

SMILES	Class
<chem>OCC4=CC(NC1C(O)C(O)C(OC1(C))OC2C(O)C(O)C(OC2(CO))OC3C(O)C(O)C(O)OC3(CO))C(O)C(O)C4(</chem>	1
<chem>O=C(Nc1ccc(O)cc1)C</chem>	1
<chem>O=C1N=CNc2cn[nH]c12</chem>	1
<chem>N#CC(c1cc(cc(c1)C(C#N)(C)C)Cn2ncnc2)(C)C</chem>	1
<chem>O=[N+][O-]c1ncn(c1Sc3ncnc2[nH]cnc23)C</chem>	1
<chem>O=C(O)CC(c1ccc(cc1)Cl)CN</chem>	1
<chem>N#Cc1ccc(cc1C(F)(F)F)NC(=O)C(O)(C)CS(=O)(=O)c2ccc(F)cc2</chem>	1
<chem>O=C(O)C1=NN(c2cc3OCOc3(cc2(C1(=O))))CC</chem>	1
<chem>N2=C(Nc1c(cccc1Cl)Cl)NCC2</chem>	1
<chem>N=1c4ccc(cc4(NC(=C2C=CC=CC=12)N3CCN(C)CC3))Cl</chem>	1
<chem>O=C1N=C(N)C=CN1C2OC(CO)C(O)C2(O)</chem>	1
<chem>O=C6OC(C)C(NC(=O)c2ccc(c1OC=5C(=Nc12)C(C(=O)NC3C(=O)NC(C(=O)N4CCCC4(C(=O)N(C)CC(=C</chem>	1
<chem>O=C3N=CNc1c3(ncn1C2OC(CO)CC2)</chem>	1
<chem>C(N(CC)CC)(=S)SSC(N(CC)CC)=S</chem>	1
<chem>O3c1ccccc1C(=CCCN(C)C)c2ccccc2C3</chem>	1
<chem>O=C(Nc1ccccc1CCC2N(C)CCCC2)c3ccc(OC)cc3</chem>	1
<chem>O=C(OCC)C=C(C=CC=C(C=Cc1c(cc(OC)c(c1C)C)C)C)C</chem>	1
<chem>O=C(OCC(c1ccccc1)COC(=O)N)N</chem>	1
<chem>O=C(NCC1NCCCC1)c2cc(OCC(F)(F)F)ccc2(OCC(F)(F)F)</chem>	1
<chem>Fc1ccc(c(F)c1)C(O)(Cn2ncnc2)Cn3ncnc3</chem>	1
<chem>O=C(Nc1ccc(c(c1)C(F)(F)F)[N+](=O)[O-])C(C)C</chem>	1
<chem>FC(F)(F)c1ccc(cc1)C(=NOCCN)CCCCOC</chem>	1
<chem>O=C3C=C(OC)C2(OC1c(c(OC)cc(OC)c1Cl)C2(=O))C(C)C3</chem>	1
<chem>O=C(NC2c1ccccc1CC2(O))C(Cc3ccccc3)CC(O)CN5CCN(Cc4cnccc4)CC5(C(=O)NC(C)(C)C)</chem>	1
<chem>O=C1N(N=CN1c2ccc(cc2)N7CCN(c6ccc(OCC3OC(OC3)(c4ccc(cc4Cl)Cl)Cn5ncnc5)cc6)CC7)C(C)CC</chem>	1
<chem>O=C(N5CCN(c4ccc(OCC1OC(OC1)(c2ccc(cc2Cl)Cl)Cn3cncc3)cc4)CC5)C</chem>	1
<chem>O=C1N=C(N)C=CN1C2OC(CO)SC2</chem>	1
<chem>n1nc(c(nc1N)N)c2cccc(c2Cl)Cl</chem>	1
<chem>O=C3OC(CCC2C(C=CC1=CC(C)CC(OC(=O)C(C)CC)C12)C)CC(O)C3</chem>	1
<chem>O=C(O)c2ccccc2(Nc1cccc(c1C)C)</chem>	1
<chem>O=C(O)C2=C(C(C)C)C1N2(C(=O)C1(C(O)C)))SC3NC(C(=O)N(C)C)CC3</chem>	1
<chem>O=C(O)CCC(NC(=O)c1ccc(cc1)N(C)Cc2nc3c(nc2)nc(nc3(N))N)C(=O)O</chem>	1
<chem>O=C(OCCOC)C2=C(NC(=C(C(=O)OC(C)C)C2(c1cccc(c1)[N+](=O)[O-]))C)C</chem>	1
<chem>O=C2NC(=O)CN2(N=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-])</chem>	1
<chem>O=C(O)C1=CN(c2cc(c(F)cc2(C1(=O))))N3CCNCC3)CC</chem>	1
<chem>N=2c4ccccc4(Nc1c(cc(C)s1)C=2N3CCN(C)CC3)</chem>	1
<chem>NNCCc1ccccc1</chem>	1
<chem>O=C(O)CC(O)CC(O)CCC2C(C=CC1=CC(O)CC(OC(=O)C(C)CC)C12)C</chem>	1
<chem>O=C(OC3C(C)C(OC)C=COC1(OC4c(C1(=O)))c5C2=NC6(NC2=C(NC(=O)C(=CC=CC(C)C(O)C(C)C(O)C3(C</chem>	1
<chem>O=C1C(=C(N=C2N1CCCC2)C)CCN5CCC(c4noc3cc(F)ccc34)CC5</chem>	1
<chem>O=C1NC(=O)N(C=C1C)C2OC(C=C2)CO</chem>	1
<chem>n1c[nH]c2c1N=C(N)NC2=S</chem>	1
<chem>O=C1OC(C(=O)N1C)(C)C</chem>	1
<chem>O=C(O)CCC(C)C2CCC3C4C(O)CC1CC(O)CCC1(C)C4(CCC23(C))</chem>	1

<chem>O=C(OC1CCCC1)Nc2ccc3c(c2)c(cnc3C)Cc4ccc(cc4(OC))C(=O)NS(=O)(=O)c5ccccc5C</chem>	1
<chem>O=C1NC(=O)N(C=C1C)C2OC(CO)C(NN=N)C2</chem>	1
<chem>O=C(N)N(O)C(c2cc1cccc1s2)C</chem>	1
<chem>OC3C(=C)C(=CC=C1CCCC2(C)(C1CCC2(C(C)CCCC(C)C)))CC(O)C3</chem>	1
<chem>O=[N+][([O-])c1cc(c(c(c1)[N+](=O)[O-])C)[N+](=O)[O-]</chem>	1
<chem>OCC1OC(O)CC(O)C1(O)</chem>	1
<chem>O=C1NC(=O)N(C=C1C)C2OC(CO)C(O)C2(F)</chem>	1
<chem>Oc1cc2c(cc1(OC))C3CCC4(C)(C(O)CCC4(C3(CC2)))</chem>	1
<chem>O=C1NC=C(F)C(=O)N1</chem>	1
<chem>O=C1N=C(N=CN1C2OC(CO)C(O)C2(O))N</chem>	1
<chem>O=C1NC(=O)N(C=C1(F))C2OC(CO)C(O)C2</chem>	1
<chem>n1cnc(c2NCNc12)S</chem>	1
<chem>O=C(Nc1nnnc(s1)S(=O)(=O)N)C</chem>	1
<chem>O=C(NC1CCCCC1)NS(=O)(=O)c2ccc(cc2)C(=O)C</chem>	1
<chem>O=C(O)C(NC(=O)C)CS</chem>	1
<chem>O=C(O)c1cccc1(OC(=O)C)</chem>	1
<chem>O=C(OCOP(=O)(OCOC(=O)C(C)(C)COCCn2cnc1c(ncnc12)N)C(C)(C)C</chem>	1
<chem>OC1N5C3CC(C1(CC))C6C(O)C4(c2cccc2N(C)C34)(CC56)</chem>	1
<chem>O=C(O)C1=CN(c2nc(c(F)cc2(C1(=O))))N3CC4C(NC(=O)C(NC(=O)C(N)C)C4(C3))c5ccc(F)cc5(F)</chem>	1
<chem>O=C(OC)Nc1nc2ccc(cc2([nH]1))SCCC</chem>	1
<chem>c1ccc(cc1)CCCN(CC)CCCc2cccc2</chem>	1
<chem>O=C(NC3CC(N)C(OC1OC(CN)C(O)C(O)C1(O))C(O)C3(OC2OC(CO)C(O)C(N)C2(O)))C(O)CCN</chem>	1
<chem>O=C(NC(=N)N)c1nc(c(nc1(N))N)Cl</chem>	1
<chem>O=C(O)CCCCCNC3c1cccc1CCc2cccc23</chem>	1
<chem>O=C2C(=C(N(N2(c1cccc1))C)C)N(C)C</chem>	1
<chem>c1ccc3c(c1)C(=CCCN(C)C)c2cccc2CC3</chem>	1
<chem>Oc1ccc(cc1CN(CC)CC)Nc3ccnc2cc(ccc23)Cl</chem>	1
<chem>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)C</chem>	1
<chem>O=C(OC1COCC1)NC(Cc2cccc2)C(O)CN(CC(C)C)S(=O)(=O)c3ccc(N)cc3</chem>	1
<chem>O=S(=O)(Nc4ccc(Nc2c3cccc3(nc1cccc12))c(OC)c4)C</chem>	1
<chem>Oc2cccc3cc1cccc(O)c1c(O)c23</chem>	1
<chem>O=C1C(O)=C(O)OC1C(O)CO</chem>	1
<chem>N(CC)(CC)CCCN1CCC2(C1)(CCC(CCC)(CCC)CC2)</chem>	1
<chem>O(c1cccc1C)C(c2cccc2)CCNC</chem>	1
<chem>O=C(NS(=O)(=O)Oc1c(cccc1C(C)C)C(C)C)Cc2c(cc(cc2C(C)C)C(C)C)C(C)C</chem>	1
<chem>O=C(O)C4N3C(=O)C(NC(=O)C(NC(=O)N1C(=O)NCC1)c2cccc2)C3SC4(C)(C)</chem>	1
<chem>O=C(O)COc1nn(c2cccc12)Cc3cccc3</chem>	1
<chem>O=C(O)C(c1ccc2oc(nc2(c1))c3ccc(cc3)Cl)C</chem>	1
<chem>O=C(c1ccc(O)cc1)c2c3cccc3(oc2CC)</chem>	1
<chem>O=C(c1cc(c(O)c(c1)Br)Br)c2c3cccc3(oc2CC)</chem>	1
<chem>O=C2C(=O)C1=C(OC(C)(C)CC1)c3cccc23</chem>	1
<chem>OC4CC3=CCC1C(CCC2(C)(C(CCC12)C(C)CCC(CC)C(C)C))C3(C)CC4</chem>	1
<chem>O=C(O)C25(CCC(C(=C)C)C5(C3CCC1C4(C)(CCC(O)C(C)(C)C4(CCC1(C)C3(C)(CC2))))</chem>	1
<chem>O=C(O)C(Oc1ccc(cc1)CCNC(=O)c2ccc(cc2)Cl)(C)C</chem>	1
<chem>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'</chem>	1

[illegible]

O=C(OC4(C(=O)C)(CCC3C5C=C(C2=CC(=O)C1CC1C2(C)C5(CCC34(C)))Cl))C	1
O=C(N)c1nc[nH]c1(N=NN(C)C)	1
O=S(=O)(c1ccc(N)cc1)c2ccc(N)cc2	1
O=C1N=C(N=CN1C2OC(CO)C(O)C2)N	1
O=C(O)c1ccc(cc1)n3nc(nc3(c2ccccc2(O)))c4ccccc4(O)	1
O=C(NCCCCCN(O)C(=O)C)CCC(=O)N(O)CCCCCNC(=O)CCC(=O)N(O)CCCCCN	1
O=C1C=CC3(C(=C1)CCC2C4CC(C)C(O)(C(=O)CO)C4(C)(CC(O)C23(F)))(C)	1
O(c1ccc2c(c1)C34(CCN(C)C(C2)C4(CCCC3)))C	1
O=C1N(c3ccc(cc3(C(=NC1)c2ccccc2))Cl)C	1
O=S2(O)(=NC(=Nc1ccc(cc12)Cl)C)	1
O=P(O)(O)Oc1ccc(cc1)C(=C(c2ccc(OP(=O)(O)O)cc2)CC)CC	1
N=C1NNC(=N)c2ccccc12	1
O=C(NC1(OC3(O)(N(C1(=O))C(C(=O)N2CCCC23)Cc4ccccc4))C)C7CN(C)C8Cc6c[nH]c5cccc(c56)C8(C	1
O=S(C)C	1
O=C1C(=C(N(N1c2ccccc2)C)C)N(C)CS(=O)(=O)O	1
O=C(OC(C(C=CC=C)C)C(C)C(O)C(C)CC(=CC(C)C(O)C(C=CC(O)CC1OC(=O)C(C)C(O)C1(C))C)C)N	1
O=C(N)C(c1ncccc1)(c2ccccc2)CCN(C(C)C)C(C)C	1
O=C(O)CCC=CCC=CCC=CCC=CCC=CCC=CCC	1
c1ccc3c(c1)C(=CCCN(C)C)c2ccccc2SC3	1
O=C2N(CC)CC(CCN1CCOCC1)C2(c3ccccc3)c4ccccc4	1
O=C1NC(=O)C(C=C1(F))C2OC(C)C(O)C2(O)	1
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(c1cccc2ccccc12)C(c3cccs3)CCNC	1
O=C4C=C3C=CC1C(CCC2(C)(C(C(=O)C)CCC12))C3(C)CC4	1
O=C(Oc2c(c1OCOc1c6c2C9C5N(C(O)C4N(C)C5(c3c(O)c(OC)c(cc3C4)C))C6COC(=O)C8(NCCC7cc(O)C	1
O=C2OC(C#CC1CC1)(c3cc(ccc3(N2))Cl)C(F)(F)F	1
O=C(O)C(NC(C(=O)N1CCCC1(C(=O)O))C)CCc2ccccc2	1
FC(F)OC(F)(F)C(F)Cl	1
O=C(O)C4(C)(CCC5(C)(CCC2(C(=CC(=O)C1C3(C)(CCC(O)C(C)(C)C3(CCC12(C))))C5(C4))(C)))	1
N#CC(=Cc1cc(O)c(O)c(c1)[N+](=O)[O-])C(=O)N(CC)CC	1
OC(c1ccccc1)C(NC)C	1
Oc1ccc(cc1(O))C(O)CNC	1
O=C(O)CCCCCN	1
O=C(NC1(OC3(O)(N(C1(=O))C(C(=O)N2CCCC23)Cc4ccccc4))C)C8C=C7c6cccc5[nH]cc(c56)CC7N(C)	1
O=C(OCC)CCC(=O)OC1C(OC(C)CC1(N(C)C))OC3C(C)C(OC2OC(C)C(O)C(OC)(C)C2)C(C(=O)OC(CC)C(C	1
O=C3OC(CC)C(O)(C)CC(C(=O)C(C)CC(O)(C)C(OC1OC(C)CC(N(C)C)C1(O))CC(OC2OC(C)C(O)C(OC)(C	1
O=S(c1nc2cc(OC)ccc2([nH]1))Cc3ncc(c(OC)c3C)C	1
O=C2CCC3C4CCc1cc(O)ccc1C4(CCC23(C))	1
C#CC3(O)(CCC2C4CCc1cc(O)ccc1C4(CCC23(C)))	1
C#CC3(O)(CCC2C4CCc1cc(OC)ccc1C4(CCC23(C)))	1
n1ccc(cc1CC)C(N)=S	1
O=C(OCC)C1(OC1)CCCCCOc2ccc(cc2)Cl	1
O=S(=O)(c2ccccc1cnccc12)N3CCNCCC3	1
O=C(c1ccc(OC(C(=O)OC(C)C)(C)C)cc1)c2ccc(cc2)Cl	1
O=C(C=C(C=CC=C(C=CC1=C(C)CCCC1(C)C)C)C)Nc2ccc(O)cc2	1

O=C2OC(C(=CC1CCC(O)C(OC)C1)C)C(C)C(O)CC(=O)C(C=C(C)CC(C)CC(OC)C4OC(O)(C(=O)C(=O)N3C	1
O=C(O)C4N3C(=O)C(NC(=O)c1c(noc1C)c2c(F)cccc2Cl)C3SC4(C)(C)	1
O=C(O)c2cccc2(Nc1cccc(c1)C(F)(F)F)	1
O=C(O)CCC(NC(=O)c1ccc(cc1)NCc2nc3C(=O)N=C(N)Nc3(nc2))C(=O)O	1
n1cc(c[nH]1)C	1
OCC1OC(O)(CO)C(O)C1(O)	1
O=P(O)(O)OCC1OC(O)(COP(=O)(O)O)C(O)C1(O)	1
OCC(N)(CO)CCc1ccc(cc1)CCCCCCCC	1
O=C(O)c2cc(c(cc2(NCc1occc1))Cl)S(=O)(=O)N	1
O=C(O)CN(CC(=O)O)CCN(CC(=O)O)CCN(CC(=O)O)C(C(=O)O)COCc1cccc1	1
O=C(O)C1=CN(c2c(OC)c(c(F)cc2(C1(=O))))N3CCNC(C)C3)C4CC4	1
Fc1ccc(cc1Cl)Nc4ncnc3cc(OC)c(OCCCN2CCOCC2)cc34	1
O=C(OC2C(=CC(C)C(O)C(OC)CC(C)CC=1C(=O)C(=CC(=O)C=1(OC))NC(=O)C(=CC=CC2(OC))C)C)N	1
O=C2C=C1CCC3C4C=CC(O)(C#C)C4(CC)(CCC3(C1CC2))	1
O=C(OCC(O)CO)c3cccc3(Nc2ccnc1cc(ccc12)Cl)	1
O=C(O)C(N)Cc1ccc(O)cc1	1
O=C(NN1CC2CCCC2(C1))NS(=O)(=O)c3ccc(cc3)C	1
O=C(O)C(N)CCC(=O)N	1
O=C2NC(=O)C(c1cccc1)(CC)CC2	1
OCC(O)CO	1
O=C(O)CC(C(=O)O)S[Au]	1
N=C(N)N	1
O=C1c3cc(c(cc3(N=CN1CC(=O)CC2NCCCC2(O)))Br)Cl	1
O=C(c1ccc(F)cc1)CCCN3CCC(O)(c2ccc(cc2)Cl)CC3	1
FC(F)(F)C(Cl)Br	1
O=C4c5c(O)cc(OC2OC(COC1OC(C)C(O)C1(O))C(O)C(O)C2(O))cc5(OC(c3ccc(OC)c(O)c3)C4)	1
c1(c(c(c(c1Cl)Cl)Cl)Cl)Cl	1
O=C(OC)CC(O)(C(=O)OC2C(OC)=CC35(N(CCc1cc4OCOc4(cc1C23))CCC5))CCCC(O)(C)C	1
O=C(O)C4OC(OC3C(O)C(OC(OC2C(OC(OC1C(O)C(OC(O)C1(NC(=O)C))CO)C(O)C2(O))C(=O)O)C3(NC	1
O=S(=O)(N)c1cc2c(cc1Cl)NCNS2(=O)(=O)	1
O=C3C=C2CCC1C4CCC(O)(C(=O)CO)C4(C)(CC(O)C1C2(C)CC3)	1
Oc1ccc(O)cc1	1
O=C(N)NO	1
O=C(O)C(c1ccc(cc1)CC(C)C)C	1
O=C(Nc1ccc(c(c1)Nc2nccc(n2)c3cnccc3)C)c4ccc(cc4)CN5CCN(C)CC5	1
c1ccc3c(c1)N(c2cccc2CC3)CCCN(C)C	1
O=C4C=C3CCC2C(C(=C)CC1(CC)(C2(CCC1(O)(C#C))))C3CC4	1
OC1C(O)C(O)C(O)C(O)C1(O)	1
Oc4ccc3c(ccc2[nH]c1c(cnc(NCCCN(C)C)c1c23)C)c4	1
O=C(NNC(C)C)COc1ccc(cc1)Cl	1
O=C(NNC(C)C)c1ccncc1	1
n1cccn1NC(C)C	1
Oc1ccc(cc1(O))C(O)CNC(C)C	1
O=[N+][[O-]]OC1COC2C(O[N+](=O)[O-])COC12	1
O=C5OC2CC(OC1(OC(C(C)CC)C(C)CC1)C2)CC=C(C)C(OC4OC(C)C(OC3OC(C)C(O)C(OC)C3)C(OC)C4)	1

<chem>O=C1Nc4cccc4(C(=O)N1CCN3CCC(C(=O)c2ccc(F)cc2)CC3)</chem>	1
<chem>O=C(O)C(N)Cc1ccc(O)c(O)c1</chem>	1
<chem>O=C(O)C(O)C</chem>	1
<chem>OCC2OC(OC1C(OC(O)(CO)C1(O))CO)C(O)C(O)C2(O)</chem>	1
<chem>O=C(O)C(N)CCCN=C(N)N</chem>	1
<chem>O=COCC(OC=O)COP(=O)(O)OCC[N+](C)(C)C</chem>	1
<chem>O=C(Nc1ccc(cc1)C(F)(F)F)c2cnoc2C</chem>	1
<chem>O=CN1C=3C(=O)N=C(N)NC=3(NCC1CNc2ccc(cc2)C(=O)NC(C(=O)O)CCC(=O)O)</chem>	1
<chem>O=C(Nc1c(cccc1C)C)CN(CC)CC</chem>	1
<chem>O=C(c1ccc(cc1)Cl)CN(C)CCCN4c2cccc2CCc3cccc34</chem>	1
<chem>O=NN(C(=O)NC1CCCCC1)CCCI</chem>	1
<chem>O=C1NCCCN1C(C(=O)NC(Cc2cccc2)CC(O)C(NC(=O)COc3c(cccc3C)C)Cc4cccc4)C(C)C</chem>	1
<chem>O=C(OC(C)C)C(C(=O)OC(C)C)=C15C=CS1</chem>	1
<chem>O=C(O)CN(Cc1c(O)c(ncc1COP(=O)(O)O)C)CCN(CC(=O)O)Cc2c(O)c(ncc2COP(=O)(O)O)C</chem>	1
<chem>OCC(O)C(O)C(O)C(O)CO</chem>	1
<chem>O=C(OC)Nc1nc2ccc(cc2([nH]1))C(=O)c3cccc3</chem>	1
<chem>O=C(OC3(C(=O)C)(CCC2C4C=C(C1=CC(=O)CCC1(C)C4(CCC23(C))))C)C</chem>	1
<chem>O=C2c1cccc1S(=O)(=O)N(C2=C(O)Nc3ncc(C)s3)C</chem>	1
<chem>O=C(O)C(N)Cc1ccc(cc1)N(CCCI)CCCI</chem>	1
<chem>O=C1C=C(C(=O)c2cccc12)C</chem>	1
<chem>O=C(OCC)C2(c1cccc1)(CCN(C)CC2)</chem>	1
<chem>O=C(CC)C(c1cccc1)(c2cccc2)CC(N(C)C)C</chem>	1
<chem>c1ccc(cc1)CC(NC)C</chem>	1
<chem>n1ccn(c1S)C</chem>	1
<chem>O=C1Oc2c(OC)c3occc3(cc2(C=C1))</chem>	1
<chem>FC(F)(OC)C(Cl)Cl</chem>	1
<chem>O=C(O)C(N)(C)Cc1ccc(O)c(O)c1</chem>	1
<chem>O=C(OC)C(c1cccc1)C2NCCCC2</chem>	1
<chem>O=[N+](O-)[O-]c1cnc(n1CCO)C</chem>	1
<chem>O=C(c1cnccc1)C(c2cnccc2)(C)C</chem>	1
<chem>c1ccc3c(c1)N4CCN(C)CC4(c2cccc2C3)</chem>	1
<chem>O=C(NC1C(=O)NC(C(=O)N4CC(O)CC4(C(=O)NC(C(=O)NC(C(=O)N2CC(C)C(O)C2(C(=O)NC(O)C(O)C1</chem>	1
<chem>O=P(O)(OCCCCCCCCCCCCCCCC)OCC[N+](C)(C)C</chem>	1
<chem>O=C(N)C=3C(=O)C4(O)(C(O)=C2C(=O)c1c(O)ccc(c1CC2CC4(C(C=3(O))N(C)C))N(C)C)</chem>	1
<chem>O=C7c3c(O)c8c(O)c(c(OC2OC(C)C(O)C(OC1OC(C)C(O)C(O)C1)C2)cc8(cc3CC(C7(OC6OC(C)C(O)C(O</chem>	1
<chem>O=C(OCC4C=1C(=O)C(N)=C(C(=O)C=1N3CC2NC2C34(OC))C)N</chem>	1
<chem>O=C1C=CN=C(N1)N(C)C5CCN(c3nc2cccc2n3Cc4ccc(F)cc4)CC5</chem>	1
<chem>O=C(N)CS(=O)C(c1cccc1)c2cccc2</chem>	1
<chem>O=C(OCC)Nc1on[n+](c1)N2CCOCC2</chem>	1
<chem>O=C(O)CC1(CC1)CSC(c4cccc(C=Cc2nc3cc(ccc3(cc2))Cl)c4)CCc5cccc5C(O)(C)C</chem>	1
<chem>Oc5ccc4c1c5(OC2C(O)C=CC3C(N(C)CCC123)C4)</chem>	1
<chem>O=C(O)C3=C(COC2N3(C(=O)C2(OC)(NC(=O)C(C(=O)O)c1ccc(O)cc1)))CSc4nnnn4C</chem>	1
<chem>O=C(O)C1=CN(c2c(OC)c(c(F)cc2(C1(=O))))N3CC4NCCCC4(C3))C5CC5</chem>	1
<chem>O=C(Oc1cc(c(OCCN(C)C)cc1C)C(C)C)C</chem>	1
<chem>O=C(O)CCC(=CCc2c(O)c1C(=O)OCc1c(c2(OC))C)C</chem>	1

[illegible]

O=C(O)c1ccc(cc1)S(=O)(=O)N(CCC)CCC	1
Oc1c(cc(cc1C(C)(C)C)SC(C)(C)Sc2cc(c(O)c(c2)C(C)(C)C)C(C)(C)C(C)(C)C	1
O=C4C=C3CCC1C(CCC2(C)(C(C(=O)C)CCC12))C3(C)CC4	1
O=C(OC(c1ccccc1)(Cc2ccccc2)C(C)CN(C)C)CC	1
OC(COc1cccc2ccccc12)CNC(C)C	1
O=C1C=C(NC(N1)=S)CCC	1
O=C(O)CCCC=CCC1C(O)CC(O)C1(C=CC(O)CCCCC)	1
n1ccc(cc1CCC)C(N)=S	1
O=C(N)c1nccnc1	1
O=C(OCc1nc(ccc1)COC(=O)NC)NC	1
O(c2ccc3Nc1cc(ccc1C(NC(C)CCCN(CC)CC)c3(c2))Cl)C	1
OC(c2ccnc1ccc(OC)cc12)C3N4CCC(C3)C(C=C)C4	1
O=C1N=C(Nc2ccc(cc12)CN(c3ccc(C(=O)NC(C(=O)O)CCC(=O)O)s3)C)C	1
O=C1OC(CC(=O)C(C=C(C)C(O)C(OC)C(=O)C(C)CC(C=CC=CC=C(C)C(OC)CC3OC(O)(C(=O)C(=O)N2CCC	1
O=C1N=C4C(O)=C5C(O)=C(C=2OC(OC=CC(OC)C(C)C(OC(=O)C)C(C)C(O)C(C)C(O)C(C=CC=C1C)C)(C	1
O=C(OC2C(C)C(OC)C=COC1(Oc3c(C1(=O))c4c(O)cc(NC(=O)C(=CC=CC(C)C(O)C(C)C(O)C2(C))C)c(O)c	1
O=C2OCC(c1ccc(cc1)S(=O)(=O)C)=C2c3ccccc3	1
O=C1NC(=O)SC1Cc3ccc(OCCN(c2ncccc2)C)cc3	1
O=C2C5=C(C=C3c1nc4cccc(c4(cc1CN23)))[N+](=O)[O-])C(O)(C(=O)OC5)CC	1
O=C(N)c1ccccc1(O)	1
O=C3Nc1ccccc1C3(=Cc2[nH]c(cc2C)C)	1
OC3C(=C)C(=CC=C1CCCC2(C)(C1CCC2(C(C=CC=CC(O)(CC)CC)C)))CC(O)C3	1
O=C1NC(=Nc2c(nn(c12)C)CCC)c3cc(ccc3(OCC))S(=O)(=O)N4CCN(C)CC4	1
O=C4c5c(O)cc(O)cc5(OC(c1ccc2OC(CO)C(Oc2(c1))c3ccc(O)c(OC)c3)C4(O))	1
O=C(c1c(ccs1)S(=O)(=O)Nc2onc(c2Cl)C)Cc3cc4OCOc4(cc3C)	1
O=C(O)CCCCc1ccccc1	1
O=C(CO)C(O)C(O)C(O)CO	1
O=C1c4ccccc4(c2n[nH]c3ccccc1c23)	1
O=CCC4CC(C)C(OC1OC(C)C(N(C)C)CC1)CCCCC(OC(=O)CC(OC(=O)C)C(OC)C4(OC3OC(C)C(OC2OC(	1
O=C1OC3(CC1)(CCC2C5C(CCC23(C))C4(C(=CC(=O)CC4)CC5SC(=O)C)(C))	1
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	1
O=C(O)CCc3c([nH]c(C=C2C(=O)Nc1ccccc12)c3C)C	1
O=C(NO)CCCCCCC(=O)Nc1ccccc1	1
O=C(O)C2N1C(=O)CC1S(=O)(=O)C2(C)(C)	1
O=S(=O)(Nc1nc(nc(OC)c1)OC)c2ccc(N)cc2	1
O=S(=O)(Nc1ncc(OC)cn1)c2ccc(N)cc2	1
O=S(=O)(Nc1nc(cc(n1)C)C)c2ccc(N)cc2	1
O=S(=O)(Nc1nnc(C)s1)c2ccc(N)cc2	1
O=S(=O)(N)c1ccc(N)cc1	1
O=S(=O)(Nc2ccnn2(c1ccccc1))c3ccc(N)cc3	1
O=C(O)c3cc(N=Nc1ccc(cc1)S(=O)(=O)Nc2ncccc2)ccc3(O)	1
O=C3N(c1ccccc1)N(c2ccccc2)C(=O)C3CCS(=O)c4ccccc4	1
OC(c1ccc(cc1)SC(C)C)C(NCCCCCCC)C	1
O=C(NCC1N(CC)CCC1)c2cc(ccc2(OC))S(=O)(=O)N	1
O=C(Nc1cccc(c1)C(=O)Nc2cc(ccc2C)C(=O)Nc3ccc(c4cc(cc(c34)S(=O)(=O)O)S(=O)(=O)O)S(=O)(=O)C	1



<chem>O(c1ccc(cc1)C(c2ccccc2)=C(c3ccccc3)CC)CCN(C)C</chem>	1
<chem>O=C2OC5(C)(C(OC(=O)C(C(=O)C(C)C(OC1OC(C)CC(N(C)C)C1(O))C(OC)(C)CC(C(=O)C(C)C5(N2CCCCr</chem>	1
<chem>O=C(O)c6ccccc6(c1ccc(cc1)CN2c3cc(cc(c3(NC2CCC))C)c5nc4ccccc4n5C)</chem>	1
<chem>O=C(N)c1ncn2C(=O)N(N=Nc12)C</chem>	1
<chem>O=P(O)(O)COC(C)Cn2cnc1c(ncnc12)N</chem>	1
<chem>O=C(N)CNC(=O)C(NC(=O)C4N(C(=O)C1NC(=O)C(NC(=O)C(NC(=O)C(NC(=O)C(NC(=O)C(NC(=O)C(NC(=O)CNC</chem>	1
<chem>O=C2CC3c1cc(OC)c(OC)cc1CCN3(CC2CC(C)C)</chem>	1
<chem>C(=C(Cl)Cl)(Cl)Cl</chem>	1
<chem>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))</chem>	1
<chem>O=C3NC(=O)C(N2C(=O)c1ccccc1C2(=O))CC3</chem>	1
<chem>n1csc1c2nc3ccccc3([nH]2)</chem>	1
<chem>OCCc1c([n+](cs1)Cc2cnc(nc2(N))C)C</chem>	1
<chem>O=C(NC(CO)C(O)c1ccc(cc1)S(=O)(=O)C(C)Cl)Cl</chem>	1
<chem>c1ccc3c(c1)N(c2cc(ccc2S3)SC)CCC4N(C)CCCC4</chem>	1
<chem>O=C(O)C(N)Cc2cc(c(Oc1cc(c(O)c(c1)I)I)c(c2)I)I</chem>	1
<chem>O=C(O)COc2ccc(C(=O)c1cccs1)c(c2Cl)Cl</chem>	1
<chem>O=C(NN1CCCCC1)NS(=O)(=O)c2ccc(cc2)C</chem>	1
<chem>O=C(c1ccc(cc1)C)c2cc(O)c(O)c(c2)[N+](=O)[O-]</chem>	1
<chem>O=C(c1ccc(cc1)C)C(C)CN2CCCCC2</chem>	1
<chem>Oc1ccc(cc1C(c2ccccc2)CCN(C(C)C)C(C)C)C</chem>	1
<chem>O(c1ccc(cc1)C(c2ccccc2)=C(c3ccccc3)CCCl)CCN(C)C</chem>	1
<chem>NC2CC2(c1ccccc1)</chem>	1
<chem>C(=C(Cl)Cl)Cl</chem>	1
<chem>O=C(O)C(N)Cc2cc(c(Oc1ccc(O)c(c1)I)c(c2)I)I</chem>	1
<chem>O(c1ccc(c(OC)c1(OC))CN2CCNCC2)C</chem>	1
<chem>O=C1NC(=O)SC1Cc4ccc(OCC3(Oc2c(c(c(O)c(c2CC3)C)C)(C))cc4</chem>	1
<chem>O=C(OC4C(OC(OC3C(C(=O)OC(C)C(C)C(OC(=O)C)C(C(=O)C1(OC1)CC(C)C(OC2OC(C)CC(N(C)C)C2(O</chem>	1
<chem>O=C1C=CNC(=O)N1</chem>	1
<chem>O=C1C=CN(C(=O)N1)C2OC(CO)C(O)C2(O)</chem>	1
<chem>O=C(O)C%10NC(=O)C2NC(=O)C(NC(=O)C6NC(=O)C(NC(=O)C(NC(=O)C(NC)CC(C)C)C(O)c7ccc(Oc5c</chem>	1
<chem>Fc4cc(ccc4(Nc3ncnc2cc(OCC1CCN(C)CC1)c(OC)cc23))Br</chem>	1
<chem>O=C2Nc1ccc(cc1CC2)N4CCN(C(=O)c3ccc(OC)c(OC)c3)CC4</chem>	1
<chem>OCC3OC(n2cnc1c(ncnc12)N)C(O)C3(O)</chem>	1
<chem>O=CN2c1cc(OC)c(cc1C35(CCN4CC=CC(CC)(C(OC(=O)C)C(O)(C(=O)OC)C23)C45))C9(C(=O)OC)(c7[nH</chem>	1
<chem>OCC=C(C=CC=C(C=CC1=C(C)CCCC1(C)C)C)C</chem>	1
<chem>O=C(N)CCC8C1=NC(=C(C7=NC(C6=NC(=C(C2=NC(=C1)C(C)(C)C2CCC(=O)N)C)C(C)(CCC(=O)NCC(OP</chem>	1
<chem>Oc2c(c(c1OC(C)(CCc1c2C)CCCC(C)CCCC(C)CCCC(C)C)C</chem>	1
<chem>OCC(NC1CC(O)(CO)C(O)C(O)C1(O))CO</chem>	1
<chem>Fc1ccc(c(F)c1)C(O)(Cn2ncnc2)C(c3ncncc3(F))C</chem>	1
<chem>O=C(NC(C(=O)NC(C(=O)N2CC3CCCC3(C2(C(=O)NC(C(=O)C(=O)NC1CC1)CCC)))C(C)(C)C)C4CCCCC4)</chem>	1
<chem>O=C1c3ccccc3(OC(O)=C1C(c2ccccc2)CC(=O)C)</chem>	1
<chem>O=C(N(C)C)Cc2c(nc1ccc(cn12)C)c3ccc(cc3)C</chem>	1
<chem>O=C(O)C3=CCSC2N3(C(=O)C2(NC(=O)C(=NOC)C1=CSC(=N)N1))</chem>	1
<chem>O=C(OC1C(OC(C)CC1(N(C)C))OC3C(C)C(OC2OC(C)C(O)C(OC)(C)C2)C(C(=O)OC(CC)C(O)(C)C(O)C(C(=</chem>	1
<chem>O=P(O)(O)OCC3OC(n2cnc1c(nc(F)nc12)N)C(O)C3(O)</chem>	1

FC(F)(F)c2nc1c(cccc1C(F)(F)F)c(c2)C(O)C3NCCCC3	1
n1cnc(c2[nH]cnc12)S	1
O=P(O)(O)C(O)(CCN)P(=O)(O)O	1
O=C(c1ccccc1(OCC(O)CNCCC))CCc2ccccc2	1
O=C(NO)C	0
OC(O)c1ccc2cc(ccc2(c1))c3ccc(OC)c(c3)C56(CC4CC(CC(C4)C5)C6)	0
Oc1ccc(cc1CO)C(O)CNC(C)(C)C	0
O=C1C=CC3(C(=C1)CC(C2C4CC(C)C(O)(C(=O)CO)C4(C)(CC(O)C23))Cl)(C)	0
O=P(O)(O)C(O)(CCCN)P(=O)(O)O	0
O=C1N(N=NN1CCN3CCC(N(C(=O)CC)c2ccccc2)(COC)CC3)CC	0
n4nc1n(c3ccc(cc3(C(=NC1)c2ccccc2))Cl)c4C	0
n1c(nc(nc1N(C)C)N(C)C)N(C)C	0
O=P(O)(O)SCCNCCCN	0
O=C2NC(=O)C(c1ccc(N)cc1)(CC)CC2	0
O=C(O)c1cc2C(=O)c3cc(ccc3(Oc2(nc1(N))))C(C)C	0
O=C(OC)C2=C(NC(=C(C(=O)OCC)C2(c1ccccc1Cl))COCCN)C	0
O=C1NC=C(C=C1(N))c2ccncc2	0
N(=C1NCCN1)c2c(cc(N)cc2Cl)Cl	0
Fc1ccc(cc1)Cn3c(nc2ccccc23)NC5CCN(CCc4ccc(OC)cc4)CC5	0
O=C1C(O)=C(C(=O)c2ccccc12)C4CCC(c3ccc(cc3)Cl)CC4	0
O=C(O)CCCCCCCC(=O)O	0
O=C2c1ccccc1C(=NN2C3CCN(C)CCC3)Cc4ccc(cc4)Cl	0
O=C(OCC)OC(OC(=O)C3N2C(=O)C(NC(=O)C(N)c1ccccc1)C2SC3(C)(C))C	0
O=C1C=CC3(C(=C1)CCC2C4CC(C)C(O)(C(=O)CO)C4(C)(CC(O)C23Cl))(C)	0
O(CC(N1CCCC1)CN(c2ccccc2)Cc3ccccc3)CC(C)C	0
OC(COc1ccc(cc1)CCOCC2CC2)CNC(C)C	0
O=C(Oc2ccc(cc2(OC(=O)c1ccc(cc1)C))C(O)CNC(C)(C)C)c3ccc(cc3)C	0
c1ccc(c(c1)C[N+](C)(C)CC)Br	0
n1ccnc3c1ccc(NC2=NCCN2)c3Br	0
O=C(NC1(OC3(O)(N(C1(=O))C(C(=O)N2CCCC23)CC(C)C))C(C)C)C7C=C6c5cccc4[nH]c(c(c45)CC6N(C	0
O=C(O)c2cc(NCCCC)c(Oc1ccccc1)c(c2)S(=O)(=O)N	0
c1ccc2c(c1)cccc2CN(C)Cc3ccc(cc3)C(C)(C)C	0
Oc1ccc3c(c1)C45(CCN(CC2CCC2)C(C3)C5(O)(CCCC4))	0
O=C(NCC)N(C(=O)C3CN(CC=C)C4Cc2c[nH]c1cccc(c12)C4(C3))CCCN(C)C	0
OC(C=CC(C)C3CCC2C(=CC=C1C(=C)C(O)CC(O)C1)CCCC23(C))C4CCC4	0
O=C2Nc1cccc(OCC(O)CNC(C)(C)C)c1CC2	0
O=COC(C(=O)NC3C(=O)N2C(C(=O)O)=C(CSc1nnnn1C)CSC23)c4ccccc4	0
O=C(O)C3=C(COC(=O)C)CSC2N3(C(=O)C2(NC(=O)CSc1ccncc1))	0
O=C(O)C4=C(C[N+](C)(CCCC1))CSC3N4(C(=O)C3(NC(=O)C(=NOC)c2nc(N)sc2))	0
N#CCSCC(=O)NC3(OC)(C(=O)N2C(C(=O)O)=C(CSc1nnnn1C)CSC23)	0
O=C(OCC3=C(C(=O)O)N2C(=O)C(OC)(NC(=O)Cc1cccs1)C2SC3)N	0
O=C(OC(O)C)C3=C(COC)CSC2N3(C(=O)C2(NC(=O)C(=NOC)c1nc(N)sc1))	0
O=C(OC(OC(=O)C3=C(COC)CSC2N3(C(=O)C2(NC(=O)C(=NOC)c1nc(N)sc1)))C)OC(C)C	0
O=C(O)C4=C(C[N+](C)1ccccc1)CSC3N4(C(=O)C3(NC(=O)C(=NCC(C(=O)O)(C)C)c2nc(N)sc2))	0
O=C(O)C3=C(COC(=O)N)CSC2N3(C(=O)C2(NC(=O)C(=NOC)c1occc1))	0

O=C(OCC3=C(C(=O)OC(OC(=O)C)C)N2C(=O)C(NC(=O)C(=NOC)c1occc1)C2SC3)N	0
O=C(OCC3=C(C(=O)OC(OC(=O)C(OC)(C)C)C)N2C(=O)C(NC(=O)C(=NOC)c1occc1)C2SC3)N	0
O=C1C=C(C=C(N1(O)))C2CCCCC2)C	0
O=C1C=CC3(C(=C1)CCC2C4CC(C)C(O)(C(=O)CCl)C4(C)(CC(O)C23(F)))(C)	0
c1ccc3c(c1)N(c2cc(ccc2CC3)Cl)CCCN(C)C	0
O=C(O)C3N2C(=O)C(NC(=O)C1(N)(CCCCC1))C2SC3(C)(C)	0
n1nc4n(c1CCN3CCN(c2ccccc2C)CC3)CCCC4	0
Oc1ccc2c(c1)C3(C)(CCCCC(C2)C3(N))	0
O=C(Oc1ccc(cc1(OC(=O)C(C)(C)C))C(O)CNC)C(C)(C)C	0
O=C3OC(CC)C(O)(C)C4OC(NC(C(C)CC(O)(C)C(OC1OC(C)CC(N(C)C)C1(O))C(C)C(OC2OC(C)C(O)C(OC'	0
O=S(=O)(N)c1cc2c(s1)S(=O)(=O)C(C)CC2(NCC)	0
O=C(N3CCN(c1nc(N)c2cc(OC)c(OC)cc2(n1))CC3)C4Oc5ccccc5(OC4)	0
n1ccn(c1)CC(OCc2ccc(cc2)Cl)c3ccc(cc3Cl)Cl	0
O=C(O)CCCC=C1OC2CC(O)C(C=CC(O)CCCC)C2(C1)	0
O=C(OC)CCc1ccc(OCC(O)CNC(C)C)cc1	0
O=C(Oc1ccc2c(c1)CCC3C2CCC4(C)(C(O)CCC34))c5ccccc5	0
O=C(OC2CCC3C4CCc1cc(O)ccc1C4(CCC23(C)))CCC5CCCCC5	0
O=C(Oc1ccc2c(c1)CCC3C2CCC4(C)(C(OC(=O)CC)CCC34))CC	0
O=C(OC2CCC3C4CCc1cc(O)ccc1C4(CCC23(C)))CCCCC	0
O=C(OC2CCC3C4CCc1cc(O)ccc1C4(CCC23(C)))CCCCCCCCC	0
O=C(OC2CCC3C4CCc1cc(O)ccc1C4(CCC23(C)))CCC	0
O=C(O)C(c1ccc(cc1)C(O)CCCN2CCC(CC2)C(O)(c3ccccc3)c4ccccc4)(C)C	0
O=C1C=CC4(C)(C(N1)CCC2C4(CCC3(C)(C(C(=O)NC(C)(C)C)CCC23)))	0
O=C(O)C(c1ccc(c(F)c1)c2ccccc2)C	0
O=C1C=CC3(C(=C1)C(F)CC2C4CC(C)C(OC(=O)CC)(C(=O)SCF)C4(C)(CC(O)C23(F)))(C)	0
O=C(NC(C(=O)NCOP(=O)(O)O)(c1ccccc1)c2ccccc2)C	0
O=C(O)CC1(CN)(CCCCC1)	0
O=C(NC1CCC(C)CC1)NS(=O)(=O)c2ccc(cc2)CCNC(=O)N3C(=O)C(=C(C)C3)CC	0
O=C(NC1CCCCC1)NS(=O)(=O)c2ccc(cc2)CCNC(=O)c3ncc(nc3)C	0
O=C(NC2CC1N(C)C(CCC1)C2)c3nn(c4ccccc34)C	0
N=C(N)NN=Cc1c(cccc1Cl)Cl	0
O=C(NC(=N)N)Cc1c(cccc1Cl)Cl	0
O=C1N(c3ccc(cc3(C(=NC1)c2ccccc2))Cl)CC(F)(F)F	0
O=C1C=CC3(C(=C1)C(F)CC2C4CC(C)C(OC(=O)CC)(C(=O)CCl)C4(C)(CC(O)C23(F)))(C)	0
O=C1CCC5C4N(C)CC25(c3c(OC12)c(O)ccc3C4)	0
O=C1c5ccccc5(C(=O)c2c(O)c4c(c(O)c12)CC(O)(C(=O)C)CC4(OC3OC(C)C(O)C(N)C3))	0
O=C(NN2c1ccccc1CC2C)c3ccc(c(c3)S(=O)(=O)N)Cl	0
O=C(NCC(O)CO)c1c(c(C(=O)NCC(O)CO)c(c(c1I)N(C(=O)C)CC(O)CN(C(=O)C)c2c(c(C(=O)NCC(O)CO)c	0
O=C(NCC(O)CO)c1c(c(C(=O)NCC(O)CO)c(c(c1I)N(C(=O)C)CC(O)CO)I)I	0
O=C(NCC(O)CO)c1c(c(NC(=O)COC)c(c(C(=O)N(C)CC(O)CO)c1I)I)I	0
O=C(NCC(O)CO)c1c(c(C(=O)NCC(O)CO)c(c(c1I)N(C(=O)CO)CCO)I)I	0
O=C(OC1CC2CCC(C1)[N+](C)(C(C)C)C(c3ccccc3)CO	0
O=C(c1ccccc1)c2ccc3n2CCC3(C(=O)O)	0
O=C2c1cccc(OCC(O)CNC(C)(C)C)c1CCC2	0
N#CC4(c1ccc(F)cc1)(CCC(N3CCC(C(=O)O)(c2ccccc2)C(C)C3)CC4)	0

N#Cc1cc(NC(=O)C(=O)O)c(c(c1)NC(=O)C(=O)O)Cl	0
O=C(O)C1=CN(c2c(F)c(c(F)cc2(C1(=O))))N3CCNC(C)C3)CC	0
O=C(OCC)N4CCC(=C2c1ncccc1CCc3cc(ccc23)Cl)CC4	0
c1ccc3c(c1)C4c2cccc2C3(CCCNC)CC4	0
O=C(N)C=2C(=O)C3(O)(C(O)=C1C(=O)c4c(O)ccc(c4(C(=C)C1C(O)C3(C(C=2(O))N(C)C)))Cl)	0
O=C(O)c2cccc2(Nc1c(ccc(c1Cl)C)Cl)	0
O=C(Oc1c(cc(OCC(O)CNC(C)C)c(c1C)C)C)C	0
O=C(O)C(N)(C)Cc1ccc(O)cc1	0
O(c1c(cccc1C)C)CC(N)C	0
O=C(O)C4N3C(=O)C(NC(=O)C(NC(=O)N1C(=O)N(CC1)S(=O)(=O)C)c2cccc2)C3SC4(C)(C)	0
O=C(NCC(O)c1cc(OC)ccc1(OC))CN	0
O=C(OC)CCCCCCC1C(=O)CC(O)C1(C=CCC(O)(C)CCCC)	0
O=C(OCCC[N+](3(C)(Cc1cc(OC)c(OC)cc1C(Cc2cc(OC)c(OC)c(OC)c2)C3))CCC=CCCC(=O)OCCC[N+](6(C	0
O=C(O)C3N(C(=O)C(NC(C(=O)OCC)CCc1cccc1)C)Cc2cc(OC)c(OC)cc2C3	0
O=C(OCC)Nc1ccc4c(c1)N(C(=O)CCN2CCOCC2)c3cccc3S4	0
O=C(OCCCCCCCCC(=O)O)C=C(C)CC2OCC(CC1OC1C(C)C(O)C)C(O)C2(O)	0
O=C3CCC1C(c2c(O)cc(cc2(OC1(C)(C)))C(C)(C)CCCCC)C3	0
O=C(C)CCc1ccc2cc(OC)ccc2(c1)	0
Oc5ccc2c3c5(OC4C(O)CCC(O)(C(N(CC)CC1CCC1)C2)C34(C))	0
Oc5ccc2c3c5(OC4C(=C)CCC(O)(C(N(CC)CC1CC1)C2)C34(C))	0
O=C(O)C=3Oc2c(cc1C(=O)C=C(C(=O)O)N(c1c2CCC)CC)C(=O)C=3	0
O=C(OC)C3=C(NC(=C(C(=O)OCCN(C)Cc1cccc1)C3(c2cccc(c2)[N+](=O)[O-]))C)C	0
O=C(O)C2=CN1c3c(OCC1C)c(c(F)cc3(C2(=O)))N4CCN(C)CC4	0
O=C(O)Cc1ccc2OCc3cccc3(C(=CCN(C)C)c2(c1))	0
O=C(O)c2cc(N=Nc1ccc(O)c(c1)C(=O)O)ccc2(O)	0
N(OCc1ccc(cc1Cl)Cl)=C(c2ccc(cc2Cl)Cl)Cn3cncc3	0
OC(COc1cccc1C2CCCC2)CNC(C)(C)C	0
N=C(N)c2ccc(OCCCCCOc1ccc(cc1)C(=N)N)cc2	0
OCC3OC(n2cnc1c2(N=CNCC1(O)))CC3(O)	0
c2cc1[nH]cc3c1c(c2)C4CC(CN(CCC)C4(C3))CSC	0
O=C2OCC(Cc1cncn1C)C2CC	0
OC(COc1cccc2[nH]ccc12)CNC(C)C	0
O=C(OC5CC6CCC2C(CCC3(C)(C(OC(=O)C)C(N1CC[N+](C)(C)CC1)CC23))C6(C)(CC5(N4CC[N+](C)(C)C	0
O=C(O)C4N3C(=O)C(NC(=O)C(NC(=O)N1C(=O)C(=O)N(CC)CC1)c2cccc2)C3SC4(C)(C)	0
O=C3OCC4C(O)c1cc5OCOc5(cc1C(c2cc(OC)c(OC)c(OC)c2)C34)	0
O=C1N(c3ccc(cc3(C(=NC1)c2cccc2))Cl)CC4CC4	0
O=C4N2CCc1cccc1C2CN(C(=O)C3CCCC3)C4	0
Fc1cccc1C2=NCC(N(c3ccc(cc23)Cl)CC(F)(F)F)=S	0
NC(C)C23(CC1CC(CC(C1)C2)C3)	0
O=C1C=CC3(C(=C1)CCC2C4CC(C)C(C(=O)CC)(C)C4(C)(CC(O)C23))(C)	0
O=C(OC3C(CC4C5CCC2CC(O)C(N1CCOCC1)CC2(C)C5(CCC34(C)))N+](6(CC=C)(CCCC6))C	0
O=C(Nc1c(cccc1C)C)C2N(CCC)CCCC2	0
O=S(=O)(Nc1ccc(cc1)C(O)CNC(C)C)C	0
O=C(N(c1cccc1)C3(COC)(CCN(CCc2cccs2)CC3))CC	0
n1ccn(c1)CC(c2ccc(cc2Cl)Cl)SCc3ccc(cc3)Cl	0

O=S(=O)(NC)Cc1ccc2[nH]cc(c2(c1))CCN(C)C	0
O=C1N(c3ccc(cc3(C(=NC1(O))c2ccccc2))Cl)C	0
O=C5OCC6C(OC2OC(C)C(OC(O)c1cccs1)C(O)C2(O))c3cc7OCOc7(cc3C(c4cc(OC)c(O)c(OC)c4)C56)	0
O=C(N3CCN(c1nc(N)c2cc(OC)c(OC)cc2(n1))CC3)C4OCCC4	0
n1ccn(c1)CC2(OCC(O2)COc3ccc(cc3)N4CCN(CC4)C(C)C)c5ccc(cc5Cl)Cl	0
O=C(OC2CCC3C4CCC1=CC(=O)CCC1(C)C4(CCC23(C)))CC	0
n1ccn(c1)CC(OCc2ccsc2Cl)c3ccc(cc3Cl)Cl	0
O=C(Nc1c(cccc1C)C)C(N)C	0
O=C2OCC=1C(=O)N4C(=CC=1C2(O)CC)c3nc5ccc(O)c(c5(cc3C4))CN(C)C	0
n4nc1n(c3ccc(cc3(C(=NC1)c2ccccc2Cl))Cl)c4C	0
NCCNCCNCCN	0
O=C1NC(=O)N(C=C1C(F)(F)F)C2OC(CO)C(O)C2	0
n1c(nc2ccc(c(c2(c1N))C)CNc3cc(OC)c(OC)c(OC)c3)N	0
O=C(OCCOCN1C=NC2C(=O)NC(=NC12)N)C(N)C(C)C	0
O=C(OC5CC6CCC1C(CCC2(C)C(OC(=O)C)C(CC12)[N+](C)(CCCCC3)))C6(C)(CC5(N4CCCCC4)))C	0
O=C(c1ccc(cc1)Cl)c2c(cc(n2C)CC(=O)O)C	0
OCC(Nc2nc(NCc1ccccc1)c3ncn(c3(n2))C(C)C)CC	0
O=C1NC(=O)N(C=C1Br)C2OC(CO)C(O)C2	0
O=C(N)c1ncn(c1(N))C2OC(CO)C(O)C2(O)	0
O=C(N)C	0
O=C(O)c1c(cc(c(NC(=O)C)c1I)I)I	0
O=C(O)CC(OC(=O)C)C[N+](C)(C)C	0
n1cnc2[nH]cnc2(c1N)	0
O=P(O)(O)OP(=O)(O)OP(=O)(O)OCC3OC(n2cnc1c(ncnc12)N)C(O)C3(O)	0
N=C(N)SCCN	0
O=C(N)NC1NC(=O)NC1(=O)	0
O=C1NC(=O)C(C(=O)N1)(CC=C)CC=C	0
O=C(Oc2c(c(c1OC(C)(CCc1c2C)CCCC(C)CCCC(C)CCCC(C)C)C)C)	0
NC23(CC1CC(CC(C1)C2)C3)	0
OC2CCC(NCc1cc(cc(c1(N))Br)Br)CC2	0
N(N)=C(N)N	0
O=C1NC(=O)C(C(=O)N1)(CC)CCC(C)C	0
O(c1ccc(cc1)C2=CC(=S)SS2)C	0
O=C1NC(=O)C(C(=O)N1)(CC=C)C(C)C	0
O=C2C(=C(C=CC(=CC=CC(=CC=CC=C(C=CC=C(C=CC1=C(C(=O)C(O)CC1(C)C)C)C)C)C)C)C(C)C)CC2(O	0
O=C(OC2CC1N(C)C(CC1)C2)C(c3ccccc3)CO	0
O=C(NOCCO)c3cc1c(ncn1C)c(F)c3(Nc2ccc(cc2Cl)Br)	0
O=C1NC(=O)C(C(=O)N1)(CC)CC	0
O=C(Oc1ccc(cc1)NC(=O)C)c2ccccc2(OC(=O)C)	0
O=C(c1cc(c(O)c(c1)I)I)c2c3ccccc3(oc2CC)	0
O=C(OOC(=O)c1ccccc1)c2ccccc2	0
O=C(O)C[N+](C)(C)C	0
O=C1C=CC3(C(=C1)CCC2C4CC(C)C(O)(C(=O)COP(=O)(O)O)C4(C)(CC(O)C23(F)))C	0
n1ccn(c1)C(c2ccccc2)c3ccc(cc3)c4ccccc4	0
n1nc3n(c1C)c2c(cc(Br)s2)C(=NC3)c4ccccc4Cl	0

[illegible]

O=S(=O)(O)c5cc(c6ccc(N=Nc1ccc(cc1C)c4ccc(N=Nc2ccc3c(c2(O))c(N)c(cc3S(=O)(=O)O)S(=O)(=O)C	0
O=C1N=C(N)C(F)=CN1	0
O=C1N(c3ccc(cc3(C(=NC1)c2ccccc2(F))))[N+](=O)[O-])C	0
O=C2OCCN2(N=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-])	0
OC1C(OCC(O)(C)C1(NC))OC3C(O)C(OC2OC(CN)CCC2(N))C(N)CC3(N)	0
c1cc(ccc1C(c2ccc(cc2)N(C)C)=C3C=CC(C=C3)=[N+](C)C)N(C)C	0
OCC1OC(O)C(N)C(O)C1(O)	0
O=C(O)CNC(=O)C(NC(=O)CCC(N)C(=O)O)CSSCC(NC(=O)CCC(N)C(=O)O)C(=O)NCC(=O)O	0
C1CC(C2CC(CCC(C12)C)C(C)C)C	0
O=C(O)CCc2c1Cc5[nH]c(Cc4[nH]c(Cc3[nH]c(Cc([nH]1)c2C)c(c3C(O)C)C)c(c4C(O)C)C)c(c5CCC(=O)C	0
Oc1c(cc(c(c1Cc2c(O)c(cc(c2Cl)Cl)Cl)Cl)Cl)Cl	0
NC1(C)(CN(CN(CC(CC)CCCC)C1)CC(CC)CCCC)	0
O=C1N=C(O)N(C(=O)C1(C2=CCCCC2)C)C	0
n1c[nH]c(c1)CCN	0
O=C(OCC(=O)C3(O)(CCC2C4CCC1=CC(=O)CCC1(C)C4(C(O)CC23(C))))C	0
O=C(O)CCC(NOC(=O)C(C(=O)C(=O)Nc1cccc1C(C)(C)C)C(=O)COc2c(F)c(F)cc(F)c2(F)	0
O(c1ccc(cc1)C(c2ccc(cc2)I)=C(c3ccccc3)CC)CCN4CCCC4	0
O=C(NO)CC(C(=O)NC(C(=O)NC)Cc2c[nH]c1ccccc12)CC(C)C	0
O=C(O)CCCC=C1CC2CC(O)C(C=CC(O)C(C)CC#CC)C2(C1)	0
O=S(=O)(O)CCCCN6c2ccc1ccccc1c2CC6(=CC=CC=CC=CC5=[N+](c4ccc3ccccc3c4C5(C)C)CCCCS(=O)	0
O=C3N=CNc1c3(ncn1C2OC(CO)C(O)C2(O))	0
O=C(O)c2c(cc(c(NC(=O)CCCCC(=O)Nc1c(cc(c(C(=O)O)c1I)I)I)c2I)I)I	0
O=C1C(=COc2ccccc12)c3ccccc3	0
O=C1ONC(=O)C1Cc4ccc(OCCc2nc(oc2C)c3ccccc3)cc4	0
OCC3OC(OC2C(O)C(OC1OC(CN)C(O)C(O)C1(N))C(N)CC2(N))C(O)C(N)C3(O)	0
O=C2CCCCC2(NC)(c1ccccc1Cl)	0
O=C2C=C(Oc3c(OC)c1occc1c(OC)c23)C	0
OCC2OC(OC1C(O)C(O)C(O)OC1(CO))C(O)C(O)C2(O)	0
N#CC(C#N)=NNc1ccc(cc1)C2=NNC(=O)CC2C	0
O=C(N(C)C)C(c1ccccc1)(c2ccccc2)CCN4CCC(O)(c3ccc(cc3)Cl)CC4	0
O=C(OCC)CC(C(=O)OCC)SP(OC)(OC)=S	0
OC3(c1ccc(cc1)Cl)(c4ccccc4(C2=NCCN23))	0
O=C(OCC(C)(COC(=O)N)C(C)CC)N	0
c1ccc(cc1)C(c2ccc(cc2)Cl)N4CCN(Cc3ccccc(c3)C)CC4	0
O=C(OCCN(C)C)COc1ccc(cc1)Cl	0
O=C2NC(c1ccccc1)(C(=O)N2C)CC	0
O=C2NC(=O)C(c1ccccc1)(C(=O)N2C)CC	0
O=C(N(c1ccccc1C)C)C2N(C)C(C)CCC2	0
O=C(OCC(C)(COC(=O)N)CCC)N	0
O=C(O)COc1ccccc1(C(=O)NCC(OC)C[Hg]O)	0
O=C1c3ccccc3(N=C(N1c2ccccc2C)C)	0
O=C1NC(=O)C(C(=O)N1C)(CC=C)C(C=CCC)C	0
O=C(OC)c1ccccc1(O)	0
O=C1NCC(C(=O)C1(CC)CC)C	0
O=C5C=C4C(=C3C(c1ccc(cc1)N(C)C)CC2(C)(C(CCC2(O)(C#CC))C3CC4))CC5	0

OCC1N(CCCC)CC(O)C(O)C1(O)	0
O=C(O)C(CC(=O)N1CC2CCCCC2(C1))Cc3ccccc3	0
n2c(OC)c(N=C1NCCN1)c(nc2C)Cl	0
Oc5ccc4c1c5(OC2C(O)C=CC3C(N(CC=C)CCCC123)C4)	0
O=C1CCC5(O)(C4N(CC=C)CCC25(c3c(OC12)c(O)ccc3C4))	0
O=C(OC2CCC3C4CCC1=CC(=O)CCC1C4(CCC23(C)))CCCCCCCCC	0
O=C2OC(C)CC=CC=CC=CC(OC1OC(C)C(O)C(N)C1(O))CC4OC(O)(CC(O)CC3OC3(C=C2))CC(O)C4(	0
OCC4OC(OC2C(O)C(N)CC(N)C2(OC1CC(CN)C(O)C(O)C1(N)))C(O)C4(OC3OC(CN)C(O)C(O)C3(N))	0
OCC4OC(OC2C(O)C(N)CC(N)C2(OC1OC(CN)C(O)C(O)C1(N)))C(O)C4(OC3OC(CN)C(O)C(O)C3(N))	0
O=C(Oc1cccc(c1)[N+](C)(C)N(C)C	0
O=C(OCC3CN(C)C4Cc2cn(c1cccc(c12)C4(OC)(C3))C)c5cncc(c5)Br	0
O=C(OCC(COC(=O)c1cnccc1)(COC(=O)c2cnccc2)COC(=O)c3cnccc3)c4cnccc4	0
O=C(NCCO[N+](=O)[O-])c1cnccc1	0
O=C(N)c1ccc[n+](c1)C5OC(COP(=O)(O)OP(=O)(O)OCC4OC(n3cnc2c(ncnc23)N)C(O)C4(O))C(O)C5(	0
O=[N+](O-)]c2oc(C=NN1CCS(=O)(=O)CC1C)cc2	0
O=C1NCCN1c2ncc([N+](=O)[O-])s2	0
O=C(c1ccc(cc1[N+](=O)[O-])C(F)(F)F)C2C(=O)CCCC2(=O)	0
O=C1Nc3ccc(cc3(C(=NC1)c2cccc2)))[N+](=O)[O-]	0
O=C(OC3(C#C)(CCC2C4CCC1=CC(=O)CCC1C4(CCC23(C)))C	0
O=C1CC3=C(CC1)C4CCC2(C)(C(CCC2(O)(C#C))C4(CC3))	0
O=C1OC(c2ccc(OC)c(OC)c12)C4c3c(OC)c5OCOc5(cc3CCN4(C))	0
O=C(N)CNC(=O)C(NC(=O)C4N(C(=O)C1NC(=O)C(NC(=O)C(NC(=O)C(NC(=O)C(NC(=O)C(NC(=O)C(N)CSSC1)Cc	0
O=C(O)C1=CC(=O)NC(=O)N1	0
O(CCN(C)C)C(c1cccc1)c2cccc2C	0
O=[N+](O-)]c1cc2NC(CNC(C)C)CCc2(cc1CO)	0
O=C1OCC4(C)(C(C1)CCC3C4(CCC2(C)(C3(CCC2(O)(C))))	0
OC(COc1cccc1(OCC=C))CNC(C)C	0
O=C(c1cccc1)c2ccc(OC)cc2(O)	0
O=C1CCC5(O)(C4N(C)CCC25(c3c(OC12)c(OC)ccc3C4))	0
O=C3N(c1cccc1)N(c2ccc(O)cc2)C(=O)C3CCCC	0
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))	0
O=C(O)C=Cc1ccc(cc1)Cn2cncc2	0
OCC4OC(OC3C(OC2OC(CO)C(OC1OC(CN)C(O)C(O)C1(N))C2(O))C(O)C(N)CC3(N))C(N)C(O)C4(O)	0
Oc1ccc2c(c1)C3(C)(CCN(CC=C(C)C)C(C2)C3(C))	0
N=C(N)NC(=N)NCCc1cccc1	0
O=C3OC(c1ccc(O)cc1)(c2ccc(O)cc2)c4cccc34	0
O(c1cccc1)CC(N(Cc2cccc2)CCCl)C	0
Oc1cccc(c1)N(c2ccc(cc2)C)CC3=NCCN3	0
OC(c1cccc1)C(N)C	0
O=C(Oc1ccc2c(c1)C3(C)(CCN(C)C3(N2C)))NC	0
N1CCNCC1	0
O1c2cc(c(cc2(OC1))CCC)COCCOCCOCCCC	0
OC=C	0
O=C(O)CCc2c1Cc5[nH]c(Cc4[nH]c(Cc3[nH]c(Cc([nH]1)c2C)c(c3CC)C)c(c4C(O)C)C)c(c5CCC(=O)O)C	0
O=C(NC(C)C)c1ccc(cc1)CNNC	0



c1ccc3c(c1)N(c2ccccc2S3)CC(N(C)C)C	0
O=Cc1c(O)c(ncc1COP(=O)(O)O)C	0
C#CC4(O)(CCC3C5CCc2cc(OC1CCCC1)ccc2C5(CCC34(C)))	0
O=C(O)C(OCC)Cc4ccc(OCCN2c3ccccc3(Oc1ccccc12))cc4	0
O=C1C=C(c2ccccc2(N1))CC(NC(=O)c3ccc(cc3)Cl)C(=O)O	0
O=C(NN1CCCC1)c4nn(c2ccc(cc2Cl)Cl)c(c3ccc(cc3)Cl)c4C	0
O=C(NCN1CCCC1)C=4C(=O)C5(O)(C(O)=C3C(=O)c2c(O)cccc2C(O)(C)C3CC5(C(C=4(O))N(C)C))	0
O=C(O)c4c(C2=C3C=C(C(=O)C(=C3Oc1c2(cc(c(O)c1)I)))I)I)c(c(c4Cl)Cl)Cl	0
O=C(O)CC(O)CC(O)C=CC1C(NC(NC1C(C)C)N(C)S(=O)(=O)C)c2ccc(F)cc2	0
O=C1OC=CC(=C1)C5CCC6(O)(C7CCC4=CC(OC3OC(C)C(OC2OC(CO)C(O)C(O)C2(O))C(O)C3(O))CCC4	0
O=C(O)C(N)CC[Se]C	0
O=C(O)c1ccccc1	0
O=C(O)O	0
O=NN(C(=O)NC1C(O)OC(CO)C(O)C1(O))C	0
OCC2OC(OC1(OC(CO)C(O)C1(O))(CO))C(O)C(O)C2(O)	0
O=S(=O)(Nc1ncnc(OC)c1(OC))c2ccc(N)cc2	0
O=S(=O)(Nc1nccc(n1)C)c2ccc(N)cc2	0
Oc1ccc(cc1)C(O)CNC	0
n2c1ccccc1c(N)c3ccccc23	0
O=C(OCC3OC(OC(=O)c1cc(O)c(O)c1)C(O)C(OC(=O)c2cc(O)c(O)c(O)c2)C3(O))c4cc(O)c(O)c(O)c	0
Oc1cc(O)cc(c1)C(O)CNC(C)(C)C	0
O=S(=O)(Nc2nc(nc(OCCO)c2(Oc1ccccc1(OC)))c3ccnc(c3)c4nn[nH]n4)c5ncc(cc5)C(C)C	0
OCCSCCCCCCCCCSCCO	0
O=C(O)C(c2ccc(C(=O)c1ccccc1)s2)C	0
O=C(N)c2nc(C1OC(CO)C(O)C1(O))sc2	0
O=C(OC2CCC1(OC1)C(C2(OC))C3(OC3(CC=C(C)C))(C))NC(=O)CCl	0
OCC3OC(OC2C(O)C(OC1OC(CN)C(O)CC1(N))C(N)CC2(N))C(O)C(N)C3(O)	0
O=C(O)c2ccccc2(NC(=O)C=Cc1ccc(OC)c(OC)c1)	0
O=C(O)Cc2cc(c(Oc1ccc(O)c(c1)I)c(c2)I)I	0
O=C1C=CC4(C(=C1)CCC3C5CC2OC(OC2(C(=O)CO)C5(C)(CC(O)C34(F))))(C)C(C)	0
O=P(OC)(OC)C(O)C(Cl)(Cl)Cl	0
O=C(O)C(Cl)(Cl)Cl	0
Oc2cc(ccc2(Oc1ccc(cc1Cl)Cl))Cl	0
O=C2N(Cc1ccccc1)C4CS5CCCC5(C4(N2Cc3ccccc3))	0
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)(:	0
O=C(O)C(N)Cc2c[nH]c1ccccc12	0
Oc1ccc(cc1)C(C)(C)CC(C)(C)C	0
O=C(O)CCC(N)C=C	0
O=C(OC2C(O)(C(=O)OC)C5N(c1cc(OC)c(cc1C45(CCN3CC=CC2(CC)C34))C9(C(=O)OC)(c7[nH]c6cccc	0
OC3CC(=CC=C1CCCC2(C)(C1CCC2(C(C)CCCC(C)C)))C(=C)CC3	0
O=C(Nc1c(cccc1C)C)c2cc(c(cc2(O))Cl)S(=O)(=O)N	0
O=C(O)Cc2ccccc2(Nc1c(cccc1Cl)Cl)	1
O=C3OC(CC)C(O)(C)C(O)C(C(=O)C(C)CC(O)(C)C(OC1OC(C)CC(N(C)C)C1(O))C(C)C(OC2OC(C)C(O)C(C	1
FC(F)(F)c2ccc(OC(c1ccccc1)CCNC)cc2	1
O=C(NN)c1ccncc1	1

O=C2Nc1c(ncccc1C)N(c3ncccc23)C4CC4	1
O=C(OCc1cnscs1)NC(Cc2cccc2)C(O)CC(NC(=O)C(NC(=O)N(C)Cc3nc(C(C)C)sc3)C(C)C)Cc4cccc4	1
O=C1c3cccc3(OC(O)=C1C(c2ccc(cc2)[N+](=O)[O-])CC(=O)C)	1
O=C(O)C=C(C=CC=C(C=Cc1c(cc(OC)c(c1C)C)C)C)C	1
O=C(NCCCN(C)C2Nc1cc(OC)c(OC)cc1C(N)N2)C3OCCC3	1
O=C(O)C3N2C(=O)C(NC(=O)C(N)c1cccc1)C2SC3(C)(C)	1
O=C(OC)NC(C(=O)NN(Cc1ccc(cc1)c2ncccc2)CC(O)C(NC(=O)C(NC(=O)OC)C(C)(C)C)Cc3cccc3)C(C)(C	1
O=C(O)CCCc2nc1cc(ccc1n2C)N(CCCl)CCCl	1
C(=CC=C(C=CC=C(C=CC1=C(C)CCCC1(C)C)C)C)C=C(C=CC=C(C=CC2=C(C)CCCC2(C)C)C)C	1
O=C(N)N2c3cccc3(C=Cc1cccc12)	1
OC3cc(O)c2c(OC(c1ccc(O)c(O)c1)C(O)C2)c3	1
O=C(O)C3=C(COC(=O)C)CSC2N3(C(=O)C2(NC(=O)Cc1cccs1))	1
O=C(OC3(C(=O)C)(CCC2C4C=C(C1=CC(=O)CCC1(C)C4(CCC23(C))))Cl))C	1
O=C(O)c2cc(nc1cccc12)c3cccc3	1
O=P1(OCCCN1)N(CCCl)CCCl	1
O=C3C(=C(O)N)C(=O)C4(O)(C(=O)C2=C(O)c1c(O)cccc1C(C)C2C(O)C4(C3N(C)C))	1
O=C(OC1C(OC(C)CC1(N(C)C))OC3C(C)C(OC2OC(C)C(O)C(OC)(C)C2)C(C(=O)OC(CC)C(O)(C)C(O)C(C(=	1
O=C1C=C(OC2c1c(O)cc(O)c2C3CCN(C)CC3(O))c4cccc4Cl	1
O=C(O)C(=C1C(OC(=O)C)CC3(C)(C1CC(O)C2C4(C)(CCC(O)C(C)C4(CCC23(C))))CCC=C(C)C	1
O=C1N(C(=O)CC(C)(C)C1)CCCN3CCN(c2ncccn2)CC3	1
O=C(O)C4OC(OC3C(OC(OC2C(OC(OC1C(O)C(NC(=O)C)C(O)OC1(COS(=O)(=O)O))C(OS(=O)(=O)O)C(	1
n1nc(NN)c2cccc2(c1)	1
O=C1N(C(=NC12(CCCC2))CCCC)Cc3ccc(cc3)c5cccc5(c4nn[nH]n4)	1
O=C(N)C(NC(=O)C3NC(=O)C(NC(=O)C(NC(=O)C(NC(=O)C(NC(=O)C(NC(=O)C(N)Cc1ccc2cccc2(c1)))	1
O=C(Nc1ncccc1)C3=C(O)c2c(cc(Cl)s2)S(=O)(=O)N3C	1
n1ccn(c1)CC(OCc2ccc(cc2Cl)Cl)c3ccc(cc3Cl)Cl	1
c1ccc(c(c1)C(c2ccc(cc2)Cl)C(Cl)Cl)Cl	1
O=C(NCN1CCOCC1)c2nccnc2	1
O=C1N(N=C(N)C1)C(c2ccc(c(c2)Cl)Cl)C	1
O=C(O)c1cnccc1	1
O=C(OC4C(O)C(OC3ccc2C(O)=C(NC(=O)c1ccc(O)c(c1)CC=C(C)C)C(=O)Oc2c3C)OC(C)(C)C4(OC))N	1
O=C(OC1ccc(cc1)C3(C(=O)Nc2cccc23)(c4ccc(OC(=O)C)cc4))C	1
O=C(OC(C)C)NCCC(=O)NC(C(=O)NC(C(=O)NC(C(=O)N)Cc1cccc1)CC(=O)O)CCSC)Cc3c[n	1
O=C(O)C1=CN(c2nc(ncc2(C1(=O))))N3CCNCC3)CC	1
O=C1C=CC4(C(=C1)CCC3C4(C(=O)CC2(C)(C3(CCC2(O)(C(=O)CO))))(C)	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	1
O=C(Nc2ccc(OC1ccnc(c1)C(=O)NC)cc2)Nc3ccc(c(c3)C(F)(F)F)Cl	1
OC4(C)(CCC3C5CCC2Cc1[nH]ncc1CC2(C)C5(CCC34(C)))	1
O=S(=O)(Nc1ncccn1)c2ccc(N)cc2	1
O=S(=O)(Nc1noc(c1)C)c2ccc(N)cc2	1
O=C(O)CC=2c3cc(F)ccc3(C(=Cc1ccc(cc1)S(=O)(=O)C)C=2C)	1
O=C1NC(=O)N(C=C1(F))C2OCCC2	1
O=C(Nc1ncccc1)C3=C(O)c2c(ccs2)S(=O)(=O)N3C	1
O=C(NC3C(=O)NCC(=O)N(C)C4C(=O)N(C)C(C(=O)SCC(NC(=O)c1nc2cccc2(cc1(O)))C(=O)NCC(=O)N	1
O=C(NCCCC)NS(=O)(=O)c1ccc(cc1)C	1

O=C1NC(C(=O)N(C)C(C(=O)N(C)C(C(=O)N(C)C(C(=O)N(C)C(C(=O)N(C)CC(=O)N(C)C(C(=O)I	1
O=C(OC2C(O)(C(=O)OC)C5N(c1cc(OC)c(cc1C45(CCN3CC=CC2(CC)C34))C9(C(=O)OC)(c7[nH]c6cccc	1
O=C(OCC)CNC(C(=O)N2CCC2(C(=O)NCc1ccc(cc1)C(=NO)N))C3CCCCC3	1
n2c1cccc1c(N)c3c2CCCC3	1
O=C(OCC(=O)C35(OC6(OC5(CC2C4CCC1=CC(=O)C=CC1(C)C4(F)(C(O)CC23(C))))(CCCC6)))C	0
O=C(OCCCCCOC(=O)CC[N+](C)(CCc1cc(OC)c(OC)cc1C3(Cc2ccc(OC)c(OC)c2)))CC[N+](C)(CCc4cc(	0
O=C(O)CN3C(=O)C(NC(C(=O)OCC)CCc1cccc1)CCc2cccc23	0
n1ccn(c1)CC(CCc2ccc(cc2)Cl)Sc3c(cccc3Cl)Cl	0
O=C(O)C4=C(CSc1nnnn1C)CSC3N4(C(=O)C3(NC(=O)C(O)c2cccc2))	0
O=C(O)C4=C(CSc1nnnn1CS(=O)(=O)O)CSC3N4(C(=O)C3(NC(=O)C(O)c2cccc2))	0
O=C(O)C3=CCSC2N3(C(=O)C2(NC(=O)C(=CCC(=O)O)c1nc(N)sc1))	0
O=C(OCCC[N+](C)(CCc1cc(OC)c(OC)c(OC)c1C3(Cc2cc(OC)c(OC)c(OC)c2)))CCC(=O)OCCC[N+](C)(	0
n1nc2n(c1)c4ccc(cc4(C(=NC2)c3cccc3))Cl	0
O=C(Oc1ccc2c(c1)CCC4C2CCC5(C)(C(OC(=O)c3ccc(cc3)N(CCCl)CCCl)CCC45))c6ccc(cc6)N(CCCl)CCC	0
O=C1C=CC4(C(=C1)C(F)CC3C5CC2OC(OC2(C(=O)CO)C5(C)(CC(O)C34))(C(C)(C)	0
O=C1N=C(N)C=CN1C2OC(CO)C(O)C2(F)(F)	0
O=C(NC(CO)CO)c1c(c(NC(=O)C(O)C)c(c(C(=O)NC(CO)CO)c1)I)I	0
O=C(O)C3=C(CCC2N3(C(=O)C2(NC(=O)C(N)c1cccc1)))Cl	0
O=C2c1[nH]cnc1C(C(=O)C2C)C	0
O=C(OCc2cccc(Oc1cccc1)c2)C3C(C=C(Cl)Cl)C3(C)(C)	0
Oc1ccc(nc1CO)C(O)CNC(C)(C)C	0
O=C(OC)CCN2CCC(C(=O)OC)(N(c1cccc1)C(=O)CC)CC2	0
O=C(OCC)c3cnc(C#Cc1ccc2c(c1)C(C)(C)CCS2)cc3	0
O=C(NC(C)C)NS(=O)(=O)c2cnccc2(Nc1cccc(c1)C)	0
c1ccc3c(c1)N(c2cccc2CC3)CC(C)CN(C)C	0
O=C(OCC[N+](C)(C)C)C	0
O=C(O)C(Oc1nc(cc(n1)C)C)C(OC)(c2cccc2)c3cccc3	0
O=C(O)CCC(NC(=O)C(NC(=O)C1N=C(C(C)C(C)CC)SC1)CC(C)C)C(=O)NC(C(=O)NC2C(=O)NC(C(=O)NC	0
O=C(Nc1c(cccc1C)C)C2N(CCCC)CCCC2	0
O=C(O)CCC(=O)OC2CCC3(C)(C4C(=O)C=C1C5CC(C(=O)O)(C)CCC5(C)(CCC1(C)C4(C)(CCC3(C2(C)(C))	0
CCCCCCCCCCCCCCCC[N+](C)(C)C	0
O=C(N)C=3C(=O)C4(O)(C(O)=C2C(=O)c1c(O)ccc(c1C(O)(C)C2CC4(C(C=3(O))N(C)C))Cl)	0
O=C(O)C4OC(O)C(OS(=O)(=O)O)C(O)C4(OC3OC(O)C(OC2OC(C(=O)O)C(OC1OC(COS(=O)(=O)O)C(O	0
O(c1cc2c(cc1(OC))C(NCC2)CC5=C(CN4CCc3cc(OC)c(OC)cc3C4C5)CC)C	0
O=C(C=CC=CCCCCCCCC)NCC(=O)NC1C(O)C(O)C(OC1(C(O)CO))Nc3ncnc2nc[nH]c23	0
O=C(NO)C(O)C(C(=O)NC(C(=O)NC)C(C)(C)C)CC(C)C	0
O=C(OC3(C(=O)C)(CCC2C4CC(C1=CC(=O)CCC1(C)C4(CCC23(C)))C))C	0
O=C(N)CCC8C1=NC(=C(C7=NC(C)(C6NC(=C(C2=NC(=C1)C(C)(C)C2CCC(=O)N)C(C)(CCC(=O)NCC(C	0
O=C(O)c1c(c4[nH]c1C(CC(=O)NC(C(=O)O)CC(=O)O)C5NC(Cc2[nH]c(c(C=C)c2C)Cc3[nH]c(c(c3C)CC)	0
O=C(NNCCC(=O)NCc1cccc1)c2ccncc2	0
O=C(O)c2cccnc2(Nc1cccc(c1)C(F)(F)F)	0
O=C(N)NN=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-]	0
O=C1OC(C)C(O1)COC(=O)c2c(nc(n2Cc3ccc(cc3)c5cccc5(c4nnnn[nH]4))CCC)C(O)(C)C	0
Oc1nc(O)c2cn[nH]c2(n1)	0
O=C(OC3CC4CN2CCc1c5ccc(OC)cc5([nH]c1C2CC4(C(C(=O)OC)C3(OC))))c6cc(OC)c(OC)c(OC)c6	0

O=S(=O)(Nc1ncccc1)c2ccc(N)cc2	0
O[n+] <sub>2</sub> nc(N)[n+](O)c1cccc12	0
O=C1C=CC3(C(=C1)CCC2C4CC(O)C(O)(C(=O)CO)C4(C)(CC(O)C23(F)))C	0
FC(F)(F)c1ccc3c(c1)N(c2cccc2S3)CCCN(C)C	0
O=C(N(CCC)CCC)Cc2c(nc1ccc(cn12)Cl)c3ccc(cc3)Cl	1
O=C2OC=4c1cccc1S(=O)(=O)N(C=4(C(=O)N2c3ncccc3))C	1
O=S(=O)(NC=NCCSCc1nc(N=C(N)N)sc1)c2ccc(cc2)Br	1
O=C(c1cc(O)c(O)c(O)c1)c2ccc(O)c(O)c2(O)	1
O=C1NC(=O)N(C=C1I)C2OC(CO)C(O)C2(F)	1
O=C(N3CCN(Cc1ccc2OCOc2(c1))CC3)COc4ccc(cc4)Cl	1
O=C(O)Cc2cc(ccc2(Nc1c(F)cccc1Cl))C	1
c1ccc3c(c1)N(c2cccc2S3)CC4CN(C)CCC4	1
O=C(N)NS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1	1
O=S(=O)(Nc1nccs1)c2ccc(N)cc2	1
O=C2N(c1nc(nc(c1CC2)C)C)Cc3ccc(cc3)c5cccc5(c4nn[nH]n4)	1
Oc2c1ncccc1c(cc2Br)C	1
O=C(O)CN(C(c2cccc1c2(ccc(OC)c1C(F)(F)F))=S)C	1
O=C(Oc1ccc(cc1)C3(C(=O)N(C(=O)C)c2cccc23)(c4ccc(OC(=O)C)cc4))C	1
O=C(O)C1=CN(c2nc(c(F)cc2(C1(=O)))N3CC4C(N)C4(C3))c5ccc(F)cc5(F)	1
n1cccc(c1)C(=CCN(C)C)c2ccc(cc2)Br	1
O=C(c1cc(c(OCCN(CC)CC)c(c1)I)I)c2c3cccc3(oc2CCCC)	1
C#CC4(O)(CCC3C5CCC2=Cc1oncc1CC2(C)C5(CCC34(C)))	1
O=C3NC(=O)CN3(N=Cc1oc(cc1)c2ccc(cc2)[N+](=O)[O-])	1
O=C(OC(C)(C)C)NC(c1cccc1)C(O)C(=O)OC4C(=C5C(O)C(=O)C6(C)(C(O)CC2OCC2(OC(=O)C)C6(C(O	1
O=S(=O)(C)CCNCc1oc(cc1)c4ccc5ncnc(Nc3ccc(OCc2cccc(F)c2)c(c3)Cl)c5(c4)	1
O=C1N(N=C(N1CCOc2cccc2)CC)CCCN4CCN(c3cccc(c3)Cl)CC4	1
O=S(=O)(N)c1cc(ccc1C)Nc2nccc(n2)N(c4ccc3c(nn(c3C)C)c4)C	1
O=C3Nc1ccc(F)cc1C3(=Cc2[nH]c(c(C(=O)NCCN(CC)CC)c2C)C)	1
O=C1C(=C(O)OC(C1)(CCc2cccc2)CCC)C(c3cccc(c3)NS(=O)(=O)c4ncc(cc4)C(F)(F)F)CC	1
O=C1N=C(N)C=CN1C2OC(CO)CC2	1
[N-]=[N+]=NC1CC(OC1(CO))N2C=C(C(=O)NC2(=O))C	1
O=C(O)c1ccc(cc1)N3NC(NC3(=C2C=CC=CC2(=O)))=C4C=CC=CC4(=O)	1
O=C(N)C1=NC=NC1(=NNN(C)C)	1
O=C(O)c1cccc(c1)C4=CC=CC(=NNC=2C(=O)N(NC=2C)c3ccc(c(c3)C)C)C4(=O)	1
O=C(NC(c1cccc1)CCN2C4CCC2CC(n3c(nnc3C(C)C)C)C4)C5CCC(F)(F)CC5	1
O=C1CCC5(O)(C4N(CCC25(c3c(OC12)c(O)ccc3C4))CC6CC6)	1
O=C(OC(C)(C)Cc1ccc(cc1)Cl)C(N)C	1
O=C(O)c5ccc(Oc1ccc(cc1)CN4CCC2(C(=O)NC(C(=O)N2(CCCC))C(O)C3CCCCC3)CC4)cc5	1
O=C([O-])C2OC(OC1C(OS(=O)(=O)[O-])C(OC(O)C1(NC(=O)C))CO)C(O)C(O)C2(O)	1
O=C2Nc6c1nc(cnc1sc6(C(=O)N2CCCCN3CC4c5c(OC)cccc5(OCC4(C3))))c7cccc7	1
O=C5OC(OCC)C(NC(=O)C4N3C(=O)C(NC(=O)c1nccc2cccc12)CCC(=O)N3CCC4)C5	1
n1c[nH]c2c1NC=NC2=S	1
O=C(OC3C(C)C(OC)C=COC1(Oc4c(C1(=O)))c5C(=O)C(=CNN2CCN(C)CC2)C(NC(=O)C(=CC=CC(C)C(O)	1
O=C(O)CC=2c3cc(F)ccc3(C(=Cc1ccc(cc1)S(=O)C)C=2C)	1
O=C(O)C1=CN(c2cc(c(F)cc2(C1(=O)))N3CCNCCC3)C4CC4	1

O=C(NNCc1ccccc1)c2noc(c2)C	1
O=C(O)C(NN)(C)Cc1ccc(O)c(O)c1	1
c1ccc(c(c1)CN3Cc2ccsc2CC3)Cl	1
O=C(O)CCC(=O)C(C(C)=O)C1CN=C(C(N)C(C)CC)S1)CC(C)C(C(=O)NC(C(=O)NC2C(=O)NC(C(=O)NC	0
O(C(c1ccccc1)c2cccc2)C4CC3N(C)C(CC3)C4	0
O=C([O-])C[N+](C)(C)C	0
O=C(OC(C)C[N+](C)(C)C)N	0
n1ccccc1C(OCCN(C)C)c2ccc(cc2)Cl	0
N(C(=NCCCCCN=C(N=C(N)Nc1ccc(cc1)Cl)N)N)=C(N)Nc2ccc(cc2)Cl	0
O(CCC1N(C)CCC1)C(c2cccc2)(c3ccc(cc3)Cl)C	0
O=C(NC(C(=O)NC(C(=O)NC(C(=O)NC1C(=O)NC(C(=O)NC(C(=O)NC(C(=O)NC(C(=O)NC(C(=O)NC(C(=O)NC(C(=O)NC(C(=O)	0
O=C(N)CCC8C1=NC(=C(C7=NC(C)(C6[N-]C(=C(C2=NC(=C1)C(C)(C)C2CCCC(=O)N)C)C(C)(CCC(=O)NCC	0
O=C1OCC(=C1)C6CCC7(O)(C8CCC5CC(OC4OC(C)C(OC3OC(C)C(OC2OC(C)C(O)C(O)C2)C(O)C3)C(O)C	0
OC3CC(=CC=C1CCCC2(C)(C1CCC2(C(C=CC(C)C(C)C)))C(=C)CCC	0
O=C([O-])CC(O)C[N+](C)(C)C	0
O=CC3(O)(C(OC(OC1C(O)C(O)C(N=C(N)N)C(O)C1(N=C(N)N))C3(OC2OC(CO)C(O)C(O)C2(NC)))C	0
O=C(OCC[N+](C)(C)C)CCC(=O)OCC[N+](C)(C)C	0
O=S(=O)(N)c1cc(ccc1(OC))CC(NCCOc2ccccc2(OCC))C	0