5866925	-10.3051	106401101	-10.2278
44621173	-10.5306	150412363	-10.4455	63078075	-10.3732	13578606	-10.3030	55097595	-10.2271
4741683	-10.5286	81413098	-10.4445	150072603	-10.3719	149023860	-10.2994	63447067	-10.2267
63695251	-10.5285	120120874	-10.4441	90710595	-10.3694	137541390	-10.2992	88684303	-10.2258
144631714	-10.5278	107793296	-10.4430	138333409	-10.3683	101973267	-10.2980	76991645	-10.2255
143243393	-10.5277	80317106	-10.4416	131862126	-10.3673	28604430	-10.2971	273419	-10.2253
129765764	-10.5271	54404491	-10.4392	72949600	-10.3647	61182667	-10.2920	90772069	-10.2206
75451206	-10.5239	120121034	-10.4380	115520113	-10.3632	91387762	-10.2917	138334803	-10.2204

PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
43789121	-10.2196	63697747	-10.1421	81798077	-10.0708	15276	-9.9918	65517205	-9.8707
21660428	-10.2182	43273880	-10.1410	88473315	-10.0663	80112575	-9.9897	63447145	-9.8673
61194925	-10.2162	142684622	-10.1409	927408	-10.0652	107935576	-9.9854	143927788	-9.8667
20524689	-10.2160	81798132	-10.1377	87184565	-10.0639	2117188	-9.9847	125390	-9.8632
62710944	-10.2135	117684813	-10.1359	9539351	-10.0610	136169894	-9.9837	22096620	-9.8626
21904094	-10.2121	145026943	-10.1350	68155083	-10.0607	21680662	-9.9824	114593586	-9.8584
103791423	-10.2071	20198290	-10.1336	117674724	-10.0595	57038092	-9.9815	136506160	-9.8584
100958410	-10.2054	2052591	-10.1325	9013100	-10.0566	62709929	-9.9799	283545	-9.8570
115485288	-10.2046	16776253	-10.1324	70522067	-10.0564	61205565	-9.9775	59262017	-9.8556
76210455	-10.2037	11402089	-10.1313	88832684	-10.0558	86594439	-9.9756	57318730	-9.8542
105954505	-10.2019	63515222	-10.1311	2131703	-10.0550	142071833	-9.9740	61827385	-9.8533
28604512	-10.2013	140997515	-10.1284	152666391	-10.0512	61871643	-9.9729	28668934	-9.8532
81813819	-10.1948	43139170	-10.1278	142089452	-10.0484	138333396	-9.9720	17974664	-9.8520
46839637	-10.1928	107935560	-10.1262	57757209	-10.0478	705604	-9.9714	70478940	-9.8514
107935745	-10.1913	146740964	-10.1245	1383563	-10.0476	63529036	-9.9706	63562685	-9.8504
107164228	-10.1912	63228708	-10.1230	107399500	-10.0454	81805555	-9.9697	107480447	-9.8503
23762242	-10.1899	18617841	-10.1217	116469160	-10.0453	132275131	-9.9686	5732866	-9.8482
307164	-10.1896	102282202	-10.1216	3342697	-10.0452	55126347	-9.9650	140763636	-9.8469
103791395	-10.1890	84675332	-10.1215	82294597	-10.0448	138332308	-9.9626	102442502	-9.8455
91619157	-10.1881	102995475	-10.1214	155321699	-10.0444	55253092	-9.9584	64685051	-9.8436
101210960	-10.1881	103791368	-10.1213	119177706	-10.0442	62888430	-9.9577	63946081	-9.8435
137266503	-10.1868	3452838	-10.1210	147720630	-10.0440	120157201	-9.9562	11601430	-9.8427
3847173	-10.1864	107444789	-10.1210	57223728	-10.0437	3385757	-9.9543	136167542	-9.8427
88601772	-10.1846	113319825	-10.1210	115485332	-10.0437	120687580	-9.9524	79476774	-9.8386
116155645	-10.1830	142098740	-10.1205	54998491	-10.0432	138334807	-9.9463	61325357	-9.8370
115485379	-10.1804	153242502	-10.1200	105759825	-10.0409	150194134	-9.9462	59847708	-9.8345
119240342	-10.1796	107815535	-10.1190	28525890	-10.0368	23531508	-9.9450	149765752	-9.8338
135526759	-10.1795	114093917	-10.1176	113644902	-10.0339	11735910	-9.9423	101541893	-9.8330
22910009	-10.1776	766434	-10.1150	123909118	-10.0313	63190303	-9.9419	44278809	-9.8319
43200270	-10.1651	154152371	-10.1146	115485300	-10.0291	87898155	-9.9417	138333393	-9.8300
28604432	-10.1648	24748843	-10.1142	55158679	-10.0283	61828355	-9.9400	63238494	-9.8275
81810374	-10.1648	83479319	-10.1124	107935633	-10.0273	5810883	-9.9389	43571279	-9.8270
55108270	-10.1644	150129614	-10.1099	116288241	-10.0273	54196571	-9.9339	62121297	-9.8233
116288259	-10.1638	7295892	-10.1089	138333015	-10.0271	104485083	-9.9338	81810297	-9.8142
108020162	-10.1627	4712022	-10.1087	101304578	-10.0268	130979573	-9.9314	114257581	-9.8129
19809702	-10.1626	107935592	-10.1064	61185445	-10.0266	69639861	-9.9280	152285935	-9.8127
84272768	-10.1622	62847644	-10.1051	116315654	-10.0261	63514863	-9.9268	43265966	-9.8123
55150929	-10.1617	119177736	-10.1050	70591856	-10.0255	7909593	-9.9260	65180512	-9.8107
138333401	-10.1613	59928028	-10.0986	101304566	-10.0248	4777990	-9.9258	28604428	-9.8086
101783323	-10.1611	20330940	-10.0979	61190072	-10.0228	70994	-9.9254	115485289	-9.8077
2759891	-10.1605	106316916	-10.0976	61203821	-10.0196	63687843	-9.9216	107935762	-9.8036
138333203	-10.1603	10609938	-10.0973	64356599	-10.0187	147947810	-9.9192	76974794	-9.8013
53435141	-10.1590	43273878	-10.0962	62681527	-10.0185	148081321	-9.9179	76974792	-9.8013
57869692	-10.1577	20318616	-10.0960	79379620	-10.0184	63864286	-9.9134	62117858	-9.8010
2801614	-10.1574	152383158	-10.0960	3245344	-10.0173	107935806	-9.9118	81800100	-9.7991
138332856	-10.1573	92045459	-10.0946	118034627	-10.0171	61278589	-9.9085	20365115	-9.7987
62135787	-10.1569	119177778	-10.0936	101373463	-10.0151	44829102	-9.9073	132605018	-9.7983
147628141	-10.1569	3511313	-10.0927	94831148	-10.0151	9013217	-9.9058	154109578	-9.7961
105648258	-10.1554	104563125	-10.0917	53936992	-10.0147	115485550	-9.9029	103869135	-9.7960
115970032	-10.1552	154376551	-10.0893	58013160	-10.0145	43273087	-9.8997	107935823	-9.7930
61590412	-10.1548	138333860	-10.0883	87369814	-10.0129	81800341	-9.8996	129694961	-9.7919
116215846	-10.1527	44414	-10.0878	79470256	-10.0125	124394414	-9.8947	66780541	-9.7900
136167567	-10.1525	79476961	-10.0851	143559480	-10.0105	61639844	-9.8907	43736080	-9.7896
81465235	-10.1515	62120072	-10.0838	119177705	-10.0096	63190411	-9.8882	113954901	-9.7859
132489688	-10.1499	61451735	-10.0833	132569116	-10.0084	43736098	-9.8861	43139180	-9.7831
66670743	-10.1498	79478143	-10.0831	9013091	-10.0067	564304	-9.8855	61182072	-9.7825
115485329	-10.1483	62122330	-10.0812	116036249	-10.0058	55028516	-9.8845	115485302	-9.7825
61578884	-10.1473	153656601	-10.0811	7059365	-10.0013	22766386	-9.8842	61195769	-9.7817
113475879	-10.1468	765807	-10.0800	17172303	-9.9986	120120810	-9.8817	115485311	-9.7816
9813277	-10.1459	43735992	-10.0796	63695585	-9.9974	114017926	-9.8807	40427069	-9.7792
82952027	-10.1446	103462067	-10.0756	6893084	-9.9935	63190354	-9.8767	121649422	-9.7787
70563130	-10.1439	153850619	-10.0742	3112779	-9.9923	90830460	-9.8731	62230529	-9.7785

PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
61188487	-9.7775	61303291	-9.6635	20667065	-9.5683	7918500	-9.4767	43269750	-9.3833
22730407	-9.7711	136167552	-9.6622	124306230	-9.5630	63190178	-9.4746	116193382	-9.3804
129017905	-9.7674	64034479	-9.6606	61605144	-9.5624	62678936	-9.4732	154956713	-9.3781
18209673	-9.7647	116046804	-9.6576	22402828	-9.5597	66623625	-9.4729	53705382	-9.3761
101851125	-9.7624	138334810	-9.6570	81756787	-9.5594	55223084	-9.4690	69853914	-9.3761
116140116	-9.7619	28604534	-9.6568	13105493	-9.5571	62711002	-9.4690	20198303	-9.3758
28604528	-9.7595	89094655	-9.6562	116318260	-9.5566	53777162	-9.4685	81810432	-9.3741
118884121	-9.7576	64008672	-9.6543	44621169	-9.5564	67762710	-9.4685	107935632	-9.3740
150984118	-9.7573	43139157	-9.6485	54305621	-9.5551	64687057	-9.4682	61878506	-9.3739
55223388	-9.7544	104564308	-9.6430	120121083	-9.5547	64677059	-9.4677	114028453	-9.3738
67876156	-9.7529	138334871	-9.6428	2844058	-9.5529	22096600	-9.4636	9013008	-9.3697
61958129	-9.7523	2632724	-9.6411	101304560	-9.5526	55181447	-9.4609	151830598	-9.3638
23009481	-9.7483	310580	-9.6360	81798112	-9.5511	88064394	-9.4585	64754650	-9.3623
43270573	-9.7473	121820	-9.6341	85594204	-9.5473	61428884	-9.4560	104328506	-9.3604
113498735	-9.7470	65536673	-9.6340	63212291	-9.5449	62122332	-9.4553	138333447	-9.3554
79694460	-9.7458	150459038	-9.6335	61958130	-9.5439	23551476	-9.4541	119177686	-9.3517
23330642	-9.7443	22725926	-9.6320	28801210	-9.5421	63190062	-9.4481	130449921	-9.3504
340888	-9.7424	22721408	-9.6318	418784	-9.5410	13188748	-9.4465	113249344	-9.3500
63188212	-9.7413	154312423	-9.6307	20747919	-9.5404	118086712	-9.4456	4558944	-9.3481
43437716	-9.7410	116300335	-9.6289	61604914	-9.5381	101851126	-9.4455	148183881	-9.3453
136085931	-9.7394	107793002	-9.6287	116288247	-9.5368	59737551	-9.4446	141124661	-9.3444
28629	-9.7379	104697986	-9.6270	61185505	-9.5268	62134086	-9.4432	115485563	-9.3438
87154234	-9.7324	107935686	-9.6267	116214818	-9.5267	63008201	-9.4402	103189317	-9.3401
42083266	-9.7302	138333520	-9.6197	107935595	-9.5266	152818343	-9.4389	64008091	-9.3373
101886839	-9.7259	133060635	-9.6187	79686417	-9.5261	113327250	-9.4380	138334014	-9.3360
154282439	-9.7241	28604385	-9.6145	113319850	-9.5258	148196115	-9.4372	62711125	-9.3357
139616613	-9.7223	63076505	-9.6130	138333664	-9.5258	20763202	-9.4367	142085068	-9.3351
62121994	-9.7214	47667	-9.6103	140117580	-9.5257	62135617	-9.4363	24869220	-9.3342
55049196	-9.7196	43271421	-9.6088	114017908	-9.5247	63983648	-9.4351	3017199	-9.3333
141242655	-9.7195	23089480	-9.6083	39368254	-9.5220	132528141	-9.4326	7010599	-9.3333
152275598	-9.7195	1758552	-9.6080	55039002	-9.5187	107793003	-9.4266	62134588	-9.3286
81800317	-9.7193	136167548	-9.6071	84320173	-9.5178	65960086	-9.4245	151946645	-9.3266
4226613	-9.7166	78944218	-9.6062	61592273	-9.5175	3402295	-9.4244	63959861	-9.3260
61592272	-9.7145	22670807	-9.6059	1808855	-9.5173	65679388	-9.4236	62121995	-9.3257
43139183	-9.7142	8022494	-9.6031	63187661	-9.5151	81811090	-9.4227	11535980	-9.3248
11107232	-9.7134	151736653	-9.6026	143557118	-9.5140	116303139	-9.4223	58289025	-9.3247
67843266	-9.7132	17808714	-9.5999	54562669	-9.5132	113500778	-9.4170	21037462	-9.3246
13632711	-9.7106	43090421	-9.5988	115485217	-9.5122	43270571	-9.4149	151946646	-9.3246
62681705	-9.7100	64521760	-9.5980	107935792	-9.5100	138332226	-9.4147	149562023	-9.3238
89949698	-9.7093	92033634	-9.5958	151957415	-9.5071	18071006	-9.4137	150853642	-9.3222
17800971	-9.7083	62135791	-9.5953	53834892	-9.5046	116315323	-9.4109	116302754	-9.3206
127562044	-9.7043	61605059	-9.5922	107935609	-9.4997	108915684	-9.4108	154138813	-9.3194
143556875	-9.7032	121252	-9.5913	43265964	-9.4977	51922197	-9.4106	116302777	-9.3189
61195835	-9.7011	62121122	-9.5897	113319874	-9.4957	63002685	-9.4100	62232188	-9.3162
113319812	-9.7010	888179	-9.5891	80179554	-9.4951	142441787	-9.4090	412404	-9.3132
144806398	-9.6991	62232568	-9.5877	81798134	-9.4945	71370216	-9.4085	114217265	-9.3089
106329921	-9.6942	21881251	-9.5867	136139017	-9.4934	63983853	-9.4074	63190355	-9.3062
63190332	-9.6912	155291887	-9.5866	115042003	-9.4930	114334397	-9.4059	63515049	-9.3059
23274774	-9.6900	61827196	-9.5859	4741684	-9.4911	137268654	-9.4047	116644916	-9.3054
80205920	-9.6862	23338258	-9.5854	61441263	-9.4910	10977812	-9.4039	66983505	-9.3049
107796389	-9.6845	101103679	-9.5849	53692333	-9.4905	81812670	-9.4033	138333423	-9.3047
107935589	-9.6821	43579704	-9.5847	81812579	-9.4904	136167557	-9.3959	15077621	-9.3030
151101028	-9.6816	21486317	-9.5833	142793886	-9.4888	82984982	-9.3951	55158871	-9.3006
138333413	-9.6807	64599419	-9.5825	138333055	-9.4887	82852371	-9.3947	60984900	-9.3005
135431158	-9.6790	129898137	-9.5804	65538793	-9.4880	28604345	-9.3940	21644168	-9.2953
43264338	-9.6783	154318033	-9.5776	81989689	-9.4877	4053593	-9.3933	61605114	-9.2942
120121038	-9.6757	63003346	-9.5743	20331108	-9.4873	23330645	-9.3932	57263556	-9.2941
62711704	-9.6749	4112112	-9.5741	81812915	-9.4871	9644264	-9.3928	43268923	-9.2940
91619144	-9.6729	43735990	-9.5727	154165978	-9.4857	61378686	-9.3901	115485310	-9.2936
3063141	-9.6684	44278837	-9.5723	107935572	-9.4833	23588335	-9.3888	61428886	-9.2922
137292285	-9.6683	12341466	-9.5712	7028097	-9.4805	44621219	-9.3860	122107209	-9.2898
61428654	-9.6674	136245094	-9.5692	101103680	-9.4796	131863041	-9.3854	119177672	-9.2895

PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
110337377	-9.2869	138333070	-9.1889	62681528	-9.0655	8375554	-8.9683	107935587	-8.8737
89877667	-9.2850	19926020	-9.1880	87154235	-9.0638	24833810	-8.9665	117043109	-8.8735
9882362	-9.2836	20482525	-9.1878	62120600	-9.0627	148309786	-8.9663	106191373	-8.8732
107935658	-9.2830	3704599	-9.1872	129469889	-9.0605	89648227	-8.9629	122546803	-8.8715
2052592	-9.2817	20482563	-9.1823	122107210	-9.0605	107303240	-8.9624	27092	-8.8694
101304588	-9.2779	81810685	-9.1823	102994027	-9.0597	81812790	-8.9610	114137932	-8.8677
107795702	-9.2770	64355830	-9.1820	142320266	-9.0586	81810545	-8.9609	115485293	-8.8663
113319818	-9.2721	81812533	-9.1804	13632712	-9.0585	91382470	-8.9590	89294881	-8.8651
65710878	-9.2713	57110483	-9.1776	59479774	-9.0560	87923999	-8.9586	138333827	-8.8648
133083734	-9.2706	115485485	-9.1768	13632699	-9.0542	106019605	-8.9565	64686462	-8.8625
133083776	-9.2695	62120431	-9.1731	43321595	-9.0534	83143899	-8.9537	69089179	-8.8611
23562258	-9.2670	11470853	-9.1679	57281363	-9.0533	138332826	-8.9497	149073001	-8.8588
43584661	-9.2648	141242647	-9.1661	55224713	-9.0493	61183934	-8.9492	6941503	-8.8581
63945905	-9.2570	7918504	-9.1641	707359	-9.0475	61441509	-8.9476	21480201	-8.8578
63539501	-9.2570	29949843	-9.1575	154452294	-9.0472	61190453	-8.9455	62231544	-8.8575
91619155	-9.2556	115485387	-9.1569	115485391	-9.0459	102267047	-8.9443	129778738	-8.8549
13079664	-9.2534	138333107	-9.1543	151001282	-9.0441	138332134	-8.9437	15508883	-8.8527
60891197	-9.2532	91210674	-9.1523	149922436	-9.0396	4312880	-8.9431	2322408	-8.8501
20198245	-9.2513	101864877	-9.1521	57305658	-9.0395	62710442	-8.9407	28801013	-8.8494
89858403	-9.2513	61443283	-9.1504	20549392	-9.0381	10897731	-8.9396	114490795	-8.8481
138334824	-9.2511	68125722	-9.1488	62135273	-9.0378	81812881	-8.9378	152671711	-8.8465
81810403	-9.2491	61592650	-9.1466	102993993	-9.0371	23268431	-8.9343	8971356	-8.8464
61704255	-9.2480	61893496	-9.1438	115485315	-9.0371	28604320	-8.9312	63514859	-8.8439
62135955	-9.2436	20492599	-9.1425	22760714	-9.0367	837284	-8.9298	101304568	-8.8385
105954235	-9.2435	108416601	-9.1414	61157017	-9.0367	115485292	-8.9277	138333840	-8.8351
124423548	-9.2392	17146	-9.1384	55181253	-9.0327	1864681	-8.9269	61592188	-8.8313
106178387	-9.2373	63447236	-9.1345	24835072	-9.0319	150400144	-8.9269	81272899	-8.8253
116391490	-9.2371	101304558	-9.1344	88538948	-9.0318	105799309	-8.9249	19907916	-8.8240
135798091	-9.2340	21108741	-9.1337	15720416	-9.0315	20820503	-8.9239	115485353	-8.8196
22992155	-9.2315	7340538	-9.1336	44621255	-9.0311	138333897	-8.9198	113252072	-8.8190
115485298	-9.2314	143927766	-9.1272	59847661	-9.0236	152482516	-8.9143	138333125	-8.8166
140789780	-9.2308	113690648	-9.1252	61183895	-9.0235	87273880	-8.9122	65180613	-8.8157
3125300	-9.2305	104698186	-9.1229	18361705	-9.0220	11317409	-8.9115	29272489	-8.8144
1913215	-9.2305	563565	-9.1227	63190013	-9.0212	149790339	-8.9108	23338314	-8.8139
69350412	-9.2289	61606786	-9.1225	63190192	-9.0192	43736019	-8.9079	80229938	-8.8132
79480	-9.2274	67762933	-9.1220	153314056	-9.0160	61873274	-8.9059	102010733	-8.8111
112660327	-9.2271	146947118	-9.1203	63954989	-9.0145	43295089	-8.9049	116116005	-8.8101
144642752	-9.2261	78974161	-9.1141	81810675	-9.0138	61604812	-8.9043	69639835	-8.8072
54336432	-9.2251	115485284	-9.1139	81810279	-9.0128	84582802	-8.9043	149055108	-8.8040
115485290	-9.2247	43274709	-9.1132	43295091	-9.0124	5108684	-8.9038	61199102	-8.8030
11462700	-9.2234	595090	-9.1129	138332303	-9.0095	3582040	-8.9031	142780998	-8.7999
6369817	-9.2233	58467903	-9.1113	153924650	-9.0082	2312558	-8.9031	115485303	-8.7948
138333850	-9.2224	154774206	-9.1106	13238790	-9.0074	101304574	-8.9016	21140830	-8.7938
115435110	-9.2212	62136123	-9.1097	61604886	-9.0057	106222862	-8.9014	116370322	-8.7922
62231847	-9.2205	55031200	-9.1095	65710890	-9.0043	107909806	-8.8998	107935629	-8.7873
104648910	-9.2199	70463981	-9.1027	17172331	-9.0038	18604951	-8.8971	63446884	-8.7863
61404167	-9.2193	88684304	-9.1027	16760907	-8.9990	81818493	-8.8968	21617334	-8.7861
1563370	-9.2155	28604361	-9.1006	1492754	-8.9970	104328550	-8.8959	61604787	-8.7838
62199270	-9.2127	61828402	-9.0984	118138357	-8.9944	101304598	-8.8950	81818573	-8.7825
61441216	-9.2123	106042921	-9.0963	124013238	-8.9937	24284692	-8.8931	81172953	-8.7812
102208478	-9.2118	117665268	-9.0940	116644351	-8.9905	71445558	-8.8905	87845410	-8.7779
115485322	-9.2117	61585242	-9.0921	44621256	-8.9860	116303985	-8.8898	22151071	-8.7728
61704105	-9.2068	148669248	-9.0899	115448248	-8.9860	102148920	-8.8874	63190233	-8.7722
63514343	-9.2067	138333636	-9.0850	152473554	-8.9842	87353377	-8.8873	102411154	-8.7713
28604190	-9.2061	23274809	-9.0790	141459264	-8.9827	66760553	-8.8861	85974508	-8.7688
218655	-9.2036	88958106	-9.0766	6899477	-8.9822	19809693	-8.8823	73453586	-8.7683
113319827	-9.2018	70180870	-9.0761	121904095	-8.9756	150959515	-8.8808	154312037	-8.7673
61446292	-9.2016	107935793	-9.0742	81805818	-8.9733	25764740	-8.8791	12552558	-8.7672
43272269	-9.1990	61190951	-9.0732	62122503	-8.9729	61441560	-8.8788	155420764	-8.7660
63954576	-9.1953	81805709	-9.0721	22216601	-8.9725	61251420	-8.8778	81812944	-8.7655
43269748	-9.1927	834932	-9.0702	22121542	-8.9705	125563026	-8.8772	63513467	-8.7650
113786030	-9.1921	63008374	-9.0655	152746775	-8.9691	120192173	-8.8740	55158302	-8.7643

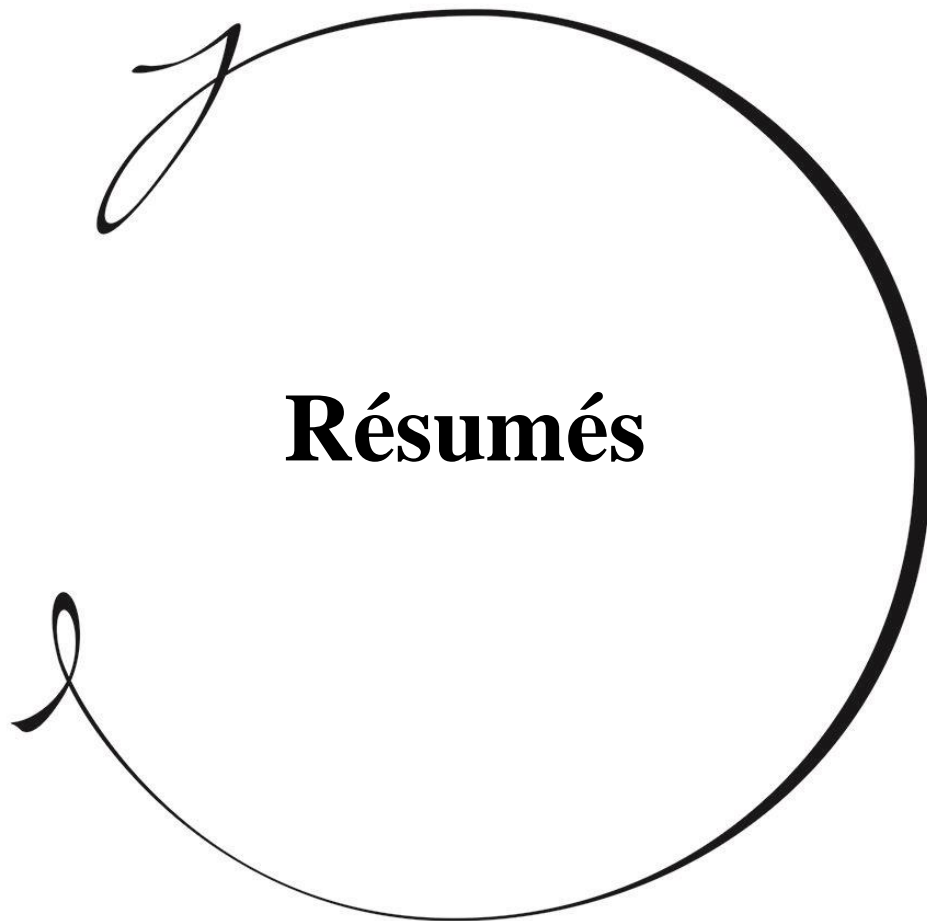
PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
113319804	-8.7642	61588154	-8.6629	20738347	-8.5135	138333072	-8.3241	28665901	-8.1846
53343561	-8.7635	101304592	-8.6618	138334640	-8.5134	149863579	-8.3208	138332823	-8.1822
129898143	-8.7613	138332814	-8.6583	151033580	-8.5132	107870297	-8.3207	107935574	-8.1820
116216952	-8.7611	154452295	-8.6559	56690355	-8.5094	22650	-8.3204	138333208	-8.1774
88434744	-8.7597	89465746	-8.6552	17944164	-8.5079	81805680	-8.3196	22023989	-8.1713
88414731	-8.7597	63515212	-8.6536	138332724	-8.5071	63189996	-8.3133	28665822	-8.1694
43139158	-8.7591	89110464	-8.6480	21549127	-8.5014	138333633	-8.3033	142768229	-8.1670
62136122	-8.7557	246469	-8.6391	149919277	-8.4900	119092571	-8.3017	81810272	-8.1662
43353139	-8.7555	44621220	-8.6366	1506140	-8.4882	4112237	-8.2913	138333903	-8.1624
6370579	-8.7545	113319795	-8.6340	138333050	-8.4851	129897777	-8.2912	147561212	-8.1618
5838011	-8.7545	116374247	-8.6330	138334787	-8.4843	65019019	-8.2890	107935590	-8.1578
82300971	-8.7536	147191649	-8.6318	115521330	-8.4825	45466624	-8.2869	136167561	-8.1547
138333862	-8.7494	138334827	-8.6305	63831074	-8.4767	13238788	-8.2854	149861744	-8.1490
64216976	-8.7428	138333232	-8.6276	138333869	-8.4759	114004152	-8.2840	9013090	-8.1429
65538600	-8.7416	89465748	-8.6259	81810681	-8.4702	43125449	-8.2824	101103677	-8.1408
61604786	-8.7385	62135611	-8.6247	15947940	-8.4690	4741724	-8.2818	115326559	-8.1396
113926927	-8.7372	121649326	-8.6233	6612355	-8.4653	23338251	-8.2814	148041775	-8.1329
90674878	-8.7366	90940307	-8.6180	9013133	-8.4645	62134931	-8.2774	101304572	-8.1257
106005259	-8.7344	64214285	-8.6152	138333054	-8.4644	81815195	-8.2773	61593887	-8.1246
311083	-8.7298	21486323	-8.6149	63405420	-8.4564	9013132	-8.2764	114098196	-8.1241
114217275	-8.7277	43571281	-8.6060	81810989	-8.4550	138332288	-8.2764	149020835	-8.1235
135721317	-8.7268	887612	-8.6047	62135448	-8.4507	3260307	-8.2762	142678170	-8.1230
107935750	-8.7260	19797893	-8.6039	151949543	-8.4476	102997926	-8.2712	28604317	-8.1196
114174513	-8.7239	150024491	-8.6039	86624964	-8.4474	69640215	-8.2658	81285254	-8.1169
61703953	-8.7230	63514504	-8.6029	81810276	-8.4460	20688619	-8.2637	107796333	-8.1134
44621224	-8.7224	113762188	-8.6021	63538320	-8.4445	63189828	-8.2583	141741876	-8.1133
106329966	-8.7217	115485313	-8.5989	20688616	-8.4416	64110551	-8.2581	140977574	-8.1106
107935580	-8.7212	14768173	-8.5944	54115920	-8.4382	148247067	-8.2555	118339212	-8.1087
115485474	-8.7172	132204992	-8.5930	43736097	-8.4294	43268921	-8.2554	139927260	-8.1016
141032846	-8.7170	81812580	-8.5916	62122006	-8.4287	254609	-8.2531	63227684	-8.1014
63187994	-8.7168	81756449	-8.5898	7918501	-8.4284	138332813	-8.2491	28604129	-8.1007
114017911	-8.7141	115485475	-8.5895	116080895	-8.4251	81818767	-8.2471	5378098	-8.0993
68968757	-8.7115	118515527	-8.5851	138333444	-8.4211	61884195	-8.2463	13188751	-8.0962
103403124	-8.7108	148993083	-8.5834	63189865	-8.4132	13632713	-8.2459	138333110	-8.0951
138333415	-8.7092	79483141	-8.5747	54083149	-8.4131	101304570	-8.2388	113319810	-8.0903
113752420	-8.7088	23338275	-8.5741	88921018	-8.4131	9013129	-8.2378	61831577	-8.0901
63189924	-8.7082	63529009	-8.5716	138333059	-8.4125	28866696	-8.2355	55139080	-8.0900
105778442	-8.7079	65709881	-8.5704	153924607	-8.4077	61199722	-8.2351	63995162	-8.0891
138333012	-8.7073	82851361	-8.5626	115432266	-8.3983	115485229	-8.2312	140064001	-8.0884
119177731	-8.7042	22023988	-8.5530	62135447	-8.3970	63513463	-8.2303	23274808	-8.0808
138333420	-8.7042	81625327	-8.5520	3154033	-8.3953	6256118	-8.2291	70590167	-8.0745
87701457	-8.7015	120157215	-8.5519	152093470	-8.3884	3638196	-8.2254	65041345	-8.0711
55110844	-8.7000	62122676	-8.5463	115485327	-8.3868	63513462	-8.2238	63983852	-8.0692
127511553	-8.6961	53435480	-8.5406	115485296	-8.3844	116374255	-8.2237	54549938	-8.0684
101304580	-8.6954	29565193	-8.5392	7918503	-8.3707	107935603	-8.2235	23338320	-8.0642
148315104	-8.6943	79477756	-8.5392	61186078	-8.3704	61199336	-8.2232	62121989	-8.0562
113319786	-8.6918	115485299	-8.5376	101667952	-8.3692	20582527	-8.2195	54077484	-8.0554
4121168	-8.6914	1528662	-8.5367	62135956	-8.3688	147424412	-8.2173	148273059	-8.0543
136167559	-8.6880	308264	-8.5346	107935791	-8.3684	154312424	-8.2138	138333657	-8.0541
283189	-8.6877	11335012	-8.5344	101304618	-8.3660	21248185	-8.2112	138333394	-8.0524
63513808	-8.6820	137292319	-8.5332	18435111	-8.3643	62711469	-8.2099	72083732	-8.0481
81810542	-8.6814	61604813	-8.5329	73679601	-8.3622	138333866	-8.2093	143994448	-8.0475
22065390	-8.6790	21904092	-8.5311	26628	-8.3594	87773011	-8.2041	63515050	-8.0359
345829	-8.6759	43736090	-8.5272	69089512	-8.3559	101304564	-8.2034	135511949	-8.0331
103791542	-8.6730	61437879	-8.5268	7003982	-8.3524	113786088	-8.1995	21904093	-8.0329
114017940	-8.6721	115485369	-8.5250	113319884	-8.3501	138334832	-8.1991	114873563	-8.0327
81813130	-8.6693	54040233	-8.5229	102404378	-8.3496	138333629	-8.1967	91896642	-8.0321
37981040	-8.6690	62231204	-8.5204	63189745	-8.3454	101304586	-8.1955	61951328	-8.0294
62677447	-8.6679	134106590	-8.5188	62835148	-8.3437	9751498	-8.1919	113319801	-8.0125
64182754	-8.6659	9013056	-8.5186	113319802	-8.3385	101059666	-8.1896	107871463	-8.0114
138334825	-8.6641	63183807	-8.5172	129778045	-8.3379	135935137	-8.1867	92221239	-8.0075
20536404	-8.6630	12800012	-8.5143	143243400	-8.3290	2052597	-8.1846	79483221	-8.0057

PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
61189925	-8.0055	3504198	-7.8267	61208429	-7.6062	63698912	-7.3422	101304584	-7.1497
138333660	-8.0053	107818200	-7.8253	63514498	-7.5938	138334800	-7.3378	28801173	-7.1493
57693893	-7.9980	91944103	-7.8234	20067058	-7.5919	101211843	-7.3368	20209877	-7.1465
61607217	-7.9948	59107444	-7.8199	113319803	-7.5878	153853973	-7.3337	138333238	-7.1395
149089853	-7.9943	62710851	-7.8076	115485347	-7.5797	88624407	-7.3302	44450225	-7.1391
154156703	-7.9930	120121036	-7.8041	135512794	-7.5762	123712761	-7.3178	81812792	-7.1378
91619162	-7.9872	70629046	-7.7988	61183566	-7.5725	66872494	-7.3173	150661322	-7.1366
17974663	-7.9857	81828196	-7.7932	137292346	-7.5723	9013204	-7.3137	138334784	-7.1338
115485297	-7.9850	63189885	-7.7842	141378809	-7.5670	137352815	-7.3036	12045717	-7.1277
101304594	-7.9843	115485281	-7.7805	138333024	-7.5668	115485399	-7.3031	151784428	-7.1193
16285	-7.9807	141497947	-7.7793	61185082	-7.5622	61567714	-7.3020	65538720	-7.1152
61605109	-7.9779	146880079	-7.7791	142579267	-7.5620	20738348	-7.2975	101304614	-7.1041
28604316	-7.9761	107935715	-7.7745	63447023	-7.5611	54308939	-7.2968	28983384	-7.0929
69640125	-7.9714	55038670	-7.7708	62682814	-7.5602	20549402	-7.2960	81818772	-7.0871
28801187	-7.9684	61443670	-7.7677	44266147	-7.5598	61201029	-7.2903	63189795	-7.0845
107870030	-7.9617	120515298	-7.7588	124384237	-7.5497	9712872	-7.2875	54423949	-7.0776
61200167	-7.9610	105704302	-7.7563	63513822	-7.5452	80374508	-7.2850	23338283	-7.0693
115485344	-7.9565	39732904	-7.7545	101304616	-7.5328	101541616	-7.2806	43321035	-7.0626
68554725	-7.9544	63190222	-7.7495	107935562	-7.5290	82984436	-7.2803	101304622	-7.0625
91606047	-7.9526	45107296	-7.7488	54413158	-7.5267	61958226	-7.2781	67441646	-7.0580
22730847	-7.9506	114159390	-7.7457	88103618	-7.5263	63534971	-7.2706	13079660	-7.0429
63188082	-7.9499	15077622	-7.7417	138332132	-7.5263	141234823	-7.2688	136685268	-7.0428
69680994	-7.9499	138333111	-7.7416	23275105	-7.5217	16283	-7.2657	70630191	-7.0416
63190021	-7.9469	43656934	-7.7330	138333833	-7.5172	5224582	-7.2651	43774343	-7.0369
69229676	-7.9363	81818666	-7.7327	258708	-7.5164	138334818	-7.2651	54513427	-7.0363
138333890	-7.9347	14154841	-7.7301	138333855	-7.5030	28801080	-7.2643	65560180	-7.0272
62135106	-7.9328	155698870	-7.7292	63163976	-7.5020	13079656	-7.2612	22319294	-7.0212
63188264	-7.9321	138333079	-7.7281	147840277	-7.5015	54093903	-7.2554	61894306	-7.0202
146923479	-7.9315	61605110	-7.7254	44354625	-7.4993	20549320	-7.2537	2764811	-7.0196
147272147	-7.9283	107935674	-7.7233	141242646	-7.4885	138333023	-7.2495	20482573	-7.0154
155107224	-7.9269	20482587	-7.7215	69427241	-7.4872	138334821	-7.2455	28801009	-7.0044
18534709	-7.9261	115485275	-7.7189	11716380	-7.4832	105969240	-7.2398	114140031	-7.0022
44828849	-7.9255	61491885	-7.7173	114253172	-7.4783	20555301	-7.2333	16280	-6.9986
590677	-7.9157	63190108	-7.7166	10401952	-7.4616	106034951	-7.2318	8971360	-6.9974
44220603	-7.9064	104484826	-7.7162	100804	-7.4546	138333547	-7.2290	115485539	-6.9824
135784277	-7.9009	115326549	-7.7155	138333622	-7.4496	9013097	-7.2289	63189949	-6.9820
72083766	-7.8963	17944162	-7.7032	18873841	-7.4442	92040	-7.2266	60941574	-6.9815
98105581	-7.8943	13188746	-7.7030	317874	-7.4318	138333844	-7.2259	63450596	-6.9769
138333803	-7.8910	20331102	-7.6928	23338266	-7.4311	146804737	-7.2254	136272155	-6.9754
63187866	-7.8893	55038909	-7.6877	150612142	-7.4273	63538985	-7.2120	64676863	-6.9742
107817442	-7.8885	3431314	-7.6863	6374862	-7.4269	65041394	-7.2101	115485333	-6.9740
2828925	-7.8879	64033194	-7.6840	138333893	-7.4261	152635307	-7.2014	138333891	-6.9549
81652601	-7.8871	113319806	-7.6827	107870012	-7.4237	18174043	-7.2008	24837881	-6.9533
135567788	-7.8852	63190349	-7.6742	14356	-7.4154	53639290	-7.2006	69440490	-6.9511
135403324	-7.8852	45466619	-7.6717	115485270	-7.4126	71001795	-7.2005	62950768	-6.9432
153066269	-7.8818	62134083	-7.6681	3597088	-7.4087	20198269	-7.1967	61591651	-6.9354
123421511	-7.8753	147204699	-7.6564	11288665	-7.4042	13632714	-7.1965	101304596	-6.9324
9013235	-7.8723	58349851	-7.6528	100947617	-7.4042	4550993	-7.1951	120121055	-6.9230
136167545	-7.8678	138333216	-7.6381	149968811	-7.3969	137292333	-7.1949	8375553	-6.9226
58023138	-7.8620	20198299	-7.6323	106039251	-7.3945	123440452	-7.1901	10717049	-6.9079
9013094	-7.8599	61191929	-7.6311	138333135	-7.3915	114101375	-7.1849	24697836	-6.8970
59901892	-7.8590	103462028	-7.6280	79686622	-7.3885	129147894	-7.1804	138334779	-6.8949
296063	-7.8577	123737786	-7.6237	101419975	-7.3855	119177721	-7.1763	23457814	-6.8798
92200647	-7.8551	150672748	-7.6209	23457767	-7.3781	155272985	-7.1754	103496569	-6.8767
79686725	-7.8525	129042226	-7.6195	13997877	-7.3780	61568208	-7.1739	154452293	-6.8735
63512607	-7.8520	148529111	-7.6169	139788787	-7.3668	63656761	-7.1700	138334789	-6.8662
61191692	-7.8475	43736018	-7.6159	36689513	-7.3660	101304620	-7.1652	55260129	-6.8659
54602160	-7.8418	61203088	-7.6151	81811014	-7.3574	81360323	-7.1645	7244720	-6.8562
115485268	-7.8409	139786063	-7.6138	105760275	-7.3555	119177708	-7.1598	101304606	-6.8562
63983444	-7.8344	43125481	-7.6097	138333076	-7.3548	21904091	-7.1525	63450769	-6.8478
16793759	-7.8317	4741686	-7.6095	81812751	-7.3530	138333098	-7.1502	13655812	-6.8324
63695587	-7.8293	89950923	-7.6091	91520393	-7.3528	151105734	-7.1500	141108438	-6.8307

PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)	PubChem ID	$\Delta G$ (kJ/mol)
12800017	-6.8242	106315807	-6.4835	546706	-6.0517	101304612	-5.6119	147380829	-4.9927
65267321	-6.8229	142678171	-6.4735	17359233	-6.0387	63450728	-5.5961	102010734	-4.9850
20536521	-6.8195	45269818	-6.4717	57994101	-6.0374	141599762	-5.5915	21057297	-4.9831
58019451	-6.8172	12099392	-6.4675	101756881	-6.0374	101366390	-5.5868	101304600	-4.9797
123273167	-6.8150	18824507	-6.4658	105705155	-6.0165	20344515	-5.5729	138333027	-4.9777
114101433	-6.8133	102994033	-6.4604	20196319	-6.0042	138332022	-5.5638	142100719	-4.9655
138332387	-6.8103	91508245	-6.4529	61606692	-5.9917	63500946	-5.5195	138333529	-4.9319
55158295	-6.7992	138332311	-6.4150	154322174	-5.9887	20482535	-5.5190	89950922	-4.9264
53919793	-6.7927	142627752	-6.4134	139823764	-5.9746	939338	-5.5151	91902023	-4.9120
120121087	-6.7923	9013005	-6.4073	135527025	-5.9727	73894767	-5.5117	23617757	-4.9088
63009099	-6.7892	58350625	-6.4025	11425900	-5.9641	82305590	-5.5064	13655814	-4.9026
138334794	-6.7798	63187948	-6.4003	21954213	-5.9563	149976790	-5.4926	155587087	-4.8943
151559654	-6.7701	28866640	-6.3951	110443478	-5.9562	70350095	-5.4801	152770120	-4.8725
61958855	-6.7698	138333141	-6.3837	80205670	-5.9552	138333122	-5.4737	122519846	-4.8569
13655813	-6.7546	115521484	-6.3450	101304624	-5.9543	141062704	-5.4677	63405162	-4.8480
138334797	-6.7538	53894357	-6.3343	17172328	-5.9497	20549365	-5.4588	80259157	-4.8458
103463328	-6.7478	106020652	-6.3225	12250027	-5.9346	20475772	-5.4484	88106317	-4.8363
138333065	-6.7359	20344509	-6.3223	138334012	-5.9307	63537855	-5.4370	3771787	-4.8205
23860911	-6.7356	76330906	-6.3217	63190399	-5.9283	102492607	-5.4191	80259887	-4.8098
120157210	-6.7256	138332829	-6.3166	11075719	-5.9279	136446300	-5.4089	57059833	-4.8019
58721586	-6.7237	70625243	-6.3159	150713224	-5.9233	71436831	-5.3985	64295359	-4.7852
79687263	-6.7108	141242652	-6.3157	13307866	-5.9136	18824508	-5.3890	61845654	-4.7826
107935794	-6.7100	154301233	-6.3104	138333847	-5.9064	140063979	-5.3771	143927779	-4.7684
26629	-6.7057	12800013	-6.3042	23457847	-5.9063	87200170	-5.3738	106232281	-4.7494
9013093	-6.6888	116303475	-6.2961	81814676	-5.9012	63450595	-5.3721	155664419	-4.7407
101304610	-6.6829	1402447	-6.2889	141046713	-5.9005	150066855	-5.3694	61186271	-4.7297
80238396	-6.6791	66975271	-6.2881	101852845	-5.8841	4446056	-5.3606	138333053	-4.7266
63190398	-6.6754	140291796	-6.2723	58024763	-5.8837	3729075	-5.3575	3831576	-4.7208
5042425	-6.6702	231165	-6.2636	132542472	-5.8739	141459265	-5.3390	81984742	-4.7184
11231813	-6.6535	20549321	-6.2574	101103676	-5.8573	101304582	-5.3238	20482543	-4.6770
63190109	-6.6353	12800014	-6.2571	59622907	-5.8515	150801047	-5.3199	155295872	-4.6710
28866648	-6.6260	102994618	-6.2571	147478009	-5.8406	129898140	-5.3198	91896868	-4.6563
136425709	-6.6253	85707060	-6.2547	6055498	-5.8378	138333392	-5.3047	20549414	-4.6450
13079666	-6.6196	67084813	-6.2496	23338262	-5.8225	138333889	-5.2857	13987130	-4.6299
63537158	-6.6181	138333834	-6.2481	101118921	-5.8105	129898139	-5.2820	54054435	-4.6263
138332377	-6.6176	139709465	-6.2190	124426471	-5.8084	65042993	-5.2801	90849212	-4.6241
113319789	-6.6107	136502450	-6.2098	101304576	-5.8058	153960947	-5.2787	146136885	-4.6067
46567129	-6.6104	18401323	-6.2056	72083723	-5.7989	101621309	-5.2588	91737337	-4.5932
71332937	-6.6075	53652619	-6.1926	21348389	-5.7962	70626285	-5.2484	12800023	-4.5921
5192013	-6.6038	3125306	-6.1835	12361504	-5.7961	153960948	-5.2301	4829267	-4.5890
20043828	-6.6001	1801350	-6.1835	28631	-5.7870	126969277	-5.2257	12195286	-4.5758
4186763	-6.5993	53772925	-6.1763	138333116	-5.7766	121215441	-5.2257	2725480	-4.5672
20198252	-6.5916	6947338	-6.1646	138334831	-5.7729	61188187	-5.2133	140291868	-4.5570
9700301	-6.5878	22610215	-6.1525	135948007	-5.7637	563752	-5.1787	57203909	-4.5546
63189744	-6.5709	147430100	-6.1412	101019004	-5.7498	23275419	-5.1763	115521241	-4.5510
68800427	-6.5623	22760710	-6.1377	129898141	-5.7459	46784071	-5.1742	143268083	-4.5483
142489336	-6.5623	102997940	-6.1377	63190069	-5.7420	101304604	-5.1725	102512187	-4.5444
11067580	-6.5587	20549372	-6.1362	23334166	-5.7395	14230957	-5.1418	124426472	-4.5039
44280652	-6.5535	148317658	-6.1358	13884865	-5.7342	20549418	-5.1403	135548369	-4.4960
138333239	-6.5530	106316074	-6.1355	149834766	-5.7244	9633136	-5.1402	120120909	-4.4835
120192177	-6.5465	138333658	-6.1247	81876014	-5.7143	104829234	-5.1383	23574197	-4.4758
9710931	-6.5389	138334819	-6.1157	141141546	-5.7042	152194137	-5.1312	20482556	-4.4754
123978170	-6.5361	138333426	-6.1121	81814747	-5.7032	61193630	-5.1165	135711787	-4.4673
154227164	-6.5353	53922123	-6.1099	143331961	-5.6982	61181422	-5.1049	54130291	-4.4662
21140829	-6.5256	9013181	-6.1089	530153	-5.6953	13632716	-5.0793	57200641	-4.4481
117043139	-6.5187	15952118	-6.1041	116193134	-5.6756	13079668	-5.0791	57203917	-4.4461
1354855	-6.5109	120515282	-6.1004	17763043	-5.6697	139786065	-5.0774	54221113	-4.4448
107201700	-6.5109	92042647	-6.0939	63536987	-5.6633	102994028	-5.0600	20549306	-4.4392
138333445	-6.5044	57320899	-6.0928	23423719	-5.6465	64293836	-5.0343	151654298	-4.4303
5706950	-6.4986	15508805	-6.0866	23450766	-5.6362	138333119	-5.0253	28801202	-4.4193
20482503	-6.4915	3100261	-6.0582	152305349	-5.6336	138333095	-5.0009	886814	-4.3927
20536407	-6.4835	138333872	-6.0564	101304608	-5.6227	101304590	-4.9986	86748654	-4.3676







# **Résumés**

## Résumé

L'objectif essentiel de notre travail est de proposer par docking moléculaire de nouveaux inhibiteurs de la Transmembranaire Protéase Sérine 2 (TMPSSR2); cible thérapeutique pour lutter contre le SARS-CoV-2. Dans ce contexte, le criblage virtuel d'une chimiothèque de 13521 similaires chimiques de L'acide 4-carbamimidamidobenzoïque fait ressortir les composés **S1, S2 et S3** comme nouveaux inhibiteurs théoriquement puissants de la TMPSSR2. Ces composés ont présenté des énergies d'interactions de -41.68 KJ/mol, -41.58 KJ/mol et -38.90 KJ/mol respectivement et qui sont nettement meilleures que celle du composé de départ soit -24,17 KJ/mol. Enfin, l'étude théorique des critères physicochimiques, pharmacocinétiques et de toxicité potentielle nous renseigne positivement sur les propriétés ADMET de ces composés.

**Mots clés :** Covid-19, Docking moléculaire, FlexX, PubChem, TmprSS2.

**Abstrat**

The main objective of our work is to propose by molecular docking new inhibitors of Transmembrane Protease Serine 2 (TMPSSR2); therapeutic target against SARS-CoV-2. In this context, the virtual screening of a chemical library of 13,521 similar chemicals of 4-carbamimidamidobenzoic acid highlights compounds S1, S2 and S3 as new theoretically potent inhibitors of TMPSSR2. These compounds exhibited interaction energies of - 41.68 KJ / mol, - 41.58 KJ / mol and -38.90 KJ / mol respectively and which are significantly better than that of the starting compound : -24.17 KJ / mol. Finally, the theoretical study of the physicochemical, pharmacokinetic and potential toxicity criteria provides us with positive information on the ADMET properties of these compounds.

**Key Words :** Covid-19, Molecular Docking, FlexX, PubChem, TmprSS2.

**الملخص**

الهدف الرئيسي من عملنا هو اقتراح مثبطات جديدة لـ Transmembrane Protease Serine 2 (TMPSSR2) هدف علاجي لمحاربة فيروس كورونا SARS-CoV-2 وذلك باستخدام مناهج الالتحام الجزيئي. من اجل ذلك، فإن الفحص الافتراضي لمكتبة كيميائية تضم 13521 مادة كيميائية مماثلة لحمض 4-carbamimidamidobenzoic يسלט الضوء على المركبات S1 وS2 وS3 كمثبطات جديدة قوية من الناحية النظرية لـ TMPSSR2. هته المركبات قدمت طاقة ربط مقدرة ب -41.68 كج/مول، -41.58 كج/مول و -38.90 كج/مول على التوالي. وبالتالي هي أفضل بكثير من مركب البداية، أي -24.17 كيلوجول / مول. أخيرًا، توفر لنا الدراسة النظرية للمعايير الفيزيائية والكيميائية والحركية الدوائية والسمية المحتملة معلومات إيجابية عن خصائص ADMET لهذه المركبات.

**الكلمات المفتاحية:** لالتحام الجزيئي، Covid-19، TMPRSS2، FlexX، PubChem.

Présenté et soutenu par : DJEKRIFF Abdelhak  
NOUADRI Yousra

Date de la soutenance : 23 / 09/ 2021

Mémoire présenté en vue de l'obtention du diplôme de Master  
Spécialité : Biochimie Appliquée.

## **Conception *in silico* de nouveaux inhibiteurs de la Transmembranaire Protéase Sérine 2 (TMPRSS2) pour lutter contre le SARS CoV-2.**

### **Résumé**

L'objectif essentiel de notre travail est de proposer par docking moléculaire de nouveaux inhibiteurs de la Transmembranaire Protéase Sérine 2 (TMPSSR2) ; cible thérapeutique pour lutter contre le SARS-CoV-2. Dans ce contexte, le criblage virtuel d'une chimiothèque de 13521 similaires chimiques de L'acide 4-carbamimidamidobenzoïque fait ressortir les composés S1, S2 et S3 comme nouveaux inhibiteurs théoriquement puissants de la TMPSSR2 Ces composés ont présenté des énergies d'interactions de -41.68 KJ/mol, -41.58 KJ/mol et -38.90 KJ/mol respectivement et qui sont nettement meilleures que celle du composé de départ soit -24,17 KJ/mol KJ/mol. Enfin, l'étude théorique des critères physicochimiques, pharmacocinétiques et de toxicité potentielle nous renseigne positivement sur les propriétés ADMET de ces composés.

Mots clés : Covid-19, Docking moléculaire, FlexX, PubChem, TMPRSS2.

Laboratoire de recherche : laboratoire de Biochimie Appliquée.

Jury d'évaluation :

- Président du jury : Mr. BENSEGUENI A. (Professeur à UFM Constantine 1).
- Encadrant : Mr. MOKRANI E.H. (Maitre de Conférences B à UFM Constantine 1).
- Examinatrice : Mme. TENIOU S. (Maitre assistante A à UFM Constantine 1).

Année universitaire  
2020 – 2021