

feasible_reaction_smarts	not_trained_on_but_known	known_from_valid_set	known_from_test_set	num_products_works_with	example_works_with_reaction_id
[C:4]-[C;H0;D4;+0:5]1(-[C:6])-[O;H0;D2;+0:3]-[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:7]-1>>O-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]-[OH;D1;+0:3].[C:4]-[C;H0;D3;+0:5](-[C:6])=[O;H0;D1;+0:7]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US04960792
[#16;a:5]:[c:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:7]-[C:6]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]:[c:4]:[#16;a:5].[C:6]-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US20100063068A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[O;H0;D2;+0:5]-[C:4]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[C:4]-[O;-;H0;D1:5]	FALSE	FALSE	FALSE	17	US20030134854A1
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:6])-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	TRUE	TRUE	TRUE	22	US20130168656A1
[#7;a:8]:[#7;a:9]:[c:10]-[NH;D2;+0:11]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[#8:3]-[C:4](-[C;D1;H3:5])(-[C;D1;H3:6])-[C;D1;H3:7]>>C-C(-C)(-C)-O-C(=O)-O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])	TRUE	TRUE	FALSE	2	US20110152240A1
[#7:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[N;H0;D3;+0:8](-[C:9])-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[C:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[C:3].[#7:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH;D2;+0:8]	FALSE	FALSE	FALSE	10	US20130217665A1
[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[NH;D2;+0:3]-[c:4]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2].[NH2;D1;+0:3]-[c:4]	TRUE	TRUE	TRUE	10	US06583180B2
[#7;a:4]:[#7;a:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:5]-[c:6]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[#7;a:3]:[#7;a:4].[OH;D1;+0:5]-[c:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20080255083A1
[C;D1;H3:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:5]-[C:4]=[O;D1;H0:3]>>I-[CH2;D2;+0:1]-[C;D1;H3:2].[O;D1;H0:3]=[C:4]-[OH;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US04683242
[#7:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH;D2;+0:8]-[C;H0;D3;+0:1](-[#8:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[#8:2])=[O;D1;H0:3].[#7:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH2;D1;+0:8]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20010009916A1
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[NH;D2;+0:4]-[C:3]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]-[NH3+;D1:4]	FALSE	FALSE	FALSE	6	US20060229330A1
[#7;a:3]:[c:2](:[#7;a:4])-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:6](-[C:5])-[C:7]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2](:[#7;a:3]):[#7;a:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US08173650B2
[C:2]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	TRUE	6	US06159983
[#8:2]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:3])-[NH;D2;+0:4]-[c:5]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[#8:2])=[O;D1;H0:3].[NH2;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	TRUE	17	US06069156
[#8:3]-[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4])-[C:6]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]-[#8:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US06359138B1
[#8:4]-[C:3](=[O;D1;H0:5])-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[O;H0;D2;+0:6]-[c:7]>>Br-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3](-[#8:4])=[O;D1;H0:5].[OH;D1;+0:6]-[c:7]	TRUE	TRUE	FALSE	6	US20150018343A1
[C:1]-[CH2;D2;+0:2]-[NH2;D1;+0:3]>>[C:1]-[C;H0;D2;+0:2]#[N;H0;D1;+0:3]	TRUE	TRUE	TRUE	16	US06887889B2
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[n;H0;D3;+0:4](:[c:3]):[c:5]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[c:3]:[nH;D2;+0:4]:[c:5]	TRUE	TRUE	TRUE	11	US20080139631A1
[#7;a:3]:[c:2](-[NH2;D1;+0:1]):[c:4]:[#7;a:5]>>O=[N+;H0;D3:1](-[O-])-[c:2](:[#7;a:3]):[c:4]:[#7;a:5]	TRUE	TRUE	FALSE	3	US07132425B2
[#7;a:2]:[c:3]:[c:4]-[CH2;D2;+0:5]-[Br;H0;D1;+0:1]>>O=C1-C-C-C(=O)-N-1-[Br;H0;D1;+0:1].[#7;a:2]:[c:3]:[c:4]-[CH3;D1;+0:5]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US05710139
[#7:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[N;H0;D3;+0:7]-[C:8]-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#7:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[NH;D2;+0:7]-[C:8]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20140213448A1
[c:2]-[CH;D2;+0:1]=[N;H0;D2;+0:3]-[c:4]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2].[NH2;D1;+0:3]-[c:4]	FALSE	FALSE	FALSE	3	US04200648
[C:8]-[N;H0;D3;+0:9](-[C:10])-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[#8:3]-[C:4](-[C;D1;H3:5])(-[C;D1;H3:6])-[C;D1;H3:7]>>C-C(-C)(-C)-O-C(=O)-O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[#8:3]-[C:4]	TRUE	TRUE	TRUE	21	US20150141400A1
[C;D1;H2:3]=[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]=[C;D1;H2:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	TRUE	4	US06703392B2
[#16:2]-[N;H0;D3;+0:3](-[CH3;D1;+0:1])-[c:4]:[c:5]:[#7;a:6]>>I-[CH3;D1;+0:1].[#16:2]-[NH;D2;+0:3]-[c:4]:[c:5]:[#7;a:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20120238571A1
[C:4]-[O;H0;D2;+0:5]-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]=[C:3]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]=[C:3].[C:4]-[OH;D1;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US20140135270A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:3])-[NH;D2;+0:5]-[C:4]>>F-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[#7;a:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20060069110A1
[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[NH;D2;+0:3]-[c:4]>>O-[CH2;D2;+0:1]-[c:2].[NH2;D1;+0:3]-[c:4]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US05925789
[c:5]:[c;H0;D3;+0:4](:[c:6])-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].O-B(-O)-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]	TRUE	TRUE	TRUE	74	US20030083357A1
[#8:8]-[C:9](=[O;D1;H0:10])-[C:11]-[NH;D2;+0:12]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[#8:3]-[C:4](-[C;D1;H3:5])(-[C;D1;H3:6])-[C;D1;H3:7]>>C-C(-C)(-C)-O-C(=O)-O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[#8:3]-[C:4]	TRUE	TRUE	FALSE	6	US07045360B2
[#8:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:6])-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[#8:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	FALSE	FALSE	FALSE	3	US20070225349A1
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:6])-[C:7]=[C:8]-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3]>>C-C(=O)-O-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]-[C:7]=[C:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US05849801
[#7;a:5]:[c;H0;D3;+0:4](:[c:6]):[c:7]:[#7;a:8])-[C;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>C-C1(-C)-O-B(-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3])-[O-C-1(-C)-C.Cl-[c;H0;D3;+0:4](:[#7;a:5]):[c:6]:[c:7]:[#7;a:8]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US08362236B2
[NH2;D1;+0:1]-[#7:2]-[C:3]=[O;D1;H0:4]>>C-C(-C)(-C)-O-C(=O)-[NH;D2;+0:1]-[#7:2]-[C:3]=[O;D1;H0:4]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20110009619A1
[#8:4]-[C:3](=[O;D1;H0:5])-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[N;H0;D3;+0:7](-[C:6])-[c:8]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[C:3](-[#8:4])=[O;D1;H0:5].[C:6]-[NH;D2;+0:7]-[c:8]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US08809538B2
[#7:1]-[C:2](=[O;D1;H0:3])-[CH2;D2;+0:4]-[CH2;D2;+0:5]-[c:6]>>[#7:1]-[C:2](=[O;D1;H0:3])-[CH;D2;+0:4]=[CH;D2;+0:5]-[c:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US05344845
[C:2]-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:3])=[N;H0;D2;+0:4]-[O;D1;H1:5]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[C;D1;H3:3].[NH2;D1;+0:4]-[O;D1;H1:5]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20070099901A1
[#7;a:1]:[c:2](:[c:3]:[#7;a:4])-[CH;D3;+0:5](-[C:6])-[OH;D1;+0:7]>>[#7;a:1]:[c:2](:[c:3]:[#7;a:4])-[C;H0;D3;+0:5](-[C:6])=[O;H0;D1;+0:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20140235643A1
[#7;a:3]:[c:4]:[n;H0;D3;+0:5](:[c:6])-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[#7;a:3]:[c:4]:[nH;D2;+0:5]:[c:6]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US05733914
[#7;a:7]:[c:6]:[c;H0;D3;+0:4](:[c:5])-[C;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>C-C1(-C)-O-B(-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3])-[O-C-1(-C)-C.Cl-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]:[#7;a:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20130090323A1
[#8:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[N;H0;D3;+0:8](-[C:9])-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#8:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH;D2;+0:8]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US04743616
[C:1]-[CH;D3;+0:2](-[C;D1;H3:3])-[CH2;D2;+0:4]-[C:5]>>[C:1]\[C;H0;D3;+0:2](-[C;D1;H3:3])=[CH;D2;+0:4]/[C:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US06255276B1
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:5](-[c:6])-[C:4]=[O;D1;H0:3]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[O;D1;H0:3]=[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[c:6]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US08263606B2
[C:2]-[CH;D3;+0:1](-[C:3])-[S;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>Br-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3].[SH;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US06020531
[#8:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[N;H0;D3;+0:7](-[C:8])-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#8:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[NH;D2;+0:7]-[C:8]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20080132482A1
[C:1]-[N;H0;D3;+0:2](-[C:3])-[C:4]=[O;D1;H0:5]-[C;H0;D3;+0:7](=[O;D1;H0:6])-[NH;D2;+0:8]-[c:9]>>[C:1]-[NH;D2;+0:2]-[C:3]-[C:4]=[O;D1;H0:5].[O;D1;H0:6]=[C;H0;D2;+0:7]=[N;H0;D3;+0:2]-[C:3]-[C:4]=[O;D1;H0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US04973598
[#8:2]-[C:3](=[O;D1;H0:4])-[C:5]-[N;H0;D3;+0:6](-[CH3;D1;+0:1])-[c:7]>>I-[CH3;D1;+0:1].[#8:2]-[C:3](=[O;D1;H0:4])-[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[c:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US06900244B2
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[NH;D2;+0:3]-[c:4]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[NH2;D1;+0:3]-[c:4]	TRUE	TRUE	TRUE	8	US04348399
[#7;a:4]:[c:5](:[#7;a:6]):[#7;a:7])-[NH;D2;+0:8]-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3]>>C-C(=O)-O-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3].[#7;a:4]:[c:5](:[#7;a:6]):[#7;a:7])	FALSE	FALSE	FALSE	1	US05750545
[#8;a:5]:[c:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:7]-[C:6]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]:[c:4]:[#8;a:5].[C:6]-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20060079548A1
[C:4]=[CH;D2;+0:5]/[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[C:4]=[CH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	FALSE	3	US07998975B2
[#7;a:4]:[n;H0;D3;+0:5](:[c:6])-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]=[C;D1;H2:3]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]=[C;D1;H2:3].[#7;a:4]:[nH;D2;+0:5]:[c:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20070225349A1
[#7;a:3]:[c:4]:[n;H0;D3;+0:5](:[#7;a:6])-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[#7;a:3]:[c:4]:[nH;D2;+0:5]:[#7;a:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20130190330A1
[#8:2]-[C:3](=[O;D1;H0:4])-[C:5]-[N;H0;D3;+0:6](-[CH3;D1;+0:1])-[C:7]=[O;D1;H0:8]>>I-[CH3;D1;+0:1].[#8:2]-[C:3](=[O;D1;H0:4])-[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]=[O;D1;H0:8]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US20090118284A1
[#7;a:4]:[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:2])-[C;H0;D3;+0:5](=[C:6])-[C:7]>>Br-[C;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]:[#7;a:4].C-C1(-C)-O-B(-[C;H0;D3;+0:5](=[C:6])-[C:7])-[O-C-1(-C)-C	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20110189167A1
[O;D1;H0:2]=[C;H0;D3;+0:1](-[c:3])-[NH;D2;+0:4]-[c:5]>>C-O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[NH2;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	FALSE	3	US20150087646A1
[C:2]-[N;H0;D3;+0:3](-[CH3;D1;+0:1])-[C:4]=[O;D1;H0:5]>>I-[CH3;D1;+0:1].[C:2]-[NH;D2;+0:3]-[C:4]=[O;D1;H0:5]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US06069145
[c:5]:[c;H0;D3;+0:4](:[c:6])-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>C-C1(-C)-O-B(-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3])-[O-C-1(-C)-C.Cl-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20090012129A1
[#7;a:3]:[c:4]-[O;H0;D2;+0:5]-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[#7;a:3]:[c:4]-[OH;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US04908379
[OH;D1;+0:1]-[c:2]>>C-C(-C)(-C)-SiI(-C)(-C)-[O;H0;D2;+0:1]-[c:2]	TRUE	TRUE	TRUE	8	US06110937
[#8:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:4]-[C;D1;H3:3]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[#8:2].[C;D1;H3:3]-[OH;D1;+0:4]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US07772285B2
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:6])-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]=[C:3]>>O=[CH;D2;+0:1]-[C:2]=[C:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20100234351A1
[#7;a:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D2;+0:5]=[#7;+4]=[N;-;D1;H0:6]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[#7;a:3].[N;-;H0;D1:4]=[#7;+5]=[N;-;D1;H0:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US04588732
[C:4]-[O;H0;D2;+0:5]-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>F-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[C:4]-[OH;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	24	US201500767639A1
[C;D1;H3:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C;D1;H3:6])-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[C;D1;H3:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;D1;H3:6]	TRUE	FALSE	TRUE	2	US20110224208A1
[#7;a:4]:[c:5](-[NH;D2;+0:6]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]):[c:7]:[#7;a:8]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[#7;a:4]:[c:5](-[NH2;D1;+0:6]):[c:7]:[#7;a:8]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20100004222A1
[#16;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:3])-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4])-[C:6]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[#16;a:2]):[#7;a:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	TRUE	TRUE	FALSE	3	US20090286974A1
[C:5]-[N;H0;D3;+0:6](-[C:7])=[O;D1;H0:8])-[S;H0;D4;+0:1](=[O;D1;H0:2])=[O;D1;H0:3]-[c:4]>>Cl-[S;H0;D4;+0:1](=[O;D1;H0:2])=[O;D1;H0:3]-[c:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]=[O;D1;H0:8]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US05164514
[#8;a:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[N;H0;D3;+0:6](-[C:5])-[C:7]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]:[#8;a:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US06395738B1
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:6])-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>I-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20110275797A1
[#7;a:4]:[c:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[NH;D2;+0:5]-[c:6]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[c:3]:[#7;a:4].[NH2;D1;+0:5]-[c:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20130338134A1

feasible_reaction_smarts	not_trained_on_but_known	known_from_valid_set	known_from_test_set	num_products_works_with	example_works_with_reaction_id
[C:1]/[C:2]=[C:3]/[CH2;D2;+0:4]-[NH2;D1;+0:5]>>[C:1]/[C:2]=[C:3]/[C;H0;D2;+0:4]#[N;H0;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20060070486A1
[#7;a:4]:[c:5](:[#7;a:6])-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[#7;a:4]:[c:5](:[#7;a:6])-[NH2;D1;+0:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20150284382A1
[#7;a:4]:[#7;a:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:2])-[NH;D2;+0:6]-[N;D1;H2:5]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[#7;a:3]:[#7;a:4].[N;D1;H2:5]-[NH2;D1;+0:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20140349990A1
[#7:2]-[CH2;D2;+0:1]-[C;D1;H3:3]>>O=[C;H0;D3;+0:1](:[#7:2]):[C:3]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US05861401
[C:3]=[C:4]/[C:5]-[N;H0;D3;+0:6](-[C:7])-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]=[C:4]/[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US04563464
[C:7]-[O;H0;D2;+0:8]-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]-[C:4](=[O;D1;H0:5])-[O;D1;H1:6]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]-[C:4](=[O;D1;H0:5])-[O;D1;H1:6].[C:7]-[O;-H0;D1:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US05344968
[#7;a:5]:[c:6]:[c:7]-[NH;D2;+0:8]-[S;H0;D4;+0:1](=[O;D1;H0:2])(-[O;D1;H0:3])-[c:4]>>Cl-[S;H0;D4;+0:1](=[O;D1;H0:2])=[O;D1;H0:3].[#7;a:5]:[c:6]:[c:7]-[NH2;D1;+0:8]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US0743581582
[#8:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[c:7]:[n;H0;D3;+0:8](:[c:9])-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[#8:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[c:7]:[nH;D2;+0:8]:[c:9]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US0770502382
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:3])-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[#7;a:3].O-B(-O)-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20090143367A1
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:6])-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	TRUE	TRUE	TRUE	7	US0759532782
[#7;a:4]:[c:3](:[c:5]:[#7;a:6]):[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2])-[NH;D2;+0:8]-[C:7]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3](:[#7;a:4]):[c:5]:[#7;a:6].[C:7]-[NH2;D1;+0:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US0794360982
[#7;a:4]:[c:5]:[c:6](:[#7;a:7])-[NH;D2;+0:8]-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>Br-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#7;a:4]:[c:5]:[c:6](:[#7;a:7])-[NH2;D1;+0:8]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US0832972982
[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	4	US0847082882
[#7;a:4]:[c:3](:[c:5]:[#7;a:6])-[c;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:8]-[C:7]>>O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3](:[#7;a:4]):[c:5]:[#7;a:6].[C:7]-[NH2;D1;+0:8]	TRUE	TRUE	TRUE	8	US0642920781
[C:3]=[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>I-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]=[C:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20060009456A1
[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:4]-[C:3]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[c:2].[C:3]-[OH;D1;+0:4]	FALSE	FALSE	FALSE	3	US20020087002A1
[c:4]-[O;H0;D2;+0:3]-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[c:2].[OH;D1;+0:3]-[c:4]	TRUE	TRUE	TRUE	7	US20070060607A1
[#7;a:3]:[n;H0;D3;+0:4](:[c:5]:[#7;a:6])-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[c:2].[#7;a:3]:[nH;D2;+0:4]:[c:5]:[#7;a:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20130190330A1
[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])/[C:3]=[C:4]>>O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[C:3]=[C:4].[C:5]-[NH2;D1;+0:6]	TRUE	FALSE	TRUE	6	US20140224606A1
[C:2]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:3])-[N;H0;D3;+0:5](-[c:4]):[c:6]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[c:4]-[NH;D2;+0:5]-[c:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20080249318A1
[#7;a:4]:[c:5]:[n;H0;D3;+0:6](:[c:7])-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]=[C;D1;H2:3]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]=[C;D1;H2:3].[#7;a:4]:[c:5]:[nH;D2;+0:6]:[c:7]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US05183492
[#7;a:3]:[c:2](-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:7](-[C:6])-[c:8]):[c:4]:[#7;a:5]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2](:[#7;a:3]):[c:4]:[#7;a:5].[C:6]-[NH;D2;+0:7]-[c:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20020169313A1
[C;D1;H3:3]-[N;H0;D3;+0:4](-[C;D1;H3:5])-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C;D1;H3:3]-[NH;D2;+0:4]-[C;D1;H3:5]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US0850178082
[#8:1]-[CH;D3;+0:2](-[CH3;D1;+0:3])-[O;H0;D2;+0:5]-[C:4]>>[#8:1]-[CH;D2;+0:2]=[CH2;D1;+0:3].[C:4]-[OH;D1;+0:5]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20090181878A1
[#7:4]-[C:3]-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3]-[#7:4]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US0643297581
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:3])-[NH;D2;+0:5]-[N;D1;H2:4]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[#7;a:3].[N;D1;H2:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20050222412A1
[#7;a:4]:[c:3]:[c:2]-[NH2;D1;+0:1]>>O=[N;H0;D3:1](-[O-])-[c:2]:[c:3]:[#7;a:4]	TRUE	TRUE	TRUE	44	US20090253685A1
[#7;a:6]:[c;H0;D3;+0:5](:[c:7])-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]:[#7;a:4]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]:[#7;a:4].C-[Sn](-C)-[c;H0;D3;+0:5](:[#7;a:6]):[c:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20120225857A1
[#7:5]-[C:4]([O;D1;H0:6])-[CH;D3;+0:1](-[c:2])-[c:3]>>O-[C;H0;D4;+0:1](-[c:2]):[c:3]-[C:4](-[#7:5])=[O;D1;H0:6]	TRUE	FALSE	TRUE	2	US0841537082
[#7;a:4]:[c:5]:[c:6]-[NH;D2;+0:7]-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>I-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[#7;a:4]:[c:5]:[c:6]-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20150021590A1
[#7;a:6]:[c:5]:[c:3](:[#7;a:4])-[c;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[N;H0;D3;+0:8](-[C:7])-[C:9]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3](:[#7;a:4]):[c:5]:[#7;a:6].[C:7]-[NH;D2;+0:8]-[C:9]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20090286778A1
[#7;a:5]:[c:4]-[S;H0;D4;+0:1]([O;D1;H0:2])(=[O;D1;H0:3])-[NH;D2;+0:6]-[c:7]>>Cl-[S;H0;D4;+0:1]([O;D1;H0:2])(=[O;D1;H0:3])-[c:4]:[#7;a:5].[NH2;D1;+0:6]-[c:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US0743581582
[C;D1;H3:2]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	FALSE	3	US20030171377A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].O-B(-O)-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]	TRUE	TRUE	TRUE	8	US0750441282
[C;D1;H2:4]=[C:5]-[C:6]-[NH;D2;+0:7]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3].[C;D1;H2:4]=[C:5]-[C:6]-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US05302590
[C:1]-[C@H;D3;+0:2](-[C:3])-[OH;D1;+0:4]>>[C:1]-[C;H0;D3;+0:2](-[C:3])=[O;H0;D1;+0:4]	TRUE	TRUE	FALSE	7	US05232917
[#7:4]-[C:5]([O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH;D2;+0:8]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3].[#7:4]-[C:5]([O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH2;D1;+0:8]	TRUE	TRUE	TRUE	4	US20110046134A1
[C:3]-[N;H0;D2;+0:4]=[CH;D2;+0:1]-[c:2]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2].[C:3]-[NH2;D1;+0:4]	TRUE	FALSE	TRUE	3	US05663334
[#7;a:6]:[c:5]:[c:3](:[#7;a:4])-[c;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:8]-[C:7]>>O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3](:[#7;a:4]):[c:5]:[#7;a:6].[C:7]-[NH2;D1;+0:8]	TRUE	FALSE	TRUE	8	US0642920781
[#7;a:4]:[c:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:6](-[C:5])-[C:7]=[O;D1;H0:8]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[c:3]:[#7;a:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]=[O;D1;H0:8]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20110257100A1
[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[C:3]=[C:4]>>O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[C:3]=[C:4].[C:5]-[NH2;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	TRUE	6	US20140242606A1
[C:2]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:3])-[NH;D2;+0:5]-[C:4]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	23	US20090264431A1
[C:1]-[CH;D3;+0:2](-[C;D1;H3:3])-[CH2;D2;+0:4]-[C:5]>>[C:1]-[C;H0;D3;+0:2](-[C;D1;H3:3])=[CH;D2;+0:4]-[C:5]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US0625527681
[C:2]-[CH;D3;+0:1](-[C:3])-[NH;D2;+0:4]-[c:5]>>Br-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3].[NH2;D1;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20060160794A1
[#8:3]-[N;H0;D2;+0:4]=[CH;D2;+0:1]-[c:2]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2].[#8:3]-[NH2;D1;+0:4]	FALSE	FALSE	FALSE	11	US20120035214A1
[#7;a:11]:[c:10]:[c:9]:[c;H0;D3;+0:7](:[c:8])-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3](:[#7;a:4]):[c:5]:[#7;a:6]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3](:[#7;a:4]):[c:5]:[#7;a:6].C-C1(-C)-O-B(-[c;H	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20070149521A1
[#7;a:1]:[c:2]:[c:3](:[#7;a:4])-[C;H0;D3;+0:5]([O;H0;D1;+0:6])-[c:7]>>[#7;a:1]:[c:2]:[c:3](:[#7;a:4])-[CH;D3;+0:5](-[OH;D1;+0:6])-[c:7]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20150105366A1
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:4]-[C:3]>>C-S(=O)(=O)-O-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]-[OH;D1;+0:4]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20150174261A1
[#7;a:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[S;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[#7;a:3].[SH;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US06162809
[C:2]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:3])-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4])-[C:6]=[O;D1;H0:7]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]=[O;D1;H0:7]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US0809763482
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[NH;D2;+0:5]-[C:4]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20140364433A1
[C;D1;H2:3]=[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4])-[C:6]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]=[C;D1;H2:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US0759838682
[#7;a:1]:[c:2]:[c:3](:[c:4]:[#7;a:5])-[C;H0;D3;+0:6](-[C;D1;H3:7])=[O;H0;D1;+0:8]>>[#7;a:1]:[c:2]:[c:3](:[c:4]:[#7;a:5])-[CH;D3;+0:6](-[C;D1;H3:7])-[OH;D1;+0:8]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20090149483A1
[#7;a:4]:[c:5]:[c:6]:[NH;D2;+0:7]-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[#7;a:4]:[c:5]:[c:6]-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20090093479A1
[#7;a:4]:[c:3](:[c:5]:[#7;a:6])-[CH2;D2;+0:1]-[OH;D1;+0:2]>>C-O-[C;H0;D3;+0:1]([O;H0;D1;+0:2])-[c:3](:[#7;a:4]):[c:5]:[#7;a:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US0843603582
[#7;a:4]:[c:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[n;H0;D3;+0:6](:[c:5]):[c:7]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[c:3]:[#7;a:4].[c:5]:[nH;D2;+0:6]:[c:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20120039804A1
[O;D1;H0:4]=[C:5]-[N;H0;D3;+0:6](-[C:7])-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[O;D1;H0:4]=[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[c:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20030092712A1
[#16;a:4]:[c:3](:[c:5]:[#7;a:6])-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[N;H0;D3;+0:8](-[C:7])-[C:9]>>O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3](:[#16;a:4]):[c:5]:[#7;a:6].[C:7]-[NH;D2;+0:8]-[C	TRUE	TRUE	TRUE	4	US0817852282
[#7;a:4]:[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:2])-[c;H0;D3;+0:5](:[c:6]):[c:7]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]:[#7;a:4].O-B(-O)-[c;H0;D3;+0:5](:[c:6]):[c:7]	TRUE	TRUE	TRUE	26	US20150246922A1
[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	102	US20100249066A1
[#7:3]-[C:2]([O;D1;H0:4])-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:5]-[c:6]>>I-[CH2;D2;+0:1]-[C:2](-[#7:3])=[O;D1;H0:4].[O;-H0;D1:5]-[c:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US04806145
[c:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].O-B(-O)-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]	TRUE	TRUE	FALSE	4	US0656298982
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[NH;D2;+0:3]-[c:4]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[NH2;D1;+0:3]-[c:4]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20080269210A1
[C:1]=[C:2]-[C:3]-[N;H0;D3;+0:4](-[C:5])-[C;H0;D3;+0:8]([O;D1;H0:9])-[NH;D2;+0:7]-[C:6]>>[C:1]=[C:2]-[C:3]-[NH;D2;+0:4]-[C:5].[C:6]-[N;H0;D2;+0:7]=[C;H0;D2;+0:8]=[O;D1;H0:	FALSE	FALSE	FALSE	2	US0915058282
[C:5]-[N;H0;D3;+0:6](-[C;D1;H3:7])-[S;H0;D4;+0:1](-[C;D1;H3:2])(=[O;D1;H0:3])=[O;D1;H0:4]>>Cl-[S;H0;D4;+0:1](-[C;D1;H3:2])(=[O;D1;H0:3])=[O;D1;H0:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20090124598A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[N;H0;D3;+0:5](-[C;D1;H3:4])-[C;D1;H3:6]>>F-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[C;D1;H3:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;D1;H3:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20140329863A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4])-[c:6]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[c:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20110015232A1
[#7;a:4]:[c:5]-[N;H0;D3;+0:6](-[C:7])-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3].[#7;a:4]:[c:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20100168185A1
[#7;a:4]:[c:5]-[NH;D2;+0:6]-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#7;a:4]:[c:5]-[NH2;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	TRUE	8	US20110237573A1
[C:4]-[O;H0;D2;+0:5]-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[OH;D1;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	10	US20010039351A1
[C:3]=[C:4]-[C:5]([O;D1;H0:6])-[O;H0;D2;+0:7]-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]=[C:4]-[C:5](-[O;-H0;D1:6])=[O;D1;H0:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US0736859381

feasible_reaction_smarts	not_trained_on_but_known	known_from_valid_set	known_from_test_set	num_products_works_with	example_works_with_reaction_id
[#7:3]-[C:2](=[O;D1;H0:4])-[CH2;D2;+0:1]-[S;H0;D2;+0:6]-[C:5]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2](-[#7:3])=[O;D1;H0:4].[C:5]-[SH;D1;+0:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US04216160
[#7;a:4]:[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2])-[O;H0;D2;+0:5]-[c:6]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]:[#7;a:4].[OH;D1;+0:5]-[c:6]	TRUE	FALSE	TRUE	2	US08268820B2
[c:2]-[CH;D3;+0:1](-[c:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>Br-[CH;D3;+0:1](-[c:2])-[c:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US06803374B2
[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[S;H0;D4;+0:1](-[C;D1;H3:2])(=[O;D1;H0:3])=[O;D1;H0:4]>>Cl-[S;H0;D4;+0:1](-[C;D1;H3:2])(=[O;D1;H0:3])=[O;D1;H0:4].[C:5]-[NH2;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	TRUE	7	US20110217311A1
[#16;a:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:6]-[C:5]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]:[#16;a:4].[C:5]-[NH2;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	TRUE	4	US08309542B2
[#8:1]-[C:2](=[O;D1;H0:3])-[CH2;D2;+0:4]-[CH;D3;+0:5](-[C;D1;H3:6])-[c:7]>>[#8:1]-[C:2](=[O;D1;H0:3])-[CH;D2;+0:4]=[C;H0;D3;+0:5](-[C;D1;H3:6])-[c:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20040006081A1
[#7;a:4]:[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:2])-[C;H0;D2;+0:6]#[C:5]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]:[#7;a:4].[C:5]#[CH;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	TRUE	6	US08022062B2
[#7;a:4]:[c;H0;D3;+0:3](-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]):[c:5]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[c:2].Br-[c;H0;D3;+0:3](:[#7;a:4]):[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20110183959A1
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[NH;D2;+0:4]-[C;D1;H3:3]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C;D1;H3:3]-[NH2;D1;+0:4]	TRUE	TRUE	FALSE	3	US04024273
[#7;a:4]:[c:5]-[NH;D2;+0:6]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[C:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[C:3].[#7;a:4]:[c:5]-[NH2;D1;+0:6]	FALSE	FALSE	FALSE	8	US20110237573A1
[#7;a:1]:[c:2]-[C;H0;D3;+0:3](=[O;H0;D1;+0:4])-[c:5]>>[#7;a:1]:[c:2]-[CH;D3;+0:3](-[OH;D1;+0:4])-[c:5]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20080064715A1
[C:4]-[O;H0;D2;+0:5]-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[C:4]-[OH;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	6	US05811424
[#7:4]-[C:3]-[CH2;D2;+0:1]-[#7:2]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[#7:2])-[C:3]-[#7:4]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US04012389
[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[S;H0;D2;+0:3]-[c:4]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[c:2].[SH;D1;+0:3]-[c:4]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20040044057A1
[#8:2]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:3])-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4])-[c:6]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[#8:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[c:6]	TRUE	TRUE	FALSE	3	US20060270675A1
[#16;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:3])-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[#16;a:2]):[#7;a:3].O-B(-O)-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20130085148A1
[#8:5]-[P;H0;D4;+0:4](-[#8:6])(=[O;H0;D1;+0:3])-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].C-C-[O;H0;D2;+0:3]-[P;H0;D3;+0:4](-[#8:5])-[#8:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US05648373
[#7;a:6]:[c:5]:[c:3](:[#7;a:4])-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[N;H0;D3;+0:8](-[C:7])-[C:9]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3](:[#7;a:4]):[c:5]:[#7;a:6].[C:7]-[NH;D2;+0:8]-[C:9]	TRUE	TRUE	FALSE	3	US20120121540A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3]):[c:4](:[#7;a:5]):[#7;a:6]([c:4]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]:[c:4](:[#7;a:5]):[#7;a:6].[NH2;D1;+0:7]-[c:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20150252047A1
[#16;a:4]:[c:5]-[NH;D2;+0:6]-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[#7;a:3]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[#7;a:3].[#16;a:4]:[c:5]-[NH2;D1;+0:6]	FALSE	FALSE	FALSE	5	US20100256097A1
[#7:3]-[C:2](=[O;D1;H0:4])-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:6](-[C:5])-[C:7]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2](-[#7:3])=[O;D1;H0:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]	TRUE	TRUE	TRUE	6	US08513239B2
[C;D1;H2:5]=[C:4]-[C:2](=[O;D1;H0:3])-[OH;D1;+0:1]>>C-[O;H0;D2;+0:1]-[C:2](=[O;D1;H0:3])-[C:4]=[C;D1;H2:5]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US04204991
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:3]-[C:4]=[O;D1;H0:5]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[O;D1;H0:3]=[C:4]-[OH;D1;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US06380387B1
[C:5]=[C:4]-[C:2](=[O;D1;H0:3])-[OH;D1;+0:1]>>C-[O;H0;D2;+0:1]-[C:2](=[O;D1;H0:3])-[C:4]=[C:5]	TRUE	TRUE	TRUE	14	US08980877B2
[#7:6]-[N;H0;D2;+0:7]=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[c:3]:[c:4]:[#7;a:5]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].[#7:6]-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US06350749B1
[#16:1]-[NH;D2;+0:2]-[C;H0;D3;+0:3](=[O;D1;H0:4])-[NH;D2;+0:6]-[C:5]>>[#16:1]-[N;H0;D2;+0:2]=[C;H0;D2;+0:3]=[O;D1;H0:4].[C:5]-[NH2;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US04645527
[C:4]=[C:3]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:5]-[c:6]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[C:3]=[C:4].[NH2;D1;+0:5]-[c:6]	FALSE	FALSE	FALSE	6	US20070123512A1
[#7;a:4]:[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:2])-[C;H0;D2;+0:6]#[C:5]>>I-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]:[#7;a:4].[C:5]#[CH;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US20150133505A1
[#16;a:5]:[c:6]:[c:7]-[NH;D2;+0:8]-[S;H0;D4;+0:1]([c:4]>>Cl-[O;D1;H0:3])-[c:4]:[#16;a:5]:[c:6]:[c:7]-[NH2;D1;+0:8]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20110028469A1
[C:3]-[N;H0;D3;+0:4](-[C;D1;H3:5])-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>O=[CH;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]-[NH;D2;+0:4]-[C;D1;H3:5]	TRUE	FALSE	TRUE	3	US20140171403A1
[O;D1;H0:5]=[CH;D2;+0:4]-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].C-N(-C)-[CH;D2;+0:4]=[O;D1;H0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	9	US04785004
[C;D1;H3:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:3]-[c:4]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C;D1;H3:2].[OH;D1;+0:3]-[c:4]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20090048258A1
[O;D1;H0:2]=[C;H0;D3;+0:1](-[c:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	FALSE	TRUE	4	US20150025068A1
[#8;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[#8;a:2]):[c:3].O-B(-O)-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20090264482A1
[#7;a:4]:[c:5]:[c:6]-[NH;D2;+0:7]-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]>>F-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[#7;a:4]:[c:5]:[c:6]-[NH2;D1;+0:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US08901118B2
[#8:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[N;H0;D3;+0:7](-[C:8])-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#8:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[NH;D2;+0:7]-[C:8]	TRUE	TRUE	FALSE	3	US08394858B2
[#7;a:4]:[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:2])-[O;H0;D2;+0:5]-[c:6]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]:[#7;a:4].[OH;D1;+0:5]-[c:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20060079520A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:3])-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4])-[C:6]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[#7;a:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20130072506A1
[#7;a:5]:[c:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[N;H0;D3;+0:7](-[#8:6])-[C;D1;H3:8]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].[#8:6]-[NH;D2;+0:7]-[C;D1;H3:8]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20140031355A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](-[N;H0;D3;+0:7](-[C:6])-[C:8]):[c:3]:[c:4]:[#7;a:5]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].[C:6]-[NH;D2;+0:7]-[C:8]	FALSE	FALSE	FALSE	7	US20150057263A1
[#7;a:4]:[c:3](:[#7;a:5]:[#7;a:6])-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:8]-[C:7]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3](:[#7;a:4]):[#7;a:5]:[#7;a:6].[C:7]-[NH2;D1;+0:8]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20120142665A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3]:[c:4]:[#7;a:5])-[NH;D2;+0:7]-[C:6]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].[C:6]-[NH2;D1;+0:7]	FALSE	FALSE	FALSE	5	US05998665
[#7;a:5]:[n;H0;D3;+0:6](:[c:7])-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[c:3]:[#7;a:4]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[c:3]:[#7;a:4].[#7;a:5]:[nH;D2;+0:6]:[c:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US07179823B1
[C:2]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:3])-[S;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[SH;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US06822100B2
[C:3]-[N;H0;D3;+0:4](-[C;D1;H3:5])-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]-[NH;D2;+0:4]-[C;D1;H3:5]	TRUE	TRUE	TRUE	7	US20150080438A1
[C:3]-[N;H0;D3;+0:4](-[C:5])-[CH2;D2;+0:1]-[C;D1;H3:2]>>I-[CH2;D2;+0:1]-[C;D1;H3:2].[C:3]-[NH;D2;+0:4]-[C:5]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US05578612
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:6]=[O;D1;H0:7])-[C:4]=[O;D1;H0:3]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[O;D1;H0:3]=[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]=[O;D1;H0:7]	FALSE	FALSE	FALSE	3	US05061720
[c:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[NH;D2;+0:4]-[c:5]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[NH2;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US07148234B2
[C:2]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:3])-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4])-[C;D1;H3:6]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;D1;H3:6]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US20080275021A1
[#7;a:4]:[c:5]:[c:6]-[O;H0;D2;+0:7]-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>F-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[#7;a:4]:[c:5]:[c:6]-[OH;D1;+0:7]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20140179715A1
[C:2]-[C@@H;D3;+0:1](-[C;D1;H3:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>O-[C@@H;D3;+0:1](-[C:2])-[C;D1;H3:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20140187554A1
[C:1]-[CH2;D2;+0:2]-[CH2;D2;+0:3]-[C:4]>>[C:1]-[CH;D2;+0:2]=[CH;D2;+0:3]-[C:4]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20030134891A1
[#7;a:4]:[#7;a:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:2])-[NH;D2;+0:6]-[C:5]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[#7;a:3]:[#7;a:4].[C:5]-[NH2;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US20060293344A1
[#8:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH;D2;+0:8]-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#8:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH2;D1;+0:8]	TRUE	TRUE	FALSE	4	US20100311777A1
[c:4]:[n;H0;D3;+0:5](:[c:6])-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>F-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[c:4]:[nH;D2;+0:5]:[c:6]	TRUE	TRUE	FALSE	3	US06069141
[C:5]-[N;H0;D3;+0:6](-[C;D1;H3:7])-[S;H0;D4;+0:1](=[O;D1;H0:2])(=[O;D1;H0:3])-[c:4]>>Cl-[S;H0;D4;+0:1](=[O;D1;H0:2])(=[O;D1;H0:3])-[c:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C;D1;H3:7]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20110086853A1
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[S;H0;D2;+0:4]-[C;D1;H3:3]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C;D1;H3:3]-[S;-H0;D1:4]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US05711964
[C;D1;H3:3]-[N;H0;D3;+0:4](-[c:5])-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[c:2].[C;D1;H3:3]-[NH;D2;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US07071358B2
[#7;a:6]:[c:5]:[c:4]-[S;H0;D4;+0:1](=[O;D1;H0:2])(=[O;D1;H0:3])-[N;H0;D3;+0:8](-[C:7])-[C:9]>>Cl-[S;H0;D4;+0:1](=[O;D1;H0:2])(=[O;D1;H0:3])-[c:4]:[c:5]:[#7;a:6].[C:7]-[NH;D2;+0:8]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20100331293A1
[c:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[S;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>I-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[SH;D1;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US07732463B2
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:3]:[#7;a:4])-[O;H0;D2;+0:6]-[C:5]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[#7;a:3]:[#7;a:4].[C:5]-[OH;D1;+0:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20120088913A1
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[c:6])-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[c:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20120245148A1
[#7:4]-[N;H0;D2;+0:5]=[C;H0;D3;+0:1](-[c:2])-[c:3]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[c:3])-[#7:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	FALSE	4	US04228284
[C:5]-[N;H0;D3;+0:6](-[C:7])-[S;H0;D4;+0:1](-[C;D1;H3:2])(=[O;D1;H0:4])>>Cl-[S;H0;D4;+0:1](-[C;D1;H3:2])(=[O;D1;H0:3])=[O;D1;H0:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]	TRUE	FALSE	TRUE	6	US20150175602A1
[#8:3]-[C:2](=[O;D1;H0:4])-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:7](-[c:8])-[C:6]=[O;D1;H0:5]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2](-[#8:3])=[O;D1;H0:4].[O;D1;H0:5]=[C:6]-[NH;D2;+0:7]-[c:8]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US08063038B2
[#7;a:8]:[c:7]:[c:6]:[c;H0;D3;+0:4](:[c:5])-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].Br-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]:[c:7]:[#7;a:8]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20150183799A1
[c:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].I-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US20060199817A1
[#7;a:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D2;+0:4]=[#7;+5]=[N;-;D1;H0:6]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[#7;a:3].[N;-;H0;D1:4]=[#7;+5]=[N;-;D1;H0:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US08440651B2
[#7;a:5]:[c:6]-[NH;D2;+0:7]-[S;H0;D4;+0:1](=[O;D1;H0:2])(=[O;D1;H0:3])-[c:4]>>Cl-[S;H0;D4;+0:1](=[O;D1;H0:2])(=[O;D1;H0:3])-[c:4].[#7;a:5]:[c:6]-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	FALSE	TRUE	2	US20060074237A1
[#7;a:4]:[c:5]:[n;H0;D3;+0:6](:[c:7])-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>O-B(-O)-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[#7;a:4]:[c:5]:[nH;D2;+0:6]:[c:7]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20110112120A9
[C:1]=[C:2]-[C@@H;D3;+0:3](-[C:4])-[OH;D1;+0:5]>>[C:1]=[C:2]-[C;H0;D3;+0:3](-[C:4])=[O;H0;D1;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20040019023A1

feasible_reaction_smarts	not_trained_on_but_known	known_from_valid_set	known_from_test_set	num_products_works_with	example_works_with_reaction_id
[#8:1]-[C:2](=[O;D1;H0:3])-[C:4]-[CH;D3;+0:5](-[C:6])-[OH;D1;+0:7]>>[#8:1]-[C:2](=[O;D1;H0:3])-[C:4]-[C;H0;D3;+0:5](-[C:6])=[O;H0;D1;+0:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US04645854
[c:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[S;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>F-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[SH;D1;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US20040106653A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[NH;D2;+0:5]-[C:4]>>F-C(-F)(-F)-S(=O)(=O)-O-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US07067658B2
[C:1]-[CH;D3;+0:2](-[C;D1;H3:3])-[C;D1;+0:4]>>[C:1]-[C;H0;D3;+0:2](-[C;D1;H3:3])=[O;H0;D1;+0:4]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US04925879
[#7;a:3]:[c:4]:[n;H0;D3;+0:5](-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]):[c:6]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[#7;a:3]:[c:4]:[nH;D2;+0:5]:[c:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20130303533A1
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:4](-[C:3])-[C;D1;H3:5]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]-[NH;D2;+0:4]-[C;D1;H3:5]	TRUE	TRUE	FALSE	5	US20070149546A1
[C:2]-[C;H0;D4;+0:3](-[C:4])(-[CH3;D1;+0:1])-[OH;D1;+0:5]>>[CH3;D1;+0:1]-[Mg+].[C:2]-[C;H0;D3;+0:3](-[C:4])=[O;H0;D1;+0:5]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20090270361A1
[#7;a:4]:[#7;a:5]:[c:6]-[O;H0;D2;+0:7]-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[#7;a:4]:[#7;a:5]:[c:6]-[OH;D1;+0:7]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20080269293A1
[#16;a:3]:[c:2](-[NH2;D1;+0:1]):[c:4]:[#7;a:5]>>C-C(-C)(-C)-O-C(=O)-[NH;D2;+0:1]-[c:2](:[#16;a:3]):[c:4]:[#7;a:5]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20130203732A1
[C:4]-[N;H0;D2;+0:5]=[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])-[C;D1;H3:3]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])-[C;D1;H3:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20100137305A1
[#7;a:3]:[c:4]:[n;H0;D3;+0:5](-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]):[c:6]:[c:7]:[#7;a:8]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[#7;a:3]:[c:4]:[nH;D2;+0:5]:[c:6]:[c:7]:[#7;a:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20140275071A1
[C:3]-[N+;H0;D4:4](-[C:5])(-[C;D1;H3:6])-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]-[N;H0;D3;+0:4](-[C:5])-[C;D1;H3:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US05451394
[c:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[n;H0;D3;+0:5](:[c:4]):[c:6]>>I-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[c:4]:[nH;D2;+0:5]:[c:6]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US20080090834A1
[#7:3]-[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>O-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]-[#7:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US20110201602A1
[#7:3]-[C:2](=[O;D1;H0:4])-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:5]-[c:6]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2](-[#7:3])=[O;D1;H0:4].[OH;D1;+0:5]-[c:6]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US04762925
[#7;a:5]:[c:4]:[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2])-[O;H0;D2;+0:6]-[c:7]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].[OH;D1;+0:6]-[c:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US07547779B2
[c:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]>>C-C1(-C)-O-B(-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3])-[O-C-1(-C)-C.I-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20090012129A1
[#7;a:4]:[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:2])-[N;H0;D3;+0:6](-[C:5])-[C:7]>>I-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]:[#7;a:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US20030225268A1
[C;D1;H3:3]-[C:4](=[O;D1;H0:5])-[O;H0;D2;+0:6](-[CH2;D2;+0:1]-[C:2])>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C;D1;H3:3]-[C:4](-[O;H0;D1:5])=[O;D1;H0:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US07709519B2
[C:5]#[C;H0;D2;+0:6]-[C;H0;D4;+0:2](-[C:1])(-[C;D1;H3:3])-[OH;D1;+0:4]>>[C:1]-[C;H0;D3;+0:2](-[C;D1;H3:3])=[O;H0;D1;+0:4].[C:5]#[CH;D1;+0:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US03932496
[#7;a:4]:[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:2])-[c;H0;D3;+0:5]:[c:6]:[c:7]:[#7;a:8]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]:[#7;a:4].O-B(-O)-[c;H0;D3;+0:5](:[c:6]):[c:7]:[#7;a:8]	TRUE	FALSE	TRUE	5	US08143271B2
[C:4]=[C:3][C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:6]-[C:5]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[C:3]=[C:4].[C:5]-[NH2;D1;+0:6]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US04395524
[C:5]=[C:6]-[C:7]-[N;H0;D3;+0:8](-[C:9])-[S;H0;D4;+0:1](-[C:2])(=[O;D1;H0:3])=[O;D1;H0:4]>>Cl-[S;H0;D4;+0:1](-[C:2])(=[O;D1;H0:3])=[O;D1;H0:4].[C:5]=[C:6]-[C:7]-[NH;D2;+0:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20070082880A1
[#16:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:6])-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[#16:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US20120094964A1
[O;D1;H0:2]=[S;H0;D4;+0:1](=[O;D1;H0:3])(-[c:4])-[NH;D2;+0:5]-[c:6]>>Cl-[S;H0;D4;+0:1](=[O;D1;H0:2])(=[O;D1;H0:3])-[c:4].[NH2;D1;+0:5]-[c:6]	TRUE	TRUE	TRUE	30	US20110021523A1
[#7;a:5]:[c:4]:[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:2])-[c;H0;D3;+0:6](:[c:7]):[c:8]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].O-B(-O)-[c;H0;D3;+0:6](:[c:7]):[c:8]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20150166485A1
[#7;a:3]:[c:4]:[c:5]-[O;H0;D2;+0:6]-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[#7;a:3]:[c:4]:[c:5]-[OH;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20140057896A1
[C:2]-[CH;D3;+0:1](-[C;D1;H3:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>Br-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[C;D1;H3:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	5	US20090258917A1
[#7;a:4]:[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2])-[N;H0;D3;+0:6](-[C:5])-[C:7]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]:[#7;a:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]	TRUE	TRUE	TRUE	6	US06583154B1
[#7;a:3]:[c:4]:[c:5]-[O;H0;D2;+0:6]-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[c:2].[#7;a:3]:[c:4]:[c:5]-[OH;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20080269213A1
[#8:5]-[C:6](=[O;D1;H0:7])-[C:8]-[NH;D2;+0:9]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[C:3]=[C:4]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[C:3]=[C:4].[#8:5]-[C:6](=[O;D1;H0:7])-[C:8]-[NH2;D1	FALSE	FALSE	FALSE	1	US06733123B2
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:4](-[C;D1;H3:3])-[C;D1;H3:5]>>C-S(=O)(=O)-O-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C;D1;H3:3]-[NH;D2;+0:4]-[C;D1;H3:5]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20020038025A1
[#7:1]-[C:2](=[O;D1;H0:3])-[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:6])-[C;H0;D3;+0:8]([=O;D1;H0:7])-[NH;D2;+0:9]-[c:10]>>[#7:1]-[C:2](=[O;D1;H0:3])-[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6].[O;D1;H0:7]=[C	TRUE	TRUE	FALSE	1	US08445674B2
[C:3]-[C;H0;D4;+0:4](-[C;D1;H3:5])(-[C;D1;H3:5])-[OH;D1;+0:6]([=O;D1;H0:3])>>[C;D1;H1:1]>>[C;D1;H1:1]#[CH;D1;+0:2].[C:3]-[C;H0;D3;+0:4](-[C;D1;H3:5])=[O;H0;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US03932496
[C:1]=[C:2]-[C@@H;D3;+0:3](-[C;D1;H3:4])-[OH;D1;+0:5]>>[C:1]=[C:2]-[C;H0;D3;+0:3](-[C;D1;H3:4])=[O;H0;D1;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20040019023A1
[c:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[Mg+]-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20100185019A1
[C:2]#[C;H0;D2;+0:1]-[C;H0;D2;+0:4]#[C:3]>>Br-[C;H0;D2;+0:1]#[C:2].[C:3]#[CH;D1;+0:4]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20150175530A1
[#7:3]-[N;H0;D2;+0:4]=[CH;D2;+0:1]-[c:2]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2].[#7:3]-[NH2;D1;+0:4]	TRUE	TRUE	TRUE	13	US20120282629A1
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;D1;H1:3]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[O;D1;H1:3]	TRUE	TRUE	TRUE	25	US04350822
[C:2]-[C;H0;D3;+0:1](-[c:3])=[N;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[c:3].[NH2;D1;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US04962234
[#8;a:5]:[c:4]:[c:3]:[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:6]-[c:7]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]:[c:4]:[#8;a:5].[NH2;D1;+0:6]-[c:7]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US08642788B2
[#16;a:5]:[c:4]:[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:2])-[c;H0;D3;+0:6](:[c:7]):[c:8]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]:[c:4]:[#16;a:5].O-B(-O)-[c;H0;D3;+0:6](:[c:7]):[c:8]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US20150182528A1
[O;D1;H0:4]=[C:3]-[C:2]-[NH2;D1;+0:1]>>C-C(-C)(-C)-O-C(=O)-[NH;D2;+0:1]-[C:2]-[C:3]=[O;D1;H0:4]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US07759373B2
[#16:1]-[NH;D2;+0:2]-[C;H0;D3;+0:4]([=O;D1;H0:3])-[NH;D2;+0:5]-[c:6]>>[#16:1]-[NH2;D1;+0:2].[O;D1;H0:3]=[C;H0;D2;+0:4]=[N;H0;D2;+0:5]-[c:6]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US05169860
[#7;a:5]:[c:6](:[#7;a:7])-[S;H0;D2;+0:8]-[CH2;D2;+0:1]-[C:2](-[#8:3])=[O;D1;H0:4]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2](-[#8:3])=[O;D1;H0:4].[#7;a:5]:[c:6](:[#7;a:7])-[S-;H0;D1:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20100029736A1
[#7:4]-[C:3]-[CH2;D2;+0:1]-[OH;D1;+0:2]>>C-O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;H0;D1;+0:2])-[C:3]-[#7:4]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20010012846A1
[#7:2]-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:3])=[N;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[#7:2])-[C;D1;H3:3].[NH2;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US04758568
[C:2]-[CH;D3;+0:1](-[C:3])-[NH;D2;+0:5]-[C:4]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3].[C:4]-[NH3+;D1:5]	FALSE	FALSE	FALSE	21	US20090275574A1
[#7;a:2]:[c:3]:[c:4]:[O;H0;D2;+0:5]-[CH3;D1;+0:1]>I-[CH3;D1;+0:1].[#7;a:2]:[c:3]:[c:4]:[OH;D1;+0:5]	TRUE	FALSE	TRUE	3	US08138188B2
[#16;a:4]:[c:5]-[NH;D2;+0:6]-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#16;a:4]:[c:5]-[NH2;D1;+0:6]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US20040024047A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[O;H0;D2;+0:5]-[C;D1;H3:4]>>F-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[C;D1;H3:4]-[OH;D1;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20150232445A1
[#8:4]-[N;H0;D2;+0:5]=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[c:3]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[c:3].[#8:4]-[NH2;D1;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	10	US05055474
[C:1]-[N;H0;D3;+0:2](-[C;D1;H3:3])-[C;H0;D3;+0:5]([=O;D1;H0:4])-[NH;D2;+0:6]-[c:7]>>[C:1]-[NH;D2;+0:2]-[C;D1;H3:3].[O;D1;H0:4]=[C;H0;D2;+0:5]=[N;H0;D2;+0:6]-[c:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20080214615A1
[#8:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH;D2;+0:8]-[C;H0;D3;+0:1]([=O;D1;H0:2])-[C:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1]([=O;D1;H0:2])-[C:3].[#8:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH2;D1;+0:8]	FALSE	FALSE	FALSE	13	US20100003305A1
[C:1]=[C:2]-[C;H0;D3;+0:3]([=O;H0;D1;+0:4])-[c:5]>>[C:1]=[C:2]-[CH;D3;+0:3](-[OH;D1;+0:4])-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US06277992B1
[C:2]-[N;H0;D3;+0:3](-[CH3;D1;+0:1])-[c:4]>>O=[CH2;D1;+0:1].[C:2]-[NH;D2;+0:3]-[c:4]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20090137587A1
[#7;a:5]:[c:4]:[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2])-[O;H0;D2;+0:6]-[c:7]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].[OH;D1;+0:6]-[c:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20100130490A1
[#7;a:4]:[c:5]-[NH;D2;+0:6]-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#7;a:4]:[c:5]-[NH2;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	TRUE	7	US20080167314A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]:[#7;a:7]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].C-C1(-C)-O-B(-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]:[#7;a:7])-[O-C-1(-C)-C	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20120172369A1
[#7;a:5]:[c:4]:[c:2](:[#7;a:3])-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:7](-[C:6])-[C:8]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2](:[#7;a:3]):[c:4]:[#7;a:5].[C:6]-[NH;D2;+0:7]-[C:8]	FALSE	FALSE	FALSE	3	US05296609
[#8:2]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:3])-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4])-[C:6]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[#8:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	TRUE	TRUE	TRUE	14	US20080312281A1
[O;D1;H0:4]=[C:3]-[C:2]-[OH;D1;+0:1]>>C-C(-C)(-C)-[Si](-C)(-C)-[O;H0;D2;+0:1]-[C:2]-[C:3]=[O;D1;H0:4]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20100160369A1
[#8:4]-[C:3](=[O;D1;H0:5])-[C@@H;D3;+0:1](-[C:2])-[O;H0;D2;+0:6]-[c:7]>>Cl-[C@@H;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3](-[#8:4])=[O;D1;H0:5].[OH;D1;+0:6]-[c:7]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US20080153850A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:3]):[c:4]:[#7;a:5]-[NH;D2;+0:7]-[C:6]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]:[#7;a:3]:[c:4]:[#7;a:5].[C:6]-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US04187305
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:4]-[C;D1;H3:3]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C;D1;H3:3]-[O-;H0;D1:4]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20100256097A1
[#7;a:4]:[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:2])-[O;H0;D2;+0:5]-[c:6]>>F-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]:[#7;a:4].[O-;H0;D1:5]-[c:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20140378487A1
[#7;a:4]:[c:3](:[c:5]:[#7;a:6])-[C;H0;D3;+0:1](-[NH2;D1;+0:7])=[O;D1;H0:2]>>C-O-[C;H0;D3;+0:1]([=O;D1;H0:2])-[c:3](:[#7;a:4]):[c:5]:[#7;a:6].[NH3;D0;+0:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US06359145B1
[#8:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH;D2;+0:8]-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#8:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH2;D1;+0:8]	TRUE	TRUE	TRUE	13	US20100003305A1
[c:2]-[CH;D3;+0:1](-[c:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>O-[CH;D3;+0:1](-[c:2])-[c:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US20040259912A1
[C;D1;H3:2]-[S;H0;D4;+0:1](=[O;D1;H0:3])(=[O;D1;H0:4])-[NH;D2;+0:5]-[c:6]>>Cl-[S;H0;D4;+0:1](-[C;D1;H3:2])(=[O;D1;H0:3])=[O;D1;H0:4].[NH2;D1;+0:5]-[c:6]	TRUE	TRUE	TRUE	15	US05994368
[C:2]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:3])-[NH;D2;+0:4]-[C:5]=[O;D1;H0:6]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[NH2;D1;+0:4]-[C:5]=[O;D1;H0:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US05585358

feasible_reaction_smarts	not_trained_on_but_known	known_from_valid_set	known_from_test_set	num_products_works_with	example_works_with_reaction_id
[#7;a:1]:[c:2]:[c:3]-[CH;D3;+0:4](-[C;D1;H3:5])-[CH3;D1;+0:6]>>[#7;a:1]:[c:2]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:4](-[C;D1;H3:5])=[CH2;D1;+0:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20150057265A1
[#7;a:4]:[#7;a:5]:[c:6]-[NH;D2;+0:7]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[#7;a:4]:[#7;a:5]:[c:6]-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20080280875A1
[#7:5]-[C:6](=[O;D1;H0:7])-[C:8]-[NH;D2;+0:9]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[C:3]-[#7:4]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[C:3]-[#7:4].[#7:5]-[C:6](=[O;D1;H0:7])-[C:8]-[NH2;D1;+0:9]	TRUE	FALSE	TRUE	3	US20080275018A1
[C:3]-[N;H0;D3;+0:4](-[C;D1;H3:5])-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2].[C:3]-[NH;D2;+0:4]-[C;D1;H3:5]	TRUE	FALSE	TRUE	3	US20090318690A1
[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[C:4]-[NH3;+D1:5]	FALSE	FALSE	FALSE	26	US08822689B2
[#7:4]-[C:3](=[O;D1;H0:5])-[C:2]-[OH;D1;+0:1]>>C-C(=O)-[O;H0;D2;+0:1]-[C:2]-[C:3](-[#7:4])=[O;D1;H0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	4	US20060069126A1
[#7:1]-[CH2;D2;+0:2]-[CH2;D2;+0:3]-[c:4]>>[#7:1]-[CH;D2;+0:2]=[CH;D2;+0:3]-[c:4]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20110281862A1
[#7;a:5]:[n;H0;D3;+0:6](:[c:7])-[CH2;D2;+0:1]-[C:2](-[#8:3])=[O;D1;H0:4]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2](-[#8:3])=[O;D1;H0:4].[#7;a:5]:[nH;D2;+0:6]:[c:7]	TRUE	TRUE	TRUE	4	US08324216B2
[#7;a:6]:[#7;a:5]:[c:3](:[c:3])-[c:3]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[N;H0;D3;+0:8](-[C:7])-[C:9]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3](:[c:3])-[#7;a:4]:[#7;a:5]:[#7;a:6]:[C:7]-[NH;D2;+0:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US04017620
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4])-[C:6]>>F-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	TRUE	TRUE	TRUE	11	US20140005168A1
[C:5]-[N;H0;D3;+0:6](-[C:7])-[CH2;D2;+0:1]-[C:2](-[N;D1;H2:3])=[O;D1;H0:4]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2](-[N;D1;H2:3])=[O;D1;H0:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US08513239B2
[#7;a:5]:[#7;a:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:7]-[C:6]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]:[#7;a:4]:[#7;a:5].[C:6]-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	TRUE	TRUE	6	US20090124596A1
[C:3]=[C:4]/[C:5]-[O;H0;D2;+0:6]-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]=[C:4]-[C:5]-[OH;D1;+0:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US05387692
[c:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[NH;D2;+0:4]:[c:5]>>O-B(-O)-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[NH2;D1;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US07247625B2
[C:1]-[CH;D2;+0:2]=[O;H0;D1;+0:3]>>[C:1]-[CH2;D2;+0:2]-[OH;D1;+0:3]	TRUE	TRUE	TRUE	27	US05891909
[#7;a:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4])-[C:6]>>O-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[#7;a:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20150284370A1
[#7;a:5]:[#7;a:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:6]-[c:7]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]:[#7;a:4]:[#7;a:5].[NH2;D1;+0:6]-[c:7]	TRUE	FALSE	TRUE	2	US08084474B2
[C:1]-[C@H;D3;+0:2](-[C:3])-[C@H;D3;+0:4](-[c:5])-[c:6]>>[C:1]-[C;H0;D3;+0:2](-[C:3])=[C;H0;D3;+0:4](-[c:5])-[c:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20090239880A1
[C:3]-[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]=[C:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US05631208
[#8:2]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:3])-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4])-[C:6]=[O;D1;H0:7]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[#8:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]=[O;D1;H0:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US06531471B2
[C:4]-[O;H0;D2;+0:5]-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[OH;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US06143769
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5])-[c:6]>>C-C-C-C[Sn](-C-C-C-C)-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].I-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20110237578A1
[#8:2]-[CH;D3;+0:1](-[C:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>Cl-[CH;D3;+0:1](-[#8:2])-[C:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US04153448
[#7:1]-[C:2](=[O;D1;H0:3])-[CH2;D2;+0:4]-[c:6]:[#7:a:8]>>[#7:1]-[C:2](=[O;D1;H0:3])/[CH;D2;+0:4]=[CH;D2;+0:5]/[c:6]:[c:7]:[#7;a:8]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20110044938A1
[C:2]-[CH;D3;+0:1](-[C:3])-[NH;D2;+0:4]-[c:5]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3].[NH2;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	TRUE	8	US20120309771A1
[#7:2]-[CH2;D2;+0:1]-[C:3]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[#7:2])-[C:3]	TRUE	TRUE	TRUE	17	US20030069392A1
[C:2]#[C;H0;D2;+0:1]-[C;H0;D4;+0:4](-[C:3])(-[C:5])-[OH;D1;+0:6]>>[C:1]#[C;H0;D2;+0:2]-[Mg+].[C:3]-[C;H0;D3;+0:4](-[C:5])=[O;H0;D1;+0:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20100292279A1
[C:3]=[C:4]-[C:5]-[O;H0;D2;+0:6]-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[c:2].[C:3]=[C:4]-[C:5]-[OH;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US04171356
[C:1]-[C@H;D3;+0:2](-[OH;D1;+0:3])-[C:4]=[C:5]>>[C:1]-[C;H0;D3;+0:2]([O;H0;D1;+0:3])-[C:4]=[C:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20040019023A1
[C:2]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:3])-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4])-[C:6]>>C-C-O-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	FALSE	FALSE	FALSE	4	US20060084807A1
[F;D1;H0:4]-[C:3](-[F;D1;H0:5])(-[F;D1;H0:6])-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:8]-[C:7]>>F-C(-F)(-F)-C(=O)-O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[C:3](-[F;D1;H0:4])(-[F;D1;H0:5])	FALSE	FALSE	FALSE	5	US20110071194A1
[#16;a:4]:[c:3](:[c:5]:[#7;a:6])-[C;H0;D2;+0:1]#[N;H0;D1;+0:2]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[NH2;D1;+0:2])-[c:3](:[#16;a:4]):[c:5]:[#7;a:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20090221604A1
[C:3]-[N;H0;D3;+0:4](-[c:5])-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>O=[CH;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]-[NH;D2;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20030186970A1
[#7;a:1]:[c:2]:[c:3]-[CH2;D2;+0:4]-[CH2;D2;+0:5]:[c:6]>>[#7;a:1]:[c:2]:[c:3]-[C;H0;D2;+0:4]#[C;H0;D2;+0:5]-[c:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20120263753A1
[#16;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:3])-[S;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#16;a:2]):[#7;a:3].[SH;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US05635197
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[c:3]>>O-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[c:3]	TRUE	TRUE	TRUE	4	US08927715B2
[#16;a:5]:[c:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1](:[c:2])-[c;H0;D3;+0:6](:[c:7]):[c:8]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]:[c:4]:[#16;a:5].C-C1(-C)-O-B(-[c;H0;D3;+0:6](:[c:7]):[c:8])-[O-C-1(-C)-C	TRUE	TRUE	FALSE	1	US07629340B2
[#7;a:4]:[c:3]:[c:2]-[NH2;D1;+0:1]>>C-C(-C)-O-C(=O)-[NH;D2;+0:1]-[c:2]:[c:3]:[#7;a:4]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20110207716A1
[#7;a:3]-[NH0;D2;+0:4]=[CH;D2;+0:1]-[c:2]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2]:[#7;a:3]-[NH2;D1;+0:4]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US08217043B2
[#7;a:3]:[c:4]:[c:5]:[n;H0;D3;+0:6](:[c:7])-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[c:2].[#7;a:3]:[c:4]:[c:5]:[nH;D2;+0:6]:[c:7]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US20050277662A1
[c:5]:[c;H0;D3;+0:4](:[c:6])-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].C-C1(-C)-O-B(-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6])-[O-C-1(-C)-C	TRUE	TRUE	TRUE	24	US20120015991A1
[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3]>>C-C(=O)-O-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	10	US20090274733A1
[#7;a:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[#7;a:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US06180629B2
[C:1]-[CH;D3;+0:2](-[C;D1;H3:3])-[CH2;D2;+0:4]-[C:5]>>[C:1]/[C;H0;D3;+0:2](-[C;D1;H3:3])=[CH;D2;+0:4]\[C:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US06255276B1
[C:4]=[CH;D2;+0:5]-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[C:4]=[CH2;D1;+0:5]	TRUE	FALSE	TRUE	3	US07998975B2
[C:2]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:3])-[n;H0;D3;+0:5](:[c:4]):[c:6]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[c:4]:[nH;D2;+0:5]:[c:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20080132540A1
[#7;a:5]:[c:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[N;H0;D3;+0:7](-[C:6])-[C:8]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].[C:6]-[NH;D2;+0:7]-[C:8]	TRUE	TRUE	TRUE	19	US20150005232A1
[#7:5]-[C:6](=[O;D1;H0:7])-[C:8]-[N;H0;D3;+0:9](-[C:10])-[CH2;D2;+0:1]-[C:2](-[#8:3])=[O;D1;H0:4]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2](-[#8:3])=[O;D1;H0:4].[#7:5]-[C:6](=[O;D1;H0:7])-[C:8]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20060135771A1
[#8:1]-[C;H0;D4;+0:2](-[C;D1;H3:3])(-[CH2;D2;+0:4]-[C:5])-[O;H0;D2;+0:7]:[C:6]>>[#8:1]-[C;H0;D3;+0:2](-[C;D1;H3:3])=[CH;D2;+0:4]\[C:5].[C:6]:[OH;D1;+0:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US04838924
[#7:3]-[C:4](=[O;D1;H0:5])-[c:6]:[n;H0;D3;+0:7](:[c:8])-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[#7:3]-[C:4](=[O;D1;H0:5])-[c:6]:[nH;D2;+0:7]:[c:8]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20070244125A1
[C;D1;H3:2]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:3])-[NH;D2;+0:4]-[c:5]>>O-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3].[NH2;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US08202885B2
[C:2]=[C:3]-[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:6])-[CH3;D1;+0:1]>>O=[CH2;D1;+0:1].[C:2]=[C:3]-[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20110110889A1
[#7;a:3]:[c:2](:[#7;a:4])-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:6](-[C:5])-[C:7]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[c:2](:[#7;a:3]):[#7;a:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20100284970A1
[C:4]=[C:5]-[C:6]-[NH;D2;+0:7]-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]=[C;D1;H2:3]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]=[C;D1;H2:3].[C:4]=[C:5]-[C:6]-[NH2;D1;+0:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US05780501
[#7:4]-[N;H0;D2;+0:5]=[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])-[c:3]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])-[c:3].[#7:4]-[NH2;D1;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20060105458A1
[C:1]-[CH;D3;+0:2](-[OH;D1;+0:3])-[C:4]=[C:5]>>[C:1]-[C;H0;D3;+0:2]([O;H0;D1;+0:3])-[C:4]=[C:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US05256824
[C:4]-[CH;D3;+0:5](-[C:6])-[O;H0;D2;+0:7]-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>F-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[C:4]-[CH;D3;+0:5](-[C:6])-[OH;D1;+0:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20100120784A1
[#7;a:4]:[c:5]:[n;H0;D3;+0:6](:[c:7])-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]#[N;D1;H0:3]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]#[N;D1;H0:3].[#7;a:4]:[c:5]:[nH;D2;+0:6]:[c:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US05624926
[#7;a:4]:[c:3](:[#7;a:5]:[#8;a:6])-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:8]:[C;D1;H3:7]>>C-C-O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3](:[#7;a:4]):[#7;a:5]:[#8;a:6].[C;D1;H3:7]-[NH	TRUE	FALSE	TRUE	1	US06897306B2
[C:2]#[C;H0;D2;+0:1]-[c;H0;D3;+0:3](:[c:4]):[c:5]>>C-[Si](-C(-C)-[C;H0;D2;+0:1]#[C:2].I-[c;H0;D3;+0:3](:[c:4]):[c:5]	TRUE	FALSE	TRUE	3	US20080194647A1
[C:3]-[N;H0;D3;+0:4](-[C;D1;H3:5])-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[c:2].[C:3]-[NH;D2;+0:4]-[C;D1;H3:5]	TRUE	FALSE	TRUE	2	US20030105328A1
[C:2]-[OH;D1;+0:1]>>C-C(=O)-[O;H0;D2;+0:1]-[C:2]	TRUE	TRUE	TRUE	20	US08362048B2
[#7:5]-[C:4](=[O;D1;H0:6])-[C:3]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:8]-[C:7]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[C:3]-[C:4](-[#7:5])=[O;D1;H0:6].[C:7]-[NH2;D1;+0:8]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US07425551B2
[#7;a:4]:[#7;a:3]:[c:2]-[NH2;D1;+0:1]>>O=[N;+H0;D3:1](-[O-]):[c:2]:[#7;a:3]:[#7;a:4]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US20150065482A1
[#7;a:1]:[c:2]:[c:3]-[NH;D2;+0:4]-[C;H0;D3;+0:6]([S;D1;H0:5])-[NH;D2;+0:7]-[c:8]>>[#7;a:1]:[c:2]:[c:3]-[NH2;D1;+0:4].[S;D1;H0:5]=[C;H0;D2;+0:6]=[N;H0;D2;+0:7]-[c:8]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20120129811A1
[#7;a:5]:[#8;a:4]:[c:2](:[#7;a:3])-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:7](-[C:6])-[C:8]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[c:2](:[#7;a:3]):[#8;a:4]:[#7;a:5].[C:6]-[NH;D2;+0:7]-[C:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US05665718
[#7:5]-[C:6](=[O;D1;H0:7])-[C:8]-[N;H0;D3;+0:9](-[C:10])-[S;H0;D4;+0:1](=[O;D1;H0:2])=[O;D1;H0:3]-[c:4]>>Cl-[S;H0;D4;+0:1](=[O;D1;H0:2])=[O;D1;H0:3]-[c:4].[#7:5]-[C:6](=[O;D1;H0:7])-[C:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20150038708A1
[C:4]-[O;H0;D2;+0:5]-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]=[C;D1;H2:3]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]=[C;D1;H2:3].[C:4]-[OH;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US20140135270A1
[#8:4]-[C:3]([O;D1;H0:5])-[C@H;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])-[O;H0;D2;+0:6]-[c:7]>>Br-[C@H;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])-[C:3](-[#8:4])=[O;D1;H0:5].[OH;D1;+0:6]-[c:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20140073650A1
[C:3]-[N;+H0;D4:4](-[C:5])(-[C:6])-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[c:2].[C:3]-[N;H0;D3;+0:4](-[C:5])-[C:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20140171414A1
[c:4]-[NH;D2;+0:5]-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>F-C(-F)(-F)-S(=O)(=O)-O-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[c:4]-[NH2;D1;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US20130178625A1

feasible_reaction_smarts	not_trained_on_but_known	known_from_valid_set	known_from_test_set	num_products_works_with	example_works_with_reaction_id
[#7;a:7]:[c:6]:[c;H0;D3;+0:4](:[c:5])-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].Br-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]:[#7;a:7]	TRUE	FALSE	TRUE	3	US20090281311A1
[#7;a:1]:[c:2]:[c:3]-[CH2;D2;+0:4]-[CH3;D1;+0:5]>>[#7;a:1]:[c:2]:[c:3]-[CH;D2;+0:4]=[CH2;D1;+0:5]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US08071592B2
[#7:1]-[C:2]-[C;H0;D3;+0:3](=[O;H0;D1;+0:4])-[C:5]-[#7:6]>>[#7:1]-[C:2]-[C@H;D3;+0:3](-[OH;D1;+0:4])-[C:5]-[#7:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US05712268
[#7;a:4]:[c;H0;D3;+0:3](:[c:5])-[CH2;D2;+0:1](:[c:2])>>Br-[CH2;D2;+0:1](:[c:2]).Br-[c;H0;D3;+0:3](:[#7;a:4]):[c:5]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20110183959A1
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:6]-[C:7](=[O;D1;H0:8])-[O;D1;H1:9])-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]-[C:7]([O;D1;H0:8])-[C:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20140356322A1
[#8:3]-[C:2]([O;D1;H0:4])-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:6](-[C:5])-[C:7]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2](-[#8:3])=[O;D1;H0:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]	TRUE	TRUE	TRUE	4	US20060142337A1
[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>F-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	15	US20130150372A1
[C:2]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:3])-[NH;D2;+0:5]-[N;D1;H2:4]>>C-C-O-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[N;D1;H2:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20150231132A1
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C;D1;H3:6])-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;D1;H3:6]	TRUE	TRUE	TRUE	19	US20060211698A1
[C:4]#[C;H0;D2;+0:5]-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>I-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[C:4]#[CH;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	31	US20130196979A1
[#8:4]-[C:3]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:6]-[C:5]>>O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[C:3]-[#8:4].[C:5]-[NH2;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20090118257A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](-[NH;D2;+0:7]-[c:8]):[c:3]-[C:4](-[#8:5])=[O;D1;H0:6]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]-[C:4](-[#8:5])=[O;D1;H0:6].[NH2;D1;+0:7]-[c:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20120245359A1
[#16;a:4]:[c:3](:[c:5]:[#7;a:6])-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:7]-[c:8]>>O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3](:[#16;a:4]):[c:5]:[#7;a:6].[NH2;D1;+0:7]-[c:8]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US07868205B2
[#8:4]-[C:5]([O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH;D2;+0:8]-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#8:4]-[C:5]([O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH3+;D1:8]	FALSE	FALSE	FALSE	13	US20100003305A1
[#16;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[#16;a:2]):[c:3].O-B(-O)-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US20100010035A1
[C:3]-[N@H;D2;+0:4]-[CH;D2;+0:1]=[O;D1;H0:2]>>O-[CH;D2;+0:1]=[O;D1;H0:2].[C:3]-[NH2;D1;+0:4]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US20080255153A1
[#7;a:5]:[c:4]:[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:2])-[NH;D2;+0:7]-[C;D1;H3:6]>>F-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].[C;D1;H3:6]-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US06136823
[C:2]-[C@H;D3;+0:1](-[C;D1;H3:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>Br-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[C;D1;H3:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	5	US20090258917A1
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:6])-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	TRUE	TRUE	TRUE	70	US08058269B2
[#7;a:5]:[c:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:6]-[c:7]>>O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].[NH2;D1;+0:6]-[c:7]	TRUE	TRUE	TRUE	7	US20100256356A1
[C:2]-[C@H;D3;+0:1](-[C;D1;H3:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>O-[C@H;D3;+0:1](-[C:2])-[C;D1;H3:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20140187554A1
[#8;a:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:6]-[C;D1;H3:5]>>O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3]:[#8;a:4].[C;D1;H3:5]-[NH2;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US06846819B1
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:6])-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]=[C:3]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]=[C:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	FALSE	FALSE	FALSE	4	US07598368B2
[#7;a:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4])-[C:6]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]:[#7;a:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US05719157
[#7;a:4]:[c:3](:[#7;a:5]:[#8;a:6])-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:8]-[C:7]>>C-C-O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3](:[#7;a:4]):[#7;a:5]:[#8;a:6].[C:7]-[NH2;D1;+0:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US06897306B2
[#7;a:3]:[c:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:4]:[c:5]:[#7;a:6])-[c;H0;D3;+0:7](:[c:8]):[c:9]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]:[#7;a:3]):[c:4]:[c:5]:[#7;a:6].C-C1(-C)-O-B(-[c;H0;D3;+0:7](:[c:8]):[c:9])·O	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20120101064A1
[C:2]-[C@H;D3;+0:1](-[C;D1;H3:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>I-[C@H;D3;+0:1](-[C:2])-[C;D1;H3:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	5	US20090111800A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[NH;D2;+0:4]-[c:5]>>F-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[NH2;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20140296261A1
[#7;a:4]:[c:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[c:5]:[#7;a:6]>>O-[CH;D3;+0:1](-[c:2]:[c:3]:[#7;a:4])-[c:5]:[#7;a:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20130317065A1
[C:2]-[C@H;D3;+0:1](-[C:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>O-[C@H;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	4	US20140187554A1
[C:3]-[NH;D2;+0:4]-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>O=[CH;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]-[NH2;D1;+0:4]	TRUE	TRUE	TRUE	15	US20080004300A1
[c:2]:[cH;D2;+0:1]:[c:3]>>I-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20060058314A1
[#7;a:1]:[c:2]:[c:3]-[CH;D3;+0:4](-[C:5])-[OH;D1;+0:6]>>[#7;a:1]:[c:2]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:4](-[C:5])=[O;H0;D1;+0:6]	TRUE	FALSE	TRUE	2	US20040044057A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](-[O;H0;D2;+0:7]-[C;D1;H3:6]):[c:3]:[c:4]:[#7;a:5]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].[C;D1;H3:6]-[O;H0;D1:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US04092150
[C:3]-[NH;D2;+0:4]-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>C-S(=O)(=O)-O-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]-[NH2;D1;+0:4]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20100048636A1
[#7;a:4]:[c:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[NH;D2;+0:6]-[C:5]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2]:[c:3]:[#7;a:4].[C:5]-[NH2;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US20090198063A1
[C:1]-[CH;D3;+0:2](-[C;D1;H3:3])-[CH2;D2;+0:4]-[C:5]>>[C:1]/[C;H0;D3;+0:2](-[C;D1;H3:3])=[CH;D2;+0:4]/[C:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US06255276B1
[#16;a:4]:[c:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[NH;D2;+0:6]-[C:5]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2]:[c:3]:[#16;a:4].[C:5]-[NH2;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20060247439A1
[#8;a:2]:[cH;D2;+0:1]:[c:3]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[#8;a:2]):[c:3]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US09023846B2
[C:2]-[C;H0;D3;+0:1](-[C:3])=[N;H0;D2;+0:4]-[O;D1;H1:5]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3].[NH2;D1;+0:4]-[O;D1;H1:5]	TRUE	TRUE	FALSE	4	US06642231B2
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C;D1;H3:6])-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>F-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;D1;H3:6]	TRUE	TRUE	TRUE	4	US08299085B2
[C:2]-[NH;D2;+0:1]-[C;D1;H3:3]>>C-C(-C)(-C)-O-C(=O)-[N;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[C;D1;H3:3]	TRUE	TRUE	TRUE	7	US20050113397A1
[O;D1;H0:4]=[C:5](-[O;D1;H1:6])-[C:7]-[NH;D2;+0:8]-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[O;D1;H0:4]=[C:5](-[O;D1;H1:6])-[C:7]-[NH2;D1;+0:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20140058098A1
[C:1]-[C@H;D3;+0:2](-[c:3])-[CH2;D2;+0:1]-[C:5]>>[C:1]-[C;H0;D3;+0:2](-[c:3])=[CH;D2;+0:4]-[C:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20140107073A1
[C:5]-[N;H0;D3;+0:6](-[C:7])-[S;H0;D4;+0:1](-[C:2])(=[O;D1;H0:3])=[O;D1;H0:4]>>Cl-[S;H0;D4;+0:1](-[C:2])(=[O;D1;H0:3])=[O;D1;H0:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]	TRUE	TRUE	TRUE	17	US20080004263A1
[#7;a:3]:[c:4](:[#7;a:5])-[S;H0;D2;+0:6]-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[#7;a:3]:[c:4](:[#7;a:5])-[SH;D1;+0:6]	TRUE	FALSE	TRUE	2	US20050267148A1
[#7;a:1]:[c:2](:[c:3]:[#7;a:4])-[C;H0;D3;+0:5]([O;H0;D1;+0:6])-[c:7]>>[#7;a:1]:[c:2](:[c:3]:[#7;a:4])-[CH;D3;+0:5](-[OH;D1;+0:6])-[c:7]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US20150105366A1
[C:3]-[O;H0;D2;+0:4]-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]-[OH;D1;+0:4]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US05190689
[C:3]-[NH;D2;+0:4]-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2].[C:3]-[NH2;D1;+0:4]	TRUE	TRUE	TRUE	35	US05578627
[#7;a:4]:[c:5]:[c:6](:[#7;a:7])-[NH;D2;+0:8]-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#7;a:4]:[c:5]:[c:6](:[#7;a:7])-[NH2;D1;+0:8]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20040014968A1
[C:3]=[C:4]/[C:5]([O;D1;H0:6])-[O;H0;D2;+0:7]-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]=[C:4]/[C:5](-[O;H0;D1:6])=[O;D1;H0:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US07368593B1
[C:4]=[C:5]-[C:6]-[N;H0;D3;+0:7](-[C:8])-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3].[C:4]=[C:5]-[C:6]-[NH;D2;+0:7]-[C:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US07910595B2
[C;D1;H3:5]-[N;H0;D3;+0:6](-[c:7])-[S;H0;D4;+0:1]([O;D1;H0:2])(=[O;D1;H0:3])-[c:4]>>Cl-[S;H0;D4;+0:1]([O;D1;H0:2])(=[O;D1;H0:3])-[c:4].[C;D1;H3:5]-[NH;D2;+0:6]-[c:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20070082899A1
[C;D1;H3:3]-[C:2]([O;D1;H0:4])-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:5]-[c:6]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2](-[C;D1;H3:3])=[O;D1;H0:4].[OH;D1;+0:5]-[c:6]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20040152893A1
[#7:4]-[C:5]([O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH;D2;+0:8]-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3]>>C-C(=O)-O-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3].[#7:4]-[C:5]([O;D1;H0:6])-[C:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20090221555A1
[#8:4]-[C:3]-[C;H0;D3;+0:1](-[NH2;D1;+0:5])=[O;D1;H0:2]>>C-O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[C:3]-[#8:4].[NH4+;D0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20060030609A1
[O;D1;H0:3]=[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]=[O;D1;H0:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	FALSE	4	US03953595
[#8:4]-[C:5]([O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH;D2;+0:8]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[C:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[C:3].[#8:4]-[C:5]([O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH2;D1;+0:8]	FALSE	FALSE	FALSE	4	US20100311777A1
[#7;a:5]:[c:4]:[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:2])-[c;H0;D3;+0:6](:[c:7]):[c:8]>>I-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].O-B(-O)-[c;H0;D3;+0:6](:[c:7]):[c:8]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US06498165B1
[#7;a:3]:[c:2](-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:7](-[C:6])-[C:8]):[c:4]:[#7;a:5]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2](:[#7;a:3]):[c:4]:[#7;a:5].[C:6]-[NH;D2;+0:7]-[C:8]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US05296609
[C:3]-[N+;H0;D4:4](-[C;D1;H3:5])-[C;D1;H3:6]-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]-[N;H0;D3;+0:4](-[C;D1;H3:5])-[C;D1;H3:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US05451394
[#7;a:5]:[c:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[N;H0;D3;+0:7](-[C:6])-[c:8]>>O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].[C:6]-[NH;D2;+0:7]-[c:8]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US07135475B2
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[N;H0;D2;+0:5]=[C:4]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[C:4]=[NH;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US08415370B2
[c:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].O-B(-O)-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]	TRUE	TRUE	TRUE	74	US20030083357A1
[#8:3]-[C:2]([O;D1;H0:4])-[CH2;D2;+0:1]-[NH;D2;+0:6]-[C:5]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2](-[#8:3])=[O;D1;H0:4].[C:5]-[NH2;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	FALSE	3	US04256761
[C:5]=[C:6]-[C:7]-[N;H0;D3;+0:8](-[C:9])-[S;H0;D4;+0:1](-[C;D1;H3:2])(=[O;D1;H0:3])=[O;D1;H0:4]>>Cl-[S;H0;D4;+0:1](-[C;D1;H3:2])(=[O;D1;H0:3])=[O;D1;H0:4].[C:5]=[C:6]-[C:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20070082880A1
[#7:2]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:3])-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4])-[C:6]>>C-C-O-[C;H0;D3;+0:1](-[#7:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	TRUE	TRUE	TRUE	4	US20080261941A1
[#16;a:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:6]-[C:5]>>O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3]:[#16;a:4].[C:5]-[NH2;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	TRUE	10	US07417066B2
[#7;a:1]:[c:2]-[NH;D2;+0:3]-[C;H0;D3;+0:6]([O;D1;H0:7])-[NH;D2;+0:5]-[C:4]>>[#7;a:1]:[c:2]-[NH2;D1;+0:3].[C:4]-[N;H0;D2;+0:5]=[C;H0;D2;+0:6]=[O;D1;H0:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US05952342
[C:4]=[C:3]/[C:2]-[NH2;D1;+0:1]>>C-C(-C)(-C)-O-C(=O)-[NH;D2;+0:1]-[C:2]/[C:3]=[C:4]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US09108981B2
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](-[O;H0;D2;+0:6]-[C;D1;H3:5]):[c:3]:[#7;a:4]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]:[#7;a:4].[C;D1;H3:5]-[O;H0;D1:6]	TRUE	FALSE	TRUE	2	US04296114

feasible_reaction_smarts	not_trained_on_but_known	known_from_valid_set	known_from_test_set	num_products_works_with	example_works_with_reaction_id
[#8:4]-[C:3](=[O;D1;H0:5])-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[O;H0;D2;+0:6]-[c:7]>>Br-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3](-[#8:4])=[O;D1;H0:5].[OH;D1;+0:6]-[c:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US04125729
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[#7;a:3].[O;-H0;D1:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20100056515A1
[#16;a:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4])-[C:6]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[#16;a:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US08293735B2
[#16;a:4]:[c:3]:[C;H0;D3;+0:1](:[NH2;D1;+0:5])=[O;D1;H0:2]>>C-O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3]:[#16;a:4].[NH3;D0;+0:5]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20080249301A1
[#8:3]-[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4])-[C:6]>>I-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]-[#8:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US07750155B2
[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>C-C-C(=O)-O-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US08247429B2
[#8:1]-[C:2](=[O;D1;H0:3])-[C;H0;D3;+0:4](-[C:5])=[O;H0;D1;+0:6]>>[#8:1]-[C:2](=[O;D1;H0:3])-[CH;D3;+0:4](-[C:5])-[OH;D1;+0:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US09115079B2
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[O;H0;D2;+0:5]-[C:4]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[C:4]-[OH;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	17	US20030134854A1
[#7;a:4]:[c:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:6](-[C:5])-[C:7]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[c:3]:[#7;a:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20150111870A1
[C:3]#[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]#[C:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	FALSE	3	US20080090839A1
[C:2]-[CH;D3;+0:1](-[C:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>O-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	TRUE	7	US20140187554A1
[#7;a:5]:[c:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[N;H0;D3;+0:7](-[C:6])-[C;D1;H3:8]>>O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].[C:6]-[NH;D2;+0:7]-[C;D1;H3:8]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US08436043B2
[C;D1;H3:2]-[S;H0;D4;+0:1]([O;D1;H0:3])([O;D1;H0:4])-[O;H0;D2;+0:5]-[c:6]>>Cl-[S;H0;D4;+0:1](-[C;D1;H3:2])([O;D1;H0:3])=[O;D1;H0:4].[OH;D1;+0:5]-[c:6]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US20070185079A1
[#16;a:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4])-[C:6]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2]:[#16;a:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US20080076758A1
[O;D1;H0:5]=[C:4](-[O;D1;H1:6])-[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:2])-[NH;D2;+0:7]-[c:8]>>I-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]-[C:4]([O;D1;H0:5])-[O;D1;H1:6].[NH2;D1;+0:7]-[c:8]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US08327467B2
[C:2]-[CH;D2;+0:1]=[O;H0;D1;+0:3]>>C-C-O-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[O;H0;D2;+0:3]-C-C	TRUE	TRUE	TRUE	3	US07122662B2
[C:2]-[OH;D1;+0:1]>>C-C(-C)(-C)[Si](-C)(-C)-[O;H0;D2;+0:1]-[C:2]	TRUE	TRUE	TRUE	39	US07176220B2
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3]:[c:4]:[#7;a:5])-[c;H0;D3;+0:6](:[c:7])>>I-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].O-B(-O)-[c;H0;D3;+0:6](:[c:7]):[c:8]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20090018131A1
[#8:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C;H0;D3;+0:7](-[C:8]#[N;D1;H0:9])=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[c:3]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[c:3].[#8:4]-[C:5]([O;D1;H0:6])-[CH2;D2;+0:7]-[C:8]#[N;D1;H0:9]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US07576212B2
[#7;a:4]:[c:5]:[c:6]-[O;H0;D2;+0:7]-[c;H0;D3;+0:1](-[C:2]):[c:3]>>I-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[#7;a:4]:[c:5]:[c:6]-[OH;D1;+0:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20140073651A1
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:3]-[c:4]>>O-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[OH;D1;+0:3]-[c:4]	TRUE	TRUE	TRUE	38	US20110237622A1
[#16;a:5]:[c;H0;D3;+0:4](:[c:6])-[c;H0;D3;+0:1](:[#16;a:2]):[#7;a:3].O-B(-O)-[c;H0;D3;+0:4](:[#16;a:5]):[c:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US07709481B2
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[N;H0;D2;+0:5](-[C;D1;H3:4])-[C;D1;H3:6]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[C;D1;H3:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;D1;H3:6]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US20070259849A1
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4]#[O;D1;H0:3])-[C:6]#[O;D1;H0:7]>>C-S(=O)-O-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[O;D1;H0:3]=[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]=[O;D1;H0:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US05622976
[#7:5]-[C:4]([O;D1;H0:6])-[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:2])-[c;H0;D3;+0:7](-[c:8]):[c:9]>>I-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]-[C:4](-[#7:5])=[O;D1;H0:6].O-B(-O)-[c;H0;D3;+0:7](:[c:8]):[c:9]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20130289033A1
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:6]=[O;D1;H0:7])-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]=[O;D1;H0:3]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]=[O;D1;H0:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20150274704A1
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:4]-[C;D1;H3:3]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C;D1;H3:3]-[OH;D1;+0:4]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20100256097A1
[O;D1;H0:3]=[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[C:4]=[O;D1;H0:5]>>C-C(-C)(-C)-O-C(=O)-[CH;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]=[O;D1;H0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US05480857
[C;D1;H3:1]-[C;H0;D4;+0:2](-[C;D1;H3:2])-[C;D1;H3:3])-[CH3;D1;+0:4])-[O;H0;D2;+0:6]-[C:5]>>I-[C;D1;H3:1]-[C;H0;D3;+0:2](-[C;D1;H3:3])=[CH2;D1;+0:4].[C:5]-[OH;D1;+0:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20110118354A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[C;H0;D3;+0:4](-[C:5])=[O;D1;H0:6]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].C-O-N(-C)-[C;H0;D3;+0:4](-[C:5])=[O;D1;H0:6]	TRUE	TRUE	FALSE	3	US20120122843A1
[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[S;H0;D4;+0:1](-[C:2])([O;D1;H0:3])=[O;D1;H0:4]>>Cl-[S;H0;D4;+0:1](-[C:2])([O;D1;H0:3])=[O;D1;H0:4].[C:5]-[NH2;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	TRUE	13	US20110217311A1
[#7;a:4]:[#7;a:5]:[c:6]-[NH;D2;+0:7]-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#7;a:4]:[#7;a:5]:[c:6]-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US08258134B2
[#7;a:2]:[cH;D2;+0:1]:[c:3]-[C:4](-[#8:5])=[O;D1;H0:6]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]-[C:4](-[#8:5])=[O;D1;H0:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US05908932
[#7;a:4]:[c:5]:[c:6]-[NH;D2;+0:7]-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3].[#7;a:4]:[c:5]:[c:6]-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US06300363B1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[O;H0;D2;+0:5]-[C;D1;H3:4]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[C;D1;H3:4]-[O;-H0;D1:5]	TRUE	TRUE	TRUE	7	US20130165436A1
[#7;a:3]:[n;H0;D3;+0:4](-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]):[c:5]:[#7;a:6]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[#7;a:3]:[nH;D2;+0:4]:[c:5]:[#7;a:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US08492540B2
[#7;a:4]:[c:5](:[#7;a:6])-[NH;D2;+0:7]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3].[#7;a:4]:[c:5](:[#7;a:6])-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20110144334A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](-[NH2;D1;+0:4]):[c:3]>>F-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[NH3;D0;+0:4]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20110130380A1
[#7;a:4]:[c:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:6](-[C:5])-[C:7]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2]:[c:3]:[#7;a:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]	TRUE	TRUE	TRUE	4	US08003649B2
[#7;a:4]:[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:2])-[N;H0;D3;+0:6](-[C:5])-[C:7]=[O;D1;H0:8]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]:[#7;a:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]=[O;D1;H0:8]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US08946260B2
[#7;a:4]:[c:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[S;H0;D2;+0:5]-[c:6]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[c:3]:[#7;a:4].[SH;D1;+0:5]-[c:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20060111353A1
[C:1]-[CH;D3;+0:2](-[C:3])-[CH2;D2;+0:4]-[c:5]>>[C:1]/[C;H0;D3;+0:2](-[C:3])=[CH;D2;+0:4]/[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	4	US20090227799A1
[#16:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;H0;D3;+0:1](-[c:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[c:2])=[O;D1;H0:3].[#16:4]-[NH2;D1;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US06803374B2
[#7;a:2]:[cH;D2;+0:1]:[c:3]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20050075375A1
[#7;a:4]:[c:5]:[n;H0;D3;+0:6](:[c:7])-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3].[#7;a:4]:[c:5]:[nH;D2;+0:6]:[c:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US05155113
[#7;a:4]:[c:3]:[cH;D2;+0:1]:[c:2]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]:[#7;a:4]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20080200448A1
[#7;a:3]:[c:4](:[#7;a:5])-[S;H0;D2;+0:6]-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[c:2].[#7;a:3]:[c:4](:[#7;a:5])-[SH;D1;+0:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US08273740B2
[C:2]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:3])-[NH;D2;+0:5]-[N;D1;H2:4]>>O-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[N;D1;H2:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20100120739A1
[#7;a:5]:[#7;a:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[N;H0;D3;+0:7](-[C:6])-[C:8]>>O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3]:[#7;a:4]:[#7;a:5].[C:6]-[NH;D2;+0:7]-[C:8]	TRUE	TRUE	TRUE	7	US20110003820A1
[C:5]-[O;H0;D2;+0:6]-[S;H0;D4;+0:1](-[C:2])([O;D1;H0:3])=[O;D1;H0:4]>>Cl-[S;H0;D4;+0:1](-[C:2])([O;D1;H0:3])=[O;D1;H0:4].[C:5]-[OH;D1;+0:6]	FALSE	FALSE	FALSE	51	US06159904
[#7;a:4]:[n;H0;D3;+0:5](:[c:6])-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3].[#7;a:4]:[nH;D2;+0:5]:[c:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20060183780A1
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:6])-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3]>>Br-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US08188301B2
[C:2]-[CH;D3;+0:1](-[C:3])-[O;H0;D2;+0:6]-[C:5]=[O;D1;H0:4]>>Br-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3].[O;D1;H0:4]=[C:5]-[OH;D1;+0:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US04036951
[C;D1;H3:3]-[NH;D2;+0:4]-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2].[C;D1;H3:3]-[NH2;D1;+0:4]	TRUE	FALSE	TRUE	2	US07119122B2
[#16;a:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[N;H0;D3;+0:6](-[#8:5])-[C;D1;H3:7]>>O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3]:[#16;a:4].[#8:5]-[NH;D2;+0:6]-[C;D1;H3:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20070155805A1
[#7;a:6]:[c:5]:[c:3](:[#7;a:4])-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:7]-[c:8]>>O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3](:[#7;a:4]):[c:5]:[#7;a:6].[NH2;D1;+0:7]-[c:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20140179690A1
[C:1]-[C@H;D3;+0:2](-[OH;D1;+0:3])-[c:4]>>[C:1]-[C;H0;D3;+0:2]([O;H0;D1;+0:3])-[c:4]	TRUE	FALSE	TRUE	7	US20150031685A1
[#7:3]-[C:4]([O;D1;H0:5])-[C;H0;D3;+0:6]([CH;D2;+0:1]-[c:2])-[C:7](-[#7:8])=[O;D1;H0:9]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2].[#7:3]-[C:4]([O;D1;H0:5])-[CH2;D2;+0:6]-[C:7](-[#7:8])=[O;D1;H0:9]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20060018848A1
[#7;a:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[N;H0;D3;+0:6](-[C:5])-[C:7]>>O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3]:[#7;a:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]	TRUE	TRUE	TRUE	15	US08436008B2
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:4]-[C:3]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]-[OH;D1;+0:4]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US05190689
[C:1]-[NH;D2;+0:2]-[C;H0;D3;+0:3]([S;D1;H0:4])-[NH;D2;+0:6]-[C:5]>>[C:1]-[N;H0;D2;+0:2]=[C;H0;D2;+0:3]=[S;D1;H0:4].[C:5]-[NH2;D1;+0:6]	FALSE	FALSE	FALSE	3	US04304780
[#7:3]-[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:6](-[C:5]=[O;D1;H0:4])-[C:7]=[O;D1;H0:8]>>O-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]-[#7:3].[O;D1;H0:4]=[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]=[O;D1;H0:8]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US08404708B2
[#7;a:4]:[c:3](:[c:5]:[#7;a:6])-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[N;H0;D3;+0:8](-[C:7])-[C:9]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3](:[#7;a:4]):[c:5]:[#7;a:6].[C:7]-[NH;D2;+0:8]-[C:9]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20090286778A1
[#7;a:5]:[c:4]:[#7;a:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2])-[c;H0;D3;+0:6](:[c:7])>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[#7;a:3]:[c:4]:[#7;a:5].O-B(-O)-[c;H0;D3;+0:6](:[c:7]):[c:8]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US20060069110A1
[#7;a:3]:[c:2](-[CH;D2;+0:1]=[N;H0;D2;+0:6]-[O;D1;H1:7]):[c:4]:[#7;a:5]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2](:[#7;a:3]):[c:4]:[#7;a:5].[NH2;D1;+0:6]-[O;D1;H1:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20130109046A1
[#7:4]-[C:5]([O;D1;H0:6])-[C:7]-[N;H0;D3;+0:8](-[c:9])-[C;H0;D3;+0:1](-[#8:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[#8:2])=[O;D1;H0:3].[#7:4]-[C:5]([O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH;D2;+0:8]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US04220647
[#7;a:5]:[c:4]:[c:3]-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[c:3]:[c:4]:[#7;a:5]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20110312945A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:3]:[c:4])-[C;H0;D3;+0:1](-[C:6]>>F-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[#7;a:3]:[c:4]:[#7;a:5].[C:6]-[NH2;D1;+0:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US07582642B2
[#16;a:4]:[c:5](:[#7;a:6])-[NH;D2;+0:7]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3].[#16;a:4]:[c:5](:[#7;a:6])-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US20100274051A1
[C:2]-[CH;D3;+0:1](-[C:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>C-S(=O)(=O)-O-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US08513424B2
[#8:4]-[C:3]([O;D1;H0:5])-[C@@H;D3;+0:1](-[C:2])-[O;H0;D2;+0:6]-[c:7]>>Br-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3](-[#8:4])=[O;D1;H0:5].[OH;D1;+0:6]-[c:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20140073650A1

feasible_reaction_smarts	not_trained_on_but_known	known_from_valid_set	known_from_test_set	num_products_works_with	example_works_with_reaction_id
[#7;a:4]:[c:3](:[c:5]:[#7;a:6]):[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2])-[O;H0;D2;+0:7]-[c:8]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3](:[#7;a:4]):[c:5]:[#7;a:6].[OH;D1;+0:7]-[c:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20090137580A1
[#7;a:4]:[n;H0;D3;+0:5](:[c:6])-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[#7;a:3]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[#7;a:3].[#7;a:4]:[nH;D2;+0:5]:[c:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US08198454B2
[#8:3]-[C:2](=[O;D1;H0:4])-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:6]-[C:5]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2](-[#8:3])=[O;D1;H0:4].[C:5]-[OH;D1;+0:6]	TRUE	FALSE	TRUE	2	US20090264405A1
[C:2]-[CH;D3;+0:1](:[c:3]:[c;D1;H3:3])-[O;H0;D2;+0:5]-[C:4]>>O-[CH;D3;+0:1](:[c:2])-[C;D1;H3:3].[C:4]-[OH;D1;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20120245136A1
[#16;a:5]:[c:4]:[c:2](:[#7;a:3])-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:6]-[c:7]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[c:2](:[#7;a:3]):[c:4]:[#16;a:5].[OH;D1;+0:6]-[c:7]	TRUE	FALSE	TRUE	2	US20120053180A1
[#16;a:4]:[c:3](:[c;H0;D2;+0:1]#[N;H0;D1;+0:2]):[c:5]:[#7;a:6]>>O=[c;H0;D3;+0:1](-[NH2;D1;+0:2])-[c:3](:[#16;a:4]):[c:5]:[#7;a:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20090221604A1
[#8:1]-[C:2](=[O;D1;H0:3])-[C:4].[C@@H;D3;+0:5](:[c:6])-[OH;D1;+0:7]>>[#8:1]-[C:2](=[O;D1;H0:3])-[C:4].[C;H0;D3;+0:5](-[c:6])=[O;H0;D1;+0:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US07094594B2
[#7;a:1]:[c:2](:[c:3]:[#7;a:4])-[CH;D2;+0:5]=[O;H0;D1;+0:6]>>[#7;a:1]:[c:2](:[c:3]:[#7;a:4])-[CH2;D2;+0:5]-[OH;D1;+0:6]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US04371468
[C:2]-[C@@H;D3;+0:1](-[C;D1;H3:3])-[O;H0;D2;+0:5]-[C:4]>>O-[C@@H;D3;+0:1](-[C:2])-[C;D1;H3:3].[C:4]-[OH;D1;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20120245136A1
[C;D1;H3:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C;D1;H3:6])-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>F-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[C;D1;H3:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;D1;H3:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US08299085B2
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[NH2;D1;+0:4]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[NH3;D0;+0:4]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US08053212B1
[#7;a:4]:[c:5]:[c:6].[N;H0;D3;+0:7](-[C:8])-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#7;a:4]:[c:5]:[c:6]-[NH;D2;+0:7]-[C:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US06297375B1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](-[O;H0;D2;+0:8]-[C;D1;H3:7]):[c:3]-[C:4](-[#8:5])=[O;D1;H0:6]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]-[C:4](-[#8:5])=[O;D1;H0:6].[C;D1;H3:7]-[O;-H0;D1:8]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20150025087A1
[#7;a:4]:[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c;H0;D3;+0:5](:[c:6]):[c:7]:[c:8]:[#7;a:9]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]:[#7;a:4].C-C1(-[c;H0;D3;+0:5](:[c:6])):[c:7]:[c:8]:[#7;a:9])-O-	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20120071514A1
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C;D1;H3:6])-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>I-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;D1;H3:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20110275797A1
[#16;a:4]:[c:3](:[c:5]:[#7;a:6])-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:8]-[C:7]>>O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3](:[#16;a:4]):[c:5]:[#7;a:6].[C:7]-[NH2;D1;+0:8]	TRUE	TRUE	TRUE	7	US08501746B2
[#7:2]-[CH2;D2;+0:1]-[c:3]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[#7:2])-[c:3]	TRUE	TRUE	TRUE	7	US05728650
[c:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[n;H0;D3;+0:5](:[c:4]):[c:6]>>F-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[c:4]:[nH;D2;+0:5]:[c:6]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US06069141
[C:5]-[O;H0;D2;+0:6]-[S;H0;D4;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3]=[O;D1;H0:3]>>Cl-[S;H0;D4;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3]=[O;D1;H0:4].[C:5]-[OH;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	TRUE	51	US06159904
[C:3]=[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:6]-[C:5]=[O;D1;H0:4]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]=[C:3].[O;D1;H0:4]=[C:5]-[OH;D1;+0:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US05817693
[#7;a:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4])-[C:6]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[#7;a:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US04220781
[O;D1;H0:2]=[C;H0;D3;+0:1]/([C:3]=[C:4]/[c:5])-[NH;D2;+0:6]-[c:7]>>O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])/([C:3]=[C:4]/[c:5]).[NH2;D1;+0:6]-[c:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20110065734A1
[#7;a:5]:[c:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:7]-[#7:6]>>O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].[#7:6]-[NH2;D1;+0:7]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US20130065876A1
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:6])-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]=[O;D1;H0:3]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US07094779B2
[C:2]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:3])-[NH;D2;+0:5]-[C;D1;H3:4]>>C-O-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[C;D1;H3:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	4	US20070161574A1
[#7;a:4]:[c:5](-[NH;D2;+0:6]-[C;H0;D3;+0:1](-[#8:2])=[O;D1;H0:3]):[c:7]:[#7;a:8]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[#8:2])=[O;D1;H0:3].[#7;a:4]:[c:5](-[NH2;D1;+0:6]):[c:7]:[#7;a:8]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US04105767
[#8:5]-[C:4]([O;D1;H0:6])-[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:2])-[NH;D2;+0:7]-[c:8]>>I-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]-[C:4](-[#8:5])=[O;D1;H0:6].[NH2;D1;+0:7]-[c:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US08327467B2
[NH2;D1;+0:4]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3]>>C-O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3].[NH3;D0;+0:4]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US20130225810A1
[C;D1;H2:4]=[C:3]-[C:2]-[NH2;D1;+0:1]>>C-C(-C)-O-C(=O)-[NH;D2;+0:1]-[C:2]-[C:3]=[C;D1;H2:4]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US09108981B2
[C:2]-[C@@H;D3;+0:1](-[C:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>O-[C@@H;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	4	US20140187554A1
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:6]-[C:5]-[C:4]=[C:3]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]=[C:4]-[C:5]-[OH;D1;+0:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US05387692
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[c:6])-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[c:6]	TRUE	TRUE	TRUE	4	US05736540
[C:2]-[N;H0;D3;+0:3](-[C:4])-[CH3;D1;+0:1]>>I-[CH3;D1;+0:1].[C:2]-[NH;D2;+0:3]-[C:4]	TRUE	TRUE	FALSE	6	US04594347
[#7;a:6]:[c:5]:[c:4].[S;H0;D4;+0:1]([O;D1;H0:2])=[O;D1;H0:3]-[NH;D2;+0:8]-[C:7]>>Cl-[S;H0;D4;+0:1]([O;D1;H0:2])=[O;D1;H0:3]-[c:4]:[c:5]:[#7;a:6].[C:7]-[NH2;D1;+0:8]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US08685986B2
[C:5]-[N;H0;D3;+0:6](-[C:7])-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[C:3]=[C;D1;H2:4]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[C:3]=[C;D1;H2:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US04663409
[NH2;D1;+0:3]-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2].[NH3;D0;+0:3]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20140179715A1
[#7:3]-[C:2]([O;D1;H0:4])-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:5]-[c:6]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2](-[#7:3])=[O;D1;H0:4].[OH;D1;+0:5]-[c:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US06593322B1
[#8;a:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:6](-[c:7])-[C:5]=[O;D1;H0:4]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[#8;a:3].[O;D1;H0:4]=[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[c:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US07935721B2
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:6])-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	TRUE	TRUE	TRUE	25	US20040110754A1
[C:2]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:3])-[N;H0;D3;+0:5](-[C;D1;H3:4])-[c:6]>>O-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[C;D1;H3:4]-[NH;D2;+0:5]-[c:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20040072818A1
[#7;a:4]:[c:5](:[#7;a:6])-[NH;D2;+0:7]-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#7;a:4]:[c:5](:[#7;a:6])-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	FALSE	TRUE	2	US20050043315A1
[C:2]-[C@@H;D3;+0:1](-[C;D1;H3:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>Br-[C@@H;D3;+0:1](-[C:2])-[C;D1;H3:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	5	US20090258917A1
[#8:4]-[C:3]([O;D1;H0:5])-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:6]-[c:7]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[C:3](-[#8:4])=[O;D1;H0:5].[NH2;D1;+0:6]-[c:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20090281074A1
[c:3]:[c;H0;D3;+0:4](:[c:5])-[CH;D2;+0:1]=[O;D1;H0:2]>>C-N(-C)-[CH;D2;+0:1]=[O;D1;H0:2].[c:3]:[cH;D2;+0:4]:[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	7	US05571923
[C:1]-[CH;D3;+0:2](-[OH;D1;+0:3])-[c:4]>>[C:1]-[C;H0;D3;+0:2]([O;H0;D1;+0:3])-[c:4]	TRUE	TRUE	TRUE	19	US20120263706A1
[c:4]:[n;H0;D3;+0:5](:[c:6])-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[c:4]:[nH;D2;+0:5]:[c:6]	TRUE	TRUE	TRUE	7	US09056883B2
[OH;D1;+0:1]-[C:2]=[O;D1;H0:3]>>C-C(-C)-[O;H0;D2;+0:1]-[C:2]=[O;D1;H0:3]	FALSE	FALSE	FALSE	61	US20140309193A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:3]:[c:4]:[#7;a:5])-[NH;D2;+0:9]-[c:8]:[#7;a:7]:[#7;a:6]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[#7;a:3]:[c:4]:[#7;a:5].[#7;a:6]:[#7;a:7]:[c:8]-[NH2;D1;+0:9]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US08486939B2
[#16:1]-[NH;D2;+0:2]-[C;H0;D3;+0:5]([O;D1;H0:6])-[NH;D2;+0:4]-[C:3]>>[#16:1]-[NH2;D1;+0:2].[C:3]-[N;H0;D2;+0:4]=[C;H0;D2;+0:5]=[O;D1;H0:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US05668176
[#7;a:3]:[#7;a:4]:[c:5]-[N;H0;D2;+0:6]=[CH;D2;+0:1]-[c:2]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2].[#7;a:3]:[#7;a:4]:[c:5]-[NH2;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US08916555B2
[C:2]-[CH;D3;+0:1](-[C:3])-[NH;D2;+0:5]-[C;D1;H3:4]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3].[C;D1;H3:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20110172230A1
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[S;H0;D2;+0:4]-[C:3]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]-[SH;D1;+0:4]	FALSE	FALSE	FALSE	3	US20120322788A1
[#8:1]-[CH;D3;+0:2](-[CH2;D2;+0:3]-[C:4])-[O;H0;D2;+0:5]-[c:6]>>[#8:1]-[CH;D2;+0:2]=[CH;D2;+0:3]-[C:4].[OH;D1;+0:5]-[c:6]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US20110224204A1
[C:2]-[CH;D3;+0:1](-[C:3])-[O;H0;D2;+0:5]-[C:4]>>O-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3].[C:4]-[OH;D1;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20120245136A1
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:6])-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	TRUE	TRUE	TRUE	106	US20060211698A1
[#16;a:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:8]-[c:7]:[c:6]:[#7;a:5]>>O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3]:[#16;a:4].[#7;a:5]:[c:6]:[c:7]-[NH2;D1;+0:8]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US04753951
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](-[O;H0;D2;+0:7]-[C;D1;H3:6]):[c:3]:[c:4]:[#7;a:5]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].[C;D1;H3:6]-[OH;D1;+0:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US04092150
[#7;a:5]:[c:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:7]-[C;D1;H3:6]>>O-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].[C;D1;H3:6]-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	TRUE	TRUE	4	US07034045B1
[C:4].[S;H0;D2;+0:5]-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>F-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[C:4]-[S;-H0;D1:5]	FALSE	FALSE	FALSE	3	US20140162985A1
[#7;a:5]:[c:4]:[#7;a:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2])-[N;H0;D3;+0:7](-[C:6])-[c:8]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[#7;a:3]:[c:4]:[#7;a:5].[C:6]-[NH;D2;+0:7]-[c:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20140323488A1
[#7;a:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>O-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[#7;a:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US20110118261A1
[#7;a:6]:[c:5]:[c:4]-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[#7;a:3]>>O-[CH;D3;+0:1](-[C:2]:[#7;a:3])-[c:4]:[c:5]:[#7;a:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20130317065A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[O;-H0;D1:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	14	US20140378487A1
[#7;a:4]:[n;H0;D3;+0:5](:[c:6])-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>I-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[#7;a:4]:[nH;D2;+0:5]:[c:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20110294808A1
[#7;a:5]:[c:4]:[#7;a:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2])-[NH;D2;+0:7]-[C:6]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[#7;a:3]:[c:4]:[#7;a:5].[C:6]-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US04187305
[#7;a:4]:[c:3](-[CH2;D2;+0:1]-[OH;D1;+0:2]):[c:5]:[#7;a:6]>>C-O-[C;H0;D3;+0:1]([O;H0;D1;+0:2])-[c:3](:[#7;a:4]):[c:5]:[#7;a:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US08436035B2
[#16;a:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[NH;D2;+0:5]-[C:4]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2]:[#16;a:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	FALSE	TRUE	2	US20150191439A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:3])-[NH;D2;+0:5]-[C:4]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[#7;a:3]:[C:4]-[NH3;+D1:5]	FALSE	FALSE	FALSE	21	US20110039857A1
[c:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	TRUE	8	US05223539
[C:1]-[CH;D3;+0:2](-[C:3])-[OH;D1;+0:4]>>[C:1]-[C;H0;D3;+0:2](-[C:3])=[O;H0;D1;+0:4]	TRUE	TRUE	TRUE	10	US04925879
[#7;a:4]:[c:3]-[CH2;D2;+0:1]-[OH;D1;+0:2]>>C-O-[C;H0;D3;+0:1]([O;H0;D1;+0:2])-[c:3]:[#7;a:4]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US20080171743A1

feasible_reaction_smarts	not_trained_on_but_known	known_from_valid_set	known_from_test_set	num_products_works_with	example_works_with_reaction_id
[#7;a:5]:[c:4]:[c:3]-[CH2;D2;+0:1]-[OH;D1;+0:2]>>C-O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;H0;D1;+0:2])-[c:3]:[c:4]:[#7;a:5]	TRUE	TRUE	TRUE	4	US07517884B2
[O;D1;H0:7]=[C:6](-[O;D1;H1:8])-[C:5]-[NH;D2;+0:4]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[NH2;D1;+0:4]-[C:5]-[C:6](=[O;D1;H0:7])-[O;D1;H0:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US04694017
[#7;a:5]:[c;H0;D3;+0:4]:([c:6])-[c;H0;D3;+0:1]:([c:2]):[c:3]>>C-C1(-C)-O-B(-[c;H0;D3;+0:1]:([c:2]):[c:3])-[O-C-1(-C)-C-F-C(-F)(-F)=O)(=O)-O-[c;H0;D3;+0:4]:([#7;a:5]):[c:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US08598355B2
[#7;a:4]:[#7;a:5]:[c:6]-[NH;D2;+0:7]-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])>>C-C(=O)-O-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3].[#7;a:4]:[#7;a:5]:[c:6]-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20130252936A1
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:4](-[C:3])-[C:5]>>O=[CH;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]-[NH;D2;+0:4]-[C:5]	TRUE	TRUE	TRUE	25	US20120101082A1
[c:2]:[c;H0;D3;+0:1]:([c:3])-[NH;D2;+0:4]-[c:5]>>F-[c;H0;D3;+0:1]:([c:2]):[c:3].[NH2;D1;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	5	US04504660
[#8;a:5]:[c:4]:[c:2]:([#8;a:3])-[CH2;D2;+0:1]-[n;H0;D3;+0:7]([c:6]):[c:8]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:([#8;a:3]):[c:4]:[#8;a:5].[c:6]:[nH;D2;+0:7]:[c:8]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US05952355
[#7;a:4]:[c:3]-[CH2;D2;+0:1]-[OH;D1;+0:2]>>C-C-O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;H0;D1;+0:2])-[c:3]:[#7;a:4]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20060035870A1
[#16;a:5]:[c:4]:[c:2]:([#7;a:3])-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:7](-[C:6])-[C:8]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:([#7;a:3]):[c:4]:[#16;a:5].[C:6]-[NH;D2;+0:7]-[C:8]	TRUE	FALSE	TRUE	3	US20100215632A1
[#16:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:6])-[c;H0;D3;+0:1]:([c:2]):[c:3]>>I-[c;H0;D3;+0:1]:([c:2]):[c:3].[#16:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20130040930A1
[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[CH;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])-[C;D1;H3:3]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])-[C;D1;H3:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US04565817
[C:4]-[CH;D3;+0:3](-[#7:5]-[C:6]=[O;D1;H0:7])-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:8]:[c:9]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[C@H;D3;+0:3](-[C:4])-[#7:5]-[C:6]=[O;D1;H0:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US04539150
[O;D1;H0:2]=[C;H0;D3;+0:1](-[c:3])-[NH;D2;+0:4]-[c:5]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[NH2;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	TRUE	25	US20020160996A1
[C:4]-[NH;D2;+0:5]:[c;H0;D3;+0:1]:([c:2]):[c:3]>>Br-[c;H0;D3;+0:1]:([c:2]):[c:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	4	US08349836B2
[C:2]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:3])-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4])-[c:6]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[c:6]	FALSE	FALSE	FALSE	11	US20070197512A1
[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]>>C-C-O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	FALSE	3	US07008636B2
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1]:([c:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>F-[c;H0;D3;+0:1]:([#7;a:2]):[c:3].[O;H0;D1:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20060178400A1
[#7;a:5]:[#7;a:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1](-[NH2;D1;+0:6])=[O;D1;H0:2]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]:[#7;a:4]:[#7;a:5].[NH3;D0;+0:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20110301122A1
[C:2]-[S;H0;D3;+0:3](-[C:4])=[O;H0;D1;+0:1]>>O-[OH;D1;+0:1].[C:2]-[S;H0;D2;+0:3]-[C:4]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US04626276
[#7;a:4]:[c:3]:[cH;D2;+0:1]:[#7;a:2]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1]:([#7;a:2]):[c:3]:[#7;a:4]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US20090227799A1
[#7;a:5]:[c:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:9]-[c:8]:[c:7]:[#7;a:6]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].[#7;a:6]:[c:7]:[c:8]-[NH2;D1;+0:9]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20080045537A1
[#8:5]-[C:6](=[O;D1;H0:7])-[C:8]-[N;H0;D3;+0:9](-[C:10])-[S;H0;D4;+0:1](=[O;D1;H0:2])=[O;D1;H0:3]-[c:4]>>Cl-[S;H0;D4;+0:1](=[O;D1;H0:2])=[O;D1;H0:3]-[c:4].[#8:5]-[C:6](=[O;D1;H0:2])	TRUE	TRUE	TRUE	4	US20050113346A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1]:([#7;a:3])-[N;H0;D3;+0:5](-[C;D1;H3:4])-[C;D1;H3:6]>>Br-[c;H0;D3;+0:1]:([#7;a:2]):[#7;a:3].[C;D1;H3:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;D1;H3:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20130072506A1
[#7;a:5]:[#8;a:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1](-[O;D1;H0:2])-[N;H0;D3;+0:7](-[C:6])>>O-[C;H0;D3;+0:1](-[O;D1;H0:2])-[c:3]:[#8;a:4]:[#7;a:5].[C:6]-[NH;D2;+0:7]-[C:8]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20130143892A1
[C:5]=[C:4]\[C:2](=[O;D1;H0:3])-[OH;D1;+0:1]>>C-C(-C)(-C)-[O;H0;D2;+0:1]-[C:2](=[O;D1;H0:3])/[C:4]=[C:5]	TRUE	TRUE	FALSE	3	US20030092712A1
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[NH;D2;+0:4]-[C:3]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]-[NH2;D1;+0:4]	TRUE	FALSE	TRUE	7	US04024273
[#7;a:1]:[c:2]-[N;H0;D3;+0:3](-[C:4])-[C;H0;D3;+0:6](=[O;D1;H0:5])-[NH;D2;+0:7]-[c:8]>>[#7;a:1]:[c:2]-[NH;D2;+0:3]-[C:4].[O;D1;H0:5]=[C;H0;D2;+0:6]=[N;H0;D2;+0:7]-[c:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20090137804A1
[#7;a:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:5]-[O;D1;H1:6]>>C-C-O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]:[#7;a:4].[NH2;D1;+0:5]-[O;D1;H1:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US07368571B2
[#7;a:5]:[c:4]:[c:3]:([c:6])-[#7;a:7]-[C;H0;D3;+0:1](-[O;D1;H0:2])-[N;H0;D3;+0:9](-[C:8])>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]:[c:4]:[#7;a:5]:[c:6]:[#7;a:7].[C:8]-[NH;D2;+0:9]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US200802121097A1
[#7:4]-[C:3]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[N;H0;D3;+0:6](-[C:5])-[C:7]=[O;D1;H0:8]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[C:3]-[#7:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]=[O;D1;H0:8]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US05686424
[#7;a:4]:[n;H0;D3;+0:5]:([c:6])-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]=[C:3]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]=[C:3].[#7;a:4]:[nH;D2;+0:5]:[c:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US200707225349A1
[#7;a:1]:[c:2]-[CH;D3;+0:3](-[OH;D1;+0:4])-[C;H0;D2;+0:6]#[C;D1;H1:5]>>[#7;a:1]:[c:2]-[CH;D2;+0:3]=[O;H0;D1;+0:4].[C;D1;H1:5]#[C;H0;D2;+0:6]-[Mg+]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20150258074A1
[#7:4]-[C:3]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[N;H0;D3;+0:6](-[C:5])-[C:7]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]-[#7:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US20150238558A1
[#7;a:3]:[c:4]:[n;H0;D3;+0:5]:([c:6])-[CH2;D2;+0:1]:[#8:2]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[#8:2].[#7;a:3]:[c:4]:[nH;D2;+0:5]:[c:6]	TRUE	FALSE	TRUE	4	US09073922B2
[#7:3]-[C:4](=[O;D1;H0:5])-[N;H0;D3;+0:6](-[C:7])-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[c:2].[#7:3]-[C:4](=[O;D1;H0:5])-[NH;D2;+0:6]-[C:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US08318949B2
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C;D1;H3:6])-[C;H0;D3;+0:1](-[c:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[c:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;D1;H3:6]	FALSE	FALSE	FALSE	5	US20130253002A1
[#8:3]-[C:2](=[O;D1;H0:4])-[CH2;D2;+0:1]-[S;H0;D2;+0:6]-[C:5]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2](-[#8:3])=[O;D1;H0:4].[C:5]-[SH;D1;+0:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US04886835
[C:2]-[C@H;D3;+0:4](-[C:3])-[N;H0;D2;+0:4]=[#7;+5]=[N;-;D1;H0:6]>>C-S(=O)(=O)-O-[C@H;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3].[N;-;H0;D1:4]=[#7;+5]=[N;-;D1;H0:6]	FALSE	FALSE	FALSE	3	US08889702B2
[#7;a:5]:[c:4]:[c:3]:[c;H0;D3;+0:6]:([c:7])-[c;H0;D3;+0:6]([c:7]):[c:8]>>Br-[c;H0;D3;+0:1]:([c:2]):[c:8]:[c:4]:[#7;a:5].C-C1(-C)-O-B(-[c;H0;D3;+0:6]([c:7]):[c:8])-[O-C-1(-C)-C	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20130178459A1
[#16;a:4]:[c:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[NH;D2;+0:5]-[c:6]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2]:[c:3]:[#16;a:4].[NH2;D1;+0:5]-[c:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20150031686A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](-[NH;D2;+0:7]-[C;D1;H3:6]):[c:3]:[c:4]:[#7;a:5]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1]:([#7;a:2]):[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].[C;D1;H3:6]-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US05998665
[C:2]-[NH;D2;+0:1]-[C:3]=[O;D1;H0:4]>>C-C(-C)(-C)-O-C(=O)-[N;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3]=[O;D1;H0:4]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20050245592A1
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:6])-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[C;D1;H3:3]>>Br-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[C;D1;H3:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	TRUE	FALSE	TRUE	2	US08188301B2
[C:2]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:3])-[NH;D2;+0:4]-[c:5]>>O-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[NH2;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	TRUE	62	US20100087427A1
[#7;a:5]:[c:4]:[c:2]:([#7;a:3])-[CH;D2;+0:1]=[N;H0;D2;+0:6]-[O;D1;H1:7]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2]:([#7;a:3]):[c:4]:[#7;a:5].[NH2;D1;+0:6]-[O;D1;H1:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20130109046A1
[#7;a:6]:[c:5]:[c:3]:([#7;a:4])-[CH2;D2;+0:1]-[OH;D1;+0:2]>>C-O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;H0;D1;+0:2])-[c:3]([#7;a:4]):[c:5]:[#7;a:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US08436035B2
[NH2;D1;+0:4]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]>>C-O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[NH4+;D0:4]	FALSE	FALSE	FALSE	3	US20130225810A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1]:([c:3]:[#7;a:4])-[NH;D2;+0:5]-[c:6]>>Br-[c;H0;D3;+0:1]:([#7;a:2]):[c:3]:[#7;a:4].[NH2;D1;+0:5]-[c:6]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US20150218170A1
[C:2]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:3])-[c:6]>>Br-[C;H0;D3;+0:1](-[C:4])-[c:6]>>Br-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US07820699B2
[C:2]-[C@H;D3;+0:1](-[C:3])-[O;H0;D2;+0:5]-[C:4]>>O-[C@H;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3].[C:4]-[OH;D1;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20120245136A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1]:([c:3])-[O;H0;D2;+0:5]-[C;D1;H3:4]>>F-[c;H0;D3;+0:1]:([#7;a:2]):[c:3].[C;D1;H3:4]-[O;H0;D1:5]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20150232445A1
[#7;a:4]:[c:3]:([c:5]:[#7;a:6])-[c;H0;D3;+0:1]:([#7;a:2])-[N;H0;D3;+0:8](-[C:7])-[C:9]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1]:([#7;a:2]):[c:3]:([#7;a:4]):[c:5]:[#7;a:6].[C:7]-[NH;D2;+0:8]-[C:9]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20060111362A1
[#7;a:4]:[c:3]:([c:5]:[#7;a:6])-[c;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:7]-[c:8]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]:([#7;a:4]):[c:5]:[#7;a:6].[NH2;D1;+0:7]-[c:8]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20140179690A1
[#7;a:4]:[c:5]:[n;H0;D3;+0:6]([c:7])-[c;H0;D3;+0:1]:([#7;a:2]):[c:3]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1]:([#7;a:2]):[c:3].[#7;a:4]:[c:5]:[nH;D2;+0:6]:[c:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20130245000A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1]:([c:3])-[c;H0;D3;+0:4]:([c:5]):[c:6]>>Br-[c;H0;D3;+0:1]:([#7;a:2]):[c:3].Br-[c;H0;D3;+0:4]:([c:5]):[c:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20030105132A1
[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	FALSE	21	US20090275574A1
[#7;a:1]:[c:2]:[c:3]:([#7;a:4])-[CH2;D2;+0:5]-[CH2;D2;+0:6]-[C:7]>>[#7;a:1]:[c:2]:[c:3]:([#7;a:4])-[CH;D2;+0:5]=[CH;D2;+0:6]-[C:7]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US20070249612A1
[#8:4]-[C:3](=[O;D1;H0:5])-[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:6]-[c:7]>>I-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]-[C:3](-[#8:4])=[O;D1;H0:5].[OH;D1;+0:6]-[c:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20100120793A1
[#8:1]-[C:2]-[C;H0;D3;+0:3](-[C:4])=[O;H0;D1;+0:5]>>[#8:1]-[C:2]-[C@H;D3;+0:3](-[C:4])-[OH;D1;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20090270431A1
[#7;a:8]:[c:9]:[c:10]-[NH;D2;+0:11]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[#8:3]-[C:4](-[C;D1;H3:5])(-[C;D1;H3:6])-[C;D1;H3:7]>>C-C(-C)(-C)-O-C(=O)-O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[#8:3]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US20140121206A1
[#8:3]-[C:4](=[O;D1;H0:5])-[C;H0;D3;+0:6](=[CH;D2;+0:1]-[c:2])-[C:7](-[#8:8])=[O;D1;H0:9]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2].[#8:3]-[C:4](=[O;D1;H0:5])-[CH2;D2;+0:6]-[C:7](-[#8:8])=[O;D1;H0:9]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20070179173A1
[#8:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH;D2;+0:8]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[#8:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH2;D1;+0:8]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US08624052B2
[#7;a:4]:[c:3]-[NH;D2;+0:1]-[C:2]>>C-C(-C)(-C)-O-C(=O)-[N;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[c:3]:[#7;a:4]	TRUE	TRUE	TRUE	4	US20150266859A1
[O;D1;H0:2]=[C;H0;D3;+0:1](-[c:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	FALSE	5	US04420630
[#16;a:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[N;H0;D3;+0:6](-[#8:5])-[C:7]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]:[#16;a:4].[#8:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20070155805A1
[C:2]-[CH;D3;+0:1](-[C;D1;H3:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>I-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[C;D1;H3:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	5	US20090111800A1
[#7;a:4]:[c:3]-[C;H0;D2;+0:1]#[N;H0;D1;+0:2]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[NH2;D1;+0:2])-[c:3]:[#7;a:4]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US05527819
[#7;a:4]:[c:5]:[c:6]-[NH;D2;+0:7]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[#7;a:4]:[c:5]:[c:6]-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	TRUE	TRUE	7	US20120184553A1
[#7;a:1]:[c:2]-[CH;D3;+0:3](-[C:4])-[OH;D1;+0:5]>>[#7;a:1]:[c:2]-[C;H0;D3;+0:3](-[C:4])=[O;H0;D1;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US07834019B2
[#7;a:4]:[c:5]:([#7;a:6])-[NH;D2;+0:7]-[C;H0;D3;+0:1]:([c:2]):[c:3]>>Br-[c;H0;D3;+0:1]:([c:2]):[c:3].[#7;a:4]:[c:5]:([#7;a:6])-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US08399674B2
[#7;a:5]:[c:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:7]-[C:6]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].[C:6]-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	TRUE	FALSE	3	US20090075980A1

feasible_reaction_smarts	not_trained_on_but_known	known_from_valid_set	known_from_test_set	num_products_works_with	example_works_with_reaction_id
[#7:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH;D2;+0:8]-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#7:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH2;D1;+0:8]	TRUE	TRUE	TRUE	26	US20020045747A1
[C:4]=[C:3]-[C:2]-[NH2;D1;+0:1]>>C-C(-C)-C(-O)-[NH;D2;+0:1]-[C:2]-[C:3]=[C:4]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US09108981B2
[#16;a:4]:[c:5](:[#7;a:6])-[NH;D2;+0:7]-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#16;a:4]:[c:5](:[#7;a:6])-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US07910613B2
[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US20120149721A1
[#7;a:3]:[c:4]:[c:5]-[O;H0;D2;+0:6]-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[#7;a:3]:[c:4]:[c:5]-[OH;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US09085578B2
[#8:1]-[CH;D3;+0:2](-[CH2;D2;+0:3]-[C:4])-[O;H0;D2;+0:6]-[C:5]>>[#8:1]-[CH;D2;+0:2]=[CH;D2;+0:3]-[C:4].[C:5]-[OH;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	TRUE	7	US20100121091A1
[C:2]-[C@H;D3;+0:1](-[C;D1;H3:3])-[O;H0;D2;+0:6]-[C:5]=[O;D1;H0:4]>>O-[C;H3;D3;+0:1](-[C:2])-[C;D1;H3:3].[O;D1;H0:4]=[C:5]-[OH;D1;+0:6]	FALSE	FALSE	FALSE	5	US20030054510A1
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:6])-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	TRUE	TRUE	TRUE	9	US04029787
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[NH;D2;+0:5]-[C:4]>>F-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	4	US20100069436A1
[#16;a:4]:[c:5]-[NH;D2;+0:6]-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[#16;a:4]:[c:5]-[NH2;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US20100256097A1
[#7;a:3]:[n;H0;D3;+0:4](-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]):[c:5].[#7;a:6]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[c:2].[#7;a:3]:[nH;D2;+0:4]:[c:5]:[#7;a:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20130190330A1
[#7;a:4]:[c:5]-[NH;D2;+0:6]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[#7;a:4]:[c:5]-[NH2;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US05919936
[C;D1;H3:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[C;D1;H3:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US20100160323A1
[#16;a:5]:[c:4]:[c:2](:[#7;a:3])-[CH2;D2;+0:1]-[NH;D2;+0:7]-[C:6]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[c:2](:[#7;a:3]):[c:4]:[#16;a:5].[C:6]-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20150191439A1
[#8:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[N;H0;D3;+0:8](-[c:9])-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#8:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH;D2;+0:8]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US05475106
[#7;a:4]:[#7;a:3]:[c:2]-[OH;D1;+0:1]>>C-O-C-[O;H0;D2;+0:1]-[c:2]:[#7;a:3]:[#7;a:4]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US07368578B2
[#7;a:1]:[#7;a:2]:[c:3]-[CH;D3;+0:4](-[C;D1;H3:5])-[OH;D1;+0:6]>>[#7;a:1]:[#7;a:2]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:4](-[C;D1;H3:5])=[O;H0;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20150203479A1
[C:2]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:3])-[O;H0;D2;+0:5]-[C:4]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[OH;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	13	US20050043353A1
[C;D1;H3:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;H0;D3;+0:1]-[C;D1;H0:2])-[c:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[C;D1;H3:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US08841289B2
[O;D1;H0:2]=[C;H0;D3;+0:1](-[c:3])-[NH;D2;+0:4]-[#7:5]-[C:6]=[O;D1;H0:7]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[NH2;D1;+0:4]-[#7:5]-[C:6]=[O;D1;H0:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US07094902B2
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:3])-[O;H0;D2;+0:5]-[C:4]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[#7;a:3].[C:4]-[OH;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	8	US08044070B2
[C:2]-[C;H0;D2;+0:1]#[N;H0;D1;+0:3]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[NH2;D1;+0:3]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US08026257B2
[#7;a:7]:[c:6]:[c;H0;D3;+0:4](:[c:5])-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>I-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].O-B(-O)-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]:[#7;a:7]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US08642585B2
[#7;a:4]:[n;H0;D3;+0:5](:[c:6])-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[#7;a:4]:[nH;D2;+0:5]:[c:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20090118280A1
[#7;a:4]:[#7;a:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:5]-[c:6]>>O-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[#7;a:3]:[#7;a:4].[OH;D1;+0:5]-[c:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20150018547A1
[#7;a:5]:[c:6]:[c:7]-[NH;D2;+0:8]-[S;H0;D4;+0:1](-[C;D1;H3:2])=(=[O;D1;H0:3])=[O;D1;H0:4]>>Cl-[S;H0;D4;+0:1](-[C;D1;H3:2])=(=[O;D1;H0:3])=[O;D1;H0:4].[#7;a:5]:[c:6]:[c:7]-[NH2	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20140336224A1
[C:2]-[O;H0;D2;+0:3]-[CH2;D2;+0:1]-[c;H0;D3;+0:5](:[c:4]):[c:6]>>O=[CH2;D1;+0:1].[C:2]-[OH;D1;+0:3].[c:4]:[cH;D2;+0:5]:[c:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US05607939
[#7;a:4]:[c:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[n;H0;D3;+0:6](:[#7;a:5]):[c:7]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[c:3]:[#7;a:4].[#7;a:5]:[nH;D2;+0:6]:[c:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US07179823B1
[C:4]#[C:5]-[C:6]:[O;H0;D2;+0:7]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[C:4]#[C:5]-[C:6]-[OH;D1;+0:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20080188521A1
[#16:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#16:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	FALSE	TRUE	2	US20040034034A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[C;H0;D2;+0:5]#[C:4]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[C:4]#[CH;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	6	US20130178631A1
[#7;a:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[#7;a:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US20100168173A1
[#7;a:5]:[c;H0;D3;+0:4](:[c:6])-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].Br-[c;H0;D3;+0:4](:[#7;a:5]):[c:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20030105132A1
[#7;a:4]:[#7;a:5]:[c:6]-[NH;D2;+0:7]-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[#7;a:4]:[#7;a:5]:[c:6]-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20140228358A1
[#7;a:4]:[c:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:6](-[C:5])-[C:7]>>C-S(=O)(=O)-O-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[c:3]:[#7;a:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US07211577B2
[#7;a:4]:[c:3](:[c:5]:[#7;a:6])-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2])-[NH2;D1;+0:7]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3](:[#7;a:4]):[c:5]:[#7;a:6].[NH3;D0;+0:7]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US08088790B2
[#7;a:5]:[c:4]:[c:3]-[C;H0;D2;+0:1]#[N;H0;D1;+0:2]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[NH2;D1;+0:2])-[c:3]:[c:4]:[#7;a:5]	TRUE	TRUE	TRUE	4	US05616601
[C:2]-[CH;D3;+0:1](-[c:3])-[NH;D2;+0:4]-[c:5]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[c:3].[NH2;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	FALSE	TRUE	2	US20050171131A1
[#7:2]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:3])-[NH;D2;+0:7]-[c:6]:[#7;a:5]:[#8;a:4]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[#7:2])=[O;D1;H0:3].[#8;a:4]:[#7;a:5]:[c:6]-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US04183856
[#7;a:4]:[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2])-[NH;D2;+0:5]-[c:6]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]:[#7;a:4].[NH2;D1;+0:5]-[c:6]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US20150218170A1
[#7;a:4]:[c:3]-[CH2;D2;+0:1]-[#7:2]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[#7:2])-[c:3]:[#7;a:4]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20110144146A1
[#7;a:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:6]-[C:5]>>C-O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]:[#7;a:4].[C:5]-[NH2;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US20150038528A1
[#7;a:6]:[c:5]:[c:3](:[#7;a:4])-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:8]-[C:7]>>C-O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3](:[#7;a:4]):[c:5]:[#7;a:6].[C:7]-[NH2;D1;+0:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US06359145B1
[C:1]-[CH;D3;+0:2](-[C:3])-[CH2;D2;+0:4]-[C:5]>>[C:1]-[C;H0;D3;+0:2](-[C:3])=[CH;D2;+0:4]-[C:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US06255276B1
[#7;a:1]:[c:2]-[CH2;D2;+0:3]-[CH2;D2;+0:4]-[c:5]>>[#7;a:1]:[c:2]-[C;H0;D2;+0:3]#[C;H0;D2;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20140080798A1
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:4]-[C:3]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]-[OH;D1;+0:4]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US05212173
[#16;a:5]:[c:4]:[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:2])-[n;H0;D3;+0:7](:[c:6]):[c:8]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]:[c:4]:[#16;a:5].[c:6]:[nH;D2;+0:7]:[c:8]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20140163012A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[O;H0;D2;+0:5]-[C:4]>>F-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[C:4]-[OH;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US20150232445A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[O;-H0;D1:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US20110039821A1
[#7;a:4]:[c:5]:[c:6](:[#7;a:7])-[NH;D2;+0:8]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[#7;a:4]:[c:5]:[c:6](:[#7;a:7])-[NH2;D1;+0:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20100004222A1
[#7:3]-[C:2](=[O;D1;H0:4])-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:6]-[C:5]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2](-[#7:3])=[O;D1;H0:4].[C:5]-[OH;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US20150005305A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3]:[c:4]:[#7;a:5])-[NH;D2;+0:7]-[C;D1;H3:6]>>F-C(-F)(-F)-S(=O)(=O)-O-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].[C;D1;H3:6]-[NH2;D1;+0:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20010027196A1
[#7;a:4]:[c:3](:[c:5]:[#7;a:6])-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2])-[O;H0;D2;+0:8]-[C:7]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3](:[#7;a:4]):[c:5]:[#7;a:6].[C:7]-[OH;D1;+0:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US04698348
[#7:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH;D2;+0:8]-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[C:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1]([O;D1;H0:2])-[C:3].[#7:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH2;D1;+0:8]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US05461049
[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH3+;D1:5]	FALSE	FALSE	FALSE	102	US20100249066A1
[C:1]-[C@H;D3;+0:2](-[CH3;D1;+0:3])-[C:4]>>[C:1]-[C;H0;D3;+0:2](-[C;D1;H3:3])=[CH2;D1;+0:4]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20080004309A1
[#7:5]-[C:6](=[O;D1;H0:7])-[C:8]-[NH;D2;+0:9]-[S;H0;D4;+0:1](=[O;D1;H0:2])=[O;D1;H0:3])-[c:4]>>Cl-[S;H0;D4;+0:1](=[O;D1;H0:2])=[O;D1;H0:3])-[c:4].[#7:5]-[C:6](=[O;D1;H0:7])-[C:8]-[NH;D2;+0:9]-[S;H0;D4;+0:1](=[O;D1;H0:2])=[O;D1;H0:3])-[c:4]>>Cl-[S;H0;D4;+0:1](=[O;D1;H0:2])=[O;D1;H0:3])-[c:4]:[C:5](-[#8:6])	TRUE	FALSE	FALSE	1	US20080306045A1
[#16;a:5]:[c:6](:[#7;a:7])-[NH;D2;+0:8]-[S;H0;D4;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:4]>>Cl-[S;H0;D4;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:4]:[C:5](-[#8:6])	TRUE	TRUE	TRUE	8	US07132436B2
[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	109	US05972937
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:3]:[c:4]:[#7;a:5])-[N;H0;D3;+0:7](-[C:6])-[C:8]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[#7;a:3]:[c:4]:[#7;a:5].[C:6]-[NH;D2;+0:7]-[C:8]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20140179662A1
[#7;a:4]:[c:5]:[c:6](:[#7;a:7])-[NH;D2;+0:8]-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#7;a:4]:[c:5]:[c:6](:[#7;a:7])-[NH2;D1;+0:8]	FALSE	FALSE	FALSE	3	US20130040949A1
[C:2]-[C@H;D3;+0:1](-[C:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>O-[C@@H;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	4	US20140187554A1
[#7;a:4]:[c:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:6](-[C:5])-[C:7]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[c:3]:[#7;a:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US06376491B1
[C:3]-[O;H0;D2;+0:4]-[CH2;D2;+0:1]-[C;D1;H3:2]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C;D1;H3:2].[C:3]-[OH;D1;+0:4]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20040138248A1
[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:3]-[c:4]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[c:2].[OH;D1;+0:3]-[c:4]	TRUE	TRUE	TRUE	38	US20150252008A1
[#7;a:4]:[c:5]-[NH;D2;+0:6]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[#7;a:4]:[c:5]-[NH2;D1;+0:6]	TRUE	FALSE	TRUE	2	US04753933
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20110039821A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[S;H0;D2;+0:5]-[C:4]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[C:4]-[S;-H0;D1:5]	FALSE	FALSE	FALSE	3	US04490380
[C:2]-[C@H;D3;+0:1](-[C;D1;H3:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>O-[C@@H;D3;+0:1](-[C:2])-[C;D1;H3:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20140187554A1
[#16;a:3]:[c:4]:[c:5](:[#7;a:6])-[NH;D2;+0:7]-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2].[#16;a:3]:[c:4]:[c:5](:[#7;a:6])-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20030229089A1

feasible_reaction_smarts	not_trained_on_but_known	known_from_valid_set	known_from_test_set	num_products_works_with	example_works_with_reaction_id
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4]=[O;D1;H0:3])-[C:6]=[O;D1;H0:7]>>O-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[O;D1;H0:3]=[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]=[O;D1;H0:7]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US20110212963A1
[#7:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[N;H0;D3;+0:7](-[C:8])-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>I-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[#7:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[NH;D2;+0:7]-[C:8]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20130210769A1
[C:4]=[C:3]-[C:2]-[OH;D1;+0:1]>>C-C(-C)(-C)-[Si](-C)(-C)-[O;H0;D2;+0:1]-[C:2]-[C:3]=[C:4]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US05436369
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:4](-[C;D1;H3:3])-[C;D1;H3:5]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C;D1;H3:3]-[NH;D2;+0:4]-[C;D1;H3:5]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US20060264431A1
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:3]-[c:4]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[O;-;H0;D1:3]-[c:4]	FALSE	FALSE	FALSE	68	US20090012055A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](-[NH2;D1;+0:4]):[c:3]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[NH4+;D0:4]	TRUE	FALSE	TRUE	2	US08053212B1
[c:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]>>F-C(-F)(-F)-S(=O)(=O)-O-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].O-B(-O)-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]	TRUE	TRUE	TRUE	6	US07923573B2
[#7;a:3]:[n;H0;D3;+0:4](:[c:5])-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[c:2].[#7;a:3]:[nH;D2;+0:4]:[c:5]	TRUE	TRUE	TRUE	7	US07968570B2
[C:1]-[NH;D2;+0:2]-[CH;D3;+0:3](-[c:4])-[c:5]>>[C:1]-[N;H0;D2;+0:2]=[C;H0;D3;+0:3](-[c:4])-[c:5]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20040192685A1
[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[n;H0;D3;+0:4](:[c:3]):[c:5]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[c:2].[c:3]:[nH;D2;+0:4]:[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	3	US20020161025A1
[#7;a:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:5]-[c:6]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]:[#7;a:4].[NH2;D1;+0:5]-[c:6]	TRUE	TRUE	TRUE	8	US08304557B2
[#8:3]-[C:2](=[O;D1;H0:4])-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:5]-[c:6]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2](-[#8:3])=[O;D1;H0:4].[OH;D1;+0:5]-[c:6]	TRUE	TRUE	TRUE	23	US06337305B1
[C:3]=[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4])-[C;D1;H3:6]>>O=[CH;D2;+0:1]-[C:2]=[C:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;D1;H3:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20100234351A1
[#7;a:1]:[c:2]-[CH;D3;+0:3](-[OH;D1;+0:4])-[CH2;D2;+0:6]-[C:5]>>[#7;a:1]:[c:2]-[CH;D2;+0:3]=[O;H0;D1;+0:4].[C:5]-[CH2;D2;+0:6]-[Mg+]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20130085164A1
[#8:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[N;H0;D3;+0:7](-[C:8])-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[#8:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[NH;D2;+0:7]-[C:8]	TRUE	FALSE	TRUE	2	US20110263571A1
[C:2]-[CH;D3;+0:1](-[C;D1;H3:3])-[NH;D2;+0:5]-[C:4]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[C;D1;H3:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	5	US04588749
[#7;a:3]:[#7;a:4]:[c:5]-[NH;D2;+0:6]-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>O=[CH;D2;+0:1]-[C:2].[#7;a:3]:[#7;a:4]:[c:5]-[NH2;D1;+0:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US07626030B2
[#16:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3]>>C-C(=O)-O-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3].[#16:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20030191323A1
[C:4]-[NH;D2;+0:5]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US08288413B2
[#7;a:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:6]-[C:5]>>C-C-O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]:[#7;a:4].[C:5]-[NH2;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US07491819B1
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3])-[c:6]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[c:6]	FALSE	FALSE	FALSE	4	US05736540
[#7;a:8]:[c:7]:[c:6]:[c;H0;D3;+0:4](:[c:5])-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].C-C1(-C)-O-B(-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]:[c:7]:[#7;a:8])-[O-C-1(-C)-C	TRUE	TRUE	TRUE	3	US20100098634A1
[#7;a:5]:[c:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1](-[NH2;D1;+0:6])=[O;D1;H0:2]>>C-O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].[NH3;D0;+0:6]	TRUE	FALSE	TRUE	2	US20130190332A1
[c:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[NH;D2;+0:4]:[c:5]>>I-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[NH2;D1;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US06528528B2
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:4](-[C:3])-[C:5]=[O;D1;H0:6]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]-[NH;D2;+0:4]-[C:5]=[O;D1;H0:6]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US20100056524A1
[#7;a:4]:[n;H0;D3;+0:5](:[c:6])-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3]>>C-C(=O)-O-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3].[#7;a:4]:[nH;D2;+0:5]:[c:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20120283297A1
[#8:1]-[C:2](=[O;D1;H0:3])-[CH;D3;+0:4](-[C:5])-[CH2;D2;+0:6]-[c:7]>>[#8:1]-[C:2](=[O;D1;H0:3])-[C;H0;D3;+0:4](-[C:5])=[CH;D2;+0:6]-[c:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US07674825B2
[C:4]-[O;H0;D2;+0:5]-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[OH;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	13	US20050043353A1
[c:4]-[NH;D2;+0:3]-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[c:2].[NH2;D1;+0:3]-[c:4]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US04328244
[#7;a:4]:[c:3](:[c:5]:[#7;a:6])-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:8]-[#7:7]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3](:[#7;a:4]):[c:5]:[#7;a:6].[#7:7]-[NH2;D1;+0:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20130109665A1
[#7:4]-[C:3](=[O;D1;H0:5])-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[N;H0;D2;+0:6]=[#7;+7]=[N;-;D1;H0:8]>>Br-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3](-[#7:4])=[O;D1;H0:5].[N;-;H0;D1:6]=[#7;+7]=[N;-;D1;H0:8	TRUE	FALSE	TRUE	1	US05705456
[#8:2]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:3])-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4])-[#7:6]=[C:7]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[#8:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[#7:6]=[C:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US04983755
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D2;+0:3]=[#7;+4]=[N;-;D1;H0:5]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[N;-;H0;D1:3]=[#7;+4]=[N;-;D1;H0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	4	US04806685
[#7:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH;D2;+0:8]:[c;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#7:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH2;D1;+0:8]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US05461049
[C:4]=[C:5]-[C:6](=[O;D1;H0:7])-[O;H0;D2;+0:8]-[C@H;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])-[C;D1;H3:3]>>O-[C@H;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])-[C;D1;H3:3].[C:4]=[C:5]-[C:6](=[O;D1;H0:7])-[OH;D1;	FALSE	FALSE	FALSE	1	US08097758B2
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:3])-[NH;D2;+0:5]-[C;D1;H3:4]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[#7;a:3].[C;D1;H3:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US05110818
[#7;a:1]:[c:2]:[c:3]-[CH2;D2;+0:4]-[OH;D1;+0:5]>>[#7;a:1]:[c:2]:[c:3]-[CH;D2;+0:4]=[O;H0;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	6	US20050187266A1
[C:5]-[N;H0;D3;+0:6](-[C:7])-[S;H0;D4;+0:1](=[O;D1;H0:2])=[O;D1;H0:3](-[c:4])>>Cl-[S;H0;D4;+0:1](=[O;D1;H0:2])=[O;D1;H0:3](-[c:4]).[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]	TRUE	TRUE	TRUE	16	US06498172B1
[#7;a:4]:[c:5]:[c:6]-[NH;D2;+0:7]:[c;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#7;a:4]:[c:5]:[c:6]-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US200902364425A1
[C:3]-[C;H0;D4;+0:4](-[C:5])(-[OH;D1;+0:6])-[C;H0;D2;+0:2]#[C;D1;H1:1]>>[C;D1;H1:1]#[C;H0;D2;+0:2]-[Mg+].[C:3]-[C;H0;D3;+0:4](-[C:5])=[O;H0;D1;+0:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20100292279A1
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:6]-[C:7]#[C;D1;H1:8])-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]-[C:7]#[C;D1;H1:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US07625908B2
[O;D1;H0:7]=[C:6](-[O;D1;H1:8])-[C:5]-[NH;D2;+0:4]-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[NH2;D1;+0:4]-[C:5]-[C:6](=[O;D1;H0:7])-[O;D1;H1:8]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20140058098A1
[#8:3]-[C:4](=[O;D1;H0:5])-[C:6]-[NH;D2;+0:7]-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[#8:3]-[C:4](=[O;D1;H0:5])-[C:6]-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US07622471B2
[O;D1;H0:1]=[C:2]-[CH2;D2;+0:3]-[CH2;D2;+0:4]-[c:5]>>[O;D1;H0:1]=[C:2]/[CH;D2;+0:3]=[CH;D2;+0:4]/[c:5]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20070232682A1
[#7;a:5]:[c;H0;D3;+0:4](:[c:6])-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>C-C1(-C)-O-B(-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3])-[O-C-1(-C)-C.Cl-[c;H0;D3;+0:4](:[#7;a:5]):[c:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US08575204B2
[C:2]-[C@H;D3;+0:1](-[C:3])-[NH;D2;+0:4]-[c:5]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3].[NH2;D1;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	7	US20120309771A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](-[NH;D2;+0:7]-[c:8]):[c:3]-[C:4](=[O;D1;H0:5])-[O;D1;H1:6]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]-[C:4](=[O;D1;H0:5])-[O;D1;H1:6].[NH2;D1;+0:7]-[c:8]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20120245359A1
[C:3]=[C:2]/[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]=[C:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	4	US06703392B2
[#7;a:1]:[c:2](:[#7;a:3])-[CH;D2;+0:4]=[O;H0;D1;+0:5]>>[#7;a:1]:[c:2](:[#7;a:3])-[CH2;D2;+0:4]-[OH;D1;+0:5]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20150239900A1
[CH3;D1;+0:1]-[CH2;D2;+0:2]-[c:3]>>[CH2;D1;+0:1]=[CH;D2;+0:2]-[c:3]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US20050014812A1
[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>F-C(-F)(-F)-S(=O)(=O)-O-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US08022062B2
[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[NH;D2;+0:3]-[c:4]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[c:2].[NH2;D1;+0:3]-[c:4]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US08476286B2
[F;D1;H0:1]-[C:2](-[F;D1;H0:3])(-[F;D1;H0:4])-[C;H0;D3;+0:5](=[O;H0;D1;+0:6])-[c:7]>>[F;D1;H0:1]-[C:2](-[F;D1;H0:3])(-[F;D1;H0:4])-[CH;D3;+0:5](-[OH;D1;+0:6])-[c:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US06380218B1
[C;D1;H3:2]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:3])-[NH;D2;+0:4]-[c:5]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3].[NH2;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	TRUE	7	US20070010511A1
[#7;a:4]:[n;H0;D3;+0:5](:[c:6])-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]>>F-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[#7;a:4]:[nH;D2;+0:5]:[c:6]	TRUE	FALSE	TRUE	2	US20150239847A1
[#7;a:1]:[c:2]/[C;H0;D3;+0:3](-[C:4])=[O;H0;D1;+0:5]>>[#7;a:1]:[c:2]-[CH;D3;+0:3](-[C:4])-[OH;D1;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	3	US20090318493A1
[#7;a:3]:[c:4]:[n;H0;D3;+0:5](:[c:6])-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[#7;a:3]:[c:4]:[nH;D2;+0:5]:[c:6]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US07727988B2
[#7;a:4]:[c:3](-[CH2;D2;+0:1]-[OH;D1;+0:2]):[c:5]:[#7;a:6]>>C-C-O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;H0;D1;+0:2])-[c:3](:[#7;a:4]):[c:5]:[#7;a:6]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20060014746A1
[#7;a:5]:[c:4]:[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:2])-[c;H0;D3;+0:6](:[c:7]):[c:8]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].Br-[c;H0;D3;+0:6](:[c:7]):[c:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20150183799A1
[#7;a:8]:[c:7]:[c:6]:[c;H0;D3;+0:4](:[#7;a:5])-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>C-C1(-C)-O-B(-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3])-[O-C-1(-C)-C.Cl-[c;H0;D3;+0:4](:[#7;a:5]):[c:6]:[c:7]:[#7;a:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US08362236B2
[#7;a:3]:[c:4]-[O;H0;D2;+0:5]-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>I-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[#7;a:3]:[c:4]-[OH;D1;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US04880817
[#8:1]-[C:2](=[O;D1;H0:3])-[CH2;D2;+0:4]-[CH;D3;+0:5](-[C:6])-[C:7]>>[#8:1]-[C:2](=[O;D1;H0:3])-[CH;D2;+0:4]=[C;H0;D3;+0:5](-[C:6])-[C:7]	TRUE	TRUE	TRUE	4	US07795283B2
[#8:3]-[C:4](=[O;D1;H0:5])-[C;H0;D3;+0:6](-[C:7]#[N;D1;H0:8])=[CH;D2;+0:1]-[c:2]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2].[#8:3]-[C:4](=[O;D1;H0:5])-[CH2;D2;+0:6]-[C:7]#[N;D1;H0:8]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US07390916B2
[#7;a:4]:[c:4]:[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2])-[c;H0;D3;+0:5](:[c:6]):[c:7]:[#7;a:4].C-C1(-C)-O-B(-[c;H0;D3;+0:5](:[c:6]):[c:7])-[O-C-1(-C)-C	TRUE	FALSE	TRUE	5	US20110263584A1
[C:2]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:3])-[N;H0;D3;+0:6](-[c:7])-[C:5]=[O;D1;H0:4]>>O-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[O;D1;H0:4]=[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[c:7]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US07196085B2
[#7;a:3]:[c:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:6]=[O;D1;H0:7])-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[c:2].[#7;a:3]:[c:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]=[O;D1;H0:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US05210092
[O;D1;H0:2]=[C;H0;D3;+0:1](-[c:3])-[NH;D2;+0:4]-[c:5]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[NH2;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	TRUE	44	US20120264750A1
[#8:3]-[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]-[#8:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US20110151258A1
[C:3]-[N;H0;D3;+0:4](-[c:5])-[CH2;D2;+0:1]-[C;D1;H3:2]>>I-[CH2;D2;+0:1]-[C;D1;H3:2].[C:3]-[NH;D2;+0:4]-[c:5]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US08163952B2
[C:1]-[C;H0;D3;+0:2](-[C:3])=[O;H0;D1;+0:4]>>[C:1]-[CH;D3;+0:2](-[C:3])-[OH;D1;+0:4]	TRUE	TRUE	TRUE	11	US05463118
[C:2]-[CH;D3;+0:1](-[C:3])-[NH;D2;+0:5]-[C:4]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	21	US20090275574A1

feasible_reaction_smarts	not_trained_on_but_known	known_from_valid_set	known_from_test_set	num_products_works_with	example_works_with_reaction_id
[#8:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[N;H0;D3;+0:8](-[C:9])-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[C:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[C:3].[#8:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH;D2;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US04743616
[#7;a:3]:[c:4]-[NH;D2;+0:5]-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>O=[CH;D2;+0:1]-[C:2].[#7;a:3]:[c:4]-[NH2;D1;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US07244763B2
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[NH;D2;+0:3]-[c:4]>>O-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[NH2;D1;+0:3]-[c:4]	FALSE	FALSE	FALSE	1	USRE030199
[#7:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH;D2;+0:8]-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>C-C(=O)-O-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#7:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH2;D1;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20090221555A1
[#7:5]-[C:4](=[O;D1;H0:6])-[C:3]-[NH;D2;+0:1]-[C:2]>>C-C(-C)-O-C(=O)-[N;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3]-[C:4](-[#7:5])=[O;D1;H0:6]	TRUE	TRUE	TRUE	23	US07659245B2
[NH2;D1;+0:4]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[NH4;D0:4]	FALSE	FALSE	FALSE	3	US04165231
[#7:1]-[C:2]-[C;H0;D3;+0:3](-[C:4])=[O;H0;D1;+0:5]>>[#7:1]-[C:2]-[C@@H;D3;+0:3](-[C:4])-[OH;D1;+0:5]	TRUE	FALSE	TRUE	5	US06235731B1
[#16;a:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D2;+0:4]=[#7;+5]=[N;-;D1;H0:6]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[#16;a:3].[N;-;H0;D1:4]=[#7;+5]=[N;-;D1;H0:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US06541467B1
[C:3]=[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]=[C:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	4	US06703392B2
[#7;a:4]:[c:3]:[c:2](-[OH;D1;+0:1]):[c:5]:[#7;a:6]>>C-[O;H0;D2;+0:1]-[c:2](:[c:3]:[#7;a:4]):[c:5]:[#7;a:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20120059014A1
[#7;a:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[N;H0;D3;+0:6](-[C:5])-[c:7]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]:[#7;a:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[c:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20110021500A1
[C:3]=[C:4]\[C:5](=[O;D1;H0:6])-[O;H0;D2;+0:7]-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]=[C:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[OH;D1;+0:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US07368593B1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](-[NH;D2;+0:6]-[C:5]):[c:3]:[#7;a:4]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]:[#7;a:4].[C:5]-[NH2;D1;+0:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US07122550B2
[C;D1;H3:2]-[CH;D3;+0:1](-[C;D1;H3:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>I-[CH;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])-[C;D1;H3:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US20090111800A1
[#7;a:4]:[c:3]:[c:2]/[CH;D2;+0:1]=[C;H0;D3;+0:6](\[C:5])-[C:7]=[O;D1;H0:8]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2]:[c:3]:[#7;a:4].[C:5]-[CH2;D2;+0:6]-[C:7]=[O;D1;H0:8]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20150072980A1
[#7;a:5]:[#7;a:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[N;H0;D3;+0:7](-[#8:6])-[C;D1;H3:8]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]:[#7;a:4]:[#7;a:5].[#8:6]-[NH;D2;+0:7]-[C;D1;H3:8]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20120184540A1
[#7:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[N;H0;D3;+0:8](-[C:9])-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#7:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH;D2;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	10	US20130217665A1
[#16;a:4]:[c:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:6](-[C:5])-[C:7]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[c:3]:[#16;a:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US06140351
[#7;a:4]:[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:2])-[C;H0;D2;+0:5]#[N;D1;H0:6]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](-[C:2]):[c:3]:[#7;a:4].[C;-;H0;D1:5]#[N;D1;H0:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20150005279A1
[#16;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[#16;a:2]):[c:3]-C-Cl(-C)-O-B(-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6])-[O-C-1(-C)-C	TRUE	TRUE	TRUE	3	US20070111988A1
[#7;a:3]:[c:4]:[c:5](-[O;H0;D2;+0:6]-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]):[c:7]:[#7;a:8]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[#7;a:3]:[c:4]:[c:5](-[OH;D1;+0:6]):[c:7]:[#7;a:8]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US07491819B1
[#7;a:4]:[c:5]-[N;H0;D3;+0:6](-[C:7])-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#7;a:4]:[c:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US20100168185A1
[#7;a:4]:[c:5](-[NH;D2;+0:6]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]):[c:7]:[#7;a:8]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]:[#7;a:4]:[c:5](-[NH2;D1;+0:6]):[c:7]:[#7;a:8]	FALSE	FALSE	FALSE	4	US20030078415A1
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:6])-[C;H0;D3;+0:1](-[O;D1;H0:2])-[c:3]>>O-[O;D1;H0:2])-[C:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	FALSE	FALSE	FALSE	106	US20060211698A1
[#7;a:4]:[#7;a:5]:[c:6]-[NH;D2;+0:7]-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[#7;a:4]:[#7;a:5]:[c:6]-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US08420642B2
[c:5]-[NH;D2;+0:4]-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>I-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[NH2;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US06528528B2
[#7;a:3]:[c:4]:[c:5](-[O;H0;D2;+0:6]-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]):[c:7]:[#7;a:8]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[#7;a:3]:[c:4]:[c:5](-[OH;D1;+0:6]):[c:7]:[#7;a:8]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US20070032485A1
[C:2]-[CH;D3;+0:1](-[C:3])-[NH2;D1;+0:4]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3].[NH3;D0;+0:4]	FALSE	FALSE	FALSE	3	US20050065164A1
[C:2]-[S;H0;D4;+0:1](=[O;D1;H0:3])=[O;D1;H0:4])-[O;H0;D2;+0:5]([S;H0;D4;+0:1](-[C:2]))(=[O;D1;H0:3])=[O;D1;H0:4].[OH;D1;+0:5]-[c:6]	FALSE	FALSE	FALSE	3	US20070185079A1
[#7;a:6]:[c:5]-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[c:3]:[#7;a:4]>>O-[CH;D3;+0:1](-[C:2]:[c:3]:[#7;a:4])-[c:5]:[#7;a:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20130317065A1
[#8:2]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:3])-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4])-[C:6]-[C:7](=[O;D1;H0:8])-[O;D1;H1:9]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[#8:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]-[C:7](=[O;D1;H0:8])	TRUE	TRUE	TRUE	3	US04703036
[#7;a:5]:[c:6]:[c:7]-[NH;D2;+0:8]-[S;H0;D4;+0:1](-[C:2])(=[O;D1;H0:3])=[O;D1;H0:4]>>Cl-[S;H0;D4;+0:1](-[C:2])(=[O;D1;H0:3])=[O;D1;H0:4].[#7;a:5]:[c:6]:[c:7]-[NH2;D1;+0:8]	TRUE	FALSE	TRUE	2	US20140336224A1
[N;D1;H0:5]#[C;H0;D2;+0:4]-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[Cu]-[C;H0;D2;+0:4]#[N;D1;H0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	4	US04374748
[#7;a:4]:[#7;a:5]:[c:6](:[#7;a:7])-[NH;D2;+0:8]-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2]):[O;D1;H0:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#7;a:4]:[#7;a:5]:[c:6](:[#7;a:7])-[NH2;D1;+0:8]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US08372874B2
[#7;a:3]:[c:4](:[#7;a:5])-[S;H0;D2;+0:6]-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[c:2].[#7;a:3]:[c:4](:[#7;a:5])-[SH;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	FALSE	3	US08269002B2
[#8:4]-[C:3](=[O;D1;H0:5])-[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:7](-[C:6])-[C:8]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]-[C:3](-[#8:4])=[O;D1;H0:5].[C:6]-[NH;D2;+0:7]-[C:8]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20100273771A1
[C:5]-[O;H0;D2;+0:6]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[C:3]=[C;D1;H2:4]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[C:3]=[C;D1;H2:4].[C:5]-[OH;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US20020192594A1
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:6])-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]#[C:3]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]#[C:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US08361962B2
[O;D1;H0:2]=[C;H0;D3;+0:1](-[c:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[C:5]=[O;D1;H0:6]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[O;D1;H0:4]=[C:5]-[OH;D1;+0:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20040048916A1
[C:2]-[C@@H;D3;+0:1](-[C:3])-[NH;D2;+0:4]-[c:5]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3].[NH2;D1;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	7	US20120309771A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](-[NH;D2;+0:5]-[C:4]):[c:3]>>F-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	4	US20100069436A1
[#7:6]-[C:7](=[O;D1;H0:8])-[C:9]-[NH;D2;+0:10]-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3](-[#8:4])=[O;D1;H0:5]>>Br-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3](-[#8:4])=[O;D1;H0:5].[#7:6]-[C:7](=[O;D1;H0:8])	TRUE	FALSE	TRUE	2	US04699905
[C:2]-[C;H0;D3;+0:1](-[NH2;D1;+0:4])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[NH4;D0:4]	TRUE	TRUE	FALSE	3	US20020165264A1
[C:2]-[C@@H;D3;+0:1](-[C:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>C-S(=O)(=O)-O-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	3	US08513424B2
[C;D1;H2:3]=[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:6]-[C:5]=[O;D1;H0:4]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]=[C;D1;H2:3].[O;D1;H0:4]=[C:5]-[OH;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US05817693
[#7;a:4]:[c:5]:[c:6]-[NH;D2;+0:7]-[c;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#7;a:4]:[c:5]:[c:6]-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US20130029991A1
[C:5]-[N;H0;D3;+0:6](-[C:7])-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[C:3]=[C:4]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[C:3]=[C:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]	TRUE	FALSE	TRUE	3	US04663409
[C:3]=[C:4]-[C:5]-[O;H0;D2;+0:6]-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]=[C:4]/[C:5]-[OH;D1;+0:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US05387692
[#7;a:5]:[c:4]:[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:2])-[c;H0;D3;+0:6](:[c:7]):[c:8]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].O-B(-O)-[c;H0;D3;+0:6](:[c:7]):[c:8]	TRUE	TRUE	TRUE	4	US07138425B2
[c:4]-[O;H0;D2;+0:3]-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]>>O-[CH2;D2;+0:1]-[c:2].[OH;D1;+0:3]-[c:4]	TRUE	TRUE	TRUE	4	US20070213364A1
[C:4]=[C:3]-[C:2]-[OH;D1;+0:1]>>C-C(=O)-[O;H0;D2;+0:1]-[C:2]-[C:3]=[C:4]	TRUE	FALSE	TRUE	2	US05196570
[#7;a:4]:[c:3](:[c:5]:[#7;a:6])-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:8]-[C:7]>>C-O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3](:[#7;a:4]):[c:5]:[#7;a:6].[C:7]-[NH2;D1;+0:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US06359145B1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](-[NH;D2;+0:7]-[C:6]):[c:3]:[c:4]:[#7;a:5]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].[C:6]-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US05998665
[#16;a:5]:[c:4]:[c:3]-[CH2;D2;+0:1]-[O;D1;H1:2]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[O;D1;H1:2])-[c:3]:[c:4]:[#16;a:5]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US05496816
[C:4]=[C:3]-[CH2;D2;+0:1]-[OH;D1;+0:2]>>C-O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;H0;D1;+0:2])-[C:3]=[C:4]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US06030952
[#7:4]-[C:3]-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[N;H0;D3;+0:6](-[C:5])-[c:7]>>O-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3]-[#7:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US20070287695A1
[C:2]-[C;H0;D4;+0:3]1(-[C;D1;H3:4])-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:5]-1>>C-[S+](=O)-[CH3;D1;+0:1].[C:2]-[C;H0;D3;+0:3](-[C;D1;H3:4])=[O;H0;D1;+0:5]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20130303524A1
[#16;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[#16;a:2]):[c:3].Br-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20080027048A1
[#8:1]-[C:2](=[O;D1;H0:3])-[C:4]-[C@@H;D3;+0:5](-[C:6])-[OH;D1;+0:7]>>[#8:1]:[C:2](=[O;D1;H0:3])-[C:4]-[C;H0;D3;+0:5](-[C:6])=[O;H0;D1;+0:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US07094594B2
[#7;a:4]:[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:2])-[CH;D2;+0:6]=[C:5]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]:[#7;a:4].[C:5]=[CH2;D1;+0:6]	FALSE	FALSE	FALSE	3	US07429609B2
[#8:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:3]-[c:4]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[#8:2].[OH;D1;+0:3]-[c:4]	TRUE	TRUE	TRUE	6	US20040038239A1
[C:2]-[C;H0;D3;+0:1](-[c:3])=[N;H0;D2;+0:4]-[O;D1;H1:5]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[c:3].[NH2;D1;+0:4]-[O;D1;H1:5]	TRUE	TRUE	TRUE	10	US05055474
[CH3;D1;+0:1]-[O;H0;D2;+0:2]-[c:3]>>I-[CH3;D1;+0:1].[OH;D1;+0:2]-[c:3]	TRUE	TRUE	TRUE	12	US20050176701A1
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[NH;D2;+0:4]-[C:3]>>O=[CH;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]-[NH2;D1;+0:4]	TRUE	TRUE	TRUE	15	US20080004300A1
[#8:1]-[C:2]-[CH2;D2;+0:3]-[CH2;D2;+0:4]-[C:5]>>[#8:1]-[C:2]-[CH;D2;+0:3]=[CH;D2;+0:4]-[C:5]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20150232480A1
[c:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]>>C-Cl(-C)-O-B(-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3])-[O-C-1(-C)-C-F-C(-F)-S(=O)(=O)-O-[c;H0;D3;+0:4](:[c:5]):[c:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20050215563A1
[#8:3]-[C:2](=[O;D1;H0:4])-[CH2;D2;+0:1]-[n;H0;D3;+0:6](:[c:5]):[c:7]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2](-[#8:3])=[O;D1;H0:4].[c:5]:[nH;D2;+0:6]:[c:7]	TRUE	FALSE	TRUE	6	US20060035956A1
[C:4]=[C:5]/[C:6]-[NH;D2;+0:7]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[C:4]=[C:5]/[C:6]-[NH2;D1;+0:7]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US05302590
[#7;a:4]:[c:5]:[c:6](:[#7;a:7])-[NH;D2;+0:8]-[C;H0;D3;+0:1](-[#8:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[#8:2])=[O;D1;H0:3].[#7;a:4]:[c:5]:[c:6](:[#7;a:7])-[NH2;D1;+0:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US04105767
[C:1]-[CH;D3;+0:2](-[C:3])-[CH2;D2;+0:4]-[c:5]>>[C:1]-[C;H0;D3;+0:2](-[C:3])=[CH;D2;+0:4]-[c:5]	TRUE	FALSE	TRUE	4	US20090227799A1
[#16;a:8]:[c:9]:[c:10]-[NH;D2;+0:11]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[#8:3]-[C:4](-[C;D1;H3:5])(-[C;D1;H3:6])-[C;D1;H3:7]>>C-Cl(-C)-O-C(=O)-O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[TRUE	FALSE	TRUE	2	US20040122016A1

feasible_reaction_smarts	not_trained_on_but_known	known_from_valid_set	known_from_test_set	num_products_works_with	example_works_with_reaction_id
[#7:1]-[C:2]-[C;H0;D3;+0:3](-[C:4])=[O;H0;D1;+0:5]>>[#7:1]-[C:2]-[CH;D3;+0:3](-[C:4])-[OH;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US06235731B1
[C:3]-[NH;D2;+0:4]-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[c:2].[C:3]-[NH2;D1;+0:4]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US20150238558A1
[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]>>C-O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US07220771B2
[#7;a:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:6]-[C:5]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]:[#7;a:4].[C:5]-[NH2;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	TRUE	18	US20140142083A1
[#7;a:4]:[c:3]-[CH2;D2;+0:1]-[O;D1;H1:2]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[O;D1;H1:2])-[c:3]:[#7;a:4]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20080058391A1
[C;D1;H3:2]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:3])-[n;H0;D3;+0:5](-[c:4]):[c:6]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3].[c:4]:[nH;D2;+0:5]:[c:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20080132540A1
[#7;a:4]:[c:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:5]-[c:6]>>O-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[c:3]:[#7;a:4].[OH;D1;+0:5]-[c:6]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US20140275172A1
[C:4]=[C:5]-[C:6]-[N;H0;D3;+0:7](-[C:8])-[C;H0;D3;+0:1](-[#8:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[#8:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]=[C:5]-[C:6]-[NH;D2;+0:7]-[C:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20110190269A1
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:7](-[c:8])-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:4]=[O;D1;H0:3]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[O;D1;H0:3]=[C:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[NH;D2;+0:7]-[c:8]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US04780477
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:6])-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	TRUE	TRUE	TRUE	21	US07294624B2
[#7;a:3]:[c:4]:[c;H0;D3;+0:5](-[c:6])-[CH;D2;+0:1]=[O;D1;H0:2]>>C-N(-C)-[CH;D2;+0:1]=[O;D1;H0:2].[#7;a:3]:[c:4]:[cH;D2;+0:5]:[c:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US05212317
[O;D1;H0:4]=[C:3]-[NH;D2;+0:1]-[C;D1;H3:2]>>C-C(-C)(-C)-O-C(=O)-[N;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])-[C:3]=[O;D1;H0:4]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20050245592A1
[C;D1;H3:1]-[CH;D3;+0:2](-[OH;D1;+0:3])-[c:4]>>[C;D1;H3:1]-[C;H0;D3;+0:2](=[O;H0;D1;+0:3])-[c:4]	TRUE	TRUE	TRUE	7	US20120263706A1
[#7;a:3]:[c:2]:[c;H0;D3;+0:1](-[C;H0;D2;+0:7])#[C:6]:[c:4]:[#7;a:5]>>I-[C;H0;D3;+0:1](-[c:2]):[#7;a:3]):[c:4]:[#7;a:5].[C:6]#[CH;D1;+0:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US05817664
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](-[c:3])-[S;H0;D2;+0:5]-[C;D1;H3:4]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[#7;a:2]):[c:3].[C;D1;H3:4]-[S-;H0;D1:5]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US05968875
[#8:4]-[C:3]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[N;H0;D3;+0:6](-[C:5])-[C;D1;H3:7]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[C:3]-[#8:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C;D1;H3:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US07625908B2
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](-[c:3])-[S;H0;D2;+0:5]-[C:4]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](-[#7;a:2]):[c:3].[C:4]-[SH;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	FALSE	3	US04490380
[#7;a:5]:[#7;a:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1](-[NH2;D1;+0:6])=[O;D1;H0:2]>>C-O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]:[#7;a:4]:[#7;a:5].[NH4+;D0:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20150065482A1
[#8:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[c:7]:[n;H0;D3;+0:8](-[c:9])-[c;H0;D3;+0:1](-[c:2]):[c:3]>>O-B(-O)-[c;H0;D3;+0:1](-[c:2]):[c:3].[#8:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[c:7]:[nH;D2;+0:8]:[c:9]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US09062055B2
[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[C:3]=[C;D1;H2:4]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[C:3]=[C;D1;H2:4].[C:5]-[NH2;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US04395524
[C:2]-[CH;D3;+0:1](-[C;D1;H3:3])-[NH;D2;+0:4]-[c:5]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[C;D1;H3:3].[NH2;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	FALSE	TRUE	2	US20040138286A1
[#16;a:4]:[c:5](-[#7;a:6])-[NH;D2;+0:7]-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>C-C(=O)-O-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#16;a:4]:[c:5](-[#7;a:6])-[NH2;D1;+0:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20070167499A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](-[c:3]):[c:4]:[#7;a:5])-[c;H0;D3;+0:6](-[c:7]):[c:8]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](-[#7;a:2]):[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].O-B(-O)-[c;H0;D3;+0:6](-[c:7]):[c:8]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US20100069629A1
[#7:4]-[C:3]-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[N;H0;D2;+0:5]-[O;D1;H1:6]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3]-[#7:4].[NH2;D1;+0:5]-[O;D1;H1:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US04771046
[#7:4]-[C:3]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:6]-[C:5]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[C:3]-[#7:4].[C:5]-[NH2;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	TRUE	7	US20090118305A1
[#7;a:4]:[c:3](-[c:5]:[#7;a:6])-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[N;H0;D3;+0:8](-[C:7]):[C:9]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3](-[#7;a:4]):[c:5]:[#7;a:6].[C:7]-[NH;D2;+0:8]-[C:9]	TRUE	FALSE	TRUE	3	US20120121540A1
[#7;a:5]:[c:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[N;H0;D3;+0:7](-[C;D1;H3:6])-[c:8]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].[C;D1;H3:6]-[NH;D2;+0:7]-[c:8]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US07135475B2
[#7;a:4]:[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](-[#7;a:2])-[NH;D2;+0:6]-[C:5]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](-[#7;a:2]):[c:3]:[#7;a:4].[C:5]-[NH2;D1;+0:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US07122550B2
[#7;a:5]:[c:4]-[S;H0;D4;+0:1](=[O;D1;H0:2])=[N;H0;D3;+0:7](-[C:6])-[C:8]>>Cl-[S;H0;D4;+0:1](=[O;D1;H0:2])=[O;D1;H0:3](-[c:4]:[#7;a:5].[C:6]-[NH;D2;+0:7]-[C:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US2010013425064A1
[#7;a:5]:[#7;a:4]:[c:3]-[CH2;D2;+0:1]-[OH;D1;+0:2]>>C-O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;H0;D1;+0:2])-[c:3]:[#7;a:4]:[#7;a:5]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20110105509A1
[#7:1]-[C:2]-[C;H0;D3;+0:3](-[C:4])=[O;H0;D1;+0:5]>>[#7:1]-[C:2]-[C@@H;D3;+0:3](-[C:4])-[OH;D1;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	5	US06235731B1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](-[c:3])-[NH2;D1;+0:4]>>F-[c;H0;D3;+0:1](-[#7;a:2]):[c:3].[NH3;D0;+0:4]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20110130380A1
[C:3]-[S;H0;D2;+0:4]-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]-[SH;D1;+0:4]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US04246263
[#16;a:4]:[c:3]-[CH2;D2;+0:1]-[#7:2]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[#7:2])-[c:3]:[#16;a:4]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US05571810
[#16;a:4]:[c:5](-[#7;a:6])-[NH;D2;+0:7]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[#16;a:4]:[c:5](-[#7;a:6])-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US07407977B2
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](-[O;H0;D2;+0:6]-[C:5]):[c:3]:[#7;a:4]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](-[#7;a:2]):[c:3]:[#7;a:4].[C:5]-[O-;H0;D1:6]	FALSE	FALSE	FALSE	5	US20150152108A1
[#8:4]-[C:3](=[O;D1;H0:5])-[C:2]-[NH2;D1;+0:1]>>C-C(-C)(-C)-O-C(=O)-[NH;D2;+0:1]-[C:2]-[C:3](-[#8:4])=[O;D1;H0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	7	US05728701
[#7;a:4]:[n;H0;D3;+0:5](-[c:6])-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3]>>Br-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3].[#7;a:4]:[nH;D2;+0:5]:[c:6]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US20100075961A1
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[NH;D2;+0:4]-[C;D1;H3:3]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C;D1;H3:3]-[NH2;D1;+0:4]	TRUE	FALSE	TRUE	2	US20040242884A1
[#7;a:1]:[c:2]-[C@@H;D3;+0:3](-[C:4])-[OH;D1;+0:5]>>[#7;a:1]:[c:2]-[C;H0;D3;+0:3](-[C:4])=[O;H0;D1;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20090215778A1
[C;D1;H3:4]-[O;H0;D2;+0:5]-[c;H0;D3;+0:1](-[c:2]):[c:3]>>F-[c;H0;D3;+0:1](-[c:2]):[c:3].[C;D1;H3:4]-[O-;H0;D1:5]	TRUE	TRUE	FALSE	4	US05648504
[#7;a:3]:[n;H0;D3;+0:4](-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]):[c:5]-[C:6](-[#8:7])=[O;D1;H0:8]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[#7;a:3]:[nH;D2;+0:4]:[c:5]-[C:6](-[#8:7])=[O;D1;H0:8]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20040127492A1
[#7;a:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[N;H0;D3;+0:6](-[C:5])-[C;D1;H3:7]>>C-O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]:[#7;a:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C;D1;H3:7]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US07598264B2
[#7;a:5]:[c:4]:[c:3]-[CH2;D2;+0:1]-[OH;D1;+0:2]>>C-C-O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;H0;D1;+0:2])-[c:3]:[c:4]:[#7;a:5]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20140134235A1
[#8:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4])=[O;D1;H0:3]-[C:6]=[O;D1;H0:7]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[#8:2].[O;D1;H0:3]=[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]=[O;D1;H0:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US05536827
[C:5]=[C:4]-[C:2](=[O;D1;H0:3])-[OH;D1;+0:1]>>C-C(-C)-O-[O;H0;D2;+0:1]-[C:2](=[O;D1;H0:3])-[C:4]=[C:5]	TRUE	FALSE	TRUE	10	US05217952
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](-[c:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>F-[c;H0;D3;+0:1](-[#7;a:2]):[c:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20060178400A1
[C:3]=[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4])-[C:6]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]=[C:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	FALSE	FALSE	FALSE	4	US07598386B2
[#7;a:6]:[c:7](-[NH;D2;+0:8]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2]))-[c:3]:[c:4]:[#7;a:5]):[c:9]:[#7;a:10]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].[#7;a:6]:[c:7](-[NH2;D1;+0:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US06310070B1
[#7;a:4]:[#7;a:3]:[c;H0;D3;+0:1](-[c:2])-[O;H0;D2;+0:6]-[C;D1;H3:5]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](-[c:2]):[#7;a:3]:[#7;a:4].[C;D1;H3:5]-[O-;H0;D1:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US04256483
[#7:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>C-O-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#7:4]-[NH2;D1;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	3	US20050154056A1
[C:3]-[O;H0;D2;+0:4]-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>I-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]-[OH;D1;+0:4]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20100249163A1
[#16;a:4]:[c:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:6](-[C:5])-[C;D1;H3:7]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]:[c:3]:[#16;a:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C;D1;H3:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US06140351
[C;D1;H3:2]-[CH;D3;+0:1](-[C;D1;H3:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>O-[CH;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])-[C;D1;H3:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20140187554A1
[#16;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](-[c:3])-[S;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](-[#16;a:2]):[c:3].[SH;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20090156642A1
[#7;a:5]:[c:6]-[NH;D2;+0:7]-[c;H0;D3;+0:1](-[#7;a:2]):[c:3]:[#7;a:4]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](-[#7;a:2]):[c:3]:[#7;a:4].[#7;a:5]:[c:6]-[NH2;D1;+0:7]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20070078155A1
[#16;a:1]:[c:2](-[#7;a:3])-[NH;D2;+0:4]-[C;H0;D3;+0:6](=[O;D1;H0:5])-[NH;D2;+0:7]-[c:8]>>[#16;a:1]:[c:2](-[#7;a:3])-[NH2;D1;+0:4].[O;D1;H0:5]=[C;H0;D2;+0:6]=[N;H0;D2;+0:7]-	TRUE	TRUE	FALSE	1	US04933355
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:4]-[C:3]>>I-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]-[OH;D1;+0:4]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20100249163A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](-[c:3])-[c;H0;D3;+0:4](-[c:5]):[c:6]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](-[#7;a:2]):[c:3].C-C1(-C)-O-B(-[c;H0;D3;+0:4](-[c:5]):[c:6])-[O-C-1(-C)-C	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20100004280A1
[#8:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C;D1;H3:6])-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[#8:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;D1;H3:6]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US20070225349A1
[C:2]-[CH;D3;+0:1](-[C:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>Br-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	FALSE	TRUE	8	US20090258917A1
[Br;H0;D1;+0:1]-[CH2;D2;+0:2]-[C:3]>>Br-C(-Br)(-Br)-[Br;H0;D1;+0:1].O-[CH2;D2;+0:2]-[C:3]	TRUE	TRUE	TRUE	7	US05935985
[C:3]-[NH;D2;+0:4]-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>I-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]-[NH2;D1;+0:4]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US05814653
[#7;a:4]:[c:5]-[NH;D2;+0:6]-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H3:7]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3].[#7;a:4]:[c:5]-[NH2;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US05654307
[#8:4]-[C:3](=[O;D1;H0:5])-[CH;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])-[O;H0;D2;+0:6]-[c:7]>>Br-[CH;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])-[C:3](-[#8:4])=[O;D1;H0:5].[OH;D1;+0:6]-[c:7]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US20150018343A1
[N;D1;H0:3]#[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:6]-[C:5]=[O;D1;H0:4]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]#[N;D1;H0:3].[O;D1;H0:4]=[C:5]-[OH;D1;+0:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US03957782
[c:5]:[c;H0;D3;+0:4](-[c:6])-[c;H0;D3;+0:1](-[c:2]):[c:3]>>O-B(-O)-[c;H0;D3;+0:1](-[c:2]):[c:3].I-[c;H0;D3;+0:4](-[c:5]):[c:6]	FALSE	FALSE	FALSE	13	US06503925B1
[C:2]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>Br-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US04824839
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:6])=[O;D1;H0:7])-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]=[O;D1;H0:7]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US08097634B2
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:6]-[C:7])=[C;D1;H2:8])-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]-[C:7]=[C;D1;H2:8]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US07910595B2
[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	26	US08822689B2

feasible_reaction_smarts	not_trained_on_but_known	known_from_valid_set	known_from_test_set	num_products_works_with	example_works_with_reaction_id
[C:2]-[NH;D2;+0:1]-[C:3]-[C:4]=[C:5]>>C-C(-C(-C)-O-C(=O)-[N;H0;D3;+0:1])(-[C:2])-[C:3]-[C:4]=[C:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US05929067
[#8:3]-[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4])-[C:6]>>C-S(=O)(=O)-O-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]-[#8:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US05854261
[#7;a:4]:[c:5]:[c:6](:[c:7]:[#7;a:8])-[O;H0;D2;+0:9]-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[#7;a:4]:[c:5]:[c:6](:[c:7]:[#7;a:8])-[OH;D1;+0:9]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US04973592
[#7;a:4]:[c:3]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:6]-[C:5]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]:[#7;a:4].[C:5]-[NH2;D1;+0:6]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US05856334
[#8:5]-[C:4](=[O;D1;H0:6])-[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:2])-[c;H0;D3;+0:7](:[c:8]):[c:9]>>I-[C;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]-[C:4](-[#8:5])=[O;D1;H0:6].O-B(-O)-[c;H0;D3;+0:7](:[c:8]):[c:9]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20090203665A1
[#7;a:4]:[#7;a:5]:[c:6](:[#7;a:7])-[NH;D2;+0:8]-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3]>>C-C(=O)-O-[C;H0;D3;+0:1](-[C;D1;H3:2])=[O;D1;H0:3].[#7;a:4]:[#7;a:5]:[c:6](:[#7;a:7])	FALSE	FALSE	FALSE	1	US05750545
[C:5]=[C:4]/[C:2](=[O;D1;H0:3])-[OH;D1;+0:1]>>C-C-[O;H0;D2;+0:1]-[C:2](=[O;D1;H0:3])\[C:4]=[C:5]	TRUE	TRUE	FALSE	10	US05217952
[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	23	US20090264431A1
[C:4]=[C:5]-[C:6]-[NH;D2;+0:7]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[C:4]=[C:5]-[C:6]-[NH2;D1;+0:7]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US05302590
[C;D1;H3:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[c:6])-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[C;D1;H3:4]-[NH;D2;+0:5]-[c:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20080027065A1
[#7;a:1]:[c:2]:[c:3](:[c:4]:[#7;a:5])-[C;H0;D3;+0:6](-[C:7])=[O;H0;D1;+0:8]>>[#7;a:1]:[c:2]:[c:3](:[c:4]:[#7;a:5])-[CH;D3;+0:6](-[C:7])-[OH;D1;+0:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20090149483A1
[#8:1]-[C:2](=[O;D1;H0:3])-[CH2;D2;+0:4]-[CH2;D2;+0:5]-[c:6]>>[#8:1]-[C:2](=[O;D1;H0:3])/[CH;D2;+0:4]=[CH;D2;+0:5]/[c:6]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US20140113922A1
[#7:2]-[C:3](=[O;D1;H0:4])-[N;H0;D3;+0:5](-[CH3;D1;+0:1])-[C:6]=[O;D1;H0:7]>>I-[CH3;D1;+0:1].[#7:2]-[C:3](=[O;D1;H0:4])-[NH;D2;+0:5]-[C:6]=[O;D1;H0:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20130040930A1
[#7:1]-[C:2]-[CH2;D2;+0:3]-[CH;D3;+0:4](-[C:5])-[c:6]>>[#7:1]-[C:2]-[CH;D2;+0:3]=[C;H0;D3;+0:4](-[C:5])-[c:6]	TRUE	TRUE	TRUE	7	US05723475
[C:2]-[C@H;D3;+0:1](-[c:3])-[NH;D2;+0:5]-[C:4]>>O-[C@H;D3;+0:1](-[C:2])-[c:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20150031685A1
[#16;a:6]:[c:5]:[c:3](:[#7;a:4])-[CH2;D2;+0:1]-[OH;D1;+0:2]>>C-C-O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;H0;D1;+0:2])-[c:3](:[#7;a:4]):[c:5]:[#16;a:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US06211215B1
[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]#[N;D1;H0:3]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]#[N;D1;H0:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20150225422A1
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:3]-[c:4]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[OH;D1;+0:3]-[c:4]	TRUE	TRUE	TRUE	68	US20090012055A1
[#7;a:5]:[c:4]:[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2])-[NH2;D1;+0:6]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].[NH4;+D0:6]	TRUE	TRUE	FALSE	3	US08114989B2
[#8:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])/[C:7]=[CH;D2;+0:8]/[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>Br-[C;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[#8:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]=[CH2;D1;+0:8]	TRUE	TRUE	TRUE	3	US20140249143A1
[O;D1;H0:2]=[C;H0;D3;+0:1](-[c:3])-[c;H0;D3;+0:5](:[c:4]):[c:6]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[c:4]:[c;H;D2;+0:5]:[c:6]	TRUE	TRUE	TRUE	4	US04362895
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])-[O;H0;D2;+0:5]-[C:4]>>F-[C;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[C:4]-[O;+H0;D1:5]	TRUE	FALSE	TRUE	5	US20150232445A1
[C:2]-[CH;D3;+0:1](-[NH2;D1;+0:4])-[c:3]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[c:3].[NH3;D0;+0:4]	FALSE	FALSE	FALSE	5	US20080221188A1
[#8:4]-[C:3](=[O;D1;H0:5])-[C@H;D3;+0:6](-[C:2])-[O;H0;D2;+0:6]-[c:7]>>O-[C@H;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3](-[#8:4])=[O;D1;H0:5].[OH;D1;+0:6]-[c:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20090054435A1
[#8:3]-[C:2](=[O;D1;H0:4])-[CH2;D2;+0:1]-[O;H0;D2;+0:5]-[c:6]>>I-[CH2;D2;+0:1]-[C:2](-[#8:3])=[O;D1;H0:4].[OH;D1;+0:5]-[c:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US03984465
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[S;H0;D2;+0:3]-[c:4]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[SH;D1;+0:3]-[c:4]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US05516904
[C:4]-[S;H0;D2;+0:5]-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>F-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[C:4]-[SH;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	FALSE	3	US20140162985A1
[C;D1;H3:4]-[O;H0;D2;+0:5]-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[C;D1;H3:4]-[O;+H0;D1:5]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US04160090
[#7;a:4]:[c:3]:[c:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:6](-[C:5])-[C:7]>>O-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]:[c:3]:[#7;a:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US08124606B2
[C:2]-[CH;D3;+0:1](-[C;D1;H3:3])-[O;H0;D2;+0:4]-[c:5]>>O-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[C;D1;H3:3].[OH;D1;+0:4]-[c:5]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US20140187554A1
[#7;a:4]:[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:2])-[O;H0;D2;+0:5]-[c:6]>>F-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]:[#7;a:4].[OH;D1;+0:5]-[c:6]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20140378487A1
[#7;a:4]:[c:3](-[NH;D2;+0:1]-[C:2]):[c:5]:[#7;a:6]>>C-C(-C(-C)-O-C(=O)-[N;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[c:3](:[#7;a:4]):[c:5]:[#7;a:6]	TRUE	FALSE	TRUE	1	US20150005311A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](-[O;H0;D2;+0:7]-[C:6]):[c:3]:[c:4]:[#7;a:5]>>Cl-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3]:[c:4]:[#7;a:5].[C:6]-[OH;D1;+0:7]	TRUE	TRUE	TRUE	6	US20140378487A1
[#7:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[N;H0;D3;+0:8](-[C:9])-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[#7:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH;D2;+0:8]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20070015812A1
[C:3]-[N;H0;D3;+0:4](-[C:5])-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>O=[CH;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]-[NH;D2;+0:4]-[C:5]	TRUE	TRUE	TRUE	25	US20120101082A1
[C:4]-[S;H0;D2;+0:5]-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3].[C:4]-[S;+H0;D1:5]	TRUE	FALSE	TRUE	6	US20090227603A1
[#7;a:2]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:3])/[C;H0;D2;+0:5]#[C:4]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[#7;a:2]):[c:3].[C:4]#[CH;D1;+0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	6	US20130178631A1
[C:2]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:3])-[NH;D2;+0:5]-[C:4]>>C-C-O-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	FALSE	TRUE	9	US04337256
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C;D1;H3:6])-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C;D1;H3:6]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US20130253002A1
[C:1]=[C:2]-[CH;D3;+0:3](-[C:4])-[OH;D1;+0:5]>>[C:1]=[C:2]-[C;H0;D3;+0:3](-[C:4])=[O;H0;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US05256824
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:4](-[C;D1;H3:3])-[C;D1;H3:5]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C;D1;H3:3]-[NH;D2;+0:4]-[C;D1;H3:5]	TRUE	TRUE	FALSE	2	US08501780B2
[#7:4]-[C:3]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[NH;D2;+0:5]-[#7:6]-[C:7]=[O;D1;H0:8]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[C:3]-[#7:4].[NH2;D1;+0:5]-[#7:6]-[C:7]=[O;D1;H0:8]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US20080015146A1
[#7;a:4]:[c:3]:[c;H0;D3;+0:1](:[c:2])-[N;H0;D3;+0:6](-[C:5])-[C:7]>>Br-[c;H0;D3;+0:1](:[c:2]):[c:3]:[#7;a:4].[C:5]-[NH;D2;+0:6]-[C:7]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US20120316147A1
[C:2]-[C@H;D3;+0:1](-[C:3])-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4])-[c:6]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[c:6]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US08980879B2
[#8:5]-[C:4](=[O;D1;H0:6])-[C:3]-[NH;D2;+0:1]-[C:2]>>C-C(-C(-C)-O-C(=O)-[N;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3]-[C:4](-[#8:5])=[O;D1;H0:6]	TRUE	FALSE	TRUE	2	US08591878B2
[C;D1;H3:3]-[N;H0;D3;+0:4](-[C;D1;H3:5])-[CH2;D2;+0:1]-[c:2]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2].[C;D1;H3:3]-[NH;D2;+0:4]-[C;D1;H3:5]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20090318690A1
[C:2]-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:3])-[NH;D2;+0:4]-[C:5]-[C:6](=[O;D1;H0:7])-[O;D1;H1:8]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[NH2;D1;+0:4]-[C:5]-[C:6](=[O;D1;H0:7])-[O;D1;	TRUE	FALSE	TRUE	3	US04734425
[C:4]-[N;H0;D3;+0:5](-[C:6])-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3]>>Cl-[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])=[O;D1;H0:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	TRUE	TRUE	TRUE	29	US20120149721A1
[C:3]-[N;H0;D3;+0:4](-[C;D1;H3:5])-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]-[NH;D2;+0:4]-[C;D1;H3:5]	TRUE	TRUE	FALSE	5	US20070149546A1
[#7:3]-[C:4](=[O;D1;H0:5])-[N;H0;D3;+0:6](-[C:7])-[CH2;D2;+0:1]-[C:2]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[#7:3]-[C:4](=[O;D1;H0:5])-[NH;D2;+0:6]-[C:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US08217063B2
[#7;a:6]:[c:5]:[c:3](:[#7;a:4])-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[N;H0;D3;+0:8](-[C:7])-[C:9]>>C-C-O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3](:[#7;a:4]):[c:5]:[#7;a:6].[C:7]-[NH;D2;+0:8]-	TRUE	TRUE	FALSE	1	US07691876B2
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:4](-[C:3])-[c:5]>>I-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[C:3]-[NH;D2;+0:4]-[c:5]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US20080255124A1
[#8:4]-[C:3](=[O;D1;H0:5])-[C@H;D3;+0:1](-[C:2])-[O;H0;D2;+0:6]-[c:7]>>O-[C@H;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3](-[#8:4])=[O;D1;H0:5].[OH;D1;+0:6]-[c:7]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20090054435A1
[#7:3]-[C:4](=[O;D1;H0:5])-[C;H0;D3;+0:6](-[c:7])=[CH;D2;+0:1]-[c:2]>>O=[CH;D2;+0:1]-[c:2].[#7:3]-[C:4](=[O;D1;H0:5])-[CH2;D2;+0:6]-[c:7]	TRUE	TRUE	FALSE	1	US06531502B1
[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[C;D1;H3:3]>>O=[C;H0;D3;+0:1](-[C:2])-[C;D1;H3:3].[C:4]-[NH2;D1;+0:5]	TRUE	TRUE	TRUE	5	US04588749
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D3;+0:5](-[c:6])-[C:4]=[O;D1;H0:3]>>Cl-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[O;D1;H0:3]=[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[c:6]	TRUE	TRUE	TRUE	2	US20070010511A1
[C:2]-[CH;D3;+0:1](-[C:3])-[N;H0;D3;+0:5](-[C:4])-[C:6]>>Br-[CH;D3;+0:1](-[C:2])-[C:3].[C:4]-[NH;D2;+0:5]-[C:6]	FALSE	FALSE	FALSE	2	US08188301B2
[C:2]-[CH2;D2;+0:1]-[N;H0;D2;+0:4]=[#7;+3]=[N;-;D1;H0:5]>>Br-[CH2;D2;+0:1]-[C:2].[N;-;H0;D1:3]=[#7;+4]=[N;-;D1;H0:5]	FALSE	FALSE	FALSE	4	US04806685
[#8:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[N;H0;D3;+0:8](-[C:9])-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3]>>O-[C;H0;D3;+0:1](=[O;D1;H0:2])-[c:3].[#8:4]-[C:5](=[O;D1;H0:6])-[C:7]-[NH;D2;+0:8]	FALSE	FALSE	FALSE	1	US20140356322A1