

SMILES	Class
<chem>n1c([nH]c(c1c2ccccc2)c3ccccc3)c4ccc(OC)cc4</chem>	1
<chem>O=C(O)C3N1C(=O)CC1S(=O)(=O)C3(C)(Cn2nncc2)</chem>	0
<chem>O=C(OCCN(C)C)C=C</chem>	0
<chem>c1c(c(cc(c1Cl)Cl)Cl)Cl</chem>	0
<chem>O=Nn2cc(c1ccccc12)CCO</chem>	1
<chem>O=C(Nc1cccc(c1)Br)c2cc([N+](=O)[O-])sc2</chem>	1
<chem>O=C1C=C(Oc2cc(OCC(=O)OCC)ccc12)c3ccccc3</chem>	0
<chem>O=C5c1cccc1N(c3c5(c(O)cc2OC(Cc23)C4(OC4)(C)))C</chem>	1
<chem>c1ccc(cc1)CCCCCCCCCCCC</chem>	0
<chem>O=S(=O)(Nc1ccc(cc1)Nc3c4ccccc4(nc2ccccc23))C</chem>	1
<chem>O=[N+](O)c2ccc(Oc1ccc(cc1Cl)Cl)cc2</chem>	1
<chem>O=[N+](O)c1ccc(c(O)c1)[N+](=O)[O-]</chem>	1
<chem>O=C(OCC)CC(C)C</chem>	0
<chem>n1ccnc3c1c2nc(N)n(c2c(c3C)C)C</chem>	1
<chem>Nc1c(cc(c(N)c1C)SC)SC</chem>	1
<chem>Oc1ccc3c(c1)c2ccccc2c4cc5ccccc5(cc34)</chem>	1
<chem>O=C(C(=C)Br)C</chem>	1
<chem>NCCNCCNCCN</chem>	1
<chem>OC12(CCCCC2(C)(CCCC1(C)))</chem>	0
<chem>OCCc1ccc(cc1)N(C)C</chem>	1
<chem>O=C2C=C(OC)C(=O)c3ncc1c4cnccc4([nH]c1c23)</chem>	1
<chem>O=Cc1ccccc1Cl</chem>	0
<chem>O=[N+](O)c1c(O)c(cc(c1Cl)Cl)Cl</chem>	0
<chem>c2c3c1csc1C4NC4(c3(cs2))</chem>	1
<chem>O=C(OCC(CC)CCCC)c1ccccc1(C(=O)OCC(CC)CCCC)</chem>	0
<chem>O=C(OCC(CC)CCCC)COc1ccc(cc1Cl)Cl</chem>	0
<chem>O=C(OC(C#CCN(CC)CC)(C)C)C(O)(c1ccccc1)C2CCCCC2</chem>	0
<chem>O=C(OCC(C)(C)C)C=C</chem>	0
<chem>FC(C(F)(F)C(F)(F)Cl)Cl</chem>	0
<chem>N(=Nc1cc(c(N)cc1(N))C)c2ccccc2</chem>	1
<chem>n1c(nc(N)c2nc(c(nc12)N)c3ccccc3)N</chem>	0
<chem>O=C(OC)c1ccc(cc1)C(=O)OC</chem>	0
<chem>n1cc(cc2ccccc12)Cl</chem>	0
<chem>O=C(OCCCCCOC(=O)C(=C)C)C(=C)C</chem>	0
<chem>O=C3c5cc6c(c(O)c5(C(=O)c4c(O)cc1c(OC2OC1(C)C(O)C(N(C)C)C2(O))c34))C(OC)CC(O)(C)C6</chem>	1
<chem>O=[N+](O)c2ccc(C=Cc1ccc(N)cc1)cc2</chem>	1
<chem>Oc1ccc(cc1(O))CC(C)C(C)Cc2ccc(O)c(O)c2</chem>	0
<chem>Oc1ccc(cc1Sc2cc(ccc2(O))Cl)Cl</chem>	0
<chem>OCC1OC(OC1)C(C)I</chem>	1
<chem>O=C(Nc1ccccc1C)CC(=O)C</chem>	0
<chem>O1CCCC1</chem>	0
<chem>n2cnn3c(nc(c1ccccc1)c(c23)CCOCC)N</chem>	0
<chem>O=C(NCCN(C)C)c2cccc1nc3ccccc3(nc12)</chem>	1
<chem>NCCS</chem>	0

Oc1ccc(cc1)c2ccc(O)cc2	0
c2ccc3cc1c(cccc1Cl)cc3(c2)	0
c1ccc3c(c1)c2ccccc2C3	0
O=C1OC(C)CCCC(=O)CCCC=Cc2cc(O)cc(O)c12	0
Nc1ccc(c(c1)C)C	1
n2ccc1c3ccccc3([nH]c1c2C)	1
O=NN1CCOC(O)C1	1
O=C(c1ccccc1[N+](=O)[O-])Cl	1
O=C(N[N+](C)(C)CC(O)C)C(=C)C	0
O=C(OCC)OCC	0
c1ccc2c(c1)cc3ccc4ccc(c5ccc2c3c45)CCl	0
O1CCOC3CCCCC3(OCCOCCOC2CCCCC2(OCC1))	0
O(CCCl)P(OCCCl)OCCCl	1
O=C1N(O)C(=O)CC1	0
O=C(OC)Nc1nc2ccccc2([nH]1)	1
O=NN(C(=O)OCC)CCCC(=O)c1cnccc1	1
C1CSCCS1	1
n1nc(NN)c2ccccc2(c1NN)	1
Oc3ccc4ccc2ccc1nc(n(c1c2c4(c3))C)C	1
NCCCN(CC)CC	0
O=[N+](O-)[c2ccc(Oc1ccc(N)cc1)cc2	1
Nc1c(cc(cc1C)c2cc(c(N)c(c2)C)C)C	0
O=[N+](O-)[c1ccccc1(OC)	1
n1cccc2ccc3c4ccccc4(ccc3(c12))	1
O=C(O)CCCCC	0
O=[N+](O-)[c2ccc3ccc4c(O)ccc5c1ccccc1c2c3c45	1
O=S(=O)(O)c5cc6cc(N)ccc6(c(O)c5(N=Nc1ccc(cc1(OC))c4ccc(N=Nc2cc(c3ccccc3(c2(O)))S(=O)(=O)	1
O=C(c1cc2c(cc1C)C(C)(C)C(C)C2C(C)C)C	0
O=C(O)CC(O)(C(=O)O)CC(=O)O	0
O=C2Oc1c(cccc1[N+](=O)[O-])c3ccccc23	1
C(I)I	0
OCc3c1ccccc1c(c2c4ccccc4(ccc23))C	1
c1ccc4c(c1)ccc3c4(cc2ccccc2c3C)	1
O=[N+](O-)[c1ccc(cc1)COS(=O)(=O)c2ccc(cc2)C	1
O=C(c1cccc(OC)c1)CBr	0
O=C4C=C(C(=O)c1c4(nc(c2c3ccccc3([nH]c12))C))N5CCN(C)CC5	1
O=C1c3ccccc3(C(=O)c2c(O)c(ccc12)C)	1
OCCN(CC)CC	0
O=C2OC(C)Cc3ccc(C(=O)NC(C(=O)O)Cc1ccccc1)c(O)c23	0
O1CC1CCCC	0
O=C6C=5C1=C(O)C=CC3C1=C(C(=O)C2OC23)C4=C(O)C=CC(C4=5)C7OC67	1
c1ccc(cc1)Nc2ccc(cc2)Nc3ccccc3	1
O2C3C=Cc1c(ccc[n+](1C)C23	1
O(COCC)CC	0
O=C(OCCO)C(=C)C	0

O=C1C(=COc2cc(O)cc(O)c12)c3ccc(OC)cc3	0
O=C(Nc1ccc(cc1)C(=O)C3OC3(c2ccccc2))C	1
O=C(OC)c1ccc(cc1)C	0
O=C(O)CNC(=O)C(C)S	0
O=[N+][([O-])c1ccc2nc3ccccc3(nc2(c1))	1
O=S(=O)(C(C)C)Cl	1
N#CCCCC#N	0
n1cc(nc2c1c3nc(N)n(c3(cc2C))C)c4cccc4	1
CCCCCl	0
O=[N+][([O-])c1oc2c(OC)ccc(c2(c1))N(CCCl)CCCl	1
n1c3cc(OC)c(N)cc3(nc2cc(OC)c(N)cc12)	1
n2c1nc3ccccc3(cc1n(c2N)C)	1
O=C1NC(=O)N(c2ncn(c12)C)C	0
O=C(O)CCc2c[nH]c1ccccc12	0
O=C(O)C(N)CC(=O)c1cccc(O)c1(N)	0
NCCC(N)C	0
O=[N+][([O-])c2cc4c3c1c(cc(cc1CCc3(c2)))[N+](=O)[O-])CC4	1
n2c(N)cc3[nH]c1ccccc1c3(c2C)	1
C(C(CBr)Cl)Cl	1
c1ccc3c(c1)cc4c2cc(ccc2c5c6ccccc6(cc3c45))C	1
O=C(OCC(CC)CCCC)C=Cc1ccc(OC)cc1	0
O=C=NCC1(C)(CC(N=C=O)CC(C)(C)C1)	0
O=[N+][([O-])c1cccc(N)c1	1
O=C(O)C3NC(c2[nH]c1ccccc1c2C3)C	0
O=[N+][([O-])c2cccc1c(nsc12)Cl	1
O=[N+][([O-])c3cc(c2c4ccccc4(c1cccc3(c12))))[N+](=O)[O-]	1
n1cc(nc2ccccc12)OP(OCC)(OCC)=S	0
O=P(OCC(CC)CCCC)(OCC(CC)CCCC)OCC(CC)CCCC	0
O=[N+][([O-])c3ccc(c2nc1ccccc1c(NCCCN(C)C)c23)Cl	1
O=C3C=C(OC)C(=O)c4nc(c1c([nH]c2c1CCCC2)c34)C	1
O=C(O)c4nc(c1nc2C(=O)C(N)=C(OC)C(=O)c2(cc1))c(N)c(c3ccc(OC)c(OC)c3(O))c4C	1
O=S4(=O)(OC(c1cc(c(O)c(c1)Br)Br)(c2cc(c(O)c(c2)Br)Br)c3c(c(c(c34)Br)Br)Br)Br	0
Oc1cc(c(c(c1)Cl)Cl)Cl	0
Nc1ccc3c(c1)cc2ccccc2[n+](3)C	1
O=C(OC1C(O)C(OC(CO)C1(O))OC6C(OC(c2nc[nH]c2)C(NC(=O)c3nc(nc(N)c3C)C(NCC(N)C(=O)N)CC	1
[O-][N+](=Nc1ccc(OCC)cc1)c2ccc(OCC)cc2	0
c1ccc(cc1)c2ccc(cc2)c3ccccc3	0
c1ccc2c(c1)ccccc2Cl	1
O=C1C=CSN1CCCCCCCC	0
O=C(O)c1cc(ccc1(O))Cl	0
n1c(nc(nc1N)Cl)N	0
N(=Nc1cccc2ccccc12)c3ccc(cc3)N(C)C	1
O=P(OC)(OC)OC	1
NC2c3ccccc3(c1ccccc12)	0
O=C1NC(=O)N(C=C1(F))C2OCCC2	0

O=C(O)C3N2C(=O)C(NC(=O)COc1ccccc1)C2SC3(C)(C)	0
O=[N+][([O-])c1ccc2NCCc2(c1)	1
O=C(Nc1ccccc1(F))c2cc([N+](=O)[O-])sc2	1
O=[N+][([O-])c1cnc(n1C)C2OCC(N2)(CO)CO	1
O(c1ccc(C=C)cc1)C	0
Oc4ccc(Nc2c3ccccc3(nc1ccccc12))c(OC)c4	1
O=C(c1ccc2ccccc2(c1))C	0
O=C(OC)c1ccccc1(O)	1
O3C4c5ccccc5(c2ccc1ccccc1c2C34)	1
O=[N+][([O-])c1ccc(cc1[N+](=O)[O-])C	1
O=C1C=C3c4cc5ccccc5(cc4(c2cccc(C1(=O))c23))	1
O=P(OCC(C(C)Br)Br)(OCC(C(C)Br)Br)OCC(C(C)Br)Br	1
O=C1N=C(N)c2ncn(c2(N1))C3OC(CO)C(O)C3	0
O=C2NC(=O)CN2(N=CC=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-])	1
n1cc(cc2c1nc(N)n2C)c3ccccc3	1
O=C3Oc1cc(O)ccc1c4oc2cc(O)ccc2c34	0
O=CC(=C)Br	1
O=C(CCc1ccc(O)c(OC)c1)CCCCCCC	0
O=C(OC1CC(C)CC(C)(C)C1)c2ccccc2(O)	0
O=C(O)CCCCCCCCC(=O)O	0
O=C(O)C(NC(=O)C)CSC(=C(C(=C(Cl)Cl)Cl)Cl)Cl	1
O=P(OC)(SC)SC	0
O=C(O)CC(O)C(=O)O	0
OC(COc1ccccc1CC=C)CNC(C)C	0
O=[N+][([O-])c2cccc1cccc(c12)[N+](=O)[O-]	1
n1ccc(C=C)cc1	0
O=C4Oc2c(c(OC)cc1OC3OC=CC3(c12))C5=C4C(O)CC5	1
O=C(OC)COc1ccc(cc1Cl)Cl	0
O=CC2=CC=C1C2(=CC(=CC=C1C)C(=C)C)	1
O=[N+][([O-])c1cccc(OCC)c1	0
n1cc[nH]c1C	0
n1c(N)ccc2nc3c(cccn3(c12))C	1
O=C(Nc1ccc(cc1)S(=O)(=O)c2ccc(N)cc2)C	0
O=C(OCC)CNC(=O)CBr	0
n1cc4c5ccccc5(cc3ccc2cccc1c2c34)	1
O=S(=O)(N)c1cc2c(cc1Cl)NC(N(C)S2(=O)(=O))CSCC(F)(F)F	0
NC1CCC(CC1)CC2CCC(N)CC2	0
N#CCCCC	0
O=C(OC)C(=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1
c1cc2cccc3c4cc(ccc4(c(c1)c23))CCl	1
O=[N+][([O-])c1ccc(c(c1)[N+](=O)[O-])Cl	1
O=C2c1ccccc1N(O)C2(c3ccccc3)C	0
n1cc(ncc1C)C	0
c1ccc(cc1)CN3C4c5ccccc5(c2ccccc2C34)	1
O=C(OCCCCC(C)C)C=C	0

O=C(O)c1cccc1(N)	0
O=[N+][([O-])c5ccc4c3c5(c1cccc1c2cccc(c23)C(O)C4(O))	1
N#CC(C#N)=C1C=C(OC(=C1)C)C=Cc2ccc(cc2)N(C)C	1
O(CCCC)CC1OC1	1
O=C(N)N(c1cccc1)c2cccc2	0
O=C(O)C=Cc1cccc(c1)[N+](=O)[O-]	1
CCCCCCCCCCCCS	0
C(=NC(C)C)=NC(C)C	0
O=C(N)NO	1
FCC1OC1	1
O=C(NCc1cccc1)C(c2cccc2)Cl	1
ON1C(C)(C)CC(O)CC1(C)C	1
O=C(Nc1ccc(cc1)Sc2cccc2)C	1
O=[N+][([O-])c2ccc(Nc1cccc1(O))c(c2)[N+](=O)[O-]	1
O=C(N(O)c1ccc(cc1)c2cccc2)CC	1
O=C1C=C(OC=C1(O))CO	1
n1cccc1N(Cc2ccc(OC)cc2)CCN(C)C	0
O=C(N(C)C(C)(C)Cc1cccc1)CN(CC(=O)N(C)C(C)(C)Cc2cccc2)CCO	0
N1CC1	1
OCC(CBr)(CBr)CBr	1
n1c(OP(OCC)(OCC)=S)c(cc(c1Cl)Cl)Cl	0
O=C(C)CC(C)C	0
O=C(OCC2=CC=C1C2(=CC(C(=C)C)CC=C1C))CCCCCCCCCCCCCCCC	1
O=C(O)c4ccc(C=NN1N=Nc2c3cccc3([nH]c2(C1(=O))))cc4	1
ONc1ccc(cc1)Sc2cccc2	1
OCC=Cc1cccc1	0
Nc1ccc(N)cc1	1
O=[N+][([O-])c1ccc2c3cccc3(cc(c2(c1)))[N+](=O)[O-])	1
O=[N+][([O-])c4cc2cccc3c1cccc1c(c23)c4[N+](=O)[O-]	1
O=[N+][([O-])c1ccc(C=C)cc1	1
N(CC(C)C)(CC(C)C)CC(C)C	0
O=C1C(=C(N(N1c2cccc2)C)C)N(C)CS(=O)(=O)O	1
ONc3nc1c(nc2c(cccn12)C)cc3	1
c1ccc3c(c1)C=Cc2cccc2C3=C4CCN(C)CC4	0
O=C(OCCCCCCCCCCCCC)c1cccc1(C(=O)OCCCCCCCCCCCCC)	0
n1cccc1Cl	1
Fc1ccc2cccn2(c1)	1
Oc1ccc(OC)cc1	0
O=C(O)COc1ccc(C(=O)C(=C)CC)c(c1Cl)Cl	0
O=C(NCCN(C)C)c1cccc2C(=O)c3cccc3(C(=O)c12)	1
N#CC(N=NC(C#N)(C)C)(C)C	0
O=[N+][([O-])C1CCCC1	1
C1(C(C(C(C1Br)Br)Br)Br)Br)Cl	0
c1ccc3c(c1)c2cccc2c5c3c4cccc4C6NC56	1
O=C1C(O)=C(Oc2cc(O)cc(O)c12)c3cccc3	0

n2c(c1cc(N)ccc1s2)Cl	1
O=C(O)CCCCCCCC=CCC=CCCCC	0
O1C(CBr)C1Cl	1
C(=CC=C(C=CC=C(C=CC=C(C)CCC=C(C)C)C)C=C(C=CC=C(C=CC=C(C)CCC=C(C)C)C)C	0
Oc1cccc2ncccc12	1
O=C(OCCCN2CCN(CCCOC(=O)c1cc(OC)c(OC)c(OC)c1)CCC2)c3cc(OC)c(OC)c(OC)c3	0
n1c3cccc(N)c3(nc2ccc(N)cc12)	1
O=C3OC(CC)C(O)(C)C(O)C(N(C)CC(C)CC(O)(C)C(OC1OC(C)CC(N(C)C)C1(O))C(C)C(OC2OC(C)C(O)C(0
O=C(Nc1cccc1Br)c2cc([N+](=O)[O-])sc2	1
O1CC1CCCCCCCCC	0
O=C(N(O)c1ccc(cc1)Cl)CO	0
n1ccc(cc1)c2ncccc2	1
O=C1CC(C)CCC1C(C)C	1
CNP1(=NP(=NP(=N1)(NC)NC)(NC)NC)NC	0
O=NN1CCOCC1	1
N#CC(C)(C)C(C#N)(C)C	0
O=C(O)C(N)CCS(=O)(=N)C	0
O=CC=CCCC	1
NNC(CNC(C=[N+]=[N-])=O)=O	1
O=C1Oc4cc(ccc4(C=C1c3nc2cccc2n3C))N(CC)CC	0
O=C(Nc1cccc(N)c1)C	1
O=C(O)C(N)Cc2c[nH]c1ccc(O)cc12	0
Oc2ccc3ccc4cc1cccc1c5ccc2c3c45	1
O=C(OCCc1cccc1)c2cccc2(N)	0
c1ccc3c(c1)ccc2cc(ccc23)C	1
[N-]=[N+]=Nc1ccc(F)c(c1)[N+](=O)[O-]	1
O=C1C=C(OC)C(=O)c2nc(c3c4cnccc4([nH]c3(c12)))C	1
OCC(O)COC=CC=CC=CC=CCC	1
O=C(ON(C(=O)NC)C(=O)C)NC	1
O1CC1c2cccc2	1
c1cc(cc3c1c2ccc(cc2C3)C)C	0
C(=CCl)CCl	1
O=Nc1ccc(OC)cc1	1
O=C(N)CCCCC(=O)N	0
O=C(N)c1cccc1(O)	0
O=C(O)C(N)CSC=CCl	0
c2cc1cccc3c1c(c2)CC(NC)C3	1
n1cccc3c1C2OC2C4OC34	0
O=C1NC3(C(=O)N1CCN2CC2)(CCCCC3)	1
Nc2ccc3c1ccc(N)cc1Cc3(c2)	1
NN(c1cccc1)CC	1
O=C(C=Cc1ccc(cc1)NC(=O)C)c2cccc2	1
N(CCCCC)(CCCC)CCCC	0
c2cc1c3c(c1CCC)CC4N(C)CC(=CC4(c3(c2)))C	1
n1cccc2cc3c(nc12)nc(N)n3C	0

O=C(O)C1=CN(c2cc3OCOC3(cc2(C1(=O))))CC	1
O=Cc1ccccc1C	0
n1ccc3c(c1)c(c2c4ccccc4([nH]c2c3C))C	1
O=Nc1nccn1C	1
O=[N+][O-]c2cccc1cn[nH]c12	1
O=C(Oc1cccc2cccn12)C	0
O=C(O)c1cc2ccccc2(cc1(O))	0
Nc1ccccc1SCCSc2ccccc2(N)	1
N(CC(CC)CCCC)CC(CC)CCCC	0
n1c(nc(nc1NC(C)C)Cl)N	0
n1cc[nH]c1	0
c1ccc2c(c1)ccc3c5C=Cc4cccc(cc23)c45	1
O=C(O)CC(NC(=O)COc1ccc(cc1Cl)Cl)C(=O)O	0
O=[N+][O-]c2ccc3c1cc4c(cc1CCc3(c2))CCCC4	1
O=C(OC)Nc2nc1ccccc1n2(C(=O)NCCCC)	0
c1ccc2cc3c(cc2(c1))cc5cccc4C=Cc3c45	1
O(c1ccccc1)c2ccccc2	0
Nc4ccc1c(ccc2c3ccccc3(ccc12))c4	1
O=Nc1ccc2ccc4c3c(ccc1c23)cc5c4CCCC5	1
OCCS	0
O=S1(=O)(CCCC1)	0
N1C(NCC1)=S	1
n1c2ccc(c(c2(nc(c1C)C))C)N(C)C	1
O=S(=O)(O)c1ccccc1	0
O=C(O)CCC(NC(=O)c1ccc(c(c1)Cl)Cl)C(=O)N(CCCOC)CCCCC	0
O=C(OCCCCOC(=O)C=C)C=C	0
Nc1ccc(cc1(N))C	1
O(Cc1ccccc1)Cc2ccccc2	0
OC(c1cc2ccc3cccc4ccc(c1)c2c34)C	1
O=C(Nc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-])c2cc([N+](=O)[O-])sc2	1
c1ccc2c(c1)c6cccc5cc4C=Cc3ccc2c(c34)c56	1
O=[N+][O-]c2cc3ccc4cc1ccccc1c5ccc(c2)c3c45	1
O=C1c2ccccc2(C(=O)N1CCl)	1
O=C(Nc1ccccc1)C(N=Nc2ccc(cc2Cl)c4ccc(N=NC(C(=O)Nc3ccccc3)C(=O)C)c(c4)Cl)C(=O)C	0
O1CC1CCCCCCCCCCCCCCC	0
O=C(OC)C2=C(NC(=C(C(=O)OC)C2(c1ccccc1[N+](=O)[O-]))C)C	0
c1ccc(cc1)C=Cc2ccc(cc2)N(C)C	1
O=C(Nc2ccc3c1ccccc1Cc3(c2))C	1
O=Nc1cccc(c1)c2ccccc2	1
O=C2c1ccccc1c4cccc3cccc2c34	1
O(c1ccc(N)cc1)C	1
c1cc(cc(c1)C)C	0
O(c1ccccc1)P(Oc2ccccc2)Oc3ccccc3	0
C(=CCl)Cl	0
O=[N+][O-]c1cc(N)cc(c1(N))C	1

<chem>O=C1C=C(c2ccccc2(C1(=O)))S(=O)(=O)O</chem>	1
<chem>O=[N+](O)c2ccc(C=Cc1cccc(OC)c1)cc2</chem>	1
<chem>O=[N+](O)c1cc(O)c(c(c1)[N+](=O)[O-])C</chem>	0
<chem>c1ccc2[nH]ccc2(c1)</chem>	0
<chem>O=C(OCc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-])c2ccccc2</chem>	1
<chem>O=C(N)C(C)Br</chem>	1
<chem>O=C1C(=O)c4c3c(ccc2cccc1c23)ccc4[N+](=O)[O-]</chem>	1
<chem>O=C(OCc1cccc1)c2ccccc2(C(=O)OCCCC)</chem>	0
<chem>Oc1ccc(cc1)CCCCCCCC</chem>	0
<chem>n1ccn(c1)C(=C(OCCOc2ccc(cc2)Cl)c3ccc(cc3Cl)Cl)C</chem>	0
<chem>n1cc(nc(c1C)C)C</chem>	0
<chem>ONc1ccc(cc1)Cl</chem>	0
<chem>O=C(NCC(NC(=O)c1cnccc1)C)c2cnccc2</chem>	0
<chem>O=C(c1cccc1)C3OC3(c2ccc(OC)cc2)</chem>	1
<chem>O=C(N)Nc1cc(ccc1(O))C(O)CNC(C)(C)C</chem>	0
<chem>O=CC(=C(C)C)Cl</chem>	1
<chem>O=C3N(c1cccc1)c2cc(ccc2N(C(=O)C3)C)Cl</chem>	0
<chem>OCCN(C)CCO</chem>	0
<chem>Oc1cccc(c1(N))C</chem>	0
<chem>O=[N+](O)c2oc3ccc1cc(ccc1c3(c2))N(CCCl)CCCl</chem>	1
<chem>O=C(O)C(F)(F)C(F)(C(F)(F)C(F)(F)Cl)Cl)Cl</chem>	0
<chem>O=C(Cc1cccc1)Cl</chem>	1
<chem>n2c1cccc1c(N)c3ccc(N)cc23</chem>	1
<chem>n2c5ccc1cccc1c5(cc4c2ccc3cccc34)</chem>	1
<chem>c1ccc2c(c1)ccc3c4cccc4(ccc23)</chem>	1
<chem>O=[N+](O)c2ccc(C=Cc1ccc(cc1)Cl)cc2</chem>	1
<chem>O=[N+](O)c1ccc(cc1)Nc2ccc(N)cc2</chem>	1
<chem>O=C1c3cccc(c3(C(=O)c2c(N)ccc(N)c12))[N+](=O)[O-]</chem>	1
<chem>O=[N+](O)c2ccc(c1cccc1[N+](=O)[O-])c(c2)[N+](=O)[O-]</chem>	1
<chem>O=C1N(C(=O)N(C(=O)N1Cl)Cl)Cl</chem>	0
<chem>O=[N+](O)c2ccc3ccc4ccc(O)c5c1cccc1c2c3c45</chem>	1
<chem>Oc2ccc3cccc3(c2(N=Nc1ccc(cc1C)C))</chem>	1
<chem>O=[N+](O)c1cc(c(O)c(c1)[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]</chem>	1
<chem>c1ccc2c(c1)c4cccc3cccc2c34</chem>	1
<chem>O=CN</chem>	0
<chem>OC3C=Cc2c4ccc1cccc1c4(ccc2C3(O))</chem>	1
<chem>O=NN(CC)CC</chem>	1
<chem>O=C2c1cccc1Cc3cccc23</chem>	1
<chem>Oc1ccc(cc1Cc2cccc2)Cl</chem>	0
<chem>O=[N+](O)c3ccc1ccc4c2c(ccc3(c12))ccc4[N+](=O)[O-]</chem>	1
<chem>O=CN(N)C</chem>	0
<chem>O=[N+](O)c1ccc2ccc4c5C=CC(O)C(O)c5(cc3ccc1c2c34)</chem>	1
<chem>O=C2c4c(O)ccc(O)c4(Oc3cc(O)cc(OC1OC(CO)C(O)C1(O))c23)</chem>	1
<chem>n1nc2cc(ccc2([nH]1))C</chem>	0
<chem>O=P1(OCCCN1(CCCl))N(CCCl)CCCl</chem>	1

Oc3ccc4ccc2c(ccc1c2(C=CC(O)C1(O)))c4(c3)	1
O=C(O)CCCCCCC	0
O=C(N(O)c1ccc(cc1)C)C	0
O(c1cc(N)c(cc1(N))C)C	0
O=[N+][([O-])c2ccc(N=Nc1ccc(cc1)N(CCO)CCO)c(c2)[N+](=O)[O-]	1
ONc1nc(nc2[nH]cnc12)N	1
NN(C)C	1
O=NC=2C(=O)N(c1cccc1)N(C=2C)C	1
O=NN(C(=O)NCCCl)CCCl	1
O=C(O)C=C(C(=O)O)CC(=O)O	0
OCc1ccc2ccc3cccc4ccc1c2c34	1
c1ccc3c(c1)c(c2ccc(cc2c3C)C)C	1
O=C(N)c1nccnc1	0
O=NN(C)C	1
c1ccc(cc1)N(Cc2ccccc2)CC	0
O=[N+][([O-])c1cccc1[N+](=O)[O-]	1
O=Cc2c3cccc3(cc1cccc12)	0
O1CC1C2OC2	1
O=[N+][([O-])c1ccc(c(c1)[N+](=O)[O-])Br	1
O=[N+][([O-])c1cc(N)c(cc1(N))Cl	1
O=[N+][([O-])c3cc2ccc1cccc4c1c2c(c3)CC4	1
n1c3ccc(cc3([o+])c2cc(ccc12)N(CC)CC))N(CC)CC	1
O1COCC1	0
O1CCN(CC)CC1	1
O=C(O)C(=C)Br	0
O(c1ccc(N)cc1(N))C	1
Oc1cc2nc3cccc3(nc2(cc1(N)))	1
O=C1OC(=O)c2c1c(c(c2Br)Br)Br)Br	0
O=C(O)c1c(N)cccc1(N)	1
O=C1c2cccc2(NS(=O)(=O)N1C(C)C)	0
O=C(O)C=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-]	1
O=[N+][([O-])c1cccc1SSC(F)=C(Cl)Cl	1
ONc2ccc3c1cccc1Cc3(c2)	1
O=C(OC)Nc1nc2cc(ccc2([nH]1))C(=NO)c3ccc(F)cc3	1
O=C2Oc1cc(ccc1N2CSP(OCC)(OCC)=S)Cl	0
O=C(O)c1ccc(cc1(N))[N+](=O)[O-]	1
O=[N+][([O-])c3ccc(F)c2nc1cccc1c(NCCCN(C)C)c23	1
C=CCN(CC=C)CC=C	0
n2c1cccc1c(N)c4c2c3cccc3c(c4C)C	1
c1ccc(cc1)NCC	0
Nc1ccc2c4cccc3cccc(c2(c1))c34	1
OC5c3ccc2c(cc1cccc1c2CC)c3C4OC4C5(O)	1
O=CN(O)c1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]	1
O=[N+][([O-])c1cccc(O)c1(N)	0
O=NN(C(=O)C)C	1

O=[N+][([O-])OCC(C)(CO[N+](=O)[O-])CO[N+](=O)[O-]	0
O=C(O)C(Oc1ccc(cc1)C(=O)c2ccc(cc2)Cl)(C)C	0
O=C1Oc2c(C=C1C(=O)OCC)cc4c3c2CCCN3CCCC4	0
O=CC(=Cc1ccccc1)Br	1
O(c2cccc(OCC1OC1)c2)CC3OC3	1
O=C3N(c1ccccc1)N(c2ccccc2)C(=O)C3CCCC	0
O=C=Nc1ccc(c(N=C=O)c1)C	1
O(OC(C)(C)C)C(C)(C)C	0
O=C(N)c1ccccc1C	0
O(OC(c1ccccc1)(C)C)C(c2ccccc2)(C)C	0
O=C(O)CCCCc1ccc(cc1)N(CCCl)CCCl	1
NCCNCCNCCNCCNCCN	1
O=[N+][([O-])C(C)CC	0
O=C(N)C3N(C(=O)C(NC(=O)C1NC(=O)CC1)Cc2nc[nH]c2)CCCC3	0
O=C(Nc1ccc(cc1)Cl)c2cc([N+](=O)[O-])sc2	1
N(=Nc1ccc(cc1)C)NCc2ccccc2	1
O=C(Oc1cccc2ccccc12)NC	1
O=CC(=CCCC)CC	0
N#Cc1ccc(cc1)C	0
O=C(OCC)N(C)C	1
O=C(c1ccc(cc1Cl)Cl)Cl	1
O=C(OC1C(O)C(OC(=O)C)C(OC1(CO))OC34(C=C(C)C2(CC2)C(O)(C)C4(C(=O)C(C)(C)C3)))C=Cc5ccc(c	1
O=C(c1ccc(O)c(OC)c1)C	0
O=[N+][([O-])c2cc1cc(cc(c1c(c2)[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1
O=S(=O)(OC)C(F)(F)F	1
ONc1ccc(cc1C)C	1
O=C(c1ccccc1(C(=O)Cl))Cl	1
O=CC(=O)C	1
O=C(OCC(C)C)C(=C)C	0
O=C1Oc3cccc4ccc2c5ccccc5(cc1c2c34)	1
Oc1ccc(O)c(c1)C(C)(C)C	0
c1ccc(cc1)CCl	1
n2c(N)n(c3ccc1nc(c(nc1c23)C)C)C	1
O=S(=O)(O)c5cc6cc(c(N=Nc1ccc(cc1)c3ccc(N=Nc2ccc(O)cc2)cc3)c(N)c6(c(O)c5(N=Nc4ccccc4)))S(1
NC1CCCC(N)C1	0
C(C(CBr)Cl)Br	1
O=C(OCCCC)c1ccc(N)cc1	0
O=C(Oc1cc(c2ccc4cccc3ccc1c2c34)[N+](=O)[O-])C	1
n1cc(N)c(c2nc3c(cccn3(c12))C)C	1
O=C1c4ccccc4(NC1=C2Nc3ccccc3(C2(=O)))	1
O=C(OCC(CC)CCCC)c1ccc(C(=O)OCC(CC)CCCC)c(c1)C(=O)OCC(CC)CCCC	0
CC1CCC(CC1)C(C)C	0
OCc3c1ccccc1c(c2c4ccccc4(ccc23))CO	1
o2c1ccccc1c3ccc(N)cc23	1
c1ccc3c(c1)ccc2cc4cccc(c4(cc23))C	1

NCCCN	0
O=C1c3cccc3(C(=O)c2cc(ccc12)C)	0
Oc1ccc(cc1)Nc2ccc3cccc3(c2)	0
c1ccc3c(c1)c2cccc2C4N(C34)C5CCCCC5	1
O=C(O)C(CC)CCCC	0
C=CC(CCl)Cl	0
O=C(OCCC(C)C)CC(C)C	0
O=C(O)CN	0
ONc1ccc(cc1)c2cccc2	1
c2cc1[nH]cc3c1c(c2)C4CC(CN(C)C4(C3))CBr	1
O=C2c1cccc1Sc3c(ccc(NCCN(CC)CC)c23)C	1
OCc4c5cccc5(c1ccc2cccc3ccc4(c1c23))	1
Fc1ccc(cc1)CO	0
N#CSCCOCCOCCCC	0
O=C1c3cccc3(C(=O)N1SC2CCCCC2)	0
n4nc1n(c3ccc(cc3(C(=NC1)c2cccc2Cl))Cl)c4C	0
O=C(OCCN1CCN(CC1)CCCN4c2cccc2Sc3ccc(cc34)C(F)(F)F)CCCCC	0
N(=Nc1ccc2ncsc2(c1))c3ccc(cc3)N(C)C	1
O=C1c2cccc2(N=NN1CSP(OC)(OC)=S)	1
O=NN1CCSC1CO	1
O=Cc1c(cccc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1
O=[N+](O-)[O-]c2cccc1cc(ccc12)C	1
O=[N+](O-)[O-]c1cccc(O)c1[N+](=O)[O-]	1
O=C(OCC(=O)C3(O)(CCC2C4CCC1=CC(=O)C=CC1(C)C4(C(O)CC23(C))))C=C(C)CCC=C(C)CCC=C(C)C	0
O=CN(O)c1cccc1	0
Oc1ccc2c(O)c3cccc3(cc2(c1(O)))	1
O=[N+](O-)[O-]c1cccc(c1)Cl	0
O=C1Nc3ccc(cc3(C(=NC1)c2cccc2))N+](=O)[O-]	0
O=C1N(c3ccc(cc3(C(=NC1)c2cccc2(F)))N+](=O)[O-])C	1
O=S(=O)(O)c6cc5ccc(O)c(N=Nc1ccc(cc1C)c4ccc(N=Nc3ccc(OS(=O)(=O)c2ccc(cc2)C)cc3)c(c4)C)c5c	1
O=S(=O)(C=C)C	0
OC(C)CC(C)C	0
O=C(OC)c4ccc(C=NN1N=Nc2c3cccc3([nH]c2(C1(=O))))cc4	1
c2cc3ccc4cc1cccc(c1c5ccc(c2)c3c45)CCl	1
N(CC(C)C)CC(C)C	0
O=C(NCc1ccc(OC)cc1)C(C)Br	1
C(C(Cl)(Cl)Cl)(Cl)(Cl)Cl	0
O=C(O)C(NC(=O)COc1cc(c(cc1Cl)Cl)Cl)CCSC	0
O=[N+](O-)[O-]c1ccc2c(c1)[nH]cc2CCO	1
N(=Nc1cccc1C)c2ccc(N)c(c2)C	1
c1ccc(cc1)c2cccc2Br	0
n1c(N)cccc1N	1
O=C(C=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-])NN=Cc2oc(cc2)[N+](=O)[O-]	1
OOC2c1cccc1CCC2	1
O=S(=O)(Nc1nc2cccc(c2(nc1))Cl)c3ccc(N)cc3	0

O=C2c1nc[nH]c1N(C(=O)N2C)C	0
O=[N+][O-]c1cccc(c1)CCl	1
O=C(NO)C	1
O=C(O)C(=O)O	0
OCCCCCCCCCCCCCCCC	0
O=[N+][O-]c2ccc3ccc1cccc(c1c3(c2))[N+](=O)[O-]	1
n1ccnc2cccc12	1
[N-]=[N+]=Nc4ccc3c(nc1cccc1c3(Nc2ccc(cc2)C(=O)O))c4	1
O=C(O)c2cc1OCOc1c3c4cccc(OC)c4(ccc23)	1
O=C(NCCO)c2c([n+][O-])c1cccc1[n+][2][O-])C	1
O=C1C=CC(=O)C(=C1)C(C)(C)C	1
O=[N+][O-]c2ccc3nc1cccc1c(NCCCN(C)C)c3(c2)	1
O=Nc2ccc3ccc4cc1cccc1c5ccc2c3c45	1
Oc1cc(ccc1C)NCCO	0
O1CC1(c2cccc2)C	1
O=CC	0
n2c(c1cccc(N)c1s2)Cl	1
O=C(O)C1=CC(N(O)C1(C)C)(C)C	0
O=C(O)O	0
O=C(O)c2c(O)cc1OC(=O)c3c(Oc1c2CCCC)cc(O)cc3CC(=O)CCCC	0
O=Nc1ccc(O)cc1	1
[N-]=[N+]=C1C=CC(=O)C=C1	1
O=P(Oc1cccc1)(Oc2cccc2)Oc3cccc(c3)C	0
O=C2C=C(Nc1cccc1)C(=O)c3cccc23	1
O=[N+][O-]c2ccc(Oc1c(cc(cc1Cl)Cl)Cl)cc2	0
O=C1Oc3c(C=C1)ccc2occc23	0
O=C(c1cc(OC)c(O)c(OC)c1)C	0
O=CC(=C(C(=O)O)Br)Br	1
O=C2Nc3cc1c(OC)cccc1c4c5OCOc5(cc2c34)	1
O(C)C6(OC2CCC3C4CCC1CC5C(CC1(C)C4(CCC23(C))))S5)(CCCC6)	0
O=[N+][O-]c1ccc(N=NN(C)C)cc1	1
O=P(O)(O)OCC(O)CO	0
N(CCCCC)CCCCC	0
O=C1c3cccc3(C(=O)c2c(N)c(OC)cc(N)c12)	1
O=CCSC	0
O=NN(C(=O)C1N(C(=O)C)CCC1)CC(=O)O	1
O=C2C(=C(C=CC(=CC=CC(=CC=CC=C(C=CC=C(C=CC1=C(C(=O)CCC1(C)C)C)C)C)C(C)(C)CC2)C	0
Oc1ccc(cc1(OC))CC2OC2	1
n2c1cccc1c(NCCCN(C)C)c3cccc23	1
O=C2c3cccc3(C(=O)c1c2(ccc(c1[N+](=O)[O-])CC))	1
OCCOCCO	0
OC2c5cccc4c1c6cccc6(ccc1C3(OC3(C2(O))))(c45))	1
N=C1C=CC(C=C1)=C(c2ccc(cc2)N(C)C)c3ccc(cc3)N(C)C	0
O=C1NC(=O)C2CC=CCC12	0
Nc1ccc3c(c1)c2cccc2n3C	1

n1cccc1C=C	0
O(c1ccc(N)cc1)c2ccc(cc2Cl)Cl	1
c1ccc5c(c1)ccc4cc3c(ccc2cccc23)cc45	1
O=P(Oc1cccc1)(Oc2cccc2)OCC(CC)CCCC	0
O=C1c3ccc(O)cc3(C(=O)c2ccc(O)cc12)	0
ON=NCC	1
c1ccc3c(c1)ccc4c2cccc2sc34	1
O=C1c5cccc(OC)c5(C(=O)c2c(O)c4c(c(O)c12)CC(O)(C(=O)CO)CC4(OC3OC(C)CC(N)C3))	1
O=C(OCc2ccc(N=Nc1ccc(cc1)COC(=O)C)cc2)C	1
O=C(OC)C2c1cc3C(=O)c4cccc(O)c4(C(=O)c3(c(O)c1C(O)CC2(O)(CC)))	1
O=[N+][([O-])c1ccc2ccc5c3c(ccc1c23)cc4C=CC(O)C(O)c45	1
O1CCOCCOC3CCCCC3(OCCOCCOCCOC2CCCC2(OCC1))	0
Oc1cccc1c2nc3cccc3(o2)	0
O=P(OCC)(OCC)CC	0
O=C1C(O)=C(C(=O)c2cccc12)CC=C(C)C	0
c1cc(ccc1CBr)Br	0
O=C3c5ccc7c8nc1cccc1n8(C(=O)c6ccc(c4nc2cccc2n34)c5c67)	1
O=C1C=C(C(=O)C(=C1)C)C	0
O=C(Nc1ccc(OCC)cc1)CC(O)C	1
O=[N+][([O-])c1cc(c(c(c1(N)))[N+](=O)[O-])C)[N+](=O)[O-]	1
O1CC1CCl	1
O=C(OC1C(=C(C(=O)C1)CC=C)C)C2C(C=C(C)C)C2(C)(C)	1
O=C(NC3CC(N)C(OC1OC(CN)C(O)C(O)C1(O))C(O)C3(OC2OCC(O)(C)C(NC)C2(O)))C(O)CN	0
O=[N+][([O-])c5cc3cccc4c1cccc1c2cccc5(c2c34)	1
O=C(N(C(C)C)C(C)C)SCC(=C(Cl)Cl)Cl	1
O=C(OCCOCCOCCOC(=O)C(=C)C)C(=C)C	0
OC[P+](CO)(CO)CO	0
O=C(Oc1cccc(c1)NC(=O)OC)Nc2cccc(c2)C	1
Fc3ccc4c2ccc1cccc1c2c5cccc3c45	1
O=C(OCC2c3cccc3(c1cccc12))Cl	1
O=S(=O)(O)c2cc1ccc(O)cc1c(c2)S(=O)(=O)O	0
O=C4C=C(OC)C(=O)c1c4(nc(c2c3cccc3([nH]c12))C)	1
Oc1cc(ccc1(N))C	1
n1c(nn(c1Cl)C(C)C)OP(OCC)(OCC)=S	1
O=[N+][([O-])c2cc5c3c1c(cc4c(c1CCc3(c2))CCCC4)CC5	1
O=C1OCC4(C(=C1)C(=CC3C4(CCC2(C)(C3(CCC2(OC(=O)C)(C(=O)C))))Cl)(C)	0
N1(CC1)P(N2CC2)(N3CC3)=S	1
n1ccc2c(c1)ccc3c4cccc4(ccc23)	1
O=C(NCCN(C)C)c2cccc1Oc3cccc3(Nc12)	1
O1CC1CCc2ccc(cc2)C	1
Oc2ccc3ccc1c4cccc4(ccc1c3(c2))	1
n3cnc1c(ncn1Cc2cccc2)c3N	1
OCC(O)Cl	1
n2c1cccc1c4c6cccc6(nc3c5cccc5(c2c34))	0
Oc2ccc3cccc3(c2(N=Nc1ccc(cc1)C))	0

O=C(O)C2=CN1c3c(OCN1C)c(c(F)cc3(C2(=O))))N4CCN(C)CC4	1
n3ccc4cc2c(ccc1ccccc12)cc4(c3)	1
O(c1ccc(cc1)C(c2ccc(OC)cc2)=C(c3ccc(OC)cc3)Cl)C	0
c1ccc(c(c1)CCl)CCl	0
O=P(O)(O)Oc1ccc(cc1)C(=C(c2ccc(OP(=O)(O)O)cc2)CC)CC	0
O=NN(O)N(CC)CC	1
O=C1c4cc(OC)ccc4(c2nccc3cc(OC)c(OC)c1c23)	1
O=C(c1ccc(cc1)C(=O)Cl)Cl	1
O=[N+](O-)[c1ccc2[nH]ncc2(c1)]	1
O=NN(c1ccc(cc1)[N+](=O)[O-])C2OC(CO)C(O)C2(O)	1
OC3C=Cc2ccc1c4ccccc4(ccc1c2C3(O))	1
n1cccc2cccc(c12)C	1
O=C1c3ccccc3(C(=O)c2c(O)c(O)cc(O)c12)	1
O=S(=O)(Nc1onc(c1C)C)c2ccc(N)cc2	0
n2c1cccc1c(N)c3ccccc23	1
O=[N+](O-)[c4ccc1ccc2ccc(c3ccc4(c1c23))][N+](=O)[O-]	1
c1ccc(cc1)CBr	1
c1ccc4c(c1)c2cccc3c2c4(ccc3CCl)	1
c1cc(cc(c1)Cl)Cl	0
O=C1c3nccc4cc(OC)c(OC)c(c2ccc(OC)cc12)c34	1
Nc1c(cc(cc1C)C)C	1
c1ccc3c(c1)cc2ccccc2c3C	1
O=[N+](O-)[c1ccc(OP(OC)(OC)=S)cc1]	1
O=C1C(=CO)CC4(C)(C(C1)CCC3C4(CCC2(C)(C3(CCC2(O)(C))))))	0
O=C(NCCO)CSc1nc(cc(n1)Cl)Nc2c(cccc2C)C	0
O=C(OCCCCCCCCCCCC)CCSCC(=O)OCCCCCCCCCCCC	0
O=C(OCC)c1cccc1(N)	0
O=C(O)CCC	0
O=C3NC(=Nc1c3(nc(O)n1C2OC(CO)C(O)C2))N	0
ON=C1C=CC(=NO)C=C1	1
O=[N+](O-)[c1cc(c(c(c1)[N+](=O)[O-])N([N+](=O)[O-])C)[N+](=O)[O-]	1
ONc1ccc2ccccc2(c1)	1
n1cc(cc(c1Oc3ccc(Oc2ncc(cc2Cl)Cl)cc3)Cl)Cl	0
O=C(O)CNC(=O)C(NC(=O)CCC(N)C(=O)O)CSC(=C(C(=C(Cl)Cl)Cl)Cl)Cl	1
O=C(C)CCc1ccc(O)c(OC)c1	0
O=C4Oc2c(c(OC)cc1OC3OCCC3(c12))C5=C4C(=O)CC5	1
OCC(CCl)Cl	1
O=S(=O)(c1ccc(N)cc1)c2ccc(N)cc2	0
O=NN1CCCCC1	1
n1cccc1c2ncccc2	1
O=[N+](O-)[c3c4ccccc4(c2ccc1ccccc1c2c3C)]	1
O=C(N)c1ccc(N)cc1	0
O=[N+](O-)[c1ccccc1SSC(=C(C(F)(F)F)Cl)Cl]	1
O=C(N(O)c2ccc3c1ccccc1Cc3(c2))C	1
O=C(OCC(C)(COC(=O)NC(C)C)CCC)N	0

O=C(Nc1ccccc1)c2ccc(OC)c(c2)[N+](=O)[O-]	1
O=C(C)CCc1ccc2cc(OC)ccc2(c1)	0
O=C(O)COc1cc(c(cc1Cl)Cl)Cl	0
O=[N+][O-]CC	0
n1c(N)n(c2ccccc12)C	1
O=C(OC4c3c5ccc1ccccc1c5(cc2ccc(c(c23)C4)C))C	1
O=[N+][O-]c2c(nc1n2(ccs1))c3ccc(cc3)Cl	1
O=C(N)CCC(=O)Nc1ccc(c(c1)Cl)Cl	0
O=C2c1ccccc1N(c4c2c(O)cc3OC(C(=C)C)Cc34)C	1
OCCN(CCO)CCO	0
OC(c1ccc(cc1)Cl)(c2ccc(cc2)Cl)C3CC3	0
c1ccc2cc3cc(ccc3(cc2(c1)))Cl	1
c1cc(c(c(c1)Cl)Cl)Cl	0
O=C(OCC[N+](C)(C(C)C)C(C)C)C2c3ccccc3(Oc1ccccc12)	0
N#CC(Cl)Br	1
O=[N+][O-]c3cc1ccccc1c2ccccc23	1
O(c1ccc(N)cc1)c2c(cc(cc2Cl)Cl)Cl	1
O=[N+][O-]c2ccc3ccc1c(cccc1[N+](=O)[O-])c3(c2)	1
Fc1cccc2cccn12	1
O=C(O)C=Cc1ccc(O)c(OC)c1	0
N#Cc1ccc(cc1)c2ccc(cc2)CCCCC	0
O=[N+][O-]C(CC)Cl	1
O=C(O)C1=CN(c2c(F)c(c(F)cc2(C1(=O))))c3ccncc3)CC	0
O=C(NC(CC1CCCCC1)C(O)C(O)C2CC2)C(NC(=O)C(Cc3ccccc3)CS(=O)(=O)C(C)(C)C)Cc4nc[nH]c4	0
O=C(NNc1ccccc1)C	1
o1cccc1C	0
O=[N+][O-]c2c(O)ccc1ccccc12	1
O=C(C(=C(OP(=O)(OC)OC)C)Cl)N(CC)CC	1
O=C(O)CC2(OCCc1c3cc(O)cc(c3([nH]c12))CC)CC	1
O=C1NC(=O)N(C=C1CCCl)C2OC(CO)C(O)C2	0
n1c(nc(cc1Cl)Cl)N	0
O=[N+][O-]c2ccc3cc1c(C=CC(O)C1(O))cc3(c2)	1
Nc1ccc(cc1)C=Cc2ccccc2	1
O=C(OCc1ccccc1)c2ccccc2(O)	0
O(C)CC1OC1	1
n1ncc2ccncc2(c1)	0
O=C(C=Cc1ccc(F)cc1)c2ccccc2	0
O=NN2CCCC2(c1cnccc1)	1
O=C(N)c1ccccc1(C(=O)N)	0
O=C1c3cccc2ccc(OC)c(C(=O)N1C)c23	0
C=C(CSC(N(CC)CC)=S)Cl	1
O=C(N)NCC=C	1
O=C(OCCCC)C=C	0
O=C1OCC=C1	0
[O-][N+](=Nc2ccc3c1ccccc1Cc3(c2))c5ccc6c4ccccc4Cc6(c5)	0

CC1CCC(CC1S)C(C)CS	0
OC3c2ccc1cc6c(nc1c2C4OC4(C3(O)))ccc5ccccc56	1
O=C(O)C=NNC(=O)N	0
O=C(O)c6cc(N=Nc1ccc(cc1)c5ccc(N=Nc3ccc(N=Nc2ccc(O)c(c2)C(=O)O)c4cc(ccc34)S(=O)(=O)O)cc	1
c1ccc5c(c1)c(c4c3cccc2cccc(c23)c4c5C)C	1
O=C1NC(=O)N(C=C1(F))C(=O)NCCCCC	0
O=CCC=O	1
N#CCC#N	0
O=[N+][([O-])c1ccc(N)c(c1)[N+](=O)[O-]	1
n1c(cc(N)s1)C	1
c1ccc2cc(ccc2(c1))Nc3ccc(cc3)Nc4ccc5ccccc5(c4)	1
c1ccc3c(c1)c2cccc2C4N(CCCC)C34	1
O=C(O)CCC(C)C2CCC3C4CCC1CC(O)CCC1(C)C4(CCC23(C))	0
O=[N+][([O-])c1ccccc1C(F)(F)F	0
NN(CCCC)CCCC	0
Fc1ccc2cc3c5cccc4cccc(c3(cc2(c1)))c45	1
O=C(OCc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-])C	1
O=C(OCC)OC(c2ccnc1ccc(OC)cc12)C3N4CCC(C3)C(C=C)C4	0
c1ccc(cc1)c2ccc(cc2)Br	0
c1cc(ccc1N(C)C)Cc2ccc(cc2)N(C)C	1
NCCNCCNCCNCCN	1
O=C(O)C45(CCC2(C(=CCC1C3(C)(CC(O)C(O)C(C(=O)O)(C)C3(CCC12(C))))C5(CC(C)(C)CC4))(C))	0
O=C(O)C(NC(=O)CCC(NC(=O)C(NC(=O)C(OC1C(O)C(OC(O)C1(NC(=O)C))CO)C)C(=O)N)CCCCNC	0
C(C(CCl)(CCl)CCl)Cl	0
n1c(oc2ccccc12)c3ccc(cc3)Cl	0
O=C2c1ccccc1c3ccc(cc23)[N+](=O)[O-]	1
FC(F)(F)C(F)(F)C(Cl)Cl	0
O=C(N(O)c4ccc1ccc2cccc3ccc4(c1c23))C	1
O=[N+][([O-])c2ccc(c(N=[N+][([O-])c1cc(ccc1C)[N+](=O)[O-])c2)C	0
O=C(C=CC=Cc1ccc2OCOc2(c1))N3CCCCC3	0
O=[N+][([O-])c2ccc(OCC1OC1)cc2	1
O(c1ccc2ccccc2(c1))CC3OC3	1
O=C2c1ccccc1c3cc4ccccc4(cc23)	1
N(=Nc1ccc(cc1)NC)c2ccccc2	1
OC(C)CNCC(O)C	0
O=Nc1ccc(cc1(O))N(CC)CC	0
O(c1ccc(OC)cc1)C	0
n1ccccc(c1Cl)Cl	1
O=S(=O)(O)c1ccc(O)c(N)c1	0
O=P(Oc1ccc(c(c1)C)SC)(OCC)NC(C)C	0
O=C(C=Cc1ccccc1)c2ccc(F)cc2	0
N#Cc1ccccc1[N+](=O)[O-]	1
c1ccc(cc1)C(C)Br	0
OCCN1CCNCC1	0
O=C(O)Cc3onc(c1ccc(OC)cc1)c3(c2ccc(OC)cc2)	0

O=C(NCCN(C)C)c1cccc2C(=O)c3ccccc3(Oc12)	1
O=P(OC(CCl)CCl)(OC(CCl)CCl)OC(CCl)CCl	1
O=C(OCCN(c3ccc(c2c3(nc1ccccc1c2(NCCCN(C)C))))[N+](=O)[O-])CCOC(=O)C)C	1
O=C(NCc1ccc(O)c(OC)c1)C(C)Br	1
O=C(Nc1cc(cc(c1(O))Cl)Cl)c2c(O)c(cc(c2Cl)Cl)Cl	0
O=C(O)C1=CN(c2nc(ncc2(C1(=O))))N3CCNCC3)CC	1
O=[N+](O)c1ccc(OP(=O)(OC)OC)cc1C	1
N(C(NC1CCCCC1)=S)C2CCCCC2	0
O=[N+](O)c1ccc2c(c1)c3ccccc3(cc2[N+](=O)[O-])	1
O=[N+](O)C=Cc1ccccc1	1
N#Cc1cc(c(O)c(c1)Br)Br	0
O=C(OC)c2cc1OCOc1c3c4cccc(OC)c4(ccc23)	1
O(CC(=CCl)Cl)CCCl	1
O=C(O)C1CC(N(O)C1(C)(C))(C)C	0
O=C1c3ccccc3(C(=O)c2c1c(N)c(cc2Br)Br)	1
n1cccc3c1ccc2c3(ncn2C)	1
c1ccc3c(c1)c2cc(ccc2C3C)C	1
O=C1OC5(CC1)(C2CC2C4C6C7CC7(C3=CC(=O)CCC3(C)C6(CCC45(C))))	0
O=C(NC(C(=O)N(C)C(C(OC)CC(=O)N1CCCC1C(OC)C(C(=O)NC(c2nccs2)Cc3ccccc3)C)C(C)CC)C(C)C)	0
O=[N+](O)c1ccc2c(nsc2(c1))Cl	1
O=C(Nc1cccc(c1)[N+](=O)[O-])c2cc([N+](=O)[O-])sc2	1
c1ccc3c(c1)cc2ccccc2c3Cl	1
O(c1cc(c(OC)cc1Cl)Cl)C	1
O=C1N(c3ccc(cc3(C(=NC1)c2ccccc2))Cl)C	0
O=C(O)c2cc1OCOc1c3c4cccc(O)c4(cc(c23)[N+](=O)[O-])	1
O=C(O)C(N)CCC(=O)NNc1ccccc1	1
O=[N+](O)c1ccc(OC=C)cc1	1
c4cc3c5ccc2c(ccc1ccc(cc12)C)c5(ccc3c(c4)C)	0
O=C(OCCCCC)C=C	0
OOC2(c3ccccc3(c1ccccc12))C	1
N#Cc2cccc(C=Cc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-])c2	1
O=[N+](O)c2cc4c3c1c(cccc1CCc3(c2))CC4	1
O=C3c2cc(OCCCC)c1c4cccc4(ccc1c2CC3)	0
O=C(NO)NC	0
c1ccc4c(c1)ccc3cc2c(cccc2C)cc34	1
n2c1ccc(cc1sc2c3ccc(N)cc3)C	1
c1c(cc(cc1C)C)C	0
O=CN(O)c2ccc(C=Cc1ccccc1)cc2	1
N(C)(CCCl)CCCl	1
O=C(OCCCCCCCC)c1ccccc1(C(=O)OCCCCCCCC)	0
O=C(Nc1ccc(cc1)c2ccccc2)C	1
O=S(=O)(OC)C	1
c1ccc5c(c1)cc3ccc2cccc4c2c3c5(cc4C)	1
OCc1ccccc1	0
O=C(Nc1ccc2ncccc2(c1))C	1

O=C(Nc4ccc(c5cc(c(N=Nc2ccc(N=Nc1ccc(cc1)S(=O)(=O)O)c3ccc(cc23)S(=O)(=O)O)c(O)c45)S(=O)(0
O=[N+][O-]c3ccc2c4cc5ccccc5(cc4(c1cccc3(c12)))	1
O=C(C=Cc1cccc1)c2ccc(cc2)Br	0
O=C(O)c1cccc1C3=C4C=CC(=N)C=C4(Oc2cc(N)ccc23)	0
c1cc(cc(c1)CBr)CBr	0
O=[N+][O-]c1ccc3c(c1)c2ccccc2n3C	1
Oc1cccc(c1Cl)Cl	0
O(CCCCCC)CC1OC1	1
OCc1cc2ccc3cccc4ccc(c1)c2c34	1
O=C(OC1CCCCC1)c3cccc3(C(=O)OC2CCCCC2)	0
O=S(=O)(OCC)OCC	1
c1ccc(cc1)C(CBr)Br	1
N=NCCCO	1
n1c(N)c(cc3c1[nH]c2ccccc23)C	1
Oc1cc3c4cccc4(ccc3(c2ccccc12))	1
c1ccc(cc1)C(Cl)(Cl)Cl	1
O=CC=C	1
O=C2c1c(O)cccc1C(C(=O)CC)c3cccc(O)c23	1
O=C(OCCCCCOC(=O)C(=C)C)C(=C)C	0
O(c1cccc2ccccc12)CC3OC3	1
O(c1cccc1)CC2OC2	1
O=C1NC(=O)N(C=C1COO)C2OC(CO)C(O)C2	1
OC(C)CCC=C(C)C	0
n2cc1cccc(N)c1s2	1
O=C(O)C=CCl	1
O=[N+][O-]c2ccc3ccc1ccc(cc1c3(c2))[N+](=O)[O-]	1
O=C(Cl)SCC	0
O=P(O)(O)C(O)(c1ccc(c(c1)N(CCCl)CCCl)C)P(=O)(O)O	1
Oc1c(N)cc(cc1Cl)Cl	0
O=CC(=C(C(=O)O)Cl)Cl	1
O=C(O)CCN[N+](C)(C)C	0
O=C3C=C(OC)C(=O)c4ncc1c([nH]c2c1CCCC2)c34	1
c1cc(ccc1C(c2ccc(cc2)Cl)C(Cl)(Cl)Cl)Cl	0
O=C(O)c1nc2ccccc2(c(O)c1)	0
O=C(Oc2c(OC(=O)C)c5c(ccc4c1ccccc1c3ccc2c3c45)[N+](=O)[O-])C	1
O=[N+][O-]CCl	1
O=C(Nc1ccc(N)cc1(OC))C	1
O=C(OC)C(NC(=O)C)CSCC(C)Br	1
O=C(NCc1cccc1)CCl	1
Oc1ccc2cccn2(c1)	0
O=C(c1cccc1[N+](=O)[O-])C	0
Fc5ccc3c(ccc4c2cccc1cccc(c12)c34)c5	1
O=C4C=C(C(=O)c1c4(nc(c2c3ccccc3([nH]c12))C))N5CC5	1
O=C(O)C(C)(Cl)Cl	0
O=C(c1cccc1(F))c3c(nn(c3(NC(=O)CNCCCN2CCCCC2C))C)C	1

O=[N+][O-]c2ccc3c1ccc4c(c1CCc3(c2))CCCC4	1
N#Cc2cccc(C=Cc1ccc(N)cc1)c2	1
c1ccc(cc1)c2cccc(c2)c3cccc3	0
CC(CBr)Br	1
O=C(OCC)C(=C)C	0
n1c[nH]cc1CCN	0
O=C(OCC(C)(COC(=O)c1cccc1)COC(=O)c2cccc2)c3cccc3	0
O=C(O)c1ccc(cc1)C(=O)O	0
O=[N+][O-]c1ccc(c(c1)[N+](=O)[O-])C	1
N(=Cc1ccc(OCCCC)cc1)c2ccc(cc2)CC	1
O=[N+][O-]c1ccc(c(c1)[N+](=O)[O-])CO	1
O=NN(c1ccc(cc1)[N+](=O)[O-])C2OCC(O)C(O)C2(O)	1
O=NN(C)Cc1cccc1	1
O=C(N)c1cc([N+](=O)[O-])sc1	1
OC2c3cccc3(Oc1cccc12)	1
O=C(Nc1ccc(cc1Cl)[N+](=O)[O-])c2cc(ccc2(O))Cl	1
n1cccc2cccc(c12)Cl	1
O=C1c3cc(OC)cc(O)c3(C(=O)c2c(O)cc(cc12)C)	1
O=C1C=C(NC(=O)C)C(=O)C=C1(OCC)	1
O3C4c6cccc6(c2cc5ccc1cccc1c5(cc2C34))	1
n2ccc3cc4c5cccc5(c1cccc1c4(cc3(c2)))	1
O1CC1Cc2ccc(cc2)C	1
O=Cc1cccc(c1)c2cccc2	0
O=C(O)Cc1cccc1[N+](=O)[O-]	1
O=C(O)CNC	0
O(c1cc(N)ccc1(N))C	1
Oc1cc(O)cc(O)c1	0
Nc2c3cccc3(cc1cccc12)	1
O(c5ccc4c(cc2c1c4(c3OCOc3(cc1CCN2C)))c5(OC))C	1
O=C(c1ccc2OC3(C(=O)c2(c1))(CC3))C	0
O=C(OCC(C)(C)COC(=O)C(=C)C)C(=C)C	0
O=[N+][O-]c1cc(c(O)c(c1(O)))[N+](=O)[O-][N+](=O)[O-]	0
n1cccc2cc(ccc12)C	1
n1c(N)n(c2c1c3nc(c(nc3(cc2C))C)C)C	1
O=C(O)CC[N+](=O)[O-]	1
Oc1ccc(O)c(O)c1	1
O=CC(C)CC	0
FC(F)(F)c1ccc(c(N)c1)Cl	0
O=C1c5cccc(OC)c5(C(=O)c2c(O)c4c(c(O)c12)CC(O)(C(=O)CO)CC4(OC3OC(C)C(O)C(N)C3))	1
O=C2c4nccc5cc1OCOc1c(c3ccc(OC)cc23)c45	1
O=C(O)C(=C(C(Cl)Cl)C(Cl)Cl)Cl	1
O=[N+][O-]c1ccc(cc1)c3nc2n(cc(C)s2)c3[N+](=O)[O-]	1
N(C)(C)C	0
O=CC=Cc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]	1
c1ccc(cc1)NC(C)C	0

O=C(O)c2ccc(N=Nc1ccc(O)c(c1)C(=O)O)cc2	0
O=S(=O)(c1ccc(O)cc1)c2ccc(O)cc2	0
Nc1ccc(cc1)C=Cc2ccc(cc2)Cl	1
c1ccc(cc1)N(C)C	0
Nc3ccc2c(ccc1ccccc12)c3	1
n1ccc(cc1)Cl	0
O=C(N(O)c2ccc(Oc1ccc(cc1)Cl)cc2)C	1
O=NN(C(=O)N)CCC	1
O=C(O)C1NC(=O)C(C)(C)SSC1	0
c4ccc5cc2c(ccc1c3ccccc3(ccc12))cc5(c4)	0
Nc1ccc(cc1)c2ccc(cc2)c3ccc(N)cc3	1
n1c(oc2ccccc12)c3ccc(cc3)C	0
O=C(O)C(N)CCC(=O)NNc1ccc(cc1)CO	1
c1cc(c(cc1Cl)Cl)C(Cl)(Cl)Cl	1
O=C(O)CCC(C)C2CCC3C4C(O)CC1CC(O)CCC1(C)C4(CCC23(C))	0
O=C2Oc1cc(OP(OCC)(OCC)=S)ccc1C(=C2Cl)C	0
Fc1c(F)c(c(F)c(c1(F))Cl)Cl	0
O=[N+][O-]c1cccc(N)c1(O)	0
O=C3NC(=O)C(N2C(=O)c1ccccc1C2(=O))CC3	0
N=C(N)c1ccccc1	0
O=[N+][O-]c4ccc1ccc3c5ccccc5(cc2ccc4(c1c23))	1
O=[N+][O-]c1cccc(c1)c2ccc(O)c(c2)[N+](=O)[O-]	1
O=C(C=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-])NCC(C)C	1
n2cccc(N=Nc1ccc(cc1)N(C)C)c2	0
Nc1ccc(cc1)Cl	1
O=C(c1ccccc1)CCl	0
O=C(OCC3=COC(OC(=O)CC(C)C)C2C3(=CC(OC(=O)CC(C)C)C12(OC1)))C	1
O=C(N)N3c2c(O)c(OC)c1[nH]c(cc1c2CC3)C(=O)N6c5c(O)c(OC)c4[nH]c(cc4c5CC6)C(=O)N9C8=CC(0
O=C(O)CCC(=O)O	0
O=[N+][O-]c2cccc1cncs12	1
O3C4c5ccccc5(c2cc1ccccc1c(c2C34)C)	1
O=[N+][O-]c1ccc(c(c1C)[N+](=O)[O-])C	1
O=Cc1ccc(cc1)C	0
OC1C(=CCC(C(=C)C)C1)C	0
Oc1cccc2cccn12	1
O1C2CCCCCCCCCCC12	0
O=Cc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]	1
N=C(Nc1ccccc1)Nc2ccccc2	1
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
OCc2c[nH]c1c2(cccc1CC)	0
O=C(c1cc2c(cc1C)C(C)(C)C(C)CC2(C)C)C	0
O=C1c3ccc(O)c(O)c3(C(=O)c2c(O)ccc(O)c12)	1
O=[N+][O-]c2ccc3oc1ccccc1c3(c2)	1
n1c(nc(cc1Cl)Cl)Cl	0
n2cccc3ccc1cc4ccccc4(cc1c23)	1

O=[N+][O-]c2cccc2(Nc1cccc1)	0
O=C(O)C4NC(c1cccc1)c3[nH]c2cccc2c3C4	0
O=C1c3cccc3(C(=O)c2cc(N)ccc12)	1
O=NN(CC(=O)C)CC(O)C	1
OC4c2ccc1c6C=Cc5cccc(cc1c2C3OC3C4(O))c56	1
O=C(O)C3N2C(=O)C(NC(=O)C(NC(=O)C(N)CC(=O)NC)c1ccc(O)cc1)C2SC3(C)(C)	0
N#CC(OC(=O)C1C(C=C(Cl)Cl)C1(C)(C))c3cccc(Oc2cccc2)c3	0
n1c[nH]c2nc(nc(N)c12)N	0
O=C(OCC=C)CC(C)C	0
O=C(OC1CCCCC1)CCC	0
O=C(O)C(NC(=O)COc1cc(c(cc1Cl)Cl)Cl)CC(C)C	0
Nc1cc2cccc2(cc1(N))	1
O=C(O)CCCc2c[nH]c1cccc12	0
n1cccc2c1cccc2Cl	1
O=C(OC)Nc1nc2cc(ccc2([nH]1))C(=O)c3cccc3	1
O=C1c3cccc3(C(=O)c2cc(ccc12)CO)	0
O=C1N(C)CCCN1C	0
O=C(c1ccc(F)cc1)CCCN3CCC(O)(c2ccc(cc2)Cl)CC3	0
O=CC(=C(C(=O)O)Cl)C(Cl)Cl	1
O=[N+][O-]c2cc3c4cccc4(ccc3(c1cccc12))	1
O=C1c2cccc2(C(=O)N1CSP(OC)(OC)=S)	1
O=C(NC)N(O)C(=O)C	1
O=C(NNc1ccc(cc1)CO)C	1
n1csc1c2nc3cccc3([nH]2)	1
OC1CC2CCC1(C)C2(C)(C)	0
O=C(C=Cc1ccc(cc1)Br)c2cccc2	0
O(CC)CC1OC1	1
O=C(OCC=C)C=C	0
O=[N+][O-]CCCCC	0
O=C(N(c2ccc(N=Nc1ccc(cc1)N(C)C)cc2)C)C	1
O=C(OCC)CC(C(=O)OCC)SP(OC)(OC)=S	0
O=C(C(=O)CC)CC	1
O=S(=O)(O)C	0
n3cccc4ccc2c(nc1cccc1c2(NCCCNCCCl))c34	1
O=C(O)C1C(C=C(C)C)C1(C)(C)	0
n1cccc2cc(N)ccc12	0
O=C(C=Cc1cccc1)c2ccc(O)cc2	0
C(Br)Br	1
O=[N+][O-]c1cccc(c1)CO	0
O=S(=O)(Nc1nccs1)c2ccc(N)cc2	0
N(=NN(C)C)c1ccc(cc1)C	1
O=C(NCCN(C)C)C1=CC=CN2C(=O)c3cccc3(N=C12)	1
O(c1ccc(cc1)CC2OC2)C	1
O=C(C=NO)Nc1cccc1	0
O=C(NCc1ccc(OC)c(OC)c1)C(C)Br	1

c1cc(c(cc1C(Cl)(Cl)Cl)Cl)Cl	1
O=CC(=CC=CC(=CC=CC=C(C=CC=C(C=CC1=C(C)CCCC1(C)C)C)C)C	0
N#CSc1ccc(cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1
Oc1cc(ccc1C)C(C)C	0
n1ccc(cc1)c2ccncc2	1
O=C(O)c6nc(c5nc(CCNC(=O)C(NC(=O)C(C)C(O)C(NC(=O)C(NC(=O)c1nc(nc(N)c1C)C(NCC(N)C(=O)N	0
O=[N+](O)c1ccc(cc1)NN	1
O=C(O)Cc2c[nH]c1ccc(O)cc12	0
O=C1OC(O)C(=C1)CCl	1
N#CC(C(=O)OCC(CC)CCCC)=C(c1cccc1)c2cccc2	0
O=C1c3c(N)ccc(N)c3(C(=O)c2c(N)ccc(N)c12)	1
O=[N+](O)c3ccc2c(nc1cccc1c2(NCCCN(C)C))c3	1
O=C4Oc2c(c(OC)cc1OC3OC=CC3(c12))C5=C4C(=O)CC5	1
O=C(O)CCC(=O)CC(=O)C	0
C1CS1	1
O2Cc1cccc1C2	1
O=C1c3c(O)ccc(O)c3(C(=O)c2c(ccc(NCCNCCO)c12)NCCNCCO)	1
O=C(O)C=Cc1ccc(O)c(O)c1	0
Oc2c1ncccc1c(cc2I)Cl	0
O=C(Nc1cccc1[N+](=O)[O-])c2cc([N+](=O)[O-])sc2	1
O=[N+](O)c1ccc(c(c1)Cl)Cl	1
O=C(C(Oc1ccc(cc1)Cl)n2cncc2)C(C)(C)C	0
n3c1ccc(cc1c(c4ccc2cccc2c34)C)C	1
c2ccc3cc1c(cccc1C)cc3(c2)	0
O=C1OC2=CCOC(O)C2(=C1)	0
c2ccc3cc4c5cccc5(c1cccc1c4(cc3(c2)))	1
O=C(OC)c2cccc1Oc4c(C(=O)c12)c(OC)cc3OC5OC=CC5(c34)	1
O=C2Oc1cc(O)cc(c1c3cc(O)cc(O)c23)C	0
c1ccc3c(c1)cc2ccc(cc2c3C)C	1
O=C(OCCOCCOC(=O)C(=C)C)C(=C)C	0
O=CC(CC)CCCC	0
O=S(=O)(N)c1cc2c(cc1Cl)NCNS2(=O)(=O)	0
n1cc(cc(c1)Cl)Cl	0
O=C1NC(Nc2cc(c(cc12)S(=O)(=O)N)Cl)CC	0
n1c3cccc3(nc2cc(N)c(N)cc12)	1
O=[N+](O)c1oc2c(c1)c(OC)ccc2N(CCCl)CCCl	1
O=CC=Cc1ccc(cc1)N(C)C	0
OC(COc1cccc2cccc12)CNC(C)C	0
O1C2CCCCC12	1
O=Cc1cccc1	0
O=C(O)C(c2ccc(Oc1nccs1)cc2)C	0
c1ccc2c(c1)c(c(c(c2Cl)Cl)Cl)Cl	0
OC6c4ccc3c2cccc1cccc(c12)c3c4C5OC5C6(O)	1
O=C(OC(C#CCNCC)(C)C)C(O)(c1cccc1)C2CCCCC2	0
O=C(C=Cc1ccc(cc1)c2cccc2)c3cccc3	0

OC(c2ccnc1ccc(OC)cc12)C3N4CCC(C3)C(C=C)C4	0
c1cc(cc(c1)CCl)CCl	0
C(=NCC)=S	0
NC1CCC(N)CC1	0
OCCNc2ccc(N=Nc1ccc(cc1)NCCO)cc2	1
O=C(Nc2ccc3c1cccc1Cc3(c2))c4cccc4	1
O=C1C=C(C(=O)c2cccc12)C	1
O=C(OCc2cccc(Oc1cccc1)c2)C3C(C=C(C)C)C3(C)(C)	1
O=C2c1cccc1c3c4cccc4(ccc23)	1
O=S(=O)(OC(C)CC)C	1
FC(F)(F)c1cccc1	0
O=C2c1c(O)cccc1C(C(=O)CCC)c3cccc(O)c23	1
OC3C=Cc2c4cc5ccc1cccc1c5(cc4(ccc2C3(O)))	1
O=C(OC)C12(Oc3ccc(c(O)c3(C(=O)C2(=C(O)CC(C)C1(O))))c4ccc5OC6(C(=O)OC)(C(C(=O)c5(c4(O)))	0
O=S(=O)(O)c3ccc(N=Nc2c(O)ccc1cc(ccc12)S(=O)(=O)O)cc3	0
N#[N+]c1cccc2C(=O)c3cccc3(C(=O)c12)	1
O(c1cccc1Cc2cccc2)CC3OC3	1
Nc2ccc4c1cccc1c3cccc2c34	1
O=C(NCCO)C(O)C	1
O=CCC(C)CCC=C(C)C	0
N(CCCl)(CCCl)CCCl	0
c1ccc2c(c1)ccc4c2c(c3cccc3c4CCl)C	1
c1cc(ccc1CCl)Br	0
n3c1occc1c(OC)c4cc2OCOc2c(OC)c34	1
O=C(C(Cl)Cl)C(Cl)(Cl)Cl	1
OCc3cc1ncc(nc1c2nc(N)n(c23)C)C	1
O1CC1CCCCCCCC	0
c1ccc2c(c1)cc3ccc4ccc(c5ccc2c3c45)C	1
O1c3c(Oc2c1c(c(c(c2Cl)Cl)Cl)c(c(c(c3Cl)Cl)Cl)Cl	0
O=[N+](=[O-])OCCN([N+](=O)[O-])CCCC	1
O=C(OCC)C(=O)C	0
O=CC(=C)Cl	1
CCCCCCCCC	0
O(c3cc4c1c5OCOc5(cc2c1C(N(C)CC2)Cc4(cc3(OC))))C	1
O=C1C=CC(=O)N1c2ccc(cc2)Cc3ccc(cc3)N4C(=O)C=CC4(=O)	0
O=C(N(O)c2ccc(Oc1cccc1)cc2)C	1
O=C(O)c1cccc1[N+](=O)[O-]	1
O=[N+](=[O-])c5cc1cccc3c1c2c5(cccc2c4c3CCCC4)	1
O=C(OC(C)C)C=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-]	1
O=[N+](=[O-])c1ccc2ccc3ccc(O)c4ccc1c2c34	1
O=C(c1cccc1)C3OC3(c2ccc(F)cc2)	0
O=[N+](=[O-])c2ccc(Nc1ccc(O)cc1)c(c2)[N+](=O)[O-]	1
O1C2CCC3OC3(CCC12)	0
O=[N+](=[O-])c1c2cccc2(ccc1C)	1
OC2C=Cc1cc3c5cccc4cccc(c3(cc1C2(O)))c45	1

c1cc(cc(c1)Br)C	0
O=C(N1CCCCC1)SCC	0
c1ccc(cc1)CN(C)C	0
N#Cc1ccc(cc1)C=Cc2ccc(N)cc2	1
O=C(O)c1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]	1
N#Cc1cccc(c1)CN(N=O)C	1
O=C1c3cc(O)cc(O)c3(C(=O)c2c(O)cc(cc12)C)	1
CSSC	0
ONc1ncnc2[nH]cnc12	1
N#CC=CC#N	0
c1cc(ccc1N(C)C)N(C)C	1
O=C2N(C)C4(C(=O)N3C1C(=CC=CC1(O))CC23SS4)(CO)	0
O=[N+](=[O-])c1cccc(c1)c2ccc(cc2[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1
O=C(O)C=CC=CC(=O)O	0
O=P(OCC(CBr)Br)(OCC(CBr)Br)OCC(CBr)Br	1
Oc1cccc(c1)NCC	1
O=[N+](=[O-])c1cc(N)ccc1Cc2ccc(N)cc2[N+](=O)[O-]	1
n1cccc2c1cccc2(N)	1
Fc1ccc(F)c2cccn12	1
O=[N+](=[O-])c2ccc3c1ccc(N)cc1Cc3(c2)	1
O=C(O)C(O)(C)CC7OC1(OC(CC(=C1)C)C(C=CC6OC2(OC3C(O)C(=C)C(OC3(CC2))C(O)CC(C)C5OC4(O	0
O=[N+](=[O-])C4=Cc3c5ccc1cccc1c5(cc2cccc4(c23))	1
O=C(C=C)N2CCN(c1cccc1)CC2	0
O=Cc1ccc(OC)cc1	0
c1cc(ccc1CSc2ccc(cc2)Cl)Cl	0
C1(C(C(C(C(C1Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl	0
O=C(Nc1cccc1)C2=C(OCCS2)C	0
O=C(OCC)C(c1cccc1)SP(OC)(OC)=S	0
n1c(OP(OCC)(OCC)=S)cc(nc1C(C)C)C	0
O=C(Nc1ncccc1)C3=C(O)c2c(ccs2)S(=O)(=O)N3C	0
O(c1ccc(cc1)CCC2OC2)C	1
O(CC)P(OCC)(=S)SCSCC	0
O=[N+](=[O-])c3c(N)ccc2[nH]c1cccc1c23	1
OCCOCCOCCCC	0
O(c1ccc2[nH]c3c(cc(N)c(c3(c2(c1))))C)C)C	1
O=Nc1cccc1c2cccc2	1
OC3c2ccc1cccnc1c2C4OC4(C3(O))	1
C(C(CCl)Cl)Cl	1
O=C1OC(OC)C(=C1Cl)C(Cl)Cl	1
O=Nc2c(nc1n2(cc(C)s1))c3ccc(cc3)[N+](=O)[O-]	1
O(c1ccc(cc1)C=Cc2ccc(N)cc2)C	1
O=C(O)CCOP(=O)(N)N(CCCl)CCCl	1
Oc2cccc3cc1cccc(O)c1c(O)c23	0
O=C(O)C=C(C(=O)c1ccc(OC)cc1)Br	1
O=C(Nc2ccc(N=Nc1ccc(cc1)N(C)C)cc2)C	1

O=C(N(O)c2ccc(Oc1ccc(cc1Cl)Cl)cc2)C	1
O=[N+](O)c1c(c(c(c1C(C)C)[N+](=O)[O-])C)C	0
O=[N+](O)C(Br)(Br)Br	1
O=[N+](O)c3ccc(c2nc1cccc1c(n2)N(CCO)CCO)s3	1
O=CC2=CC1(O)(CC(C)(C)CC1C34(C(=O)OC(O)C24(C3)))	1
O=C(OCC)CCCC	0
n1c3cccc(N)c3(nc2cccc(N)c12)	1
OC3C=Cc2c4cc1cccc1c(c4(ccc2C3(O)))Cl	1
O=[N+](O)c2ccc1c(cns1)c2	1
OC2C=Cc1c3ccc5cccc4ccc(cc1C2(O))c3c45	1
c1ccn(c1)C	0
O=[N+](O)c3ccc2c(ccc1ccc(cc12)[N+](=O)[O-])c3	1
N#CC(O)c1cccc1	0
O=C(O)C3=C(C1OCCC1)SC2N3(C(=O)C2(C(O)C))	0
O=[N+](O)c1cc(c(N)c(c1)Cl)Cl	1
Oc1ccc(cc1)C(C)(C)CC	0
OCC(O)C(O)C(O)C(O)CO	0
Nc1cccc(c1)C	0
C(=NCCc1cccc1)=S	1
O=Cc1ccc(cc1)Cl	0
Fc1c(F)c(F)c(c(F)c1(F))Cl	0
O=C(c1cccc1)C3OC3(c2ccc(cc2)[N+](=O)[O-])	0
O=C(Nc1cccc1)Nc2cccc2	0
O=C2C(=CC(=CC=C1C=C(C(=O)C(=C1)C(C)(C)C(C)(C)C)C=C2C(C)(C)C(C)(C)C	0
O=C(O)CC2(OCCc1c3cccc(c3([nH]c12))C(O)C)CC	0
O=[N+](O)c3ccc1ccc5c2c(ccc3(c12))cc4C=CCCc45	1
O=[N+](O)C=Cc1occc1	0
O=[N+](O)c1cccc1CBr	0
C=C1CCC2CC1C2(C)(C)	0
O1CC1	1
O=C3N=C2C(=Nc1cc(c(cc1N2C)C)C)C(=O)N3	1
O=[N+](O)c2ccc1cccc1c2C	1
N#Cc1cccc1	0
O2C3C=Cc1c4cc6cccc5C=Cc(c4(ccc1C23))c56	1
O=[N+](O)c1cccc1S(=O)(=O)O	0
OCC(=C(CO)Br)Br	1
O=C1c3c(O)cc(O)cc3(Oc2c(O)ccc(O)c12)	1
O=[N+](O)c1ccc2Oc3cc(ccc3(Oc2(c1)))N+](=O)[O-]	1
OC1C=CC2OC2(C1(O))	1
O=C(OCC(CC)CCCC)CCCC(=O)OCC(CC)CCCC	0
O=C1OC(=C(O1)CN5CCN(c2cc3c(cc2(F))C(=O)C(C(=O)O)=C4N3C(C)S4)CC5)C	0
O=C(OCC(=O)C3(OC(=O)C)(CCC2C4CC(F)C1=CC(=O)C(=CC1(C)C4(F)(C(O)CC23(C)))Br))C	0
O=[N+](O)c1cccc(c1)S(=O)(=O)OCC2OC2	1
O=C(O)c1ccc(OCCCCCCCC)cc1	0
c1ccc(cc1)C(c2ccc(cc2)N(C)C)c3ccc(cc3)N(C)C	0

N#CC(C#N)=C(C#N)C#N	0
N#Cc1ccc(cc1)C2(OC2)(C)	1
Fc1cccc2cc3c5cccc4cccc(c3(cc12))c45	1
OCC(O)CCl	1
O=[N+][([O-])c1cc(c(c(c1)[N+](=O)[O-])C)[N+](=O)[O-]	1
n1cccc(c1)C	0
O=[N+][([O-])c3c1cccc1c(c2cccc23)[N+](=O)[O-]	0
O=C2NC(=O)C(c1cccc1)(C(=O)N2)CC	1
O=C(OCC(CBr)Br)C(=C)C	1
O=C(NCCN(C)C)c2cccc1nc3cccc3(cc12)	1
Nc1ccc(cc1)C=Cc2cccc(N)c2	1
O=[N+][([O-])c2ccc(C=Cc1ccc(cc1)C)cc2	1
n2c(OCCCC)ccc3nc1cc(ccc1c(NCCCN(CC)CCCl)c23)Cl	1
OCC=CCl	1
O=NN1CCSC1C(O)C(O)C(O)C(O)CO	1
OCCOCC	0
O(c1ccc(cc1)Cc2cccc2)CC3OC3	1
N#CCCN(c2ccc(N=Nc1cccc1)cc2)C	1
O=[N+][([O-])c2cc(c(Nc1c(cc(cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-])c(c2)[N+](=O)[O-])[N+](=	1
O=C(OCCCCCCCC(C)C)C(=C)C	0
c2cc3ccc4cc1c(C=CCC1)c5ccc(c2)c3c45	1
O=Nc1ccc(OCCCC)cc1	1
O=[N+][([O-])C(CC)C(O)C	0
O=C4C=C3CCC2C(CCC1(CC)(C2(CCC1(O)(C#C))))C3CC4	0
c3ccc4cc2c(ccc1cc(ccc12)C)cc4(c3)	1
O=[N+][([O-])c2ccc3[nH]c1ccc(cc1c3(c2))[N+](=O)[O-]	1
Nc1cc4cccc3ccc2cccc1c2c34	1
O1CCC1	1
O=C(OCC=C)c1cccc1(N)	0
n1cccc1N	0
O(CC)P(OCC)(=S)SCCl	0
O=C(c1cccc(c1)Cl)Cl	1
O=C1c5c(O)ccc(c5(Oc2cc3OC4OC=CC4(O)(c3(c(O)c12))))CC=C(C)C	1
O=Cc1cccc(c1Cl)Cl	0
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	0
O=C(OCC=C(C=CC=C(C=CC1=C(C)CCCC1(C)C)C)C)C	0
O=[N+][([O-])c1ccc(OC)cc1	1
O=CC2=C1CC(C)(C)CC1C(O)C3(C)(CC23(C=O))	1
O=C(OCC(C)C)CCCCC(=O)OCC(C)C	0
O=[N+][([O-])c1ccc2nc3c(nc2(c1))cccc3[N+](=O)[O-]	1
Nc1ccc(c(N)c1)C	1
O=C(O)c1ccc(cc1)Cl	0
O=C1c3cccc3(C(=O)c2c(ccc(NC)c12)NCCO)	1
O=[N+][([O-])c6ccc4c3c6(c1cccc1c2cccc(c23)C5OC45)	1
n3c(OC)c2cc(OCC1OC1)ccc2s3	1

O=C(OOC(=O)CCCCCCCCC)CCCCCCCCC	0
O=CC(=C)CCC	1
n3c5ccc1cccc1c5(cc4ccc2cccc2c34)	1
O=[N+](O)c1cc(c(N)c(c1)Br)[N+](=O)[O-]	1
O=C2c3[nH]c4cccc4(c3(N=NN2(N=Cc1ccc(cc1)Cl)))	1
O=[N+](O)C(Cl)Cl	1
[N-]=[N+]=CC(=O)NCC(=O)N	1
O=C1c3cccc3(C(=O)c2c(O)cccc12)	1
n1cc(nc(c1)C)C	1
Nc1cccc2cc3cccc3(cc12)	1
O=C(OCC(C)C)Cc1cccc1	0
Nc1ccc(cc1)c2cc(c(N)c(c2)Cl)Cl	1
O=C(OCC(CBr)Br)C=C	1
O=Nc1ccc(cc1)Sc2cccc2	1
N#Cc1cccc(C#N)c1	0
O=C(OCC)CNC(=O)CCCCSc2ncnc1[nH]cnc12	0
O=C(OCCOCC)C=Cc1ccc(OC)cc1	0
O1CC1C2(OC2)(C)	1
O=C(C)CC(OC)(C)C	0
O=C(c1cccc1Cl)Cl	1
N#CC2=CC(c1ccncc1)=C(NC2(=O))C	0
O(c1cccc1)c2ccc(N)cc2	1
O=CCCCC=O	1
O=[N+](O)c1oc2ccc(OC)c(c2(c1))N(CCCl)CCC	1
O=C(OCC1OC1)C=C	1
n1nc2cccc2([nH]1)	1
O=C(O)C1NCSC1	0
Oc1nsc2cccc12	0
O=[N+](O)c1cccc(N)c1CO	0
N=C(N)NN=C1C=CC(=NNC(N)=S)C=C1	1
O=C(C)CC(O)(C)C	0
O=C(C(c1cccc1)Cl)Cl	1
N(=Nc1ccc(N)cc1)c2ccc(N)cc2	1
O=C2OCCN2(N=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-])	1
n1c(nc(nc1NCC)Cl)N	0
O=[N+](O)c5ccc3c2c5(ccc1cccc(c12)C4OC34)	1
O=[N+](O)c1ccc2nc3cc(ccc3(nc2(c1)))N[N+](=O)[O-]	1
OCC=C(C)CCC=C(C)C	0
O=C(OCC(CC)CCCC)CCCCCCCCC(=O)OCC(CC)CCCC	0
O=[N+](O)c1ccc(cc1)n3cnc2c(ncnc23)N	1
OCc1ccc(cc1)C	0
O(C)C(C)(C)CC	0
c1ccc(c(c1)Cl)Cl	0
Nc1ccc(cc1Cl)c2ccc(N)c(c2)Cl	1
O=[N+](O)c2nc1c3ccncc3(ccc1n2C)	1

O=[N+][O-]c2ccc(C=Cc1cccc(c1)[N+](=O)[O-])cc2	1
c1ccc3c(c1)c(c2ccccc2c3CBr)C	1
O=C(O)c1ccccc1	0
O(c1ccccc1(N))CC	0
Nc1ccc(cc1C)Cl	1
O=[N+][O-]c1ccc2c(c1)cc(c3ccc(cc23)[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1
O=C1OCCN1P(=O)(N2C(=O)OCC2)Cl	1
O=C(OCCCCC)C(=C)C	0
OCc2cc3cccc4c1ccccc1c(c2)c34	0
O=C(O)C(N)CSC(=C(Cl)Cl)Cl	1
O=C(NC(=O)c1c(F)cccc1(F))Nc3cc(c(Oc2ncc(cc2Cl)C(F)(F)F)c(c3)Cl)Cl	0
n1c(N)ccc2ccccc12	1
O=C1NC(=O)N(C=C1(C=CBr))C2OC(CO)C(O)C2	0
O=C2Oc1cc(OC(=O)C)ccc1C(=C2)CBr	0
O=C(N(c1ccccc1)CC)N(c2ccccc2)CC	0
O=C(Nc1ccccc1)C	0
O=NOCCCC	1
O=P(Oc1cccc(c1)C)(Oc2cccc(c2)C)Oc3cccc(c3)C	0
O=[N+][O-]c1ccc(cc1)Br	1
N(=Nc1[n+](ccs1)C)c4c2ccccc2n(c4(c3ccccc3))C	1
O=C(Nc1ccc(OC(C)CNC(C)C)c(c1)C(=O)C)NCC	0
O=C(OC(CO)(COC(=O)C=C)COC(=O)C=C)C=C	0
O=[N+][O-]c2ccc3c1ccc(cc1Cc3(c2))[N+](=O)[O-]	1
O=C2N(c1ccc(cc1)Cl)C(=O)CC2	0
OCCCCCl	1
O=[N+][O-]c1cc(N)cc(c1C)[N+](=O)[O-]	1
n1ccc(c2ccccc12)Cl	1
c1ccc(cc1)c2cc[n+](cc2)C	0
O=C(O)C(Oc1ccc(cc1Cl)Cl)C	0
O=S(=O)(O)c5cc(O)c6c(N=Nc1ccc(cc1)c4ccc(N=Nc2cc(c3ccccc3(c2(N)))S(=O)(=O)O)cc4)c(N)ccc6(c1cc2ccc3ccc4ccc5ccc6ccc1c7c2c3c4c5c67	1
O=C(O)CNC(=O)C(N)CS	1
O=Cc1cccc(c1)[N+](=O)[O-]	1
O=[N+][O-]c1ccc(cc1)COC2ccccc2	0
ON=C2Nc1ncc(cc1N2C)c3ccccc3	1
O=C1C=CC(=O)C(OC)=C1	0
O=[N+][O-]c1ccc2c4cccc3c5ccccc5(cc(c2(c1))c34)	1
O=S(=O)(O)c5ccc6c(N=Nc1ccc(cc1Cl)c4ccc(N=Nc2c(N)c(cc3cc(ccc23)S(=O)(=O)O)S(=O)(=O)O)c(c4	0
O=C2c3cc(ccc3C(=O)c1c2(cccc1[N+](=O)[O-]))S(=O)(=O)O	1
N(CCCl)CCCl	1
ON=Cc1ccncc1	0
O=C(O)Cc1cccc(c1)[N+](=O)[O-]	0
c1ccc4c(c1)ccc3c4(cc2ccccc2c3CBr)	1
O(c1ccc(cc1)C(c3ccc(OCC2OC2)cc3)(C)C)CC4OC4	1
O=C(Nc1ccc(cc1)C(=O)CCl)C	1

Nc1ccc(cc1)Sc2ccc(N)cc2	1
OC1(C)(CC2CCC1(C)C2(C)(C))	0
O=C1c4ccc(OC)cc4(c2nccc3cc(OC)c(O)c1c23)	1
CC(CCl)(CBr)Br	0
ON1C(C)(C)CC(N)CC1(C)C	1
Oc1ccc(OC)cc1C(C)(C)C	0
c1ccc3c(c1)cc2ccccc2c3CCl	1
O=[N+][([O-])c4ccc2c1cccc(c1c3cccc4(c23))[N+](=O)[O-]	1
O=C4Oc2c(c(OC)cc1OC3OC=CC3(c12))C5=C4C(=O)CC5(O)	1
O=C(OCC)C=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-]	1
O=[N+][([O-])c1nc(n(c1)CC(O)COC)Cl	1
O1CC1CCc2ccc(cc2)Cl	1
N(CCCCC)CCCCC	0
FC(F)(F)c1ccc(cc1)CO	0
O=S(=O)(O)c4c(N=Nc2c(O)ccc1ccccc12)ccc3ccccc34	0
O=C(O)COCC	0
O=C1Oc2ccccc2(C=C1)	1
c1ccc4c(c1)ccc3cc2ccccc2c(c34)CC	0
C=C(C)C	0
O=[N+][([O-])c1cccc(c1(O))][N+](=O)[O-]	0
O=C3C=C(OC)C2(Oc1c(c(OC)cc(OC)c1Cl)C2(=O))C(C)C3	0
n1cc2ccc3cccc4ccc(c1)c2c34	1
c1ccc3c(c1)c(c2ccccc2c3CCl)C	1
O=[N+][([O-])C	0
N(CC)(CC)CCCC	0
Oc2ccc3c1cccc1c4cc5ccccc5(cc4(c3(c2)))	1
O=P(OC)(OC)N1CCOCC1	0
FC(F)(F)c1cccc(c1)Cl	0
n2cc(nc3ccc1c(nc(N)n1C)c23)C	1
O=C1c5c(O)cccc5(Oc2cc3OC4OC=CC4(c3(c(O)c12)))	0
O=C(OC1C(O)C(OC(CO)C1(O))OC7C(OC(c2nc[nH]c2)C(NC(=O)c3nc(nc(N)c3C)C(NCC(N)C(=O)N)CC	1
Nc2ccc3cccc4c1cccc1c2c34	1
O=[N+][([O-])c1ccc2cn(nc2(c1))C	1
O=C2NCCN2(N=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-])	1
O=C3c2ccc1cccc1c2c4c5ccccc5(ccc34)	1
O=S(=O)(O)c2ccc(O)c1ncccc12	1
n1c[nH]c2ccccc12	0
O=C(OCC)CCCCC	0
O=C1c3cc(O)ccc3(Oc2cc(O)cc(O)c12)	1
n2cccc3ccc1cccn1c23	0
c2cc1cccc3c1c(c2)CC(N(C)C)C3	1
c1ccc4c(c1)ccc3c4(ccc2cccc(c23)C)	1
N(=Nc1ccc2[nH]ncc2(c1))c3ccc(cc3)N(C)C	1
O=C1c4c(C(=O)N1CCN2C(=O)c3c(C2(=O))c(c(c(c3Br)Br)Br)Br)c(c(c(c4Br)Br)Br)Br	0
NN(c1ccccc1)c2ccccc2	0

O=C(C=Cc1ccc(cc1)N(C)C)c2ccccc2	0
n3cc2cccc(OCC1OC1)c2s3	1
O=P(Oc1cccc1)(Oc2cccc2)OCCCCCCCC(C)C	0
O=[N+][([O-])c1ccc(cc1)NO	1
O=[N+][([O-])c1cc(N)c(OC)cc1(N)	1
c1cc(ccc1C)C(C)(C)C	0
N=C(N)c1ccc(cc1)c2cc3ccc(cc3([nH]2))C(=N)N	0
O=NN(C(=O)N(C)C)C	1
O=CC(=C(Cl)Cl)C(Cl)Cl	1
O=C(O)c1cccc1(C(=O)OCC(CC)CCCC)	0
n2c1c4cccc4(ccc1c(c3cc(cc(c23)C)C)C)	1
C=CCCCCCCCCCCC	0
c1ccc(cc1)NC(Nc2cccc2)=S	0
O=C(Nc1ccc(cc1)Nc2ccc(cc2)[N+](=O)[O-])C	1
O=[N+][([O-])c2ccc(Oc1ccc(N=C=S)cc1)cc2	1
OCCN(c1ccc(cc1)C)CCO	1
Nc1ccc(cc1)C=Cc2ccc(cc2)C	1
O=[N+][([O-])c5ccc3c2c5(ccc1ccc(c(c12)c4c3CCCC4)[N+](=O)[O-])	1
O=C(OCc1occc1)C	1
C=CCCCCCCCCCCCC	0
O=C(O)c1cccc1(C(=O)O)	0
O=C1c3cccc3(C(=O)C2=C(N)CCC(N)=C12)	1
O=C(c1occc1)C	1
O=NN(C(=O)N)C	1
c1ccc5c(c1)cc4c3c5(ccc2cccc(c23)C4)	1
O=C(Nc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-])C	0
O=[N+][([O-])c1ccc2Oc3ccc(cc3(Oc2(c1)))][N+](=O)[O-]	1
n1nn(O[P+](N(C)C)(N(C)C)N(C)C)c2ccccc12	0
N#CC(=C)C	0
O=C(O)CCC(=O)NN(C)C	0
ON=CC(C)(C)SC	0
O=C(NC)c1cccc(c1)NCC(=O)NCCc2ccc(OC)c(OC)c2	0
O=C(O)c1occc1	0
N#CC=1C(=O)C(=C(C(=O)C=1(C#N))Cl)Cl	0
O=C(O)c2oc(c(c1cccc1)c2c3cccc3)[N+](=O)[O-]	1
n3c1cc(c(cc1c(c4ccc2cccc2c34)C)C)C	1
C(N(C)C)(N(C)C)=S	0
O=[N+][([O-])c1ccc(cc1)C3=NC2=NC=NC2=C(N)N3	1
O=[N+][([O-])c2c3cccc3(cc1cccc12)	1
O=C1C=CC(=O)C(=C1)Cl	0
c1ccc2c(c1)cc3ccc4cccc5cc(c2c3c45)C	1
c3ccc4cc2c(ccc1c2(cccc1C))cc4(c3)	1
O=C2NCNC(=O)C2(c1cccc1)CC	1
O=C(OCC)CCl	0
n2ccc3ccc1cc4cccc4(cc1c3(c2))	1

O=S1(=O)(OCCC1)	1
O=C(ON)N(C(=O)NC)C	1
Oc1ccc4c(c1)c6cc2ccccc2c5cc3ccccc3c4c56	1
O=C2c5c(O)ccc(c5(Oc3cc1OC4OC=CC4(c1c(OC)c23)))CCC(O)(C)C	1
n1cc(N)cc2ccccc12	1
c3ccc4cc2c(ccc1ccc(cc12)C)cc4(c3)	1
O=C(OCC)C1C(C=C(C)C)C1(C)(C)	0
C(Cl)Br	1
O1CC1C(Cl)(Cl)Cl	1
O=S(=O)(O)CCN	0
O=[N+][O-]C(C)CO	0
O=C(OCCO)C=C	0
OCCN(CCO)C(C)(C)C	0
O=Cc1ccc(cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1
OCCCC	0
O=C1OC(C)C1	1
O=[N+][O-]c3cccc1c3(cc(c2cccc(c12)[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-])	1
O=C(OCC(C)CC)C=Cc2ccc(N=Cc1ccc(OC)cc1)cc2	1
O=C(Nc1c(cccc1C)C)CN2C(=O)CCC2	0
O=C(OC2CCCCC2(N1CCCC1))Nc3cccc(OCCCCC)c3	0
O=C(N(O)c1ccc(cc1)c2ccccc2)C	1
O=C(Nc1cccc(c1)C)C	0
o1ccc2cc3ccc4cccc5ccc(c12)c3c45	1
O=C1OC(O)C(=C1Cl)CCl	1
O=C1NNc2ccccc12	0
O=C2Oc1cc(ccc1C(=C2)C(F)(F)F)N(CC)CC	0
n3c(OC)c2ccc(OCC1OC1)cc2s3	1
O=C3c2cc(OC)c1c4cccc4(ccc1c2CC3)	1
O=C2c3[nH]c4cccc4(c3(N=NN2(N=Cc1ccc(OC)cc1)))	1
O=CNC(C(=O)NC(C(=O)O)Cc1ccccc1)CCSC	0
O=C5C=C4C(=C3C(c1ccc(cc1)N(C)C)CC2(C)(C(CCC2(O)(CCCO))C3CC4))CC5	0
O=NN1CC(OC(C)C1)C	1
O=C(c1cc([N+](=O)[O-])sc1)N(c2ccccc2)C	1
O=[N+][O-]c1ccc(cc1)Nc2ccc(N=C=S)cc2	0
O=C1c3cccc(N)c3(C(=O)c2cccc(N)c12)	1
O=[N+][O-]c1ccc(N)c(N)c1	1
Oc1c(cc(cc1C(C)(C)C)Cc2cc(cc(c2(O))C(C)(C)C)C	0
O=C(Nc2ccc(Oc1ccc(cc1)NC(=O)C)cc2)C	0
O=C(Nc1ccc(cc1)Br)N(OC)C	0
O=C(O)c2ccccc2(OC(=O)c1ccccc1(OC(=O)C))	0
O2C3c4cccc4(c1ccccc1C23)	1
Nc1ccc(cc1Cl)c2cc(c(N)c(c2)Cl)Cl	1
O=C(N)CN1C(=O)CC(O)C1	0
O(c1ccc(cc1)c2ccccc2)CC3OC3	1
O=C(Cl)SCCC	1

O=CC2=CC1CC(C)(C)CC1C34(C(=O)OC(O)C24(C3))	1
NC(C)=S	0
n1ccnc(c1)CC	0
O=[N+][O-]c1c(c(c(c1Cl)Cl)Cl)Cl	0
O=C(OCC(COC(=O)C=C)(COC(=O)C=C)CC)C=C	1
O=Cc1cccc(c1)Cl	0
O=NOCCC	1
Oc2ccc3nc1cccc1c(N)c3(c2)	1
O=C(Nc1ccc(c(N)c1)C)C	1
O=NN(C)Cc1ccc(F)cc1	1
O=C(O)C(NC(=O)C(C)(C)S)CS	0
NN(Cc1cccc1)Cc2cccc2	0
O=C(O)C(=O)Nc1cccc(c1)c2nnn[nH]2	0
O=C(OCC1OC1)C(=C)C	1
C=C(C)C1CC=C(C)CC1	0
N(=Nc1ccc(N)c(c1(N))C)c2cccc2	1
O=Nc1cc(ccc1C)[N+](=O)[O-]	1
c1ccc3c(c1)c(c2cccc2c3CCl)CCl	1
Nc2ccc3[nH]c1cccc1c3(c2)	1
O=C(OC)c1cccc1(N)	0
O=C(O)C2N(C(=O)C1NC(=O)CC1)CSC2	0
O=C(NC)N(c2nc1cccc1s2)C	0
O=C(OCCCC)c2cccc2(C(=O)OC1CCCCC1)	0
O=[N+][O-]c3cc(c2[nH]c1cccc1c2c3C)C	1
O(c1ccc(N)c(c1)C)C	1
O1CC1CCCCCCCCCCC	0
c1ccc2c(c1)ccc4c2c(c3cccc3c4CBr)C	1
O=C(NC)NC	0
O=C1C=Cc2ccc4C(=O)C=Cc3ccc1c2c34	1
O=C(O)c1ccc(c(c1)[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1
O(c1ccc(cc1)Nc2ccc(OC)cc2)C	0
O=[N+][O-]c2c4cccc4(cc1c3cccc3(ccc12))	0
O=P1(OCCC(O)N1)N(CCCl)CCCl	1
n2c1cccc1c(N)c3cc(ccc23)Cl	1
Nc1cccc1Cl	0
Nc1ccc(cc1(N))c2ccc(N)c(N)c2	1
Nc1cccc(c1C)C	1
N1CCN(C)CC1	0
O=C(OC)CC(=O)C	0
O=C(O)C(=C(CO)C(Cl)Cl)Cl	1
FC(F)(F)C(Cl)Br	0
O=NN(C(=O)c1c(ncn1C)N(N=O)C)C	1
CCC(C)(C)C	0
O=C(C=Cc1cccc1)c2ccc(cc2)c3cccc3	0
O=C(OC(C)C)C	0

N#CC(OC(=O)C1C(C)(C)C1(C)(C))c3cccc(Oc2ccccc2)c3	0
O=C(c1cc(cc2c1CCC2(C)C)C(C)(C)C)C	0
[N-]=[N+]=C1C=C(C=CC1(=O))C(O)CN(N=O)CCCC	1
O=[N+][([O-])c3ccc(N=Nc1c(N)ccc2cc(cc(O)c12)S(=O)(=O)O)c(c3)S(=O)(=O)O	0
n1ccncc1	0
O=[N+][([O-])c1cccc(c1)C(F)(F)F	0
O=[N+][([O-])c2ccc(c1ccccc1)c(c2)[N+](=O)[O-]	1
OC1C=CC5C4N(C)CCC25(c3c(OC12)c(OC)ccc3C4)	0
c1cc(C)sc1	0
O=C1C=CC(=O)c2c(O)ccc(O)c12	1
OC5C=Cc4cc2c6ccccc6(cc3c1ccccc1c(c23)c4C5(O))	1
n2c1occc1c(OC)c3ccccc23	1
O=C1OC2C(C1(=C))CCC(C)C3C=CC(=O)C23(C)	0
O=[N+][([O-])c1ccccc1(O)	0
Nc1cc(c(c(c1)Cl)Cl)Cl	0
c1ccc(cc1)Nc3cccc2ccccc23	0
O=[N+][([O-])c1cc(ccc1(O))c2ccccc2	0
O=NN(C(=N)N[N+](=O)[O-])CCCCC	1
O=C(N)NNC(=O)N	0
O=[N+][([O-])c1ccc(cc1)c2ccc(cc2)[N+](=O)[O-]	1
O=C1c3ccc(N)cc3(C(=O)c2ccc(N)cc12)	1
O=C3OC(CC)C(O)(C)C(O)C(C(=NOCOCOC)C(C)CC(O)(C)C(OC1OC(C)CC(N(C)C)C1(O))C(C)C(OC2OC	0
O=C(Nc1cc3c(cc1Cl)c2ccccc2C3)C	1
N(=Nc1ccc(cc1)N(CC)CC)c2ccccc2	0
ON=C	0
c1ccc5c(c1)ccc4cc3cccc2C=Cc(c23)c45	1
Oc1ccnc2ccccc12	0
O=[N+][([O-])C3=Cc2cccc1cccc3(c12)	1
NCCN1CCNCC1	0
Oc1ccc(c(c1)NCC)C	1
O=C(OCC(C)(C)COC(=O)C=C)C=C	0
O=C(Nc1ccccc1)C(C)(C)Br	0
OC4c2c5ccc1ccccc1c5(ccc2C3OC3C4(O))	1
O=[N+][([O-])C5=Cc4c2c(ccc1ccccc12)cc3cccc5(c34)	1
O=C1OC(O)C(=C1Cl)Cl	1
O=C(O)C(Oc1ccc(cc1)C3c2ccccc2CCC3)(C)C	0
O=C(Nc1ccc2ccc3cccc4ccc1c2c34)C	1
O=C(NCCN(C)C)c2cccc1cc3ccccc3(nc12)	1
Fc1ccc(N)cc1	1
c1ccc2cc3c(cc2(c1))cc(c4ccccc34)C	1
n1ccc(cc1)CCl	0
c1ccc(cc1)C(N(C)C)C	0
O=[N+][([O-])c1ccc(cc1)Nc2ccccc2	0
O=C(OC)C2=C(NC(=C(C(=O)OCC(=O)C)C2(c1ccccc1[N+](=O)[O-]))C)C	0
O=C(O)CCc1ccc(cc1)C(=O)C2CCC(CN)CC2	0

O=C1NSc2cc(ccc12)[N+](=O)[O-]	1
O=C(OCC)C1OC1(C(=O)NC(C(=O)NCCC(C)C)CC(C)C)	0
O=C2Oc1cc(O)cc(O)c1C(=C2)C	0
N(=Nc1cccc1C)c2ccc(cc2)N(C)C	0
O=[N+][([O-])c1oc2c(c1)cc3ccc4cccc5ccc2c3c45	1
O=[N+][([O-])c2ccc3c1cccc1sc3(c2)	1
O=C(c1ccc(cc1)NO)C	1
O=C(OCc2ccc(N=Nc1ccc(cc1)N(C)C)cc2)C	1
O=C2C(=O)c1cccc1c3cccc23	0
O=NN(C)COC(=O)C	1
O=C(O)C(CCl)Cl	0
O=C1c3cc(O)c(O)c(O)c3(C(=O)c2c(O)cc(cc12)C)	1
Nc1ccc(cc1)C=Cc2ccc(N)cc2	1
O=S(=O)(NC)c1ccc(N)cc1	0
O=C2c5c(Oc3cc1OC4OC=CC4(c1c(OC)c23))ccc(c5(OC))Cl	1
Oc3ccc4ccc2ccc1c(ccn1C)c2c4(c3)	1
O=C(O)c1cccc(c1)[N+](=O)[O-]	1
Oc1ccc(cc1(OC))c3nc(c2cccc2)c([nH]3)c4cccc4	1
O=C1Nc2ccc(cc2(C1(=O))))[N+](=O)[O-]	1
O=[N+][([O-])c2cccc1c2(c(ns1)OC)	1
O=NN(C)C(OC(=O)C)C(=O)C	1
O=S(=O)(OCCCCOS(=O)(=O)C)C	1
O=C2c1c(ncn1C)N(C(=O)N2C)C	0
O=[N+][([O-])c2cc(N)ccc2(c1ccc(N)cc1)	1
O=Cc1ccc(c(c1)Cl)Cl	0
O=[N+][([O-])OC2COc1c(OC(C)C)C)cccc1C2	0
O=CN(N=CC)C	0
O=C(N)C=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-]	1
O=C(O)C(NN)(C)Cc1ccc(O)c(O)c1	1
C(C(CCl)Br)Cl	1
Oc1c(cc(cc1Br)C(c2cc(c(O)c(c2)Br)Br)(C)C)Br	0
n3c1cc(ccc1c(c4ccc2cccc2c34)C)C	1
O=C(Nc1ccc(cc1)Br)c2cc(cc(c2(O))Br)Br	0
c1ccc(cc1)P(c2cccc2)c3cccc3	0
O=C(OCc3c1cccc1c(c2cccc23)C)C	1
O(CC1OC1)CC(CC)CCCC	1
O=C(OC)Nc1nc2cc(ccc2([nH]1))Sc3cccc3	0
O=NN(c1cccc1)c2cccc2	0
O=C1NC3=C(C(=O)N1C2CCCC2)CCC3	0
O=[N+][([O-])c1ccc(cc1)C4C(O)C(OC4(n3cnc2c(ncnc23)N))CO	1
n1cccc2ccc3c(c12)C4OC4(CC3)	1
O=P(OCC)(OCC)N2C3c4cccc4(c1cccc1C23)	1
O=[N+][([O-])c1ccc(cc1)Sc2ccc(N)cc2	1
O=[N+][([O-])c1ccc(cc1)c2nc3n(c2[N+](=O)[O-])CCS3	1
Oc2cccc3c4cc5cccc5(cc4(c1cccc1c23))	1

O=C(C=Cc1ccccc1)c2ccccc2	0
Nc1ccccc1C	1
O2C3c5ccccc5(c1cc4ccccc4(cc1C23))	1
c1ccc2cc4c(cc2(c1))c3ccccc3C5NC45	1
O=C5c4c(O)ccc3c1ccc(O)c2C(=O)CC(O)C(O)(c12)C(c34)CC5	1
O=C(O)c1oc(cc1)[N+](=O)[O-]	1
O=C(OC4CCC2(C)(C(CCC1C3CCC(=O)NC3(C)(CCC12))C4))COc5ccc(cc5)N(CCCl)CCCl	1
O=[N+](O-)[O-]c3ccc2cccc1C=Cc3(c12)	1
O=C1C(O)=C(Oc2cc(O)cc(O)c12)c3ccc(O)cc3	1
O=C3C=CC(=O)c4c(O)c(C1=CC(=O)c2c(O)cc(cc2(C1(=O))))C)c(cc34)C	0
OCC(CO)(CBr)CBr	1
Fc1ccc3c4cc5ccccc5(cc4(c2cccc1c23))	1
O=C(OCCBr)C=C	1
O=[N+](O-)[O-]c1ccc2c(c1)NCC2	1
n2c1ccccc1c(NCCCNCCCl)c3ccc(OC)c23	1
FC(F)(F)c1cccc(N)c1	0
O=C(N)c1cc[n+](cc1)COC[n+]2ccccc2(C=NO)	0
C=CCN	0
O=[N+](O-)[O-]c1nc2ccccc2([nH]1)	1
O=C(OC)c2cc1OCOc1c3c4cccc(OC)c4(cc(c23)[N+](=O)[O-])	1
Nc2cc3cccc4c1ccccc1c(c2)c34	1
n2c1ccc(OC)cc1c(NCCCNCCCl)c3ccc(cc23)Cl	1
O2CCc1cc3c(cc1C2C)C(C)(C)C(C)C3(C)C	0
O=S(=O)(O)c1cc(N)ccc1(N)	0
c1ccc3c(c1)c(c2cc(c(cc2c3C)C)C)C	1
Oc1ccccc1CC	0
O=[N+](O-)[O-]c3ccc(c2nc1ccccc1c(NCCCN(C)C)c23)C	1
O=[N+](O-)[O-]c2cc(N=[N+](O-)[O-])c1ccc(c(c1)[N+](=O)[O-])C)ccc2C	0
O=C(OCc3c1ccccc1c(c2c4cccc4(ccc23))C)C	1
O=C1c2ccccc2(C(=O)N1(N))	0
O=C(c1ncccc1)C	0
O=[N+](O-)[O-]c3cc1c4ccccc4(ccc1c2c3(C=CC(O)C2(O)))	1
O=C1c5c(O)cccc5(Oc3c1c(OC)cc2OC4OCCC4(c23))	0
O=C(O)C1=CN(c2cc(c(F)cc2(C1(=O))))N3CCNCC3)C4CC4	1
O=C(N)C	0
O=C(O)COc1ccc(cc1)Cl	0
O=[N+](O-)[O-]c1ccc(cc1Cl)Cl	1
O=C1C(O)=C(Oc2cc(OC)cc(O)c12)c3ccc(O)c(O)c3	1
n1cccc(c1)Cl	0
O=C3N(c1ccccc1)N(c2ccc(O)cc2)C(=O)C3CCCC	1
O=C1NC(=O)CN1	0
n1c3ccccc3(cc2cc(N)ccc12)	1
O=[N+](O-)[O-]c1cc(ccc1Cl)Cl	1
ONc2ccccc2(c1ccccc1)	1
OCC(CC)C(O)CCC	0

N#Cc1ccc2[nH]c(nc2(c1))N	1
c1ccc5c(c1)ccc4[nH]c3ccc2cc(ccc2c3c45)C	1
N#CC1(O)(CCCCC1)	0
O=[N+][O-]c1cc(N)c(c(N)c1)C	1
O=C(Nc1ccc(cc1Cl)Cc2ccc(NC(=O)C)c(c2)Cl)C	1
O=C(c1ccccc1)C(=O)c2ccccc2	0
O1CC1C=C	1
n4c2c(ccc1ccccc12)cc5ccc3ccccc3c45	1
O=C(OCCOCCOCCOCCOC(=O)C=C)C=C	0
O=C(Nc2ccc3c1ccc(cc1Cc3(c2))NC(=O)C)C	1
C=CCCCCCCCCCCC	0
Oc1ccc(O)c2c(O)c3ccccc3(c(O)c12)	1
n1cccc2cc(OC)cc(NC(C)CCCN(CC)CC)c12	1
CCCCCCCCCCC	0
O(c1c(c(c(c1Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)C	1
O=[N+][O-]c5ccc2ccc3cc1c(C=CCC1)c4ccc5(c2c34)	1
O=[N+][O-]c2ccccc2(c1ccccc1)	0
O=C(O)C1=CN(c2cc(c(F)cc2(C1=O)))N3CCN(CC)CC3)C4CC4	1
O=C1N=C(N)C(O)=CN1C2OC(CO)C(O)C2	0
O=[N+][O-]c1ccccc1CC	0
N=C(N)NC(=N)NCCc1ccccc1	0
OC2C=Cc1c3ccccc3(ccc1C2(O))	1
O=C(O)c2ccccc2(N=Nc1ccc(cc1)N(C)C)	1
c1ccc2c(c1)NC(C=C2C)(C)C	0
O=C1c3ccccc3(C(=O)c2c(O)ccc(O)c12)	1
O=C(OC(C)C)COc1ccc(cc1Cl)Cl	0
O=NOCCC(C)C	1
O=C(O)CC(O)CC(O)C=Cc3c(c1ccc(F)cc1)c2ccccc2n3C(C)C	0
O(CC)C(C)(C)C	0
O=S(=O)(O)N=Nc1ccc(cc1)N(C)C	1
O=[N+][O-]c3ccc2c(oc1ccc(cc12)[N+](=O)[O-])c3	1
N=2c1ccccc1C(C=2C)(C)C	0
O=C(O)c2cc1OCOc1c3c4ccccc4(cc(c23)[N+](=O)[O-])	1
O=CCC	0
O=C(Nc1ccc(OCC(O)CNC(C)(C)C)c(c1)C(=O)C)Nc2ccc(OCC(O)CNC(C)(C)C)c(c2)C(=O)C	0
O=C1OC(=O)C(CC=CCCCCCCCC)C1	0
O=C(C=C)CC	1
O=C(OCCCl)C=C	1
O=CC=CC=CC=CC(O)CC	1
O=C1c3ccccc3(C(=O)c2c(N)ccc(N)c12)	1
O=C3c5ccc1OC(C(=C)C)Cc1c5(OC4COc2cc(OC)c(OC)cc2C34)	0
O(CC1OC1)C(C)C	1
c1ccc6c(c1)cc4c3c6(ccc2ccccc23)C5NC45)	1
O=NN1CC(C(C1)Cl)Cl	1
O=C(NN)c1ccncc1	1

[O-][N+]2(C)(CCCC2(c1cnccc1))	0
ON=NC	1
O=C(OCCC)C=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-]	1
O=Nc1ccc(cc1)c2ccccc2	1
O=C(NC(C)C)NS(=O)(=O)c2cnccc2(Nc1cccc(c1)C)	0
c2cc3ccc4cc1ccc(cc1c5ccc(c2)c3c45)C	1
O=[N+](O-)[O-]c1ccc2c4cccc3cccc(c2(c1))c34	1
O=C5c7ccc2nc(c1cccc1)sc2c7(C(=O)c6ccc4nc(c3cccc3)sc4c56)	0
N#Cc2ccc1c(nc(N)n1C)c2	1
Oc1cnc2ccccc2(c1)	0
[N-]=[N+]=NCCc1cccc1	1
c3ccc4cc2c(ccc1cccc(c12)C)cc4(c3)	1
O=S(=O)(O)c1cc(c(cc1(N))Cl)C	1
O=C1NC(=O)N(C=C1CO)C2OC(CO)C(O)C2	1
O=C(O)CN(C(=O)C(NC(C(=O)OCC)CCc1cccc1)C)C3Cc2ccccc2C3	0
OCCN(CCCC)CCCC	0
n1c(nc(nc1NCl)NCl)NCl	0
O=C(O)C1=CN(c2cc(c(F)c(c2(C1=O))))C)N3CCNC(C)C3)C4CC4	0
OCC(O)CO	0
OCc2c4ccccc4(cc1c3ccccc3(ccc12))	1
c1ccc2c(c1)c3ccc4ccc5cccc6cc2c3c4c56	1
O=C(NC)c1cccc1	0
O(c1cc4c3c(c1(OC))c2cc5OCOc5(cc2CC3N(C)CC4))C	1
Nc1cccc1CC	0
N#CC(C#N)=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-]	1
OCC9OC(OC6CC5=CCC4C(CCC3(C)(C4(CC2OC1(OCC(C)CC1)C(C)C23)))C5(C)CC6)C(O)C(O)C9(OC8C	0
c1ccc(cc1)Nc2ccc(cc2)NC(C)CC(C)C	0
O=C(c1ccc(cc1)[N+](=O)[O-])C	1
O=CC=CCCC	1
O=C(Nc1cccc(c1)C)c2cc([N+](=O)[O-])sc2	1
O=NN(N(C(=O)C(=NO)C(=O)C)c1cccc1)C	1
O=NN1CCCCC1	1
Nc1cc(ccc1Cl)Cl	0
O=C(OCc2ccccc2(N=Nc1ccc(cc1)N(C)C))C	1
O=C1OCC(=C1Cl)Cl	1
n3c(OC)c2cccc(OCC1OC1)c2s3	1
O=C2Nc3cc1cccc1c4c5OCOc5(cc2c34)	1
NCC(N)C	0
n2c1cccc1c(N)c3cc(ccc23)C	1
O=CC=CCC	1
n1cccc2cccc(OCC)c12	0
n1c(oc2ccccc12)c3ccccc3C	0
NC(N)=S	0
O=NN(C(=O)NCCO)CCCI	1
c1cc(ccc1CBr)CBr	0

<chem>O=C6c4c(O)cc(O)c5c3c(O)cc(O)c2C(=O)c1c(O)cc(c8c1c(c23)c(c45)c7c6c(O)cc(c78)C)C</chem>	0
<chem>O=NN(COC(=O)C)CC(=O)C</chem>	1
<chem>O(CC=C)CC1OC1</chem>	1
<chem>Nc1ccc(cc1)Cc2ccc(N)c(c2)Cc3ccc(N)cc3</chem>	1
<chem>O=C(OCC)N</chem>	1
<chem>O=C(O)C(=O)C(=O)O</chem>	0
<chem>O=C(O)c1cc(O)c2C(=O)c3c(O)cc(O)cc3(C(=O)c2(c1))</chem>	0
<chem>O=C(O)c2c[n+][([O-])c1cccc1[n+]]2([O-])</chem>	1
<chem>O=C(OOC(=O)c1cccc1)c2cccc2</chem>	0
<chem>O2CCc1c3cccc(c3([nH]c1C2(C)CC))CC</chem>	0
<chem>O=C(O)C(c1ccc2cc(OC)ccc2(c1))C</chem>	0
<chem>C=CCN2C3c4cccc4(c1cccc1C23)</chem>	1
<chem>O=C2N(C)C(c1cnccc1)CC2</chem>	0
<chem>O=CC=CC=CCCCC</chem>	0
<chem>NN(CC(C)C)CC(C)C</chem>	1
<chem>O=C1C(O)=C(Oc2cc(O)cc(O)c12)c3ccc(O)c(OC)c3</chem>	0
<chem>O=S(=O)(O)c1cccc1(N)</chem>	1
<chem>O1CC1Cc2ccc(cc2)Cl</chem>	1
<chem>O(C)C(C)(C)C</chem>	0
<chem>O=C1c3cccc3(C(=O)c2cccc12)</chem>	1
<chem>O=C2Oc1cccc1CC2</chem>	0
<chem>O=NN(C=O)C</chem>	1
<chem>O=C(O)C=CC=CC</chem>	0
<chem>OC(C)CCl</chem>	1
<chem>O=C1C(=O)c3ccc(NC(=O)C)c4ccc2cccc1c2c34</chem>	1
<chem>O=[N+][([O-])c1ccc2cccc2(c1)]</chem>	1
<chem>O=S(=O)(c1ccc(N)cc1)N(CC)CC</chem>	0
<chem>O=[N+][([O-])c2cccc1c3cccc3(ccc12)]</chem>	1
<chem>Nc2cccc3c1cccc1Cc23</chem>	1
<chem>O=C(C=C)NCO</chem>	0
<chem>O=CC=C(C)CCC=C(C)C</chem>	0
<chem>c1ccc4c(c1)ccc3c4(cc2cccc2c3Cl)</chem>	1
<chem>n1cc(nc2cccc12)C</chem>	0
<chem>N(=Nc1ccc(cc1)N(C)C)c2cccc2</chem>	1
<chem>O=C(N(C)C)C</chem>	0
<chem>O1CCN(C)CC1</chem>	0
<chem>O=C(N1CCN(C(=O)CCBr)CC1)CCBr</chem>	1
<chem>O=C(OC(=C)C)C</chem>	0
<chem>O=C2c3cccc3(C(=O)c1c2(ccc(c1[N+](=O)[O-])C))</chem>	1
<chem>O=C(OCC)CC(=O)C</chem>	0
<chem>c1ccc3c(c1)c2cccc(c2C3C)C</chem>	1
<chem>O=[N+][([O-])c1cccc(c1)S(=O)(=O)O</chem>	0
<chem>O=C(O)C(NC(=O)C(C)(C)SC)CS</chem>	0
<chem>O=[N+][([O-])c1cccc(c1[N+](=O)[O-])C</chem>	1
<chem>n1c(nc(nc1Cl)Cl)Nc2cccc2Cl</chem>	0

O=[N+][O-]c1ccc(cc1)c2ccc(N)cc2	1
N#CC(=Cc1occcc1)C(=O)OC	0
C=CC(=C)C	0
c1ccccc1	0
O=C1c5cccc(OC)c5(C(=O)c2c(O)c4c(c(O)c12)CC(O)(C(=O)C)CC4(OC3OC(C)C(O)C(N(C)C)C3))	1
O(CCCN)CC(CC)CCCC	0
O=C1c3ccccc3(C(=O)c2c(OC)cccc12)	1
O=C3c5ccccc5(C(=O)c4c(O)c(OC2OC(COC1OCC(O)C(O)C1(O))C(O)C(O)C2(O))ccc34)	0
Nc1ccc(cc1)CCc2ccccc2	1
c1ccc3c(c1)cc4c2ccccc2c6ccccc5ccc3c4c56	1
O=C(OC)NC(Nc1ccccc1(NC(NC(=O)OC)=S))=S	1
N#CCc2cn(N=O)c1ccccc12	1
O=C(OC)c4nc(c1nc2C(=O)C=CC(=O)c2(cc1))c5[nH]c3ccccc3c5(c4)	1
O=C(c1ccccc1)Cl	1
O(c2ccc(Oc1ccc(N)cc1)cc2)c3ccc(N)cc3	1
O=C(Oc1ccc(cc1)NC(=O)C)c2ccccc2(OC(=O)C)	0
Nc1cccc3c1c2ccccc2C3	1
O=C(O)CCC(C)C2CCC3C4CCC1CC(O)CCC1(C)C4(CC(O)C23(C))	0
O=C(Nc1ccc(cc1)S(=O)(=O)Nc2ncccc2)C	0
c1ccc4c(c1)ccc3ccc2c(C=CC2)c34	1
O=C(c1cccn1[N+](=O)[O-])C	1
O=C(O)CCCC=CCC1C(=O)CC(O)C1(C=CC(O)(C)CCCC)	0
O=CC=Cc1occcc1	0
O=[N+][O-]c1ccc(c(N)c1)c2ccc(N)cc2[N+](=O)[O-]	1
O=C2c4nccc5cc1OCOc1c(c3ccccc23)c45	1
O=C5Oc3c(c(OC)cc2OC4OC1OC1C4(c23))C6=C5C(=O)CC6	1
NCCCCCCCCCCCCCCC	0
n1c(nc(nc1NCC)Cl)NCC	0
O(C)P(OC)(OC)=S	0
c1c(c(c(c1Cl)Cl)Cl)Cl)Cl	0
Oc2ccc3ccccc3(c2(N=Nc1ccccc1C))	1
O=C(O)C=Cc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]	1
O=[N+][O-]CCCC	0
O=[N+][O-]c2nc[nH]c2(c1ccccc1)	1
O=C(O)C(N)CSCCl	1
O=[N+][O-]c1c(nc2n1CCS2)c3ccc(cc3)Cl	1
ONc3cnc1c(nc2c(cccn12)C)c3C	1
NCCCCCCCCCCCCCCC	0
c1ccc4c(c1)cc3c2ccccc2C5NC5(c3c4C)	1
O=[N+][O-]c3ccc2C=Cc1cccc3(c12)	1
N#[N+]c1ccc(cc1)C	1
O=C2Oc1cc(OC)ccc1C(=C2)CBr	0
O(c1cc(ccc1(N))c2ccc(N)c(OC)c2)C	1
O=P(Oc1ccccc1C)(Oc2ccccc2C)Oc3ccccc3C	1
O=C1Oc4c(ccc3ccc2ccccc1c2c34)[N+](=O)[O-]	1

<chem>C(=C1CC2C=CC1C2)C</chem>	0
<chem>O=C(O)COC</chem>	0
<chem>Nc1cccc2c4cccc3cccc(c12)c34</chem>	1
<chem>O=[N+][O-]c2nc1cccc1n2C</chem>	1
<chem>O=NN(C(=O)NC1CCCCC1)CCCl</chem>	1
<chem>O=[N+][O-]c3cc(c2[nH]c1ccc(O)cc1c2c3C)C</chem>	1
<chem>O=C(Nc1cccc1)NC</chem>	0
<chem>O=[N+][O-]c1cc(ccc1(N))c2ccc(N)cc2</chem>	1
<chem>O=C1OC4(c2cccc12)(c5cc(c(O)c(c5(Oc3c4(cc(c(O)c3I)I)))I)I)</chem>	0
<chem>O=[N+][O-]c4ccc3c2c4(ccc1cccc(c12)C(O)C3(O))</chem>	1
<chem>O=C(c1cccc(c1)[N+](=O)[O-])Cl</chem>	1
<chem>O=S(=O)(NC1CCCCC1)c2ccc(cc2)C</chem>	0
<chem>c1cc(ccc1NC(C)CC)NC(C)CC</chem>	0
<chem>O=CC=CC=CC</chem>	1
<chem>O2c1cccc1Sc3cccc23</chem>	0
<chem>Oc1cccc(O)c1(O)</chem>	1
<chem>O=C(C=C)N(CC1OC1)CC2OC2</chem>	1
<chem>OC3C=Cc2c4cc(N)c1cccc1c4(ccc2C3(O))</chem>	1
<chem>c1ccc2c(c1)ccc3c4ccc(cc4(ccc23))C</chem>	1
<chem>O=C(OCCOC(=O)C=C)C=C</chem>	0
<chem>O(C=CC=CC=CC=CCC)CCC</chem>	1
<chem>O=C(c1cc(cc(c1)[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-])Cl</chem>	1
<chem>OCc1ccc2c4cccc3cccc(c2(c1))c34</chem>	1
<chem>Oc1ccc(c(c1)Cl)Cl</chem>	0
<chem>N(N=C2NN=Cc1cccc12)=C(C=C(C)C)C</chem>	1
<chem>C1CSCSC1</chem>	1
<chem>c1ccc3c(c1)c(c2cccc2c3C)C</chem>	1
<chem>O(c1ccc(N)c(c1)Cl)c2ccc(N)c(c2)Cl</chem>	1
<chem>O=C2Oc1cc(NCC)c(cc1C(=C2)C)C</chem>	0
<chem>n1c3cccc3(cc2ccc(N)cc12)</chem>	1
<chem>O=C(c1ccc(c(c1Cl)Cl)Cl)C</chem>	1
<chem>O=[N+][O-]c5ccc2ccc3cccc4c1cccc1c5(c2c34)</chem>	1
<chem>O=C4Oc2c(c(OC)cc1OC3OC=CC3(c12))C5=C4C(=O)OCC5</chem>	1
<chem>O1c2c1c4cc5cccc5(cc4(c3cccc23))</chem>	1
<chem>[N-]=[N+]=NCC(N)C(=O)O</chem>	1
<chem>O=C(c1ccc(cc1)[N+](=O)[O-])Cl</chem>	1
<chem>O=CC3(O)(C(OC(OC1C(O)C(O)C(NC(=N)N)C(O)C1(NC(=N)N))C3(OC2OC(CO)C(O)C(O)C2(NC)))C</chem>	1
<chem>O=C1Oc2c(C=C1)cc4c3c2CCCN3CCCC4</chem>	1
<chem>O=CC(=C)C</chem>	1
<chem>O=[N+][O-]c4ccc1ccc3c5C=CCc5(cc2ccc4(c1c23))</chem>	1
<chem>O=C1NC(=O)N(C(=O)N1Cl)Cl</chem>	0
<chem>O=C(c1oc(c(c1Cl)Cl)[N+](=O)[O-])CBr</chem>	1
<chem>O=C(C=Cc1cccc1)c2ccc(OC)cc2</chem>	0
<chem>Nc1cc(c(N)cc1C)C</chem>	1
<chem>O=[N+][O-]c1cccc1CCl</chem>	1

O=S(c1cc(cc(c1(O))Cl)Cl)c2cc(cc(c2(O))Cl)Cl	1
O=C(Nc1ccc(cc1)C)CC(=O)C	0
N(CC)CCCC	0
O=C(O)CNC(=O)c1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]	1
O3C4c1ccccc1c2c5ccccc5(ccc2C34)	1
O=C(O)c2cc(c(cc2(NCc1occc1))Cl)S(=O)(=O)N	0
O=C(OCCBr)C(=O)OCCBr	1
Oc2c6cccc5ccc4ccc3c1ccccc1c2c3c4c56	1
O=C3c1cc(cc(c1c2c3(cc(cc2[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]))[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1
O=C(Nc1ccc(OCC(O)CNC(C)C)cc1)C	0
O=C(c3oc(c(c1ccccc1)c3(c2ccccc2))[N+](=O)[O-])CBr	1
O=[N+](O)c4ccc1ccc2cc5c(c3ccc4(c1c23))CCCC5	1
FC(F)(F)C	0
O=CCCCCCCC	0
O=C1c3c(O)cc(OC)cc3(Oc2c(O)ccc(O)c12)	1
c1ccc(cc1)c2ccccc2	0
FC(F)(F)c1ccccc1Cl	0
O=C(CC(C)C)CC(C)C	0
n2cc(nc3ccc1c(nc(N)n1CC)c23)C	1
O=CC(=Cc1ccccc1)CCCC	0
O=C(O)CN(C)C	0
O3C4c6ccccc6(c2cc1ccc(c5c1c(c2C34)CC5)C)	1
O=C1N(CO)C(O)C(O)N1CO	1
O=C(C=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-])NC(C)CC	1
O=C(OCC)CC(=O)CCl	0
O=C(O)COc1ccccc1	0
O=C(NCc1ccccc1)C2(OC2)(C)	1
O=C(O)Cc1ccc(N)cc1	1
c1ccc(cc1)c2ccccc2Br	0
O=[N+](O)c2cc1ccccc1c(c2)[N+](=O)[O-]	1
c1ccc(c(c1)C)C	0
c1ccc2c(c1)cc3ccc4cc(cc5ccc2c3c45)C	1
c1ccc2c(c1)ccc4c2c(c3ccccc3c4CC)C	0
O=C(OCCCCCCC(C)C)CCCC(=O)OCCCCCCC(C)C	0
Oc1ccccc1(O)	0
O=C(O)CNC(=O)C(NC(=O)CCC(N)C(=O)O)CSC(=O)NCCCCI	1
O=C1c5c(O)ccc(c5(Oc2cc3OC4OC=CC4(c3(c(O)c12))))CCC(O)(C)C	1
c1ccc2cc(ccc2(c1))N(CCCl)CCCl	1
O=C(OCc2c4ccccc4(cc1c3ccccc3(ccc12)))C	1
O=C(OC1CCCCC1)c2ccccc2(N)	0
N1CCCC1	0
N(CCCC)(CCCC)CCCC	0
O=C1NCC(N1c2ncc([N+](=O)[O-])s2)C	1
O=[N+](O)c1ccc(N)cc1	1
O=C(NCCCC)SC=2NC=NC1=NC=NC1=2	1

O=C(c1oc(c(c1Cl)Cl)[N+](=O)[O-])C	1
O=C(N(O)c1ccc(cc1)Sc2ccccc2)C	1
OC1c2cc3ccc4cccc5ccc(c2(C=CC1))c3c45	1
O=C2C(=C(N(N2(c1cccc1))C)C)C(C)C	0
O=C(OC)C(Cl)Cl	1
c1ccc(cc1)CSCc2ccccc2	0
O=C4Oc2c(c(OC)cc1OC3OC=CC3(O)(c12))C5=C4C(=O)CC5	1
O=[N+](([O-])c1ccc2c(c1)c3cccc(c3(cc2[N+](=O)[O-]))[N+](=O)[O-])	1
OCC	0
OC4C=Cc3ccc2nc5ccc1cccc1c5(cc2c3C4(O))	1
O=[N+](([O-])c1ccc(cc1)Sc2ccccc2	1
O=C1C=CC(=NC(=O)C)C=C1	0
N#Cc1cc(c(O)c(c1)I)[N+](=O)[O-]	0
O=Cc1ccc(OC)c(OC)c1	0
Nc1ccc(cc1(N))Cl	1
O=C(Nc1ccc2ccc4c(O)ccc3ccc1c2c34)C	1
O=C1N(C(=O)C2CC=CCC12)SC(Cl)(Cl)Cl	1
c1cc(ccc1Cl)SC	0
O=CNc2ccc3c1cccc1Cc3(c2)	1
O=C3c1cccc1c4ccc5C(=O)c2cccc2c6ccc3c4c56	0
O=C3OC(c1ccc(O)cc1)(c2ccc(O)cc2)c4cccc34	0
C(CBr)Br	1
OC(C)C(O)C	0
[N-]=[N+]=CC(=O)NCC(=O)OCC	1
O6C7c3ccc4cccc5C=C2c1cccc1C(=C2c3c45)C67	1
OCCN	0
n1c3ccc(N)cc3(nc2cc(N)ccc12)	1
n1c(nc(nc1NC(C)C)Cl)NCC	0
c1ccc4c(c1)ccc5c3cccc2cccc(c23)c45	1
c1ccc2c(c1)cc(c3cccc23)Cl	1
O=C(O)CCC(=O)Nc1ccc(cc1)Cl	0
O=C(OC)C12(OC2(C)(C(O)(NC1(=O))C))	1
O=[N+](([O-])c3ccc2c1c3(cccc1CC2)	1
O=C(NCCO)CCCCCCCCC	0
O=C(O)C(=C)C	0
O=C(O)C3NC(c2[nH]c1cccc1c2C3)CO	0
OCCCl	1
O=[N+](([O-])c3ccc2c(ccc1cccc12)c3	1
O=C(OC)C=C	0
n3c1cccc1c(NCCCN(CC)CCCl)c4ccc2ccccc2c34	1
O=[N+](([O-])c2ccc(c1cccc12)C	1
c1ccc(cc1)Nc2ccc(cc2)NC(C)C	0
O5C6c4cc1cccc1c3cc2cccc2c(c34)C56	1
O(c1c(c(c(c1Br)Br)Br)Br)Br)c2c(c(c(c2Br)Br)Br)Br)Br	0
O=C(OCCC(C)C)CCC	0

O=C(OC)C3=C(NC(=C(C(=O)OCC=Cc1ccccc1)C3(c2cccc(c2)[N+](=O)[O-]))C)C	0
Nc1cc(c(cc1C)C)C	1
O=[N+](O)c4cc2c(ccc1c2(C=CC(O)C1(O)))c3ccccc34	1
O=C(Oc2cccc1c2(OC(C)(C)C1))NC	0
O=NN(C)CC(=O)C	1
c1ccc3c(c1)c2ccccc2C4N(C34)Cl	1
O=C(O)CCl	0
Oc2ccc3ccccc3(c2(N=Nc1cc(ccc1C)C))	0
O=C(N(OC1OC(CO)C(O)C(O)C1(O))c3ccc(Oc2ccc(cc2)Cl)cc3)C	1
O=C(OCc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-])CCC	1
O=C1OC(CC1)CCCCCCC	0
O=C(O)CN(CC(=O)O)CC(=O)O	0
O=[N+](O)c1ccc(cc1)COC(=NC(C)C)NC(C)C	1
n1cccc2c1ccc3c4ccccc4(ccc23)	1
N#CP(=O)(OCC)N(C)C	0
Oc2c(cc(C=Cc1cc(c(O)c(c1)C(C)(C)C(C)(C)C)cc2C(C)(C)C)C(C)(C)C)C	0
Nc1c(cc(cc1Cl)Cl)Cl	0
O=C(OCC(C)C)C=C	0
O=C(OCC1OC1)C3CCCCC3(C(=O)OCC2OC2)	1
O=[N+](O)c1ccc2cc(c3ccc(cc3(c2(c1))))[N+](=O)[O-][N+](=O)[O-]	1
NCC1(C)(CC(N)CC(C)(C)C1)	0
O=[N+](O)c1cc(ccc1C)NO	0
c1(c(c(c(c1Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)C(=C(Cl)Cl)Cl	0
O=[N+](O)c4ccc2c1ccccc1c5c3c(ccc4(c23))ccc5[N+](=O)[O-]	1
O=C(O)C(N)CSC(=CCl)Cl	1
O=NN(C(=O)NC(C)P(=O)(OCC)OCC)CCCl	1
O=C1c3cccc(O)c3(C(=O)c2c(O)cc(cc12)CO)	1
c1ccc2c(c1)ccc3c5cccc4C=Cc(cc23)c45	1
O=[N+](O)c1ccc(cc1)c2nc(N)c3ncn(c3(n2))c4ccc(cc4)[N+](=O)[O-]	1
O=C(Oc1ccccc1)NC	0
O=C2C=Cc1ccccc1C2(=O)	1
O=NOC(C)(C)C	1
O=C(Nc1ccc(cc1(OC)))[N+](=O)[O-]C	1
O=C1c2ccccc2(C(=O)C1(O)(O))	0
n2nc(c3[nH]c1ccccc1c3(c2NN))n4nc(cc4C)C	0
O=[N+](O)c1ccc2ccc3ccccc4cc(O)c1c2c34	1
O=C(OC1OC(OC(C)C1)C)C	1
O=C(c1c(cc(n1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-])C	1
n1c(nc(nc1N)N)N	0
O=[N+](O)c1ccc(cc1)c2ccc(cc2(N)))[N+](=O)[O-]	1
c1cc(c(c(c1C)C)C)C	0
O=[N+](O)c2ccc3c1ccc(O)cc1Cc3(c2)	1
Nc1c(c(c(N)c(c1C)C)C)C	0
O=C(OCC(C)C)c1ccccc1(N)	0
O=[N+](O)c1c(ncn1C)c2ccccc2	1

O(c2ccccc2(OCC1OCCNC1))CC	0
O(c1ccc(cc1(OC))CC2OC2)C	1
n2c1ccccc1sc2C	0
c1cc2ccc3c6cccc5C=Cc(c4ccc(c1)c2c34)c56	1
n2c1ccc(nc1c(NCCCNCCCl)c3ccc(cc23)Cl)OCCCC	1
n1cccc3c1cc(c2c3(nc(N)n2C))C	1
O=[N+](O)N(c1ncccc1)S(=O)(=O)c2ccccc2	0
ON1C(C)(C)CCCC1(C)C	0
O=Nc1ccc(OCC)cc1	1
O=C(OC3CCC5(C)(C6CCC7(C)(C(CCC7(C6(CC4N(N1C(=O)c2ccccc2(C1(=O))))C45(C3))))C(C)CCCC(C)C	1
n3c1ccccc1c(Nc2ccc(OC)cc2)c4ccccc34	1
Nc3cccc2c3(cc1ccccc1[n+])2C	1
O=C(Nc2nc1c3cccn3(ccc1n2C))C	1
O=C1c3cccc(O)c3(C(=O)c2c(O)cccc12)	1
O=C2c4c(O)ccc(O)c4(Oc3cc(OC)cc(OC1OC(CO)C(O)C(O)C1(O))c23)	1
O=C1OC(=O)C(C=CCCCCCCCCCC)C1	0
N#CN2CC(C)CC3c4cccc1c4(c(c1CCCC)CC23)	1
O=[N+](O)c4ccc2cccc3c1ccccc1c4(c23)	1
n1cccc3c1ccc2nc(N)n(c23)C	1
O=C1OCC1	1
O=C(O)C(O)C	0
O=C(O)C(NC(C(=O)N1CCCC1(C(=O)O))CCCCN)CCc2ccccc2	0
O=S(=O)(O)c2cc(N)ccc2(C=Cc1ccc(N)cc1S(=O)(=O)O)	0
n2c1ccccc1sc2SN3CCOCC3	0
O=C(OCCOCCCC)COc1ccc(cc1Cl)Cl	0
O=Cc1ccccc1(O)	0
Nc1cc3c4cccc4(ccc3(c2ccccc12))	1
n1cc(ccc1Cl)Cl	0
O=C(Nc1ccc(c(c1)Cl)Cl)CC	0
O=C(C=Cc1ccccc1)c2ccc(cc2)[N+](=O)[O-]	1
O=Nc1ccc2ccc3cccc4ccc1c2c34	1
Fc1cc(ccc1(N))c2ccc(N)c(F)c2	1
O(Cc2cccc1ccccc12)CC3OC3	1
O=[N+](O)c1ccc(F)c(c1)[N+](=O)[O-]	1
O=C(OC)C(Oc1ccc(cc1)c2ccc(cc2)Cl)(C)C	0
O=C1C=C(C(=O)c2cccc(O)c12)C	1
O=C(N)Nc1nc2cccc2([nH])1	1
O=[N+](O)c2cccc1c(nsc12)OC	1
O=C(OC(CC=CCCCCCCCC(=O)OC)CCCCC)C	0
O=[N+](O)c1cc(cc(c1Cl)[N+](=O)[O-])C(F)(F)F	0
OOCC(C)(C)C	1
O=C3C=Cc2ccc1c4cccc4(ccc1c2C3(=O))	1
O=C(C=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-])NCCC	1
n2c1ccc(OC)cc1c(NCCCN(CC)CCCl)c3ccc(cc23)Cl	1
O=[N+](O)c3cccc2c3(oc1ccccc12)	1

O=[N+][O-]c2ccc(OC1OC1)cc2	1
O=C(O)c1cc(cc(c1)[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1
O=[N+][O-]c2ccc(C=Cc1ccc(cc1)N(C)C)cc2	1
O=[N+][O-]c1ccc2[nH]ccc2(c1)	1
Nc1cc(ccc1C)C	1
O=C(ONC(=O)C)NC	1
O=C(Nc1ccc(OC)cc1)c2cc([N+](=O)[O-])sc2	1
O=S(=O)(c1ccc(cc1)C)N3C4c5ccccc5(c2ccccc2C34)	1
N=C1N=C2OC3C(O)C(OC3(N2(C=C1)))CO	0
O=C(O)CCC(=O)OCC(NC(=O)C(Cl)Cl)C(O)c1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]	0
O=C(O)c1cc(ccc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1
O=[N+][O-]c1ccc(cc1)CNN=Nc2ccc(cc2)C	1
N(=NC)NC	1
O=C(N)Nc1ccc(OCC(O)CNC(C)(C)C)c(c1)C(=O)C	1
O=C(O)C1=CN(c2cc(c(F)cc2(C1=O)))N3CCN(C)CC3)CC	1
O=C(OCCOC(=O)C(=C)C)NCCC(C)CC(C)(C)CNC(=O)OCCOC(=O)C(=C)C	0
O=S(=O)(O)CCNC	0
Nc1c(cccc1CC)CC	1
N#Cc1ccccc1[N+](=O)[O-]	0
N#CC(=CC)C	0
[N-]=[N+]=Nc3ccc4nc1ccccc1c(Nc2ccc(cc2)NS(=O)(=O)C)c4(c3)	1
c1(c(c(c(c1Br)Br)Br)Br)Br)CC	0
O=C(O)c3cc(N=Nc1ccc(cc1)S(=O)(=O)Nc2ncccc2)ccc3(O)	0
O=C1c3ccccc3(C(=O)c2c(N)ccc(O)c12)	1
O1CC1CC	1
[O-][N+](=Nc1ccc(c(N)c1)C)c2ccc(c(N)c2)C	1
Oc1ccc2c(c1)c3ccc4ccc5ccccc6cc2c3c4c56	1
n1c3ccc(cc3(nc2cc(N)c(N)cc12))Cl	1
O=C(OCC(CC)CCCC)CCCCCCCC1OC1(CCCCCCCC)	0
C(CSCCCl)Cl	1
O=[N+][O-]c3ccc(N=Nc1c(N)ccc2ccccc12)cc3	1
n1cc(nc3c1c(c(c2c3(nc(N)n2C))C)C)C	1
O=C(OC)C3c1cc4C(=O)c5ccccc(O)c5(C(=O)c4(c(O)c1C(OC2OC(C)C(O)C(N(C)C)C2)CC3(O)(CC)))	1
O=C(OC4c1c3c(ccc1C)cc2c5ccccc5(ccc2c3C4))C	1
C(CBr)CBr	0
O=C1Oc2cc3OC(Cc3(cc2(C=C1C(C=C)(C)C)))C(OC(=O)C)(C)C	0
O=[N+][O-]c3ccc1ccc4c2c(ccc3(c12))cc5c4CCCC5	1
Oc5ccccc3c5(ccc2nc4ccc1ccccc1c4(cc23))	0
Oc5ccc4c1c5(OC2C(O)C=CC3C(N(C)CCC123)C4)	0
n1ccccc1N(Cc2ccc(Cl)s2)CCN(C)C	0
n1cc(nc3c1ccc2c3(nc(N)n2CC))C	1
O1c2ccccc2(OCCOCCOCCOCC1)	0
n1c3ccccc3(nc2c1cccc2(N))	1
n1cccc2ccc(cc12)C	1
O=S(=O)(O)OCc4c5ccccc5(c1ccc2ccccc3ccc4(c1c23))	1

Oc1cc(c(O)cc1Cl)Cl	0
O=C1C(=O)CCCC1	1
O=[N+](O)c4ccc1c(ccc2c3ccccc3(ccc12))c4	1
O=C3C=C(C=C(c1cccc1)N3(N=Cc2oc(cc2)[N+](=O)[O-]))c4cccc4	1
O=C(Nc1ccc(cc1)S(=O)(=O)N)C	0
O=C(CCCCCC)Cl	1
c1cc(ccc1Nc2ccc(cc2)CCCCCCCC)CCCCCCCC	0
O=NN(C)Cc1cccc(c1)C	1
O=C(C=Cc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-])c2cccc2	1
O=[N+](O)c1cc(N)cc(N)c1C	1
O=C(Nc1cccc1)C2(OC2)(C)	1
O=NN(CC(=O)O)CCO	1
N#CC(=C)C(=O)OCC	0
O=[N+](O)c2cccc1cccc12	1
O=C1C=C(N)c2cccc2(C1(=O))	1
O=C1N(C(=O)CN(C1)CCN2CC(=O)N(C(=O)C2)CN3CCOCC3)CN4CCOCC4	1
c1ccc2c(c1)cc3cc(c5cccc4ccc2c3c45)C	1
O=C1C=CC(=O)C(=C1)C	0
Oc1ccc2c(c1)CCC4C2CCC5(C)(C3(O)(CCC45(CC3(O))))	0
O=S4(=O)(OC(c1cc(c(O)c(c1)Br)Br)(c2cc(c(O)c(c2)Br)Br)c3cccc34)	0
OC3c4cccc4(c2ccc1cccc1c2C3(O))	0
O=C(C(Cl)Cl)Cl	1
O=C(O)c1cccc(c1)Cl	0
O=C(OC(C#C)(c1cccc1)c2cccc2)NC3CCCCC3	1
O=C1c3c(O)ccc(N)c3(C(=O)c2c(O)ccc(N)c12)	1
Oc1cc(c(c(c1Cl)Cl)Cl)Cl	0
N#CCBr	0
O=C(C=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-])NC(C)C	1
Nc1cccc1SCSc2cccc2(N)	1
O=C(NCO)CCl	0
O=C(NO)c1ccc(O)c(O)c1	1
O=[N+](O)c1cc(N)ccc1(NCCO)	1
O=C(O)CCCCCCCC=CCCCCCCC	0
C=C(CBr)Br	1
O=[N+](O)c1cc(ccc1(NCCO))N(CCO)CCO	1
O=NN(C(=O)NCC(=O)N)CCCl	1
O=[N+](O)c1ccc(O)cc1	0
c1ccc3c(c1)cc4cc2cccc2c5C=Cc3c45	1
O=[N+](O)c1ccc3c(c1)c2cccc2s3	1
O(c1cc(OC)c(C=CC)cc1(OC))C	1
OC2C=Cc1c3ccc5cccc4ccc(cc1C2)c3c45	1
O=C(N)NCC(=O)O	0
O=C(O)c1ccc(N=NN(C)C)cc1	0
O=C(O)C(Oc1ccc(cc1C)Cl)C	0
n1c2cccc2(nc(c1Cl)Cl)	0

N(C)(C)CCN(C)C	0
Oc1ccc(cc1(N))C	1
O=C(Nc1cccc(c1)CC)c2cc([N+](=O)[O-])sc2	1
Nc1cccc(c1)c2ccccc2	1
O=CO	0
O=[N+](O-)C=1Oc2cccc3cccc(C=1)c23	1
O=C3c2ccc(OCC1OC1)cc2SN3CC4OC4	1
Nc1ccc(cc1)c2ccccc2C	1
O=NN(CC(OC(=O)C)C)CC(OC(=O)C)C	1
O=C(OCCCCC)C=C	0
OC3c5ccccc5(c1c4OCOc4(cc2c1C3(N(C)CC2)))	1
O=C1C=C(C(=O)C(OC)=C1(OC))C	0
O=C(OC)c2cc(OC)c1OCOc1c2c3c4OCOc4(c(OC)cc3(C(=O)OC))	0
c1ccc(cc1)Nc2ccc3ccccc3(c2)	0
O=C(O)C(c1ccc(cc1)CC(C)C)C	0
O=C(OC)Nc1nc2cc(ccc2([nH]1))C(=O)c3ccc(F)cc3	0
O=C(O)c2ccccc2(Nc1cccc(c1)C(F)(F)F)	0
O=C1c2ccccc2(C(=O)N1SC(Cl)(Cl)Cl)	1
OOc23(C=CC1C4CCC(C(C)CCCC(C)C)C4(C)(CCC1C3(C)(CCC(O)C2)))	1
Nc1cccc(N)c1C	1
c1cc(ccc1C(c2ccc(cc2)Cl)=C(Cl)Cl)Cl	0
O=NN(C)Cc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]	1
NC(C)C	0
O=C(OCC(CC)CCCC)c1ccc(c(c1)[N+](=O)[O-])N(C)C	1
O=C(C)C(O)C	0
O=C(O)c1cc(c2C(=O)c3ccccc3(C(=O)c2(c1(N))))[N+](=O)[O-]	1
O=C1C2=C(CCC1)C(C)(C)C(C)C2(C)C	0
c1ccc3c(c1)c2ccccc2c4ccccc34	1
O=C(c1cc2c(cc1C)C(C)(C)C(C)C2(C)C)C	0
CCCCC	0
n2c1ccccc1c(NCCCN(CC)CCCl)c3cccc(OC)c23	1
c1ccc2c(c1)c5cccc4ccc3cccc2c3c45	1
O=S(=O)(O)c4ccc(C=2c3ccc(cc3(OC1=CC(C=CC1=2)=[N+](CC)CC))N(CC)CC)c(c4)S(=O)(=O)O	1
O=[N+](O-)c2c(N)ccc1c3ccccc3([nH]c12)	1
O=C(OC(C#C)(c1ccccc1)c2ccc(c(c2)C)C)NC3CCCCC3	1
C=CCSSCCC	0
C(CCl)CBr	1
O=[N+](O-)c1ccc(cc1)c2nc(N)c3ncn(c3(n2))C4OC(CO)C(O)C4(O)	1
Nc2cc1ccccc1c3ccccc23	1
O=[N+](O-)c3cccc2nc1ccccc1c(NCCCN(C)C)c23	1
O=C(Nc1ccc(OCC)c(N)c1)C	1
N(=Nc1ccccc1)c2ccccc2	1
c1ccc3c(c1)ccc4c2ccccc2c(cc34)Cl	1
O=C1c5ccccc5(C(=O)c2c(O)c4c(c(O)c12)CC(O)(CO)CC4(OC3OC(C)C(O)C(O)C3I))	1
O=C(OC)C12(OC2(CC)(C(O)(NC1(=O))C))	1

O=S4(=O)(c3cccc2ccc1c5cccc5(cc4(c1c23)))	1
O=[N+][O-]c2ccc3c1cccc1CCc3(c2)	1
O=S(=O)(N)c1ccc(N)cc1	0
O=S(=O)(O)c1cc(cc(N)c1(O))Cl	0
c1ccc(cc1)Cl	0
OCC2=CC3c4cccc1c4(c(c1CC=C)CC3(N(C)C2))	1
O=C(OC)c1cccc1	0
OCC(O)COC=CC=CC=CC=CCCC	1
c1ccc2c(c1)ccc3c2c(cc4c3CCC4)C	0
N(CC)CC	0
O=C(OOC(C)(C)C)c1cccc1	1
O=C(Nc2cccc3C(=O)c1c(cccc1Cl)C(=O)c23)c4cccc4	1
O=C(C=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-])N(C)C	1
O=C(Nc1ccc(cc1)S(=O)(=O)c2ccc(cc2)NC(=O)C)C	0
N(=Nc1ccc2cccc2(c1))c3ccc(cc3)N(C)C	1
O=C(OC)CCl	0
O=C(C(=C)C)C	0
O(c1ccc(cc1)Nc2cccc2)C(C)C	0
c1ccc(cc1)NNc2cccc2	1
Oc2ccc3cc4c5cccc5(c1cccc1c4(cc3(c2)))	1
O=C1C=C(C(=O)C=C1C)C	0
O1CC1Cc2ccc(cc2)Cc3cccc3	1
O=C3c1cccc1CN4C(=O)c2cccc2CN34	0
Nc1cccc1(N)	1
O=C(OCCCCCCCC)C(=C)C	0
ONc1cc(ccc1C)C	1
O=C(OC(C)C)CCl	0
O=C1OC(=CCC)c2cccc12	1
Oc2ccc3cccc3(c2(N=Nc1cccc1))	1
Nc2ccc3ccc1cccc1c3(c2)	1
N#CC(O)(C)C	0
O=C(O)COc1ccc(cc1C)Cl	0
OC(COc2cccc1c2(OCC(O)C1))CNC(C)C	0
Nc2ccc3cc1cccc1[n+](c3(c2))C	1
O=[N+][O-]c1ccc(cc1)CNC=3NC=NC2=NC=NC2=3	0
c1ccc6c(c1)cc4c3c6(cc2cccc2c3C5=C4CCCC5)	1
O=C(OC(=O)C)C	0
Oc2ccc3cccc3(c2(N=Nc1cccc1(OC)))	1
O=C1NC=C(C=C1(N))c2ccncc2	0
O=[N+][O-]c1cc(ccc1C)C	1
C1C(CC(CC(CC(CC1Br)Br)Br)Br)Br)Br	0
Oc1c(cc(cc1C(C)(C)C)C(C)(C)C	0
c1ccc(c(c1)CBr)CBr	0
O=P(F)(OC(C)C)C	0
O=C1C(=O)c4cccc3ccc2cccc1c2c34	0

O=[N+](O)c1ccc3c(c1)c2c(cccc2[N+](=O)[O-])cc3[N+](=O)[O-]	1
O=C2C=C1CCC(O)C(C)C1(C)C4OC24(C3OC3(CO))	1
O=[N+](O)N(C)C	1
CC(C)C(C)(C)C(C)(C)C(C)(C)S	0
O=C(Oc1ccc(cc1COC(=O)C)C(=O)C)C	1
o1ccc2c1cc3ccc4cccc5ccc2c3c45	1
O=C(OCC=C)c1cccc1(C(=O)OCC=C)	0
O=NN(CCO)CCO	1
O=C(N(Nc2ccc3c1cccc1Cc3(c2))c5ccc6c4cccc4Cc6(c5))C	1
O=C1C=C(Oc2cc(O)cc(O)c12)c3ccc(O)c(O)c3	0
O=C4c5c(O)cccc5(Oc2c4(c(O)cc1OC3OC=CC3(c12)))	1
O=[N+](O)c4ccc3c1cccc1c2ccc4(c23)	1
O=[N+](O)c1cccc(c1)[N+](=O)[O-]	1
O=[N+](O)c2oc(C=NN1CCS(=O)(=O)CC1C)cc2	1
O=C1c3cc(OC)cc(O)c3(C(=O)c2c(O)cc(c(O)c12)C)	1
O2CCC1(OC1)CC2	1
OC5c4ccc1ccc2cccc3cc(c4(c1c23))C5	1
O=P(N(C)C)(N(C)C)N(C)C	0
O=C(Nc1cnc2cccc2(c1))C	0
OC(c1cccc1)C	0
c1ccc3c(c1)cc2cccc2c3CBr	1
n2c1cccc1c(c4c2c3cccc3c(c4C)C)Cl	1
N#Cc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]	0
O=C(Nc1ccc(cc1)c2ccc(cc2)NC(=O)C)C	1
O=C(O)CC(C(=O)O)C	0
O(CCCCCCCCCC)CC1OC1	0
O=P(O)(O)Oc1c(cc(cc1Br)Br)c2cc(cc(c2(O))Br)Br	0
c1ccc3c(c1)c2c(ccc(c2n3C)C)C	1
n1ccnc2c1ccc(NC)c2C	1
O=[N+](O)c5ccc2ccc3c1cccc1[n+](O)c4ccc5(c2c34)	1
O=[N+](O)c1cc(O)c(N)cc1Cl	1
NNc1cccc1	1
O=C(c1cccc1(O))c2ccc(OC)cc2(O)	1
Oc1cccc(c1)N(CC)CC	1
n2c1cccc1c(N)c3c2cccc3(N)	1
OCc1occc1	0
O=S5(=O)(CCS(=O)(=O)C35(CC1C4CCC(C(C)CCCC(C)C)C4(C)(CCC1C2(C)(CCC(CC23)Br))))	1
O1CC1C	1
O=[N+](O)c3cnc1c(nc2c(cccn12)C)c3C	1
O=CC=CCCC=CCC	0
c1ccc(cc1)C2=CCN(C)CC2	0
c2cc3ccc4cc1cc(ccc1c5ccc(c2)c3c45)C	1
Oc1ccc(cc1)Nc3c4cccc4(nc2cccc23)	1
N#CCCl	0
c1ccc3c(c1)ccc2c3(cc(cc2C)C)	1

O=[N+][O-]c2cc3cccc4c1cccc1c(c2)c34	1
O=[N+][O-]c1ccc(cc1)C2(OC2)(C)	1
O=C(O)C(F)(F)C(F)(C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)Cl)Cl)Cl)Cl	0
O(C)CCCN	0
n1cccc3c1ccc2c3(nc(NC)n2C)	1
Nc1ccc(c(N)c1)Cl	1
c1ccc3c(c1)Nc2ccccc2S3	0
O=C(NCCN(C)C)c2cccc1ccc(nc12)c3ccccc3	1
ONc2cccc1cccc12	1
OC(C)COC=CC=CC=CC=CCC	1
N#CN(C)C	0
O=C(OCC(CC)CCCC)c1ccc(cc1)C(=O)OCC(CC)CCCC	0
O=[N+][O-]c1cc(cc(c1)[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1
O=C1OC(=O)CC1	0
Oc1nc2ccc3cccc4ccc(c1)c2c34	1
OC4c2ccc1c5cccc(c5(cc(c1c2C3OC3C4(O))C))C	1
O=C(O)C3N2C(=O)C(NC(=O)C(N)c1cccc1)C2SC3(C)(C)	0
N(=Cc1ccc(OC)cc1)c2ccc(cc2)CCCC	1
O=[N+][O-]C(C)(C)C	0
OC3C(=C)C(=CC=C1CCCC2(C)(C1CCC2(C(C)CCC(O)C(C)C)))CC(O)C3	0
c1ccc(cc1)C2=CC=[N+](C)CC2	1
Oc1ncc(c(O)n1)N(CCCl)CCCl	1
O=C(O)Cc1cccc1Cl	0
Oc1ccc2cc(ccc2(c1))SSc3ccc4cc(O)ccc4(c3)	0
O=[N+][O-]c1cccc1SSC(=C(C(=C(Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl	1
O=Cc1ccc(cc1)C(=O)OC	0
O=C(C=Cc1ccc2OCOc2(c1))C	0
OCCBr	1
O=C(Nc1cccc(OC)c1)c2cc([N+](=O)[O-])sc2	1
O=[N+][O-]c1ccc(NN)c(c1)[N+](=O)[O-]	1
O=CC=C(Cl)Cl	1
OCC5OC(n2cnc1c(ncnc12)NCC(O)COc3cccc4cccc34)C(O)C5(O)	0
Oc2cccc3cc1cc(cc(O)c1c(O)c23)C	1
c1ccc3c(c1)c2cccc2n3C	1
O=C(OCC(COC(=O)C(=C)C)(COC(=O)C(=C)C)CC)C(=C)C	1
O=NN(CC(=O)C)CC(=O)C	1
n2cc1cccc1c3cccc23	1
O=C2Nc1ccc(cc1CC2)N4CCN(C(=O)c3ccc(OC)c(OC)c3)CC4	0
O(C)C1OC1(C)(C)	1
CC(CCl)Cl	1
O=[N+][O-]C(Cl)(Cl)Cl	1
O=C(NCCNC(=O)CC	0
N=C(N)c2ccc(OCCCCCOc1ccc(cc1)C(=N)N)cc2	0
O=[N+][O-]c1cccc1CO	0
O=C(Nc1cc3c(cc1(O))c2cccc2C3)C	0

OCc2c3ccccc3(cc1ccccc12)	1
O=C(N)N(c1ccc(OCC(O)CNC(C)(C)C)c(c1)C(=O)C)C(C)(C)C	0
O=C(Nc1ccccc1)CBr	0
O1C2CCC=CCCC=CCCC12	0
CC(C)Br	1
O=C(Nc1cccc(O)c1)C	0
C=CCNCC=C	0
c2cc1c3c(cn1CCCC)CC4N(C)CC(=CC4(c3(c2)))C	1
n1cc(nc3c1c2nc(N)n(c2c(c3C)C)C)C	1
O=C(OC)C12(OC2(CC)(C(OC1(=O))C))	1
Oc1c(cc(cc1C(C)(C)C)Cc2cc(c(O)c(c2)C(C)(C)C)C(C)(C)C)C(C)(C)C	0
c1ccc(cc1)N2CCNCC2	0
Fc1nc(F)ccc1	0
O=CC=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-]	1
n1c3ccccc3(nc2cc(N)ccc12)	1
O=[N+](O-)[c1cccc(c1C)[N+](=O)[O-]	1
O=C(OC)C(C=C(C=C(C=CC=C(C(=O)C12(OC2(C(O)(NC1(=O))CCO)))C)C)C)=CC	1
O=C1c3ccccc3(C(=O)c2c(O)c(O)c(O)cc12)	1
O4C5c3cccc2ccc1c6cccc6(cc(c1c23)C45)	1
O=[N+](O-)[c2cccc1cc(c(cc12)[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1
O=C2c1c(O)cc(OC)cc1Cc3cc(cc(O)c23)C	1
O=[N+](O-)[c1ccc2C=CCc2(c1)	1
c1ccc2c(c1)ccc3c4cccc4(cc(c23)C)	1
C(Cl)(Cl)(Cl)Br	1
O=Nc1ccc2ccc4c(ccc3ccc1c2c34)[N+](=O)[O-]	1
O=C(NCc1ccccc1)C2OC2	1
O=C(c1ccc(cc1)N(C)C)c2ccc(cc2)N(C)C	1
c1cc(c(cc1Cl)Cl)Cl	0
N1CCNCC1	0
Oc4cc1NCC(c1c3c4(ccc2ccccc23))C	1
n2cc(nc3cc(c1c(nc(N)n1C)c23)C)C	1
Nc1ccc(cc1)Br	0
O=Cc1ccc(O)c(OCC)c1	0
O=C1C=C(N(N1c2ccccc2)C)C	0
O=C(C=C(OP(=O)(OC)OC)C)NC	1
O(c2cccc(C=Cc1ccc(N)cc1)c2)C	1
O=[N+](O-)[c1cc(N)cc(c1)[N+](=O)[O-]	1
O=Cc1cc(OC)c(OC)cc1(OC)	0
O1CC1CCC=C	1
c1ccc4c(c1)ccc3cc2ccccc2c(c34)CBr	1
o2c1ccccc1c3ccc(cc23)Cl	1
n1ccn(c1)Cc2ccccc2	1
Oc1ccc(C=C)cc1(OC)	0
C(C(CBr)Br)Br	1
O=C3c1cc(ccc1c2c3(cc(cc2[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]))[N+](=O)[O-]	1

O=C(OC(OC(=O)C)c1oc(cc1)[N+](=O)[O-])C	1
O=C(OCC=2NC(=C(C(=O)OC)C(c1cccc(c1Cl)Cl)C=2(C(=O)OC(C)C))C)N	0
O=C(Nc1cccc1)c2cc([N+](=O)[O-])sc2	1
Oc2cccc3ccc1c4cccc4(ccc1c23)	1
OCC(CO)(CO)CO	0
n1cc(nc3c1cc2nc(N)n(c2c3C)C)C	1
O=Cc1ccc(O)c(OC)c1	0
O=C(OCC(O)CO)C	1
O=P(OC(=CCl)c1cc(c(cc1Cl)Cl)Cl)(OC)OC	0
O=CC(=Cc1cccc1)C	0
c2cc1c3ccc(cc3(ccc1c(c2)C))C(C)C	0
OOC2C=C1CC(O)CCC1(C)C3CCC4(C)(C(CCC4(C23))C(C)CCCC(C)C)	1
O=C(c1c(O)cc(O)cc1(O))CCc2ccc(O)cc2	0
CC(Cl)Cl	0
O=C1c3cccc3(Nc2cccc12)	0
OC4c2nc5ccc1cccc1c5(cc2c3cccc3C4(O))	0
O=[N+](([O-])c1ccc(c(c1)[N+](=O)[O-])SC	1
n3c1cccc1c(Nc2ccc(N)cc2)c4cccc34	1
O=C1OC2CC[N+](=O)[O-](CC=C(COC(=O)C(O)(CO)C(C)CC1(=CC))C23)	0
O=NN(C(=O)C(NC(=O)C)C(C)C)CC(=O)O	1
c1ccc2c(c1)ccc4c2c(c3cccc3c4CC)CC	0
O(C)P(OC)(OCCSCC)=S	0
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(1
O=C(ON)NC	1
O=C(N=NC(=O)N)N	1
O1CCOCCOCCOCC1	0
c1ccc2cc3c5cccc4cccc(c3(cc2(c1)))c45	1
n2c1ccc(nc1c(NCCCNCCCl)c3ccc(cc23)Cl)OC	1
O=C(NCC(O)CO)c1c(c(C(=O)NCC(O)CO)c(c(c1)N(C(=O)C)CC(O)CN(C(=O)C)c2c(c(C(=O)NCC(O)CO),	0
O=C1NCCCCC1	0
O=[N+](([O-])c1cc(c(c(c1Cl)Cl)Cl)Cl)Cl	0
c1ccc3c(c1)c2ccc(cc2C3C)C	1
n2c1c4cccc4(ccc1c(c3cccc(c23)C)C)	1
O=P(Oc1noc(c1)c2cccc2)(OCC)OCC	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)CCCCC(O)CC(O	0
Oc1ccc(cc1(N))Cl	1
Oc3ccc4ccc2ccc1[nH]c(nc1c2c4(c3))CC	1
c1ccc3c(c1)c2cccc2C3C	1
O=C(Nc1cccc1CC)c2cc([N+](=O)[O-])sc2	1
O=[N+](([O-])c1cc(c(cc1C)C)[N+](=O)[O-])	1
O=[N+](([O-])c1cc(N)ccc1C	1
O=C(OCCCCC)C=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-]	1
NN(C(C)C)C(C)C	1
O=C(O)C	0
O=[N+](([O-])C=1Oc2cccc3c(OC)ccc(C=1)c23	1

N#CCc1ccccc1	0
O=C(O)CNC(=O)C(NC(=O)CCC(N)C(=O)O)CSC(=C(Cl)Cl)Cl	1
c1ccc2cc3cc4ccccc4(cc3(cc2(c1)))	1
Oc1c(c(c(c1Br)Br)Br)Br	0
O=C2Oc1cc(ccc1C(=C2)C)N(CC)CC	0
NCCCNCCCN	0
O=C(NCCC)NS(=O)(=O)c1ccc(cc1)Cl	0
O=C(O)C(NC(=O)COc1ccc(cc1Cl)Cl)C	0
O=C(OC3CC2=CCC1C4CCC(=O)NC4(C)(CCC1C2(C)CC3))C=Cc5cccc(c5)N(CCCl)CCCl	1
O=C(O)CS	0
O=C(Nc1ccccc1)C(C)Br	1
n1cccc2nc3nc(N)n(c3(cc12))C	0
O=S(=O)(O)c2cccc1cccn12	0
O=[N+][([O-])c3ccc(OC)c2nc1ccccc1c(NCCCN(C)C)c23	1
O=NN(C(=O)N(C)C)CC	1
O=NC([N+](=O)[O-])(C)C	1
O=C1C(O)=C(OCC1(O))C	1
O=P3(Oc1ccccc1)(Oc2ccccc2CO3)	1
O=C(OC)C=1C(=O)OC(C=1CC)C	1
n1cc2c(nc1C)CCC2	0
O=C(OC)C1=CCCN(C)C1	1
O=[N+][([O-])OCCN([N+](=O)[O-])C	1
c1ccc5c(c1)cc3ccc2cccc4c2c3c5(cc4CCl)	1
Nc2ccc(c1ccc(N)cc1Cl)c(c2)Cl	1
O=C1C=CN=C(N1)N(C)C5CCN(c3nc2ccccc2n3Cc4ccc(F)cc4)CC5	0
O=C2c3c(O)cc(O)cc3(OC(c1ccc(O)cc1)C2)	0
O=NN1CCSC1	1
n2cccc3ccc1c(nc(N)n1C)c23	1
O=C(c1ccccc1)C(=O)C	0
O=C(O)C(Cl)Br	1
O=C(OCc1ccccc1)CN3C(=O)Sc2ccccc23	0
C=1(C(=C(C(C=1Cl)(Cl)Cl)Cl)Cl)Cl	0
N(=Nc1cc(c(N)cc1(N))C)c2ccccc2C	1
Nc1ccc3c(c1)c2ccccc2C3	1
n2c4cc(ccc4(cc3ccc1ccccc1c23))C	1
O=NN1CC(=CCC1)C(=O)OC	1
O=[N+][([O-])c1cccc(O)c1	1
O=S(CC)CCSP(=O)(OC)OC	1
O=CCCCCCC	0
O4C5=C3C=CC=C2c1cc6ccccc6(cc1CC(=C23)C45)	1
o2c1ccccc1c3ccccc23	0
c2c(cc(c(c1c(cc(cc1Br)Br)Br)c2Br)Br)Br	0
c1ccc4c(c1)ccc3c4(cc2ccccc2c3CC)	1
O=Cc1oc(cc1)C	0
O1C2CCCCCCCC12	0

O=C(N(c2ccc(N=Nc1ccc(cc1)NC)cc2)C)C	1
n1ccc(c2ccccc12)C	1
O=[N+](O)c1ccc(N)c(c1)Cl	1
O=C1NC(=O)c2cc(ccc12)[N+](=O)[O-]	1
O=CC(Cl)(Cl)Cl	1
O=C(O)COc1ccc(cc1Cl)Cl	0
O=CNc1ccccc1	0
O(C)P(OC)(=S)SCCSCC	0
O(OC(C)(C)CCC(OOC(C)(C)C)(C)C)C(C)(C)C	0
O=C(OCC(OC)C=1C(=O)C(=C(C(=O)C=1N2CC2)C)N3CC3)N	1
O=[N+](O)c1cc(ccc1C)Cl	0
O=[N+](O)c1cc(N)c(cc1(N))C	1
O=C(OCC)C2OC2(c1ccccc1)(C)	0
O=C(OC)CCC(=O)OC	0
O(c1ccc(N)cc1)CC	1
O=C(O)C4=C(CSC(=O)c1occc1)CSC3N4(C(=O)C3(NC(=O)C(=NOC)c2nc(N)sc2))	0
Oc5ccc4c(ccc3[nH]c2ccc1ccccc1c2c34)c5	1
C13(C4(C2(C5(C(C1(C2(Cl)Cl)Cl)(C3(C(C45Cl)(Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl	0
O(CCCCOCC1OC1)CC2OC2	1
n1cc(nc2c1ccc(NC)c2C)C	1
O=C1c3ccccc(O)c3(C(=O)c2c(O)cc(cc12)C)	1
O=C(OCCN1CCCCC1)Nc2ccccc2(OCCCCCCC)	0
O=C1C=C(C(=O)C=C1C)C(C)C	0
o1ccc2ccccc12	0
[O-][n+]2ccc(NO)c1ccccc12	1
O=C(c1ccccc1)C	0
O=C(O)C(N)CCSCCCC	0
OCCNCCN	1
N#CC(=NOC(=O)OC(C)(C)C)c1ccccc1	0
n3ccc4ccc2cc5ccc1ccccc1c5(cc2c4(c3))	1
O=C(N(c2ccc3c1ccccc1Cc3(c2))Cl)C	1
O=[N+](O)c1cc2ccc3cccc4ccc(c1)c2c34	1
n1cc(nc2ccc(NC)c(c12)C)C	1
O=[N+](O)c2ccc3ccc4nc1ccccc1c5ccc2c3c45	1
O=C(O)c1nc2c(O)cccc2(c(O)c1)	0
ON=CC=NO	0
ON=C1CCCCC1	1
O=C2NCCCN2(N=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-])	1
O=S(=O)(O)c6cc(N=Nc1ccc(cc1(OC))c4ccc(N=Nc2cc(c3ccccc3(c2O)))S(=O)(=O)O)c(OC)c4)c(O)c5c	0
OCC(O)COC=CC=CC=CC=CC=CC=CCC	1
O=S(=O)(O)c1ccc(N)cc1	0
C=C(CCl)Br	1
O=NN(C(=O)NCc1cnc(nc1(N))C)CCCl	1
O=NN(C(=O)NCCS(=O)(=O)N(C)C)CCCl	1
O=C(OC2OC(COC1OC(CO)C(O)C(O)C1(O))C(O)C(O)C2(O))C(=CC=CC(=CC=CC=C(C=CC=C(C(=O)OC	0

O=[N+][O-]c1cnc(n1CCS(=O)(=O)CC)C	1
O=C(N)C2(OC2(C(=O)c1cccc1))(C(=O)N)	1
O=C2Oc1cc(N)ccc1C(=C2)C	0
O=C(Nc2ccc3c1cccc1Cc3(c2(O)))C	0
Fc1ncccc1	1
O=C1Oc4cccc(O)c4(C=C1C3Cc2cccc2CC3)	0
c2cc3ccc4cc1c(cccc1C)c5ccc(c2)c3c45	1
n2c1occc1c(OC)c3cc(OC)ccc23	1
OC(C)CN(CCN(CC(O)C)CC(O)C)CC(O)C	0
N(=NCC)NCC	1
O=C1c3cccc(O)c3(C(=O)c2cccc(O)c12)	1
O=C(N(O)c1ccc(OCC)cc1)C	1
O=[N+][O-]CCO	1
O=C1N(C(=O)CC1)Br	1
O=C(Oc1ccc(cc1)CO)C	0
O=Nn1cnc(c1)CC(=O)NO	1
[N-]=[N+]=NCC(O)CO	1
O=C(c1ccc(cc1)C)Cl	1
O(c1ccc(N)cc1)c2ccc(N)cc2	1
O=C(Nc1c(cccc1CC)CC)CCl	1
O(c1cccc1(N))C	1
n1ccsc1	1
N(=Nc1cccc(c1)C)c2ccc(cc2)N(C)C	1
Nc1ccc(cc1Br)c2ccc(N)c(c2)Br	1
O(C)CCOCCOC	0
O=C(C(=O)CC)C	0
n2c(OC)c1cccc(N)c1s2	1
O=C(c1ccccc1(F))c2c(nn(c2(N))C)C	1
ONc1cc(cc(c1)C)C	1
[O-][N+](=Nc1ccc(OC)cc1)c2ccc(OC)cc2	1
O=[N+][O-]c2cccc1c2(cccc1[N+](=O)[O-])	1
O(Cc1ccccc1)CC2OC2	1
O=C1C=C(C(=O)C(=C1)C(C)(C)C)C2=CC(=O)C=C(C2(=O))C(C)(C)C	1
O=C(N)C1CC(N(O)C1(C)(C))(C)C	0
OC(c1ccccc1)COC=CC=CC=CC=CCC	1
O=C(O)CCCOc1ccc(cc1C)Cl	0
O=C(N(O)c1ccccc1C)C	1
O=C(Nc1ccccc1(OC))c2cc([N+](=O)[O-])sc2	1
O=C1OC(=O)C=C1	0
O=S(=O)(OCC1OC1)c2ccc(cc2)C	1
NCC(CC)CCCC	0
O=[N+][O-]c1ccc(OC)c(c1)[N+](=O)[O-]	1
O=C(O)c1cc2C(=O)c3cc(ccc3(Oc2(nc1(N))))C(C)C	0
O=C(OCc1oc(cc1)CC#C)C2C(C=C(C)C)C2(C)(C)	1
O=C1OC(O)C(=C1Cl)C(Cl)Cl	1

n2c1cccc1c(NCCCNCCCl)c3cccc23	1
Oc1ccc2OCOc2(c1)	0
c3cc2ccc1cccc4c1c2c(c3)C4	1
O=CC1OC1	1
OCC(C)C(C)CC	0
Nc1ccc(cc1Cl)Cc2ccc(N)c(c2)Cl	1
O=C1NC(=O)C(O)(O)C(=O)N1	0
O(c1ccc(cc1)C(C)(C)C)CC2OC2	1
O=[N+][O-]c2oc3ccc1cc(OC)ccc1c3(c2)	1
C=C(CCl)Cl	1
O=C(OC(C)C)C(=C)C	0
O=C1c5cccc5(C(=O)c2c(O)c4c(c(O)c12)CC(O)(C(=O)C)CC4(OC3OC(C)C(O)C(N)C3))	1
O=S(=O)(O)OCc4cc1cccc1c3ccc2cccc2c34	1
O=[N+][O-]c3cc(ccc3(N=Nc1c(O)ccc2cccc12))C	1
CCCCCCCCCCC	0
O=C(O)c1cccc1(OC(=O)C)	0
O=[N+][O-]c1cc3c(cc1(N))[nH]c2cccc23	1
O=C(O)COc1ccc(cc1)N(CCCl)CCCl	1
[N-]=[N+]=NCC(O)Cn2cnc1c(ncnc12)N	1
n1c(N)n(c3c1c2nc(c(nc2c(c3C)C)C)C)C	1
n3c1cccc1c(c4ccc2cccc2c34)C	1
N#CCc1cccc1[N+](=O)[O-]	1
O=C(N)c1cnccc1	0
O=C(OC)C12(OC2(C)(C(OC1(=O))C(C)C))	1
O1CC12(CCC3CC2C3(C)(C))	0
c1ccc(cc1)Br	0
O=C(O)CCCCCCCCCCCC	0
O(C1=CC=CC=C1)C	1
n1c(N)ccc3c1[nH]c2cccc23	1
O=C(NCc1cccc1)CBr	1
O=C(OC)c1oc(cc1)[N+](=O)[O-]	1
N#CC(N)=C(C#N)N	0
n1c2cccc2(ccc1Cl)	0
c1ccc5c(c1)ccc3c5(cc2ccc(c4c2c3CC4)C)	1
O=C(OC)C(=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-])C	1
N(=Nc1ccc(N)cc1)c2cccc2	1
n1c2ccc(NC)c(c2(nc(c1C)C))C	1
O=C(c1c(cccc1Cl)Cl)Cl	1
O=C(Nc1cccc1)C2OC2	1
O=C5C=C4C(=C3C(c1ccc(cc1)N(C)C)CC2(C)(C(CCC2(O)(C=CCO))C3CC4))CC5	0
Oc1cc(c(cc1C(C)(C)C)C(c2cc(c(O)cc2C)C(C)(C)C)CCC)C	0
OCCN(C)C	0
O=C(NCc1cccc1)Cn2ccnc2[N+](=O)[O-]	1
c1ccc2c(c1)ccc4c2c3cccc3C5NC45	1
Oc1ccc(cc1Cl)Cl	0

O=C(O)c2cccc1cccnc12	0
n1cccc1	0
O2C3c4csc4(c1csc1C23)	1
ON=Cc1ncccc1	0
O=C(OC1C(O)C(OC(CO)C1(O))OC7C(OC(c2nc[nH]c2)C(NC(=O)c3nc(nc(N)c3C)C(NCC(N)C(=O)N)CC	1
OCOCc1cc(c(cc1Cl)Cl)Cl	0
CBr	1
OCCO	0
O=C3c2cc(c1c4C=CC(O)C(O)c4(ccc1c2CC3))C(F)(F)F	1
Oc2ccc3ccc1ccc(cc1c3(c2))NC	1
O=CC23(C(=CC1CC(C)(C)CC1C3(C)(C2))CO)	1
O=C1OCC(=C1)CCl	1
O(CC)P(OCC)(OP(OCC)(OCC)=S)=S	1
c1ccc4c(c1)ccc3cc2ccccc2c(c34)C	1
O=Nn2cc(c1cccc12)CC(O)C(=O)O	1
O=[N+][([O-])c1cnc(n1CCO)C	1
O1C2C1C3C4C2C5C3C6(C4(C(C5(C6(Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl	1
O=[N+][([O-])c1cccc(c1)Br	1
O=C1c3cc(ccc3(c2ccc(cc12)[N+](=O)[O-]))[N+](=O)[O-]	1
O=C1c3nccc4cc(OC)c(OC)c(c2cccc12)c34	1
O=NN(CCCC)CCCCO	1
O=S(=O)(OC)OC	1
c1c[n+](ccc1c2cc[n+](cc2)C)C	0
O=C4Oc2c(c(OC)cc1OC3OCCC3(c12))C5=C4C(=O)OCC5	0
O=C(OCCCCCCCC(C)C)c1cccc1(C(=O)OCCCCCCCC(C)C)	0
OCC(O)C1OC1	1
c1cc2ccc3ccc(c4ccc(c1)c2c34)Cl	1
Oc1ccc2[nH]ccc2(c1)	0
O1CC1CCc3cccc2cccc23	1
O=[N+][([O-])c1cc2Oc3cc(c(cc3(Oc2(cc1Cl))))Cl)Cl	1
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)CCCCCCC(O)CC(O)C(0
Oc1cc(cc(c1)Cl)Cl	0
Nc1ccc(c(c1)Cl)C	0
O=C(OCCCCCCCCC)C(=C)C	0
O=C(OCCN1CCN(CC1)CCCN4c2ccccc2Sc3ccc(cc34)C(F)(F)F)CCCCCCCC	0
O=[N+][([O-])c2cc(Oc1ccc(cc1Cl)Cl)cc(OC)c2	0
O=C(Nc1ccc(cc1)Cl)Nc2ccc(c(c2)Cl)Cl	0
Oc4ccc1c(ccc2c3cccc3(ccc12))c4	1
c1ccc2cc3cc(ccc3(cc2(c1)))C	1
O=C(N(c1c(cccc1CC)CC)COC)CCl	1
c1ccc5c(c1)ccc4[nH]c3ccc2ccccc2c3c45	1
O=C(C=C)C	1
O=[N+][([O-])c2ccc(c1ccc(cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-])c(c2)[N+](=O)[O-]	1
C=CC1CC=CCC1	0
Oc1ccc2[nH]cc(c2(c1))CCN	0

O1c2cc5c4c(c2(OC1))c3ccccc3CC4N(C)CC5	1
Oc1ccc(cc1)C3(c2ccc(O)cc2)(CCCCC3)	0
O=C(O)C=C(OC)C(=O)C(=C)C	0
O=C(C)C(Cl)Cl	1
O=[N+][([O-])c2ccc3c1c(cccc12)c5ccc4ccc(c3c45)[N+](=O)[O-]	1
O=C1c5ccccc5(C(=O)c2c(O)c4c(c(O)c12)CC(O)(C(=O)CO)CC4(OC3OC(C)C(O)C(N)C3))	1
O=C(OCCOCCOC(=O)C=C)C=C	0
c1cc2ccc3ccc4ccc5ccccc6c(c1)c2c3c4c56	1
O=C2Oc1ccc(cc1c3ccccc23)[N+](=O)[O-]	1
O=CN(C)C	0
O=C1c5c(O)ccc(OC)c5(Oc3c1c(OC)cc2OC4OCCCC4(c23))	0
O=C(Nc2ccc(Oc1ccccc1)cc2)C	1
O=C3C(C)CC4(OC1OC(CO)C(O)C1(O))(C=C(C)C2(CC2)C(O)(C)C34)	1
O(c1ccccc1c2ccccc2)CC3OC3	1
O=C(OC)C(NC(=O)C)CSCCBr	1
c1ccc4c(c1)c3cc2ccc(c6c2c(c3C5NC45)CC6)C	1
O=S(=O)(OC(C)C)C	1
O=C(OCCCCCCC(C)C)c1ccccc1(C(=O)OCCCCCCC(C)C)	0
O1CCOCCOCCOCCOCCOCC1	0
c1cc(ccc1N(C)C)C	1
O=C(Oc1ccc(cc1)c2ccccc2)NC	1
c1ccc6c(c1)cc3c2ccccc2c4c3c6(cc5c4CCCC5)	1
Nc3ccccc2c3(ccc1ccccc12)	1
OC(c1ncccc1)(c2ccccc2)CCCN3C(C)CCCC3C	0
O=[N+][([O-])c2ccc(Oc1ccccc1)cc2	1
O=[N+][([O-])c1ccc2[nH]c3c(ccc(c3(c2(c1))))C)C	1
c1cc(ccc1NCCCl)C	1
O=Nc1ccc2ccccc2(c1)	1
n2ccc3ccc1c(nc(N)n1C)c3(c2)	1
c3ccc4cc2c(ccc1ccccc12)cc4(c3)	1
O=C(NC)N(c1ccccc1)c2ccccc2	0
O=P1(OCCCN1)N(CCCl)CCCl	1
O=C(O)CCCCC	0
OCC9OC(OC8C(O)C(OC(OC6CC5=CCC4C(CCC3(C)(C4(CC2N1CC(C)CCC1C(C)C23)))C5(C)CC6)C8(OC	0
O(CC(CC)CCCC)P(OCC(CC)CCCC)OCC(CC)CCCC	0
O=[N+][([O-])c2ccc3c1ccccc1C(O)c3(c2)	1
n3cc2cc(OCC1OC1)ccc2s3	1
Oc1nc2ccccc2(cc1)	0
O=Nc2c(nc1n2(ccs1))c3ccc(cc3)[N+](=O)[O-]	1
c1cc2ccc3ccccc4ccc(c1)c2c34	1
O=C(ON(c2ccc3c1ccccc1Cc3(c2))C(=O)C)C	1
OCc1ccc(cc1)Br	0
n1ccccc1C	0
O=C1c3cc(OC)ccc3(Oc2cc(OC)cc(O)c12)	1
O=C1C=CC(=O)c2c(O)ccccc12	1

O=C1C=C(OC2cc(O)c(OC)c(O)c12)c3ccc(O)cc3	0
O=C1c3ccccc3(C(=O)c2c(O)c(cc(O)c12)C)	1
O=C(N(C)C)Cl	1
N(=Nc1ccc(N)c(OC)c1)c2ccccc2	1
OC(COc1ccccc1(OCC=C))CNC(C)C	0
O=C(OCCCCCOC(=O)C=C)C=C	0
O=CC2=CC=C1C2(=COC=C1COC(=O)CC(C)C)	1
O=C(OCc3c4ccccc4(cc2ccc1ccccc1c23))C	1
O=C(C(=NO)C)C	0
O=[N+][O-]c1ccc(N)c(OC)c1	1
O=C(O)CC3(OCCc2c1ccccc1n(c23)C)CC	0
O=C(NC)CSP(OC)(OC)=S	1
OC3c2nc1occc1c(OC)c2c(c4OCOc34)CC=C(C)C	0
ONc1ccccc1C	1
O=C2N6c1cc(OC)c(OC)cc1C57(CCN4CC3=CCOC(C2)C(C3CC45)C67)	0
OC4ccc5ccc3[nH]c2ccc1ccccc1c2c3c5(c4)	1
N#CC=CCC	0
O=C(C=C)NCNC(=O)C=C	1
c1ccc(cc1)C(Cl)Cl	1
O=[N+][O-]c2ccc(C=Cc1cccc(c1)Cl)cc2	1
O=[N+][O-]c2ccc(c1ccc(c(c1)[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-])c(c2)[N+](=O)[O-]	1
O=NN(CCCC)CCCC	1
O=[N+][O-]c1ccc(OCC)cc1	1
Nc1ccc(N)c(c1C)C	0
O=C(c1ccc(O)c(c1)CO)CN(Cc2ccccc2)C(C)(C)C	1
O=C2Oc1cc(ccc1c3ccccc23)[N+](=O)[O-]	1
O=C(Nc1ccccc1Cl)c2cc([N+](=O)[O-])sc2	1
O=[N+][O-]c1cc(N)c(F)cc1(N)	1
N(=Nc1cccc(c1)CCl)c2ccc(cc2)N(C)C	1
CC(C(CCl)Br)Br	1
OC1ncc2ccc3cccc4ccc1c2c34	0
O=S(=O)(N=C(NCCSCc1oc(cc1)CNC)NCC(O)c2ccc(O)cc2)C	0
O=C(NC(C)C)c1ccc(cc1)CNNC	0
n1ccnc2c1c3nc(N)n(c3(cc2C))C	1
c1ccc3c(c1)ccc2ccc4c(c23)CCC4	1
O(C)CC4C=C3c1cccc2c1c(cn2C)CC3N(C)C4	1
O=[N+][O-]c2cc(c(c1ccccc1)c(c2)[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1
n1c3ccccc3(cc2ccccc12)	1
O=C(O)C1=CN(c2nc(c(F)cc2(C1(=O))))N3CCNCC3)CC	1
O=C(O)C(NC(=O)C)CSCCCL	1
O=C(C=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-])NC	1
OCCNCCO	0
O=S(=O)(Nc4ccc(Nc2c3ccccc3(nc1ccccc12))c(OC)c4)C	1
O=Nc1c(ncn1C)c2ccccc2	1
O=[N+][O-]c1ccc2ccc4c5ccccc5(nc3ccc1c2c34)	1

FC(F)(OC)C(Cl)Cl	0
N#CC1=Cc3cccc2cccc1c23	1
Oc2c1ncccc1c(cc2Cl)Cl	0
O=CCCCC	0
n2c1cccc1c(N)c3cc(N)ccc23	1
ONc1cccc1	1
c1ccc3c(c1)cc4ccc5cccc6c2cccc2c3c4c56	1
O=C(C=CC1=C(C)CCCC1(C)C)C	0
O=C(OC(C)CC)C=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-]	1
O=S(=O)(O)c1ccc(c(c1)C)C	0
OC(c2oc1c(cccc1CC)c2)CNC(C)(C)C	0
O=C(OC(C=C)(C)CCC=C(C)C)c1cccc1(N)	0
O=[N+](=[O-])c1ccc2ccc4c(O)ccc3ccc1c2c34	1
c1ccc(cc1)CSC(=CCl)Cl	1
n3c2c(ccc1cccc12)cc4cccc(c34)C	0
c1ccc5c(c1)c2ccc3cccc4ccc(c2c34)c5CCl	0
O=C1C(=COc2cc(O)ccc12)c3ccc(O)cc3	0
c1ccc4c(c1)ccc3cc5c2cccc2C6NC6(c5(cc34))	1
O=C1NC(=O)C(N1)(c2cccc2)c3cccc3	0
O=C(OCCCCC)c1cccc1(C(=O)OCCCCC)	0
O=C(Nc2cccc1cccn12)C	1
Nc1cc(c(c(c1)CC)Cc2c(cc(N)cc2CC)C)C	0
N#CCO	0
O=C(C)CC(=O)C	0
O=[N+]1C(N)=C2N=CN(C2(=NC1))C	1
O=CC(=CC)Cl	1
O=C(O)Cc2c[nH]c1cccc12	0
O=C(NC(=N)N)c1nc(c(nc1(N))N)Cl	1
O(c1ccc(N)c(OC)c1)C	1
O=S(=O)(O)C=2C=C(C1=CC(=CC=C(C1=2)C)C(C)C)C	0
O=C(c1c(c(c(c1C)[N+](=O)[O-])C(C)(C)C)[N+](=O)[O-])C	0
C2C1C(C(C(CCl)(C1(CCl)(CCl))C2(Cl)Cl)Cl)Cl	0
c1cc(c(c(c1Cl)Cl)Cl)Cl	0
Oc1cccc1(OC)	0
O=C(OCN([N+](=O)[O-])C)C	1
O=[N+](=[O-])C(C)(Cl)Cl	1
C(N(C)C)(=S)SSC(N(C)C)=S	1
Nc1cc2ccc3cccc4ccc(c1)c2c34	1
Nc1ccc(cc1)Sc2cccc2	1
O=C(O)CCc1cccc1	0
OC5c3ccc2c(cc1cccc1c2C)c3C4OC4C5(O)	1
O=C1N(C(=O)C(Cl)Cl)CCN1c2ncc([N+](=O)[O-])s2	1
O=C3C(OC)=CC4C2N(C)CCC4(c1c(O)c(OC)ccc1C2)(C3)	0
O=Nc2c(O)ccc1cccc12	0
O=C(O)c5cc(N=Nc1ccc(cc1)c4ccc(N=Nc3cc(N=Nc2ccc(cc2)S(=O)(=O)O)c(N)cc3(N))cc4)ccc5(O)	1

N3=C(c2[nH]c1cc(OC)ccc1c2CC3)C	0
O=C(OC)c1ccccc1(NC)	0
O=[N+](O)c3ccc(c2nc1ccccc1c(NCCCN(C)C)c23)N(CCO)CCO	1
O=C(Nc1ccc(cc1)C)c2cc([N+](=O)[O-])sc2	1
c1ccc(c(c1)C(c2ccc(cc2)Cl)C(Cl)Cl)Cl	0
O=CC(=C(Cl)Cl)Cl	1
n2c1occc1c(OC)c3cccc(OC)c23	1
O=C1c5c(O)cc(OC)c(OC)c5(Oc3c1c(OC)cc2OC4OC=CC4(c23))	1
OCC(CC)CCCC	0
O=[N+](O)c1ccc(cc1)Nc2ccc(cc2)Cl	1
O=C(O)CNC(=O)C(NC(=O)CCC(N)C(=O)O)CSc1ccc(cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1
OC(C=C)(C)CCC=C(C)C	0
O=NN(C(=O)c1c(ncn1C)NC)C	1
c2cc1ccc(cc1c3cc(ccc23)C)C	1
[N-]=[N+]=Nc4ccc3c(nc1c(cccc1C)c3(Nc2ccc(cc2(OC))NS(=O)(=O)C))c4	1
O=C(Nc1ccccc1)C(C(C)(C)C)Br	0
O=[N+](O)c1ccc(cc1)S(=O)(=O)O	0
O=S(=O)(c1ccc(cc1)Cl)C	0
n2c1ccccc1c(NCCCN(CC)CCCl)c3ccccc23	1
OC(C)CN(C1=NNC(=NN)C=C1)C	1
c1ccc3c(c1)ccc2cc4ccc(cc4(cc23))C	1
O=C(O)CC2(OCCc1c3cccc(c3([nH]c12))CC)CC	0
O=C1OCC1(C)C	1
O=NN(CC(O)C)CC(O)C	1
OCC(C)Cl	1
O=C(C)C2(c1ccccc1)(CCNCC2)	0
N(=Nc1ccc(c(N)c1)C)c2ccc(c(N)c2)C	1
C(N(CC)CC)(=S)SSC(N(CC)CC)=S	0
Nc1ccccc1c2ccccc2	1
O=C(C(Cl)Cl)C(Cl)Cl	1
O=C1Oc2c(OC)c3occc3(cc2(C=C1))	1
OC3C=Cc2c1cc4ccccc4(cc1c(cc2C3(O))C)	1
O=C(O)c1ccc(N)cc1	0
Nc1ccc(N)c2ccccc12	1
O=C(O)C(c1ccccc1)C(=O)c2ccccc2)C	0
O=Nc1ccc2ccc4c5ccccc5(cc3ccc1c2c34)	1
O=C(Nc2nc1c3cccn3(cc(c1n2C)C))C	1
N=C(N(C)C)N(C)C	0
O=C1OC(=C(O1)COC(=O)C4N3C(=O)C(NC(=O)C(N)c2ccccc2)C3SC4(C)(C))C	0
N#CSCSC#N	0
O=C(O)c1cc(ccc1Cl)Cl	0
n1cccc(c1)c2ncccc2	1
O=C(OCC(CC)CCCC)C=C	0
c1ccc2c(c1)ccc4c2c(c3ccccc3c4C)CBr	1
O=C(O)CCCCC(=O)O	0

O=C(O)c1c(N)cccc1(NC(=O)C)	1
O=CCC(C)C	0
c1ccc3c(c1)cc4ccc5cc2ccccc2c6ccc3c4c56	1
O1C2C=CC=CC12	1
O=C(OC)C=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-]	1
N=C1C=CC2=Nc3c(OC2(=C1))cc(N)c4cccc34	1
O=[N+](O-)[c1cccc(c1(N))][N+](=O)[O-]	1
O1CC1Cc2cccc2	1
O=C(O)CCCCCCCCCCCCCCCC	0
c1ccc2c(c1)CCCC2	0
O=[N+](O-)[c1cc(cc(c1(O)))[N+](=O)[O-]]c2cccc2	1
O=[N+](O-)[c1cccc1(OCC)]	1
O(c1ccc(cc1)C(c2cccc2)=C(c3cccc3)CC)CCN(C)C	0
n2c4ccc(cc4(cc3ccc1cccc1c23))C	1
FC(F)(F)C(O)C(F)(F)F	0
C1=CC(C2C1C3(C(=C(C2(C3(Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl	0
O=C1c3c(O)ccc(OC)c3(Oc2cc(OC)cc(OC)c12)	1
O1CC1(C=C)C	0
c1cc(ccc1NC(C)CCC(C)C)NC(C)CCC(C)C	0
n1c2ccc(NC)c(c2(nc(c1CC)CC))C	1
O=[N+](O-)[c1ccc2[nH]cnc2(c1)]	1
O=C(OC)C	0
Oc1cccc(c1)N(C)C	1
NC(C)(C)C	0
N(C)C	0
OC1C=C(C)C2CC1C2(C)(C)	0
O=C(Nc1ccc(cc1)Cl)N(C)C	0
O=P(OCC)(OCC)OCC	0
[N-]=[N+]=Nc4ccc3c(nc1cccc1c3(Nc2ccc(cc2(OC))NS(=O)(=O)C))c4	1
O=C1NC(=N)C=CN1C2OC(COP(=O)(O)O)C(O)C2(O)	0
n2c1cc(N)c(cc1c(cc2C)C)C	1
OC(C)C	0
O=C3c5c(OC)c(OC)ccc5(c2ccc1cc4OCOc4(cc1c2N3C))	1
O=[N+](O-)[c1cc(N)c(O)c(c1)S(=O)(=O)O	0
O=[N+](O-)[c3ccc2c5cccc4cccc(c1cccc3(c12))c45	1
O=C(OC1C(=O)OC2C(OC(=O)C)C(=O)OC12)C	0
O=C(NN=Cc2c[n+](O-)[c1cccc1[n+]]2(O-))C	1
N#Cc1ccc(cc1)CCl	0
O=C(O)CN(CC(=O)O)CCN(CC(=O)O)CC(=O)O	0
O=CC2=CC1(O)(CC(C)(C)CC1C3(C)(CC23(C=O)))	1
O=C1C=C(C)CC(C)(C)C1	0
O=C(O)c1ccc(cc1)S(=O)(=O)N(CCC)CCC	0
O=C(O)c1c(cccc1Cl)Cl	0
c1cc(ccc1C)C	0
O=C1OC3CCN2CC=C(COC(=O)C(O)(C(=C)CC1(=CC))CO)C23	1

O=C(Nc1ccc(N)cc1)C	1
O=S(=O)(OCC)c1ccc(cc1)C	1
O=S1(=O)(CC=CC1)	0
O=[N+][([O-])c2ccc3c1ccccc1Cc3(c2)	1
c1ccc5c(c1)cc4c3c5(ccc2cccc(c23)s4)	1
O=C2c4cccc4(C(=O)c3c(N)c(Oc1ccccc1)cc(O)c23)	1
O=C(NN=C(C)C3(O)(Cc1c(O)c4C(=O)c5cccc(OC)c5(C(=O)c4(c(O)c1C(OC2OC(C)C(O)C(N)C2)C3))))c	1
C=CCCCCCCC	0
O1c3cc(c(cc3(Oc2cc(c(cc12)Cl)Cl))Cl)Cl	0
O=C1NC(=O)C(N1)(c2cccc2)c3ccc(O)cc3	0
c1ccc(cc1)c3cccc3(c2cccc2)	0
c1cc(ccc1C)CCl	0
n2cc(N)cc3nc1cccn1c23	1
O=C(Nc1ccc(F)cc1)c2cc([N+](=O)[O-])sc2	1
O=C(n1cncc1)n2cncc2	0
O=[N+][([O-])c1cc(N)ccc1(O)	1
O=C(Nc1ccccc1)CC(=O)C	0
O=[N+][([O-])c1ccc(cc1)n3nc(n[n+](c2ccc(cc2)l))c4ccccc4	0
Oc1ccccc1C(C)CC	0
N12(CCN(CC1)CC2)	0
O=P(OC(C)C(CBr)Br)(OC(C)C(CBr)Br)OC(C)C(CBr)Br	1
c1cc2ccc3ccc(c4ccc(c1)c2c34)C	1
ONc1ccc(cc1)C	1
Nc1ccc2cc3ccccc3(cc2(c1))	1
O=P(OC(=CBr)c1ccc(cc1Cl)Cl)(OC)OC	0
OC(C)COCC(O)C	0
OC5C=C3c2ccc1ccccc1c2c4cccc(c34)C5(O)	1
O=[N+][([O-])c1ccc(OP(OC)(OC)=S)cc1C	0
O=C(O)CCCCCCCCCCC	0
O=C(N)c1ccccc1	0
O=C(O)C(N)Cc1ccc(F)cc1	0
O=C(C=Cc1ccc(OC)cc1)c2cccc2	0
n1nc(c2cccc2(c1))Cl	0
O=C1NC(=O)C(=C1Cl)Cl	1
c1ccc(cc1)CC	0
O=C(C=Cc1ccc(O)c(OC)c1)CC(=O)C=Cc2ccc(O)c(OC)c2	0
O=C(NNC(=O)C)c1ncccc1	0
OCCN1CN(CN(C1)CCO)CCO	1
N#CCCN	0
n1ccc(cc1CC)C(N)=S	0
O=[N+][([O-])c3c5cccc5(c2ccc1cccc4c1c2c3CC4)	1
CCCC	0
C(=CCCl)CCl	1
O=C(O)C=Cc1ccc(cc1)Cl	0
c1ccc2c(c1)c4cccc3cc(cc2c34)CCl	1

ONc2ncnc1c2(ncn1C)	1
O=CC(=O)c1ccccc1	1
O=[N+][O-]c3ccc2c(ccc1cc(ccc12)[N+](=O)[O-])c3	1
NCCCC	0
Oc1c(cc(cc1C(C)(C)CC)C(C)(C)CC)N2Nc3ccccc3(N2)	0
Oc1ccc(N)cc1	0
OCCN(c1ccc2ccccc2(c1))CCO	1
O=C	1
Nc1ccc(cc1)N(C)C	1
n1c3cc(N)ccc3(cc2ccc(N)cc12)	1
n1ccc2c3nc(N)n(c3(ccc2(c1)))C	1
O=C(C=Cc1cccc(c1)[N+](=O)[O-])c2ccccc2	0
c1ccc2c(c1)cc3cc(c5cccc4ccc2c3c45)CCl	1
O=[N+][O-]c1ccc(cc1)Nc2ccc(cc2)C	1
O=P(OC)(OC)C	0
O=C(C=CCCCC)CCc1ccc(O)c(OC)c1	1
OCCCCCCCCCCCC	0
O(c1ccc(N)c(c1)C)P(OC)(OC)=S	1
O=C1OC(=O)c2c1c(c(c(c2Cl)Cl)Cl)Cl	0
c1ccc(cc1)C2=CSC(=S)S2	0
O=C(C=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-])NCC	1
OC5C=Cc4c(ccc3c2cccc1cccc(c12)c34)C5(O)	1
O=C(NCc1ccc(O)c(OC)c1)CCCCCCC(C)C	1
OCC9OC(OC6CC5=CCCC4(CCCC3(C)(C4(CC2N1CC(C)CCC1C(C)C23)))C5(C)CC6)C(O)C(O)C9(OC8OC(i	0
n1cccc3c1ccc2c3(nc(N)n2C)	1
OC2CC13(OC3(C=CC=C1)(C2))	0
O=Nc2c(nc1n2(ccs1))c3ccc(cc3)Cl	1
O=C(OC(C)(C)C)C=C	0
O=C(CCl)CCl	1
O=P(O)(N)N(CCCl)CCCl	1
O=C(O)C(c1ccc3c(c1)[nH]c2ccc(cc23)Cl)C	0
O=C1c6cc(cc(O)c6(C(=O)c2c(O)cc(O)c(c12)c4c(O)cc(O)c3C(=O)c5c(O)cc(cc5(C(=O)c34))C))C	0
OCC(O)C(O)C(OC1OC(CO)C(O)C(O)C1(O))C(O)CO	0
c1csc1C	0
O=C(OC(C(Cl)(Cl)Cl)P(=O)(OC)OC)CCl	0
O=[N+][O-]c4c5ccccc5(c1ccc2cccc3ccc4(c1c23))	1
O=C(ON(c2ccc3c1ccccc1Cc3(c2))C(=O)C)c4ccccc4	1
O=C(c1cccc(c1)[N+](=O)[O-])C	1
OCc1ccc(cc1)Cl	0
O=C1C(=C(C(=O)C1(Cl)Cl)Cl)Cl	0
O=P(OCCCCCCCC)(OCCCCCCCC)OCCCCCCCC	0
o1cccc1CC	0
n2c5ccc1ccccc1c5(cc4c2ccc3C=CCCC34)	1
O=CN(O)c1ccc(cc1)c2ccccc2	1
Oc3cc1ccccc1c4ccc2ccccc2c34	0

O=S(=O)(O)c1ccc(N)c(c1)C	0
O=C(c1cccc(c1)C)N(CC)CC	0
O=[N+](O)c2cccc1cn(nc12)C	1
O=C1c4cccc3ccc2cccc1c2c34	1
O=C1OCC(=C1Cl)CCl	1
c1ccc3c(c1)ccc2ccccc23	1
NCC	0
O=S(=O)(N)c2cccc1cccnc12	0
O=C(O)CSc1nc(cc(n1)Cl)Nc2cccc(c2C)C	0
O=Nc1cccc1C	1
Oc5cccc4c5(ccc3[nH]c2ccc1cccc1c2c34)	1
O=C(C(=O)C)C	1
ONc1ccc(c(c1)C)C	1
c1c(c(cc(c1C)C)C)C	0
O=C(Nc1ccc(cc1)Br)c2cc([N+](=O)[O-])sc2	1
O=[N+](O)c1oc2cc3ccc4cccc5ccc(c2(c1))c3c45	1
O=C(OCCCC)CCCCCCCC(=O)OCCCC	0
Oc1ccc(c(O)c1)CCCCC	0
c1ccc2c(c1)[nH]c3c(ccc(c23)C)C	1
O=[N+](O)c1ccc2Oc3cccc3(Oc2(c1))	1
O=C(N)NN=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-]	1
N#Cc3ccc(nc3(OC(=O)c1cccc(c1)C(=O)N2C=C(F)C(=O)N(C2(=O))COCC))OC(=O)c4cccc4	0
n1c(N)n(c2cc(c3nc(c(nc3(c12))C)C)C)C	1
C(=NCC=C)=S	1
O=[N+](O)C([N+](=O)[O-])([N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1
OC(C)CN(CC(O)C)CC(O)C	0
O=C(O)c1nn(c2ccccc12)Cc3ccc(cc3Cl)Cl	0
O2CCCC1(OC1)(C2)	1
Oc1ccc2ccc4c5ccccc5(cc3ccc1c2c34)	1
O=[N+](O)c1cc(N)c(c(c1)[N+](=O)[O-])C	1
[O-][N+](=Nc1cccc1)c2ccccc2	1
O=C(c1cccc1)Cl	1
[O-][N+](=Nc1ccc(c(c1)Cl)Cl)c2ccc(c(c2)Cl)Cl	0
FC(F)C(F)(F)F	0
O=C(OC1OC1)N	1
O=C1c3cc(O)ccc3(Oc2cc(OC)cc(O)c12)	1
O=C1c2ccccc2(C(=O)C(=C1Cl)Cl)	1
O=[N+](O)c1ccc2c(O)cc4cccc3ccc1c2c34	1
n2c1occc1c(OC)c3ccc(OC)cc23	1
Oc1c(cc(cc1Br)Br)Br	0
N1CCSC1	1
c1ccc(cc1)Nc2ccccc2	0
O=C(OCC)C(Oc1ccc(cc1)Cl)(C)C	0
OCCCCO	0
n1cc(cc2ccccc12)C	1

O=[N+][O-]c1cccc1Br	1
O=P(Oc1cccc1)(OCCCC)OCCCC	0
O=C(OC(C)(C)C)C=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-]	1
O=C(N)CBr	0
O=[N+][O-]c1ncn(c1Sc3ncnc2[nH]cnc23)C	1
ON=C2Nc1c3nc(cnc3(ccc1N2C))C	1
Oc1c(cc(cc1C(C)(C)C)CC)C(C)(C)C	0
O=NN(C(=O)N)CCCC	1
O=C1Oc3cccc4ccc2cccc1c2c34	0
O=C(C=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-])NC(C)(C)C	1
O=[N+][O-]c2ccc3c1c(cccc1Cc3(c2))[N+](=O)[O-]	1
O=C(OC)NN=Cc2c[n+][O-]c1cccc1[n+](2)[O-]	1
n1ccnc(c1)C2=C(C(=S)SS2)C	0
Nc1ccc(cc1)c2ccc(N)cc2	1
O=S(=O)(O)c1cccc(c1)CN(c2ccc(cc2)C(c3ccc(cc3)N(C)C)=C4C=CC(C=C4)=[N+](Cc5cccc(c5)S(=O))=	1
Nc1ccc(c(c1Cl)Cl)Cl	0
O=NN(C)CC	1
O=[N+][O-]c2ccc3c1ccc(cc1CCc3(c2))[N+](=O)[O-]	1
ONc1ccc(OCC)cc1	1
[N-]=[N+]=NCC(O)CN=[N+]=[N-]	1
Fc1ccc(N)c(F)c1	1
c1ccc5c(c1)c(cc4[nH]c3cc(c2cccc2c3c45)C)C	1
O=C2c1cccc1CCc3cccc23	0
c1cc(c(cc1C)C)C	0
O=[N+][O-]c2ccc3[nH]c1cccc1c3(c2)	1
O=C(OCc1cccc1)Cl	0
O=C(Nc7cccc8C(=O)c3c(ccc2c4cc(NC(=O)c1cccc1)c5C(=O)c6cccc6(C(=O)c5(c4([nH]c23))))C(=O)	0
O=NN(CC(O)C)CC(O)CO	1
O=C(O)CC(C(=O)O)Cl	0
O=[N+][O-]c5ccc2ccc3c1cccc1c(c4ccc5(c2c34))[N+](=O)[O-]	1
N(=NN(C)C)c1ccc(cc1)Cl	1
Nc2ccc3ccc4cc1cccc1c5ccc2c3c45	1
O=C(NCCN(C)C)c2cccc1Oc3cccc3(Oc12)	1
n1nc(c2cccc2(c1Cl))Cl	0
OCc2ccc4c1cccc1c3cccc2c34	0
O=[N+][O-]c1cc(c(c(c1)C)C)[N+](=O)[O-]	0
c1ccc3c(c1)c(c2cccc2c3Cl)CCl	1
O=C(NO)c1cccc1	1
O=[N+][O-]c1nccn1C	1
O1CCOCC1	0
c1ccc3c(c1)ccc2cc4cc(ccc4(cc23))C	1
O=C(Nc1cc(O)c2ccc3cccc4ccc1c2c34)C	1
n1cccc2cccc12	1
Oc1ccc(cc1)CO	0
c1ccc2c(c1)ccc4c2c(c3cccc3c4C)C	1

O=C(O)C1=CN(c2cc(c(F)cc2(C1(=O))))N3CCNCCC3)CC	1
O=C2c1cccc1C(c3cccc23)[N+](=O)[O-]	0
n1c3ccc(c(N)c3(nc2cc(N)c(cc12)C))C	1
n1cc(nc3c1c(cc2c3(nc(N)n2C))C)C	1
Nc1cccc2c(N)cccc12	1
O=C(O)CCC(=CCc2c(O)c1C(=O)OCc1c(c2(OC))C)C	0
n1cc(nc3c1c(cc2c3(nc(N)n2C))C)c4cccc4	1
c1ccc3c(c1)cc2cccc2[n+](3)C	1
O=C1C=C(O)C1(=O)	0
n2c(N)c(c3[nH]c1cccc1c3(c2C))C	1
Oc1ccc(cc1)C(c2ccc(O)cc2)(C)C	0
O=C1C=Cc2ccc3C=CC(=O)c4ccc1c2c34	1
O=C(OO)C	0
O=C(O)Cc1ccc(O)c(O)c1	1
n1c(N)n(c2ccc(cc12)C)C	1
Oc1c(c(cc(c1Cl)Cl)Cl)Cl	0
O=P(OC=C(Cl)Cl)(OC)OC	1
c1ccc(cc1)C	0
N#Cc1c(cccc1Cl)Cl	0
Oc1cc4c3c(c1(OC))c2cccc2CC3N(C)CC4	1
OCC(CBr)Br	1
O=C1C(=COc2cc(OC(C)C)ccc12)c3cccc3	0
O=[N+](O-)[c3cc2ccc1cc(cc4c1c2c(c3)CC4)[N+](=O)[O-]	1
[O-][n+](2)cccc1cccc12	0
n2c1cccc1sc2SNC3CCCCC3	0
O=C1C(=O)c3cccc2cccc1c23	1
c1cc2ccc3ccc(c4ccc(c1)c2c34)CCl	1
O=NN(c1cccc1)CC	0
O=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-]	1
O=C(NC1CCCCC1)NS(=O)(=O)c2ccc(cc2)C(=O)C	0
n1cc(nc2c1ccc(NC)c2C)c3cccc3	1
OC(C)(C)C	0
O=C(Nc1ccc(cc1)c2ccc(N)cc2)C	1
n1cccc2C=CC3OC3(c12)	1
O=C(O)C(Oc1ccc(cc1)C2CC2(Cl)Cl)(C)C	0
O=[N+](O-)[c1cccc(c1)C	0
n1c2ccc(N)cc2(nc(c1C)C)	1
O=[N+](O-)[c3ccc(Nc2ccc(Nc1cccc1)c(c2)S(=O)(=O)O)c(c3)[N+](=O)[O-]	1
O=[N+](O-)[C]C	0
O1COCOC1	0
O(c1c(cc(cc1Br)Br)Br)CCOc2c(cc(cc2Br)Br)Br	0
O=Cc2ccc(N=Nc1ccc(cc1)N(C)C)cc2	1
c1ccc2c(c1)ccc4c2c(c3cccc3c4C)CC	0
O=C(OCC)C	0
O=[N+](O-)[c1cc(ccc1(NC))N(CCO)CCO	1

[illegible]

[illegible]

Oc2cc1cccc1c3cccc23	1
C(=CBr)Br	1
O=C(OCCCCOC(=O)c1ccc(N)cc1)c2ccc(N)cc2	0
O=CC2=CC1(O)(C(OC(=O)C=CCCC)C(C)(C)CC1C34(C(=O)OC(O)C24(C3)))	1
Oc1ccc(C=CC)cc1(OC)	0
O=C(O)C(NC(=O)COc1ccc(cc1Cl)Cl)CC(C)C	0
O=[N+][([O-])c1ccc2Oc3cc(c(cc3(Oc2(c1))))Cl)Cl	1
O=NN(O)N(CCCN)CCCCNCCCN	1
O=C(O)c1cc(cc(c1)Cl)Cl	0
O=C(OCCCC)C	0
O3C4c5cccc5(c2c(c1cccc1c(c2C34)C)C)	1
C1CCC2CCCCC2(C1)	0
O=[N+][([O-])c1ccc(cc1)CC	0
c1(c(c(c(c1Br)Br)Br)Br)Br)C	0
O=C(Oc2c(c1OCOc1c6c2C9C5N(C(O)C4N(C)C5(c3c(O)c(OC)c(cc3C4)C))C6COC(=O)C8(NCCc7cc(O)	1
O=[N+][([O-])c1ccc(cc1)c3nc2n(ccs2)c3[N+](=O)[O-]	1
N(=NN(C)C)c1ccc(cc1)Br	1
O=[N+][([O-])c1ccc3c(c1)c2cccc2C3	1
O=[N+][([O-])c1oc(cc1)C(=NO)N	1
n1cccc3c1ccc2cccc23	1
O=[N+][([O-])c2cccc1c3cccc3([nH]c12)	1
n1cccc2cccc(N)c12	1
N#CC	0
O=[N+][([O-])c4ccc(N=Nc2c(N)c3c(O)c(N=Nc1cccc1)c(cc3(cc2S(=O)(=O)O))S(=O)(=O)O)cc4	1
O(c1ccc(cc1)C(C)(C)CC(C)(C)CCOCC[N+](C)(C)Cc2cccc2	0
c1ccc(cc1)C[N+](C)(C)CCCCCCCCCCCCCCCCC	0
Nc3ccc4c1ccc(N)cc1[n+](c2cccc2)c4(c3))CC	1
O=S(=O)(O)OCC(CC)CCCC	0
O=NN(O)c1cccc1	1
n1c3cc(N)c(cc3(cc2cc(c(N)cc12)C))C	1
FC(F)(F)c1ccc3c(c1)N(c2cccc2S3)CCCN4CCN(CCO)CC4	0
O=C(O)C=3Oc4cccc(OCC(O)COc2cccc1OC(=CC(=O)c12)C(=O)O)c4(C(=O)C=3)	0
n2c1cccc1c(N)c3c2CCCC3	1
O=S(=O)(O)c3ccc2c(ccc(O)c2(N=Nc1cccc1))c3	0
O=S(=O)(O)c3cc2ccc(O)c(N=Nc1cccc1)c2c(c3)S(=O)(=O)O	0
O=S(=O)(O)c5cc6cc(c(N=Nc1ccc(cc1)c3ccc(N=Nc2ccc(N)cc2(N))cc3)c(N)c6(c(O)c5(N=Nc4cccc4))	1
c1ccc(cc1)N(Cc2cccc2)CCN(C)C	0
OC1CC(C)CCC1(C(C)C)	0
c1cc(ccc1C(c2ccc(cc2)N(CC)CC)=C3C=CC(C=C3)=[N+](CC)CC)N(CC)CC	1
O=S(=O)(O)c5cc(N)c6c(O)c(N=Nc1ccc(cc1)c4ccc(N=Nc2c(O)c3cc(N)ccc3(cc2S(=O)(=O)O))cc4)c(cc	1
O=C(O)c5cc(N=Nc1ccc(cc1)c4ccc(N=Nc2c(O)c3cc(N)ccc3(cc2S(=O)(=O)O))cc4)ccc5(O)	1
N=C(c1ccc(cc1)N(C)C)c2ccc(cc2)N(C)C	1
O=S(=O)(O)c5cc(O)c6c(N=Nc1ccc(cc1)c4ccc(N=Nc2c(N)ccc3cc(cc(O)c23)S(=O)(=O)O)cc4)c(N)ccc	1
O=S(=O)(O)c5cc(c6ccc(N=Nc1ccc(cc1(OC))c4ccc(N=Nc2ccc3c(c2(O))c(N)c(cc3S(=O)(=O)O)S(=O)(=	1
O=C(Nc3ccc4c(O)c(N=Nc2ccc(N=Nc1ccc(cc1)S(=O)(=O)O)cc2)c(cc4(c3))S(=O)(=O)O)c5cccc5	0

O=S(=O)(O)c4cc3ccc(O)c(N=Nc1ccc(c2ccccc12)S(=O)(=O)O)c3c(c4)S(=O)(=O)O	0
O=C(OC)C(c1ccccc1)C2NCCCC2	0
O=S(=O)(O)c5cc(c6ccc(N=Nc1ccc(cc1C)c4ccc(N=Nc2ccc3c(c2(O))c(N)c(cc3S(=O)(=O)O)S(=O)(=O)O	1
O=C(N)c1cc(ccc1(O))C(O)CNC(C)CCc2ccccc2	0
O=C(OCCN1CCCCC1)c2cccc3C(=O)C(=C(Oc23)c4ccccc4)C	0
O=S(=O)(O)c1ccc3c(c1)cc(c(O)c3(N=Nc2ccc(cc2C)C))S(=O)(=O)O	1
n2cnc(NCc1ccccc1)c3[nH]cnc23	0
OC1CCC3(C)(C4CCC5(C)(C(CCC5(C4(CC2OC23(C1))))C(C)CCCC(C)C))	1
O=C1OC3CCN2CC=C(COC(=O)C(O)(C)C(C)CC1(=CC))C23	0
O=NN(C(=N)N[N+](=O)[O-])CCCC	1
O=C1NC(=Nc2[nH]nnc12)N	0
C(=CCl)C[N+](=O)C2(CN1CN(CN(C1)C2)C3)	1
n3c1cc(c(N)cc1[n+])(c2ccccc2)c4cc(N)c(cc34)C)C	1
N(C)(C)CCCCl	1
N=C1C=CC(C=C1)=C(c2ccc(N)cc2)c3ccc(N)cc3	1
Oc2c(c(c1OC(C)(CCc1c2C)CCCC(C)CCCC(C)CCCC(C)C)C)C	0
O=C(O)C[N+](C)(C)C	0
O(N)C	0
n2c1ccc(cc1[s+])c3cc(ccc23)N(C)C)N(C)C	1
N=C1C=CC(C=C1)=C(c2ccc(N)cc2)c3ccc(N)c(c3)C	1
O=S(=O)(O)c3ccc(N=Nc2c(O)ccc1ccccc12)cc3	0
OCCc1c([n+])(cs1)Cc2cnc(nc2(N))C)C	0
n2c1ccc(OC)cc1c(NC(C)CCCN(CC)CC)c3ccc(cc23)Cl	1
n1ccccc1CCl	1
O=S(=O)(O)c5cc(N)c6c(O)c(N=Nc1ccc(cc1C)c4ccc(N=Nc2c(O)c3c(N)cc(cc3(cc2S(=O)(=O)O))S(=O)O	1
n2c1ccc(cc1[s+])c3cc(N)c(cc23)C)N(C)C	1
O=C1NC(=O)NC(=O)N1	0
[O-][n+](c1ccccc1)O)c12	0
O=C(O)C1C(C(=O)O)C2(C(=C(C1(C2(Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl	0
O=C1NN=Cc2ccccc12	0
O=[N+](O-)[c1cnc(N)s1	1
O=C(O)C(N)Cc1ccc(cc1)N(CCCl)CCCCl	1
n2c1ccccc1sc2S	0
OCC(O)C(O)CO	0
O1C2CC3CC(C12(C))C3(C)(C)	0
n2c1ccc(OC)cc1sc2N	1
O=C1C(C(=O)C4N1C(C)(C)C5Cc3cccc2[nH]cc(c23)C45)=C(O)C	0
O=NN(C(=O)NC(C(=O)C(O)C(O)CO)C	1
O=C(OCC34(CC(OC(=O)CC(C)C)C(=CC4(OC2C(O)C(OC(=O)C)C3(C)(C12(OC1))))C))C	0
O=C1OC(CC=C1)C(O)C4CC=2C(=O)OC(=O)C=2C(O)C(C=3C(=O)OC(=O)C=3C4)C(O)CCCCC	0
O=C(OCC34(CCC(=CC4(OC2C(O)C(OC(=O)C)C3(C)(C12(OC1))))C))C	0
O=C(OC2C(O)C4OC1C=C(C(=O)C(O)C1(CO)C2(C)C34(OC3))C)C	0
n1nc(S)sc1N	0
O=C(OC3CC4CN2CCc1c5ccc(OC)cc5([nH]c1C2CC4(C(C(=O)OC)C3(OC))))C=Cc6cc(OC)c(OC)c(OC)c	0
C1(=C(C2(C(CCl)C(CCl)C1(C2(Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl	0

N4=CN3C(=CN=C(c1ccccc1)c2cc(ccc23)Cl)N4	0
[N-]=[N+]=NC1CC(OC1(CO))N2C=C(C(=O)NC2(=O))C	1
O=C1OC3CCN2CC=C(COC(=O)C(O)(C)C(O)(C)C1C)C23	0
O=C(OC1CC(O)(C(=O)O)CC(O)C1(O))C=Cc2ccc(O)c(O)c2	0
N(=CN(C=Nc1ccc(cc1C)C)C)c2ccc(cc2C)C	0
O=C3NC(=Nc1c3(nc(O)n1C2OC(CO)C(O)C2(O)))N	0
O=[N+][([O-])NC(=N)NC	0
O=C(OC4(C(=O)C)(CCC3C5C=C(C2=CC(=O)C1CC1C2(C)C5(CCC34(C)))Cl))C	0
O=C(N)c1nc[nH]c1(N=NN(C)C)	1
O=C(O)CCC(=O)Oc2c(c(c1OC(C)(CCc1c2C)CCCC(C)CCCC(C)CCCC(C)C)C	0
O=C1C=NNC(=O)N1	1
O1C(C)(C)C2CCC1(C)CC2	0
O=C1C=C3C(=CC=C1(OC))c2c(OC)c(OC)c(OC)cc2CCC3(NC)	0
O4c1ccc(cc1)CC7c6c(Oc2cc3c(cc2(OC))CCN(C)C3Cc5ccc(OC)c4c5)c8OCOc8(cc6CCN7(C))	1
OC(CBr)C(O)C(O)C(O)CBr	1
O=C(OCC4C=1C(=O)C(N)=C(C(=O)C=1N3CC2NC2C34(OC))C)N	1
O=C1C=CC3(C(=C1)CCC2C4CCC(O)(C(=O)CO)C4(C)(CC(O)C23))(C)	0
Oc1ccc2c(c1)CCC3C2CCC4(C)(C(O)CCC34)	0
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	0
O=C1NC(=O)N(C=C1C)C2OC(CO)C(O)C2	0
O=C(OC3(C#C)(CCC2C4CCC1=CC(=O)CCC1C4(CCC23(C))))C	0
OC6CC5=CCC4C(CCC3(C)(C4(CC2OC1(OCC(C)CC1)C(C)C23)))C5(C)CC6	0
O=C3C(=CC4OC2C(O)CC(C)(C12(OC1))C4(CO)(C3(O)))C	0
Oc4ccc2c(OCC3(O)(Cc1cc(O)c(O)cc1C23))c4(O)	0
O4c1ccc(cc1)CC7c6c(Oc2c(OC)c(OC)cc3c2C(N(C)CC3)Cc5ccc(OC)c4c5)cc(OC)cc6CCN7(C)	1
O=C(O)C=2C(=O)C(=C1C(=COC(C)C1C)C=2(O))C	0
O=C1NNC(=O)c2c(N)cccc12	0
n1cccc(c1)C2N(C)CCC2	0
O=C(O)C(N)(C)Cc1ccc(O)c(O)c1	0
O=C1C=C(NC(N1)=S)C	0
O=C(O)CCC(N)C(=O)O	0
C#CC3(O)(CCC2C4CCc1cc(O)ccc1C4(CCC23(C)))	0
OCC3OC(n2cnc1c2(ncnc15))C(O)C3(O)	1
OCC3OC(n2cnc1c(ncnc12)N)C(O)C3(O)	0
O=C1NC2CSC(CCCCC(=O)O)C2(N1)	0
O=S(=O)(N)c2cc1c(N=CNS1(=O)(=O))cc2Cl	0
O=C1NC(=O)N(C=C1Br)C2OC(CO)C(O)C2	0
O=C(O)CCC(NC(=O)c1ccc(cc1)NCc2nc3C(=O)N=C(N)Nc3(nc2))C(=O)O	0
O=C(O)C(N)Cc1ccc(O)c(O)c1	1
ON=C(N)c1ccccc1	1
Oc1ccc(cc1)Nc2ccc(N)c(c2)C	1
O=C1NC(NC=C1C)=S	0
OC3CC(=CC=C1CCCC2(C)(C1CCC2(C(C)CCCC(C)C)))C(=C)CC3	0
O=C(O)C(N)Cc1ccccc1	0
O=C1CC3=C(CC1)C4CCC2(C)(C(CCC2(O)(C#C))C4(CC3))	0

<chem>O=C1NC(=O)N(C=C1C(F)(F)F)C2OC(CO)C(O)C2</chem>	1
<chem>O=NN(C(=N)N[N+](=O)[O-])C</chem>	1
<chem>O=C(OC8C(OC(Oc1cc2cc6c(c(O)c2(c(O)c1C))C(=O)C(OC5OC(C)C(O)C(OC4OC(C)C(O)C(OC3OC(C)C</chem>	0
<chem>O=C(OC3(C(=O)C)(CCC2C4CC(C1=CC(=O)CCC1(C)C4(CCC23(C)))C))C</chem>	0
<chem>OCC3OC(n2cnc1c(ncnc12)N)C(O)C3</chem>	1
<chem>O=C(O)C4C2C1(OC(=O)C2(C)(C(O)C=C1))C5CCC3(O)(C(=C)CC45(C3))</chem>	0
<chem>C2=CC3C1C=CC(C1)C3(C2)</chem>	0
<chem>O=C(O)CCC(C)C2CCC3C4C(O)CC1CC(O)CCC1(C)C4(CC(O)C23(C))</chem>	0
<chem>C=C1CCC=C(C)CCC2C1CC2(C)(C)</chem>	0
<chem>O=C1OC(C(O)=C1(O))C(O)CO</chem>	0
<chem>O=C1C=CN(C(=O)N1)C2OC(CO)C(O)C2</chem>	0
<chem>OCC3OC(n2cnc1c(ncnc12)N)CC3(O)</chem>	0
<chem>n1ccsc1N</chem>	1
<chem>O=[N+](O-)[c1ccc(cc1)CBr</chem>	1
<chem>O=C(OCC)CCC</chem>	0
<chem>N#CC=C</chem>	1
<chem>O=C(c1ccncc1)C</chem>	0
<chem>n1c(cccc1Cl)Cl</chem>	0
<chem>O=[N+](O-)[c1ccc(OP(=O)(OCC)OCC)cc1</chem>	1
<chem>OCC(O)C</chem>	0
<chem>OCC(C)C</chem>	0
<chem>O=C1C(O)=C(C)CC1</chem>	0
<chem>O=C2Oc1cc(O)ccc1C(=C2)C</chem>	0
<chem>c1ccc(cc1)N(CC)CC</chem>	0
<chem>C(C(CBr)Br)Cl</chem>	1
<chem>O=C(OCCCC)C(=C)C</chem>	0
<chem>C(CCl)Cl</chem>	1
<chem>O=C3C1=CC(C)(CO)C(O)C1=C(C)C2(CC2)C3(O)C</chem>	1
<chem>O1C2CC(C(=C)C)CCC12(C)</chem>	0
<chem>Oc1ccc2ccccc2(c1(N))</chem>	0
<chem>O=C1Oc2cc3OC(Cc3(cc2(C=C1)))C(O)(C)C</chem>	1
<chem>O=C(OC2C(O)(C(=O)OC)C5N(c1cc(OC)c(cc1C45(CCN3CC=CC2(CC)C34))C9(C(=O)OC)(c7[nH]c6cccc</chem>	0
<chem>N(N)=C2N(c1ccccc1S2)C</chem>	1
<chem>O=C2N(C)C4(C(=O)N3C5N(c1c(OC)c(OC)c(cc1C5(O)(C(O)C23SS4))Cl)C)(C)</chem>	0
<chem>O=S(=O)(O)OCCCCCCCCCCCC</chem>	0
<chem>O=C(O)Cc2ccccc2(Nc1c(cccc1Cl)Cl)</chem>	0
<chem>c1ccc(cc1)C3NC3(c2ccccc2)</chem>	1
<chem>O=C(O)c1ccccc1C3=C4C=C(C(=O)C(=C4(Oc2c3(cc(c(O)c2Br)Br)))Br)Br</chem>	1
<chem>O=C1N=C(N)c2ncn(c2(N1))C3OC(CO)C(O)C3(O)</chem>	0
<chem>O=C(OC3CC1C(=COC(OC(=O)CC(C)C)C1C23(OC2))COC(=O)CC(C)C)C</chem>	1
<chem>Oc1cc2c(cc1(O))C(NCC2)Cc3cc(OC)c(OC)c(OC)c3</chem>	0
<chem>O=C(OCc1ccccc1)NC(C(=O)NC(C(=O)NC(C(=O)NC(C(=O)N)Cc2ccccc2)CC(=O)O)CCSC)Cc4c[nH]c3c</chem>	0
<chem>O=[N+](O-)[c2cnc(c1nnc(N)s1)n2C</chem>	1
<chem>c1ccc3c(c1)cc4cccc5c2ccccc2c3c45</chem>	1
<chem>O=C(N)C=3C(=O)C4(O)(C(O)=C2C(=O)c1c(O)cccc1C(O)(C)C2C(O)C4(C(C=3(O))N(C)C))</chem>	0

O=CN2c1cc(OC)c(cc1C35(CCN4CC=CC(CC)(C(OC(=O)C)C(O)(C(=O)OC)C23)C45))C9(C(=O)OC)(c7[n	0
O=C1c5cccc(OC)c5(C(=O)c2c(O)c4c(c(O)c12)CC(O)(C(=O)C)CC4(OC3OC(C)C(O)C(N)C3))	1
O=[N+][([O-])c1ccc(cc1)C=2N=C3N=CNC(N)=C3(N=2)	1
O=C1N=C(N=C(N1)NC(C)C)NCC	0
O=C1c8c(O)cc(c(O)c8(C(=O)C24(C1=C(O)C3CC56(C(=O)c7c(O)c(cc(O)c7(C(=O)C6(=C(O)C(C2)C(O)'	0
O=C1c5c(O)ccc(OC)c5(OC3c1c(OC)cc2OC4OC=CC4(c23))	1
O=C1c8c(O)cc(cc8(C(=O)C67(C1=C(O)C3C(O)C7(C4C(O)C6(C(O)=C2C(=O)c5c(O)cc(cc5(C(=O)C234	0
On2nnc1cccc12	0
O=C1NP(=O)(OCC1)N(CCCl)CCCl	1
N3=C(c1cccc1)c2cc(ccc2N(C)CC3)Cl	0
O=C6OCC7C(OC1OC2COC(OC2(C(O)C1(O)))c3cccs3)c4cc8OCOc8(cc4C(c5cc(OC)c(O)c(OC)c5)C67'	1
N=C(N)C(N=NC(C(=N)N)(C)C)(C)C	1
[O-][N+](C)(CCCl)CCCl	1
O=C(O)C(N)CSCc1cccc1	0
O=C(O)C(N)CCC(=O)NCC	0
O(c1cc2c(cc1(OC))C(NCC2)CC4CC5c3cc(OC)c(OC)cc3CCN5(CC4(CC)))C	0
O=C(OC3C5C6(OC(=O)C)(COC6(CC(O)C5(C(=O)C(OC(=O)C)C4=C(C)C(OC(=O)C(O)C(NC(=O)c1cccc	0
O=C(Nc1ncc([N+](=O)[O-])s1)NCCCl	1
c1ccc(cc1)N(CCCN(CC)CC)C3Cc2cccc2C3	0
O=C1C=CN(C(=O)N1)C2OC(COP(=O)(O)O)C(O)C2(O)	0
ONc3ncnc1c3(ncn1C2OC(CO)C(O)C2(O))	1
NCCc2c[nH]c1cccc12	0
O=C(Nc1ccc(OCC(O)CNC(C)C)c(c1)C(=O)C)CCC	0
Fc1ccc(cc1)CCl	0
O=C(OC4CC3=CCC1C(CCC2(C)(C(CCC12)C(C)CCCC(C)C))C3(C)CC4)Cc5ccc(cc5)N(CCCl)CCCl	0
O=C(OC2C(OC1COP(=O)(O)OC12)n4cnc3c(ncnc34)NC(=O)CCC)CCC	0
O=C(OCC)NNc1nncc2cccc12	1
n2c(OC)ccc3nc1cc(ccc1c(NCCCN(CC)CCCl)c23)Cl	1
n3cccc4ccc2c(nc1cccc1c2(NCCCN(CC)CCCl))c34	1
O=[N+][([O-])c1ccc(cc1)CNc4ncnc2c4(ncn2C3OC(CO)C(O)C3(O))	0
O=CC1=CN(C(=O)NC1(=O))C2OC(CO)C(O)C2	0
O=C1OC3CCN2CC=C(COC(=O)C(O)(C(=C)CC1(=CC))C)C23	1
O=C(Nc1cccc1)CN	1
O=C1NC=Nc2cccc12	0
O(c1cc2c(cc1(OC))C(NCC2)CC5=C(CN4CCc3cc(OC)c(OC)cc3C4C5)CC)C	0
n1ccc(NC(C)CCCN(CC)CC)c2ccc(cc12)Cl	1
O=C4OC2(c3ccc(O)cc3(OC1cc(O)ccc12))c5cccc45	0
O=C(O)CCCCCCCC=CCC(O)CCCCC	0
O=C([O-])c1ccc[n+](c1)C	0
O=C(O)C7OC(OC1C(OC(C(=O)O)C(O)C1(O))OC3CCC4(C)(C5C(=O)C=C2C6CC(C(=O)O)(C)CCC6(C)(C	0
n1c(N)[nH]c2ccc(cc12)Cl	0
O=NN(C(=N)N[N+](=O)[O-])CC(C)C	1
c2cc1[nH]cc3c1c(c2)C4C=C(C)CN(C)C4(C3)	1
OC1ccc(cc1)NC	1
O=C3NC(=Nc1c3(ncn1C2OC(COP(=O)(O)O)C(O)C2(O)))N	0

c2cc1[nH]cc3c1c(c2)C4CC(C)CN(C)C4(C3)	1
Oc1cccc(c1)C(O)CNC	0
N=C1N=CN1	0
Nc1ccc3c(c1)c2ccccc2n3CC	1
O=C1NC(=N)C(=CN1C2OC(CO)C(O)C2)I	0
n1c(N)[nH]c2ccc(cc12)C	1
C2=C1CCCCC1(C)C3CCC4(C)(C(CCC4(C3(C2))))C(C)CCCC(C)C	0
O=C2CC3CCC1C4CCC(O)C4(C)(CCC1C3(C)(CC2C))	0
Oc1c(ncc(c1CO)CO)C	0
n2c1ccc(N)cc1[s+]c3cc(N)ccc23	1
O=C(O)c3cc1ccccc1c(N=Nc2ccc(cc2S(=O)(=O)O)C)c3(O)	0
NC	0
O=[N+][[O-]]NC	0
O1C2C1C3CC2C4C3C5(C(=C(C4(C5(CI)CI)CI)CI)CI)CI	0
O=C(O)C(NC(=O)C(NC(=O)CNC(=O)CN)Cc1cccc1)CC(C)C	0
O=C(OC4CC3=CCC1C(CCC2(C)(C(CCC12)C(C)CCCC(C)C))C3(C)CC4)C	0
n1cccc2cc(OC)cc(NC(C)CCCN)c12	1
n1cccn1N(Cc2ccc(OC)cc2)CCN(C)C	0
O=C(OC1CC6(OC1(C))(OC4CC(C(=O)OC3OC(C)C(O)C(OC(=O)C)C3(OC2OC(C)C(O)C(OC(=O)C)C2(C	0
O=C(N)C=3C(=O)C4(O)(C(O)=C2C(=O)c1c(O)cccc1C(O)(C)C2CC4(C(C=3(O))N(C)C))	0
O=C1C=C3C(=CC=C1(OC))c2c(OC)c(OC)c(OC)cc2CCC3(NC(=O)C)	0
O=C(OC1CC3N(C)C(C1)C2OC23)C(c4cccc4)CO	0
O=[N+][[O-]]C=C(NC)NCCSCc1oc(cc1)CN(C)C	0
O=C(O)c4cc(N=Nc1ccc(cc1C)c3ccc(N=Nc2c(N)c(cc(c2(N))S(=O)(=O)O)C)c(c3)C)ccc4(O)	1
O=C(OC)C3c1cc4C(=O)c5c(O)ccc(O)c5(C(=O)c4(c(O)c1C(OC2OC(C)C(O)C(N(C)C)C2)CC3(O)(CC)))	1
O1CC1Cc3cccc2cccc23	1
O=C1N=C(N)C=CN1C2OC(CO)C(O)C2(O)	0
O=C(OC)C5c1cc6C(=O)c7c(O)ccc(O)c7(C(=O)c6(c(O)c1C(OC4OC(C)C(OC3OC(C)C(OC2OC(C(=O)C=	1
O=C(O)CNC(=O)C(NC(=O)CCC(N)C(=O)O)CS	1
O=C(c1cccc1)C3OC3(c2cccc2)	1
C=C2C1CCC(C1)C2(C)C	0
n2c1occc1c(OC)c3ccc(OC)c(OC)c23	1
N1=NC(=NN)C2C=CC=CC2(=C1)	1
O=C(O)C(O)C(O)C(=O)O	0
O=C(N)CC1OC1	1
O=C1N=C(N)C=CN1C2C=C(CO)C(O)C2(O)	0
O=NOC(C)CC	1
O=C(Nc1cccc1)C2C(=O)NC(NC2(=O))=S	0
O=C=Nc1cccc(N=C=O)c1C	1
O=NN(c1cccc1)C	1
O=C(OCCCCC)C(=C)C	0
O=C(OCCOC(=O)C(=C)C)C(=C)C	0
O(c1ccc2NC(C=C(c2(c1))C)(C)C)CC	0
O=[N+][[O-]]c2ccc1cccc3c1c2CC3	1
O=C(OC)C1(OC1(C)(C(O)C(C)C))(C(=O)N)	1

O=C(O)C4=CC3=CCC1C(CCC2(C)(C(C(=O)NC(C)(C)C)CCC12))C3(C)CC4	0
c1cc(ccc1C)Br	0
O=C2Oc3c(OC)c1occc1c(OC)c3(C=C2)	0
Nc1ccc(cc1)c2ccc(cc2)Cl	1
O=C(OCCC(C)C)C	0
O=[N+](O-)[c1ccc(cc1)c2ccc(cc2[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1
O=[N+](O-)[c1cc(c(c(c1)[N+](=O)[O-])Cl)[N+](=O)[O-]	1
O=C1c5cccc(OC)c5(C(=O)c2c(O)c4c(c(O)c12)CC(O)(C(=O)CO)CC4(OC3OC(C)C(OC)C(N)C3))	1
Fc2ccc3c1ccc(F)cc1C(c3(c2))C	1
O=Nc2ccc3c1ccccc1Cc3(c2)	1
O=C(O)c1ccc(c(c1)[N+](=O)[O-])Cl	1
c1c(cc(cc1Cl)Cl)Cl	0
O=[N+](O-)[c2ccc(OP(=O)(OCC)c1ccccc1)cc2	1
O=C1C(=O)c3ccc(c4ccc2cccc1c2c34)[N+](=O)[O-]	1
O=C(N)N	0
[O-][N+](O-)=C1CCCC1	1
O=[N+](O-)[c1ccccc1	0
n1ccc(cc1)C	0
OC3c2ccc1cc5ccc6ccccc6(c5(nc1c2C4OC4(C3(O))))	1
n1c3ccccc3(cc2c1cccc2(N))	1
OC(COc1cccc2c1CC(O)C(O)C2)CNC(C)(C)C	0
n1c2ccc(N)c(c2(nc(c1C)C))C	1
O=[N+](O-)[c1ccccc1SSC(=C(Cl)Cl)Cl	1
O=C(Nc1ccc(cc1)S(=O)(=O)NC)C	0
O=CC=CC	1
O=C(ON(c1ccc(cc1)Sc2ccccc2)C(=O)C)C	1
O=CC1=CC(C)C2CC(C)(C)CC2(O)(C=C1(C=O))	1
c1ccc2c(c1)cc3ccc4cccc5ccc2c3c45	1
c1ccc5c(c1)ccc4ccc3c2ccccc2Cc3c45	1
Nc1ccc(N)c(c1)C	1
Oc2ccc3ccccc3(c2(N=Nc1cc(OC)ccc1(OC)))	1
Oc1cc(c(cc1C(C)(C)C)Sc2cc(c(O)cc2C)C(C)(C)C)C	0
O=C(OC)N	0
N#CC(Cl)Cl	1
O=C(OCC(C)(C)C)C(=C)C	0
O1CCOCCOCCOCCOCCOCCOCC1	0
O=C(OCCC(=C(NC(=O)Cc1cnc(nc1(N))C)C)SC(=O)c2ccccc2)c3ccccc3	0
O=C(C)Cl	0
N(=Nc1ccc(cc1)N(C)C)c2ccc(cc2)N(C)C	0
O(CCOCC1OC1)CC2OC2	1
Nc1cc(cc(c1)Cl)Cl	0
O=S(=O)(C)C	0
O=C(N)C(=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-])c2occc2	1
O=[N+](O-)[c1cccc(c1CO)[N+](=O)[O-]	0
O=P(Oc1ccccc1)(Oc2ccccc2)Oc3ccccc3	0

Oc1c(cc(c(c1Cl)Cl)Cl)Cl	0
O=S(=O)(OCC)C	1
N#Cc1ccc(cc1)C=Cc2ccc(cc2)[N+](=O)[O-]	1
O=[N+]([O-])c1ccc(c(c1)[N+](=O)[O-])I	1
c1ccc2cc3c(cc2(c1))c4ccccc4(cc3C)	1
O=[N+]([O-])c1cc(cc(c1)CCl)[N+](=O)[O-]	1
O=C(O)C=Cc1ccccc1[N+](=O)[O-]	0
O=C(OCc2c3ccccc3(cc1ccccc12))C	1
O=CC2=CC=C1C2(=COC=C1COC(=O)C)	1
O=[N+]([O-])c1cnc(n1CCO)CO	1
c1ccc2c(c1)cc3ccc4cccc5cc(c2c3c45)CCl	1
O=C(N(C(C)C)C(C)C)SCC(=CCl)Cl	1
O=[N+]([O-])c2cccc1cccn12	1
N#CC(OC(=O)C(c1ccc(cc1)Cl)C(C)C)c3cccc(Oc2ccccc2)c3	0
NC(C)CC	0
c1ccc3c(c1)c2cc(c(cc2C3C)C)C	1
n1c5ccccc5(cc4c1c2ccccc2c3ccccc34)	1
n2c5ccc1ccccc1c5(cc4c2ccc3c4(C=CCC3))	1
O=C(OC(C)CN(CC)CC)Nc1ccccc1(OCCCCCCC)	0
NN(c1ccc(cc1)C)c2ccc(cc2)C	1
O1C(C)CNCC1C	1
O=[N+]([O-])C(CO)CC	0
Oc4cccc1c4(ccc2c3ccccc3(ccc12))	1
O=C(NN=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-])c2ccc(O)cc2	1
O=C(OC(=O)OC(C)(C)C)OC(C)(C)C	0
Oc1cccc(c1)Nc2ccccc2	0
O=[N+]([O-])c2cccc(N=[N+](=[O-])c1cccc(c1C)[N+](=O)[O-])c2C	0
Fc2ccc3c1ccccc1C(c3(c2))C	1
O=[N+]([O-])c1cc(c(N)c(c1)Cl)[N+](=O)[O-]	1
O=C(OC)c1ccc(O)cc1	0
c1ccc2c(c1)cc4cccc3C=Cc2c34	1
n1c3ccc(N)cc3(nc2cc(OC)c(N)cc12)	1
O1CC1CBr	1
O=C(c3oc(c(c1ccccc1)c3(c2ccccc2)))[N+](=O)[O-])C	1
O=C(ON=CC(C)(C)SC)NC	0
O=S(=O)(O)c4ccc1ccc2cccc3ccc4(c1c23)	1
O=Nc1ccc2ccc3ccc(c4ccc1c2c34)[N+](=O)[O-]	1
n2cccc3ccc1ccccc1c23	1
n1ccc2ccc4cccc3ccc1c2c34	1
N#CC(=Cc1ccccc1Br)C(=O)OC	0
c1ccc3c(c1)ccc4c2ccccc2C5NC5(c34)	1
O=C(OCCCC)CCC	0
O(CCCC)CCCC	0
n1ncc2ccccc2(c1)	0
O=Cc1c(cccc1Cl)Cl	0

c1cc2cccc3c5cccc4cccc(c(c1)c23)c45	1
n1cc(nc3c1cc(c2c3(nc(N)n2C))C)C	1
N#CC(=C)C(=O)OC	1
O=C(C=Cc1ccc(O)cc1)c2cccc2	0
Oc5cccc1c5(ccc2c4C=Cc3cccc(cc12)c34)	1
O=C1OC(=O)c2cc(ccc12)[N+](=O)[O-]	1
O=CC=Cc1cccc1	0
n1c3ccc(N)cc3(nc2ccc(N)cc12)	1
O=[N+](O)c1ccc2c(c1)c(ns2)Cl	1
O=COC	0
O=C(NCCN(C)C)c2cccc3C(=O)c1cccc1Sc23	1
O=C1c3cccc3(C(=O)c2c(N)c(ccc12)C)	1
O=[N+](O)c1ccc(cc1)CCl	1
O=C(N(CCC)CCC)SCC	0
O=[N+](O)c1ccc(N)c(c1)C	1
n2cc1cc(N)ccc1s2	1
O(c1ccc(cc1(OC))CC=C)C	0
O=[N+](O)c1oc2ccc(cc2(c1))N(CCCl)CCCl	1
c1ccc5c(c1)ccc4c5(ccc3ccc2cccc2c34)	1
O(c1ccc(N)cc1)c2ccc(N)c(N)c2	1
O=C(O)C(N)CSC(=C(C(Cl)(Cl)Cl)Cl)Cl	1
O=C1N(C)CCC1	0
OC1C=CC=CC1(O)	1
O=[N+](O)C=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-]	1
O=C(O)C(N)CS	1
OC4c2ccc1c5cccc5(cc(c1c2C3OC3C4(O))CC)	1
OCCCCl	1
O=Nc2ccc(Oc1cccc1)cc2	1
c3c1c4c(cn1CC2CC2)CC5N(C)CC(C)CC5(c4(cc3Br))	0
n1c3c(N)cccc3(cc2c1CCCC2)	1
O=C4C=C(c1cccc1)N(c2cc(OC)cc(OC)c2Cl)C(c3ccc(F)cc3)=C4C	0
O=C(OCC(COC(=O)c1cccc1)(COC(=O)c2cccc2)COC(=O)c3cccc3)c4cccc4	0
Nc2ccc3c1cccc1Cc3(c2)	1
c1c[n+](cn1CSCCCCCCCCCC)C	1
Oc1ccc(cc1)CC=C	0
O=[N+](O)c1ccc(c(c1)NO)C	0
O=[N+](O)c3ccc1c5cccc4ccc(c(c2cccc3(c12))c45)[N+](=O)[O-]	1
O=C2C(=O)N(c4cc1c(OC)c(OC)ccc1c3c5OCOc5(cc2c34))C	1
O=[N+](O)c1cc2ccc3cc(cc4ccc(c1)c2c34)[N+](=O)[O-]	1
O=[N+](O)c3ccc(c2nc1cccc1c(NCCCN(C)C)c23)N(C)C	1
O=C(N(O)c1ccc(cc1)Cl)C	0
O=C(O)C(=C(C(=O)O)Cl)C(Cl)Cl	1
c1cc(ccc1Cl)Cl	0
O=C(Nc1cccc(c1)Cl)c2cc([N+](=O)[O-])sc2	1
O=C(Nc1ccc(cc1)Cc2ccc(N)cc2)C	0

O4C5c1cccc1c3c6cccc6(c2cccc2c3C45)	1
O=C1OC(=CC(O)=C1C(=O)C)C	0
O=[N+](O)c1c(c(c(OC)c(c1Cl)Cl)Cl)Cl	0
n1cccc1N(Cc2ccsc2)CCN(C)C	0
c2cc3ccc4cc1cccc(c1c5ccc(c2)c3c45)C	1
O=C(O)c1cc(N)cc(c1(O))S(=O)(=O)O	0
O=C(C=Cc1cccc1[N+](=O)[O-])c2cccc2	0
O=[N+](O)c1ccc2c(nsc2(c1))OC	1
n2cnc1c(ncn1C)c2N	1
OC1cc(cc(c1Cl)Cl)Cl	0
O=C2c3[nH]c4cccc4(c3(N=NN2(N=Cc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]))	1
c2cc1cccc3c1c(c2)C4NC34	1
[N-]=[N+]=NCC(N)C(=O)OC(C)(C)C	1
O=[N+](O)c1oc2cc(ccc2(c1))N(CCCl)CCCl	1
n1c(oc2cccc12)c3cccc3	0
O=C4N2CCc1cccc1C2CN(C(=O)C3CCCC3)C4	0
c1ccc3c(c1)c2ccc(cc2C3)NCl	1
N(CC)(CC)CC	0
O1CC1Cc2ccc(cc2)c3cccc3	1
OCCNC	0
O=C(c1cccc1Cl)c2cc(ccc2n3nc(nc3CNC(=O)CN)C(=O)N(C)C)Cl	0
OC1ccc2c(O)cccc2(c1)	1
O=C3c5cccc5(C(=O)c4c(O)c(c(OC2OC(COC1OCC(O)C(O)C1(O))C(O)C(O)C2(O))cc34)CO)	1
Nc1ccc2ccc4c5cccc5(cc3ccc1c2c34)	1
O=NN(C)CC(O)CO	1
CC(C(CBr)Br)Cl	1
O1C(C)C1C	1
O=S1OCC2C(CO1)C3(C(=C(C2(C3(Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl	0
O=S(=O)(NCC)c1ccc(cc1)C	0
O=C(NCc1ccc(cc1)Cl)C(C)Br	1
O=C(OCc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-])CC	1
OC(c1cccc1)C(NC)C	0
O=C(O)c1c(OC)c(ccc1Cl)Cl	0
O=C1c3c(O)ccc(c3(C(=O)c2c(ccc(O)c12)[N+](=O)[O-]))[N+](=O)[O-]	1
O=C(OC(C)(C)C)NN=Cc2c[n+](O)c1cccc1[n+](O)	1
O=C(N(O)c1ccc2cccc2(c1))C	1
NCCCCCN	0
OC2C=Cc1c3ncccc3(ccc1C2(O))	1
O=C1c3cc(OC)ccc3(OC2cc(OC)cc(OC)c12)	1
FC(Cl)(Cl)Cl	0
O=C1C(=CCC(C(=C)C)C1)C	0
O=C(O)C(N)CNCCCC(N)C(=O)O	0
Fc1cccc2ncccc12	1
O=[N+](O)c2ccc(C=Cc1cccc1)cc2	1
O=C(c3c(O)cc(OC2OC(CO)C(O)C(O)C2(OC1OC(C)C(O)C(O)C1(O)))cc3(O))CCc4ccc(OC)c(O)c4	0

O=C4C=C2C(=C1C=CC3(C)(C(O)CCC3(C1CC2)))CC4	0
O=C(O)c1cnccc1	0
n1cnc2[nH]cnc2(c1N)	1
NCC(C)C	0
O=C(O)CC2(OCCc1c3ccc(O)c(c3([nH]c12))CC)CC	1
O=C(C=Cc1occcc1)C	0
c1ccc5c(c1)cc2c4c5(ccc3cccc(cc2CCl)c34)	1
O=C(OCc4c5ccccc5(c1ccc2cccc3ccc4(c1c23)))C	1
O=[N+][O-]OC1COC2C(O)COC12	0
c1ccc2cc3c(cc2(c1))c5cccc4cc(cc3c45)C	1
O=C2Oc1cc(O)cc(c1c3cc(OC)cc(O)c23)C	0
N#CCCO	0
O=P(OC)(OC)SC	0
O=C(OCCCCCCCCCCC)c1ccccc1(C(=O)OCCCCCCCCCCC)	0
OC(CCl)CCl	1
O=CCC3CC(C)C(O)C=CC=CCC(OC(=O)CC(O)C(OC)C3(OC2OC(C)C(OC1OC(C)C(OC(=O)CCC)C(OC(=O	0
Nc1ccc(cc1)c2ccccc2	1
O=Cc1ccc(cc1Cl)Cl	0
OOc(c1ccccc1)(C)C	1
c1ccc(cc1)CSSCc2ccccc2	1
c1ccc(cc1)CSCCCL	1
O=C1C(=O)c3c4ccccc4(ccc3(c2ccccc12))	0
O=C1c5c(O)ccc(c5(OC2cc3OC4OC=CC4(O)(c3(c(O)c12))))CCC(O)(C)C	1
N#CNC(=N)N	1
O=P(OCCOCCCC)(OCCOCCCC)OCCOCCCC	0
O=C(C)CCC(=O)C	0
n2c(OC)c1ccc(N)cc1s2	1
C(Cl)Cl	1
O=[N+][O-]c1ccc(O)cc1[N+](=O)[O-]	1
c1ccc3c(c1)c2c(cccc2C3C)C	1
O=C2c3[nH]c4ccccc4(c3(N=NN2(N=Cc1ccccc1)))	1
O=C1NC(=O)N(C=C1CC)C2OC(CO)C(O)C2	0
Oc1cc(ccc1C(C)C)C	0
O=[N+][O-]c2nc1ncc(cc1n2C)c3ccccc3	1
Oc1ccccc1c2ccccc2(O)	0
FCC(F)(F)F	0
OCC2=CC=C1C2(=CC(=CC=C1C)C(=C)C)	1
O=C=Nc1ccc(cc1(OC))c2ccc(N=C=O)c(OC)c2	1
O=C1OCCC1	0
Nc1ccc(cc1C)C	1
c1cc(ccc1C)CC	0
O=CC=Cc1ccccc1[N+](=O)[O-]	1
O=C(Nc2ccc(Oc1ccc(N)cc1)cc2)C	1
O=[N+][O-]c1ccc3c(c1)c(cc2cccc(c23)[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1
O=C(O)C1=NN(c2cc3OCOc3(cc2(C1(=O))))CC	1

O=C1c5cccc(O)c5(C(=O)c2c(O)c4c(c(O)c12)CC(O)(C(=O)C)CC4(OC3OC(C)C(O)C(N)C3))	1
n1c2cccc2(ccc1C)	1
OCc1ccc(OC)cc1	0
O=C(c1cccc(c1)C)Cl	1
O(c1ccc(cc1(N))C)C	1
C(=Nc1cccc2cccc12)=S	1
O(c1ccc(N)cc1(N))CC	1
n1ccnc3c1cc(c2c3(nc(N)n2C))C	1
O=[N+][([O-])c5ccc2ccc3cc1cccc1c4ccc5(c2c34)	1
O=[N+][([O-])c1ccc3c(c1)[nH]c2cccc23	1
OCC(O)COC=CC=CC=CC=CCC	1
O=[N+][([O-])c5cc(c3c2c5(ccc1cccc(c12)c4c3CCCC4))][N+](=O)[O-]	1
C2=C(C)CC1C(C(=CCC1(C(C)C))C)C2	0
O=C(O)Cc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]	1
O=C(ON(c1ccc(cc1)c2cccc2)C(=O)C)C	1
O=C(N)c1cc(c(cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-])N2CC2	1
O=C(O)Cc1ccc(cc1)NC(=O)C	0
O=C2NC(=O)CN2(N=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-])	1
O=[N+][([O-])OCC(O[N+](=O)[O-])CO[N+](=O)[O-]	1
n3c(OCC1OC1)c2cccc2s3	1
O=C(N(c2ccc(N=Nc1ccc(cc1)N(C(=O)C)C)cc2)C)C	0
O1CC1COC(C)(C)C	1
OC6C=Cc2c(cc4c5cccc5(cc3c1cccc1c2c34))C6(O)	1
O=C(OCOC(=O)C(C)(C)C)C4=C(C=Cc1c(ncs1)C)CSC3N4(C(=O)C3(NC(=O)C(=NOC)c2nc(N)sc2))	0
OCc2ccnc1cccc12	0
Oc1ccc2ncccc2(c1)	0
CCBr	1
O=[N+][([O-])c4cc3cccc2ccc1cccc4(c1c23)	1
O1CC1CCc2ccc(cc2)c3cccc3	1
O=CCCC	0
O=C(C=C)NC(C)(C)CC(=O)C	0
O=C(O)c1ccc(cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1
NC(C)(C)C1CCC(N)(C)CC1	0
OCC1OC1	1
O=S(=O)(O)c3cc(N=Nc1cc(c(cc1C)C)S(=O)(=O)O)c(O)c2cccc23	0
O=C(NCCc2c[nH]c1ccc(OC)cc12)C	0
n1c(nc(nc1NC(C)C)Cl)NC(C)C	0
O=[N+][([O-])c1ccc(c(N)c1)C	1
O=C(OC(C)(C)C)C(=C)C	0
O=C(Nc1cccc3c1c2cccc2C3)C	1
C=CCCCCCCCC	0
O=P(OC(=CBr)c1ccc(cc1Cl)Cl)(OCC)OCC	0
O=NN(C)Cc1ccc(OC)cc1	0
O(CC)P(OCC)(=S)SCSC(C)(C)C	0
Fc1cccc1c2cccc2	0

c1ccc2cc(ccc2(c1))Cl	0
O=[N+][O-]c2c3cccc3(cc1c2(C=CC(O)C1(O)))	1
n1cc(c(nc1N)N)Cc2ccc(OC)c(OC)c2	1
O=C(N)C1OC1	1
n1cccc1c2nc(ccc2)c3ncccc3	1
C=Cc1ccc(N)cc1	1
O=C(O)CCC(C)C3CCC2C4C(=O)CC1CC(O)CCC1(C)C4(CCC23(C))	0
O=S(=O)(O)OCc3c1cccc1c(c2c4cccc4(ccc23))CO	1
O=C(OC2CCC3C4CC=C1NC(=O)CCC1(C)C4(CCC23(C)))CCCc5ccc(cc5)N(CCCl)CCCl	1
OCc4cc1cccc1c3ccc2cccc2c34	1
O=[N+][O-]c1c(N)c(cc(N)c1C)C	1
O=C1c3cccc3(C(=O)c2c(O)cc(O)cc12)	1
c1c(cc(c(c1Cl)Cl)Cl)Cl	0
O=C(O)c1cccc(O)c1(N)	0
O=P(OCCCC)(OCCCC)OCCCC	0
O=NOCC(C)C	1
O=[N+][O-]c1ccc2nc3ccc(cc3(nc2(c1))))[N+](=O)[O-]	1
NCCCN(C)C	0
n1ccc3c(c1)c(c2c4cc(N)ccc4([nH]c2c3C))C	1
c1ccc(cc1)N(c2cccc2)c3cccc3	0
O=C1C(=O)C(O)=C1(O)	0
OC(c4ccc1ccc2cccc3ccc4(c1c23))C	1
O=C(O)C(N)CCC(=O)Nc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]	0
NC(C)CC(C)C	0
O=C1OC(C)CN1CC(O)C	0
O=S(=O)(O)c1cc(ccc1(N))C	0
O=NN(C)CCCC(=O)c1cnccc1	1
O=NN(C(=O)N)CC	1
O=C(Nc1ccc(cc1)Cc2ccc(cc2)NC(=O)C)C	0
N#Cc1cccc(c1)C	0
Nc1ccc(cc1C)c2cccc2C	1
Nc1cccc(N)c1	1
O=C(Nc1ccc(OCC(O)CNC(C)(C)C)c(c1)C(=O)C)N(CC)CC	0
O=C(Nc1ccc(cc1Cl)Cc2ccc(N)c(c2)Cl)C	1
O=C3c2cc(OCC)c1c4cccc4(ccc1c2CC3)	0
O=[N+][O-]c1cc(N)c(O)c(c1)[N+](=O)[O-]	1
O=C(O)C(N)CCSCC	0
N#Cc1cccc1C	0
O=CC(CBr)Br	1
Oc1ccc(cc1)c2cccc2	1
O=C(C=Cc1cccc1)C	1
O=[N+][O-]c1cc(c(OC)c(c1)[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1
Oc1cc(ccc1Cl)Cl	0
O=[N+][O-]c4cccc3c2cccc1cccc(c12)c34	1
OC(C=CC(C)C3CCC2C(=CC=C1C(=C)C(O)CC(O)C1)CCCC23(C))C4CC4	0

n1ccnc(c1C)C	0
O=C1Nc3ccc(cc3(C(=NC1(O))c2ccccc2))Cl	0
Oc1ccc(cc1)c2nc3cc(ccc3([nH]2))c4nc5cc(ccc5([nH]4))N6CCN(C)CC6	0
OC(COc2cccc3[nH]c1ccccc1c23)CNC(C)C	0
N1=C(NCC1)c2ccc(cc2)c3cc4ccc(cc4([nH]3))C5=NCCN5	0
O=C1Oc2c(OCC=C(C)C)c3occc3(cc2(C=C1))	1
O=C1c3ccccc3(C(=O)c2c(O)c(c(O)cc12)CO)	1
c1ccc2cc3ccccc3(cc2(c1))	1
O=C(c1cc(O)c(O)cc1(O))CCC	1
n3c1ccccc1c(NCCCCCOc2ccc(cc2)N(CC)CCCl)c4ccccc34	1
Nc1ccc(cc1)C=Cc2cccc(c2)Cl	1
O=C(OCC)C(C)Br	1
O=Cc1ccc2ccc3cccc4ccc1c2c34	1
O=C(N)C3N(C(=O)C(NC(=O)C1NC(=O)C(C)SC1)Cc2nc[nH]c2)CCC3	0
O=P(Oc1ccc(cc1C)C)(Oc2ccc(cc2C)C)Oc3ccc(cc3C)C	0
Nc1ccc2ccccc2(c1)	1
O=S(=O)(O)c1cccc(N)c1	0
O=C1N(C(=O)N(C(=O)N1CCO)CCO)CCO	0
O=[N+][O-]c2ccc(C=Cc1ccc(OC)cc1)cc2	1
c1ccc(cc1)C=Cc2ccccc2	0
O=C1OC(=O)c2ccccc12	0
O=C(Oc1ccccc1(OC(C)C))NC	1
OCCOC	0
c1ccc3c(c1)cc5c2ccccc2c4cccc3c45	1
C=CCCl	1
O=C(C)C(Cl)(Cl)Cl	1
n2c1occc1c(OC)c3cc4OCOc4(cc23)	1
O=[N+][O-]c3ccc2ccc1cccc4c1c2c3C5OC45	1
O=NSCC(NC(=O)CCC(N)C(=O)O)C(=O)NCC(=O)O	1
O=C(O)COCCCC	0
Oc2cccc3cc4c5ccccc5(c1ccccc1c4(cc23))	1
N(=Nc1ccccc1)Nc2ccccc2	1
OC5c4cc1OCOc1c3c2ccccc2CC(c34)N(C)C5	1
n1c(N)n(c2ccc(OC)cc12)C	1
O=C2c1ccccc1c3ccccc23	0
O=C(O)C2=CN1c3c(OCC1C)c(c(F)cc3(C2(=O)))C4(N)(CC4)	0
O=[N+][O-]c1cc2ccccc2(cc1C)	0
O=C(OC1CC(C)CCC1C(C)C)c2ccccc2(N)	0
O=C1c4ccc(OC)cc4(c2nccc3cc(OC)c(OC)c1c23)	1
OC(C)CBr	1
O=CC2=CC1CC(C)(C)CC1C3(C(=O)OC)(CC23(C=O))	1
O=[N+][O-]c2ccc3oc1ccc(cc1c3(c2))[N+](=O)[O-]	1
O=C(OCC=Cc1ccccc1)c2ccccc2(N)	0
O1CCSCC1	0
O=C1OC(C=C1)=C(Cl)Cl	1

ON=C2Nc1c3cccnc3(ccc1N2C)	1
O=C1Oc3ccc(c4ccc2cccc1c2c34)[N+](=O)[O-]	1
O=C1N(N=C(C)C1)c2ccccc2	0
O=C1c3ccccc3(C(=O)c2c(O)c(c(O)cc12)COCC)	1
n1c(OP(OC)(OC)=S)c(cc(c1Cl)Cl)Cl	0
O=C(OCC=C)CCCC	0
c1ccc4c(c1)ccc3c4(ccc2ccc(cc23)C)	1
O=C(N(c1c(cccc1CC)C)COCC)CCl	0
O(c1ccccc1C)CC2OC2	1
Nc1ccc(c(c1)Cl)Cl	0
c1ccc(cc1)c3ccc(c(c3(c2ccccc2))N(CC)CC)N(CC)CC	1
O=C(c1cc(N)ccc1(OCC(O)CNC(C)(C)C))C	0
O=CC(C)C	0
O1CCOCCOCCOCCOCC1	0
O=S(c1ccc(cc1)Cl)C	0
O=C(O)C(Cl)(Cl)Cl	0
O=[N+](=[O-])c3ccc2ccc1ccc(c4c1c2c3c5c4CCCC5)[N+](=O)[O-]	1
O=CN(C(=O)CSP(OC)(OC)=S)C	0
O=[N+](=[O-])OCCN([N+](=O)[O-])CC	1
O=C(O)CCCCCCCC	0
O=C2c1ccccc1c3cc(ccc23)[N+](=O)[O-]	1
O=C1C=C(OC)C=C(C1(=O))C(C)(C)C	0
O=C(OCC(=O)NCCCOc1cccc(c1)CN2CCCCC2)C	0
c1ccc(c(c1)C)Br	0
c1ccc2c(c1)cc3ccc5c4c(ccc2c34)ccc5C	1
O=C(OCC)c1ccccc1C3=C4C=C(C(=NCC)C=C4(Oc2cc(NCC)c(cc23)C))C	0
OC4c2cc(c1c5ccccc5(ccc1c2C3OC3C4(O)))C	0
O=C1NC(C(=O)NC1)CC(C)C	0
c1ccc5c(c1)ccc3c5(ccc2c4cccc4(ccc23))	1
O=[N+](=[O-])c1cc(N)c(O)c(c1)Cl	1
O=C(O)c1ccc2C(=O)OC(=O)c2(c1)	0
O=C(C=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-])NCCCC	1
O=C(O)C=CC(=O)O	0
O=C1Oc2cc3occc3(cc2(C=C1))	0
O=C(OCCCC)C=CC(=O)OCCCC	0
O(CC1OC1)CC(C)(C)COCC2OC2	1
O=[N+](=[O-])c1ccc(O)c(N)c1	1
N(NC)C	0
O=C1C=CC(=O)C(=C1)c2ccccc2	0
O=C1c3cccc(c3(C(=O)c2cccc(c12)[N+](=O)[O-]))S(=O)(=O)O	1
O=NN(C)Cc1ccc(cc1)Cl	1
[N-]=[N+]=Nc1ccc(cc1)Nc3c4ccccc4(nc2ccccc23)	1
O=Nc2c1ccccc1c3ccc5cccc4ccc2c3c45	1
N#CC1N(CCOC1)C6CC(OC3c2c(O)c4C(=O)c5c(OC)cccc5(C(=O)c4(c(O)c2CC(O)(C(=O)CO)C3)))OC(C	0
O=NN(CCC)CCC	1

O=Cc1oc(cc1)CO	1
O4C5c3cccc2cc1c6cccc6(ccc1c(c23)C45)	1
O=C(c1cocc1)CCC(O)C	0
c1ccc3c(c1)ccc2cc(cc(c23)C)C	1
O=S(=O)(O)c5cc(ccc5(C=Cc1ccc(cc1S(=O)(=O)O)Nc2nc(nc(n2)N3CCOCC3)Nc4cccc4))Nc6nc(nc(ONc1cccc(c1C)C	0
O=C4Oc1c(cc3c2c1CCCN2CCC3)C(=C4)C	1
O=[N+][([O-])c1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]	1
O=[N+][([O-])c1cccc(c1)CBr	0
O=[N+][([O-])c2ccc(C=Cc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-])cc2	1
O=CCOC	1
N(=CN(C)C)c1ccc(cc1C)Cl	0
O=[N+][([O-])C4=Cc2cc1cc5cccc5(cc1c3cccc4(c23))	1
C=CCNC(N)=S	0
C=C(c1cccc1)C	0
c1ccc(cc1)NC	0
O=P1(OCCCN1(CCCl))(NCCCl)	1
N#CCC	0
CC(C)C(C)C	0
N1=C4C=CC(C=C4(Oc2cc(N)c3cccc3(c12)))=[N+](CC)CC	1
Oc1cc(O)c2cccc2(c1)	1
O=C(c1ccc(OC(C(=O)OC(C)C)(C)C)cc1)c2ccc(cc2)Cl	0
O=P(OC(=CCl)c1ccc(cc1Cl)Cl)(OCC)OCC	0
O=C1c3cccc3(C(=O)c2c(O)c(O)ccc12)	1
O=S(=O)(O)c2ccc3c(N=Nc1cc(c(cc1(OC))S(=O)(=O)O)C)c(O)ccc3(c2)	0
O=[N+][([O-])c2cc3[nH]c1cccc1c3(cc2(N))	1
c1ccc3c(c1)ccc2c3(cccc2C)	1
O=C(OCC(C)C)C=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-]	1
Nc1ccc(cc1)CCc2ccc(N)cc2	1
O=P(Oc1nc(nc(c1)C)C(C)C)(OCC)OCC	1
O=C(OCCCC)C=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-]	1
N#Cc1ccc2nc(N)n(c2(c1))C	1
O=C(OC)C12(OC2(C)(C(O)(NC1(=O))C(C)C))	1
n1cccc2ccc(N)cc12	1
O(c1ccc(cc1)C)CC2OC2	1
O1CC1CC(Cl)(Cl)Cl	1
O=C(OC)c1occc1	0
O=C(Nc4ccc(C=NN1N=Nc2c3cccc3([nH]c2(C1(=O))))cc4)C	1
O=C1c3cccc3(C(=O)c2c(N)c(N)ccc12)	1
O=C(Nc1cccc1C)c2cc([N+](=O)[O-])sc2	1
O(OC(C)(C)C)C(c1cccc(c1)C(OOC(C)(C)C)(C)C)C	0
N2=C1N(C(=S)SS1)CC2	0
O=C(Nc1ccc2cccnc2(c1))C	1
O=NN(C(=O)NC1CCC(C)CC1)CCCl	1
O=[N+][([O-])c1ccc2[nH]c3c(cc(c(c3(c2(c1))))C)[N+](=O)[O-]C	1

O=[N+][O-]c5ccc2c1cccc1c4cccc3ccc5(c2c34)	1
n1ccc(cc1)N(C)C	0
ONc1c(cccc1C)C	1
O=C(OC)c1cc(ccc1(N))c2ccc(N)c(c2)C(=O)OC	1
O=[N+][O-]c1cccc(N)c1(N)	1
O=[N+][O-]c3cccc2c3(nc1cccc1c2(NCCCN(C)C))	1
[O-][N+](=NCC)CC	0
O=C(N)Nc1ccc(cc1)C	0
O=C(O)C2N(C(=O)CCS)C(c1ccccc1(O))SC2	0
N1CC1C	1
O=C(O)c1cc(N)ccc1(O)	0
O=[N+][O-]c2ccc(N=Nc1ccc(cc1)N(CC)CC[N+](C)(C)C)c(c2)Cl	1
O=[N+][O-]c4ccc1ccc2cccc3ccc4(c1c23)	1
O=[N+][O-]c2ccc(N=Nc1ccc(cc1)N(CC)CC)cc2	1
O=C1OC(O)C(=C1Cl)C	1
O=C(O)C=Cc1ccc(N)cc1	0
O=C3c4cccc4(C(=O)c2c3(ccc(c2(Nc1ccccc1))C))	1
O=C1C(=C(C(=O)C(=C1Cl)Cl)Cl)Cl	1
O=[N+][O-]c3ccc1ccc5c2c(ccc3(c12))c4cccc4[n+](5)[O-]	1
ONc3cnc2c(nc1cccn12)c3	1
O=NN(CC(=O)O)CC(=O)O	1
O=P(Oc1nc(c(cc1Cl)Cl)Cl)(OCC)OCC	0
O=C(O)C2N(C(=O)C(NC(C(=O)OCC)CCc1ccccc1)C)C3CCCCC3(C2)	0
N#CCCNCCC#N	0
N(CCC)CCC	0
O=NN(C(=O)c1c(ncn1C)N(C(=O)OC(C)(C)C)C)C	1
Oc1cccc(N)c1	1
O=[N+][O-]c1cc(ccc1(N))Cl	1
O=C(OCC)CC(C(=O)OCC)SP(=O)(OC)SC	0
ONc1cccc(c1)C	1
O=C2c1cccc1C(=O)C2C(=O)C(C)(C)C	0
O=C(NS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1)C	0
O=C(c1ccc(F)cc1)CCCN3CCN(c2ncccc2)CC3	0
Nc1ccc3c(c1)[nH]c2cccc23	1
O=C(c1ccccc1)c2ccccc2	0
O=C(O)C1=CN(c2c(F)c(c(F)cc2(C1(=O))))N3CCN(C)CC3)CCF	1
O=C(OC)C12(OC2(C)(C(O)(OC1(=O))C))	1
FC(F)(F)c1ccccc1(N)	0
CC1CS1	0
O=C(O)CCC(C)C2CCC3C4CCC1CC(O)CCC1(C)C4(CC(=O)C23(C))	0
O=C(C=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-])NCC(C)(C)C	1
OCC(NC1CC(O)(CO)C(O)C(O)C1(O))CO	0
O=S(=O)(O)c7cc8ccc(N=Nc1ccc(N)cc1(N))cc8(c(O)c7(N=Nc2ccc(cc2)Nc6ccc(N=Nc4c(O)c5cc(N=Nc	1
O=Nc1ccc(OP(OC)(OC)=S)cc1C	1
O=C(OCCCCOC(=O)C(=C)C)C(=C)C	0

N(C(C)C)C(C)C	0
O=C1N(C(=O)N(C(=O)N1CC2OC2)CC3OC3)CC4OC4	1
O=S(=O)(O)c1cc(c(cc1(N))C)Cl	0
O=C(O)CNC(=O)C(NC(=O)CCC(N)C(=O)O)CSCCCl	1
N1(C)CCN(C)CC1	0
O=[N+][([O-])c1ccc2c3cccc(c3(cc(c2(c1)))[N+](=O)[O-]))[N+](=O)[O-]	1
Oc2ccc3ccc4c(cc1[nH]c(nc1c4(c3(c2))))C)C	1
O=C1c3cc(OC)ccc3(Oc2cc(O)cc(O)c12)	1
Nc1ccc2ccc3cccc4ccc1c2c34	1
O=C(OCC)C(CC(=O)C(NC(=O)C(N)Cc1ccc(F)cc1)Cc2cccc(c2)N(CCCl)CCCl)CCSC	1
c2cc1cccc3c1c(c2)CC3	0
O=C(O)C=Cc1nc[nH]c1	0
O=C1c5c(O)cccc5(Oc3c1c(OC)cc2OC4OC=CC4(c23))	1
Nc1cccc2cccc(N)c12	1
c1ccc2c(c1)cc4C=Cc3cccc2c34	1
OCC1OCCC1	0
O=C1NC(Nc2cccc12)c3ccc([N+](=O)[O-])s3	1
O=C3C(OC2OC(CO)C(OC1OC(C)C(O)C1(O))C(O)C2(O))=C(Oc4cc(OCCO)cc(O)c34)c5ccc(OCCO	0
N(=Nc1cccc1C)c2ccc(N)c(c2(N))C	1
OC4c3ccc2nc6ccc1cccc1c6(cc2c3C5OC5(C4(O)))	1
n3c1cccc1c(NCCCC2ccc(cc2)N(CC)CCCl)c4cccc34	1
O=[N+][([O-])c2ccc3ccc1cccc1c3(c2)	1
Oc1ccc(cc1)C(=C(c2ccc(O)cc2)CC)CC	0
O5C6c4cccc3cc2ccc1cccc1c2c(c34)C56	1
O=C(OCC)CNC(=O)C(C)Br	1
O=[N+][([O-])c3ccc4c1cccc2c1c(ccc2[N+](=O)[O-])c4(c3)	1
O=C(C=Cc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-])c2ccc(cc2)[N+](=O)[O-]	1
n1c(N)n(c2ccc(cc12)Cl)C	1
Oc3ccc4cccc4(c3(N=Nc2ccc(N=Nc1cccc1C)cc2C))	1
O=C(CCc1cccc1)Cl	1
[O-][N+][([O-])=C(C)C	1
C(=C(C(Cl)Cl)Cl)Cl	1
O=[N+][([O-])c1ccc(cc1)c3nc2c(ncnc2n3c4ccc(cc4)[N+](=O)[O-])N	1
O=S(=O)(O)Oc2ccc3ccc4cc1cccc1c5ccc2c3c45	1
NCCNCCN	0
O=NN1CCCC1	1
N(C)(C)CCCl	1
N#CN2CC(C)CC3c4cccc1c4(c(cn1CC=C)CC23)	1
O=C(NCCN(C)C)c1cccc2C(=O)c3cccc3(Nc12)	1
O=C(OCc1ccc2OCOc2(c1))C	0
O=[N+][([O-])c1cccc(OC)c1	0
c1ccc(cc1)C(c2cccc2)c3cccc3	0
OC(C)(C)C1CC=C(C)CC1	0
O=C4C=CC(=O)c1c4(nc(c2c3cccc3([nH]c12))C)	1
O=C(OCN1C(=O)C2=C(C1(=O))CCCC2)C3C(C=C(C)C)C3(C)(C)	1

O=C(Nc1ccc(cc1)CC)c2cc([N+](=O)[O-])sc2	1
O1CC1CCc2ccccc2	1
O=[N+](O)c1cc(N)ccc1(N)	1
O=C(C=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-])NCCCCC	1
ON=C(C)CC	1
n2c1occc1c(OC)c3cc(OC)c(OC)cc23	1
c1cc4c3c(c1)C6NC6(c2cccc(c23)C5NC45)	1
O=[N+](O)c5ccc2ccc3cc1C=CCc1c4ccc5(c2c34)	1
c1ccc4c(c1)ccc3c4(cc2cccc2c3CCl)	1
Oc1cc(O)c(cc1(O))CCN	1
ONc2ccc(N=Nc1cccc1)cc2	1
Nc1ccc(cc1)N(CC)CC	1
c1ccc(c(c1)C)Cl	0
n1cc3cccc4ccc2cccc1c2c34	1
O1CC1CCC2OC2	1
O=CCCl	1
N(=Nc1ccc(cc1C)N(C)C)c2ccccc2	1
O=S(=O)(NN)c1ccc(cc1)C	1
O=C(OC)c1oc(c(c1Cl)Cl)[N+](=O)[O-]	1
O=C1N=C(N)C(O)=CN1C2OC(CO)C(O)C2(O)	0
OCCCC1cccc1	0
O=C(OC(C)(C)C)Sc1nc(cc(n1)C)C	0
O=C(O)C=Cc1cccc1	0
O=C1N(C(=O)C(N1Cl)(C)C)Cl	0
O=C(OCC(O)COc1ccc(cc1)C(c2ccc(OCC(O)COC(=O)C(=C)C)cc2)(C)C)C(=C)C	0
O=C(C)CC	0
O=C(O)C(Br)Br	1
O=C(c1cccc1)CBr	0
O=C(c1cccc1(F))Cl	1
Oc1ccc2[nH]c3c(cc(N)c(c3(c2(c1))))C)C	1
O=C1c2c(O)ccc(O)c2(C(=O)C(=C1Cl)Cl)	1
O1CCNCC1	0
O=C1Oc2cccc2(N1)	0
N(=Nc1c(N)ccc2cccc12)c3cccc3	0
O=C(NP(=O)(OC)SC)C	0
O=[N+](O)c1ccc2cn[nH]c2(c1)	1
[N-]=[N+]=C1C=NC(=O)NC1(=O)	1
O(c1cc(N)ccc1C)C	1
Nc1c(cc(c(N)c1C)C)C	1
O=P(OC)(OC)C(O)C(Cl)(Cl)Cl	1
O=C(OCCC)C(=C)C	0
O=C(Nc1ccc2c(c1)Cc3cccc(O)c23)C	1
O=C(n1cncc1)C	0
N#CCCC#N	0
O=C(c1cccc1)N(O)c3ccc4c2cccc2Cc4(c3)	1

O=Cc1occcc1	1
O=[N+][O-]c3cnc2c(nc1ccccc12)c3	1
Nc1ccc(cc1C)c2ccc(N)c(c2)C	1
O1c2cc(c(cc2(OC1))CCC)COCCOCCOCCCC	0
O=C(Nc1cccc(c1)[N+](=O)[O-])c3cc4cccc4(c(N=Nc2cc(ccc2(OC)))[N+](=O)[O-])c3(O))	1
OC	0
O=[N+][O-]C(C)(C)Cl	1
FC(F)(F)c1ccc(cc1)Cl	0
O=S(=O)(Nc1nncc(C)s1)c2ccc(N)cc2	0
O=C(Nc1ccc(cc1)S(=O)(=O)N(CC)CC)C	0
NC(c1c(ccccc1Cl)Cl)=S	1
O=C(O)CC(N)C(=O)O	0
O=C(OCCCC)c1cccc1(N)	0
O=C(c1ccc(F)cc1)C3OC3(c2cccc2)	1
c1ccc3c(c1)ccc2ccc(c(c23)C)C	0
O=[N+][O-]c1ccc2cc3ccccc3(cc2(c1))	1
O=C4C=Cc2c(ccc1c3ccccc3(ccc12))C4(=O)	0
O=C(c1ccc(cc1)C)c2cc(O)c(O)c(c2)[N+](=O)[O-]	0
c1ccc3c(c1)c2cc6c(cc2C4NC34)c5ccccc5C7NC67	1
O=[N+][O-]c1ccc(c(c1)[N+](=O)[O-])S(=O)(=O)O	0
O=[N+][O-]c1ccc(O)c(c1)[N+](=O)[O-]	0
O=C(N(CC)CC)Cc1cccc1	0
O=NN(CC(=O)O)CC1(O)(OCC(O)C(O)C1(O))	0
O=C(OCc1cccc1)C	0
O=C(OCc2cccc(Oc1cccc1)c2)C3C(C=C(Cl)Cl)C3(C)(C)	1
CC(Br)Br	0
O=C3c2cc(c1c4cccc4(ccc1c2CC3))C	1
c1ccc5c(c1)c2ccc3cccc4ccc(c2c34)c5C	1
O=C(OCCCCCOC(=O)C=C)C=C	0
O=CCO	0
O=C(OCC(C)C)c1cccc1(C(=O)OCC(C)C)	0
O=P(O)(OCC(CBr)Br)OCC(CBr)Br	1
O=[N+][O-]c1ccc(N)c(O)c1	1
Oc1ccc(c(c1Cl)Cl)Cl	0
Oc1cc(O)cc(c1)CCCCC	0
c1ccc3c(c1)c2cccc2C4NC34	1
O=C(O)COc1ccc2cccc2(c1)	0
c1cc(ccc1N(CCCl)CCCl)C	0
O=S(=O)(N(c1cccc1)SC(F)(Cl)Cl)N(C)C	0
n1cccc2cc(ccc12)Cl	1
n2c1cccc1sc2SSc4nc3cccc3s4	1
c1cc[nH]c1	0
O=C1NC(=O)CN(C1)CCCN2CC(=O)NC(=O)C2	0
n1cc(nc3c1ccc2c3(nc(N)n2C))C	1
n2c1occcc1c(OC)c3cc(OC)cc(OC)c23	1

<chem>n2c(OC)c1cc(N)ccc1s2</chem>	1
<chem>O=[N+][([O-])c3ccc1ccc5c2c(ccc3(c12))c4cccc4c5[N+](=O)[O-]</chem>	1
<chem>O=C(O)CCCOc1ccc(cc1Cl)Cl</chem>	0
<chem>O=C(O)C(N)CSC(=C(C(=C(Cl)Cl)Cl)Cl)Cl</chem>	1
<chem>O=C(OC(C(=O)OCCCC)(CC(=O)OCCCC)CC(=O)OCCCC)C</chem>	0
<chem>O=C1C=CC3(C(=C1)CC(C2C4CC(C)C(OC(=O)CC)(C(=O)COC(=O)CC)C4(C)(CC(O)C23))Cl)(C)</chem>	0
<chem>C=Cc1cccc1Cl</chem>	0
<chem>O=C(Nc1ccc(cc1)C3OC3(C(=O)c2cccc2))C</chem>	1
<chem>O=C(c1ccc(cc1)Br)CBr</chem>	0
<chem>O=C1NC(=O)NCN1</chem>	1
<chem>Nc2c1cccc1[n+](c3cccc23)C</chem>	1
<chem>O=CC1=CCC(C(=C)C)CC1</chem>	0
<chem>c1ccc2c(c1)ccc3c2c(ccc3C)C</chem>	1
<chem>O=C1C=Cc3cccc2cccc1c23</chem>	1
<chem>[N-]=[N+]=NCc1cccc1</chem>	1
<chem>O=[N+][([O-])c1cc[n+][([O-])cc1</chem>	1
<chem>O=C(O)C(OC1cc(c(cc1Cl)Cl)Cl)C</chem>	0
<chem>n2c1cccc1c(c3cc(c4cccc4(c23))C)C</chem>	1
<chem>O=CC=O</chem>	1
<chem>OCCC</chem>	0
<chem>n1c(cccc1Cl)C(Cl)(Cl)Cl</chem>	1
<chem>c1ccsc1</chem>	0
<chem>O=[N+][([O-])c2ccc3c1cc5c(cc1CCc3(c2))c4cccc4CC5</chem>	1
<chem>O=C1C=CC(=O)c2cccc12</chem>	1
<chem>O=C(NCCc2c[nH]c1cc(O)c(OC)cc12)C</chem>	0
<chem>O=[N+][([O-])c3ccc(c2nc1cccc1c(n2)NCCO)s3</chem>	1
<chem>O=C(O)CC</chem>	0
<chem>OC1CCCCC1</chem>	0
<chem>O1CC1(c2ccc(cc2)c3cccc3)C</chem>	1
<chem>O=C(O)c2cccn2(Nc1cccc(c1)C(F)(F)F)</chem>	0
<chem>CC1CCCC1</chem>	0
<chem>O=C(OCC=Cc1cccc1)C=Cc2cccc2</chem>	1
<chem>O(c1cccc1CC2OC2)C</chem>	1
<chem>O=C1C=Cc2c3nc(N)n(c3(ccc2(N1)))C</chem>	1
<chem>Fc1ccc2ncccc2(c1)</chem>	1
<chem>O=[N+][([O-])c1cc(O)c2ccc3cccc4ccc1c2c34</chem>	1
<chem>O=C1C=C(OC)C(=O)c2nc(c3c4cccc4([nH]c3(c12)))C</chem>	1
<chem>Oc3ccc4cccc4(c3(N=Nc2ccc(N=Nc1cccc1)cc2))</chem>	1
<chem>Fc1ccnc2cccc12</chem>	1
<chem>c1(c(c(c(c1Br)Br)Br)Br)Br</chem>	0
<chem>CC(C)(C)c4ccc(OP1OCC3(CO1)(COP(Oc2ccc(cc2C(C)(C)C(C)(C)OC3))c(c4)C(C)(C)C</chem>	0
<chem>O=C(Nc1ccc(c(c1)Cl)Cl)N(C)C</chem>	1
<chem>O=C(OCC=C(C=CC=C(C=CC1=C(C)CCCC1(C)C)C)C)CCCCCCCCCCCC</chem>	0
<chem>o2c1cccc1c3cc(ccc23)Cl</chem>	1
<chem>O=[N+][([O-])c1ccc2ccc3ccc(N)c4ccc1c2c34</chem>	1

Nc1cccc2ccccc12	1
c1ccc5c(c1)c2ccc3cccc4ccc(c2c34)c5CBr	1
n4ccc5ccc3cc2c(ccc1ccccc12)cc3c5(c4)	1
n1c[nH]c2cnc(nc12)N	0
O=C1c4ccccc4(C(=O)c2c(cc(c(N)c12)S(=O)(=O)O)NC3CCCCC3)	0
O=NN(C=O)CC	1
Oc1ccc(cc1Cc2cc(ccc2(O))Cl)Cl	1
O=C(N)Cl	0
O=[N+](=[O-])c1c(c(c(c(c1C)[N+](=O)[O-])C(C)(C)C)[N+](=O)[O-])C	0
O=C4c5c(O)cccc5(Oc2c4(c(O)cc1OC3OCCC3(c12)))	0
Oc1cc(N)ccc1C	1
O=C1OC(=CC1)C	0
O=C(OC(C#CC)(c1ccccc1)c2ccccc2)NC3CCCCC3	1
Oc3ccc4ccc2ccc1ccn(c1c2c4(c3))C	1
o1c(ccc1C)C	0
O=[N+](=[O-])c1ccc(cc1)S	1
c1ccc2c(c1)c4cccc3ccc(c2c34)CCl	1
O=C1NCCN1c2ncc([N+](=O)[O-])s2	1
O=CC2C=CC3C4(C)(CCC1C(C)(C)CCCC1(C)C4(CC(OC(=O)C)C3(C)(C2(C=O))))	0
O=C(Nc1ccccc1)C(C)C	0
O=C(O)Cc1ccc(cc1)Cl	0
n1ccc2ccccc2(c1)	0
O=C(C=Cc1ccccc1)c2ccc(cc2)NC(=O)C	0
O=C1Oc3c(O)c(O)cc4C(=O)Oc2c(O)c(O)cc1c2c34	0
Oc1ccc(cc1CN(CC)CC)Nc3ccnc2cc(ccc23)Cl	0
O=CC(=C)CC	1
O=C(OC)c3ccc(c2c3(nc1ccccc1c2(NCCCN(C)C))) [N+](=O)[O-]	1
O=C1OCC(=C1Cl)C(Cl)Cl	1
O=[N+](=[O-])c1ccc(c(c1C)[N+](=O)[O-])	1
n3c1ccccc1c(Nc2ccc(cc2)NC)c4ccccc34	1
O=C(Nc1ccccc1F)c1c2cc([N+](=O)[O-])sc2	1
n2c([nH]c(c1ccccc1)c2c3ccccc3)c4ccccc4	1
OC2C=Cc1cc3c4ccccc4(cc(c3(cc1C2(O))))C	1
n2c(N)ccc3nc1cccn1c23	1
O=C(O)c1ccccc1Cl	0
Oc1c(cc(cc1Sc2cc(cc(c2(O))Cl)Cl)Cl)Cl	0
OC2C=Cc1c3cc5cccc4C=Cc(c3(ccc1C2(O)))c45	1
O=C2N(c1cc(cc(c1)Cl)Cl)C(=O)CC2	0
O=C2c3[nH]c4ccccc4(c3(N=NN2(N=Cc1ccc(O)cc1)))	1
n1ccnc(c1)C	0
O=[N+](=[O-])C(C)C	1
O=C(NCCN(C)C)c2cccc1cc3ccccc3(cc12)	1
O=P(O)(O)Oc1ccc(cc1)C(c2ccc(OCCN(C)C)cc2)=C(c3ccc(cc3)C(C)C)CC	0
c1ccc(cc1)C[N+](C)(C)C	0
Oc1ccc(N)cc1(N)	1

O=S(=O)(O)c1ccc2c(c1)cc(c(O)c2C(c3ccc(cc3)N(C)C)=C4C=CC(C=C4)=[N+](C)C)S(=O)(=O)O	0
O=S(=O)(O)c2cc(N)c3c(O)c(N=Nc1cccc1)c(cc3(c2))S(=O)(=O)O	0
O=C1OC(C(O)=C1(O))C(O)COC(=O)CCCCCCCCCCCCC	0
n2c1ccc(OC)cc1c(NC(C)CCCN(CCCl)CCCl)c3ccc(cc23)Cl	1
O=[N+][([O-])c6ccc(N=Nc4c(N)c5c(O)c(N=Nc1ccc(cc1)c3ccc(N=Nc2ccc(O)cc2)cc3)c(cc5(cc4S(=O)(1
O=S(=O)(O)c6cc(N=Nc1ccc(cc1)c4ccc(N=Nc2cc(c3cccc3(c2(N)))S(=O)(=O)O)cc4)c(N)c5cccc56	1
c1ccc3c(c1)N(c2cccc2S3)CC(N(C)C)C	0
n1c3cc(ccc3(cc2ccc(cc12)N(C)C))N(C)C	1
O=C(O)c1cccc1c3c4ccc(cc4([o+])c2cc(ccc23)N(CC)CC))N(CC)CC	1
Nc2ccc3cc1ccc(N)cc1[n+](c3(c2))C	1
[N-]=[N+]=CC(=O)OCC(N)C(=O)O	1
O=C(OC(CC)CCCC)c1cccc(c1)C(=O)OC(CC)CCCC	0
O=C(O)C3C(O)CC2(O)(OC3(CC(OC1OC(C)C(O)C(N)C1(O))C=CC=CC=CC=CC=CC=CC(C)C(O)C(C)(0
O=C1NNC(=O)c2cccc12	0
C=CC2CC1C=CC2(C1)	0
C1=CC2CC1C3C2C4(C(=C(C3(C4(Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl	0
O=C1N=C(N=CN1C2OC(CO)C(O)C2(O))N	1
c1ccc4c(c1)ccc3cc2c(cccc2Br)cc34	1
O=C5OCC6C(OC1OC2COC(OC2(C(O)C1(O)))C)c3cc7OCOc7(cc3C(c4cc(OC)c(O)c(OC)c4)C56)	0
O=C1NNC(=O)c2cc(ccc12)[N+](=O)[O-]	1
OCC4(O)(CCC23(CC4(CC3(CCC1C(C)(CO)C(O)CCC12(C))))	0
O=NN(C(=N)N[N+](=O)[O-])CC	1
O=C(O)C4(C)(CCCC2(C)(C4(CCC13(CC(=C)C(O)(CCC12)C3))))	0
Oc1ccc2c(c1)CCC3C2CCC4(C)(C(O)C(O)CC34)	0
n1cnc(c2[nH]cnc12)S	1
O=C(OC3CC4CN2CCc1c5ccc(OC)cc5([nH]c1C2CC4(C(C(=O)OC)C3(OC))))c6cc(OC)c(OC)c(OC)c6	0
O=C1NC=C(F)C(=O)N1	0
O=C3OCC4C(O)c1cc5OCOc5(cc1C(c2cc(OC)c(OC)c(OC)c2)C34)	0
O=C4c5c(O)cc(OC2OC(COC1OC(C)C(O)C(O)C1(O))C(O)C(O)C2(O))cc5(OC(c3ccc(OC)c(O)c3)C4)	0
O=C2CCC3C4CC=C1CC(O)CCC1(C)C4(CCC23(C))	0
O=C1NC(=O)N(C=C1I)C2OC(CO)C(O)C2	0
O=C1CC2(CC2(C1C))(C(C)C)	0
O=C4C=C3CCC1C(CCC2(C)(C(C(=O)C)CCC12))C3(C)CC4	0
n1c2cccc2([nH]c15)	0
O=C(O)C(NC(=O)C)CS	1
O=[N+][([O-])c1ccc2nc(N)sc2(c1)	1
O=C(OC2CC4OC1C=C(C(=O)CC1(C)C2(C)C34(OC3))C)C=CC	0
O=C4C=C3CCC2C(CCC1(C)(C2(CCC1(O)(C#C))))C3CC4	0
[O-][N+]2=CNC1=NC=NC1=C2(N)	1
C1=C(C)C2CC(C1)C2(C)(C)	0
OC6CC5=CCC4C(CCC3(C)(C4(CC2N1CC(C)CCC1C(C)C23)))C5(C)CC6	0
O=[N+][([O-])OC1COC2C(O[N+](=O)[O-])COC12	0
O=C1NN=C(C(=O)N1)C	0
O=C(Oc1ccc[n+](c1)C)N(C)C	0
OCC(NCCNC(CO)CC)CC	0

O=C3C1=CC(C)(C)C(O)C1=C(C)C2(CC2)C3(O)C	1
Nc1cccc1	0
O=C(NNCc1ccc(O)c(O)c1(O))C(N)CO	1
O=C(O)C2=NN(C(=O)C2(N=Nc1ccc(cc1)S(=O)(=O)O))c3ccc(cc3)S(=O)(=O)O	0
O=C1c4cccc(OC)c4(C(=O)c2c(O)c3c(c(O)c12)CC(O)(C(=O)C)CC3(O))	1
O1CC[N+](C)(C)CC1	0
O=C(O)C(N)CSc1ccc(cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1
n1ccn(c1)CC(OCc2ccc(cc2)Cl)c3ccc(cc3Cl)Cl	0
O=C(O)CCC(C)C2CCC3C4CCC1CC(=O)CCC1(C)C4(CC(=O)C23(C))	0
O=S(=O)(OCC(O)C(O)COS(=O)(=O)C)C	1
FC(F)(F)c1cc(N)ccc1Cl	0
Fc1cnccc1	0
O=C(OC3(C#C)(CCC2C4CCC1=CC(=O)CCC1C4(CCC23(C))))CCCCC	0
O=C(OC4CCC2(C)(C(CCC1C3CCC(=O)NC3(C)(CCC12))C4))Cc5ccc(cc5)N(CCCl)CCCl	1
O=C3NC=Nc1c3(ncn1C2OC(COP(=O)(O)O)C(O)C2(O))	0
O=C(O)C2(C)(CCCC3(C)(C1C(C=C(CC1)C(C)C)=CCC23))	0
Oc1cc(O)c2cc(O)c([o+])c2(c1))c3cc(O)c(O)c(O)c3	0
O=C(O)c1cccc1(O)	0
O=C(OC1CCN(C)CC1)C(OCCC)(c2cccc2)c3cccc3	0
O=C(Oc1ccc2c(c1)C3(C)(CCN(C)C3(N2C)))NC	0
O=C(O)C(N)Cc1ccc(O)c(c1)[N+](=O)[O-]	0
OC(COc1cccc(c1C)C)CNC(C)(C)C	0
Oc1ccc2c(c1)[nH]c3C(=NCCc23)C	0
c1ccc(cc1)C(c2ccc(cc2)N(CC)CC)=C3C=CC(C=C3)=[N+](CC)CC	1
O=C2c4cccc4(C3=Nc1ccc(N)cc1CN23)	1
Oc1ncnc(O)n1	0