

SMILES	Class
O=P(OC)(OC)C(O)C(Cl)(Cl)Cl	0
O=C(NC)CSP(OC)(OC)=S	0
O=P(OC=C(Cl)Cl)(OC)OC	0
O=C(OCC)CC(C(=O)OCC)SP(OC)(OC)=S	0
O=C(OC(C)C)C=C(C=CCC(C)CCCC(OC)(C)C)C	0
NC(NCCC)=S	0
ON=C(C)CC	0
O=C(O)C(Br)Br	0
O=C(OCC(CC)CCCC)CCCCC(=O)OCC(CC)CCCC	0
F[Sn](CCCC)(CCCC)CCCC	1
O=C(ON=CC(C)(C)SC)NC	0
O=P(OC)(OC)SCCSCC	0
O=CC=C(C)CCC=C(C)C	0
C(N(CC)CC)(=S)SSC(N(CC)CC)=S	1
OCC(CC)C(O)CCC	0
O=P(OCCCC)(OCCCC)OCCCC	0
C(N(C)C)(=S)SC(N(C)C)=S	1
O=P(OCCCl)(OCCCl)OCCCl	0
OCCO	0
C(C(CBr)Br)Cl	0
O=C(N(C)C)Cl	0
CCC[Sn](CCC)(CCC)Cl	1
O=CN(C(=O)CSP(OC)(OC)=S)C	0
O=C(NP(=O)(OC)SC)C	0
C(=C(Cl)Cl)(Cl)Cl	0
Oc1ccc2c(c1)CCC3C2CCC4(C)(C(O)CCC34)	1
O=C2CCC3C4CCc1cc(O)ccc1C4(CCC23(C))	1
Oc1ccc2c(c1)CCC3C2CCC4(C)(C(O)C(O)CC34)	1
O=C(OC2CCC3C4CCc1cc(O)ccc1C4(CCC23(C)))CCCC	1
O=C(Oc1ccc2c(c1)CCC3C2CCC4(C)(C(O)CCC34))c5ccccc5	1
O=C(Oc1ccc2c(c1)CCC3C2CCC4(C)(C(OC(=O)CCC)CCC34))c5ccccc5	0
OC2CC3C4CCc1cc(OC)ccc1C4(CCC3(C)(C2(O)))	1
O=C2CCC3C4CCc1cc(OC)ccc1C4(CCC23(C))	1
C#CC3(O)(CCC2C4CCc1cc(OC)ccc1C4(CCC23(C)))	1
O=C(O)COc1ccc2c(c1)CCC3C2CCC4(C)(C(O)CCC34)	1
O=C(O)CCC(=O)OC2CCC3C4CCc1cc(O)ccc1C4(CCC23(C))	1
O=C(OC2CCC3C4CCc1cc(O)ccc1C4(CCC23(C)))CCCCC	1
C#CC4(O)(CCC3C5CCc2cc(OC1CCCC1)ccc2C5(CCC34(C)))	1
O=C(Oc1ccc2c(c1)CCC3C2CCC4(C(=O)CCC34)(C))C	1
O=C(OC2CCC3C4CCc1cc(O)ccc1C4(CCC23(C)))CC	1
OC3CC4C5CCc2cc(OCc1ccccc1)ccc2C5(CCC4(C)(C3(O)))	1
O=C(OC2CC3C4CCc1cc(O)ccc1C4(CCC3(C)(C2(OC(=O)C))))C	1
O=C(Oc1ccc2c(c1)CCC3C2CCC4(C)(C(OC(=O)C)C(OC(=O)C)CC34))C	1
O=C2CC3C4CCc1cc(O)ccc1C4(CCC3(C)(C2(O)))	1

Oc1cc2c(cc1(O))C3CCC4(C)(C(O)CCC4(C3(CC2)))	1
Oc1ccc2c(c1(O))CCC3C2CCC4(C)(C(O)CCC34)	1
Oc1cc2c(cc1(OC))C3CCC4(C)(C(O)CCC4(C3(CC2)))	1
Oc1cc2c(cc1(O))C3CCC4(C)(C(O)C(O)CC4(C3(CC2)))	1
O=C2CCC3C4CCc1ccccc1C4(CCC23(C))	1
O=C2CCC3C4CCc1c(O)c(O)ccc1C4(CCC23(C))	1
O=C2CCC3C4CCc1cc(O)c(OC)cc1C4(CCC23(C))	1
Oc1ccc2c(c1)C(O)CC3C2CCC4(C)(C(O)CCC34)	1
O=C2c1cc(O)ccc1C3CCC4(C)(C(O)CCC4(C3(C2)))	1
O=C2CCC3C4C=Cc1cc(O)ccc1C4(CCC23(C))	1
O=C(O)CON=C2c1cc(O)ccc1C3CCC4(C)(C(O)CCC4(C3(C2)))	1
O=C3CCC4C2=CCc1cc(O)ccc1C2CCC34(C)	1
O=C1CC3=C(CC1)C4CCC2(C)(C(CCC2(O)(C#C)))C4(CC3))	1
O=C4C=C3CCC2C(CCC1(C)(C2(CCC1(O)(C#C))))C3CC4	1
O=C3C=C2CCC1C4CCC(=O)C4(C)(CCC1C2(C)CC3)	0
O=C4C=C3CCC2C(CCC1(CC)(C2(CCC1(O)(C#C))))C3CC4	1
O=C(OC2CCC3C4CCC1CC(=O)CCC1(C)C4(CCC23(C)))CCCCC	0
O=C2CCC3C4CCC1CC(O)CCC1(C)C4(CCC23(C))	0
OC4CCC2(C)(C(CCC1C3CCCC3(C)(CCC12))C4)	1
O=C4C=C3CCC1C(CCC2(C)(C(C(=O)C)CCC12))C3(C)CC4	0
O=C3C=C2CCC1C4CCC(C(=O)CO)C4(C)(CC(O)C1C2(C)CC3)	0
O=C2CCC3C4CC=C1CC(O)CCC1(C)C4(CCC23(C))	1
O=C3C=C1C(CCC2(C)(C(CCC12(O))C(C)C(O)CCC(O)(C)C))C4(C)(CC(O)C(O)CC34)	0
O=C(OC3(C(=O)C)(CCC2C4CC(C1=CC(=O)CCC1(C)C4(CCC23(C)))C))C	0
O=C5C=C4C(=C3C(c1ccc(cc1)N(C)C)CC2(C)(C(CCC2(O)(C#CC))C3CC4))CC5	1
O=C3C=C2CCC1C4CCC(O)(C(=O)CO)C4(C)(CC(O)C1C2(C)CC3)	0
O=C4C=C3CCC1C(CCC2(C)(C(O)CCC12))C3CC4	1
O=C(O)C(=C1C(OC(=O)C)CC3(C)(C1CC(O)C2C4(C)(CCC(O)C(C)C4(CCC23(C))))CCC=C(C)C	0
O=C(O)CCC(=O)Oc1ccc2c(c1)CCC3C2CCC4(C(=O)CCC34)(C)	1
O=C1C=CC3(C(=C1)CCC2C4CC(C)C(O)(C(=O)CO)C4(C)(CC(O)C23(F))))(C)	0
O=C1C(=CO)CC4(C)(C(C1)CCC3C4(CCC2(C)(C3(CCC2(O)(C))))	1
O=C(O)CCC(C)C3CCC2C4C(=O)CC1CC(=O)CCC1(C)C4(CC(=O)C23(C))	0
O=C1CC(C)C3(C)(C(C1)CCC2C4CCC(O)C4(C)(CCC23))	1
O=C1CCC3(C)(C(C1)CCC2C4CCC(=O)C4(C)(CCC23))	0
O=C1CCC3(C)(C(C1)CCC2C4CCC(C(=O)C)C4(C)(CCC23))	0
O=C(O)CCC(C)C2CCC3C4CCC1CC(=O)CCC1(C)C4(CCC23(C))	0
O=C1CCC2(C)(C3C(=O)CC4(C)(C(C(=O)C)CCC4(C3(CCC2(C1))))	0
O=C(OCC(=O)C3(O)(CCC2C4CCC1=CC(=O)CCC1(C)C4(C(O)CC23(C))))C	0
O=C1OC3(CC1)(CCC2C5C(CCC23(C))C4(C(=CC(=O)CC4)CC5SC(=O)C)(C))	0
O=C(OC2CCC3C4CCC1=CC(=O)CCC1(C)C4(CCC23(C)))CC	0
O=C4C=C3CCC2C(CCC1(C)(C2(CCC1(O)(C(=O)C))))C3(C)CC4	0
O=C(OC3(C(=O)C)(CCC2C4CCC1=CC(=O)CCC1(C)C4(CCC23(C))))C	0
O=C(OC3(C(=O)C)(CCC2C4CCC1=CC(=O)CCC1(C)C4(CCC23(C)))CCCC	0
O=C(OCC(=O)C3(O)(CCC2C4CCC1=CC(=O)CCC1(C)C4(C(=O)CC23(C))))C	0
O=C(OC2CCC3C4CCC1=CC(=O)CCC1(C)C4(CCC23(C)))C	0

O=C(OC3(C(=O)CO)(CCC2C4CCC1=CC(=O)CCC1(C)C4(C(O)CC23(C))))CCC	0
O=C3C=C2CCC1C4CCC(O)(C(=O)C)C4(C)(CC(O)C1C2(C)CC3)	0
O=C4C=C3C(O)CC1C(CCC2(C)(C(O)CCC12))C3(C)CC4	0
O=C3C=C2CCC1C4CCC(=O)C4(C)(CC(O)C1C2(C)CC3)	0
O=C4C=C3CCC2C(CCC1(C)(C2(CCC1(O)(C(=O)CO))))C3(C)CC4	0
O=C3C=C2CCC1C4CCC(=O)C4(C)(CCC1C2(CO)CC3)	0
O=C(OCC(=O)C2CCC3C4CCC1=CC(=O)CCC1(C)C4(CCC23(C)))C	0
O=C3C=C2CCC1C4CCC(O)(C(=O)CO)C4(C)(CC(O)C1(F)C2(C)CC3)	0
O=C(OC3(C(=O)CO)(CCC2C4CCC1=CC(=O)CCC1(C)C4(C(O)CC23(C))))CCCC	0
O=C4C=C3CCC2C5CC1OC(OC1(C(=O)CCL)C5(C)(CC(O)C2(F)C3(C)CC4))(C)C	0
O=C4C=C3CCC1C(CCC2(C)(C(CCC12)C(C)CCCC(C)C))C3(C)CC4	0
O=C3C=C2CCC1C4CCC(C(=O)C)C4(C)(CC(O)C1C2(C)CC3)	0
O=C4C=C3CCC1C(C(=O)CC2(C(=O)CCC12)(C))C3(C)CC4	0
O=C4C=C3CCC1C(C(=O)CC2(C)(C(C(=O)C)CCC12))C3(C)CC4	0
O=C4C=C3CCC1C(CCC2(C)(C(CCC12)C(O)C))C3(C)CC4	0
O=C(O)CCC(=O)OCC(=O)C2CCC3C4CCC1=CC(=O)CCC1(C)C4(CCC23(C))	0
O=C5C=C4CCC3C(CCC2(C)(C3(CC1OC12(C(=O)C))))C4(C)CC5	0
O=C4C=C3CCC1C(CCC2(C)(C(C(=O)COC(O)C(O)C(O)C(=O)CCO)CCC12))C3(C)CC4	0
O=C3C=C2CCC1C4CCC(C(=O)COS(=O)(=O)O)C4(C)(CC(O)C1C2(C)CC3)	0
O=C(OC3(O)(CCC2C4CCC1=CC(=O)CCC1(C)C4(C(O)CC23(C))))CCCCCCC	0
O=C(O)CCC(=O)OCC(=O)C3(O)(CCC2C4CCC1=CC(=O)CCC1(C)C4(C(O)CC23(C)))	0
O=C3C=C2C(C)CC1C4CCC(O)(C(=O)C)C4(C)(CC(O)C1C2(C)CC3)	0
O=C4C=C3CCC2C(CCC1(C)(C2(CCC1(O)(C(O)C))))C3(C)CC4	0
O=C(O)C5OC(OC2CCC3C4CCC1=CC(=O)CCC1(C)C4(CCC23(C)))C(O)C(O)C5(O)	0
Oc1cccc1	0
Oc1ccc(cc1)CC	0
Oc1ccc(cc1)CCC	0
Oc1ccc(cc1)CCCC	1
Oc1ccc(cc1)CCCCC	1
Oc1ccc(cc1)CCCCCCC	1
Oc1cccc(c1)CCCCCCCCCCCCCCC	0
Oc1ccc(cc1)C(C)C	1
Oc1ccc(cc1)C(C)CC	1
Oc1ccc(cc1)C(C)(C)CC	1
Oc1ccc(cc1)CCCCCCCCC	1
Oc1ccc(cc1)C(C)(C)CC(C)(C)C	1
Oc1ccc(cc1)C2CCCC2	1
Oc1ccc(cc1)C34(CC2CC(CC(C2)C3)C4)	1
FC(F)(F)c1ccc(O)cc1	1
c1cc(ccc1CCCC)Br	0
c1cc(c(cc1Cl)Cl)C	0
c1cc(ccc1C(Cl)(Cl)Cl)Cl	0
O=C(O)c1ccc(cc1Cl)Cl	0
O=C(OCC)c1ccc(cc1)Br	0
O=C(c1ccc(F)cc1)CCCC	0

N#Cc1c(cc(cc1Cl)Cl)Cl	0
O=P(OC(=C(Cl)c1cc(c(cc1Cl)Cl)Cl)(OC)OC	0
O=P(Oc1ccc(cc1Cl)Br)(OCC)SCCC	0
O=C(OCC(CC)CCCC)c1ccccc1(O)	0
O=C(OCCC=CCC)c1ccccc1(O)	0
O=C(OCC)c1ccccc1(OCC(=O)OCC)	0
O=C(O)COc1cc(c(cc1Cl)Cl)Cl	0
Oc1ccc(OC)cc1C(C)(C)C	0
Nc1ccc(c(c1)Cl)Cl	0
O=[N+][O-]c1cc(c(O)c(c1)C(C)CC)[N+](=O)[O-]	0
O=C(Nc1ccc(c(c1)Cl)Cl)C(C)C	0
N#Cc1cc(c(O)c(c1)I)I	0
O=C(O)CCCOc1ccc(cc1Cl)Cl	0
Oc1ccccc1C(C)CC	0
Oc1ccccc1CC	0
Oc1cccc(c1)CC	0
Oc1ccc(cc1)C	0
Oc1ccccc1C(C)(C)C	0
Oc1ccc(cc1C(C)(C)C)C(C)(C)C	1
Oc1cc(ccc1C)C(C)C	0
Oc1cc(cc(c1)C(C)(C)C)C(C)(C)C	0
Oc1c(cc(cc1C(C)(C)C)C)C	0
Oc1c(cc(cc1C(C)(C)C)CC)C(C)(C)C	0
O=C(O)c1ccc(O)cc1	0
O=C(OCCCC)c1ccc(O)cc1	1
O=C(OCCCCCC)c1ccc(O)cc1	1
O=C(OCCCCCCCCCCCC)c1ccc(O)cc1	1
O=C(OCC(CC)CCCC)c1ccc(O)cc1	1
O=C(OCCC)c1ccc(O)cc1	1
O=C(OCCCCC)c1ccc(O)cc1	1
O=C(OCc1ccccc1)c2ccc(O)cc2	1
O=C(OC(C)C)c1ccc(O)cc1	1
Oc1ccc(O)cc1	0
Oc1ccc(OCC)cc1	0
Oc1ccc(OCCC)cc1	0
Oc1ccc(OCCCCC)cc1	1
Oc1ccc(c(O)c1)CCCCCCCCCCCC	1
Oc1ccc(cc1(O))C(C)(C)C	1
Oc1cc(O)cc(c1)CCCCC	0
Oc1ccc(c(O)c1)C2CCCCC2	1
O=C(OC)C=Cc1cc(O)ccc1(O)	1
O=C(OCCCCCCCC)c1cc(O)c(O)c(O)c1	1
O=C(OC(C)C)c1cc(O)c(O)c(O)c1	1
O=C(OCCCCC)c1ccc(O)c(OC)c1	0
O=C(OC)c1cc(c(O)c(c1)Cl)Cl	0

<chem>Oc1ccc(cc1)CCCO</chem>	1
<chem>O=C(c1ccc(O)cc1(O))CCCCC</chem>	1
<chem>O=C(c1ccc(O)cc1)CC</chem>	0
<chem>O=C(O)C=Cc1ccc(O)cc1</chem>	0
<chem>O=C(c1ccc(O)cc1)CCCCCCCC</chem>	1
<chem>O=C(OC)CCc1ccc(O)cc1</chem>	0
<chem>Oc1ccc(c(c1)C)Cl</chem>	0
<chem>Oc1ccc(cc1C)Cl</chem>	0
<chem>Oc1ccc(cc1Cl)C</chem>	0
<chem>Oc1cc(c(c(c1)C)Cl)C</chem>	0
<chem>Oc1cc(c(cc1Cl)C)C</chem>	0
<chem>Oc1c(c(c(c(c1Br)Br)Br)Br)C</chem>	0
<chem>O=C1NC(=O)C(C(=O)N1)(c2ccc(O)cc2)CC</chem>	0
<chem>O=C(OC)Cc1ccc(O)cc1</chem>	1
<chem>O=C(O)CCc1ccc(O)cc1</chem>	0
<chem>O=C(C)CCc1ccc(O)cc1</chem>	0
<chem>Oc1ccc(cc1)CCOC</chem>	0
<chem>c1ccc(cc1)Cl</chem>	0
<chem>c1cc(cc(c1)Cl)Cl</chem>	0
<chem>c1cc(c(cc1Cl)Cl)Cl</chem>	0
<chem>c1c(cc(cc1Cl)Cl)Cl</chem>	0
<chem>c1cc(c(c(c1Cl)Cl)Cl)Cl</chem>	1
<chem>c1c(cc(c(c1Cl)Cl)Cl)Cl</chem>	0
<chem>c1c(c(c(c(c1Cl)Cl)Cl)Cl)Cl</chem>	0
<chem>c1ccc(c(c1)Br)Br</chem>	0
<chem>c1cc(cc(c1)Br)Br</chem>	0
<chem>c1cc(ccc1Br)Br</chem>	0
<chem>c1cc(c(cc1Br)Br)Br</chem>	0
<chem>c1c(cc(cc1Br)Br)Br</chem>	0
<chem>c1cc(c(cc1Cl)Cl)CCl</chem>	0
<chem>FC(F)(F)c1ccc(cc1Cl)Cl</chem>	0
<chem>Fc1c(F)c(F)c(c(F)c1(F))C(F)(F)F</chem>	0
<chem>Oc1ccc(cc1Cl)Cl</chem>	0
<chem>Oc1cc(ccc1Cl)Cl</chem>	0
<chem>Oc1c(cccc1Cl)Cl</chem>	0
<chem>Oc1cc(cc(c1)Cl)Cl</chem>	0
<chem>Oc1cc(cc(c1Cl)Cl)Cl</chem>	0
<chem>Oc1cc(c(cc1Cl)Cl)Cl</chem>	0
<chem>Oc1c(cc(cc1Cl)Cl)Cl</chem>	0
<chem>Oc1c(cc(c(c1Cl)Cl)Cl)Cl</chem>	0
<chem>Oc1c(c(c(c(c1Cl)Cl)Cl)Cl)Cl</chem>	0
<chem>Oc1ccccc1Br</chem>	0
<chem>Oc1cccc(c1)Br</chem>	0
<chem>Oc1ccc(cc1Br)Br</chem>	0
<chem>Oc1c(cc(cc1Br)Br)Br</chem>	0

c1cc(ccc1CCCC)Cl	0
c1cc(ccc1CCCCCCC)Br	0
O=C(OCC)c1ccccc1(C(=O)OCC)	0
O=C(OCCCCC)c1ccccc1(C(=O)OCCCCC)	1
O=C(OCCCCCC)c1ccccc1(C(=O)OCCCCCC)	1
O=C(OCCCCCCCC)c1ccccc1(C(=O)OCCCCCCCC)	1
O=C(OCCCCCCCCC)c1ccccc1(C(=O)OCCCCCCCCC)	0
O=C(OCC(C)C)c1ccccc1(C(=O)OCC(C)C)	1
O=C(OCC=C)c1ccccc1(C(=O)OCC=C)	0
O=C(OCCCCCCC(C)C)c1ccccc1(C(=O)OCCCCCCC(C)C)	1
O=C(OCC(CC)CCCC)c1ccccc1(C(=O)OCC(CC)CCCC)	1
O=C(OC1CCCCC1)c3ccccc3(C(=O)OC2CCCCC2)	1
O=C(Oc1ccccc1)c3ccccc3(C(=O)Oc2ccccc2)	0
O=C(OCc1ccccc1)c3ccccc3(C(=O)OCc2ccccc2)	1
O=C(OCCOCCCC)c1ccccc1(C(=O)OCCOCCCC)	0
O=C(O)c1ccccc1(C(=O)OC)	0
O=C(O)c1ccccc1(C(=O)OCC(CC)CCCC)	1
O=C(OCc1ccccc1)c2ccccc2(C(=O)OCCCC)	1
O=C(OCC(=O)OCCCC)c1ccccc1(C(=O)OCCCC)	0
O=C(OCC(CC)CCCC)c1ccc(C(=O)OCC(CC)CCCC)c(c1)C(=O)OCC(CC)CCCC	0
O=C(OCCCCCC)c1ccc(C(=O)OCCCCCC)c(c1)C(=O)OCCCCCC	0
O=C(OCCCCCCC(C)C)c1ccc(C(=O)OCCCCCCC(C)C)c(c1)C(=O)OCCCCCCC(C)C	0
O=C(OC)c1ccccc1(C(=O)OC)	0
O=C(Oc1ccccc1)c2cccc(c2)C(=O)Oc3ccccc3	0
O=C(OCC)c1ccc(cc1)C(=O)OCC	0
O=C(OCC=C)c1ccc(cc1)C(=O)OCC=C	0
O=C(OCC(CC)CCCC)c1ccc(cc1)C(=O)OCC(CC)CCCC	0
O=C(Oc1ccccc1)c2ccc(cc2)C(=O)Oc3ccccc3	0
c1ccc(cc1)CCCC	0
Nc1ccc(cc1)CCCC	0
Nc1ccc(cc1)CCCCC	0
Nc1ccc(cc1)CCCCCC	0
Nc1ccc(cc1)C(C)(C)C	0
O=C(O)c1ccc(cc1)CCCCC	0
O=C(O)c1ccc(cc1)CCCCCCC	0
O=[N+][O-]c1ccccc1	0
O=[N+][O-]c1ccc(cc1)C	0
O=[N+][O-]c1ccc(c(c1)[N+](=O)[O-])C	0
O=C(OCCN(CC)CC)c1ccc(N)cc1	0
O=C(OCC(CC)CCCC)c1ccc(cc1)N(C)C	0
O=C(Nc1ccc(c(c1)C(F)(F)F)[N+](=O)[O-])C(C)C	0
O=C(Nc1ccc(c(c1)Cl)Cl)N(OC)C	0
O=C(O)COc1ccc(cc1Cl)Cl	0
O=C(N(c1c(cccc1CC)CC)COC)CCl	0
O=C(O)C=C(C=CC=C(C=CC1=C(C)CCCC1(C)C)C)C	0

O=[N+](O)c1cccc1[N+](=O)[O-]	0
O=C(OC)c1cccc1(O)	0
Oc1cc(c(c(c1)C)C)C	0
O=C(OCCCCCCCCCCCCCCC)c1cc(c(O)c(c1)C(C)(C)C(C)(C)C	0
c1(c(c(c(c1Br)Br)Br)Br)Br	0
Oc1c(c(c(c(c1Br)Br)Br)Br)Br	0
c1(c(c(c(c(c1Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)C(=C(Cl)Cl)Cl	0
O=C(OCCOC)c1cccc1(C(=O)OCCOC)	0
O=C(OC(C)C)c1ccc(N)cc1	0
O=C(OCC)c1ccc(F)cc1	0
O=C(OCC)c1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]	0
Nc1ccc(cc1)CCCCCCCC	0
Oc1ccc(OC)c(OC)c1	0
O=C(c1ccc(c(c1Cl)Cl)Cl)C	0
O=C(OCCCC)c1ccc(N)cc1	1
O=C(OCCC)c1ccc(N)cc1	0
O=C(O)c1ccc(cc1)C(F)(F)F	0
O=Cc1ccc(cc1)C(F)(F)F	0
FC(F)(F)c1cc(O)cc(c1)C(F)(F)F	0
O=C(OCCCC)c1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]	0
FC(F)(F)Oc1ccc(O)cc1	1
O=C(OC)c1cc(O)cc(c1)C(=O)OC	0
O=C(OCCC(C)C)c1ccc(cc1)N(C)C	0
O=C(O[Sn](CCCC)(CCCC)CCCC)c1cccc1	1
O=C(O)C=Cc1ccc(O)c(OC)c1	0
O=C(NC(C#C)(C)C)c1cc(cc(c1)Cl)Cl	0
Oc1ccc(N)cc1	1
O(c1cc(c(cc1Cl)Cl)Cl)P(OC)(OC)=S	1
O=C(O)C(Oc1ccc(cc1Cl)Cl)C	0
Nc1ccc(c(N)c1)C	0
c1ccc(cc1)CCl	0
O=C(Oc1cccc1(OC(C)C))NC	0
O=C(Nc1ccc(cc1)Cl)N(OC)C	0
O=C(O)C(Oc1ccc(cc1C)Cl)C	0
O=C(O)COc1ccc(cc1C)Cl	0
Nc1cccc1C	0
O=C(c1cccc(c1)C)N(CC)CC	0
O=C(Nc1ccc(cc1)Cl)N(C)C	0
O=P(Oc1ccc(cc1Cl)C(C)(C)C)(OC)NC	0
Oc1cccc(O)c1(O)	1
Oc1cccc1(N)	0
Oc1cccc1(O)	0
Oc1cccc(N)c1	0
O(c1cc(c(cc1Cl)Br)Cl)P(OC)(OC)=S	1
O=P(OC(C)C)(OC(C)C)SCc1cccc1	0

O=[N+][O-]c1ccc(cc1)Cl	0
NNc1ccccc1	0
O=[N+][O-]c1ccc(OP(OC)(OC)=S)cc1C	0
O=S(=O)(O)N=Nc1ccc(cc1)N(C)C	0
O=C(OCC)Cc1ccc(O)cc1	0
Oc1ccc(cc1)CC(NC)C	0
Oc1ccc(cc1)C(c2ccc(O)cc2)C(C)C	1
c1ccc(cc1)c2ccccc2Cl	0
c1ccc(cc1)c2cccc(c2)Cl	0
c1cc(ccc1c2ccc(cc2)Br)Br	0
Fc1ccc(cc1)c2ccc(F)cc2	0
c1cc(ccc1c2ccc(cc2)I)I	1
Oc1ccc(cc1)c2ccccc2	1
Oc1ccccc1c2ccccc2	0
Oc1ccc(cc1)c2ccc(O)cc2	1
Oc1ccccc1c2ccccc2(O)	0
Oc1cc(O)c(c(O)c1)c2cc(O)cc(O)c2	0
Oc1ccc(cc1)c2ccc(cc2)Cl	1
Oc1ccc(cc1)c2ccc(cc2)Br	1
Oc1ccc(cc1)c2ccc(OC)cc2	1
O=C(O)c1ccc(cc1)c2ccc(O)cc2	1
O=C(O)c1ccc(cc1)c2ccccc2	0
c1ccc(cc1)Cc2ccccc2	0
Oc1ccc(cc1)Cc2ccccc2	1
Oc1ccc(cc1)Cc2ccc(O)cc2	1
Oc1ccc(cc1)C(c2ccc(O)cc2)C	1
Oc1ccc(cc1)C(c2ccccc2)(C)C	1
Oc1ccc(cc1)C(c2ccc(O)cc2)(C)CC	1
Oc1ccc(cc1)C(c2ccc(O)cc2)(C)CC(C)C	1
Oc1ccc(cc1)C(c2ccccc2)(c3ccc(O)cc3)C	1
Oc1ccc(cc1)C(c2ccc(O)cc2)c3ccccc3CO	1
FC(F)(F)C(c1ccc(O)cc1)(c2ccc(O)cc2)C(F)(F)F	1
Oc1ccc(cc1)C5(c2ccc(O)cc2)(CC3CC5(C4CCCC34))	1
O=C1C=CC(C=C1)=C(c2ccc(O)cc2)c3ccc(O)cc3	1
O=S4(=O)(OC(c1ccc(O)cc1)(c2ccc(O)cc2)c3ccccc34)	0
O=C(O)CCC(c1ccc(O)cc1)(c2ccc(O)cc2)C	1
Oc1ccc(cc1)C(c2cccc(c2)C(c3ccc(O)cc3)(C)C)(C)C	1
Oc1ccc(cc1)C(c2ccc(cc2)C(c3ccc(O)cc3)(C)C)(C)C	1
Oc1ccc(cc1Cc2ccc(cc2Cl)Cl)C(C)(C)CC(C)(C)C	1
O=S(=O)(c1ccc(O)cc1)c2ccc(O)cc2	1
O=C1NC(=O)C(N1)C(c2ccccc2)c3ccc(O)cc3	0
O=S4(=O)(OC(c1ccc(O)cc1C)(c2ccc(O)cc2C)c3ccccc34)	1
Oc1ccc(cc1)C(c2ccccc2)(c3ccccc3)c4ccc(O)cc4	1
Oc1c(cc(cc1C)Cc2cc(c(O)c(c2)C)C)C	1
Oc1c(cc(cc1C)C(c2cc(c(O)c(c2)C)C)(C)C)C	1

<chem>Oc1c(cc(cc1Br)C(c2cc(c(O)c(c2)Br)Br)(C)C)Br</chem>	0
<chem>Oc1ccc(cc1C)C(c2ccc(O)c(c2)C)(C)C</chem>	1
<chem>Oc1ccc(cc1(C=C))C(c2ccc(O)c(C=C)c2)(C)C</chem>	1
<chem>Oc1cc(c(cc1C(C)(C)C)C(c2cc(c(O)cc2C)C(C)(C)C)CC(c3cc(c(O)cc3C)C(C)(C)C)C</chem>	1
<chem>c1cc(ccc1C(c2ccc(cc2)Cl)C(Cl)Cl)Cl</chem>	0
<chem>c1cc(ccc1C(c2ccc(cc2)Cl)=C(Cl)Cl)Cl</chem>	0
<chem>c1ccc(c(c1)C(c2ccc(cc2)Cl)C(Cl)Cl)Cl</chem>	1
<chem>c1ccc(c(c1)C(c2ccc(cc2)Cl)=C(Cl)Cl)Cl</chem>	1
<chem>OC(c1ccc(cc1)Cl)(c2ccc(cc2)Cl)C(Cl)(Cl)Cl</chem>	1
<chem>OC(c1ccc(cc1)Cl)(c2ccc(cc2)Cl)C</chem>	0
<chem>OCC(c1ccc(cc1)Cl)c2ccc(cc2)Cl</chem>	0
<chem>OC(c1ccc(cc1)Cl)c2ccc(cc2)Cl</chem>	0
<chem>N#CCC(c1ccc(cc1)Cl)(c2ccc(cc2)Cl)c3ccc(cc3)Cl</chem>	0
<chem>OC(c1ccc(cc1)Cl)(c2ccc(cc2)Cl)c3ccc(cc3)Cl</chem>	0
<chem>c1cc(ccc1C(c2ccc(cc2)Br)C(Cl)(Cl)Cl)Br</chem>	0
<chem>Fc1ccc(cc1)C(c2ccc(F)cc2)Cl</chem>	0
<chem>OC(c1ccccc1)c2ccc(cc2)Cl</chem>	0
<chem>Nc1ccc(c(c1)C)CCc2ccc(N)cc2C</chem>	1
<chem>c1ccc(cc1)CCc2ccccc2</chem>	0
<chem>Oc1ccc(cc1)C(CC)C(c2ccc(O)cc2)CC</chem>	1
<chem>Oc1ccc(cc1)C(=CC)C(=CC)c2ccc(O)cc2</chem>	1
<chem>O=C(C(=O)c1ccc(OC)cc1)c2ccc(OC)cc2</chem>	0
<chem>O=C(c1ccc(OC)cc1)Cc2ccc(OC)cc2</chem>	0
<chem>O=C(c1ccc(cc1)Br)C(=O)c2ccc(cc2)Br</chem>	0
<chem>O=C(C(=O)c1ccccc(OC)c1)c2ccccc(OC)c2</chem>	0
<chem>O=C(c1ccc(O)cc1(O))Cc2ccccc2</chem>	1
<chem>O=C(c1ccc(O)cc1)Cc2ccccc2</chem>	1
<chem>O=C(Oc1ccc(cc1)C(CC)C(c2ccc(OC(=O)CC)cc2)CC)CC</chem>	1
<chem>c1ccc(cc1)C=Cc2ccccc2</chem>	0
<chem>Oc1ccc(cc1)C(=C(c2ccc(O)cc2)CC)CC</chem>	1
<chem>O(c1ccc(cc1)C(c2ccccc2)=C(c3ccccc3)CC)CCN(C)C</chem>	1
<chem>Oc1ccc(cc1)C=Cc2ccc(N)cc2</chem>	1
<chem>Oc2cc(O)cc(C=Cc1ccc(O)c(O)c1)c2</chem>	1
<chem>Nc1ccc(cc1)C=Cc2ccc(N)cc2</chem>	0
<chem>Oc1ccc(cc1)C=Cc2cc(O)cc(O)c2</chem>	1
<chem>O(c1ccc(cc1)C(c2ccc(OC)cc2)=C(c3ccc(OC)cc3)Cl)C</chem>	1
<chem>c1ccc(cc1)C=C(c2ccccc2)c3ccccc3</chem>	1
<chem>O=C(c1ccccc1)c2ccccc2</chem>	0
<chem>O=C(c1ccccc1)c2ccc(O)cc2</chem>	1
<chem>O=C(c1ccccc1)c2cccc(O)c2</chem>	1
<chem>O=C(c1ccc(O)cc1)c2ccc(O)cc2</chem>	1
<chem>O=C(c1ccccc1(O))c2ccccc2(O)</chem>	0
<chem>O=C(c1ccc(O)cc1)c2ccc(O)c(O)c2(O)</chem>	1
<chem>O=C(c1ccc(O)cc1(O))c2ccc(O)cc2(O)</chem>	1
<chem>O=C(c1ccc(O)cc1)c2ccc(cc2)Cl</chem>	1

O=C(c1ccc(F)cc1)c2ccc(O)cc2	1
O=C(c1ccccc1)c2ccc(O)c(O)c2(O)	1
O=C(c1ccc(cc1)Br)c2ccc(cc2)Br	1
Oc2ccc(Oc1ccccc1)cc2	1
Oc2ccc(OCc1ccccc1)cc2	1
O(c1ccccc1)c2ccc(cc2)Cl	0
O(c1ccc(cc1)Br)c2ccc(cc2)Br	0
O=C(OCc2ccccc(Oc1ccccc1)c2)C3C(C=C(C)C)C3(C)(C)	0
O=C(OCc2ccccc(Oc1ccccc1)c2)C3C(C=C(Cl)Cl)C3(C)(C)	0
O=[N+][O-]c2ccc(Oc1ccc(cc1Cl)Cl)cc2	0
O=C(OCC)NCCOc2ccc(Oc1ccccc1)cc2	0
O=C(O)C(NC(=O)C(N)Cc1ccc(O)cc1)Cc2ccccc2	0
Oc1ccc(cc1)C(O)C(NC(C)COc2ccccc2)C	0
Oc2ccc(N=Nc1ccccc1)cc2	1
Oc1ccc(cc1)C25(CC4CC(C2)CC(c3ccc(O)cc3)(C4)C5)	1
Oc1ccc(cc1)c2cc(cc(c2)c3ccc(O)cc3)c4ccc(O)cc4	1
Oc1ccc(cc1(O))CC(C)C(C)Cc2ccc(O)c(O)c2	1
Oc1ccc(cc1)CCNC(C)C(O)c2ccc(O)cc2	0
O=C(c1c(O)cc(O)cc1(O))CCc2ccc(O)cc2	1
Oc1cc4c(cc1(O))C3(c2cc(O)c(O)cc2C(C)(C)C3)(CC4(C)C)	1
O=C(O)C(NC(=O)C(N)Cc1ccc(O)cc1)Cc2ccc(O)cc2	0
Oc1ccc(cc1)Sc2ccc(O)cc2	1
N=C(Nc1ccccc1)Nc2ccccc2	0
O=P(Oc1ccccc1C)(Oc2ccccc2C)Oc3ccccc3C	1
c1ccc(cc1)Nc2ccc(cc2)Nc3ccccc3	1
O=C(N5CCN(c4ccc(OCC1OC(OC1)(c2ccc(cc2Cl)Cl)Cn3cnccc3)cc4)CC5)C	0
O=C(N1CCCCC1)SC(c2ccccc2)(C)C	0
c1ccc(cc1)Nc2ccccc2	0
O=[N+][O-]c2ccc(OP(OCC)(c1ccccc1)=S)cc2	0
O(c1cc(c(cc1Cl)Br)Cl)P(OC)(c2ccccc2)=S	1
N(=CN(C=Nc1ccc(cc1C)C)C)c2ccc(cc2C)C	0
Oc1cnc(nc1)c2ccc(O)cc2	0
Oc2ccc(N=Nc1ccccc1)c(O)c2	1
Oc1ccc(cc1Sc2cc(ccc2(O))C(C)(C)CC(C)(C)C(C)(C)CC(C)(C)C	1
O=C(OCC)C(NC(=O)c1ccccc1)Cc2ccc(O)cc2	0
Oc1ccc(cc1)CCC(NCCc2ccc(O)c(O)c2)C	1
O=[N+][O-]c2ccc(N=Nc1ccc(O)cc1(O))cc2	0
O=C(O)Cc2cc(c(Oc1ccc(O)c(c1)I)c(c2)I)I	1
O=C(O)C(N)Cc2cc(c(Oc1ccc(O)c(c1)I)c(c2)I)I	0
O=C(O)C(N)Cc2ccc(Oc1cc(c(O)c(c1)I)I)c(c2)I	0
O(c1ccc(cc1)C(c2ccccc2)=C(c3ccccc3)Cl)CCN(CC)CC	1
O=C(NC(=O)c1c(F)cccc1(F))Nc2ccc(cc2)Cl	0
O[Sn](c1ccccc1)(c2ccccc2)c3ccccc3	1
OC(c1ccc(OC)cc1)c2ccc(OC)cc2	0
Nc1ccc(cc1)Cc2ccc(N)cc2	0

O=C(O)c1cc(ccc1(O))c2ccc(F)cc2(F)	0
c1ccc(cc1)c2ccc(cc2)Br	0
O=C(c1ccccc1)c2ccc(cc2)[N+](=O)[O-]	0
O=C(Oc1ccccc1)c2ccccc2(O)	0
c1ccc(cc1)C(c2ccc(cc2)Cl)N3CCN(C)CC3	0
n1ccccc1C(c2ccc(cc2)Br)CCN(C)C	0
Fc1c(F)c(F)c(c(F)c1(F))c2c(F)c(F)c(F)c(F)c2(F)	0
O=Cc1ccc(cc1)c2ccccc2	0
O=C(c1ccccc1)c2ccc(cc2)Cl	0
O=C(c1ccccc1)c2ccc(cc2)Br	0
O=C(c1ccc(cc1)c2ccccc2)C	0
O=C(c1ccccc1(O))c2ccc(OC)cc2(O)	0
O=C(O)c2cccc(Oc1ccccc1)c2	0
O=C(c1ccc(cc1)Cl)c2ccccc2Cl	0
O=C(O)c1ccc(cc1)C(=O)c2ccccc2	0
c1ccc(cc1)C(c2ccc(cc2)Cl)N3CCNCC3	0
O=C(c1ccccc1)c2ccc(cc2)N(C)C	0
O=C(c1ccc(cc1)C)C(=O)c2ccc(cc2)C	0
Oc1ccc(cc1)C=Cc2ccccc2	1
O=C(c1ccccc1)c2ccc(cc2)N3CCOCC3	0
c1ccc(cc1)C(c2ccccc2)=C(c3ccccc3)c4ccccc4	1
O=C(c1ccc(F)cc1)c2ccccc2(F)	0
c1ccc(cc1)C(c2ccccc2)=C(c3ccccc3)Br	1
O=C(O)c1ccc(cc1)c2ccc(cc2)CC	0
Fc1ccc(cc1)Cc2ccc(F)cc2	0
O=C(c1ccc(cc1)N(C)C)C(=O)c2ccc(cc2)N(C)C	0
c1ccc(cc1)C=C(c2ccccc2)C	0
O=C(O)c1ccc(cc1)c2ccc(cc2)C(=O)O	0
c1ccc(cc1)C=Cc2ccc(cc2)CCl	0
O=Cc1ccc(cc1)C=Cc2ccccc2	0
O=C(c1cccc(c1)C(F)(F)F)c2cccc(c2)C(F)(F)F	0
O=C(c1ccccc1)c2ccc(F)c(F)c2	0
O=C(c1cccc(F)c1)c2cccc(F)c2	0
O(c1ccc(cc1)C(c2ccc(OC)cc2)(c3ccc(OC)cc3)Cl)C	1
O=C(O)c1ccc(cc1)C(c2ccc(cc2)C(=O)O)(C(F)(F)F)C(F)(F)F	1
FC(F)(F)C(c1ccc(cc1)C)(c2ccc(cc2)C)C(F)(F)F	1
O=C(c1ccc(N)cc1)c2ccc(N)cc2	0
Nc1cccc(c1)Cc2cccc(N)c2	0
O=C(C(=O)c1ccc(F)cc1)c2ccc(F)cc2	0
FC(F)(F)c2ccc(Oc1ccc(O)cc1)cc2	1
Nc1c(cc(c(c1CC)Cl)Cc2cc(c(N)c(c2Cl)CC)CC)CC	1
O=C(c1ccc(F)cc1)c2ccccc2C(=O)c3ccc(F)cc3	0
O=C(c1ccccc1)c2ccc(cc2)C(=O)c3ccccc3	0
Nc1ccc(cc1)C(c2ccccc2)C(c3ccc(N)cc3)(C)C(C)C	1
O=C(c1ccc(OC(C(=O)OC(C)C)(C)C)cc1)c2ccc(cc2)Cl	0

O=C(c1ccc(cc1)Cl)Cc2ccccc2	0
O=C(c1ccccc1)c3ccc(OCc2ccccc2)cc3	0
O=C(C=CC(=O)c1ccc(F)cc1)c2ccc(F)cc2	1
O=C(c1cccc(c1)[N+](=O)[O-])c2ccc(c(c2)C)C	0
O=C(OC)c2ccc(C=Cc1ccc(cc1)C(=O)OC)cc2	0
c1cc(ccc1N(C)C)Cc2ccc(cc2)N(C)C	0
O=C(O)COc1ccc(cc1)C(c2ccc(OCC(=O)O)cc2)(C)C	0
O(c1ccc(cc1)C(c3ccc(OCC2OC2)cc3)(C)C)CC4OC4	0
O=C3OC(c1ccc(O)c(c1)C)(c2ccc(O)c(c2)C)c4ccccc34	1
c1ccc(cc1)C(c2ccccc2)c3ccccc3	1
O(c1ccc(cc1)C(c2ccccc2)(c3ccc(OC)cc3)Cl)C	0
O=C(c1ccccc1)C(c2ccccc2)(c3ccccc3)c4ccccc4	1
O=C(O)CC(c1ccccc1)(c2ccccc2)c3ccccc3	0
O=C(O)CCc2cc(c(Oc1ccc(O)c(c1)I)c(c2)I)I	1
O=C(O)C(N)Cc2ccc(Oc1ccc(O)cc1)cc2	0
O=C(O)C(N)Cc2ccc(Oc1ccc(cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-])cc2	0
O=C1C(=COc2cc(O)ccc12)c3ccc(O)cc3	1
O=C(OCC)C=2Oc3cc(O)cc(O)c3(C(=O)C=2(c1ccc(OC)cc1))	1
O=C1C(=COc2cc(OC)ccc12)c3ccc(OC)cc3	0
O=C1C(=COc2cc(O)ccc12)c3ccc(O)c(O)c3	1
O=C1C(O)=C(Oc2cc(O)cc(O)c12)c3ccc(O)cc3	1
O=C2c3c(O)cc(O)cc3(OC(c1ccc(O)cc1)C2)	1
O=C2c3c(O)cc(O)cc3(OC(c1ccc(O)c(O)c1)C2)	1
O=C1C=C(Oc2cc(O)cc(O)c12)c3ccc(O)cc3	1
O=C2c3cc(O)ccc3(OC(c1ccccc1)C2)	1
c3ccc4cc2c(ccc1ccccc12)cc4(c3)	1
c1ccc2c(c1)cc3ccc4cccc5ccc2c3c45	0
c1ccc2c(c1)c5cccc4ccc3cccc2c3c45	0
O=C2N6c1ccccc1C57(CCN4CC3=CCOC(C2)C(C3CC45)C67)	0
Oc1ccc2ccccc2(c1)	1
Oc1ccc2cc(ccc2(c1))Br	1
O=C(Oc1cccc2ccccc12)NC	0
Oc1cccc2ccccc12	0
Oc1ccc2c(c1)CCCC2	1
OC2Cc1ccccc1CC2	0
O=C1C=CC(c2ccccc12)=C(c3ccccc3)c5ccc(O)c4ccccc45	1
O=C2c1ccccc1c3ccc(O)cc23	1
Oc2ccc1ccccc1c2Cc4c(O)ccc3ccccc34	1
O=C(c1ccccc1)c2ccc3cc(O)ccc3(c2)	1
Oc3cc(O)c2c(OC(c1ccc(O)c(O)c1)C(O)C2)c3	1
Oc1ccc3c2c1CCCN2CCC3	0
Oc1ccc2OCOc2(c1)	0
Oc1ccc2cc(ccc2(c1))SSc3ccc4cc(O)ccc4(c3)	1
O=C1C=C(c2ccccc2(N1))C	0
O(c4ccc5C(c2ccc(OCCN1CCCC1)cc2)=C(c3ccccc3)CCc5(c4))C	1

C2=CC3C1C=CC(C1)C3(C2)	0
O=Cc1c(O)c(O)c(c2cc(c(c(O)c12)c3c(O)c4c(C=O)c(O)c(O)c(c4(cc3C))C(C)C)C(C)C	0
O=C1C=C(Oc2cc(O)cc(O)c12)c3ccccc3	0
Oc4ccc2c(OCC3(O)(Cc1cc(O)c(O)cc1C23))c4(O)	1
O=C1C(O)=C(Oc2ccccc12)c3ccccc3	0
O=C1C=C3C(C=C1(O))=C2c4ccc(O)c(O)c4(OCC2(O)C3)	1
O=C3C=C(Oc1c3(ccc2ccccc12))c4ccccc4	0
O=C2Oc1cc(O)cc(c1c3cc(O)cc(O)c23)C	1
O=C2c3ccccc3(OC(c1ccccc1)C2)	0
O=C1C=C(Oc2cccc(O)c12)c3ccccc3	0
O=C2C=C(Oc3ccc1ccccc1c23)c4ccccc4	0
O=C1C(O)=C(Oc2cc(O)ccc12)c3ccc(O)c(O)c3	1
O=C1C=C(Oc2cc(O)cc(O)c12)c3ccc(OC)cc3	0
O=C1C=C(Oc2c(O)c(O)ccc12)c3ccccc3	1
c1cc(cc3c1c2c(cc(cc2Cl)Cl)C3)Cl	0
O=C2c1cc(ccc1c3ccc(cc23)Cl)Cl	0
O=C2Oc1cc(O)ccc1C(=C2)C(F)(F)F	1
O=C1C=C(Oc2ccc(O)cc12)c3ccccc3	1
O=C1C=C(Oc2ccc(cc12)Cl)c3ccccc3	0
O=C1C=C(Oc2ccc(cc12)C)c3ccccc3	0
O=C1C=C(Oc2ccc(OC)cc12)c3ccccc3	0
O=C1C=C(Oc2cc(OC)ccc12)c3ccccc3	0
O=C1C=C(Oc2cc(O)c(O)c(O)c12)c3ccccc3	1
O=C1C=C(Oc2c(O)c(O)ccc12)c3ccc(O)c(O)c3	1
O=C1C=C(Oc2cc(OC)ccc12)c3ccc(OC)c(OC)c3	0
O=C1C=C(Oc2cc(OC)c(OC)c(O)c12)c3ccc(O)c(O)c3	1
O=C1C=C(Oc2ccccc12)c3ccc(OC)c(OC)c3	0
O=C1C=C(Oc2ccccc12)c3ccc(O)c(O)c3	1
O=C1C=C(Oc2cc(OC)cc(O)c12)c3ccc(O)cc3	1
O=C1C(OC)=C(Oc2cc(O)cc(O)c12)c4ccc(OC)c(OCc3ccccc3)c4	1
O=C(C=Cc1ccc(OC)cc1(OC))c2c(O)cc(OC)c(OC)c2(OC)	0
O=C1C=C(Oc2cc(OC)c(OC)c(O)c12)c3ccc(OC)c(O)c3	0
O=C1C=C(Oc2cc(OC)cc(OC)c12)c3ccc(OC)c(OC)c3	0
c1ccc2c(c1)ccc3c4ccccc4(ccc23)	0
c1ccc3c(c1)ccc4c2ccccc2Cc34	0
O=C1Oc4ccccc4(C(O)=C1CC=2C(=O)Oc3ccccc3(C=2(O)))	0
O=C2Oc1cc(O)ccc1C(=C2)C	0
O=C1c3ccc(O)cc3(OC=C1c2ccc(OC)cc2)	1
O=C1OC(c2ccccc12)(c4ccc(O)c3ccccc34)c6ccc(O)c5ccccc56	1
Nc1ccc(cc1)C4(c2ccc(N)cc2)(c5ccccc5(c3ccccc34))	0
O=C1OC(C)CCCC(=O)CCCC=Cc2cc(O)cc(O)c12	1
O=C1OC(C)CCCC(O)CCCCCc2cc(O)cc(O)c12	1
O=C1OC(C)CCCC(=O)CCCCCc2cc(O)cc(O)c12	1
O=C1C(=COc2cc(O)cc(O)c12)c3ccc(O)cc3	1
n1c(nc(nc1NC(C)C)Cl)NCC	0

O=C1C=Cc2ccccc2(N1)	0
O=C2Oc1cc(O)ccc1C(=C2CCN(CC)CC)C	0
O=C1Oc2cc(O)ccc2(C=C1C(=O)OCC)	0
O=C1Oc3cc(O)ccc3(C=C1c2ccccc2)	1
O=C2N(c1cc(cc(c1)Cl)Cl)C(=O)C3(C)(CC23(C))	0
O=C(NC(C)C)N2C(=O)N(c1cc(cc(c1)Cl)Cl)C(=O)C2	0
O=C1OC(C=C)(C(=O)N1c2cc(cc(c2)Cl)Cl)C	0
C1(C(C(C(C(C1Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl	0
C13(C4(C2(C5(C(C1(C2(Cl)Cl)Cl)(C3(C(C45Cl)(Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl	0
O=C1C2(C3(C4(C1(C5(C2(C3(C(C45Cl)(Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl	1
O=C(c1ccc(F)cc1)CCCN3CCC(O)(c2ccc(cc2)Cl)CC3	0
n1cnn(c1)CC2(OCC(O2)CCC)c3ccc(cc3Cl)Cl	0
O=C(OC3CC4CN2CCc1c5ccc(OC)cc5([nH]c1C2CC4(C(C(=O)OC)C3(OC))))c6cc(OC)c(OC)c(OC)c6	0
OC(c1cncnc1)(c2ccc(cc2)Cl)c3ccccc3Cl	1
n1cnc(N)[nH]1	0
O=C2NC(=O)C(c1ccccc1)(C(=O)N2)CC	0
O=S1OCC2C(CO1)C3(C(=C(C2(C3(Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl	1
O=C(Nc1nc(OC)cc(n1)OC)NS(=O)(=O)c2ncccc2S(=O)(=O)CC	0
N#CC(c1ccccc1)(Cn2ncnc2)CCc3ccc(cc3)Cl	0
O=C(OC)Nc2nc1ccccc1n2(C(=O)NCCCC)	0
O1CCOC3CCCCC3(OCCOCCOC2CCCCC2(OCC1))	0
O=C(N1CCCCCCC1)SCC	0
N1C(NCC1)=S	0
n1c3ccccc3(ccc1c2ccccc2)	0
O=C(c1ccncc1)c2ccc(cc2)Cl	0
O=C1OC(=Nc2ccccc12)c3ccccc3	0
O=C1C=Cc2cc(O)ccc2(N1)	0
O=C1Oc4cc(O)ccc4(C=C1c3nc2ccccc2s3)	1
N#CC=1c4ccc(O)cc4(OC(=O)C=1c2nc3cc(ccc3(o2))Cl)	1
O=C2c1c(ncn1C)N(C(=O)N2C)C	0
O=C(Oc2cccc1c2(OC(C)(C)C1))NC	0
O=C(OC)Nc1nc2ccccc2([nH]1)	0
n1cnn(c1)CC(c2ccc(cc2)Cl)Cl)CCC	0
OC(Cn1ncnc1)(CCc2ccc(cc2)Cl)C(C)(C)C	0
n1nc(nnc1c2ccccc2Cl)c3ccccc3Cl	0
n1cccc(c1)C2N(C)CCC2	0
O=C1C=C3C(=CC=C1(OC))c2c(OC)c(OC)c(OC)cc2CCC3(NC(=O)C)	0
O=C1N(C(=O)C2CC=CCC12)SC(Cl)(Cl)Cl	1
O=C1c2ccccc2(C(=O)N1SC(Cl)(Cl)Cl)	1
O=C1Oc3ccccc3(C(O)=C1C(c2ccccc2)CC(=O)C)	0
O=C1NCCCCC1	0
O1C(C)CN(CCCCCCCCCCCC)CC1C	0
n2c1ccccc1sc2SNC3CCCCC3	1
n2c1ccccc1sc2SSc4nc3ccccc3s4	1
n2c1ccccc1sc2S	1

<chem>n1c(nc(nc1NC(C)C)SC)NCC</chem>	0
<chem>O=C1OC(=CC(=O)C1C(=O)C)C</chem>	0
<chem>O=C(OC2CC1N(C)C(CC1)C2)C(c3ccccc3)CO</chem>	0
<chem>O=C(Oc1ccc2c(c1)C3(C)(CCN(C)C3(N2C)))NC</chem>	0
<chem>O=C1OC(=O)c2ccccc2(N1)</chem>	0
<chem>n1c(nc(nc1NCC)SC)NCC</chem>	0
<chem>O=C1c2ccccc2(C(=O)N1C(CCl)SP(OCC)(OCC)=S)</chem>	1
<chem>N#CC(Nc1nc(nc(n1)Cl)NCC)(C)C</chem>	0
<chem>O=C1c2ccccc2(NS(=O)(=O)N1C(C)C)</chem>	0
<chem>O=C(OC)c1ccccc1C5(=O)(=O)NC(=O)Nc2nc(OC)cc(n2)OC</chem>	0
<chem>O=C(O)c1c2ncc(cc2(ccc1Cl))Cl</chem>	0
<chem>C=1(C(=C(C(C=1Cl)(Cl)Cl)Cl)Cl)Cl</chem>	1
<chem>O=C(O)c1nc(ccc1Cl)Cl</chem>	0
<chem>n1c(cccc1Cl)C(Cl)(Cl)Cl</chem>	0
<chem>O=C1N=C(N(C(=O)N1C2CCCCC2)C)N(C)C</chem>	0
<chem>O=C(N(c1ccccc1)C)COc3nc2ccccc2s3</chem>	0
<chem>OCCN1CCN(CC1)CCCN4c2ccccc2Sc3ccc(cc34)Cl</chem>	0
<chem>O=C(O)C1=CN(c2cc(c(F)cc2(C1(=O)))N3CCNCC3)CC</chem>	0
<chem>Oc1ccc(cc1)Cn2ccnc2S</chem>	0
<chem>O=C(OCC)C(Oc3ccc(Oc1nc2ccc(cc2(nc1))Cl)cc3)C</chem>	0
<chem>N#CC(c1ccc(cc1)Cl)(Cn2ncnc2)CCCC</chem>	0
<chem>O=C1C(=NN=C(N1(N))SCC)C(C)(C)C</chem>	0
<chem>OC(c1ccc(cc1)Cl)(Cn2ncnc2)C(C)C3CC3</chem>	0
<chem>n1ccn(c1)CC(OCC=C)c2ccc(cc2Cl)Cl</chem>	0
<chem>O=C2OCC(Cc1ccccc(O)c1)C2Cc3ccccc(O)c3</chem>	1
<chem>O=CNC(N1CCN(CC1)C(NC=O)C(Cl)(Cl)Cl)C(Cl)(Cl)Cl</chem>	0
<chem>O=C1C=C(N)NN1c2c(cc(cc2Cl)Cl)Cl</chem>	1
<chem>C(N(C)C)(=S)SSC(N(C)C)=S</chem>	1
<chem>O=C(ON=C(C)SC)NC</chem>	0
<chem>O(CC)P(OCC)(=S)SCSCC</chem>	0
<chem>O=CN(C)C</chem>	0
<chem>O=C(OC)C=C(OP(=O)(OC)OC)C</chem>	0
<chem>O=C(NC)CSP(=O)(OC)OC</chem>	0
<chem>CCCC[Sn](CCCC)(CCCC)Cl</chem>	1
<chem>C#CC3(O)(CCC2C4CCc1cc(O)ccc1C4(CCC23(C)))</chem>	1
<chem>O=C(OC2CCC3C4CCc1cc(O)ccc1C4(CCC23(C)))C</chem>	1
<chem>O=C(Oc1ccc2c(c1)CCC3C2CCC4(C)(C(OC(=O)CC)CCC34))CC</chem>	1
<chem>O=C(OC2CCC3C4CCc1cc(O)ccc1C4(CCC23(C)))CCC5CCCC5</chem>	1
<chem>O=C(O)COc1ccc2c(c1)CCC3C2CCC4(C)(C(O)C(O)CC34)</chem>	1
<chem>O=C2C(O)CC3C4CCc1cc(O)ccc1C4(CCC23(C))</chem>	1
<chem>O=C2c1cc(O)ccc1C3CCC4(C(=O)CCC4(C3(C2))))(C)</chem>	1
<chem>OC4CCC2(C)(C(CCC1C3CCC(O)C3(C)(CCC12))C4)</chem>	1
<chem>O=C4C=C3C(C)CC2C(CCC1(C)(C2(CCC1(O)(C(=O)C))))C3(C)CC4</chem>	0
<chem>O=C1CCC2(C)(C3C(=O)CC4(C(=O)CCC4(C3(CCC2(C1))))(C))</chem>	0
<chem>O=C4C=C3CCC2C(C(=O)CC1(C)(C2(CCC1(O)(C(=O)CO))))C3(C)CC4</chem>	0

O=C4C=C3CCC1C(CCC2(C)(C(C(=C)CO)CCC12))C3(C)CC4	0
O=C3C=C2CCC1C4CCC(O)C4(C)(CC(O)C1C2(C)CC3)	0
O=C(OCC(=O)C3(O)(CCC2C4CCC1=CC(=O)CCC1(C)C4(F)(C(O)CC23(C))))C	0
O=C4C=C3C(F)CC2C5CC1OC(OC1(C(=O)CO)C5(C)(CC(O)C2C3(C)CC4))(C)C	0
O=CC34(CC(O)C2C(CCC1=CC(=O)CCC12(C))C4(CCC3(C(=O)COC(=O)CCC(=O)O)))	0
O=C(OC=1C(=O)CCC3(C=1CCC2C4CCC(=O)C4(C)(CCC23))(C))C	0
O=C4C=C3C(O)CC2C(C(=O)CC1(C)(C2(CCC1(O)(C(=O)CO))))C3(C)CC4	0
O=C4C=C3CCC1C(CCC2(C)(C(C(=O)C)C(C)CC12))C3(C)CC4	0
O=C(OCC(=O)C3(O)(CCC2C4CCC1=CC(=O)CCC1(C)C4(CCC23(C))))C	0
O=C(OC2CCC3C4CCC1=CC(=O)CCC1(C)C4(CCC23(C)))CCC(C)C	0
C#CC4(O)(CCC3C5CCC2=Cc1oncc1CC2(C)C5(CCC34(C)))	1
Oc1ccc(cc1)CCCCC	1
Oc1ccc(cc1)CCCCCCCCCCCC	1
Oc1ccc(cc1)C(C)(C)C	1
Oc1ccc(cc1)C2CCCCC2	1
c1cc(ccc1C(C)(C)C)Br	0
O=C(O)c1ccc(c(c1)Cl)Cl	0
O=[N+](O)c1c(c(c(c1Cl)Cl)Cl)Cl	0
O=C(n1cncc1)N(CCOc2c(cc(cc2Cl)Cl)Cl)CCC	0
O=C1C(=NN=C(N1(N))SC)C(C)(C)C	0
N#Cc1cc(c(O)c(c1)Br)Br	0
Oc1cccc(c1)C(C)(C)C	0
Oc1cc(ccc1C(C)C)C	0
Oc1c(cc(cc1C(C)(C)C)C(C)(C)C)C(C)(C)C	0
O=C(OCCC(C)C)c1ccc(O)cc1	1
O=C(OCC)c1ccc(O)c(O)c1	0
O=C(OCC)c1c(O)cc(O)cc1C	1
O=C(OCCCCC)c1ccccc1(O)	0
N#CCCc1ccc(O)cc1	0
Oc1cc(ccc1Cl)C	0
c1cc(ccc1Cl)Cl	0
c1ccc(c(c1)Cl)Cl	0
c1c(c(cc(c1Cl)Cl)Cl)Cl	0
c1c(c(cc(c1Br)Br)Br)Br	0
FC(F)(F)c1ccc(c(c1)Cl)Cl	0
Oc1ccccc1Cl	0
Oc1ccc(c(c1Cl)Cl)Cl	0
Oc1c(ccc(c1Cl)Cl)Cl	0
Oc1ccc(cc1)Br	0
c1cc(ccc1CCCC)Br	0
O=C(OC)c1ccccc1(C(=O)OC)	0
O=C(OCCCCCCCCC)c1ccccc1(C(=O)OCCCCCCCCC)	0
O=C(OCCCCC(C)C)c1ccccc1(C(=O)OCCCCC(C)C)	1
O=C(OCCCCCCCC(C)C)c1ccccc1(C(=O)OCCCCCCCC(C)C)	1
O=C(O)c1ccccc1(C(=O)OCCCC)	0

<chem>O=C(OCC=C)c1ccc(C(=O)OCC=C)c(c1)C(=O)OCC=C</chem>	0
<chem>O=C(OC)c1ccc(cc1)C(=O)OC</chem>	0
<chem>c1ccc(cc1)CC</chem>	0
<chem>O=C(O)c1ccc(cc1)CCCCCCCC</chem>	0
<chem>O=Cc1ccc(cc1)CCCCC</chem>	0
<chem>O=[N+][O-]c1ccccc1C</chem>	0
<chem>O=C(N(c1c(ccccc1CC)C)COCC)CCl</chem>	0
<chem>n1c(OP(OCC)(OCC)=S)c(cc(c1Cl)Cl)Cl</chem>	1
<chem>O(c1ccc(c(c1)C)SC)P(OC)(OC)=S</chem>	0
<chem>O=[N+][O-]c1ccc(N)c(c1)[N+](=O)[O-]</chem>	0
<chem>O=C(O)C(Oc1cc(c(cc1Cl)Cl)Cl)C</chem>	0
<chem>O=C(OC)NC(Nc1ccccc1(NC(NC(=O)OC)=S))=S</chem>	0
<chem>Nc1cccc(N)c1</chem>	0
<chem>N(=CN(C)C)c1ccc(cc1C)Cl</chem>	0
<chem>O=C(O)C(NC(=O)C(N)CO)Cc1ccc(O)cc1</chem>	0
<chem>c1ccc(cc1)c2ccccc2</chem>	0
<chem>c1ccc(cc1)c2ccc(cc2)Cl</chem>	1
<chem>Oc1cccc(c1)c2ccccc2</chem>	0
<chem>N#Cc1ccc(cc1)c2ccc(O)cc2</chem>	1
<chem>Oc1c(cc(cc1C)c2cc(c(O)c(c2)C)C)C</chem>	1
<chem>O(c1ccc(cc1)c2ccccc2)C</chem>	0
<chem>Oc1ccc(cc1)C(c2ccc(O)cc2)(C)C</chem>	1
<chem>Oc1ccc(cc1)C(c2ccc(O)cc2)(c3ccc(O)cc3)C</chem>	1
<chem>Oc1ccc(cc1)C3CCC(c2ccc(O)cc2)CC3</chem>	1
<chem>Oc1ccc(cc1)C4(c2ccc(O)cc2)(c5ccccc5(c3ccccc34))</chem>	1
<chem>O(c1ccc(cc1)C(c2ccc(OC)cc2)C(Cl)(Cl)Cl)C</chem>	1
<chem>O=C(O)CC(c1ccc(cc1)Cl)(c2ccc(cc2)Cl)c3ccc(cc3)Cl</chem>	0
<chem>Oc1ccc(cc1)C(c2ccc(OCCN(C)C)cc2)=C(c3ccccc3)CC</chem>	1
<chem>O=C(Oc1ccc(cc1)C(=C(c2ccc(OC(=O)CC)cc2)CC)CC)CC</chem>	1
<chem>O=C(c1ccccc1)c2ccccc2(O)</chem>	0
<chem>O=C(c1ccccc1)c2ccc(O)cc2(O)</chem>	1
<chem>O=C(c1ccc(O)cc1)c2ccc(O)cc2(O)</chem>	1
<chem>O=C(c1ccc(OC)cc1)c2ccc(OC)cc2</chem>	0
<chem>O=C(c1ccc(cc1)Cl)c2ccc(cc2)Cl</chem>	0
<chem>Oc2ccc(Oc1ccc(O)cc1)cc2</chem>	1
<chem>O=C(O)C(N)Cc2cc(c(Oc1cc(c(O)c(c1)I)I)c(c2)I)I</chem>	0
<chem>N#CC(OC(=O)C1C(C=C(Cl)Cl)C1(C)(C))c3ccccc(Oc2ccccc2)c3</chem>	0
<chem>n1cnn(c1)CC2(OCC(O2)C)c4ccc(Oc3ccc(cc3)Cl)cc4Cl</chem>	0
<chem>O=C(C=Cc1ccc(O)cc1)c2ccccc2</chem>	1
<chem>O=C(C=Cc1ccc(O)cc1)c2ccc(O)cc2(O)</chem>	1
<chem>O=S(=O)(c1ccc(N)cc1)c2ccc(N)cc2</chem>	0
<chem>O=S(=O)(c1ccccc1)SCC(N(C)C)CSS(=O)(=O)c2ccccc2</chem>	1
<chem>O=C(Nc1ccc(cc1)C(C)C)N(C)C</chem>	0
<chem>Fc1c(F)c(F)c(c(F)c1(F))c2c(F)c(F)c(O)c(F)c2(F)</chem>	1
<chem>O(c1ccc(N)cc1)c2ccc(N)cc2</chem>	0

O=C(c1cccc1)c2cccc(c2)Cl	0
c1ccc(cc1)C(c2cccc2)(Cl)Cl	0
O=C(c1cccc1)c2ccc(F)cc2	0
Fc1ccc(cc1)c2cccc2	0
O=C(c1cccc1)c2ccc(OC)cc2	0
c1ccc(cc1)[SnH](c2cccc2)c3cccc3	1
O=C(OC1ccc(cc1)Cl)c2cccc2	0
OC(c1cccc1)(c2cccc2)Cc3ccc(cc3)Cl	1
O=C(c1ccc(cc1)C(F)(F)F)c2cccc(c2)C(F)(F)F	0
FC(F)(F)C(c1ccc(N)cc1)(c2ccc(N)cc2)C(F)(F)F	1
O=Cc3ccc(OCc1cccc1)c(OCc2cccc2)c3	1
O=C(c1ccc(cc1)Br)Cc2cccc2	0
O=C(O)c2ccc(C=Cc1ccc(cc1)C(=O)O)cc2	0
OC1ccc(cc1C(c2cccc2)(C)C)C(c3cccc3)(C)C	1
O=C(O)C(c1cccc1)(c2cccc2)c3cccc3	0
OC(c1ccc(N)cc1)(c2ccc(N)cc2)c3ccc(N)cc3	1
c1ccc(cc1)C(=CC=C(c2cccc2)c3cccc3)c4cccc4	1
O=C1C(=COc2cc(O)cc(O)c12)c3ccc(OC)cc3	1
O=C1C=C(OC2cc(O)ccc12)c3cccc3	0
O=C1C(O)=C(OC2cc(O)cc(O)c12)c3ccc(O)cc3(O)	1
O=C3c5ccc1OC(C(=C)C)Cc1c5(OC4COc2cc(OC)c(OC)cc2C34)	0
OC2ccc3c1cccc1Cc3(c2)	1
OC1ccc2c(c1)CCC2	0
OC1ccc2ncccc2(c1)	0
O=C1C=C(OC2cccc12)c3cccc3	0
O=C1C(O)=C(OC2cc(O)cc(O)c12)c3cc(O)c(O)c(O)c3	1
O=C1C=C(OC2cc(OC)c(O)c(O)c12)c3cccc3	1
O=C1C(O)=C(OC2cc(O)cc(O)c12)c3ccc(OC)cc3	0
O=C1C=C(OC2cc(OC)c(OC)c(OC)c12)c3cccc3	0
OC1ccc(c2cccc12)C(O)(c3cccc3)c5ccc(O)c4cccc45	1
c1ccc(cc1)C(c2cccc2)=C4c5cccc5(c3cccc34)	0
O=C4c1cccc1C(c2cccc2)=C4(c3cccc3)	1
O=C1OC(C)CCCC(O)CCCC=Cc2cc(O)cc(O)c12	1
O=C3Oc1cc(O)ccc1c4oc2cc(O)ccc2c34	1
n2cnc(NCc1cccc1)c3[nH]cnc23	0
O=C(C(OC1ccc(cc1)Cl)n2ncnc2)C(C)(C)C	0
O=C1N(C(=O)C2CC=CCC12)SC(C(Cl)Cl)(Cl)Cl	1
OC1CCCCC1	0
O1c2ccc(cc2(OC1))CC=C	0
O=S1(=O)(OCCC1)	0
n1c(nc(nc1NC(C)C)SC)NC(C)C	0
O=C(OCCCC)C(OC2ccc(OC1ncc(cc1)C(F)(F)F)cc2)C	0