

SMILES	Class
<chem>CC(C)CC(C)(O)CCC(C)(O)CC(C)C</chem>	1
<chem>CN(C)CCCN1CN(CCCN(C)C)CN(CCCN(C)C)C1</chem>	1
<chem>O=C1C=C(O)C(=O)c2ccccc21</chem>	1
<chem>CC1=C(CC(=O)O)c2cc(F)ccc2C1=Cc1ccc(S(C)=O)cc1</chem>	0
<chem>CC(Cl)CCl</chem>	1
<chem>CCC(C)O</chem>	1
<chem>COc1ccc(C(=O)c2ccccc2)c(O)c1</chem>	0
<chem>COc1cc(OC)c2c(c1Cl)OC1(C2=O)C(C)CC(=O)CC1OC</chem>	0
<chem>O=CC(=O)c1ccccc1</chem>	1
<chem>C=C(C#N)CCC#N</chem>	0
<chem>COc1cc(C(=O)NS(=O)(=O)c2ccccc2C)ccc1Cc1cn(C)c2ccc(NC(=O)OC3CCCC3)cc12</chem>	0
<chem>CC(C)(S)C(N)C(=O)O</chem>	0
<chem>CCCN(CCCc1cccs1)C1CCc2c(O)cccc2C1</chem>	0
<chem>Clc1ccc(C(c2ccc(Cl)cc2)C(Cl)Cl)cc1</chem>	1
<chem>CC(=O)OC1CC2CCC3C(CCC4(C)C3CC([N+](C)CCCC3)C4OC(C)=O)C2(C)CC1[N+](C)CCCCC1</chem>	0
<chem>CCC(O)C(C)(C)C</chem>	1
<chem>Nc1ccc(N=Nc2ccccc2)c(N)n1</chem>	0
<chem>O=P(O)(OCc1ccccc1)OCc1ccccc1</chem>	1
<chem>Cc1nnc(C(C)C)n1C1CC2CCC(C1)N2CCC(NC(=O)C1CCC(F)(F)CC1)c1ccccc1</chem>	0
<chem>CC(C)(O)C(=O)O</chem>	1
<chem>CCOP(=S)(OCC)SCCSCC</chem>	1
<chem>CC(C)CCCCCCCCCCCCC(=O)OC(C)C</chem>	0
<chem>C1CCCCC1</chem>	1
<chem>CC(Cc1ccccc1)NCCC(c1ccccc1)c1ccccc1</chem>	0
<chem>COc1ccc2c(C(=S)N(C)CC(=O)O)cccc2c1C(F)(F)F</chem>	0
<chem>CCN(CC)Cc1cc(Nc2ccnc3cc(Cl)ccc23)ccc1O</chem>	0
<chem>CC(=O)c1ccc2c(c1)N(CCCN1CCN(CCO)CC1)c1ccccc1S2</chem>	0
<chem>Cc1c(Cl)cccc1Cl</chem>	1
<chem>CCc1nc(N)nc(N)c1-c1ccc(Cl)cc1</chem>	0
<chem>O=C1OCCN1N=Cc1ccc([N+](=O)[O-])o1</chem>	0
<chem>C=C(C)C(=O)OCCOCCOCCOC(=O)C(=C)C</chem>	0
<chem>OC1COCOC1</chem>	1
<chem>C=COCCCl</chem>	1
<chem>OCC(O)CO</chem>	0
<chem>CNC1C(OC2C(OC3C(O)C(O)C(NC(=N)N)C(O)C3NC(=N)N)OC(C)C2(O)C=O)OC(CO)C(O)C1O</chem>	0
<chem>COc1cccc(C=O)c1</chem>	0
<chem>N#CC(=C1SCC(c2ccccc2Cl)S1)n1ccnc1</chem>	0
<chem>CC(C)CC(C)O</chem>	1
<chem>CCO[Si](OCC)(OCC)OCC</chem>	0
<chem>O=C(O)C(O)C(O)C(O)C(O)CO</chem>	0
<chem>O=C1OC2(c3ccccc31)c1ccc(O)c(Br)c1Oc1c2ccc(O)c1Br</chem>	1
<chem>CCCCC(C)(O)C=CC1C(O)CC(O)C1CC=C=CCCC(=O)OC</chem>	0
<chem>CCn1cc(C(=O)O)c(=O)c2cc(F)c(N3CCNCC3)nc21</chem>	0
<chem>OCCNCCO</chem>	0

CC(CC=O)CC(C)(C)C	1
CC(C)c1nc(-c2cccc2)cc(-c2ccc(F)cc2)c1C=CC1CC(O)CC(=O)O1	0
CN1CCN(C(=O)OC2C3=C(SCCS3)C(=O)N2c2ccc3ccc(Cl)nc3n2)CC1	0
CCCCOc1ccc(OCCCC)cc1	1
CCCCCCCCCOC(=O)CCCCC(=O)OCCCCCCCC	1
CCCC(C)(COC(N)=O)COC(N)=O	0
CCCCCCCCCCCCCCCC(C)c1cc(C)cc(C)c1O	0
CCOC(=O)Nc1ccc2c(c1)N(C(=O)CCN1CCOCC1)c1cccc1S2	0
CC(=O)NC1C(NC(=N)N)C=C(C(=O)O)OC1C(O)C(O)CO	0
Oc1ccc2ccc(O)cc2c1	1
OC1COC2C(O)COC12	0
CN1C(=O)CN=C(c2cccc2F)c2cc([N+](=O)[O-])ccc21	0
C[N+](1(C)CCN(CC(O)(c2cccc2)C2CCCC2)CC1	0
CC(C)c1nc(CN(C)C(=O)NC(C(=O)NC(Cc2cccc2)CC(O)C(Cc2cccc2)NC(=O)OCc2cnccs2)C(C)C)cs1	0
C=C[Si](OCC)(OCC)OCC	0
CNC1C(OC2C(OC3C(O)C(O)C(NC(=N)N)C(O)C3NC(=N)N)OC(C)C2(O)CO)OC(CO)C(O)C1O	0
CCC#N	1
CC(Cl)Cl	1
C=C(CC(C)(C)c1cccc1)c1cccc1	0
COC(=O)C1CC2=CC(=O)CCC2(C)C23OC2CC2(C)C(CCC24CCC(=O)O4)C13	0
COCCOC(C)=O	1
O=C(Cc1cccs1)NC1C(=O)N2C(C(=O)O)=C(C[n+](3cccc3)CSC12	0
O=[N+](O-)]c1cc([N+](=O)[O-])c(O)c([N+](=O)[O-])c1O	0
CC(C)CC(O)CC(CC(C)C)CC(C)C	0
COc1cccc(OC)c1C(=O)NC1C(=O)N2C1SC(C)(C)C2C(=O)O	0
CC(C)(C#N)N=NC(C)(C)C#N	1
CC(=O)CBr	1
c1nnc[nH]1	1
CC(C)(C)c1ccc(O)cc1	1
CCN(CC)CCSC(=O)C(c1cccc1)c1cccc1	0
CNCC(OC)OC	1
OCC(O)COCC(O)CO	0
Nc1ncn(C2OC(CO)C(O)C2O)c(=O)n1	0
CC(=O)Oc1ccc2c(c1)CCC1C2CCC2(C)C(O)CCC12	0
O=Cc1ccco1	1
CN(C)C1C(=O)C(C(N)=O)C(=O)C2(O)C(O)=C3C(=O)c4c(O)ccc(Cl)c4C(O)C3CC12	0
CC(O)CN(CCCN(C)C)CC(C)O	1
C=CCOC(C)=O	1
COc1ccc(C(=O)Nc2cccc2CCC2CCCCN2C)cc1	0
CC(C)CC(C)OC(=O)CC(C(=O)OC(C)CC(C)C)S(=O)(=O)O	1
CC(C)N	1
Oc1c(Cl)cc(Cl)cc1Cl	1
O=S(O)CNc1ccc(S(=O)(=O)c2ccc(NCS(=O)O)cc2)cc1	0
CCSc1ccc2c(c1)N(CCCN1CCN(C)CC1)c1cccc1S2	0
C1COC1	1

O=C(COC1ccc(Cl)cc1Cl)OCC=CCCCl	1
CC(C)Br	1
COC	1
Clc1nc(Cl)nc(Nc2ccccc2Cl)n1	1
OC(Cn1cncn1)(Cn1cncn1)c1ccc(F)cc1F	0
CO[Si](CCCCSCCC[Si])(OC)(OC)OC(OC)OC	0
CNCCC(OC1cccc2ccccc12)c1cccs1	0
CCCC(N)(C#N)CC	1
C#CC1(O)CCC2C3CCC4=CCCCC4C3C(=C)CC21CC	0
C=CCN1CCC23c4c5ccc(O)c4OC2C(=O)CCC3(O)C1C5	0
COP(=O)(OC)OC	1
CCc1cc(C)cc(CC)c1-c1c(OC(=O)C(C)(C)C)n2n(c1=O)CCOCC2	1
OC(CCN1CCCCC1)(c1ccccc1)C1CCCC1	0
CC(C)N1CCC(N(C(=O)Cc2ccccc2)c2ccc(Cl)cc2)CC1	0
C=C(C)C(=O)OCCN1CCNC1=O	1
O=C(O)CCCc1ccc(N(CCCl)CCCl)cc1	0
CCCCC(CC)COC(=O)c1ccc(C(=O)OCC(CC)CCCC)cc1	1
O=[N+][O-]c1ccccc1O	1
CC(O)CN(CCCN(C)C)CCCN(C)C	1
CCC(C)OC(C)=O	1
CCCNc1CCc2nc(N)sc2C1	0
CCOc1ccc2ccccc2c1C(=O)NC1C(=O)N2C1SC(C)(C)C2C(=O)O	0
CN1CCCN=C1C=Cc1cccs1	0
CC(=O)OC(C)C[N+](C)(C)C	0
CC[N+](=O)[O-]	1
Cc1ccc(OP(=O)(Oc2ccc(C)cc2)Oc2ccc(C)cc2)cc1	0
FC(Cl)(Cl)C(F)(Cl)Cl	1
CCC1(O)C(=O)OCc2c1cc1n(c2=O)Cc2cc3c(CN(C)C)c(O)ccc3nc2-1	0
COc1ncnc(NS(=O)(=O)c2ccc(N)cc2)c1OC	0
C=CC(=C)C	1
CCC(C)c1cc(S(=O)(=O)O)cc(-n2nc3ccccc3n2)c1O	1
N=C(N)C1=CC(=O)C(=CC=c2ccc(=C(N)N)cc2)C=C1	0
CCOC(=O)OC(C)OC(=O)C1N2C(=O)C(NC(=O)C(N)c3ccccc3)C2SC1(C)C	0
CCCCCCCCCCCCOP(=O)(O)O	1
CCCCCCn1c(=O)c2c(ncn2C)n(C)c1=O	0
CCO[Si](C)(OCC)OCC	0
CCOC(=O)c1[nH]n(-c2ccccc2)c(=O)c1N=Nc1ccc(-c2ccc(/N=N/c3c(C(=O)OCC)[nH]n(-c4ccccc4)c3=O)cc1	0
CC1(C)C(=O)N(CI)C(=O)N1Cl	1
CC(=O)/C(=N\Nc1cc(C(=O)Nc2cc(Cl)ccc2C)ccc1Cl)C(=O)Nc1cc(C)c(NC(=O)/C(=N/Nc2cc(C(=O)Nc3c(C(=O)OCC)[nH]n(-c4ccccc4)c3=O)cc1	0
CCC1(CC)C(=O)NC(=O)N(C)C1=O	0
OCC(CBr)(CBr)CBr	1
NCCC(O)C(=O)NC1CC(N)C(OC2OC(CN)C(O)C(O)C2O)C(O)C1OC1OC(CO)C(O)C(N)C1O	0
CCNc1nc(Cl)nc(NCC)n1	1
C=C(Br)C(F)(F)F	0
C[N+](C)C2CC(OC(=O)C(CO)c3ccccc3)CC1C1OC12	0

Cc1cc(Cc2cc(C)c(O)c(C)c2)cc(C)c1O	0
CCOC(=O)CS	1
C=C(C)C(N)=O	1
Cc1c(O)cccc1C(=O)NC(CSc1cccc1)C(O)CN1CC2CCCCC2CC1C(=O)NC(C)(C)C	0
O=c1[nH]ncc2cccc12	1
C#CC1(O)CCC2C3CCC4=CC(=O)CCC4(C)C3CCC21C	0
CCSCCO	1
CN(C)C=Nc1c(I)cc(I)c(CCC(=O)O)c1I	0
CNC(=O)NC	1
Nc1ccn(C2CSC(CO)O2)c(=O)n1	0
CCCCCCCCC=CCCCCCCCCNC(=O)CCCCCCCCCCCCCCC	0
CCCCCCCCCCCCC(=O)O	0
C1=CCC=C1	1
CCCCCNCCCCC	1
Oc1c(I)cc(I)c2cccnc12	0
CC1(C)SC2C(NC(=O)C(N)c3cccc3)C(=O)N2C1C(=O)O	0
CCC(OC(C)=O)C(CC(C)N(C)C)(c1cccc1)c1cccc1	0
CN(CCCN)CCCN	1
Cc1cscn1	1
CC(C=CC1=C(C)CCCC1(C)C)=CC[P+](c1cccc1)(c1cccc1)c1cccc1	1
Clc1cc2c(oc3c(Cl)c(Cl)c(Cl)c(Cl)c32)c(Cl)c1Cl	1
Oc1c(Br)cc(Br)cc1Br	1
Clc1cccc1CN1CCc2sccc2C1	0
CC(C(=O)O)c1ccc2oc(-c3ccc(F)cc3)nc2c1	0
CC(C)(C)CC(C)(C)OO	1
CC(C)CC1CC(C)(O)CCO1	1
O=C(NCCNCC(O)COc1ccc(O)cc1)N1CCOCC1	0
CCCO[Si](OCCC)(OCCC)OCCC	0
CN1CCN2c3cccc3Cc3cccc3C2C1	0
C=C(C)C(=O)OC(C)CO	1
CC(N)(Cc1ccc(O)cc1)C(=O)O	0
CC1CCCC(C)N1NC(=O)c1ccc(Cl)c(S(N)(=O)=O)c1	0
C=COCC(F)(F)F	0
O=C(O)c1cccc1C(=O)c1cccc1	1
CCCCCCC(=O)OCC(COC(=O)CCCCC)OC(=O)CCCCC	0
CN	1
CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O	0
CCC1(O)CC(OC2CC(N(C)C)C(OC3CC(O)C(OC4CCC(=O)C(C)O4)C(C)O3)C(C)O2)c2c(cc3c(c2O)C(=O)	0
CCCCC(C)=O	0
CC(C(=O)O)c1cccc(Oc2cccc2)c1	0
CC(C)(C)OOC1(OOC(C)(C)C)CCCCC1	0
Cc1ncsc1CCCl	0
CC(C)(C)C(O)C(Oc1ccc(-c2cccc2)cc1)n1cncn1	0
O=P1(NCCCl)OCCCN1CCCl	0
COc1ccc2c3c1OC1C(=O)CCC4C(C2)N(C)CCC314	0

C#CCC(Cc1cnc2nc(N)nc(N)c2n1)c1ccc(C(=O)NC(CCC(=O)O)C(=O)O)cc1	0
Cc1cc(C2(c3ccc(O)c(C)c3)CCCCC2)ccc1O	0
CCN(CC)CC#CCOC(=O)C(O)(c1ccccc1)C1CCCCC1	0
N#CC(Br)c1ccccc1	1
CN1C(CCl)Nc2cc(Cl)c(S(N)(=O)=O)cc2S1(=O)=O	0
CC(O)CNCC(C)O	1
Nc1nc(Cl)nc2c1ncn2C1OC(CO)C(O)C1F	0
COCCCN1CCC(NC(=O)c2cc(Cl)c(N)c3c2OCC3)CC1	0
CNC(C)C1CCC(N)C(OC2C(N)CC(N)C(OC3OCC(C)(O)C(NC)C3O)C2O)O1	1
OCCOc1ccccc1	1
Cc1ncc(CNC(=O)N(CCCl)N=O)c(N)n1	0
CC(C)C1CCC2C(CCC3C(C)(CO)CCCC23C)C1	1
CON=C(C(=O)NC1C(=O)N2C(C(=O)O)=C(CSc3nc(=O)c(O)nn3C)CSC12)c1csc(N)n1	0
CC1CC2C3CC(F)C4=CC(=O)C=CC4(C)C3(F)C(O)CC2(C)C1(O)C(=O)CO	0
COc1cc(NS(C)(=O)=O)ccc1Nc1c2ccccc2nc2ccccc12	0
O=C(O)c1cc(SSc2ccc([N+](=O)[O-])c(C(=O)O)c2)ccc1[N+](=O)[O-]	1
NS(=O)(=O)c1cc2c(cc1Cl)NCNS2(=O)=O	0
OC(c1ccc(Cl)cc1)(c1ccc(Cl)cc1)C(Cl)(Cl)Cl	1
CC=CCCC1CCCC(=O)O1	0
COc1ccc(C(Cl)=C(c2ccc(OC)cc2)c2ccc(OC)cc2)cc1	0
Nc1ccc(Oc2ccc(N)cc2)cc1	1
Nc1ccc(OCCO)c(N)c1	0
CCC(C)(C)CC	0
Cc1cc(C(C)(C)C)c(O)c(C(C)(C)C)c1	1
Nc1ccc(C(=O)O)cc1	0
C=CCOC(=O)OCCOCCOC(=O)OCC=C	0
O=C(c1ccccc1)C1(O)CCCCC1	0
O=C1C2C3CCC(C3)C2C(=O)N1CC1CCCCC1CN1CCN(c2nsc3ccccc23)CC1	0
COC1(NC(=O)C(C(=O)O)c2ccc(O)cc2)C(=O)N2C(C(=O)O)=C(CSc3nnnn3C)COC21	0
CCCN(CCC)CCc1cccc2c1CC(=O)N2	0
CC(=O)CC(=O)OC(C)C	1
Nc1ccc(Cc2ccc(N)cc2)cc1	0
C/N=C(/C[N+](=O)[O-])NCCSCc1csc(CN(C)C)n1	0
NP(N)(=O)Nc1ccccc1[N+](=O)[O-]	0
CC(C)=CCC1C(=O)N(c2ccccc2)N(c2ccccc2)C1=O	0
CC1=CC(C)(C)Nc2ccccc21	0
O=C(CS)OCC(O)CO	0
O=C(O)CCNC(=O)c1ccc(N=Nc2ccc(O)c(C(=O)O)c2)cc1	0
C=C(Cl)Cl	1
O=C1Cc2ccccc2O1	1
NCCCNCCCN	1
CN1CC2c3ccccc3Oc3ccc(Cl)cc3C2C1	0
O=C(O)C(O)C(O)C(=O)O	0
NS(=O)(=O)c1ccc(N2CCCCS2(=O)=O)cc1	0
Cc1ccc(Nc2ccc(Nc3ccc(C)cc3S(=O)(=O)O)c3c2C(=O)c2ccccc2C3=O)c(S(=O)(=O)O)c1	0

CCOC(COCC(OCC)OCC)OCC	0
COC=O	1
CN1CCN(C)CC1	1
CCc1ncc(C)[nH]1	1
C=CC(=O)OCCCOCC(C)(C)COCCCOCC(=O)C=C	0
C[N+](C)(CCOc1ccccc1)Cc1ccccc1	0
CNC=O	1
C=CCC1(CC(C)C)C(=O)NC(=O)NC1=O	0
C=CCCCCCCCCCCCC	0
CON(C)C(=O)Nc1ccc(Br)c(Cl)c1	1
NNC(=O)c1ccncc1	0
COc1cc(NCc2ccc3nc(N)nc(N)c3c2C)cc(OC)c1OC	0
O=C(O)Cc1sc(-c2ccccc2)nc1-c1ccc(Cl)cc1	0
CN1C(=O)C(O)N=C(c2ccccc2Cl)c2cc(Cl)ccc21	0
O=C(C(Cl)(Cl)Cl)C(Cl)(Cl)Cl	1
O=[N+][O-]c1ccc([N+](=O)[O-])cc1	1
CC1(C)C(=O)C(C)(C)C1=O	0
NC(CO)(CO)CO	0
Cc1ccnc(NS(=O)(=O)c2ccc(N)cc2)n1	0
CCCCCCCCCCCCCCCCCOCCO	0
C=CCCCCCCCCCC	1
CNC1CCC(c2ccc(Cl)c(Cl)c2)c2ccccc21	0
CC1COc2ccccc2N1C(=O)C(Cl)Cl	0
CC1OC(C)OC(C)OC(C)O1	1
O=C(Cl)c1c(Cl)cccc1Cl	1
O=C(O)c1cc(O)c(O)c(O)c1	1
COC(=O)CC#N	1
Cc1c(O)cc2c(c1C)OC(C)(CCCC(C)CCCC(C)CCCC(C)C)CC2	0
Clc1cc2c(cc1Cl)Oc1cc(Cl)c(Cl)cc1O2	1
CC(C)(C)c1ccc(OCC2CO2)cc1	0
C#CCN(C)Cc1ccccc1	0
Fc1ccccc1C1=NCC(=S)N(CC(F)(F)F)c2ccc(Cl)cc21	0
CCC(=O)OC(Cc1ccccc1)(c1ccccc1)C(C)CN(C)C	0
CN(C)CCON=C1c2ccccc2CCc2ccccc21	0
ClC(Cl)C(Cl)Cl	1
O=[N+][O-]c1cccc(Cl)c1	1
CCCc1cc(C(N)=S)ccn1	0
O=C(c1ccc(OCCN2CCCC2)cc1)c1c(-c2ccc(O)cc2)sc2cc(O)ccc12	0
O=P(O)(O)O	0
COC(=O)C1=C(C)NC(C)=C(C(=O)OC)C1c1ccccc1[N+](=O)[O-]	0
Nc1ccc2ccccc2c1	1
CC(C)n1c(C=CC(O)CC(O)CC(=O)O)c(-c2ccc(F)cc2)c2ccccc21	0
CCNC(=O)OCC	1
COc1cc(S(=O)(=O)O)c(C)cc1N	1
Clc1ccc(C(Cn2ccnc2)OCc2ccsc2Cl)c(Cl)c1	0

CCCC(=O)OCOC(=O)C1=C(C)NC(C)=C(C(=O)OC)C1c1cccc(Cl)c1Cl	0
CN(C)C(=O)Oc1ccc[n+](C)c1	0
C=C(C)C(=O)OCCOCC	0
COc1ccc(-n2nc(C(N)=O)c3c2C(=O)N(c2ccc(N4CCCC4=O)cc2)CC3)cc1	0
S=C(Nc1ccccc1)Nc1ccccc1	1
C=CC1CN2CCC1CC2C(O)c1ccnc2ccc(OC)cc12	0
CCCCCS	1
CN1CCN(CCC=C2c3ccccc3Sc3ccc(S(=O)(=O)N(C)C)cc32)CC1	0
B	0
CCc1oc2ccccc2c1C(=O)c1cc(Br)c(O)c(Br)c1	0
CN(C)C(=O)Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1	0
O=C(O)c1cccc2ccccc12	1
CCCCOCCCO(=O)COc1ccc(Cl)cc1Cl	1
O=C1c2ccccc2C(=O)C1c1ccc2ccccc2n1	1
CC(=O)Nc1ccc(OCC(O)CNC(C)C)cc1	0
CCN(CC)CCOc1ccc(C=C(Cl)c2ccccc2)c2ccccc2)cc1	0
CC(=O)OCC1OC(OC2(COC(C)=O)OC(COC(=O)C(C)C)C(OC(=O)C(C)C)C2OC(=O)C(C)C)C(OC(=O)C(C)C	1
CCCC(C)C1(CC)C(=O)NC(=O)NC1=O	0
COc1ccc2c(c1)N(CC(C)CN(C)C)c1ccccc1S2	0
NC(=O)c1cnccn1	0
C=C(C)C(=O)OCCCCCCCCC	0
CCOC(=O)Cl	1
CC(C)OC(=O)Nc1ccccc1	1
BrC1CC(Br)CC(Br)CC(Br)CC(Br)CC(Br)C1	0
COP(=S)(OC)Oc1ccc([N+](=O)[O-])c(C)c1	1
CCOC(=O)C1C(=COCCN)NC(C)=C(C(=O)OC)C1c1ccccc1Cl	0
CCCCC(C=O)CC	0
CCC12COCN1COC2	1
Clc1cc(Cl)cc(Cl)c1	1
CCCCOc1ccc(CC(=O)NO)cc1	0
CC(=O)OC1(C(C)=O)CCC2C3C=C(C)C4=CC(=O)CCC4C3CCC21C	0
Cc1nnc(C(=O)NC(C)(C)c2nc(C(=O)NCc3ccc(F)cc3)c(O)c(=O)n2C)o1	0
N#CCC(=O)O	1
CC1c2cccc(O)c2C(=O)C2=C(O)C3(O)C(=O)C(C(N)=O)C(=O)C(N(C)C)C3C(O)C21	0
CCOC(=O)C(CCc1ccccc1)NC(C)C(=O)N1C(=O)N(C)CC1C(=O)O	0
CCCCCCCCCCCC=CCC=CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCNCCCCCCCCCCCCC=CCC=CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	1
CC(C)CCCCC(=O)NCCCCC(=O)O	0
CC(C)NCC(O)c1ccc(NS(C)(=O)=O)cc1	0
NCCS	0
CC1=C(NC(=O)O)C(NC(=O)C=N)C=CC1(NC(=O)O)c1cccc(-c2cccc(NC(=O)CN)c2C)c1	0
NC(N)=S	0
CCCc1ccccc1	1
Cc1nccn1C	1
CC(O)C(=O)Nc1c(l)c(C(=O)NC(CO)CO)c(l)c(C(=O)NC(CO)CO)c1l	0
CCCCCCCCC(=O)OCCN1CCN(CCCN2c3ccccc3Sc3ccc(C(F)(F)F)cc32)CC1	0

c1ccc(C2CN3CCSC3=N2)cc1	0
NS(=O)(=O)c1cc2c(cc1Cl)NC(C1CC3C=CC1C3)NS2(=O)=O	0
CCCCCCCC[Si](OC)(OC)OC	0
CCC1(O)C(=O)OCc2c1cc1n(c2=O)Cc2cc3c([N+](=O)[O-])cccc3nc2-1	0
NC12CC3CC(CC(C3)C1)C2	0
FC(F)OC(F)C(F)(F)F	0
O=C(CCCCC(=O)Nc1c(l)cc(l)c(C(=O)O)c1l)Nc1c(l)cc(l)c(C(=O)O)c1l	0
O=C(O)CCBr	1
CCCC(Cl)CCCC(Cl)CCC(Cl)CCC(Cl)CCCC(Cl)CCC	0
CC[N+]1(CC)CCCC(OC(=O)C(O)(c2cccc2)c2cccc2)C1	0
CC(C)(Oc1ccc(C2CC2(Cl)Cl)cc1)C(=O)O	0
COc1ccc(Cc2nccc3cc(OC)c(OC)cc23)cc1OC	0
NC(=O)CN1CCCC1=O	0
CN(C)CCOC(c1ccc(Cl)cc1)c1cccn1	0
CCC(C)=NO[Si](ON=C(C)CC)(ON=C(C)CC)ON=C(C)CC	1
CC(=Cc1csc(C)n1)C1CC2OC2(C)CCCC(C)C(O)C(C)C(=O)C(C)(C)C(O)CC(=O)N1	0
CCN(CC)C(C)C#N	1
COc1ccc2c(c1)C13CCCCC1C(C2)N(C)CC3	0
N#Cc1c(Cl)cccc1Cl	0
CC(C)C(=O)OOC(=O)C(C)C	1
C=CC=CCCC=CCC	0
CCCC(C)CC	0
O=C(Nc1cccc(Cl)c1)OCC#CCCl	1
CCCCC(C#N)c1cccc1	0
Cc1ccc(C)cc1	1
Clc1ccc2c(c1)C(N1CCNCC1)=Nc1cccc1O2	0
ClC(c1cccc1)(c1cccc1)c1cccc1	1
CC1CC2C3CCC4=CC(=O)C=CC4(C)C3C(=O)CC2(C)C1(O)C(=O)CO	0
Cc1cc(C=CC#N)cc(C)c1Nc1ccnc(Nc2ccc(C#N)cc2)n1	0
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC(CO)C1OC(=O)C(=O)C1OC(=O)CCCCCCCCCCCCCCC	0
CCCCCC(O)C=CC1C(O)CC2(C)CC(=CCCCC(=O)O)CC12	0
CC(C)N1CCN(c2ccc(OCC3COC(Cn4cncn4)(c4ccc(Cl)cc4Cl)O3)cc2)CC1	0
CCC(NC)c1cccc1OC	0
CCOC(=O)C(CCc1cccc1)NC(C)C(=O)N1Cc2cc(OC)c(OC)cc2CC1C(=O)O	0
C=CCCCCCCCC	1
CCCC(C)C=O	1
CC(C)c1cc(C(C)C)c(N=C=O)c(C(C)C)c1N=C=O	0
CC1CC2(C)C(CCC3C4CCC(O)C4(C)CCC32)CC1=O	0
Oc1cc(Cl)ccc1Oc1ccc(Cl)cc1Cl	1
CCOC(=O)C1OC1(C)c1cccc1	0
O=C(O)CCC(=O)OOC(=O)CCC(=O)O	1
CNC(=S)NN	1
Cc1nc(Nc2ncc(C(=O)Nc3c(C)cccc3Cl)s2)cc(N2CCN(CCO)CC2)n1	0
NCCO	1
CCCCCCCCCC[N+](C)(C)Cc1cccc1	1

NS(=O)(=O)c1cc2c(cc1Cl)N=CNS2(=O)=O	0
c1ccc2sc(SSN3CCOCC3)nc2c1	1
CCCCC(CC)COC(=O)c1ccc(Nc2nc(Nc3ccc(C(=O)NC(C)(C)C)cc3)nc(Nc3ccc(C(=O)OCC(CC)CCCC)cc3)	0
CC(=O)OC1CC(C)CCC1C(C)C	0
Cc1ccc(S(=O)(=O)NCl)cc1	1
CCC(=C(c1ccccc1)c1ccc(OCCN(C)C)cc1)c1ccccc1	0
CN1C(=O)CC(=O)N(c2ccccc2)c2cc(Cl)ccc21	0
Cc1ccccc1S(N)(=O)=O	0
CCCCOCCCC	0
CCN(CC)CCNC(=O)c1ccc(N)cc1	0
CC(C)(C)c1ccc(OP2OCC3(CO2)COP(Oc2ccc(C(C)(C)C)cc2C(C)(C)C)OC3)c(C(C)(C)C)c1	0
CON=C(C(=O)NC1C(=O)N2C(C(=O)O)=C(CSc3nnnn3C)CSC12)c1csc(N)n1	0
CCCCOCCOC(C)=O	1
Cc1cc([N+](=O)[O-])cc([N+](=O)[O-])c1O	1
C1CN(CCOCCN2CCOCC2)CCO1	1
COCc1c(C(C)C)nc(C(C)C)c(C=CC(O)CC(O)CC(=O)O)c1-c1ccc(F)cc1	0
Cc1ccc(-n2[nH]c(C)c(N=Nc3ccc(-c4ccc(/N=N/c5c(C)[nH]n(-c6ccc(C)cc6)c5=O)c(Cl)c4)cc3Cl)c2=O)	0
CC(O)C(O)C1CNc2[nH]c(N)nc(=O)c2N1	0
OCC1CC2CCC1C2	1
CCC(c1ccc2cc(OC)ccc2c1)C(C)(C)C(=O)O	0
CCOP(OCC)OCC	1
CCCCC(CC)COC(=O)CCCCC(=O)OCC(CC)CCCC	1
CCCCCCCCCCCCOCCOCCOCCOCCOCCOCCOCCOCCOCCOCCO	0
CCCCC(CC)COC(=O)c1ccccc1O	0
CCOC(=O)n1ccn(C)c1=S	0
O=S(=O)(O)c1ccc(O)cc1	1
CNC1C(O)C(OC2C(N)CC(N)C(OC3OC(CN)=CCC3N)C2O)OCC1(C)O	0
O=c1[nH]c2ccccc2n1C1CCN(CCCC(c2ccc(F)cc2)c2ccc(F)cc2)CC1	0
CN(C)CCCN(C)CCCN(C)C	1
CN(C)CCN1C(=O)c2ccccc2N(C)c2ccccc21	0
CCCCCl	0
CC(N)C(O)c1cccc(O)c1	0
O=C1c2ccccc2C(=O)N1CC1CO1	1
CC1CN(c2cc3c(cc2F)c(=O)c(C(=O)O)cn3-c2ccc(F)cc2F)CCN1	0
NC=O	1
CC(C)(C)C(O)C=Cc1ccc2c(c1)OCO2	0
CC(=O)NC(CS)C(=O)O	0
CC1=CCC(=C(C)C)CC1	0
O=[N+](O-)]C(Br)(CO)CO	1
CCCCCCCCCCCCOCC(=O)CCCCC(=O)OCCCCCCCCCCCCC	0
CC(C)(N)Cc1ccccc1Cl	0
C=CC1CC2C=CC1C2	0
CCCCCCCCCCCCC(=O)OCCOCC(OCCO)C1OCC(OCCO)C1OCCO	0
CC(=O)OC1C(=O)C2(C)C(O)CC3OCC3(OC(C)=O)C2C(OC(=O)c2ccccc2)C2(O)CC(OC(=O)C(O)C(NC(=O	0
CCOCCCOCC(O)CC	0

O=C1OC2(c3ccccc31)c1ccc(O)c(l)c1Oc1c2ccc(O)c1l	1
CC(=O)Nc1c(l)c(C(=O)O)c(l)c(C(=O)NCCO)c1l	0
COC(C)CCOC(C)=O	0
CCCCOC(=O)CO	1
CC(C)NCC(O)COc1ccc(COCCOC(C)C)cc1	0
C=CCO	1
Cc1c(F)c(N2CCNC(C)C2)cc2c1c(=O)c(C(=O)O)cn2C1CC1	0
CC(c1ccc(Cl)c(Cl)c1)n1[nH]c(N)cc1=O	0
BrC1ccc(-c2ccccc2)cc1	0
O=CC1CC=CCC1	1
CC(C)c1ccc2ccccc2c1C(C)C	0
Cc1[nH]c(=O)n(C(C)(C)C)c(=O)c1Cl	0
Cc1ncc2n1-c1ccc(Cl)cc1C(c1ccccc1F)=NC2	0
CC12CCC3c4ccc(O)cc4CCC3C1CCC2O	0
CC(C)C(=O)OCC(=O)C12OC(C3CCCCC3)OC1CC1C3CCC4=CC(=O)C=CC4(C)C3C(O)CC12C	0
CC(C)(C)c1ccc(CSc2cnn(C(C)(C)C)c(=O)c2Cl)cc1	1
O=P(O)(O)C(Cl)(Cl)P(=O)(O)O	0
C=C(C)C(=O)OCC	1
CCN(CCO)CCCC(C)Nc1ccnc2cc(Cl)ccc12	0
C=CCCCCCCCCCCC	1
CC(C)=CCN1CCC2(C)c3cc(O)ccc3CC1C2C	0
CCC1(c2cccc(O)c2)CCCCN(C)C1	0
OCCCOCCN(CCOCCCO)CCOCCCO	0
O=[N+][O-]c1ccc(O)c(CCl)c1	0
CCCCCCCCC(=O)OCCOCCOC(=O)CCCCCCCC	1
O=P(O)(O)C(Sc1ccc(Cl)cc1)P(=O)(O)O	0
CCC(C)C1(CC)C(=O)NC(=O)NC1=O	0
CCl	0
C[Si]1(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O1	0
CCOC(=O)C1Oc2ccc(Cl)cc2C(C)c2cc(Cl)ccc2O1	0
CC(C)OC(=O)CCC(=O)OC(C)C	0
CC(C)(C)N	1
CC1(C)C(C(=O)O)N2C(=O)CC2S1(=O)=O	0
CCCOc1cc(N)ccc1C(=O)OCCN(CC)CC	0
CCNc1nc(Cl)nc(NC(C)(C)C)n1	1
CCCCC(CC)CN(CCC(=O)O)CCC(=O)O	0
Cc1ccc(C)c(O)c1C	1
C=CCOCC1CO1	1
CC#CC1(O)CCC2C3CCC4=CC(=O)CCC4=C3C(c3ccc(N(C)C)cc3)CC21C	0
CCCCC=O	1
Cc1ncc(CO)c(CO)c1O	0
Nc1ccccc1[N+](=O)[O-]	1
C=CC1=C(C(=O)O)N2C(=O)C(NC(=O)C(=NOCC(=O)O)c3csc(N)n3)C2SC1	0
CCOCCOC(C)=O	1
C=CC(=O)OC(C)COCC(C)OC(=O)C=C	1

CCS(=O)c1c(C#N)nn(-c2c(Cl)cc(C(F)(F)F)cc2Cl)c1N	0
O=C(O)Cc1cccc1	1
O=C1NCCN1CCN1CCC(c2cn(-c3ccc(F)cc3)c3ccc(Cl)cc23)CC1	0
CN(C)C(=O)Oc1cccc([N+](C)(C)C)c1	0
NC(=O)NO	0
Clc1nc(Cl)nc(Cl)n1	1
CCCCC(O)C=CC1C(O)CC(=O)C1CCCCCCC(=O)O	0
O=C(Oc1cccc2ccnc12)c1cccc1	0
C=C(C)C(=O)OCC(C)C	0
O=C(O)C(O)c1cccc1Cl	1
CC1CC(O)CC(C)(C)C1	1
O=C(O)c1cc(O)ccc1O	1
CCCCCCCCCCCC(=O)N(C)CC(=O)O	1
CO[Si](CCC(F)(F)F)(OC)OC	0
C1=CC2C3C=CC(C3)C2C1	1
C1CN1P1(N2CC2)=NP(N2CC2)(N2CC2)=NP(N2CC2)(N2CC2)=N1	1
CCCC(C)C	0
CCN(CCOC(C)OCC(C)C)c1ccc(N=Nc2ccccc2)cc1	0
CC(O)(P(=O)(O)O)P(=O)(O)O	0
CCCC	0
CCCCOCOCCCC	0
CCCCC(C)(OC)C(O)C=CC1C(O)CC(=O)C1CCCCCCC(=O)OC	0
CN(C)c1ccc(N=O)cc1	1
CCSCCCI	1
COc1cccc2c1C(=O)c1c(O)c3c(c(O)c1C2=O)CC(O)(C(=O)CO)CC3OC1CC(N)C(O)C(C)O1	0
CCOC(=O)C(C)OC(=O)c1cc(Oc2ccc(C(F)(F)F)cc2Cl)ccc1[N+](=O)[O-]	0
COC1CCCC1	1
CCC1(c2ccccc2)NC(=O)N(C)C1=O	0
CC(C)c1cccc2c(C(C)C)cccc12	0
ClCOCCI	1
OCC1OC(OC2C(CO)OC(O)(CO)C2O)C(O)C(O)C1O	0
CC(N)C(O)c1ccc(O)c(O)c1	0
C=CC(=O)OC(C)OC	1
O=C(O)C1N=C(c2ccccc2)c2cc(Cl)ccc2NC1=O	0
CCC1(O)CCC2C3CCC4=CCCCC4C3CCC21C	0
COc1cc(NC(=O)/C(=N/Nc2ccc(-c3ccc(N/N=C(\C(C)=O)C(=O)Nc4ccc(C)cc4C)c(Cl)c3)cc2Cl)C(C)=O)c	0
Nc1ccc(O)c(Cc2cc(N)ccc2O)c1	1
CCCCC=CCCC=CCCCCCC	0
O=C(Cn1ccnc1[N+](=O)[O-])NCc1cccc1	0
CNC(C)CC1CCCCC1	0
FCOC(C(F)(F)F)C(F)(F)F	0
CC12CCC(=O)C=C1CCC1C2CCC2(C)C(OC(=O)CCC3CCCC3)CCC12	0
Cc1ccc(N)c(N)c1	0
CN1C(=O)CCS(=O)(=O)C1c1ccc(Cl)cc1	0
COC12C(COC(N)=O)C3=C(C(=O)C(C)=C(N)C3=O)N1CC1NC12	0

CCC(C)Br	0
O=C1CCCC1	1
O=C(O)c1c(Cl)c(Cl)c(Cl)c(Cl)c1-c1c2cc(Br)c(=O)c(Br)c-2oc2c(Br)c(O)c(Br)cc12	1
Oc1c(l)cc(Cl)c2ccnc12	0
CC(C)NCC(O)c1ccc(O)c(O)c1	0
O=C(O)CCC(=O)C(=O)O	1
CCCCOCCOCCOCCOCCOCCOCCCC	0
CC(Br)C(=O)O	1
CCCCC(CC)COC(=O)OOC(C)(C)C	0
BrC1CCCCC1	1
C=CC(=C)CCC=C(C)C	1
O=C(O)C(F)(OC(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F)C(F)(F)F	1
C=C(C)C(=O)OC(=O)C(=C)C	1
CC(O)C(=O)O	1
CN(C)c1nc(N(C)C)nc(N(C)C)n1	0
CCCCCCCCC=CCCCCCCCC(=O)O	0
Cc1cc(NS(=O)(=O)c2ccc(N)cc2)no1	1
CC(O)C1C(=O)N2C(C(=O)O)=C(SC3CCC(C(=O)N(C)C)N3)C(C)C12	0
CCCCC(CC)CCI	0
NCC1OC(OC2C(N)CC(N)C(OC3OC(CO)C(O)C(N)C3O)C2O)C(N)CC1O	1
CC(N)C(O)c1CCCCC1	0
CCOP(=O)(Oc1c(C)cc(C(C)(C)C)cc1C(C)(C)C)Oc1c(C)cc(C(C)(C)C)cc1C(C)(C)C	0
CCCCCCCCCCCC	0
CN1CCN(C2=Nc3cc(Cl)ccc3Nc3cccc32)CC1	0
O=NN(CCCl)C(=O)NC1CCCCC1	0
CC(O)CC(C)O	0
CC(C)CN	1
N#Cc1cc(NC(=O)C(=O)O)c(Cl)c(NC(=O)C(=O)O)c1	0
COc1ccc(OC)c(Cc2cnc3nc(N)nc(N)c3c2C)c1	0
CO[P+](=O)OC	0
CC(=O)Nc1c(l)c(NC(C)=O)c(l)c(C(=O)O)c1l	0
CC(=O)NC(Cc1ccc2ccccc2c1)C(=O)NC(Cc1ccc(Cl)cc1)C(=O)NC(Cc1cccn1)C(=O)NC(CO)C(=O)N(C	0
Cn1sccc1=O	1
CC(C)NCCCC1(C(N)=O)c2ccccc2-c2ccccc21	0
N#CSc1ccc(N)c([N+](=O)[O-])c1	1
C=CCCCCCCCC(=O)OC	1
CCCCO	1
C=C(C)COCCC=CCC	0
COc1cc2nc(N3CCN(C(=O)C4CCCO4)CC3)nc(N)c2cc1OC	0
CN1C(C(=O)Nc2cccn2)=C(O)c2sccc2S1(=O)=O	0
CN(C)CCOC(c1ccccc1)c1ccccc1	0
COC(=O)c1ccccc1S(=O)(=O)NC(=O)Nc1nc(C)cc(C)n1	0
O=S(=O)(O)c1cc(Nc2nc(Nc3ccccc3)nc(N(CCO)CCO)n2)ccc1C=Cc1ccc(Nc2nc(Nc3ccccc3)nc(N(CCO	0
CN(C)CCCC1(c2ccc(F)cc2)OCc2cc(C#N)ccc21	0
CC(C)(CO)C(O)C(=O)NCCCO	0

Cc1cc(-c2ccc(N/N=C3/C=Cc4c(S(=O)(=O)O)cc(S(=O)(=O)O)c(N)c4C3=O)c(C)c2)ccc1N/N=C1/C=Cc2	0
CC(C)c1nn(C(=O)NC(C)(C)C)c(=O)n1N	0
C=C(C)C(=O)OCCCCC	1
CC(=O)OCC(=O)C1(O)C(C)CC2C3CCC4=CC(=O)C=CC4(C)C3(F)C(O)CC21C	0
N#CO	0
COCCO	1
CC12CCC3c4ccc(O)cc4CC(CCCCCCCCCS(=O)CCCC(F)(F)C(F)(F)F)C3C1CCC2O	0
CCCCOc1cc(C(=O)NCCN(CC)CC)c2ccccc2n1	0
Cc1ncc[nH]1	1
CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCC(C)C	1
CC1CC2C3CCC4=CC(=O)C=CC4(C)C3(F)C(O)CC2(C)C1(OC(=O)c1ccccc1)C(=O)CO	0
CCCC1CC(C(=O)NC(C(C)O)C2OC(SC)C(O)C(O)C2O)N(C)C1	0
C=CC(=O)OCCO	1
Nc1cccc2ccccc12	0
CC(C)COC(=O)CCCCC(=O)OCC(C)C	0
C=C(C)C(=O)OCCCCOC(=O)C(=C)C	0
CN1c2c(oc(=O)n(-c3cccn3)c2=O)-c2ccccc2S1(=O)=O	0
CC12C=CC(=O)C=C1CCC1C2CCC2(C)C1CCC2(C)O	0
CN1C(=O)CC(C)(c2ccccc2)C1=O	0
O=C(Cc1ccccc1)OCCc1ccccc1	0
CCN(CC)CCOC(=O)c1ccc(N)cc1Cl	0
CC(C)(C)OOC(C)(C)C	0
CCCCCCCCCCCCCCCCCN(C)C	1
CN=C=O	1
CCCCCCCCCCCCC[N+](C)(C)CCOc1ccccc1	1
Clc1cc2oc3c(Cl)c(Cl)c(Cl)c(Cl)c3c2cc1Cl	1
C=COC(=O)C(CC)CCCC	0
O=C(O)C=Cc1ccc(Cl)cc1Cl	1
CC(=O)C1=C(C)C2CC3(C1)C(C)CCC3C2(C)C	0
CC(C)(C)CCCCC(=O)OOC(C)(C)C	0
CCCCCCCCO	1
CCC(=O)OC1CCC2C3CCC4=CC(=O)CCC4(C)C3CCC12C	0
O=C1Nc2ccc(Cl)cc2C(c2ccccc2)=NC1O	0
CC1(C)C(=CC=CC=CC=CC2=[N+](CCCCS(=O)(=O)O)c3ccc4ccccc4c3C2(C)C)N(CCCCS(=O)(=O)O)c2cc	0
CC(NCCc1ccc(O)cc1)C(O)c1ccc(O)cc1	0
CC(CS)C(=O)N1CCCC1C(=O)O	0
CN1CCCCC1	1
O=C(O)c1ccc2c(c1)C(=O)OC2=O	1
OCC1OC2OC3C(CO)OC(OC4C(CO)OC(OC5C(CO)OC(OC6C(CO)OC(OC7C(CO)OC(OC1C(O)C2O)C(O)	0
CC(=O)/C(=N\Nc1ccc(-c2ccc(N/N=C\N(C)C(=O)C(=O)Nc3ccc(C)cc3)c(Cl)c2)cc1Cl)C(=O)Nc1ccc(C)cc1	0
CCON=O	1
NS(=O)(=O)c1cc2c(cc1Cl)NC(Cc1ccccc1)NS2(=O)=O	0
N#CC(C#N)=Cc1ccccc1Cl	1
Cc1ccc(N)cc1	0
CC(C)CCCCCCCCCCCCC(=O)OCC(COC(=O)CCCCCCCCCCCCCCCC(C)C)(COC(=O)CCCCCCCCCCCCCCCC	0

CCCN(C)C	1
CCC(=O)Oc1ccc2c(c1)CCC1C2CCC2(C)C(OC(=O)CC)CCC12	0
CCC1C2CC3C4N(C)c5ccccc5C45CC(C2C5C(=O)OCCl)N3C1O	0
CCN(CC)CCCN(c1ccccc1)C1Cc2ccccc2C1	0
O=C1CC2OCC=C3CN4CCC56c7ccccc7N1C5C2C3CC46	0
BrCCCB	1
c1ccc2ncccc2c1	1
CC12CCC3c4ccc(O)cc4CCC3C1CCC2=O	0
CCC(=O)N(c1ccccc1)C1(COC)CCN(CCc2cccs2)CC1	0
O=CNC(N1CCN(C(NC=O)C(Cl)(Cl)Cl)CC1)C(Cl)(Cl)Cl	1
OCCCCCO	0
C=c1cc(C)cc(C)c1=C(O)P(=O)(OCC)c1ccccc1	0
CC1COC(=O)O1	0
CC(C)OC(=O)c1ccc(O)cc1	0
CC(=O)Oc1ccccc1C(=O)Nc1ncc([N+](=O)[O-])s1	0
Cc1ccc(C)c1O	1
O=C(O)c1cc2ccccc2c(N=Nc2ccccc2)c1O	1
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)Nc1cc(Cl)c(CC)c(Cl)c1O	1
ClCc1ccccc1	1
CN(CCOc1ccc(NS(C)(=O)=O)cc1)CCc1ccc(NS(C)(=O)=O)cc1	0
CCC(C)C	1
CN(C)CCCN1c2ccccc2C(C)(C)c2ccccc21	0
CC(C)(C)CC(C)(C)c1ccc(OCCO)cc1	1
NC(=O)NC1NC(=O)NC1=O	0
C=C(C)CCl	1
CCCCN(CC)C(=O)SCCC	1
N#Cc1ccccc1NC(=O)c1snc(Cl)c1Cl	0
Clc1ccc(CC(=CCN2CCCC2)c2ccccc2)cc1	0
S=C(Cl)Cl	1
O=C(CO)C1=C(O)C(O)C(O)O1	1
OCCc1ccccc1	1
CCO[Si](C)(CCCCl)OCC	0
O=C1CN=C(c2ccccc2)c2c(sc3c2CCCC3)N1	0
NC(=S)Nc1ccccc1	0
COc1nn(CSP(=S)(OC)OC)c(=O)s1	1
CCCCOC(=O)C1=CC(=O)CC(C)(C)O1	1
CC(=O)/C(=N\Nc1ccc(C)cc1[N+](=O)[O-])C(=O)Nc1ccccc1	0
CCCCCCCCCCCC(CC1OC(=O)C1CCCCC)OC(=O)C(CC(C)C)NC=O	0
O=P(O)(O)CN(CCN(CP(=O)(O)O)CP(=O)(O)O)CP(=O)(O)O	0
CCCCC(C)(O)CC=CC1C(O)CC(=O)C1CCCCCCC(=O)OC	0
Nc1ncccc1O	1
COCCI	1
N12[Si]34N5[Si]16N3[Si]25N46	0
CO[Si](CCCNCCC[Si](OC)(OC)OC)(OC)OC	1
CCCCC(CC)C(=O)OCC(C)(C)COC(=O)C(CC)CCCC	0

CCOC(=O)C1=C(C)NC(C)=C(C(=O)OC)C1c1cccc(Cl)c1Cl	0
Clc1cc2c(c(Cl)c1Cl)Oc1c(Cl)c(Cl)c(Cl)c(Cl)c1O2	1
CCC1(c2ccccc2)CCC(=O)NC1=O	0
NCC(CC(=O)O)c1ccc(Cl)cc1	0
CCC(CO)(CO)COCC(CC)(CO)CO	0
CCN(CC)CCOC(=O)C(Cc1cccc2ccccc12)CC1CCCO1	0
O=C(O)c1cc(Br)ccc1O	1
Nc1nc(=O)c2c([nH]1)NCC(CNc1ccc(C(=O)NC(CCC(=O)O)C(=O)O)cc1)N2C=O	0
Cc1c(C)c2c(c(C)c1OC(=O)C(C)(C)Oc1ccc(Cl)cc1)CCC(C)(CCCC(C)CCCC(C)CCCC(C)C)O2	0
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCOC(=O)CC	0
CC12CCC3C(CC=C4CC(O)CCC43C)C1CCC2=O	0
CCC1(C)OOC(C)(CC)OOC(C)(CC)OO1	0
CCCCCCCC(=O)OC	1
COc1cnc(NS(=O)(=O)c2ccc(N)cc2)nc1	0
CCCCCCCCC=CCCCCCCCCNCCCN	1
CC(C)(O)C(Cl)(Cl)Cl	1
Clc1ccc(CCC(Cn2ccnc2)Sc2c(Cl)cccc2Cl)cc1	0
CCCN(CCC)c1c([N+](=O)[O-])cc(C(F)(F)F)cc1[N+](=O)[O-]	1
O=C1OC(c2ccc(O)cc2)(c2ccc(O)cc2)c2ccccc21	0
Clc1ccc(COC(Cn2ccnc2)c2ccc(Cl)cc2Cl)c(Cl)c1	0
CCOCC(C)O	0
CCN(CC)CCOCCOC(=O)C1(c2ccccc2)CCCC1	0
CC(Oc1cc(Cl)c(Cl)cc1Cl)C(=O)O	1
CCc1cccc(C)c1N(C(=O)CCl)C(C)COC	0
O=CC=Cc1ccccc1	1
CCCCCNC12C=CC(=O)C3Oc4c(O)ccc5c4C31CCN(C)C2C5	0
COc1ccc(C(=O)Nc2ccccc2)cc1N=Nc1c(O)c(C(=O)Nc2ccc3[nH]c(=O)[nH]c3c2)cc2ccccc12	0
COC(=O)C(C)(C)C	0
CCCCOCC(C)OCC(C)O	0
COCC(C)O	0
N#CBr	1
CCOC(=O)C1=C(C)NC(C)=C(C(=O)OC)C1c1cccc([N+](=O)[O-])c1	0
CC1CN(c2c(F)c(N)c3c(=O)c(C(=O)O)cn(C4CC4)c3c2F)CC(C)N1	0
CCC=O	1
CC(C)(C)c1ccc(C(=O)O)cc1	0
NC1=NCC(c2ccccc2)O1	0
OCC(CO)(CO)COCC(CO)(CO)CO	0
Cc1ccc(Cl)c(Nc2ccccc2C(=O)O)c1Cl	0
O=S(=O)(O)c1ccccc1C=Cc1ccc(-c2ccc(C=Cc3ccccc3S(=O)(=O)O)cc2)cc1	1
O=C(c1ccccc1)c1ccccc1	0
CN1C(C(=O)Nc2ccccc2)=C(OC(=O)C=Cc2ccccc2)c2ccccc2S1(=O)=O	0
CNC(=NCc1ccccc1)NC	0
CCCCCCCCCCCCC	0
Cc1ncc[C[n+]]2csc(CCO)c2C)c(N)n1	0
CC(=CC(C)(C)C)CC(C)(C)C	1

CC(C)CCCCCCCCCOC(=O)CCCCC(=O)OCCCCCCCCCCC(C)C	0
CC(=O)OC1C(O)CC(OC2C(O)CC(OC3C(O)CC(OC4CCC5(C)C(CCC6C5CC(O)C5(C)C(C7=CC(=O)OC7)C	0
CCCCCCCCC(=O)O	1
CCN(CC)C(=O)Nc1ccc(OCC(O)CNC(C)(C)C)c(C(C)=O)c1	0
N=C(N)N/N=C/c1c(Cl)cccc1Cl	0
CCCCCCCCCCCCCCCCCOC(=O)Oc1c(Cl)cc(C(=O)OCC)cc1Cl	0
CC12COC(=O)CC1CCC1C2CCC2(C)C1CCC2(C)O	0
CC(=O)CCCN1C(=O)c2ccccc2C1=O	0
Oc1c(Cl)c(Cl)c(Cl)c(Cl)c1Cl	1
C=C1C(=CC=C2CCCC3(C)C2CCC3C(C)C=CC(O)C2CC2)CC(O)CC1O	0
CC(C)CCCCCCCCO	1
O=C1c2ccccc2C(=O)N1SC1CCCCC1	1
O=c1[nH]c(=S)[nH]cc1I	0
Nc1ccn(CC(CO)OCP(=O)(O)O)c(=O)n1	0
CN(C)c1ccc2nc3ccc(=[N+](C)C)cc-3sc2c1	0
NC(=O)c1cn(Cc2c(F)cccc2F)nn1	0
CCCCCCCCCCCCC(=O)OOC(=O)CCCCCCCCCCCC	1
CCCCCCCCCCCCCS	1
CCCCC(O)CCC1C(O)CC2Cc3c(cccc3OCC(=O)O)CC21	0
CC(C)(Oc1ccc(C(=O)c2ccc(Cl)cc2)cc1)C(=O)O	0
Cc1cc(C)c(S(=O)(=O)O)cc1N=Nc1cc(S(=O)(=O)O)c2ccccc2c1O	1
CCCCCCC(O)CCOC(C)=O	1
CCCCN(CCCC)CCCC	1
COc1c(Cl)ccc(Cl)c1C(=O)O	1
Oc1cccc(Cl)c1	1
C=C1C(CO)C(O)CC1n1cnc2c(=O)nc(N)[nH]c21	0
Oc1ccc(OCc2ccccc2)cc1	0
NCCC(O)C(=O)NC1CC(N)C(OC2OC(CN)CCC2N)C(O)C1OC1OC(CO)C(O)C(N)C1O	0
O=c1c(-c2ccccc2)c1-c1ccccc1	0
CC(C)(C)c1ccc(OP(Oc2ccc(C(C)(C)C)cc2C(C)(C)C)Oc2ccc(C(C)(C)C)cc2C(C)(C)C)c(C(C)(C)C)c1	0
C1CCNCC1	1
C=C(C)C(=O)OCCSCC	0
N=C(N)c1ccc(CNC(=O)C2CCN2C(=O)C(NCC(=O)O)C2CCCCC2)cc1	0
CC(C)CCCC(C)C1CCC2C3CC=C4CC(O)CCC4(C)C3CCC12C	0
C=COC(C)=O	0
COc1ccc(C(CN(C)C)C2(O)CCCCC2)cc1	0
NCCCC(N)CC(=O)NC1CNC(=O)C(C2CC(O)N=C(N)N2)NC(=O)C(C=NC(N)=O)NC(=O)C(CO)NC(=O)C(0
CN(c1c(Br)cc(Br)cc1Br)c1c([N+](=O)[O-])cc([N+](=O)[O-])cc1C(F)(F)F	0
CCCCCCC(O)CO	0
CC#N	1
COc1ccc([N+](=O)[O-])cc1N/N=C\C(C)=O)C(=O)Nc1ccccc1OC	0
CN(Cc1cnc2nc(N)nc(N)c2n1)c1ccc(C(=O)NC(CCC(=O)O)C(=O)O)cc1	0
O=C(NCCN1CCOCC1)c1ccc(Cl)cc1	0
CC1(C)SC2C(NC(=O)C(C(=O)O)c3ccccc3)C(=O)N2C1C(=O)O	0
CC(C)(C)CC(C)(C)c1ccc(O)cc1	1

CCC(C(N)=O)N1CCCC1=O	0
C=C(Cl)CSC(=S)N(CC)CC	1
COc1cc([N+](=O)[O-])ccc1N/N=C\C(C)=O)C(=O)Nc1cc(Cl)ccc1OC	0
CCNc1nc(Cl)nc(NC(C)C)n1	1
CN(C1CCCCC1)C1CCCCC1	1
COc1nc(N)nc2c1ncn2C1OC(CO)C(O)C1O	0
CCCCC1ccc(O)cc1O	1
CCSC(=O)N1CCCCC1	1
Clc1cc2oc3cc(Cl)c(Cl)c(Cl)c3c2c(Cl)c1Cl	1
C=C(C#N)C(=O)OCC	1
ClCC=CCCl	1
CC1(C(=O)O)CCC2(C)CCC3(C)C(=CC(=O)C4C5(C)CCC(OC(=O)CCC(=O)O)C(C)(C)C5CCC43C)C2C1	0
C=C[Si](ON=C(C)CC)(ON=C(C)CC)ON=C(C)CC	1
c1ccc(-c2ccccc2)cc1	1
COc1ccc2c(c1)c(CC(=O)O)c(C)n2C(=O)c1ccc(Cl)cc1	0
CCCCCCCCCN	1
Cc1cn(C2C=CC(CO)O2)c(=O)[nH]c1=O	0
COC(=O)CCC=C=CCC1C(O)CC(O)C1C=CC(O)COc1ccccc1	0
Nc1ccc(S(N)(=O)=O)cc1	0
O=Cc1ccc2c(c1)OCO2	0
CNC1(C)C2CCC(C2)C1(C)C	0
Cc1nnc(NS(=O)(=O)c2ccc(N)cc2)s1	0
CCCCC(C)O	1
CN(C)CCC=C1c2ccccc2C=Cc2ccccc21	0
CC(C)CN(CC(O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)OC1COC2OCCC12)S(=O)(=O)c1ccc(N)cc1	0
O=C(O)c1ccccc1C(=O)Nc1ccc(S(=O)(=O)Nc2nccs2)cc1	0
NCCN	0
CCCCC(CC)COC(=O)C(C)O	1
CC1(C)SC2C(NC(=O)C(C(=O)O)c3ccsc3)C(=O)N2C1C(=O)O	0
CCCCCCCCCCCCCCCCO	0
C=CC(=O)NC(C)(C)CC(C)=O	0
COC(=O)CS	1
O=C(O)CCCCCCCCCCCC(=O)O	1
O=[N+](O-)]c1ccc(N=Nc2ccc(Nc3ccccc3)cc2)cc1	0
CCC1(CO)COC1	1
CN(C)C(=O)Nc1cccc(C(F)(F)F)c1	0
O=C(O)COc1ccccc1	1
CC(=O)c1ccc(S(=O)(=O)NC(=O)NC2CCCC2)cc1	0
CC(CN1c2ccccc2Sc2ccnc21)N(C)C	0
CC1=C(C/C=C\C)CCCC(C)CCCC(C)CCCC(C)C(=O)c2ccccc2C1=O	0
CN(C)CCCN(C)C	1
C=C(C)C(=O)OCCOCCOCCCC	0
CC1OC(OC2C=C3CCC4C(CCC5(C)C(c6ccc(=O)oc6)CCC45O)C3(C)CC2)C(O)C(O)C1O	0
COc1ccc(-c2ccc(COC)cc2)cc1	0
CCOC(=O)C(C)(C)Oc1ccc(Cl)cc1	0

c1ccc(OCCOc2ccccc2)cc1	0
COC(=O)c1ccccc1O	0
CC1CC2C3CC(F)C4=CC(=O)C=CC4(C)C3(F)C(O)CC2(C)C1(O)C(=O)COC(=O)C(C)(C)C	0
COP(=S)(OC)Oc1ccc([N+](=O)[O-])cc1	1
CC(=O)OCC(=O)C12OC3(CCCC3)OC1CC1C3CCC4=CC(=O)C=CC4(C)C3(F)C(O)CC12C	0
Cc1c(N(C)CS(=O)(=O)O)c(=O)n(-c2ccccc2)n1C	0
CC1NCCOC1c1ccccc1	0
COc1ccc(C=O)cc1OC	0
O=P(OCC(Br)CBr)(OCC(Br)CBr)OCC(Br)CBr	1
C=CC1CO1	1
C=C(C)C(=O)OCCOC(=O)NCCC(C)CC(C)(C)CNC(=O)OCCOC(=O)C(=C)C	0
CC(CC(c1ccccc1)c1ccccc1)NC(C)(C)C	0
O=P(Oc1ccccc1)(Oc1ccccc1)Oc1ccccc1	0
N=C(N)c1ccc(OCCCCCOc2ccc(C(=N)N)cc2)cc1	0
CC(Cc1ccccc1)N(C)Cc1ccccc1	0
CCCCCCCCCCCC1CO1	1
CC(C)COC(=O)C1CCCCC1C(=O)OCC(C)C	0
CC(C)(Oc1ccc(Cl)cc1)C(=O)OCCNC(=O)c1cccnc1	0
CCC1(CCC(C)C)C(=O)NC(=O)NC1=O	0
CCC(=O)OC1C=CC2C3CCC(C3)C12	0
Cc1cc(Cc2cc(C)cc(C3(C)CCCCC3)c2O)c(O)c(C2(C)CCCCC2)c1	1
CCN(CC)CC	1
CC(C)N=c1cc2n(-c3ccc(Cl)cc3)c3ccccc3nc-2cc1Nc1ccc(Cl)cc1	0
Cc1c(-c2ccccc2)oc2c(C(=O)OCCN3CCCCC3)cccc2c1=O	0
N=C1NC(=O)C(c2ccccc2)O1	0
CCCCC(CC)COC(=O)c1ccccc1	0
COc1c(N2CCNC(C)C2)c(F)cc2c(=O)c(C(=O)O)cn(C3CC3)c12	1
CC1CCC2C(C)C(OC(=O)CCC(=O)O)OC3OC4(C)CCC1C32OO4	0
CC(C(=O)O)c1ccc(CC2CCCC2=O)cc1	0
CC(C)(C)NCCOCCO	1
CC(=O)Oc1ccc(C(C)(C)CC(C)(C)C)cc1C1C(=O)Oc2ccc(C(C)(C)CC(C)(C)C)cc21	0
CCOCCC(=O)OCC	0
NS(=O)(=O)c1cc2c(cc1Cl)NC(CC1CCCC1)NS2(=O)=O	0
CC(C(=O)O)c1ccc(N2CC=CC2)c(Cl)c1	0
COC(F)(F)C(Cl)Cl	0
CCOC(=O)C=C(C)C=CCC(C)CCCC(C)C	0
O=C(O)CC(O)(CC(=O)O)C(=O)O	0
COc1ccc(OC)c(C(O)CNC(=O)CN)c1	0
OCCCCCO	0
CC(C=CC=C(C)C=CC1=C(C)CCCC1(C)C)=CC=CC=C(C)C=CC=C(C)C=CC1=C(C)CCCC1(C)C	0
N#CSCSC#N	1
CC(=O)OC1CCC(C(C)(C)C)CC1	0
CCCCCOC(C)=O	0
CCC(C)(C)C(=O)OC1CC(C)C=C2C=CC(C)C(CCC(O)CC(O)CC(=O)O)C21	0
CC(C)=CCCC(C)CCO	0

CCCCl	1
Nc1cc(S(=O)(=O)O)ccc1Cl	1
CC(C)CC(NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)c1cnccn1)B(O)O	0
CCCCC(C)(O)CC=CC1C(O)CC(=O)C1CCCCCCCCO	0
COC(=O)C=CC(=O)OC	0
CCCCCCCCOCCCCCCCC	1
C[N+](C)(C)CCCCCCCCC[N+](C)(C)C	0
Clc1ccccc1C(c1ccccc1)(c1ccccc1)n1ccnc1	1
c1cnc2cc3c(cc2n1)C1CNCCC3C1	0
FC(F)(Cl)C(Cl)(Cl)Cl	1
C=CC(=O)OCC[N+](C)(C)Cc1ccccc1	1
COCCOCOCCOC	1
Cc1onc(-c2ccccc2)c1C(=O)NC1C(=O)N2C1SC(C)(C)C2C(=O)O	0
C1=CCCC=CCCC=CCC1	1
Cc1cc2c(cc1CC(=O)c1sccc1S(=O)(=O)Nc1onc(C)c1Cl)OCO2	0
O=C1CCCCC1	0
CCCCCO	0
O=C(Oc1ccccc1)c1ccc(O)cc1	1
CC1CC2=CC(=O)CCC2(C)C2CCC3(C)C(CCC3(C)O)C12	0
COc1ccc(CN(CCN(C)C)c2ccccc2)cc1	0
CCN(CC)CCS(=O)(=O)C1CCN2C(=O)c3coc(n3)CC(=O)CC(O)C=C(C)C=CCNC(=O)C=CC(C)C(C(C)C)OC(0
CCCOc1ccc(N)c([N+](=O)[O-])c1	0
Cc1cccc(C)c1	0
N=C(N)NCCCC(N)C(=O)O	0
COC(=O)c1cccc(C(=O)OC)c1	1
Clc1ccc(CSc2ccc(Cl)cc2)cc1	0
NCC1OC(OC2C(CO)OC(OC3C(O)C(N)CC(N)C3OC3OC(CN)C(O)C(O)C3N)C2O)C(N)C(O)C1O	0
CCCCC(=O)OC1(C(=O)CO)CCC2C3CCC4=CC(=O)CCC4(C)C3C(O)CC21C	0
CCCCCCCCCN	1
O=S(=O)(O)c1cc(O)ccc1O	0
C=CC(N)CCC(=O)O	0
COc1cc(C(C)=O)ccc1OCCCN1CCC(c2noc3cc(F)ccc23)CC1	0
O=C1Nc2ccc(Cl)cc2C(C#CC2CC2)(C(F)(F)F)O1	0
O=C(CCS)OCC(COC(=O)CCS)(COC(=O)CCS)COC(=O)CCS	0
O=C(NC(CO)C(O)c1ccc([N+](=O)[O-])cc1)C(Cl)Cl	0
CC1=CCC2C(C1)C2(C)C	0
CCN(CC)C(=O)C(C#N)=Cc1cc(O)c(O)c([N+](=O)[O-])c1	0
CCCCC(CCC)COC(=O)c1ccccc1C(=O)OCC(CCC)CCCC	0
CCn1cc(C(=O)O)c(=O)c2cc(F)c(N3CCNCC3)cc21	0
OC(CCCN1CCCCC1)(c1ccccc1)c1ccccc1	0
CC(=O)OC12COC1CC(O)C1(C)C(=O)C(O)C3=C(C)C(OC(=O)C(O)C(NC(=O)OC(C)(C)C)c4ccccc4)CC(O)	0
CCOCCOCCO	0
CN(C)CCC=C1c2ccccc2COc2ccccc21	0
CC(C)(O)C#CC(C)(C)O	0
CC(C)Nc1nc(Cl)nc(NC(C)C)n1	0

COCCOCCOC	0
CCN1CCCCC1	1
CCOC(=O)C=Cc1ccc(O)c(OC)c1	0
CC1(C)SC2C(N=CN3CCCCC3)C(=O)N2C1C(=O)O	0
CC(Cl)(Cl)[N+](=O)[O-]	1
O=C(Cl)Cl	1
O=CC1CO1	1
CCOc1cc(C(C)(C)C)ccc1C1COC(c2c(F)cccc2F)=N1	0
Cc1nc(-c2ccc(Cl)cc2)oc1COC(C)(C)C(=O)O	0
CCC(=O)N(c1cccc1)C1CCN(CCc2cccc2)CC1	0
Nc1nc(=O)c2ncn(CCC(CO)CO)c2[nH]1	0
CCCCC(C)N	0
CCCOC(C(=O)OC1CCN(C)CC1)(c1cccc1)c1cccc1	0
CC(C)(C)c1cc(C(C)(CC(=O)OCCOC(=O)CC(C)(c2ccc(O)c(C(C)(C)C)c2)c2ccc(O)c(C(C)(C)C)c2)c2ccc(O)	0
O=[N+](O-)]c1ccc(F)c(Cl)c1	0
CSCCC(N)C(=O)O	0
CC(=O)c1cccc1	0
CC(O)COc1ccc(C(C)(C)c2ccc(OCC(C)O)cc2)cc1	1
S=C(S)NCCNC(=S)S	1
OCCCCC(O)CO	0
Cc1nccn1CC1CCc2c(c3cccc3n2C)C1=O	0
O=NN(CCO)CCO	1
CCOP(=O)(OCC)OCC	1
c1ccc(Nc2cccc2)cc1	1
CCCS1ccc(N)c([N+](=O)[O-])c1	0
CC(CN(C)C)CN1c2cccc2CCc2cccc21	0
CCCCC(CC)COC(=O)OCC(CC)CCCC	0
CS(=O)(=O)c1ccc(C2=C(c3cccc3)C(=O)OC2)cc1	0
CC(C(=O)O)c1ccc(C(=O)c2cccc2)s1	0
CCCCCCC(=O)O	0
CN(C)C(=O)Oc1cc(OC(=O)N(C)C)cc(C(O)CNC(C)(C)C)c1	0
CC(=O)C1(O)Cc2c(O)c3c(c(O)c2C(OC2CC(N)C(O)C(C)O2)C1)C(=O)c1cccc1C3=O	0
CC(C=CC(C)C(C)(C)O)C1CCC2C(=CC=C3CC(O)CC(O)C3)CCCC21C	0
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC	0
CC(=O)C1CCC2C3CC(C)C4=CC(=O)CCC4(C)C3C(O)CC12C	0
CC(=O)OCC(=O)C1(O)C(C)CC2C3CC(F)C4=CC(=O)C=CC4(C)C3C(O)CC21C	0
NNC(=O)NN	0
C=CCCCCCCCCCC	0
CC(=O)Nc1ccc(Nc2cc(S(=O)(=O)O)c(N)c3c2C(=O)c2cccc2C3=O)cc1	1
O=c1[nH]c(=O)n(C2CC(O)C(CO)O2)cc1C(F)(F)F	0
Cc1noc(NS(=O)(=O)c2ccc(N)cc2)c1C	0
CN(C)CCC=C1c2cccc2Sc2ccc(Cl)cc21	0
O=c1oc(=O)c2ccc3c4ccc5c(=O)oc(=O)c6ccc(c7ccc1c2c73)c4c65	0
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCCCCCCCC	0
ClC1C(Br)C(Br)C(Br)C(Br)C1Br	1

CCCCCCC(O)CCCCCCCCCCC(=O)O	0
c1ccoc1	0
Cc1cc(=O)oc2cc(O)cc(O)c12	1
CC1OC(OC2C(O)CC(OC3C(O)CC(OC4CCC5(C)C(CCC6C5CCC5(C)C(C7=CC(=O)OC7)C(O)CC65O)C4)	0
Cn1ccnc1	1
NCCNCCN	1
CN(C)N	0
CC(O)COc1ccccc1	1
NC(=O)c1ccccc1O	0
C=O	1
COc1c(Cl)c(Cl)c(Cl)c(Cl)c1Cl	1
COB(OC)OC	1
ClCCCl	1
CC(C)(O)C#N	1
Cc1ccccc1Cl	0
Oc1cccc(O)c1O	1
CCc1nnc(NS(=O)(=O)c2ccc(N)cc2)s1	0
O=[N+][([O-])c1cccc(O)c1	1
OCC1OC(OC2C(CO)OC(OC3C(CO)OC(O)C(O)C3O)C(O)C2O)C(O)C(O)C1O	0
CCOC(=O)C(CCc1ccccc1)NC(C)C(=O)N1Cc2ccccc2CC1C(=O)O	0
CC(=O)Nc1ccc(O)cc1	0
CC(=O)OCCN1CCN(CCC=C2c3ccccc3Sc3ccc(Cl)cc32)CC1	0
O=[N+][([O-])c1ccccc1Cl	0
CNC(=O)Oc1cccc2ccccc12	1
C1CC2OC2C1	1
O=c1occo1	1
Cc1cc(C)nc(NS(=O)(=O)c2ccc(N)cc2)n1	0
CC(=O)NC(CSC(=O)C(C)(C)Oc1ccc(Cl)cc1)CC(=O)O	0
O=S(=O)(O)O	0
c1ccc(Nc2cccc3ccccc23)cc1	0
CCCCCCCCSCc1cc(C)c(O)c(CSCCCCCCCC)c1	0
CC(O)C#CC(C)O	1
COc1ccc(Cl)cc1C(=O)NCCc1ccc(S(=O)(=O)NC(=O)NC2CCCCC2)cc1	0
c1ccc2scnc2c1	1
CCCCCCC	1
COC(=O)CCc1ccc(OCC(O)CNC(C)C)cc1	0
CCCCOC(=O)CCCCCCCCC(=O)OCCCC	0
BrC=CBr	1
Cc1nc(-c2ccc(OCC(C)C)c(C#N)c2)sc1C(=O)O	0
CCCCCCCCCCCCCCC	0
COc1nc(C)nc(Cl)c1NC1=NCCN1	0
CC(C)CCCCCOC(=O)CCCCC(=O)OCCCCCCCC(C)C	0
O=C1C(Cl)=C(Cl)C(=O)c2ccccc21	1
O=C(O)Cc1cccc2ccccc12	1
CCOCOC1CCCCCCCCCCCC1	0

CN(C)c1ccccc1	0
Cc1ccc(S(=O)(=O)Cl)cc1	1
OCOCN1CCN(C2=Nc3ccccc3Sc3ccccc32)CC1	0
Fc1ccc(C(c2ccc(F)cc2)N2CCN(CC=Cc3ccccc3)CC2)cc1	0
CC(CCO)CCO	0
CC1(C)C2CCC1(C)C(OC(=O)CSC#N)C2	1
N=C1NC(=N)c2cc3ccccc3cc21	1
CSC(C)(C)SC	1
NC(N)=O	1
O=C(Cl)OCCCI	1
CC(C)CCCCCCCCCO	0
C=C(C)c1ccccc1	1
CC(C)(O)C(C)(O)c1ccc(Cl)cc1	0
O=[As](O)(O)O	1
CC(Cl)(Cl)C(=O)OCCOc1cc(Cl)c(Cl)cc1Cl	1
CC(C)C(=O)Nc1ccc([N+](=O)[O-])c(C(F)(F)F)c1	0
CN(C)CCCN1c2ccccc2CCc2ccc(Cl)cc21	0
CCOC(=O)c1ncn2c1CN(C)C(=O)c1cc(F)ccc1-2	0
CCOC1OC2OC3(C)CCC4C(C)CCC(C1C)C24OO3	0
O=C1CN=C(c2ccccc2)c2cc(Cl)ccc2N1CC1CC1	0
CC(=O)N(CC(O)CO)c1c(l)c(C(=O)NCCO)c(l)c(C(=O)NCC(O)CO)c1l	0
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC(C)C	0
C=C1C2CCC(C2)C1(C)C	1
CN1CCC23c4c5ccc(O)c4OC2C(=O)CCC3C1C5	0
N=C(N)NCCCN(C(=O)C1CCCCN1C(=O)C(CC1CCCC1)NCC(=O)O	0
CN(C)CCOC(c1ccccc1)c1ccc(Br)cc1	0
OO	0
C=C(C)C(=O)OCCC(C)CC(C)(C)C	0
COC(=O)CCC=C=CCC1C(=O)CC(O)C1C=CC(O)COc1ccccc1	0
CCC(C)C(C)C1Nc2cc(Cl)c(S(N)(=O)=O)cc2S(=O)(=O)N1	0
ClC1=C(Cl)C2(Cl)C3C4C=CC(C4)C3C1(Cl)C2(Cl)Cl	1
C=CCC1(C(C)CCC)C(=O)NC(=S)NC1=O	0
CCOC1OC(C(COCc2ccccc2)OCc2ccccc2)C(OCc2ccccc2)C1O	0
CC[N+](CC)(CC)CCC(O)(c1ccccc1)C1CCCCC1	0
Oc1ccc(CCCCNCC(O)c2ccc(O)c(O)c2)cc1	0
BrC(Br)C(Br)Br	1
CC(=O)OC1CC2CCC3C(CCC4(C)C3CC(N3CC[N+](C)(C)CC3)C4OC(C)=O)C2(C)CC1N1CC[N+](C)(C)CC	0
CSc1ccc(C(=O)c2[nH]c(=O)[nH]c2C)cc1	0
C=CCCCCCCCC(=O)O	1
CCCCc1ccccc1	1
O=C1CC2(C(=O)N1)C(=O)N(Cc1ccc(Br)cc1F)C(=O)c1ccc(F)cc12	0
C=CCc1ccc(O)c(OC)c1	1
O=P(OCCCI)(OCCCI)OCC(CCI)(CCI)COP(=O)(OCCCI)OCCCI	0
C[N+](1(CC2CC2)CCC23c4c5ccc(O)c4OC2C(=O)CCC3(O)C1C5	0
C=c1cc(C)ccc1=C1N=C(c2ccc(C)cc2C)NC(c2ccc(OCC(O)COCC(CC)CCCC)cc2O)=N1	0

COP(=S)(OC)SCSc1ccc(Cl)cc1	1
CCCCCCC1CCC(O)C1CCCCCCC(=O)O	0
C=C(C)C(=O)OCc1ccccc1	0
O=C(O)c1cc(S(=O)(=O)O)ccc1O	1
CN(C)CC1CCn2cc(c3ccccc32)C2=C(C(=O)NC2=O)c2cn(c3ccccc23)CCO1	0
OCCO	0
CCCc1nc(C)c2c(=O)nc(-c3cc(S(=O)(=O)N4CCN(CC)CC4)ccc3OCC)[nH]n12	0
ClSC(Cl)(Cl)Cl	1
CC(C=O)Cc1ccc(C(C)(C)C)cc1	1
Cc1cc(C)c(Nc2ccc(Nc3c(C)cc(C)cc3C)c3c2C(=O)c2ccccc2C3=O)c(C)c1	0
CC(=O)OC1(C(C)=O)CCC2C3CC(C)C4=CC(=O)CCC4(C)C3CCC21C	0
Cn1ccn(C)c1=[N+]=Nc1ccc(N)cc1	1
NCCC(=O)O	0
CCC(C)NC(N)=O	1
Cc1c(N)cccc1N	0
CC1(C(=O)Nc2ccc(O)c(Cl)c2Cl)CCCCC1	0
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCC(CC)CCCC	0
O=C(O)Cc1ccccc1Oc1ccc(Cl)cc1Cl	0
O=C(Nc1ccc2[nH]c(=O)[nH]c2c1)c1cc2ccccc2c(N=Nc2cc(Cl)ccc2Cl)c1O	0
COCCOCCOCCOC	1
CCCCC(CC)COCOCC(CC)CCCC	0
CS(=O)(=O)CCNCc1ccc(-c2ccc3ncnc(Nc4ccc(OCc5ccccc(F)c5)c(Cl)c4)c3c2)o1	0
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCC(C)C	0
CCC(C)Nc1c([N+](=O)[O-])cc(C(C)(C)C)cc1[N+](=O)[O-]	1
CC(C)(C)c1ccc(CN2CCN(C(c3ccccc3)c3ccc(Cl)cc3)CC2)cc1	0
CCCCCCCCCCCCCCCCOS(=O)(=O)O	1
C=C(C(=O)O)C1CCC(C)C2CCC(C)=CC12	0
CC(C)N(C(=O)SCC(Cl)=CCl)C(C)C	0
O=C=Nc1ccc(Cl)cc1	1
CC(=O)c1c(O)c(C)c(O)c2c1OC1=CC(=O)C(=C(C)O)C(=O)C12C	1
CN1CCC(=C2c3ccccc3C=Cc3ccccc32)CC1	0
Cc1ccc(C(=CCN2CCCC2)c2cccc(C=CC(=O)O)n2)cc1	0
O=C(O)C(Cl)(Cl)Cl	1
C=Cc1cccn1	1
CCCCCCCCCCCCCCCC1CO1	1
Nc1ccc([N+](=O)[O-])cc1	1
OCCN1CCN(CCCN2c3ccccc3Sc3ccc(C(F)(F)F)cc32)CC1	0
CC(=O)c1ccc2c(c1)N(CCCN1CCC(CCO)CC1)c1ccccc1S2	0
Cc1ccc2c(Cl)cc(Cl)c(O)c2n1	0
O=[p+]1oc2ccccc2c2ccccc21	0
CN(C)C	1
CC(C)N(Sc1nc2ccccc2s1)C(C)C	0
FC(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F	0
C=CC(O)(CC=CC1C(O)CC(=O)C1CC=CCCCC(=O)OC)CCCC	0
Cc1cc2nc3c(=O)[nH]c(=O)nc-3n(CC(O)C(O)C(O)CO)c2cc1C	0

COC(=O)CCl	1
Cc1cccc1OP(=O)(Oc1cccc1C)Oc1cccc1C	0
Nc1ncn(C2CC(O)C(CO)O2)c(=O)n1	0
CCCC(O)CO	1
CCCCC(CC)COC(=O)C=Cc1ccc(OC)cc1	0
NC1CCN(c2c(F)cc3c(=O)c(C(=O)O)cn(C4CC4)c3c2Cl)C1	0
On1cccc1=5	0
Cc1cccc(C)c1NC(=O)C(C)N	0
Clc1cc2c(cc1Cl)Oc1c(Cl)c(Cl)c(Cl)c(Cl)c1O2	1
CC(C)(CO)C(O)C(=O)NCCC(=O)O	0
CC(C)CCCCCCCOC(=O)c1cccc1C(=O)OCCCCCCCC(C)C	1
CCC(=O)C(CC(C)N(C)C)(c1cccc1)c1cccc1	0
COC(=O)CCCC=CCC1C(O)CC(O)C1C#CC(O)CCC1CCCCC1	0
CCCC(CC)COC(=O)CCc1cc(C(C)(C)C)c(O)c(C(C)(C)C)c1	0
CN1CCC23c4c5ccc(O)c4OC2C(O)C=CC3C1C5	0
C=C1CCC2(O)C3Cc4ccc(O)c5c4C2(CCN3CC2CC2)C1O5	0
ClC1(Cl)C2(Cl)C3(Cl)C4(Cl)C(Cl)(Cl)C5(Cl)C3(Cl)C1(Cl)C5(Cl)C24Cl	1
CCCCCCCCCc1ccc(OCCOCCO)cc1	1
CCOC(=O)N(C)N=O	1
COc1cc(OC)c(OC)cc1C=O	0
COc1ccc(C2C(=O)c3cccc3C2=O)cc1	0
C#CC1(O)CCC2C3CCC4=CC(=O)CCC4C3CCC21CC	0
NC(=O)NC(=O)O	0
Oc1ccc(-c2ccc(O)cc2)cc1	0
O=[N+][([O-])c1ccc(Oc2ccc(Cl)cc2)cc1	0
CC(C)C(=O)OCC(C)(C)C(OC(=O)C(C)C)C(C)C	0
CCCCS	1
O=C1c2c(O)ccc(O)c2C(=O)c2c(NCCNCCO)ccc(NCCNCCO)c21	0
CNC(=O)c1c(l)c(NC(=O)CCCC(=O)Nc2c(l)c(C(=O)O)c(l)c(C(=O)NC)c2l)c(l)c(C(=O)O)c1	0
Cc1c(C)c2c(c(C)c1OC(=O)CCC(=O)OCCO)CCC(C)(CCCC(C)CCCC(C)CCCC(C)C)O2	0
CCCCCCCCCOC(=O)c1cccc1C(=O)OCCCCCCCC	1
CCCCC(CC)C(=O)O	0
CO[Si](CCCN=C=O)(OC)OC	1
Cc1cc(=O)[nH]c(=S)[nH]1	0
CCC1(CO)COCOC1	1
CC(N)Cc1ccc(O)cc1	0
CCC(C)CC(C)CCCCCCCCC(=O)NC1CC(O)C(NCCN)NC(=O)C2C(O)CCN2C(=O)C(C(O)CCN)NC(=O)C(C(C	0
CCCCCCCCOCC(COCCCCCCCC)(COCCCCCCCC)COCCCCCCCC	0
NCCCNCCSP(=O)(O)O	0
S=c1[nH]c2cccc2s1	0
CCCCCCCCCCCCCCCCCOC(=O)CCSCCC(=O)OCCCCCCCCCCCCCCCCC	0
CN(CCCN1c2cccc2CCc2cccc21)CC(=O)c1ccc(Cl)cc1	0
O=C(O)Cn1c(=O)n(Cc2ccc(Br)cc2F)c(=O)c2ccc(Cl)cc21	0
NCCOCCN	1
CC(=O)C1(O)CCC2C3C=C(Cl)C4=CC(=O)C5CC5C4(C)C3CCC21C	0

CC(C)[N+](=O)[O-]	1
CCCC(CC)CNC(=O)CCCCC(C)C	0
CCCCCOC1ccc(-c2nc(-c3cccc3)nc(-c3cccc3)n2)c(O)c1	0
O=C1C(CCS(=O)c2cccc2)C(=O)N(c2cccc2)N1c1cccc1	0
ClCCOCCl	1
CN1C2CCC1CC(OC(=O)C(O)c1cccc1)C2	0
C[N+](C)CCCC1COC(=O)C(O)(c1cccc1)c1cccc1	0
NCCCN	1
ClC1C(Cl)C(Cl)C(Cl)C1Cl	0
CN(C)CCcn1c2c(c3cccc31)CCCCC2	0
CC(=O)NO	0
CN(C)CCOCCO	1
CCCCN	1
Cc1ccc(N(CCO)CCO)cc1N=Nc1ccc([N+](=O)[O-])cc1	0
CCS(=O)(=O)CCn1c([N+](=O)[O-])cnc1C	0
C=CC(=O)OCC	1
OCc1cccnc1	0
CC(=O)c1c(O)cc(C)oc1=O	1
CCCOC(=O)Cc1ccc(OCC(=O)N(CC)CC)c(OC)c1	0
CC(C)(Oc1ccc(Cl)cc1)C(=O)OCCOC(=O)c1cccnc1	0
O=C(O)CCc1nc(-c2cccc2)c(-c2cccc2)o1	0
CCCN(CC1CC1)c1c([N+](=O)[O-])cc(C(F)(F)F)cc1[N+](=O)[O-]	1
CC1C2C=CC1C1C(=O)OC(=O)C21	1
O=[N+]([O-])c1ccc(Cl)cc1	1
CC1C2Cc3ccc(O)cc3C1(C)CCN2CC1CC1	0
Nc1ccc(F)cc1	1
O=c1[nH]c(=O)n(C2CCCO2)cc1F	0
CCCCCCC(C=O)=Cc1cccc1	0
O=C(OCC1CCC2OC2C1)C1CCC2OC2C1	0
Cc1ccc(C(=O)c2ccc(CC(=O)O)n2C)cc1	0
CCN(CC)CCO	1
CC(C=CC1=C(C)CCCC1(C)C)=CC=CC(C)=CCO	0
COc1cccc2c1C(=O)c1c(O)c3c(c(O)c1C2=O)CC(O)(C(C)=O)CC3OC1CC(N)C(O)C(C)O1	0
c1ccc(CC2=NCCN2)cc1	0
OCCN1CCN(CCC=C2c3cccc3Sc3ccc(Cl)cc32)CC1	0
CO[Si](CCCS)(OC)OC	0
CCCCCO	1
NS(=O)(=O)c1cc2c(cc1Cl)NC(C(Cl)Cl)NS2(=O)=O	0
CC=CCCCCCCC	0
CCCC(=O)Cl	1
CCCCOP(=O)(OCCCC)OCCCC	1
Cc1c(-c2ccc(O)cc2)n(Cc2ccc(OCCN3CCCCC3)cc2)c2ccc(O)cc12	0
CCOC(=O)C(C)(CC)Oc1ccc(Cc2ccc(Cl)cc2)cc1	0
CCCCCCL	1
O=C(O)COc1ccc(Cl)cc1Cl	1

CC(C)C(=O)O	1
CCCSC(=O)N(CCC)CCC	1
CCS(=O)(=O)O	1
CC(C)(CO)C(O)C(=O)NCCCC(=O)O	0
CC(C)(C)CC(=O)OCC(=O)C1(O)CCC2C3CCC4=CC(=O)C=CC4(C)C3C(O)CC21C	0
CCCCCCC(O)CC=CCCCCCCCC(=O)OCC	0
CC(=O)Nc1ccc(S(=O)(=O)Cl)cc1	1
COc1c(C)c2c(c(O)c1CC=C(C)CCC(=O)OCCN1CCOCC1)C(=O)OC2	0
CCOc1nc(C(Cl)(Cl)Cl)ns1	1
O=c1c2ccccc2[nH]c2cc3c(=O)c4ccccc4[nH]c3cc12	0
COC(C)(C)CC(C)=O	1
CC(C)C	0
O=C(O)CN(CCO)CC(=O)O	0
CCCCCCCCCCCC(CCCCCC)COC(=O)CCCCCCCCCCCCCCCC(C)C	0
Clc1cc2c(oc3c(Cl)c(Cl)c(Cl)cc32)c(Cl)c1Cl	1
N=C(N)NCc1cccc(I)c1	0
CCC1(C2=CCCCC2)C(=O)NC(=O)NC1=O	0
CN(C)c1ccc(C(=O)c2ccc(N(C)C)cc2)cc1	0
CCC1(CC)OOC(CC)(CC)OOC(CC)(CC)OO1	0
CN(C)S(=O)(=O)N(SC(F)(Cl)Cl)c1ccccc1	1
O=C(O)c1ccc(O)cc1O	1
CC(=O)N(CC(O)CN(C(C)=O)c1c(I)c(C(=O)NCC(O)CO)c(I)c(C(=O)NCC(O)CO)c1I)c1c(I)c(C(=O)NCC(O)CO)c1I)cc1O	0
COc1ccccc1O	1
BrC1c(Br)c(Br)c(-c2c(Br)c(Br)c(Br)c(Br)c2Br)c(Br)c1Br	0
BrC1c(Br)c(Br)c(CCC2c(Br)c(Br)c(Br)c2Br)c(Br)c1Br	0
COc1ccc2c(c1)c(CC(=O)O)c(C)n2C(=O)C=Cc1ccccc1	0
C#CC1(O)CCC2C3CCC4=CC(=O)CCC4C3C(=C)CC21CC	0
C#CC1(OC(N)=O)CCCCC1	0
C=CC(=O)NCC(OC)OC	0
NCC(=O)NC(CCC(N)=O)C(=O)O	0
COc1ccc2c(c1)c(CC(=O)OCC(C(=O)O)c1ccccc1)c(C)n2C(=O)c1ccc(Cl)cc1	0
CN(CCCCCCCCCCN(C)C(=O)Oc1cccc([N+](C)(C)C)c1)C(=O)Oc1cccc([N+](C)(C)C)c1	0
NCCCCC(=O)O	0
C[Si]1(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O1	0
C=CC(=O)OCC(CCC)CCCCC	0
COc1cc(CCC(=O)C=C(O)CCc2ccc(O)c(OC)c2)ccc1O	0
C=CC(Cl)CCl	1
O=C=NCc1cccc(CN=C=O)c1	1
CC(=O)Nc1ccc(C=NNC(N)=S)cc1	0
c1c[nH]cn1	1
CC1(C)C(=O)N(CO)C(=O)N1CO	1
CC(OC1OCCN(Cc2nn(P(=O)(O)O)c(=O)[nH]2)C1c1ccc(F)cc1)c1cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c1	0
CO[Si](OC)(C1CCCC1)C1CCCC1	0
Cc1cccc(C)c1NC(=O)C1CCCCN1C	0
ClCC1CO1	0

CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O	0
CC(CC(C)(C)C)CP(=O)(O)CC(C)CC(C)(C)C	1
NS(=O)(=O)c1cc(C(=O)O)cc(N2CCCC2)c1Oc1ccccc1	0
CCc1ccc(CCOc2ccc(CC3SC(=O)NC3=O)cc2)nc1	0
CC(C)OC(=O)C(O)(c1ccc(Br)cc1)c1ccc(Br)cc1	0
CC(=O)OO	1
CCCCNC(=O)OCC#Cl	1
CC(=O)OC(C)C	1
C=C(C)CC	0
CCO[Si](CCCCSSCCC[Si](OCC)(OCC)OCC)(OCC)OCC	0
CS(=O)(=O)OCCCCOS(C)(=O)=O	0
Cn1cc(C(=O)Nc2cccc3c2C2CCC3C2=C(Cl)Cl)c(C(F)F)n1	0
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCC(O)C1OCC(O)C1O	1
C=CCC	0
CC(C)(C#N)c1cc(Cn2cncn2)cc(C(C)(C)C#N)c1	0
CCCCC(O)C=CC1C(O)CC(=O)C1CC=CCCCC(=O)O	0
C=C(C)C(=O)OCCCCCCC	0
COCCOc1cnc(NS(=O)(=O)c2ccccc2)nc1	0
CC(=O)N(CC(C)C(=O)O)c1c(I)cc(I)c(N)c1I	0
C=C1CCC(O)CC1=CC=C1CCCC2(C)C1CCC2C(C)CCCC(C)(C)O	0
CCN(CC)CCOC(=O)C1(C2CCCCC2)CCCCC1	0
Cc1ccc(Cl)cc1	1
O=C1OC(=O)C2CC=CCC12	1
COc1c(N2CC3CCCN3C2)c(F)cc2c(=O)c(C(=O)O)cn(C3CC3)c12	0
Cn1c(=O)c2c(ncn2C)n(C)c1=O	0
Oc1ccc(-c2ccccc2)cc1	0
CCCCOC(=O)C=CC(=O)OCCCC	0
CC(c1ccccc1)c1ccc(O)cc1O	0
CCCCCCCCCCCCCc1ccccc1S(=O)(=O)O	1
Nc1ccc(O)cc1[N+](=O)[O-]	1
CCOc1ccc(NC(=O)/C(=N/Nc2ccc(-c3ccc(N/N=C\C(C)=O)C(=O)Nc4ccc(OCC)cc4)c(Cl)c3)cc2Cl)C(C)	0
CC(C)Cc1ccc(C(C)C(=O)NO)cc1	0
Nc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccc(Cl)nn2)cc1	0
CCOC(=O)CNC(C(=O)N1CCC1C(=O)NCc1ccc(C(=N)NO)cc1)C1CCCCC1	0
NCC1OC(OC2C(N)CC(N)C(OC3OC(CO)C(O)C(N)C3O)C2O)C(O)C(O)C1O	0
O=C1CN(N=Cc2ccc(-c3ccc([N+](=O)[O-])cc3)o2)C(=O)N1	0
CCOCCO	0
Oc1ccc(Cl)cc1Cc1ccccc1	1
CC1COC2(c3ccccc3Cl)c3cc(Cl)ccc3NC(=O)CN12	0
C#CCOC(=O)C(C)Oc1ccc(Oc2ncc(Cl)cc2F)cc1	0
CCCCC(CC)C(=O)OOC(C)(C)CCC(C)(C)OOC(=O)C(CC)CCCC	0
O=C(c1ccc(O)cc1O)c1ccc(O)cc1O	0
CCC(=O)OC(OP(=O)(CCCCc1ccccc1)CC(=O)N1CC(C2CCCCC2)CC1C(=O)O)C(C)C	0
Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1	1
Nc1ccc(Oc2ccccc2)cc1	0

Cc1cc(Cl)cc2c1C(=O)C(=C1Sc3cc(Cl)cc(C)c3C1=O)S2	1
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCCCCCCCCCCCCCCCC	0
CC12C=CC(=O)C=C1CCC1C2C(=O)CC2(C)C1CCC2(O)C(=O)CO	0
C[Si]1(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O[Si](C)(C)O1	0
COc1ccc(Cn2c(=O)c3ccc4c5ccc6c(=O)n(Cc7ccc(OC)cc7)c(=O)c7ccc(c8ccc(c2=O)c3c48)c5c67)cc1	0
CC(C)(C)NCC(O)c1cc(Cl)c(N)c(Cl)c1	0
CC(CN1CC(=O)NC(=O)C1)N1CC(=O)NC(=O)C1	0
CSc1ccc(C=O)cc1	0
CC(C)(C)NC(=O)C1CCC2C3CCC4NC(=O)C=CC4(C)C3CCC12C	0
CNCCCC1c2ccccc2C=Cc2ccccc21	0
O=[N+][([O-])C(Cl)(Cl)Cl	1
Cc1cc(C)cc(O)c1	1
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCC(CC)CCCC	0
CC(C)CCCCCN(CCCCC(C)C)CCCCC(C)C	0
CN(C)C(=O)C(c1ccccc1)c1ccccc1	0
Cc1ccc([N+](=O)[O-])cc1	1
C=C(C)C(=O)O	1
[C-]#[O+]	0
C[N+](C)(C)CC(O)CC(=O)O	0
O=c1[nH]c2cc(Cl)ccc2o1	0
C=CCN1CCc2nc(N)sc2CC1	0
CCC(CO)NC(=O)C1C=C2c3cccc4c3c(cn4C)CC2N(C)C1	0
C=CCOC(Cn1ccnc1)c1ccc(Cl)cc1Cl	0
CC(C)(C)c1ccc([I+2]=c2cc[c-](C(C)(C)C)cc2)cc1	1
CN(Cc1cc(Br)cc(Br)c1N)C1CCCCC1	0
Cc1cc(-c2ccc(N)c(C)c2)ccc1N	1
CC12CCC3c4ccc(O)cc4CCC3C1CCC2OC(=O)CCC1CCCC1	0
CCC(CC)Nc1c([N+](=O)[O-])cc(C)c(C)c1[N+](=O)[O-]	1
CCCCCCCCCCCCCCCCOCC(=O)CCCCC	0
OCC(O)C(O)C(O)C(O)CO	0
O=[N+][([O-])C1(Br)COCOC1	1
CC1CC2C3CCC4=CC(=O)C=CC4(C)C3(F)C(O)CC2(C)C1C(=O)CO	0
O=C(CCl)c1ccccc1	1
COc1ccc(C(c2ccc(OC)cc2)C(Cl)(Cl)Cl)cc1	1
c1ccsc1	1
C=C(C)CCO	1
NC(Cc1ccc(O)c(O)c1)C(=O)O	0
OCc1cccc(OC2ccccc2)c1	0
Clc1ccc(C(c2ccccc2Cl)C(Cl)Cl)cc1	0
CC(C)(C)NCC(O)c1ccc(O)c(CO)n1	0
CCN1C2CCC1CC(OC(c1ccccc1)c1ccccc1)C2	0
COc1ccccc1N/N=C(\C(C)=O)C(=O)Nc1ccc2[nH]c(=O)[nH]c2c1	0
Cc1cn(C2CC(O)C(CO)O2)c(=O)[nH]c1=O	0
Nc1ccc(-c2ccc(N)cc2)cc1	1
FC(F)(Cl)C(F)(Cl)Cl	0

N=C(N)N	1
CN1CCN(CCCN2c3ccccc3Sc3ccc(C(F)(F)F)cc32)CC1	0
CON=C(C(=O)NC1C(=O)N2C(C(=O)O)=CCSC12)c1cnc(N)s1	0
COc1cc(C2c3cc4c(cc3C(O)C3COC(=O)C23)OCO4)cc(OC)c1OC	0
CCC(C)C(=O)OC1CCC=C2C=CC(C)C(CCC3CC(O)CC(=O)O3)C21	0
CC(C)(C)C1CCC(OC(=O)OOC(=O)OC2CCC(C(C)(C)C)CC2)CC1	0
CCOCCOCCOC(C)=O	1
CC(=O)CC(=O)N(C)C	0
CC(C)CCC(C)C(O)O	1
CCc1ccc2c(c1)C(=O)c1ccccc1C2=O	0
CCN	1
CCC(=O)Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1	0
CCCC1CO1	1
CC(CC(C)(C)C)CC(C)(C)CC(C)(C)C	0
COc1cc(NC(=O)/C(=N/Nc2cc(OC)c(S(=O))(=O)Nc3ccccc3)cc2OC)C(C)=O)c(OC)cc1Cl	0
OC(CCN1CCCCC1)(c1ccccc1)C1CC2C=CC1C2	0
CCC(C)(C)c1cc(-n2nc3ccccc3n2)c(O)c(C(C)(C)CC)c1	0
CCCc1cc(CCC)c(CCC)c(CCC)c1	0
O=C1NC(=O)C2(CCOc3ccc(F)cc32)N1	0
O=C(c1ccccc1)c1ccc(O)cc1O	1
O=C1OCC(CO)O1	0
CS(=O)(=O)Nc1ccc([N+](=O)[O-])cc1Oc1ccccc1	0
CCCCOC(=O)NC(CNC(=O)CC1CC(c2ccc(C(=N)N)cc2)=NO1)C(=O)OC	0
CN(C)CCCN1c2ccccc2Sc2ccccc21	0
CCCC(NC(C)C(=O)N1C(C(=O)O)CC2CCCCC21)C(=O)OCC	0
O=C1C=Cc2cc(S(=O))(=O)O)ccc2/C1=N\Nc1ccc(S(=O))(=O)O)cc1	1
CCCCOCCOCCOCCCC	0
NC(=O)NNC(N)=O	0
N=C(N)Nc1nc(CSCCC(N)=NS(N)(=O)=O)cs1	0
Cc1ccc(NC(=O)Nc2ccc(C)c(NC(=O)Nc3ccc(C)cc3)c2)cc1	0
CCCCC(CC)COC(=O)OOC(C)(C)CC	0
COC(=O)c1ccc2cc(C(=O)OC)ccc2c1	0
C#CCOS(=O)OC1CCCCC1Oc1ccc(C(C)(C)C)cc1	1
CCn1nc(C(=O)O)c(=O)c2cc3c(cc21)OCO3	0
COc1ccc2c3c1OC1CC(O)C=CC31CCN(C)C2	0
O=S(=O)(O)c1ccccc1	1
CCOC(=O)COc1cc(-c2nn(C)c(OC(F)F)c2Cl)c(F)cc1Cl	1
CC(N)(Cc1ccc(O)c(O)c1)C(=O)O	0
CC(C)OC(=O)CCCC=CCC1C(O)CC(O)C1C=CC(O)COc1ccccc(F)(F)F)c1	0
OCCN(CCO)CCO	0
COC1C(O)CC(OC2C(O)CC(OC3C(O)CC(OC4CCC5(C)C(CCC6C5CC(O)C5(C)C(C7=CC(=O)OC7)CCC65	0
ClC1CCCCC1	1
NC1CCC(CC2CCC(N)CC2)CC1	1
Clc1cc2oc3cc(Cl)c(Cl)c(Cl)c3c2cc1Cl	1
CC(=O)CC(c1ccc([N+](=O)[O-])cc1)c1c(O)c2ccccc2oc1=O	0

CCCCCCCCOc1ccc(C(=O)c2ccccc2)c(O)c1	0
NS(=O)(=O)c1cc2c(cc1Cl)NC(CSCC(F)(F)F)NS2(=O)=O	0
Nc1ccc(O)c(C(=O)O)c1	1
O=C(O)C1C2CCC(O2)C1C(=O)O	1
CCCCNc1c2c(nc3ccccc13)CCCC2	0
O=C1CN=C(c2ccccc2)c2cc(Br)ccc2N1	0
CC(CCc1ccccc1)NC(C)C(O)c1ccc(O)cc1	0
C=CC(=O)OCCCCCCCCCCCCCCCCC	0
O=C(CNC(=O)c1ccc(Cl)cc1)NO	0
O=c1n(CCO)c(=O)n(CCO)c(=O)n1CCO	0
CC(C)C1CCCC(C(=O)NC(Cc2ccccc2)C(=O)O)C1	0
CCCCCOC(=O)CCCCC(=O)OCCCCC	0
COc1ccc2c3c1OC1C(O)C=CC4C(C2)N(C)CCC341	0
Nc1ccc2cc3ccccc3cc2c1	1
N=C(N)NCCCCCCC(=O)NC(O)C(=O)NCCCCNCCCN	0
C=C(O)C(C)=O	1
CCCCCCCCCCCCCCCC	0
CCCCCCC(=O)OC	0
C=CC(=O)OCC(C)C	1
CN1CCN(C2=Nc3ccccc3Sc3ccc(Cl)cc32)CC1	0
CCNc1nc(Cl)nc(NC(C)(C)C#N)n1	0
O=C(Nc1ccccc1SSc1ccccc1NC(=O)c1ccccc1)c1ccccc1	0
CCC=CCCCCCCCCCCCCCCCOCC	0
CCCCOC(=O)c1ccccc1N=Nc1c(O)c(C(=O)Nc2ccc3[nH]c(=O)[nH]c3c2)cc2ccccc12	0
CCCC(C)C1(CC)C(=O)NC(=S)NC1=O	0
COc1cc(O)c(C(=O)c2ccccc2)cc1S(=O)(=O)O	0
O=C(O)c1cc(N=Nc2ccc(O)c(C(=O)O)c2)ccc1O	0
CCNC1CC(C)S(=O)(=O)c2sc(S(N)(=O)=O)cc21	0
CCOC(=O)C1=CC(OC(CC)CC)C(NC(C)=O)C(N)C1	0
Cc1ccc(C=S)cc1	0
COc1c(C)c2c(c(O)c1CC=C(C)CCC(=O)O)C(=O)OC2	0
NCCCC(NC(=O)C1CCCN1C(=O)C1CSSCC(N)C(=O)NC(Cc2ccc(O)cc2)C(=O)NC(Cc2ccccc2)C(=O)NC(C	0
CCCN(CCC)S(=O)(=O)c1ccc(C(=O)O)cc1	0
Nc1cccc2c(N)cccc12	0
COCCOCCOCCOB(OCCOCCOCCOC)OCCOCCOCCOC	0
CCOC(=O)C(C)C(C)=O	1
NC(=O)NC(N)=O	1
CCC(=O)OCC(=O)C1(OC(=O)CC)C(C)CC2C3CCC4=CC(=O)C=CC4(C)C3(F)C(O)CC21C	0
Cn1cc[nH]c1=S	0
CC(C)NC(C)Cc1ccc(I)cc1	0
O=C1CC2(C(=O)N1)C(=O)N(Cc1ccc(Br)cc1F)C(=O)c1cccn12	0
NCCCCCCCCCCC(=O)O	0
Nc1nc(C(=CCC(=O)O)C(=O)NC2C(=O)N3C(C(=O)O)=CCSC23)cs1	0
O=[N+][O-]c1ccc(F)cc1F	1
COc1ccc(OC)cc1	0

O=S(=O)(O)c1ccc(Nc2nc(Nc3ccc(C=Cc4ccc(Nc5nc(Nc6ccc(S(=O)(=O)O)cc6)nc(N(CCO)CCO)n5)c(S(0
CN(C)CCCO	1
CC12CCC(C[N+](C)(CCC[N+](C)(C)C)C1)C2(C)C	0
CCCCC(CC)COC(=O)C1CCC(C(=O)OCC(CC)CCCC)CC1	0
CCCCOC(=O)c1ccc(C(=O)OCCCC)cc1	0
Clc1cc2c(c(Cl)c1Cl)Oc1cc(Cl)c(Cl)c(Cl)c1O2	1
CCCCC(CC)COC(=O)CCCCC(C)C	0
Oc1c(Cl)cc(Cl)cc1Sc1cc(Cl)cc(Cl)c1O	0
S=C1N=CC=N1	0
CC(C)OC(=O)Nc1cccc(Cl)c1	0
NCC1OC(OC2C(CO)OC(OC3C(O)C(N)CC(N)C3OC3OC(CO)C(O)C(O)C3N)C2O)C(N)C(O)C1O	0
C=C(C)C(=O)O[Si](C(C)C)(C(C)C)C(C)C	0
CCCCCCCCCCCCCCCCCN=C=O	0
Cc1cc(NCCN2ccnc2)ccc1N	1
NS(=O)(=O)c1cc2c(cc1C(F)(F)F)NCNS2(=O)=O	0
CC(C)(C)CC(=O)OCC(=O)C12OC(C)(C)OC1CC1C3CCC4=CC(=O)C=CC4(C)C3(F)C(O)CC12C	0
Nc1nc(=O)[nH]cc1F	0
CCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCCCC	0
B#N	0
CCCCCCCCC=CCCCCCCCCO	0
c1ccc(CN(CC2=NCCN2)c2ccccc2)cc1	0
CC(C)=CC1C(C(=O)OCc2coc(Cc3ccccc3)c2)C1(C)C	0
CCCCOc1ccc(C(=O)CCN2CCCCC2)cc1	0
CCCCCCCCC=CCCCCCCCC1=NCCN1CCO	1
Oc1ccc(CCNCCCCCNCCc2ccccc2)cc1O	0
CC(Oc1ccccc1)C(=O)NC1C(=O)N2C1SC(C)(C)C2C(=O)O	0
O=C=Nc1ccccc1	1
Cl	1
S=C1NCCN1	0
Cc1ccc(C(C)C)cc2c(C)ccc1-2	1
Nc1ccc(C2(c3ccc(N)c(Cl)c3)c3ccccc3-c3ccccc32)cc1Cl	0
CCCCC(C)(C)C(O)C=CC1C(O)CC(=O)C1CCCCC=CC(=O)OC	0
CC[Si](ON=C(C)C)(ON=C(C)C)ON=C(C)C	0
CN(C)c1cc(NC(=O)CNC(C)(C)C)c(O)c2c1CC1CC3C(N(C)C)C(=O)C(C(N)=O)C(=O)C3(O)C(O)=C1C2=O	0
COC(=O)CCCCC(=O)OC	1
COCC1=C(C(=O)O)N2C(=O)C(NC(=O)C(=NOC)c3csc(N)n3)C2SC1	0
C=Cc1ccncc1	1
CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCCOC(=O)CCCCCCCCCCCCCCCCC	0
Cn1c(N)cc(=O)n(C)c1=O	0
NS(=O)(=O)c1ccc(NC(=S)Nc2ccc(F)cc2)cc1	1
CC#CCC(C)C(O)C=CC1C(O)CC2Oc3c(CCCC(=O)O)cccc3C21	0
Cc1ccc(Cl)cc1N=Nc1c(O)c(C(=O)Nc2cc(C)c(NC(=O)c3cc4ccccc4c(N=Nc4cc(Cl)ccc4C)c3O)cc2C)cc2	0
O=C1OC(=O)c2ccccc21	1
O=C(O)CN(CCN(CC(=O)O)CC(=O)O)CCN(CC(=O)O)CC(=O)O	0
ClCC(Cl)=C(Cl)Cl	1

<chem>ClC1=C(Cl)C2(Cl)C3C(Cl)C=CC3C1(Cl)C2(Cl)Cl</chem>	1
<chem>CON=C(C(=O)NC1C(=O)N2C(C(=O)O)=C(C)CSC12)c1csc(N)n1</chem>	0
<chem>CCCCCCCCCCCC=CC1CC(=O)OC1=O</chem>	1
<chem>OCc1ccco1</chem>	1
<chem>CCCCCCCCCCCCCOC(=O)CCSCCC(=O)OCCCCCCCCCCCC</chem>	0
<chem>C=CCCCC</chem>	0
<chem>CCC</chem>	0
<chem>O=C(OCC(O)CO)c1ccccc1Nc1ccnc2cc(Cl)ccc12</chem>	0
<chem>O=c1c2ccccc2c(=O)c2c1ccc1[nH]c3c(ccc4c(=O)c5ccccc5c(=O)c43)[nH]c12</chem>	0
<chem>COC1(NC(=O)Cc2cccs2)C(=O)N2C(C(=O)O)=C(COC(N)=O)CSC21</chem>	0
<chem>CCOC(=O)NC</chem>	0
<chem>O=Cc1ccccc1</chem>	1
<chem>CC(C)(C)C(=O)C(Oc1ccc(Cl)cc1)n1ccnc1</chem>	1
<chem>O=P(O)(O)CN(CCN(CP(=O)(O)O)CP(=O)(O)O)CCN(CP(=O)(O)O)CP(=O)(O)O</chem>	0
<chem>CC(C)(C)OOC(C)(C)c1ccc(C(C)(C)OOC(C)(C)C)cc1</chem>	0
<chem>C=C(C)C(C)=O</chem>	1
<chem>ClC1=C(Cl)C(Cl)(C2(Cl)C(Cl)=C(Cl)C(Cl)=C2Cl)C(Cl)=C1Cl</chem>	0
<chem>CC1=C(C(=O)O)N2C(=O)C(NC(=O)C(N)c3ccc(O)cc3)C2SC1</chem>	0
<chem>CC[N+](CC)(CC)CC</chem>	0
<chem>NC(CSSCC(N)C(=O)O)C(=O)O</chem>	0
<chem>CN1CCN2c3ncccc3Cc3ccccc3C2C1</chem>	0
<chem>CC(C)c1cccc(C(C)C)c1N=C=Nc1c(C(C)C)cccc1C(C)C</chem>	0
<chem>Cc1cccc(N=Nc2ccc(N(C)C)cc2)c1</chem>	1
<chem>Cc1nnc2n1-c1ccc(Cl)cc1C(c1ccccc1Cl)=NC2</chem>	0
<chem>CCN(CC)CCNc1ccc(CO)c2sc3ccccc3c(=O)c12</chem>	0
<chem>CCN1CC(CCN2CCOCC2)C(c2ccccc2)(c2ccccc2)C1=O</chem>	0
<chem>CCN(CC)C(=O)C1(c2ccccc2)CC1CN</chem>	0
<chem>C1CCOC1</chem>	1
<chem>CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC</chem>	0
<chem>CC(C)(C)c1cc(CCC(=O)NNC(=O)CCc2cc(C(C)(C)C)c(O)c(C(C)(C)C)c2)cc(C(C)(C)C)c1O</chem>	0
<chem>CCn1cc(C(=O)O)c(=O)c2cc(F)c(N3CCNC(C)C3)c(F)c21</chem>	0
<chem>Cc1cc2c(cc1S(N)(=O)=O)S(=O)(=O)CCC2</chem>	0
<chem>CCCCCOC(=O)CCCCCCCC(=O)OCCCCC</chem>	0
<chem>O=C(CCNNC(=O)c1ccncc1)NCc1ccccc1</chem>	0
<chem>CCC(=O)OCCc1ccccc1</chem>	1
<chem>CON=C(C(=O)NC1C(=O)N2C(C(=O)OC(C)OC(C)=O)=C(COC(N)=O)CSC12)c1ccco1</chem>	0
<chem>O=NN1CN2CN(C1)CN(N=O)C2</chem>	1
<chem>CCCCN(CCCC)CCC(O)c1cc2c(Cl)cc(Cl)cc2c2cc(C(F)(F)F)ccc12</chem>	0
<chem>CC(=O)/C(OO/C(C(C)=O)=C(/C)O)=C(\C)O</chem>	1
<chem>O=c1[nH]sc2ccccc12</chem>	1
<chem>CNCCCC12CCC(c3ccccc31)c1ccccc12</chem>	0
<chem>CCn1cc(C(=O)O)c(=O)c2ccc(C)nc21</chem>	0
<chem>ClC=CCl</chem>	1
<chem>Cc1ncc([N+](=O)[O-])n1CCO</chem>	0
<chem>CC(C)COC(=O)c1ccccc1C(=O)OCC(C)C</chem>	0

NC(=O)NC(=O)Cc1ccccc1	0
O=C(O)CCCO	0
CC(C)(c1ccc(OCCO)cc1)c1ccc(OCCO)cc1	0
CCN=C=O	1
C=C(C)C(=O)OCC(F)(F)F	0
Oc1ccc(Cl)cc1Cc1cc(Cl)ccc1O	1
O=C(NCC1CN(c2ccc(N3CCOCC3=O)cc2)C(=O)O1)c1ccc(Cl)s1	0
OCCN1CCN(CCCN2c3ccccc3Sc3ccc(Cl)cc32)CC1	0
CN(C)C1C(=O)C(C(=O)NCN2CCCC2)C(=O)C2(O)C(O)=C3C(=O)c4c(O)cccc4C(C)(O)C3CC12	0
O=C1Nc2ccccc2C1=O	0
O=C1C2(Cl)C3(Cl)C4(Cl)C(Cl)(Cl)C5(Cl)C3(Cl)C1(Cl)C5(Cl)C24Cl	1
CC1CC(C)(C)CC(OOC(C)(C)C)(OOC(C)(C)C)C1	1
CCOC(=O)C(C)(C)O	1
CCCCCCCCC=CCCCCCCCC(=O)OCC(OC(=O)CCCCCCCCC=CCCCCCCCC)C1OCC(O)C1OC(=O)CCCCCCCC	0
CN(C)CCn1nnnc1SCC1=C(C(=O)O)N2C(=O)C(NC(=O)Cc3csc(N)n3)C2SC1	0
CCCCCCCCCCCCCCCCCO	0
CCN(CC)CCNC(=O)c1cc(Cl)c(N)cc1OC(C)C(C)=O	0
CC(=O)OOC(C)=O	1
CC(=Cc1ccccc1)C=C1SC(=S)N(CC(=O)O)C1=O	0
CC(CN1c2ccccc2Sc2ccccc21)N(C)C	1
Oc1ccc2c(c1)CCC(c1ccccc1)C2c1ccc(OCCN2CCCC2)cc1	0
O=C(O)c1cccn1Nc1cccc(C(F)(F)F)c1	0
CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)NCC(=O)O	1
CC(C)C1=CC2=CCC3C(C)(CCCC34C(=O)OCC35CC4(C3)C5)C2CC1	0
CCCCC(C)(O)C=CC1C(O)CC(O)C1CC=CCCCC(=O)O	0
CC(C)CCOCCC(C)C	1
CC(=O)OCCOC(C)=O	0
CC(=O)C=C(C)O	1
NCc1ccc(S(N)(=O)=O)cc1	0
C1COC(NC(C2CC2)C2CC2)=N1	0
CC(C)(C)C1=CC(=Cc2ccccc2)C=C(C(C)(C)C)C1=O	0
OC1CCCC1	1
c1ccc2c(c1)CCCC2	1
COC(=O)c1ccccc1	0
C#CC1(O)CCC2C3CCc4cc(OC)ccc4C3CCC21C	0
BrCCCCBr	1
CC(C)c1cccc(C(C)C)c1O	0
O=C(Nc1ccc(Cc2ccc(NC(=O)NC3CCCC3)cc2)cc1)NC1CCCCC1	1
CN1CCOCC1	1
CCC(c1ccccc1)c1c(O)c2ccccc2oc1=O	0
C=CCOc1ccc(CC(=O)O)cc1Cl	0
C=C(C)C(=O)OC(C)(C)C	0
CC(=O)N(C)C	1
Cc1ccc(NC(=O)N(C)C)cc1NC(=O)N(C)C	0
CN(c1c([N+](=O)[O-])cc([N+](=O)[O-])cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1

CCCCC(CC)C(=O)OCCOCCOCCOC(=O)C(CC)CCCC	0
CCCCCCCCCCCCC(=O)OC	0
CCCCOCCO	1
Fc1ccc(Cn2c(NC3CCNCC3)nc3cccc32)cc1	0
CCOC(=O)C1CCC(C(=O)OCC)CC1	0
CC1C(OS(=O)(=O)O)CC2CC(C(O)c3cc(=O)[nH]c(=O)[nH]3)NC3=NCC1N32	1
O=C(Cl)OCCI	1
CCOC(=O)Nc1c[n+](N2CCOCC2)no1	0
CCCCCCCCCCCCC(=O)N(CCCC)CCCC	0
CNC(=O)Oc1cccc1OC(C)C	0
NC(=O)c1ncn(C2OC(CO)C(O)C2O)n1	0
C=CC(=O)OCCCCCCCCC	0
NCCc1ccc(O)c(O)c1	0
CC(CC(=O)OOC(C)(C)C)CC(C)(C)C	0
C=CC(=O)OCCCCCCC(C)C	0
CC(C)(C)c1cc(CCC(=O)OCCSCCOC(=O)CCc2cc(C(C)(C)C)c(O)c(C(C)(C)C)c2)cc(C(C)(C)C)c1O	0
Cc1c(O)c(=O)ccn1C	0
CC(C)NC(=N)N=C(N)Nc1ccc(Cl)cc1	0
CCN(CC)c1nc(Nc2ccc(C=Cc3ccc(Nc4nc(Nc5cc(S(=O)(=O)O)ccc5S(=O)(=O)O)nc(N(CC)CC)n4)cc3S(=	0
Clc1ccc(CON=C(Cn2ccnc2)c2ccc(Cl)cc2Cl)c(Cl)c1	0
CC1OC2(CS1)CN1CCC2CC1	0
CC(=O)/C(=N\Nc1cc(Cl)c(-c2cc(Cl)c(N/N=C\C(C)=O)C(=O)Nc3ccc(C)cc3C)cc2Cl)cc1Cl)C(=O)Nc1cc	0
CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)Cl	1
CC1C=CC=CC=CC=CC=CC(OC2OC(C)C(O)C(N)C2O)CC2OC(O)(CC(O)CC(O)C(O)CCC(O)CC(O)	0
SC1CCCCC1	1
O=CC=O	1
CC1(C)NC(=O)N(c2ccc([N+](=O)[O-])c(C(F)(F)F)c2)C1=O	0
CC(Cc1cccc1)(NC(=O)CN)c1cccc1	0
CCCCC(CC)CN(CC(CC)CCCC)CC(CC)CCCC	0
Nc1nc(N)nc(N)n1	0
CCCCc1oc2cccc2c1C(=O)c1cc(I)c(OCCN(CC)CC)c(I)c1	0
CC1CC=CCCCCCCCC(=O)C1	0
c1cccc1	1
C=C(c1cccc1OCc1cccc(Cl)c1)n1ccnc1	0
CC(C)(Sc1cc(C(C)(C)C)c(O)c(C(C)(C)C)c1)Sc1cc(C(C)(C)C)c(O)c(C(C)(C)C)c1	0
CC(CC(=O)OOC(=O)CC(C)CC(C)(C)C)CC(C)(C)C	0
O=C1OCCO1	1
CC(C)CCCCCCCCC=O	0
CC(=O)C1CCC2C3CCC4CC(O)CCC4(C)C3C(=O)CC12C	0
ClC=C(Cl)Cl	1
O=C(O)C(Cl)Cl	0
COc1ccc(CCN2CCC(Nc3nc4cccc4n3Cc3ccc(F)cc3)CC2)cc1	0
CCOc1ccc(CC2NC(=O)CCSSCC(C(=O)N3CCCC3C(=O)NC(CCCN)C(=O)NCC(N)=O)NC(=O)C(CC(N)=O)	0
CCN(CC)CCNC(=O)c1cc(S(C)(=O)=O)ccc1OC	0
Nc1cccc1	0

Cc1ccc(OP(=O)(Oc2ccccc2)Oc2ccccc2)cc1	0
CN1CCC(=C2c3ccccc3CCc3sccc32)CC1	0
CN1CCC(OC(=O)C(Oc2ccc(Cl)cc2)Oc2ccc(Cl)cc2)CC1	0
CCOC(=O)C(O)(c1ccc(Cl)cc1)c1ccc(Cl)cc1	0
CCCN(CCC)C(=O)SCC	1
Cc1ccc(-c2nc3ccc(C)cn3c2CC(=O)N(C)C)cc1	0
O=S(O)(O)=S	0
CC(C)NCC(O)COc1ccc(O)cc1	0
CC1=C(C(=O)O)N2C(=O)C(NC(=O)C(N)c3ccccc3)C2SC1	0
NC(=O)CCl	1
Cc1ccc(S(=O)(=O)O)cc1C	0
CCCCOC(=O)COc1ccc(Cl)cc1Cl	1
O=C(OCc1ccccc1)c1ccccc1	0
Cc1ccccc1N	1
CC(C)CCCCCCCCCCCCCOC(=O)C(C)(C)C	0
C=C(C)C(=O)OCC1CO1	1
CC(CO)CCCC1CCCCC1	0
O=c1ccc(=O)[nH][nH]1	1
CC(=O)Nc1ccc(Cl)cc1	1
C[Si](C)(C)C	0
C#CC1(OC(=O)CCCCC)CCC2C3CCC4=CC(=O)CCC4C3CCC21C	0
CCOC(=O)C(CCc1ccccc1)NC(C)C(=O)N1C(C(=O)O)CC2CCCCC21	0
CC(=O)OCC(COC(C)=O)OC(C)=O	0
CCC(C)=NO[Si](C)(ON=C(C)CC)ON=C(C)CC	1
O=C(O)c1cc(-c2ccccc2)nc2ccccc12	0
CC(C)(C)CSSCC(C)(C)C	1
CCCCCCCCC(C)C=O	0
NC(=O)c1cc[n+](CC2=C(C(=O)O)N3C(=O)C(NC(=O)C(c4ccccc4)S(=O)(=O)O)C3SC2)cc1	0
C#CC1(OC(C)=O)CCC2C3CCC4=CC(=O)CCC4C3CCC21C	0
CCCN1CCCCC1C(=O)Nc1c(C)cccc1C	0
CCC(CCC(C)C1CCC2C3CC=C4CC(OC(=O)C(C)(C)Oc5ccc(Cl)cc5)CCC4(C)C3CCC12C)C(C)C	0
CCCCOCCOC(=O)COc1ccc(Cl)cc1Cl	1
Nc1nc(N)c(N)c(N)n1	1
CN1C(=O)CN=C(c2ccccc2)c2cc(Cl)ccc21	0
CCOP(=O)(O)C(N)=O	0
CCS	1
Cn1nnc2ccccc21	1
O=C(c1ccccc1)c1ccc(Cl)cc1	1
Nc1ccc(C(=O)NCC(=O)O)cc1	0
CCCCc1oc2ccc(NS(C)(=O)=O)cc2c1C(=O)c1ccc(OCCCN(CCCC)CCCC)cc1	0
CC1COc2c(C3(N)CC3)c(F)cc3c(=O)c(C(=O)O)cn1c23	0
NC(=O)OC(CCl)CCl	0
Cc1ccccc1OCC(O)CO	0
COCCOCCOCCO	0
O=C(C(F)(F)C(F)(F)F)C(F)(F)F)C(F)(F)F)C(F)(F)F	0

CCCCNC(=O)n1c(NC(=O)OC)nc2ccccc21	0
CNCCc1ccc(OC(=O)C(C)C)c(OC(=O)C(C)C)c1	0
O=C1CCC(N2C(=O)c3ccccc3C2=O)C(=O)N1	0
Cc1ccc(N=Nc2c(O)c(C(=O)O)cc3ccccc23)c(S(=O)(=O)O)c1	1
CON=C1CN(c2nc3c(cc2F)c(=O)c(C(=O)O)cn3C2CC2)CC1CN	0
O=C1C(=C(O)C(c2ccccc2)c2ccccc2)C(=O)c2ccccc21	0
CC(C)=CC1C(C(=O)OCN2C(=O)C3=C(CCCC3)C2=O)C1(C)C	0
CCCC1COC(Cn2cncn2)(c2ccc(Cl)cc2Cl)O1	0
CCCCCCCCCCC	0
O=C(NCNC(=O)NC1C(=O)NC(=O)N1CO)NC1C(=O)NC(=O)N1CO	0
CN(C)CCC(c1ccc(Br)cc1)c1cccn1	0
NCC1(CC(=O)O)CCCCC1	0
CCC(NC(C)C)C(O)c1ccc(O)c(O)c1	0
COc1ccc(-c2ccc3cc(C(=O)O)ccc3c2)cc1C12CC3CC(CC(C3)C1)C2	0
O=C(O)C(O)C(O)C(O)C(O)CO	0
C1CC1	0
CCCCCCCCCCCCc1ccccc1	0
CC1(C)CCC(=Cc2ccc(Cl)cc2)C1(O)Cn1cncn1	0
CCCCCCCCC=CCCCCCCCC(=O)OCCOCC(OCCO)C1OC(OCCO)CC1OCCO	1
CC1CC2C3CCC4=CC(=O)C=CC4(C)C3(F)C(O)CC2(C)C1(O)C(=O)CO	0
CCCCNC1CC(C)(C)NC(C)(C)C1	0
O=C(Cl)c1ccc(C(=O)Cl)cc1	1
CCO[Si](CC(C)C)(OCC)OCC	0
Clc1ccc(C(c2ccc(Cl)cc2)C(Cl)(Cl)Cl)cc1	1
CCCC(=O)OC1(C(=O)COC(C)=O)CCC2C3CC(F)C4=CC(=O)C=CC4(C)C3(F)C(O)CC21C	0
O=c1nc[nH]c2c1nncn2C1CCC(CO)O1	0
NC(=O)N/N=C/c1ccc([N+](=O)[O-])o1	0
N=C(N)NCCN1CCCCCCC1	0
C=C(C)C(=O)OC1CCCCC1	1
COP(=S)(OC)SCN1C(=O)c2ccccc2C1=O	1
Cc1cc(O)c2ccccc2c1O	0
C=C(C)OC	0
CC(C)S	1
CCN1CCCC(OC(=O)C(c2ccccc2)c2ccccc2)C1	0
CC(CO)COC1CC2CCC1(C)C2(C)C	1
NNc1nncc2ccccc12	0
Cc1ccccc1C(=O)Nc1ccc(C(=O)N2CCCC(O)c3cc(Cl)ccc32)c(C)c1	0
CCC#CCC(C)C(O)C#CC1C(O)CC2CC(=CCOCC(=O)O)CC21	0
CCCCCCCC=O	1
O=S(=O)(Cl)c1ccccc1	1
CCCCOc1cc(C(=O)OCCN(CC)CC)ccc1N	0
CON=C(C(=O)NC1C(=O)N2C(C(=O)O)=C(COC(N)=O)CSC12)c1ccco1	0
CP(=O)(Cl)Cl	1
CC(C)CCCCCCCOP(=O)(Oc1ccccc1)Oc1ccccc1	0
CC(O)(CS(=O)(=O)c1ccc(F)cc1)C(=O)Nc1ccc(C#N)c(C(F)(F)F)c1	0

CC1(C)OC2CC3C4CCC5=CC(=O)CCC5(C)C4(F)C(O)CC3(C)C2(C(=O)CCl)O1	0
O=C(OCCOCCO)c1ccccc1Nc1cccc(C(F)(F)F)c1	0
CC[Si](OC(C)=O)(OC(C)=O)OC(C)=O	0
CCOC(=O)CBr	1
O=S(=O)(Oc1ccc(Cl)cc1)c1ccc(Cl)cc1	1
CC(=O)NS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1	1
CCC(C)(C)C(=O)O	1
Cc1c(N(C)C)c(=O)n(-c2ccccc2)n1C	1
Cc1cc(C)cc(C)c1	1
C#CC1(OC(C)=O)CCC2C3CCC4=CC(OC(C)=O)CCC4C3CCC21C	0
CC(C)CC1Nc2cc(Cl)c(S(N)(=O)=O)cc2S(=O)(=O)N1	0
O=C(Oc1ccccc1)Oc1ccccc1	0
CCCCCCCCC=CCCCCCCCC(=O)OCCCCCCCCC	0
CCCCC1(COC(=O)CCC(=O)O)C(=O)N(c2ccccc2)N(c2ccccc2)C1=O	0
Oc1cccc(-c2c3nc(c(-c4cccc(O)c4)c4[nH]c(c(-c5cccc(O)c5)c5ccc([nH]5)c(-c5cccc(O)c5)c5nc2C=C5	0
CC(=O)Cl	1
C[Si]1(CCC(F)(F)F)O[Si](C)(CCC(F)(F)F)O[Si](C)(CCC(F)(F)F)O1	0
CC(C)N=O	1
CNCCC(Oc1ccc(C(F)(F)F)cc1)c1ccccc1	0
C#CC1(O)CCCCC1	1
CC(C)OC(=O)NP(N)(N)=O	0
CCCC(CCC)C(=O)O	0
CCC(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F	0
CNCC(O)c1ccc(O)c(O)c1	0
O=C1CCN(c2ccccc2)N1	0
COC(=O)C1C(c2ccc(l)cc2)CC2CCC1N2CCCF	0
Cc1ccc2[nH]c3cc4c(=O)c5cc(C)ccc5[nH]c4cc3c(=O)c2c1	0
C[N+]12CCC(CC1)C(OC(=O)C(O)(c1ccccc1)c1ccccc1)C2	0
CCC=CCC(C)OC(=O)c1ccccc1O	0
C=CC(=O)O[Si](C(C)C)(C(C)C)C(C)C	0
C[N+](C)(C)CCOC(=O)CCC(=O)OCC[N+](C)(C)C	0
CCCCCCCCCCCCCCCC	0
CCN(CC)C(=O)N1CCN(C)CC1	0
CCC(C)c1cc([N+](=O)[O-])cc([N+](=O)[O-])c1O	1
CSC1=NC(C)(c2ccccc2)C(=O)N1Nc1ccccc1	0
CS(C)=O	1
COC(=O)C1=C(C)NC(C)=C(C(=O)OC(C)C)C1c1cccc2nonc12	0
CCN(CC)c1c([N+](=O)[O-])cc(C(F)(F)F)c(N)c1[N+](=O)[O-]	1
C=CCCCCCCCCCCCCCCCC	0
N#Cc1c(Cl)c(Cl)c(Cl)c(C#N)c1Cl	1
CN(Cc1ccc(C(C)(C)C)cc1)Cc1cccc2ccccc12	0
CO[Si](C)(OC)OC	0
CCOC=O	0
CCCCCCCC[N+](CCCCCCCC)(CCCCCCCC)CCCCCCCC	1
COc1cc(CNC(=O)CCCCC=CC(C)C)ccc1O	1

C=C(C)C1Cc2c(ccc3c2OC2COc4cc(OC)c(OC)cc4C2C3=O)O1	1
CC(C)(Oc1ccc(Cl)cc1)C(=O)OCc1cccnc1	0
Cc1ccc(NN=c2c(=O)ccc(=NNc3ccc(S(=O)(=O)O)cc3)c2=O)c(C)c1	1
CC(C)OC(=O)COc1ccc(Cl)cc1Cl	1
CC1CCC2C(C)C(=O)OC3OC4(C)CCC1C32OO4	0
CC12CCC3C(CCC4=CC(=O)C=CC43C)C1CCC(=O)O2	0
CC(c1ccccc1)c1ccccc1	0
CCCCCCCCCCCC(=O)N(CCO)CCO	1
CC1OC(Oc2c(-c3ccc(O)c(O)c3)oc3cc(O)cc(O)c3c2=O)C(O)C(O)C1O	0
C=CC(=O)OCCCCCOC(=O)C=C	1
Cc1c(C)c2c(c(C)c1OC(=O)c1cccnc1)CCC(C)(CCCC(C)CCCC(C)CCCC(C)C)O2	0
CCCCCCCCC=CCCCCCCCC(=O)NCC(C)O	0
CC(C)(C)OO	1
CCn1ccc(NS(=O)(=O)c2ccc(N)cc2)nc1=O	0
CCCCC(C)(C)C(O)C=CC1C(C)CC(=O)C1CC=CCCCC(=O)O	0
CC(=O)Nc1c(l)c(C(=O)NC2C(O)OC(CO)C(O)C2O)c(l)c(N(C)C(C)=O)c1l	0
O=[N+][([O-])c1ccc(C=Cc2ccc([N+](=O)[O-])cc2S(=O)(=O)O)c(S(=O)(=O)O)c1	0
NCCCOCCCCOCCCN	1
Cc1ccccc1N1C(=O)c2cc(S(N)(=O)=O)c(Cl)cc2NC1C	0
CCCCCOC(CO)CO	1
COc1ccc(O)cc1	0
CCCCS(=O)(=O)NC(Cc1ccc(OCCCCC2CCNCC2)cc1)C(=O)O	0
CC(=O)CC(C)(C)O	1
O=C(CCl)c1ccc(O)cc1	1
CCCCC(CC)COC(=O)OOC(=O)OCC(CC)CCCC	1
Cc1ccc(O)c(C(=O)O)c1	1
Cc1ccccc1C(OCCN(C)C)c1ccccc1	0
CN(C)C=O	0
CCCCCCC(O)CC=CCCCCCCCC(=O)OC(C)C	0
COCCCOc1cc(CC(CC(N)C(O)CC(C(=O)NCC(C)(C)C(N)=O)C(C)C)C(C)C)ccc1OC	0
CCCCOC(=O)CC(C)C	1
CCCCCCCCC	1
CN1CCC(OC(c2ccccc2)c2ccccc2)CC1	0
O=C1NC(=O)C(=c2[nH]c(=C3C(=O)NC(=O)NC3=O)c3ccccc23)C(=O)N1	0
CCC(C(C)O)n1ncn(-c2ccc(N3CCN(c4ccc(OCC5COC(Cn6cncn6)(c6ccc(F)cc6F)C5)cc4)CC3)cc2)c1=O	0
CCCC(CC)CCCCCCCN	1
CCCCC	1
CC(=O)OCC(=O)c1ccccc1	0
c1ccc(-c2ccc(-c3nc(-c4ccc(-c5ccccc5)cc4)nc(-c4ccc(-c5ccccc5)cc4)n3)cc2)cc1	0
Clc1ccc2nsnc2c1NC1=NCCN1	0
CNC(=O)Oc1cccc2c1OC(C)(C)O2	0
C=C(C)OC(C)=O	0
CCOC(=O)C(CCc1ccccc1)NC(C)C(=O)N1CCCC1C(=O)O	0
COc1ccc2c(c1)c(CC(=O)NO)c(C)n2C(=O)c1ccc(Cl)cc1	0
C=C(C)C(=O)OCCOc1ccc(C(C)(C)c2ccc(OCCOC(=O)C(=C)C)cc2)cc1	0

CC(Cc1ccc(O)cc1)NCC(O)c1cc(O)cc(O)c1	0
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCCCCCCCCCCCCCCCC(C)C	0
CC(C)CC(=O)CC(C)C	0
CCOc1ccc2c(c1)C(C)=CC(C)(C)N2	0
CN(C)C1C(=O)C(C(N)=O)C(=O)C2(O)C(O)=C3C(=O)c4c(O)ccc(Cl)c4C(C)(O)C3CC12	0
O=c1c2ccc3c4ccc5c(=O)n(CCc6ccccc6)c(=O)c6ccc(c7ccc(c(=O)n1CCc1ccccc1)c2c37)c4c56	0
O=C1c2ccccc2C(=O)C1c1ccc2cc(S(=O)(=O)O)cc(S(=O)(=O)O)c2n1	1
CCOC(N)=O	0
COP(=S)(OC)Oc1cc(Cl)c(I)cc1Cl	0
CCCCCON=O	0
CCC(=O)NCCC1CCc2ccc3c(c21)CCO3	0
CC(C)C(N)C(=O)O	0
CCCCNP(N)(N)=S	1
CON=C(C(=O)NC1C(=O)N2C(C(=O)O)=C(COC(C)=O)CSC12)c1csc(N)n1	0
CCCCCCCCCCCC(=O)OCCO	0
Cc1cc(CCC(=O)OCCOCCOCCOC(=O)CCc2cc(C)c(O)c(C(C)(C)C)c2)cc(C(C)(C)C)c1O	0
CC(C)NC(C)C	1
O=CC(=O)O	1
CC#CCC(C)C(O)C=CC1C(O)CC2CC(=CCCC(=O)O)CC21	0
S=c1[nH]c(=S)[nH]c(=S)[nH]1	1
CCCCC(C)CC(O)C=CC1C(O)CC(=O)C1CCCC=CC(=O)O	0
CNCC(O)C(O)C(O)C(O)CO	0
CCCCCCCCOCCCCCCCC	1
C=CN1CCCC1=O	0
CN(C)CCOc1ccc(C(=C(CCCl)c2ccccc2)c2ccccc2)cc1	0
COc1cc2c(cc1OC)CC(=O)N(CCCN(C)CC1Cc3cc(OC)c(OC)cc31)CC2	0
CN(C)c1ccc(N=Nc2ccccc2)cc1	1
CCCOCC(C)OCC(C)O	1
Cc1c(C2CCCCC2)[n+](N=NN2c3cccc[n+]3C(C)C2C2CCCCC2)c2ccccn12	0
CC(C)C1=CC2=CCC3C(C)(C(=O)O)CCCC3(C)C2CC1	0
CCCCC(CC)COC(=O)c1ccccc1C(=O)OCC(CC)CCCC	0
CCCOCC(=O)C(C)O	1
O=C(OOC(=O)c1ccccc1)c1ccccc1	1
CC(=O)OCCC(C)C	1
Cc1ccc(S(=O)(=O)O)cc1	0
Nc1ccc(O)cc1	0
COC(N)=O	1
O=C(O)CCO	1
CCOCCOCC	0
COc1ccc2cc1Oc1cc3c(cc1OC)CC[N+](C)(C)C3Cc1ccc(cc1)Oc1c(OC)c(OC)cc3c1C(C2)[N+](C)(C)CC3	0
CCCCOCCOCCOC(=O)CCCCC(=O)OCCOCCOCCCC	1
CN1CCC(CN2c3ccccc3Sc3ccccc32)C1	0
CCCCOC(=O)c1ccc(N)cc1	0
CON=C(C1=NOCCO1)c1ccccc1Oc1ncnc(Oc2ccccc2Cl)c1F	0
CCOP(=O)(OCC)OP(=O)(OCC)OCC	1

<chem>ClC1=C(Cl)C(Cl)(Cl)C(Cl)=C1Cl</chem>	1
<chem>CCC(C)(C)C(=O)OC1=C(c2ccc(Cl)cc2Cl)C(=O)OC12CCCCC2</chem>	0
<chem>c1ccc(Oc2ccccc2)cc1</chem>	1
<chem>CCCC(C)CO</chem>	1
<chem>O=C(CCCN1CC=C(n2c(=O)[nH]c3ccccc32)CC1)c1ccc(F)cc1</chem>	0
<chem>Nc1ccc(N)cc1</chem>	1
<chem>CCOC(=O)C1(c2ccccc2)CCN(CCC(C#N)(c2ccccc2)c2ccccc2)CC1</chem>	0
<chem>O=Cc1ccc(C(=O)O)cc1</chem>	1
<chem>Cc1ccc(N(CC2=NCCN2)c2ccc(O)cc2)cc1</chem>	0
<chem>O=C(Cc1ccc(-c2ccccc2)cc1)Nc1cccn1</chem>	0
<chem>CCOC(=O)C=CC(=O)OCC</chem>	1
<chem>CCC1OC(=O)C(C)C(OC2CC(C)(OC)C(O)C(C)O2)C(C)C(OC2OC(C)CC(N(C)C)C2O)C(C)(O)CC(C)C2NC(</chem>	0
<chem>CC(C)CC(C)Nc1ccc(Nc2ccccc2)cc1</chem>	0
<chem>Cc1ccc(S(=O)(=O)N(C)N=O)cc1</chem>	1
<chem>C=CC(=O)OCC(O)COCCCCOCC(O)COC(=O)C=C</chem>	1
<chem>CN1CSC(=S)N(C)C1</chem>	1
<chem>CCCC[N+](CCCC)(CCCC)CCCC</chem>	1
<chem>Nc1nc(NC2CC2)c2ncn(C3C=CC(CO)C3)c2n1</chem>	0
<chem>CCCCN(CCCC)C(=O)N(CCCC)CCCC</chem>	0
<chem>Clc1ccc(C2(Cn3cnncn3)CC(Br)CO2)c(Cl)c1</chem>	0
<chem>CCCCCCCCCCC(=O)O</chem>	0
<chem>CCCCC(CC)COC(=O)C=CC(=O)OCC(CC)CCCC</chem>	0
<chem>O=C1C=Cc2ccccc2/C1=N\Nc1ccc([N+](=O)[O-])cc1Cl</chem>	0
<chem>Fc1ccc(C2CCNCC2COc2ccc3c(c2)OCO3)cc1</chem>	0
<chem>O=C(O)c1cc(-c2ccc(F)cc2F)ccc1O</chem>	0
<chem>CN(C)CC(c1ccc(O)cc1)C1(O)CCCCC1</chem>	0
<chem>O=[N+](O-)]c1cc([N+](=O)[O-])c2ccc(S(=O)(=O)O)cc2c1O</chem>	1
<chem>CC(Cn1cnc2c(N)ncnc21)OCP(=O)(O)O</chem>	0
<chem>O=C1OC(CO)C(O)C(O)C1O</chem>	0
<chem>Nc1ccc(S(=O)(=O)Nc2cccn2)cc1</chem>	0
<chem>CCC1OC(=O)C(C)C(OC2CC(C)(OC)C(O)C(C)O2)C(C)C(OC2OC(C)CC(N(C)C)C2O)C(C)(O)CC(C)CN(C)Cl</chem>	0
<chem>CC(=O)OCC(=O)C1(O)CCC2C3CCC4=CC(=O)CCC4(C)C3=CCC21C</chem>	0
<chem>CC(c1ncncc1F)C(O)(Cn1cnncn1)c1ccc(F)cc1F</chem>	0
<chem>C=CC1(C)CC(OC(=O)CSC2CC3CCCC(C2)N3C)C2(C)C(C)CCC3(CCC(=O)C32)C(C)C1O</chem>	0
<chem>CC(C)(C)c1ccc(C(=O)CCCN2CCC(OC(c3ccccc3)c3ccccc3)CC2)cc1</chem>	0
<chem>CC(C)C1=CC2=CCC3C(C)(C(=O)OCC(CO)(CO)CO)CCCC3(C)C2CC1</chem>	0
<chem>CC(C)(C)CCCCC1(C(=O)OC(C)(C)CC(C)(C)C)OO1</chem>	0
<chem>CCCC(c1cc(C(C)(C)C)c(O)cc1C)c1cc(C(C)(C)C)c(O)cc1C</chem>	1
<chem>OC(c1ccccc1)(c1ccccc1)C1CCCCN1</chem>	0
<chem>Nc1c2c(nc3ccccc13)CCCC2</chem>	0
<chem>CC12CCCC=C1C(=O)OC2=O</chem>	1
<chem>NC(CS)C(=O)O</chem>	0
<chem>COc1cc(OC)nc(NC(=O)Oc2ccccc2)n1</chem>	0
<chem>S=c1nccc[nH]1</chem>	1
<chem>O=C1C=CC(=O)C=C1</chem>	1

C[N+](C)(C)CC1CO1	1
CCCCC(=O)CC	0
CC(=O)OCC(C)OC(C)=O	0
CCCS	1
COC(C)CCO	0
COP(=O)(OC)OC=C(Cl)Cl	0
Cc1ccc(N=C=O)cc1N=C=O	1
c1cc(N(CC2CO2)CC2CO2)ccc1Cc1ccc(N(CC2CO2)CC2CO2)cc1	1
CCCCCC(O)C=CC1C(O)CC(O)C1CC=CCCCC(=O)O	0
C=CCOC(=O)CCC1CCCCC1	0
O=C(O)CCCCC1SCC2NC(=O)NC21	0
CC(CCl)OC(C)CCl	1
COc1ncccn1	1
O=S(=O)(O)c1ccc(Nc2nc(Cl)nc(Cl)n2)cc1	1
CCCCNC(=O)NS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1	0
OCC(CO)(CO)CO	1
N#CCCC(Br)(C#N)CBr	1
CCCCOCCOC(=O)COc1cc(Cl)c(Cl)cc1Cl	1
CC(=O)OC1CCC2(C)C(=CCC3C2CCC2(C)C(c4cccn4)=CCC32)C1	0
C#CC1(O)CCC2C3CCC4=C(CCC(=O)C4)C3CCC21C	0
Nc1nc(N)c(-c2ccccc2)s1	0
CC(=O)OC(C)CC(C)C	1
COc1cc(OC)nc(NC(=O)NS(=O)(=O)c2ncccc2C(F)(F)F)n1	0
CCCN(CCC)C(=O)C(CCC(=O)OCCCN1CCN(CCOC(=O)Cc2c(C)n(C(=O)c3ccc(Cl)cc3)c3ccc(OC)cc23)CC	0
COc1cc(Br)c2oc(C3CCNCC3)cc2c1	0
CCCCNc1cc(C(=O)O)cc(S(N)(=O)=O)c1Oc1ccccc1	0
NC1CCN(c2nc3c(cc2F)c(=O)c(C(=O)O)cn3-c2ccc(F)cc2F)C1	0
O=C(O)c1c(O)c(-c2ccccc2)nc2ccccc12	0
CCOCC(C)OC(C)=O	0
Cc1ccc(N/N=C2/C(=O)C=Cc3ccccc32)c([N+](=O)[O-])c1	0
CCOC(=O)N1CCC(=C2c3ccc(Cl)cc3CCc3cccn32)CC1	0
NC1CN(c2c(F)cc3c(=O)c(C(=O)O)cn(C4CC4F)c3c2Cl)CC12CC2	0
COc1cc(N)c(Cl)cc1C(=O)NC1CCN(CCCOc2ccc(F)cc2)CC1OC	0
CC(C)(C)OOC(=O)c1ccccc1	0
O=C(c1ccc(F)cc1)c1ccc(F)cc1	0
O=CC(=O)c1ccc(O)cc1	1
Cc1ccccc1OCC1CO1	0
O=C1CCc2ccc(OCCCCN3CCN(c4cccc(Cl)c4Cl)CC3)cc2N1	0
CC12C=CC(=O)C=C1C(F)CC1C2C(O)CC2(C)C1CCC2(O)C(=O)CO	0
c1ccc(-c2ccc(C(c3ccccc3)n3ccnc3)cc2)cc1	0
COc1ccc2c(c1OC)C(=O)OC2C1c2c(cc3c(c2OC)OCO3)CCN1C	0
Nc1cnn(-c2ccccc2)c(=O)c1Cl	0
CCCCCC(C)(O)C=CC1C(O)CC(=O)C1CC=CCCCC(=O)O	0
CCNC(=O)CCCC=CCC1C(O)CC(O)C1C=CC(O)CCc1ccccc1	0
N#Cc1ccccc1	1

BrC1ccc(-c2c(Br)c(Br)c(Br)c2Br)c(Br)c1Br	1
Cc1cc(=O)[nH]c(O)c1C	0
C=C(C)CN(CC)c1c([N+](=O)[O-])cc(C(F)(F)F)cc1[N+](=O)[O-]	1
CC(C=O)(CO)CO	0
CC1(C)SC2C(NC(=O)C3(N)CCCCC3)C(=O)N2C1C(=O)O	0
CC(C)(Oc1ccc(Cl)cc1)C(=O)OC(COC(=O)c1cccnc1)COC(=O)c1cccnc1	0
NS(=O)(=O)c1cc2c(cc1Cl)NC(=CSCc1ccccc1)NS2(=O)=O	0
CNC1C(O)C(NC)C2OC3(O)C(=O)CC(C)OC3OC2C1O	0
C1CCCC2OC2CC1	0
C=COCCCCCCCCCCCCCCCCC	0
COc1ccc(C=NN=CC2N(C)c3ccccc3C2(C)C)cc1	1
O=C=NC1CCCCC1	1
OCCCO	0
CC(C)(C)OOC(C)(C)c1cccc(C(C)(C)OOC(C)(C)C)c1	0
CC(C)(C1CCC(O)CC1)C1CCC(O)CC1	0
COc1cc2c(Nc3ccc(Br)cc3F)ncnc2cc1OCC1CCN(C)CC1	0
CC1CCC(C(C)C)C(O)C1	1
O=C(O)c1ccccc1Nc1cccc(C(F)(F)F)c1	0
COc1ccc(NS(=O)(=O)c2ccc(N)cc2)nn1	0
C=CCSCC1Nc2cc(Cl)c(S(N)(=O)=O)cc2S(=O)(=O)N1	0
CO[Si](CC(C)C)(OC)OC	0
COC(=O)c1ccc(C(=O)OC)c(N/N=C\C(C)=O)C(=O)Nc2ccc(NC(=O)/C(=N/Nc3cc(C(=O)OC)ccc3C(=O)O)C(=O)N1	0
O=C(O)CCCCCCCCCCCC(=O)O	1
C=COCCOCCOCCOC=C	0
C=CCC1(C(C)CCC)C(=O)NC(=O)NC1=O	0
COc1cc(NS(=O)(=O)c2ccc(N)cc2)nc(OC)n1	0
CN(C(=O)CN(CCO)CC(=O)N(C)C(C)(C)Cc1ccccc1)C(C)(C)Cc1ccccc1	0
Nc1cccc(N)c1	1
O=C1NCCN1	1
C=CC(=O)OC	1
CCCCCOc1ccc(-c2ccc(-c3ccc(C(=O)NC4CC(O)C(O)NC(=O)C5C(O)C(C)CN5C(=O)C(C(C)O)NC(=O)C(C)C)CC1nn(CCCN2CCN(c3cccc(Cl)c3)CC2)c(=O)n1CCOc1ccccc1	0
NC(CCC(=O)O)C(=O)O	0
O=C(O)c1cc(F)c(Br)cc1Cl	0
COP(=S)(OC)Oc1cc(Cl)c(Cl)cc1Cl	0
CC(C)(OOC(C)(C)c1ccccc1)c1ccccc1	0
C=CCS(=O)(=O)O	0
CCCC=O	1
C=C(C)C(=O)OCCOP(=O)(O)OCC[N+](C)(C)C	0
Cc1ccc(S(=O)(=O)NC(=O)NN2CC3CCCC3C2)cc1	0
CCCCc1ccc(C(=O)O)nc1	0
CC(O)CN	1
SCC(S)CS	1
CCOC(=O)C1(c2ccccc2)CCN(C)CC1	0
O=C(Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1)C1CC1	0

Nc1nc(N)c2nc(-c3ccccc3)c(N)nc2n1	0
CC(C)NCC(O)COc1ccc(CCOCC2CC2)cc1	0
COC(=O)C=C(C)OP(=O)(OC)OC	0
Nc1ccc(Cl)cc1N	1
CC(=O)CCl	1
CCC1(C)OC(=O)N(C)C1=O	0
C[N+](C)(C)CCCCC[N+](C)(C)C	0
CC12CCC3C4CCC(=O)C=C4CCC3C1CCC2O	0
CNC(C)Cc1ccccc1	0
CCN(CC)CCN1C(=O)CN=C(c2ccccc2F)c2cc(Cl)ccc21	0
CC(CNC1CCCCC1)OC(=O)c1ccccc1	0
COc1ccc(C(=O)O)cc1	1
Nc1nc(=O)c2ncn(COC(CO)CO)c2[nH]1	1
O=C1CCC2(O)C3Cc4ccc(O)c5c4C2(CCN3CC2CC2)C1O5	0
O=C(C(F)(F)F)C(F)(F)F	1
NS(=O)(=O)c1cc(C2(O)NC(=O)c3ccccc32)ccc1Cl	0
Cc1cc(C(C)(C)C)cc(C)c1CC1=NCCN1	0
CCOC(=O)c1cncn1C(C)c1ccccc1	0
CC(=O)CCc1ccccc1	0
O=C(O)c1cn(C2CC2)c2cc(N3CCNCC3)c(F)cc2c1=O	0
CCCC(=O)OC1(C(=O)COC(=O)CC)CCC2C3CCC4=CC(=O)CCC4(C)C3C(O)CC21C	0
Cc1ccc(C(=O)OC(C)C)cc1N=Nc1c(O)c(C(=O)Nc2cc(Cl)c(NC(=O)c3cc4ccccc4c(N=Nc4cc(C(=O)OC(C)C)cc1cc(C)nc(Nc2ccccc2)n1	0
CC12CCC(CC1=O)C2(C)C	0
FC(F)(F)N1C(F)(F)C(F)(F)OC(F)(F)C1(F)F	0
O=c1oc(-c2ccc(-c3nc4ccccc4c(=O)o3)cc2)nc2ccccc12	0
CN(CCOc1ccc(CC2SC(=O)NC2=O)cc1)c1ccccc1	0
CC(C)C(N)C(=O)OCC(CO)OCn1cnc2c(=O)nc(N)[nH]c21	0
C1=CCCCCCCC1	1
S=P(Oc1ccccc1)(Oc1ccccc1)Oc1ccccc1	0
CO[SiH](CC1CCCCC1)OC	0
NC(=O)C1CC2(NC(=O)NC2=O)c2cc(F)ccc2O1	0
NC(Cc1cc(I)c(Oc2cc(I)c(O)c(I)c2)c(I)c1)C(=O)O	0
CCCCCOC(=O)c1ccccc1O	0
CN1CCN(CCCN2c3ccccc3Sc3ccc(Cl)cc32)CC1	0
CCOC(=O)CCCCC(=O)OCC	0
CC(C)(O)CCC(C)(C)O	1
CSCCC(NC(C)=O)C(=O)O	1
COP(=O)(CCC(=O)NCO)OC	0
CN(CCO)c1ccccc1	1
CCCCCCCCOC(=O)c1ccc(C(=O)OCCCCCCCC)c(C(=O)OCCCCCCCC)c1	0
COC(=O)c1ccc(C(=O)OC)c(N/N=C\C(C)=O)C(=O)Nc2ccc3[nH]c(=O)[nH]c3c2)c1	0
CCCN	1
CN(C)C(=S)SC(=S)N(C)C	1
COC(C)(C)CCOC(C)=O	0

O=C(O)c1ccccc1S	1
Cc1cc(O)cc(C)c1Cl	1
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCC(COC(=O)CCCCCCCCCCCCCCCC)OC(=O)CCCCCCCCCCCCCCCC	0
Clc1ccc(COC(Cn2ccnc2)c2ccc(Cl)cc2Cl)cc1	0
COc1cc(OC)nc(NC(=O)NS(=O)(=O)c2c(NC=O)cccc2C(=O)N(C)C)n1	1
CC(COc1ccccc1)N(CCCl)Cc1ccccc1	0
CCC1CN2CCc3cc(OC)c(OC)cc3C2CC1CC1NCCc2cc(OC)c(OC)cc21	0
Nc1ccc(S(=O)(=O)c2ccc(N)cc2)cc1	0
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCCCCCCCCCCCCCCCC(C)C	0
CCCCCCCCCCCCCCCCOP(=O)(O)OCC[N+](C)(C)C	0
O=C(Cl)OC(Cl)(Cl)Cl	1
C=C(C)C(=O)OCCC	1
OCC(CO)NC1CC(O)(CO)C(O)C(O)C1O	0
O=Nc1ccc(NO)cc1	1
BrC1c(NC2=NCCN2)ccc2ncnc12	1
CCCCC1Nc2cc(C(F)(F)F)c(S(N)(=O)=O)cc2S(=O)(=O)N1	0
Cc1cc(NC(=O)C2=C(O)c3ccccc3S(=O)(=O)N2C)no1	0
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCC=C(C)C=CC=C(C)C=CC1=C(C)CCCC1(C)C	0
COc1ccc(CC2c3cc(OC)c(OC)cc3CC[N+](C)(C)CCC(=O)OCCCCOC(=O)CC[N+](C)(C)CCc3cc(OC)c(OC)cc3	0
Cc1[nH]n(-c2ccccc2)c(=O)c1N=Nc1ccc(-c2ccc(/N=N/c3c(C)[nH]n(-c4ccccc4)c3=O)c(Cl)c2)cc1Cl	0
CC1(C)OC2OC3(COS(N)(=O)=O)OC(C)(C)OC3C2O1	0
O=C(O)Cc1ccc(-c2ccccc2)cc1	0
CCCC(=O)c1cc(O)c(O)cc1O	0
OC(CNCC(O)C1CCc2cc(F)ccc2O1)C1CCc2cc(F)ccc2O1	0
O=S1(=O)CCCC1	1
BrCCCCBr	1
Cc1cc(Cl)ccc1OC(C)C(=O)O	1
CCCCCCCCCCCCCCCCOS(=O)(=O)O	0
COc1ccc2ccccc(CN(C)C(=O)c2c1	0
C=C(C)C(=O)OCCOC(=O)CC(C)=O	0
CCCCCCCCCCCCCCCCOP(=O)(O)O	1
Cc1nnc(N)s1	0
CCCCCCCCCCCC(=O)Cl	1
CC1(C)CC(NCCCCCNC2CC(C)(C)NC(C)(C)C2)CC(C)(C)N1	1
CCCCC(C)(C)C(O)C=CC1C(O)CC(Cl)C1CC=CCCC(=O)O	0
CN(C)CCCN1c2ccccc2CCc2ccccc21	0
O=C=Nc1cccc2c(N=C=O)cccc12	1
CC1OC1P(=O)(O)O	0
CCC(C)(C)OOC(C)(C)CC	0
CC(C)(O)C(=O)c1ccc(Cc2ccc(C(=O)C(C)(C)O)cc2)cc1	0
CC(C)(C1CCCO1)C1CCCO1	1
CCOC(=O)C(F)(F)F	1
O=P(Oc1ccccc1)(Oc1ccccc1)Oc1cccc(OP(=O)(Oc2ccccc2)Oc2ccccc2)c1	0
CCCCC(C)(O)CC=CC1C(O)CC(=O)C1CCC=CCCC(=O)OC	0
CC	0

CC(O)C1C(=O)N2C(C(=O)O)=C(SC3CNC(C(=O)Nc4cccc(C(=O)O)c4)C3)C(C)C12	0
CNC	1
OCC(F)(F)F	1
COc1ccc(NS(=O)(=O)c2ccc(NC(c3c(C)n(C)n(-c4cccc4)c3=O)S(=O)(=O)O)cc2)nn1	0
COc1cc([N+](=O)[O-])ccc1N/N=C\C(C)=O)C(=O)Nc1cccc1OC	0
CC(=O)OC1CC2CCC1(C)C2(C)C	0
CC(C(=O)O)c1ccc2c(c1)Cc1cccn1O2	0
COc1cccc1OCC(O)CO	0
Oc1c(Cl)cc(Cl)c(Cl)c1Cl	1
CCCN(CCC)C(=O)Cc1c(-c2ccc(Cl)cc2)nc2ccc(Cl)cn12	0
Nc1c(S(=O)(=O)O)cc(Nc2cccc(S(=O)(=O)CCOS(=O)(=O)O)c2)c2c1C(=O)c1cccc1C2=O	0
NC(CC(=O)O)C(=O)O	1
CCCCOC(=O)CC(CC(=O)OCCCC)(OC(C)=O)C(=O)OCCCC	0
Nc1ccc(S(=O)(=O)O)cc1	1
O=C1CCC(=O)N1Br	1
CC(C)(OCc1ccc(-c2ccc(Cl)cc2)cc1)C(=O)O	0
OCCCl	0
CC(N)=S	1
CCCO	1
COc1ccc(CCNCC(O)COc2cccc(C)c2)cc1OC	0
O=c1c2ccc3c4ccc5c(=O)n(-c6ccc(N=Nc7cccc7)cc6)c(=O)c6ccc(c7ccc(c(=O)n1-c1ccc(N=Nc8cccc	0
CC(CCl)OP(=O)(OC(C)CCl)OC(C)CCl	0
CCCCCCCCCCCCCN(C)C	1
CN1CCCC(n2nc(Cc3ccc(Cl)cc3)c3cccc3c2=O)CC1	0
Cc1cc(C)c(N)c(C)c1	1
Cc1nc(=O)c2cc(CN(C)c3ccc(C(=O)NC(CCC(=O)O)C(=O)O)s3)ccc2[nH]1	0
CC(=O)/C(=N\Nc1cccc1C(=O)O)C(=O)Nc1ccc2[nH]c(=O)[nH]c2c1	0
CC1OC(OC2CCC3(C)C(CCC4C3CC(O)C3(C)C(C5=CC(=O)OC5)CCC43O)C2)CC(O)C1OC1CC(O)C(OC2(0
CCOC(=O)/C(=N\Nc1ccc([N+](=O)[O-])cc1)C(=O)c1nn2c(nc(=O)c3cccc32)s1	1
CCCCOP(=O)(OCCCC)Oc1cccc1	0
CC(CC1c2cccc2CCc2cccc21)CN(C)C	0
CCOc1cc(CC(=O)NC(CC(C)C)c2cccc2N2CCCC2)ccc1C(=O)O	0
COC(=O)C1=C(C)NC(C)=C(C(=O)OCCN(C)Cc2cccc2)C1c1cccc([N+](=O)[O-])c1	0
CNP(=O)(NC)Oc1cccc1	1
O=C(O)c1cc(C(=O)O)cc([N+](=O)[O-])c1	1
CCCCCCCCCCCCC(=O)OC	0
O=C(CCCCCC(=O)Nc1cccc1)NO	0
CC(C)C(=O)OOC(C)(C)C	0
CS(=O)(=O)NC(=O)CCCC=CCC1C(=O)CC(O)C1C=CC(O)COc1cccc1	0
COc1ccc(C(=O)N2CCN(c3ccc4c(c3)CCC(=O)N4)CC2)cc1OC	0
ClC(c1cccc1)c1cccc1	1
COCCCCC(=NOCCN)c1ccc(C(F)(F)F)cc1	0
O=C1CN(N=Cc2ccc([N+](=O)[O-])o2)C(=O)N1	0
CC12CCC3c4ccc(OC(=O)N(CCCl)CCCl)cc4CCC3C1CCC2O	0
CCOC(=O)CP(=O)(OCC)OCC	1

CCC1NC(=O)c2cc(S(N)(=O)=O)c(Cl)cc2N1	0
CCN(CC)C(C)=O	1
CC(=O)OCc1ccccc1	1
C=CC(N)=O	1
Nc1cc(S(=O)(=O)O)cc2cc(S(=O)(=O)O)cc(O)c12	1
CCCCOc1ccc(OCCCN2CCOCC2)cc1	0
Cc1onc(-c2c(F)cccc2Cl)c1C(=O)NC1C(=O)N2C1SC(C)(C)C2C(=O)O	0
CCCCC(C)OC(=O)COc1ccc(Cl)c2cccnc12	0
CO[Si](C)(CCCCl)OC	0
CCCCCCCCC=CCCCCCCCC(=O)N(CCO)CCO	0
Nc1ccccc1O	0
CC1=CC(=O)NS(=O)(=O)O1	0
CCOCCOCCOCC	0
C=CCN(CC=C)C(=O)CCl	1
NC(=O)OCC(O)COc1ccc(Cl)cc1	0
CC(=O)OCC=C(C)CCC=C(C)C	1
CC(C)(C(=O)c1cccnc1)c1cccnc1	0
CCCC(=O)Nc1c(l)cc(l)c(CC(CC)C(=O)O)c1l	0
COC(=O)CC(C(C)=O)C(=O)OC	0
CC=CC1=C(C(=O)O)N2C(=O)C(NC(=O)C(N)c3ccc(O)cc3)C2SC1	0
CC=CCl	1
O=C1C(CCC(O)c2ccc(F)cc2)C(c2ccc(O)cc2)N1c1ccc(F)cc1	0
COC(=O)Cl	1
CC[N+]1(C)C2CC(OC(=O)C(CO)c3ccccc3)CC1C1OC12	0
CC(=O)Nc1ccccc1Cl	1
CC(=O)OC1CC(OC2C(O)CC(OC3C(O)CC(OC4CCC5(C)C(CCC6C5CC(O)C5(C)C(C7=CC(=O)OC7)CCC65	0
c1ccc2c(c1)Sc1ccccc1N2CC1CN2CCC1CC2	0
CCC(=O)OCc1ccccc1	0
C=CCCCCCCCC(=O)OC	0
CCN(CC)C(C)CN1c2ccccc2Sc2ccccc21	0
Nc1nc(=O)n(C2CSC(CO)O2)cc1F	0
CC12CC(=O)C3C(CCC4CC(O)CCC43C)C1CCC2C(=O)CO	0
CON=C(C(=O)NC1C(=O)N2C(C(=O)O)=C(C[N+]3(C)CCCC3)CSC12)c1csc(N)n1	0
Cc1ccc(S(C)(=O)=O)cc1[N+](=O)[O-]	0
CC(=O)OCC(COc1ccccc1)OC(C)=O	1
CC(C)CCCCCOC(=O)CCCCC(=O)OCCCCCCCC(C)C	0
Cc1cc(C(F)(C(F)(F)F)C(F)(F)F)ccc1NC(=O)c1cccc(l)c1C(=O)NC(C)(C)CS(C)(=O)=O	1
CCC(O)OC(O)CC	0
O=C=Nc1ccc(Cc2ccc(N=C=O)cc2)cc1	0
c1ccc2c(c1)-c1ccccc1C2(c1ccc(OCC2CO2)cc1)c1ccc(OCC2CO2)cc1	0
ClC1=C(Cl)C2(Cl)C3CCC4C(CCC3C1(Cl)C2(Cl)Cl)C1(Cl)C(Cl)=C(Cl)C4(Cl)C1(Cl)Cl	0
O=C1CCCCCN1C(=O)NCCCCCNC(=O)N1CCCCC1=O	0
Cc1nc2n(c(=O)c1CCN1CCC(c3noc4cc(F)ccc34)CC1)CCCC2O	0
CC(C)(Oc1ccc(CCNC(=O)c2ccc(Cl)cc2)cc1)C(=O)O	0
FC(F)=C(F)OC(F)(F)F	0

CCC1(C2OC(C3OC(O)(CO)C(C)CC3C)CC2C)CCC(C2(C)CCC3(CC(O)C(C)C(C(C)C(OC)C(C)C(=O)O)O3)	1
O=C(O)CCC(CC(=O)O)(C(=O)O)P(=O)(O)O	1
COc1nc(NC(C)C)nc(NC(C)C)n1	1
CN(C(=O)CO)c1c(I)c(C(=O)NCC(O)CO)c(I)c(C(=O)NCC(O)CO)c1I	0
O=C1C=C/C(=N/Nc2cccn2)C(=O)C1	0
CCCCCCCCCCCCOCCOCC(CC(=O)O)S(=O)(=O)O	1
O=C(O)CNCP(=O)(O)O	1
Cc1cc(C=Cc2ccc3cc(N(C)C)ccc3[n+]2C)c(C)n1-c1cccc1	0
CCN(CC)c1ccc([C+])(c2ccc(N(CC)CC)cc2)c2cc(S(=O)(=O)O)ccc2S(=O)(=O)O)cc1	0
Clc1cccc(Cl)c1Cl	1
c1ccc2c(c1)Nc1cccc1S2	0
CC(Cc1cc2c(c(C(N)=O)c1)N(CCCO)CC2)NCCOc1cccc1OCC(F)(F)F	0
COP(=S)(OC)SCn1nnc2cccc2c1=O	1
CC1CCC2C(C)C(O)OC3OC4(C)CCC1C32OO4	0
CC(C)CCCCCCCCCCCCCO	0
CCc1cccc1CC	1
Cc1ccc(N=CN(C)C=Nc2ccc(C)cc2C)c(C)c1	0
CC(O)C1C(=O)N2C(C(=O)O)=C(SCCNC=N)CC12	0
COC(=O)C1=C(C)NC(C)=C(C(=O)OCCN2CCN(C(c3cccc3)c3cccc3)CC2)C1c1cccc([N+](=O)[O-])c1	0
C=CC(=O)OCC(CC)CCCC	1
NCCCCCN	1
CCCC1(CCc2cccc2)CC(=O)C(C(CC)c2cccc(NS(=O)(=O)c3ccc(C(F)(F)F)cn3)c2)C(=O)O1	0
COc1cc(Cc2cnc(N)nc2N)cc(OC)c1OC	0
CC(NCCCc1cccc(C(F)(F)F)c1)c1cccc2cccc12	0
CCCOCC(C)O	1
OCC1OC(OC2(CO)OC(CO)C(O)C2O)C(O)C(O)C1O	0
CC(C)(Cl)[N+](=O)[O-]	1
CC1OC(OC2C(CO)OC(OC3C(CO)OC(O)C(O)C3O)C(O)C2O)C(O)C(O)C1NC1C=C(CO)C(O)C(O)C1O	0
Cc1ccc(Nc2ccc(Nc3ccc(C)cc3)c3c2C(=O)c2cccc2C3=O)cc1	1
CCCCCCCCCOC(=O)CCCCC(=O)OCCCCCCCC	0
Nc1ccn(C2OC(CO)C(O)C2O)c(=O)n1	0
CC(C)CCCCCOC(=O)CC(C(=O)OCCCCCCCC(C)C)S(=O)(=O)O	1
CCCCC(O)C=C(C)C=CC=CC(=O)N1CCCC1=O	0
Cn1cnc2c1c(=O)[nH]c(=O)n2C	0
CCCCCCCC(=O)CCC1C(O)CC(O)C1CC=CCCCC(=O)O	1
CCCCCCCCCCCCCOC(=O)OOC(=O)OCCCCCCCCCCCCC	0
O=C(O)CCCc1cccc1	0
Cl(Cl)(Cl)C(Cl)(Cl)Cl	1
COC1C=COC2(C)Oc3c(C)c(O)c4c(O)c(cc(O)c4c3C2=O)NC(=O)C(C)=CC=CC(C)C(O)C(C)C(O)C(C)C(O)	0
CCC(C)CCC(C)(O)CC	1
CC(O)CN(C)C	1
OCCS	1
CCCCC(CC)COC(=O)c1ccc(N(C)C)cc1	0
CC(C)CCCCCCCOP(OCCCCCCCC(C)C)OCCCCCCCC(C)C	0
CCSSCCC	0

[illegible]

COC(=O)CCC(=O)OC	1
N#CCCCC#N	1
CC(C)(C)C(=O)CCC1C(=O)N(c2ccccc2)N(c2ccccc2)C1=O	0
CC(C)COCC(CN(Cc1ccccc1)c1ccccc1)N1CCCC1	0
CC(=O)CCCC(C)CCCC(C)CCCC(C)C	0
CCc1cccc(C)c1	0
O=[N+][O-]c1cncn1CCN1CCOCC1	0
CC(C)CN(CC(O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)OC1CCOC1)S(=O)(=O)c1ccc(N)cc1	0
C=COCCOCCOC=C	0
CC(C)NCC(O)COc1cccc2ccccc12	0
CC(C)C(C(=O)OC(C#N)c1cccc(Oc2ccccc2)c1)c1ccc(Cl)cc1	1
Oc1ccc(O)cc1	1
Cc1ccccc1	0
C=CC(=O)OC1C=CC2C3CCC(C3)C12	0
C1COCCO1	1
COC1C(O)C(C)OC(OC2CCC3(C=O)C(CCC4C3CCC3(C)C(C5=CC(=O)OC5)CCC43O)C2)C1O	0
CCOP(=O)(Cl)Cl	1
CCCC(=O)Nc1ccc(OCC(O)CNC(C)C)c(C(C)=O)c1	0
Cn1nnnc1SCC1=C(C(=O)O)N2C(=O)C(NC(=O)C(O)c3ccccc3)C2SC1	0
O=C1C2CC=CCC2C(=O)N1SC(Cl)(Cl)Cl	1
O=S(=O)(O)OOS(=O)(=O)O	1
O=c1n(CC2CO2)c(=O)n(CC2CO2)c(=O)n1CC1CO1	1
C1CN1c1nc(N2CC2)nc(N2CC2)n1	0
CN1CCCN(C)C1=O	1
CCCC(O)C(CC)CO	1
CCCCCCCCCCCCCCCCOS(=O)(=O)O	0
CCOC(OCC)OCC	0
CCCN(CCC)c1c([N+](=O)[O-])cc(S(N)(=O)=O)cc1[N+](=O)[O-]	0
CN(C)CCCN1c2ccccc2Sc2ccc(Cl)cc21	0
ClCc1ccc(Cl)cc1	1
CCOCCOCCOC(=O)C1CCC(C(=O)OCCOCCOCC)CC1	0
COC(C)OC	1
Cc1c2oc3c(C)ccc(C(=O)NC4C(=O)NC(C(C)C)C(=O)N5CCCC5C(=O)N(C)CC(=O)N(C)C(C(C)C)C(=O)OC	0
Cc1c(C(C)C)c(=O)n(-c2ccccc2)n1C	0
CCCCN(CCCC)C(=O)OCC[N+](C)(C)CC	0
CCN(CC)c1ccc(C=C(C#N)C(=O)OCCC[N+](C)(C)CCOC(=O)C(C#N)=Cc2ccc(N(CC)CC)cc2)cc1	0
CC(C)CCCC(C)C1CCC2C3CC=C4CC(OS(=O)(=O)O)CCC4(C)C3CCC12C	0
CN1CCN(C(=O)Oc2c3[nH]ccnc-3c(=O)n2-c2ccc(Cl)cn2)CC1	0
CC(C)(O)C(=O)c1ccccc1	0
C=Cc1ccc(C)cc1	1
O=C(OCCO)c1ccc(C(=O)OCCO)cc1	0
O=C1NC(=O)c2ccccc21	0
CNC(=O)c1cc(Oc2ccc(NC(=O)Nc3ccc(Cl)c(C(F)(F)F)c3)cc2)ccn1	1
C#CC1(O)CCC2C3CCc4cc(OC5CCCC5)ccc4C3CCC21C	0
CCC12CCCN3CCc4c(n(c5ccccc5)C(O)(C(=O)OC)C1)C32	0

CC(COc1ccccc1)NC(C)C(O)c1ccc(O)cc1	0
CCCC#N	1
COc1ccccc1OC(=O)CNC(=O)Cc1ccc(C(=O)c2ccc(C)cc2)n1C	0
CCCCC(CC)CN1C(=O)C2C3C=CC(C3)C2C1=O	1
COCCOC	0
CC1(C(=O)O)CCC2(C)CCC3(C)C(=CC(=O)C4C5(C)CCC(O)C(C)(C)C5CCC43C)C2C1	1
CC(C)(C)C	1
CC(C)CC(C)(C)C	0
N#CCCCI	1
c1ccc(N=Nc2ccccc2)cc1	1
CCC(=O)N(c1ccccc1)C1(C(=O)OC)CCN(CCC(=O)OC)CC1	0
O=C(O)COCCN1CCN(C(c2ccccc2)c2ccc(Cl)cc2)CC1	0
CCOCCP(CCOCC)CCP(CCOCC)CCOCC	0
N#CCNC(=O)c1cnccc1C(F)(F)F	0
ClCCCCBr	0
CCC1OC(=O)C(C)C(OC2CC(C)(OC)C(O)C(C)O2)C(C)C(OC2OC(C)CC(N(C)C)C2O)C(C)(O)CC(C)C(=NO	0
O=C(O)CCCCCCCCC(=O)O	1
CC(C)=O	1
CC(=O)CC(=O)Nc1ccc(Cl)cc1	0
C=CCOCC(CC)(CO)COCC=C	0
COP(N)(=O)SC	1
CCC(C)C(=O)OC1CC(O)C=C2C=CC(C)C(CCC(O)CC(O)CC(=O)O)C21	0
Cc1cc(C)c(O)c(C(C)(C)C)c1	1
O=S(=O)(O)CCO	0
COC(=O)CCCCCCCCC(=O)OC	1
CC(=O)OCCN1CCN(CCCN2c3ccccc3Sc3ccc(Cl)cc32)CC1	0
CC(=O)OC1CCCCC1	1
C=CC=C	0
COc1cc2c(cc1OC)C(=O)C(CC1CCN(Cc3ccccc3)CC1)C2	0
CC(=O)C1(O)CCC2C3C=C(C)C4=CC(=O)CCC4(C)C3CCC21C	0
Cn1c(CCCC(=O)O)nc2cc(N(CCCl)CCCl)ccc21	0
CCC(Cl)[N+](=O)[O-]	1
CCCCCCCCCCCCSCCO	0
Cc1ccc(C(C)C)c(O)c1	1
CCCCCCCCC=CCCCCCCCC(=O)OC	0
CC(C=O)=Cc1ccccc1	0
CCCCC(Cc1cc(C(C)(C)C)c(O)c(C(C)(C)C)c1)(C(=O)OC1CC(C)(C)N(C)C(C)(C)C1)C(=O)OC1CC(C)(C)N(C	0
CC(O)C(=O)N(C)C	0
CC1Cc2ccccc2N1NC(=O)c1ccc(Cl)c(S(N)(=O)=O)c1	0
O=C(O)CCC(=O)O	1
Nc1cc(Cl)nc(C(=O)O)c1Cl	1
CC(=O)O[Si](C)(OC(C)=O)OC(C)=O	0
FC(F)Cl	0
CN(C)CCOc1ccccc1Cc1ccccc1	0
C#CCN(C)C(C)Cc1ccccc1	0

CCCCC(=O)O	1
CCCCCCCCCCCC[N+](C)(C)CCCS(=O)(=O)O	1
CCOC(=O)c1ccc(N)cc1	0
O=C(O)c1ccc(-n2nc(-c3cccc3O)nc2-c2cccc2O)cc1	0
CC1CC(CC2CCC(N)C(C)C2)CCC1N	1
Cc1cccc1C	1
NC(=O)NCO	1
O=C(O)c1ccc(O)c(O)c1	1
Sc1cccc1	1
Cc1c(C)c2c(c(C)c1O)CCC(C)(CCCC(C)CCCC(C)CCCC(C)C)O2	0
CC(C)NO	0
CC(C)(C)C(=O)CC#N	0
CCCCCCCCCCCCCOC(=O)c1cccc1O	0
CCOC(=O)CC(O)CC(O)C=CC1=C(c2ccc(F)cc2)c2cccc2OC12CCCC2	0
ClCCOCCOCCCl	1
Nc1ccc(-c2cccc2N=NS(=O)(=O)O)cc1	0
COc1cccc1NC(=O)/C(=N/Nc1ccc(-c2ccc(N/N=C(\C(C)=O)C(=O)Nc3ccc(C)cc3C)c(Cl)c2)cc1Cl)C(C)	0
CC[N+](C)(C)c1cccc(O)c1	0
CC(C)(COC(=O)c1cccc1)COC(=O)c1cccc1	0
Cc1cc(Oc2cc(C)cc(S(=O)(=O)O)c2)cc(S(=O)(=O)O)c1	1
CC(=O)OOC(=O)c1cccc1	1
O=C(O)CCSSCCC(=O)O	1
COc1ccc2c(c1)c(CC(=O)NC(C=O)C(O)C(O)CO)c(C)n2C(=O)c1ccc(Cl)cc1	0
CC(C)OS(C)(=O)=O	1
C=CCC1(C(C)C#CCC)C(=O)NC(=O)N(C)C1=O	0
CC=CCCCCCCCCCC	0
Nc1cccc2c1CN(C1CCC(=O)NC1=O)C2=O	0
C=C(C)C(=O)OCCCCCCCCCCC	1
c1cc(OCC2CO2)cc(OCC2CO2)c1	1
CCC(c1cccc(O)c1)C(C)CN(C)C	0
COP(=O)(OC)OC(Br)C(Cl)(Cl)Br	1
O=C(O)C(F)(F)F	0
CCOC(=O)NC(C)(C)Cc1ccc(Cl)cc1	0
CCCCC(N)=O	1
CCC1=C(C)c2cc3[nH]c(cc4[nH]c(cc5nc(cc1n2)C(C)=C5C(C)O)c(C)c4CCC(=O)O)c(CCC(=O)O)c3C	0
OCCCCO	1
CCOc1cccc1OCC1CNCCO1	0
CC[N+](C)(CC)CCOC(=O)C(O)(c1cccs1)C1CCCC1	0
CN1CCN(C)C1=O	1
CCCCC(CC)COC(=O)CC(CC(=O)OCC(CC)CCCC)(OC(C)=O)C(=O)OCC(CC)CCCC	0
Nc1ccc(Cl)c(N)c1	1
CC=CCCCCCC	0
C=C=O	1
CCCC(=O)OC1(C(=O)CO)CCC2C3CCC4=CC(=O)CCC4(C)C3C(O)CC21C	0
CCOc1ccc(NC(C)=O)cc1	0

CCCCOCCOP(=O)(OCCOCCCC)OCCOCCCC	1
CC1(C)OC2CC3C4CC(F)C5=CC(=O)CCC5(C)C4C(O)CC3(C)C2(C(=O)CO)O1	0
NNc1cccc1	1
CS(=O)(=O)c1ccc(C(O)C(CO)NC(=O)C(Cl)Cl)cc1	0
CCN(CC)C(=O)C(C)Oc1cccc2cccc12	1
Cc1cc(CC(=O)O)n(C)c1C(=O)c1ccc(Cl)cc1	0
Cc1[nH]c(=O)c(C#N)cc1-c1ccc2nccn2c1	0
CC1CC(OC(=O)C2CCC(=O)N2)CC(C)(C)C1	0
CC1CN1	1
Oc1cccc2c(O)cccc12	1
Cc1ncc(CSSCc2cnc(C)c(O)c2CO)c(CO)c1O	0
CCN(CC)C(=S)SSC(=S)N(CC)CC	0
O=C=Nc1ccc(OP(=S)(Oc2ccc(N=C=O)cc2)Oc2ccc(N=C=O)cc2)cc1	0
ClC(Cl)(Cl)Cl	1
Cc1ccsc1C(=CCCN1CCCC(C(=O)O)C1)c1sccc1C	0
C=CC(=O)OCC[N+](C)(C)C	1
OB(O)O	0
CS(=O)(=O)Nc1cc2c(cc1Oc1ccc(F)cc1F)C(=O)CC2	0
CN1C(C(=O)Nc2ccccn2)=C(O)c2sc(Cl)cc2S1(=O)=O	0
CC1=C(C)C(=O)OC1=O	1
CCCCOCCC	1
COCCOCCOCCOCCOC	0
CC(C)(C)C(=O)Cl	1
CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC(C)C	0
O=[N+](O-)[c1cc(C(F)(F)F)c(Cl)c([N+](=O)[O-])c1Nc1ncc(C(F)(F)F)cc1Cl	1
O=c1[nH]c(=O)n(C2CC(O)C(CO)O2)cc1F	0
CCC(=O)OC1CC(=O)OC(C)CC=CC=CC(O)C(C)CC(CC=O)C(OC2OC(C)C(OC3CC(C)(O)C(OC(=O)CC)C(C)	0
CCO[Si](CCCCl)(OCC)OCC	0
O=C1CCC(=O)O1	1
CC(=O)Nc1nnc(S(N)(=O)=O)s1	1
CC1=C(C(=O)O)N2C(=O)C(NC(=O)C(N)C3=CCC=CC3)C2SC1	0
O=Cc1c(Cl)ccc(Cl)c1Cl	1
c1ccc2n[nH]nc2c1	1
CCCCCCCCOS(=O)(=O)O	0
CN(C)CCO	1
CCc1cc(C(N)=S)ccn1	0
CN(C)CCN(Cc1cccc1)c1ccccn1	0
COCCc1ccc(OCC(O)CNC(C)C)cc1	0
CCC(C)CCCC(C)CCCC(C)C	0
OCCN1CCOCC1	0
CC(C)(Oc1ccc(Cl)cc1)C(=O)OCCCOCC(=O)c1cccnc1	0
CCCCNc1ccc(C(=O)OCCN(C)C)cc1	0
O=C(O)C1=NN(c2ccc(S(=O)(=O)O)cc2)C(=O)/C1=N\Nc1ccc(S(=O)(=O)O)cc1	0
C=CCN1CCC23CCCCC2C1Cc1ccc(O)cc13	0
N=C(N=C(N)N)NCCc1cccc1	0

CCCC1nc2c(C)cc(-c3nc4ccccc4n3C)cc2n1Cc1ccc(-c2ccccc2C(=O)O)cc1	0
c1ccncc1	1
CCCCC(CC)COC(=O)C(C#N)=C(c1ccccc1)c1ccccc1	0
CN(c1nc(=O)cc[nH]1)C1CCN(c2nc3ccccc3n2Cc2ccc(F)cc2)CC1	0
CCCCC1C(=O)NN(c2ccccc2)C1=O	0
C=CCN1CCC23c4c5ccc(O)c4OC2C(O)C=CC3C1C5	0
CC(C)N(C(=O)CCl)c1ccccc1	1
Nc1ccc(S(=O)(=O)Nc2nccs2)cc1	0
Nc1ncnc2c1ncn2C1OC(COP(=O)(O)O)C(O)C1O	0
CCN(CC)CCOC(=O)C(c1ccccc1)c1ccccc1	0
NCCCCC(NC(=O)C1CCCN1C(=O)C1SSCC(NC(=O)CNC(=O)CNC(=O)CN)C(=O)NC(Cc2ccc(O)cc2)C(=O)C	0
C=C1CCC2CC1C2(C)C	0
CCCCC(CC)C(=O)OOC(C)(C)C	0
CCN(C(C)=O)c1cccc(-c2ccnc3c(C#N)cnn23)c1	0
O=C1C=CC(=O)N1c1ccc(Cc2ccc(N3C(=O)C=CC3=O)cc2)cc1	0
CC(C)CCCCCCCCCOP(OCCCCCCCCCCCC(C)C)OCCCCCCCCCCCC(C)C	0
O=C(Nc1c(Cl)cncc1Cl)c1ccc(OC(F)F)c(OCC2CC2)c1	0
CCOC(=O)c1ccccc1C(=O)OCC	0
O=C1OC(OC(=O)c2cccn2Nc2cccc(C(F)F)c2)c2ccccc21	0
CCCCCCCCCCCCCCCC[N+](C)(C)C	1
CSc1c(Cl)c(Cl)c(Cl)c(Cl)c1Cl	0
OCC1OC(OCC=Cc2ccccc2)C(O)C(O)C1O	0
COc1cc(C2c3cc4c(cc3C(OC3OC5COC(C)OC5C(O)C3O)C3COC(=O)C23)OCO4)cc(OC)c1O	0
CC(CSC(=O)c1ccccc1)C(=O)N1CC(Sc2ccccc2)CC1C(=O)O	0
O=C(O)CCC(=O)c1ccc(-c2ccccc2)cc1	0
CCCOC(C)=O	1
Cn1c(=O)c2[nH]cnc2n(C)c1=O	0
CCOS(=O)(=O)c1ccc(C)cc1	1
C=CC1=C(C(=O)O)N2C(=O)C(NC(=O)C(N=O)c3csc(N)n3)C2SC1	0
CC(CCc1ccc(O)cc1)NCCc1ccc(O)c(O)c1	0
CC(c1ccccc1)C1Nc2cc(Cl)c(S(N)(=O)=O)cc2S(=O)(=O)N1	0
CC(C)(C)c1ccc(O)c(O)c1	1
Nc1c(OCCO)nn2ccccc12	0
COc1ccc2c3c1OC1C(O)CCC4C(C2)N(C)CCC341	0
C=CCOC(=O)C(=C)C	1
c1ccc2c(CC3=NCCN3)cccc2c1	0
O=C(CCBBr)N1CCN(C(=O)CCBr)CC1	0
CC(=O)C=Cc1ccccc1	0
CC(O)CC(C)(C)O	1
O=C(O)O	0
O=C(O)Cc1nn(Cc2nc3cc(C(F)F)F)ccc3s2)c(=O)c2ccccc12	0
Clc1cnn(CCCCN2CCN(c3ncccn3)CC2)c1	0
CC1(C)CC(O)CC(C)(C)N1O	1
OCCOCCOc1ccccc1	1
C=CCC1(C(C)CC)C(=O)NC(=O)NC1=O	0

CCCCOC(=O)CCCCC(=O)OCCCC	0
CC(C)(C)CCCCCCCCCN	0
COC(OC)OC	1
O=S(=O)(O)CC(S)CS	0
CC(=O)OC(C)(C)C1CC=C(C)CC1	0
CCN(CC)C(=O)c1cccc(C)c1	1
C=C(C)C(=O)OCC(CC)(COC(=O)C(=C)C)COC(=O)C(=C)C	0
CCC(C)(C)O	1
C=CC(=O)OCCCC(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F	0
CNCCCN1c2cccc2CCc2cccc21	0
CCC(=C(CC)c1ccc(O)cc1)c1ccc(O)cc1	0
C[N+](C)(C)CC(=O)O	0
CCNCC	1
CC1CC2C3CCC4=CC(=O)C=CC4(C)C3=CCC2(C)C1C(=O)CN1CCN(c2cc(N3CCCC3)nc(N3CCCC3)n2)CC	0
CCCCCCCCCCCCCCCCCOC(=O)CCCCCCCC=CCC(O)CCCCC	0
CC(O)CO	0
C=C1C(=O)NC(C)C(=O)NC(CC(C)C)C(=O)NC(C(=O)O)C(C)C(=O)NC(CCCNC(=N)N)C(=O)NC(C=CC(C)=	1
CC(=O)OCCOC(C)C	0
CCCC=CCCC	0
CC(=O)NCCCS(=O)(=O)O	0
CCOC(=O)CC(=O)c1cc(F)c(Cl)nc1Cl	1
OCC1CCC(CO)CC1	1
OC(CCl)CCl	1
CC(=O)CCC1C(=O)N(c2cccc2)N(c2cccc2)C1=O	0
CC(=O)Nc1cccc(Cl)c1	1
ClC=CCCl	1
CCC(C)(CCC(C)C)C(=O)O	1
N#CCCCCCCC#N	0
CCCCCCCC(=O)NCC(=O)O	1
CC1=CCC(C(C)CC2CCCC2=O)CC1	0
CCCN(C(=O)NS(=O)(=O)c1ccc(Cl)cc1	0
O=C(O)P(=O)(O)O	0
Cc1cc(=O)n(-c2cccc2)n1C	1
CC(C)(N)Cc1ccc(Cl)cc1	0
O=C(OCCCCOCCOC(=O)c1cccc1)c1cccc1	0
O=C(Oc1cccc1C(=O)O)c1cccc1O	0
O=C1CCCCCN1C(=O)c1cccc(C(=O)N2CCCCC2=O)c1	0
CC=CCCCCCCCCCCC	0
C=C(C)C(=O)OC	1
C/N=C(/C[N+](=O)[O-])NCCSCc1ccc(CN(C)C)o1	0
O=C1CN2Cc3c(ccc(Cl)c3Cl)N=C2N1	0
C=CC(=O)OCCOCCOCCOCCOC(=O)C=C	1
c1ccc(CNCCNCc2cccc2)cc1	0
CN(C)C(N)=O	1
CC(C)O	1

Cc1ccc(S(=O)(=O)NC(=O)NC2C3CCC(C)(C2O)C3(C)C)cc1	0
CCCCOC(=O)CC(O)(CC(=O)OCCCC)C(=O)OCCCC	1
Clc1ccc(Cl)c(Cl)c1	1
CN1CCCN=C1COC(=O)C(O)(c1ccccc1)C1CCCCC1	0
O=P(OCCCl)(OCCCl)OCCCl	0
CCc1c2c(nc3ccc(OC(=O)N4CCC(N5CCCCC5)CC4)cc13)-c1cc3c(c(=O)n1C2)COC(=O)C3(O)CC	0
CN1CCc2c(c3ccccc3n2Cc2ccccc2)C1	0
OOC1(OOC2(O)CCCCC2)CCCCC1	1
CCCC(C)(COC(N)=O)COC(=O)NC(C)C	0
CCN(CC)C(C)C(=O)c1ccccc1	0
Cc1ccc(C(=O)O)c(O)c1	1
O=C=Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1	1
Cc1cccc(CN2CCN(C(c3ccccc3)c3ccc(Cl)cc3)CC2)c1	0
CCOC(=O)C(C)Oc1ccc(Oc2nc3ccc(Cl)cc3o2)cc1	1
CCOC(=O)CN(CC(=O)OCC)C(=O)Oc1c(C#N)c(C(=O)OC2C(C(C)(C)C)CC(C)CC2C(C)(C)C)c2nc(-c3ccc(c	0
CCOC(=O)CC(O)(CC(=O)OCC)C(=O)OCC	1
CCC1(c2ccccc2)C(=O)NC(=O)N(C)C1=O	0
O=Cc1cccc(Oc2ccccc2)c1	0
C[N+](=O)[O-]	1
CCCCCCCC1CCC(=O)O1	0
CC1CC(OC(=O)c2ccccc2O)CC(C)(C)C1	0
CC1CN(CC(Cc2ccccc2)C(=O)NCC(=O)O)CCC1(C)c1cccc(O)c1	0
CC1CC2CC(C)C(OCc3ccc(C(=O)O)cc3)OC34OC(C)(O3)C(O)C(C1)C24	0
CCCCCCCC(=O)Oc1c(Br)cc(C#N)cc1Br	0
O=P(Cl)(Cl)Cl	1
CC1(C)OC2CC3C4CCC5=CC(=O)C=CC5(C)C4C(O)CC3(C)C2(C(=O)CO)O1	0
Cc1nnc2n1-c1sc(Br)cc1C(c1ccccc1Cl)=NC2	0
O=C1OC2(c3cc(Br)c(O)c(Br)c3Oc3c2cc(Br)c(O)c3Br)c2c(Cl)c(Cl)c(Cl)c(Cl)c21	1
CC(C)(C)NC(=O)C1CN(Cc2ccnc2)CCN1CC(O)CC(Cc1ccccc1)C(=O)NC1c2ccccc2CC1O	0
NS(=O)(=O)c1cc(Cl)c(Cl)c(S(N)(=O)=O)c1	0
CC(C)c1cccc(C(C)CC=O)c1	0
CCNc1nc(NC(C)C)nc(SC)n1	0
CCCC(F)(F)C1(O)CCC2C(CC(=O)C2CCCCCCC(=O)O)O1	0
CC(C)OP(C)(=O)OC(C)C	1
O=C(OCCN1CCOCC1)c1cccnc1Nc1cccc(C(F)(F)F)c1	0
NC(=O)N1c2ccccc2CC(=O)c2ccccc21	0
CCCC1CC(C(=O)NC(C(C)Cl)C2OC(SC)C(O)C(O)C2O)N(C)C1	0
COc1cc(NC(=O)/C(=N/Nc2ccc(-c3ccc(N/N=C\N(C)=O)C(=O)Nc4cc(OC)c(Cl)cc4OC)c(Cl)c3)cc2Cl)C(0
CC1OC(OC2C(C)OC(OC3C(C)OC(OC4CCC5(C)C(CCC6C5CCC5(C)C(C7=CC(=O)OC7)C(OC=O)CC65O	0
CN(C)C1C(=O)C(C(N)=O)C(=O)C2(O)C(O)=C3C(=O)c4c(O)cccc4C(C)(O)C3CC12	0
CC1CCOC1	1
COC1C(OC(N)=O)C(O)C(Oc2ccc3c(O)c(NC(=O)c4ccc(O)c(CC=C(C)C)c4)c(=O)oc3c2C)OC1(C)C	0
CN1C(CSCC(F)(F)F)Nc2cc(Cl)c(S(N)(=O)=O)cc2S1(=O)=O	0
NS(=O)(=O)Cc1noc2ccccc12	0
CCOC(=O)CC(C)=O	1

C=CC[N+]1(C2CC3C4CCC5CC(O)C(N6CCOCC6)CC5(C)C4CCC3(C)C2OC(C)=O)CCCC1	0
CCC=C(C)C1(CC)C(=O)NC(=O)NC1=O	0
CC1(C)SC2C(NC(=O)C(C(=O)Oc3ccc4c(c3)CCC4)c3ccccc3)C(=O)N2C1C(=O)O	0
CC1(C)C(C=C(Br)Br)C1C(=O)OC(C#N)c1cccc(Oc2cccc2)c1	1
CC(C)C1CCCCC1	0
CCC[Si](OC)(OC)OC	0
COC1CC(OC2C(C)C(=O)OC(C)C(C)C(O)C(C)C(=O)C3(CO3)CC(C)C(OC3OC(C)CC(N(C)C)C3O)C2C)OC(Nc1cc(C(=O)O)ccc1O	0
CO[Si](CCCNCCN)(OC)OC	1
Nc1ccc(N=Nc2cccc2)cc1	0
CCC(C)n1ncn(-c2ccc(N3CCN(c4ccc(OCC5COC(Cn6cn6)cc4)cc6Cl)O5)cc4)CC3)cc2)c1=O	0
CCCCCCCCBr	0
CC(C)C1(C)NC(c2nc3ccccc3cc2C(=O)O)=NC1=O	0
CN(C)CCC(O)(c1ccccc1)c1cccc1Cl	0
CCOC(=O)C(CCc1ccccc1)NC(C)C(=O)N1CC2(CC1C(=O)O)SCCS2	0
Cc1ccc(C(=CCN2CCCC2)c2cccn2)cc1	0
CC(=O)n1ccnc1	1
CC(CCOCC(=O)CC(C)CC(C)(C)C)CC(C)(C)C	0
NS(=O)(=O)c1cc2c(cc1C(F)(F)F)NC(Cc1ccccc1)NS2(=O)=O	0
CC(O)COC(C)CO	1
CC(CCc1ccccc1)NCC(O)c1ccc(O)c(C(N)=O)c1	0
CNC(C)=O	0
O=C(c1ccc(F)cc1)C1CCN(CCn2c(=O)[nH]c3ccccc3c2=O)CC1	0
CC(C)C(=O)Cl	1
O=[N+]([O-])c1ccc(N(CCO)CCO)c(O)c1	0
O=C(O)Cn1cc(Cc2nc3c(F)c(F)cc(F)c3s2)c2ccccc21	0
CC1CNc2c(cccc2S(=O)(=O)NC(CCCNC(=N)N)C(=O)N2CCC(C)CC2C(=O)O)C1	0
O=C(O)CN(CC(=O)O)CC(=O)O	0
CCCCCCCCCCCCCCCC[n+]1ccccc1	1
CC(N)C12CC3CC(CC(C3)C1)C2	0
O=C(O)CCCC=CCC1C(O)CC(O)C1C=CC(O)COc1cccc(Cl)c1	0
Nc1cc(-c2ccncc2)c[nH]c1=O	0
CC(C)NCC(O)COc1ccc(CC(N)=O)cc1	0
NC1CONC1=O	0
CC12CCC(=O)C=C1CCC1C3CCC(O)(C(=O)CO)C3(C)CC(O)C12F	0
CC=Cc1ccc(OC)cc1	0
O=C(Cl)CCl	1
C=CC(=O)OCc1c(Br)c(Br)c(Br)c(Br)c1Br	1
CC(=O)CC(C)C	1
Cc1ccc(C(C)C)cc1	0
CC(OC(=O)C(Oc1ccc(Cl)cc1)Oc1ccc(Cl)cc1)C1CCCN1	0
O=C(O)C1OC(O)C(O)C(O)C1O	0
CCC1(CC)C(=O)NCC(C)C1=O	0
Nc1c2ccccc2nc2ccccc12	0
COc1ccccc1N	1

O=C(C1CCCCC1)N1CC(=O)N2CCc3cccc3C2C1	0
CN(C(=O)CC(=O)N(C)c1c(I)c(C(=O)NC(CO)C(O)CO)c(I)c(C(=O)NC(CO)C(O)CO)c1I)c1c(I)c(C(=O)NC(CO)C(O)CO)CC(OC2C(O)CC(OC3C(O)CC(OC4CCC5(C)C(CCC6C5CCC5(C)C(C7=CC(=O)OC7)CCC65O)C4)OC3CC(C)(C)CC(C)(C)c1ccc(OCCOCC[N+](C)(C)C2cccc2)cc1	0
NC(=O)CCN(CCO)c1nc(Nc2cccc2)nc(Nc2ccc(C=Cc3ccc(Nc4nc(Nc5cccc5)nc(N(CCO)CCC(N)=O)n4	0
CC(COc1ccc(C(C)(C)cc1)OS(=O)OCCCI	1
COc1cc2c(cc1Cc1cccc(Cl)c1F)c(=O)c(C(=O)O)cn2C(CO)C(C)C	0
O=C1CN=C(c2cccc2)c2cc([N+](=O)[O-])ccc2N1	0
O=S(O)CO	0
C=CCN=C=S	1
O=C(O)c1cc2cccc2c(N=Nc2ccc3cccc3c2S(=O)(=O)O)c1O	1
O=C1c2cccc2-c2cccc3cccc1c23	1
CNS(=O)(=O)c1cc(OC)c(N=Nc2c(O)c(C(=O)Nc3ccc4[nH]c(=O)[nH]c4c3)cc3cccc23)cc1C	0
N#CNC(=N)NCCCCCNC(=N)NC#N	1
CC1(C)SC2C(N3C(=O)C(c4cccc4)NC3(C)C)C(=O)N2C1C(=O)O	0
OCCN1CC(O)C(O)C(O)C1CO	0
N#CN	1
Nc1ccc(-n2[nH]c(N3CCCC3)cc2=O)cc1	0
COc1ccc(C2CC(=O)c3c(O)cc(OC4OC(COC5OC(C)C(O)C(O)C5O)C(O)C(O)C4O)cc3O2)cc1O	0
CCC1(c2ccc(N)cc2)CCC(=O)NC1=O	0
COC(=O)c1cc(N/N=C\C(C)=O)C(=O)Nc2ccc3[nH]c(=O)[nH]c3c2)cc(C(=O)OC)c1	0
CCCCCCCCCCCCO	0
O=C1c2cccc2C(=O)C1c1cccc1	0
C=CCCC=C	1
OCCOc1ccc(OCCO)cc1	1
CCCCCCCCCCCCCOC(=O)c1cccc1	0
C[Si](C)(C)N[Si](C)(C)C	0
C=CN1CCCCC1=O	1
C=C(C)CC(C)(C)C	0
CN(C)C(=N)N	1
Nc1ccc(-c2ccc(N)c(Cl)c2)cc1Cl	1
Cc1cccc(C)c1OCC(=O)NC(Cc1cccc1)C(O)CC(Cc1cccc1)NC(=O)C(C(C)C)N1CCCN1=O	0
CCOP(=S)(OCC)Oc1ccc2c(C)c(Cl)c(=O)oc2c1	1
O=c1c2cccc2[nH]c2c(Cl)c3c(=O)c4cccc4[nH]c3c(Cl)c12	0
O=[N+](=[O-])c1ccc(F)c([N+](=O)[O-])c1	1
CCC(C)NC(C)CC	1
CCOP(=S)(OCC)SC(CCl)N1C(=O)c2cccc2C1=O	0
CCCCCCCCCCCCCO	1
CCCCCOc1ccc(-c2cc(-c3ccc(C(=O)NC4CC(O)C(O)NC(=O)C5C(O)C(C)CN5C(=O)C(C(O)CC(N)=O)NC(=	0
Nc1ccncc1N	0
C=CC(=O)OCCCS(=O)(=O)O	0
CCN(CC)CCNC(=O)c1cc(Cl)c(N)cc1OC	0
Cc1scc2c1N(C(=O)CN1CCN(C)CC1)c1cccc1NC2=O	0
ClCC(Cl)Cl	1
OC(CCN1CCCC1)(c1cccc1)C1CCCC1	0

CCCCCCCCCCCCCCCCCOC(=O)CCc1cc(C(C)(C)C)c(O)c(C(C)(C)C)c1	0
N#CS	1
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	0
COC(=O)CCC(=O)CN	0
CCOCCN(C(=O)CCl)c1c(C)cccc1CC	1
CCCC(C)=O	1
CCSC	1
C=CC(=O)OCCCCCCCCCCC	1
O=S(=O)(O)c1cc(S(=O)(=O)O)c2nc(-c3ccc(-c4nc5c(S(=O)(=O)O)cc(S(=O)(=O)O)cc5[nH]4)cc3)[nH]c	0
CC(C)(C)c1cccc1O	1
CCCCCCCCSc1nc(Nc2cc(C(C)(C)C)c(O)c(C(C)(C)C)c2)nc(SCCCCCCCC)n1	0
CC1(C)CC1C(=O)NC(=CCCCCSCC(N)C(=O)O)C(=O)O	0
ClC(Cl)Br	1
CCCCC(=O)OC1(C(C)=O)CCC2C3CCC4=CC(=O)CCC4(C)C3CCC21C	0
O=C(c1cccc1)c1ccc2n1CCC2C(=O)O	0
CCOc1ccc2nc(S(N)(=O)=O)sc2c1	0
NC1CC1c1cccc1	0
Cc1ccc(N(SC(F)(Cl)Cl)S(=O)(=O)N(C)C)cc1	1
BrCCCCCBr	0
C=C(C)C1CC=C(C)CC1	0
c1ccc2c(c1)CCc1cccc1N2	0
O=c1nc[nH]c2c1ncn2C1OC(CO)C(O)C1O	1
CN(C)CCOC(C)(c1cccc1)c1ccc(Br)cc1	1
CCN(CC)CCOC(=O)C(O)(c1cccc1)c1cccc1	0
Cc1ccc(Nc2ccc(O)c3c2C(=O)c2cccc2C3=O)cc1	1
COP(=S)(OC)Oc1ccc(Sc2ccc(OP(=S)(OC)OC)cc2)cc1	0
CC(=O)Nc1ccc2c(O)c(N=Nc3ccc(S(=O)(=O)CCOS(=O)(=O)O)cc3)c(S(=O)(=O)O)cc2c1	0
CCCCN(CCCC)CC(O)c1cc(Cl)cc2c1-c1ccc(Cl)cc1C2=Cc1ccc(Cl)cc1	1
Cc1cccc(Nc2ccncc2S(=O)(=O)NC(=O)NC(C)C)c1	0
CC1(C)SC2C(NC(=O)C(N)c3ccc(O)cc3)C(=O)N2C1C(=O)O	0
c1ccc(COCc2cccc2)cc1	0
CC(C)(C)NCC(O)c1ccc(O)c(CO)c1	0
Cc1cccc(C)c1NC(=O)c1cc(S(N)(=O)=O)c(Cl)cc1O	0
Nc1nc(=O)c2ncn(C3OC(CO)C(O)C3O)c2[nH]1	1
CC(C)NC(=N)N=C(N)Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1	1
CC(=O)OCC(=O)C1(O)C(OC(C)=O)CC2C3CCC4=CC(=O)C=CC4(C)C3(F)C(O)CC21C	0
O=CC1CCCSC1	1
CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCC(O)CO	0
NO	0
CC(C)CN(CC(OP(=O)(O)O)C(Cc1cccc1)NC(=O)OC1CCOC1)S(=O)(=O)c1ccc(N)cc1	0
CCCCCCC(=O)OC1CCC2C3CCC4=CC(=O)CCC4(C)C3CCC12C	0
CCOC(=O)C(C)(C)C	0
CN(C)C(=N)N=C(N)N	0
COSc1cn(C)c2cc(F)ccc2c1=O	0
COC12CCC3(CC1C(C)(O)C(C)(C)C)C1Cc4ccc(O)c5c4C3(CCN1CC1CC1)C2O5	0

CCN1CCOCC1	1
CN(C)C1C(=O)C(C(N)=O)C(=O)C2(O)C(O)=C3C(=O)c4c(O)cccc4C(C)(O)C3C(O)C12	0
CNC(=O)c1c(l)c(C(=O)NCC(=O)Nc2c(l)c(C(=O)O)c(l)c(C(=O)NCCO)c2l)c(l)c(N(C)C(C)=O)c1l	0
CC(C)Cc1ccc(C(C)C(=O)O)cc1	0
O=C(O)c1cc([N+](=O)[O-])ccc1O	1
CCC(=O)NS(=O)(=O)c1ccc(-c2c(-c3cccc3)noc2C)cc1	0
C[N+](C)(C)CCO	0
CC(=O)Nc1ccc(NC(=O)c2cc3cccc3c(N=Nc3cc(C(N)=O)ccc3Cl)c2O)cc1	0
CC12CCC(CC1)C(C)(C)O2	1
Cc1ccnc2c1NC(=O)c1cccnc1N2C1CC1	0
O=C1c2c(O)cccc2Cc2cccc(O)c21	0
CCCCCCCCCCCCCCCCCN	1
C=CC(=O)OCC(C)OCC(C)OCC(C)OC(=O)C=C	1
C=CCCCCCCCC=C	0
CCOC(=O)C(CCc1cccc1)NC1CCCN2CCCC(C(=O)O)N2C1=O	0
CC(l)C1OCC(CO)O1	0
CC(C)(c1cc(Br)c(OCC(Br)CBr)c(Br)c1)c1cc(Br)c(OCC(Br)CBr)c(Br)c1	1
CN1C2CCCC1CC(NC(=O)c1nn(C)c3cccc13)C2	0
Oc1cccc(O)c1	0
CCCCCCCCO	1
Nc1ccc(O)c([N+](=O)[O-])c1	1
CCC1OC(=O)C(C)C(OC2CC(C)(OC)C(O)C(C)O2)C(C)C(OC2OC(C)CC(N(C)C)C2O)C(C)(OC)CC(C)C(=O)(0
O=c1oc2cccc2c(O)c1C1CC(c2ccc(-c3ccc(Br)cc3)cc2)Cc2cccc21	0
CC=CCC(C)C(O)C1C(=O)NC(CC)C(=O)N(C)CC(=O)N(C)C(CC(C)C)C(=O)NC(C(C)C)C(=O)N(C)C(CC(C)C	0
COC(=O)C(c1cccc1Cl)N1CCc2sccc2C1	0
O=C(O)C(S)C(S)C(=O)O	0
Cc1cc(C2=C(C=CC3CC(O)CC(=O)O3)C(C)(C)CC(C)(C)C2)ccc1F	0
OCCOCCN1CCN(C(c2cccc2)c2ccc(Cl)cc2)CC1	0
O=S(=O)(O)c1cc(O)c2ccc3c(S(=O)(=O)O)cc(S(=O)(=O)O)c4ccc1c2c34	1
O=C(O)c1cc(N=Nc2ccc(S(=O)(=O)Nc3cccn3)cc2)ccc1O	0
CCC(C)S	0
CC(C)CCCCCCCCCCCCC(=O)OCC(O)COCC(O)COC(=O)CCCCCCCCCCCCCCCC(C)C	0
Nc1cccc1C(=O)O	1
COc1ccc2nc3c(c(N)c2c1)CCCC3	0
CCCCCCCCC=CCCCCCCCC(=O)OCC(O)C1OCC(O)C1O	0
C1CCCCCCCCCCCC1	0
CCN(CC)CCNC(=O)c1ccc(NC(C)=O)cc1	0
CCCCCCCCCc1ccc(OCC(=O)O)cc1	1
Clc1cc(Cl)c(Cl)cc1Cl	1
Cc1cccc2n[nH]nc12	1
CN1C(CC(=O)c2cccc2)CCCC1CC(O)c1cccc1	0
NS(=O)(=O)c1cc(C(=O)O)c(NCc2ccco2)cc1Cl	0
CC1COc2c(N3CCN(C)CC3)c(F)cc3c(=O)c(C(=O)O)cn1c23	0
NC(=S)C(N)=S	1
CCCCOCCOCCOCc1cc2c(cc1CCC)OCO2	0

C[Si](C)(CCCN)O[Si](C)(C)CCCN	1
O=C(OCC1CO1)c1ccc(C(=O)OCC2CO2)c(C(=O)OCC2CO2)c1	1
COc1c2occc2cc2ccc(=O)oc12	0
Cc1[nH]c(=O)c(C#N)cc1-c1ccncc1	0
COc1ccc(CNc2nc(N3CCCC3CO)ncc2C(=O)NCc2ncccn2)cc1Cl	0
COc1cc2c(cc1OC)C(Cc1cc(OC)c(OC)c(OC)c1)[N+](C)(CCOC(=O)CCC=CCCC(=O)OCCC[N+])1(C)CCC:	0
Clc1ccc(Cl)cc1	0
ClCC(Cl)(Cl)Cl	1
O=c1[nH]c2ccccc2c(=O)o1	1
C=C(CC)C(=O)c1ccc(OCC(=O)O)c(Cl)c1Cl	0
CCCCCCCCCNCCNC1(C)CC(OC2C(Oc3c4cc5cc3Oc3ccc(cc3Cl)C(O)C3NC(=O)C(NC(=O)C5NC(=O)C(0
CC(C)(C)S	1
CCC1OC(=O)C(C)C(OC2CC(C)(O)C(O)C(C)O2)C(C)C(OC2OC(C)CC(N(C)C)C2O)C(C)(OC2CC(N(C)C)C(0
CO[Si](CCCCl)(OC)OC	0
CC1(C)CNCC(C)(C)C1OC(=O)CCCCCCCCC(=O)OC1C(C)(C)CNCC1(C)C	1
C=CCCCCCCC	0
O=C(O)c1ccc2ccccc2c1O	0
O=C(OCC(O)CO)c1ccccc1Nc1ccnc2c(C(F)(F)F)cccc12	0
CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCC(OC(=O)CCCCCCCCCCCCCCCCC)C1OCC(O)C1OC(=O)CCCCCCCCC	0
O=P(O)(O)OCC(Cl)(Cl)Cl	0
CCOc1cc(OC2ccc(C(F)(F)F)cc2Cl)ccc1[N+](=O)[O-]	0
CC12CCC(O)CC1=CCC1C2CCC2(C)C1CCC2(C)O	0
Cc1cc(Cc2cc(C)cc(C(C)(C)C)c2O)c(O)c(C(C)(C)C)c1	0
CN1C2CCC1CC(OC(c1ccccc1)c1ccccc1)C2	0
CCCCCCCCCCCCCCCCC[N+](C)(C)CCCCCCCCCCCCCCCCC	1
CC(=O)Nc1ccccc1C	1
OCc1cc(C(O)CNCCCCCOCCCCc2ccccc2)ccc1O	0
O=C(O)C(=O)O	0
Nc1ncnc2c1ncn2C1OC(COP(=O)(O)OP(=O)(O)OP(=O)(O)O)C(O)C1O	0
NNC(=O)CCCCC(=O)NN	0
CCCCC(CC)COc1ccc(-c2nc(-c3ccc(OC)cc3)nc(-c3ccc(OCC(CC)CCCC)cc3O)n2)c(O)c1	0
CCCCC(=O)OC1CCC2C3CCc4cc(O)ccc4C3CCC12C	0
O=C(O)c1cccc(C(=O)O)c1	0
CCCCCCC(=O)OCC(CC)(COC(=O)CCCCC)COC(=O)CCCCC	0
CC1=CC(=O)OC1=O	1
CCCCC(CC)COC(=O)CC(C(=O)OCC(CC)CCCC)S(=O)(=O)O	1
C1=COCCC1	1
CC1(C)C2CCC1(CS(=O)(=O)O)C(=O)C2=Cc1ccc(C=C2C(=O)C3(CS(=O)(=O)O)CCC2C3(C)C)cc1	0
CCCCC(CC)C1NC(=O)N(SC(Cl)(Cl)Cl)C1=O	0
CC(C)(C)c1cc(Cc2cc(C(C)(C)C)c(O)c(C(C)(C)C)c2)cc(C(C)(C)C)c1O	0
CC1=CC2C3CC(C=C3C)C2C1	0
CC(=O)C=CC=C(C)CCC=C(C)C	1
CCO[P+](=O)OCC	1
CC1(C)SC2C(N)C(=O)N2C1C(=O)O	1
OCC(O)COC1CCCCC1	1

CCCCCCCCC(CCCCCC)COc1ccccc1C(N)=O	0
CC(C)(C)C(O)C(Oc1ccc(Cl)cc1)n1cncn1	0
CCOC(=O)CC#N	1
NC(=O)O	1
CC1=CC(=O)c2ccccc2C1=O	0
CN(C)C(=O)Nc1ccc(Oc2ccc(Cl)cc2)cc1	1
CC1CO1	1
CC1(O)CCC2C3CCC4=CC(=O)CCC4(C)C3(F)C(O)CC21C	0
NC(C(=O)NC1C(=O)N2C(C(=O)O)=C(Cl)CSC12)c1ccccc1	0
CCCCCCC(=O)OCCN1CCN(CCCN2c3ccccc3Sc3ccc(C(F)(F)F)cc32)CC1	0
CC(=O)/C(=N\Nc1ccc(-c2ccc(N/N=C(\C(C)=O)C(=O)Nc3ccccc3)c(Cl)c2)cc1Cl)C(=O)Nc1ccccc1	0
CC12C=CC(C1)C1C(=O)OC(=O)C12	1
CCN(CC)CCCC(C)Nc1ccnc2cc(Cl)ccc12	0
CN(CCO)CCO	1
Cc1cc(Cl)ccc1OCCCC(=O)O	1
C=C1C(=CC=C2CCCC3(C)C2CCC3C(C)C=CC(C)C(C)C)CC(O)CC1O	0
CCc1ccccc1	1
CCn1cc(C(=O)O)c(=O)c2cc(F)c(N3CCN(C)CC3)cc21	0
C=CCc1ccccc1OCC(O)CNC(C)C	0
C1COCOC1	1
CCCCCCCCC(=O)OC1(c2ccc(Cl)cc2)CCN(CCCC(=O)c2ccc(F)cc2)CC1	0
CCCCCCC(O)CC=CCCCCCCCC(=O)OC	0
CN(C)CCOC(C)(c1ccccc1)c1ccc(Cl)cc1	0
O=C1c2c(Cl)c(Cl)c(Cl)c2C(=O)C1c1ccc2ccccc(N3C(=O)c4c(Cl)c(Cl)c(Cl)c(Cl)c4C3=O)c2n1	0
O=C(O)CCC(=O)Nc1ccc(S(=O)(=O)Nc2nccs2)cc1	0
CC(=O)N(c1onc(C)c1C)S(=O)(=O)c1ccc(N)cc1	0
Cc1cc(C2CCCCC2)n(O)c(=O)c1	0
c1ccc2nc3ccccc3cc2c1	0
O=C(NCCO[N+](=O)[O-])c1cccn1	0
CCCCC1C(=O)N(c2ccccc2)N(c2ccc(O)cc2)C1=O	0
COc1ccc(N)c(C)c1	0
CN1C(=O)CC(c2ccccc2)C1=O	0
CNC(C)C(O)c1ccccc1	0
NCCCCN	1
CN(C)CCCN1c2ccccc2Sc2ccc(C(F)(F)F)cc21	0
CC1(c2ccc(Oc3ccccc3)cc2)OC(=O)N(Nc2ccccc2)C1=O	0
IC(I)I	0
CC(CN1c2ccccc2Sc2ccccc21)[N+](C)(C)C	0
CCCCCCCC[Si](OCC)(OCC)OCC	0
CC(=O)/C(=N/Nc1ccc(-c2ccc(N/N=C(\C(C)=O)C(=O)Nc3ccc(C)cc3C)c(Cl)c2)cc1Cl)C(=O)Nc1ccc(C)c	0
CCC(=O)Cl	1
OC(Cc1ccccc1Cl)(Cn1nc[nH]c1=S)C1(Cl)CC1	0
C=CNC=O	1
CC(C)(Oc1ccc(Cl)cc1)C(=O)N1CSCC1C(=O)O	0
O=C1CCc2cc(OCCCCc3nnnn3C3CCCCC3)ccc2N1	0

Nc1ccn(C2OC(CO)C(O)C2(F)F)c(=O)n1	0
C=C(C#N)C(=O)OC	1
CC1(C)OC2CC3C4CC(F)C5=CC(=O)C=CC5(C)C4C(O)CC3(C)C2(C(=O)CO)O1	0
C=CCN	1
CC1CCCCN1CCCCOC(=O)c1ccc(OC2CCCCC2)cc1	0
O=C(OCCOCCOC(=O)c1ccccc1)c1ccccc1	0
Oc1c(Cl)cc(Cl)c(Cl)c1Cc1c(O)c(Cl)cc(Cl)c1Cl	1
CNNCc1ccc(C(=O)NC(C)C)cc1	0
CCNCCO	1
C=C(C)C(=O)OCCC[Si](OC)(OC)OC	0
CC(=O)Nc1cc(S(=O)(=O)O)cc(N)c1O	0
Nc1nc2ccc(OC(F)(F)F)cc2s1	0
COCCOCCO	0
C=CCOC(=O)CCCCC	0
O=C1OC(=O)c2c(Br)c(Br)c(Br)c(Br)c21	1
O=c1[nH]c2ccccc2n1CCCN1CCC(n2c(=O)[nH]c3cc(Cl)ccc32)CC1	0
CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCCO	0
CC(C)=CCCC(C)=CC=O	1
Cc1cc(C(=O)NCCc2ccc(S(=O)(=O)NC(=O)NN3CCCCC3)cc2)no1	0
CCCC(=O)OCC	1
CC(O)CN(CC(C)O)CC(C)O	1
CC(C)c1ccc(C(C)CC=O)cc1	0
C1CCNC1	1
CN(N=O)C(=O)NC1C(O)OC(CO)C(O)C1O	0
COC(=O)OC	1
C=C1CCC(O)CC1=CC=C1CCCC2(C)C1CCC2C(C)CCCC(C)C	0
C1N2CN3CN1CN(C2)C3	0
O=C(O)CCCCNc1nc(NCCCCC(=O)O)nc(NCCCCC(=O)O)n1	0
O=c1n(CCCN2CCN(c3ccccc(Cl)c3)CC2)nc2ccccc12	0
Nc1nc(=O)c2nc(CNc3ccc(C(=O)NC(CCC(=O)O)C(=O)O)cc3)cnc2[nH]1	0
O=C(Nc1ccc2c(O)c(N=Nc3ccc4cc(S(=O)(=O)O)ccc4c3)c(S(=O)(=O)O)cc2c1)Nc1ccc2c(O)c(N=Nc3cc	0
CCOC(=O)COC1CCN(C(=O)C(C)NC(=O)c2ccc(C(=N)NO)cc2)CC1	0
C=C=C	1
Nc1ccc(S(=O)(=O)NC(=O)c2ccccc2)cc1	0
CC(C)CCCCCCCCCCCCC=C1CC(=O)OC1=O	0
C=C(C)C(=O)OCCCC	1
CCC(Cc1c(I)cc(I)c(N)c1I)C(=O)O	0
CCOc1ccc2c(c1)C1(CCC(OCCN3CCOCC3)CC1)C(=O)N2S(=O)(=O)c1ccc(C(=O)NC(C)(C)C)cc1OC	0
C1OCOCO1	0
COC(c1ccccc1)(c1ccccc1)C(Oc1nc(C)cc(C)n1)C(=O)O	0
O=P(O)(O)OP(=O)(O)O	1
CC(=O)C1CCC2C3CCC4=CC(=O)CCC4(C)C3CCC12C	0
CC1=CCC2CC1C2(C)C	1
Cc1cc(NC(=NC2CCCCC2)Nc2nccs2)c2ccccc2n1	0
COCC(C)OC(C)=O	0

C#CCO	1
CCCCCCC(O)CC=CCCCCCCCC(=O)OCCO	0
O=c1[nH]c(=O)[nH]c(=O)[nH]1	0
CN(CCCI)CCCI	0
CC(C)(C)NSc1nc2ccccc2s1	0
O=C(O)c1ccc([N+](=O)[O-])cc1	1
OC(CCN1CCCCC1)(c1ccccc1)C1CCCCC1	0
CC(O)Cn1cnc2c1c(=O)n(C)c(=O)n2C	0
CCc1cc2c(cc1CC)CC(NCC(O)c1ccc(O)c3[nH]c(=O)ccc13)C2	0
Cc1cc(-c2ccc(N=C=O)c(C)c2)ccc1N=C=O	0
CCC(C)(C)C(=O)OC1CC(C)C=C2C=CC(C)C(CCC3CC(O)CC(=O)O3)C21	0
O=C(O)c1ccc(C(=O)O)o1	1
CSc1ccc2c(c1)N(CCC1CCCCN1C)c1ccccc1S2	0
CCCCCCCCCCCC[Si](C)(O[Si](C)(C)C)O[Si](C)(C)C	0
c1cc2c3c(cccc3c1)CC2	1
N#CCCI	1
CCNC(=S)OC(C)C	0
COc1cc(S(=O)(=O)O)c(C)cc1N/N=C1/C(=O)C=Cc2cc(S(=O)(=O)O)ccc21	0
CO[Si](CCCN1c(=O)n(CCC[Si](OC)(OC)OC)c(=O)n(CCC[Si](OC)(OC)OC)c1=O)(OC)OC	0
CC(C)OC(=O)CCCC=CCC1C(O)CC(O)C1C=CC(F)(F)COc1ccccc1	0
CC(=O)Oc1cc(C(C)C)c(OCCN(C)C)cc1C	0
C=C(C)C(=O)OCC[N+](C)(C)C	1
Cc1nc2scn2c(=O)c1CCN1CCC(=C(c2ccc(F)cc2)c2ccc(F)cc2)CC1	0
O=C(O)CS	1
Cc1cccc(Cc2ccccc2)c1Cc1ccccc1	0
CC(=O)OCC1=C(C(=O)O)N2C(=O)C(NC(=O)Cc3cccs3)C2SC1	0
CN(C)CCN(Cc1cccs1)c1cccn1	0
CC(C)(N=NC(C)(C)C(=N)N)C(=N)N	1
COP(OC)OC	1
CC1C=CC=C1	0
CCN(Cc1cccc(S(=O)(=O)O)c1)c1ccc([C+](c2ccc(N(CC)Cc3cccc(S(=O)(=O)O)c3)cc2)c2ccc(O)cc2S(=C	1
C=CC(=O)OCCCCOc1ccc(C(=O)Oc2ccc(OC(=O)c3ccc(OCCCCOC(=O)C=C)cc3)c(C)c2)cc1	0
O=C(O)CCI	1
Cn1c(=O)c2ccc3c4ccc5c(=O)n(C)c(=O)c6ccc(c7ccc(c1=O)c2c37)c4c56	0
C=C1CC2C(CCC3(C)C(=O)CCC23)C2(C)C=CC(=O)C=C12	0
O=C(O)c1cc2ccccc2c(Cc2c(O)c(C(=O)OCCOCCN3CCN(C(c4ccccc4)c4ccc(Cl)cc4)CC3)cc3ccccc23)c	0
CCBr	1
CCCCCCCCCCCC(C)C	0
CN1CCN(CC(=O)N2c3ccccc3C(=O)Nc3cccn32)CC1	0
CCCOC(=O)c1ccc(O)cc1	0
CCCCC(C(=O)O)C(=O)N(Nc1ccccc1)c1ccccc1	0
ClCC(Cl)CCI	0
C[Si](C)(C)O[Si](C)(C)C	0
CC(C)(C)c1cc(CCC(=O)OCC(COC(=O)CCc2cc(C(C)(C)C)c(O)c(C(C)(C)C)c2)(COC(=O)CCc2cc(C(C)(C)C)	0
CC[N+](CC)(CCNC(=O)C(=O)NCC[N+](CC)(CC)Cc1ccccc1Cl)Cc1ccccc1Cl	0

<chem>C=CC(=O)OCCCCOCC(COCCCCOC(=O)C=C)OCCCCOC(=O)C=C</chem>	1
<chem>CCCCOCC(C)O</chem>	0
<chem>O=C(O)CO</chem>	1
<chem>CC(=O)OC1CCCCC1C</chem>	1
<chem>O=P(OC(CCl)CCl)(OC(CCl)CCl)OC(CCl)CCl</chem>	1
<chem>Nc1ccc(Nc2ccccc2)cc1</chem>	1
<chem>CC(C)(N=C=O)c1cccc(C(C)(C)N=C=O)c1</chem>	1
<chem>CO[Si](CCCCOCC1CO1)(OC)OC</chem>	1
<chem>CCCCCCCCCCCC(CO)CCCCCCCCC</chem>	1
<chem>CCOc1cc(C=O)ccc1O</chem>	1
<chem>COc1ccc(C)cc1C(CCN(C(C)C)C(C)C)c1ccccc1</chem>	1
<chem>C=CC(C)(O)CCC=C(C)C</chem>	1
<chem>CCCCCCCCCCCCCCCC[N+](C)(C)CCCCCCCCCCCCC</chem>	1
<chem>NC(=O)c1ccnc1</chem>	1
<chem>O=C(O)CCS</chem>	1
<chem>CN1CN(C)CN(C)C1</chem>	1
<chem>COCCCN</chem>	1
<chem>CCC(=O)CC</chem>	1
<chem>C=COCC</chem>	1
<chem>CCNC(=S)NCC</chem>	1
<chem>N=C(N)S(=O)O</chem>	1
<chem>N=C(N=C(N)Nc1ccc(Cl)cc1)NCCCCCN(C(=N)N=C(N)Nc1ccc(Cl)cc1</chem>	1
<chem>CC(C)=CCCC(C)=CCO</chem>	1
<chem>CCCCCOCCOCCO</chem>	1
<chem>C=CC(=O)OCCOC</chem>	1
<chem>O=C1C=CC(=O)N1c1ccccc1</chem>	1
<chem>CCCCCCCCCCC(=O)N(C)C</chem>	1
<chem>OC1CCCCC1</chem>	1
<chem>O=C(O)CCCCCCCCCCCCC(=O)O</chem>	1
<chem>c1ccc(OP(Oc2ccccc2)Oc2ccccc2)cc1</chem>	1
<chem>Cc1cc(O)c(C(C)(C)C)cc1Sc1cc(C(C)(C)C)c(O)cc1C</chem>	1
<chem>CCO[Si](C)(CCCN)OCC</chem>	1
<chem>C1CN2CCN1CC2</chem>	1
<chem>O=C(O)CCCC(=O)O</chem>	1
<chem>CCCCNCCCC</chem>	1
<chem>CC(C)CCCCCc1ccc(O)cc1</chem>	1
<chem>O=C(O)CN(CCN(CC(=O)O)CC(=O)O)CC(=O)O</chem>	1
<chem>COC(C)=O</chem>	1
<chem>O=CN1CCOCC1</chem>	1
<chem>CN=C=S</chem>	1
<chem>CC(C)C(=O)OC(=O)C(C)C</chem>	1
<chem>CO[Si](C)(CCCNCCN)OC</chem>	1
<chem>C=CC(=O)OCCOCC(CC)(COCCOC(=O)C=C)COCCOC(=O)C=C</chem>	1
<chem>COc1cc(C=O)ccc1O</chem>	1
<chem>CCCCCOC1OC(C)C(O)C1O</chem>	1

BrCCBr	1
O=C1CCCCCO1	1
CC(C)CCO	1
CCO[SiH](OCC)OCC	1
O=C(O)c1cccnc1	1
CCCCCCCCCCCCCNCCCCCCCCCCCCC	1
C=CCOC(=O)c1cccc1C(=O)OCC=C	1
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC1CC(C(=O)O)N(C(=O)CCCCCCCCCCCCCCC)C1	1
CCCCCCCCCN(CCO)CCO	1
NCCCNCCNCCCN	1
C(CCOCC1CO1)COCC1CO1	1
CCCCCCCCCc1cccc1O	1
CC(C)c1ccc(C(C)C)cc1	1
CNCCS(=O)(=O)O	1
O=CCCCC=O	1
CC(C)(CO)COC(=O)C(C)(C)CO	1
CN(C)CCN(C)CCN(C)C	1
CC(C)c1cccc(C(C)C)c1	1
O=NC1CCCCC1	1
CC(C)N(C)C	1
O=C(O)C=CC(=O)O	1
COC(=O)C(C)CCC(=O)N(C)C	1
OCC1OC2OC3C(CO)OC(OC4C(CO)OC(OC5C(CO)OC(OC6C(CO)OC(OC7C(CO)OC(OC8C(CO)OC(OC1	1
CCC(C)N=O	1
O=C(O)c1cccc1	1
CSSC	1
COC(=O)CC(C)=O	1
CC=CC=CC(=O)O	1
CC1=CCC(C(C)(C)O)CC1	1
CCC1CCC(CCC(=O)O)C1	1
CC1CCC(C(C)C)C(C(=O)NCCc2ccccc2)C1	1
CCO[Si](CCCN)(OCC)OCC	1
CC1(C)CC(OC(=O)CCCCCCCCC(=O)OC2CC(C)(C)NC(C)(C)C2)CC(C)(C)N1	1
CN(C)C(C)(C)CO	1
O=C1CCCCO1	1
OCCSCCO	1
CCCCCCCCCCCN(C)C	1
CCOC(=S)S	1
Cc1c(O)cccc1O	1
CCCCCCCCCCCCCCCCCOP(=O)(O)O	1
COP(=S)(OC)SCC(=O)N(C)C=O	1
CC(C)C=O	1
c1ccc(C2CO2)cc1	1
O=C(O)c1cccc1-c1c2cc(Br)c(=O)c(Br)c-2oc2c(Br)c(O)c(Br)cc12	1
COc1cccc1N/N=C1/C(=O)C=Cc2cccc21	1

c1cc2ccc3cccc4ccc(c1)c2c34	1
CS(=O)(=O)NC(=O)c1cc(Oc2ccc(C(F)(F)F)cc2Cl)ccc1[N+](=O)[O-]	1
COc1ccc(N)cc1	1
O=C(O)CC(O)C(=O)O	1
CC=Cc1ccc(O)c(OC)c1	1
CCc1ccc(S(=O)(=O)O)cc1	1
Cc1cccn1	1
CCOP(=S)(OCC)SCSCC	1
CC(C)OC(=O)OOC(=O)OC(C)C	1
Oc1cc(Cl)ccc1Oc1ccc(Cl)cc1	1
C=CCOC(=O)Cl	1
Cc1cc(O)ccc1Cl	1
CC#Cc1cc(C)nc(Nc2ccccc2)n1	1
CCCCC=CCC=CCCCCCCCC(=O)N(CCO)CCO	1
COc1ccc2cc(C(C)C(=O)O)ccc2c1	1
O=C1C(=C2Nc3ccccc3C2=O)Nc2ccccc21	1
C=CC(=O)OCCCC	1
CCCBBr	1
O=C1OC2(c3ccccc31)c1cc(Br)c(O)c(Br)c1Oc1c2cc(Br)c(O)c1Br	1
CCSC(=O)N(CC)C1CCCCC1	1
NCC(=O)O	1
Cn1sc(Cl)cc1=O	1
CC(C)(C)c1cccc(C(C)(C)C)c1O	1
CC(C)(C)O	1
CCOP(=S)(OCC)Oc1cc(C)nc(C(C)C)n1	1
O=Cc1ccccc1Cl	1
Cc1ccc(Cl)cc1Cl	1
C=CC(C)=O	1
CCc1cc(Cc2cc(CC)cc(C(C)(C)C)c2O)c(O)c(C(C)(C)C)c1	1
NC(=O)CCCCC(N)=O	1
CCN1C(=O)C=CC1=O	1
C1=CCCCC1	1
C=CC=O	1
ClC=C(Cl)CCl	1
O=C(c1ccccc1)c1ccccc1O	1
CCCCCCCCC1=C(CCCCCC(=O)O)C1	1
COP(=S)(OC)Oc1nc(Cl)c(Cl)cc1Cl	1
Nc1ccc(S(=O)(=O)CCOS(=O)(=O)O)cc1	1
N=C(N)N[N+](=O)[O-]	1
CC(C)(c1ccc(O)cc1)c1ccc(O)cc1	1
C=CBr	1
O=C1NC(=O)C(O)(C2(O)C(=O)NC(=O)NC2=O)C(=O)N1	1
CC=C1C(=O)NC(C(=O)O)C(C)C(=O)NC(CCCNC(=N)N)C(=O)NC(C=CC(C)=CC(C)C(Cc2ccccc2)OC)C(C)	1
CCCCC=O	1
O=C1CCCCCN1	1

CC(C)c1ccc2c(c1)CCC1C(C)(CN)CCCC21C	1
CC1(C)C(C=C(Cl)Cl)C1C(=O)OC(C#N)c1cccc(Oc2ccccc2)c1	1
O=C(O)c1c([N+](=O)[O-])cc([N+](=O)[O-])cc1[N+](=O)[O-]	1
O=[N+]([O-])c1ccc(O)c(CBr)c1	1
O=C(OC(C(=O)O)(C(=O)c1ccccc1)C(O)C(=O)O)c1ccccc1	1
CCC(=O)c1ccccc1	1
CN(C)C(=S)SSC(=S)N(C)C	1
CC(CCC(=O)O)C1CCC2C3CCC4CC(O)CCC4(C)C3CC(O)C12C	1
CCCCCCCCCCCC(CO)CCCCCCCC	1
Oc1ccccc1-c1ccccc1	1
COC(=O)C1CCC(C(=O)OC)CC1	1
c1ccc2c(c1)C1=NC2=NC2=NC(=NC3=NC(=NC4=NC(=N1)c1ccccc14)c1ccccc13)c1ccccc12	1
O=C(O)c1cc([N+](=O)[O-])cc([N+](=O)[O-])c1O	1
CCCCCCCCCCCCC(=O)OCC(O)C1OCC(O)C1O	1
Nc1ccc([N+](=O)[O-])cc1[N+](=O)[O-]	1
CC1CCCC(=O)CCCC=Cc2cc(O)cc(O)c2C(=O)O1	1
CCOC(=O)Cl	1
CCC(C)C(C)CO	1
CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCC	1
O=C(OCc1ccccc1)c1ccc(O)cc1	1
CC(CO)CCO	1
O=C(O)c1cc(Cl)ccc1O	1
C=CC#N	1
C1CCC2CCCCC2C1	1
CCN(CC)CC(=O)Nc1c(C)cccc1C	1
C1=Nc2ccccc2Oc2ccccc21	1
O=CC(Cl)Cl	1
Clc1cc2oc3c(Cl)c(Cl)c(Cl)cc3c2cc1Cl	1
CCOC(=O)OCC	1
C=CCCl	1
Cc1c(Br)c(Br)c(Br)c(Br)c1Br	1
CCCCCCCCCCCCCCCCC[N+](C)(C)C	1
FC(F)(F)C1(F)OC1(F)F	1
CC(=O)OC1CC(C)OC(C)O1	1
CCc1c(C(=O)O)c(=O)cnn1-c1ccc(Cl)cc1	1
C=C(C)Cl	1
Cc1ccc2cc3c(ccc4ccccc43)c3c2c1CC3	1
CC(C)N1C(=O)N(c2ccccc2)CSC1=NC(C)(C)C	1
CC(O)CCO	1
N#Cc1sc2c(=O)c3ccccc3c(=O)c=2sc1C#N	1
O=C(O)C=Cc1ccc(O)c(O)c1	1
O=C1c2cccc(O)c2C(=O)c2c(O)cccc21	1
CC1=CC2C(O)(CC(CO)=CC3C4C(C)(C)C4(O)C(O)C(C)C32O)C1=O	1
CCN(CC)C(=O)SCc1ccc(Cl)cc1	1
Cc1ccc2ccccc2c1	1

CSC	1
CCC(C)CO	1
Nc1ccc(Cl)cc1	1
OCC(Br)CBr	1
Clc1ccccc1Cl	1
O=C=NCCCCCCN=C=O	1
COc1cc2c(cc1OC)C13CCN4CC5=CCOC6CC(=O)N2C1C6C5CC43	1
CC(C)OP(=S)(OC(C)C)SCCNS(=O)(=O)c1ccccc1	1
CN1CCCC1=O	1
NCC(O)c1ccc(O)c(O)c1	1
CC(=O)C=C(C)C	1
O=C(O)COc1cc(Cl)c(Cl)cc1Cl	1
ClC(Cl)=Nc1ccccc1	1
CCC(CC)CO	1
CCCCCCCCC=CCCCCCCCCCCCC(N)=O	1
O=[N+](O)c1ccc(O)c([N+](=O)[O-])c1	1
CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCCCC	1
Clc1ccc(-c2ccc(Cl)c(Cl)c2)cc1Cl	1
C=CC(C)(CCC=C(C)C)OC(C)=O	1
COS(=O)(=O)OC	1
CC(C)(c1cc(Br)c(O)c(Br)c1)c1cc(Br)c(O)c(Br)c1	1
CCOC(=O)CCl	1
ClC(Cl)=C(Cl)C(Cl)(Cl)Cl	1
C=C(C)C(=O)Cl	1
Nc1cc([N+](=O)[O-])ccc1O	1
CC1=CC=CC(C)CCC1	1
O=[N+](O)c1ccc(Cl)c([N+](=O)[O-])c1	1
Cc1cc(N)c(S(=O)(=O)O)cc1Cl	1
CC(C)CCCCCCC=O	1
CC(=O)OC(C)(C)C	1
N#CCCO	1
OCc1ccccc1	1
CCCCCCCCC(=O)O	1
OC1cc2c(cc1O)C1c3ccc(O)c(O)c3OCC1(O)C2	1
C=C(C)C(=O)OCCOCCOC(=O)C(=C)C	1
O=C(Cl)OCCOCCOC(=O)Cl	1
O=C(O)c1ccccc1C(=O)O	1
Cc1ccc(C(C)(C)C)c(O)c1	1
NC(=O)N=NC(N)=O	1
COC(=O)c1cccc(Cl)c1	1
CCCCOC(=O)c1ccccc1	1
O=[N+](O)N1CN([N+](=O)[O-])CN([N+](=O)[O-])C1	1
Cc1ccccc1N/N=C1/C(=O)C=Cc2ccccc21	1
OCCCCCCCCCl	1
C=CC(C)C	1

O=C(OC(C(=O)O)C(OC(=O)c1ccccc1)C(=O)O)c1ccccc1	1
C#CCBr	1
CC1CC(C)C(=O)C(C(O)CC2CC(=O)NC(=O)C2)C1	1
CCCCCCCCC(=O)OC	1
CC(C)OC(C)C	1
C=CCC1=C(C)C(OC(=O)C2C(C=C(C)C)C2(C)C)CC1=O	1
O=S(=O)(Cl)c1ccc(Cl)cc1	1
Clc1cccc(Cl)c1	1
CCC(C)=O	1
CCOc1ccc(N=Nc2ccc(-c3ccc(N/N=C4\C(=O)C=Cc5cc(S(=O)(=O)O)cc(S(=O)(=O)O)c54)c(C)c3)cc2C)c1	1
CC(C)(C)C1=CC(=O)C(C(C)(C)C)=CC1=O	1
Clc1ccccc1	0
FC(F)(F)c1ccc(Cl)c(Cl)c1	0
CCCCCCCCCCCCCCCCOC(=O)CCCCCCCCCCCCC	0
FC(F)(F)Cl	0
CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCCCCCCCC	0
FC(F)(Cl)Cl	0
CCCCOC(C)=O	0
O=C(O)c1ccc(O)cc1	0
CCCCCCCCCCCCC(=O)OCC(CC)CCCC	0
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCO	0
CCC=CCCCOC(C)=O	0
C=CCOC(=O)CCCCC	0
CCCCC(CC)COC(C)=O	0
O=C(O)c1ccccc1O	0
FC(F)(F)C(Cl)Br	0
CCCCCCCCC(=O)OCC(CC)CCCC	0
FC(F)OC(F)(F)C(F)Cl	0
CCCCCCCCC=CCCCCCCCC(=O)OCCCCCCCC(C)C	0
FC(F)OC(Cl)C(F)(F)F	0
FC(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F	0
FC(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)Br	0
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	0
C=CC(=O)OCCCCCCCC(C)C	0
Cc1ccccc1Cc1ccccc1	0
CC(C)c1ccccc1	0
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	0
S	0
CCCCCOCOCCO	0
CCCCC(CC)COC(=O)CCCCCCCCC(=O)OCC(CC)CCCC	0
CCCCC	0
CCCCC(CC)COC(=O)CCC(=O)OCC(CC)CCCC	0
FC(F)=C(F)F	0
CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC	0
CC=CC	0

c1ccc2cc3ccccc3cc2c1	0
CCCCCCCCCCCCOCCO	0
CCCCCCCCCCCCC	0
CCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC(C)C	0
CC=C(C)C	0
CC(=O)Oc1ccccc1C(=O)O	0
CCCCCCCCCCCC(C)CCCCCCCC	0
CCCCCCCC(C)C(C)CCCCCCCC	0
O=C(O)c1ccc(C(=O)O)cc1	0
C=CCCCCCC	0
CCO	0
C=CC(=C)CCC=C(C)CCC=C(C)C=O	0
C=CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	0
CCC(=O)O	0
CCOC(C)=O	0
CC(C)(Cl)OC(C)(C)Cl	0
CS	0
CCCCCBr	0
CCCCCCCCCCCCCCC(=O)O	0
CCCCC(CC)C(=O)Cl	0
CCCCCBr	0
CC(=O)OCC(C)C	0
CCCCCCCCCCCCCCCCOC(=O)Cl	0
CCCCC(CC)COC(=O)CSCC(=O)OCC(CC)CCCC	0
CCOC(=O)c1ccc(O)cc1	0
CC1CCCCC1	0
CC(C)CCCCCCCCCCCCCCC(=O)O	0
CCCCCCCCCCC(=O)OOC(=O)CCCCCCCCC	0
C=COC	0
CCC=CCCCC	0
CCCCCCCCCCCCOC(=O)c1ccccc1C(=O)OCCCCCCCC	0
BrC1CCC(Br)C(Br)CCC(Br)C(Br)CCC1Br	0
CCCCC(CC)COC(=O)CS	0
CC1=CCCC(C)=CCC1	0
COc1ccc(C(=O)c2ccc(OC)cc2O)c(O)c1	0
CCCCCCCCCCCCCCCCCNC(=O)CCCCCCCCCCCCCCCCC	0
CCCCOC(=O)c1ccccc1C(=O)OCCCC	0
CCC(=O)OCC(=O)OC(C)C1CCCC(C)(C)C1	0
CCCCOC(=O)CSCSCC(=O)OCCCC	0
C=C(C)C(=O)OCCC(C)OC(=O)C(=C)C	0
O=C(O)CCCCC(=O)O	0
COc1ccc(C(=O)C=C(O)c2ccc(C(C)(C)C)cc2)cc1	0
COC(=O)CCCC(=O)OC	0
OCCOCCO	0
COC(=O)c1ccccc1C(=O)OC	0

CC(C)(Oc1ccc(Cl)cc1)C(=O)Oc1ccc(Cl)cc1	0
O=[N+][([O-])c1cc([N+](=O)[O-])c(O)c([N+](=O)[O-])c1	0
Cc1cc(N=Nc2ccccc2C)ccc1N	0
OC(O)C(Cl)(Cl)Cl	0
CC1CCC(C(C)C)CC1	0
CC(C)C(=O)OCC(C)(C)C(O)C(C)C	0
OCC#CCO	0
CCCCN(CCCC)C(=S)SCSC(=S)N(CCCC)CCCC	0
CCCCCCCCCCCCCCCCSSCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	0
CN(C)C(=S)S	0
ClCCOCOCCL	0
C[N+](C)(C)C	0
CCOCCCC(C)OCCOCC(C)CO	0
OCCOCCOCCOCCO	0
CCCCCCC(O)CCCCCCCCCCC(=O)OCC(COC(=O)CCCCCCCCCCC(O)CCCCC)OC(=O)CCCCCCCCCCC(O)	0
CC(C)OC(=O)CCCCC(=O)OC(C)C	0
O=C(O)C(O)C(O)C(O)C(O)C(=O)O	0
NC(=O)c1c(Cl)cccc1Cl	0
CCOC(=O)c1cccc(C(=O)OCC)c1	0
c1ccc(CSCc2ccccc2)cc1	0
Nc1ccncc1	0
CCCCOC(=O)c1ccc(O)cc1	0
CC(C)CCCCCOC(=O)CS	0
CC(=O)Oc1cccc2c1C(=O)c1c(OC(C)=O)cc(C(=O)O)cc1C2=O	0
CCCCCCC(O)CC=CCCCCCCCC(=O)O	0
CCOc1ccc(Br)cc1	0
CCCCC=CCCC(CCCCCCCC(=O)O)C(CCCCCCCC)CCCCCCCCC(=O)O	0
OCCCOCC(COCCCO)(COCCCO)COCCCO	0
CC(OC(C)(C)COC(=O)C1CC1)C1CCCC(C)(C)C1	0
OCCOCC#CCOCCO	0
OCCCOCC(OCCCO)C(OCCCO)C(OCCCO)C(COCCCO)OCCCO	0
C=COCC(C)C	0
O=C(CO)CO	0
CC(O)CSCCCCCCCCC(C)(C)C	0
CC(C)(Oc1ccc(C(O)c2ccc(Cl)cc2)cc1)C(=O)O	0
Nc1cc(Cl)cc(C(=O)O)c1Cl	0
CCC(C(=O)O)c1ccc(CC(C)C)cc1	0
CCC(CO)(CO)CO	0
O=C(O)CSSCC(=O)O	0
CO[Si](CCCCC[Si](OC)(OC)OC)(OC)OC	0
CCCCC1CCC(=O)O1	0
CCCCCCCCC(=O)Oc1ccc(C(=O)O)cc1	0
O=C1CCCCCCCCCCCCC(=O)OCCO1	0
CN(C)C(=O)N(C)C	0
O=C(CO)C(O)C(O)C(O)CO	0

Nc1ccc2c(c1)Cc1ccccc1-2	0
CC(C)(N)Cc1ccccc1	0
CCCCCCC(O)CC=CCCCCCCCC(=O)OCC(O)CO	0
CC(N)Cc1ccccc1	0
CCCCCCCCC=CCCCCCCCC(=O)OCC(O)CO	0
CC1CC(OC(=O)C(O)c2ccccc2)CC(C)(C)C1	0
C#CC(O)(C=CCl)CC	0
O=c1ccc2ccccc2o1	0
CO[Si](OC)(c1ccccc1)c1ccccc1	0
CCC(C)(CCC(C)C)C(=O)OCC1CO1	0
CC(COCC(C)OC(=O)c1ccccc1)OC(=O)c1ccccc1	0
CCCCCCCCCCCCCCCC[Si](OC)(OC)OC	0
CCO[Si](CCl)(OCC)OCC	0
CO[Si](OC)(OC)c1ccccc1	0
CCC(CO)NCCNC(CC)CO	0
O=C(Nc1ccc(Cl)cc1)Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1	0
CC(C)OP(=O)(F)OC(C)C	0
COCC(O)CO	0
C[N+](CCCC[N+](C)CCCC2)CCCC1	0
CC(C)c1ccc(S(=O)(=O)O)cc1	0
CC1CCC(C(C)C)C(OCC(O)CO)C1	0
CCCCC(CC)COC(=O)c1c(Br)c(Br)c(Br)c(Br)c1C(=O)OCC(CC)CCCC	0
O=C(O)CCC(C(=O)O)N(CC(=O)O)CC(=O)O	0
O=c1c2cc(Cl)ccc2[nH]c2cc3c(=O)c4cc(Cl)ccc4[nH]c3cc12	0
CC[N+](C)(C)C(C)CC(c1ccccc1)c1ccccc1	0
CC(C)(C)CC(C)(C)c1ccc(OCCOCCO)cc1	0
CC(C(=O)O)c1ccc(C(=O)c2cccs2)cc1	0
O=C1c2ccccc2C(=O)C1c1ccc(F)cc1	0
CNC(C)(C)Cc1ccccc1	0
CC(NC(C)(C)C)C(=O)c1cccc(Cl)c1	0
ClC1OCCOC1Cl	0
COC(=O)c1cc(C(=O)OC)cc(S(=O)(=O)O)c1	0
CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCC(O)C1OCC(O)C1O	0
CO[Si](CCC#N)(OC)OC	0
CC1CCCC(O)C1=CC=C1CCCC2(C)C1CCC2C(C)C=CC(C)C(C)C	0
Cc1cc2cc3c(C)cc(=O)oc3c(C)c2o1	0
CC(C)C(C(=O)OC(C#N)c1cccc(Oc2ccccc2)c1)c1ccc(OC(F)F)cc1	0
CC(=O)Oc1ccccc1C(=O)OC(COC(=O)C(C)(C)Oc1ccc(Cl)cc1)COC(=O)C(C)(C)Oc1ccc(Cl)cc1	0
CC(C)(Oc1ccc(Cl)cc1)C(=O)OCCOC(=O)C(C)(C)Oc1ccc(Cl)cc1	0
CCC[N+](=O)[O-]	0
Cc1ccc(C(=O)c2cc(O)c(O)c([N+](=O)[O-])c2)cc1	0
CCCC(Cc1ccccc1)N1CCCC1	0
CC(=O)Nc1cccc2c1-c1ccccc1C2	0
Cc1cc(Nc2ccccc2C(=O)O)ccc1Cl	0
CCCCCOC(=O)CCC(=O)CN	0

COc1ccc(OC)c(C(O)C(C)N)c1	0
C=C1CC(O)C(C=CC(O)C(C)(C)CCCC)C1CC=CCCCC(=O)O	0
CCC(C)(C#N)N=NC(C)(C#N)CC	0
C=CC(=O)OCCCCOc1ccc(C(=O)Oc2ccc(OC(=O)c3ccc(OCCCCOC(=O)C=C)cc3)c(C)c2)cc1	0
CCCCCCCCCCCCCCCCCN(O)CCCCCCCCCCCCCCCCC	0
Cc1ccc(S(N)(=O)=O)cc1	0
CSc1cc(SC)c(N)c(C)c1N	0
C=C[Si](OCCOC)(OCCOC)OCCOC	0
Cc1cccc(C)c1OP(=O)(Oc1cccc(OP(=O)(Oc2c(C)cccc2C)Oc2c(C)cccc2C)c1)Oc1c(C)cccc1C	0
CC(=O)Oc1c(C)c(C)c2c(c1C)CCC(C)(CCCC(C)CCCC(C)CCCC(C)C)O2	0
CCCCC(C)CC(O)C=CC1C(O)CC(=O)C1CC(=O)CCCCC(=O)OC	0
C#CC1(O)CCC2C3CCc4cc(O)ccc4C3CCC21C	0
CC12CC3CC(C)(C1)CC(N)(C3)C2	0
CCNC(C)Cc1cccc(C(F)(F)F)c1	0
CC12CCC(=O)C=C1CCC1C2CCC2(C)C1CCC2(C)O	0
O=C(O)CCC(=O)c1ccc(C2CCCC2)c(Cl)c1	0
CC(=O)C1CCC2C3C=CC4=CC(=O)CCC4(C)C3CCC12C	0
CC(=O)Oc1ccc(C(c2ccc(OC(C)=O)cc2)c2cccn2)cc1	0
CCC(CCC(C)C1CCC2C3CC=C4CC(O)CCC4(C)C3CCC12C)C(C)C	0
Nc1c(Oc2ccccc2)cc(O)c2c1C(=O)c1ccccc1C2=O	0
CC12CCC(=O)C=C1CCC1C2CCC2(C)C(O)CCC12	0
NC(Cc1ccc(O)cc1)C(=O)O	0
OCC1OC(O)CC(O)C1O	0
Nc1ccc(N=Nc2ccc(S(=O)(=O)O)cc2)cc1	0
CC(=O)CC(c1ccccc1)c1c(O)c2ccccc2oc1=O	0
CC(CCC(=O)O)C1CCC2C3C(O)CC4CC(O)CCC4(C)C3CCC12C	0
C#CCNC1CCc2ccccc21	0
CNCCc1cccn1	0
CN1CCN(C(c2ccccc2)c2ccccc2)CC1	0
C#CC1(O)CCC2C3CCC4=CC(=O)CCC4C3CCC21C	0
OCC1OC(O)C(O)C(O)C1O	0
O=C(Nc1ccccc1-c1ccc(Cl)cc1)c1cccn1Cl	0
CCOC(=O)C(c1c(O)c2ccccc2oc1=O)c1c(O)c2ccccc2oc1=O	0
O=S(=O)(c1ccccc1)c1ccccc1	0
O=S(=O)(c1ccc(O)cc1)c1ccc(O)cc1	0
CC[N+](C)(C)Cc1ccccc1Br	0
CC12CC(C=O)=C(O)CC1CCC1C2CCC2(C)C1CCC2(C)O	0
CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCC(=O)C1=C(O)C(O)C(O)O1	0
COc1ccc(C(=O)c2cc(S(=O)(=O)O)c(OC)cc2O)c(O)c1	0
CC(=O)OC1(C(C)=O)CCC2C3C=C(C)C4=CC(=O)CCC4(C)C3CCC21C	0
CN1CCCC1c1cccn1	0
CC(=O)N(CCN(C(C)=O)C(C)=O)C(C)=O	0
O=C1/C(=N\Nc2cc(S(=O)(=O)O)ccc2O)C=Cc2c(O)cccc21	0
CC(=O)N1CCOCC1	0
C=C(C)C(=O)NCCC[N+](C)(C)C	0

O=S(=O)(O)CCS(=O)(=O)O	0
CCC(C)(Oc1ccc(C2(c3ccc(OC(C)(CC)C(=O)O)cc3)CCCCC2)cc1)C(=O)O	0
C(=Cc1ccccc1)CN1CCN(C(c2ccccc2)c2ccccc2)CC1	0
C=C1C(=CC=C2CCCC3(C)C2CCC3C(C)CCCC(C)(C)O)CC(O)CC1O	0
CC(=O)OC1CC(OC2C(O)CC(OC3C(O)CC(OC4CCC5(C)C(CCC6C5CCC5(C)C(C7=CC(=O)OC7)CCC65O)	0
CC1C(c2ccccc2)OCCN1C	0
CCN(CC)CCOC(=O)C1(c2ccccc2)CCCC1	0
CC(C)(Oc1ccc(Cl)cc1)C(=O)OCCSCCCCCCCCCCSCCOC(=O)C(C)(C)Oc1ccc(Cl)cc1	0
CNCC(O)c1ccccc(O)c1	0
Cc1cccc(C)c1OCC(C)N	0
CCCOC(N)=O	0
O=C1CCCCCCCCCCCCN1	0
CC1COCc2cc3c(cc21)C(C)(C)C(C)C3(C)C	0
Cc1ccnc(NC(=O)C(C)c2cccc(C(=O)c3ccccc3)c2)c1	0
CC(N=C(NC#N)Nc1ccncc1)C(C)(C)C	0
CC(=O)OC1CC(OC2C(O)CC(OCC3CC(O)CC(OC4CCC5(C)C(CCC6C5CC(O)C5(C)C(C7=CC(=O)OC7)CCC	0
CN(C)CCC=C1c2ccccc2CCc2ccccc21	0
CC1OC(OC2C(O)CC(OC3C(O)CC(OC4CCC5(C)C(CCC6C5CC(O)C5(C)C(C7=CC(=O)OC7)CCC65O)C4)	0
CC12CCC(=O)C=C1CCC1C2C(=O)CC2(C)C1CCC2(O)C(=O)CO	0
NC1(C(=O)O)CCCC1	0
O=C(Nc1ccc([N+](=O)[O-])cc1Cl)c1cc(Cl)ccc1O	0
CCCN(CC)C(CC)C(=O)Nc1c(C)cccc1C	0
CN1CCN(C(c2ccccc2)c2ccc(Cl)cc2)CC1	0
O=C(O)CCCC=CCC1C(O)CC(O)C1C=CC(O)COc1cccc(C(F)(F)F)c1	0
CCC1CCC(c2ccc(-c3cc(F)c(C(F)(F)Oc4cc(F)c(F)c(F)c4)c(F)c3)cc2)OC1	0
C=CC(=O)NCO	0
CCc1cc(C)cc(CC)c1Nc1ccc(Nc2c(CC)cc(C)cc2CC)c2c1C(=O)c1ccccc1C2=O	0
O=c1[nH]c(=O)c2ccc3c4ccc5c(=O)[nH]c(=O)c6ccc(c7ccc1c2c73)c4c65	0
O=S(=O)(O)CCCS	0
CCC(=O)C1(c2ccccc(O)c2)CCN(C)CC1	0
Cc1cccc(N(C)C(=S)Oc2ccc3ccccc3c2)c1	0
O=C(O)CCCC=CCC1C(O)CC(O)C1C=CC(O)COc1ccsc1	0
CC[N+](C)(CC)CCOC(=O)C(O)(c1ccccc1)C1CCCCC1	0
CN(C)CCOC(C)(c1ccccc1)c1cccn1	0
Cc1ccc(=O)n(-c2ccccc2)c1	0
C[n+] ₁ ccccc1C=NO	0
O=C(O)CCCC=CCC1C(O)CC(O)C1SCC(O)COc1cccc(Cl)c1	0
O=C1C(O)=C(C2CCC(c3ccc(Cl)cc3)CC2)C(=O)c2ccccc21	0
CC(C)NCC(O)c1cc(O)cc(O)c1	0
CCN(CC)CCOC(=O)c1ccc(N)cc1	0
CC(C(=O)O)c1ccc2oc(-c3ccc(Cl)cc3)nc2c1	0
CC(C)(CO)[N+](=O)[O-]	0
O=C1Nc2ccccc2C1(c1ccc(O)cc1)c1ccc(O)cc1	0
CN(C)CCC(c1ccc(Cl)cc1)c1cccn1	0
COC1OC2OC3(C)CCC4C(C)CCC(C1C)C24OO3	0

O=S(=O)(O)Oc1ccc(C(c2ccc(OS(=O)(=O)O)cc2)c2ccccc2)cc1	0
CNC(=O)c1c(l)c(NC(C)=O)c(l)c(C(=O)O)c1l	0
CN1CCCC(CN2c3ccccc3Sc3ccccc32)C1	0
NC(=O)N1c2ccccc2C=Cc2ccccc21	0
N=C(N)NC(=O)Cc1c(Cl)cccc1Cl	0
CC(C1=C(CCN(C)C)Cc2ccccc21)c1ccccc1	0
CC[N+](CC)(CC)CCOc1cccc(OCC[N+](CC)(CC)CC)c1OCC[N+](CC)(CC)CC	0
CNCCC=C1c2ccccc2CCc2ccccc21	0
CN1CCOC(c2ccccc2)c2ccccc2C1	0
COc1cccc(C2(O)CCCCC2CN(C)C)c1	0
CCC(=O)OC1(c2ccccc2)CCN(C)CC1C	0
CCN(C)C(=O)Oc1cccc(C(C)N(C)C)c1	0
CC(C)(Oc1ccc(Cl)cc1)C(=O)OCc1cccc(CO)n1	0
NS(=O)(=O)c1cc(C(=O)O)c(Cl)cc1Cl	0
S=C(SSSSSSC(=S)N1CCCCC1)N1CCCCC1	0
C=CCOc1cccc1OCC(O)CNC(C)C	0
COC(=O)C(c1ccccc1)C1CCCCN1	0
CC(=O)Nc1c(l)c(C(=O)O)c(l)c(N(C)C(C)=O)c1l	0
CC(C)(C)c1ccc(C(O)CCCN2CCC(C(O)(c3ccccc3)c3ccccc3)CC2)cc1	0
CCC1(C)CC(=O)NC1=O	0
CN1CCC2=C(C1)C(c1ccccc1)c1ccccc12	0
CCC(C)C(C)(COC(N)=O)COC(N)=O	0
O=C(O)CCCCCNC1c2ccccc2CCc2ccccc21	0
CC12CCC3C(CCC45OC4C(=O)C(C#N)CC35C)C1CCC2O	0
COc1ccc(CCN(C)CCCC(C#N)(c2ccc(OC)c(OC)c2)C(C)C)cc1OC	0
N=C(N)NC(=O)c1nc(Cl)c(N)nc1N	0
CCCCCOC(=O)c1ccccc1C(=O)c1ccc(N(CC)CC)cc1O	0
Cc1cc(S(=O)(=O)O)c(N=Nc2c(O)c(C(=O)O)cc3ccccc23)cc1Cl	0
O=P(O)(O)CN(CP(=O)(O)O)CP(=O)(O)O	0
CCN(Cc1cccc(S(=O)(=O)O)c1)c1ccc([C+](c2ccc(N(CC)Cc3cccc(S(=O)(=O)O)c3)cc2)c2ccccc2S(=O)(=O)C1CCc2nnnn2CC1	0
COc1cccc(C(=O)CCNC(C)C(O)c2ccccc2)c1	0
CCCSP(=S)(OCC)Oc1ccc(SC)cc1	0
CC(C)(C)NCC(O)COc1ccccc1C1CCCC1	0
CCCCN1CCCCC1C(=O)Nc1c(C)cccc1C	0
CNC(=O)CSP(=S)(OC)OC	0
CCCN(CCCl)c1c([N+](=O)[O-])cc(C(F)(F)F)cc1[N+](=O)[O-]	0
O=C(O)COC(=O)Cc1ccccc1Nc1c(Cl)cccc1Cl	0
COc1cc(OC)c(C(=O)CCCN2CCCC2)c(OC)c1	0
CN(C)CCC=C1c2ccccc2CSc2ccccc21	0
CN1CCC(=C2c3ccccc3CCc3ccccc32)CC1	0
NC(Cc1ccc(N(CCCl)CCCl)cc1)C(=O)O	0
CCOC(=O)C(C)(N)Cc1ccc(O)c(O)c1	0
Clc1ccc2c(N3CCN(CCCN4CCN(c5ccccc5cc(Cl)ccc56)CC4)CC3)ccnc2c1	0
CC1=CC23C(=O)C(C=C(CO)C(O)C2(O)C1O)C1C(CC3C)C1(C)C	0

CC(C)[N+](C)(CCOC(=O)C1c2ccccc2Oc2ccccc21)C(C)C	0
CC1(C)COP(=S)(OP2(=S)OCC(C)(C)CO2)OC1	0
COc1cc(NC(=O)CC(C)=O)c(OC)cc1Cl	0
NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(=O)O	0
COc1ccc(N/N=C(\C(C)=O)C(=O)Nc2ccccc2OC)c([N+](=O)[O-])c1	0
CC1(C)NC(=O)NC1=O	0
CCOc1ccccc1OC(c1ccccc1)C1CNCCO1	0
C[N+](1(C)CCCC(OC(=O)C(O)(c2ccccc2)c2ccccc2)C1	0
CC[N+](C)(CC)CCOC(=O)C1c2ccccc2Oc2ccccc21	0
c1ccc(C2(c3ccccc3)CC2C2=NCCN2)cc1	0
COc1cc2c(cc1OC)C1CC(=O)C(CC(C)C)CN1CC2	0
CC1CC(OC(=O)C(O)c2ccccc2)CC(C)(C)N1C	0
CCCCN(CC)c1c([N+](=O)[O-])cc(C(F)(F)F)cc1[N+](=O)[O-]	0
CC(=O)N(O)CCCCCNC(=O)CCC(=O)N(O)CCCCCNC(=O)CCC(=O)N(O)CCCCCN	0
CC(=O)NCc1c(I)c(NC(C)=O)c(I)c(C(=O)O)c1I	0
O=c1cc(O)c(Cl)c[nH]1	0
C[N+](1(C)CCC(OC(=O)C(O)(c2ccccc2)C2CCCC2)C1	0
O=c1[nH]c2ccccc2n1CCCN1CCN(C(c2ccccc2)c2ccccc2)CC1	0
COc1ccc(CC(C)NCC(O)c2ccc(O)c(NC=O)c2)cc1	0
O=C(O)CN1C(=O)c2cccc3cccc(c23)C1=O	0
Oc1ccc2c(c1)C13CCCCC1(O)C(C2)N(CC1CCC1)CC3	0
O=C1CCCC(=O)C1=C(O)c1ccc(C(F)(F)F)cc1[N+](=O)[O-]	0
Clc1ccc(C(Cn2ccnc2)OCc2c(Cl)cccc2Cl)c(Cl)c1	0
NC(=O)NC(=O)C(Oc1ccc(Cl)cc1)Oc1ccc(Cl)cc1	0
CCN1C(=O)NC(c2ccccc2)C1=O	0
O=C(O)CC(O)CC(O)C=Cc1c(C2CC2)nc2ccccc2c1-c1ccc(F)cc1	0
CC(C)(C)NCC(O)COc1cccc2c1CC(O)C(O)C2	0
CCCC(CCC)C(=O)OC1CC2CCC(C1)[N+](2(C)C	0
CC(CN(C)C)CN1c2ccccc2Sc2ccccc21	0
CCCCN(c1nc(N(CCCNC2NC(N(CCCC)C3CC(C)(C)N(C)C(C)(C)C3)NC(N(CCCC)C3CC(C)(C)N(C)C(C)(C)C	0
COc1ccccc1NC(=O)/C(=N/Nc1ccc(Cl)cc1[N+](=O)[O-])C(C)=O	0
COc1cc(C(=O)NCc2ccc(OCCN(C)C)cc2)cc(OC)c1OC	0
COc1cc2ccc1Oc1cc3c(cc1OC)CCN(C)C3Cc1ccc(cc1)Oc1c(OC)c(OC)cc3c1C(C2)[N+](C)(C)CC3	0
CCOC(=O)CCC(=O)OC1C(OC2C(C)C(OC3CC(C)(OC)C(O)C(C)O3)C(C)C(=O)OC(CC)C(C)(O)C(O)C(C)C(0
Cc1cc(C#N)cc(C)c1Oc1nc(Nc2ccc(C#N)cc2)nc(N)c1Br	0
CC(C(=O)O)c1ccc(N2Cc3ccccc3C2=O)cc1	0
NCCCCC(NC(CCc1ccccc1)C(=O)O)C(=O)N1CCCC1C(=O)O	0
CCOC(=O)Cn1cc(I)c(=O)c(I)c1	0
CC(Cc1ccc(O)c(O)c1)(NN)C(=O)O	0
Cc1oncc1C(=O)Nc1ccc(C(F)(F)F)cc1	0
COCC(NC(C)=O)C(=O)NCc1ccccc1	0
CNC1(c2ccccc2Cl)CCCCC1=O	0
Cc1ccccc(C)c1NC(=O)CN1CCN(CCCC(c2ccc(F)cc2)c2ccc(F)cc2)CC1	0
CCCCNS(=O)(=O)c1ccccc1	0
CC1=NN(c2ccccc2)C(=O)/C1=N\Nc1ccc(-c2ccc(N/N=C3\C(=O)N(c4ccccc4)N=C3C)c(Cl)c2)cc1Cl	0

CC(=O)OC1CC2CCC3C(CCC4(C)C3CC([N+](C)CCCC3)C4OC(C)=O)C2(C)CC1N1CCCCC1	0
Cn1nnc2c(C(N)=O)ncn2c1=O	0
CCC1(c2ccccc2)C(=O)NC(=O)NC1=O	0
NC(=O)CCCN=C(c1ccc(Cl)cc1)c1cc(F)ccc1O	0
COc1cc(NC(C)CCCN)c2ncccc2c1	0
CCN(CC)C(=O)C1CN2CCc3cc(OC)c(OC)cc3C2CC1OC(C)=O	0
CC(=O)NC1C(O)OC(CO)C(O)C1OC1OC(C(=O)O)C(OC2OC(CO)C(O)C(OC3OC(C(=O)O)C(O)C(O)C3O)C	0
CCOC(=O)Nc1ccc(NCc2ccc(F)cc2)cc1N	0
O=C1NC(=O)C2(N1)c1cc(F)ccc1-c1ccc(F)cc12	0
CN1C2CCC1CC(OC(=O)C(CO)c1ccccc1)C2	0
CCC(=O)c1ccc2c(c1)N(CC(C)N(C)C)c1ccccc1S2	0
CC1C=CC=CCCC=CC=CC=CC(OC2OC(C)C(O)C(N)C2O)CC2OC(O)(CC(O)C(O)CCC(O)CC(O)CC(O)C	0
O=C(O)Cc1cn(-c2ccccc2)nc1-c1ccc(Cl)cc1	0
O=C1NS(=O)(=O)c2ccccc21	0
O=C(Nc1cc(Cl)c(NC(=O)c2cc3ccccc3c(N=Nc3cc(Cl)ccc3Cl)c2O)cc1Cl)c1cc2ccccc2c(N=Nc2cc(Cl)cc	0
CC(C)(c1ccccc1)c1cc(-n2nc3ccccc3n2)c(O)c(C(C)(C)c2ccccc2)c1	0
O=C1N(Cc2ccccc2)C2C[S+](CCCC3C2N1Cc1ccccc1	0
COc1ccc2c(C(=O)c3ccc(Cl)cc3)c(C)n(CC(=O)O)c2c1	0
O=C1Nc2ccc(Cl)cc2C(c2ccccc2Cl)=NC1O	0
CCN1C(=CC=CC=Cc2sc3ccccc3[n+](2CC)Sc2ccccc21	0
CCOC(=O)C(CCc1ccccc1)NC(C)C(=O)N1C(C(=O)O)CC2CCCC21	0
C#CC1(O)CCC2C3CCC4=CC(=NO)CCC4C3CCC21CC	0
Clc1ccc2c(c1)CCc1cccn1C2=C1CCNCC1	0
COc1cc2c3cc1Oc1cc(ccc1O)CC1c4c(cc(OC)c(O)c4Oc4ccc(cc4)CC3N(C)CC2)CC[N+](1(C)C	0
CCCCC(CC)COC(=O)c1ccc(Nc2nc(Nc3ccc(C(=O)OCC(CC)CCCC)cc3)nc(Nc3ccc(C(=O)OCC(CC)CCCC)C	0
CNC(Cc1ccccc1)C(=O)N1CCCC1C(=O)NC(C=O)CCCNC(=N)N	0
O=C(CCCN1CCC(O)(c2ccc(Cl)cc2)CC1)c1ccc(F)cc1	0
CC(Cc1ccc2c(c1)OCO2)NCC(O)c1ccc(O)c(O)c1	0
O=C1CC2(CCCC2)CC(=O)N1CCCCN1CCN(c2ncccn2)CC1	0
CN(C)C(=O)C(CCN1CCC(O)(c2ccc(Cl)cc2)CC1)(c1ccccc1)c1ccccc1	0
O=C(O)c1nc(=O)[nH]c(=O)[nH]1	0
Cc1ccc(-c2cc(C(F)(F)F)nn2-c2ccc(S(N)(=O)=O)cc2)cc1	0
CCOP(=S)(OCC)Oc1nc(Cl)c(Cl)cc1Cl	0
CN1CCC23c4c5ccc(O)c4OC2C(=O)CCC3(O)C1C5	0
CC(NC(CCc1ccccc1)C(=O)O)C(=O)C1CCCN1C(=O)O	0
CCCCC1C(=O)N(c2ccccc2)N(c2ccccc2)C1=O	0
CCC1(c2ccccc2)C(=O)NCNC1=O	0
COc1ccc2c(c1)c(CC(=O)OCC(=O)O)c(C)n2C(=O)c1ccc(Cl)cc1	0
COc1cc2c(c(OC)c1OC)-c1ccc(OC)c(=O)cc1C(NC(C)=O)CC2	0
Oc1ccc2c3c1OC1C(O)CCC4(O)C(C2)N(CC2CCC2)CCC314	0
CC(=O)N(CC(O)CO)c1c(l)c(C(=O)NCC(O)CO)c(l)c(C(=O)NCC(O)CO)c1I	0
O=C(OCCN1CCN(c2cccc(C(F)(F)F)c2)CC1)c1ccccc1Nc1ccnc2cc(C(F)(F)F)ccc12	0
CNC(=O)Oc1ccc2c(c1)C1(C)CCN(C)C1N2C	0
C#CC1(O)CCC2C3CCC4=Cc5oncc5CC4(C)C3CCC21C	0
CCC1OC(=O)C(C)C(OC2CC(C)(OC)C(O)C(C)O2)C(C)C(OC2OC(C)CC(N(C)C)C2O)C(C)(O)CC(C)C(=O)C	0

O=C(O)Cc1nn(-c2ccc(F)cc2)cc1-c1ccc(Cl)cc1	0
O=C(Nc1cccc1)OCC(CN1CCCCC1)OC(=O)Nc1cccc1	0
CC(C)(C)CC(C)(C)c1ccc(O)c(-n2nc3cccc3n2)c1	0
COc1cccc1NC(=O)/C(=N/Nc1ccc(-c2ccc(N/N=C\C(C)=O)C(=O)Nc3cccc3OC)c(Cl)c2)cc1Cl)C(C)=	0
CCCCCOc1ccc(C2SC(=O)NC2=O)cc1OCC	0
CC(C)(C)CC(C)(C)c1cc(Cc2cc(C(C)(C)CC(C)(C)C)cc(-n3nc4cccc4n3)c2O)c(O)c(-n2nc3cccc3n2)c1	0
CN(C)CCOC1=Cc2cccc2Sc2ccc(Cl)cc21	0
Cc1cc2c(s1)Nc1cccc1N=C2N1CCN(C)CC1	0
CC(C)(O)c1cccc1CCC(SCC1(CC(=O)O)CC1)c1ccc(C=Cc2ccc3ccc(Cl)cc3n2)c1	0
O=C(O)C1C(=CCO)OC2CC(=O)N21	0
C=C1c2cccc(O)c2C(=O)C2=C(O)C3(O)C(=O)C(C(N)=O)C(=O)C(N(C)C)C3C(O)C12	0
O=c1[nH]cc(N(CC(Cl)CC(Cl)c(=O)[nH])1	0
Cc1ncc([N+](=O)[O-])n1CC(O)CCl	0
CC1(C)SC(C(NC(=O)Cc2cccc2)C(=O)NCCCCC(=O)O)NC1C(=O)O	0
CCCc1cc(=O)[nH]c(=S)[nH]1	0
CC(c1cc2cccc2s1)N(O)C(N)=O	0
CCCN(C)C(=O)Nc1c(C)csc1C(=O)OC	0
O=C1CN=C(c2cccc2)c2cc(Cl)ccc2N1CC(F)(F)F	0
CCCCC1(CN2CCN(C)CC2)C(=O)N(c2cccc2)N(c2cccc2)C1=O	0
CC1=Nc2ccc(Cl)cc2S(=O)(=O)N1	0
Cn1c(=O)c2c(ncn2CC(O)CO)n(C)c1=O	0
O=C(O)Cc1nn(Cc2ccc(Br)cc2F)c(=O)c2cccc12	0
CC(C1CC1)C(O)(Cn1cncn1)c1ccc(Cl)cc1	0
CN(CC(O)CO)C(=O)c1c(l)c(NC(=O)C(CO)CO)c(l)c(C(=O)N(C)CC(O)CO)c1l	0
OC1(c2ccc(Cl)cc2)c2cccc2C2=NCCN21	0
CC(O)CN(CC(C)O)c1nc(Nc2ccc(S(=O)(=O)O)cc2)nc(Nc2ccc(C=Cc3ccc(Nc4nc(Nc5ccc(S(=O)(=O)O)cc5)cc4)cc3)cc2)cc1	0
COc1cc(Cc2cnc(N)nc2N)c2c(c1OC)OC(C1CC1)C=C2	0
CCC(=O)N(c1cccc1)C1(COC)CCN(CCN2nnn(CC)c2=O)CC1	0
CCCCc1ncc(C=C(Cc2cccs2)C(=O)O)n1Cc1ccc(C(=O)O)cc1	0
CC(=O)NCC1CN(c2ccc(N3CCOCC3)c(F)c2)C(=O)O1	0
Cc1cc(C(=O)NNCc2cccc2)no1	0
Cc1ccc(-c2c(Cl)nc(C#N)n2S(=O)(=O)N(C)C)cc1	0
COc1cc2nc(N3CCN(C(=O)c4ccco4)CC3)nc(N)c2cc1OC	0
NS(=O)(=O)c1cc2c(cc1Cl)NC(Cc1ccc(F)cc1)NS2(=O)=O	0
CCCCNC(=O)NS(=O)(=O)c1ccc(C)cc1	0
CCCC1C(=O)N2C(N(C)C)=Nc3ccc(C)cc3N2C1=O	0
COc1cc2nc(N(C)CCNC(=O)C3CCCO3)nc(N)c2cc1OC	0
CC(C)NCC1CCc2cc(CO)c([N+](=O)[O-])cc2N1	0
O=C1NC(c2cccc2)(c2cccc2)C(=O)N1COP(=O)(O)O	0
CCCCc1nc(Cl)c(CO)n1Cc1ccc(-c2cccc2-c2nn[nH]n2)cc1	0
NC(C(=O)NC1C(=O)N2C(C(=O)O)=C(Cl)CCC12)c1cccc1	0
CN1CC(C(=O)NC2(C)OC3(O)C4CCCN4C(=O)C(Cc4cccc4)N3C2=O)C=C2c3cccc4c3c(cn4C)CC21	0
COCCOC(=O)C1=C(C)NC(C)=C(C(=O)OC(C)C)C1c1cccc([N+](=O)[O-])c1	0
COC(=O)c1ccc(l)cc1S(=O)(=O)NC(=O)Nc1nc(C)nc(OC)n1	0
O=c1[nH]c(=O)n(C2CC(O)C(CO)O2)cc1l	0

Cn1c(CNc2ccc(C(=N)N)cc2)nc2cc(C(=O)N(CCC(=O)O)c3ccccc3)ccc21	0
COC(=O)NC(C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(O)CN(Cc1ccc(-c2ccccc2)cc1)NC(=O)C(NC(=O)OC)C(C)(C)C(C)C	0
CC1(C)SC2C(NC(=O)COc3ccccc3)C(=O)N2C1C(=O)O	0
CC1(C)SC2C(NC(=O)C(NC(=O)N3CCNC3=O)c3ccccc3)C(=O)N2C1C(=O)O	0
Cc1ncc(COP(=O)(O)O)c(CN(CCN(CC(=O)O)Cc2c(COP(=O)(O)O)cnc(C)c2O)CC(=O)O)c1O	0
COC(=O)C1=C(C)NC(C)=C(C(=O)OC(C)(C)CN(C)CCC(c2ccccc2)c2ccccc2)C1c1cccc([N+](=O)[O-])c1	0
OCC1OC(n2cnc3c2NC=NCC3O)CC1O	0
Nc1nc(F)nc2c1ncn2C1OC(CO)C(O)C1O	0
CC(C)C(N)C(=O)OCCOCn1cnc2c(=O)nc(N)[nH]c21	0
CN1COCN(Cc2cnc(Cl)s2)C1=N[N+](=O)[O-]	0
Nc1nc(Cl)nc2c1ncn2C1CC(O)C(CO)O1	0
O=C1NCCN1c1ncc([N+](=O)[O-])s1	0
CCOc1ccccc1OCCNC(C)Cc1ccc(OC)c(S(N)(=O)=O)c1	0
CNC(=O)c1cnn(-c2nc(N)c3ncn(C4OC(CO)C(O)C4O)c3n2)c1	0
COC(=O)C1=C(C)NC(C)=C(C(=O)OC2CCN(Cc3ccccc3)C2)C1c1cccc([N+](=O)[O-])c1	0
CC1C(NC(=O)C(=NOC(C)(C)C(=O)O)c2csc(N)n2)C(=O)N1S(=O)(=O)O	0
COc1ccccc1Oc1c(NS(=O)(=O)c2ccc(C(C)(C)C)cc2)nc(-c2ncccn2)nc1OCCO	0
Cc1nc2n(c(=O)c1CCN1CCC(c3noc4cc(F)ccc34)CC1)CCCC2	0
CCN1CCCC1CNC(=O)c1cc(S(=O)(=O)CC)c(N)cc1OC	0
CC(=O)OCC1=C(C(=O)O)N2C(=O)C(NC(=O)CSc3ccncc3)C2SC1	0
Cc1cnc(C(=O)NCCc2ccc(S(=O)(=O)NC(=O)NC3CCCC3)cc2)cn1	0
CCN1CCCC1CNC(=O)c1cc(S(N)(=O)=O)ccc1OC	0
Cc1onc(-c2c(Cl)cccc2Cl)c1C(=O)NC1C(=O)N2C1SC(C)(C)C2C(=O)O	0
CN=C1CN(O)C(c2ccccc2)=c2cc(Cl)ccc2=N1	0
CCCN1CC(NS(=O)(=O)N(CC)CC)CC2Cc3c(O)cccc3CC21	0
COc1ccc2c(c1)C(=O)N(CCc1ccc(S(=O)(=O)NC(=O)NC3CCCC3)cc1)C(=O)C2(C)C	0
COC1(NC(=O)C2SC(=C(C(N)=O)C(=O)O)S2)C(=O)N2C(C(=O)O)=C(CSc3nnnn3C)CSC21	0
CC1(Cn2ccnn2)C(C(=O)O)N2C(=O)CC2S1(=O)=O	0
NCC1ccccc1CC(=O)NC1C(=O)N2C(C(=O)O)=C(CSc3nnnn3CC(=O)O)CSC12	0
CC1CS(=O)(=O)CCN1N=Cc1ccc([N+](=O)[O-])o1	0
O=C(O)C1=C(CSc2nnnn2CS(=O)(=O)O)CSC2C(NC(=O)C(O)c3ccccc3)C(=O)N12	0
CCC1=C(C)CN(C(=O)NCCc2ccc(S(=O)(=O)NC(=O)NC3CCC(C)CC3)cc2)C1=O	0
CC1(C)SC2C(NC(=O)C(NC(=O)N3CCN(S(C)(=O)=O)C3=O)c3ccccc3)C(=O)N2C1C(=O)O	0
CC(O)C1C(=O)N2C(C(=O)O)=C(SC3CNC(CNS(N)(=O)=O)C3)C(C)C12	0
N=C(N)N1CCCC(CN(C(CCN)=O)C(=O)N(CC(=O)O)C2CC2)S(=O)(=O)c2ccc3ccccc3c2)C1	0
CCN1CCN(C(=O)NC(C(=O)NC2C(=O)N3C(C(=O)O)=C(CSc4nnnn4C)CSC23)c2ccc(O)cc2)C(=O)C1=O	0