

SMILES	Class
O=CC	1
ON=CC	0
O=C(N)C	1
O=C(NC1CCCCC1)NS(=O)(=O)c2ccc(cc2)C(=O)C	0
O=[N+][O-]c1oc(cc1)c2cnc(NN=C(C)C)s2	1
N#CC	0
O=C(OC(C=C)c1ccc2OCOc2(c1))C	1
O=C(Nc2cccc3c1cccc1Cc23)C	0
O=C(Nc2ccc3c1cccc1Cc3(c2))C	1
O=C(Nc1cccc3c1c2cccc2C3)C	0
O=C(O)Cc1ccc(cc1)NC(=O)C	0
O=CC=C	0
O(CC)C(OCC)C=C	0
ON=CC=C	0
O=C2c1cccc1N(c3c4C=CC(Oc4(cc(OC)c23))(C)C)C	1
O=C(N)C=C	1
O=C(O)C=C	0
N#CC=C	1
O=C6OC(C)C(NC(=O)c2ccc(c1OC=5C(=Nc12)C(C(=O)NC3C(=O)NC(C(=O)N4CCCC4(C(=O)N(C)CC(=O)N5)C)C)C)C)C	1
O=C(N)CCCCC(=O)N	0
O=C(N)C(=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-])c2occc2	1
O=C4Oc2c(c(OC)cc1OC3OC=CC3(c12))C5=C4C(O)CC5	1
O=C(O)Cc1ccc(OCC=C)c(c1)Cl	0
O=C(ON=CC(C)(C)SC)NC	0
O=C(N)NC1NC(=O)NC1(=O)	0
OCC=C	0
O(CC=C)CC1OC1	0
O=NN(C(=O)N)CC=C	1
O=C1c3cccc3(C(=O)c2c1c(N)c(cc2Br)Br)	1
O=C(Nc1ccc(OCC)c(N)c1)C	0
O=C1c3cccc3(C(=O)c2c(N)c(ccc12)C)	1
O=[N+][O-]c1oc(cc1)c2nnc(o2)N	1
O=[N+][O-]c1oc(cc1)c2nnc(N)s2	1
O=[N+][O-]c1oc(cc1)c2nc(N)sc2	1
O=[N+][O-]c1ccc(O)c(N)c1	1
O=[N+][O-]c1cc(N)ccc1(O)	1
O=[N+][O-]c1cnc(N)s1	1
O=C1c3cccc3(C(=O)c2cc(N)ccc12)	1
N(=Nc1cccc1C)c2ccc(N)c(c2)C	1
O=C(O)CCCCCN	0
O=C(O)CC1(CN)(CCCCC1)	1
n1cnc(N)[nH]1	1
O=C1NC(=O)C(C(=O)N1)(CC)CCC(C)C	0
O=NN(C(=O)N)CCCCC	1

<chem>n1c(nc(nc1Cl)Cl)Nc2cccc2Cl</chem>	0
<chem>O=S(OCCCl)OC(C)COc1ccc(cc1)C(C)(C)C</chem>	1
<chem>O=C1C(O)=C(O)OC1C(O)CO</chem>	0
<chem>O=C(O)CC(N)C(=O)NC(C(=O)OC)Cc1cccc1</chem>	0
<chem>O=C(O)c1cccc1(OC(=O)C)</chem>	0
<chem>n1c(nc(nc1NC(C)C)Cl)NCC</chem>	1
<chem>O=C(OC2CC1N(C)C(CC1)C2)C(c3cccc3)CO</chem>	0
<chem>O=C1N=C(N)C=NN1C2OC(CO)C(O)C2(O)</chem>	0
<chem>N#[N+]C=C([O-])OCC(N)C(=O)O</chem>	1
<chem>O=[N+][([O-])c1ncn(c1Sc3ncnc2nc[nH]c23)C</chem>	0
<chem>O=C(OC(C)C)C5=C(NC(N)=C(C(=O)OC1CN(C1)C(c2cccc2)c3cccc3)C5(c4cccc(c4)[N+](=O)[O-]))C</chem>	0
<chem>O=C1c2cccc2(N=NN1CSP(OC)(OC)=S)</chem>	0
<chem>[O-][N+](=NC)C</chem>	1
<chem>[O-][N+](=NCCC)CCC</chem>	1
<chem>[O-][N+](=NC(C)C)C(C)C</chem>	1
<chem>O=C1NC(=O)CC(=O)N1</chem>	0
<chem>n2cnn3c(nc(c1cccc1)c(c23)CCOCC)N</chem>	1
<chem>O=C(O)c1ccc(cc1)NN=C2C=CC(=O)C(=C2)C(=O)O</chem>	0
<chem>O=Cc1cccc1</chem>	0
<chem>c1cccc1</chem>	1
<chem>Nc1ccc(cc1)c2ccc(N)cc2</chem>	1
<chem>c1ccc2c(c1)cc3ccc4cccc5ccc2c3c45</chem>	1
<chem>o1ccc2cccc12</chem>	1
<chem>n1c(nc(nc1N)c2cccc2)N</chem>	0
<chem>O=C(c1cccc1)C(O)c2cccc2</chem>	0
<chem>n1[nH]nc2cccc12</chem>	0
<chem>O=C(OCc1cccc1)C</chem>	0
<chem>OCc1cccc1</chem>	0
<chem>c1ccc(cc1)CCl</chem>	0
<chem>Oc1ccc(cc1Cc2cccc2)Cl</chem>	0
<chem>C(=NCc1cccc1)=S</chem>	0
<chem>N#CSCc1cccc1</chem>	0
<chem>O=C(N)Cc1c([O-])on[n+]1Cc2cccc2</chem>	1
<chem>OCC(CO)(CBr)CBr</chem>	1
<chem>O(C(C)CCl)C(C)CCl</chem>	0
<chem>n1cc(cc(c1Oc3ccc(Oc2ncc(cc2Cl)Cl)cc3)Cl)Cl</chem>	0
<chem>O=[N+][([O-])c3ccc(c2nc1cccc1c(n2)N(CCO)CCO)s3</chem>	1
<chem>OCCN(c2nc(nc1cccc12)c3cccs3)CCO</chem>	0
<chem>OC(C)CNCC(O)C</chem>	0
<chem>Oc1ccc(cc1)C(c2ccc(O)cc2)(C)C</chem>	0
<chem>O=[N+][([O-])c1cc(ccc1(NC))N(CCO)CCO</chem>	1
<chem>O=[N+][([O-])c1cc(ccc1(NCCO))N(CCO)CCO</chem>	0
<chem>C(Cl)(Cl)Br</chem>	1
<chem>O=C1C=CC4(C(=C1)CCC3C5CC2OC(OC2(C(=O)CO)C5(C)(CC(O)C34))CCC)(C)</chem>	1
<chem>C=CC=C</chem>	1

OC(C)(C)C	1
CCCCCl	0
Oc1c(cc(cc1C(C)(C)C)CO)C(C)(C)C	0
Oc1ccc(cc1C(C)(C)C)C	0
O=NN(C(=N[N+](=O)[O-])N)CCCC	0
Oc1c(cc(cc1C(C)(C)C)C)C(C)(C)C	0
Oc1ccc(cc1)C(C)(C)C	0
O=C(N)NCCCC	0
O=C1OC(C)C1	1
O=C1OCCC1	0
O=C2c1c(ncn1C)N(C(=O)N2C)C	0
O=C(OC(OC(=O)c2cccc1nc(OCC)n(c12)Cc3ccc(cc3)c5cccc5(c4nn[nH]n4))C)OC6CCCCC6	0
O=C1NCCCCC1	0
O=C1N(C(=O)C2CC=CCC12)SC(C(Cl)Cl)(Cl)Cl	1
C(Cl)(Cl)(Cl)Cl	1
O=NN(C(=O)N)CC(=O)O	1
O=C(N)NC(=O)C(CC)(CC)Br	0
C(=CC=C(C=CC=C(C=CC1=C(C)CCCC1(C)C)C)C=C(C=CC=C(C=CC2=C(C)CCCC2(C)C)C)C	0
O=C(Nc1ccc(OCC(O)CNC(C)(C)C)c(c1)C(=O)C)N(CC)CC	0
O=C(O)c1cc(cc(N)c1Cl)Cl	0
O=C(O)CCCc1ccc(cc1)N(CCCl)CCCl	1
O=C(NC(CO)C(O)c1ccc(cc1)[N+](=O)[O-])C(Cl)Cl	0
O=C(O)C1C(C(=O)O)C2(C(=C(C1(C2(Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl	1
O=C(O)c1cc(ccc1Cl)S(=O)(=O)N2CC(C)CC(C)C2	1
O=[N+](O)c1cccc1Cl	0
O=[N+](O)c1ccc(cc1)Cl	0
Nc1ccc(c(N)c1)Cl	1
Nc1ccc(cc1(N))Cl	1
Nc1ccc(c(c1)Cl)C	0
Nc1cc(ccc1C)Cl	0
FC(F)(F)CCl	1
O=C(O)CSc1nc(cc(n1)Cl)Nc2cccc(c2C)C	1
O=C(NCCO)CSc1nc(cc(n1)Cl)Nc2cccc(c2C)C	1
O=C(c1cccc1)CCl	0
O=C(Nc1ccc(cc1)C(=O)CCl)C	0
Nc1ccc(cc1)Cl	0
N#CC(C#N)=Cc1cccc1Cl	0
c1ccc(cc1)Cl	1
O=C(OCC)C(O)(c1ccc(cc1)Cl)c2ccc(cc2)Cl	0
C(Cl)(Br)Br	0
O(C)CCl	1
O=C(OC(C#C)(c1cccc1)c2ccc(cc2)Cl)N	1
c1cc(ccc1Cl)Sc2cc(c(cc2Cl)Cl)Cl	0
C=CC(=C)Cl	1
N#Cc1c(c(C#N)c(c(c1Cl)Cl)Cl)Cl	1

O=NN(C(=O)NC1C(O)OC(CO)C(O)C1(O))CCCl	1
O=C(NCCCC)NS(=O)(=O)c1ccc(cc1)Cl	0
N#CNC(=NC)NCCSCc1nc[nH]c1C	0
O=C(O)C(Oc1ccc(cc1)C2CC2(Cl)Cl)(C)C	1
O=C(O)CC(O)(C(=O)O)CC(=O)O	0
O=C(O)C(OCc1ccc(cc1)c2ccc(cc2)Cl)(C)C	0
O=C(OCC)C(Oc1ccc(cc1)Cl)(C)C	1
OC1C=CC5C4N(C)CCC25(c3c(OC12)c(OC)ccc3C4)	0
O=C1C=C3C(=CC=C1(OC))c2c(OC)c(OC)c(OC)cc2CCCC3(NC)	0
O=C3N=C(c1cccc(O)c1)c2ccc(cc2N3C(C)C)C	0
O=C2Oc1cc(OP(OCC)(OCC)=S)ccc1C(=C2Cl)C	0
O(c1ccc(N)c(c1)C)C	1
O(c1ccc(cc1(N))C)C	1
O=CC=CC	1
N#CN=C(N)N	0
N=C1N=C2OC3C(O)C(OC3(N2(C=C1)))CO	0
OCC8OC7OC1C(O)C(O)C(OC1(CO))OC2C(O)C(O)C(OC2(CO))OC3C(O)C(O)C(OC3(CO))OC4C(O)C(O	0
ON=C1CCCC1	1
O=P1(OCCCN1)N(CCCl)CCCl	1
O=C(N)C1=NC=NC1(=NNN(C)C)	1
O=S(=O)(c1ccc(N)cc1)c2ccc(N)cc2	1
c1cc(ccc1C(c2ccc(cc2)Cl)C(Cl)Cl)Cl	0
c1cc(ccc1C(c2ccc(cc2)Cl)=C(Cl)Cl)Cl	0
O(c1c(c(c(c(c1Br)Br)Br)Br)Br)c2c(c(c(c(c2Br)Br)Br)Br)Br	1
O=C(OCC(=O)C35(N=C(OC5(CC2C4CCC1=CC(=O)C=CC1(C)C4(C(O)CC23(C))))C))C	0
O=C2CCC3C4CC=C1CC(O)CCC1(C)C4(CCC23(C))	1
N#CC(OC(=O)C1C(C=C(Br)Br)C1(C)(C))c3cccc(Oc2ccccc2)c3	0
O=C1C=CC3(C(=C1)CCC2C4CC(C)C(O)(C(=O)CO)C4(C)(CC(O)C23(F)))(C)	0
O=C(N(c3cccc2c1cccc1Cc23)C(=O)C)C	1
O=C(OCC=C)c1cccc1(C(=O)OCC=C)	0
O=NN(CC=C)CC=C	1
Nc1ccc(c(N)c1)C	1
n1c(OP(OCC)(OCC)=S)cc(nc1C(C)C)C	0
O1c3ccccc3(Oc2ccccc12)	0
o2c1ccccc1c3ccc(N)cc23	1
C(C(CBr)Br)Cl	1
OC(CBr)C(O)C(O)C(O)CBr	1
C(CBr)Br	1
n1cccc2c1cc(cc2Br)Br	0
O=NN(C(=O)NCCCC)CCCC	1
FC(C)(Cl)Cl	1
O=C(O)C(Cl)Cl	1
C(#CCl)Cl	1
c1cc(ccc1Cl)Cl	1
Nc1ccc(cc1Cl)c2ccc(N)c(c2)Cl	1

O1c3ccc(cc3(Oc2ccc(cc12)Cl))Cl	0
FC(F)(Cl)Cl	0
C(CCl)Cl	1
Oc1ccc(cc1Cl)Cl	0
CC(CCl)Cl	0
O=P(OC=C(Cl)Cl)(OC)OC	1
N(C(NC1CCCCC1)=S)C2CCCCC2	0
O3C4CC5C2CC(C1OC12)C5(C34)	0
O1C2C1C3C4C2C5C3C6(C4(C(C5(C6(Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl	0
n1c(OP(OCC)(OCC)=S)c(cc(c1Cl)Cl)Cl	0
OCCOCCO	1
O=CN(CC)CC	0
O=C(OCC)C=CC(=O)OCC	0
Oc1ccc(cc1)C(=C(c2ccc(O)cc2)CC)CC	1
O=C(O)C(N)(CCCN)C(F)F	0
O(c2cccc(OCC1OC1)c2)CC3OC3	1
O=NN1OCC=CC1	1
O=C2Oc1cccc1CC2	1
O1c2ccc(cc2(OC1))CCC	1
O=C1OC(C(=O)N1)(C)C	0
O=C(NC)CSP(OC)(OC)=S	0
O(c2ccc(OC)c(C=Cc1ccc(N)cc1)c2)C	1
O=C=Nc1ccc(cc1(OC))c2ccc(N=C=O)c(OC)c2	1
O=C2Oc1cc(OC)cc(OC)c1C3=C2CCC3	0
O=C2Oc1cc(OC)cc(OC)c1C=3C(=O)CCC2=3	0
O=C2Oc1cc(OC)cc(OC)c1C3=C2C(=O)CC3	0
O=C1c5c(O)cc(OC)c(OC)c5(Oc3c1c(OC)cc2OC4OC=CC4(c23))	1
N(=Nc1ccc(cc1)N(C)C)c2cccc2	1
O=NN(C(=O)c1cccc1(C(=O)N(N=O)C))C	0
O=[P+](OC)OC	1
O=[N+](O)c1cnc(n1C)C	1
O=C(OC)c1ccc(cc1)C(=O)OC	0
O=C(N(C)C)C	0
O=[N+](O)c2oc(C=Cc1nnc(o1)NCN(C)C)cc2	1
c1ccc(cc1)N(C)C	1
O=C1NC(=O)C(C(=O)N1)(C)C	0
[O-][N+](C)(C)CCCCCCCCC	0
O=CN(C)C	0
NN(C)C	0
O=[N+](O)c1oc(cc1)c2nc(NN(C)C)sc2	1
O=[N+](O)N(C)C	1
C(=C(C)C)Cl	1
O=[N+](O)c1cc(c(OS(=O)(=O)C)c(c1)C(C)(C)C)[N+](=O)[O-]	0
O=NN1CCN(N=O)CCC1	1
O=[N+](O)c1cccc(c1C)[N+](=O)[O-]	1

O1CCOCC1	1
O1CCOC(C1SP(OCC)(OCC)=S)SP(OCC)(OCC)=S	0
O=C1NC(=O)C(N1)(c2ccccc2)c3ccccc3	0
NC(NNC(N)=S)=S	0
O=C1OC(C(OCC(=O)CCCCCCCCCCC)=C1(O))C(O)CO	0
O=C(O)C(N)Cc1ccc(O)c(O)c1	0
O=C1N(c3ccc(cc3(C(=NC1(O))c2ccccc2(F)))Cl)CCO	0
O=C1Oc3c(O)c(O)cc4C(=O)Oc2c(O)c(O)cc1c2c34	0
O1CC1CCl	1
n1nc2n(c1)c4ccc(cc4(C(=NC2)c3ccccc3))Cl	0
O=C(Oc1ccc2c(c1)CCC4C2CCC5(C)(C(OC(=O)Cc3ccc(cc3)N(CCCl)CCCl)CCC45))Cc6ccc(cc6)N(CCCl)	0
C#CC3(O)(CCC2C4CCc1cc(O)ccc1C4(CCC23(C)))	1
O=C(N)Nc1ccc(OCC)cc1	1
O(c1ccc2NC(C=C(c2(c1))C)(C)C)CC	0
O=C(OCC)C=C	1
[O-][N+](=NC)CC	1
O=C(O)C(N)CSCC	0
c1cc(ccc1CC)C(c2ccc(cc2)CC)C(Cl)Cl	0
O=C(OCC)C2OC2(c1ccccc1)(C)	0
c1ccc(cc1)CC	1
O1CC1	1
N1C(NCC1)=S	1
O1CC1C2CCC3OC3(C2)	0
OCC(CC)CCCC	0
O=C(OCC(CC)CCCC)CCCCC(=O)OCC(CC)CCCC	0
O=C(OCC(CC)CCCC)c1ccccc1(C(=O)OCC(CC)CCCC)	1
O=NN(C(=O)NCCO)CC	1
O=NN(C(=O)NCC(=O)C)CC	1
N#CN(N=O)CC	1
O=C(N)NC(=O)C(c1ccccc1)CC	0
O=C(OC4C=C3CCC2C(CCC1(C)(C2(CCC1(C#C)(OC(=O)C))))C3CC4)C	0
O=C(O)CC2(OCCc1c3cccc(c3([nH]c12))CC)CC	0
O(c1ccc(c(c1)C)SC)P(OC)(OC)=S	0
N#CC(OC(=O)C(c1ccc(cc1)Cl)C(C)C)c3cccc(Oc2ccccc2)c3	0
Fc1ccc(c(F)c1)C(O)(Cn2ncnc2)Cn3ncnc3	1
O=C(Nc1cccc(c1)C(F)(F)F)N(C)C	0
O=C(Nc2ccc3c1ccccc1Cc3(c2))C(F)(F)F	1
O=C(Nc1ccc(cc1)c2ccc(F)cc2)C	1
O=NN(C(=O)N)CCF	1
O=C(O)CC(O)CC(O)C=Cc3c(c1ccc(F)cc1)c2ccccc2n3C(C)C	1
O=CNnc1nc(cs1)c2occc2	0
O=CNnc1nc(cs1)c2oc(cc2)[N+](=O)[O-]	1
O=CNNC(N)=S	0
O=C(O)CC(C(=O)O)CC(=O)OC(CC(C)CCC)C(OC(=O)CC(C(=O)O)CC(=O)O)CC(C)CC(O)CCCC(O)CC(O	1
o1ccccc1	1

<chem>O=C(OC2C(O)C4OC1C=C(C(=O)C(O)C1(CO)C2(C)C34(OC3))C)C</chem>	0
<chem>O=C(O)c1cc(O)c(O)c(O)c1</chem>	0
<chem>OCC(C)(C)CCCCCCC(C)(C)CO</chem>	0
<chem>O=C(O)C(C)(C)CCCOc1cc(ccc1C)C</chem>	0
<chem>n1c(N)ccc2nc3c(cccn3(c12))C</chem>	1
<chem>O=CC1OC1</chem>	0
<chem>OCC1OC1</chem>	1
<chem>O=C(O)CN</chem>	1
<chem>O=C(O)C4(C)(CCC5(C)(CCC2(C(=CC(=O)C1C3(C)(CCC(O)C(C)(C)C3(CCC12(C))))C5(C4))(C)))</chem>	0
<chem>Oc4ccc2c(OCC3(O)(Cc1cc(O)c(O)cc1C23))c4(O)</chem>	1
<chem>C1=CC(C2C1C3(C(=C(C2(C3(Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl</chem>	0
<chem>N1CCCCCCC1</chem>	0
<chem>c1(c(c(c(c1Cl)Cl)Cl)Cl)Cl</chem>	1
<chem>C(C(=C(Cl)Cl)Cl)(=C(Cl)Cl)Cl</chem>	1
<chem>C1(C(C(C(C1Cl)Cl)Cl)Cl)Cl</chem>	1
<chem>C=1(C(=C(C(C=1Cl)(Cl)Cl)Cl)Cl)Cl</chem>	0
<chem>C(C(Cl)(Cl)Cl)(Cl)(Cl)Cl</chem>	1
<chem>Oc1c(cc(c(c1Cc2c(O)c(cc(c2Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl</chem>	0
<chem>N12(CN3CN(C1)CN(C2)C3)</chem>	0
<chem>OCN(c1nc(nc(n1)N(CO)CO)N(CO)CO)CO</chem>	1
<chem>O=P(N(C)C)(N(C)C)N(C)C</chem>	1
<chem>O=C(N)CCCCC</chem>	0
<chem>Oc1c(cc(OCCCCC)c(c1C)C)C</chem>	0
<chem>O=NN(C(=O)N)CCCCC</chem>	1
<chem>Oc1ccc(c(O)c1)CCCCC</chem>	0
<chem>O=[N+][O-]c1ccc(cc1)c2nc(NN)sc2</chem>	1
<chem>n1c(csc1NN)c2cccc2</chem>	0
<chem>c1ccc(cc1)NNc2cccc2</chem>	1
<chem>FC(F)(F)C(Cl)Cl</chem>	1
<chem>O=S(=O)(N)c1cc2c(cc1Cl)NCNS2(=O)(=O)</chem>	0
<chem>O=C3C=C2CCC1C4CCC(O)(C(=O)CO)C4(C)(CC(O)C1C2(C)CC3)</chem>	0
<chem>O=C(N(O)c1ccc(cc1)c2cccc2)C</chem>	0
<chem>O=C(N(O)c2ccc3c1cccc1Cc3(c2))C</chem>	1
<chem>Oc1cc(ccc1(N))c2cccc2</chem>	0
<chem>O=C1c3cccc3(C(=O)c2c(O)cccc12)</chem>	1
<chem>O=C2N(N=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-])CCN2CCO</chem>	1
<chem>O=NN(C(=O)NCC)CCO</chem>	1
<chem>O=[N+][O-]c3ccc(c2nc1cccc1c(n2)NCCO)s3</chem>	1
<chem>O=NN(C(=O)N)CCCCO</chem>	1
<chem>OC(C=C)c1ccc2OCOc2(c1)</chem>	1
<chem>O=C(O)C(c1ccc(cc1)CC(C)C)C</chem>	0
<chem>O=C1NC(=O)CN(C1)CC(N2CC(=O)NC(=O)C2)C</chem>	1
<chem>O=C(N)CCCCn1nc(cc1)NC(=NCC(F)(F)F)N</chem>	1
<chem>O=C3NN=C(c1ccc2NC(=O)C(c2(c1))(C)C)CC3</chem>	1
<chem>O=C(O)Cc3c1cc(OC)ccc1n(C(=O)c2ccc(cc2)Cl)c3C</chem>	1

[illegible]

O=C(OC)CCCCCCCC=CC=CC(OO)CCCCC	0
O=C(OC)C(=C)C	0
O=NN(C(=N[N+](=O)[O-])N)C	1
O=C2c3ccccc3(C(=O)c1c2(ccc(c1[N+](=O)[O-])C))	1
O=C2NC(C)CN2(N=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-])	1
O=NN(C(=O)c1ccccc1)C	1
O=NN(C(=O)NCCCC(N)C(=O)O)C	1
O=NN1CCCCC1C	1
O=[N+](([O-])c1ccc(OP(OC)(OC)=S)cc1	0
O=C1N(C)CCC1	0
OC(c1ccccc1)C	1
Oc1ccc(cc1(O))C	1
c1ccc5c(c1)ccc3c5(cc2ccc(c4c2c3CC4)C)	1
Nc1ccc(cc1Cl)Cc2ccc(N)c(c2)Cl	1
Nc1ccc(cc1C)Cc2ccc(N)c(c2)C	1
Oc1c(cc(cc1C(C)(C)C)C)Cc2cc(cc(c2(O))C(C)(C)C)C	0
O=[N+](([O-])CN	1
O=NN(C)CCCC(O)c1cnccc1	1
O=NN(C)CCCC(=O)c1cnccc1	1
N#CN(N=O)C	1
O=C(C=C)NCO	0
n1cccc2cc(ccc12)C	0
n1cccc2cccc(c12)C	0
N=2c1cccc1Sc4ccc(cc4(C=2N3CCN(C)CC3))C	0
O=C(Oc1cc(c(c(c1)C)N(C)C)C)NC	0
O=C(c1ccc(cc1)N(C)C)c2ccc(cc2)N(C)C	1
C13(C4(C2(C5(C(C1(C2(Cl)Cl)Cl)(C3(C(C45Cl)(Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)	1
O=C(OC)CCCCCCC1C(=O)CC(O)C1(C=CCC(O)(C)CCCC)	0
O=C(OCC4C=1C(=O)C(N)=C(C(=O)C=1N3CC2NC2C34(OC))C)N	1
O=C(O)CCl	0
O=S(=O)(OCCCCOS(=O)(=O)C)C	0
O=C(O)C(Oc1ccc(cc1)C3c2ccccc2CCC3)(C)C	1
O=C(O)C1=CN(c2nc(ccc2(C1(=O))))C)CC	1
Nc1cccc2c(N)cccc12	1
Nc1ccc2ccccc2(c1)	1
O=C(Nc1c(cccc1C)C)CN2C(=O)CCC2	0
n1cccc(c1)C2N(C)CCC2	0
O=C(Nc1ncc([N+](=O)[O-])s1)NCC	1
O=C(O)CN(CC(=O)O)CC(=O)O	1
O=C(Nc1ccc(OCC)c(c1)[N+](=O)[O-])C	0
O=[N+](([O-])c1ccc(OC)c(N)c1	1
O=C(N)NN=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-]	1
O=[N+](([O-])c1oc(cc1)C(=NO)N	0
O=C(OC(OC(=O)C)c1oc(cc1)[N+](=O)[O-])C	0
O=[N+](([O-])c1oc(cc1)c3cnc2ccccn23	1

O=C1OC(=NN1)c2oc(cc2)[N+](=O)[O-]	1
O=C(Nc2nnc(c1oc(cc1)[N+](=O)[O-])s2)C	1
O=C(Nc1nc(cs1)c2oc(cc2)[N+](=O)[O-])C	1
O=CNc1nc(cs1)c2oc(cc2)[N+](=O)[O-]	1
O=[N+](O-)[C](=CCC)CC	1
O=[N+](O-)[C]1ccc(N)c(N)c1	0
O=[N+](O-)[C]1ccc(c(N)c1)C	0
O=[N+](O-)[C]1ccc(N)cc1	0
O=[N+](O-)[C]1ccccc1(OC)	1
O=C(O)c1ccc(cc1(N))[N+](=O)[O-]	0
O=[N+](O-)[C]1ccccc1	1
O=[N+](O-)[C]1ccc2nc[nH]c2(c1)	0
O=[N+](O-)[C]CCCC	0
O=[N+](O-)CCC	1
O=[N+](O-)[C]2ccc(Oc1ccc(cc1Cl)Cl)cc2	1
O=[N+](O-)[C]2ccc3c1ccccc1Cc3(c2)	1
O=C2NC(=O)CN2(N=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-])	1
O=C2NCCN2(N=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-])	1
O=[N+](O-)[C]	1
O=[N+](O-)[C]2cccc1ccccc12	0
O=[N+](O-)[C](CC)CC	1
O=[N+](O-)[C]CCC	0
O=C(O)CC[N+](=O)[O-]	0
O=[N+](O-)[C]4ccc1ccc2cccc3ccc4(c1c23)	1
O=[N+](O-)[C]2cccc1cccn12	1
O=NN(C(=O)Oc1ccccc1(OC(C)C))C	1
O=NN(CCCC(F)(F)F)CCCC(F)(F)F	1
O=NN1C(=O)NC(=O)C(C)C1	0
O=NN1C(=O)NC(=O)CC1	1
O=NN(CC(O)C)CC(O)CO	1
O=NC(O)C(O)CNCC(=O)C	1
O=NN(CCO)CC(O)CO	1
O=NN2CC(N(C(=O)c1ccccc1)C(C)C2)C	1
O=NN(C(=O)NCCCl)CC(O)C	1
O=NN1CCC(O)C1	1
O=NN(C)CCCCCCCCCCCC	1
O=NN(c1ccc(F)cc1)C	1
O=NN(c1ccc(cc1)[N+](=O)[O-])C	0
O=NN(C)CCCCCCCCCCCCC	1
O=NN(C)CCCCCCCCCCC	1
O=NN(C(=O)N)C	1
O=NN1C(=O)OCC1	1
O=NN1CN(N=O)CCC1	1
O=NN1CC=CCC1	1
O=NN(CC)CC(F)(F)F	1

O=NN1CC(N(C)C(C)C1)C	1
O=NN(CC=C)CC(O)CO	1
O=NN(CC=C)CC(O)C	1
O=NN(CC=C)CCO	1
O=NN(C(=O)Nc2nc1cccc1s2)C	1
O=NN(CC(O)C)CC(O)C	1
O=NN(CC(=O)C)CC(=O)C	1
O=NN(CCCC)CCCC	1
O=NN(CCO)CCO	1
O=NN(CC)CC	1
O=NN(C)C	1
O=NN(c1cccc1)c2cccc2	1
O=Nc1ccc(cc1)Nc2cccc2	1
O=NN(CCC)CCC	1
O=NN1CSCSC1	0
O=NN1CCCCCCCCCCCC1	1
O=NN(C)C(C)C(O)c1cccc1	1
O=NN(C)CC	1
O=NN(C(=O)OCC)CC	1
O=NN1CC(=CCC1)C(=O)OC	0
O=NN1CCCCCCCC1	1
O=NN1CC(O)CC1(C(=O)O)	0
O=NN(CC(=O)O)CC(=O)O	0
O=NN(C)CC(O)CO	1
O=NN(C)CCO	1
O=NN(C)CCCO	1
O=NN(C)CC(=O)C	1
O=NN(c1ncccc1)C	1
O=NN(c1cnccc1)C	0
O=NN(c1ccncc1)C	0
O=NN(c1cccc1)C	1
O=NN(C)CCCCCCCCCCC	1
O=NN1CCOCC1	1
O=NN2CCCC2(c1ccc[n+][O-])c1	1
O=NN1CCCCC1(C(=O)O)	0
O=NN1CCCC1	1
O=NN1C(C)SC(C)SC1C	1
n1ccc3c(c1)[nH]c2cccc23	0
O=C1OC(C)Cc2c1c(O)c(cc2Cl)C(=O)NC(C(=O)O)Cc3cccc3	1
c1(c(c(c(c1Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)C(=C(Cl)Cl)Cl	0
n1ccnc(c1)C2=C(C(=S)SS2)C	0
O=C(ON=C(C(=O)N(C)C)SC)NC	0
O=C1Nc3ccc(cc3(C(=NC1(O))c2cccc2))Cl	0
O=C2c1cccc1c3ccc(cc23)NC(=O)C	1
O=C(O)C1=CN(c2cc3OCOc3(cc2(C1(=O))))CC	1

O=NN(C(=O)NCCCl)CC(=O)C	0
O=NN(C(=O)N)CC(=O)C	0
O=C(C=C)c1ccc2OCOc2(c1)	0
O(c1ccc(N)cc1)c2ccc(N)cc2	1
O2CCN(C(=S)SN1CCOCC1)CC2	1
O=[N+][O-]c1ccc(OP(OCC)(OCC)=S)cc1	0
O=C1OC2=CCOC(O)C2(=C1)	0
O(c1c(c(c(c1Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)C	1
C(C(Cl)(Cl)Cl)(Cl)Cl	0
O=C(Nc1ccc(OCC)cc1)C	1
O=C1C=C(N(N1c2ccccc2)C)C	1
O=C(OC4CC3=CCC1C(CCC2(C)(C(CCC12)C(C)CCCC(C)C))C3(C)CC4)Cc5ccc(cc5)N(CCCl)CCCl	1
C(=NCCc1ccccc1)=S	0
Oc1ccccc1	0
O=C3OC(c1ccc(O)cc1)(c2ccc(O)cc2)c4ccccc34	1
N(=NN(C)C)c1ccccc1	1
c1ccc(cc1)Nc2ccc3ccccc3(c2)	0
O=C(O)CCCC=C(c1cnccc1)c2ccccc2	0
NC(Nc1ccccc1)=S	0
O=C3C=Cc1ccccc1C3(=NNc2ccccc2)	1
O=C3N(c1ccccc1)N(c2ccccc2)C(=O)C3CCCC	1
Nc1ccc(N)cc1	0
O=C(OCCc1ccccc1)C=Cc2ccc(O)c(OC)c2	0
O(c1ccccc1)CC2OC2	1
O=C(N)c1ccccc1(C(=O)N)	0
O=C1OC(=O)c2ccccc12	0
O=C2OCC(Cc1cncn1C)C2CC	0
O=C2OC(C)CC=CC=CC=CC=CC(OC1OC(C)C(O)C(N)C1(O))CC4OC(O)(CC(O)CC3OC3(C=C2))CC(O)C4	0
N1CCNCC1	0
N1CCCCC1	0
O=S(CCCCCCCC)C(C)Cc1ccc2OCOc2(c1)	0
O=C2c1ccccc1S(=O)(=O)N(C2=C(O)Nc3ncccc3)C	0
O=C1OCC1(C)C	1
O=C(Nc1ccc(OCC(O)CNC(C)C)cc1)C	0
O=C1N(c3ccc(cc3(C(=NC1)c2ccccc2))Cl)CC4CC4	0
O=C1C=CC4(C(=C1)CCC3C5CCC(O)(C(=O)COC(=O)CCCc2ccc(cc2)N(CCCl)CCCl)C5(C)(CC(O)C34))(C	1
O=C1C=CC3(C(=C1)CCC2C4CCC(O)(C(=O)CO)C4(C)(CC(O)C23))(C	1
O=C(O)c1ccc(cc1)S(=O)(=O)N(CCC)CCC	0
O=C(NC(C)C)c1ccc(cc1)CNNC	1
O=C(OCCC)c1cc(O)c(O)c(O)c1	0
O=NN(C(=N[N+](=O)[O-])N)CCC	1
O=NN(C(=O)N)CCC	1
C=CC	0
OCC(O)C	0
O1CC1C	1

O=C1C=C(NC(N1)=S)CCC	1
O=C(NNCC)C3C(c1cc(OC)c(OC)c(OC)c1)c2cc4OCOc4(cc2C(O)C3(CO))	0
O=C(O)c1ccc(O)c(O)c1	0
O=C(N)c1nccnc1	0
O=C(Nc1cccc(c1)[N+](=O)[O-])C3=Cc4cccc4(C(=NNc2cc(ccc2(OC)))[N+](=O)[O-])C3(=O))	0
O=[N+](O)c1cc(N)ccc1(NCCO)	0
Oc1cccc(O)c1	0
O=C(O)C=C(C=CC=C(C=CC1=C(C)CCCC1(C)C)C)C	0
O=C(OCC=C(C=CC=C(C=CC1=C(C)CCCC1(C)C)C)C)C	1
O=C(OCC=C(C=CC=C(C=CC1=C(C)CCCC1(C)C)C)C)CCCCCCCCCCCCCCC	0
O=C1OC3CCN2CC=C(COC(=O)C(O)(CO)C(C)CC1(=CC))C23	1
O=C(OC3C(C)C(OC)C=COC1(Oc4c(C1=O))c5C(=O)C(=CNN2CCN(C)CC2)C(NC(=O)C(=CC=CC(C)C(O	0
O=C3c5ccc1OC(C(=C)C)Cc1c5(OC4COc2cc(OC)c(OC)cc2C34)	0
O=C1NS(=O)(=O)c2cccc12	0
Oc1ccc(cc1CO)C(O)CNC(C)(C)C	1
O=C(O)C3=CC(=NNc1ccc(cc1)S(=O)(=O)Nc2ncccc2)C=CC3(=O)	1
Oc1ccc2OCOc2(c1)	1
O=C(O)C=CC=CC	0
O=C1c5c(O)cccc5(Oc3c1c(OC)cc2OC4OC=CC4(c23))	1
O=NN(C(=O)NC1C(O)OC(CO)C(O)C1(O))C	1
O1CC1c2cccc2	1
O=C1OC(=O)CC1	0
C=C(CSC(N(CC)CC)=S)Cl	1
O=S(=O)(Nc1onc(c1C)C)c2ccc(N)cc2	0
O=S1(=O)(CC=CC1)	0
O=C(Nc1ccc(cc1)S(=O)(=O)c2ccc(cc2)NC(=O)C)C	1
O=C(O)CCC(=O)OCC2(C(=O)N(c1cccc1)N(C2(=O))c3cccc3)CCCC	0
O=C(OC2CCN1CC=C(COC(=O)C(O)(C(O)C)C(C)C)C12)C(=CC)C	1
O(c1ccc(cc1)C(c2ccc(OC)cc2)=C(c3ccc(OC)cc3)Cl)C	0
O=S(=O)(O)CCN	0
O=C1NC(=O)N(C=C1(F))C2OCCC2	0
Oc1c(cc(cc1C(C)(C)C)C(C)(C)C)C(C)(C)C	0
O=[N+](O)c1c(c(c(OC)c(c1Cl)Cl)Cl)Cl	0
Nc1cc(c(cc1Cl)c2cc(c(N)cc2Cl)Cl)Cl	0
O1c3cc(c(cc3(Oc2cc(c(cc12)Cl)Cl))Cl)Cl	1
C(C(Cl)(Cl)Cl)Cl	0
C(C(Cl)Cl)(Cl)Cl	0
C(=C(Cl)Cl)(Cl)Cl	1
C(N(CC)CC)(=S)SSC(N(CC)CC)=S	0
FCC(F)(F)F	1
FC(F)=C(F)F	1
O=NN1OCCCC1	1
O1CCCC1	1
O=C1NC(O)CCN1C2OC(CO)C(O)C2(O)	0
C(N(C)C)(=S)SSC(N(C)C)=S	0

O=[N+](O-)[C](N+)(=O)[O-])([N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1
n1cccc1N(Cc2ccsc2)CCN(C)C	0
O=C2c1[nH]cnc1N(C(=O)N2C)C	0
n1csc1c2nc3cccc3([nH]2)	0
O=C(NC(CO)C(O)c1ccc(cc1)S(=O)(=O)C)C(Cl)Cl	0
N1(CC1)P(N2CC2)(N3CC3)=S	1
NC(C)=S	1
Oc1cc(c(cc1C(C)(C)C)Sc2cc(c(O)cc2C)C(C)(C)C)C	0
Nc1ccc(cc1)Sc2ccc(N)cc2	1
OCC3OC(n2cnc1C(N=C(N)Nc12)=S)CC3(O)	1
NNC(N)=S	0
O=C1C=CNC(N1)=S	1
NC(N)=S	1
Oc2c(c(c1OC(C)(CCc1c2C)CCCC(C)CCCC(C)CCCC(C)C)C)C	0
O=C(Oc2c(c(c1OC(C)(CCc1c2C)CCCC(C)CCCC(C)CCCC(C)C)C)C)C	0
O=C(NCCCC)NS(=O)(=O)c1ccc(cc1)C	0
O=S(=O)(N)c1ccccc1C	1
O=C1C=C(C(=O)C(=C1N2CC2)N3CC3)N4CC4	1
O=C1C=CC4(C(=C1)CCC3C5CC2OC(OC2(C(=O)CO)C5(C)(CC(O)C34(F)))(C)C)(C)	1
n1c(nc(N)c2nc(c(nc12)N)c3cccc3)N	0
C(Br)(Br)Br	1
FC(F)(C(F)(Cl)Cl)Cl	0
Nc1c(cc(cc1Cl)Cl)Cl	0
C(C(Cl)Cl)Cl	0
CC(Cl)(Cl)Cl	0
C(=C(Cl)Cl)Cl	0
FC(Cl)(Cl)Cl	0
O=C1c2cccc2(C(=O)N1SC(Cl)(Cl)Cl)	0
Oc1c(cc(cc1Cl)Cl)Cl	1
O=C(O)COc1cc(c(cc1Cl)Cl)Cl	0
C(C(CCl)Cl)Cl	1
OCCN(CCO)CCO	0
OCCOCCOCCO	0
O=C(Nc1nc(cs1)c2oc(cc2)[N+](=O)[O-])C(F)(F)F	1
O=[N+](O-)[C]1cc(cc(c1N(CCC)CCC)[N+](=O)[O-])C(F)(F)F	0
O=C1OC(C(=O)N1C)(C)C	0
O=C(O)CCCCC(c1cccc1)C=2C(=O)C(=C(C(=O)C=2C)C)C	0
Nc1cc(c(cc1C)C)C	1
N(C(N(C)C)=S)C	1
O=[N+](O-)[C]1cc(cc(c1)[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	0
O=[N+](O-)[OCC(O[N+](=O)[O-])CO[N+](=O)[O-]	1
O=P(OCC(CBr)Br)(OCC(CBr)Br)OCC(CBr)Br	1
O=P(OCC(CC)CCCC)(OCC(CC)CCCC)OCC(CC)CCCC	0
OC(C)CN(CC(O)C)CC(O)C	0
O=C(O)C(N)Cc2c[nH]c1cccc12	0

O=C(O)C(N)Cc2c[nH]c1cccc12	0
O=C(C=Cc1ccc(O)c(OC)c1)CC(=O)C=Cc2ccc(O)c(OC)c2	0
O=C1C=CNC(=O)N1	1
O=C3C=C(NCCCN2CCN(c1cccc1(OC))CC2)N(C(=O)N3C)C	0
O=C(N)N	0
O=C(OCC)N	1
O=C(OC2C(O)(C(=O)OC)C5N(c1cc(OC)c(cc1C45(CCN3CC=CC2(CC)C34))C9(C(=O)OC)(c7[nH]c6cccc	0
O=C(OC=C)C	1
C=CBr	1
FC=C	1
O=C1N(C=C)CCC1	1
OCC(NC1CC(O)(CO)C(O)C(O)C1(O))CO	0
O=C2C=CC(=CC2(=NNc1ccc(cc1)NC(=O)C))C	1
O=C(Nc1cccc1)C(N=Nc2ccc(cc2Cl)c4ccc(N=NC(C(=O)Nc3cccc3)C(=O)C)c(c4)Cl)C(=O)C	0
O=C3c1cccc1c4ccc5C(=O)c2cccc2c6ccc3c4c56	0
O=C1OC(C)CCCC(=O)CCCC=Cc2cc(O)cc(O)c12	0
ON=C(C)C	1
O=C(Nc1ccc(cc1)c2cccc2)C	1
O=C(O)C(NC(=O)C)CS	0
O=C4Oc2c(c(OC)cc1OC3OC=CC3(c12))C5=C4C(=O)CC5	1
C(=NCC=C)=S	1
O=C(OCC=C)CC(C)C	1
O=[N+][O-]c1ccc(N)c(O)c1	1
O=C(O)CCCCCCCCCN	1
O(c1ccc(cc1)C=CC)C	0
Nc1cccc1	0
O=C(O)c1cccc1(N)	0
Fc1ccc(cc1)Cn3c(nc2cccc23)NC5CCN(CCc4ccc(OC)cc4)CC5	0
N(=Nc1cccc1)c2cccc2	1
[N-]=[N+]=NC1CC(OC1(CO))N2C=C(C(=O)NC2(=O))C	1
O=C(O)c1cccc1	0
O(CCl)CCl	1
O=C1c3c(N)ccc(N)c3(C(=O)c2c(N)ccc(N)c12)	1
CCBr	1
O=C(OCc1cccc1)c2cccc2(C(=O)OCCCC)	1
O=NN(CCCC)CCCCO	1
O=NN(C(=O)N)CCCC	1
O=C(O)C=Cc1ccc(O)c(O)c1	1
O=C(Oc1cccc2cccc12)NC	1
Oc1cccc1(O)	1
C2(=C(C3(C1C(CC(C1Cl)Cl)C2(C3(Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl	0
O(c1ccc(N)cc1)c2ccc(cc2)Cl	1
O=C1OC(O)C(=C1Cl)C(Cl)Cl	1
O=[N+][O-]c1ccc(c(c1)[N+](=O)[O-])Cl	0
FC(F)Cl	0

CCCCI	0
FCCI	1
O=C(Nc1ccc(cc1)Cl)N(C)C	1
n1nc4n(c1C)c3c(cc(CCc2ccc(cc2)CC(C)C)s3)C(=NC4C)c5ccccc5Cl	0
O=C1c3ccccc(O)c3(C(=O)c2c(O)cccc12)	1
O=C2C1=COC(C)C(C1=C(C(=O)C2(=C(O)O))C)C	1
O=C1CCCCC1	0
O=C1NC(C(=O)N(C)C(C(=O)N(C)C(C(=O)N(C)C(C(=O)N(C)C(C(=O)NC(C(=O)N(C)CC(=O)N(C)C(C(=O)c1cc(ccc1C(c2ccc(cc2)Cl)C(Cl)(Cl)Cl)Cl	0
O=C(OC3CC2=CCC1C4CCC(=O)C4(C)(CCC1C2(C)CC3))C	1
O=C(OC3CC4CN2CCc1c5ccccc5([nH]c1C2CC4(C(C(=O)OC)C3(OC))))c6cc(OC)c(OC)c(OC)c6	0
O=[N+](O)c1oc(cc1)c2nc(nc(n2)N)N	1
O=C1N(c3ccc(cc3(C(=NC1)c2ccccc2))Cl)C	0
Nc1cc(c(N)c(c1)Cl)Cl	0
c1ccc(c(c1)Cl)Cl	0
CC(Cl)Cl	0
O=C(O)COc1ccc(cc1Cl)Cl	0
OC(c1ccc(cc1)Cl)(c2ccc(cc2)Cl)C(Cl)(Cl)Cl	0
O1CC1C2OC2	0
O=C(N(CC)CC)C	1
O=C(NC(=O)C)N(CC)CC	0
N(C(NCC)=S)CC	1
O=C1NC(=NCN1C2OC(CO)C(O)C2(O))N	0
O=C1NC(Nc2ccccc12)c3ccc([N+](=O)[O-])s3	1
O=C(OC1OC(OC(C)C1)C)C	1
O=C(NCCSP(OC)(OC)=S)C	0
O=P(OC)(OC)N1CCOCC1	1
O=[N+](O)c1oc(cc1)c2nc(cc(n2)C)C	1
O=NN(CCCCC)CCCCC	1
c1ccc(cc1)Nc2ccc(cc2)Nc3ccccc3	0
NC(C(N)=S)=S	0
O1C2C1C3CC2C4C3C5(C(=C(C4(C5(Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl	0
O1CC1CC	1
O=C(O)C(N)CCSCC	1
OCC	1
[O-][N+](=NCC)CC	1
O=C1OC(C(OCC)=C1(O))C(O)CO	0
Oc1ccc(cc1(OC))CC=C	0
O=C1NC=C(F)C(=O)N1	0
O=C	1
O=CNc1nc(cs1)C	1
O=C(N)NN=Cc1occc1	0
O=Cc1occc1	1
O=C(O)c2cc(c(cc2(NCc1occc1))Cl)S(=O)(=O)N	0
n2c(N)ccc3nc1cccn1c23	

OCC(O)CCI	0
NCCCCCCC	0
n1c(csc1NN)c2ccc(N)cc2	1
O=[N+][O-]c1oc(cc1)c2nc(NN)sc2	1
O=NN(C(=O)N)CCO	1
Oc1cccc2cccnc12	0
n1cccc3c1ccc2c3(nc(N)n2C)	1
C=C(C)C	1
O=C2C(=C(O)Nc1ncccc1)N(C)S(=O)(=O)c3cc(Cl)sc23	0
O=C3OC(CCCC2C(C=CC1=CC(C)CC(OC(=O)C(C)CC)C12)C)CC(O)C3	0
O=C(OCC)CC(C(=O)OCC)SP(OC)(OC)=S	0
O=C2c1cccc1S(=O)(=O)N(C2=C(O)Nc3ncc(C)s3)C	0
n1cccc1N(Cc2occc2)CCN(C)C	0
O=C(O)CCC(NC(=O)c1ccc(cc1)N(C)Cc2nc3c(nc2)nc(nc3(N))N)C(=O)O	0
o2c1cccc1c3cc(OC)c(N)cc23	1
O(c1ccc(cc1)C(c2ccc(OC)cc2)C(Cl)(Cl)Cl)C	0
O=C(OC)CCCCCCCC=CCC=CCCCC	0
C(Cl)Cl	1
c1cc(ccc1N(C)C)Cc2ccc(cc2)N(C)C	1
N(=C(N)N)C	0
O=C1N=C(N)Nc2ncn(c12)C	0
Oc1ccc(O)c(c1)C	0
O=[N+][O-]c1cnc(n1CCO)C	1
C13(C4(C2(C5(C(C1(C2(Cl)Cl)Cl)(C3(C(C45Cl)(Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl	1
O=C1OC3CCN2CC=C(COC(=O)C(O)(C)C(O)(C)C1C)C23	1
O=[N+][O-]c4ccc(c2nc1cccc1c(n2)N3CCOCC3)s4	1
O=C(NCc1nc(no1)c2oc(cc2)[N+](=O)[O-])C	1
O=[N+][O-]c1oc(cc1)c2ncsc2	1
O=C(Nc1nc(nc(n1)c2oc(cc2)[N+](=O)[O-])NC(=O)C)C	1
O=[N+][O-]c1cc(N)ccc1(N)	0
O=[N+][O-]c3ccc2c1c3(cccc1CC2)	1
O=C(O)c1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]	1
O=[N+][O-]CC	0
N(C)(CCCl)CCCl	1
O=[N+][O-]C(C)C	0
O=[N+][O-]c1ccc2ncccc2(c1)	0
O=NN(C(=O)NCCCl)CCO	1
O=NN1CCOC(O)C1	0
O=NN(CCO)CC(O)C	1
O=NN(C(=O)N)CC(C)C	1
O=NN(C)CCc1cccc1	1
O=NC(=O)CCNCCO	1
O=NN(CC=C)CC(=O)C	1
O=NN(C(=O)OCC)CCCCC	1
O=NN2CCCCC2(c1cnccc1)	1

O=NN(CC(F)(F)F)CC(F)(F)F	0
N#CNC(=NCCSCc1nc[nH]c1C)N(N=O)C	0
O=NN1C(=O)NC(=O)C1	1
O=NN1CCNCC1	1
O=NN1CCCCC1	1
O=NN1CCCC1(C(=O)O)	0
O=NN1CCSCC1	1
O=Nc1cccc1C	1
O=S(c1nc2ccc(OC)cc2([nH]1))Cc3ncc(c(OC)c3C)C	1
O=NN(C(=N[N+](=O)[O-])N)CCCCC	0
O=C2OCC3=CCN(C)CCC(OC(=O)C1(OC1(C)))(CC(C)C2(O)C))C3(=O)	1
O=C2NC(=O)C(c1cccc1)(C(=O)N2)CC	0
O=C1N(N=C(C)C1)c2cccc2	0
Oc1cccc1c2cccc2	1
O=C(O)c1nc(c(c(N)c1Cl)Cl)Cl	0
O1c2cc(c(cc2(OC1))CCC)COCCOCCOCCCC	1
O=C4N2CCc1cccc1C2CN(C(=O)C3CCCC3)C4	0
O=S1(=O)(OCCC1)	1
O=C1OCC1	1
O=C1c3cccc3(C(=O)c2c(O)c(O)cc(O)c12)	1
n1c(nc(c(c1N)c2ccc(cc2)Cl)CC)N	0
O=Nc1ccc(cc1)NO	1
O=C3C=Cc1cccc1C3(=NNc2ccc(cc2[N+](=O)[O-])C)	1
O=C(OC3CC4CN2CCc1c5ccc(OC)cc5([nH]c1C2CC4(C(C(=O)OC)C3(OC))))c6cc(OC)c(OC)c(OC)c6	1
O=C1Nc3c(nn(c3(C(=NC1)c2cccc2))CC)C	0
O1c2ccc(cc2(OC1))CC=C	1
OC3CC(=CC=C1CCCC2(C)(C1CCC2(C(C)CCC(O)C(O)(C)C)))C(=C)CC3	0
O=C2OC1C(=O)C(=CCN(C)CC1)COC(=O)C(O)(C)C(C)CC2(=CC)	1
O=C(OC1OC(CO)C(O)C(O)C1(O))C7(C)(CCCC4(C)(C7(CCC56(CC(=C)C(OC3OC(CO)C(O)C(O)C3(OC2	0
Oc1cc(O)cc(c1)C(O)CNC(C)(C)C	1
Oc1cc(cc2OC(C)(C)C3CCC(=CC3(c12))C)CCCCC	0
O=C(NN1CCCCC1)NS(=O)(=O)c2ccc(cc2)C	0
O=C(N)Nc1ccc(cc1)C	0
O=C(OCC(OC(=O)CCCCCCC)COC(=O)CCCCCCC)CCCCCCC	1
O=C(O)C(Cl)(Cl)Cl	0
O=P(OC)(OC)C(O)C(Cl)(Cl)Cl	0
c1cc(c(cc1C)C)C	1
C=CCl	1
FC(F)=C	0
O=C(Nc1ccc(cc1C)c3ccc(NC(=O)C(N=Nc2ccc(cc2Cl)Cl)C(=O)C)c(c3)C)C(N=Nc4ccc(cc4Cl)Cl)C(=O)C	0
O=C(Nc1cc(OC)c(cc1(OC))Cl)C(N=Nc2ccc(cc2Cl)c4ccc(N=NC(C(=O)Nc3cc(OC)c(cc3(OC))Cl)C(=O)C	0
O=[N+][[O-]]c1ccc(NCCO)c(OCCO)c1	0