

Supplementary Materials for A Game with a Purpose: Designing Structural Modifications in Polymyxin B to Face Multi-drug Resistant Bacteria

Inês Machado¹, João Inácio^{2,3}, Paula Jorge^{3,4}, and Filipe Teixeira^{2,*}

1 Institute for Polymers and Composites, University of Minho, 4800-058 Guimarães, Portugal

2 Centre of Chemistry, University of Minho, 4710-057 Braga, Portugal

3 Centre of Biological Engineering, University of Minho, 4710-057 Braga, Portugal

4 LABBELS – Associated Laboratory, Braga/Guimarães, Portugal.

Table S1: Labeling convention used for the sets of molecular descriptors used in this work

Acronym	Description	n_{features}
Gen.	<i>BalabanJ, BertzCT, Ipc, HallKierAlpha, MolLogP, MolWt, HeavyAtomCount, NumHeteroatoms, NumRotatableBonds, NumValenceElectrons, RingCount, FractionCSP3, TPSA, LabuteASA</i>	14
Hb	<i>Descriptors related to H-Bond formation: NHOHCount, NOCount, NumHAcceptors, NumHDonors</i>	4
CKP	<i>κ-form Kier and Hall indices</i>	15
PEOE_VSA	<i>MOE-type descriptors using partial charges and surface area contributions</i>	14
SMR_VSA	<i>MOE-type descriptors using Molar Refractivity and surface area contributions</i>	10
SLogP_VSA	<i>MOE-type descriptors using LogP and surface area contributions</i>	12
Estate_VSA	<i>MOE-type descriptors using Kier and Hall's Estate indices and surface area contributions</i>	11
AC2D	<i>2-dimensional autocorrelation functions</i>	192
BCUT2D	<i>Perlman's BCUT metrics</i>	8
FG	<i>Counting of functional group fragments</i>	85

Table S2: Optimized hyper-parameters of the random forest and AdaBoost models

<i>Descriptor Set</i>	<i>Random Forest</i>			<i>AdaBoost</i>		
	n_{est}	n_f	n_s	n_{est}	d_{est}	r_L
<i>Gen.</i>	25	0.78	0.47	9	10	0.01
<i>Hb</i>	25	0.55	0.58	8	10	0.01
<i>CKP</i>	25	0.78	0.16	10	10	0.01
<i>PEOE_VSA</i>	20	0.78	0.47	10	10	0.01
<i>SMR_VSA</i>	15	1.00	0.89	10	10	0.01
<i>SLogP_VSA</i>	20	0.78	0.89	50	100	0.95
<i>Estate_VSA</i>	25	0.78	0.58	10	10	0.01
<i>AC2D</i>	20	1.00	1.00	10	100	1.00
<i>BCUT2D</i>	20	0.78	0.26	10	10	0.10
<i>FG</i>	10	0.78	0.89	5	2	2.00

Table S3: Curated data used in this work.

isomiles	targetname	TxG	Mtyp	MIC	Q
<chem>C[C@H]([C@H]1C(=O)NCC[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N1)CCN)CCN)CC(C)C)CC2=CC=CC=C2)CCN)NC(=O)[C@H](CCN)NO</chem>	<i>Pseudomonas aeruginosa</i>	<i>Pseudomonas</i>	<i>g_neg</i>	64	4
<chem>C[C@H]([C@H]1C(=O)NCC[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N1)CCN)CCN)CC(C)C)CC2=CC=CC=C2)CCN)NC(=O)[C@H](CCN)NO</chem>	<i>Escherichia coli</i>	<i>Escherichia</i>	<i>g_neg</i>	128	4
<chem>C[C@H]([C@H]1C(=O)NCC[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N1)CCN)CCN)CC(C)C)CC2=CC=CC=C2)CCN)NC(=O)[C@H](CCN)NO</chem>	<i>Salmonella enterica</i>	<i>Salmonella</i>	<i>g_neg</i>	256	4
<chem>C[C@H]([C@H]1C(=O)NCC[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N1)CCN)CCN)CC(C)C)CC2=CC=CC=C2)CCN)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)O</chem>	<i>Pseudomonas aeruginosa</i>	<i>Pseudomonas</i>	<i>g_neg</i>	4	2
<chem>C[C@H]([C@H]1C(=O)NCC[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N1)CCN)CCN)CC(C)C)CC2=CC=CC=C2)CCN)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)O</chem>	<i>Escherichia coli</i>	<i>Escherichia</i>	<i>g_neg</i>	8	3
<chem>C[C@H]([C@H]1C(=O)NCC[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N1)CCN)CCN)CC(C)C)CC2=CC=CC=C2)CCN)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)O</chem>	<i>Salmonella enterica</i>	<i>Salmonella</i>	<i>g_neg</i>	16	3
<chem>CCC(C)CCCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2)CC(C)C)CCN)CCN)[C@@H](C)O</chem>	<i>Pseudomonas aeruginosa</i>	<i>Pseudomonas</i>	<i>g_neg</i>	1	1
<chem>CCC(C)CCCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2)CC(C)C)CCN)CCN)[C@@H](C)O</chem>	<i>Salmonella enterica subsp. enterica serovar Typhimurium</i>	<i>Salmonella</i>	<i>g_neg</i>	1	1
<chem>CCC(C)CCCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2)CC(C)C)CCN)CCN)[C@@H](C)O</chem>	<i>Escherichia coli</i>	<i>Escherichia</i>	<i>g_neg</i>	1	1
<chem>CCC(C)CCCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2)CC(C)C)CCN)CCN)[C@@H](C)O</chem>	<i>Bacillus subtilis</i>	<i>Bacillus</i>	<i>g_pos</i>	6	3
<chem>CCC(C)CCCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2)CC(C)C)CCN)CCN)[C@@H](C)O</chem>	<i>Staphylococcus aureus</i>	<i>Staphylococcus</i>	<i>g_pos</i>	23	3
<chem>C[C@H]([C@H]1C(=O)NCC[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N1)CCN)CCN)CC(C)C)CC2=CC=CC=C2)CCN)NO</chem>	<i>Pseudomonas aeruginosa</i>	<i>Pseudomonas</i>	<i>g_neg</i>	128	4
<chem>C[C@H]([C@H]1C(=O)NCC[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N1)CCN)CCN)CC(C)C)CC2=CC=CC=C2)CCN)NO</chem>	<i>Escherichia coli</i>	<i>Escherichia</i>	<i>g_neg</i>	256	4
<chem>C[C@H]([C@H]1C(=O)NCC[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N1)CCN)CCN)CC(C)C)CC2=CC=CC=C2)CCN)NO</chem>	<i>Salmonella enterica</i>	<i>Salmonella</i>	<i>g_neg</i>	256	4
<chem>CCCCCCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2)CC(C)C)CCN)CCN)[C@@H](C)O</chem>	<i>Pseudomonas aeruginosa</i>	<i>Pseudomonas</i>	<i>g_neg</i>	8	3
<chem>CCCCCCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2)CC(C)C)CCN)CCN)[C@@H](C)O</chem>	<i>Escherichia coli</i>	<i>Escherichia</i>	<i>g_neg</i>	16	3
<chem>CCCCCCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2)CC(C)C)CCN)CCN)[C@@H](C)O</chem>	<i>Salmonella enterica</i>	<i>Salmonella</i>	<i>g_neg</i>	16	3
<chem>CC[C@H](C)CCCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2)CC(C)C)CCN)CCN)[C@@H](C)O</chem>	<i>Acinetobacter baumannii</i>	<i>Acinetobacter</i>	<i>g_neg</i>	0.25	1

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC(=O)CC(C)CCN)CCN)[C@@H](C)O					
CC[C@H](C)CCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC(=O)CC(C)CCN)CCN)[C@@H](C)O	Staphylococcus aureus	Staphylococcus	g_pos	98.34	4
CC[C@H](C)CCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC(=O)CC(C)CCN)CCN)[C@@H](C)O	Candida albicans	Candida	fungus	100	4
CC[C@H](C)CCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC(=O)CC(C)CCN)CCN)[C@@H](C)O	Candida albicans	Candida	fungus	120	4
CC[C@H](C)CCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC(=O)CC(C)CCN)CCN)[C@@H](C)O	Aspergillus flavus	Aspergillus	fungus	120	4
CC[C@H](C)CCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC(=O)CC(C)CCN)CCN)[C@@H](C)O	Aspergillus fumigatus	Aspergillus	fungus	120	4
CCCCCCCC(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC(=O)CC(C)CCN)CCN)[C@@H](C)O	Escherichia coli	Escherichia	g_neg	128	4
CCCCCCCC(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC(=O)CC(C)CCN)CCN)[C@@H](C)O	Salmonella enterica	Salmonella	g_neg	128	4
CCCCCCCC(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC(=O)CC(C)CCN)CCN)[C@@H](C)O	Pseudomonas aeruginosa	Pseudomonas	g_neg	128	4
CCCCCCCC(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC(=O)CC(C)CCN)CCN)[C@@H](C)O	Escherichia coli	Escherichia	g_neg	2	2
CCCCCCCC(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC(=O)CC(C)CCN)CCN)[C@@H](C)O	Salmonella enterica	Salmonella	g_neg	2	2
CCCCCCCC(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC(=O)CC(C)CCN)CCN)[C@@H](C)O	Pseudomonas aeruginosa	Pseudomonas	g_neg	2	2
CCCCCCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC(=O)CC(C)CCN)CCN)[C@@H](C)O	Escherichia coli	Escherichia	g_neg	1	1
CCCCCCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC(=O)CC(C)CCN)CCN)[C@@H](C)O	Salmonella enterica	Salmonella	g_neg	1	1
CCCCCCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC(=O)CC(C)CCN)CCN)[C@@H](C)O	Pseudomonas aeruginosa	Pseudomonas	g_neg	1	1
C[C@H]([C@H]1C(=O)NCC[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N1)CCN)CC(C)CC2=CC=CC(=O)CCN)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)[C@@H]([C@@H](C)O)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)CCCC(C)O	Escherichia coli	Escherichia	g_neg	1	1
C[C@H]([C@H]1C(=O)NCC[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@@H](C(=O)N1)CCN)CC(C)CC2=CC=CC(=O)CCN)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)[C@@H]([C@@H](C)O)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)CCCC(C)O	Salmonella enterica	Salmonella	g_neg	1	1
C[C@H]([C@H]1C(=O)NCC[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@@H](C(=O)N1)CCN)CC(C)CC2=CC=CC(=O)CCN)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)[C@@H]([C@@H](C)O)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)CCCC(C)O	Pseudomonas aeruginosa	Pseudomonas	g_neg	1	1

(CCN)NC(=O)CCCC(C)CO					
C[C@H]([C@@H]1C(=O)NCCC[C@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@@H] C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@H]) (C(=O)N1)CCN)CC(C)C)CC2=CC=CC=C2)CCN)NC(=O)[C@H] (CCN)NC(=O)[C@H]([C@@H](C)O)NC(=O)CO	Pseudomonas <i>aeruginosa</i>	Pseudomonas	g_neg	2	2
C[C@H]([C@@H]1C(=O)NCCC[C@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@@H] C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@H]) (C(=O)N1)CCN)CC(C)C)CC2=CC=CC=C2)CCN)NC(=O)[C@H] (CCN)NC(=O)[C@H]([C@@H](C)O)NC(=O)CO	Escherichia coli	Escherichia	g_neg	32	3
C[C@H]([C@@H]1C(=O)NCCC[C@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@@H] C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@H]) (C(=O)N1)CCN)CC(C)C)CC2=CC=CC=C2)CCN)NC(=O)[C@H] (CCN)NC(=O)[C@H]([C@@H](C)O)NC(=O)CO	Salmonella enterica	Salmonella	g_neg	128	4
CCCCCCCCCCCCC(=O)N[C@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H] (CCN)C(=O)N[C@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O) [C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@H](NC(=O)[C@@H] (NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2))CC(C)C)CCN)CCN][C@@H](C)O	Escherichia coli	Escherichia	g_neg	4	2
CCCCCCCCCCCCC(=O)N[C@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H] (CCN)C(=O)N[C@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O) [C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@H](NC(=O)[C@@H] (NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2))CC(C)C)CCN)CCN][C@@H](C)O	Salmonella enterica	Salmonella	g_neg	4	2
CCCCCCCCCCCCC(=O)N[C@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H] (CCN)C(=O)N[C@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O) [C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@H](NC(=O)[C@@H] (NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2))CC(C)C)CCN)CCN][C@@H](C)O	Pseudomonas <i>aeruginosa</i>	Pseudomonas	g_neg	4	2
CC[C@H](C)[C@H](C(=O)N[C@@H] (CC1=CC=CC=C1)C(=O)N[C@@H](CO)C(=O)N[C@@H] (CCCN)C(=O)N[C@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H] (C)C(=O)NCC(=O)N[C@H](CCCN)C(=O)N[C@@H] (CCCN)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)CC)C(=O)N[C@@H] (CCCN)C(=O)N[C@@H](CC(=O)N)C(=O)N[C@@H] (CC(C)C)C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H]([C@@H] (C)CC)C(=O)N[C@@H](CO)C(=O)NCC(=O)N[C@@H] (CC(C)C)C(=O)N[C@@H](CCCN)C(=O)NCC(=O)N)NC(=O)CN	Pseudomonas <i>aeruginosa</i>	Pseudomonas	g_neg	4	2
CC[C@H](C)[C@H](C(=O)N[C@@H] (CC1=CC=CC=C1)C(=O)N[C@@H](CO)C(=O)N[C@@H] (CCCN)C(=O)N[C@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H] (C)C(=O)NCC(=O)N[C@H](CCCN)C(=O)N[C@@H] (CCCN)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)CC)C(=O)N[C@@H] (CCCN)C(=O)N[C@@H](CC(=O)N)C(=O)N[C@@H] (CC(C)C)C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H]([C@@H] (C)CC)C(=O)N[C@@H](CO)C(=O)NCC(=O)N[C@@H] (CC(C)C)C(=O)N[C@@H](CCCN)C(=O)NCC(=O)N)NC(=O)CN	Pseudomonas <i>aeruginosa</i>	Pseudomonas	g_neg	4	2
CC[C@H](C)[C@H](C(=O)N[C@@H] (CC1=CC=CC=C1)C(=O)N[C@@H](CO)C(=O)N[C@@H] (CCCN)C(=O)N[C@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H] (C)C(=O)NCC(=O)N[C@H](CCCN)C(=O)N[C@@H] (CCCN)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)CC)C(=O)N[C@@H] (CCCN)C(=O)N[C@@H](CC(=O)N)C(=O)N[C@@H] (CC(C)C)C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H]([C@@H] (C)CC)C(=O)N[C@@H](CO)C(=O)NCC(=O)N[C@@H] (CC(C)C)C(=O)N[C@@H](CCCN)C(=O)NCC(=O)N)NC(=O)CN	Pseudomonas <i>aeruginosa</i>	Pseudomonas	g_neg	16	3
CC[C@H](C)[C@H](C(=O)N[C@@H] (CC(C)C)C(=O)N)NC(=O)CNC(=O)[C@H](CO)NC(=O)[C@H] (CC(C)C)NC(=O)[C@H](C(C)C)NC(=O)[C@H] (CCCN=C(N)N)NC(=O)CNC(=O)[C@H]([C@@H](C)CC)NC(=O)[C@H] (CC(C)C)NC(=O)[C@H](CCC(=O)N)NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC(=O) [C@H](CC1=CC=CC=C1)N	Priestia megaterium	Priestia	g_pos	0.75	1
CC[C@H](C)[C@H](C(=O)N[C@@H] (CC(C)C)C(=O)N)NC(=O)CNC(=O)[C@H](CO)NC(=O)[C@H] (CC(C)C)NC(=O)[C@H](C(C)C)NC(=O)[C@H] (CCCN=C(N)N)NC(=O)CNC(=O)[C@H]([C@@H](C)CC)NC(=O)[C@H] (CC(C)C)NC(=O)[C@H](CCC(=O)N)NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC(=O) [C@H](CC1=CC=CC=C1)N	Staphylococcus <i>epidermidis</i>	Staphylococcus	g_pos	1.5	2
CC[C@H](C)[C@H](C(=O)N[C@@H] (CC(C)C)C(=O)N)NC(=O)CNC(=O)[C@H](CO)NC(=O)[C@H] (CC(C)C)NC(=O)[C@H](C(C)C)NC(=O)[C@H] (CCCN=C(N)N)NC(=O)CNC(=O)[C@H]([C@@H](C)CC)NC(=O)[C@H] (CC(C)C)NC(=O)[C@H](CCC(=O)N)NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC(=O) [C@H](CC1=CC=CC=C1)N	Staphylococcus <i>aureus</i>	Staphylococcus	g_pos	1.5	2
CC[C@H](C)[C@H](C(=O)N[C@@H] (CC(C)C)C(=O)N)NC(=O)CNC(=O)[C@H](CO)NC(=O)[C@H] (CC(C)C)NC(=O)[C@H](C(C)C)NC(=O)[C@H] (CCCN=C(N)N)NC(=O)CNC(=O)[C@H]([C@@H](C)CC)NC(=O)[C@H] (CC(C)C)NC(=O)[C@H](CCC(=O)N)NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC(=O) [C@H](CC1=CC=CC=C1)N	Staphylococcus <i>capitis</i>	Staphylococcus	g_pos	1.5	2
CC[C@H](C)[C@H](C(=O)N[C@@H] (CC(C)C)C(=O)N)NC(=O)CNC(=O)[C@H](CO)NC(=O)[C@H] (CC(C)C)NC(=O)[C@H](C(C)C)NC(=O)[C@H] (CCCN=C(N)N)NC(=O)CNC(=O)[C@H]([C@@H](C)CC)NC(=O)[C@H] (CC(C)C)NC(=O)[C@H](CCC(=O)N)NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC(=O) [C@H](CC1=CC=CC=C1)N	Staphylococcus <i>aureus</i>	Staphylococcus	g_pos	1.5	2

CC[C@H](C)[C@@H](C(=O)N[C@@H] (CC(C)C)C(=O)N)NC(=O)CNC(=O)[C@H](CO)NC(=O)[C@H] (CC(C)C)NC(=O)[C@H](C(C)C)NC(=O)[C@H] (CCCN=C(N)N)NC(=O)CNC(=O)[C@H](C)[C@@H](C)CCNC(=O)[C@H] (CC(C)C)NC(=O)[C@H](CCC(=O)N)NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC(=O) [C@H](CC1=CC=CC=C1)N	Saccharomyces	Saccharomyces	fungus	3	2
CC[C@H](C)[C@@H](C(=O)N[C@@H] (CC(C)C)C(=O)N)NC(=O)CNC(=O)[C@H](CO)NC(=O)[C@H] (CC(C)C)NC(=O)[C@H](C(C)C)NC(=O)[C@H] (CCCN=C(N)N)NC(=O)CNC(=O)[C@H](C)[C@@H](C)CCNC(=O)[C@H] (CC(C)C)NC(=O)[C@H](CCC(=O)N)NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC(=O) [C@H](CC1=CC=CC=C1)N	Candida albicans	Candida	fungus	6	3
CC[C@H](C)[C@@H](C(=O)N[C@@H] (CC(C)C)C(=O)N)NC(=O)CNC(=O)[C@H](CO)NC(=O)[C@H] (CC(C)C)NC(=O)[C@H](C(C)C)NC(=O)[C@H] (CCCN=C(N)N)NC(=O)CNC(=O)[C@H](C)[C@@H](C)CCNC(=O)[C@H] (CC(C)C)NC(=O)[C@H](CCC(=O)N)NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC(=O) [C@H](CC1=CC=CC=C1)N	Saccharomyces cerevisiae (baker's yeast)	Saccharomyces	fungus	6	3
CC[C@H](C)[C@@H](C(=O)N[C@@H] (CC(C)C)C(=O)N)NC(=O)CNC(=O)[C@H](CO)NC(=O)[C@H] (CC(C)C)NC(=O)[C@H](C(C)C)NC(=O)[C@H] (CCCN=C(N)N)NC(=O)CNC(=O)[C@H](C)[C@@H](C)CCNC(=O)[C@H] (CC(C)C)NC(=O)[C@H](CCC(=O)N)NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC(=O) [C@H](CC1=CC=CC=C1)N	Streptococcus pyogenes	Streptococcus	g_pos	6	3
CC[C@H](C)[C@@H](C(=O)N[C@@H] (CC(C)C)C(=O)N)NC(=O)CNC(=O)[C@H](CO)NC(=O)[C@H] (CC(C)C)NC(=O)[C@H](C(C)C)NC(=O)[C@H] (CCCN=C(N)N)NC(=O)CNC(=O)[C@H](C)[C@@H](C)CCNC(=O)[C@H] (CC(C)C)NC(=O)[C@H](CCC(=O)N)NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC(=O) [C@H](CC1=CC=CC=C1)N	Yersinia pseudotuberculosis	Yersinia	g_neg	6	3
CC[C@H](C)[C@@H](C(=O)N[C@@H] (CC(C)C)C(=O)N)NC(=O)CNC(=O)[C@H](CO)NC(=O)[C@H] (CC(C)C)NC(=O)[C@H](C(C)C)NC(=O)[C@H] (CCCN=C(N)N)NC(=O)CNC(=O)[C@H](C)[C@@H](C)CCNC(=O)[C@H] (CC(C)C)NC(=O)[C@H](CCC(=O)N)NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC(=O) [C@H](CC1=CC=CC=C1)N	Enterobacter	Enterobacter	g_neg	6	3
CC[C@H](C)[C@@H](C(=O)N[C@@H] (CC(C)C)C(=O)N)NC(=O)CNC(=O)[C@H](CO)NC(=O)[C@H] (CC(C)C)NC(=O)[C@H](C(C)C)NC(=O)[C@H] (CCCN=C(N)N)NC(=O)CNC(=O)[C@H](C)[C@@H](C)CCNC(=O)[C@H] (CC(C)C)NC(=O)[C@H](CCC(=O)N)NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC(=O) [C@H](CC1=CC=CC=C1)N	Pseudomonas syringae	Pseudomonas	g_neg	24	3
CC[C@H](C)[C@@H](C(=O)N[C@@H] (CC(C)C)C(=O)N)NC(=O)CNC(=O)[C@H](CO)NC(=O)[C@H] (CC(C)C)NC(=O)[C@H](C(C)C)NC(=O)[C@H] (CCCN=C(N)N)NC(=O)CNC(=O)[C@H](C)[C@@H](C)CCNC(=O)[C@H] (CC(C)C)NC(=O)[C@H](CCC(=O)N)NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC(=O) [C@H](CC1=CC=CC=C1)N	Pseudomonas aeruginosa	Pseudomonas	g_neg	24	3
CC[C@H](C)[C@@H](C(=O)N[C@@H] (CC(C)C)C(=O)N)NC(=O)CNC(=O)[C@H](CO)NC(=O)[C@H] (CC(C)C)NC(=O)[C@H](C(C)C)NC(=O)[C@H] (CCCN=C(N)N)NC(=O)CNC(=O)[C@H](C)[C@@H](C)CCNC(=O)[C@H] (CC(C)C)NC(=O)[C@H](CCC(=O)N)NC(=O)[C@H](CC(C)C)NC(=O) [C@H](CC1=CC=CC=C1)N	Escherichia coli	Escherichia	g_neg	24	3
CCCCCCCC(=O)N[C@@H](C)C(=O)N[C@@H]([C@@H] (C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O) [C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O) [C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2)CC(C)C)CCN)CCN)[C@@H] (C)O	Escherichia coli	Escherichia	g_neg	2	2
CCCCCCCC(=O)N[C@@H](C)C(=O)N[C@@H]([C@@H] (C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O) [C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O) [C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2)CC(C)C)CCN)CCN)[C@@H] (C)O	Salmonella enterica	Salmonella	g_neg	2	2
CCCCCCCC(=O)N[C@@H](C)C(=O)N[C@@H]([C@@H] (C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O) [C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O) [C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2)CC(C)C)CCN)CCN)[C@@H] (C)O	Pseudomonas aeruginosa	Pseudomonas	g_neg	2	2
CCCCCCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H](C)C(=O)N[C@@H] (CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O) [C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H] (NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2)CC(C)C)CCN)CCN)[C@@H](C)O	Pseudomonas aeruginosa	Pseudomonas	g_neg	2	2
CCCCCCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H](C)C(=O)N[C@@H] (CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O) [C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H] (NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2)CC(C)C)CCN)CCN)[C@@H](C)O	Salmonella enterica	Salmonella	g_neg	4	2
CCCCCCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H](C)C(=O)N[C@@H] (CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O) [C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H] (NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2)CC(C)C)CCN)CCN)[C@@H](C)O	Escherichia coli	Escherichia	g_neg	8	3

[illegible]

[illegible]

[illegible]

C[C@H]([C@H]1C(=O)NCC[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@H](CC(C)C)CC2=CC=CC=C2)CCN)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)[C@H]([C@@H](C)O)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)C3CCCCCCCCC3)O	Pseudomonas aeruginosa	Pseudomonas	g_neg	2	2
CCCC1CCC(CC1)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@H]2CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC2=O)CCN)CC3=CC=CC=C3)CC(C)C)CCN)CCN][C@@H](C)O	Pseudomonas aeruginosa	Pseudomonas	g_neg	2	2
CCCC1CCC(CC1)C(=O)N[C@H](CCN)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@H](CCN)C(=O)N[C@H]2CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC2=O)CCN)CC3=CC=CC=C3)CC(C)C)CCN)CCN][C@@H](C)O	Escherichia coli	Escherichia	g_neg	4	2
CCCC1CCC(CC1)C(=O)N[C@H](CCN)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@H]2CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC2=O)CCN)CC3=CC=CC=C3)CC(C)C)CCN)CCN][C@@H](C)O	Salmonella enterica	Salmonella	g_neg	4	2
C[C@H]([C@H]1C(=O)NCC[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@@H](C(=O)N1)CCN)CC(C)C)CC2=CC=CC=C2)CCN)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)[C@H]([C@@H](C)O)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)C3CCCC3)C4=CC=CC=C4)O	Pseudomonas aeruginosa	Pseudomonas	g_neg	2	2
C[C@H]([C@H]1C(=O)NCC[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@@H](C(=O)N1)CCN)CC(C)C)CC2=CC=CC=C2)CCN)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)C3CCCC3)C4=CC=CC=C4)O	Escherichia coli	Escherichia	g_neg	8	3
C[C@H]([C@H]1C(=O)NCC[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@@H](C(=O)N1)CCN)CC(C)C)CC2=CC=CC=C2)CCN)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)[C@H]([C@@H](C)O)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)C3CCCC3)C4=CC=CC=C4)O	Salmonella enterica	Salmonella	g_neg	8	3
C[C@H]([C@H]1C(=O)NCC[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@@H](C(=O)N1)CCN)CC(C)C)CC(C)C)CCN)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)[C@H]([C@@H](C)O)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)C2CCCC2)C3=CC=CC=C3)O	Pseudomonas aeruginosa	Pseudomonas	g_neg	2	2
C[C@H]([C@H]1C(=O)NCC[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@@H](C(=O)N1)CCN)CC(C)C)CC(C)C)CCN)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)[C@H]([C@@H](C)O)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)C2CCCC2)C3=CC=CC=C3)O	Escherichia coli	Escherichia	g_neg	16	3
C[C@H]([C@H]1C(=O)NCC[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@@H](C(=O)N1)CCN)CC(C)C)CC(C)C)CCN)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)[C@H]([C@@H](C)O)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)C2CCCC2)C3=CC=CC=C3)O	Salmonella enterica	Salmonella	g_neg	16	3
C[C@H]([C@H]1C(=O)NCC[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@@H](C(=O)N1)CCN)CC(C)C)CC2=CC=CC=C2)CCN)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)[C@H]([C@@H](C)O)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)O)O	Escherichia coli	Escherichia	g_neg	32	3
C[C@H]([C@H]1C(=O)NCC[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@@H](C(=O)N1)CCN)CC(C)C)CC2=CC=CC=C2)CCN)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)[C@H]([C@@H](C)O)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)O)O	Pseudomonas aeruginosa	Pseudomonas	g_neg	32	3
C[C@H]([C@H]1C(=O)NCC[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@@H](C(=O)N1)CCN)CC(C)C)CC2=CC=CC=C2)CCN)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)[C@H]([C@@H](C)O)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)O)O	Salmonella enterica	Salmonella	g_neg	64	4
CCCCCCCC(=O)N[C@H](CCN)C(=O)N[C@@H](C)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)C)CC2=CC=CC=C2)CC(C)C)CCN)CCN][C@@H](C)O	Pseudomonas aeruginosa	Pseudomonas	g_neg	4	2
CCCCCCCC(=O)N[C@H](CCN)C(=O)N[C@@H](C)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)C)CC2=CC=CC=C2)CC(C)C)CCN)CCN][C@@H](C)O	Escherichia coli	Escherichia	g_neg	16	3
CCCCCCCC(=O)N[C@H](CCN)C(=O)N[C@@H](C)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)C)CC2=CC=CC=C2)CC(C)C)CCN)CCN][C@@H](C)O	Salmonella enterica	Salmonella	g_neg	16	3
C[C@H]([C@H]1C(=O)NCC[C@@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@@H](C(=O)N1)CCN)CC(C)C)CC2=CC=CC=C2)CCN)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)[C@H]([C@@H](C)O)NC(=O)[C@H](CCN)NC(=O)O	Escherichia coli	Escherichia	g_neg	64	4

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

CC[C@H](C)CCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2)CC(C)C)CCN)CCN)[C@@H](C)O.O5(=O)(=O)O	Streptococcus pyogenes	Streptococcus	g_pos	6.1	3
CC[C@H](C)CCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2)CC(C)C)CCN)CCN)[C@@H](C)O.O5(=O)(=O)O	Streptococcus pyogenes	Streptococcus	g_pos	12.3	3
CC[C@H](C)CCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2)CC(C)C)CCN)CCN)[C@@H](C)O.O5(=O)(=O)O	Enterococcus faecium	Enterococcus	g_pos	49	4
CC[C@H](C)CCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2)CC(C)C)CCN)CCN)[C@@H](C)O.O5(=O)(=O)O	Enterococcus faecium	Enterococcus	g_pos	98	4
CC[C@H](C)CCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2)CC(C)C)CCN)CCN)[C@@H](C)O.O5(=O)(=O)O	Staphylococcus aureus	Staphylococcus	g_pos	98	4
CC[C@H](C)CCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2)CC(C)C)CCN)CCN)[C@@H](C)O.O5(=O)(=O)O	Staphylococcus aureus	Staphylococcus	g_pos	98	4
CC[C@H](C)CCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2)CC(C)C)CCN)CCN)[C@@H](C)O.O5(=O)(=O)O	Staphylococcus aureus	Staphylococcus	g_pos	98	4
CC[C@H](C)CCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2)CC(C)C)CCN)CCN)[C@@H](C)O.O5(=O)(=O)O	Enterococcus faecalis	Enterococcus	g_pos	98	4
CCC(C)CCC(CC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2)CCN)CCN)CC(C)C)O	Pseudomonas aeruginosa	Pseudomonas	g_neg	5	3
CCC(C)CCC(CC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2)CCN)CCN)CC(C)C)O	Escherichia coli	Escherichia	g_neg	10	3
CCC(C)CCC(CC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2)CCN)CCN)CC(C)C)O	Erwinia amylovora	Erwinia	g_neg	24	3
CCC(C)CCC(CC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2)CCN)CCN)CC(C)C)O	Erwinia amylovora	Erwinia	g_neg	24	3
CCC(C)CCC(CC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2)CCN)CCN)CC(C)C)O	Staphylococcus aureus	Staphylococcus	g_pos	50	4
CCC(C)CCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)O	Staphylococcus aureus	Staphylococcus	g_pos	5	3
CCC(C)CCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)O	Pseudomonas aeruginosa	Pseudomonas	g_neg	5	3
CCC(C)CCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)O	Escherichia coli	Escherichia	g_neg	15	3
CC[C@H](C)CCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@H]1CCNC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC1=O)CCN)CC2=CC=CC=C2)CC(C)C)CCN)CCN)[C@@H](C)O.C[C@@H]([C@@H]1C(=O)NCC[C@@H](C(=O)N[C@@H](C(=O)N[C@@H](C(=O)N[C@@H](C(=O)N[C@@H](C(=O)N1)CCN)CCN)CC(C)C)CC2=CC=CC=C2)CCN)NC(=O)[C@@H](CCN)NC(=O)[C@@H]([C@@H](C)O)NC(=O)[C@@H]					

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

(C)O)CO)C					
CC[C@H](C)[C@H]1C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N2CCC[C@H]2C(=O)N[C@@H](C(=O)N3CCC[C@H]3C(=O)N[C@H](C(=O)N1)CC4=CC=CC=C4)[C@H](C)O)CO)C	<i>Candida albicans</i>	<i>Candida</i>	<i>fungus</i>	128	4
CC[C@H](C)[C@H]1C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N2CCC[C@H]2C(=O)N[C@@H](C(=O)N3CCC[C@H]3C(=O)N[C@H](C(=O)N1)CC4=CC=CC=C4)[C@H](C)O)CO)C	<i>Bacillus subtilis</i>	<i>Bacillus</i>	<i>g_pos</i>	128	4
CC[C@H](C)[C@H]1C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N2CCC[C@H]2C(=O)N[C@@H](C(=O)N3CCC[C@H]3C(=O)N[C@H](C(=O)N1)CC4=CC=CC=C4)[C@H](C)O)CO)C	<i>Micrococcus luteus</i>	<i>Micrococcus</i>	<i>g_pos</i>	128	4
CC[C@H](C)[C@H]1C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N2CCC[C@H]2C(=O)N[C@@H](C(=O)N3CCC[C@H]3C(=O)N[C@H](C(=O)N1)CC4=CC=CC=C4)[C@H](C)O)CO)C	<i>Proteus vulgaris</i>	<i>Proteus</i>	<i>g_neg</i>	128	4
CC[C@H](C)[C@H]1C(=O)N[C@H](C(=O)N[C@H](C(=O)N2CCC[C@H]2C(=O)N[C@@H](C(=O)N3CCC[C@H]3C(=O)N[C@H](C(=O)N1)CC4=CC=CC=C4)[C@H](C)O)CO)C	<i>Staphylococcus aureus</i>	<i>Staphylococcus</i>	<i>g_pos</i>	128	4
CC[C@H](C)[C@@H](C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)CC)C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H](CC1=CC=CC=C1)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H](C)N	<i>Escherichia coli</i>	<i>Escherichia</i>	<i>g_neg</i>	4	2
CC[C@H](C)[C@@H](C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)CC)C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H](CC1=CC=CC=C1)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H](C)N	<i>Escherichia coli</i>	<i>Escherichia</i>	<i>g_neg</i>	4	2
CC[C@H](C)[C@@H](C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)CC)C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H](CC1=CC=CC=C1)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H](C)N	<i>Escherichia coli</i>	<i>Escherichia</i>	<i>g_neg</i>	4	2
CC[C@H](C)[C@@H](C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)CC)C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H](CC1=CC=CC=C1)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H](C)N	<i>Escherichia coli</i>	<i>Escherichia</i>	<i>g_neg</i>	4	2
CC[C@H](C)[C@@H](C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)CC)C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H](CC1=CC=CC=C1)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H](C)N	<i>Escherichia coli</i>	<i>Escherichia</i>	<i>g_neg</i>	8	3
CC[C@H](C)[C@@H](C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)CC)C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H](CC1=CC=CC=C1)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H](C)N	<i>Escherichia coli</i>	<i>Escherichia</i>	<i>g_neg</i>	8	3
CC[C@H](C)[C@@H](C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)CC)C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H](CC1=CC=CC=C1)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H](C)N	<i>Escherichia coli</i>	<i>Escherichia</i>	<i>g_neg</i>	8	3
CC[C@H](C)[C@@H](C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)CC)C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H](CC1=CC=CC=C1)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H](C)N	<i>Salmonella enterica subsp. enterica serovar Typhimurium</i>	<i>Salmonella</i>	<i>g_neg</i>	16	3
CC[C@H](C)[C@@H](C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)CC)C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H](CC1=CC=CC=C1)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H](C)N	<i>Staphylococcus aureus</i>	<i>Staphylococcus</i>	<i>g_pos</i>	16	3
CC[C@H](C)[C@@H](C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)CC)C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H](CC1=CC=CC=C1)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H](C)N	<i>Salmonella enterica subsp. enterica serovar Typhimurium</i>	<i>Salmonella</i>	<i>g_neg</i>	16	3
CC[C@H](C)[C@@H](C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)CC)C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H]([C@@H](C)O)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H](CC1=CC=CC=C1)C(=O)N[C@@H](CCCN=C(N)N)C(=O)N[C@@H](C)N	<i>Staphylococcus epidermidis</i>	<i>Staphylococcus</i>	<i>g_pos</i>	16	3

[illegible]

[illegible]