



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

جامعة قسنطينة 1 الإخوة منتوري
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 : Sciences de la Nature et de la Vie

Filière : Sciences Biologiques

Spécialité : Biochimie Appliquée

N° d'ordre :

N° de série :

Intitulé :

**Approche *in silico* pour l'identification de nouveaux inhibiteurs naturels de
la N-myristoyltransférase de *Leishmania* en vue du traitement de la
leishmaniose**

Présenté par :

Le 24/06/2025

➤ BENIRBAH Souheila

➤ FERCHA Bouchra

Jury d'évaluation :

Président : Mr. MOKRANI E.H. (MCA – U. Constantine 1 Frères Mentouri).

Encadrante : M^{elle} GUENDOUZE A. (MCA- U. Constantine 1 Frères Mentouri).

Examinatrice : M^{me} DEMMAK R.G. (MCA- U. Constantine 3- Salah Boubnider).

**Année universitaire
2024 -2025**



Remerciements

Nous remercions avant tout Allah, pour la force, la patience et la persévérance qu'Il nous a accordées tout au long de ce travail.

Nous avons eu la chance d'être guidées dans ce travail par Madame Guendouze A., notre encadrante. Grâce à son accompagnement constant, son sérieux et son engagement, elle a su faire de cette expérience une étape marquante de notre parcours. Sa rigueur scientifique, sa pédagogie, ainsi que la qualité de ses conseils nous ont permis de progresser à chaque étape de ce mémoire. Elle a toujours été à l'écoute, disponible pour nous orienter, corriger et nous encourager, même dans les moments de doute.

Qu'elle trouve ici l'expression sincère de notre profonde reconnaissance et de notre gratitude la plus respectueuse.

Nous remercions chaleureusement Monsieur Mokrani E.H, pour l'honneur d'avoir présidé le jury de notre mémoire. Sa présence et son regard expert ont donné à ce travail toute sa valeur.

Nous lui exprimons également notre sincère gratitude pour ses conseils avisés et l'aide précieuse qu'il nous a apportée dans la réalisation de ce travail, en nous orientant avec justesse et bienveillance.

Nos vifs remerciements vont également à Madame Demmak R., pour avoir accepté d'évaluer ce travail et pour l'attention qu'elle y a portée avec bienveillance et exigence.

Enfin, nous exprimons notre reconnaissance à tous ceux qui, de près ou de loin, ont contribué à notre formation et à l'aboutissement de ce travail, pour leur encadrement, leur soutien et leur accompagnement tout au long de notre parcours.



Dédicace

— souheila —

À Allah, source de toute force et de toute sagesse.

À ma mère Leila et à mon père Riad, pour leur amour sans limite et leur présence silencieusement puissante.

À mes frères, Yazen et Anes, compagnons de vie et de cœur.

À mes amies Hind et Dunia, sœurs choisies du quotidien.

À Lina, Maroua, Rihem et Fatima, pour les éclats de rire et les souvenirs partagés sur les bancs de la faculté.

À Bouchra, ma binôme, pour cette belle traversée à deux.

À celle que j'étais : merci d'avoir tenu bon



Dédiase

Zouhra

Je remercie tout d'abord Dieu, qui m'a donné la force et le courage d'atteindre cette étape importante de ma vie. Je crois profondément qu'Il a orchestré les choses pour que je sois ici aujourd'hui.

Je dédie ce travail à la femme qui m'a donné la vie, ma mère, la femme la plus souriante au monde.

À mon père, mon héros, toujours présent à mes côtés, me soutenant et croyant en moi, même dans les situations les plus difficiles.

À ma sœur Choubeila, mon deuxième esprit. Si elle n'était pas là, je me demande quel sens aurait ma vie. Nos liens dépassent les mots, et rien ne saurait exprimer ce que je ressens pour elle.

À mon frère Yasser, mon axe de positivité, mon soutien inébranlable, ma source de force. Quand tout le monde s'éloigne, sa lumière demeure.

À Hala, ma complice de toujours, avec qui j'ai partagé joies et difficultés. Elle a toujours su faire ressortir le meilleur de moi.

À Melek, mon amie d'enfance, une amie précieuse, à elle seule une expérience unique. Merci d'avoir toujours été là, malgré le temps et la distance. Notre amitié sincère a résisté à tout.

À mes amies de l'université : Fatima, Maroua et Lina. Ensemble, nous avons vécu des moments inoubliables.

À toutes les personnes, qu'elles soient proches ou lointaines, qui m'ont offert leur force, leur soutien et un amour sincère : merci du fond du cœur.

À ma binôme Souheila, je suis très reconnaissante pour son sérieux, ses efforts et son sens des responsabilités tout au long de cette année.

Et enfin... à moi-même.

Merci pour la persévérance, le courage, les nuits blanches, les doutes, les efforts silencieux et le cœur passionné.

Table des matières

Intoduction.....	1
Chapitre 01 : La leishmaniose – Généralités, diagnostic et stratégies de traitement	
1.Définition.....	3
2.Historique.....	3
3.Formes cliniques.....	3
3.1.Leishmaniose cutanée (LC)	4
3.2.Leishmaniose mucocutanée (LMC)	4
3.3.Leishmaniose viscérale (LV).....	4
4.Epidémiologie	4
4.1. Répartition des espèces selon les régions.....	4
4.2.Données mondiales de répartition	5
4.3.Données de répartition géographique en Algérie	5
5.Protagoniste de la maladie.....	6
5.1.Agent pathogène	6
5.2.Vecteur.....	6
5.3.Mécanisme d'infection	7
6.Facteurs de risques.....	8
6.1.Implication de l'immunité	8
6.2.Changements climatiques	8
7.Diagnostic.....	8
7.1.Diagnostic parasitologique	8
7.2. Diagnostic sérologique	8
7.3.Techniques de biologie moléculaire	8
8.Traitements et approches thérapeutiques	9
8.1.Antimoniote.....	9
8.2.Antimoniote de meglumine.....	9
8.3.Amphotéricine B.....	9
8.4.Miltefosine.....	9
8.5.Paromomycine (PM)	9
9. Nouvelles stratégies thérapeutiques.....	9
10. Substances naturelles à potentiel antiparasitaire	10
11. Ciblage enzymatique comme stratégie thérapeutique	10

Chapitre 02 : La N-myristoyltransférase – Structure, Fonction et Intérêt Thérapeutique

1.Myristoyltransférase	11
2.Structure	11
2.1. Site actif.....	12
3.Mode d'action	13
3.1. Réaction de myristoylation.....	13
4.Validation de la NMT comme cible thérapeutique.....	14
5.Inhibiteurs de la N-myristoyltransférase	15
5.1.TUQ	15
5.2.Benzofurannes	15
5.3.Sulfonamides pyrazolylés	15
5.4. Le DDD85646 comme inhibiteur de la NMT	15
5.5.Inhibiteurs naturels de la N-myristoyltransférase	16

Chapitre 03: Docking moléculaire

1.Introduction	17
2.Principe du docking moléculaire	17
2.1.Docking.....	17
2.2.Scoring.....	17
3.Types de docking moléculaire	17
3.1.Docking rigide.....	17
3.2.Docking semi-flexible	18
3.3.Docking flexible	18
4.Outils du docking moléculaire	18
4.1.Récepteur	19
4.2. Ligand.....	19
4.3.Programmes	19
4.3.1.FlexX.....	21

Chapitre 04 : Matériel et Méthodes

1.Matériel	22
1.1.Ordinateurs.....	22
1.2. Logiciels.....	22
1.2.1. FlexX.....	22
1.2.2. PDBaser.....	23

1.2.3. Biovia discovery studio visualizer	24
1.3. Banques des données	24
1.3.1. Protéine data Bank (pdb).....	24
1.3.2. Base de données des produits naturels d’Afrique (ANPDB)	25
1.3.3. PubChem.....	25
1.4. ADMETlab	26
1.5. SwissADME	27
2. Méthodes	27
2.1. Test de fiabilité du programme FlexX	27
2.1.1. Test RMSD	27
2.1.2. Analyse visuelle.....	27
2.2. Préparation des molécules pour le docking moléculaire.....	28
2.2.1. Préparation de la cible	28
2.2.2. Préparation du site active	28
2.2.3. Choix du ligand de référence.....	29
2.2.4. Préparation de la chimiothèque	29
2.2.5. Criblage virtuel.....	30
3. Prédiction des propriétés ADMET	30
3.1. Prédiction des propriétés physico-chimiques.....	30
3.1.1. Règle de Lipinski	30
3.1.2. Règle de Veber	31
3.1.3. Solubilité dans l’eau	31
3.1.4. Accessibilité à la synthèse chimique.....	31
3.2. Prédiction des propriétés pharmacocinétique	31
3.2.1. Perméabilité à la barrière hémato-encéphalique	31
3.2.2. Absorption gastro-intestinale	32
3.2.3. Inhibition des cytochromes P450	32
3.3. Prédiction des propriétés toxicocinétiques.....	32
3.3.1. Test d’Ames	32
3.3.2. Toxicité hépatique.....	32
3.3.3. Inhibition des canaux hERG I et II	33
3.3.4. Sensibilisation cutanée	33

Chapitre 05: Résultats et discussion

1. Teste de fiabilité	34
1.1. Test RMSD	34
1.2. Analyse visuelle	35
2. Identification et caractérisation du site actif de la N-myristoyltransférase.....	37
3.Proposition de nouveaux inhibiteurs de la N-myristoyltransférase	38
4. Evaluation des propriétés ADMET	39
4.1. Propriétés physico-chimiques.....	39
4.2. Propriétés pharmacocinétiques.....	41
4.3. Toxicité potentielle.....	42
5. Etude des interactions des meilleurs inhibiteurs	43
5.1. Etude des interactions du complexe N-myristoyltransférase - Teucrol_001.....	43
5.2. Etude des interactions du complexe N-myristoyltransférase-N-E-caffeoyl tyramine	44
5.3. Comparaison de l'effet inhibiteur des meilleurs inhibiteurs de NMT	46
Conclusion.....	48

Références Bibliographiques

Annexes

Résumés

Liste des Abréviations

2D : Deux dimensions

3D : Trois dimensions

Å : Angstrom

AA : Acide aminé

ADMET : Absorption, Distribution, Métabolisme, Excrétion, Toxicité

ANPDB: African Natural Products Database

Arg: Arginine

Asp: Aspartate

BBB: Blood-Brain Barrier (barrière hémato-encéphalique)

CYP1A2: Cytochrome P450 1A2

CYP2C19: Cytochrome P450 2C19

CYP2C9: Cytochrome P450 family 2 subfamily C member 9

CYP2D6: Cytochrome P450 family 2 subfamily D member 6

CYP3A4: Cytochrome P450 3A4

EANPDB: East African Natural Products Database

GI: Gastro-intestinal

Gln: Glutamine

Gly: Glycine

HASPs: Hydrophilic Acidic Surface Proteins

hERG: Human Ether-go-go Related Gene (canal potassium cardiaque)

His : Histidine

LC : Leishmaniose cutanée

LdNMT : NMT de Leishmania donovani

LMC : Leishmaniose mucocutanée

LmNMT : NMT de Leishmania major

Log P : Coefficient de partage octanol/eau (lipophilie)

LV : Leishmaniose viscérale

MA : Antimoniote de méglumine

MetAP: Méthionine aminopeptidase

NANPDB: Northern African Natural Products Database

NCBI: National Center for Biotechnology Information

NIH: National Institutes of Health

NMT : N-myristoyltransférase

OMS : Organisation Mondiale de la Santé

PCR : Polymerase Chain Reaction (réaction de polymérisation en chaîne)

PDB : Protein Data Bank (Banque de données protéiques)

RMN : Résonance Magnétique Nucléaire

RMSD : Root Mean Square Deviation (écart quadratique moyen)

SSG: Stibogluconate de sodium

Thr: Thréonine

TPSA : Surface polaire topologique

Trp : Tryptophane

Val : Valine

Liste des figures

Figure 1: Endémicité de la leishmania viscérale dans le monde en 2023 (Jain et al., 2023).	5
Figure 2 : Cycle morphologique de <i>Leishmania</i> spp (Krüger & Engstler, 2015).....	6
Figure 3 : Phlébotome femelle gorgée (Prudhomme, 2015).	6
Figure 4 : Cycle de transmission du parasite leishmania, modifiée d'après (Burza et al., 2018).	7
Figure 5 : Structure tridimensionnelle de <i>leishmania donovani</i> (Brannigan et al., 2010).	12
Figure 6: Structure cristalline de l'inhibiteur lié à la NMT de <i>Leishmania major</i> (LmNMT) (Rackham et al., 2015).....	12
Figure 7 : Interactions clés entre l'inhibiteur et le site actif de la LmNMT (Rackham et al., 2015).	13
Figure 8 : Myristoylation des protéines comme un processus survenant pendant la traduction (Kavouris, 2014).	14
Figure 9 : Représentation en 2D des structures chimiques : (a) molécule TUQ, (b) molécule DDD85646, et (c) dérivés de Benzofurannes.....	16
Figure 10 : Approches rigide et flexible (Mohanty & Mohanty, 2023).	18
Figure 11 : Pourcentage de citation de chaque programme de docking (Bano & Umar, 2016).	20
Figure 12: Interface d'accueil du logiciel FlexX	23
Figure 13 : Représentation de l'interface du PDBaser.	23
Figure 14: Représentation de l'interface du Biovia Discovery Studio.	24
Figure 15 : Principales classes de composés étudiées dans La NANPDB.	25
Figure 16: Processus de fonctionnement d'ADMETlab.....	26
Figure 17 : Structure de l'inhibiteur DDD85646 (2,6-Dichloro-4-(2-Piperazin-1-Ylpyridin-4-Yl)-N-(1,3,5-Trimethyl-1h-Pyrazol-4-Yl) benzenesulfonamide).....	29
Figure 18 : Résultats du test RMSD donnés en pourcentage.	34
Figure 19 : Superposition de la structure du ligand TUQ (code PDB : 5A28) prédite par FlexX (en bleu) et de la position expérimentale (en vert).	36
Figure 20 : Alignement de la structure du ligand STU (code PDB : 1AQ1) prédite par FlexX (en bleu) et de la position expérimentale (en vert).	36
Figure 21 : Représentation schématique de l'interaction du complexe N-myristoyltransférase	38
Figure 22 : Représentation en 2D du mode d'interaction du composé teucrol_001 avec le site de liaison de N-myristoyltransférase.	44
Figure 23 : Représentation en 2D du mode d'interaction du composé N-E-caffeoyl tyramine et le site de liaison de N-myristoyltransférase.	46

Liste des tableaux

Tableau 1: Programmes du docking moléculaire.	20
Tableau 2: Caractéristiques des micro-ordinateurs utilisés.	22
Tableau 3 : Propriétés des complexes PDB de la N-myristoyltransférase de Leishmania.....	28
Tableau 4 : Scores d'interaction, structures chimiques et propriétés physico-chimiques des meilleurs composés.	40
Tableau 5 : Propriétés pharmacocinétiques des composés étudiés.	41
Tableau 6: Toxicité prédite des composés DDD85646, Teucrol_001 et N-E-caffeoyl tyramine.	42
Tableau 7 : Résumé comparatif des interactions et des énergies d'interaction entre la N-myristoyltransférase et les trois ligands étudiés.	47



Leishmaniose constitue une maladie tropicale négligée à transmission vectorielle, causée par des protozoaires du genre *Leishmania* et transmise à l'homme par la piqûre de phlébotomes femelles infectés. Endémique dans près de 100 pays et territoires, elle affecte principalement les populations vulnérables vivant dans des conditions socio-économiques précaires, avec un accès limité aux services de santé (Ruiz-Postigo et al., 2023). On estime qu'entre 700 000 et 1 million de nouveaux cas surviennent chaque année dans le monde, dont environ 50 000 à 90 000 cas de leishmaniose viscérale, souvent mortels sans prise en charge appropriée (OMS, 2024). La maladie se manifeste principalement sous deux formes cliniques : la leishmaniose viscérale et la leishmaniose cutanée, cette dernière se caractérisant par des lésions dermatologiques défigurantes pouvant entraîner isolement social et stigmatisation (Verma et al., 2022).

Malgré des décennies de recherche, l'arsenal thérapeutique disponible demeure limité et inadéquat. Les traitements actuels présentent de nombreuses limitations : coût prohibitif, toxicité élevée, nécessité d'hospitalisation prolongée, et efficacité parfois compromise par l'émergence de résistances parasitaires. En l'absence de vaccin homologué, la lutte contre la leishmaniose repose essentiellement sur la chimiothérapie, soulignant ainsi l'urgence de développer de nouveaux agents antiparasitaires plus sûrs, plus efficaces et plus accessibles.

Dans ce contexte, l'identification de nouvelles cibles thérapeutiques constitue un enjeu majeur. La N-myristoyltransférase (NMT), enzyme clé du processus de myristoylation des protéines, joue un rôle fondamental dans la croissance, la différenciation et la survie des parasites *Leishmania*. Sa spécificité structurale par rapport à son homologue humain, combinée à son caractère indispensable pour le parasite, en fait une cible particulièrement attractive pour le développement de nouveaux inhibiteurs sélectifs (Buckner et al., 2023). L'inhibition de la NMT perturbe de multiples processus cellulaires essentiels chez *Leishmania*, conduisant potentiellement à l'éradication du parasite.

Les approches computationnelles, et notamment le criblage virtuel de composés naturels, offrent une stratégie prometteuse et économiquement viable pour l'identification rapide de nouveaux candidats thérapeutiques. Ces méthodes permettent d'explorer de vastes bibliothèques de molécules bioactives, d'évaluer leur potentiel inhibiteur et d'optimiser leurs propriétés pharmacologiques avant toute synthèse ou test expérimental coûteux.

Le présent travail vise à identifier, par des approches *in silico*, de nouveaux inhibiteurs naturels potentiels de la N-myristoyltransférase de *Leishmania*, dans une perspective de développement de traitements anti-leishmaniose innovants.

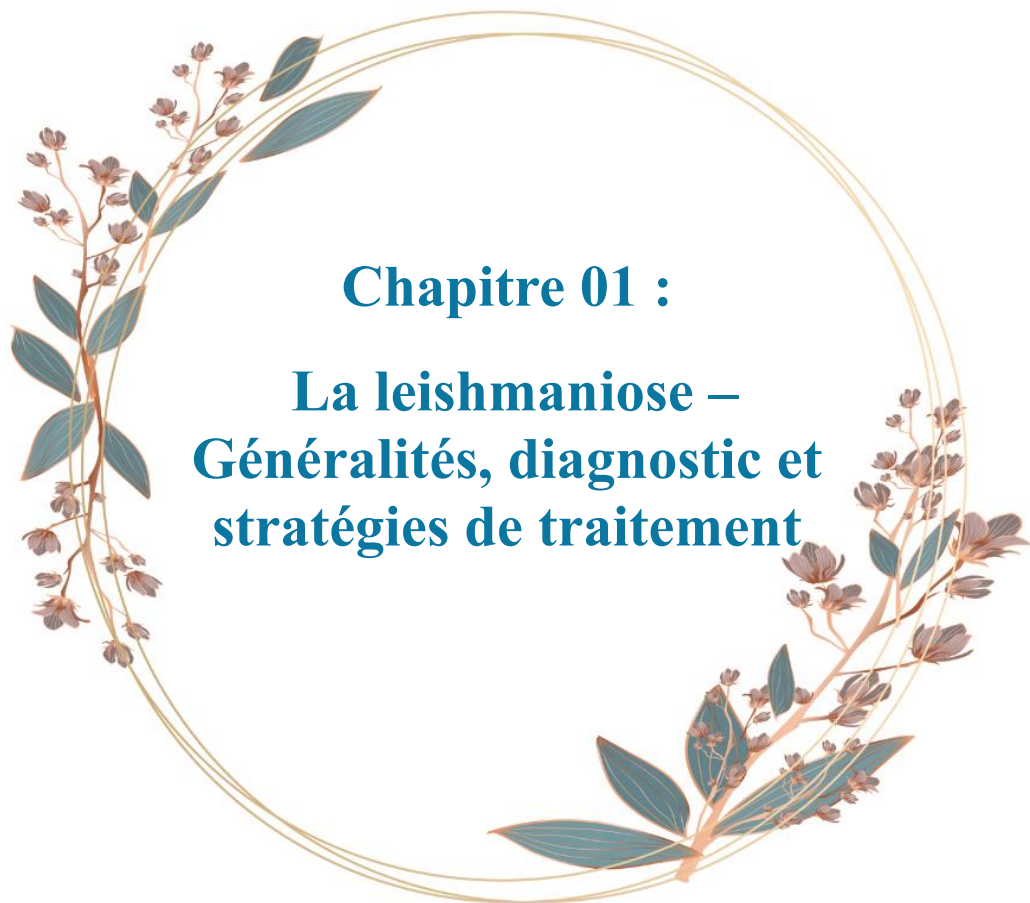
Cette étude est organisée en trois parties complémentaires :

La première partie consiste en une revue bibliographique portant sur la leishmaniose, ses formes cliniques, les traitements existants, ainsi que sur la N-myristoyltransférase (NMT) en tant que cible thérapeutique. Elle présente également les approches de docking moléculaire.

La deuxième partie détaille la méthodologie employée pour l'identification de nouveaux inhibiteurs potentiels de la NMT, incluant le test de fiabilité du docking, le criblage virtuel et l'analyse des propriétés pharmacocinétiques et toxicologiques des composés sélectionnés.

La troisième partie est dédiée à la présentation des résultats obtenus, à leur interprétation et à la discussion de leur portée en vue d'une exploitation thérapeutique.

Enfin, une conclusion générale synthétise les apports de cette recherche et ouvre sur les perspectives d'investigation future dans le domaine de la lutte anti-leishmaniose.



Chapitre 01 :
La leishmaniose –
Généralités, diagnostic et
stratégies de traitement

1. Définition

La leishmaniose est une maladie parasitaire causée par des protozoaires flagellés du genre *Leishmania*, qui infectent les cellules du système des phagocytes mononucléés. Elle est transmise à l'homme par la piqûre de phlébotomes infectés, appartenant aux genres *Phlebotomus* dans l'Ancien Monde et *Lutzomyia* dans le Nouveau Monde (Mokni, 2019).

2. Historique

La leishmaniose est connue depuis des siècles, mais ce n'est qu'au XIX^e siècle qu'elle a commencé à être décrite scientifiquement. Le terme *kala-azar*, qui signifie "maladie noire", a été utilisé pour désigner la forme viscérale de la leishmaniose, en raison de la teinte grisâtre que prend la peau des patients atteints. Avant cette période, la maladie était souvent confondue avec d'autres affections fébriles endémiques (Steverding, 2017).

En 1827, le chirurgien britannique William Twining rapporta pour la première fois en Inde des cas de patients présentant une rate hypertrophiée, une anémie sévère et une fièvre persistante, sans en identifier la cause exacte (Steverding, 2017).

Ce n'est qu'en 1900 que des avancées majeures furent réalisées : William Boog Leishman observa des corps ovoïdes dans des prélèvements de rate d'un soldat décédé, et les associa à la maladie qu'il nomma « fièvre de Dum-Dum », du nom de la localité indienne où le cas avait été observé. Peu de temps après, Charles Donovan détecta les mêmes formes parasitaires dans la rate d'un autre patient atteint. En reconnaissance de leurs découvertes conjointes, le parasite fut nommé *Leishmania donovani* (Steverding, 2017).

En 1921, une avancée significative fut réalisée en Algérie : à l'Institut Pasteur d'Alger, Edmond et Étienne Sergent, accompagnés de leurs collaborateurs, démontrèrent que *Phlebotomus papatasi* était le vecteur de la leishmaniose cutanée. Ils mirent en évidence sa responsabilité dans la transmission du "bouton de Biskra", forme locale et endémique de la leishmaniose cutanée (Killick-Kendrick, 2013). Cette découverte a marqué un tournant dans la compréhension de l'épidémiologie de la maladie et dans les stratégies de lutte vectorielle.

3. Formes cliniques

Les manifestations cliniques de la leishmaniose varient en fonction de l'espèce de *Leishmania* en cause, de la réponse immunitaire de l'hôte, ainsi que de facteurs environnementaux et génétiques (Makarani et al., 2025). Trois formes principales sont décrites

3.1. Leishmaniose cutanée (LC)

La leishmaniose cutanée, également appelée « bouton d'Orient », est la forme la plus fréquente. Elle est causée par plusieurs espèces, notamment *Leishmania major*, *L. tropica* et *L. mexicana*. Elle se manifeste par l'apparition de lésions au niveau de la peau : papules, nodules, plaques croûteuses ou ulcères localisés, principalement sur les zones découvertes comme le visage, les mains ou les jambes. Dans la majorité des cas, ces lésions évoluent lentement vers une cicatrisation spontanée, mais peuvent laisser des cicatrices résiduelles importantes (Oryan, 2015).

3.2. Leishmaniose mucocutanée (LMC)

Provoquée surtout par *L. braziliensis*, cette forme peut faire suite à une LC mal soignée. L'infection atteint les muqueuses du nez, du palais et de la gorge, causant des ulcérations et des déformations faciales aux conséquences esthétiques et fonctionnelles majeures (Jain et al., 2023).

3.3. Leishmaniose viscérale (LV)

Forme la plus grave, aussi appelée kala-azar, causée par *L. donovani*, *L. infantum* et *L. chagasi*. Elle se manifeste par une fièvre prolongée, une perte de poids sévère, une faiblesse marquée et une hépatosplénomégalie (hypertrophie du foie et de la rate). Si elle n'est pas traitée, elle peut conduire à une défaillance organique multiple et à la mort (Oryan, 2015).

4. Epidémiologie

4.1. Répartition des espèces selon les régions

La leishmaniose est présente dans plus de 90 pays, avec une répartition des espèces et des réservoirs variant selon les régions :

- *L. donovani* (forme anthroponotique, réservoir humain) est répandue en Asie du Sud et en Afrique de l'Est.
- *L. infantum* (forme zoonotique, réservoir canin) est présente dans le bassin méditerranéen, au Moyen-Orient et en Amérique du Sud.

En Afrique du Nord (Algérie, Maroc, Tunisie), la LV est endémique, en particulier dans les régions nord et centre, avec une progression vers le sud. En Europe du Sud (France, Espagne, Italie, etc.), elle touche principalement les zones rurales ou boisées. En France, les foyers se concentrent en Provence, Côte d'Azur, Cévennes, Pyrénées-Orientales et Corse (Louzir et al., 2013).

4.2. Données mondiales de répartition

Selon l'OMS, en 2023, 272 098 nouveaux cas de LC ont été signalés, dont 94 % provenaient de la Région de la Méditerranée orientale (81 %) et de la Région des Amériques (13 %). La LV a représenté 11 922 nouveaux cas, majoritairement rapportés par la Région de la Méditerranée orientale (42 %) et la Région africaine (37 %) (Figure 1).

Les pays les plus touchés incluent l'Afghanistan, l'Algérie, le Brésil, la Colombie, l'Iran, l'Iraq, le Pakistan, le Pérou, la Syrie, le Sri Lanka et le Yémen, totalisant 91 % des cas de LC à l'échelle mondiale (Jain et al., 2023 ; Louzir et al., 2013).

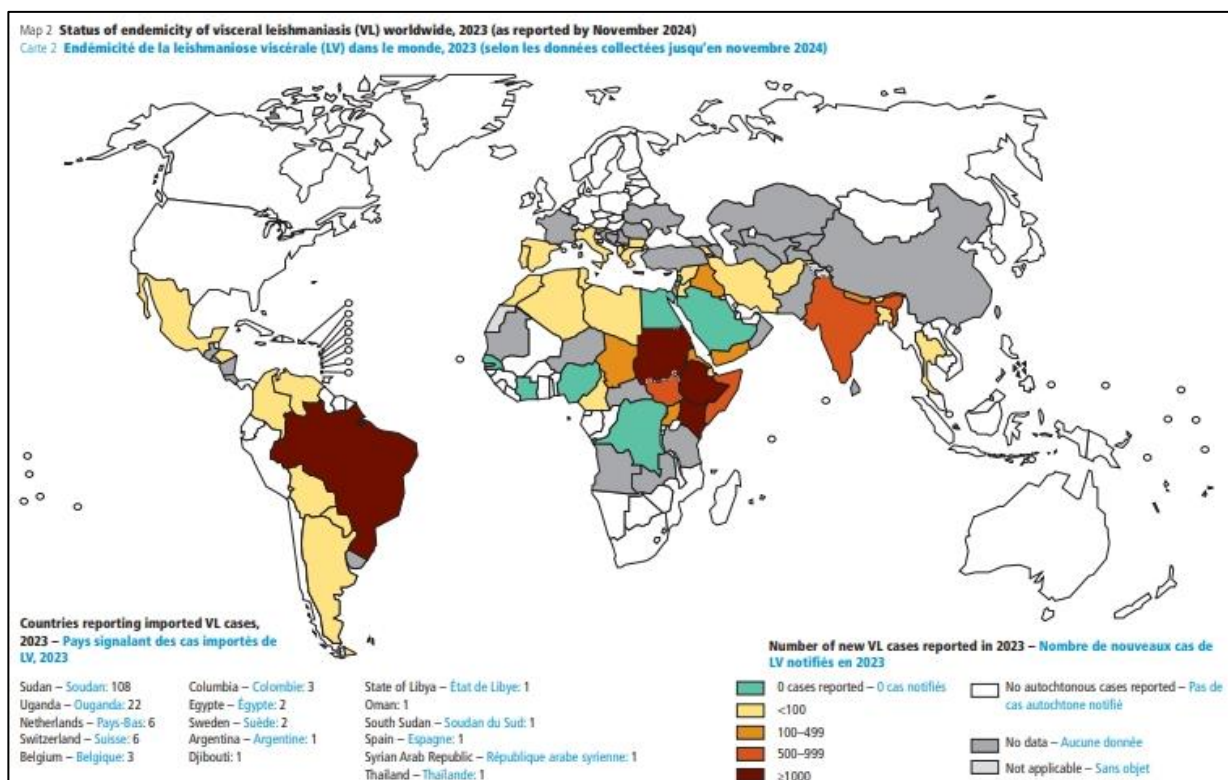


Figure 1: Endémicité de la leishmania viscérale dans le monde en 2023 (Jain et al., 2023).

4.3. Données de répartition géographique en Algérie

En Algérie, la leishmaniose représente un problème de santé publique majeur, notamment dans ses formes cutanée et viscérale. La leishmaniose cutanée est la plus fréquente, avec une incidence variable selon les années et les régions endémiques. Entre 2000 et 2020, plus de 250 000 cas de leishmaniose cutanée ont été notifiés, l'Algérie figurant parmi les dix pays les plus touchés au monde. En 2019, près de 11 000 nouveaux cas de leishmaniose cutanée ont été recensés, principalement dans le nord-est et le centre du pays. La leishmaniose viscérale, quant

à elle, est moins fréquente mais plus grave, avec plusieurs centaines de cas déclarés chaque année, touchant surtout les enfants des zones rurales (OMS, 2020). Ces chiffres traduisent l'ampleur persistante de l'endémie et la nécessité de renforcer les mesures de surveillance, de prévention et d'accès aux traitements.

5. Protagoniste de la maladie

5.1. Agent pathogène

Le genre *Leishmania* regroupe plus de 20 espèces pathogènes pour l'homme. Ces parasites sont transmis par des phlébotomes des genres *Phlebotomus* (Ancien Monde) et *Lutzomyia* (Nouveau Monde). Le cycle parasitaire alterne entre deux formes morphologiques (Figure 2) :

- **Le promastigote**, forme mobile dotée d'un flagelle, se développe dans l'intestin du phlébotome. C'est cette forme qui est injectée dans la peau de l'hôte lors de la piqûre.
- **L'amastigote**, forme intracellulaire arrondie et non flagellée, se multiplie à l'intérieur des macrophages, principalement dans les organes du système des phagocytes mononucléés (Krüger & Engstler, 2015).

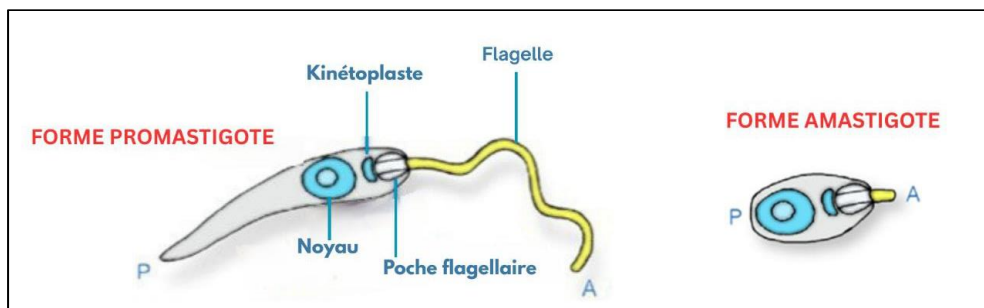


Figure 2 : Cycle morphologique de *Leishmania* spp (Krüger & Engstler, 2015).

5.2. Vecteur

La transmission à l'humain est assurée par la piqûre de phlébotomes femelles (Figure 3) hématophages infectées. Ces insectes, de petite taille (2 à 3 mm), se nourrissent de sang pour permettre la maturation de leurs œufs (Kato, 2025).



Figure 3 : Phlébotome femelle gorgée (Prudhomme, 2015).

5.3. Mécanisme d'infection

Lors de la piqûre, le phlébotome injecte les promastigotes dans la peau. Ceux-ci sont rapidement phagocytés par les macrophages où ils se transforment en amastigotes. Ces formes intracellulaires prolifèrent ensuite dans les cellules du système immunitaire, en particulier les macrophages et les cellules dendritiques (Figure 4) (Pasquier & Ravel, 2023). L'issue de l'infection dépend de sa dissémination :

- Si elle reste localisée, elle provoque une leishmaniose cutanée.
- En cas de diffusion systémique (rate, foie, moelle osseuse, ganglions), elle entraîne une leishmaniose viscérale, forme grave de la maladie.

Chez l'hôte vertébré, le parasite est présent sous forme d'amastigote, tandis que chez l'insecte vecteur, il est sous forme de promastigote. Selon l'espèce de *Leishmania*, divers mammifères, y compris l'humain, peuvent jouer un rôle de réservoir (Pasquier & Ravel, 2023).

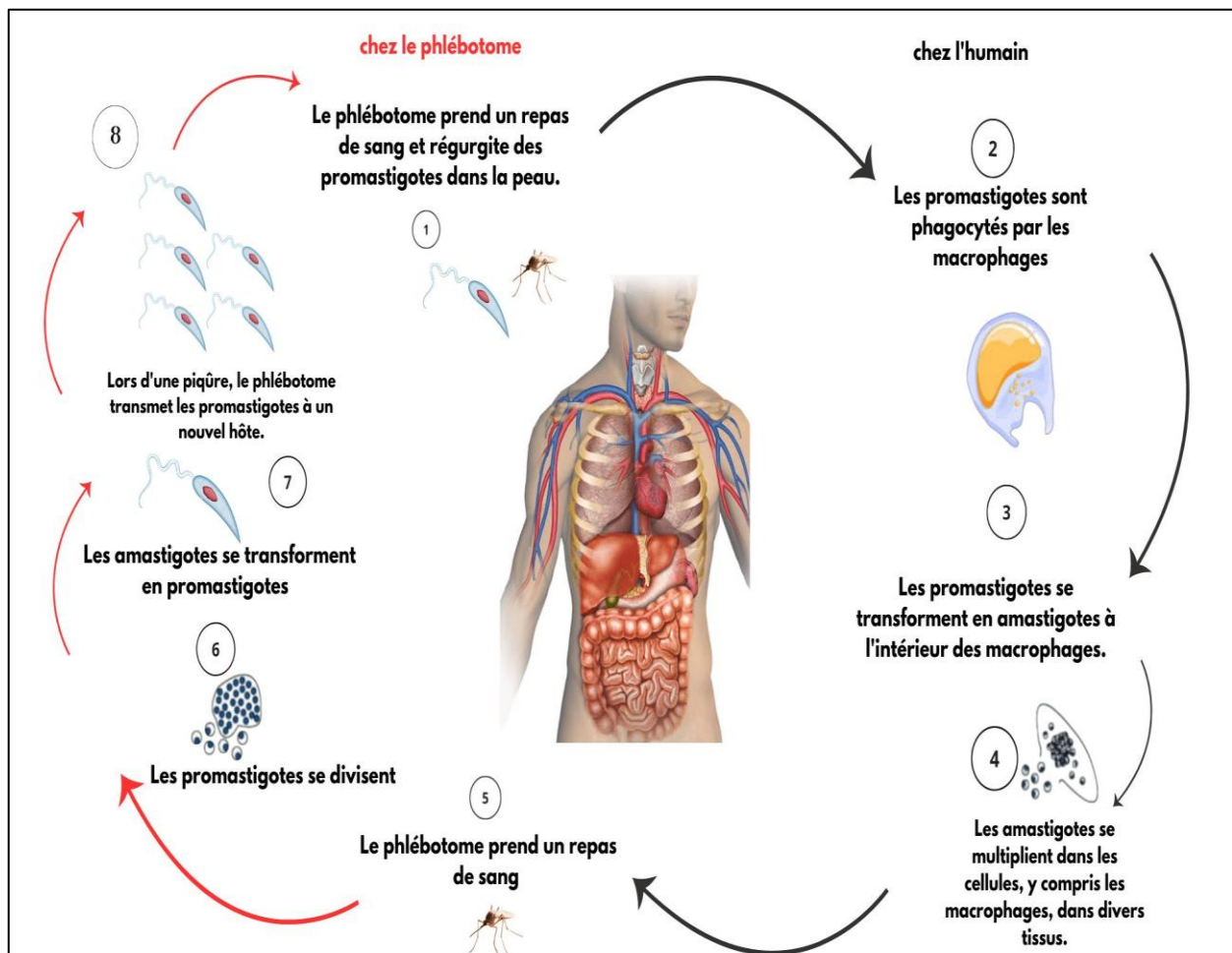


Figure 4 : Cycle de transmission du parasite *leishmania*, modifiée d'après (Burza et al., 2018).

6. Facteurs de risques

6.1. Implication de l'immunité

La co-infection *Leishmania*-VIH constitue un facteur aggravant majeur, notamment pour la leishmaniose viscérale. Le VIH affaiblit la réponse immunitaire, facilitant la multiplication du parasite, réduisant l'efficacité des traitements, et augmentant les risques de rechute. Cette interaction peut entraîner des complications graves, telles qu'une anémie sévère, une atteinte de la moelle osseuse et une perte de poids importante, rendant la prise en charge plus complexe et le pronostic plus sombre (Dawkins et al., 2023).

6.2. Changements climatiques

Les variations climatiques : hausse des températures, modification des précipitations, sécheresse ou inondations- favorisent l'expansion géographique des phlébotomes, vecteurs de la maladie. Ces changements perturbent les écosystèmes et entraînent des mouvements de population vers des zones endémiques, augmentant ainsi le risque d'exposition au parasite (Oryan & Akbari, 2016).

7. Diagnostic

Le diagnostic repose sur un ensemble de techniques complémentaires, choisies selon le contexte épidémiologique, la forme clinique suspectée et les moyens disponibles.

7.1. Diagnostic parasitologique

La recherche directe d'amastigotes dans les frottis de ponction de moelle osseuse reste la méthode de référence. Bien que spécifique, elle est invasive et peut être difficile à mettre en œuvre dans certaines régions (Siala et al., 2022).

7.2. Diagnostic sérologique

Le diagnostic sérologique de la leishmaniose viscérale repose sur la détection d'anticorps spécifiques dans le sérum, nécessitant une interprétation attentive selon le contexte clinique et épidémiologique (Cadeau, 2024).

7.3. Techniques de biologie moléculaire

La PCR en temps réel permet de détecter l'ADN de *Leishmania* dans le sang et constitue la méthode de référence pour la leishmaniose viscérale (Pasquier & Ravel, 2023).

8. Traitements et approches thérapeutiques

8.1. Antimoniates

Les antimoniaux restent le traitement de première ligne pour la leishmaniose cutanée dans de nombreux pays. Deux formulations principales sont utilisées : le stibogluconate de sodium (SSG) et l'antimoniate de méglumine (MA). Leur efficacité repose sur l'activation des macrophages et l'inhibition de la trypanothione réductase par la forme active Sb(III) (Madusanka et al., 2022).

8.2. Antimoniate de méglumine

Commercialisé sous le nom de Glucantime®, cet agent leishmanicide est utilisé pour traiter les formes cutanées et viscérales de la maladie. Il est cependant inefficace contre certaines espèces comme *Leishmania aethiopica*, naturellement résistante (Dardé et al., 2018).

8.3. Amphotéricine B

Utilisée en alternative, notamment dans les cas de résistance aux antimoniaux. Elle agit en se liant à l'ergostérol des membranes parasitaires, entraînant leur destruction. Elle est disponible sous deux formes : déoxycholate et liposomale, cette dernière étant mieux tolérée. Son administration se fait par voie intraveineuse ou intra-lésionnelle, en particulier pour les formes sévères (Madusanka et al., 2022).

8.4. Miltefosine

Ce médicament oral agit en perturbant la biosynthèse des stérols et des phospholipides, et en interférant avec les voies de signalisation intracellulaires du parasite. Il est principalement utilisé dans le traitement de la leishmaniose cutanée (Madusanka et al., 2022).

8.5. Paromomycine (PM)

Antibiotique de la famille des aminoglycosides, utilisé sous forme topique ou parentérale dans certains pays. Elle inhibe la synthèse protéique des parasites tout en préservant les cellules humaines. Toutefois, selon l'Organisation panaméricaine de la santé, la PM n'est pas encore officiellement recommandée pour le traitement de la leishmaniose cutanée (Madusanka et al., 2022).

9. Nouvelles stratégies thérapeutiques

Les vaccins recombinants représentent une voie prometteuse. Ils visent à induire une réponse immunitaire protectrice à l'aide d'antigènes spécifiques produits par génie génétique ou

à partir de parasites vivants atténués. Diverses combinaisons d'antigènes et de vecteurs sont actuellement à l'étude pour en améliorer l'efficacité (Shital et al., 2024).

10. Substances naturelles à potentiel antiparasitaire

Certaines molécules naturelles font actuellement l'objet de recherches pour le développement de nouveaux traitements contre les leishmanioses viscérales et cutanées. Trois composés d'origine végétale se distinguent par leur activité prometteuse :

- **Saponosides de *Maesa balansae*** : actifs contre les formes parasitaires, mais leur toxicité nécessite des modifications structurales pour une meilleure tolérance.
- **Quinoléines de *Galipea longiflora*** : alcaloïdes issus d'un arbre amazonien, utilisés en médecine traditionnelle, montrant une activité significative contre *Leishmania*.
- **Licochalcone A (extrait de *Glycyrrhiza* spp.)** : molécule active par voie orale ; ses dérivés synthétiques permettent de réduire jusqu'à 97 % la charge parasitaire, notamment en ciblant la mitochondrie du parasite (Acebey et al., 2008).

11. Ciblage enzymatique comme stratégie thérapeutique

La montée de la résistance aux traitements actuels rend urgente la recherche de nouvelles thérapies avec des mécanismes d'action innovants. Plusieurs enzymes cruciales à la survie de *Leishmania* constituent des cibles thérapeutiques prometteuses :

- **Trypanothione réductase** : essentielle à la neutralisation du stress oxydatif (Madia et al., 2023)
- **Arginase** : impliquée dans la biosynthèse des polyamines, molécules clés pour la croissance du parasite (Carter et al., 2021).
- **Cystéine protéases** : enzymes thiol essentielles impliquées dans la dégradation des protéines, l'absorption des nutriments, la virulence et l'évasion immunitaire des parasites, représentant des cibles potentielles pour le diagnostic, la chimiothérapie et le développement de vaccins (Yang et al., 2023)
- **N-myristoyltransférase (NMT)** : enzyme catalysant la myristoylation des protéines, cruciale pour leur fonction et localisation ; elle est aujourd'hui reconnue comme une cible thérapeutique de choix contre les leishmanioses (Zhao & Ma, 2014).

Le développement d'inhibiteurs sélectifs de ces enzymes ouvre la voie à des traitements plus efficaces et potentiellement moins toxiques que les options actuelles.



Chapitre 02 :

La N-myristoyltransférase –

Structure, Fonction et

Intérêt Thérapeutique

1. Myristoyltransférase

La N-myristoyltransférase (NMT) est une enzyme monomérique cytosolique présente chez les eucaryotes, tels que les champignons et les protozoaires, mais absente chez les procaryotes (Zhao & Ma, 2014). Elle a été largement étudiée chez divers organismes, notamment chez l'humain, *Trypanosoma brucei*, *T. cruzi* et plusieurs espèces du genre *Leishmania* (Corpas-Lopez et al., 2019).

La NMT joue un rôle clé dans les processus métaboliques des parasites en catalysant le transfert co-traductionnel d'un acide gras à 14 carbones (myristoyl-CoA) sur le résidu glycine en position N-terminale de certaines protéines. Ce processus, appelé N-myristoylation, est indispensable à la fonction, la localisation et à la stabilité des protéines ciblées (Orabi et al., 2023).

2. Structure

La N-myristoyltransférase présente une architecture tridimensionnelle complexe organisée autour d'un feuillet β torsadé central, constitué de 14 brins, entouré d'hélices α (Figure 5). Cette structure forme un sillon allongé et incurvé qui traverse deux parties distinctes de la protéine, appelées lobes N-terminal et C-terminal, servant de site de liaison au substrat (Brannigan et al., 2010).

Le myristoyl-CoA, substrat lipidique, se loge profondément dans le lobe N-terminal. Sa fixation induit l'ouverture d'un rabat mobile qui, en absence de ligand, bloque normalement le site de liaison au substrat protéique situé dans le lobe C-terminal (Brannigan et al., 2010).

Le myristoyl-CoA se fixe dans le lobe N-terminal, induisant l'ouverture d'un rabat mobile qui libère le site de liaison protéique dans le lobe C-terminal, actif uniquement en présence du ligand.

Le cœur de l'enzyme est un feuillet β à 12 brins (ordre : A, C, D, E, F, N, G, M, L, K, J, H) formant un tonneau ouvert, stabilisé par les hélices αA , αB et αG , entourant le segment C-terminal de la chaîne peptidique (Figure 5).

- Le lobe N-terminal comprend les brins a, c, d, e, f, n, g, flanqués des hélices A et B d'un côté, C de l'autre.
- Le lobe C-terminal comprend les brins g, m, l, k, j, h, associés aux hélices F et G d'un côté, H de l'autre (Brannigan et al., 2010).

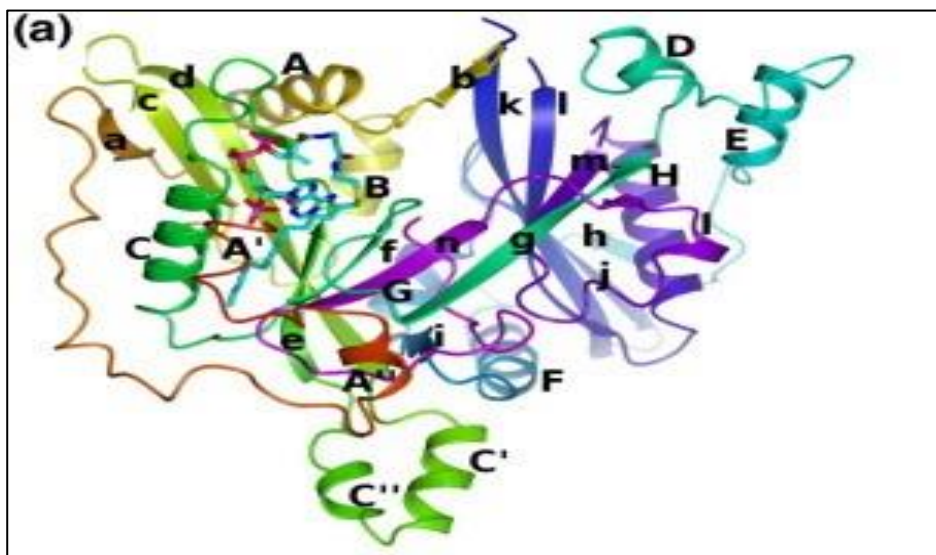


Figure 5 : Structure tridimensionnelle de *leishmania donovani* (Brannigan et al., 2010).

2.1. Site actif

L'analyse structurale des NMT parasites révèle une forte conservation du site de liaison du myristoyl-CoA, tandis que la région de liaison aux peptides varie entre espèces, ce qui ouvre la voie au développement d'inhibiteurs sélectifs (Rackham et al., 2015).

Le site actif de la N-myristoyltransférase parasite est défini par plusieurs acides aminés clés (Figure 7), chacun jouant un rôle spécifique dans l'interaction avec les inhibiteurs. La **Ser330** participe à des liaisons hydrogène, tandis que **Phe90** établit des interactions hydrophobes. **Leu421** intervient dans des interactions polaires avec la fraction pipéridine des inhibiteurs, et **Tyr92** peut former des interactions médiées par l'eau. Enfin, **Met377** influence la topologie du site actif en modulant la taille de la poche de liaison.

La fraction pipéridine basique de l'inhibiteur interagit avec le carboxylate de Leu421 et forme un pont hydrogène avec Tyr92, imitant l'extrémité N-terminale des peptides substrats. Le groupement triméthyl-pyrazole établit des interactions π - π et polaires respectivement avec Phe90 et Ser330 (Figure 7C).

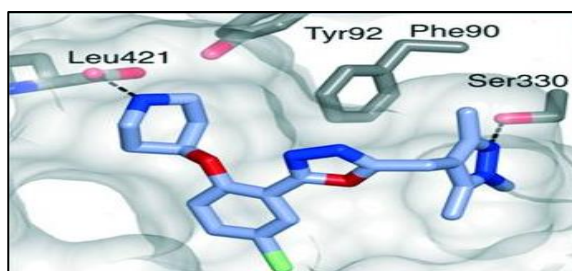


Figure 6: Structure cristalline de l'inhibiteur lié à la NMT de *Leishmania major* (LmNMT) (Rackham et al., 2015).

Une interaction notable est celle du substituant 5-chlore, qui s'insère dans une poche hydrophobe. En revanche, les substituants volumineux en position 4 sont défavorisés, en raison du manque d'espace disponible. L'absence d'activité des substituants en position 3 reste hypothétique, pouvant résulter d'un encombrement hydrophobe ou de restrictions conformationnelles de la pipéridine (Rackham et al., 2015).

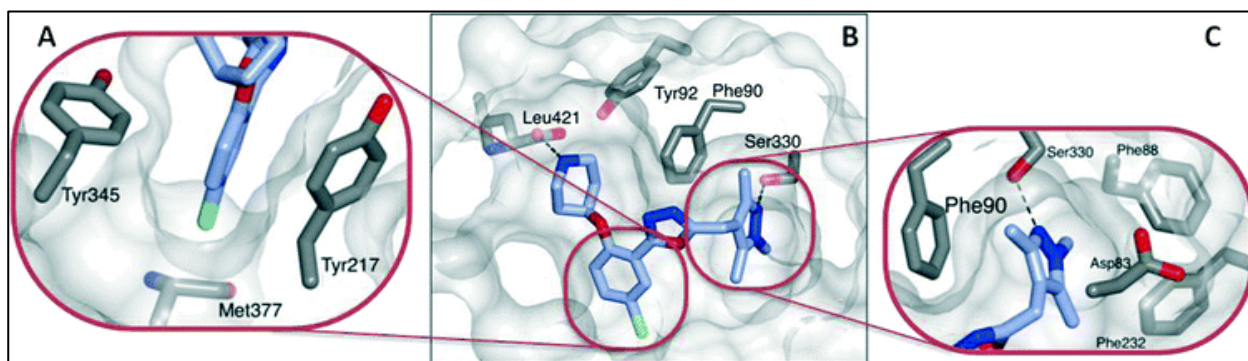


Figure 7 : Interactions clés entre l'inhibiteur et le site actif de la LmNMT (Rackham et al., 2015).

3. Mode d'action

3.1. Réaction de myristoylation

La myristoylation est une modification covalente irréversible qui consiste à attacher un acide gras saturé à 14 carbones, l'acide myristique, à la glycine N-terminale de certaines protéines eucaryotes ou virales. Catalysée par la N-myristoyltransférase (NMT), cette réaction joue un rôle essentiel dans l'ancrage membranaire des protéines et leurs interactions fonctionnelles (Martin et al., 2011).

Le mécanisme suit un modèle Bi-Bi ordonné : l'enzyme se lie d'abord au myristoyl-CoA, ce qui induit un changement conformationnel exposant un site de fixation pour la protéine substrat. Le groupement myristate est ensuite transféré à la glycine N-terminale par une substitution nucléophile (addition-élimination), suivie de la libération du CoA libre et de la protéine N-myristoylée (Figure 8) (Brannigan et al., 2010). La liaison amide formée est très stable et irréversible -aucune enzyme connue, hormis Ipal, capable de cliver après la glycine, ne peut l'éliminer sans dégrader la protéine (Riviere et al., 2022).

Ce processus peut être co-translationnel, lorsque la méthionine initiatrice est excisée par la méthionine aminopeptidase (MetAP) comme montre le figure 8, révélant une glycine N-terminale, suivie de la myristoylation. Il peut aussi survenir post-translationnellement,

notamment après un clivage protéolytique, comme lors de l'apoptose, où une glycine nouvellement exposée devient cible de la NMT.

Les protéines myristoylées participent à de nombreux processus cellulaires, notamment la signalisation, l'oncogenèse et la réplication virale (Martin et al., 2011).

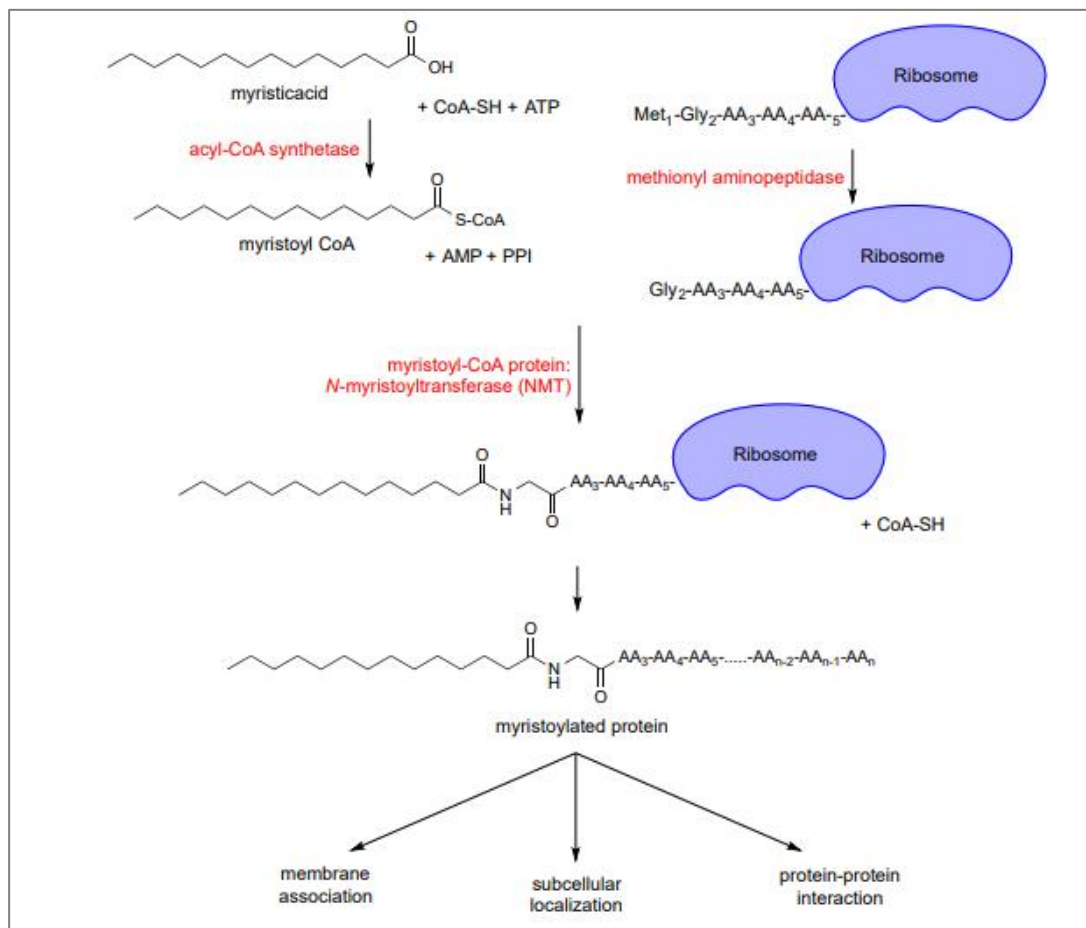


Figure 8 : Myristoylation des protéines comme un processus survenant pendant la traduction (Kavouris, 2014).

4. Validation de la NMT comme cible thérapeutique

La N-myristoyltransférase (NMT) est essentielle à la myristoylation des protéines HASPs de *Leishmania*, impliquées dans l'infektivité. McKenna et al., (2015) ont montré une activité enzymatique in vitro (K_m : 5,8–16,7 μM), confirmée par spectrométrie de masse et RMN.

La structure cristalline de la NMT de *L. major* (2,45 Å) a permis d'identifier les sites de liaison du myristoyl-CoA et du peptide substrat, facilitant le design d'inhibiteurs. Certains ont montré une activité létale sur les promastigotes.

Paape et al., (2020) ont validé génétiquement l'essentiel de NMT chez les amastigotes : sa délétion conditionnelle réduit la charge parasitaire chez la souris, confirmant son potentiel thérapeutique.

5. Inhibiteurs de la N-myristoyltransférase

La N-myristoyltransférase (NMT) est une cible thérapeutique prometteuse pour les maladies protozoaires telles que la leishmaniose. Toutefois, les inhibiteurs spécifiques de la NMT de *Leishmania* restent peu documentés, avec des données SAR et structurales encore limitées.

5.1. TUQ

Le composé TUQ (4-(4-chloro-2-{5-[(triméthyl-1H-pyrazol-4-yl) méthyl]-1,3,4-oxadiazol-2-yl} phenoxy)piperidine) (PDB : 5A28) se lie spécifiquement au site actif de la NMT de *Leishmania major* Figure 9 (a), formant des interactions stables avec plusieurs résidus clés. Grâce à sa forte affinité et sélectivité, il constitue un candidat prometteur pour le traitement des leishmanioses (Rackham et al., 2015).

5.2. Benzofurannes

Des dérivés de benzofurannes et similaires ont montré une inhibition notable de la NMT de *L. donovani* ($IC_{50} < 5 \mu M$ pour 74 composés) (Figure 9c), avec certains présentant une bonne sélectivité vis-à-vis de l'enzyme humaine (Kavouris, 2014).

5.3. Sulfonamides pyrazolylés

Le composé DDD100097 (CID : 58561169) ($K_i = 0,34 \text{ nM}$) inhibe efficacement la NMT de *Leishmania*, mais montre une activité modérée contre les formes amastigotes intracellulaires ($EC_{50} = 2,4 \mu M$) (Corpas-Lopez et al., 2019).

5.4. Le DDD85646 comme inhibiteur de la NMT

Le DDD85646 (CID: [44199337](#)) cible la NMT de *L. donovani*, mais son efficacité reste limitée, illustrant la complexité de développer des inhibiteurs à large spectre Figure 9 (b) (Bell et al., 2012).

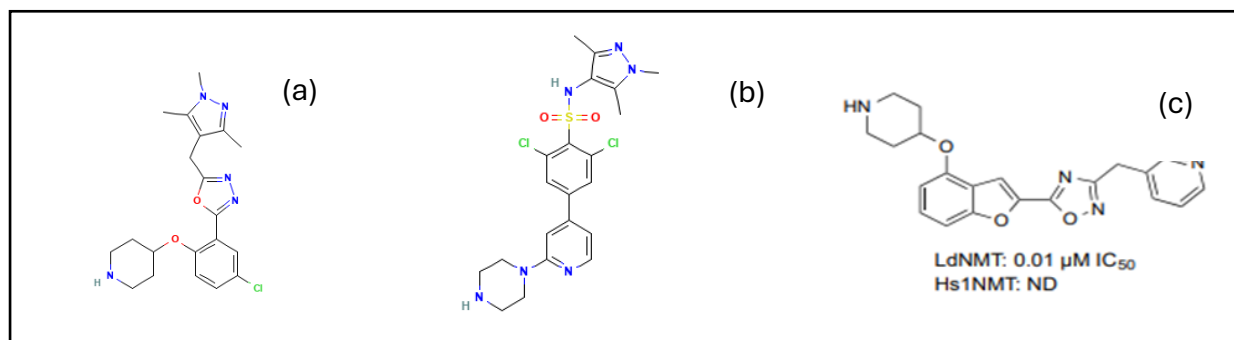
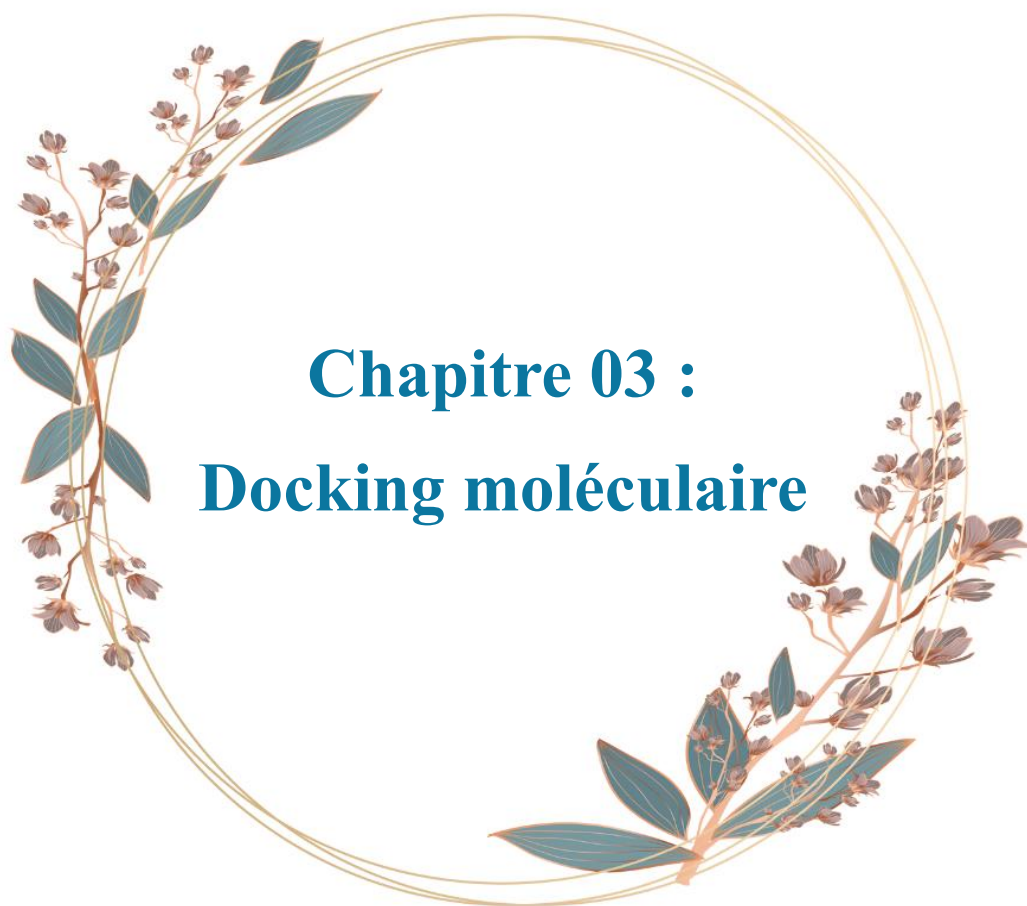


Figure 9 : Représentation en 2D des structures chimiques : (a) molécule TUQ, (b) molécule DDD85646, et (c) dérivés de Benzofurannes.

5.5. Inhibiteurs naturels de la N-myristoyltransférase

Les produits naturels constituent une source précieuse de structures bioactives capables d'inhiber la N-myristoyltransférase. Les withanolides, des stéroïdes isolés des feuilles, racines et fruits de *Withania somnifera*, ont démontré des propriétés antiparasitaires, notamment une activité contre *Leishmania* (Orabi et al., 2023). Dans une étude récente, le flavonoïde apigénine, extrait d'*Artemisia absinthium*, a montré une capacité à inhiber efficacement la NMT de *Leishmania* (Boudou et al., 2024). D'autres composés issus d'*Azadirachta indica*, comme le nimbolide, présentent également une forte affinité pour la NMT de *L. donovani* selon des études in silico, suggérant un bon potentiel inhibiteur (Tewari et al., 2024). Enfin, l'hespérétine, un flavonoïde dérivé de l'hespéridine, cible la NMT ainsi que d'autres enzymes parasitaires, et se distingue par une activité antipromastigote intéressante ($IC_{50} = 62,89 \mu M$) accompagnée d'un bon indice de sélectivité (Parente Rocha et al., 2025).



Chapitre 03 :

Docking moléculaire

1. Introduction

La technique de docking moléculaire repose sur la modélisation informatique des interactions entre deux molécules, le plus souvent entre un ligand (petite molécule) et une cible biologique de grande taille, telle qu'une protéine. Elle est largement utilisée dans des domaines comme la conception de nouveaux médicaments, la biologie structurale et la recherche en biologie moléculaire (Li et al., 2019).

2. Principe du docking moléculaire

Le docking moléculaire se déroule généralement en deux étapes fondamentales.

2.1. Docking

Le docking consiste à générer et explorer l'ensemble des conformations possibles que peut adopter le ligand lors de son interaction avec la protéine cible (Agu et al., 2023).

2.2. Scoring

Les poses sont triées grâce à une fonction de score qui estime leur énergie d'interaction. L'objectif est que le logiciel trouve au moins une pose proche de la réalité, avec une énergie qui la démarque des autres (Chevrollier, 2019).

3. Types de docking moléculaire

Le docking moléculaire peut être classé en trois grandes catégories selon la prise en compte de la flexibilité des molécules impliquées (Agu et al., 2023). La figure 11 illustre ces approches appliquées à une interaction entre une protéine et un ligand (Mohanty & Mohanty, 2023).

3.1. Docking rigide

Cette méthode considère la protéine cible et le ligand comme des structures rigides. Seules les orientations spatiales du ligand sont évaluées (translation et rotation) par rapport à la cible. Ce modèle repose sur le principe de l'ajustement type serrure-clé, sans tenir compte de modifications conformationnelles. Il est principalement utilisé pour les interactions entre macromolécules (protéine-protéine ou protéine-acide nucléique), où la complexité structurale rend l'exploration de multiples conformations difficile à réaliser en temps raisonnable (Chevrollier, 2020).

3.2. Docking semi-flexible

Dans cette approche, seule la flexibilité du ligand est prise en compte, tandis que le récepteur reste rigide. Le ligand peut subir des ajustements conformationnels en plus de ses mouvements de base. Ce type de docking repose sur l'hypothèse que la conformation du récepteur est déjà compatible avec la liaison du ligand (Chevrollier, 2020).

3.3. Docking flexible

Cette stratégie permet à la fois au ligand et à la cible de s'ajuster pendant l'interaction. La flexibilité du récepteur peut se limiter à certaines chaînes latérales ou s'étendre à des réarrangements de domaines entiers. Ce modèle, plus fidèle aux conditions biologiques, intègre les mécanismes d'ajustement induit et de sélection conformationnelle. Cependant, il requiert des ressources computationnelles importantes, ce qui peut restreindre son usage (Chevrollier, 2020).

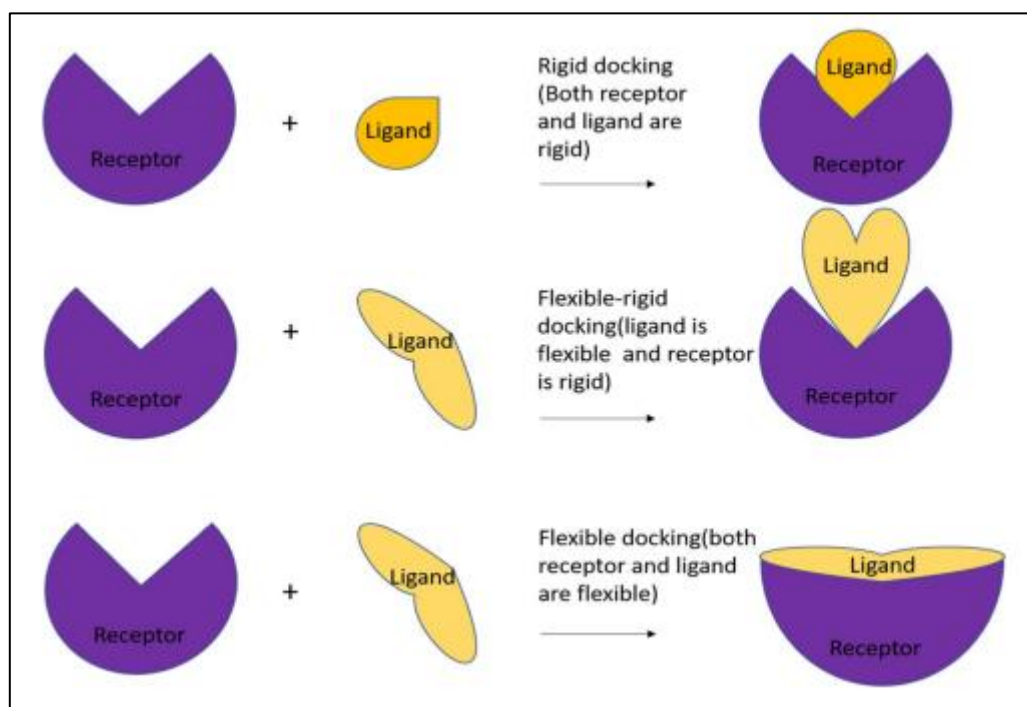


Figure 10 : Approches rigide et flexible (Mohanty & Mohanty, 2023).

4. Outils du docking moléculaire

La mise en œuvre d'un protocole de docking nécessite trois composantes fondamentales : un récepteur (souvent une protéine d'intérêt), un ligand (molécule bioactive potentielle), et un outil informatique capable de simuler leur interaction et de prédire les conformations optimales du complexe.

4.1. Récepteur

Le récepteur, généralement une protéine, constitue la cible du ligand. Il est impératif de disposer de sa structure tridimensionnelle pour entreprendre une simulation de docking. Ces structures sont le plus souvent obtenues par des techniques expérimentales comme la cristallographie aux rayons X, la résonance magnétique nucléaire (RMN), ou encore la cryo-microscopie électronique. En l'absence de données expérimentales, des approches de modélisation moléculaire permettent d'affiner ou de prédire la structure du récepteur (Ramos et al., 2018). La Protein Data Bank (PDB), une base de données librement accessible, constitue la source principale pour l'obtention de structures 3D de protéines. Elle offre une vaste collection de récepteurs potentiels utilisables pour des études de docking (Berman et al., 2000; Spyraakis & Cavasotto, 2015).

4.2. Ligand

Le ligand est une molécule capable d'interagir spécifiquement avec une cible biologique afin de déclencher une réponse thérapeutique ou biologique. Comme pour le récepteur, la connaissance de la structure tridimensionnelle du ligand est indispensable.

Deux principales approches permettent d'obtenir la structure 3D d'un ligand :

- **Construction manuelle** : les ligands décrits dans la littérature peuvent être dessinés et optimisés à l'aide de logiciels spécialisés tels que *ChemDraw*, *ArgusLab*, *Titan* ou *Sybyl*. Ces outils permettent d'enregistrer les structures dans des formats adaptés au docking (PDB, MOL, MOL2, etc.).
- **Consultation de chimiothèques** : des bases de données telles que PubChem, ZINC ou la Chimiothèque Nationale Française répertorient un grand nombre de ligands prêts à l'emploi pour les simulations de docking (Chaudhary & Mishra, 2016; Rudnitskaya et al., 2010; Stefaniu, 2019).

4.3. Programmes de docking moléculaire

Au fil des années, plus d'une soixantaine de programmes ont été développés pour répondre aux besoins croissants en modélisation des interactions ligand-récepteur, tant dans les milieux académiques qu'industriels. Ces outils diffèrent par leurs algorithmes, leur rapidité, leur précision, leur capacité à gérer la flexibilité des molécules, ou encore par leur accessibilité.

Parmi les plus utilisés figurent DOCK, AutoDock, AutoDock Vina, FlexX, GOLD, Surflex, Glide, ICM, Cdocker, LigandFit, LeDock, MCDock, FRED ou encore MOE-Dock (Pagadala

et al., 2017). La figure 11 présente la répartition des citations associées à ces logiciels, illustrant leur impact dans la littérature scientifique (Bano & Umar, 2016).

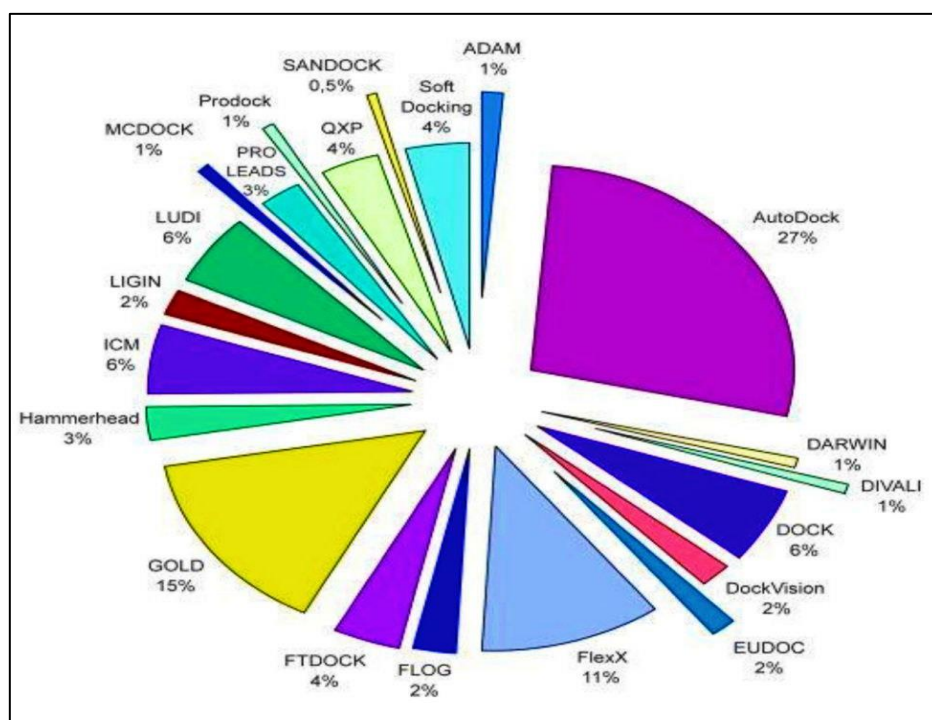


Figure 11 : Pourcentage de citation de chaque programme de docking (Bano & Umar, 2016).

Le tableau suivant fournit un aperçu des principaux logiciels de docking moléculaire,

Tableau 1: Programmes du docking moléculaire.

Logiciel	Algorithme utilisé	Éditeur	Site Web
FlexX	Reconstruction incrémentale	BioSolveIT	https://www.biosolveit.de/products/#FlexX
GOLD	Algorithme génétique	CCDC	https://www.ccdc.cam.ac.uk/solutions/software/gold/d
Glide	Méthode Monte Carlo	Schrödinger	https://www.schrodinger.com/platform/products/glide/
AutoDock	Algorithme génétique lamarkien	Scripps Research	https://www.scripps.edu/search/?s=autodock
AutoDock Vina	Optimisation globale	Scripps Research	https://vina.scripps.edu/
Surflex	Surflex-Dock Search Algorithm	Biopharmics/ Optibrium	https://optibrium.com/products/biopharmics/

4.3.1. FlexX

Le docking par FlexX se fait par une fragmentation puis reconstruction du ligand afin de prédire la meilleure interaction du ligand avec le site actif de l'enzyme. L'évaluation des poses générées est assurée par la fonction FlexX-score, dérivée de la fonction de Böhm. Celle-ci estime l'énergie libre de liaison entre le ligand et le récepteur en tenant compte de plusieurs paramètres tels que les interactions stériques, électrostatiques et hydrophobes entre les atomes du ligand et du récepteur. Cette méthode permet de hiérarchiser les ligands selon leur affinité potentielle pour le site actif, facilitant ainsi l'identification des candidats les plus prometteurs, que ce soit à des fins thérapeutiques ou de recherche (Rarey et al., 1996).



Chapitre 04 : Matériel et Méthodes

1. Matériel

1.1. Ordinateurs

Deux micro-ordinateurs de marques différentes (DELL et HP) ont été utilisés pour l'ensemble des travaux réalisés dans le cadre de ce mémoire. Leurs principales caractéristiques techniques sont présentées dans le tableau suivant :

Tableau 2: Caractéristiques des micro-ordinateurs utilisés.

	Micro-ordinateur 01 : DELL	Micro-ordinateur 02 : HP
Processeur	Intel(R) Core (TM) i7-6600U CPU @ 2.60GHz 2.80 GHz	Intel(R) Core (TM) i7-9850 CPU @ 2.60GHz 2.59GHz
Type du système	Système d'exploitation 64 bits, processeur x64	Système d'exploitation 64 bits, processeur x64
Système d'exploitation	Windows 11 Professionnel	Windows 10 professionnel

1.2. Logiciels

1.2.1. FlexX

Nous avons choisi d'utiliser le logiciel FlexX pour effectuer le docking moléculaire dans le cadre de notre travail. FlexX présente les résultats sous forme de tableau, en classant les différentes poses du ligand selon une énergie d'interaction décroissante. Chaque pose est accompagnée d'un ensemble de valeurs précises décrivant les types et intensités des interactions établies avec l'enzyme cible. En complément, le logiciel propose une représentation schématique des interactions ligand-récepteur, offrant ainsi une visualisation claire et intuitive des résultats. La figure 12 illustre l'interface d'accueil du logiciel FlexX.

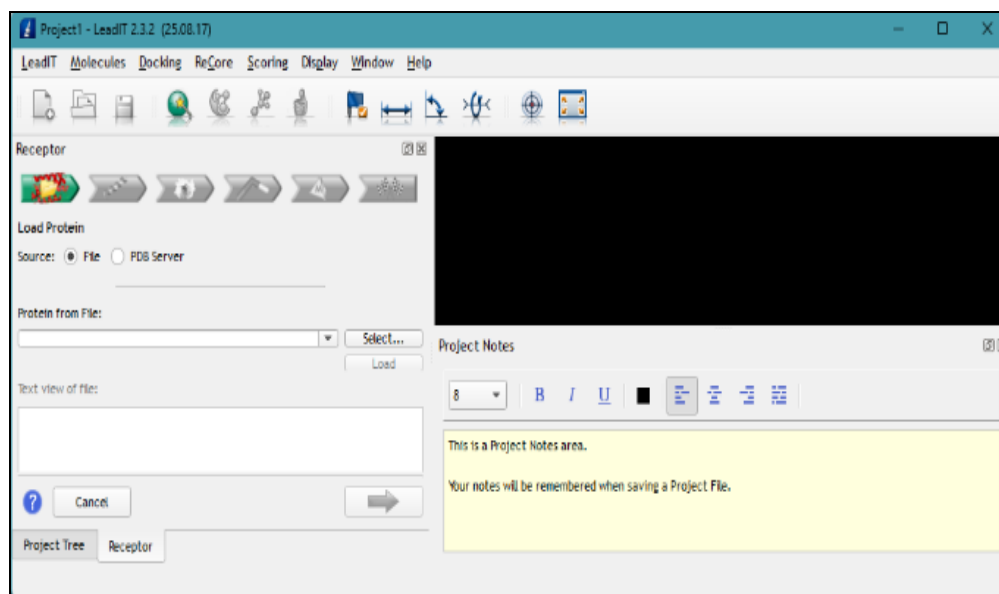


Figure 12: Interface d'accueil du logiciel FlexX

1.2.2. PDBaser

PDBaser est un logiciel de bioinformatique conçu pour préparer et traiter rapidement les structures 3D des protéines, offrant des fonctionnalités particulièrement adaptées au docking moléculaire. Il permet notamment de représenter les ligands en 2D, d'extraire les chaînes protéiques dans différents formats et d'identifier le site actif d'une protéine à partir d'un ligand de référence (Mokrani et al., 2022). La figure 13 présente l'interface du logiciel PDBaser.

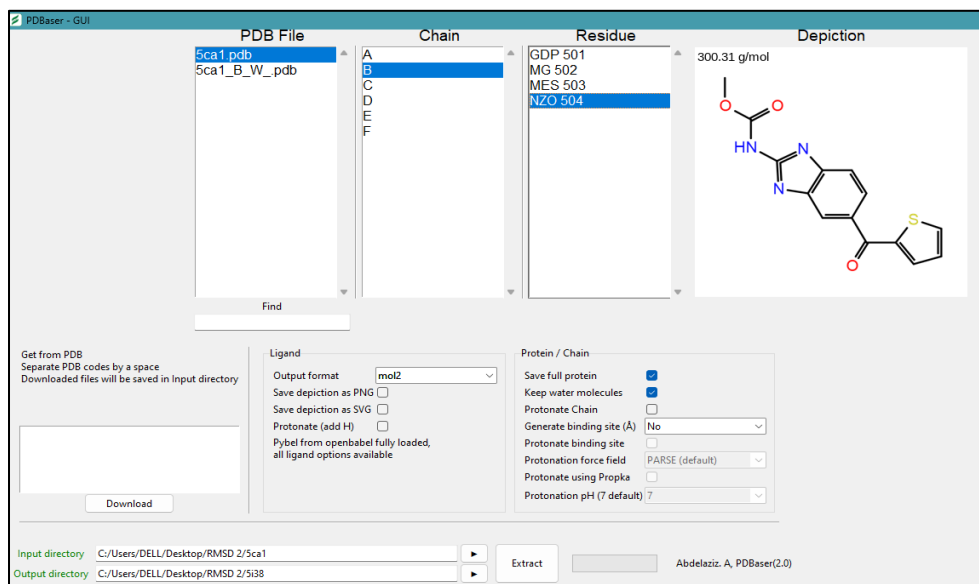


Figure 13 : Représentation de l'interface du PDBaser.

1.2.3. Biovia discovery studio visualizer

Discovery Studio est une suite logicielle complète destinée aux chercheurs en sciences de la vie. Elle permet l'analyse et la modélisation de structures moléculaires, de séquences, ainsi que d'autres données pertinentes. Le logiciel inclut une visionneuse gratuite permettant d'ouvrir des données issues d'autres programmes de la même suite. Son interface interactive (Figure 14) facilite la visualisation et l'édition de structures moléculaires), de séquences, de données de diffraction des rayons X, de scripts et d'autres types de données (Pawar & Rohane, 2021).

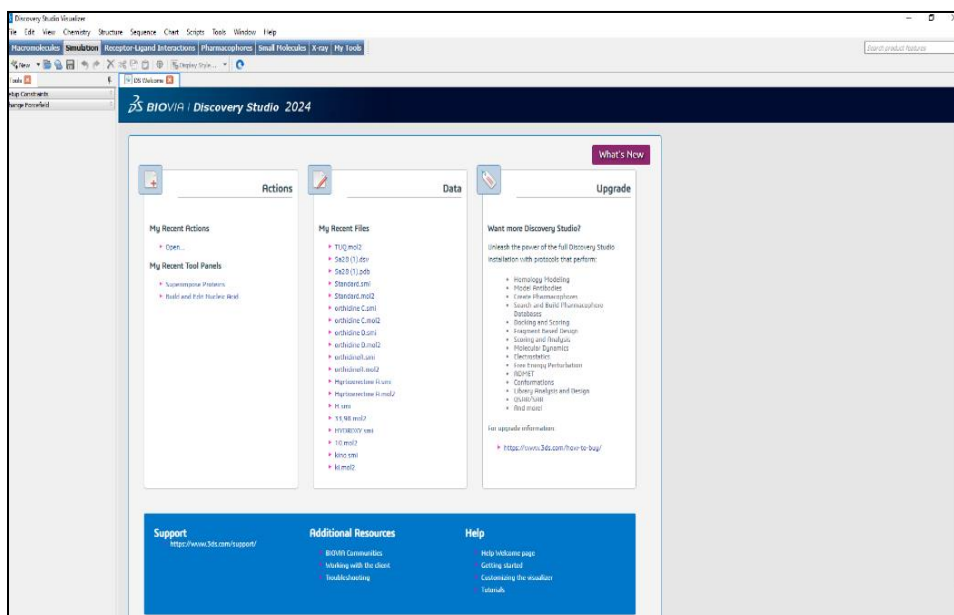


Figure 14: Représentation de l'interface du Biovia Discovery Studio.

1.3. Banques des données

Dans le cadre de notre recherche plusieurs banques de données ont été utilisées afin d'assurer la précision et la fiabilité des résultats.

1.3.1. Protéine data Bank (pdb)

La protéine data bank <https://www.rcsb.org/> regroupe des données cristallographiques permettant de représenter les structures en trois dimensions des protéines et des acides nucléiques. Nous avons utilisé le pdb, afin d'obtenir la structure de notre protéine cible.

1.3.2. Base de données des produits naturels d'Afrique (ANPDB)

L'African Natural Products Database (ANPDB) est une ressource unifiée, issue de la fusion de plusieurs bases régionales notamment la Northern African Natural Products Database (NANPDB) et la Eastern African Natural Products Database (EANPDB) et accessible en ligne (<https://african-compounds.org/anpdb/>).

Elle offre une collection structurée et variée de composés naturels extraits d'espèces végétales et microbiennes africaines (Figure 15). Sa chimiothèque est fournie sous forme de fichiers SDF (Structure Data File), un format standard qui encode à la fois les structures 2D/3D et les données moléculaires essentielles (nom, formule, masse molaire, propriétés physico-chimiques). Cette organisation normalisée facilite l'intégration directe des composés dans les protocoles de criblage virtuel et de modélisation moléculaire, faisant de l'ANPDB un outil de référence pour l'identification de nouvelles molécules bioactives d'origine naturelle.

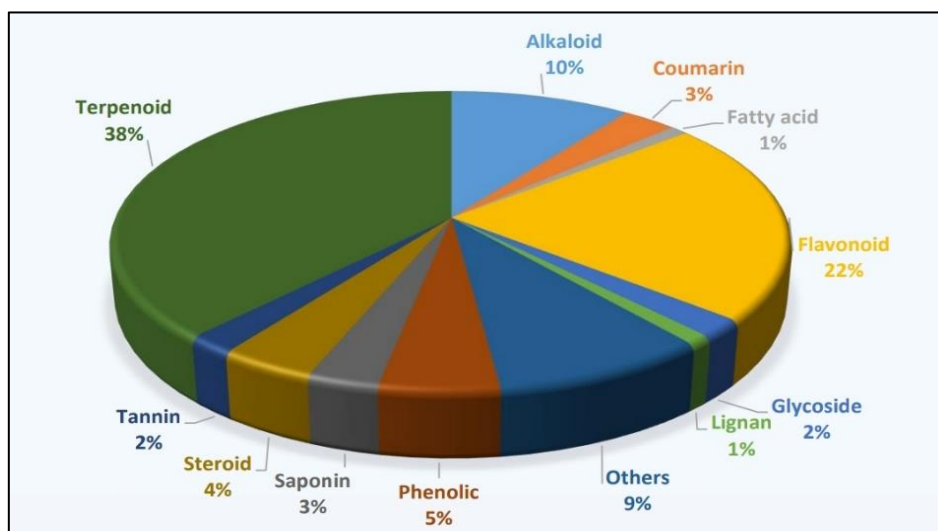


Figure 15 : Principales classes de composés étudiées dans La NANPDB¹.

1.3.3. PubChem

C'est une vaste base de données publique dédiée aux composés chimiques, gérée par les *National Institutes of Health (NIH)*. Ces dernières années, la plateforme a connu de nombreuses améliorations, notamment par l'intégration de plus de 130 nouvelles sources d'information, portant le total à plus de 1 000 sources. PubChem répertorie plus de 119 millions de composés, 322

¹https://www.researchgate.net/publication/320232037_RDKit_habitation_in_Pharmaceutical_Bioinformatics

millions de substances et 295 millions de données relatives aux activités biologiques (Kim et al., 2025).

1.4. ADMETlab

ADMETlab est une plateforme web dédiée à la prédiction des propriétés ADMET (Absorption, Distribution, Métabolisme, Excrétion et Toxicité) des composés chimiques (Figure 16). Elle repose sur une base de données collectée de manière exhaustive, intégrant à la fois les propriétés ADMET connues et les paramètres physico-chimiques de base (Dong et al., 2018).

La version utilisée dans cette étude, ADMETlab 3.0, constitue une mise à jour majeure du serveur, offrant un environnement plus complet et performant pour l'évaluation des paramètres liés à l'ADMET, ainsi que des propriétés physico-chimiques et des caractéristiques de chimie médicinale intervenant dans le processus de découverte de médicament. Cette version comprend 119 fonctionnalités soit 31 de plus que la version précédente (Fu et al., 2024). ADMETlab 3.0 est accessible publiquement à l'adresse suivante : <https://admetlab3.scbdd.com>.

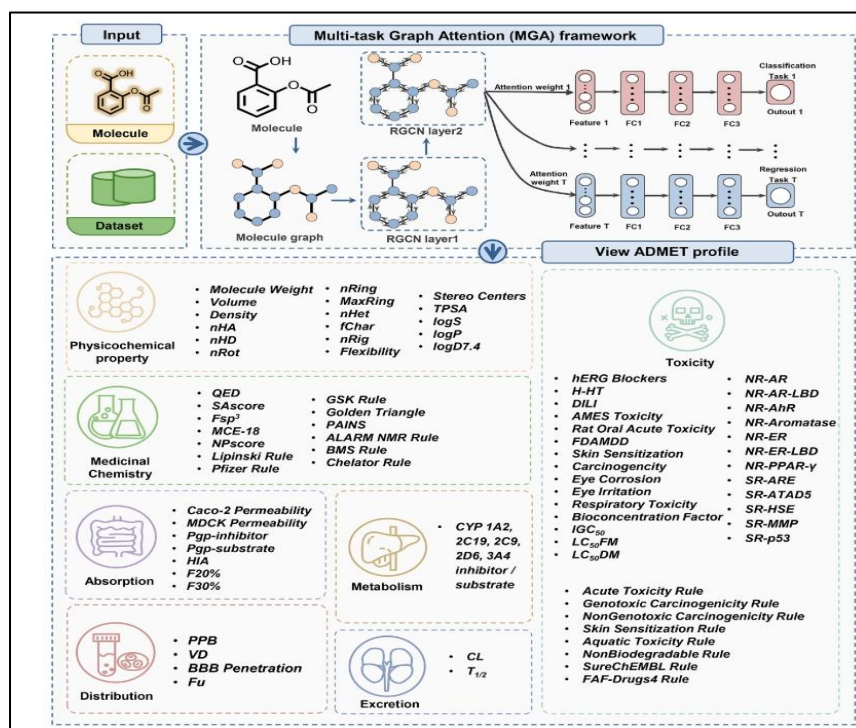


Figure 16: Processus de fonctionnement d'ADMETlab2

² <https://admetmesh.scbdd.com/docs/#/>

1.5. SwissADME

SwissADME est une plateforme en ligne gratuite offrant l'accès à une large gamme de modèles prédictifs rapides et fiables pour l'évaluation des propriétés physico-chimiques, de la pharmacocinétique, de la similarité médicamenteuse "drug-likeness" et de la pertinence en chimie médicinale. Grâce à une interface intuitive et sans nécessité d'inscription (Daina et al., 2017), cet outil permet une saisie aisée des données ainsi qu'une interprétation rapide des résultats. SwissADME est accessible à l'adresse suivante : <http://www.swissadme.ch>.

2. Méthodes

2.1. Test de fiabilité du programme FlexX

Afin de garantir l'efficacité du logiciel FlexX nous avons réalisé un test RMSD (Root-Mean-Square Deviation), afin d'assurer la fiabilité de nos résultats.

2.1.1. Test RMSD

Le test RMSD (*Root Mean Square Deviation*) permet d'évaluer la précision d'un docking moléculaire en mesurant la distance entre deux conformations d'un même ligand : la conformation prédite et la conformation expérimentale obtenue par cristallographie. Cette comparaison s'effectue après superposition des positions atomiques.

Une valeur faible de RMSD indique une bonne concordance entre les structures, traduisant une prédiction fiable. En pratique, un RMSD inférieur à 2 Å est généralement considéré comme acceptable. Au-delà, la précision est remise en question, ce qui peut invalider le protocole utilisé (Bell & Zhang, 2019).

Dans le cadre de cette étude, le RMSD a été calculé pour 100 complexes protéine-ligand, sélectionnés aléatoirement à partir de la PDB.

2.1.2. Analyse visuelle

L'analyse visuelle constitue une étape complémentaire importante après le test RMSD, permettant de valider les résultats des simulations de docking. Elle consiste à examiner visuellement la superposition du ligand simulé avec sa pose de référence, afin de vérifier s'il est correctement positionné dans le site actif de l'enzyme et si les interactions avec les résidus clés sont pertinentes. Cette étape est réalisée à l'aide de Discovery Studio.

2.2. Préparation des molécules pour le docking moléculaire

2.2.1. Préparation de la cible

Dans cette étude, nous avons choisi comme cible l'enzyme N-myristoyltransférase, impliquée dans plusieurs processus biologiques chez les eucaryotes. Plusieurs structures cristallographiques de cette enzyme sont disponibles dans la banque de données PDB comme montre le tableau 3, variant selon l'organisme d'origine, la présence de mutations et la résolution.

Nous avons sélectionné le complexe 5A28, issu de *Leishmania*, en raison de sa résolution élevée (1,48 Å). Ce complexe, co-cristallisé avec l'inhibiteur TUQ, a été téléchargé au format PDB.

Tableau 3 : Propriétés des complexes PDB de la N-myristoyltransférase de *Leishmania*.

Code du complexe	Code de l'inhibiteur	Chaîne	Resolution (Å)	Mutation	Intitulé
2wsa	646	A	1.60	0	Crystal structure of <i>leishmania major</i> n-myristoyltransferase (nmt) with bound myristoyl-coa and a pyrazole sulphonamide ligand (ddd85646)
4cgl	A6k	A	1.48	0	<i>Leishmania major</i> n-myristoyltransferase in complex with an aminoacylpyrrolidine inhibitor
5a28	TUQ	A	1.48	0	<i>Leishmania major</i> n-myristoyltransferase in complex with a chlorophenyl 1,3,4-oxadiazole inhibitor.
6rxc	KMK	A	2.10	0	<i>Leishmania major</i> pteridine reductase 1 (lmptr1) in complex with inhibitor 4 (nmt-c0026)

2.2.2. Préparation du site active

La préparation de la cible dans FlexX repose sur une série d'étapes essentielles visant à garantir un docking moléculaire fiable. Dans un premier temps, la protéine cible, identifiée par le code PDB 5A28, est importée dans le logiciel. La chaîne d'intérêt est ensuite sélectionnée, puis le site actif est défini, généralement à partir d'un ligand co-cristallisé. Dans notre cas, il s'agit du TUQ (Figure 9), utilisé comme ligand pour déterminer le site actif de la cible. Enfin, la structure complète est validée afin d'assurer sa compatibilité avec le protocole de docking.

2.2.3. Choix du ligand de référence

Dans cette étude, plusieurs inhibiteurs potentiels de la N-myristoyltransférase (NMT) ont été évalués, mais le composé DDD85646 (Figure 17) a été retenu comme molécule de référence en raison de son efficacité largement documentée. DDD85646 est un inhibiteur puissant de la NMT de *Leishmania donovani*, avec une IC_{50} enzymatique de 1,2 nM, ce qui témoigne d'une forte affinité pour la cible enzymatique. Néanmoins, son activité cellulaire s'est révélée plus modeste, avec une IC_{50} de 8 μ M sur les amastigotes intracellulaires (Paape et al., 2014).

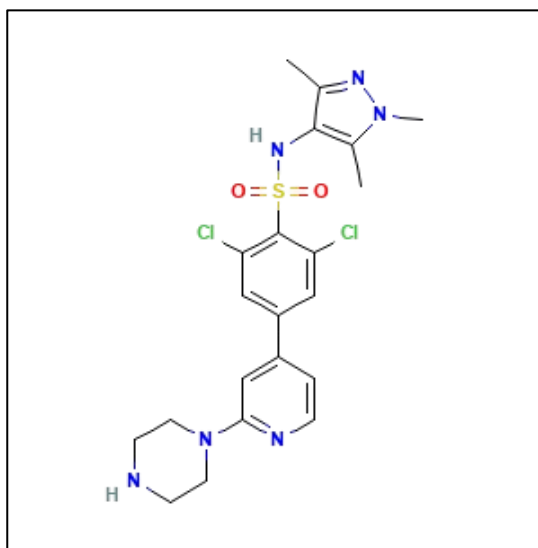


Figure 17 : Structure de l'inhibiteur DDD85646 (2,6-Dichloro-4-(2-Piperazin-1-Ylpyridin-4-Yl)-N-(1,3,5-Trimethyl-1h-Pyrazol-4-Yl) benzenesulfonamide).

2.2.4. Préparation de la chimiothèque

Afin d'identifier des molécules présentant un potentiel inhibiteur comparable à celui de l'inhibiteur de référence DDD85646 (CID : 44199337), nous avons utilisé la chimiothèque des produits naturels d'Afrique (ANPDB), constituée de 6 910 composés naturels.

Ces molécules ont été réparties en 34 fichiers au format SDF, contenant chacun 200 composés, à l'exception du dernier fichier, qui en regroupe 310. L'ensemble de la chimiothèque a été traité à l'aide du logiciel FlexX dans le cadre d'un criblage virtuel, en vue d'identifier les candidats présentant une forte affinité avec la protéine cible.

2.2.5. Criblage virtuel

Après la préparation de la chimiothèque, le criblage virtuel a été réalisé à l'aide du logiciel FlexX, qui permet de prédire de manière fiable la conformation spatiale d'un ligand au sein du site actif de l'enzyme. L'arrimage d'un ligand dans le site d'interaction suit plusieurs étapes : le choix de l'option « Docking » dans le logiciel, la sélection du ligand à tester, puis le lancement de l'opération de docking moléculaire. Les résultats obtenus sont classés dans un tableau en fonction de leur score d'affinité. Par ailleurs, FlexX, via l'interface graphique LeadIT, permet également d'analyser les interactions spécifiques entre le ligand et les acides aminés du site actif, en générant une représentation schématique facilitant la visualisation des différentes liaisons impliquées dans la fixation du ligand.

3. Prédiction des propriétés ADMET

Pour qu'un candidat-médicament soit efficace, il doit atteindre sa cible biologique à une concentration optimale après administration. Toutefois, cette biodisponibilité dépend de sa capacité à franchir diverses barrières biologiques et à éviter une élimination rapide. L'évaluation des propriétés ADMET (Absorption, Distribution, Métabolisme, Excrétion et Toxicité) est donc essentielle pour estimer son comportement pharmacocinétique.

Dans cette étude, nous avons utilisé le serveur ADMETlab.3.0 et SwissADME pour prédire les propriétés ADMET des inhibiteurs les plus prometteurs de l'enzyme N-myristoyltransférase, identifiés lors du criblage virtuel. Les structures moléculaires des inhibiteurs, initialement enregistrées au format SDF, ont été converties en SMILES afin de les analyser.

3.1. Prédiction des propriétés physico-chimiques

3.1.1. Règle de Lipinski

Tous les candidats-médicaments devaient satisfaire à la règle des cinq de Lipinski, qui indique leur probabilité d'être actifs par voie orale. Cette règle permet d'estimer la biodisponibilité orale d'un composé chimique en se basant sur sa structure bidimensionnelle (2D).

1. Le poids moléculaire doit être inférieur ou égale à 500 Da.
2. Le nombre de donneur de liaisons hydrogène doit être inférieure ou égale à 5.
3. Le nombre d'accepteur d'hydrogène doit être inférieur ou égale à 10.
4. Le nombre de liaisons flexibles doit être inférieur ou égale à 15.

5. Le log P de son coefficient de partage doit être $-2 \leq \log p \leq 5$ (Lipinski et al., 2012).

3.1.2. Règle de Veber

La règle de Veber repose sur un ensemble de critères permettant d'évaluer la biodisponibilité orale des médicaments. Elle indique qu'un composé a une probabilité accrue d'être bien absorbé par voie orale s'il satisfait aux conditions suivantes :

1. Une aire de surface polaire (PSA, polar surface area) inférieure ou égale à 140 Å².
2. Un nombre de liaisons flexibles ne dépassant pas 10.
3. Un nombre d'accepteurs de liaisons hydrogène inférieur ou égal à 10.
4. Un nombre de donneurs de liaisons hydrogène ne dépassant pas 5 (Veber et al., 2002).

3.1.3. Solubilité dans l'eau

La capacité d'un composé à se dissoudre dans l'eau constitue un paramètre clé dans le développement de médicaments, car elle influence directement l'absorption, la distribution et l'élimination du principe actif. Une bonne solubilité favorise une meilleure biodisponibilité, ce qui est essentiel pour garantir l'efficacité thérapeutique du composé.

3.1.4. Accessibilité à la synthèse chimique

Elle représente un critère déterminant dans la sélection des candidats-médicaments. Les molécules faciles à synthétiser sont privilégiées, car elles réduisent les coûts de production et augmentent les chances de succès lors du développement à grande échelle. Ce serveur utilise une échelle de notation de 1 à 10 pour évaluer l'accessibilité synthétique des molécules, où 1 correspond à une synthèse facile et 10 à une synthèse très difficile.

3.2. Prédiction des propriétés pharmacocinétique

Les propriétés pharmacocinétiques étudiées dans notre étude sont :

3.2.1. Perméabilité à la barrière hémato-encéphalique

Structure essentielle à la protection du cerveau, la barrière hémato-encéphalique agit comme un filtre hautement sélectif entre le sang et le tissu cérébral. Elle empêche certaines substances potentiellement nocives d'atteindre le système nerveux central, tout en permettant le passage de molécules indispensables. Cette fonction est assurée grâce à une organisation cellulaire

complexe et à des jonctions serrées (Lechevallier et al., 2024). Toutefois, la capacité d'un composé à franchir cette barrière peut aussi représenter un risque, notamment lorsqu'elle s'accompagne d'effets secondaires neurotoxiques.

3.2.2. Absorption gastro-intestinale

Le passage des composés administrés par voie orale à travers les cellules épithéliales du tractus gastro-intestinal conditionne leur absorption. Ce processus de transport transmembranaire est déterminant pour la biodisponibilité des médicaments (Le, 2022).

3.2.3. Inhibition des cytochromes P450

Parmi les principaux mécanismes responsables des interactions médicamenteuses, l'inhibition des enzymes du cytochrome P450 (CYP450) occupe une place centrale. Cette inhibition peut être réversible, compétitive ou non compétitive, ou irréversible, comme c'est le cas dans l'inhibition basée sur le mécanisme. Elle perturbe le métabolisme de certains médicaments, augmentant ainsi le risque d'effets indésirables. Maîtriser ces interactions est essentiel pour optimiser la sécurité et l'efficacité des traitements (Deodhar et al., 2020).

3.3. Prédiction des propriétés toxicocinétiques

Les composés les plus prometteurs ont été soumis à une étape supplémentaire d'évaluation à l'aide de l'outil ADMETlab, qui permet de prédire leurs propriétés toxicocinétiques. Les paramètres évalués comprennent :

3.3.1. Test d'Ames

Le test d'Ames est une méthode couramment utilisée pour évaluer le potentiel mutagène d'un composé à l'aide de souches bactériennes spécifiques. Un résultat positif indique que le composé peut induire des mutations, suggérant ainsi un risque cancérogène potentiel (Zeiger, 2019).

3.3.2. Toxicité hépatique

La toxicité hépatique constitue un enjeu majeur en matière de sécurité dans le développement pharmaceutique, car elle représente l'une des principales causes d'échec en phase clinique. Le modèle prédictif proposé par ADMETlab s'appuie sur des données expérimentales pour estimer diverses propriétés toxicologiques, notamment la toxicité hépatique. Un composé est

considéré comme hépatotoxique s'il est associé à au moins un événement pathologique ou physiologique lié au foie, et fortement corrélé à une altération de la fonction hépatique normale (Xiong et al., 2021).

3.3.3. Inhibition des canaux hERG I et II

Le gène hERG (Human Ether-à-go-go-Related Gene) code un canal potassique impliqué dans la régulation du rythme cardiaque. L'inhibition de ces canaux peut provoquer un allongement de l'intervalle QTs, augmentant le risque d'arythmies ventriculaires potentiellement mortelles. Ce risque est à l'origine du retrait de plusieurs médicaments commercialisés. Les modèles de prédiction intégrés dans ADMETlab permettent d'évaluer le potentiel d'inhibition des canaux hERG I et hERG II à partir de données expérimentales (Wang et al., 2016).

3.3.4. Sensibilisation cutanée

La sensibilisation cutanée correspond à une réaction indésirable provoquée par le contact de la peau avec certaines substances, pouvant entraîner une dermatite allergique de contact. Il est donc essentiel d'évaluer ce risque afin d'assurer la sécurité des composés susceptibles d'être appliqués sur la peau. Le modèle utilisé repose sur l'analyse de données issues d'un ensemble de composés dont le potentiel sensibilisant a été évalué expérimentalement (Ponvert, 2006).



Chapitre 05 : Résultats et Discussion

L'objectif principal de ce mémoire de master est d'acquérir des compétences en simulation informatique par docking moléculaire afin de contribuer à la conception *in silico* de nouveaux inhibiteurs ciblant la N-myristoyltransférase, une enzyme représentant une cible thérapeutique prometteuse pour le traitement de la leishmaniose.

1. Teste de fiabilité

Avant d'aborder l'étude *in silico* de l'inhibition de la N-myristoyltransférase par docking moléculaire, il était essentiel d'évaluer la fiabilité du logiciel utilisé. Pour cela, nous avons appliqué le test RMSD afin de mesurer la reproductibilité des résultats théoriques par rapport aux structures expérimentales de référence. Cette étape a été suivie d'une analyse visuelle des complexes générés pour confirmer la précision des résultats obtenus et garantir la validité des simulations de docking pour la suite de l'étude.

1.1. Test RMSD

Dans notre étude, nous avons appliqué le test RMSD sur 100 complexes protéine-ligand, sélectionnés de manière aléatoire à partir de la base de données PDB. Ces complexes ont été récupérés depuis la PDB, puis préparés en dissociant la protéine de son ligand.

Les résultats de l'évaluation des 100 complexes en termes de RMSD, obtenus par FlexX, sont illustrés dans la figure 18, qui présente la répartition en pourcentage selon deux intervalles de RMSD ($< 2 \text{ \AA}$ et $\geq 2 \text{ \AA}$). Les codes PDB des complexes et de leurs inhibiteurs, ainsi que les valeurs de RMSD obtenues par FlexX, sont détaillés dans l'annexe N°1, offrant ainsi un aperçu complet des résultats de cette analyse.

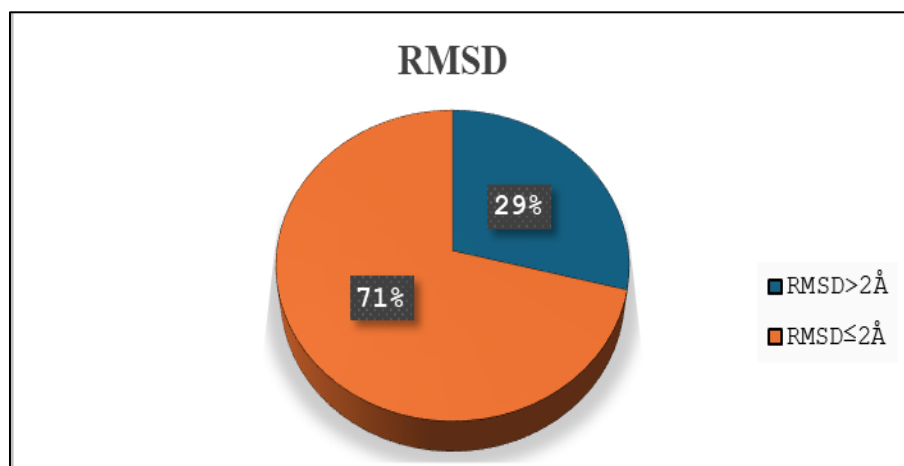


Figure 18 : Résultats du test RMSD donnés en pourcentage.

Il ressort de cette figure que 71 % des valeurs de RMSD obtenues avec FlexX sont inférieures à 2 Å, seuil généralement admis dans la littérature pour juger de la fiabilité d'un logiciel de docking moléculaire. En effet, un $\text{RMSD} \leq 2 \text{ Å}$ entre la conformation prédite et la structure cristallographique indique une bonne précision du positionnement du ligand dans le site actif.

Ce résultat est conforme à ceux rapportés dans plusieurs études antérieures. Guendouze et al., (2024) ont observé que 64 % des complexes analysés affichaient un RMSD inférieur ou égal à 2 Å.

Ces données confirment que le logiciel FlexX offre une performance satisfaisante, avec une marge d'erreur réduite, ce qui le rend adapté à la prédiction du positionnement des ligands dans leur site actif.

1.2. Analyse visuelle

À la suite du calcul des valeurs de RMSD, une analyse visuelle est effectuée afin de confirmer la concordance entre la conformation prédite par le logiciel et la structure cristallographique expérimentale.

Dans notre étude, cette analyse a été appliquée au complexe cristallographique identifié par le code PDB 5A28, représentant la N-myristoyltransférase en interaction avec l'inhibiteur TUQ. Comme illustré dans la figure 19, la structure prédite par FlexX présente une superposition étroite avec la structure expérimentale, indiquant une excellente concordance spatiale. Cette adéquation est corroborée par une valeur de RMSD de 1,108 Å, témoignant d'une forte conservation de la conformation globale du ligand dans le site actif.

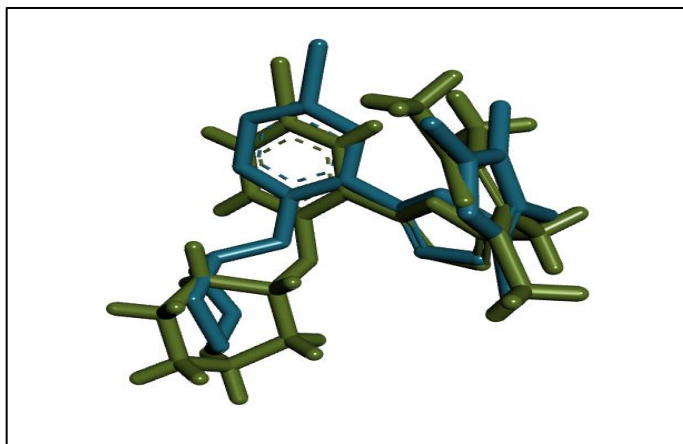


Figure 19 : Superposition de la structure du ligand TUQ (code PDB : 5A28) prédite par FlexX (en bleu) et de la position expérimentale (en vert).

Le complexe 1AQ1 a été choisi à titre de comparaison ; il présente un RMSD de 5,1212 Å. L'analyse visuelle de la superposition structurale révèle une discordance marquée entre la conformation prédite et la conformation réelle, indiquant une précision insuffisante du docking dans ce cas (Figure 20). Ces observations permettent de conclure que FlexX offre une fiabilité satisfaisante pour la prédiction des conformations moléculaires.

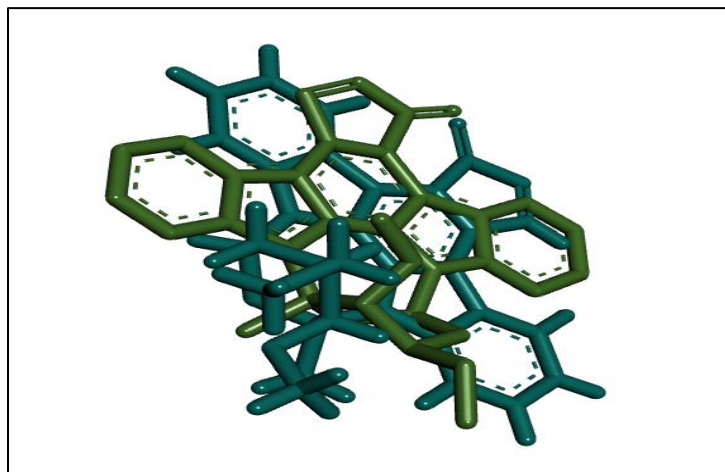


Figure 20 : Alignement de la structure du ligand STU (code PDB : 1AQ1) prédite par FlexX (en bleu) et de la position expérimentale (en vert).

2. Identification et caractérisation du site actif de la N-myristoyltransférase

Pour initier notre étude, le site actif de la N-myristoyltransférase a été identifié à l'aide du logiciel FlexX, en se basant sur la présence du ligand co-cristallisé TUQ, dont l'interaction avec la protéine a été confirmée expérimentalement. L'utilisation de ce ligand a permis de localiser précisément le site de liaison de l'enzyme.

Le composé DDD85646 (2,6-Dichloro-4-(2-piperazin-1-ylpyridin-4-yl)-N-(1,3,5-triméthyl-1H-pyrazol-4-yl) benzenesulfonamide), identifié sous le CID 44199337, a été sélectionné comme molécule de référence en raison de sa forte affinité inhibitrice à l'égard de la N-myristoyltransférase. Il a servi de point de comparaison pour la recherche de composés présentant une capacité d'inhibition équivalente ou supérieure.

Le docking du DDD85646 dans le site actif de la N-myristoyltransférase a été réalisé avec FlexX, révélant une énergie d'interaction de -26,8487 kcal/mol.

Par la suite, l'interface graphique de LeadIT a été utilisée pour analyser en détail les interactions moléculaires entre le ligand et les résidus du site actif. Comme l'illustre la figure 21, cette analyse a permis d'identifier les points de contact critiques et les interactions stabilisantes, fournissant des pistes précieuses pour améliorer l'affinité et l'efficacité des inhibiteurs potentiels.

Trois liaisons hydrogène principales ont été identifiées entre le ligand DDD85646 et le site actif de la N-myristoyltransférase.

La première est indirecte, établie entre un atome d'azote du noyau hétérocyclique du ligand et une molécule d'eau (HOH2105). La deuxième liaison hydrogène, également médiée par l'eau (HOH5108), connecte un atome d'azote du cycle pipérazine du ligand à l'environnement du site actif. Enfin, une liaison hydrogène directe est observée entre ce même atome d'azote et le groupement carboxyle du résidu Leu421. Cette interaction directe est particulièrement importante, car elle implique un contact stable avec un acide aminé clé du site actif, renforçant ainsi l'affinité de liaison.

En complément de ces liaisons hydrogène, le ligand interagit avec plusieurs résidus hydrophobes tels que Phe90, Leu399, His219, Leu421, Tyr217, Tyr345 et Asn376, qui contribuent à la stabilisation de la molécule dans la poche active par des interactions de type Van der Waals.

Des résidus polaires ou chargés, notamment Asp83 et Glu82, participent également à la structuration du site actif, ajoutant une dimension électrostatique favorable à l'ancrage du ligand.

Ces interactions hydrogène et hydrophobes combinées permettent une fixation stable et spécifique du ligand dans la cavité enzymatique, condition indispensable à une inhibition efficace de la N-myristoyltransférase.

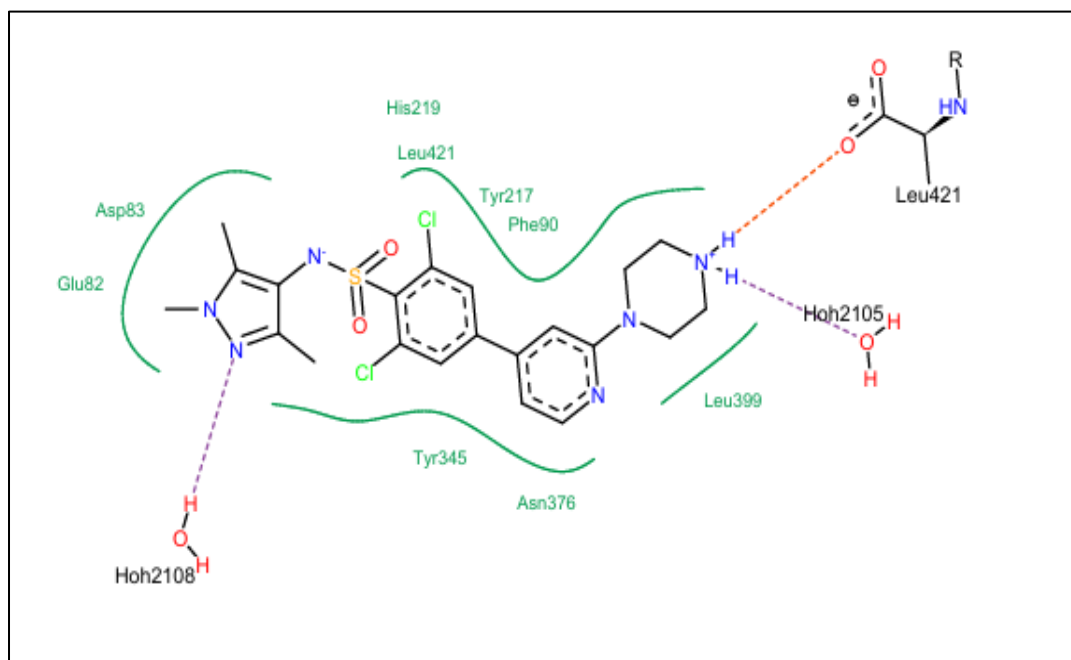


Figure 21 : Représentation schématique de l'interaction du complexe N-myristoyltransférase-DDD85646. Les liaisons hydrophobes sont représentées en vert, tandis que les liaisons hydrogène sont indiquées par des points.

3.Proposition de nouveaux inhibiteurs de la N-myristoyltransférase

Dans cette étude visant à identifier de nouveaux inhibiteurs plus puissants de la N-myristoyltransférase (NMT), nous avons évalué l'affinité de fixation d'un large panel de composés naturels africains par docking moléculaire avec FlexX.

Au total, 6910 molécules issues de la chimiothèque ANPDB ont été testées. Ces composés ont été comparés à la molécule de référence DDD85646 (CID : 44199337), un inhibiteur reconnu pour son affinité ciblée envers la NMT.

Les résultats des simulations ont révélé 70 composés présentant une énergie d'interaction inférieure à celle du composé standard, indiquant une affinité potentiellement supérieure (voir Annexe 2).

4. Evaluation des propriétés ADMET

Sur un total de 70 molécules présentant des scores prometteurs lors de l'analyse de docking, 34 ont été sélectionnées pour une évaluation approfondie de leurs propriétés pharmacocinétiques à l'aide des prédictions ADMET. Parmi celles-ci, Teucrol_001 et la N-E-caféoyltyramine se sont démarqués par un score élevé ainsi qu'un profil ADMET globalement favorable.

Bien que certaines autres structures aient obtenu des scores de docking supérieurs, elles ont été exclues en raison de violations majeures des règles de Lipinski et de Veber, ainsi que d'une absorption gastro-intestinale prédite comme insuffisante.

Étant donné que notre étude porte sur la leishmaniose viscérale, la biodisponibilité orale constitue un critère déterminant dans la sélection des candidats-médicaments

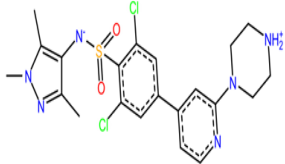
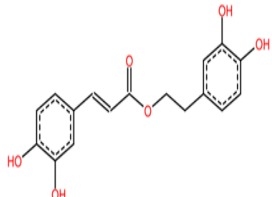
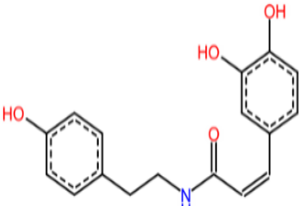
4.1. Propriétés physico-chimiques

Dans le cadre de cette étude *in silico*, l'évaluation des propriétés physico-chimiques des inhibiteurs potentiels de la N-myristoyltransférase représente une étape clé dans l'appréciation de leur potentiel pharmacologique. Pour prédire leur aptitude à devenir des candidats médicaments, les règles de Lipinski (règle des cinq) et de Veber sont couramment utilisées afin d'évaluer la drug-likeness, c'est-à-dire la probabilité qu'un composé présente une bonne absorption et distribution après administration orale.

Les principaux paramètres analysés incluent : le poids moléculaire (PM), le nombre de liaisons flexibles (nLF), le nombre de donneurs (nOHNH) et d'accepteurs (nON) de liaisons hydrogène, le log P (coefficient de partage octanol/eau), et la surface polaire accessible (TPSA).

Ces caractéristiques ont été prédites à l'aide de l'outil SwissADME. Les deux meilleurs inhibiteurs naturels issus du criblage virtuel, Teucrol_001 et N-E-caféoyl tyramine, ont été comparés au composé de référence DDD85646. Les résultats sont présentés dans le tableau 4.

Tableau 4 : Scores d'interaction, structures chimiques et propriétés physico-chimiques des meilleurs composés.

Propriétés	DDD85646 (Standard)	Teucrol_001	N-E-caffeoyl tyramine
Score (kJ/mol)	-26.8487	-29.1138	-28.7406
Structure			
Formule chimique	C ₂₁ H ₂₄ Cl ₂ N ₆ O ₂ S	C ₁₇ H ₁₆ O ₆	C ₁₇ H ₁₇ NO ₄
Poids moléculaire (g/mol)	495.43	316.31	299.32
nLF – Liaisons flexibles	5	6	6
nON – Accepteurs H	5	6	4
nOHNH – Donneurs H	1	4	4
Log P	2.37	2.34	2.11
TPSA (Å²)	93.08	107.22	89.79
Règle de Lipinski	Accepté	Accepté	Accepté
Règle de Veber	Accepté	Accepté	Accepté
Solubilité	Peu soluble	Soluble	Soluble
Accessibilité à la synthèse (score)	3.46	2.75	2.43

Les résultats montrent que tous les composés respectent les critères de Lipinski et de Veber, indiquant une bonne biodisponibilité orale potentielle. Leurs caractéristiques physico-chimiques sont compatibles avec une administration par voie orale, notamment en termes de poids moléculaire, de polarité et de lipophilie.

En termes de solubilité, les deux molécules naturelles, Teucrol_001 et N-E-caffeoyl tyramine, sont prédits comme solubles, ce qui favorise leur dissolution dans les milieux biologiques tels que le sang. À l'inverse, DDD85646 présente une solubilité plus limitée, ce qui

pourrait restreindre sa distribution systémique, bien que cette faiblesse puisse être corrigée lors d'optimisations futures.

Enfin, l'accessibilité à la synthèse est jugée satisfaisante pour les trois composés, avec des scores compris entre 2.43 et 3.46. Ce paramètre est essentiel pour la poursuite du développement pharmaceutique, car il conditionne la faisabilité des modifications structurales nécessaires à l'amélioration de l'efficacité ou de la sécurité du composé.

4.2. Propriétés pharmacocinétiques

L'évaluation pharmacocinétique *in silico* permet d'anticiper le comportement des composés candidats dans l'organisme. Elle permet d'anticiper leur comportement dans l'organisme, notamment en termes d'absorption, de distribution, et de métabolisme, ainsi que les risques potentiels d'interactions médicamenteuses via l'inhibition des enzymes du cytochrome P450. Le tableau 5 ci-dessous résume les résultats obtenus pour les composés DDD85646, Teucrol_001 et N-E-caféoyl tyramine.

Tableau 5 : Propriétés pharmacocinétiques des composés étudiés.

Propriétés	DDD85646 (Standard)	Teucrol_001	N-E-caféoyl tyramine
Absorption GI	Haute	Haute	Haute
Perméabilité BBB	Non	Non	Non
Inhibition CYP1A2	Non	Non	Non
Inhibition CYP2C19	Non	Non	Non
Inhibition CYP2C9	Oui	Oui	Oui
Inhibition CYP2D6	Non	Non	Oui
Inhibition CYP3A4	Non	Non	Oui

Les trois composés présentent une absorption gastro-intestinale élevée, indiquant une bonne capacité à franchir la muqueuse intestinale pour rejoindre la circulation systémique, ce qui est favorable à une biodisponibilité orale efficace.

Aucun des composés n'est capable de traverser la barrière hémato-encéphalique (BBB), ce qui suggère une absence d'effet au niveau du système nerveux central. Cette caractéristique peut être perçue comme un avantage en matière de sécurité, en réduisant le risque d'effets indésirables neurologiques.

Concernant le métabolisme hépatique, les trois molécules partagent un profil commun d'inhibition de l'isoforme CYP2C9, ce qui pourrait engendrer des interactions médicamenteuses avec des substances métabolisées par cette enzyme. Par ailleurs, N-E-caffeoyl tyramine inhibe également les isoformes CYP2D6 et CYP3A4, élargissant ainsi le risque d'interactions pharmacocinétiques. À l'inverse, Teucrol_001 et DDD85646 n'inhibent aucune de ces deux isoformes, ce qui confère à ces derniers un profil métabolique plus favorable.

Pour limiter les effets indésirables liés à l'inhibition des cytochromes P450, des modifications structurales ciblées peuvent être envisagées lors des phases ultérieures d'optimisation. Cette démarche est d'autant plus réalisable que les composés étudiés présentent une accessibilité à la synthèse jugée satisfaisante, facilitant les ajustements nécessaires à l'amélioration de leur profil pharmacocinétique.

4.3. Toxicité potentielle

Dans cette étude, la toxicité potentielle des composés DDD85646, Teucrol_001 et N-E-caffeoyl tyramine a été prédite à l'aide du serveur ADMETlab 3.0. Les résultats sont présentés dans le tableau 6.

Tableau 6 : Toxicité prédite des composés DDD85646, Teucrol_001 et N-E-caffeoyl tyramine.

Paramètres	DDD85646 (Standard)	Teucrol_001	N-E-caffeoyl tyramine
Toxicité AMES	--	+	-
Cancérogénicité	-	--	-
Toxicité hépatique	+++	--	-
Inhibition du canal hERG	++	--	-
Toxicité respiratoire	+++	--	--
Sensibilisation cutanée	-	+++	+++

Ces données révèlent des profils toxicologiques globalement acceptables pour les deux composés naturels, avec toutefois quelques différences notables.

- Le test de mutagénicité AMES est positif pour Teucrol_001, suggérant un potentiel mutagène, tandis qu'il est négatif pour N-E-caffeoyl tyramine et indéterminé pour le standard DDD85646.

- Aucun des trois composés n'est prédictivement cancérogène, ce qui est favorable du point de vue de la sécurité à long terme.
- Le risque de toxicité hépatique est présent uniquement pour DDD85646, contrairement à Teucrol_001 et N-E-caféoyl tyramine, qui ne présentent pas d'indicateurs négatifs à ce niveau.
- L'inhibition du canal hERG, associée à un risque d'arythmie cardiaque, est prédite pour DDD85646, alors qu'elle est absente pour les deux composés naturels.
- Concernant la toxicité respiratoire, seul le composé standard présente un risque potentiel marqué, ce qui n'est pas observé pour Teucrol_001 ni pour N-E-caféoyl tyramine.
- À l'inverse, une sensibilisation cutanée est prédite pour les deux composés naturels, ce qui nécessite une attention particulière en cas d'administration topique, alors que DDD85646 ne présente pas ce type de toxicité.

En conclusion, N-E-caféoyl tyramine apparaît comme le composé présentant le profil toxicologique le plus favorable, notamment par l'absence de mutagénicité, de toxicité humaine, de cardiotoxicité et de toxicité respiratoire. Ces résultats soulignent son intérêt en tant que candidat potentiel pour le développement d'inhibiteurs sûrs et efficaces de la N-myristoyltransférase.

5. Etude des interactions des meilleurs inhibiteurs

Le composé teucrol_001, classé 22ème dans l'ordre des meilleurs scores de liaison, et le composé N-E-caféoyl tyramine, classé 26ème, ont été sélectionnés pour une étude approfondie de leur activité inhibitrice. Bien que d'autres molécules aient obtenu des scores plus élevés dans ce classement, elles n'ont pas été retenues en raison de leurs propriétés ADMET défavorables, qui limitaient leur potentiel en tant que candidats médicaments.

5.1. Etude des interactions du complexe N-myristoyltransférase - Teucrol_001

Le teucrol (également connu sous le nom d'acide 90-décarboxyrosmarinique) est un ester phénolique naturel, résultant de la condensation entre l'acide caféique et le 3,4-dihydroxyphényléthanol. Il appartient à la classe des esters caféiques et a été isolé pour la première fois à partir de *Teucrium pilosum*. Son intérêt scientifique repose sur le fait qu'il constitue la première occurrence naturelle d'un tel ester au sein de la famille des Lamiacées (El-Mousallamy et al., 2000).

Le composé teucrol_001 s'est révélé être un inhibiteur prometteur de la N-

myristoyltransférase, avec une énergie d'interaction estimée à $-29,1138$ kcal/mol, soit une affinité supérieure à celle du composé de référence.

L'analyse structurale du complexe formé entre le teucrol_001 et la NMT, prédite par FlexX (Figure 22) met en évidence six liaisons hydrogène spécifiques : deux sont médiées par des molécules d'eau (HOH2236 et HOH2108) impliquant un atome d'oxygène du ligand, tandis que les quatre autres se forment directement avec les résidus Tyr345, Asn376, Met377 et Phe218.

Par ailleurs, plusieurs interactions hydrophobes stabilisantes sont observées avec les résidus Tyr217, Tyr345, Asn376, Met377, Val378, Phe90, Phe80, Asp83 et Val81, ancrant solidement le ligand dans la poche catalytique.

Ensemble, ces interactions renforcent la stabilité du complexe ligand-enzyme et confirment le fort potentiel inhibiteur du teucrol_001 vis-à-vis de la NMT.

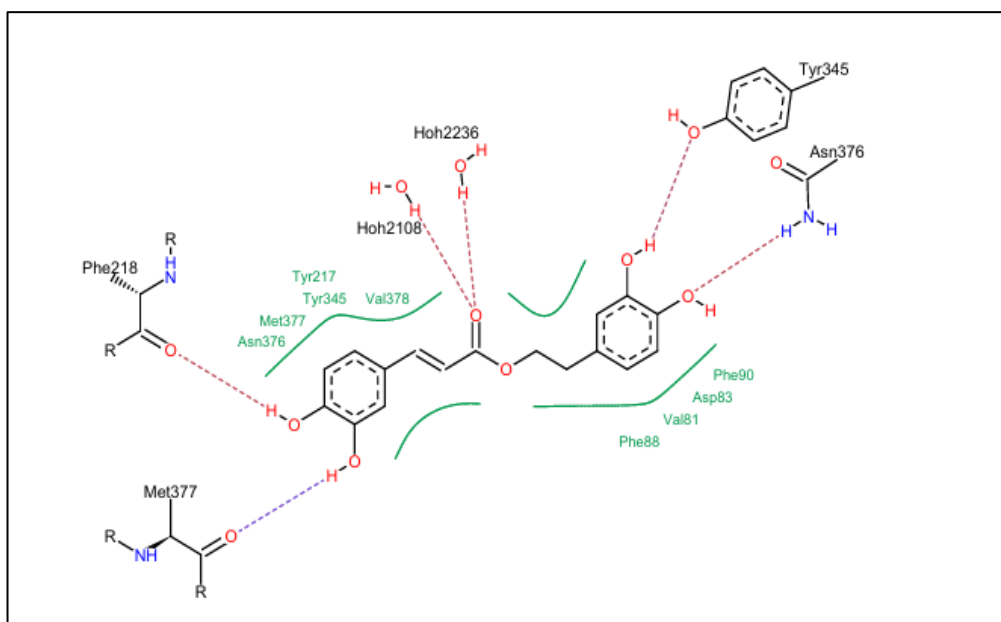


Figure 22 : Représentation en 2D du mode d'interaction du composé teucrol_001 avec le site de liaison de N-myristoyltransférase.

5.2. Etude des interactions du complexe N-myristoyltransférase-N-E-caféoyl tyramine

La N-E-caféoyltyramine (ou N-trans-caféoyltyramine) est un composé phénolique naturel appartenant à la famille des amides d'acides hydroxycinnamiques. Elle est présente dans diverses plantes médicinales et alimentaires, telles que *Lycium chinense* (goji), *Tribulus terrestris*, et le chanvre (*Cannabis sativa*).

Elle possède plusieurs activités biologiques notables :

- **Antioxydante** : Elle neutralise les radicaux libres grâce à ses groupes phénoliques, protège les cellules PC12 contre le stress oxydatif induit par H_2O_2 , et agit via les mécanismes HAT, SET-PT et SPLET (Bahloul et al., 2022).
- **Anti-inflammatoire** : Elle inhibe la production de NO et l'expression de COX-2 dans les macrophages RAW 264.7, et réduit l'expression de la P-sélectine sur les plaquettes, limitant les interactions plaquettes-leucocytes (Buckner et al., 2023).
- **Neuroprotectrice** : Elle protège les neurones contre les dommages oxydatifs (Olatunji et al., 2017).
- **Effet anticancéreux potentiel** : Par ses propriétés antioxydantes et anti-inflammatoires, elle pourrait contribuer à la prévention de la carcinogenèse (Chaudhry et al., 2022).
- **Modulation du microbiote intestinal** : Elle améliore la diversité microbienne et la perméabilité intestinale (Flores Martinez et al., 2024).

Le composé N-E-caféoyltyramine s'est révélé être un inhibiteur potentiel de la N-myristoyltransférase, avec une énergie d'interaction estimée à -28,7406 kJ/mol. L'analyse visuelle des interactions établies avec le site actif de l'enzyme (Figure 23) met en évidence plusieurs liaisons hydrogène : deux impliquant l'atome d'oxygène du ligand et les molécules d'eau HOH2108 et HOH2236, et d'autres avec les résidus Asn376, Leu421 et Tyr326. En complément, des interactions hydrophobes ont été observées avec les résidus Tyr217, Val376, Leu399, Phe90, Asp83 et Phe222. L'ensemble de ces interactions confère une stabilité notable au complexe formé, renforçant ainsi le potentiel inhibiteur de cette molécule naturelle.

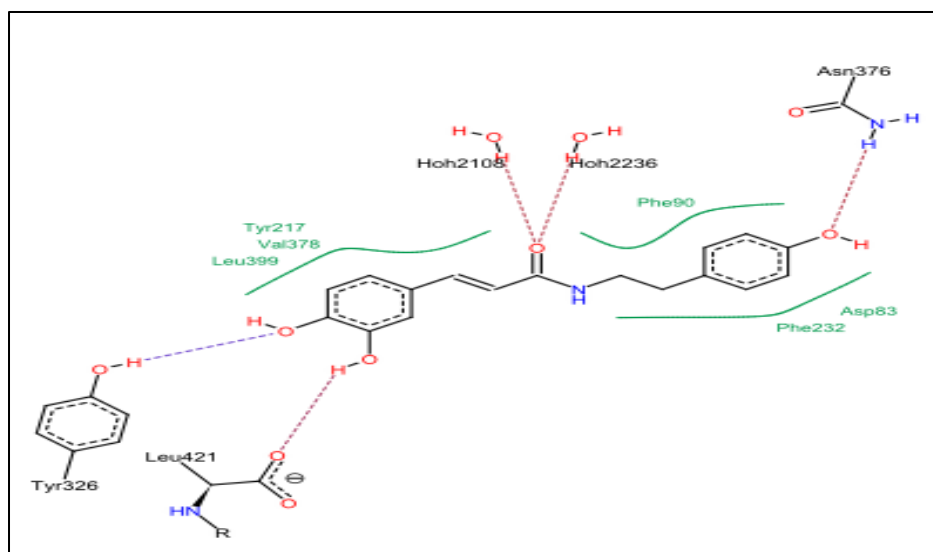


Figure 23 : Représentation en 2D du mode d'interaction du composé N-E-caffeoyl tyramine et le site de liaison de N-myristoyltransférase.

5.3. Comparaison de l'effet inhibiteur des meilleurs inhibiteurs de NMT

Afin d'évaluer l'efficacité inhibitrice des deux composés naturels identifiés, teucrol_001 et N-E-caffeoyl tyramine, une comparaison directe a été réalisée avec le ligand de référence DDD85646. Cette évaluation repose sur les énergies d'interaction, le nombre et la nature des liaisons établies avec le site actif de la N-myristoyltransférase.

Les résultats présentés dans le tableau 7 montrent que les deux composés naturels possèdent une affinité de liaison supérieure à celle du standard, traduisant un meilleur ancrage dans le site actif de l'enzyme.

En termes d'interactions spécifiques, teucrol_001 établit six liaisons hydrogène, tandis que N-E-caffeoyl tyramine en forme cinq, contre seulement trois pour le ligand de référence. Ces interactions, notamment avec des résidus clés du site actif, participent au renforcement de la stabilité du complexe enzyme-ligand.

Les interactions hydrophobes sont également plus nombreuses chez teucrol_001 (9 liaisons), équivalentes à celles du standard, alors que N-E-caffeoyl tyramine en établit six. Ces contacts hydrophobes, impliquant notamment des résidus tels que Phe90, Tyr217, Asn376, et Val378, jouent un rôle essentiel dans le maintien du ligand au sein de la poche catalytique.

Tableau 7 : Résumé comparatif des interactions et des énergies d'interaction entre la N-myristoyltransférase et les trois ligands étudiés.

Composé	Énergie d'interaction (kcal/mol)	Liaisons hydrogène	Interactions hydrophobes	Total des interactions
DDD85646 (standard)	-26,8487	3	9	12
Teucrol_001	-29,1138	6	9	15
N-E-caffeoyl tyramine	-28,7406	5	6	11

En conclusion, les deux molécules naturelles présentent un profil d'interaction plus favorable que le ligand standard. Parmi elles, teucrol_001 se distingue par le plus grand nombre d'interactions totales (15), une énergie d'interaction plus basse, et une meilleure capacité à établir à la fois des liaisons hydrogène et hydrophobes. Ces données suggèrent que teucrol_001 constitue le candidat le plus prometteur en tant qu'inhibiteur potentiel de la NMT.



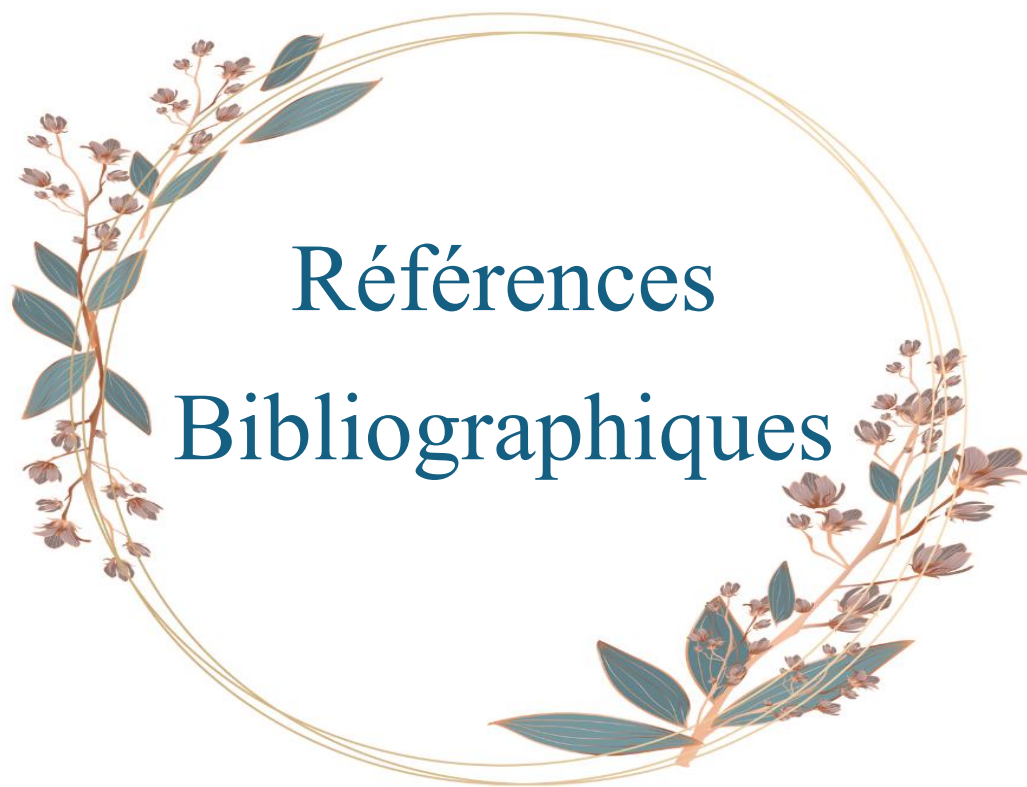
Conclusion

Dans cette étude, une approche *in silico* a été utilisée afin d'identifier de nouveaux inhibiteurs potentiels de la N-myristoyltransférase de *Leishmania*, une enzyme clé impliquée dans la pathogenèse de la leishmaniose. Le logiciel FlexX a été utilisé pour le docking moléculaire, après validation de sa fiabilité par un test RMSD sur 100 complexes issus de la PDB, dont 71 % ont présenté une valeur inférieure à 2 Å, attestant ainsi de la robustesse de l'outil.

Un criblage virtuel de 6910 composés naturels issus de la base ANPDB a permis d'identifier 70 molécules présentant un score de liaison supérieur à celui du ligand de référence DDD85646. Trente-quatre d'entre elles ont ensuite été sélectionnées pour une évaluation approfondie de leurs propriétés physico-chimiques, pharmacocinétiques et toxicologiques à l'aide des plateformes SwissADME et ADMETlab.

Parmi ces Trente-quatre candidats, Teucrol_001 et N-E-caffeoyl tyramine se sont distingués par un profil ADMET particulièrement favorable, en plus de leurs scores de docking élevés (respectivement -29.1138 et -28.7406 kJ/mol). Tous deux respectent les règles de Lipinski et de Veber, présentent une bonne absorption gastro-intestinale, une solubilité satisfaisante et une faisabilité de synthèse accessible. De plus, N-E-caffeoyl tyramine affiche un profil toxicologique plus sûr, sans toxicité humaine ni inhibition du gène hERG.

Enfin, l'analyse des interactions moléculaires avec la NMT a confirmé une liaison stable et ciblée pour ces deux composés, soutenant leur potentiel en tant qu'inhibiteurs efficaces. Ces résultats ouvrent la voie à des études expérimentales ultérieures (*in vitro/in vivo*) en vue du développement de nouvelles thérapies contre la leishmaniose.



- Agu, P. C., Afiukwa, C. A., Orji, O. U., Ezech, E. M., Ofoke, I. H., Ogbu, C. O., Ugwuja, E. I., & Aja, P. M. (2023). Molecular docking as a tool for the discovery of molecular targets of nutraceuticals in diseases management. *Scientific Reports*, 13(1), 13398. <https://doi.org/10.1038/s41598-023-40160-2>
- Acebey, L., Jullian, V., & Sauvain, M. (2008). Ethnopharmacologie et leishmanioses en Amérique latine. *Phytothérapie*, 6(3), 144–152. <https://doi.org/10.1007/s10298-008-0312-z>
- Bahloul, A., Benayahoum, A., Bouakkaz, S., Bordjiba, T., Boudjahem, A., Lilya, B., & Bachari, K. (2022). The antioxidant activity of N - E - caffeoyl and N - E - feruloyl tyramine conformers and their sulfured analogs contribution : density functional theory studies. *Theoretical Chemistry Accounts*, December. <https://doi.org/10.1007/s00214-022-02939-w>
- Bano, S., & Umar, T. (2016). Docking software: a review of literature and citation trends. *International Journal of Pharmaceutical Sciences and Research*, 7(8), 3260–3270. [https://doi.org/10.13040/IJPSR.0975-8232.7\(8\).3260-70](https://doi.org/10.13040/IJPSR.0975-8232.7(8).3260-70)
- Bell, A. S., Mills, J. E., Williams, G. P., Brannigan, J. A., Wilkinson, A. J., Parkinson, T., Leatherbarrow, R. J., Tate, E. W., Holder, A. A., & Smith, D. F. (2012). Selective inhibitors of protozoan protein N-myristoyltransferases as starting points for tropical disease medicinal chemistry programs. *PLoS Neglected Tropical Diseases*, 6(4), e1625. <https://doi.org/10.1371/journal.pntd.0001625>
- Bell, E. W., & Zhang, Y. (2019). DockRMSD: An open-source tool for atom mapping and RMSD calculation of symmetric molecules through graph isomorphism. *Journal of Cheminformatics*, 11(1), 1–9. <https://doi.org/10.1186/s13321-019-0362-7>
- Berman, H. M., Westbrook, J., Feng, Z., Gilliland, G., Bhat, T. N., Weissig, H., ... Bourne, P. E. (2000). The Protein Data Bank. *Nucleic Acids Research*, 28(1), 235–242. <https://doi.org/10.1093/nar/28.1.235> www3.rcsb.org+www2.rcsb.org+www2.rcsb.org+4
- Boudou, F., Belakredar, A., Berkane, A., Keziz, A., Alsaedi, H., Cornu, D., Bechelany, M., & Barhoum, A. (2024). Phytochemical profiling and in silico evaluation of Artemisia absinthium compounds targeting Leishmania N-myristoyltransferase: molecular docking, drug-likeness, and toxicity analyses. *Frontiers in Chemistry*, 12(November), 1–16. <https://doi.org/10.3389/fchem.2024.1508603>
- Brannigan, J. A., Smith, B. A., Yu, Z., Brzozowski, A. M., Hodgkinson, M. R., Maroof, A., Price, H. P., Meier, F., Leatherbarrow, R. J., Tate, E. W., Smith, D. F., & Wilkinson, A. J. (2010). N-myristoyltransferase from Leishmania donovani: structural and functional characterisation of a potential drug target for visceral leishmaniasis. *Journal of Molecular Biology*, 396(4), 985–999. <https://doi.org/10.1016/j.jmb.2009.12.032>
- Buckner, C. A., Lafrenie, R. M., Dénommée, J. A., Caswell, J. M., Want, D. A., Gan, G. G., Leong, Y. C., Bee, P. C., Chin, E., Teh, A. K. H., Picco, S., Villegas, L., Tonelli, F., Merlo, M., Rigau, J., Diaz, D., Masuelli, M., Korrapati, S., Kurra, P., ... Mathijssen, R. H. J. (2023). We are IntechOpen , the world ' s leading publisher of Open Access books Built by scientists , for scientists TOP 1 %. *Intech*, 11(tourism), 13. <https://www.intechopen.com/books/advanced-biometric-technologies/liveness-detection-in-biometrics>
- Burza, S., Croft, S. L., & Boelaert, M. (2018). Leishmaniasis. *The Lancet*, 392(10151), 951–970. [https://doi.org/10.1016/S0140-6736\(18\)31204-2](https://doi.org/10.1016/S0140-6736(18)31204-2)
- Cadeau, M. (2024). Apport des techniques de PCR maison en parasitologie médicale et mise en place de la détection de la leishmaniose viscérale au laboratoire To cite this version : HAL Id : dumas-04830449. NANTES UNIVERSITE.
- Carter, N. S., Stamper, B. D., Elbarbry, F., Nguyen, V., Lopez, S., Kawasaki, Y., Poormohamadian, R., & Roberts, S. C. (2021). Natural products that target the arginase in leishmania parasites hold therapeutic promise. *Microorganisms*, 9(2), 1–32. <https://doi.org/10.3390/microorganisms9020267>
- Chaudhary, K., & Mishra, N. (2016). A Review on Molecular Docking: Novel Tool for Drug Discovery. *JSM Chemistry*, 4, 1029.
- Chaudhry, G. E. S., Md Akim, A., Sung, Y. Y., & Sifzizul, T. M. T. (2022). Cancer and apoptosis: The apoptotic activity of plant and marine natural products and their potential as targeted cancer therapeutics. *Frontiers in*

- Pharmacology*, 13(August), 1–24. <https://doi.org/10.3389/fphar.2022.842376>
- Chevrollier, N. (2020). Développement et application d'une approche de docking par fragments pour modéliser les interactions entre protéines et ARN simple-brin (Master's thesis). Université Paris-Saclay.
- Corpas-Lopez, V., Moniz, S., Thomas, M., Wall, R. J., Torrie, L. S., Zander-Dinse, D., Tinti, M., Brand, S., Stojanovski, L., Manthri, S., Hallyburton, I., Zuccotto, F., Wyatt, P. G., De Rycker, M., Horn, D., Ferguson, M. A. J., Clos, J., Read, K. D., Fairlamb, A. H., ... Wyllie, S. (2019). Pharmacological Validation of N-Myristoyltransferase as a Drug Target in *Leishmania donovani*. *ACS Infectious Diseases*, 5(1), 111–122. <https://doi.org/10.1021/acsinfecdis.8b00226>
- Daina, A., Michielin, O., & Zoete, V. (2017). SwissADME : a free web tool to evaluate pharmacokinetics , drug-likeness and medicinal chemistry friendliness of small molecules. *Nature Publishing Group, January*, 1–13. <https://doi.org/10.1038/srep42717>
- Dardé, M.-L., Fougère, É., & Buxeraud, J. (2018). Les médicaments de la leishmaniose. *Actualités Pharmaceutiques*, 57(581, Supplement), 18–21. <https://doi.org/10.1016/j.actpha.2018.09.023>
- Dawkins, M., Lin, Z., Cohen, C., Mikkilineni, S., Shakil, F., & Tewari, V. (2023). A Rare Case of Visceral Leishmaniasis Diagnosed by Endoscopy in an Anemic Patient With HIV/AIDS. *ACG Case Reports Journal*, 10(7), e01108. <https://doi.org/10.14309/crj.0000000000001108>
- Dong, J., Wang, N. N., Yao, Z. J., Zhang, L., Cheng, Y., Ouyang, D., Lu, A. P., & Cao, D. S. (2018). Admetlab: A platform for systematic ADMET evaluation based on a comprehensively collected ADMET database. *Journal of Cheminformatics*, 10(1), 1–12. <https://doi.org/10.1186/s13321-018-0283-x>
- El-Mousallamy, A. M. D., Hawas, U. W., & Hussein, S. A. M. (2000). Teucrol, a decarboxyrosmarinic acid and its 4'-O-triglycoside, teucroside from *Teucrium pilosum*. *Phytochemistry*, 55(8), 927–931. [https://doi.org/10.1016/S0031-9422\(00\)00218-1](https://doi.org/10.1016/S0031-9422(00)00218-1)
- Flores Martinez, K. E., Blozies, C. S., Bolino, M. J., Henrick, B. M., & Frese, S. A. (2024). Hemp hull fiber and two constituent compounds, N-trans-caffeoyltyramine and N-trans-feruloyltyramine, shape the human gut microbiome in vitro. *Food Chemistry: X*, 23(May), 101611. <https://doi.org/10.1016/j.fochx.2024.101611>
- Fu, L., Shi, S., Yi, J., Wang, N., He, Y., Wu, Z., Peng, J., Deng, Y., Wang, W., Wu, C., Lyu, A., Zeng, X., Zhao, W., Hou, T., & Cao, D. (2024). ADMETlab 3.0: an updated comprehensive online ADMET prediction platform enhanced with broader coverage, improved performance, API functionality and decision support. *Nucleic Acids Research*, 52(W1), W422–W431. <https://doi.org/10.1093/nar/gkac236>
- Guendouze, A., Mokrani, E. H., Benslama, O., & Lekmine, S. (2024). Exploring the Potential of Avenanthramides and their Analogues as α -Glucosidase Inhibitors for Type 2 Diabetes Treatment Utilizing Virtual Screening, Molecular Dynamics, and Drug-likeness Predictions. *Letters in Drug Design & Discovery*, 21, 3858–3871. <https://doi.org/10.2174/0115701808306787240709073814>
- Jain, S., Madjou, S., Virrey, F., Jain, S., Madjou, S., & Virrey, F. (2023). Global leishmaniasis surveillance updates 2023 : 3 years of the NTD road map Surveillance mondiale de la leishmaniose , 2023 : la feuille de route pour les MTN a 3 ans.
- Kato, H. (2025). Epidemiology of Leishmaniasis: Risk factors for its pathology and infection. *Parasitology International*, 105, 102999. <https://doi.org/10.1016/j.parint.2024.102999>
- Kavouris, J. A. (2014). N-Myristoyltransferase inhibition as a tool for antileishmanial drug discovery: Use in high-throughput, de novo, and piggyback strategies for drug development. UNIVERSITY OF PITTSBURGH Dietrich.
- Killick-Kendrick, R. (2013). The race to discover the insect vector of kala-azar: A great saga of tropical medicine 1903-1942. *Bulletin de La Societe de Pathologie Exotique*, 106(2), 131–137. <https://doi.org/10.1007/s13149-013-0285-x>
- Krüger, T., & Engstler, M. (2015). Flagellar motility in eukaryotic human parasites. *Seminars in Cell and Developmental Biology*. <https://doi.org/10.1016/j.semedb.2015.10.034>

- Kim, S., Chen, J., Cheng, T., Gindulyte, A., He, J., He, S., Li, Q., Shoemaker, B. A., Thiessen, P. A., Yu, B., Zaslavsky, L., Zhang, J., & Bolton, E. E. (2025). *PubChem 2025 update: expanding the integrated chemical database to support biomedical research*. *Nucleic Acids Research*, 53(D1), D1516–D1525. <https://doi.org/10.1093/nar/gkac1059>
- Le, J. (2022). Absorption des médicaments. *Le Manuel Msd*. <https://www.msdmanuals.com/fr/professional/pharmacologieclinique/pharmacocinétique/absorption-des-médicaments>
- Lipinski, C. A., Lombardo, F., Dominy, B. W., & Feeney, P. J. (2012). Experimental and computational approaches to estimate solubility and permeability in drug discovery and development settings. *Advanced Drug Delivery Reviews*, 64(SUPPL.), 4–17. <https://doi.org/10.1016/j.addr.2012.09.019>
- Li, B., Liu, S., Fang, S., Chen, Y., & Hu, W. (2019). *Progress in molecular docking and molecular dynamics simulation*. *Journal of Comparative Chemistry*, 3(1), 1–10. <https://doi.org/10.12677/CC.2019.31001>
- Louzir, H., Aoun, K., Späth, G. F., Laouini, D., Prina, E., Victoir, K., & Bouratbine, A. (2013). *Leishmania epidemiology, diagnosis, chemotherapy and vaccination approaches in the international network of Pasteur Institutes*. *Médecine/Sciences*, 29(12), 1151–1160. <https://doi.org/10.1051/medsci/20132912020>
- Lechevallier, M., Vidal, V., Guyot, M., & Boudier, A. (2024). *Les jonctions cellulaires : structure, fonction et implication dans les pathologies humaines*. *Médecine/Sciences*, 40(2), 105–112. <https://doi.org/10.1051/medsci/2024006>
- Madia, V. N., Ialongo, D., Patacchini, E., Exertier, C., Antonelli, L., Colotti, G., Messori, A., Tudino, V., Saccoliti, F., Scipione, L., Ilari, A., Costi, R., & Di Santo, R. (2023). Inhibition of *Leishmania infantum* Trypanothione Reductase by New Aminopropanone Derivatives Interacting with the NADPH Binding Site. *Molecules*, 28(1). <https://doi.org/10.3390/molecules28010338>
- Madusanka, R. K., Silva, H., & Karunaweera, N. D. (2022). Treatment of Cutaneous Leishmaniasis and Insights into Species-Specific Responses: A Narrative Review. *Infectious Diseases and Therapy*, 11(2), 695–711. <https://doi.org/10.1007/s40121-022-00602-2>
- Makarani, N., Bharadava, K., Kaushik, A., Dave, A., Gangawane, A. K., & Kaushal, R. S. (2025). Leishmaniasis: A multifaceted approach to diagnosis, maladies, drug repurposing and way forward. *Microbe (Netherlands)*, 6(January), 100239. <https://doi.org/10.1016/j.microb.2025.100239>
- Martin, D. D. O., Beauchamp, E., & Berthiaume, L. G. (2011). Post-translational myristoylation: Fat matters in cellular life and death. *Biochimie*, 93(1), 18–31. <https://doi.org/10.1016/j.biochi.2010.10.018>
- McKenna, S. E. (2015). Functional and structural studies of the hydrophilic acylated surface proteins from *Leishmania donovani* (Doctoral thesis, University of York, Department of Chemistry).
- Mokni, M. (2019). Cutaneous leishmaniasis. *Annales de Dermatologie et de Venereologie*, 146(3), 232–246. <https://doi.org/10.1016/j.annder.2019.02.002>
- Mokrani, E. H., Abdelaziz, A., Akakba, N., Teniou, S., Demmak, R. G., & Bensegueni, A. (2022). Molecular Docking and Drug-likeness Prediction of New Potent Tubulin Colchicine Binding Site Inhibitors for Potential Antitumor Drug. *Cumhuriyet Science Journal*, 43(3), 398–403. <https://doi.org/10.17776/csj.1063966>
- Organisation mondiale de la Santé. (2023, 12 janvier). *Leishmaniasis* [Fiche d'information]. Consulté le 20 mars 2025, sur <https://www.who.int/fr/news-room/fact-sheets/detail/leishmaniasi>
- Orabi, M. A. A., Alshahrani, M. M., Sayed, A. M., Abouelela, M. E., Shaaban, K. A., & Abdel-Sattar, E. S. (2023). Identification of Potential *Leishmania* N-Myristoyltransferase Inhibitors from *Withania somnifera* (L.) Dunal: A Molecular Docking and Molecular Dynamics Investigation. *Metabolites*, 13(1). <https://doi.org/10.3390/metabo13010093>
- Oryan, A. (2015). Plant-derived compounds in treatment of leishmaniasis. *Iranian Journal of Veterinary Research*, 16(1), 1–19.

- Oryan, A., & Akbari, M. (2016). Worldwide risk factors in leishmaniasis. *Asian Pacific Journal of Tropical Medicine*, 9(10), 925–932. <https://doi.org/10.1016/j.apjtm.2016.06.021>.
- Olatunji, O. J., Chen, H., & Zhou, Y. (2017). Neuroprotective effect of trans-N-caffeoyltyramine from *Lycium chinense* against H₂O₂ induced cytotoxicity in PC12 cells by attenuating oxidative stress. *Biomedicine and Pharmacotherapy*, 93, 895–902. <https://doi.org/10.1016/j.biopha.2017.07.013>
- Organisation mondiale de la Santé. (2024). *Leishmaniose*. <https://www.who.int/fr/news-room/fact-sheets/detail/leishmaniasis>
- Organisation mondiale de la Santé. (2020). *Leishmaniasis country profiles: Algeria*. Retrieved from <https://www.who.int/leishmaniasis/burden/Algeria/en/>
- Paape, D., Bell, A. S., Heal, W. P., Hutton, J. A., Leatherbarrow, R. J., Tate, E. W., & Smith, D. F. (2014). Using a Non-Image-Based Medium-Throughput Assay for Screening Compounds Targeting N-myristoylation in Intracellular *Leishmania* Amastigotes. *PLoS Neglected Tropical Diseases*, 8(12). <https://doi.org/10.1371/journal.pntd.0003363>
- Paape, D., Prendergast, C. T., Price, H. P., Doehl, J. S. P., & Smith, D. F. (2020). Genetic validation of *Leishmania* genes essential for amastigote survival in vivo using N-myristoyltransferase as a model. *Parasites and Vectors*, 13(1), 1–16. <https://doi.org/10.1186/s13071-020-3999-1>
- Pasquier, G., & Ravel, C. (2023). Les leishmanioses au laboratoire. *Revue Francophone Des Laboratoires*, 2023(556), 26–33. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S1773-035X\(23\)00212-5](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S1773-035X(23)00212-5)
- Prudhomme, J. (2015). D. par l' U. de M. P. au sein de l' école doctorale C. E. de l' unité de recherche M. S. : B.-S. P. par J. P. P. et écosystèmes : impact des facteurs biotiques et. (2015). Délivré par l' Université de Montpellier Préparée au sein de l' école doctorale CBS2 Et de l' unité de recherche MIVEGEC Spécialité : Biologie-Santé Présentée par Jorian PRUDHOMME Phlébotomes et écosystèmes : impact des facteurs biotiques et abiotiques. l'Université de Montpellier.
- Pawar, S. S., & Rohane, S. H. (2021). Review on Discovery Studio: An important Tool for Molecular Docking. *Asian Journal Of Research in Chemistry*, 14(1), 1–3. <https://doi.org/10.5958/0974-4150.2021.00014.6>
- Parente Rocha, S. I., Fernandes, V. B., Barbosa da Silva, W. M., Frota, L. S., Garcia, A. R., Schulze Spíndola, F. F., Alexandre Roberto, C. H., Rodrigues de Souza, V. M., Antonio da Franca Rodrigues, K., de Almeida Rodrigues, I., Marinho, E. S., Marinho, M. M., Vila-Nova, N. S., & Maia de Moraes, S. (2025, janvier 19). *Antileishmanial activity of hesperetin on Leishmania donovani, in vitro and in silico inhibition of acetylcholinesterase and investigation of the targets sterol C-24 reductase and N-myristoyltransferase*. *Experimental Parasitology*, Article 108903. Advance online publication. <https://doi.org/10.1016/j.exppara.2025.108903>
- Ponvert, C. (2006). Valeurs diagnostique et prédictive des tests cutanés aux médicaments et substances biologiques. *Revue Française d'Allergologie et d'Immunologie Clinique*, 46(1), 14–28. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.allerg.2005.11.002>
- Rackham, M. D., Yu, Z., Brannigan, J. A., Heal, W. P., Paape, D., Barker, K. V., Wilkinson, A. J., Smith, D. F., Leatherbarrow, R. J., & Tate, E. W. (2015). Discovery of high affinity inhibitors of *Leishmania donovani* N-myristoyltransferase. *MedChemComm*, 6(10), 1761–1766. <https://doi.org/10.1039/c5md00241a>
- Ramos, K. S., Reyes-Reyes, E., & Nanez, A. (2018). 8.02 - Overview of Receptor Systems☆. In C. A. McQueen (Ed.), *Comprehensive Toxicology (Third Edition)* (Third Edit, pp. 8–17). Elsevier. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/B978-0-12-801238-3.01906-1>
- Rarey, M., Kramer, B., Lengauer, T., & Klebe, G. (1996). A fast flexible docking method using an incremental construction algorithm. *Journal of Molecular Biology*, 261(3), 470–489. <https://doi.org/10.1006/jmbi.1996.0477>
- Riviere, F., Riviere, F., & De, E. (2022). Extension de l' identification des protéines myristoylées chez les Eucaryotes To cite this version : HAL Id : tel-03794051 Extension de l' identification des protéines

myristoylées chez les Eucaryotes.

- Rudnitskaya, A., Torok, B., & Torok, M. (2010). Molecular docking of enzyme inhibitors: A computational tool for structure-based drug design. *Biochemistry and Molecular Biology Education : A Bimonthly Publication of the International Union of Biochemistry and Molecular Biology*, 38, 261–265. <https://doi.org/10.1002/bmb.20392>
- Ruiz-Postigo, J. A., Jain, S., Madjou, S., Agua, J. F. V., Maia-Elkhoury, A. N., Valadas, S., Warusavithana, S., Osman, M., Yajima, A., Zaw Lin, & Beshah, A. (2023). Global leishmaniasis surveillance, 2022: assessing trends over the past 10 years. *Weekly Epidemiological Record, WHO*, 471–487. <https://www.who.int/publications/i/item/who-wer9840-471-487>
- Shital, S., Madan, E., Selvapandiyan, A., & Kumar Ganguly, N. (2024). An update on recombinant vaccines against leishmaniasis. *The Indian Journal of Medical Research*, 160(34), 323–337. https://doi.org/10.25259/IJMR_1040_2024
- Siala, E., Bouratbine, A., & Aoun, K. (2022). La leishmaniose viscérale méditerranéenne : Actualités du diagnostic biologique. *La Tunisie Medicale-2022*, 100(01), 13–26.
- Spyrakakis, F., & Cavasotto, C. N. (2015). Open challenges in structure-based virtual screening: Receptor modeling, target flexibility consideration and active site water molecules description. *Archives of Biochemistry and Biophysics*, 583, 105–119. <https://doi.org/10.1016/j.abb.2015.08.002>
- Stefaniu, A. (2019). Introductory Chapter Molecular Docking and Molecular Dynamics Techniques to Achieve Rational Drug Design (p. <https://www.intechopen.com/online-first/introducto>). <https://doi.org/10.5772/intechopen.84200>
- Steverding, D. (2017). The history of leishmaniasis. *Parasites and Vectors*, 10(1), 1–10. <https://doi.org/10.1186/s13071-017-2028-5>
- Tewari, D., Rawat, K., Bisht, A., Almoyad, M. A. A., Wahab, S., Chandra, S., & Pande, V. (2023). Screening of potential inhibitors of *Leishmania* major N-myristoyltransferase from *Azadirachta indica* phytochemicals for leishmaniasis drug discovery by molecular docking, molecular dynamics simulation and density functional theory methods. *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*, 42(24), 13953–13970. <https://doi.org/10.1080/07391102.2023.2279281>
- Veber, D. F., Johnson, S. R., Cheng, H. Y., Smith, B. R., Ward, K. W., & Kopple, K. D. (2002). Molecular properties that influence the oral bioavailability of drug candidates. *Journal of Medicinal Chemistry*, 45(12), 2615–2623. <https://doi.org/10.1021/jm020017n>
- Verma, G., Nayak, S., Gupta, N., Bisht, R., & Tripathy, S. (2022). Review on Leishmaniasis. *Asian Journal of Research in Infectious Diseases*, 49–54. <https://doi.org/10.9734/ajrid/2022/v10i230288>
- Wang, S., Sun, H., Liu, H., Li, D., Li, Y., & Hou, T. (2016). ADMET Evaluation in Drug Discovery. 16. Predicting hERG Blockers by Combining Multiple Pharmacophores and Machine Learning Approaches. *Molecular Pharmaceutics*, 13(8), 2855–2866. <https://doi.org/10.1021/acs.molpharmaceut.6b00471>
- Xiong, G., Wu, Z., Yi, J., Fu, L., Yang, Z., Hsieh, C., Yin, M., Zeng, X., Wu, C., Lu, A., Chen, X., Hou, T., & Cao, D. (2021). ADMETlab 2.0: An integrated online platform for accurate and comprehensive predictions of ADMET properties. *Nucleic Acids Research*, 49(W1), W5–W14. <https://doi.org/10.1093/nar/gkab255>
- Yang, N., Matthew, M. A., & Yao, C. (2023). Roles of Cysteine Proteases in Biology and Pathogenesis of Parasites.
- Zeiger, E. (2019). The test that changed the world: The Ames test and the regulation of chemicals. *Mutation Research. Genetic Toxicology and Environmental Mutagenesis*, 841, 43–48.
- Zhao, C., & Ma, S. (2014). Recent Advances in The Discovery of N-Myristoyltransferase Inhibitors. *ChemMedChem*, 9(11), 2425–2437. <https://doi.org/10.1002/cmdc.201402174>



Annexe 1

Tableau 1 : Liste des 100 complexes utilisés pour tester la fiabilité de FlexX avec leurs valeurs de RMSD

Code PDB	Code ligand	RMSD (Å)	Code PDB	Code ligand	RMSD (Å)	Code PDB	Code ligand	RMSD (Å)	Code PDB	Code ligand	RMSD (Å)
1AX9	EDR	0.5188	1AQ1	STU	5.1212	1BNQ	AL4	1.0365	1IL9	MOG	0.6956
1CEB	AMH	0.9606	2ABI	1CA	0.4501	1E7W	MTX	7.0404	2ACE	ACH	6.3359
1EKO	I84	3.8831	2AI7	SB7	1.188	1FT7	PLU	0.8764	2BAN	357	2.1227
1G2A	BB2	1.1704	2D0T	PIM	1.4113	1G36	R11	1.139	2EVC	FC3	0.7327
1GQS	SAF	4.3073	2EW6	Y13	1.0522	1I33	TND	1.2535	2R8Q	IBM	1.3161
1LOX	RS7	0.7642	2FS4	PZ1	3.2624	1M17	AQ4	7.7277	2FS9	C4A	13.8384
1N7I	LY1	0.8777	2I4Q	UA4	1.0511	1RBP	RTL	0.7946	2IL2	LIX	1.0023
1RIW	OSC	6.9875	2IVU	ZD6	0.6466	1N8Q	DHB	1.0784	2JBj	G88	0.8012
1IDA	0PO	5.5856	2JFH	LK1	2.2977	1S17	GNR	0.355	2Q95	A05	0.6244
1VRU	AAP	0.5187	2QJR	PZF	0.5651	1VYZ	N5B	0.7108	2R4B	GW7	0.8642
1X7J	GEN	7.0352	2VQ6	FP1	1.1147	1K22	MEL	0.7366	2WON	ZZE	1.051
1YW8	A75	2.7382	2WSA	646	0.6213	1HPX	KNI	3.5894	2UZO	C62	0.5860
1ZVX	FIN	1.3053	3C6T	M14	0.7986	3C6U	M22	1.0347	4O13	2P1	5.3454
3HY7	97	0.8858	4O1D	DGB	2.4697	3KWF	B1Q	0.6092	4RYC	3ZK	3.4779
3L4T	BJ1	2.8360	4XUD	43H	0.4691	3l4w	MIG	0.7412	5A28	TUQ	1.1089
3NT1	NPS	0.5433	5AAA	VGH	0.4853	3PGH	FLP	0.6826	5AAB	VGH	2.7708
3QTQ	X35	0.4191	5F1V	3VN	7.1968	3R01	UNE	0.6262	5HQ0	LZ9	1.2393
4CQ0	SXS	2.1452	5IX0	6EZ	0.6331	4DLI	IRG	0.4581	5I38	KOJ	1.1613
4EBV	0O7	2.8705	5SZ7	72H	1.6419	4CGI	A6K	0.5998	5TFT	P6U	1.2780
4EY7	E20	0.7873	5w80	9XL	0.4390	4FNY	I3K	0.6436	6B2C	C9Y	0.5694
4GJC	0mj	2.8981	6RXC	KMK	6.7642	4HLM	16S	0.4836	6EWE	C0W	0.4101
4HOE	18G	0.6213	6AAH	9T6	1.9439	4NGM	JB7	0.8565	6MD7	JE1	1.0636
4IVS	VSI	7.8678	6PEB	OE4	1.5254	4JPE	1M7	0.4460	6PZR	P7D	1.2168
4K9H	1QU	1.1568	6SUK	FT8	1.4339	4M0E	1YL	0.5322	6OHS	MJY	2.3667
4MP7	PFT	0.2794	6EU5	BXN	4.9907	4MPC	PV2	0.2688	6THZ	NB5	3.0982

Annexe 2

Tableau 2 : Résultats de criblage virtuel – Classement par ligne selon leur score

Molécule	Score	Molécule	Score	Molécule	Score
hyrtioerectine A_001	-37.2915	orthidine A_001	-37.1495	TUQ_1002_001	-36.7643
globoidnan A_001	-35.7078	10'-hydroxyusambarensine_001	-33.981	2',4'-dihydroxychalcone-(4-O-5''')-4'',2''',4'''-trihydroxychalcone_001	-33.5552
orthidine D_001	-33.4262	knipholone_001	-33.0479	globoidnan A_001	-32.9659
gaboroquinone B_001	-32.8793	naringenin 7-glucoside_001	-31.6794	6',8-O-dimethylknipholone_001	-31.6626
11-methoxylettowianthine_001	-31.144	valoneic dilactone dioxine_001	-30.9192	liriodenine_001	-30.6891
N1,N10-di-dihydrocaffeoylspermidine_001	-30.6398	isosilybin B_001	-30.4037	flavomannin D_001	-29.2508
teucrol_001	-29.1138	alternariol 5-O-sulphate_001	-29.0434	isoknipholone_001	-28.9972
2',4,4'-trihydroxy-3'-methoxychalcone_001	-28.9117	N-E-caffeoyl tyramine_001	-28.7406	5',6'-dihydroxy- 2'-(4-hydroxy-2-oxo-2H-pyran-6-yl)-5-[(E)-2-(4-hydroxy-phenyl) ethenyl]-3H-spiro[furan-2,1'-inden]-3-one_001	-28.4563
(2S,2''S)-7,7''-di-O-methyltetrahydroamentoflavone_001	-28.4428	(+)-silychristin_001	-28.3791	tuberculatol_001	-28.3459
N-propionylaplysinopsin_001	-28.3355	asphodaside C_001	-28.299	methylpenicilline_001	-28.2912
isosilybin A_001	-28.116	epsilon-viniferin_001	-28.1123	isorhamnetin 3,4'-disulphate_001	-28.0824
subereamine B_001	-27.982	caulindole A_001	-27.9689	matairesinol_001	-27.8967
aloesaponol I-6-O-glucoside_001	-27.8022	penicilline_001	-27.7879	liriodendrin_001	-27.7449
(-)-silychristin_001	-27.8873	aloesaponol I-6-O-glucoside_001	-27.8022	penicilline_001	-27.7879
liriodendrin_001	-27.7449	6-hydroxyjusticidin A_001	-27.726	7,3'-dimethoxy-4',5'-methylenedioxyisoflavone_001	-27.7237
(-)-shonanin_001	-27.6998	dalbergin_001	-27.618	3,6-dihydroxy-1,7-dimethyl-9-methoxyphenanthrene_001	-27.561
2-hydroxypterocarpin_001	-27.5335	isouvarinol_001	-27.5311	chamuvartin_001	-27.503
isoscuteallarein 7-O-beta-xylopyranoside_001	-27.4886	3-O-beta-arabinopyranosyl-(+)-taxifolin_001	-27.4743	narciclasine-4-O-beta-D-glucopyranoside_001	-27.4731
6'-O-coumaroyl-1'-O-[2-(3,4-dihydroxyphenyl)ethyl]-beta-D-glucopyranoside_001	-27.4012	chamaejasmin_001	-27.3366	3-(1-(2,4-dihydroxyphenyl)-3,3-bis(4-hydroxyphenyl)-1-oxopropan-2-yl)-7-methoxy-4H-chromone-4-one_001	-27.3243
10-hydroxy-10-(chrysophanol-7'-yl)chrysophanol anthrone_001	-27.3173	knipholone anthrone_001	-27.2989	butein_001	-27.2945
quercetin-3-O-beta-(6''-galloyl)galactoside_001	-27.2524	patuletin 3-O-beta-D-galactoside_001	-27.2496	hyrtioerectine B_001	-27.1756
dehydrotrigallic acid_001	-27.1184	myricetin-3-O-rhamnoside_001	-27.1092	lyscamine_001	-27.0532
naamidine A_001	-27.0449	kaempferide 3-O-(2''-O-galloylrhamnoside)_001	-26.9505	7,8-dimethoxy-5-methyl-2,3-methylenedioxybenzo[c]-phenanthridin-6(5H)-one_001	-26.9033
asphodelin_001	-26.8503	DDD85646 (Standard)	-26.8487	isolarrien_001	-26.7895
(-)-epipinoresinol_001	-26.6713	quercetin 5-glucoside_001	-26.6628	aloe-emodin 11-O-rhamnoside_001	-26.6161
abyssinin III_001	-26.5278	apigenin 7-O-[2-O-beta-glucopyranuronosyl-lactate]_001	-26.5143	wikstromol_001	-26.5119
5,7,3'-trihydroxy-4'-methoxy-5'-(3-methylbut-2-enyl)isoflavone_001	-26.3967	nigrosphaerin A_001	-26.3526	2,7-dihydroxy-1,8-dimethoxypyrene_001	-26.3466
lotusine D_001	-26.2749	demethoxyexcelsin_001	-26.2064	uvarinol_001	-26.1753
tectochrysin_001	-26.136	(◆)-enterolactone_001	-26.1294	(-)-3,4-divanillyltetrahydrofuran_001	-26.1008
knipholone cyclooxanthrone_001	-26.0609	lanuginosine_001	-26.058	3,3'-di-O-methyl-4-O-(beta-D-xylopyranosyl) ellagic acid_001	-26.0444

2'-glucosyl-4'-hydroxy-6'-methoxydihydrochalcone_001	-25.9739	3-(2',3'-dihydroxy-3'-methylbutyl)-5-(3''-methylcrotonoyl) indole_001	-25.9169	thymelol_001	-25.8723
sigmoidin B_001	-25.8097	hyperin_001	-25.7917	pinobanksin 3-(E)-caffeate_001	-25.7682
quercetin 3-O-pentoside_001	-25.7138	7-O-lactoyl-apigenin_001	-25.6992	apigenin 7-O-beta-neohesperdoside_001	-25.6777
butyrolactone I_001	-25.5274	citrinamide A_001	-25.5204	isoscutellarein_001	-25.5181
deguelin_001	-25.5105	2-debromostevensine_001	-25.5052	busseihydroquinone C_001	-25.4906
penilactone_001	-25.4234	hoslundin_001	-25.3956	decarboxy dehydrodigallic acid_001	-25.3937
kaempferol 3-O-alpha-arabinoside_001	-25.3571	5-hydroxy-6,4'-dimethoxyisoflavone 7-O-glucoside_001	-25.3453	knipholone cyclooxanthrone_001	-25.3436
trans-N-feruloyltyramine_001	-25.2834	beta-D-glucopyranosyl 4-O-beta-D-glucopyranosylcaffeate_001	-25.2792	acerosin_001	-25.2702
3-[6-(3-methyl-but-2-enyl)-1H-indolyl]-6-(3-methyl-but-2-enyl)-1H-indole_001	-25.2576	(+)-balanophonin_001	-25.2499	caryatin-3'-sulphate_001	-25.2474
4,4'-dihydroxypulvinone_001	-25.2168	4'-ethyl-4-methyl-2,3',5',6-tetrahydroxy[1,1'-biphenyl]-4,4'-dicarboxylate_001	-25.1745	pinoresinol_001	-25.1562
diphyllin_001	-25.0595	caulindole B_001	-25.0508	hypolaetin 8-O-glucuronide_001	-25.0221
3-O-alpha-rhamnopyranosyl(1?6)-beta-galactopyranoside-7-O-alpha-rhamnopyranoside 6-hydroxykaempferol 6-methyl ether_001	-24.9363	1alpha-hydroxypinoresinol_001	-24.9123	myricetin-3-O-alpha-arabinofuranoside_001	-24.9069
rautandiol B_001	-24.8702	alternariol 5-O-methyl ether_001	-24.8667	alternariol_001	-24.8639
cyphostemmin A_001	-24.8423	maculosidine_001	-24.8403	asphodioside B_001	-24.8348
microstigmin A_001	-24.8276	luteolin 3'-glucoside_001	-24.8173	3-O-methyl-4-(alpha-L-rhamnopyranosyl)ellagic acid_001	-24.799
knipholone cyclooxanthrone_001	-24.7427	rhamnetin_001	-24.7421	3-debromolatondue A_001	-24.7305
◆-paulownia_001	-24.7188	seco-anthraquinone_001	-24.7122	sarcolobine_001	-24.7093
6H-indolo[3,2,1-de][1,5]naphthyridin-6-one_001	-24.6707	latondue B methyl ester_001	-24.6664	isobavachalcone_001	-24.6382
emodic acid_001	-24.6003	edulein_001	-24.5725	3-hydroxymollugin_001	-24.5656
isoscutellarein 8-O-glucuronide_001	-24.5397	(?)galocatechin_001	-24.5382	arugosin F_001	-24.5364
(+)-neo-olivil_001	-24.5225	5-O-methylhoslundin_001	-24.4821	aloesaponarin II_001	-24.465
quercetin 3-O-glucuronide_001	-24.4535	7a-O-methyldeguelol_001	-24.4534	miquelianin_001	-24.4287
austramide_001	-24.3895	gnetin C_001	-24.3874	7a-O-methyl-12a-hydroxydeguelol_001	-24.3775
pinoresinol 4-sulphate_001	-24.3329	isorhamnetin 3,7,4'-trisulphate_001	-24.3299	trachelogenin_001	-24.3142
catechin gallate_001	-24.2693	tecleanthine_001	-24.2401	1-O-methylemodin_001	-24.2361
quercetagenin 3,7-dimethyl ether_001	-24.2311	quercetagenin 3,7-dimethyl ether_001	-24.2311	quercetagenin 3,7-dimethyl ether_001	-24.2311
quercetin 3-O-glucoside_001	-24.204	rhamnocitrin 3-O-beta-glucopyranoside_001	-24.2004	kaempferol-3-glucuronide_001	-24.1999
8-epi-xanthatin-1beta,5beta-epoxide_001	-24.1812	8-epi-xanthatin-1beta,5beta-epoxide_001	-24.1812	8-epi-xanthatin-1beta,5beta-epoxide_001	-24.1812
quercetin_001	-24.161	kaempferol 3,7-disulphate_001	-24.157	kaempferol 3,7-disulphate_001	-24.157
Molécule 1 - Nom	Molécule 1 - Score	Molécule 2 - Nom	Molécule 2 - Score	Molécule 3 - Nom	Molécule 3 - Score
arctigenin_001	-24.1354	arctigenin_001	-24.1354	arctigenin_001	-24.1354
2',4'-dihydroxy-6'-methoxydihydrochalcone_001	-24.0908	pendulone_001	-24.0622	(+)-4'-methylgalocatechin 3'-O-beta-D-glucopyranoside_001	-24.0579
(148) neorautanone_001	-24.0431	5,7-dihydroxy-3-(hydroxy-phenyl-methyl)-6-methoxy-chroman-4-one_001	-24.0367	5-prenylbutein_001	-24.0344
demethoxymatteucinol_001	-24.0005	aloenin aglycone_001	-23.9985	manniflavanone_001	-23.9905
(S)-4-methoxy-7-phenyl-7,8-dihydro[1,3]dioxolo[4,5-g]isochromen-5-one_001	-23.9767	rhamnetin 3-O-glucoside_001	-23.9599	neorautenol_001	-23.959
SB 236050_001	-23.9421	diphenylpentanoid (E)-1,5-bis(4-hydroxyphenyl)-pent-1-en-3-one_001	-23.931	2',4'-dihydroxy-3',6'-dimethoxychalcone_001	-23.9252

quercetin 3-arabinoside_001	-23.9067	isoeleutherol_001	-23.8881	iristectorigenin B 4'-O-[beta-D-glucopyranosyl-(1''?6'')-beta-D-glucopyranoside]_001	-23.8701
quercetin 3-O-xyloside_001	-23.8219	5,7,3'-trihydroxy-4'-methoxy-5'-(3-hydroxy-3-methylbuten-1-yl)isoflavanone_001	-23.8189	(-)-arctigenin 4'-glucoside_001	-23.8139
6-bromo-N-propionylaplysinsinopsin_001	-23.7971	hippaccine_001	-23.7943	5,3,4'-trihydroxy-7-methoxyflavanone_001	-23.7866
7-O-methyluteolin_001	-23.7678	2alpha-acetyloxy-4beta-hydroxy-6alpha-p-hydroxybenzoyloxy-10beta-benzoyloxy-dauc-8-ene_001	-23.7528	rutamontine_001	-23.7511
hierochin C_001	-23.7292	piloin 6-C-beta-D-glucoside_001	-23.7275	isoscuteallarein 7-O-beta-xylopyranoside-2''-O-sulphate_001	-23.7168
sonchuionoside A_001	-23.7115	eryvarin L_001	-23.7043	(◆)-enterofuran_001	-23.7006
5,7,4'-trihydroxy-3,8,3',5'-tetramethoxyflavone_001	-23.6858	5,6-dihydranitidine_001	-23.6612	aloin B_001	-23.6589
pallidol_001	-23.6521	dehydrodigallic acid_001	-23.6505	(17) (-)-secoisolariciresinol_001	-23.6427
onopordin_001	-23.5855	2',6'-dihydroxy-3',4'-dimethoxychalcone_001	-23.5608	5,7,4'-trihydroxy-3,3'-dimethoxyflavone_001	-23.5588
12-N-methyl-2-debromostevensine_001	-23.5338	N-formyl-7-hydroxyglaucine_001	-23.5317	apigenin 7-glucoside_001	-23.5233
isoarnottinin-4'-O-beta-D-glucoside_001	-23.5094	maculine_001	-23.5066	burttinone_001	-23.505
quercetin 3,7-disulphate_001	-23.4883	kaempferol-3-O-beta-D-glucoside_001	-23.488	rosmarinic acid_001	-23.4679
apigenin 4'-glucoside_001	-23.4421	trichodermamide C_001	-23.4402	(181) (-)-4'-methylepigallocatechin_001	-23.4374
azaleatin_001	-23.3927	pinobanksin 3-acetate_001	-23.3797	eriodictyol 7-methyl ether_001	-23.3703
6-methoxydiphyllin_001	-23.3578	aloesaponol III_001	-23.354	uvaretin_001	-23.3505
Aspergillus diketopiperazine 6_001	-23.3151	3,5,3'-trihydroxy-7,4'-dimethoxyflavone_001	-23.3089	aurasperone B_001	-23.3072
(7E,8◆R)-7,8-didehydroarctigenin_001	-23.2927	5-hydroxy-6,8,8-trimethyl-2-phenylchromene-4,7-dione_001	-23.2509	herbalbin_001	-23.2483
7-hydroxyaloe-emodin_001	-23.2259	medicarpan_001	-23.2239	casimiroin_001	-23.2194
dihydroisocoumarin glucoside_001	-23.2007	amentoflavone_001	-23.1981	3-[3-hydroxy-4-(3-methyl-but-2-enyl)-phenyl]-5-(4-hydroxybenzyl)-4-methyl-dihydrofuran-2(3H)-one_001	-23.1956
2(S),3',4'-dihydroxy-7-methoxyflavan_001	-23.1814	rhein_001	-23.1722	5'-formylpratensein_001	-23.169
5,7,2'-trihydroxyflavone_001	-23.1645	isorhamnetin_001	-23.162	6-O-trans-caffeoyl-beta-D-glucopyranoside_001	-23.1589
carviolin_001	-23.1346	lawinal_001	-23.1292	7,3'-O-dimethylquercetin_001	-23.1178
forsythiaside_001	-23.0971	1-methoxy-3-indolylmethyl glucosinolate_001	-23.0588	3'-(2-hydroxy-3-methylbuten-3-yl)-biochanin A_001	-23.0431
rubiadin_001	-23.0169	5-hydroxyaspastipuline_001	-23.0096	isoscuteallarein 7-[6'''-acetylallosyl-(1→2)glucoside_001	-23.0089
10-acetonylkniphofone cyclooxanthrone_001	-23.0031	wentiquinone B_001	-22.994	feruloylputrescine_001	-22.9828
5,3',4'-trihydroxy-3,6,7,8-tetramethoxyflavone_001	-22.9724	homobutein_001	-22.9658	sydowinin B_001	-22.9563
uguenenonamide_001	-22.9423	cystodione B_001	-22.9404	pratorimine_001	-22.9282
1-O-caffeoyl-beta-D-glucopyranoside_001	-22.9103	(◆)-5,7,2'-trihydroxy-4'-methoxy-3'-(3''-methylbut-2''-enyl)-isoflavanone_001	-22.9062	5,3'-dihydroxy-3,6,7,4',5'-pentamethoxyflavone_001	-22.9025
lactupicrin_001	-22.886	5,7,2',3''-tetrahydroxy-2'',2''-dimethyldihydropyrano-[5'',6''':3',4']-isoflavanone_001	-22.8824	butyrolactone VI_001	-22.8609
arborinine_001	-22.8427	5,7,2'-trihydroxy-4'-methoxy-5'-(3''-methylbut-2''-enyl) isoflavanone_001	-22.8401	5-methylgenistein 7-O-glucoside_001	-22.8398
barbaloin B_001	-22.826	aloesaponol I_001	-22.8252	8-C-p-hydroxybenzyluteolin_001	-22.8149
4'-epialtenuene_001	-22.8066	5,7-dihydroxy-3-[3-hydroxy-4-methoxy-5[(E)-3-methylbuta-1,3-dienyl]phenyl-1-benzopyran-4-one_001	-22.8036	7-hydroxyaloin-4',6'-O-diacetate_001	-22.7982
methyl ellagic acid_001	-22.7586	nepseudin_001	-22.7576	pituranthoside_001	-22.7466
ungeremine_001	-22.7247	4,8-dimethoxy-7-hydroxy-2-oxo-2H-1-benzopyran-5,6-dicarboxylic acid_001	-22.7079	aloesaponol II-6-methyl ether_001	-22.7039
7-hydroxy-3,3-dimethyl-10-methoxy-3H-benzo[f]chromene-8-carboxylic acid_001	-22.6879	isoethuliacoumarin B_001	-22.6854	isoethuliacoumarin B_001	-22.6854

8-oxoerythraline_001	-22.676	allocryptopine_001	-22.6625	valoneic dilactone acid_001	-22.6611
diuvaretin_001	-22.6479	(3S)-3,7-dihydroxy-8-methoxy-3-(3',4'-methylenedioxybenzyl)chroman-4-one_001	-22.6394	argaminolic C_001	-22.6377
apigenin 7-glucoside_001	-22.6255	3'-(3-methylbut-2-enyl)biochanin A_001	-22.6102	(-) catechin_001	-22.5945
sanguinine_001	-22.5792	ephedrone_001	-22.5489	parvinaphthol A_001	-22.5445
5'-methoxy-3'-(3-methylbut-2-enyl)biochanin A_001	-22.5298	chrysoeriol 7,3'-diglucoside_001	-22.5134	7-methyl-6-methoxytricin_001	-22.5053
ayanin_001	-22.4926	puguenolide_001	-22.4867	1,9-dihydroxy-3-methoxy-2-methylpterocarpan_001	-22.4834
genistein 7-O-malonylglucoside_001	-22.4749	flavone_001	-22.4617	maximaisoflavone-G_001	-22.4549
5,7,3'-trihydroxy-3,8,4',5'-tetramethoxyflavone_001	-22.4348	7-O-methyl-acacetin_001	-22.4285	1alpha,3beta,4beta-trihydroxy-(5alpha,7alpha,11betaH-10alphamethyl)-eudesman-12,6alpha-olide_001	-22.424
myricetin-3-glucoside_001	-22.4169	6'-(3'',4''-dihydroxy cinnamoyl) arbutin_001	-22.4152	caryatin_001	-22.4036
Molécule 1 - Nom	Molécule 1 - Score	Molécule 2 - Nom	Molécule 2 - Score	Molécule 3 - Nom	Molécule 3 - Score
(2E)-4-(5-acetyl-2-hydroxyphenyl)-2-methylbut-2-enal_001	-22.3893	aloin_001	-22.3716	wentiquinone A_001	-22.3612
azaleatin 3-rhamnoside_001	-22.3496	ancistrosectorine_001	-22.3475	chrysoeriol_001	-22.3471
1-hydroxy-5-methoxy-3-methyl-9,10-dihydroanthracene 9,10-dione_001	-22.3145	laccaic acid D-methyl ester_001	-22.3082	glyasperin F_001	-22.308
(+/-)-5-methoxy-7-phenyl-[4-methoxy-2-pyranyl]- 1-(E)-styryl-2-oxabicyclo-[4.2.0]octa-4-en-3-one_001	-22.2886	desmosdomutin_001	-22.2829	luteolin-7,3'-dimethyl ether_001	-22.2768
7-oxo-15-hydroxydehydroabietic acid_001	-22.2566	subereamine A_001	-22.2385	abyssinone II_001	-22.2347
(6aR,11aR)-7,8,9-trimethoxy-3-hydroxypterocarpan_001	-22.2071	3-methoxy-1-methyl-9,10-anthraquinone_001	-22.2027	aloesaponol II_001	-22.1938
lanceolatin A_001	-22.187	1-hydroxy-8-methoxy-3-methylantraquinone_001	-22.1754	5,7-dihydroxy-4'-methoxy-2''-(2'''-hydroxyisopropyl)-dihydrofurano-[4'',5':3',2']-isoflavanone_001	-22.1744
beninine_001	-22.1312	aloinoside_001	-22.1194	5,7-dihydroxy-4'-methoxy3'-(3-methylbut-2-enyl)isoflavone_001	-22.1075
toussaintine B_001	-22.0922	nepetin_001	-22.0709	abyssinone I_001	-22.0587
quercetin 3,7,4'-trisulphate_001	-22.0367	quercetin 3,4'-dimethyl ether_001	-22.0166	galanthindole_001	-22.0141
butyrolactone II_001	-21.9785	asphodelin A 4'-O-beta-D-glucoside_001	-21.9757	apigenin 7-O-beta-D-glucoside_001	-21.9689
nataloe-emodin-8-methyl ester_001	-21.9564	3,5-hexalobine D_001	-21.9538	(S)-flavogallonic acid_001	-21.9501
17-O-acetyl,10-hydroxycorynantheol_001	-21.9137	mangiferin_001	-21.9046	justicidin-A_001	-21.9018
3-O-methylquercetin_001	-21.8712	3-O-methylquercetin_001	-21.8712	3-O-methylquercetin_001	-21.8712
corniculatusin_001	-21.8497	O-methylismine_001	-21.8441	fallacinol_001	-21.8381
epigallocatechin-3-O-gallate_001	-21.8194	biochanin A_001	-21.8148	toussaintine A_001	-21.8104
(4R)-2-(1,2-dihydroxy-2-methylpropyl)-4-ethenyl-2-hydroxy-4,10-dimethyl-2H,3H,4H,5H-pyrano[3,2-c]chromen-5-one_001	-21.8013	(4R)-2-(1,2-dihydroxy-2-methylpropyl)-4-ethenyl-2-hydroxy-4,10-dimethyl-2H,3H,4H,5H-pyrano[3,2-c]chromen-5-one_001	-21.8013	rhamnocitrin_001	-21.8001
phenethyl (E)-caffeate_001	-21.78	2-methoxy-3-methylantraquinone_001	-21.7785	naringenin-7-glucoside_001	-21.7684
isobutyrolactone II_001	-21.7568	aloechrysone_001	-21.756	3-O-beta-xylopyranosyl-(+)-taxifolin_001	-21.7532
6-hydroxyapigenin_001	-21.7397	derrone_001	-21.7385	2,3',4,5',6'-pentahydroxybenzophenone 4-O-(6''-benzoyl)-beta-D-glucopyranoside_001	-21.7295
apigenin_001	-21.719	pedalitin_001	-21.7177	wentiquinone C_001	-21.6893
caryatin 4'-rhamnoglucoside_001	-21.679	rugulosin B_001	-21.675	tazettamide_001	-21.673
tetrahydroaltersolanol B_001	-21.6512	aliarin_001	-21.6424	3-O-caffeoylquinic methyl ester_001	-21.6382
3'-hydroxyflindulatin_001	-21.6223	pseudolycorine_001	-21.6157	5,7-dihydroxy-3',4',5'-trimethoxyisoflavone_001	-21.5975
aloinoside_001	-21.5676	altenusin_001	-21.5647	N-methylcytisine_001	-21.5642
plumieride_001	-21.5555	tectorigenin 4'-O-beta-D-glucopyranoside_001	-21.5554	8alpha-acetoxytaurin_001	-21.552

resveratrol_001	-21.5434	sorbifolin_001	-21.5385	rubiadin-1-methyl ether 3-O-beta-primeveroside_001	-21.5243
isorhamnetin-3,7-dirhamnoside_001	-21.51	6-bromoaplysinsin_001	-21.5096	luteolin-7-O-glucuronide_001	-21.5093
tectorigenin 7-O-beta-D-glucopyranoside_001	-21.4961	alternarienic acid_001	-21.4833	rautandiol A_001	-21.4798
hypolaetin 7-O-glucoside_001	-21.4706	dichamanetin_001	-21.4627	kaempferide 3-O-beta-xylosyl (1→2)-beta-glucoside_001	-21.4621
ligstral_001	-21.4437	1,8-dihydroxy-3-(hydroxyl methyl)-5-methoxy anthracene-9,10-dione_001	-21.4387	Aspergillus diketopiperazine 6a_001	-21.4345
calycopterin_001	-21.4233	eriodictyol_001	-21.4179	cyphostemmin B_001	-21.4133
7-hydroxy-4'-methoxy-3'-prenylisoflavone_001	-21.4046	tryprostatin B_001	-21.404	iso-seco-tanaphtholide-3-O-methyl ether_001	-21.403
dehydroneotenone_001	-21.389	3'-O-methylpratensein_001	-21.3881	4-O-methyl eleutherol_001	-21.3862
alizarin_001	-21.3824	1,8-dihydroxy-10-methoxy-3-methyldibenzo[b,e]oxepine-6,11-dione_001	-21.3768	moloka'iakitamide_001	-21.3748
quercetin 3,7-dimethyl ether_001	-21.3608	flavone 3-methoxycarpachromene_001	-21.3572	quercetagenin 3,6,3'-trimethyl ether_001	-21.3552
aloe-emodin acetate_001	-21.3423	1beta,4beta-peroxide-5alphaH,7alphaH,8beta,10betaH-guaia-2,11(13)-dien-8beta,12-olide_001	-21.3416	(+)-catechin-5-galloyl ester_001	-21.3335
3'-O-methylorobol_001	-21.3257	hispolon_001	-21.313	12-hydroxyquercetin_001	-21.3077
pinostrobin chalcone_001	-21.2989	sigmodin E_001	-21.2968	(165) lucidin-3-O-beta-primeveroside_001	-21.2858
(?)epigallocatechin_001	-21.2747	4-O-demethylisobutyrolactone II_001	-21.2737	genkwanin-6-C-beta-glucopyranoside_001	-21.2682
usararotenoid A_001	-21.2454	digallic acid_001	-21.2265	robustaside A_001	-21.224
Z-debromohymenialdisine_001	-21.2159	5,7,3'-trihydroxy-6,4'-dimethoxyflavone_001	-21.2147	caryatin-3'-methyl ether_001	-21.2141
macrosporin_001	-21.1935	5,3'-dihydroxy-4',5'-dimethoxyisoflavone 7-O-glucoside_001	-21.1931	caryatin-3'-methyl ether-7-O-beta-D-glucoside_001	-21.1897
dihydrochelerythrine_001	-21.1778	eucleanal A_001	-21.1685	6-methoxyquercetin_001	-21.165
7,8-dimethoxy-2,3-methylenedioxybenzo[c]phenanthridine_001	-21.1479	5,4'-dihydroxy-3,6,7,8,3'-pentamethoxyflavone_001	-21.1434	5,4'-dimethoxy-3'-hydroxy-6,7-methylenedioxyisoflavone_001	-21.1414
gossypetin 3,8-dimethyl ether_001	-21.1322	methyl 5,10-dihydroxy-7-methoxy-1,1,3a-trimethyl-1a,2,3,3a,10c,10d-hexahydro-1H-4-oxacyclobuta[cd]indeno[5,6-a]naphthalene-9-carboxylate_001	-21.1319	anhydroevoxine_001	-21.1272
chamanetin_001	-21.1167	genistein_001	-21.1135	[(3alpha,3'alpha,4beta,4'beta)-3,3']-dimethoxy-cis-[4,4'-bis(3,4,5,10-tetrahydro-1H-naphtho[2,3-c]pyran)]-5,5',10,10'-tetraone_001	-21.1119
rhamnetin-3-O-beta-D-glucopyranoside_001	-21.0955	(◆)-8-oxohypecorinine_001	-21.0918	apigenin 7-(6"-methylglucuronide)_001	-21.0898
quercetagenin-6-methyl ether 3-O-beta-D-galactoside_001	-21.0715	5,6,7,3',4'-pentahydroxyflavone_001	-21.0461	toussaintine D_001	-21.044
desmethylaltenusin_001	-21.0225	emodin 1-O-beta-D-glucopyranoside_001	-21.0184	(113) (6aR,12aS)-2,3-methylenedioxy-9-methoxy-8-(3,3-dimethylallyl)-12a-hydroxyrotenoid_001	-21.0054
Molécule 1 - Nom	Molécule 1 - Score	Molécule 2 - Nom	Molécule 2 - Score	Molécule 3 - Nom	Molécule 3 - Score
isorhamnetin 3,7-disulphate_001	-21.004	resveratrol-3-beta-rutinoside glycoside_001	-20.9948	1-epi-erivanin_001	-20.9934
(2S)-4'-hydroxy-5-methoxy-6'',6''-dimethylpyrano[2'',3'':7,8]flavanone_001	-20.9787	rhein methylester_001	-20.9782	myricetin 3-xyloside_001	-20.9756
aspastipuline_001	-20.947	foliamangiferoside A_001	-20.9448	nataloe-emodin_001	-20.9429
herbacetin-7-methyl ether_001	-20.9232	cyclo-D-Trp-L-pro_001	-20.9172	6,8-di-C-methylkaempferol 3,4'-dimethyl ether_001	-20.9162
crepidiaside A_001	-20.8979	5-hydroxy-3,6,7,3',4',5'-hexamethoxyflavone_001	-20.8957	trans-3,4-dihydroxy-3,4-dihydromollugin_001	-20.8909
(+)-1,2-bis-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-propane-1,3-diol [threo form]_001	-20.8827	littoraloin_001	-20.8815	quercetin 3-rhamnoglucoside_001	-20.879
naringenin 5-O-glucoside_001	-20.8606	myricetin 3-(3'',4''-diacetylramnoside)_001	-20.849	sigmodin A_001	-20.837
buphanisine_001	-20.8323	5,3'-dihydroxy-6,7,4'-trimethoxyflavone_001	-20.8218	5,3'-dihydroxy-6,7,4'-trimethoxyflavone_001	-20.8218

eucleanal_001	-20.8089	argaminolic B_001	-20.8085	ancistrotanzanin A_001	-20.8069
6-hydroxykaempferol 3,5,7-trimethyl ether_001	-20.8008	methyl (S)-flavogallate_001	-20.7952	glochidiobioside_001	-20.7939
sorigenin-1-O-methyl ether_001	-20.7864	(+)-1-hydroxypinoresinol-4'-O-beta-D-glucopyranoside_001	-20.7797	chrysoeriol-7-O-xyloside-(1,2)-arabinofuranoside_001	-20.7781
4-hydroxy-5-methylcoumarin-4-O-beta-D-glucopyranoside_001	-20.7701	4-hydroxy-5-methylcoumarin-4-O-beta-D-glucopyranoside_001	-20.7701	5,4,3'-trihydroxy-6,4',5'-trimethoxyflavone_001	-20.7655
pyrophen_001	-20.7591	calystegine N1_001	-20.7538	7-hydroxy-4',5,6,8-tetramethoxyflavanone_001	-20.7397
liquiritigenin_001	-20.7311	kaempferol 3-O-glucuronide_001	-20.7305	3,5'-dimethyl myricetin 7-O-glucoside_001	-20.7303
(+)-pinoresinol-4'-O-beta-D-glucopyranoside_001	-20.7222	isoknipholone anthrone_001	-20.7211	damnecanthol-3-O-methyl ether_001	-20.7142
apigenin-7-O-6''-E-p-coumaroyl-beta-D-glucopyranoside_001	-20.696	3alpha-hydroxyilicic acid_001	-20.6939	3alpha-hydroxyilicic acid_001	-20.6939
2,3',4,5',6-pentahydroxybenzophenone 2-O-(2''-benzoyl)-alpha-L-arabinopyranoside_001	-20.6776	nevadensin_001	-20.6755	3,3',4-trimethoxyellagic acid_001	-20.6738
(-)-isolariciresinol_001	-20.6578	1-hydroxy-3,5,6,7,8-pentamethoxyxanthone_001	-20.6541	dehydrobenzophenanthridine_001	-20.6503
6-C-arabinosyl-8-C-glucosylapigenin_001	-20.643	6-C-arabinosyl-8-C-glucosylapigenin_001	-20.643	6-C-arabinosyl-8-C-glucosylapigenin_001	-20.643
oroxilin A_001	-20.635	tenaxin II_001	-20.635	tenaxin II_001	-20.635
caffeic acid glucorhamnoside_001	-20.6266	casticin_001	-20.6249	chlorohyssopifolin B_001	-20.6244
limoniastramide_001	-20.6221	8-C-p-hydroxybenzylapigenin_001	-20.618	ungeremine_001	-20.6174
retusin_001	-20.6098	1alpha,4alpha,10alpha-trihydroxy-8alpha-valeryl-11,13-dehydroguaia-2-en-6alpha,12-olide_001	-20.6084	graveolide_001	-20.6083
ellagic acid_001	-20.6043	helminthosporin_001	-20.6009	physcion-8-O-galactoside_001	-20.5918
5,8-dihydroxy-1-methylnaphtho[2,3c]furan-4,9-dione_001	-20.5891	crotonimide C_001	-20.5826	isosamarcandin_001	-20.5767
4'-O-methylgallocatechin_001	-20.564	isoferulic acid_001	-20.5634	6alpha-hydroxybuphanisidine_001	-20.5595
3-O-methylalaternin_001	-20.5552	4-hydroxy-2',4'-dimethoxy-dihydrochalcone_001	-20.5453	alpha,4,2'-trihydroxy-4'-O-geranyldihydrochalcone_001	-20.5389
4',4'''-di-O-methyl-prodelphinidin B4_001	-20.5113	sexangularetin_001	-20.5088	abyssinone III_001	-20.5038
pilosin_001	-20.4768	2,8-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-1-methoxyanthracene-9,10-dione_001	-20.468	4'-hydroxy-3,3',4,5,5'-pentamethoxy-7,9':7',9'-diepoxylignane_001	-20.4646
quercetin-3-O-beta-D-glucopyranoside_001	-20.4511	leptosphaerin D_001	-20.4498	neochlorogenic acid_001	-20.4409
alpinumisoflavone_001	-20.4296	abyssin II_001	-20.429	aloesaponol III-8-methyl ether_001	-20.4279
5,4'-dihydroxy-3,6,7-trimethoxyflavone_001	-20.4024	aloe emodin_001	-20.3999	5-hydroxy-3,7,4'-trimethoxyflavone_001	-20.3999
5,7,4'-trihydroxy-6-methoxy-3-O-glucosylflavone_001	-20.3939	quercetin 3-alpha-L-arabinopyranoside_001	-20.3923	7-hydroxyaloin_001	-20.3869
chrysoeriol 4'-glucoside_001	-20.3855	deoxytazettine_001	-20.3695	islandicin_001	-20.3676
(+)-1-hydroxypinoresinol_001	-20.3566	picropodophyllotoxin_001	-20.3559	rubiadin-1-methyl ether_001	-20.3559
myricetin 3-O-beta-glucopyranoside_001	-20.3427	spinacetin_001	-20.3417	chrysoeriol 7-glucoside_001	-20.3368
(103) 3,7-dihydroxy-5,8-dimethoxyflavanone_001	-20.3244	aloein_001	-20.3204	5,7,3',4'-tetrahydroxy-3,6,8-trimethoxyflavone_001	-20.3073
cystodione D_001	-20.2963	(-)-5-hydroxydeltoin_001	-20.2957	(83) isorhamnetin 3-sulphate_001	-20.2887
dehydroabietic acid_001	-20.2856	7-O-methylnaringenin_001	-20.2837	naringenin 7-methyl ether_001	-20.281
luteolin 7-O-beta-D-diglycoside_001	-20.2794	1-(4-hydroxy-3-((Z)-4-hydroxy-3-methylbut-2-enyl)-5-(3-methylbut-2-enyl)phenyl)ethanone_001	-20.2757	eupatilin_001	-20.2715
10-hydroxy-Nb-methylcorynantheol_001	-20.2549	caffeic acid_001	-20.2525	cis-3,4-dihydroxy-3,4-dihydromollugin_001	-20.2506
isojamaicin_001	-20.2382	5,7,4'-trihydroxy-3-methoxyflavone_001	-20.2362	naamidine B_001	-20.2334
2',4'-dihydroxy-6'-methoxydihydrochalcone_001	-20.2116	cleistenediol E_001	-20.2115	latonduine A_001	-20.2113
tricin 5-O-beta-D-glucoside_001	-20.2046	2,3-epoxy-jaschkeanadiol p-hydroxybenzoate_001	-20.2012	5-hydroxy-3,6,7,4'-tetramethoxyflavone_001	-20.1887
(+)-piperitol-3,3-dimethylallyl ether_001	-20.1831	triuveretin_001	-20.1683	quercetin 3-O-rhamnoside_001	-20.1643
gardenin C_001	-20.1568	(+)-gallocatechin_001	-20.1512	apigenin 7-O-alpha-L-rhamnopyranoside_001	-20.1483
3-(10-hydroxygeranyl)-4-hydroxy-p-coumaric acid_001	-20.1481	(2S)-5-methoxy-6'',6''-dimethyl-4'',5''-dihydrocyclopropa[4'',5'']furano[2'',3'':7,8]flavanone_001	-20.145	kaempferol-3,7,4'-trimethyl ether_001	-20.1441

herbacetin 7-O-(6"-quinyglucoside)_001	-20.1365	aloeresin B_001	-20.1338	damnacanthal_001	-20.1322
totaradiol_001	-20.1258	delta-sesamin_001	-20.1231	thymidine_001	-20.1226
farinosone C_001	-20.1051	hydroxydroserone_001	-20.0841	normelicopicine_001	-20.0767
Molécule 1 - Nom	Molécule 1 - Score	Molécule 2 - Nom	Molécule 2 - Score	Molécule 3 - Nom	Molécule 3 - Score
1-((S)-2,3-dihydro-2-((S)-1-hydroxypropan-2-yl)benzofuran-5-yl)ethanone_001	-20.0619	4beta-hydroxypseudoguai-11(13)-en-12-oic acid_001	-20.0577	7-oxo-dehydroabietinol_001	-20.0574
(-)-farrerol_001	-20.0394	3-methoxyellagic acid 4-O-galactopyranoside_001	-20.034	6-hydroxy-3,5-dimethoxy-2-methyl-1,4-naphthoquinone_001	-20.0306
quercetagenin-6,3',4'-trimethyl ether_001	-20.0177	Z-acetylmelodorinol_001	-20.012	nepetin 7-glucuronide_001	-20.0104
2-acetyl-1-hydroxy-8-methoxy-3-methylnaphthalene_001	-19.9911	5,4'-dihydroxy-3,6,7,3'-tetramethoxyflavone_001	-19.99	dideacetylcrotopoxide_001	-19.9864
1,7-dihydroxy-4-methoxyxanthone_001	-19.957	3-O-methylcalopocarpin_001	-19.9546	(+)-3'-o-methyltaxifolin_001	-19.9389
trispheeridine_001	-19.9204	6,8-di-C-methylkaempferol 3-methyl ether_001	-19.9151	3,3',4'-tri-O-methylellagic acid_001	-19.9137
genistein 7-O-glucoside_001	-19.8903	herbacetin 7-glucoside_001	-19.8737	galangin_001	-19.8726
neomacrolin_001	-19.8598	kaempferol 4'-methyl ether_001	-19.859	1-(4-hydroxy-3-((E)-4-hydroxy-3-methylbut-2-enyl)phenyl)ethanone_001	-19.8513
8-epi-helenalin_001	-19.8418	8-epi-helenalin_001	-19.8418	8-epi-helenalin_001	-19.8418
cirsilineol_001	-19.8202	(+)-taxifolin_001	-19.8186	obovatin_001	-19.8143
fumaritin_001	-19.7907	parvinaphthol C_001	-19.7846	isoquercitrin 6"-O-p-hydroxybenzoate_001	-19.7797
2-methyl-2-butenyl (E)-caffeate_001	-19.7688	6-O-[[2"-O-p-methoxy-cis-cinnamoyl-3"-O-acetyl]-alpha-L-rhamnopyranosyl]-catalpol_001	-19.7684	oxyresveratrol 2-O-beta-D-glucopyranoside_001	-19.7643
kaempferol_001	-19.7583	dianellin_001	-19.7583	sulfamarin_001	-19.7577
aguerin-beta_001	-19.7455	sophoraisoflavanone A_001	-19.7451	quercetin-3-O-glucoside-7-O-rhamnoside_001	-19.7436
1"-O-beta-D-glucosylformoside_001	-19.7343	nagilactone C_001	-19.7306	6'-hydroxy-2',3',4',4'-tetra-methoxychalcone_001	-19.7278
ceratinamine_001	-19.7101	kaempferol-3,7-di-O-alpha-rhamnopyranoside_001	-19.7077	ammodendrine_001	-19.7027
cycloethuliacoumarin_001	-19.6995	4-(alpha-L-rhamnopyranosyl)ellagic acid_001	-19.6983	1,2-didehydroancistrobertsonine D_001	-19.6953
cryptochlorogenic acid_001	-19.6854	torosachrysone_001	-19.6846	3,3',4'- trimethoxyquercetin_001	-19.6833
jamaicin_001	-19.6765	aloesaponol IV_001	-19.6718	isochamanetin_001	-19.6608
8alpha-(2-(hydroxymethyl)but-2-enoyloxy)salonitenolide_001	-19.6574	8alpha-(2-(hydroxymethyl)but-2-enoyloxy)salonitenolide_001	-19.6574	4-[2',4'-dihydroxy-6'-(hydroxymethyl)benzyl]benzene-1,2-diol_001	-19.6536
atraflavoside A_001	-19.6497	(+)-2,3-dihydroxy-1-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-1-propanone_001	-19.6481	6-hydroxy-4-methoxy-5-methylcoumarin_001	-19.6445
isorhamnetin-4'-O-rhamnopyranoside_001	-19.6336	5,7-dihydroxy-2',3',4',5'-tetramethoxyflavone_001	-19.6329	badkhsyn_001	-19.6324
tachrosin_001	-19.6015	orientin 7-glucoside_001	-19.6002	1-hydroxy-3,5,8-trimethoxyxanthone_001	-19.5896
cynarin_001	-19.581	8beta-hydroxy-1-oxo-eudesm-4-en-6alpha,7beta,11betaH-12,6-olide_001	-19.5806	benzyl 2-hydroxy-6-methoxybenzoate_001	-19.5786
5-deoxyabyssinin II_001	-19.5727	calopocarpin_001	-19.5684	naringenin_001	-19.5662
cystodione E_001	-19.5635	2'-deoxyuridine_001	-19.5622	apiin_001	-19.5617
gmelinolide A_001	-19.5553	acacetin_001	-19.5525	forbexanthone_001	-19.5498
12-hydroxyrotenone_001	-19.5448	quinolactacide_001	-19.5413	(-)-epigallocatechin_001	-19.537
harpagoside_001	-19.5292	2,4'-dihydroxy-3'-methoxyacetophenone_001	-19.5274	chryslancidin_001	-19.5261
7,4'-dihydroxy-2',5'-dimethoxyisoflav-3-ene_001	-19.5159	15-hydroxy phaseic acid_001	-19.5135	dictamnine_001	-19.5115
1,5,8-trihydroxy-3,6,7-trimethoxyxanthone_001	-19.4986	3'-O-methylquercetin 3-glucoside_001	-19.4931	nobilisitin A_001	-19.493
nobiletin_001	-19.4877	artemetin_001	-19.4816	phlomurosides_001	-19.4794
demethoxysudachitin_001	-19.4727	pinocembrin_001	-19.4711	4H-1-benzopyran-4-one, 2, 3-dihydro-5- hydroxy-2-(4'-methoxy-3'-hydroxybenzyl)-7-O-(2-methyl butanol) ether_001	-19.4679
2-(p-hydroxybenzyl)-7-methoxybenzofuran-6-ol_001	-19.465	samarcandin_001	-19.4615	isorhamnetin disulphate_001	-19.4592

kaempferitin_001	-19.4509	achillin_001	-19.4351	trans-3',5'-dihydroxy-4',7'-dimethoxydihydro?avonol_001	-19.4286
6-hydroxy-5,7,4'-trimethoxyflavanone_001	-19.4005	5,8-dimethoxy-2-(3',4'-dimethoxyphenyl)-3-propyl-1H-quinolin-4-one_001	-19.3966	2-amino-6-(1R,2S-dihydroxypropyl)-3-methylpterin-4-one_001	-19.3953
ottellione A_001	-19.3844	evolitrine_001	-19.3787	(-)-pipoxide_001	-19.3746
quercetin 3-O-glucosyl-pentoside_001	-19.3605	wistin_001	-19.3538	10-hydroxyaloin B_001	-19.3525
kaempferol-3-rhamnoside-7-glucouronic acid_001	-19.3396	methyl gallate_001	-19.3377	foliosone_001	-19.3359
apiumetin_001	-19.3035	isorhamnetin 3-sulphate_001	-19.3009	phyllamyricin C_001	-19.2973
11,12-dehydroanhydrolycorine_001	-19.2957	deacetylittoraloin_001	-19.2929	3-methoxy gallic acid_001	-19.2918
8alpha-angeloyloxy-10alpha-hydroxy-1alpha,4alpha-peroxy-11,13-dehydroguaia-6alpha,12-olide_001	-19.2878	8alpha-isobutanoyloxy-10alpha-hydroxy-1alpha,4alpha-peroxy-11,13-dehydroguaia-6alpha,12-olide_001	-19.2878	4,5,6,7-tetramethoxyfuro[2,3-b]quinoline_001	-19.2769
5-hydroxy-7,2',3',4',5'-pentamethoxyflavone_001	-19.2684	sigmoidin B 4'-methylether diacetate_001	-19.2646	spiro-ethuliacoumarin_001	-19.2619
altersolanol_001	-19.2592	2-(2'-hydroxy-4'-methoxyphenyl)-5,8-dimethoxy-3-propyl-1H-quinolin-4-one_001	-19.2575	(+)-12-dihydrousarotenoid-A_001	-19.2531
8alpha-isobutanoyloxy-1alpha,4alpha,10alpha-trihydroxy-11,13-dehydroguaia-2-en-6alpha,12-olide_001	-19.2434	1H-1,2,3-triazole-1,5-diamine,3-nitro_001	-19.2419	1,8-dihydroxy-3,6-dimethoxyxanthone_001	-19.2412
8-epi-confertin_001	-19.2402	8-epi-confertin_001	-19.2402	1alpha,4alpha,10alpha-trihydroxy-8alpha-methylbutanoyloxy-11,13-dehydroguaia-2-en-6alpha,12-olide_001	-19.2369
hispidulin_001	-19.2329	luteolin 7-glucuronide_001	-19.228	30'-hydroxytriacontanyl-(E)-ferulate_001	-19.2273
d-cyclocapillarol_001	-19.2164	harmine_001	-19.2161	nagilactone K_001	-19.2116
3beta,4alpha,10alpha-trihydroxy-1beta,2beta-epoxy-8alpha-propanoyloxy-11,13-dehydroguaia-6alpha,12-olide_001	-19.198	myricetin_001	-19.1936	bidwillol A_001	-19.1919
myricetin 3-O-galactoside_001	-19.1852	4-[3-(1,1-dimethyl-but-2-enyl)-1H-indol-5-yl]-but-3-en-2-one_001	-19.1777	tazettine_001	-19.1667
Molécule 1 - Nom	Molécule 1 - Score	Molécule 2 - Nom	Molécule 2 - Score	Molécule 3 - Nom	Molécule 3 - Score
matricarin_001	-19.1568	(-)-S-trans-marmin_001	-19.1518	eupatilin 7-methyl ether_001	-19.1515
trans-ferulic acid_001	-19.1454	6alpha-hydroxyycrinine_001	-19.1441	5,6,8,4'-tetrahydroxy isoflavone_001	-19.1368
3,7-dihydroxy-5,8-dimethoxyflavone_001	-19.1267	microdontin A_001	-19.1131	(7S) 3,5,4'-trihydroxy-7-methoxyflavanone_001	-19.1058
isoorientin_001	-19.0828	ethuliaconyzophenone_001	-19.0812	6,7-dimethyl-4-chromanone_001	-19.0773
kaempferol-3,6-dimethyl ether-7-glucoside_001	-19.0686	3beta,4alpha,10alpha-trihydroxy-1beta,2beta-epoxy-8alpha-valeryloxy-11,13-dehydroguaia-6alpha,12-olide_001	-19.0667	5,7,4'-trihydroxy-6,3'-dimethoxyflavone_001	-19.0649
calopogonium isoflavone B_001	-19.0634	5-hydroxy-6,7,3',4'-tetramethoxyflavone_001	-19.0633	(-)-shikimic acid-4-O-gallate_001	-19.0516
4'-hydroxy-7-methoxy-flavan-3-ol_001	-19.0391	crinamine_001	-19.0361	altertoxin I_001	-19.0334
(3S,5S)-dihydro-5-(3-hydroxy-2-methyl-5-oxocyclopent-1-enyl)-3-methyl-4-((E)-3-oxobut-1-enyl)furan-2(3H)-one_001	-19.0183	norsanguinine_001	-19.0125	methyl-beta-peltatin B_001	-19.007
14-hydroxy-2-oxoguaia-1(10),3-dien-5alpha,11alphaH-12,6alpha-olide_001	-19.003	4-methoxy-5-hydroxymethylcoumarin_001	-18.9968	erysubin F_001	-18.9966
2,5-dihydroxybenzyl benzoate_001	-18.9909	subereamolline A_001	-18.9904	pinobanksin_001	-18.9851
myricetin 3-O-glucuronide_001	-18.9799	patuletin 3-glucoside_001	-18.9786	capillarol_001	-18.978
2,14-dioxoguaia-3-en-1alpha,5alpha,10alpha,11betaH-12,6alpha-olide_001	-18.9708	kaempferol 3-rutinoside_001	-18.9684	aegyptinone A_001	-18.9645
nordurlettone_001	-18.9538	coumarleucasin_001	-18.9535	maroccanin_001	-18.9513

bioside_001	-18.9369	5,6-dimethoxy-2-(2',5',6'-trimethoxyphenyl)-1H-quinolin-4-one_001	-18.9285	3'-methyl myricetin 7-O-glucoside_001	-18.9206
lateropyrone_001	-18.917	calystegine B1_001	-18.9106	3,5- dihydroxy-7,4'-dimethoxyflavone_001	-18.9102
isoeleutherol-5-O-glucoside_001	-18.903	isoelliptol_001	-18.9026	terreinol_001	-18.8973
calopogonium isoflavone A_001	-18.8844	(2R)-2-O-beta-D-glucopyranosyl-2H-1,4-benzoxazin-3(4H)-one_001	-18.8826	3-methyl-3-butenyl (E)-caffeate_001	-18.8805
1-epi-isoerivanin_001	-18.873	flavan-3-ol_001	-18.873	aloenin-2''-p-coumaroyl ester_001	-18.8654
conoflorine_001	-18.8588	1,3-di-O-galloyl glucose_001	-18.8553	kaempferol-3-rutinoside_001	-18.8536
dimethyl ellagic acid_001	-18.8399	formononetin_001	-18.8176	Thapsia transtagana Phenylpropanoid 6_001	-18.8145
1,3-dioxo-7alpha,11betaH-2,3-secogermacra-4Z,9Z-dien-12,6alpha-olide_001	-18.8108	pachypodol_001	-18.8104	(+)-aromadendrin_001	-18.8046
sumatrol_001	-18.7981	sphaeropsidin D_001	-18.7862	oxocitrine_001	-18.7834
ancistrotanzanine C_001	-18.7734	7beta-hydroxy-4(13),7-coloratadiene-11,12-olide_001	-18.771	isoimpinellin_001	-18.7675
kaempferol 3-O-rutinoside_001	-18.7432	neoisoschaftoside_001	-18.7393	altertoxin I_001	-18.737
ethyl caffeate_001	-18.7284	5,8-dihydroxy-3-methoxy-2-methylnaphthalene-1,4-dione_001	-18.7235	7-O-methylaloesin_001	-18.7136
1,5-dicaffeoylquinic acid_001	-18.6873	1,5-dicaffeoylquinic acid_001	-18.6873	1,5-dicaffeoylquinic acid_001	-18.6873
2alpha-hydroxy-4-epi-ilicic acid_001	-18.6813	1beta,8alpha-dihydroxyremophil-7(11),9-dien-8beta,12-olide_001	-18.681	(10R)-1,4,8,1',8'-pentahydroxy-3,3'-dimethyl-[10,7'-bianthracene]-9,9',10'(10H)-trione_001	-18.677
chromon_001	-18.6691	5,7-trihydroxy-4'-methoxyflavone_001	-18.6669	megalocarpoidolide A_001	-18.6558
2,3-dehydrokievitone_001	-18.6384	11beta,13-dihydrolactucin_001	-18.6311	isorhamnetin 3-galactoside_001	-18.6208
4beta,9alpha-dihydroxy-6alpha-(4-hydroxy-3-methoxybenzoyl)-dauc-7-ene_001	-18.6159	kaempferol-3-O-beta-glucopyranoside-7-O-alpha-rhamnopyranoside_001	-18.6156	quercetin 3-O-galactoside_001	-18.6132
5,3'-dihydroxy-6,7,4',5'-tetramethoxyflavone_001	-18.6018	8alpha-angeloyloxy-3beta,4alpha,10alpha-trihydroxy-1beta,2beta-epoxy-11,13-dehydroguaia-6alpha,12-olide_001	-18.596	bismurrangatin_001	-18.5888
apigenin-7-O-rhamnosyl-glucoside_001	-18.5772	toussaintine E_001	-18.5772	apigenin-7-O-rhamnosyl-glucoside_001	-18.5772
quercetin 3,7-di-O-beta-D-glucopyranoside_001	-18.5718	beta-sorigenin_001	-18.5704	arctolide_001	-18.5661
1-O-caffeoylquinic acid_001	-18.5638	3,4,8,9,10-pentahydroxy dibenzo[b,d]pyran-6-one_001	-18.5637	fonsecin B_001	-18.5634
11,13-dihydrosonchucarpolide_001	-18.5478	1beta,9alpha-dihydroxy-alpha-cyclocostunolide_001	-18.5415	6-methoxyhamiltone A_001	-18.5384
isorhamnetin-3-p-coumaroylglucoside_001	-18.53	5,7,4'-trihydroxy-2',3',5'-trimethoxyflavone_001	-18.5291	ismine_001	-18.5288
o-coumaric acid_001	-18.5233	erythrabyssin I_001	-18.5177	quercetin-3-O-beta-D-glucopyranoside_001	-18.5038
11,13-dihydroisoreynosin_001	-18.4998	phtalate_001	-18.4956	9alpha,13alpha,15,16-bisepoxy-15alpha-hydroxy- 3-oxo-labdan-6beta,19-olide_001	-18.4883
homonataloin_001	-18.478	(-)-prantschimgin_001	-18.4777	4alpha-hydroxy-4,15,11,13-tetrahydroreynosin_001	-18.4759
maximaisoflavone J_001	-18.471	3-epimacronine_001	-18.4638	10-methoxy-10,7'-(chrysophanol anthrone)-chrysophanol_001	-18.4614
6-(3,4-dihydroxyphenyl)-4- hydroxyhexa-3,5-dien-2-one_001	-18.45	Z-toussaintine E_001	-18.438	(+)-1,2-bis-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-propane-1,3-diol [erythro form]_001	-18.4328
edudiol_001	-18.4206	melicopicine_001	-18.4177	isorhamnetin-3-O-beta-glucopyranoside_001	-18.4157
siderin_001	-18.405	patuletin 3-rutinoside_001	-18.402	1alpha,6alpha,8alpha-trihydroxy-5alpha,7betaH-guaia-3,9,11(13)-trien-12-oic acid_001	-18.3947
inuloxin B_001	-18.3669	6-(4-oxo-but-2-enyl)-1H-indole_001	-18.3643	luteolin 7-rutinoside_001	-18.3532
daphnelone_001	-18.3507	isoheyl dihydrocaffeate_001	-18.3475	isoheyl dihydrocaffeate_001	-18.3475
epicocconigrone B_001	-18.3298	luteolin-7-O-glucoside_001	-18.3249	3alpha,4alpha-epoxy-1alpha-hydroxy-9alpha-angeloyloxy-alpha-cyclocostunolide_001	-18.322
quercetin-7-rhamnoside_001	-18.3066	quercetin-7-glucoside_001	-18.3062	3-(3'-methoxytropoyloxy)tropane_001	-18.3042
maximaisoflavone B_001	-18.2941	rutarensin_001	-18.2924	4,5-dioxo-11betaH-xanth-1(10)-en-12,8beta-olide_001	-18.2912

methyl 8-hydroxy-1,4,6,7-tetramethoxy-2-naphthoate_001	-18.2902	6-methylcurvulinic acid_001	-18.2863	calystegine B3_001	-18.2853
10-hydroxyaloin A_001	-18.2777	brevifolin_001	-18.2768	quercetagetin 3,5,7-trimethyl ether_001	-18.2751
Molécule 1 - Nom	Molécule 1 - Score	Molécule 2 - Nom	Molécule 2 - Score	Molécule 3 - Nom	Molécule 3 - Score
isoerivanin_001	-18.2534	8alpha-hydroxy-3beta-(benzoyloxy)-1alphaH,5alphaH,6betaH,7alphaH-guai-4(15),10(14),11(13)-trien-6,12-olide_001	-18.2523	8alpha-hydroxy-3beta-(benzoyloxy)-1alphaH,5alphaH,6betaH,7alphaH-guai-4(15),10(14),11(13)-trien-6,12-olide_001	-18.2523
kaempferol-3-rhamnoside_001	-18.2409	Thapsia transtagana Phenylpropanoid 5_001	-18.2351	haemanthamine_001	-18.2322
diversinin_001	-18.2037	1-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-2-{4-[(E)-3-hydroxy-1-propenyl]-2-methoxyphenoxy}-1,3-propanediol_001	-18.2003	beta-sorigenin-8-O-beta-D-glucoside_001	-18.2001
apigenin 7-O-beta-D-galactoside_001	-18.1841	apigenin-7-O-gentiobioside_001	-18.1813	wighteone_001	-18.1703
chrysophanolanthrone_001	-18.1544	9-angeloylretronecine_001	-18.152	acacetin 7-glucoside_001	-18.1502
12-methoxy-13-methylpodocarpa-8,11,13-triene-3,7-dione_001	-18.1461	kaempferol-3-O-(6''-O-acetyl)-beta-D-glucopyranoside_001	-18.1446	gentesic acid 5-O-glucoside_001	-18.1428
malafil_001	-18.137	8-epi-xanthatin_001	-18.1271	4beta,8beta-dihydroxy-6alpha-benzoyldauc-9-ene_001	-18.1266
luteolin 3',4'-dimethylether-7-O-beta-D-glucoside_001	-18.1224	4alpha-hydroxy-guaia-1,12-dien-8beta,11-olide_001	-18.1223	4alpha-hydroxy-guaia-1,12-dien-8beta,11-olide_001	-18.1223
5'-epi-isoethuliacoumarin B_001	-18.1173	5'-epi-isoethuliacoumarin B_001	-18.1173	5'-epi-isoethuliacoumarin B_001	-18.1173
pseudolycorine_001	-18.1049	taxiphyllin_001	-18.0999	8alpha-hydroxy-11alpha,13-dihydrozaluzanin C_001	-18.098
trans-cinnamic acid_001	-18.0941	uguenenazole_001	-18.0937	8-methoxycoumarsabin_001	-18.0935
coniferaldehyde_001	-18.0845	lirioresinol-C-dimethyl ether_001	-18.0822	glaberin B_001	-18.0821
flindersine_001	-18.0671	omega-hydroxypropioaguaiacone_001	-18.065	englerin A_001	-18.0613
3-deacetyl-11,13-dihydro-10,14-deoxyarctolide_001	-18.0482	beta-sorigenin-1-O-beta-glucoside_001	-18.048	echinatine_001	-18.045
5,6-dihydroxy-7,3',4'-trimethoxyflavone_001	-18.0339	neoambrosin_001	-18.0312	1-(4-hydroxy-3-((Z)-4-hydroxy-3-methylbut-2-enyl)phenyl)ethanone_001	-18.0264
p-hydroxycinnamic acid, ethyl ester_001	-18.0218	(2S)-7-hydroxy-5-methoxy-8-prenylflavanone_001	-18.0093	1alpha,9alpha-dihydroxy-alpha-cyclocostunolide_001	-18.0084
quercetin-3-glucoside-7-rhamnoside_001	-17.9943	apigenin-7-galacturonic acid methyl ester_001	-17.992	yangambin_001	-17.9914
8alpha,9alpha-dihydroxy-4beta,15,11beta,13-tetrahydrodehydrozaluzanin_001	-17.9719	4,6-dihydroxy-5-methoxy-7-methyl-1,3-dihydroisobenzofuran_001	-17.96	pentalongin_001	-17.9498
5-methoxy-6,8,8-trimethyl-2-phenylchromene-4,7-dione_001	-17.9429	9-methoxy-2-methyl-2-(4-methyl-3-pentenyl)-2H-benzo[h]chromene-7,10-diol_001	-17.9387	5-p-trans-coumaroylquinic acid_001	-17.9383
4beta,6alpha,8beta-trihydroxy-9alpha-p-hydroxybenzoyloxydaucane_001	-17.9171	7,3',4',5'-tetramethyltricitin_001	-17.9106	8alpha,13-diacetoxy-1beta-hydroxyeudesma-4(15),7(13)-dien-6a,12-olide_001	-17.9102
benzyl benzoate_001	-17.9003	quercetin 5-glucoside_001	-17.9002	caffeine_001	-17.8983
prunasin_001	-17.8946	(+)-pipoxide_001	-17.8873	desacetoxymatricarin_001	-17.8818
6-(3-methylbuta-1,3-dienyl)-1H-indole_001	-17.8681	penduliflaworosin_001	-17.8649	(◆)-enterodiol_001	-17.8639
3,4-dihydroxy-3-(O-beta-D-glucopyranosyl)phenethanol_001	-17.8534	trans-1,2-dihydroancistrocladisine_001	-17.8528	chrysoeriol-7-galactoside_001	-17.8518
isoethuliacoumarin C_001	-17.8466	isoethuliacoumarin C_001	-17.8466	isoethuliacoumarin C_001	-17.8466
(8',9'-dihydroxy)-3-farnesylindole_001	-17.8413	gentesic acid 2-O-glucoside_001	-17.8411	4'-O-methylabyssinone V_001	-17.8301
prinoidin_001	-17.815	cystodione F_001	-17.8139	(+)?cycloolivil_001	-17.811
dehydrodeguelin_001	-17.7999	5-hydroxyleucodin_001	-17.7954	8-desoxy-3alpha,4alpha-epoxyrupiculin-B_001	-17.7897
cynarinine_001	-17.7719	cynarinine_001	-17.7719	cynarinine_001	-17.7719
4'-prenyloxyderrone_001	-17.7579	psammaphysin-A_001	-17.7445	isorhamnetin-3-O-rutinoside_001	-17.7438
3-oxo-4alpha-hydroxy-15-hydroxy-1alphaH,5alphaH,6betaH,7alphaH,11betaH-guai-10(14)-ene-6,12-olide_001	-17.737	3-oxo-4alpha-hydroxy-15-hydroxy-1alphaH,5alphaH,6betaH,7alphaH,11betaH-guai-10(14)-ene-6,12-olide_001	-17.737	sonchucarpolide_001	-17.7323
quercetin 4◆-glucoside_001	-17.7263	quercetin 4◆-glucoside_001	-17.7263	isolophanthin A_001	-17.7256

10alpha-hydroxy-8-epi-confertin_001	-17.7192	(S)-3,4',5-trihydroxy-2',7-dimethoxy-3'-prenylisoflavanone_001	-17.7188	acetovanillone_001	-17.7151
5,7-dimethoxy-8-(3'-hydroxy-3'-methyl-1'-butene)-coumarin_001	-17.7106	5,2',4'-trihydroxy-7-methoxy-6-(3-methylbut-2-enyl)isoflavone_001	-17.7096	9alpha,13alpha,15,16-bisepoxy-3-oxolabdan-6beta,19-olide_001	-17.708
1H-indole-5-carbaldehyde_001	-17.7029	luteolin 7,4'-di-O-glucoside_001	-17.7016	quercetin 3-galactoside_001	-17.7006
vulgarin_001	-17.695	postratol_001	-17.6829	syzalterin_001	-17.6779
5,7,4'-trihydroxy-6,2',3'-trimethoxyflavone_001	-17.6728	glomerol_001	-17.6672	6,7-dehydro-3-apatropoyloxytropene_001	-17.6671
isoarnottinin_001	-17.6588	diphenylamine_001	-17.6586	4,6-dimethoxy-5-methylcoumarin_001	-17.6581
11beta,13-dihydrocynaropicrin_001	-17.654	11beta,13-dihydrocynaropicrin_001	-17.654	11beta,13-dihydrocynaropicrin_001	-17.654
harmaline_001	-17.6517	podolide_001	-17.6496	methyl-2,3-epoxy-3-prenyl-1,4-naphthoquinone-2-carboxylate_001	-17.6454
vebenaline_001	-17.63	helioscopinolide B_001	-17.6142	quercetin 3,7-diglucoside_001	-17.6141
lactucin-8-O-acetate_001	-17.6126	4,5-di-p-cis-coumaroylquinic acid_001	-17.6096	2-hydroxytomentosin_001	-17.609
pterocarpan_001	-17.5861	echihumiline_001	-17.5846	11-hydroxy-ent-abieta-8,11,13-trien-15-one_001	-17.5824
7-O-beta-glucopyranosyl benzyl alcohol_001	-17.5768	3-oxo-1alpha,5alphaH-guaia-10(14)-en-6alpha,12-olide_001	-17.5757	1-methyl-4-methoxy-2-quinolone_001	-17.5706
3-(10-acetoxygeranyl)-4-acetoxy-p-coumaric acid_001	-17.5669	3-(10-acetoxygeranyl)-4-acetoxy-p-coumaric acid_001	-17.5669	daphenone_001	-17.5638
2,4,5-trimethoxy benzaldehyde_001	-17.5608	apigenin-7-O-methylglucuronide_001	-17.5528	apigenin-7-O-methylglucuronide_001	-17.5528
5,4'-dimethoxy-6,7-methylenedioxyisoflavone_001	-17.5428	pectachol B_001	-17.5415	3-(O-beta-D-glucopyranosyl)-alpha-(O-beta-D-glucopyranosyl)-4-hydroxyphenylethanol_001	-17.5399
dehydroabietinol_001	-17.5295	bianthracene II_001	-17.5259	(-)-deltoid_001	-17.5189
E-ferulaldehyde_001	-17.5167	citreisocoumarin_001	-17.5098	2-(3,7-dimethylocta-2,6-dienyl)-6-[7-(3,7-dimethylocta-2,6-dienyl)-5-hydroxybenzofuran-2-yl]-[1,4]benzoquinone_001	-17.5097
11alphaH,13-dihydroconfertin_001	-17.5017	11alphaH,13-dihydroconfertin_001	-17.5017	11alphaH,13-dihydroconfertin_001	-17.5017
Molécule 1 - Nom	Molécule 1 - Score	Molécule 2 - Nom	Molécule 2 - Score	Molécule 3 - Nom	Molécule 3 - Score
tracheloside_001	-17.4902	tracheloside_001	-17.4902	7alpha-hydroxydehydroabietinol_001	-17.4895
quercetin-3,7-di-O-alpha-rhamnopyranoside_001	-17.4818	8alpha-isobutanoyloxy-3beta,4alpha,10alpha-trihydroxy-1beta,2beta-epoxy-11,13-dehydroguaia-6alpha,12-olide_001	-17.4781	(4R,5R,6R)-4,5-dihydroxy-6-(6'-methylsalicyloxy)-2-methyl-2-cyclohexen-1-one_001	-17.4686
luteolin 7-gentiobioside_001	-17.4626	globularioside_001	-17.4626	ferrugone_001	-17.4548
vanilloside_001	-17.4494	kaempferol 3-O-rhamnosyl(1?2)glucoside_001	-17.4419	(-)-samarcondone_001	-17.4419
uvaretin trimethyl ether_001	-17.435	cleomiscosin C_001	-17.4324	1beta-hydroxycostic acid_001	-17.4306
(+)-(S)-dihydro-2',3'-epoxyasteranthine_001	-17.4216	11-methoxyversodine_001	-17.4213	6,7-dimethoxy-4-chromanone_001	-17.4195
isouvaretin_001	-17.4105	diellagic lactone_001	-17.4006	7,8-epoxyisocholilide lactone_001	-17.3966
8alpha-hydroxy-11,13-dihydroreynosin_001	-17.3848	10-hydroxylancerdiodiol-6-benzoate_001	-17.3833	9-O-demethylhomolycorine_001	-17.3822
mexicanolide_001	-17.3699	ancistrobertsonine D_001	-17.3689	cleistenonal_001	-17.3644
(-)-4'-methylpigallocatechin 5-O-beta-D-glucopyranoside_001	-17.3613	luteolin 7,3'-diglucoside_001	-17.3569	[2,4-dihydroxy-6-(beta-D-glucopyranosyloxy)phenyl]-butan-1-one_001	-17.3555
apigenin-7-methylgalacturonide_001	-17.354	11beta,13-dihydroxy-4-oxo-guaia-1alpha,5alphaH-6beta,12-olide_001	-17.3447	6-O-methylpretazettine_001	-17.343
malvone A_001	-17.3388	myricitrin_001	-17.3353	8alpha,4'-(hydroxytigilate)-8-desacyloxysubtleolide_001	-17.3348
afrormosin_001	-17.334	alpha-santonin_001	-17.3326	papyramine_001	-17.3307
carvacryl acetate_001	-17.3216	dendronephthol C_001	-17.3211	(E)-3-((2S,3S)-2,3-dihydro-7-hydroxy-3-(hydroxymethyl)-2-(3,4-dimethoxyphenyl)benzofuran-5-yl)acrylaldehyde_001	-17.3153
nkolbisine_001	-17.2988	(+)-6-styryl-7,8-epoxy-4-methoxypyran-2-one_001	-17.294	methyl-12beta-acetoxysandaracopimarate_001	-17.2927

9alpha,13alpha,15,16-bisepoxy-15beta-hydroxy- 3-oxo-labdan-6beta,19-olide_001	-17.2914	daidzein 7-O-glucoside_001	-17.2911	quercetagenin-6-methyl ether 3-O-beta-D-digalactoside_001	-17.2838
zarzissine_001	-17.2651	butyrolactone I_001	-17.2583	(-)-9,10-epoxymuquibilin A_001	-17.2574
desacyl laurenobiolide angelate_001	-17.2482	desacyl laurenobiolide angelate_001	-17.2482	desacyl laurenobiolide angelate_001	-17.2482
subgallate_001	-17.2306	5'-epi-isoethuliacoumarin A_001	-17.2283	ethuliconyzone_001	-17.2259
2,3-di-O-galloyl glucose_001	-17.2216	isofoliosone_001	-17.22	thymoquinol 2,5-O-beta-diglucopyranoside_001	-17.2168
ligustolide-A_001	-17.1978	(-)-(R)-dihydro-2',3'-epoxyasteranthine_001	-17.1969	isorhamnetin 5-glucoside_001	-17.1964
globularinin_001	-17.1827	5,7,2',4'-tetrahydroxy-6-(3-methylbut-2-enyl)isoflavanone_001	-17.1795	3,4-dimethyl cinnoline_001	-17.1791
11,13-dihydroreynosin_001	-17.1772	2',3'-epoxyasteranthine_001	-17.1771	3alpha,4beta-dihydroxy-5betaH,11alpha H-eudesman-6,12- olide_001	-17.1709
(1.alpha.(s*),5-beta.)-1 -(phenyl sulfinyl)-bicyclo-[3.3.1]nona-3-one_001	-17.1667	thymoquinol dimethyl ether_001	-17.1556	altersolanol A_001	-17.1552
arbutoside_001	-17.1507	(-)-6alpha-hydroxy-5alpha,8alpha,9alpha,10alpha-cleroda-3,13-dien-16,15-olid-18-oic acid_001	-17.1483	methylancistrobertsonine D_001	-17.1462
4-hydroxygalegine_001	-17.1399	cis-1,2-dihydroancistrocladisine_001	-17.1386	(+)-(S,R)-epoxyartemidin_001	-17.1369
3,4-dihydroxy-9-methoxypterocarpan_001	-17.132	isovaleroyloxylinolool_001	-17.1297	xanthoxol_001	-17.1256
viscic acid_001	-17.1256	quercetagenin 3,5,7,3'-tetramethyl ether_001	-17.1226	11-hydroxyvittatine_001	-17.1186
benzyl alcohol-O-beta-xylopyranosyl-(1?2)-beta-glucopyranoside_001	-17.1033	3-(4-methoxyphenyl)-6-methoxy-8,8-dimethyl-4H,8H-benzo[1,2-b:3,4-b']dipyrans-4-one_001	-17.1008	kaempferol-4'-methoxy-3,7-dirhamnoside_001	-17.0912
10-angeloyloxy-6-p-methoxybenzoyl-jaeschkeanadiol_001	-17.0855	toussaintine F_001	-17.0823	kaempferol 3-galactoside_001	-17.0795
methylscopolamine_001	-17.0569	quercetin-3-glucoside_001	-17.056	3,4,5-trimethoxyphenol_001	-17.0548
3-oxo-4alpha-acetoxy-15-hydroxy-1alphaH,5alphaH,6betaH,7alphaH,11betaH-guai-10(14)-ene-6,12-olide_001	-17.0536	3-oxo-4alpha-acetoxy-15-hydroxy-1alphaH,5alphaH,6betaH,7alphaH,11betaH-guai-10(14)-ene-6,12-olide_001	-17.0536	methyl-p-coumarate_001	-17.048
5-oxo-eudesmane-4,11(13)-dien-12-oic acid_001	-17.0381	isorhamnetin-3- O-beta-glucopyranoside-7-O-alpha-rhamnopyranoside_001	-17.0379	8-epi-tomentosin_001	-17.0362
ancistrocladidine_001	-17.0342	2alpha-hydroxy-2R-xanthalongin_001	-17.0244	2alpha-hydroxy-2R-xanthalongin_001	-17.0244
5,7,4'-trihydroxy-8-(3'''-methylbut-2'''-enyl)-6-(2''-hydroxy-3''-methylbut-3''enyl) isoflavone_001	-17.0182	fumitremorgin C_001	-17.0091	vanillin_001	-17.008
cystomexicone A_001	-16.999	3-tigloyloxy-6,7-epoxytropane_001	-16.9875	2-desoxo-4-acetyloxy-2-hydroxy-tomentosin_001	-16.9843
8alpha-isobutyroyloxysalonitenolide_001	-16.962	8alpha-isobutyroyloxysalonitenolide_001	-16.962	8alpha-isobutyroyloxysalonitenolide_001	-16.962
1beta,9beta-dihydroxyeudesm-3-en-5alpha,6beta,11betaH-12,6-olide_001	-16.9478	15-hydroxygermacra-1(10),4,11(13)-trien-(12,6);(14,8)-diolide 15-O-beta-D-glucopyranoside 6''-p-hydroxyphenylacetate_001	-16.9474	baptifoline_001	-16.9426
salonitenolide-9-O-(4-hydroxy-2-methyl)but-2-enote_001	-16.9397	salonitenolide-9-O-(4-hydroxy-2-methyl)but-2-enote_001	-16.9397	10alpha-hydroxy-1alpha,4alpha-peroxy-2beta,3beta-epoxy-8alpha-methylbutanoyloxy-11,13-dehydroguaia-6alpha,12-olide_001	-16.9394
nepetin 7-glucoside_001	-16.9326	3-tropoyloxy-6-acetoxytropane_001	-16.9284	2beta-hydroxy-13-oxo-alpha-cyperene_001	-16.9254
1beta-hydroxy-8alphaH-eremophil-7(11),9-dien-8beta,12-olide_001	-16.9184	4-(2-formyl-5-hydroxymethylpyrrol-1-yl) butyric acid_001	-16.9173	3,5-dicafeoylquinic acid_001	-16.9099
flavomannin B_001	-16.9063	yomogin_001	-16.9043	isoscuteallarein 7-allosyl(1→2)glucoside_001	-16.9038
4-oxo-iphionan-3(5),11(13)-dien-12-oic acid_001	-16.8997	ent-abieta-8,11,13-trien-16-ol_001	-16.8959	O,N-dimethyltyramine_001	-16.8868
methyl phloroglucinol 2-MeB_001	-16.8788	indoleacetic acid methyl ester_001	-16.8785	7-angeloylrinderine_001	-16.8772
harmalol_001	-16.8674	lupiwighteone_001	-16.866	(3-methyl phenyl)-phenyl methanol_001	-16.8576
(7S,8R)-4-(O-beta-D-glucopyranosyl)-dehydrodiconiferyl alcohol_001	-16.8414	crotomacrine_001	-16.8407	5, 4'-dihydroxy-6-(3'''-methylbut-2'''-enyl)-2''-hydroxyisopropyl dihydrofurano [4'',5'':8,7] isoflavone_001	-16.8364

15-desoxylactucin-alpha-D-glucopyranoside_001	-16.8305	kaempferol-3-rhamnoside-7-glucoside_001	-16.8284	(4alpha,5alpha,8beta,10alpha)-4,10-dihydroxyl-1,11(13)-guaïdien-12,8-olide_001	-16.8247
hispidulin-7-O-glucoside_001	-16.8157	hispidulin-7-O-glucoside_001	-16.8157	hispidulin-7-O-glucoside_001	-16.8157
3-hydroxy-4-methoxybenzaldehyde_001	-16.8097	2-oxocandesalvone A_001	-16.8082	lumisantonin_001	-16.8072
4beta-hydroxy,10beta-hydroperoxyl,5alphaH,7alphaH,8betaH-guaia-1,11(13)-dien-8alpha,12-olide_001	-16.7931	solstitialin_001	-16.7925	methyl phloroglucinol iB_001	-16.7908
Molécule 1 - Nom	Molécule 1 - Score	Molécule 2 - Nom	Molécule 2 - Score	Molécule 3 - Nom	Molécule 3 - Score
phloroglucinol iB_001	-16.7807	2-((4aS,7R)-1,2,4a,5,6,7,8,8a-octahydro-4a-methyl-1-methylene-2-oxonaphthalen-7-yl)acrylic acid_001	-16.7773	11beta,13-dihydrourospermal A_001	-16.7773
4alpha,10beta-dihydroxy-2-oxo-guaia-1(5)-en-6alpha,12-olide_001	-16.7697	dihydrolanneaflavonol_001	-16.7589	5alpha-hydroperoxyivalin_001	-16.7523
13-acetoxy-1beta,8alpha-dihydroxyeudesma-3,7(13)-dien-6alpha,12-olide_001	-16.7493	gentisic acid_001	-16.7454	8alpha-angeloyloxy-10alpha-hydroxy-1beta,2beta,3beta,4beta-diepoxy-11,13-dehydroguaia-6alpha,12-olide_001	-16.7333
globularidin_001	-16.7252	apigenin-7-O-malonyl glucoside_001	-16.7229	14-hydroxy-2-oxoguaia-1(10),3-dien-5alpha,11betaH-12,6alpha-olide_001	-16.7225
lithospermoxide_001	-16.7167	7,4'-dihydroxy-2'-methoxy-6-(1",1"-dimethylallyl)isoflav-3-ene_001	-16.7158	ammirol_001	-16.715
artemin_001	-16.7024	genkwanin 8-C-beta-glucopyranoside_001	-16.7014	3-(1,1-dimethyl-but-2-enyl)-5-(3-methyl-but-2-enyl)-1H-indole_001	-16.6992
erysotrine_001	-16.6937	4-[(3S,3aS,6R,6aS)-3,6-dimethyl-2-oxo-hexahydro-2H-cyclopenta[b]furan-6-carbonyl]pent-4-enoic acid_001	-16.6904	sternbergine_001	-16.6877
violaceol II_001	-16.6634	9alpha-isovaleryloxyludovicin A_001	-16.6619	glaberrin 5s_001	-16.6613
bigelovin_001	-16.6524	bigelovin_001	-16.6524	imperatorin_001	-16.652
13-hydroxy-3-oxogermacra-1(10),7(12)-6alpha,12-olide_001	-16.6455	15-O-beta-D-glucopyranosyl-11beta,13-dihydrourospermal A_001	-16.64	3alpha-hydroxyilicic acid methyl ester_001	-16.6383
marmaricin_001	-16.6362	laudanin_001	-16.6359	parthenin_001	-16.6316
herniarin_001	-16.6189	6,7-dehydrohyoscyamine_001	-16.6115	furoaloesone_001	-16.6109
ampelopyrone_001	-16.5932	teucrin F_001	-16.5903	kosin_001	-16.5892
gallic acid_001	-16.5805	ilicic acid_001	-16.5776	ilicic acid_001	-16.5776
3,3',4'-trimethoxyellagic acid-4'-glucoside_001	-16.5699	lanciaquinone_001	-16.5694	14-hydroxy-11,13-dihydrohypocretinolide_001	-16.5672
5,6-dihydroxy-7,8,3',4'-tetramethoxyflavone_001	-16.5503	1-(4-hydroxy-3-(3-methylbut-2-enyl)phenyl)ethanone_001	-16.5465	(E)-5-(3-methylbuta-1,3-dienyl)-1H-indole_001	-16.5427
aranosin_001	-16.536	myricetin 3-O-beta-D-sorbose_001	-16.535	3-alpha-hydroxytirucall-8,24-dien-21-oic acid_001	-16.5311
kaempferol-3-methoxy-7-O-alpha-L-rhamnoside_001	-16.5283	scutellarein 7-O-glycoside_001	-16.5273	arohynapene D_001	-16.5247
5,7-dihydroxy-6-methoxy-2,8-dimethylchromone_001	-16.5169	4-methoxy-6-methyl-5-(3-oxobutyl)-2H-pyran-2-one_001	-16.5158	3beta,4alpha,10alpha-trihydroxy-1beta,2beta-epoxy-8alpha-methylbutanoyloxy-11,13-dehydroguaia-6alpha,12-olide_001	-16.5132
(3aR,9aR)-3a,4,9,9a-tetrahydro-5,8-dimethyl-3-methylenenaphtho[2,3-b]furan-2(3H)-one_001	-16.5096	8-O-methylretusin_001	-16.5028	(-)-shikimic acid-O-gallate_001	-16.5021
teucrin A_001	-16.4837	2',3'-dihydroxyasteranthine_001	-16.4833	oplopanone_001	-16.4832
(4alpha,5alpha,8beta,10beta)-4,10-dihydroxy-1,11(13)-guaïdien-12,8-olide_001	-16.4715	(+)-sydowic acid_001	-16.4679	isorhamnetin 3-rhamnosyl-(1?6)-galactoside_001	-16.4641
tatarolone_001	-16.4456	glaberrin C_001	-16.4448	isorhamnetin-3-O-rhamnoglucoside_001	-16.4237
(S)-elata-dihydrochalcone_001	-16.4201	1alpha,6alpha,8alpha-trihydroxy-5alpha,7betaH-guaia-3,10(14),11(13)-trien-12-oic acid_001	-16.4187	3-benzylhexahydropyrrolo[1,2-a]pyrazine-1,4-dione_001	-16.4177
delta-2-4-epi-ilicic acid_001	-16.4165	teuhircoside_001	-16.4045	gancaonin C_001	-16.4029

6-cis-amentadione-1'-methyl ether_001	-16.3929	(10R)-3',4'-dihydro-1,4,8,3',8',9'-hexahydroxy-3,3'-dimethyl-[10,7'-bianthracene]-9,1'-(10H,2'H)-dione_001	-16.3887	3-oxo-eudesma-4,11(13)-dien-12-oic acid_001	-16.3879
ekersenin_001	-16.3829	3,4-dicaffeoylquinic acid_001	-16.3806	3,4-dicaffeoylquinic acid_001	-16.3806
3-methoxyepicoccone B_001	-16.3719	12'-hydroxygymnastatin N_001	-16.37	harpagoside B_001	-16.3577
quercitrin_001	-16.3493	2-(nonan-8-one)-N-methyl-4-quinolone_001	-16.3442	1alpha,10beta-dihydroxyguaia-3-en-6alpha,12-olide_001	-16.3434
dihydroprotopine_001	-16.331	flexinine_001	-16.3288	transtaganolide G_001	-16.3149
glaucine_001	-16.2825	paradoxonine_001	-16.2748	usneoidone Z_001	-16.2691
karatavicinol_001	-16.2561	9alpha-hydroxy-4alpha,15-dihydro-zaluzanin C_001	-16.2545	2-(decan-9-one)-N-methyl-4-quinolone_001	-16.2527
2-acetoxytomentosin_001	-16.2323	1-dehydrogingerdione_001	-16.2247	4beta,9alpha-dihydroxy-6alphabenzoyl-dauc-7-ene_001	-16.2212
bis-(5Z-7-oxo-caryophyllene)-14-O-ether_001	-16.2136	marmesinin_001	-16.2118	1beta,10beta-epoxy-8alpha-hydroxyeremophil-7(11)-en-8beta,12-olide_001	-16.2095
fraxicarboside C_001	-16.2009	8alpha-angeloyloxy-10alpha-hydroxy-1alpha,2alpha,3alpha,4alpha-diepoxy-11,13-dehydroguaia-6alpha,12-olide_001	-16.1982	subereamolline B_001	-16.195
3-tropoyloxy-6-tigloyloxytropane_001	-16.1831	sinuleptolide_001	-16.1807	3beta,14-dihydroxycostunolide-3-O- beta-glucopyranosyl-14-O-p-hydroxyphenylacetate_001	-16.1779
8beta-(2,3-dihydroxy-2-methylpropyloxy)-11,13-dihydroartecanin_001	-16.1725	chrysoeriol 7-gentiobioside_001	-16.1714	istanbulin A_001	-16.1684
1,2-benzene dicarboxylic acid, mono-(2-ethylhexyl ester)_001	-16.146	10-oxo-jaesckeanadiol-6-anisate_001	-16.1328	alternariol 5-O-methyl ether_001	-16.1325
E-artemedin_001	-16.1219	9-O-beta-xylopyranosyl-(1?6)-O-beta-glucopyranosyl-(1?6)-O-beta-glucopyranosyl trans-cinnamyl alcohol_001	-16.1191	luteolin-7-neohesperidoside_001	-16.1151
8-desoxy-3alpha,4alpha-epoxyrupiculin-A_001	-16.1111	myricetin-3-glucoside_001	-16.1106	4-hydroxy-5,7-dimethoxy-8-methylflavan_001	-16.1036
epicoccone B_001	-16.0983	11beta-methoxycurcularin_001	-16.0944	xenibellal_001	-16.0883
para-methoxythymol_001	-16.0784	1-betahydroxyeremophil-7(11),9(10)-diene-8-one_001	-16.078	talasin B_001	-16.0771
O-alpha-D-glucopyranosyl-(1?4)-alpha-D-glucopyranosyl-(1?4)-alpha-D-glucopyranosyl-(1?2)-beta-D-fructofuranoside_001	-16.0645	apigenin 7-O-beta-D-(2''-O-L-alpha-rhamnosyl)galacturonide_001	-16.061	loganic acid_001	-16.0593
acetylmontrifoline_001	-16.0553	7-O-beta-apiofuranosyl-(1?6)-O-beta-glucopyranosyl benzyl alcohol_001	-16.0519	5-alpha-hydroxy-2-oxo-8alpha-isovaleryloxy-11,13-dehydroguaia-1(10),3-dien-6alpha,12-olide_001	-16.0506
2-oxoisodauc-5-en-12-al_001	-16.0438	hypolaetin 7-allosyl(1?2)glucoside_001	-16.0418	5-OH-3-methylnaphtho[2-3-c]furan-4(9H)-one_001	-16.038
11-hydroxy-8,11,13-abietatriene-12-O-beta-xylopyranoside_001	-16.0309	5Halpha,6Hbeta,7Halpha,-15-hydroxy-8alpha-(1',2'-dihydroxyethyl-acryloxy)-elema- 1(2),3(4),11(13)-trien-6,12-olide_001	-16.0281	4beta,8beta-dihydroxy-6alpha-(4-hydroxy-3-methoxybenzoyl)-dauc-9-ene_001	-16.0261
ar-tumerone_001	-16.0172	chrysoeriol 7-rutinoside_001	-16.0029	2,6-di-C-methyl-dinicotinic acid 3,5-diethyl ester_001	-16.0016
myrtenol-beta-D-glucopyranoside-6'-O-acetate_001	-15.9809	teferidin_001	-15.9751	12a-hydroxy-alpha-toxicarol_001	-15.9746
terpurinflavone_001	-15.9599	1-((S)-2,3-dihydro-2-(prop-1-en-2-yl)benzofuran-5-yl)ethanone_001	-15.9571	5,7-dihydroxy-2',3',4'-trimethoxy-6-(3-methylbut-2-enyl)isoflavanone_001	-15.9559
sigmoidin F_001	-15.9342	umbellactal_001	-15.9336	Sargassaceae meroditerpenoid 2_001	-15.933
Molécule 1 - Nom	Molécule 1 - Score	Molécule 2 - Nom	Molécule 2 - Score	Molécule 3 - Nom	Molécule 3 - Score
6alpha-hydroxyneopulchellin_001	-15.9226	mukaadial_001	-15.9194	damcinic acid_001	-15.9113
ancistrocladine_001	-15.9033	cynaropicrin_001	-15.902	teferin_001	-15.8943
3-indolylmethyl glucosinolate_001	-15.8835	austriecin_001	-15.8817	3-oxo-4beta,15-dihydrocistic acid_001	-15.8805
isolophanthin E_001	-15.8634	quercetin-3-glucuronide-7-glucoside_001	-15.8589	isorhamnetin 3-galactoside_001	-15.8585
inuloxin A_001	-15.8516	7beta-hydroxy-4(13),8-coloratadien-11,12-olide_001	-15.8492	3beta,13-diacetoxy-1beta,13-dihydroxyeudesma-4(14),7(11)-dien-6alpha,12-olide_001	-15.8466

9 tigloylretronecine_001	-15.841	6-hydroxyluteolin 7-O-beta-D-glucopyranoside_001	-15.8373	hispidulin 7-O-glucoside_001	-15.8367
limonin_001	-15.8314	3,4-dibromopyrrole-2-carbamide_001	-15.8253	nepetin 7-O-beta-D-glucopyranoside_001	-15.8175
catalponol_001	-15.8058	6,7-dehydroroleanon_001	-15.8052	4-epi-illicic acid_001	-15.8043
apigenin 7-rutinoside_001	-15.8007	8alpha-hydroxy-4alpha,5alpha-epoxytaurin_001	-15.7978	5-p-cis-coumaroylquinic acid_001	-15.7977
caulindole C_001	-15.7778	herbolide D_001	-15.7758	5alpha-hydroxy-11,13-dihydroreynosin_001	-15.7688
4beta-hydroxy-6alpha-benzoyloxy-10alpha-hydroxydauc-8-ene_001	-15.7545	isoscutellarein 7-allosyl(1?2)glucoside-6"-actate_001	-15.754	8alpha-acetoxy,13-hydroxy-1-oxo-germacra-4,7(11),10(14)-trien-6alpha,12-olide_001	-15.7532
dihydrourospermal A_001	-15.7428	epimontanadiiepoxide chlorhydrin_001	-15.7286	4-hydroxyquinolin-2(1H)-one_001	-15.727
4-oxo-germacra-1(10)-en-12,6beta-olide_001	-15.7174	2-hydroxybut-3-enylglucosinolate_001	-15.7125	(-)-lychnopholide_001	-15.7089
quercetin 8-C-alpha-beta-rhamnosyl(1?2)glucoside_001	-15.6954	4beta-hydroxy-6alpha-(4-hydroxy-3-methoxybenzoyl)-7-daucen-9-one_001	-15.694	epicoccone_001	-15.6938
ottellione B_001	-15.6903	4-epi-isoinuviscolide_001	-15.69	4-epi-isoinuviscolide_001	-15.69
3-methoxyepicoccone_001	-15.6852	polygodial_001	-15.6824	lucenin-2_001	-15.6709
8alpha-(2-methylacryloyloxy)salonitenolide_001	-15.6683	8alpha-(2-methylacryloyloxy)salonitenolide_001	-15.6683	quercetin 3-O-(6"-alpha-L-rhamnopyranosyl)-beta-D-glucopyranoside_001	-15.6655
psoralen_001	-15.6594	uracil_001	-15.653	gallic acid-4-O-(6'-O-galloyl)-beta-D-glucose_001	-15.6521
fraxicarboside A_001	-15.6435	8,15-dihydroxygermacra-1(10),4-dien-(12,6)-olide-14-al_001	-15.631	6alpha,8beta-dimethoxy-10beta-hydroxyeremophilanolide_001	-15.6304
urospermal A 15-O-beta-D-glucopyranoside_001	-15.6209	3-hydroxybenzaldehyde_001	-15.6144	iso-imperatorin_001	-15.6129
umbelliferone_001	-15.6044	apigenin 7-O-beta-glucoside 2",3"-diacetate_001	-15.6005	thymohydrochinone-2-O-beta-glucopyranoside_001	-15.5992
(3S)-6-hydroxy- 8-methoxy-3,5-dimethylisochroman_001	-15.5921	isoschizogaline_001	-15.5908	microdantin_001	-15.5864
cleistodienol B_001	-15.5805	6alpha,9alpha-dihydroxy-4(13),7-coloratadiene- 11,12-dial_001	-15.58	11,16-epoxy-ent-abieta-8,11,15-triene-13,14-dione_001	-15.5765
4beta,9alpha-dihydroxy-6alpha-p-hydroxybenzoyl dauc-7-ene_001	-15.5536	phlomurin_001	-15.5534	3-oxo-alpha-costic acid_001	-15.552
methyl phloroglucinol iV_001	-15.545	(E)-2-(tetrahydro-5-methyl-5-vinylfuran-2-yl)-6-hydroperoxy-6-methylhept-4-en-3-one_001	-15.543	incensole oxide_001	-15.5377
cimifugin 2-methylbutanoate_001	-15.5292	(25R)-3beta-{O-beta-D-glucopyranosyloxy}-22alphaN-spirosol-5-ene_001	-15.5265	7-angeloylretronecine_001	-15.5226
methyl-6-acetoxy-9-oxo-1(10)E,7E-alpha-humulene-15-oate_001	-15.5157	7-acetyl-1,4-dimethylazulene_001	-15.512	antheindurolid A_001	-15.5032
(E)-isoeugenol_001	-15.4982	15,16,17-trihydroxy-7- oxopimar-8(9)-ene_001	-15.4971	4H-xanthalongin_001	-15.4958
pyrogallol_001	-15.4935	3-oxo-gamma-costic acid methyl ester_001	-15.4883	3,4-dihydroxybenzaldehyde_001	-15.4736
lucenin-2_001	-15.461	digallic acid_001	-15.4585	8alpha-[2'-hydroxymethyl-2'-butenoyloxy]-sonchucarpolid_001	-15.4568
centaurepensis_001	-15.4496	centaurepensis_001	-15.4496	centaurepensis_001	-15.4496
3,5-dicaffeoylquinic acid_001	-15.4388	3,5-dicaffeoylquinic acid_001	-15.4388	3,5-dicaffeoylquinic acid_001	-15.4388
santamarin_001	-15.4272	plicatolide_001	-15.4265	cystomexicone B_001	-15.4248
isoorientin 2"-O-alpha-rhamnopyranoside_001	-15.4172	6-C-glucosyl-8-C-arabinosylapigenin_001	-15.4159	(-)-tingtanoxide_001	-15.4145
ferulenol_001	-15.4091	urospermal A_001	-15.4072	lolilide_001	-15.4041
8alpha-isobutanoyloxy-5-alpha-hydroxy-2-oxo-11,13-dehydroguaia-1(10),3-dien-6alpha,12-olide_001	-15.3882	nuapapuin A methyl ester_001	-15.3865	8alpha-isobutanoyl-10alpha-hydroxy-1beta,2beta,3beta,4beta-diepoxy-11,13-dehydroguaia-6alpha,12-olide_001	-15.3833
(S)-lupinifolin 4'-methyl ether_001	-15.3762	6alpha-p-hydroxybenzoyloxy-4beta-hydroxydauc-8-ene-10-one_001	-15.3745	aloeresin F_001	-15.374
isobutyryl-3-methylphloroglucinol-2-methyl ether_001	-15.3695	1beta-acetoxyeudesman-4(15),7(11)-dien-8alpha,12-olide_001	-15.3659	isorhamnetin-3-O-beta-D-glucopyranoside-(2"?1")-rhamnopyranoside_001	-15.3658
rutin_001	-15.3506	dihydroaposcopamine_001	-15.3402	cis,trans-2,3-dimethylthiochroman-4-carbonitrile_001	-15.3379

Sargassaceae meroditerpenoid 9a_001	-15.3226	parthenolid-9-one_001	-15.3213	1-[(3aR,7S,8aS)-7-methyl-3-methylidene-2-oxo-2H,3H,3aH,4H,7H,8H,8aH-cyclohepta[b]furan-6-yl]-3-hydroxybutyl acetate_001	-15.3202
9alpha-[3'-methyl valeryloxy]-ludovicin A_001	-15.3078	3-tigloyloxy-6-hydroxytropene_001	-15.304	eruciflorine (E)_001	-15.2994
6-anjeloyloxy-10-p-methoxybenzoyl-jaeschkeanadiol_001	-15.2835	3,4,5-trimethoxyphenol O-alpha-L-rhamnopyranosyl-(1''76')-beta-D-glucopyranoside_001	-15.2828	12-hydroxy-13-methylpodocarpa-8,11,13-triene-3-one_001	-15.2787
phellidine E_001	-15.2707	isoscuteallarein 7-allosyl(1?2)glucoside_001	-15.2678	3beta-acetoxy-1beta,13-dihydroxyeudesma-4(14),7(11)-dien-6alpha,12-olide_001	-15.2674
hyoscyamine_001	-15.2616	pulicazine_001	-15.2554	cleistanolate_001	-15.2525
1beta,8alpha-dihydroxygermacr-4-en-12,6-olide_001	-15.2414	tri-O-galloyl-shikimic acid_001	-15.2376	phloroglucinol 2-MeB_001	-15.2369
arborescin_001	-15.2177	xanthinosin_001	-15.215	1alpha-(beta-D-glucopyranoxy)-6alpha,7alpha-epoxy-4beta,5alpha-dihydroxy-7-methyl-1,4a,5,6,7,7abeta-hexahydrocyclopenta[c]pyran_001	-15.2107
echimidine_001	-15.1972	dihydrocumambrin A_001	-15.197	dihydrocumambrin A_001	-15.197
talaromannin B_001	-15.1901	tenuazonic acid_001	-15.1885	8alpha-hydroxy-11beta,13-dihydro onopordaldehyde_001	-15.188
artemisinin_001	-15.1869	moloka'iamine_001	-15.1851	luteolin-7-O-acetyl-glucoside_001	-15.1838
3-O-feruloylquinic acid_001	-15.1837	erivanin_001	-15.183	luteolin 7-diglucoside_001	-15.182
Molécule 1 - Nom	Molécule 1 - Score	Molécule 2 - Nom	Molécule 2 - Score	Molécule 3 - Nom	Molécule 3 - Score
8alphaO-(4-hydroxy-2-methylenebutanoyloxy)-11beta,13-dihydrosonchucarpolide_001	-15.1778	8alphaO-(4-hydroxy-2-methylenebutanoyloxy)-11beta,13-dihydrosonchucarpolide_001	-15.1778	aloesol_001	-15.1743
4alpha-hydroxy-4,15-dihydrocostic acid methyl ester_001	-15.165	1beta,6alpha-dihydroxy-8-alpha-(3'-hydroxy-isobutanoyloxy)-11-carboxymethyl-eudesm-11(13)-en-4-one_001	-15.1538	O-methylpapyramine_001	-15.1532
isorhamnetin 3-O-glucosyl-pentoside_001	-15.1451	(R)-5-hydroxy-2',4',5'-trimethoxy-2'',2''-dimethylpyrano[5'',6'':6,7]isoflavanone_001	-15.145	6-methoxy-7-geranyloxy coumarin_001	-15.1435
4beta-hydroxy-6alpha-benzoyl-7-dauncen-9-one_001	-15.1316	hydroxytyrosol-1-O-glucoside_001	-15.1142	(S,E)-2-((2S,5R)-tetrahydro-5-methyl-5-vinylfuran-2-yl)-6-hydroxy-6-methylhept-4-en-3-one_001	-15.112
phloroglucinol iV_001	-15.1009	isorhamnetin 3-O-rutinoside_001	-15.0925	2-((4aR,7R)-decahydro-4a-methyl-1-methylenenaphthalen-7-yl)acrylic acid_001	-15.0887
6alpha-acetoxy-10beta-hydroxyguaia-1,4(15),11(13)-trien-8alpha,12-olide_001	-15.0884	dillapiol_001	-15.0849	dichrocepholide C_001	-15.0813
5-hydroxy-3,7-dimethoxyflavone-4'-O-beta-glucopyranoside_001	-15.0789	isoschaftoside_001	-15.0712	chenopanone_001	-15.0677
benzaldehyde 4-O-beta-glucoside_001	-15.064	(1R*,ZR*,3E,7R*.8E,11R*,12S*)-3,8-dolabelladiene-2,7,16,18-tetrol-7-O-beta-D-glucopyranoside_001	-15.0638	blumenol C glucoside_001	-15.0619
thymoquinol 2-O-beta-glucopyranoside_001	-15.0424	Tribulus saponin aglycone 9_001	-15.0398	quercetin 3-O-robinobioside_001	-15.0343
dichrocepholide E_001	-15.0306	8alpha-hydroxy-1beta,10alpha-epoxygermacra-4,11(13)-dien-6alpha,12-olide_001	-15.0278	8alpha-angeloyloxy-1alpha,4alpha,10alpha-trihydroxy-2beta,3beta-epoxy-11,13-dehydroguaia-6alpha,12-olide_001	-15.0232
8-epiloganin_001	-15.0182	coumarin_001	-15.0162	3-(2'-phenylpropionyloxy)tropane_001	-15.0114
8alpha-acetoxy-2alpha-hydroxy-1alpha,5alpha,6beta,7alpha,11betaH-guaia-3,10(14)-dien-12,6-olide_001	-14.9946	(7S,8aR)-7-methyl-3-methylidene-6-(3-oxobutyl)-2H,3H,3aH,4H,7H,8H,8aH-cyclohepta[b]furan-2-one_001	-14.9915	englerin B_001	-14.9912
taxodione_001	-14.9808	tephropurpulin A_001	-14.9657	madiol_001	-14.9655
ethyl cis-cinnamate_001	-14.961	8-epi-xanthanol_001	-14.9596	dihydrofumariline_001	-14.9593
6,7-dihydroxykaratavicinol_001	-14.9413	barbigerone_001	-14.9378	14-hydroxyvaginatin_001	-14.9356
5-(hydroxymethyl)-2-furancarboxylic acid_001	-14.9341	9alpha-hydroxysantamarin_001	-14.9336	3beta,4beta-dihydroxypallene_001	-14.9191

vicenin 3_001	-14.9139	3-indolyethylene oxide_001	-14.9123	daucoeudesmanolactone A_001	-14.9067
4'-hydroxylittorine_001	-14.8717	kaempferol 3-O-(3"-E-p-coumaroyl)-beta-D-glucopyranoside_001	-14.8676	2-methylphenylmethanol beta-gentiobioside_001	-14.8655
hypolaetin 3'-methylether-7-allosyl(1?2)glucoside_001	-14.8359	triacontanyl-(E)-caffeate_001	-14.833	quercetin 3-O-[alpha-rhamnosyl (1→6)] [beta-glucosyl (1→2)]-beta-glucoside-7-O-alpha-rhamnoside_001	-14.8224
chrysophanol-physcion bianthrone_001	-14.8155	deacetylated sclerotiorin_001	-14.8105	O-methylmaritidine_001	-14.8105
(-)-seco-isolariciresinol_001	-14.8086	methyl-2-epinuapapuanolate_001	-14.8084	conduritol C_001	-14.801
coniferyl-diisovalerate_001	-14.7902	9beta-hydroxy-11,13-dihydroreynosin_001	-14.7899	1,6-di-O-galloyl-beta-D-glucose_001	-14.7886
8alpha-hydroxy-11alpha,13-dihydrozaluzanin C_001	-14.779	chlorohyssopifolin B_001	-14.779	chlorohyssopifolin B_001	-14.779
2-methoxy-8,12-epoxygermacra-1(10),7,11-trien-6-one_001	-14.7759	erycristagallin_001	-14.7681	chaetorcinol_001	-14.768
15-hydroxyisocostic acid_001	-14.7617	chiliadenol C_001	-14.7517	schaftoside_001	-14.7502
8alpha-hydroxy-11beta,13-dihydro-4-epi-sonchucarpolide_001	-14.7451	luteolin 7-rutinoside_001	-14.7433	Sargassaceae meroditerpenoid 1a_001	-14.7404
10beta-hydroxycichopumilide_001	-14.7258	10beta-hydroxycichopumilide_001	-14.7258	15-O-beta-D-glucopyranosylurospermal A_001	-14.7251
11,13-dehydromelitensin_001	-14.7086	erybraedin A_001	-14.7086	repdiolide triol_001	-14.7048
ugandensidial_001	-14.7041	teumicropodine_001	-14.7039	2-phenylethyl-beta-D-glucopyranoside_001	-14.7034
1beta,10alpha,4alpha,5beta-diepoxyglechoman-8alpha,12-olide_001	-14.6971	4alpha-hydroxy-1alphaH-guaia-9(14),12-dien-8beta,11-olide_001	-14.6927	4alpha-hydroxy-1alphaH-guaia-9(14),12-dien-8beta,11-olide_001	-14.6927
3-(3'-acetoxytropoyloxy)tropane_001	-14.6888	megalocarpoidolide C_001	-14.6886	aikupikoxide A_001	-14.6726
15-hydroxy-8-alpha-(3'-hydroxy-isobutanoyloxy)-elemene-1,3,11(13)-trien-12,6-olide_001	-14.658	methyl 4-O-beta-D-glucopyranosylcaffeate_001	-14.6559	3-geranylindole_001	-14.6555
(6R,7R,8S, 3'R)-8alpha-(3,4-dihydroxy-2-methylene-butanoyloxy)-15-oxohelianga-1(10),4(5),11(13)-trien-6-olide_001	-14.6489	lotusine A_001	-14.6472	myricetin-3-galactoside_001	-14.6437
luteolin 7-O-sophoroside_001	-14.6326	13-O-desacetyl eudesma-afraglaucolide_001	-14.628	6alpha-hydroxyguaia-1(10),4(15),11(13)-trien-8alpha,12-olide_001	-14.625
luteolin 7-O-galactoside_001	-14.6112	14-hydroxy-5,6-dihydrocaryophyllen-7-one_001	-14.6053	2-((2S,4aS,7R)-1,2,4a,5,6,7,8,8a-octahydro-2-hydroxy-4a-methyl-1-methylenenaphthalen-7-yl)acrylic acid_001	-14.6009
leucosceptoside A_001	-14.5995	conyzanol B_001	-14.5989	2alpha-hydroxyalantolactone_001	-14.5962
2,3-dehydrodichrocepholide A_001	-14.5961	6'-O-p-coumaroyl-7-hydroxyaloin_001	-14.5922	2-piperidineethanamine_001	-14.59
2,5-dimethyl-7-hydroxychromone_001	-14.5781	2,3,4',5,6-pentahydroxybenzophenone-4-C-glucoside_001	-14.5736	ivalin_001	-14.5677
E-coniferin_001	-14.5613	tribuloside_001	-14.5605	eupatolin_001	-14.5579
pectachol_001	-14.5499	leroyine_001	-14.5425	1alpha,3beta-dihydroxy-7alpha,11alpha-germacra-4E,10(14)-dien-12,6alpha-olide_001	-14.5354
8alpha-hydroxy-3-oxo-6betaH,7alphaH,11betaH-germacran-4(14),9(10)-dien-6,12-olide_001	-14.5311	methyl salicylate_001	-14.5302	erythrabysyn II_001	-14.523
methylangolensate_001	-14.5194	5-O-acetyl-inuloxin C_001	-14.5185	13-O-desacetyl-1alpha-hydroxy-afraglaucolide_001	-14.5146
1,2-dehydro-1,10a-dihdropseudoivalin_001	-14.4992	jaeschkeanadiol p-methoxybenzoate_001	-14.4852	(oleoside 11-methyl ester_001	-14.4836
sipholenol J_001	-14.4706	shikimic acid_001	-14.4579	1beta,6alpha-dihydroxy-eudesm-4(15)-ene_001	-14.4573
4beta,8beta-dihydroxy-6alpha-p-hydroxybenzoyl-dauc-9-ene_001	-14.4404	3beta-tropoyloxy-6beta-isovaleroyloxytropane_001	-14.4386	8beta-hydroxycrotocorylifuran_001	-14.4376
methyl-1beta,6alpha,15-trihydroxy-4beta,15-dihydrocostate_001	-14.4249	megalocarpoidolide G_001	-14.4234	corydine N-oxide_001	-14.4201
palustric acid_001	-14.4152	2-hydroxy-5btetahoxy-6(14)-dehydro-5,6-dihydrocaryophyllen-7-one_001	-14.4145	luteolin-7-galactoside_001	-14.4136
6-hydroxy-2-methyl-5-(5'-hydroxy-1'(R),5'-dimethylhex-3'-enyl)-phenol_001	-14.4078	2-phenylethyl-O-beta-xylopyranosyl-(1?2)-beta-glucopyranoside_001	-14.4037	quercetin-3-O-beta-glucopyranoside-7-O-alpha-rhamnopyranoside_001	-14.3991

tomentosin_001	-14.3772	tomentosin_001	-14.3772	tomentosin_001	-14.3772
dihydroxanthyletin_001	-14.3681	jolkinolide E_001	-14.3677	voacangine_001	-14.3662
Molécule 1 - Nom	Molécule 1 - Score	Molécule 2 - Nom	Molécule 2 - Score	Molécule 3 - Nom	Molécule 3 - Score
1beta-hydroxy-3-oxo-eudesman-6alpha,12-olide_001	-14.3595	sphaeropsidone_001	-14.3544	homoaerotionin_001	-14.3499
8alpha-O-(4-hydroxy-2-methylenebutanoyloxy)-11beta,13-dihydro-4-epi-sonchucarpolide_001	-14.3358	8alpha-O-(4-hydroxy-2-methylenebutanoyloxy)-11beta,13-dihydro-4-epi-sonchucarpolide_001	-14.3358	8alpha-O-(4-hydroxy-2-methylenebutanoyloxy)-11beta,13-dihydro-4-epi-sonchucarpolide_001	-14.3358
syringic acid_001	-14.3249	17-acetoxy-dictyodial_001	-14.3246	p-hydroxybenzoic acid_001	-14.3233
sonchuside A_001	-14.3179	5-OH-3-methylnaphtho[2-3-c]furan-4,9-dione_001	-14.3173	(+)-6,6'-dimethoxygossypol_001	-14.3159
methyl-15-hydroxy-8alpha,12alpha-epidioxiabiet-13-en-19-oate_001	-14.3052	naupliolide_001	-14.3003	muqubilin_001	-14.2972
atropine_001	-14.2926	paradoxenoline_001	-14.2908	1beta,5alpha-dihydroxyvoucapane_001	-14.2908
(-)-crotepoxyde_001	-14.2803	kaempferol 3-O-beta-D-glucopyranoside-7-O-alpha-L-rhamnopyranoside_001	-14.2771	3alpha-tropoyloxy-6beta-isovaleroyloxytropene_001	-14.2713
(1S,2S,8S,9R)-4,4,8-trimethyltricyclo[6.3.1.0 ^{1,5}]dodecane-2,9-diol_001	-14.2678	6alpha-angeloyloxy-4alpha,5beta-epoxygermacra-1(10),4,11(13)-trien-8alpha,12-olide_001	-14.2661	benzeneacetic acid, alpha-(hydroxymethyl)_001	-14.2638
alpha-limonene diepoxide_001	-14.2554	9-hydroxylinalyl glucoside_001	-14.2489	4beta-hydroxy-6alpha(p-hydroxybenzoyloxy)-10alpha-angeloxydauc-7-ene_001	-14.2476
cumambrin A_001	-14.2355	cumambrin A_001	-14.2355	cumambrin A_001	-14.2355
11,12-dihydroxy-7-oxo-ent-abieta-8,11,13-trien-16-oic acid methyl ester_001	-14.2204	poliumoside_001	-14.2195	dichrocepholide A_001	-14.2173
7-geranyloxycoumarin_001	-14.217	inuloxin D_001	-14.2158	calodendrolide_001	-14.2158
corchoinoside C_001	-14.215	13-hydroxy-alpha-cyperene_001	-14.2104	4-(methylamino)butyric acid_001	-14.2068
Sargassaceae meroditerpenoid 6_001	-14.1945	(2E)-2-[(thiophen-2-yl)methylidene]-1,6-dioxaspiro[4.5]dec-3-ene_001	-14.1909	methyl angolensate_001	-14.1835
herbolide A_001	-14.1806	5-pentyl-3-methoxy-N-butylaniline_001	-14.1799	6'-hydroxy-beta-cycloauraptene_001	-14.1782
isounedoside_001	-14.1665	1,2-dehydrobeninine_001	-14.161	montanin C_001	-14.1543
3',4'-dimethoxycinnamol_001	-14.1459	isovanillic acid ethyl ester_001	-14.1452	thymol-beta-glucopyranoside_001	-14.1446
4-[(3aR,7S,8aS)-7-methyl-3-methylidene-2-oxo-2H,3H,3aH,4H,7H,8H,8aH-cyclohepta[b]furan-6-yl]-4-hydroxybutan-2-yl acetate_001	-14.1356	artabin_001	-14.1334	2,3-di-O-galloylglucose_001	-14.1295
8alpha-angeloyloxy-4beta,5alpha,10alpha-trihydroxy-1alpha,2alpha-epoxy-11,13-dehydroguaia-6alpha,12-olide_001	-14.121	3,6-ditigloyloxy-7-hydroxytropene_001	-14.1207	tessmannic acid_001	-14.1191
N-alpha,N-alpha-dimethylhistamine_001	-14.1121	janerin diacetate_001	-14.112	vernolide_001	-14.1117
isoxanthanol_001	-14.1032	8-(tetrahydro-3'-methylene-2'-oxofuran-4'-yl)-2,6-dimethylocta-2,6-dienal_001	-14.1015	megalocarpoidolide E_001	-14.1009
3-O-benzoylhosloquinone_001	-14.0974	5-(3-methylbut-2-enyl)-1H-indole_001	-14.0971	peroxyvulgarin_001	-14.097
(3R,5R)-3-methyl-5-(2-oxopropyl)oxolan-2-one_001	-14.0906	3beta-hydroxy-1-oxo-7alpha,11beta-germacra-4Z,10(14)-dien-12,6alpha-olide_001	-14.0873	herbolide B_001	-14.0845
5-hydroxyaloin A_001	-14.0719	cis-dehydrocurvularin_001	-14.0677	3"-O-galloyl-benzyl-D-alpha-L-rhamnopyranosyl-(1?6)-beta-D-glucopyranoside_001	-14.0659
elgonene J_001	-14.0616	1beta,9alpha-dihydroxyeudesm-3,11(13)-dien-5alpha,7alphaH-12,6-olide_001	-14.0613	2-({2-[(5S,7R,10S)-7-hydroxy-10-methyl-6-methylidenespiro[4.5]decan-2-yl]propan-2-yl}oxy)-6-methyloxane-3,4,5-triol_001	-14.0562
tricosanoic acid_001	-14.0548	kandavanolide_001	-14.054	kandavanolide_001	-14.054
5,6-dehydrocalotropagenin_001	-14.0488	4alpha-hydroxy,10alpha-hydroperoxyl,5alphaH,7alphaH,8beta-guaia-1,11(13)-dien-8beta,12-olide_001	-14.047	10alpha-hydroxy-1alpha,4alpha-peroxy-8alpha-valeryloxy-11,13-dehydroguaia-6alpha,12-olide_001	-14.0437

muzigadial_001	-14.0249	ceratinophenol A_001	-14.0247	lupanine_001	-14.0202
2''-glucosyl-8-C-glucosyl-4'-O-methylapigenin_001	-14.0152	cadalene_001	-14.0106	lacitemzine_001	-14.0032
(?)-carnegine_001	-14.001	ekeberin D4_001	-13.997	anthepseudolide_001	-13.9954
6,7-dihydroxy-dihydrolinalool 3-O-beta-glucopyranoside_001	-13.9895	11-hydroxy-7,9(11),13-abietatrien-12-one_001	-13.9893	teusalvin C_001	-13.9849
3-oxo-guaia-1alpha,5alphaH-7(11)-en-6beta,12-olide_001	-13.9769	3alpha-acetylicilic acid methyl ester_001	-13.9735	3alpha-acetylicilic acid methyl ester_001	-13.9735
6-methylsalicylic acid_001	-13.9589	ampelanol_001	-13.9559	1alpha,5beta-dihydroxyeudesm-3-en-6beta,11betaH-12,6-olide_001	-13.9548
8alpha,13-diacetoxy-1-oxo-germacra-4,7(11),10(14)-trien-6alpha,12-olide_001	-13.946	amentadione-1'-methyl ether_001	-13.9449	5-butyl-6-(hydroxymethyl)-4-methoxy-2H-pyran-2-one_001	-13.9413
desacetyl xanthiuminol_001	-13.932	1,13-bis-O-desacetyl-1-oxo-afraglaucolide_001	-13.93	2,3-epoxy-jaeschkeanadiol vanillate_001	-13.9291
desmethyldichlorodiaportin_001	-13.9258	2beta-hydroxyhardwickiic acid_001	-13.9256	(2S,5R)-5-(2-hydroxypropan-2-yl)-2-[(2R)-5-oxohexan-2-yl]cyclohexan-1-one (2-xylopyranoside 2-acetate)_001	-13.9149
diketolinifoliol_001	-13.908	muzigadiolide_001	-13.9073	sedanonic anhydride_001	-13.8991
7-(3,7-dimethylocta-2,6-dienyl)-5-hydroxy-3H-benzofuran-2-one_001	-13.8906	9beta-hydroxy-11beta,13-dihydrozaluzanin C_001	-13.8836	melitensin_001	-13.8811
3-ketotirucall-8,24-dien-21-oic acid_001	-13.8678	arteincultone_001	-13.8659	p-methoxyacetophenone_001	-13.8635
1alpha-hydroxyafraglaucolide_001	-13.8578	(2R,5R)-5-(2-hydroxypropan-2-yl)-2-methyl-2-(4-oxopentyl)cyclohexanone_001	-13.8567	(2R,5R)-5-(2-hydroxypropan-2-yl)-2-methyl-2-(4-oxopentyl)cyclohexanone_001	-13.8567
zapoterin_001	-13.8519	syringaresinol_001	-13.8453	cupressuflavone_001	-13.8439
sonchucarpolide_001	-13.837	sonchucarpolide_001	-13.837	tanzawaic acid F_001	-13.8338
8-epi-inuviscolide_001	-13.8304	farnesiferol A_001	-13.8284	ethuliacoumarin_001	-13.8147
13-hydroxyfeselol_001	-13.8114	apigenin 7-allosyl(1?2)glucoside_001	-13.8089	19-deacetylteuscorodol_001	-13.8065
blephariside A_001	-13.7855	1alpha-acetoxyeudesm-4(15)-en-5alpha,6beta,11betaH-12,6-olide_001	-13.7798	5alpha-hydroxy-4alpha,15-dihydrocistic acid_001	-13.7794
7-hydroxy-6-methyl-hepta-5-en-2-one_001	-13.7735	7-hydroxy-6-methyl-hepta-5-en-2-one_001	-13.7735	7-hydroxy-6-methyl-hepta-5-en-2-one_001	-13.7735
11beta,13-dihydroaguerin B_001	-13.7684	11beta,13-dihydroaguerin B_001	-13.7684	bourbonanone_001	-13.7643
3beta-hydroxyisopimaric acid_001	-13.7557	1beta,8beta-dihydroxyeudesman-3,7(11)-dien-8alpha,12-olide_001	-13.7555	(3R,5S)-3-methyl-5-(2-oxopropyl)oxolan-2-one_001	-13.7528
capillin_001	-13.7477	7,10-diisobutyryloxy-8,9-dihydro-8,9-epoxythymol-isobutyrate_001	-13.7364	11alpha-methoxycurvularin_001	-13.7337
6-epi-1,10-dehydro-10,14-dihydrochrysostamolide acetate_001	-13.7334	coniferyl alcohol_001	-13.7268	methyl-6-acetoxy-9-oxo-1(10)Z,7Z-alpha-humulene-15-oate_001	-13.7249
Molécule 1 - Nom	Molécule 1 - Score	Molécule 2 - Nom	Molécule 2 - Score	Molécule 3 - Nom	Molécule 3 - Score
Aspergillus diketopiperazine 11_001	-13.7176	3-phenylacetoxytropane_001	-13.7132	ferulsinaic acid_001	-13.7065
4beta-dihydroxy-5alpha(H)-guaia-1(10),11(13)-dien-8alpha,12-olide_001	-13.7006	solanidin_001	-13.7004	hardwickiic acid_001	-13.6992
3beta-Hydroxy-6beta-tigloyloxytropane_001	-13.6958	chlorojanerin_001	-13.6956	chlorojanerin_001	-13.6956
7-chloro-8-hydroxy-6-methoxy-3-pentylisocoumarin_001	-13.6877	3-phenylpropyl acetate_001	-13.6791	(+)-salonitenolide_001	-13.6708
teucjaponin A_001	-13.6639	totarolenone_001	-13.6627	(+)-fraxiresinol-1-O-beta-D-glucopyranoside_001	-13.66
chlorohyssopifolin A_001	-13.6547	3beta-angeloyloxy-10beta-hydroxyeremophilenolide_001	-13.6498	bianthrane IV_001	-13.6473
beta-cyclocostunolide_001	-13.6456	(R)-5-(1-hydroxybutyl)-4-methoxy-6-methyl-2H-pyran-2-one_001	-13.6408	ionylideneacetic acid_001	-13.6384
8-desacetylcentaurepensis-8-O-(4-hydroxytiglate)_001	-13.6233	8-desacetylcentaurepensis-8-O-(4-hydroxytiglate)_001	-13.6233	8-desacetylcentaurepensis-8-O-(4-hydroxytiglate)_001	-13.6233

anagryne_001	-13.6144	2-oxotrachyloban-18,19-diol_001	-13.6129	1beta,4beta-dihydroxy-5alphaH,7alphaH,8beta-guaia-10(14),11(13)-dien-8beta,12-olide_001	-13.6114
dehydrocardiopetaline_001	-13.6069	2,6-digalloyl glucose_001	-13.5936	phthalic acid ester_001	-13.5929
2,2,4-trimethyl-5-oxocyclohex-3-enecarboxylic acid_001	-13.5869	episphaeropsidone_001	-13.5846	terretonin_001	-13.5826
2-(p-tolyl)propanal_001	-13.5747	excelside B_001	-13.5736	luteolin 7-glucosylglucuronide_001	-13.5705
14-acetoxy-5,6-dihydrocaryophyllen-7-one_001	-13.5564	3-tigloyloxy-6-acetoxytropane_001	-13.5552	quercetin 3-acetyl-O-rhamnoside_001	-13.5517
2-epi-16-deoxysarcophine_001	-13.5409	8alpha-[2'-hydroxymethyl-2'-butenoyloxy]-dehydromelitsin_001	-13.5382	10alpha-acetoxy-8alpha-angeloyloxy-3beta,4alpha-dihydroxy-1beta,2beta-epoxy-11,13-dehydroguaia-6alpha,12-olide_001	-13.5374
3-hydroxy-6-acetoxytropane_001	-13.5304	1,10,7,8-tetradehydro-asteriscanolide_001	-13.5286	(+,-)-tetramisole_001	-13.525
ent-abieta-8(14),13(15)-dien-16,12-olide_001	-13.52	1alpha,3beta-dihydroxy-7alpha,11betaH-germacra-4Z,9Z-dien-12,6alpha-olide_001	-13.5084	apo-13'-fucoxanthinone_001	-13.5081
8alpha,13-diacetoxy-1alpha-hydroxygermacra-4E,7(11),9Z-trien-6alpha,12-olide_001	-13.5042	aikupikoxide C_001	-13.503	littorine_001	-13.4989
p-coumaryl alcohol_001	-13.4904	matricarin_001	-13.4864	13,17-dihydroxy-labda-8,14-diene-17-O-xylopyranoside_001	-13.4849
3beta-acetoxy-5alpha,7-dihydroxycarvotacetone_001	-13.476	algerianolide_001	-13.4751	7-O-tigloylplatynecine_001	-13.4737
totalol_001	-13.4716	ent-abieta-8,11,13-trien-11,16-diol_001	-13.4698	1alpha-acetoxy-5beta,8alpha-dihydroxyeudesm-4(15)-en-6beta,11betaH-12,6-olide_001	-13.4676
10beta-hydroxy-11beta,13-dihydrocichopumilide_001	-13.4613	8alpha-isobutanoyloxy-1alpha,4alpha,10alpha-trihydroxy-2beta,3beta-epoxy-11,13-dehydroguaia-6alpha,12-olide_001	-13.448	(6S,7S,10R)-7,10-epoxy-3-hydroxy-2,6,10-trimethyl-dodeca-1,3,11-trien-5-one_001	-13.4425
2-O-acetylchlidanthine_001	-13.4336	patuletin-7-O-glucoside_001	-13.4231	patuletin-7-O-glucoside_001	-13.4231
3-methylfilicinic acid_001	-13.4169	6-O-methylancistrocladinine_001	-13.4154	(+)-onopordopicrin_001	-13.4024
4-epi-abietic acid_001	-13.3935	corydine_001	-13.3928	(Z)-volkendousin_001	-13.3886
10alpha-hydroxy-1alpha,2alpha,3alpha,4alpha-diepoxy-8-alpha-methylbutanoyloxy-11,13-dehydroguaia-6alpha,12-olide_001	-13.3735	1beta-hydroxy-15-oxo-8alpha-(2-(hydroxymethyl)acroyloxy)eudesm-11(13)-en-6alpha,12-olide_001	-13.3671	1beta-hydroxy-15-oxo-8alpha-(2-(hydroxymethyl)acroyloxy)eudesm-11(13)-en-6alpha,12-olide_001	-13.3671
voucapane-18,19-diol_001	-13.3647	9-angeloylretronecine_001	-13.3534	(7S,8R)-5-methoxy-4-(O-beta-D-glucopyranosyl)dehydrodiconiferyl alcohol_001	-13.349
2,3-dihydro-5,7-dihydroxy-3-((3Z,6Z,9Z,12Z,15Z)-octadeca-3,6,9,12,15-pentaenyl)chromen-4-one_001	-13.3369	(+)-sclerotioramin_001	-13.332	2-({2-[(5S,7S,10S)-7-hydroxy-10-methyl-6-methylidenespiro[4.5]decan-2-yl]propan-2-yl}oxy)-6-methyloxane-3,4,5-triol_001	-13.3317
24,25-dehydroprecysterone_001	-13.3241	(+)-austrosene_001	-13.3153	dihydroridentin_001	-13.3137
1alpha,3beta-dihydroxy-9beta,10beta-epoxy-7alpha,11betaH-germacra-4Z-en-12,6alpha-olide_001	-13.302	11,13-dihydro-onopordopicrin_001	-13.2962	11,13-dihydro-onopordopicrin_001	-13.2962
14-chloro-10beta-hydroxy-10(14)-dihydrozaluzanin D_001	-13.2958	14-chloro-10beta-hydroxy-10(14)-dihydrozaluzanin D_001	-13.2958	isoarnottinin-7-O-beta-D-glucoside_001	-13.2815
3beta-hydroxy-8alpha-(3,4-dimethoxybenzoyloxy)-11beta,13-dihydro-1alphaH,5alphaH,6betaH,7alphaH-guai-4(15),10(14)-dien-6,12-olide_001	-13.2739	3beta-hydroxy-8alpha-(3,4-dimethoxybenzoyloxy)-11beta,13-dihydro-1alphaH,5alphaH,6betaH,7alphaH-guai-4(15),10(14)-dien-6,12-olide_001	-13.2739	3beta-hydroxy-8alpha-(3,4-dimethoxybenzoyloxy)-11beta,13-dihydro-1alphaH,5alphaH,6betaH,7alphaH-guai-4(15),10(14)-dien-6,12-olide_001	-13.2739
(1R,3S,4S,5S,6S,7R,8S)-4beta-(chloromethyl)-3beta,4alpha-dihydroxy-8alpha-(3-formyl-2-methyl-propenoyloxy)-1alphaH,5alphaH,6betaH,7alphaH-guai-10(14),11(13)-dien-6,12-olide_001	-13.2637	11,13-dihydroridentin_001	-13.2616	zataroside B_001	-13.2566
6alpha-angeloyloxy-1alpha-hydroxygermacra-4E,9Z,11-trien-8alpha,12-olide_001	-13.2502	6alpha-angeloyloxy-1alpha-hydroxygermacra-4E,9Z,11-trien-8alpha,12-olide_001	-13.2502	quercetin-3-(2''-galloylglucoside)_001	-13.2452

zataroside A_001	-13.2438	5-(2-(furan-3-yl)ethyl)-3,4,4a,5,6,7,8,8a-octahydro-8-hydroxy-5,6,8a-trimethylnaphthalene-1-carboxylic acid_001	-13.241	retronecine_001	-13.2393
suspensolide A_001	-13.2222	12-acetoxy-5beta-methoxy-6(14)-dehydro-5,6-dihydrocaryophyllen-7-one_001	-13.2199	bidwillon A_001	-13.2193
(-)-epicatechin (4beta?8) (-)-epicatechin_001	-13.2027	myrtenol beta-D-glucopyranoside_001	-13.2016	1alpha-hydroxy-8alpha,13-diacetoxy-germacra-4,7(11),9-trien-6alpha,12-olide_001	-13.2011
(+)-sclerotiorin_001	-13.1947	(+)-(2S,3R)-diacetoxy-1-benzoyloxymethylenecyclohex-4,6-diene_001	-13.1929	isocorydine N-oxide_001	-13.1926
hyrtiosenolide B_001	-13.1843	3alpha,12alpha-dihydroxy-ent-8(14),15-isopimaradien-18-al_001	-13.182	saharanolide A_001	-13.1734
agarospirol_001	-13.1686	11-hydroxyguaia-4,6-diene_001	-13.168	5-O-beta-glucopyranosylcarvotacetone_001	-13.165
4beta,6alpha-dihydroxydauc-8-ene-10-one_001	-13.1535	4-isopropylbenzaldehyde_001	-13.1458	schaftoside_001	-13.1448
1beta-hydroperoxyl,4alpha-hydroxy-5alphaH,7alphaH,8betaH-guaia-10(14),11(13)-dien-8alpha,12-olide_001	-13.1337	zaluzanin D_001	-13.1325	zaluzanin D_001	-13.1325
(1R,3S,4S,5S,6S,7R,8S)-4beta-(chloromethyl)-3beta,4alpha-dihydroxy,8alpha-(sarracenoyloxy)-1alphaH, 5alphaH,6betaH,7alphaH-guai-10(14),11(13)-dien-6,12-olide_001	-13.125	(1R,3S,4S,5S,6S,7R,8S)-4beta-(chloromethyl)-3beta,4alpha-dihydroxy,8alpha-(sarracenoyloxy)-1alphaH, 5alphaH,6betaH,7alphaH-guai-10(14),11(13)-dien-6,12-olide_001	-13.125	(1R,3S,4S,5S,6S,7R,8S)-4beta-(chloromethyl)-3beta,4alpha-dihydroxy,8alpha-(sarracenoyloxy)-1alphaH, 5alphaH,6betaH,7alphaH-guai-10(14),11(13)-dien-6,12-olide_001	-13.125
1alpha,5beta-dihydroxyeudesm-4(15)-en-6beta,11betaH-12,6-olide_001	-13.1171	ugandensolide_001	-13.1163	chlorovenidin_001	-13.1148
Aspergillus diketopiperazine 10_001	-13.1056	chiliadenol D_001	-13.0904	quebrachitol_001	-13.0866
elgonene E_001	-13.0504	N-methylpretrichodermamide B_001	-13.0439	tanzawaic acid B_001	-13.0404
elgonene H_001	-13.0333	alpha-senepoxide_001	-13.0315	(R)-3,6-dihydro-6-((S)-1-((2S,5R)-tetrahydro-5-methyl-5-vinylfuran-2-yl)ethyl)-3,3-dimethyl-1,2-dioxine_001	-13.0279
antirrhinoside_001	-13.0158	macrophyllin_001	-13.0147	inermynoside C_001	-13.0144
ingenol-3,5,20-triacetate_001	-13.0039	morroniside_001	-13.0037	6-hydroxymethyl-hepta-6-ene-2,5-dione_001	-13.0019
2alpha-hydroxyisocostic acid_001	-12.9994	2alpha-hydroxyisocostic acid_001	-12.9994	2alpha-hydroxyisocostic acid_001	-12.9994
alpha-copaen-11-ol_001	-12.9888	bakkenolide A_001	-12.9879	3beta,8alpha-dihydroxyguaia-4(15),10(14)-dien-1alpha,5alpha,6beta,11betaH-12,6-olide 8-O-[2(S)-3-hydroxy-2-methylpropionate]_001	-12.9841
Molécule 1 - Nom	Molécule 1 - Score	Molécule 2 - Nom	Molécule 2 - Score	Molécule 3 - Nom	Molécule 3 - Score
rabaichromone_001	-12.9831	methyl-15-hydroperoxy-8alpha,12alpha-epidioxiabiet-13-en-19-oate_001	-12.9816	7-tiglyl-9-dihydroxy-seneciylretronecine_001	-12.9798
(Z)-tagetone_001	-12.9524	2-((2R,4aR)-1,2,3,4,4a,5,6,8a-octahydro-4a,8-dimethylnaphthalen-2-yl)acrylic acid_001	-12.9477	2-((2R,4aR)-1,2,3,4,4a,5,6,8a-octahydro-4a,8-dimethylnaphthalen-2-yl)acrylic acid_001	-12.9477
beta-ionone_001	-12.9426	(1R,4S,8aR)-4,8a-dimethyl-6-(propan-2-yl)-1,2,3,4,4a,7,8,8a-octahydronaphthalene-1,4,5-triol_001	-12.9383	(1R,4S,8aR)-4,8a-dimethyl-6-(propan-2-yl)-1,2,3,4,4a,7,8,8a-octahydronaphthalene-1,4,5-triol_001	-12.9383
alpha-costic acid_001	-12.933	nilocitin_001	-12.9315	1beta,4b,7a-trihydroxy-8,9-eudesmene_001	-12.9272
syringin_001	-12.9211	8alpha-isobutanoyloxy-4beta,5alpha,10alpha-trihydroxy-1alpha,2alpha-epoxy-11,13-dehydroguaia-6alpha,12-olide_001	-12.9184	Tribulus saponin aglycone 2_001	-12.9177
artemisin_001	-12.8989	nagilactone F_001	-12.8975	3-acetoxy-5,7-dihydroxycarvotacetone_001	-12.8961
9-deoxymuzigadial_001	-12.8803	1beta,10alpha,4alpha,5beta-diepoxy-8alpha hydroxy-glechoman-8alpha,12-olide_001	-12.8792	ferruginol_001	-12.879

3alpha-tigloyloxy-6-isovaleroyloxy-7-hydroxytropone_001	-12.8654	2-(nonan-8-one)-4-methoxy-quinoline_001	-12.8651	ferugin_001	-12.8603
(2R,3S,6R)-2,6-dimethyl-3,6-epoxyoct-7-enoic acid_001	-12.8507	(S)-alpha-methoxy-alpha-trifluoromethyl-alpha-phenylacetate (MTPA) of inuloxin D_001	-12.8448	(2R,3R)-spiro-2,3-dimethyl-1,4-dioxolane-5,1',3'-cyanocyclopentane_001	-12.844
farnesylscopoletin_001	-12.8391	guaiol_001	-12.8385	5alpha,12-dihydroxy-5,6-dihydrocaryophyllen-7-one_001	-12.8348
trans-piperitol acetate_001	-12.8308	epiglobulol_001	-12.8208	3beta-tigloyloxytropone_001	-12.8198
gentisylquinone_001	-12.8123	elgonene C_001	-12.8096	cuparene_001	-12.8066
oplopanoyl acetate_001	-12.7979	4-(2-hydroxyethyl) phenol_001	-12.7947	aranorosinol A_001	-12.7939
9alpha,13alpha-epidioxiabiet-8(14)-en-18-ol_001	-12.7664	kaempferol-3-glucuronide-7-glucoside_001	-12.7503	11beta,13-dihydrolactucin-8-O-acetate_001	-12.7477
sinaicin_001	-12.7353	sinaicin_001	-12.7353	2-desoxo-2,4-bis(acetyloxy)tomentosin_001	-12.7322
salonitenolide 8-O-(4'-acetoxy-5'-hydroxyangelate)_001	-12.7298	salonitenolide 8-O-(4'-acetoxy-5'-hydroxyangelate)_001	-12.7298	1alpha-hydroxyeudesm-4(15)-en-5alpha,6beta,11betaH-12,6-olide_001	-12.7278
rosifoliol_001	-12.7122	3beta-11-dihydroxyisoiphion-4-one_001	-12.706	cryptanol_001	-12.7017
1alpha,3beta,10alpha-trihydroxy-7alpha,11betaH-germacra-4Z-en-12,6alpha-olide_001	-12.6761	carumoside_001	-12.671	8alpha-O-(4-hydroxy-2-methylenebutanoyloxy)melitensin_001	-12.6665
aguerin A_001	-12.6594	aguerin A_001	-12.6594	macommelinol_001	-12.659
2-methoxyphenol_001	-12.6534	cleistodienol A_001	-12.6464	erucifoline (Z)_001	-12.6455
diaz derivative of Inuloxin A_001	-12.64	rhombifoline_001	-12.6378	foetidin_001	-12.6203
13,17-dihydroxy-labda-8,14-diene-17-O-xylopyranoside_001	-12.6151	kaempferol 3-O-alpha-L-rhamnoside-7-O-beta-D-galacturonide_001	-12.5994	8alpha-hydroxy-13-epi-pimar-16-en-6,18-olide_001	-12.5956
3beta-hydroxygermacra-1(10),4-dien-6alpha,12-olide_001	-12.5852	elgonene G_001	-12.5815	mannitol_001	-12.5781
transtaganolide F_001	-12.5694	isocostic acid_001	-12.5638	isocostic acid_001	-12.5638
15alpha-hydroxymansuminone_001	-12.5613	3-(3'-acetoxy-2'-hydroxy-2'-methyl butyryl)-cuahtemone_001	-12.5504	1beta,6alpha-dihydroxyeudesma-4(15),11(13)-dien-8alpha,12-olide_001	-12.5474
coladin_001	-12.5358	auroside_001	-12.5352	benzoic acid 4-O-beta-glucoside_001	-12.5346
7-angelylretronecine_001	-12.5127	9-hydroxyisohexenoylretronecine_001	-12.5036	Sargassaceae meroditerpenoid 8b_001	-12.501
costic acid_001	-12.4887	costic acid_001	-12.4887	3,4,5-trimethoxyphenyl-beta-D-glucopyranoside_001	-12.4803
crotohalimaneic acid_001	-12.4676	6-O-angeloyl-9alpha-hydroxyludovicin A_001	-12.4648	cleistenechlorohydrin A_001	-12.4645
phenylacetoneitrile_001	-12.4598	ethyl mandelate_001	-12.4575	dictyol H_001	-12.4567
(2Z,4E)-3,7-dimethylocta-2,4,6-trienal_001	-12.4298	megalocarpoidolide F_001	-12.4168	(1R,2R,3R,6R,7R)-1,2,3,6,7-pentahydroxy-1-acetoxy-bisabol-10(11)-ene_001	-12.4091
13-O-desacetyl-1beta-hydroxyafraglaucolide_001	-12.4049	aguerin B_001	-12.404	aguerin B_001	-12.404
13-acetoxy-9beta-hydroxy-1beta,10alpha-epoxygermacra-4,7(11)-dien-6alpha,12-olide_001	-12.3939	(+)-vasicine_001	-12.3939	apigenin 7-O-beta-glucoside 3'',4''-diacetate_001	-12.3901
ipolamiide_001	-12.3755	2,5-dihydroxy-3-methyl-6-undecyl-1,4-benzoquinone_001	-12.3703	3'5'-dihydroxy-4-(2-hydroxy-ethoxy) resveratrol-3-O-  -rutinoside_001	-12.3584
(1S,3S,5R,6R,7R,8S)-8-angelyloxy-3-hydroxyguai-3(15),10(14),11(13)-trien-6,12-olide_001	-12.3551	(1R,5S,8R,10S,11R)-11-hydroxy-1-isoprenyl-8-methyl-3,6-dioxo-5,8-epoxycyclotetradec-12-ene 10,12-carbolactone_001	-12.3521	gymnamide_001	-12.3512
(2E)-2-(hexa-2,4-dien-1-ylidene)-1,6-dioxaspiro[4.5]dec-3-ene_001	-12.3282	(S,5Z,8Z,11Z,13E,17Z)-15-hydroxy-1-(2,4,6-trihydroxyphenyl)-15-methylcosa-5,8,11,13,17-pentaen-1-one_001	-12.3281	3-hydroxybenzyl alcohol_001	-12.3241
1beta,8alpha-dihydroxy-eudesm-4-en-6beta,7alpha,11betaH-6-olide_001	-12.3203	safranal_001	-12.3194	marrubiin_001	-12.3087
7-acetylneotrichilenone_001	-12.2972	(4R,6R)-6-hydroxypiperitone_001	-12.2966	(-)-trans-sobrerol_001	-12.2947
lamiide_001	-12.2866	uguenensene_001	-12.2726	benzoic acid 4-O-alpha-rhamnosyl-(1?2)-beta-glucoside_001	-12.2715

(2E,5R,8S)-2-(penta-2,4-dien-1-ylidene)-1,6-dioxaspiro[4.5]dec-3-en-8-yl acetate_001	-12.2611	chrysanthene_001	-12.2586	dichloroverongiaquinol_001	-12.257
10beta-hydroxyeremophilanolide_001	-12.2378	ingenol-20-O-octanoate_001	-12.2345	oxyphyllanol_001	-12.2291
3beta-acetoxy-5alpha-(2alpha-hydroxyethyl)acryloyloxy-7-hydroxycarvotacetone_001	-12.2158	5beta,12-dihydroxy-5,6-dihydrocaryophyllen-7-one_001	-12.2137	(Z)-hex-3-en-1-ol O-beta-D-xylopyranosyl-(1''2'')-beta-D-glucopyranoside_001	-12.2082
2-desoxo-2-hydroxy-8-epi-tomentosin_001	-12.2053	4,5-di-p-trans-coumaroylquinic acid_001	-12.2052	dibutylphthalate_001	-12.2038
3,6-ditigloyloxytropene_001	-12.1671	(2E,4E)-3,7-dimethylocta-2,4,6-trienal_001	-12.1657	15-hydroxy-1(10),4-germacra-1(10),4-dien-(l 2,6);(14,8)-diolide_001	-12.1588
hautriacid_001	-12.1524	10beta-hydroxycichopumilide_001	-12.1518	rhamnitol 3-O-beta-neohesperidoside_001	-12.1458
isoaromadendrene oxide_001	-12.1433	13,14,15- trihydroxylabd-8,17-ene_001	-12.1428	8-hydroxykaempferol 8-methyl ether 3-O-beta-glucopyranoside-7-O-alpha-rhamnopyranoside_001	-12.1414
aranosinol B_001	-12.1235	isointermedeol_001	-12.1207	(ent)-16beta,17-dihydroxykauran-20-oic acid_001	-12.1196
1-O-3,4-dimethoxyphenylethyl-4-O-3,4-dimethoxy cinnamoyl-beta-D-glucopyranose_001	-12.0943	2,10-diacetyl-8-hydroxyferutriol-6-anisate_001	-12.089	1alpha,4alpha,5alpha-trihydroxyeudesm-6beta,11betaH-12,6-olide_001	-12.0858
(E)-methyl-3-(5-butyl-1-hydroxy-2,3-dimethyl-4-oxocyclopent-2-enyl)acrylate_001	-12.0738	retroisosenine_001	-12.0713	delta-tocopherol_001	-12.0686
caryophyllene oxide_001	-12.057	thunalside_001	-12.0521	eudesm-7(11)-en-4-ol_001	-12.0519
Molécule 1 - Nom	Molécule 1 - Score	Molécule 2 - Nom	Molécule 2 - Score	Molécule 3 - Nom	Molécule 3 - Score
Sargassaceae meroditerpenoid 7_001	-12.0425	rhamnetin 3-O-beta-neohesperidoside_001	-12.0413	levopimaric acid_001	-12.0357
1beta-hydroperoxy-9beta-acetoxygermacra-4,10(14)-dien-6beta,11betaH-12,6-olide_001	-12.0321	jasomontanone_001	-12.0291	hypolaetin 4'-methyl ether 8-O-glucuronide_001	-12.0234
aloeresin A_001	-12.0046	glabratephrin_001	-12.0036	argentolide B_001	-11.9986
4-chloro-2-(hepta-1,3,5-trien-1-yl)-phenol_001	-11.9918	4beta,17alpha,27-trihydroxy-1-oxo-22-R-witha-2,5,24-trienolide_001	-11.9905	4 t-butyl-2-(dimethyl benzyl) phenol_001	-11.9903
(106) isorhamnetin 3-O-(6''-E-p-coumaroyl)-beta-D-glucopyranoside_001	-11.9754	elemicin_001	-11.9747	pimara-7,15-dien-3beta,18-diol_001	-11.9706
retusolide A_001	-11.9617	6alpha-hydroxy-4beta,5alpha-epoxygermacra-1(10),4,11(13)-trien-8alpha,12-olide_001	-11.9612	3-alpha-hydroxycativic acid_001	-11.9535
isoacteoside_001	-11.9474	6,7-dihydroxy-dihydrolinalool 7-O-beta-glucopyranoside_001	-11.9434	1beta,3beta-dihydroxy-7alpha,11betaH-germacra-4Z,9Z-dien-12,6alpha-olide_001	-11.9345
cis-14-nor-muulol-5-en-4-one_001	-11.9192	artemin_001	-11.9109	25-dehydroxy-12-epi-deacetylscalarin_001	-11.9084
apo-9'-fucoxanthinone_001	-11.8852	6-oxo-8-hydroxy-santolina-1,4-diene_001	-11.8812	dihydro-p-coumaric acid_001	-11.8693
1beta,8alpha-dihydroxygermacra-4,10(14),11(13)-trien-6alpha,12-olide_001	-11.8575	tanzawaic acid H_001	-11.8475	3-(1-hydroxyethyl)-4-methyl dihydrofuran-2(3H)-one_001	-11.8453
scopolin_001	-11.8242	tropinone_001	-11.8202	1beta,4beta-dihydroxy-11,12,13-trinor-8,9-eudesmen-7-one_001	-11.8139
pinocampone isomer_001	-11.8059	aikupikoxide B_001	-11.8026	5-hydroxy-5,6-secocaryophyllen-6-one_001	-11.7943
chrysoeriol 7-rutinoside_001	-11.7742	isophrone_001	-11.7737	neoabietic acid_001	-11.7721
3beta-hydroxysandaracopimaric acid_001	-11.7599	jasonol_001	-11.7587	ent-kaurane-3beta,16beta,17-triol_001	-11.7552
dichrocepholide B_001	-11.755	longiverbenone_001	-11.7536	beta-senepoxide_001	-11.7501
12-acetoxy-14-methoxy-5E-caryophyllen-7-one_001	-11.7416	1beta,4beta,6beta-trihydroxyeudesmane_001	-11.7405	8-methoxygenistein 7-O-alpha-L-rhamnoside 4'-O-beta-D-glucoside_001	-11.739
(S)-MTPA-ester or methyl (2E,6E,10R)-10,11-dihydroxy-7,9,11- trimethyl-2,6-dodecadienoate_001	-11.7252	lotusine G_001	-11.7188	kaempferol 3-O-(6''-alpha-L- rhamnopyranosyl)-beta-D-glucopyranoside-7-O-alpha-L-rhamnopyranoside_001	-11.7148

3beta-hydroxy-8alpha-(3-hydroxyisobutyryloxy)guaia-4(15),10(14),11(13)-trien-6alpha,12-olide_001	-11.7042	5beta,9beta-dihydroxy-1-oxo-germacra-1(10),4(15)-dien-12,6-olide_001	-11.7019	methyl-3alpha,5alpha,8alpha,8alpha,10alphaH-asteriscan-15-oate_001	-11.6992
sootepenol B_001	-11.6888	8alpha-angeloyloxy-5alpha-chloro-4beta,10alpha-dihydroxy-1alpha,2alpha-epoxy-11,13-dehydroguaia-6alpha,12-olide_001	-11.6865	methyl (2E,6E,10R)-10,11-dihydroxy-3,7,11-trimethyl-2,6-dodecadienoate_001	-11.6833
galanthine_001	-11.6789	2'-O-formoylaloetin_001	-11.6777	22-oxocysterone_001	-11.6758
2,7,7-trimethylcyclohepta-2,4-dien-1-one_001	-11.6635	1beta,4beta-dihydroxy-5alpha(H)-guaia-10(14),11(13)-dien-8alpha,12-olide_001	-11.6605	13,17-dihydroxy-labda-8,14-diene-17-O-xylopyranoside_001	-11.6572
nor beta-calamenene_001	-11.6511	lucenin III_001	-11.6506	beta-anhydroepidigitoxigenin_001	-11.6439
6,7-dehydro-3-tigloyloxytropene_001	-11.6293	2-[penta-1,3-diyn-1-yl]-5-[3,4-dihydroxy-but-1-yn-1-yl]thiophene_001	-11.6236	microstegiol_001	-11.621
repin monoacetate_001	-11.6099	1beta,10alpha-epoxyhaageanolide_001	-11.6068	elemacarmarin_001	-11.606
kaempferol 3-rhamnogalactoside_001	-11.6046	isopulegone_001	-11.6037	(-)-methylperillate_001	-11.5969
alpha-eudesmol (2-xylopyranoside 2-acetate)_001	-11.5932	15-O-octyllatrunculin B_001	-11.5923	kaempferol 3-O-robinobioside_001	-11.5907
12-epi-crocorylifuran_001	-11.5794	hypostenonol A_001	-11.5737	vomifoliol_001	-11.573
3,6-dihydroxytropene_001	-11.569	6beta-isobutyloxy-1beta,4alpha-dihydroxy-9-alpha-tigloyloxyeudesm-11(13)-en-5alpha,7alpha,8alpha,12-olide_001	-11.565	methyl-9-oxo-1(10)Z,7E-alpha-humulene-15-oate_001	-11.5628
(7Z)-7-(hexa-2,4-diyn-1-ylidene)-1,6-dioxaspiro[4.4]nona-2,8-dien-4-yl acetate_001	-11.5566	filifolene_001	-11.5555	3beta-O-(2-methylbutyryl)-moroccolide A_001	-11.546
cebellin F_001	-11.5401	cebellin F_001	-11.5401	intermedeol_001	-11.5323
8alpha-O-(4-acetoxy-5-hydroxyangeloyl)-11beta,13-dihydrocnicin_001	-11.5161	8alpha-O-(4-acetoxy-5-hydroxyangeloyl)-11beta,13-dihydrocnicin_001	-11.5161	8alpha-O-(4-acetoxy-5-hydroxyangeloyl)-11beta,13-dihydrocnicin_001	-11.5161
8-benzoyl-ingol-3,12-diacetate_001	-11.5133	2''-alpha-L-rhamnopyranosyl-hyperin_001	-11.5103	trichodesmine_001	-11.5075
8-O-acetylharpagide_001	-11.4962	2,3-dihydro-7-hydroxy-5-methyl-3-((3Z,6Z,9Z,12Z,15Z)-octadeca-3,6,9,12,15-pentaenyl)chromen-4-one_001	-11.4931	asteriscunolide B_001	-11.491
(+)-cnicin 4'-acetate_001	-11.4852	3,5,7-trihydroxy-carvotacetone_001	-11.48	3beta-tigloyloxy-6-isovaleroyloxy-7-hydroxytropene_001	-11.4687
sennecicannabine_001	-11.4641	alpha-tumerone_001	-11.4622	1beta-angeloyloxy-9alpha-hydroxyeudesm-3,11(13)-dien-5alpha,7alphaH-12,6-olide_001	-11.4592
13-acetoxy-17-hydroxy-labda-8,14-diene-17-O-(xylopyranoside triacetate)_001	-11.4502	bianthrane III_001	-11.4392	andrographolide_001	-11.4387
rephienynol_001	-11.4355	1beta,6beta-dihydroxyvoucapane 19beta-methyl ester_001	-11.4348	voucapan-5-ol_001	-11.4348
ent-18-acetoxy-3beta,7alpha-dihydroxykaur-15-en-17-ol_001	-11.4186	jacozine_001	-11.4177	romalea allene_001	-11.4124
methyl 4-hydroxybenzoate_001	-11.4048	apigenin 7-O-(6''-p-coumaryl)glucoside_001	-11.4026	famesylic acid_001	-11.4009
2-acetyl-jaesckeanadiol-6-anisate_001	-11.3943	7-isovaleryloxy-10-isobutyryloxy-8,9-dihydro-8,9-epoxythymol-isobutyrate_001	-11.3917	isopulegyl acetate_001	-11.3891
6acetoxy-hydroxyguaia-1(10),4(15),11(13)-trien-8alpha,12-olide_001	-11.3735	4alpha,10alpha-dihydroxy-1alpha,2alpha-epoxy-5alpha,7alphaH-guaia-11(13)-en-12,6alpha-olide_001	-11.373	isopimar-8(14)-en-15,16-diol_001	-11.3698
(E)-alpha-ionone_001	-11.3632	(E)-alpha-ionone_001	-11.3632	quercetin-3-glucoside-7-galactoside_001	-11.3584
19-desoxy-15-chlorojanerin_001	-11.35	19-desoxy-15-chlorojanerin_001	-11.35	siphonellin C_001	-11.3478
elgonene A_001	-11.3217	citroside A_001	-11.3213	cis-muurolo-5-en-4-alpha-ol_001	-11.3172
cladiellisin_001	-11.3097	4-epi-vulgarin_001	-11.3054	isorhamnetin 3-rutinoside_001	-11.2978
6beta,10beta-dihydroxy-8beta-methoxyeremophilanolide_001	-11.2955	crocorylifuran-2-one_001	-11.2946	verticillarone_001	-11.2899
1beta-hydroxy-8-epi-inuvicolide_001	-11.2815	15,16-dihydroxy-7,11-dioxopimar-8(9)-ene_001	-11.2808	(4R, 6S)-6-hydroxypiperitone_001	-11.2804
ferulagol A_001	-11.2743	pristimerin_001	-11.2637	kaempferol-3-gentiobioside_001	-11.2536

14beta-15alpha-dihydroxy-Delta4pregnene-3,20 dione_001	-11.2389	2-(p-tolyl)propan-2-ol_001	-11.2379	isorhamnetin 3-O-neohesperidoside_001	-11.2319
cleistenediol A_001	-11.229	3beta-hydroxyteucroxylepin_001	-11.2246	(1R,4S,6R,7R,8S)-4,11-dimethyl-8-(propan-2-yl)-5,12-dioxatricyclo[9.1.0.04,6]dodecan-7-ol_001	-11.2187
Molécule 1 - Nom	Molécule 1 - Score	Molécule 2 - Nom	Molécule 2 - Score	Molécule 3 - Nom	Molécule 3 - Score
(20R)-3beta,16beta-trihydroxydammar-24-ene_001	-11.2173	15,16,17-trihydroxypimar-8(9)-ene_001	-11.2093	methyl-6-acetoxy-9-oxo-1(10)Z,7E-alpha-humulene-15-oate_001	-11.1999
pinocarvone_001	-11.1829	verbenone_001	-11.1807	verbenone_001	-11.1807
daucoguaianolactone B_001	-11.1644	xysmalogenin_001	-11.1441	aucubin_001	-11.122
eudesm-3-ene-1,6-diol_001	-11.1055	18-hydroxyvoucapan-19-al_001	-11.1019	angustifolioside B_001	-11.1017
asteriscunolide D_001	-11.0943	chiliadenol A_001	-11.0924	stemmin C_001	-11.0922
hugorosenone_001	-11.0802	3alpha,18-dihydroxytrachylobane_001	-11.0712	parthenolide_001	-11.0642
platambin-1,6-dione_001	-11.0514	3beta,8alpha-dihydroxyguaia-4(15),10(14)-dien-6alpha,12-olide_001	-11.0309	3beta,8alpha-dihydroxyguaia-4(15),10(14)-dien-6alpha,12-olide_001	-11.0309
salonitenolide-9-O-(2-hydroxymethyl)but-2-enoate_001	-11.0074	salonitenolide-9-O-(2-hydroxymethyl)but-2-enoate_001	-11.0074	salonitenolide-9-O-(2-hydroxymethyl)but-2-enoate_001	-11.0074
methyl-9-oxo-1(10)Z,7Z-alpha-humulene-15-oate_001	-11.0013	ancistrotanzenine B_001	-11.0005	5,6-dehydrolupanine_001	-11.0002
8alpha-isobutanoyl-10alpha-hydroxy-1alpha,2alpha,3alpha,4alpha-diepoxy-11,13-dehydroguaia-6alpha,12-olide_001	-10.9936	13-epi-pimara-8,16-diene-6alpha,18-diol_001	-10.9798	beta-thujone_001	-10.9776
costic acid methyl ester_001	-10.9644	2-(butoxymethyl)-2-(2,4-dimethylphenyl)oxirane_001	-10.964	3-O-alpha-arabinopyranosyl-(1?6)-beta-glucopyranosyl-(1?6)-beta-glucopyranosyl-1-octen-3-ol_001	-10.9582
8beta-(2-methylbutyryloxy)-11,13-dihydroartecanin_001	-10.9516	isobutylamide_001	-10.9504	trans-p-2-menthen-1-ol_001	-10.9476
glutinosin_001	-10.9135	N-methylcorydine_001	-10.9101	resorcinol derivative, C9 chain_001	-10.9071
asteriscunolide A_001	-10.8977	3beta-acetoxy-1beta,4alpha,13-trihydroxyeudesm-7(11)-en-6alpha,12-olide_001	-10.8945	humulene oxide_001	-10.8926
calamenene_001	-10.8846	6beta-hydroxylupanine_001	-10.8814	kaempferol-3-gentiobioside-7-glucoside_001	-10.8813
1beta,4beta,7alpha-trihydroxyeudesmane_001	-10.8649	Tribulus saponin aglycone 1_001	-10.8565	11,13-dihydro-salonitenolide-9-O-(4-hydroxy-2-methyl)but-2-enote_001	-10.8538
cleistenediol D_001	-10.8529	daturametelin A_001	-10.8502	p-menth-3-ene-1,2-diol_001	-10.8494
1beta acetoxy, 8beta-hydroxyeudesman-4(15),7(11)-dien-8alpha,12-olide_001	-10.844	trihydroxy octadecadienoic acid_001	-10.8416	trihydroxy octadecadienoic acid_001	-10.8416
1,2-benzene dicarboxylic acid, diisooctyl ester_001	-10.8365	thunbergol_001	-10.8364	homalomenol C_001	-10.8319
O-methyl guaianediol_001	-10.8038	olibanumol A_001	-10.8037	1beta,5,12-trihydroxygermacra-1(10),4(15),11(13)-triene_001	-10.8019
repin_001	-10.7859	repin_001	-10.7859	cinnamyl isovalerate_001	-10.7669
retusolide D_001	-10.7437	alloaromadendrene oxide-(1)_001	-10.741	alpha-acorenol_001	-10.7377
camphor_001	-10.7208	6-hydroxybisabol-2-en-1-one_001	-10.7134	quercetin 3-acetyl-O-glucoside_001	-10.7077
harpagide_001	-10.6931	17, 19-dihydroxy-3beta-acetoxyspongia-13(16),14-dien-2-one_001	-10.6919	p-menth-1-ene-3,4-diol 4-O-beta-glucopyranoside_001	-10.6894
roseostachenone_001	-10.668	14-acetoxy-12-hydroxy-5,6-dihydrocaryophyllen-7-one_001	-10.6659	4alpha-hydroxy-homalomenol C_001	-10.6641
N-butylaniline_001	-10.6621	balchanolide_001	-10.6616	6alpha-angeloyloxy-1beta,4alpha-dihydroxyeudesm-11(13)-en-8alpha,12-olide_001	-10.6593
linalool oxide_001	-10.6542	linalool oxide_001	-10.6542	linalool oxide_001	-10.6542
menthone_001	-10.6401	delcosine 14-O-acetate_001	-10.6392	elemol_001	-10.6311

xanthipungolide_001	-10.6255	4,4-di(3-methylbut-2-enyl)-6-geranyl-1-hydroxy-2-(10,11-dihydroxybenzoyl)-6-[2-(1-methylethenyl)-5-methylhex-5-enyl]-cyclohex-1-en-3,5-dione_001	-10.6223	tetraacetylaltersolanol A_001	-10.6199
trans-carveol_001	-10.6018	3-acetoxytropane_001	-10.5948	2-phenyl ethanol_001	-10.5931
14beta-hydroxy-2-epi-16-deoxysarcophine_001	-10.5784	6,8-di-C-glucosylapigenin_001	-10.5749	2-(5-ethenyl-5-methyloxolan-2-yl)-6-methylhept-5-en-3-one_001	-10.5717
benzaldehyde_001	-10.565	4beta,5alpha-epoxy-7alphaH-germacr-10(14)-en-6beta-ol-1-one_001	-10.5613	trans-1(2H)-naphthalenone-3,4,4a,5,8,8a-hexahydro-8-methyl_001	-10.5524
(5R,6R,Z)-5,6-dihydroxy-5,6-dihydro-2H-thiopyran-2-one O-methyl oxime beta-D-glucopyranoside_001	-10.5428	2-((2S,5S)-tetrahydro-5-methyl-5-vinylfuran-2-yl)propanoic acid_001	-10.5408	trans-thujone_001	-10.5408
beta-acorenol_001	-10.5251	sceleratine_001	-10.5226	4-epicubebol_001	-10.5194
1beta-angeloyloxy-9alpha-hydroxy-alpha-cyclocostunolide_001	-10.5102	quercetin 3-O-gentiobioside_001	-10.509	verbascoside_001	-10.506
13beta-hydroxyabiet-8(14)-en-7-one_001	-10.4961	abyssinol A_001	-10.4926	scutellarein-7-O-alpha-rhamnopyranosyl-(1?2)-alpha-rhamnopyranoside_001	-10.4918
3-n-propylphenol_001	-10.4828	isospathulenol_001	-10.4824	caesaldekarin C_001	-10.479
methyl phenylheptanoate_001	-10.4734	latrunculin A_001	-10.4703	2'-p-O-methylcoumaroylaloetin_001	-10.4645
polyanthin_001	-10.4605	10-angeloyloxy-6-p-hydroxybenzoyl-jaeschkeanadiol_001	-10.4595	6,11,12,16-tetrahydroxy-5,8,11,13-abietatetra-en-7-one_001	-10.4585
methyl-beta-hydroxy sandaracopimarate_001	-10.4454	tamarixetin-3-O-beta-robinoside_001	-10.4433	2,3,22,23-tetrahydroxy-2,6,10,15,19,23-hexamethyl-6,10,14,18-tetracosatetraene (3R,22R)_001	-10.4394
fissinolide_001	-10.4233	dendrolasin_001	-10.4162	trans-carveol_001	-10.4095
(3R,4S,7R)-3,7-dimethyl-4,7-epoxynon-8-enoic acid_001	-10.4008	7beta-hydroxy cholesterol_001	-10.3859	2,4,5-trimethyl-thiazole_001	-10.3788
linalool oxide_001	-10.3497	quercetin 3-galactosyl (1?2)rhamnoside_001	-10.3462	eudesm-4(15),11(13)-diene-12,5beta-olide_001	-10.3445
trans-longipinocarveol_001	-10.3436	6alpha-acetoxy-1beta-hydroxyguaia-4(15),10(14),11(13)-trien-8alpha,12-olide_001	-10.3383	methyl eugenol_001	-10.3372
3-acetoxy-6-hydroxytropane_001	-10.3326	6-hydroxy methyl angolensate_001	-10.3313	methyl 1-hydroxy-6-oxocyclohex-2-enecarboxylate_001	-10.3291
13,14,15,16-tetranorlabdane-8alpha,12,14-triol_001	-10.2987	26,27-bisnorcholest-5,16-dien-23-yn-3beta,7alpha-diol_001	-10.2946	8alpha-isobutanoyloxy-5alpha-chloro-4beta,10alpha-dihydroxy-1alpha,2alpha-epoxy-11,13-dehydroguaia-6alpha,12-olide_001	-10.2939
jacobine_001	-10.2884	thymol_001	-10.2854	linichlorin B diacetate_001	-10.2758
24-methylenelanosta-7,9(11)-dien-3beta-ol_001	-10.2707	4,5-di-O-caffeoylquinic acid 1-methyl ether_001	-10.2695	palustrol_001	-10.2615
monocrotaline_001	-10.2465	geranial_001	-10.2446	undecanyl resorcinol, C11:0 chain_001	-10.2439
1-hydroxy-guai-3,10(14)-diene_001	-10.2346	acetylerucifoline_001	-10.2344	quercetin-3-O-sophoroside_001	-10.2333
Molécule 1 - Nom	Molécule 1 - Score	Molécule 2 - Nom	Molécule 2 - Score	Molécule 3 - Nom	Molécule 3 - Score
3-alpha-hydroxycativic acid methyl ester_001	-10.2272	angustifolioside C_001	-10.2122	calemenene_001	-10.2094
1,1-dimethylprop-2-enyl 1-O-beta-D-glucopyranoside_001	-10.2011	thapsianolide_001	-10.1909	coniine_001	-10.1879
1-methoxy-beta-L-glucopyranoside tetraacetate_001	-10.1684	irniine_001	-10.168	3beta-acetyloxy-1alpha,13-dihydroxygermacra-4,7(11),9-trien-6alpha,12-olide_001	-10.1674
3-hydroxy-6-isobutyryloxytropane_001	-10.1584	dimethylhistamine_001	-10.1577	kaempferol 3-rhamnoside-4'-galactoside_001	-10.1516
farnochrol_001	-10.1398	alpha-eudesmol_001	-10.1364	N-(-4-methyl-sulphinyl-3-butenyl) isothiocyanate_001	-10.1357
1beta,6alpha-dihydroxy-7epi-eudesm-4(15)-ene_001	-10.1234	ekeberin B_001	-10.1205	trans-verbenol_001	-10.1183
1alpha-acetoxy-5beta-hydroxyeudesm-4(15)-en-6beta,11betaH-12,6-olide_001	-10.1097	caedulis, 1-{1-[2-(2 hydroxypropoxy) propoxy] propan-2-yloxy} propan-2-ol_001	-10.1023	bucharol_001	-10.0954
anhydroverlotrin_001	-10.0886	dammarane triterpene16_001	-10.0827	2beta,6alpha,18,19-ent-trachylobantetraol_001	-10.0768

9-hydroxyheptanoylretronecine_001	-10.0605	3-oxomarrubiin_001	-10.0564	desoxy repin_001	-10.0532
desoxy repin_001	-10.0532	cis-muuro-5-en-4beta-ol_001	-10.0496	) martynoside_001	-10.0491
gamma-eudesmol_001	-10.0414	6alpha-acetoxy-1alpha-hydroxyguaia-4(15),10(14),11(13)-trien-8alpha,12-olide_001	-10.0393	6-methyl-5-hepten-2-one_001	-10.0375
(-)-lyoniresinol-3a-O-beta-D-glucopyranoside_001	-10.026	Scopine_001	-10.0196	3-hydroxytoluene_001	-10.0154
carvone_001	-10.0092	1-((2E,6E,10E)-3,7,11,15-tetramethylhexadeca-2,6,10,14-tetraenyl)-2-azabicyclo[2.2.1]hept-5-en-3-one_001	-10.0046	inermynoside D_001	-10.0036
isopropylbenzene_001	-9.9897	(E)-ocimenone_001	-9.9888	4beta-hydroxy-6alpha-p-hydroxybenzoyloxy-10alpha-acetyloxydauc-8-ene_001	-9.9833
(+)-borneol angelate_001	-9.9621	incensole_001	-9.9576	deacetylherbolide A_001	-9.9553
1beta,6beta-dihydroxy-7-epi-eudesm-3-ene_001	-9.932	abietinal_001	-9.9167	isovitexin 7-O-galactoside_001	-9.9126
ent-18-acetoxy-3beta,7alpha,17-trihydroxykaur-15-ene_001	-9.8949	1-oxo-9beta-hydroxygermacra-4,10(14)-dien-6beta,11betaH-12,6-olide_001	-9.8893	alpha-thujone_001	-9.8869
erythroxy-4(17),15(16)-dien-3-one_001	-9.874	octahydro-3,8,8-trimethyl-6-methylene-1H-3a,7-methanoazulen-5-ol_001	-9.8733	kaempferol-3,7-di-O-beta-glucopyranoside_001	-9.8693
tiliroside_001	-9.8561	cis-sabinene hydrate_001	-9.856	valeranone_001	-9.8536
alpha-curcumene_001	-9.8531	13-acetoxy-17-hydroxy-labda-8,14-diene-17-O-(xylopyranoside triacetate)_001	-9.8523	picriside B_001	-9.8504
13-acetoxy-17-hydroxy-labda-8,14-diene-17-O-(xylopyranoside triacetate)_001	-9.8348	Sargassaceae meroditerpenoid 5a_001	-9.8346	2alpha,16-dihydroxy-4beta-carboxy-O-beta-D-glucopyranosyl-19-nor-totarol_001	-9.8331
(4,6-dimethylhept-5-en-2-yl)benzene_001	-9.8211	adonifoline_001	-9.8198	cis-sabinene hydrate acetate_001	-9.8161
8alpha,13-diacetoxy-1alpha-hydroxygermacra-4,7(11),10(14)-trien- 6alpha,12-olide_001	-9.808	trans-piperitol_001	-9.806	lepadiformine B_001	-9.8052
trans-sabinene hydrate_001	-9.8034	3-farnesylindole_001	-9.7988	4alpha,5beta-epoxy-7alphaH-germacr-10(14)-en,1beta-hydroperoxy,6beta-ol_001	-9.7983
5-[[5-acetoxymethyl-2-thienyl]-2-(but-3-en-1-ynyl)]-thiophene_001	-9.7854	5,8-epoxy-4,6-dihydroxy-santolin-1-ene_001	-9.7853	estragol_001	-9.784
p-menth-8-en-2-ol acetate_001	-9.7785	3,20-bis-diacetylteupyreinidine_001	-9.7769	2-benzylactonal_001	-9.774
madurensine_001	-9.7693	spathulenol_001	-9.7679	cyclohexane-1,2,4,5-tetrol_001	-9.7631
umbellulone_001	-9.7429	dihydrocarveol_001	-9.7415	haageanolide_001	-9.7387
humulene epoxide_001	-9.7296	17-O-[N-(3-Chloropropyl)carbamoyl]atrunculin A_001	-9.7278	isopulegol_001	-9.7269
(6R,7S,10R)-7,10-epoxy-7,11-dimethyldodec-1-ene-6,11-diol_001	-9.7256	chrysothol_001	-9.7235	chrysothol_001	-9.7235
ent-trachyloban-18-ol_001	-9.7157	dihydroxy-octadecatrienoic acid_001	-9.7136	phenol_001	-9.7077
methyl-12-oxo-8alpha-hydroxyabiet-13-en-19-oate_001	-9.701	eucarvone_001	-9.6967	artapetalin B_001	-9.6966
1,2-benzenedicarboxylic acid, bis (2-ethylhexyl) ester_001	-9.688	AR,alpha-dimethylstyrene_001	-9.6821	apigenin 5-galloylglucoside_001	-9.6816
olibanumol C_001	-9.6726	cis-piperitol_001	-9.6716	14-hydroxy-dauc-4-ene_001	-9.6686
elgonene K_001	-9.6636	limonin diosphenol_001	-9.6546	aeropysinin-1_001	-9.6521
9-alpha-angeloyloxy-6beta-isobutoxyloxy-1beta,4alpha-dihydroxy-eudesm-11(13)-en-5alpha,7alpha,8alpha,12-olide_001	-9.646	3beta,10alpha-acetoxy-8alpha-angeloyloxy-4alpha-hydroxy-1beta,2beta-epoxy-11,13-dehydroguaia-6alpha,12-olide_001	-9.6426	terpinen-4-ol acetate_001	-9.6392
maticaria ester_001	-9.6271	sarcophytolide_001	-9.6216	betaine_001	-9.621
cedrol_001	-9.6125	(E)-solanone_001	-9.609	otosenine_001	-9.6015
patchouli alcohol_001	-9.5977	8alpha-hydroxy-13-epi-pimar-16-en-18-yl acetate_001	-9.5839	lapiferin_001	-9.5812
tanzanene_001	-9.5404	2'-O-p-coumaroylaloetin_001	-9.5207	acetylpectachol B_001	-9.5147
10-epi-cubebol_001	-9.5003	gamma-acoradiene_001	-9.4957	p-mentha-1,5-dien-8-ol_001	-9.4934
dichrocepholide D_001	-9.4922	dichrocepholide D_001	-9.4922	(+)-butyl-O-alpha-L-rhamnoside_001	-9.4777

pimara-8(14),15-dien-3beta,18-diol_001	-9.475	28-acetoxy-15alpha-hydroxymansumbinone_001	-9.4743	4,6-dimethyltetrahydro-1,3-oxazine-2-thione_001	-9.4738
rel-(1R,2S,3R,4R,6S)-p-menthane-1,2,3,6-tetrol_001	-9.4493	scopofarnol_001	-9.447	Sargassaceae meroditerpenoid 5_001	-9.4273
kaempferol-3-O-beta-D-glucopyranoside-7-O-alpha-L-rhamnopyranoside_001	-9.4044	2-hydroxymethyl-2,3,22,23-tetrahydroxy-2,6,10,15,19,23-hexamethyl-6,10,14,18-tetracosatetraene (2R,3R,22R)_001	-9.4037	1beta,9beta-diacetoxyeudesm-3-en-5alpha,6beta,11beta-H-12,6-olide_001	-9.3956
cis-murol-5-en-4alpha-ol_001	-9.3728	9alpha-hydroxy-2-epi-16-deoxysarcophine_001	-9.37	beta-sitosterol_001	-9.3637
14,15-dihydroajugapitin_001	-9.3514	(22S,25S)-16beta,22,26-trihydroxycholest-4-en-3-one-16-O-beta-D-xylopyranoside_001	-9.3502	sabina ketone_001	-9.349
alpha-curcumene_001	-9.3336	ledene_001	-9.3323	5alpha-chloro-4beta,10alpha-dihydroxy-1alpha,2alpha-epoxy-8alpha-methylbutanoyloxy-11,13-dehydroguaia-6alpha,12-olide_001	-9.332
hydroxy-octadecatrienoic acid isomer_001	-9.3215	hydroxy-octadecatrienoic acid isomer_001	-9.3215	6'-O-cinnamoyl-8-O-methyl-7-hydroxyaloin_001	-9.3119
p-menth-1-en-4alpha,6beta-diol_001	-9.3052	(1R,2R,3R,6R,7R)-1,2,3,6,7-pentahydroxy-2-acetoxy-bisabol-10(11)-ene_001	-9.2983	methyl-7alpha,12beta-dihydroxysandaracopimarate_001	-9.2974
Molécule 1 - Nom	Molécule 1 - Score	Molécule 2 - Nom	Molécule 2 - Score	Molécule 3 - Nom	Molécule 3 - Score
cis-communic acid_001	-9.2648	quercetin 3-O-[alpha-rhamnosyl (1?2)][alpha-rhamnosyl (1?4)]-alpha-rhamnoside_001	-9.2641	maesanol_001	-9.2539
6,20-bis-deacetylteupyrenidine_001	-9.2444	2,5-dihydroxy-3-pentadecyl-1,4-benzoquinone_001	-9.2397	cryptone_001	-9.2395
4-epi-abietal_001	-9.2184	trans-verbenol_001	-9.2064	palustrol_001	-9.2015
5-hydroxyvinhaticoic acid_001	-9.1962	imbricatoloic acid_001	-9.1873	p-menth-4-en-1,2-diol_001	-9.1865
1alpha,4alpha,10alpha-trihydroxy-2beta,3beta-epoxy-8alpha-valeryloxy-11,13-dehydroguaia-6alpha,12-olide_001	-9.1736	1beta-hydroxy-6betaH,7alphaH,11alphaH-germacran-4(5),10(15)-dien-6,12-olide_001	-9.1706	ixerisoside D_001	-9.1668
p-cymene_001	-9.1597	inuloxin C_001	-9.1487	isoagathotal_001	-9.1365
isopimar-8(14)-en-16-hydroxy-15-one_001	-9.1192	delta-octalactone_001	-9.1184	isopimaric acid_001	-9.1132
ent-7alpha,18-diacetoxykaur-16-en-3-one_001	-9.1083	gmelinolide F_001	-9.1056	13-epitorulosal_001	-9.101
alpha-methylstyrene_001	-9.0698	ethyl 2-methylbutanoate_001	-9.0682	6-phenyl-n-hexanol_001	-9.0651
3-O-(3'-acetoxy-2'-hydroxy-2'-methylbutyryl)cuathemone_001	-9.0518	3-(hydroxyacetoxy)tropane_001	-9.0474	(E)-ethyl-3,7-dimethyl-3,6-octadienoate_001	-9.034
daucoguaianolactone D_001	-9.0208	13-acetoxy-17-hydroxy-labda-8,14-diene-17-O-(xylopyranoside triacetate)_001	-9.0192	gymnastatin A_001	-9.0161
3beta-angeloyloxy-6beta,10beta-dihydroxy-8beta-methoxyeremophilenolide_001	-9.0059	piperitone_001	-9.0048	withanolide F_001	-9.004
3-methylbutyryloxytropane_001	-8.9888	13,17-dihydroxy-labda-8,14-diene-17-O-xylopyranoside_001	-8.9866	sandaraco acid_001	-8.9809
trihydroxy octadecenoic acid_001	-8.9775	trihydroxy octadecenoic acid_001	-8.9775	neosenkirkine_001	-8.9742
teuluteumin B_001	-8.97	4beta,6beta-dihydroxy-1alpha,5beta(H)-guai-9-ene_001	-8.9668	4beta-hydroxygermacra-1(10),5-diene_001	-8.962
dimethyl 2,3-bis-[5-(3,7-dimethylocta-2,6-dienyl)-3,6-dioxocyclohexa-1,4-dienyl]-succinate_001	-8.9555	1,8-cineole_001	-8.9547	eucalyptol_001	-8.9546
gurjunene_001	-8.9379	1-O-acetylkhayanolide B_001	-8.9351	trachyloban-19-oic acid_001	-8.9194
1-acetoxy-7-hydroxy-3,7-dimethylocta-2E,5E-diene_001	-8.9091	1-acetoxy-7-hydroxy-3,7-dimethylocta-2E,5E-diene_001	-8.9091	1-acetoxy-7-hydroxy-3,7-dimethylocta-2E,5E-diene_001	-8.9091
quercetin-3-(2''-galloylglucoside)_001	-8.9001	tashiromine_001	-8.8988	sucrose_001	-8.8986
m-cymene_001	-8.8726	marrubenol_001	-8.871	pentanedioic acid, dimethyl ester_001	-8.8708
3,7,11-trimethyl-2,6,10-dodecatrienal_001	-8.8661	bisabol-2-en-1-one_001	-8.8659	4-O-acetylcuathemone 3-O-angelate_001	-8.8632
gymnastatin S_001	-8.8497	lambertiamic acid_001	-8.8417	8alpha-angeloyloxy-1beta,10alpha,4alpha,5beta-bisepoxy-3beta-hydroxygermacr-11(13)-en-12,6alpha-olide_001	-8.8338

oxo-T-cadinol_001	-8.8129	(3S,4S,5R)-(E)-3,4-dihydroxy-2-(hexa-2,4-diynyliden)-1,6-dioxaspiro-(4,5)decane_001	-8.8114	tasnemoxide C_001	-8.7981
ent-3,13E-clerodadien-15-ol_001	-8.7877	laxitextine B_001	-8.7838	isorhamnetin 3-[3'''-feruloylrhamnosyl(1?6)galactoside_001	-8.781
(122) methylmonocrotaline_001	-8.7707	sipholenol I_001	-8.7525	guaiazulene_001	-8.7521
3-vinyl-3-methyl-2-isopropenyl-6-isopropyl-cyclohexanone_001	-8.7476	artabotriol_001	-8.7469	italicene ether_001	-8.7391
B73beta-angeloyloxy-10beta-hydroxy-8beta-methoxyeremophilenolide_001	-8.7281	farnesylamine_001	-8.7274	neoplatyphylline_001	-8.7165
hyrtiosal_001	-8.6771	hugorosediol_001	-8.677	13,17-dihydroxy-labda-8,14-diene-17-O-xylopyranoside_001	-8.6656
alpha-bisabolone-beta-D-fucopyranoside_001	-8.6361	alpha-bisabolone-beta-D-fucopyranoside_001	-8.6361	quercetin-3-O-[6'''-alpha-L-rhamnosyl-6''-beta-D-glucosyl]-beta-D-glucoside_001	-8.6326
alpha-bisabolol_001	-8.6239	alpha-bisabolol_001	-8.6239	paradoxenoic acid_001	-8.6152
3-O-beta-glucopyranosyl-1-octen-3-ol_001	-8.595	3alpha-chloro-4beta,10beta-dihydroxy-1beta,2beta-epoxy-5alpha,7alphaH-guaia-11(13)-en-12,6alpha-olide_001	-8.5825	Delta7-avenasterol_001	-8.5742
7beta-chloro-8alpha-hydroxy-12-acetoxy-deepoxysarcophine_001	-8.5627	chamolol_001	-8.5627	bornyl acetate_001	-8.5595
cis-para-menth-2-en-1-ol_001	-8.5544	kaempferol-7-diglucoside_001	-8.5532	cis-muurolo-5-en-4-beta-ol_001	-8.5448
6,7-dehydrotropine_001	-8.511	maesanin_001	-8.5109	beta-tocopherol_001	-8.5087
trans-communic acid_001	-8.4916	13,14,15-trihydroxylabd-7-ene_001	-8.4822	N-isobutyl-6- 2-thienyl -2E,4E-hexadienamide_001	-8.4785
Sargassaceae meroditerpenoid 9b_001	-8.4747	carotol_001	-8.464	ent-3alpha-hydroxytrachyloban-18-al_001	-8.4591
isorhamnetin 3-diglucoside_001	-8.4559	3beta,8alpha-O-di-(4-hydroxytigloyl)-1alphaH,5alphaH,6alphaH,7alphaH-guai-4(1s5),10(14),11(13)-triene-6,12-olide_001	-8.4545	3beta,8alpha-O-di-(4-hydroxytigloyl)-1alphaH,5alphaH,6alphaH,7alphaH-guai-4(1s5),10(14),11(13)-triene-6,12-olide_001	-8.4545
epi-centaurepensin_001	-8.4525	epi-centaurepensin_001	-8.4525	isothiocyanatomethyl benzene_001	-8.4481
ent-3beta-acetoxy-7alpha,18-dihydroxykaur-15-en-17-al_001	-8.4415	acetic acid_001	-8.4366	cis-verbenol_001	-8.4281
beta-elemol_001	-8.4029	8alpha,11-elemodiol_001	-8.3915	cubebol_001	-8.3764
capillen_001	-8.3655	beta-eudesmol_001	-8.3551	2'-O-tigloylaloetin_001	-8.3486
selina-6-en-4-ol_001	-8.338	farnesol_001	-8.3277	(1R,2R,3R,6R,7R)-1,2,3,6,7-pentahydroxy-bisabol-10(11)-ene_001	-8.3245
cynarascoloside A_001	-8.3108	7-keto-8alpha-hydroxy-deepoxysarcophine_001	-8.3034	alpha-acoradiene_001	-8.285
myrtenyl acetate_001	-8.2742	2R,7R,8R-dihydroxydeepoxysarcophine_001	-8.2692	(Z)-6-octen-2-one_001	-8.2676
agathadiol_001	-8.2457	trans-pinocarveol_001	-8.2384	akhdarenol_001	-8.2356
isorhamnetin 3-O-beta-D-xylopyranosyl-(1'''?3)-alpha-L-rhamnopyranosyl-(1?6'')-beta-D-galactopyranoside_001	-8.2175	6-hydroxystigmast-4-en-3-one_001	-8.2173	beta-gurjunene_001	-8.2165
axillaridine_001	-8.2024	achillyl A alcaneate_001	-8.1953	pellitorine_001	-8.185
fenchone_001	-8.141	verbenol_001	-8.1366	grandiflorenic acid_001	-8.1333
dihydroxy-octadecadienoic acid_001	-8.0932	ent-3beta-acetoxy-7alpha,17,18-trihydroxykaur-15-ene_001	-8.0714	gamma-coniceine_001	-8.0712
ent-3beta-acetoxy-7alpha,17,18-dihydroxy-15beta,16beta-epoxykaurane_001	-8.0603	canaric acid_001	-8.0589	4,12-dideoxy(4alpha)phorbol-13-hexadecanoate_001	-8.0561
Molécule 1 - Nom	Molécule 1 - Score	Molécule 2 - Nom	Molécule 2 - Score	Molécule 3 - Nom	Molécule 3 - Score
4-methylstyrene_001	-8.0355	(ent-3beta,8alpha)-15,16-epoxy-13(16),14-labdadiene-3,8-diol_001	-8.0249	propyl acetate_001	-8.02

4alpha,5beta-epoxy-7alphaH-germacr-10(14)-en,1beta-hydroperoxyl,6alpha-ol_001	-7.999	nezukol_001	-7.9945	o-cymene_001	-7.9889
cis-muuro-la-4(14),5-diene_001	-7.9438	theaspirane I_001	-7.9408	3beta-hydroxy-13-epi-manool_001	-7.9368
aromadendrene_001	-7.9154	thuj-3-en-10-al_001	-7.9154	2-methylbutyl butyrate_001	-7.9148
isoline_001	-7.9026	dimethyl sulfone_001	-7.9014	ent-3beta-acetoxy-7alpha,18-dihydroxykaur-16-ene_001	-7.893
patchoulane_001	-7.8649	isoglabratephrin_001	-7.8559	torulosal_001	-7.8545
N-methyl-2(2'-methoxybutyl),6(2''-hydroxybutyl)-Delta3-piperidine_001	-7.8386	7alpha,18-diacetoxyabiet-8(14)-en-13beta-ol_001	-7.8365	sibthorpine_001	-7.8341
linalyl-propanoate_001	-7.8121	macrocliniside A_001	-7.808	isoborneol_001	-7.8051
salvial-4(14)-en-one_001	-7.7753	salvial-4(14)-en-one_001	-7.7753	salvial-4(14)-en-one_001	-7.7753
quercetin 3-O-gentobiosyl-pentoside_001	-7.7571	pregn-5-ene-3,14-beta-dihydroxy-7,20-dione 3-O-beta-glucopyranoside_001	-7.7515	epoxyvescriterenol_001	-7.7257
cis-muuro-la-3,5-diene_001	-7.7175	alpha-campholenal_001	-7.7144	alpha-campholenal_001	-7.7098
alpha-copaene_001	-7.6874	selina-3,7(11)-diene_001	-7.6844	valencene_001	-7.6741
methylanhydrovilangin_001	-7.654	nerol_001	-7.6472	epi-alpha-cadinol_001	-7.6438
(9Z,12Z)-octadecadienoic acid glucoside_001	-7.6204	o-xylene_001	-7.6195	13,17-dihydroxy-labda-8,14-diene-17-O-xylopyranoside_001	-7.6146
akhdardiol_001	-7.5792	(+)-lyoniresinol-3a-O-beta-D-glucopyranoside_001	-7.5784	citronellyl acetate_001	-7.5763
aromadendrene_001	-7.5588	(Z)-hex-3-en-1-ol_001	-7.5541	13,17-dihydroxy-labda-8,14-diene-17-O-xylopyranoside_001	-7.5475
alpha-fenchyl alcohol_001	-7.5137	bicyclo[3.3.1]nona-2,6-diol_001	-7.5079	bicyclo[3.3.1]nona-2,6-diol_001	-7.5079
ergosta-7-en-3beta-ol_001	-7.5047	alpha-guaiene_001	-7.4979	akhdartriol_001	-7.497
3-O-[(2,3,4-triacetyl-alpha-L-rhamnopyranosyl)-(1?6)]-beta-D-galactopyranoside_001	-7.4803	m-xylene_001	-7.4792	(+)-7alpha,8beta-dihydroxydeepoxysarcophine_001	-7.4685
khayanolide D_001	-7.4608	argeloside O_001	-7.4542	2-[penta-1,3-diyn-1-yl]-5-[acetoxy-3-chloro-but-1-yn-1-yl] thiophene_001	-7.4495
cyperene_001	-7.4254	dehydro-p-cymene_001	-7.4218	4beta,6beta,10beta-trihydroxy-1alpha,5beta(H)-guaiane_001	-7.4002
vernolic acid_001	-7.3933	alpha-selinene_001	-7.3885	chamazulene_001	-7.3816
2,3-O-hexahydroxydiphenoyl-(alpha/beta)-D-(4)C(1)-glucopyranose_001	-7.3686	dihydro-beta-agarofuran_001	-7.3638	epicatechin (4beta?8) epigallocatechin_001	-7.3512
alpha-cubebene_001	-7.3243	ophrypetalin_001	-7.317	heptan-2-one_001	-7.3152
spathulenol_001	-7.2892	alpha-cedrene_001	-7.2885	cedr-8-ene_001	-7.2885
lepadiformine A_001	-7.2755	3beta-25-dihydroxy-4-methyl-5alpha,8alpha-epidioxy-2-ketoergost-9-ene_001	-7.27	kaempferol 3-acetyl-O-glucoside_001	-7.2618
tetradeca-12-ene-8,10-diyne-1,4,5-triol_001	-7.2283	hativene C_001	-7.2282	hativene B_001	-7.2245
trans-sabinene hydrate_001	-7.1898	ehrenasterol_001	-7.1874	isovaleryl (IV)_001	-7.1811
sphaerolabddiene-3,14-diol_001	-7.1711	1-adamantyl methyl ketone_001	-7.1652	(+)-gamma-decalactone_001	-7.1603
1alpha,3beta-dihydroxytatarol_001	-7.1397	Tribulus saponin aglycone 8_001	-7.1385	18-hydroxy-dollabela-8(17)-ene_001	-7.1369
maesaquinone_001	-7.1081	citronellyl formate_001	-7.1054	Tribulus saponin aglycone 4_001	-7.1032
diamino-di nitro-methyl dioctyl phthalate_001	-7.063	duva-3,6,8,13-tetraen-5alpha-ol-1-acetate_001	-7.0569	pachycladin D_001	-7.0554
kaempferol 3-O-alpha-L-rhamnopyranosyl-(1?6)-(4''-trans-p-coumaroyl) beta-D-galactopyranoside 7-O-alpha-L-rhamnopyranoside_001	-7.034	trans-2-methyl cyclopentanol_001	-7.009	gamma-gurjunene_001	-7.0064
1,2,3,4,4a,7-hexahydro-1,6-dimethyl-4-(1-methylethyl)naphthalene_001	-6.9845	sarcophytol A_001	-6.9841	6-octadecanoic acid methyl ester_001	-6.9809
alpha-amorphene_001	-6.9602	alpha-eudesmol-(alpha-xylopyranoside-triacetate)_001	-6.9597	thujopsene_001	-6.9583

teuluteumin A_001	-6.9222	2-acetoxy-7alpha-hydroxy-14-methoxy-5E-caryophyllene_001	-6.9197	zonarene_001	-6.9049
6-acetyl-marrubienol_001	-6.8806	pumilaside A_001	-6.8782	pumilaside A_001	-6.8782
amberboin_001	-6.8776	amberboin_001	-6.8776	caproic acid_001	-6.8657
ergosta-7,22-diene-3beta-ol_001	-6.8564	octenyl acetate_001	-6.8458	octenyl acetate_001	-6.8458
3,3,6-trimethylhepta-1,5-dien-4-ol_001	-6.8402	alloaramadendrene_001	-6.8358	Delta7-stigmastanol_001	-6.8219
(?)pinellic acid_001	-6.7805	cholesterol_001	-6.7739	preizazeane_001	-6.7703
alpha-euphorbol_001	-6.7548	alpha-fenchyl alcohol_001	-6.7533	alpha-tocopherol_001	-6.7526
epi-zonarene_001	-6.743	beta-fenchol_001	-6.7249	n-propylbenzene_001	-6.721
alpha-copaene_001	-6.7161	neoolloocimene_001	-6.7115	vicenin-2_001	-6.7091
camphene hydrate_001	-6.6995	cossonine_001	-6.6937	propanenitrile_001	-6.693
toluene_001	-6.6488	guaia-1(10),11-diene_001	-6.646	8alpha-hydroxyguaia-4(15),10(14),11(13)-trien-6alpha,12-olide_001	-6.6224
isopropyl isothiocyanate_001	-6.5981	alpha-copaene_001	-6.5966	(E,E)2,4-nonadienal_001	-6.5953
(E)-2-heptenoic acid, ethyl ester_001	-6.5847	methyl 4-isothiocyanatobutyrate_001	-6.5771	alpha-trans-bergamotene_001	-6.5759
3,7-dimethyloct-6-en-1-yl propanoate_001	-6.5359	beta-copaene_001	-6.5345	chamigrene_001	-6.5327
dihydroxy hexadecanoic acid_001	-6.5104	4,8,8-trimethyl-2-methylene-4-vinylbicyclo[5.2.0]nonane_001	-6.5094	alpha-selinene_001	-6.4884
Molécule 1 - Nom	Molécule 1 - Score	Molécule 2 - Nom	Molécule 2 - Score	Molécule 3 - Nom	Molécule 3 - Score
beta-acoradiene_001	-6.4707	simplexin_001	-6.4658	trans-caryophyllene_001	-6.462
bicyclogermacrene_001	-6.4505	7,11,15-trimethyl-3-methylenehexadecane-1,2-diol_001	-6.443	alpha-selinene_001	-6.4394
phytone_001	-6.3943	dehydrosenkirkine_001	-6.3825	5-vinyl-2-oxazolidinethione_001	-6.3689
aikupikanyne F_001	-6.3577	cyclosativene_001	-6.3569	3beta,14beta-dihydroxy-19-methoxy-5alpha-card-20(22)-enolide_001	-6.3536
3-(3,4-dihydrophenyl)propyl 4-methylvalerate_001	-6.3441	3-(3,4-dihydrophenyl)propyl 4-methylvalerate_001	-6.3441	isofouquierol_001	-6.3411
gamma-cadinene_001	-6.32	12alpha-acetoxy-24,25-epoxy-24-hydroxy-20,24-dimethylscalarane_001	-6.312	(3R,20S)-3-acetoxy-20-hydroxydammar-24-ene_001	-6.3011
hexyl isovalerate_001	-6.2989	ent-18-acetoxy-3beta,7alpha-dihydroxykaur-16-ene_001	-6.2976	7-epi-eudesm-4(15)-ene-1beta,6alpha-diol_001	-6.2921
scopolin tetraacetate_001	-6.2772	scopolin tetraacetate_001	-6.2772	scopolin tetraacetate_001	-6.2772
3beta,7beta,15beta-trihydroxy-14-oxolathyra-5E,12E-dienyl-16-O-beta-D-glucopyranoside_001	-6.2615	ergosta-4,6,8(14),22-tetraene-3one_001	-6.2532	(1R*,2R*,3E,7R,11R*,12S*)-3,8(17)-dolabelladiene-2,7,16,18-tetrol-18- O-beta-D-glucopyranoside_001	-6.2514
salmahyrtisol B_001	-6.2249	longifolene_001	-6.2243	13-epi-pimar-16-ene-8alpha,18-diol_001	-6.2172
22alpha-acetoxy-6-hydroxyneomacrolactone_001	-6.2073	5-O-acetylembelin_001	-6.2069	5alpha,8alpha-epidioxy-ergost-6,22-dien-3beta-ol_001	-6.1898
(24E) stigmasta-5,8-dien-3beta-ol_001	-6.1795	isoheptyl dihydro-p-coumarate_001	-6.1778	isoheptyl dihydro-p-coumarate_001	-6.1778
methyl isothiocyanate_001	-6.1637	delcosine_001	-6.1625	pentanoic acid_001	-6.1606
7beta-hydroxy-1-methylene-8alpha-pyrrolizidine_001	-6.126	striatal D_001	-6.1236	linalool_001	-6.1203
daturamalakin B_001	-6.1077	coroglaucigenin-3-(6-deoxy-beta-D-allopyranoside)-19-acetate_001	-6.105	gamma-murolene_001	-6.1021
isorhamnetin 3-O-sophoroside_001	-6.0589	knipholone tetraacetate_001	-6.0573	15-acetoxy-gamma-eudesmol-(alpha-xylopyranoside-triacetate)_001	-6.0485
3-deacetyl-10,14-deoxyarctolide_001	-6.0261	15-acetoxy-ent-3,13E-clerodadiene_001	-6.0187	ent-sarcophine_001	-6.006
7-methyl-4-methylidene-1-(propan-2-yl)-1,2,3,4,4a,5,6,8a-octahydronaphthalene_001	-5.9906	ent-3,13E-clerodadiene-15-formate_001	-5.9906	2-nonanone_001	-5.9868
geraniol_001	-5.937	campestanol_001	-5.9348	(1S,4R,13S)-cembra-2E,7E,11E-trien-4,13-diol_001	-5.933
4-beta-H,5-alpha-eremophilane_001	-5.8964	(Z)-nerolidol_001	-5.8931	3beta,4beta,10alpha-trihydroxy-1beta,6alpha,7beta(H)-cadinane_001	-5.8925

(1R*,2R*,3E,7R*,11R*,12S*)-2-O-acetyl-16-O-(3-hydroxy-3-methylglutaryl)-dolabella-3,8(17)-dien-2,7,16,18-tetrol_001	-5.8132	beta-copaene_001	-5.8092	7-O-6'-O-malonylcachinesidic acid_001	-5.8083
ergosta-5,22-dien-3beta-ol_001	-5.7973	ergosta-5,22-dien-3beta-ol_001	-5.7708	algerianin_001	-5.7658
frugoside_001	-5.7426	incrusterol B_001	-5.7403	epi-obtusane_001	-5.7364
2alpha-hydroxyarborescin_001	-5.7165	pretrichodermamide_001	-5.7076	28-hydroxysipholenol A_001	-5.6949
lepadiformine C_001	-5.6787	1,5-cycloundecadien,8,8-dimethyl-9-methylene_001	-5.6693	jancerin_001	-5.6691
3,3',4'-trimethoxyellagic acid-4'-gentobioside_001	-5.6679	2-hydroxymethyl-2,3,22,23-tetrahydroxyl-6,10,15,19,23-pentamethyl-6,10,14,18-tetracosatetraene_001	-5.6671	9,12,13-trihydroxyoctadeca-10(E)-dienoic acid_001	-5.6574
hexanal_001	-5.6209	(+)-3-hydroxyperillaldehyde_001	-5.6018	8alpha-(3,4-dihydroxy-2-methylenebutanoyloxy)dehydromelitensin_001	-5.6
31-norlanostenol_001	-5.57	alpha-eudesmol-(alpha-xylopyranoside-triacetate)_001	-5.5683	epsilon-cadinene_001	-5.5661
isopimara-9-(11),15-diene_001	-5.5019	8-heptadecene-1-carbonic acid_001	-5.4829	(1R*,2R*,3E,7R*,11R*,12S*)-16-O-(3-hydroxy-3-methylglutaryl)-dolabella-3,8(17)-dien-2,7,16,18-tetrol_001	-5.4811
6-pentadecylsalicylic acid_001	-5.4614	delta3-carene_001	-5.4197	linalyl acetate_001	-5.3901
p-mentha-1(7),8(10)-dien-9-ol_001	-5.3456	18-hydroxyrosane_001	-5.3449	2,3,22,23-tetrahydroxy-2,6,10,15,19,23-hexamethyl-6,10,14,18-tetracosatetraene_001	-5.3402
cycloeucalenol_001	-5.3194	gamma-curcumene_001	-5.2911	gamma-curcumene_001	-5.2911
2,6-dihydroxyfissinolide_001	-5.2732	ergosta-4,6,8(14),22-tetraene-3beta-ol_001	-5.2621	achilleol A_001	-5.2348
(24S)-24-ethylcholesta-5-(E)-22-dien-3-beta-ol_001	-5.2245	E-docosyl-p-coumarate_001	-5.2222	p-mentha-1,3,8-triene_001	-5.2209
17-hydroxy-3beta,19-diacetoxyspongia-13(16),14-dien-2-one_001	-5.2035	13-acetoxy-17-hydroxy-labda-8,14-diene-17-O-(xylopyranoside triacetate)_001	-5.1995	20-deoxy-ingenol-3-O-angelate_001	-5.1954
elixene_001	-5.1822	terpinolene_001	-5.1603	stigmat-4-ene-3-one_001	-5.1583
alpha-pinene_001	-5.1325	Tribulus saponin aglycone 6_001	-5.13	(1R*,2R*,3E,7R*,8S*,9R*,11R*,12S*)-16-O-(3-hydroxy-3-methylglutaryl)-8,9-epoxydolabell-3-en-2,7,16,18-tetrol_001	-5.1249
13-hydroxyfeselol diacetate_001	-5.0935	myrtenol_001	-5.0897	lupenone_001	-5.0861
13-acetoxy-17-hydroxy-labda-8,14-diene-17-O-(xylopyranoside triacetate)_001	-5.0562	8-hydroxyheptadeca-4,6-diyn-3-yl ethanoate_001	-5.0549	luteolin 7,4'-diglucoside_001	-5.0311
acylated isovitexin_001	-5.0094	(+)-4-carene_001	-5.0056	(23zeta)-23-isopropyl-24-methyl-cycloart-25-en-3beta-ol_001	-5.0052
callyspongenol B_001	-4.9936	4-fluoro-1-methyl-5-carboxylic acid ethyl ester_001	-4.9814	7-octen-1-ol,2-methyl-6-methylene_001	-4.9791
alpha-amyrone_001	-4.9374	alpha-thujene_001	-4.9131	nerolidol_001	-4.9123
8-desacylrepin_001	-4.8962	8-desacylrepin_001	-4.8962	8-desacylrepin_001	-4.8962
caprylic acid methyl ester_001	-4.8786	4-methylthiobutyl isothiocyanate_001	-4.8713	chrysoeriol 7-diglucuronide_001	-4.8552
daucogaianolactone A_001	-4.8191	beta-cubebene_001	-4.8165	2-decanone_001	-4.8141
(3aR,6S,7aR)-octahydro-7-(1-hydroxyprop-2-en-2-yl)-6-methyl-3-methylene-2-oxo-6-vinylbenzofuran-4-yl 2-(hydroxymethyl)acrylate_001	-4.7954	(3aR,6S,7aR)-octahydro-7-(1-hydroxyprop-2-en-2-yl)-6-methyl-3-methylene-2-oxo-6-vinylbenzofuran-4-yl 2-(hydroxymethyl)acrylate_001	-4.7954	(3aR,6S,7aR)-octahydro-7-(1-hydroxyprop-2-en-2-yl)-6-methyl-3-methylene-2-oxo-6-vinylbenzofuran-4-yl 2-(hydroxymethyl)acrylate_001	-4.7954
acropilin_001	-4.7921	gamma-terpinene_001	-4.7746	heptanal_001	-4.7673
alpha-spinasterol_001	-4.7424	(cis) nerolidole_001	-4.7398	2-methylbutyl isothiocyanate_001	-4.7384
octyl formate_001	-4.7272	alpha-thujene_001	-4.7096	alpha-thujene_001	-4.7096
acteoside_001	-4.6752	3beta-hydroxylup-20(29)-en-28-oic acid 3-O-beta-D-glucuronopyranoside_001	-4.6731	(E)-2-undecenal_001	-4.6711
Molécule 1 - Nom	Molécule 1 - Score	Molécule 2 - Nom	Molécule 2 - Score	Molécule 3 - Nom	Molécule 3 - Score
(E,Z)-2,4-decadienyl isovalerate_001	-4.6449	16-acetoxy-11-hydroxyoctadeca-17-ene-12,14-diynyl ethanoate_001	-4.6347	ergosta-7,9(14),22-triene-3beta-ol_001	-4.6277

undecan-2-one_001	-4.5803	germacrene D isomer_001	-4.5762	hativene A_001	-4.5757
12beta-hydroxykualactone_001	-4.5475	taraxasterol_001	-4.5289	teucrolivin G_001	-4.5264
alpha-phellandrene_001	-4.4866	cabraleadiol 3-acetate_001	-4.485	alpha-phellandrene_001	-4.4836
(E)-2-hexenal_001	-4.461	cholesterol-3beta-acetate_001	-4.4449	verticilla-4(20),7,11-triene_001	-4.4098
7,8-dehydrocalotropin_001	-4.3881	tri-O-galloyl glucose_001	-4.3784	3-beta-hydroxy-11-oxo-urs-12-ene_001	-4.378
(3S,6Z)-3,7,11-trimethyl-1,6,10-dodecatrien-3-ol_001	-4.3395	pachycladin E_001	-4.3092	(22R)-14alpha,15alpha,17beta,20beta-tetrahydroxy-1-oxowitha-2,5,24-trien-26,22-olide_001	-4.2791
alpha-thujene_001	-4.2058	terretonin A_001	-4.1745	germacrene_001	-4.1707
callyspongamide A_001	-4.1425	dehydroisophonochalynol_001	-4.1416	5-(penta-1,3-diynyl)-2-(but-3-en-1-ynyl)-thiophene_001	-4.1392
2-dodecanone_001	-4.0979	naringenin-7-rhamnoglucoside_001	-4.0954	chlorovenidol_001	-4.0897
19-acetyl-marrubenol_001	-4.0491	tans-alpha-bergamotene_001	-4.0367	1-methyl-4-methylene-cycloheptane_001	-4.0299
3beta-acetoxy-16beta,20(R)-dihydroxydammar-24-ene_001	-4.0158	octyl acetate_001	-3.9859	bornane_001	-3.9795
9alpha-hydroxy-11beta,13-dihydro-3-epi-zaluzanin C_001	-3.9613	p-mentha-1,5,8-triene_001	-3.9585	phytol_001	-3.9353
undecanoic acid_001	-3.9218	2,5-O-diacetylembelin_001	-3.916	hellebrigenin_001	-3.896
citronellol_001	-3.8435	14,15-dihydro-ajugapitin_001	-3.8224	2,3-hexahydroxydiphenoxyl-(alpha/beta)-glucose_001	-3.8217
fusaristatin A_001	-3.8048	biemnic acid_001	-3.8042	tetracyclo[6,3,2,0(2,5),0(1,8)]tridecan-9-ol_001	-3.7994
(Z)-beta-ocimene_001	-3.7572	solasodine_001	-3.7572	3alpha-hydroxylup-20(29)-ene-23,28-dioic acid_001	-3.7465
15-O-butylatrunculin B_001	-3.7009	(3R,4R,5S)-4-hydroxy-5-methyl-3-tetradecanyl gamma-lactone_001	-3.6981	beta-eudesmol-(alpha-xylopyranoside-triacetate)_001	-3.6816
beta-pinene_001	-3.6175	taraxast-20-ene-3beta,30-diol_001	-3.6086	(E)-2-heptenal_001	-3.5979
sclarene_001	-3.5302	dodecanal_001	-3.5174	2-[penta-1,3-diyn-1-yl]-5-[isovaleryloxy-3-chloro-but-1-yn-1-yl] thiophene_001	-3.5082
oculiferane_001	-3.4979	undecyclic acid_001	-3.49	(E)-2-nonenal_001	-3.4896
(1R*,2R*,3E,7E,11R*,12S*)-2-O-acetyl-16-O-(3-hydroxy-3-methylglutaryl)-dolabella-3,7-dien-2,16,18-triol_001	-3.4383	deacylcynaropicrin_001	-3.4295	deacylcynaropicrin_001	-3.4295
2-methyl-2-phenyl pentadecane_001	-3.41	tricyclene_001	-3.3999	acetylmaesaquinone_001	-3.3997
(1R*,2R*,3E,7R*,11R*,12S*)-2-O-acetyl-16-O-(3-hydroxy-3-methylglutaryl)-dolabella-3,8(17)-dien-2,7,9,16,18-pentol_001	-3.3353	hellebrigenin 3-acetate_001	-3.32	9-hydroxy-cis-11-octadecenoic acid_001	-3.3198
Thiarubrine A_001	-3.2268	1-O-linoleoyl-3-O-beta-D-galactopyranosyl-syn-glycerol_001	-3.2058	desglucouzarine_001	-3.1924
beta-bisabolene_001	-3.1709	13-epi-manool_001	-3.1647	(1R*,2R*,3E,7E,11R*,12S*)-16-O-(3-hydroxy-3-methylglutaryl)-dolabella-3,7-dien-2,16,18-triol_001	-3.1642
isoorientin 7-glucoside_001	-3.135	methyldecanoate_001	-3.1334	methyldecanoate_001	-3.1334
20-hydroxyecdysone_001	-3.0889	santalene_001	-3.0886	turanolide_001	-3.072
carisson-(alpha-xylopyranoside-triacetate)_001	-3.0081	thuja-2,4(10)-diene_001	-3.0004	ekeberin D3_001	-2.9776
o-mentha-1(7),8-dien-3-ol_001	-2.9346	neviotine A_001	-2.9255	2,4-dimethylheptane_001	-2.9073
beta-phellandrene_001	-2.9013	cycloartenol_001	-2.8575	(E)-2-nonenal_001	-2.8525
cyclopropane-1,1,2-trimethyl_001	-2.7522	methylvilagin_001	-2.7326	decyl acetate_001	-2.6749
uguenensone_001	-2.6102	3-beta-hydroxytirucall-8,24-dien-21-oic acid_001	-2.591	aikupikanyne E_001	-2.5879
eufanol_001	-2.544	1-heptanol_001	-2.5412	2-hydroxy-3-butenyl isothiocyanate_001	-2.5266
beta-farnesene_001	-2.4277	28-norlup-20(29)-en-3beta-hydroxy-17beta-hydroperoxide_001	-2.4237	khayanolide B_001	-2.4188
16beta-hydroxy-proscillaridin A_001	-2.3876	11,16-diacetoxyoctadeca-17-ene-12,14-diynyl ethanoate_001	-2.3761	santolina triene_001	-2.355

tetradec-1-yn-1-ol_001	-2.2782	crassoside A_001	-2.2747	crassoside A_001	-2.2747
callyspongenol C_001	-2.1836	cis-3-hexen-1-ol_001	-2.177	sitosterol glucoside_001	-2.1718
alpha-elemol-(alpha-xylopyranoside-triacetate)_001	-2.1038	ergosta-5(6),7,22-triene-3beta-ol_001	-2.0572	4-O-acetylcauauthemone3-O-(2'-methyl-2'-hydroxy-3-acetoxy butyrate)_001	-2.0521
phytol_001	-1.9731	ergosta-7,22-epidioxy-3beta-ol_001	-1.9616	(Z)-5,8,11,14,17-eicosapentaenoic acid_001	-1.9552
proscillaridin_001	-1.9096	(Z)-beta-farnesene_001	-1.8854	ekeberin D1_001	-1.8195
linolenic acid_001	-1.7352	urticifolene_001	-1.7191	R-bgugaine_001	-1.7082
(85) (16S,20R)-dihydroxydammar-24-en-3-one_001	-1.67	scutellarein-7-O-alpha-rhamnopyranosyl-(1?2)-alpha-rhamnopyranosyl-(1?2)-alpha-rhamnopyranoside_001	-1.664	methyl neochebulanin_001	-1.6096
(1R*,2R*,3E,7R*,11R*,12S*)-16-O-(3-hydroxy-3-methylglutaryl)-18-O-acetyldolabella-3,8(17)-dien-2,7,9,16,18-pentol_001	-1.5764	isofouquierol acetate_001	-1.5487	cyclopropane-1,2-dimethyl-1-pentyl_001	-1.5449
octanal_001	-1.5348	myrcene_001	-1.5328	dieporeticanin-1_001	-1.5199
(E,E)-pentadeca-5,7-diene-9,11,13-trien-2-one_001	-1.505	beta-sitosterol glucoside_001	-1.3966	methyl (Z)-5,11,14,17-eicosatetraenoate_001	-1.3374
nonanal_001	-1.267	terflavin B_001	-1.2666	10-epi-cubebol-(alpha-xylopyranoside-triacetate)_001	-1.1202
desacetylurvaricin_001	-0.9918	24-methylene cycloart-3-one_001	-0.9761	pentadecanal_001	-0.9198
petroselinic acid_001	-0.8545	cis-palmitoleic acid_001	-0.8242	linolelaicid acid_001	-0.7174
ergosta-7,22-dien-3beta-ol_001	-0.6248	6-acetoxy methyl angolensate_001	-0.6129	euphohelioscopin B_001	-0.5926
Molécule 1 - Nom	Molécule 1 - Score	Molécule 2 - Nom	Molécule 2 - Score	Molécule 3 - Nom	Molécule 3 - Score
palmitic acid_001	-0.5393	myristic acid methyl ester_001	-0.5211	trans-palmitoleic acid_001	-0.5145
repin monochlorhydrin_001	-0.5085	(-)-epicatechin (4beta?8) (-)-4'-methylepigallocatechin_001	-0.4997	1-heptyl-2-methyl-cyclopropane_001	-0.4143
(4'''-O-acetyl)-2''-O-rhamnosylvitexin_001	-0.3132	Z-docosyl-p-coumarate_001	-0.2332	methyl linolenate_001	-0.2201
decanol_001	-0.1776	sipholenol A_001	-0.1522	pentadecanoic acid_001	-0.1457
ergosta-6,22-diene-3beta,5alpha,8alpha-triol_001	-0.0315	methyl palmitate_001	-0.0304	syringaresinol 4,4'-O-bis-beta-D-glucopyranoside	0.0
blepharaside B	0.0	viburtinoside A	0.0	viburtinoside B	0.0
hecogenin-3-O-beta-D-glucopyranosyl-(1?2)-[beta-D-xylopyranosyl-(1?3)]-beta-D-glucopyranosyl (1?4)-beta-D-galactopyranoside	0.0	hecogenin-3-O-beta-D-xylopyranosyl-(1?3)-beta-D-glucopyranosyl-(1?2)-[beta-D-xylopyranosyl (1?3)]-beta-D-glucopyranosyl (1?4)-beta-D-galactopyranoside	0.0	hecogenin-3-O-alpha-L-rhamnopyranosyl (1?4)-beta-D-xylopyranosyl (1?3)-[beta-D-glucopyranosyl (1?2)]-D-glucopyranosyl (1?4)-beta-D-galactopyranoside	0.0
1-O-alpha-L-rhamnopyranosyl-(1?2)-[alpha-L-rhamnopyranosyl-(1?4)]-beta-D-glucopyranosyl-26-O-beta-D-glucopyranosyl-22-O-methylfurosta-5,25(27)-diene-1beta,3beta,22,26-tetraol	0.0	neohecogenin 3-O-beta-D-glucopyranosyl-(1?3)-[beta-D-xylopyranosyl-(1?3)-beta-D-xylopyranosyl-(1?2)]-beta-D-glucopyranosyl-(1?4)-beta-D-galactopyranoside	0.0	16-oxosarcophytonin E	0.0
7alpha,8beta-dihydroxydeopoxysarcophine	0.0	7beta-acetoxy-8alpha-hydroxydeopoxysarcophine	0.0	pachycladin B	0.0
sclerophytin B	0.0	singardin	0.0	incensole	0.0
N-[(2S,3S,4R)-1,3,4-trihydroxyhexacosan-2-yl]icosanamide	0.0	(R)-20-hydroxy-N-[(2S,3S,4R)-1,3,4-trihydroxypentacosan-2-yl]nonadecanamide	0.0	2-epi-sarcophine	0.0
17alpha-hydroxy-7,8-dehydrocalotropin	0.0	2''-O-alpha-L-rhamnopyranosylhyperin-6''-O-gallate	0.0	alpha-humulene	0.0
[ERROR]	0.0	stavaroside I	0.0	foliamangiferoside A1	0.0
penta-O-galloyl-glucose	0.0	tetra-O-galloyl-glucose	0.0	robustaflavone	0.0
3-epibetulonic acid 3-O-beta-D-glucopyranoside, 28-O-[4'-O-alpha-L-rhamnopyranosyl-6'-O-beta-D-glucopyranosyl]-beta-D-glucopyranosyl ester	0.0	desmiflavaside A	0.0	desmiflavaside B	0.0
callichiline	0.0	amataine	0.0	goziline	0.0
oleandrigenin-beta-D-glucosyl (1?4)-beta-D-digitalose	0.0	stavaroside J	0.0	argeloside N	0.0
calotropoceryl acetate B	0.0	pseudotaraxasterol acetate	0.0	taraxasterol	0.0
calotropursenyl acetate B	0.0	Stavaroside H tetraacetate	0.0	russelioside E	0.0
russelioside H	0.0	pergularine A	0.0	Stavaroside H diacetate	0.0

alpha-amyrin	0.0	3-acetyl taraxasterol	0.0	3-taraxasterol	0.0
stavaroside B	0.0	stavaroside C	0.0	stavaroside D	0.0
stavaroside G	0.0	stavaroside H	0.0	argeloside M	0.0
argeloside I	0.0	argeloside J	0.0	lupeol arachidate	0.0
laevigatin I	0.0	laevigatin II	0.0	lupeol acetate	0.0
16alpha-hydroxy-5,6-dehydrocalotropin	0.0	calotropin	0.0	5,6-dehydrocalotropin	0.0
3'-O-beta-D-glucocalotropin	0.0	caretroside A	0.0	12beta-benzoyloxy-8beta,14beta-dihydroxypregn-20-one-3-O-[beta-D-oleandropyranosyl-(1?4)-beta-D-cymaropyranoside]	0.0
6'-hydroxycalactin	0.0	6'-hydroxy-16alpha-acetoxycalactin	0.0	16alpha-hydroxycalactin	0.0
russelioside A	0.0	russelioside B	0.0	russelioside C	0.0
beta-amyrin	0.0	lupeol	0.0	beta-amyrin acetate	0.0
cryptostigmin III	0.0	cryptostigmin IV	0.0	subalpinosid	0.0
solargin II	0.0	alpinoside A	0.0	alpinoside B	0.0
russelioside F	0.0	russelioside G	0.0	russelioside H	0.0
argeloside C	0.0	argeloside D	0.0	argeloside E	0.0
argeloside H	0.0	argeloside I	0.0	argeloside J	0.0
3alpha,23-dihydroxylup-20(29)-en-28-oic acid 28-O-[4'-O-alpha-L-rhamnopyranosyl-6'-O-beta-D-glucopyranosyl]-beta-D-glucopyranosyl ester	0.0	penicilloside A	0.0	penicilloside B	0.0
penicilloside E	0.0	penicilloside F	0.0	caratuberside C	0.0
caratuberside F	0.0	caratuberside G	0.0	russelioside B	0.0
russelioside D	0.0	russelioside E	0.0	3beta-hydroxyurs-12-en-28-oic acid 3-O-[beta-D-galactopyranosyl-(1?2)]-beta-D-glucuronopyranoside	0.0
3alpha-hydroxylup-20(29)-en-30-ol-23,28-dioic acid	0.0	3alpha-hydroxylup-20(29)-en-23,28-dioic acid 3-O-beta-D-glucopyranoside	0.0	3alpha-hydroxylup-20(29)-ene-23,28-dioic acid 23-O-beta-D-glucopyranosyl ester	0.0
3-epi-betulinic acid 3-O-sulphate, 28-O-[4'-O-alpha-L-rhamnopyranosyl-6'-O-beta-D-glucopyranosyl]-beta-D-glucopyranosyl ester	0.0	3-epi-betulinic acid 3-O-beta-D-6'-acetylglucopyranoside, 28-O-[4'-O-alpha-L-rhamnopyranosyl-6'-O-beta-D-glucopyranosyl]-beta-D-glucopyranosyl ester	0.0	3-O-alpha-L-arabinopyranosyl echinocystic acid 28-O-[alpha-L-rhamnopyranosyl-(1?4)-beta-D-glucopyranosyl-(1?6)-beta-D-glucopyranosyl] ester	0.0
3-O-[alpha-L-rhamnopyranosyl-(1?2)-alpha-L-arabinopyranosyl]3beta,23-dihydroxy olean-18-en-28-oic acid 28-O-[alpha-L-rhamnopyranosyl-(1?4)-beta-D-6-O-acetyl glucopyranosyl-(1?6)-beta-D-glucopyran	0.0	3-O-[alpha-L-rhamnopyranosyl-(1?2)-alpha-L-arabinopyranosyl]hederagenin 28-O-[alpha-L-rhamnopyranosyl-(1?4)-beta-D-glucopyranosyl-(1-6)-[beta-D-xylopyranosyl-(1?2)-]beta-D-glucopyranosyl]ester	0.0	3-O-[alpha-L-rhamnopyranosyl-(1?2)-alpha-L-arabinopyranosyl]hederagenin 28-O-[alpha-L-rhamnopyranosyl-(1?4)-beta-D-glucopyranosyl-(1?6)-[beta-D-glucopyranosyl (1?2)-]beta-D-glucopyranosyl] ester	0.0
saponin 9	0.0	saponin 10	0.0	saponin 11	0.0
saponin 15	0.0	kalopanaxsaponin B	0.0	saponin 17	0.0
3-O-[beta-D-glucopyranosyl-(1?2)-beta-D-glucopyranosyl-(1?3)-beta-D-glucopyranosyl-(1?3)-alpha-L-arabinopyranosyl]oleanolic acid 28-O-[alpha-L-rhamnopyranosyl-(1?4)-beta-D-glucopyranosyl-(1?6)]	0.0	3-O-[beta-D-glucopyranosyl-(1?2)-beta-D-glucopyranosyl-(1?3)-beta-D-glucopyranosyl-(1?3)-alpha-L-arabinopyranosyl]echinocystic acid 28-O-[alpha-L-rhamnopyranosyl-(1?4)-beta-D-glucopyranosyl-(1??	0.0	leonticin E	0.0
3-O-[beta-D-apiofuranosyl-(1?4)-beta-D-glucuronopyranosyl]oleanolic acid 28-O-beta-D-glucopyranosyl ester	0.0	3-O-alpha-L-rhamnopyranosyl-(1?4)-[alpha-L-arabinopyranosyl-(1?2)-] beta-D-glucuronopyranosyl oleanolic acid	0.0	3-O-[beta-D-glucopyranosyl-(1?2)-beta-D-glucuronopyranosyl] hederagenin 28-O-beta-D-glucopyranosyl ester	0.0
3-O-alpha-L-rhamnopyranosyl-(1?4)-[beta-D-galactopyranosyl-(1?2)-] beta-D-glucuronopyranosyl oleanolic acid 28-O-beta-D-glucopyranosyl ester	0.0	3-O-beta-D-apiofuranosyl-(1?4)-[alpha-L-arabinopyranosyl-(1?2)-] beta-D-glucuronopyranosyl oleanolic acid	0.0	3-O-beta-D-apiofuranosyl-(1?4)-[alpha-L-arabinopyranosyl-(1?2)-] beta-D-glucuronopyranosyl oleanolic acid 28-O-beta-D-glucopyranosyl ester	0.0

3-O-[beta-D-glucopyranosyl-(1?2)-beta-D-glucuronopyranosyl] oleanolic acid 28-O-[alpha-L-rhamnopyranosyl-(1?4)-beta-D-6-O-acetyl glucopyranosyl-(1?6)-beta-D-glucopyranosyl]ester	0.0	3-O-[beta-D-glucopyranosyl-(1?3)-beta-D-glucopyranosyl-(1?3)-alpha-L-arabinopyranosyl] oleanolic acid 28-O-[alpha-L-rhamnopyranosyl-(1?4)-beta-D-glucopyranosyl-(1?6)-beta-D-glucopyranosyl] ester	0.0	3-O-[beta-D-glucopyranosyl-(1?2)-beta-D-glucuronopyranosyl] hederagenin	0.0
zingibroside R1	0.0	chikusetsusaponin V	0.0	hemsloside G2	0.0
hederasaponin F	0.0	ciwujianoside A1	0.0	ciwujianoside C3	0.0
Molécule 1 - Nom	Molécule 1 - Score	Molécule 2 - Nom	Molécule 2 - Score	Molécule 3 - Nom	Molécule 3 - Score
3-O-[beta-D-glucopyranosyl-(1?3)]-[beta-D-glucopyranosyl-(1?2)]-alpha-L-arabinopyranosyl echinocystic acid 28-O-[alpha-L-rhamnopyranosyl-(1?4)-beta-D-glucopyranosyl-(1?6)-beta-D-glucopyranosyl]	0.0	3-O-[beta-D-3-O-trans-p-coumaroyl-glucopyranosyl-(1?3)]-[beta-D-glucopyranosyl-(1?2)]-alpha-L-arabinopyranosyl echinocystic acid 28-O-[alpha-L-rhamnopyranosyl-(1?4)-b-D-glucopyranosyl-(1?6)-beta	0.0	3-O-[beta-D-3-O-cis-p-coumaroyl-glucopyranosyl-(1?3)]-[beta-D-glucopyranosyl-(1?2)]-alpha-L-arabinopyranosyl echinocystic acid 28-O-[alpha-L-rhamnopyranosyl-(1?4)-beta-D-glucopyranosyl-(1?6)-bet	0.0
3-O-alpha-L-arabinopyranosyl-echinocystic acid	0.0	calenduloside E	0.0	ciwujianoside C3	0.0
hederasaponin F	0.0	3-O-beta sulphate-oleanolic acid 28-O-alpha-L-rhamnopyranosyl-(1?4)-beta-D-gentiobiosyl ester	0.0	bacterioruberin	0.0
sablacaurin B	0.0	quercetin 3-O-beta-4C1-D-glucopyranoside	0.0	stigmasterol	0.0
[ERROR]	0.0	[ERROR]	0.0	[ERROR]	0.0
betulinic acid	0.0	maslinic acid	0.0	crassoside	0.0
luteoside B	0.0	amphipaniculoside A	0.0	amphipaniculoside B	0.0
saponarin	0.0	beta-methyl oleanate	0.0	sipholenol K	0.0
olibanumol M	0.0	olibanumol N	0.0	epilupeol	0.0
glochidiol	0.0	lup-20(29)-ene-2alpha,3beta-diol	0.0	3beta-acetoxylup-20(29)-en-11beta-ol	0.0
neolexonol acetate	0.0	urs-12-ene-3beta,11alpha-diol	0.0	sipholenol L	0.0
dammarenediol II acetate	0.0	ocotillol acetate	0.0	3beta-hydroxymansumbin-13(17)-en-16-one	0.0
olibanumol I	0.0	olibanumol E	0.0	olibanumol F	0.0
pheophorbide A	0.0	pyropheophorbide A	0.0	sipholenone E	0.0
aikupikanyne B	0.0	aikupikanyne C	0.0	octahydrosiphonochalyne	0.0
lanosterol	0.0	dammarane triterpene1	0.0	3-O-acetyl-12beta-acetoxy-17alpha-hydroxycabraleaahydroxylactone	0.0
12beta-acetoxycleocarpane	0.0	12beta-acetoxycleocarpanol	0.0	3-O-acetyl-12beta-hydroxycleocarpanol	0.0
dammarane triterpene13	0.0	12beta-acetoxyl(2),22(23)-tetrahydrocabralea-lactone	0.0	12beta-acetoxy-Delta-1,2-dehydrocabralea-lactone	0.0
3-butenyl isothiocyanate	0.0	stigmasterol-3-O-beta-D-glucopyranoside	0.0	6-di(7-hydroxy,1,5-epoxy germacrane)	0.0
(1R,2R,3E,7E,11R,12S)-2,18-O-diacetyl-16-O-(3-hydroxy-3-methylglutaryl)-dolabella-3,7-dien-2,16,18-triol	0.0	drosericarpone	0.0	stigmasterol glucoside	0.0
succulentoside B	0.0	Snatzkein F	0.0	gypsogenin	0.0
beta-D-glucopyranosiduronic acid	0.0	isorhamnetin 3-robinobioside	0.0	3-O-[beta-D-glucopyranoside-(1?4)-O-alpha-L-(2-O-acetyl)-arabinopyranosyl]-2alpha,3beta,19beta,20beta-tetrahydroxyfern-7-en-6-oxo-29-oic acid	0.0
16-O-(4-O-acetyl)-alpha-L-arabinopyranosyl-20-O-beta-D-glucopyranosyl-6alpha,16alpha,20beta,21alpha-tetrahydroxytetrahymanol	0.0	chikusetsusaponin Iva	0.0	gypsogenin 3-O-beta-xylopyranosyl-(1?3)-[beta-galactopyranosyl-(1?2)]-beta-glucuronopyranoside	0.0
gypsin A	0.0	gypsin B	0.0	gypsin C	0.0
herniariasaponin C	0.0	herniariasaponin D	0.0	snatzkein C	0.0
snatzkein B	0.0	succulentoside C	0.0	succulentoside D	0.0

kaempferol-3-O-(4-beta-D-xylopyranosyl)-alpha-L-rhamnopyranoside-7-O-alpha-L-rhamno-pyranoside	0.0	azizic acid	0.0	3-O-beta-D-xylopyranosyl-(172)-O-beta-D-glucuronopyranosyl-akebonic acid 28-O-beta-D-glucopyranoside	0.0
silphioside G	0.0	boussingoside A2	0.0	quercetin-3-O-(6"-caffeoyl)-sophoroside	0.0
oleanolic acid-3-O-beta-glucopyranoside	0.0	chikusetsusaponin-IVa methyl ester	0.0	oleanolic acid-3,28-beta-diglucopyranoside	0.0
kaempferol 3-O-alpha-rhamnoside-7-O-beta-D-xylosyl(1?2)-O-alpha-L-rhamnoside	0.0	hederagenin-3-O-beta-D-glucuronopyranoside	0.0	oleanolic acid-3-O-beta-D-glucuronopyranoside	0.0
2,3,4,6-tetragalloyl glucose	0.0	3'-O-methyl-4-O-(3'',4''-di-O-galloyl-alpha-L-rhamnopyranosyl) ellagic acid	0.0	chebulanin	0.0
2,3:4,6-bis-hexahydroxydiphenyl-l-galloyl-beta-glucose	0.0	methyl neochebulagate	0.0	methyl neochebulinate	0.0
corilagin	0.0	gallagic acid	0.0	punicalin	0.0
4-O-(3'',4''-di-O-galloyl-alpha-L-rhamnopyranosyl) ellagic acid	0.0	3'-O-methyl-4-O-(n''-O-galloyl-beta-D-xylopyranosyl) ellagic acid	0.0	3,3'-di-O-methyl-4-O-(n''-O-galloyl-beta-D-xylopyranosyl) ellagic acid	0.0
quercetin 3,4'-di-O-beta-D-glucopyranoside-7-O-alpha-L-rhamnopyranoside	0.0	atraflavoside B	0.0	stigmasterol 3-beta-glucoside	0.0
beta-sitosteryl-beta-D-glucoside	0.0	stigmasterol 3-O-beta-D-glucoside	0.0	perilladehyde	0.0
methyl-9-oxo-1(10)E,7Z-alpha-humulene-15-oate	0.0	methyl-6-acetoxy-9-oxo-1(10)E,7Z-alpha-humulene-15-oate	0.0	methyl-6-acetoxy-9-oxo-1(10)Z,4E,7Z-alpha-humulene-15-oate	0.0
alpha-myrcene	0.0	1,5,12-trihydroxy-5-O-(2',3',6'-O-triacetyl-4'-O-angeloyl-beta-D-glucopyranosyl)-farsenol	0.0	pentandroside A	0.0
acetyltrimartol B	0.0	(2S,3S,4R,5R,6R,8R, 12S,13S,14R,15R)-5,8,14-triacetoxy-3-benzoyloxy-15-hydroxy-9-oxo-paralane	0.0	(22E)-ergosta-5,8,22-trien-7-one-3beta-ol	0.0
didemnaketal D	0.0	didemnaketal E	0.0	ursolic acid	0.0
2'',2'''-di-O-beta-glucopyranosyl-vicenin II	0.0	herbacetin 3-O-alpha-rhamnopyranoside-8-O-beta-glucopyranoside	0.0	kaempferol-3-sophoroside-7-glucoside	0.0
euphoscopin B	0.0	euphohelioscopin A	0.0	euphoscopin C	0.0
euphornin B	0.0	euphornin C	0.0	euphohelin A	0.0
euphohelin D	0.0	euphohelin E	0.0	euphornin D	0.0
euphornin G	0.0	euphornin H	0.0	euphornin I	0.0
euphoscopin E	0.0	euphoscopin F	0.0	euphoscopin H	0.0
euphoscopin K	0.0	euphoscopin L	0.0	epieuphoscopin A	0.0
epieuphoscopin F	0.0	euphohelionon	0.0	euphornin	0.0
euphoheliosnoid B	0.0	euphoheliosnoid C	0.0	euphoheliosnoid D	0.0
euphoscopin N	0.0	6,6'' -Di-C-beta-glucopyranosyl-methylene-(8,8'')-biapigenin	0.0	euphornin N	0.0
Molécule 1 - Nom	Molécule 1 - Score	Molécule 2 - Nom	Molécule 2 - Score	Molécule 3 - Nom	Molécule 3 - Score
14alpha,15beta-diacetoxy-3beta,7beta-dibenzoyloxy-17-hydroxy-9-oxo-2betaHjatropa-5E,11E-diene	0.0	euphohelioscopin C	0.0	lup-20(29)-ene-3-acetate	0.0
6,6'''-Di-C-beta-glucopyranosyl-methylene-(3,8'')-biapigenin	0.0	helioscopinin A	0.0	helioscopinin B	0.0
euphorscopin	0.0	euphorhelin	0.0	1,2,3-tri-O-galloyl-beta-D-glucose	0.0
(1R*,2R*,3E,11R*,12S*)-2,18-O-diacetyl-16-O-(3-hydroxy-3-methylglutaryl)-2,16,18-trihydroxydolabella-3,8(17)-dien-7-one	0.0	(1R*,2R*,3E,7E,11R*,12S*)-16-O-(3-hydroxy-3-methylglutaryl)-18-O-acetyldolabella-3,7-dien-2,16,18-triol	0.0	(1R*,2R*,3E,7E,11R*,12S*)-2,18-O-diacetyl-16-O-(3-hydroxy-3-methylglutaryl)-dolabella-3,7-dien-2,16,18-triol	0.0
synagrantol A	0.0	synagrantol B	0.0	germanicol	0.0
8-alpha-methylbutyrol-ingol-3,7,12-triacetate	0.0	8-angoyl-ingol-3,12-diacetate	0.0	8-alpha-methylbutyrol-ingol-3,12-diacetate	0.0

segetene B	0.0	5,6,11,14,17(R)-pentaacetoxy-3-benzoyloxy-15-hydroxysegetan-9-one	0.0	6,14,17(R)-triacetoxy-5-(2-acetoxyacetoxy)-3-benzoyloxy-15-hydroxysegetan-9-one	0.0
(2R,3R,3aS,4R,6S,7S,12S,13aR)-3,4,6,13a-tetrakis(acetyloxy)-2,9,9,12-tetramethyl-5-methylidene-7-(2-methylpropoxy)-8,13-dioxo-1H,2H,3H,3aH,4H,5H,6H,7H,8H,9H,12H,13H,13aH-cyclopenta[12]annulen-2-yl aceta	0.0	(2E)-2-[[[(2R,3R,3aS,4R,6S,7S,12S,13aR)-2,3,4,6,13a-pentakis(acetyloxy)-2,9,9,12-tetramethyl-5-methylidene-8,13-dioxo-1H,2H,3H,3aH,4H,5H,6H,7H,8H,9H,12H,13H,13aH-cyclopenta[12]annulen-7-yl]oxy}but-2-enoa	0.0	(1R,2R,3aR,5S,10S,11S,13R,13aS)-3a,11,13-tris(acetyloxy)-2-hydroxy-2,5,8,8-tetramethyl-12-methylidene-10-(2-methylpropoxy)-4,9-dioxo-1H,2H,3H,3aH,4H,5H,8H,9H,10H,11H,12H,13H,13aH-cyclopenta[12]annulen-1	0.0
(1S,2R,3R,3aR,4R,5S,10R,12R,13S,13aS)-3,4,10,13-tetrakis(acetyloxy)-3a-hydroxy-2,5,8,8,12-pentamethyl-9-oxo-tetradecahydro-1H-cyclopenta[12]annulen-1-yl benzoate	0.0	(1S,2S,3aR,4R,5S,10R,12R,13S,13aS)-4,10,13-tris(acetyloxy)-3a-hydroxy-2,5,8,8,12-pentamethyl-9-oxo-tetradecahydro-1H-cyclopenta[12]annulen-1-yl benzoate	0.0	ent-3-hydroxyatis-16(17)-ene-2,14-dione	0.0
multiflorenyl palmitate	0.0	guyonianin E	0.0	guyonianin F	0.0
4,20-dideoxy(4lpha)phorbol-12-benzoate-13-isobutyrate	0.0	25-hydroperoxycycloart-3beta-ol	0.0	3beta-hydroxycycloart-25-ene-24-hydroperoxide	0.0
ingol-7,8,12-triacetate-3-phenylacetate	0.0	ingol-7,8,12-triacetate-3-(4-methoxyphenyl)acetate	0.0	8-methoxyingol-7,12-diacetate-3-phenylacetate	0.0
(2S,3S,4R,5R,6R,8R,11S,12S,13R,14R,15R)-6,11,14,17-tetraacetoxy-5-(2-acetoxyacetoxy)-3-benzoyloxy-15-hydroxy-9-oxo-segetane	0.0	(2S,3S,4R,5R,6R,8R,11S,12S,13R,14R,15R)-6,14,17-triacetoxy-5-(2-hydroxyacetoxy)-3-benzoyloxy-15-hydroxy-9-oxo-segetane	0.0	(2R,3R,4S,5R,7S,8R,13R,15R)-2,3,5,7,15-pentaacetoxy-8-iso-butyroyloxy-9,14-dioxojatropha-6(17), 11E-diene	0.0
(2S,3S,4R,5R,6R,8R,12S,13S,14R,15R)-1,5,8,14-tetraacetoxy-3-benzoyloxy-15-hydroxy-9-oxo-paraliane	0.0	oxaline	0.0	cocciferin D1	0.0
cocciferin T1	0.0	cocciferin T2	0.0	cocciferin D2	0.0
acutissimin B	0.0	castalagin	0.0	vascalagin	0.0
isocastavaloninic acid	0.0	mongolicain A	0.0	desgalloylstachyurin	0.0
3-O-[(2,3,4-triacetyl-alpha-L-rhamnopyranosyl)-(176)]-3-acetyl-beta-D-galactopyranoside	0.0	sinaicinone	0.0	hurghadin	0.0
glucoscillaren A	0.0	scillarenin-3-O-beta-D-glucosido-1''?4'-beta-D-glucoside	0.0	scillirubrosldin-3-O-beta-D-glucosido-1''?4'-beta-D-glucoside	0.0
scilliphaeosidin-3-O-beta-D-glucoside	0.0	glucoscilliphaeoside	0.0	6-desacetyl-scilliroside	0.0
12beta-hydroxy-scilliroside	0.0	12beta-hydroxy-scillirosidin-3-O-alpha-L-rhamnoside	0.0	16beta-hydroxy-scillarenin-3-O-beta-D-glucoside	0.0
16beta-O-acetyl-scillarenin-3-O-beta-D-glucosid-1''?4'-D-glucoside	0.0	16beta-O-acetyl-glucoscillaren A	0.0	16beta-O-acetyl-scillirubroside	0.0
anchinopeptolide D	0.0	irisamide A	0.0	irisamide B	0.0
tectorigenin 7-O-beta-D-glucopyranoside-4◆-O-[beta-D-glucopyranosyl-(1''?6'')]-beta-D-glucopyranoside]	0.0	stemphyllanthranol A	0.0	stemphyllanthranol B	0.0
[ERROR]	0.0	alterporriol D	0.0	7alpha,18-diacetoxy-13beta-methoxyabiet-8(14)-ene	0.0
17-O-[N-(2-Bromoethyl)carbamoyl]latrunculin A	0.0	podocarpusflavone A	0.0	7'',4''-dimethylamentoflavone	0.0
17-O-[N-(2-Chloroethyl)carbamoyl]latrunculin A	0.0	17-O-[N-(Phenyl)carbamoyl]latrunculin A	0.0	17-O-[N-(Benzyl)carbamoyl]latrunculin A	0.0
alternariol 5-O-methyl ether-4'-O-sulphate	0.0	3'-hydroxyalternariol 5-O-methyl ether	0.0	isooctyl phthalate	0.0
olean-18-en-3-one	0.0	adiantoxide	0.0	kaempferol-3-O-beta-xylopyranosyl-(1''?2'')-O-alpha-rhamnopyranoside-7-O-alpha-rhamnopyranoside	0.0
lotusine E	0.0	6,8-di-C-cellobiosylapigenin	0.0	2''-O-alpha-rhamnopyranosylvitexin	0.0
procyanidin B-5	0.0	procyanidin C-1	0.0	variabiloside E	0.0
(23S)-23-ethyl-24-methyl-cycloart-24(241)-3beta-yl acetate	0.0	Sargassaceae meroditerpenoid 3	0.0	Sargassaceae meroditerpenoid 1aS	0.0
scropolioside B	0.0	scrophuloside B5	0.0	scropolioside D	0.0
asphodoside A	0.0	asphodelin-10'-oxanthrone-(10'R)-beta-L-arabinopyranoside	0.0	Asparagus saponin 1	0.0

3beta,6alpha,23epsilon-trihydroxy-6alpha-cholest-9(11)-ene	0.0	methyl 3beta-acetoxy-6-hydroxy-1-oxomeliac-14-enoate	0.0	1-O-beta-D-glucopyranosyl-(2S,3S,4R,8Z)-2-[(2'R)-2'-hydroxypalmito-ylamino]-8-octadecene-1,3,4'-triol	0.0
20-hydroxyecdysone-20,22-monoacetone	0.0	khayanolide A	0.0	khayanolide E	0.0
1-O-acetylkhayanolide A	0.0	khayalactol	0.0	khayanone-(S)-methoxy-alpha-(trifluoromethyl)phenylacetate ester	0.0
swietephragmin A	0.0	swietephragmin B	0.0	beta-sitosterol-3-O-(3Z)-pentacosenoate	0.0
swietephragmin E	0.0	swietephragmin F	0.0	2-hydroxy-3-O-tigloylswietenolide	0.0
swietemahonin G	0.0	7-deacetoxy-7-oxogedunin	0.0	swietephragmin H	0.0
6-O-acetyl-2-hydroxyswietenin	0.0	2-hydroxyswietenine	0.0	swietenialide A	0.0
swietenialide D	0.0	swietenialide E	0.0	2-hydroxyswietenin	0.0
glinuside E	0.0	glinuside A	0.0	glinuside B	0.0
grandinin	0.0	20S-17beta,29-epoxy-28-norlupan-3beta-ol	0.0	28-norlup-20(29)-en-3beta,17beta-diol	0.0
ursolaldehyde	0.0	2alpha,3beta-dihydroxyurs-12-en-28-oic acid	0.0	1-O-3,4-dimethoxy-phenylethyl-4-O-3,4-dimethoxy cinnamoyl-6-O-cinnamoyl-beta-D-glucopyranose	0.0
enniatiin A1	0.0	isorhamnetin 3-O-4Rham-galactosylrobinobioside	0.0	nympholide A	0.0
GI-5	0.0	nonaacetyl angustifolioside A	0.0	octaacetyl angustifolioside B	0.0
1,2,6-tri-O-galloylglucose	0.0	withanolide J	0.0	withametelin Q	0.0
phenowithanolide	0.0	daturametelin D	0.0	5beta,6beta-epoxy-4beta,17alpha,27-trihydroxy-1-oxowitha-2,24-dienolide	0.0
alpha-solanine	0.0	cesdiurin I	0.0	cesdiurin II	0.0
Molécule 1 - Nom	Molécule 1 - Score	Molécule 2 - Nom	Molécule 2 - Score	Molécule 3 - Nom	Molécule 3 - Score
phyllagallin M1	0.0	phyllagallin D1	0.0	phyllagallin M2	0.0
phyllagallin D4	0.0	gemin D	0.0	remurin A	0.0
3alpha-(3'',4''-dihydroxy-trans-cinnamoyloxy)-D-friedoolean-14-en-28-oic acid	0.0	hirtellin A	0.0	hirtellin B	0.0
nilotin D7	0.0	nilotin D8	0.0	nilotin D9	0.0
isohirtellin C	0.0	tellimagrandin I	0.0	tellimagrandin II	0.0
nilotin D2	0.0	nilotin D3	0.0	tamarixellagic acid	0.0
[ERROR]	0.0	[ERROR]	0.0	[ERROR]	0.0
nilotin T2	0.0	nilotin Q1	0.0	nilotin T1	0.0
hirtellin T3	0.0	tamarixinin B	0.0	nilotin D3	0.0
nilotin M5	0.0	nilotin M6	0.0	nilotin M7	0.0
16-epi-scalarolbutenolide	0.0	swinholid A	0.0	swinholid I	0.0
3-acetylsesterstatin 1	0.0	alpinoside C	0.0	3-acetyl sesterstatin 1	0.0
salmahyrtisol C	0.0	hyrtiosterol	0.0	phyllspongine A	0.0
phyllspongine E	0.0	12alpha-acetoxy-13beta,18beta-cyclobutan-20,24-dimethyl-24-oxoscalar-16-en-25beta-ol	0.0	gnidicin	0.0
12-O-heptadecenyl-5-hydroxy-6,7-epoxy-resiniferonol-9,13,14-orthobenzoate	0.0	12-O-butenyl-5-hydroxy-6,7-epoxy-resiniferonol-9,13-14-orthobenzoate	0.0	hirsein A	0.0
isorhamnetin-3-gentiobioside-7-glucoside	0.0	quercetin-3-rhamnogentiobioside	0.0	pentandroside B	0.0
pentandroside F	0.0	pentandroside G	0.0	parvispinoside A	0.0
22-O-methyl-parvispinoside B	0.0	talaromin A	0.0	talaromin B	0.0
biemodin	0.0	skyrin	0.0	oxyskyrin	0.0
Aspergillus diketopiperazine 5a	0.0	neobulgarone G	0.0	neobulgarone E	0.0
3beta,16alpha,23,28,30-pentahydroxyoleana-11,13(18)-diene 3-O-beta-D-glucopyranosyl-(1?2)-beta-D- glucopyranosyl-(1?3)-beta-D-fucopyranoside	0.0	3beta,16beta,23-trihydroxy-13,28-epoxyolean-11-ene 3-O-beta-D-glucopyranosyl-(1?2)-beta-D- glucopyranosyl-(1?3)-beta-D-fucopyranoside	0.0	talasin A	0.0
feselol	0.0	neveskone	0.0	samarcandin	0.0

isorhamnetin 3-O-gentobiosyl-pentoside	0.0	2alpha-acetyloxy-4beta-hydroxy-6alpha-angeloyloxy-10beta-benzoyloxydauc-8-ene	0.0	quercetin 7,3,3'-O-triglucoside	0.0
4beta,8alpha-dihydroxy-6alpha-vanilloxyloxydauc-9-ene	0.0	kaempferol 3-O-[2''-(4''-acetylramnosyl)(1?2)-6''-glucosyl] glucoside	0.0	isorhamnetin 3-O-[2''-(4''-acetylramnosyl)(1?2)-6''-glucosyl] glucoside	0.0
3beta-O-beta-D-glucopyranosyl-(1?2)-beta-D-galactopyranosyl-(1?2)-beta-D-glucuronopyranosyl-oleanolic acid-28-O-beta-D-glucopyranoside methyl ester	0.0	inermoside A	0.0	gnetin E	0.0
13-hydroxy-3-oxo-olean-11-en-28-oic acid	0.0	oleanonic acid	0.0	3beta, 25beta-dihydroxy-olean-12-en-28-oic acid	0.0
camaric acid	0.0	quinovic acid 28-O-beta-D-glucopyranosyl (2?1)beta-D-glucopyranosyl ester	0.0	quinovic beta acid 3beta-O-beta-D-acid quinovopyranosyl (3?1) beta-D-xylopyranoside	0.0
quinovic acid-3-beta-O-glucopyranosyl(2?1)rhampopyranoside	0.0	quinovic acid-3beta-O-beta-D-quinovoside	0.0	3beta-O-beta-D-quinovopyranosyl-1-quinovic acid (28?1)acid quinovopyranosyl ester	0.0
(22S,25S)-16-O-beta-D-xylopyranosyl-5alpha-cholestan-3beta,16beta,22,26-tetraol-3-O-beta-D-glucopyranosyl-(1?2)-O- [beta-D-glucopyranosyl-(1?3)]-O-beta-D-glucopyranosyl- (1?4)-beta-D-galactopyrano	0.0	(25S)-5alpha-spirostan-2alpha,3beta-diol-3-O-b-D-galactopyranosyl-(1?2)-O-[beta-D-glucopyranosyl- (1?3)]-O-beta-D-glucopyranosyl-(1?4)-beta-Dgalactopyranoside	0.0	(25S)-5alpha-spirostan-3beta-ol-3-O-beta-D-galactopyranosyl- (1?2)-O-[beta-D-glucopyranosyl-(1?3)]-O-beta-Dglucopyranosyl-(1?4)-beta-D-galactopyranoside	0.0
O-beta-D-fructofuranosyl-(2?6)-alpha-D-glucopyranosyl-(1?6)-beta-D-fructofuranosyl-(2?6)-beta-D-fructofuranosyl-(2?1)-beta-D-glucopyranosyl-(6?2)-beta-D-fructofuranoside	0.0	prosapogenin B of dioscin	0.0	dioscin	0.0
hydroxy-octadecatrienoic acid_001	0.0	germacrene D-4-ol	0.0	abietadiene	0.0
calenduladiol-3-O-myristate	0.0	calendulagycoside A	0.0	calendulagycoside A 6'-O-n-methyl ester	0.0
calendulagycoside B 6'-O-n-butyl ester	0.0	calendulagycoside C	0.0	calendulagycoside C 6'-O-n-methyl ester	0.0
calendulose G 6'-O-methyl ester	0.0	8alpha-O-beta-D-glucopyranosyllabd-13E-ene-15,19-diol-8alpha-2',3',4',6'- hexaacetate	0.0	3,5-di-O-caffeoylquinic acid	0.0
cynarasaponin E	0.0	cynarasaponin F	0.0	cynarasaponin I	0.0
cynarasaponin C	0.0	cynarasaponin C	0.0	3alpha,7beta-dihydroxy-5beta,6beta-epoxyeudesm-4(15)-ene-11-(O-beta-D-fucopyranoside-2',4'-diangelate-3'-isobutyrate)	0.0
3alpha,7beta-dihydroxy-15-acetoxyeudesm-4(5)-ene-11-(O-beta-D-fucopyranoside-2',4'-diangelate-3'-acetate)	0.0	7beta-hydroxy-3beta-acetoxy-5beta,6beta-epoxyeudesm-5(15)-ene-11-(O-beta-D-fucopyranoside-2',4'-diangelate-3'-acetate)	0.0	arvensoside A	0.0
erythrodiol	0.0	lup-20(29)-ene-1,3-diol	0.0	crispiside A	0.0
1,5-di-O-caffeoylquinic acid	0.0	luteolin 7-gentiobioside-4'-glucoside	0.0	3beta-hydroxy-11alpha-ethoxy-olean-12-ene	0.0
3beta-hydroxy-11alpha-ethoxyurs-12-ene	0.0	3beta-hydroxy-11alpha-methoxyolean-12-ene	0.0	3beta-hydroxy-11alpha-methoxyurs-12-ene	0.0
methyl 3,4-di-O-caffeoyl quinate	0.0	ent-11beta,15beta-dihydroxykaur-16-en-19-oic acid	0.0	dammradienyl acetate	0.0
methyl ursolate	0.0	Delta12 lupeol	0.0	deacetyldoronine	0.0
tanacetolide A	0.0	1beta,9alpha-diacetyloxy-6beta-isobutoxyloxy-4alpha-hydroxy-eudesm-11(13)-en-5alpha,7alpha,8alpha,12-olide	0.0	urospermal A-15-O-[4'-(p-hydroxyphenylacetyl)]-beta-D-glucopyranoside	0.0
leontogenin	0.0	taccalonolide A	0.0	taccalonolide B	0.0
quercetin 3-rutinoside-4◆-glucoside	0.0	stigmasterol	0.0	cucurbitacin E	0.0
1(22),7(16)diepoxytricyclo[20,8,00(7,16)]tricontane	0.0	chrysophanol-10,10'-bianthrone	0.0	chrysophanol- isophyscion bianthrone	0.0
stachysetin	0.0	teucroside	0.0	uvaol	0.0
lup-20(29)-ene-3beta,23-diol	0.0	2alpha-methoxylup-20(29)-en-3beta-ol	0.0	3alpha-acetoxyolean-12-en-28-al	0.0
7alpha,14alpha,18-triacetoxy-8,15-isopimaradien-1alpha-ol	0.0	11alpha-methoxyurs-12-ene-1beta,3beta,15alpha-triol	0.0	urs-12-ene-1beta,3beta,11alpha,15alpha-tetraol	0.0
1beta,3beta,15alpha-trihydroxyurs-12-en-28-al	0.0	urs-12-ene-1beta,3beta,15alpha,28-tetraol	0.0	11alpha-methoxyurs-12-ene-1beta,3beta,28-triol	0.0

Molécule 1 - Nom	Molécule 1 - Score	Molécule 2 - Nom	Molécule 2 - Score	Molécule 3 - Nom	Molécule 3 - Score
olean-12-ene-3beta,7beta,15alpha,28-tetraol	0.0	urs-12-ene-1beta,3beta,11alpha-triol	0.0	poliusaposide A	0.0
3beta,19alpha, 23-trihydroxy-urs-12-en-28- oic acid	0.0	montanin D	0.0	leucosceptoside B	0.0
liriodendrin	0.0	teucroside	0.0	(9) nopinone	0.0
caspiacoside E	0.0	caspiacoside F	0.0	caspiacoside G	0.0
caspiacoside K	0.0	trigoneoside Xa	0.0	trigoneoside Xb	0.0
trigoneoside XIIb	0.0	trigoneoside XIIIa	0.0	trigoneoside Ia	0.0
trigoneoside glucoside D	0.0	trigonelloside C	0.0	astrarmatuside	0.0
mauritanin	0.0	isorhamnetin-3-O-alpha-rhamnopyranosyl-(1→2)[alpha-rhamnopyranosyl-(1→6)]-beta-galactopyranoside	0.0	ancistrobertsonine A	0.0
gmelinoside G	0.0	gmelinoside H	0.0	gmelinoside I	0.0
6-O-(2''-O-acetyl-3'',4''-O-di-trans-cinnamoyl)-alpha-L-rhamnopyranosylcatalpol	0.0	O,N-dimethylancistrocladine	0.0	ancistrobertsonine B	0.0
(+/-)-schefflone	0.0	lutein	0.0	acuminavone	0.0
schweinfurthin B	0.0	knipholone-1,3-oxazine	0.0	10-methoxy-10-(chrysophanol-7'-yl)chrysophanol anthrone	0.0
chryslandicin	0.0	(20S)-3beta-acetoxy-12beta,16beta,25-tetrahydroxydammar-23-ene	0.0	(20S)-3beta-acetoxy-12beta,16beta-trihydroxydammar-24-ene	0.0
3beta,16beta,20(R)-trihydroxydammar-24-ene acetate	0.0	3beta-acetoxy-16beta,20(S),25-trihydroxydammar-23-ene	0.0	3beta-acetoxy-20(S)-dihydroxydammar-24-ene	0.0
aloenin B	0.0	aloeresin C	0.0	aloeresin D	0.0
beta-amyrin acetate	0.0	elgonicardine	0.0	epi-lupeol	0.0
cinnamolide	0.0	cinnamolide-3beta-acetate	0.0	azadirachtin	0.0
kaempferol 3-O-alpha-rhamnoside-7,4'-di-O-beta-galactoside	0.0	4-O-(3'',4''-di-O-galloyl-alpha-L-rhamnopyranosyl)ellagic acid	0.0	kaempferol 3,7,4'-tri-O-beta-glucoside	0.0
isoiguesterin	0.0	20-epi-isoiguesterinol	0.0	dihydro-20-epi-isoiguesterinol triacetate	0.0
cangoronine methyl ester	0.0	5,5-dimethyl-6-geranyl-3-hydroxy-2-(13,14-dihydroxybenzoyl)-4-(3,7-dimethyloct-2,7-dienyl)-8-(3-methylbut-2-enyl)-bicyclo[3.3.1]nonan-2-en-1,9-dione	0.0	3beta,24-O-ethylidenyl-2alpha,19alpha-dihydroxyolean-12-en-28-oic acid	0.0
tomentosic acid	0.0	arjungenin	0.0	sericoside	0.0
punicalagin	0.0	punicalagin	0.0	8-acetoxyisochiliolide lactone	0.0
trivernolin	0.0	friedelin acetate	0.0	nystatin	0.0
22alpha-acetoxynoomacrolactone	0.0	6-hydroxyneomacrolactone	0.0	6,7-epoxyneomacrolactone	0.0
neomacrotriol	0.0	22-de-O-acetyl-26-deoxyneoboutomellerone	0.0	5beta,24-cyclofriedelan-3-one	0.0
friedelane-3,7-dione	0.0	acetyl aleurotolic acid	0.0	labda-13E-ene-8a,15-diol	0.0
trachylobane	0.0	pimarane	0.0	3beta-acetoxy tetraxer-14-en-28-oic acid	0.0
striatoid A	0.0	otostegindiol	0.0	leucolactone	0.0
3beta-acetyloleanan-28-13beta-olide	0.0	linifolioside	0.0	linifolioside acetate	0.0
prosapgenin	0.0	glycone	0.0	lupeol palmitate	0.0
presengulone	0.0	physcion bianthrone	0.0	floribundone-1	0.0
anhydrophlegmacin-9,10-quinones A2	0.0	anhydrophlegmacin-9,10-quinones B2	0.0	5,7'-physcion-physcionanthrone	0.0
5,7'-physcion-fallacinol	0.0	torosanin-9',10'-quinone	0.0	anhydrophlegmacin-9',10'-quinone	0.0
3-O-alpha-rhamnopyranosyl(1?2)[(3-O-E-feruloyl)-alpha-rhamnopyranosyl(1?6)]-beta-galactopyranoside 6-hydroxykaempferol 6-methyl ether	0.0	9-angeloylanacrotine	0.0	5,14-dimethylbudmunchiamine L1	0.0
budmunchiamine K	0.0	hydroxysenkirkine	0.0	acacic acid lactone	0.0

(25R)-5beta-spirostan-3beta-ol 3-O-{beta-D-glucopyranosyl-(1?2)-[alpha-L-arabinopyranosyl-(1?6)]-beta-D-glucopyranoside}	0.0	26-O-beta-D-glucopyranosyl]-22alpha-methoxy-(25R)-furostan-3beta,26-diol 3-O-{beta-D-glucopyranosyl-(1?2)-[beta-D-glucopyranoside]}	0.0	12-methoxy-13-methylpodocarpa-1,8,11,13-tetraen-3,7-dione	0.0
hugonone A	0.0	(-)-6-methoxygossypol	0.0	28-nor-4alpha-carbomethoxy-11beta-acetoxy-12alpha-(2-methylbutanoyloxy)-14,15-deoxyhavanensin-1,7-diacetate	0.0
28-nor-4alpha-carbomethoxy-7-deoxy-7-oxo-11beta-acetoxy-12alpha-(2-methylbutanoyloxy)-14,15-deoxyhavanensin-1-acetate	0.0	11beta-acetoxy-3,7-diacetyl-4alpha-carbomethoxy-12alpha-isobutyryloxy-28-nor-1-tigloyl-havanensin	0.0	11beta,12alpha-Diacetoxynеotectleanin	0.0
7alpha,12alpha-Diacetoxy-11beta-hydroxynеotectleanin	0.0	11beta,12alpha-Diacetoxy-1-deoxo-14beta,15beta-epoxy-3beta-hydroxy-2-oxo-neotectleanin	0.0	ekeberin A	0.0
3-epioleanolic acid	0.0	3,11-dioxolean-12-en-28-oic acid	0.0	melliferone	0.0
swietenolide	0.0	3alpha-hydroxy-12-oleanen-28-oic acid	0.0	3-oxo-12-oleanen-28-oic acid	0.0
turraparvin B	0.0	turraparvin C	0.0	11-epi-21-hydroxytoonacilide	0.0
1alpha,3alpha-diacetylvilasinin	0.0	1alpha-acetyl-3alpha-propionylvilasinin	0.0	1alpha,3alpha-diacetyl-7alpha-tigloylvilasinin	0.0
3-oxo-12beta-hydroxy-oleanan-28,13beta-olide	0.0	azadirone	0.0	12alpha-acetoxy-7-deacetylazadirone	0.0
1alpha,3alpha-diacetyl-7alpha-tigloylvilasinin	0.0	niloticin	0.0	hispidol B	0.0
stigmasterol-3-O-beta-D-glucopyranoside acetate	0.0	3-O-{beta-D-glucopyranosyl(1?2)-[alpha-L-arabinopyranosyl(1?6)]-beta-D-glucopyranosyl}-oleanolic acid	0.0	beta-D-glucopyranosyl(1?2)-beta-Dglucopyranosyl 3-O-{beta-D-glucopyranosyl(1?2)-[alpha-L-arabinopyranosyl(1?6)]-beta-D-glucopyranosyl}-oleanolate	0.0
A-homo-3a-oxa-5beta-olean-12-en-3-one-28-oic acid	0.0	3-acetoxy-beta-amyrin	0.0	kaempferide 3-O-(2''-O-galloylrutinoside)-7-O-alpha-rhamnoside	0.0
corosolic acid	0.0	7-hydroxy-5,8-dimethoxyflavone	0.0	glucofrangulin A diacetate	0.0
busseihydroquinone F	0.0	chisocheton A	0.0	kihadalactone A	0.0
tricoccin S13 acetate	0.0	nobiline	0.0	neo-clerodan-3,13-dien-16,15,18,19-diolide	0.0
Molécule 1 - Nom	Molécule 1 - Score	Molécule 2 - Nom	Molécule 2 - Score	Molécule 3 - Nom	Molécule 3 - Score
kirkinine B	0.0	kirkinine C	0.0	yuanhuandine	0.0
excoecariatoxin	0.0	tetramethylormocarpin	0.0	dodecacetylormocarpin	0.0
7,7''-diacetyl-4',4''',5,5''-tetramethylchamaejasmin	0.0	di-podocarpanoid hugonone A	0.0	16-oxo-28-hydroxyolean-12-ene 3-O-beta-glucopyranosyl-(1''?6')-beta-glucopyranoside	0.0
22alpha-acetyl-16alpha-hydroxyolean-12-en-28-al 3-O-[alpha-rhamnopyranosyl-(1''''?6''')-beta-glucopyranosyl-(1''''?3'')][beta-glucopyranosyl-(1''?2'')]-beta-arabinopyranoside	0.0	22alpha-acetyl-16alpha,21beta-dihydroxyoleanane-13beta:28-olide 3-O-[beta-glucopyranosyl-(1''''?6'')][6''-O-coumaroylglucopyranosyl-(1''?2'')]-beta-glucopyranoside	0.0	16alpha,22alpha-diacetyl-21beta-angeloyloleanane-13beta:28-olide 3beta-O-[beta-glucopyranosyl-(1''?2'')][beta-glucopyranosyl-(1''''?4'')]-beta-glucopyranoside	0.0
quercetin 3-glucosyl (1''''?4'')rhamnoside-7-rhamnosyl (1''''?6''') glucoside	0.0	glutenol	0.0	embelinone	0.0
schimperinone	0.0	primulagenin A	0.0	3beta,16alpha-di-O-acetyl-13beta,28-epoxyoleanane	0.0
3beta-acetyl-16alpha-hydroxyoleanane-13beta,28-olide	0.0	3beta-acetyl-28-hydroxy-16-oxo-12-oleanene	0.0	3beta,28-di-O-acetyl-16alpha-hydroxy-12-oleanene	0.0
3beta-acetyl-16alpha,28alpha-dihydroxy-13beta,28-oxidooleanane	0.0	3beta,28alpha-dihydroxy-16-oxo-13beta,28-oxidooleanane	0.0	3beta,28-dihydroxy-16-oxo-12-oleanene	0.0
5,4'-dihydroxy-6-(3''-methylbut-2''-enyl)-2''-hydroxyisopropyl dihydrofurano [4'',5'':8,7] isoflavone	0.0	D:B-friedoolean-5-en-3beta-ol	0.0	dependensin	0.0
10-hydroxy-10,7'-(chrysophanol anthrone)-chrysophanol	0.0	1,14-dibromotetradecane	0.0	grandibracteoside C	0.0
ohchinin-3-acetate	0.0	1-cinnamoyltrichilin	0.0	1-tigloyltrichilin	0.0
1beta-hydroxymaprounic acid 3-p-hydroxybenzoate	0.0	2alpha-hydroxymaprounic acid 2,3-bis-p-hydroxybenzoate	0.0	hellebrigenin 3,5-diacetate	0.0

alpha-spinasterol 3-O-beta-D-glucoside	0.0	lucidene	0.0	10-(chrysophanol-7'-yl)-10-(?)-hydroxychrysophanol-9-anthrone	0.0
trivalvone	0.0	cynarasaponin C	0.0	3alpha,7beta-dihydroxy-5beta,6beta-epoxyeudesm-4(15)-ene-11-(O-beta-D-fucopyranoside-2',4'-diangelate-3'-isobutyrate)	0.0
3alpha,7beta-dihydroxy-15-acetoxyeudesm-4(5)-ene-11-(O-beta-D-fucopyranoside-2',4'-diangelate-3'-acetate)	0.0	7beta-hydroxy-3beta-acetox-5beta,6beta-epoxyeudesm-5(15)-ene-11-(O-beta-D-fucopyranoside-2',4'-diangelate-3'-acetate)	0.0	arvensoside B	0.0
erythrodiol	0.0	lup-20(29)-ene-1,3-diol	0.0	crispioside A	0.0
3alpha,7beta-dihydroxy-5beta,6beta-epoxyeudesm-4(15)-ene-11-(O-beta-D-fucopyranoside-2',4'-diangelate-3'-acetate)	0.0	3alpha,7beta-dihydroxy-5beta,6beta-epoxyeudesm-4(15)-ene-11-(O-beta-D-fucopyranoside-2',4'-diangelate-3'-methylbutyrate)	0.0	3alpha,7beta-dihydroxy-15-acetoxyeudesm-4(5)-ene-11-(O-beta-D-fucopyranoside-2',4'-diangelate-3'-acetate)	0.0
arvensoside B	0.0	3beta-acetox-12,20(30)-diene-11alpha-21alpha-diol	0.0	erythrodiol	0.0
6,10,14-trimethyl-2-pentadecene_001	0.0727	6,10,14-trimethyl-2-pentadecene_001	0.0727	6,10,14-trimethyl-2-pentadecene_001	0.0727
(E)-4-octene_001	0.1997	isorhamnetin 3-O-2G-rhamnosylrutinoside_001	0.2308	pachycladin A_001	0.2493
browniine_001	0.3618	19-acetylglucocoroglaucigenin_001	0.3978	oleic acid_001	0.4308
3-hydroxycycloart-24-one_001	0.484	squalene_001	0.5013	(Z)-3-dodecene_001	0.5639
floridanine_001	0.6535	stearic acid_001	0.6775	13-O-acetylphorbol-20-linoleate_001	0.6933
3-O-(beta-D-glucopyranosyl) etioline_001	0.7681	8,15-dihydroxygermacra-1(10),4,11(13)-trien-(12,6)-olide-14-al 15-O-beta-D-glucopyranoside 2'-p-hydroxyphenylacetate_001	0.7742	1-octene_001	0.7896
hexadecanoic acid,15-methyl, methyl ester_001	0.9111	4'',5''-dihydro-5,2',4'-trihydroxy-5''-isopropenylfurano-(2'',3''	1.0	4'',5''-dihydro-2'-methoxy-5,4'-dihydroxy-5''-isopropenylfurano-(2'',3''	1.0
oleoside 11-methyloleoside_001	1.0789	n-octane_001	1.0923	n-octane_001	1.0923
methyl erucate_001	1.1471	feroxin B_001	1.1501	nuezhenide 11-methyloleoside_001	1.1787
6alpha,17,19-ent-trachylobantriol_001	1.349	11(S)-hydroperoxysarcoph-12(20)-ene_001	1.4186	(1R, 2R, 3E, 7E, 11R,12S)-2-O-acetyl-16-O-(3-hydroxy-3-methylglutaryl)-dolabella-3,7-diene-2, 16,18-triol_001	1.4441
lupulin A_001	1.6599	ekeberin C3_001	1.6953	hexadecanal_001	1.7267
11-eicosanoic acid methyl ester_001	1.8786	4,5-dicaffeoylquinic acid_001	1.9075	4,5-dicaffeoylquinic acid_001	1.9075
behenic acid_001	2.0074	methyl oleate_001	2.0498	deltatsine_001	2.1279
alienusolin_001	2.162	cycloartanol_001	2.1858	tridecanal_001	2.2401
undecane_001	2.375	undecane_001	2.375	heneicosanoic acid_001	2.3925
khayanolide C_001	2.587	dieporeticanin-2_001	2.6505	lignoceric acid_001	2.7205
desacylcynaropicrin_001	2.8373	1-decene_001	2.941	(E)-6-heptacosen-5-one_001	2.9935
beta-sitosterol-3-O-beta-D-glucoside_001	3.0509	hexadecanol_001	3.1707	kirkinine_001	3.2243
6-hydroxy-5-normethylbudmunchiamine K_001	3.3496	dodecane_001	3.505	dodecane_001	3.505
beta-anhydroepidigitoxigenin-3beta-O-glucopyranoside_001	3.7059	1-octadecanol_001	3.7318	1-pentadecene_001	3.7975
laxitextine A_001	3.9519	luteolin 7-[6'''-acetylallosyl-(1→2)glucoside]_001	3.9649	tamarixetin 3-robinobioside_001	3.9944
n-tetradecane_001	4.3434	5-hydroxyhexacosan-9-one_001	4.4132	(1R*,2R*,3E,7R*,8S*,9R*,11R*,12S*)-2-O-acetyl-16-O-(3-hydroxy-3-methylglutaryl)-8,9-epoxydolabeli-3-en-2,7,16,18-tetrol_001	4.4533
11-octadecenal_001	4.8542	(1R*,2R*,3E,7R*,8S*,9R*,11R*,12S*)-16-O-(3-hydroxy-3-methylglutaryl)-18-O-acetyl-8,9- eoxydolabell-3-en-2,7,16,18-tetrol_001	4.8762	hexadecane_001	4.8958
z-5-nonadecene_001	4.9177	aikupikanyne D_001	5.0106	12-O-acetylphorbol-13-decanoate_001	5.0307

sphinga-4,8 dienine ester_001	5.3388	1beta-hydroxy-kryptogenin-1-O-alpha-L-rhamnopyranosyl-(1?2)-alpha-L-arabinopyranoside_001	5.4086	7-hydroxydotriacontan-2-one_001	5.5305
gmelinoside C_001	5.8821	dieporeticenin_001	6.1349	methyl ester of (1R,2R,3E,7E,11R,12S)-2,18-O-diacetyl-16-O-(3-hydroxy-3-methylglutaryl)-dolabella-3,7-dien-2,16,18-triol_001	6.3231
nonadecane_001	6.7859	nonadecane_001	6.7859	nonadecane_001	6.7859
4,5-dicaffeoylquinic acid_001	7.0543	4,5-dicaffeoylquinic acid_001	7.0543	4,5-dicaffeoylquinic acid_001	7.0543
n-eicosane_001	7.2536	12-O-decanoylphorbol-13-(2-methylbutyrate)_001	7.2662	1-nonadecene_001	7.3788
5-hydroxytriacontan-9-one_001	7.6114	1-eicosene_001	7.7947	2S,3R-4E,8E-2-(hexadecanoylamino)-docosa-4,8-diene-1,3-diol_001	7.8828
heneicosane_001	8.1926	heneicosane_001	8.1926	heneicosane_001	8.1926
2S,3R-4E,8E-2-(octadecanoylamino)-octadeca-4,8-diene-1,3-diol_001	8.4527	octacosyl alcohol_001	8.6506	docosane_001	8.8499
Molécule 1 - Nom	Molécule 1 - Score	Molécule 2 - Nom	Molécule 2 - Score	Molécule 3 - Nom	Molécule 3 - Score
9-octylheptadecane_001	9.5136	(Z)-10-hexacosene_001	9.8158	tricosane_001	9.8712
2S,3R-4E-2-(octadecanoylamino)-octadec-4-ene-1-ol_001	9.9978	solargin III_001	10.0378	tetracosane_001	10.534
n-hexacosane_001	11.7181	1-hydroxytetraatriacontan-4-one_001	11.9103	5-hydroxydotriacontan-9-one_001	11.914
32-methyltetraatriacontan-8-ol_001	15.0256	nonacosane_001	15.0825	triacontane_001	15.2834
hentriacontane_001	16.7974	tritriacontane_001	18.0089	tetraatriacontane_001	18.5542
eicosyl docosanoate_001	19.6809	eicosyl docosanoate_001	19.6809	eicosyl docosanoate_001	19.6809
24-methylcycloart-25(26)-en-3-one_001	-0.6365	apigenin 8-C-glucoside_001	-0.9539	mansumbinone_001	-10.1716
jioglutolide_001	-11.1565	1-dehydroxy-3,4-dihydroaucubigenin_001	-11.5193	verminoside_001	-11.5261
jiofuran_001	-11.9486	ajugol_001	-12.1643	18,19-epoxyxenic-19-methoxy-18-hydroxy-4-acetoxy-6,9,13-triene_001	-12.4228
7-(2-methylbutyryl)-9-echimidinylretronecine_001	-12.6265	phytyl-3,7,11,15-tetramethyl-2-hexadecanenate_001	12.881	7-acetyl-9-curassavoylheliotridine_001	-12.9596
intermedine_001	-13.2956	heliotridine_001	-13.298	7-hydroxy viteoid II_001	-13.3074
p-hydroxybenzoic acid_001	-13.5022	parmentin A_001	-13.6729	9-curassavoylheliotridine_001	-13.6799
2-(3?,4?-dihydroxyphenyl) ethyl-3-O-alpha-L-rhamnopyranosyl-4-O-p-hydroxyphenylacetyl-6-O-caffeoyl-beta-D-glucopyranoside_001	-14.0366	3-(2'-hydroxyethyl)-5-(2''-hydroxypropyl)-dihydrofuran-2(3H)-one_001	-14.0521	carnegine_001	-14.0528
7-(2-methylbutyryl)-9-(2,3-dihydroxybutyryl) retronecine_001	-14.3574	rinderine_001	-14.8058	acetyllycopsamine_001	-14.813
heliosupine_001	-15.2244	7-hydroxy eucommic acid_001	-15.3759	1-O-p-hydroxybenzoyl-beta-D-glucopyranoside_001	-15.4566
1,6-di-O-p-hydroxybenzoyl-beta-D-glucopyranoside_001	-15.5796	(+)-lyoniresinol 3alpha-O-beta-D-glucopyranoside_001	-15.7087	7-norcarnegine_001	-15.939
tricin 4'-O-beta-glucopyranoside_001	-16.0061	trachelanthamine_001	-16.1379	3'-acetylechimidine_001	-16.1444
triangularicine_001	-16.8787	kaempferol-3-O-[6''-O-alpha-L-rhamnopyranosyl]-beta-D-glucopyranoside_001	-17.4027	luteolin-7,3?,4?-trimethyl ether_001	-17.5025
7-tigloyl-9-(hydroxypropenoyl) retronecine_001	-18.2161	indole-beta-carboxylic acid_001	-18.3403	pycnanthine_001	-18.5978
iso-vitexin_001	-18.9465	isovanillic acid_001	-19.1645	7-senecioid-lycopsamine_001	-19.2288
quercetin 3-O-sambubioside_001	-19.3718	orientin_001	-19.4232	1-O-ethyl-6-(p-hydroxybenzoyl)-beta-D-glucopyranoside_001	-19.5338
methyl ester of acetoxy-2-heneidecanoic acid_001	2.0267	myristic acid_001	-2.1627	phytol_001	-2.7454
amabiline_001	-20.2201	nicotiflorin_001	-20.2538	oleuropein_001	-20.3216
tricin 5 O-beta-4C1-D-glucoside_001	-20.9872	(113) naringenin-O-hexoside_001	-21.0848	botryorhodine A_001	-21.5084
vanillic acid_001	-22.1294	berberine_001	-22.1806	ixoside_001	-22.3349
6-transcaffeoyl ajugol_001	-23.0455	(-)-(R,R)-7'-O-methylcuspidaline_001	-23.0701	tricin 7-O-beta-glucopyranoside_001	-23.0757

parmentin B_001	-23.6728	luteolin 7-O-methylether 3'-O-beta-D-galactoside_001	-24.0247	quercetin 3-O-beta-galactopyranoside_001	-25.9338
(-)-temuconine_001	-29.5506	lauric acid_001	-3.2135	3-oxo-24-methylenecycloartane_001	-3.2784
tetraacetylsphingamine 4a_001	-3.7222	hydroxyhopane_001	-3.7941	capric acid_001	-4.1369
6,10,14-trimethylpentadecan-2-one_001	-4.7078	sablacaurin A_001	-5.4377	caprylic acid_001	-5.6401
sitosterol_001	-7.1087	(24R)-6beta-hydroxy-24-ethyl-cholest-4-en-3-one_001	-7.2209	(-)-lyoniresinol 3alpha-O-beta-D-glucopyranoside_001	-7.5808
des-p-hydroxybenzoyl kisasagenol B_001	-9.0513	1-benzyl-[6-p-hydroxybenzoyl]-beta-D-glucopyranosyl-(1?3)-beta-D-glucopyranoside_001	-9.4963	urs-9(11),12-dien-3beta-ol_001	-9.6085
2-(3?,4?-dihydroxyphenyl) ethyl-3-O-alpha-L-rhamnopyranosyl-4-O-piperidine- 3-carboxylic acid-6-O-caffeoyl-alpha-D-glucopyranoside_001	-9.7453				



Résumé

La leishmaniose est une maladie parasitaire grave pour laquelle il n'existe toujours pas de traitement entièrement efficace, malgré des décennies de recherche. Ce travail vise à identifier de nouveaux inhibiteurs potentiels de la N-myristoyltransférase (NMT) de *Leishmania*, une cible thérapeutique prometteuse.

Un criblage virtuel de 6910 composés naturels a été réalisé par docking moléculaire afin d'évaluer leur énergie d'interaction avec la NMT. Parmi eux, 70 composés ont présenté des énergies d'interaction supérieure à celle de l'inhibiteur de référence. Les deux candidats les plus prometteurs, Teucrol_001 et N-E-caffeoyl tyramine, ont affiché des énergies d'interaction respectives de $-29,1138$ kJ/mol et $-28,7406$ kJ/mol.

L'analyse de leurs propriétés physico-chimiques, pharmacocinétiques et toxicologiques suggère qu'ils pourraient constituer des candidats pertinents pour le développement de nouveaux traitements contre la leishmaniose. Ces résultats ouvrent des perspectives thérapeutiques prometteuses pour cette pathologie difficile à traiter.

Mots-clés : Leishmaniose ; Inhibiteurs ; Docking moléculaire ; Énergie d'interaction ; NMT

Abstract

Leishmaniasis is a serious parasitic disease for which no fully effective treatment currently exists, despite decades of research. This study aims to identify new potential inhibitors of *Leishmania* N-myristoyltransferase (NMT), a promising therapeutic target.

A virtual screening of 6,910 natural compounds was performed using molecular docking to evaluate their binding affinity with NMT. Among them, 70 compounds showed better interaction energies than the reference inhibitor. The two most promising candidates, Teucrol_001 and N-E-caffeoyl tyramine, exhibited binding energies of -29.1138 kJ/mol and -28.7406 kJ/mol, respectively.

Analysis of their physicochemical, pharmacokinetic, and toxicological properties suggests that they could serve as relevant candidates for the development of new treatments against leishmaniasis. These findings open up promising therapeutic avenues for this challenging disease.

Keywords: Leishmaniasis; N-myristoyltransferase ; Inhibitors; Molecular docking; Binding energy;

ملخص

الليشمانيا هي مرض طفيلي خطير لا يزال يفتقر إلى علاج فعال على الرغم من الجهود البحثية المستمرة منذ أكثر من عشرين عامًا. يهدف هذا العمل إلى اكتشاف مثبطات جديدة لإنزيم N-myristoyltransferase (NMT) الخاص بالليشمانيا، والذي يُعد هدفًا علاجيًا واعدًا.

تم إجراء فرز افتراضي لـ 6910 مركبًا طبيعيًا باستخدام تقنية الالتحام الجزيئي (Docking) لتقييم طاقاتهم التفاعلية مع إنزيم NMT. أظهر 70 مركبًا منها طاقة ارتباط أفضل من المثبط المرجعي. من بين هذه المركبات، أظهرت Teucrol_001 و N-E-caffeoyl tyramine نتائج واعدة، بطاقة ارتباط بلغت -29.1138 و -28.7406 كيلوجول/مول على التوالي. تشير دراسة خصائصهما الفيزيائية-الكيميائية والدوائية والسمية إلى إمكانية تطويرهما كعلاج محتمل ضد داء الليشمانيا. وتفتح هذه النتائج آفاقًا علاجية جديدة لهذا المرض الصعب.

الكلمات المفتاحية: الليشمانيا، مثبطات، الالتحام الجزيئي، طاقة الارتباط، N-myristoyltransferase

Année universitaire: 2024-2025	Présenté par : BENIRBAH Souheila FERCHA Bouchra
Approche <i>in silico</i> pour l'identification de nouveaux inhibiteurs naturels de la N-myristoyltransférase de <i>Leishmania</i> en vue du traitement de la leishmaniose	
Mémoire pour l'obtention du diplôme de Master en Biochimie Appliquée	
Résumé La leishmaniose est une maladie parasitaire grave pour laquelle il n'existe toujours pas de traitement entièrement efficace, malgré des décennies de recherche. Ce travail vise à identifier de nouveaux inhibiteurs potentiels de la N-myristoyltransférase (NMT) de <i>Leishmania</i>, une cible thérapeutique prometteuse. Un criblage virtuel de 6910 composés naturels a été réalisé par docking moléculaire afin d'évaluer leur énergie d'interaction avec la NMT. Parmi eux, 70 composés ont présenté des énergies d'interaction supérieure à celle de l'inhibiteur de référence. Les deux candidats les plus prometteurs, Teucrol_001 et N-E-caffeoyl tyramine, ont affiché des énergies d'interaction respectives de $-29,1138$ kJ/mol et $-28,7406$ kJ/mol. L'analyse de leurs propriétés physico-chimiques, pharmacocinétiques et toxicologiques suggère qu'ils pourraient constituer des candidats pertinents pour le développement de nouveaux traitements contre la leishmaniose. Ces résultats ouvrent des perspectives thérapeutiques prometteuses pour cette pathologie difficile à traiter.	
Mots-clés : Leishmaniose ; N-myristoyltransférase ; Inhibiteurs ; Docking moléculaire ; Énergie d'interaction ;	
Laboratoires de recherche : Laboratoire de Biochimie Appliquée (U. Constantine 1 Frères Mentouri).	
Président du jury : Mr. MOKRANI E.H. (MCA – U Constantine 1 Frères Mentouri). Encadrant : M^{elle} GUENDOUZE A. (MCA- U Constantine 1 Frères Mentouri). Examineur : M^{me} DEMMAK R.G. (MCA- U Constantine 3- Salah Boubnider).	