



UNIVERSIDAD
CATÓLICA
DE CUENCA

UNIVERSIDAD CATÓLICA DE CUENCA

Comunidad Educativa al Servicio del Pueblo

UNIDAD ACADÉMICA DE SALUD Y BIENESTAR

CARRERA DE BIOQUIMICA Y FARMACIA

**EVALUACION DEL POTENCIAL CARDIOTOXICO DE
LOS FITOQUIMICOS DE LA PLANTA *Urginea maritima*
MEDIANTE LOS METODOS COMPUTACIONALES**

**PROYECTO DE TITULACIÓN PREVIO A LA OBTENCIÓN DEL
TÍTULO DE BIOQUIMICO FARMACEUTICO**

AUTORES: FAUSTO DANIEL IDROVO HIDALGO

PAMELA KATHERINE LUCERO ARIAS

DIRECTOR: DR. JUAN MARCELO CARPIO AREVALO, PHD

CUENCA- ECUADOR

2024

DIOS, PATRIA, CULTURA Y DESARROLLO



UNIVERSIDAD CATÓLICA DE CUENCA

Comunidad Educativa al Servicio del Pueblo

UNIDAD ACADÉMICA DE SALUD Y BIENESTAR

CARRERA DE BIOQUIMICA Y FARMACIA

EVALUACION DEL POTENCIAL CARDIOTOXICO DE LOS
FITOQUIMICOS DE LA PLANTA *Urginea maritima* MEDIANTE LOS
METODOS COMPUTACIONALES

**PROYECTO DE TITULACIÓN PREVIO A LA OBTENCIÓN DEL
TÍTULO DE BIOQUIMICO FARMACEUTICO**

AUTORES: FAUSTO DANIEL IDROVO HIDALGO

PAMELA KATHERINE LUCERO ARIAS

DIRECTOR: DR. JUAN MARCELO CARPIO AREVALO, PHD

CUENCA - ECUADOR

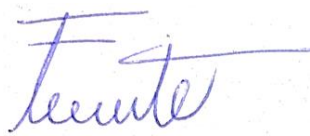
2024

DIOS, PATRIA, CULTURA Y DESARROLLO

Declaratoria de Autoría y Responsabilidad

Fausto Daniel Idrovo Hidalgo y Pamela Katherine Lucero Arias portadores de las cédulas de ciudadanía N° **0107455321** y N° **0106983257**. Declaramos ser los autores de la obra: “**EVALUACION DEL POTENCIAL CARDIOTOXICO DE LOS FITOQUIMICOS DE LA PLANTA *Urginea maritima* MEDIANTE LOS METODOS COMPUTACIONALES**”, sobre la cual nos hacemos responsables sobre las opiniones, versiones e ideas expresadas. Declaramos que la misma ha sido elaborada respetando los derechos de propiedad intelectual de terceros y eximimos a la Universidad Católica de Cuenca sobre cualquier reclamación que pudiera existir al respecto. Declaramos finalmente que nuestra obra ha sido realizada cumpliendo con todos los requisitos legales, éticos y bioéticos de investigación, que la misma no incumple con la normativa nacional e internacional en el área específica de investigación, sobre la que también nos responsabilizamos y eximimos a la Universidad Católica de Cuenca de toda reclamación al respecto.

Cuenca, **2 de mayo de 2024**



Fausto Daniel Idrovo Hidalgo

C.I. 0107455321



Pamela Katherine Lucero Arias

C.I. 0106983257

Cuenca, 29 de febrero de 2024

Q.F. Jonnathan Gerardo Ortiz, MSc.

**RESPONSABLE DE LA UNIDAD DE TITULACIÓN
CARRERA DE BIOQUÍMICA Y FARMACIA**

La presente certifica que el trabajo Teórico - Práctico denominado **EVALUACION DEL POTENCIAL CARDIOTOXICO DE LOS FITOQUIMICOS DE LA PLANTA *Urginea maritima* MEDIANTE LOS METODOS COMPUTACIONALES**, de la autoría de **IDROVO HIDALGO FAUSTO DANIEL y LUCERO ARIAS PAMELA KATHERINE**, ha sido revisado y aprobado, cumpliendo con los requisitos necesarios y suficientes para ser presentado como Trabajo de Titulación correspondiente a la carrera de Bioquímica y Farmacia de la Universidad Católica de Cuenca.

Atentamente,



Firmado electrónicamente por:
**JUAN MARCELO CARPIO
AREVALO**

Dr. Juan Marcelo Carpio Arévalo, PhD..

CI: 0103130522

Director de Trabajo de Titulación

DEDICATORIA.

A mis amados padres, cuyo amor incondicional y apoyo constante han sido mi faro en este viaje académico. A mis queridos hermanos, por ser mi inspiración y compañeros de aventuras desde el principio. A mis amigos, quienes han llenado cada día de estudio con risas y complicidad, recordándome que el equilibrio entre el trabajo y la diversión es fundamental. Y a mí mismo, por la perseverancia, el esfuerzo y la determinación que he dedicado a este logro. Esta tesis es el resultado de nuestro compromiso compartido y del amor que nos une. ¡Gracias por ser parte de este importante capítulo de mi vida!

Fausto Daniel Idrovo Hidalgo

Dedico este trabajo a Dios, fuente de toda fortaleza y amor, por haberme brindado una familia excepcional que ha sido mi soporte incondicional desde el principio.

A mi mami, quien con visión y determinación me encaminó hacia esta carrera, infundiendo en mí desde el inicio valentía y fuerza. A mi papi, por su constante apoyo, amor y por inculcarme la importancia de ser un profesional con integridad, valentía y un compromiso inquebrantable de ayudar a los demás, sin importar sus circunstancias.

A mi querido hermano Jesús, mi más preciado tesoro, le agradezco por llenar mis días de alegría y por los abrazos cargados de amor que siempre me ha brindado.

También dedico este logro a mis tres hermanos que ahora habitan en el cielo, su recuerdo es un vínculo eterno de amor. No puedo dejar de mencionar a mi madrina, Elizabeth Arias, quien ha sido un faro constante en mi vida, guiándome y apoyándome junto a mi familia en cada paso del camino.

A mi querida Hally que siempre le llevare en mi corazón por ser un apoyo fundamental en mi vida.

Este trabajo es el resultado de su amor, apoyo y enseñanzas que siempre llevaré conmigo.

Pamela

AGRADECIMIENTOS:

Agradecemos en primer lugar a Dios por permitirnos cumplir con nuestras metas trazadas y habernos dado la sabiduría, el entendimiento y la fortaleza para culminar con la presente tesis y con nuestra formación académica.

A todo el personal docente que fue parte de nuestra formación académica, con especial gratitud al Dr. Juan Carpio por todo el apoyo intelectual y moral en el desarrollo de la tesis, al Dr. Diego Andrade y Dr. Jonnathan Ortiz por habernos guiado en la ejecución de todos los procesos académicos.

Finalmente, a todas las personas que de una u otra manera nos apoyaron y contribuyeron con la culminación de esta tesis.

RESUMEN

Palabras clave: *Urginea maritima*, modelos QSAR, hERG, Pred-hERG, Admetlab 2.0.

Introducción: Esta investigación se enfocó en evaluar la actividad cardiotoxica de los fitoquímicos de *Urginea maritima*, que ha sido tradicionalmente utilizada en la medicina herbaria. Sin embargo, la aplicación terapéutica de estos compuestos exige una evaluación rigurosa de sus posibles efectos secundarios, en el sistema cardiovascular, los aspectos cruciales a considerar se encuentra la interacción de estos fitoquímicos con el canal HERG del corazón.

Objetivo: Evaluar la cardiotoxicidad de los fitoquímicos de la *U. maritima* en seres humanos, mediante herramientas QSAR.

Metodología: Para el desarrollo de esta tesis se empleó un diseño de investigación experimental de tipo cuantitativa y descriptiva. Se utilizó un enfoque metodológico que incluyó herramientas virtuales como QSAR, Pred-hERG y ADMETlab 2.0 para predecir la cardiotoxicidad de los compuestos identificados.

Resultados: Se sugiere que ciertos fitoquímicos de *Urginea maritima*, además de los ya conocidos, pueden tener cardiotoxicidad en seres humanos, resultado que 23 fitoquímicos son bloqueadores del canal hERG en el miocardio. De estos, se seleccionaron los 10 con mejor índice de confiabilidad, 5 moléculas se agruparon en el grupo de los bufadienólidos, una perteneció a los glucósidos y otra a los diterpenoides; las otras tres, no se encontró literatura que las clasificara.

Conclusión: Se corroboró la necesidad de seguir aportando a la literatura científica publicada sobre estos nuevos avances y enfoques de consolidación, por la escasa información sobre varios de los compuestos que están presentes en estas plantas medicinales y de los que aún no existen evidencias sobre su cardiotoxicidad.

ABSTRACT

Keywords: *Urginea maritima*, QSAR models, hERG, Pred-hERG, Admetlab 2.0.

Introduction: This research evaluated the cardiotoxic activity of phytochemicals from *Urginea maritima*, which is traditionally used in herbal medicine. However, the therapeutic application of these compounds requires a rigorous evaluation of their potential side effects. In the cardiovascular system, the crucial aspect to consider is the interaction of these phytochemicals with the hERG channel of the heart.

Objective: To evaluate the cardiotoxicity of phytochemicals from *U. maritima* in humans, using Quantitative Structure Activity Relationship (QSAR) tools.

Methodology: A quantitative and descriptive experimental research design was used to develop this research. A methodological approach including virtual tools such as QSAR, Pred-hERG, and ADMETlab 2.0, was used to predict the cardiotoxicity of the identified compounds.

Results: It is suggested that certain phytochemicals from *U. maritima*, in addition to those already known, may have cardiotoxicity in humans. It was found that 23 phytochemicals act as blockers of the hERG channel in the myocardium. Among these, the top 10 with the highest reliability index were selected, with five molecules grouped in the bufadienolides group, one belonging to the glycosides, and another to the diterpenoids; for the remaining three, no literature was found that classified them.

Conclusion: The need to continue contributing to the published scientific literature on these new advancements and consolidation approaches was corroborated, due to the limited information available on several of the compounds present in these medicinal plants, for which there is still no evidence on their cardiotoxicity.

ÍNDICE

Contenido

DEDICATORIA.....	1
AGRADECIMIENTOS:	3
RESUMEN	4
ABSTRACT	5
ÍNDICE	6
I. INTRODUCCIÓN	7
I.1.- PLANTEAMIENTO DE LA INVESTIGACIÓN.....	8
I.3.- OBJETIVOS	9
I.3.1.-Objetivo General:	9
I.3.2.-Objetivos Específicos:	9
I.4.2.- Marco referencial:	11
II.2- Población y muestra.....	11
II.3.- Definición y clasificación de las variables	11
II.1.1.- Procedimientos estadísticos y análisis de datos.....	13
II.1.2.- Aspectos éticos	13
III. RESULTADOS	14
IV. DISCUSIÓN.....	19
IV.1.- CONCLUSIONES	25
IV.2.- RECOMENDACIONES.....	26
BIBLIOGRAFÍA	27
ABREVIATURAS.....	37

I. INTRODUCCIÓN

En las últimas décadas, la investigación en el ámbito de la farmacología y la toxicología se ha beneficiado significativamente del uso de enfoques computacionales avanzados. Uno de los desafíos críticos en esta área es la evaluación temprana y precisa de los posibles efectos adversos de compuestos químicos, especialmente aquellos destinados a ser utilizados con fines terapéuticos. Entre las diversas clases de sustancias bioactivas, los fitoquímicos extraídos de plantas medicinales han ganado considerable interés debido a su diversidad estructural y sus potenciales propiedades terapéuticas.

La planta *U. maritima*, conocida por su riqueza en fitoquímicos, ha sido tradicionalmente utilizada en la medicina herbaria para tratar diversas afecciones. Sin embargo, la aplicación terapéutica de estos compuestos exige una evaluación rigurosa de sus posibles efectos secundarios, en particular en el sistema cardiovascular. Entre los aspectos cruciales a considerar se encuentra la interacción de estos fitoquímicos con el canal hERG (Human Ether-à-go-go-Related Gene), un componente esencial en la regulación de la actividad eléctrica del corazón.

El canal HERG, responsable de la corriente de potasio rectificadora tardía (IKr) en las células cardíacas, desempeña un papel crucial en la repolarización del corazón. La inhibición no deseada de este canal puede resultar en el prolongamiento del intervalo QT en el electrocardiograma, predisponiendo al individuo a arritmias ventriculares graves, incluida la torsade de pointes. Por lo tanto, la evaluación del potencial cardiotoxico de los fitoquímicos de *U. maritima*, especialmente a través de métodos computacionales como el Análisis de Relación Cuantitativa Estructura-Actividad (QSAR), se presenta como una estrategia clave para prevenir eventos adversos en la fase de desarrollo de nuevos agentes farmacológicos.

Esta tesis se evaluó la probabilidad de bloquer Herg que poseen los fitoquímicos de *U. maritima* utilizando modelos QSAR. Al comprender mejor los posibles riesgos cardiovasculares asociados con estos compuestos, se espera contribuir al diseño

más seguro y eficiente de futuros agentes farmacológicos basados en productos naturales

CAPÍTULO I
PLANTEAMIENTO TEÓRICO.

I.1.- PLANTEAMIENTO DE LA INVESTIGACIÓN.

- **Situación problemática:** La planta *U. maritima*, conocida por su riqueza en fitoquímicos, ha captado la atención debido a sus propiedades medicinales potenciales. Sin embargo, la aplicación terapéutica de los fitoquímicos de esta planta plantea desafíos cruciales por la ausencia de evaluación de posibles efectos secundarios, especialmente en el sistema cardiovascular. Esta carencia de información limita por lo tanto otras áreas relevantes como la investigación en la aplicación segura de preparaciones formuladas con *Urginea maritima*.

I.2.- JUSTIFICACIÓN

La *U. maritima* es una planta conocida por contener esteroides cardíacos, compuestos que pueden afectar el sistema cardiovascular humano. A pesar de esta información, la investigación específica sobre su cardiotoxicidad de otros de sus metabolitos en seres humanos es limitada. Este estudio se justifica por la necesidad de proporcionar una evaluación científica de los posibles efectos cardiotóxicos de esos otros metabolitos de *U. maritima* en seres humanos. Al obtener información sobre su toxicidad cardíaca, se podrá aumentar el conocimiento sobre los riesgos potenciales asociados con el consumo de esta planta y de esos metabolitos que puede estar presentes en otras plantas adicionalmente. Además, la investigación permitirá identificar posibles brechas de conocimiento que podrían impulsar futuras investigaciones y contribuir a la protección de la salud de la población.

I.2.1.- PREGUNTA CIENTÍFICA:

U. maritima posee metabolitos con potencial cardiotóxico además de los que han sido reportados en la literatura?

I.2.2.- Variables

Variables de investigación

Variables	
Independiente	<ul style="list-style-type: none">• Estructuras químicas de los metabolitos secundarios de la <i>U. maritima</i>
Dependiente	<ul style="list-style-type: none">• Probabilidad de bloqueo de Herg de los metabolitos secundarios de la <i>U. maritima</i>.

Fuente: Elaboración propia

I.3.- OBJETIVOS

I.3.1.-Objetivo General:

- Evaluar la cardiotoxicidad de los fitoquímicos de la *U. maritima* en seres humanos, mediante herramientas QSAR.

I.3.2.-Objetivos Específicos:

- Identificar los fitoquímicos presentes en la planta *U. maritima* con ayuda de la literatura científica.
- Evaluar mediante QSAR la toxicidad cardiaca de los fitoquímicos encontrados a través de evaluar su potencial para bloquear Herg.
- Clasificar los fitoquímicos presentes en la planta que tienen mayor potencial cardiotoxico a partir de los resultados obtenidos.

I.4.- MARCO TEÓRICO

I.4.1.- Antecedentes:

En la investigación de Maryam et al. (1), evaluaron el glucósido cardíaco Proscillaridina A (PSD-A), extraído de *U. maritima*, ha mostrado capacidad tanto para tratar trastornos cardiovasculares como para potencialmente combatir el cáncer. Un estudio reciente enfocado en el cáncer de pulmón, específicamente en las células A549, reveló que el PSD-A inhibe su crecimiento y promueve la apoptosis.

El-Seedi et al. (2) recolectaron 61 especies de plantas medicinales egipcias provenientes del desierto del Sinaí. Los extractos como *Asclepias sinaica*, *U. maritima*, *Nerium oleander* y *Catharanthus roseus*, se sometieron a análisis más detallados. De *U. maritima* se aisló PSD-A, una bufadienolida bioactiva. Este descubrimiento indica que varias de estas plantas generan compuestos llamados esteroides cardíacos. Al dividir los extractos alcohólicos de *U. maritima* usando bioensayos, se logró aislar una sustancia bioactiva conocida como PSD-A. Este hallazgo subraya la importancia de las plantas de la medicina tradicional como proveedoras de compuestos citotóxicos valiosos para el ámbito médico (3).

El-Hagrassi et al. (4) investigaron a *U. maritima* L., una planta importante por sus propiedades medicinales. Buscó analizar los compuestos fenólicos, la actividad citotóxica del extracto alcohólico y los compuestos aislados de sus partes aéreas, además de evaluar la actividad hipoglucémica del extracto. Se aislaron diez compuestos fenólicos y se identificaron utilizando técnicas cromatográficas y análisis químicos. Los compuestos incluyeron kaempferol, quercetina, ácido ferúlico y ácido cafeico. Algunos de estos compuestos se aislaron por primera vez de esta planta. Se evaluó la actividad citotóxica de los compuestos y el extracto alcohólico en líneas celulares de cáncer humano, y la actividad hipoglucémica del extracto alcohólico. Los resultados indicaron que los efectos citotóxicos de los compuestos aislados abarcan desde niveles significativamente elevados hasta moderados y leves. En contraste, el extracto alcohólico de las partes aéreas de *U. maritima* L. no demostró tener efecto sobre las tres líneas celulares examinadas.

lizuka et al. (5) en la investigación, *U. maritima*, al investigar sobre obre Bufadienólidos y un nuevo lignano de los bulbos de *U. maritima* menciona que se

cultiva en el área mediterránea y se utiliza en Europa como un diurético cardiotónico para tratar el marasmo cardíaco y el edema. Del bulbo de *U. maritima* obtuvieron 33 compuestos, identificados mediante espectrometría de masas. Diez de estos compuestos eran nuevos en la naturaleza, nueve eran bufadienólidos y solo uno era un lignano.

En la investigación de Krenn et al. (6) El estudio identificó dos nuevos compuestos bufadienólidos, 11a-acetilgamabufotalina 3-O-4-O-b-D-glucosil-a-L-ramnósido y 11a-hidroxiscilliglaucósido, aislados de *U. maritima*. Ambos compuestos muestran características estructurales relevantes para la cardiotoxicidad, un área de interés farmacológico y clínico, aunque se necesitan más investigaciones para comprender completamente su impacto en el sistema cardiovascular.

I.4.2.- Marco referencial:

1. *Urginea maritima*

1.1. Descripción botánica

Esta planta es una hierba perenne que se caracteriza por tener un bulbo del que emerge un tallo sin hojas. Las hojas, que se encuentran en la base de la planta, son oblongas y agudas. Las flores, que se agrupan en una inflorescencia en forma de racimo, tienen seis tépalos soldados en la base y un nervio central de color púrpura o verde. Los estambres, que son seis, tienen filamentos planos y ensanchados en la base. El fruto es una cápsula de tres partes (7).

Figura 1.

Urginea maritima



Fuente: Plantas y hongos (7)

1.2. Características morfológicas

La característica más distintiva de la *U. maritima* es su bulbo de considerable tamaño (6–15cm), que suele estar enterrado a poca profundidad y a menudo asoma en la superficie. Durante finales del verano, esta planta florece exhibiendo un tallo robusto y erecto que puede alcanzar alturas de 50–150 cm. Este tallo está adornado con numerosas flores blancas en forma de estrella que se abren gradualmente desde la base hasta la punta del tallo, creando un conjunto muy atractivo. Las hojas, amplias y largas, surgen en una disposición en forma de roseta al finalizar la floración y mantienen su color verde hasta mediados de la primavera (7). Es importante mencionar que también se le conoce por diversas sinonimias como *Drimia maritima* (L.) Stearn, entre sus nombres comunes se encuentran Cebolla albarrana, Escila, Almorran, Cebolla albarrama, mientras que en inglés se le denomina Squill (8).

1.3. Hábitat y distribución

Esta planta se puede encontrar en una gran variedad de hábitats, incluyendo matorrales, tomillares, pastizales, herbazales, terrenos pedregosos, bolsas de suelo e incluso arenales. Es una planta de distribución amplia, que se encuentra en la región mediterránea, submediterránea, irano-turánica y macaronesia. En España, es más abundante en el cuadrante suroeste, el Levante y las Islas Baleares. En la Región de Murcia, se encuentra en la zona litoral, pero es más dispersa en la franja costera occidental y muy rara en la zona prelitoral (9). Esta planta bulbosa pertenece a la región del Mediterráneo y se distribuye principalmente en Europa, África del Norte y Asia Occidental (10).

1.4. Composición Fitoquímica

Los fitoquímicos presentes en *U. maritima* abarcan una amplia variedad de moléculas, siendo los esteroides cardíacos los más notables. Estos esteroides son sustancias que se hallan en la naturaleza, originadas por diversas plantas y anfibios.

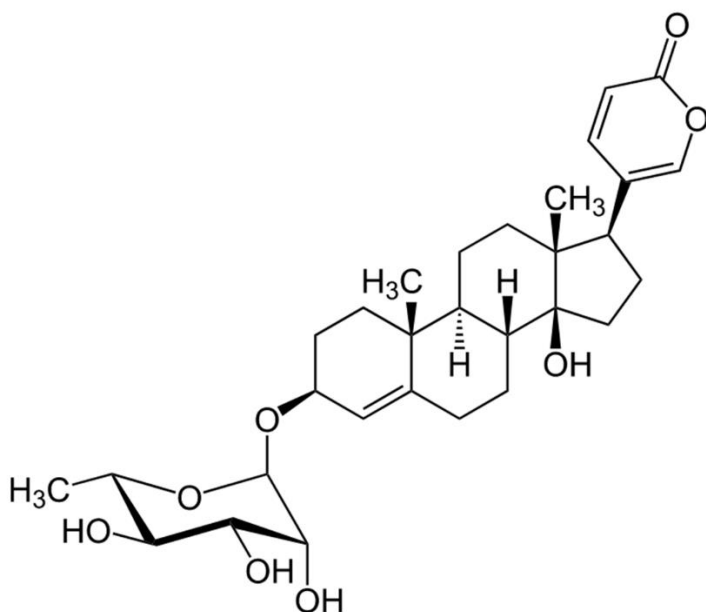
Algunos de los esteroides cardíacos identificados en *U. maritima* incluyen:

- **Escilarenina:** Escilarenina con fórmula $C_{24}H_{32}O_4$, es uno de los principales esteroides cardíacos presentes en la planta. La escilarenina se ha estudiado por su actividad cardiotónica, que se refiere a su capacidad para fortalecer la contracción del músculo cardíaco (6).
- **Escilin:** Otro glucósido cardíaco importante en la *U. maritima*. Al igual que la escilarenina, la escilin también posee propiedades cardiotónicas y puede influir en la función contráctil del corazón (6).
- **La proscilaridina A** La proscilaridina A (PsA), ilustrada en la Figura 2, representa otro de los esteroides cardíacos presentes en esta planta. Se ha

observado que este compuesto muestra actividades anticancerígenas al inhibir la proliferación celular y desencadenar el proceso de apoptosis en células cancerosas (11). Además, se ha utilizado en contextos clínicos para el tratamiento de trastornos cardíacos. Pertenece al grupo de bufadienólidos, caracterizados por la presencia de un anillo de lactona insaturado α/β de seis miembros. A lo largo de milenios, las plantas que albergan glucósidos cardíacos han sido utilizadas tanto como venenos como remedios cardíacos. En la actualidad, estos glucósidos cardíacos se emplean para tratar pacientes con insuficiencia cardíaca congestiva y arritmias cardíacas. En este contexto, el mecanismo de acción parece centrarse principalmente en la inhibición de la Na^+/K^+ -ATPasa en los miocitos cardíacos, lo que conduce a un aumento en los niveles de calcio intracelular (12).

Figura 2.

Proscillaridina estructura



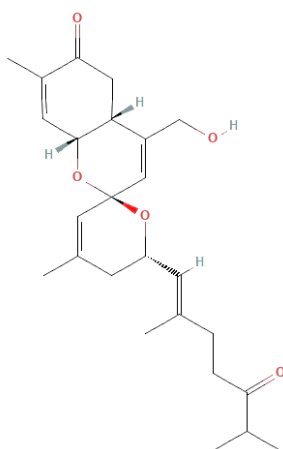
Fuente: Shahin et al. (13)

- **Phorbaketal E:** Los compuestos identificados como phorbaketals D-K, presentan una configuración de benzopirano espirocíclico similar al phorbaketal A, y sus diferencias estructurales se deben a procesos de

oxidación y/o reducción en el núcleo tricíclico o en la cadena lateral. Por otro lado, el compuesto 9, conocido como phorbin A, tiene una estructura monocíclica y se sugiere como un posible precursor biogénico de los phorbaketals. La citotoxicidad de los compuestos 1-9 fue evaluada en cuatro líneas celulares de cáncer humano (A498, ACHN, MIA-paca y PANC-1), revelando que algunos de ellos muestran actividad citotóxica (14).

Figura 3.

Estructura molecular Phorbaketal E

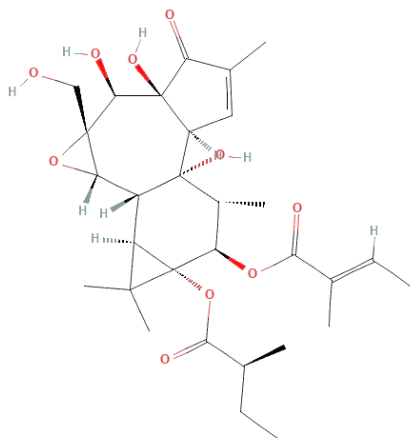


Fuente: PubChem (15)

- **Tiglato de tigilanol:** Es un compuesto diterpenoide de origen natural encontrado en las semillas del árbol Blushwood (*Fontainea picrosperma*), nativo de Australia. Su aplicación se encuentra autorizada como medicamento veterinario para tratar tumores de mastocitos en perros que no se han diseminado y no son susceptibles a cirugía. Este compuesto desempeña funciones importantes como agente contra el crecimiento de tumores, metabolito vegetal y activador de la proteína quinasa C (16).

Figura 4.

Estructura molecular Tiglato de tigilano

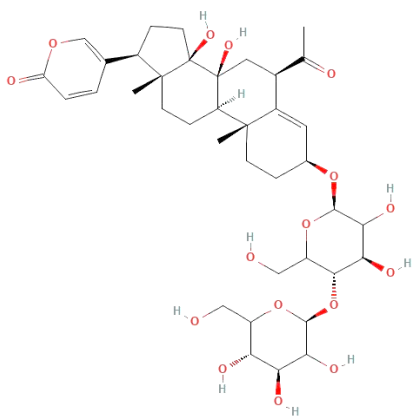


Fuente: PubChem (16)

- **Glucosilirósido:** El glucosilirósido, una lactona esteroide, presenta una estrecha relación funcional con bufadienólidos. Este compuesto exhibe una estructura característica que incluye un núcleo esteroide modificado con la adición de un grupo glucosilo, lo que le confiere propiedades distintivas y funciones biológicas particulares(17).

Figura 5.

Estructura molecular glucosilirósido

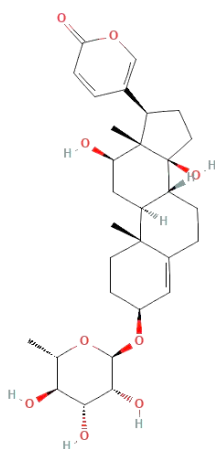


Fuente: PubChem (17)

- **Scilliphaeoside:** Es un compuesto que ha sido encontrado en *U. maritima* que experimenta variaciones estacionales, mostrando una tendencia similar a la proscillaridina A y la escilaren A, con fluctuaciones máximas durante el ciclo anual, este compuesto puede tener diversas funciones dentro de la planta, que van desde su papel en la defensa contra patógenos hasta su participación en procesos metabólicos internos (18).

Figura 6.

Estructura molecular Scilliphaeoside



Fuente: PubChem (19)

1.4.1. Efectos farmacológicos de *U. Maritima*

El extracto de *U. maritima* exhibe una riqueza química notable, albergando taninos con propiedades antivirales, antibacterianas, antiinflamatorias, antiulcerosas y antioxidantes, respaldando así su potencial terapéutico (20). Además, la presencia de flavonoides, reconocidos por su actividad antimicrobiana, antiviral y capacidad antioxidante, junto con glicósidos conocidos por sus efectos cardiotónicos y diuréticos, sugieren un amplio espectro de posibles aplicaciones farmacológicas para este extracto, desde acciones antiinflamatorias hasta el tratamiento de afecciones cardíacas como el marasmo y el edema (21).

1.4.2. Mecanismos de acción cardiotoxicidad de esteroides cardíacos

Los esteroides cardíacos ejercen su acción principal al bloquear la Na/K ATPasa del corazón. Este mecanismo implica un efecto inotrópico positivo, que se traduce en un aumento de la fuerza de contracción del músculo cardíaco. Al bloquear específicamente esta enzima, los esteroides cardíacos intervienen en el equilibrio iónico intracelular, generando un incremento en la concentración de calcio, lo que fortalece la contractilidad del corazón y mejora su eficiencia en el bombeo de sangre (22).

Por su estructura química similar, se cree que estos esteroides comparten mecanismos de acción. Se postula que todos tienen la capacidad de bloquear la Na⁺/K⁺-ATPasa del corazón, lo que resulta en un efecto inotrópico positivo. Existen estudios que han planteado que los compuestos de *U. maritima* afectan la función del corazón y pueden tener propiedades tanto terapéuticas como tóxicas, dependiendo de su dosificación (22).

El bloqueo del canal hERG por varios fármacos clínicos puede causar el síndrome de QT largo, aumentando el riesgo de arritmias potencialmente mortales como las Torsades de Pointes (TdP) y la fibrilación ventricular (FV) (23). Esta inhibición farmacológica del canal hERG constituye la principal causa del síndrome de QT largo inducido por fármacos (diLQT), lo que subraya la importancia de evaluar nuevos agentes farmacéuticos en relación con este canal durante las pruebas preclínicas de seguridad cardíaca.

Por otro lado, el gen relacionado con el canal de potasio humano Ether-a-go-go (hERG) desempeña un papel central en la regulación de la excitabilidad cardíaca y el mantenimiento del ritmo cardíaco normal. Las mutaciones en hERG son responsables de un tercio de todos los casos del síndrome congénito del QT largo, un trastorno de la repolarización cardíaca caracterizado por el alargamiento del intervalo QT en el electrocardiograma, ondas T anormales y un riesgo de muerte súbita debido a arritmias ventriculares. Además, la proteína del canal hERG es el

objetivo molecular de casi todos los fármacos que causan la forma adquirida del síndrome del QT largo. Los avances en la comprensión de la base estructural de la activación del hERG, su tráfico a la superficie celular y la arquitectura molecular involucrada en el bloqueo del hERG por fármacos están sentando las bases para el tratamiento racional y la prevención del síndrome del QT largo asociado al hERG. Esta revisión resume el conocimiento actual sobre la función y disfunción del hERG, así como las áreas de investigación en curso (24).

1.4.3. Síntomas y efectos de la cardiotoxicidad

Los síntomas asociados con la exposición a los glucósidos cardíacos se pueden dividir en varias categorías. Estos incluyen malestares gastrointestinales como vómitos, dolor abdominal, cefalea y diarrea. Además, se puede presentar irritación del tracto respiratorio y manifestaciones neurológicas como somnolencia y debilidad. La toxicidad puede conducir a desequilibrios electrolíticos, especialmente hipercalcemia. A nivel cardíaco, se pueden observar diferentes tipos de arritmias como bradicardia sinusal, contracciones ventriculares prematuras y bloqueos aurículo-ventriculares de diversos grados, incluso arritmias graves como taquicardia ventricular o fibrilación ventricular. Mareos, desvanecimientos y, en casos severos, existe un riesgo significativo de muerte. Aquellos expuestos también pueden experimentar la aparición retardada de síntomas días después de la exposición inicial (7).

2. Herramientas computacionales

2.1. QSAR

El QSAR, o Relaciones Cuantitativas Estructura-Actividad, es un conjunto de métodos de análisis que relacionan las estructuras químicas con sus efectos biológicos. Este enfoque abarca el diseño virtual y la visualización espacial de

moléculas, así como el cálculo de propiedades fisicoquímicas y el uso de bioinformática y estadística. Su objetivo principal es predecir teóricamente la actividad biológica para facilitar la creación de potenciales fármacos futuros sin necesidad de realizar procesos de síntesis orgánica mediante ensayos y errores. Al operar en un entorno virtual, este método elimina la necesidad de infraestructura de laboratorio convencional, lo que lo hace más económico y rápido al centrarse en las relaciones entre la estructura química y la actividad biológica (25).

El desarrollo de los modelos QSAR implica la caracterización inicial de moléculas a través de descriptores numéricos. Estos descriptores, que representan las características estructurales de los compuestos, asignan valores numéricos a cada uno según distintos aspectos de su composición, como la presencia de heteroátomos o grupos funcionales (Figura 3). Luego, se emplean técnicas estadísticas y de aprendizaje automático para crear algoritmos que vinculen estos descriptores con los parámetros estudiados. El aprendizaje automático, una rama de la inteligencia artificial, capacita a las computadoras para aprender por sí mismas, sin requerir una programación explícita. En este contexto, los algoritmos aprenden las relaciones entre la estructura molecular y las propiedades o actividades biológicas (26).

Para realizar un estudio de tipo QSAR, se requieren principalmente tres tipos de información: (A) La estructura molecular de diversos compuestos que compartan un mismo mecanismo de acción, siendo considerados como ligandos para un objetivo biomolecular común. (B) Datos relacionados con la actividad biológica de cada uno de estos ligandos presentes en el análisis, tales como DE50, DL50, Ki, IC50, entre otros. (C) Propiedades fisicoquímicas, representadas por descriptores numéricos, que se derivan computacionalmente de la estructura molecular creada de manera virtual (*in silico*) (25).

2.2. Pred-HERG web server

El servidor web Pred-hERG proporciona herramientas computacionales para evaluar la capacidad de compuestos químicos de bloquear el canal hERG, un aspecto crucial en el desarrollo de fármacos. Su utilidad radica en la identificación temprana de posibles efectos secundarios cardíacos, ya que la inhibición del canal hERG puede llevar a arritmias cardíacas graves e incluso la muerte. Esta plataforma se basa en modelos QSAR (Relación Cuantitativa Estructura-Actividad) mejorados, desarrollados con un conjunto de datos ampliado de casi 6.000 compuestos, lo que aumenta su precisión y fiabilidad. Pred-hERG permite a los usuarios realizar evaluaciones rápidas y eficientes, agilizando el proceso de cribado de compuestos y mejorando la seguridad en el desarrollo de nuevos fármacos (27).

El desarrollo de modelos de aprendizaje automático, especialmente utilizando técnicas de aprendizaje profundo, ha demostrado ser una herramienta efectiva para predecir la cardiotoxicidad asociada con hERG, permitiendo una exploración temprana y rentable de la seguridad cardíaca durante el proceso de descubrimiento de fármacos (28). Estos enfoques computacionales pueden identificar candidatos prometedores y la necesidad de estudios experimentales adicionales para evaluar las interacciones fuera del objetivo con el canal Herg (29).

2.3. ADMETlab 2.0

Los problemas de farmacocinética no deseables y la toxicidad de compuestos candidatos son las principales razones del fracaso en el desarrollo de fármacos, y se reconoce ampliamente que la evaluación de la absorción, distribución, metabolismo, excreción y toxicidad (ADMET) de sustancias químicas debe realizarse lo antes posible. ADMETlab 2.0 es una versión mejorada de ADMETlab, ampliamente utilizado para la evaluación sistemática de propiedades ADMET, así como de algunas propiedades fisicoquímicas y su idoneidad en química medicinal. Con actualizaciones significativas en módulos funcionales, modelos predictivos, explicaciones y la interfaz de usuario, ADMETlab 2.0 tiene una mayor capacidad

para asistir a los químicos medicinales en acelerar el proceso de investigación y desarrollo de fármacos (33). Entre los parámetros de toxicidad que evalúa esta herramienta es el potencial de una molécula para bloquear Herg.

CAPÍTULO II
METODOLOGÍA

II.1.- Diseño de investigación. Investigación básica de tipo cuantitativa y descriptiva

Enfoque: El enfoque de la investigación es cuantitativo.

- **Diseño de Investigación: No experimental**
- **Nivel de investigación: Descriptivo**
- **Tipo de Investigación:**
- **Por el ámbito: Exploratorio**
- **Por la técnica: Observacional**
- **Por la temporalidad: Transversal actual.**

II.2- Población y muestra.

La presente investigación se orienta hacia la evaluación del potencial cardiotoxico de los fitoquímicos presentes en *Urginea maritima*. Se incluirán todas las moléculas de la planta que han sido reportadas en la literatura.

II.3.- Definición y clasificación de las variables

Variables	Definición	Clasificación	Indicador	Escala.
Estructura química de los metabolitos de la planta.	La estructura química es una categoría que refleja el orden de los átomos de los elementos dentro de la molécula de sustancia, es decir, la categoría y	Cualitativa nominal	Fórmula de la molécula.	Nominal.

	secuencia de la conexión del átomo			
Probabilidad de inhibición de Herg.	Probabilidad de que una molécula es capaz de bloquear canales Herg.	Cuantitativa continua.	Valores generados por programa Ped-hERG	Ordinal.
Probabilidad de inhibición de Herg.	Probabilidad de que una molécula es capaz de bloquear canales Herg.	Cuantitativa continua.	Valores generados por el programa ADAMED lab 2.0	Ordinal.

II.4.- Procedimientos, técnicas e instrumentos para la obtención de datos.

Técnicas e instrumentos:

Para este estudio se recopilaron todas las moléculas de *Urginea maritima* que se encuentran reportadas en diversas fuentes bibliográficas a través de bases digitales de libre acceso y las que ofrece la Universidad Católica de Cuenca.

Una vez ya identificadas estas moléculas se realizó una conversión de la estructura de la molécula al formato SMILES utilizando el programa Marvin JS. Estos archivos fueron ingresados en los programas de análisis Pred-hERG y ADMETlab 2.0 los mismos que van generar predicciones de la cardiotoxicidad de las moléculas colocadas, una vez obtenido los resultados de las moléculas se las organizo en tablas de Excel, a las mismas se les coloco un filtro para facilitar el trabajo, y se los clasifico del fitoquímico más cardiotóxico al menos cardiotóxico (30-32).

II.1.1.- Procedimientos estadísticos y análisis de datos

Este estudio no requiere análisis estadístico.

II.1.2.- Aspectos éticos

Por la naturaleza esta investigación no requiere aval del comité de ética debido a que no involucran muestras biológicas y no se manejan datos de pacientes.

CAPÍTULO III
RESULTADOS Y DISCUSIÓN

III. RESULTADOS

Después de realizar un análisis exhaustivo de las 151 moléculas de *U. maritima* que se lograron encontrar en la base de datos Lotus, el análisis con Pred-hERG mostró que 23 serían bloqueadoras de canales hERG. Entre éstas, las 10 mostradas en la Tabla 1 corresponden a las que fueron clasificadas como más probables bloqueadoras de acuerdo al valor de confiabilidad. Adicionalmente, con valores superiores al 60% se posicionaron tres moléculas indicadas con los códigos Q105152912, Q105156645 y Q105032309.

Tabla 1. Ranking de probabilidad de bloque de Herg de las moléculas presentes en *U. maritima* según modelo predictivo QSAR realizado en Pred-hERG

Código	SMILES	Nombre IUPAC	Cardiotoxicidad	Ranking
Q105152912	<chem>CO[C@H]1C=C2CC[C@@H]3[C@H](C[C@@H](O)[C@]4(C)[C@@H](c5ccc(=O)oc5)CC[C@]34O)[C@@]2(C)CC1</chem>	Phorbaketal E	79.8	1
Q105156645	<chem>C[C@]12CC[C@H](O[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C1CC[C@@H]1[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](c3ccc(=O)oc3)[C@@H](O)C[C@]12O</chem>	Tiglató de tigilanol	64.5	2
Q105032309	<chem>CC(=O)OC1CC2(O)C(CCC3(C)C(c4ccc(=O)oc4)CCC32O)C2(C)CC(C(OC3OC(C)C(O)C(O)C3O)C=C12</chem>	3a,3b-dihidroxi-9a,11a-dimetil-1-(6-oxopirán-3-il)-7-[(3,4,5-trihidroxi-6-metiloxán-2-il)oxi]-1h,2h,3h,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-acetato de ciclopenta[a]fenantren-5-ilo	61.2	3
Q105287002	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@H](C[C@@H](O)[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O)C=C12</chem>	(1r,3ar,3bs,5r,7s,9ar,9br,11r,11as)-3a,3b,7,11-tetrahidroxi-9a,11a-dimetil-1-(6-oxopirán-3-il)-1h, Acetato de 2h,3h,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,	55.5	4

Código	SMILES	Nombre IUPAC	Cardiotoxicidad	Ranking
		11h-ciclopenta[a]fenantren-5-ilo		
Q105248979	<chem>CC1C(O)C(OC2C(O)C(O)C(O)C(CO)O2)C(O)C(O[C@H]2CC[C@@]3(C)C(CC[C@H]4[C@]5(O)[C@]([C@H](CC5)c5coc(=O)cc5)(C)CC[C@@H]43)=C2)O1</chem>	Scillaren a	55.5	5
Q104995817	<chem>CC1OC(OC2C=C3CCC4C(CCC5(C)C(c6ccc(=O)oc6)C(O)CC45O)C3(C)CC2)C(O)C(O)C1O</chem>	5-{2, 3a-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-7-[(3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl)oxy]-1H,2H,3H,3aH,3bH,4H,5H,7H,8H,9H,9aH,9bH,10H,11H,11aH-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl}-2H-pyran-2-ona	55.4	6
Q104995816	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@@H]4[C@@H](CC[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)[C@@H](O)C[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	5-[(1R,2S,3aS,3bR,7S,9aR,9bR,11aR)-2,3a-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-7-[(2R,3R,4R,5R,6S)-3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy]-1H,2H,3H,3aH,3bH,4H,5H,7H,8H,9H,9aH,9bH,10H,11H,11aH-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl}-2H-pyran-2-ona	55.4	7
Q105034625	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@@H]4[C@H](CC[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)[C@@H](O)C[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O[C@@H]1O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]2O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	5-[(3S,6R,8S,9R,10R,13R,14R,17R)-6-acetyl-3-[(2R,4R,5S)-3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[(2S,4S,5S)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxyoxan-2-yl]oxy-8,14-dihydroxy-10,13-dimethyl-2,3,6,7,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-ona	53.9	8
Q105034622	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@@H]4[C@H](CC[C</chem>	5-[(3S, 8R, 9S, 10R, 13R, 14S, 16S, 17R) -3-[(2R, 3R	53.9	9

Código	SMILES	Nombre IUPAC	Cardiotoxicidad	Ranking
	<chem>@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)[C@@H](O)C[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O[C@@H]1O[C@H](CO)[C@@H](O[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H](O)[C@H]2O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	, 4S , 5R , 6S) -5 -[(2 S , 3 R , 4 R , 5 S , 6 R) -3,4-dihidroxi-6-(hidroximetil)-5-[(2 S , 3 R , 4 R , 5 S , 6 R) -3,4,5-trihidroxi-6-(hidroximetil)oxan-2-il]oxioxan-2-il]oxi-3,4-dihidroxi-6-metiloxan-2-il]oxi-14,16-dihidroxi- 10,13-dimetil-1,2,3,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahidrociclopenta[a]fenan-17-il]piran-2-ona		
Q105274060	<chem>CC(=O)[C@@H]1C[C@]2(O)[C@H](CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)C[C@H](O[C@@H]3OC(CO)[C@@H](O[C@@H]4OC(CO)[C@@H](O)[C@H](O)C4O)[C@H](O)C3O)C=C12</chem>	Glucoscillirosido	53.7	10

Nota: *Moléculas con mayor probabilidad de bloquear Herg de acuerdo a PredHerg.

A continuación, se llevó a cabo el mismo procedimiento de predicción utilizando, esta vez, el programa ADMETLab 2.0 para evaluar la capacidad de bloquear Herg de las 166 moléculas identificadas en *U. maritima*. Se seleccionaron, igualmente, las 10 moléculas con el mayor porcentaje de probabilidad de bloquear los receptores hERG. Los compuestos Q104388988 y Q105159199, sobresalieron con puntajes de bloqueo de Herg superiores al 60%. Los resultados de este análisis se presentan en la Tabla 2.

Tabla 2. Ranking de probabilidad de bloque de Herg de las moléculas presentes en *U. maritima* según modelo predictivo QSAR realizado en ADMETlab 2.0

Código	SMILES	Nombre IUPAC	Cardiotoxicidad
Q10438 8988	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@H]2CC[C@]3(C)[C@H]4[C@H](O)C[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]5(O)[C@@H]4CC[C@@H]3C2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	5-[(3S,5R,8R,9S,10S,11R,13R,14S,17R)-11,14-dihidroxi-10,13-dimetil-3-[(2R,3R,4R,5R,6S)-3,4,5-trihidroxi-6-metiloxan-2-il]oxi-1,2,3,4,5,6,7,8,9,11,12,15,16,17-tetradecahidrociclopenta[a]fenantren-17-il]piran-2-one	69.6*
Q10515 9199	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@H]2CC[C@@]3(C)[C@@H](CC[C@H]4[C@@H]3CC[C@@]3(C)[C@@H](c5ccc(=O)oc5)CC[C@]43O)C2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O[C@@H]1O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	4,5-Dihydro-5alpha-scillaren A	62.3*
Q10515 6645	<chem>C[C@]12CC[C@H](O[C@@H]3O[C@H](C O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C1C C[C@@H]1[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](c3ccc(=O)oc3)[C@@H](O)C[C@]12O</chem>	16beta-Hydroxyscillarenin 3-glucoside	59.0
Q10521 0701	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@H](CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O)[C@@H]3O[C@@H]1C)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]3O)C[C@H]12</chem>	[(3S,5S,6R,8S,9R,10S,13R,14R,17R)-8,14-dihidroxi-10,13-dimetil-17-(6-oxopyran-3-yl)-3-[(2R,3R,4R,5R,6S)-3,4,5-trihidroxi-6-methyloxan-2-yl]oxy-2,3,4,5,6,7,9,11,12,15,16,17-dodecahydro-1H-ciclopenta[a]fenantrén-6-yl] acetato	58.3
Q10531 1603	<chem>CC(=O)O[C@H]1[C@H](O)[C@@H]2C=C3CC[C@@H]4[C@H](CC[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)C C2)O[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]2O)[C@H]1O</chem>	[(2R,3R,4R,5R,6S)-4-hidroxi-2-[(3S,8R,9S,10R,13R,14S,17R)-14-hidroxi-10,13-dimetil-17-(6-oxopirán-3-il)-1,2,3,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahidrociclopenta[a]fenantreno-3-il]oxi]-6-metil-5-[(2S,3R,4S,5S,6R)-3,4,5-trihidroxi-6-(hidroximetil)oxan-2-ilo]oxioxan-3-il]acetato	57.0
Q10520 3735	<chem>CO[C@@H]1[C@@H](O)[C@H](C)O[C@@H](O)[C@H]2CC[C@@]3(C)[C@H](C2)[C@H](OC(C)=O)C[C@]2(O)[C@@H]3CC[C@@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@H]1O</chem>	[(3S,5S,6R,8S,9R,10S,13R,14R,17R)-3-[(2R,3S,4R,5S,6S)-3,5-dihidroxi-4-metoxi-6-methyloxan-2-yl]oxy-8,14-dihidroxi-10,13-dimetil-17-(6-oxopyran-3-yl)-2,3,4,5,6,7,9,11,12,15,16,17-dodecahydro-1H-ciclopenta[a]fenantrén-6-yl] acetato	54.1
Q27252 791	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3C C[C@@H]4[C@H](C[C@@H](O)[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	Scilliphaeoside	51.4
Q10515 2912	<chem>CO[C@H]1C=C2CC[C@@H]3[C@H](C[C@@H](O)[C@]4(C)[C@@H](c5ccc(=O)oc5)CC[C@]34O)[C@@]2(C)CC1</chem>	5-[(3R,8R,9S,10R,12R,13S,14S,17R)-12,14-dihidroxi-3-metoxi-10,13-dimetil-1,2,3,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahidrociclopenta[a]fenantren-17-il]piran-2-ona	48.7
Q10503 2308	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@H](CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O)[C@@H]3O[C</chem>	3beta-(alpha-L-Rhamnopyranosyloxy)-8,14-dihidroxi-6beta-(acetyloxy)bufa-4,20,22-trienolide	48.1

Código	SMILES	Nombre IUPAC	Cardiotoxicidad
	<chem>@@H](C)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]3O)C=C12</chem>		
Q105210704	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@H](CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O[C@@H]3O[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]3O)[C@H]12</chem>	(1r,3ar,3bs,5r,5as,7s,9as,9br,11ar)-3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-7-[[[(2r,3s,4r,5r,6s)-3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy]-dodecahydro-1h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	46.1

Nota: *Moléculas con mayor probabilidad de bloquear Herg de acuerdo a ADMETlab.

Interesantemente, los programas predictivos utilizados discreparon uno del otro en cuanto a la probabilidad de bloquear Herg. Tomando como prototipo predictivo el resultado con Pred-hERG, ninguna de las moléculas seleccionadas coincidió con la predicción realizada por ADMETlab. La primera molécula, codificada como Q105152912, para su mejor distinción, ocupó la 8^{va} posición en dicho software, con una capacidad cardiotoxica de 69% (Tabla 3). Las dos siguientes moléculas se ubicaron en la posición 46 y 124, con 22% y 2% de cardiotoxicidad predicha, respectivamente (Véase Anexo 1 y 2).

Tabla 3. Relación porcentual entre la cardiotoxicidad predicha por Pred-hERG y ADMETlab en moléculas de *U. maritima*

Código	Pred-hERG	ADMETlab	Ranking en ADMETlab
Q105152912	79.8	69.0	8
Q105156645	64.5	22.0	46
Q105032309	61.2	2.0	124
Q105287002	55.5	1.0	127
Q105248979	55.5	1.0	128
Q104995817	55.4	3.0	113
Q104995816	55.4	38.0	22
Q105034625	53.9	21.6	52

Código	Pred-hERG	ADMETlab	Ranking en ADMETlab
Q105034622	53.9	20.2	56
Q105274060	53.7	13.1	83

IV. DISCUSIÓN

Respecto a la principal molécula bloqueadora de canales hERG encontrada en *U. maritima* según Pred-hERG, Q105152912 (Phorbaketal E); no coincidió con los resultados de ADMETlab, en donde pasa a ser la 8^{va} en el *Ranking* con un valor predictivo de 69.0 (Anexo 2).

En un estudio coreano realizado por Kim et al. (34), encontraron que Phorbaketal E, aislada en esponjas marinas, posee actividad antimicrobiana contra el *Staphylococcus aureus*. Así mismo, Said et al. (35), exponen diversas actividades biológicas *in vitro* de Q105152912 que incluyen: acción antiviral, antimicrobiana, antiinflamatoria y anticancerígena. Sin embargo, no mencionan si existe algún potencial cardiotoxico.

En el segundo lugar de Pred-hERG, se ubicó Q105156645, que ha sido usado como producto farmacéutico veterinario para el tratamiento de tumores de mastocitos caninos no metastásicos y no resecables. Es un diterpenoide (36) que ha demostrado potencial como agente antineoplásico. En contraste, en los análisis realizados con ADMETlab se ubica en la posición 46 con un valor de 22.0 (Anexo 2).

De Ridder et al. (37), en su investigación mencionan que Q105156645 (Tiglatol de tigilanol) es un producto farmacéutico veterinario para el tratamiento intratumoral de tumores de mastocitos caninos (MCT). Así mismo, en otro estudio, administraron este compuesto para evaluar el efecto anticanceroso en dos caballos. La inflamación localizada y los hematomas se desarrollaron rápidamente en el sitio del tratamiento con necrosis hemorrágica del tumor, evidente dentro de las 24 horas. Se produjo desprendimiento de la masa tumoral necrótica en un plazo de 6 a 16 días, seguido del relleno del defecto tisular y la reepitelización completa del sitio de

tratamiento con un buen resultado funcional. los signos flogísticos inducidos por los fármacos in situ, se controlaron con los medicamentos concomitantes y llegaron a la resolución en gran medida, a las 72 horas; mientras que la herida que se formó después del desprendimiento del esfacelo tumoral, sanó sin incidentes. Ambos pacientes mostraron un letargo leve durante las primeras 36 horas después del tratamiento y la molestia localizada en el lugar del tratamiento fue evidente durante los primeros 3 a 5 días. No hubo evidencia de recurrencia del sarcoide a los 93 días, ni del carcinoma de células escamosas a los 189 días (38).

A pesar de no poderse contrastar los resultados de este estudio desde el enfoque planteado (citotoxicidad miocárdica), podemos inferir que las características beneficiosas encontradas por los autores anteriormente mencionados, se debe al efecto citotóxico localizado de este compuesto (necrosis tumoral e inhibición de la adipogénesis) (38).

En el caso de las moléculas codificadas como Q105032309 (3a,3b-dihidroxi-9a,11a-dimetil-1-(6-oxopirán-3-il)-7-[(3,4,5-trihidroxi-6-metiloxan-2-il)oxi]-1h,2h,3h,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-acetato de ciclopenta[a]fenantren-5-ilo) y Q105287002 ((1r,3ar,3bs,5r,7s,9ar,9br,11r,11as)-3a,3b,7,11-tetrahidroxi-9a,11a-dimetil-1-(6-oxopirán-3-il)-1h, acetato de 2h,3h,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-ciclopenta[a]fenantren-5-ilo), ubicadas según Pred-eHERG en los lugares 3 y 4, y con posiciones de 124 y 126, en ADMETlab, no fue posible encontrar información sobre efectos biológicos reportados. Por lo cual se señala como una de las limitaciones para una interpretación más amplia de los resultados de este estudio.

La quinta molécula según predicción de ranking de Pred-hERG, Q105248979, se ubicó con un valor de 0.141 en la posición 128 en ADMETlab 2.0 (Anexo 2). Distintas bases de datos proporcionan información variada sobre la molécula citada, conocida también como Scillaren a. En ChEMBL (39), según el modelo predictivo propuesto en esta web, existe un 90% de probabilidad de que Scillaren a interactúe con diversas dianas incluyendo la Leucotrieno A4 hidrolasa, Interleucina-2, Ubiquitin carboxyl-terminal hidrolasa 7, PI3-quinasa p110-delta/p85-alfa, Quinasa de adhesión focal 1, Receptor de prostanoides EP3, Quinasa de proteínas

serina/treonina que interactúa con la MAP quinasa MNK1, Subunidad alfa del canal de sodio tipo III, Quinasa de proteínas activada por la MAP quinasa 2, Glutaminil-péptido ciclotransferasa, Anhidrasa carbónica XII y Receptor muscarínico de acetilcolina M1.

Esta molécula es un esteroide bufadienólido que se encuentra en los bulbos de *U. maritima* (40–42).

Scillaren a se describe como un glucósido esteroideo obtenido de *Scilla maderensis* Menezes (*Hyacinthaceae*). De hecho, es un glucósido cardíaco, lo que coincide con el resultado de la predicción computacional. Esta molécula, en particular, es un derivado glucosilado del compuesto 16 β -Hydroxyscillarenin y tiene efectos sobre la función cardíaca (43–45).

Se ha informado por Manganyi et al. (47), que existen varios glucósidos cardíacos que contribuyen a la toxicidad natural de *Drimia* sp., sobre todo de las plantas rojas de *D. maritima*. Sin embargo, las investigaciones se han centrado sobre los beneficios biológicos de *Drimia*; por lo tanto, hay datos limitados sobre la toxicidad de estas plantas. Existe una línea delgada de los biocompuestos de este género que podrían tener efectos tanto venenosos como curativos. Además, añaden que, debido al número de muertes tanto en humanos como en animales, se deben fomentar más investigaciones sobre la toxicidad y seguridad de estas especies de plantas, lo cual afirma el basamento teórico de esta investigación.

La molécula Q104995817 se ubicó en la posición 6^{ta} como potencial bloqueador de Herg, sin embargo, en la predicción en ADMETlab ocupó el lugar 113 con un valor de 3.0 (Anexo 2). En cuanto a su biosíntesis, se sintetiza en la vía del mevalonato y se clasifica como esteroide, específicamente como bufadienólido. Considerando nuevamente que este tipo de moléculas tiene la capacidad de actuar a nivel cardíaco, es entendible que estas moléculas hayan sido clasificadas entre probables bloqueadores de HERG como lo hizo al menos unos de los programas (47–50).

Por su parte, codificado como Q104995816 (5-[(1R,2S,3aS,3bR,7S,9aR,9bR,11aR)-2,3a-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-7-

$\{[(2R,3R,4R,5R,6S)-3,4,5\text{-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy\}$ -
 1H,2H,3H,3aH,3bH,4H,5H,7H,8H,9H,9aH,9bH,10H,11H,11aH-
 cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]-2H-pyran-2-ona) (51), es referido como compuesto
 presente en *U. maritima* en las bases de datos de PubChem (52) y en el Diccionario
 Japonés de Sustancias Químicas [Nikkij] (53). Se encuentra ubicada en la 7^{ma}
 posición según Pred-hERG. En lo que respecta a su clasificación, esta molécula
 pertenece también al grupo de los terpenoides como superclase y los esteroides
 como clase. Además, se subclasifica también como en los casos anteriores como
 un bufadienólido (51).

Según Škubník et al. (54), esta molécula pertenece al grupo de compuestos
 conocidos como escilarenas, que son un tipo de glicósidos esteroidales que se
 encuentran en algunas plantas, especialmente en varias especies del género *Escila*,
 como la estudiada en esta investigación. Se conocen desde hace mucho tiempo
 como agentes cardiotónicos comúnmente utilizados para diversas enfermedades
 cardíacas debido a la inhibición de la actividad de bombeo de Na⁺/K⁺-ATPasa
 (NKA) y a la modulación de la contractilidad del músculo cardíaco (55).

Kopp et al. (56), aislaron cuarenta y un bufadienólidos de los bulbos de *U. maritima*
agg. en un estudio aplicado en Egipto; 26 de ellos fueron nuevos compuestos
 naturales en su tiempo. Dieciséis de los glucósidos derivaron de nueve agliconas
 estructuralmente nuevas: 16 *beta-hidroxi-escilarenina*, 16 *beta-O-acetil-*
escilarenina, 12 *beta-hidroxi-5 alfa-4,5-dihidro-escilirosidina*, 16 *beta-hidroxi-5 alfa -*
4,5-dihidro-escilirosidina, 16 *beta-O-acetil-5 alfa-4,5-dihidro-escilirosidina*, 12 *beta-*
hidroxi-escilirubrosidina, 16 *beta-O-acetil-escilirubrosidina*, 9-*hidroxi-*
escilifaeosidina y 12 *beta-hidroxi-desacetil-scilirosidina*. Esto demuestra que este
 tipo de moléculas son muy abundantes en la planta.

De forma semejante, El-Naggar et al. (57) obtuvieron treinta y tres compuestos de
 los bulbos de *U. maritima*. Diez de ellos eran nuevos compuestos naturales. Nueve
 eran bufadienólidos y sólo uno era lignano en estos compuestos.

La 8^{va} molécula, codificada como Q105034625, en LOTUS: *Natural Products Online*.
 En términos de su clasificación metabólica, este compuesto se en la vía relacionada

con la síntesis de los terpenoides, siendo más específicamente un esteroide y perteneciendo también a la subclase de los bufadienólidos (58). Apareciendo en el ADMETlab en la posición 52, con un valor de 21.6 (Anexo 2).

Así mismo, en misma base de datos, se encuentran los compuestos con el código Q105034622 (56) y Q105274060 (60). Ambos compuestos son también bufadienólidos y se ha revelado que son producidos por *U. maritima* en un estudio realizado en los años 90 en Egipto (56).

CAPÍTULO IV
CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

IV.1.- CONCLUSIONES

- Al término de este estudio, se lograron evaluar más de 150 moléculas diferentes en *U. maritima*. Mediante los programas virtuales Pred-hERG y ADMETlab 2.0, se evaluó la actividad cardiotoxica de estas moléculas. Se identificaron 23 de ellas que mostraron ser bloqueadoras del canal hERG en el miocardio. De estas, se seleccionaron las 10 con mejor índice de confiabilidad en cuanto a la predicción de su potencial para bloquear Herg. Dentro de este ranking establecido según el programa tomado como prototipo, 5 moléculas se agruparon en el grupo de los bufadienólidos, una perteneció a los glucósidos y otra a los diterpenoides; las otras tres, no se encontró literatura que las clasificara. Por tanto, se corroboró la necesidad de seguir aportando a la literatura científica publicada sobre estos nuevos avances y enfoques de consolidación, por la escasa información sobre varios de los compuestos que están presentes en estas plantas medicinales y de los que aún no existen evidencias experimentales sobre su cardiotoxicidad. De hecho, la mayoría de la bibliografía encontrada se enfoca en los efectos beneficiosos de algunos de los compuestos y no en sus efectos nocivos. Por ende, queda claro la importancia de continuar aportando conocimientos sobre nuevos fitofármacos y sus derivados.

IV.2.- RECOMENDACIONES

- Investigación adicional sobre los fitoquímicos identificados: Dado que se encontraron moléculas en *U. maritima* con potencial cardiotoxico, se sugiere realizar investigaciones adicionales para comprender mejor sus efectos y mecanismos de acción. Estudios complementarios, como ensayos in vitro e in vivo, podrían proporcionar información más detallada sobre la toxicidad cardíaca de estos fitoquímicos y su seguridad en diferentes contextos.
- Educación y concientización: Es esencial educar a los profesionales de la salud, los investigadores y el público en general sobre los resultados obtenidos en relación con la toxicidad cardíaca de los fitoquímicos de *U. maritima*. Esto ayudará a promover un uso responsable de la planta y a generar conciencia sobre los posibles riesgos asociados con su consumo.
- Investigación de alternativas terapéuticas: Los resultados obtenidos pueden motivar la investigación de alternativas terapéuticas que tengan propiedades beneficiosas sin los efectos cardiotoxicos asociados. Es importante explorar otras opciones naturales o sintéticas que puedan ofrecer beneficios similares sin comprometer la seguridad cardiovascular

BIBLIOGRAFÍA

1. Maryam A, Mehmood T, Yan Q, Li Y, Khan M, Ma T. Proscillaridin A Promotes Oxidative Stress and ER Stress, Inhibits STAT3 Activation, and Induces Apoptosis in A549 Lung Adenocarcinoma Cells. *Oxidative Medicine and Cellular Longevity*. 2018;2018:e3853409.
2. El-Seedi HR, Burman R, Mansour A, Turki Z, Boulos L, Gullbo J, et al. The traditional medical uses and cytotoxic activities of sixty-one Egyptian plants: Discovery of an active cardiac glycoside from *Urginea maritima*. *Journal of Ethnopharmacology*. 2013;145(3):746-57.
3. Carpio Arevalo JM, Amorim JC. An in-silico analysis reveals 7,7'-bializarin as a promising DNA gyrase B inhibitor on Gram-positive and Gram-negative bacteria. *Computers in Biology and Medicine*. 2021; 135: 104626; <https://doi.org/10.1016/j.combiomed.2021.104626>
4. El-Hagrassi AM, Osman AF, El-Manawaty MA, Eskander M, Nassar MI. Characterization and biological evaluation of the isolated phenolic constituents of *Urginea maritima* (L.) Aerial parts. *Bioscience Research*. 2019;16(1):720-32.
5. Iizuka M, Warashina T, Noro T. Bufadienolides and a new lignan from the bulbs of *Urginea maritima*. *Chem Pharm Bull (Tokyo)*. 2001;49(3):282-6.
6. Krenn L, Jelovina M, Kopp B. New bufadienolides from *Urginea maritima* sensu strictu. *Fitoterapia*. abril de 2000;71(2):126-9.

7. Planta y Hongos. *Urginea maritima* [Internet]. [citado 18 de diciembre de 2023]. Disponible en:
https://www.plantasyhongos.es/herbarium/htm/Urginea_maritima.htm
8. Martín IV, Medina-Gavilán JL. Intoxicación por consumo de órganos subterráneos de plantas herbáceas silvestres: diagnosis casuística en Andalucía occidental. *Revista de Salud Ambiental*. 2022;22(2):159-75.
9. Instituto Nacional de Salud Pública. Cebolla Albarrana, Cebolla Almorrana [Internet]. Ministerio de Salud; 2021 [citado 26 de febrero de 2024]. Disponible en:
<https://www.ispch.cl/wp-content/uploads/2021/10/Cebolla-Albarrana-30072021A.pdf>
10. López J. Fondo Europeo de Desarrollo Regional. 2021 [citado 18 de diciembre de 2023]. CEBOLLA ALBARRANA. *Urginea maritima* (= *Drimmia maritima*) [Liliaceae]. Disponible en:
https://www.regmurcia.com/servlet/s.SI?sit=c,365,m,1050&r=ReP-27524-DETALLE_REPORTAJESABUELO
11. Renobales G, Sallés J. *Urginea maritima*: morfología y ecología [Internet]. Plantas de interés farmacéutico; 2001. Disponible en:
<https://www.ehu.eus/documents/1686888/3913390/69.+Urginea+maritima.pdf>
12. He Y, Khan M, Yang J, Yao M, Yu S, Gao H. Proscillaridin A induces apoptosis, inhibits STAT3 activation and augments doxorubicin toxicity in prostate cancer cells. *Int J Med Sci*. 2018;15(8):832-9.

13. Shah V, Ferguson J, Hunsaker L, Deck L, DL V. Cardiac Glycosides Inhibit LPS-induced Activation of Pro-inflammatory Cytokines in Whole Blood through an NF-kB-dependent Mechanism. *International Journal of Applied Research in Natural Products*. 2011;4.
14. Shahin H, El-Hela AA, Nasr MI, Nasr GM. Effect of elicitors on cell suspension culture of *Urginea maritima* L. towards production of proscillaridin A. *FBL*. 2022;27(2):45.
15. Wang W, Mun B, Lee Y, Venkat Reddy M, Park Y, Lee J, et al. Bioactive sesterterpenoids from a Korean sponge *Monanchora* sp. *J Nat Prod*. 2013;76(2):170-7.
16. PubChem. Phorbaketal E [Internet]. [citado 26 de febrero de 2024]. Disponible en: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/71579367>
17. PubChem. Tigilanol Tiglate [Internet]. 2015 [citado 26 de febrero de 2024]. Disponible en: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/92135637>
18. PubChem. Glucoscilliroside [Internet]. 2011 [citado 26 de febrero de 2024]. Disponible en: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/52931498>
19. Bala R, Kaul V. URGINEA INDICA – IMPORTANCE AND NEED FOR AWARENESS. *Journal of Plant Development Sciences*. 2014;6(4):593-7.
20. PubChem. Scilliphaeoside [Internet]. 2007 [citado 26 de febrero de 2024]. Disponible en: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/12315402>

21. Oum B, Charef N, Amamra S, Zerargui F, Baghiani A, Khenouf S, et al. Chromatographic fractionation, antioxidant and antibacterial activities of *Urginea maritima* methanolic extract. *Pharm Sci*. 2018;30(1):127-34.
22. Boumerfeg S, Baghiani A, Messaoudi D, Khenouf S, Arrar L. Antioxidant properties and xanthine oxidase inhibitory effects of *Tamus communis* L. root extracts. *Phytother Res*. 2009;23(2):283-8.
23. Botelho AFM, Pierezan F, Soto-Blanco B, Melo MM. A review of cardiac glycosides: Structure, toxicokinetics, clinical signs, diagnosis and antineoplastic potential. *Toxicon*. 2019;158:63-8.
23. El Harchi A, Hancox JC. hERG agonists pose challenges to web-based machine learning methods for prediction of drug-hERG channel interaction. *Journal of Pharmacological and Toxicological Methods*. 2023;123:107293.
24. Perrin MJ, Subbiah RN, Vandenberg JI, Hill AP. Human ether-a-go-go related gene (hERG) K⁺ channels: function and dysfunction. *Prog Biophys Mol Biol*. 2008;98(2-3):137-48.
25. Lozano-Aponte J, Scior T. ¿Qué sabe Ud. acerca de...QSAR? *Revista mexicana de ciencias farmacéuticas*. 2012;43(2):82-4.
26. protoqsar. Modelos QSAR [Internet]. ProtoQSAR. 2021 [citado 18 de diciembre de 2023]. Disponible en: <https://protoqsar.com/modelos-qsar/>
27. Carpio Arévalo JM, Feuser PE, Rossi GR, Trindade ES, et al. Preparation and characterization of 4-nitrochalcone-folic acid-poly (methyl methacrylate)

nanocapsules and cytotoxic activity on HeLa and NIH3T3 cells. *J Drug Delivery Sci and Tech.* 2019; 54(12): 101300: <https://doi.org/10.1016/j.jddst.2019.101300>.

28. Cavalluzzi MM, Imbrici P, Gualdani R, Stefanachi A, Mangiatordi GF, Lentini G, et al. Human ether-à-go-go-related potassium channel: exploring SAR to improve drug design. *Drug Discovery Today.* 2020;25(2):344-66.

29. Cai C, Guo P, Zhou Y, Zhou J, Wang Q, Zhang F, et al. Deep Learning-Based Prediction of Drug-Induced Cardiotoxicity. *J Chem Inf Model.* 2019;59(3):1073-84.

30. Amorim JC, Cabrera Bermeo AE, Vásquez Urgilés VE, Martínez León MR, Carpio Arévalo JM. An In-Silico Evaluation of Anthraquinones as Potential Inhibitors of DNA Gyrase B of *Mycobacterium tuberculosis*. *Microorganisms.* 2022; 10(12), 2434; <https://doi.org/10.3390/microorganisms10122434>.

31. Amorim JC, Carpio JM. Alpha-Naphthoflavone as a Novel Scaffold for the Design of Potential Inhibitors of the APH(3')-IIIa Nucleotide-Binding Site of *Enterococcus faecalis*. *Microorganisms* 2023, 11(9), 2351; <https://doi.org/10.3390/microorganisms11092351>.

32. Amorim J, Vásquez V, Cabrera A, Martínez M, Carpio J. In Silico and In Vitro Identification of 1, 8-Dihydroxy-4, 5-dinitroanthraquinone as a New Antibacterial Agent against *Staphylococcus aureus* and *Enterococcus faecalis*. *Molecules* 2024, 29(1), 203; <https://doi.org/10.3390/molecules29010203>.

33. Xiong G, Wu Z, Yi J, Fu L, Yang Z, Hsieh C, et al. ADMETlab 2.0: an integrated online platform for accurate and comprehensive predictions of ADMET properties. *Nucleic Acids Res.* 2 de julio de 2021;49(W1):W5-14.
34. Kim YG, Lee JH, Lee S, Lee YK, Hwang BS, Lee J. Antibiofilm Activity of Phorbaketals from the Marine Sponge *Phorbasp* against *Staphylococcus aureus*. *Mar Drugs.* 24 de mayo de 2021;19(6):301.
35. Said AAE, Khalaf Mahmoud B, Zekry Attia E, Ramadan Abdelmohsen U, Ahmed Fouad M. Bioactive natural products from marine sponges belonging to family Hymedesmiidae. *RSC Advances.* 2021;11(27):16179-91.
36. PubChem. Tigilanol Tiglate [Internet]. [citado 27 de marzo de 2024]. Disponible en: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/92135637>
37. Ridder TD, Reddell P, Jones P, Brown G, Campbell J. Tigilanol Tiglate-Mediated Margins: A Comparison With Surgical Margins in Successful Treatment of Canine Mast Cell Tumours. *Frontiers in Veterinary Science* [Internet]. 15 de diciembre de 2021 [citado 27 de marzo de 2024];8. Disponible en: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC8715915/>
38. Byun MR, Lee CH, Hwang JH, Kim AR, Moon SA, Sung MK, et al. Phorbaketal A inhibits adipogenic differentiation through the suppression of PPAR γ -mediated gene transcription by TAZ. *European Journal of Pharmacology.* 2013;718(1-3):181-7.

39. ChEMBL. EMBL-EBI. 2024 [citado 27 de marzo de 2024]. Compound Report Card. Disponible en: https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound_report_card/CHEMBL1988384/
40. Khattab OM, El-Kersh DM, Khalifa SAM, Yosri N, El-Seedi HR, Farag MA. Comparative MS- and NMR-Based Metabolome Mapping of Egyptian Red and White Squill Bulbs F. Liliaceae and in Relation to Their Cytotoxic Effect. *Plants (Basel)*. 23 de mayo de 2023;12(11):2078.
41. Iizuka M, Warashina T, Noro T. Bufadienolides and a New Lignan from the Bulbs of *Urginea maritima*. 2001;49(3).
42. Krenn L, Jelovina M, Kopp B. New bufadienolides from *Urginea maritima sensu strictu*. *Fitoterapia*. 1 de abril de 2000;71(2):126-9.
43. Chemical Book. Chemical Book. 2023 [citado 27 de marzo de 2024]. Scillaren A. Disponible en: https://www.chemicalbook.com/ProductChemicalPropertiesCB5940503_EN.htm
44. BIOSYNTH. Biosynth Ltd. 2024 [citado 27 de marzo de 2024]. XS161356 | 124-99-2 | Scillaren A | Biosynth. Disponible en: <https://www.biosynth.com/p/XS161356/124-99-2-scillaren-a#nav-desc>
45. Department of Pharmacognosy and Nutriciology. National University of Pharmacy. 2020 [citado 27 de marzo de 2024]. Theoretical-part-on-cardioglycosides.pdf. Disponible en: <https://cnc.nuph.edu.ua/wp-content/uploads/2020/05/Theoretical-part-on-cardioglycosides.pdf>

46. Manganyi MC, Tlatsana GS, Mokoroane GT, Senna KP, Mohaswa JF, Ntsayagae K, et al. Bulbous Plants *Drimia*: “A Thin Line between Poisonous and Healing Compounds” with Biological Activities. *Pharmaceutics*. 1 de septiembre de 2021;13(9):1385.
47. LOTUS: Natural Products Online. LOTUS: Natural Products Online. 2021 [citado 27 de marzo de 2024]. Q104995817. Disponible en: https://lotus.naturalproducts.net/compound/lotus_id/LTS0067055
48. PubChem. 5-[14,16-Dihydroxy-10,13-dimethyl-3-(3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl)oxy-1,2,3,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahydrocyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one [Internet]. [citado 27 de marzo de 2024]. Disponible en: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/162955697>
49. Kazemi Rad H, Memarzia A, Amin F, Boskabady MH. Relaxant Effect of *Urginea maritima* on Tracheal Smooth Muscle Mediated by the Effect on Beta-2 Adrenergic, Muscarinic Receptors and Calcium and Potassium Channels. *Evid Based Complement Alternat Med*. 2021;2021:6637990.
50. Rhimi W, Ben salem I, Camarda A, Saidi M, Boulila A, Otranto D, et al. Chemical characterization and acaricidal activity of *Drimia maritima* (L) bulbs and *Dittrichia viscosa* leaves against *Dermanyssus gallinae*. *Veterinary Parasitology*. 1 de abril de 2019;268:61-6.

51. LOTUS: Natural Products Online. Q104995816 [Internet]. 2021 [citado 27 de marzo de 2024]. Disponible en: https://lotus.naturalproducts.net/compound/lotus_id/LTS0207171
52. PubChem. 4,5-Dihydro-5alpha-scillaren A [Internet]. 2016 [citado 27 de marzo de 2024]. Disponible en: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/substance/275098162>
53. Japan Science and Technology Agency. J-GLOBAL. 2021 [citado 27 de marzo de 2024]. 4,5-Dihydro-5 α -scillaren A | Chemical Substance Information | J-GLOBAL. Disponible en: https://jglobal.jst.go.jp/en/detail?JGLOBAL_ID=200907038152994076
54. Škubník J, Pavlíčková V, Rimpelová S. Cardiac Glycosides as Immune System Modulators. *Biomolecules*. 29 de abril de 2021;11(5):659.
55. Matsuo Y, Yamashiro A, Ootomo K, Nakagawa M, Tsuchihashi H, Inaba N, et al. Chemical Constituents of the Bulbs of *Scilla peruviana* and Their Pancreatic Lipase Inhibitory Activity. *Int J Mol Sci*. 27 de enero de 2021;22(3):1262.
56. Kopp B, Krenn L, Draxler M, Hoyer A, Terkola R, Vallaster P, et al. Bufadienolides from *Urginea maritima* from Egypt. *Phytochemistry*. 1 de mayo de 1996;42(2):513-22.
57. El-Naggar HM, Shehata AM, Morsi MAA. Micropropagation and GC–MS analysis of bioactive compounds in bulbs and callus of white squill. *In Vitro CellDevBiol-Plant*. 1 de febrero de 2023;59(1):154-66.

58. LOTUS: Natural Products Online. Q105034625 [Internet]. 2021 [citado 27 de marzo de 2024]. Disponible en: https://lotus.naturalproducts.net/compound/lotus_id/LTS0174747
59. LOTUS: Natural Products Online. Q105034622 [Internet]. 2021 [citado 27 de marzo de 2024]. Disponible en: https://lotus.naturalproducts.net/compound/lotus_id/LTS0231013
60. LOTUS: Natural Products Online. Q105274060 [Internet]. 2021 [citado 27 de marzo de 2024]. Disponible en: https://lotus.naturalproducts.net/compound/lotus_id/LTS0274536

ABREVIATURAS

- *U. maritima*: *Urginea maritima*
- hERG: Human Ether-à-go-go-Related Gene
- QSAR: Análisis de Relación Cuantitativa Estructura-Actividad

ANEXOS

- **Anexo 1.** Cardiotoxicidad de moléculas derivadas de *U. maritima* según Pred-eHRG

Código	SMILES	Nombre IUPAC	Bloqueador canal hERG	Predicción	Ranking
Q10515291 2	<chem>CO[C@H]1C=C2CC[C@@H]3[C@H](C[C@@H](O)[C@]4(C)[C@@H](c5ccc(=O)oc5)CC[C@]34O)[C@@]2(C)CC1</chem>	Phorbaketal E	Bloqueador	79.82	1
Q10515664 5	<chem>C[C@]12CC[C@H](O[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C1CC[C@@H]1[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](c3ccc(=O)oc3)[C@@H](O)C[C@]12O</chem>	Tiglatol de tigilanol	Bloqueador	64.54	2
Q10503230 9	<chem>C(=O)OC1CC2(O)C(CCC3(C)C(c4ccc(=O)oc4)CCC32O)C2(C)C(C)C(OC3OC(C)C(O)C(O)C3O)C=C12</chem>	3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-7-[(3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl)oxy]-1h,2h,3h,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	Bloqueador	61.21	3
Q10528700 2	<chem>[C@@]2(C)CC[C@H](O)C=C12</chem>	(1r,3ar,3bs,5r,7s,9ar,9br,11r,11as)-3a,3b,7,11-tetrahydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-1h,2h,3h,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	Bloqueador	55.55	4
Q10524897 9	<chem>CC1C(O)C(OC2C(O)C(O)C(O)C(CO)O2)C(O)C(O)[C@H]2CC[C@@]3(C)C(C)[C@H]4[C@]5(O)[C@@]([C@H](CC5)c5coc(=O)cc5)(C)CC[C@@H]43)=C2)O1</chem>	5-[(1r,3as,3br,7s,9ar,9bs,11ar)-7-[(3,5-dihydroxy-6-methyl-4-[(3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl)oxy]oxan-2-yl)oxy]-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	Bloqueador	55.55	5
Q10499581 7	<chem>CC1OC(OC2C=C3CCC4C(CCC5(C)C(c6ccc(=O)oc6)C(O)CC45O)C3(C)CC2)C(O)C(O)C1O</chem>	5-[14,16-Dihydroxy-10,13-dimethyl-3-(3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl)oxy]-1,2,3,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahydrocyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	Bloqueador	55.42	6
Q10499581 6	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@@H]4[C@@H](CC[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)[C@@H](O)C[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	[(3S,8R,9R,10R,13R,14S,16S,17R)-14,16-dihydroxy-10,13-dimethyl-3-[(2R,3R,4R,5R,6S)-3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy]-1,2,3,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahydrocyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	Bloqueador	55.42	7
Q10503462 5	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@@H]4[C@@H](C[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)[C@H](O)C[C@]45O)[C@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O[C@@H]1O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]2O[C@H](CO)</chem>	5-[(1r,2r,3as,3br,7s,9as,9bs,11ar)-7-[(2r,3r,4s,5r,6s)-5-[(2s,3r,4r,5s,6r)-3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-	Bloqueador	53.89	8

Código	SMILES	Nombre IUPAC	Bloqueador canal hERG	Predicción	Ranking
	<chem>[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]2O[C@H](O)[C@H]1O</chem>	(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)oxan-2-yl]oxy)-3,4-dihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy)-2,3a-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one			
Q10503462 2	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O)[C@@H]2C=C3CC[C@@H]4[C@H](C[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)[C@@H](O)C[C@]45O)[C@@]3(C)CC2[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O[C@@H]1O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H](O)[C@H]1O</chem>	5-[(1r,2s,3as,3br,7s,9ar,9bs,11ar)-7-[(2r,3r,4s,5r,6s)-5-[(2s,3r,4r,5s,6r)-3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[(2s,3r,4r,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)oxan-2-yl]oxy)-3,4-dihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy)-2,3a-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	Bloqueador	53.89	9
Q10527406 0	<chem>CC(=O)[C@@H]1C[C@]2(O)[C@H](CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O)[C@@H]3OC(CO)[C@@H](O)[C@@H]4OC(CO)[C@@H](O)[C@H](O)C4O)[C@H](O)C3O)C=C12</chem>	5-[7-[(3,4-dihydroxy-6-methyl-5-[(3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl)oxy]oxan-2-yl]oxy)-3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	Bloqueador	53.74	10
Q10528238 6	<chem>CC1OC(OC2C(C)OC(OC3C=C4CCC5(O)C(CCC6(C)C(c7ccc(=O)oc7)CCC65O)C4(C)CC3)C(O)C2O)C(O)C(O)C1O</chem>	5-[3-[3,4-dihydroxy-6-methyl-5-(3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl)oxyoxan-2-yl]oxy-8,14-dihydroxy-10,13-dimethyl-2,3,6,7,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	Bloqueador	52.78	11
Q10528238 7	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O)[C@@H]2C=C3CC[C@]4(O)[C@H](CC[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)CC2[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O[C@@H]1O[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]1O</chem>	3beta-(4-O-alpha-L-Rhamnopyranosyl-alpha-L-rhamnopyranosyloxy)-8,14-dihydroxybufa-4,20,22-trienolide	Bloqueador	52.78	12
Q10523882 0	<chem>CC(=O)OC1C(O)C(OC2C=C3CC4C(CCC5(C)C(c6ccc(=O)oc6)CCC45O)C3(C)CC2)OC(C)C1OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O</chem>	[3-Hydroxy-2-[[14-hydroxy-10,13-dimethyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-1,2,3,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahydrocyclopenta[a]phenanthren-3-yl]oxy]-6-methyl-5-[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxyoxan-4-yl] acetate (2r,3s,4s,5r,6s)-2-(hydroxymethyl)-6-{4-[(2s,3r)-3-(hydroxymethyl)-7-methoxy-5-[(1e)-3-methoxyprop-1-en-1-yl]-2,3-dihydro-1-benzofuran-2-yl]-2-methoxyphenoxy}oxane-3,4,5-triol	Bloqueador	52.67	13
Q10521800 0	<chem>COC/C=C/c1cc(OC)c2c(c1)[C@H](CO)[C@@H](c1ccc(O)[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)c(OC)c1O2</chem>	(hydroxymethyl)-6-{4-[(2s,3r)-3-(hydroxymethyl)-7-methoxy-5-[(1e)-3-methoxyprop-1-en-1-yl]-2,3-dihydro-1-benzofuran-2-yl]-2-methoxyphenoxy}oxane-3,4,5-triol	Bloqueador	51.3	14

Código	SMILES	Nombre IUPAC	Bloqueador canal hERG	Predicción	Ranking
Q10515291 6	<chem>CO[C@@H]1C=C2CC[C@@H]3[C@H](C[C@@H](O)[C@]4(C)[C@@H](c5ccc(=O)oc5)CC[C@]34O)[C@@]2(C)CC1</chem>	5- [(1r,3as,3br,7s,9ar,9bs,11r,11as)-3a,11-dihydroxy-7-methoxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	Bloqueador	79,82	15
Q10515664 6	<chem>CC12CCC(OC3OC(CO)C(O)C(O)C3O)C=C1CCC1C2CCC2(C)C(c3ccc(=O)oc3)C(O)CC12O</chem>	5-(2,3a-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-7-[[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl)pyran-2-one	Bloqueador	64,54	16
Q10532987 5	<chem>CC12CCC(OC3OC(CO)C(O)C(O)C3O)C=C1C(O)CC1(O)C2CCC2(C)C(c3ccc(=O)oc3)CCC21O</chem>	5-(3a,3b,5-trihydroxy-9a,11a-dimethyl-7-[[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]-1h,2h,3h,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl)pyran-2-one	Bloqueador	59,28	17
Q82995153	<chem>C[C@]12CC[C@H](O)[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C1[C@H](O)C[C@]1(O)[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@]12O</chem>	5- [(1r,3ar,3bs,5r,7s,9ar,9br,11ar)-3a,3b,5-trihydroxy-9a,11a-dimethyl-7-[[2r,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]-1h,2h,3h,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	Bloqueador	59,28	18
Q10503462 3	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O)[C@@H]2C=C3CC[C@@H]4[C@H](C[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)[C@@H](O)C[C@]45O)[C@@]3(C)CC2[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O[C@@H]1O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]2O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	5- [(1r,2s,3as,3br,7s,9ar,9bs,11ar)-7-[[2r,3r,4s,5r,6s)-5-[[2s,3r,4r,5s,6r)-3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[[2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy]-3,4-dihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy]-2,3a-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	Bloqueador	53,89	19
Q10503462 4	<chem>CC1OC(OC2C=C3CCC4C(CCC5(C)C(c6ccc(=O)oc6)C(O)CC45O)C3(C)CC2)C(O)C(O)C1OC1OC(CO)C(OC2OC(CO)C(O)C(O)C2O)C(O)C1O</chem>	5-{7-[(5-[[3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy]-3,4-dihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy]-2,3a-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	Bloqueador	53,89	20
Q10531160 4	<chem>CC(=O)OC1C(OC2C=C3CCC4C(CCC5(C)C(c6ccc(=O)oc6)CCC4</chem>	2-[[3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh	Bloqueador	50,61	21

Código	SMILES	Nombre IUPAC	Bloqueador canal hERG	Predicción	Ranking
	<chem>5O)C3(C)CC2)OC(C)C(OC2OC(CO)C(O)C(O)C2O)C1O</chem>	,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-7-yl]oxy)-4-hydroxy-6-methyl-5-[[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-3-yl acetate			
Q10531160 3	<chem>CC(=O)O[C@H]1[C@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@@H]4[C@H](CC[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)O[C@@H](C)[C@H](O[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]2O)[C@H]1O</chem>	(2r,3r,4r,5r,6s)-2-[[[(1r,3as,3br,7s,9ar,9bs,11ar)-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-7-yl]oxy)-4-hydroxy-6-methyl-5-[[[(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-3-yl acetate	Bloqueador	50,61	22
Q10515291 4	<chem>COC1C=C2CCC3C(CC(O)C4(C)C(c5ccc(=O)oc5)CCC34O)C2(C)CC1</chem>	5-{3a,11-dihydroxy-7-methoxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	Bloqueador	79,82	23
Q10438898 8	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@H]2CC[C@]3(C)[C@H]4[C@H](O)C[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]5(O)[C@@H]4CC[C@@H]3C2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	5-[[[(1r,3as,3br,5ar,7s,9as,9bs,10r,11ar)-3a,10-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-7-[[[(2r,3r,4r,5r,6s)-3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy]-tetradecahydrocyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	96.35	24
Q10531188 5	<chem>COC1C(O)C(C)OC(OC2CCC3(C)C(C2)C(OC(C)=O)CC2(O)C3CC(O)C3(C)C(c4ccc(=O)oc4)CCC23O)C1O</chem>	[3-(3,5-dihydroxy-4-methoxy-6-methyloxan-2-yl)oxy-8,12,14-trihydroxy-10,13-dimethyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-2,3,4,5,6,7,9,11,12,15,16,17-dodecahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-6-yl] acetate	No Bloqueador	90.37	25
Q10528700 2	<chem>CC(=O)O[C@@H]1[C@H](O)[C@]2(O)[C@H](C[C@@H](O)[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O)C=C12</chem>	(1r,3ar,3bs,5r,7s,9ar,9br,11r,11as)-3a,3b,7,11-tetrahydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-1h,2h,3h,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	No Bloqueador	90.23	26
Q10536900 5	<chem>COC1C(O)C(OC2CCC3(C)C(C2)C(OC(C)=O)CC2(O)C3CC(O)C3(C)C(c4ccc(=O)oc4)CCC23O)O)C(C)C1OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O</chem>	[8,12,14-trihydroxy-3-[3-hydroxy-4-methoxy-6-methyl-5-[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxyoxan-2-yl]oxy-10,13-dimethyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-2,3,4,5,6,7,9,11,12,15,16,17-dodecahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-6-yl] acetate	No Bloqueador	89.02	27
Q10536900 4	<chem>CO[C@@H]1[C@@H](O)[C@@H](O)[C@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]2O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	(1r,3ar,3bs,5r,5as,7s,9as,9br,11r,11as)-3a,3b,11-trihydroxy-7-[[[(2r,3s,4s,5s,6s)-3-hydroxy-4-methoxy-6-methyl-5-	No Bloqueador	89.02	28

Código	SMILES	Nombre IUPAC	Bloqueador canal hERG	Predicción	Ranking
	<chem>C@H](C2)[C@H](OC(C)=O)C[C@]2(O)[C@@H]3C[C@@H](O)[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@H]1O</chem>	{[(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy}oxan-2-yl]oxy)-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-dodecahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate			
Q105330708	<chem>C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](C)CC4=C[C@@H](O)CC[C@@]43C=O)[C@@]1(O)CC[C@@H]2c1ccc(=O)oc1</chem>	(1r,3as,3br,7s,9as,9bs,11ar)-3a,7-dihydroxy-11a-methyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthrene-9a-carbaldehyde	No Bloqueador	88.05	29
Q105330710	<chem>C[C@]12CC[C@H]3C(CCC4=C[C@@H](O)CC[C@@]43C=O)[C@@]1(O)CC[C@@H]2c1ccc(=O)oc1</chem>	3-beta,14-Dihydroxy-19-oxobufa-4,20,22-trienolide	No Bloqueador	88.05	30
Q105330703	<chem>C[C@]12CCC3C(CCC4=C[C@@H](O)CC[C@@]43C=O)[C@@]1(O)CC[C@@H]2c1ccc(=O)oc1</chem>	(1R,3aS,7S,9aS,11aR)-3a,7-dihydroxy-11a-methyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-1H,2H,3H,3bH,4H,5H,7H,8H,9H,9bH,10H,11H-cyclopenta[a]phenanthrene-9a-carbaldehyde	No Bloqueador	88.05	31
Q104944165	<chem>CC12CCC3C(CCC4=CC(=O)CC43CO)C1(O)CCC2c1ccc(=O)oc1</chem>	5-[14-hydroxy-10-(hydroxymethyl)-13-methyl-3-oxo-2,6,7,8,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	87.66	32
Q104944152	<chem>C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](C)CC4=CC(=O)CC[C@@]43CO)[C@@]1(O)CC[C@@H]2c1ccc(=O)oc1</chem>	3-Oxo-14,19-dihydroxybufa-4,20,22-trienolide	No Bloqueador	87.66	33
Q104976175	<chem>CC(=O)O[C@H]1C[C@]2(O)[C@@H]3CC[C@]4(O)[C@@H]5O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]5O)C=CCC[C@]4(C=O)[C@H]3CC[C@]2(C)[C@H]1c1ccc(=O)oc1</chem>	[(5S,8R,9S,10S,13R,14S,16S,17R)-10-formyl-14-hydroxy-13-methyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-5-[(2S,3R,4S,5S,6R)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy-2,6,7,8,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-16-yl] acetate	No Bloqueador	85.36	34
Q104976174	<chem>CC(=O)OC1CC2(O)C3CCC4(OC5OC(CO)C(O)C(O)C5O)C=CCC4(C=O)C3CCC2(C)C1c1ccc(=O)oc1</chem>	9a-formyl-3a-hydroxy-11a-methyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-5a-[[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]-1H,2H,3H,3bH,4H,5H,8H,9H,9bH,10H,11H-cyclopenta[a]phenanthren-2-yl acetate	No Bloqueador	85.36	35
Q104953045	<chem>COC1C(O)C(OC2CCC3(C)C(C2)C(OC(C)=O)CC2(O)C3CCC3(C)C(c4ccc(=O)oc4)C(OC(C)=O)CC32O)OC(C)C1OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O</chem>	[16-acetyloxy-8,14-dihydroxy-3-[3-hydroxy-4-methoxy-6-methyl-5-[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxyoxan-2-yl]oxy-10,13-dimethyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-2,3,4,5,6,7,9,11,12,15,16,17-	No Bloqueador	85.07	36

Código	SMILES	Nombre IUPAC	Bloqueador canal hERG	Predicción	Ranking
		dodecahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-6-yl] acetate			
Q10495304 7	<chem>CO[C@@H]1[C@@H](O[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H](O)[C@H]2O)[C@H](C)O[C@@H](O)[C@H]2CC[C@@]3(C)[C@H](C2)[C@H](OC(C)=O)C[C@]2(O)[C@@H]3CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)[C@@H](OC(C)=O)C[C@]23O)[C@H]1O</chem>	(1r,2s,3ar,3bs,5r,5as,7s,9as,9br,11ar)-5-(acetyloxy)-3a,3b-dihydroxy-7-[[{(2r,3s,4s,5s,6s)-3-hydroxy-4-methoxy-6-methyl-5-[[{(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy]-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-dodecahydro-1h-cyclopenta[a]phenanthren-2-yl] acetate	No Bloqueador	85.07	37
Q10511179 6	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@]3(O)CCC4=C[C@@H](O)[C@@H]5O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]5O)CC[C@@]4(C)[C@@H]3CC[C@]2(C)[C@H]1c1ccc(=O)oc1</chem>	[(3S,8S,9S,10S,13R,14R,16R,17R)-8,14-dihydroxy-10,13-dimethyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-3-[[{(2R,3R,4S,5S,6R)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]-2,3,6,7,9,11,12,15,16,17-dodecahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-16-yl] acetate	No Bloqueador	79.22	38
Q10528905 7	<chem>CC(=O)OC1CC2(O)C3CCC4=CC(OC5OC(C)C(O)C(O)C5O)CC4(C)C3CCC2(C)C1c1ccc(=O)oc1</chem>	[14-Hydroxy-10,13-dimethyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-3-(3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl)oxy-1,2,3,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahydrocyclopenta[a]phenanthren-16-yl] acetate	No Bloqueador	79.0	39
Q10528905 6	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@@H]3CCC4=C[C@@H](O)[C@@H]5O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]5O)CC[C@@]4(C)[C@@H]3CC[C@]2(C)[C@H]1c1ccc(=O)oc1</chem>	(1r,2r,3as,3br,7s,9as,9bs,11ar)-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-7-[[{(2r,3r,4r,5r,6s)-3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy]-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-2-yl] acetate	No Bloqueador	79.0	40
Q10528905 9	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@@H]3CCC4=C[C@@H](O)[C@@H]5O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]5O)CC[C@@]4(C)[C@@H]3CC[C@]2(C)[C@H]1c1ccc(=O)oc1</chem>	(1r,2s,3as,3br,7s,9ar,9bs,11ar)-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-7-[[{(2r,3r,4r,5r,6s)-3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy]-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-2-yl] acetate	No Bloqueador	79.0	41
Q10526300 4	<chem>C[C@@]12[C@@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@]1(O)[C@@H]1CCC3=C[C@@H](O)[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O)CC[C@]3(C=O)[C@H]1C[C@H]2O</chem>	(3S,8R,9S,10S,12R,13S,14S,17R)-12,14-dihydroxy-13-methyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-3-[[{(2R,3R,4S,5S,6R)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]-1,2,3,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahydrocyclopenta[a]phenanthrene-10-carbaldehyde	No Bloqueador	77.08	42
Q10526300 5	<chem>CC12C(O)CC3C(CCC4=CC(OC5OC(CO)C(O)C(O)C5O)CCC43C=O)C1(O)CCC2c1ccc(=O)oc1</chem>	3a,11-dihydroxy-11a-methyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-7-[[3,4,5-trihydroxy-6-	No Bloqueador	77.08	43

Código	SMILES	Nombre IUPAC	Bloqueador canal hERG	Predicción	Ranking
		(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthrene-9a-carbaldehyde			
Q105350608	<chem>COC1C(O)C(C)OC(OC2CCC3(C)C(C2)C(OC(C)=O)CC2(O)C3CC3(C)C(c4ccc(=O)oc4)C(O)CC32O)C1O</chem>	[3-(3,5-dihydroxy-4-methoxy-6-methyloxan-2-yl)oxy-8,14,16-trihydroxy-10,13-dimethyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-2,3,4,5,6,7,9,11,12,15,16,17-dodecahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-6-yl] acetate	No Bloqueador	76.97	44
Q105191794	<chem>CC12CCC3C(CCC4C=CCCC43C=O)C1(O)CCC2c1ccc(=O)oc1</chem>	14-Hydroxy-13-methyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-1,2,5,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahydrocyclopenta[a]phenanthrene-10-carbaldehyde	No Bloqueador	75.73	45
Q105159199	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@H]2CC[C@@]3(C)[C@@H](CC[C@@H]4[C@@H]3CC[C@]3(C)[C@@H](c5ccc(=O)oc5)CC[C@]43O)C2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O[C@@H]1O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	4,5-Dihydro-5alpha-scillaren A	No Bloqueador	74.95	46
Q105159198	<chem>CC1OC(OC2CCC3(C)C(CCC4C3CCC3(C)C(c5ccc(=O)oc5)CCC43O)C2)C(O)C(O)C1OC(C)C(O)C(O)C1O</chem>	5-{7-[(3,4-dihydroxy-6-methyl-5-[[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy}oxan-2-yl)oxy]-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-tetradecahydrocyclopenta[a]phenanthren-1-yl}pyran-2-one	No Bloqueador	74.95	47
Q105218252	<chem>CC(=O)OC1CC2(O)C(CCC3(C)C(c4ccc(=O)oc4)CCC32O)C2(C)CCC(OC3OC(C)C(OC4OC(CO)C(O)C(O)C4O)C(O)C3O)CC12</chem>	[3-[3,4-dihydroxy-6-methyl-5-[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxyoxan-2-yl]oxy-8,14-dihydroxy-10,13-dimethyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-2,3,4,5,6,7,9,11,12,15,16,17-dodecahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-6-yl] acetate	No Bloqueador	74.74	48
Q105218250	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@H](CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O)[C@@H]3O[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O)[C@@H](O)[C@H]3O)[C@H]12</chem>	(1r,3ar,3bs,5r,5as,7s,9as,9br,11ar)-7-[[[(2r,3r,4s,5r,6s)-3,4-dihydroxy-6-methyl-5-[[[(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy}oxan-2-yl]oxy]-3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-dodecahydro-1h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl] acetate	No Bloqueador	74.74	49
Q105005672	<chem>CC1OC(OC2C=C3CCCC4C(O)C(C(O)C5(C)C(c6ccc(=O)oc6)CCC45O)C3(C)CC2)C(O)C(O)C1O</chem>	5-[9,12,14-trihydroxy-10,13-dimethyl-3-(3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl)oxy-2,3,6,7,8,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	74.47	50

Código	SMILES	Nombre IUPAC	Bloqueador canal hERG	Predicción	Ranking
Q105005670	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@H]4[C@@]5(O)CC[C@H](c6ccc(=O)oc6)[C@@]5(C)[C@H](O)C[C@]4(O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	9-Hydroxyscilliphaeoside	No Bloqueador	74.47	51
Q105160366	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@H](C[C@@H](O)[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@]2(C)CC[C@H](O)[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C12</chem>	12beta-Hydroxyscilliroside	No Bloqueador	74.07	52
Q105210701	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@H](CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O)[C@@H]3O[C@H](C)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]3O)C[C@H]12</chem>	[(3S,5S,6R,8S,9R,10S,13R,14R,17R)-8,14-dihydroxy-10,13-dimethyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-3-[(2R,3R,4R,5R,6S)-3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy-2,3,4,5,6,7,9,11,12,15,16,17-dodecahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-6-yl]acetate	No Bloqueador	73.8	53
Q105210704	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@H](CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O)[C@@H]3O[C@H](C)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]3O)C[C@H]12</chem>	(1r,3ar,3bs,5r,5as,7s,9as,9br,11ar)-3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-7-[[{(2r,3s,4r,5r,6s)-3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy]-dodecahydro-1h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	No Bloqueador	73.8	54
Q105375026	<chem>CC(=O)OC1CC2(O)C3CCC4=C(C(OC5OC(C)C(OC6OC(CO)C(O)C7OC(CO)C(O)C(O)C7O)C(O)C6O)C(O)C5O)CCC4(C)C3CCC2(C)C1c1ccc(=O)oc1</chem>	7-[(5-[[{3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[[{3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy}oxan-2-yl]oxy]-3,4-dihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy)-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-2-yl acetate	No Bloqueador	73.78	55
Q105116619	<chem>CC12CCC(=O)C=C1CCC1C2CC(O)C2(C)C(c3ccc(=O)oc3)CCC12O</chem>	5-(12,14-dihydroxy-10,13-dimethyl-3-oxo-2,6,7,8,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-17-yl)pyran-2-one	No Bloqueador	73.3	56
Q105116618	<chem>C[C@]12[C@H](O)C[C@H]3[C@@H](CCC4[C@]3(C)CCC(=O)C=4)[C@@]1(O)CC[C@@H]2c1ccc(=O)cc1</chem>	5-[(1r,3as,3br,9ar,9bs,11r,11as)-3a,11-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-7-oxo-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	73.3	57
Q105203735	<chem>CO[C@@H]1[C@@H](O)[C@H](C)O[C@@H](O[C@H]2CC[C@@]3(C)[C@H](C2)[C@H](OC(C)=O)C[C@]2(O)[C@@H]3CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@H]1O</chem>	[(3S,5S,6R,8S,9R,10S,13R,14R,17R)-3-[(2R,3S,4R,5S,6S)-3,5-dihydroxy-4-methoxy-6-methyloxan-2-yl]oxy-8,14-dihydroxy-10,13-dimethyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-2,3,4,5,6,7,9,11,12,15,16,17-dodecahydro-1H-	No Bloqueador	72.52	58

Código	SMILES	Nombre IUPAC	Bloqueador canal hERG	Predicción	Ranking
		cyclopenta[a]phenanthren-6-yl] acetate			
Q105347720	<chem>CC(=O)OC1CC2(O)C3CCC4=C(C(OC5OC(CO)C(OC6OC(CO)C(O)C(O)C6O)C(O)C5O)CCC4(C)C3CCC2(C)C1c1ccc(=O)oc1</chem>	[3-[3,4-Dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxyoxan-2-yl]oxy-14-hydroxy-10,13-dimethyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-1,2,3,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahydrocyclopenta[a]phenanthren-16-yl] acetate	No Bloqueador	72.39	59
Q105193437	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@H](CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O[C@@H]3O[C@@H](C)[C@H](O[C@@H]4O[C@@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]5O)[C@H](O)[C@H]4O)[C@@H](O)[C@@H]3O)C[C@H]12</chem>	(1r,3ar,3bs,5r,5as,7s,9as,9br,11ar)-7-(((2r,3s,4s,5r,6s)-5-((2s,3r,4r,5s,6r)-3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-((2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)oxan-2-yl]oxy)-3,4-dihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy)-3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-dodecahydro-1h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	No Bloqueador	71.75	60
Q105193438	<chem>CC(=O)OC1CC2(O)C(CCC3(C)C(c4ccc(=O)oc4)CCC32O)C2(C)CCC(OC3OC(C)C(OC4OC(CO)C(OC5OC(CO)C(O)C5O)C(O)C4O)C(O)C3O)CC12</chem>	7-((5-((3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-((3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)oxan-2-yl]oxy)-3,4-dihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy)-3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-dodecahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	No Bloqueador	71.75	61
Q105193439	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@H](CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O[C@@H]3O[C@@H](C)[C@H](O[C@@H]4O[C@@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]5O)[C@H](O)[C@H]4O)[C@@H](O)[C@@H]3O)C[C@H]12</chem>	(1r,3ar,3bs,5r,5as,7s,9as,9br,11ar)-7-(((2r,3r,4s,5r,6s)-5-((2s,3r,4r,5s,6r)-3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-((2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)oxan-2-yl]oxy)-3,4-dihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy)-3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-dodecahydro-1h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	No Bloqueador	71.75	62
Q105378881	<chem>CC12CCCC(=O)C=C1CCC1C2C(O)CC2(C)C(c3ccc(=O)oc3)CCC12O</chem>	5-(11,14-dihydroxy-10,13-dimethyl-3-oxo-2,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-17-yl)pyran-2-one	No Bloqueador	71.38	63
Q105350960	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@H](C[C@@]3(C)C[C@@H](O)[C@@H]5O)[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]5O)CC[C@]14</chem>	[(3S,8R,9S,10S,13R,14S,16R,17R)-14-hydroxy-10,13-dimethyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-3-((2R,3R,4S,5S,6R)-3,4,5-	No Bloqueador	70.09	64

Código	SMILES	Nombre IUPAC	Bloqueador canal hERG	Predicción	Ranking
	<chem>(C)[C@H]3CC[C@]2(C)[C@H]1c1ccc(=O)oc1</chem>	trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy-1,2,3,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahydrocyclopenta[a]phenanthren-16-yl] acetate			
Q10535096 2	<chem>CC(=O)OC1CC2(O)C3CCC4=C(C)(OC5OC(CO)C(O)C(O)C5O)C(C)C3CCC2(C)C1c1ccc(=O)oc1</chem>	(1r,2s,3as,3br,7s,9ar,9bs,11ar)-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-7-(((2r,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-2-yl acetate	No Bloqueador	70.09	65
Q10535096 1	<chem>CC(=O)OC1CC2(O)C3CCC4=C(C)(OC5OC(CO)C(O)C(O)C5O)C(C)C3CCC2(C)C1c1ccc(=O)oc1</chem>	3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-7-[[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-2-yl acetate	No Bloqueador	70.09	66
Q27117135	<chem>CC(O)[C@H]1C2[C@@](CC[C@@H](C=2)O)(C)[C@H]2CC[C@]3([C@@](O)([C@]2(O)C1)CC[C@@H]3c1coc(=O)cc1)C=O</chem>	Scillirosidin	No Bloqueador	69.44	67
Q10520142 8	<chem>C[C@]12CC[C@@H](O)C=C1C[C@@H]1[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@]12O</chem>	5-[(1r,3as,3br,7r,9ar,9bs,11ar)-3a,7-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	68.5	68
Q10520143 0	<chem>CC12CCC(O)C=C1CCC1C2CC2(C)C(c3ccc(=O)oc3)CCC12O</chem>	Scillarenin	No Bloqueador	68.5	69
Q27117429	<chem>C[C@]12CC[C@@H](O)C=C1CC[C@@H]1[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@@]21O</chem>	Scillarenin	No Bloqueador	68.5	70
Q27103365	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O)[C@@H]2C=C3CC[C@@H]4[C@H](C[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O[C@@H]1O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	Scillaren a	No Bloqueador	65.34	71
Q10518721 6	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O)[C@@H]2C=C3CC[C@@H]4[C@H](C[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O[C@@H]1O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	5-[(1r,3as,3br,7s,9ar,9bs,11ar)-7-(((2r,3r,4r,5r,6s)-3,4-dihydroxy-6-methyl-5-(((2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)oxan-2-yl]oxy)-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	65.34	72
Q10518721 8	<chem>CC1C(OC2C(O)C(O)C(O)C(CO)O2)C(O)C(O)C(OC2CCC3(C)C(CCC4C5(O)C(C(C5)c5coc(=O)cc5)(C)CCC43)=C2)O1</chem>	5-{7-[(3,4-dihydroxy-6-methyl-5-[[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy]-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-	No Bloqueador	65.34	73

Código	SMILES	Nombre IUPAC	Bloqueador canal hERG	Predicción	Ranking
		1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl)pyran-2-one			
Q105268928	<chem>CC12CCC3C(CCC4(O)C=CCCC34C=O)C1(O)CCC2c1ccc(=O)oc1</chem>	5,14-dihydroxy-13-methyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-2,6,7,8,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthrene-10-carbaldehyde	No Bloqueador	65.3	74
Q105268930	<chem>C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](C[C@]4(O)C=CCC[C@]34C=O)[C@@]1(O)CC[C@]2c1ccc(=O)oc1</chem>	(5S,8R,9S,10S,13R,14S,17R)-5,14-dihydroxy-13-methyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-2,6,7,8,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthrene-10-carbaldehyde	No Bloqueador	65.3	75
Q105289481	<chem>CC12CCC(OC3OC(CO)C(O)C(O)C3O)C=C1C(O)CC1(O)C2CC(O)C2(C)C(c3ccc(=O)oc3)CCC12O</chem>	5-[6,8,12,14-tetrahydroxy-10,13-dimethyl-3-[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy-2,3,6,7,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	64.93	76
Q105289480	<chem>C[C@@]12[C@@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@]1(O)[C@]1(O)C[C@@H](O)C3=C[C@@H](O)[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]4O)CC[C@]3(C)[C@H]1C[C@H]2O</chem>	6-Desacetyl-12beta-hydroxyscilliroside	No Bloqueador	64.93	77
Q105273124	<chem>CC1OC(OC2C=C3CCC4C(CCC5(C)C(c6ccc(=O)oc6)CCC45O)C3(C)CC2)C(O)C(O)C1OC(CO)C(OC2OC(CO)C(O)C2O)C(O)C1O</chem>	Glucoscillaren a	No Bloqueador	64.33	78
Q105370424	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@@H]4[C@H](C[C@@H](O)[C@]5(C)[C@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	5-[(3S,8R,9S,10R,12R,13S,14S,17S)-12,14-dihydroxy-10,13-dimethyl-3-[(2R,3R,4R,5R,6S)-3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy-1,2,3,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahydrocyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	64.09	79
Q105370426	<chem>CC1OC(OC2C=C3CCC4C(CC(O)C5(C)C(c6ccc(=O)oc6)CCC45O)C3(C)CC2)C(O)C(O)C1O</chem>	Scillipeoside	No Bloqueador	64.09	80
Q27252791	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@@H]4[C@H](C[C@@H](O)[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	Scilliphaeoside	No Bloqueador	64.09	81
Q105370429	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@@H]4[C@H](C[C@@H](O)[C@]5(C)[C@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	5-[(1s,3as,3br,7s,9ar,9bs,11s,11as)-3a,11-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-7-[(2r,3r,4r,5r,6s)-3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-	No Bloqueador	64.09	82

Código	SMILES	Nombre IUPAC	Bloqueador canal hERG	Predicción	Ranking
		cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one			
Q105277320	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@@H](CC[C@]3(C)[C@@H](c4cc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O[C@@H]3O[C@@H](C)[C@H](O[C@@H]4O[C@@H](CO)[C@@H](O)[C@H]4O)[C@@H](O)[C@H]3O)C=C12</chem>	3beta-(4-O-beta-D-Glucopyranosyl-alpha-L-rhamnopyranosyloxy)-6beta-acetoxy-8,14-dihydroxybufa-4,20,22-trienolide	No Bloqueador	64.07	83
Q105161038	<chem>C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](C[C@]4(O[C@@H]5O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]5O)C=CCC[C@]34C(=O)O)[C@@]1(O)CC[C@@H]2c1ccc(=O)oc1</chem>	(5S,8R,9S,10S,13R,14S,17R)-14-hydroxy-13-methyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-5-[(2S,3R,4S,5S,6R)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy-2,6,7,8,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthrene-10-carboxylic acid	No Bloqueador	63.77	84
Q105257344	<chem>CC1OC(OC2C=C3CCC4(O)C(C(C(O)C5(C)C)(c6ccc(=O)oc6)CCC45O)C3(C)CC2)C(O)C(O)C1O</chem>	5-[8,12,14-trihydroxy-10,13-dimethyl-3-(3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl)oxy-2,3,6,7,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	62.7	85
Q105257343	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@]4(O)[C@H](C[C@@H](O)[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	12beta-Hydroxyscillirubrosidin 3-rhamnoside	No Bloqueador	62.7	86
Q105257342	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@]4(O)[C@H](C[C@@H](O)[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	5-[(3S,8S,9S,10R,12R,13S,14R,17R)-8,12,14-trihydroxy-10,13-dimethyl-3-[(2R,3R,4R,5R,6S)-3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy-2,3,6,7,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	62.7	87
Q105265250	<chem>CC12CCC(OC3OC(CO)C(OC4OC(CO)C(O)C4O)C(O)C3O)C=C1CCC1C2CCC2(C)C(c3ccc(=O)oc3)CCC12O</chem>	5-[3-[3,4-Dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxyoxan-2-yl]oxy-14-hydroxy-10,13-dimethyl-1,2,3,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahydrocyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	62.48	88
Q105265248	<chem>C[C@]12CC[C@H](O)[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O)[C@@H](O)[C@H]3O)C=C1CC[C@@H]1[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@]12O</chem>	Scillarenin 3-(4-glucosyl)glucoside	No Bloqueador	62.48	89
Q105118545	<chem>CC12CCC=CC1(O)CCC1C2CC2(C)C(c3ccc(=O)oc3)CCC12O</chem>	5-(5,14-dihydroxy-10,13-dimethyl-2,6,7,8,9,11,12,15,16,17-	No Bloqueador	61.94	90

Código	SMILES	Nombre IUPAC	Bloqueador canal hERG	Predicción	Ranking
		decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one			
Q10511854 4	<chem>C[C@]12CCC=C[C@@]1(O)CC[C@@H]1[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@]12O</chem>	5,14-Dihydroxy-5beta-bufa-3,20,22-trienolide	No Bloqueador	61.94	91
Q10503230 8	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@@H](CC[C@]3(C)[C@@H](c4cc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O)[C@@H]3O[C@@H](C)[C@@H](O)[C@@H](O)[C@@H]3O)C=C12</chem>	3beta-(alpha-L-Rhamnopyranosyloxy)-8,14-dihydroxy-6beta-(acetyloxy)bufa-4,20,22-trienolide	No Bloqueador	61.76	92
Q10493281 9	<chem>C[C@]12CC[C@H](O)[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H](O)[C@@H]4O)[C@@H](O)[C@@H]3O)C=C1CC[C@]1(O)[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@]12O</chem>	Scillirubrosidin 3-(4-glucosyl)glucoside	No Bloqueador	61.56	93
Q10520000 6	<chem>C[C@]12[C@@H](O)[C@@H]3[C@@H](CCC4=C[C@@H](O)CC[C@@]143C)[C@@]1(O)CC[C@@H]2c1ccc(=O)oc1</chem>	3alpha,12alpha,14-Trihydroxybufa-4,20,22-trienolide	No Bloqueador	60.41	94
Q10520000 5	<chem>C[C@]12[C@@H](O)[C@@H]3[C@@H](CCC4=C[C@@H](O)C[C@@]143C)[C@@]1(O)CC[C@@H]2c1ccc(=O)oc1</chem>	5-[(1r,3as,3br,7r,9ar,9bs,11s,11as)-3a,7,11-trihydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	60.41	95
Q7250550	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O)[C@@H]2C=C3CC[C@@H]4[C@@H](C[C@@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@@H](O)[C@@H](O)[C@@H]1O</chem>	Proscillaridin	No Bloqueador	60.01	96
Q10517484 0	<chem>CC1OC(OC2C=C3CCC4C(CCC5(C)C(c6ccc(=O)oc6)CCC45O)C3(C)CC2)C(O)C(O)C1O</chem>	Proscillaridin	No Bloqueador	60.01	97
Q10517483 9	<chem>CC1OC(O)[C@@H]2C=C3CC[C@@H]4[C@@H](CC[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)C(O)C(O)C1O</chem>	Proscillaridin	No Bloqueador	60.01	98
Q10438802 2	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O)[C@@H]2C=C3CC[C@@H]4[C@@H](CC[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@@H](O)[C@@H](O)[C@@H]1O</chem>	Proscillaridin	No Bloqueador	60.01	99
Q10493717 6	<chem>C[C@]12CC[C@H](O)[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H](O)[C@@H]3O)C=C1CC[C@]1(O)[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@]12O</chem>	5-[(3S,8S,9R,10R,13R,14R,17S)-8,14-dihydroxy-10,13-dimethyl-3-[(2R,3R,4S,5S,6R)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy-2,3,6,7,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	59.38	100

Código	SMILES	Nombre IUPAC	Bloqueador canal hERG	Predicción	Ranking
Q10493717 7	<chem>CC12CCC(OC3OC(CO)C(O)C(O)C3O)C=C1CCC1(O)C2CCC2(C)C(c3ccc(=O)oc3)CCC21O</chem>	5-[8,14-dihydroxy-10,13-dimethyl-3-[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy-2,3,6,7,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	59.38	101
Q10493717 5	<chem>C[C@@]12CC[C@@H](O[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C1CC[C@]1(O)[C@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@]12O</chem>	5-[(3R,8S,9S,10S,13R,14R,17R)-8,14-dihydroxy-10,13-dimethyl-3-[(2R,3R,4S,5S,6R)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy-2,3,6,7,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	59.38	102
Q10511688 5	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@]4(O)[C@H](CC[C@]5(C)[C@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	5-[(3S,8S,9R,10R,13R,14R,17S)-8,14-dihydroxy-10,13-dimethyl-3-[(2R,3R,4R,5R,6S)-3,4,5-trihydroxy-6-methylloxan-2-yl]oxy-2,3,6,7,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	57.48	103
Q10511688 3	<chem>CC1OC(OC2C=C3CCC4(O)C(CC5(C)C(c6ccc(=O)oc6)CCC54O)C3(C)CC2)C(O)C(O)C1O</chem>	5-{3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-7-[(3,4,5-trihydroxy-6-methylloxan-2-yl)oxy]-1h,2h,3h,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl}pyran-2-one	No Bloqueador	57.48	104
Q10537799 0	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@H]4[C@H](C[C@@H](O)[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O[C@@H]1O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	5-[(1r,3as,3br,7s,9ar,9bs,11r,11as)-7-[(2r,3r,4s,5r,6s)-3,4-dihydroxy-6-methyl-5-[(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy]-3a,11-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	57.32	105
Q10519377 5	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@H]4[C@]5(O)CC[C@H](c6ccc(=O)oc6)[C@@]5(C)CC[C@]4(O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O[C@@H]1O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]2O)[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]2O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	5-[(1r,3as,3bs,7s,9as,9br,11ar)-7-[(2r,3r,4s,5r,6s)-5-[(2s,3r,4r,5s,6r)-3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy]-3,4-dihydroxy-6-methylloxan-2-yl]oxy]-3a,9b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	56.03	106
Q7433895	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@H](CC[C@]3(C)[C@@H](c4c</chem>	Scillirosida	No Bloqueador	55.86	107

Código	SMILES	Nombre IUPAC	Bloqueador canal hERG	Predicción	Ranking
	<chem>cc(=O)oc4CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O)[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C12</chem>				
Q10515662 7	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@@]2(O)[C@H](CC[C@@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@@]32O)[C@@]2(C)CC[C@H](O)[C@@H]3O[C@H](CO)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C12</chem>	[(3S,6R,8R,9R,10R,13S,14R,17R)-8,14-dihydroxy-10,13-dimethyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-3-[(2R,3R,4S,5R,6R)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy-2,3,6,7,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-6-yl]acetate	No Bloqueador	55.86	108
Q82984855	<chem>CC12CCCC3C(CCC4=CC(OC5OC(CO)C(O)C(O)C5O)CCC43C=O)C1(O)CCC2c1ccc(=O)oc1</chem>	3-(Hexopyranosyloxy)-14-hydroxy-19-oxobufa-4,20,22-trienolide	No Bloqueador	55.27	109
Q10491964 5	<chem>C[C@]12CC[C@H]3[C@H](CCC4=C[C@H](O)[C@@H]5O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]5O)CC[C@@]43C=O)[C@@]1(O)CC[C@H]2c1ccc(=O)oc1</chem>	(3R,8S,9S,10S,13R,14S,17R)-14-hydroxy-13-methyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-3-[(2R,3R,4S,5S,6R)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy-1,2,3,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahydrocyclopenta[a]phenanthrene-10-carbaldehyde	No Bloqueador	55.27	110
Q10532942 1	<chem>C[C@]12CC[C@H](O)[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C1CC[C@@H]1[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@]12O</chem>	Scillarenin glucoside	No Bloqueador	54.91	111
Q10493839 8	<chem>CC1OC(OC2C=C3CCC4(O)C(CCC5(C)C(c6ccc(=O)oc6)CCC54O)C3(C)CC2)C(O)C(O)C1OC1OC(CO)C(OC2OC(CO)C(O)C(O)C2O)C(O)C1O</chem>	5-{7-[(5-[(3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[(3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)oxan-2-yl]oxy)-3,4-dihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy]-3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	54.78	112
Q10538243 4	<chem>CC(=O)OC[C@]12CC[C@H](O)C=C1CC[C@@]1(O)C2CC[C@]2(C)[C@@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@]12O</chem>	[(1r,3ar,3br,7s,9as,11ar)-3a,3b,7-trihydroxy-11a-methyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-1h,2h,3h,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-9a-yl]methyl acetate	No Bloqueador	54.64	113
Q10532959 7	<chem>C[C@@]12[C@@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@@]1(O)[C@@H]1CCC3=C[C@@H](O)[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O)CC[C@@]3(C)[C@H]1C[C@H]2O</chem>	Scilliphaeosidin 3-glucoside	No Bloqueador	54.1	114
Q10532959 9	<chem>CC12CCCC(OC3OC(CO)C(O)C(O)C3O)C=C1CCC1C2CC(O)C2(C)C(c3ccc(=O)oc3)CCC12O</chem>	5-[12,14-Dihydroxy-10,13-dimethyl-3-[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy-1,2,3,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahydrocyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	54.1	115

Código	SMILES	Nombre IUPAC	Bloqueador canal hERG	Predicción	Ranking
Q10532959 5	<chem>C[C@]12[C@@H](O)C[C@H]3[C@@H](CCC4=C[C@@H](O)C@@H5O[C@H](CO)C[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]5O)CC[C@@]143C)[C@@]1(O)CC[C@@H]2c1ccc(=O)oc1</chem>	5-[(3S,8R,9S,10R,12S,13S,14S,17R)-12,14-dihydroxy-10,13-dimethyl-3-[(2R,3R,4S,5S,6R)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy-1,2,3,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahydrocyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	54.1	116
Q76149193	<chem>C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](C)CC4=CC(=O)CC[C@@]143C=O)[C@@]1(O)CC[C@@H]2c1ccc(=O)oc1</chem>	Scilliglucosidine	No Bloqueador	52.34	117
Q10526524 7	<chem>C[C@]12CC[C@H](O)[C@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O)[C@@H](O)[C@H]3O)C=C1CC[C@@H]1[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@]12O</chem>	5-[(1r,3as,3br,7s,9ar,9bs,11ar)-7-[[[(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[[[(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy]-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	62.48	118
Q10516890 1	<chem>CC1OC(OC2CCC3(C)C(CCC4C3C(O)CC3(C)C(c5ccc(=O)oc5)CC43O)C2)C(O)C(O)C1O</chem>	5-{3a,10-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-7-[(3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl)oxy]-tetradecahydrocyclopenta[a]phenanthren-1-yl}pyran-2-one	No Bloqueador	96,35	119
Q10531188 4	<chem>CO[C@@H]1[C@@H](O)[C@H](C)O[C@@H](O)[C@H]2CC[C@@]3(C)[C@H](C2)[C@H](OC(C)=O)[C@]2(O)[C@@H]3C[C@@H](O)[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@H]1O</chem>	(1r,3ar,3bs,5r,5as,7s,9as,9br,11r,11as)-7-[[[(2r,3s,4r,5s,6s)-3,5-dihydroxy-4-methoxy-6-methyloxan-2-yl]oxy]-3a,3b,11-trihydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-dodecahydro-1h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	No Bloqueador	90,37	120
Q82881612	<chem>CC(=O)O[C@H]1C[C@]2(O)C3CC[C@@]4(O[C@@H]5OC(CO)[C@@H](O)C(O)C5O)C=CCC[C@]4(C=O)C3CC[C@]2(C)[C@H]1c1ccc(=O)oc1</chem>	(1r,2s,3as,5as,9as,11ar)-9a-formyl-3a-hydroxy-11a-methyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-5a-[[[(2s,5s)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-2-yl acetate	No Bloqueador	85,36	121
Q10521868 9	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@@H]2[C@H](CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O)[C@@H]3O[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H]4O[C@@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O)[C@@H](O)[C@H]3O)C=C12</chem>	(1r,3as,3br,5r,7s,9ar,9bs,11ar)-7-[[[(2r,3r,4s,5r,6s)-3,4-dihydroxy-6-methyl-5-[[[(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy]-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	No Bloqueador	84,24	122
Q10521871 3	<chem>CC12CCC3C(CCC4(OC5OC(CO)C(O)C(O)C5O)C=CCCC34C=O)C1(O)CCC2c1ccc(=O)oc1</chem>	3a-hydroxy-11a-methyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-5a-[[[(3,4,5-trihydroxy-6-	No Bloqueador	81,29	123

Código	SMILES	Nombre IUPAC	Bloqueador canal hERG	Predicción	Ranking
		(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthrene-9a-carbaldehyde			
Q21547205	<chem>C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](C[C@]4(O[C@@H]5O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]5O)C=CCC[C@]34C=O)[C@@]1(O)CC[C@]2c1ccc(=O)oc1</chem>	Scilliglaucoside	No Bloqueador	81,29	124
Q10511179 4	<chem>CC(=O)O[C@H]1C[C@]2(O)[C@]3(O)CCC4=C[C@@H](O[C@@H]5O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]5O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]2(C)[C@H]1c1ccc(=O)oc1</chem>	(1r,2s,3ar,3bs,7s,9ar,9br,11ar)-3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-7-(((2r,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)-1h,2h,3h,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-2-yl acetate	No Bloqueador	79,22	125
Q10511179 5	<chem>CC(=O)OC1CC2(O)C(C)(CCC3C4(C)CCC(OC5OC(CO)C(O)C(O)C5O)C=C4CCC32O)C1c1ccc(=O)oc1</chem>	3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-7-(((3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)-1h,2h,3h,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-2-yl acetate	No Bloqueador	79,22	126
Q10491342 0	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@H](CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O)[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)[C@H]12</chem>	(1r,3ar,3bs,5r,5as,7s,9as,9br,11ar)-3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-7-(((2r,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)-dodecahydro-1h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	No Bloqueador	76,73	127
Q10491341 9	<chem>CC(=O)OC1CC2(O)C(CCC3(C)C(c4ccc(=O)oc4)CCC32O)C2(C)CCC(OC3OC(CO)C(O)C(O)C3O)CC12</chem>	3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-7-(((3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)-dodecahydro-1h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	No Bloqueador	76,73	128
Q10519179 5	<chem>C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](C[C@]4C=CCC[C@@]34C=O)[C@@]1(O)CC[C@]2c1ccc(=O)oc1</chem>	(1r,3as,3br,5ar,9as,9bs,11ar)-3a-hydroxy-11a-methyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,5ah,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthrene-9a-carbaldehyde	No Bloqueador	75,73	129
Q10534352 3	<chem>CO[C@@H]1[C@@H](O[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)[C@H](O)[C@H]2O)[C@H](C)O[C@@H](O[C@H]2CC[C@]3(C)[C@H](C2)[C@H](OC(C)=O)C[C@]2(O)[C@@H]3CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@H]1O</chem>	(1r,3ar,3bs,5r,5as,7s,9as,9br,11ar)-7-(((2r,3s,4s,5s,6s)-5-((2s,3r,4r,5s,6r)-3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-(((2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)oxan-2-yl]oxy)-3-hydroxy-4-methoxy-6-methyloxan-2-yl]oxy)-3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-dodecahydro-1h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	No Bloqueador	74,96	130

Código	SMILES	Nombre IUPAC	Bloqueador canal hERG	Predicción	Ranking
Q10534352 4	<chem>COC1C(O)C(OC2CCC3(C)C(C2)C(OC(C)=O)CC2(O)C3CCC3(C)C(c4ccc(=O)oc4)CCC32O)OC(C)C1OC1OC(CO)C(OC2OC(CO)C(O)C(O)C2O)C(O)C1O</chem>	7-[(5-[[3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy]-3-hydroxy-4-methoxy-6-methyloxan-2-yl]oxy]-3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-dodecahydro-1h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	No Bloqueador	74,96	131
Q10521825 1	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@H](CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O)[C@@H]3O[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H]4O[C@@H](CO)[C@@H](O)[C@H]4O)[C@@H](O)[C@@H]3O)[C@H]12</chem>	(1r,3ar,3bs,5r,5as,7s,9as,9br,11ar)-7-[[[(2r,3s,4s,5r,6s)-3,4-dihydroxy-6-methyl-5-[[[(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy]-3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-dodecahydro-1h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	No Bloqueador	74,74	132
Q10537502 4	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@@H]3CCC4=C[C@@H](O)[C@@H]5O[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H]6O[C@@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]7O[C@@H](CO)[C@@H](O)[C@H]6O)[C@@H](O)[C@H]5O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]2(C)[C@H]1c1ccc(=O)oc1</chem>	(1r,2s,3as,3br,7s,9ar,9bs,11ar)-7-[[[(2r,3r,4s,5r,6s)-5-[[[(2s,3r,4r,5s,6r)-3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[[[(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy]-3,4-dihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy]-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-2-yl acetate	No Bloqueador	73,78	133
Q10537502 8	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@@H]3CCC4=C[C@@H](O)[C@@H]5O[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H]6O[C@@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]7O[C@@H](CO)[C@@H](O)[C@H]6O)[C@@H](O)[C@H]5O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]2(C)[C@H]1c1ccc(=O)oc1</chem>	(1r,2s,3as,3br,7s,9ar,9bs,11ar)-7-[[[(2r,3s,4s,5r,6s)-5-[[[(2s,3r,4r,5s,6r)-3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[[[(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy]-3,4-dihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy]-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-2-yl acetate	No Bloqueador	73,78	134
Q10520373 6	<chem>COC1C(O)C(C)OC(OC2CCC3(C)C(C2)C(OC(C)=O)CC2(O)C3CCC3(C)C(c4ccc(=O)oc4)CCC32O)C1O</chem>	7-[(3,5-dihydroxy-4-methoxy-6-methyloxan-2-yl]oxy]-3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-dodecahydro-1h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	No Bloqueador	72,52	135
Q10534771 9	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@@H]3CCC4=C[C@@H](O)[C@@H]5O[C@@H](CO)[C@@H](O)[C@H]5O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]2(C)[C@H]1c1ccc(=O)oc1</chem>	(1r,2s,3as,3br,7s,9ar,9bs,11ar)-7-[[[(2r,3r,4r,5s,6r)-3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-	No Bloqueador	72,39	136

Código	SMILES	Nombre IUPAC	Bloqueador canal hERG	Predicción	Ranking
	<chem>@@H]6O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]6O)[C@H](O)[C@H]5O)CC[C@]4(C)[C@H]3C[C@]2(C)[C@H]1c1ccc(=O)oc1</chem>	{{(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy}oxan-2-yl]oxy}-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-2-yl acetate			
LTS0202416	<chem>C[C@]12CC[C@H](O)C=C1CC[C@@H]1[C@@H]2CC[C@]2(C)C(c3ccc(=O)oc3)CC[C@]12O</chem>	5-[(3as,3br,7s,9ar,9bs,11ar)-3a,7-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	68,5	137
Q83014807	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@@H]4[C@H](C[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O[C@@H]1O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]2O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	5-[(1r,3as,3br,7s,9ar,9bs,11ar)-7-[[[(2r,3r,4s,5r,6s)-5-[[[(2s,3r,4r,5s,6r)-3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[[[(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy}oxan-2-yl]oxy]-3,4-dihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy]-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	64,33	138
Q105161040	<chem>CC12CCC3C(CCC4(OC5OC(CO)C(O)C5O)C=C3CC34C(=O)O)C1(O)CCC2c1ccc(=O)oc1</chem>	3a-hydroxy-11a-methyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-5a-[[[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthrene-9a-carboxylic acid	No Bloqueador	63,77	139
Q104932821	<chem>CC12C3CCC4(C(O)(C3(O)CCC1=CC(OC1C(O)C(O)C(OC3C(O)C(O)C(CO)O3)C(CO)O1)C2)CCC4c1ccc(=O)oc1)C</chem>	5-(7-[[[3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[[[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy}oxan-2-yl]oxy]-3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	61,56	140
Q76085539	<chem>C[C@]12CC[C@H](O[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C1CC[C@]1(O)[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@]12O</chem>	5-[(1r,3ar,3bs,7s,9ar,9br,11ar)-3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-7-[[[(2r,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]-1h,2h,3h,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	59,38	141
Q105377991	<chem>CC1OC(OC2C=C3CCC4C(CC(O)C5(C)C(c6ccc(=O)oc6)CCC45O)C3(C)CC2)C(O)C(O)C1OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O</chem>	5-[[[(3,4-dihydroxy-6-methyl-5-[[[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy}oxan-2-yl]oxy]-3a,11-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-	No Bloqueador	57,32	142

Código	SMILES	Nombre IUPAC	Bloqueador canal hERG	Predicción	Ranking
		1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one			
Q10537798 9	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@@H]4[C@H](C[C@@H](O)[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]1O[C@@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	5-([(1r,3as,3br,7s,9ar,9bs,11r,11as)-7-([(2r,3r,4r,5r,6s)-3,4-dihydroxy-6-methyl-5-([(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)oxan-2-yl]oxy)-3a,11-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	57,32	143
Q10538342 8	<chem>C[C@]12[C@@H](O)C[C@H]3[C@@H](CCC4=C[C@@H](O)[C@H]5O[C@H](CO)[C@@H](O[C@@H]6O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]6O)[C@@H](O)[C@H]5O)CC[C@@]43C)[C@@]1(O)CC[C@@H]2c1ccc(=O)oc1</chem>	5-([(1r,3as,3br,7s,9ar,9bs,11s,11as)-7-([(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-([(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)oxan-2-yl]oxy)-3a,11-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	56,94	144
Q10515662 9	<chem>CC(=O)OC1CC2(O)C(CCC3(C)C(c4ccc(=O)oc4)CCC32O)C2(C)CCC(OC3OC(CO)C(O)C(O)C3O)C=C12</chem>	Red squill glycoside	No Bloqueador	55,86	145
Q10532942 4	<chem>C[C@]12CC[C@H](O)[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C1CC[C@@H]1[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@]12O</chem>	5-[(1s,3as,3br,7s,9ar,9bs,11ar)-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-7-([(2r,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	54,91	146
Q10532942 2	<chem>CC12CCC(OC3OC(CO)C(O)C(O)C3O)C=C1CCC1C2CCC2(C)C(c3ccc(=O)oc3)CCC12O</chem>	5-(3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-7-[(3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	54,91	147
Q10529931 2	<chem>OC[C@H]1O[C@H](O[C@]2(CO[C@]3(CO[C@]4(CO)O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]4O)O[C@@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]3O)O[C@H](CO)[C@]3(CO)O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]3O)[C@@H](O)[C@@H]2O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]1O</chem>	(2r,3r,4s,5s,6r)-2-([(2s,3s,4s,5r)-5-([(2r,3s,4s,5r)-3,4-dihydroxy-2,5-bis(hydroxymethyl)oxolan-2-yl]oxy)methyl)-2-([(2r,3s,4s,5r)-2-([(2r,3s,4s,5r)-3,4-dihydroxy-2,5-bis(hydroxymethyl)oxolan-2-yl]oxy)methyl)-3,4-dihydroxy-5-(hydroxymethyl)oxolan-2-yl]oxy)methyl)-3,4-dihydroxyoxolan-2-yl]oxy)-6-(hydroxymethyl)oxane-3,4,5-triol	No Bloqueador	54,90	148

Código	SMILES	Nombre IUPAC	Bloqueador canal hERG	Predicción	Ranking
Q10520000 7	<chem>CC12CCC(O)C=C1CCC1C2CC(O)C2(C)C(c3ccc(=O)oc3)CCC12O</chem>	5-{3a,7,11-trihydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl}pyran-2-one	No Bloqueador	53.71	149
Q10537888 2	<chem>C[C@]12CCC(=O)C=C1CC[C@@H]1[C@@H]2[C@H](O)C[C@]2(C)[C@@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@]12O</chem>	5-[(1r,3as,3br,9ar,9bs,10r,11ar)-3a,10-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-7-oxo-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	No Bloqueador	52.90	150
Q10534771 8	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@@H]3CCC4=C[C@@H](O)[C@@H]5O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]6O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]5O)CC[C@@]4(C)[C@H]3CC[C@]2(C)[C@H]1c1ccc(=O)oc1</chem>	(1r,2r,3as,3br,7s,9as,9bs,11ar)-7-[[[(2r,3r,4r,5s,6r)-3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[[[(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy]-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-2-yl]acetate	No Bloqueador	52.31	151

- **Anexo 2.** Cardiotoxicidad de moléculas derivadas de *U. maritima* según ADMETlab

Código	SMILES	Nombre	Bloqueador canal hERG	Ranking
Q104388988	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@H]2CC[C@]3(C)[C@H]4[C@H](O)C[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]5(O)[C@@H]4CC[C@@H]3C2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	5-[(1r,3as,3br,5ar,7s,9as,9bs,10r,11ar)-3a,10-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-7-[[[(2r,3r,4r,5r,6s)-3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy]-tetradecahydrocyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	0.696	1
Q105159199	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@H]2CC[C@@]3(C)[C@@H](CC[C@@H]4[C@@H]3CC[C@]3(C)[C@@H](c5ccc(=O)oc5)CC[C@]43O)C2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O[C@@H]1O[C@@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	4,5-Dihydro-5alpha-scillaren A	0.623	2
Q105156645	<chem>C[C@]12CC[C@H](O[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C1CC[C@@H]1[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](c3ccc(=O)oc3)[C@@H](O)C[C@]12O</chem>	16beta-Hydroxyscillarenin 3-glucoside	0.59	3
Q105210701	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@H](CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O)[C@@H]3O[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]3O)C[C@H]12</chem>	[(3S,5S,6R,8S,9R,10S,13R,14R,17R)-8,14-dihydroxy-10,13-dimethyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-3-[(2R,3R,4R,5R,6S)-3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy-	0.583	4

Código	SMILES	Nombre	Bloqueador canal hERG	Ranking
		2,3,4,5,6,7,9,11,12,15,16,17-dodecahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-6-yl] acetato		
Q105311603	<chem>CC(=O)O[C@H]1[C@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@H]4[C@H](CC[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)O[C@@H](C)[C@H](O[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]2O)[C@H]1O</chem>	(2r,3r,4r,5r,6s)-2-(((1r,3as,3br,7s,9ar,9bs,11ar)-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-7-yl]oxy)-4-hydroxy-6-methyl-5-(((2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)oxan-3-yl acetate	0.57	5
Q105203735	<chem>CO[C@@H]1[C@@H](O)[C@H](C)O[C@@H](O[C@H]2CC[C@@]3(C)[C@H](C2)[C@H](OC(C)=O)[C@]2(O)[C@@H]3CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@H]1O</chem>	[(3S,5S,6R,8S,9R,10S,13R,14R,17R)-3-[(2R,3S,4R,5S,6S)-3,5-dihydroxy-4-methoxy-6-methylloxan-2-yl]oxy-8,14-dihydroxy-10,13-dimethyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-2,3,4,5,6,7,9,11,12,15,16,17-dodecahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-6-yl] acetate	0.541	6
Q27252791	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@@H]4[C@H](C[C@@H](O)[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	Scilliphaeoside	0.514	7
Q105152912	<chem>CO[C@H]1C=C2CC[C@@H]3[C@H](C)[C@@H](O)[C@]4(C)[C@@H](c5ccc(=O)oc5)CC[C@]34O)[C@]2(C)CC1</chem>		0.487	8
Q105032308	<chem>CC(=O)O[C@@H]1[C@]2(O)[C@H](CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O)[C@@H]3O[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]3O)C=C12</chem>	3beta-(alpha-L-Rhamnopyranosyloxy)-8,14-dihydroxy-6beta-(acetyloxy)bufa-4,20,22-trienolide	0.481	9
Q105210704	<chem>CC(=O)O[C@@H]1[C@]2(O)[C@H](CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O)[C@@H]3O[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]3O)[C@H]12</chem>	Phorbaketal E	0.461	10
Q7250550	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@@H]4[C@H](CC[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	Proscillaridin	0.45	11
Q105257343	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@@H]4(O)[C@H](C[C@@H](O)[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	12beta-Hydroxyscillirubrosidin 3-rhamnoside	0.443	12
Q104953047	<chem>CO[C@@H]1[C@@H](O[C@@H]2O[C@H](C)[C@@H](O)[C@H]2O)[C@H](C)O[C@@H](O)[C@H]2CC[C@@]3(C)[C@H](C2)[C@H](OC(C)=O)[C@]2(O)[C@@H]3CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)[C@@H](OC(C)=O)[C@]23O)[C@H]1O</chem>	(1r,2s,3ar,3bs,5r,5as,7s,9as,9br,11ar)-5-(acetyloxy)-3a,3b-dihydroxy-7-(((2r,3s,4s,5s,6s)-3-hydroxy-4-methoxy-6-methyl-5-(((2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-	0.433	13

Código	SMILES	Nombre	Bloqueador canal hERG	Ranking
		(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)oxan-2-yl]oxy)-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-dodecahydro-1h-cyclopenta[a]phenanthren-2-yl acetate		
Q105343523	<chem>CO[C@@H]1[C@@H](O[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)[C@H](O)[C@H]2O)[C@H](C)O[C@@H](O[C@H]2CC[C@@]3(C)[C@H](C2)[C@H](OC(C)=O)C[C@]2(O)[C@@H]3CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@H]1O</chem>	(1r,3ar,3bs,5r,5as,7s,9as,9br,11ar)-7-(((2r,3s,4s,5s,6s)-5-(((2s,3r,4r,5s,6r)-3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-(((2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)oxan-2-yl]oxy)-3-hydroxy-4-methoxy-6-methyloxan-2-yl]oxy)-3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-dodecahydro-1h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	0.428	14
Q105218000	<chem>COC/C=C/c1cc(OC)c2c(c1)[C@H](CO)[C@@H](c1ccc(O[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)c(OC)c1)O2</chem>	(2r,3s,4s,5r,6s)-2-(hydroxymethyl)-6-(4-((2s,3r)-3-(hydroxymethyl)-7-methoxy-5-((1e)-3-methoxyprop-1-en-1-yl]-2,3-dihydro-1-benzofuran-2-yl]-2-methoxyphenoxy)oxane-3,4,5-triol	0.426	15
Q105370424	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@H]4[C@H](C[C@@H](O)[C@]5(C)[C@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)C[C2])[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	5-(((3S,8R,9S,10R,12R,13S,14S,17S)-12,14-dihydroxy-10,13-dimethyl-3-((2R,3R,4R,5R,6S)-3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy)-1,2,3,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahydrocyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	0.425	16
Q105370429	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@H]4[C@H](C[C@@H](O)[C@]5(C)[C@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	5-(((1s,3as,3br,7s,9ar,9bs,11s,11as)-3a,11-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-7-(((2r,3r,4r,5r,6s)-3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	0.417	17
Q105218689	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@@H]2[C@H](CC[C@@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O[C@@H]3O[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](</chem>	(1r,3as,3br,5r,7s,9ar,9bs,11ar)-7-(((2r,3r,4s,5r,6s)-3,4-dihydroxy-6-methyl-5-(((2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-	0.403	18

Código	SMILES	Nombre	Bloqueador canal hERG	Ranking
	<chem>O[C@H](O)[C@H]4O[C@@H](O)[C@H]3O)C=C12</chem>	(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)oxan-2-yl]oxy)-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate		
Q105311884	<chem>CO[C@@H]1[C@@H](O)[C@H](C)O[C@@H](O)[C@H]2CC[C@@]3(C)[C@H](C2)[C@H](OC(C)=O)C[C@]2(O)[C@@H]3C[C@@H](O)[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@H]1O</chem>	(1r,3ar,3bs,5r,5as,7s,9as,9br,11r,11as)-7-(((2r,3s,4r,5s,6s)-3,5-dihydroxy-4-methoxy-6-methyloxan-2-yl]oxy)-3a,3b,11-trihydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-dodecahydro-1h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	0.39	19
Q105289059	<chem>CC(=O)O[C@H]1C[C@]2(O)[C@@H]3CCC4=C[C@@H](O)[C@@H]5O[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]5O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]2(C)[C@H]1c1ccc(=O)oc1</chem>	(1r,2s,3as,3br,7s,9ar,9bs,11ar)-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-7-(((2r,3r,4r,5r,6s)-3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-2-yl acetate	0.385	20
Q105118544	<chem>C[C@]12CCC=C[C@@]1(O)CC[C@@H]1[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@]12O</chem>	5,14-Dihydroxy-5beta-bufa-3,20,22-trienolide	0.384	21
Q105152916	<chem>CO[C@@H]1C=C2CC[C@@H]3[C@H](C)[C@@H](O)[C@]4(C)[C@@H](c5ccc(=O)oc5)C[C@]34O)[C@@]2(C)CC1</chem>	5-[[1r,3as,3br,7s,9ar,9bs,11r,11as)-3a,11-dihydroxy-7-methoxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	0.384	22
Q105193439	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@H](CC[C@@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O)[C@@H]3O[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]5O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]5O)[C@H](O)[C@H]4O)[C@@H](O)[C@H]3O)C[C@H]12</chem>	(1r,3ar,3bs,5r,5as,7s,9as,9br,11ar)-7-(((2r,3r,4s,5r,6s)-5-(((2s,3r,4r,5s,6r)-3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-(((2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)oxan-2-yl]oxy)-3,4-dihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy)-3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-dodecahydro-1h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	0.381	23
Q105257342	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O)[C@@H]2C=C3CC[C@]4(O)[C@@H](C)[C@@H](O)[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	5-[[3S,8S,9S,10R,12R,13S,14R,17R)-8,12,14-trihydroxy-10,13-dimethyl-3-[[2R,3R,4R,5R,6S)-3,4,5-	0.376	24

Código	SMILES	Nombre	Bloqueador canal hERG	Ranking
		trihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy-2,3,6,7,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one		
Q105193437	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@H](CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O[C@@H]3O[C@@H](C)[C@H](O[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O[C@@H]5O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]5O)[C@H](O)[C@H]4O)[C@@H](O)[C@@H]3O)C[C@H]12</chem>	(1r,3ar,3bs,5r,5as,7s,9as,9br,11ar)-7-[[{(2r,3s,4s,5r,6s)-5-[[{(2s,3r,4r,5s,6r)-3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[[{(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)oxan-2-yl]oxy]-3,4-dihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy]-3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-dodecahydro-1h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	0.37	25
Q104388022	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@@H]4[C@@H](CC[C@]5(C)[C@@H](c6cc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	Proscillaridin	0.338	26
Q104976175	<chem>CC(=O)O[C@H]1C[C@]2(O)[C@@H]3CC[C@]4(O[C@@H]5O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]5O)C=CCC[C@]4(C=O)[C@H]3CC[C@]2(C)[C@H]1c1ccc(=O)oc1</chem>	[(5S,8R,9S,10S,13R,14S,16S,17R)-10-formyl-14-hydroxy-13-methyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-5-[[{(2S,3R,4S,5S,6R)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy-2,6,7,8,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-16-yl] acetate	0.312	27
Q105218250	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@H](CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O[C@@H]3O[C@@H](C)[C@H](O[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O)[C@@H](O)[C@H]3O)C[C@H]12</chem>	(1r,3ar,3bs,5r,5as,7s,9as,9br,11ar)-7-[[{(2r,3r,4s,5r,6s)-3,4-dihydroxy-6-methyl-5-[[{(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)oxan-2-yl]oxy]-3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-dodecahydro-1h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	0.31	28
Q21547205	<chem>C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CC[C@]4(O)[C@@H]5O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]5O)C=CCC[C@]34C=O)[C@@]1(O)C[C@@H]2c1ccc(=O)oc1</chem>	Scilliglucoside	0.293	29
Q105268930	<chem>C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CC[C@]4(O)C=CCC[C@]34C=O)[C@@]1(O)CC[C@@H]2c1ccc(=O)oc1</chem>	(5S,8R,9S,10S,13R,14S,17R)-5,14-dihydroxy-13-methyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-2,6,7,8,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-	0.291	30

Código	SMILES	Nombre	Bloqueador canal hERG	Ranking
		cyclopenta[a]phenanthrene-10-carbaldehyde		
Q76149193	<chem>C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=CC(=O)CC[C@]43C=O)[C@@]1(O)CC[C@]2c1ccc(=O)oc1</chem>	Scilliglaucosidine	0.29	31
Q105174839	<chem>CC1OC(O[C@@H]2C=C3CC[C@]4[C@H](CC[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)C(O)C(O)C1O</chem>	Proscillaridin	0.285	32
Q105377989	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@]4[C@H](C[C@@H](O)[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]1O[C@@H]1O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	5- [(1r,3as,3br,7s,9ar,9bs,11r,11as)-7-[(2r,3r,4r,5r,6s)-3,4-dihydroxy-6-methyl-5-[[[(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy]-3a,11-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	0.283	33
Q105282387	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@]4(O)[C@H](CC[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O[C@@H](O)[C@H]1O</chem>	3beta-(4-O-alpha-L-Rhamnopyranosyl-alpha-L-rhamnopyranosyloxy)-8,14-dihydroxybufa-4,20,22-trienolide	0.256	34
Q105218251	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@@]2(O)[C@H](CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O[C@@H]3O[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O)[C@@H](O)[C@H]3O)C[C@H]12</chem>	(1r,3ar,3bs,5r,5as,7s,9as,9br,11ar)-7-[[[(2r,3s,4s,5r,6s)-3,4-dihydroxy-6-methyl-5-[[[(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy]-3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-dodecahydro-1h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	0.256	35
Q105187216	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@]4[C@H](CC[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]1O[C@@H](CO)[C@@H](O)[C@H]1O</chem>	Scillaren a	0.251	36
Q105277320	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@@]2(O)[C@H](CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O[C@@H]3O[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O)[C@@H](O)[C@H]3O)C=C12</chem>	3beta-(4-O-beta-D-Glucopyranosyl-alpha-L-rhamnopyranosyloxy)-6beta-acetoxy-8,14-dihydroxybufa-4,20,22-trienolide	0.25	37
Q105156627	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@@]2(O)[C@H](CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O[C@@H]3O[C@@H](CO)[C@@H](O)[C@H]3O)C=C12</chem>	[(3S,6R,8R,9R,10R,13S,14R,17R)-8,14-dihydroxy-10,13-dimethyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-3-[[[(2R,3R,4S,5R,6R)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]-2,3,6,7,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-	0.248	38

Código	SMILES	Nombre	Bloqueador canal hERG	Ranking
		cyclopenta[a]phenanthren-6-yl] acetate		
Q7433895	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@H](CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O)[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C12</chem>	Scillirosida	0.241	39
Q105329595	<chem>C[C@@]12[C@@H](O)C[C@H]3[C@@H](CC4=C[C@@H](O)[C@@H]5O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]5O)CC[C@@]43C)[C@@]1(O)CC[C@@H]2c1ccc(=O)oc1</chem>	5- [(3S,8R,9S,10R,12S,13S,14S,17R)-12,14-dihydroxy-10,13-dimethyl-3- [(2R,3R,4S,5S,6R)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy-1,2,3,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahydrocyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	0.241	40
Q105347718	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@@H]3CC4=C[C@@H](O)[C@@H]5O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]6O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]6O)[C@H](O)[C@H]5O)CC[C@@]4(C)[C@H]3CC[C@]2(C)[C@H]1c1ccc(=O)oc1</chem>	(1r,2r,3as,3br,7s,9as,9bs,11ar)-7-[[[(2r,3r,4r,5s,6r)-3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[[[(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy]-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-2-yl]acetate	0.241	41
Q105200006	<chem>C[C@@]12[C@@H](O)C[C@H]3[C@@H](CC4=C[C@@H](O)CC[C@@]43C)[C@@]1(O)C[C@@H]2c1ccc(=O)oc1</chem>	3alpha,12alpha,14-Trihydroxybufa-4,20,22-trienolide	0.235	42
Q105377990	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O)[C@@H]2C=C3CC[C@@H]4[C@H](C[C@@H](O)[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O[C@@H]1O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	5- [(1r,3as,3br,7s,9ar,9bs,11r,11as)-7-[[[(2r,3r,4s,5r,6s)-3,4-dihydroxy-6-methyl-5-[[[(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy]-3a,11-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	0.235	43
Q105160366	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@H](C[C@@H](O)[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O)[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C12</chem>	12beta-Hydroxyscilliroside	0.23	44
Q105289480	<chem>C[C@@]12[C@@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@]1(O)[C@]1(O)C[C@@H](O)C3=C[C@@H](O)[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O)CC[C@]3(C)[C@H]1C[C@H]2O</chem>	6-Desacetyl-12beta-hydroxyscilliroside	0.225	45

Código	SMILES	Nombre	Bloqueador canal hERG	Ranking
Q104919645	<chem>C[C@]12CC[C@H]3[C@H](CCC4=C[C@H](O[C@@H]5O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]5O)CC[C@@]43C=O)[C@@]1(O)C[C@@H]2c1ccc(=O)oc1</chem>	(3R,8S,9S,10S,13R,14S,17R)-14-hydroxy-13-methyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-3-[(2R,3R,4S,5S,6R)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy-1,2,3,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahydrocyclopenta[a]phenanthrene-10-carbaldehyde	0.224	46
Q105311885	<chem>COC1C(O)C(C)OC(OC2CCC3(C)C(C2)C(OC(C)=O)CC2(O)C3CC(O)C3(C)C(c4ccc(=O)oc4)CCC23O)C1O</chem>	[3-(3,5-dihydroxy-4-methoxy-6-methyloxan-2-yl)oxy-8,12,14-trihydroxy-10,13-dimethyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-2,3,4,5,6,7,9,11,12,15,16,17-dodecahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-6-yl] acetate	0.22	47
Q82995153	<chem>C[C@]12CC[C@H](O[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C1[C@H](O)C[C@]1(O)[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@]12O</chem>	[(1r,3ar,3bs,5r,7s,9ar,9br,11ar)-3a,3b,5-trihydroxy-9a,11a-dimethyl-7-(((2r,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)-1h,2h,3h,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	0.219	48
Q105375028	<chem>CC(=O)O[C@H]1C[C@]2(O)[C@@H]3CCC4=C[C@@H](O)[C@@H]5O[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H]6O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]7O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]7O)[C@H](O)[C@H]6O)[C@@H](O)[C@@H]5O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]2(C)[C@H]1c1ccc(=O)oc1</chem>	(1r,2s,3as,3br,7s,9ar,9bs,11ar)-7-(((2r,3s,4s,5r,6s)-5-(((2s,3r,4r,5s,6r)-3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-(((2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)oxan-2-yl]oxy)-3,4-dihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy)-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-2-yl acetate	0.216	49
Q105375024	<chem>CC(=O)O[C@H]1C[C@]2(O)[C@@H]3CCC4=C[C@@H](O)[C@@H]5O[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H]6O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]7O)[C@H](O)[C@H]6O)[C@@H](O)[C@H]5O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]2(C)[C@H]1c1ccc(=O)oc1</chem>	(1r,2s,3as,3br,7s,9ar,9bs,11ar)-7-(((2r,3r,4s,5r,6s)-5-(((2s,3r,4r,5s,6r)-3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-(((2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)oxan-2-yl]oxy)-3,4-dihydroxy-6-methyloxan-2-	0.214	50

Código	SMILES	Nombre	Bloqueador canal hERG	Ranking
		yl]oxy)-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-2-yl acetate		
Q104944165	<chem>CC12CCC3C(CCC4=CC(=O)CCC43CO)C1(O)CCC2c1ccc(=O)oc1</chem>	5-[14-hydroxy-10-(hydroxymethyl)-13-methyl-3-oxo-2,6,7,8,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	0.213	51
Q105034625	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@@H]4[C@H](CC[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)[C@H](O)C[C@]45O)[C@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O[C@@H]1O[C@@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]2O)[C@H](O)[C@@H]1O</chem>	5-[(1r,2r,3as,3br,7s,9as,9bs,11ar)-7-[[[(2r,3r,4s,5r,6s)-5-[[[(2s,3r,4r,5s,6r)-3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[[[(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy]-3,4-dihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy]-2,3a-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	0.209	52
Q105329597	<chem>C[C@@]12[C@@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@]1(O)[C@@H]1CCC3=C[C@@H](O)[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O)CC[C@]3(C)[C@H]1C[C@H]2O</chem>	Scilliphaeosidin 3-glucoside	0.208	53
Q27103365	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@@H]4[C@H](CC[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@]45O)[C@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O[C@@H]1O[C@@H](CO)[C@@H](O)[C@H]2O)[C@H](O)[C@@H]1O</chem>	Scillaren A	0.207	54
Q105116618	<chem>C[C@]12[C@H](O)C[C@H]3[C@@H](CCC4[C@]3(C)CCC(=O)C=4)[C@]1(O)CC[C@@H]2c1coc(=O)cc1</chem>	5-[(1r,3as,3br,9ar,9bs,11r,11as)-3a,11-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-7-oxo-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	0.204	55
Q105034622	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@@H]4[C@H](CC[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)[C@H](O)C[C@]45O)[C@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O[C@@H]1O[C@@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]2O)[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]2O)[C@H](O)[C@@H]1O</chem>	5-[(1r,2s,3as,3br,7s,9ar,9bs,11ar)-7-[[[(2r,3r,4s,5r,6s)-5-[[[(2s,3r,4r,5s,6r)-3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[[[(2s,3r,4r,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy]-3,4-dihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy]-2,3a-dihydroxy-	0.202	56

Código	SMILES	Nombre	Bloqueador canal hERG	Ranking
		9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one		
Q105116885	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@@]4(O)[C@@H](CC[C@@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@@H](O)[C@@H](O)[C@@H]1O</chem>	5-[(3S,8S,9R,10R,13R,14R,17S)-8,14-dihydroxy-10,13-dimethyl-3-[(2R,3R,4R,5R,6S)-3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy-2,3,6,7,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	0.201	57
Q105350960	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@@]2(O)[C@@H]3CC[C@@]4(C)[C@@H](O[C@@H]5O[C@@H](CO)[C@@H](O)[C@@H](O)[C@@H]5O)CC[C@@]4(C)[C@@H]3CC[C@@]2(C)[C@@H]1c1ccc(=O)oc1</chem>	[(3S,8R,9S,10S,13R,14S,16R,17R)-14-hydroxy-10,13-dimethyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-3-[(2R,3R,4S,5S,6R)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy-1,2,3,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahydrocyclopenta[a]phenanthren-16-yl] acetate	0.2	58
Q83014807	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@@]4(C)[C@@H](CC[C@@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)CC[C@@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@@H](O)[C@@H](O)[C@@H]1O[C@@H]2O[C@@H](CO)[C@@H](O)[C@@H](O)[C@@H]2O)[C@@H](O)[C@@H]1O</chem>	5-[(1r,3as,3br,7s,9ar,9bs,11ar)-7-[[[(2r,3r,4s,5r,6s)-5-[[[(2s,3r,4r,5s,6r)-3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[[[(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy]-3,4-dihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy]-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	0.197	59
Q105329421	<chem>C[C@@]12CC[C@@H](O)[C@@H]3O[C@@H](CO)[C@@H](O)[C@@H](O)[C@@H]3O)C=C1CC[C@@H]1[C@@H]2CC[C@@]2(C)[C@@H](c3cc(=O)oc3)CC[C@@]12O</chem>	Scillarenin glucoside	0.192	60
Q105350608	<chem>COC1C(O)C(C)OC(OC2CCC3(C)C(C2)C(OC(C)=O)CC2(O)C3CCC3(C)C(c4ccc(=O)oc4)C(O)CC32O)C1O</chem>	[3-(3,5-dihydroxy-4-methoxy-6-methyloxan-2-yl)oxy-8,14,16-trihydroxy-10,13-dimethyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-2,3,4,5,6,7,9,11,12,15,16,17-dodecahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-6-yl] acetate	0.191	61
Q105330710	<chem>C[C@@]12CC[C@@H]3C(CCC4=C[C@@H](O)CC[C@@]43C=O)[C@@]1(O)CC[C@@H]2c1ccc(=O)oc1</chem>	3-beta,14-Dihydroxy-19-oxobufa-4,20,22-trienolide	0.19	62

Código	SMILES	Nombre	Bloqueador canal hERG	Ranking
Q105383428	<chem>C[C@]12[C@@H](O)C[C@H]3[C@@H](CC4=C[C@@H](O)[C@H]5O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]6O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]6O)[C@@H](O)[C@H]5O)CC[C@@]43C)[C@@]1(O)CC[C@@H]2c1ccc(=O)oc1</chem>	5- [[1r,3as,3br,7s,9ar,9bs,11s,11as]-7-[[2s,3r,4s,5s,6r]-3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[[2s,3r,4s,5s,6r]-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy)-3a,11-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	0.189	63
Q105268928	<chem>CC12CCC3C(CCC4(O)C=CCCC34C=O)C1(O)CCC2c1ccc(=O)oc1</chem>	5,14-dihydroxy-13-methyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-2,6,7,8,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthrene-10-carbaldehyde	0.183	64
Q105265248	<chem>C[C@]12CC[C@H](O)[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]3O)C=C1CC[C@@H]1[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@]12O</chem>	Scillarenin 3-(4-glucosyl)glucoside	0.182	65
Q105369005	<chem>COC1C(O)C(OC2CCC3(C)C(C2)C(OC(C)=O)CC2(O)C3CC(O)C3(C)C(c4ccc(=O)oc4)CCC23O)OC(C)C1OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O</chem>	[8,12,14-trihydroxy-3-[3-hydroxy-4-methoxy-6-methyl-5-[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxyoxan-2-yl]oxy-10,13-dimethyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-2,3,4,5,6,7,9,11,12,15,16,17-dodecahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-6-yl] acetate	0.18	66
Q82881612	<chem>CC(=O)O[C@H]1C[C@]2(O)C3CC[C@]4(O)[C@@H]5OC(CO)[C@@H](O)C(O)C5O)C=C3C[C@]4(C=O)C3CC[C@]2(C)[C@H]1c1ccc(=O)oc1</chem>	(1r,2s,3as,5as,9as,11ar)-9a-formyl-3a-hydroxy-11a-methyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-5a-[[2s,5s]-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-2-yl acetate	0.179	67
Q105218713	<chem>CC12CCC3C(CCC4(OC5OC(CO)C(O)C(O)C5O)C=CCCC34C=O)C1(O)CCC2c1ccc(=O)oc1</chem>	3a-hydroxy-11a-methyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-5a-[[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthrene-9a-carbaldehyde	0.178	68
Q105201428	<chem>C[C@]12CC[C@H](O)C=C1CC[C@@H]1[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@]12O</chem>	5- [[1r,3as,3br,7r,9ar,9bs,11ar]-3a,7-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-	0.177	69

Código	SMILES	Nombre	Bloqueador canal hERG	Ranking
		1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one		
Q105263004	<chem>C[C@@]12[C@@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@]1(O)[C@@H]1CCC3=C[C@@H](O)[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O)CC[C@]3(C=O)[C@H]1C[C@H]2O</chem>	(3S,8R,9S,10S,12R,13S,14S,17R)-12,14-dihydroxy-13-methyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-3-[(2R,3R,4S,5S,6R)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy-1,2,3,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahydrocyclopenta[a]phenanthrene-10-carbaldehyde	0.176	70
Q105218252	<chem>CC(=O)OC1CC2(O)C(CCC3(C)C(c4ccc(=O)oc4)CCC32O)C2(C)CCC(OC3OC(C)C(OC4OC(CO)C(O)C(O)C4O)C(O)C3O)CC12</chem>	[3-[3,4-dihydroxy-6-methyl-5-[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxyoxan-2-yl]oxy-8,14-dihydroxy-10,13-dimethyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-2,3,4,5,6,7,9,11,12,15,16,17-dodecahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-6-yl] acetate	0.175	71
Q105287002	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@H](C[C@@H](O)[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O)C=C12</chem>	(1r,3ar,3bs,5r,7s,9ar,9br,11r,11as)-3a,3b,7,11-tetrahydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-1h,2h,3h,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	0.174	72
Q104995816	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@@H]4[C@@H](CC[C@]5(C)[C@@H](c6cc(=O)oc6)[C@@H](O)[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	[(3S,8R,9R,10R,13R,14S,16S,17R)-14,16-dihydroxy-10,13-dimethyl-3-[(2R,3R,4R,5R,6S)-3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy-1,2,3,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahydrocyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	0.168	73
Q105159198	<chem>CC1OC(OC2CCC3(C)C(CCC4C3CCC3(C)C(c5ccc(=O)oc5)CCC43O)C2)C(O)C(O)C1OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O</chem>		0.16	74
Q105330703	<chem>C[C@]12CCC3C(CCC4=C[C@@H](O)CC[C@@]43C=O)[C@@]1(O)CC[C@@H]2c1ccc(=O)oc1</chem>	(1R,3aS,7S,9aS,11aR)-3a,7-dihydroxy-11a-methyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-1H,2H,3H,3bH,4H,5H,7H,8H,9H,9bH,10H,11H-cyclopenta[a]phenanthrene-9a-carbaldehyde	0.157	75
Q105329424	<chem>C[C@]12CC[C@H](O)[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C1CC[C</chem>	5-[(1s,3as,3br,7s,9ar,9bs,11ar)-3a-hydroxy-9a,11a-	0.152	76

Código	SMILES	Nombre	Bloqueador canal hERG	Ranking
	<chem>@@H]1[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@]12O</chem>	dimethyl-7- {[(2r,3r,4s,5s,6r)-3,4,5- trihydroxy-6- (hydroxymethyl)oxan-2- yl]oxy}- 1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9 h,9bh,10h,11h- cyclopenta[a]phenanthren- 1-yl]pyran-2-one		
Q105116619	<chem>CC12CCC(=O)C=C1CCC1C2CC(O)C2(C)C(c3ccc(=O)oc3)CCC12O</chem>	5-(12,14-dihydroxy-10,13- dimethyl-3-oxo- 2,6,7,8,9,11,12,15,16,17- decahydro-1H- cyclopenta[a]phenanthren- 17-yl)pyran-2-one	0.151	77
Q105343524	<chem>COC1C(O)C(OC2CCC3(C)C(C2)C(OC(C)=O)CC2(O)C3CCC3(C)C(c4ccc(=O)oc4)CCC32O)OC(C)C1OC1OC(CO)C(OC2OC(CO)C(O)C(O)C2O)C(O)C1O</chem>	7-[(5-[[3,4-dihydroxy-6- (hydroxymethyl)-5-[[3,4,5- trihydroxy-6- (hydroxymethyl)oxan-2- yl]oxy]oxan-2-yl]oxy)-3- hydroxy-4-methoxy-6- methyloxan-2-yl]oxy]-3a,3b- dihydroxy-9a,11a-dimethyl- 1-(6-oxopyran-3-yl)- dodecahydro-1h- cyclopenta[a]phenanthren- 5-yl acetate	0.149	78
Q105330708	<chem>C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=C[C@@H](O)CC[C@@]43C=O)[C@@]1(O)CC[C@@H]2c1ccc(=O)oc1</chem>	Scilliglucosidin	0.142	79
Q105111796	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@]3(O)CCC4=C[C@@H](O)[C@@H]5O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]5O)CC[C@@]4(C)[C@@H]3CC[C@]2(C)[C@H]1c1ccc(=O)oc1</chem>	[(3S,8S,9S,10S,13R,14R,1 6R,17R)-8,14-dihydroxy- 10,13-dimethyl-17-(6- oxopyran-3-yl)-3- [(2R,3R,4S,5S,6R)-3,4,5- trihydroxy-6- (hydroxymethyl)oxan-2- yl]oxy)- 2,3,6,7,9,11,12,15,16,17- decahydro-1H- cyclopenta[a]phenanthren- 16-yl] acetate	0.141	80
Q104944152	<chem>C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=CC(=O)CC[C@@]43CO)[C@@]1(O)CC[C@@H]2c1ccc(=O)oc1</chem>	3-Oxo-14,19- dihydroxybufa-4,20,22- trienolide	0.139	81
Q104932819	<chem>C[C@]12CC[C@H](O[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O)[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C1CC[C@]1(O)[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@]12O</chem>	Scillirubrosidin 3-(4- glucosyl)glucoside	0.138	82
Q105274060	<chem>CC(=O)[C@@H]1C[C@]2(O)[C@H](CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O)[C@@H]3OC(CO)[C@@H](O)[C@H]4OC(CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H](O)C4O)[C@H](O)C3O)C=C12</chem>	glucoscilliroside	0.133	83
Q105378882	<chem>C[C@]12CCC(=O)C=C1CC[C@@H]1[C@@H]2[C@H](O)C[C@]2(C)[C@@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@]12O</chem>	5- [[1r,3as,3br,9ar,9bs,10r,11a r)-3a,10-dihydroxy-9a,11a- dimethyl-7-oxo- 1h,2h,3h,3bh,4h,5h,8h,9h,9	0.131	84

Código	SMILES	Nombre	Bloqueador canal hERG	Ranking
		bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one		
Q105005670	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@H]4[C@@]5(O)CC[C@H](c6ccc(=O)oc6)[C@@]5(C)[C@H](O)C[C@]4(O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	9-Hydroxyscilliphaeoside	0.127	85
Q105265247	<chem>C[C@]12CC[C@H](O[C@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O)[C@@H](O)[C@H]3O)C=C1CC[C@@H]1[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@]12O</chem>	5-[(1r,3as,3br,7s,9ar,9bs,11ar)-7-[[{(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[[{(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy]-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	0.125	86
Q105193775	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@H]4[C@@]5(O)CC[C@H](c6ccc(=O)oc6)[C@@]5(C)CC[C@]4(O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O[C@@H]1O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]2O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	5-[(1r,3as,3bs,7s,9as,9br,11ar)-7-[[{(2r,3r,4s,5r,6s)-5-[[{(2s,3r,4r,5s,6r)-3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[[{(2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy]-3,4-dihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy]-3a,9b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	0.118	87
Q105378881	<chem>CC12CCC(=O)C=C1CCC1C2C(O)CC2(C)C(c3ccc(=O)oc3)CCC12O</chem>	5-(11,14-dihydroxy-10,13-dimethyl-3-oxo-2,6,7,8,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-17-yl)pyran-2-one	0.107	88
Q104976174	<chem>CC(=O)OC1CC2(O)C3CCC4(OC5OC(CO)C(O)C(O)C5O)C=CCCC4(C=O)C3CCC2(C)C1c1ccc(=O)oc1</chem>	9a-formyl-3a-hydroxy-11a-methyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-5a-[[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]-1H,2H,3H,3bH,4H,5H,8H,9H,9bH,10H,11H-cyclopenta[a]phenanthren-2-yl acetate	0.1	89
Q104953045	<chem>COC1C(O)C(OC2CCC3(C)C(C2)C(OC(C)=O)CC2(O)C3CCC3(C)C(c4ccc(=O)oc4)C(OC(C)=O)CC32O)OC(C)C1OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O</chem>	[16-acetyloxy-8,14-dihydroxy-3-[3-hydroxy-4-methoxy-6-methyl-5-[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy-10,13-dimethyl-17-(6-oxopyran-3-	0.099	90

Código	SMILES	Nombre	Bloqueador canal hERG	Ranking
		yl)- 2,3,4,5,6,7,9,11,12,15,16,17-dodecahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-6-yl] acetate		
Q104937176	<chem>C[C@]12CC[C@H](O[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C1CC[C@]1(O)[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@]12O</chem>	5- [(3S,8S,9R,10R,13R,14R,17S)-8,14-dihydroxy-10,13-dimethyl-3- [(2R,3R,4S,5S,6R)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy-2,3,6,7,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	0.098	91
Q104937175	<chem>C[C@@]12CC[C@@H](O[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C1CC[C@]1(O)[C@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](c3cc(=O)oc3)CC[C@]12O</chem>	5- [(3R,8S,9S,10S,13R,14R,17R)-8,14-dihydroxy-10,13-dimethyl-3- [(2R,3R,4S,5S,6R)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy-2,3,6,7,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	0.097	92
Q105161038	<chem>C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CC[C@]4(O[C@@H]5O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]5O)C=CCC[C@]34C(=O)O)[C@@]1(O)CC[C@@H]2c1ccc(=O)oc1</chem>	(5S,8R,9S,10S,13R,14S,17R)-14-hydroxy-13-methyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-5- [(2S,3R,4S,5S,6R)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy-2,6,7,8,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthrene-10-carboxylic acid	0.094	93
Q105382434	<chem>CC(=O)OC[C@]12CC[C@H](O)C=C1CC[C@@]1(O)C2CC[C@]2(C)[C@@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@]12O</chem>	[(1r,3ar,3br,7s,9as,11ar)-3a,3b,7-trihydroxy-11a-methyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-1h,2h,3h,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-9a-yl]methyl acetate	0.078	94
Q105116883	<chem>CC1OC(OC2C=C3CCC4(O)C(CCC5(C)C(c6ccc(=O)oc6)CCC54O)C3(C)CC2)C(O)C(O)C1O</chem>	5-{3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-7-[(3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl)oxy]-1h,2h,3h,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl}pyran-2-one	0.057	95
Q105282386	<chem>CC1OC(OC2C(C)OC(OC3C=C4CCC5(O)C(CCC6(C)C(c7ccc(=O)oc7)CCC65O)C4(C)CC3)C(O)C2O)C(O)C(O)C1O</chem>	5-[3-[3,4-dihydroxy-6-methyl-5-(3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl)oxy]-8,14-dihydroxy-10,13-dimethyl-	0.056	96

Código	SMILES	Nombre	Bloqueador canal hERG	Ranking
		2,3,6,7,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one		
Q105193438	<chem>CC(=O)OC1CC2(O)C(CCC3(C)C(c4ccc(=O)oc4)CCC32O)C2(C)CCC(OC3OC(C)C(OC4OC(CO)C(OC5OC(CO)C(O)C(O)C5O)C(O)C4O)C(O)C3O)CC12</chem>	7-[(5-[[3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy)-3,4-dihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy]-3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-dodecahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	0.053	97
Q105201430	<chem>CC12CCC(O)C=C1CCC1C2CCC2(C)C(c3ccc(=O)oc3)CCC12O</chem>	scillarenin	0.05	98
Q105174840	<chem>CC1OC(OC2C=C3CCC4C(CCC5(C)C(c6ccc(=O)oc6)CCC45O)C3(C)CC2)C(O)C(O)C1O</chem>	Proscillaridin	0.05	99
Q105152914	<chem>COC1C=C2CCC3C(CC(O)C4(C)C(c5ccc(=O)oc5)CCC34O)C2(C)CC1</chem>	5-(3a,11-dihydroxy-7-methoxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl)pyran-2-one	0.049	100
Q104937177	<chem>CC12CCC(OC3OC(CO)C(O)C(O)C3O)C=C1CCC1(O)C2CCC2(C)C(c3ccc(=O)oc3)CCC21O</chem>	5-[8,14-dihydroxy-10,13-dimethyl-3-[[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]-2,3,6,7,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	0.048	101
Q105329875	<chem>CC12CCC(OC3OC(CO)C(O)C(O)C3O)C=C1C(O)CC1(O)C2CCC2(C)C(c3ccc(=O)oc3)CC21O</chem>	5-(3a,3b,5-trihydroxy-9a,11a-dimethyl-7-[[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]-1h,2h,3h,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl)pyran-2-one	0.048	102
Q105257344	<chem>CC1OC(OC2C=C3CCC4(O)C(CC(O)C5(C)C(c6ccc(=O)oc6)CCC45O)C3(C)CC2)C(O)C(O)C1O</chem>	5-[8,12,14-trihydroxy-10,13-dimethyl-3-(3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl)oxy]-2,3,6,7,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	0.046	103
Q105118545	<chem>CC12CCC=CC1(O)CCC1C2CCC2(C)C(c3ccc(=O)oc3)CCC12O</chem>	5-(5,14-dihydroxy-10,13-dimethyl-2,6,7,8,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-17-yl)pyran-2-one	0.046	104

Código	SMILES	Nombre	Bloqueador canal hERG	Ranking
Q105289481	<chem>CC12CCCC(OC3OC(CO)C(O)C(O)C3O)C=C1C(O)CC1(O)C2CC(O)C2(C)C(c3ccc(=O)oc3)CCC12O</chem>	5-[6,8,12,14-tetrahydroxy-10,13-dimethyl-3-[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy-2,3,6,7,9,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	0.042	105
Q105311604	<chem>CC(=O)OC1C(OC2C=C3CCC4C(CCC5(C)C(c6ccc(=O)oc6)CCC45O)C3(C)CC2)OC(C)C(OC2OC(CO)C(O)C(O)C2O)C1O</chem>	2-([3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-7-yl]oxy)-4-hydroxy-6-methyl-5-([3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)oxan-3-yl acetate	0.041	106
Q105370426	<chem>CC1OC(OC2C=C3CCC4C(CC(O)C5(C)C(c6ccc(=O)oc6)CCC45O)C3(C)CC2)C(O)C(O)C1O</chem>	Scillipheoside	0.039	107
Q105200007	<chem>CC12CCCC(O)C=C1CCC1C2CC(O)C2(C)C(c3ccc(=O)oc3)CCC12O</chem>	5-(3a,7,11-trihydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl)pyran-2-one	0.039	108
Q105191794	<chem>CC12CCCC3C(CCC4C=CCCC43C=O)C1(O)C(C2c1ccc(=O)oc1</chem>	14-Hydroxy-13-methyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-1,2,5,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahydrocyclopenta[a]phenanthrene-10-carbaldehyde	0.038	109
Q105238820	<chem>CC(=O)OC1C(O)C(OC2C=C3CCC4C(CCC5(C)C(c6ccc(=O)oc6)CCC45O)C3(C)CC2)OC(C)C1OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O</chem>	[3-Hydroxy-2-[[14-hydroxy-10,13-dimethyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-1,2,3,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahydrocyclopenta[a]phenanthren-3-yl]oxy]-6-methyl-5-[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxyoxan-4-yl] acetate	0.036	110
Q105329599	<chem>CC12CCCC(OC3OC(CO)C(O)C(O)C3O)C=C1CCC1C2CC(O)C2(C)C(c3ccc(=O)oc3)CCC12O</chem>	5-[12,14-Dihydroxy-10,13-dimethyl-3-[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy-1,2,3,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahydrocyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	0.036	111
Q105187218	<chem>CC1C(OC2C(O)C(O)C(O)C(CO)O2)C(O)C(O)C(OC2CCC3(C)C(CCC4C5(O)C(C(C5)c5cc(=O)cc5)(C)CCC43)=C2)O1</chem>	5-(7-[(3,4-dihydroxy-6-methyl-5-([3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)oxan-2-yl]oxy)-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-	0.036	112

Código	SMILES	Nombre	Bloqueador canal hERG	Ranking
		1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one		
Q104995817	<chem>CC1OC(OC2C=C3CCC4C(CCC5(C)C(c6ccc(=O)oc6)C(O)CC45O)C3(C)CC2)C(O)C(O)C1O</chem>	5-[14,16-Dihydroxy-10,13-dimethyl-3-(3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl)oxy-1,2,3,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahydrocyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	0.033	113
Q104938398	<chem>CC1OC(OC2C=C3CCC4(O)C(CCC5(C)C(c6ccc(=O)oc6)CCC54O)C3(C)CC2)C(O)C(O)C1OC1OC(CO)C(OC2OC(CO)C(O)C(O)C2O)C(O)C1O</chem>	5-(7-[(5-[(3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[(3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)oxan-2-yl]oxy)-3,4-dihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy]-3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	0.033	114
Q105156646	<chem>CC12CCC(OC3OC(CO)C(O)C(O)C3O)C=C1CCC1C2CCC2(C)C(c3ccc(=O)oc3)C(O)CC12O</chem>	5-(2,3a-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-7-[(3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	0.033	115
Q105377991	<chem>CC1OC(OC2C=C3CCC4C(CC(O)C5(C)C(c6ccc(=O)oc6)CCC45O)C3(C)CC2)C(O)C(O)C1OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O</chem>	5-(7-[(3,4-dihydroxy-6-methyl-5-[(3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)oxan-2-yl]oxy]-3a,11-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	0.032	116
Q105265250	<chem>CC12CCC(OC3OC(CO)C(OC4OC(CO)C(O)C4O)C(O)C3O)C=C1CCC1C2CCC2(C)C(c3ccc(=O)oc3)CCC12O</chem>	5-[3-[3,4-Dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxyoxan-2-yl]oxy-14-hydroxy-10,13-dimethyl-1,2,3,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahydrocyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	0.031	117
Q105273124	<chem>CC1OC(OC2C=C3CCC4C(CCC5(C)C(c6ccc(=O)oc6)CCC45O)C3(C)CC2)C(O)C(O)C1OC1OC(CO)C(OC2OC(CO)C(O)C(O)C2O)C(O)C1O</chem>	glucoscillaren A	0.028	118

Código	SMILES	Nombre	Bloqueador canal hERG	Ranking
Q82984855	<chem>CC12CCC3C(CCC4=CC(OC5OC(CO)C(O)C(O)C5O)CCC43C=O)C1(O)CCC2c1ccc(=O)oc1</chem>	3-(Hexopyranosyloxy)-14-hydroxy-19-oxobufa-4,20,22-trienolide	0.025	119
Q105289057	<chem>CC(=O)OC1CC2(O)C3CCC4=CC(OC5OC(C)C(O)C(O)C5O)CCC4(C)C3CCC2(C)C1c1ccc(=O)oc1</chem>	[14-Hydroxy-10,13-dimethyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-3-(3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl)oxy-1,2,3,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahydrocyclopenta[a]phenanthren-16-yl] acetate	0.024	120
Q105005672	<chem>CC1OC(OC2C=C3CCC4C(O)(CC(O)C5(C)C(c6ccc(=O)oc6)CCC45O)C3(C)CC2)C(O)C(O)C1O</chem>	5-[9,12,14-trihydroxy-10,13-dimethyl-3-(3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl)oxy-2,3,6,7,8,11,12,15,16,17-decahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-17-yl]pyran-2-one	0.024	121
Q105034624	<chem>CC1OC(OC2C=C3CCC4C(CCC5(C)C(c6ccc(=O)oc6)C(O)CC45O)C3(C)CC2)C(O)C(O)C1OC1OC(CO)C(OC2OC(CO)C(O)C(O)C2O)C(O)C1O</chem>	5-(7-[(5-[[3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy)-3,4-dihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy)-2,3a-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	0.023	122
Q105156629	<chem>CC(=O)OC1CC2(O)C(CCC3(C)C(c4ccc(=O)oc4)CCC32O)C2(C)CCC(OC3OC(CO)C(O)C(O)C3O)C=C12</chem>	Red squill glycoside	0.02	123
Q105032309	<chem>C(=O)OC1CC2(O)C(CCC3(C)C(c4ccc(=O)oc4)CCC32O)C2(C)CCC(OC3OC(C)C(O)C(O)C3O)C=C12</chem>	3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-7-[(3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl)oxy]-1h,2h,3h,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	0.019	124
Q105375026	<chem>CC(=O)OC1CC2(O)C3CCC4=CC(OC5OC(C)C(OC6OC(CO)C(OC7OC(CO)C(O)C(O)C7O)C(O)C6O)C(O)C5O)CCC4(C)C3CCC2(C)C1c1ccc(=O)oc1</chem>	7-[(5-[[3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy)-3,4-dihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy]-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-2-yl acetate	0.017	125
Q105347720	<chem>CC(=O)OC1CC2(O)C3CCC4=CC(OC5OC(C)C(OC6OC(CO)C(O)C(O)C6O)C(O)C5O)CCC4(C)C3CCC2(C)C1c1ccc(=O)oc1</chem>	[3-[3,4-Dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxyoxan-2-yl]oxy-14-	0.017	126

Código	SMILES	Nombre	Bloqueador canal hERG	Ranking
		hydroxy-10,13-dimethyl-17-(6-oxopyran-3-yl)-1,2,3,6,7,8,9,11,12,15,16,17-dodecahydrocyclopenta[a]phenanthren-16-yl] acetate		
Q105287002	<chem>[C@@]2(C)CC[C@H](O)C=C12</chem>	(1r,3ar,3bs,5r,7s,9ar,9br,11r,11as)-3a,3b,7,11-tetrahydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-1h,2h,3h,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	0.017	127
Q105248979	<chem>CC1C(O)C(OC2C(O)C(O)C(CO)O2)C(O)C(O)[C@H]2CC[C@@]3(C)C(CC[C@H]4[C@@]5(O)[C@]([C@H](CC5)c5coc(=O)cc5)(C)C[C@@H]43)=C2)O1</chem>	5-[(1r,3as,3br,7s,9ar,9bs,11ar)-7-[(3,5-dihydroxy-6-methyl-4-[(3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)oxan-2-yl]oxy]-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	0.016	128
Q27117135	<chem>CC(O[C@H]1C2[C@@](CC[C@@H](C=2O)(C)[C@H]2CC[C@]3([C@@](O)([C@]2(O)C1)CC[C@@H]3c1coc(=O)cc1)C)=O</chem>	Scillirosidin	0.016	129
Q27117429	<chem>C[C@]12CC[C@H](O)C=C1CC[C@@H]1[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@@]21O</chem>	Scillarenin	0.016	130
Q105289056	<chem>CC(=O)O[C@@H]1C[C@]2(O)[C@@H]3CC C4=C[C@@H](O)[C@@H]5O[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]5O)CC[C@@]4(C)[C@H]3CC[C@]2(C)[C@H]1c1ccc(=O)oc1</chem>	(1r,2r,3as,3br,7s,9as,9bs,11ar)-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-7-[(2r,3r,4r,5r,6s)-3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-2-yl acetate	0.015	131
Q104932821	<chem>CC12C3CCC4(C(O)(C3(O)CCC1=CC(OC1C(O)C(O)C(OC3C(O)C(O)C(CO)O3)C(CO)O1)CC2)CCC4c1coc(=O)cc1)C</chem>	5-(7-[(3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[(3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)oxan-2-yl]oxy)-3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl)pyran-2-one	0.015	132
Q105350962	<chem>CC(=O)OC1CC2(O)C3CCC4=CC(OC5OC(CO)C(O)C(O)C5O)CCC4(C)C3CCC2(C)C1c1ccc(=O)oc1</chem>	(1r,2s,3as,3br,7s,9ar,9bs,11ar)-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-7-[(2r,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9	0.015	133

Código	SMILES	Nombre	Bloqueador canal hERG	Ranking
		h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-2-yl acetate		
Q105200005	<chem>C[C@]12[C@@H](O)C[C@H]3[C@@H](CC4=C[C@@H](O)CC[C@@]43C)[C@@]1(O)CC[C@@H]2c1ccc(=O)oc1</chem>	5-[(1r,3as,3br,7r,9ar,9bs,11s,11as)-3a,7,11-trihydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	0.014	134
Q104913420	<chem>CC(=O)O[C@@H]1[C@]2(O)[C@H](CC[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@@]2(C)CC[C@H](O)[C@@H]3O[C@H](C(O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C[C@H]12</chem>	(1r,3ar,3bs,5r,5as,7s,9as,9br,11ar)-3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-7-[(2r,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)-dodecahydro-1h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	0.014	135
Q105161040	<chem>CC12CCC3C(CCC4(OC5OC(CO)C(O)C(O)C5O)C=CCCC34C(=O)O)C1(O)CCC2c1ccc(=O)oc1</chem>	3a-hydroxy-11a-methyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-5a-[[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthrene-9a-carboxylic acid	0.014	136
Q105111794	<chem>CC(=O)O[C@H]1C[C@]2(O)[C@]3(O)CCC4=C[C@@H](O)[C@@H]5O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]5O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]2(C)[C@H]1c1ccc(=O)oc1</chem>	(1r,2s,3ar,3bs,7s,9ar,9br,11ar)-3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-7-[[2r,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy)-1h,2h,3h,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-2-yl acetate	0.013	137
Q105369004	<chem>CO[C@@H]1[C@@H](O)[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]2O)[C@H](C)O[C@@H](O)[C@H]2CC[C@@]3(C)[C@H](C2)[C@H](OC(C)=O)C[C@]2(O)[C@@H]3C[C@@H](O)[C@]3(C)[C@@H](c4ccc(=O)oc4)CC[C@]23O)[C@H]1O</chem>	(1r,3ar,3bs,5r,5as,7s,9as,9br,11r,11as)-3a,3b,11-trihydroxy-7-[(2r,3s,4s,5s,6s)-3-hydroxy-4-methoxy-6-methyl-5-[[2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy)-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-dodecahydro-1h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	0.013	138
Q105350961	<chem>CC(=O)OC1CC2(O)C3CCC4=CC(OC5OC(CO)C(O)C(O)C5O)CCC4(C)C3CCC2(C)C1c1ccc(=O)oc1</chem>	3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-7-[[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]-	0.013	139

Código	SMILES	Nombre	Bloqueador canal hERG	Ranking
		1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-2-yl acetate		
Q105168901	<chem>CC1OC(OC2CCC3(C)C(CCC4C3C(O)CC3(C)C(c5ccc(=O)oc5)CCC43O)C2)C(O)C(O)C1O</chem>	5-(3a,10-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-7-[(3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl)oxy]-tetradecahydrocyclopenta[a]phenanthren-1-yl)pyran-2-one	0.013	140
Q105111795	<chem>CC(=O)OC1CC2(O)C(C)(CCC3C4(C)CCC(O)C5OC(CO)C(O)C(O)C5O)C=C4CCC32O)C1c1ccc(=O)oc1</chem>	3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-7-[(3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl)oxy]-1h,2h,3h,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-2-yl acetate	0.012	141
Q105034623	<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@@H]2C=C3CC[C@@H]4[C@H](CC[C@]5(C)[C@@H](c6ccc(=O)oc6)[C@@H](O)C[C@]45O)[C@@]3(C)CC2)[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O[C@@H]1O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]2O)[C@H](O)[C@H]1O</chem>	5-[[[1r,2s,3as,3br,7s,9ar,9bs,11ar]-7-[[[2r,3r,4s,5r,6s)-5-[[[2s,3r,4r,5s,6r)-3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[[[2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy]-3,4-dihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy]-2,3a-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	0.012	142
Q105347719	<chem>CC(=O)O[C@H]1C[C@]2(O)[C@@H]3CCC4=C[C@@H](O)[C@@H]5O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]6O)[C@H](O)[C@H]5O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]2(C)[C@H]1c1ccc(=O)oc1</chem>	(1r,2s,3as,3br,7s,9ar,9bs,11ar)-7-[[[2r,3r,4r,5s,6r)-3,4-dihydroxy-6-(hydroxymethyl)-5-[[[2s,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]oxan-2-yl]oxy]-3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-2-yl acetate	0.012	143
Q104913419	<chem>CC(=O)OC1CC2(O)C(CCC3(C)C(c4ccc(=O)oc4)CCC32O)C2(C)CCC(OC3OC(CO)C(O)C(O)C3O)CC12</chem>	3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-7-[(3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl)oxy]-dodecahydro-1h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	0.011	144

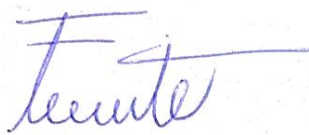
Código	SMILES	Nombre	Bloqueador canal hERG	Ranking
Q105329422	<chem>CC12CCC(OC3OC(CO)C(O)C(O)C3O)C=C1CCC1C2CCC2(C)C(c3ccc(=O)oc3)CCC12O</chem>	5-(3a-hydroxy-9a,11a-dimethyl-7-[[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl)pyran-2-one	0.011	145
Q105191795	<chem>C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CC[C@@H]4C=CCC[C@@]34C=O)[C@@]1(O)CC[C@@H]2c1ccc(=O)oc1</chem>	(1r,3as,3br,5ar,9as,9bs,11ar)-3a-hydroxy-11a-methyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,5ah,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthrene-9a-carbaldehyde	0.01	146
LTS0202416	<chem>C[C@]12CC[C@H](O)C=C1CC[C@@H]1[C@@H]2CC[C@]2(C)C(c3ccc(=O)oc3)CC[C@]12O</chem>	5-[(3as,3br,7s,9ar,9bs,11ar)-3a,7-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	0.009	147
Q76085539	<chem>C[C@]12CC[C@H](O)[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C=C1CC[C@@]1(O)[C@@H]2CC[C@]2(C)[C@H](c3ccc(=O)oc3)CC[C@]12O</chem>	5-[(1r,3ar,3bs,7s,9ar,9br,11ar)-3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-7-[[{(2r,3r,4s,5s,6r)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]-1h,2h,3h,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthren-1-yl]pyran-2-one	0.007	148
Q105203736	<chem>COC1C(O)C(C)OC(OC2CCC3(C)C(C2)C(OC(C)=O)CC2(O)C3CCC3(C)C(c4ccc(=O)oc4)CC32O)C1O</chem>	7-[(3,5-dihydroxy-4-methoxy-6-methyloxan-2-yl)oxy]-3a,3b-dihydroxy-9a,11a-dimethyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-dodecahydro-1h-cyclopenta[a]phenanthren-5-yl acetate	0.006	149
Q105263005	<chem>CC12C(O)CC3C(CCC4=CC(OC5OC(CO)C(O)C(O)C5O)CCC43C=O)C1(O)CCC2c1ccc(=O)oc1</chem>	3a,11-dihydroxy-11a-methyl-1-(6-oxopyran-3-yl)-7-[[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy]-1h,2h,3h,3bh,4h,5h,7h,8h,9h,9bh,10h,11h-cyclopenta[a]phenanthrene-9a-carbaldehyde	0.005	150
Q105299312	<chem>OC[C@H]1O[C@H](O[C@]2(CO[C@]3(CO[C@]4(CO)O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]4O)O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]3O)O[C@H](CO)[C@]3(CO)O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]3O)[C@@H](O)[C@@H]2O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]1O</chem>	(2r,3r,4s,5s,6r)-2-[[{(2s,3s,4s,5r)-5-[[{(2r,3s,4s,5r)-3,4-dihydroxy-2,5-bis(hydroxymethyl)oxolan-2-yl]oxy)methyl]-2-[[{(2r,3s,4s,5r)-2-	0.005	151

Código	SMILES	Nombre	Bloqueador canal hERG	Ranking
		(([(2r,3s,4s,5r)-3,4-dihydroxy-2,5-bis(hydroxymethyl)oxolan-2-yl]oxy)methyl)-3,4-dihydroxy-5-(hydroxymethyl)oxolan-2-yl]oxy)methyl)-3,4-dihydroxyoxolan-2-yl]oxy)-6-(hydroxymethyl)oxane-3,4,5-triol		

Autorización de publicación en el repositorio institucional

Fausto Daniel Idrovo Hidalgo y Pamela Katherine Lucero Arias portadores de la cédula de ciudadanía N° **0107455321** y N° **010683257**. En calidad de autores y titulares de los derechos patrimoniales del trabajo de titulación **“EVALUACION DEL POTENCIAL CARDIOTOXICO DE LOS FITOQUIMICOS DE LA PLANTA *Urginea maritima* MEDIANTE LOS METODOS COMPUTACIONALES”** de conformidad a lo establecido en el artículo 114 Código Orgánico de la Economía Social de los Conocimientos, Creatividad e Innovación, reconocemos a favor de la Universidad Católica de Cuenca una licencia gratuita, intransferible y no exclusiva para el uso no comercial de la obra, con fines estrictamente académicos y no comerciales. Autorizamos además a la Universidad Católica de Cuenca, para que realice la publicación de éste trabajo de titulación en el Repositorio Institucional de conformidad a lo dispuesto en el artículo 144 de la Ley Orgánica de Educación Superior.

Cuenca, **02 de mayo de 2024**



Fausto Daniel Idrovo Hidalgo

C.I. 0107455321



Pamela Katherine Lucero Arias

C.I. 0106983257