

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ABC

Trabalho de Conclusão de Curso | Bacharelado em Química

Jean Carlos de Mattos Pinto

**Análise *in silico* da dinâmica estrutural,
movimentos funcionais e não-funcionais e
interação com inibidores dos mutantes da
protease principal do SARS-CoV-2**

Santo André

NOVEMBRO – 2021

Jean Carlos de Mattos Pinto

**Análise *in silico* da dinâmica estrutural,
movimentos funcionais e não-funcionais e
interação com inibidores dos mutantes da
protease principal do SARS-CoV-2**

Monografia de Trabalho de
Conclusão de Curso, apresentado ao
Bacharelado em Química da UFABC
para obtenção do título de Bacharel
em Química
Orientador: Ana Lígia Barbour Scott

Santo André
NOVEMBRO – 2021

De Mattos Pinto, Jean Carlos
ANÁLISE *IN SILICO* DA DINÂMICA
ESTRUTURAL, MOVIMENTOS FUNCIONAIS E
NÃO-FUNCIONAIS E INTERAÇÃO COM
INIBIDORES DA PROTEASE PRINCIPAL DO
SARS-COV-2/ Jean Carlos de Mattos Pinto — 2021.

x fls. : iJ.

Orientador: Ana Lígia Barbour Scott

Trabalho de Conclusão de Curso — Universidade Federal do ABC,
Bacharelado em Química, Santo André, 2021.

I. Modelagem. 2. SARS-Cov-2 I. SCOTT, Ana Ligia Barbour. II.
Bacharelado em Química, 2021. III. Título.

Jean Carlos de Mattos Pinto

Análise *in silico* da dinâmica estrutural, movimentos funcionais e não-funcionais e interação com inibidores dos mutantes da protease principal do SARS-CoV-2

Monografia apresentada ao curso de Bacharelado em Química do Centro de Ciências Naturais e Humanas da Universidade Federal do ABC, como requisito para conclusão de curso.

Aprovada em 25 de novembro de 2021

Prof.^a Dr.^a Paula Homem de Mello
Examinador UFABC

Prof. Dr. André Sarto Polo
Examinador UFABC

Prof. Dr^a. Ana Lígia Barbour Scott
Orientador

Santo André –
SP 2021

AGRADECIMENTOS

Esse trabalho está sendo concluído em uma das semanas mais difíceis da minha vida. Porém, independentemente desse fato, ele não seria possível sem a ajuda de pessoas maravilhosas que sempre me deram apoio, carinho, consolo, um escape ou um abraço sincero.

Agradeço a minha mãe, Aparecida Santos de Mattos Pinto, por sempre pegar no meu pé e cuidar de mim.

Agradeço ao meu pai, Cicero Carlos Lins Pinto, por ter dado o pontapé inicial no meu gosto pela química e por sempre garantir os meios necessários para que eu chegasse até aqui.

Agradeço às minhas irmãs por sempre servirem de inspiração. Quando eu crescer, quero ser igual a vocês duas.

Agradeço ao meu namorado, Max Mario Fuhlendorf, pelo carinho de sempre, por todos os programas em *shell* que me ajudaram a analisar essa enorme quantidade de dados, e por todas as jantas e abraços que você me deu quando eu não estava mais aguentando.

Agradeço a toda equipe do Laboratório de Bioinformática e Biologia Computacional, e em especial a Eric Alisson Phillot pelo enorme suporte e disponibilidade nesta fase final do trabalho. Agradeço também a Simone Queiroz pela simpatia e acessibilidade sempre que precisei.

Agradeço à minha orientadora Ana Lígia Scott por ter me aceito como seu aluno.

Em tempos incertos para a ciência e para a universidade pública e de qualidade, eu sou imensamente grato por estar tão próximo de me formar em uma universidade de ponta, pública e gratuita. Obrigado pela trajetória, UFABC. Você é parte de quem eu sou hoje. Viva a ciência!

SUMÁRIO

AGRADECIMENTOS	5
RESUMO	7
INTRODUÇÃO	9
Objetivos e metas alcançadas	10
FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	12
Materiais e Métodos	15
Cluster TITÂNIO	15
Softwares de Visualização	15
Seleção da estrutura, preparo e geração de seus respectivos mutantes e inputs, minimização e critérios de seleção	17
Amostragem do espaço conformacional e seleção de novas estruturas	18
RESULTADOS PARCIAIS E DISCUSSÃO	20
Análise de flexibilidade dos mutantes em relação ao tipo selvagem	20
Teste de Mantel e verificação de mudanças estatísticas consideráveis em propriedades químicas dos mutantes	21
Desempenho dos ligantes no acoplamento molecular	22
Principais interações observadas para os inibidores nas regiões analisadas	
	22
CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS DE TRABALHOS FUTUROS	26
REFERÊNCIAS	27

RESUMO

Com mais de quatro milhões de mortos e duzentos milhões de infectados em 18 de agosto de 2021, a pandemia de SARS-CoV-2 é o maior desafio que a humanidade enfrenta desde a segunda guerra mundial. Apesar de atualmente existirem pelo menos 14 imunizantes aprovados mundialmente, a alta demanda e distribuição desigual culminam em uma data incerta para o fim da pandemia. Além disso, a baixa disponibilidade e alto custo de tratamentos efetivos para sintomas graves da doença fazem com que a taxa de mortalidade em casos de internação nas Unidades de Terapia Intensiva (UTI) seja alta. Com base nessas informações, buscou-se compreender a dinâmica estrutural, movimentos funcionais e não-funcionais e novas possíveis conformações de 48 mutantes da protease principal de SARS-CoV-2, obtidos via plataforma GISAID. Para tanto, utilizamos as técnicas de dinâmica molecular, modos normais *all-atoms* e técnicas de estatística. Resultados preliminares sugerem que os mutantes, em média, passaram a ser mais flexíveis que o tipo selvagem, onde foram verificadas em especial as regiões envolvidas na dimerização da molécula, recepção do substrato, resíduos envolvidos na catálise e *N-Finger*. Em adição, os resultados dos cálculos de modos normais com posterior tratamento via teste de Mantel sugerem que as mutações estudadas, presentes nas três principais variantes em circulação atualmente [Brasil (P.1.), África do Sul (501Y.V2) e Reino Unido (B.1.1.7)], passaram a acessar conformações não disponíveis para o tipo selvagem. Verificou-se visualmente, por exemplo, que uma das novas conformações de uma mutação presente nas três variantes aqui citadas pode conferir uma maior facilidade para esta molécula desempenhar sua atividade proteolítica em seu substrato. Os resultados de acoplamento molecular realizados com os ligantes 3,4-dihidroxibenzoato de geranila e *p*-hidroxibenzoato de geranila sugerem que, em termos de energia de ligação e de ligação e de interações moleculares, ambos possuem potencial inibitório contra a protease principal do SARS-CoV-2, e que os resíduos Gln189 e Glu166 são alvos potencialmente interessantes no sítio-ativo desta molécula.

Palavras-chave: protease, COVID-19, SARS-CoV-2, mutações, dinâmica molecular, modos normais, bioquímica

ABSTRACT

With over four million dead and two hundred million infected as of August 2021, the SARS-CoV-2 pandemic is humanity's biggest challenge since World War 2. Even though at least 14 vaccines have been approved for use around the world, the large demand and unequal availability of shots make predicting the end of the pandemic difficult. Besides the issues with immunization, the high cost and low availability of effective symptomatic treatment result in high mortality in hospital ICUs. Thus, given the importance of SARS-CoV-2, we here attempt to understand the structural dynamics, functional and non-functional movement and possible novel conformations of 48 mutants of the virus' main protease, obtained via the GISAID platform. Our investigations are based on molecular dynamics, all atom normal mode analysis and statistics. Preliminär results suggest that, overall, protease mutants gained flexibility when compared with their wild type counterpart, especially in regions involved in dimerization, subtract contact, N-fingers and residues involved in catalysis. Furthermore, normal mode calculation results with subsequent Mantel tests suggest that the mutations we analyze here, which are present in the main variants circulating today [Brazil (P.1.), South Africa (501Y.V2) and U.K. (B.1.1.7)], became able to access protein conformations not found in the wild type. Even though we do not attempt to analyze the adaptive effect of such conformational changes, we have found visual cues that suggest that at least one of the mutations studied can facilitate proteolytic interactions with the target substrate. Molecular coupling results with the ligands 3,4-dihydroxybenzoic acid geranyl ester and p-hydroxybenzoic acid-geranyl ester suggest that, in terms of free energy and molecular interaction, both have potential inhibitory activity against the main protease of SARS-CoV-2, with residues Gln189 and Glu166 being the most promising targets.

Keywords: *protease, COVID-19, SARS-CoV-2, mutation, molecular dynamics, normal modes, biochemistry*

1. INTRODUÇÃO

A síndrome respiratória aguda grave causada pelo SARS-CoV-2 (COVID-19) é uma infecção viral altamente contagiosa que causa morbidade e mortalidade consideráveis. O surto de COVID-19, que se originou na província de Wuhan (China) durante dezembro de 2019, tornou-se uma pandemia global, se espalhando por 216 países, áreas ou territórios e infectando mais de 210.352.669 milhões de pessoas com mortalidade confirmada de 4.410.505 milhões até 13 de março de 2021 (“Coronavírus Brasil”, [s.d.]). No Brasil, mais de 20 milhões de pessoas foram infectadas, com mortalidade confirmada de mais de 571 mil relatadas até 19 de agosto de 2021. Apesar de ter ocorrido uma evolução considerável no desenvolvimento de métodos preventivos desde o início da pandemia, o prognóstico para casos graves que necessitam de internação ainda se mostra desafiador, principalmente frente ao grande número de mutações que estão emergindo com a disseminação do vírus (HARIZI et al., 2021)

Os coronavírus fazem parte de uma enorme, complexa e diversa família de vírus: Coronaviridae, ordem Nidovirales. Dois terços dos genomas dos coronavírus, incluindo o SARS-CoV-2, são ocupados por dois longos ORFs (*Open Reading Frames*) sobrepostos (ORF1a e ORF1b), que são traduzidos nas poliproteínas pp1a e pp1ab. Estas poliproteínas são processadas para gerar 16 proteínas não estruturais (nsp1 até 16) (XIU et al., 2020). O restante dos genomas destes vírus inclui 75 ORFs responsáveis pela síntese das proteínas estruturais: a proteína spike (S), a proteína do envelope (E), a proteína de membrana (M) e a nucleoproteína (N), assim como um número variável de proteínas acessórias (1-3) (XIU et al., 2020). Na busca de um tratamento para COVID-19, diversas proteínas virais e do hospedeiros são investigadas, principalmente as que estão envolvidas no processo de entrada da célula e maturação viral, como é o caso da protease principal. Esta apresenta um papel crucial no processo de maturação do vírus, clivando suas poliproteínas em subunidades funcionais que posteriormente desempenham um papel no metabolismo viral (SENGER et al., 2020).

Com o significativo aumento de desempenho computacional nos últimos anos, o uso de técnicas híbridas que envolvem modos normais e dinâmica molecular somadas ao acoplamento molecular vem se mostrando grandes

aliadas no estudo e desenvolvimento de novos medicamentos. Estas técnicas estão sendo aplicadas no estudo de proteases virais e apresentam um futuro promissor no desenvolvimento de fármacos que tenham esta proteína como alvo (TOVISSODÉ; DOUMATÈ; GLELE KAKAÏ, 2021).

Diversas moléculas que possuem propriedades comumente associadas à inibição de proteases estão no radar de grupos de pesquisa como potenciais inibidores para a protease principal do SARS-CoV-2, como por exemplo o *rendesvir* e *boceprevir*. Este último é um medicamento desenvolvido como inibidor para a serino protease NS3 do vírus da hepatite C e apresenta boa tolerância em termos toxicidade renal e hepática, bem como baixa/nenhuma interação droga-droga. Borkotoky e colegas estão avaliando sua capacidade de inibir a atividade enzimática da M^{pro} com bons resultados até o momento, e também obtiveram com sucesso um cristal da M^{pro} complexada com o boceprevir (PDB ID: 6WNP) (BORKOTOKY et al., 2021).

1.1. Objetivos e metas alcançadas

O objetivo deste trabalho foi investigar, através do uso de técnicas híbridas, as mudanças conformacionais e movimentos funcionais e não-funcionais de 48 mutantes selecionados da protease principal do SARS-CoV-2. Os objetivos específicos foram:

- Verificar se ocorreram mudanças significativas desses movimentos em relação ao tipo selvagem;
- Caso fossem verificadas mudanças, determinar em quais regiões elas ocorreram;
- Selecionar os mutantes mais significativos, incluindo as três variantes Brasil (P.1.), África do Sul (501Y.V2) e Inglaterra (B.1.1.7);
- Calcular o desvio quadrático médio das flutuações e realizar análise das variações de flexibilidade;
- Amostrar o espaço conformacional dos mutantes e do tipo selvagem utilizando o protocolo VMOD (PHILOT et al., 2016), e com os resultados aplicar o Teste de Mantel (PT Resende-Lara et al, 2020);
- Filtrar novamente os mutantes com mudanças estruturais e energéticas mais significativas;

- Realizar o *docking* das estruturas selecionadas com *boceprevir*, 3,4-dihidroxibenzoato de geranila e *p*-hidroxibenzoato de geranila;
- Analisar os resultados com base nos *scores* de energia livre e interações.

Através destes direcionamentos, foi possível verificar que, em média, algumas mutações sofridas pela protease principal do SARS-CoV-2 resultaram em ganhos de flexibilidade em regiões de grande importância para a sua função. Através do cálculo dos modos normais e aplicação de teste de Mantel, pôde-se observar também que alguns mutantes passaram a acessar conformações não disponíveis para o tipo selvagem, fator que pode sugerir vantagem ou desvantagem no desempenho de sua atividade proteolítica. Foi também possível verificar através da técnica de acoplamento molecular que os três ligantes utilizados apresentaram bons de valores de ΔG , e que 3,4-dihidroxibenzoato de geranila obteve o melhor desempenho em um panorama geral. Por fim, verificou-se que as interações do tipo ligação de hidrogênio e hidrofóbicas são bastante importantes no processo de ligação dos inibidores ao sítio ativo, e que as interações do tipo π - π (nos termos deste trabalho) ocorreram apenas com o ligante *p*-hidroxibenzoato de geranila.

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1. Dinâmica Molecular como ferramenta para o estudo de biomoléculas

A dinâmica molecular é uma das metodologias de modelagem de sistemas biológicos que mais se destacou nas últimas décadas. Foi utilizada pela primeira vez em proteínas em 1977 por Karplus et al.: seu grupo demonstrou que era possível utilizar soluções das equações de Newton e uma função de energia potencial empírica para estudar o comportamento da PTI (proteína inibidora da tripsina pancreática bovina) em altas temperaturas. Apesar do tempo de simulação ser relativamente curto (na escala de picosegundos), o trabalho sugeriu que esta biomolécula tem comportamento fluído quando atinge uma certa temperatura e que, além disso, o uso desta dinâmica poderia confirmar resultados de outras metodologias experimentais utilizadas na mesma escala de tempo, como a ressonância magnética nuclear (MCCAMMON; GELIN; KARPLUS, 1977).

Desde então, a dinâmica molecular tornou-se um pilar para o estudo de sistemas biológicos e *drug design* (DURRANT; MCCAMMON, 2011b). A constante melhora do poder computacional e o desenvolvimento de novos softwares que utilizam como base esta técnica possibilitaram o desenvolvimento de análises de sistemas maiores e mais complexos, como a interação inibidor-alvo, essencial para o desenvolvimento de fármacos, e atualmente é comum que o desenvolvimento de drogas passe primeiramente por uma etapa *in silico* antes dos testes *in vitro*. Entretanto, é importante reforçar que a escolha de um alvo molecular deve ser realizada com cuidado, levando em consideração suas características: interações hidrofóbicas, ligações iônicas e de hidrogênio, distribuição de carga pelo sistema e ligações covalentes, bem como o papel desempenhado por essa molécula no organismo (LANDRY; GIES, 2008). Algumas proteases virais, por exemplo, desempenham um papel crucial no processo de replicação destes organismos, e por isso são alvos bastante interessantes para o desenvolvimento de fármacos, como é o caso da protease principal do SARS-CoV-2 (DOCHERTY et al., 2003).

Estudos preliminares com esta molécula mostraram, por exemplo, que a sua versão funcional é apenas dimérica: a versão monomérica apresenta

instabilidade conformacional no domínio III e uma orientação relativa ruim entre sua díade catalítica e o substrato, levando a uma infuncionalidade da molécula neste formato (SUÁREZ; DÍAZ, 2020).

2.2. Modos Normais

O cálculo de modos normais, diferente da técnica de dinâmica molecular (DM), busca soluções analíticas por meio da diagonalização da Matriz Hessiana, que corresponderão aos movimentos intrínsecos das macromoléculas e não geram uma trajetória dependente do tempo (BATISTA et al., 2011). Esta técnica permite a investigação dos modos vibracionais de um sistema harmônico que oscila nos arredores de um ponto de equilíbrio, e os movimentos gerados são característicos da região de equilíbrio (fundo do poço de energia potencial) (SKJAERVEN; HOLLUP; REUTER, 2009).

Os resultados destes cálculos permitem compreender a direção do movimento associado à frequência, fornecendo um fino panorama em diferentes níveis estruturais (átomos, resíduos, estruturas secundárias, domínios, entre outros) e permitindo compreender, por exemplo, o padrão de movimento do sítio ativo de uma proteína (WAKO; ENDO, 2017). Os modos normais são calculados em três etapas, sendo: i) minimização da estrutura utilizando dinâmica molecular para certificar que esta esteja no estado “mínimo” energia; ii) cálculo da matriz Hessiana; iii) Extração dos autovetores e autovalores desta matriz, pois estes valores correspondem aos deslocamentos e frequências, respectivamente.

2.3. Acoplamento Molecular (*Docking*)

O acoplamento molecular (*docking*) é um procedimento computacional que permite prever interações não-covalentes de macromoléculas (chamadas também de alvos ou receptores, sendo normalmente proteínas) e pequenas moléculas (chamadas de ligantes). Se executado da forma correta, este procedimento permite prever prováveis conformações do ligante em, por exemplo, sítios-ativos de proteínas, bem como as prováveis interações que podem ocorrer entre esses dois sistemas dada uma determinada conformação. Diferentemente das dinâmicas moleculares que tratam da energia dos sistemas, os softwares de *docking* tratam de potenciais químicos, como a energia livre de ligação. Os acoplamentos moleculares deste trabalho foram realizados através do software Autodock Vina (TROTT; OLSON, 2010). Este

software utiliza uma função de *score* que realiza a somatória sobre um conjunto simétrico de funções de interações (descartando interações 1-4, i.e., átomos separados por três ligações covalentes consecutivas) aplicada sobre cada átomo, levando em consideração seu tipo e distância interatômica conforme **equação 1**.

$$c = \sum_{i < j} f_{t_i t_j}(r_{ij}) \quad (1)$$

Uma outra maneira de interpretar o valor de c é entendê-lo como a soma das interações intra e intermoleculares. A função de *score* do Vina baseia-se no método X-Score (“User manual for X-Score”, [s.d.]) porém com alguns diferenciais, como extrair informações empíricas tanto das conformações preferenciais do ligantes como de dados experimentais de afinidade (“User manual for X-Score”, [s.d.]).

METODOLOGIA

2.4. Materiais e Métodos

2.4.1. Cluster TITÂNIO

Cluster (2620 Cores, 10.4 Tb de RAM, 120 Tb de Storage) com rede Infiniband FDR (56 gbps), 180 Tb brutos de storage, 40 nós de cálculo com 64 core, AMD Opteron 6376 (4 CPUs), 256 Gb de RAM e SSD para arquivos temporários, 03 nós de cálculo com 20 cores Intel Xeon E5-2660 (2 CPUs), 64 Gb de RAM, 3 GPU Tesla K20 e SSD para arquivos temporários.

2.4.2. Softwares de Visualização

Para este trabalho, foram usados dois softwares de visualização: *Visual Molecular Dynamics* (VMD) (HUMPHREY; DALKE; SCHULTEN, 1996) e PyMOL (The PyMOL Molecular Graphics System, Version 2.0 Schrödinger, LLC).

2.4.3. CHARMM

O CHARMM (*Chemistry at Harvard Macromolecular Mechanics*) é um pacote de campos de força, simulação molecular e análise amplamente utilizado para a execução de dinâmicas moleculares nos mais diversos âmbitos. O campo de força utilizado para os cálculos deste trabalho foi o CHARMM36m (HUANG et al., 2017).

2.4.4. *BINding ANAlyzer* (BINANA)

O BINANA (DURRANT; MCCAMMON, 2011a) é um algoritmo que identifica alguns tipos de interações moleculares [ligações de hidrogênio (HB); contatos hidrofóbicos (HC); pontes salinas (SB) e interações do tipo π , sendo elas a de empilhamento π (π - π stacking):(PIS); empilhamento T: (π - π T-stacking) (PIT) e cátion- π (CPI)] entre um alvo e um potencial inibidor. Utilizou-se o BINANA em suas configurações padrão (**Ver tabela 4, anexo J**) para as análises deste trabalho.

2.4.5. *Groningen Machine for Chemical Simulations* (GROMACS)

GROMACS é um pacote de campos de força para desempenhar simulações de dinâmica molecular em sistemas biológicos e não-biológicos. A versão usada para este trabalho foi a 2018.1 (BERENDSEN; VAN DER SPOEL; VAN DRUNEN, 1995).

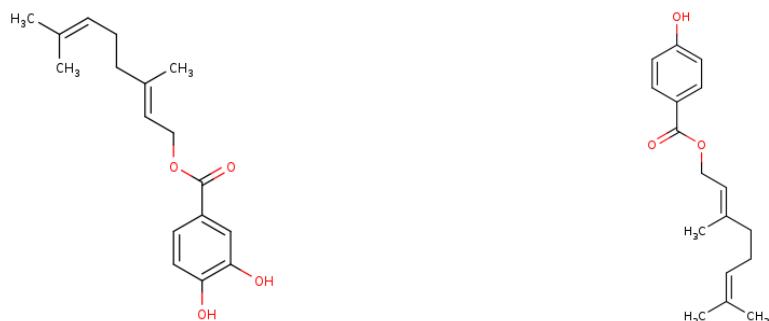
2.4.6. Pacote AutoDock

O AutoDock Vina 1.1.2 é um programa de código aberto pertencente ao pacote AutoDock que permite a realização de acoplamentos moleculares. Este mesmo pacote conta com o programa MGLTools que permite a visualização dos resultados, bem como construção de *grids* (caixa que delimita a região do acoplamento molecular) .

2.4.7. 3,4-dihidroxibenzoato de geranila e e *p*-hidroxibenzoato de geranila

Os derivados geranilados do ácido 3,4-dihidroxibenzóico e ácido *p*-hidroxibenzóico foram extraídos do banco de dados de moléculas bioativas do NuBBE - Núcleo de Bioensaios, Biossíntese e Ecofisiologia de Produtos Naturais (“NuBBE - Núcleo de Bioensaios, Biossíntese e Ecofisiologia de Produtos Naturais”, [s.d.]). Silvia López e colegas (LÓPEZ et al., 2010) utilizaram a espécie *Piper crassinervium* como fonte da enzima geraniltransferase para a biosíntese dos derivados geranilados dos ácidos. Esta espécie pertence à família Piperaceae, comumente utilizada na medicina tradicional no tratamento de diversas enfermidades. A potencialidade biológica desta família está diretamente ligada à ampla gama de metabólitos secundários bioativos, dentre eles o ácido *p*-hidroxibenzóico e seus derivados (CARVALHO, 2014). Os derivados apresentaram certo potencial inibitório para alguns tipos de protease semelhantes à do HIV, portanto avaliou-se seu potencial inibitório neste trabalho.

Figura 1. À esquerda, a representação estrutural do 3,4-dihidroxibenzoato de geranila. À direita, a molécula de *p*-hidroxibenzoato de geranila.



Fonte: (LÓPEZ et al., 2010)

2.5. Protocolo utilizado

2.5.1. Seleção da estrutura, preparo e geração de seus respectivos mutantes e *inputs*, minimização e critérios de seleção

Foram analisadas 98 estruturas do SARS-CoV-2 presentes no PDB até novembro de 2020 e selecionou-se aquela com resolução de 1.91 Å correspondente ao seu estado selvagem (PDB ID: 7C2Y ZHOU et al., 2020). Essa estrutura foi utilizada como base para gerar 48 mutantes reportados por Amamuddy Sheik e colegas (SHEIK AMAMUDDY; VERKHIVKER; TASTAN BISHOP, 2020). Utilizando a ferramenta *Mutagenesis* do software PyMOL, selecionou-se o rotâmero mais provável [i.e., a conformação espacial mais provável em pH fisiológico (pH=7,0)]. Utilizando este valor de pH como referência, utilizou-se o servidor PROPKA (OLSSON et al., 2011; SØNDERGAARD et al., 2011) para predizer os valores de pKa dos grupos ionizáveis e determinar, portanto, o estado de protonação destes mutantes.

O preparo das estruturas para minimização no GROMACS (versão 2018.1) foi realizado no servidor CHARMM-GUI seguindo os passos: 1) Verificação das informações da estrutura, como número de resíduos e cadeias; 2) Correção dos eventuais erros estruturais, como ausência de aminoácidos; 3) Solvatação da molécula em uma caixa d' água retangular com 10.0Å e íons de KCl com concentração de 0.15M através do método de Monte-Carlo (BONATE, 2001); 4) Seleção do campo de força CHARMM36m e *ensemble* NVT (Volume, temperatura e número de átomos constantes) com temperatura de 303,15K.

Para a etapa de minimização, cada sistema foi processado em dois estágios: no primeiro, aplicaram-se restrições harmônicas que decresceram progressivamente (250 até 0 kcal mol⁻¹Å⁻²) utilizando o algoritmo de gradiente conjugado. Em seguida, calcularam-se os modos normais utilizando o módulo DIMB do CHARMM considerando todos os átomos da proteína e campo de força CHARMM36m. Utilizou-se como critério de seleção dos modos normais os movimentos de alta amplitude, culminando no descarte dos modos normais acima do modo seis, pois estes contém movimentos globais que não são relevantes para a análise deste trabalho. Para tratamento das interações não-ligadas, utilizou-se como referência distâncias de ligação de 5 a 9 Å para forças de van der Waals (VDW) e $\epsilon = 2r_{i,j}$ como constante dielétrica dependente

da distância para considerar a blindagem decorrente das interações eletrostáticas do solvente.

2.5.2. Amostragem do espaço conformacional e seleção de novas estruturas

Para obter as estruturas deslocadas energeticamente permitidas ao longo de modos normais selecionados, utilizou-se o módulo VMOD do CHARMM. Este faz uso de restrições harmônicas aplicadas apenas aos átomos Ca. As restrições são definidas para visar uma determinada posição ao longo de um vetor de modo normal específico. A dinâmica e minimização foram realizadas para todos os átomos, permitindo total liberdade de movimento da proteína, incluindo as cadeias laterais (PHILOT et al., 2016). As estruturas foram deslocadas de -1 para +1 Å ao longo dos modos com passos de 0,2 Å, resultando em 11 estruturas intermediárias para cada modo. Os deslocamentos ao longo dos modos são obtidos usando uma série de simulações MD seguidas por minimização de energia. Em cada estágio, a constante de força do potencial de restrição harmônica (K_d) foi aumentada para garantir que o deslocamento do modo normal desejado fosse obtido. Este procedimento garante que a estrutura converja lentamente para o deslocamento desejado. O valor K_d da força de restrição foi aumentado de 1.000 para 10.000 kcal/mol⁻¹Å⁻² durante sucessivas simulações MD de 10 ps. As velocidades foram atribuídas aleatoriamente correspondendo a uma temperatura de 30 K no MD. O termostato Berendsen com uma constante de acoplamento de 0,1 ps foi usado em todas as simulações de baixa temperatura. Usar uma dinâmica de baixa temperatura permite uma busca conformacional mais eficiente do que usar apenas minimização de energia. Uma simulação MD final foi alcançada com um valor K_d de 20.000 kcal · mol⁻¹ Å⁻² seguido por 1.000 descidas mais íngremes e 1.000 etapas de gradiente conjugado de minimizações para atingir o alvo de deslocamento final ao longo do modo. Usando este procedimento 55 estruturas foram geradas (11 estruturas por modo x 5 modos) para cada sistema molecular considerado.

2.5.2.1. Acoplamento molecular (*docking*)

O preparo das estruturas e cálculo de cargas parciais foi realizado utilizando o programa AutodockTools. Neste software, utilizou-se a ferramenta Gasteiger para calcular as cargas parciais e mesclar os hidrogênios não

polarizáveis em vias de maximizar o tempo de cálculo. Foram geradas três regiões de acoplamento via inspeção visual (denominada *grid*) com coordenadas correspondentes às regiões do sítio-ativo das cadeias A e B e interface do dímero. Para cada uma dessas regiões realizou-se acoplamento para os dois ligantes (3,4-dihidroxibenzoato de geranila e *p*-hidroxibenzoato de geranila) extraídos do NuBBE e referência extraída dos trabalhos de Lifeng Fu e colegas (FU et al., 2020) (*Boceprevir*). A entrada foi parametrizada para que se obtivessem 20 candidatos (denominados *poses*) ranqueados de forma crescente pela energia de ligação (kcal/mol). Para verificar as possíveis implicações da conformação espacial e eventuais interações no processo de formação do dímero, realizou-se o acoplamento molecular para as cadeias A e B e região de interface do dímero para todas estruturas.

3. RESULTADOS PARCIAIS E DISCUSSÃO

3.1. Análise de flexibilidade dos mutantes em relação ao tipo selvagem

Os anexos A e B compreendem a variação média de flexibilidade dos mutantes em relação ao tipo selvagem de todos os mutantes para a cadeia A e B. A linha vermelha representa a variação média dos 48 mutantes ao longo dos 298 resíduos; A linha azul corresponde a esta variação para o tipo selvagem. Levando em consideração todos os resíduos, notou-se que os mutantes apresentaram uma flexibilidade maior que o tipo selvagem. As linhas verticais representam as regiões descritas pela **tabela 1**, onde a linha azul-ciano corresponde a região de N-Finger, as vermelhas-claras as regiões de dimerização, as amarelas-claras as regiões de ligação do substrato, a azul-escuro a CIS145 e a vermelho-escuro a HIS41, ambas componentes da díade catalítica. Uma outra observação importante é que, apesar da M^{pro} ser um homodímero (isto é, ser composta de dois monômeros iguais), suas cadeias apresentam comportamentos diferentes em termos de variação estrutural. Na cadeia B fica evidente que a região de ligação do substrato passou a ser mais flexível que a do tipo selvagem, bem como a região da díade catalítica.

Para entender o impacto da mudança de flexibilização dos mutantes em relação ao tipo selvagem, foram selecionadas algumas regiões de destaque que desempenham um papel importante na estabilidade e funcionalidade da M^{pro} para a análise. Essas regiões estão descritas no trabalho de Goyal e colegas (GOYAL & GOYAL, 2020) e estão representadas na **tabela 1 (ver anexo E)**. Foram selecionados alguns mutantes (**ver anexo F**) para destacar as regiões contidas na **tabela 1** através de linhas verticais coloridas. Pode-se observar que nestas regiões os mutantes apresentaram, em média, variações positivas de RMSF em relação ao tipo selvagem, tanto na cadeia A como na cadeia B.

Foi priorizada a análise mais minuciosa das mutações A7V, K90R e P108S em relação ao tipo selvagem devido à sua presença nas três variantes mais importantes do SARS-CoV-2 em circulação atualmente (ABDOOL KARIM; DE OLIVEIRA, 2021). O mutante A7V (**ver anexo D**), por exemplo, sofreu uma mutação em um dos resíduos envolvidos no N-Finger, levando a um aumento

da flexibilidade dessa região da proteína na cadeia B. Esse resultado pode sugerir um impacto no processo de estabilidade do dímero. Um outro resultado que reforça essa hipótese é o aumento da flexibilidade nas regiões de dimerização da cadeia A (**ver anexo B**). Ainda na cadeia A, é notável a grande variação de RMSF próximo ao resíduo 49, este ligado a região responsável pela recepção e ligação do substrato na diáde catalítica. Um aumento (ainda que menor) também é observado nas outras regiões envolvidas nesse processo. Esse resultado pode sugerir que este mutante pode acessar mais conformações no momento de recepção do substrato e assim acomodá-lo mais efetivamente em seu sítio ativo.

3.2. Teste de Mantel e verificação de mudanças estatísticas consideráveis em propriedades químicas dos mutantes

O teste de Mantel é uma ferramenta estatística que permite verificar a correlação entre duas matrizes de mesma dimensão (MANTEL, 1967). Com o uso desta técnica, foi possível verificar a perpetuação dos modos em relação ao tipo selvagem, e as principais observações estão sintetizadas na **tabela 2** (**ver anexo G**). Foram observados principalmente os modos normais que surgiram com as mutações e os que desapareceram. Com base na análise, verificou-se que os modos mais conservados (isto é, um modo que estava presente no tipo selvagem e continuou presente no mutante) foram os de número 7, 9 e 10 para todas as moléculas analisadas, e que o menos conservado (isto é, estava presente no tipo selvagem e deixou de ocorrer na mutação) foi o de número 8.

A mutação A7V (presente nas três variantes em circulação mais importantes) passou a acessar duas novas conformações. Em inspeção visual, verificou-se que o modo 8 era um movimento de torção em torno dos domínios da proteína e o 7 um movimento de abertura próximo ao sítio ativo. Este último pode sugerir que esta mutação conferiu a M^{pro} a capacidade de se adequar melhor ao substrato para a catálise. Na **figura 4** (**ver anexo H**) pode-se observar os dois momentos desse movimento. O modo 12 da mutação K90R consiste em uma torção local em torno do eixo do domínio I da proteína, bem como os modos 7, 8, 10 e 12 da mutação P108S.

A **tabela 3** presente do **anexo H** contém as principais observações de mudanças em propriedades químicas para os mutantes que apresentaram maior significância estatística em termos de alterações estruturais. Verificou-se principalmente mudanças de polaridade, área acessível do solventes para regiões hidrofílicas e hidrofóbicas, distância entre os átomos S_y (enxofre da cisteína) e N_ε (nitrogênio da histidina), bem como mudanças em regiões importantes da MPro, como o sítio ativo. Verificou-se também a incidência (em %) dessas mutações nas principais variantes em circulação até 31/05/2021.

3.3. Desempenho dos ligantes no acoplamento molecular

Para analisar o desempenho dos ligantes em relação às três regiões estudadas, foram extraídos os valores numéricos do coeficiente de energia de ligação para cada um dos acoplamentos realizados. A energia de ligação de um processo é uma quantidade fundamental que determina a espontaneidade ou não deste processo, um dado extremamente importante para compreender o desempenho de um ligante em relação ao seu alvo e sua capacidade de se manter atrelado ao sítio-ativo deste (HALL; DIXON; DICKSON, 2020). Para a cadeia B de todos os mutantes, observou-se que o *p*-hidroxibenzoato de geranila apresentou o melhor *score* entre os três ligantes estudados, compreendendo 13 mutantes com menor valor de ΔG. Para a cadeia A, o ligante com melhor desempenho foi o 3,4-dihidroxibenzoato de geranila, totalizando 24 mutantes cujo primeiro lugar foi ocupado por este sozinho ou em empate com algum dos outros dois. Na região de interface foi observado um empate entre Boceprevir e 3,4-dihidroxibenzoato de geranila, ambos presentes no primeiro lugar do ranqueamento de 15 mutantes. De modo geral, o ligante que apresentou melhor desempenho no ranqueamento de energia de ligação (isto é, aquele que apresentou valores mais exergônicos para as três regiões-alvo do acoplamento molecular) foi o 3,4-dihidroxibenzoato de geranila, estando presente em pelo menos 10 mutantes. Não foram considerados os casos em que houve empate entre os ligantes.

Os mapas de calor presentes no **anexo I** representam a distribuição dos ligantes com o melhor desempenho na cadeia A, B e interface, bem como seu desempenho em um panorama geral, respectivamente. As linhas se referem aos mutantes estudados e as colunas aos ligantes. A coloração bege das três

primeiras figuras representa o ligante com melhor desempenho, e a preta o ligante com menor desempenho (caso haja dois ligantes com a mesma coloração, significa um empate). Na última figura, a coloração roxa se refere ao ligante 3,4-dihidroxibenzoato de geranila, a laranja ao ligante *Boceprevir* e a bege ao ligante *p*-dihidroxibenzoato de geranila. Uma das três colorações na linha significa que aquele ligante teve o melhor desempenho para o mutante.

3.4. Principais interações observadas para os inibidores nas regiões analisadas

Em paralelo à análise da energia de ligação associada aos complexos inibidor-alvo, verificaram-se as principais interações formadas entre as poses de cada um dos três inibidores geradas pelo procedimento de *docking* molecular e seus respectivos alvos utilizando o programa BINANA (DURRANT; MCCAMMON, 2011a). A contagem das interações são apresentadas nas tabelas do **anexo K** para as cadeias A, B e região de interface da M^{pro}, respectivamente.

Para a cadeia A, nota-se que:

- Dos 15 resíduos importantes para a região de ligação do substrato (**ver anexo E, tabela 1**), observaram-se interações do tipo ligação de hidrogênio com 11 deles (considerando os três ligantes): Gln189, Glu166, Ser144, Glh166, Arg188, Gln192, Asp187, Gly143, Ala191, Thr190 e Hid164. Observou-se também o mesmo tipo de interação para os resíduos da diáde catalítica Hid41 e Cys145;
- Das 1438 interações do tipo ligação de hidrogênio que foram formadas considerando todos os ligantes e mutações, 475 foram com o resíduo Gln189;
- Para o resíduo supracitado, a maioria das interações do tipo ligação de hidrogênio foram realizadas com o ligante 3,4-dihidroxibenzoato de geranila;
- Além das interações do tipo ligação de hidrogênio, foram observadas também interações hidrofóbicas, π-π stacking PIS, T-stacking PIT e cátion-π PIC, sendo que essas três últimas aconteceram apenas quando o ligante era o *p*-dihidroxibenzoato de geranila.

Para a cadeia B, nota-se que:

- Dos 15 resíduos importantes para a região de ligação do substrato (**ver anexo E, tabela 1**), observou-se interações do tipo ligação de hidrogênio com 8 deles (considerando os três ligantes): Gln189, Glu166, Glh166, Arg188, Gln192, Asp187, Gly143 e Thr190. Observou-se também o mesmo tipo de interação para os resíduos da diáde catalítica His41 e Cys145;
- Das 954 interações do tipo ligação de hidrogênio que foram formadas considerando todos os ligantes e mutações, 294 foram com o resíduo Glu166;
- Para o resíduo supracitado, a maioria das interações do tipo ligação de hidrogênio foram realizadas com o ligante *p*-hidroxibenzoato de geranila;
- Além das interações do tipo ligação de hidrogênio, foram observadas também interações hidrofóbicas, π - π stacking PIS, T-stacking PIT e cátion- π PIC, sendo que essas três últimas aconteceram apenas quando o ligante era o *p*-dihidroxibenzoato de geranila.

Para a região de interface, nota-se que:

- Dos 10 resíduos importantes relacionados à dimerização da M^{pro} (**ver anexo E, tabela 1**), observou-se interações do tipo ligação de hidrogênio com 5 deles (considerando os três ligantes): Arg298, Ser139, Phe140, Ser10 e Arg4;
- Das 1022 interações do tipo ligação de hidrogênio que foram formadas considerando todos os ligantes e mutações, 274 foram com o resíduo ARG(298), mais que o dobro que o segundo colocado [(Tyr154 com 108 interações)];
- O ligante que mais realizou interações do tipo ligação de hidrogênio foi o Boceprevir;
- Além das interações do tipo ligação de hidrogênio, foram observadas também interações hidrofóbicas, π - π stacking PIS, T-stacking PIT e cátion- π PIC, sendo que essas três últimas aconteceram apenas quando o ligante era o *p*-dihidroxibenzoato de geranila.

Para a região do sítio-ativo, verificou-se que os resíduos Glu166 e Gln189 desempenham um papel importante como potenciais alvos no desenvolvimento de inibidores devido à alta prevalência de interações de hidrogênio com as moléculas estudadas neste trabalho. A importância do resíduo Glu166 já havia sido evidenciada nos trabalhos de Yoshino e colegas, onde verificou-se, em simulações de dinâmica molecular, que há considerável probabilidade de ocorrência de interações importantes entre inibidores semelhantes a peptídeos e este resíduo (YOSHINO; YASUO; SEKIJIMA, 2020).

Um outro fator interessante é que observou-se novamente a disparidade entre as cadeias da M^{pro} independentemente de sua característica de homodímero. Apesar das condições de acoplamento molecular terem sido as mesmas para ambas as cadeias (com exceção da disposição espacial), tanto os resíduos quanto o ligante com resultados mais evidentes foram diferentes.

4. CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS DE TRABALHOS FUTUROS

Este trabalho permitiu a análise da dinâmica estrutural, de movimentos funcionais e não-funcionais e a verificação da existência ou desaparecimento de conformações de 48 mutações extraídas do banco de dados GISAID da protease principal do SARS-CoV-2. O cálculo do desvio quadrático médio das flutuações demonstrou que as mutações conferiram mais flexibilidade a esta molécula, inclusive em regiões importantes ligadas a sua estabilidade como dímero e envolvidas na recepção do substrato para atividade proteolítica. Além disso, notou-se também que a característica de homodímero da M^{pro} não implica em comportamentos iguais de suas duas cadeias.

Os resultados do teste de Mantel obtido após as dinâmicas em baixa temperatura com protocolo VMOD sugerem que os mutantes passaram a atingir conformações que o tipo selvagem não possuía, inclusive as mutações presentes nas três principais variantes em circulação no momento. As análises de acoplamento molecular demonstram preliminarmente que, nos parâmetros utilizados neste trabalho, dois ligantes extraídos de um banco de dados de um grupo de pesquisa brasileiro possuem potencial como inibidores da protease de um ponto de vista termodinâmico e de interações moleculares. Os valores de ΔG_{livre} obtidos para os ligantes se assemelharam (e foram potencialmente melhores) que o de um antiviral comercial, evidenciando a importância do resíduo Glu166, já descrito na literatura como potencial alvo para inibição. Verificou-se também que o resíduo Gln189 pode apresentar propriedades e potenciais semelhantes.

Este trabalho pode nortear pesquisas futuras sobre as interações aqui descritas, e seu potencial para manter os inibidores na região do sítio catalítico através de simulações de dinâmica molecular. Além disso, explora a potencialidade do NubBE, um banco de dados de moléculas brasileiro, como potencial fonte de compostos bioativos contra o SARS-CoV-2.

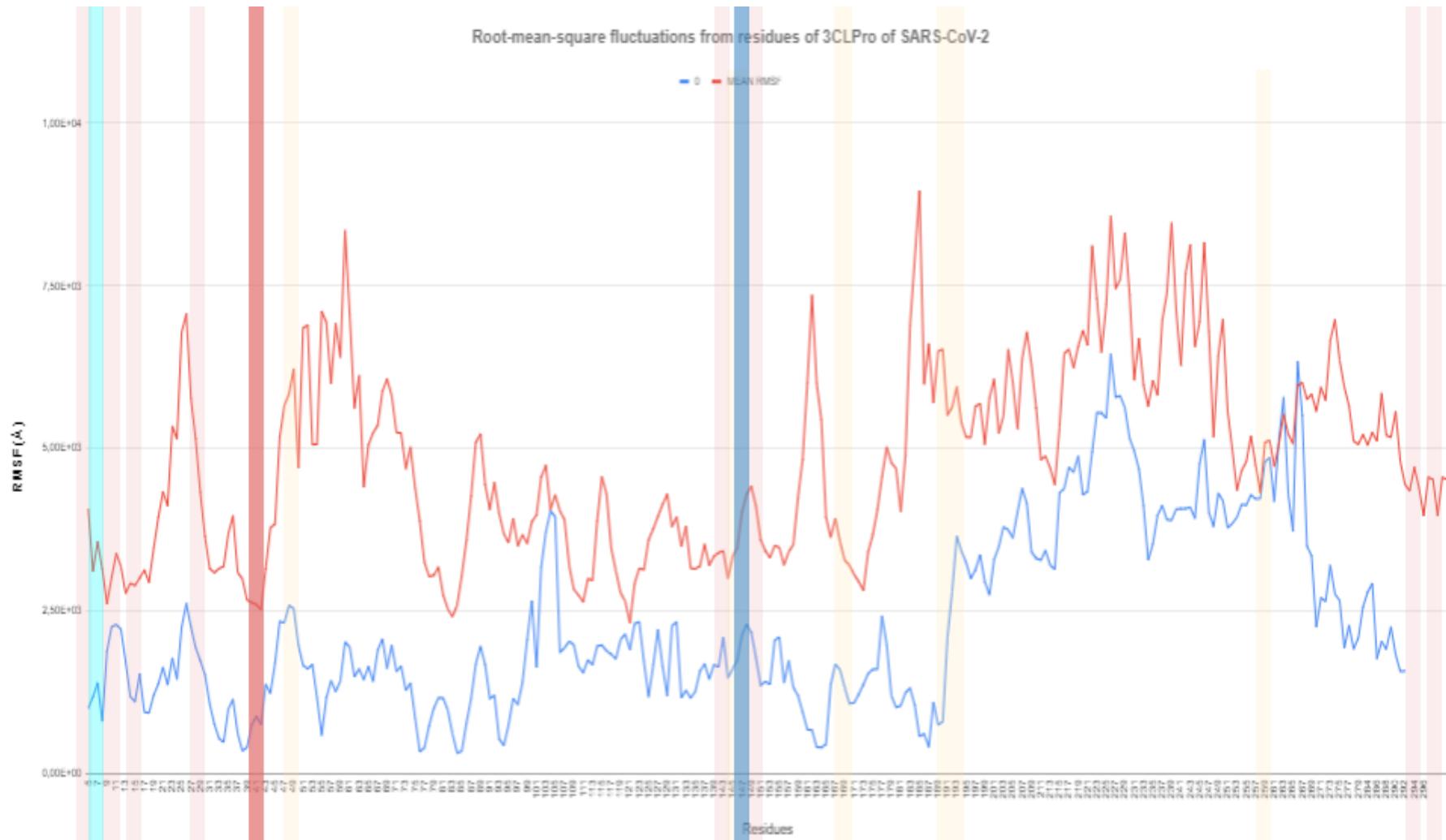
REFERÊNCIAS

- LOUET M, PERAHIA D, MARTINEZ J, FLOQUET N (2011) A concerted mechanism for opening the GDP binding pocket and release of the nucleotide in hetero-trimeric G-proteins. *J Mol Biol* 411: 298–312
- RESENDE-LARA, PEDRO TÚLIO ; PERAHIA, DAVID ; SCOTT, ANA LÍGIA ; BRAZ, ANTÔNIO SÉRGIO KIMUS. Unveiling functional motions based on point mutations in biased signaling systems: A normal mode study on nerve growth factor bound to TrkA. *PLoS One*, v. 15, p. e0231542, 2020.
- ABDOOL KARIM, S. S.; DE OLIVEIRA, T. New SARS-CoV-2 Variants — Clinical, Public Health, and Vaccine Implications. **New England Journal of Medicine**, v. 0, n. 0, p. null, 24 mar. 2021.
- BATISTA, P. R. et al. Free Energy Profiles along Consensus Normal Modes Provide Insight into HIV-1 Protease Flap Opening. **Journal of Chemical Theory and Computation**, v. 7, n. 8, p. 2348–2352, jul. 2011.
- BERENDSEN, H. J. C.; VAN DER SPOEL, D.; VAN DRUNEN, R. GROMACS: A message-passing parallel molecular dynamics implementation. **Computer Physics Communications**, v. 91, n. 1, p. 43–56, 2 set. 1995.
- BONATE, P. L. A Brief Introduction to Monte Carlo Simulation. **Clinical Pharmacokinetics**, v. 40, n. 1, p. 15–22, 1 jan. 2001.
- BORKOTOKY, S. et al. Identification of high affinity and low molecular alternatives of boceprevir against SARS-CoV-2 main protease: A virtual screening approach. **Chemical Physics Letters**, v. 770, p. 138446, maio 2021.
- CARVALHO, A. U. DE [UNESP. Dinâmica metabólica em Piper gaudichaudianum: estudo das etapas de ciclização estereosseletiva do ácido gaudichaudianico. **Aleph**, p. 107 f. : il., 24 jan. 2014.
- Coronavírus Brasil.** Disponível em: <<https://covid.saude.gov.br/>>. Acesso em: 10 abr. 2021.
- DOCHERTY, A. J. et al. Proteases as drug targets. **Biochemical Society Symposium**, n. 70, p. 147–161, 2003.
- DURRANT, J. D.; MCCAMMON, J. A. BINANA: A Novel Algorithm for Ligand-Binding Characterization. **Journal of molecular graphics & modelling**, v. 29, n. 6, p. 888–893, abr. 2011a.
- DURRANT, J. D.; MCCAMMON, J. A. Molecular dynamics simulations and drug discovery. **BMC Biology**, v. 9, n. 1, p. 71, 28 out. 2011b.
- FU, L. et al. Both Boceprevir and GC376 efficaciously inhibit SARS-CoV-2 by targeting its main protease. **Nature Communications**, v. 11, n. 1, p. 4417, 4 set. 2020.
- GOYAL, B.; GOYAL, D. Targeting the Dimerization of the Main Protease of Coronaviruses: A Potential Broad-Spectrum Therapeutic Strategy. **ACS Combinatorial Science**, 13 maio 2020.
- HALL, R.; DIXON, T.; DICKSON, A. On Calculating Free Energy Differences Using Ensembles of Transition Paths. **Frontiers in Molecular Biosciences**, v. 7, p. 106, 2020.
- HARIZI, C. et al. Characteristics and prognostic factors of COVID-19 among infected cases: a nationwide Tunisian analysis. **BMC Infectious Diseases**, v. 21, n. 1, p. 140, 3 fev. 2021.
- HUANG, J. et al. CHARMM36m: an improved force field for folded and intrinsically disordered proteins. **Nature Methods**, v. 14, n. 1, p. 71–73, jan. 2017.

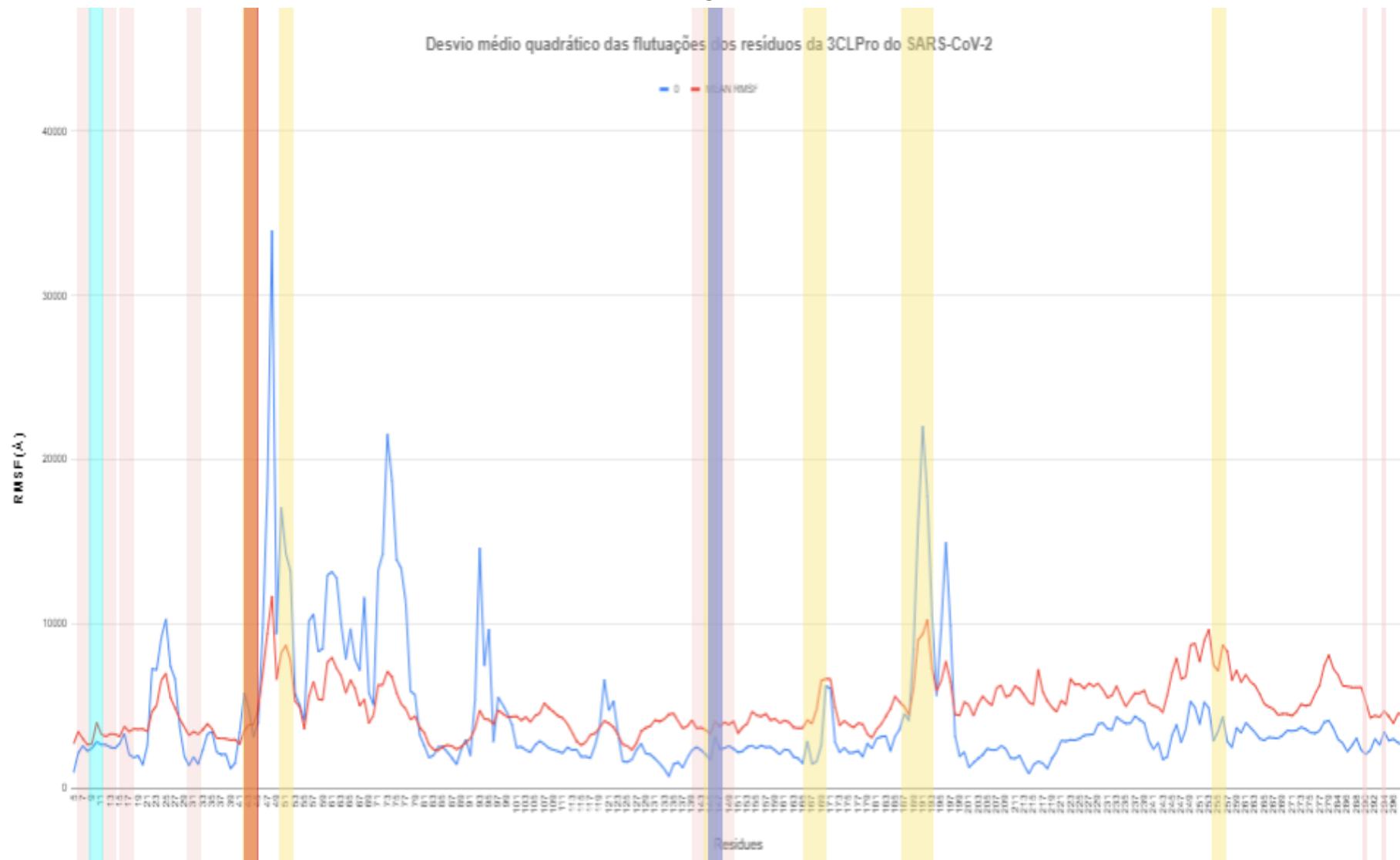
- HUMPHREY, W.; DALKE, A.; SCHULTEN, K. VMD: Visual molecular dynamics. **Journal of Molecular Graphics**, v. 14, n. 1, p. 33–38, 1 fev. 1996.
- LÓPEZ, S. N. et al. Geranylation of benzoic acid derivatives by enzymatic extracts from Piper crassinervium (Piperaceae). **Bioresource Technology**, v. 101, n. 12, p. 4251–4260, jun. 2010.
- MANTEL, N. The Detection of Disease Clustering and a Generalized Regression Approach. **Cancer Research**, v. 27, n. 2 Part 1, p. 209–220, 1 fev. 1967.
- MCCAMMON, J. A.; GELIN, B. R.; KARPLUS, M. Dynamics of folded proteins. **Nature**, v. 267, n. 5612, p. 585–590, jun. 1977.
- NuBBE - Núcleo de Bioensaios, Biosíntese e Ecofisiologia de Produtos Naturais**. Disponível em: <<https://nubbe.iq.unesp.br/>>. Acesso em: 18 set. 2021.
- OLSSON, M. et al. PROPKA3: Consistent Treatment of Internal and Surface Residues in Empirical pKa Predictions. **Journal of Chemical Theory and Computation**, v. 7, 6 jan. 2011.
- PHILOT, E. A. et al. Binding of phenothiazines into allosteric hydrophobic pocket of human thioredoxin 1. **European Biophysics Journal**, v. 45, n. 3, p. 279–286, 1 abr. 2016.
- SENGER, M. R. et al. COVID-19: molecular targets, drug repurposing and new avenues for drug discovery. **Memórias do Instituto Oswaldo Cruz**, v. 115, 2020.
- SHEIK AMAMUDDY, O.; VERKHIVKER, G.; TASTAN BISHOP, O. **Impact of emerging mutations on the dynamic properties the SARS-CoV-2 main protease: an in silico investigation**. [s.l.: s.n.].
- SKJAERVEN, L.; HOLLUP, S. M.; REUTER, N. Normal mode analysis for proteins. **Journal of Molecular Structure: THEOCHEM**, Theoretical treatment of large molecular systems. v. 898, n. 1, p. 42–48, 30 mar. 2009.
- SØNDERGAARD, C. R. et al. Improved Treatment of Ligands and Coupling Effects in Empirical Calculation and Rationalization of pKa Values. **Journal of Chemical Theory and Computation**, v. 7, n. 7, p. 2284–2295, 12 jul. 2011.
- SUÁREZ, D.; DÍAZ, N. SARS-CoV-2 Main Protease: A Molecular Dynamics Study. **Journal of Chemical Information and Modeling**, 17 jul. 2020.
- TOVISSODÉ, C. F.; DOUMATÈ, J.; GLELE KAKAÏ, R. L. **A Hybrid Modelling Technique of Epidemic Outbreaks With Application to COVID-19 Dynamics in West Africa**. [s.l.: s.n.].
- Trott, O.; Olson, A. J. AutoDock Vina: improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization and multithreading. **Journal of computational chemistry**, v. 31, n. 2, p. 455–461, 30 jan. 2010.
- User manual for X-Score**. Disponível em:
<https://www.ics.uci.edu/~dock/manuals/xscore1.1_manual/usage.html>.
Acesso em: 18 set. 2021.
- WAKO, H.; ENDO, S. Normal mode analysis as a method to derive protein dynamics information from the Protein Data Bank. **Biophysical Reviews**, v. 9, n. 6, p. 877–893, 4 nov. 2017.
- XIU, S. et al. Inhibitors of SARS-CoV-2 Entry: Current and Future Opportunities. **Journal of Medicinal Chemistry**, v. 63, n. 21, p. 12256–12274, 12 nov. 2020.
- YOSHINO, R.; YASUO, N.; SEKIJIMA, M. Identification of key interactions between SARS-CoV-2 main protease and inhibitor drug candidates. **Scientific Reports**, v. 10, n. 1, p. 12493, dez. 2020.

ZHOU, X. et al. Structure of SARS-CoV-2 main protease in the apo state.
Science China. Life Sciences, p. 1–4, 1 set. 2020.

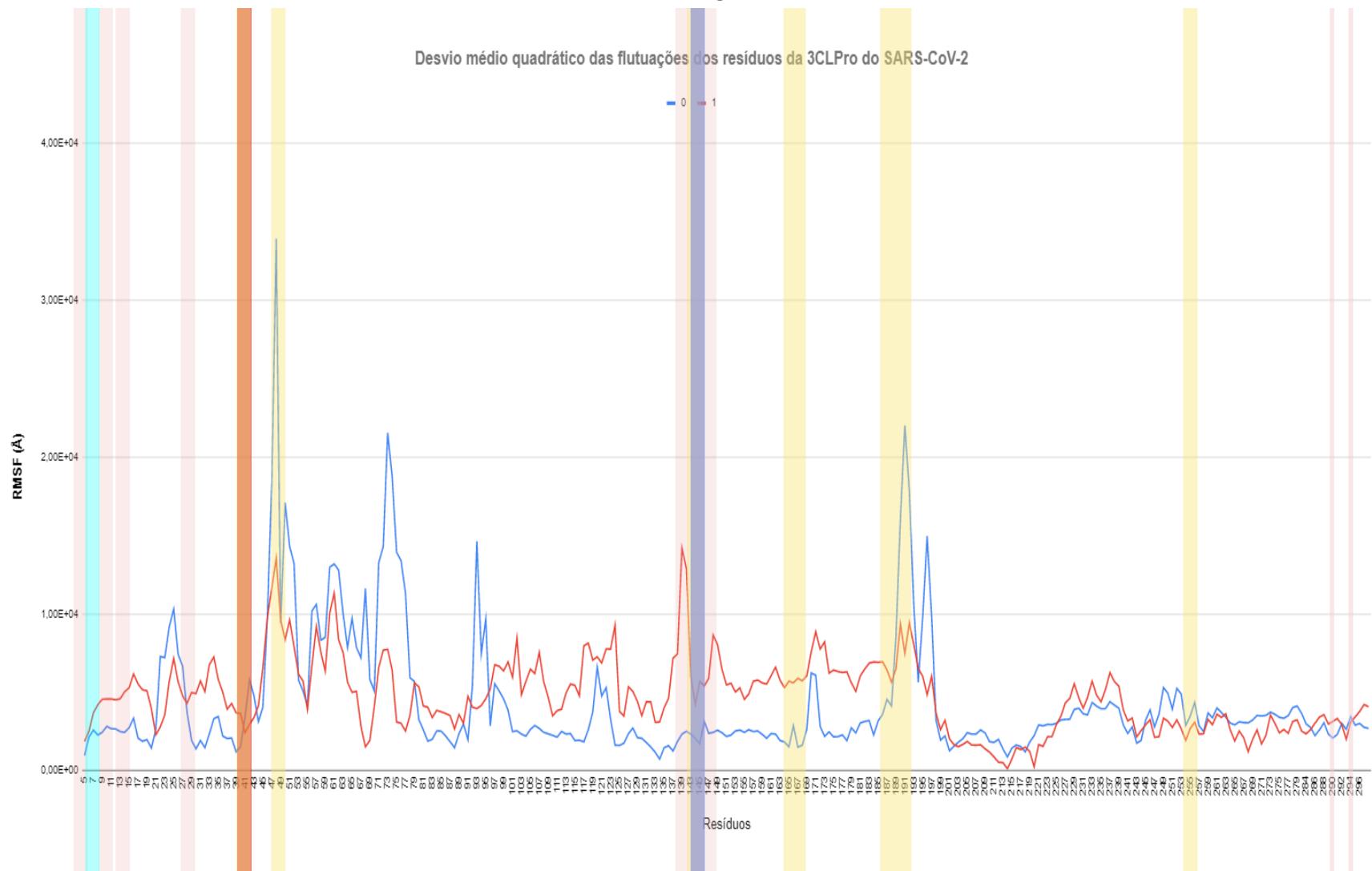
ANEXO A



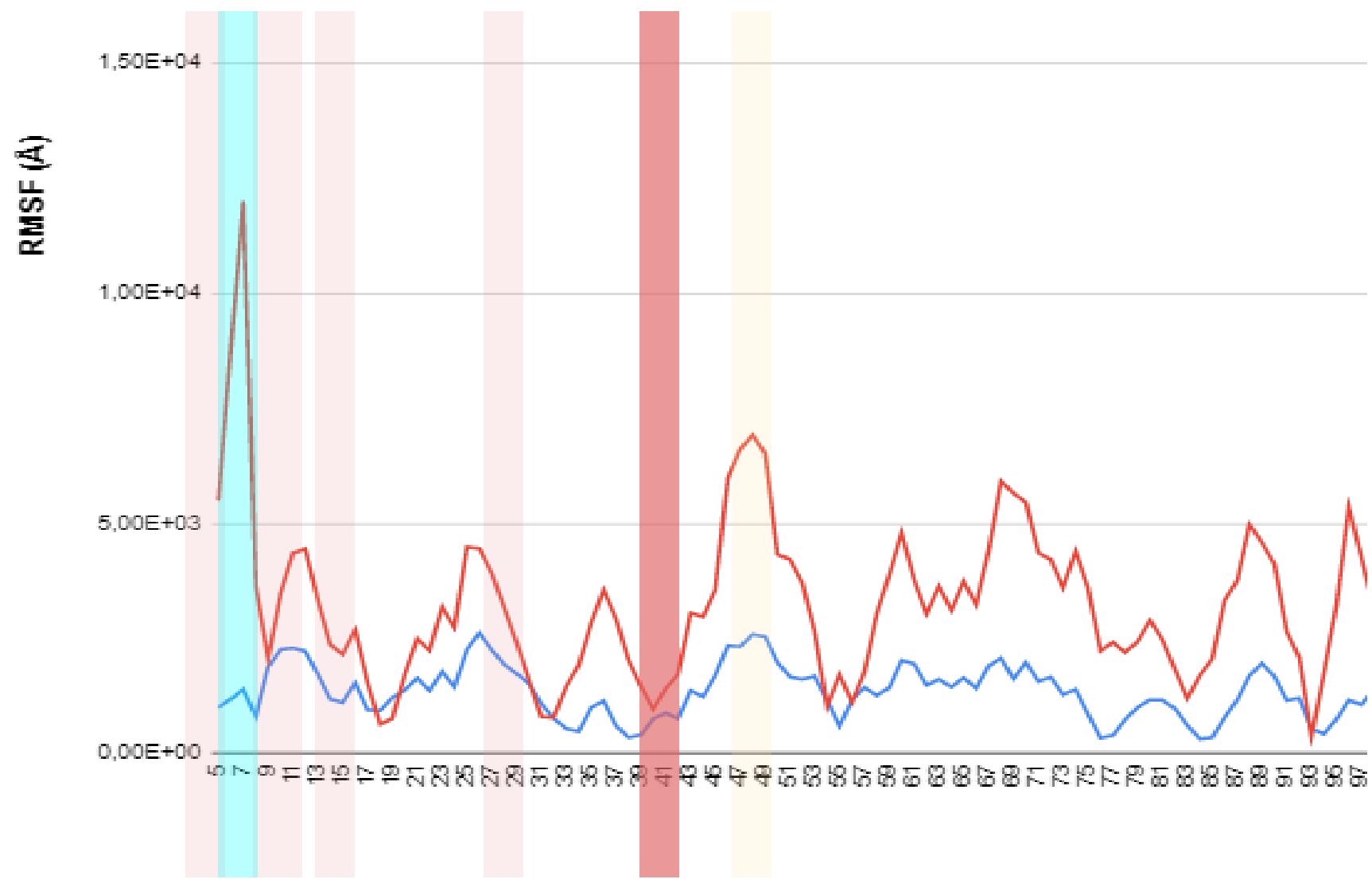
ANEXO B



ANEXO C



ANEXO D



ANEXO E

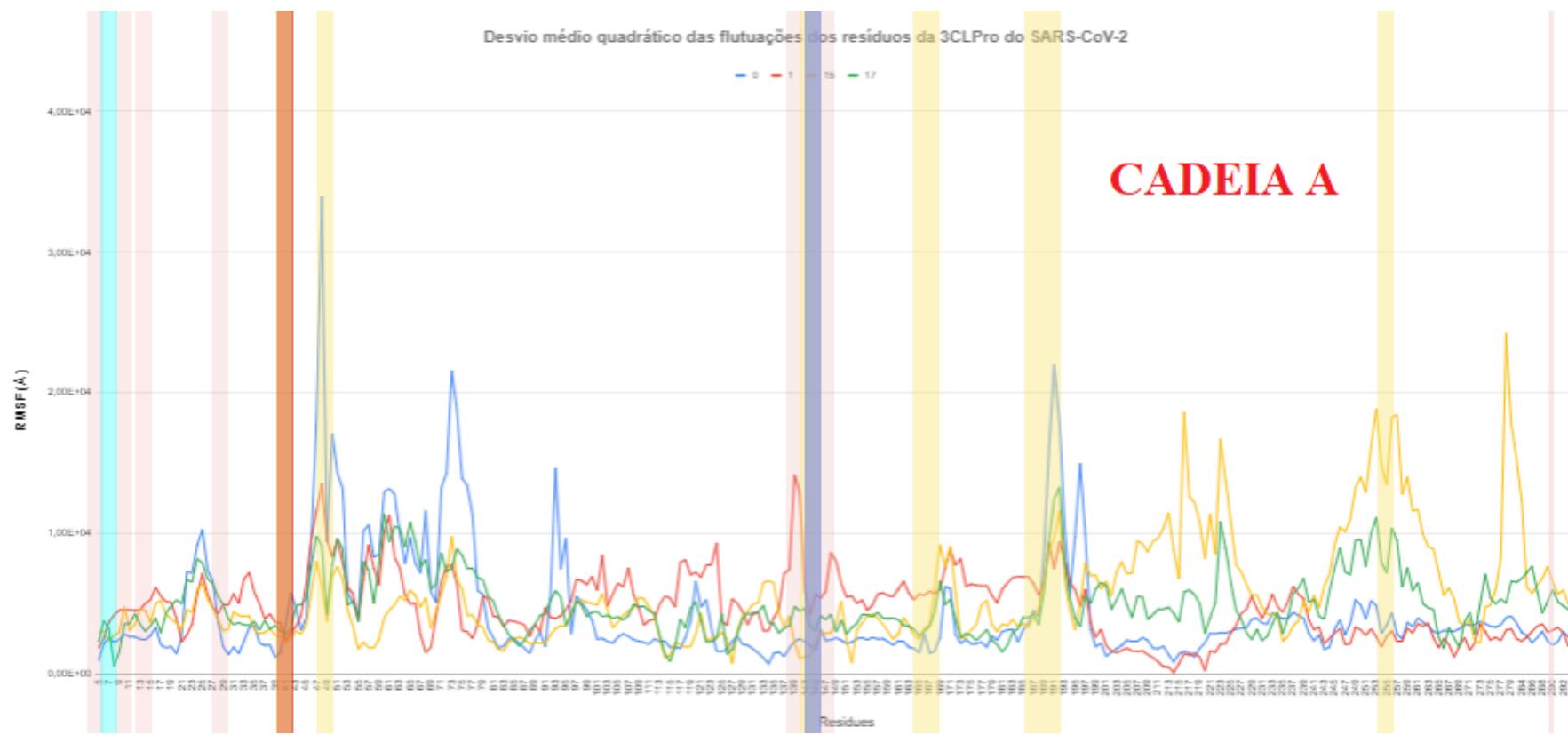
Tabela 1 - Regiões de importância funcional e estrutural da M^{pro} com seus respectivos resíduos e funcionalidade

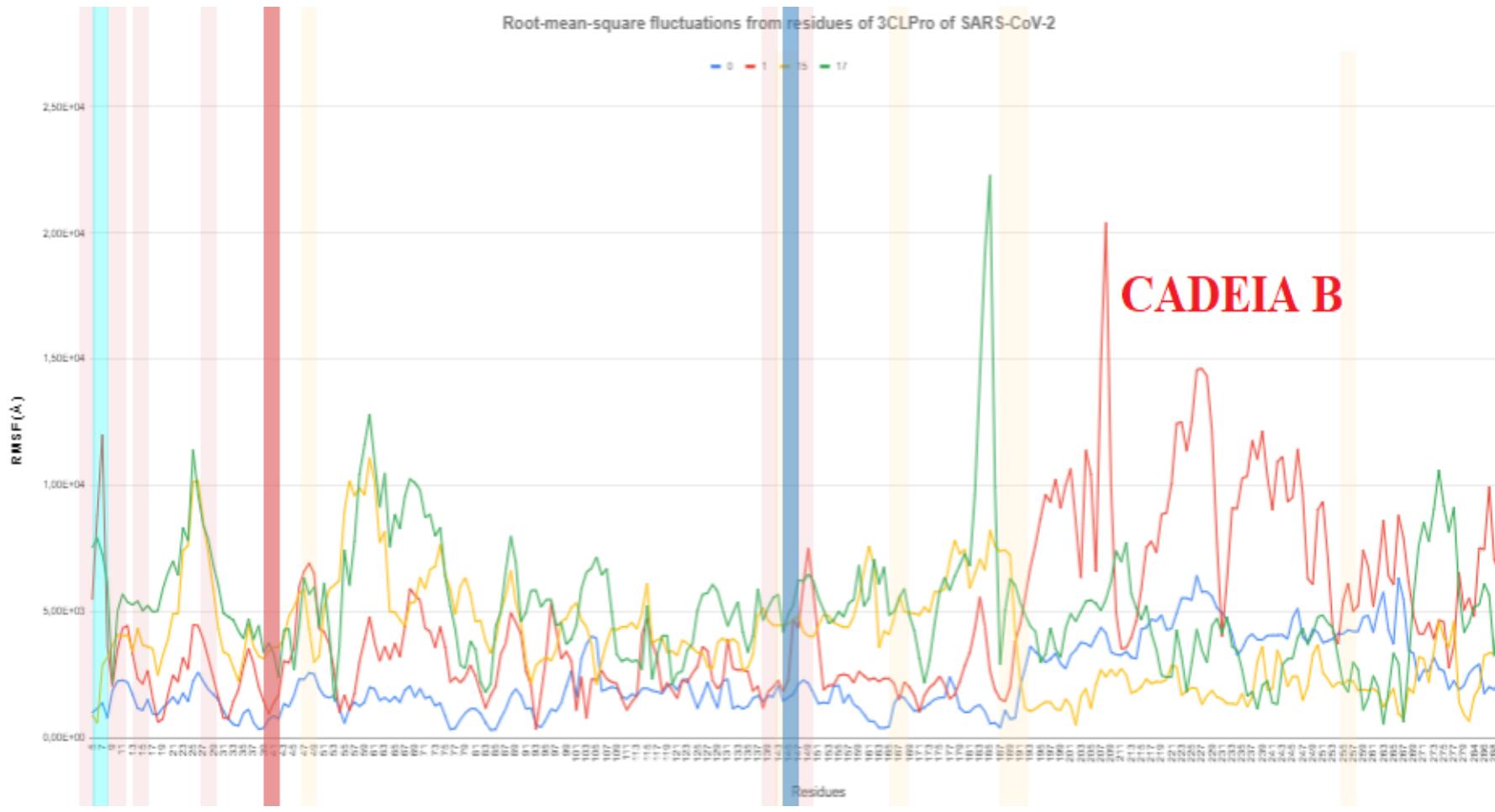
REGIÃO	RESÍDUOS	FUNCIONALIDADE
Díade catalítica	His41, Cys145	Responsáveis pela clivagem do substrato
Ligação do substrato	His41, Met49, Gly143, Ser144, His163, His164, Met165, Glu166, Leu167, Asp187, Arg188, Gln189, Thr190, Ala191, Gln192	Região da protease que sofre modificações conformacionais para recebimento do substrato e posterior atividade enzimática
Dimerização	Arg4, Ser10, Gly11, Glu14, Asn28, Ser139, Phe140, Ser147, Glu290, Arg298	Região ligada ao processo de junção das duas subunidades monoméricas em um dímero funcional
N-Finger	Ser1, Gly2, Phe3, Arg4, Lys5, Met6, Asp7	Região ligada a estabilidade do dímero

Fonte: (GOYAL; GOYAL, 2020)

ANEXO F

Figura 3 - RMSF do tipo selvagem (em azul) versus os mutantes A7V (vermelho), K90R (verde) e P108S (amarelo). As linhas verticais representam as regiões descritas pela **tabela 1**, onde a linha azul-ciano corresponde a região de N-Finger, as vermelhas-claras as regiões de dimerização, as amarelas-claras as regiões de ligação do substrato, a azul-escuro a CIS145 e a vermelho-escuro a HIS41, ambas componentes da díade catalítica.





Fonte: Autoria própria

ANEXO G

Tabela 2 - Tabela contendo os mutantes com mudanças mais significativas de RMSF que foram submetidos ao teste de Mantel. A primeira coluna contém a mutação, as segunda e terceira coluna contém os modos que desapareceram e apareceram em relação ao tipo selvagem, respectivamente. A última informa se essa mutação está presente em alguma das três variantes principais.

MUTAÇÃO	MODOS QUE DESAPARECERAM	NOVOS MODOS	PRESENÇA NAS PRINCIPAIS VARIANTES
A7V	Todos presentes	7 e 8	B117, B1351 e P1
G15D	8	Nenhum	Não está presente
G15S	Todos presentes	Nenhum	Não está presente
G71S	8	8	Não está presente
L89F	8	9, 10 e 11	P1
K90R	8	12	B117, B1351 e P1
Y101C	8	8, 9 e 12	B117
R105H	8	Nenhum	B117
P108S	7, 8 e 12	7, 8, 10 e 12	B117, B1351 e P1
A116V	Nenhum	8 e 10	B117 e P1
I136V	8/modo 7	7	Não está presente
V157I	8	7, 9, 10 e 12	Não está presente

A191V	8 e 10	7, 8 e 9	B117 e B1351
A193V	7, 8, 12 e 12	7, 10 e 12	B117 e B1351
T201A	8	7, 11 e 12	Não está presente
A234V	8	7 e 11	B117
K236R	7, 8, 9 e 11	7, 9, 11 e 12	B117
Y237H	8	10	Não está presente
A260V	7, 8 e 9	10, 11 e 12	Não consta do Banco GSAID

Fonte: Autoria própria

Tabela 3 - A tabela lista os mutantes que apresentaram pelo menos três mudanças características estruturais com variação significativa em relação ao WT. Os dados foram agrupados da seguinte forma: **1) Sem mudança de carga:** apolar para apolar (AP → AP: A→V, V→A, I→V, L→F, V→L), polar com carga positiva para polar com carga positiva (P(+) → P(+): K→R, R→H), polar com carga negativa para polar com carga negativa (P(-) → P(-): D→E); **2) Inversão de carga:** Neutro para polar com carga negativa (NT → P(-): N→D); **3) Polar para apolar:** polar para apolar (P → AP: T→I); **4) Resíduo especial:** especial para neutro (spe → NT: P→S), especial para apolar (spe → AP: P→L), polar com carga negativo para especial (P(-) → spe: R→C), especial para polar com carga negativa (spe → P(-): G→D). **Significado das colunas:** **Mutante:** mutação e resíduo; **Res.:** tipo de mutação (resíduos); **RMSF:** Desvio quadrático médio das posições atômicas das cadeias A e B; **Energia:** energia calculada para cada mutante; **Distâncias atômicas:** distância entre o átomo **Sy** da Cys145 e átomo **Nε** da His41; **Cys145 e His45:** diáde catalítica; **Sítio atv.:** SASA da região de ligação do substrato; **Hidrop. SASA :**SASA de resíduos hidrofóbicos; **SASA Total:** área total acessível por solvente; **Freq.:** frequência de cada mutação em variantes (%), pela sequência presente no GISAID (last access: 31/05/2021). **Variante:** variantes cuja mutação está presente no GISAID. Símbolos utilizados para denotar mudança estatisticamente significante dos mutantes em relação ao WT: “**” (presença de mudança estatística significante); “-” (parâmetro de decréscimo), “+” (parâmetro de acréscimo), “**A-**” (parâmetro de decréscimo na cadeia A), “**B-**” (parâmetro de decréscimo na cadeia B), “**B+**” (parâmetro de acréscimo na cadeia B).

	Res.	RMSF	Energia	Distânci a NE2	CYS 145	HSD 41	Sítio atv.	SASA Hydrop.	Dimer interface	Total SAS A	Freq.	Variant
No charge change												
A116V	A->V	*	* -	* A-	* B-		* A-	* -			0,67	B117;P1;B1429+B1427; B1525
A129V	A->V	*		* A+	* B-	* A+ B-		* -	* +	* -	0,62	B117;B1351;P1;B1617; B1429+B1427;B1525

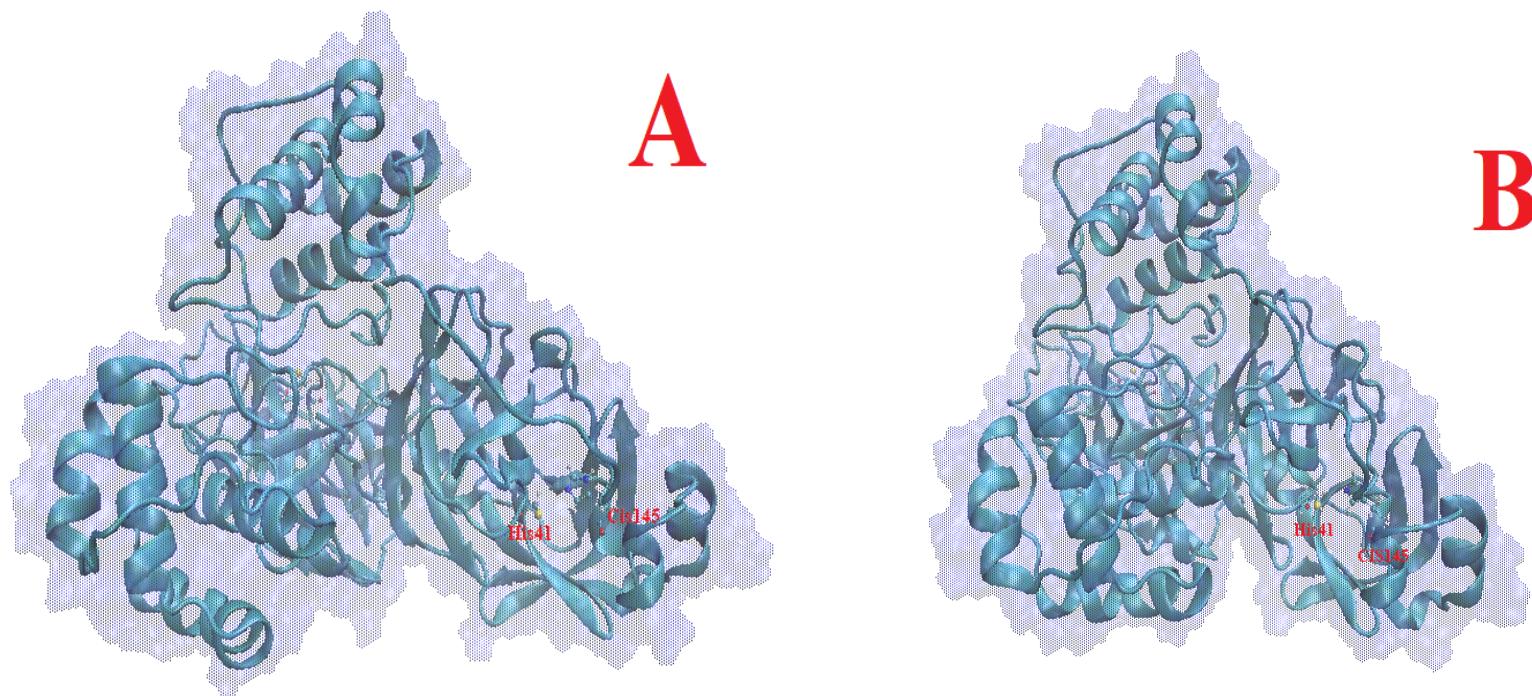
A173V	A->V	*	* -	* A-	* A+	* A-	* A-	* +		* -	0,04	B117
A193V	A->V	*			* A-					* -	0,78	B117;B1351;P1;B1617; B1429+B1427
A234V	A->V	*		* A-				* +			0,29	B117;P1;B1617;B1429+ B1427
A255V	A->V	*		* A-				* +			0,15	B117;B1351;P1;B1617; B1429+B1427
A266V	A->V		* +								0,24	B117;B1351;P1;B1617; B1429+B1427
V261A	V->A	*	* -		* B-					* -	0,02	B117;B1429+B1427
I136V	I->V	*	* -	* A- B+	* A+	* A-	* A-	* -	* -	* -	0	none
L220F	L->F	*	* +	* A+	* A+ B-	* A+		* -	* -	* -	0,71	B117;B1351;P1;B1617; B1429+B1427;B1525
L232F	L->F	*		* B-		* B-			* -	* -	0,32	B117;B1351;P1;B1617; B1429+B1427
V20L	V->L	*		* B-	* A+	* B-		* +	* +		0,04	B117
K236R	K->R	*	* -	* A-				* -		* -	1,08	B117;B1351;P1;B1617; B1429+B1427
K61R	K->R	*	* -				* A-	* -			0,01	B117
K90R	K->R	*	* -	* A-					* -	* -	70,54	B117;B1351;P1;B1617; B1429+B1427;B1525
D48E	D->E	*	* -			* B+	* B+				0,71	B117;B1617
Mutant	Res.	RMSF	Energy	Distance NE2	CYS 145	HSD 41	Bind. site	SAS Hydrop.	Dimer interface	Total SAS	Freq.	Variant
Charge inversion												
N151D	N->D	*	* -	* A-		* A-		* -	* -	* -	0,01	B117
Polar to apolar without charge												
T135I	T->I	*		* B+					* -		0,03	B117;P1;B1617

T190I	T->I	*	* -			* B+	* A- B+	* +	* +	* -	0,32	B117;B1351;P1;B1429+ B1427
T45I	T->I	*	* +	* A- B+		* B+	* A- B+	* +			0,10	B117;B1351;B1617;B14 29+B1427
Special residue												
P108S	P->S	*	* -					* -	* -	* -	5,71	B117;B1351;P1;B1617; B1429+B1427;B1525
P132L	P->L	*	* -			-	* A- B+			* -	0,79	B117;B1351;P1;B1429+ B1427;B1525
P99L	P->L	*	* -	* B-	* B-	* B-		* -	* -	0,10	B117;B1429+B1427	
R279C	R->C	*	* +	* A+	* A+ B-	* A+		* -	* -	* -	0,93	B117;P1;B1617;B1429+ B1427;B1525
R60C	R->C	*	* +		A- B-	A- B-	* A- B-	* -	* +	* -	0,27	B117;B1351;B1429+B1 427
G15D	G->D	*	* -		* A-		* B+		* -		0,01	B117;B1429+B1427
R105H	R->H	*	* +	* B-	* B-			* -		* -	0,04	B117;B1617;B1429+B1 427

Fonte: Autoria própria

ANEXO H

Figura 4 - Na figura A, observa-se o primeiro frame do modo normal 7, com a região de recepção do substrato aberta. Na B observa-se um segundo momento, onde a região está mais fechada.



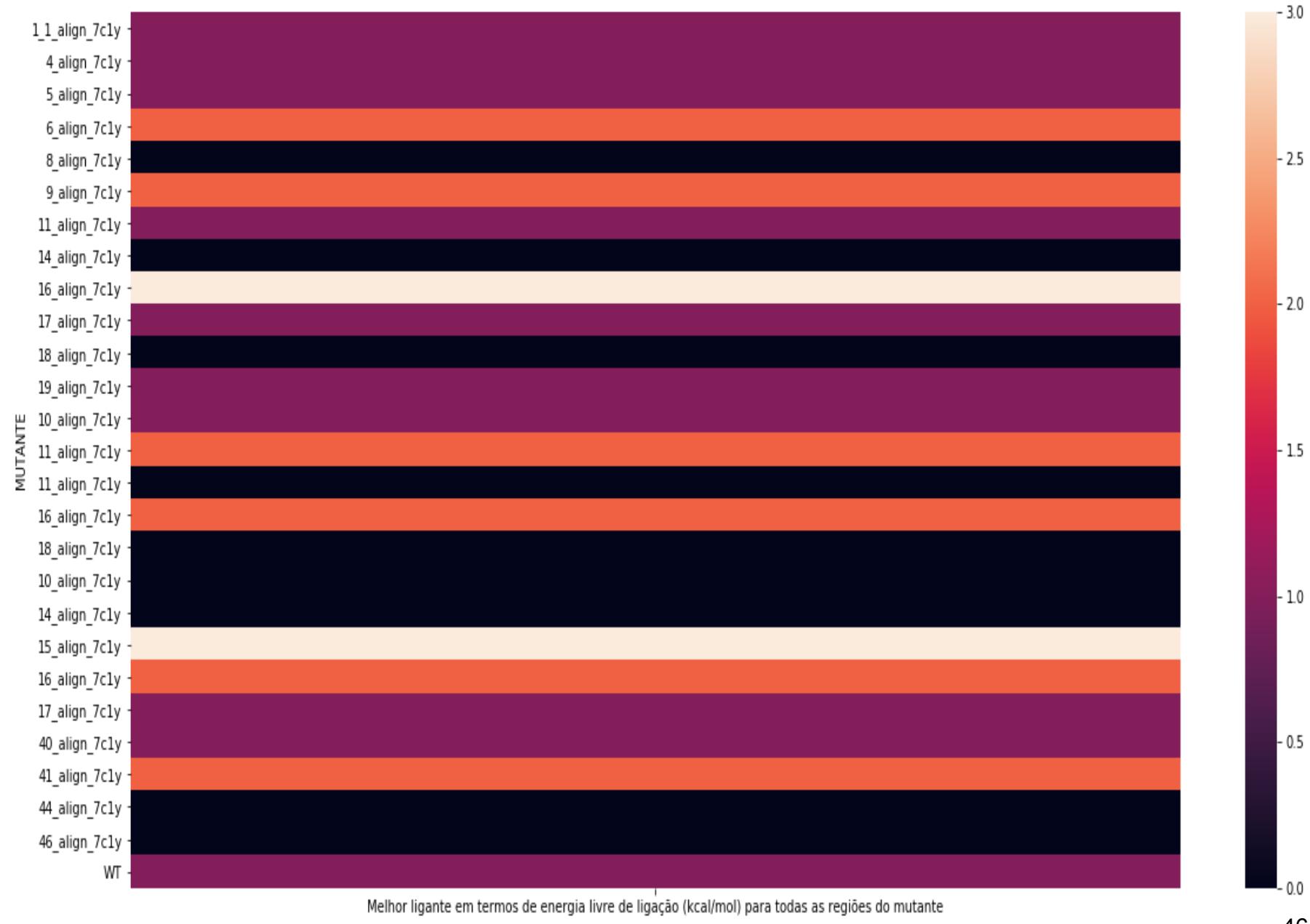
Fonte: Autoria própria

ANEXO I









ANEXO J

Tabela 4 - Valores padrão utilizados no BINANA para cálculo das interações dos ligantes com os alvos

Interações π-π e π-π-cátion	(i) corte de distância de interação π-π: 7,5 Å
	(ii) corte de distância entre cátions e π: 6 Å
Corte de distância dos contatos próximos	(iv) 2,5 Å; distância de flexibilidade do local ativo: 4 Å;
	(v) distância de preenchimento π: 0.75Å;
	(vi) distância de corte hidrofóbico: 4 Å
	(vii) corte de distância mais próxima do empilhamento em T: 5 Å
	(viii) tolerância do ângulo de empilhamento em T: 30 Å;
	(ix) corte de distância dos contatos próximos: 4 Å
	(x) tolerância do ângulo de empilhamento π: 30 Å;
	(xi) ângulo de ligação de hidrogênio: 40 Å;
	(xii) distância de ligação de hidrogênio à distância: 4 Å
	(xiii) corte da distância da ponte salina: 5,5 Å
	(xiv) distância de corte eletrostática: 4 Å

Fonte: Autoria própria

ANEXO K

Mutante	Ligante	Solução	HBN	HYD	PIS	PIT	PIC	SAL
WT	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	1	0	34	0	0	0	0
WT	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	2	0	13	0	0	0	0
WT	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	3	0	14	0	0	0	0
WT	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	4	0	14	0	0	0	0
WT	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	5	0	27	0	0	0	0
WT	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	6	0	11	0	0	0	0
WT	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	7	1	21	0	0	0	0
WT	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	8	1	14	0	0	0	0
WT	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	9	0	23	0	0	0	0
WT	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	10	0	16	0	0	0	0
WT	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	11	0	15	0	0	0	0
WT	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	12	0	10	0	0	0	0
WT	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	13	1	22	0	0	0	0
WT	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	14	0	16	0	0	0	0
WT	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	15	0	11	0	0	0	0
WT	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	16	0	16	0	0	0	0
WT	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	17	0	20	0	0	0	0
WT	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	18	0	17	0	0	0	0

WT	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	19	0	17	0	0	0	0
WT	p-hidroxibenzoato de geranila	1	1	19	0	1	0	0
WT	p-hidroxibenzoato de geranila	2	2	28	0	0	0	0
WT	p-hidroxibenzoato de geranila	3	0	18	0	0	0	0
WT	p-hidroxibenzoato de geranila	4	1	15	0	0	0	0
WT	p-hidroxibenzoato de geranila	5	1	17	0	0	0	0
WT	p-hidroxibenzoato de geranila	6	1	14	0	0	0	0
WT	p-hidroxibenzoato de geranila	7	0	16	0	0	0	0
WT	p-hidroxibenzoato de geranila	8	1	18	0	0	0	0
WT	p-hidroxibenzoato de geranila	9	1	16	0	0	0	0
WT	p-hidroxibenzoato de geranila	10	0	15	0	0	0	0
WT	p-hidroxibenzoato de geranila	11	1	18	0	0	0	0
WT	p-hidroxibenzoato de geranila	12	2	16	0	0	0	0
WT	p-hidroxibenzoato de geranila	13	0	14	0	0	0	0
WT	p-hidroxibenzoato de geranila	14	0	21	0	0	0	0
WT	p-hidroxibenzoato de geranila	15	0	15	0	0	0	0
WT	p-hidroxibenzoato de geranila	16	1	13	0	0	0	0
WT	p-hidroxibenzoato de geranila	17	0	17	0	0	0	0
WT	p-hidroxibenzoato de geranila	18	0	10	0	0	0	0
WT	p-hidroxibenzoato de geranila	19	0	8	0	0	0	0
WT	p-hidroxibenzoato de geranila	20	0	14	0	0	0	0

WT	Boceprevir	1	0	33	0	0	0	0
WT	Boceprevir	2	0	12	0	0	0	0
WT	Boceprevir	3	0	11	0	0	0	0
WT	Boceprevir	4	1	20	0	0	0	0
WT	Boceprevir	5	0	10	0	0	0	0
WT	Boceprevir	6	1	15	0	0	0	0
WT	Boceprevir	7	0	16	0	0	0	0
WT	Boceprevir	8	0	15	0	0	0	0
WT	Boceprevir	9	0	7	0	0	0	0
WT	Boceprevir	10	0	11	0	0	0	0
WT	Boceprevir	11	0	10	0	0	0	0
WT	Boceprevir	12	1	23	0	0	0	0
WT	Boceprevir	13	0	14	0	0	0	0
WT	Boceprevir	14	0	26	0	0	0	0
WT	Boceprevir	15	0	13	0	0	0	0
WT	Boceprevir	16	0	18	0	0	0	0
WT	Boceprevir	17	0	33	0	0	0	0
WT	Boceprevir	18	1	15	0	0	0	0
WT	Boceprevir	19	0	17	0	0	0	0
WT	Boceprevir	20	0	19	0	0	0	0
G15D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	1	0	32	0	0	0	0
G15D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	2	1	31	0	0	0	0
G15D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	3	0	11	0	0	0	0
G15D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	4	0	13	0	0	0	0

G15D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	5	0	17	0	0	0	0
G15D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	6	0	7	0	0	0	0
G15D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	7	0	13	0	0	0	0
G15D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	8	2	22	0	0	0	0
G15D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	9	0	26	0	0	0	0
G15D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	10	0	11	0	0	0	0
G15D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	11	1	27	0	0	0	0
G15D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	12	1	20	0	0	0	0
G15D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	13	0	13	0	0	0	0
G15D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	14	1	23	0	0	0	0
G15D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	15	1	32	0	0	0	0
G15D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	16	0	19	0	0	0	0
G15D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	17	0	18	0	0	0	0
G15D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	18	0	18	0	0	0	0
G15D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	19	0	19	0	0	0	0
G15D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	20	0	16	0	0	0	0
G15D	p-hidroxibenzoato de geranila	1	1	23	0	1	0	0
G15D	p-hidroxibenzoato de geranila	2	0	16	0	0	0	0
G15D	p-hidroxibenzoato de geranila	3	0	15	0	0	0	0
G15D	p-hidroxibenzoato de geranila	4	1	16	0	1	0	0
G15D	p-hidroxibenzoato de geranila	5	2	16	0	1	0	0

G15D	p-hidroxibenzoato de geranila	6	2	17	0	0	0	0
G15D	p-hidroxibenzoato de geranila	7	0	15	0	0	0	0
G15D	p-hidroxibenzoato de geranila	8	1	16	0	0	0	0
G15D	p-hidroxibenzoato de geranila	9	0	16	0	0	0	0
G15D	p-hidroxibenzoato de geranila	10	1	16	0	0	0	0
G15D	p-hidroxibenzoato de geranila	11	1	17	0	0	0	0
G15D	p-hidroxibenzoato de geranila	12	0	16	0	0	0	0
G15D	p-hidroxibenzoato de geranila	13	0	17	0	0	0	0
G15D	p-hidroxibenzoato de geranila	14	1	17	0	0	0	0
G15D	p-hidroxibenzoato de geranila	15	1	19	0	0	0	0
G15D	p-hidroxibenzoato de geranila	16	0	21	0	0	0	0
G15D	p-hidroxibenzoato de geranila	17	1	20	0	0	0	0
G15D	p-hidroxibenzoato de geranila	18	0	8	0	0	0	0
G15D	p-hidroxibenzoato de geranila	19	1	25	0	0	0	0
G15D	p-hidroxibenzoato de geranila	20	0	12	0	0	0	0
G15D	Boceprevir	1	0	34	0	0	0	0
G15D	Boceprevir	2	1	31	0	0	0	0
G15D	Boceprevir	3	0	16	0	0	0	0
G15D	Boceprevir	4	0	13	0	0	0	0
G15D	Boceprevir	5	2	27	0	0	0	0
G15D	Boceprevir	6	1	19	0	0	0	0
G15D	Boceprevir	7	0	9	0	0	0	0

G15D	Boceprevir	8	0	9	0	0	0	0
G15D	Boceprevir	9	0	6	0	0	0	0
G15D	Boceprevir	10	0	13	0	0	0	0
G15D	Boceprevir	11	0	14	0	0	0	0
G15D	Boceprevir	12	0	31	0	0	0	0
G15D	Boceprevir	13	0	7	0	0	0	0
G15D	Boceprevir	14	1	21	0	0	0	0
G15D	Boceprevir	15	0	21	0	0	0	0
G15D	Boceprevir	16	1	13	0	0	0	0
G15D	Boceprevir	17	0	20	0	0	0	0
G15D	Boceprevir	18	0	8	0	0	0	0
G15D	Boceprevir	19	0	17	0	0	0	0
G15D	Boceprevir	20	0	14	0	0	0	0
V20L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	1	0	34	0	0	0	0
V20L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	2	1	32	0	0	0	0
V20L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	3	1	12	0	0	0	0
V20L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	4	0	18	0	0	0	0
V20L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	5	0	17	0	0	0	0
V20L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	6	1	17	0	0	0	0
V20L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	7	0	11	0	0	0	0
V20L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	8	2	18	0	0	0	0
V20L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	9	0	12	0	0	0	0
V20L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	10	1	33	0	0	0	0

V20L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	11	0	14	0	0	0	0
V20L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	12	0	14	0	0	0	0
V20L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	13	0	12	0	0	0	0
V20L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	14	0	19	0	0	0	0
V20L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	15	0	12	0	0	0	0
V20L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	16	0	19	0	0	0	0
V20L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	17	2	20	0	0	0	0
V20L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	18	0	16	0	0	0	0
V20L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	19	0	13	0	0	0	0
V20L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	20	0	15	0	0	0	0
V20L	p-hidroxibenzoato de geranila	1	1	18	0	1	0	0
V20L	p-hidroxibenzoato de geranila	2	1	19	0	0	0	0
V20L	p-hidroxibenzoato de geranila	3	1	17	0	1	0	0
V20L	p-hidroxibenzoato de geranila	4	0	17	0	0	0	0
V20L	p-hidroxibenzoato de geranila	5	0	17	0	0	0	0
V20L	p-hidroxibenzoato de geranila	6	1	19	0	0	0	0
V20L	p-hidroxibenzoato de geranila	7	0	18	0	0	0	0
V20L	p-hidroxibenzoato de geranila	8	0	16	0	0	0	0
V20L	p-hidroxibenzoato de geranila	9	1	18	0	0	0	0
V20L	p-hidroxibenzoato de geranila	10	0	18	0	0	0	0
V20L	p-hidroxibenzoato de geranila	11	1	15	0	0	0	0

V20L	p-hidroxibenzoato de geranila	12	2	15	0	0	0	0
V20L	p-hidroxibenzoato de geranila	13	2	18	0	0	0	0
V20L	p-hidroxibenzoato de geranila	14	0	16	0	0	0	0
V20L	p-hidroxibenzoato de geranila	15	0	14	0	0	0	0
V20L	p-hidroxibenzoato de geranila	16	0	18	0	0	0	0
V20L	p-hidroxibenzoato de geranila	17	0	17	0	0	0	0
V20L	p-hidroxibenzoato de geranila	18	0	18	0	0	0	0
V20L	p-hidroxibenzoato de geranila	19	0	15	0	0	0	0
V20L	p-hidroxibenzoato de geranila	20	0	16	0	0	0	0
V20L	Boceprevir	1	2	31	0	0	0	0
V20L	Boceprevir	2	0	16	0	0	0	0
V20L	Boceprevir	3	0	12	0	0	0	0
V20L	Boceprevir	4	0	9	0	0	0	0
V20L	Boceprevir	5	0	22	0	0	0	0
V20L	Boceprevir	6	0	14	0	0	0	0
V20L	Boceprevir	7	1	9	0	0	0	0
V20L	Boceprevir	8	0	17	0	0	0	0
V20L	Boceprevir	9	0	6	0	0	0	0
V20L	Boceprevir	10	0	9	0	0	0	0
V20L	Boceprevir	11	1	21	0	0	0	0
V20L	Boceprevir	12	0	27	0	0	0	0
V20L	Boceprevir	13	0	26	0	0	0	0
V20L	Boceprevir	14	0	18	0	0	0	0

V20L	Boceprevir	15	0	31	0	0	0	0
V20L	Boceprevir	16	0	8	0	0	0	0
V20L	Boceprevir	17	0	23	0	0	0	0
V20L	Boceprevir	18	1	12	0	0	0	0
V20L	Boceprevir	19	0	14	0	0	0	0
V20L	Boceprevir	20	0	19	0	0	0	0
T45I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	1	0	33	0	0	0	0
T45I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	2	1	32	0	0	0	0
T45I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	3	0	17	0	0	0	0
T45I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	4	0	15	0	0	0	0
T45I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	5	0	17	0	0	0	0
T45I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	6	2	23	0	0	0	0
T45I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	7	1	15	0	0	0	0
T45I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	8	1	11	0	0	0	0
T45I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	9	2	20	0	0	0	0
T45I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	10	0	9	0	0	0	0
T45I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	11	1	28	0	0	0	0
T45I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	12	0	11	0	0	0	0
T45I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	13	1	29	0	0	0	0
T45I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	14	0	20	0	0	0	0
T45I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	15	0	16	0	0	0	0
T45I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	16	0	20	0	0	0	0

T45I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	17	1	24	0	0	0	0
T45I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	18	0	12	0	0	0	0
T45I	p-hidroxibenzoato de geranila	1	1	19	0	1	0	0
T45I	p-hidroxibenzoato de geranila	2	1	16	0	0	0	0
T45I	p-hidroxibenzoato de geranila	3	1	17	0	0	0	0
T45I	p-hidroxibenzoato de geranila	4	1	16	0	1	0	0
T45I	p-hidroxibenzoato de geranila	5	1	24	0	0	0	0
T45I	p-hidroxibenzoato de geranila	6	0	13	0	0	0	0
T45I	p-hidroxibenzoato de geranila	7	0	14	0	0	0	0
T45I	p-hidroxibenzoato de geranila	8	0	19	0	0	0	0
T45I	p-hidroxibenzoato de geranila	9	0	16	0	0	0	0
T45I	p-hidroxibenzoato de geranila	10	1	12	0	0	0	0
T45I	p-hidroxibenzoato de geranila	11	1	17	0	0	0	0
T45I	p-hidroxibenzoato de geranila	12	0	15	0	0	0	0
T45I	p-hidroxibenzoato de geranila	13	0	12	0	0	0	0
T45I	p-hidroxibenzoato de geranila	14	0	20	0	0	0	0
T45I	p-hidroxibenzoato de geranila	15	2	14	0	0	0	0
T45I	p-hidroxibenzoato de geranila	16	0	15	0	0	0	0
T45I	p-hidroxibenzoato de geranila	17	0	17	0	0	0	0
T45I	p-hidroxibenzoato de geranila	18	0	16	0	0	0	0
T45I	p-hidroxibenzoato de geranila	19	2	16	0	0	0	0

T45I	p-hidroxibenzoato de geranila	20	0	11	0	0	0	0
T45I	Boceprevir	1	0	8	0	0	0	0
T45I	Boceprevir	2	1	25	0	0	0	0
T45I	Boceprevir	3	0	9	0	0	0	0
T45I	Boceprevir	4	0	12	0	0	0	0
T45I	Boceprevir	5	0	11	0	0	0	0
T45I	Boceprevir	6	0	12	0	0	0	0
T45I	Boceprevir	7	0	14	0	0	0	0
T45I	Boceprevir	8	0	9	0	0	0	0
T45I	Boceprevir	9	2	40	0	0	0	0
T45I	Boceprevir	10	0	17	0	0	0	0
T45I	Boceprevir	11	1	12	0	0	0	0
T45I	Boceprevir	12	0	14	0	0	0	0
T45I	Boceprevir	13	0	14	0	0	0	0
T45I	Boceprevir	14	0	31	0	0	0	0
T45I	Boceprevir	15	0	20	0	0	0	0
T45I	Boceprevir	16	0	17	0	0	0	0
T45I	Boceprevir	17	0	29	0	0	0	0
T45I	Boceprevir	18	0	21	0	0	0	0
T45I	Boceprevir	19	1	11	0	0	0	0
T45I	Boceprevir	20	1	20	0	0	0	0
D48E	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	1	0	35	0	0	0	0
D48E	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	2	0	13	0	0	0	0
D48E	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	3	0	15	0	0	0	0

D48E	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	4	1	16	0	0	0	0
D48E	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	5	2	16	0	0	0	0
D48E	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	6	0	34	0	0	0	0
D48E	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	7	0	17	0	0	0	0
D48E	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	8	1	19	0	0	0	0
D48E	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	9	0	13	0	0	0	0
D48E	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	10	1	14	0	0	0	0
D48E	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	11	1	27	0	0	0	0
D48E	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	12	1	25	0	0	0	0
D48E	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	13	0	15	0	0	0	0
D48E	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	14	0	25	0	0	0	0
D48E	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	15	1	23	0	0	0	0
D48E	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	16	1	23	0	0	0	0
D48E	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	17	0	15	0	0	0	0
D48E	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	18	0	15	0	0	0	0
D48E	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	19	0	8	0	0	0	0
D48E	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	20	0	12	0	0	0	0
D48E	p-hidroxibenzoato de geranila	1	1	19	0	1	0	0
D48E	p-hidroxibenzoato de geranila	2	1	19	0	0	0	0
D48E	p-hidroxibenzoato de geranila	3	0	19	0	0	0	0
D48E	p-hidroxibenzoato de geranila	4	1	16	0	1	0	0

D48E	p-hidroxibenzoato de geranila	5	0	16	0	0	0	0
D48E	p-hidroxibenzoato de geranila	6	1	18	0	0	0	0
D48E	p-hidroxibenzoato de geranila	7	0	13	0	0	0	0
D48E	p-hidroxibenzoato de geranila	8	1	15	0	0	0	0
D48E	p-hidroxibenzoato de geranila	9	0	15	0	0	0	0
D48E	p-hidroxibenzoato de geranila	10	0	15	0	0	0	0
D48E	p-hidroxibenzoato de geranila	11	0	16	0	0	0	0
D48E	p-hidroxibenzoato de geranila	12	0	13	0	0	0	0
D48E	p-hidroxibenzoato de geranila	13	0	15	0	0	0	0
D48E	p-hidroxibenzoato de geranila	14	1	14	0	0	0	0
D48E	p-hidroxibenzoato de geranila	15	2	17	0	0	0	0
D48E	p-hidroxibenzoato de geranila	16	0	9	0	0	0	0
D48E	p-hidroxibenzoato de geranila	17	2	15	0	0	0	0
D48E	p-hidroxibenzoato de geranila	18	1	17	0	0	0	0
D48E	p-hidroxibenzoato de geranila	19	1	13	0	0	0	0
D48E	p-hidroxibenzoato de geranila	20	2	16	0	0	0	0
D48E	Boceprevir	1	0	37	0	0	0	0
D48E	Boceprevir	2	1	36	0	0	0	0
D48E	Boceprevir	3	1	19	0	0	0	0
D48E	Boceprevir	4	0	11	0	0	0	0
D48E	Boceprevir	5	0	23	0	0	0	0
D48E	Boceprevir	6	0	8	0	0	0	0

D48E	Boceprevir	7	1	21	0	0	0	0
D48E	Boceprevir	8	0	9	0	0	0	0
D48E	Boceprevir	9	0	7	0	0	0	0
D48E	Boceprevir	10	2	16	0	0	0	0
D48E	Boceprevir	11	0	15	0	0	0	0
D48E	Boceprevir	12	0	11	0	0	0	0
D48E	Boceprevir	13	0	21	0	0	0	0
D48E	Boceprevir	14	0	18	0	0	0	0
D48E	Boceprevir	15	0	17	0	0	0	0
D48E	Boceprevir	16	0	11	0	0	0	0
D48E	Boceprevir	17	0	19	0	0	0	0
D48E	Boceprevir	18	0	14	0	0	0	0
D48E	Boceprevir	19	0	13	0	0	0	0
D48E	Boceprevir	20	0	12	0	0	0	0
R60C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	1	0	10	0	0	0	0
R60C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	2	1	21	0	0	0	0
R60C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	3	1	26	0	0	0	0
R60C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	4	1	22	0	0	0	0
R60C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	5	1	25	0	0	0	0
R60C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	6	1	12	0	0	0	0
R60C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	7	0	19	0	0	0	0
R60C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	8	0	20	0	0	0	0
R60C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	9	2	10	0	0	0	0

R60C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	10	2	24	0	0	0	0
R60C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	11	2	22	0	0	0	0
R60C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	12	1	21	0	0	0	0
R60C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	13	1	27	0	0	0	0
R60C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	14	0	16	0	0	0	0
R60C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	15	2	12	0	0	0	0
R60C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	16	1	24	0	0	0	0
R60C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	17	2	17	0	0	0	0
R60C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	18	1	16	0	0	0	0
R60C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	19	1	22	0	0	0	0
R60C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	20	0	17	0	0	0	0
R60C	p-hidroxibenzoato de geranila	1	0	24	0	0	0	0
R60C	p-hidroxibenzoato de geranila	2	2	18	0	0	0	0
R60C	p-hidroxibenzoato de geranila	3	3	16	0	0	0	0
R60C	p-hidroxibenzoato de geranila	4	0	22	0	0	1	0
R60C	p-hidroxibenzoato de geranila	5	0	21	0	0	0	0
R60C	p-hidroxibenzoato de geranila	6	0	21	0	0	0	0
R60C	p-hidroxibenzoato de geranila	7	0	17	0	0	0	0
R60C	p-hidroxibenzoato de geranila	8	2	11	0	0	0	0
R60C	p-hidroxibenzoato de geranila	9	2	14	0	0	0	0
R60C	p-hidroxibenzoato de geranila	10	0	23	0	0	0	0

R60C	p-hidroxibenzoato de geranila	11	1	18	1	0	0	0
R60C	p-hidroxibenzoato de geranila	12	0	16	1	0	0	0
R60C	p-hidroxibenzoato de geranila	13	1	15	1	0	0	0
R60C	p-hidroxibenzoato de geranila	14	0	18	0	0	0	0
R60C	p-hidroxibenzoato de geranila	15	0	14	1	0	0	0
R60C	p-hidroxibenzoato de geranila	16	1	16	0	0	0	0
R60C	p-hidroxibenzoato de geranila	17	1	20	0	0	0	0
R60C	p-hidroxibenzoato de geranila	18	0	28	0	0	0	0
R60C	p-hidroxibenzoato de geranila	19	1	12	0	0	0	0
R60C	p-hidroxibenzoato de geranila	20	1	11	0	0	0	0
R60C	Boceprevir	1	4	15	0	0	0	0
R60C	Boceprevir	2	0	19	0	0	0	0
R60C	Boceprevir	3	2	17	0	0	0	0
R60C	Boceprevir	4	1	15	0	0	0	0
R60C	Boceprevir	5	2	18	0	0	0	0
R60C	Boceprevir	6	2	28	0	0	0	0
R60C	Boceprevir	7	1	20	0	0	0	0
R60C	Boceprevir	8	0	19	0	0	0	0
R60C	Boceprevir	9	2	25	0	0	0	0
R60C	Boceprevir	10	0	20	0	0	0	0
R60C	Boceprevir	11	2	22	0	0	0	0
R60C	Boceprevir	12	1	23	0	0	0	0
R60C	Boceprevir	13	1	18	0	0	0	0

R60C	Boceprevir	14	0	19	0	0	0	0
R60C	Boceprevir	15	2	12	0	0	0	0
R60C	Boceprevir	16	0	14	0	0	0	0
R60C	Boceprevir	17	0	14	0	0	0	0
R60C	Boceprevir	18	0	17	0	0	0	0
R60C	Boceprevir	19	1	16	0	0	0	0
R60C	Boceprevir	20	1	15	0	0	0	0
K61R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	1	0	10	0	0	0	0
K61R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	2	2	16	0	0	0	0
K61R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	3	1	22	0	0	0	0
K61R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	4	0	19	0	0	0	0
K61R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	5	1	28	0	0	0	0
K61R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	6	1	25	0	0	0	0
K61R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	7	1	29	0	0	0	0
K61R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	8	0	16	0	0	0	0
K61R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	9	3	16	0	0	0	0
K61R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	10	1	14	0	0	0	0
K61R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	11	2	12	0	0	0	0
K61R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	12	0	20	0	0	0	0
K61R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	13	2	23	0	0	0	0
K61R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	14	1	26	0	0	0	0
K61R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	15	2	28	0	0	0	0

K61R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	16	0	19	0	0	0	0
K61R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	17	4	15	0	0	0	0
K61R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	18	0	23	0	0	0	0
K61R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	19	0	27	0	0	0	0
K61R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	20	2	13	0	0	0	0
K61R	p-hidroxibenzoato de geranila	1	1	28	0	0	0	0
K61R	p-hidroxibenzoato de geranila	2	1	17	0	0	0	0
K61R	p-hidroxibenzoato de geranila	3	1	18	0	0	0	0
K61R	p-hidroxibenzoato de geranila	4	1	21	0	0	0	0
K61R	p-hidroxibenzoato de geranila	5	2	19	0	0	0	0
K61R	p-hidroxibenzoato de geranila	6	0	22	0	0	1	0
K61R	p-hidroxibenzoato de geranila	7	0	24	0	0	0	0
K61R	p-hidroxibenzoato de geranila	8	0	14	0	0	0	0
K61R	p-hidroxibenzoato de geranila	9	1	17	0	0	0	0
K61R	p-hidroxibenzoato de geranila	10	0	23	1	0	0	0
K61R	p-hidroxibenzoato de geranila	11	1	18	0	0	0	0
K61R	p-hidroxibenzoato de geranila	12	0	11	1	0	1	0
K61R	p-hidroxibenzoato de geranila	13	0	24	1	0	0	0
K61R	p-hidroxibenzoato de geranila	14	0	20	0	0	0	0
K61R	p-hidroxibenzoato de geranila	15	2	11	1	0	0	0
K61R	p-hidroxibenzoato de geranila	16	0	17	0	1	0	0

K61R	p-hidroxibenzoato de geranila	17	3	20	0	0	0	0
K61R	p-hidroxibenzoato de geranila	18	0	13	0	0	0	0
K61R	p-hidroxibenzoato de geranila	19	2	12	1	0	0	0
K61R	p-hidroxibenzoato de geranila	20	1	14	0	0	0	0
K61R	Boceprevir	1	4	18	0	0	0	0
K61R	Boceprevir	2	2	15	0	0	0	0
K61R	Boceprevir	3	1	28	0	0	0	0
K61R	Boceprevir	4	0	10	0	0	0	0
K61R	Boceprevir	5	2	27	0	0	0	0
K61R	Boceprevir	6	1	15	0	0	0	0
K61R	Boceprevir	7	0	22	0	0	0	0
K61R	Boceprevir	8	1	27	0	0	0	0
K61R	Boceprevir	9	1	22	0	0	0	0
K61R	Boceprevir	10	2	29	0	0	0	0
K61R	Boceprevir	11	1	19	0	0	0	0
K61R	Boceprevir	12	0	15	0	0	0	0
K61R	Boceprevir	13	1	13	0	0	0	0
K61R	Boceprevir	14	1	19	0	0	0	0
K61R	Boceprevir	15	2	22	0	0	0	0
K61R	Boceprevir	16	1	26	0	0	0	0
K61R	Boceprevir	17	1	22	0	0	0	0
K61R	Boceprevir	18	0	21	0	0	0	0
K61R	Boceprevir	19	0	14	0	0	0	0
K61R	Boceprevir	20	2	19	0	0	0	0

K90R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	1	1	23	0	0	0	0
K90R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	2	1	28	0	0	0	0
K90R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	3	1	27	0	0	0	0
K90R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	4	0	10	0	0	0	0
K90R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	5	1	24	0	0	0	0
K90R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	6	0	19	0	0	0	0
K90R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	7	1	18	0	0	0	0
K90R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	8	1	15	0	0	0	0
K90R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	9	1	16	0	0	0	0
K90R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	10	0	18	0	0	0	0
K90R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	11	0	21	0	0	0	0
K90R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	12	1	27	0	0	0	0
K90R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	13	1	21	0	0	0	0
K90R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	14	0	14	0	0	0	0
K90R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	15	1	22	0	0	0	0
K90R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	16	2	20	0	0	0	0
K90R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	17	1	20	0	0	0	0
K90R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	18	2	10	0	0	0	0
K90R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	19	0	16	0	0	0	0
K90R	p-hidroxibenzoato de geranila	1	1	28	0	0	0	0
K90R	p-hidroxibenzoato de geranila	2	0	16	0	0	0	0

K90R	p-hidroxibenzoato de geranila	3	1	18	0	0	0	0
K90R	p-hidroxibenzoato de geranila	4	3	18	0	0	0	0
K90R	p-hidroxibenzoato de geranila	5	1	19	0	0	0	0
K90R	p-hidroxibenzoato de geranila	6	0	23	0	0	1	0
K90R	p-hidroxibenzoato de geranila	7	0	21	0	0	0	0
K90R	p-hidroxibenzoato de geranila	8	1	13	0	0	0	0
K90R	p-hidroxibenzoato de geranila	9	1	13	1	0	0	0
K90R	p-hidroxibenzoato de geranila	10	0	17	0	0	1	0
K90R	p-hidroxibenzoato de geranila	11	3	19	1	0	0	0
K90R	p-hidroxibenzoato de geranila	12	1	18	1	0	0	0
K90R	p-hidroxibenzoato de geranila	13	0	21	1	0	0	0
K90R	p-hidroxibenzoato de geranila	14	1	21	0	0	0	0
K90R	p-hidroxibenzoato de geranila	15	1	14	0	0	0	0
K90R	p-hidroxibenzoato de geranila	16	0	20	0	0	0	0
K90R	p-hidroxibenzoato de geranila	17	1	14	0	0	0	0
K90R	p-hidroxibenzoato de geranila	18	1	15	0	0	0	0
K90R	p-hidroxibenzoato de geranila	19	0	15	1	0	0	0
K90R	p-hidroxibenzoato de geranila	20	1	16	0	0	0	0
K90R	Boceprevir	1	4	16	0	0	0	0
K90R	Boceprevir	2	2	18	0	0	0	0
K90R	Boceprevir	3	1	22	0	0	0	0
K90R	Boceprevir	4	2	16	0	0	0	0

K90R	Boceprevir	5	2	19	0	0	0	0
K90R	Boceprevir	6	0	19	0	0	0	0
K90R	Boceprevir	7	1	26	0	0	0	0
K90R	Boceprevir	8	0	20	0	0	0	0
K90R	Boceprevir	9	1	20	0	0	0	0
K90R	Boceprevir	10	1	12	0	0	0	0
K90R	Boceprevir	11	1	21	0	0	0	0
K90R	Boceprevir	12	1	25	0	0	0	0
K90R	Boceprevir	13	2	29	0	0	0	0
K90R	Boceprevir	14	1	19	0	0	0	0
K90R	Boceprevir	15	0	14	0	0	0	0
K90R	Boceprevir	16	1	24	0	0	0	0
K90R	Boceprevir	17	0	17	0	0	0	0
K90R	Boceprevir	18	1	18	0	0	0	0
K90R	Boceprevir	19	2	16	0	0	0	0
P99L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	1	4	16	0	0	0	0
P99L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	2	1	28	0	0	0	0
P99L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	3	1	28	0	0	0	0
P99L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	4	1	23	0	0	0	0
P99L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	5	1	16	0	0	0	0
P99L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	6	2	13	0	0	0	0
P99L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	7	1	27	0	0	0	0
P99L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	8	1	12	0	0	0	0

P99L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	9	1	28	0	0	0	0
P99L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	10	0	19	0	0	0	0
P99L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	11	0	19	0	0	0	0
P99L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	12	2	11	0	0	0	0
P99L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	13	0	21	0	0	0	0
P99L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	14	1	17	0	0	0	0
P99L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	15	2	23	0	0	0	0
P99L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	16	1	14	0	0	0	0
P99L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	17	2	14	0	0	0	0
P99L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	18	1	22	0	0	0	0
P99L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	19	0	14	0	0	0	0
P99L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	20	0	18	0	0	0	0
P99L	p-hidroxibenzoato de geranila	1	0	16	0	0	0	0
P99L	p-hidroxibenzoato de geranila	2	1	31	0	0	0	0
P99L	p-hidroxibenzoato de geranila	3	1	18	0	0	0	0
P99L	p-hidroxibenzoato de geranila	4	1	25	0	0	0	0
P99L	p-hidroxibenzoato de geranila	5	1	11	0	0	0	0
P99L	p-hidroxibenzoato de geranila	6	0	21	0	0	0	0
P99L	p-hidroxibenzoato de geranila	7	0	22	0	0	0	0
P99L	p-hidroxibenzoato de geranila	8	0	17	0	0	0	0
P99L	p-hidroxibenzoato de geranila	9	0	18	0	0	0	0

P99L	p-hidroxibenzoato de geranila	10	0	25	1	0	0	0
P99L	p-hidroxibenzoato de geranila	11	1	18	0	0	0	0
P99L	p-hidroxibenzoato de geranila	12	1	13	1	0	0	0
P99L	p-hidroxibenzoato de geranila	13	1	18	0	0	0	0
P99L	p-hidroxibenzoato de geranila	14	2	13	0	0	0	0
P99L	p-hidroxibenzoato de geranila	15	0	11	0	0	0	0
P99L	p-hidroxibenzoato de geranila	16	1	16	0	0	0	0
P99L	p-hidroxibenzoato de geranila	17	2	17	0	0	0	0
P99L	p-hidroxibenzoato de geranila	18	0	19	1	0	0	0
P99L	p-hidroxibenzoato de geranila	19	2	10	1	0	0	0
P99L	p-hidroxibenzoato de geranila	20	0	14	1	0	0	0
P99L	Boceprevir	1	0	11	0	0	0	0
P99L	Boceprevir	2	2	18	0	0	0	0
P99L	Boceprevir	3	0	17	0	0	0	0
P99L	Boceprevir	4	1	23	0	0	0	0
P99L	Boceprevir	5	2	18	0	0	0	0
P99L	Boceprevir	6	1	28	0	0	0	0
P99L	Boceprevir	7	1	14	0	0	0	0
P99L	Boceprevir	8	1	18	0	0	0	0
P99L	Boceprevir	9	1	22	0	0	0	0
P99L	Boceprevir	10	1	28	0	0	0	0
P99L	Boceprevir	11	1	19	0	0	0	0
P99L	Boceprevir	12	1	27	0	0	0	0

P99L	Boceprevir	13	0	18	0	0	0	0
P99L	Boceprevir	14	2	30	0	0	0	0
P99L	Boceprevir	15	1	14	0	0	0	0
P99L	Boceprevir	16	2	12	0	0	0	0
P99L	Boceprevir	17	1	22	0	0	0	0
P99L	Boceprevir	18	0	17	0	0	0	0
P99L	Boceprevir	19	1	17	0	0	0	0
P99L	Boceprevir	20	1	21	0	0	0	0
R105H	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	1	4	17	0	0	0	0
R105H	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	2	1	27	0	0	0	0
R105H	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	3	1	21	0	0	0	0
R105H	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	4	0	21	0	0	0	0
R105H	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	5	1	23	0	0	0	0
R105H	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	6	0	31	0	0	0	0
R105H	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	7	1	15	0	0	0	0
R105H	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	8	4	18	0	0	0	0
R105H	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	9	2	22	0	0	0	0
R105H	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	10	3	26	0	0	0	0
R105H	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	11	1	25	0	0	0	0
R105H	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	12	1	13	0	0	0	0
R105H	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	13	0	14	0	0	0	0
R105H	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	14	0	20	0	0	0	0

R105H	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	15	3	27	0	0	0	0
R105H	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	16	1	18	0	0	0	0
R105H	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	17	2	28	0	0	0	0
R105H	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	18	0	11	0	0	0	0
R105H	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	19	1	24	0	0	0	0
R105H	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	20	0	14	0	0	0	0
R105H	p-hidroxibenzoato de geranila	1	0	24	0	0	0	0
R105H	p-hidroxibenzoato de geranila	2	0	17	0	0	0	0
R105H	p-hidroxibenzoato de geranila	3	2	20	0	0	0	0
R105H	p-hidroxibenzoato de geranila	4	2	15	0	0	0	0
R105H	p-hidroxibenzoato de geranila	5	0	22	0	0	1	0
R105H	p-hidroxibenzoato de geranila	6	1	22	0	0	0	0
R105H	p-hidroxibenzoato de geranila	7	0	21	0	0	0	0
R105H	p-hidroxibenzoato de geranila	8	3	16	1	0	0	0
R105H	p-hidroxibenzoato de geranila	9	0	19	0	0	0	0
R105H	p-hidroxibenzoato de geranila	10	0	13	0	0	0	0
R105H	p-hidroxibenzoato de geranila	11	2	14	0	0	0	0
R105H	p-hidroxibenzoato de geranila	12	0	18	0	1	0	0
R105H	p-hidroxibenzoato de geranila	13	0	15	1	0	0	0
R105H	p-hidroxibenzoato de geranila	14	3	22	0	0	0	0
R105H	p-hidroxibenzoato de geranila	15	1	15	1	0	0	0

R105H	p-hidroxibenzoato de geranila	16	0	12	0	0	0	0
R105H	p-hidroxibenzoato de geranila	17	1	18	0	0	0	0
R105H	p-hidroxibenzoato de geranila	18	0	18	1	0	0	0
R105H	p-hidroxibenzoato de geranila	19	1	18	1	0	0	0
R105H	p-hidroxibenzoato de geranila	20	0	14	1	0	0	0
R105H	Boceprevir	1	1	28	0	0	0	0
R105H	Boceprevir	2	1	28	0	0	0	0
R105H	Boceprevir	3	1	10	0	0	0	0
R105H	Boceprevir	4	0	19	0	0	0	0
R105H	Boceprevir	5	1	23	0	0	0	0
R105H	Boceprevir	6	2	20	0	0	0	0
R105H	Boceprevir	7	0	18	0	0	0	0
R105H	Boceprevir	8	1	28	0	0	0	0
R105H	Boceprevir	9	2	13	0	0	0	0
R105H	Boceprevir	10	0	20	0	0	0	0
R105H	Boceprevir	11	1	21	0	0	0	0
R105H	Boceprevir	12	0	19	0	0	0	0
R105H	Boceprevir	13	1	23	0	0	0	0
R105H	Boceprevir	14	1	20	0	0	0	0
R105H	Boceprevir	15	3	17	0	0	0	0
R105H	Boceprevir	16	0	17	0	0	0	0
R105H	Boceprevir	17	2	19	0	0	0	0
R105H	Boceprevir	18	1	15	0	0	0	0
R105H	Boceprevir	19	0	11	0	0	0	0

R105H	Boceprevir	20	0	19	0	0	0	0
P108S	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	1	4	20	0	0	0	0
P108S	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	2	2	21	0	0	0	0
P108S	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	3	2	26	0	0	0	0
P108S	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	4	1	26	0	0	0	0
P108S	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	5	0	22	0	0	0	0
P108S	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	6	1	17	0	0	0	0
P108S	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	7	1	23	0	0	0	0
P108S	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	8	2	29	0	0	0	0
P108S	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	9	0	16	0	0	0	0
P108S	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	10	1	13	0	0	0	0
P108S	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	11	0	14	0	0	0	0
P108S	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	12	0	19	0	0	0	0
P108S	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	13	0	16	0	0	0	0
P108S	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	14	0	11	0	0	0	0
P108S	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	15	0	18	0	0	0	0
P108S	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	16	3	14	0	0	0	0
P108S	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	17	1	22	0	0	0	0
P108S	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	18	1	16	0	0	0	0
P108S	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	19	0	23	0	0	0	0
P108S	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	20	1	19	0	0	0	0

P108S	p-hidroxibenzoato de geranila	1	0	25	0	0	0	0
P108S	p-hidroxibenzoato de geranila	2	0	16	0	0	0	0
P108S	p-hidroxibenzoato de geranila	3	2	18	0	0	0	0
P108S	p-hidroxibenzoato de geranila	4	0	22	0	0	1	0
P108S	p-hidroxibenzoato de geranila	5	2	15	1	0	0	0
P108S	p-hidroxibenzoato de geranila	6	0	21	0	0	0	0
P108S	p-hidroxibenzoato de geranila	7	2	12	0	0	0	0
P108S	p-hidroxibenzoato de geranila	8	0	15	0	0	0	0
P108S	p-hidroxibenzoato de geranila	9	1	18	1	0	0	0
P108S	p-hidroxibenzoato de geranila	10	0	16	0	0	0	0
P108S	p-hidroxibenzoato de geranila	11	3	20	0	0	0	0
P108S	p-hidroxibenzoato de geranila	12	1	16	1	0	0	0
P108S	p-hidroxibenzoato de geranila	13	0	15	0	0	0	0
P108S	p-hidroxibenzoato de geranila	14	0	19	0	0	0	0
P108S	p-hidroxibenzoato de geranila	15	2	12	1	0	0	0
P108S	p-hidroxibenzoato de geranila	16	0	19	1	0	0	0
P108S	p-hidroxibenzoato de geranila	17	1	24	0	0	0	0
P108S	p-hidroxibenzoato de geranila	18	0	21	0	0	0	0
P108S	p-hidroxibenzoato de geranila	19	0	16	0	0	0	0
P108S	p-hidroxibenzoato de geranila	20	0	11	0	0	0	0
P108S	Boceprevir	1	1	11	0	0	0	0

P108S	Boceprevir	2	1	28	0	0	0	0
P108S	Boceprevir	3	0	16	0	0	0	0
P108S	Boceprevir	4	2	26	0	0	0	0
P108S	Boceprevir	5	2	14	0	0	0	0
P108S	Boceprevir	6	1	18	0	0	0	0
P108S	Boceprevir	7	0	21	0	0	0	0
P108S	Boceprevir	8	2	28	0	0	0	0
P108S	Boceprevir	9	2	18	0	0	0	0
P108S	Boceprevir	10	1	20	0	0	0	0
P108S	Boceprevir	11	2	24	0	0	0	0
P108S	Boceprevir	12	0	19	0	0	0	0
P108S	Boceprevir	13	0	18	0	0	0	0
P108S	Boceprevir	14	1	21	0	0	0	0
P108S	Boceprevir	15	2	28	0	0	0	0
P108S	Boceprevir	16	1	19	0	0	0	0
P108S	Boceprevir	17	0	22	0	0	0	0
P108S	Boceprevir	18	2	20	0	0	0	0
P108S	Boceprevir	19	1	12	0	0	0	0
P108S	Boceprevir	20	0	13	0	0	0	0
A116V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	1	2	22	0	0	0	0
A116V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	2	1	17	0	0	0	0
A116V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	3	1	12	0	0	0	0
A116V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	4	1	22	0	0	0	0
A116V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	5	0	18	0	0	0	0

A116V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	6	1	27	0	0	0	0
A116V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	7	1	23	0	0	0	0
A116V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	8	1	16	0	0	0	0
A116V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	9	1	15	0	0	0	0
A116V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	10	3	15	0	0	0	0
A116V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	11	0	17	0	0	0	0
A116V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	12	1	15	0	0	0	0
A116V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	13	0	26	0	0	0	0
A116V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	14	0	20	0	0	0	0
A116V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	15	2	25	0	0	0	0
A116V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	16	2	15	0	0	0	0
A116V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	17	1	22	0	0	0	0
A116V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	18	0	18	0	0	0	0
A116V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	19	0	18	0	0	0	0
A116V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	20	2	12	0	0	0	0
A116V	p-hidroxibenzoato de geranila	1	0	28	0	0	0	0
A116V	p-hidroxibenzoato de geranila	2	0	16	0	0	0	0
A116V	p-hidroxibenzoato de geranila	3	1	18	0	0	0	0
A116V	p-hidroxibenzoato de geranila	4	0	22	0	0	1	0
A116V	p-hidroxibenzoato de geranila	5	3	16	1	0	0	0
A116V	p-hidroxibenzoato de geranila	6	1	13	0	0	0	0

A116V	p-hidroxibenzoato de geranila	7	0	21	0	0	0	0
A116V	p-hidroxibenzoato de geranila	8	1	18	0	0	0	0
A116V	p-hidroxibenzoato de geranila	9	1	18	1	0	0	0
A116V	p-hidroxibenzoato de geranila	10	0	21	1	0	0	0
A116V	p-hidroxibenzoato de geranila	11	3	16	0	0	0	0
A116V	p-hidroxibenzoato de geranila	12	0	22	0	0	0	0
A116V	p-hidroxibenzoato de geranila	13	2	15	0	0	0	0
A116V	p-hidroxibenzoato de geranila	14	0	12	1	0	0	0
A116V	p-hidroxibenzoato de geranila	15	1	16	0	0	0	0
A116V	p-hidroxibenzoato de geranila	16	1	14	1	0	0	0
A116V	p-hidroxibenzoato de geranila	17	1	10	1	0	0	0
A116V	p-hidroxibenzoato de geranila	18	2	14	1	0	0	0
A116V	p-hidroxibenzoato de geranila	19	0	16	0	0	0	0
A116V	p-hidroxibenzoato de geranila	20	3	13	0	0	0	0
A116V	Boceprevir	1	0	21	0	0	0	0
A116V	Boceprevir	2	2	19	0	0	0	0
A116V	Boceprevir	3	1	22	0	0	0	0
A116V	Boceprevir	4	1	15	0	0	0	0
A116V	Boceprevir	5	2	17	0	0	0	0
A116V	Boceprevir	6	0	17	0	0	0	0
A116V	Boceprevir	7	1	21	0	0	0	0
A116V	Boceprevir	8	2	27	0	0	0	0

A116V	Boceprevir	9	0	18	0	0	0	0
A116V	Boceprevir	10	1	25	0	0	0	0
A116V	Boceprevir	11	0	19	0	0	0	0
A116V	Boceprevir	12	0	19	0	0	0	0
A116V	Boceprevir	13	1	22	0	0	0	0
A116V	Boceprevir	14	1	22	0	0	0	0
A116V	Boceprevir	15	2	13	0	0	0	0
A116V	Boceprevir	16	2	18	0	0	0	0
A116V	Boceprevir	17	2	9	0	0	0	0
A116V	Boceprevir	18	1	24	0	0	0	0
A116V	Boceprevir	19	1	15	0	0	0	0
A116V	Boceprevir	20	0	20	0	0	0	0
A129V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	1	4	18	0	0	0	0
A129V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	2	0	10	0	0	0	0
A129V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	3	0	19	0	0	0	0
A129V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	4	1	26	0	0	0	0
A129V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	5	1	23	0	0	0	0
A129V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	6	1	16	0	0	0	0
A129V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	7	1	13	0	0	0	0
A129V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	8	0	19	0	0	0	0
A129V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	9	0	12	0	0	0	0
A129V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	10	2	11	0	0	0	0
A129V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	11	1	28	0	0	0	0

A129V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	12	1	21	0	0	0	0
A129V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	13	0	16	0	0	0	0
A129V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	14	1	23	0	0	0	0
A129V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	15	0	27	0	0	0	0
A129V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	16	2	12	0	0	0	0
A129V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	17	1	32	0	0	0	0
A129V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	18	0	22	0	0	0	0
A129V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	19	0	14	0	0	0	0
A129V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	20	2	14	0	0	0	0
A129V	p-hidroxibenzoato de geranila	1	0	25	0	0	0	0
A129V	p-hidroxibenzoato de geranila	2	1	16	0	0	0	0
A129V	p-hidroxibenzoato de geranila	3	1	18	0	0	0	0
A129V	p-hidroxibenzoato de geranila	4	2	16	0	0	0	0
A129V	p-hidroxibenzoato de geranila	5	0	21	0	0	0	0
A129V	p-hidroxibenzoato de geranila	6	0	19	0	0	0	0
A129V	p-hidroxibenzoato de geranila	7	1	12	0	0	0	0
A129V	p-hidroxibenzoato de geranila	8	1	20	0	0	0	0
A129V	p-hidroxibenzoato de geranila	9	0	22	1	0	1	0
A129V	p-hidroxibenzoato de geranila	10	1	14	0	0	0	0
A129V	p-hidroxibenzoato de geranila	11	1	19	0	0	0	0
A129V	p-hidroxibenzoato de geranila	12	0	16	0	1	0	0

A129V	p-hidroxibenzoato de geranila	13	0	17	1	0	0	0
A129V	p-hidroxibenzoato de geranila	14	0	20	0	1	0	0
A129V	p-hidroxibenzoato de geranila	15	1	21	1	0	0	0
A129V	p-hidroxibenzoato de geranila	16	1	16	0	0	0	0
A129V	p-hidroxibenzoato de geranila	17	0	17	0	0	0	0
A129V	p-hidroxibenzoato de geranila	18	0	20	0	0	0	0
A129V	p-hidroxibenzoato de geranila	19	4	13	0	0	0	0
A129V	p-hidroxibenzoato de geranila	20	0	18	0	0	0	0
A129V	Boceprevir	1	4	17	0	0	0	0
A129V	Boceprevir	2	0	20	0	0	0	0
A129V	Boceprevir	3	1	23	0	0	0	0
A129V	Boceprevir	4	2	25	0	0	0	0
A129V	Boceprevir	5	2	18	0	0	0	0
A129V	Boceprevir	6	2	28	0	0	0	0
A129V	Boceprevir	7	3	15	0	0	0	0
A129V	Boceprevir	8	2	23	0	0	0	0
A129V	Boceprevir	9	0	9	0	0	0	0
A129V	Boceprevir	10	1	17	0	0	0	0
A129V	Boceprevir	11	2	22	0	0	0	0
A129V	Boceprevir	12	0	14	0	0	0	0
A129V	Boceprevir	13	2	14	0	0	0	0
A129V	Boceprevir	14	1	23	0	0	0	0
A129V	Boceprevir	15	1	18	0	0	0	0

A129V	Boceprevir	16	2	11	0	0	0	0
A129V	Boceprevir	17	1	18	0	0	0	0
A129V	Boceprevir	18	1	25	0	0	0	0
A129V	Boceprevir	19	2	15	0	0	0	0
A129V	Boceprevir	20	1	26	0	0	0	0
P132L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	1	4	17	0	0	0	0
P132L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	2	0	9	0	0	0	0
P132L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	3	2	19	0	0	0	0
P132L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	4	1	28	0	0	0	0
P132L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	5	0	19	0	0	0	0
P132L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	6	1	14	0	0	0	0
P132L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	7	1	23	0	0	0	0
P132L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	8	1	16	0	0	0	0
P132L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	9	1	20	0	0	0	0
P132L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	10	2	28	0	0	0	0
P132L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	11	3	19	0	0	0	0
P132L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	12	2	25	0	0	0	0
P132L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	13	1	12	0	0	0	0
P132L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	14	1	26	0	0	0	0
P132L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	15	1	22	0	0	0	0
P132L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	16	2	24	0	0	0	0
P132L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	17	0	14	0	0	0	0

P132L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	18	0	19	0	0	0	0
P132L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	19	1	23	0	0	0	0
P132L	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	20	3	15	0	0	0	0
P132L	p-hidroxibenzoato de geranila	1	0	25	0	0	0	0
P132L	p-hidroxibenzoato de geranila	2	0	17	0	0	0	0
P132L	p-hidroxibenzoato de geranila	3	3	21	0	0	0	0
P132L	p-hidroxibenzoato de geranila	4	2	19	0	0	0	0
P132L	p-hidroxibenzoato de geranila	5	0	23	1	0	0	0
P132L	p-hidroxibenzoato de geranila	6	2	15	1	0	0	0
P132L	p-hidroxibenzoato de geranila	7	0	22	0	0	0	0
P132L	p-hidroxibenzoato de geranila	8	1	20	0	0	0	0
P132L	p-hidroxibenzoato de geranila	9	1	14	1	0	0	0
P132L	p-hidroxibenzoato de geranila	10	1	18	1	0	0	0
P132L	p-hidroxibenzoato de geranila	11	0	16	0	0	0	0
P132L	p-hidroxibenzoato de geranila	12	3	18	1	0	0	0
P132L	p-hidroxibenzoato de geranila	13	0	16	0	0	0	0
P132L	p-hidroxibenzoato de geranila	14	2	15	1	0	0	0
P132L	p-hidroxibenzoato de geranila	15	0	14	0	0	0	0
P132L	p-hidroxibenzoato de geranila	16	2	12	1	0	0	0
P132L	p-hidroxibenzoato de geranila	17	0	19	0	0	0	0
P132L	p-hidroxibenzoato de geranila	18	1	14	1	0	0	0

P132L	p-hidroxibenzoato de geranila	19	0	13	0	0	0	0
P132L	p-hidroxibenzoato de geranila	20	0	12	0	0	0	0
P132L	Boceprevir	1	2	17	0	0	0	0
P132L	Boceprevir	2	1	27	0	0	0	0
P132L	Boceprevir	3	0	20	0	0	0	0
P132L	Boceprevir	4	1	16	0	0	0	0
P132L	Boceprevir	5	3	18	0	0	0	0
P132L	Boceprevir	6	1	26	0	0	0	0
P132L	Boceprevir	7	1	19	0	0	0	0
P132L	Boceprevir	8	1	15	0	0	0	0
P132L	Boceprevir	9	0	21	0	0	0	0
P132L	Boceprevir	10	0	20	0	0	0	0
P132L	Boceprevir	11	1	22	0	0	0	0
P132L	Boceprevir	12	0	13	0	0	0	0
P132L	Boceprevir	13	2	15	0	0	0	0
P132L	Boceprevir	14	0	15	0	0	0	0
P132L	Boceprevir	15	2	9	0	0	0	0
P132L	Boceprevir	16	0	21	0	0	0	0
P132L	Boceprevir	17	0	12	0	0	0	0
P132L	Boceprevir	18	0	21	0	0	0	0
P132L	Boceprevir	19	1	14	0	0	0	0
P132L	Boceprevir	20	3	25	0	0	0	0
T135I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	1	0	12	0	0	0	0
T135I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	2	0	20	0	0	0	0

T135I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	3	1	26	0	0	0	0
T135I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	4	2	17	0	0	0	0
T135I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	5	0	31	0	0	0	0
T135I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	6	1	20	0	0	0	0
T135I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	7	1	15	0	0	0	0
T135I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	8	2	20	0	0	0	0
T135I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	9	1	29	0	0	0	0
T135I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	10	0	18	0	0	0	0
T135I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	11	0	15	0	0	0	0
T135I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	12	0	18	0	0	0	0
T135I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	13	0	14	0	0	0	0
T135I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	14	2	29	0	0	0	0
T135I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	15	1	27	0	0	0	0
T135I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	16	1	19	0	0	0	0
T135I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	17	0	18	0	0	0	0
T135I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	18	1	15	0	0	0	0
T135I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	19	3	14	0	0	0	0
T135I	p-hidroxibenzoato de geranila	1	0	26	0	0	0	0
T135I	p-hidroxibenzoato de geranila	2	0	16	0	0	0	0
T135I	p-hidroxibenzoato de geranila	3	3	19	0	0	0	0
T135I	p-hidroxibenzoato de geranila	4	2	18	0	0	0	0

T135I	p-hidroxibenzoato de geranila	5	1	20	0	0	0	0
T135I	p-hidroxibenzoato de geranila	6	0	22	0	0	1	0
T135I	p-hidroxibenzoato de geranila	7	0	21	0	0	0	0
T135I	p-hidroxibenzoato de geranila	8	0	15	0	0	0	0
T135I	p-hidroxibenzoato de geranila	9	0	20	0	0	0	0
T135I	p-hidroxibenzoato de geranila	10	1	17	1	0	0	0
T135I	p-hidroxibenzoato de geranila	11	0	21	0	1	0	0
T135I	p-hidroxibenzoato de geranila	12	2	16	0	0	0	0
T135I	p-hidroxibenzoato de geranila	13	2	18	1	0	0	0
T135I	p-hidroxibenzoato de geranila	14	0	19	0	0	0	0
T135I	p-hidroxibenzoato de geranila	15	0	15	0	0	1	0
T135I	p-hidroxibenzoato de geranila	16	1	17	0	0	0	0
T135I	p-hidroxibenzoato de geranila	17	0	15	1	0	0	0
T135I	p-hidroxibenzoato de geranila	18	1	15	0	0	0	0
T135I	p-hidroxibenzoato de geranila	19	0	10	1	0	0	0
T135I	p-hidroxibenzoato de geranila	20	2	14	1	0	0	0
T135I	Boceprevir	1	2	16	0	0	0	0
T135I	Boceprevir	2	1	27	0	0	0	0
T135I	Boceprevir	3	0	19	0	0	0	0
T135I	Boceprevir	4	1	15	0	0	0	0
T135I	Boceprevir	5	2	18	0	0	0	0
T135I	Boceprevir	6	2	27	0	0	0	0

T135I	Boceprevir	7	1	14	0	0	0	0
T135I	Boceprevir	8	1	21	0	0	0	0
T135I	Boceprevir	9	2	27	0	0	0	0
T135I	Boceprevir	10	1	18	0	0	0	0
T135I	Boceprevir	11	1	9	0	0	0	0
T135I	Boceprevir	12	0	20	0	0	0	0
T135I	Boceprevir	13	1	18	0	0	0	0
T135I	Boceprevir	14	2	23	0	0	0	0
T135I	Boceprevir	15	1	24	0	0	0	0
T135I	Boceprevir	16	0	15	0	0	0	0
T135I	Boceprevir	17	0	20	0	0	0	0
T135I	Boceprevir	18	2	12	0	0	0	0
T135I	Boceprevir	19	0	17	0	0	0	0
T135I	Boceprevir	20	2	11	0	0	0	0
N151D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	1	1	28	0	0	0	0
N151D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	2	1	24	0	0	0	0
N151D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	3	1	16	0	0	0	0
N151D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	4	1	17	0	0	0	0
N151D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	5	2	28	0	0	0	0
N151D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	6	3	25	0	0	0	0
N151D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	7	0	18	0	0	0	0
N151D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	8	1	14	0	0	0	0
N151D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	9	1	25	0	0	0	0

N151D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	10	2	23	0	0	0	0
N151D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	11	0	22	0	0	0	0
N151D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	12	1	10	0	0	0	0
N151D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	13	1	28	0	0	0	0
N151D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	14	0	19	0	0	0	0
N151D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	15	1	23	0	0	0	0
N151D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	16	0	14	0	0	0	0
N151D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	17	1	21	0	0	0	0
N151D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	18	0	17	0	0	0	0
N151D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	19	1	23	0	0	0	0
N151D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	20	3	12	0	0	0	0
N151D	p-hidroxibenzoato de geranila	1	0	27	0	0	0	0
N151D	p-hidroxibenzoato de geranila	2	1	17	0	0	0	0
N151D	p-hidroxibenzoato de geranila	3	2	18	0	0	0	0
N151D	p-hidroxibenzoato de geranila	4	1	21	0	0	0	0
N151D	p-hidroxibenzoato de geranila	5	0	28	0	0	0	0
N151D	p-hidroxibenzoato de geranila	6	4	16	0	0	0	0
N151D	p-hidroxibenzoato de geranila	7	0	21	0	0	0	0
N151D	p-hidroxibenzoato de geranila	8	0	22	0	0	1	0
N151D	p-hidroxibenzoato de geranila	9	2	12	0	0	0	0
N151D	p-hidroxibenzoato de geranila	10	0	18	0	0	0	0

N151D	p-hidroxibenzoato de geranila	11	1	18	1	0	0	0
N151D	p-hidroxibenzoato de geranila	12	1	13	0	0	0	0
N151D	p-hidroxibenzoato de geranila	13	0	18	0	1	0	0
N151D	p-hidroxibenzoato de geranila	14	1	17	0	0	0	0
N151D	p-hidroxibenzoato de geranila	15	0	15	0	0	0	0
N151D	p-hidroxibenzoato de geranila	16	1	17	1	0	0	0
N151D	p-hidroxibenzoato de geranila	17	0	15	1	0	0	0
N151D	p-hidroxibenzoato de geranila	18	2	16	0	0	0	0
N151D	p-hidroxibenzoato de geranila	19	0	15	1	0	0	0
N151D	p-hidroxibenzoato de geranila	20	2	14	1	0	0	0
N151D	Boceprevir	1	4	16	0	0	0	0
N151D	Boceprevir	2	2	19	0	0	0	0
N151D	Boceprevir	3	1	28	0	0	0	0
N151D	Boceprevir	4	1	29	0	0	0	0
N151D	Boceprevir	5	1	17	0	0	0	0
N151D	Boceprevir	6	1	17	0	0	0	0
N151D	Boceprevir	7	3	19	0	0	0	0
N151D	Boceprevir	8	0	19	0	0	0	0
N151D	Boceprevir	9	1	20	0	0	0	0
N151D	Boceprevir	10	2	27	0	0	0	0
N151D	Boceprevir	11	2	24	0	0	0	0
N151D	Boceprevir	12	0	21	0	0	0	0
N151D	Boceprevir	13	1	21	0	0	0	0

N151D	Boceprevir	14	0	14	0	0	0	0
N151D	Boceprevir	15	2	12	0	0	0	0
N151D	Boceprevir	16	0	17	0	0	0	0
N151D	Boceprevir	17	1	25	0	0	0	0
N151D	Boceprevir	18	1	32	0	0	0	0
N151D	Boceprevir	19	1	16	0	0	0	0
N151D	Boceprevir	20	0	24	0	0	0	0
A173V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	1	4	17	0	0	0	0
A173V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	2	1	28	0	0	0	0
A173V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	3	1	20	0	0	0	0
A173V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	4	2	26	0	0	0	0
A173V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	5	1	20	0	0	0	0
A173V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	6	1	22	0	0	0	0
A173V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	7	0	22	0	0	0	0
A173V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	8	1	13	0	0	0	0
A173V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	9	3	26	0	0	0	0
A173V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	10	2	17	0	0	0	0
A173V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	11	1	28	0	0	0	0
A173V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	12	0	16	0	0	0	0
A173V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	13	2	13	0	0	0	0
A173V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	14	1	23	0	0	0	0
A173V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	15	0	15	0	0	0	0

A173V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	16	1	16	0	0	0	0
A173V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	17	1	29	0	0	0	0
A173V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	18	0	13	0	0	0	0
A173V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	19	0	21	0	0	0	0
A173V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	20	1	19	0	0	0	0
A173V	p-hidroxibenzoato de geranila	1	0	24	0	0	0	0
A173V	p-hidroxibenzoato de geranila	2	1	16	0	0	0	0
A173V	p-hidroxibenzoato de geranila	3	3	18	0	0	0	0
A173V	p-hidroxibenzoato de geranila	4	1	19	0	0	0	0
A173V	p-hidroxibenzoato de geranila	5	0	20	0	0	0	0
A173V	p-hidroxibenzoato de geranila	6	1	14	1	0	0	0
A173V	p-hidroxibenzoato de geranila	7	2	13	0	0	0	0
A173V	p-hidroxibenzoato de geranila	8	1	14	0	0	0	0
A173V	p-hidroxibenzoato de geranila	9	2	18	1	0	0	0
A173V	p-hidroxibenzoato de geranila	10	0	19	0	1	0	0
A173V	p-hidroxibenzoato de geranila	11	0	20	0	1	0	0
A173V	p-hidroxibenzoato de geranila	12	0	19	1	0	0	0
A173V	p-hidroxibenzoato de geranila	13	0	15	1	0	0	0
A173V	p-hidroxibenzoato de geranila	14	3	19	0	0	0	0
A173V	p-hidroxibenzoato de geranila	15	2	14	0	0	0	0
A173V	p-hidroxibenzoato de geranila	16	0	17	0	0	0	0

A173V	p-hidroxibenzoato de geranila	17	0	19	0	0	0	0
A173V	p-hidroxibenzoato de geranila	18	0	14	0	0	0	0
A173V	p-hidroxibenzoato de geranila	19	2	14	1	0	0	0
A173V	p-hidroxibenzoato de geranila	20	1	11	1	0	0	0
A173V	Boceprevir	1	4	17	0	0	0	0
A173V	Boceprevir	2	2	21	0	0	0	0
A173V	Boceprevir	3	0	12	0	0	0	0
A173V	Boceprevir	4	1	27	0	0	0	0
A173V	Boceprevir	5	1	24	0	0	0	0
A173V	Boceprevir	6	1	11	0	0	0	0
A173V	Boceprevir	7	0	19	0	0	0	0
A173V	Boceprevir	8	2	28	0	0	0	0
A173V	Boceprevir	9	2	17	0	0	0	0
A173V	Boceprevir	10	1	18	0	0	0	0
A173V	Boceprevir	11	0	21	0	0	0	0
A173V	Boceprevir	12	2	29	0	0	0	0
A173V	Boceprevir	13	2	23	0	0	0	0
A173V	Boceprevir	14	0	21	0	0	0	0
A173V	Boceprevir	15	1	18	0	0	0	0
A173V	Boceprevir	16	3	15	0	0	0	0
A173V	Boceprevir	17	0	26	0	0	0	0
A173V	Boceprevir	18	0	14	0	0	0	0
A173V	Boceprevir	19	0	22	0	0	0	0
A173V	Boceprevir	20	0	17	0	0	0	0

T190I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	1	1	11	0	0	0	0
T190I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	2	1	22	0	0	0	0
T190I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	3	0	21	0	0	0	0
T190I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	4	1	27	0	0	0	0
T190I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	5	1	24	0	0	0	0
T190I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	6	1	15	0	0	0	0
T190I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	7	2	27	0	0	0	0
T190I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	8	2	23	0	0	0	0
T190I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	9	1	14	0	0	0	0
T190I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	10	3	21	0	0	0	0
T190I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	11	1	15	0	0	0	0
T190I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	12	0	21	0	0	0	0
T190I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	13	1	24	0	0	0	0
T190I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	14	0	14	0	0	0	0
T190I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	15	1	18	0	0	0	0
T190I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	16	0	16	0	0	0	0
T190I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	17	0	20	0	0	0	0
T190I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	18	2	13	0	0	0	0
T190I	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	19	1	26	0	0	0	0
T190I	p-hidroxibenzoato de geranila	1	0	25	0	0	0	0
T190I	p-hidroxibenzoato de geranila	2	2	19	0	0	0	0

T190I	p-hidroxibenzoato de geranila	3	3	19	0	0	0	0
T190I	p-hidroxibenzoato de geranila	4	1	20	0	0	0	0
T190I	p-hidroxibenzoato de geranila	5	1	18	0	0	0	0
T190I	p-hidroxibenzoato de geranila	6	0	22	1	0	1	0
T190I	p-hidroxibenzoato de geranila	7	0	15	0	0	0	0
T190I	p-hidroxibenzoato de geranila	8	0	14	0	0	0	0
T190I	p-hidroxibenzoato de geranila	9	1	16	0	0	0	0
T190I	p-hidroxibenzoato de geranila	10	1	14	1	0	0	0
T190I	p-hidroxibenzoato de geranila	11	0	18	0	0	0	0
T190I	p-hidroxibenzoato de geranila	12	0	19	1	0	0	0
T190I	p-hidroxibenzoato de geranila	13	1	21	0	1	0	0
T190I	p-hidroxibenzoato de geranila	14	0	21	1	0	0	0
T190I	p-hidroxibenzoato de geranila	15	1	17	1	0	0	0
T190I	p-hidroxibenzoato de geranila	16	0	17	0	0	0	0
T190I	p-hidroxibenzoato de geranila	17	2	19	1	0	0	0
T190I	p-hidroxibenzoato de geranila	18	0	19	0	0	0	0
T190I	p-hidroxibenzoato de geranila	19	1	16	0	0	0	0
T190I	p-hidroxibenzoato de geranila	20	0	13	0	0	1	0
T190I	Boceprevir	1	4	15	0	0	0	0
T190I	Boceprevir	2	1	28	0	0	0	0
T190I	Boceprevir	3	1	26	0	0	0	0
T190I	Boceprevir	4	0	11	0	0	0	0

T190I	Boceprevir	5	1	15	0	0	0	0
T190I	Boceprevir	6	2	17	0	0	0	0
T190I	Boceprevir	7	2	19	0	0	0	0
T190I	Boceprevir	8	2	30	0	0	0	0
T190I	Boceprevir	9	0	20	0	0	0	0
T190I	Boceprevir	10	2	25	0	0	0	0
T190I	Boceprevir	11	2	28	0	0	0	0
T190I	Boceprevir	12	1	21	0	0	0	0
T190I	Boceprevir	13	2	23	0	0	0	0
T190I	Boceprevir	14	0	20	0	0	0	0
T190I	Boceprevir	15	1	19	0	0	0	0
T190I	Boceprevir	16	0	10	0	0	0	0
T190I	Boceprevir	17	0	15	0	0	0	0
T190I	Boceprevir	18	2	13	0	0	0	0
T190I	Boceprevir	19	0	21	0	0	0	0
T190I	Boceprevir	20	0	15	0	0	0	0
A193V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	1	4	16	0	0	0	0
A193V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	2	1	20	0	0	0	0
A193V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	3	1	22	0	0	0	0
A193V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	4	1	18	0	0	0	0
A193V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	5	1	28	0	0	0	0
A193V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	6	0	12	0	0	0	0
A193V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	7	0	19	0	0	0	0

A193V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	8	1	15	0	0	0	0
A193V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	9	2	15	0	0	0	0
A193V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	10	0	16	0	0	0	0
A193V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	11	0	23	0	0	0	0
A193V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	12	2	12	0	0	0	0
A193V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	13	0	17	0	0	0	0
A193V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	14	2	11	0	0	0	0
A193V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	15	1	24	0	0	0	0
A193V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	16	3	27	0	0	0	0
A193V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	17	1	20	0	0	0	0
A193V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	18	0	20	0	0	0	0
A193V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	19	3	27	0	0	0	0
A193V	p-hidroxibenzoato de geranila	1	1	16	0	0	0	0
A193V	p-hidroxibenzoato de geranila	2	0	26	0	0	0	0
A193V	p-hidroxibenzoato de geranila	3	3	18	0	0	0	0
A193V	p-hidroxibenzoato de geranila	4	0	22	0	0	1	0
A193V	p-hidroxibenzoato de geranila	5	0	21	0	0	0	0
A193V	p-hidroxibenzoato de geranila	6	0	20	0	0	0	0
A193V	p-hidroxibenzoato de geranila	7	2	15	1	0	0	0
A193V	p-hidroxibenzoato de geranila	8	3	12	0	0	0	0
A193V	p-hidroxibenzoato de geranila	9	2	11	0	0	0	0

A193V	p-hidroxibenzoato de geranila	10	1	14	0	0	0	0
A193V	p-hidroxibenzoato de geranila	11	1	18	1	0	0	0
A193V	p-hidroxibenzoato de geranila	12	0	19	0	0	0	0
A193V	p-hidroxibenzoato de geranila	13	0	20	0	0	0	0
A193V	p-hidroxibenzoato de geranila	14	1	25	0	0	0	0
A193V	p-hidroxibenzoato de geranila	15	0	15	1	0	0	0
A193V	p-hidroxibenzoato de geranila	16	1	13	1	0	0	0
A193V	p-hidroxibenzoato de geranila	17	1	15	0	0	0	0
A193V	p-hidroxibenzoato de geranila	18	1	16	1	0	0	0
A193V	p-hidroxibenzoato de geranila	19	0	13	0	0	0	0
A193V	p-hidroxibenzoato de geranila	20	2	19	1	0	0	0
A193V	Boceprevir	1	0	12	0	0	0	0
A193V	Boceprevir	2	2	20	0	0	0	0
A193V	Boceprevir	3	1	15	0	0	0	0
A193V	Boceprevir	4	2	26	0	0	0	0
A193V	Boceprevir	5	1	15	0	0	0	0
A193V	Boceprevir	6	3	16	0	0	0	0
A193V	Boceprevir	7	3	23	0	0	0	0
A193V	Boceprevir	8	0	22	0	0	0	0
A193V	Boceprevir	9	1	26	0	0	0	0
A193V	Boceprevir	10	1	16	0	0	0	0
A193V	Boceprevir	11	1	17	0	0	0	0
A193V	Boceprevir	12	0	19	0	0	0	0

A193V	Boceprevir	13	2	27	0	0	0	0
A193V	Boceprevir	14	1	26	0	0	0	0
A193V	Boceprevir	15	1	19	0	0	0	0
A193V	Boceprevir	16	1	17	0	0	0	0
A193V	Boceprevir	17	0	14	0	0	0	0
A193V	Boceprevir	18	2	14	0	0	0	0
A193V	Boceprevir	19	0	22	0	0	0	0
A193V	Boceprevir	20	1	17	0	0	0	0
L220F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	1	2	22	0	0	0	0
L220F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	2	0	18	0	0	0	0
L220F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	3	0	9	0	0	0	0
L220F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	4	1	26	0	0	0	0
L220F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	5	1	18	0	0	0	0
L220F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	6	1	22	0	0	0	0
L220F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	7	1	18	0	0	0	0
L220F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	8	2	19	0	0	0	0
L220F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	9	1	20	0	0	0	0
L220F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	10	0	18	0	0	0	0
L220F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	11	1	13	0	0	0	0
L220F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	12	1	16	0	0	0	0
L220F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	13	0	20	0	0	0	0
L220F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	14	1	23	0	0	0	0

L220F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	15	2	18	0	0	0	0
L220F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	16	0	18	0	0	0	0
L220F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	17	2	14	0	0	0	0
L220F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	18	0	25	0	0	0	0
L220F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	19	2	17	0	0	0	0
L220F	p-hidroxibenzoato de geranila	1	0	27	0	0	0	0
L220F	p-hidroxibenzoato de geranila	2	0	15	0	0	0	0
L220F	p-hidroxibenzoato de geranila	3	1	18	0	0	0	0
L220F	p-hidroxibenzoato de geranila	4	2	16	0	0	0	0
L220F	p-hidroxibenzoato de geranila	5	0	22	0	0	0	0
L220F	p-hidroxibenzoato de geranila	6	1	14	1	0	0	0
L220F	p-hidroxibenzoato de geranila	7	2	13	0	0	0	0
L220F	p-hidroxibenzoato de geranila	8	0	23	1	0	1	0
L220F	p-hidroxibenzoato de geranila	9	1	18	1	0	0	0
L220F	p-hidroxibenzoato de geranila	10	0	24	0	0	0	0
L220F	p-hidroxibenzoato de geranila	11	2	12	0	0	0	0
L220F	p-hidroxibenzoato de geranila	12	0	18	0	1	0	0
L220F	p-hidroxibenzoato de geranila	13	4	17	0	0	0	0
L220F	p-hidroxibenzoato de geranila	14	0	20	0	0	0	0
L220F	p-hidroxibenzoato de geranila	15	0	18	1	0	0	0
L220F	p-hidroxibenzoato de geranila	16	0	19	0	1	0	0

L220F	p-hidroxibenzoato de geranila	17	1	17	0	0	0	0
L220F	p-hidroxibenzoato de geranila	18	0	13	0	0	0	0
L220F	p-hidroxibenzoato de geranila	19	1	17	0	0	0	0
L220F	p-hidroxibenzoato de geranila	20	1	16	1	0	0	0
L220F	Boceprevir	1	2	20	0	0	0	0
L220F	Boceprevir	2	1	28	0	0	0	0
L220F	Boceprevir	3	1	28	0	0	0	0
L220F	Boceprevir	4	1	15	0	0	0	0
L220F	Boceprevir	5	2	16	0	0	0	0
L220F	Boceprevir	6	2	28	0	0	0	0
L220F	Boceprevir	7	0	16	0	0	0	0
L220F	Boceprevir	8	0	14	0	0	0	0
L220F	Boceprevir	9	2	24	0	0	0	0
L220F	Boceprevir	10	1	17	0	0	0	0
L220F	Boceprevir	11	0	18	0	0	0	0
L220F	Boceprevir	12	0	18	0	0	0	0
L220F	Boceprevir	13	1	23	0	0	0	0
L220F	Boceprevir	14	0	20	0	0	0	0
L220F	Boceprevir	15	1	18	0	0	0	0
L220F	Boceprevir	16	0	13	0	0	0	0
L220F	Boceprevir	17	3	14	0	0	0	0
L220F	Boceprevir	18	1	25	0	0	0	0
L220F	Boceprevir	19	1	11	0	0	0	0
L220F	Boceprevir	20	0	13	0	0	0	0

L232F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	1	1	23	0	0	0	0
L232F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	2	1	27	0	0	0	0
L232F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	3	2	26	0	0	0	0
L232F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	4	2	22	0	0	0	0
L232F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	5	2	13	0	0	0	0
L232F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	6	2	17	0	0	0	0
L232F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	7	2	21	0	0	0	0
L232F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	8	0	21	0	0	0	0
L232F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	9	0	18	0	0	0	0
L232F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	10	1	11	0	0	0	0
L232F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	11	0	14	0	0	0	0
L232F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	12	0	15	0	0	0	0
L232F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	13	1	18	0	0	0	0
L232F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	14	2	19	0	0	0	0
L232F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	15	0	16	0	0	0	0
L232F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	16	1	23	0	0	0	0
L232F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	17	1	21	0	0	0	0
L232F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	18	0	18	0	0	0	0
L232F	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	19	2	13	0	0	0	0
L232F	p-hidroxibenzoato de geranila	1	0	28	0	0	0	0
L232F	p-hidroxibenzoato de geranila	2	1	18	0	0	0	0

L232F	p-hidroxibenzoato de geranila	3	2	17	0	0	0	0
L232F	p-hidroxibenzoato de geranila	4	1	21	0	0	0	0
L232F	p-hidroxibenzoato de geranila	5	1	20	0	0	0	0
L232F	p-hidroxibenzoato de geranila	6	0	23	0	0	0	0
L232F	p-hidroxibenzoato de geranila	7	2	11	0	0	0	0
L232F	p-hidroxibenzoato de geranila	8	1	15	0	0	0	0
L232F	p-hidroxibenzoato de geranila	9	2	15	1	0	0	0
L232F	p-hidroxibenzoato de geranila	10	2	18	1	0	0	0
L232F	p-hidroxibenzoato de geranila	11	1	14	0	0	0	0
L232F	p-hidroxibenzoato de geranila	12	3	16	1	0	0	0
L232F	p-hidroxibenzoato de geranila	13	0	14	0	0	0	0
L232F	p-hidroxibenzoato de geranila	14	0	12	0	0	1	0
L232F	p-hidroxibenzoato de geranila	15	0	17	0	1	0	0
L232F	p-hidroxibenzoato de geranila	16	0	19	0	0	0	0
L232F	p-hidroxibenzoato de geranila	17	0	20	0	0	0	0
L232F	p-hidroxibenzoato de geranila	18	0	19	0	0	0	0
L232F	p-hidroxibenzoato de geranila	19	1	17	1	0	0	0
L232F	p-hidroxibenzoato de geranila	20	1	12	1	0	0	0
L232F	Boceprevir	1	2	15	0	0	0	0
L232F	Boceprevir	2	0	10	0	0	0	0
L232F	Boceprevir	3	1	27	0	0	0	0
L232F	Boceprevir	4	1	16	0	0	0	0

L232F	Boceprevir	5	1	16	0	0	0	0
L232F	Boceprevir	6	2	22	0	0	0	0
L232F	Boceprevir	7	1	20	0	0	0	0
L232F	Boceprevir	8	0	19	0	0	0	0
L232F	Boceprevir	9	2	28	0	0	0	0
L232F	Boceprevir	10	0	16	0	0	0	0
L232F	Boceprevir	11	1	15	0	0	0	0
L232F	Boceprevir	12	1	32	0	0	0	0
L232F	Boceprevir	13	1	22	0	0	0	0
L232F	Boceprevir	14	2	19	0	0	0	0
L232F	Boceprevir	15	1	11	0	0	0	0
L232F	Boceprevir	16	2	14	0	0	0	0
L232F	Boceprevir	17	2	19	0	0	0	0
L232F	Boceprevir	18	0	18	0	0	0	0
L232F	Boceprevir	19	0	13	0	0	0	0
L232F	Boceprevir	20	1	21	0	0	0	0
A234V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	1	4	15	0	0	0	0
A234V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	2	1	26	0	0	0	0
A234V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	3	2	18	0	0	0	0
A234V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	4	1	22	0	0	0	0
A234V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	5	3	26	0	0	0	0
A234V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	6	2	18	0	0	0	0
A234V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	7	0	18	0	0	0	0

A234V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	8	1	13	0	0	0	0
A234V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	9	2	22	0	0	0	0
A234V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	10	0	18	0	0	0	0
A234V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	11	0	12	0	0	0	0
A234V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	12	1	21	0	0	0	0
A234V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	13	3	31	0	0	0	0
A234V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	14	0	20	0	0	0	0
A234V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	15	1	23	0	0	0	0
A234V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	16	1	25	0	0	0	0
A234V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	17	2	12	0	0	0	0
A234V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	18	0	18	0	0	0	0
A234V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	19	0	15	0	0	0	0
A234V	p-hidroxibenzoato de geranila	1	0	26	0	0	0	0
A234V	p-hidroxibenzoato de geranila	2	1	19	0	0	0	0
A234V	p-hidroxibenzoato de geranila	3	1	18	0	0	0	0
A234V	p-hidroxibenzoato de geranila	4	1	20	0	0	0	0
A234V	p-hidroxibenzoato de geranila	5	2	12	0	0	0	0
A234V	p-hidroxibenzoato de geranila	6	0	20	1	0	0	0
A234V	p-hidroxibenzoato de geranila	7	0	16	0	0	0	0
A234V	p-hidroxibenzoato de geranila	8	0	20	0	0	0	0
A234V	p-hidroxibenzoato de geranila	9	1	14	1	0	0	0

A234V	p-hidroxibenzoato de geranila	10	0	19	0	0	0	0
A234V	p-hidroxibenzoato de geranila	11	3	12	0	0	0	0
A234V	p-hidroxibenzoato de geranila	12	1	17	1	0	0	0
A234V	p-hidroxibenzoato de geranila	13	0	13	0	0	1	0
A234V	p-hidroxibenzoato de geranila	14	0	16	0	0	0	0
A234V	p-hidroxibenzoato de geranila	15	3	12	0	0	0	0
A234V	p-hidroxibenzoato de geranila	16	1	14	0	0	0	0
A234V	p-hidroxibenzoato de geranila	17	3	16	0	0	0	0
A234V	p-hidroxibenzoato de geranila	18	2	11	1	0	0	0
A234V	p-hidroxibenzoato de geranila	19	1	13	0	0	0	0
A234V	p-hidroxibenzoato de geranila	20	2	11	1	0	0	0
A234V	Boceprevir	1	2	18	0	0	0	0
A234V	Boceprevir	2	1	26	0	0	0	0
A234V	Boceprevir	3	1	29	0	0	0	0
A234V	Boceprevir	4	1	16	0	0	0	0
A234V	Boceprevir	5	2	28	0	0	0	0
A234V	Boceprevir	6	2	17	0	0	0	0
A234V	Boceprevir	7	0	18	0	0	0	0
A234V	Boceprevir	8	1	14	0	0	0	0
A234V	Boceprevir	9	1	27	0	0	0	0
A234V	Boceprevir	10	1	21	0	0	0	0
A234V	Boceprevir	11	0	18	0	0	0	0
A234V	Boceprevir	12	2	24	0	0	0	0

A234V	Boceprevir	13	2	28	0	0	0	0
A234V	Boceprevir	14	3	23	0	0	0	0
A234V	Boceprevir	15	1	19	0	0	0	0
A234V	Boceprevir	16	1	18	0	0	0	0
A234V	Boceprevir	17	1	19	0	0	0	0
A234V	Boceprevir	18	3	14	0	0	0	0
A234V	Boceprevir	19	1	11	0	0	0	0
A234V	Boceprevir	20	0	20	0	0	0	0
K236R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	1	4	16	0	0	0	0
K236R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	2	1	10	0	0	0	0
K236R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	3	1	28	0	0	0	0
K236R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	4	0	18	0	0	0	0
K236R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	5	1	15	0	0	0	0
K236R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	6	1	23	0	0	0	0
K236R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	7	1	18	0	0	0	0
K236R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	8	1	27	0	0	0	0
K236R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	9	0	15	0	0	0	0
K236R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	10	1	13	0	0	0	0
K236R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	11	1	15	0	0	0	0
K236R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	12	0	19	0	0	0	0
K236R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	13	2	22	0	0	0	0
K236R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	14	0	20	0	0	0	0

K236R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	15	0	20	0	0	0	0
K236R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	16	0	28	0	0	0	0
K236R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	17	1	25	0	0	0	0
K236R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	18	1	19	0	0	0	0
K236R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	19	2	17	0	0	0	0
K236R	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	20	0	20	0	0	0	0
K236R	p-hidroxibenzoato de geranila	1	1	26	0	0	0	0
K236R	p-hidroxibenzoato de geranila	2	0	17	0	0	0	0
K236R	p-hidroxibenzoato de geranila	3	1	18	0	0	0	0
K236R	p-hidroxibenzoato de geranila	4	0	19	0	0	0	0
K236R	p-hidroxibenzoato de geranila	5	2	21	1	0	0	0
K236R	p-hidroxibenzoato de geranila	6	0	22	0	0	1	0
K236R	p-hidroxibenzoato de geranila	7	0	22	0	0	0	0
K236R	p-hidroxibenzoato de geranila	8	2	10	0	0	0	0
K236R	p-hidroxibenzoato de geranila	9	1	14	1	0	0	0
K236R	p-hidroxibenzoato de geranila	10	0	17	0	0	0	0
K236R	p-hidroxibenzoato de geranila	11	1	22	0	0	0	0
K236R	p-hidroxibenzoato de geranila	12	3	13	0	0	0	0
K236R	p-hidroxibenzoato de geranila	13	1	18	1	0	0	0
K236R	p-hidroxibenzoato de geranila	14	1	24	0	0	0	0
K236R	p-hidroxibenzoato de geranila	15	0	18	1	0	0	0

K236R	p-hidroxibenzoato de geranila	16	0	17	0	0	0	0
K236R	p-hidroxibenzoato de geranila	17	1	20	0	1	0	0
K236R	p-hidroxibenzoato de geranila	18	3	11	0	0	0	0
K236R	p-hidroxibenzoato de geranila	19	1	12	1	0	0	0
K236R	p-hidroxibenzoato de geranila	20	0	14	1	0	0	0
K236R	Boceprevir	1	0	12	0	0	0	0
K236R	Boceprevir	2	0	21	0	0	0	0
K236R	Boceprevir	3	1	27	0	0	0	0
K236R	Boceprevir	4	2	20	0	0	0	0
K236R	Boceprevir	5	2	27	0	0	0	0
K236R	Boceprevir	6	1	15	0	0	0	0
K236R	Boceprevir	7	2	29	0	0	0	0
K236R	Boceprevir	8	0	19	0	0	0	0
K236R	Boceprevir	9	2	19	0	0	0	0
K236R	Boceprevir	10	1	27	0	0	0	0
K236R	Boceprevir	11	1	13	0	0	0	0
K236R	Boceprevir	12	2	23	0	0	0	0
K236R	Boceprevir	13	0	18	0	0	0	0
K236R	Boceprevir	14	1	17	0	0	0	0
K236R	Boceprevir	15	1	23	0	0	0	0
K236R	Boceprevir	16	2	31	0	0	0	0
K236R	Boceprevir	17	1	29	0	0	0	0
K236R	Boceprevir	18	1	19	0	0	0	0
K236R	Boceprevir	19	0	18	0	0	0	0

K236R	Boceprevir	20	0	14	0	0	0	0
A255V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	1	4	15	0	0	0	0
A255V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	2	0	13	0	0	0	0
A255V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	3	0	20	0	0	0	0
A255V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	4	1	27	0	0	0	0
A255V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	5	1	23	0	0	0	0
A255V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	6	1	16	0	0	0	0
A255V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	7	1	15	0	0	0	0
A255V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	8	4	15	0	0	0	0
A255V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	9	0	18	0	0	0	0
A255V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	10	0	16	0	0	0	0
A255V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	11	0	19	0	0	0	0
A255V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	12	0	18	0	0	0	0
A255V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	13	1	20	0	0	0	0
A255V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	14	1	21	0	0	0	0
A255V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	15	1	19	0	0	0	0
A255V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	16	1	18	0	0	0	0
A255V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	17	2	21	0	0	0	0
A255V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	18	1	25	0	0	0	0
A255V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	19	2	18	0	0	0	0
A255V	p-hidroxibenzoato de geranila	1	1	27	0	0	0	0

A255V	p-hidroxibenzoato de geranila	2	1	14	0	0	0	0
A255V	p-hidroxibenzoato de geranila	3	0	20	0	0	0	0
A255V	p-hidroxibenzoato de geranila	4	1	18	0	0	0	0
A255V	p-hidroxibenzoato de geranila	5	3	21	0	0	0	0
A255V	p-hidroxibenzoato de geranila	6	1	13	1	0	0	0
A255V	p-hidroxibenzoato de geranila	7	0	13	0	0	0	0
A255V	p-hidroxibenzoato de geranila	8	1	10	0	0	0	0
A255V	p-hidroxibenzoato de geranila	9	0	19	0	0	0	0
A255V	p-hidroxibenzoato de geranila	10	2	18	1	0	0	0
A255V	p-hidroxibenzoato de geranila	11	1	21	0	0	0	0
A255V	p-hidroxibenzoato de geranila	12	0	16	0	1	0	0
A255V	p-hidroxibenzoato de geranila	13	1	16	0	0	0	0
A255V	p-hidroxibenzoato de geranila	14	0	17	0	0	0	0
A255V	p-hidroxibenzoato de geranila	15	0	22	0	0	0	0
A255V	p-hidroxibenzoato de geranila	16	0	19	0	0	1	0
A255V	p-hidroxibenzoato de geranila	17	2	15	0	0	0	0
A255V	p-hidroxibenzoato de geranila	18	1	10	0	0	0	0
A255V	p-hidroxibenzoato de geranila	19	0	19	0	1	0	0
A255V	p-hidroxibenzoato de geranila	20	2	15	0	0	0	0
A255V	Boceprevir	1	0	10	0	0	0	0
A255V	Boceprevir	2	2	17	0	0	0	0
A255V	Boceprevir	3	1	28	0	0	0	0

A255V	Boceprevir	4	1	28	0	0	0	0
A255V	Boceprevir	5	1	24	0	0	0	0
A255V	Boceprevir	6	0	21	0	0	0	0
A255V	Boceprevir	7	2	27	0	0	0	0
A255V	Boceprevir	8	2	25	0	0	0	0
A255V	Boceprevir	9	0	19	0	0	0	0
A255V	Boceprevir	10	1	17	0	0	0	0
A255V	Boceprevir	11	1	18	0	0	0	0
A255V	Boceprevir	12	2	29	0	0	0	0
A255V	Boceprevir	13	1	19	0	0	0	0
A255V	Boceprevir	14	1	25	0	0	0	0
A255V	Boceprevir	15	0	16	0	0	0	0
A255V	Boceprevir	16	3	14	0	0	0	0
A255V	Boceprevir	17	0	14	0	0	0	0
A255V	Boceprevir	18	0	19	0	0	0	0
A255V	Boceprevir	19	0	15	0	0	0	0
A266V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	1	1	24	0	0	0	0
A266V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	2	0	9	0	0	0	0
A266V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	3	1	27	0	0	0	0
A266V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	4	1	22	0	0	0	0
A266V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	5	0	21	0	0	0	0
A266V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	6	1	18	0	0	0	0
A266V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	7	1	22	0	0	0	0

A266V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	8	1	12	0	0	0	0
A266V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	9	1	15	0	0	0	0
A266V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	10	3	14	0	0	0	0
A266V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	11	4	17	0	0	0	0
A266V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	12	0	22	0	0	0	0
A266V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	13	0	12	0	0	0	0
A266V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	14	1	22	0	0	0	0
A266V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	15	1	24	0	0	0	0
A266V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	16	0	17	0	0	0	0
A266V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	17	1	23	0	0	0	0
A266V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	18	2	12	0	0	0	0
A266V	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	19	0	14	0	0	0	0
A266V	p-hidroxibenzoato de geranila	1	0	27	0	0	0	0
A266V	p-hidroxibenzoato de geranila	2	3	18	0	0	0	0
A266V	p-hidroxibenzoato de geranila	3	1	15	0	0	0	0
A266V	p-hidroxibenzoato de geranila	4	2	18	0	0	0	0
A266V	p-hidroxibenzoato de geranila	5	1	17	0	0	0	0
A266V	p-hidroxibenzoato de geranila	6	0	23	0	0	1	0
A266V	p-hidroxibenzoato de geranila	7	2	13	0	0	0	0
A266V	p-hidroxibenzoato de geranila	8	1	15	0	0	0	0
A266V	p-hidroxibenzoato de geranila	9	0	21	0	0	0	0

A266V	p-hidroxibenzoato de geranila	10	2	14	1	0	0	0
A266V	p-hidroxibenzoato de geranila	11	1	19	0	1	0	0
A266V	p-hidroxibenzoato de geranila	12	0	19	0	0	0	0
A266V	p-hidroxibenzoato de geranila	13	0	20	0	0	0	0
A266V	p-hidroxibenzoato de geranila	14	2	18	0	0	0	0
A266V	p-hidroxibenzoato de geranila	15	1	14	0	0	0	0
A266V	p-hidroxibenzoato de geranila	16	2	15	1	0	0	0
A266V	p-hidroxibenzoato de geranila	17	1	13	1	0	0	0
A266V	p-hidroxibenzoato de geranila	18	1	15	1	0	0	0
A266V	p-hidroxibenzoato de geranila	19	0	23	0	0	0	0
A266V	p-hidroxibenzoato de geranila	20	1	12	0	0	0	0
A266V	Boceprevir	1	2	20	0	0	0	0
A266V	Boceprevir	2	1	9	0	0	0	0
A266V	Boceprevir	3	1	29	0	0	0	0
A266V	Boceprevir	4	1	23	0	0	0	0
A266V	Boceprevir	5	1	15	0	0	0	0
A266V	Boceprevir	6	2	28	0	0	0	0
A266V	Boceprevir	7	0	19	0	0	0	0
A266V	Boceprevir	8	1	25	0	0	0	0
A266V	Boceprevir	9	1	17	0	0	0	0
A266V	Boceprevir	10	0	20	0	0	0	0
A266V	Boceprevir	11	2	30	0	0	0	0
A266V	Boceprevir	12	2	20	0	0	0	0

A266V	Boceprevir	13	1	18	0	0	0	0
A266V	Boceprevir	14	1	28	0	0	0	0
A266V	Boceprevir	15	0	14	0	0	0	0
A266V	Boceprevir	16	4	18	0	0	0	0
A266V	Boceprevir	17	1	24	0	0	0	0
A266V	Boceprevir	18	1	14	0	0	0	0
A266V	Boceprevir	19	2	18	0	0	0	0
A266V	Boceprevir	20	1	16	0	0	0	0
V274D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	1	4	17	0	0	0	0
V274D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	2	1	23	0	0	0	0
V274D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	3	0	11	0	0	0	0
V274D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	4	1	27	0	0	0	0
V274D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	5	0	20	0	0	0	0
V274D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	6	1	16	0	0	0	0
V274D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	7	1	22	0	0	0	0
V274D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	8	1	28	0	0	0	0
V274D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	9	0	15	0	0	0	0
V274D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	10	1	15	0	0	0	0
V274D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	11	1	27	0	0	0	0
V274D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	12	0	14	0	0	0	0
V274D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	13	0	11	0	0	0	0
V274D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	14	1	29	0	0	0	0

V274D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	15	0	26	0	0	0	0
V274D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	16	1	20	0	0	0	0
V274D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	17	0	17	0	0	0	0
V274D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	18	0	13	0	0	0	0
V274D	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	19	2	11	0	0	0	0
V274D	p-hidroxibenzoato de geranila	1	0	26	0	0	0	0
V274D	p-hidroxibenzoato de geranila	2	0	16	0	0	0	0
V274D	p-hidroxibenzoato de geranila	3	2	19	0	0	0	0
V274D	p-hidroxibenzoato de geranila	4	2	18	0	0	0	0
V274D	p-hidroxibenzoato de geranila	5	0	19	0	0	0	0
V274D	p-hidroxibenzoato de geranila	6	0	23	0	0	0	0
V274D	p-hidroxibenzoato de geranila	7	1	16	1	0	0	0
V274D	p-hidroxibenzoato de geranila	8	2	13	0	0	0	0
V274D	p-hidroxibenzoato de geranila	9	0	22	1	0	0	0
V274D	p-hidroxibenzoato de geranila	10	1	21	0	0	0	0
V274D	p-hidroxibenzoato de geranila	11	1	18	1	0	0	0
V274D	p-hidroxibenzoato de geranila	12	2	22	1	0	0	0
V274D	p-hidroxibenzoato de geranila	13	0	19	0	1	0	0
V274D	p-hidroxibenzoato de geranila	14	0	15	0	0	0	0
V274D	p-hidroxibenzoato de geranila	15	0	15	0	0	0	0
V274D	p-hidroxibenzoato de geranila	16	3	15	0	0	0	0

V274D	p-hidroxibenzoato de geranila	17	0	13	1	0	0	0
V274D	p-hidroxibenzoato de geranila	18	2	18	1	0	0	0
V274D	p-hidroxibenzoato de geranila	19	1	20	0	0	0	0
V274D	p-hidroxibenzoato de geranila	20	2	12	0	0	0	0
V274D	Boceprevir	1	4	17	0	0	0	0
V274D	Boceprevir	2	0	19	0	0	0	0
V274D	Boceprevir	3	2	20	0	0	0	0
V274D	Boceprevir	4	1	26	0	0	0	0
V274D	Boceprevir	5	1	23	0	0	0	0
V274D	Boceprevir	6	0	19	0	0	0	0
V274D	Boceprevir	7	2	26	0	0	0	0
V274D	Boceprevir	8	1	20	0	0	0	0
V274D	Boceprevir	9	1	20	0	0	0	0
V274D	Boceprevir	10	3	14	0	0	0	0
V274D	Boceprevir	11	0	15	0	0	0	0
V274D	Boceprevir	12	2	11	0	0	0	0
V274D	Boceprevir	13	1	14	0	0	0	0
V274D	Boceprevir	14	0	17	0	0	0	0
V274D	Boceprevir	15	1	21	0	0	0	0
V274D	Boceprevir	16	1	32	0	0	0	0
V274D	Boceprevir	17	0	19	0	0	0	0
V274D	Boceprevir	18	1	18	0	0	0	0
V274D	Boceprevir	19	1	17	0	0	0	0
V274D	Boceprevir	20	1	22	0	0	0	0

R279C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	1	4	17	0	0	0	0
R279C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	2	1	28	0	0	0	0
R279C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	3	2	18	0	0	0	0
R279C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	4	0	20	0	0	0	0
R279C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	5	2	19	0	0	0	0
R279C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	6	1	17	0	0	0	0
R279C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	7	1	15	0	0	0	0
R279C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	8	0	30	0	0	0	0
R279C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	9	1	22	0	0	0	0
R279C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	10	1	27	0	0	0	0
R279C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	11	2	18	0	0	0	0
R279C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	12	0	14	0	0	0	0
R279C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	13	0	21	0	0	0	0
R279C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	14	1	14	0	0	0	0
R279C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	15	1	20	0	0	0	0
R279C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	16	0	13	0	0	0	0
R279C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	17	0	15	0	0	0	0
R279C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	18	0	14	0	0	0	0
R279C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	19	3	13	0	0	0	0
R279C	3,4-dihidroxibenzoato de geranila	20	0	16	0	0	0	0
R279C	p-hidroxibenzoato de geranila	1	0	27	0	0	0	0

R279C	p-hidroxibenzoato de geranila	2	1	13	0	0	0	0
R279C	p-hidroxibenzoato de geranila	3	2	18	0	0	0	0
R279C	p-hidroxibenzoato de geranila	4	0	22	0	0	1	0
R279C	p-hidroxibenzoato de geranila	5	2	21	0	0	0	0
R279C	p-hidroxibenzoato de geranila	6	0	19	0	0	0	0
R279C	p-hidroxibenzoato de geranila	7	2	20	0	0	0	0
R279C	p-hidroxibenzoato de geranila	8	0	21	0	0	0	0
R279C	p-hidroxibenzoato de geranila	9	1	15	0	0	0	0
R279C	p-hidroxibenzoato de geranila	10	3	11	0	0	0	0
R279C	p-hidroxibenzoato de geranila	11	3	14	1	0	0	0
R279C	p-hidroxibenzoato de geranila	12	2	16	0	0	0	0
R279C	p-hidroxibenzoato de geranila	13	1	16	0	0	0	0
R279C	p-hidroxibenzoato de geranila	14	2	17	1	0	0	0
R279C	p-hidroxibenzoato de geranila	15	0	18	0	1	0	0
R279C	p-hidroxibenzoato de geranila	16	1	21	0	0	0	0
R279C	p-hidroxibenzoato de geranila	17	0	11	0	0	0	0
R279C	p-hidroxibenzoato de geranila	18	2	13	1	0	0	0
R279C	p-hidroxibenzoato de geranila	19	0	22	0	1	0	0
R279C	p-hidroxibenzoato de geranila	20	1	21	0	1	0	0
R279C	Boceprevir	1	2	24	0	0	0	0
R279C	Boceprevir	2	0	10	0	0	0	0
R279C	Boceprevir	3	1	28	0	0	0	0

R279C	Boceprevir	4	2	22	0	0	0	0
R279C	Boceprevir	5	0	20	0	0	0	0
R279C	Boceprevir	6	1	25	0	0	0	0
R279C	Boceprevir	7	4	16	0	0	0	0
R279C	Boceprevir	8	1	28	0	0	0	0
R279C	Boceprevir	9	1	20	0	0	0	0
R279C	Boceprevir	10	0	18	0	0	0	0
R279C	Boceprevir	11	0	20	0	0	0	0
R279C	Boceprevir	12	2	23	0	0	0	0
R279C	Boceprevir	13	2	26	0	0	0	0
R279C	Boceprevir	14	3	25	0	0	0	0
R279C	Boceprevir	15	1	18	0	0	0	0
R279C	Boceprevir	16	1	12	0	0	0	0
R279C	Boceprevir	17	1	23	0	0	0	0
R279C	Boceprevir	18	0	19	0	0	0	0
R279C	Boceprevir	19	0	15	0	0	0	0
R279C	Boceprevir	20	0	13	0	0	0	0

