

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
O=C(Cc1nnc2ccccc2c1=O)c1ccco1	O=C(Cc1nnc2ccccc2c1=O)c1ccco1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1ccn(CCOCCc2ccccc2)c(=O)[nH]1	O=c1ccn(CCOCCc2ccccc2)c(=O)[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cc1ccc(Cl)cc1)C(=O)Nc1cnc(Cl)c(Cl)c1	O=C(Cc1ccc(Cl)cc1)C(=O)Nc1cnc(Cl)c(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)C1(N(Cc2c[nH]c3ccccc23)Cc2ccccc2)CCN(Cc2cccs2)CC1	NC(=O)C1(N(Cc2c[nH]c3ccccc23)Cc2ccccc2)CCN(Cc2cccs2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CN1C(=O)NC2(CCc3ccccc32)C1=O)NC1CCc2ccccc21	O=C(CN1C(=O)NC2(CCc3ccccc32)C1=O)NC1CCc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc2cc(-c3cc4ccc(C5=NCCN5)cc4[nH]3)[nH]c2c1	c1ccc2[nH]c(-c3cc4ccc(C5=NCCN5)cc4[nH]3)cc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(cc1O)CCN(CCCCCCCCOCc1ccc(C)cc1)C2	COc1cc2c(cc1O)CCN(CCCCCCCCOCc1ccc(C)cc1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
CN(c1nnc2[nH]ccc12)C1CCC(CS(=O)(=O)N2CCCC(CN(C)CCCC(F)(F)c3ccccc3)CC2)CC1	CN(CCCC(F)(F)c1ccccc1)CC1CCN(S(=O)(=O)CC2CCC(N(C)c3nnc4[nH]ccc34)CC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)N1CCcN2c(nc(CN(C)C)cc2=O)C1	CC(=O)N1CCcN2c(nc(CN(C)C)cc2=O)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2C(C#N)=C(N)Oc3c2ccc2cc(OC)ccc32)cc1	COc1ccc(C2C(C#N)=C(N)Oc3c2ccc2cc(OC)ccc32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cccc(Cl)c1)c1snnc1C(F)(F)F	O=C(Nc1cccc(Cl)c1)c1snnc1C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc2nc(NC(=O)COc3ccc4c5c(c(=O)oc4c3C)CCCS)sc2c1	Cc1ccc2nc(NC(=O)COc3ccc4c5c(c(=O)oc4c3C)CCCS)sc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)c1cn(O)c2cc(N3CCOCc3)c(F)cc2c1=O	CC(=O)c1cn(O)c2cc(N3CCOCc3)c(F)cc2c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1noc(CCN(C)Cc2csc(C)n2)n1	CCc1noc(CCN(C)Cc2csc(C)n2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CC1(CC(=O)Nc2ccc(OCc3ccccc3)cc2)CCCCC1	O=C(O)CC1(CC(=O)Nc2ccc(OCc3ccccc3)cc2)CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(=O)C(C)OC(=O)CNC(=O)c2ccccc2Cl)cc1	Cc1ccc(NC(=O)C(C)OC(=O)CNC(=O)c2ccccc2Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=NN=c1sc2ccccc2n1C)c1cccc[n+]1[O-]	CC(=NN=c1sc2ccccc2n1C)c1cccc[n+]1[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(C)C)c(OC(C=O)N(C=O)CC(=O)NCC2CCCO2)c1	Cc1ccc(C(C)C)c(OC(C=O)N(C=O)CC(=O)NCC2CCCO2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
N#CC1=C(SCc2cc([N+](=O)[O-])ccc2O)NC(=O)CC1c1ccccc1F	N#CC1=C(SCc2cc([N+](=O)[O-])ccc2O)NC(=O)CC1c1ccccc1F	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)CNC(=O)c1ccc2c(c1)C(=C1Nc3ccccc3C1=NO)C(=O)N2	NC(=O)CNC(=O)c1ccc2c(c1)C(=C1Nc3ccccc3C1=NO)C(=O)N2	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCN(C)C(=O)C(c1ccccc1)c1cccs1	CN(C)CCN(C)C(=O)C(c1ccccc1)c1cccs1	TRUE	TRUE	TRUE
CNc1nc(Cl)c(N2CCN(C(C(=O)O)C3CCCC3)CC2)c(OC)c1NC	CNc1nc(Cl)c(N2CCN(C(C(=O)O)C3CCCC3)CC2)c(OC)c1NC	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)CCCOc1ccc(C2Nc3cccc(OC)c3C3C=CCC13)O2	CCN(CC)CCCOc1ccc(C2Nc3cccc(OC)c3C3C=CCC12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCCC(=O)O)NcCc1cccc(Cl)c1	O=C(C)CCCC(=O)NcCc1cccc(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)Oc1ccc(C(C)(C)c2ccc(OCCCN3CCC(Cc4ccccc4)CC3)cc2)cc1	CC(C)Oc1ccc(C(C)(C)c2ccc(OCCCN3CCC(Cc4ccccc4)CC3)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(OCCCN2CCOCC2)nc(-c2ccccc2Nc2c(Cl)cccc2Cl)n1	Cc1cc(OCCCN2CCOCC2)nc(-c2ccccc2Nc2c(Cl)cccc2Cl)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C(=O)NC2CC3CC2C3)no1	Cc1cc(C(=O)NC2CC3CC2C3)no1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(NC(=O)CSCc2ccccc2)no1	Cc1cc(NC(=O)CSCc2ccccc2)no1	TRUE	TRUE	FALSE
BrC1cnc(Nc2c[nH]cn2)nc1N1CCN(CCNc2ccncc2)CC1	BrC1cnc(Nc2c[nH]cn2)nc1N1CCN(CCNc2ccncc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2cn(CCCC(=O)O)c(=O)c3ccccc23)cc1	COc1ccc(-c2cn(CCCC(=O)O)c(=O)c3ccccc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C=C2CCCN=C2c2ccncc2)c(OC)c1	COc1ccc(C=C2CCCN=C2c2ccncc2)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NC1CC(C(=O)N2CCC3(CC2)Nc2ccccc23)Nc2cc(Cl)ccc21	CC(=O)NC1CC(C(=O)N2CCC3(CC2)Nc2ccccc23)Nc2cc(Cl)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc(C2=C(c3c4n(c5ccccc35)CCC(Br)C2=O)c2cc(OCCc3ccccc3)ccc21	Cn1cc(C2=C(c3c4n(c5ccccc35)CCC(Br)C2=O)c2cc(OCCc3ccccc3)ccc21	FALSE	TRUE	TRUE
Cn1c2c(c3cccc(-c4cc(Cl)ccc4O)c31)C1CCC(C2)N1	Cn1c2c(c3cccc(-c4cc(Cl)ccc4Cl)c31)C1CCC(C2)N1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(NC(=O)c1ccccc1)C(=O)N1CCN(Cc2ccc(Cl)cc2)CC1	CC(C)C(NC(=O)c1ccccc1)C(=O)N1CCN(Cc2ccc(Cl)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(=O)n(CCCCNc2nc3ccccc3c(=O)[nH]2)n1	Cc1ccc(=O)n(CCCCNc2nc3ccccc3c(=O)[nH]2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(NCC(O)c1ccccc2ccccc12)c1ccccc2ccccc12	CC(C)(NCC(O)c1ccccc2ccccc12)c1ccccc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(Sc2cc(Nc3cccc(Cn4ccnc4)c3)nc(N3CCC(O)C3)n2)c(C)c1	Cc1ccc(Sc2cc(Nc3cccc(Cn4ccnc4)c3)nc(N3CCC(O)C3)n2)c(C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NN1C(=O)NC(c2ccccc2)=C(Nc2ccncc2)C1=O)c1ccccc1	O=C(Nn1c(=O)[nH]c(-c2ccccc2)c(Nc2ccncc2)c1=O)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ccc(Cc2ccccc2)cc1C(=O)NcC1cccc(N2CCCC2)c1	Nc1ccc(Cc2ccccc2)cc1C(=O)NcC1cccc(N2CCCC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C(Cc1ccccc1)NP(=O)(Oc1ccccc1)Oc1ccccc1	COC(=O)C(Cc1ccccc1)NP(=O)(Oc1ccccc1)Oc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)CCn1cnc(S(=O)(=O)c2cc(Cl)cc(Cl)c2)c1	CCN(CC)CCn1cnc(S(=O)(=O)c2cc(Cl)cc(Cl)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccccc1N1CCCC1)c1cc(F)cc(F)c1	O=C(Nc1ccccc1N1CCCC1)c1cc(F)cc(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(CO)NC(=O)c1cn(CCCCOc2cccc(OC(=O)N(C)C)c2)c(=O)[nH]c1=O	CC(CO)NC(=O)c1cn(CCCCOc2cccc(OC(=O)N(C)C)c2)c(=O)[nH]c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NC(=O)OC2Cc3ccccc32)C(C=O)c1	COc1ccc(N(C)C(=O)C(=O)OC2Cc3ccccc32)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1ccc(NC(=O)c2cc3ccccc3o2)c1	CC(=O)Nc1ccc(NC(=O)c2cc3ccccc3o2)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
COc1ccc(C=C2C(=O)N(C3CC3)C(C)(C)C2=O)cc1OCC(=O)N1CCOCC1	COc1ccc(C=C2C(=O)N(C3CC3)C(C)(C)C2=O)cc1OCC(=O)N1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1CCN1CCC2(C=CC(=O)NC2=O)CC1	COc1ccccc1CCN1CCC2(C=CC(=O)NC2=O)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1ccc(C2CC(c3ccc(N(C)C)cc3)=NN2)cc1	CN(C)c1ccc(C2=NNC(c3ccc(N(C)C)cc3)C2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc2c(c1C)SCC(=O)N2	Cc1ccc2c(c1C)SCC(=O)N2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1csc(Cl(=O)N2CC3CN(c2cccc(-c4ccco4)n3)CC2C)n1	Cc1csc(Cl(=O)N2CC3CN(c2cccc(-c4ccco4)n3)CC2C)n1	FALSE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(C(=O)NC(C)C)N(Cc2ccco2)C(=O)CNC(=O)c2cccs2)cc1OC	COc1ccc(C(C(=O)NC(C)C)N(Cc2ccco2)C(=O)CNC(=O)c2cccs2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
COC1C=CCOC2(COC(=O)C(OCc3ccccc3)c3ccccc3)C(OC(=O)NC(O)(C)C)CC(C)(OC)C(O)C12	COC1C=CCOC2(COC(=O)C(OCc3ccccc3)c3ccccc3)C(OC(=O)NC(O)(C)C)CC(C)(OC)C(O)C12	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C(=O)CNC(=O)c1ccc2c(c1)OCCCO2)C(CN1CCC(Cc2ccccc2)CC1)c1ccccc1	CN(C(=O)CNC(=O)c1ccc2c(c1)OCCCO2)C(CN1CCC(Cc2ccccc2)CC1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1ccc(-c2nc3c(c(SCC(=O)Nc4ccccc4F)n2)Cc2c(CO)cnc(C)c2O3)cc1	Cc1ncc(CO)c2c1Oc1nc(-c3ccc(C(C)(C)C)cc3)nc(SCC(=O)Nc3ccccc3F)c1C2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(Cl(=O)Nn2cnnc2)c(Br)c1	Cc1ccc(Cl(=O)Nn2cnnc2)c(Br)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(CO)Nc1nc(-c2ccnc(N)c2)ncc1C(=O)Nc1ccc2cc(C)ccc2c1	CCC(CO)Nc1nc(-c2ccnc(N)c2)ncc1C(=O)Nc1ccc2cc(C)ccc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C1CC(NC(=O)c2c(C)nn(Cc3ccccc3F)c2C)CN1C(C)=O	COC(=O)C1CC(NC(=O)c2c(C)nn(Cc3ccccc3F)c2C)CN1C(C)=O	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(N)c1ccc(C2=Cc3ccc(C(=N(CCP(=O)(O)O)c4ccccc4)c4ccccc4)cc3C3CCCC3)cc1	N=C(N)c1ccc(C2=Cc3ccc(C(=N(CCP(=O)(O)O)c4ccccc4)c4ccccc4)cc3C3CCCC3)cc1	FALSE	TRUE	TRUE
CCCC1C(=O)N2C(C(=O)OCCc3ccccc3)=C(COC(C)=O)CS(=O)(=O)C12	CCCC1C(=O)N2C(C(=O)OCCc3ccccc3)=C(COC(C)=O)CS(=O)(=O)C12	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1nc(Cl(=O)NC(C)(C)C)c2c1-c1nc(Nc3cccc(-c4cnn(CC(=O)Nc5ccccc5)c4)c3)ncc1CC2	Cn1nc(Cl(=O)NC(C)(C)C)c2c1-c1nc(Nc3cccc(-c4cnn(CC(=O)Nc5ccccc5)c4)c3)ncc1CC2	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1CCN(C(=O)C(Cc2c[nH]c3ccccc23)NC(=O)c2cccc(OC)c2)CC1	CCOC(=O)C1CCN(C(=O)C(Cc2c[nH]c3ccccc23)NC(=O)c2cccc(OC)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
C[n+] <sup>1</sup> nc(NC(=N)NS(=O)(=O)c2ccc(S(N)(=O)=O)cc2)sc1SCc1c(F)c(F)c(F)c(F)c1F	C[n+] <sup>1</sup> nc(NC(=N)NS(=O)(=O)c2ccc(S(N)(=O)=O)cc2)sc1SCc1c(F)c(F)c(F)c(F)c1F	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccccc(NC(=O)CN(C)C(=O)c2cc3ccccc3[nH]2)c1	CCc1ccccc(NC(=O)CN(C)C(=O)c2cc3ccccc3[nH]2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1=C(C)NC(SC)=NC1c1cc(Br)ccc1OC(C)=O	CCOC(=O)C1=C(C)NC(SC)=NC1c1cc(Br)ccc1OC(C)=O	TRUE	TRUE	TRUE
COC1(C)OCC2COC(OC3=CC(=O)C(OC(C)C)C)C(C3O(CO)C(O)C(O)C3O)C2O1	COC1(C)OCC2COC(OC3=CC(=O)C(OC(C)C)C)C(C3O(CO)C(O)C(O)C3O)C2O1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)OC(Cc(=O)Nc1ccc(NC(C)=O)cc1)c1ccc(Cl)cc1	CC(=O)Nc1ccc(NC(=O)CC(OC(C)=O)c2ccc(Cl)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CNCCCOc1ccc(C)cc1C(C)C	CNCCCOc1ccc(C)cc1C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CN(C(=O)Cc2ccc(N3C(=O)CCC3=O)cc2)C(c2ccccc2O)c2cc(Cl)ccc2N1	O=C1CN(C(=O)Cc2ccc(N3C(=O)CCC3=O)cc2)C(c2ccccc2O)c2cc(Cl)ccc2N1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1Nc2ccncc2N1c1cc(C2CC2)[nH]n1	O=C1Nc2ccncc2N1c1cc(C2CC2)[nH]n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1ccccc2ccccc12)n1nnc2ccccc21	O=C(c1ccccc2ccccc12)n1nnc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc(C2CCCN2C(=O)CCN2CCC(CCOc(c3ccc(F)cc3)c3ccc(F)cc3)CC2)cs1	Nc1nc(C2CCCN2C(=O)CCN2CCC(CCOc(c3ccc(F)cc3)c3ccc(F)cc3)CC2)cs1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc(C2=CC(=O)CC(C)(C)C2=O)c1OC	COc1ccccc(C2=CC(=O)CC(C)(C)C2=O)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)N2CC(=O)Nc3ccc(F)cc3C2c2ccccc2)cc1	COc1ccc(C(=O)N2CC(=O)Nc3ccc(F)cc3C2c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
CC1CNC1c1cccc(C=O)c1	CC1CNC1c1cccc(C=O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)c1ccc(N2CCN(CCCOCc3ccc4[nH]c5ccccc5c4c3)CC2)cc1	CC(=O)c1ccc(N2CCN(CCCOCc3ccc4[nH]c5ccccc5c4c3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NC(=O)C(C)n2c(=O)n(Cc3ccco3)c(=O)c3sccc32)cc1OC	COc1ccc(NC(=O)C(C)n2c(=O)n(Cc3ccco3)c(=O)c3sccc32)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1c2c(O)cc(O)cc2oc2cc(O)cc(O)c12	O=c1c2ccc(O)cc2oc2cc(O)cc(O)c12	TRUE	TRUE	FALSE
COc1ccc(NC(=O)c2ccc(C)cc2)cc1	COc1ccc(NC(=O)c2ccc(C)cc2)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1ccccc(N2C(=NC(=O)CC3CCCC3)SC3CS(=O)(=O)CC32)c1	Cc1ccccc(N2C(=NC(=O)CC3CCCC3)SC3CS(=O)(=O)CC32)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc(C2(CNC(=O)c3ccc(-c4ccccc4)sc3C)CCCC2)c1	COc1ccccc(C2(CNC(=O)c3ccc(-c4ccccc4)sc3C)CCCC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1oc(-c2c(F)cccc2F)nc1CN1CCC2(CC1)OCCO2	Cc1oc(-c2c(F)cccc2F)nc1CN1CCC2(CC1)OCCO2	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c(CCCC(=O)c2nn(C)c(COc3ccccc3)c2l)nc2ccccc21	Cn1nc(Cl(=O)CCCCc2nc3ccccc3n2C(l)c1COC1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
O=c1oc2ccccc2c(O)c1C(c1c(O)c2ccccc2oc1=O)c1c(O)c2ccccc2oc1=O	O=c1oc2ccccc2c(O)c1C(c1c(O)c2ccccc2oc1=O)c1c(O)c2ccccc2oc1=O	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(N)c1ccc(N2CCN(C(=O)NCC3OCCC3c3ccccc3)CC2)cc1	N=C(N)c1ccc(N2CCN(C(=O)NCC3OCCC3c3ccccc3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCn1c(NCc2ccco2)nc2c1c(=O)[nH]c(=O)n2C	C=CCn1c(NCc2ccco2)nc2c1c(=O)[nH]c(=O)n2C	TRUE	TRUE	TRUE
CSc1[nH]nc(N)c1-c1ccc(F)cc1	CSc1[nH]nc(N)c1-c1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCn1nc(C(=O)OCC(=O)Nc2ccc3c(c2)OCCO3)c2ccccc2c1=O	C=CCn1nc(C(=O)OCC(=O)Nc2ccc3c(c2)OCCO3)c2ccccc2c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1ccc(-c2ccc(NC(=O)c3ccccc3)cc2)cc1	CN(C)c1ccc(-c2ccc(NC(=O)c3ccccc3)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(N)c1ccc(NCC#Cc2cccc(C(=N)N)c2)cc1	N=C(N)c1ccc(NCC#Cc2cccc(C(=N)N)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(CCC(=O)O)(N(C(=O)CNC(=O)N1CCOCC1)C(=O)NCC(=O)O	CC(CCC(=O)O)(N(C(=O)CNC(=O)N1CCOCC1)C(=O)NCC(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cc1ccccc1)N1CC(Cc1n2ccc3c2nc(NCCc2cccn2)n2ncnc32)CC1	O=C(Cc1ccccc1)N1CC(Cc1n2ccc3c2nc(NCCc2cccn2)n2ncnc32)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C(=O)CCCCNC(=O)c1ccc(N=NN(CCO)CCO)cc1	CO(C(=O)CCCCNC(=O)c1ccc(N=NN(CCO)CCO)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1cc(NS(=O))(=O)c2enn(CC)c2)cn1Cc1cc(F)ccc1F	CCOC(=O)c1cc(NS(=O))(=O)c2enn(CC)c2)cn1Cc1cc(F)ccc1F	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)c2c(Cl)nc(C(=O)O)n2C)c(OC)c1OC	COc1ccc(C(=O)c2c(Cl)nc(C(=O)O)n2C)c(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C2SCC(=O)N2c2ccc(OC)cc2)cc(OC)c1OC	COc1ccc(N2C(=O)C5C2c2cc(OC)c(OC)c(OC)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1ccccc1)N(CC(O)COc1ccc2c(c1)OCO2)CC1(Cc2ccc(F)cc2)CCCC1	O=C(c1ccccc1)N(CC(O)COc1ccc2c(c1)OCO2)CC1(Cc2ccc(F)cc2)CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC(O)CC(=O)CCl	CCCC(O)CC(=O)CCl	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NN=Cc1ccc(O)cc1)c1ccc(O)cc1	O=C(NN=Cc1ccc(O)cc1)c1ccc(O)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
CCS(=O)(=O)c1cncc(OCC2CCN2C)c1	CCS(=O)(=O)c1cncc(OCC2CCN2C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=CC2=NC(=O)C(=Cc3ccc(C)cc3)N2O1	CC1=CC2=NC(=O)C(=Cc3ccc(C)cc3)N2O1	TRUE	TRUE	TRUE
COCC(=O)NCC(=O)Nc1cccc(-c2nc3cccn3s2)c1	COCC(=O)NCC(=O)Nc1cccc(-c2nc3cccn3s2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCc2cnc3ncn(-c4ccccc4)c3c2C1	CN1CCc2cnc3ncn(-c4ccccc4)c3c2C1	TRUE	TRUE	TRUE
CS(C=NNc1nc2ccccc2nc1Cl)Nn1c(C)nc2ccccc2c1=O	CS(C=NNc1nc2ccccc2nc1Cl)Nn1c(C)nc2ccccc2c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(NC(=O)Cn1c(-c2ccc3cc(OC(F)(F)F)ccc3c2)ccc(NC(=O)OCc2ccccc2)c1=O)C(=O)C(F)(F)F	CC(C)C(NC(=O)Cn1c(-c2ccc3cc(OC(F)(F)F)ccc3c2)ccc(NC(=O)OCc2ccccc2)c1=O)C(=O)C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
CNc1c(C#N)c(N)c(C#N)c(-c2ccccc2)c1C#N	CNc1c(C#N)c(N)c(C#N)c(-c2ccccc2)c1C#N	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C(Sc1ccc(C(F)(F)F)cc1)c1ccccc1	CCOC(=O)C(Sc1ccc(C(F)(F)F)cc1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(F)c(C2C3=C(COC3=O)Nc3snc(C)c32)c1	COc1ccc(F)c(C2C3=C(COC3=O)Nc3snc(C)c32)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CC(CNc2cccc3cc(Cl)ccc23)C1	CN1CC(CNc2cccc3cc(Cl)ccc23)C1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1c2ccccc2-c2[nH]c3ccccc3c21	O=C1c2ccccc2-c2[nH]c3ccccc3c21	TRUE	TRUE	FALSE
CCOc1ccc(NC(=O)Cn2nnc(-c3ccccc3NC(=O)C(C)C)n2)cc1	CCOc1ccc(NC(=O)Cn2nnc(-c3ccccc3NC(=O)C(C)C)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCCNCc1ccco1)c1ccc(OCC(F)(F)F)nc1	O=C(NCCNCc1ccco1)c1ccc(OCC(F)(F)F)nc1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)C(Cc1c[nH]c2ccccc12)NC(=O)C(CC(C)C)CP(=O)(O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)OC(C)(C)C	CNC(=O)C(Cc1c[nH]c2ccccc12)NC(=O)C(CC(C)C)CP(=O)(O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)OC(C)(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1c(N=Cc2ccc(O)cc2)js(C)c1C	CCOC(=O)c1c(N=Cc2ccc(O)cc2)js(C)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=C(Cl)CCN(CCCn2nc(C)c([N+])(=O)[O-])c2C)C1	CC1=C(Cl)CCN(CCCn2nc(C)c([N+])(=O)[O-])c2C)C1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-n2nc3c(=O)n(CCl(=O)NCC4CCCO4)nc(C)c3c2C)cc1	Cc1ccc(-n2nc3c(=O)n(CCl(=O)NCC4CCCO4)nc(C)c3c2C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CNS(=O))(=O)c2ccc3[nH]cc(SO)c3c2)cc1OC	COc1ccc(CNS(=O))(=O)c2ccc3[nH]cc(SO)c3c2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)c1ccc(OC2c(Cl)cnn(Cc3ccccc3F)c2=O)cc1	CC(=O)c1ccc(OC2c(Cl)cnn(Cc3ccccc3F)c2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nn(CC(N)=O)c(C)c1C(=S)NCC1CCCN1C	Cc1nn(CC(N)=O)c(C)c1C(=S)NCC1CCCN1C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(COC(=O)CC12CC3CC(Cc(O)(C3)C1)C2)NCCc1ccc(Br)cc1	O=C(COC(=O)CC12CC3CC(Cc(O)(C3)C1)C2)NCCc1ccc(Br)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1[nH]nc(-c2ccc(OCCCNc3ccccc3)cc2)c2cccn12	O=c1[nH]nc(-c2ccc(OCCCNc3ccccc3)cc2)c2cccn12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(cc1OC)SC1=NCCCN1C2	COc1cc2c(cc1OC)SC1=NCCCN1C2	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c(CC(=O)Nc2ccc(F)cc2)cc(=O)n(C)c1=O	Cn1c(CC(=O)Nc2ccc(F)cc2)cc(=O)n(C)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C(=O)OCc2ccc3nc(O)ccc3c2)cc(OC)c1OC	COc1cc(C(=O)OCc2ccc3nc(O)ccc3c2)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
NCC1ccc(CNC(=O)C2CCN2C(=O)CC(N)Cc2cc(F)c(F)c(F)c2F)cc1	NCC1ccc(CNC(=O)C2CCN2C(=O)CC(N)Cc2cc(F)c(F)c(F)c2F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccc(C(=O)N2CCC(c3ccc4nc(-c5ccc(S(=O)(=O)NC)cc5)[nH]c4c3)CC2)cc1	CCc1ccc(C(=O)N2CCC(c3ccc4nc(-c5ccc(S(=O)(=O)NC)cc5)[nH]c4c3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(OCC#CCSc1nnc(-c2cccc3ccccc23)o1)c1ccc(O)cc1	O=C(OCC#CCSc1nnc(-c2cccc3ccccc23)o1)c1ccc(O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NC(=O)CNC(=O)COc2cccc3c(Cl)c[nH]c23)cc1	COc1ccc(NC(=O)CNC(=O)COc2cccc3c(Cl)c[nH]c23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(OCC(=O)NCCc2c[nH]c3ccccc23)cc1	CCOc1ccc(OCC(=O)NCCc2c[nH]c3ccccc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(C2C(=O)NC(CC(C)C)C(=O)Nc3ccccc32)c1OC	COc1cccc(C2C(=O)NC(CC(C)C)C(=O)Nc3ccccc32)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CCCc1c(O)c(OC)c(O)c(C(=O)C=Cc2ccccc2)c1O	CCCc1c(O)c(OC)c(O)c(C(=O)C=Cc2ccccc2)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CC(=O)N(Nc2nc(C3CCCC3)nc3ccccc23)C(=O)C1c1ccc(Br)cc1	O=C1CC(=O)N(Nc2nc(C3CCCC3)nc3ccccc23)C(=O)C1c1ccc(Br)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)C12CC1C(n1cnc3c(NC)nc(C#Cc4ccccc4C(F)(F)F)nc31)C(O)C2O	CNC(=O)C12CC1C(n1cnc3c(NC)nc(C#Cc4ccccc4C(F)(F)F)nc31)C(O)C2O	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCOc1ccc(C(=O)N(Cc2ccco2)C2CCS(=O)(=O)C2)cc1OC	C=CCOc1ccc(C(=O)N(Cc2ccco2)C2CCS(=O)(=O)C2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CC(C(=O)CS(=O))(=O)c2ccc(Cl)cc2)N1	O=C1CC(C(=O)CS(=O))(=O)c2ccc(Cl)cc2)N1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C=CCOc1ccccc1-c1ccccc1)=CC(=O)NC(C)(C)C	CC(C=CCOc1ccccc1-c1ccccc1)=CC(=O)NC(C)(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CCN1C(c2ccccc2)CC(=O)C(C(C(C)C)NC(=O)c2cccs2)C1c1cccc(O)c1	CC(C)CCN1C(c2ccccc2)CC(=O)C(C(C(C)C)NC(=O)c2cccs2)C1c1cccc(O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(O)ccc(C(=O)NC2CCC(O)CC2)c1O	Cc1c(O)ccc(C(=O)NC2CCC(O)CC2)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1ccc2c(-c3ccc(C#N)cc3)cc(CN)cc21	Cn1ccc2c(-c3ccc(C#N)cc3)cc(CN)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)c1ccc(-c2cc(C(F)(F)F)c3ccc(O)c(CCc4ccccc(F)c4)c3n2)cc1	CS(=O)(=O)c1ccc(-c2cc(C(F)(F)F)c3ccc(O)c(CCc4ccccc(F)c4)c3n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC#CCn1c(N2CCCC(N)C2)nc2c(F)c(C(=O)NCC3ccc(OC)c(F)c3)nc(C#N)c21	CC#CCn1c(N2CCCC(N)C2)nc2c(F)c(C(=O)NCC3ccc(OC)c(F)c3)nc(C#N)c21	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1ccccc1	CCOC(=O)c1ccccc1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)(C)c1cc2nc(N3CCNCC3)c(N3CCC(CNC(=O)c4ccc(-c5ccc(O)cc5)cc4)CC3)nc2cc1F	CC(C)(C)c1cc2nc(N3CCNCC3)c(N3CCC(CNC(=O)c4ccc(-c5ccc(O)cc5)cc4)CC3)nc2cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc2c(c1)C1(COC(N)=N1)c1cc(-c3ccnc3F)ccc1O2	Cc1ccc2c(c1)C1(COC(N)=N1)c1cc(-c3ccnc3F)ccc1O2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(CNc2nc(-c3cncnc3)nc3ccccc23)cc1	Cc1ccc(CNc2nc(-c3cncnc3)nc3ccccc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)CNC(=O)c1cnc2c(C3CC3)c(COC3nc4c(cc3Cl)C(=O)NC4)nn2c1	CC(C)(C)CNC(=O)c1cnc2c(C3CC3)c(COC3nc4c(cc3Cl)C(=O)NC4)nn2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1=C(C)NC(=S)NC1c1cccc(O)c1F	CCOC(=O)C1=C(C)NC(=S)NC1c1cccc(O)c1F	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(c2cc(NC(=O)c3cc(Cl)cnc3Cl)ccc2F)N=C(N)OCC1(F)F	CC1(c2cc(NC(=O)c3cc(Cl)cnc3Cl)ccc2F)N=C(N)OCC1(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCN1CCN(CCC)C(=O)C1CC(=O)NCCc1ccccc1	CCCCN1CCN(CCC)C(=O)C1CC(=O)NCCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC1(CC(C)C)NCc2nc(N)c(C(=O)N3CCN(C(=O)Cc4ccccc4)CC3)nc2Cl)CCCCC1	COC1(CC(C)C)NCc2nc(N)c(C(=O)N3CCN(C(=O)Cc4ccccc4)CC3)nc2Cl)CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)(C)C(NC(=O)CCCCN(Cc1ccccc1)C(=O)C(Cc1CCCN1)N=C(N)N)C(=O)NC(CCC(N)=O)C(=O)O	CC(O)(C)C(NC(=O)CCCCN(Cc1ccccc1)C(=O)C(Cc1CCCN1)N=C(N)N)C(=O)NC(CCC(N)=O)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)CC(NC(=O)Nc2cccc(F)c2)c2cc(F)ccc2O1	CC1(C)CC(NC(=O)Nc2cccc(F)c2)c2cc(F)ccc2O1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=Cc1ccccc1)NCCC(=O)NO	O=C(C=Cc1ccccc1)NCCC(=O)NO	TRUE	TRUE	FALSE
NS(=O)(=O)c1ccc(NC(=O)CC=CC=NO)cc1	NS(=O)(=O)c1ccc(NC(=O)CC=CC=NO)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(=O)NC1C(C)CC(C)(c2ccccc2)OC1(C)C	CCC(=O)NC1C(C)CC(C)(c2ccccc2)OC1(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CCC1CN(Cc2ccccc2)c2nccc(N)c2N1CCCN(S(=O)(=O)c1ccccc(C(F)(F)F)c1	CCC1CN(Cc2ccccc2)c2nccc(N)c2N1CCCN(S(=O)(=O)c1ccccc(C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1cc(O)cc2nnc(C3CCCC3)nc12	N#Cc1cc(O)cc2nnc(C3CCCC3)nc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)c1ccc(NC(=O)CC2C(=O)N(c3ccc(C)cc3)C(=O)N2Cc2ccco2)cc1	CC(=O)c1ccc(NC(=O)CC2C(=O)N(c3ccc(C)cc3)C(=O)N2Cc2ccco2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C(=O)c1ccc(CN(Cc2ccc3c(c2)OCO3)C(S)=NC(C)(C)C)cc1	CO(C(=O)c1ccc(CN(Cc2ccc3c(c2)OCO3)C(S)=NC(C)(C)C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ccc2c(-c3cncnc3)[nH]nc2c1	Nc1ccc2c(-c3cncnc3)[nH]nc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCC1OC(n2cc(C3CCCC3)c3c(Cl)cccc32)C(O)C(O)C1O)c1ccccc2ccccc12	O=C(NCC1OC(n2cc(C3CCCC3)c3c(Cl)cccc32)C(O)C(O)C1O)c1ccccc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CNC(=O)c1ccco1)NN=Cc1c(O)ccc2cccn12	O=C(CNC(=O)c1ccco1)NN=Cc1c(O)ccc2cccn12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NNc1cccc(Cl)c1)c1cn2c(ccc3c(F)cc(F)cc32)n1	O=C(NNc1cccc(Cl)c1)c1cn2c(ccc3c(F)cc(F)cc32)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccccc1)c1ccc2c(c1)S(=O)(=O)c1ccccc1C2=O	O=C(Nc1ccccc1)c1ccc2c(c1)S(=O)(=O)c1ccccc1C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
Fc1cccc(-c2nc3ccccc3c(SCCCc3cccn3)c2Cc2ccccc2)c1	Fc1cccc(-c2nc3ccccc3c(SCCCc3cccn3)c2Cc2ccccc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+][([O-])c1ccccc1COc1ncnc2c1ncn2C1CN(Cc2ccc(F)c(F)c2)CC(CO)O1	O=[N+][([O-])c1ccccc1COc1ncnc2c1ncn2C1CN(Cc2ccc(F)c(F)c2)CC(CO)O1	TRUE	TRUE	TRUE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>CC(=O)C1CCC2C3CCC4CC(N5CCN(CC6OCCO6)CC5)CCC4(C)C3CCC12C</chem>	<chem>CC(=O)C1CC2C3CCC4CC(N5CCN(CC6OCCO6)CC5)CCC4(C)C3CCC12C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(Cc1ccc(O)cc1)NCC(O)c1ccccc(Cl)c1</chem>	<chem>CC(Cc1ccc(O)cc1)NCC(O)c1ccccc(Cl)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)CN1CCN(C)CC(NC(=O)c2ccc(NC(=O)N3Cc4ccccc4C3)cc2)C1</chem>	<chem>CCOC(=O)CN1CCN(C)CC(NC(=O)c2ccc(NC(=O)N3Cc4ccccc4C3)cc2)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c(COc2ccc(-c3cccc(-c4nnn[nH]4)c3)cc2)ccc2ncccc12</chem>	<chem>Cc1c(COc2ccc(-c3cccc(-c4nnn[nH]4)c3)cc2)ccc2ncccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(OC)c2c(C)n(CC(=O)O)c(C)c12</chem>	<chem>COc1ccc(OC)c2c(C)n(CC(=O)O)c(C)c12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C=CC(=O)c2ccc3c(c2)OCCO3)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(C=CC(=O)c2ccc3c(c2)OCCO3)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC(=O)NNC(=O)CSCc1ccc(C)cc1</chem>	<chem>CCC(=O)NNC(=O)CSCc1ccc(C)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(CCN(C(=O)C(C)c2ccccc2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(CCN(C(=O)C(C)c2ccccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(Cc(=O)N)C2CCC(CCN3CCC(c4ccccc5c4OCO5)CC3)CC2)cc1OC</chem>	<chem>COc1ccc(Cc(=O)N)C2CCC(CCN3CCC(c4ccccc5c4OCO5)CC3)CC2)cc1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1cc(C2CCCN2Cc2ccnc(C)c2)c(O)nc1C</chem>	<chem>CCc1cc(C2CCCN2Cc2ccnc(C)c2)c(O)nc1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(N=C(O)c1cn(C2CC2)c2c(F)cccc2c1=O)(C(F)(F)F)C(F)(F)F</chem>	<chem>CC(N=C(O)c1cn(C2CC2)c2c(F)cccc2c1=O)(C(F)(F)F)C(F)(F)F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Clc1c(Cl)cnnc1SCc1ccc(Cl)cc1</chem>	<chem>Clc1ccc(CSc2nncc(Cl)c2Cl)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1ccc(-c2cc(NC(=O)C3CNC(=O)C3)nn2-c2cccc(OCc3ccccc3)c2)c1</chem>	<chem>CCc1ccc(-c2cc(NC(=O)C3CNC(=O)C3)nn2-c2cccc(OCc3ccccc3)c2)c1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CCOc1ccc(NC(=O)Cn2c(=O)n(CC)c3cc(S(C)(=O)=O)ccc32)cc1</chem>	<chem>CCOc1ccc(NC(=O)Cn2c(=O)n(CC)c3cc(S(C)(=O)=O)ccc32)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)c1ccccc1NC(S)=Nc1cccc(C)c1</chem>	<chem>CCOC(=O)c1ccccc1NC(S)=Nc1cccc(C)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)c1nen2ncnc(Nc3ccc4c(cnn4Cc4cccn4)c3)c12</chem>	<chem>CC(C)c1nen2ncnc(Nc3ccc4c(cnn4Cc4cccn4)c3)c12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNc1cc(C)nc(C2CCN(C(=O)C3(c4ccccc5c4OCCO5)CC3)CC2)n1</chem>	<chem>CNc1cc(C)nc(C2CCN(C(=O)C3(c4ccccc5c4OCCO5)CC3)CC2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC(C(=O)O)C(O)C(O)c1ccc(OCc2ccccc2)cc1</chem>	<chem>NC(C(=O)O)C(O)C(O)c1ccc(OCc2ccccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CSc1ccc2c(n1)Cn1c-2cc2ccccc21</chem>	<chem>CSc1ccc2c(n1)Cn1c-2cc2ccccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cccc(CNCc2cc3n(n2)CCCN(S(=O)(=O)c2ccc(C)cc2)C3)c1</chem>	<chem>COc1cccc(CNCc2cc3n(n2)CCCN(S(=O)(=O)c2ccc(C)cc2)C3)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(O)n1cc(NC(=O)c2cc(NC(=O)c3cc(N(CCC)CCCl)cn3C)cn2C)cc1C(=O)NCCC(=N)N</chem>	<chem>CC(C)n1cc(NC(=O)c2cc(NC(=O)c3cc(N(CCC)CCCl)cn3C)cn2C)cc1C(=O)NCCC(=N)N</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(CCN2CCC(CC(=O)O)CC2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(CCN2CCC(CC(=O)O)CC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=CC(Cc1ccccc1)NC(=O)C(Cc1ccc(O)cc1)NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)OCc1ccccc1</chem>	<chem>O=CC(Cc1ccccc1)NC(=O)C(Cc1ccc(O)cc1)NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)OCc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=S(=O)(C=Cc1cc(Cl)cc(Cl)c1Cl)N1CCCC1</chem>	<chem>O=S(=O)(C=Cc1cc(Cl)cc(Cl)c1Cl)N1CCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NCCCc1cccn1)C(=O)NCC1OCCN1S(=O)(=O)c1cccs1</chem>	<chem>O=C(NCCCc1cccn1)C(=O)NCC1OCCN1S(=O)(=O)c1cccs1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(CCCN1CCN(CCCN2c3ccccc3CSc3ccccc32)CC1)C(=O)Oc1cccc(C2=NCCN2)c1</chem>	<chem>CN(CCCN1CCN(CCCN2c3ccccc3CSc3ccccc32)CC1)C(=O)Oc1cccc(C2=NCCN2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C2=NS(=O)(=O)N(C)C(C(=O)NCc3ccccc3C(F)(F)F)=C2)cc1OC</chem>	<chem>COc1ccc(C2=NS(=O)(=O)N(C)C(C(=O)NCc3ccccc3C(F)(F)F)=C2)cc1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(Cc1ccccc1)NC(=O)c1ccc2c(=O)n3c(nc2c1)CCC3</chem>	<chem>CC(Cc1ccccc1)NC(=O)c1ccc2c(=O)n3c(nc2c1)CCC3</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC(CCc1ccccc1)C(O)C(=O)N1C(=O)OCC1c1ccccc1</chem>	<chem>NC(CCc1ccccc1)C(O)C(=O)N1C(=O)OCC1c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1Cc2cc(O)c3c(c2)C(O)(c2ccc(O)c(O)c2)C(C)CO3</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C2NC(=O)c3cnc4c(OC)cc(C)cc4c3N2)c1</chem>	<chem>COc1cccc(C2NC(=O)c3cnc4c(OC)cc(C)cc4c3N2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN1CCN(c2nc(-c3ccccc3)cc(-c3ccccc3[N+])(=O)[O-])n2)CC1</chem>	<chem>CN1CCN(c2nc(-c3ccccc3)cc(-c3ccccc3[N+])(=O)[O-])n2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)C(CCCCN(C(=O)OCc1ccccc1)NC(=O)C(C(C)C)NC(=O)C(C(C)C)NC(=O)OCc1ccccc1</chem>	<chem>COC(=O)C(CCCCN(C(=O)OCc1ccccc1)NC(=O)C(C(C)C)NC(=O)C(C(C)C)NC(=O)OCc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1ccc(NC(=S)Nc2ccccc2-c2ccccc2)cc1)c1ccco1</chem>	<chem>O=C(Nc1ccc(NC(=S)Nc2ccccc2-c2ccccc2)cc1)c1ccco1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1sc2nc(SCCN3CCCC3C)nc(Cl)c2c1C</chem>	<chem>CCc1sc2nc(SCCN3CCCC3C)nc(Cl)c2c1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1cccc(NC(=O)c2sccc2-n2ccccc2)c1)c1ccncc1</chem>	<chem>O=C(Nc1cccc(NC(=O)c2sccc2-n2ccccc2)c1)c1ccncc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(CCCOc1ccccc1)CCc1ncc[nH]1</chem>	<chem>O=C(CCCOc1ccccc1)CCc1ncc[nH]1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=[N+](([O-])c1cn2c(n1)OCC(OCc1ccc(-c3ccc(OC(F)(F)C(F)F)cc3)cc1)C2</chem>	<chem>O=[N+](([O-])c1cn2c(n1)OCC(OCc1ccc(-c3ccc(OC(F)(F)C(F)F)cc3)cc1)C2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=NNC(=O)c1ccccc1Br)c1cccs1</chem>	<chem>CC(=NNC(=O)c1ccccc1Br)c1cccs1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(C1CCCO1)N1CCN(S(=O)(=O)c2cccc(Cl)c2)CC1</chem>	<chem>O=C(C1CCCO1)N1CCN(S(=O)(=O)c2cccc(Cl)c2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCCNC(=O)c1ccc(-c2ccc3c(N4CCOCC4C)nc(N4CCOCC4C)nc3n2)cc1F</chem>	<chem>COCCNC(=O)c1ccc(-c2ccc3c(N4CCOCC4C)nc(N4CCOCC4C)nc3n2)cc1F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCC=CCC=CCCCCCCC(C(=O)O)[n+]&lt;1ccccc1</chem>	<chem>CCCCC=CCC=CCCCCCCC(C(=O)O)[n+]&lt;1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nc2ccccc2c2c1C(=O)C(Cl)=C(N1CCN(C(=O)c3ccco3)CC1)C2=O</chem>	<chem>Cc1nc2ccccc2c2c1C(=O)C(Cl)=C(N1CCN(C(=O)c3ccco3)CC1)C2=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1cccc(NC(=O)c2[nH]cnc2C(=O)NC(C)C(=O)OC2CCN(C(=O)OC(C)(C)C)CC2)c1</chem>	<chem>CCc1cccc(NC(=O)c2[nH]cnc2C(=O)NC(C)C(=O)OC2CCN(C(=O)OC(C)(C)C)CC2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(-c2ccc3c(c2)C2(C)C3(C)NCCc3ccccc3F)CN2C(=O)NCc2ccc(C)cn2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(-c2ccc3c(c2)C2(C)C3(C)NCCc3ccccc3F)CN2C(=O)NCc2ccc(C)cn2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>[O-][S+]&lt;1CCN(c2ccc(-n3ccc4cc(-c5ccc(OC6ccccc6)cc5)ccc43)cn2)CC1</chem>	<chem>[O-][S+]&lt;1CCN(c2ccc(-n3ccc4cc(-c5ccc(OC6ccccc6)cc5)ccc43)cn2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCC(=O)Nc1ccc2c(c1)C(=Cc1[nH]c(C)nc1C)C(=O)N2C</chem>	<chem>CCCC(=O)Nc1ccc2c(c1)C(=Cc1[nH]c(C)nc1C)C(=O)N2C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(C2CC(=O)Nc3ccccc3N2)cc(O)C)c1OC</chem>	<chem>COc1cc(C2CC(=O)Nc3ccccc3N2)cc(O)C)c1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCSC1=NNC(c2ccc(OC)cc2)(c2ccccc2)O1</chem>	<chem>CCSC1=NNC(c2ccc(OC)cc2)(c2ccccc2)O1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(CNCC2(F)CCNCC2)cc1NC(=O)c1ccc(Nc2ncc(C)c(-c3ccc(OC(F)(F)F)cc3)n2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(CNCC2(F)CCNCC2)cc1NC(=O)c1ccc(Nc2ncc(C)c(-c3ccc(OC(F)(F)F)cc3)n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)Cc1ccc(C#Cc2cccc(C#N)n2)o1</chem>	<chem>CN(C)Cc1ccc(C#Cc2cccc(C#N)n2)o1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NCC1Cc2cc(F)cc(F)c2C1O</chem>	<chem>NCC1Cc2cc(F)cc(F)c2C1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOc1ccc(S(=O)(=O)N(c2cccc(Cl)c2)c2cccc(Cl)c2)cc1C1(C)CCN(C(C)=O)CC1</chem>	<chem>CCOc1ccc(S(=O)(=O)N(c2cccc(Cl)c2)c2cccc(Cl)c2)cc1C1(C)CCN(C(C)=O)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cccc(-c2[nH]c3ccccc3c2CCNCCc2cccn2)c1</chem>	<chem>Cc1cccc(-c2[nH]c3ccccc3c2CCNCCc2cccn2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)COC(=O)N1CCCC(n2nc(C(=O)N3CCOCC3)c3c2-c2ccncn2n3S(C)(=O)=O)C1</chem>	<chem>CC(C)(C)COC(=O)N1CCCC(n2nc(C(=O)N3CCOCC3)c3c2c2ccncn2n3S(C)(=O)=O)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)N1CCC2(CC1)CN(c1ccnnc1)C(=O)N2C</chem>	<chem>CC(=O)N1CCC2(CC1)CN(c1ccnnc1)C(=O)N2C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(N)C(=O)NC(C)C(=O)OC1CC(C)=CCCC(C)=CCCC2(C)OC2C1C(C)C</chem>	<chem>CC1=CCCC2(C)OC2C(C(C)C)C(OC(=O)C(C)NC(=O)C(C)N)CC(C)=CCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC(C)C(NC(=O)C(C(C)C)NC(=O)C(N)Cc1ccccc1)C(=O)O</chem>	<chem>CCC(C)C(NC(=O)C(C(C)C)NC(=O)C(N)Cc1ccccc1)C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cccc(NCc2ccc(C(=O)N3CCCC3c3cccs3)cc2)c1</chem>	<chem>Cc1cccc(NCc2ccc(C(=O)N3CCCC3c3cccs3)cc2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCn1c2c(c3cc(S(C)(=O)=O)ccc31)CN(C)CC2c1ccccc1</chem>	<chem>CCn1c2c(c3cc(S(C)(=O)=O)ccc31)CN(C)CC2c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1c(O)c(CCc2ccc(F)cc2F)c(=O)n(C)c1=O</chem>	<chem>Cn1c(O)c(CCc2ccc(F)cc2F)c(=O)n(C)c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=Cc1ccc(C2CC3CS(C(N)=NC3(c3ccc(F)cc3F)CO2)cc1Cl</chem>	<chem>C=Cc1ccc(C2CC3CS(C(N)=NC3(c3ccc(F)cc3F)CO2)cc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cccc(C)c1COc1cc(NC(=O)Cc2ccc(Cl)c(Cl)c2)ccn1</chem>	<chem>Cc1cccc(C)c1COc1cc(NC(=O)Cc2ccc(Cl)c(Cl)c2)ccn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CCN(S(=O)(=O)c2ccc3c(c2)N(C(=O)N2CCCC2)C(=O)CO3)CC1</chem>	<chem>CC1CCN(S(=O)(=O)c2ccc3c(c2)N(CC(=O)N2CCCC2)C(=O)CO3)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)c1scsc(SCc2ccc(F)cc2)n1</chem>	<chem>O=C(O)c1scsc(SCc2ccc(F)cc2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#CSCCC(=O)Nc1ccc(CCCNCC(O)COc2nc(O)c(F)c3ccccc23)cc1</chem>	<chem>N#CSCCC(=O)Nc1ccc(CCCNCC(O)COc2nc(O)c(F)c3ccccc23)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc2nc(CSc3nc(-c4ccccc4)c(-c4ccccc4)[nH]3)cc(=O)n2c1</chem>	<chem>Cc1ccc2nc(CSc3nc(-c4ccccc4)c(-c4ccccc4)[nH]3)cc(=O)n2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C=Cc1ccccc1)=NNC(=O)CNC(=O)c1ccccc1C</chem>	<chem>CC(C=Cc1ccccc1)=NNC(=O)CNC(=O)c1ccccc1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(N=c1nc(N2C(=O)OCC2C(C)O)cc(Cl)[nH]1)c1cccc(Cl)cc1</chem>	<chem>CC(N=c1nc(N2C(=O)OCC2C(C)O)cc(Cl)[nH]1)c1cccc(Cl)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc(COc2nccc3ccsc23)cc1</chem>	<chem>c1ccc(COc2nccc3ccsc23)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#CC=CC1C2(C3=C=CCC(CO)=C3)c3[nH]c4cc(CCC(=O)O)ccc4c3CC2N(C(=O)C2CCC2)C1</chem>	<chem>N#CC=CC1CN(C(=O)C2CCC2)C2Cc3c([nH]c4cc(CCC(=O)O)ccc34)C2(C2=C=CCC(CO)=C2)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1OC(OC2CO)C(O)C(O)C2OC1(C)C</chem>	<chem>CC1OC2OC(CO)C(OC1(C)C)C(O)C2O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1c2c(nc3ccccc13)-c1ccc([N+](=O)[O-])cc1C2=O</chem>	<chem>Nc1c2c(nc3ccccc13)-c1ccc([N+](=O)[O-])cc1C2=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cccc(NC(=O)Cn2c(=S)[nH]c3cc4c(cc3c2=O)OCCO4)n1</chem>	<chem>Cc1cccc(NC(=O)Cn2c(=S)[nH]c3cc4c(cc3c2=O)OCCO4)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1NCC(=O)N1c1ccc(Br)cn1</chem>	<chem>O=C1CN(C(=O)N1c1ccc(Br)cn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc2c(=O)c(-c3cnn(Cc4ccccc4)c3)ccoc2c1</chem>	<chem>Cc1ccc2c(=O)c(-c3cnn(Cc4ccccc4)c3)ccoc2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC(=O)CC(NC(=O)Cc1ccc(Cl)Cl)c1c1ccc(NC2CCc3ccccc3C2)c([N+](=O)[O-])c1</chem>	<chem>NC(=O)CC(NC(=O)Cc1ccc(Cl)Cl)c1c1ccc(NC2CCc3ccccc3C2)c([N+](=O)[O-])c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccccc1CNC(=O)C1CCC(Cn2c(=O)c3ccccc3n(Cc3ccc(Cl)cc3)c2=O)CC1</chem>	<chem>Cc1ccccc1CNC(=O)C1CCC(Cn2c(=O)c3ccccc3n(Cc3ccc(Cl)cc3)c2=O)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(O)c1ccccc1Sc1ccc(-c2cc(Nc3ncc(C(F)(F)F)cc3F)ncn2)c(Cl)c1Cl</chem>	<chem>CC(C)c1ccccc1Sc1ccc(-c2cc(Nc3ncc(C(F)(F)F)cc3F)ncn2)c(Cl)c1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C=NNC(=O)c2ccnc2)cc1OC</chem>	<chem>COc1ccc(C=NNC(=O)c2ccnc2)cc1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(C)c(C#N)c(NCCN)n1</chem>	<chem>Cc1cc(C)c(C#N)c(NCCN)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOc1ncccc1C(=O)OCC(=O)NC1CCCC1</chem>	<chem>CCOc1ncccc1C(=O)OCC(=O)NC1CCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNC(C)C(O)=NC1CCc2ccc(Br)c(N(C)C)c2C1=O</chem>	<chem>CNC(C)C(O)=NC1CCc2ccc(Br)c(N(C)C)c2C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CCN(CC)CCOC(=O)C(CC(=O)c1ccc(C(C)(C)C)cc1)OC(=O)COC1ccc(C(C)(C)C)cc1	CCN(CC)CCOC(=O)C(CC(=O)c1ccc(C(C)(C)C)cc1)OC(=O)COC1ccc(C(C)(C)C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(c1OC)C(c1ccccc1)=NC1c3ccccc3OCC1N2	COc1cc2c(cc1OC)C(c1ccccc1)=NC1c3ccccc3OCC1N2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1ccc(C=CC(=O)NCc2cn(C34CC5CC(CC(C5)C3)C4)nn2)cc1	CC(C)(C)c1ccc(C=CC(=O)NCc2cn(C34CC5CC(CC(C5)C3)C4)nn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc1OCCOC(=O)Nc1ccccc1C(=O)O	Cc1ccccc1OCCOC(=O)Nc1ccccc1C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(CCC)S(=O)(=O)c1ccc(C(=O)NNC(=O)CCn2cncn2)cc1	CCCN(CCC)S(=O)(=O)c1ccc(C(=O)NNC(=O)CCn2cncn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccccc(CC)c1N=C(S)N(CCc1ccc(OC)cc1)Cc1cc(OC)c(OC)c(OC)c1	CCc1ccccc(CC)c1N=C(S)N(CCc1ccc(OC)cc1)Cc1cc(OC)c(OC)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1nc(CNC2CCOC3(CCN(C(=O)c4ccno4)CC3)C2)no1	CC(C)c1nc(CNC2CCOC3(CCN(C(=O)c4ccno4)CC3)C2)no1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)c2cccc(N=C=S)c2)cc1OC	COc1ccc(C(=O)c2cccc(N=C=S)c2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CCNC(=O)N1CCCCe2cc(S(=O)(=O)NCCC(=O)OCC)ccc21	CCNC(=O)N1CCCCe2cc(S(=O)(=O)NCCC(=O)OCC)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=Cc1cc(F)c(OCOC)c(Br)c1)C(=O)N1CC(CCl)c2ccc(C(F)(F)F)cc21	CC(=Cc1cc(F)c(OCOC)c(Br)c1)C(=O)N1CC(CCl)c2ccc(C(F)(F)F)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCc1nc2cc(S(=O)(=O)N(C)C)ccc2n1Cc1ccc(-c2ccccc2-c2nnn[nH]2)cc1	CCCCc1nc2cc(S(=O)(=O)N(C)C)ccc2n1Cc1ccc(-c2ccccc2-c2nnn[nH]2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c(N=Cc2cccc([N+](=O)[O-])c2)nc2ccccc21	Cn1c(N=Cc2cccc([N+](=O)[O-])c2)nc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1cccc(N2CCCCCN(Cc3cccc(O)c3)C2=O)c1	N#Cc1cccc(N2CCCCCN(Cc3cccc(O)c3)C2=O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1ccc(Nc2ccc3ccccc3n2)cc1Cl	Clc1ccc(Nc2ccc3ccccc3n2)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C1C(=O)OC2C1CC1(C)C(O)(C(C)C)C(O)CCC12C	CC(C)C1C(=O)OC2C1CC1(C)C2(C)CCC(O)C1(O)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)OC(=O)N1CCCC1(C)C(=O)Nc1ccccc(-c2cn3ccnc3n2)c1	CC(C)OC(=O)N1CCCC1(C)C(=O)Nc1ccccc(-c2cn3ccnc3n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCCCCSC(C(=O)Nc1ccc(Cl)cc1)c1cccs1)OCc1ccccc1	O=C(NCCCCSC(C(=O)Nc1ccc(Cl)cc1)c1cccs1)OCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc(CN(C)C(=O)n2c(=O)oc3ccccc32)c1OC	COc1ccccc(CN(C)C(=O)n2c(=O)oc3ccccc32)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)c2cccc(OCc3c(Cl)ccc(S(=O)(=O)NC4(C(=O)N5CCNCC5)CCOCC4)c3Cl)c2n1	Cc1cc(C)c2cccc(OCc3c(Cl)ccc(S(=O)(=O)NC4(C(=O)N5CCNCC5)CCOCC4)c3Cl)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
COCl(=O)CCC(=O)N1CCl(OCc2ccccc2)CC1Cl(=O)NC(C)c1ccccc1	COCl(=O)CCC(=O)N1CCl(OCc2ccccc2)CC1Cl(=O)NC(C)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC1CC2CC(C1)N2C(Clcccc1)c1ccccc1Cl	CCOC1CC2CC(C1)N2C(Clcccc1)c1ccccc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CCSC(=Cc1ccc(OC)c(OC)c1)C(C)=O	CCSC(=Cc1ccc(OC)c(OC)c1)C(C)=O	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nnc2c1ncn2C1C=CC(COC(=O)c2ccccc2)O1	Nc1nnc2c1ncn2C1C=CC(COC(=O)c2ccccc2)O1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccncc1)NC1CCN(CCn2cc(N=C(O)c3cnn4ccnc34)c(-c3cc(Cl)ccc3OC(F)F)n2)C1	O=C(Nc1ccncc1)NC1CCN(CCn2cc(N=C(O)c3cnn4ccnc34)c(-c3cc(Cl)ccc3OC(F)F)n2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(COCC2CCN(CCc3ccc(OC)cc3)CC2)cc1	COc1ccc(CCN2CC(C)COCc3ccc(OC)cc3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCCCCCCC=C(C(=O)C=C(C(=O)O)C(=O)C=Cc1ccccc1	COCCCCCCCC=C(C(=O)C=C(C(=O)O)C(=O)C=Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1=CN(Cc2ccc(Cl)cc2)C=C(C(=O)OCC)C1c1ccc(C)o1	CCOC(=O)C1=CN(Cc2ccc(Cl)cc2)C=C(C(=O)OCC)C1c1ccc(C)o1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)CC(=O)NC(CCCNC(=N)N)C(=O)NCc1ccccc1)N(C)CCc1ccccc1	CC(C)CC(C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)CC(=O)NC(CCCNC(=N)N)C(=O)NCc1ccccc1)N(C)CCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+](([O-])c1ccccc1CN2CCN(Cc3ccccc4c3OCO4)CC2)c1	O=[N+](([O-])c1ccccc1CN2CCN(Cc3ccccc4c3OCO4)CC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC1CCN(CC2CCC3(CCCC3)O2)C1)c1ccccc1	O=C(NC1CCN(CC2CCC3(CCCC3)O2)C1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1oc(C2CCCC2)nc1Cn1c(=O)ccn(Cc2ccc(C(=O)O)cc2)c1=O	Cc1oc(C2CCCC2)nc1Cn1c(=O)ccn(Cc2ccc(C(=O)O)cc2)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ccc(-c2cc3cnccc3c3sc4ccccc4c23)cc1	N#Cc1ccc(-c2cc3cnccc3c3sc4ccccc4c23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
OC(=NC1CCC1)C1COC2ncsc21	OC(=NC1CCC1)C1COC2ncsc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)CCN1C(=O)C(O)=C(C(=O)c2ccccc2)C1c1ccccc1Cl	CCN(CC)CCN1C(=O)C(O)=C(C(=O)c2ccccc2)C1c1ccccc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1c2cc(Cl)c(Cl)cc2sn1-c1c(Cl)cd(Cl)cc1Cl	O=c1c2cd(Cl)c(Cl)cc2sn1-c1c(Cl)cd(Cl)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc(-c2cnc(NCCN3CC4CC3CO4)nc2)cn1	Cn1cc(-c2cnc(NCCN3CC4CC3CO4)nc2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1cnc2ccc3ccccc3c2n1)N1CCCC1	O=C(c1cnc2ccc3ccccc3c2n1)N1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
Fc1cnc(N2CCN3CC(Oc4ccc(C(F)(F)F)cn4)CCC3C2)nc1N1CCOCC1	Fc1cnc(N2CCN3CC(Oc4ccc(C(F)(F)F)cn4)CCC3C2)nc1N1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCC2(C(=O)OCc3nc(-c4cccs4)no3)CCC3(C)C(=CCC4C5(C)CC(O)C(O)C(C)C)C5CCC43C)C2C1C	CC1CCC2(C(=O)OCc3nc(-c4cccs4)no3)CCC3(C)C(=CCC4C5(C)CC(O)C(O)C(C)C)C5CCC43C)C2C1C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2ccccc2c1-c1csq(NC(=S)Nc2ccccc2)n1	COc1ccc2ccccc2c1-c1csq(NC(=S)Nc2ccccc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C2c3c(oc4ccccc4c3=O)C(=O)N2c2ccc(S(=O)(=O)NC(=O)Nc3nccs3)cc2)cc(OC)c1O	COc1cc(C2c3c(oc4ccccc4c3=O)C(=O)N2c2ccc(S(=O)(=O)NC(=O)Nc3nccs3)cc2)cc(OC)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCNc1nc(Nc2ccccc2)nc2c1ncn2C(C)C	CCCCNc1nc(Nc2ccccc2)nc2c1ncn2C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc2nc(O)c3nnnn(Cc4ccc5c(c4)OCCO5)c3c2c1	Cc1ccc2nc(O)c3nnnn(Cc4ccc5c(c4)OCCO5)c3c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c2ccccc2cc2cc([N+](=O)[O-])c(=O)n(Cc3OC(CO)C(O)C(O)C3O)c12	Cc1c2ccccc2cc2cc([N+](=O)[O-])c(=O)n(Cc3OC(CO)C(O)C(O)C3O)c12	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C(=O)C=C1Nc2ccccc2N(c2ccccc2)C1=O	CCOC(=O)C(=O)C=C1Nc2ccccc2N(c2ccccc2)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CC1CCCC1)N1CC2(C(C1)CN(c1ccncc1)C2	O=C(CC1CCCC1)N1CC2(C(C1)CN(c1ccncc1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(c2ccccc2)OCC(Nc2ncnc3[nH]cnc23)C1O	CC1(c2ccccc2)OCC(Nc2ncnc3[nH]cnc23)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc2c1nc(C)n2-c1nc(N2CCOCC2)nc(N2CCOCC2)n1	Cc1ccccc2c1nc(C)n2-c1nc(N2CCOCC2)nc(N2CCOCC2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)N(c1ccc(Cl)c(C(=O)c2ccc(=N)[nH]c2)c1F	CC(C)N(c1ccc(Cl)c(C(=O)c2ccc(=N)[nH]c2)c1F	TRUE	TRUE	FALSE
CC(NC(Cc1ccc(-c2ccc(-c3ccccc3)cc2)cc1)C(=O)O)C(N)=O	CC(NC(Cc1ccc(-c2ccc(-c3ccccc3)cc2)cc1)C(=O)O)C(N)=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c(=O)c2c(ncn2CCOc2ccccc1CN3CCCC3)c2)n(C)c1=O	Cn1c(=O)c2c(ncn2CCOc2ccccc1CN3CCCC3)c2)n(C)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCC(Cc1ccc(OC)c(OCc2ccccc2)c1)S(=O)(=O)O	C=CCC(Cc1ccc(OC)c(OCc2ccccc2)c1)S(=O)(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2C(C(=O)Nc3ccc(F)c(Cl)c3F)=C(C)Nc3nc(CCCO)nn32)cc1OC	COc1ccc(C2C(C(=O)Nc3ccc(F)c(Cl)c3F)=C(C)Nc3nc(CCCO)nn32)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccc(C(NCC2CCC(N(C)C)CC2)c2ccccc1NS(C)(=O)=O)c2)cc1	CCc1ccc(C(NCC2CCC(N(C)C)CC2)c2ccccc1NS(C)(=O)=O)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=Cc1ccccc2ccccc12)NCCc1c[nH]c2ccccc12	O=C(C=Cc1ccccc2ccccc12)NCCc1c[nH]c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)cc(N2C(=O)CS2=C(C#N)C(=O)NCCc2ccccc2)c1	Cc1cc(C)cc(N2C(=O)CS2=C(C#N)C(=O)NCCc2ccccc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nccc(-c2ccc(CC3CN(S(=O)(=O)C(F)(F)F)C3)cc2)n1	Cc1nccc(-c2ccc(CC3CN(S(=O)(=O)C(F)(F)F)C3)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1noc(C)c1C(=O)N1CCOC2(CCN(c3cccn3)CC2)C1	Cc1noc(C)c1C(=O)N1CCOC2(CCN(c3cccn3)CC2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nncc(NC(=O)CSc2nnc(-c3ccc4c(c3)OCCO4)c(-c3ccco3)n2)s1	CCc1nncc(NC(=O)CSc2nnc(-c3ccc4c(c3)OCCO4)c(-c3ccco3)n2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CN1C(=O)C2CN(C3CCCCC3)CC2C1=O)N1CCN(c2ccc(Cl)cc2)CC1	O=C(CN1C(=O)C2CN(C3CCCCC3)CC2C1=O)N1CCN(c2ccc(Cl)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1SC(=NNC(=O)c2cccs2)N(C)C1=O	CC1SC(=NNC(=O)c2cccs2)N(C)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=CC(C)(C)Nc2cc3c(cc21)-c1ccccc1)c1C3	CC1=CC(C)(C)Nc2cc3c(cc21)-c1ccccc1)c1C3	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cc1ccccc(Cl)c1)Nc1ccc(C(=O)O)c(O)c1	O=C(Cc1ccccc(Cl)c1)Nc1ccc(C(=O)O)c(O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1CCc2ccccc3nc4c(c(c23)C1)CCN(CCc1ccccc1OCC(=O)O)C4	CCN1CCc2ccccc3nc4c(c(c23)C1)CCN(CCc1ccccc1OCC(=O)O)C4	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCNCC1cc2c(Nc3ccc(C(F)(F)F)cc3)ncnc2s1	CN(C)CCNCC1cc2c(Nc3ccc(C(F)(F)F)cc3)ncnc2s1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1c2cc(Br)ccc2sn1-c1ccccc1	O=c1c2cc(Br)ccc2sn1-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(COc1cncc(-c2ccc(NCc3cnn(-c4ccccc4)c3)cc2)c1)Cc1c[nH]c2ccccc12	NC(COc1cncc(-c2ccc(NCc3cnn(-c4ccccc4)c3)cc2)c1)Cc1c[nH]c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(F)cc(C)c1NC(=O)c1cc(S(C(=O)=O)c(Cl)cc1N	Cc1cc(F)cc(C)c1NC(=O)c1cc(S(C(=O)=O)c(Cl)cc1N	TRUE	TRUE	TRUE
CNc1ccnc(NC)n1	CNc1ccnc(NC)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccc(O)c(NC(=O)COC2ccccc2)c1	CCc1ccc(O)c(NC(=O)COC2ccccc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cnc2nc(C(=O)Nc3ccc(S(=O)(=O)C(F)F)cc3)cn2c1	Cc1cnc2nc(C(=O)Nc3ccc(S(=O)(=O)C(F)F)cc3)cn2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CN1CCOCC1)Nc1ccccc(-c2ccc(-c3nc4cc(C(F)(F)F)ccc4[nH]3)cc2)c1	O=C(CN1CCOCC1)Nc1ccccc(-c2ccc(-c3nc4cc(C(F)(F)F)ccc4[nH]3)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1cccc(NC(=O)Nc2ncc3c(n2)CC(c2ccccc(Cl)c2)CC3=O)c1	N#Cc1cccc(NC(=O)Nc2ncc3c(n2)CC(c2ccccc(Cl)c2)CC3=O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCc1cccn1)C1CCC(=O)N(Cc2c(F)cccc2Cl)C1	O=C(NCc1cccn1)C1CCC(=O)N(Cc2c(F)cccc2Cl)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCN1c2c(F)cc3ccccc3c2NS1(=O)=O	CCCCN1c2c(F)cc3ccccc3c2NS1(=O)=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccncc1C(O)=Nc1cncc(C(=O)c2cn(C(C)C)c3cncnc23)c1	Cc1cccncc1C(O)=Nc1cncc(C(=O)c2cn(C(C)C)c3cncnc23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1c(-c2ccc(OC)cc2)cn(C)c1Cl	COC(=O)c1c(-c2ccc(OC)cc2)cn(C)c1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1nccc2n1CCc1cc(OC3ccccc3)ccc1-2	O=c1nccc2n1CCc1cc(OC3ccccc3)ccc1-2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CCN(C2CN(Cc3ccccc3Br)S(=O)(=O)C2)CCS1	O=C1CCN(C2CN(Cc3ccccc3Br)S(=O)(=O)C2)CCS1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)C(=NOC)c1ccccc1COC1ccccc1C(F)(F)F	CNC(=O)C(=NOC)c1ccccc1COC1ccccc1C(F)(F)F	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1c(C2C(O)CC3(C)C(CCC4C3CCC3)C(C)C(C5=C(=O)OC5)CCC43O)C2)ccc2c1CCCC2(C)C	Cc1c(C2C3CC4C(CCC5(C)C(C6=CC(=O)OC6)CCC45O)C3(C)CC2O)ccc2c1CCCC2(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)N=S2Oc3ccccc3C=Cc2ccc(F)cc2)cc1	Cc1ccc(S(=O)(=O)N=S2Oc3ccccc3C=Cc2ccc(F)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Nc2ncc(Br)c(Nc3cc(C4CC4)n[nH]3)n2)cc1Cl	COc1ccc(Nc2ncc(Br)c(Nc3cc(C4CC4)n[nH]3)n2)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>COc1ccc(CNC(=O)CCCc2cc(C)c3c(C)nnc(O)c3n2)c(OC)c1</chem>	<chem>COc1ccc(CNC(=O)CCCc2cc(C)c3c(C)nnc(O)c3n2)c(OC)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1c2ccccc2C(O)(c2ccc(OCCN3CCCC3)cc2)N1CCCN1CCOCC1</chem>	<chem>O=C1c2ccccc2C(O)(c2ccc(OCCN3CCCC3)cc2)N1CCCN1CCOCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C2C(C(=O)c3ccc(C)o3)=C(O)C(=O)N2CCN2CCOCC2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(C2C(C(=O)c3ccc(C)o3)=C(O)C(=O)N2CCN2CCOCC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)CC1CCC2Cc3cnc(Nc4ccccc4)nc3N2C1</chem>	<chem>COC(=O)CC1CCC2Cc3cnc(Nc4ccccc4)nc3N2C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)CCCN1c(=O)oc2c(C)c3c(cc2c1=O)OC03</chem>	<chem>O=C(O)CCCN1c(=O)oc2c(C)c3c(cc2c1=O)OC03</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1ncnc2c1ncn2C1OC(COP(=O)(NC(C(=O)O)c2ccccc2)Oc2ccccc2)C(O)C1O</chem>	<chem>Nc1ncnc2c1ncn2C1OC(COP(=O)(NC(C(=O)O)c2ccccc2)Oc2ccccc2)C(O)C1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(CSCC1OC(=O)N)C1Cc1ccccc1)NN=Cc1ccc(Br)cc1</chem>	<chem>O=C(CSCC1OC(=O)N)C1Cc1ccccc1)NN=Cc1ccc(Br)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(C)c(N2CCN(S(=O)(=O)c3ccc(Br)s3)CC2)c1</chem>	<chem>Cc1ccc(C)c(N2CCN(S(=O)(=O)c3ccc(Br)s3)CC2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)OC1CC(C)C23OC(C)(C)C(CC(OC(=O)c4ccccc4)C2(C)C1OC(=O)c1ccc(OC)cc1)C(OC(C)=O)C3OC(=O)c1ccc(OC)cc1</chem>	<chem>COC(=O)OC1CC(C)C23OC(C)(C)C(CC(OC(=O)c4ccccc4)C2(C)C1OC(=O)c1ccc(OC)cc1)C(OC(C)=O)C3OC(=O)c1ccc(OC)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCc1nn(-c2ccc(S(=O)(=O)N3CCOCC3)cc2[N+](=O)[O-])c(=O)n1Cc1ccc(-c2ccccc2S(=O)(=O)NC(=O)NCC2ccccc2)cc1</chem>	<chem>CCCCc1nn(-c2ccc(S(=O)(=O)N3CCOCC3)cc2[N+](=O)[O-])c(=O)n1Cc1ccc(-c2ccccc2S(=O)(=O)NC(=O)NCC2ccccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nn(-c2ccc([N+](=O)[O-])cc2)c(N)c1C=NO</chem>	<chem>Cc1nn(-c2ccc([N+](=O)[O-])cc2)c(N)c1C=NO</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCC1=CC2=NC(=O)C3(OC(=O)C(C(C)C)=C3C=C)C(=N)N2O1</chem>	<chem>C=CC1=C(C(C)C)C(=O)OC12C(=N)N1OC(CCC)=CC1=NC2=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)C1NC(=O)CC(Cc2ccc(O)cc2)NC(=O)C(Cc2ccccc2)N(C)C(=O)C(CCCNC(=N)N)NC(=O)C2CCCN2C1=O</chem>	<chem>CC(C)C1NC(=O)CC(Cc2ccc(O)cc2)NC(=O)C(Cc2ccccc2)N(C)C(=O)C(CCCNC(=N)N)NC(=O)C2CCCN2C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1C(=O)N(CC2CCNCC2)c2ccc(Br)cc21</chem>	<chem>O=C1C(=O)N(CC2CCNCC2)c2ccc(Br)cc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)c1ocnc1CC(NC(=O)c1ccccc1OCc1ccccc1)C(=O)O</chem>	<chem>CC(C)(C)c1ocnc1CC(NC(=O)c1ccccc1OCc1ccccc1)C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1nccc(-c2ccccc2C(O)=Nc2cccc(CN3CCC(C(O)=NC4CCCC4)CC3)c2)cc1Cl</chem>	<chem>COc1nccc(-c2ccccc2C(O)=Nc2cccc(CN3CCC(C(O)=NC4CCCC4)CC3)c2)cc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccccc(N(CC(=O)N)NC2CCCC(C)C2)S(=O)(=O)c2c(C)nc(O)nc2O)c1</chem>	<chem>COc1ccccc(N(CC(=O)N)NC2CCCC(C)C2)S(=O)(=O)c2c(C)nc(O)nc2O)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Sc1nnc(CN2CCN(c3cccn3)CC2)n1Cc1ccccc1</chem>	<chem>Sc1nnc(CN2CCN(c3cccn3)CC2)n1Cc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NC1CC1)c1cccc(-c2cnc3[nH]nc(-c4cc(N5CCC(F)(F)C5)ncn4)c3n2)c1</chem>	<chem>O=C(NC1CC1)c1cccc(-c2cnc3[nH]nc(-c4cc(N5CCC(F)(F)C5)ncn4)c3n2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nnc(NC(=O)CC2C(=O)NCCN2CCc2ccccc2)s1</chem>	<chem>Cc1nnc(NC(=O)CC2C(=O)NCCN2CCc2ccccc2)s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>BrC1cccc(C2Nc3ccccc3NC3=C2CC3)c1</chem>	<chem>BrC1cccc(C2Nc3ccccc3NC3=C2CC3)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC1CCC2C3CCC4(O)CC(=CC5(C)C(C6=CC(=O)OC6)CC(O)C(C)(O)C5CCC43C)OC12C</chem>	<chem>CCC1CCC2C3CCC4(O)CC(=CC5(C)C(C6=CC(=O)OC6)CC(O)C(C)(O)C5CCC43C)OC12C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)NOC(C)(C)C(Sc1ccccc1)C(C)(C)C</chem>	<chem>CCOC(=O)NOC(C)(C)C(Sc1ccccc1)C(C)(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC(=O)N)NCc1ccco1)C(=O)C1CCN(S(=O)(=O)c2ccnc2)CC1</chem>	<chem>CCN(CC(=O)N)NCc1ccco1)C(=O)C1CCN(S(=O)(=O)c2ccnc2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)CC(NC(=O)Cc1ccccc1)c1nnc(SCc2ccc3c(c2)OCO3)n1-c1ccncc1</chem>	<chem>CC(C)CC(NC(=O)Cc1ccccc1)c1nnc(SCc2ccc3c(c2)OCO3)n1-c1ccncc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(C(=O)NS(=O)(=O)c2ccccc2)CCN1C(=O)c1cccs1</chem>	<chem>CC1(C(=O)NS(=O)(=O)c2ccccc2)CCN1C(=O)c1cccs1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)OC(=O)N1CC(CNC(=O)c2cc3c(nc(N)n3Cc3ccccc3F)[nH]2)CC1</chem>	<chem>CC(C)(C)OC(=O)N1CC(CNC(=O)c2cc3c(nc(N)n3Cc3ccccc3F)[nH]2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC(Cc1COC(N)=N1)c1ccccc1</chem>	<chem>CCC(Cc1COC(N)=N1)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>O=C(NN=Cc1ccc(C=NNC(=O)c2ccncc2)cc1)c1ccncc1</chem>	<chem>O=C(NN=Cc1ccc(C=NNC(=O)c2ccncc2)cc1)c1ccncc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CCOC(=O)COc1c(OC)cc2cc3[n+](cc2c1OC(=O)OCC)CCc1cc2c(cc1-3)OCO2</chem>	<chem>CCOC(=O)COc1c(OC)cc2cc3[n+](cc2c1OC(=O)OCC)CCc1cc2c(cc1-3)OCO2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccccc1Nc1cnc(-n2cnc3ccccc32)n1</chem>	<chem>COc1ccccc1Nc1cnc(-n2cnc3ccccc32)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)NC1=C(NCCCO)C(=O)c2ccccc2C1=O</chem>	<chem>CC(=O)NC1=C(NCCCO)C(=O)c2ccccc2C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1cc(O)nc2nc(O)c(O)nc12</chem>	<chem>Nc1cc(O)nc2nc(O)c(O)nc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)C(=O)N1c2ccccc2-c2[nH]c3ccccc3c2C1CC(=O)NCC1cccn1</chem>	<chem>CN(C)C(=O)N1c2ccccc2-c2[nH]c3ccccc3c2C1CC(=O)NCC1cccn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)OC(N)=O)OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O</chem>	<chem>CC(C)OC(N)=O)OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCC(O)c1ccccc(OC)c1OC</chem>	<chem>CCCCCCC(O)c1ccccc(OC)c1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(C)C=C(C(=O)NCCNC(=O)COc2ccc([N+](=O)[O-])cc2)C(C)(C)N1</chem>	<chem>CC1(C)C=C(C(=O)NCCNC(=O)COc2ccc([N+](=O)[O-])cc2)C(C)(C)N1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1cnc(S(=O)(=O)N2CCCc3cc(F)ccc32)c1</chem>	<chem>Cn1cnc(S(=O)(=O)N2CCCc3cc(F)ccc32)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)CCn1nc2c3ccccc3sc3c(NS(=O)(=O)c4ccccc4F)ccc1c32</chem>	<chem>O=C(O)CCn1nc2c3ccccc3sc3c(NS(=O)(=O)c4ccccc4F)ccc31)Sc1ccccc1-2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCN(CCC)c1c(C)nc(-c2c(C)cc(C)cc2OC)nc1C</chem>	<chem>CCCN(CCC)c1c(C)nc(-c2c(C)cc(C)cc2OC)nc1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(OC)c(CNc2cc(C)nc3c(-c4ccccc4)c(C)nn23)c1</chem>	<chem>COc1ccc(OC)c(CNc2cc(C)nc3c(-c4ccccc4)c(C)nn23)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)N(C(=O)C=Cc1ccco1)C1CC=CCC1</chem>	<chem>CC(=O)N(C(=O)C=Cc1ccco1)C1CC=CCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCc1c(Cc2ccc(-c3ccccc3-c3nc(=O)o[nH]3)cc2)c(=O)n(C2CCC(OCC(C)(C)CN(C)C)CC2)c2ncnn12</chem>	<chem>CCCc1c(Cc2ccc(-c3ccccc3-c3nc(=O)o[nH]3)cc2)c(=O)n(C2CCC(OCC(C)(C)CN(C)C)CC2)c2ncnn12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC1CC(COC(=O)N2CCN(C(=O)c3csnn3)CC2)C1</chem>	<chem>NC1CC(COC(=O)N2CCN(C(=O)c3csnn3)CC2)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CN(Cc2ccc(CN3CCNCN3=N)cc2)CCN1c1cnc2ccc(Cl)cc12</chem>	<chem>CC1CN(Cc2ccc(CN3CCNCN3=N)cc2)CCN1c1cnc2ccc(Cl)cc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(O)C1CN(Cc2ccoc2)CC1N(C)c1ncnc2[nH]ccc12</chem>	<chem>CC(O)C1CN(Cc2ccoc2)CC1N(C)c1ncnc2[nH]ccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1ccc(NC(=O)CNC(=O)N(CCC)N=O)cc1</chem>	<chem>Nc1ccc(NC(=O)CNC(=O)N(CCC)N=O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1Nc2ccccc2C1=Cc1cc(C)ccc1OCCOc1ccccc1</chem>	<chem>O=C1Nc2ccccc2C1=Cc1cc(C)ccc1OCCOc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCN1C(=O)c2[nH]nc(-c3ccccc3O)c2C1c1ccncc1</chem>	<chem>CCCN1C(=O)c2[nH]nc(-c3ccccc3O)c2C1c1ccncc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(C)cc(NC(=O)C2(NC(=O)C(F)(F)F)CCCC2)c1</chem>	<chem>Cc1cc(C)cc(NC(=O)C2(NC(=O)C(F)(F)F)CCCC2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)=CCN1C(=O)N(CCN2CCN(C)CC2)CN=C1C</chem>	<chem>CC(C)=CCN1C(=O)N(CCN2CCN(C)CC2)CN=C1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccccc1C=C1C(=O)N(c2cccc(C(F)(F)F)c2)S(=O)(=O)c2cc(Br)ccc21</chem>	<chem>COc1ccccc1C=C1C(=O)N(c2cccc(C(F)(F)F)c2)S(=O)(=O)c2cc(Br)ccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c(C(=O)N(c2ccc(O)cc2)c2ccc(O)cc2)cc(-c2cc(Cl)ccc2C(=O)N2Cc3ccccc3CC2CN2CCOCC2)n1C</chem>	<chem>Cc1c(C(=O)N(c2ccc(O)cc2)c2ccc(O)cc2)cc(-c2cc(Cl)ccc2C(=O)N2Cc3ccccc3CC2CN2CCOCC2)n1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(c1ccccc1)n1cnc2cc3cc(-c4ccc(CN(C)C)cc4)oc3cc21</chem>	<chem>CC(c1ccccc1)n1cnc2cc3cc(-c4ccc(CN(C)C)cc4)oc3cc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)c1cc(-c2n[nH]c(CN)n2)c(O)c(C)C)c1</chem>	<chem>CC(C)c1cc(-c2n[nH]c(CN)n2)c(O)c(C)C)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1CCCCCCC=CCN(C(=O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)CN1</chem>	<chem>O=C1CCCCCCC=CCN(C(=O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)CN1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(Nc2c(NS(=O)(=O)c3c(C)cccc3C)c(=O)c2=O)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(Nc2c(NS(=O)(=O)c3c(C)cccc3C)c(=O)c2=O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C(=O)CN(CCc1ccccc1)C(=O)CN(CC(=O)N)O)CC1CCCCC1)c1ccc(Br)cc1)c1cccs1</chem>	<chem>CN(CC1CCCCC1)C(=O)CN(CC(=O)N(CCc1ccccc1)CC(=O)N(C)c1cccs1)c1ccc(Br)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Cc1CCCC1)N1CC(C)Oc2ccc(NC(=O)N3Cc4cncnc4C3)cc2)CC1</chem>	<chem>O=C(Cc1CCCC1)N1CC(C)Oc2ccc(NC(=O)N3Cc4cncnc4C3)cc2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>Cc1ccc(C)c(C(C)O)C=CC2C(O)CC(=O)C2CCC=CCCCC(=O)O)c1</chem>	<chem>Cc1ccc(C)c(C(C)O)C=CC2C(O)CC(=O)C2CCC=CCCCC(=O)O)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1=CCC(C(C)(C)CNC(=O)Nc2ccc(C(=O)O)cc2)CC1</chem>	<chem>CC1=CCC(C(C)(C)CNC(=O)Nc2ccc(C(=O)O)cc2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=c1nc(CN2CCCC2)nc2n1CCc1ccccc1-2</chem>	<chem>O=c1nc(CN2CCCC2)nc2n1CCc1ccccc1-2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(O)c2c(c1)C(CSCCN1CCN(c3ccc(F)cc3)CC1)CC2=O</chem>	<chem>COc1cc(O)c2c(c1)C(CSCCN1CCN(c3ccc(F)cc3)CC1)CC2=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Fc1cccc2sc(NN=Cc3ccccc3)nc12</chem>	<chem>Fc1cccc2sc(NN=Cc3ccccc3)nc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NS(=O)(=O)c1ccc(NC(=O)COc2ccccc2-c2nnnn2-c2ccccc2)cc1</chem>	<chem>NS(=O)(=O)c1ccc(NC(=O)COc2ccccc2-c2nnnn2-c2ccccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCOC(=O)c1ccc(N)cc1</chem>	<chem>CCCCCOC(=O)c1ccc(N)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc2c(OC3OCC3OC(=O)c3ccc(O)cc3)c3c(c(-c4c(OC)cc5c(c4OC)COC5=O)c2cc1OC)C(=O)OC3</chem>	<chem>COc1cc2c(OC3OCC3OC(=O)c3ccc(O)cc3)c3c(c(-c4c(OC)cc5c(c4OC)COC5=O)c2cc1OC)C(=O)OC3</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Clc1ccc(CN2CC3CCCC(CNc4cncnc4)C3C2)cn1</chem>	<chem>Clc1ccc(CN2CC3CCCC(CNc4cncnc4)C3C2)cn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(-c2nc3ccnc3n2C)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(-c2nc3ccnc3n2C)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=c1cc(C=NN5(=O)(=O)c2ccccc2)c2ccc(OCc3ccccc3)cc2o1</chem>	<chem>O=c1cc(C=NN5(=O)(=O)c2ccccc2)c2ccc(OCc3ccccc3)cc2o1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)c1ccc(C=NNC(=O)O)c2cccc(NC(=O)C(F)(F)F)c2cc1</chem>	<chem>CN(C)c1ccc(C=NNC(=O)O)c2cccc(NC(=O)C(F)(F)F)c2cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(C=Cc1ccc(O)c(O)c1)OCC(=O)N1CCN(c2ccc(N3CC(O)C3)nn2)CC1</chem>	<chem>O=C(C=Cc1ccc(O)c(O)c1)OCC(=O)N1CCN(c2ccc(N3CC(O)C3)nn2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nnc(NC(=O)CN2CCOCC2)s1</chem>	<chem>Cc1nnc(NC(=O)CN2CCOCC2)s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1c2ccccc2-c2onc3ccccc1c23</chem>	<chem>O=C1c2ccccc2-c2onc3ccccc1c23</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(NS(=O)(=O)c2ccccc3c(N(C)C)cccc23)c2c1C(=O)c1ccccc1C2=O</chem>	<chem>COc1ccc(NS(=O)(=O)c2ccccc3c(N(C)C)cccc23)c2c1C(=O)c1ccccc1C2=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c(-c2ccc3c(n2)OC(O)(CO)C3)cnm1-c1cncn1</chem>	<chem>Cc1c(-c2ccc3c(n2)OC(O)(CO)C3)cnm1-c1cncn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CN(C2CCN(C(=O)C=CCC(C)(C)C)CC2)CC(C)O1</chem>	<chem>CC1CN(C2CCN(C(=O)C=CCC(C)(C)C)CC2)CC(C)O1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Cc1cccs1)Nc1ccc(C(=O)N2CCCC2)cc1</chem>	<chem>O=C(Cc1cccs1)Nc1ccc(C(=O)N2CCCC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC12CCC(=O)N1n1c(Cn3nnc4ccccc43)nnc1S2</chem>	<chem>CC12CCC(=O)N1n1c(Cn3nnc4ccccc43)nnc1S2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1NC(=S)NC1=Cc1ccc[nH]1</chem>	<chem>O=C1NC(=S)NC1=Cc1ccc[nH]1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=[N+](([O-])c1ccccc1N1Cc2cnc3nccccc3c2C1=O</chem>	<chem>O=C1c2c(cnc3nccccc23)CN1c1ccccc1[N+](=O)[O-]</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nnc(SCCOc2ccc(F)cc2)n1N</chem>	<chem>Cc1nnc(SCCOc2ccc(F)cc2)n1N</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c(C(=O)O)sc2[nH]c(=O)[nH]c(=O)c12</chem>	<chem>Cc1c(C(=O)O)sc2[nH]c(=O)[nH]c(=O)c12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>O=C(CCCN1CC=C(c2c(O)cc(O)c3c(=O)cc(-c4cccc(O)c4)oc23)CC1=O)Nc1ccc(O)cc1</chem>	<chem>O=C(CCCN1CC=C(c2c(O)cc(O)c3c(=O)cc(-c4cccc(O)c4)oc23)CC1=O)Nc1ccc(O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)c1ccc(OCCCN2CC3CC2CN3OC2CCCC2)cc1O</chem>	<chem>O=C(O)c1ccc(OCCCN2CC3CC2CN3OC2CCCC2)cc1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN1C(=N)N(C)C(=Cc2enc3cccc3c2)C1=O</chem>	<chem>CCN1C(=N)N(C)C(=Cc2enc3cccc3c2)C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCCC(C)(CCCCCCC(C)OC1OC2COC(c3cccc3)OC2C(O)C1OCCCCCCCC</chem>	<chem>CCCCCCCCC(C)(CCCCCCC(C)OC1OC2COC(c3cccc3)OC2C(O)C1OCCCCCCCC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN1CCN(N=Cc2ccc(N(C)C)c3cccc23)CC1</chem>	<chem>CN1CCN(N=Cc2ccc(N(C)C)c3cccc23)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=S1(=O)C=C(Nc2c(O)nc3cc(Cl)ccc3c2O)CC1</chem>	<chem>O=S1(=O)C=C(Nc2c(O)nc3cc(Cl)ccc3c2O)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1C(c2ccc(Cl)cc2)=[N+](=[O-])c2ccc(Cl)cc21</chem>	<chem>O=C1C(c2ccc(Cl)cc2)=[N+](=[O-])c2ccc(Cl)cc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)Cc1ccc(Oc2c(F)c(F)c(C#N)c(F)c2F)cc1</chem>	<chem>CN(C)Cc1ccc(Oc2c(F)c(F)c(C#N)c(F)c2F)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(C(=O)OCC(N)=O)c(C)n1-c1ccc(F)cc1</chem>	<chem>Cc1cc(C(=O)OCC(N)=O)c(C)n1-c1ccc(F)cc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>Nn1c(=O)[nH]c2cc(C(F)F)ccc2c1=O</chem>	<chem>Nn1c(=O)[nH]c2cc(C(F)F)ccc2c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(c1ccc(Cl)cc1)C1CCCN1C(=O)CCc1cccc1</chem>	<chem>O=C(c1ccc(Cl)cc1)C1CCCN1C(=O)CCc1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(Nc2nc(-c3nc4c(s3)CCCC4)cs2)n[nH]1</chem>	<chem>Cc1cc(Nc2nc(-c3nc4c(s3)CCCC4)cs2)n[nH]1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=c1ccoc2cccc(NC3=NCCN3)c12</chem>	<chem>O=c1ccoc2cccc(NC3=NCCN3)c12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c(CC(=O)NCCc2cccc2)c(=O)oc2cc(OS(N)(=O)=O)ccc12</chem>	<chem>Cc1c(CC(=O)NCCc2cccc2)c(=O)oc2cc(OS(N)(=O)=O)ccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(NC(=O)CCc1cccc1)c1cccc1</chem>	<chem>CC(NC(=O)CCc1cccc1)c1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)c1c(-c2cccc2)c(-c2cccc2)nn(CCS(=O)(=O)O)c1=O</chem>	<chem>CC(=O)c1c(-c2cccc2)c(-c2cccc2)nn(CCS(=O)(=O)O)c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(Nc2ncc(F)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1C1CCNCC1</chem>	<chem>Cc1cc(Nc2ncc(F)c(Nc3cn(C)nc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC2CC2)cc1C1CCNCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=C(c1cc(OC)cc(Cl(=O)O)c1)c1cc(OC)c(OC)c(OC)c1</chem>	<chem>C=C(c1cc(OC)cc(Cl(=O)O)c1)c1cc(OC)c(OC)c(OC)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=C(C)CN(CC)c1nc(C)nc2c(-c3ccc(Cl)cc3C)n(C)nc12</chem>	<chem>C=C(C)CN(CC)c1nc(C)nc2c(-c3ccc(Cl)cc3C)n(C)nc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(-c2ncc(C3CN4CCC3CC4)cn2)ccc1Nc1nccc(-c2c(-c3cccc(C(=O)Nc4c(F)cccc4F)c3)nc3cccn23)n1</chem>	<chem>COc1cc(-c2ncc(C3CN4CCC3CC4)cn2)ccc1Nc1nccc(-c2c(-c3cccc(C(=O)Nc4c(F)cccc4F)c3)nc3cccn23)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#CCc1cc(F)c1cc1S(=O)(=O)Nc1cccc(-c2ccc3c(N)n[nH]c3c2)c1</chem>	<chem>N#CCc1cc(F)c1cc1S(=O)(=O)Nc1cccc(-c2ccc3c(N)n[nH]c3c2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1cncc(CNCC2COCc3nc4cccc4n32)c1</chem>	<chem>c1cncc(CNCC2COCc3nc4cccc4n32)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc(=O)C(C(C)C)C1CC2(C)C3CC(=O)C4(O)CC(O)CCC4(C)C3C(OC(C)=O)CC12C(C)C(O</chem>	<chem>COc(=O)C(C(C)C)C1CC2(C)C3CC(=O)C4(O)CC(O)CCC4(C)C3C(OC(C)=O)CC12C(C)C(O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1cc2c(-c3ccc(O)cc3)nn(-c3cccc(C(F)F)F)c3)c2cn1)c1cccc1Cl</chem>	<chem>O=C(Nc1cc2c(-c3ccc(O)cc3)nn(-c3cccc(C(F)F)F)c3)c2cn1)c1cccc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(C)CC=C(c2cc(C3CN(C(=O)C4SCCC(C(C)=O)O)(CC4)C5(C)C)CCO3)ccc2NC(=O)c2ncc(C#N)[nH]2)CC1</chem>	<chem>CC1(C)CC=C(c2cc(C3CN(C(=O)C4SCCC(C(C)=O)O)(CC4)C5(C)C)CCO3)ccc2NC(=O)c2ncc(C#N)[nH]2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=C1CC2CC34CC5OC6c(OC7CC(C)C(=O)CC8C(CC9OC(CCC1O2)CC(C)C9=C)OC(C(C(=O)O)C8OC(C8OC)OC7C6O3)C5O4</chem>	<chem>C=C1CC2CC34CC5OC6c(OC7CC(C)C(=O)CC8C(CC9OC(CCC1O2)CC(C)C9=C)OC(C(C(=O)O)C8OC(C8OC)OC7C6O3)C5O4</chem>	FALSE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1cccc1)N1CCN(c2nccn2)CC1</chem>	<chem>O=C(Nc1cccc1)N1CCN(c2nccn2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>COc1ccc(CN(C)CCCc2c[nH]c3ccc(N)cc23)cc1OC</chem>	<chem>COc1ccc(CN(C)CCCc2c[nH]c3ccc(N)cc23)cc1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCc1cc(O)c2c(c1)OC(C)(C)C1CC=C(C)CC21</chem>	<chem>CCCCCc1cc(O)c2c(c1)OC(C)(C)C1CC=C(C)CC21</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>NS(=O)(=O)c1ccc(Nc2ncc3c(n2)N(c2cccc(Cl)c2Cl)C(=O)CC3)cc1</chem>	<chem>NS(=O)(=O)c1ccc(Nc2ncc3c(n2)N(c2cccc(Cl)c2Cl)C(=O)CC3)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1c(O)c2cc(Cl)ccc2oc1=O</chem>	<chem>CCc1c(O)c2cc(Cl)ccc2oc1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(CS)C(=O)N(CC(=O)O)c1cccc(CCCCCCCCc2cccc2)c1</chem>	<chem>CC(CS)C(=O)N(CC(=O)O)c1cccc(CCCCCCCCc2cccc2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCCCCC(=O)OCC</chem>	<chem>CCCCCCCCCCC(=O)OCC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(C(F)(F)F)c(SC)c1C(=O)NC1C2CC3CC1CC(C(=O)NCC(C)(C)CN1CCCC1)(C3)C2</chem>	<chem>COc1cc(C(F)(F)F)c(SC)c1C(=O)NC1C2CC3CC1CC(C(=O)NCC(C)(C)CN1CCCC1)(C3)C2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)NC1CN(C(=O)c2cccc2)CC1C(C)C</chem>	<chem>COC(=O)NC1CN(C(=O)c2cccc2)CC1C(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(NC(=S)NC(=O)c2cccs2)cc1C</chem>	<chem>Cc1ccc(NC(=S)NC(=O)c2cccs2)cc1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(C(=O)N)NC(=O)c2cncc2)CC1(Cl)Cl</chem>	<chem>CC1(C(=O)N)NC(=O)c2cncc2)CC1(Cl)Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c(C)n(Cc2ccc(-c3cccc3C(=O)O)cc2)c2ccc(C(=O)NC(C)c3cccc(C(C)(C)C)c3)cc12</chem>	<chem>Cc1c(C)n(Cc2ccc(-c3cccc3C(=O)O)cc2)c2ccc(C(=O)NC(C)c3cccc(C(C)(C)C)c3)cc12</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CC(C)N(CCN(C(=O)C1c2cccc2Oc2cccc21)Cc1cccc1</chem>	<chem>CC(C)N(CCN(C(=O)C1c2cccc2Oc2cccc21)Cc1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(-c2n[nH]c(C)c2-c2cnc(N)n2)ccn1</chem>	<chem>COc1cc(-c2n[nH]c(C)c2-c2cnc(N)n2)ccn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C[S+](=[O-])c1nc(N2CCOCC2)c2nc(OC3CCNCC3)nc(N3CCN(c4cccc(F)c4)CC3)c2n1</chem>	<chem>C[S+](=[O-])c1nc(N2CCOCC2)c2nc(OC3CCNCC3)nc(N3CCN(c4cccc(F)c4)CC3)c2n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Clc1cccc(N2CCN(CCCNCC3CCc4cccc43)CC2)c1</chem>	<chem>Clc1cccc(N2CCN(CCCNCC3CCc4cccc43)CC2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1n[n+](=[O-])c2c3c(ccc2[n+]1[O-])CCC3</chem>	<chem>Nc1n[n+](=[O-])c2c3c(ccc2[n+]1[O-])CCC3</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)Nc1cccc(NC(=O)CSc2nc(-c3cccs3)cc(C(F)(F)F)n2)c1</chem>	<chem>CC(=O)Nc1cccc(NC(=O)CSc2nc(-c3cccs3)cc(C(F)(F)F)n2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Clc1cccc2nc(-c3cccc4cccc34)nn12</chem>	<chem>Clc1cccc2nc(-c3cccc4cccc34)nn12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC(C(=O)COP(=O)(N(CC)CCl)N(C)CCl)c1cccc1</chem>	<chem>CCC(C(=O)COP(=O)(N(CC)CCl)N(C)CCl)c1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(C)N=C(N)N=C(N)N1c1cccc(CN)c1</chem>	<chem>CC1(C)N=C(N)N=C(N)N1c1cccc(CN)c1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>COc1cc(-c2cn(CCO(C(=O)NN3CCCC3)c3cccc23)cc(OC)c1OC</chem>	<chem>COc1cc(-c2cn(CCO(C(=O)NN3CCCC3)c3cccc23)cc(OC)c1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N=C(N)c1cccc(N2CCN(S(=O)(=O)O)CCCCCO)CC2)c1</chem>	<chem>N=C(N)c1cccc(N2CCN(S(=O)(=O)O)CCCCCO)CC2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc2c(Oc3ccc(NC(=O)c4cc(-c5ccc(F)cc5)ccn4)cc3F)ccnc2cc1OCCCN1CCCCC1</chem>	<chem>COc1cc2c(Oc3ccc(NC(=O)c4cc(-c5ccc(F)cc5)ccn4)cc3F)ccnc2cc1OCCCN1CCCCC1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>C=C(C)COC(C)OCc1cc2c(cc1OC)C(=O)C(=Cc1ccc(N(C)C)cc1)C2</chem>	<chem>C=C(C)COC(C)OCc1cc2c(cc1OC)C(=O)C(=Cc1ccc(N(C)C)cc1)C2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)c1cccc(Oc2nc3cccc3nc2C(Cl)(Cl)Cl)c1</chem>	<chem>COC(=O)c1cccc(Oc2nc3cccc3nc2C(Cl)(Cl)Cl)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CCC2C(C)C(OCC#CCCCC(=O)N)O)OC3OC4(C)CCC1C32O04</chem>	<chem>CC1CCC2C(C)C(OCC#CCCCC(=O)N)O)OC3OC4(C)CCC1C32O04</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(O)c(C(=O)C=Cc2ccc(OCc3cccc3)c2)c(OC)c1</chem>	<chem>COc1cc(O)c(C(=O)C=Cc2ccc(OCc3cccc3)c2)c(OC)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCc1cc(=O)oc2c(C)c(OC(C)C(=O)OC)ccc12</chem>	<chem>CCCc1cc(=O)oc2c(C)c(OC(C)C(=O)OC)ccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nc(N)sc1-c1csc(Nc2ccc(Br)cc2)n1</chem>	<chem>Cc1nc(N)sc1-c1csc(Nc2ccc(Br)cc2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(C)C(C(=O)c2cn(CC#N)c3ccc(Br)cc23)C1(C)C</chem>	<chem>CC1(C)C(C(=O)c2cn(CC#N)c3ccc(Br)cc23)C1(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=CCN(CC=C)c1cc[n+](CC=C)c2cccc12</chem>	<chem>C=CCN(CC=C)c1cc[n+](CC=C)c2cccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=c1[nH]c2ccc(Cc3ccc(OCc4ccc(F)c(F)c4)cc3)cc2cc1O</chem>	<chem>O=c1[nH]c2ccc(Cc3ccc(OCc4ccc(F)c(F)c4)cc3)cc2cc1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cccc(-c2nccc3c2[nH]c2cccc23)c1</chem>	<chem>COc1cccc(-c2nccc3c2[nH]c2cccc23)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCn1ccc2cc(-c3ccc4c(c3)OCO4)ccc21</chem>	<chem>CCn1ccc2cc(-c3ccc4c(c3)OCO4)ccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(O)c2c(=O)c(OC)c(-c3ccc(O)c(O)c3)oc2c1</chem>	<chem>COc1cc(O)c2c(=O)c(OC)c(-c3ccc(O)c(O)c3)oc2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCN1C(=O)C(CC(=O)NCC2CCC(C(=O)C(N)=O)CC2)CC2(C(=O)OCC)CCCC=C12</chem>	<chem>CCCCCCCN1C(=O)C(CC(=O)NCC2CCC(C(=O)C(N)=O)CC2)CC2(C(=O)OCC)CCCC=C12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)CCCS1C(C)OC2CCCOC2(C)O(C)CC2CCCC2)N(C2CCCC2)C(=O)N1Cc1cccc1</chem>	<chem>CN(C)CCCS1C(C)OC2CCCOC2(C)O(C)CC2CCCC2)N(C2CCCC2)C(=O)N1Cc1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1c2cccc2CN1c1c(Cl)cccc1Cl</chem>	<chem>O=C1c2cccc2CN1c1c(Cl)cccc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)c1cccc(CCN(C(=S)SCCCc2c[nH]cn2)c1</chem>	<chem>CN(C)c1cccc(CCN(C(=S)SCCCc2c[nH]cn2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1c2cccc2S2C2c3cccc3CCN12</chem>	<chem>O=C1c2cccc2S2C2c3cccc3CCN12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(C)CCN(Cc2ncc(CO)s2)CC1</chem>	<chem>CC1(C)CCN(Cc2ncc(CO)s2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C#CC(Cc1ccc2c(c1)OC(C(=O)O)(c1cccc1)O2)NC(=O)C(CCCN=C(N)N)NC(=O)c1cc(OC)c(OC)c(OC)c1</chem>	<chem>C#CC(Cc1ccc2c(c1)OC(C(=O)O)(c1cccc1)O2)NC(=O)C(CCCN=C(N)N)NC(=O)c1cc(OC)c(OC)c(OC)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1cc2sc3ccc(C4=NCCN4)cc3c2c2cccc12</chem>	<chem>c1cc2sc3ccc(C4=NCCN4)cc3c2c2cccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)NCCCC1NC(=O)C(Cc2ccc3cccc3c2)NC(=O)C(C)C)NC(=O)C(Cc2cn(CCCNC(=N)N)c3cccc23)NC1=O</chem>	<chem>CC(=O)NCCCC1NC(=O)C(Cc2ccc3cccc3c2)NC(=O)C(C)C)NC(=O)C(Cc2cn(CCCNC(=N)N)c3cccc23)NC1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC1(c2cccc(C(F)(F)F)c2)CCC(=O)N(C)CC1C</chem>	<chem>COC1(c2cccc(C(F)(F)F)c2)CCC(=O)N(C)CC1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(C)c(N2CCN(C(=O)c3cccc4c3(=O)N(Cc3ccco3)C4=O)CC2)c1</chem>	<chem>Cc1ccc(C)c(N2CCN(C(=O)c3cccc4c3(=O)N(Cc3ccco3)C4=O)CC2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCN(C(=O)CC1CC2c3cc(NC(=O)C4CCOCC4)ccc3OC2C1</chem>	<chem>CCCN(C(=O)CC1CC2Oc3ccc(NC(=O)C4CCOCC4)cc3C2C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(CN2CCN(Cc3ccc(Cl(=O)Nc4cccc(C)c4)cc3)CC2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(CN2CCN(Cc3ccc(Cl(=O)Nc4cccc(C)c4)cc3)CC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc(Cc2nc3ccc(-c4nc(Cc5ccc6[nH]ncc6c5)c[nH]4)cc3[nH]2)cc1</chem>	<chem>c1ccc(Cc2nc3ccc(-c4nc(Cc5ccc6[nH]ncc6c5)c[nH]4)cc3[nH]2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)CCN1CCN(C2CCCC2)c2nc(-c3ccc(Br)cc3)cncc21</chem>	<chem>O=C(O)CCN1CCN(C2CCCC2)c2nc(-c3ccc(Br)cc3)cncc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc2cc(Nc3cc(CN4CCCC4)nc(N4CCOCC4)n3)ccc2c1</chem>	<chem>c1ccc2cc(Nc3cc(CN4CCCC4)nc(N4CCOCC4)n3)ccc2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)c1cccc(-n2sc3cccc3c2=O)c1</chem>	<chem>COC(=O)c1cccc(-n2sc3cccc3c2=O)c1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>c1ccc(CCNc2nenc3c2[nH]c2cccc23)cc1</chem>	<chem>c1ccc(CCNc2nenc3c2[nH]c2cccc23)cc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>Cc1ccc(-c2cc(C(=O)Nc3cc4ccc(OC5OC(C)C(O)C5O)c(OC)c4oc3=O)ccc2OC2OC(C)C(O)C(O)C2O)cc1</chem>	<chem>Cc1cc(OC2OC(CO)(C)O(C)C2O)ccc2cc(NC(=O)c3ccc(OC4OC(C)C(O)C(O)C4O)c(-c4ccc(C)cc4)c3)c(=O)oc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)C1(C(=O)N(C)Cc2cnn(-c3cccc3)c2)CCC(NC2CCOCC2F)C1</chem>	<chem>CC(C)C1(C(=O)N(C)Cc2cnn(-c3cccc3)c2)CCC(NC2CCOCC2F)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN1CN(C2CCCC2)c2n[nH]c(=O)c3cccc1c23</chem>	<chem>CN1CN(C2CCCC2)c2n[nH]c(=O)c3cccc1c23</chem>	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
Cc1ccc(S(=O)(=O)N2CCC(C(=O)Nc3ccc(Cl)cc3)CC2)cc1	Cc1ccc(S(=O)(=O)N2CCC(C(=O)Nc3ccc(Cl)cc3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C(C)(CCCN1CCC2(CC1)COCc1ccccc1O2)c1ccccc2ccccc12	CCOC(=O)C(C)(CCCN1CCC2(CC1)COCc1ccccc1O2)c1ccccc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(=O)c1ccc(OCC(=O)OCC(=O)Nc2ccc3[nH]c(O)nc3c2)cc1	CCC(=O)c1ccc(OCC(=O)OCC(=O)Nc2ccc3[nH]c(O)nc3c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1-c1ccccc(-c2nnc3n2CCCC3)c1	COc1ccccc1-c1ccccc(-c2nnc3n2CCCC3)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)OC1C(O)C2(CO2)C2(C)C(Cl)C(C34COCc5c6ccoc6ccc5C3(C)CCC4C(C)(C)CC7(O)C2O5)C1(C)C	FALSE	FALSE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(=O)CC2SC(N3CCOCC3)=NC2=O)cc1C	Cc1ccc(NC(=O)CC2SC(N3CCOCC3)=NC2=O)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1oc(COc2ccccc2)nc2ccccc12	O=c1oc(COc2ccccc2)nc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ncc2cc(C(=O)N3CCC(c4nnscc4C4CC4)CC3)c(=O)n(C3CCCC3)c2n1	Nc1ncc2cc(C(=O)N3CCC(c4nnscc4C4CC4)CC3)c(=O)n(C3CCCC3)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCNC(=S)N(CCC)Cc1cc2cc(C)cc(C)c2nc1O	C=CCNC(=S)N(CCC)Cc1cc2cc(C)cc(C)c2nc1O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(N=c1[nH]c(=NC2CC2)n2ncc(C=C3N=C(O)N=C3O)c2[nH]1)c1ncc(Cl)cn1	CC(N=c1[nH]c(=NC2CC2)n2ncc(C=C3N=C(O)N=C3O)c2[nH]1)c1ncc(Cl)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(c2ccccc2S(=O)(=O)N(C)C)CC1	CN1CCN(c2ccccc2S(=O)(=O)N(C)C)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)C1(CCCc2ccccc2)CCCC(O)C1	CN(C)C1(CCCc2ccccc2)CCCC(O)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCC=CCCCCCCCC(=O)O	CCCCCCCCC=CCCCCCCCC(=O)O	TRUE	TRUE	FALSE
CC1=C(N(CCCOC(C2ccccc2)c2ccccc2)CC(=O)O)C(=O)c2ccccc2C1=O	CC1=C(N(CCCOC(C2ccccc2)c2ccccc2)CC(=O)O)C(=O)c2ccccc2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
#CCOCc1cnc(C(=O)Nc2ccccc([N+](=O)[O-])c2)cn1	#CCOCc1cnc(C(=O)Nc2ccccc([N+](=O)[O-])c2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)Nc1ccccc1C(=O)Nc1ccc2c1C(=O)c1ccccc1C2=O	CS(=O)(=O)Nc1ccccc1C(=O)Nc1ccc2c1C(=O)c1ccccc1C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C)C(NC(=O)NCC1cccoc1)C(=O)NC(C1ccccc1)C(N)=O	CCC(C)C(NC(=O)NCC1cccoc1)C(=O)NC(C1ccccc1)C(N)=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(-c2ccc(CCCO)cc2)sc(Nc2ccc(F-c3cncoc3)c(F)c2)c1C(=O)O	FALSE	FALSE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC1COC2C(OC(=O)c3ccccc3)COC12	CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC1COC2C(OC(=O)c3ccccc3)COC12	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nccc2c1ncn2C1OC(CO)C(O)C1O	Nc1nccc2c1ncn2C1OC(CO)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)C(=O)Cn1c(=O)n(Cc2CCCC2)c(=O)c2c3c(sc21)CCCC3	CCN(CC)C(=O)Cn1c(=O)n(Cc2CCCC2)c(=O)c2c3c(sc21)CCCC3	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1=COc(OC2OC(CO)C(O)C(O)C2O)C2C3(C)C4=C(C(=O)O)CC5(O)OC(=O)C(C)CC5(O)C45OC13C1C3OCC21OC1(C)C	FALSE	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=NNC(=O)c2ccc(C)s2)ccc1OC(C(=O)c1ccc(Br)cc1	COc1cc(C=NNC(=O)c2ccc(C)s2)ccc1OC(C(=O)c1ccc(Br)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCc1c(C)c2ccc(OC(C)=O)cc2oc1=O	CCCCCCCc1c(C)c2ccc(OC(C)=O)cc2oc1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCC(=O)OC(CC)CC(NC(=O)CC(C)NC(=O)C(CCCN=C(N)N)NC(=O)OCc1ccccc1)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(N)=O	CCCCCCCCC(=O)OC(CC)CC(NC(=O)CC(C)NC(=O)C(CCCN=C(N)N)NC(=O)OCc1ccccc1)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(N)=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2cc(OC(=O)c3ccccc3)c(C(C)C)cc2O)cc1	Cc1ccc(-c2cc(OC(=O)c3ccccc3)c(C(C)C)cc2O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(Cc2ccc(NC(=O)Nc3ccc(OC4cccc(C(F)(F)F)c4)c(-c4ccccc4)c3)cc2)CC1	CN1CCN(Cc2ccc(NC(=O)Nc3ccc(OC4cccc(C(F)(F)F)c4)c(-c4ccccc4)c3)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1ccc(-c2ccc(NC(=O)c3ccc(C(N)=O)cc3)c2)cc1	COC(=O)c1ccc(-c2ccc(NC(=O)c3ccc(C(N)=O)cc3)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1ccc(Cn2cc(COc3ccc(CCCN4CCN(c5cccc(C(=O)c6ccccc6)c5)CC4)cc3)nn2)cc1	CC(C)(C)c1ccc(Cn2cc(COc3ccc(CCCN4CCN(c5cccc(C(=O)c6ccccc6)c5)CC4)cc3)nn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2cc3c(cc2cc1C(C)NCCN1CCN(C)CC1)OCO3	COc1cc2cc3c(cc2cc1C(C)NCCN1CCN(C)CC1)OCO3	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Cl)cc1C(=O)N(Cc1ccccc1)CC(N)=O	COc1ccc(Cl)cc1C(=O)N(Cc1ccccc1)CC(N)=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCC(C)(C)c1cc(O)c(C(CCCCC[N+](C)(C)C)C(C)CCCC(C)C)c(=O)o1	CCCCCCC(C)(C)c1cc(O)c(C(CCCCC[N+](C)(C)C)C(C)CCCC(C)C)c(=O)o1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)CC(=O)C2=C(C1)OC(N)=C(C#N)C2c1ccc2c(c1)OCCO2	CC1(C)CC(=O)C2=C(C1)OC(N)=C(C#N)C2c1ccc2c(c1)OCCO2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)N1CCCC(Nc2nc(N3CCN(c4ccc(C(F)(F)F)cc4)CC3)c3c(n2)C(c2ccccc2)CN3)C1	CC(=O)N1CCCC(Nc2nc3c(c(N4CCN(c5ccc(C(F)(F)F)cc5)CC4)n2)CNCC3c2ccccc2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NO)c1ccccc1-c1nc(-c2ccccc2)c(-c2ccccc2)o1	O=C(NO)c1ccccc1-c1nc(-c2ccccc2)c(-c2ccccc2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nnc(-c2ccc(C(=O)N3CCN(CC(N)=O)CC3)c(C)c2)c1C#Cc1ccc(N)nc1	CCc1nnc(-c2ccc(C(=O)N3CCN(CC(N)=O)CC3)c(C)c2)c1C#Cc1ccc(N)nc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(N)c(Cl)cc1C(=O)NC1CCN(CCN2CCN(C)CC2)CC1	COc1cc(N)c(Cl)cc1C(=O)NC1CCN(CCN2CCN(C)CC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1ccc2c(c1)N(Cc1cccc(Cl)c1)C(=O)c1ccccc1S2	O=C(O)c1ccc2c(c1)N(Cc1cccc(Cl)c1)C(=O)c1ccccc1S2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nnc2n1-c1sc(C#CCn3c(=O)n(C4CC4)c4ccc(C(F)(F)F)cc43)cc1C(c1ccccc1Cl)=NC2	Cc1nnc2n1-c1sc(C#CCn3c(=O)n(C4CC4)c4ccc(C(F)(F)F)cc43)cc1C(c1ccccc1Cl)=NC2	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccccc1C(=O)Nc1cc(C)nn1C	CCOc1ccccc1C(=O)Nc1cc(C)nn1C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(NC(=O)COc2ccc3c(C)cc(=O)oc3c2)cc(OC)c1	COc1cc(NC(=O)COc2ccc3c(C)cc(=O)oc3c2)cc(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)CCN(C(=O)C1CC(NC(=O)c2ccccc(N(C)C)c2)CN1Cc1ccc(Cl)cc1	COC(=O)CCN(C(=O)C1CC(NC(=O)c2ccccc(N(C)C)c2)CN1Cc1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(CO)C(=O)NC(C)C(=O)Nc1nnc(-c2ccc(Br)cc2)s1	CCCN(CO)C(=O)NC(C)C(=O)Nc1nnc(-c2ccc(Br)cc2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)CC2CC(C)(CN2C(=O)c2cc(Cl)ccc2Cl)C1	CC1(C)CC2CC(C)(CN2C(=O)c2cc(Cl)ccc2Cl)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1C(=O)Sc1c(C(=O)O)[nH]c2ccc(Cl)cc12	COc1ccccc1C(=O)Sc1c(C(=O)O)[nH]c2ccc(Cl)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(CC2CC(=O)N(Cc3ccc(N(C)C)nc3F)C2=O)c1	Cc1cccc(CC2CC(=O)N(Cc3ccc(N(C)C)nc3F)C2=O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1)c(CC(=O)NNS(=O)(=O)c1ccc(C)cc1)c(C)n2C(=O)c1ccc(Cl)cc1Cl	COc1ccc2c(c1)c(CC(=O)NNS(=O)(=O)c1ccc(C)cc1)c(C)n2C(=O)c1ccc(Cl)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4c(c3)COC4=O)cc2)CC1	CN1CCN(c2ccc(-c3ccc4c(c3)COC4=O)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1NS(=O)(=O)c1ccc2c(c1)CCN2C(=O)CN1C(=O)C(C)(C)c2nc3ccccc3cc21	COc1ccccc1NS(=O)(=O)c1ccc2c(c1)CCN2C(=O)CN1C(=O)C(C)(C)c2nc3ccccc3cc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(S(=O)(=O)C=C2NC(=O)NC2=O)c(C)cc1Cl	Cc1cc(S(=O)(=O)C=C2NC(=O)NC2=O)c(C)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
COCC1CCC(CC2CCCCN2C(=O)Cn2c(C)nc(Br)c2Br)N1C	COCC1CCC(CC2CCCCN2C(=O)Cn2c(C)nc(Br)c2Br)N1C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CC(O)C(NC2OC(CO)C(O)C(O)C2O)N1	O=C1CC(O)C(NC2OC(CO)C(O)C(O)C2O)N1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)N2CCN(C(C)C(=O)N(C(C)C)C3CCS(=O)(=O)C3)CC2)cc1C	Cc1ccc(S(=O)(=O)N2CCN(C(C)C(=O)N(C(C)C)C3CCS(=O)(=O)C3)CC2)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCCCCCCOC(C(COCC)COP(=O)(O)OCC(N)C(=O)NC(CO)C(=O)O	CCCCCCCCCCCCCCCCOC(C(COCC)COP(=O)(O)OCC(N)C(=O)NC(CO)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc2c(SSc3ccc(Sc4cc5cc(c4-c6ccc(-c7cncnc7)cc6)OCOC5)cc3)c(-c3ccc(N4CCCCC4)cc3)sc2c1	c1ccc2c(SSc3ccc(Sc4cc5cc(c4-c4ccc(-c6cncnc6)cc4)OCOC5)cc3)c(-c3ccc(N4CCCCC4)cc3)sc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C=O)COc1ccc(Br)cc1Cl	CN(C=O)COc1ccc(Br)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C1=C(C)C(=O)N(C2nc3ccccc3s2)C1c1ccc(F)c(Cl)c1)c1ccc(Cl)cc1	O=C(C1=C(C)C(=O)N(C2nc3ccccc3s2)C1c1ccc(F)c(Cl)c1)c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
C=Cc1ccc2nnc(C(=O)NCCCC)nc1	C=Cc1ccc2nnc(C(=O)NCCCC)nc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(OC)c(SC2=CC(=O)c3c(OC)ccc(OC)c3C2=O)c1	COc1ccc(OC)c(SC2=CC(=O)c3c(OC)ccc(OC)c3C2=O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1C(NCCc2cc(OC)c(OC)c(OC)c2)=NC(c2ccccc2)C(C(=O)OC)C1C	CCN1C(NCCc2cc(OC)c(OC)c(OC)c2)=NC(c2ccccc2)C(C(=O)OC)C1C	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1nc(C(N)=O)n(COC(CO)CO)c1-c1ccccc2cc[nH]c12	NC(=O)c1nc(C(N)=O)n(COC(CO)CO)c1-c1ccccc2cc[nH]c12	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c2c(c3ccc(-n4ccc(OCc5ccccc5)cc4=O)nc31)CNCC2	Cn1c2c(c3ccc(-n4ccc(OCc5ccccc5)cc4=O)nc31)CNCC2	TRUE	TRUE	FALSE
CN1Cc2c(C3=CCN(CC(=O)N4CCCC4C(=O)N4C5CCC4C(COC(N)=O)C5)C3=O)[nH]c3nccc(c23)-c2cc(F)ccc21	CN1Cc2c(C3=CCN(CC(=O)N4CCCC4C(=O)N4C5CCC4C(COC(N)=O)C5)C3=O)[nH]c3nccc(c23)-c2cc(F)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(N2CCOCC2)cc1)c1nc2scn2c(=O)c1NCCN1CCOCC1	O=C(Nc1ccc(N2CCOCC2)cc1)c1nc2scn2c(=O)c1NCCN1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1ccc(NC(=O)C(C)OC(=O)c2ccc(Br)o2)cc1	CC(=O)Nc1ccc(NC(=O)C(C)OC(=O)c2ccc(Br)o2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(Cc1cc(l)c(OC2ccc(O)c(CC(=O)O)c2)c(l)c1)C(=O)O	NC(Cc1cc(l)c(OC2ccc(O)c(CC(=O)O)c2)c(l)c1)C(=O)O	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1ccc2[nH]c3c(c2c1)CCN=C3	Cc1ccc2[nH]c3c(c2c1)CCN=C3	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CSc1nnc2n(-c3ccccc3)c(=O)c3sc4ccccc4c3n12)N1CCOCC1	O=C(CSc1nnc2n(-c3ccccc3)c(=O)c3sc4ccccc4c3n12)N1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1=C(OC(=O)c2ccc(C#N)cc2)CC(c2ccccc2)N(C(=O)c2ccc(-c3ccccc3)cc2)C1C	CCOC(=O)C1=C(OC(=O)c2ccc(C#N)cc2)CC(c2ccccc2)N(C(=O)c2ccc(-c3ccccc3)cc2)C1C	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1=CS2C(=Cc3ccc(C)cc3)C(=O)N12	CCOC(=O)C1=CS2C(=Cc3ccc(C)cc3)C(=O)N12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(NC(=O)COC(=O)C2CS3(C)CCC(=O)N23)c(S(=O)(=O)N2CCOCC2)cc1C	Cc1cc(NC(=O)COC(=O)C2CS3(C)CCC(=O)N23)c(S(=O)(=O)N2CCOCC2)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
CN1C2CN(C(=O)N3C(C)(C)CC3(C)C)CC1CC2C(=O)c1ccnc2ccc(F)cc12	CN1C2CN(C(=O)c3cnc4ccc(F)cc34)C1CN(C(=O)N1C(C)(C)CC1(C)C)C2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CSc1nc2ccccc2nc1N1CCCCC1)NGc1cccs1	O=C(CSc1nc2ccccc2nc1N1CCCCC1)NGc1cccs1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1cccc(N2CCC(N)C2)c1	Nc1cccc(N2CCC(N)C2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCN1=C(N2CCN(C)CC2)C(=O)c2ccccc2C1=O	COCCN1=C(N2CCN(C)CC2)C(=O)c2ccccc2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC1C2CC3CC1CC(C(=O)O)(C3)C2)c1ccc(OCc2nccs2)nc1	O=C(NC1C2CC3CC1CC(C(=O)O)(C3)C2)c1ccc(OCc2nccs2)nc1	TRUE	TRUE	TRUE
CSC1CN(S(=O)(=O)c2ccc(C)cc2)c2cc(-c3nnn[nH]3)ccc2O1	CSC1CN(S(=O)(=O)c2ccc(C)cc2)c2cc(-c3nnn[nH]3)ccc2O1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CC(CC2(O)CCCC2)C(=O)N1	O=C1CC(CC2(O)CCCC2)C(=O)N1	TRUE	TRUE	TRUE
COC1C=CC=C(C)C(=O)NC2=CC(=O)C(NCCN(C)C)=C(CC(C)CC(OC)C(N(C)C)C(C)C=C(C)C1OC(N)=O)C2=O	COC1C=CC=C(C)C(=O)NC2=CC(=O)C(NCCN(C)C)=C(CC(C)CC(OC)C(N(C)C)C(C)C=C(C)C1OC(N)=O)C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc(-c2sc3nc(C)c4c(=O)n(CC(=O)NCCc5ccccc5)enc4c23)c1	Cc1ccccc(-c2sc3nc(C)c4c(=O)n(CC(=O)NCCc5ccccc5)enc4c23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1OC(CO)(COC(=O)c2ccccc2)C1Cc1ccccc1	O=C(OCc1(CO)OC(=O)C1Cc1ccccc1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(F)c(C=C2Sc3ccccc3C2=O)cc1OC	COc1cc(F)c(C=C2Sc3ccccc3C2=O)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)S(=O)(=O)c1ccccc(-c2nnc(SCC(=O)NCC3CCCO3)n2C)c1	CCN(CC)S(=O)(=O)c1ccccc(-c2nnc(SCC(=O)NCC3CCCO3)n2C)c1	TRUE	TRUE	TRUE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CC1CN(C(C)CO)S(=O)(=O)c2ccc(C#Cc3ccccc3F)cc2OC1CN(C)C(=O)CN(C)Cc1ccccc1	CC1CN(C(C)CO)S(=O)(=O)c2ccc(C#Cc3ccccc3F)cc2OC1CN(C)C(=O)CN(C)Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(C=O)c1ccc(NC(=O)c2noc(C)c2Cl)cc1	CNC(=O)c1ccc(NC(=O)c2noc(C)c2Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCC(N)C(=O)NC(Cc1ccc(N)cc1)B(O)O	C=CCC(N)C(=O)NC(Cc1ccc(N)cc1)B(O)O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1nc([N+](=O)[O-])cn1CC(Cl)(Cl)Cl	COc1nc([N+](=O)[O-])cn1CC(Cl)(Cl)Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCn1cc(C(=O)O)c(-c2cccc(F)c2)n1	CCCCn1cc(C(=O)O)c(-c2cccc(F)c2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)C(NC(=O)C(CC(C)C)C(Cn1cccc1)CP(=O)(O)CNC(=O)C=Cc1ccccc1		FALSE	TRUE	TRUE
NCc1cccc(C(C2=C(O)C)C(=O)c3ccccc3C2=O)C2CC2)c1	NCc1cccc(C(C2=C(O)C)C(=O)c3ccccc3C2=O)C2CC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1cc(CCCN2CCC(O)CC2)cc(-c2cc(Cl)ccc2OCc2ccccc2)c1	N#Cc1cc(CCCN2CCC(O)CC2)cc(-c2cc(Cl)ccc2OCc2ccccc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCn1c(N)c(C(=O)CSc2nc3ccccc(C(F)(F)F)c3s2)c(=O)n(C)c1=O	C=CCn1c(N)c(C(=O)CSc2nc3ccccc(C(F)(F)F)c3s2)c(=O)n(C)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCc1ccc(OC(C=O)Cn2cc(C(=O)O)c3ccccc32)cc1	CCCCCCCCc1ccc(OC(C=O)Cn2cc(C(=O)O)c3ccccc32)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
CNC(=O)c1ccc(C(=O)OC)cc1O	CNC(=O)c1ccc(C(=O)OC)cc1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)N1CCN(c2cnc3cc(C(=O)Nc4ccc(F)cc4)ccc3n2)CC1	CCOC(=O)N1CCN(c2cnc3cc(C(=O)Nc4ccc(F)cc4)ccc3n2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(NC(=O)C(NC(=O)CCC(N)C(=O)O)C(C)C)C(=O)O	CC(NC(=O)C(NC(=O)CCC(N)C(=O)O)C(C)C)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2ccc3c(N4CCOCC4C)nc(N4CCOCC4C)nc3n2)cc1CO	COc1ccc(-c2ccc3c(N4CCOCC4C)nc(N4CCOCC4C)nc3n2)cc1CO	TRUE	TRUE	FALSE
CC(=O)NC1C(OCc2ccccc2)OC(CO)C(O)C1O		FALSE	TRUE	TRUE
COc1cccc2cc(C(=O)OCC(O)(CNC(C)(C)C)C(=O)O)c(=O)oc12	COc1cccc2cc(C(=O)OCC(O)(CNC(C)(C)C)C(=O)O)c(=O)oc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C(NS(=O)(=O)c2cccc(-c3ccccc3)c2)CCN1CCc1cc2c[nH]cc(Cl)c2[nH]1		FALSE	TRUE	TRUE
O=C1C2Cc3c([nH]c4ccccc34)C(c3ccc4c(c3)OCCO4)N2C(=O)CN1CCc1ccc(Cl)cc1	O=C1C2Cc3c([nH]c4ccccc34)C(c3ccc4c(c3)OCCO4)N2C(=O)CN1CCc1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCOc1ccc(-c2ncon2)cc1	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCOc1ccc(-c2ncon2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCn1c(=O)c2c(nc3n2CCCN3CCCOc2ccc(C#N)cc2)n(CCCC)c1=O	CCCCn1c(=O)c2c(nc3n2CCCN3CCCOc2ccc(C#N)cc2)n(CCCC)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)=CCCC(C)=CCCC(C)=CCC(P(=O)(O)O)P(=O)(O)O	CC(C)=CCCC(C)=CCCC(C)=CCC(P(=O)(O)O)P(=O)(O)O	TRUE	TRUE	FALSE
CC1CN(C(C)CO)C(=O)c2cc(Br)cnc2OC1CN(C)Cc1ccc(C(F)(F)F)cc1	CC1CN(C(C)CO)C(=O)c2cc(Br)cnc2OC1CN(C)Cc1ccc(C(F)(F)F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCn1c(=O)oc2ccc(Cl)cc21	COCCn1c(=O)oc2ccc(Cl)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NN=C(S)Nc1ccccc1)c1ccccc1Br	O=C(NN=C(S)Nc1ccccc1)c1ccccc1Br	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)Nc2cccc3nnc23)cc1	Cc1ccc(S(=O)(=O)Nc2cccc3nnc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ncccn2)cc1)c1ccc(-c2cccn2)cc1	O=C(Nc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ncccn2)cc1)c1ccc(-c2cccn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccccc1C(=O)NC(=S)NCC1ccco1	CCOc1ccccc1C(=O)NC(=S)NCC1ccco1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1(C(=N)NO)CCCCCCCCCCCCC1	CCOC(=O)C1(C(=N)NO)CCCCCCCCCCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc([S+](=[O-])C(c2ccc(O)cc2)P(=O)(O)O)cc1C(=O)O	Cc1ccc([S+](=[O-])C(c2ccc(O)cc2)P(=O)(O)O)cc1C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
NCC1CCN(c2nccc(-c3cn(C4CCC(NS(=O)(=O)c5ccsc5)CC4)c4ccc(C(F)(F)F)cc34)n2)CC1	NCC1CCN(c2nccc(-c3cn(C4CCC(NS(=O)(=O)c5ccsc5)CC4)c4ccc(C(F)(F)F)cc34)n2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)nc(OC(C(=O)O)C2(c3ccccc3)NC(C(=O)N(Cc3ccccc3)c3ccccc32)n1	Cc1cc(C)nc(OC(C(=O)O)C2(c3ccccc3)NC(C(=O)N(Cc3ccccc3)c3ccccc32)n1	TRUE	TRUE	FALSE
CCCN1N=C2C(=Cc3cc(C(F)(F)F)ccc3F)CSCC2C1c1ccc(Cl)cc1	CCCN1N=C2C(=Cc3cc(C(F)(F)F)ccc3F)CSCC2C1c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCC(=O)NC(Cc1ccc(O)cc1)C(=O)O)NC(CCC(=O)O)C(=O)NCc1ccccc1	O=C(CCC(=O)NC(Cc1ccc(O)cc1)C(=O)O)NC(CCC(=O)O)C(=O)NCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCC(NC(=O)c1ccc2c(c1O)C(=O)CCC1C3CC(O3)C21)c1ccccc1	CN(C)CCC(NC(=O)c1ccc2c(c1O)C(=O)CCC1C3CC(O3)C21)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(N)=NC(=O)N1CCc2ccc(NC(=O)c3ccccc3-c3ccc(C(F)(F)F)cc3)cc2C1	NC(N)=NC(=O)N1CCc2ccc(NC(=O)c3ccccc3-c3ccc(C(F)(F)F)cc3)cc2C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(NCN2C(=O)C(C)Oc3ccc(C)cc32)cc1	CCOc1ccc(NCN2C(=O)C(C)Oc3ccc(C)cc32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CNCC(=O)N1CCn2c(c(C(N)=O)c3cc(C)ccc32)C1	CNCC(=O)N1CCn2c(c(C(N)=O)c3cc(C)ccc32)C1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nnc2c1ncn2C1OC(COP(=O)(O)OP(=O)(O)OP(=O)(O)O)C(O)C1O	Nc1nnc2c1ncn2C1OC(COP(=O)(O)OP(=O)(O)OP(=O)(O)O)C(O)C1O	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)(C)OC(=O)NC(Cc1ccccc1)C(O)CNCC(O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)OC(C)(C)C	CC(C)(C)OC(=O)NC(Cc1ccccc1)C(O)CNCC(O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)OC(C)(C)C	TRUE	TRUE	FALSE
COc1cccc(NP(=S)(N2CCOCC2)N2CCOCC2)c1	COc1cccc(NP(=S)(N2CCOCC2)N2CCOCC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)CN1CCC2(CC1)CN(c1ccccc1N=C(O)Nc1ccccc1)c1c(O)ccc(-c3nc4ccccc4s3)c12	CC(C)(C)CN1CCC2(CC1)CN(c1ccccc1N=C(O)Nc1ccccc1)c1c(O)ccc(-c3nc4ccccc4s3)c12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NCC1OC(=O)N2c3ccc(-c4cnccn4)cc3c4c(c3c(c3c4[nH]c(CO)c(C)c43)C12)C(=O)NC4=O		FALSE	TRUE	TRUE
CC(=NNC(=O)CO)c1ccc(NC(=O)c2ccc(C(C)(C)C)cc2)cc1	CC(=NNC(=O)CO)c1ccc(NC(=O)c2ccc(C(C)(C)C)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(C)S(=O)(=O)c1cccc(-c2ccc(OC)cc2OC)c1	CCN(CC)S(=O)(=O)c1cccc(-c2ccc(OC)cc2OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CSc1nncc(-c2ccccc2)n1C1CCCCC1)NC1CCCCC1	O=C(CSc1nncc(-c2ccccc2)n1C1CCCCC1)NC1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
COC1(C2CCCN2C(=O)c2ccc(F)cc2)CCN(c2nnc3[nH]ccc23)CC1	COC1(C2CCCN2C(=O)c2ccc(F)cc2)CCN(c2nnc3[nH]ccc23)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)N=C(N)N=C(N)N1c1ccc(OCc2cccc(N)c2)c(OC2CCN(S(=O)(=O)C(F)(F)F)CC2)c1	CC1(C)N=C(N)N=C(N)N1c1ccc(OCc2cccc(N)c2)c(OC2CCN(S(=O)(=O)C(F)(F)F)CC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
BrC1ccccc1CNc1nc2ccccc2s1	BrC1ccccc1CNc1nc2ccccc2s1	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(N)c1ccc(CNC(=O)Cn2c(-c3ccccc3F)c(Cl)nc(NCCc3cccn3)c2=O)cc1	N=C(N)c1ccc(CNC(=O)Cn2c(-c3ccccc3F)c(Cl)nc(NCCc3cccn3)c2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(CCCNC(=O)c2cc3c(n(C)c2=O)CCCC3)CC1	CN1CCN(CCCNC(=O)c2cc3c(n(C)c2=O)CCCC3)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1ccc(N=c2[nH][nH]c3cccn23)cc1	Clc1ccc(N=c2[nH][nH]c3cccn23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2csc(NC(=O)C(=O)O)n2)cc1	Cc1ccc(-c2csc(NC(=O)C(=O)O)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Fc1cccc(COc2ccc(-c3ncc(CNC4CCN(CCN5CCOCC5)C4)o3)cc2)c1	Fc1cccc(COc2ccc(-c3ncc(CNC4CCN(CCN5CCOCC5)C4)o3)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(Cl)nc(Cl)c1C(=O)N1CC(OCc2cc(F)ccc2F)CC2(CCOCC2)C1	Cc1cc(Cl)nc(Cl)c1C(=O)N1CC(OCc2cc(F)ccc2F)CC2(CCOCC2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
Fc1ccc(COc2ccc(-c3cc(-c4ccccc4)c(C4CCCC4)c(N4CCCC4)n3)cc2)cc1	Fc1ccc(COc2ccc(-c3cc(-c4ccccc4)c(C4CCCC4)c(N4CCCC4)n3)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1[nH]c2ccc(-c3csc(-c4ccccc4)n3)cc2c1CC1CCCCC1	O=C(O)c1[nH]c2ccc(-c3csc(-c4ccccc4)n3)cc2c1CC1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(S(=O)(=O)N2CCCC2)cc1NC(=O)C1COc2ccccc2O1	COc1ccc(S(=O)(=O)N2CCCC2)cc1NC(=O)C1COc2ccccc2O1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(Nc2nccc(C(F)(F)F)n2)cc(-c2ccc(OC(C=O)O)c(C(=O)O)c2)c1	Cc1cc(Nc2nccc(C(F)(F)F)n2)cc(-c2ccc(OC(C=O)O)c(C(=O)O)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)NCCc2nnc(SCC(=O)N3CCCC(C)C3)o2)cc1	COc1ccc(C(=O)NCCc2nnc(SCC(=O)N3CCCC(C)C3)o2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CC=CC=CC1(O)C(C)C(=O)N1Cc1ccccc1	C=CC=CC=CC1(O)C(C)C(=O)N1Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)N=C(Nc1nccs1)Nc1nccs1	CC(C)(C)N=C(Nc1nccs1)Nc1nccs1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1cc2ncc(Nc3ccccc(NC(=O)c4cccc(Cl)c4)c3)c2cc1OCCNC(C)C	CCOc1cc2ncc(Nc3ccccc(NC(=O)c4cccc(Cl)c4)c3)c2cc1OCCNC(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
c1coc(-c2csc(-c3cccn3)n2)c1	c1nccc(-c2nc(-c3ccco3)cs2)c1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)(C)OC(=O)N1CCC(Cn2ncc(N3CC4CCC(C3)O4)c(Cl)c2=O)CC1	CC(C)(C)OC(=O)N1CCC(Cn2ncc(N3CC4CCC(C3)O4)c(Cl)c2=O)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)Nc1nc2cc(Sc3ccc(NC(=O)Nc4cc(C(F)(F)F)ccc4F)cc3)ccc2[nH]1	COC(=O)Nc1nc2cc(Sc3ccc(NC(=O)Nc4cc(C(F)(F)F)ccc4F)cc3)ccc2[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(NC(=O)c2cc(N3CCOCC3)cc(C(F)(F)F)c2)c(=O)n(-c2ccccc2)n1C	Cc1c(NC(=O)c2cc(N3CCOCC3)cc(C(F)(F)F)c2)c(=O)n(-c2ccccc2)n1C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCC(c1cccn1)N1CCCCC1)c1cc(S(N)(=O)=O)ccc1F	NS(=O)(=O)c1ccc(F)c(C(=O)NCC(c2cccn2)N2CCCCC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cccc(OCc2cnnc3[nH]c(=O)[nH]c23)c1)c1cccc(C2=NCCO2)c1	O=C(Nc1cccc(OCc2cnnc3[nH]c(=O)[nH]c23)c1)c1cccc(C2=NCCO2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nccccc1S(=O)(=O)Nc1ccccc1	Cc1nccccc1S(=O)(=O)Nc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(C)C(=Nc2nc3c(s2)CCCc2cc(Cl)ccc2-3)C1	CN1CCN(C)C(=Nc2nc3c(s2)CCCc2cc(Cl)ccc2-3)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)Cc1ccc(OCc2ccc(Cl)cc2)c(-c2cn(Cc3ccc(OC)cc3)nn2)c1C	CCOC(=O)Cc1ccc(OCc2ccc(Cl)cc2)c(-c2cn(Cc3ccc(OC)cc3)nn2)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1ccc(Nc2n[se]nc2Nc2ccc3c3c(c2)COC3)cc1		FALSE	TRUE	TRUE
Cn1c(N2CCNC(c3ccc(N4CCC(O)CC4)cc3)C2)nc(-c2cncc2F)cc1=O	Cn1c(N2CCNC(c3ccc(N4CCC(O)CC4)cc3)C2)nc(-c2cncc2F)cc1=O	TRUE	TRUE	FALSE
CCOc1ccc2nc(NC(=O)c3ccc(C(=O)N(C)Cc4ccccc4)cc3)sc2c1	CCOc1ccc2nc(NC(=O)c3ccc(C(=O)N(C)Cc4ccccc4)cc3)sc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)C(=O)c1ccc2c(c1)CC(C(=O)NCC1cccs1)CN2	CN(C)C(=O)c1ccc2c(c1)CC(C(=O)NCC1cccs1)CN2	TRUE	TRUE	TRUE
COC(C(=O)O)c1ccc2c(c1)C1C(=O)CCCC1C(c1cc(OC)c(OC)c(OC)c1)N2	COc1cc(C2Nc3ccc(C(OC)C(=O)O)cc3C3C(=O)CCCC23)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=Cc1ccco1)NC1CCN(Cc2ccccc2)CC1	O=C(C=Cc1ccco1)NC1CCN(Cc2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC12CC3CC(C)(C1)CC(NC(=O)C1CCCCC1C(=O)Nc1ccccc1F)(C3)C2	CC12CC3CC(C)(C1)CC(NC(=O)C1CCCCC1C(=O)Nc1ccccc1F)(C3)C2	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCCNc1ccc2nnn3c4ccc(O)cc4c(=O)c1c23	CN(C)CCCNc1ccc2nnn3c4ccc(O)cc4c(=O)c1c23	TRUE	TRUE	FALSE
COc1ccc(Nc2nc(C)c(C(=O)C=Cc3ccc(F)cc3)s2)cn1	COc1ccc(Nc2nc(C)c(C(=O)C=Cc3ccc(F)cc3)s2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CCNc1nc(NC(=O)c2ccc(S(=O)(=O)N(C)C)cc2)nc2nc(-c3ccco3)nn12	CCNc1nc(NC(=O)c2ccc(S(=O)(=O)N(C)C)cc2)nc2nc(-c3ccco3)nn12	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc(N)c2cc(CNc3ccc(C(=O)NC(CCC(=O)O)C(=O)O)cc3)ccc2n1	Nc1nc(N)c2cc(CNc3ccc(C(=O)NC(CCC(=O)O)C(=O)O)cc3)ccc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)C(=O)C(=Cc1ccc(C(F)(F)F)cc1)Nc1nc2c(s1)CCCC1ccsc1-2	CN(C)C(=O)C(=Cc1ccc(C(F)(F)F)cc1)Nc1nc2c(s1)CCCC1ccsc1-2	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
COCC1CCN(c2cc(OCC(N)Cc3c[nH]c4ccccc34)ncn2)C1	COCC1CCN(c2cc(OCC(N)Cc3c[nH]c4ccccc34)ncn2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C(Cc1c[nH]c2ccccc12)NC(=O)C(CO)NC(=O)OCc1ccccc1	COC(=O)C(Cc1c[nH]c2ccccc12)NC(=O)C(CO)NC(=O)OCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(COC(C)=O)C1CCC2(C)CCC3(C)C(CCC4C5(C)CCC(OC(=O)C=Cc6ccccc6)C(C)(C)C5CCC43C)C12	C=C(COC(C)=O)C1CCC2(C)CCC3(C)C(CCC4C5(C)CCC(OC(=O)C=Cc6ccccc6)C(C)(C)C5CCC43C)C12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)Nc1cc(Nc2ccc3ncsc3c2)nc1-c1nnco1	CC(C)Nc1cc(Nc2ccc3ncsc3c2)nc1-c1nnco1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC1CC2CCCC(C1)N2Cc1ccc(Br)cc1)c1cccc(Cl)c1	O=C(NC1CC2CCCC(C1)N2Cc1ccc(Br)cc1)c1cccc(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nc2ccccc2n1CCNC(=O)c1ccccc1O	CCc1nc2ccccc2n1CCNC(=O)c1ccccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCCCCCCCCCCCCc1ccc(NC(=O)Nc2ccccc2F)cc1	C=CCCCCCCCCCCCCc1ccc(NC(=O)Nc2ccccc2F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)OC1CCC2(C)C(=CCC3C2CCC2(C)C(=C(C#N)C#N)CCC32)C1	CC(=O)OC1CCC2(C)C(=CCC3C2CCC2(C)C(=C(C#N)C#N)CCC32)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(CN1C(=O)c2ccccc2C1=O)S(=O)(=O)c1cc(Cl)c(Cl)s1	CC(C)(CN1C(=O)c2ccccc2C1=O)S(=O)(=O)c1cc(Cl)c(Cl)s1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1cc(S(=O)(=O)Nc2ncc(Cl)s2)ccc1Oc1ccc(F)c(CNCCCC)cc1	N#Cc1cc(S(=O)(=O)Nc2ncc(Cl)s2)ccc1Oc1ccc(F)c(CNCCCC)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)OC(C1CC(C)C2C(O1)C(O)C1(C)C3CC4C(C)(C)C(OC5CNCCO5)CCC45CC35CCC21C)C(C)(C)O	CC(=O)OC(C1CC(C)C2C(O1)C(O)C1(C)C3CC4C(C)(C)C(OC5CNCCO5)CCC45CC35CCC21C)C(C)(C)O	TRUE	TRUE	FALSE
OCc1ccc(N2CC(C(=O)N3CCC(C(=O)NC4CCCC4)CC3)CC2=O)cc1	OCc1ccc(N2CC(C(=O)N3CCC(C(=O)NC4CCCC4)CC3)CC2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)N1N=C(c2ccc(Cl)cc2Cl)CC1(C#N1CCOCC1)c1ccccc1	CC(=O)N1N=C(c2ccc(Cl)cc2Cl)CC1(C#N1CCOCC1)c1ccccc1	FALSE	TRUE	TRUE
C=CCN(c1ccc(C(O)(C(F)(F)F)C(F)(F)F)cc1)S(=O)(=O)c1ccc2nc(NC(C)=O)sc2c1	C=CCN(c1ccc(C(O)(C(F)(F)F)C(F)(F)F)cc1)S(=O)(=O)c1ccc2nc(NC(C)=O)sc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
NS(=O)(=O)c1ccc(SCC2OC(n3cc(C4CC4)nn3)C(F)C2O)cc1	NS(=O)(=O)c1ccc(SCC2OC(n3cc(C4CC4)nn3)C(F)C2O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)N2CCN(C(=O)c3oc(Cc4ccccc4)nc3-c3ccc(Cl)cc3)CC2)cc1	Cc1ccc(S(=O)(=O)N2CCN(C(=O)c3oc(Cc4ccccc4)nc3-c3ccc(Cl)cc3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C=C(C)(C)O)cc(C)c1Oc1ccc(Cl=O)O)cc1	Cc1cc(C=C(C)(C)O)cc(C)c1Oc1ccc(Cl=O)O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC#CC1(O)CCC2C3CC4=CC(=O)CCC4=C3C(c3ccc(N(C)Cc4ccc(F)cc4)cc3)CC21C	CC#CC1(O)CCC2C3CC4=CC(=O)CCC4=C3C(c3ccc(N(C)Cc4ccc(F)cc4)cc3)CC21C	TRUE	TRUE	TRUE
CCCNCc1coc(-c2ccc(OC)c(OCc3cccc(OC)c3)c2)n1	CCCNCc1coc(-c2ccc(OC)c(OCc3cccc(OC)c3)c2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(-n2ccc3c(N4CCN(S(=O)(=O)c5ccc6ccccc6c5)CC4)ncnc32)cc1)c1ccccc1	O=C(Nc1ccc(-n2ccc3c(N4CCN(S(=O)(=O)c5ccc6ccccc6c5)CC4)ncnc32)cc1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C(=O)C2(O)COC2)CC1	Cc1cc(Nc2ncc(Cl)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n2)c(OC(C)C)cc1C1CCN(C(=O)C2(O)COC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C)c(NC(=O)C[N+])23CCC(CC2)C(OC(=O)C2(C4=CC=CC4)CCCCC2)C3)c1	Cc1ccc(C)c(NC(=O)C[N+])23CCC(CC2)C(OC(=O)C2(C4=CC=CC4)CCCCC2)C3)c1	TRUE	TRUE	TRUE
C[N+](C)(CCCCCCCCCCCCC[N+])(C)(C)CCO)Cc1ccccc1	C[N+](C)(CCO)CCCCCCCCCCCCC[N+](C)(C)CCO)Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CC=Cc1nncc(-c2ccccc2)n1	O=C(O)CC=Cc1nncc(-c2ccccc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCC=C(c2nsnc2SCCC[S+])([O-])Cc2ccccc2)C1	CN1CCC=C(c2nsnc2SCCC[S+])([O-])Cc2ccccc2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NC(Cc1ccc(C(C)C)cc1)C(=O)NC(CCl(=O)O)C(=O)NC(CO)C(=O)NC(Cc1cccs1)C(=O)O	CC(=O)NC(Cc1ccc(C(C)C)cc1)C(=O)NC(CCl(=O)O)C(=O)NC(CO)C(=O)NC(Cc1cccs1)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C)Nc1ccc(F)cc1)c1cccc(Cl)c1Nc1ccccc1	O=C(C)Nc1ccc(F)cc1)c1cccc(Cl)c1Nc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc([N+](=O)[O-])c1NC(=O)Nc1cccc(F)c1	Cc1cccc([N+](=O)[O-])c1NC(=O)Nc1cccc(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCN(C)C(=O)c1ccc(-n2cnnn2)cc1	COCCN(C)C(=O)c1ccc(-n2cnnn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=Cc1ccccc1[N+](=O)[O-])c1cccc2ccccc12	O=C(C=Cc1ccccc1[N+](=O)[O-])c1cccc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)c1ccc(-c2cc(C(F)(F)F)ccc2OCC(=O)Nc2ccc3c(c2)OCO3)cc1	CS(=O)(=O)c1ccc(-c2cc(C(F)(F)F)ccc2OCC(=O)Nc2ccc3c(c2)OCO3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cccc(C(F)(F)F)c1)C1CCN(C(=O)Nc2CCN(Cc3ccc(C(F)(F)F)cc3)CC2)CC1	O=C(Nc1cccc(C(F)(F)F)c1)C1CCN(C(=O)Nc2CCN(Cc3ccc(C(F)(F)F)cc3)CC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1nc2ccccc2nc1NC1CCN(Cc2cccc(C(F)(F)F)c2)CC1	CCOc1nc2ccccc2nc1NC1CCN(Cc2cccc(C(F)(F)F)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C=O)CN1CC(=O)N(c2ccc(OC)cc2)C1=S	CO(C=O)CN1CC(=O)N(c2ccc(OC)cc2)C1=S	TRUE	TRUE	TRUE
COCc1nc(C)nn1-c1ccc(N=c2[nH]c(Nc3cn(C)cn3)nc2C(F)(F)F)c(OC(C)C)n1	COCc1nc(C)nn1-c1ccc(N=c2[nH]c(Nc3cn(C)cn3)nc2C(F)(F)F)c(OC(C)C)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C12CCC(C)C(C)C1C1=CCC3C4(C)CCC(O)C(C)(C)C4CCC3(C)C1(C)CC2	COC(=O)C12CCC(C)C(C)C1C1=CCC3C4(C)CCC(O)C(C)(C)C4CCC3(C)C1(C)CC2	TRUE	TRUE	FALSE
COc1ccc(Cn2cc(CNC(=O)c3ccc4c(c3)NC(=O)CS4)cn2)cc1	COc1ccc(Cn2cc(CNC(=O)c3ccc4c(c3)NC(=O)CS4)cn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1cc(C(=O)O)c(=O)c2cc(Br)c(N3CCN(C(=O)OCCF)CC3)cc21	CCn1cc(C(=O)O)c(=O)c2cc(Br)c(N3CCN(C(=O)OCCF)CC3)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
OCc1ccc(C(C)O)OCc2ccccc2)cc1OC1OC2OC3(C)CCC4C(C)CCC(C1C)C24OO3	OCc1ccc(C(C)O)OCc2ccccc2)cc1OC1OC2OC3(C)CCC4C(C)CCC(C1C)C24OO3	TRUE	TRUE	TRUE
OCc1ccc(CCN5(=O)(=O)CCN(C(=O)C2CCN2S(=O)(=O)c2ccc(Cl)cc2)cc1OC	OCc1ccc(CCN5(=O)(=O)CCN(C(=O)C2CCN2S(=O)(=O)c2ccc(Cl)cc2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(N)c1ccc(-n2nc(C(F)(F)F)c3c2CN(C2COC2)CC3)cc1	N=C(N)c1ccc(-n2nc(C(F)(F)F)c3c2CN(C2COC2)CC3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C=O)C1=CO(C(OC2OC(COC(=O)c3ccccc3)C(O)C(O)C2O)C2C(CC(C)=O)=CCCC12	CO(C=O)C1=CO(C(OC2OC(COC(=O)c3ccccc3)C(O)C(O)C2O)C2C(CC(C)=O)=CCCC12	TRUE	TRUE	TRUE
OCc1ccc(CNc2nnc3cc(OCCN4CCCC4)cc(OCCCN(C(=O)c4ccccc4)c23)cc1Cl	OCc1ccc(CNc2nnc3cc(OCCN4CCCC4)cc(OCCCN(C(=O)c4ccccc4)c23)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CcC1ccc(S(=O)(=O)N2CCCC2)cc1)NCCc1ccc(F)cc1	O=C(CcC1ccc(S(=O)(=O)N2CCCC2)cc1)NCCc1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NC1CCC(N=C2C=Nc3cc(OCCCO)ccc32)CC1	NC1CCC(N=C2C=Nc3cc(OCCCO)ccc32)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
OCc1ccc(C(CC(=O)c2ccccc2F)=NNC(N)=O)cc1	OCc1ccc(C(CC(=O)c2ccccc2F)=NNC(N)=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nnc2n1CCN(C1COC(c3cc(C#CCc4ccc(F)cc4)nn3C)C(C3CC3)C1)C2	Cc1nnc2n1CCN(C1COC(c3cc(C#CCc4ccc(F)cc4)nn3C)C(C3CC3)C1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccc(S(=O)(=O)CC(=O)OCC(=O)c2c(N)n(C)c(=O)n(C)c2=O)cc1	CCc1ccc(S(=O)(=O)CC(=O)OCC(=O)c2c(N)n(C)c(=O)n(C)c2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c(SCc2ccccc2Cl)nc2c1c(=O)[nH]c(=O)n2C	Cn1c(SCc2ccccc2Cl)nc2c1c(=O)[nH]c(=O)n2C	TRUE	TRUE	FALSE
CC1(C)CCCC2(C)C(Cc3cc(O)ccc3O)=C(c3cc(O)ccc3O)C(=O)C3(O)CC=CC(=O)C312	CC1(C)CCCC2(C)C(Cc3cc(O)ccc3O)=C(c3cc(O)ccc3O)C(=O)C3(O)CC=CC(=O)C123	TRUE	TRUE	TRUE
CCC=C1OC(c2ccc3c(c2)OCO3)=NC1=Cc1ccc(C(=O)O)cc1	CCC=C1oc(-c2ccc3c(c2)OCO3)nc1=Cc1ccc(C(=O)O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(C(Nc2nc3ccccc3[nH]2)c2ccc(-c3cnccc3)cc2)cc1	c1ccc(C(Nc2nc3ccccc3[nH]2)c2ccc(-c3cnccc3)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC(Cc1ccc(OC)cc1)C1=CC(=O)c2c(O)ccc(O)c2C1=O	CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC(Cc1ccc(OC)cc1)C1=CC(=O)c2c(O)ccc(O)c2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1sc2nc3c(c(-c4ccco4)c2c1N)CN(C(=O)C1CC1)CC3	CCOC(=O)c1sc2nc3c(c(-c4ccco4)c2c1N)CN(C(=O)C1CC1)CC3	TRUE	TRUE	TRUE
C=C1CCC2C(C)(C)C(=O)CCC12C	C=C1CCC2C(C)(C)C(=O)CCC12C	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CN(C(C)CO)C(=O)c2cc(NC(=O)Nc3ccc4c(c3)OCO4)ccc2OC1CN(C)C(=O)Nc1ccc2c(c1)OCO2	CC1CN(C(C)CO)C(=O)c2cc(NC(=O)Nc3ccc4c(c3)OCO4)ccc2OC1CN(C)C(=O)Nc1ccc2c(c1)OCO2	TRUE	TRUE	TRUE
OCc1ccc(C2CC(c3ccc(Nc4cccn4)cc3)=NN2C(C)=O)cc1	OCc1ccc(C2CC(c3ccc(Nc4cccn4)cc3)=NN2C(C)=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(CCCC(=O)O)c(=O)oc2ccc(-c3cc(Cl)c(Cl)cc3Cl)cc12	Cc1c(CCCC(=O)O)c(=O)oc2ccc(-c3cc(Cl)c(Cl)cc3Cl)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1c(NC(=O)c2ccc(C(F)(F)F)cc2)sc2c1CCC2	NC(=O)c1c(NC(=O)c2ccc(C(F)(F)F)cc2)sc2c1CCC2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CN1C(=O)C2(C(C(=O)O)C(c3ccc(Cl)cc3)N3C(=O)CN(C4CC4)C(=O)C32)c2cccc(F)c21	O=C(O)CN1C(=O)C2(c3cccc(F)c31)C(C(=O)O)C(c1ccc(Cl)cc1)N1C(=O)CN(C3CC3)C(=O)C12	TRUE	TRUE	TRUE
COCc1ccc2nc(-c3ccc(Nc4cnnc5cc(Cl)ccc45)cc3)[nH]c2c1	COCc1ccc2nc(-c3ccc(Nc4cnnc5cc(Cl)ccc45)cc3)[nH]c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1cc(NC2OC(C)C(O)C2O)cc(NC2OC(CO)C(O)C(O)C2O)c1	O=C(O)c1cc(NC2OC(C)C(O)C2O)cc(NC2OC(CO)C(O)C(O)C2O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NC1(C)OC(OCc2ccc(l)cc2C(=O)Nc2ccc(-c3ccccc3S(N)(=O)=O)cc2F)(C(=O)O)OC1C(O)C(O)CO	CC(=O)NC1(C)OC(OCc2ccc(l)cc2C(=O)Nc2ccc(-c3ccccc3S(N)(=O)=O)cc2F)(C(=O)O)OC1C(O)C(O)CO	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C(C)N(C(=O)N2CCN(C)CC2)C(=O)NC(Cc2ccccc2)C(=O)NN2CCCC2C(N)=O)cc2cn[nH]c12	Cc1cc(C(C)N(C(=O)N2CCN(C)CC2)C(=O)NC(Cc2ccccc2)C(=O)NN2CCCC2C(N)=O)cc2cn[nH]c12	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1ccc(Br)c2n1CCC2(C=O)C=Cc1ccccc1	O=C(C=Cc1ccccc1)C1CCn2c1c(Br)ccc2=O	TRUE	TRUE	TRUE
COC1C=CC=C(C)C(=O)NC2=CC(=O)C(Nc3ccc(-n4cc5ccccc5n4)cc3)=C(CC(C)CC(OC)C(O)C(C)C=C(C)C1OC(N)=O)C2=O	COC1C=CC=C(C)C(=O)NC2=CC(=O)C(Nc3ccc(-n4cc5ccccc5n4)cc3)=C(CC(C)CC(OC)C(O)C(C)C=C(C)C1OC(N)=O)C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C(Cc1ccc(O)cc1)NC(=O)C1(N(O)C=Nc2ccc(Cl)cc2)CCCCC1	CCOC(=O)C(Cc1ccc(O)cc1)NC(=O)C1(N(O)C=Nc2ccc(Cl)cc2)CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(Br)C(=O)NS(C)(=O)=O	CC(C)C(Br)C(=O)NS(C)(=O)=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(N(C)C)C(=O)NN=Cc2ccc(O)cc2O)S(C)(=O)=O)cc1C	Cc1ccc(N(C)C)C(=O)NN=Cc2ccc(O)cc2O)S(C)(=O)=O)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(OCc1cc2oc(=O)c3ccccc3c2cc1Cl)c1ccccc1	O=C(OCc1cc2oc(=O)c3ccccc3c2cc1Cl)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
OCc1ccc(-c2cc(C(=O)c3cc(OC)c(OC)c3)c(=O)[nH]n2)cc1OC	OCc1ccc(-c2cc(C(=O)c3cc(OC)c(OC)c3)c(=O)[nH]n2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)OC(=O)NC(Cc1ccccc1)C(O)CC(O)CN(Cc1ccccc1)NC(=O)c1cc2cc(NC(=O)CCc3cccs3)ccc2s1	CC(C)(C)OC(=O)NC(Cc1ccccc1)C(O)CC(O)CN(Cc1ccccc1)NC(=O)c1cc2cc(NC(=O)CCc3cccs3)ccc2s1	TRUE	TRUE	TRUE
COCc1ncc2c(n1)CN(C(=O)C1CCOC1)CC2	COCc1ncc2c(n1)CN(C(=O)C1CCOC1)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
COCCNc1cncc(-c2cc(C3CN(C4COC4)C3)cc(=O)n2C)n1	COCCNc1cncc(-c2cc(C3CN(C4COC4)C3)cc(=O)n2C)n1	TRUE	TRUE	TRUE
C=C1C=C(C)CC(=O)OC2(C)C(C=CC=C(C)C(=O)C3=C2C(=O)OC3C)C(C)CCCC1O	C=C1C=C(C)CC(=O)OC2(C)C3=C(C(=O)C)C=CC=C2(C)CCCC1O)C(C)OC3=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc2nc(N3CCN(C)CC3)c(N)nc12	Cc1cccc2nc(N3CCN(C)CC3)c(N)nc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC1CCC(CCN2CCN(c3ccccc4c3OCO4)CC2)CC1)c1c[nH]cn1	O=C(NC1CCC(CCN2CCN(c3ccccc4c3OCO4)CC2)CC1)c1c[nH]cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1Cn2c(S(C)(C)C)cn3c(c2=S)OC(N)=C(C#N)C31	CC1Cn2c(S(C)(C)C)cn3c(c2=S)OC(N)=C(C#N)C31	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CCC2(N3CCOCC3)C3Cc4ccc(O)c5c4C2(CCN3CC2CC2)C1O5	O=C1CCC2(N3CCOCC3)C3Cc4ccc(O)c5c4C2(CCN3CC2CC2)C1O5	TRUE	TRUE	TRUE
OC(COc1ccc(Cl)cc1)CN1CCN(Cc2ccccc2)CC1	OC(COc1ccc(Cl)cc1)CN1CCN(Cc2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(NC(=O)CN(C=O)COc1ccccc1C(N)=O)c1ccccc1F	CC(NC(=O)CN(C=O)COc1ccccc1C(N)=O)c1ccccc1F	TRUE	TRUE	TRUE
OCc1ccc(C2CC(=O)C3=C(C)NC(C)=C(C(=O)OC2CCCCC2)C3c2ccco2)cc1	OCc1ccc(C2CC(=O)C3=C(C)NC(C)=C(C(=O)OC2CCCCC2)C3c2ccco2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CN(C(=O)C2(Cc3cc(Cl)c(Cl)c3)CC2)CCN1C(=O)c1ccc2cc[nH]c2c1	CC1CN(C(=O)C2(c3ccc(Cl)c(Cl)c3)CC2)CCN1C(=O)c1ccc2cc[nH]c2c1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CCC1(C2=CC3CC(Cl)CC2C2(C)C3CC(=O)C2(C)C)NC(=O)c2ccccc2N1C(N)=O	CCC1(C2=CC3CC(Cl)CC2C2(C)C3CC(=O)C2(C)C)NC(=O)c2ccccc2N1C(N)=O	TRUE	TRUE	TRUE
C=C1CCN(Cc2ccnc2)CNC1=O	C=C1CCN(Cc2ccnc2)CNC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cc(-n2ccnc2)ccn1)c1cc(-c2sccc2-n2cnnn2)ccn1	O=C(Nc1cc(-n2ccnc2)ccn1)c1cc(-c2sccc2-n2cnnn2)ccn1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc2c3c(n(CC(O)C[N+](C)(C)C)c12)C(CO)c1ccc(F)cc1C3=O	COc1cccc2c3c(n(CC(O)C[N+](C)(C)C)c12)C(CO)c1ccc(F)cc1C3=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1ccn(C2C(OCc3ccccc3)C(COP(=O)(O)OP(=O)(O)OP(=O)(O)OCc3ccccc3)OC2n2cnc3c(N=P(O)O)ncnc32)c(NCC1NC1ccccc1		FALSE	TRUE	TRUE
COc1cc[Sc2c(C#N)cnc3cc(C)n(Cc4cn4C)c23]cc(OC)c1OC	COc1cc[Sc2c(C#N)cnc3cc(C)n(Cc4cn4C)c23]cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+](([O-]))c1ccc(C2=NN=C(NNc3ccc(S(=O)(=O)Nc4ccc(SC(F)F)cc4)cc3)SC2)cc1	O=[N+](([O-]))c1ccc(C2=NN=C(NNc3ccc(S(=O)(=O)Nc4ccc(SC(F)F)cc4)cc3)SC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
N#CC(N)Cc1ccc(OCc2ccc(Cl)cc2)cc1	N#CC(N)Cc1ccc(OCc2ccc(Cl)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1NCCc2c1c1c3ccccc3n3c1c1c2c2ccccc2n1C1OC(CO)C(O)C(O)C13	O=C1NCCc2c1c1c3ccccc3n3c1c1c2c2ccccc2n1C1OC(CO)C(O)C(O)C13	TRUE	TRUE	TRUE
COc1nncn2c1ncn2C1OC(CSCCC(N)C(=O)O)CC1O	COc1nncn2c1ncn2C1OC(CSCCC(N)C(=O)O)CC1O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cn1cnc2sc(-c3ccccc3)cc2c1=O)Nc1ccc(F)cc1	O=C(Cn1cnc2sc(-c3ccccc3)cc2c1=O)Nc1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nccn2c(C3CCC3)nc(-c3cccc(OCc4ccccc4)c3)c12	Nc1nccn2c(C3CCC3)nc(-c3cccc(OCc4ccccc4)c3)c12	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)(OCCc1c[nH]cn1)(c1ccccc1)c1ccccc1		FALSE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(Nc2cc(O)nc(O)n2)c1SSc1ccccc1N	Cc1cccc(Nc2cc(O)nc(O)n2)c1SSc1ccccc1N	TRUE	TRUE	TRUE
N#CC1=C(N)Oe2cc(N)ccc2C1c1ccc(Cl)cc1	N#CC1=C(N)Oe2cc(N)ccc2C1c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
COc1cc2c(cc1OC)CN(CCc1ccc(NC(=O)c3ccc(F)cc3)cc1)CC2	COc1cc2c(cc1OC)CN(CCc1ccc(NC(=O)c3ccc(F)cc3)cc1)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)Cc1ncc2cc(Cl)ccc2n(C2CCCC2)c1=O	O=C(O)Cc1ncc2cc(Cl)ccc2n(C2CCCC2)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1ccc(CN2CCCC3(CCOCC3)C2)cc1	Oc1ccc(CN2CCCC3(CCOCC3)C2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccc(OC3ccccc3)cc2)cc1	COc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccc(OC3ccccc3)cc2)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)(C)c1ccc(-c2nc3ccncc3[nH]2)cc1	CC(C)(C)c1ccc(-c2nc3ccncc3[nH]2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc(Nc2cccc(C(F)(F)F)c2)c[n+](([O-]))n1	Nc1nc(Nc2cccc(C(F)(F)F)c2)c[n+](([O-]))n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(CC(N)CS)CC(=O)N1CC2(C)CC1CC(C)(C)C2	CCC(CC(=O)N1CC2(C)CC1CC(C)(C)C2)CC(N)CS	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1ccc(Nc2nncn3c2cnn3CC(Cl)c2ccccc2)cc1	CCOC(=O)c1ccc(Nc2nncn3c2cnn3CC(Cl)c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NCCC(=O)c2ccccc2)cc1	COc1ccc(NCCC(=O)c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NC(Cc1cccc(F)c1)C(O)CNC1CCN(Cc2ccc(CC(C)(C)C#N)cc2)C1	CC(=O)NC(Cc1cccc(F)c1)C(O)CNC1CCN(Cc2ccc(CC(C)(C)C#N)cc2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ncc(-c2ccc(COc3ccc4c(c3)C3(CCC4)NC(=O)NC3=O)cc2)cn1	COc1ncc(-c2ccc(COc3ccc4c(c3)C3(CCC4)NC(=O)NC3=O)cc2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(Cc1ccnec1)CC(O)COc1ccccc1Cc1ccccc1Cl	CN(Cc1ccnec1)CC(O)COc1ccccc1Cc1ccccc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CSC(C(=O)NC(CC(C)C)C(O)CC(Cc1ccccc1)NC(=O)C(Cc1ccccc1F)NC(=O)OCc1ccccc1)C(C)C	CSC(C(=O)NC(CC(C)C)C(O)CC(Cc1ccccc1)NC(=O)C(Cc1ccccc1F)NC(=O)OCc1ccccc1)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)OCC1OC(n2nc(C(C)=O)nc2O)C(OC(C)=O)C1OC(C)=O	CC(=O)OCC1OC(n2nc(C(C)=O)nc2O)C(OC(C)=O)C1OC(C)=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CSc1nncn2sc3c(c12)CCCC3)NNC(=O)c1ccco1	O=C(CSc1nncn2sc3c(c12)CCCC3)NNC(=O)c1ccco1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C(=Cc1ccc(F)cc1)SCc1ccc(Cl)cc1)c1ccc(F)cc1	O=C(C(=Cc1ccc(F)cc1)SCc1ccc(Cl)cc1)c1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)CC(O)CC(=O)C=Cc1ccccc1O	COC(=O)CC(O)CC(=O)C=Cc1ccccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(O)C(O)C(CO)OC1n1cnc2c(N)ncnc21	CC1(O)C(O)C(CO)OC1n1cnc2c(N)ncnc21	TRUE	TRUE	FALSE
COc1cc(OC)c(NC(=O)CSc2nnc(Cc3c[nH]c4ccccc34)n2CCc2ccccc2)c(OC)c1	COc1cc(OC)c(NC(=O)CSc2nnc(Cc3c[nH]c4ccccc34)n2CCc2ccccc2)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
C#Cc1cc(OCc2cnc(NCCCN3CCOCC3)nc2N)c(C(C)C)cc1OCCCC	C#Cc1cc(OCc2cnc(NCCCN3CCOCC3)nc2N)c(C(C)C)cc1OCCCC	TRUE	TRUE	TRUE
CCNc1ncc2cc(C(=O)c3cc(Cl)sc3Cl)c(=O)n(C)C2n1	CCNc1ncc2cc(C(=O)c3cc(Cl)sc3Cl)c(=O)n(C)C2n1	TRUE	TRUE	TRUE
Fc1ccc(N=Cc2cc(Br)c(O)c(Br)c2)cc1	Oc1c(Br)cc(C=Nc2ccc(F)cc2)cc1Br	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)C(=O)NCc1ccc(Cl)c(-c2nc3n(n2)CCNC3)c1	CC(C)(C)C(=O)NCc1ccc(Cl)c(-c2nc3n(n2)CCNC3)c1	TRUE	TRUE	TRUE
BrC1ccc(-c2nc(-c3ccccc3)c[nH]2)cc1	BrC1ccc(-c2nc(-c3ccccc3)c[nH]2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1ccc(-c2nc(C3CCC3)no2)c(-c2ccc(OC3ccccc3)cc2)c1	Oc1ccc(-c2nc(C3CCC3)no2)c(-c2ccc(OC3ccccc3)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)CC(C(=O)NCCS(N)(=O)=O)c2ccccc2)cc1	Cc1ccc(S(=O)(=O)CC(C(=O)NCCS(N)(=O)=O)c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=Cc1ccccc1)Nc1cccc(OCc2ccc3c(C=Cc4ccccc4)n[nH]c3c2)c1	O=C(C=Cc1ccccc1)Nc1cccc(OCc2ccc3c(C=Cc4ccccc4)n[nH]c3c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C)c(Nc2nncn3ccc(NC(=O)Nc4cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c4)cc23)c1	COc1ccc(C)c(Nc2nncn3ccc(NC(=O)Nc4cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c4)cc23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C(F)(F)F)cc(C(=O)NCC2ccc(OC(F)(F)F)cc2)n1	Cc1cc(C(F)(F)F)cc(C(=O)NCC2ccc(OC(F)(F)F)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(CCC)C(=O)c1ccc(NC(=O)CN2CCSc3nccccc32)cc1	CCCN(CCC)C(=O)c1ccc(NC(=O)CN2CCSc3nccccc32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
N=c1[nH]nc(-c2ccc3[nH]cc(-c4nc5ccc(OCc6ccccc6)cc5[nH]4)c3c2)s1	N=c1[nH]nc(-c2ccc3[nH]cc(-c4nc5ccc(OCc6ccccc6)cc5[nH]4)c3c2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)c1ccc(S(=O)(=O)N2CCC(C(=O)N3CCC(C(=O)O)CC3)CC2)cc1	CC(=O)c1ccc(S(=O)(=O)N2CCC(C(=O)N3CCC(C(=O)O)CC3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CNC1sc(S(=O)(=O)c2ccc(C)cc2)nc1C(N)=O	CC(C)CNC1sc(S(=O)(=O)c2ccc(C)cc2)nc1C(N)=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1[nH]nc(-c2ccc(F)cc2)n1-c1ccc2c(c1)OCCO2	O=c1[nH]nc(-c2ccc(F)cc2)n1-c1ccc2c(c1)OCCO2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C)c(NCC(=O)N2CCCN3nc(C)cc3C2c2ccccc2)c1	Cc1ccc(C)c(NCC(=O)N2CCCN3nc(C)cc3C2c2ccccc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)Oc2c(c3ncccc3c3ccccc23)C(=O)c2ccccc21	CC1(C)Oc2c(c3ncccc3c3ccccc23)C(=O)c2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=NOCCO)c1cnc(-n2nc(C)nc2C)cn1	CC(=NOCCO)c1cnc(-n2nc(C)nc2C)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)-c1nnc(N)s1	CC(C)(C)c1nnc(N)s1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ncc(Cc2cccc3ccccc23)c(N)n1	Nc1ncc(Cc2cccc3ccccc23)c(N)n1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(NCc1ccccc1)c1nc(-c2ccc(Cl)cc2Cl)[nH]c(=O)c1O	O=C(NCc1ccccc1)c1nc(-c2ccc(Cl)cc2Cl)[nH]c(=O)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nn(C)cc1C(O)=NC1=CCCC(N=c2cccc(C(F)(F)F)[nH]2)C1O	Cc1nn(C)cc1C(O)=NC1=CCCC(N=c2cccc(C(F)(F)F)[nH]2)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(=O)c(Cc3nn[nH]n3)coc2c1	COc1ccc2c(=O)c(Cc3nn[nH]n3)coc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CGN1CCN(S(=O)(=O)c2cccc(C(F)(F)F)c2)CC1)NCC1cccs1	O=C(CGN1CCN(S(=O)(=O)c2cccc(C(F)(F)F)c2)CC1)NCC1cccs1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCc1ccc2c(c1)C(c1ccc(O)cc1)=[N+](([O-]))C(c1ccc(OC)cc1)N2	CCCCc1ccc2c(c1)C(c1ccc(O)cc1)=[N+](([O-]))C(c1ccc(OC)cc1)N2	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1cccc(N2CCN(c3nc(C(F)(F)F)nc4onc(-c5ccccc5)c34)CC2)c1	FC(F)(F)c1nc(N2CCN(c3cccc(Cl)c3)CC2)c2c(-c3ccccc3)noc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(C(=O)O)cc1)c1cccc(Cc2nnc(O)c3c2CCCC3)c1	O=C(O)c1ccc(NC(=O)c2cccc(Cc3nnc(O)c4c3CCCC4)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(cc1OC)C1C3Cc4ccc(OC)c(OC)c4C3CCN1CC2	COc1cc2c(cc1OC)C1C3Cc4ccc(OC)c(OC)c4C3CCN1CC2	TRUE	TRUE	TRUE
C#CCN(c1ccc2ncc(-c3cnn(C)c3)nc2c1)C1CCN(C(=O)NC(C)(C)C)CC1	C#CCN(c1ccc2ncc(-c3cnn(C)c3)nc2c1)C1CCN(C(=O)NC(C)(C)C)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ccc(C(=O)NC(C2CCCCC2)C(=O)NC(Cc2ccc(Cl)cc2)C(=O)NC2CCCCN(C3CCCCC3)C2=O)cc1	Nc1ccc(C(=O)NC(C2CCCCC2)C(=O)NC(Cc2ccc(Cl)cc2)C(=O)NC2CCCCN(C3CCCCC3)C2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1c(NS(=O)(=O)c2cccs2)cc(-c2cccc([N+](=O)[O-])c2)oc1=O	O=C(O)c1c(NS(=O)(=O)c2cccs2)cc(-c2cccc([N+](=O)[O-])c2)oc1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1Nc2ccc(F)cc2C12NN=C(c1cccs1)S2	O=C1Nc2ccc(F)cc2C12NN=C(c1cccs1)S2	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)COC(=O)c2cc(O)nnc2C)cc1OC	COc1ccc(C(=O)COC(=O)c2cc(O)nnc2C)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc1C(=O)NCCc1nc2ccccc2[nH]1	Cc1ccccc1C(=O)NCCc1nc2ccccc2[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1N(c2ccc(O)cc2)C(c2ccccc2)C12CCN(C1CCCCC1)CC2	O=C1N(c2ccc(O)cc2)C(c2ccccc2)C12CCN(C1CCCCC1)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(NC(=O)CCN)C(=O)NC(Cc1cn(C(=O)CCCCC(=O)NC(CCC(N)C(=O)O)C(=O)O)c2ccccc12)C(N)=O	CC(C)CC(NC(=O)CCN)C(=O)NC(Cc1cn(C(=O)CCCCC(=O)NC(CCC(N)C(=O)O)C(=O)O)c2ccccc12)C(N)=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CC(NC2CCC2)CCC1(C)O	CC1CC(NC2CCC2)CCC1(C)O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1nc(C(=O)Nc2cnc(OC3cccn3)nc2)cs1	CC(=O)Nc1nc(C(=O)Nc2cnc(OC3cccn3)nc2)cs1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1c(C)[nH]c(C)c1C(=O)COC(=O)CNC(=O)c1ccc(C)cc1	CCOC(=O)c1c(C)[nH]c(C)c1C(=O)COC(=O)CNC(=O)c1ccc(C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ncc(-c2cc3c(n2C(C)C)C(c2ccc(C#N)cc2)N(c2cc(Cl)cn(C)c2=O)C3=O)c(OC)n1	COc1ncc(-c2cc3c(n2C(C)C)C(c2ccc(C#N)cc2)N(c2cc(Cl)cn(C)c2=O)C3=O)c(OC)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(-c2ccccc2)sc1CCn1cc(C=CC(=O)NO)sc1=O	Cc1nc(-c2ccccc2)sc1CCn1cc(C=CC(=O)NO)sc1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(NC(=O)CCc2ccccc2)n(-c2ccccc2)n1	Cc1cc(NC(=O)CCc2ccccc2)n(-c2ccccc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c2ccc(F)cc2c2nnc(SCc3cn4ccccc4n3)nc21	Cn1c2ccc(F)cc2c2nnc(SCc3cn4ccccc4n3)nc21	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=S)NN=Cc1cccc([N+](=O)[O-])[O-]]c1	NC(=S)NN=Cc1cccc([N+](=O)[O-])[O-]]c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1N(Cc2ccc(F)cc2)C(Cc2ccccc2)C(O)C(O)C(Cc2ccc3c(c2)OCO3)N1Cc1ccc(O)cc1	O=C1N(Cc2ccc(F)cc2)C(Cc2ccccc2)C(O)C(O)C(Cc2ccc3c(c2)OCO3)N1Cc1ccc(O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1cc(C(=O)NC(C)c2c(C3CC3)n(C)c3cc(C)nc(N)c23)cccc1Cl	CC(=O)Nc1cc(C(=O)NC(C)c2c(C3CC3)n(C)c3cc(C)nc(N)c23)cccc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CN(CCO)C(=O)c1cnccc1-c1cnc(C#N)cc1Nc1CCCNc1	CN(CCO)C(=O)c1cnccc1-c1cnc(C#N)cc1Nc1CCCNc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1ccc(-n2c(CN3CCN(C(c4ccccc4)c4ccccc4)CC3)nc3ccccc3c2=O)cc1	CN(C)c1ccc(-n2c(CN3CCN(C(c4ccccc4)c4ccccc4)CC3)nc3ccccc3c2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(C)c1Sc1nc(-c2ccccc2)c(-c2ccccc2)o1	Cc1cccc(C)c1Sc1nc(-c2ccccc2)c(-c2ccccc2)o1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
Nc1ncc(-c2ccc(-c3ccccc3S(=O)(=O)N3CCC(n4cncn4)CC3)cn2)cc1OC(F)F	Nc1ncc(-c2ccc(-c3ccccc3S(=O)(=O)N3CCC(n4cncn4)CC3)cn2)cc1OC(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)c1cc2c(s1)C(=O)c1c(O)cccc1C2=O	CC(=O)c1cc2c(s1)C(=O)c1c(O)cccc1C2=O	TRUE	TRUE	FALSE
N#CCC1(n2cc(C(=N)O)c(=Nc3ccccc3)[nH]2)CCN(Cc2ccc(Cl)cc2)CC1	N#CCC1(n2cc(C(=N)O)c(=Nc3ccccc3)[nH]2)CCN(Cc2ccc(Cl)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC(OC(=O)c1ccccc1)c1cccc(C(=O)O)CC(=O)NCC2CCN2)c1	CCCC(OC(=O)c1ccccc1)c1cccc(C(=O)O)CC(=O)NCC2CCN2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1c(O)nnc(-c2cccc(S(=O)(=O)N(C)C)c2)c1-c1ccccc1	CC(=O)Nc1c(O)nnc(-c2cccc(S(=O)(=O)N(C)C)c2)c1-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
NS(=O)(=O)c1cc(S(N)(=O)=O)c(Nc2nccn2)cc1Cl	NS(=O)(=O)c1cc(S(N)(=O)=O)c(Nc2nccn2)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(Nc3ccc(Cl)c(Cl)c3)ncnc2cc1OCC1CN(C)CCO1	COc1cc2c(Nc3ccc(Cl)c(Cl)c3)ncnc2cc1OCC1CN(C)CCO1	TRUE	TRUE	FALSE
C=CCOC(=O)C1=C(C)NC(=O)NC1c1cccn(-c2ccccc2)c1=O	C=CCOC(=O)C1=C(C)NC(=O)NC1c1cccn(-c2ccccc2)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
N=C1C2N=C(c3ccccc3)CC(c3sccc3Cl)N2C(=O)N1CN1CCOCC1	N=C1C2N=C(c3ccccc3)CC(c3sccc3Cl)N2C(=O)N1CN1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCOc1ccc(-c2noc(C3CCCN(CCc4cccn4)C3)n2)cc1	COCCOc1ccc(-c2noc(C3CCCN(CCc4cccn4)C3)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C1(F)C(C)(F)CCC2C3C=C(Cl)C4=CC(=O)C=CC4(C)C3(F)C(O)CC21C	COC(=O)C1(F)C(C)(F)CCC2C3C=C(Cl)C4=CC(=O)C=CC4(C)C3(F)C(O)CC21C	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nn(C)c(Cl)c1-c1cc(Cl)c2c(c1)N(CCCCC(=O)O)C(=O)CS2(=O)=O	Cc1nn(C)c(Cl)c1-c1cc(Cl)c2c(c1)N(CCCCC(=O)O)C(=O)CS2(=O)=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)C(NC(=O)C1CCCN1C(=O)C(C1CCCC1)CN(O)C=O)C(=O)C(N)CC(C)C	CC(O)C(N)C(=O)C(NC(=O)C1CCCN1C(=O)C(C1CCCC1)CN(O)C=O)C(=O)C(N)CC(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CN1Cc2cc(C(=O)Nc3ccc(CCN(C(=O)Nc4ccc([N+](=O)[O-])cc4)cc3)ccc2NC(C(=O)O)C1=O	CN1Cc2cc(C(=O)Nc3ccc(CCN(C(=O)Nc4ccc([N+](=O)[O-])cc4)cc3)ccc2NC(C(=O)O)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nnc(NC(=S)NC(=O)c2ccc(Br)o2)s1	CCc1nnc(NC(=S)NC(=O)c2ccc(Br)o2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)c2c(C)n(CCN3CCCC3)c3ccccc23)cc1OC	COc1ccc(C(=O)c2c(C)n(CCN3CCCC3)c3ccccc23)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCSc1nc(C)c2c(C)nc3ccc(CC)cc3n12	C=CCSc1nc(C)c2c(C)nc3ccc(CC)cc3n12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1oc(-c2ccc(Cl)cc2)nc1CCOc1ccc(C=C(C(=O)O)C(F)(F)F)cc1	Cc1oc(-c2ccc(Cl)cc2)nc1CCOc1ccc(C=C(C(=O)O)C(F)(F)F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC=C1CN2C(=NCCc3ccccc3)N(CC)CC=CC=C2c2cc3c(cc21)OCO3	CCCCC=C1CN2C(=CC=CCN(CC)C2=NCCc2ccccc2)c2cc3c(cc21)OCO3	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(CC(=O)NCCO)CCN(C(=O)c2cccc(F)n2)CC1	CC1(CC(=O)NCCO)CCN(C(=O)c2cccc(F)n2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=CC2C(CCC2(C)O)C(C)(O)C12Cc1c(O)c(Cl)ccc(C(=O)O)c1O2	CC1=CC2C(CCC2(C)O)C(C)(O)C12Cc1c(O)c(Cl)ccc(C(=O)O)c1O2	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C(=O)NS(=O)(=O)C(C)C)CCN1C(=O)C1(c2ccccc2)CC1	CC1(C(=O)NS(=O)(=O)C(C)C)CCN1C(=O)C1(c2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(NC(=O)C1CCCN1C(=O)C(Cc1ccccc1)N(C(=O)C(CCCNC(=N)N)NC(=O)C(CO)NC(=O)C(N)CC(=O)O)C(=O)O	CC(C)C(NC(=O)C1CCCN1C(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)C(CCCNC(=N)N)NC(=O)C(CO)NC(=O)C(N)CC(=O)O)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ncc(N2CCCN(Cc3ccccc3)CC2)c(N2CCOCC2)n1	Cc1ncc(N2CCCN(Cc3ccccc3)CC2)c(N2CCOCC2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1c(NC(=O)c2ccc3cc4n(c3c2)CCNC4=O)nc2ccccc21	CCn1c(NC(=O)c2ccc3cc4n(c3c2)CCNC4=O)nc2ccccc21	TRUE	TRUE	FALSE
COc1ccc(C(=O)N)C(C(=O)N)NC(C(=O)c2ccc(C)c2)C(C)Ccc1	COc1ccc(C(=O)N)C(C(=O)N)NC(C(=O)c2ccc(C)c2)C(C)Ccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(c1ccc(-c2cc(F)cc(F)c2)cc1)N1CC(CCCO)(c2ccccc2)OC1	CC(c1ccc(-c2cc(F)cc(F)c2)cc1)N1CC(CCCO)(c2ccccc2)OC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)OCC(N)(c2ccc(-n3nc4c(C(F)F)cccc4c3-c3ccccc3)cc2)C1(F)F	CC1(C)OCC(N)(c2ccc(-n3nc4c(C(F)F)cccc4c3-c3ccccc3)cc2)C1(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2ccc(C(=O)CC3CO3)cc2c1	COc1ccc2ccc(C(=O)CC3CO3)cc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+](([O-])c1ccc(C2=Nn3c(nnc3-c3cnc4ccccc4c3)SC2)cc1	O=[N+](([O-])c1ccc(C2=Nn3c(nnc3-c3cnc4ccccc4c3)SC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2cc(=O)c3ccc(OC)cc3o2)cc1	COc1ccc(-c2cc(=O)c3ccc(OC)cc3o2)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
O=c1oc2cccc(O)c2cc1-c1ccc(O)cc1	O=c1oc2cccc(O)c2cc1-c1ccc(O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CN(C)CCCNc2nc(N3CCN(C(=O)c4ccccc4)CC3)nc3c2ncn3C(C)C)cc1Br	COc1ccc(CN(C)CCCNc2nc(N3CCN(C(=O)c4ccccc4)CC3)nc3c2ncn3C(C)C)cc1Br	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cnc(C)c(-c2ccc(OCCNCc3cnccc3)c(Cl)C(C)C2)n1	Cc1cnc(C)c(-c2ccc(OCCNCc3cnccc3)c(Cl)C(C)C2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1[nH]n(Cc2c(Cl)cccc2Cl)c(=O)c2ccccc12	O=c1[nH]n(Cc2c(Cl)cccc2Cl)c(=O)c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C)(C)NC(=O)C(c1cccs1)N(Cc1cccs1)C(=O)Cn1nnc2ccccc21	CCC(C)(C)NC(=O)C(c1cccs1)N(Cc1cccs1)C(=O)Cn1nnc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1ccccc2n1CC1CC2CN(C(=O)c2ccc3c(c2)OCO3)C1	O=C(c1ccc2c(c1)OCO2)N1CC2CC(C1)c1cccc(=O)n1C2	TRUE	TRUE	TRUE
NS(=O)(=O)c1ccc(CCN(S(=O)(=O)c2ccc3c(c2)CCCC3)cc1	NS(=O)(=O)c1ccc(CCN(S(=O)(=O)c2ccc3c(c2)CCCC3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C1=CC2C3C(=O)N(C)C(=O)C3C(C)(C(=O)O)C(c3ccccc3C2N(C)C1=O	COC(=O)C1=CC2C3C(=O)N(C)C(=O)C3C(C)(C(=O)O)C(c3ccccc3C2N(C)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1CC(C)(C)CC(NC(=O)NCC2CCO2)C1O	CCOC(=O)C1CC(C)(C)CC(NC(=O)NCC2CCO2)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)CNC(=O)C1=C(C)Nc2ccnn2C1c1ccc(F)cc1	COC(=O)CNC(=O)C1=C(C)Nc2ccnn2C1c1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+](([O-])c1ccc(-c2nnc3n2N=C(Nc2ccccc2)S3)o1	O=[N+](([O-])c1ccc(-c2nnc3n2N=C(Nc4ccccc4)nn23)o1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1cc(NC2COCC2N2CCCC2)n2nc(C3CC3)cc2n1	CCc1cc(NC2COCC2N2CCCC2)n2nc(C3CC3)cc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(NCc1cccc2[nH]ccc12)c1cccs1	N=C(NCc1cccc2[nH]ccc12)c1cccs1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ncnc2c1ncn2C1CC2(CO)CN2Cc2ccccc21	Nc1ncnc2c1ncn2C1CC2(CO)CN2Cc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(-c2nnc3sc(COc4ccccc4)nn23)cc1	c1ccc(OCC2nn3c(-c4ccccc4)nn3s2)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
CS(=O)(=O)N1CCc2c(c(-c3ccc(C(F)(F)F)c(SCCN4CCCC4)c3)nn2CC(O)C2CC2)C1	CS(=O)(=O)N1CCc2c(c(-c3ccc(C(F)(F)F)c(SCCN4CCCC4)c3)nn2CC(O)C2CC2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1nc(NC(=O)c2ccccc2F)sc1C	CCOC(=O)c1nc(NC(=O)c2ccccc2F)sc1C	TRUE	TRUE	TRUE
CCCOc1ccc(CN=c2[nH]c(=NC3CC3)n3ncc(C=C4N=C(O)N=C4O)c3[nH]2)cc1Cl	CCCOc1ccc(CN=c2[nH]c(=NC3CC3)n3ncc(C=C4N=C(O)N=C4O)c3[nH]2)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(OC)c(Cl)=O)Nc2ccccc(-c3nc4ncnc4o3)c2)cc1OC	COc1cc(OC)c(Cl)=O)Nc2ccccc(-c3nc4ncnc4o3)c2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)C1CCN(C(=O)c2cc3cc(Nc4nccc(-c5cc(OC6CCOCC6)ccn5)n4)ccc3[nH]2)C1	CN(C)C1CCN(C(=O)c2cc3cc(Nc4nccc(-c5cc(OC6CCOCC6)ccn5)n4)ccc3[nH]2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(NC(=O)c2ccccc(-c3n[nH]c(=O)n3-c3ccc(Cl)c(Cl)c3)c2)cc(OC)c1OC	COc1cc(NC(=O)c2ccccc(-c3n[nH]c(=O)n3-c3ccc(Cl)c(Cl)c3)c2)cc(OC)c1OC	FALSE	TRUE	TRUE
CCCCC=CC(=O)OCC1OC2(CCN(CCCCCCC)CC2)c2c(OC)c(OC)cc(OC(=O)CCCCC)c2C1=O	CCCCC=CC(=O)OCC1OC2(CCN(CCCCCCC)CC2)c2c(OC)c(OC)cc(OC(=O)CCCCC)c2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1cccc(CC2CCN(C(=O)c3c[nH]cn3)CC2)c1	COC(=O)c1cccc(CC2CCN(C(=O)c3c[nH]cn3)CC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(F)cc1Oc1c(Cl)=O)N2CCNCC2)c2nn(-c3ccc(OCCF)cc3)c(=O)n2c2ccc(Cl)cc12	Cc1ccc(F)cc1Oc1c(Cl)=O)N2CCNCC2)c2nn(-c3ccc(OCCF)cc3)c(=O)n2c2ccc(Cl)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(C=O)NC(=O)C(CO)NC(=O)CCCCCCC(=O)NC(CCCCN)C(=O)O	CC(C)CC(C=O)NC(=O)C(CO)NC(=O)CCCCCCC(=O)NC(CCCCN)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1c(NS(=O)(=O)c2ccsc2C(=O)O)ccc2c1CCN(CCN(C(=O)c1ccco1)C2	O=C(NCCN1CCc2c(ccc(NS(=O)(=O)c3ccsc3C(=O)O)c2C(=O)O)C1)c1ccco1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1c2ccccc2C(=O)N1CCCCN1CC=C(c2c[nH]c3ccc(Cl)cc23)CC1	O=C1c2ccccc2C(=O)N1CCCCN1CC=C(c2c[nH]c3ccc(Cl)cc23)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC1C(=O)NC(C2Cc3ccccc3C2)C(=O)N1C(C(=O)NC(C)(C)C)c1ccc(F)c(F)c1	CC(C)CC1C(=O)NC(C2Cc3ccccc3C2)C(=O)N1C(C(=O)NC(C)(C)C)c1ccc(F)c(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CN(CCCC(F)(F)F)c2nc3c(c(=O)[nH]c(=O)n3C)n2C1	CC1CN(CCCC(F)(F)F)c2nc3c(c(=O)[nH]c(=O)n3C)n2C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCOc1ccc(C(=O)c2ccccc2)cc1	CCCCCOc1ccc(C(=O)c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCc1ccc(OC(=O)Cn2ccc3cc(C(=O)O)ccc32)cc1	CCCCCCCCc1ccc(OC(=O)Cn2ccc3cc(C(=O)O)ccc32)cc1	TRUE	FALSE	FALSE
CC(C)S(=O)(=O)N1CCN(c2ccc(C(=O)O)cc2[N+](=O)[O-])CC1	CC(C)S(=O)(=O)N1CCN(c2ccc(C(=O)O)cc2[N+](=O)[O-])CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(CCc1ccccc1)NC(=O)C1CCN(C(=O)N2Cc3ccccc3C2)CC1	CC(CCc1ccccc1)NC(=O)C1CCN(C(=O)N2Cc3ccccc3C2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ccc(CCc2ccc(N)c(C(N)=O)c2)cc1	NC(=O)c1cc(CCc2ccc(N)cc2)ccc1N	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(N2CCN(C(CNC(=O)C3CC3)c3ccc(F)c(F)c3)CC2)c1C	Cc1cccc(N2CCN(C(CNC(=O)C3CC3)c3ccc(F)c(F)c3)CC2)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C1CNCCC1c1ccc(-c2ocnc2C(C)C)cc1	COC(=O)C1CNCCC1c1ccc(-c2ocnc2C(C)C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nn(-c2ccc3[nH]cc(-c4cccc(N)c4)c3n2)c(C)c1C	Cc1nn(-c2ccc3[nH]cc(-c4cccc(N)c4)c3n2)c(C)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
OC(=NC1CCCC1)C1CCc2c(sc3ncnc(Nc4ccc5nc(O)sc5e4)e23)C1	OC(=NC1CCCC1)C1CCc2c(sc3ncnc(Nc4ccc5nc(O)sc5e4)e23)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(nc1-c1ccc(C1(c3ccccc3)OCCCO1)n2CC(C)(C)O	COc1cc2c(nc1-c1ccc(C1(c3ccccc3)OCCCO1)n2CC(C)(C)O	FALSE	TRUE	TRUE
C=CCNC(C)C=C[N+](=O)[O-]	C=CCNC(C)C=C[N+](=O)[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCCc1nc2ncccc2[nH]1)c1cccc(F)c1	O=C(NCCc1nc2ncccc2[nH]1)c1cccc(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
C#CC1(O)OC(n2cc(C)c(=O)[nH]c2=O)CC1O	C#CC1(O)OC(n2cc(C)c(=O)[nH]c2=O)CC1O	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)C(S)=NCCO	CN(C)C(S)=NCCO	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(c1cccn1)n1cc2c(n1)C(=N)N(c1cccc(-c3c[nH]cn3)c1)C2	CC(C)(c1cccn1)n1cc2c(n1)C(=N)N(c1cccc(-c3c[nH]cn3)c1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1ncn2c1CN(CC(=O)O)C1cccc1C=Cc1ccccc1-2	CCOC(=O)c1ncn2c1CN(CC(=O)O)C1cccc1C=Cc1ccccc1-2	TRUE	TRUE	TRUE
CNCC1(O)CCCN(c2ncc(C(=O)c3cc(OC)c(OC)c(OC)c3)cc2C#N)C1	CNCC1(O)CCCN(c2ncc(C(=O)c3cc(OC)c(OC)c(OC)c3)cc2C#N)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(NC(=O)Nc1ccccc1)c1nncn1C	CC(NC(=O)Nc1ccccc1)c1nncn1C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(Nc1ncn2[nH]cnc12)c1nn2ccc(S(=O)(=O)c3cccc(Cl)c3)cc2c(=O)n1-c1ccccc1	CC(Nc1ncn2[nH]cnc12)c1nn2ccc(S(=O)(=O)c3cccc(Cl)c3)cc2c(=O)n1-c1ccccc1	FALSE	TRUE	TRUE
CN(Cc1ccc2c(c1)CCCP(=O)(O)O2)c1cc(-c2ccc3c(c2)OCO3)on1	CN(Cc1ccc2c(c1)CCCP(=O)(O)O2)c1cc(-c2ccc3c(c2)OCO3)on1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1nnc2c(O)nc3cc(Cl)c(Cl)cc3n12	NC(=O)c1nnc2c(O)nc3cc(Cl)c(Cl)cc3n12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(NC(=O)CSc2nnc(COc3ccc(Cl)cc3)n2N)c1	Cc1cccc(NC(=O)CSc2nnc(COc3ccc(Cl)cc3)n2N)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)C=CC=CCO1	CC1(C)C=CC=CCO1	TRUE	TRUE	TRUE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
N#Cc1c(NC(=O)c2ccco2)[n+](([O-])c2cc(Cl)c(Cl)cc2[n+])1[O-]	N#Cc1c(NC(=O)c2ccco2)[n+](([O-])c2cc(Cl)c(Cl)cc2[n+])1[O-]	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1cccc1C=C1OC(=O)C(c2ccc(Cl)cc2C)=C1c1ccc(S(C)(=O)=O)cc1	Cc1ccc(C2=C(c3ccc(S(C)(=O)=O)cc3)C(=Cc3cccc3C)OC2=O)c(C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCOC1(C(F)(F)F)OC(=O)Nc2ccc(Cl)cc21	COCCOC1(C(F)(F)F)OC(=O)Nc2ccc(Cl)cc21	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)Sc1nc2sc3c(c2c(=O)n1-c1cccc1)CCC3	CC(C)Sc1nc2sc3c(c2c(=O)n1-c1cccc1)CCC3	TRUE	TRUE	TRUE
C=CC1CN(CC)CCC1Cl	C=CC1CN(CC)CCC1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)Oc2cccc3sc(NC(=O)C=Cc4ccccc4)c(c23)O1	CC1(C)Oc2cccc3sc(NC(=O)C=Cc4ccccc4)c(c23)O1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1cccc(NS(=O))(=O)c2cccc2F)c1)n1cnen1	O=C(c1cccc(NS(=O))(=O)c2cccc2F)c1)n1cnen1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1sc2nc(SCC(=O)NCCC(C)C)nc(O)c2c1C	Cc1sc2nc(SCC(=O)NCCC(C)C)nc(O)c2c1C	TRUE	TRUE	TRUE
c1cnc(NCc2ccc(CO3CCOCC3)cc2)nc1		FALSE	TRUE	TRUE
CCN1CCN(C(c2ccccc2)c2cn(-c3ccc(CC)cc3)nn2)CC1	CCc1ccc(-n2cc(C(c3ccccc3)N3CCN(CC)CC3)nn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(NC(=O)c2ccc3c(c2)C(=O)N(CC2CCCO2)C3=O)cc(OC)c1OC	COc1cc(NC(=O)c2ccc3c(c2)C(=O)N(CC2CCCO2)C3=O)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(C2C=C(c3cccc([N+])(=O)[O-])c3)Nc3nc(NC(=O)c4ccccc4)nn32)c1	COc1cccc(C2C=C(c3cccc([N+])(=O)[O-])c3)Nc3nc(NC(=O)c4ccccc4)nn32)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOCC1=NN(c2ccccc2)C(=O)C1=CNc1ccc(-c2ccc3ncc(C(=O)C=C(O)C(=O)O)c(N)c3c2)c(F)c1	CCOCC1=NN(c2ccccc2)C(=O)C1=CNc1ccc(-c2ccc3ncc(C(=O)C=C(O)C(=O)O)c(N)c3c2)c(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
NC1CCN(c2cc(-c3n[nH]c4ccc(-c5enn(CCN6CCOCC6)c5)cc34)ncn2)C1	NC1CCN(c2cc(-c3n[nH]c4ccc(-c5enn(CCN6CCOCC6)c5)cc34)ncn2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)Nc2cc3nc(N4CCN(Cc5ccccc(C)c5)CC4)n(C)c3cc2Cl)o1	COc1ccc(C(=O)Nc2cc3nc(N4CCN(Cc5ccccc(C)c5)CC4)n(C)c3cc2Cl)o1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(S(=O))(=O)NC(=O)C2(C)CCN2C(=O)Cc2ccccc2-c2ccccc2)cc1	COc1ccc(S(=O))(=O)NC(=O)C2(C)CCN2C(=O)Cc2ccccc2-c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC1(c2ccc(OC)cc2OC)NC(=O)N(CC(=O)NC2CCCC2)C1=O	CCC1(c2ccc(OC)cc2OC)NC(=O)N(CC(=O)NC2CCCC2)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(Cc1csc(-c2cncnc2)n1)c1ccc2ccccc2c1	O=S(=O)(Cc1csc(-c2cncnc2)n1)c1ccc2ccccc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc2c(CNc3ncccn3)c[nH]c2c1	c1cnc(NCc2c[nH]c3ccccc23)nc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cn(C)c(CNC(=O)c2ccc(NC(=O)c3ccccc3)cc2)n1	Cc1cn(C)c(CNC(=O)c2ccc(NC(=O)c3ccccc3)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCS(=O)(=O)Nc1ccc(Oc2ccc(CC(Nc3ccccc3C(=O)O)C(=O)O)cc2Cl)cn1	CCCS(=O)(=O)Nc1ccc(Oc2ccc(CC(Nc3ccccc3C(=O)O)C(=O)O)cc2Cl)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(CCC=C(c1cccc1)c1ccccc1)CCNCc1ccc(Cl)c(Cl)c1	CN(CCC=C(c1cccc1)c1ccccc1)CCNCc1ccc(Cl)c(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(=O)N1CCC(n2cc(-c3ccc(F)cc3)nn2)CC1	CC(C)CC(=O)N1CCC(n2cc(-c3ccc(F)cc3)nn2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1c(NCc2cccn2)n[nH]c1-c1ccc(Cl)cc1)N1CCCCC1	O=C(c1c(NCc2cccn2)n[nH]c1-c1ccc(Cl)cc1)N1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1ccc(NC(=O)CCc2nnc3ccccc3c2=O)cc1	CC(=O)Nc1ccc(NC(=O)CCc2nnc3ccccc3c2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccnc1CCC1CCN(S(=O))(=O)CC2(N(O)C=O)CCN(C(=O)c3ccccc3)CC2)CC1	Cc1ccnc1CCC1CCN(S(=O))(=O)CC2(N(O)C=O)CCN(C(=O)c3ccccc3)CC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(OCCCONC(=N)c2nc3ccc(C)cc3[nH]2)cc(OC)c1OC	COc1cc(OCCCONC(=N)c2nc3ccc(C)cc3[nH]2)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nn(C)c(C)c1NS(=O))(=O)c1ccccc1	Cc1nn(C)c(C)c1NS(=O))(=O)c1ccccc1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(=O)c1cccc(-c2cnc3ccc(NCc4ccnc4)nn23)c1	CC(=O)c1cccc(-c2cnc3ccc(NCc4ccnc4)nn23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cnc(NCCc2ccccc2)c(=O)n1CC(=O)NCc1ccc2[nH]ccc2c1	Cc1cnc(NCCc2ccccc2)c(=O)n1CC(=O)NCc1ccc2[nH]ccc2c1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(=O)OC1C(CO)Si](C)(C)C(C)(C)CO)Si](C)(C)Si](C)(C)C(C)CO1		FALSE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1[nH]c2cc(Cl)ccc2c1C(C(=O)=NCC)N(C=O)Cc1cccc(C(F)(F)F)c1Cl		TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(N=S(C)=O)sc1S(=O))(=O)Cc1c(Cl)ccccc1Cl		TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCCN1CCCC1)c1ccc(NC2=NCCN2)c([N+])(=O)[O-])c1	O=C(NCCN1CCCC1)c1ccc(NC2=NCCN2)c([N+])(=O)[O-])c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccnc(N2CCN(c3ccc(CC(C#N)NC(=O)C4NC5CCC4C5)c(F)c3)CC2)c1	COc1ccnc(N2CCN(c3ccc(CC(C#N)NC(=O)C4NC5CCC4C5)c(F)c3)CC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc2ccc([N+])(=O)[O-])cc2c(=O)n1-c1ccc(Br)cc1	Cc1nc2ccc([N+])(=O)[O-])cc2c(=O)n1-c1ccc(Br)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CNc1nc2ccccc2n1Cc1cc(OC)ccc1OC	CNc1nc2ccccc2n1Cc1cc(OC)ccc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(CNc2ncnc3cc(-c4ccccc4)sc23)c1	Cc1cccc(CNc2ncnc3cc(-c4ccccc4)sc23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1)C(Cc1cncnc1)(c1ccc(Cl)cc1)OC2	COc1ccc2c(c1)C(Cc1cncnc1)(c1ccc(Cl)cc1)OC2	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(O)C(n2cnc3c(N)ncnc32)C(FC2=NC3(CCC3)C(=O)N2)C1O		FALSE	TRUE	TRUE
COc1ncc2ncc(=O)n(CCSc3ncc[nH]3)c2n1	COc1ncc2ncc(=O)n(CCSc3ncc[nH]3)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C(=O)C1C(=O)c2cc(OC)cc(OC)c2C(Nc2ccc(C#N)cc2)C1O	CO(C(=O)C1C(=O)c2cc(OC)cc(OC)c2C(Nc2ccc(C#N)cc2)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)CN1CCN(S(=O))(=O)CCC(C)C)CC1	CC(C)CCS(=O))(=O)N1CCN(CC(C)C)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCNC(=O)C1OC(n2cnc3c(NC(=O)Nc4ccc(F)cc4)nc(C#Cc4cc(OC)c(OC)cc4Br)nc32)C(O)C1O	CCNC(=O)C1OC(n2cnc3c(NC(=O)Nc4ccc(F)cc4)nc(C#Cc4cc(OC)c(OC)cc4Br)nc32)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)CC(O)CC(O)Cn1cnc2c(N)ncnc21	CCOC(=O)CC(O)CC(O)Cn1cnc2c(N)ncnc21	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCC(C(c2c[nH]c3ccccc23)c2ccc(F)cc2)C1	CN1CCC(C(c2ccc(F)cc2)c2c[nH]c3ccccc23)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(=O)N1CCC2(CC1)OCc1cc(F)c(F)cc12	CC(C)C(=O)N1CCC2(CC1)OCc1cc(F)c(F)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C(=O)c1c(-c2ccccc2OC)c(-c2ccccc2)c2cccn12	CO(C(=O)c1c(-c2ccccc2OC)c(-c2ccccc2)c2cccn12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)CC(C(=O)NO)C(=O)NC(CC(C)C)C(=O)NC(Cc1ccco1)C(=O)CCOc1ccccc1	CC(C)CC(NC(=O)C(CC(C)C)C(=O)NO)C(=O)NC(Cc1ccco1)C(=O)CCOc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)Oc1cc2c(cc1-c1ccc(C3CC3)cc1)C(=O)CC2Cc1ccccc1Cl	CC(C)Oc1cc2c(cc1-c1ccc(C3CC3)cc1)C(=O)CC2Cc1ccccc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+](([O-])c1cnsclScc1ccccc1[N+])(=O)[O-]	O=[N+](([O-])c1ccccc1CSclsncc1[N+])(=O)[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
CCCc1cc(C(O)(c2ccc(Cl)cc2)c2ccncn2)c2c(n1)NCCCC2	CCCc1cc(C(O)(c2ccc(Cl)cc2)c2ccncn2)c2c(n1)NCCCC2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=Cc1ccc(O)cc1)OCC1OC(Oc2cc(O)c3c(=O)c4ccccc4oc3c2)C(O)C(O)C1O	O=C(C=Cc1ccc(O)cc1)OCC1OC(Oc2cc(O)c3c(=O)c4ccccc4oc3c2)C(O)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C(=O)C1=C(C)N(C=C2OC(=O)C(OCc3ccccc3)=C2OC(=O)C(=S)NC1c1ccco1	CO(C(=O)C1=C(C)N(C=C2OC(=O)C(OCc3ccccc3)=C2OC(=O)C(=S)NC1c1ccco1	TRUE	TRUE	TRUE
CSNc1ccc(O)cc1	CSNc1ccc(O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(Nc1ncns1)c1ccc2c(-c3ccc(C(F)(F)F)cc3CC3CC3)cccc2c1	O=S(=O)(Nc1ncns1)c1ccc2c(-c3ccc(C(F)(F)F)cc3CC3CC3)cccc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
NCC(=O)OC1CCOC1=O	NCC(=O)OC1CCOC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Fc1ccc2c(c1)ccc1c3ccccc3[nH]c12	Fc1ccc2c(ccc3c4ccccc4[nH]c23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C)C(NC(=O)C(CC(=O)O)NC(=O)C(N)CCCCN)C(=O)O	CCC(C)C(NC(=O)C(CC(=O)O)NC(=O)C(N)CCCCN)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(SC1=C(C(=O)O)N2C(=O)C(C(C)O)C2C1C)S(=O))(=O)c1ccc(C)cc1	Cc1ccc(S(=O))(=O)C(O)S2=C(C(=O)O)N3C(=O)C(C(C)O)C3C2C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(CNc2nnc(Cc3ccc(Cl)c(Cl)c3)c3ccccc23)s1	Cc1ccc(CNc2nnc(Cc3ccc(Cl)c(Cl)c3)c3ccccc23)s1	TRUE	TRUE	TRUE
SC1=Nc2ncnc2C(c2c[nH]c3ccccc23)=NN1	SC1=Nc2ncnc2C(c2c[nH]c3ccccc23)=NN1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-n2cc(C=CC(=O)Nc3ccccc3C(=O)O)c3ccccc32)cc1Cl	Cc1ccc(-n2cc(C=CC(=O)Nc3ccccc3C(=O)O)c3ccccc32)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1=C(Nc2ccccc2OC)CC(c2cccn2)N(c2ccccc2)C1c1ccc(Br)cc1	CCOC(=O)C1=C(Nc2ccccc2OC)CC(c2cccn2)N(c2ccccc2)C1c1ccc(Br)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc1-c1cc2c(cc1C(N)=O)c(=O)c(C(=O)O)cn2C(C)C#N	Cc1ccccc1-c1cc2c(cc1C(N)=O)c(=O)c(C(=O)O)cn2C(C)C#N	TRUE	TRUE	TRUE
CON=C(C#N)C(=O)NCC1=NOF1		FALSE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)cc(NC(=O)CN2C(=O)c3ccccc3Sc3ccc(C(=O)Nc4ccccc4F)cc32)c1	Cc1cc(C)cc(NC(=O)CN2C(=O)c3ccccc3Sc3ccc(C(=O)Nc4ccccc4F)cc32)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cc1ccc(F)cc1)Nc1cnc2cccn2c1=O	O=C(Cc1ccc(F)cc1)Nc1cnc2cccn2c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C=CCN2CC3CC(O)CC3C2)cc1OC	COc1ccc(C=CCN2CC3CC(O)CC3C2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C(=O)c1cc(NC(=O)CSCc2ccccc2OC)c2OC)cc(C(=O)OC)c1	CO(C(=O)c1cc(NC(=O)CSCc2ccccc2OC)c2OC)cc(C(=O)OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1N(c2ccccc2)c2ccccc2C12CCN(Cc1c(F)cccc1F)CC2	O=C1N(c2ccccc2)c2ccccc2C12CCN(Cc1c(F)cccc1F)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(C(=O)Cn1c2c(cc(N3CCN(C)CC3)c1=O)C(=O)c1ccccc1-2	CCCN(C(=O)Cn1c2c(cc(N3CCN(C)CC3)c1=O)C(=O)c1ccccc1-2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C(=O)O)c1ccc(-c2cc(C(C)(C)Cs2)c(F)c1	CC(C(=O)O)c1ccc(-c2cc(C(C)(C)Cs2)c(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1ncc(Br)c(N2CCCC2)n1	Clc1ncc(Br)c(N2CCCC2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1ccc2c(=O)n(CCCc3ccccc3)c(=S)[nH]c2c1)N1CCCCC1	O=C(c1ccc2c(=O)n(CCCc3ccccc3)c(=S)[nH]c2c1)N1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(S(C)(=O)=O)ccc1-c1nc2ccccc2s1	COc1cc(S(C)(=O)=O)ccc1-c1nc2ccccc2s1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc(NC(=O)c2nn(-c3ccccc3)c(OCc3ccccc3)c2CN(C(=O)c2ccccc2)C2CCCCC2)c1	Cc1ccccc(NC(=O)c2nn(-c3ccccc3)c(OCc3ccccc3)c2CN(C(=O)c2ccccc2)C2CCCCC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(cc1O)OC1(C3CCCC3)C(COC3CCC4NC(=O)NC43)OCC21	COc1cc2c(cc1O)OC1(C3CCCC3)C(COC3CCC4NC(=O)NC43)OCC21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c2c(n3c1C(c1ccc(Cl)cc1)C(C#N)=C(N)O3)CC(C)C)CC2=O	Cc1c2c(n3c1C(c1ccc(Cl)cc1)C(C#N)=C(N)O3)CC(C)C)CC2=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1)C1(COC(N)=N1)c1cc(-c3enc(C)c(Cl)c3)ccc1O2	COc1ccc2c(c1)C1(COC(N)=N1)c1cc(-c3enc(C)c(Cl)c3)ccc1O2	TRUE	TRUE	TRUE
N#CC(c1ccnc(NCc2cccn2)n1)c1nc2ccccc2n1-c1cccc(C(=O)O)c1	N#CC(c1ccnc(NCc2cccn2)n1)c1nc2ccccc2n1-c1cccc(C(=O)O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C=CC2(OC(C)C(O)C2OCc2ccc(F)cc2)C(c2cccc(O)c2)O1	O=C1C=CC2(OC(C)C(O)C2OCc2ccc(F)cc2)C(c2cccc(O)c2)O1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=C(C(=O)O)c2ccc(O)c(OC)c2)ccc1OCC(=O)O	COc1cc(C=Cc2ccc(OC(=O)O)c(OC)c2)ccc1O	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>C=C(Cl)C(Cl)(Cl)CCl</chem>	<chem>C=C(Cl)C(Cl)(Cl)CCl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC1cccc2c1CC(C1CCCC1)C2N(C)C</chem>	<chem>CCOC1cccc2c1CC(C1CCCC1)C2N(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(C=CC(=O)C=Cc2ccccc2Br)ccc1O</chem>	<chem>COc1cc(C=CC(=O)C=Cc2ccccc2Br)ccc1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCOc1ccc(NC(=O)c2ccc(CN3CCSCC3)cc2)cc1</chem>	<chem>CCCCOc1ccc(NC(=O)c2ccc(CN3CCSCC3)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc(CN2CCN(Cc3nc4n(n3)CCCC4)CC2)cc1</chem>	<chem>c1ccc(CN2CCN(Cc3nc4n(n3)CCCC4)CC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1nc(CC(=O)Nc2ccc(Cl)c(S(=O)(=O)N3CCOCC3)c2)cc1Nc1c(Cl)cccc1Cl</chem>	<chem>Cn1nc(CC(=O)Nc2ccc(Cl)c(S(=O)(=O)N3CCOCC3)c2)cc1Nc1c(Cl)cccc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(Cl)c(OCCOc2ccc(F)c(Cl)c2)c(Br)c1</chem>	<chem>Cc1cc(Cl)c(OCCOc2ccc(F)c(Cl)c2)c(Br)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN1CCN(CCOc2ccc(NC(=O)c3ccc(F)cc3)cc2NC(=O)c2cccc(Cl)c2)CC1</chem>	<chem>CCN1CCN(CCOc2ccc(NC(=O)c3ccc(F)cc3)cc2NC(=O)c2cccc(Cl)c2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNC(C(=O)NC(C(=O)N(C)C(C=C(C)C(=O)NO)(C)C)C(C)C(C)C(C)C(C)C)c1cccc1</chem>	<chem>CNC(C(=O)NC(C(=O)N(C)C(C=C(C)C(=O)NO)(C)C)C(C)C(C)C(C)C(C)C)c1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CC(C)c1ccc(NC(=O)Cn2c(=O)n(-c3cccc([N+](=O)[O-])c3)c(=O)c3c(C)cccc32)cc1</chem>	<chem>Cc1cccc2c1c(=O)n(-c1cccc([N+](=O)[O-])c1)c(=O)n2CC(=O)Nc1ccc(C(C)C)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cccc1NC(=O)Nc1cccc(NC(=O)Nc2ccc(F)cc2)c1</chem>	<chem>Cc1cccc1NC(=O)Nc1cccc(NC(=O)Nc2ccc(F)cc2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1[nH]cnc1Cn1cnc2cc(-c3ccc(F)cc3F)cc(Cl)c2c1=O</chem>	<chem>Cc1[nH]cnc1Cn1cnc2cc(-c3ccc(F)cc3F)cc(Cl)c2c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1nnnc1SC(N1C(=O)c2cccc3ccc(c23)C1=O)C(C)(C)C</chem>	<chem>Cn1nnnc1SC(N1C(=O)c2cccc3ccc(c23)C1=O)C(C)(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc2[nH]c(=O)[nH]c2cc1C(=O)CSc1ccc(C(=O)O)cc1</chem>	<chem>Cc1cc2[nH]c(=O)[nH]c2cc1C(=O)CSc1ccc(C(=O)O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1noc(C)c1C(=O)N1CCN(S(=O)(=O)c2ccccc2Cl)CC1</chem>	<chem>CCc1noc(C)c1C(=O)N1CCN(S(=O)(=O)c2ccccc2Cl)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCSCc1cc(NCc2ccc(F)cc2)c([N+](=O)[O-])cc1[N+](=O)[O-]</chem>	<chem>CCCCSCc1cc(NCc2ccc(F)cc2)c([N+](=O)[O-])cc1[N+](=O)[O-]</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1ccc(C(=O)NC2CC3CCC(C2)N3CC(O)COc2ccc(F)cc2)cc1</chem>	<chem>CCc1ccc(C(=O)NC2CC3CCC(C2)N3CC(O)COc2ccc(F)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=C(CNCCCCC)c1ccc2c(c1)CCCC2Nc1ccc(F)cc1</chem>	<chem>C=C(CNCCCCC)c1ccc2c(c1)CCCC2Nc1ccc(F)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc(N2CCCC2)cc1</chem>	<chem>c1ccc(N2CCCC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(CC(=O)NC(Cc2c[nH]cc2-c2ccccc2)C(=O)NCC2CCN(C(C)=O)CC2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(CC(=O)NC(Cc2c[nH]cc2-c2ccccc2)C(=O)NCC2CCN(C(C)=O)CC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCn1c(=O)c2cnc3c(OC)ccc(Cl)c3c2n(-c2ccc(C)cc2)c1=O</chem>	<chem>CCn1c(=O)c2cnc3c(OC)ccc(Cl)c3c2n(-c2ccc(C)cc2)c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)NCCNc1cc2c(c3occc13)C(=O)C(OC(=O)NCCCN(C)C)=C(C)C2=O</chem>	<chem>CC(=O)NCCNc1cc2c(c3occc13)C(=O)C(OC(=O)NCCCN(C)C)=C(C)C2=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(C)CCC(C)(C)c2cc3oc(C(=O)O)cc(=O)c3cc21</chem>	<chem>CC1(C)CCC(C)(C)c2cc3c(=O)cc(C(=O)O)oc3cc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NC1CCCC1)c1ccc2nc(Cc3ccc(Cl)c3)oc2c1</chem>	<chem>O=C(NC1CCCC1)c1ccc2nc(Cc3ccc(Cl)c3)oc2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNc1nc2c(c(=O)n(C)c(=O)n2C)n1C</chem>	<chem>CNc1nc2c(c(=O)n(C)c(=O)n2C)n1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc2c(Oc3ccc(NC(=O)c4nn(-c5ccccc5Cl)c(=O)c5ccccc45)cc3F)ccnc2cc1OCCCN1CCCCC1</chem>	<chem>COc1cc2c(Oc3ccc(NC(=O)c4nn(-c5ccccc5Cl)c(=O)c5ccccc45)cc3F)ccnc2cc1OCCCN1CCCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(COC(c1ccccc1)c1ccccc1)N1CC2(CC1)OCCc1cc(F)c(F)cc12</chem>	<chem>O=C(COC(c1ccccc1)c1ccccc1)N1CC2(CC1)OCCc1cc(F)c(F)cc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(c1cc(Cl)c(O)c(Cl)c1)c1cc(O)cc(N[N+](=O)[O-])c1[N+](=O)[O-]</chem>	<chem>CC(C)(c1cc(Cl)c(O)c(Cl)c1)c1cc(O)cc(N[N+](=O)[O-])c1[N+](=O)[O-]</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CSc1ccc(CSc2nnc(-c3ccccc3)o2)cc1</chem>	<chem>CSc1ccc(CSc2nnc(-c3ccccc3)o2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cccc(C(=O)Nc2cccc(Oc3ccc4c(C=Cc5cccn5)n[nH]c4c3)c2C)c1</chem>	<chem>Cc1cccc(C(=O)Nc2cccc(Oc3ccc4c(C=Cc5cccn5)n[nH]c4c3)c2C)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1=C(c2ccc(C)cc2)C(OCC(C)O)CNC(C)(C)c2cccc2c2ccccc2c2ccccc21</chem>	<chem>CCc1=C(c2ccc(C)cc2)C(OCC(C)O)CNC(C)(C)c2cccc2c2ccccc2c2ccccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(N)C(=O)N1Cn2c(Cc3ccccc3)cnc2C1Cc1ccc(c(C(F)(F)F)c1</chem>	<chem>CC(C)(N)C(=O)N1Cn2c(Cc3ccccc3)cnc2C1Cc1ccc(c(C(F)(F)F)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1cccc(CN2CCC(C)C(=O)NC3CCCC3)CC2)c1c1cc(C(F)(F)F)ccc1Cl</chem>	<chem>O=C(Nc1cccc(CN2CCC(C)C(=O)NC3CCCC3)CC2)c1c1cc(C(F)(F)F)ccc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC(CCC(=O)N)Nc1ccc(Cl)cc1CC(=O)N1CCCC1Cc1nc(N)nc(N)n1</chem>	<chem>Nc1nc(N)nc(Cc2CCCN2C(=O)CC(N)CC(C=O)N)Cc2ccc(Cl)cc2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cccc(-c2cccc(C3CC3CN3CCC(NC(=O)CO)C3)c2)c1</chem>	<chem>Cc1cccc(-c2cccc(C3CC3CN3CCC(NC(=O)CO)C3)c2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)CBr</chem>	<chem>COC(=O)CBr</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(-c2sc(-c3ccc(Cl)cc3)n2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(-c2sc(-c3ccc(Cl)cc3)n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(NC(=O)CCC(=O)N(Cc2ccco2)C(C(=O)NC2CCCC2)c2ccncc2)no1</chem>	<chem>Cc1cc(NC(=O)CCC(=O)N(Cc2ccco2)C(C(=O)NC2CCCC2)c2ccncc2)no1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1nnc2ccc(-c3c(OCc4ccc(F)cc4)ccc4ncccc34)cc21</chem>	<chem>Cn1nnc2ccc(-c3c(OCc4ccc(F)cc4)ccc4ncccc34)cc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(C(F)(F)F)ccc1-c1ccc2cc(S(=O)(=O)Nc3nccn3)ccc12</chem>	<chem>COc1cc(C(F)(F)F)ccc1-c1ccc2cc(S(=O)(=O)Nc3nccn3)ccc12</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>COc1cccc(C(=O)Nc2cnc3ccc(N4CCCC4c4cc(F)ccc4F)nn23)c1OC</chem>	<chem>COc1cccc(C(=O)Nc2cnc3ccc(N4CCCC4c4cc(F)ccc4F)nn23)c1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(c1ccccc1)c1cc(CN2CCOCC2)on1</chem>	<chem>O=C(c1ccccc1)c1cc(CN2CCOCC2)on1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCN(CCCC)CC(=O)NC1COc2ccccc2C1</chem>	<chem>CCCCCN(CCCC)CC(=O)NC1COc2ccccc2C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCCC(=O)Nc1cccc(S(=O)(=O)Nc2cc(SCc3ccccc3)c(O)c3ccccc23)c1</chem>	<chem>CCCCCCCCC(=O)Nc1cccc(S(=O)(=O)Nc2cc(SCc3ccccc3)c(O)c3ccccc23)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(C1=C(C)O)C(=Cc2ccccc2[N+](=O)[O-])CC1c1ccc(F)cc1</chem>	<chem>O=C(C1=C(C)O)C(=Cc2ccccc2[N+](=O)[O-])CC1c1ccc(F)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1c(O)cc(CN(C)CCCNc2cnc3cc(Cl)ccc23)cc1O</chem>	<chem>COc1c(O)cc(CN(C)CCCNc2cnc3cc(Cl)ccc23)cc1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(C2c3cc4c(cc3C(NC(=O)OC3CC(C)(C)NC(C)(C)C3)C3COC(=O)C23)OCO4)cc(OC)c1O</chem>	<chem>COc1cc(C2c3cc4c(cc3C(NC(=O)OC3CC(C)(C)NC(C)(C)C3)C3COC(=O)C23)OCO4)cc(OC)c1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(C)OC(=O)N=C1NC(=O)Nc1ccc(-c2cnc(Nc3ccc4[nH]ccc4c3)c2)cc1</chem>	<chem>CC1(C)OC(=O)N=C1NC(=O)Nc1ccc(-c2cnc(Nc3ccc4[nH]ccc4c3)c2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(c1ccccc1)N1CC(c2nc3ccccc3o2)C1</chem>	<chem>O=C(c1ccccc1)N1CC(c2nc3ccccc3o2)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NCCN1CCOCC1)c1cccc(S(=O)(=O)N2CCc3ccccc32)c1</chem>	<chem>O=C(NCCN1CCOCC1)c1cccc(S(=O)(=O)N2CCc3ccccc32)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1nncs1)c1n[nH]c(-c2cccc(Cl)c2)n1</chem>	<chem>O=C(Nc1nncs1)c1n[nH]c(-c2cccc(Cl)c2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=CC1(C)CC(OC(=O)CSc2nccc(-c3cccc(C)c3)n2)C2(C)C(C)CCC3(CCC(=O)C32)C(C)C1O</chem>	<chem>C=CC1(C)CC(OC(=O)CSc2nccc(-c3cccc(C)c3)n2)C2(C)C(C)CCC3(CCC(=O)C32)C(C)C1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c(O)c(=O)ccn1CCN1CC(=Cc2ccc(C(F)(F)F)cc2)C2=C1CC(C)(C)CC2=O</chem>	<chem>Cc1c(O)c(=O)ccn1CCN1CC(=Cc2ccc(C(F)(F)F)cc2)C2=C1CC(C)(C)CC2=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(c1sc2cc(O)ccc2c1Cl)N1CCN(c2ccc(F)cc2)CC1</chem>	<chem>O=C(c1sc2cc(O)ccc2c1Cl)N1CCN(c2ccc(F)cc2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1c2ccccc2C(=O)c2c1c(S(=O)(=O)c1ccc(F)cc1)cc1[nH]c3cc(S(=O)(=O)O)ccc3c21</chem>	<chem>O=C1c2ccccc2C(=O)c2c1c(S(=O)(=O)c1ccc(F)cc1)cc1[nH]c3cc(S(=O)(=O)O)ccc3c21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1CCC2C1OCCN2C(=O)CCS(=O)(=O)c1cccs1</chem>	<chem>COc1CCC2C1OCCN2C(=O)CCS(=O)(=O)c1cccs1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)C(C=O)Cc1ccc(OC)cc1</chem>	<chem>CCOC(=O)C(C=O)Cc1ccc(OC)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCCCCCCCCCCCN(C(=O)O)c1ccc(C=C2C(=O)NC(=S)NC2=O)cc1</chem>	<chem>CCCCCCCCCCCCCCCCCN(C(=O)O)c1ccc(C=C2C(=O)NC(=S)NC2=O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(C(=O)c1ccc(C(F)(F)F)cc1)c1ccc2[nH]cc(-c3ccncc3)c2c1</chem>	<chem>O=C(C(=O)c1ccc2[nH]cc(-c3ccncc3)c2c1)c1ccc(C(F)(F)F)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1cc(O)nc(NC(=O)c2ccccc2)n1</chem>	<chem>CCc1cc(O)nc(NC(=O)c2ccccc2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(CSc2nnc(O)n2-c2ccc(C(=O)O)cc2)o1</chem>	<chem>Cc1ccc(CSc2nnc(O)n2-c2ccc(C(=O)O)cc2)o1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1=C(C(=O)O)N2C(=O)C(NC(=O)CN(C)C(=O)CN(C)N)c3ccccc3)C2SC1</chem>	<chem>CC1=C(C(=O)O)N2C(=O)C(NC(=O)CN(C)C(=O)CN(C)N)c3ccccc3)C2SC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)Oc1cc2c(cc1OC(C)=O)C(=O)C(=Cc1cc(C)ccc1O)C2=O</chem>	<chem>CC(=O)Oc1cc2c(cc1OC(C)=O)C(=O)C(=Cc1cc(C)ccc1O)C2=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)NC(CCC([n+])1ccccc1)C(=O)O</chem>	<chem>CC(=O)NC(CCC([n+])1ccccc1)C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CCC2(C)CCC3(C)C(=CCC4C5(C)CC=C(c6cnc(=O)n(C)c6)C(C)(C)C5CCC43C)C2C1C</chem>	<chem>CC1CCC2(C)CCC3(C)C(=CCC4C5(C)CC=C(c6cnc(=O)n(C)c6)C(C)(C)C5CCC43C)C2C1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nc(NC2CCCC2)c2oc3ccccc3c2n1</chem>	<chem>Cc1nc(NC2CCCC2)c2oc3ccccc3c2n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1=NN(c2cccc(Cl)c2)C(=O)C1=NNc1ccc(S(N)(=O)=O)cc1</chem>	<chem>CC1=NN(c2cccc(Cl)c2)C(=O)C1=NNc1ccc(S(N)(=O)=O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(Nc2ccccc2C(=O)NC2CCN(Cc3ccc4c(c3)OCO4)CC2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(Nc2ccccc2C(=O)NC2CCN(Cc3ccc4c(c3)OCO4)CC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCN(C#N)C1CCN(CC(SCC)=NC(C)C)CC1</chem>	<chem>CCCCCN(C#N)C1CCN(CC(=NC(C)C)SCC)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=NNC(=O)CNC(=O)c1cccc1Oe1ccccc1)c1ccc(O)c2ccccc12</chem>	<chem>CC(=NNC(=O)CNC(=O)c1cccc1Oe1ccccc1)c1ccc(O)c2ccccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(c1ccc2c(c1)OCCO2)S(=O)(=O)c1ccc(C(=O)N2CCCC2)cc1</chem>	<chem>CN(c1ccc2c(c1)OCCO2)S(=O)(=O)c1ccc(C(=O)N2CCCC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C(=O)NCC2CCN(c3ccnc(F)c3)CC2)c(OC)c1</chem>	<chem>COc1ccc(C(=O)NCC2CCN(c3ccnc(F)c3)CC2)c(OC)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOc1ccc(N(C)C(=O)C(=O)NCCN2ccnc2)cc1</chem>	<chem>CCOc1ccc(N(C)C(=O)C(=O)NCCN2ccnc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1noc(CN(CCN52(=O)=O)C3CC4CC(C3)CC2C4)n1</chem>	<chem>CCc1noc(CN2CCN5(=O)(=O)C3CC4CC(C2C4)C3)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCC[S+](O)c1oc(=O)cc(-c2ccccc2O)C1C</chem>	<chem>CCCC[S+](O)c1oc(=O)cc(-c2ccccc2O)C1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>OC1CCC(N=c2[nH]c(=NC3CC3)n3ncc(C=C4N=C(O)N=C4O)c3[nH]2)CC1</chem>	<chem>OC1=NC(=Cc2cnn3c(=NC4CC4)[nH]c(=NC4CCC(O)CC4)[nH]c23)C(O)=N1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>C=C(C)C(Nc1nncc(Cc2ccc([N+](=O)[O-])cc2)s1)c1ccccc1</chem>	<chem>C=C(C)C(Nc1nncc(Cc2ccc([N+](=O)[O-])cc2)s1)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)c1cnn(-c2nc(NCc3c(C)cc(C)cc3C)nc(NC(C)C)n2)c1C(F)F</chem>	<chem>CCOC(=O)c1cnn(-c2nc(NCc3c(C)cc(C)cc3C)nc(NC(C)C)n2)c1C(F)F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNC(=O)C(Cc1ccc2c(c1)CCC(c1ccc(OC)cc1)O2)NC(=O)C(CCC(=O)O)NC(=O)C(CC(C)C)NC(=O)OC(C)(C)C</chem>	<chem>CNC(=O)C(Cc1ccc2c(c1)CCC(c1ccc(OC)cc1)O2)NC(=O)C(CCC(=O)O)NC(=O)C(CC(C)C)NC(=O)OC(C)(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)c1ccc(Nc2nncn3c2nncn3Cc2ccccc2)cc1</chem>	<chem>CN(C)c1ccc(Nc2nncn3c2nncn3Cc2ccccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCN(CCO)c1cc(-c2ccc(OC)cc2)ncn1</chem>	<chem>CCCN(CCO)c1cc(-c2ccc(OC)cc2)ncn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC(CCc1ccccc1)P(=O)(O)O</chem>	<chem>NC(CCc1ccccc1)P(=O)(O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cccc(OC)c1-c1ccc(CC(NC(=O)C2(S(=O)(=O)c3ccccc3)CCN(C(=O)OC(C)(C)CC2)C(=O)O)cc1</chem>	<chem>COc1cccc(OC)c1-c1ccc(CC(NC(=O)C2(S(=O)(=O)c3ccccc3)CCN(C(=O)OC(C)(C)CC2)C(=O)O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CSC(Cn1ccnc1)c1cccc(F)c1	CSC(Cn1ccnc1)c1cccc(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCOC(=O)Nc1ccc(S(=O)(=O)N2CCN(C(=O)OC(C)(C)C)CC2C(=O)NO)cc1	CCCCCOC(=O)Nc1ccc(S(=O)(=O)N2CCN(C(=O)OC(C)(C)C)CC2C(=O)NO)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1[nH]c2cc(Cl)ccc2c1C(=O)N1CCN(CCO)CC1	CCOC(=O)c1[nH]c2cc(Cl)ccc2c1C(=O)N1CCN(CCO)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)O)c1cc1NC(=O)CN(Cc1ccccc1)S(C)(F)=O	Cc1ccc(C(=O)O)c1cc1NC(=O)CN(Cc1ccccc1)S(C)(F)=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(OCc2ccccc2)cc(N(CCO)CCCCO)n1	Cc1cc(OCc2ccccc2)cc(N(CCO)CCCCO)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CN2CCc3ncnc(C4CCN(C)CC4)c3CC2)c(OC)c1	COc1ccc(CN2CCc3ncnc(C4CCN(C)CC4)c3CC2)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)Oc1cccc2c1CC(=O)N(CC)C2=O	CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)Oc1cccc2c1CC(=O)N(CC)C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
N#CCC1(n2cc(C(=N)O)c(=Nc3ccccc3)[nH]2)CCC(NCc2cc(Cl)c(Oc3ccccc3)o2)CC1	N#CCC1(n2cc(C(=N)O)c(=Nc3ccccc3)[nH]2)CCC(NCc2cc(Cl)c(Oc3ccccc3)o2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(C)c1C(=O)N1CCC(N2CCC(Cc3ccc(S(=O)(=O)c4ccc5c(c4)OCCO5)cc3)CC2)CC1	Cc1cccc(C)c1C(=O)N1CCC(N2CCC(Cc3ccc(S(=O)(=O)c4ccc5c(c4)OCCO5)cc3)CC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCNc1ccnc(NCc2cccc(C(F)(F)F)c2)n1	CCCCCCCCCCCNc1ccnc(NCc2cccc(C(F)(F)F)c2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(OCc2ccccc2)cc1)NC1CCCC1	O=C(Nc1ccc(OCc2ccccc2)cc1)NC1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc(CN2CCC3OC(COC(c4cccn4)c4ccccc4)CCC32)cn1	Cn1cc(CN2CCC3OC(COC(c4ccccc4)c4cccn4)CCC32)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCN(CCCCCS(=O)(=O)c1cccc2nsnc12)C(=O)Nc1ccc(F)cc1F	CCCCCN(CCCCCS(=O)(=O)c1cccc2nsnc12)C(=O)Nc1ccc(F)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(=O)Cn2cc3c(n2)-c2c([nH]c4ccccc24)CC3)cc1	Cc1ccc(NC(=O)Cn2cc3c(n2)-c2c([nH]c4ccccc24)CC3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(c1ccc([N+](=O)[O-])cc1)c1cn2nc(C3CC3)nc2c(Nc2ccc(C#N)cc2)n1	CN(c1ccc([N+](=O)[O-])cc1)c1cn2nc(C3CC3)nc2c(Nc2ccc(C#N)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C(Cc1ccccc1)NP(=O)(N1CC1C)N1CC1(C)C	CCOC(=O)C(Cc1ccccc1)NP(=O)(N1CC1C)N1CC1(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C=Cc2c3cccc(Cl)c3C(=O)c3c(O)ccc(O)c32)cc1	COc1ccc(C=Cc2c3cccc(Cl)c3C(=O)c3c(O)ccc(O)c32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCc1cc2c(=O)c(-c3ccc(OC)c(OC)c3)coc2cc1O	CCCCCc1cc2c(=O)c(-c3ccc(OC)c(OC)c3)coc2cc1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC(C)NCc1cnc(OC2CCOCC2)s1	CCCCC(C)NCc1cnc(OC2CCOCC2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN=C(S)NNC(C(=O)c1c(Br)c(C23CC4CC(C(C4)C2)C3)nc2ccccc12	CCN=C(S)NNC(C(=O)c1c(Br)c(C23CC4CC(C(C4)C2)C3)nc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
N#CC1=C(SCc2ccccc2)NC(=O)CS1	N#CC1=C(SCc2ccccc2)NC(=O)CS1	TRUE	TRUE	TRUE
CSCCC(NC(=O)CC1CCSS1)C(=O)NCC(N)=O	CSCCC(NC(=O)CC1CCSS1)C(=O)NCC(N)=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)N1CCCC1c1ncnc1Nc1ncc(Cl)c(-c2cccc(OC(F)(F)F)c2)n1	CC(=O)N1CCCC1c1ncnc1Nc1ncc(Cl)c(-c2cccc(OC(F)(F)F)c2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(c1ccccc1)S(=O)(=O)c1ccc(C(N)=O)s1	CN(c1ccccc1)S(=O)(=O)c1ccc(C(N)=O)s1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)S(=O)(=O)c1cccc(-c2ccc(-c3nc4cc(C(F)(F)F)ccc4[nH]3)cc2)c1	CCN(CC)S(=O)(=O)c1cccc(-c2ccc(-c3nc4cc(C(F)(F)F)ccc4[nH]3)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)C1CCN(C(=O)c2cccc(NC(=O)N3Cc4ccccc4C3)c2)CC1	NC(=O)C1CCN(C(=O)c2cccc(NC(=O)N3Cc4ccccc4C3)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(N(CC(=O)Nc2ccc3c(c2)OCCO3)S(C)(=O)=O)cc1	COc1ccc(N(CC(=O)Nc2ccc3c(c2)OCCO3)S(C)(=O)=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCCC1CCN(C(=O)c2ccc(O)cc2)CC1)NN=Cc1ccccc1C(=O)O	O=C(CCCC1CCN(C(=O)c2ccc(O)cc2)CC1)NN=Cc1ccccc1C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(C2=C(CCC#N)C(c3ccccc3OCc3ccccc3)CC(=O)N2CC(=O)NC(c2ccccc2)c2ccccc2)c1	Cc1cccc(C2=C(CCC#N)C(c3ccccc3OCc3ccccc3)CC(=O)N2CC(=O)NC(c2ccccc2)c2ccccc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C=Cc1ccc(-c2cc(-c3ccccc3)n(-c3cccc(Cl)c3)n2)cc1	O=C(O)C=Cc1ccc(-c2cc(-c3ccccc3)n(-c3cccc(Cl)c3)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(Cc1cc(F)c(Oc2cccc(CC(=O)NC(CCC(=O)O)C(=O)O)c2)c(F)c1)C(=O)O	NC(Cc1cc(F)c(Oc2cccc(CC(=O)NC(CCC(=O)O)C(=O)O)c2)c(F)c1)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)CCC(C)C1CCC2C3CC=C4CC(O)CCC4(C)C3CC12C	COC(=O)CCC(C)C1CCC2C3CC=C4CC(O)CCC4(C)C3CC12C	TRUE	TRUE	FALSE
COc1cc2nc(N3CCC(N4CCCC4)CC3)nc(NC3CCN(Cc4ccccc4)CC3)c2cc1OC	COc1cc2nc(N3CCC(N4CCCC4)CC3)nc(NC3CCN(Cc4ccccc4)CC3)c2cc1OC	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1cnc(N2CCCC2)nc1-c1cc(NC(C)c2ccc(Cl)cc2Cl)ncn1	Cc1cnc(N2CCCC2)nc1-c1cc(NC(C)c2ccc(Cl)cc2Cl)ncn1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC1CCN(C(=O)c2cccc3ccccc23)CC1)c1ccc(-c2ccccc2)c(N2CCCC2=O)c1	O=C(NC1CCN(C(=O)c2cccc3ccccc23)CC1)c1ccc(-c2ccccc2)c(N2CCCC2=O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C(=O)Nc1ccc(Cl)cn1	CCOC(=O)C(=O)Nc1ccc(Cl)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(cc1OC)C(=O)C(C(=O)Nc1ccccc(S(=O)(=O)N3CCOCC3)c1)=CO2	COc1cc2occ(C(=O)Nc3cccc(S(=O)(=O)N4CCOCC4)c3)c(=O)c2cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(-n2cc(-c3cn(-c4ccc(C(=O)O)cc4)nn3)nn2)c1	Cc1cccc(-n2cc(-c3cn(-c4ccc(C(=O)O)cc4)nn3)nn2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc2oc(=O)cc(N)c2c2c1CCCC2	Cc1cc2oc(=O)cc(N)c2c2c1CCCC2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cn(Cc2ccn(CCCCN(Cc3cccs3)C(=O)Cc3c(C)cc(C)nc3Cn2)c(=O)[nH]c1=O	Cc1cc(C)c(CC(=O)N(CCCN2ccc(Cn3cc(C)c(=O)[nH]c3=O)n2)Cc2ccs2)c(C)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1NC(=O)C(c2ccccc2)(CCCN2ccnc2)C(=O)N1	O=C1NC(=O)C(CCCCN2ccnc2)(c2ccccc2)C(=O)N1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C1=C(C(=O)OC(C)(C)C)C(c2ccccc2)n2nc(SCC(=O)c3cccs3)nc2N1	CC(C)C1=C(C(=O)OC(C)(C)C)C(c2ccccc2)n2nc(SCC(=O)c3cccs3)nc2N1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C(C)(C)C(=O)N1CCC(c2cc(NC(=O)c3ccc(CO)cc3)n(-c3ccc(C)cc3)n2)CC1	CCOC(=O)C(C)(C)C(=O)N1CCC(c2cc(NC(=O)c3ccc(CO)cc3)n(-c3ccc(C)cc3)n2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(N)C(=O)NC(COCc1ccccc1)c1nnnn1CCC(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)NC(Cc1c[nH]cn1)C(=O)NC(CCCNC(=O)CCC(=O)O)C(=O)O	CC(C)(N)C(=O)NC(COCc1ccccc1)c1nnnn1CCC(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)NC(Cc1c[nH]cn1)C(=O)NC(CCCNC(=O)CCC(=O)O)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCOc1ccc(S(=O)(=O)N2CCN(C)CC2)cc1-c1nc2c(c(=O)n(C)c(=O)n2C)n1Cc1ccc(OC)c(F)c1	CCCOc1ccc(S(=O)(=O)N2CCN(C)CC2)cc1-c1nc2c(c(=O)n(C)c(=O)n2C)n1Cc1ccc(OC)c(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C=C(C)C=CC(C)CCCC(C)C(C)C(O	CCOC(=O)C=C(C)C=CC(C)CCCC(C)C(C)C(O	TRUE	TRUE	TRUE
C1CCCN1Cc1ccn2c(-c3ccnc(NCc4ccncc4)n3)c(-c3ccc(F)cc3)nc2c1	Fc1ccc(-c2nc3cc(CN4CCCC4)ccn3c2-c2ccnc(NCc3ccncc3)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C(=O)NCCNC(=O)c1ccc(Br)c2c(N)c3ccccc3nc12	CN(C(=O)NCCNC(=O)c1ccc(Br)c2c(N)c3ccccc3nc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC1C(=NO)CC(c2ccccc2)N(Nc2ccccc2)C1c1ccnc1	CC1C(=NO)CC(c2ccccc2)N(Nc2ccccc2)C1c1ccnc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(-c2ccc(F)cc2)nn1CC1CC(c2cccc(NC(=O)CCN3CCCC3)c2)=NO1	Cc1cc(-c2ccc(F)cc2)nn1CC1CC(c2cccc(NC(=O)CCN3CCCC3)c2)=NO1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C(=O)N1c2ccccc2-c2nnc(SC)nc2OC1c1ccc(OC)cc1F	CC(C(=O)N1c2ccccc2-c2nnc(SC)nc2OC1c1ccc(OC)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C)c(CS(=O)(=O)CC(=O)NCc2nnc(SCC(=O)N3CCOCC3)n2C)c1	Cc1ccc(C)c(CS(=O)(=O)CC(=O)NCc2nnc(SCC(=O)N3CCOCC3)n2C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NC(=O)Cn2c(=O)n(CCC(=O)NCCc3ccccc3)c(=O)c3ccccc32)cc1OC	COc1ccc(NC(=O)Cn2c(=O)n(CCC(=O)NCCc3ccccc3)c(=O)c3ccccc32)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2nenc(Nc3cccc(Br)c3)c2cc1OC	COc1cc2nenc(Nc3cccc(Br)c3)c2cc1OC	TRUE	FALSE	TRUE
NCCC(NC(=O)c1ccccc1)c1cccc(Cl)c1	NCCC(NC(=O)c1ccccc1)c1cccc(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)OC(=O)N(c2ccc(-c3ncc(-c4cnn(CCC(=O)N5CCOCC5)c4)cc3Cl)cc2)C1c1ccccc1	CC1(C)OC(=O)N(c2ccc(-c3ncc(-c4cnn(CCC(=O)N5CCOCC5)c4)cc3Cl)cc2)C1c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COP(=O)(CC(O)C1COc2ccccc2O1)OC	COP(=O)(CC(O)C1COc2ccccc2O1)OC	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(N=P(c2ccc3c(c2)OCO3)(c2ccccc2)c2ccccc2)CCN(CCCc2c(S)n(C(=O)c3ccc4c(c3)OCO4)c3ccccc23)CC1	CC1(N=P(c2ccccc2)(c2ccccc2)c2ccc3c(c2)OCO3)CCN(CCCc2c(S)n(C(=O)c3ccc4c(c3)OCO4)c3ccccc23)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc2c(-c3ncc(Cl)cc3Cl)ncn2n1	Cc1ccc2c(-c3ncc(Cl)cc3Cl)ncn2n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2cc(C(=O)Nc3ccc(S(=O)(=O)Nc4onc(C)c4C)cc3)c3cc(Br)ccc3n2)cc1	Cc1ccc(-c2cc(C(=O)Nc3ccc(S(=O)(=O)Nc4onc(C)c4C)cc3)c3cc(Br)ccc3n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1=C(CN2CCN(C)CC2)NC(c2ccccc2)=C(C(=O)OCC)C1c1ccccc1C(F)(F)F	CCOC(=O)C1=C(CN2CCN(C)CC2)NC(c2ccccc2)=C(C(=O)OCC)C1c1ccccc1C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CC(c2ccc(Cl)cc2)C2(CCCc3ccccc32)C(=O)N1	O=C1CC(c2ccc(Cl)cc2)C2(CCCc3ccccc32)C(=O)N1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1cc(-c2ccccc2)c2ccc(OCc3ccccc3)cc2o1	O=c1cc(-c2ccccc2)c2ccc(OCc3ccccc3)cc2o1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1NCc1cnc2ccccc2n1	COc1ccccc1NCc1cnc2ccccc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C(C)(Oc1ccc(Oc2ccc(Br)c(O)c2)cc1)C(=O)OCC	CCOC(=O)C(C)(Oc1ccc(Oc2ccc(Br)c(O)c2)cc1)C(=O)OCC	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1c(-c2cccc(N(C)S(C)(=O)=O)c2)[nH]c2cc(OC)ccc2c1=O	CCOC(=O)c1c(-c2cccc(N(C)S(C)(=O)=O)c2)[nH]c2cc(OC)ccc2c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C1=CC(c2coc3ccc(F)cc23)CC(OCc2ccc(CO)cc2)O1)N1CCOCC1	O=C(C1=CC(c2coc3ccc(F)cc23)CC(OCc2ccc(CO)cc2)O1)N1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCGn1nnnc1CCn1cnc2c(N3CCOCC3)nc(-c3ccccc3OCC)nc21	CCGn1nnnc1CCn1cnc2c(N3CCOCC3)nc(-c3ccccc3OCC)nc21	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(N=Nc2ccc(Cl)cc2)CC1	CN1CCN(N=Nc2ccc(Cl)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CCCN1Cc1nnc2n1CCN(C(=O)NC1CC1)CC2	O=C1CCCN1Cc1nnc2n1CCN(C(=O)NC1CC1)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)OC(=O)NC(Cc1ccc(Cl)cc1)C(=O)NC1CCC(O)C2(CO)C(C(=O)NCCc3ccc(O)cc3)CC3CCCC312	CC(C)(C)OC(=O)NC(Cc1ccc(Cl)cc1)C(=O)NC1CCC(O)C2(CO)C(C(=O)NCCc3ccc(O)cc3)CC3CCCC312	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1cnc(-c2ccc(-c3ccccc3S(=O)(=O)N3CCC(N4CCC(F)(F)C4=O)CC3)cc2F)cn1	Nc1cnc(-c2ccc(-c3ccccc3S(=O)(=O)N3CCC(N4CCC(F)(F)C4=O)CC3)cc2F)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=c2sc3nccn3c2=O)cc(OC)c1O	COc1cc(C=c2sc3nccn3c2=O)cc(OC)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1c(C)[nH]c(C(=O)C#N=CC=Cc2ccco2)c1C	COC(=O)c1c(C)[nH]c(C(=O)C#N=CC=Cc2ccco2)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(CN2CCN(C(=O)C3CCCC3)CC2)cc1C	Cc1ccc(CN2CCN(C(=O)C3CCCC3)CC2)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CC(NC(=O)CCCC(=O)Nc1ccc(C(=Nc2ccc(Cl)cc2)c2ccccc2)cc1)c1ccnc1	O=C(O)CC(NC(=O)CCCC(=O)Nc1ccc(C(=Nc2ccc(Cl)cc2)c2ccccc2)cc1)c1ccnc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC(NC(=O)OC1C(=O)N2C(C(=O)OC(c3ccccc3)c3ccccc3)=C(C(F)(F)F)CSC12)C(=O)C(=O)NCCCCOCCC	CCCCC(NC(=O)OC1C(=O)N2C(C(=O)OC(c3ccccc3)c3ccccc3)=C(C(F)(F)F)CSC12)C(=O)C(=O)NCCCCOCCC	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NS(=O)(=O)C1CCN(c2ccc(OCc3ccc4ccccc4n3)cc2)C1=O)c1ccc(-c2nc3ccccc3o2)cc1	O=C(NS(=O)(=O)C1CCN(c2ccc(OCc3ccc4ccccc4n3)cc2)C1=O)c1ccc(-c2nc3ccccc3o2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2nccc(C(O)CCC3CCN(C4CC(c5ccccc5C)C4)CC3C(=O)O)c2c1	COc1ccc2nccc(C(O)CCC3CCN(C4CC(c5ccccc5C)C4)CC3C(=O)O)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1CN1CCC(N2CC(C(=O)O)C2)CC1	COc1ccccc1CN1CCC(N2CC(C(=O)O)C2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(NC(C)c2cccc(-c3cnc(N4CC(O)CC4)nc3)c2)cc(-c2ccc3occ(C)c3c2)n1	Cc1nc(NC(C)c2cccc(-c3cnc(N4CC(O)CC4)nc3)c2)cc(-c2ccc3occ(C)c3c2)n1	TRUE	FALSE	FALSE
O=C(O)Cn1c2c(c3cc(F)ccc31)CN(CCCC1CCCCC1)CC2	O=C(O)Cn1c2c(c3cc(F)ccc31)CN(CCCC1CCCCC1)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CC2(CCC(=O)N2c2ccc(OCc3ccccc3)cc2)N1	O=C1CC2(CCC(=O)N2c2ccc(OCc3ccccc3)cc2)N1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CCCCCCCCCCCCc1c(OC)cc(Cc2cnc(N)nc2N)cc1OC	CCCCCCCCCCCCOc1c(OC)cc(Cc2cnc(N)nc2N)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(COO5(=O)(=O)O)C1CCC2C3CCC4C(C(=O)C=CC4(C)C(=C)C)CCO)CC3CCC12C	CC(C)(COO5(=O)(=O)O)C1CCC2C3CCC4C(C(=O)C=CC4(C)C(=C)C)CCO)CC3CCC12C	TRUE	TRUE	TRUE
COCC(=O)N1CCC(n2nccc2NC(=O)CCCS)CC1	COCC(=O)N1CCC(n2nccc2NC(=O)CCCS)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc1C(=O)N1CCN(S(=O)(=O)c2ccc3cccc3c2)CC1	Cc1cccc1C(=O)N1CCN(S(=O)(=O)c2ccc3cccc3c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC1C(=O)N(C)c2cnc(Nc3ccc(C(=O)NC4CC4)c(C)c3OC)nc2N1C1CCC(O)CC1	CCC1C(=O)N(C)c2cnc(Nc3ccc(C(=O)NC4CC4)c(C)c3OC)nc2N1C1CCC(O)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nn(-c2ccccc2)c2cc(NC3CCCCNC3)ccc12	CCc1nn(-c2ccccc2)c2cc(NC3CCCCNC3)ccc12	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(N)NCCCC1NC(=O)C2CCCN2C(=O)C(C(=O)O)NC(=O)C(Cc2ccc(O)cc2)NC(=O)CNC(=O)C(C)NC1=O	CC1NC(=O)C(CCCN(=N)N)NC(=O)C2CCCN2C(=O)C(C(=O)O)NC(=O)C(Cc2ccc(O)cc2)NC(=O)CNC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC1C(=O)N2CCOC(c3ccccc3)(OC1=O)C(=O)C(F)C(F)C(F)C2Cl	CC1C(=O)OC2(c3ccccc3)OCCN(C1=O)C(Cl)C(F)C(F)C(F)C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)cc(-c2[nH]c3ccc(C(C)(C)C(=O)N4CCC4)cc3c2CCNCCCc2ccc3cncnc3c2)c1	Cc1cc(C)cc(-c2[nH]c3ccc(C(C)(C)C(=O)N4CCC4)cc3c2CCNCCCc2ccc3cncnc3c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(C(C)O)=Nc2cccc(Cl)c2)n(S(=O)(=O)c2cc(Cl)cc(Cl)c2)c2ccc(C(=O)NC3CCN(C4CC4)CC3)cc12	Cc1c(C(C)O)=Nc2cccc(Cl)c2)n(S(=O)(=O)c2cc(Cl)cc(Cl)c2)c2ccc(C(=O)NC3CCN(C4CC4)CC3)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1ccc2c(c1)N=C(c1ccc(-n3cnc4cc(O)ccc43)cc1)N(C1CCC(N3CCCC3)CC1)C2	O=C(O)c1ccc2c(c1)N=C(c1ccc(-n3cnc4cc(O)ccc43)cc1)N(C1CCC(N3CCCC3)CC1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C=O)c1cccc(C(CNC(=O)Nc2ccc(C)c(C)c2)OC)c1O	CO(C=O)c1cccc(C(CNC(=O)Nc2ccc(C)c(C)c2)OC)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1cccc(-c2ccc3c(c2)OCC2C(CCN2Cc2ccccc2)O3)c1	N#Cc1cccc(-c2ccc3c(c2)OCC2C(CCN2Cc2ccccc2)O3)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cccc1-c1nc2ccc(Cl)cc2c2c1[nH]c1c(C#N)cnn12	Cn1cccc1-c1nc2ccc(Cl)cc2c2c1[nH]c1c(C#N)cnn12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)CO(C=O)c2cc([N+])(=O)[O-])ccc2Cl)c(OC)c1	COc1ccc(C(=O)CO(C=O)c2cc([N+])(=O)[O-])ccc2Cl)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(Nc1cc(Sc2ncn[nH]2)c(O)c2ccccc12)c1ccc(-c2ccnc2)s1	O=S(=O)(Nc1cc(Sc2ncn[nH]2)c(O)c2ccccc12)c1ccc(-c2ccnc2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1ccc(-n2nc(C3CCN(S(=O)c4ccc(C(F)F)cc4)CC3)cc2N=C(O)c2cnn3ccccc23)cc1	CC(C)c1ccc(-n2nc(C3CCN(S(=O)c4ccc(C(F)F)cc4)CC3)cc2N=C(O)c2cnn3ccccc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C=O)NNc1nncn1N=Cc1cccn1CC=Cc1ccc(Cl)cc1	CC(C=O)NNc1nncn1N=Cc1cccn1CC=Cc1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cnc([N+])(=O)[O-]n1CCOC(=O)c1ccc(OC(F)F)cc1Oc1ccc(F)cc1	Cc1cnc([N+])(=O)[O-]n1CCOC(=O)c1ccc(OC(F)F)cc1Oc1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCc1cc(NCCCN(C)C=O)n2nc(C)c2n1	CCCc1cc(NCCCN(C)C=O)n2nc(C)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)OC(=O)NCC(c1ccc(N)cc1)c1c[nH]c2ccc(O)cc12	CC(C)(C)OC(=O)NCC(c1ccc(N)cc1)c1c[nH]c2ccc(O)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc2ccc(CCCN3CCN(c4ccccc4)CC3)c2c1	CCOc1ccc2ccc(CCCN3CCN(c4ccccc4)CC3)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2Sc3cccc3N=C3C2=C(O)c2ccccc23)cc1	COc1ccc(C2Sc3cccc3N=C3C2=C(O)c2ccccc23)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
COc1ccc2c(c1)C(=O)N(Cc1(C#Cc3ccc(C(N)=O)cn3)NC(=O)NC1=O)C2	COc1ccc2c(c1)C(=O)N(Cc1(C#Cc3ccc(C(N)=O)cn3)NC(=O)NC1=O)C2	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)C(CBr)N=C(O)CCc1ccc(-c2ccccc2)cc1	NC(=O)C(CBr)N=C(O)CCc1ccc(-c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)NCC2CCCN2Cc2ccnc2)s1	Cc1ccc(S(=O)(=O)NCC2CCCN2Cc2ccnc2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(C#N)cc(C(=O)N2c3cccc3Sc3cccc32)n1C	Cc1c(C#N)cc(C(=O)N2c3cccc3Sc3cccc32)n1C	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc2c(=O)n(C)c(=O)n(C)c2[nH]1	Cc1nc2c(=O)n(C)c(=O)n(C)c2[nH]1	TRUE	TRUE	FALSE
CN(C)C(=O)c1nn(Cc2ccccc2F)c(=O)c2cc(OC)c(OC)cc12	COc1cc2c(C(=O)N(C)C)nn(Cc2ccccc2F)c(=O)c2cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
COCC(=O)N1CC(C)(C)C(c2ccc(Cl)c(Cl)c2)C(C)(C(=O)O)C1	COCC(=O)N1CC(C)(C)C(c2ccc(Cl)c(Cl)c2)C(C)(C(=O)O)C1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CN(C(=O)c1ccc(F)cc1F)c1ccc(-c2ccccc2)cc1	O=C(O)CN(C(=O)c1ccc(F)cc1F)c1ccc(-c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1ccco1)N1CCN(c2ccc(Cl)cc2[N+])(=O)[O-]CC1	O=C(c1ccco1)N1CCN(c2ccc(Cl)cc2[N+])(=O)[O-]CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(C2CC(c3ccc(Cl)cc3)c3ccc4cccc4c3S2)CC1	CN1CCN(C2CC(c3ccc(Cl)cc3)c3ccc4cccc4c3S2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)c1nc2ccc(C(O)(c3noc(SCc4c(C)noc4C)n3)c3cc(F)c(F)c3)cc2c(Cl)c1OC	CCN(CC)c1nc2ccc(C(O)(c3ccc(F)c(F)c3)c3noc(SCc4c(C)noc4C)n3)cc2c(Cl)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(O)=Nc2cc(C(F)F)F)ccn2)cc1-n1cc(-c2cncc(N3CCN(C)CC3)c2)nn1	Cc1ccc(C(O)=Nc2cc(C(F)F)F)ccn2)cc1-n1cc(-c2cncc(N3CCN(C)CC3)c2)nn1	TRUE	TRUE	FALSE
N=C(N)NCCCC(NC(=O)c1cccc1)C(=O)CS	N=C(N)NCCCC(NC(=O)c1cccc1)C(=O)CS	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1nc2cc3c(cc2s1)OCCO3)c1ccco1	O=C(Nc1nc2cc3c(cc2s1)OCCO3)c1ccco1	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1ccccc1OCC(=O)Nc1ccc(S(=O)(=O)N2CCCC2)cc1	Cc1ccccc1OCC(=O)Nc1ccc(S(=O)(=O)N2CCCC2)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(CC(=O)N1CCN(c2ccccc2)CC1)Nc1nc(-c2ccccc2)cs1	O=C(CC(=O)N1CCN(c2ccccc2)CC1)Nc1nc(-c2ccccc2)cs1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C)c(N2CCN(c3cc(-c4ccccc4)nc4ccc(C)cc34)CC2)c1	Cc1ccc(C)c(N2CCN(c3cc(-c4ccccc4)nc4ccc(C)cc34)CC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCC2(O)C3(C)CC4(O)OC2(C1O)C1(O)C3(O)C(OC2OCC(O)C3(C)C(c4ccoc4)CCC23O)C1OC(=O)c1ccccc1		FALSE	TRUE	TRUE
N#Cc1cc([N+])(=O)[O-])ccc1OCc1cccc(-c2ccc(C(F)F)cc2)c1	N#Cc1cc([N+])(=O)[O-])ccc1OCc1cccc(-c2ccc(C(F)F)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCc1cc(O)nc(SCc2nc(-c3ccc(Br)cc3)no2)n1	CCCc1cc(O)nc(SCc2nc(-c3ccc(Br)cc3)no2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)NC(CNC(=O)CNC(=O)c2ccc3c(N)n[nH]c3c2)C(=O)N2CCC3(C)c4cccc(O)c4CC2C3(C)C)cc1	Cc1ccc(S(=O)(=O)NC(CNC(=O)CNC(=O)c2ccc3c(N)n[nH]c3c2)C(=O)N2CCC3(C)c4cccc(O)c4CC2C3(C)C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1cc(Oc2c(l)cc(C(C)N)C(=O)O)cc2l)ccc1O	CCc1cc(Oc2c(l)cc(C(C)N)C(=O)O)cc2l)ccc1O	TRUE	TRUE	FALSE
CNC(=O)c1c(-c2ccc(F)cc2)oc2cc(N(C)S(C(=O)O)c(-c3ccc4nc5ccc(N6CCCC6)cc5n4n3)cc12	CNC(=O)c1c(-c2ccc(F)cc2)oc2cc(N(C)S(C(=O)O)c(-c3ccc4nc5ccc(N6CCCC6)cc5n4n3)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCc1ccc(O)c(Cl)c1)NCCc1ccc(S(N)(=O)=O)cc1	O=C(CCc1ccc(O)c(Cl)c1)NCCc1ccc(S(N)(=O)=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(N2CCN(Ccn3nc(-c4ccc(Br)o4)(C)sc3=S)CC2)c1C	Cc1cccc(N2CCN(Ccn3nc(-c4ccc(Br)o4)(C)sc3=S)CC2)c1C	FALSE	TRUE	TRUE
CC1CN(C(C)CO)C(=O)c2cc(NC(=O)Cc3cn(C)c4cccc34)ccc2OC1CN(C)S(=O)(=O)c1ccc(Cl)cc1	CC1CN(C(C)CO)C(=O)c2cc(NC(=O)Cc3cn(C)c4cccc34)ccc2OC1CN(C)S(=O)(=O)c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ncc2ccc(=O)[nH]c2n1)c1ccccc1Nc1ccnc1	O=C(Nc1ncc2ccc(=O)[nH]c2n1)c1ccccc1Nc1ccnc1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1cc(N)ccc1Oc1cccc(C(F)F)F)c1	NC(=O)c1cc(N)ccc1Oc1cccc(C(F)F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(CC(=O)O)CC(=O)Oc1ccc(OCc2ccccc2)cc1	CC(CC(=O)O)CC(=O)Oc1ccc(OCc2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1ccc(CN(Cc2CCC(c3ccc(C#Cc4cccc4)cc3)CC2)S(=O)(=O)c2ccccc2)cc1	O=C(O)c1ccc(CN(Cc2CCC(c3ccc(C#Cc4cccc4)cc3)CC2)S(=O)(=O)c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(C)=O)cc1CSCc1cnc(OC(C(=O)c2cc(OC)c(OC)c(OC)c2)s1	COc1ccc(C(C)=O)cc1CSCc1cnc(OC(C(=O)c2cc(OC)c(OC)c(OC)c2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2csc(NC(=O)CC)c2)cc1	COc1ccc(-c2csc(NC(=O)CC)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NC(Cc1ccc(OP(=O)(O)O)cc1)C(=O)NCCOc1cc(-c2cc(C)c(=O)n(C)c2)ccc1C	CC(=O)NC(Cc1ccc(OP(=O)(O)O)cc1)C(=O)NCCOc1cc(-c2cc(C)c(=O)n(C)c2)ccc1C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1)OC(C1=NCCN1)CC2	COc1ccc2c(c1)OC(C1=NCCN1)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(N)SC1CCc2c(Br)cccc2N(Cc2ccc(-c3ccccc3-c3nn[nH]n3)cc2)C1=O	N=C(N)SC1CCc2c(Br)cccc2N(Cc2ccc(-c3ccccc3-c3nn[nH]n3)cc2)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1CCC(NC(=O)c2cccc(Cn3cnnc3S)c2)CC1	CCN1CCC(NC(=O)c2cccc(Cn3cnnc3S)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(Nc1cc(NCCc2cccc(O)c2)ncn1)c1ccccc1	CC(Nc1cc(NCCc2cccc(O)c2)ncn1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1ccc(C(c2ccc3oc4cccc4c3c2)n2ccnc2)cc1Cl	Clc1ccc(C(c2ccc3oc4cccc4c3c2)n2ccnc2)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C1=C(O)C(=O)C2=C(C(C)C)CCCC2(C)C1CC=C1C(=O)CC(O)C(C)O1	CC(C)C1=C2C(=O)C(O)=C(C(C)C)C(CC=C3OC(C)C(O)CC3=O)C2(C)CCC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C(=O)N2CCN(Cc3ccc(F)cc3)CC2)no1	Cc1cc(C(=O)N2CCN(Cc3ccc(F)cc3)CC2)no1	TRUE	TRUE	TRUE
C=Cc1c(C)c(-c2ccccc2)c2c(c1C)OCC1c3cc4c(cc3OC21)OCO4	C=Cc1c(C)c2c(c(-c3ccccc3)c1C)C1Oc3cc4c(cc3C1CO2)OCO4	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCN(Cc1ccccc1)c1ccc(C(=O)N2CCc3c2ccc(OC(F)F)F)c3F)c(=O)n1C	CN(C)CCN(Cc1ccccc1)c1ccc(C(=O)N2CCc3c2ccc(OC(F)F)F)c3F)c(=O)n1C	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1csc(N2CC(C)C)c1C(=O)N=C(N)N		FALSE	TRUE	TRUE
CCCCCCCC=CCCCCCCCCCC(=O)c1nc2ccncc2o1	CCCCCCCC=CCCCCCCCCCC(=O)c1nc2ccncc2o1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(S(=O)(=O)N2CCN(C(=O)c3cccc(S(=O)(=O)N4CCOCC4)c3)CC2)cc1	COc1ccc(S(=O)(=O)N2CCN(C(=O)c3cccc(S(=O)(=O)N4CCOCC4)c3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(-c2cccc(COc3cc4c(c(OC)c3)OCC(=O)N4Cc3cccc(o3)CCC(F)F)F)c2)ccc1C(=O)O		FALSE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1CCCN(Cc2cc3c(OC)cccc3oc2=O)C1	CCOC(=O)C1CCCN(Cc2cc3c(OC)cccc3oc2=O)C1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(=O)n2nc(CNc3ccc(S(=O)(=O)N4CCCC4)cc3)sc2n1	Cc1cc(=O)n2nc(CNc3ccc(S(=O)(=O)N4CCCC4)cc3)sc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(CN)CC(C)C1CCC2C3C(=NO)CC(O)C4(C)OCC=CC3CCC124	CC(CN)CC(C)C1CCC2C3C(=NO)CC(O)C4(C)OCC=CC3CCC124	TRUE	TRUE	TRUE
COCCN(C(=S)SCC(=O)Nc1cccc(S(=O)(=O)N(C)C)c1)C(C)c1ccc(OC)cc1	COCCN(C(=S)SCC(=O)Nc1cccc(S(=O)(=O)N(C)C)c1)C(C)c1ccc(OC)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(Cl)c(OC(CCN2CCC(n3c(=O)n(CCN(C=O)N)c4cccc43)CC2)C(C)C)c1	Cc1ccc(Cl)c(OC(CCN2CCC(n3c(=O)n(CCN(C=O)N)c4cccc43)CC2)C(C)C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(Cl)sc1CCN	Cc1nc(Cl)sc1CCN	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(Cc1ccc(Cl)cc1Cl)C(Oc1nc(N)c2cnn(C(C)C)c3ccccc3)c2n1)C(C)C	CCOC(Cc1ccc(Cl)cc1Cl)C(Oc1nc(N)c2cnn(C(C)C)c3ccccc3)c2n1)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(OC(C)CNCCc2cccc(Cl)c2)cc1)N1Cc2ccnc2C1	O=C(Nc1ccc(OC(C)CNCCc2cccc(Cl)c2)cc1)N1Cc2ccnc2C1	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C=O)C(Cc1ccccc1)N(C(=O)c1cccc(Cl)c1)C1c2cc(C#N)ccc2OC(C)(C)C1O	CO(C=O)C(Cc1ccccc1)N(C(=O)c1cccc(Cl)c1)C1c2cc(C#N)ccc2OC(C)(C)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C(=Cc1cccc(OS(=O)(=O)c2ccccc2Cl)c1)NC(=O)c1ccccc1Cl	O=C(O)C(=Cc1cccc(OS(=O)(=O)c2ccccc2Cl)c1)NC(=O)c1ccccc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(OCCc2ncc[nH]2)cc1	c1ccc(OCCc2ncc[nH]2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1CCN(c2nc(-c3ccc(NCc4ccc(-c5nc6cc(-c7ccc(Cl)c(F)c7)cc6[nH]5)cc4)cc3)cs2)CC1		FALSE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CCN(C)C(=O)CCCc2nnc3ccc(NCc4ccco4)nn23)cc1OC	COc1ccc(CCN(C)C(=O)CCCc2nnc3ccc(NCc4ccco4)nn23)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(Cc2ccccc2Cl)C1=Nc1cccn1	CN1CCN(Cc2ccccc2Cl)C1=Nc1cccn1	TRUE	TRUE	TRUE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>OCC(O)C(O)C(O)C(O)CN(Cc1cccc(Cl)c(Br)c1)c1cccc(Br)c1</chem>	<chem>OCC(O)C(O)C(O)C(O)CN(Cc1cccc(Cl)c(Br)c1)c1cccc(Br)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(O)(C)c1ccc(C(=O)N)C(Cc2cccc2)C(O)CC(Cc2cccc2)C(=O)NC2c3cccc3CC2O)cc1</chem>	<chem>CC(C)(C)c1ccc(C(=O)N)C(Cc2cccc2)C(O)CC(Cc2cccc2)C(=O)NC2c3cccc3CC2O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1nccc(C=Cc2ccc([N+](=O)[O-])cc2)n1</chem>	<chem>Nc1nccc(C=Cc2ccc([N+](=O)[O-])cc2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=S1(=O)N=C(c2ccc(Cl)cc2)Oc2c(C3CCCC3)cccc21</chem>	<chem>O=S1(=O)N=C(c2ccc(Cl)cc2)Oc2c(C3CCCC3)cccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(O)(c1ccc(Br)cc1)C(O)(Cn1cncn1)c1ccc(Cl)cc1</chem>	<chem>CC(O)(c1ccc(Br)cc1)C(O)(Cn1cncn1)c1ccc(Cl)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1=C(N2CC2)C(=O)c2nc3n(c2C1=O)CCC3NC(=O)Cc1cccc(Cl)c1</chem>	<chem>CC1=C(N2CC2)C(=O)c2nc3n(c2C1=O)CCC3NC(=O)Cc1cccc(Cl)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(c1ccc2cc(Oc3ccc(C(F)(F)F)cn3)ccc2n1)N1CC(Oc2ccnc2)C1</chem>	<chem>O=C(c1ccc2cc(Oc3ccc(C(F)(F)F)cn3)ccc2n1)N1CC(Oc2ccnc2)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(C=Cc1ccc(Br)cc1)NCc1cncnc1</chem>	<chem>O=C(C=Cc1ccc(Br)cc1)NCc1cncnc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1enc2e3c(nccc13)C(=O)c1cccc1-2</chem>	<chem>COc1enc2e3c(nccc13)C(=O)c1cccc1-2</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>OC(Cc1cccc1)CC(F)(F)C(F)(F)Cl</chem>	<chem>OC(Cc1cccc1)CC(F)(F)C(F)(F)Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Brc1ccc(Nc2nnc(Cc3cncnc3)s2)cc1</chem>	<chem>Brc1ccc(Nc2nnc(Cc3cncnc3)s2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN1CC2CCN(CC1)C2Cc1ccncc1</chem>	<chem>CN1CCN2CC(C1)C2Cc1cncnc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=C1C(=O)OC2C1CC(OC(=O)NCCc1ccc(O)cc1)C(C)=CCCC1(C)OC21</chem>	<chem>C=C1C(=O)OC2C1CC(OC(=O)NCCc1ccc(O)cc1)C(C)=CCCC1(C)OC21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CCN(C(=O)C(COCC2ccc([N+](=O)[O-])cc2)NC(=O)OC(C)(C)C)CC1</chem>	<chem>CC1CCN(C(=O)C(COCC2ccc([N+](=O)[O-])cc2)NC(=O)OC(C)(C)C)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNC(=O)C1CC=CC1n1cnc2c(NCc3cccc(l)c3)ncnc21</chem>	<chem>CNC(=O)C1CC=CC1n1cnc2c(NCc3cccc(l)c3)ncnc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOc1ccc2cc(C(=O)CSc3nccc(N)n3)c(=O)oc2c1</chem>	<chem>CCOc1ccc2cc(C(=O)CSc3nccc(N)n3)c(=O)oc2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOc1ccc2c(c1)c(=O)c(C(=O)CCCN1CCOCC1)cn2CC</chem>	<chem>CCOc1ccc2c(c1)c(=O)c(C(=O)CCCN1CCOCC1)cn2CC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)C1c2cccc(O)c2C(=O)c2c(O)cccc21</chem>	<chem>COC(=O)C1c2cccc(O)c2C(=O)c2c(O)cccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)CC1C2(C)CC3C(=O)OC(c4ccoc4)(C1O)C3CC(CO)=C2C</chem>	<chem>COC(=O)CC1C(C)C2(c3ccoc3)OC(=O)C3CC1(C)C(C)=C(CO)CC32</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1c(OCCCc2cc(-c3cccc(Cl)c3)no2)ccc2c1OC(C(=O)O)CC2</chem>	<chem>CCc1c(OCCCc2cc(-c3cccc(Cl)c3)no2)ccc2c1OC(C(=O)O)CC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(NS(=O)(=O)c2ccccc2)c(NC(=O)c2cncnc2)c1</chem>	<chem>Cc1ccc(NS(=O)(=O)c2ccccc2)c(NC(=O)c2cncnc2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCOc1cccc(NC(=O)C2CCN(S(=O)(=O)c3cccs3)CC2)c1</chem>	<chem>CCCCOc1cccc(NC(=O)C2CCN(S(=O)(=O)c3cccs3)CC2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cccc1-c1ccc2oc3c(c2c1)C(=O)C(=O)c1cccc1-3</chem>	<chem>COc1cccc1-c1ccc2oc3c(c2c1)C(=O)C(=O)c1cccc1-3</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(CON=C2CN(c3nc4c(cc3F)c(=O)c(C(=O)O)cn4C3CC3)CC2CN)cc1OC</chem>	<chem>COc1ccc(CON=C2CN(c3nc4c(cc3F)c(=O)c(C(=O)O)cn4C3CC3)CC2CN)cc1OC</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>COC(=O)c1cccc1N1CCN(CGNC(=O)c2ccc3[nH]c(=O)c4c(c3c2)CCSC4)CC1</chem>	<chem>COC(=O)c1cccc1N1CCN(CCN(C(=O)c2ccc3[nH]c(=O)c4c(c3c2)CCSC4)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CC(O)C2=CC(=O)CC2(C)C1CC(F)(F)F</chem>	<chem>CC1CC(O)C2=CC(=O)CCC2(C)C1CC(F)(F)F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=c1nc(OCC2COc3ncccc3O2)cc2n1CCc1cc(C#CCO)ccc1-2</chem>	<chem>O=c1nc(OCC2COc3ncccc3O2)cc2n1CCc1cc(C#CCO)ccc1-2</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>Cc1c(-c2cccc2F)c(=O)n(CCCCCCc2nnn[nH]2)c(=O)n1Cc1cccc1</chem>	<chem>Cc1c(-c2cccc2F)c(=O)n(CCCCCCc2nnn[nH]2)c(=O)n1Cc1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC)c1ccc(C=NNc2[nH]cnc3ncnc2-3)cc1</chem>	<chem>CCN(CC)c1ccc(C=NNc2[nH]cnc3ncnc2-3)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN1c2ncc(CCc3cncnc3)cc2C(=O)N(C)c2ccc(Cl)nc21</chem>	<chem>CCN1c2ncc(CCc3cncnc3)cc2C(=O)N(C)c2ccc(Cl)nc21</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>Oc1ccc2c(O)c3c(c4nc(ccc2c1)OCO4)CN(Cc1ccc2c(c1)OCO2)CC3</chem>	<chem>Oc1ccc2c(O)c3c(c4nc(ccc2c1)OCO4)CN(Cc1ccc2c(c1)OCO2)CC3</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Cn1c(-c2ccccc2)cs1=O)Nc1ccc(N2CCOCC2)c([N+](=O)[O-])c1</chem>	<chem>O=C(Cn1c(-c2ccccc2)cs1=O)Nc1ccc(N2CCOCC2)c([N+](=O)[O-])c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCNC(=O)c1nc(CSc2nc3cccc3s2)oc1-c1ccc(C)cc1</chem>	<chem>CCCCNC(=O)c1nc(CSc2nc3cccc3s2)oc1-c1ccc(C)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(NC(=O)Cn1cnnn1)c1ccc(OC2CN(c3cccn3)C2)cc1</chem>	<chem>CC(NC(=O)Cn1cnnn1)c1ccc(OC2CN(c3cccn3)C2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cccc1-n1c(=O)c2ccc2n2c(CCC(=O)Nc3cccc3OC)nnc12</chem>	<chem>COc1cccc1NC(=O)CCc1nnc2n(-c3cccc3OC)c(=O)c3scnc3n12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CN2c3c(cc4c(C(=O)N5CCCC(C)(O)CC5)noc4c3F)CC3CCCC(C(O)=NC4CCCC4)C3C2C(C)O1</chem>	<chem>CC1CN2c3c(cc4c(C(=O)N5CCCC(C)(O)CC5)noc4c3F)CC3CCCC(C(O)=NC4CCCC4)C3C2C(C)O1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1cc2nc(SCc3cccc3Cl)n(-c3cccc3)c(=O)c2n1</chem>	<chem>Cn1cc2nc(SCc3cccc3Cl)n(-c3cccc3)c(=O)c2n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(C(=O)NCCc2ccc(Cl)cc2)cc(OC)c1OC</chem>	<chem>COc1cc(C(=O)NCCc2ccc(Cl)cc2)cc(OC)c1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nnc(SC(C)C(=O)Nc2c(C)n(C)n(-c3cccc3)c2=O)s1</chem>	<chem>Cc1nnc(SC(C)C(=O)Nc2c(C)n(C)n(-c3cccc3)c2=O)s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)c1[nH]c(C)C(=O)Nc2ccc(OC)c(OC)c2)c1C</chem>	<chem>CCOC(=O)c1[nH]c(C)C(=O)Nc2ccc(OC)c(OC)c2)c1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1c2cc3c(cc2C2(c4ccccc4)CCN1C2)OCCO3</chem>	<chem>O=C1c2cc3c(cc2C2(c4ccccc4)CCN1C2)OCCO3</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN1CC(C(=O)NCC2CCN(CCc3ccsc3)CC2)CC2c3cccc4[nH]cc(c34)CC21</chem>	<chem>CN1CC(C(=O)NCC2CCN(CCc3ccsc3)CC2)CC2c3cccc4[nH]cc(c34)CC21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)C1CN(Cc2ccccc2)C(=O)C1CC(=O)NCCc1ccc(Sc2ccccc2)cc1</chem>	<chem>CC(C)C1CN(Cc2ccccc2)C(=O)C1CC(=O)NCCc1ccc(Sc2ccccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(NC(=O)COC(=O)C(NC(C)=O)C(C)C)cc1Cl</chem>	<chem>COc1ccc(NC(=O)COC(=O)C(NC(C)=O)C(C)C)cc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NC1CCCC1)N(Cc1cccc1)Cc1cccc1</chem>	<chem>O=C(NC1CCCC1)N(Cc1cccc1)Cc1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#Cc1cc(Cl)cc(Cl)c1Oc1cccc1O</chem>	<chem>N#Cc1cc(Cl)cc(Cl)c1Oc1cccc1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#Cc1cc(Br)cc2ccnc12</chem>	<chem>N#Cc1cc(Br)cc2ccnc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(CCCCCC1Cc2nc(cs2)CC(OC(=O)c2c(Cl)cccc2Cl)CCC(=O)O1)OCc1cccc1F</chem>	<chem>O=C(CCCCCC1Cc2nc(cs2)CC(OC(=O)c2c(Cl)cccc2Cl)CCC(=O)O1)OCc1cccc1F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC(=O)NCCc1ccc2c(c1)OCO2)C(=O)c1cccc(S(=O)(=O)NCCc2ccnc2)c1</chem>	<chem>CCN(CC(=O)NCCc1ccc2c(c1)OCO2)C(=O)c1cccc(S(=O)(=O)NCCc2ccnc2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=C(C)CSc1nc2ccccc2o1</chem>	<chem>C=C(C)CSc1nc2ccccc2o1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NO)c1ccc2c(c1)CC(NS(=O)(=O)c1cccs1)C2</chem>	<chem>O=C(NO)c1ccc2c(c1)CC(NS(=O)(=O)c1cccs1)C2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(CN)C(=O)NC(CSCc1cccc1)C(=O)NC(Cc1ccc(-c2ccccc2)cc1)C(=O)NC(C)C(=O)O</chem>	<chem>CC(CN)C(=O)NC(CSCc1cccc1)C(=O)NC(Cc1ccc(-c2ccccc2)cc1)C(=O)NC(C)C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1=CCCC2(C)OC2C(=O)C2(CCC(C)C(C)C2)C(C)C1</chem>	<chem>CC1=CCCC2(C)OC2C(=O)C2(CCC(C)C(C)C2)C(C)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC=CC=C(C)=NNC(=O)CC12CC3CC(C(C)C3)C1)C2(=O)Nc1cccc1</chem>	<chem>CC=CC=C(C)=NNC(=O)CC12CC3CC(C(C)C3)C1)C2(=O)Nc1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(OC(Cc1ccc(OCCCN2CCOCC2)cc1)C(=O)N1CCOCC1)C(Cc1cccc1)NC(=O)CNC(=O)C=Cc1ccc(C(C)C)C)cc1</chem>	<chem>CC(OC(Cc1ccc(OCCCN2CCOCC2)cc1)C(=O)N1CCOCC1)C(Cc1cccc1)NC(=O)CNC(=O)C=Cc1ccc(C(C)C)C)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN1CCc2c(sc3nc4c(c(NCC5CCOCC5)c23)CC(C)(C)CS4)C1</chem>	<chem>CN1CCc2c(sc3nc4c(c(NCC5CCOCC5)c23)CC(C)(C)CS4)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>OC1(C(F)(F)F)Nc2ccc(F)cc2C1(O)c1ccc(Cl)C(Cl)c1</chem>	<chem>OC1(c2ccc(Cl)C(Cl)c2)c2cc(F)ccc2N1(C)C(F)(F)F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCn1c(CC(=O)Nc2ccc(Cl)cc2)nnc1SCC(=O)Nc1cccc1F</chem>	<chem>CCn1c(CC(=O)Nc2ccc(Cl)cc2)nnc1SCC(=O)Nc1cccc1F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cccc1C(=O)NCCS(=O)(=O)N1CCN(c2ccccc2)CC1</chem>	<chem>COc1cccc1C(=O)NCCS(=O)(=O)N1CCN(c2ccccc2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOCCOC(=O)C(C#N)=CN1CCN(C(=O)C2COc3cccc3O2)CC1</chem>	<chem>CCOCCOC(=O)C(C#N)=CN1CCN(C(=O)C2COc3cccc3O2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1=CCCC2(C)OC2C2O(C(=O)C(C(=O)O)C2CC1</chem>	<chem>CC1=CCCC2(C)OC2C2O(C(=O)C(C(=O)O)C2CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=NOC(=O)c1ccc(O)c(O)c1)c1ccc(Cl)cc1</chem>	<chem>CC(=NOC(=O)c1ccc(O)c(O)c1)c1ccc(Cl)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1=C(C(=O)Nc2ccccc2)C(c2ccccc2)C([N+](=O)[O-])C(C)=N1</chem>	<chem>CC1=NC(C)=C(C(=O)Nc2ccccc2)C(c2ccccc2)C1[N+](=O)[O-]</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(-c2ccccc2O)nc(NCCOC(c2ccccc2)c2ccccc2)n1</chem>	<chem>Cc1cc(-c2ccccc2O)nc(NCCOC(c2ccccc2)c2ccccc2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C(=O)NCCc1cc(OC)ccc1S(=O)(=O)Nc1ccc2c(c1C(=O)O)CCCC2</chem>	<chem>CC(C(=O)NCCc1cc(OC)ccc1S(=O)(=O)Nc1ccc2c(c1C(=O)O)CCCC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)N(C(=O)C(C#N)=C1NC(C)C1(C)C)C(C)C</chem>	<chem>CC(C)N(C(=O)C(C#N)=C1NC(C)C1(C)C)C(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CSc1nn2c(=O)cc(-c3ccc4c(c3)OCO4)[nH]c2c1-c1cccn1</chem>	<chem>CSc1nn2c(=O)cc(-c3ccc4c(c3)OCO4)[nH]c2c1-c1cccn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(O)n(CCC#N)c(=O)c1C#N</chem>	<chem>Cc1cc(O)n(CCC#N)c(=O)c1C#N</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)C1NC(=O)C2C3C=CC(O3)C2C1=O</chem>	<chem>CC(C)C1NC(=O)C2C3C=CC(O3)C2C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(C)OC2O(C)CS)OC2C1O</chem>	<chem>CC1(C)OC2O(C)CS)OC2C1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOc1ccc(-c2ccc(S(=O)(=O)C=C3C(CN=[N+]=[N-])C4CCCN4C3c3ccc(Cl)c(F)c3)cc2)cc1</chem>	<chem>CCOc1ccc(-c2ccc(S(=O)(=O)C=C3C(CN=[N+]=[N-])C4CCCN4C3c3ccc(Cl)c(F)c3)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCCOC(=O)c1[nH]c2c(c1C)C(=O)CC(c1cccc1)C2</chem>	<chem>COCCOC(=O)c1[nH]c2c(c1C)C(=O)CC(c1cccc1)C2</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>Fc1ccc2c(c1)C1CNCCC1N2</chem>	<chem>Fc1ccc2c(c1)C1CNCCC1N2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCCC=CCCCCCCCC(=O)NC(CO)C(=O)NC(CO)C(N)=O</chem>	<chem>CCCCCCCCC=CCCCCCCCC(=O)NC(CO)C(=O)NC(CO)C(N)=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)c1cccc(NC(=O)N2CCCC(CN3CCN(C)CC3)C2)c1</chem>	<chem>CCOC(=O)c1cccc(NC(=O)N2CCCC(CN3CCN(C)CC3)C2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cccn2c(=O)nc(SCc3cccc3C#N)nc12</chem>	<chem>Cc1cccn2c(=O)nc(SCc3cccc3C#N)nc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1C2Cc3ccc(C(=O)NCCc4cccc4)cc3C1(C)CCN2CC1CC1</chem>	<chem>CC1C2Cc3ccc(C(=O)NCCc4cccc4)cc3C1(C)CCN2CC1CC1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>COc1cccc(CCc2nnc(N)s2)c1</chem>	<chem>COc1cccc(CCc2nnc(N)s2)c1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>O=C(Cc1cccc1)NC1CCC2(O)C3Cc4ccc(O)c5c4C2(C(OC(=O)CSCC2CC2)C1O)C3O5</chem>	<chem>O=C(Cc1cccc1)NC1CCC2(O)C3Cc4ccc(O)c5c4C2(C(OC(=O)CSCC2CC2)C1O)C3O5</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(N2CCC(N(C)C3CCN(C)CC3)CC2)ccc1NC(=O)c1cncnc1</chem>	<chem>Cc1cc(N2CCC(N(C)C3CCN(C)CC3)CC2)ccc1NC(=O)c1cncnc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cccc(N2C(=O)CS2c2ccc(C)c2)c1</chem>	<chem>Cc1cccc(C2SCC(=O)N2c2cccc(C)c2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(OCCCN2CCOCC2)nc2ccc(NC(=O)COC3ccc(OC(F)(F)F)cc3)cc12</chem>	<chem>Cc1cc(OCCCN2CCOCC2)nc2ccc(NC(=O)COC3ccc(OC(F)(F)F)cc3)cc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NCCCN1cnc1)C1CCCN1C(=O)c1nccc2cc3cccc3nc12</chem>	<chem>O=C(NCCCN1cnc1)C1CCCN1C(=O)c1nccc2cc3cccc3nc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
c1ccc(-c2nc3ncccn3c2NC2CCCC2)cc1	c1ccc(-c2nc3ncccn3c2NC2CCCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(NCC1CCCN(CCOc2ccccc2-c2ccccc2)C1)c1ccccc1	O=S(=O)(NCC1CCCN(CCOc2ccccc2-c2ccccc2)C1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOCCOc1cccc1C(=O)N1CCCC(c2nnc(CN3CCCS3(=O)=O)o2)C1	CCOCCOc1cccc1C(=O)N1CCCC(c2nnc(CN3CCCS3(=O)=O)o2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1[nH]ccn(C2OC(COP(=O)(O)O)C(O)C2O)c1=O	O=c1[nH]ccn(C2OC(COP(=O)(O)O)C(O)C2O)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2[nH]c(-c3ccc(OC)nc3)nc2-c2ccc3c(c2)OCO3)cc1OC	COc1ccc(-c2nc(-c3ccc4c(c3)OCO4)c(-c3ccc(OC)c(OC)c3)[nH]2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(CCN(C(=O)c2cc(Cl)cnc2C)cs1	Cc1nc(CCN(C(=O)c2cc(Cl)cnc2C)cs1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCn1c(COc2ccc(OC)cc2)nnc1SCC(=O)O	CCCCCn1c(COc2ccc(OC)cc2)nnc1SCC(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
NCC(NC(=O)c1ccc(C2CC2)c(OCC2CCCO2)n1)c1ccccc1	NCC(NC(=O)c1ccc(C2CC2)c(OCC2CCCO2)n1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1C(=O)Nc1cccc(NC(=O)c2cccs2)c1	COc1ccccc1C(=O)Nc1cccc(NC(=O)c2cccs2)c1	TRUE	TRUE	FALSE
COc1cc2c(c(OC)c1OC)-c1ccc(SC)c(=O)cc1C(NC(=O)c1cccc(CO[N+](=O)[O-])c1)CC2	COc1cc2c(c(OC)c1OC)-c1ccc(SC)c(=O)cc1C(NC(=O)c1cccc(CO[N+](=O)[O-])c1)CC2	TRUE	TRUE	FALSE
O=[N+](([O-])c1ccc2c(c1)CCCN2CC1=NCCN1Cc1ccc(Cl)cc1	O=[N+](([O-])c1ccc2c(c1)CCCN2CC1=NCCN1Cc1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(C)N=CC1=C(O)c2ccccc2C1=O	CC(C)C(C)N=CC1=C(O)c2ccccc2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCNC(=O)C(=O)C(C)NC(=O)C(C)C(C)C(NC(=O)C(NC(=O)CCCCCCCCCOC(=O)N(c1ccccc1)C1CCN(S(=O)(=O)c2ccccc2)CC1)C(C)C	CCNC(=O)C(=O)C(C)NC(=O)C(C)C(C)C(NC(=O)C(NC(=O)CCCCCCCCCOC(=O)N(c1ccccc1)C1CCN(S(=O)(=O)c2ccccc2)CC1)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Nc2nc(=O)n(C3CC3)c(=O)n2Cc2ccc(Cl)cc2)cc1	COc1ccc(Nc2nc(=O)n(C3CC3)c(=O)n2Cc2ccc(Cl)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)COc1ccc(-c2cc(-c3ccccc3)nn2CC(F)(F)F)c(C(F)(F)F)c1	O=C(O)COc1ccc(-c2cc(-c3ccccc3)nn2CC(F)(F)F)c(C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(Cc1ccccc1)P(=O)(O)O	NC(Cc1ccccc1)P(=O)(O)O	TRUE	TRUE	FALSE
CCCCc1nc(Cl)c(CC(=O)OC)n1Cc1ccc(C(=O)OC)cc1	CCCCc1nc(Cl)c(CC(=O)OC)n1Cc1ccc(C(=O)OC)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)OC2CC(=O)N3C21CC3(C)O	CC1(O)CC23C(CC(=O)N12)OC3(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CN1C(=NC(=O)c2ccccc2Cl)SCC1(C)C	CN1C(=NC(=O)c2ccccc2Cl)SCC1(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc(-c2ccc(C=C3SC(=N)NC3=O)o2)c2ccccc21	Cn1cc(-c2ccc(C=C3SC(=N)NC3=O)o2)c2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)C(Cc1ccc(CP(=O)(O)O)cc1)NC(=O)C(CCCc1ccccc1)CC(=O)NO	NC(=O)C(Cc1ccc(CP(=O)(O)O)cc1)NC(=O)C(CCCc1ccccc1)CC(=O)NO	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1nc2ccc(Cl)cn2c(=O)[nH]1	O=c1nc2ccc(Cl)cn2c(=O)[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
OC1cc2c(cc1Cl)CN(Cc1cccc(-c3ccc(-c4ccccc4)cc3)c1)CC2	OC1cc2c(cc1Cl)CN(Cc1cccc(-c3ccc(-c4ccccc4)cc3)c1)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)C(C)CC(O)(Cn1ncnn1)c1cc(F)c(C(F)cc1F	CC(CC(O)(Cn1ncnn1)c1cc(F)c(C(F)cc1F)C(C)C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CN1CCC2C(=O)N(C)CCN2C1=O	CC(C)CN1CCC2C(=O)N(C)CCN2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(Nc1c(-c2c(F)cc(OCCO)cc2F)c(Cl)nc2ncnn12)C(F)(F)F	CC(Nc1c(-c2c(F)cc(OCCO)cc2F)c(Cl)nc2ncnn12)C(F)(F)F	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(NCCCCCNC(=O)NC1CCCC1)NC12CC3CC(CC(C3)C1)C2	O=C(NCCCCCNC(=O)NC12CC3CC(CC(C3)C1)C2)NC1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=NOC(=O)c1ccc([N+](=O)[O-])cc1)c1ccccc1	NC(=NOC(=O)c1ccc([N+](=O)[O-])cc1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(OC)cc1NS(=O)(=O)c1ccc(NC(=S)NC(=O)c2cccs2)cc1	COc1ccc(C)c(NS(=O)(=O)c2ccc(NC(=S)NC(=O)c3cccs3)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)C(=O)C1CCN(c2cc(-c3cnc(N)nc3)nc(N3CC4CC3C4)n2)CC1	CCN(CC)C(=O)C1CCN(c2cc(-c3cnc(N)nc3)nc(N3CC4CC3C4)n2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1ccc(CN(Cc2ccccc2)C23C4CC(C(C)O)(C4)C2)C3)cc1	OC12CC3CC(C1)CC(N(Cc1ccccc1)Cc1ccc(Cl)cc1)(C3)C2	TRUE	TRUE	TRUE
CC1OC(n2cc(C#N)c3c(N)ncnc32)C(O)C1O	CC1OC(n2cc(C#N)c3c(N)ncnc32)C(O)C1O	TRUE	TRUE	FALSE
C=CCC1N(C(=O)c2cnccc2C(F)(F)F)CCCC1(OC1ccc(C(F)(F)F)cc1)C(=O)N1CCC(OC2ccccc2C#N)CC1	C=CCC1N(C(=O)c2cnccc2C(F)(F)F)CCCC1(OC1ccc(C(F)(F)F)cc1)C(=O)N1CCC(OC2ccccc2C#N)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1OCc2nc3n(c21)CCCC3	O=C1OCc2nc3n(c21)CCCC3	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc(OCC2CC2)c2[nH]c(Nc3ccc(S(=O)(=O)O)cc3)nc2n1	Nc1nc(OCC2CC2)c2[nH]c(Nc3ccc(S(=O)(=O)O)cc3)nc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NC(=O)N2CC(C)OC(C)C2)cc1OC	COc1ccc(NC(=O)N2CC(C)OC(C)C2)cc1OC	TRUE	TRUE	FALSE
NC(=O)C1CCN(c2cc(=O)n(CC3(O)CCC3)c(=O)[nH]2)CC1	NC(=O)C1CCN(c2cc(=O)n(CC3(O)CCC3)c(=O)[nH]2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1cc(NC(=O)C2(NC(=O)c3ccc4c(C5CCCC5)c(-c5ncc(C(=N)O)cn5C)n(C)c4c3)CCC2)ccc1C=CC(=O)O	FALSE	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCCc1nnc(-c2ccccc2)o1)N1CCN(C2CCCC2)C(=O)C1	O=C(CCCc1nnc(-c2ccccc2)o1)N1CCN(C2CCCC2)C(=O)C1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCCCCC#CCCCCCCCCCC(=O)O)c1cncnc1	O=C(O)CCCCCCCCCCC#CCCCCCC(=O)c1cncnc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(C(=O)Nc2cccc(N3CCOCC3)c2)c1N(C)C	COc1cccc(C(=O)Nc2cccc(N3CCOCC3)c2)c1N(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(CCc1ccccc1)NC(=O)COc1ccc(Br)cc1	CC(CCc1ccccc1)NC(=O)COc1ccc(Br)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCNC(=O)c1cc(C(=O)NCCCc2ccc(Cl)c2)cn1C	CCCCNC(=O)c1cc(C(=O)NCCCc2ccc(Cl)c2)cn1C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1[nH]nc2c1C(c1ccccc1OCc1c(F)cccc1F)N(c1cccc(Cl)c1F)C2=O	CC(C)c1[nH]nc2c1C(c1ccccc1OCc1c(F)cccc1F)N(c1cccc(Cl)c1F)C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
OCc1cnnn1Cn1cccn1	OCc1cnnn1Cn1cccn1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1n[nH]c(SCCc2ccccc2)n1	Cc1n[nH]c(SCCc2ccccc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1sccc1NC(=O)CSc1nnc(CNC(=O)c2ccc(OC)cc2)o1	COC(=O)c1sccc1NC(=O)CSc1nnc(CNC(=O)c2ccc(OC)cc2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)c1ccc(-c2cc(C(=N)N)=CC(C)(O)CO)nn2-c2ccc(Cl)cc2)cc1Cl	CNC(=O)c1ccc(-c2cc(C(=N)N)=CC(C)(O)CO)nn2-c2ccc(Cl)cc2)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(Cn2nnc(C(=O)NCC3CCCO3)c2N)cc1C	Cc1ccc(Cn2nnc(C(=O)NCC3CCCO3)c2N)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1cc(C2NC(=O)N(c3ccccc3)C3=C2C(=O)CC3)cs1	NC(=O)c1cc(C2NC(=O)N(c3ccccc3)C3=C2C(=O)CC3)cs1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cccc1C(C#N)NCc1cccn1	Cn1cccc1C(C#N)NCc1cccn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(Sc1ccNn2ccccc2C1)C(=O)Nc1ccc(OC(F)F)cc1	COc1ccc(-c2ccc(COc3ccc(-c4cccc(C)c4C(O)c4cccc(C(=O)O)c4O)cc3)cc2)cc1	FALSE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2ccc(COc3ccc(-c4cccc(C)c4C(O)c4cccc(C(=O)O)c4O)cc3)cc2)cc1	CCCN=C1SCCN1Cc1ccc(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN=C1SCCN1Cc1ccc(Cl)c1	O=c1oc2ccc(Nc3c([N+](=O)[O-])cc([N+](=O)[O-])c4ccccc34)cc2cc1-c1ccc(CN2CCCCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1oc2ccc(Nc3c([N+](=O)[O-])cc([N+](=O)[O-])c4ccccc34)cc2cc1-c1ccc(CN2CCCCC2)cc1	COc1ccc(CCN(N)=O)c2cccn12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CCN(N)=O)c2cccn12	C=CC1(C)CC(=O)C2(O)C(C)(O1)C(OC(=O)CCN1CCC1)C(O)C1C(C)(C)CCC(O)C12C	TRUE	TRUE	TRUE
C=CC1(C)CC(=O)C2(O)C(C)(O1)C(OC(=O)CCN1CCC1)C(O)C1C(C)(C)CCC(O)C12C	CCC(C)NC(=O)c1ccc2c(c1)N(C)C(=O)CO2	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C)NC(=O)c1ccc2c(c1)N(C)C(=O)CO2	O=C(O)CCc1c2ccccc2nc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CCc1c2ccccc2nc2ccccc12	CCCc1cccc2c(C(=O)OCC)c(C(=O)OCC)[nH]c12	TRUE	TRUE	TRUE
CCCc1cccc2c(C(=O)OCC)c(C(=O)OCC)[nH]c12	CCCc1cccc2c(C(=O)OCC)c(C(=O)OCC)[nH]c12	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)c1ccccc1-c1ccc(N2CCC(NS(=O)(=O)C=Cc3cn(C4CC4)cn3)C2=O)cc1	CS(=O)(=O)c1ccccc1-c1ccc(N2CCC(NS(=O)(=O)C=Cc3cn(C4CC4)cn3)C2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1ccc2c(c1)nc(Nc1ccccc1)c1ncsc12	O=C(O)c1ccc2c(c1)nc(Nc1ccccc1)c1ncsc12	TRUE	TRUE	FALSE
COc1cc(C(=O)c2c(NCCN(C)C)sc3c2CCCC3)cc(OC)c1OC	COc1cc(C(=O)c2c(NCCN(C)C)sc3c2CCCC3)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1)OC1(c3ccc(F)cc3)CC(Br)S(=O)(=O)C2=C1c1ccc(S(C)(=O)=O)cc1	COc1ccc2c(c1)OC1(c3ccc(F)cc3)CC(Br)S(=O)(=O)C2=C1c1ccc(S(C)(=O)=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(CNC(=O)C2CCN(S(=O)(=O)c3ccccc4nonc34)CC2)c1OC	COc1cccc(CNC(=O)C2CCN(S(=O)(=O)c3ccccc4nonc34)CC2)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CC(NC(=O)C(F)(F)F)CCCCOc1ccc2c(c1)OCO2	CC(CCCCOc1ccc2c(c1)OCO2)NC(=O)C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CCN=Cc1ccc(OCc2ccc(l)cc2)c(l)c1	O=C(O)CCN=Cc1ccc(OCc2ccc(l)cc2)c(l)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(Cl)cn1)N1CCN(C(c2ccccc2)c2ccccc2)CC1	O=C(Nc1ccc(Cl)cn1)N1CCN(C(c2ccccc2)c2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1oc2ccc(O)c(O)cc2cc1-c1c(O)cc(O)cc1O	O=c1oc2cc(O)c(O)cc2cc1-c1c(O)cc(O)cc1O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1ccccc1)c1ccccc1-c1ccc(O)cc1	O=C(c1ccccc1)c1ccccc1-c1ccc(O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C(CC[P+](c1ccccc1)(c1ccccc1)c1ccccc1)(c1ccccc1)c1ccccc1	COC(=O)C(CC[P+](c1ccccc1)(c1ccccc1)c1ccccc1)(c1ccccc1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(CCN=C(S)N(C)CCCN2CCC(C(c3ccccc3)c3ccccc3)CC2)ccc1O	COc1cc(CCN=C(S)N(C)CCCN2CCC(C(c3ccccc3)c3ccccc3)CC2)ccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C(Cc1c[nH]cn1)NC(=S)Nc1ccccc1	COC(=O)C(Cc1c[nH]cn1)NC(=S)Nc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1ccc(S(=O)(=O)N(Cc2ccccc2OC(F)(F)F)c2c(C(=O)NO)cnc3ccc(Cl)cc23)cc1	COC(=O)c1ccc(S(=O)(=O)N(Cc2ccccc2OC(F)(F)F)c2c(C(=O)NO)cnc3ccc(Cl)cc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)C(=O)CN1CCN(C(=O)c2cccc(C#Cc3ccccc3)c2)CCS1(=O)=O	CN(C)C(=O)CN1CCN(C(=O)c2cccc(C#Cc3ccccc3)c2)CCS1(=O)=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc2ccnc(NC3CC(CO)CCC3N(C)C)c2[nH]c1=O	Cc1cc2ccnc(NC3CC(CO)CCC3N(C)C)c2[nH]c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1[nH]c2ccccc2c1NC(=O)C1CCN(S(=O)(=O)c2cccs2)CC1	CCOC(=O)c1[nH]c2ccccc2c1NC(=O)C1CCN(S(=O)(=O)c2cccs2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1cc(Nc2cc(NCC#N)n3ncc(C#N)c3n2)[nH]n1	CC(C)(C)c1cc(Nc2cc(NCC#N)n3ncc(C#N)c3n2)[nH]n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc2c1CCC(=O)C2=Cc1ccc(Cl)cc1	COc1ccccc2c1CCC(=O)C2=Cc1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(CCCN1C(=O)C(=CC=Cc2ccccc2)SC1=5)Nc1ccccc1C(=O)O	O=C(CCCN1C(=O)C(=CC=Cc2ccccc2)SC1=5)Nc1ccccc1C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(c1ccc(F)cc1)N1CC2=Cc3c(cnn3-c3ccc(F)cc3)CC2(Cc2ccc(F)cc2)C1	O=S(=O)(c1ccc(F)cc1)N1CC2=Cc3c(cnn3-c3ccc(F)cc3)CC2(Cc2ccc(F)cc2)C1	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1cc(-c2nnc(C3CC(F)(F)C3)o2)nc(N2CCC(c3nc(C#N)c(N)o3)CC2)n1	Cc1cc(-c2nnc(C3CC(F)(F)C3)o2)nc(N2CCC(c3nc(C#N)c(N)o3)CC2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(NCc2cc(Cl)cc(Cl)c2)n2nnnc2n1	Cc1cc(NCc2cc(Cl)cc(Cl)c2)n2nnnc2n1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CC(C)N(CCCNC(=O)c1c[nH]c2ccc(N(C)C)cc12)Cc1ccccc1	CC(C)N(CCCNC(=O)c1c[nH]c2ccc(N(C)C)cc12)Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1noc(C)c1Cn1cc(N2C(=O)CN(CCCc3ccccc3)C2=O)cn1	Cc1noc(C)c1Cn1cc(N2C(=O)CN(CCCc3ccccc3)C2=O)cn1	TRUE	TRUE	FALSE
COc1ccnc(OCC(O)CNC(C)C)c1	COc1ccnc(OCC(O)CNC(C)C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(CSc2nnc(-c3ccncc3)n2-c2ccccc2)cc1	c1ccc(CSc2nnc(-c3ccncc3)n2-c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-n2nc3c4cc(OC)c(OC)cc4c(=O)[nH]c3c2C)c(OC)c1	COc1ccc(-n2nc3c([nH]c(=O)c4cc(OC)c(OC)cc43)c2C)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1oc(-c2ccc(O)cc2)cc2ccc(O)cc12	O=c1oc(-c2ccc(O)cc2)cc2ccc(O)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(C)C(=O)N1CCN(c2ccc(Nc3nccc(Nc4cc(OC)c(OC)c(OC)c4)n3)cc2)CC1	CCN(C)C(=O)N1CCN(c2ccc(Nc3nccc(Nc4cc(OC)c(OC)c(OC)c4)n3)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCN(NC(=O)CC(=O)NN=Cc1cc(C)n(C)C)c1c(N)n(CCCC)c(=O)[nH]c1=O	CCCCN(NC(=O)CC(=O)NN=Cc1cc(C)n(C)C)c1c(N)n(CCCC)c(=O)[nH]c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C(NC1CCCC1)c1ccccc1	O=C(O)C(NC1CCCC1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)Cc1cc(Nc2ccnc3cc(Cl)ccc23)cc(-c2ccccc2Cl)c1O	CCN(CC)Cc1cc(Nc2ccnc3cc(Cl)ccc23)cc(-c2ccccc2Cl)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)CCOC(=O)c1ccc(NC(=O)C(C)C)cc1	CCN(CC)CCOC(=O)c1ccc(NC(=O)C(C)C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCc1ccc(Cl(=O)CCC(=O)c2nccs2)c(Cl)c1	CCCCc1ccc(Cl(=O)CCC(=O)c2nccs2)c(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(ClNCc2nc(-c3ccc(Cl)c3)no2)C2CCCC2)cc1	COc1ccc(ClNCc2nc(-c3ccc(Cl)c3)no2)C2CCCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CCSCCN1CC(O)CN1CCC(C2CCCC2)CC1	O=C1CCSCCN1CC(O)CN1CCC(C2CCCC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCN(C(=O)C(CCC(=O)NCc1cccc(Cl(F)(F)F)c1)NC(=O)CCC(N)=O	CCCCCN(C(=O)C(CCC(=O)NCc1cccc(Cl(F)(F)F)c1)NC(=O)CCC(N)=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(CN1CCC(n2c(=O)[nH]c3ccc(Cl)cc32)CC1)S(C)(=O)=O	CC(C)(CN1CCC(n2c(=O)[nH]c3ccc(Cl)cc32)CC1)S(C)(=O)=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2ccc(OCc3cc(OC)c(OC)c(OC)c3)nn2)cc1	COc1ccc(-c2ccc(OCc3cc(OC)c(OC)c(OC)c3)nn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc2[nH]ncc2c1)c1cc(-c2ccc(Cl)c(Cl)c2)nc2ccccc12	O=C(Nc1ccc2[nH]ncc2c1)c1cc(-c2ccc(Cl)c(Cl)c2)nc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1c2ccccc2c2cc(C#N)c3nc4ccccc4n3c21	CCn1c2ccccc2c2cc(C#N)c3nc4ccccc4n3c21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nn(-c2ccccc2)nc1CCOc1ccc(Cc(Nc2ccccc2C(=O)c2ccccc2)C(=O)O)cc1	Cc1nn(-c2ccccc2)nc1CCOc1ccc(Cc(Nc2ccccc2C(=O)c2ccccc2)C(=O)O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCc1ccncc1)C(=Cc1ccncc1)NC(=O)c1ccccc1	O=C(NCc1ccncc1)C(=Cc1ccncc1)NC(=O)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=S1(=O)CCC(CNc2nc(F)nc(O)c2-c2ccc(F)cc2)CC1	O=S1(=O)CCC(CNc2nc(F)nc(O)c2-c2ccc(F)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(CCC)S(=O)(=O)c1ccc(OC)c(NC(=O)c2ccc(F)cc2)c1	CCCN(CCC)S(=O)(=O)c1ccc(OC)c(NC(=O)c2ccc(F)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc21C(=O)c1c(O)c3c(c(O)c1C2=O)CC(O)(C(N)=O)CC3OC1CC(N)C(O)C(C)O1	COc1ccccc2c1C(=O)c1c(O)c3c(c(O)c1C2=O)CC(O)(C(N)=O)CC3OC1CC(N)C(O)C(C)O1	TRUE	TRUE	FALSE
NC1CCc2cc(Br)c(O)cc2C1	NC1CCc2cc(Br)c(O)cc2C1	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1ccccc2c1nc(Cc1ccsc1)c1cnccc12	Oc1ccccc2c1nc(Cc1ccsc1)c1cnccc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCS(=O))(=O)c1ccccc1)NCC1(N2CCOCC2)CCCCC1	O=C(CCS(=O))(=O)c1ccccc1)NCC1(N2CCOCC2)CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1NC(=O)C(=Cc2cccc3cc[nH]c23)S(=O)(=O)O1	O=C1NC(=O)C(=Cc2cccc3cc[nH]c23)S(=O)(=O)O1	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(C)CSc1oc2cc3c(cc2c(=O)c1C=C(C(=O)OC)OC)OC3	C=C(C)CSc1oc2cc3c(cc2c(=O)c1C=C(C(=O)OC)OC)OC3	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN1c2ccc(OC)cc2c2c(Cl)c(-c3cccc4ccccc34)[nH]c21	CCCN1c2ccc(OC)cc2c2c(Cl)c(-c3cccc4ccccc34)[nH]c21	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(ClCCN2CCN(c3[nH]cnc4ncnc3-4)CC2)cc1	c1ccc(ClCCN2CCN(c3[nH]cnc4ncnc3-4)CC2)cc1	FALSE	TRUE	TRUE
CCCCCO(C=O)N1CCN(C(=O)C(CCC(=O)O)NC(=O)c2cc(N(C(=O)C3CC3NC(C)=O)C3CCCC3)cc(-c3ccccc3)n2)CC1	CCCCCO(C=O)N1CCN(C(=O)C(CCC(=O)O)NC(=O)c2cc(N(C(=O)C3CC3NC(C)=O)C3CCCC3)cc(-c3ccccc3)n2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccn2c(=O)c3cc(Cl(=O)O)n(Cc4cccc(Cl)c4)c3nc12	Cc1cccn2c(=O)c3cc(Cl(=O)O)n(Cc4cccc(Cl)c4)c3nc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(Cc1ccc(Cl)cc1)C(=O)NC1N=C(C2ccccc2)c2ccccc2N(Cc2ccc3cc(Cl(=O)NCCC(=O)O)ccc3c2)C1=O	CC(Cc1ccc(Cl)cc1)C(=O)NC1N=C(C2ccccc2)c2ccccc2N(Cc2ccc3cc(Cl(=O)NCCC(=O)O)ccc3c2)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2c(-c3ccccc3)nn3c(-c4ccc(CN5CCC(N6CCCC6)CC5)cc4)cccc23)cc1	Cc1ccc(-c2c(-c3ccccc3)nn3c(-c4ccc(CN5CCC(N6CCCC6)CC5)cc4)cccc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1NCC23CCCCNC12CCN(CCC3(O)CO)C1CCc2ccccc2C1	O=C1NCC23CCCCNC12CCN(C1CCc2ccccc2C1)CCC3(O)CO	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(OCC(=O)Nc2ccccc2N2CCCC2)c(Cl)c1	Cc1ccc(OCC(=O)Nc2ccccc2N2CCCC2)c(Cl)c1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C1C(=O)N(CCCn2cc(C3(SCc4ccccc4)CCCC3)nn2)c2ccccc21	O=C1C(=O)N(CCCn2cc(C3(SCc4ccccc4)CCCC3)nn2)c2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C(Cl)=C(Nc2cccc(Br)c2)C(=O)c2[nH]cnc21	O=C1C(Cl)=C(Nc2cccc(Br)c2)C(=O)c2[nH]cnc21	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(NCc1ccc(F)c(Cl(F)(F)F)c1)Nc1cccc(Oc2ncnc3[nH]ccc23)c1	O=C(NCc1ccc(F)c(Cl(F)(F)F)c1)Nc1cccc(Oc2ncnc3[nH]ccc23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCC=C1c2ccccc2CCc2ccccc21)C(=O)c1ccccc1	O=C(NCC=C1c2ccccc2CCc2ccccc21)C(=O)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1cc(CNc2ccccc2)ccc1OCC(=O)N1CCOCC1	CCOc1cc(CNc2ccccc2)ccc1OCC(=O)N1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCS(=O)(=O)NCCc1ccccc1Oc1ccccc1	CCCCS(=O)(=O)NCCc1ccccc1Oc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)c1ccc(-c2[nH]c3ccccc3c2CCNCCCCc2ccc(F)cc2)cc1	CS(=O)(=O)c1ccc(-c2[nH]c3ccccc3c2CCNCCCCc2ccc(F)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
C=C1CC2CCC34C5OC6C(OC(=O)C7(C)CCC7(C)CCC(=O)C7(C)C6CC(C)OC5C3C2(O)O4)OC1=O	C=C1CC2CCC34C5OC6C(OC(=O)C7(C)CCC7(C)CCC(=O)C7(C)C6CC(C)OC5C3C2(O)O4)OC1=O	FALSE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(Cl(=O)NC(Cc2ccccc2)C(=O)O)cc1Nc1ncnc2cnc(N3CCOCC3)nc12	Cc1ccc(Cl(=O)NC(Cc2ccccc2)C(=O)O)cc1Nc1ncnc2cnc(N3CCOCC3)nc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(Cl)cc1)c1cc(Cl)ccc1O	O=C(Nc1ccc(Cl)cc1)c1cc(Cl)ccc1O	TRUE	TRUE	FALSE
Cn1nc(C(=O)NN=Cc2ccc(-c3ccsc3)o2)c2ccccc2c1=O	Cn1nc(C(=O)NN=Cc2ccc(-c3ccsc3)o2)c2ccccc2c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc1NC(=O)N1CCN(C(=S)SCc2cn(Cc3ccccc3F)nn2)CC1	Cc1ccccc1NC(=O)N1CCN(C(=S)SCc2cn(Cc3ccccc3F)nn2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)OCC12CCC3C(Cc4C5(C)CCC(Oc6Oc(C)C(O)C(O)C6O)C(C)(C)C5C(OC5OC(C)C(O)C(O)C5O)C4(C)C3(C1)OC(=O)CC2	CC(=O)OCC12CCC3C(Cc4C5(C)CCC(Oc6Oc(C)C(O)C(O)C6O)C(C)(C)C5C(OC5OC(C)C(O)C(O)C5O)C4(C)C3(C1)OC(=O)CC2	FALSE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2oc3cc(OC)c(O)cc3c(=O)c2OC)cc1	COc1ccc(-c2oc3cc(OC)c(O)cc3c(=O)c2OC)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)=CCCC(C)=CCCC(=CCCC(C)C1CC=C(C(C)C1O)CS(=O)(=O)c1ccccc1	CC(O)=CCCC(C)=CCCC(=CCCC(C)C1CC=C(C(C)C1O)CS(=O)(=O)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1cn(Cc2ccccc2)c2c(cc(O)c3nccccc32)c1=O	CCOC(=O)c1cn(Cc2ccccc2)c2c(cc(O)c3nccccc32)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc(-c2nc3ccccc3c(=O)o2)c2ccccc21	Cn1cc(-c2nc3ccccc3c(=O)o2)c2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C1=C(c2ccc(Cl(F)(F)F)cc2)CC2CCC1N2C(=O)NCCc1ccccc1	COC(=O)C1=C(c2ccc(Cl(F)(F)F)cc2)CC2CCC1N2C(=O)NCCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)C(=O)c1ccc(Cl=C2CCCC2)C2CC3CCC(C2)N3Cc2ccncc2)cc1	CN(C)C(=O)c1ccc(Cl=C2CCCC2)C2CC3CCC(C2)N3Cc2ccncc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC#CCSc1nc2c(c(=O)[nH]c(=O)n2C)n1CCc1ccccc1	CCCC#CCSc1nc2c(c(=O)[nH]c(=O)n2C)n1CCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc1CSc1nncc(CSc2n[nH]c(N)n2)o1	Cc1ccccc1CSc1nncc(CSc2n[nH]c(N)n2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCc1nc(Cl)c(C(=O)n1Cc1ccccc2c1ccn2-c1ccccc1C(=O)O	CCCCc1nc(Cl)c(C(=O)n1Cc1ccccc2c1ccn2-c1ccccc1C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1sc2ccccc2n1CCN1CCN(C2CCC2)CC1	O=c1sc2ccccc2n1CCN1CCN(C2CCC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C(=O)Nc1ccccc1Cl)N1CCNC1=O	CC(C(=O)Nc1ccccc1Cl)N1CCNC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)C1C(=O)N(c2cccc(Cl(F)(F)F)c2)CC1(C)C	CC(=O)C1C(=O)N(c2cccc(Cl(F)(F)F)c2)CC1(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CCOCC1CNC(=O)CN1Cc1cncc1	CCOCC1CNC(=O)CN1Cc1cncc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)OC(=O)NCC(=O)N1CCCC1c1nc(O)c(O)c(Cl(=O)NCc2ccc(F)cc2)n1	CC(C)(C)OC(=O)NCC(=O)N1CCCC1c1nc(O)c(O)c(Cl(=O)NCc2ccc(F)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
C=C1CCC(CO)C1=CC=C1CCCC2(C)C1CCC2C(C)CCC(C)C	C=C1CCC(CO)C1=CC=C1CCCC2(C)C1CCC2C(C)CCC(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1COC(=O)c1cn(-c2cccc(C)c2)nc1-c1ccccc1	COc1ccccc1COC(=O)c1cn(-c2cccc(C)c2)nc1-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C1(C)CCC2(C)CCC3(C)C(=CC(=O)C4C5(C)CCC(=NN(CCO)CCO)C(C)(COC(C)=O)C5CCC43C)C2C1	COC(=O)C1(C)CCC2(C)CCC3(C)C(=CC(=O)C4C5(C)CCC(=NN(CCO)CCO)C(C)(COC(C)=O)C5CCC43C)C2C1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=Cc1oc2ccccc2c1=O)C1CC2OCC=CCCC(=O)NC(C)C(=O)N(C)C(Cc1ccc2ccccc2c1)C(=O)NC(Cc1ccc(O)cc1)C(C)(C)N	CC(=Cc1oc2ccccc2c1=O)C1CC2OCC=CCCC(=O)NC(C)C(=O)N(C)C(Cc1ccc2ccccc2c1)C(=O)NC(Cc1ccc(O)cc1)C(C)(C)N	FALSE	TRUE	TRUE
COC(=O)C(NC(=O)CS)C(C)C	COC(=O)C(NC(=O)CS)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(CS(=O))(=O)C1CC1)N1C(=O)C(C)(CC(=O)O)CC(c2cccc(Cl)c2)C1c1ccc(Cl)cc1	CC(C)C(CS(=O))(=O)C1CC1)N1C(=O)C(C)(CC(=O)O)CC(c2cccc(Cl)c2)C1c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
#CCCN(C)C(=O)CCNC(=O)C(C(C)C)S(N)(=O)=O	#CCCN(C)C(=O)CCNC(=O)C(C(C)C)S(N)(=O)=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CCn1cc(-c2cccc3c2-c2ccsc2C3(O)C(F)(F)F)cn1	CC(C)CCn1cc(-c2cccc3c2-c2ccsc2C3(O)C(F)(F)F)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCCCCCc1ccccc1)c1ncc(Cl(O)C2OC(CO)C(O)C(O)C2O)c1	O=C(CCCCCCc1ccccc1)c1ncc(Cl(O)C2OC(CO)C(O)C(O)C2O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cccs1)c1cc(S(=O)(=O)Nc2ccccc2)ccc1Cl	O=C(Nc1cccs1)c1cc(S(=O)(=O)Nc2ccccc2)ccc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1cc(C=C2C(=O)Nc3ccc(F)cc32)c2cc(OC)ccc21	CCn1cc(C=C2C(=O)Nc3ccc(F)cc32)c2cc(OC)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(N)c1ccc(OCCOc2ccc(Cl(=N)N)cc2)cc1	N=C(N)c1ccc(OCCOc2ccc(Cl(=N)N)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(=O)N1Cc2n[nH]c(NC(=O)c3ccc(Cl(C)(C)C)cc3)c2C1	CCC(=O)N1Cc2n[nH]c(NC(=O)c3ccc(Cl(C)(C)C)cc3)c2C1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc(Nc2ccc3c(c2)CCC(N)C3)cc(-c2cccc(N)c2)n1	Nc1cccc(-c2cc(Nc3ccc4c(c3)CC(N)C4)nc(N)n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1c(O)cc(O)c(Cl)c1CCC(=O)Nc1nc2ccc([N+](=O)[O-])cc2s1	COC(=O)c1c(O)cc(O)c(Cl)c1CCC(=O)Nc1nc2ccc([N+](=O)[O-])cc2s1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCOc1ccc(C2SCC(=O)N2NC(=O)CCC(=O)Nc2ccccc(F)c2)cc1	C=CCOc1ccc(C2SCC(=O)N2NC(=O)CCC(=O)Nc2ccccc(F)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CC(F)(F)F)Nc1ccc(-c2nnc(NCCCc3ccccc3)o2)c(Cl(F)(F)F)c1	O=C(CC(F)(F)F)Nc1ccc(-c2nnc(NCCCc3ccccc3)o2)c(Cl(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1C)NC(=O)C21SCC(=O)N1C(=O)c1ccccc[n+]]1[O-]	COc1ccc2c(c1C)NC(=O)C21SCC(=O)N1C(=O)c1ccccc[n+]]1[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
COc1c(N2CCCC2)cn(C)c1=O	COc1c(N2CCCC2)cn(C)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
COc1ccc2c(c1)C1(NC(=O)NC2=O)C2CC(C)C2C1(C)C	COc1ccc2c(c1)C1(NC(=O)NC2=O)C2CC(C)C2C1(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)CC(C(=O)NC(=O)C(CCCCN)NC(=O)C(C(N)=O)NC(=O)OCc1ccccc1	CC(C)CC(C(=O)NC(=O)C(CCCCN)NC(=O)C(C(N)=O)NC(=O)OCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(N=C(O)c2cccc(N3CCc4nc(N=C(O)c5cccn5)sc4C3)c2)cc1C(F)(F)F	COc1ccc(N=C(O)c2cccc(N3CCc4nc(N=C(O)c5cccn5)sc4C3)c2)cc1C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)N1CCC2(CC1)NC(=O)c1ccc(OC(F)(F)F)cc1O2	CC(C)N1CCC2(CC1)NC(=O)c1ccc(OC(F)(F)F)cc1O2	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C)NC(=O)C1CCC(n2c(=N)n(C)c3cc(Cl)ccc32)CC1	CCC(C)NC(=O)C1CCC(n2c(=N)n(C)c3cc(Cl)ccc32)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)Nn1c(S)nc2cc(Cl)ccc2c1=O	CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)Nn1c(S)nc2cc(Cl)ccc2c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
OCC(=NO)c1nc2ccccc2s1	OCC(=NO)c1nc2ccccc2s1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ccc(Nc2ccc(F)cc2)c(Cl)c1	Nc1ccc(Nc2ccc(F)cc2)c(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NC1CCc2cc(Cl)c3c(c21)CC1(CC(C)(C)OC3=O)O1		FALSE	TRUE	TRUE
CCC(=O)Nc1cc(NC(C)C(OC)C(O)C(C)OC)c([N+](=O)[O-])cc1[N+](=O)[O-]	CCC(=O)Nc1cc(NC(C)C(OC)C(O)C(C)OC)c([N+](=O)[O-])cc1[N+](=O)[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NC1C(CO)OC(OC(C)=O)C(OC(C)=O)C1OC(C)=O	CC(=O)NC1C(CO)OC(OC(C)=O)C(OC(C)=O)C1OC(C)=O	TRUE	TRUE	TRUE
C=CC(=O)Nc1cc2c(Nc3ccc(Br)cc3F)ncnc2cc1OCCN1CCN(c2cccc(Cl)c2)CC1	C=CC(=O)Nc1cc2c(Nc3ccc(Br)cc3F)ncnc2cc1OCCN1CCN(c2cccc(Cl)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(COC(=O)c1cc([N+](=O)[O-])ccc1N1CCOCC1)Nc1CCCC1	O=C(COC(=O)c1cc([N+](=O)[O-])ccc1N1CCOCC1)Nc1CCCC1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(NCc1cc(Cl(F)(F)F)cc(Cl(F)(F)F)c1)NC1CCC(OC2ccc(Cl)cc2)CC1	O=C(NCc1cc(Cl(F)(F)F)cc(Cl(F)(F)F)c1)NC1CCC(OC2ccc(Cl)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1nc(OCc2cccc(CN3CCCC3)c2)c2cc[nH]c2n1	Clc1nc(OCc2cccc(CN3CCCC3)c2)c2cc[nH]c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
Fc1ccc2c(c1)ON=C(c1ccc(OCCOCc3ccccc3)cc1)S2	Fc1ccc2c(c1)ON=C(c1ccc(OCCOCc3ccccc3)cc1)S2	TRUE	TRUE	TRUE
C[n+] <sub>1</sub> cc[n+](CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC[n+] <sub>2</sub> ccc(CC[n+] <sub>3</sub> ccccc3)cc2)cc1	C[n+] <sub>1</sub> cc[n+](CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC[n+] <sub>2</sub> ccc(CC[n+] <sub>3</sub> ccccc3)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCNC(=O)C1C(C)(C)C(=O)N1Cc1ccc(OC)cc1	COCCNC(=O)C1N(Cc2ccc(OC)cc2)C(=O)C1C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nn(Cc2ccc(NC(=O)c3ccc([N+](=O)[O-])cc3N)cc2F)c(CC)c1CC(=O)O	CCc1nn(Cc2ccc(NC(=O)c3ccc([N+](=O)[O-])cc3N)cc2F)c(CC)c1CC(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cc(Cl(=O)N2CCCC2CO)nn1-c1ccccc1)c1cc(-c2cccn2)c(F)cc1Cl	O=C(Nc1cc(Cl(=O)N2CCCC2CO)nn1-c1ccccc1)c1cc(-c2cccn2)c(F)cc1Cl	TRUE	TRUE	FALSE
COc1c(OC2OC(COC3OC(CO)(C)(O)C3O)(C)(O)C2OC2OC(C)(O)CO)(C)(O)C2O)c(=O)oc2ccccc12	COc1c(OC2OC(COC3OC(CO)(C)(O)C3O)(C)(O)C2OC2OC(C)(O)CO)(C)(O)C2O)c(=O)oc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCN1C(=O)C(C(=O)N2CCN(C)CC2)CC2(C(=O)OCC)CCC=CC12	CCCCCCCCCN1C(=O)C(C(=O)N2CCN(C)CC2)CC2(C(=O)OCC)CCC=CC12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)c2sc(CNC(=O)c3cccs3)nc2c1	Cc1cc(C)c2sc(CNC(=O)c3cccs3)nc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2nc3cc(NS(=O)(=O)c4cccc5cccn45)ccc3o2)cc1	Cc1ccc(-c2nc3cc(NS(=O)(=O)c4cccc5cccn45)ccc3o2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCCc1ccccc1)c1cc(-c2cncc2)nc(N2CCOCC2)c1	O=C(NCCc1ccccc1)c1cc(-c2cncc2)nc(N2CCOCC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCN1CCN(c2cc(C(N)=O)nc3ccc(Cl)cc23)CC1	C=CCN1CCN(c2cc(C(N)=O)nc3ccc(Cl)cc23)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(Cc1ccccc1)C(=O)Cn1c(=O)c2cccn2c2cccn21	CN(Cc1ccccc1)C(=O)Cn1c(=O)c2cccn2c2cccn21	TRUE	TRUE	FALSE
CCN(CC)c1ccc2cc(C(=O)NC3C4CC5CC3CC(C(N)=O)(C5)C4)c(=O)oc2c1	CCN(CC)c1ccc2cc(C(=O)NC3C4CC5CC3CC(C(N)=O)(C5)C4)c(=O)oc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCC(=O)CCCCCCC(=O)C(=O)NCCC#N	CCCCCCCCC(=O)CCCCCCC(=O)C(=O)NCCC#N	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C)c(S(=O)(=O)Nc2c(C)ccc3c2CCC(=O)N3)c1	Cc1ccc(C)c(S(=O)(=O)Nc2c(C)ccc3c2CCC(=O)N3)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)N1CCC(C(=O)N2CCC(C3c4ncc(C#N)cc4CCc4cc(Cl)cn43)CC2)CC1	COC(=O)N1CCC(C(=O)N2CCC(C3c4ncc(Cl)cc4CCc4cc(C#N)cn43)CC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)n1nc(-c2cn3[nH]cc(-c4cccc(C#N)n4)c3c2)cc1C1CCN(CCO(C)(C)C)CC1	CC(C)n1nc(-c2cn3[nH]cc(-c4cccc(C#N)n4)c3c2)cc1C1CCN(CCO(C)(C)C)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1c(N)cccc1CSc1nncc(-c2cc(Cl)[nH]n2)n1-c1ccccc1	N#Cc1c(N)cccc1CSc1nncc(-c2cc(Cl)[nH]n2)n1-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NC(=O)c2ccc(=O)n(CC(O)Cn3nnnc3[N+](=O)[O-])n2)cc1	COc1ccc(NC(=O)c2ccc(=O)n(CC(O)Cn3nnnc3[N+](=O)[O-])n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(-c2cccc(OCc3ccc(C(C)(C)S(C)(=O)=O)cc3)c2)ccc1-n1c(=O)ccc2cc(S(=O)(=O)Nc3con3)ccc21	COc1cc(-c2cccc(OCc3ccc(C(C)(C)S(C)(=O)=O)cc3)c2)ccc1-n1c(=O)ccc2cc(S(=O)(=O)Nc3con3)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1cccn2nc(-c3cccs3)nc12	Nc1cccn2nc(-c3cccs3)nc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C)NC(=O)c1ccc(OCCOC)cc1	CCC(C)NC(=O)c1ccc(OCCOC)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCCCCCCCCCNC(=O)CCc1c[nH]c2ccccc12)NO	O=C(CCCCCCCCCCNC(=O)CCc1c[nH]c2ccccc12)NO	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C(Sc2ccc(O)cc2)=C(Sc2ccc(O)cc2)C(=O)c2ncc21	O=C1C(Sc2ccc(O)cc2)=C(Sc2ccc(O)cc2)C(=O)c2ncc21	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(Nc1ccc(F)cc1F)Nc1ccc(S(=O)(=O)N2CCOCC2)cc1	O=C(Nc1ccc(S(=O)(=O)N2CCOCC2)cc1)Nc1ccc(F)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1cc(=O)oc2cc(OCC(=O)N(C)C3CCS(=O)(=O)C3)ccc12	CCc1cc(=O)oc2cc(OCC(=O)N(C)C3CCS(=O)(=O)C3)ccc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nccc2c1c(C(=O)c1ccc(C(=O)O)cc1)cn2CC(O)CN1CCC2(CC1)OCCO2	Cc1nccc2c1c(C(=O)c1ccc(C(=O)O)cc1)cn2CC(O)CN1CCC2(CC1)OCCO2	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1NS(=O)(=O)c1ccc(NS(=O)(=O)c2ccc(C)cc2)cc1	COc1ccccc1NS(=O)(=O)c1ccc(NS(=O)(=O)c2ccc(C)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(C)CSc1nc2c(C#N)c(N)nc(N)c2n1C1N=C(CF)C(O)C1O	C=C(C)CSc1nc2c(C#N)c(N)nc(N)c2n1C1N=C(CF)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=Cc1ccc(F)cc1)N1CCc2cc(OCc3ccccc3)ccc2C1CN1CCOCC1	O=C(C=Cc1ccc(F)cc1)N1CCc2cc(OCc3ccccc3)ccc2C1CN1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
NC1=NC2(CO1)c1cc(-c3cccn3F)cc1OC1cnc(-c3ccc(F)cn3)cc12	NC1=NC2(CO1)c1cc(-c3cccn3F)cc1OC1cnc(-c3ccc(F)cn3)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
CSC1(C)CC(C)=C2CC3(O)OC4CC5C(C)(CO)C(C=O)(CO)C(O)CC5(C)C4CC(O)C2(O)C3C1	CSC1(C)CC(C)=C2CC3(O)OC4CC5C(C)(CC(O)C(C=O)(CO)C5(C)CO)C4CC(O)C2(O)C3C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccccc1C1Nc2ccccc2N1C(=O)Cc1ccc(OC)cc1	CCOc1ccccc1C1Nc2ccccc2N1C(=O)Cc1ccc(OC)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NC(=O)Nc2ccc(F)cc2)cc1	COc1ccc(NC(=O)Nc2ccc(F)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NC1CN(c2ccc(-n3ccccc3)cc2)C(=O)CC1c1cc(F)c(F)cc1F	NC1CN(c2ccc(-n3ccccc3)cc2)C(=O)CC1c1cc(F)c(F)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
c1csc(CNc2nccn3[nH]cnc23)c1	c1csc(CNc2nccn3[nH]cnc23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C1=C2CCCC2C(NC(=O)C(=NOC(C)(C)C(=O)O)c2nc(N)no2)CN1	COC(=O)C1=C2CCCC2C(NC(=O)C(=NOC(C)(C)C(=O)O)c2nc(N)no2)CN1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(-c2cn(Cc3ccc4ccccc4c3)nn2)cc1	c1ccc(-c2cn(Cc3ccc4ccccc4c3)nn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1NCCc2cc(O)c(O)cc21	O=C1NCCc2cc(O)c(O)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1[nH]c2ccccc2n1CCCCN1CCN(CCCNc2ccnc3cc(Cl)ccc23)CC1	O=c1[nH]c2ccccc2n1CCCCN1CCN(CCCNc2ccnc3cc(Cl)ccc23)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc(CC(=O)NC2(C(=O)NC(CN3CCC(F)C3)(=O)NCC3CCCC3)CCCC2)c1	COc1ccccc(CC(=O)NC2(C(=O)NC(CN3CCC(F)C3)(=O)NCC3CCCC3)CCCC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
N#CC(=Cc1ccc([N+](=O)[O-])cc1)c1ccc(l)cc1	N#CC(=Cc1ccc([N+](=O)[O-])cc1)c1ccc(l)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1c(=O)cc(SCC(=O)NC(C)(C)C)c2ccccc21	CCn1c(=O)cc(SCC(=O)NC(C)(C)C)c2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCNC(=S)NC(=N)Nc1ccccc2ccccc12	C=CCNC(=S)NC(=N)Nc1ccccc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NC(=O)CCC(=O)N2CCc3ccccc32)cc1	COc1ccc(NC(=O)CCC(=O)N2CCc3ccccc32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)c1c2cnnc3ccnc4[nH]ccC1c4c2c34		FALSE	TRUE	TRUE
CC(C)=CN1CCC(C)=CC1CC(=O)CCc1ccccc1	CC(C)=CN1CCC(C)=CC1CC(=O)CCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC=Cc1ccc(OCCCCCCCCCN2CCN(c3cccc(C)c3)CC2)c(OC)c1	CC=Cc1ccc(OCCCCCCCCCN2CCN(c3cccc(C)c3)CC2)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C1CCOC1)N1CCC(NC(c2ccc(C(F)(F)F)cc2)c2cccn2)CC1	O=C(C1CCOC1)N1CCC(NC(c2ccc(C(F)(F)F)cc2)c2cccn2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCNC(=O)c1cc(-c2cccc(NC(=O)CCC3CCCC3)c2)on1	CCCCNC(=O)c1cc(-c2cccc(NC(=O)CCC3CCCC3)c2)on1	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1ccccc1-c1cc(N2CCNCC2)n2ccnc2n1	Clc1ccccc1-c1cc(N2CCNCC2)n2ccnc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)C(C)Sc1cccc[n+] <sub>1</sub> [O-]	CC(=O)C(C)Sc1cccc[n+] <sub>1</sub> [O-]	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(NC(=O)NC2=NC(=O)CC(C(=O)Nc3ccc(Br)cc3)S2)c1	COc1cccc(NC(=O)NC2=NC(=O)CC(C(=O)Nc3ccc(Br)cc3)S2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)OC(=O)NC(C(=O)N1CCCC1C(=O)NCc1cc(CN)cs1)(Clc1ccccc1)c1ccccc1	CC(C)(C)OC(=O)NC(C(=O)N1CCCC1C(=O)NCc1cc(CN)cs1)(Clc1ccccc1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ncc(C2CC2)c2nc(-c3cccn3)n[nH]c12		FALSE	TRUE	TRUE
CCc1nc2c(N3CCN(C)CC3)ncnc2n1Cc1ccccc1	CCc1nc2c(N3CCN(C)CC3)ncnc2n1Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ccc(C(=O)Nc2ccc(Cl)c2)cc1	N#Cc1ccc(C(=O)Nc2ccc(Cl)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)OC(=O)N1CCC(C(Sc2ccccc2)c2ccccc2)CC1	CC(C)(C)OC(=O)N1CCC(C(Sc2ccccc2)c2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCCC(=O)OCC(CO)C1C(O)CC2(C)C3CCC(C(=CC=C(C)C(=O)O)CCCC(C)CCC=C(C)C(=O)O)C3(C)CCC12C	CCCCCCCCCCCCC(=O)OCC(CO)C1C(O)CC2(C)C3CCC(C(=CC=C(C)C(=O)O)CCCC(C)CCC=C(C)C(=O)O)C3(C)CCC12C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(N1CC1)c1cnc2ccc(S(=O)(=O)N3CCCC3)cc2c1O	O=C(N1CC1)c1cnc2ccc(S(=O)(=O)N3CCCC3)cc2c1O	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)CC=C(c2cc(C3(N4CCNCCC4)CCCC3)ccc2NC(=O)c2ncc(C#N)[nH]2)CC1	CC1(C)CC=C(c2cc(C3(N4CCNCCC4)CCCC3)ccc2NC(=O)c2ncc(C#N)[nH]2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(OCc1ccccc1)N1CCN(CCO)C1c1ccccc1	O=C(OCc1ccccc1)N1CCN(CCO)C1c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=C(C(=O)C=Cc2ccc(C(F)(F)F)cc2)ccc1OC(C)C(C)O)CO	COc1cc(C=C(C(=O)C=Cc2ccc(C(F)(F)F)cc2)ccc1OC(C)C(C)O)CO	TRUE	TRUE	TRUE
Fc1c(F)c(F)c(-c2nc3c(N4CCCC4)ncnc3[nH]2)c(F)c1F	Fc1c(F)c(F)c(-c2nc3c(N4CCCC4)ncnc3[nH]2)c(F)c1F	TRUE	TRUE	TRUE
COCCNC(=O)c1ccc(-n2c(SCc3ccc(Br)cc3)nc3cccn32)cc1	COCCNC(=O)c1ccc(-n2c(SCc3ccc(Br)cc3)nc3cccn32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)c1cn(CC(=O)N2CC(F)CC2(CO)=Nc2ccc(-n3ccccc3=O)c(C)c2)c2cc(C(F)(F)F)ccc12	CNC(=O)c1cn(CC(=O)N2CC(F)CC2(CO)=Nc2ccc(-n3ccccc3=O)c(C)c2)c2cc(C(F)(F)F)ccc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c(N)c(C(=O)CO(C=O)CCS(=O)(=O)c2ccccc2)c(=O)n(C)c1=O	Cn1c(N)c(C(=O)CO(C=O)CCS(=O)(=O)c2ccccc2)c(=O)n(C)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NNC(=S)NC12CC3CC(C(C3)C1)C2)c1cccs1	O=C(NNC(=S)NC12CC3CC(C(C3)C1)C2)c1cccs1	TRUE	TRUE	FALSE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CCOC(=O)c1sc2cc(-c3ccc(C)c(C)c3)cnc2c1N	CCOC(=O)c1sc2cc(-c3ccc(C)c(C)c3)cnc2c1N	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cncc1C(O)(c1ccc(Oc2ccc(C(F)(F)F)cn2)c(F)c1)c1cc2cc(C#CCO)ccc2s1	Cn1cncc1C(O)(c1ccc(Oc2ccc(C(F)(F)F)cn2)c(F)c1)c1cc2cc(C#CCO)ccc2s1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)OC(=Cc1ccc(F)c(F)c1)c1nc(-c2ccccc2)c(-c2ccc(F)cc2)o1	CCOC(=O)OC(=Cc1ccc(F)c(F)c1)c1nc(-c2ccccc2)c(-c2ccc(F)cc2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CCc2c(C(F)(F)F)n[nH]c2O)cc1	COc1ccc(CCc2c(C(F)(F)F)n[nH]c2O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1CC(=O)N2C(Cc3c([nH]c4ccccc34)C2c2ccc(Cl)cc2)C1=O	CCN1CC(=O)N2C(Cc3c([nH]c4ccccc34)C2c2ccc(Cl)cc2)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nnc(NC(=O)CCC(=O)N2CCOC3c4ccccc4CCC32)s1	Cc1nnc(NC(=O)CCC(=O)N2CCOC3c4ccccc4CCC32)s1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC=O	CCOC=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=Cc1ccc2ccccc2c1)NC1OC(CO)C(O)C(O)C1O	O=C(C=Cc1ccc2ccccc2c1)NC1OC(CO)C(O)C(O)C1O	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)N(C(=O)c1cccn1Oc1ccc(F)cc1)C(C)C	CC(C)N(C(=O)c1cccn1Oc1ccc(F)cc1)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1OC)N(CCc1noc(C(C)C)n1)CCC2	COc1ccc2c(c1OC)N(CCc1noc(C(C)C)n1)CCC2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CN1CCN(c2[nH]nc3nccc23)CC1)Nc1ccc(C(F)(F)F)cc1		FALSE	TRUE	TRUE
Oc1ccc(Br)cc1F	Oc1ccc(Br)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(OCc1OC(Oc2ccc(Cl)cc2)C(OC(=O)c2cc(O)c(O)c(O)c2)C(OC(=O)c2cccc(Cl)c2)C1OC(=O)c1ccc(Cl)c1)c1cc(O)c(O)cc(O)c1C(=O)O	O=C(OCc1C(CO(C(=O)c2c(O)c(O)cc(O)c2C(=O)O)OC(Oc2ccc(Cl)cc2)C(OC(=O)c2cc(O)c(O)c(O)c2)C1OC(=O)c1cccc(Cl)c1)c1cc(O)c(O)c(O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nccn1CCC1CCN(C(=O)c2ccco2)CC1	Cc1nccn1CCC1CCN(C(=O)c2ccco2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cnc2[nH]c3ccc(C(F)(F)F)cc3c2c1	Cc1cnc2[nH]c3ccc(C(F)(F)F)cc3c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(C(=O)COC(=O)c1cc(O)nc2ccccc12)c1c(N)n(Cc2ccccc2)c(=O)[nH]c1=O	CCN(C(=O)COC(=O)c1cc(O)nc2ccccc12)c1c(N)n(Cc2ccccc2)c(=O)[nH]c1=O	TRUE	TRUE	FALSE
COc1cc(O)c2c(C(F)(F)F)cc(=O)oc2c1C=O	COc1cc(O)c2c(C(F)(F)F)cc(=O)oc2c1C=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1ccc(C=Cc2nc(C=Cc3ccc(OC(F)(F)F)cc3)no2)cc1	CC(C)(C)c1ccc(C=Cc2nc(C=Cc3ccc(OC(F)(F)F)cc3)no2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCOC(=O)C(CCC(N)=O)NC(=O)C1CCCN1	CCCCOC(=O)C(CCC(N)=O)NC(=O)C1CCCN1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(-c2ccccc(C(F)(F)F)c2)sc1C1CCN(c2ncnc(N)c2-c2ccc(S(C)(=O)=O)cc2)CC1	Cc1nc(-c2ccccc(C(F)(F)F)c2)sc1C1CCN(c2ncnc(N)c2-c2ccc(S(C)(=O)=O)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)c(NC(=O)CCn2nc(C)c3sc4ccccc4c3c2=O)c(C)c1	Cc1cc(C)c(NC(=O)CCn2nc(C)c3sc4ccccc4c3c2=O)c(C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1oc2ccc(NC(=O)C(C)(C)C)cc2c1C	Cc1oc2ccc(NC(=O)C(C)(C)C)cc2c1C	TRUE	TRUE	TRUE
CC=CC=CC(=O)OC1C(C)C2(O)C3C=C(C)C(=O)C3CC(CO)=C3C1(OC(C)=O)C2OC3(C)C	CC=CC=CC(=O)OC1C(C)C2(O)C3C=C(C)C(=O)C3CC(CO)=C3C(C)(C)OC2C31OC(C)=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCSc1ccc2c(c1)C(=O)c1ccccc1-2	CCSc1ccc2c(c1)C(=O)c1ccccc1-2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1ccc(Nc2nnc(-c3cccn3Cc3ccccc3Cl)s2)cc1	O=C(O)c1ccc(Nc2nnc(-c3cccn3Cc3ccccc3Cl)s2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(COc2ccc3c(c2)C(=O)N(CN(C)Cc2ccc(F)cc2)C3=O)c1	Cc1cccc(COc2ccc3c(c2)C(=O)N(CN(C)Cc2ccc(F)cc2)C3=O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1cc(-c2nc(OC)o2)cc(CNc2ccc(C)cn2)c1O	CCOc1cc(-c2nc(OC)o2)cc(CNc2ccc(C)cn2)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1c2ccccc2C(=O)c2c1ccc1nc(CNc3ccc(F)cc3Cl)[nH]c21	O=C1c2ccccc2C(=O)c2c1ccc1nc(CNc3ccc(F)cc3Cl)[nH]c21	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)N2N=C(c3ccc(OC)cc3)CC2c2ccs2)cc1	COc1ccc(C(=O)N2N=C(c3ccc(OC)cc3)CC2c2ccs2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+][([O-])c1ccc(S(=O)(=O)N2CCN(C(c3cccn3)c3ccc(F)cc3)CC2)cc1	O=[N+][([O-])c1ccc(S(=O)(=O)N2CCN(C(c3ccc(F)cc3)c3cccn3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cc1OC(CO)C(O)C(O)C1O)Nc1cc[n+](Cc2ccccc2)cc1	O=C(Cc1OC(CO)C(O)C(O)C1O)Nc1cc[n+](Cc2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCC2(COC(=O)Cc3ccccc3)CCC3(C)C=CCC4C5(C)C=C(O)C(=O)C(C)(C)C5CCC43C)C2C1(C)O	CC1CCC2(COC(=O)Cc3ccccc3)CCC3(C)C=CCC4C5(C)C=C(O)C(=O)C(C)(C)C5CCC43C)C2C1(C)O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(=O)NC(=Cc1ccc2c(c1)CCC2)C(=O)NCCc1ccccc1	CC(C)CC(=O)NC(=Cc1ccc2c(c1)CCC2)C(=O)NCCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccccc2c1CCC2CN1CCC(CC(C)C)CC1	CCc1ccccc2c1CCC2CN1CCC(CC(C)C)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1ccc(Cl)cc1NS(=O)(=O)c1cccc(C2CCOCC2)c1)N1CCC(O)(CCc2cccc(Cl)c2)CC1	O=C(c1ccc(Cl)cc1NS(=O)(=O)c1cccc(C2CCOCC2)c1)N1CCC(O)(CCc2cccc(Cl)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CNc1ccc(C(F)(F)F)cc1S(=O)(=O)Nc1ccc2c(c1)C(=O)N(C(C)CO)CC(C)C(CN(C)S(C)(=O)=O)O2	CNc1ccc(C(F)(F)F)cc1S(=O)(=O)Nc1ccc2c(c1)C(=O)N(C(C)CO)CC(C)C(CN(C)S(C)(=O)=O)O2	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc2c1C(CNS1(=O)=NOC(c3ccccc(F)c3)C1)CCC2	COc1ccccc2c1C(CNS1(=O)=NOC(c3ccccc(F)c3)C1)CCC2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2nc(NCc3ccc(F)c(Cl)c3)sc2C(=O)Nc2ccc3c(c2)N(C)CCS3)cc1	Cc1ccc(-c2nc(NCc3ccc(F)c(Cl)c3)sc2C(=O)Nc2ccc3c(c2)N(C)CCS3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCNC(=O)CS(=O)(=O)Cc1ccccc1[N+](=O)[O-]	CCCCNC(=O)CS(=O)(=O)Cc1ccccc1[N+](=O)[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
C=C1C(=O)c2ccccc2C1(CC=C(C)C)OC(=O)c1ccc(Cl)cc1	C=C1C(=O)c2ccccc2C1(CC=C(C)C)OC(=O)c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CN1N=C(c2ccc(F)c(F)c2)CC1=O	O=C(O)CN1N=C(c2ccc(F)c(F)c2)CC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
OCc1OC(n2cnc3c(Nc4ccc5ccccc5c4)nc(l)nc32(C)O)C1O	OCc1OC(n2cnc3c(Nc4ccc5ccccc5c4)nc(l)nc32(C)O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2nc3ccccc3o2)cc1NC(=O)CN1CCc2ccccc21	Cc1ccc(-c2nc3ccccc3o2)cc1NC(=O)CN1CCc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(=O)N1N=C(c2cccn2)CC1c1ccc(C)cc1	Cc1ccc(C2CC(c3cccn3)=NN2C(=O)C(C)C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCNC(=O)Cn1c(=O)n(-c2ccc(OC)cc2)c(=O)c2ccc(C(=O)NCCCN3CCOCC3)cc21	COCCNC(=O)Cn1c(=O)n(-c2ccc(OC)cc2)c(=O)c2ccc(C(=O)NCCCN3CCOCC3)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccc(NS(=O)(=O)c3ccc(C)cc3)cc2)cc1	CCCCCc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccc(NS(=O)(=O)c3ccc(C)cc3)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCNCc1nc2ccccc2c(-c2ccccc3[nH]ccc23)n1	COCCNCc1nc(-c2ccccc3[nH]ccc23)c2ccccc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCCNc1nccc2cc(NC(=O)C(F)(F)F)ccc12	CN(C)CCCNc1nccc2cc(NC(=O)C(F)(F)F)ccc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1c2c3n(c(=O)n2ccn1CN1CCc2ccccc2C1)CCS3	O=c1c2c3n(c(=O)n2ccn1CN1CCc2ccccc2C1)CCS3	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)OCc1OC(n2nnnc2C2Cc3ccccc3C2)C(OC(C)=O)C(OC(C)=O)C1OC(C)=O	CC(=O)OCc1OC(n2nnnc2C2Cc3ccccc3C2)C(OC(C)=O)C(OC(C)=O)C1OC(C)=O	TRUE	TRUE	TRUE
C=C1CCCC2C1(C)CC(C)C2(C)Cc1cc(O)c(OC)c(C2C2C)=CCc3c2c([N+](=O)[O-])cc(Cl)nc3S1)c1c(Cl)cccc1C		FALSE	TRUE	TRUE
CCN(C(=O)c1cn(Cc2ccc(F)cc2)c2nc(C(=O)O)cc2c1=O)c1ccccc2c1CC1CCN1C2=O	CCN(C(=O)c1cn(Cc2ccc(F)cc2)c2nc(C(=O)O)cc2c1=O)c1ccccc2c1CC1CCN1C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=NO)NCCN2CCOCC2)c(Oc2cc(C(F)(F)F)ccc2Cl)n1	Cc1ccc(C(=NO)NCCN2CCOCC2)c(Oc2cc(C(F)(F)F)ccc2Cl)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(Cn2cnn(CC(=O)c3ccc(Cl)cc(Cl)c3)c2=O)cc1	Cc1ccc(Cn2cnn(CC(=O)c3ccc(Cl)cc(Cl)c3)c2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(CNC(CNC(Cc1ccccc1)CN1CCCC1CNC(CNC(CN)Cc1ccc(O)cc1)Cc1ccc(O)cc1)Cc1ccc(O)cc1		FALSE	TRUE	TRUE
CC(=CC(OC(=O)CC(=O)O)C(C)(C)OC(=O)CC(=O)O)CC(=O)C(C)C1CCC2(C)C3C(=CCC12C)CC(O)C1C(C)(C(=O)O)CCCC13C		TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)C(=O)c1cc(N(Cc2ccc(OC)cc2)C(=O)c2cc(-c3ccc(C)cc3)n[nH]2)ccc1O	CCN(CC)C(=O)c1cc(N(Cc2ccc(OC)cc2)C(=O)c2cc(-c3ccc(C)cc3)n[nH]2)ccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCc1cc(=O)n2nc(C(C)cc2[nH]1	CCCCc1cc(=O)n2nc(C(C)cc2[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN=Cc1ccc(OC(=O)Nc2ccc(Br)cn2)c(OC)c1	CCCN=Cc1ccc(OC(=O)Nc2ccc(Br)cn2)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCN1c(=S)[nH]c2cc[n+](Cc3ccccc3[N+](=O)[O-])cc2c1=O)NCc1cccc(C(F)(F)F)c1	O=C(CCN1c(=S)[nH]c2cc[n+](Cc3ccccc3[N+](=O)[O-])cc2c1=O)NCc1cccc(C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
C=C1C(=O)OC2C=C(C(CO)CCCC(C=O)=CCC12	C=C1C(=O)OC2C=C(C(CO)CCCC(C=O)=CCC12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C=C2C(=O)C3=C(C2)N(C)C(=O)CC3c2ccccc2)c(OC)c1OC	COc1ccc(C=C2CC3=C(C2=O)C(c2ccccc2)CC(=O)N3C)c(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCCCCCOc1ccc2[nH]c3nc(O)nc-3cc2c1)c1cccn1O	O=C(NCCCCCOc1ccc2[nH]c3nc(O)nc-3cc2c1)c1cccn1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(S(=O)(=O)Nc2nc(-c3ccc(S)cc3)cs2)cc1	CCOc1ccc(S(=O)(=O)Nc2nc(-c3ccc(S)cc3)cs2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C=C2Cc3ccc(OC(=O)O)cc3C2=O)cc1	COc1ccc(C=C2Cc3ccc(OC(=O)O)cc3C2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCOc1ccc(C(=O)O)c(NC(=O)c2ccncc2)c1	CCCOc1ccc(C(=O)O)c(NC(=O)c2ccncc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
N#CC(=Cc1cc([N+](=O)[O-])c2ncccc2c1)c1nc2ccccc2[nH]1	N#CC(=Cc1cc([N+](=O)[O-])c2ncccc2c1)c1nc2ccccc2[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C(=O)N2CCN(c3ccccc3)CC2)COC(c2nc(-c3ccc(F)cc3)c(-c3ncc(Cl)cn3)s2)OC1	CC1(C(=O)N2CCN(c3ccccc3)CC2)COC(c2nc(-c3ccc(F)cc3)c(-c3ncc(Cl)cn3)s2)OC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NN=CC=Cc1ccccc1)N1CCCCC1	O=C(NN=CC=Cc1ccccc1)N1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nnc(N2CCC(c3nc(-c4ccc(F)c(C(F)F)c4)cn3CCN3CCC3)CC2)c1-c1ccc(F)cc1	Nc1nnc(N2CCC(c3nc(-c4ccc(F)c(C(F)F)c4)cn3CCN3CCC3)CC2)c1-c1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(=O)OC1C2CC3C(CC=C4CC(OC(C)=O)CCC43C)C2(C)C2CC1C1(C)OC3(CCC4C(C)(C)C(=O)CCC4(C)C3C3CC12C)O4		FALSE	TRUE	TRUE
CC(C(CO)N(Cc1ccc2c(c1)OCO2)S(=O)(=O)c1ccc(F)cc1	CCC(CO)N(Cc1ccc2c(c1)OCO2)S(=O)(=O)c1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(CCN1CCc2c(Cl)cc(C)cc2C1C1CCN(C2CCCC2O)CC1)C1CCc2nc(NC)sc2C1	CCCN(CCN1CCc2c(Cl)cc(C)cc2C1C1CCN(C2CCCC2O)CC1)C1CCc2nc(NC)sc2C1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NCC1CN(c2ccc(OC(C)C)cc2)C(=O)O1	CC(=O)NCC1CN(c2ccc(OC(C)C)cc2)C(=O)O1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1c(Cl)n(CCO)c2cc(F)ccc12)N1CCN(C2CCCC2)CC1	O=C(c1c(Cl)n(CCO)c2cc(F)ccc12)N1CCN(C2CCCC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccccc1)c1ccccc(N2C(=O)c3ccccc4cccc(c34)C2=O)c1	O=C(Nc1ccccc1)c1ccccc(N2C(=O)c3ccccc4cccc(c34)C2=O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCNC(=O)N1CCCN(CCCOc2ccccc2Cl)CC1	CCNC(=O)N1CCCN(CCCOc2ccccc2Cl)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
OCcN1CCC(CNc2nc3cc(F)c(F)cc3[nH]2)CC1	OCcN1CCC(CNc2nc3cc(F)c(F)cc3[nH]2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCC(=O)c1c(C(=O)O)n(C)c2ccc(O)cc12	CCCCCCCCCCCC(=O)c1c(C(=O)O)n(C)c2ccc(O)cc12	TRUE	TRUE	FALSE
COc1ccc(C(=S)N(C(=O)c2ccc(F)cc2)C(C)c2cccn2)cc1	COc1ccc(C(=S)N(C(=O)c2ccc(F)cc2)C(C)c2cccn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=NNS(=O)(=O)c1ccc(C)cc1)c1ccccc1O	CC(=NNS(=O)(=O)c1ccc(C)cc1)c1ccccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1NC=Cc2[nH]c3ccc(F)cc3c21	O=c1[nH]ccc2[nH]c3ccc(F)cc3c12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(c1nc2ccccc2s1)N(Cc1ccc(F)cc1)C(=O)CSc1ccccc1	CC(c1nc2ccccc2s1)N(Cc1ccc(F)cc1)C(=O)CSc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
Cc1[nH]c(C(Cc2cn(C)c3ccccc23)NC(=O)c2cc[nH]n2)nc1C1CCNCC1	Cc1[nH]c(C(Cc2cn(C)c3ccccc23)NC(=O)c2cc[nH]n2)nc1C1CCNCC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCN1CCOCC1)Nc1ccc2sc3c(c2c1)CCc1cn[nH]c1-3	O=C(CCN1CCOCC1)Nc1ccc2sc3c(c2c1)CCc1cn[nH]c1-3	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1ccc(C=CC(=O)C=Cc2ccc3c(c2)OCO3)cc1	CN(C)c1ccc(C=CC(=O)C=Cc2ccc3c(c2)OCO3)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(CCCCCCN(C(=O)c1ccc(Nc2nc(-c3ccccc3)nc3ccccc23)cc1)NO	O=C(CCCCCCN(C(=O)c1ccc(Nc2nc(-c3ccccc3)nc3ccccc23)cc1)NO	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1)C(=O)c1c-2c(O)nc2cc([N+](=O)[O-])ccc12	COc1ccc2c(c1)C(=O)c1c-2c(O)nc2cc([N+](=O)[O-])ccc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1cccc(F)c1)N1CCC2(CC1)OC(=O)c1cccc12	O=C1OC2(CCN(C(=O)c3cccc(F)c3)CC2)c2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1N1CCN(C(=O)c2nc3ccccc3n(CC(=O)N(C)Cc3ccc(Cl)cc3)c2=O)CC1	COc1ccccc1N1CCN(C(=O)c2nc3ccccc3n(CC(=O)N(C)Cc3ccc(Cl)cc3)c2=O)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)N1CC2CN(c3cc(OC)cc(NC(C)C)n3)CC(C1)C2	COc1cc(NC(C)C)nc(N2CC3CC(CN(C)C(=O)C3)C2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC1CCN(C(C(=O)N(C)Cc2ccc(F)cc(F)c2)C(O)C2CC(OCc3ccccc3)CN2)C(C)C)S(=O)(=O)c2ccccc21	CCCCC1CCN(C(C(=O)N(C)Cc2ccc(F)cc(F)c2)C(O)C2CC(OCc3ccccc3)CN2)C(C)C)S(=O)(=O)c2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
OCCCCOc1cc(C2CCCN2)c(Cl)cc1Cl	OCCCCOc1cc(C2CCCN2)c(Cl)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(O)c1ccccc1C(CC1CCCCC1)n1ccc(-c2ccc(S(C)(=O)=O)cc2)c(l)c1=O	CC(C)(O)c1ccccc1C(CC1CCCCC1)n1ccc(-c2ccc(S(C)(=O)=O)cc2)c(l)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c(-c2ccc(OCCCCO)cc2)nc2ccc(Cl)cc21	Cn1c(-c2ccc(OCCCCO)cc2)nc2ccc(Cl)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(COC(=O)Cn1cnc2ccccc2c1=O)N1CCN(c2ccccc2)CC1	O=C(Cn1cnc2ccccc2c1=O)OCC(=O)N1CCN(c2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1ccc(C(=O)NC2CCN(CCCOc3ccc4ccc(=O)oc4c3)CC2)cc1	CC(=O)Nc1ccc(C(=O)NC2CCN(CCCOc3ccc4ccc(=O)oc4c3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1ccc(-c2ccccc2)cc1	CC(C)(C)c1ccc(-c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nc(N(C)Cc2ccc(C(F)(F)F)cc2)c2cnn(C)c2n1	CCc1nc(N(C)Cc2ccc(C(F)(F)F)cc2)c2cnn(C)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
[N-]=[N+]=NC1=P(OC2ccccc2)CCCCC1C1CCCCC1	[N-]=[N+]=NC1=[PH](OC2ccccc2)CCCCC1C1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1ncc(NC(=O)c2nc(-c3c(F)ccccc3F)sc2N)c1N1CCC(N)C(F)CC1	Cn1ncc(NC(=O)c2nc(-c3c(F)ccccc3F)sc2N)c1N1CCC(N)C(F)CC1	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1ccc(C(c2ccccc2)N2CCN(CCCCN3C(=O)c4ccccc4C3=O)CC2)cc1	Cc1ccc(C(c2ccccc2)N2CCN(CCCCN3C(=O)c4ccccc4C3=O)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ccc(CON=Cc2c(Cl)sc3c2CCCC3)cc1	N#Cc1ccc(CON=Cc2c(Cl)sc3c2CCCC3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(=O)Nc1nnnn1-c1cc(Cl)c(Cl)cc1Cl	CCC(=O)Nc1nnnn1-c1cc(Cl)c(Cl)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(COc2ccc(OCCCCN3CCOCC3)cc2)cc1	c1ccc(COc2ccc(OCCCCN3CCOCC3)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C1=Cc2cc(O)c(O)c2OC12C(=O)N(Cc1ccc([N+](=O)[O-])cc1)c1ccccc12	O=C(O)C1=Cc2cc(O)c(O)c2OC12C(=O)N(Cc1ccc([N+](=O)[O-])cc1)c1ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCN(C)CCCN1c2ccccc2Sc2ccc(Cl)cc21	CN(C)CCN(C)CCCN1c2ccccc2Sc2ccc(Cl)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C1CC1c1nc2cc(OCc3ccccc(F)c3)ccc2n1Cc1ccc(-c2ccccc2-c2nn[nH]n2)cc1	O=C(O)C1CC1c1nc2cc(OCc3ccccc(F)c3)ccc2n1Cc1ccc(-c2ccccc2-c2nn[nH]n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2nn(-c3ccccc3)cc2CNC(C)C(=O)NCC(F)(F)F)cc1	COc1ccc(-c2nn(-c3ccccc3)cc2CNC(C)C(=O)NCC(F)(F)F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCC2C(Cc3ccccc3)C(=O)OC3OC4(C)CCC1C32O04	CC1CCC2C(Cc3ccccc3)C(=O)OC3OC4(C)CCC1C32O04	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+](([O-])c1cccc(CSc2nnc(Cc3ccc(Br)cc3)o2)c1	O=[N+](([O-])c1cccc(CSc2nnc(Cc3ccc(Br)cc3)o2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2nnc3ccc(SCC(=O)NCc4ccco4)nn23)c1	Cc1ccc(-c2nnc3ccc(SCC(=O)NCc4ccco4)nn23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1CCCC1CNC(=O)c1cc(Br)c(NC(C)=O)cc1OC	CCN1CCCC1CNC(=O)c1cc(Br)c(NC(C)=O)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(N)nc(CCc2ccccc(C(OCc3ccc(Cl)cc3Cl)C(=O)O)c2)c1	Cc1cc(N)nc(CCc2ccccc(C(OCc3ccc(Cl)cc3Cl)C(=O)O)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(c1ccc(OC2ccc(Cl)cc2)cn1)N1CCC2(CCCCC2)OC1=O	CC(c1ccc(OC2ccc(Cl)cc2)cn1)N1CCC2(CCCCC2)OC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(Nc2nccc(-c3ccccc3)n2)c(Cl)cc1-n1cnc(Cl)c1	COc1cc(Nc2nccc(-c3ccccc3)n2)c(Cl)cc1-n1cnc(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCN(C(=O)c1cccc(NC(=O)c2ccccc([N+](=O)[O-])c2)c1	COCCN(C(=O)c1cccc(NC(=O)c2ccccc([N+](=O)[O-])c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(C(=O)OC1CC(C)(O)C23OC(C)C)C(C)C(OC(C)=O)C(OC(=O)c4ccccc4)C12C)C3OC(=O)c1ccccc1	CCCN(C(=O)OC1CC(C)(O)C23OC(C)C)C(C)C(C(OC(C)=O)C(OC(=O)c4ccccc4)C12C)C3OC(=O)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(ON=Cc1ccccc1)c1ccc(CN2CCOCC2)cc1	O=C(ON=Cc1ccccc1)c1ccc(CN2CCOCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(COc1ccc(OCc2ccccc3ccccc23)cc1)N1CCN(S(=O)(=O)c2ccccc2)CC1	O=C(COc1ccc(OCc2ccccc3ccccc23)cc1)N1CCN(S(=O)(=O)c2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)c2c(-c3ccc(C)cc3)[nH]c3c2C(=NC(C)=O)CC(C)(O)C3)cc1	COc1ccc(C(=O)c2c(-c3ccc(C)cc3)[nH]c3c2C(=NC(C)=O)CC(C)(O)C3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2cc(C(=O)N3CC(O)CC3C(O)=NCc3ccccc(F)c3F)[nH]c2c(OC)c1OC	COc1cc2cc(C(=O)N3CC(O)CC3C(O)=NCc3ccccc(F)c3F)[nH]c2c(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
NCCc1ccccc1N(CCCl)CCCl	NCCc1ccccc1N(CCCl)CCCl	TRUE	TRUE	TRUE
CCCc1cccc2c3c([nH]c12)C(CC)(CC(=O)O)OCC3	CCCc1cccc2c3c([nH]c12)C(CC)(CC(=O)O)OCC3	TRUE	TRUE	FALSE
CN1CC=Cc2c[nH]c3ccc(N=c4[nH]nc5cc(F)ccc45)cc23)CC1	CN1CC=Cc2c[nH]c3ccc(N=c4[nH]nc5cc(F)ccc45)cc23)CC1	FALSE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-n2nnnc2SC2Cc3ccccc3O2)cc1C	Cc1ccc(-n2nnnc2SC2Cc3ccccc3O2)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCCCOC1C(O)C(CO)OC(OC(N)=O)C1O	CCCCCCCCCCCCCOC1C(O)C(CO)OC(OC(N)=O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(C(=O)CO(C)=O)c3cccn3C)c[nH]c2c1	COc1ccc2c(C(=O)CO(C)=O)c3cccn3C)c[nH]c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCCCOCCOCCOCCNc1=CC(=O)C(NC(CN)C(=O)O)=CC1=O	CCCCCCCCCCCCCOCCOCCOCCNc1=CC(=O)C(NC(CN)C(=O)O)=CC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1nn(C(=O)c2ccc(OC)cc2)c2ccccc12	CCOC(=O)c1nn(C(=O)c2ccc(OC)cc2)c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C(=Cc2ccc(O)c(Cl)c2)CCCC1=Cc1ccc(O)c(Br)c1	O=C1C(=Cc2ccc(O)c(Cl)c2)CCCC1=Cc1ccc(O)c(Br)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCOC(=O)C1=C(C)NC(=S)NC1c1cn(-c2ccc(Cl)cc2Cl)nc1-c1ccccc1	CCCCOC(=O)C1=C(C)NC(=S)NC1c1cn(-c2ccc(Cl)cc2Cl)nc1-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(OCCN=C(N)N)cc1	COc1ccc(OCCN=C(N)N)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+](([O-])c1cc(CN2CCN(c3ccccc(C(F)(F)F)n3)CC2)c(O)c2ncccc12	O=[N+](([O-])c1cc(CN2CCN(c3ccccc(C(F)(F)F)n3)CC2)c(O)c2ncccc12	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCNC(=O)c1ccccc1NC(=O)c1ccccc1	C=CCNC(=O)c1ccccc1NC(=O)c1ccccc1	TRUE	TRUE	FALSE
O=c1cc(-c2nnn3c2CCC3)[nH]c2c(-c3cc(N4CCCC(C(F)(F)F)CC4)ccn3)cn12	O=c1cc(-c2nnn3c2CCC3)[nH]c2c(-c3cc(N4CCCC(C(F)(F)F)CC4)ccn3)cn12	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccccc(Cc)c1NC(=O)c1cn2cc(C(F)(F)F)c(-c3ccccc3)cc2n1	CCc1ccccc(Cc)c1NC(=O)c1cn2cc(C(F)(F)F)c(-c3ccccc3)cc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(OC(=O)C(C)C)cc(N(CC2CC2)c2ccccc2)c1	Cc1cc(OC(=O)C(C)C)cc(N(CC2CC2)c2ccccc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C=CC(=O)N1c1ccc(CCc2ccccc2)cc1	O=C1C=CC(=O)N1c1ccc(CCc2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C(=CNO(C(=O)C1CC1)c1cc(OC)c(OC)c(OC)c1	CCOC(=O)C(=CNO(C(=O)C1CC1)c1cc(OC)c(OC)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)C1=C(C)N(Cc2ccccc2)C(=O)NC1c1ccc(F)cc1F	CC(=O)C1=C(C)N(Cc2ccccc2)C(=O)NC1c1ccc(F)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC(=O)NCCCc1c[nH]c2ccccc12	CCCC(=O)NCCCc1c[nH]c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
NCCCCN(CCCN)C(=O)CCNC(=O)C(Cc1c[nH]c2ccccc12)NC(=O)CCCN	NCCCCN(CCCN)C(=O)CCNC(=O)C(Cc1c[nH]c2ccccc12)NC(=O)CCCN	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C1=CC2CC3(C=O)C4CCC(C)C4CC(O)C3(CN3CCCC3CO)C2=CC1=O	CC(C)C1=CC2CC3(C=O)C4CCC(C)C4CC(O)C3(CN3CCCC3CO)C2=CC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1oc2c(C)cc(C)cc2c(=O)c1-c1ccccc1	CCOC(=O)c1oc2c(C)cc(C)cc2c(=O)c1-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
ON=C(NCc1ccccc1)c1ccc(OC2ccccc3c2OCCC3)nc1	ON=C(NCc1ccccc1)c1ccc(OC2ccccc3c2OCCC3)nc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCCNc1cc(NCCCN(C)C)c2c3c(nn2CCN(C)C)-c2ccccc2C(=O)c13	CN(C)CCCNc1cc(NCCCN(C)C)c2c3c(nn2CCN(C)C)-c2ccccc2C(=O)c13	TRUE	TRUE	TRUE
COCCCN(C(=O)c1ccccc1NC(=O)c1cccs1	COCCCN(C(=O)c1ccccc1NC(=O)c1cccs1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C(=CNC2ccccc2F)C(=O)N(c2ccccc2)N1c1ccccc1	O=C1C(=CNC2ccccc2F)C(=O)N(c2ccccc2)N1c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)NCCC(=O)NN=Cc2ccc(C(=O)O)c2)c(C)c1	Cc1ccc(S(=O)(=O)NCCC(=O)NN=Cc2ccc(C(=O)O)c2)c(C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)OC(=O)NCCCCCCCC(C)O)c1ccccc1	CC(C)(C)OC(=O)NCCCCCCCC(C)O)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(NC1CN2CCCC1CC2)c1cn(C)nc1-c1ccccc1	CC(NC1CN2CCCC1CC2)c1cn(C)nc1-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
S=C(Nc1ccc(Cl)cc1)NC12CC3CC(C(C)C3)C1)C2	S=C(Nc1ccc(Cl)cc1)NC12CC3CC(C(C)C3)C1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2ncc(F)c(C(O)C3CCC(NCC=CCOc4ccc5cc(C)[nH]c(=O)c5c4)CO3)c2n1	COc1ccc2ncc(F)c(C(O)C3CCC(NCC=CCOc4ccc5cc(C)[nH]c(=O)c5c4)CO3)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=CC2(O)Oc3c(c(=O)oc4cc(O)c(CO)cc34)C2C(OC(=O)c2ccccc2)C1	CC1=CC2(O)Oc3c(c(=O)oc4cc(O)c(CO)cc34)C2C(OC(=O)c2ccccc2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1nn(Cc2cccc(-c3ccccc3C(F)(F)F)c2)c2c1CS(=O)(=O)c1ccccc1-2)N1CCOCC1	O=C(c1nn(Cc2cccc(-c3ccccc3C(F)(F)F)c2)c2c1CS(=O)(=O)c1ccccc1-2)N1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN1c(CCC)nc2c(NC(=N)N)ncnc21	CCCN1c2c(CCC)nc2c(NC(=N)N)ncnc21CCC	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc1-n1c(N)c(Cl(=O)NCc2ccco2)sc1=5	Cc1ccccc1-n1c(N)c(Cl(=O)NCc2ccco2)sc1=5	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(Cl(=O)c2sc(NC(=O)OC3CCOC3)nc2C)cc1	Cc1ccc(Cl(=O)c2sc(NC(=O)OC3CCOC3)nc2C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)C(NC(=O)C(N)C(O)c1ccccc1)C(=O)NC(C(=O)NC(Cc1ccc(O)cc1)C(=O)O)C(C)O	CC(O)C(NC(=O)C(N)C(O)c1ccccc1)C(=O)NC(C(=O)NC(Cc1ccc(O)cc1)C(=O)O)C(C)O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(NC(=O)CC2C(=O)N(C3CCC3)CC2c2ccc(OC(C)C)cc2)cc1	CCOc1ccc(NC(=O)CC2C(=O)N(C3CCC3)CC2c2ccc(OC(C)C)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCOc1cccc2ccn(Cc3cccc(NC(=O)NCCCCCCC(=O)Nc4ccccc4)c3)c12	CCCCOc1cccc2ccn(Cc3cccc(NC(=O)NCCCCCCC(=O)Nc4ccccc4)c3)c12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)N1CCC2(CC1)OCCN2c1ccc(Cl)nc1	CC(C)N1CCC2(CC1)OCCN2c1ccc(Cl)nc1	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)c1ccc(-n2nc(C(N)=O)c3c2-c2cc(NC(=O)c4ccccc4OC(F)(F)F)ccc2CC3)cc1	CS(=O)(=O)c1ccc(-n2nc(C(N)=O)c3c2-c2cc(NC(=O)c4ccccc4OC(F)(F)F)ccc2CC3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NS(=O)(=O)c2ccccc3ccccc23)c(OC)c1	COc1ccc(NS(=O)(=O)c2ccccc3ccccc23)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2ncc(C#N)c(Nc3ccccc(Br)c3)c2cc1OC	COc1cc2ncc(C#N)c(Nc3ccccc(Br)c3)c2cc1OC	TRUE	TRUE	FALSE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>Cc1ccc2cc3cc(C(=O)N4CCC(C(N)C(C)C)CC4)oc3nc2c1</chem>	<chem>Cc1ccc2cc3cc(C(=O)N4CCC(C(N)C(C)C)CC4)oc3nc2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCN(C(=O)CCN(C(=O)N)C12CC3CC(C(C3)C1)C2</chem>	<chem>CCCN(C(=O)CCCN(C(=O)N)C12CC3CC(C(C3)C1)C2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC)C(C(=O)CSc1nncc(-c2ccc(OC)cc2)n1C(C)C</chem>	<chem>CCN(CC)C(C(=O)CSc1nncc(-c2ccc(OC)cc2)n1C(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NC1=NC(c2ccccc2)C(C(=O)OCc2ccccc2)S1)c1cccs1</chem>	<chem>O=C(NC1=NC(c2ccccc2)C(C(=O)OCc2ccccc2)S1)c1cccs1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC)S(=O)(=O)c1ccc(N2CCOCC2)c(NC(=O)COC(=O)c2ccc(O)nc2)c1</chem>	<chem>CCN(CC)S(=O)(=O)c1ccc(N2CCOCC2)c(NC(=O)COC(=O)c2ccc(O)nc2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCN(C(=O)OCC1CC2(O)C3Cc4ccc(O)c5c4C2(CCN3CC2CC2)C(O5)C1=O</chem>	<chem>CCCCCCN(C(=O)OCC1CC2(O)C3Cc4ccc(O)c5c4C2(CCN3CC2CC2)C(O5)C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=C(C)C1(C(F)(F)F)N(C(=S)N(c2ccc(Br)cc2)c2)N1</chem>	<chem>C=C(C)C1(C(F)(F)F)N(C(=S)N(c2ccc(Br)cc2)c2)N1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN1CCN(C(C)=Nc2nc(C)c(-c3ccc(C)cc3)c(O)n2)CC1</chem>	<chem>CCN1CCN(C(C)=Nc2nc(C)c(-c3ccc(C)cc3)c(O)n2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)CNC1nc(-c2ccccc2)nc2ccsc12</chem>	<chem>O=C(O)CNC1nc(-c2ccccc2)nc2ccsc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(CC)N(CC)c1ccc(C=C2Cc3cc(OC)c(O)C)c3C2=O)cc1</chem>	<chem>CC(C)(CC)N(CC)c1ccc(C=C2Cc3cc(OC)c(O)C)c3C2=O)cc1</chem>	FALSE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C(=O)Cc1ccc(Cn2ccnc2)cc1)C(CN1CCC(O)C1)c1ccccc1</chem>	<chem>CN(C(=O)Cc1ccc(Cn2ccnc2)cc1)C(CN1CCC(O)C1)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)CC1csc(NC(=O)c2ccc(S(=O)(=O)C=C3CN4CCC3(C)C4(C)C)c2)n1</chem>	<chem>CCOC(=O)CC1csc(NC(=O)c2ccc(S(=O)(=O)C=C3CN4CCC3(C)C4(C)C)c2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(O)c1noc(-c2c(Cl)cccc2-c2ccc(CN3CCC4(CC3)NC(=O)NC4=O)cc2)n1</chem>	<chem>CC(O)c1noc(-c2c(Cl)cccc2-c2ccc(CN3CCC4(CC3)NC(=O)NC4=O)cc2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc2c(cc1F)c(C#N)c(-c1ccc(S(=O)(=O)NC(C)C(F)(F)F)cn1)n2CC1CC1</chem>	<chem>Cc1cc2c(cc1F)c(C#N)c(-c1ccc(S(=O)(=O)NC(C)C(F)(F)F)cn1)n2CC1CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(CC(=O)O)CC(c2ccc(Cl)c2)C(c2ccc(Cl)cc2)N(C(CS(=O)=O)C2CC2)C2CC2)C1=O</chem>	<chem>CC1(CC(=O)O)CC(c2ccc(Cl)c2)C(c2ccc(Cl)cc2)N(C(CS(=O)=O)C2CC2)C2CC2)C1=O</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CCOC(=O)c1cnc2c(cnn2CC(Cl)c2ccccc2)c1NC1CCC1</chem>	<chem>CCOC(=O)c1cnc2c(cnn2CC(Cl)c2ccccc2)c1NC1CCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1c(=O)c(-c2c(Cl)cccc2Cl)cc2cnc(Nc3ccc4ccccc4c3)nc21</chem>	<chem>Cn1c(=O)c(-c2c(Cl)cccc2Cl)cc2cnc(Nc3ccc4ccccc4c3)nc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>#CCn1c(=O)c2c(nc(C=Cc3cccc(F)C3)n2C)n(C)c1=O</chem>	<chem>#CCn1c(=O)c2c(nc(C=Cc3cccc(F)C3)n2C)n(C)c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(OC2CC(C(=O)N(C)CO)(CO)CO)N(C(=O)C(NC(=O)OC(C)(C)C(C)C)C2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(OC2CC(C(=O)N(C)CO)(CO)CO)N(C(=O)C(NC(=O)OC(C)(C)C(C)C)C2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(N2CCN(C(=O)CSc3nc4ccccc4[nH]3)CC2)c(OC)c1</chem>	<chem>COc1ccc(N2CCN(C(=O)CSc3nc4ccccc4[nH]3)CC2)c(OC)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(COC(=O)c1ccc([N+](=O)[O-])ccc1O)NCC1CCC01</chem>	<chem>O=C(COC(=O)c1ccc([N+](=O)[O-])ccc1O)NCC1CCC01</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(CNC(=O)COC(=O)c2cc(S(=O)(=O)N3CCOCC3)ccc2N2CCOCC2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(CNC(=O)COC(=O)c2cc(S(=O)(=O)N3CCOCC3)ccc2N2CCOCC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C=Cc1ccccc1)OCC(OCc2cocc(CO)cc2=O)C(C)(C)C1(C(=O)O</chem>	<chem>CC(C=Cc1ccccc1)OCC(OCc2cocc(CO)cc2=O)C(C)(C)C1(C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1ccccc1CN2CCN(c3ccccc3-n3cccc3)CC2)c1)c1ccccc(F)c1</chem>	<chem>O=C(Nc1ccccc1CN2CCN(c3ccccc3-n3cccc3)CC2)c1)c1ccccc(F)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=S(=O)(c1ccccc1F)N1CCC2(CCCNC2=O)C1</chem>	<chem>O=C1NCCCC12CCN(S(=O)(=O)c1ccccc1F)C2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCCCCCCCN(C(C)=O)c1ccc([S+](C)[O-])cc1</chem>	<chem>CCCCCCCCCCCCCN(C(C)=O)c1ccc([S+](C)[O-])cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC)S(=O)(=O)c1ccc(NN=C(C)C)c2cn(C)c3ccccc23)c([N+](=O)[O-])c1</chem>	<chem>CCN(CC)S(=O)(=O)c1ccc(NN=C(C)C)c2cn(C)c3ccccc23)c([N+](=O)[O-])c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccccc1N=C(S)NCCNC(=O)c1ccccc1C</chem>	<chem>Cc1ccccc1N=C(S)NCCNC(=O)c1ccccc1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(Nc2nccc(Nc3ccc4cncccc4c3)n2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(Nc2nccc(Nc3ccc4cncccc4c3)n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC(C)NCc1ccc(OC)cc1[N+](=O)[O-]</chem>	<chem>CCC(C)NCc1ccc(OC)cc1[N+](=O)[O-]</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN=C(O)C(N=C(O)c1csc(-c2noc(C)n2)n1)c1nc2ccccc2c(=O)n1-c1ccccc(Br)c1</chem>	<chem>CN=C(O)C(N=C(O)c1csc(-c2noc(C)n2)n1)c1nc2ccccc2c(=O)n1-c1ccccc(Br)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(N2Cc3nc(N)nc(C)c3C2=O)c(OC)cc1Br</chem>	<chem>COc1cc(N2Cc3nc(N)nc(C)c3C2=O)c(OC)cc1Br</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1OC(=CCn2ccnn2)C(=O)c2ccc(O)cc21</chem>	<chem>O=C1OC(=CCn2ccnn2)C(=O)c2ccc(O)cc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C1=C(CCNCCCCCNCCCCNCCCNCC2=CCOc3ccccc32)CCC1</chem>	<chem>C1=C(CCNCCCCCNCCCCNCCCNCC2=CCOc3ccccc32)CCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(c1ccccc1)c1ccc(S(=O)(=O)NC(C)C)cc1</chem>	<chem>CCOC(c1ccccc1)c1ccc(S(=O)(=O)NC(C)C)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(N2CCc3c(-c4cnc(=N)[nH]c4)nc(N4CCOCC4)nc32)CCN(C(=O)OC2CCCC2)CC1</chem>	<chem>CC1(N2CCc3c(-c4cnc(=N)[nH]c4)nc(N4CCOCC4)nc32)CCN(C(=O)OC2CCCC2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)Nc1ccc(C(=O)N)C2(C)OC(n3cnc4c(NC5CCCC5)ncnc43)C2O)cc1</chem>	<chem>CC(=O)Nc1ccc(C(=O)N)C2(C)OC(n3cnc4c(NC5CCCC5)ncnc43)C2O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=S(=O)(c1cccs1)N1c2cc(Br)ccc2-c2[nH]ncc2C1C1CC1</chem>	<chem>O=S(=O)(c1cccs1)N1c2cc(Br)ccc2-c2[nH]ncc2C1C1CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=[N+](([O-])c1ccccc1(S(=O)(=O)N(Cc2ccccc2)c2ccccc2n)c1</chem>	<chem>O=[N+](([O-])c1ccccc1(S(=O)(=O)N(Cc2ccccc2)c2ccccc2n)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=c1[nH]c2cc(-c3ccoc3)ccc2c2nc(-c3ccccc3)nn12</chem>	<chem>O=c1[nH]c2cc(-c3ccoc3)ccc2c2nc(-c3ccccc3)nn12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)C(OC)C1(C)CC(=Cc2ccc(Cl)cc2)C(=O)O1(C)C(C)C(=O)O</chem>	<chem>CC(C)C(OC)C1(C)CC(=Cc2ccc(Cl)cc2)C(=O)O1(C)C(C)C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>OC(=Cc1ccccc1F)c1ccnc2ccccc12</chem>	<chem>OC(=Cc1ccccc1F)c1ccnc2ccccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C=C(C(=O)c2sc(S)N(-c3ccccc3)c2N)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(C=C(C(=O)c2sc(S)N(-c3ccccc3)c2N)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(C)C1CC=CCCC(N(Cc2cncn2Cc2ccc(C#Cc3ccc(F)cc3)cc2)C(=O)c2ccccc2)C(=O)NS(=O)(=O)C1c1ccccc1NO</chem>	<chem>O=C(C)C1CC=CCCC(N(Cc2cncn2Cc2ccc(C#Cc3ccc(F)cc3)cc2)C(=O)c2ccccc2)C(=O)NS(=O)(=O)C1c1ccccc1NO</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)OC1(C)OC(C(=O)C)C(OC(C)=O)C2(C)C3=C(C)C(=O)C4(O)C5(C)OC(=O)C5(O)C(OC(C)=O)C4(C)C3(O)CC2(O)C1OC(C=O)CCCc1ccccc1</chem>	<chem>CC(=O)OC1(C)OC(C(=O)C)C(OC(C)=O)CCCc2ccccc2)C2(O)CCC3(O)C(=C(C)C(=O)C4(O)C5(C)OC(=O)C5(O)C(OC(C)=O)C34C)C12C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN1c2ccccc2c2cc(NC(=O)CN3CCN(CC(=O)O)CC3)ccc21</chem>	<chem>CN1c2ccccc2c2cc(NC(=O)CN3CCN(CC(=O)O)CC3)ccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)NC(CS)C(=O)NC(Cc1ccc(O)cc1)C(=O)NC(C)P(=O)(O)O</chem>	<chem>CC(=O)NC(CS)C(=O)NC(Cc1ccc(O)cc1)C(=O)NC(C)P(=O)(O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC)S(=O)(=O)n1ccc2c(=O)n(C(C(=O)c3ccc(OC)c(OC)c3)c(SCC(=O)Nc3ccccc(F)c3)nc21</chem>	<chem>CCN(CC)S(=O)(=O)n1ccc2c(=O)n(C(C(=O)c3ccc(OC)c(OC)c3)c(SCC(=O)Nc3ccccc(F)c3)nc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)NCC1OC(=O)N2c3ccc(C(=O)N)C4CC4)cc3CC12</chem>	<chem>CC(=O)NCC1OC(=O)N2c3ccc(C(=O)N)C4CC4)cc3CC12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(Cc1cccs1)CC(O)Cn1c(=O)c2ccccc2n(C)c1=O</chem>	<chem>CN(Cc1cccs1)CC(O)Cn1c(=O)c2ccccc2n(C)c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)c1ccc(CNC(=O)C2CCN(c3ncnc4c3nc3n4CCCC3)CC2)cc1</chem>	<chem>CC(C)(C)c1ccc(CNC(=O)C2CCN(c3ncnc4c3nc3n4CCCC3)CC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)NCC1CN(c2ccc(OCc3ccccc3)c(F)c2)C(=O)O1</chem>	<chem>CC(=O)NCC1CN(c2ccc(OCc3ccccc3)c(F)c2)C(=O)O1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>ClP1(Cl)=NP2(c3ccco3)=NP(Cl)(Cl)=NP(Cl)(Cl)=NP(Cl)(Cl)=NP(n3cnc3O)(Cl)=NP1](Cl)O</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc2c(c1)C(=NN=C1C(=O)N(CN)c3ccc([N+](=O)[O-])cc31)C(=O)N2</chem>	<chem>Cc1ccc2c(c1)C(=NN=C1C(=O)N(CN)c3ccc([N+](=O)[O-])cc31)C(=O)N2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1csc2nc(O)c(O)nc12</chem>	<chem>CCc1csc2nc(O)c(O)nc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)CN1CCN(c2ccccc2NC(=O)C(C)NC=C2C(=O)CC(C)(C)CC2=O)CC1</chem>	<chem>CC(C)CN1CCN(c2ccccc2NC(=O)C(C)NC=C2C(=O)CC(C)(C)CC2=O)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCn1c2ccccc2c2cc(S(=O)(=O)NC3=NCCCC3)ccc21</chem>	<chem>CCn1c2ccccc2c2cc(S(=O)(=O)NC3=NCCCC3)ccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(CSc1nncc(-c2ccncc2)n1Cc1ccccc1)NC(=O)Nc1ccccc1</chem>	<chem>O=C(CSc1nncc(-c2ccncc2)n1Cc1ccccc1)NC(=O)Nc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOCCCNc1cc(NCc2ccnc2)c2ncc(N(C)CO)CO)c2n1</chem>	<chem>CCOCCCNc1cc(NCc2ccnc2)c2ncc(N(C)CO)CO)c2n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C(=c1cn(Cc2cn(-c3ccccc4ccccc34)nn2)c2ccccc12)c1ccccc2ccccc12</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)c1ccc(N2CCN(C(=O)c3ccccc1(S(=O)(=O)N4CCOCC4)c3)CC2)cc1</chem>	<chem>CC(=O)c1ccc(N2CCN(C(=O)c3ccccc1(S(=O)(=O)N4CCOCC4)c3)CC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NS(=O)(=O)c1ccc(NC(=S)NC(=O)c2ccc(-c3ccccc1(C=O)O)c3)cc2)cc1</chem>	<chem>NS(=O)(=O)c1ccc(NC(=S)NC(=O)c2ccc(-c3ccccc1(C=O)O)c3)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC)C(=O)NC(Cc1c[nH]cn1)C(=O)NC(C=CC(=O)NC(C1CCCCC1)C(=O)NC(C(C(=O)O)Cc1ccccc1)CCc1ccccc1</chem>	<chem>CCN(CC)C(=O)NC(Cc1c[nH]cn1)C(=O)NC(C=CC(=O)NC(C1CCCCC1)C(=O)NC(C(C(=O)O)Cc1ccccc1)CCc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NS(=O)(=O)c1ccc(C(=O)Nc2c3c(nc4ccccc24)CCCCC3)cc1</chem>	<chem>NS(=O)(=O)c1ccc(C(=O)Nc2c3c(nc4ccccc24)CCCCC3)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)c1ccccc1NC(=O)c2ccc(NC(=N)N)cc2)c1</chem>	<chem>CC(=O)c1ccccc1NC(=O)c2ccc(NC(=N)N)cc2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=C(C(=O)OC)C(O)c1cc(=O)n(-c2ccccc2)[nH]1</chem>	<chem>C=C(C(=O)OC)C(O)c1cc(=O)n(-c2ccccc2)[nH]1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(C1CCCN1C(=O)Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1)N1CCN(Cc2ccc3c(c2)OCCO3)CC1</chem>	<chem>O=C(C1CCCN1C(=O)Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1)N1CCN(Cc2ccc3c(c2)OCCO3)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(OC2CCN2)ncc1C=Cc1cnsc1</chem>	<chem>Cc1cc(OC2CCN2)ncc1C=Cc1cnsc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOc1cc(S(=O)(=O)NC2CCCO2)ccc1F</chem>	<chem>CCOc1cc(S(=O)(=O)NC2CCCO2)ccc1F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc(OCc2cccc(NCc3nnc4n3CCNCC4)c2)cc1</chem>	<chem>c1ccc(OCc2cccc(NCc3nnc4n3CCNCC4)c2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCCOCOc1cc2oc(-c3ccccc(C(C(=O)O)c3)cc(=O)c2cc1Cl</chem>	<chem>COCCOCOc1cc2oc(-c3ccccc(C(C(=O)O)c3)cc(=O)c2cc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(C)c(N2CCN(C(=O)CN(c3ccccc3)S(O)(=O)CC2)c1</chem>	<chem>Cc1ccc(C)c(N2CCN(C(=O)CN(c3ccccc3)S(O)(=O)CC2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)c1ccc2c(c1)nc(Nc1cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c1)c1cnccc12</chem>	<chem>O=C(O)c1ccc2c(c1)nc(Nc1cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c1)c1cnccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC1COC2(CC[N+](C)(C)CC2)CC1(O)C1CCCCC1</chem>	<chem>CCC1COC2(CC[N+](C)(C)CC2)CC1(O)C1CCCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Fc1cncc(Nc2ncc3ccn(-c4ccccc4)c3n2)c1</chem>	<chem>Fc1cncc(Nc2ncc3ccn(-c4ccccc4)c3n2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)OC(=O)N1C5CC1C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)O</chem>	<chem>CC(C)(C)OC(=O)N1C5CC1C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc([N+](=O)[O-])ccc1NC(=O)OCc1ccc([N+](=O)[O-])cc1</chem>	<chem>COc1ccc([N+](=O)[O-])ccc1NC(=O)OCc1ccc([N+](=O)[O-])cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C=CC(=O)c2cc(Cl)ccc2O)cc1[N+](=O)[O-]</chem>	<chem>COc1ccc(C=CC(=O)c2cc(Cl)ccc2O)cc1[N+](=O)[O-]</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(O)cc2c1C(=O)Oc1c(O)ccc(C)c1OCC(Cc1ccccc1)O2</chem>	<chem>COc1cc(O)cc2c1C(=O)Oc1c(O)ccc(C)c1OCC(Cc1ccccc1)O2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)CC1c2ccccc2CCN1S(=O)(=O)c1ccccc(F)c1</chem>	<chem>O=C(O)CC1c2ccccc2CCN1S(=O)(=O)c1ccccc(F)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC1OC(CO)C(O)C(O)C1Nc1CCCC1</chem>	<chem>CCOC1OC(CO)C(O)C(O)C1Nc1CCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)OC(=O)CP(=O)(O)C(F)(F)C(=O)O</chem>	<chem>CC(C)OC(=O)CP(=O)(O)C(F)(F)C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#Cc1ccc(Nc2nc(N)c(C(=O)Nc3ccccc3)s2)cc1</chem>	<chem>N#Cc1ccc(Nc2nc(N)c(C(=O)Nc3ccccc3)s2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
Cc1c(-c2ccc(-c3cccc(Cl)c3)cc2)nc2ccc(F)cc2c1C(=O)O	Cc1c(-c2ccc(-c3cccc(Cl)c3)cc2)nc2ccc(F)cc2c1C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2ccc(O)cc2)c(OC)c1O	COc1ccc(-c2ccc(O)cc2)c(OC)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)C(=O)C(Cc1cccc1)NC(=O)N1CCCCC1	CN(C)C(=O)C(Cc1cccc1)NC(=O)N1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
NCCNCCN	NCCNCCN	TRUE	TRUE	FALSE
C=CCOc1cccc2cc(C(C)N(O)C(C)=O)ccc12	C=CCOc1cccc2cc(C(C)N(O)C(C)=O)ccc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc1NC(=O)CSc1nc2ccc(-c3ccco3)nc2[nH]1	Cc1cccc1NC(=O)CSc1nc2ccc(-c3ccco3)nc2[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1c2cccc2Nc2ccc(NC(=S)Nc3cccc3)cc21	O=C1c2cccc2[nH]c2ccc(NC(=S)Nc3cccc3)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCc1c(C)c2ccc(O)c(CC=C)c2oc1=O	C=CCc1c(C)c2ccc(O)c(CC=C)c2oc1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1c2c(=N)c(C3OCCO3)c[nH]c2c(C)c2c1[nH]c1cccc12	COc1c2[nH]c3cccc3c2c(C)c2[nH]cc(C3OCCO3)c(=N)c12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C(=O)Nc1nccs1)C(c1cccc1)N1Cc2cccc2C1=O	CC(C)(C(=O)Nc1nccs1)C(c1cccc1)N1Cc2cccc2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C)c(N2CCN(C(c3cccc3)c3nc(N)n([N+](=O)[O-])n3)CC2)c1	Cc1ccc(C)c(N2CCN(C(c3cccc3)c3nc(N)n([N+](=O)[O-])n3)CC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)C1CCC2C3CCc4cc(O)c(O)cc4C3C(O)CC12C	CC(=O)C1CCC2C3CCc4cc(O)c(O)cc4C3C(O)CC12C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc1N1CCCN(CCCCN(C(=O)c2ccc(C#N)c3cccc23)CC1	COc1cccc1N1CCCN(CCCCN(C(=O)c2ccc(C#N)c3cccc23)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CN=C(O)C1CCN(Cc2cccc(Oc3enc4cccc4c3)c2)CC1	O=C(O)CN=C(O)C1CCN(Cc2cccc(Oc3enc4cccc4c3)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCN1CCN(C2C3CC4CC(C3)CC2C4)CC1	CCCCCN1CCN(C2C3CC4CC(C3)CC2C4)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C(Cl)=C(NCCN2ccnc2)C(=O)c2cccc21	O=C1C(Cl)=C(NCCN2ccnc2)C(=O)c2cccc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1cccc1)c1cn2c3c(ccc13)nc1cccc12		FALSE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCCC(C(=O)OC(COP(=O)(COCCNC(=O)OCc1cccc1)OC1COc2nc([N+](=O)[O-])cn2C1)OC(=O)CCCCCCCCCCCCC	CCCCCCCCCCCCC(C(=O)OC(COC(=O)CCCCCCCCCCCCC)COP(=O)(COCCNC(=O)OCc1cccc1)OC1COc2nc([N+](=O)[O-])cn2C1	TRUE	TRUE	TRUE
CSc1sc(C(=N)N)cc1S(=O)(=O)c1c(F)cccc1[N+](=O)[O-]	CSc1sc(C(=N)N)cc1S(=O)(=O)c1c(F)cccc1[N+](=O)[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCn1c(SCS(=O))(=O)c2ccc(Cl)cc2)nc2ccsc2c1=O	C=CCn1c(SCS(=O))(=O)c2ccc(Cl)cc2)nc2ccsc2c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCCN1CCc1cc2cc(-c3ccc(Cl)=O)N4CCN(c5cccc5)CC4)cc3)ccc2o1	CC1CCCN1CCc1cc2cc(-c3ccc(Cl)=O)N4CCN(c5cccc5)CC4)cc3)ccc2o1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(N)C(=O)NC(C)C(=O)NC(C)C(=O)NCC(=O)NC(C)C(=O)NC(C)C(N)=O	CC(N)C(=O)NC(C)C(=O)NC(C)C(=O)NCC(=O)NC(C)C(=O)NC(C)C(N)=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)CCCC(C)(C2CCC3(C)C2C(O)CC2C4(C)CC(C)OCC(=O)O)CCO(C(=O)O)C(C)(C)C4C(OC(=O)CC(=O)O)CCC23C)O1	CC1(C)CCCC(C)(C2CCC3(C)C2C(O)CC2C4(C)CC(C)OCC(=O)O)CCO(C(=O)O)C(C)(C)C4C(OC(=O)CC(=O)O)CCC23C)O1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1ccc(-c2noc(CCC(=O)N3CCCN(c4ccc(F)cc4)CC3)n2)cc1	CC(C)(C)c1ccc(-c2noc(CCC(=O)N3CCCN(c4ccc(F)cc4)CC3)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(Cl=O)Nc2ccc(-c3csc(N(C)C)n3)cc2)c1-c1ccc2[nH]nc(-c3enn(C)c3)c2c1	Cc1ccc(Cl=O)Nc2ccc(-c3csc(N(C)C)n3)cc2)c1-c1ccc2[nH]nc(-c3enn(C)c3)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(=O)CSc2nnc(CC(C)c3cccn3)o2)c1	Cc1ccc(NC(=O)CSc2nnc(CC(C)c3cccn3)o2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1CCCC1CNC(=O)c1cc2cc(Br)ccc2oc1=O	CCN1CCCC1CNC(=O)c1cc2cc(Br)ccc2oc1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc1C(=O)NN=Cc1cc([N+](=O)[O-])ccc1O	COc1cccc1C(=O)NN=Cc1cc([N+](=O)[O-])ccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC1CO(C(=O)O)CCCCCN(C(=N)N)C1	CCCCC1CO(C(=O)O)CCCCCN(C(=N)N)C1	TRUE	TRUE	TRUE
C(=Nc1cccc1)Nc1ccc(N=Nc2cccc(C=NN=Cc3cccc3)c2)cc1		FALSE	TRUE	TRUE
O=[N+][([O-])c1ccc(-c2nnc(N3CCCC3)s2)o1	O=[N+][([O-])c1ccc(-c2nnc(N3CCCC3)s2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C(=O)N2CCC3CN(C(=O)C4CC4)CC3C2)CCCN1C(=O)C1(c2cc(Cl)ccc2Cl)CC1	CC1(C(=O)N2CCC3CN(C(=O)C4CC4)CC3C2)CCCN1C(=O)C1(c2cc(Cl)ccc2Cl)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc2nc(C(F)(F)F)nc(Nc3ccc(OCc4cccc4)cc3)c2c1	CCOc1ccc2nc(C(F)(F)F)nc(Nc3ccc(OCc4cccc4)cc3)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1c2cccc2N(Cc2cccc2)S(=O)(=O)N1c1ccc(Cl)cc1	O=C1c2cccc2N(Cc2cccc2)S(=O)(=O)N1c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(OC3cccc3N1C(C)=O)CCC(c1cc(C3CC3)n[nH]1)C2		FALSE	TRUE	TRUE
CNc1cc(C)cnc2c1N=C(c1cccc1OC)CN2Cc1cccc1	CNc1cc(C)cnc2c1N=C(c1cccc1OC)CN2Cc1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(C)Cn1c(SCc2cccc(OC)c2)nc2c(oc3cccc32)c1=O	C=C(C)Cn1c(SCc2cccc(OC)c2)nc2c(oc3cccc32)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
NC1CC(OCc2cc(Br)c(OCc3cccc3)c(Br)c2)CC1CNC(=O)c1cc(F)c(F)cc1F	NC1CC(OCc2cc(Br)c(OCc3cccc3)c(Br)c2)CC1CNC(=O)c1cc(F)c(F)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C(=O)Nc2cc(Cl)ccc2Cl)CCN1Cc1nc(-c2ccc(Cl)cc2)oc1Cl	CC1(C(=O)Nc2cc(Cl)ccc2Cl)CCN1Cc1nc(-c2ccc(Cl)cc2)oc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCOc1ccc(-c2cc(OCN3CCCC3)c3cccc3n2)cn1	C=CCOc1ccc(-c2cc(OCN3CCCC3)c3cccc3n2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC1CNCC1OC(=O)c1cccc(O)c1O)c1cccc(O)c1	O=C(NC1CNCC1OC(=O)c1cccc(O)c1O)c1cccc(O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1C(O)C(O)C(OCc2cccc(-c3cccc(NC(C)=O)c3)c2)OC1(C)C	COc1C(O)C(O)C(OCc2cccc(-c3cccc(NC(C)=O)c3)c2)OC1(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)N1CCN(C(=O)CC2CC3(C(=O)OC)CCCC=C4CCCCC4(CC)C2C1C(O)C3#CCCCC(=O)O		FALSE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ncnc2[nH]c(-c3cccc3)nc12)c1ccco1	O=C(Nc1ncnc2[nH]c(-c3cccc3)nc12)c1ccco1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1c(CCCN2CCc3c(nc(C)C)(C)C)n3C)C2)n(C)c(=O)c2cccc12	CCOC(=O)c1c(CCCN2CCc3c(nc(C)C)(C)C)n3C)C2)n(C)c(=O)c2cccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CN(Cc2cccc(Br)c2)C2CC(NC(=O)CCN3CCCC3)CC1(C(N)=O)C2	CC1CN(Cc2cccc(Br)c2)C2CC(NC(=O)CCN3CCCC3)CC1(C(N)=O)C2	TRUE	TRUE	TRUE
N#CCC(=O)NN=Cc1cn(Cc2cc(Cl)ccc2Cl)c2cccc12	N#CCC(=O)NN=Cc1cn(Cc2cc(Cl)ccc2Cl)c2cccc12	TRUE	TRUE	TRUE
COCc1cc(C)nc2sc(C)c(C(=O)OC3CC3(C)C)c12	COCc1cc(C)nc2sc(C)c(C(=O)OC3CC3(C)C)c12	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ccc2[nH]c4ccc(O)cc4c2c1	N#Cc1ccc2[nH]c3ccc(O)cc3c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc2c3c(c(C(=O)Nc4ccc(C(=O)N5CCCC(C#N)CC5)cc4)cn2c1C)CCC(C(C)C)C3	Cc1nc2c3c(c(C(=O)Nc4ccc(C(=O)N5CCCC(C#N)CC5)cc4)cn2c1C)CCC(C(C)C)C3	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NO)C1(NS(=O))(=O)c2ccc(Cl)cc2)CCCC1	O=C(NO)C1(NS(=O))(=O)c2ccc(Cl)cc2)CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cccc2c1[nH]c1cccc12)c1cccc1	O=C(Nc1cccc2c1[nH]c1cccc12)c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(Cl)cccc1NC(=O)Cc1c(C)nn(CC(=O)N)C(C)c2ccccc2)c1C	Cc1nn(CC(=O)N)C(C)c2ccccc2)c(C)c1CC(=O)Nc1cccc(Cl)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nn(C)c(OCc2ccc(Cl)c2)c1C(=O)N1CCN(Cc2cccn2)CC1	Cc1nn(C)c(OCc2ccc(Cl)c2)c1C(=O)N1CCN(Cc2cccn2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
NC1(c2ccccc2)C(=O)N(CCC2=CCCCC2)c2cccc21	NC1(c2ccccc2)C(=O)N(CCC2=CCCCC2)c2cccc21	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1ccc(-c2nc(-c3cccc3)cc3c2[nH]c2cccc23)cc1	Clc1ccc(-c2nc(-c3cccc3)cc3c2[nH]c2cccc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CNc1cccc(N(CCl)CCl)c1	CNc1cccc(N(CCl)CCl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nc(-c2[nH]nc3c2NC(C)=C(C(=O)Nc2cccc(C)c2C)C3c2ccc(SC)cc2)no1	CCc1nc(-c2[nH]nc3c2NC(C)=C(C(=O)Nc2cccc(C)c2C)C3c2ccc(SC)cc2)no1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCN1cc(CCl)COC(=O)c2ccc(OC)cc2)COC(C)=O)nn1	CCCCCCCN1cc(CCl)COC(C)=O)COC(=O)c2ccc(OC)cc2)nn1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(-c2ccc(C(CC(=O)NO)S3(=O)=NCN(Cc4ncccc4C)C3)cc2F)c1	Cc1cccc(-c2ccc(C(CC(=O)NO)S3(=O)=NCN(Cc4ncccc4C)C3)cc2F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(OC)c1C(=O)NN=Cc1cn(Cc2cccc(OC)c2F)c2cccc12	COc1cccc(Cn2cc(C(=N)N)C(=O)c3c(OC)cccc3OC)c3cccc32)c1F	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(C)CCOc1ccc2cc(-c3cccc(C(C)C)c3)oc(=O)c2c1	C=C(C)CCOc1ccc2cc(-c3cccc(C(C)C)c3)oc(=O)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CSCCC(NC(=O)c1ccc(Cl)cc1)C(=O)OCc1nnc(-c2cccc2)o1	CSCCC(NC(=O)c1ccc(Cl)cc1)C(=O)OCc1nnc(-c2cccc2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1cccc(Nc2nc(-c3cccc3)nc3ccc([N+](=O)[O-])cc23)c1	Nc1cccc(Nc2nc(-c3cccc3)nc3ccc([N+](=O)[O-])cc23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(-c2nnc(Nc3nc(Nc4cccc4F)nc(Nc4cccc4)n3)o2)cc(OC)c1OC	COc1cc(-c2nnc(Nc3nc(Nc4cccc4F)nc(Nc4cccc4F)n3)o2)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
COCCn1c(=O)c(-c2cccc(C)c2)nc2enc(N3CCOCC3)nc21	COCCn1c(=O)c(-c2cccc(C)c2)nc2enc(N3CCOCC3)nc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1ccc(-c2ccccc2)cc1)N(c1cccn1)C1C=CS(=O)(=O)C1	O=C(c1ccc(-c2ccccc2)cc1)N(c1cccn1)C1C=CS(=O)(=O)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCCN(C=O)Nc1ccc(-c2nc(C2(c3ccc4c(cnn4C)c3)N=N=C(O)N(c3ccc(F)c(Cl)c3)C2)cc1		FALSE	TRUE	TRUE
NC(CCC(=O)NC1CCCN(C)P(=O)(O)O	NC(CCC(=O)NC1CCCN(C)P(=O)(O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCc1nn(Cc2ccc(NC(=O)c3ccc(C#N)cc3)cc2)c(NC(=O)c2ccncc2)c1CC(=O)O	CCCc1nn(Cc2ccc(NC(=O)c3ccc(C#N)cc3)cc2)c(NC(=O)c2ccncc2)c1CC(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CCc1ccn2c1nc(C(F)(F)F)c1cccc12	O=C(O)CCc1ccn2c1nc(C(F)(F)F)c1cccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CN(CCc1ccc(F)cc1)CCC(O)(P(=O)(O)O)P(=O)(O)O	CN(CCc1ccc(F)cc1)CCC(O)(P(=O)(O)O)P(=O)(O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)COc1cc(-c2nc(CNC(C)=O)co2)cc([N+](=O)[O-])c1	CCOC(=O)COc1cc(-c2nc(CNC(C)=O)co2)cc([N+](=O)[O-])c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CN1CC(CCl)c2ccc([N+](=O)[O-])cc21)Nc1ccc2c(cnn2CCc2ccccc2)c1	O=C(CN1CC(CCl)c2ccc([N+](=O)[O-])cc21)Nc1ccc2c(cnn2CCc2ccccc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc1CCNc1nn2c(=O)c3ccc(C(=O)NCCc4ccco4)cc3nc2s1	COc1cccc1CCNc1nn2c(=O)c3ccc(C(=O)NCCc4ccco4)cc3nc2s1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=S)N1CC2CC(C(=O)NCC(N)=O)C(C1)O2	CNC(=S)N1CC2CC(C(=O)NCC(N)=O)C(C1)O2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)=CCCC(C)=CC=CCC1(C)OCC(C(C)(O)C(C)C)CO1	CC(C)=CCCC(C)=CC=CCC1(C)OCC(C(C)(O)C(C)C)CO1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(CN2CCC(C(=O)Nc3cnn(CCO)c3)(C(C)C)C2)ccc1OCc1cccc(F)c1	COc1cc(CN2CCC(C(=O)Nc3cnn(CCO)c3)(C(C)C)C2)ccc1OCc1cccc(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(S(=O))(=O)NC(=O)c2ccc(C)c(N3C(=O)C4=C(CCC4)C3=O)c2)c2ccccc12	COc1ccc(S(=O))(=O)NC(=O)c2ccc(C)c(N3C(=O)C4=C(CCC4)C3=O)c2)c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C1=Cc2ccc(OC)cc2OC)CC2CCC1N2C(=O)NCCOc1ccc(F)cc1	COC(=O)C1=Cc2ccc(OC)cc2OC)CC2CCC1N2C(=O)NCCOc1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(OC(C=O)NCCN2CCOCC2)c(C)c(C)c1	Cc1cc(C)c(C)c(OC(C=O)NCCCN2CCOCC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)N1CCC(COC(=O)Nc2cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c2)(n2cc(Cl)cn2)CC1	CC(=O)N1CCC(COC(=O)Nc2cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c2)(n2cc(Cl)cn2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)=CC1CC(O)c2c(n(C)c3nc(O)c(C#N)c(N)c23)C1	CC(C)=CC1Cc2c(c3c(N)c(C#N)c(O)nc3n2C)C(O)C1	TRUE	TRUE	TRUE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>C=C1CC23CCC4C(C)(C(=O)O)CCCC4(C)C2CC(O)C1C3</chem>	<chem>C=C1CC23CCC4C(C)(C(=O)O)CCCC4(C)C2CC(O)C1C3</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(CCCOc2c(C)c(-c3noc(C4CC4)n3)c(Cl)cc2Cl)on1</chem>	<chem>Cc1cc(CCCOc2c(Cl)cc(Cl)c(-c3noc(C4CC4)n3)c2C)on1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(-c2ccc3c(c2)SC(C)C2CN(C)CC32)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(-c2ccc3c(c2)SC(C)C2CN(C)CC32)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N=C(N)c1ccc(CN(C)=O)N2CCC3CN(C(=O)N)N4CCN(C(=O)Cc5ccc(C(=N)N)cc5)CC4)CC32)cc1</chem>	<chem>N=C(N)c1ccc(CN(C)=O)N2CCC3CN(C(=O)N)N4CCN(C(=O)Cc5ccc(C(=N)N)cc5)CC4)CC32)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Cc1cccs1)NCC=CCc1cc(Cl)c(O)c(Cl)c1</chem>	<chem>O=C(Cc1cccs1)NCC=CCc1cc(Cl)c(O)c(Cl)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NCCOc1ccc2c(c1)C(c1c[nH]c3ccccc13)CC(=O)N2</chem>	<chem>NCCOc1ccc2c(c1)C(c1c[nH]c3ccccc13)CC(=O)N2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNc1nn2c(C)cc(C(F)(F)F)nc2c1S(=O)=(=O)c1ccccc1</chem>	<chem>CNc1nn2c(C)cc(C(F)(F)F)nc2c1S(=O)=(=O)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC(=NO)c1cccc(-c2ccc(CCNc3ccc(l)cc3)s2)c1</chem>	<chem>NC(=NO)c1cccc(-c2ccc(CCNc3ccc(l)cc3)s2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=CC(=O)Nc1cc2c(Nc3ccc(Br)cc3F)ncnc2nc1COC</chem>	<chem>C=CC(=O)Nc1cc2c(Nc3ccc(Br)cc3F)ncnc2nc1COC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccccc1C(CC(=O)O)NC(=O)c1cccc(Cn2cc(C)ccc2=O)n1</chem>	<chem>Cc1ccc(=O)n(Cc2cccc(C(=O)N)(CC(=O)O)c3ccccc3C)n2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(C)c(NC(=O)Cn2c(=O)oc3cc(S(=O)=(=O)N)N4CCc5ccccc5C4)ccc32)c1</chem>	<chem>Cc1ccc(C)c(NC(=O)Cn2c(=O)oc3cc(S(=O)=(=O)N)N4CCc5ccccc5C4)ccc32)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)c1cccc(N2C(=O)c3[nH]nc(-c4cccc(Cl)c4O)c3C2c2ccc(F)cc2)c1</chem>	<chem>COC(=O)c1cccc(N2C(=O)c3[nH]nc(-c4cccc(Cl)c4O)c3C2c2ccc(F)cc2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=S(=O)(CCc1ccccc1)c1ccc(-c2ccc(F)cc2)cc1</chem>	<chem>O=S(=O)(CCc1ccccc1)c1ccc(-c2ccc(F)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(C2CC(c3ccc(NS(C)(=O)=O)cc3)=NN2C(=O)Cc2ccccc2N)ccc1OC1CCCC1</chem>	<chem>COc1cc(C2CC(c3ccc(NS(C)(=O)=O)cc3)=NN2C(=O)Cc2ccccc2N)ccc1OC1CCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1C(=Cc2ccc(-c3ccccc3)cc2)CN(C(=O)N)Cc2ccccc2)CC1=Cc1ccc(-c2ccccc2)cc1</chem>	<chem>O=C1C(=Cc2ccc(-c3ccccc3)cc2)CN(C(=O)N)Cc2ccccc2)CC1=Cc1ccc(-c2ccccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCC(C)(C)(C)(O)c1ccc(N2CCN(S(=O)=(=O)c3ccc(F)cc3)CC2)cc1</chem>	<chem>CCCC(C)(C)(C)(O)c1ccc(N2CCN(S(=O)=(=O)c3ccc(F)cc3)CC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC(NC(=O)C1CC(S(=O)=(=O)c2ccccc2)CN1C(=O)C1(c2ccc(Cl)cc2)CC1)(C(=O)C(=O)NC1CC1</chem>	<chem>CCC(NC(=O)C1CC(S(=O)=(=O)c2ccccc2)CN1C(=O)C1(c2ccc(Cl)cc2)CC1)(C(=O)C(=O)NC1CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c(Sc2ccccc2C2=C(O)C(O)=CC(C)(C)C2)c2ccccc2n1C</chem>	<chem>Cc1c(Sc2ccccc2C2=C(O)C(O)=CC(C)(C)C2)c2ccccc2n1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)c1cccc(CN2C(C(=O)Nc3cc(C(=O)O)ccc3C)Cs4ncccc32)c1</chem>	<chem>COC(=O)c1cccc(CN2c3ccccc3CC2C(=O)Nc2cc(C(=O)O)ccc2C)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)CC1(O)C(O)CC(O)C(=O)N1CCCCO</chem>	<chem>COC(=O)CC1(O)C(O)CC(O)C(=O)N1CCCCO</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=c1cc(N2CCCC2)c2ccc(OCc3cccc(-c4ccccc4)c3)cc2o1</chem>	<chem>O=c1cc(N2CCCC2)c2ccc(OCc3cccc(-c4ccccc4)c3)cc2o1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nn1cnnc1)c1ccc(-c2ccccc2)s1</chem>	<chem>O=C(Nn1cnnc1)c1ccc(-c2ccccc2)s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)c1secc1S(=O)=(=O)N1CCCC(C(=O)Nc2ccc(C)c(Cl)c2)C1</chem>	<chem>COC(=O)c1secc1S(=O)=(=O)N1CCCC(C(=O)Nc2ccc(C)c(Cl)c2)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCNc1cc(C(F)(F)F)ccc1S(=O)=(=O)c1ccc(C)cc1</chem>	<chem>CCNc1cc(C(F)(F)F)ccc1S(=O)=(=O)c1ccc(C)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc(Oc2cnc(NCCCc3ccc(OC1CCN4COC1C4)cc3)nc2)cc1</chem>	<chem>c1ccc(Oc2cnc(NCCCc3ccc(OC1CCN4COC1C4)cc3)nc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>S=C(NCCCC1CCC(c2c[nH]cn2)CC1)NCCC1c[nH]cn1</chem>	<chem>S=C(NCCc1c[nH]cn1)NCCCC1CCC(c2c[nH]cn2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCCn1cc(C2C(=O)N(Cc3ccccc3)C(=O)C2)c2ccccc21</chem>	<chem>COCCn1cc(C2C(=O)N(Cc3ccccc3)C(=O)C2)c2ccccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=c1c2ccccc2sn1-c1cc2c(cc1Br)CCCC2</chem>	<chem>O=c1c2ccccc2sn1-c1cc2c(cc1Br)CCCC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)c1cnc(-c2csc(C(C)(C)C)n2)nc1Cl</chem>	<chem>CCOC(=O)c1cnc(-c2csc(C(C)(C)C)n2)nc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(c1ccco1)c1cc([N+])(=O)[O-])ccc1C(F)(F)F</chem>	<chem>O=C(c1ccco1)c1cc([N+])(=O)[O-])ccc1C(F)(F)F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)NC(CC(C)C)C(=O)NO</chem>	<chem>CC(=O)NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)NC(CC(C)C)C(=O)NO</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CCN(C=O)c1ccc(NC(=O)c2ccc(OCc3ccccc3)cc2)c1)Cc1ccccc1</chem>	<chem>CCN(CCN(C=O)c1ccc(NC(=O)c2ccc(OCc3ccccc3)cc2)cc1)Cc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(c1ccc(C(O)(C(F)(F)F)C(F)(F)F)cc1Cl)C(COC(=O)Cc1ccc2c(c1)OCO2)c1ccccc1</chem>	<chem>CCN(c1ccc(C(O)(C(F)(F)F)C(F)(F)F)cc1Cl)C(COC(=O)Cc1ccc2c(c1)OCO2)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)OC(=O)c1c(NC(=O)c2ccccc2)sc2c1CCCC2</chem>	<chem>CC(C)OC(=O)c1c(NC(=O)c2ccccc2)sc2c1CCCC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CS(=O)=(=O)c1ccc(-n2cnc(Cl)c2-c2ccc(F)cc2)cc1</chem>	<chem>CS(=O)=(=O)c1ccc(-n2cnc(Cl)c2-c2ccc(F)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc(Cn2n2)cc1</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)CC(N)c1cc(C(F)(F)F)ccc1N1CCN(C(=O)CCc2ccc(Cl)cc2Cl)CC1</chem>	<chem>CC(C)CC(N)c1cc(C(F)(F)F)ccc1N1CCN(C(=O)CCc2ccc(Cl)cc2Cl)CC1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>Nc1nc(N)c2cc(CNc3ccc(C(=O)NC(CCC(=O)N)CCCCCCC(=O)NO)C(=O)O)nc3)ccc2n1</chem>	<chem>Nc1nc(N)c2cc(CNc3ccc(C(=O)NC(CCC(=O)N)CCCCCCC(=O)NO)C(=O)O)nc3)ccc2n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(CSc2c3c(nc4c2CCCC4)CCCC3)c(C2SCC(=O)N2CN2CCCCC2)c1</chem>	<chem>COc1ccc(CSc2c3c(nc4c2CCCC4)CCCC3)c(C2SCC(=O)N2CN2CCCCC2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)C1=C2N(CCCCN3C(=O)c4ccccc4C3=O)CCCC2C=C(C)C1=O</chem>	<chem>COC(=O)C1=C2C(C=C(C)C)C1=O)CCCN2CCCN1C(=O)c2ccccc2C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(c1ccco1)c1cc2c(n(C3CCCC3)c1=O)CCCCC2</chem>	<chem>O=C(c1ccco1)c1cc2c(n(C3CCCCC3)c1=O)CCCCC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ncc(OC)c(-c2cccc(C3(C)CC(c4ccccc4)=C(C)(O)=NS(C)(=O)=O)c5scc(C)c5c2)n3)n1</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1cccc1C(=O)N1CC(Cn2cccn2)CC(C(=O)N)CC2CCCO2)C1</chem>	<chem>Cn1cccc1C(=O)N1CC(Cn2cccn2)CC(C(=O)N)CC2CCCO2)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccccc2cc(Cn3nc(OCc4ccc(C(F)(F)F)cc4)c(C)c(S(C)(=O)=O)c3=O)n(-c3ccccc3)c(=O)c12</chem>	<chem>Cc1c(OCc2ccc(C(F)(F)F)cc2)nn(Cc2cc3cccc(C)c3c(=O)n2-c2ccccc2)c(=O)c1S(C)(=O)=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)c1ccc(S(=O)=(=O)NC(CCCN=C(N)N)C(=O)Nc2ccccc(C(=O)NC(Cc(=O)O)C(=O)O)c2)cc1</chem>	<chem>CC(=O)c1ccc(S(=O)=(=O)NC(CCCN=C(N)N)C(=O)Nc2ccccc(C(=O)NC(Cc(=O)O)C(=O)O)c2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Fc1cccc(C2(c3cccc(-c4cnccc4)c3)CCN2)n1</chem>	<chem>Fc1cccc(C2(c3cccc(-c4cnccc4)c3)CCN2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Cc1c(F)cccc1Cl)NNC(=O)c1ccccc1</chem>	<chem>O=C(Cc1c(F)cccc1Cl)NNC(=O)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1nc(O)c2nnc(CCOCP(=O)(O)O)c2n1</chem>	<chem>Nc1nc(O)c2nnc(CCOCP(=O)(O)O)c2n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(Cn2c(C)c(OCc3ccc(C=CC(=O)c4ccccc4O)cc3)c3cc(C(=O)c4ccccc4)ccc32)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(Cn2c(C)c(OCc3ccc(C=CC(=O)c4ccccc4O)cc3)c3cc(C(=O)c4ccccc4)ccc32)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(C2c3cc4c(cc3C(Nc3ccc(F)cc3)C3COC(=O)C23)OCO4)cc(OC)c1OC</chem>	<chem>COc1cc(C2c3cc4c(cc3C(Nc3ccc(F)cc3)C3COC(=O)C23)OCO4)cc(OC)c1OC</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CN1CCCC1CCOc1ccc(NC(=O)Nc2ccc(F)cc2)cc1</chem>	<chem>CN1CCCC1CCOc1ccc(NC(=O)Nc2ccc(F)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC)CCN(C(=O)c1cc(Cl)c(Nc2nccc(N3CCCNCC3)n2)cc1OC</chem>	<chem>CCN(CC)CCN(C(=O)c1cc(Cl)c(Nc2nccc(N3CCCNCC3)n2)cc1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CS(=O)(=O)c1ccc(-n2nc(C(N)=O)c2-c2ccc(OCc3ccccc3)cc2)cc1</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(Nc2nc(N)nc(C(C)(C)C)n2)cc1</chem>		TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(O)c1c(N)ncnc1N1CCCC2nc(-c3ccc(F)c(C(F)(F)F)c3)cn2CCN(C)C)CC1</chem>	<chem>CC(O)c1c(N)ncnc1N1CCCC2nc(-c3ccc(F)c(C(F)(F)F)c3)cn2CCN(C)C)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)C1CCCC23CCC4C(C)(CC(=O)O)CCCC4(C)C3C(OC(=O)C=Cc3ccccc3)CC12C</chem>	<chem>CC(=O)C1CCCC23CCC4C(C)(CC(=O)O)CCCC4(C)C3C(OC(=O)C=Cc3ccccc3)CC12C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCn1nc(-c2ccc3ccccc3c2)c(-c2cccc3ccccc23)c(C#N)c1=O</chem>	<chem>CCn1nc(-c2ccc3ccccc3c2)c(-c2cccc3ccccc23)c(C#N)c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1cc(CCNc2ccc(-c3nc(NCc4ccccc4)c4sccc4n3)cc2)ccn1</chem>	<chem>c1cnccc(CNc2nc(-c3ccc(NCCc4cnccc4)cc3)nc3ccsc23)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(C)c(C)COc2cc(NC3COC3)n3nccc(C=C4N=C(O)N=C4O)c3n2)c1</chem>	<chem>Cc1ccc(C)c(C)COc2cc(NC3COC3)n3nccc(C=C4N=C(O)N=C4O)c3n2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cccc(NC(=O)NC(C)(C)c2ccccc2)n1</chem>	<chem>Cc1cccc(NC(=O)NC(C)(C)c2ccccc2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(Cc(=O)Nc1ccccc1Br)C(=O)Cc1cc(l)c(Oc2ccc(O)c(l)c2)c(l)c1</chem>	<chem>CN(Cc(=O)Nc1ccccc1Br)C(=O)Cc1cc(l)c(Oc2ccc(O)c(l)c2)c(l)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)CC(CS(=O)=(=O)O)NC(=O)C(Cc1c[nH]c2ccccc12)NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)C(CO)N(C)C(=O)OC(C)(C)C</chem>	<chem>CC(C)CC(CS(=O)=(=O)O)NC(=O)C(Cc1c[nH]c2ccccc12)NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)C(CO)N(C)C(=O)OC(C)(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1ncc(Cc2cnc3ccc(N(CC)CC)cc3c2)c2cc(OC)c(OC)cc12</chem>	<chem>CCc1ncc(Cc2cnc3ccc(N(CC)CC)cc3c2)c2cc(OC)c(OC)cc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)CN1C(=O)NC(c2ccccc2)(c2ccccc2)C1=O</chem>	<chem>CCOC(=O)CN1C(=O)NC(c2ccccc2)(c2ccccc2)C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)c1ccc(OC=CcCOc2ccc(CNc3ccc(C(F)(F)F)cc3)cc2)cc1</chem>	<chem>O=C(O)c1ccc(OC=CcCOc2ccc(CNc3ccc(C(F)(F)F)cc3)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)C(=O)N1CCCC(O)(Cn2nc(C3CC3)cc2C(=O)O)C1</chem>	<chem>CN(C)C(=O)N1CCCC(O)(Cn2nc(C3CC3)cc2C(=O)O)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCc1nc2cnc(C(C(=O)O)c3ccccc3)c(=O)c2n1Cc1ccc(-c2ccccc2-c2nn[nH]n2)cc1</chem>	<chem>CCCCc1nc2cnc(C(C(=O)O)c3ccccc3)c(=O)c2n1Cc1ccc(-c2ccccc2-c2nn[nH]n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>COc1ccc(NS(=O)=O)=O)c2ccc(N3CCN(C(=O)c4nn(-c5ccc(OC)cc5OC)c(=O)cc4)CC3)cc2)nc(OC)n1</chem>	<chem>COc1ccc(-n2nc(C(=O)N3CCN(C4ccc(S(=O)=(=O)Nc5ccc(OC)nc(OC)n5)cc4)CC3)ccc2=O)c(OC)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1OC(=Cc2ccccc2OCc3ccccc3)c2)C=C1Cc1ccccc1</chem>	<chem>O=C1OC(=Cc2ccccc2OCc3ccccc3)c2)C=C1Cc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ncc2c(n1)CN(Cc1ccoc1)CC2COC1CCCC1</chem>	<chem>Cc1ncc2c(n1)CN(Cc1ccoc1)CC2COC1CCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc2c(-c3ccccc(NC(=O)C(C)C(N)CO)c3)nc3ccc(C(C)(C)C)cc3c2cc1OC</chem>	<chem>COc1cc2c(-c3ccccc(NC(=O)C(C)C(N)CO)c3)nc3ccc(C(C)(C)C)cc3c2cc1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cnccc1-c1ccc2cc(NC(=O)C3CC3(F)F)nc2c1</chem>	<chem>Cc1cnccc1-c1ccc2cc(NC(=O)C3CC3(F)F)nc2c1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>Fc1ccccc1CNc1ccccc1Cn1cnc2c(NCc3cccc(c3ccccc3)c3ccccc3)nncnc21</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CN(C(=NO)c2ccnc(OCc3ccc(F)cc3)c2)C(C)CN1C(=O)N(c1ccccc1)C(C)C</chem>	<chem>CC1CN(C(=NO)c2ccnc(OCc3ccc(F)cc3)c2)C(C)CN1C(=O)N(c1ccccc1)C(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1nc(-c2ccccc2)c(N=NN2CCCCC2)c1O</chem>	<chem>Cn1nc(-c2ccccc2)c(N=NN2CCCCC2)c1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)=CCCC(C)=CCCC(=CCO)COc1c(l)cc(l)c1C(C)(C)C</chem>	<chem>CC(C)=CCCC(C)=CCCC(=CCO)COc1c(l)cc(l)c1C(C)(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(-c2noc(CC(=O)N)CC(c3ccccc3)N(C)C)n2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(-c2noc(CC(=O)N)CC(c3ccccc3)N(C)C)n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=c1c(NN=Cc2cccc(Br)c2)c[nH]c2ccccc12</chem>	<chem>O=c1c(NN=Cc2cccc(Br)c2)c[nH]c2ccccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)Nc1nc(C)c(S(=O)=(=O)N)N2CCN(c3sc(C)c(C)c3C#N)CC2)s1</chem>	<chem>CC(=O)Nc1nc(C)c(S(=O)=(=O)N)N2CCN(c3sc(C)c(C)c3C#N)CC2)s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)c1ccc(CC(c2ccc(O)cc2)c2ccccc2)cc1</chem>	<chem>CC(C)c1ccc(CC(c2ccccc2)c2ccccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(c1nc2ccccc2[nH]1)C(O)COc1ccc(O)cc1</chem>	<chem>O=C(c1nc2ccccc2[nH]1)C(O)COc1ccc(O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#Cc1ccc(C(c2ccccc2)n2cncn2)c(OCc2ccccc2C#N)c1</chem>	<chem>N#Cc1ccc(C(c2ccccc2)n2cncn2)c(OCc2ccccc2C#N)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccccc(C(C)(C)CCN2CCCCC2)c1</chem>	<chem>COc1ccccc(C(C)(C)CCN2CCCCC2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>CC(=O)NC1CCC(Cn2c(=O)c3sc3cc3n(Cc3ccc(Cl)cc3)c2=O)CC1</chem>	<chem>CC(=O)NC1CCC(Cn2c(=O)c3sc3cc3n(Cc3ccc(Cl)cc3)c2=O)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(NS(=O)(=O)c2ccc(NC(=O)Nc3ccc(C)C3)cc2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(NS(=O)(=O)c2ccc(NC(=O)Nc3cccc(C)C3)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ncnc(-c2ccc(C(=O)N3CCN(C)CC3)c(F)c2)c1C#Cc1ccc(N)nc1</chem>	<chem>Cc1ncnc(-c2ccc(C(=O)N3CCN(C)CC3)c(F)c2)c1C#Cc1ccc(N)nc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>Cc1ccc(-c2sc(N3N=C(C4cccc4)CC3c3ccc4c(c3)OCO4)n2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(-c2sc(N3N=C(C4cccc4)CC3c3ccc4c(c3)OCO4)n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCCn1c(=O)nc(-c2cccc2OC)c2cc3ccccc3nc21</chem>	<chem>COCCn1c(=O)nc(-c2cccc2OC)c2cc3ccccc3nc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=c1ccccc1Cc1cc2c(cc1O)CC(Cn1cncn1)CC2</chem>	<chem>O=c1ccccc1Cc1cc2c(cc1O)CC(Cn1cncn1)CC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c(NC(=O)c2ccc(Cl)cc2)ccccc1-n1cn1</chem>	<chem>Cc1c(NC(=O)c2ccc(Cl)cc2)ccccc1-n1cn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nn(CC(=O)Nc2c(Br)c(-c3cccs3)nn2-c2ccccc2)c(C)c1[N+](=O)[O-]</chem>	<chem>Cc1nn(CC(=O)Nc2c(Br)c(-c3cccs3)nn2-c2ccccc2)c(C)c1[N+](=O)[O-]</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NCCNc1ccnn1)c1ccc(Br)o1</chem>	<chem>O=C(NCCNc1ccnn1)c1ccc(Br)o1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1cc(CN(C)C)C2CCN(Cc3cccc(OC)c3)CC2)cs1</chem>	<chem>CCc1cc(CN(C)C)C2CCN(Cc3cccc(OC)c3)CC2)cs1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCCSc1nc(OCCCCCCCC)c2[nH]c(=O)c(=O)c(=O)n(Cc3ccnc3)c2n1</chem>	<chem>CCCCCCCCCOc1nc(SCCCCCCCC)nc2c1[nH]c(=O)c(=O)c(=O)n2Cc1ccnc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1C(=O)N(Cc2ccco2)c2c(Cl)ccc(Cl)c21</chem>	<chem>O=C1C(=O)N(Cc2ccco2)c2c(Cl)ccc(Cl)c21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(CC2c3cc(OC)c(OC)cc3CC[N+]2(C)CC2(C)CCC2=O)cc1OC</chem>	<chem>COc1ccc(CC2c3cc(OC)c(OC)cc3CC[N+]2(C)CC2(C)CCC2=O)cc1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCC(NC(=O)CNC(=O)CNC(=O)C(CCCNC(=N)N)NC(=O)CCCCN=C(N)N)C(=O)NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)(C)N=O</chem>	<chem>CCCCC(NC(=O)CNC(=O)CNC(=O)C(CCCNC(=N)N)NC(=O)CCCCN=C(N)N)C(=O)NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)(C)N=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCS(=O)(=O)c1ccc2c(c1)C(=NNC(=N)N)c1ccccc1-2</chem>	<chem>CCS(=O)(=O)c1ccc2c(c1)C(=NNC(=N)N)c1ccccc1-2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)c1cc(C#N)c(N2CCC(C(=O)NS(=O)(=O)Cc3ccccc3C)CC2)nc1C</chem>	<chem>CCOC(=O)c1cc(C#N)c(N2CCC(C(=O)NS(=O)(=O)Cc3ccccc3C)CC2)nc1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC(=O)CC1SCC2S(=O)(=O)CCN2C1=O</chem>	<chem>NC(=O)CC1SCC2N(CCS2(=O)=O)C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=CCC1CCN(C(=O)c2cnn(-c3ccccc3)c2N)CC1</chem>	<chem>C=CCC1CCN(C(=O)c2cnn(-c3ccccc3)c2N)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)Nc1ccc(SCC(=O)Nc2cc(C)cc(C)c2)c([N+](=O)[O-])c1</chem>	<chem>CC(=O)Nc1ccc(SCC(=O)Nc2cc(C)cc(C)c2)c([N+](=O)[O-])c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC1C=C2C(CCC(OC(=O)c3ccccc3)C2(C)C)C2(C)CCC3(C)C(C(C)(C)O)C(O)CC(O)C3(O)C12</chem>	<chem>COC1C=C2C(CCC(OC(=O)c3ccccc3)C2(C)C)C2(C)CCC3(C)C(C(C)(C)O)C(O)CC(O)C3(O)C12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNc1cc(CCN(C(=O)c2ccc3c(c2)c(C)c(C)n3Cc2ccc(-c3ccccc3C(F)(F)F)cc2)ccn1</chem>	<chem>CNc1cc(CCN(C(=O)c2ccc3c(c2)c(C)c(C)n3Cc2ccc(-c3ccccc3C(F)(F)F)cc2)ccn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1cnc2ccc(-c3ccnn3-c3ccc(F)cc3)cc2c1</chem>	<chem>Nc1cnc2ccc(-c3ccnn3-c3ccc(F)cc3)cc2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1ccc(C2=CC3(CCNCC3)Oc3ccccc32)cc1)c1ccccc1</chem>	<chem>O=C(Nc1ccc(C2=CC3(CCNCC3)Oc3ccccc32)cc1)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCONC(=O)c1ccc2c(c1)n1c(=O)[nH]c3ccc(C)cc3c1n2C</chem>	<chem>CCONC(=O)c1ccc2c(c1)n1c(=O)[nH]c3ccc(C)cc3c1n2C</chem>	FALSE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)C1=C(C)NC(C)=C(C(=O)OCC)C1c1ccc([N+](=O)[O-])cc1</chem>	<chem>CCOC(=O)C1=C(C)NC(C)=C(C(=O)OCC)C1c1ccc([N+](=O)[O-])cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(NCCCc2ccccc2)c2n1n(CCNCCO)c2c1</chem>	<chem>COc1cc(NCCCc2ccccc2)c2n1n(CCNCCO)c2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(NC(=O)c2ccc(-n3cnc4cccc43)cc2)c(C(=O)Nc2ccc(Cn3ccnc3)nc2)c1</chem>	<chem>Cc1ccc(NC(=O)c2ccc(-n3cnc4cccc43)cc2)c(C(=O)Nc2ccc(Cn3ccnc3)nc2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)c1nc(Nc2[nH]nc3c2CN(C)CC3c2cccc(F)c2)nc1C(F)(F)F</chem>	<chem>CN1Cc2c([nH]c2Nc2ncc(C(F)(F)F)c(N(C)C)n2)C(c2cccc(F)c2)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=CCNC(=O)C1CC(CI)CN1CC(=O)C(NC(=O)Cc1ccc(O)cc1)C1CCCC1</chem>	<chem>C=CCNC(=O)C1CC(CI)CN1CC(=O)C(NC(=O)Cc1ccc(O)cc1)C1CCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)N1c2ccc(Nc3ncc(C(F)(F)F)c(OCc4ccnc4)n3)cc2C(C)(C)C1C</chem>	<chem>CC(=O)N1c2ccc(Nc3ncc(C(F)(F)F)c(OCc4ccnc4)n3)cc2C(C)(C)C1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc2nc3cc(OC)c(C2c1)-c1occcc1C3=O</chem>	<chem>COC1=CC2C(=Nc3cc(OC)c2c2occc2c3=O)C=C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CN(C(=O)CC(F)(F)F)C(C)CN1CCC(NCc1ccc(CO)o1)c1ccccc1</chem>	<chem>CC1CN(C(=O)CC(F)(F)F)C(C)CN1CCC(NCc1ccc(CO)o1)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=C1C(CO)OC(=O)C1N(c1ccccc1)c1ccccc1</chem>	<chem>C=C1C(CO)OC(=O)C1N(c1ccccc1)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(Nc1ncc(F)c(N2C(=O)OCC2C(C)O)n1)c1cn(-c2ccccc2)cn1</chem>	<chem>CC(Nc1ncc(F)c(N2C(=O)OCC2C(C)O)n1)c1cn(-c2ccccc2)cn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1ccnc1CN1CCN(CC(O)COC(F)(F)F)CC1</chem>	<chem>Cn1ccnc1CN1CCN(CC(O)COC(F)(F)F)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)c1ccc2c(c1)nc(-c1ccc(Oc3ccccc3)cc1)n2C1CCCC1</chem>	<chem>O=C(O)c1ccc2c(c1)nc(-c1ccc(Oc3ccccc3)cc1)n2C1CCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC(=O)C1CCCN1C(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)C(CO)NC(=O)OCc1ccccc1</chem>	<chem>NC(=O)C1CCCN1C(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)C(CO)NC(=O)OCc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN1Cc2c(cccc2OC)C(C)O)C1</chem>	<chem>CCN1Cc2c(Cl)cccc2C(C)O)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCNC(=S)NNC(=O)c1ccc(CS(=O)(=O)c2ccccc2)o1</chem>	<chem>CCNC(=S)NNC(=O)c1ccc(CS(=O)(=O)c2ccccc2)o1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(CC2(CO)CCCC2)c2c(c1)OC(C1CO1)CC2=O</chem>	<chem>COc1cc(CC2(CO)CCCC2)c2c(c1)OC(C1CO1)CC2=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCC(=O)N2Cc3ccccc3CC2C(=O)NC(S)=Nc2cccc([N+](=O)[O-])c2</chem>	<chem>CCCC(=O)N1Cc2ccccc2CC1C(=O)NC(S)=Nc1cccc([N+](=O)[O-])c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)Nc1c(Cl)ccc(Cl(=O)C(F)(F)F)Br)cc1Cl</chem>	<chem>CC(=O)Nc1c(Cl)ccc(Cl(=O)C(F)(F)F)Br)cc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccccc2c1CCC2c1cn(S(=O)(=O)c2ccc(C)cc2)c2ccccc12</chem>	<chem>COc1ccccc2c1CCC2c1cn(S(=O)(=O)c2ccc(C)cc2)c2ccccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=NNc1nc(-c2ccc(C#N)cc2)cs1)c1ccc(=O)n(-c2ccccc2C)c1</chem>	<chem>CC(=NNc1nc(-c2ccc(C#N)cc2)cs1)c1ccc(=O)n(-c2ccccc2C)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCn1ccc2ccc(C(=O)N3CC4(C)CC3Cc3nn(C(C)C)c3C(=O)N4)cc21</chem>	<chem>CCN1ccc2ccc(C(=O)N3CC4(C)CC3Cc3nn(C(C)C)c3C(=O)N4)cc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCC(C)N1CCC(CNC(=O)c2csc3c(NCC(N)CS4cc(C)ccc4C)ncnc23)CC1</chem>	<chem>COCC(C)N1CCC(CNC(=O)c2csc3c(NCC(N)CS4cc(C)ccc4C)ncnc23)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)N1CC2(CCN(C(=O)c3ccc4nc[nH]c4c3)CC2)c2ccccc21</chem>	<chem>CC(=O)N1CC2(CCN(C(=O)c3ccc4nc[nH]c4c3)CC2)c2ccccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNC(=N)NCCC(N)C(=O)O</chem>	<chem>CNC(=N)NCCC(N)C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(CC(=O)Nc1ccccc1Cl)C(=O)COc1ccc(Cl)cc1Cc1ccccc1</chem>	<chem>CN(CC(=O)Nc1ccccc1Cl)C(=O)COc1ccc(Cl)cc1Cc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC1OC(Cn2cnc3c(C(=O)NCc4cccc(Cl)c4)ccccc32)C(O)C(O)C1O</chem>	<chem>COC1OC(Cn2cnc3c(C(=O)NCc4cccc(Cl)c4)ccccc32)C(O)C(O)C1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN1c(=O)c2nc(-c3ccc(OC(C=O)NN)cc3)[nH]c2n(CCC)c1=O</chem>	<chem>CCN1c(=O)c2nc(-c3ccc(OC(C=O)NN)cc3)[nH]c2n(CCC)c1=O</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>c1ccc(C(N=Cc2ccccc2)P2(=S)NCCCO2)cc1</chem>	<chem>S=P1(C(N=Cc2ccccc2)c2ccccc2)NCCCO1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Fc1ccc(C(OCNC2CCCC2)(c2ccccc2)c2ccc(Cl)cc2)cc1</chem>	<chem>Fc1ccc(C(OCNC2CCCC2)(c2ccccc2)c2ccc(Cl)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)CCc1ccc(-n2nc(C(c3ccccc3)c3ccccc3)cc2-c2ccc[n+](CC(=O)O)c2)cc1</chem>	<chem>O=C(O)CCc1ccc(-n2nc(C(c3ccccc3)c3ccccc3)cc2-c2ccc[n+](CC(=O)O)c2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nsc(C2CN(C)CC2C(=O)NCC2(C)CCOCC2)n1</chem>	<chem>Cc1nsc(C2CN(C)CC2C(=O)NCC2(C)CCOCC2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(-n2nc(C(=O)N3CCOCC3)c3c2-c2ccc(NC(=O)c4cccc4Cl)cc2S(=O)(=O)C3)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(-n2nc(C(=O)N3CCOCC3)c3c2-c2ccc(NC(=O)c4cccc4Cl)cc2S(=O)(=O)C3)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)CC=CC(=O)Nc1cc2c(Nc3ccc(F)c(Cl)c3)ncnc2cn1</chem>	<chem>CN(C)CC=CC(=O)Nc1cc2c(Nc3ccc(F)c(Cl)c3)ncnc2cn1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CN(C)CC1CCN(C(=O)CCCCCn2nc(C(=O)NCCc3cccn3)c3ccccc3c2=O)CC1</chem>	<chem>CN(C)CC1CCN(C(=O)CCCCCn2nc(C(=O)NCCc3cccn3)c3ccccc3c2=O)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCS(=O)(=O)N1CCC(CNC(=O)c2ccc(F)[nH]2)(c2ccco2)CC1</chem>	<chem>CCCS(=O)(=O)N1CCC(CNC(=O)c2ccc(F)[nH]2)(c2ccco2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc2c(cc1OC)-c1cc(=NC(=O)c3ccccc3)n(O)c(C)c1CC2</chem>	<chem>COc1cc2c(cc1OC)-c1cc(=NC(=O)c3ccccc3)n(O)c(C)c1CC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1CN2CCC3(CN(Cc4cccc4)C(=O)C3Cc4cccc4N23)C(=O)N1</chem>	<chem>O=C1CN2CCC3(CN(Cc4cccc4)C(=O)C3Cc4cccc4N24)C(=O)N1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ncc(C(O)CN1CCN(c2nccn2)CC1)c1ccc(S(C)(=O)=O)cc1</chem>	<chem>Cc1ncc(C(O)CN1CCN(c2nccn2)CC1)c1ccc(S(C)(=O)=O)cc1</chem>	FALSE	TRUE	TRUE
<chem>O=S(=O)(Cc1cn(C2c3ccccc3-c3ccccc32)nn1)c1ccccc1</chem>	<chem>O=S(=O)(Cc1cn(C2c3ccccc3-c3ccccc32)nn1)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(N)C(O)=Nc1cccc(-c2cnc3cccn23)c1</chem>	<chem>CC(N)C(O)=Nc1cccc(-c2cnc3cccn23)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1nc2ccccc2n2cncc12)c1ccccc1</chem>	<chem>O=C(Nc1nc2ccccc2n2cncc12)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(COc2ncc(C(F)(F)F)cn2)Cn2cc([N+](=O)[O-])nc2O1</chem>	<chem>CC1(COc2ncc(C(F)(F)F)cn2)Cn2cc([N+](=O)[O-])nc2O1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>O=C(O)CCC(=O)NCCc1cc(C)c2c(c1)OCCCO2</chem>	<chem>O=C(O)CCC(=O)NCCc1cc(Cl)c2c(c1)OCCCO2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Clc1ccc(CN(Cc2cncc2)C2CCNC2)cc1Cl</chem>	<chem>Clc1ccc(CN(Cc2cncc2)C2CCNC2)cc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>FC(F)(F)c1cccc(Nc2nnc(-c3cn(CCN4CCOCC4)c4cccc34)c3ccccc23)c1</chem>	<chem>FC(F)(F)c1cccc(Nc2nnc(-c3cn(CCN4CCOCC4)c4cccc34)c3ccccc23)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOc1ccc(CCN2C(=O)c3nnc(-c4ccc(C)cc4)n3C(c3ccc(Cl)c3)C2=O)cc1OCC</chem>	<chem>CCOc1ccc(CCN2C(=O)c3nnc(-c4ccc(C)cc4)n3C(c3ccc(Cl)c3)C2=O)cc1OCC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)c1nc(N2CCN(c3ccccc3)CC2)c2c(-c3ccccc3)sc2n1</chem>	<chem>CC(C)(C)c1nc(N2CCN(c3ccccc3)CC2)c2c(-c3ccccc3)sc2n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)C1C(C(=O)OC)NC(C)(C)C2C(c3ccccc3O)=NOC12</chem>	<chem>COC(=O)C1C(C(=O)OC)NC(C)(C)C2C(c3ccccc3O)=NOC21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC(=O)N1c2ccccc2NC(=O)c2ccccc21)C1CCCC1</chem>	<chem>CCN(CC(=O)N1c2ccccc2NC(=O)c2ccccc21)C1CCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(S(=O)(=O)N(CCCN2Cc3ncccc3C2)C(C)C)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(S(=O)(=O)N(CCCN2Cc3ccnc3C2)C(C)C)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)c1cc2c(s1)C(=O)N(c1ccccc1F)C2=O</chem>	<chem>CCOC(=O)c1cc2c(s1)C(=O)N(c1ccccc1F)C2=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)CC1NC(=O)C(Cc2c[nH]c3ccccc23)NC(=O)C(C(C)C)NC(=O)C2CCCN2C(=O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)C(CC(=O)O)N(C)C)C1=O</chem>	<chem>CC(C)CC1NC(=O)C2CCCN2C(=O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)C(CC(=O)O)N(C)C(C(=O)C)NC(=O)C(Cc2c[nH]c3ccccc23)NC1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC=CC=CCOC1Sc2ccccc2NC1=O</chem>	<chem>CC=CC=CCOC1Sc2ccccc2NC1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCSc1ccccc1C(=O)OCC(=O)NC(=O)NC1CCCCC1</chem>	<chem>CCCCCSc1ccccc1C(=O)OCC(=O)NC(=O)NC1CCCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(C(=O)N2CCN(C)CC2)cc1-n1cc(-c2cnc(N)nc2)cn1</chem>	<chem>Cc1ccc(C(=O)N2CCN(C)CC2)cc1-n1cc(-c2cnc(N)nc2)cn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)OCC1OC(NC(=O)Cn2c3ccccc3c3cc(NC(=O)C4CCCO4)ccc32)C(OC(C)=O)C(OC(C)=O)C1OC(C)=O</chem>	<chem>CC(=O)OCC1OC(NC(=O)Cn2c3ccccc3c3cc(NC(=O)C4CCCO4)ccc32)C(OC(C)=O)C(OC(C)=O)C1OC(C)=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1cnc(C2CCc3ccc(OC4ncccn4)cc3C2=O)o1</chem>	<chem>CCc1cnc(C2CCc3ccc(OC4ncccn4)cc3C2=O)o1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1ccc(-c2nc3ccc([N+](=O)[O-])cc3n2O)cc1)Nc1ccc(Br)c(C(F)(F)F)c1</chem>	<chem>O=C(Nc1ccc(-c2nc3ccc([N+](=O)[O-])cc3n2O)cc1)Nc1ccc(Br)c(C(F)(F)F)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(-c2nc3cccn3[nH]2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(-c2nc3cccn3[nH]2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CNc1cc(=O)n(Cc2cccc(C(=O)O)c2)cc1C=C(c1ccccc1)c1cccc([N+](=O)[O-])c1	CNc1cc(=O)n(Cc2cccc(C(=O)O)c2)cc1C=C(c1cccc([N+](=O)[O-])c1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Cn1c(C=Cc2cccc2)nc2sc3c(c2c1=O)CCCC3	CC(=O)Cn1c(C=Cc2cccc2)nc2sc3c(c2c1=O)CCCC3	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC(COC(N)=O)N1C(=O)C2CC(Oc3ccc(C(C)=O)cc3)CN2C(=O)C1Cc1cccc1	CCCC(COC(N)=O)N1C(=O)C2CC(Oc3ccc(C(C)=O)cc3)CN2C(=O)C1Cc1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)N2CC(C(=O)O)CC(C=O)c3ccccc3C(=O)c3ccc(C)cc3)CC2)c(C)c1	Cc1ccc(C(=O)c2cccc2C(=O)COC(=O)C2CCN(S(=O)(=O)c3ccc(C)cc3C)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
N#CC1CCCN1C(=O)CNC(=O)c1ccccc1	N#CC1CCCN1C(=O)CNC(=O)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)c(C)c(S(=O)(=O)N2CCC(C(=O)N(Cc3ccc(C)o3)C3CCCC3)CC2)c1C	Cc1ccc(CN(C(=O)C2CCN(S(=O)(=O)c3c(C)c(C)cc(C)c3C)CC2)C2CCCCC2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1cnc2c3cccc(Cl)c3n(-c3ccccc3)c12	Oc1cnc2c3cccc(Cl)c3n(-c3ccccc3)c12	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCC(=O)N1CCN(c2ccc(-c3ccccc3)nn2)CC1	CCCCCCCCC(=O)N1CCN(c2ccc(-c3ccccc3)nn2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1C(=O)NC(C=O)C(=Cc2cccc(Oc3ccccc3)c2)C1=O	CN1C(=O)NC(=O)C(=Cc2cccc(Oc3ccccc3)c2)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(c1ccc(N2CCOCC2)nc1)N1CC2Cc3c([nH]c4ccccc34)C(c3ccc(F)c3)C2C1	O=S(=O)(c1ccc(N2CCOCC2)nc1)N1CC2Cc3c([nH]c4ccccc34)C(c3ccc(F)c3)C2C1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1SC(c2ccc(Cl)cc2Cl)NC1=S	CC1SC(c2ccc(Cl)cc2Cl)NC1=S	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(-n2c(=O)cc(N3CCN(c4ccccc4)CC3)[nH]c2=O)c1	Cc1cccc(-n2c(=O)cc(N3CCN(c4ccccc4)CC3)[nH]c2=O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)C2=C(O)C(=O)N(CCN3CCOCC3)C2c2cccc([N+](=O)[O-])c2)cc1	Cc1ccc(C(=O)C2=C(O)C(=O)N(CCN3CCOCC3)C2c2cccc([N+](=O)[O-])c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=Cc2cc(OCc3ccc(Cl)cc3)ccc2C(C(CCCCC(=O)O)c2ccc(Cl)c(Cl)c2)C1	CC1=Cc2cc(OCc3ccc(Cl)cc3)ccc2C(C(CCCCC(=O)O)c2ccc(Cl)c(Cl)c2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)N1CCCC(c2cccc(C(F)(F)F)c2)C1CN1CCCC1	CC(=O)N1CCCC(c2cccc(C(F)(F)F)c2)C1CN1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C(=O)N1CCN(C(=O)c2cnc2)CC1)c1c([nH]c2c(-c3ccccc3)ccnc12	O=C(C(=O)N1CCN(C(=O)c2cnc2)CC1)c1c([nH]c2c(-c3ccccc3)ccnc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1cccc(-n2nnnc25CC(=O)Nc2ccc(F)cc2F)c1	O=C(C5c1nnnn1-c1cccc(C(=O)O)c1)Nc1ccc(F)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NC1(C)O)C=C(C(=O)O)OC1(O)C(=O)Nc1cccc1	CC(=O)NC1(C)O)C=C(C(=O)O)OC1(O)C(=O)Nc1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c(=Nc2ccc(F)cc2)n2cccc2n(C)c1=O	Cn1c(=O)n(C)c2cccn2c1=Nc1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)c1cccc1NC(=O)COC(=O)c1c(C)noc1C	CNC(=O)c1cccc1NC(=O)COC(=O)c1c(C)noc1C	TRUE	TRUE	TRUE
NCc1cccc(-n2cc3cccc(C(N)=O)c3n2)c1	NCc1cccc(-n2cc3cccc(C(N)=O)c3n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1cccc(Br)c1)N1CCN(c2cnc2)CC1	O=C(c1cccc(Br)c1)N1CCN(c2cnc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)CCNCCCNc1cnc2c(C(F)(F)F)cccc12	CCN(CC)CCNCCCNc1cnc2c(C(F)(F)F)cccc12	TRUE	TRUE	TRUE
COCc1nc(-c2ccc(Cl)c([N+](=O)[O-])c2)cnc1N	COCc1nc(-c2ccc(Cl)c([N+](=O)[O-])c2)cnc1N	TRUE	TRUE	TRUE
CC[n+ ]1ccn(COCCO)c1C=NO(C(C#N)C(OC)C(=O)Nc1cccc(Cl)c1	CC[n+ ]1ccn(COCCO)c1C=NO(C(C#N)C(OC)C(=O)Nc1cccc(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C(C)O)#Cc1cccc1)NC1CCN(Cc2cccc2)C1	O=C(C(C)O)#Cc1cccc1)NC1CCN(Cc2cccc2)C1	FALSE	TRUE	TRUE
S=c1oc(-c2cccc2)cn1CN1CCc2cccc2C1	S=c1oc(-c2cccc2)cn1CN1CCc2cccc2C1	TRUE	TRUE	TRUE
N#CC(=Cc1ccc(-c2ccc(C(=O)O)cc2)o1)C(=O)N1CCCCC1	N#CC(=Cc1ccc(-c2ccc(C(=O)O)cc2)o1)C(=O)N1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ccc2c(-n3cc(-c4cc(CN5CCC(c6ccccc6)CC5)cn4)cn3)n[nH]c2c1	N#Cc1ccc2c(-n3cc(-c4cc(CN5CCC(c6ccccc6)CC5)cn4)cn3)n[nH]c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1COCC1NC(=O)C(Cc1cccc1)NC(=O)C(=O)NC1CCCCC1	CC1COCC1NC(=O)C(Cc1cccc1)NC(=O)C(=O)NC1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(cc1OC)C(COc1cccc1)N(C(=O)CN1CCOCC1)CC2	COc1cc2c(cc1OC)C(COc1cccc1)N(C(=O)CN1CCOCC1)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
CN(CCCN(C(=O)c1cc(-c2ccco2)on1)Cc1cccc1	CN(CCCN(C(=O)c1cc(-c2ccco2)on1)Cc1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(CCC(C)C1CCC2(C)C3CCC4C(C)(C(=O)O)C(C)O)CC45CC35CCC12C(C)C(C(=O)O	C=C(CCC(C)C1CCC2(C)C3CCC4C(C)(C(=O)O)C(C)O)CC45CC35CCC12C(C)C(C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1cccc(CNC(C=O)c2cccc(Cc3c([nH]cn3)c2)c1	Nc1cccc(CNC(C=O)c2cccc(Cc3c([nH]cn3)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NO)c1cccc(CSc2ccc(OCc3ccccc3)cc2)c1	O=C(NO)c1cccc(CSc2ccc(OCc3ccccc3)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(cc1OC)C(CCN1CCCC1)OC(c1cccc1)C2	COc1cc2c(cc1OC)C(CCN1CCCC1)OC(c1cccc1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1cccc(N2Cc3nc(N4CCSCC4)ncc3C2=O)c1	CCc1cccc(N2Cc3nc(N4CCSCC4)ncc3C2=O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCN1CC(=O)C(=C(O)C=Cc2ccc3c(cccc3c2)C(=O)OC)C1=O	C=CCN1CC(=O)C(=C(O)C=Cc2ccc3c(C(=O)OC)cccc3c2)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1ccc2c(c1)C(c1cccc1)(c1cccc1)NC(=S)N2	Oc1ccc2c(c1)C(c1cccc1)(c1cccc1)NC(=S)N2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1cccc1)N1CCCC(CNCc2cnc(OC3cccc(F)c3)s2)C1	O=C(c1cccc1)N1CCCC(CNCc2cnc(OC3cccc(F)c3)s2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC1CC2(CCN(C(=O)NCC(NC(=O)OC(C)(C)C)c3ccccc3)CC2)c2cc(Cl)c(C)cc21	CCCCC1CC2(CCN(C(=O)NCC(NC(=O)OC(C)(C)C)c3ccccc3)CC2)c2cc(Cl)c(C)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)C(=O)Nn1c(SCC(O)=C(C#N)c2ccccc3ccccc23)nn1-c1ccccc1	CC(C)(C)C(=O)Nn1c(SCC(O)=C(C#N)c2ccccc3ccccc23)nn1-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(OC3ccc(NC(=O)c4c(Cl)cccc4Cl)cc3F)ccnc2cc1OCCCN1CCOCC1	COc1cc2c(OC3ccc(NC(=O)c4c(Cl)cccc4Cl)cc3F)ccnc2cc1OCCCN1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(C)c1N1CCN(Cc2c(C)nn(C(C)C)c2C)CC1	Cc1cccc(C)c1N1CCN(Cc2c(C)nn(C(C)C)c2C)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nc2ccc(C(=O)N3CCN4CCCC4C3)cn2c1N(CC)CCOC	CCc1nc2ccc(C(=O)N3CCN4CCCC4C3)cn2c1N(CC)CCOC	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)CCNC(=O)Nc1nc2ccsc2c2nc(-c3ccco3)nn12	NC(=O)CCNC(=O)Nc1nc2ccsc2c2nc(-c3ccco3)nn12	TRUE	TRUE	TRUE
Fc1cc(OC2CCN(Cc3ccc(C(c4csc5ccccc45)C4CC4)cc3)CC2)cc(C(F)(F)F)c1	Fc1cc(OC2CCN(Cc3ccc(C(c4csc5ccccc45)C4CC4)cc3)CC2)cc(C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)C(C)C(Cc1cccc1)NC(=O)C(Cc1c([nH]c2ccccc12)NC(=O)OC(C)(C)C)C(=O)NCCNC(=N)N	CC(C)(C)C(C)C(Cc1cccc1)NC(=O)C(Cc1c([nH]c2ccccc12)NC(=O)OC(C)(C)C)C(=O)NCCNC(=N)N	TRUE	TRUE	TRUE
CSc1cc(-c2cn(C3CC(O)C(CO)O3)c(=O)[nH]c2=O)ccc1F	CSc1cc(-c2cn(C3CC(O)C(CO)O3)c(=O)[nH]c2=O)ccc1F	TRUE	TRUE	TRUE
CC1N(c2nc(-c3cnc(N)c(Cl)c3)cc(C3(O)CCC3)n2)CCC12CC2	CC1N(c2nc(-c3cnc(N)c(Cl)c3)cc(C3(O)CCC3)n2)CCC12CC2	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=CC(C)(C)n2c(O)c(N=Nc3ccccc3)c3c(N)nc1c32	CC1=CC(C)(C)n2c(O)c(N=Nc3ccccc3)c3c(N)nc1c32	FALSE	TRUE	TRUE
CC(O)Cn1nc(-c2enn(C)c2)cc1-c1ccc(C(F)(F)F)cc1	CC(O)Cn1nc(-c2enn(C)c2)cc1-c1ccc(C(F)(F)F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(S(=O)(=O)c2cn(CC(=O)Nc3ccc(Cl)cn3)c3ccc(Cl)cc3c2=O)c1	Cc1cccc(S(=O)(=O)c2cn(CC(=O)Nc3ccc(Cl)cn3)c3ccc(Cl)cc3c2=O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
NCC1=NO(C)c2cc(OC3ccc(NC(N)=O)cn3)ccc2F)(C(F)(F)F)C1	NCC1=NO(C)c2cc(OC3ccc(NC(N)=O)cn3)ccc2F)(C(F)(F)F)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(C(=O)c1ccc(CCC2CCN(Cc3cnc(N4CCOCC4)nc3)CC2)cc1	CCCN(C(=O)c1ccc(CCC2CCN(Cc3cnc(N4CCOCC4)nc3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(O)c(-c2nnc3sc(Cc4c(Cl)cccc4Cl)nn23)c1	COc1ccc(O)c(-c2nnc3sc(Cc4c(Cl)cccc4Cl)nn23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(C(=O)c1snc(C(N)=O)c1N)C1CCCC1	CCCN(C(=O)c1snc(C(N)=O)c1N)C1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(Nc2cccc(Cl)c2)nc(Cl)n1	Cc1cc(Nc2cccc(Cl)c2)nc(Cl)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(N2CCN(c3nccc(-c4c([nH]c5ccccc45)n3)CC2C)c1C	Cc1cccc(N2CCN(c3nccc(-c4c([nH]c5ccccc45)n3)CC2C)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C(=O)Nc1nnc(C)s1)c1ccc(Cl)cc1	CCC(C(=O)Nc1nnc(C)s1)c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1ccc(-c2cnc(N)c(-c3ccc(C(O)=NC(c4ccc(S(C)(=O)=O)cc4)C4CC4)c(F)c3)c2)n1	Cn1ccc(-c2cnc(N)c(-c3ccc(C(O)=NC(c4ccc(S(C)(=O)=O)cc4)C4CC4)c(F)c3)c2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1cccc(-c2cccc2F)c1	NC(=O)c1cccc(-c2cccc2F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CN2N=C3COC(C)(C)C=C3NC2=O)cc1OC	COc1ccc(CN2N=C3COC(C)(C)C=C3NC2=O)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C(=O)C1CCN(C(=O)c2ccc(C(F)(F)F)cc2)CC1)c1cccc1	CN(C(=O)C1CCN(C(=O)c2ccc(C(F)(F)F)cc2)CC1)c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(NC(=O)CN(C)C(=O)CSc2nnc(NC(C)=O)s2)c1	COc1cccc(NC(=O)CN(C)C(=O)CSc2nnc(NC(C)=O)s2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(=O)Nc1ccc(OCC(O)CNC(C)(C)C)c(Cl)c1	CCC(=O)Nc1ccc(OCC(O)CNC(C)(C)C)c(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)NC(=N)c1ccc(Cl)c(OCc2ccc3sc(C(=N)N(C)C)cc3c2)c1	CC(C)NC(=N)c1ccc(Cl)c(OCc2ccc3sc(C(=N)N(C)C)cc3c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(-c2[nH]cc(C=C3sc4nc(-c5cc(Cl)ccc5O)[nH]n4c3=O)c2C#N)c1	Cc1cccc(-c2[nH]cc(C=C3sc4nc(-c5cc(Cl)ccc5O)[nH]n4c3=O)c2C#N)c1	FALSE	TRUE	TRUE
NC1CCC(Nc2cc(-c3cccc(NCc4cccc(F)c4)n3)c(Cl)cn2)CC1	NC1CCC(Nc2cc(-c3cccc(NCc4cccc(F)c4)n3)c(Cl)cn2)CC1	TRUE	TRUE	FALSE
Nc1ccc(C2CC(O)C(N)CCC2NC(=O)c2ccc(F)c(Cl)c2)cn1	Nc1ccc(C2CC(O)C(N)CCC2NC(=O)c2ccc(F)c(Cl)c2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(N)SCc1ccc(Cl)cc1	N=C(N)SCc1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)(C)OC(=O)NC1CCCN(CCc2c([nH]c3ccc(F)cc23)C1	CC(C)(C)OC(=O)NC1CCCN(CCc2c([nH]c3ccc(F)cc23)C1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1cccc1C(=O)CN(Cc1cccc1)Cc1cccc1[N+](=O)[O-]	O=C(O)c1cccc1C(=O)CN(Cc1cccc1)Cc1cccc1[N+](=O)[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2[nH]nc(C)c2C(=O)OCC(=O)N(C)Cc2ccccc2)cc1	COc1ccc(-c2[nH]nc(C)c2C(=O)OCC(=O)N(C)Cc2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC(C)Sc1nc2cc(C(C)(C)C)ccc2[nH]1	CCCC(C)Sc1nc2cc(C(C)(C)C)ccc2[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc2ccccc2n1C1CC2CCC(C1)N2CCC(NC(=O)C1CCN(c2ncccn2)CC1)c1cccs1	Cc1nc2ccccc2n1C1CC2CCC(C1)N2CCC(NC(=O)C1CCN(c2ncccn2)CC1)c1cccs1	TRUE	TRUE	TRUE
C[S+](([O-])c1cc(-c2nc(-c3cccc(Cl)c3c)no2)ccc1O	Cc1c(Cl)cccc1-c1noc(-c2ccc(O)c([S+](C)[O-])c2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C(CSSCC(NC(=O)C(=O)O)C(=O)N(C(=O)O)C(C)C)NC(=O)C(CS)CCCN(C=NC(=O)CCNC(=N)N)N	COC(=O)C(CSSCC(NC(=O)C(=O)O)C(=O)N(C(=O)O)C(C)C)NC(=O)C(CS)CCCN(C=NC(=O)CCNC(=N)N)N	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CC1(O)C(=O)Nc2cc3c(cc21)C(=O)c1c(O)cccc1C3=O	O=C(O)CC1(O)C(=O)Nc2cc3c(cc21)C(=O)c1c(O)cccc1C3=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CCN(C(CO)CCCCNC(=O)C)CC1CCCC(c2ccccc2)C1S(=O)(=O)c1ccc(N)cc1	CC(C)CCN(C(CO)CCCCNC(=O)C)CC1CCCC(c2ccccc2)C1S(=O)(=O)c1ccc(N)cc1	FALSE	TRUE	TRUE
C=CCNc1nc(N)nc(COC)n1	C=CCNc1nc(N)nc(COC)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC1CCN(Cc2ccc3c(c2)OCCO3)CC1)C(c1cccc1)c1cccc1	O=C(NC1CCN(Cc2ccc3c(c2)OCCO3)CC1)C(c1cccc1)c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(CNC(=O)C(=O)Nc2ccc(OCc3c(C)noc3C)c(C(C)C)c2)c1	COc1cccc(CNC(=O)C(=O)Nc2ccc(OCc3c(C)noc3C)c(C(C)C)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
O=C(O)C=Cc1ccc(C2=Cc3ccccc3OC2)cc1	O=C(O)C=Cc1ccc(C2=Cc3ccccc3OC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1c(Br)c(l) c2c(c1)C(C)C(N(C(=O)Nc1ccc(C(=O)N(C)CCCN(C)C)cc1)C(C)(C)C2	COc1c(Br)c(l)c2c(c1)C(C)C(N(C(=O)Nc1ccc(C(=O)N(C)CCCN(C)C)cc1)C(C)(C)C2	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(N(C)S(=O)(=O)c2ccc(SC)cc2)cc1	COc1ccc(N(C)S(=O)(=O)c2ccc(SC)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc(-c2cc(F)cc(F)c2)c2ccc(S(=O)(=O)Nc3nccs3)cc21	Cn1cc(-c2cc(F)cc(F)c2)c2ccc(S(=O)(=O)Nc3nccs3)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1sc(-c2ccc(OC)cc2OC)nc1CSc1cnn1CC(=O)O	CCc1sc(-c2ccc(OC)cc2OC)nc1CSc1cnn1CC(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C)C(N)C(=O)O	CCC(C)C(N)C(=O)O	TRUE	TRUE	FALSE
COc1ccc(S(=O)(=O)N(C)c2cc3c4c(c2)CCN4C(=O)C3=Cc2[nH]c(C)C(C(=O)O)c2C)cc1	COc1ccc(S(=O)(=O)N(C)c2cc3c4c(c2)C=Cc2[nH]c(C)C(C(=O)O)c2C)C(=O)N4CC3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C)N(C(=O)CSc1nnc(Nc2cccc3ccccc23)s1)C1CCS(=O)(=O)C1	CCC(C)N(C(=O)CSc1nnc(Nc2cccc3ccccc23)s1)C1CCS(=O)(=O)C1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CCc1ccc(OCc2cccn2)cc1	O=C(O)CCc1ccc(OCc2cccn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccnc1-c1nn2c(C)nc3cnccc3c2c1-c1ccc(F)cc1	Cc1ccnc1-c1nn2c(C)nc3cnccc3c2c1-c1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)c1cc(C#N)c(N2CCN(C(O)=Nc3cccc(Cl)c3)C(C)C2)nc1C	CC(=O)c1cc(C#N)c(N2CCN(C(O)=Nc3cccc(Cl)c3)C(C)C2)nc1C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)OCc2nnc(-c3ccc(C)cc3C)o2)cc1OC	COc1ccc(C(=O)OCc2nnc(-c3ccc(C)cc3C)o2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CC23c4c5ccc(O)c4OC2C(=O)CCC3(CCCc2ccccc2)C1C5	CN1CC23c4c5ccc(O)c4OC2C(=O)CCC3(CCCc2ccccc2)C1C5	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCCC1NC(=O)c1ccc(Nc2nc(N3CCCC3)c3[nH]cnc3n2)cc1	CC1CCCC1NC(=O)c1ccc(Nc2nc(N3CCCC3)c3[nH]cnc3n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(COC(=O)c1ccc(S(=O)(=O)N2CCCC2)cc1)Nc1ccccc1F	O=C(COC(=O)c1ccc(S(=O)(=O)N2CCCC2)cc1)Nc1ccccc1F	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(Sc2cnc(N=C(O)S(=O)(=O)N(C)S2)c(C(=O)Nc2cc(C(=O)NCC3CN(C)CCO3)n(C)c2)c1	Cc1ccc(Sc2cnc(N=C(O)S(=O)(=O)N(C)S2)c(C(=O)Nc2cc(C(=O)NCC3CN(C)CCO3)n(C)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(=O)Cn2nnc(C(=O)Nc3cccs3)c2N)cc1C	Cc1ccc(NC(=O)Cn2nnc(C(=O)Nc3cccs3)c2N)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1)C(C)NC(C)C2	COc1ccc2c(c1)C(C)NC(C)C2	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)N1CCC(n2ncc3c(N4CCOCC4C)nc(-c4cnc(N)nc4)nc32)CC1	COC(=O)N1CCC(n2ncc3c(N4CCOCC4C)nc(-c4cnc(N)nc4)nc32)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(C(NC(=O)c2cccs2)c2cc(Cl)c3ccnc3c2O)cc1	CCOc1ccc(C(NC(=O)c2cccs2)c2cc(Cl)c3ccnc3c2O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=NO)N2CCN(C)CC2)c(OCc2ccnc2)n1	Cc1ccc(C(=NO)N2CCN(C)CC2)c(OCc2ccnc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CCc2cc(O)cc(OC)c2)cc1	COc1ccc(CCc2cc(O)cc(OC)c2)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
CCCCCCCCCCCCCOc1ccc(C=C(C)C(=O)OC)cc1OC	CCCCCCCCCCCCCOc1ccc(C=C(C)C(=O)OC)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)Nc1ccc2c(c1)S(=O)(=O)N=C(C1=C(O)C3C4CCC(C4)C3N(Cc3ccc(C(F)(F)F)c(F)c3)C1=O)N2	CS(=O)(=O)Nc1ccc2c(c1)S(=O)(=O)N=C(C1=C(O)C3C4CCC(C4)C3N(Cc3ccc(C(F)(F)F)c(F)c3)C1=O)N2	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1cc2c(cc1Cl)CNCC2	Oc1cc2c(cc1Cl)CNCC2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1NC(=S)N(c2cc(Cl)ccc2O)C(=O)C1=Cc1ccc(OCcOc2ccc(Cl)cc2)cc1	O=C1NC(=S)N(c2cc(Cl)ccc2O)C(=O)C1=Cc1ccc(OCcOc2ccc(Cl)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1noc(C)c1CN1C(=O)CC2CCCC2C1=O	Cc1noc(C)c1CN1C(=O)CC2CCCC2C1=O	FALSE	TRUE	TRUE
CC(C)C(CO)NC(=O)c1ccc(C(=C2CC3CCC(C2)N3Cc2ccoc2)cc1	CC(C)C(CO)NC(=O)c1ccc(C(=C2CC3CCC(C2)N3Cc2ccoc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)c1ccc(-c2ccc(Cl)c(Cl)c2)o1	CNC(=O)c1ccc(-c2ccc(Cl)c(Cl)c2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(NC(N)=O)C(=O)NCC(=O)NC(CCCCN)C(=O)NC(CCCCN)C(=O)NC(c1ccccc1)c1ccccc1	CC(C)CC(NC(N)=O)C(=O)NCC(=O)NC(CCCCN)C(=O)NC(CCCCN)C(=O)NC(c1ccccc1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(Cc1ccccc([N+](=[O])[O-])c1)C1=Nc2ccccc2Nc2nn(C)cc21	CN(Cc1ccccc([N+](=[O])[O-])c1)C1=Nc2ccccc2Nc2nn(C)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)cc(S(=O)(=O)c2ccccc2Cl)c1	Cc1cc(C)cc(S(=O)(=O)c2ccccc2Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCO(Cn1cnen1)c1ccc(Cl)cc1Cl	CCCO(Cn1cnen1)c1ccc(Cl)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)N=C(NC#N)NCCCCN=C(N)NCc1ccccc1	CCOC(=O)N=C(NC#N)NCCCCN=C(N)NCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC1Oc2cccc(Cl)c2-c2ccc3c(c21)C(C)=CC(C)(C)N3	CCCC1Oc2cccc(Cl)c2-c2ccc3c(c21)C(C)=CC(C)(C)N3	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2nc(C3CCN(C4CCN(C(=O)c5ccc(C)nc5)CC4)CC3)co2)cc1	COc1ccc(-c2nc(C3CCN(C4CCN(C(=O)c5ccc(C)nc5)CC4)CC3)co2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(=O)Nc1ccc(C(=O)CCc2ccccc2F)cc1O	CC(C)C(=O)Nc1ccc(C(=O)CCc2ccccc2F)cc1O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(N2C(=O)CC(N3CCN(c4cc(C)ccc4C)CC3)C2=O)cc1	COc1ccc(N2C(=O)CC(N3CCN(c4cc(C)ccc4C)CC3)C2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(N=C2S(Cc3ccccc3Cl)C(C)S(=Nc3ccccc3)=N2)cc1	Cc1ccc(N=C2N=C(C)S(=Nc3ccccc3)C(c3ccccc3Cl)S2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)Cn1c(SCc2ccc(F)cc2)nc2c1c(=O)[nH]c(=O)n2C	CC(C)Cn1c(SCc2ccc(F)cc2)nc2c1c(=O)[nH]c(=O)n2C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NO)C1CCC(=O)N1Cc1ccc(OCc2ccc(Cl)cc2)cc1	O=C(NO)C1CCC(=O)N1Cc1ccc(OCc2ccc(Cl)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
FC(F)(F)OC1cccc(CN2CCN(CCCNc3cnc4cc(Cl)ccc34)CC2)c1	FC(F)(F)OC1cccc(CN2CCN(CCCNc3cnc4cc(Cl)ccc34)CC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCc1ccc(Cl)cc1)c1ccc(Cn2cc(Br)nn2)cc1	O=C(NCc1ccc(Cl)cc1)c1ccc(Cn2cc(Br)nn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1cc2c3ccccc3[nH]c2c2cn(CCOC3OC(COC(C)=O)C(OC(C)=O)C3OC(C)=O)nc12	COC(=O)c1cc2c3ccccc3[nH]c2c2cn(CCOC3OC(COC(C)=O)C(OC(C)=O)C3OC(C)=O)nc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CNc1ccccc(F)c1)NN=C1C(=O)Nc2ccc(Cl)cc21	O=C(CNc1ccccc(F)c1)NN=C1C(=O)Nc2ccc(Cl)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cc1cccs1)OCC(=O)c1ccc(F)cc1	O=C(Cc1cccs1)OCC(=O)c1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cn(CCC(=O)O)c(=O)[nH]c1=O	Cc1cn(CCC(=O)O)c(=O)[nH]c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
c1csc(-c2nnn3c2COC(CNc2ccoc2)C3)c1	c1csc(-c2nnn3c2COC(CNc2ccoc2)C3)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCN1C(C2CC2)CC1C(O)=NC(CCCCN)C(O)=NC1CC1	CCCCCCCCN1C(C2CC2)CC1C(O)=NC(CCCCN)C(O)=NC1CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)N1C2CCC1CC(NCc1ccc(-c3ccccc3-c3nn[nH]n3)cc1)C2	CCOC(=O)N1C2CCC1CC(NCc1ccc(-c3ccccc3-c3nn[nH]n3)cc1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
COCCN=C(S)N1CCC(NC2CCCC2)CC1	COCCN=C(S)N1CCC(NC2CCCC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1cnccc1P(=O)(O)O	O=C(O)c1cnccc1P(=O)(O)O	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c(C(N)CS)nc2c(N)nc(N)nc21	Cn1c(C(N)CS)nc2c(N)nc(N)nc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC1Cc2oc(cc2C(=O)NCC2CC3c4ccccc4C2c2cccc[n+]23)-c2ccc(cc2)C[N+]1(C)CC	CCCCC1Cc2oc(cc2C(=O)NCC2CC3c4ccccc4C2c2cccc[n+]23)-c2ccc(cc2)C[N+]1(C)CC	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)N1CCC(N(C)C(=O)c2cccc(NCc3ccnc3)c2)CC1	CC(=O)N1CCC(N(C)C(=O)c2cccc(NCc3ccnc3)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
N#CC(=Cc1ccc(O)c(O)c1)c1c(O)cnc2c(C(F)(F)F)ccccc12	N#CC(=Cc1ccc(O)c(O)c1)c1c(O)cnc2c(C(F)(F)F)ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1ccc(OCcN2C(=O)N(C)N=C3CC(C)(C)CC(O)=C3C2=O)cc1	CC(C)c1ccc(OCcN2C(=O)C3=C(O)CC(C)(C)CC3=NN(C)C2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C)c(NC(=O)Nc2ccc(OC3cnc(-c4cc(C(=O)NCC(=O)O)c[nH]4)c3)cc2)c1	Cc1ccc(C)c(NC(=O)Nc2ccc(OC3cnc(-c4cc(C(=O)NCC(=O)O)c[nH]4)c3)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
(C)N1CCc2c([nH]c3ccccc23)C(C(=O)Nc2ccco2)C1	(C)N1CCc2c([nH]c3ccccc23)C(C(=O)Nc2ccco2)C1	FALSE	TRUE	TRUE
CC1NC(=O)C(CCCN=C(N)N)NC(=O)C(CCCCN)NC(=O)C(C)C)NC(=O)C(CO)NC(=O)C(CO)NC1=O	CC1NC(=O)C(CCCN=C(N)N)NC(=O)C(CCCCN)NC(=O)C(C)C)NC(=O)C(CO)NC(=O)C(CO)NC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(CC(=O)Nc1nccs1)N(Cl)Cl	CC(C)(CC(=O)Nc1nccs1)N(Cl)Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CC12CCC3c4ccc(O)cc4CCC3C1CC1C3C(CCC3(C)C(=O)OCCl)C(C)(CNC(=O)C33CCC(C)C)CC3)C12	CC12CCC3c4ccc(O)cc4CCC3C1CC1C3C(CCC3(C)C(=O)OCCl)C(C)(CNC(=O)C33CCC(C)C)CC3)C12	FALSE	TRUE	TRUE
O=C1C(=Cc2ccccc2)c2ccccc2-c2ccccc21	O=C1C(=Cc2ccccc2)c2ccccc2-c2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCOCC(COC(C)=O)OC(=O)CCc1ccc(OS(=O)(=O))cc1	CCOCC(COC(C)=O)OC(=O)CCc1ccc(OS(=O)(=O))cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1noc(C)c1-c1ccc2c(c1)C(c1ccc(Cl)cc1)(c1ccnc1)C(O)=N2	Cc1noc(C)c1-c1ccc2c(c1)C(c1ccc(Cl)cc1)(c1ccnc1)C(O)=N2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C)c(NC(=O)C=NO)c1	Cc1ccc(C)c(NC(=O)C=NO)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1cn(Cc2ccccc2)c2cccc(F)c2c1=O	O=C(O)c1cn(Cc2ccccc2)c2cccc(F)c2c1=O	TRUE	TRUE	FALSE
CS(=O)(=O)c1ccc2c(C3CCN(Cc4ccc(-c5nc6ccc(C(F)(F)F)cc6[nH]5)cc4)CC3)c[nH]c2c1	CS(=O)(=O)c1ccc2c(C3CCN(Cc4ccc(-c5nc6ccc(C(F)(F)F)cc6[nH]5)cc4)CC3)c[nH]c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C[n+]1nc(-c2ccccc2)c2cc(Cc3ccc(Cl)cc3)ccc21)c1ccc2ccccc2c1	O=C(C[n+]1nc(-c2ccccc2)c2cc(Cc3ccc(Cl)cc3)ccc21)c1ccc2ccccc2c1	FALSE	TRUE	TRUE
CC1(C)OCC2CO C3(CC4C(C)(CO)CCCC24S(=O)N(Sc2ccc(C(F)(F)F)cc2)C35O)O1	CC1(C)OCC2CO C3(CC4C(C)(CO)CCCC24S(=O)N(Sc2ccc(C(F)(F)F)cc2)C35O)O1	FALSE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)Cc2c(Cl)ccccc2Cl)o1	Cc1ccc(C(=O)Cc2c(Cl)ccccc2Cl)o1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(N=C(O)Nc1cc2[nH][nH]c(=Nc3ccccc3)c2cn1)c1ccccc1	CC(N=C(O)Nc1cc2[nH][nH]c(=Nc3ccccc3)c2cn1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1cc2nc(-c3c(F)ccccc3F)[nH]c2cc1NC(=S)Nc1ccnc1	Cc1cc2nc(-c3c(F)ccccc3F)[nH]c2cc1NC(=S)Nc1ccnc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCOc1ccc(CC(NC(=O)c2c(C)nn(-c3ccccc3)c2C)C(=O)NC2CCC(O)CC2)cc1	CCCOc1ccc(CC(NC(=O)c2c(C)nn(-c3ccccc3)c2C)C(=O)NC2CCC(O)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C2C3C(=O)N(c4ccc(C)cc4)C(=O)C3ON2c2ncc(C(F)(F)F)cc2Cl)ccc1OCc1ccccc1	COc1cc(C2C3C(=O)N(c4ccc(C)cc4)C(=O)C3ON2c2ncc(C(F)(F)F)cc2Cl)ccc1OCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C1=C(C)NC(SC)=C(C#N)C1c1ccccc1	COC(=O)C1=C(C)NC(SC)=C(C#N)C1c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCNC(=O)Nc1ccc(-c2nc(N3CC4CC3CO4)c3cnn(C4CCN(C5CCCC5)C4)c3n2)cc1	CCNC(=O)Nc1ccc(-c2nc(N3CC4CC3CO4)c3cnn(C4CCN(C5CCCC5)C4)c3n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CS5c1nncl(-c2cccc(C)c2)n1-c1ccccc1	CS5c1nncl(-c2cccc(C)c2)n1-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN=C1SC(=Cc2cc(C)n(-c3c(F)ccccc3F)c2C)C(=O)N1CC	CCN=C1SC(=Cc2cc(C)n(-c3c(F)ccccc3F)c2C)C(=O)N1CC	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(-n2cccn2)cc1)c1ccc([N+](=[O])[O-])o1	O=C(Nc1ccc(-n2cccn2)cc1)c1ccc([N+](=[O])[O-])o1	TRUE	TRUE	TRUE
OCc1ccc(O)c(CNc2ccc(OC(F)F)c(OCc3CC3)c2)c1	OCc1ccc(O)c(CNc2ccc(OC(F)F)c(OCc3CC3)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2nnc(Nc3cccc(Br)c3)c2cc1OC	COc1cc2nnc(Nc3cccc(Br)c3)c2cc1OC	TRUE	FALSE	TRUE
CCCCCCCCCCCCCNC(=O)NC(CCC(=O)OC1CCCCC1)C(O)CP(=O)(O)O	CCCCCCCCCCCCCNC(=O)NC(CCC(=O)OC1CCCCC1)C(O)CP(=O)(O)O	TRUE	TRUE	TRUE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CN(C)C(=O)CN1CCc2cnc(OCC(F)(F)F)nc2CC1=O	CN(C)C(=O)CN1CCc2cnc(OCC(F)(F)F)nc2CC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)c1ccc(N2CCN(C(=O)c3ccc(NS(=O)(=O)c4ccc(OC(F)(F)F)cc4)cc3)CC2)c(F)c1	CC(=O)c1ccc(N2CCN(C(=O)c3ccc(NS(=O)(=O)c4ccc(OC(F)(F)F)cc4)cc3)CC2)c(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(-c2cc(C(=O)Nc3cc4ccc(OC5CCN(C)CC5)c(OC)c4oc3=O)ccc2OC)c1	COc1cccc(-c2cc(C(=O)Nc3cc4ccc(OC5CCN(C)CC5)c(OC)c4oc3=O)ccc2OC)c1	TRUE	TRUE	FALSE
N#CC(C=Cc1ccccc1)c1nc(-c2ccc(F)cc2)cs1	N#CC(C=Cc1ccccc1)c1nc(-c2ccc(F)cc2)cs1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccccc1NC(=O)CSc1nc(C)cc(C)c1C#N	CCc1ccccc1NC(=O)CSc1nc(C)cc(C)c1C#N	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CCN(C2Cc3ccccc3C2)CC1	O=C1CCN(C2Cc3ccccc3C2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(=O)COC(=O)c2ccc(O)c2C)c([N+])(=O)[O-])c1	Cc1ccc(NC(=O)COC(=O)c2ccc(O)c2C)c([N+])(=O)[O-])c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(Nc2sc(C(=O)c3ccccc3)c(N)c2Cl)cc1	CCOc1ccc(Nc2sc(C(=O)c3ccccc3)c(N)c2Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCc1ccc(CCCCOc2ccc(C(=O)C3CCCO3)c(Cl)c2)cc1	CCCCc1ccc(CCCCOc2ccc(C(=O)C3CCCO3)c(Cl)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)CSc1nnc2c1cnn2-c1cccc(OC)c1	COC(=O)CSc1nnc2c1cnn2-c1cccc(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2noc(CCC(=O)NCc3cccn3)n2)cc1	Cc1ccc(-c2noc(CCC(=O)NCc3cccn3)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(COc1cc(O)c2c(=O)cc(-c3ccccc3)oc2c1)Oc1ccccc1O	O=C(COc1cc(O)c2c(=O)cc(-c3ccccc3)oc2c1)Oc1ccccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1noc(C)c1CN1CCC2OC(COCC3CCOCC3)CCC21	Cc1noc(C)c1CN1CCC2OC(COCC3CCOCC3)CCC21	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(O)c(Cc(Cc2ccccc2)C2C2CCCC2)cc1OC	COc1cc(O)c(Cc(Cc2ccccc2)C2C2CCCC2)cc1OC	FALSE	TRUE	TRUE
COc(=O)C1CCCN1C(=O)C1(Cc2ccccc2)CCN(C(=O)Nc2ncc(C)s2)CC1	COc(=O)C1CCCN1C(=O)C1(Cc2ccccc2)CCN(C(=O)Nc2ncc(C)s2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C2NCCc3c2[nH]c2ccccc32)ccc1O	COc1cc(C2NCCc3c2[nH]c2ccccc32)ccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
COCC(=O)C(CC1CCCCC1)NC(=O)C(CC(C)C)NC(=O)C(NC(=O)C(NC(=O)C(OC(C)C)C)C)C(C)C	COCC(=O)C(CC1CCCCC1)NC(=O)C(CC(C)C)NC(=O)C(NC(=O)C(NC(=O)C(OC(C)C)C)C)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+](O-)]c1cccc(CN2CCN(c3ccccc3O)CC2)c1	O=[N+](O-)]c1cccc(CN2CCN(c3ccccc3O)CC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(Cl)c1NC(=O)COC(=O)c1ccncc1	Cc1cccc(Cl)c1NC(=O)COC(=O)c1ccncc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C(Nc1ccc(C)c(CN2CCCC2)n1)C(N)=O	CC(C(Nc1ccc(C)c(CN2CCCC2)n1)C(N)=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC(Cc1ccccc1)C(=O)N1CCC2(CCCCN2CC(Cc2ccccc2)OC(=O)C(O)CC2CCCC2)CC1)c1ccccc1	O=C(NC(Cc1ccccc1)C(=O)N1CCC2(CCCCN2CC(Cc2ccccc2)OC(=O)C(O)CC2CCCC2)CC1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2cn3c(n2)sc2cc(C(=O)NC4CCCCC4)ccc23)cc1	Cc1ccc(-c2cn3c(n2)sc2cc(C(=O)NC4CCCCC4)ccc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCC(Cn2c(N3CC(C)C(N)=O)(n4cccn4)CC3)nc3cc(-c4nc(=O)o[nH]4)nc(-c4cncc(Cl)c4)c32)CC1	CC1CCC(Cn2c(N3CC(C)C(N)=O)(n4cccn4)CC3)nc3cc(-c4nc(=O)o[nH]4)nc(-c4cncc(Cl)c4)c32)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C(=Cc2ccc(Cl)cc2Cl)Cc2ccccc21	O=C1C(=Cc2ccc(Cl)cc2Cl)Cc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCCO)c1cccc(CS(=O)(=O)c2ccc(OCC3CC3)cc2)o1	O=C(NCCO)c1cccc(CS(=O)(=O)c2ccc(OCC3CC3)cc2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)c1nc2cc(OC)c(Cl)cc2[nH]1	CNC(=O)c1nc2cc(OC)c(Cl)cc2[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=Cc1ccc(CN(CCO)CCO)cc1)NO	O=C(C=Cc1ccc(CN(CCO)CCO)cc1)NO	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ncc2c(n1)CN(CCN(C)C(=O)c1cccs1)CC2	CCc1ncc2c(n1)CN(CCN(C)C(=O)c1cccs1)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1=CS2Cc3c([nH]c4ccccc34)C(c3ccc4c(c3)OCO4)N12	CCOC(=O)C1=CS2Cc3c([nH]c4ccccc34)C(c3ccc4c(c3)OCO4)N12	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cnc2c1C(COCC1CC1)CCCC2NC(=O)N1CCc2ccccc2C1	Cn1cnc2c1C(COCC1CC1)CCCC2NC(=O)N1CCc2ccccc2C1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(Nc2cc(Nc3ccccc3)nc(OC3CCCC3)n2)cc1	c1ccc(Nc2cc(Nc3ccccc3)nc(OC3CCCC3)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(Cc(=O)OCC(=O)N(C)Cc2ccccc2)N2Cc3ccccc3C2=O)cc1	COc1ccc(C(Cc(=O)OCC(=O)N(C)Cc2ccccc2)N2Cc3ccccc3C2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCON=C(c1ccc(-c2nc(OCCCC)c(Cl)cc2C(OC)C2COC(C)C(O)2)cc1)C(F)(F)F	CCCCON=C(c1ccc(-c2nc(OCCCC)c(Cl)cc2C(OC)C2COC(C)C(O)2)cc1)C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CN(C(=O)CNS(=O)(=O)c1ccc2c(c1)CCC2)C1CCCC1)Nc1cccc(Cl)c1	O=C(CN(C(=O)CNS(=O)(=O)c1ccc2c(c1)CCC2)C1CCCC1)Nc1cccc(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COCOc1ccc(C=C2CN(C)CC(=Cc3ccc(OC)cc3)C2=O)cc1	COCOc1ccc(C=C2CN(C)CC(=Cc3ccc(OC)cc3)C2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC1C(=O)N(CC)C2SC(=NCCN3CCOCC3)NN2C1=O	CCC1C(=O)N(CC)C2SC(=NCCN3CCOCC3)NN2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)c1cccc(-c2cc(F)c(-n3c(=O)ccc4ccc(S(=O)(=O)Nc5ccon5)ccc43)cc2F)c1	CC(O)c1cccc(-c2cc(F)c(-n3c(=O)ccc4ccc(S(=O)(=O)Nc5ccon5)ccc43)cc2F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1C2CCC1CC(N=C(O)c1cc3cc(Nc4ncccc(-c5cccn5)n4)ccc3[nH]1)C2	CN1C2CCC1CC(N=C(O)c1cc3cc(Nc4ncccc(-c5cccn5)n4)ccc3[nH]1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c(-c2nonc2NCC(=O)NC2CC2)nc2ccccc21	Cn1c(-c2nonc2NCC(=O)NC2CC2)nc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
C=C1CC23CC1CCC2C1(C)CCC(OC(=O)c2ccccc2)C(C)(COC(C)=O)C1CCC(C3)C1(C)CO	C=C1CC23CC1CCC2C1(C)CCC(OC(=O)c2ccccc2)C(C)(COC(C)=O)C1CCC(C3)C1(C)CO	FALSE	TRUE	TRUE
COc1cc(C23CC2CNC3)c(F)cc1-n1c(=O)ccc2cc(S(=O)(=O)Nc3nccs3)ccc21	COc1cc(C23CC2CNC3)c(F)cc1-n1c(=O)ccc2cc(S(=O)(=O)Nc3nccs3)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NC(c1ccccc1)c1nc(-c2ccc(F)cc2C#N)c[nH]1	CC(=O)NC(c1ccccc1)c1nc(-c2ccc(F)cc2C#N)c[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ncc(-c2ccc(-c3ccccc3S(N)(=O)=O)cc2F)cn1	Nc1ncc(-c2ccc(-c3ccccc3S(N)(=O)=O)cc2F)cn1	TRUE	TRUE	FALSE
CN(c1c2ccccc2nc2cc(S(N)(=O)=O)ccc12)S(C)(=O)=O	CN(c1c2ccccc2nc2cc(S(N)(=O)=O)ccc12)S(C)(=O)=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc1C(=O)NC(c1cnncn1)c1ccc2cccn2c1O	Cc1ccccc1C(=O)NC(c1cnncn1)c1ccc2cccn2c1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCN1cc(Cc2Oc3ccccc4cccc(c34)C2CN2CCN(CCO)CC2)nn1	CCCCCCCCCN1cc(Cc2Oc3ccccc4cccc(c34)C2CN2CCN(CCO)CC2)nn1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1Cc2cc(OCCCN3CCN(CCO)CC3)ccc2NC(CC(=O)O)C1=O	CCN1Cc2cc(OCCCN3CCN(CCO)CC3)ccc2NC(CC(=O)O)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1ccc(-c2ccc3ccccc(F)c3n2)nn1-c1cccn1	O=c1ccc(-c2ccc3ccccc(F)c3n2)nn1-c1cccn1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(CN2CCCC3(CC(=O)N(N)C3=O)C2)s1	Cc1ccc(CN2CCCC3(CC(=O)N(N)C3=O)C2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)N1CCN(c2nc(-c3cc([N+])(=O)[O-])ccc3Cl)cs2)CC1	CC(=O)N1CCN(c2nc(-c3cc([N+])(=O)[O-])ccc3Cl)cs2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1ccccc2c1C(=O)N(C1CCN(C3CCCC3)CC1)C2	NC(=O)c1ccccc2c1C(=O)N(C1CCN(C3CCCC3)CC1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
CSc1nc(-c2ccc(F)cc2)c(-c2cncc2)[nH]1	CSc1nc(-c2ccc(F)cc2)c(-c2cncc2)[nH]1	TRUE	TRUE	FALSE
CNc1cccc(C)c1CN(C(=O)N1CCN(CCc2c[nH]c3ccc(OC)c23)CC1	CNc1cccc(C)c1CN(C(=O)N1CCN(CCc2c[nH]c3ccc(OC)c23)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(OCc2csc(-c3ccc(C(N)=O)cc3)n2)c2cc(-c3cn4nc(OC)s4n3)oc2c1	COc1cc(OCc2csc(-c3ccc(C(N)=O)cc3)n2)c2cc(-c3cn4nc(OC)s4n3)oc2c1	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1ccccc1C(=O)N(C)C1CCC2(C)C(CCC3C2C2CC4OC4C2(O)C3OC(=O)C23CCC3)C1	Cc1ccccc1C(=O)N(C)C1CCC2(C)C(CCC3C2C2CC4OC4C2(O)C3OC(=O)C23CCC3)C1	FALSE	TRUE	TRUE
CCn1cc(CNC(=O)c2cnc(N(C)CC(C)C)c(Cl)c2)cn1	CCn1cc(CNC(=O)c2cnc(N(C)CC(C)C)c(Cl)c2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C(=O)Cc1cc(Cc(=O)O)cs1)c1ccc(OP(=O)(O)O)cc1	CN(C(=O)Cc1cc(Cc(=O)O)cs1)c1ccc(OP(=O)(O)O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2ccc3c(c2)C2(COC(N)=N2)C2(COC2)C2(CCC2)O3)nc1C	COc1ccc(-c2ccc3c(c2)C2(COC(N)=N2)C2(COC2)C2(CCC2)O3)nc1C	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C1(Cc2ccccc2)C2CN(Cc3ccccc3)c3ccccc3)CC21	COC(=O)C1(Cc2ccccc2)C2CN(Cc3ccccc3)c3ccccc3)CC21	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+](O-)]c1ccc(Cl)c(C=NN=c2nc3ccccc3[nH]c3ccccc23)c1	O=[N+](O-)]c1ccc(Cl)c(C=NN=c2nc3ccccc3[nH]c3ccccc23)c1	FALSE	TRUE	TRUE
CC(C)C(=O)SCCC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)C(CC(C)C)NC(=O)C1CCCN1C(=O)C(CC(C)C)NC(=O)OC(C)C(C)C	CCC(C)C(=O)SCCC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)C(CC(C)C)NC(=O)C1CCCN1C(=O)C(CC(C)C)NC(=O)OC(C)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C(=O)OC1N=C(c2ccc(S(C)(=O)=O)cc2)c2cc(F)ccc2NC1=O)c1ccc(OC(F)(F)F)cc1	CN(C(=O)OC1N=C(c2ccc(S(C)(=O)=O)cc2)c2cc(F)ccc2NC1=O)c1ccc(OC(F)(F)F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCc1nnc(NC(=O)c2cccc(NS(=O)(=O)c3cccc4cccn34)c2)s1	CCCCc1nnc(NC(=O)c2cccc(NS(=O)(=O)c3cccc4cccn34)c2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2[nH]ncc2C=NNc2nc3ccccc3c(=O)n2-c2ccccc2)cc1	Cc1ccc(-c2[nH]ncc2C=NNc2nc3ccccc3c(=O)n2-c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1Cl)C=C1C(C#N)N3C(=O)c1ccccc1C3[N+](O-)]CC1CC1	COc1ccc2c(c1Cl)C=C1C(C#N)N3C(=O)c1ccccc1C3[N+](O-)]CC1CC1	FALSE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCCC1=C(C)C(=O)C(OC(C)=O)=C(CCCCCC(O)CCCCCCCC)C1=O	CCCCCCCCCCCCC1=C(C)C(=O)C(OC(C)=O)=C(CCCCCC(O)CCCCCCCC)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ccc(Sc2ccc3c(c2)NC(=O)CO3)cc1	Nc1ccc(Sc2ccc3c(c2)NC(=O)CO3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)C(=O)c1ccc(-c2ccc3nccn(NCC4(F)CCNCC4)c3c2)cc1	CN(C)C(=O)c1ccc(-c2ccc3nccn(NCC4(F)CCNCC4)c3c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Fc1cccc(C=Nc2ccc(N3CCOCC3)nc2)c1	Fc1cccc(C=Nc2ccc(N3CCOCC3)nc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1nccc1-n1cc(C(=O)O)c(=O)c2cc(N3CCNCC3)c(N3CCC(c4ccccc4)CC3)nc21	Cn1nccc1-n1cc(C(=O)O)c(=O)c2cc(N3CCNCC3)c(N3CCC(c4ccccc4)CC3)nc21	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C(=O)NN=C2C(=O)N(CCc3c[nH]c4ccccc34)c3ccc(Br)cc32)cc(OC)c1OC	COc1cc(C(=O)NN=C2C(=O)N(CCc3c[nH]c4ccccc34)c3ccc(Br)cc32)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(cc1OC)C1c3ccc(OC)c(OC)c3OCC1C(c1ccc(OC)c(OC3CC(N4CCCCC4)CCO3)c1)O2	COc1cc2c(cc1OC)C1c3ccc(OC)c(OC)c3OCC1C(c1ccc(OC)c(OC3CC(N4CCCCC4)CCO3)c1)O2	TRUE	TRUE	TRUE
CC1C(C)C(=O)Nc2c(O)cc3c(c21)C(C#N)CCCC3	CC1C(C)C(=O)Nc2c(O)cc3c(c21)C(C#N)CCCC3	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(c1ccccc1)c1sc2nccccc2c1-c1ccccc1	O=S(=O)(c1ccccc1)c1sc2nccccc2c1-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)c2oc(-c3ccc(NC(=O)COc4ccccc4F)cc3)nc2c1	Cc1cc(C)c2oc(-c3ccc(NC(=O)COc4ccccc4F)cc3)nc2c1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C1C(=Cc2ccc(Br)cc2)COCC1=Cc1ccccc1[N+](=O)[O-]	O=C1C(=Cc2ccc(Br)cc2)COCC1=Cc1ccccc1[N+](=O)[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1ccc2c(c1)OC(c1ccc(OCCN3CCCCC3)cc1)C1=C2CCOc2cc3c(cc21)OCO3	Oc1ccc2c(c1)OC(c1ccc(OCCN3CCCCC3)cc1)C1=C2CCOc2cc3c(cc21)OCO3	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)NC(C(=O)O)C(C)C	CC(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)NC(C(=O)O)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1ccc2ccccc2c1	NC(=O)c1ccc2ccccc2c1	TRUE	TRUE	FALSE
Nc1ccc(-c2sc(NC(=O)c3ccccc4ccccc34)n2)cc1	Nc1ccc(-c2sc(NC(=O)c3ccccc4ccccc34)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1ccc(-c2nnc(NCc3nc4cc(Cl)ccc4[nH]3)s2)cc1	COC(=O)c1ccc(-c2nnc(NCc3nc4cc(Cl)ccc4[nH]3)s2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)C(C(=O)N1CCCC1C(=O)N1CCC(c2ccn[nH]2)CC1)c1ccc(Br)cc1	CN(C)C(C(=O)N1CCCC1C(=O)N1CCC(c2ccn[nH]2)CC1)c1ccc(Br)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1c2c(cc(O)c(O)c2O)CN1C=NNCc1ccccc1	O=C1c2c(cc(O)c(O)c2O)CN1C=NNCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CCCCc1ccc(C(=O)N(CCN(C)C)Cc2ccc(F)cc2)cc1	CCCCc1ccc(C(=O)N(CCN(C)C)Cc2ccc(F)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1C1(c2ccccc2)NC(c2ccccc2)C(C(=O)OC)N1S(=O)(=O)c1ccccc1	CC1C1(c2ccccc2)NC(c2ccccc2)C(C(=O)OC)N1S(=O)(=O)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=CC(=O)OCCc2c[nH]c3ccccc23)cccc1OS(=O)(=O)c1ccc(Cl)cc1	COc1cc(C=CC(=O)OCCc2c[nH]c3ccccc23)cccc1OS(=O)(=O)c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCc1cncnc1)c1cc(Oc2cnc3[nH]c(=O)cc(Cl)c23)c(F)cc1F	O=C(NCc1cncnc1)c1cc(Oc2cnc3[nH]c(=O)cc(Cl)c23)c(F)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=C(C#N)C(=O)NCCNC(=O)C#N)=Cc2ccc(OC)c(OC)c2)ccc1O	COc1cc(C=C(C#N)C(=O)NCCNC(=O)C#N)=Cc2ccc(OC)c(OC)c2)ccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(C(=O)N1CC(C)CCC2CCN(C(=O)c3ccc(-n4ccnc4)cc3)CC2)CC1	CCCN(C(=O)N1CC(C)CCC2CCN(C(=O)c3ccc(-n4ccnc4)cc3)CC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1C(C)CC(Oc2cc(CO)ccc2F)CC(C)C1O	CC1CC(Oc2cc(CO)ccc2F)CC(C)C(O)C1C	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1[nH]cnc2nc3c(c(NCCc4cccs4)c1-2)CCCC3		FALSE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1=C(C)NC(=O)CC1c1sccc1C	CCOC(=O)C1=C(C)NC(=O)CC1c1sccc1C	TRUE	TRUE	TRUE
CN=C(O)Nc1ccc(C#Cc2ccc3ncc(N4CCC(C)(C)C4)nc3c2)cc1	CN=C(O)Nc1ccc(C#Cc2ccc3ncc(N4CCC(C)(C)C4)nc3c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(-c2cc(=O)c3c(C)cccc3o2)ccc1O	COc1cc(-c2cc(=O)c3c(C)cccc3o2)ccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CC2c3cc(OC)c(OC)cc3CC[N+](C)CC[N+])(C)(C)CCCCCNC(=O)C=Cc2ccc(OC)c(OC)c2)cc1OC	COc1ccc(C=C(=O)NCCCCC[N+](C)(C)CC[N+](C)CCc3cc(OC)c(OC)cc3C2Cc2ccc(OC)c(OC)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(-c2ccc3nc(Nc4ccc(N5CCOCC5)cc4)[nH]c3n2)cc1	c1ccc(-c2ccc3nc(Nc4ccc(N5CCOCC5)cc4)[nH]c3n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCOc1ccc(C=CC(=O)Nc2ccc3[nH]c(O)nc3c2)cc1	C=CCOc1ccc(C=CC(=O)Nc2ccc3[nH]c(O)nc3c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nnc2n1CCN(Cc1ccc(-c3ccco3)cc1)C2=O	CCc1nnc2n1CCN(Cc1ccc(-c3ccco3)cc1)C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1[nH]nc2c1C1(CCN(CCC3CC3)CC1)Cc1cncnc1-2	Cc1[nH]nc2c1C1(CCN(CCC3CC3)CC1)Cc1cncnc1-2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(Sc1ccc(Cl)cc1Cl)C(=O)NCC1cccO1	CC(Sc1ccc(Cl)cc1Cl)C(=O)NCC1cccO1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)Oc1ccccc1N1CCN(Cc2c[nH]nc2-c2cccc(C(N)=O)n2)CC1	CC(C)Oc1ccccc1N1CCN(Cc2c[nH]nc2-c2cccc(C(N)=O)n2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1cc(OC(=O)N(C)C)nc(C(C)C)n1	CCc1cc(OC(=O)N(C)C)nc(C(C)C)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C=NNC(=O)c2ccc(O)cc2)cc1	Cc1ccc(C=NNC(=O)c2ccc(O)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C(=Cc2ccc(OCCc3c3ccc3)c2)(OCc3ccccc3)c2)Oc2c1c(=O)c1cc(Cl)ccc1n2O	O=C1C(=Cc2ccc(OCCc3c3ccc3)c2)(OCc3ccccc3)c2)Oc2c1c(=O)c1cc(Cl)ccc1n2O	TRUE	TRUE	TRUE
CON(C)CCN(CCC(C)C)C(=O)CNC(=O)c1cc(Nc2nnc3cc(OC)c(OC)cc23)cc(-c2ccc(C)cc2)c1	COc1cc2nnc(Nc3cc(C(=O)NCC(=O)N(CCC(C)C)CCN(C)OC)cc(-c4ccc(C)cc4)c3)c2cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCC(Oc2cc(F)c(C(=O)NS(=O)(=O)N(C)C)cc2C2=CCCC2)CC1	CC1CCC(Oc2cc(F)c(C(=O)NS(=O)(=O)N(C)C)cc2C2=CCCC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2=CC(C(F)F)F)n3nc(C(=O)Nc4ccccc4)cc3N2)cc1	COc1ccc(C2=CC(C(F)F)F)n3nc(C(=O)Nc4ccccc4)cc3N2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ccc(N(Cc2ccccc2F)n2cnnc2)cc1C(F)(F)F	N#Cc1ccc(N(Cc2ccccc2F)n2cnnc2)cc1C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
NC(Cc1ccc(O)cc1)C(=O)N(C)C(=O)O)C1OC(n2ccc(=O)[nH]c2=O)C(O)C1O	NC(Cc1ccc(O)cc1)C(=O)N(C)C(=O)O)C1OC(n2ccc(=O)[nH]c2=O)C(O)C1O	TRUE	TRUE	FALSE
C1=C2Nc3ccccc3C2=[N+](c2ccccc2)C21	C1=c2[nH]c3ccccc3c2=[N+](c2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1ccc(CN2CCN(c3cccn3)CC2)o1	COC(=O)c1ccc(CN2CCN(c3cccn3)CC2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(-c2cncc(-c3cc4ccccc4nc35CCN3CCOCC3)c2)cc1	c1ccc(-c2cncc(-c3cc4ccccc4nc35CCN3CCOCC3)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C1=C(C)C(=O)N(CCCc2[nH]c3ccccc23)C1c1cccn1)c1cccs1	O=C(C1=C(C)C(=O)N(CCCc2c[nH]c3ccccc23)C1c1cccn1)c1cccs1	TRUE	TRUE	TRUE
[O-][S+](c1sc(-c2ccc(Cl)cc2)nc1-c1ccsc1)C(F)(F)F	[O-][S+](c1sc(-c2ccc(Cl)cc2)nc1-c1ccsc1)C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(COc2nc(C(F)(F)F)ccc2C(F)(F)F)Cn2cc([N+](=O)[O-])nc2O1	CC1(COc2nc(C(F)(F)F)ccc2C(F)(F)F)Cn2cc([N+](=O)[O-])nc2O1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C2Oc3cc(C4Oc5cc(O)cc(O)c5C(=O)C4O)ccc3OC2CO)ccc1O	COc1cc(C2Oc3cc(C4Oc5cc(O)cc(O)c5C(=O)C4O)ccc3OC2CO)ccc1O	TRUE	TRUE	FALSE
N=C(N)NCCCC1NC(=O)C(Cc2c[nH]c3[nH]ccc23)NC(=O)C2CCCN2C(=O)C(Cc2CCCC2)NC(=O)C(Cc2c[nH]c3ccccc23)NC1=O	N=C(N)NCCCC1NC(=O)C(Cc2c[nH]c3[nH]ccc23)NC(=O)C2CCCN2C(=O)C(Cc2CCCC2)NC(=O)C(Cc2c[nH]c3ccccc23)NC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC(C)CC(N)c1nn[nH]1)C(=O)N(C)CC(C)C(=O)N(C)CC(C)C(=O)N(C)CC1cccc1)C(=O)N(C)CCCN=C(N)N)C(=O)NCC1cccc1	CCCC(C)CC(N)c1nn[nH]1)C(=O)N(C)CC(C)C(=O)N(C)CC(C)C(=O)N(C)CC1cccc1)C(=O)N(C)CCCN=C(N)N)C(=O)NCC1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1cc2c3c(cc(F)c(O)c3c1)C(=O)NC2=O	COC(=O)c1cc2c3c(cc(F)c(O)c3c1)C(=O)NC2=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(N)nc2c1cc(-c1cnn(C)c1)c(=O)n2C1CCCC1	Cc1nc(N)nc2c1cc(-c1cnn(C)c1)c(=O)n2C1CCCC1	TRUE	TRUE	FALSE
c1coc(-c2nnc(SCCCN3Cc4cc5ccc(-c6cccn6)cc5nc4C3)o2)c1	c1cnncc(-c2ccc3cc4c(nc3c2)CN(CCCSc2nnc(-c3ccco3)o2)CC4)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC1=C(C(=O)OCC)C(c2ccccc2)NC(=O)N1	CCCC1=C(C(=O)OCC)C(c2ccccc2)NC(=O)N1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ncc(Cc2ccc(Cl)cc2)c(N)n1	Nc1ncc(Cc2ccc(Cl)cc2)c(N)n1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)CCC=C(CO)C(=O)O	CC(C)CCC=C(CO)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Sc2ccc(NC(=O)c3ccco3)cc2)nn1	COc1ccc(Sc2ccc(NC(=O)c3ccco3)cc2)nn1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2nc3cc(NC(=O)CCc4ccccc4F)ccc3o2)cc1	COc1ccc(-c2nc3cc(NC(=O)CCc4ccccc4F)ccc3o2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C=CSc1nc2cc(Br)c(Br)cc2s1	CCOC(=O)C=CSc1nc2cc(Br)c(Br)cc2s1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(NC(=O)N2CCC(NC(=O)C3CCCC3)CC2)c1	COc1cccc(NC(=O)N2CCC(NC(=O)C3CCCC3)CC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1sc(c(Cc2ccc(NS(=O)(=O)O)c2)NC(=O)CCc2ccc3c(c2)OCO3)n1	CCOC(=O)c1sc(c(Cc2ccc(NS(=O)(=O)O)c2)NC(=O)CCc2ccc3c(c2)OCO3)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=C(F)C(=O)Nc1ccc(-c2ccccc2S(N)(=O)=O)cc1)c1cccc(C(=N)N)c1	CC(=C(F)C(=O)Nc1ccc(-c2ccccc2S(N)(=O)=O)cc1)c1cccc(C(=N)N)c1	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1ccc(NC(=O)C2Cc3ccccc3N2C(=O)CN(C)S(=O)(=O)c2ccccc2)cc1C	Cc1ccc(NC(=O)C2Cc3ccccc3N2C(=O)CN(C)S(=O)(=O)c2ccccc2)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(NC(=O)C)CC(C)C)NC(=O)C(CC(C)C)NC(=O)C(CO)NC(=O)CNC)C(=O)NC(C)C(=O)O	CC(C)C(NC(=O)C)CC(C)C)NC(=O)C(CC(C)C)NC(=O)C(CO)NC(=O)CNC)C(=O)NC(C)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)N2CCN(C(=O)Cn3cc(C(F)(F)F)ccc3=O)CC2)cc1	Cc1ccc(S(=O)(=O)N2CCN(C(=O)Cn3cc(C(F)(F)F)ccc3=O)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1-c1cccc(-c2[nH]c(C3=NC(C)C)C4(CC4)CN3)cc2-c2ccc3nccnc3c2)n1	COc1ccccc1-c1cccc(-c2[nH]c(C3=NC(C)C)C4(CC4)CN3)cc2-c2ccc3nccnc3c2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)C(=O)C=CCc1ccc(Br)cc1	CN(C)C(=O)C=CCc1ccc(Br)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(O)CC1CC2(C)C(CCC3C4(C)CCC(O)C(C)(C)C4CCC32C)CC1OC1OC(C(C)(C)O)C(O)C(O)C1O	CC(C)(O)CC1CC2(C)C(CCC3C4(C)CCC(O)C(C)(C)C4CCC32C)CC1OC1OC(C(C)(C)O)C(O)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(CNC(=O)C)S+](O)Cc2nc(-c3ccccc3Cl)oc2C)cc1	Cc1ccc(CNC(=O)C)S+](O)Cc2nc(-c3ccccc3Cl)oc2C)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
COc1cc(O)c(C)c(O)c1C(=O)OCCO	COc1cc(O)c(C)c(O)c1C(=O)OCCO	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NC(=O)Cl)c(C(N)=O)c1	COc1ccc(NC(=O)Cl)c(C(N)=O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN=C(O)CC1(N=C(O)c2cc(OCC(F)(F)F)c(C3CC3)cn2)COC1	CN=C(O)CC1(N=C(O)c2cc(OCC(F)(F)F)c(C3CC3)cn2)COC1	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1cc(C(=O)NC(C)c2ccc(-n3cccn3)cc2)no1	Cc1cc(C(=O)NC(C)c2ccc(-n3cccn3)cc2)no1	TRUE	TRUE	TRUE
CCSc1ccc(-c2nc3cc(C)ccn3c2NC2CC2)cc1	CCSc1ccc(-c2nc3cc(C)ccn3c2NC2CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)OC1CC2(C)CC1C2(C)OCc1ccccc1	CC(=O)OC1CC2(C)CC1C2(C)OCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-n2c3c(c(=O)[nH]c2=O)C(NC(=O)CCc2ccccc2)SC3=Nc2ccc(Cl)cc2)cc1C	Cc1ccc(-n2c3c(c(=O)[nH]c2=O)C(NC(=O)CCc2ccccc2)SC3=Nc2ccc(Cl)cc2)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc2c(s1)CCc1cc(OCCCC(=O)N3CCOCC3)ccc1-2	Nc1nc2c(s1)CCc1cc(OCCCC(=O)N3CCOCC3)ccc1-2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(N)C(=O)NC(Cc1ccc2ccccc2c1)C(=O)C(F)(F)C(=O)NC(C)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)CCN(C)C	CC(N)C(=O)NC(Cc1ccc2ccccc2c1)C(=O)C(F)(F)C(=O)NC(C)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)CCN(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C(c1cccs1)C1CC1	O=C(O)C(c1cccs1)C1CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cc1CCN(C(=O)N2CCCC(=O)N2)CC1)Nc1cccc(F)c1	O=C(Cc1CCN(C(=O)N2CCCC(=O)N2)CC1)Nc1cccc(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
NOCCCCc1cn(CCCN(CCO)CCO)nn1	NOCCCCc1cn(CCCN(CCO)CCO)nn1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C=Cn1cnc(N)n1	CCOC(=O)C=Cn1cnc(N)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc(-c2nc3cnccc3n2CC2CCCC2)c2cncnc21	Cn1cc(-c2nc3cnccc3n2CC2CCCC2)c2cncnc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)N1CCCC1C(=O)NC(CC(C)C)C(=O)NC(C)C(=O)NC(C)C(=O)NC(CS)C(N)=O	CC(=O)N1CCCC1C(=O)NC(CC(C)C)C(=O)NC(C)C(=O)NC(C)C(=O)NC(CS)C(N)=O	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)Nc1sc2ccccc2c1-c1nc(-c2cncnc2)c(N2CCOCC2)[nH]1	NC(=O)Nc1sc2ccccc2c1-c1nc(-c2cncnc2)c(N2CCOCC2)[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(=O)NC1C(OCCCO)C(CO)C(O)C1OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O	CC(C)C(=O)NC1C(OCCCO)C(CO)C(O)C1OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(NC(=O)C)NC(=O)C(CC(C)C)NC(=O)OCc1ccccc1)C(O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)OC(C)C(=O)OCc1ccccc1	CC(C)CC(NC(=O)C)NC(=O)C(CC(C)C)NC(=O)C1Cc2ccccc2CN1C(=O)OCc1ccccc1)C(O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)OC(C)C(=O)OCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc2c(c(=O)o1)C=C1CC(C)C(C)CNCc3ccc(-c4ccccc4)cc3)CC1O2	Cc1cc2c(c(=O)o1)C=C1CC(C)C(C)CNCc3ccc(-c4ccccc4)cc3)CC1O2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)NCC(=O)OCC(=O)c2ccncnc2)cc1C	Cc1ccc(S(=O)(=O)NCC(=O)OCC(=O)c2ccncnc2)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
CN1C(=O)C(CC(C)(C)C)N(C)C(=O)c2ccncnc21	CN1C(=O)C(CC(C)(C)C)N(C)C(=O)c2ccncnc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1nc(N2CCSCC2)c2nnn(CC3CCN(Cc4ccccc4)CC3)c2n1	CC(C)(C)c1nc(N2CCSCC2)c2nnn(CC3CCN(Cc4ccccc4)CC3)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)NC(C)C)cc1-c1ccc2cc(NC(=O)C3CC3)ncc2c1	Cc1ccc(C(=O)NC(C)C)cc1-c1ccc2cc(NC(=O)C3CC3)ncc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc1-n1c(-c2ccc(F)cc2)cc(CNc2cccc(NC(=O)c3ccccc(Cl)c3C)c2)c1C	Cc1ccccc1-n1c(-c2ccc(F)cc2)cc(CNc2cccc(NC(=O)c3ccccc(Cl)c3C)c2)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1[nH]c2ccccc2c1Cc1ccccc1	COC(=O)c1[nH]c2ccccc2c1Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1n[nH]c(N2CCN(c3ccc([N+](=O)[O-])cc3)CC2)n1	Nc1n[nH]c(N2CCN(c3ccc([N+](=O)[O-])cc3)CC2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(-c2cnn(C)c2)ccc1Nc1nc2cc[nH]c(=NCCC3CCOCC3)c2n1	COc1cc(-c2cnn(C)c2)ccc1Nc1nc2cc[nH]c(=NCCC3CCOCC3)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(Cn2c(CNS(N)(=O)=O)nc3cc(Cl)c(Cl)cc32)c1	Cc1cccc(Cn2c(CNS(N)(=O)=O)nc3cc(Cl)c(Cl)cc32)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cc1ccccc1)Nc1ccccc1NC(=O)c1ccccc1	O=C(Cc1ccccc1)Nc1ccccc1NC(=O)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>CC(=O)CCC(=O)Nc1ccc2c(c1)C(=O)NC2=O</chem>	<chem>CC(=O)CCC(=O)Nc1ccc2c(c1)C(=O)NC2=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(S(=O)(=O)N2CC(=C(Cl)Cl)OC(C)(C)C2)ccc1F</chem>	<chem>COc1cc(S(=O)(=O)N2CC(=C(Cl)Cl)OC(C)(C)C2)ccc1F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc2c(c1)c(C1=C(CN3C(=O)OCC3C(C)C)C(=O)N(CCC3CCC([N+](=O)[O-])CC3)C1=O)cn2C</chem>	<chem>COc1ccc2c(c1)c(C1=C(CN3C(=O)OCC3C(C)C)C(=O)N(CCC3CCC([N+](=O)[O-])CC3)C1=O)cn2C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOc1ccc(C(=O)C(=O)c2ccc(-c3ccc4nc(-c5ccccc5O)C)[nH]c4c3)cc2)cc1</chem>	<chem>CCOc1ccc(C(=O)C(=O)c2ccc(-c3ccc4nc(-c5ccccc5O)C)[nH]c4c3)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Clc1ccccc1-c1noc(CCC2C(C)O)CCC2SCC2CCCC2)n1</chem>	<chem>OC1CCC(SCC2CCCC2)C(CCCc2nc(-c3ccccc3Cl)no2)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(C2OC(c3cc(Br)c(OC4OC(CO)C(O)C(O)C4O)c(OC)c3)C(F)C2CO)ccc1O</chem>	<chem>COc1cc(C2OC(c3cc(Br)c(OC4OC(CO)C(O)C(O)C4O)c(OC)c3)C(F)C2CO)ccc1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC(=O)c1cnn2ccc(-c3ccc4cc(C(=O)NC5COCS)ccc4n3)nc12</chem>	<chem>NC(=O)c1cnn2ccc(-c3ccc4cc(C(=O)NC5COCS)ccc4n3)nc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOc1cc(OC2CCCC2)cc(C(Nc2ccc(C(=N)N)cc2F)C(=O)NC(Cc2ccccc2)C(N)=O)c1</chem>	<chem>CCOc1cc(OC2CCCC2)cc(C(Nc2ccc(C(=N)N)cc2F)C(=O)NC(Cc2ccccc2)C(N)=O)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1cnc2cc(-c3ccc(C(C)(C)O)nc3)nc(NCCN3CCOCC3)c2c1=O</chem>	<chem>Cn1cnc2cc(-c3ccc(C(C)(C)O)nc3)nc(NCCN3CCOCC3)c2c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(Cc1cnc2nc(N)nc(N)c2n1)c1ccc(C(=O)N(C(CCC(=O)O)C(=O)O)C)cc1</chem>	<chem>CCN(Cc1cnc2nc(N)nc(N)c2n1)c1ccc(C(=O)N(C(CCC(=O)O)C(=O)O)C)cc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CC(c1ccc(Cl)cc1)N1CCC2=C(C1)C(c1cccc(Br)c1)c1ccc(Br)cc1</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1ccc(-c2ccc3c(c2)CC(=O)N(O)C3=O)cc1</chem>	<chem>Nc1ccc(-c2ccc3c(c2)CC(=O)N(O)C3=O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1ccc(Cc2ccc(C3CCN(C4CN(C5CCOCC5)CC4c4ccccc4)CC3)cc2)nn1</chem>	<chem>CCc1ccc(Cc2ccc(C3CCN(C4CN(C5CCOCC5)CC4c4ccccc4)CC3)cc2)nn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(c2cc(NC(=O)c3ccc(OC(F)F)cn3)ccc2F)N=C(N)OCC1F</chem>	<chem>CC1(c2cc(NC(=O)c3ccc(OC(F)F)cn3)ccc2F)N=C(N)OCC1F</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>Cc1ccc(-c2nnc3n2CCN(CCOc2ccccc2)C3=O)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(-c2nnc3n2CCN(CCOc2ccccc2)C3=O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=CCn1c(Cc2ccc(OC)cc2)nnc1SC=C</chem>	<chem>C=CCSc1nnc(Cc2ccc(OC)cc2)n1CC=C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCC(=O)N(Cc1ccnc1)c1cc(F)cc(F)c1</chem>	<chem>COCC(=O)N(Cc1ccnc1)c1cc(F)cc(F)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(NC(=O)c1cno1)c1cnc(OCC23CC4CC(CC(C4)C2)C3)s1</chem>	<chem>CC(NC(=O)c1cno1)c1cnc(OCC23CC4CC(CC(C4)C2)C3)s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(S(=O)(=O)Nc2cccc(C(F)(F)F)c2)cc1C(=O)NC(C)CN1CCN(C)CC1</chem>	<chem>Cc1ccc(S(=O)(=O)Nc2cccc(C(F)(F)F)c2)cc1C(=O)NC(C)CN1CCN(C)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccnc1-c1cnc(C(=O)N)Nc2enn(CC(CF)c3ccccc3F)c2)c1</chem>	<chem>Cc1ccnc1-c1cnc(C(=O)N)Nc2enn(CC(CF)c3ccccc3F)c2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCCNCN(C=O)CSc1nc2c([nH]c3ccccc32)c(=O)n1-c1ccccc1</chem>	<chem>COCCNCN(C=O)CSc1nc2c([nH]c3ccccc32)c(=O)n1-c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nc(-c2ccc(OCCCN3CCOCC3)cc2)cs1</chem>	<chem>Cc1nc(-c2ccc(OCCCN3CCOCC3)cc2)cs1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCn1c(SCC(=O)NC(C)(C)C)nnc1-c1ccnc1</chem>	<chem>CCn1c(SCC(=O)NC(C)(C)C)nnc1-c1ccnc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCC(C=O)OCC(CO(C(=O)CCCCC)OC(=O)CCC</chem>	<chem>CCCCCC(C=O)OCC(COC(=O)CCCCC)OC(=O)CCC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(C)c(C(S(=O)(=O)N)Cc2ccc3c(c2)OCO3)c1</chem>	<chem>Cc1ccc(C)c(C(S(=O)(=O)N)Cc2ccc3c(c2)OCO3)c1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CONc1ncnc2c1ncn2C1OC(COP2(=O)OC(n3ccc(=O)[nH]c3=O)C(O)C2O)C(O)C1O</chem>	<chem>CONc1ncnc2c1ncn2C1OC(COP2(=O)OC(n3ccc(=O)[nH]c3=O)C(O)C2O)C(O)C1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(C)CC(O)CC(C)(CNCc2cc(Br)ccc2Cl)C1</chem>	<chem>CC1(C)CC(O)CC(C)(CNCc2cc(Br)ccc2Cl)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(CNCCCCCNc2c3c(nc4ccccc24)CCCC3)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(CNCCCCCNc2c3c(nc4ccccc24)CCCC3)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)C(CNC(=O)C1CCN(S(=O)(=O)c2ccccc2)CC1)c1ccccc1</chem>	<chem>CN(C)C(CNC(=O)C1CCN(S(=O)(=O)c2ccccc2)CC1)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>COCCOc1ccc(CC2C(N)=NOC2CCSCCCN)cc1</chem>	<chem>COCCOc1ccc(CC2C(N)=NOC2CCSCCCN)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccccc(NC(=O)c2sc3nc(-c4ccccc4)ccc3c2N)c1</chem>	<chem>Cc1ccccc(NC(=O)c2sc3nc(-c4ccccc4)ccc3c2N)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(OC)cc(C(=O)N2CC(=O)Nc3c(F)c(F)c(F)c(F)c32)c1</chem>	<chem>COc1cc(OC)cc(C(=O)N2CC(=O)Nc3c(F)c(F)c(F)c(F)c32)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc2[nH]c(C(=O)Nc3ccc(CN4COCOCC4)cc3)cc2c1</chem>	<chem>COc1ccc2[nH]c(C(=O)Nc3ccc(CN4COCOCC4)cc3)cc2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(-c2nc(-c3ccc(OCC4(C)COC4)c(OCC4CC4)c3)n3c2CCOC(C)C3)cc(C)n1</chem>	<chem>Cc1cc(-c2nc(-c3ccc(OCC4(C)COC4)c(OCC4CC4)c3)n3c2CCOC(C)C3)cc(C)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)c1ccccc1OCCOCCN(C)C</chem>	<chem>CC(C)NCCOCCOc1ccccc1C(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(C)c(C(C2CC2COc2nc(C)ncc2-c2cc(=O)n(C)cc2F)nc1</chem>	<chem>Cc1cnc(C2CC2COc2nc(C)ncc2-c2cc(=O)n(C)cc2F)c(C)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(C)c(C(NC(=O)N(Cc2cccs2)C2CCS(=O)(=O)C2)c(C)C1</chem>	<chem>Cc1cc(C)c(C(NC(=O)N(Cc2cccs2)C2CCS(=O)(=O)C2)c(C)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1c(=O)oc2cc(S(=O)(=O)NCCC(=O)N)C3CCC3)ccc21</chem>	<chem>Cn1c(=O)oc2cc(S(=O)(=O)NCCC(=O)N)C3CCC3)ccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(C(=O)O)CC(=O)NC(C)CCc2ccccc2)cc1S(=O)(=O)N1CCCCC1</chem>	<chem>Cc1ccc(C(=O)OCC(=O)NC(C)CCc2ccccc2)cc1S(=O)(=O)N1CCCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccccc(C)c1OCC(O)CN1CCc2ccccc2C1</chem>	<chem>Cc1ccccc(C)c1OCC(O)CN1CCc2ccccc2C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(C)c2nc(C(=O)N)Cc3ccc(C(F)(F)F)cc3)c(O)c(=O)n2CCN1Cc1c(F)ccccc1Cl</chem>	<chem>CC1(C)c2nc(C(=O)N)Cc3ccc(C(F)(F)F)cc3)c(O)c(=O)n2CCN1Cc1c(F)ccccc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC)CCOc1ccc(Nc2ncc3cnn(C4CCC(N)CC4)c3n2)cc1</chem>	<chem>CCN(CC)CCOc1ccc(Nc2ncc3cnn(C4CCC(N)CC4)c3n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOc1cnccl(-c2cccn2O)c2ccc(C(=O)c3nc4ccccc4[nH]3)cc2)c1</chem>	<chem>CCOc1cnccl(-c2cccn2O)c2ccc(C(=O)c3nc4ccccc4[nH]3)cc2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Cc1ccccc1F)N(c1ccccc1)C1CCN(CCCc2ccccc2)CC1</chem>	<chem>O=C(Cc1ccccc1F)N(c1ccccc1)C1CCN(CCCc2ccccc2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1cc(N2CCOCC2)ccc1CN1CCC(Oc2nnc3sccl(-c4ccccc4)c23)CC1</chem>	<chem>c1ccc(-c2csc3nnccl(OC4CCN(Cc5ccc(N6CCOC6)cc5)CC4)c23)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC(C(=O)C(=O)NCCC(=O)O</chem>	<chem>CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC(C(=O)C(=O)NCCC(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc2c(C(=O)NCCN)Cc3ccc(S(N)(=O)=O)cc3)c(C)n(-c3ccccc3)c2c1</chem>	<chem>Cc1ccc2c(C(=O)NCCN)Cc3ccc(S(N)(=O)=O)cc3)c(C)n(-c3ccccc3)c2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNCCOc1ccccc1-c1ccc(-c2cnc(N)cn2)c(F)c1</chem>	<chem>CNCCOc1ccccc1-c1ccc(-c2cnc(N)cn2)c(F)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1OC(=O)C(C)C(OC2CC(C)(OC)C(C)C(C)O2)C(C)C(OC2OC(C)CC(N(C)C)C2O)C(C)(OC)CC(C)NC(=O)CC(O)C(C)C(OC)C1(C)O</chem>	<chem>CCc1OC(=O)C(C)C(OC2CC(C)(OC)C(C)C(C)O2)C(C)C(OC2OC(C)CC(N(C)C)C2O)C(C)(OC)CC(C)NC(=O)CC(O)C(C)C(OC)C1(C)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)NC(=O)c1cnc2c(c1N)c1ccccc1n2C1CCCC1</chem>	<chem>CC(C)NC(=O)c1cnc2c(c1N)c1ccccc1n2C1CCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(C(=O)N2CCN(C(=O)c3cc4cc(Nc5nccc(-c6ccccc6)n5)ccc4[nH]3)CC2)ccc1C</chem>	<chem>COc1cc(C(=O)N2CCN(C(=O)c3cc4cc(Nc5nccc(-c6ccccc6)n5)ccc4[nH]3)CC2)ccc1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(C=Cc1ccc(C)cc1)c1ccccc(NS(=O)(=O)c2cc(O)ccc2Cl)c1</chem>	<chem>O=C(C=Cc1ccc(C)cc1)c1ccccc(NS(=O)(=O)c2cc(O)ccc2Cl)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1=C(C=CC(=O)C=Cc2cccs2)C(C)(C)CCCC1</chem>	<chem>CC1=C(C=CC(=O)C=Cc2cccs2)C(C)(C)CCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccccc(OCCCN5(=O)(=O)c2ccccc2)c1</chem>	<chem>Cc1ccccc(OCCCN5(=O)(=O)c2ccccc2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1nc(CN2CCN(C(=O)c3ccccc3)CC2)cs1</chem>	<chem>Nc1nc(CN2CCN(C(=O)c3ccccc3)CC2)cs1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1cc(=O)oc2cc(C)cc(OC(C(=O)N)Cc3ccc4c(c3)OCO4)c12</chem>	<chem>CCc1cc(=O)oc2cc(C)cc(OC(C(=O)N)Cc3ccc4c(c3)OCO4)c12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCCCCCCCOc1ccc(C(=O)CCCCCCCC)cc1</chem>	<chem>CCCCCCCCCCCCCOc1ccc(C(=O)CCCCCCCC)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NCCC(=O)N1CCCC1)c1ccccc1Cl</chem>	<chem>O=C(NCCC(=O)N1CCCC1)c1ccccc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CCCCCCCCC(C(=O)O)[S+](([O-])CCc1ccccc1</chem>	<chem>CCCCCCCCC(C(=O)O)[S+](([O-])CCc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCCN(CCO)Cc1ccc2cc(-c3n[nH]c4ccc(C(O)=NC5CCCCC5)cc34)[nH]c2c1</chem>	<chem>COCCN(CCO)Cc1ccc2cc(-c3n[nH]c4ccc(C(O)=NC5CCCCC5)cc34)[nH]c2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc2[nH]c3c(C(=O)C(C)C)cccc3c2cc1Cl</chem>	<chem>COc1cc2[nH]c3c(C(=O)C(C)C)cccc3c2cc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1ccccc2c1C(=O)NC1(CCN(C(=O)Cn3cnc4ccccc43)CC1)N2</chem>	<chem>CCc1ccccc2c1C(=O)NC1(CCN(C(=O)Cn3cnc4ccccc43)CC1)N2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1nc(Cl)nc(-c2ccc(N3CCCC3)cc2)n1</chem>	<chem>Nc1nc(Cl)nc(-c2ccc(N3CCCC3)cc2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)C(NC(=O)c1cccocl)C(=O)N1CCC(O)(c2ccc(Cl)cc2)C(C)(C)C1</chem>	<chem>CC(C)C(NC(=O)c1cccocl)C(=O)N1CCC(O)(c2ccc(Cl)cc2)C(C)(C)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCC(=O)N1CC2COCC2(COCc2cccn2)C1</chem>	<chem>COCC(=O)N1CC2COCC2(COCc2cccn2)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)NCC1CCCN(C(=O)Cc2c(C)c3cc4c(C)[nH]nc4cc3oc2=O)C1</chem>	<chem>CC(=O)NCC1CCCN(C(=O)Cc2c(C)c3cc4c(C)[nH]nc4cc3oc2=O)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1c(S(=O)(=O)O)cc(NC2CCCC2)cc1NS(=O)(=O)c1ccc(-c3ccc([N+](=O)[O-])c3)cc2)cc(NC2CCCC2)cc1S(=O)(=O)O</chem>	<chem>Nc1c(NS(=O)(=O)c2ccc(-c3ccc([N+](=O)[O-])c3)cc2)cc(NC2CCCC2)cc1S(=O)(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=S(=O)(Nc1sc(C)cc1-c1nc2ccccc2s1)c1cc2c(cc1Br)OCO2</chem>	<chem>O=S(=O)(Nc1sc(C)cc1-c1nc2ccccc2s1)c1cc2c(cc1Br)OCO2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOCC1CCCN1P(=O)(OCC1C=CC(n2cc(C)c(=O)[nH]c2=O)O1)Oc1ccccc1[N+](=O)[O-]</chem>	<chem>CCOCC1CCCN1P(=O)(OCC1C=CC(n2cc(C)c(=O)[nH]c2=O)O1)Oc1ccccc1[N+](=O)[O-]</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1ccc(-c2[nH]c3nc(N)nc(N)c3c2CC)cc1</chem>	<chem>CCc1ccc(-c2[nH]c3nc(N)nc(N)c3c2CC)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNc1oc(-c2ccc(S(=O)(=O)N)N3CCCCC3)cc2)nc1C#N</chem>	<chem>CNc1oc(-c2ccc(S(=O)(=O)N)N3CCCCC3)cc2)nc1C#N</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1c2cc(-c3ccc(OC(F)(F)F)cc3)ccc2OCCN1Cc1ncccn1</chem>	<chem>O=C1c2cc(-c3ccc(OC(F)(F)F)cc3)ccc2OCCN1Cc1ncccn1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CCCNc1c(N)c(N(CCO)C(=O)C2(O)CCCC2)c(=O)[nH]c1=O</chem>	<chem>CCCNc1c(N)c(N(CCO)C(=O)C2(O)CCCC2)c(=O)[nH]c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1=NNc2nc3n(c(=O)c2N1)CCc1ccc(OC)nc1-3</chem>	<chem>CC1=NNc2nc3n(c(=O)c2N1)CCc1ccc(OC)nc1-3</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CSCCC(NC(=O)OC(C)(C)C)C(=O)N(C1CCCC1)C1(C(=O)N)Cc2ccccc2)CCN(C(=O)OC(C)(C)C)CC1</chem>	<chem>CSCCC(NC(=O)OC(C)(C)C)C(=O)N(C1CCCC1)C1(C(=O)N)Cc2ccccc2)CCN(C(=O)OC(C)(C)C)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCC1Cc2cc(OS(C)(=O)=O)ccc2-c2c(CC)nn(CC(=O)O)c(=O)c21</chem>	<chem>CCCCC1Cc2cc(OS(C)(=O)=O)ccc2-c2c(CC)nn(CC(=O)O)c(=O)c21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc2c(c1OC)SCC(=O)NCC(=O)N2</chem>	<chem>COc1ccc2c(c1OC)SCC(=O)NCC(=O)N2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(C2c3cc4c(cc3OC(N3CCCS(CCS)C3=O)C2C(=O)OC42C(=O)Nc3ccccc32)cc(OC)c1O</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(NC(=O)C(=O)NCCC2=CCCC2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(NC(=O)C(=O)NCCC2=CCCC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c(Cc2ccc(=O)cc2F)nn2c(C)c(N3CCCC3)cn12</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1csc(CN2CCC(Nc3ncc(C(=O)NO)cn3)C2)n1</chem>	<chem>Cc1csc(CN2CCC(Nc3ncc(C(=O)NO)cn3)C2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nc2c(C)cccc2c(Nc2ccc(F)cc2)c1C</chem>	<chem>Cc1nc2c(C)cccc2c(Nc2ccc(F)cc2)c1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=c1c(CCc2cncn2)non1-c1ccccc1</chem>	<chem>O=c1c(CCc2cncn2)non1-c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
O=C(O)c1ccc(NCCCCCCCCOc2ccc(C(=O)O)cc2)cc1	O=C(O)c1ccc(NCCCCCCCCOc2ccc(C(=O)O)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(OC(C=O)c1cccc1Br)c1cccc1	O=C(OC(C=O)c1cccc1Br)c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CN1C(=O)COc2ccccc21)Nc1cccc1N1CCCCC1	O=C(CN1C(=O)COc2ccccc21)Nc1cccc1N1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCNc1cc(-n2cnnc2Cc2cc(C#N)ccn2)ncc1C(=O)NC1CC1	COCCNc1cc(-n2cnnc2Cc2cc(C#N)ccn2)ncc1C(=O)NC1CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(CSc3nc4ccccc4s3)cc(=O)oc2c1	COc1ccc2c(CSc3nc4ccccc4s3)cc(=O)oc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ccc2c(c1)ccc1cnn(Cc3ccccc3F)c(=O)c12	N#Cc1ccc2c(ccc3cnn(Cc4ccccc4F)c(=O)c32)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(=O)OC1C2C(=O)C=C3C(C2(C)C=C2(C)C1CCC2(O)C(C)C1CCC13C)C(C)C	CC(C)CC(=O)OC1C2C(=O)C=C3C(C(C)C)C2(C)C=C2(C)C1CCC2(O)C(C)C1CCC13C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1c(C)C(O)cc(C)c1Cc1c(OC(C)=O)cc(O)c2c1Oc1c(Br)cc(CCCC(=O)O)cc1OC2	COc1c(C)C(O)cc(C)c1Cc1c(OC(C)=O)cc(O)c2c1Oc1c(Br)cc(CCCC(=O)O)cc1OC2	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)CCC(=O)NC1=C(Cl)C(=O)c2ccccc2C1=O	CCOC(=O)CCC(=O)NC1=C(Cl)C(=O)c2ccccc2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cn1cnc2sccc2c1=O)NN=Cc1ccccc1OC(F)(F)F	O=C(Cn1cnc2sccc2c1=O)NN=Cc1ccccc1OC(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)C1=C(C)C(=O)N(c2cccc(C)c2)C1c1ccccc1	CC(=O)C1=C(C)C(=O)N(c2cccc(C)c2)C1c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCn1cc(C(=O)NC23CC4CC(C(C4)C2)C3)c(=O)c2cc3c(cc21)OCO3	CCCCCn1cc(C(=O)NC23CC4CC(C(C4)C2)C3)c(=O)c2cc3c(cc21)OCO3	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nccn1-c1cc(OC(F)(F)F)c(S(=O)(=O)c2ccccc2Cl)c(-n2cnnn2)c1	Cc1nccn1-c1cc(OC(F)(F)F)c(S(=O)(=O)c2ccccc2Cl)c(-n2cnnn2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC1CCC(c2ccccc2)C1n1cc(C(N)=O)c(Nc2ccc(C(F)(F)F)cc2)n1	CNC1CCC(c2ccccc2)C1n1cc(C(N)=O)c(Nc2ccc(C(F)(F)F)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCCCOC(C=O)NCC[N+](C)(C)C	CCCCCCCCCCCCCOC(C=O)NCC[N+](C)(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)Cc1cn(CC(O)CN(C)CCCCCCNCCCCCCCCNCc2ccc(Cl)cc2)nn1	CN(C)Cc1cn(CC(O)CN(C)CCCCCCNCCCCCCCCNCc2ccc(Cl)cc2)nn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC#Cc1ccc(CCC(=O)N2CCN(c3ccc(C#N)c(OC(C=O)O)c3)CC2)cc1	CC#Cc1ccc(CCC(=O)N2CCN(c3ccc(C#N)c(OC(C=O)O)c3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cn(-c2cc3nc(O)cc(C(F)(F)F)n3n2)cn1	Cc1cn(-c2cc3nc(O)cc(C(F)(F)F)n3n2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(CN)c1ccc(-c2ccc(-c3nc(C(=O)OC)co3)cc2)c(F)c1	C=C(CN)c1ccc(-c2ccc(-c3nc(C(=O)OC)co3)cc2)c(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)CC(N)Cc1c[nH]cn1	NC(=O)CC(N)Cc1c[nH]cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC12CCC3c4ccc(O)c(N)c4CC3C1CCC2=O	CC12CCC3c4ccc(O)c(N)c4CC3C1CCC2=O	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)c1c(NC(=O)c2nc(C3CC3)cnc2Nc2cnnc2)cnn1C	CNC(=O)c1c(NC(=O)c2nc(C3CC3)cnc2Nc2cnnc2)cnn1C	TRUE	TRUE	FALSE
CC(CO)Nc1nc(NC2CCC3(CC2)OCCO3)c2nnc(Cc3ccccc3)c2n1	CC(CO)Nc1nc(NC2CCC3(CC2)OCCO3)c2nnc(Cc3ccccc3)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC(C)NCC(=O)c1ccc(OC)cc1)NC(=O)NCC(C)C	CCCC(C)NCC(=O)c1ccc(OC)cc1)NC(=O)NCC(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
COC1C=CC=C(C)C(=O)NC2=CC(C)=C(C(OC)C(O)C(C)C=C(C)C1O)C(=O)C2=O	COC1C=CC=C(C)C(=O)NC2=CC(C)=C(C(=O)C2=O)C(OC)C(O)C(C)C=C(C)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(-c2cnoc2)ccc1C(C)=NNC(=S)Nn1cnnc1	COc1cc(-c2cnoc2)ccc1C(C)=NNC(=S)Nn1cnnc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1C(=O)NC(c2ccccc2)C(C(=O)OC)=C1C	CCN1C(=O)NC(c2ccccc2)C(C(=O)OC)=C1C	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)(C)C(=O)Nc1ncc(Cc2ccccc2Cl)s1	CC(C)(C)C(=O)Nc1ncc(Cc2ccccc2Cl)s1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nccc(-c2c[nH]c3ncc(-c4cc[nH]n4)cc23)n1	Nc1nccc(-c2c[nH]c3ncc(-c4cc[nH]n4)cc23)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=NNc1nc(-c2ccc(Cl)cc2C)cs1)c1ccccc1	CC(=NNc1nc(-c2ccc(Cl)cc2C)cs1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=NNC(=O)CC1C(=O)NN=C1C)c1ccccc2ccccc12	CC(=NNC(=O)CC1C(=O)NN=C1C)c1ccccc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cc1COCC2CN(CC1)C2)N1CCc2ccccc2C1	O=C(Cc1COCC2CN(CC1)C2)N1CCc2ccccc2C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1)[n+](([O-]))c(C=NNCc1ccc(Cl)cc1Cl)c(C)[n+2][O-]	COc1ccc2c(c1)[n+](([O-]))c(C=NNCc1ccc(Cl)cc1Cl)c(C)[n+2][O-]	TRUE	TRUE	TRUE
Fc1ccc(C2=NC(c3ccc(F)cc3)Nc3nccn32)cc1	Fc1ccc(C2=NC(c3ccc(F)cc3)Nc3nccn32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1cccc(C)c1NC(=O)CN1C(=O)C(c2cccc(Cl)c2)Oc2ccnnc21	CCc1cccc(C)c1NC(=O)CN1C(=O)C(c2cccc(Cl)c2)Oc2ccnnc21	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CGNC(=O)C2CCN(c3nnc(Cl)c3-c3ccccc3)CC2)cc1	COc1ccc(CGNC(=O)C2CCN(c3nnc(Cl)c3-c3ccccc3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccccc1O)c1ccc(Cl)c(S(=O)(=O)N2CCCCC2)c1	O=C(Nc1ccccc1O)c1ccc(Cl)c(S(=O)(=O)N2CCCCC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC=C(C)C(=O)OC1C=C2C(=O)OCC2(C)C2C(CCC(C)(O)CCC=C(C)C(=O)C3OC3C1OC(C)=O)OC(=O)C2CC(C)C	CC=C(C)C(=O)OC1C=C2C(=O)OCC2(C)C2C(CCC(C)(O)CCC=C(C)C(=O)C3OC3C1OC(C)=O)OC(=O)C2CC(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)Oc1ccc(C=NNC(=O)c2ccnnc2)c(O)c1	CC(C)Oc1ccc(C=NNC(=O)c2ccnnc2)c(O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(N)C(=O)Nc1cnc2c(cnn2CCc2ccccc2)c1	CC(N)C(=O)Nc1cnc2c(cnn2CCc2ccccc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ccccc1Sc1ncnc2c1ncn2C1OC(CO)C(F)C1O	Nc1ccccc1Sc1ncnc2c1ncn2C1OC(CO)C(F)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CC(=O)N(C(C)C(=O)N2CCCCC2)C1=O	CC1CC(=O)N(C(C)C(=O)N2CCCCC2)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCNC(=O)C(=O)NC1C2CCN(CC2)C1Cc1ccccc1	CCNC(=O)C(=O)NC1C2CCN(CC2)C1Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1noc(=O)c2ccc(NC(=O)Cn3cc(N=C(O)c4ncoc4-c4ccccc(C)c4)cn3)cc12	Cc1cccc(-c2ocnc2C(O)=Nc2cnn(CC(=O)Nc3ccc4c(=O)onc(C)c4c3)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1[nH]c2ccccc2c1C=Cc1cc(l)c2c(N)c(C#N)c(N)nc2c1	Cc1[nH]c2ccccc2c1C=Cc1cc(l)c2c(N)c(C#N)c(N)nc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)CC(NC(=O)c1[nH]cnc1C(=O)NC1CCCN(C(=O)c2ccccc2)C1)(C=O)OCCCC(C)C	CC(C)CCCC(=O)C(C)CC(O)C(NC(=O)c1[nH]cnc1C(=O)NC1CCCN(C(=O)c2ccccc2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C(C)c1ccc2c(c1)cc(C(C)(C)C(=O)NCc1ccc(C(=N)N)cc1)n2CCc1ccc(-c2ccccc2)cc1	CCOC(=O)C(C)C1ccc2c(c1)cc(C(C)(C)C(=O)NCc1ccc(C(=N)N)cc1)n2CCc1ccc(-c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2cc(O)c3c(C)c(C)COc4cccc5ccccc45)c(=O)oc3c2)cc1	Cc1ccc(-c2cc(O)c3c(C)c(C)COc4cccc5ccccc45)c(=O)oc3c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C=C(NC(=O)c2ccccc2)C(=O)Nc2cccn2)cc1	Cc1ccc(C=C(NC(=O)c2ccccc2)C(=O)Nc2cccn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)n(CC(=O)NC(=S)N2CCN(c3ccccc3)CC2)n1	Cc1cc(C)n(CC(=O)NC(=S)N2CCN(c3ccccc3)CC2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1[nH]n(-c2ccccc2)c(=O)c1N=Nc1ccc(Cl)cc1	Cc1[nH]n(-c2ccccc2)c(=O)c1N=Nc1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(O)Cc1cccc(C(=O)C=Cc2ccc(C=CC(=O)Nc3ccccc3Cl)c(Cl)c2)c1	O=C(O)Cc1cccc(C(=O)C=Cc2ccc(C=CC(=O)Nc3ccccc3Cl)c(Cl)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1CCN(C(=O)c2ccc3oc(COc4cc(C(F)(F)F)nc5ccccc45)cc3c2)CC1	CCN1CCN(C(=O)c2ccc3oc(COc4cc(C(F)(F)F)nc5ccccc45)cc3c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc2nccc(N3CCC(NCc4ccc([N+](=O)[O-])c5cnnc45)CC3)c2c1	CCOc1ccc2nccc(N3CCC(NCc4ccc([N+](=O)[O-])c5cnnc45)CC3)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(C)C1=C(C)C(=O)C(C)=C(c2cccn2C)C1=O	C=C(C)C1=C(C)C(=O)C(C)=C(c2cccn2C)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1cccc(CNC(=N)c2c(O)ccc3ccccc23)c1	CN(C)c1cccc(CNC(=N)c2c(O)ccc3ccccc23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC1CCCC1)C1=C(O)CCn2c1nc1ccccc12	O=C(NC1CCCC1)C1=C(O)CCn2c1nc1ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1ccc(OCCCCOc2ncc(Cl)cc2C2CCOCC2)cc1	CC(C)(C)c1ccc(OCCCCOc2ncc(Cl)cc2C2CCOCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1NC(=O)C(=Cc2ccc(OCc3ccc([N+](=O)[O-])cc3)cc2)S1	O=C1NC(=O)C(=Cc2ccc(OCc3ccc([N+](=O)[O-])cc3)cc2)S1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1sc2nc3ccccc3c-2c1N		FALSE	TRUE	TRUE
CC(c1ccccc1)N1C(=O)OC(Cc2ccccc2)(C(=O)NCCc2cccn2)C1=O	CC(c1ccccc1)N1C(=O)OC(Cc2ccccc2)(C(=O)NCCc2cccn2)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCOCc1ccc(C(CC(=O)O)NC(=O)C2CCCC2)cc1	CCCCCOCc1ccc(C(CC(=O)O)NC(=O)C2CCCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C1CCC2(CC1)OOC1(O2)C2CC3CC(C2)CC1C3)N1CCOCC1	CC(C1CCC2(CC1)OOC1(O2)C2CC3CC(C2)CC1C3)N1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C=O)C(Cc1c[nH]c2c(-c3ccc(F)cc3)ccccc12)NC(C)=O	CO(C=O)C(Cc1c[nH]c2c(-c3ccc(F)cc3)ccccc12)NC(C)=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)Sc1cc(-c2ccc(NC(O)=Nc3ccc(N4CCCC4=O)nc3)cc2)cnc1N	CC(C)Sc1cc(-c2ccc(NC(O)=Nc3ccc(N4CCCC4=O)nc3)cc2)cnc1N	TRUE	TRUE	TRUE
C=CC1(C)CC(OC(=O)CSc2nc(C)c3ccccc3n2)C2(C)C(C)CCC3(CCC(=O)C32)C(C)C1O	C=CC1(C)CC(OC(=O)CSc2nc(C)c3ccccc3n2)C2(C)C(C)CCC3(CCC(=O)C32)C(C)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccc(l)c(CCCC)c1OCC(O)CNC(C)C	CCCCc1c(l)ccc(C)C1OCC(O)CNC(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc(C2=CCOCC2)c2ccccc(OCc3c(Cl)ccc(N(C)C(=O)CNC(=O)C=Cc4ccc(-c5ccc(C(F)(F)F)cc5)cc4)c3Cl)c21	CN(C(=O)CNC(=O)C=Cc4ccc(-c2ccc(C(F)(F)F)cc2)cc1)c1ccc(Cl)c(COc2ccccc3c(C4=CCOCC4)cn(C)c23)c1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1ccc(NC(=O)Cn2c(=O)n(Cc3ccco3)c(=O)c3oc4ccccc4c32)cc1	CC(C)c1ccc(NC(=O)Cn2c(=O)n(Cc3ccco3)c(=O)c3oc4ccccc4c32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc(C2Oc3ccccc3CC2OC(=O)c2ccc([N+](=O)[O-])c2)c1	COc1ccccc(C2Oc3ccccc3CC2OC(=O)c2ccc([N+](=O)[O-])c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCc1nc(-c2ccccc2C(=O)O)cn1Cc1ccc(-c2ccccc2-c2nn[nH]n2)cc1	CCCCc1nc(-c2ccccc2C(=O)O)cn1Cc1ccc(-c2ccccc2-c2nn[nH]n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C1=C(C)N=C(C)C(=O)OC(C)c1c1ccncc1	COC(=O)C1=C(C)N=C(C)C(=O)OC(C)c1c1ccncc1	TRUE	TRUE	FALSE
CCOC(=O)N1CCC(NC(=O)C(C)Sc2nnc(-c3ccccc3)o2)CC1	CCOC(=O)N1CCC(NC(=O)C(C)Sc2nnc(-c3ccccc3)o2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(F)ccc1OC1c2ccccc2C2CC(O)=NN12	Cc1cc(F)ccc1OC1c2ccccc2C2CC(O)=NN21	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1ccc(CC(CN(C)C)N(O)C(N)=O)cc1	CC(C)c1ccc(CC(CN(C)C)N(O)C(N)=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCN1CCC(n2nc(C=Cc3ccc4ccccc4n3)c3c(N)ncn32)CC1	CN(C)CCN1CCC(n2nc(C=Cc3ccc4ccccc4n3)c3c(N)ncn32)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC(=O)N(C)C1CCN(c2cc3c(cc2F)c(=O)c(C(=O)O)cn3CC(C)(C)C)C1	CCCCC(=O)N(C)C1CCN(c2cc3c(cc2F)c(=O)c(C(=O)O)cn3CC(C)(C)C)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1ccc(-c2ccc(C(=O)N(C)C3CCN(C(=O)N(C)C4CCN(C)C4)C3)cc2)cc1	CC(=O)Nc1ccc(-c2ccc(C(=O)N(C)C3CCN(C(=O)N(C)C4CCN(C)C4)C3)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
OCC1CN(Cc2cccn2)CC(n2cnc3c(NC4CC4)nc(Cl)nc32)O1	OCC1CN(Cc2cccn2)CC(n2cnc3c(NC4CC4)nc(Cl)nc32)O1	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1ccccc2c1nc(C(F)(F)F)n2-c1ccccc1	Oc1ccccc2c1nc(C(F)(F)F)n2-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(F)ccc1Oc1ccccc(Cc(=O)O)c1	COc1cc(F)ccc1Oc1ccccc(Cc(=O)O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C(Br)=C(Nc2ccc(Cl)cc2)C(=O)c2[nH]c(-c3cc[nH]n3)nc21	O=C1C(Br)=C(Nc2ccc(Cl)cc2)C(=O)c2[nH]c(-c3cc[nH]n3)nc21	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCNC(=O)Nc1cccc(Cl)c1	CN(C)CCNC(=O)Nc1cccc(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CC(C)CCCC(C)C1CCC2C3(C)O)C=C4CC(O)CCC4(C)C3CCC12C	CC(C)CCCC(C)C1CCC2C3(C)O)C=C4CC(O)CCC4(C)C3CCC12C	TRUE	FALSE	FALSE
COc1cc(-c2nnc3n2CCCCC3c2ccc(F)c(F)c2)ccc1-c1nc(C)O1	COc1cc(-c2nnc3n2CCCCC3c2ccc(F)c(F)c2)ccc1-c1nc(C)O1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCS(=O))(=O)c1cccc1)NCC1cccc1	O=C(CCS(=O))(=O)c1cccc1)NCC1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=S1(=O)C2CCC(c3ccccc3)C2C1(c1ccsc1)c1cnnc1	O=S1(=O)C2CCC(c3ccccc3)C2C1(c1cnnc1)c1ccsc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C(=O)O)CC2(C)CC3(C)C(=CC(=O)C4C5(C)CC(N)C(C)(C)C5CCC43C)C2C1	CC1(C(=O)O)CC2(C)CC3(C)C(=CC(=O)C4C5(C)CC(N)C(C)(C)C5CCC43C)C2C1	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1cccc(OC(C)C(=O)N)(Cc2ccccc2)C(=O)Nc2ccnc2)c1C	Cc1cccc(OC(C)C(=O)N)(Cc2ccccc2)C(=O)Nc2ccnc2)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN1CCC2(C)c3cc(O)ccc3CC1C2C	CCCN1CCC2(C)c3cc(O)ccc3CC1C2C	TRUE	TRUE	FALSE
C1CCCCN1CCCN(C(=O)C(c1ccccc1)N(C(=O)Cn1nnc2ccccc21)c1ccc(C(C)(C)C)cc1	C1CCCCN1CCCN(C(=O)C(c1ccccc1)N(C(=O)Cn1nnc2ccccc21)c1ccc(C(C)(C)C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1cc(-c2ccccc2F)oc2c(Cl)cc(Cl)cc12	O=c1cc(-c2ccccc2F)oc2c(Cl)cc(Cl)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-n2c(S)nnc2-c2ccnc2)c(OC)c1	COc1ccc(-n2c(S)nnc2-c2ccnc2)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1ccc2nc(-c3ccc(N4C(=O)CSC4c4ccccc4)cc3)sc2c1	CC(=O)Nc1ccc2nc(-c3ccc(N4C(=O)CSC4c4ccccc4)cc3)sc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)Cn1cc(-c2cc3c(cn2)cnnc3-c2cccc(N3CCCC(N)C3)n2)cn1	CNC(=O)Cn1cc(-c2cc3c(cn2)cnnc3-c2cccc(N3CCCC(N)C3)n2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCOCCOc1cc2c(cc1O)CC1c3cc(OC)c(O)cc3CCN1C2	COCCOCCOc1cc2c(cc1O)CC1c3cc(OC)c(O)cc3CCN1C2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1cc(C(C(=O)O)c2ccco2)=NNC(=O)Nc2ccccc2)cc(C(C)(C)C)c1O	CC(C)(C)c1cc(C(C(=O)O)c2ccco2)=NNC(=O)Nc2ccccc2)cc(C(C)(C)C)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(C(=O)N)Cc1cccc1)C1CCN(CCC(CN(C)S(=O)(=O)c2cccs2)c2ccccc2)CC1	CCCN(C(=O)N)Cc1cccc1)C1CCN(CCC(CN(C)S(=O)(=O)c2cccs2)c2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCc1ccc(C=CC(=O)Nc2cnc3ccccc3c2)cc1	CCCCc1ccc(C=CC(=O)Nc2cnc3ccccc3c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=NNC(N)=O)c1cccc(Cl)c1	CC(=NNC(N)=O)c1cccc(Cl)c1	TRUE	TRUE	FALSE
COc1cccc(C(=O)Nc2cccc(C(=O)N)Cc3ccc4c(c3)OCO4)c2c1	COc1cccc(C(=O)Nc2cccc(C(=O)N)Cc3ccc4c(c3)OCO4)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1noc(-c2ncn3c2CN(C)C(=O)c2cc(OC)c(OC)cc2-3)n1	CCc1noc(-c2ncn3c2CN(C)C(=O)c2cc(OC)c(OC)cc2-3)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc(-c2cnc3ccc4cc(CN5CCC(N)C5)c(=O)n(C5CCOCC5)c4c23)cn1	Cn1cc(-c2cnc3ccc4cc(CN5CCC(N)C5)c(=O)n(C5CCOCC5)c4c23)cn1	FALSE	TRUE	TRUE
Cc1nn(-c2ccccc2)c(Cl)c1C=CC(=O)O	Cc1nn(-c2ccccc2)c(Cl)c1C=CC(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1[nH]c(=S)[nH]c2nccc(N3CCC(c4ncc(Cc5ccccc5)[nH]4)CC3)c12	O=c1[nH]c(=S)[nH]c2nccc(N3CCC(c4ncc(Cc5ccccc5)[nH]4)CC3)c12	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(C(=O)C2CCC(CNS(=O)(=O)c3cc(Cl)ccc3Cl)CC2)CC1	CN1CCN(C(=O)C2CCC(CNS(=O)(=O)c3cc(Cl)ccc3Cl)CC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
C(=NNc1cccc1)c1ccc2c(c1)c1cccc1n2Cc1cccc1	C(=NNc1cccc1)c1ccc2c(c1)c1cccc1n2Cc1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1NC(c2ccc(Cl)cc2)(c2ccc(Cl)cc2)C(=O)N1c1cn2ncc(-c3ccc(Cl)s3)c2n1	O=C1NC(c2ccc(Cl)cc2)(c2ccc(Cl)cc2)C(=O)N1c1cn2ncc(-c3ccc(Cl)s3)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(C(=O)C=C(C)C=CC(C)C(C)(CO)CO	CCCN(C(=O)C=C(C)C=CC(C)C(C)(CO)CO	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C=CC(=O)c2occc2C)cc1OC	COc1ccc(C=CC(=O)c2occc2C)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1OCCC1N1C(=O)C2C3CCC(O3)C2C1=O	O=C1OCCC1N1C(=O)C2C3CCC(O3)C2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)Oc1cc(F)c(C(C)C)cc1NC(=O)N(Cc1ccc(CO)cc1)c1cccc2[nH]ncc12	CC(C)Oc1cc(F)c(C(C)C)cc1NC(=O)N(Cc1ccc(CO)cc1)c1cccc2[nH]ncc12	TRUE	TRUE	TRUE
OCC(NCc1cccc(OC(F)F)F)c1cccc(Cl)cc1	OCC(NCc1cccc(OC(F)F)F)c1cccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1)OC(c1ccccc1)CC2=O	COc1ccc2c(c1)OC(c1ccccc1)CC2=O	TRUE	TRUE	FALSE
COc1ccc(N=N(C(C(=O)O)c2ccc([N+](=O)[O-])cc2[N+](=O)[O-])=N2CCCCC2)cc1	COc1ccc(N=N(C(C(=O)O)c2ccc([N+](=O)[O-])cc2[N+](=O)[O-])=N2CCCCC2)cc1	FALSE	TRUE	TRUE
Cc1c(-c2ccccc2)cc(-c2ccc(O)cc2)c(-c2ccc(S(C)(=O)O)cc2)c1C	Cc1c(-c2ccccc2)cc(-c2ccc(O)cc2)c(-c2ccc(S(C)(=O)O)cc2)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1cccc2c1ncc1c(=O)n(-c3ccc(S(C)(=O)O)cc3)c(=S)[nH]c12	CCOc1cccc2c1ncc1c(=O)n(-c3ccc(S(C)(=O)O)cc3)c(=S)[nH]c12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1NC(c2ccccc2)(c2ccccc2)C(=O)N1CCN1CCOCC1	O=C1NC(c2ccccc2)(c2ccccc2)C(=O)N1CCN1CCOCC1	TRUE	TRUE	FALSE
C=C(C)CC1C(=O)N(CCc2ccc(OC)cc2)C(=O)N1CCc1cccc1	C=C(C)CC1C(=O)N(CCc2ccc(OC)cc2)C(=O)N1CCc1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCn1c(-c2ccccc2)c(C#N)c(N2CCN(C(=O)C(C)C)CC2)c1-c1ccc(Cl)cc1	COCCn1c(-c2ccccc2)c(C#N)c(N2CCN(C(=O)C(C)C)CC2)c1-c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1cc(CN2CCCC2C(=O)N2CCN(c3ccccc3)CC2)on1	CCc1cc(CN2CCCC2C(=O)N2CCN(c3ccccc3)CC2)on1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1C(C(=O)Nc2nnc(S(N)(=O)O)s2)=C(O)c2cccc[n+]2S1(=O)=O	CN1C(C(=O)Nc2nnc(S(N)(=O)O)s2)=C(O)c2cccc[n+]2S1(=O)=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C=NNC(=O)CC2C(=O)NN=C2C)ccc1OCC(C)C	COc1ccc(C=NNC(=O)CC2C(=O)NN=C2C)ccc1OCC(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(CNC(=O)NC2CC3(CCN(Cc4ccccc4)CC3)c3c(C)cccc32)c1	Cc1cccc(CNC(=O)NC2CC3(CCN(Cc4ccccc4)CC3)c3c(C)cccc32)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cn(C2O(C)CO)(S(C)(=O)=O)C(O)C2O)c(=O)[nH]c1=O	Cc1cn(C2O(C)CO)(S(C)(=O)=O)C(O)C2O)c(=O)[nH]c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC[n+](1ccc(Nc2cc(Nc3cccc(N(C)CC)c3)n3ncc(-c4ccc(OC)c(OC)c4)c3n2)cc1	CN(C)C(c1cccc(Nc2cc(Nc3ccc[n+](CC)cc3)nc3c(-c4ccc(OC)c(OC)c4)cnnc23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1cccc1)N1CCN(C(=O)c2ccoc2)CC1	O=C(c1ccoc1)N1CCN(C(=O)c2ccco2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCc1nc2cc(Cl)ccc2n1Cc1ccc(-c2nccccc2C(=O)O)cc1	CCCc1nc2cc(Cl)ccc2n1Cc1ccc(-c2nccccc2C(=O)O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(N2CCC(OCCCN3CCOCC3)CC2)cc1	c1ccc(N2CCC(OCCCN3CCOCC3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(Nc2nncn3ccc(NCCN(C)C)c23)ccc1NC(=O)c1cc(-c2cccc(C)c2)on1	COc1cc(Nc2nncn3ccc(NCCN(C)C)c23)ccc1NC(=O)c1cc(-c2cccc(C)c2)on1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)Cc1nn(Cc2nc3cc(Cl)c([N+](=O)[O-])cc3s2)c(=O)c2ccccc12	O=C(O)Cc1nn(Cc2nc3cc(Cl)c([N+](=O)[O-])cc3s2)c(=O)c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C(=O)C(C)CC(NC(=O)CC(C(=O)OC)C(=O)C(CCCN)NC(=O)CCc1ccc(C(=O)NC(Cc2c[nH]c3ccccc23)C(=O)NC(Cc2c[nH]c3ccccc23)C(=O)OC)cc1	CO(C(=O)CC(C(=O)NC(C)CC(NC(=O)C(CCCN)NC(=O)CCc1ccc(C(=O)NC(Cc2c[nH]c3ccccc23)C(=O)NC(Cc2c[nH]c3ccccc23)C(=O)OC)cc1)C(=O)OC)C(=O)OC	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CN1CCN(C(=O)c1ccc2cc(Nc3ncc(-c4cccc(OC(F)F)c4)n3)[nH]c2c1	CC1CN1CCN(C(=O)c1ccc2cc(Nc3nccc(-c4cccc(OC(F)F)c4)n3)[nH]c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCOc1ccc(=O)n2c(-c3ccc(OCCCC)cc3)csc2n1	CCCCOc1ccc(-c2csc3nc(OCCCC)cc(=O)n23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)CC(C(=O)OCC(=O)c2ccnc2)CC(C)(C)N1	CC1(C)CC(C(=O)OCC(=O)c2ccnc2)CC(C)(C)N1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CNC(=O)c2sc3nc(-c4ccncc4)ccc3c2N)cc1OC	COc1ccc(CNC(=O)c2sc3nc(-c4ccncc4)ccc3c2N)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCCC(n2nc(C(=O)N3CCC3)c3c2-c2ccccc2S(=O)(=O)C3)C1	CN1CCCC(n2nc(C(=O)N3CCC3)c3c2-c2ccccc2S(=O)(=O)C3)C1	TRUE	TRUE	TRUE
NC1=C[N+](([O-])=NC1=O	NC1=C[N+](([O-])=NC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2c(C#N)c(O)ncc2C#N)cc1	COc1ccc(-c2c(C#N)cncc(O)c2C#N)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC1CCS(=O))(=O)C1C1CCN(S(=O)(=O)c2ccc(Br)cc2)CC1	O=C(NC1CCS(=O))(=O)C1C1CCN(S(=O)(=O)c2ccc(Br)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCC(NC(=S)N)Cc2ccnc2)CC1	CC1CCC(NC(=S)N)Cc2ccnc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCSCCC(=O)OC(C)C(=O)Nc1ccc(S(=O)(=O)N2CCCC2)cc1	CCSCCC(=O)OC(C)C(=O)Nc1ccc(S(=O)(=O)N2CCCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C2CC3CCC(C2c2ccc(C)cc2)N3)cc1	Cc1ccc(C2CC3CCC(N3)C2c2ccc(C)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)C(Cc1ccc(OC)cc1)CC(C)C	CNC(=O)C(Cc1ccc(OC)cc1)CC(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(Nc1ncc(C(N)=O)cc1-c1nc(C(C)(C)C)co1)c1cccc1	CC(Nc1ncc(C(N)=O)cc1-c1nc(C(C)(C)C)co1)c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)N2CCC(C(=O)N(C)Cc3ncco3)CC2)cc1C	Cc1ccc(S(=O)(=O)N2CCC(C(=O)N(C)Cc3ncco3)CC2)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
Fc1ccc(Oc2nccnc2C2CN(c3ccc4ccccc4n3)C2)cc1	Fc1ccc(Oc2nccnc2C2CN(c3ccc4ccccc4n3)C2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(COCCN1CCN(CCO)CC1)Nc1cccc(F)c1	O=C(COCCN1CCN(CCO)CC1)Nc1cccc(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(OCCCC2c(C(=O)NS(=O)(=O)c3ccc(NCCSc4ccccc4)c([N+](=O)[O-])c3)[nH]c3c(C4CC4)c(Cl)ccc23)cc(C)c1Cl	Cc1cc(OCCCC2c(C(=O)NS(=O)(=O)c3ccc(NCCSc4ccccc4)c([N+](=O)[O-])c3)[nH]c3c(C4CC4)c(Cl)ccc23)cc(C)c1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CNC(=O)C(F)F)NN=Cc1ccc(Br)cc1	O=C(CNC(=O)C(F)F)NN=Cc1ccc(Br)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=CC(=O)c2ccc3c(c2)OCO3)cc(OC)c1OC	COc1cc(C=CC(=O)c2ccc3c(c2)OCO3)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	FALSE
CN1c2nc(-c3ccccc3)c(-c3ccc(Cl)cc3Cl)nc2C(N)=NS1(=O)=O	CN1c2nc(-c3ccccc3)c(-c3ccc(Cl)cc3Cl)nc2C(N)=NS1(=O)=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccc3c(c2)C(=O)N(C(C)CO)CC(C)C(CN(C)S(=O)(=O)c2ccc(F)cc2)OCCCC(C)O3)cc1	COc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccc3c(c2)C(=O)N(C(C)CO)CC(C)C(CN(C)S(=O)(=O)c2ccc(F)cc2)OCCCC(C)O3)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
NCCCCN1c2nc3ccccc3cc2C(=O)Nc2ccsc21	NCCCCN1c2nc3ccccc3cc2C(=O)Nc2ccsc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C(C)c1ccc(C(C)=O)cc1	CCOC(=O)C(C)c1ccc(C(C)=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCC1CCCN1Cc1ccc(-c2ccccc2Cl)n1	COCCC1CCCN1Cc1ccc(-c2ccccc2Cl)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NC1C(NC(=N)N)C=C(C(=O)O)OC1CO	CC(=O)NC1C(NC(=N)N)C=C(C(=O)O)OC1CO	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1c(SCC(=O)N2CCc3ccccc32)nnc1-c1cccn1	CCn1c(SCC(=O)N2CCc3ccccc32)nnc1-c1cccn1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(OCC(=O)Nc2ccc3c(c2)OCCO3)cc1C	Cc1ccc(OCC(=O)Nc2ccc3c(c2)OCCO3)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(C(=O)C1(C)CCN(Cc2ccc(-c3ccc(C(=O)OCC)cc3)cc2)C1	CCCN(C(=O)C1(C)CCN(Cc2ccc(-c3ccc(C(=O)OCC)cc3)cc2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CC=C(C)C(=O)OCC1C2=CC3OC(=O)C=CC=CC(=O)CC(C)C(CN(C)S(=O)(=O)c2ccc(F)cc2)OCCCC(C)O3)cc1	CC=C(C)C(=O)OCC1C2=CC3OC(=O)C=CC=CC(=O)CC(C)C(CN(C)S(=O)(=O)c2ccc(F)cc2)OCCCC(C)O3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c3c1OC1c4ncc(-c5cccs5)cc4CC4(O)C(C2)N(C)CCC314	COc1ccc2c3c1OC1c4ncc(-c5cccs5)cc4CC4(O)C(C2)N(C)CCC314	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc2c3c(ncn2n1)C(=O)N(Cc1ccc(N2CCOCC2)cc1)CC3	Cc1nc2c3c(ncn2n1)C(=O)N(Cc1ccc(N2CCOCC2)cc1)CC3	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCN1CCN(c2cc3c(cc2F)c(=O)c(C(=O)O)cn3C(CNC)c2ccccc2)CC1	C=CCN1CCN(c2cc3c(cc2F)c(=O)c(C(=O)O)cn3C(CNC)c2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC#CCOc1ccc(S(=O)(=O)[O-])cc1-c1ccc(Cn2cccc2O)[nH]1	CC#CCOc1ccc(S(=O)(=O)[O-])cc1-c1ccc(Cn2cccc2C)[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2cc(cc1OC(C)C)c1ccc(Cl)cc1)N(c1ccc(N)cc1)C(=O)C2	COc1cc2cc(cc1OC(C)C)c1ccc(Cl)cc1)N(c1ccc(N)cc1)C(=O)C2	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CN1C(=O)C(=Cc2ccc(C(=O)NCCCN3CCOCC3)cc2)N=C1c1ccccc1	CN1C(=O)C(=Cc2ccc(C(=O)NCCCN3CCOCC3)cc2)N=C1c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
[C-]#[N+]c1ccccc1Cn1cc(Cl)c(=O)[nH]c1=S	[C-]#[N+]c1ccccc1Cn1cc(Cl)c(=O)[nH]c1=S	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1cccc(N2C(=O)CCC2=O)c1)N1CCN(S(=O))(=O)c2ccccc2Cl)CC1	O=C(c1cccc(N2C(=O)CCC2=O)c1)N1CCN(S(=O))(=O)c2ccccc2Cl)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCC1CC1)C1CC2CCN(Cc3cccc(F)c3)CC2O1	O=C(NCC1CC1)C1CC2CCN(Cc3cccc(F)c3)CC2O1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1OC(=Cc2c(F)cccc2C(F)(F)F)c2ccccc21	O=C1OC(=Cc2c(F)cccc2C(F)(F)F)c2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nn(Cc2ccc(NC(=O)c3ccccc3Cl)cc2)c(C)c1CC(=O)O	Cc1nn(Cc2ccc(NC(=O)c3ccccc3Cl)cc2)c(C)c1CC(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCN(C(=O)c1cc(S(=O))(=O)N2CCCC2)ccc1F)c1ccc(Br)cc1C	C=CCN(C(=O)c1cc(S(=O))(=O)N2CCCC2)ccc1F)c1ccc(Br)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
CN(CCC(=O)Nc1ccc(S(=O))(=O)Nc2ncs2)cc1)Cc1ccc([N+](=O)[O-])cc1	CN(CCC(=O)Nc1ccc(S(=O))(=O)Nc2ncs2)cc1)Cc1ccc([N+](=O)[O-])cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)c1ccc(-c2csc(-c3ncs3)n2)cc1	CCN(CC)c1ccc(-c2csc(-c3ncs3)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2oc3c(ccc4[nH]c(C)c(C)c43)c(=O)c2OC(C)C)cc1	COc1ccc(-c2oc3c(ccc4[nH]c(C)c(C)c43)c(=O)c2OC(C)C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1cc(-c2nc3cc(Br)ccc3s2)ccc1O	CC(=O)Nc1cc(-c2nc3cc(Br)ccc3s2)ccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
CSc1ccc(C=NOCC(=O)N(C)Cc2ccc3c(c2)cc(C)n3C)cc1	CSc1ccc(C=NOCC(=O)N(C)Cc2ccc3c(c2)cc(C)n3C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(CN1CCOC(CF)C1)C1CC(C)(CO)OC1	C=C(CN1CCOC(CF)C1)C1CC(C)(CO)OC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(=O)n(CCCNCCO)c2c(Cl)cccc12	COc1cc(=O)n(CCCNCCO)c2c(Cl)cccc12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-n2c(N)c(C(=O)c3ccccc3F)sc2=S)cc1OC	COc1ccc(-n2c(N)c(C(=O)c3ccccc3F)sc2=S)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C(CC(=O)C=Cc1ccc(O)c(O)c1)C(=O)C=Cc1ccc(O)c(O)c1	COC(=O)C(CC(=O)C=Cc1ccc(O)c(O)c1)C(=O)C=Cc1ccc(O)c(O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(-n2ncn2)c1C(=O)O	Cc1cccc(-n2ncn2)c1C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(c2ccc([N+](=O)[O-])cc2NC(=O)c2cc(F)ccc2Cl)CC1	CN1CCN(c2ccc([N+](=O)[O-])cc2NC(=O)c2cc(F)ccc2Cl)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)C(=O)N(c2ccc(C#N)c(C(F)(F)F)c2)C(=S)N1CCc1ccc(F)cc1	CC1(C)C(=O)N(c2ccc(C#N)c(C(F)(F)F)c2)C(=S)N1CCc1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(NC(=O)CSc2nc(=O)c(-c3ccc(F)cc3)[nH]o2)no1	Cc1cc(NC(=O)CSc2nc(=O)c(-c3ccc(F)cc3)[nH]o2)no1	FALSE	TRUE	TRUE
O=[N+](([O-])c1ccccc1C[n+])1ccn(C(c2ccccc2)c2ccc3c(c2)Cc2ccccc2-3)c1	O=[N+](([O-])c1ccccc1C[n+])1ccn(C(c2ccccc2)c2ccc3c(c2)Cc2ccccc2-3)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)OC1C(C)C(OC(=O)c2ccc(C#N)cc2)C2(CO2)C(OC(=O)c2cccn2)C(O)C2C(C)(C)CC1C21CO1	CC(=O)OC1C(C)C(OC(=O)c2ccc(C#N)cc2)C2(CO2)C(OC(=O)c2cccn2)C(O)C2C(C)(C)CC1C21CO1	TRUE	TRUE	TRUE
COC1CCC(C(C#N)C(=O)Nc2ccc3c(c2)CCC3)=C(C)N1	COC1CCC(C(C#N)C(=O)Nc2ccc3c(c2)CCC3)=C(C)N1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ncnc2c1ncn2C1OC(Cl)C(O)C1O	Nc1ncnc2c1ncn2C1O(Cl)C(O)C1O	TRUE	TRUE	FALSE
[O-][n+]1cc(-c2ccc(Cl)cc2)nc2ccccc21	[O-][n+]1cc(-c2ccc(Cl)cc2)nc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1[nH]c2ccc(C(N)=O)cc2c1C	Cc1[nH]c2ccc(C(N)=O)cc2c1C	TRUE	TRUE	TRUE
COC1COC1CC1NC1CC2CCCC2(C(=O)N2CC3CC2CN3c2cccc3cc(C(=O)O)ccc23)C1	COC1COC1CC1NC1CC2CCCC2(C(=O)N2CC3CC2CN3c2cccc3cc(C(=O)O)ccc23)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2nccc(N3CCC(Oc4ncc(F)c(N5C(=O)OCC5C(C)C)n4)CC3)c2c1	COc1ccc2nccc(N3CCC(Oc4ncc(F)c(N5C(=O)OCC5C(C)C)n4)CC3)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(N1CCc2ccc3ccnc(Cc4ccc(Cl)cc4)c3c2C1)C(O)(Cn1cncn1)c1ccc(F)cc1F	CC(N1CCc2ccc3ccnc(Cc4ccc(Cl)cc4)c3c2C1)C(O)(Cn1cncn1)c1ccc(F)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CC(=O)Nc2ccnc2)cc1Br	COc1ccc(CC(=O)Nc2ccnc2)cc1Br	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1cccc(-c2nc(N(C)c3cncn3)sc2-c2ccc(OCCN(C)C)cc2)cc1	CC(=O)Nc1cccc(-c2nc(N(C)c3cncn3)sc2-c2ccc(OCCN(C)C)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NCC1CN(c2ccc(-n3cc(C(=O)N4CCN(C(=O)OC(C)(C)C)CC4)nn3)c(F)c2)C(=O)O1	CC(=O)NCC1CN(c2ccc(-n3cc(C(=O)N4CCN(C(=O)OC(C)(C)C)CC4)nn3)c(F)c2)C(=O)O1	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1ccc(C(=C2CCN(Cc3ccccc3)CC2)c2ccccc2Cl)c2ccccc12	Oc1ccc(C(=C2CCN(Cc3ccccc3)CC2)c2ccccc2Cl)c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C(=O)O)CCCC2(C)c3cc(OCC(=O)O)ccc3CCC12	CC1(C(=O)O)CCCC2(C)c3cc(OCC(=O)O)ccc3CCC12	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1snnc1Cl	Clc1nnsc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ccc(Oc2ccc(S(=O))(=O)C3CCN(C(Cc4ccccc4)C(=O)O)C3)c(Cl)c2)cc1	N#Cc1ccc(Oc2ccc(S(=O))(=O)C3CCN(C(Cc4ccccc4)C(=O)O)C3)c(Cl)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1ccc(C(=O)OC(C)CNC2CCCC2)c1	CC(CN1CCCC1)OC(=O)c1cccc(N(C)C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)OCc1ccnc2c(C(C)C)cccc12	CC(=O)OCc1ccnc2c(C(C)C)cccc12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)N2CCC3CN(c4nccn4)CCOC3C2)cc1OC	COc1ccc(C(=O)N2CCC3CN(c4nccn4)CCOC3C2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1C(=O)Nc1ncnc2c1nn1c(SC)cc(-c3cncnc3)cc21	COc1ccccc1C(=O)Nc1ncnc2c1nn1c(SC)cc(-c3cncnc3)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C(O)=C(C(Sc2ccc(Cl)cc2)c2cccc(O)c2)C(=O)c2ccccc21	O=C1C(O)=C(C(Sc2ccc(Cl)cc2)c2cccc(O)c2)C(=O)c2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CN(C(=O)c1ccc(-c2ccc(CN3C(=O)C(NC(=O)Cc4ccccc4)CCc3ccccc3)cc2)o1	CC(C)CN(C(=O)c1ccc(-c2ccc(CN3C(=O)C(NC(=O)Cc4ccccc4)CCc3ccccc3)cc2)o1	FALSE	TRUE	TRUE
COCCCCOc1ccc(CC(=O)Nc2cc(C(=O)c3ccc(-c4ccc(OC)cc4)s3)ccc2N2CCN(C)CC2)c1	COCCCCOc1ccc(CC(=O)Nc2cc(C(=O)c3ccc(-c4ccc(OC)cc4)s3)ccc2N2CCN(C)CC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(S(=O))(=O)N2CCCC2)cc1)c1cn(-c2ccccc2F)nc1C(F)(F)F	O=C(Nc1ccc(S(=O))(=O)N2CCCC2)cc1)c1cn(-c2ccccc2F)nc1C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)CCCCn1c(-c2ccc3ccccc3c2)nc2ccccc21	CCN(CC)CCCCn1c(-c2ccc3ccccc3c2)nc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NCCn1c(=O)c2ccc(NCCN3CCOCC3)c3c(=O)c4cc(Cl)c(Cl)cc4n(c1=O)c2C3	CC(=O)NCCn1c(=O)c2ccc(NCCN3CCOCC3)c3c(=O)c4cc(Cl)c(Cl)cc4n(c1=O)c2C3	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC(C)(CCC)c1cc(O)cc(N2CCCCS2(=O)=O)c1	CCCC(C)(CCC)c1cc(O)cc(N2CCCCS2(=O)=O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Fc1ccc(Cn2nnnc2C(c2ccc(Cl)cc2)N2CCN(Cc3ccc4c(c3)OCO4)CC2)cc1	Fc1ccc(Cn2nnnc2C(c2ccc(Cl)cc2)N2CCN(Cc3ccc4c(c3)OCO4)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(OC)c1OCCNCC(O)COc1ccc2ncccc2c1	COc1cccc(OC)c1OCCNCC(O)COc1ccc2ncccc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)NCc1ccc(C(=O)CCCC2CCCC2)cc1	CC(C)NCc1ccc(C(=O)CCCC2CCCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c(-c2cnn(C)c2)cnc1-c1ccn2ccnc2c1	Cn1cc(-c2cnc(-c3ccn4ccnc4c3)n2C)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCNc1ccnc2sc3c(=O)n(-c4ccc(Cl)cc4)c(=O)ccc3c12	CN(C)CCNc1ccnc2sc3c(=O)n(-c4ccc(Cl)cc4)c(=O)ccc3c12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1c2cc([N+](=O)[O-])ccc2C(=O)N1Cc1ccc(Cl)cc1	O=C1c2cc([N+](=O)[O-])ccc2C(=O)N1Cc1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCc1cccs1)NN=Cc1cccs1	O=C(CCc1cccs1)NN=Cc1cccs1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1ccc(OCCCON2C(=N)N=C(N)NC2(C)C)cn1	CC(C)(C)c1ccc(OCCCON2C(=N)N=C(N)NC2(C)C)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCc2[nH]nc(C(=O)N3CCC(N4CCN(c5nc6cccc(F)c6o5)CC4)CC3)c2C1	CN1CCc2[nH]nc(C(=O)N3CCC(N4CCN(c5nc6cccc(F)c6o5)CC4)CC3)c2C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCc1c(O)c(O)cc2oc3ccccc3c(=O)c12	CCCCCCCCc1c(O)c(O)cc2oc3ccccc3c(=O)c12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(OC)cc(N(CC(O)C(F)(F)F)c2ccc3ncc(-c4cnn(CC(=O)NO)c4)nc3c2)c1	COc1cc(OC)cc(N(CC(O)C(F)(F)F)c2ccc3ncc(-c4cnn(CC(=O)NO)c4)nc3c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(N(Cc1ccccc1)C(=O)N1CCCC1C(=O)O)N(CCN1C2CCC1CC(c1cccc(C(=N)NOCC(F)(F)F)c1)C2)Cc1ccccc1	N=C(NOCC(F)(F)F)c1cccc(C2CC3CCC(C2)N3CCN(Cc2ccccc2)C(=O)NC(Cc2ccccc2)C(=O)N2CCCC2C(=O)O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)C(=O)Cc1ccc2c(c1)nc(F)c2N	CN(C)C(=O)Cc1ccc2c(N)c(F)cnc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC12CN(Cc3ccccc3)CC1(c1ccccc1)c1ccccc1-n1nnc3ccccc3c12	CNS(=O)(=O)c1cccc(Nc2ccnc(Nc3cccc(S(C)(=O)=O)c3)n2)c1	FALSE	TRUE	TRUE
CNS(=O)(=O)c1cccc(Nc2ccnc(Nc3cccc(S(C)(=O)=O)c3)n2)c1	CNS(=O)(=O)c1cccc(Nc2ccnc(Nc3cccc(S(C)(=O)=O)c3)n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC=CC=CC(=O)Nc1ccc(l)cc1Br	CC=CC=CC(=O)Nc1ccc(l)cc1Br	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NS(=O))(=O)c2cccc(C(=O)N3CC(CCl)c4c3cc([N+](=O)[O-])c3ccccc43)c2)cc1OC	COc1ccc(NS(=O))(=O)c2cccc(C(=O)N3CC(CCl)c4c3cc([N+](=O)[O-])c3ccccc43)c2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CCOCC1(O)C(OC2CC(O)(O)Cc3c(O)c4c(c(O)c332)C(=O)c1CC=C(C)CC4(C)C)C2=CCCC(C)(C)C2	CCOCC1(O)C2CC=C(C)CC(C)(c3c(O)c4c(c(O)c332=O)C(C)C(O)(O)C4)OC1C1=CCCC(C)(C)C1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(OC(C(=O)O)c1ccccc1)c1ccccc1	O=C(OC(C(=O)O)c1ccccc1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCCN(S(=O))(=O)c2ccc(C(=O)Nc3cccn3)cc2)C1	CC1CCCN(S(=O))(=O)c2ccc(C(=O)Nc3cccn3)cc2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)n1nc(C#Cc2ccccc2)n(Cc2ccccc2)c1=O	CC(=O)n1nc(C#Cc2ccccc2)n(Cc2ccccc2)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)NCc1ccc([N+](=O)[O-])cc1	CS(=O)(=O)NCc1ccc([N+](=O)[O-])cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCS(=O)(=O)N(O)CC1CCC(N(C)C(=O)c2ccc3ccccc3n2)CC1	CCCCS(=O)(=O)N(O)CC1CCC(N(C)C(=O)c2ccc3ccccc3n2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)OC(=N)NC2(C1)c1cc(Br)c(-c3ccc(Cl)cc3)cc1CC21CCC(=O)CC1	CC1(C)CC2(NC(=N)O1)c1cc(Br)c(-c3ccc(Cl)cc3)cc1CC21CCC(=O)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC(C)n1nc(-c2cccs2)c(O)c(C2=NS(=O))(=O)c3cc(NS(C)(=O)=O)ccc3N2)c1=O	CCCC(C)n1nc(-c2cccs2)c(O)c(C2=NS(=O))(=O)c3cc(NS(C)(=O)=O)ccc3N2)c1=O	TRUE	TRUE	FALSE
CN(C)c1ccc(C(=O)C2CCCN(Cc3nc(C(C)(C)C)no3)C2)cn1	CN(C)c1ccc(C(=O)C2CCCN(Cc3nc(C(C)(C)C)no3)C2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(Cl)nc(COC2CCC3C2OCCN3Cc2ccc(C(=O)O)cc2)c2ccc(F)cc12	Cc1c(Cl)nc(COC2CCC3C2OCCN3Cc2ccc(C(=O)O)cc2)c2ccc(F)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C1=C(C(=O)N2CCCCC2)SC2=NC(C)(c3ccc(Cl)cc3)C(c3ccc(Cl)cc3)N21	CC(C)C1=C(C(=O)N2CCCCC2)SC2=NC(C)(c3ccc(Cl)cc3)C(c3ccc(Cl)cc3)N21	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1sc(N)nc1-c1ccc(O)c(F)c1	CCc1sc(N)nc1-c1ccc(O)c(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2nc(N3CCNC(C)C3)nc(NCc3ccccc3)c2cc1OC	COc1cc2nc(N3CCNC(C)C3)nc(NCc3ccccc3)c2cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cn(C2OC(CO)Si(=S)(c3ccccc3)c3cc(C)c(N)nc3N)C(O)C2(C)O)c(=O)[nH]c1=O	Cc1cc([Si])(=S)(OCC2OC(n3cc(C)c(=O)[nH]c3=O)C(C)(O)C2O)c2ccccc2)c(N)nc1N	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCNc1nc(C)nc2c1nnn2-c1c(Br)cc(C(C)C)cc1Br	CCCCCCCNc1nc(C)nc2c1nnn2-c1c(Br)cc(C(C)C)cc1Br	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(C(=O)C(C#N)=Cc1ccc(N(C)C)cc1	CCCN(C(=O)C(C#N)=Cc1ccc(N(C)C)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C1c2ccccc2OC2c3[nH]c4ccccc4c3CCN12	O=C1c2ccccc2OC2c3[nH]c4ccccc4c3CCN12	TRUE	TRUE	FALSE
OCc1ccccc1-c1csc(Nc2ccc(F)cc2)n1	OCc1ccccc1-c1csc(Nc2ccc(F)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1C(=O)CCc2cc(C#Cc3ccc(OCC4CC4)nc3)ccc21	CN1C(=O)CCc2cc(C#Cc3ccc(OCC4CC4)nc3)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
COCC1CC(=O)NCC(=O)NCC(CC(C)C)N1S(=O)(=O)c1ccc(F)cc1	COCC1CC(=O)NCC(=O)NCC(CC(C)C)N1S(=O)(=O)c1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1csc2nc(-c3ccc(O)cc3)cc(C(F)(F)F)c12	NC(=O)c1csc2nc(-c3ccc(O)cc3)cc(C(F)(F)F)c12	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1cc2nc(O)c(O)nc2cc1[N+](=O)[O-]	COC(=O)c1cc2nc(O)c(O)nc2cc1[N+](=O)[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C=O)N1CC2CC1CN2C(=N)c1ccccc1	CC(C=O)N1CC2CC1CN2C(=N)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(NC(=O)c2cc(-c3ccc(Cl)c(Cl)c3)on2)n1	Cc1cccc(NC(=O)c2cc(-c3ccc(Cl)c(Cl)c3)on2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NN=Cc1cc(Br)ccc1O)c1sc2cccc2c1Cl	O=C(NN=Cc1cc(Br)ccc1O)c1sc2cccc2c1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC1CN(C(C)C(C)C)CN2CCCC2CN2C(NCc3ccc4cccc4c3)=NCC2Cc2cccc2C[C-]=[N+]2CCCC2)N1CCc1c(n(C)C)c2ncccccc2c1OC	CC(C)CN(C(C)C(C)C)C(Cc1ccccc1F)NC(=O)OC1COC2OCCC12)S(=O)(=O)c1ccc(N)cc1	FALSE	TRUE	TRUE
CC(C)CN(C(C)C(C)C)C(Cc1ccccc1F)NC(=O)OC1COC2OCCC12)S(=O)(=O)c1ccc(N)cc1	CC(C)CN(C(C)C(C)C)C(Cc1ccccc1F)NC(=O)OC1COC2OCCC12)S(=O)(=O)c1ccc(N)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nnc(Nc2ccc(OCc3ccc(Cl)cc3Cl)c(Cl)c2)c1Br	Nc1nnc(Nc2ccc(OCc3ccc(Cl)cc3Cl)c(Cl)c2)c1Br	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nn(C)c(C)c1N[S+](=O)[O-]c1ccc(CN(C)C2CCC(OC3cccc3C=Cc3ccccc3)CC2)nc1	Cc1nn(C)c(C)c1N[S+](=O)[O-]c1ccc(CN(C)C2CCC(OC3cccc3C=Cc3ccccc3)CC2)nc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(CSc1nc2cc(Cl)ccc2[nH]1)N1CCC(NC(=O)CCCC(=O)O)CC1	CCC(CSc1nc2cc(Cl)ccc2[nH]1)N1CCC(NC(=O)CCCC(=O)O)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCNC(=O)c1ccc2c(c1)NC(=O)C(CS(=O)(=O)Cc1ccccc1)N2	COCCNC(=O)c1ccc2c(c1)NC(=O)C(CS(=O)(=O)Cc1ccccc1)N2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)CC(CP(=O)(O)C)Cc1ccccc1NC(=O)C(NC(=O)CC(C(C)C)C(=O)O)C(C)C)C(=O)O	CC(O)CC(CP(=O)(O)N)C(C(=O)N)C(C(=O)N)C(Cc1ccccc1)P(=O)(O)CC(C(C)C)C(=O)O)C(C)C)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(N)C(=O)N1CCCCC1C(=O)O	CC(N)C(=O)N1CCCCC1C(=O)O	TRUE	TRUE	FALSE
C#Cc1c(C)n(Cc2cccc2)c2cc(C(=O)NCCN(C)C)ccc12	C#Cc1c(C)n(Cc2cccc2)c2cc(C(=O)NCCN(C)C)ccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1cc2c(cc1CC)Nc1cc(OC)ccc1N=Cc1ccc(C(=O)O)cc1	CCOc1ccc2c(c1)Nc1cc(CC)c(OC)cc1C(c1ccc(C(=O)O)cc1)=N2	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCc1c(OC)ccc2nc3[nH]nc(C)c3nc12	C=CCc1c(OC)ccc2nc3[nH]nc(C)c3nc12	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)CN(c1ccc([N+](=O)[O-])cc1)S(=O)(=O)c1ccc([N+](=O)[O-])cc1	COC(=O)CN(c1ccc([N+](=O)[O-])cc1)S(=O)(=O)c1ccc([N+](=O)[O-])cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NC1CCc2c(F)ccc(C)OCc3cc4ccc(C(=N)N)cc4o3)c3ccnc3)c2C1	N=C(N)c1ccc2cc(COC(c3ccnc3)c3ccc(F)c4c3CC(N)CC4)oc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(c2cccc2)NC(=O)N(NC(=O)OCC(=O)NCc2cccc2Cl)C1=O	CC1(c2cccc2)NC(=O)N(CC(=O)OCC(=O)NCc2cccc2Cl)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cccc([N+](=O)[O-])c1ccc(Cl)c(S(=O)(=O)N2CCOCC2)c1	O=C(Nc1cccc([N+](=O)[O-])c1ccc(Cl)c(S(=O)(=O)N2CCOCC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)CCc1nc(N)nc(N)n1	CCN(CC)CCc1nc(N)nc(N)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(N2C3=C(C(=O)CCC3)C(c3ccc([N+](=O)[O-])o3)C3=C2CC(C)(C)CC3=O)cc1	CCOc1ccc(N2C3=C(C(=O)CCC3)C(c3ccc([N+](=O)[O-])o3)C3=C2CC(C)(C)CC3=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)Cc1ncc(-c2nc3[nH]cc(C(F)(F)F)c3c2)cc1NC(=O)Nc1ccc(OC(F)(F)F)cc1	CC(C)(C)Cc1ncc(-c2nc3[nH]cc(C(F)(F)F)c3c2)cc1NC(=O)Nc1ccc(OC(F)(F)F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CN(c2cc3c(cc2[N+](=O)[O-])c(=O)c(C(=O)O)cn3C2CC2)CCN1	CC1CN(c2cc3c(cc2[N+](=O)[O-])c(=O)c(C(=O)O)cn3C2CC2)CCN1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nnc(N)n1Nc1ccc2cccc12	Nc1nnc(N)n1Nc1ccc2cccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C(=O)Oc1cc(C(=O)C=Cc2cccc2)nn1-c1ccccc1	CCOC(=O)C(=O)Oc1cc(C(=O)C=Cc2cccc2)nn1-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1nssc1=5	S=c1ssnc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)n(-c2nc(N)cc(Nc3ccc(F)c(Cl)c3)n2)n1	Cc1cc(C)n(-c2nc(N)cc(Nc3ccc(F)c(Cl)c3)n2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C=CC=CC(=O)N1CCC(CC(=O)O)CC1)=C(c1ccccc1)c1ccccc1	CCC(C=CC=CC(=O)N1CCC(CC(=O)O)CC1)=C(c1ccccc1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(Nc1cccn1)C(=N)NN=Cc1ccccc1	CN(Nc1cccn1)C(=N)NN=Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)C1CCN(c2ccc3[nH]c(-c4c(NC(CO)Cc5ccccc5)cc[nH]c4=O)nc3c2)CC1	CN(C)C1CCN(c2ccc3[nH]c(-c4c(NC(CO)Cc5ccccc5)cc[nH]c4=O)nc3c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(C=NNC(=O)c2ccc3c(c2)OCCO3)c1O	COc1cccc(C=NNC(=O)c2ccc3c(c2)OCCO3)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
CN(c1cc2ncc(=O)[nH]c2cc1Nc1nc(Nc2ccc(N3CCOCC3)cc2)ncc1C(F)(F)F)C1CCOCC1	CN(c1cc2ncc(=O)[nH]c2cc1Nc1nc(Nc2ccc(N3CCOCC3)cc2)ncc1C(F)(F)F)C1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1csc1CN(C)C(=O)Cc1c(C)nc2nc(C)nn2c1C	Cc1nc2nc(C)c(CC(=O)N)C(Cc3sc3C)c(C)n2n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cn1ncc2c(=O)oc3cccc3c21)N1CCC2(CC1)OCCO2	O=C(Cn1ncc2c(=O)oc3cccc3c21)N1CCC2(CC1)OCCO2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc2sc(-c3cccc(C)c3)c(-c3cccc(Br)c3)n2c(=O)c1C	Cc1cccc(-c2sc3nc(C)c(C)c(=O)n3c2-c2cccc(Br)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(C)c1NC(=O)CCc1c(C)nn(-c2ccc(N3CCCC3)nn2)c1C	Cc1cccc(C)c1NC(=O)CCc1c(C)nn(-c2ccc(N3CCCC3)nn2)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(OC2ncc(Cl)cc2Cl)c(C(=O)N2CCOCC2)n1	Cc1ccc(OC2ncc(Cl)cc2Cl)c(C(=O)N2CCOCC2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C(CSSCC(NS(C)(=O)=O)C(=O)OC)NC(=O)CNC(=O)C(N)CSSCCC(=O)O	COC(=O)C(CSSCC(NS(C)(=O)=O)C(=O)OC)NC(=O)CNC(=O)C(N)CSSCCC(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccn2c(=O)c(C=Nc3nc(-c4ccccc4)cs3)c(N3CCOCC3)nc12	Cc1cccn2c(=O)c(C=Nc3nc(-c4ccccc4)cs3)c(N3CCOCC3)nc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(CSc2ccc(C(=O)NC3CC3)o2)cc1	Cc1cccc(CSc2ccc(C(=O)NC3CC3)o2)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
COc1ccc(C=NNC(=O)c2onc(C)c2Br)cc1COc1cccc(Cl)c1	COc1ccc(C=NNC(=O)c2onc(C)c2Br)cc1COc1cccc(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(N)NCCCC(NC(=O)C)CC1CCNC1=O)NC(=O)C1CCCN1C(=O)C1CCC(=O)N1)C(N)=O	N=C(N)NCCCC(NC(=O)C)CC1CCNC1=O)NC(=O)C1CCCN1C(=O)C1CCC(=O)N1)C(N)=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(NNc2nccc(C(F)(F)F)n2)c2cccc2n1	Cc1cc(NNc2nccc(C(F)(F)F)n2)c2cccc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)c2c(=O)nc(Nc3ccc4ncsc4c3)oc2c1	Cc1cc(C)c2c(=O)nc(Nc3ccc4ncsc4c3)oc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(cc1OC)CN(CCCCc1ccncc1)CC2	COc1cc2c(cc1OC)CN(CCCCc1ccncc1)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)Nc2cccc(-c3cn4ccnc4c(NCC4CCOC4)n3)c2)cc1	Cc1ccc(S(=O)(=O)Nc2cccc(-c3cn4ccnc4c(NCC4CCOC4)n3)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)CC(=O)C(=O)Nc2ccc(C)cc2)cc1	Cc1ccc(NC(=O)C(=O)CC(=O)c2ccc(C)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NCCNC(=O)C(Cc1ccc(O)cc1)NC(=O)C(=O)Cc1cccc(O)c(O)c1	NCCNC(=O)C(Cc1ccc(O)cc1)NC(=O)C(=O)Cc1ccc(O)c(O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
BrC1ccc2[nH]c3c(c2c1)CSc1ccccc1-3	BrC1ccc2[nH]c3c(c2c1)CSc1ccccc1-3	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1nc(C2CC2)c(Br)c1Br	CCn1nc(C2CC2)c(Br)c1Br	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nc(NC(=O)c2cccc(Nc3ncc4c(n3)-c3ccccc3N(C(=O)C3CC3)CC4)c2)cn1	CCc1nc(NC(=O)c2cccc(Nc3ncc4c(n3)-c3ccccc3N(C(=O)C3CC3)CC4)c2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(C)c(C(=O)N(C)C)c2ccc(O)cc2)c(C)n1-c1ccc(OC2cccc2)cc1	Cc1c(C(=O)N(C)C)c2ccc(O)cc2)c(C)n(-c2ccc(OC3ccccc3)cc2)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
OC1=NC(=Cc2cnn3c(NC4CC4)cc(Nc4ccnc4)nc23)C(O)=N1	OC1=NC(=Cc2cnn3c(NC4CC4)cc(Nc4ccnc4)nc23)C(O)=N1	TRUE	TRUE	FALSE
CC1(C)CN(C2OCC3(C)C(CCC4C5CCC(=O)C5(C)CCC43)C2O)C(=O)O1	CC1(C)CN(C2OCC3(C)C(CCC4C5CCC(=O)C5(C)CCC43)C2O)C(=O)O1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(c2c(C)n[nH]c2O)c2c(C)n[nH]c2O)c(OC)c1OC	COc1ccc(C(c2c(C)n[nH]c2O)c2c(C)n[nH]c2O)c(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(-c2ccc(O)cc2)nc2cccc(Cl)c2c1-c1ccccc1F	Cc1c(-c2ccc(O)cc2)nc2cccc(Cl)c2c1-c1ccccc1F	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C(=O)OCc1ccccc1C#N)N1C(=O)COc2ccc(S(=O)(=O)N3CCCCC3)cc21	CC(C(=O)OCc1ccccc1C#N)N1C(=O)COc2ccc(S(=O)(=O)N3CCCCC3)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cccc1C(=O)N1CCN(Cc2cccc2Cl)CC1	Cn1cccc1C(=O)N1CCN(Cc2cccc2Cl)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1cc(COc2ccnc2)c2c(c1)C1CC(F)C(c3ccnc3){c3cccn3}ON1C(=O)O2	CC(C)(C)c1cc(COc2ccnc2)c2c(c1)C1CC(F)C(c3ccnc3){c3cccn3}ON1C(=O)O2	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(-n2c(SCC(=O)Nc3cccc(S(=O)(=O)Nc4ncsc4)c3)nc3cccc3c2=O)cc1	CCOc1ccc(-n2c(SCC(=O)Nc3cccc(S(=O)(=O)Nc4ncsc4)c3)nc3cccc3c2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(=O)Oc1c(Sc2cccc2)c(=O)n2nccc2c1OC(=O)O		FALSE	TRUE	TRUE
COCC(C)n1ccc(-c2cc(C(=O)N)C(NCCF)C(O)=Nc3cccc(Cl)c3C)C)cc2C2CC2)n1	COCC(C)n1ccc(-c2cc(C(=O)N)C(NCCF)C(O)=Nc3cccc(Cl)c3C)C)cc2C2CC2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1ccc(CCP(Cc2cccc2)C(=O)O)cc1	CC(=O)Nc1ccc(CCP(Cc2cccc2)C(=O)O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(c1ccc(F)cc1)N1CC(c2nc(OCc3CCOCC3)no2)C1	O=S(=O)(c1ccc(F)cc1)N1CC(c2nc(OCc3CCOCC3)no2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1noc2cccc12)c1ccc(-c2ccc(F)cc2)cc1	O=C(Nc1noc2cccc12)c1ccc(-c2ccc(F)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCN1C(=O)c2c(Br)cc(OC)cc2C1=O	C=CCN1C(=O)c2c(Br)cc(OC)cc2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCC(=O)OCC1OC(n2nc3c(N)ncnc32)C(OC(=O)CCCC(=O)CCCCCCCCC)C1OC(=O)CCCCCCCCCCC	CCCCCCCCCCCCC(=O)OC1C(COC(=O)CCCCCCCCC)OC(n2nc3c(N)ncnc32)C1OC(=O)CCCC(=O)CCCCCCCCC	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)c1ccc2c(c1)ncn2-c1ccc(OC(C)(F)F)cc1	CNC(=O)c1ccc2c(c1)ncn2-c1ccc(OC(C)(F)F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nc(N)nc(N)c1-c1ccc(NCc2cccc(-c3ccnc3)c2)c([N+](=O)[O-])c1	CCc1nc(N)nc(N)c1-c1ccc(NCc2cccc(-c3ccnc3)c2)c([N+](=O)[O-])c1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CC(C)(C)c1cc(OC)c2c3c(c(=O)oc2c1)CCC3	C=CC(C)(C)c1cc(OC)c2c3c(c(=O)oc2c1)CCC3	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)N(C)C(=O)CN1C2CCC1CC(NC(=O)c1c(F)cccc1F)C2	CC(C)N(C)C(=O)CN1C2CCC1CC(NC(=O)c1c(F)cccc1F)C2	TRUE	TRUE	TRUE
CCOCCN1CC(C)CC1=O	CCOCCN1CC(C)CC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-n2nc3c(C(=O)O)nc4cccc4n3c2=O)cc1	COc1ccc(-n2nc3c(C(=O)O)nc4cccc4n3c2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1noc(C)c1-c1ccc2c(c1)C(Cc1ccc(Cl)cc1)C(NS(=O)(=O)C(C)(C)CC2	Cc1noc(C)c1-c1ccc2c(c1)C(Cc1ccc(Cl)cc1)C(NS(=O)(=O)C(C)(C)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CC(c2cccc2)Cc2c1c(=O)c1cc(Cl)ccc1n2O	O=C1CC(c2cccc2)Cc2c1c(=O)c1cc(Cl)ccc1n2O	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)(C)NC(=O)C(c1ccccc1Cl)N(C(=O)Cn1nnc(-c2ccnc2)n1)c1cccc(F)c1	CC(C)(C)NC(=O)C(c1ccccc1Cl)N(C(=O)Cn1nnc(-c2ccnc2)n1)c1cccc(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
S=C1NC(=O)C(CSc2cccc3ccccc23)S1	O=C1NC(=S)SC1CSc1cccc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(c1cccc2ccccc12)N1CCC(O)(CCc2ccccc2)CC1	CC(c1cccc2ccccc12)N1CCC(O)(CCc2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Sc1nn(-c2cc3ccccc3o2)n1CCc1ccnc1	Sc1nn(-c2cc3ccccc3o2)n1CCc1ccnc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1cnc(N2CCN(C(=O)Nc3ccnc3)CC2)c(Cl)c1	CCOC(=O)c1cnc(N2CCN(C(=O)Nc3ccnc3)CC2)c(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C(=O)CNC(=O)Cn1cnc2c(N(C)C)ncnc21)N1CCCC1	CN(C)c1nnc2c1ncn2CC(=O)NCC(=O)N(C)N1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>COC(=O)c1seccc1S(=O)(=O)Nc1cc(OC)c(NC(=O)C=Cc2ccco2)cc1OC</chem>	<chem>COC(=O)c1seccc1S(=O)(=O)Nc1cc(OC)c(NC(=O)C=Cc2ccco2)cc1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)c1ccc(NCc2cccc(Cl)c2Cl)cc1O</chem>	<chem>O=C(O)c1ccc(NCc2cccc(Cl)c2Cl)cc1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN1C=CN(c2cccc2)C(=O)C1</chem>	<chem>CN1C=CN(c2cccc2)C(=O)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C=O)Cn1[nH]c1=O)c2cccc2c1=O</chem>	<chem>CN(C=O)Cn1[nH]c1=O)c2cccc2c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(C)C(=O)C(=O)N(C)C1CC2(C)C(=O)C(=O)C(C4OCC(O)(C(=O)O)CC4O)CCC3C)C1</chem>	<chem>CCN(CC)C(=O)C(=O)N(C)C1CC2(C)C(=O)N(C)C(=O)C(C4OCC(O)(C(=O)O)CC2O)C(C(=O)O)CC2O)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(-n2c(Cc3cccn3C)nnc2SCC(=O)NC(=O)NC2CCCC2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(-n2c(Cc3cccn3C)nnc2SCC(=O)NC(=O)NC2CCCC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc2c3c1OC1C(O)C=CC4C(C2)N(C)CCC341</chem>	<chem>COc1ccc2c3c1OC1C(O)C=CC4C(C2)N(C)CCC341</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)CC(NC(=O)C1CCN(S(=O)(=O)c2cc(Cl)ccc2Cl)CC1)c1cccnc1</chem>	<chem>O=C(O)CC(NC(=O)C1CCN(S(=O)(=O)c2cc(Cl)ccc2Cl)CC1)c1cccnc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc(CCC2CCN(CC(c3ccccc3)c3ccccc3)CC2)cc1</chem>	<chem>c1ccc(CCC2CCN(CC(c3ccccc3)c3ccccc3)CC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(C(=O)Nc2cc(C(C)(C)C)on2)nn1C</chem>	<chem>Cc1cc(C(=O)Nc2cc(C(C)(C)C)on2)nn1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc(-c2[nH]c([n+])(-c3ccccc3)cc2-c2cnc2)cc1</chem>	<chem>c1ccc(-c2[nH]c([n+])(-c3ccccc3)cc2-c2cnc2)cc1</chem>	FALSE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Cc1cccc1)Nc1c2cccc2nc2cccc12</chem>	<chem>O=C(Cc1cccc1)Nc1c2cccc2nc2cccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cccc2cc(C(=O)NC(C)CCc3ccccc3)c(=N)oc12</chem>	<chem>COc1cccc2cc(C(=O)NC(C)CCc3ccccc3)c(=N)oc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=S(=O)(Nc1cnc(-n2cc(-c3ccccc3)cn2)cn1)c1ccc(F)cc1</chem>	<chem>O=S(=O)(Nc1cnc(-n2cc(-c3ccccc3)cn2)cn1)c1ccc(F)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)n1cnc1CN1(C)CCCC1C</chem>	<chem>CC1CCCC(C)N1Cc1cncn1C(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(OCNC(C)C(O)c2cccc2)ccc1O</chem>	<chem>COc1cc(CNC(C)C(O)c2cccc2)ccc1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cccc(OCOCOc2cccc2Br)c1</chem>	<chem>Cc1cccc(OCOCOc2cccc2Br)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1c2c(c3cc(S(=O)(=O)c4c(Cl)cc(-c5cn6cc(Br)ccc6n5)cc43)1)C1CC(C2)N1</chem>	<chem>Cn1c2c(c3cc(S(=O)(=O)c4c(Cl)cc(-c5cn6cc(Br)ccc6n5)cc43)1)C1CC(C2)N1</chem>	FALSE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)OC(=O)N1CCCCC1c1nc(C(=O)Nc2ccc(OC(F)(F)F)cc2)co1</chem>	<chem>CC(C)(C)OC(=O)N1CCCCC1c1nc(C(=O)Nc2ccc(OC(F)(F)F)cc2)co1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NC(Cc1c[nH]c2cccc12)C(=O)O)C1CN(C(=O)N2CCCCC2)CCN1C(=O)Cc1ccc(O)cc1</chem>	<chem>O=C(O)C(Cc1c[nH]c2cccc12)NC(=O)C1CN(C(=O)N2CCCCC2)CCN1C(=O)Cc1ccc(O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>S=C(Nc1cccc1)OCCc1cccc1</chem>	<chem>S=C(Nc1cccc1)OCCc1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>Clc1cc2nc(CN3CCN(c4ccc(Cl)cc4)CC3)c(-c3ccccc3)nc2cc1Cl</chem>	<chem>Clc1ccc(N2CCN(Cc3nc4cc(Cl)c(Cl)cc4nc3-c3ccccc3)CC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc2nnc(-c3cc(OCc4cccc(F)c4)nc(N)n3)c2cc1OC</chem>	<chem>COc1cc2nnc(-c3cc(OCc4cccc(F)c4)nc(N)n3)c2cc1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1nc(C)ncc1C(=O)Nc1cccc1N1CCCC1</chem>	<chem>CCc1nc(C)ncc1C(=O)Nc1cccc1N1CCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(S(=O)(=O)NN=Cc2c(C)nn(-c3ccc(Cl)cc3)c2Cl)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(S(=O)(=O)NN=Cc2c(C)nn(-c3ccc(Cl)cc3)c2Cl)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc2c(c1)c(=O)c(C(=O)c1ccc(Cl)cc1)cn2CC(=O)N1CCOCC1</chem>	<chem>Cc1ccc(C(=O)c2cn(CC(=O)N3CCOCC3)c3ccc(C)cc3c2=O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN1Cc2cc(O)c(O)cc2-c2cc(O)cc(F)c2C1</chem>	<chem>CN1Cc2cc(O)c(O)cc2-c2cc(O)cc(F)c2C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(-c2cc(C(CC(C)=O)NC(=O)C(C)CO)nn2-c2cccc2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(-c2cc(C(CC(C)=O)NC(=O)C(C)CO)nn2-c2cccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=c1c2cccc2n(CCN2CCCC2)c2cc(S(=O)(=O)NCCCN3CCOCC3)ccc12</chem>	<chem>O=c1c2cccc2n(CCN2CCCC2)c2cc(S(=O)(=O)NCCCN3CCOCC3)ccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)Cc1sc(C=C2NC(=O)N(Cc3ccc(F)cc3)C2=S)nc1-c1ccc(F)cc1</chem>	<chem>O=C(O)Cc1sc(C=C2NC(=O)N(Cc3ccc(F)cc3)C2=S)nc1-c1ccc(F)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N=C(O)c1ccc2cnc(NC3CC(CO)C(O)C3O)nc2c1</chem>	<chem>N=C(O)c1ccc2cnc(NC3CC(CO)C(O)C3O)nc2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc2ncc(=O)n(CCN3CCC(CNC(=O)CCCC(=O)N4CCN(C)CC4)CC3)c2c1</chem>	<chem>COc1ccc2ncc(=O)n(CCN3CCC(CNC(=O)CCCC(=O)N4CCN(C)CC4)CC3)c2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN1CCN(c2ccc(S(=O)(=O)c3ccc(F)cc3)cn2)CC1</chem>	<chem>CN1CCN(c2ccc(S(=O)(=O)c3ccc(F)cc3)cn2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ncc(-c2ccc(-c3nc(C4(c5ccc(-c6cnc(N)nc6)nc5)CCC4)no3)c(NC(C)C)c2)cc1C(F)(F)F</chem>	<chem>COc1ncc(-c2ccc(-c3nc(C4(c5ccc(-c6cnc(N)nc6)nc5)CCC4)no3)c(NC(C)C)c2)cc1C(F)(F)F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(NC(=O)C2(C)CCCN2C(=O)CCCC2CCCC2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(NC(=O)C2(C)CCCN2C(=O)CCCC2CCCC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(C(C)(C)O)ccc1Cnc1ccc(C(F)(F)F)cc1</chem>	<chem>Cc1cc(C(C)(C)O)ccc1Cnc1ccc(C(F)(F)F)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(-c2nc(Cl)c(C)n2Cc2cccc2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(-c2nc(Cl)c(C)n2Cc2cccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc2[nH]c3c(C)c4cc[n+](CCCCCCCCCCC[n+])5ccc6c(OC)cc7c6[nH]c6cc7ccc(OC)cc7c6c5)cc-5c(=O)c4c(C)c3c2c1</chem>	<chem>COc1ccc2[nH]c3c(C)c4cc[n+](CCCCCCCCCCC[n+])5ccc6c(OC)cc7c6[nH]c6cc7ccc(OC)cc7c6c5)cc-5c(=O)c4c(C)c3c2c1</chem>	FALSE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cccc1N(CC(=O)NCC1CCCCO1)C(=O)Cn1nnc(-c2cccc2)n1</chem>	<chem>COc1cccc1N(CC(=O)NCC1CCCCO1)C(=O)Cn1nnc(-c2cccc2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cccc(-c2nc(CN3CCOCC3)co2)c1</chem>	<chem>Cc1cccc(-c2nc(CN3CCOCC3)co2)c1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CCN1CCN(S(=O)(=O)c2cc(-c3nnc(O)c4ccc(C)nc34)ccc2C)CC1)c1cccc1</chem>	<chem>O=C1COc2ccc(C(=O)NC3CC(OCc4cccc4)C3)cc2N1</chem>	FALSE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1COc2ccc(C(=O)NC3CC(OCc4cccc4)C3)cc2N1</chem>	<chem>COc1ccc2c(c1)CC1CN(Cc3cccn3)CCN1C2=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc2c(c1)CC1CN(Cc3cccn3)CCN1C2=O</chem>	<chem>CCCCCCCCCCCCCCCCC1OC(=O)C(=O)CCCCCCCCCCCCC1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCCCCCCCCC(=O)C1=C(O)OC(CCCCCCCCCCCCCC)C1=O</chem>	<chem>CCN(C(=O)CCc1nc(-c2ccc(Cl)cc2)no1)c1c(N)n(CC(C)C)c(=O)[nH]c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(C(=O)CCc1nc(-c2ccc(Cl)cc2)no1)c1c(N)n(CC(C)C)c(=O)[nH]c1=O</chem>	<chem>CC(C1CCC2CC3CCN(C)C3C21)N1CC(Cc2cccc2)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C1CCC2CC3CCN(C)C3C21)N1CC(Cc2cccc2)C1</chem>	<chem>Cc1cc(C)c(C(=O)N(C)CC(=O)Nc2cccc2C)c(C)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(C)c(C(=O)N(C)CC(=O)Nc2cccc2C)c(C)c1</chem>	<chem>COc1ccc(C2C(C(=O)OCc3ccc(C)o3)=C(C)NC(C)=C2C(=O)Nc2ccc3c(c2)OCCO3)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C2C(C(=O)OCc3ccc(C)o3)=C(C)NC(C)=C2C(=O)Nc2ccc3c(c2)OCCO3)cc1</chem>	<chem>OC1=NC(=Cc2cnn3c(=NC4CC4)[nH]c(=NCc4cccc4F)[nH]c23)C(O)=N1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>OC1=NC(=Cc2cnn3c(=NC4CC4)[nH]c(=NCc4cccc4F)[nH]c23)C(O)=N1</chem>	<chem>O=C(CSc1cccc1)NCCNC(=O)c1cccc1Br</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(CSc1cccc1)NCCNC(=O)c1cccc1Br</chem>	<chem>Clc1cc2c3c(c4cccc4c2c2cccc12)OCO3</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Clc1cc2c3c(c4cccc4c2c2cccc12)OCO3</chem>	<chem>Cc1nc(-c2cccc(C(F)(F)F)c2)sc1C1CCN(c2ncnc(N)c2-c2ccc(F)cc2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nc(-c2cccc(C(F)(F)F)c2)sc1C1CCN(c2ncnc(N)c2-c2ccc(F)cc2)CC1</chem>	<chem>CC(C)N(Cc1cc(Cl)ccc1OC(F)(F)F)C1CCN(C(=O)C(Cc2cccc(C(=N)N)c2)NS(=O)(=O)c2cccc(N)c2)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)N(Cc1cc(Cl)ccc1OC(F)(F)F)C1CCN(C(=O)C(Cc2cccc(C(=N)N)c2)NS(=O)(=O)c2cccc(N)c2)C1</chem>	<chem>Cc1ccc(C=NC2cc(C(=N)N)ccn2)c(OC2ccc(F)c(Cl)c2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(C=NC2cc(C(=N)N)ccn2)c(OC2ccc(F)c(Cl)c2)n1</chem>	<chem>COc1ccc(NC(=O)ON=Cc2ccc([N+](=O)[O-])cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(NC(=O)ON=Cc2ccc([N+](=O)[O-])cc2)cc1</chem>	<chem>OC1Cc2c([nH]c3ccc(Cl)cc23)CN1CCSc1nc(-c2ccnc2)nc2c1CCC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>OC1Cc2c([nH]c3ccc(Cl)cc23)CN1CCSc1nc(-c2ccnc2)nc2c1CCC2</chem>	<chem>COCNC1nnc(-c2cccc2C)c2sc3ccccc3c12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCNC1nnc(-c2cccc2C)c2sc3ccccc3c12</chem>	<chem>Cc1cccc1OCC(=O)c1c[nH]c2ccc([N+](=O)[O-])cc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cccc1OCC(=O)c1c[nH]c2ccc([N+](=O)[O-])cc12</chem>	<chem>COc1cccc1Cnc1ncc(C(=O)NCc2cccc2)c(NCC2CCCC2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cccc1Cnc1ncc(C(=O)NCc2cccc2)c(NCC2CCCC2)n1</chem>	<chem>Cc1cc(Cl)nc2ccc(NC(=O)c3cncn3)cc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(Cl)nc2ccc(NC(=O)c3cncn3)cc12</chem>	<chem>N=C(N)NCCCC(NC(=O)C(Cc1c[nH]c2cccc12)NC(=O)C1CCCN1)C(=O)NC(Cc1cccc2cccc12)C(=O)NCc1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N=C(N)NCCCC(NC(=O)C(Cc1c[nH]c2cccc12)NC(=O)C1CCCN1)C(=O)NC(Cc1cccc2cccc12)C(=O)NCc1cccc1</chem>	<chem>COC(=O)c1ccc(Cl)c(NS(=O)(=O)c2cc(NC(=O)c3cc4cccc4s3)ccc2OC)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)c1ccc(Cl)c(NS(=O)(=O)c2cc(NC(=O)c3cc4cccc4s3)ccc2OC)c1</chem>	<chem>Cc1c(C(=O)NN=Cc2cc([N+](=O)[O-])ccc2O)nnn1-c1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c(C(=O)NN=Cc2cc([N+](=O)[O-])ccc2O)nnn1-c1cccc1</chem>	<chem>CCN(CC)C(=O)CSc1nnnn1-c1cc(OC)ccc1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC)C(=O)CSc1nnnn1-c1cc(OC)ccc1OC</chem>	<chem>COc1cc(-c2nnc3ccc(-c4ccc(Cl)cc4Cl)cn23)cc(OC)c1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(-c2nnc3ccc(-c4ccc(Cl)cc4Cl)cn23)cc(OC)c1OC</chem>	<chem>COc1ccc(-c2cc(=O)n3cc(C(=O)N(CCN4CCOCC4)Cc4ccco4)ccc3[nH]2)cc1</chem>	FALSE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(-c2cc(=O)n3cc(C(=O)N(CCN4CCOCC4)Cc4ccco4)ccc3[nH]2)cc1</chem>	<chem>COC(=O)c1ccc(NS(=O)(=O)c2cccc(-c3cnc(C4CC4)o3)c2)cc1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)c1ccc(NS(=O)(=O)c2cccc(-c3cnc(C4CC4)o3)c2)cc1OC</chem>	<chem>Cs1nnc2[nH]c1=O)c3cnn(Cc4cccc4)c3n12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cs1nnc2[nH]c1=O)c3cnn(Cc4cccc4)c3n12</chem>	<chem>CC(C)(N)C(=O)NC(COCc1cccc1)c1nnnn1CCOC(=O)NCCCCO</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(N)C(=O)NC(COCc1cccc1)c1nnnn1CCOC(=O)NCCCCO</chem>	<chem>CCc1cccc1C1CC(=O)c2c(c(OC)cc3ccc(=O)oc23)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1cccc1C1CC(=O)c2c(c(OC)cc3ccc(=O)oc23)C1</chem>	<chem>CCCCOc1ccc2cc(N(C)CC(O)(Cn3cncn3)c3ccc(F)cc3F)ccc2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCOc1ccc2cc(N(C)CC(O)(Cn3cncn3)c3ccc(F)cc3F)ccc2c1</chem>	<chem>CCc1nc2c(C)ccnc2n1Cc1ccc(OC(C(=O)O)c2cccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CCc1nc2c(C)ccnc2n1Cc1ccc(OC(C(=O)O)c2cccc2)cc1</chem>	<chem>COc1cc(=O)oc2c3c(ccc12)OC(C)(CCC=C(C)C)C(OC(C)=O)C3OC(C)=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(=O)oc2c3c(ccc12)OC(C)(CCC=C(C)C)C(OC(C)=O)C3OC(C)=O</chem>	<chem>CN1C(=O)CCC1C(=O)NCc1cccc(C(F)(F)F)c1Cl</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CN1C(=O)CCC1C(=O)NCc1cccc(C(F)(F)F)c1Cl</chem>	<chem>CC(=O)c1ccc(CN2CCN(C(=O)CCOc3ccccc3)CC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)c1ccc(CN2CCN(C(=O)CCOc3ccccc3)CC2)cc1</chem>	<chem>C=C(C)C1Cc2c(ccc(O)c2O)C2CC(OC)C(O)CC12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=C(C)C1Cc2c(ccc(O)c2O)C2CC(OC)C(O)CC12</chem>	<chem>CC(c1ccc(C(=O)=N(C)CO)c2cccc2)cc1)N1CCC(CCCc2cccc2)(c2ccc(Cl)cc2)OC1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(c1ccc(C(=O)=N(C)CO)c2cccc2)cc1)N1CCC(CCCc2cccc2)(c2ccc(Cl)cc2)OC1=O</chem>	<chem>CCOC(=O)C(CCCC=CCNC(=O)Cc1ccc(N(CCC)CCl)cc1)NC(=O)c1cnc(C)cn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)C(CCCC=CCNC(=O)Cc1ccc(N(CCC)CCl)cc1)NC(=O)c1cnc(C)cn1</chem>	<chem>Cc1cc(F)cc(F)c1Cc1sc(N)c(C(=O)CCCC2CCSC2)c1N</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(F)cc(F)c1Cc1sc(N)c(C(=O)CCCC2CCSC2)c1N</chem>	<chem>O=C(NC1CC1)c1ccc(-c2ccc(F)c(CNc3ccc(CCN4CCOCC4)cc3)n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NC1CC1)c1ccc(-c2ccc(F)c(CNc3ccc(CCN4CCOCC4)cc3)n2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc2c(c1)C=C1CNCC(Cc3ccc(F)cc3F)(C(=O)OCCc3ccccc3)-2C1=O</chem>	FALSE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc2c(c1)C=C1CNCC(Cc3ccc(F)cc3F)(C(=O)OCCc3ccccc3)-2C1=O</chem>	<chem>#CCN(CCN1c2c(c3ccccc3c1=O)C(=O)c1cccc1-2)CCc1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>#CCN(CCN1c2c(c3ccccc3c1=O)C(=O)c1cccc1-2)CCc1cccc1</chem>	<chem>Cc1n[nH]c(C)C1CQ(=O)NC1CCN(Cc2cccc2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1n[nH]c(C)C1CQ(=O)NC1CCN(Cc2cccc2)CC1</chem>				



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
COc1cc2c(c(OC)c1OC)-c1ccc(S(C)(=O)=O)c(=O)cc1C(NC(=O)c1cccc(CO[N+](=O)[O-])c1)CC2	COc1cc2c(c(OC)c1OC)-c1ccc(S(C)(=O)=O)c(=O)cc1C(NC(=O)c1cccc(CO[N+](=O)[O-])c1)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C1=CC(c2ccc(Cl)cc2)CC(OCc2ccc(CO)cc2)O1	O=C(O)C1=CC(c2ccc(Cl)cc2)CC(OCc2ccc(CO)cc2)O1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCc1c(C)nc(O)nc1O	CCCCCCCCCc1c(C)nc(O)nc1O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C#Cc2ccc(S(=O)(=O)Nc3ncc(Cl)cn3)cc2)cc1	COc1ccc(C#Cc2ccc(S(=O)(=O)Nc3ncc(Cl)cn3)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2C(Cc(=O)O)c3cc4c(cc32)OCO4)cc1	COc1ccc(C2c3cc4c(cc3C2CC(=O)O)OCO4)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc2c(c1)OCCC=C2c1ccc(O)c(C(=O)O)c1	Cc1ccc2c(c1)OCCC=C2c1ccc(O)c(C(=O)O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1ccc(-c2c[nH]c(C34CC5CC(C(C5)C3)C4)n2)cc1	Clc1ccc(-c2c[nH]c(C34CC5CC(C(C5)C3)C4)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCn1c(-c2cc(OC)c(OC)c(OC)c2)nc2c3cc(OC)ccc3ccc2c1=O	C=CCn1c(-c2cc(OC)c(OC)c(OC)c2)nc2c(ccc3ccc(OC)cc32)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ncc2nccnc(Nc3cc(C(=O)Nc4cccc(C(F)(F)F)cc4)ccc3F)c2n1	COc1ncc2nccnc(Nc3cc(C(=O)Nc4cccc(C(F)(F)F)cc4)ccc3F)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C(N)C	CCOC(=O)C(C)N	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCNC(=O)c1cn2ncc(-c3ccc(C4CNCCO4)cc3)cc2n1	CCCCNC(=O)c1cn2ncc(-c3ccc(C4CNCCO4)cc3)cc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(CCN(C(=O)CCc2c(C)nc3c(c(C)nn3-c3ccccc3)c2C)cc1	Cc1ccc(CCN(C(=O)CCc2c(C)nc3c(c(C)nn3-c3ccccc3)c2C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(F)ccc1Cc1sc(Nc2ccccc2)nc1-c1ccccc1	COc1cc(F)ccc1Cc1sc(Nc2ccccc2)nc1-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCCCOc1ccc(Br)cc1C1c2c(n[nH]c2C(C)(C)C)C(=O)N1c1ccc(-c2cccs2)cc1	CN(C)CCCCOc1ccc(Br)cc1C1c2c(n[nH]c2C(C)(C)C)C(=O)N1c1ccc(-c2cccs2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C=O)C12CCOC1N(Cc1ccc(Br)cc1)C(=O)c1ccccc12	CO(C=O)C12CCOC1N(Cc1ccc(Br)cc1)C(=O)c1ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(N2CC[N+](C)(C)CC2)cc2[nH]c(-c3c(NCCc4ccncc4)cc[nH]c3=O)nc12	Cc1cc(N2CC[N+](C)(C)CC2)cc2[nH]c(-c3c(NCCc4ccncc4)cc[nH]c3=O)nc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(l)cc1)c1ccc([N+](=O)[O-])cc1Cl	O=C(Nc1ccc(l)cc1)c1ccc([N+](=O)[O-])cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(CCC)C(=O)C1=Cc2ccc(C(=O)Nc3cccc(C(C(=O)Nc4cc(CO)ccn4)c3)cc2NC(=N)C1	CCCN(CCC)C(=O)C1=Cc2ccc(C(=O)Nc3cccc(C(C(=O)Nc4cc(CO)ccn4)c3)cc2NC(=N)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CC12CC3C(Cc(=O)C4=CC(Cl)CCC43C)C1CCC2O	CC12CC3C(Cl)C=C1C(=O)CC1C2CCC2(C)C(O)CCC12	TRUE	TRUE	TRUE
CN1C2COCC1CC(OC(=O)CC1C3CCCCO3)CCC1)(c1ccc(Cl)cc1)C2	CN1C2COCC1CC(OC(=O)CC1C3CCCCO3)CCC1)(c1ccc(Cl)cc1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cn(C2CC3OCC3O2)c(=O)[nH]c1=O	Cc1cn(C2CC3OCC3O2)c(=O)[nH]c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ccc2nc(O)c(O)nc2c1	Nc1ccc2nc(O)c(O)nc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(OC)c(CNCc2cccc(-c3ccc4nccnc(Nc5ccc(OCc6cccc(F)c6)c(Cl)c5)c4c3)c2)c1	COc1ccc(OC)c(CNCc2cccc(-c3ccc4nccnc(Nc5ccc(OCc6cccc(F)c6)c(Cl)c5)c4c3)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)(NS(=O)(=O)c1ccc(Cl)cc1)C(=O)OCc1cn(Cc2ccccc2Cl)nn1	CC(C)(NS(=O)(=O)c1ccc(Cl)cc1)C(=O)OCc1cn(Cc2ccccc2Cl)nn1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(CN2CCN(CCC(c3ccccc3)c3ccc(C(F)(F)F)cc3)CC2CCO)c1O	COc1cccc(CN2CCN(CCC(c3ccccc3)c3ccc(C(F)(F)F)cc3)CC2CCO)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nonc1NC1CCC(NC(=O)C2CC2c2ccccc2)CC1	Cc1nonc1NC1CCC(NC(=O)C2CC2c2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc2nc(C)c3c(c2c1)NC(=O)CC3(C)C	CCOc1ccc2nc(C)c3c(c2c1)NC(=O)CC3(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)N1CCC(C2C(C#N)=C(N)OC3=C2C(=O)CCC3)CC1	CCOC(=O)N1CCC(C2C(C#N)=C(N)OC3=C2C(=O)CCC3)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCN(CC(=O)N)CC(O)COc1ccc(C(=O)c2ccccc2)cc1	CCCCN(CC(=O)N)CC(O)COc1ccc(C(=O)c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1C=C1CCC(=Cc2cccn2C)C1=O	COc1ccccc1C=C1CCC(=Cc2cccn2C)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C(=O)c1ccccc1)c1ccccc1O	O=C(C(=O)c1ccccc1O)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(OC(C=O)Nc2ccncc2)cc1Cl	COc1ccc(OC(C=O)Nc2ccncc2)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCc1ccc(-c2ccc(-c3cnccn3)cc2)cc1	CCCCc1ccc(-c2ccc(-c3cnccn3)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)NCCCC(=O)N1CCOc2cc3c(cc21)OCO3	CCOC(=O)NCCCC(=O)N1CCOc2cc3c(cc21)OCO3	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(Cc2cnc(N)nc2N)c1	COc1cccc(Cc2cnc(N)nc2N)c1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(C=Cc1cccc2ccccc12)Nc1sc2c(c1C(=O)O)CCCC2	O=C(C=Cc1cccc2ccccc12)Nc1sc2c(c1C(=O)O)CCCC2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC1CCCC1)C(c1ccccc1C)N(Nc1ccco1)C(=O)c1cccncc1	Cc1ccccc1C(C(=O)NC1CCCC1)N(Nc1ccco1)C(=O)c1cccncc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC12NC(Cc3ccc(O)cc31)c1ccccc12	CC12NC(Cc3ccc(O)cc31)c1ccccc12	TRUE	TRUE	FALSE
CCN1CCCC(c2csc(C(=O)Nc3cccc(C(=O)O)c3)c2)C1	CCN1CCCC(c2csc(C(=O)Nc3cccc(C(=O)O)c3)c2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(NS(=O)(=O)c2ccc3ncc(C(=O)Nc4ccco4)c(O)c3c2)c1	COc1cccc(NS(=O)(=O)c2ccc3ncc(C(=O)Nc4ccco4)c(O)c3c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1cs(CCCc2ccc(CCN(S(=O)(=O)c3cccc4ccccc34)cc2)n1	CC(C)(C)c1cs(CCCc2ccc(CCN(S(=O)(=O)c3cccc4ccccc34)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CC(C)CN(CCCNC(=O)C=Cc2c(F)cccc2Cl)C1	CC1CC(C)CN(CCCNC(=O)C=Cc2c(F)cccc2Cl)C1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(=O)n2nc(-c3ccccc3)cc2nc1C=O	Cc1cc(=O)n2nc(-c3ccccc3)cc2nc1C=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(NC(=O)C1CCCN1C(=O)C(CCC(=O)O)NC(=O)C(Cc(=O)O)NC(=O)C(C1CCCC1)NC(=O)C(Cc1cccc1)NC(=O)C(NC(=O)CC(C)O)C(CCP(=O)(O)CC(F)(F)F		FALSE	TRUE	TRUE
Clc1cc(Cl)cc(Nc2ncc3[nH]ncc23)c1	Clc1cc(Cl)cc(Nc2ncc3[nH]ncc23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1C=C(C(N)=S)[N+](=O)[O-])SC1		FALSE	TRUE	TRUE
CCOc1cc2c(CNc3ccc(-c4csc(N)n4)cc3)cn(Cc3ccccc3)c2cc1OCC	CCOc1cc2c(CNc3ccc(-c4csc(N)n4)cc3)cn(Cc3ccccc3)c2cc1OCC	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cc1ccco1)NC(Cc1ccccc1)C(=O)O	O=C(Cc1ccco1)NC(Cc1ccccc1)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)C(=O)C1Cc2[nH]nc(NC(=O)c3ccccc3Cl)c2C1	CN(C)C(=O)C1Cc2[nH]nc(NC(=O)c3ccccc3Cl)c2C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1ccc(Nc2ccc(OC)c(C(=O)NC3CCN(C(C(=O)CC3)c2)cc1	CCOC(=O)c1ccc(Nc2ccc(OC)c(C(=O)NC3CCN(C(C(=O)CC3)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(CCC)CCNC(=O)c1cc2c(=O)n(C)C)c3ccccc3c2s1	CCCN(CCC)CCNC(=O)c1cc2c(=O)n(C)C)c3ccccc3c2s1	TRUE	TRUE	FALSE
CC1CC(n2cnc3c(NCc4ccc(Br)cc4)ncnc32)C(O)C1O	CC1CC(n2cnc3c(NCc4ccc(Br)cc4)ncnc32)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOP(=S)(OCO)N1SCCC1n1cnc2ccccc21	CCOP(=S)(OCO)N1SCCC1n1cnc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=S1=NC(CCc2ccccc2)CO1	O=[SH]1=NC(CCc2ccccc2)CO1	TRUE	TRUE	TRUE
O=P(O)(O)C(F)(F)c1ccc(NC(P(=O)(O)O)P(=O)(O)O)cc1	O=P(O)(O)C(Nc1ccc(C(F)(F)P(=O)(O)O)cc1)P(=O)(O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C1(C(=O)N2CC3CC2CN3C(=O)CN2CC(C)(C)C(N(C)C)C2)CCC(NC2CCOCC2C)C1	CC1COCCC1NC1CCC(C(=O)N2CC3CC2CN3C(=O)CN2CC(N(C)C)C(C)(C)C2)(C(C)C)C1	TRUE	TRUE	TRUE
NC1CC(Nc2c(C(=O)C3CC3)cnc3ccc(-c4cc(Cl)c(O)c(Cl)c4)cc23)CC1	NC1CC(Nc2c(C(=O)C3CC3)cnc3ccc(-c4cc(Cl)c(O)c(Cl)c4)cc23)CC1	TRUE	TRUE	FALSE
COc1ccccc1C=C(C#N)C(NC(C(=O)c1ccc2c(c1)OCO2	COc1ccccc1C=C(C#N)C(NC(C(=O)c1ccc2c(c1)OCO2	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)C(=O)c1ccc(C(c2ccc3c(c2)CN(C(=N)N)CC3)N(CCCN)C(=O)CCc2ccc3c(c2)OCO3)cc1	CCN(CC)C(=O)c1ccc(C(c2ccc3c(c2)CN(C(=N)N)CC3)N(CCCN)C(=O)CCc2ccc3c(c2)OCO3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1c(C=Cc2ccc(=O)n(C(C(=O)c2=O)cc2c3c(c(-c4ccccc4)oc2c1CC)OCO3		FALSE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)NC1C(=O)N(c2ccccc2)C1c1ccccc1	CS(=O)(=O)NC1C(=O)N(c2ccccc2)C1c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1sc2nccn(CC(=O)Nc3ccc(S(N)(=O)=O)cc3)c(=O)c2c1C	Cc1sc2nccn(CC(=O)Nc3ccc(S(N)(=O)=O)cc3)c(=O)c2c1C	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc(C#CCOC(=O)C=Cc2ccc(Cl)cc2)nc2c1ncn2C1OC(CO)C(O)C1O	Nc1nc(C#CCOC(=O)C=Cc2ccc(Cl)cc2)nc2c1ncn2C1OC(CO)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1occc1-c1nncc(SCC(=O)c2cccs2)n1C	Cc1occc1-c1nncc(SCC(=O)c2cccs2)n1C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CSc1cccc2ccccc12)NCCNC(=O)c1ccco1	O=C(CSc1cccc2ccccc12)NCCNC(=O)c1ccco1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1csc(NC(=O)c2cc(N(CCCN(C)C)C3CCCCC3)ncn2)n1	Cc1csc(NC(=O)c2cc(N(CCCN(C)C)C3CCCCC3)ncn2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CC(Cc1ccc([N+](=O)[O-])cc1)N(C)C(=O)CCCc1ccc(OC)cc1	C=CC(Cc1ccc([N+](=O)[O-])cc1)N(C)C(=O)CCCc1ccc(OC)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(COC(=O)c1c[nH]c2ccccc12)Nc1ccc(F)c(Cl)c1	O=C(COC(=O)c1c[nH]c2ccccc12)Nc1ccc(F)c(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCCCC=CC=CCCCCCCCCc1cccc(O)c1	C=CCCCC=CC=CCCCCCCCCc1cccc(O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc2nc(C)c(CN3CCC(c4nc5ccccc5[nH]4)CC3)c(C)n2n1	Cc1cc2nc(C)c(CN3CCC(c4nc5ccccc5[nH]4)CC3)c(C)n2n1	TRUE	TRUE	TRUE
OC(Cc1ccccc1)c1nc(-c2cc3cc(F)ccc3[nH]2)c[nH]1	OC(Cc1ccccc1)c1nc(-c2cc3cc(F)ccc3[nH]2)c[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1c2cc3ccccc3cc2n(Cc2ccccc2)c(=O)n1-c1nn[nH]n1	O=c1c2cc3ccccc3cc2n(Cc2ccccc2)c(=O)n1-c1nn[nH]n1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nccc2ccc(CN3CCCN(C(=O)Cc4cccc5ccccc45)CC3)cc12	Nc1nccc2ccc(CN3CCCN(C(=O)Cc4cccc5ccccc45)CC3)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1ccc(C=CC2=NCCN2)c(Cl)c1	Clc1ccc(C=CC2=NCCN2)c(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(=O)Oc1ccc(NC(=O)Nc2ccc(OC(=O)c3cc(O)c(O)c(O)c3)cc2)cc1	CC(C)C(=O)Oc1ccc(NC(=O)Nc2ccc(OC(=O)c3cc(O)c(O)c(O)c3)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nn(C)c(C)C1NC(=O)c1c(=O)nc2ccc(-c3ccccc3)cc2n1-c1ccccc1		FALSE	TRUE	TRUE
Cc1c(NC2CCC2)nc(C2CC2)nc1N1CCN(C(=O)c2cc3cc(Cl)ccc3[nH]2)C(C)C1	Cc1c(NC2CCC2)nc(C2CC2)nc1N1CCN(C(=O)c2cc3cc(Cl)ccc3[nH]2)C(C)C1	TRUE	TRUE	TRUE
N#CCCN1nnc2ccc(CNCCO)cc21	N#CCCN1nnc2ccc(CNCCO)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C=O)C1(C)CCCC2(C)C3=CC(=O)OC3CCC12	CO(C=O)C1(C)CCCC2(C)C3=CC(=O)OC3CCC12	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(N)C1CCN(Cc2ccccc2S(=O)(=O)c2ccccc3cccn23)CC1	N=C(N)C1CCN(Cc2ccccc2S(=O)(=O)c2ccccc3cccn23)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1cc(C=Nc23CC4CC(C(C4)C2)C3)ccc1OCc1ccccc1	CCOc1cc(C=Nc23CC4CC(C(C4)C2)C3)ccc1OCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=NNC(=O)Cc1cccs1)c1ccc(O)cc1O	CC(=NNC(=O)Cc1cccs1)c1ccc(O)cc1O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1-c1ccccc1COC1COC2nc([N+](=O)[O-])cn2C1	COc1ccccc1-c1ccccc1COC1COC2nc([N+](=O)[O-])cn2C1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>CNS(=O)(=O)c1ccc(Nc2ccccc2-c2nnn(C)n2)cc1</chem>	<chem>CNS(=O)(=O)c1ccc(Nc2ccccc2-c2nnn(C)n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(NC(=O)C2CCN(S(=O)(=O)c3ccccc3)C2)cc(OC)c1</chem>	<chem>COc1cc(NC(=O)C2CCCN(S(=O)(=O)c3ccccc3)C2)cc(OC)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1nc(O)c2nnc(COC(COP(=O)(O)OP(=O)(O)O)CP(=O)(O)O)c2n1</chem>	<chem>Nc1nc(O)c2nnc(COC(COP(=O)(O)OP(=O)(O)O)CP(=O)(O)O)c2n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(CCl(=O)NCC2ccncc2)cc(OC)c1</chem>	<chem>COc1cc(CCl(=O)NCC2ccncc2)cc(OC)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccccc1N1CCN(Cc2ccccc2)CC1</chem>	<chem>COc1ccccc1N1CCN(Cc2ccccc2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CCCCC1Nc2ccccc2-c2nc3ccccc3nc21</chem>	<chem>CCCCC1Nc2ccccc2-c2nc3ccccc3nc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(-c2nc3ccc(C(=O)O)ccc3c2C2Cc2c-3none2-3)cc1</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NN=Cc1ccc([N+])(=O)[O-])cc1)c1ccncc1</chem>	<chem>O=C(NN=Cc1ccc([N+])(=O)[O-])cc1)c1ccncc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CCN(CCO)Cc1ccoc(-c2ccc(Br)cc2)n1</chem>	<chem>CCN(CCO)Cc1ccoc(-c2ccc(Br)cc2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1cc(C(=O)C(=O)c2ccc3ccccc3c2)c2ccccc21</chem>	<chem>Cn1cc(C(=O)C(=O)c2ccc3ccccc3c2)c2ccccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)CCCS(=O)(=O)N1CCN(c2cc(-c3ccc(F)cc3F)nc3cc(-c4ccccc4)nn23)CC1</chem>	<chem>CN(C)CCCS(=O)(=O)N1CCN(c2cc(-c3ccc(F)cc3F)nc3cc(-c4ccccc4)nn23)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)Oc1cc(OC(C)=O)c2c(c1)C(=O)c1c(OC(C)=O)cc(C(C)(O)C(=O)OC(C)C)cc1C2=O</chem>	<chem>CC(=O)Oc1cc(OC(C)=O)c2c(c1)C(=O)c1c(OC(C)=O)cc(C(C)(O)C(=O)OC(C)C)cc1C2=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(NC(=O)NC(=O)c2ccco2)c(OC)c1</chem>	<chem>COc1ccc(NC(=O)NC(=O)c2ccco2)c(OC)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN1CC(C2CCNCC2)C(Cc2ccc(O)cc2)C1</chem>	<chem>CN1CC(Cc2ccc(O)cc2)C(C2CCNCC2)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=c1c2nenc(N3CCN(C=O)CC3)c2cnn1-c1ccccc1</chem>	<chem>O=CN1CCN(c2nenc3c(=O)n(-c4ccccc4)nc23)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN1CC(C(=O)Nc2nccs2)CC2c3ccccc4[nH]cc(c34)CC21</chem>	<chem>CN1CC(C(=O)Nc2nccs2)CC2c3ccccc4[nH]cc(c34)CC21</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>Cc1ccc(C(C)C)c(OCCCN)c1</chem>	<chem>Cc1ccc(C(C)C)c(OCCCN)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC(=O)C(Cc1c[nH]c2ccccc12)NC(=O)C1CCN(Cc2ccccc2)CC1</chem>	<chem>NC(=O)C(Cc1c[nH]c2ccccc12)NC(=O)C1CCN(Cc2ccccc2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C=C(C#N)C(O)c2ccc([N+])(=O)[O-])cc2)cc1OC</chem>	<chem>COc1ccc(C=C(C#N)C(O)c2ccc([N+])(=O)[O-])cc2)cc1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCNS(=O)(=O)c1ccc(OC(C)=O)N2CCN(c3ccc(O)cc3)CC2)cc1</chem>	<chem>CCNS(=O)(=O)c1ccc(OC(C)=O)N2CCN(c3ccc(O)cc3)CC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(CN2CCN3nc(CN(Cc4ccc(F)cc4)Cc4ccc(C)O4)cc3C2)cc1OC</chem>	<chem>COc1ccc(CN2CCN3nc(CN(Cc4ccc(F)cc4)Cc4ccc(C)O4)cc3C2)cc1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCN1nc(SC2CCOC2=O)cc1S(=O)(=O)c1ccccc1</chem>	<chem>CCCN1nc(SC2CCOC2=O)cc1S(=O)(=O)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1nc(CCN(=O)c2c1C(=O)NCC1C2NC(c2ccc(OCc3ccccc3)cc2Cl)C1O</chem>	<chem>Cn1nc(CCN(=O)c2c1C(=O)NCC1C2NC(c2ccc(OCc3ccccc3)cc2Cl)C1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)c1ccc2c(ccn2Cc2cccc(C=Cc3ccc4ccccc4n3)c2)n1</chem>	<chem>O=C(O)c1ccc2c(ccn2Cc2cccc(C=Cc3ccc4ccccc4n3)c2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1C(=CNCCc2ccc([N+])(=O)[O-])cc2)CCCN1Cc1cccc(C(F)(F)F)c1</chem>	<chem>O=C1C(=CNCCc2ccc([N+])(=O)[O-])cc2)CCCN1Cc1cccc(C(F)(F)F)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCOC(=O)C(CCCCN1C(=O)CCC1=O)N1CCN(C)CC1</chem>	<chem>CCCCCCCOC(=O)C(CCCCN1C(=O)CCC1=O)N1CCN(C)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1nnc(COCc2ccccc2)c1-c1ccc(Cl)cc1</chem>	<chem>Nc1nnc(COCc2ccccc2)c1-c1ccc(Cl)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCC(NC(C)C(C)=O)O)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)NCC(=O)NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(=O)O</chem>	<chem>CCCC(NC(C)C(C)=O)O)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)NCC(=O)NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)C1CCN(C(=O)CSc2ccc(C#N)cn2)CC1</chem>	<chem>CCOC(=O)C1CCN(C(=O)CSc2ccc(C#N)cn2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nc(O)c(-c2nc3ccccc3[nH]2)cc1C#N</chem>	<chem>Cc1nc(O)c(-c2nc3ccccc3[nH]2)cc1C#N</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC(Cc1cc2ccccc2o1)=NN=Cc1ccc(Cl)c([N+])(=O)[O-])c1</chem>	<chem>NC(Cc1cc2ccccc2o1)=NN=Cc1ccc(Cl)c([N+])(=O)[O-])c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)c1nc2sc3c(c2c(=O)s1)CC(C)CC3</chem>	<chem>CC1CCc2sc3nc(C(C)C)sc(=O)c3c2C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nccccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(CCc2ccccc2B(O)O)n1</chem>	<chem>Cc1nccccc1Nc1ncc(C(F)(F)F)c(CCc2ccccc2B(O)O)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(C)cc(C(=O)NC2CCc3c2cnn3-c2ccc(C)cc2)c1</chem>	<chem>Cc1ccc(-n2ncc3c2CCC3NC(=O)c2cc(C)cc(C)c2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNc1cc(NC(=O)c2ccc(C)c(Nc3nnc4cccc(Cl)c34)c2)ccc1Cl</chem>	<chem>CNc1cc(NC(=O)c2ccc(C)c(Nc3nnc4cccc(Cl)c34)c2)ccc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CON=C1CC2C(C)(C(=O)O)CCCC2(C)c2cc(OC(=O)C3CO3)ccc21</chem>	<chem>CON=C1CC2C(C)(C(=O)O)CCCC2(C)c2cc(OC(=O)C3CO3)ccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C=O)c1cn(CC(=O)N2C(C(=O)=NCCOC)CC3CC32)c2cc(OCc3ncccn3)ccc12</chem>	<chem>CC(C=O)c1cn(CC(=O)N2C(C(=O)=NCCOC)CC3CC32)c2cc(OCc3ncccn3)ccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC)S(=O)(=O)c1ccc(C(=O)OCC(=O)C2CC3CCC(C)C3C2=O)cc1</chem>	<chem>CCN(CC)S(=O)(=O)c1ccc(C(=O)OCC(=O)C2CC3CCC(C)C3C2=O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNC(=O)c1ccccc1-c1ccc(CCN(C(=O)C2(c3ccc(Cl)cc3)CCCCC2)C(=O)O)cc1</chem>	<chem>CNC(=O)c1ccccc1-c1ccc(CCN(C(=O)C2(c3ccc(Cl)cc3)CCCCC2)C(=O)O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN1C2CCCC1CC(NC(=O)c1ccccc3ccoc13)C2</chem>	<chem>CN1C2CCCC1CC(NC(=O)c1ccccc3ccoc13)C2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nc(N)sc1Sc1ccc(Cl)cc1</chem>	<chem>Cc1nc(N)sc1Sc1ccc(Cl)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c(Cl)nc(N)nc1N(C)O</chem>	<chem>Cc1c(Cl)nc(N)nc1N(C)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(Cl)cc1CNc1ccc(C(=O)N2Cc3cccn3Cc3ccccc32)cn1</chem>	<chem>COc1ccc(Cl)cc1CNc1ccc(C(=O)N2Cc3cccn3Cc3ccccc32)cn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(NCCNC(=O)C(c2ccccc2)c2ccccc2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(NCCNC(=O)C(c2ccccc2)c2ccccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC12CC3(C)CC(C)(C1)CC(CCl(=O)O)c1ccccc1)c1ccccc1)(C2)C3</chem>	<chem>CC12CC3(C)CC(C)(C1)CC(CCl(=O)O)c1ccccc1)c1ccccc1)(C2)C3</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=c1cc(-c2ccccc2)oc2cc(OCc3ccc([N+])(=O)[O-])cc3)cc(O)c12</chem>	<chem>O=c1cc(-c2ccccc2)oc2cc(OCc3ccc([N+])(=O)[O-])cc3)cc(O)c12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCCN1C(=O)NCC(=O)NC1=O</chem>	<chem>CCCCCCCCN1C(=O)NCC(=O)NC1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)c1cc(-c2nc3ccccc3[nH]2)cc(C(C)(C)C)c1O</chem>	<chem>CC(C)(C)c1cc(-c2nc3ccccc3[nH]2)cc(C(C)(C)C)c1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOc1ccc2nc(N3CCCC3)c(C(=O)cc2c1</chem>	<chem>CCOc1ccc2nc(N3CCCC3)c(C(=O)cc2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(CN2CCNC(=O)C2CC(=O)NC2CCCC2)no1</chem>	<chem>Cc1cc(CN2CCNC(=O)C2CC(=O)NC2CCCC2)no1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN1CC=C(c2c[nH]c3ccccc23)CC1</chem>	<chem>CN1CC=C(c2c[nH]c3ccccc23)CC1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CC(=O)Nc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccc3c(c2)OCO3)cc1</chem>	<chem>CC(=O)Nc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccc3c(c2)OCO3)cc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>O=S1(=O)Nc2cccc(F)c2OCc2cccn21</chem>	<chem>O=S1(=O)Nc2cccc(F)c2OCc2cccn21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(S(=O)(=O)Nc2cccc3cc(C(=O)NO)sc23)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(S(=O)(=O)Nc2cccc3cc(C(=O)NO)sc23)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cnc(N(Cc2ccco2)Cc2cc3ccccc3nc2O)s1</chem>	<chem>Cc1cnc(N(Cc2ccco2)Cc2cc3ccccc3nc2O)s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(C)C=C2C3CC(C(C)(O)O)C3(C)CC2(C)CC1</chem>	<chem>CC1(C)C=C2C3CC(C(C)(O)O)C3(C)CC2(C)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(S(=O)(=O)NC(C(=O)OC(C(=O)OCc2cc(=O)c(O)cn2O)C(=O)O)c2ccc(O)c(O)c2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(S(=O)(=O)NC(C(=O)OC(C(=O)OCc2cc(=O)c(O)cn2O)c2ccc(O)c(O)c2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C(=O)C=Cc2cccc(OC(C=O)Nc3ccc(S(N)(=O)=O)cc3)c2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(C(=O)C=Cc2cccc(OC(C=O)Nc3ccc(S(N)(=O)=O)cc3)c2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(CCCCCCCC(=O)Nc1ccc(Cl)c([N+])(=O)[O-])c1)Nc1ccc(Cl)cc1</chem>	<chem>O=C(CCCCCCCC(=O)Nc1ccc(Cl)c([N+])(=O)[O-])c1)Nc1ccc(Cl)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNC(C)C(O)=Nc1cc(-c2cccc(S(=O)(=O)N3CCC(N4CCCC4)CC3)c2)cc(NC(=O)c2ccc(Cl)cn2)n1</chem>	<chem>CNC(C)C(O)=Nc1cc(-c2cccc(S(=O)(=O)N3CCC(N4CCCC4)CC3)c2)cc(NC(=O)c2ccc(Cl)cn2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(NC(=O)C2CCCN2C(=O)NC2CCCCC2)cc1C</chem>	<chem>Cc1ccc(NC(=O)C2CCCN2C(=O)NC2CCCCC2)cc1C</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CO(C=O)C(Cc1c[nH]c2ccc(C(=N)N)cc12)NS(=O)(=O)c1cc2c(N)ncnc2cc1NS(C)(=O)=O</chem>	<chem>CO(C=O)C(Cc1c[nH]c2ccc(C(=N)N)cc12)NS(=O)(=O)c1cc2c(N)ncnc2cc1NS(C)(=O)=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1ccn(C2CS(C)CO)C2O)c(=O)n1</chem>	<chem>Nc1ccn(C2CS(C)CO)C2O)c(=O)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(C=C(C#N)C(=O)Nc2ccccc2C)cc(OC)c1OC</chem>	<chem>COc1cc(C=C(C#N)C(=O)Nc2ccccc2C)cc(OC)c1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CO(C=O)C(CSC)NC(=O)C(N)CC(=O)O</chem>	<chem>CO(C=O)C(CSC)NC(=O)C(N)CC(=O)O</chem>	TRUE	FALSE	FALSE
<chem>O=C1C2CN(Cc3ccsc3)CC2CN1Cc1ccccc1</chem>	<chem>O=C1C2CN(Cc3ccsc3)CC2CN1Cc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1c2ccccc2C(=O)N1Cc1ccccc1NS(=O)(=O)c1ccc(OS(=O)(=O)C(F)(F)F)cc1</chem>	<chem>O=C1c2ccccc2C(=O)N1Cc1ccccc1NS(=O)(=O)c1ccc(OS(=O)(=O)C(F)(F)F)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1nnc(NC(=O)c2cc(-c3ccncc3)n(CC)c2C)s1</chem>	<chem>CCc1nnc(NC(=O)c2cc(-c3ccncc3)n(CC)c2C)s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(O)CNS(=O)(=O)Cc1ccco1</chem>	<chem>CC(O)CNS(=O)(=O)Cc1ccco1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C2CC(=O)CCC2=O)cc1OC1CCCC1</chem>	<chem>COc1ccc(C2CC(=O)CCC2=O)cc1OC1CCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCOc1ccc(NC(=O)C2CCN(S(=O)(=O)c3c(C)n[nH]c3C)CC2)cc1</chem>	<chem>CCCOc1ccc(NC(=O)C2CCN(S(=O)(=O)c3c(C)n[nH]c3C)CC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NCCCO)c1cc2c(s1)-c1cc(Br)ccc1C2O</chem>	<chem>O=C(NCCCO)c1cc2c(s1)-c1cc(Br)ccc1C2O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCC1C=C(C(=O)OCc2ccccc2)CC(C)CC(=O)O)c2ccccc2)O1</chem>	<chem>CCCCC1C=C(C(=O)OCc2ccccc2)CC(C)CC(=O)O)c2ccccc2)O1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nc2ccc(C(=O)c3cccc(OC(=O)CC)c3)cn2c1N</chem>	<chem>Cc1nc2ccc(C(=O)c3cccc(OC(=O)CC)c3)cn2c1N</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(CNC(=O)Cn2ccccc2C(=O)c2ccccc2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(CNC(=O)Cn2ccccc2C(=O)c2ccccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)c1nc(N2CCN(c3ncc(C(=O)NO)cn3)CC2)cc(C(F)(F)F)n1</chem>	<chem>CC(C)(C)c1nc(N2CCN(c3ncc(C(=O)NO)cn3)CC2)cc(C(F)(F)F)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)c1c(C#N)c(-c2ccc(F)cc2)nn1-c1nc(CSc2nc3ccccc3s2)cc(N)c1C#N</chem>	<chem>CN(C)c1c(C#N)c(-c2ccc(F)cc2)nn1-c1nc(CSc2nc3ccccc3s2)cc(N)c1C#N</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NCc1c[nH]c2c(Cl)cccc12</chem>	<chem>NCc1c[nH]c2c(Cl)cccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)N1CCc2c(sc(NC(=O)c3ccccc3)c2C(N)=O)C1</chem>	<chem>CC(C)N1CCc2c(sc(NC(=O)c3ccccc3)c2C(N)=O)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)C1CCc2c(sc(NC(=O)c3cc([N+])(=O)[O-])ccc3Cl)c2C#N)C1</chem>	<chem>CC(C)(C)C1CCc2c(sc(NC(=O)c3cc([N+])(=O)[O-])ccc3Cl)c2C#N)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc2c(c1)NC(=O)C2=C(Nc1ccc(N2CCN(C)CC2)cc1)c1ccccc1</chem>	<chem>COc1ccc2c(c1)NC(=O)C2=C(Nc1ccc(N2CCN(C)CC2)cc1)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Fc1ccc(Cn2cc(Cn3c(CCOc4ccccc4)nnc3C(F)(F)F)nn2)cc1</chem>	<chem>Fc1ccc(Cn2cc(Cn3c(CCOc4ccccc4)nnc3C(F)(F)F)nn2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CN(c2nc3cc(cc2F)c(=O)c(C(=O)O)cn3-c2nccs2)CC(C)O1</chem>	<chem>CC1CN(c2nc3cc(cc2F)c(=O)c(C(=O)O)cn3-c2nccs2)CC(C)O1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE



[illegible]



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CCCCCOC(=O)N(C)C1c(C(C)C)cc(NCCCN(C=O)Nc2ccc(OCC(=O)O)c(N(C)C)c2)cc1C(C)C	CCCCCOC(=O)N(C)C1c(C(C)C)cc(NCCCN(C=O)Nc2ccc(OCC(=O)O)c(N(C)C)c2)cc1C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(OC)c(NC(=O)c2cccc(S(=O))(=O)N(C)C)Cc3ccccc3)c2)c1	COc1ccc(OC)c(NC(=O)c2cccc(S(=O))(=O)N(C)C)Cc3ccccc3)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C1=C(C)N(Cc2cccc(C(F)(F)F)c2)C(NCc2ccccc2)=NC1c1cccc(F)c1	COC(=O)C1=C(C)N(Cc2cccc(C(F)(F)F)c2)C(NCc2ccccc2)=NC1c1cccc(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1c(O)cc(O)c(Cl)c1CCC(=O)Nc1cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c1	COC(=O)c1c(O)cc(O)c(Cl)c1CCC(=O)Nc1cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C(Nc2ccccc2)=C(Cl)C(=O)N1c1ccc(Br)cc1	O=C1C(Cl)=C(Nc2ccccc2)C(=O)N1c1ccc(Br)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=Cc1c(Cl)cccc1Cl)c1cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c1	O=C(C=Cc1c(Cl)cccc1Cl)c1cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C[S+])([O-])Cc2ccc(C(=O)NCC3nccccc3C)o2)cc1	COc1ccc(C[S+])([O-])Cc2ccc(C(=O)NCC3nccccc3C)o2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1CCC(CN(Cc2ccco2)c2cccc(F)c2)CC1	CCN1CCC(CN(Cc2ccco2)c2cccc(F)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1ccc(F)cc1)c1ccc2c(c1)C(=O)N(c1ccc(-c3nnnn[nH]3)cc1F)C2=O	O=C(c1ccc(F)cc1)c1ccc2c(c1)C(=O)N(c1ccc(-c3nnnn[nH]3)cc1F)C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(-c2nc(N3CCOCC3)[nH]c2-c2ccccc2)cc1	c1ccc(-c2nc(N3CCOCC3)[nH]c2-c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1csc(C(COC)NC(=O)OC(C)(C)C)n1	CCOC(=O)c1csc(C(COC)NC(=O)OC(C)(C)C)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(Cc1ccccc1)S(=O)(=O)c1ccc2c(c1)oc(=O)n2CC(=O)NCC1ccccc1	CCN(Cc1ccccc1)S(=O)(=O)c1ccc2c(c1)oc(=O)n2CC(=O)NCC1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)CCCOc1cccc(Cc2cn(Cc3ccn(C(C(=O)NC)C(C)C)n3)nn2)c1	CCOC(=O)CCCOc1cccc(Cc2cn(Cc3ccn(C(C(=O)NC)C(C)C)n3)nn2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CCNC(=O)NC(=O)COC(=O)c1cccc2c1OCCO2	CC(C)CCNC(=O)NC(=O)COC(=O)c1cccc2c1OCCO2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)N2CC(=O)N3CCc4ccccc4C3C2)cc1	Cc1ccc(C(=O)N2CC(=O)N3CCc4ccccc4C3C2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NCCCNc2c3c(c4cc(F)ccc42)CC(C)(C)CC3)cc1	COc1ccc(NCCCNc2c3c(c4cc(F)ccc42)CC(C)(C)CC3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1sc2nc(O)c(C(=O)NCCN3CCCCC3)c(=O)n12	Cc1sc2nc(O)c(C(=O)NCCN3CCCCC3)c(=O)n12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(N(C)CC(C)(C)C)nc2ccc(NC(=O)Cc3ccccc3C(F)(F)F)cc12	Cc1nc(N(C)CC(C)(C)C)nc2ccc(NC(=O)Cc3ccccc3C(F)(F)F)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
CN1C(=O)Cn2c1nc1c2ccc2cc(OCC(N)=O)ccc12	CN1C(=O)Cn2c1nc1c3ccc(OCC(N)=O)cc3ccc12	TRUE	TRUE	TRUE
N#CC1CCCN1C(=O)CNC(=O)c1cccc1	N#CC1CCCN1C(=O)CNC(=O)c1cccc1	TRUE	TRUE	FALSE
Clc1ccc(C2=Nn3c(nnc3-c3ccncc3)SC2)cc1	Clc1ccc(C2=Nn3c(nnc3-c3ccncc3)SC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CSc1nnc2ccc(-c3ccncc3)nn12)Nc1ccc(F)cc1	O=C(CSc1nnc2ccc(-c3ccncc3)nn12)Nc1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
N#Cc1ccc2[nH]cc(CCCCN3CCN(c4cccc5[nH]c(-c6ccc(COc7ccccc7)cc6)nc45)CC3)c2c1	N#Cc1ccc2[nH]cc(CCCCN3CCN(c4cccc5[nH]c(-c6ccc(COc7ccccc7)cc6)nc45)CC3)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2nnq(CCCC(=O)O)n2-c2cc(C)cc(C)c2)cc1	COc1ccc(-c2nnq(CCCC(=O)O)n2-c2cc(C)cc(C)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(Cl)cccc1CN1C(=O)c2ccccc2C1CC(=O)O	Cc1c(Cl)cccc1CN1C(=O)c2ccccc2C1CC(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1c(NC(C)=O)ccc2c1C13CCN(S(=O))(=O)c4ccc(C#N)cc4)C(C2)C1NCC3	COc1c(NC(C)=O)ccc2c1C13CCN(C1C2)N(S(=O))(=O)c1ccc(C#N)cc1)CC3	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccccc1NC(=O)CC1C(=O)NCCN1C(=O)Nc1ccc2c(c1)OCO2	CCOc1ccccc1NC(=O)CC1C(=O)NCCN1C(=O)Nc1ccc2c(c1)OCO2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(OCCSCC(O)CNC(=O)c2ccc(-n3ccnc3)cc2)c1	Cc1cccc(OCCSCC(O)CNC(=O)c2ccc(-n3ccnc3)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN=c1[nH]c(-n2cc(Br)cn2)ncc1C(N)=O	CCCN=c1[nH]c(-n2cc(Br)cn2)ncc1C(N)=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)n(-c2nnc(N3CCCC3CCO)s2)n1	Cc1cc(C)n(-c2nnc(N3CCCC3CCO)s2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CSCCC(NC(=O)Cc1ccccc1)C(=O)O	CSCCC(NC(=O)Cc1ccccc1)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(OCCCNc2cc(Br)cn2)c1	Cc1cccc(OCCCNc2cc(Br)cn2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CNCCC(Oc1ccc(C(F)(F)F)cc1)c1cccc1	CNCCC(Oc1ccc(C(F)(F)F)cc1)c1cccc1	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1ccc(-n2ncc3c(=NN)c(C(=O)NC4CCCC4)cn(Cc4CCCC4)c32)cc1C	Cc1ccc(-n2ncc3c(=NN)c(C(=O)NC4CCCC4)cn(Cc4CCCC4)c32)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCc1nn(-c2cc(NC(=O)CC)ccc2Cl)c(=O)n1Cc1ccc(-c2ccccc2S(=O))(=O)NC(=O)c2oc(C)nc2C)cc1	CCCCc1nn(-c2cc(NC(=O)CC)ccc2Cl)c(=O)n1Cc1ccc(-c2ccccc2S(=O))(=O)NC(=O)c2oc(C)nc2C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1ccc(OC2CCN(Cc3ccc(Br)o3)CC2)cc1Br	Clc1ccc(OC2CCN(Cc3ccc(Br)o3)CC2)cc1Br	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2=NN(S(=O))(=O)c3ccc(C)cc3)C(O)(c3ccco3)C2)cc1	COc1ccc(C2=NN(S(=O))(=O)c3ccc(C)cc3)C(O)(c3ccco3)C2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
C[Sij](C)(C)CCC(CO)c1cccn1	C[Sij](C)(C)CCC(CO)c1cccn1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)CSc1nnq(Cc2ccccc2)n1Cc1ccccc1	CCOC(=O)CSc1nnq(Cc2ccccc2)n1Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C1NCCCc2ccccc2CCNC(=O)C(NC=O)c2ccc(cc2)CNC1=O	CC(C)C1NCCCc2ccccc2CCNC(=O)C(NC=O)c2ccc(cc2)CNC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)n1cc(C(=O)c2cncc(NC(=O)Cn3oc(=O)c4ccccc4c3=O)c2)c2cnnc21	CC(C)n1cc(C(=O)c2cncc(NC(=O)Cn3oc(=O)c4ccccc4c3=O)c2)c2cnnc21	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CCNCC(=O)N2CCN(C(c3ccccc3)c3ccccc3)CC2)cc1OC	COc1ccc(CCNCC(=O)N2CCN(C(c3ccccc3)c3ccccc3)CC2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCC(=C2c3ccccc3CCc3ccnc32)CC1	CN1CCC(=C2c3ccccc3CCc3ccnc32)CC1	TRUE	TRUE	FALSE
Oc1ccc(-c2nnc(-c3ccc([N+])(=O)[O-])cc3)o2)cc1	O=[N+](([O-])c1ccc(-c2nnc(-c3ccc(O)cc3)o2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(OC2ccnc3[nH]ccc23)c(F)c1)c1cc(-c2ccc(F)cc2)cc(C(F)(F)F)c1	O=C(Nc1ccc(OC2ccnc3[nH]ccc23)c(F)c1)c1cc(-c2ccc(F)cc2)cc(C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C(=O)O)C1CCC2(C)C3=CCC4C(C)(C)C(O)CCC4(C)C3C(O)CC12C	CC(C(=O)O)C1CCC2(C)C3=CCC4C(C)(C)C(O)CCC4(C)C3C(O)CC12C	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C)c(NC(=O)C(CSc2nc3ccccc3o2)N2Cc3ccccc3C2=O)c1	Cc1ccc(C)c(NC(=O)C(CSc2nc3ccccc3o2)N2Cc3ccccc3C2=O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)NCC1CC(=O)OC1OC(=O)c1cccc1F	CS(=O)(=O)NCC1CC(=O)OC1OC(=O)c1cccc1F	TRUE	TRUE	TRUE
CC(NS(=O)(=O)c1cccc(C(F)(F)F)c1)C(=O)NO	CC(NS(=O)(=O)c1cccc(C(F)(F)F)c1)C(=O)NO	TRUE	TRUE	TRUE
CCS(=O)(=O)c1c(O)nc2ccc(Cl)cc2c1-c1ccccc1	CCS(=O)(=O)c1c(O)nc2ccc(Cl)cc2c1-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(-c2[nH]c3nc(NCc4ccccc4)cc3c2Cc2cccc(F)c2)n1	Cc1cccc(-c2[nH]c3nc(NCc4ccccc4)cc3c2Cc2cccc(F)c2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(Nc1ncnc2[nH]cnc12)c1ncc(F)c(N4CCCC(C(=O)NC(CSC)CC(=O)O)C4)n1	CCC(Nc1ncnc2[nH]cnc12)c1ncc(F)c(N2CCCC(C(=O)NC(CSC)CC(=O)O)C2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC=CCC1C=CC(Oc2ccc(OC)cc2)C(I)O1	CCCC=CCC1C=CC(Oc2ccc(OC)cc2)C(I)O1	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(N)N=C(C=Cc1ccccc1)Nc1ccc(C(=O)O)cc1	N=C(N)N=C(C=Cc1ccccc1)Nc1ccc(C(=O)O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cn(C2CC(O[N+])(=O)[O-])C(COC(c3ccccc3)(c3ccccc3)O2)c(=O)[nH]c1=O	Cc1cn(C2CC(O[N+])(=O)[O-])C(COC(c3ccccc3)(c3ccccc3)O2)c(=O)[nH]c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCNC(=O)c1ccc(Cl)c(Nc2ccccc2C(N)=O)c1	CN(C)CCNC(=O)c1ccc(Cl)c(Nc2ccccc2C(N)=O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(=O)CN(c2cc(C)ccc2C)S(=O)(=O)c2cccs2)cc1	Cc1ccc(NC(=O)CN(c2cc(C)ccc2C)S(=O)(=O)c2cccs2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+](([O-])c1ccc(CNC(=O)CCOP(=O)(O)O)Cc2ccc([N+])(=O)[O-])cc2)cc1	O=C(NCc1ccc([N+])(=O)[O-])cc1C(CCOP(=O)(O)O)Cc1ccc([N+])(=O)[O-])cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cn1c(O)nc2ccccc21)N1CCN(Cc2ccc3c(c2)OCO3)CC1	O=C(Cn1c(O)nc2ccccc21)N1CCN(Cc2ccc3c(c2)OCO3)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc2nc(-c3ccc(-c4ccc(NC(=O)C(Cc5ccccc5)N5C(=O)c6ccccc6C5=O)cc4)cc3)[nH]c12	Cc1cccc2nc(-c3ccc(-c4ccc(NC(=O)C(Cc5ccccc5)N5C(=O)c6ccccc6C5=O)cc4)cc3)[nH]c12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-n2ccnn2)cc1-c1ccc2cc(NC(=O)C3CC3)ncc2c1	Cc1ccc(-n2ccnn2)cc1-c1ccc2cc(NC(=O)C3CC3)ncc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2[nH]c(SCc3cn(C)nc3C)nc2c1	COc1ccc2[nH]c(SCc3cn(C)nc3C)nc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1ccc(N2C(=O)CC(NC3=NCCN3)C2=O)cc1	CCOC(=O)c1ccc(N2C(=O)CC(NC3=NCCN3)C2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1ccc(-c2csc(NC3CCCC3)n2)cc1	Clc1ccc(-c2csc(NC3CCCC3)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-n2c(=O)c3c(c4c5c(sc42)CCC3)CCC5)cc1	Cc1ccc(-n2c(=O)c3c4c5c(c(sc42)CCC3)CCC4)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c(N)c(C(=O)COC(=O)C=Cc2cccs2)c(=O)n(C)c1=O	Cn1c(N)c(C(=O)COC(=O)C=Cc2cccs2)c(=O)n(C)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(Nc2nn3c(=O)c4ccc(C(=O)NCC5ccco5)cc4nc3s2)cc1	Cc1ccc(Nc2nn3c(=O)c4ccc(C(=O)NCC5ccco5)cc4nc3s2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1cc(C(=O)O)c(=O)c2cc(F)c(N3CCN(C(=S)NC(=O)c4ccc(l)cc4)CC3)cc21	CCn1cc(C(=O)O)c(=O)c2cc(F)c(N3CCN(C(=S)NC(=O)c4ccc(l)cc4)CC3)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(C2CCN(C(=O)c3ccc4c(n3)[nH]c3nc(-c5ccc(Cl)s5)ccc34)CC2)no1	Cc1nc(C2CCN(C(=O)c3ccc4c(n3)[nH]c3nc(-c5ccc(Cl)s5)ccc34)CC2)no1	FALSE	TRUE	TRUE
NC(=O)CCC(NC(=O)c1ccc1)C(=O)NC(Cc1ccc(OCc2ccccc2)cc1)C(=O)N1CCC(CCN2CCN(c3ccccc3)CC2)CC1	NC(=O)CCC(NC(=O)c1ccc1)C(=O)NC(Cc1ccc(OCc2ccccc2)cc1)C(=O)N1CCC(CCN2CCN(c3ccccc3)CC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCc1ccccc1NC(=O)Oc1ccc2c1CCCC2	CCCCc1ccccc1NC(=O)Oc1ccc2c1CCCC2	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1sc2c(c1Br)CC1NCCCC21	Clc1sc2c(c1Br)CC1NCCCC21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1Nc2cc(O)ccc2Nc2nn(-c3ccccc3)cc21	O=C1Nc2cc(O)ccc2Nc2nn(-c3ccccc3)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC=CCSc1nc(N)nc(O)c1N=O	CC=CCSc1nc(N)nc(O)c1N=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C1CCCC1)N1C=CN(S(=O))(=O)c2ccc(F)cc2F)CC1	O=C(C1CCCC1)N1C=CN(S(=O))(=O)c2ccc(F)cc2F)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1)OC(C)(C)CC2N(C)C	COc1ccc2c(c1)OC(C)(C)CC2N(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C(F)(F)F)c2[nH]c(-c3ccccc3Cl)nc2c1	Cc1cc(C(F)(F)F)c2[nH]c(-c3ccccc3Cl)nc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(-c2nn(C)c3ccc(C(O)=NC4(c5ccccc5)CC4)cc23)c1	Cc1cccc(-c2nn(C)c3ccc(C(O)=NC4(c5ccccc5)CC4)cc23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C(C#N)=Cc1cn(CCC2CO2)c2ccccc12	CCOC(=O)C(C#N)=Cc1cn(CCC2CO2)c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
OCc1cncc(N2CCN(C3CC4CCC3C4)CC2)c1	OCc1cncc(N2CCN(C3CC4CCC3C4)CC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCc1nc(CSc2nc(N)cc(O)n2)c[nH]1	CCCCc1nc(CSc2nc(N)cc(O)n2)c[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
O=Cc1cc(O)c(O)c(-c2cc3cc(O)c(OC4OC(CO)C(O)C(O)C4O)cc3o2)c1	O=Cc1cc(O)c(O)c(-c2cc3cc(O)c(OC4OC(CO)C(O)C(O)C4O)cc3o2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NC(C)Cc1ccc(C#Cc2cnc(OC(C)C)nc2)cc1	CC(=O)NC(C)Cc1ccc(C#Cc2cnc(OC(C)C)nc2)cc1	TRUE	TRUE	FALSE

files	canonical_smiles	valid	unique	novel
Nc1cccc(-n2nn(-c3cccc(NC(=O)c4ccc(F)cc4)c3)n2)c1	Nc1cccc(-n2nn(-c3cccc(NC(=O)c4ccc(F)cc4)c3)n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)NC2(C(=O)NCC3CCN(CC4CCOCC4)CC3)CCCC2)cc1	COc1ccc(C(=O)NC2(C(=O)NCC3CCN(CC4CCOCC4)CC3)CCCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)CCn1nc2c3c(cccc31)C=Cc1cccc1-2	CCN(CC)CCn1nc2c3c(cccc31)C=Cc1cccc1-2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1cc(Oc2ccc(Cl)cc2O)nc(C(F)(F)F)c1)N1CCN(c2ncccn2)CC1	O=C(c1cc(Oc2ccc(Cl)cc2O)nc(C(F)(F)F)c1)N1CCN(c2ncccn2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(NC(=O)Nc2cc(Cl)ccc2C(=O)N2CCC3(CC2)OCCO3)c1	Cc1cccc(NC(=O)Nc2cc(Cl)ccc2C(=O)N2CCC3(CC2)OCCO3)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)NC1=NC(=O)C(=Cc2ccc(OC)c(OC)c2OC)S1	COC(=O)NC1=NC(=O)C(=Cc2ccc(OC)c(OC)c2OC)S1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2ccc3oc(-c4c(N)n[nH]c4C)nc3c2)c1	COc1ccc(-c2ccc3oc(-c4c(N)n[nH]c4C)nc3c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1CCc2(Cc1)Cc1ccc(#CC3C4C=NOc3(C)C)CC3CC3CO4)cc1C21NC(=N)N(C)C(=N)C1(CO)CO	COc1CCc2(Cc1)Cc1ccc(#CC3C4C=NOc3(C)C)Cc1C21NC(=N)N(C)C(=N)C1(CO)CO	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cnn(CC2CN(CC(=O)NCCn3cccn3)CCO2)c1	Cc1cnn(CC2CN(CC(=O)NCCn3cccn3)CCO2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)NC(=O)C1CCN(S(=O))(=O)c2c[nH]cn2)CC1	CC(C)(C)NC(=O)C1CCN(S(=O))(=O)c2c[nH]cn2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ncc(Cl)cc1-c1cnc(NC2CCOC2)c(-c2ncccn2)c1	N#Cc1ncc(Cl)cc1-c1cnc(NC2CCOC2)c(-c2ncccn2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2nc(CO)c(C(=O)NCc3ccc(F)cc3)o2)cc1	Cc1ccc(-c2nc(CO)c(C(=O)NCc3ccc(F)cc3)o2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCN(C=O)c1ccc(Cl)cc1)Nc1ccc(C(=O)N2CCN(c3ccc4c(c3)OCO4)CC2)cc1	O=C(CCN(C=O)c1ccc(Cl)cc1)Nc1ccc(C(=O)N2CCN(c3ccc4c(c3)OCO4)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(C(=O)c1cccn1Oc1ccc(C(=O)OC)cc1)c1cccc1	CCCN(C(=O)c1cccn1Oc1ccc(C(=O)OC)cc1)c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(C(=O)Nc2cnccc2N2CCOCC2)cs1	Cc1nc(C(=O)Nc2cnccc2N2CCOCC2)cs1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1nnc(N2CC(C)CNC(=O)c3ccc(F)cc3)OC2=O)n1	Cn1nnc(N2CC(C)CNC(=O)c3ccc(F)cc3)OC2=O)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1NC(=S)C(=Cc2ccc(OC(=O)Nc3cccc3)cc2)S1	O=C(COc1ccc(C=C2SC(=O)NC2=S)cc1)Nc1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1cccc(NC(=O)CSc2nnc3ccc(-c4cccc(C)c4)nn23)c1	COC(=O)c1cccc(NC(=O)CSc2nnc3ccc(-c4cccc(C)c4)nn23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCON(C=O)CCCC(=O)NNc1nnc2c3cccc3nc-2s1	CCONC(=O)CCCC(=O)NNc1nnc2c3cccc3nc-2s1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(Nc1ccc(S(=O))(=O)Nc2cc(NCCC(=O)O)nc(N)n2)cc1F)c1ccc(-c2ccc(F)c(F)c2)cc1	CC(Nc1ccc(S(=O))(=O)Nc2cc(NCCC(=O)O)nc(N)n2)cc1F)c1ccc(-c2ccc(F)c(F)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)OC1CC(O)C23COC4CCC(C)(C)C5C(=O)OC1(C)C4C2C(O)(C)OC3O)OC1OC(COC2OC(CO)(C)O(C)O)C2O(C)O(C)O)C1O)C5(C)C	CC(=O)OC1CC(O)C23COC4CCC(C)(C)C5C(=O)OC1(C)C4C2C(O)(C)OC1OC(COC2OC(CO)(C)O(C)O)C2O(C)O(C)O)C1O)OC3O)C5(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc(N)c2c(ncn2Cc2ccc(F)cc2)n1	Nc1nc(N)c2c(ncn2Cc2ccc(F)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CSc1ccc2c(c1)C1(C=C(C(=O)N(C)Cc3ccc(C)cc3)SC)CCCN1C2=O	CSc1ccc2c(c1)C1(C=C(C(=O)N(C)Cc3ccc(C)cc3)SC)CCCN1C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
CNc1nc(Nc2ccc(C(=O)N3CCOCC3)cc2OCC2C2)nc1C(F)(F)F	CNc1nc(Nc2ccc(C(=O)N3CCOCC3)cc2OCC2C2)nc1C(F)(F)F	TRUE	TRUE	FALSE
Cn1c(-c2ccc(Cl)cc2)c(CNCCCCCCNc2ccc(Cl)cc2)c2cc(Cl)ccc21	Cc1ccc(CNCCCCCCNc2cc(-c3ccc(Cl)cc3)n(C)c3ccc(Cl)cc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
OC(c1cc2n(n1)CCCN(Cc1cccc1)C2)(C1CCCCC1)C1CCCCC1	OC(c1cc2n(n1)CCCN(Cc1cccc1)C2)(C1CCCCC1)C1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1sc(=S)n(-c2ccc(Cl)c(Cl)c2)c1-c1ccc(Cl)cc1Cl	O=C(O)c1sc(=S)n(-c2ccc(Cl)c(Cl)c2)c1-c1ccc(Cl)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CC12CCC(COC(=O)C3CCCC3)CC1=CCC1C2CCc2(C)C(n3cccn3)=C(C=O)CC12	CC12CCC(COC(=O)C3CCCC3)CC1=CCC1C2CCc2(C)C(n3cccn3)=C(C=O)CC12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(COc1ccc(OCCN(CCC(F)(F)F)c2ccc([N+](=O)[O-])cc2)cc1)NO	O=C(COCc1ccc(OCCN(CCC(F)(F)F)c2ccc([N+](=O)[O-])cc2)cc1)NO	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCcn1cc(C2=Nc3cc(Cl)ccc3CC=C2c2cccc(Cl)c2)c2cccc21	CN(C)CCcn1cc(C2=Nc3cc(Cl)ccc3CC=C2c2cccc(Cl)c2)c2cccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)NC(=O)c1cccc1Cc1cc(Cl)c2c(c1)OCO2	CS(=O)(=O)NC(=O)c1cccc1Cc1cc(Cl)c2c(c1)OCO2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(C)N(C)Cc1ccc(C(F)(F)F)cc1	CC(C)C(C)N(C)Cc1ccc(C(F)(F)F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C(F)(F)F)no1	Cc1cc(C(F)(F)F)no1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1CCN(Cc2cc(COC)ccc2S(N)(=O)=O)CC1	CCN1CCN(Cc2cc(COC)ccc2S(N)(=O)=O)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C1CC(OP(=O)(O)OP(=O)(O)OCC2OC(n3ccc(=O)[nH]c3=O)C(O)C2O)CN1c1cccc(C(F)(F)F)c1	COC(=O)C1CC(OP(=O)(O)OP(=O)(O)OCC2OC(n3ccc(=O)[nH]c3=O)C(O)C2O)CN1c1cccc(C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(NC(=O)C(NC(=O)C(CCCNC(=N)N[N+](=O)[O-])NC(=O)OC(C)(C)C(C)C(C)C(C)O)CC(=O)NC1CCCCC1	CC(C)CC(NC(=O)C(NC(=O)C(CCCNC(=N)N[N+](=O)[O-])NC(=O)OC(C)(C)C(C)C(C)C(C)O)CC(=O)NC1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1c(=O)c(-c2cn(CCN(CCCNc3nc(-c4cccc4)ns3)C(C)N(=O)c3ccc(OCc4cccc4)cc3)nn2)c(O)c2cccc21	CCn1c(=O)c(-c2cn(CCN(CCCNc3nc(-c4cccc4)ns3)C(C)N(=O)c3ccc(OCc4cccc4)cc3)nn2)c(O)c2cccc21	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(COc2cc3oc(N4CCOCC4)ccc3c2C2=CCCC2)cc1	C1=C(c2cc3cc(N4CCOCC4)oc3cc2OC2c2cccc2)CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(CN2CCC(CO)(Cc3ccc(F)cc3)CC2)c1OC	COc1cccc(CN2CCC(CO)(Cc3ccc(F)cc3)CC2)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
NS(=O)(=O)c1ccc(NC(=O)CSc2nnc(O)n2-c2ccc3c(c2)OCCO3)cc1	NS(=O)(=O)c1ccc(NC(=O)CSc2nnc(O)n2-c2ccc3c(c2)OCCO3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc1NC(=O)NCCCCC(C)=				

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
O=[N+][([O-])c1ccc(C=NNc2nc(N3CCOCC3)nc(N3CCOCC3)n2)cc1	O=[N+][([O-])c1ccc(C=NNc2nc(N3CCOCC3)nc(N3CCOCC3)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
C(=Cc1nc2c(N3CCOCC3)cc(N3CCOCC3)nc2[nH]1)c1ccnc1	C(=Cc1nc2c(N3CCOCC3)cc(N3CCOCC3)nc2[nH]1)c1ccnc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CCCC1=CC=Cc1ccccc1	O=C1CCCC1=CC=Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	FALSE
CC1N(C)CCN(c2cc(-n3cnc4ccccc43)ncn2)C1C(=O)Nc1ccnc1	CC1C(C(=O)Nc2ccnc2)N(c2cc(-n3cnc4ccccc43)ncn2)CCN1C	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(C[Nc2ccc3[nH]ccc3n2])c2nc3ccccc3[nH]2)cc1	c1ccc(C[Nc2ccc3[nH]ccc3n2])c2nc3ccccc3[nH]2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nnc(N2CCC(C3CCN(C)C3)C2C)c2cc3occcc3n12	CCc1nnc(N2CCC(C3CCN(C)C3)C2C)c2cc3occcc3n12	TRUE	TRUE	TRUE
COP(=O)(O)CNC(=O)OCC(C)CCl	COP(=O)(O)CNC(=O)OCC(C)CCl	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(OC)c1C1CCCC(=O)N1Cc1ccc(OC(F)(F)F)cc1	COc1cccc(OC)c1C1CCCC(=O)N1Cc1ccc(OC(F)(F)F)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
c1ccc(-c2nc3ccccc3nc2-c2ccccc2)cc1	c1ccc(-c2nc3ccccc3nc2-c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCCOCCS(=O))(=O)c1cc2c(cc1Cl)N(C(=O)C1CC1)CC2)NO	O=C(CCCOCCS(=O))(=O)c1cc2c(cc1Cl)N(C(=O)C1CC1)CC2)NO	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(N)NCCCC(NC(=O)C(CO)NC(=O)C1Cc2c([nH]c3ccccc23)CN1)C(=O)NC(CC(=O)O)C(=O)NC(CO)C(=O)NC(CCCNC(=N)N)C(N)=O	N=C(N)NCCCC(NC(=O)C(CO)NC(=O)C(CC(=O)O)NC(=O)C(CCCNC(=N)N)NC(=O)C(CO)NC(=O)C1Cc2c([nH]c3ccccc23)CN1)C(N)=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1OCC(c2ccc(Br)cc2)N1c1ccn2ncc(-c3ccc(-c4nnn[nH]4)c(F)c3)c2n1	O=C1OCC(c2ccc(Br)cc2)N1c1ccn2ncc(-c3ccc(-c4nnn[nH]4)c(F)c3)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(CC(=O)Nc1ccc(Cl)cc1)C(=O)c1cc(C)c2ccccc2n1	CCCN(CC(=O)Nc1ccc(Cl)cc1)C(=O)c1cc(C)c2ccccc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc2n(n1)CCC(=O)N2Cc1ccc(C(=O)Nc2cc(C)ccn2)cc1	Cc1ccnc(NC(=O)c2ccc(CN3C(=O)CCn4nc(C)cc43)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-n2c(=O)[nH]c3cc(C(=O)N4CCCC4)ccc3c2=O)cc1OC	COc1ccc(-n2c(=O)[nH]c3cc(C(=O)N4CCCC4)ccc3c2=O)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=NNc1nc2ccccc2[nH]1)c1ccnc1	CC(=NNc1nc2ccccc2[nH]1)c1ccnc1	TRUE	TRUE	TRUE
N#CCCN(Cc1ccc(N2CCCC2)cc1)C(=O)Cc1ccc(Cl)c(Cl)c1	N#CCCN(Cc1ccc(N2CCCC2)cc1)C(=O)Cc1ccc(Cl)c(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc2nc(-c3ccc(NC(=O)c4cccc(-c5ccccc5)c4)cc3)sc2c1	Cc1ccc2nc(-c3ccc(NC(=O)c4cccc(-c5ccccc5)c4)cc3)sc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)n1nc(C2=C(c3noc4ccccc34)C(=O)OC2C)c2ccccc21	CC(=O)n1nc(C2=C(c3noc4ccccc34)C(=O)OC2C)c2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
COCCN1CC2(CCN(Cc3cscn3)CC2)CC1=O	COCCN1CC2(CCN(Cc3cscn3)CC2)CC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1CCc2c(sc(NC(=O)c3ccco3)c2C(N)=O)C1	CCN1CCc2c(sc(NC(=O)c3ccco3)c2C(N)=O)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1c(NC(=O)C2CC=CCC2C(=O)O)oc2c1CC(C)(C)CC2	COC(=O)c1c(NC(=O)C2CC=CCC2C(=O)O)oc2c1CC(C)(C)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccc(NC(=O)Cn2c(=O)n(-c3ccc(OC)cc3)c(=O)c3ccnc32)cc1	CCc1ccc(NC(=O)Cn2c(=O)n(-c3ccc(OC)cc3)c(=O)c3ccnc32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCOc1cc2nnc(N3CCN(C(=O)Nc4ccc5c(c4)OCO5)CC3)c2cc1OC	COCCOc1cc2nnc(N3CCN(C(=O)Nc4ccc5c(c4)OCO5)CC3)c2cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)OC(=O)NC(CC(=O)O)C(=O)CNC(=O)OCc1ccc2ccccc2c1	CC(C)(C)OC(=O)NC(CC(=O)O)C(=O)CNC(=O)OCc1ccc2ccccc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(Cc1ccc2cn[nH]c2c1)C1CN(CC2CCC(O)(c3ccccc3)CC2)CC1C1CC1	CN(Cc1ccc2cn[nH]c2c1)C1CN(CC2CCC(O)(c3ccccc3)CC2)CC1C1CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=CNC(=O)C1=Cc1sc(-c2ccc(OC3ccccc3-c3nn[nH]n3)cc2)n1	CC1=CNC(=O)C1=Cc1sc(-c2ccc(OC3ccccc3-c3nn[nH]n3)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(C(=O)N1CCC(F)C1CN=C(O)c1ccc(-c2cn[nH]c2)s1)C1CCCC1	NC(C(=O)N1CCC(F)C1CN=C(O)c1ccc(-c2cn[nH]c2)s1)C1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(Cc1ccccc1)C1CCn2c(CN3CCCC3)cnc2C1	CCN(Cc1ccccc1)C1CCn2c(CN3CCCC3)cnc2C1	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+][([O-])C1(C2CCCC2)N=NN(Cc2ccccc2)C1c1ccccc1	O=[N+][([O-])C1(C2CCCC2)N=NN(Cc2ccccc2)C1c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
c1cc2c3cnc(Nc4ccc(N5CCNCC5)cn4)nc3n(C3CCCC3)c2cn1	c1cc2c3cnc(Nc4ccc(N5CCNCC5)cn4)nc3n(C3CCCC3)c2cn1	TRUE	TRUE	FALSE
CCc1nn2c(=O)cc(COC(=O)COc3cccc(C(C)=O)c3)nc2s1	CCc1nn2c(=O)cc(COC(=O)COc3cccc(C(C)=O)c3)nc2s1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1ccc(-c2ccc(F)cc2)nn1-c1ccc(Cl)c(Cl)c1	O=c1ccc(-c2ccc(F)cc2)nn1-c1ccc(Cl)c(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc2c(c1F)CC(=O)N(c1ccc(C(C)C(=O)O)c(F)c1)C2c1ccc(Cl)cc1	CCOc1ccc2c(c1F)CC(=O)N(c1ccc(C(C)C(=O)O)c(F)c1)C2c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)CN	CC(O)CN	TRUE	TRUE	FALSE
COc1cc(C=CC(=O)c2ccccc2)cc(OC)c1OC	COc1cc(C=CC(=O)c2ccccc2)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	FALSE
Nc1nccc(-c2c(Cl)ccccc2Oc2cccc3c2C(=O)C(=O)NC3=O)n1	Nc1nccc(-c2c(Cl)ccccc2Oc2cccc3c2C(=O)C(=O)NC3=O)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=NNC(=O)c2ccccc2)cc(l)c1O	COc1cc(C=NNC(=O)c2ccccc2)cc(l)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)cc(S(=O)(=O)n2c(C3(O)CCN(C(=O)CO)CC3)cc3cc([N+](=O)[O-])ccc32)c1	Cc1cc(C)cc(S(=O)(=O)n2c(C3(O)CCN(C(=O)CO)CC3)cc3cc([N+](=O)[O-])ccc32)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)CCCOc1ccc2c(=O)c(-c3nc(C)no3)cc2c1	CCN(CC)CCCOc1ccc2c(=O)c(-c3nc(C)no3)cc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ccc(-c2cccc(C(CC(=O)O)c3nccs3)c2)nc1	N#Cc1ccc(-c2cccc(C(CC(=O)O)c3nccs3)c2)nc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(CCCOc1ccc2ccccc2c1)C1(O)C(C)(O)CCC2(O)C3(C)CC4OC(C5(C)CCC(O)C5(C)C3C(O)C(O)C214C)OC1OC(C)(O)C(O)C(O)C1O	CC(=O)Nc1ccc(C=C(NC(=O)c2ccccc2)C(=O)Nc2ccc(F)cc2F)cc1	FALSE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1ccc(C=C(NC(=O)c2ccccc2)C(=O)Nc2ccc(F)cc2F)cc1	CC(=O)Nc1ccc(C=C(NC(=O)c2ccccc2)C(=O)Nc2ccc(F)cc2F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Sc2ccc(NC(=O)c3ccc(S(=O)(=O)Nc4cc(C)c(C)cc4O)cc3)cc2)cc1	COc1ccc(Sc2ccc3c(c2)CCN(C2CCC2)C3)c(-c2csc(N3CCC4(C(=O)O)CC4C3)n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(OC2ccc3c(c2)CCN(CC2CC2)C3)c(-c2csc(N3CCC4(C(=O)O)CC4C3)n2)c1	Cc1ccc(OC2ccc3c(c2)CCN(C2CCC2)C3)c(-c2csc(N3CCC4(C(=O)O)CC4C3)n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CNCCc1cc(Cl)c(O)c(OC)c1	CNCCc1cc(Cl)c(O)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1oc(C(Cc2cn(C)c3ccccc23)NC(=O)C(CC(C)C)NC(=O)OC(C)(C)C)nc1C(=O)O	Cc1oc(C(Cc2cn(C)c3ccccc23)NC(=O)C(CC(C)C)NC(=O)OC(C)(C)C)nc1C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)OC(Cn1oc(=O)[nH]c1=O)c1ccc(Cl)cc1	CCOC(=O)OC(Cn1oc(=O)[nH]c1=O)c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CSc1nc2c(c(=O)[nH]1)C(c1ccccc1)C1=C(S2)C(=O)NC1=O	CSc1nc2c(c(=O)[nH]1)C(c1ccccc1)C1=C(S2)C(=O)NC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=NO)c1ccc(NC(=O)c2cnc(OC3ccc4c(c3)CCC(c3ccccc3)O4)s2)c(OCc2cncs2)c1	NC(=NO)c1ccc(NC(=O)c2cnc(OC3ccc4c(c3)CCC(c3ccccc3)O4)s2)c(OCc2cncs2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cnc(N(C)C)c(-c2nc3c(c(Nc4ccc(C(=O)N5CCC(C#N)CC5)cc4OC)n2)CNC3)c1	COc1cnc(N(C)C)c(-c2nc3c(c(Nc4ccc(C(=O)N5CCC(C#N)CC5)cc4OC)n2)CNC3)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NN=Cc1ccccc1Cl)c1ccc2[nH]cnc2c1	O=C(NN=Cc1ccccc1Cl)c1ccc2[nH]cnc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)CCN(C(=O)c1cc2c3ccccc3n(Cc3ccccc3)c2cn1	CCN(CC)CCN(C(=O)c1cc2c3ccccc3n(Cc3ccccc3)c2cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)Oc2cc3oc(=O)ccc3cc2CC1OC(=O)c1ccc(C(F)(F)F)cc1	CC1(C)Oc2cc3oc(=O)ccc3cc2CC1OC(=O)c1ccc(C(F)(F)F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)N(C)=S)Nc2cccc(NC(=O)c3ccc(C)cc3)c2)cc1	COc1ccc(C(=O)N(C)=S)Nc2cccc(NC(=O)c3ccc(C)cc3)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)N(Cc1ccc(O)cc1)c1nc(C)cs1	CC(=O)N(Cc1ccc(O)cc1)c1nc(C)cs1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NC(S)=NNC(=O)c2ccc3c(c2)OCO3)cc1	COc1ccc(NC(S)=NNC(=O)c2ccc3c(c2)OCO3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)Oc1cc2c(Nc3ccc(NS(C(=O)=O)cc3F)ncnc2cc1OCCCN1CCCCC1	CS(=O)(=O)Nc1ccc(Nc2ncnc3cc(OC(CCN4CCCC4)c(OS(C(=O)=O)cc23)c(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc(C(=NO)C(=O)c2ccc(Cl)cc2)cn2nc(-c3ccco3)nc12	Nc1nc(C(=NO)C(=O)c2ccc(Cl)cc2)cn2nc(-c3ccco3)nc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(-c2cc(C3C4C=CC5CCCCC5C4C3C(=O)O)ccc2OCCN(C)C)c1	Cc1cccc(-c2cc(C3C4C=CC5CCCCC5C4C3C(=O)O)ccc2OCCN(C)C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1cc(NC(=O)c2cccc(S(=O)(=O)NC3CCCC3)c2)on1	CC(C)(C)c1cc(NC(=O)c2cccc(S(=O)(=O)NC3CCCC3)c2)on1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C1C2C=CC(N2)C1C(=O)NC1CCOC1=O	O=C1OCCC1NC(=O)C1C2C=CC(N2)C1C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(C)Oc2ccc(-c3nc4cc(C(N)=O)ccc4[nH]3)cc2C)cc1	Cc1ccc(C(C)Oc2ccc(-c3nc4cc(C(N)=O)ccc4[nH]3)cc2C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nn(-c2ccccc2)c2nc3cc(S(=O)(=O)c4cccs4)ccc3c(O)c12	Cc1nn(-c2ccccc2)c2nc3ccc(S(=O)(=O)c4cccs4)ccc3c(O)c12	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc(Br)c(C(=O)NN=Cc2cc3ccccc3nc2Cl)n1	Cn1cc(Br)c(C(=O)NN=Cc2cc3ccccc3nc2Cl)n1	TRUE	TRUE	FALSE
C=CC(=O)N1CCC(OC2cc3c(Nc4ccc(F)c(Cl)c4F)ncnc3cc2OC)CC1	C=CC(=O)N1CCC(OC2cc3c(Nc4ccc(F)c(Cl)c4F)ncnc3cc2OC)CC1	TRUE	TRUE	FALSE
S=C(c1ccccc1)N1CCN(C(c2ccccc2)c2ccccc2)CC1	S=C(c1ccccc1)N1CCN(C(c2ccccc2)c2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)C1NC(=O)N(CC2CCC2)c2nc3ccccc3n21	CC(O)C1NC(=O)N(CC2CCC2)c2nc3ccccc3n21	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C(S)CCSCS	COC(=O)C(S)CCSCS	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Nc2ncnc3cccc(OC4ccc5nc(NC(=O)C(C)(C)C)sc5c4)c23)cc1OC	COc1ccc(Nc2ncnc3cccc(OC4ccc5nc(NC(=O)C(C)(C)C)sc5c4)c23)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc2nc(-c3ccccc(-c4cccc(NC(=O)c5ccc(Cl)c(C(F)(F)F)c5)c4)c3)[nH]c12	Cc1cccc2nc(-c3ccccc(-c4cccc(NC(=O)c5ccc(Cl)c(C(F)(F)F)c5)c4)c3)[nH]c12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2nnn(Cc3ccnc4ccccc34)n2)cc1	COc1ccc(-c2nnn(Cc3ccnc4ccccc34)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc2c(CC(=O)O)cccc2n1C(=O)c1ccc(OCc2cccn2)cc1	Cc1cc2c(CC(=O)O)cccc2n1C(=O)c1ccc(OCc2cccn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cnc(NC(=O)N(CCC(c2ccccc2)c2ccccc2)CCN2CCOCC2)s1	Cc1cnc(NC(=O)N(CCC(c2ccccc2)c2ccccc2)CCN2CCOCC2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccc(-c2ccnc(N)c2)s1	CCc1ccc(-c2ccnc(N)c2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ccc2ncnc(N3CC(O)C(CO)C3)c2n1	Nc1ccc2ncnc(N3CC(O)C(CO)C3)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(N)ccc2c(=O)cc(C(=O)O)[nH]c12	Cc1c(N)ccc2c(=O)cc(C(=O)O)[nH]c12	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1CC2(COC(=O)c3ccccc3N3C(=O)CC(C)C3=O)CCC(OC)C34C5CC6C(OC)CC(O)(C5C6OC)C(C(OC)C23)C14	CCN1CC2(COC(=O)c3ccccc3N3C(=O)CC(C)C3=O)CCC(OC)C34C5CC6C(OC)CC(O)(C5C6OC)C(C(OC)C23)C14	TRUE	TRUE	TRUE
CC(N)c1ccc(-c2c(O)cc(Cl)c3[nH]c(=O)c4sccc4c23)c(F)c1	CC(N)c1ccc(-c2c(O)cc(Cl)c3[nH]c(=O)c4sccc4c23)c(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)CCC1(C)C(=NN)c2cc3nc(C#N)c(C#N)nc3cc2C1=O	CCOC(=O)CCC1(C)C(=O)c2cc3nc(C#N)c(C#N)nc3cc2C1=NN	TRUE	TRUE	TRUE
CN(N=O)c1ccc2oc(=O)ccc2c1	CN(N=O)c1ccc2oc(=O)ccc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CSc1nc(-c2ccc(F)cc2)c(-c2ccnc(-c3cccc4ccccc34)c2)[nH]1	CSc1nc(-c2ccc(F)cc2)c(-c2ccnc(-c3cccc4ccccc34)c2)[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccsc1C=NNc1ncc[nH]1	Cc1ccsc1C=NNc1ncc[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>COc1cc2c(c(OC)c1)C(=O)N(CC1(C#Cc3ccnc3)NC(=O)NC1=O)C2</chem>	<chem>COc1cc2c(c(OC)c1)C(=O)N(CC1(C#Cc3ccnc3)NC(=O)NC1=O)C2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)c1ccc(N2C(=O)CCC2=O)cc1</chem>	<chem>COC(=O)c1ccc(N2C(=O)CCC2=O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C#CCOC(=O)C=C(C)C#CC#CCCCCCCCCCC</chem>	<chem>C#CCOC(=O)C=C(C)C#CC#CCCCCCCCCCCC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Cn1ncc2c3ccccc3n(Cc3ccccc3)c2c1=O)NCCCN1CCOCC1</chem>	<chem>O=C(Cn1ncc2c3ccccc3n(Cc3ccccc3)c2c1=O)NCCCN1CCOCC1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CC(C)(O)C(F)CN=C(O)c1cnc(-n2ncc3cc(Cl)cnc32)cc1NC1CCC(C(=O)NCCC#N)C1</chem>	<chem>CC(C)(O)C(F)CN=C(O)c1cnc(-n2ncc3cc(Cl)cnc32)cc1NC1CCC(C(=O)NCCC#N)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc2cc3c(cc2nc1SCC(=O)Nc1ccccc1)OCCO3</chem>	<chem>Cc1cc2cc3c(cc2nc1SCC(=O)Nc1ccccc1)OCCO3</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nn(C2CCC(NC(=O)c3ncc[nH]3)CC2)c(C)c1Br</chem>	<chem>Cc1nn(C2CCC(NC(=O)c3ncc[nH]3)CC2)c(C)c1Br</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C=CCC2(C)C(=O)CC(C)(C)C2=O)cc1OC</chem>	<chem>COc1ccc(C=CCC2(C)C(=O)CC(C)(C)C2=O)cc1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)C1C(c2cccs2)c2c(n(C)c3ncccc23)C(C#N)(C#N)C1(C#N)C#N</chem>	<chem>CCOC(=O)C1C(c2cccs2)c2c(n(C)c3ncccc23)C(C#N)(C#N)C1(C#N)C#N</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC#CC1(O)CCC2C3CCC4=CC(=O)CCC4=C3C(c3ccc(N(C)C)cc3)CC21C</chem>	<chem>CC#CC1(O)CCC2C3CCC4=CC(=O)CCC4=C3C(c3ccc(N(C)C)cc3)CC21C</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>O=C1c2ccccc2C(=O)N1CCNCc1cc[n+](([O-]))cc1</chem>	<chem>O=C1c2ccccc2C(=O)N1CCNCc1cc[n+](([O-]))cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)c1cc(NNc1ccc(NCc2ccccc(Oc3ccccc3)c2)c2ncnc3ccccc2c31)cc2ncccc3cccc12</chem>	<chem>O=C(O)c1cc(NNc1ccc(NCc2ccccc(Oc3ccccc3)c2)c2ncnc3ccccc2c31)cc2ncccc3cccc12</chem>	FALSE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nc2c(O)cccc2n1-c1ccc(C(=O)NN=Cc2cc(Cl)ccc2O)cc1</chem>	<chem>Cc1nc2c(O)cccc2n1-c1ccc(C(=O)NN=Cc2cc(Cl)ccc2O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(C(O)c2ccc(F)cc2)nc(SC)n1</chem>	<chem>COc1cc(C(O)c2ccc(F)cc2)nc(SC)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)Nc1cccc(Oc2nccc(-c3c(-c4ccc(F)cc4)ncn3C3CCNCC3)n2)c1</chem>	<chem>CC(=O)Nc1cccc(Oc2nccc(-c3c(-c4ccc(F)cc4)ncn3C3CCNCC3)n2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CN(c2ccc(C(=O)Nc3cccc(F)c3)cc2)CCN1C(=O)c1ccccc1</chem>	<chem>CC1CN(c2ccc(C(=O)Nc3cccc(F)c3)cc2)CCN1C(=O)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(Cc1ccccc1)C(=O)Cn1cc(Nc2nc(Nc3ccc(N4CCN(C(=O)C(C)CO)CC4)cc3)ncc2F)cn1</chem>	<chem>CN(Cc1ccccc1)C(=O)Cn1cc(Nc2nc(Nc3ccc(N4CCN(C(=O)C(C)CO)CC4)cc3)ncc2F)cn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)C(NC(=O)C(NC(=O)C(NC(=O)C1CS(Cc2cccc3ccccc23)N1)C(C)O)C(N)=O</chem>	<chem>CC(C)C(NC(=O)C(NC(=O)C(NC(=O)C1CS(Cc2cccc3ccccc23)N1)C(C)O)C(N)=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1nccc(N2CCC(Oc3ccc(C(C)NC(C)=O)cc3)C2)n1</chem>	<chem>COc1nccc(N2CCC(Oc3ccc(C(C)NC(C)=O)cc3)C2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)Nc1nc2c(c(-c3nccs3)n1)CCN(S(=O)(=O)c1ccccc(C#N)c1)CC2</chem>	<chem>CC(C)Nc1nc2c(c(-c3nccs3)n1)CCN(S(=O)(=O)c1ccccc(C#N)c1)CC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=c1c2c(oc(O)c1C(c1ccccc(NS(=O)(=O)c3ccccc3F)c1)C1CC1)CCCCC2</chem>	<chem>O=c1c2c(oc(O)c1C(c1ccccc(NS(=O)(=O)c3ccccc3F)c1)C1CC1)CCCCC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC(=O)N1CCN(CCN=C(C#N)C(N)=O)CC1</chem>	<chem>CCC(=O)N1CCN(CCN=C(C#N)C(N)=O)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(c1ccccc1)C1NC(C(=O)O)Cc2c1[nH]c1ccccc21</chem>	<chem>COC(c1ccccc1)C1NC(C(=O)O)Cc2c1[nH]c1ccccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC)C(=O)C(Nc1ccc(-c2ccno2)cc1)c1ccc(OCCN2CCN(C)CC2)cc1</chem>	<chem>CCN(CC)C(=O)C(Nc1ccc(-c2ccno2)cc1)c1ccc(OCCN2CCN(C)CC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(C2c3c(nc4c(OCc5ccc(F)c(F)c5)cccn34)C(=O)N2Cc2ccncc2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(C2c3c(nc4c(OCc5ccc(F)c(F)c5)cccn34)C(=O)N2Cc2ccncc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOc1cccc2sc(N3CCCC3c3nncc(C)o3)nc12</chem>	<chem>CCOc1cccc2sc(N3CCCC3c3nncc(C)o3)nc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCCNC(=O)Cn1cccc(Nc2nc(C)cc(C)n2)c1=O</chem>	<chem>COCCNC(=O)Cn1cccc(Nc2nc(C)cc(C)n2)c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC[N+](C)(C)CC(=O)Nc1ccc(C(=O)OC)cc1</chem>	<chem>CC[N+](C)(C)CC(=O)Nc1ccc(C(=O)OC)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNC(=O)c1coc(-c2ccc(Cl)cc2Cl)n1</chem>	<chem>CNC(=O)c1coc(-c2ccc(Cl)cc2Cl)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)C1COC(c2cccc(Cl)c2Cl)=N1</chem>	<chem>COC(=O)C1COC(c2cccc(Cl)c2Cl)=N1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(Cc1ccccc1)C(=O)c1ccc(OS(=O)(=O)c2ccc(-n3cncn3)cc2)cc1</chem>	<chem>CN(Cc1ccccc1)C(=O)c1ccc(OS(=O)(=O)c2ccc(-n3cncn3)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(CC2C(=O)OCC3OC(C)C(OC2=O)CC(C)C(C)=CC=C(C)C(=O)NC3OC(C)=O)OC2=O)cc1OC</chem>	<chem>COc1ccc(CC2C(=O)OCC3OC(C)C(CC(C)C(C)=CC=C(C)C(=O)NC3OC(C)=O)OC2=O)cc1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC)c1ccc(NC(=O)CNS(=O)(=O)c2ccccc3nsnc23)cc1Cl</chem>	<chem>CCN(CC)c1ccc(NC(=O)CNS(=O)(=O)c2ccccc3nsnc23)cc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC)c1ccc(C=Cc2cc(OC)c(OC)c(OC)c2)cc1O</chem>	<chem>CCN(CC)c1ccc(C=Cc2cc(OC)c(OC)c(OC)c2)cc1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)C1CCC(c2cc(-c3cnc(Nc4ccccc4)[nH]3)n3ncnc3n2)CC1</chem>	<chem>O=C(O)C1CCC(c2cc(-c3cnc(Nc4ccccc4)[nH]3)n3ncnc3n2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(NC(=O)CN1CCN(CCO)CC1)c1ccccc1</chem>	<chem>CC(NC(=O)CN1CCN(CCO)CC1)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccccc(C(=O)N(C)c2ccc(-c3nc4ccccc4[nH]3)cc2)c1</chem>	<chem>COc1ccccc(C(=O)N(C)c2ccc(-c3nc4ccccc4[nH]3)cc2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCN1C(=O)N(C)C2(CCN(C(C)c3ccccc3)CC2)C1=O</chem>	<chem>CCCCCCCN1C(=O)N(C)C2(CCN(C(C)c3ccccc3)CC2)C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCN1C(C(=N)S)=C(C(=O)OCC)C(=O)N(C)C1=O</chem>	<chem>CCCCCN1c(C(=N)S)c(C(=O)OCC)c(=O)n(CC)c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1c2c(c(O)c3c(=O)cc(C)oc13)OC(C)(C)c1onc(C)n1-2</chem>	<chem>COc1c2c(c(O)c3c(=O)cc(C)oc13)OC(C)(C)c1onc(C)n1-2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)c1ncnc2ccc(NC(c3ccccc3)c3ccc(Cl)cc3)cc12</chem>	<chem>CN(C)c1ncnc2ccc(NC(c3ccccc3)c3ccc(Cl)cc3)cc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCC(NC(=O)OCCF)C(=O)C(=O)Nc1cc(C)c(C(=O)N2CCCC2)cn1</chem>	<chem>CCCCC(NC(=O)OCCF)C(=O)C(=O)Nc1cc(C)c(C(=O)N2CCCC2)cn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccccc2C(=O)Nc2ccccc2-c2ccccc2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccccc2C(=O)Nc2ccccc2-c2ccccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)OC1(C)CC2(CCCC(C)C(=O)CCCC2)C2(C)CCC(C(C)C3CC(C)=CCC3OC(=O)Cc3ccccc3)C12</chem>	<chem>CC(=O)OC1(C)CC2(C3CCC(=O)C3(C)CCC(C(C)C3CC(C)=CCC3OC(=O)Cc3ccccc3)C12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1=C2CCCCCN2C(=O)C2=C1C1NC(C)(C)C(=O)C1N2</chem>	<chem>Cc1c2c(c(=O)n3c1CCCC3)NC1C(=O)C(C)(C)NC21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#CCSC(=S)Nc1cccc(S(=O)(=O)Nc2ccccc2)c1</chem>	<chem>N#CCSC(=S)Nc1cccc(S(=O)(=O)Nc2ccccc2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CS(=O)(=O)OCCOP(=O)(O)OCCSC(=O)OCCOCn1ccc(N)nc1=O</chem>	<chem>CS(=O)(=O)OCCOP(=O)(O)OCCSC(=O)OCCOCn1ccc(N)nc1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCOC(=O)NS(=O)(=O)c1sc(C(C)C)cc1-c1ccccc(C(=O)O)c1</chem>	<chem>CCCCOC(=O)NS(=O)(=O)c1sc(C(C)C)cc1-c1ccccc(C(=O)O)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCC(C)n1c(C(=O)N2CCOCC2)nc2c(-c3ccc(OC)cc3)cc(Cl)cc21</chem>	<chem>COCC(C)n1c(C(=O)N2CCOCC2)nc2c(-c3ccc(OC)cc3)cc(Cl)cc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1ncc(-c2ccc(-c3ccc(C(F)(F)F)cc3C(=O)N3CCC(F)(F)C3)cc2F)cn1</chem>	<chem>Nc1ncc(-c2ccc(-c3ccc(C(F)(F)F)cc3C(=O)N3CCC(F)(F)C3)cc2F)cn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)CNC(=O)Nc1ccc2c(c1)OC(CN(C)C(=O)Nc1c(C)ccccc1Cl)C(C)CN(C(C)CO)S2(=O)=O</chem>	<chem>CCOC(=O)CNC(=O)Nc1ccc2c(c1)OC(CN(C)C(=O)Nc1c(C)ccccc1Cl)C(C)CN(C(C)CO)S2(=O)=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1COC2(CCC(c3nc4nnn(Cc5ccc(F)cc5)c4c3)CC2)CN1</chem>	<chem>O=C1COC2(CCC(c3nc4nnn(Cc5ccc(F)cc5)c4c3)CC2)CN1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Oc1ccc(O)c(ClCc2ccsc2)=NNC(=S)NCCCN2CCOCC2c1</chem>	<chem>Oc1ccc(O)c(ClCc2ccsc2)=NNC(=S)NCCCN2CCOCC2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)=CCC12OC1C1Oc3c(O)ccc4c3C13CCN(Cc1CC1)C(C4)C3(O)C2=O</chem>	<chem>CC(C)=CCC12OC1C1Oc3c(O)ccc4c3C13CCN(Cc1CC1)C(C4)C3(O)C2=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNc1oc(-c2ccccc2)nc1-c1ccc(OC)cc1</chem>	<chem>CNc1oc(-c2ccccc2)nc1-c1ccc(OC)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(CC(=O)O)OCCc2c1[nH]c1c(Cl)ccc(Cl)c21</chem>	<chem>CC1(CC(=O)O)OCCc2c1[nH]c1c(Cl)ccc(Cl)c21</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CCOC(=O)C1=C(C)C(=O)C2(OC(C)=O)C(C)=CC(O)(C(=O)OC)C12C</chem>	<chem>CCOC(=O)C1=C(C)C(=O)C2(OC(C)=O)C(C)=CC(O)(C(=O)OC)C12C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(C=C1SC(=S)N(CCC(=O)OC)C1=O)OCC</chem>	<chem>CCOC(C=C1SC(=S)N(CCC(=O)OC)C1=O)OCC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NCCc1c[nH]c(-c2ccccc2)n1</chem>	<chem>NCCc1c[nH]c(-c2ccccc2)n1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>Nc1ccccc(C(=O)NNc2nc3c(c(-c4cccs4)n2)C(=O)CCC3)c1</chem>	<chem>Nc1ccccc(C(=O)NNc2nc3c(c(-c4cccs4)n2)C(=O)CCC3)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>BrC1cnc(Nc2ccc(N3CCCC3)cc2)nc1NCC1CC1</chem>	<chem>BrC1cnc(Nc2ccc(N3CCCC3)cc2)nc1NCC1CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1nccn2c(-c3ccnc(NCc4cccn4)n3)c(-c3ccc(F)cc3)nc12</chem>	<chem>COc1nccn2c(-c3ccnc(NCc4cccn4)n3)c(-c3ccc(F)cc3)nc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(Br)cc1NC(=O)Cn1c(=O)n2nc(C)ccc2n1</chem>	<chem>Cc1ccc2nn(CC(=O)Nc3cc(Br)ccc3C)c(=O)n2n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)n1cc(C(=O)c2ccn3c2CSC3c2ccnc2)c2cncnc21</chem>	<chem>CC(C)n1cc(C(=O)c2ccn3c2CSC3c2ccnc2)c2cncnc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(c1ccc(OCc2ccn2)cc1)C1CC1CN1CCC2(CC1)C(=O)NCN2c1ccccc1</chem>	<chem>O=C(c1ccc(OCc2ccn2)cc1)C1CC1CN1CCC2(CC1)C(=O)NCN2c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCN(C(=O)C(=O)c1c[nH]c2ccccc12)c1nc(-c2ccccc2)c(-c2ccccc2)s1</chem>	<chem>CCCN(C(=O)C(=O)c1c[nH]c2ccccc12)c1nc(-c2ccccc2)c(-c2ccccc2)s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(CCC1CCCC1)NNC(=O)c1ccc(C(F)(F)F)cc1NS(=O)(=O)c1ccc([N+](=O)[O-]))cc1</chem>	<chem>O=C(CCC1CCCC1)NNC(=O)c1ccc(C(F)(F)F)cc1NS(=O)(=O)c1ccc([N+](=O)[O-]))cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1ccccc1O)c1ccc(N2CCCC2)c(NC(=O)C2ccco2)c1</chem>	<chem>O=C(Nc1ccccc1O)c1ccc(N2CCCC2)c(NC(=O)C2ccco2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccccc(C(=O)NC2C(O)C(CO)OC2n2ncnc3c(NC)ncnc32)c1</chem>	<chem>CNc1ncnc2c1ncn2C1OC(CO)C(O)C1NC(=O)c1cccc(OC)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN1C(=O)c2c(nn(Cc3ccccc3)c2-c2ccc(F)cc2)N2CC(C)C(N)=C12</chem>	<chem>CCN1C(=O)c2c(nn(Cc3ccccc3)c2-c2ccc(F)cc2)N2CC(C)C(N)=C12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)Nc1cc(-c2ccccc2)nc(-c2ccccc2Cl)n1</chem>	<chem>CC(=O)Nc1cc(-c2ccccc2)nc(-c2ccccc2Cl)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(C1CCC2C(CCN2C(=O)=Nc2ccnc2OC(F)F)O1)N1CCC(n2c(=O)n(Cc3nc4ccccc4s3)c3c(F)ccccc32)CC1</chem>	<chem>O=C(C1CCC2C(CCN2C(=O)=Nc2ccnc2OC(F)F)O1)N1CCC(n2c(=O)n(Cc3nc4ccccc4s3)c3c(F)ccccc32)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>FC(F)Oc1ccc(-c2cc(-c3ccccc(Cl)c3)nc(OCc3ccco3)n2)cc1</chem>	<chem>FC(F)Oc1ccc(-c2cc(-c3ccccc(Cl)c3)nc(OCc3ccco3)n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=CCOC(=O)C1=C(C(=O)OCC=C)c2ccccc2C1=O</chem>	<chem>C=CCOC(=O)C1=C(C(=O)OCC=C)c2ccccc2C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(CCc1cccn1)C(=O)Cn1ncc2c3ccccc3nc-2c1O</chem>	<chem>CN(CCc1cccn1)C(=O)Cn1ncc2c3ccccc3nc-2c1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1NC(=O)C(Cc2cccc(-n3cc(-c4ccc(Cl)cc4)nn3)c2)S1</chem>	<chem>O=C1NC(=O)C(Cc2cccc(-n3cc(-c4ccc(Cl)cc4)nn3)c2)S1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)C1(Cc2ccc(F)cc2)C2c3cc(C(=O)N4CCCC4)n(CC1O)c3C1CCC(C#N)(c3ccccc(C(=O)N(C)C)c3)C1C2O</chem>	<chem>COC(=O)C1(Cc2ccc(F)cc2)C(O)Cn2c(C(=O)N3CCCC3)cc3c2C2CCC(C#N)(c4cccc(C(=O)N(C)C)c4)C2C(O)C31</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)c1nc2c(c(Nc3ccc(C(C)C(C(=O)O)cc3)n1)CCN(c1ncccc1C(F)F)F)CC2</chem>	<chem>CC(C)c1nc2c(c(Nc3ccc(C(C)C(C(=O)O)cc3)n1)CCN(c1ncccc1C(F)F)F)CC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nc2ccc(Br)cc2c(=O)n1CCN1CCN(c2ccc3nonc3c2)CC1</chem>	<chem>Cc1nc2ccc(Br)cc2c(=O)n1CCN1CCN(c2ccc3nonc3c2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC)C(=O)CSc1nnnn1-c1ccccc1</chem>	<chem>CCN(CC)C(=O)CSc1nnnn1-c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=CC(O)=Nc1ccccc1C1CCNc2c(C(N)=O)c(-c3ccc(OC4ccccc4)c(l)c3)nn21</chem>	<chem>C=CC(O)=Nc1ccccc1C1CCNc2c(C(N)=O)c(-c3ccc(OC4ccccc4)c(l)c3)nn21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(C(=O)c2cccs2)ccc1OCCCOc1ccccc1</chem>	<chem>COc1cc(C(=O)c2cccs2)ccc1OCCCOc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N=C(N)c1ccc(CNC(=O)C2CCN2CCCCCCCCCS(N)(=O)=O)cc1</chem>	<chem>N=C(N)c1ccc(CNC(=O)C2CCN2CCCCCCCCCS(N)(=O)=O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
O=C(Cn1c(=O)oc2ccccc21)NCc1ccccc1	O=C(Cn1c(=O)oc2ccccc21)NCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1nc(SCc2ccccc2C(F)(F)F)nc2ccccc12	Oc1nc(SCc2ccccc2C(F)(F)F)nc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
OCC1OC(OC2CCC3(CC2O)C(O)CCC3C(O)CCc2ccc3c(c2)OCO3)C(O)C(O)C1O	OCC1OC(OC2CCC3(CC2O)C(O)CCC3C(O)CCc2ccc3c(c2)OCO3)C(O)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(Oc2cc(O)c(C(N)=O)cc2Cl)ccc1NC(=O)c1ccc(NC(=O)NC(=O)c2ccc(F)cc2)cc1C	Cc1cc(Oc2cc(O)c(C(N)=O)cc2Cl)ccc1NC(=O)c1ccc(NC(=O)NC(=O)c2ccc(F)cc2)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cn(C2CC(N=[N+]=[N-])C(COP(=O)(OCC(F)(F)F)OC3OC(CO)C(OP(=O)(O)OC4C(O)C(CO)OC(n5cnc(C(N)O)c6c5)C4)C55)C53)O2)c(=O)n1	Cc1cn(C2CC(N=[N+]=[N-])C(COP(=O)(OCC(F)(F)F)OC3OC(CO)C(OP(=O)(O)OC4C(O)C(CO)OC(n5cnc(C(N)O)c6c5)C4)C55)C53)O2)c(=O)n1	FALSE	TRUE	TRUE
CC(C)CCCC(C)C1CCC2C3C(O)C=C4CC(O)CCC4(C)C3CCC12C	CC(C)CCCC(C)C1CCC2C3C(O)C=C4CC(O)CCC4(C)C3CCC12C	TRUE	FALSE	FALSE
Cc1nn(-c2cccn2)c(=O)c2nc3cc(C#N)cc(-n4cc(CN5CCOCC5)nn4)c3nc12	Cc1nn(-c2cccn2)c(=O)c2nc3cc(C#N)cc(-n4cc(CN5CCOCC5)nn4)c3nc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCc1ccc(S(=O)(=O)NC(Cc2c[nH]c3ccccc3c2=O)C(=O)O)cc1	CCCCCc1ccc(S(=O)(=O)NC(Cc2c[nH]c3ccccc3c2=O)C(=O)O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(Cl)c1Nc1cnc2ccc(NCc3cc(F)ccc3C)nn12	Cc1ccc(F)cc1CNc1ccc2ncc(Nc3c(C)cccc3Cl)n2n1	TRUE	TRUE	TRUE
c1cnc(N2CC3(COCCN(Cc4ncco4)C3)C2)nc1	c1cnc(N2CC3(COCCN(Cc4ncco4)C3)C2)nc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C(Cc1ccc(OCCn2c3c(c4ccccc42)C[S+](O)CC3)cc1)N1C(=O)c2ccccc2C1=O	COC(=O)C(Cc1ccc(OCCn2c3c(c4ccccc42)C[S+](O)CC3)cc1)N1C(=O)c2ccccc2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(-c2nc3ccccc3s2)cc1	c1ccc(-c2nc3ccccc3s2)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
c1nnc2nc(N3CCCC3)n3nnnc3c2n1	c1nnc2nc(N3CCCC3)n3nnnc3c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1NC(=O)C(=Cc2ccc(O)cc2)S1	O=C1NC(=O)C(=Cc2ccc(O)cc2)S1	TRUE	TRUE	FALSE
O=[N+](([O-])c1ccc(S(=O)(=O)N2CCN(S(=O)(=O)c3ccccc3C(F)(F)F)CC2)cc1	O=[N+](([O-])c1ccc(S(=O)(=O)N2CCN(S(=O)(=O)c3ccccc3C(F)(F)F)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(S(=O)(=O)NNC(=O)c2ccccc2)cc1OC	COc1ccc(S(=O)(=O)NNC(=O)c2ccccc2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CC(O)CC1CNc1nccc(-c2cc(F)cc(F)c2)n1	CN1CC(O)CC1CNc1nccc(-c2cc(F)cc(F)c2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)c1ccc(-c2cnc3ccc(C)cn23)c1	CC(=O)c1ccc(-c2cnc3ccc(C)cn23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(C(=O)N2CCC(N3C(=O)CCc4ccccc43)CC2)CC1	CN1CCN(C(=O)N2CCC(N3C(=O)CCc4ccccc43)CC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1N=C(NCCc2ccccc2)S1C=Cc1c[nH]c2ccccc12	O=C1N=C(NCCc2ccccc2)S1C=Cc1c[nH]c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(N)N=C(Nc1ccc(S(=O)(=O)Nc2nnc(-c3ccccc3)s2)cc1)c1ccccc1	N=C(N)N=C(Nc1ccc(S(=O)(=O)Nc2nnc(-c3ccccc3)s2)cc1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2cc(C(=O)NCCN3CCOCC3)c3ccccc3n2)cc1	Cc1ccc(-c2cc(C(=O)NCCN3CCOCC3)c3ccccc3n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C1=C(c2ccccc(O)C(F)F)c2)CC2CC1N2C(=O)NCCOc1ccccc1Cl	COC(=O)C1=C(c2ccccc(O)C(F)F)c2)CC2CC1N2C(=O)NCCOc1ccccc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nnc2c1cn2CCO	Nc1nnc2c1cn2CCO	TRUE	TRUE	FALSE
CCN(CC)C(=O)c1c(C)[nH]c(C=C2C(=O)Nc3ccc(F)cc32)c1C	CCN(CC)C(=O)c1c(C)[nH]c(C=C2C(=O)Nc3ccc(F)cc32)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(-c2cc(SCC(=O)O)c3ccc(Cl)cc3c2)c1	Cc1cccc(-c2cc(SCC(=O)O)c3ccc(Cl)cc3c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cnc1CN1CC(N(Cc2ccc(-c3cn[nH]c3)cc2)S(=O)(=O)c2cccn2)Cc2cc(C#N)ccc21	Cn1cnc1CN1CC(N(Cc2ccc(-c3cn[nH]c3)cc2)S(=O)(=O)c2cccn2)Cc2cc(C#N)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ccc(CCC(=O)N)C(CCCCN(C(=O)c2ccccc(NC(=N)N)c2)C(=O)NCCc2ccc(S(N)(=O)=O)c2)cc1	N#Cc1ccc(CCC(=O)N)C(CCCCN(C(=O)c2ccccc(NC(=N)N)c2)C(=O)NCCc2ccc(S(N)(=O)=O)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOCCCNc1nc(N2CCCC2)nc2sc(-c3ccc(F)cc3)cc12	CCOCCCNc1nc(N2CCCC2)nc2sc(-c3ccc(F)cc3)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2cc(=O)c3c(O)c(OC)c(O)cc3o2)cc1Cl	COc1ccc(-c2cc(=O)c3c(O)c(OC)c(O)cc3o2)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)c1ccc(N2CCN(Cc3coc(-c4ccc(Cl)cc4)n3)CC2)cc1	CC(=O)c1ccc(N2CCN(Cc3coc(-c4ccc(Cl)cc4)n3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)Cc1c(C(=O)N2CC(Cc3ncccn3)C2)nc2n1CCC2	CN(C)Cc1c(C(=O)N2CC(Cc3ncccn3)C2)nc2n1CCC2	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1ccc(-c2c[nH]c(-c3ccccc3)n2)nn1Cc1ccccc1Cl	O=c1ccc(-c2c[nH]c(-c3ccccc3)n2)nn1Cc1ccccc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1ccc(CC2COc3cc2ccc(O)c3OCCCN2CCOCC2)cc1	Oc1ccc(CC2COc3cc2ccc(O)c3OCCCN2CCOCC2)cc1	FALSE	TRUE	TRUE
CCC(=O)Nc1ccccc2c1C(=O)c1c(NC(=O)CN(C)C)ccc(OC)c1C2=O	CCC(=O)Nc1ccccc2c1C(=O)c1c(NC(=O)CN(C)C)ccc(OC)c1C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2nccnc2Oc2cc(C(N)=O)ccn2)cc1	Cc1ccc(-c2nccnc2Oc2cc(C(N)=O)ccn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(N)nc(CCc2c(C)ccc(OCC(=O)O)c(C)C2C)c1	Cc1cc(N)nc(CCc2c(C)ccc(OCC(=O)O)c(C)C2C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1C(=O)NC(=O)C2(C1=O)C(c1ccc(Cl)c1)CC(=O)N2c1ccc(Cl)cc1	CN1C(=O)NC(=O)C2(C1=O)C(c1ccc(Cl)c1)CC(=O)N2c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc(NC(=O)c2cc(NC(=O)c3cc(NC(=O)c4nsc4N)cn3C)cn2C)cc1C(=O)NCCC(=N)N	Cn1cc(NC(=O)c2cc(NC(=O)c3cc(NC(=O)c4nsc4N)cn3C)cn2C)cc1C(=O)NCCC(=N)N	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(Cc2cnc(O)nc2O)cc1)Nc1ccc(C(F)(F)F)cc1	O=C(Nc1ccc(Cc2cnc(O)nc2O)cc1)Nc1ccc(C(F)(F)F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
S=C(Nc1ccc(-c2ccccc(NC(=S)Nc3ccc(NC4=NC5CS(=O)(=O)CC5S4)cc3)c2)cc1)N1CCOCC1	O=S1(=O)CC2N=C(Nc3cccc(NC(=S)Nc4cccc(-c5ccc(NC(=S)N6CCOCC6)cc5)c4)cc3)SC2C1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CC(O)(C#CCN1CCOCC1)C1CCCCC1	C=CC(O)(C#CCN1CCOCC1)C1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)NS(=O)(=O)c1cc(C#Cc2ccccc2)c(N)s1	COC(=O)NS(=O)(=O)c1cc(C#Cc2ccccc2)c(N)s1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CCNC(=O)c1ccc(NC(=O)N2O)s1		FALSE	TRUE	TRUE
CC1(C)COC(c2ccccc2O)=N1	CC1(C)COC(c2ccccc2O)=N1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1=C(C)N(Cc2ccccc2)C(NCc2ccccc2)=NC1c1cccc(F)c1	CCOC(=O)C1=C(C)N(Cc2ccccc2)C(NCc2ccccc2)=NC1c1cccc(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(F)cc1N1C(=O)CCC(c(N2CCN(c3cccn3)CC2)C(=O)N(C)C)C1=O		FALSE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)N2CCOCC2)cc1NC(=O)C=Cc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccco2)cc1	Cc1ccc(S(=O)(=O)N2CCOCC2)cc1NC(=O)C=Cc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccco2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCCNCC1CC1)C(c1ccccc1)c1ccccc1	O=C(NCCNCC1CC1)C(c1ccccc1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)Nc2c(C(=O)N3CCCC3)c(-c3ccccc3)nn2Cc2ccc(F)cc2)cc1	Cc1ccc(S(=O)(=O)Nc2c(C(=O)N3CCCC3)c(-c3ccccc3)nn2Cc2ccc(F)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCNc1c(N=CS)nc2ccccc21	CCCNc1c(N=CS)nc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nccc2c3ccccc3n(CCCCC3CC(=O)NC(=O)C3)c12	Cc1nccc2c3ccccc3n(CCCCC3CC(=O)NC(=O)C3)c12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C1(O)CC(O)C(O)C(OC(=O)c2ccco2)C1	O=C(OC1CC(O)(C(=O)O)CC(O)C1O)c1ccco1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(Nc2nccc(-n3cnc4ccccc43)n2)c1	COc1cccc(Nc2nccc(-n3cnc4ccccc43)n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCC(c1ccco1)N1CCc2ccccc2C1)c1cccc(S(=O)(=O)N2CCOCC2)c1	O=C(NCC(c1ccco1)N1CCc2ccccc2C1)c1cccc(S(=O)(=O)N2CCOCC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)C1CCN(c2nccn3c(-c4cccc(NCc5ccccc5)n4)cnc23)CC1	NC(=O)C1CCN(c2nccn3c(-c4cccc(NCc5ccccc5)n4)cnc23)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C12OCC34C(CC5(C)=CC(O)C(O)C5(C)C3C(O)CC(OC(=O)C=C(C)C)C1(C)C(O)C(OC(C)=O)C(O)(C(C)C)C14)O2	COC(=O)C12OCC34C(CC5(C)=CC(O)C(O)C5(C)C3C(O)CC(OC(=O)C=C(C)C)C1(C)C(O)C(OC(C)=O)C(O)(C(C)C)C14)O2	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(Cl)ccc1Nc1nnnc(-c2ccncc2S)C1s1	COc1cc(Cl)ccc1Nc1nnnc(-c2ccncc2S)C1s1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(NC(=O)Cn2nnnc(-c3ccccc3NC(=O)C3CC3)n2)c1	Cc1cccc(NC(=O)Cn2nnnc(-c3ccccc3NC(=O)C3CC3)n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(CN2CCCC(N)C)CCc3cnn(C)c3)C2)no1	Cc1cc(CN2CCCC(N)C)CCc3cnn(C)c3)C2)no1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCN1CCc2ccc3[nH]c(C(=O)NC4CCCC4)cc3c2C1	COCCN1CCc2ccc3[nH]c(C(=O)NC4CCCC4)cc3c2C1	TRUE	TRUE	TRUE
CC=CC1=CC23CC4C(C)(C(=O)OC)CCCC4(C)C2=CCC1C3	CC=CC1=CC23CC4C(C)(C(=O)OC)CCCC4(C)C2=CCC1C3	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)c2cc3c4c([nH]c3cc2C(=O)N1Cc1ccccc1F)CCCN4	CC1(C)c2cc3c4c([nH]c3cc2C(=O)N1Cc1ccccc1F)CCCN4	TRUE	TRUE	TRUE
CCSc1ccccc1C(=O)NCC1(N2CCOCC2)CCCC1	CCSc1ccccc1C(=O)NCC1(N2CCOCC2)CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc2c(-c3ccc(Cl)c(Cl)c3)cc(CN3CCCC3)nn2c1C	Cc1nc2c(-c3ccc(Cl)c(Cl)c3)cc(CN3CCCC3)nn2c1C	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)Oc1cccc(OCCN(C)C(C)c2ccccc2)c1	CNC(=O)Oc1cccc(OCCN(C)C(C)c2ccccc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(NCCCC(c1ccccc1)c1ccccc1)N[N+](=O)[O-]	N=C(NCCCC(c1ccccc1)c1ccccc1)N[N+](=O)[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
CCGn1c(=O)c2nc(-c3ccc(-n4cnnc4)CC3)[nH]c2n(CCC)c1=O	CCGn1c(=O)c2nc(C3=CC=C(n4cnnc4)CC3)[nH]c2n(CCC)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Nc2nc(C)enc2NS(=O)(=O)c2ccc(NC(C)=O)cc2Cl)cc1Cl	COc1ccc(Nc2nc(C)enc2NS(=O)(=O)c2ccc(NC(C)=O)cc2Cl)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
BrC1ccc(CNCCSc2nc3ccccc3o2)cc1	BrC1ccc(CNCCSc2nc3ccccc3o2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1nccc1-c1cccc(COC2CCCN(S(=O)(=O)c3ccccc3)C2)c1	Cn1nccc1-c1cccc(COC2CCCN(S(=O)(=O)c3ccccc3)C2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C(CCC(c2ccccc2)c2ccccc2)C(c2ccc(O)cc2)N1c1cnc(-c2ccc(F)cc2)n1	O=C1C(CCC(c2ccccc2)c2ccccc2)C(c2ccc(O)cc2)N1c1cnc(-c2ccc(F)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)N(C(C)=O)c1ccccc1[N+](=O)[O-]	CC(=O)N(C(C)=O)c1ccccc1[N+](=O)[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(CNC(C(=O)N)C(=O)N)C(Cc2ccccc2)CC(O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)OCc2ccccc2)C(C)C(C)C)cn1	Cc1ccc(CNC(C(=O)N)C(=O)N)C(Cc2ccccc2)CC(O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)OCc2ccccc2)C(C)C(C)C(C)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCC1=C(C)C(=O)c2ccccc2C1=O	CCCCCCCCCCC1=C(C)C(=O)c2ccccc2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1cc(C)nc(N2CCN(C(=O)C3CCC(=O)N(C4CC4)C3)CC2)n1	CCOc1cc(C)nc(N2CCN(C(=O)C3CCC(=O)N(C4CC4)C3)CC2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CC(C(=O)N2CCN(C3(CNC3)c3ccc(C(F)(F)F)cc3F)CC2)CCC1=O	CN1CC(C(=O)N2CCN(C3(C4cccc(C(F)(F)F)cc4F)CNC3)CC2)CCC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCC(n2cnc([N+](=O)[O-])c2)O1	CC1CCC(n2cnc([N+](=O)[O-])c2)O1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NCC(=O)N2CC3CCC(C2)N3Cc2c[nH]nc2-c2ccccc2)cc1	COc1ccc(NCC(=O)N2CC3CCC(C2)N3Cc2c[nH]nc2-c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)S(=O)(=O)c1ccc(C(c2nnnn2Cc2ccccc2)N2CCSCC2)cc1	CCN(CC)S(=O)(=O)c1ccc(C(c2nnnn2Cc2ccccc2)N2CCSCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)NN=Cc1ccc(OC(=O)c2ccco2)c(Br)c1	NC(=O)NN=Cc1ccc(OC(=O)c2ccco2)c(Br)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN=C(O)c1ccccc1N1CCc2c(-n3ccc(C(F)(F)F)n3)ccnc21	CN=C(O)c1ccccc1N1CCc2c(-n3ccc(C(F)(F)F)n3)ccnc21	TRUE	TRUE	TRUE
C[n+ ]1c2n(c3ccc(Cl)cc31)CCCS2	C[n+ ]1c2n(c3ccc(Cl)cc31)CCCS2	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
Nc1nc(C=Cc2cccc(O)c2)C(=O)c2ccc(Br)cc2)nc2nc(-c3ccco3)nn12	Nc1nc(C=Cc2cccc(O)c2)C(=O)c2ccc(Br)cc2)nc2nc(-c3ccco3)nn12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cn(C2CC(N=[N+]=[N-])C(COP(=O)(O)OP(=O)(O)OP(=O)(O)OP(=O)(O)O2)c(=O)[nH]c1=O	Cc1cn(C2CC(N=[N+]=[N-])C(COP(=O)(O)OP(=O)(O)OP(=O)(O)OP(=O)(O)O2)c(=O)[nH]c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)Cn1cc(C(=O)O)c(=O)c2cc(-c3ccccc3N(C)C)sc21	CCOC(=O)Cn1cc(C(=O)O)c(=O)c2cc(-c3ccccc3N(C)C)sc21	TRUE	TRUE	TRUE
OCOCOCO	OCOCOCO	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1ccc(-c2ccc3ncc(C(=O)C4CC4)c(Nc4c(C)cccc4Cl)c3c2)o1	Cc1ccc(-c2ccc3ncc(C(=O)C4CC4)c(Nc4c(C)cccc4Cl)c3c2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
CON=C(CN1CCCC1)c1ccc(OC)c(OC)c1	CON=C(CN1CCCC1)c1ccc(OC)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(c2ccc3nc(C(=O)NC4CCC(CCN5CCOCC5)CC4)c(Cc4cccc4)n3n2)CC1	CN1CCN(c2ccc3nc(C(=O)NC4CCC(CCN5CCOCC5)CC4)c(Cc4cccc4)n3n2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1ccc2c(c1)CC(P(=O)(O)O)C(c1c[nH]c3ccccc13)S2	O=P(O)(O)C1Cc2cc(O)ccc2S1c1c[nH]c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C(NC(=O)C1CCCN1Cc1ccc(C#N)cc1)C(C)C	CCOC(=O)C(NC(=O)C1CCCN1Cc1ccc(C#N)cc1)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=Cc1ccc(F)cc1)N(C(Cc1ccccc1)C(O)C(=O)N(CCCc1ccccc1)NC(=O)OCc1ccccc1	O=C(C=Cc1ccc(F)cc1)N(C(Cc1ccccc1)C(O)C(=O)N(CCCc1ccccc1)NC(=O)OCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C=C(C#N)C(=O)N1CCCCC1Cn1nc(-c2ccc(Oc3ccccc3)cc2F)c2c(N)ncnc21	CC(C)C=C(C#N)C(=O)N1CCCCC1Cn1nc(-c2ccc(Oc3ccccc3)cc2F)c2c(N)ncnc21	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(S(=O)(=O)Nc2cc(OC)nc(OC)n2)c(OC)c1	COc1ccc(S(=O)(=O)Nc2cc(OC)nc(OC)n2)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Brc1ccccc1C1=C(c2ccnnc2)COCc1	Brc1ccccc1C1=C(c2ccnnc2)COCc1	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(C)C1CCC2(C(N)=O)CCC3(C)C(CCC4C5(C)CCC(O)C(C)(C)C5CCC43C)C12	C=C(C)C1CCC2(C(N)=O)CCC3(C)C(CCC4C5(C)CCC(O)C(C)(C)C5CCC43C)C12	TRUE	TRUE	FALSE
COc1cc(C=C2C(=O)NN(c3ccccc3)C2=O)cc([N+](=O)[O-])c1O	COc1cc(C=C2C(=O)NN(c3ccccc3)C2=O)cc([N+](=O)[O-])c1O	TRUE	TRUE	FALSE
N#CC(=Cc1cccc2ccccc12)c1ccc(O)cc1	N#CC(=Cc1cccc2ccccc12)c1ccc(O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCOc1ccc(C2CC3CCC(N3)C2C(=O)OCCC)cc1	CCCCO(C=O)C1C2CCC(CC1c1ccc(OCCC)cc1)N2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nccn1Cc1cccc(C=C2N(CC(=O)O)N=C(c3ccc4c(c3)OCCO4)c3c2nnn3-c2ccc(F)cc2)c1	Cc1nccn1Cc1cccc(C=C2c3nnn(-c4ccc(F)cc4)c3c(c3ccc4c(c3)OCCO4)=NN2CC(=O)O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
OCCNc1nnc(SCc2cc(O)c3c(c2)OCO3)s1	OCCNc1nnc(SCc2cc(O)c3c(c2)OCO3)s1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1ccc2cc(-c3ccc(-c4cccs5c(c4)OCOS)cc3)ccc21	Cn1ccc2cc(-c3ccc(-c4ccc5c(c4)OCOS)cc3)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=C(C2=C(C)CC(=O)OC2O)C(=O)OC1C1CCCC1	CC1=C(C2=C(C)C(C3CCCC3)OC2=O)C(O)OC(=O)C1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C2CCCN2C(=O)C(=O)c2c[nH]c3ccc(Br)cc23)ccn1	Cc1cc(C2CCCN2C(=O)C(=O)c2c[nH]c3ccc(Br)cc23)ccn1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(N2C(=O)NC(=O)C=Cc3ccc(C(C)(C)O)o3)C2=O)cc1	Cc1ccc(N2C(=O)NC(=O)C=Cc3ccc(C(C)(C)O)o3)C2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(CC(=O)Nc1ccccc1C(F)(F)F)C(=O)CCc1ccc2c(c1)OCO2	CN(CC(=O)Nc1ccccc1C(F)(F)F)C(=O)CCc1ccc2c(c1)OCO2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCC1CC(Br)=NO1)c1ccc(NC(=O)N2Cc3ccccc3Cc3ccccc32)cc1	O=C(NCC1CC(Br)=NO1)c1ccc(NC(=O)N2Cc3ccccc3Cc3ccccc32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C)(c1ccc(O)c(C(C)(C)C)c1)c1ccc(O)c(C(C)(C)C)c1	CCC(C)(C)c1cc(C(C)C)C(C)C2ccc(O)c(C(C)(C)C)c2)ccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(c1ccc(OC)cc1)N1CCN(C(=O)C(CN)Cc2cccc(C(F)(F)F)c2)CC1	CCC(c1ccc(OC)cc1)N1CCN(C(=O)C(CN)Cc2cccc(C(F)(F)F)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2nc3cnc(N4CCCN(C)CC4)nc3n(CC3CCO3)c2=O)cc1	COc1ccc(-c2nc3cnc(N4CCCN(C)CC4)nc3n(CC3CCO3)c2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)OCCCC2=C3CC(C)CC3(OC)C(C)(O)C2)cc1	COc1ccc(C(=O)OCCCC2=C3CC(C)CC3(OC)C(C)(O)C2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)N(CCC(C(=O)O)c1ccccc1)Cc1cc(CCc2cccc(Cl)c2)ccc1-c1ccccc1Cl	CC(C)N(CCC(C(=O)O)c1ccccc1)Cc1cc(CCc2cccc(Cl)c2)ccc1-c1ccccc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nn(-c2ccccc2)c2cc(-c3noc(C4CNCCN4C(=O)COc4ccc(C(F)(F)F)cc4)n3)ccc12	CCc1nn(-c2ccccc2)c2cc(-c3noc(C4CNCCN4C(=O)COc4ccc(C(F)(F)F)cc4)n3)ccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1ccc(OC(=O)NC(=O)c2ccccc2)cc1	CN(C)c1ccc(OC(=O)NC(=O)c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NO)c1ccc(CNC(=O)c2cccc(COc3cccc4c3CCN(CC3CCC3)C4)c2)cc1	O=C(NO)c1ccc(CNC(=O)c2cccc(COc3cccc4c3CCN(CC3CCC3)C4)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)c2cc(F)cc(Cl)c2)cc1O	Cc1ccc(C(=O)c2cc(F)cc(Cl)c2)cc1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCOc1ccc(C2N=C(N)N=C3C2=C(C)O)c2ccccc23)cc1	CCCCOc1ccc(C2N=C(N)N=C3C2=C(C)O)c2ccccc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC12C(=O)OC(C)C1CCC(C=NNC(=O)c1ccncc1)=C2c1ccc(Cl)cc1	CC1OC(=O)C2(C)C(c3ccc(Cl)cc3)=C(C=NNC(=O)c3ccncc3)CCCC12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC1CC1)c1ccc2[nH]c(-c3cccs3)cc(=O)c2c1	O=C(NC1CC1)c1ccc2[nH]c(-c3cccs3)cc(=O)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(C(C)C)c(-c2ccc(S(C)(=O)=O)cc2)o1	Cc1nc(C(C)C)c(-c2ccc(S(C)(=O)=O)cc2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(=O)NCCc2ccccc2)c(O)c1	Cc1ccc(NC(=O)NCCc2ccccc2)c(O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1nc(C)c(-c2cnc(NC(C)c3ccc(F)cc3)c3nc(C=Cc4ccccc4)cn23)s1	CC(=O)Nc1nc(C)c(-c2cnc(NC(C)c3ccc(F)cc3)c3nc(C=Cc4ccccc4)cn23)s1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ccc(SCc2cn(CC(N)=O)c3cc(Cl)ccc23)cc1	N#Cc1ccc(SCc2cn(CC(N)=O)c3cc(Cl)ccc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc2nc(-c3ccc(NC(=O)COc4cccc4Cl)cc3)sc2c1	Cc1ccc2nc(-c3ccc(NC(=O)COc4cccc4Cl)cc3)sc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1ccccc2c1C(=O)N(C1CCC(O)(c3ccc4ccccc4c3)CC1)C2	NC(=O)c1ccccc2c1C(=O)N(C1CCC(O)(c3ccc4ccccc4c3)CC1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)Nc1ccccc1-c1ccc(CNC(=O)CCCc2cccs2)c(F)c1	CS(=O)(=O)Nc1ccccc1-c1ccc(CNC(=O)CCCc2cccs2)c(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1sc(NC(=O)c2ccc(S(=O)(=O)N3CCCCC3)cc2)c1(C(=O)c2ccccc2)c1C	Cc1sc(NC(=O)c2ccc(S(=O)(=O)N3CCCCC3)cc2)c1(C(=O)c2ccccc2)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1cc(Cl)cc(OCc2cc(F)cc(Nc3ccc(C#N)cc3F)n2)c1	N#Cc1cc(Cl)cc(OCc2cc(F)cc(Nc3ccc(C#N)cc3F)n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC1N(C(=O)c2ccoc2)CCCC1(OC1ccc(-c2cc(CO)no2)s1)C(=O)N1CCC(OC2ccccc2S(C)(=O)=O)CC1	CCCC1N(C(=O)c2ccoc2)CCCC1(OC1ccc(-c2cc(CO)no2)s1)C(=O)N1CCC(OC2ccccc2S(C)(=O)=O)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)N2C=CN(C=O)C2CC(=O)N2CCCCC2)cc1	Cc1ccc(S(=O)(=O)N2C=CN(C=O)C2CC(=O)N2CCCCC2)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(CN1CCN(Cc2ccc(Cl)cc2)CC1)Nc1ccc(NC(=O)c2ccnnc2)cc1	O=C(CN1CCN(Cc2ccc(Cl)cc2)CC1)Nc1ccc(NC(=O)c2ccnnc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1ccccc(C(C)C)c1NC(=O)NCC(NC(=O)c1nn(-c2nccnc2N(C)C)c(=O)c2ccccc12)c1ccccc1	CC(C)c1ccccc(C(C)C)c1NC(=O)NCC(NC(=O)c1nn(-c2nccnc2N(C)C)c(=O)c2ccccc12)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(-c2cn3nnccn3n2)cc(OC)c1OC	COc1cc(-c2cn3nnccn3n2)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C1Cc2ccccc2CN1C(=O)CCC(=O)O)N1CCN(C(=O)C2CCCCC2)CC1	O=C(C)CCC(=O)N1Cc2ccccc2CC1C(=O)N1CCN(C(=O)C2CCCCC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CN(C(=O)C(O)C(O)C(=O)N2CS(=O)(=O)C(C)(C)C2C(=O)NC(C)Cc2ccc(CN3CCOCC3)cc2)CC(C)(C)c2cc(Cl)c(OCc3CC3)cc21	CC1CN(C(=O)C(O)C(O)C(=O)N2CS(=O)(=O)C(C)(C)C2C(=O)NC(C)Cc2ccc(CN3CCOCC3)cc2)CC(C)(C)c2cc(Cl)c(OCc3CC3)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1c(F)c(N)c(P(=O)(NC(C(=O)O)C(=O)O)Oc2ccccc2)c2c1C(=O)c1ccccc1C2=O	Nc1c(F)c(N)c(P(=O)(NC(C(=O)O)C(=O)O)Oc2ccccc2)c2c1C(=O)c1ccccc1C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(C(=O)CSc1nnc(-c2ccco2)n1C)c1c(N)n(Cc2ccccc2)c(=O)[nH]c1=O	CCN(C(=O)CSc1nnc(-c2ccco2)n1C)c1c(N)n(Cc2ccccc2)c(=O)[nH]c1=O	TRUE	TRUE	FALSE
CNC1Cc2cccc(S(N)(=O)=O)c21	CNC1Cc2cccc(S(N)(=O)=O)c21	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1=C(COC(=O)c2cccc(Cl)c2)NC(=O)NC1C	CCOC(=O)C1=C(COC(=O)c2cccc(Cl)c2)NC(=O)NC1C	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-n2ncc(C(=O)NCCN3CCOCC3)c2C2CCN(C(=O)OCC(C)(C)C)CC2)cc1	Cc1ccc(-n2ncc(C(=O)NCCN3CCOCC3)c2C2CCN(C(=O)OCC(C)(C)C)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(O)CCC(N=C(O)C)c2ncc(-n3ccc4cc(C#N)cnc43)cc2NC2CC2)C1(C)C	CC1(O)CCC(N=C(O)C)c2ncc(-n3ccc4cc(C#N)cnc43)cc2NC2CC2)C1(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)NC(=O)c1ncc(-c2cnc3ccc(C#CCNC(=O)c4cccn(C(CO)c5ccc(F)c(F)c5)c4=O)cc3n2)c1	CC(C)(C)NC(=O)c1ncc(-c2cnc3ccc(C#CCNC(=O)c4cccn(C(CO)c5ccc(F)c(F)c5)c4=O)cc3n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1ncc(NC(=O)c2ncc(-c3c(F)ccccc3F)sc2N)c1N1CCN(CCN)CC1	Cn1ncc(NC(=O)c2ncc(-c3c(F)ccccc3F)sc2N)c1N1CCN(CCN)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)=CCCC(C)=CCC12OC3(C=C(C)C)OO1(CC=C(C)C)OC21C1(C)CCCCC1(O)C3(C)O	FALSE	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCn1nccc1C(=O)NNC(=O)C(C1CCCCC1)NC(=O)C(C)C	C=CCn1nccc1C(=O)NNC(=O)C(C1CCCCC1)NC(=O)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C(=O)c1ccc2c(=O)n(-c3ccccc(OC)c3)c(CNCCC3=CCCCC3)nc2c1	CO(C(=O)c1ccc2c(=O)n(-c3ccccc(OC)c3)c(CNCCC3=CCCCC3)nc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C)O=C1C(C)=NC(C)=C(C(=O)OCCO)C1c1c(-c2cc([N+](=O)[O-])cc3c2OCO3)nc2sc(C)cn12	CO(C)O=C1C(C)=NC(C)=C(C(=O)OCCO)C1c1c(-c2cc([N+](=O)[O-])cc3c2OCO3)nc2sc(C)cn12	TRUE	TRUE	TRUE
CNc1nc(-c2ccccc2C)nc(N2CCN(S(C)(=O)=O)CC2)n1	CNc1nc(-c2ccccc2C)nc(N2CCN(S(C)(=O)=O)CC2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1nn(-c2ccc(S(N)(=O)=O)cc2)c2c1oc1ccccc12	NC(=O)c1nn(-c2ccc(S(N)(=O)=O)cc2)c2c1oc1ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ccc(C2C3=C(CCC3=O)N(c3ccccc(C(F)(F)F)c3)C(=O)N2C(=N)O)cc1	N#Cc1ccc(C2C3=C(CCC3=O)N(c3ccccc(C(F)(F)F)c3)C(=O)N2C(=N)O)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(O)c1ccccc(F)c1NC(=O)N(CCO)CC1CC1	O=C(O)c1ccccc(F)c1NC(=O)N(CCO)CC1CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CN=C(NN=Cc1c2ccccc2c(C=NNC(N)=S)c2ccccc12)NN	CN=C(NN)NN=Cc1c2ccccc2c(C=NNC(N)=S)c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2nccnc2C2CN(c3ccc4ccnnc4n3)C2)cc1F	FALSE	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(C(=O)c2cccc(Nc3nccc(-c4c(-c5cccc(NC(=O)c6c(F)cccc6F)c5)nc5ccccc45)n3)c2)CC1	CN1CCN(C(=O)c2cccc(Nc3nccc(-c4c(-c5cccc(NC(=O)c6c(F)cccc6F)c5)nc5ccccc45)n3)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCn1c(SCC(=O)Nc2ccc3c(c2)OCO3)nnc1-c1ccccc1	COCCn1c(SCC(=O)Nc2ccc3c(c2)OCO3)nnc1-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(CNc2nccc(-c3ccccc3)n2)cc1	c1ccc(CNc2nccc(-c3ccccc3)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(-c2cn3nc(-c4ccccc4)sc3n2)cc1	c1ccc(-c2cn3nc(-c4ccccc4)sc3n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccc(C(C)NC(=O)C2c3ccccc3C(=O)N(CC(C)C)C2c2ccs2)cc1	CCc1ccc(C(C)NC(=O)C2c3ccccc3C(=O)N(CC(C)C)C2c2ccs2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1ccccc(-c2ccc3c4n3CCC(SC(F)(F)F)C4)c2	FALSE	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCCN1cncn1)C1CC(=O)N(C2CCCC2)C1	O=C(NCCCN1cncn1)C1CC(=O)N(C2CCCC2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C1Cc2c([nH]c3ccccc23)C(c2ccc3c(c2)OCCCCO3)N1	O=C(O)C1Cc2c([nH]c3ccccc23)C(c2ccc3c(c2)OCCCCO3)N1	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1ncc(C2=CCCN(C)C2)c1C	CCn1ncc(C2=CCCN(C)C2)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ccc(COc2cccc(C3CC(=O)NC4=C3C(=O)CCC4)c2)cc1	N#Cc1ccc(COc2cccc(C3CC(=O)NC4=C3C(=O)CCC4)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(=O)NCc1cc(O)nc2ccccc12	CCC(=O)NCc1cc(O)nc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccccc1C=C1SC(C(C(=O)Nc2ccc3c(c2)OCCO3)SC1=O	CCOc1ccccc1C=C1SC(C(C(=O)Nc2ccc3c(c2)OCCO3)SC1=O	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
COc1cc(Nc2ncc3nc(Cc4c(F)cccc4Cl)c(=O)n(C4CCCC4)c3n2)cc(OC)c1	COc1cc(Nc2ncc3nc(Cc4c(F)cccc4Cl)c(=O)n(C4CCCC4)c3n2)cc(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)S(=O)(=O)n1c(N)nc2ccc(-n3nc4cc(C(F)(F)F)ccc43)cc21	CC(C)S(=O)(=O)n1c(N)nc2ccc(-n3nc4cc(C(F)(F)F)ccc43)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(N2CCN(c3cc(C)nc4cccc34)CC2)cc1	COc1cccc(N2CCN(c3cc(C)nc4cccc34)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1cc(-c2nc(-c3ccc(C(F)(F)F)cc3)cs2)c(=O)[nH]c1C	CCOC(=O)c1cc(-c2nc(-c3ccc(C(F)(F)F)cc3)cs2)c(=O)[nH]c1C	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C(=O)CNC(=O)N1CCSc2ccccc21)C1CCCC1	CN(C(=O)CNC(=O)N1CCSc2ccccc21)C1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C(Cl)C(c2ccccc2)N1c1ccc(C2=NNC(=O)CC2)cc1	O=C1CCC(c2ccc(N3C(=O)C(Cl)C3c3ccccc3)cc2)=NN1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(O)nc(SCC(=O)N2CCCc3ccccc32)n1	Cc1cc(O)nc(SCC(=O)N2CCCc3ccccc32)n1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(OC1OC(C)C(O)C(O)C1O)C(O)C=Cc1ccccc1	CC(OC1OC(C)C(O)C(O)C1O)C(O)C=Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)NC(C)(C)CC(=O)N2CCC3(CC2)OCCO3)cc1	Cc1ccc(S(=O)(=O)NC(C)(C)CC(=O)N2CCC3(CC2)OCCO3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1ccccc1C(=O)NC(C)C1ccco1	CC(=O)Nc1ccccc1C(=O)NC(C)C1ccco1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1NC(=O)C(Cc2ccccc3ccccc23)(c2ccccc2Cl)N1	O=C1NC(=O)C(Cc2ccccc3ccccc23)(c2ccccc2Cl)N1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Br)c(NC(=O)NC2=NC(=O)C(=Cc3ccccc3O)S2)c1	COc1ccc(Br)c(NC(=O)NC2=NC(=O)C(=Cc3ccccc3O)S2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC1OC2(CC(c3cccs3)N(c3ccc(C(=O)OC)cc3)C2=O)c2ccccc21	CCOC1OC2(CC(c3cccs3)N(c3ccc(C(=O)OC)cc3)C2=O)c2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CCNc1nnc(NCCc2ccccc2)c1C#N	CC(C)CCNc1nnc(NCCc2ccccc2)c1C#N	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C2c3cc4c(cc3C(Nc3cc(O)c(OC)cc3Cl)C3COC(=O)C23)OCO4)cc(OC)c1OC	COc1cc(Cl)c(NC2c3cc4c(cc3C(c3cc(OC)c(OC)c(OC)c3)C3C(=O)OCC23)OCO4)cc1O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(S)=NCCCN2CCOCC2)cc1Cl	Cc1ccc(NC(S)=NCCCN2CCOCC2)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(COc1ccc(Br)cc1)Nc1nnc(-c2ccccc2)o1	O=C(COc1ccc(Br)cc1)Nc1nnc(-c2ccccc2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cc1ccc(Cl)cc1Cl)N1CCN(S(=O)(=O)c2ccccc2)CC1	O=C(Cc1ccc(Cl)cc1Cl)N1CCN(S(=O)(=O)c2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1cc2c(cc1NC(=O)COC(=O)COc1ccccc1Cl)OCO2		FALSE	TRUE	TRUE
O=C(NC(Cc1ccccc1)C(=O)NN1C(=O)CS1c1ccc([N+](=O)[O-])cc1)c1ccco1	O=C(NC(Cc1ccccc1)C(=O)NN1C(=O)CSC1c1ccc([N+](=O)[O-])cc1)c1ccco1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ncc(-c2nnc3n2CCN(C(=O)c2ccc(COc4ccc(Cl)cc4)cc2)C3C(=O)NC(C)C)c(C)n1	Cc1ncc(-c2nnc3n2CCN(C(=O)c2ccc(COc4ccc(Cl)cc4)cc2)C3C(=O)NC(C)C)c(C)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1c(Cc2ccccc2)ccccc1C(O)C1CCCCN1	Oc1c(Cc2ccccc2)ccccc1C(O)C1CCCCN1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1oc(-c2cc3ccccc3o2)nc1COc1cccc(N2C(=O)CC(Sc3nc[nH]n3)C2=O)c1	Cc1oc(-c2cc3ccccc3o2)nc1COc1cccc(N2C(=O)CC(Sc3nc[nH]n3)C2=O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOCc1nc(-c2ccccc2)n(S(=O)(=O)c2ccc(C)cc2)c1C(=O)NCc1ccc(NC(C)=O)cc1	CCOCc1nc(-c2ccccc2)n(S(=O)(=O)c2ccc(C)cc2)c1C(=O)NCc1ccc(NC(C)=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CSc1nnc(N)s1	CSc1nnc(N)s1	TRUE	TRUE	FALSE
CCNC(=O)Cc1ccc(C2=Nc3c(N)ncnc3NC(C)(C)C2)cc1	CCNC(=O)Cc1ccc(C2=Nc3c(N)ncnc3NC(C)(C)C2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2cccc(CCN(C)C=O)c2c1	COc1ccc2cccc(CCN(C)C=O)c2c1	TRUE	TRUE	FALSE
CCC(CO)NC(=O)Nc1cccc(SC)c1	CCC(CO)NC(=O)Nc1cccc(SC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(C(=O)C(O)C(C(=O)NCc2cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c2)c2ncc(Br)c2)CC1	CN1CCN(C(=O)C(O)C(C(=O)NCc2cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c2)c2ncc(Br)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(COCCNC(=O)c2ccccc2OCc2ccccc2F)c1	COc1cccc(COCCNC(=O)c2ccccc2OCc2ccccc2F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CCN=C(Cl)O)C1CC2CC2N1C(=O)Cn1nc(C(=N)O)c2ccccc21	CC(C)CCN=C(Cl)O)C1CC2CC2N1C(=O)Cn1nc(C(=N)O)c2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CN(Cc1ccccc1F)C(=O)c1ccc2ncoc2c1	CN(Cc1ccccc1F)C(=O)c1ccc2ncoc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1nc2c(F)cccc2c(=O)n1O	CC(C)c1nc2c(F)cccc2c(=O)n1O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCc1ccccc1)C(=Cc1ccc(Br)cc1)NC(=O)c1ccccc1	O=C(NCc1ccccc1)C(=Cc1ccc(Br)cc1)NC(=O)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(CCCCC=CCCCC(=O)NCCCCC(=O)O)C(=O)CCC1CC(=O)O	CC1(CCCCC=CCCCC(=O)NCCCCC(=O)O)C(=O)CCC1CC(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=Cc1cc(F)c(Oc2ccccc3c2c(Br)cc[n+](3[O-])cc1Br)C(=O)NC1C(O)C(O)C2OCOC2C1O	CC(=Cc1cc(F)c(Oc2ccccc3c2c(Br)cc[n+](3[O-])cc1Br)C(=O)NC1C(O)C(O)C2OCOC2C1O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CS(C(c2ccc(Cl)c(C(F)(F)F)c2)N1c1ccc2nc[nH]c2c1	O=C1CS(C(c2ccc(Cl)c(C(F)(F)F)c2)N1c1ccc2nc[nH]c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cccc(-c2c[nH]c3ncc(-c4cccc(OCc5cnn(-c6ccccc6)n5)c4)cc23)c1)Nc1cccc(C(F)(F)F)c1	O=C(Nc1cccc(-c2c[nH]c3ncc(-c4cccc(OCc5cnn(-c6ccccc6)n5)c4)cc23)c1)Nc1cccc(C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CNS(=O)(=O)c1ccc(NC(=O)CN=Cc2ccc(O)cc2)cc1	O=C(O)CNS(=O)(=O)c1ccc(NC(=O)CN=Cc2ccc(O)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(c(O)c1OC)-c1oc(=O)c(OC)c(O)c1CC2	COc1cc2c(c(O)c1OC)-c1oc(=O)c(OC)c(O)c1CC2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccccc1)Nc1nnc(CNC(=O)OCc2ccccc2)s1	O=C(Nc1ccccc1)Nc1nnc(CNC(=O)OCc2ccccc2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(Nc2nc(Sc3ccc(NC(=O)C4CC4)cc3)nn3ccccc23)[nH]1	Cc1cc(Nc2nc(Sc3ccc(NC(=O)C4CC4)cc3)nn3ccccc23)[nH]1	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1ccc(C)c(CC(=O)N2CCCC(c3nc(C)c(C(=O)NCc4ccc(Cl)cc4)o3)C2)c1	Cc1ccc(C)c(CC(=O)N2CCCC(c3nc(C)c(C(=O)NCc4ccc(Cl)cc4)o3)C2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=S1(=O)C=CC2(CCN(CC3CC3)C2)O1	O=S1(=O)C=CC2(CCN(CC3CC3)C2)O1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(Nc2cc(-c3ccc(CN4CCCN(Cc5ccco5)CC4)cc3)on2)cc1	c1ccc(Nc2cc(-c3ccc(CN4CCCN(Cc5ccco5)CC4)cc3)on2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Fc1ccccc1-n1ccc2sc(NC3CCc4ccccc43)nc21	Fc1ccccc1-n1ccc2sc(NC3CCc4ccccc43)nc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC(NCC(O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)c1cccc(C(=O)NCC(C)CCCC(C)C)n1)C(=O)NC(C)c1ccccc1	CCCC(NCC(O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)c1cccc(C(=O)NCC(C)CCCC(C)C)n1)C(=O)NC(C)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(NCCNc1ccnc2cc(Cl)ccc12)c1ccccc1	O=S(=O)(NCCNc1ccnc2cc(Cl)ccc12)c1ccccc1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(Nc1nsc2ncccc12)N1CCOCC1	O=C(Nc1nsc2ncccc12)N1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCNc1ccc(NC(=O)C=Cc2ccc(OCC(=O)O)c(OC)c2)cc1	CCNc1ccc(NC(=O)C=Cc2ccc(OCC(=O)O)c(OC)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C2COc3c2ccc(=O)n3C)cc1	Cc1ccc(C2COc3c2ccc(=O)n3C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1ncc2c(OCCc3ccc(F)cc3)nc3ccc(Cl)cc3n12	CC(C)c1ncc2c(OCCc3ccc(F)cc3)nc3ccc(Cl)cc3n12	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc(N2CCCC2)c(OCc2ccc(S(=O)(=O)NC3nccs3)cc2C#N)cc1=O	Cn1cc(N2CCCC2)c(OCc2ccc(S(=O)(=O)NC3nccs3)cc2C#N)cc1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1ccc(N2CCCCc2=O)cc1Cl	COC(=O)c1ccc(N2CCCCc2=O)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(NC(=O)C(CCC1ccccc1)n1c(=O)[nH]c2ccccc2c1=O)B(O)O	CC(C)CC(NC(=O)C(CCC1ccccc1)n1c(=O)[nH]c2ccccc2c1=O)B(O)O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1NCCc2nnc(-c3cncc(-c4ccccc4)c3)c2c1	O=C1NCCc2nnc(-c3cncc(-c4ccccc4)c3)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2cnc3nc(N)nc(O)c3n2)cc1	COc1ccc(-c2cnc3nc(N)nc(O)c3n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1OCC2CN(C(=O)NCCCCc3ccccc3)CCC12	O=C1OCC2CN(C(=O)NCCCCc3ccccc3)CCC12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1nc2sc3c(N4CCN(C(=O)c5ccco5)CC4)ncnc3c2c2c1CCCCC2	CC(C)c1nc2sc3c(N4CCN(C(=O)c5ccco5)CC4)ncnc3c2c2c1CCCCC2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccnc(NC(=O)CSc2nnc(-c3ccc(Br)cc3)o2)c1	Cc1ccnc(NC(=O)CSc2nnc(-c3ccc(Br)cc3)o2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(-c2cc(=O)c3cc(F)ccc3o2)cc(OC)c1OC	COc1cc(-c2cc(=O)c3cc(F)ccc3o2)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc(-c2ccc3[nH]nc(-c4cc(N5CC(C)O)(CO)CC5)ncn4)c3c2)cn1	Cn1cc(-c2ccc3[nH]nc(-c4cc(N5CC(C)O)(CO)CC5)ncn4)c3c2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=S)CCn1c(=O)c2ccccc2n(Cc2ccccc2)C(C)C(=O)c2ccccc2)c1=O	CNC(=S)CCn1c(=O)c2ccccc2n(Cc2ccccc2)C(C)C(=O)c2ccccc2)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(Cc2cn3c(n2)CN(Cc2ccc(Br)cc2)CC3)CC1	CN1CCN(Cc2cn3c(n2)CN(Cc2ccc(Br)cc2)CC3)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C)cc1N1CCN(CCNc2ncnc3c2cnn3-c2ccc(C)cc2)CC1	COc1ccc(C)cc1N1CCN(CCNc2ncnc3c2cnn3-c2ccc(C)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(CCN)Nc1nc(-c2ccncc2)nc2sc3c(c12)CCN(Cc1ccccc1)C3	CC(CCN)Nc1nc(-c2ccncc2)nc2sc3c(c12)CCN(Cc1ccccc1)C3	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(N)C(=O)NC(C(C)C)C(=O)N1C(C(=O)NC(Cc2ccccc2)C(=O)O)CC2CCCCC21	CC(C)C(N)C(=O)NC(C(C)C)C(=O)N1C(C(=O)NC(Cc2ccccc2)C(=O)O)CC2CCCCC21	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)C(=O)Nc1nc(COC(=O)c2ccc(F)cc2)cs1	CC(C)(C)C(=O)Nc1nc(COC(=O)c2ccc(F)cc2)cs1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC(=O)Nc1cccc(NC(=O)Cc2ccccc2)c1	CCCC(=O)Nc1cccc(NC(=O)Cc2ccccc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC12c3nnn(-c4ccccc4)c3CCN1C(=O)C(Cc1cccc(C(=N)N)c1)CC2c1ccccc1	CC12c3nnn(-c4ccccc4)c3CCN1C(=O)C(Cc1cccc(C(=N)N)c1)CC2c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
OC1(c2ccc(Cl)cc2)CCN(CCc2cccs2)CC1	OC1(c2ccc(Cl)cc2)CCN(CCc2cccs2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc(SCc2ccccc2)nc2c1ncn2C1OC(CO)C(O)C1O	Nc1nc(SCc2ccccc2)nc2c1ncn2C1OC(CO)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(OC)c(C(=O)N2CCN(C3CCCC3)CC2)cc1OC	COc1cc(OC)c(C(=O)N2CCN(C3CCCC3)CC2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=S)C1=C(N)Oc2c(ccc3ccccc23)C1c1ccc(O)cc1	NC(=S)C1=C(N)Oc2c(ccc3ccccc23)C1c1ccc(O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)CC(NC(=O)c2nnc(C3OC(CO)C(O)C3O)n2)CC(C)(C)C1	CC1(C)CC(NC(=O)c2nnc(C3OC(CO)C(O)C3O)n2)CC(C)(C)C1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1ccc2c(c1)S(=O)(=O)N=C(C1=C(O)C3CCCN3N(C3CCC3)C1=O)N2	NC(=O)c1ccc2c(c1)S(=O)(=O)N=C(C1=C(O)C3CCCN3N(C3CCC3)C1=O)N2	TRUE	TRUE	TRUE
CC1COc2c(N3CCOCC3)c(F)cc3c(=O)c(C(=O)O)cn1c23	CC1COc2c(N3CCOCC3)c(F)cc3c(=O)c(C(=O)O)cn1c23	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)CN1C(=N)NC2(C1=O)c1cc(OC#CC3CC3)ccc1CC21CCC(OC)CC1	COC(=O)CN1C(=N)NC2(C1=O)c1cc(OC#CC3CC3)ccc1CC21CCC(OC)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
OC1(c2ccccc2)CN2CCCCC2CO1	OC1(c2ccccc2)CN2CCCCC2CO1	TRUE	TRUE	FALSE
COc1c(Br)c(C(=O)N2CCN(c3nncc3)CC2)cc(Br)c1OC	COc1c(Br)cc(C(=O)N2CCN(c3nncc3)CC2)c(Br)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
[O-][n+](1ccc2c(-c3ccc(O)cc3)c3c(=O)[nH]c4ccccc4c3cc2c1	O=c1[nH]c2ccccc2c2cc3c[n+](O-)]ccc3c(-c3ccc(O)cc3)c12	TRUE	TRUE	TRUE
[C-]#[N+](c1ccc(NC(c2nnc(-c3ccccc3)o2)C(C)O)c(C)c1Cl	[C-]#[N+](c1ccc(NC(c2nnc(-c3ccccc3)o2)C(C)O)c(C)c1Cl	TRUE	TRUE	FALSE
COc1ccc(NC(=O)CCNC(=O)Cn2cnc3sc(C)c(S(=O)(=O)N4CC(C)CC(C)C4)c3c2=O)cc1Cl	COc1ccc(NC(=O)CCNC(=O)Cn2cnc3sc(C)c(S(=O)(=O)N4CC(C)CC(C)C4)c3c2=O)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
O=C(CN1C(=O)C(=Cc2ccccc2)SC1=S)NC1CCS(=O)(=O)C1	O=C(CN1C(=O)C(=Cc2ccccc2)SC1=S)NC1CCS(=O)(=O)C1	TRUE	TRUE	FALSE
O=[N+](([O-])[c1ccc(N2CCNCC2)cc1NC1c(F)cccc1Cl	O=[N+](([O-])[c1ccc(N2CCNCC2)cc1NC1c(F)cccc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(C)c1C1=Cc2c(cc3n2CCC3C(=O)O)CN1	Cc1cccc(C)c1C1=Cc2c(cc3n2CCC3C(=O)O)CN1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1ccccc1Cn1c([N+](=O)[O-])cnc1C=Cc1ccccc1	O=C(O)c1ccccc1Cn1c([N+](=O)[O-])cnc1C=Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)SSCC(N)C(=O)N1CCCC1C#N	CC(C)(C)SSCC(N)C(=O)N1CCCC1C#N	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCC=CCCCCCCCC(=O)NC1C(O)OC(CO)C(O)C1OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O	CCCCCCC=CCCCCCCCC(=O)NC1C(O)OC(CO)C(O)C1OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(N(C(=O)c2snc(C(N)=O)c2N)C(C(=O)N)C2CCCC2)c2ccc(F)cc2)c1	COc1cccc(N(C(=O)c2snc(C(N)=O)c2N)C(C(=O)N)C2CCCC2)c2ccc(F)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(N(C(=O)CC)C(C(=O)NCc2cnc2)c2ccc(OC)c(OC)c2)cc1	COc1ccc(N(C(=O)CC)C(C(=O)NCc2cnc2)c2ccc(OC)c(OC)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CN2C(=NN1)COc1ccc(NCC3CC3)cc12	O=C1CN2C(=NN1)COc1ccc(NCC3CC3)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(NC(=O)OCc1ccccc1)C(=O)C=CC(=O)OC(C)(C)Cc1ccc2ccccc2c1	CC(C)CC(NC(=O)OCc1ccccc1)C(=O)C=CC(=O)OC(C)(C)Cc1ccc2ccccc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(Cc1nc(O)c2c(C)c(C)sc2n1)C(=O)c1cc(C)C(C)C)c1	CCCN(Cc1nc(O)c2c(C)c(C)sc2n1)C(=O)c1cc(C)C(C)C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(N)NC(=O)c1nc(Cl)c(NCc2cnc2)nc1N	N=C(N)NC(=O)c1nc(Cl)c(NCc2cnc2)nc1N	TRUE	TRUE	FALSE
Nc1nnc2[nH]c(SCc3ccccc3)nc12	Nc1nnc2[nH]c(SCc3ccccc3)nc12	TRUE	TRUE	TRUE
COC1=CC(C)C2CC(C)C(CCC(C)(O)CC3OC3C(C)C3CC(O)(C4C(C)(O)CCC4(C)C)OC(C3(C)OC1=O)C2(C)C)OC	COC1=CC(C)C2CC(C)C(C)C(CCC(C)(O)CC3OC3C(C)C3CC(O)(C4C(C)(O)CCC4(C)O)OC(C2(C)C)C3(C)OC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-n2c(=O)c3c(C)c(C)sc3n(CCl=O)Nc3ccc(C)c(F)c3)c2=O)cc1	COc1ccc(-n2c(=O)c3c(C)c(C)sc3n(CCl=O)Nc3ccc(C)c(F)c3)c2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1cc(N)c(OC2ccccc2)c(O)c1C	CC(=O)Nc1cc(N)c(OC2ccccc2)c(O)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCNC(=O)C(Cn1nnc2ccccc21)=NNC(=O)c1ccc(O)cc1O	CN(C)CCNC(=O)C(Cn1nnc2ccccc21)=NNC(=O)c1ccc(O)cc1O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCN1CCCCC1)N1CCCN(c2nc(O)cc(-c3ccccc3)n2)CC1	O=C(CCN1CCCCC1)N1CCCN(c2nc(O)cc(-c3ccccc3)n2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C(=CNC2CCc3ccccc3C2)cc(Cl)c2ccccc12	O=C1C(=CNC2CCc3ccccc3C2)C=CC(Cl)c2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Br)cc1CNCC(C)c1ccccc1	COc1ccc(Br)cc1CNCC(C)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1=C(C)NC(C)=C(C(=O)OCC)C1c1ccc(N2CCCCC2)c(OC)c1	CCOC(=O)C1=C(C)NC(C)=C(C(=O)OCC)C1c1ccc(N2CCCCC2)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C(=O)c1ccccc1NC(=O)c1ccccc1)C1CCCCC1	CN(C(=O)c1ccccc1NC(=O)c1ccccc1)C1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1c(=S)[nH]c2cc(C(=O)NC3CCCC3)ccc2c1=O	CCn1c(=S)[nH]c2cc(C(=O)NC3CCCC3)ccc2c1=O	TRUE	TRUE	FALSE
COc1cc(C(=O)c2c[nH]c3cc(Br)ccc23)cc(OC)c1OC	COc1cc(C(=O)c2c[nH]c3cc(Br)ccc23)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C(=C1Nc2cc(C(F)(F)F)ccc2S1)C(F)(F)F	O=C(O)C(=C1Nc2cc(C(F)(F)F)ccc2S1)C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
CC1Oc2ccc(Nc3nccnc3[N+](=O)[O-])cc2NC1=O	CC1Oc2ccc(Nc3nccnc3[N+](=O)[O-])cc2NC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ncc(-c2cc(N3C4CC3CO4)nc(N3CC(F)(F)C3)n2)cn1	Nc1ncc(-c2cc(N3CC4CC3CO4)nc(N3CC(F)(F)C3)n2)cn1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(O)c1ccccc(NC(=O)c2ccc(NC(=O)C3CCCC3)cc2)c1	O=C(O)c1ccccc(NC(=O)c2ccc(NC(=O)C3CCCC3)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=CCC2(CO1)OC(=O)CC(c1ccccc1)O2	CC1=CCC2(CO1)OC(=O)CC(c1ccccc1)O2	TRUE	TRUE	TRUE
CNS(=O)(=O)Cc1ccc(C(=O)NCCOc2ccc(=O)[nH]n2)cc1	CNS(=O)(=O)Cc1ccc(C(=O)NCCOc2ccc(=O)[nH]n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(COc1ccccc1F)N1CCN(c2ccccc2[N+](=O)[O-])CC1	O=C(COc1ccccc1F)N1CCN(c2ccccc2[N+](=O)[O-])CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(c1ccc(F)c(F)c1)c1ccc(F)cc2sc(Nc3ccc(Cl)cc3)nc12	O=S(=O)(c1ccc(F)c(F)c1)c1ccc(F)cc2sc(Nc3ccc(Cl)cc3)nc12	TRUE	TRUE	TRUE
c1csc(CCN2c3nc(N4C5CC5C4)cc(N4CCOCC4)c3CCC2(C(F)(F)F)c1	FC(F)(F)C1CCc2c(N3CCOCC3)cc(N3CC4CC4C3)nc2N1CCc1cccs1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2nn(-c3ccc(Cl)cc3)cc2C=NOCC(O)Cn2cncn2)cc1	Cc1ccc(-c2nn(-c3ccc(Cl)cc3)cc2C=NOCC(O)Cn2cncn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)COC(=O)c1ccc(NC(=O)NC(Cc2c[nH]c3ccccc23)C(=O)NC2CCN(Cc3ccc4ccccc4c3)CC2)c1	CC(C)COC(=O)c1ccc(NC(=O)NC(Cc2c[nH]c3ccccc23)C(=O)NC2CCN(Cc3ccc4ccccc4c3)CC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCc1cn(-c2ccccc3[nH]ncc23)nn1)c1cncnc1	O=C(NCc1cn(-c2ccccc3[nH]ncc23)nn1)c1cncnc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(CNC(=O)C2(c3ccc(Cl)cc3)CCOCC2)c1OC	COc1cccc(CNC(=O)C2(c3ccc(Cl)cc3)CCOCC2)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
OC1ccccc1C=NC(Cc1ccccc1)c1nc2ccccc2[nH]1	OC1ccccc1C=NC(Cc1ccccc1)c1nc2ccccc2[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(c1ccccc1C(=O)Nc1ccccc1C(=O)O)S(C)(=O)=O	CN(c1ccccc1C(=O)Nc1ccccc1C(=O)O)S(C)(=O)=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(CO)Nc1nc(SCc2ccccc2)nc2nc(N)sc12	CC(C)(CO)Nc1nc(SCc2ccccc2)nc2nc(N)sc12	TRUE	TRUE	FALSE
CC1(C)CC(=O)C(O)(CC(=O)C=Cc2ccc(Br)cc2)C(=O)C1	CC1(C)CC(=O)C(O)(CC(=O)C=Cc2ccc(Br)cc2)C(=O)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)OCc1ccc2oc(=O)cc(O)c2c1	CC(C)OCc1ccc2oc(=O)cc(O)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
NNc1nnc2c1c(-c1ccccc1)cn2-c1cccc([N+](=O)[O-])c1	NNc1nnc2c1c(-c1ccccc1)cn2-c1cccc([N+](=O)[O-])c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1CCN(Cc2ccc(-n3c(-c4cncnc4)nc4ccc(C(=O)NCc5ccccc(Br)c5)cc4c3=O)cc2)CC1	CCOC(=O)C1CCN(Cc2ccc(-n3c(-c4cncnc4)nc4ccc(C(=O)NCc5ccccc(Br)c5)cc4c3=O)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC(c1ccc(Cl)cc1)c1cncnc1)C1CCCCC1	O=C(NC(c1ccc(Cl)cc1)c1cncnc1)C1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2cnc(NC3CCNC3)nc2-c2ccc(C)c2)cc1	COc1ccc(-c2cnc(NC3CCNC3)nc2-c2ccc(C)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
C=C1CCC2C(C)(C)CCCC2(C)C1CCC1(C)CCC(=O)O1	C=C1CCC2C(C)(C)CCCC2(C)C1CCC1(C)CCC(=O)O1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-n2nnnc2SC(=O)NNC(=O)CC#N)c(OC)c1	COc1ccc(-n2nnnc2SC(=O)NNC(=O)CC#N)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CN1CCOCC1	O=C(O)CN1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1onc(-c2ccc(OC(F)(F)F)cc2)c1COc1ccc(C(=O)NCC(C)O)cn1	Cc1onc(-c2ccc(OC(F)(F)F)cc2)c1COc1ccc(C(=O)NCC(C)O)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)N1CCc2cc3cc(OC)ccc3nc2C1	CC(C)N1CCc2cc3cc(OC)ccc3nc2C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(S(=O)(=O)N2CCCC(C(=O)N)CCCN3CCN(c4ccccc4OC)CC3)CC2)cc1	CCOc1ccc(S(=O)(=O)N2CCCC(C(=O)N)CCCN3CCN(c4ccccc4OC)CC3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1nc(N)nc2c1ncn2Cc1cc(O)c(O)c1Br	COc1nc(N)nc2c1ncn2Cc1cc(O)c(O)c1Br	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C=O)NNc1nnc2c1cnn2CC(Cl)CC	CC(C=O)NNc1nnc2c1cnn2CC(Cl)CC	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(S(=O)(=O)Nc2cc(OC3cc(C)nc(C)n3)c3cc(C)oc3c2)cc1	COc1ccc(S(=O)(=O)Nc2cc(OC3cc(C)nc(C)n3)c3cc(C)oc3c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(NC(C)c2cccc(-c3cnc(N4CC(C)OC4)nc3)c2)cc(-c2ccc3occ(C)c3c2)n1	Cc1nc(NC(C)c2cccc(-c3cnc(N4CC(C)OC4)nc3)c2)cc(-c2ccc3occ(C)c3c2)n1	TRUE	FALSE	FALSE
CC(=O)Nc1ccc(NC(=O)c2ccco2)c2c1C(=O)c1ccccc1C2=O	CC(=O)Nc1ccc(NC(=O)c2ccco2)c2c1C(=O)c1ccccc1C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2oc(C)c(CC(=O)OCc3sc(CCC(=O)N4CCCC4)n3)c2c1	COc1ccc2oc(C)c(CC(=O)OCc3sc(CCC(=O)N4CCCC4)n3)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1cc(-c2ccc(OC(F)(F)F)cc2)cc(-c2ccc(OC3ccc(OC(F)(F)F)cc3)cc2)[nH]1	O=c1cc(-c2ccc(OC(F)(F)F)cc2)cc(-c2ccc(OC3ccc(OC(F)(F)F)cc3)cc2)[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CN(CCCN2CCC3(CCCc4ccccc43)CC2)C(=O)O1	CC1CN(CCCN2CCC3(CCCc4ccccc43)CC2)C(=O)O1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)CCCCCCCCNC(=O)c1c[nH]c2ccccc12	CC(=O)CCCCCCCCNC(=O)c1c[nH]c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C2c3cc4c(cc3C(NC(=Nc3ccc5ccccc5c3)C3CC3CO)C3COC(=O)C23)OCO4)cc(OC)c1O	COc1cc(C2c3cc4c(cc3C(NC(=Nc3ccc5ccccc5c3)C3CC3CO)C3COC(=O)C23)OCO4)cc(OC)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1[nH]c(OCc2COc3ccccc3O2)nc2c1cnn2-c1ccccc1	O=c1[nH]c(OCc2COc3ccccc3O2)nc2c1cnn2-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)c1sc(NC(=O)COc2cccc(C)c2C)nc1C	CNC(=O)c1sc(NC(=O)COc2cccc(C)c2C)nc1C	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCNC(=O)C(Cc1ccc(OC(=O)O)c(C(=O)O)c1)NC(=O)CC12CC3CC(C(C3)C1)C2	CCCCNC(=O)C(Cc1ccc(OC(=O)O)c(C(=O)O)c1)NC(=O)CC12CC3CC(C(C3)C1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-n2ncc3c(=O)n(CCN4CCOCC4)enc32)cc1	COc1ccc(-n2ncc3c(=O)n(CCN4CCOCC4)enc32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C1NC(=O)C(C)(C)N(C(=O)C(Cc2ccc(O)cc2)NC(=O)C(Cc2ccccc2)N(C)C(=O)C(Cc2ccccc2)NC1=O	CC(C)C1NC(=O)C(C)(C)N(C(=O)C(Cc2ccc(O)cc2)NC(=O)C(Cc2ccccc2)N(C)C(=O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)C(C)(C)N)NC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)OC(=O)N1CC(C)c2c(C(=O)N3CCN(c4ccc(F)cc4)CC3)cnn2-c2ccc(F)cc2F)CC1	CC(C)(C)OC(=O)N1CC(C)c2c(C(=O)N3CCN(c4ccc(F)cc4)CC3)cnn2-c2ccc(F)cc2F)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(Cc1CC1)C(=NO)c1ccc(OC2cc(Cl)ccc2Cl)nc1	CCCN(Cc1CC1)C(=NO)c1ccc(OC2cc(Cl)ccc2Cl)nc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=S1(=O)c2ccccc2CC12CN(c1nc3nc(-c4ccco4)n(-c4ccccc4)c3n1)CCO2	O=S1(=O)c2ccccc2CC12CN(c1nc3nc(-c4ccco4)n(-c4ccccc4)c3n1)CCO2	FALSE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(O)c1NC(=O)C1CC2C=CC1C2	Cc1cccc(O)c1NC(=O)C1CC2C=CC1C2	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NC(=O)CN2CCCC(c3ccc(OC)cc3)C2)cc1	COc1ccc(NC(=O)CN2CCCC(c3ccc(OC)cc3)C2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1cc(S(=O)(=O)c2cnc2S5CCO)c2ccccc21	CCn1cc(S(=O)(=O)c2cnc2S5CCO)c2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C(=O)Nc1ccc(C(=O)O)cc1)n1cc(Cl)c(-c2cc(Cl)cc(C(F)F)c2)c(F)c1=O	CC(C(=O)Nc1ccc(C(=O)O)cc1)n1cc(Cl)c(-c2cc(Cl)cc(C(F)F)c2)c(F)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc2c(-c3nc4cc([N+](=O)[O-])ccc4[nH]3)ccccc2n1	Cc1ccc2c(-c3nc4cc([N+](=O)[O-])ccc4[nH]3)ccccc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1nc(Nc2ccc(S(N)(=O)=O)cc2)nc(Nc2ccc(C)cc2)n1	COc1nc(Nc2ccc(S(N)(=O)=O)cc2)nc(Nc2ccc(C)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)OC(=O)N(C2CCC(n3c(=O)n(C4CCOCC4)c4ccnc43)CC2)C1c1ccccc1	CC1(C)OC(=O)N(C2CCC(n3c(=O)n(C4CCOCC4)c4ccnc43)CC2)C1c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C(=O)c1cn(Cc2ccccc2)c2ccc(Br)cc12	O=C(O)C(=O)c1cn(Cc2ccccc2)c2ccc(Br)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C=Cc1ccccc1)=NNC(=O)CNC(=O)COC(=O)c1ccccc1C	CC(C=Cc1ccccc1)=NNC(=O)CNC(=O)COC(=O)c1ccccc1C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC1CC1)c1nc(C2CCCN2C)nc(-c2ccccc2)c1Cl	O=C(NC1CC1)c1nc(C2CCCN2C)nc(-c2ccccc2)c1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc2c(c1)CNC1c(ccc3c1[nH]c1ccccc13)C2	c1ccc2c(c1)CNC1c(ccc3c1[nH]c1ccccc13)C2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(C)(C)NCC(O)COc1ccc(-c2ccccc2)cc1	CC(C)CC(C)(C)NCC(O)COc1ccc(-c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C1C=C2c3ccccc4[nH]cc(c34)CC2N(C(=O)NC2CCCCC2)C1)N1CCOCC1	O=C(C1C=C2c3ccccc4[nH]cc(c34)CC2N(C(=O)NC2CCCCC2)C1)N1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
COC1c(N2CCC(N3CCCC3C)C2)c(F)cc2c(=O)c(C(=O)O)cn(C3CC3)c12	COC1c(N2CCc(N3CCCC3C)C2)c(F)cc2c(=O)c(C(=O)O)cn(C3CC3)c12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCCN1C(=O)C(=Cc2ccccc2)SC1=S)Nc1ccc(O)c(C(=O)O)c1	O=C(CCCN1C(=O)C(=Cc2ccccc2)SC1=S)Nc1ccc(O)c(C(=O)O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCCCOc1cc(Cc(CCN)C)OC(Cc(=O)NCC(C)(C)C(N)=O)C(C)C(C)C)cccc1OC	COCCCCOc1cc(Cc(CCN)C)OC(Cc(=O)NCC(C)(C)C(N)=O)C(C)C(C)C)cccc1OC	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)(O)C1CCN(c2ncc3ccc(-c4ccccc4)c(-c4ccc(CN5CCOCC5)cc4)nc3n2)CC1	CC(C)(O)C1CCN(c2ncc3ccc(-c4ccccc4)c(-c4ccc(CN5CCOCC5)cc4)nc3n2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(c1ccc(F)cc1)S(=O)(=O)c1ccc(C(=O)Nc2nnc(S(=O)=O)N3CCCCC3)s2)cc1	CN(c1ccc(F)cc1)S(=O)(=O)c1ccc(C(=O)Nc2nnc(S(=O)=O)N3CCCCC3)s2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Cl)cc1N1CCN(CCCNc2cc(-c3ccccc3)nc(C(C)C)n2)CC1	COc1ccc(Cl)cc1N1CCN(CCCNc2cc(-c3ccccc3)nc(C(C)C)n2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C(=O)NC(=O)Nc2ccc3c(c2)NC(=O)C3=Cc2cc(C#N)c(O)c(OC)c2)cc(OC)c1OC	COc1cc(C=C2C(=O)Nc3ccc(NC(=O)NC(=O)c4cc(OC)c(OC)c(OC)c4)ccc32)cc(C#N)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)N1CCC(S(=O)(=O)c2ccc(Cl)cc2)CC1	CCOC(=O)N1CCC(S(=O)(=O)c2ccc(Cl)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(Oc2nc3c(c(C(F)(F)F)nn3-c3ccccc3C)c(=O)n2C(=O)Nc2ccc(C)cc2)cc(OC)c1OC	COc1cc(Oc2nc3c(c(C(F)(F)F)nn3-c3ccccc3C)c(=O)n2C(=O)Nc2ccc(C)cc2)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1ccccc1NC(=O)C(C)OC(=O)c1ccccc1OCc1cccs1	COC(=O)c1ccccc1NC(=O)C(C)OC(=O)c1ccccc1OCc1cccs1	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)N1CCN(C(=O)c2ccccc2[N+](=O)[O-])CC1	CS(=O)(=O)N1CCN(C(=O)c2ccccc2[N+](=O)[O-])CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)OCCOCn1nc(C(F)F)c(Cl)c(Cl)c1=O	CC(=O)OCCOCn1nc(C(F)F)c(Cl)c(Cl)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1cccc(C=CC(=O)Nc2ccccc2C(=O)O)c1	CN(C)c1cccc(C=CC(=O)Nc2ccccc2C(=O)O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(N)N=C(N)SCc1cc2ccccc2c(=O)n1Cc1ccccc1	N=C(N)N=C(N)SCc1cc2ccccc2c(=O)n1Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(OCCCN2CCOCC2)cc1)c1ccc2cc(-c3cc(Cl)cc(C4CNC(=O)C4)c3)ccc2c1	O=C1CC(c2cc(Cl)cc(-c3ccc4cc(C(=O)Nc5ccc(OCCCN6CCOCC6)cc5)ccc4c3)c2)CN1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C2C=C(C(=O)O)Nc3ccccc32)o1	Cc1ccc(C2C=C(C(=O)O)Nc3ccccc32)o1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)CCC(NC(=O)CN(c1nnc(C)s1)C(C)C)C(=O)OCC	CCOC(=O)CCC(NC(=O)CN(c1nnc(C)s1)C(C)C)C(=O)OCC	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(CN(C(=O)Nc2cc(Cl)cc(Cl)c2)C2CCN(2)cc1	Cc1cccc(CN(C(=O)Nc2cc(Cl)cc(Cl)c2)C2CCN(2)cc1	FALSE	TRUE	TRUE
CN1CC2CC1CN2c1c(F)cc2c(=O)c(C(=O)O)cn(C3CC3)c2c1F	CN1CC2CC1CN2c1c(F)cc2c(=O)c(C(=O)O)cn(C3CC3)c2c1F	TRUE	TRUE	FALSE
CN1CCN(C(=O)c2cnn(-c3ccc(F)cc3)c2-n2ccccc2)CC1	CN1CCN(C(=O)c2cnn(-c3ccc(F)cc3)c2-n2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C(Nc1ncc(Cl)c(Nc2cc(C(C)(C)C)[nH]n2)n1)c1c(F)ccc(F)c1F	CC(C(Nc1ncc(Cl)c(Nc2cc(C(C)(C)C)[nH]n2)n1)c1c(F)ccc(F)c1F	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C)C(NC(=O)C1CNCC(N2CC(=O)N(c3ccccc3Cl)CC2(C)C1)C(=O)NCC(C)(C)CO	CCC(C)C(NC(=O)C1CNCC(N2CC(=O)N(c3ccccc3Cl)CC2(C)C1)C(=O)NCC(C)(C)CO	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nn(C)c(C)c1NS(=O)(=O)c1ccc(CCCN2C3CCCCC3C2)cc1	Cc1nn(C)c(C)c1NS(=O)(=O)c1ccc(CCCN2CC3CCCCC3C2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC=CC=CC=CC=CC(C)O	CCCCC=CC=CC=CC=CC(C)O	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1ncnc1COCp(=O)(O)O	Cn1ncnc1COCp(=O)(O)O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cn1c(=O)n(-c2ccc(F)cc2)c(=O)c2c1c1ccc(F)cc1n2O)NC1CCCCC1	O=C(Cn1c(=O)n(-c2ccc(F)cc2)c(=O)c2c1c1ccc(F)cc1n2O)NC1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
Brc1ccc(Cn2nnc3sc4c(c3c2=O)CCCC4)cc1	O=c1c2c3c(sc2nnn1Cc1ccc(Br)cc1)CCCC3	TRUE	TRUE	FALSE
CC(=O)c1cccc(NC(=O)CCC2CCCCC2)c1	CC(=O)c1cccc(NC(=O)CCC2CCCCC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(Cl)cc1)c1ccc(-c2cncs2)cc1	O=C(Nc1ccc(Cl)cc1)c1ccc(-c2cncs2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCN1C(=O)C(C)OC(Cc2ccccc2)NC(=O)OCc2ccccc2)NC(=O)C12CCN(Cc1ccc(Oc3ccc(F)cc3)cc1)CC2	CCCCN1C(=O)C(C)OC(Cc2ccccc2)NC(=O)OCc2ccccc2)NC(=O)C12CCN(Cc1ccc(Oc3ccc(F)cc3)cc1)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
NC(C=O)C(NC(=O)C(Cc(C)C)C(C(=O)NO)C1CCCCC1)C(C)C	NC(C=O)C(NC(=O)C(Cc(C)C)C(C(=O)NO)C1CCCCC1)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
Brc1ccc(-c2nn3c(-c4ccc(Br)s4)nnc3s2)cc1	Brc1ccc(-c2nn3c(-c4ccc(Br)s4)nnc3s2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NN1C(=O)c2c(F)c(F)c(F)c(F)c2C1=O	NN1C(=O)c2c(F)c(F)c(F)c(F)c2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(C(=O)Nc2nnc(SCC(=O)NCCCN3cnc3)s2)c1	Cc1cccc(C(=O)Nc2nnc(SCC(=O)NCCCN3cnc3)s2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(C=CC(C)C1CCC2C3CC=C4CC(O)CCC4(C)C3C(O)CC12C)C(C)C	CC(C)C(C=CC(C)C1CCC2C3CC=C4CC(O)CCC4(C)C3C(O)CC12C)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(S(=O)(=O)N2CCCCC2)cc1NC(=O)c1cc(-c2ccccc2)[nH]n1	COc1ccc(S(=O)(=O)N2CCCCC2)cc1NC(=O)c1cc(-c2ccccc2)[nH]n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1sc2ncnc(SCC(=O)NCCc3ccc(Cl)cc3)c2c1C	Cc1sc2ncnc(SCC(=O)NCCc3ccc(Cl)cc3)c2c1C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)(CCCON=C(COCc1c(Cl)cccc1Cl)C(C)(C)C)c1cc2cc(C#N)c(C(F)(F)F)cc2[nH]1	CC(C)(C)C(COCc1c(Cl)cccc1Cl)=NOCCCC(C)(O)c1cc2cc(C#N)c(C(F)(F)F)cc2[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)N1CC2(C)OC(C)(C)C(O)(Cc3c(O)c(C)ccc(O)c32)C1c1c(F)cccc1F	CC(=O)N1CC2(C)OC(C)(C)C(O)(Cc3c(O)c(C)ccc(O)c32)C1c1c(F)cccc1F	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(Cn2ccc3c(OCc4ccc5ccccc5n4)nncn32)cc1	c1ccc(Cn2ccc3c(OCc4ccc5ccccc5n4)nncn32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NP(=O)(OCC1OC(n2cc(l)c(=O)[nH]c2=O)CC1O)OP(=O)(O)OP(=O)(O)OCC1OC(n2cc(l)c(=O)[nH]c2=O)CC1N=[N+]=[N		FALSE	TRUE	TRUE
Cc1cc2c(cc1Cl)N(S(=O)(=O)c1c(Cl)cc(C#N)cc1Cl)CC2	Cc1cc2c(cc1Cl)N(S(=O)(=O)c1c(Cl)cc(C#N)cc1Cl)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1Cc1sc2nc(Cc3ccccc3)n(Cc3ccc(C(=O)Nc4cc(C)on4)cc3)c(=O)c2c1C	COc1ccccc1Cc1sc2nc(Cc3ccccc3)n(Cc3ccc(C(=O)Nc4cc(C)on4)cc3)c(=O)c2c1C	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)CNC(=O)CSc1nc2ccccc2nc1C	CCOC(=O)CNC(=O)CSc1nc2ccccc2nc1C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=NNC(=O)CSc2nnc(-c3ccc(F)cc3)n2N)ccc1OCc1csc(-c2ccc(F)cc2)n1	COc1cc(C=NNC(=O)CSc2nnc(-c3ccc(F)cc3)n2N)ccc1OCc1csc(-c2ccc(F)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(Nc2nnc(SCc3csc(-c4ccc(F)cc4)n3)[nH]2)c1	Cc1cccc(Nc2nnc(SCc3csc(-c4ccc(F)cc4)n3)[nH]2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1cccc1-c1ccc(C(O)(C(F)(F)F)C(F)(F)F)cc1	CCOC(=O)c1cccc1-c1ccc(C(O)(C(F)(F)F)C(F)(F)F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(C(O)=Nc2ccccc2)cc1)c1ccc2[nH]nc(C3=CC3)c2c1	O=C(Nc1ccc(C(O)=Nc2ccccc2)cc1)c1ccc2[nH]nc(C3=CC3)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NO)c1cnc(NC(=S)Nc2ccc(Br)cc2)nc1	O=C(NO)c1cnc(NC(=S)Nc2ccc(Br)cc2)nc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1sc(Nc2ccc(C(F)(F)F)cc2)nc1-c1ccc(F)cc1	Cc1sc(Nc2ccc(C(F)(F)F)cc2)nc1-c1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOP(=O)(OCC)C(Cc1ccccc1)P(=O)(OCC)OCC	CCOP(=O)(OCC)C(Cc1ccccc1)P(=O)(OCC)OCC	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1cc(-c2ccnc2)cc2ccc(OCc3cccc(F)c3)cc12	Cc1cc(-c2ccnc2)cc2ccc(OCc3cccc(F)c3)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)N1CCc2cc(-c3ccccc3)ccc21	CS(=O)(=O)N1CCc2cc(-c3ccccc3)ccc21	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1cc(C(=O)OCC(=O)NC2CCCCC2)c2ccccc2n1	Cc1cc(C(=O)OCC(=O)NC2CCCCC2)c2ccccc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)OCC(=O)C1CCC2C3CC=C4C=CC=CC4(C)C3C=CC12C	CC(=O)OCC(=O)C1CCC2C3CC=C4C=CC=CC4(C)C3C=CC12C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(-c2nc(CNCCN(C)c3ccccc3)co2)c1	COc1cccc(-c2nc(CNCCN(C)c3ccccc3)co2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1ccc2cc(Oc3ccc(C(F)(F)F)cn3)ccc2n1)N1CCC(F)(F)C(F)C1	O=C(c1ccc2cc(Oc3ccc(C(F)(F)F)cn3)ccc2n1)N1CCC(F)(F)C(F)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(C(=O)c2cc(F)c(F)c(F)c2)c2c(O)cc(C)[nH]c2=O)cc1	COc1ccc(C(C(=O)c2cc(F)c(F)c(F)c2)c2c(O)cc(C)[nH]c2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(N(C)S(=O)(=O)c2ccc(C)c(C)c2)cc1	COc1ccc(N(C)S(=O)(=O)c2ccc(C)c(C)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccccc1)c1ccoc(CSc2ncccn2)n1	O=C(Nc1ccccc1)c1ccoc(CSc2ncccn2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1c2ccc([N+](=O)[O-])c3ccccc(c23)C(=O)N1CC1CCCCC1	O=C1c2ccc3c([N+](=O)[O-])ccc(c23)C(=O)N1CC1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccc2c(c1)c(-c1ccccc3cc[nH]c13)c(Cl(=O)O)n2Cc1cc(F)ccc1F	CCc1ccc2c(c1)c(-c1ccccc3cc[nH]c13)c(Cl(=O)O)n2Cc1cc(F)ccc1F	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(OC)cc(C(=O)NC(c2ccncc2)c2ccccc2)c1	COc1cc(OC)cc(C(=O)NC(c2ccccc2)c2ccncc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1ccccc1Nc1cnc(-n2cnc3c(OC4CCNCC4)cc(N)nc32)cn1	CC(C)(C)c1ccccc1Nc1cnc(-n2cnc3c(OC4CCNCC4)cc(N)nc32)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(c2ccc(NC(=O)Nc3cc(C(F)(F)F)ccc3Cl)cc2)CCSC(N)=N1	CC1(c2ccc(NC(=O)Nc3cc(C(F)(F)F)ccc3Cl)cc2)CCSC(N)=N1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(CCC(=O)O)C(=O)N1c2ccccc2CC1C(=O)O	NC(CCC(=O)O)C(=O)N1c2ccccc2CC1C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(C(=O)C1C(C(C)C)C1(CO)Cl	CCCN(C(=O)C1C(C(C)C)C1(C)CO	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(S(=O)(=O)N2CC3(CC2)C(=O)C=CN3c2ccccc2)cc1	COc1ccc(S(=O)(=O)N2CC3(CC2)C(=O)C=CN3c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCC#Cc1ccc2ccn(-c3ccc(C(F)(F)F)cc3)c2c1	CN(C)CCC#Cc1ccc2ccn(-c3ccc(C(F)(F)F)cc3)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc2ccc1C(C)CO(C)O=Nc1ccccc1Nc1cc(cc(OC(F)F)c1)C(O)=Nc1cc(Cl)nc(N)n1		FALSE	TRUE	TRUE
CCc1nc2ccccc2n1CC(=O)Nc1cccc(S(=O)=O)N2CCCCC2)c1	CCc1nc2ccccc2n1CC(=O)Nc1cccc(S(=O)=O)N2CCCCC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(Cl)c(C(=O)NNC(=O)NNC(N)=O)nn1C	Cc1c(Cl)c(C(=O)NNC(=O)NNC(N)=O)nn1C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)N(C)C(=O)c1ccccc1C(CC1CCN(C(=O)C1)c1ccc(OC)cc1	CC(C)N(C)C(=O)c1ccccc1C(CC1CCN(C(=O)C1)c1ccc(OC)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1)c(C(=O)CN1CCCC1)cn2-c1ccc(C(=O)O)cc1	COc1ccc2c(c1)c(C(=O)CN1CCCC1)cn2-c1ccc(C(=O)O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc(-c2n[nH]c3ccc(C(O)=NC4CCCC(NC(=O)c5cccs5)C4)cc23)cn1	Cn1cc(-c2n[nH]c3ccc(C(O)=NC4CCCC(NC(=O)c5cccs5)C4)cc23)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2oc(-c3c(-c4c(Cl)cc(C)n4C)n(C)c4cccc(OC)c34)cc2n1	COc1ccc2oc(-c3c(-c4c(Cl)cc(C)n4C)n(C)c4cccc(OC)c34)cc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1onc(-c2cc3ccccc3o2)n1-c1cccc(C(F)(F)F)c1	O=c1onc(-c2cc3ccccc3o2)n1-c1cccc(C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CC(C(=O)NCCCNc2nc3c(s2)CCc2cc(F)ccc2-3)N(C)C1=O	CN1CC(C(=O)NCCCNc2nc3c(s2)CCc2cc(F)ccc2-3)N(C)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(OC(=O)N1CCC1(C)OC(=O)N1CC(F)CC1C(=O)NC(CC(=O)O)C(=O)COc1ccccc1	CC(OC(=O)N1CCC1(C)OC(=O)N1CC(F)CC1C(=O)NC(CC(=O)O)C(=O)COc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc2c3c(c(C(=O)N4CCOCC4)cn2c1C)CCC(c1ccccc1)O3	Cc1nc2c3c(c(C(=O)N4CCOCC4)cn2c1C)CCC(c1ccccc1)O3	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1ccc(C(=O)c2c(C(=O)OC)c(C(=O)OCC)c(C)n2Cc2ccccc2)cc1	CCOC(=O)c1ccc(C(=O)c2c(C(=O)OC)c(C(=O)OCC)c(C)n2Cc2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(=O)N(CCN1CCOCC1)Cc1ccc2c(c1)C=CC(C)(C)O2	CC(C)C(=O)N(CCN1CCOCC1)Cc1ccc2c(c1)C=CC(C)(C)O2	TRUE	TRUE	TRUE
OCc1c(O)nc(SCc2ccccc2Cl)nc1Nc1ccccc1	OCc1c(O)nc(SCc2ccccc2Cl)nc1Nc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
O=C(Nc1nc2c(cn1)N(C1CC1)CC2)c1cn(C2CC2)c2cnccc12	O=C(Nc1ncc2c(n1)CCN2C1CC1)c1cn(C2CC2)c2cnccc12	TRUE	TRUE	TRUE
#CCCN(Cc1ccc2nc(C)nc(O)c2c1)c1ccc(C(=O)N(C(CCC(=O)O)N(C(CCC(=O)O)C(=O)O)C(=O)O)cc1	#CCCN(Cc1ccc2nc(C)nc(O)c2c1)c1ccc(C(=O)N(C(CCC(=O)O)N(C(CCC(=O)O)C(=O)O)C(=O)O)cc1	TRUE	FALSE	FALSE
CC(CCc1cccc1)NC(=O)c1cccc1N	CC(CCc1cccc1)NC(=O)c1cccc1N	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ncoc1-c1nnc(SCCCN2CC3CC3(c3ccc(C(F)(F)F)cc3)C2)n1C	Cc1ncoc1-c1nnc(SCCCN2CC3CC3(c3ccc(C(F)(F)F)cc3)C2)n1C	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(O)c1ccc2c(c1)CCc1c(C(F)(F)F)noc1-2	O=C(O)c1ccc2c(c1)CCc1c(C(F)(F)F)noc1-2	TRUE	TRUE	TRUE
C#CCOn1c(N)c(C#N)c(-c2cccc2F)c(Br)c1=O	C#CCOn1c(N)c(C#N)c(-c2cccc2F)c(Br)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(O)c2c(=O)cc(-c3cccc3)oc2c1-c1ccc(O)cc1	COc1cc(O)c2c(=O)cc(-c3cccc3)oc2c1-c1ccc(O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(C)n(C2CCCN(C(=O)c3cccn3)C2)n1	Cc1nc(C)n(C2CCCN(C(=O)c3cccn3)C2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=C(C(=O)Nc2ccccc2)C(c2ccc(Br)s2)n2nc(-c3ccncc3)nc2N1	CC1=C(C(=O)Nc2ccccc2)C(c2ccc(Br)s2)n2nc(-c3ccncc3)nc2N1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(Nc2ccc([N+](=O)[O-])cc2C(=O)O)c1C#N	COc1cccc(Nc2ccc([N+](=O)[O-])cc2C(=O)O)c1C#N	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC(Cc1cccc1)C(=O)N(C)CO)c1cccc2cccc12)c1cc2cccc2o1	O=C(NC(Cc1cccc1)C(=O)N(C)CO)c1cccc2cccc12)c1cc2cccc2o1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOP(=O)(C=C(C)C)C(Nc1ccc(O)cc1)c1cccn1	CCOP(=O)(C=C(C)C)C(Nc1ccc(O)cc1)c1cccn1	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(CCC(C)C1CCC2C3C(O)CC4C(O)CCC4(C)C3CCC12C)C(C)CO	C=C(CCC(C)C1CCC2C3C(O)CC4C(O)CCC4(C)C3CCC12C)C(C)CO	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CC(NS(=O)(=O)c2ccc3cccc3c2)CC(C)(C)C1	CC1CC(NS(=O)(=O)c2ccc3cccc3c2)CC(C)(C)C1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(COC(=O)c1cccc(F)c1)Nc1cccc1Cl	O=C(COC(=O)c1cccc(F)c1)Nc1cccc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(C(=O)N)C2CCC2)N(C(=O)CN(C(=O)c2cccs2)c2cccc(F)c2)cc1	Cc1ccc(C(C(=O)N)C2CCC2)N(C(=O)CN(C(=O)c2cccs2)c2cccc(F)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(NC(=O)C1(C)CCCC2(C)c3ccc(C(C)C)cc3CCC12)C(=O)NCC	CCN(C(=O)C(NC(=O)C1(C)CCCC2(C)c3ccc(C(C)C)cc3CCC12)C(C)CC	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)CN1C(=O)C2(OCCN2C(=O)c2ccc(Br)cc2)c2cc(Cl)ccc21	CCOC(=O)CN1C(=O)C2(OCCN2C(=O)c2ccc(Br)cc2)c2cc(Cl)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(O)c(Br)c(-c2cccc2F)c1	Cc1cc(O)c(Br)c(-c2cccc2F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NC(=O)CSc2nc3c(=O)[nH]c(C)N)nc3[nH]2)cc1	COc1ccc(NC(=O)CSc2nc3c(=O)[nH]c(C)N)nc3[nH]2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(NNC(=O)c2ccco2)c2cccc2n1	Cc1cc(NNC(=O)c2ccco2)c2cccc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCc1cccs1)c1c(O)c2ncc(Cc3ccc(F)cc3)cc2[nH]c1=O	O=C(NCc1cccs1)c1c(O)c2ncc(Cc3ccc(F)cc3)cc2[nH]c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)Cn1c(NC(c2ccc(N3CCCC3=O)cc2)c2ccc([N+](=O)[O-])cc2)nc2cc(Cl)ccc21	O=C(O)Cn1c(NC(c2ccc(N3CCCC3=O)cc2)c2ccc([N+](=O)[O-])cc2)nc2cc(Cl)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)Cn1c(-c2ccc(P(=O)(O)O)o2)nc2c(N)c(F)ccc21	CC(O)Cn1c(-c2ccc(P(=O)(O)O)o2)nc2c(N)c(F)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cnc(C(=O)NCC2(c3cccc3)CC2)cn1	Cc1cnc(C(=O)NCC2(c3cccc3)CC2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCCCCCCCOCCOc1ccc(C=Cc2nc(O)sc2C#N)cc1	CCCCCCCCCCCCCCCCCOCCOc1ccc(C=Cc2nc(O)sc2C#N)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1cnc2scn2c1=O	CCOC(=O)c1cnc2scn2c1=O	TRUE	TRUE	FALSE
COc1ccc(C(=O)c2sc3nc4c(c(-c5ccc(OC)c(OC)c5)c3c2N)CC(C)CS4)cc1	COc1ccc(C(=O)c2sc3nc4c(c(-c5ccc(OC)c(OC)c5)c3c2N)CC(C)CS4)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCCN1CCNCN(C(=O)c1ccc2c(c1)NC(=O)C(=Cc1cccc1F)S2	CC1CCCN1CCNCN(C(=O)c1ccc2c(c1)NC(=O)C(=Cc1cccc1F)S2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)OCC1=C(C(=O)OC(c2ccccc2)c2ccccc2)N2C(=O)C(=Cc3ccc(O)cc3)C2S(=O)(=O)C1	CC(=O)OCC1=C(C(=O)OC(c2ccccc2)c2ccccc2)N2C(=O)C(=Cc3ccc(O)cc3)C2S(=O)(=O)C1	TRUE	TRUE	TRUE
NC1CC(N2Cc3nc(-c4ccccc4)oc3-c3ccccc32)C1	NC1CC(N2Cc3nc(-c4ccccc4)oc3-c3ccccc32)C1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCCCCCN(C=O)c1ccc(NC2=N C3CS(=O)(=O)CC3S2)cc1)NO	O=C(CCCCCCN(C=O)c1ccc(NC2=N C3CS(=O)(=O)CC3S2)cc1)NO	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nc2c(OCc3ccc(C(F)(F)F)cc3)ccn2c1N(C)C(=O)c1ccccc1	CCc1nc2c(OCc3ccc(C(F)(F)F)cc3)ccn2c1N(C)C(=O)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCNC(=O)c1cccc2nc3c4c(cc(l)c3nc12)OC(C)(C)C=C4	CN(C)CCNC(=O)c1cccc2nc3c4c(cc(l)c3nc12)OC(C)(C)C=C4	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=Cc1sccc1S(=O)(=O)Nc1cccn1)Nc1ccc(CN2CCCC2)cc1	O=C(C=Cc1sccc1S(=O)(=O)Nc1cccn1)Nc1ccc(CN2CCCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC(=O)NC1CCC(CCN2CCC(c3coc4ccccc34)CC2)CC1	CCCCC(=O)NC1CCC(CCN2CCC(c3coc4ccccc34)CC2)CC1	TRUE	TRUE	FALSE
COCl(=O)C(CCCCC(=O)Nc1cccc1O)NC(=O)c1cc(Cl)cc(Cl)c1	COCl(=O)C(CCCCC(=O)Nc1cccc1O)NC(=O)c1cc(Cl)cc(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCNc1nc(NCC)nc(OC2ccc(N(C)C)cc2)n1	CCNc1nc(NCC)nc(OC2ccc(N(C)C)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CC(=O)N1CCCC(Nc2nc(C#N)nc3c2ncn3C2OC(COP(=O)(O)O)C(O)C2O)C1	C=CC(=O)N1CCCC(Nc2nc(C#N)nc3c2ncn3C2OC(COP(=O)(O)O)C(O)C2O)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc1CNC(=O)COCl(=O)c1ccc(C)s1	COc1cccc1CNC(=O)COCl(=O)c1ccc(C)s1	TRUE	TRUE	FALSE
CCOC(=O)c1ccc(-n2nmnc2SCC(=O)NC2CCCC2)cc1	CCOC(=O)c1ccc(-n2nmnc2SCC(=O)NC2CCCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1c(C)c(O)c2c(c1O)C(=O)c1c(cc(O)c(CCC(C)(O)C(=O)OC(C(=O)O)c3ccc(O)cc3)c1O)C2=O	COc1c(C)c(O)c2c(c1O)C(=O)c1c(cc(O)c(CCC(C)(O)C(=O)OC(C(=O)O)c3ccc(O)cc3)c1O)C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)CCc1c(C)[nH]c2ccc(OC)cc12	CCN(CC)CCc1c(C)[nH]c2ccc(OC)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
CN(CC(=O)Nc1cccc1Cl)C(=O)CCC(=O)Nc1nc(-c2ccco2)cs1	CN(CC(=O)Nc1cccc1Cl)C(=O)CCC(=O)Nc1nc(-c2ccco2)cs1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(N2CCN(C(=O)CSc3nc(C)cc(O)n3)CC2)cc1	COc1ccc(N2CCN(C(=O)CSc3nc(C)cc(O)n3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
[O-][n+]1c2ccc(F)cc2cc2oc3ccc(OCCN4CCCC4)cc3c21	[O-][n+]1c2ccc(F)cc2cc2oc3ccc(OCCN4CCCC4)cc3c21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCCCC1CCS1)NC1CCCCC1	O=C(CCCCC1CCS1)NC1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCOC(=O)N1CCC(c2nc3ccc(Nc4ccnc5cc(Cl)ccc45)cc3n2CC(C)C)CC1	CCCCOC(=O)N1CCC(c2nc3ccc(Nc4ccnc5cc(Cl)ccc45)cc3n2CC(C)C)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
c1csc(-c2nc3[nH]c(-c4cn[nH]c4)c(-c4ccnc4)nc-3n2)c1	c1csc(-c2nc3nc(-c4ccnc4)oc3-c3ccccc32)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(O)(c1ccc(NC2CCN(c3ncnc4sc(C(N)=O)cc34)CC2)nc1)C(F)(F)F	CC(C)C(O)(c1ccc(NC2CCN(c3ncnc4sc(C(N)=O)cc34)CC2)nc1)C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2nnc(SCC(=O)N3CCOCC3)n2C)cc1	Cc1ccc(-c2nnc(SCC(=O)N3CCOCC3)n2C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cc(Cl)c(O)c(Cl)c1)C1=CCN(S(=O)(=O)c2cccc(C(F)(F)F)c2)CC1	O=C(Nc1cc(Cl)c(O)c(Cl)c1)C1=CCN(S(=O)(=O)c2cccc(C(F)(F)F)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(CC(CCl(=O)N)C(=S)Nc2ccc(S(=O)(=O)N3CCN(C(=O)CC[S+](C)[O-])CC3)cc2)C(CN)=S)cc1	Cc1ccc(CC(CCl(=O)N)C(=S)Nc2ccc(S(=O)(=O)N3CCN(C(=O)CC[S+](C)[O-])CC3)cc2)C(CN)=S)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc1-n1cc(C(=O)N2CCN(c3cccc(Cl)c3)CC2)c(=O)c2cc(S(=O)(=O)N(C)CC3CCCO3)ccc21	Cc1cccc1-n1cc(C(=O)N2CCN(c3cccc(Cl)c3)CC2)c(=O)c2cc(S(=O)(=O)N(C)CC3CCCO3)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1ccc(-c2n[nH]c(-c3ccc4c(c3)NC(=O)C4(C)C)n2)cn1	CN(C)c1ccc(-c2n[nH]c(-c3ccc4c(c3)NC(=O)C4(C)C)n2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1cc(NC(=O)Nc2ccccc(C(=O)c3ccc4c(C=Cc5cccc(OCc6ccccc6)c3)ccnc4)c2)no1	CC(C)(C)c1cc(NC(=O)Nc2ccccc(C(=O)c3ccc4c(C=Cc5cccc(OCc6ccccc6)c3)ccnc4)c2)no1	FALSE	TRUE	TRUE
NS(=O)(=O)c1ccc(-c2ccc(C#Cc3ccc(F)cc3)cn2)cc1	NS(=O)(=O)c1ccc(-c2ccc(C#Cc3ccc(F)cc3)cn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1c[nH]c2ccc(OCCCOc3ccccc3CCc3ccccc3)cc2c1=O	O=C(O)c1c[nH]c2ccc(OCCCOc3ccccc3CCc3ccccc3)cc2c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(c1ccc(F)cc1)N1CCC(CCOc2ccc(F)cc2)CC1	O=S(=O)(c1ccc(F)cc1)N1CCC(CCOc2ccc(F)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1NC2=C(C(CCC2=O)C(c2ccc(Cl)c(Cl)c2)N1	O=C1NC2=C(C(CCC2=O)C(c2ccc(Cl)c(Cl)c2)N1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(O)c2c(c1)C=CCC(O)C(O)C(=O)C=CCC(C)OC2=O	COc1cc(O)c2c(c1)C=CCC(O)C(O)C(=O)C=CCC(C)OC2=O	TRUE	TRUE	FALSE
CC(=O)NC1C(OC2C(N)CC(N)C(OC3OC(CO)C(O)C(NC(=N)N)C3O)C2OC2OC(C)C(O)C(N(C)C)C2O)OC1(C)O	CC(=O)NC1C(OC2C(N)CC(N)C(OC3OC(CO)C(O)C(NC(=N)N)C3O)C2OC2OC(C)C(O)C(N(C)C)C2O)OC1(C)O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)CCCNc1nc(O)c2[nH]cnc2n1	CCOC(=O)CCCNc1nc(O)c2[nH]cnc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc2cc(C(=O)CN3CCOCC3)c(=O)oc12	COc1cccc2cc(C(=O)CN3CCOCC3)c(=O)oc12	TRUE	TRUE	TRUE
CN(Cc1cccc1)C(=O)c1cc(C(C)C)On1	CN(Cc1cccc1)C(=O)c1cc(C(C)C)On1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2nnc3c(Cc4ccccc4)c(=O)c4ccc(Cl)cc4n23)c(OC)c1	COc1ccc(-c2nnc3c(Cc4ccccc4)c(=O)c4ccc(Cl)cc4n23)c(OC)c1	FALSE	TRUE	TRUE
O=C1CS(C2c[nH]c3ccccc23)N1Cc1ccco1	O=C1CS(C2c[nH]c3ccccc23)N1Cc1ccco1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)S(=O)(=O)c1ccc(C(=O)OC(C)C(=O)NC2CCS(=O)(=O)C2)cc1	CCN(CC)S(=O)(=O)c1ccc(C(=O)OC(C)C(=O)NC2CCS(=O)(=O)C2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(CCS)Nc1ccc(S(=O)(=O)N=C(O)c2ccc(NN=C3C(=O)Nc4ccc(Br)cc43)cc2)cc1	N=C(CCS)Nc1ccc(S(=O)(=O)N=C(O)c2ccc(NN=C3C(=O)Nc4ccc(Br)cc43)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(c1cccc1)c1nccc(N(C)c2nc3c(s2)Cc2cc(N)ccc2-3)n1	CN(c1cccc1)c1nccc(N(C)c2nc3c(s2)Cc2cc(N)ccc2-3)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cnn1SCC1=C(C(=O)O)N2C(=O)C(NC(=O)C(=NOCC3cnc(Cl)s3)c3csc(N)n3)C2SC1	Cn1cnn1SCC1=C(C(=O)O)N2C(=O)C(NC(=O)C(=NOCC3cnc(Cl)s3)c3csc(N)n3)C2SC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCCCCC(=O)(=O)N1CCCC1)N1CCN(c2cc(-c3cccn3)c(Cl)cn2)CC1	O=C(CCCCCC(=O)(=O)N1CCCC1)N1CCN(c2cc(-c3cccn3)c(Cl)cn2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1cccc(C(=O)NCC(=O)NN=Cc2ccccc2Cl)c1	CCOc1cccc(C(=O)NCC(=O)NN=Cc2ccccc2Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)CCC(=O)N2CCCCC2)cc1	COc1ccc(C(=O)CCC(=O)N2CCCCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CC(=O)N(Cc2ccccc2)C(=O)C12CCN(c1c(F)cccc1F)CC2	CN1CC(=O)N(Cc2ccccc2)C(=O)C12CCN(c1c(F)cccc1F)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
CCC1OC(=O)OC12CCN(C(=O)c1ccc[nH]1)CC2	CCC1OC(=O)OC12CCN(C(=O)c1ccc[nH]1)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1c(-c2ccc(Cl)cc2)cc(-c2cc3c(Cl)cccc3nc2Cl)nc1N	N#Cc1c(-c2ccc(Cl)cc2)cc(-c2cc3c(Cl)cccc3nc2Cl)nc1N	TRUE	TRUE	TRUE
C=CC1=CC2=C(CC(CCC=C)OC2=O)C(c2ccc(F)cc2)C1O	C=CCCC1CC2=C(C=C(C=C)C(O)C2c2ccc(F)cc2)C(=O)O1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(OC)c(S(=O)(=O)NCc2ccc(Cl)cc2)c1	COc1ccc(OC)c(S(=O)(=O)NCc2ccc(Cl)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2nc3sc(CGNS(=O)(=O)c4ccc(F)cc4)c(C)n3n2)cc1	COc1ccc(-c2nc3sc(CGNS(=O)(=O)c4ccc(F)cc4)c(C)n3n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(c1cc(Cl)ccc1OCC(O)CNC(C)(C)C)n1ccnc1	C=C(c1cc(Cl)ccc1OCC(O)CNC(C)(C)C)n1ccnc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc2c3c(cn(Cc4ccc(Cl)cc4)c13)C(=O)C2=O	Cc1ccc2c3c(cn(Cc4ccc(Cl)cc4)c13)C(=O)C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(c1OC)C1=NNC(=O)C1CC2	COc1cc2c(cc1OC)C1=NNC(=O)C1CC2	TRUE	TRUE	FALSE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
COCCOC(=O)C(C#N)=C(NCc1ccncc1)SC	COCCOC(=O)C(C#N)=C(NCc1ccncc1)SC	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1cc(F)cc(N2CCCC(CO))(CCOc3ccccc3)C2)c1	O=C(O)c1cc(F)cc(N2CCCC(CO))(CCOc3ccccc3)C2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CN1C(=O)c2cccc3ccccc1c23)Nc1ccc(Cc2cnccc2)cc1	O=C(CN1C(=O)c2cccc3ccccc1c23)Nc1ccc(Cc2cnccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(NC(=O)c1cc(-c2cccc3c2OCO3)on1)C(=O)Nc1ccc2c(c1)OCO2	CC(C)C(NC(=O)c1cc(-c2cccc3c2OCO3)on1)C(=O)Nc1ccc2c(c1)OCO2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1nc(CN2CCC(OCc3ncc(F)cn3)CC2)no1	CC(C)c1nc(CN2CCC(OCc3ncc(F)cn3)CC2)no1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(CNC(=O)CNS(=O)) (=O)c2ccc3c(c2)CCC(=O)N3)cc1	Cc1ccc(CNC(=O)CNS(=O)) (=O)c2ccc3c(c2)CCC(=O)N3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCS(=O)) (=O)NC(=O)CCCC=CCc1ccccc1OCCc2ccc3nc(C(C)C)oc3c2)c1	CCCS(=O)) (=O)NC(=O)CCCC=CCc1ccccc1OCCc2ccc3nc(C(C)C)oc3c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc(N2CCCC(CN3CCCC3)CC2)nc(NC2CCCC2)c12CCN(Cc1ccc3c(c1)OCO3)CC2	FALSE	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1Cc2cc(S(=O)) (=O)Nc3ccc(OC(F)(F)F)cc3)ccc2N1	O=C1CCc2cc(S(=O)) (=O)Nc3ccc(OC(F)(F)F)cc3)ccc2N1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCc1ncc(C=C2C(=O)N(CCCC)C(=O)N2Cc2ccc(F)cc2)n1Cc1ccc(C(=O)OC)cc1	CCCCc1ncc(C=C2C(=O)N(N(CCCC)C(=O)N2Cc2ccc(F)cc2)n1Cc1ccc(C(=O)OC)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ccc(O)c(-c2sc(NCC(C)O)n2)c1	CC(O)CNc1nc(-c2cc(N)ccc2O)cs1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOCCN1c(=N)c(S(=O)) (=O)c2ccc(C)cc2)c2c(=O)n3ccccc3nc21	CCOCCN1c(=N)c(S(=O)) (=O)c2ccc(C)cc2)c2c(=O)n3ccccc3nc21	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1ccc(-c2nn(-c3ccccc3)cc2C=C2S(C=S)N(C(C(=O)O)C2=O)cc1	Cc1ccc(-c2nn(-c3ccccc3)cc2C=C2S(C=S)N(C(C(=O)O)C2=O)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
Clc1ccc2nc(Sc3nnnn3C3CCC3)n(-c3ccccc3)c2c1	Clc1ccc2nc(Sc3nnnn3C3CCC3)n(-c3ccccc3)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCN(C(=O)C1CCCN1C(=O)C(NC(=O)C(C(=O)O)NC(=O)C(N)CO)C(C)OC(=O)C(N)CCCCN=C(N)N	CCCCN(C(=O)C1CCCN1C(=O)C(NC(=O)C(C(=O)O)NC(=O)C(C(=O)O)NC(=O)C(N)CO)C(C)OC(=O)C(N)CCCCN=C(N)N	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccc(C(C(=O)N2C2CCCC2)N(C(=O)c2ccca2)c2ccc(F)c2)cc1	CCc1ccc(C(C(=O)N2C2CCCC2)N(C(=O)c2ccca2)c2ccc(F)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=NNC(=S)Nc2ccccc2)NCCCCCCCCCN2CCN(Cc3ccccc3OC(C)C)CC2)cc1	COc1ccc(C(=NNC(=S)Nc2ccccc2)NCCCCCCCCCN2CCN(Cc3ccccc3OC(C)C)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1cc(COc2ccc(Cl)cc2Cl)on1)N1CCCC1	O=C(c1cc(COc2ccc(Cl)cc2Cl)on1)N1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
C1=C(c2ccccc2)C2CCCC3CCC(CN1)O23	FALSE	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)Cc1c(C(=O)OCO)[nH]c2cc(Cl)ccc12	CCOC(=O)Cc1c(C(=O)OCO)[nH]c2cc(Cl)ccc12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(OC)c2c(C)[n+]( [O-])c3cccn3c2c1	COc1cc(OC)c2c(C)[n+]( [O-])c3cccn3c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)CCOc1ccc(-c2cc(=O)c3ccc(O)cc3s2)cc1	CCN(CC)CCOc1ccc(-c2cc(=O)c3ccc(O)cc3s2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1c(C)c(C)c2cc(C(=O)NCCc3cnccc3)ccc21	CCn1c(C)c(C)c2cc(C(=O)NCCc3cnccc3)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccn2Oc2ccc(C(=O)CC(C)C)cc2)ncc1Cl	CNC(=O)c1ccccc1Nc1nc(Nc2cccn2Oc2ccc(C(=O)CC(C)C)cc2)ncc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1n(CC(F)(F)F)c2ccccc2c1Cl)N1CCC(O)(CN2CCOCC2)CC1	O=C(c1c(Cl)c2ccccc2n1CC(F)(F)F)N1CCC(O)(CN2CCOCC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nnc2c1ccn2C1CC(O)C(CO)O1	Nc1nnc2c1ccn2C1CC(O)C(CO)O1	TRUE	TRUE	FALSE
COc1ccc2c(=O)cc(-c3ccc(OC4CS4)c(OC4CCOCC4O)c3)oc2c1	COc1ccc2c(=O)cc(-c3ccc(OC4CS4)c(OC4CCOCC4O)c3)oc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CN(S(=O)) (=O)c2ccccc2)C(c2ccc(Cl)cc2)c2cc(F)ccc2N1	O=C1CN(S(=O)) (=O)c2ccccc2)C(c2ccc(Cl)cc2)c2cc(F)ccc2N1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2=NN(c3ccc(C=O)cc3)C(c3cc4ccccc4nc3Cl)C2)cc1	COc1ccc(C2=NN(c3ccc(C=O)cc3)C(c3cc4ccccc4nc3Cl)C2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1nnnc1Sc1cc(N2CCNCC2)c([N+](=O)[O-])cc1[N+](=O)[O-]	Cn1nnnc1Sc1cc(N2CCNCC2)c([N+](=O)[O-])cc1[N+](=O)[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=CC(=O)NCCCCCOC(=O)C1(C2C2O2)CCc2ccccc21)c1ccc2c(c1)OCO2	CC(=CC(=O)NCCCCCOC(=O)C1(C2C2O2)CCc2ccccc21)c1ccc2c(c1)OCO2	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)NC(=S)NNC(=O)CCN2CCN(C)CC2)cc1Br	COc1ccc(C(=O)NC(=S)NNC(=O)CCN2CCN(C)CC2)cc1Br	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)C1CCC(=NNC(=O)c2nnnn(-c3nonc3N)c2-c2ccccc2)CC1	CC(C)(C)C1CCC(=NNC(=O)c2nnnn(-c3nonc3N)c2-c2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CSc1nc(C)cc(C)c1S(=O)) (=O)c1ccc(C#N)cc1	CSc1nc(C)cc(C)c1S(=O)) (=O)c1ccc(C#N)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(Nc1nncs1)c1cc(C(F)(F)F)ccc1Oc1ccc(C(F)(F)F)cc1-c1cnccc1	O=S(=O)(Nc1nncs1)c1cc(C(F)(F)F)ccc1Oc1ccc(C(F)(F)F)cc1-c1cnccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1ccc(NC(=O)c2cc(OC)c(OC)c(OC)c2)cc1[N+](=O)[O-]	CCOC(=O)c1ccc(NC(=O)c2cc(OC)c(OC)c(OC)c2)cc1[N+](=O)[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1ccc(CCCCOc2ccc(CCl)cc2)cc1	NC(=O)c1ccc(CCCCOc2ccc(CCl)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)) (=O)Cc2nc(Nc3ccc(Br)cc3)c3ccccc3n2)cc1	Cc1ccc(S(=O)) (=O)Cc2nc(Nc3ccc(Br)cc3)c3ccccc3n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc(NC(=O)Cc2nncc(SCc3c(F)ccccc3Cl)n2C)c1	COc1ccccc(NC(=O)Cc2nncc(SCc3c(F)ccccc3Cl)n2C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2C3=C(COC3=O)N(Cc3ccc(CO)cc3)c3cc4c(cc32)OCO4)cc1OC	COc1ccc(C2C3=C(COC3=O)N(Cc3ccc(CO)cc3)c3cc4c(cc32)OCO4)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)OC(=O)c1n2n2c(-c3enn(Cc4ccccc4F)c3)cnc12	FALSE	TRUE	TRUE	TRUE
NCCN(Cc1ccccc1F)C1CCCc2c1[nH]c1ccccc21	NCCN(Cc1ccccc1F)C1CCCc2c1[nH]c1ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1ncc([N+](=O)[O-])c1NC(=O)Nc1ccccc1F	Cn1ncc([N+](=O)[O-])c1NC(=O)Nc1ccccc1F	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NS(=O)) (=O)c2ccc3c(c2)CCC(=O)N3)cc1C	Cc1ccc(NS(=O)) (=O)c2ccc3c(c2)CCC(=O)N3)cc1C	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)N1CCN(C2=C(Cl)C(=O)N(c3ccc(Cl)cc3)C2=O)CC1	CC(C)N1CCN(C2=C(Cl)C(=O)N(c3ccc(Cl)cc3)C2=O)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2noc(CCC(=O)O)n2)cc1F	Cc1ccc(-c2noc(CCC(=O)O)n2)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
CN1C(=O)NC(=O)C(=Cc2ccc(S(C)(=O)=O)cc2)C1=O	CN1C(=O)NC(=O)C(=Cc2ccc(S(C)(=O)=O)cc2)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc(-c2ccc(NC(=O)C3CCCN3C(=O)c3cc(C(=CF)NS(=O)) (=O)c4ccccc(Cl)c4)ccc3C(F)(F)F)cc2)cn1	Cn1cc(-c2ccc(NC(=O)C3CCCN3C(=O)c3cc(C(=CF)NS(=O)) (=O)c4ccccc(Cl)c4)ccc3C(F)(F)F)cc2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1Nc2ccc(Cl)cc2C1=Cc1c[nH]c2ccccc12	O=C1Nc2ccc(Cl)cc2C1=Cc1c[nH]c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1NC(=O)CSc1ccsc1C(=O)O	COc1ccccc1NC(=O)CSc1ccsc1C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1cc2nc(C3CCCC3)nc(N3CCN(c4ccccc4)CC3)c2cc1OCC	CCOc1cc2nc(C3CCCC3)nc(N3CCN(c4ccccc4)CC3)c2cc1OCC	TRUE	TRUE	TRUE
CSc1ccccc1C(=O)CSc1nc2c(c(=O)[nH]1)C=C(NC(C)O)C=C2OC	COc1ccc(NC(C)O)cc2oc(=O)c(CN(C)C)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
NCC1(O)COC(n2cc(F)c(N)c(C#N)c2=N)OC1	N#Cc1c(N)c(F)cn(C2OCC(O)(CN)CO2)c1=N	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(CN2CCC2CNc2cnn(C)c2)oc1C	Cc1nc(CN2CCC2CNc2cnn(C)c2)oc1C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(N(C)CCCCCCCCN2CCN(c3ccc(C4=NCCN4)cc3)C2=O)cc1OC	COc1ccc(N(C)CCCCCCCCCN2CCN(c3ccc(C4=NCCN4)cc3)C2=O)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)CNC1=C2CC(C)CC(OC)C(C(OC)C(=O)C(OC(N)=O)C(OC)C=CC=C(C)C(=O)NC(=CC2=O)C1=O	CCOC(=O)CNC1=C2CC(C)CC(OC)C(C(OC)C(=O)C(C)C=C(C)C(OC(N)=O)C(OC)C=CC=C(C)C(=O)NC(=CC2=O)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C)cc1NC(=O)c1ccccc1O	COc1ccc(C)cc1NC(=O)c1ccccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)COc1c(C)ccc2oc(=O)c(CN(C)C)cc12	COC(=O)COc1c(C)ccc2oc(=O)c(CN(C)C)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=C=Cc1ccc(OCc2ccc(C(F)(F)F)cc2)cc1)c1ccc(Cl)c(Cl)c1	O=C(C=C=Cc1ccc(OCc2ccc(C(F)(F)F)cc2)cc1)c1ccc(Cl)c(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C1CN(Cc2ccc(-c3noc(-c4ccc(C(F)(F)F)nc4)n3)c(F)c2)C1	O=C(O)C1CN(Cc2ccc(-c3noc(-c4ccc(C(F)(F)F)nc4)n3)c(F)c2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nccc(C=Cc2cccc3ccccc23)n1	Cc1nccc(C=Cc2cccc3ccccc23)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)NC(=NC#N)NCCCCSc1ncccn1	CC(C)(C)NC(=NC#N)NCCCCSc1ncccn1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(OC)c(NC(=O)CCN2CCCC2)cc1Cl	COc1cc(OC)c(NC(=O)CCN2CCCC2)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1oc2c(c1C)-c1oc(C)c3c(O)c(O)ccc1CC23	CC1=C2C(O)=C(O)C=C3=C(O1)c1c(oc(C)c1C)C2C3	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1(C)CCC2(C)CCC3(C)C(=CC(=O)C4C5(C)CCC(O)C(C)(C)C5CCC43C)C2C1	CCOC(=O)C1(C)CCC2(C)CCC3(C)C(=CC(=O)C4C5(C)CCC(O)C(C)(C)C5CCC43C)C2C1	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1ccc(COc2ccc(C=NNC(N)=S)cc2OCc2ccccc2)cc1C	Cc1ccc(COc2ccc(C=NNC(N)=S)cc2OCc2ccccc2)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCc1ccc2c(c1)OCO2)c1cccon1	O=C(NCc1ccc2c(c1)OCO2)c1cccon1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)C(NC(=O)N1CCCC1)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(N)=O	CC(O)C(NC(=O)N1CCCC1)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(N)=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c(=O)nc2n(-c3ccccc3)c3ccccc3nc-2c1=O	Cn1c(=O)nc2n(-c3ccccc3)c3ccccc3nc-2c1=O	TRUE	TRUE	FALSE
Oc1cc(O)cc(CCc2ccc(F)cc2)c1O	Oc1cc(O)c(O)c(CCc2ccc(F)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCSc1nnc(CNC(=O)C=C)C(O)n1	C=CCSc1nnc(CNC(=O)C=C)C(O)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CC(C(N)C(O)CC(C(=O)NCCc2ccccc2)C(C)C)C(C)C)cc1	COc1ccc(CC(C(C)C)C(N)C(O)CC(C(=O)NCCc2ccccc2)C(C)C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc2c3c(n(Cc4cccn4)c12)-c1ccccc1C3=O	Cc1ccc2c3c(n(Cc4cccn4)c12)-c1ccccc1C3=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CN(c2enenc2-c2ccc(C(=O)Nc3ncc[nH]3)c(F)c2)C(C)CN1C1CCC(O)CC1	CC1CN(C2CCC(O)CC2)C(C)CN1c1enenc1-c1ccc(C(=O)Nc2ncc[nH]2)c(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1-c1cc(C)c(-c2nc3ccc(F)cc3o2)[nH]1	COc1ccccc1-c1cc(C)c(-c2nc3ccc(F)cc3o2)[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2cc(-c3c[nH]c4cc(OC)ccc34)nc(OC3OC(CO)C(O)C(O)C3O)n2)cc1	COc1ccc(-c2cc(-c3c[nH]c4cc(OC)ccc34)nc(OC3OC(CO)C(O)C(O)C3O)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)S(=O)) (=O)c1ccccc(-c2ccc3nc(C(C(=O)NCCS(N)) (=O)=O)S(C)(=O)=O)sc3c2)c1	CCN(CC)S(=O)) (=O)c1ccccc(-c2ccc3nc(C(C(=O)NCCS(N)) (=O)=O)S(C)(=O)=O)sc3c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2cc3ccc(O)c(CN4CCCC4)c3oc2=O)cc1	Cc1ccc(-c2cc3ccc(O)c(CN4CCCC4)c3oc2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C1CC2(CN1S(=O)) (=O)c1ccc(Br)cc1)SCCS2	COC(=O)C1CC2(CN1S(=O)) (=O)c1ccc(Br)cc1)SCCS2	TRUE	TRUE	TRUE
O=CC(Cc1ccccc1)NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)C(CCCCN(=O)) (=O)c1ccc([N+](=O)[O-])cc1)NC(=O)OCc1ccccc1	O=CC(Cc1ccccc1)NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)C(CCCCN(=O)) (=O)c1ccc([N+](=O)[O-])cc1)NC(=O)OCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc(OC)c1-c1ccc2c(c1)c(C#N)cn2-c1ccccc(S(=O)) (=O)NC(C)C)c1	FALSE	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCCn1c2nc(=O)n(C)c(=O)c-2cc2c1C(=O)C(=O)c1ccccc1-2	CCCCCCCCCCCCn1c2nc(=O)n(C)c(=O)c-2cc2c1C(=O)C(=O)c1ccccc1-2	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1nc(N2CCNCC2)nc2ccc(NC(=O)COc3ccc(C(F)(F)F)cc3)cc12	Cc1nc(N2CCNCC2)nc2ccc(NC(=O)COc3ccc(C(F)(F)F)cc3)cc12	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>FC(F)(F)c1cccc(NCCC2(c3ccccc3)CCNCC2)c1</chem>	<chem>FC(F)(F)c1cccc(NCCC2(c3ccccc3)CCNCC2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Sc1nc(-c2cc(Cl)cc(Cl)c2)nn1-c1ccccc1</chem>	<chem>Sc1nc(-c2cc(Cl)cc(Cl)c2)nn1-c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc(CCc2ccc(OCc3ccccc3)cc2)cc1</chem>	<chem>c1ccc(CCc2ccc(OCc3ccccc3)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(Nc2ncc(-c3ccc(-c4nc5ccccc5s4)cc3)o2)ccc1-c1cnco1</chem>	<chem>COc1cc(Nc2ncc(-c3ccc(-c4nc5ccccc5s4)cc3)o2)ccc1-c1cnco1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)C1C(N)CN1c1c(F)cc2c(=O)c(C(=O)O)cn(C3CC3)c2c1C#N</chem>	<chem>CC(C)C1C(N)CN1c1c(F)cc2c(=O)c(C(=O)O)cn(C3CC3)c2c1C#N</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>FC(F)(F)Oc1ccccc1CNCCCNc1nc2ccccc2o1</chem>	<chem>FC(F)(F)Oc1ccccc1CNCCCNc1nc2ccccc2o1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1c2ccccc2c2nc(O)ccc2c1Oc1ccc(Br)cc1</chem>	<chem>COc1c(Oc2ccc(Br)cc2)c2ccc(O)nc2c2ccccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NCCCC(NC(=O)CCC(=O)O)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)O</chem>	<chem>NCCCC(NC(=O)CCC(=O)O)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC)CCNC(=O)c1ccc(Cl)c(N)cc1OCCCCCCCCCOc1ccc(Cl)cc1</chem>	<chem>CCN(CC)CCNC(=O)c1ccc(Cl)c(N)cc1OCCCCCCCCCOc1ccc(Cl)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(Cc1ccc(C#Cc2cccn2)cc1)NCC(O)COc1ccccc2[nH]ccc12</chem>	<chem>CC(Cc1ccc(C#Cc2cccn2)cc1)NCC(O)COc1ccccc2[nH]ccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1nnc(S)n1N=Cc1ccccc1O</chem>	<chem>CCc1nnc(S)n1N=Cc1ccccc1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1ccc(F)cc1)N(c1cccn1)C1CCN(Cc2ccc(F)cc2)CC1</chem>	<chem>O=C(Nc1ccc(F)cc1)N(c1cccn1)C1CCN(Cc2ccc(F)cc2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)OCC1OC(n2c(SCc3cn(C(=O)c4cccc(Cl)c4)nn3)nc3c(NC(=O)Nc4ccccc4)ncnc32)C(OC(C)=O)C1OC(C)=O</chem>	<chem>CC(=O)OCC1OC(n2c(SCc3cn(C(=O)c4cccc(Cl)c4)nn3)nc3c(NC(=O)Nc4ccccc4)ncnc32)C(OC(C)=O)C1OC(C)=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCOc1ccc(-n2c(=O)c3ccccc3n(Cc3ccccc3Br)c2=O)cc1</chem>	<chem>CCCOc1ccc(-n2c(=O)c3ccccc3n(Cc3ccccc3Br)c2=O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)Oc1ccc(-c2nc(-c3ccccc4c3CCC4NS(=O))(-=O)CCN3CCC(O)C3)no2)cc1C#N</chem>	<chem>CC(C)Oc1ccc(-c2nc(-c3ccccc4c3CCC4NS(=O))(-=O)CCN3CCC(O)C3)no2)cc1C#N</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>Cc1cc(C#N)cc(C)c1Oc1cc(Nc2ccc(C#N)cc2)c(N)cc1C</chem>	<chem>Cc1cc(N)c(Nc2ccc(C#N)cc2)cc1Oc1c(C)cc(C#N)cc1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CC(=O)NN=C1c1ccc(NC2=C(Cc3c[nH]c4ccccc34)C(=O)CCC2)cc1</chem>	<chem>CC1CC(=O)NN=C1c1ccc(NC2=C(Cc3c[nH]c4ccccc34)C(=O)CCC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)C1SC(=O)N1</chem>	<chem>CN(C)C1SC(=O)N1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)CON=Cc1cc([N+])(=O)[O-])ccc1OCCN1C(=O)c2ccccc2C1=O</chem>	<chem>COC(=O)CON=Cc1cc([N+])(=O)[O-])ccc1OCCN1C(=O)c2ccccc2C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(N(C(=O)CNC(=O)c2ccco2)C(C(=O)NC2CCCC2)c2cncc2)cc1Cl</chem>	<chem>Cc1ccc(N(C(=O)CNC(=O)c2ccco2)C(C(=O)NC2CCCC2)c2cncc2)cc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)=CCN1OC2(O)C3C4CC5C4C2C1C53CCO</chem>	<chem>CC(C)=CCN1OC2(O)C3C4C5CC4C(CCO)(C31)C52</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)N1CCc2c(c3ccccc3n2C(=O)c2ccccc2)C1</chem>	<chem>COC(=O)N1CCc2c(c3ccccc3n2C(=O)c2ccccc2)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)c1ccc(N2C(=O)CC(Nc3ccc(C)c(C)c3)C2=O)cc1</chem>	<chem>CCOC(=O)c1ccc(N2C(=O)CC(Nc3ccc(C)c(C)c3)C2=O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCO(C(=O)N1CCN1C(=O)C(CCC(=O)O)NC(=O)c1ccc(NCC(=O)O)cc(-c2ccccc2)n1</chem>	<chem>CCCCCO(C(=O)N1CCN1C(=O)C(CCC(=O)O)NC(=O)c1ccc(NCC(=O)O)cc(-c2ccccc2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccccc(C2Nc3ccccc4cccc(c34)N2)c1</chem>	<chem>COc1ccccc(C2Nc3ccccc4cccc(c34)N2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1ccc(Cl)cc(Cl)c1)c1cc2ccccc2oc1=O</chem>	<chem>O=C(Nc1cc(Cl)cc(Cl)c1)c1cc2ccccc2oc1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC(=O)Cn1cc(-c2cc(CN3CC(C(=O)O)C3)cn2-c2ccc(F)cc2)cn1</chem>	<chem>NC(=O)Cn1cc(-c2cc(CN3CC(C(=O)O)C3)cn2-c2ccc(F)cc2)cn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc2[nH]cc(C3CCN(CC4CN(c5ccccc5OC)C(=O)CO4)CC3)c2c1</chem>	<chem>COc1ccc2[nH]cc(C3CCN(CC4CN(c5ccccc5OC)C(=O)CO4)CC3)c2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOc1ccc(CCN(C(=O)Cn2ccc3cc(S(=O))(-=O)N4CCCC4)ccc32)cc1OCC</chem>	<chem>CCOc1ccc(CCN(C(=O)Cn2ccc3cc(S(=O))(-=O)N4CCCC4)ccc32)cc1OCC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(CC(=O)N2CCN(c3nccccc3F)CC2)ccc1[N+](=O)[O-]</chem>	<chem>Cc1cc(CC(=O)N2CCN(c3nccccc3F)CC2)ccc1[N+](=O)[O-]</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCOC(=O)C(=O)Nc1cc(NC(=O)C(=O)OCCCC)c(F)cc1Cl</chem>	<chem>CCCCOC(=O)C(=O)Nc1cc(NC(=O)C(=O)OCCCC)c(Cl)cc1F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC(CCP(=O))(O)CC(CCC(=O)O)C(=O)O)C(=O)O</chem>	<chem>NC(CCP(=O))(O)CC(CCC(=O)O)C(=O)O)C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CC(=O)c1ccc(NC(=O)CN(C)CC(=O)Nc2ccc(C(C)=O)cc2)cc1</chem>	<chem>CC(=O)c1ccc(NC(=O)CN(C)CC(=O)Nc2ccc(C(C)=O)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(OC(C=O)N1CCNCC1)c1ccccc2c1C(=O)c1ccc(N3CCCC3=O)cc1S2(=O)=O</chem>	<chem>O=C(OC(C=O)N1CCNCC1)c1ccccc2c1C(=O)c1ccc(N3CCCC3=O)cc1S2(=O)=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)NC(C)c1ccc(OC2CCN(c3ncnc(OC(C)(C)O)c3F)C2)cc1</chem>	<chem>CC(=O)NC(C)c1ccc(OC2CCN(c3ncnc(OC(C)(C)O)c3F)C2)cc1</chem>	TRUE	FALSE	FALSE
<chem>NC(=NO)C(C(C(=O)c1cccs1)c1ccccc1</chem>	<chem>NC(=NO)C(C(C(=O)c1cccs1)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=c1cc(-c2ccccc2)oc2c(Br)c(O)c([N+])(=O)[O-])c(O)c12</chem>	<chem>O=c1cc(-c2ccccc2)oc2c(Br)c(O)c([N+])(=O)[O-])c(O)c12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC1=C(Br)C(=O)C(Br)=C(C)C1=O</chem>	<chem>COC1=C(Br)C(=O)C(Br)=C(C)C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)c1cc(-c2cccs2)ccc1OC(C)=O</chem>	<chem>COC(=O)c1cc(-c2cccs2)ccc1OC(C)=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(C)C(n2nc(Cc3ccccc3F)c(=O)[nH]c2=O)C1(C)C</chem>	<chem>CC1(C)C(n2nc(Cc3ccccc3F)c(=O)[nH]c2=O)C1(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCN(CC)CCNC(=O)c1ccc2c(=O)n(Cc3ccccc3)c(=O)[nH]c2c1</chem>	<chem>CCCCN(CC)CCNC(=O)c1ccc2c(=O)n(Cc3ccccc3)c(=O)[nH]c2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN1C(=O)c2c(F)ccc(Nc3ccc(OCCCC(=O)O)c(F)c3)c2C1=O</chem>	<chem>CN1C(=O)c2c(F)ccc(Nc3ccc(OCCCC(=O)O)c(F)c3)c2C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1CS(C)N2N=C(c3ccccc3)CC2c2ccccc2=N1</chem>	<chem>O=C1CS(C)N2N=C(c3ccccc3)CC2c2ccccc2=N1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CCC(C)C(N=c1[nH]c(=N)[nH]c(N)c1C#N)c1nc2cc(F)cc(F)c2c(=O)n1-c1cnc(C)cn1</chem>	<chem>CCC(C)C(N=c1[nH]c(=N)[nH]c(N)c1C#N)c1nc2cc(F)cc(F)c2c(=O)n1-c1cnc(C)cn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1c(CCCC(=O)O)c[nH]c1Cc1ccccc1</chem>	<chem>CCc1c(CCCC(=O)O)c[nH]c1Cc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)Nc1cc2ccccc2cc1C(=O)Nc1ccc(C(=O)O)cc1C</chem>	<chem>COC(=O)Nc1cc2ccccc2cc1C(=O)Nc1ccc(C(=O)O)cc1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(NC(=O)CSc2nccc(C)n2)cc1S(=O))(-=O)N1CCCCC1</chem>	<chem>COc1ccc(NC(=O)CSc2nccc(C)n2)cc1S(=O))(-=O)N1CCCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(C=C(C#N)C(=O)Nc2nc3c(s2)CCC3)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(C=C(C#N)C(=O)Nc2nc3c(s2)CCC3)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCN(C)C(=O)CN1CC(c2ccc3c(c2)OCO3)C(C(=O)O)C1c1ccc(OC)cc1</chem>	<chem>CCCCN(C)C(=O)CN1CC(c2ccc3c(c2)OCO3)C(C(=O)O)C1c1ccc(OC)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#CC1=C2NN=C(C(C(=O)CSc3ccc(Cl)cc3)C2NC2=C1C(=O)CC(c1ccccc1)C2</chem>	<chem>N#CC1=C2NN=C(C(C(=O)CSc3ccc(Cl)cc3)C2NC2=C1C(=O)CC(c1ccccc1)C2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1ncnc1COc1nn2c(-c3ccoc3)nnc2c2c1C1CCOC1C2</chem>	<chem>Cn1ncnc1COc1nn2c(-c3ccoc3)nnc2c2c1C1CCOC1C2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(S(=O))(-=O)N2CC(C(=O)OCC(=O)Nc3ccc4c(c3)OCO4)c3ccccc32)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(S(=O))(-=O)N2CC(C(=O)OCC(=O)Nc3ccc4c(c3)OCO4)c3ccccc32)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCn1c(C(C(=O)N(C(C)CC)nc2ccccc21</chem>	<chem>CCCCCn1c(C(C(=O)N(C(C)CC)nc2ccccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(C1CCCC1)N1CCN(c2ncnc3c2CCNCC3)CC1</chem>	<chem>O=C(C1CCCC1)N1CCN(c2ncnc3c2CCNCC3)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Fc1ccc(-c2cc3ccccc3o2)cc1</chem>	<chem>Fc1ccc(-c2cc3ccccc3o2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CC(C)=CCOc1ccc2c(c1)S(=O)(=O)c1c(C)cc(=O)oc1C2=O</chem>	<chem>CC(C)=CCOc1ccc2c(c1)S(=O)(=O)c1c(C)cc(=O)oc1C2=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c2c(n3c1CCNC(C)CNC1cc-3ccc1C(N)=O)CC(C)(C)CC2=O</chem>	<chem>Cc1c2c(n3c1CCNC(C)CNC1cc-3ccc1C(N)=O)CC(C)(C)CC2=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=c1cc(-c2c[nH]c3ccccc23)sc(N2CCOCC2)c1</chem>	<chem>O=c1cc(-c2c[nH]c3ccccc23)sc(N2CCOCC2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1OC2(CCC(C(=O)N3CC(Cc4ccc(C(F)(C(F)(F)F)cc4)(S(=O)(=O)c4ccc(F)cc4)C3)CC2)c2ccccc21</chem>	<chem>O=C1OC2(CCC(C(=O)N3CC(Cc4ccc(C(F)(C(F)(F)F)cc4)(S(=O)(=O)c4ccc(F)cc4)C3)CC2)c2ccccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nc(C)n(CC2CCCN2CC(=O)Nc2cc(C)on2)n1</chem>	<chem>Cc1nc(C)n(CC2CCCN2CC(=O)Nc2cc(C)on2)n1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CCCC(C)Oc1cc2c(cc1OC)C(=O)N1CCCCC1C=N2</chem>	<chem>CCCC(C)Oc1cc2c(cc1OC)C(=O)N1CCCCC1C=N2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(OCCCC(=O)Nc2sc3c(c2C(N)=O)CCCC3)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(OCCCC(=O)Nc2sc3c(c2C(N)=O)CCCC3)cc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>COC(=O)C(=Cc1cc(C)c(C)nc1O)c1ccc(Cl)cc1</chem>	<chem>COC(=O)C(=Cc1cc(C)c(C)nc1O)c1ccc(Cl)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNC(=O)C1CCN(CCN2CCCC(n3nc(-c4ccc(OC5ccccc5)cc4)c4c(N)ncnc43)C2)CC1</chem>	<chem>CNC(=O)C1CCN(CCN2CCCC(n3nc(-c4ccc(OC5ccccc5)cc4)c4c(N)ncnc43)C2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(C=Cc1ccccc1)OC1C(OC(=O)C=Cc2ccccc2)C(COC(=O)C=Cc2ccccc2)OC2OC(C)(C)OC12</chem>	<chem>CC1(C)OC2OC(COC(=O)C=Cc3ccccc3)C(OC(=O)C=Cc3ccccc3)C(OC(=O)C=Cc3ccccc3)C2O1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccccc(NC(=O)NC(=S)N2CCN(C(=O)OCc3ccccc3)CC2)c1C</chem>	<chem>Cc1ccccc(NC(=O)NC(=S)N2CCN(C(=O)OCc3ccccc3)CC2)c1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC(CCC(N)C(=O)NCP(=O)(O)O)C(=O)OCc1ccccc1</chem>	<chem>NC(CCC(N)C(=O)OCc1ccccc1)C(=O)NCP(=O)(O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(-c2nc3ccccc3n2Cc2nnc(SC(C)C(=O)Nc3cc(C)on3)o2)c(Cl)c1</chem>	<chem>Cc1ccc(-c2nc3ccccc3n2Cc2nnc(SC(C)C(=O)Nc3cc(C)on3)o2)c(Cl)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCCC1(CNC(=O)NC2CCC(C)(O)CC2)COc2ccccc2OC1</chem>	<chem>COCCC1(CNC(=O)NC2CCC(C)(O)CC2)COc2ccccc2OC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nc(C(=O)Nc2ccc(N3CCOCC3)c22)c(Cl)n1-c1cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c1</chem>	<chem>Cc1nc(C(=O)Nc2ccc(N3CCOCC3)cc2)c(Cl)n1-c1cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)OC(=O)NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(=O)Nc1cncnc1</chem>	<chem>CC(C)(C)OC(=O)NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(=O)Nc1cncnc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NS(=O)(=O)c1ccc(NC(S)=NCc2cccn2)cc1</chem>	<chem>NS(=O)(=O)c1ccc(NC(S)=NCc2cccn2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>O=C(Cc1cc(S(=O))(-=O)Nc2ccccc(C(F)(F)F)c2)ccc1F)NC1CC1</chem>	<chem>O=C(Cc1cc(S(=O))(-=O)Nc2ccccc(C(F)(F)F)c2)ccc1F)NC1CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>OCc1ccnc(SCc2ccc3c(c2Cl)OCO3)n1</chem>	<chem>OCc1ccnc(SCc2ccc3c(c2Cl)OCO3)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCN1c(S)nn1-c1ccccc1</chem>	<chem>CCCN1c(S)nn1-c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc2cc(NC(=O)C=Cc3ccccc3)c(=O)oc2cc1O</chem>	<chem>COc1cc2cc(NC(=O)C=Cc3ccccc3)c(=O)oc2cc1O</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>O=S(=O)(NCc1ccco1)c1cc(F)ccc1Cl</chem>	<chem>O=S(=O)(NCc1ccco1)c1cc(F)ccc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ncccc1-c1ccccc2sc(C(=O)NCC3CC3)cc12</chem>	<chem>COc1ncccc1-c1ccccc2sc(C(=O)NCC3CC3)cc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(C(=O)N2CC2)cc1-c1ccn2c(-c3cnccc3)c(-c3ccc(F)cc3)nc2c1</chem>	<chem>Cc1ccc(C(=O)N2CC2)cc1-c1ccn2c(-c3cnccc3)c(-c3ccc(F)cc3)nc2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCCCCCC(=O)OC(c1ccc2c(c1)OCO2)C1CO1</chem>	<chem>CCCCCCCCCCCC(=O)OC(c1ccc2c(c1)OCO2)C1CO1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1)c1cc2ccc(O)cc2oc1=Nc1ccccc1</chem>	<chem>O=C(Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1)c1cc2ccc(O)cc2oc1=Nc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1ccc(-c2cc(OCCOC)c3[nH]c(-c4ccnc5ccccc45)cc3c2)cn1</chem>	<chem>CCc1ccc(-c2cc(OCCOC)c3[nH]c(-c4ccnc5ccccc45)cc3c2)cn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(N=C(S)N(C)C2(C#N)CCN(C(=O)OC(C)(C)C)CC2)cc1C</chem>	<chem>Cc1ccc(N=C(S)N(C)C2(C#N)CCN(C(=O)OC(C)(C)C)CC2)cc1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>COc1ccc(C(=O)Nc2cc(C(F)(F)F)ccc2Nc2ccc3c(c2)OCCO3)cc1OC</chem>	<chem>COc1ccc(C(=O)Nc2cc(C(F)(F)F)ccc2Nc2ccc3c(c2)OCCO3)cc1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NCCOC(=O)Nc1c(O)nc2cc(Cl)ccc2c1O)c1cccc(Cl)c1</chem>	<chem>O=C(Nc1c(O)nc2cc(Cl)ccc2c1O)OCCN(C(=O)c1cccc(Cl)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc2c(N3CCN(C(=O)Nc4cccn4)CC3)nc(N3CCN(C)CC3)nc2cc1OCCCN1CCCCC1</chem>	<chem>COc1cc2c(N3CCN(C(=O)Nc4cccn4)CC3)nc(N3CCN(C)CC3)nc2cc1OCCCN1CCCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1N(C(=O)N(c2cccc(Cl)c2)C(=O)C1=CNc1CCN(Cc2cccc3cccc23)CC1</chem>	<chem>O=C1N(C(=O)N(c2cccc(Cl)c2)C(=O)C1=CNC1CCN(Cc2cccc3cccc23)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1cc2c(=O)c(C(=O)O)cn(Cc3ccccc3)c2cc1N1CCCC1</chem>	<chem>Nc1cc2c(=O)c(C(=O)O)cn(Cc3ccccc3)c2cc1N1CCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CS(=O)(=O)c1ncc(S(=O)(=O)Nc2nccs2)cn1</chem>	<chem>CS(=O)(=O)c1ncc(S(=O)(=O)Nc2nccs2)cn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#Cc1cccc(S(=O)(=O)NC2CCN(CCCOc3cc(F)c(F)c(F)c3F)CC2)c1</chem>	<chem>N#Cc1cccc(S(=O)(=O)NC2CCN(CCCOc3cc(F)c(F)c(F)c3F)CC2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cccc1C(=O)NC1CCN(Cc2ccc(Br)cc2)CC1OC</chem>	<chem>COc1cccc1C(=O)NC1CCN(Cc2ccc(Br)cc2)CC1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1nc(O)c2c(C=O)c[nH]c2n1</chem>	<chem>Nc1nc(O)c2c(C=O)c[nH]c2n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCNc1c([N+])([O-])=NCC)ccc2c(=O)cc(-c3cc(OC)c(OC)c(OC)c3)oc12</chem>	<chem>CCCNc1c([N+])([O-])=NCC)ccc2c(=O)cc(-c3cc(OC)c(OC)c(OC)c3)oc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Oc1ccc(C2C=C(c3ccccc3)Nc3nccn32)cc1</chem>	<chem>Oc1ccc(C2C=C(c3ccccc3)Nc3nccn32)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1OC(CCc2cccc2)CC1n1cc(COc2ccc(C=Cc3ccc(O)cc3)cc2)nn1</chem>	<chem>O=C1OC(CCc2cccc2)CC1n1cc(COc2ccc(C=Cc3ccc(O)cc3)cc2)nn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)CCCN1CCc2c(c3cc(F)ccc3n2-c2cccc2)C1</chem>	<chem>O=C(O)CCCN1CCc2c(c3cc(F)ccc3n2-c2cccc2)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(CCCNC(=O)c1cccc(S(=O)(=O)Nc2cccc2)c1)c1cccc1</chem>	<chem>CN(CCCNC(=O)c1cccc(S(=O)(=O)Nc2cccc2)c1)c1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNCC1ccc(-c2cnc3c(N4CCCC(C(=O)NCc5ccc(C(F)(F)F)cc5)C4)ncn23)cc1</chem>	<chem>CNCC1ccc(-c2cnc3c(N4CCCC(C(=O)NCc5ccc(C(F)(F)F)cc5)C4)ncn23)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(NC(=O)C=CC2=Cc3ccccc3OC2c2ccc(O)cc2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(NC(=O)C=CC2=Cc3ccccc3OC2c2ccc(O)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cccc1C=CC=CC=CC=Cc1cc(OC)c(OC)c(OC)c1</chem>	<chem>COc1cccc1C=CC=CC=CC=Cc1cc(OC)c(OC)c(OC)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1csc(NC(=O)c2oc3ccc(S(=O)(=O)N4CCCC4)cc3c2C)n1</chem>	<chem>Cc1csc(NC(=O)c2oc3ccc(S(=O)(=O)N4CCCC4)cc3c2C)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CSc1cccc(NS(=O)(=O)c2ccc(Br)s2)c1</chem>	<chem>CSc1cccc(NS(=O)(=O)c2ccc(Br)s2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=CC(C(Nc1ncc2c(C(N)=O)cccc12)c1cccc1O</chem>	<chem>C=CC(C(Nc1ncc2c(C(N)=O)cccc12)c1cccc1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Oc1ccc(-c2ccc(-n3ccnc3)cc2)cc1O</chem>	<chem>Oc1ccc(-c2ccc(-n3ccnc3)cc2)cc1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=c1[nH]c2cccc2n1C1CCN(Cc2cccc2)CC1</chem>	<chem>O=c1[nH]c2cccc2n1C1CCN(Cc2cccc2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN1CCN(c2cc(Cl)ccc2Oc2cnc(-c3c(Cl)nc(N)nc3N3CC4CC3CN4C3CC3)c2)CC1</chem>	<chem>CCN1CCN(c2cc(Cl)ccc2Oc2cnc(-c3c(Cl)nc(N)nc3N3CC4CC3CN4C3CC3)c2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c(CN(C(=O)C(C)Oc2cccc2)c(C)[n+])2c(c1CNC(=O)c1cccc1)CCC2</chem>	<chem>Cc1c(CN(C(=O)C(C)Oc2cccc2)c(C)[n+])2c(c1CNC(=O)c1cccc1)CCC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CSc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccc3c(c2)CC(=O)N(C(C)CO)CC(C)C(CN(C)C(=O)c2ccnc2)O3)cc1</chem>	<chem>CSc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccc3c(c2)CC(=O)N(C(C)CO)CC(C)C(CN(C)C(=O)c2ccnc2)O3)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=S(=O)(NCCNc1cccc1)c1ccc(Br)cc1Br</chem>	<chem>O=S(=O)(NCCNc1cccc1)c1ccc(Br)cc1Br</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1noc(C)c1Cn1cc(N2C(=O)N(Cc3ccccc3F)C(C)(C)C2=O)cn1</chem>	<chem>Cc1noc(C)c1Cn1cc(N2C(=O)N(Cc3ccccc3F)C(C)(C)C2=O)cn1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>O=C(Cc1nnc(O)nc1O)Nc1ccc(-n2cnn(CC(O)c3ccccc3)c2=O)cc1F</chem>	<chem>O=C(Cc1nnc(O)nc1O)Nc1ccc(-n2cnn(CC(O)c3ccccc3)c2=O)cc1F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(C=C2SC(=Nc3ccccc3)N(c3nc4cccc(F)c4s3)C2=O)ccc1OCC#N</chem>	<chem>COc1cc(C=C2SC(=Nc3ccccc3)N(c3nc4cccc(F)c4s3)C2=O)ccc1OCC#N</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1C(=O)N(C(=O)C2CC2)C2CCN(C(=O)c3cc(Br)ccc3O)C12</chem>	<chem>CC1C(=O)N(C(=O)C2CC2)C2CCN(C(=O)c3cc(Br)ccc3O)C12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCOc1ccc(CC(=O)O)c(OCC)C1</chem>	<chem>CCCOc1ccc(CC(=O)O)c(OCC)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cccc1Nc1nc(NCCC(=O)O)nc1[N+](=O)[O-]</chem>	<chem>COc1cccc1Nc1nc(NCCC(=O)O)nc1[N+](=O)[O-]</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1CSC(=S)N1C1OC(CO)C(OP(=O)(O)O)C(O)C1O</chem>	<chem>O=C1CSC(=S)N1C1OC(CO)C(OP(=O)(O)O)C(O)C1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)CCC(=O)Nc1ccc(OCCCNCC(O)c2ccnc2)cc1</chem>	<chem>O=C(O)CCC(=O)Nc1ccc(OCCCNCC(O)c2ccnc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCSC1=NN(c2cccc(Cl)c2)C(=O)C1=Cc1ccc(C)O1</chem>	<chem>CCSC1=NN(c2cccc(Cl)c2)C(=O)C1=Cc1ccc(C)O1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(O)C(=O)C=Cc1cccc2cccc12</chem>	<chem>CCN(O)C(=O)C=Cc1cccc2cccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(C)n2nc(SCc3nnc(SCC(=O)Nc4cccc4)o3)nc2n1</chem>	<chem>Cc1cc(C)n2nc(SCc3nnc(SCC(=O)Nc4cccc4)o3)nc2n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCCC(=CC=C(CCC)[N+](=O)[O-])c1cccc1</chem>	<chem>CCCCCCCCC(=CC=C(CCC)[N+](=O)[O-])c1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc(Oc2nc3ncccn3n2)cc1</chem>	<chem>c1ccc(Oc2nc3ncccn3n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cccc1CN1CCCC(n2c(=O)[nH]c3ccccc32)C1</chem>	<chem>COc1cccc1CN1CCCC(n2c(=O)[nH]c3ccccc32)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CCC2C(C)C(O)C(=O)OC3OC4(C)CCC1C32O04</chem>	<chem>CC(=O)OC1OC2OC3(C)CCC4C(C)CCC(C1C)C24O03</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(CCCc1ccc(Cl)cc1)Nc1nnc(CCCCCc2nnc(NC(=O)C(O)c3cccc(OCCc4cccc4)c3)s2)s1</chem>	<chem>O=C(CCCc1ccc(Cl)cc1)Nc1nnc(CCCCCc2nnc(NC(=O)C(O)c3cccc(OCCc4cccc4)c3)s2)s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN1CC2C(C1)C2c1ccc(-c2ccnc(F)c2)cn1</chem>	<chem>CN1CC2C(C1)C2c1ccc(-c2ccnc(F)c2)cn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc2c(c1)C(=O)c1nccnc1C2=O</chem>	<chem>Cc1ccc2c(c1)C(=O)c1nccnc1C2=O</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>Cc1cc(C)c2cccc(OCc3c(Cl)ccc(S(=O)(=O)NC4(C(=O)N5CC([N+](C)(C)CC5)CCOCC4)c3Cl)c2n1</chem>	<chem>Cc1cc(C)c2cccc(OCc3c(Cl)ccc(S(=O)(=O)NC4(C(=O)N5CC([N+](C)(C)CC5)CCOCC4)c3Cl)c2n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)C1=CS2=NCCN12</chem>	<chem>CC(C)(C)C1=CS2=NCCN12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1cccc1SC(F)F)c1cccc1</chem>	<chem>O=C(Nc1cccc1SC(F)F)c1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(C)CC(=O)c2c(N)c(C#N)cc(C(=O)c3ccccc3)c2C1</chem>	<chem>CC1(C)CC(=O)c2c(N)c(C#N)cc(C(=O)c3ccccc3)c2C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c(-c2cccc3nc(C(F)(F)F)[nH]c23)cccc1N1Cc2c(F)ccc(F)c2C1=O</chem>	<chem>Cc1c(-c2cccc3nc(C(F)(F)F)[nH]c23)cccc1N1Cc2c(F)ccc(F)c2C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CCCNCCCN1Cc2c(O)ccc3c2C1Cc1cccc(O)c1-3</chem>	<chem>CCN(CCCNCCCN1Cc2c(O)ccc3c2C1Cc1cccc(O)c1-3</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=S(=O)(c1ccc2c(c1)C1C=CCC1C(c1cccc(Br)c1)N2)c1c(-c2ccc(Br)cc2)n[nH]c1-c1ccc(Br)cc1</chem>	<chem>O=S(=O)(c1ccc2c(c1)C1C=CCC1C(c1cccc(Br)c1)N2)c1c(-c2ccc(Br)cc2)n[nH]c1-c1ccc(Br)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c2c(n(-c3ccccc3F)c1C)CCCC(C)N(Cc1cccc1)C2=O</chem>	<chem>Cc1c2c(n(-c3ccccc3F)c1C)CCCC(C)N(Cc1cccc1)C2=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC)S(=O)(=O)c1ccc(C(=O)NCC(=O)Oc2ccc3c(c2)CCC2C3CCC3(C)C(=O)CCC32)s1</chem>	<chem>CCN(CC)S(=O)(=O)c1ccc(C(=O)NCC(=O)Oc2ccc3c(c2)CCC2C3CCC3(C)C(=O)CCC32)s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)C(SN1CNC(=S)NC1)c1cccc1</chem>	<chem>CCOC(=O)C(SN1CNC(=S)NC1)c1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOc1ccc(CNC(=O)C2CCN(S(=O)(=O)c3ccccc3F)CC2)cc1</chem>	<chem>CCOc1ccc(CNC(=O)C2CCN(S(=O)(=O)c3ccccc3F)CC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Oc1c(C(Nc2ccc3c(NCCO)ccnc3c2)c2ccc(OCCN4CCCC4)cc3)ccc2ccnc1c2</chem>	<chem>OCCNc1ccnc2cc(NC(c3ccc(OCCN4CCCC4)cc3)c3ccc4ccnc4c3O)ccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Cn1cc(Cc2cncn2)c(=O)nc1SCc1ccc(F)cc1)c1cccc1</chem>	<chem>O=C(Cn1cc(Cc2cncn2)c(=O)nc1SCc1ccc(F)cc1)c1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(Cl)ccc1OCc1cc(C(=O)NCc2ccc(F)cc2)no1</chem>	<chem>COc1cc(Cl)ccc1OCc1cc(C(=O)NCc2ccc(F)cc2)no1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CCC2(CC1)NC(=O)N(CC(=O)N1CC(C)C)CC1)C2=O</chem>	<chem>CC1CCN(C(=O)CN2C(=O)NC3(CCC(C)CC3)C2=O)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCN(C)C(=O)c1ccc2c(c1)[nH]c(=O)c1nn(C3CCN(C4CCOCC4)C3)cc12</chem>	<chem>CCCN(C)C(=O)c1ccc2c(c1)[nH]c(=O)c1nn(C3CCN(C4CCOCC4)C3)cc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1c(O)cccc1-n1c(C=Cc2ccc(O)c(O)c2)c(C)c2ccc(O)cc21</chem>	<chem>COc1c(O)cccc1-n1c(C=Cc2ccc(O)c(O)c2)c(C)c2ccc(O)cc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCOC(=O)NS(=O)(=O)c1ccc(CC(C)C)cc1-c1ccc(Cn2c(CC)nc3nc(C)nc(C)c32)cc1</chem>	<chem>CCCCOC(=O)NS(=O)(=O)c1ccc(CC(C)C)cc1-c1ccc(Cn2c(CC)nc3nc(C)nc(C)c32)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(C=Cc1ccc(O)c(O)c1)OCCc1ccc(O)c(O)c1</chem>	<chem>O=C(C=Cc1ccc(O)c(O)c1)OCCc1ccc(O)c(O)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Fc1ccc(Cc2noc(C3CCCN3CCc3ccc(Cl)cc3)n2)cc1</chem>	<chem>Fc1ccc(Cc2noc(C3CCCN3CCc3ccc(Cl)cc3)n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NCc1ccc(-n2cncn2)nc1)c1nc2ncccc2o1</chem>	<chem>O=C(NCc1ccc(-n2cncn2)nc1)c1nc2ncccc2o1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=CC1N=C(CCCc2cccc2)N(c2cccc2)C1=O</chem>	<chem>O=CC1N=C(CCCc2cccc2)N(c2cccc2)C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(Cc1ccc(Cl)cc1)C(=O)C1CCCN1C(=O)Nc1ccc(Cl)cc1-c1cccc1</chem>	<chem>CN(Cc1ccc(Cl)cc1)C(=O)C1CCCN1C(=O)Nc1ccc(Cl)cc1-c1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)n1ncc2c(NCc3ccccc3)nc(NCc3ccc(-c4ccccc4)cc3)nc21</chem>	<chem>CC(C)n1ncc2c(NCc3ccccc3)nc(NCc3ccc(-c4ccccc4)cc3)nc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>[O-][n+])1cc(NO)ccc1CNCCc1ccc(O)cc1</chem>	<chem>[O-][n+])1cc(NO)ccc1CNCCc1ccc(O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)N1CCCN(S(=O)(=O)c2ccc(C(=O)NCc3ccccc3C(F)(F)F)cc2)CC1</chem>	<chem>CC(=O)N1CCCN(S(=O)(=O)c2ccc(C(=O)NCc3ccccc3C(F)(F)F)cc2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(OCC(=O)N)C2CC(=O)N(c3ccc(Cl)cc3)C2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(OCC(=O)N)C2CC(=O)N(c3ccc(Cl)cc3)C2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC(=O)N1Cc2nc(-c3ccc(F)cc3)nc(O)c2C1c1cccc1</chem>	<chem>CCC(=O)N1Cc2nc(-c3ccc(F)cc3)nc(O)c2C1c1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)C1=C(C(O)C(C)C(C)C(=O)C2=C(C)C(C)C(=O)C(C)C(=O)C2=O)C1=O</chem>	<chem>CC(=O)C1=C(C(O)C(C2=C(C)C(C)C(=O)C(C)C(=O)C2=O)C(C)C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c(C)c2ccc(OCc3ccc(CN4CCOCC4)cc3)cc2oc1=O</chem>	<chem>Cc1c(C)c2ccc(OCc3ccc(CN4CCOCC4)cc3)cc2oc1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c2c(nn1C(=O)Nc1cccc1)-c1cccc1CC2</chem>	<chem>Cc1c2c(nn1C(=O)Nc1cccc1)-c1cccc1CC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(C(=O)N2CC3CON(C)C3C2)cc1C</chem>	<chem>Cc1ccc(C(=O)N2CC3CON(C)C3C2)cc1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1COc2ccc(C(=O)COC(=O)c3ccc4c(c3)OCCO4)cc2N1</chem>	<chem>O=C1COc2ccc(C(=O)COC(=O)c3ccc4c(c3)OCCO4)cc2N1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=P(O)(O)C(O)(c1ccc(Br)cc1)P(=O)(O)O</chem>	<chem>O=P(O)(O)C(O)(c1ccc(Br)cc1)P(=O)(O)O</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CCOC(=O)NC(CCCNC(=O)OCc1cccc1)C(=O)NC(Cc1cccc1)C(=O)NC(CC(C)C)C(=O)NCCN1CCOCC1</chem>	<chem>CCOC(=O)NC(CCCNC(=O)OCc1cccc1)C(=O)NC(Cc1cccc1)C(=O)NC(CC(C)C)C(=O)NCCN1CCOCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCN(CCCCCC)C1CCc2c(O)cccc2C1</chem>	<chem>CCCCCCCN(CCCCCC)C1CCc2c(O)cccc2C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(C)C2CC1(CS(=O)(=O)N1CCN(C3ccc(C(F)(F)F)nc(N4CCCC4)n3)CC1)C(=O)C2</chem>	<chem>CC1(C)C2CC1(CS(=O)(=O)N1CCN(C3ccc(C(F)(F)F)nc(N4CCCC4)n3)CC1)C(=O)C2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NN=Cc1cccc1OCc1cccc1)c1ccc(F)cc1</chem>	<chem>O=C(NN=Cc1cccc1OCc1cccc1)c1ccc(F)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ncc(CN2CCCC(C(=O)N3CCCC3)C2)o1</chem>	<chem>Cc1ncc(CN2CCCC(C(=O)N3CCCC3)C2)o1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
N#Cc1cccc(Cn2ccnc2SCC(=O)Nc2cccc(F)cc2)c1	N#Cc1cccc(Cn2ccnc2SCC(=O)Nc2ccc(F)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=CNc1ccc(Cc2ccc(-c3ccc4c(c3)OCO4)cc2)cc1	O=CNc1ccc(Cc2ccc(-c3ccc4c(c3)OCO4)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CN(C(C)CO)C(=O)Cc2cc(NC(=O)Nc3ccc(F)cc3)ccc2OC1CN(C)S(=O)(=O)c1cccc(F)cc1	CC1CN(C(C)CO)C(=O)Cc2cc(NC(=O)Nc3ccc(F)cc3)ccc2OC1CN(C)S(=O)(=O)c1cccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)N1CCC(CCOc2cccc(C(=O)c3cc(C)C(C)[nH]3)cc2)CC1	CCOC(=O)N1CCC(CCOc2cccc(C(=O)c3cc(C)C(C)[nH]3)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(C=O)CCCCN1C(=O)C(=C2C(=O)Nc3cc(CI)c(F)cc32)SC1=Nc1ccc(Br)cc1F	COC(C=O)CCCCN1C(=O)C(=C2C(=O)Nc3cc(CI)c(F)cc32)SC1=Nc1ccc(Br)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
Fc1ccc(-c2ccc(Cn3c(C4CCCC4)n[nH]c3=S)cn2)cc1	Fc1ccc(-c2ccc(Cn3c(C4CCCC4)n[nH]c3=S)cn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)Cc1c(C)c2ccc(OC(C)=O)c(C)c2oc1=O	CCOC(=O)Cc1c(C)c2ccc(OC(C)=O)c(C)c2oc1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Fc1ccc(CC(c2ccccc2)N2CCN(C3CCCC3)CC2)cc1	Fc1ccc(CC(c2ccccc2)N2CCN(C3CCCC3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(C=NNC(N)=S)c1OC(=O)c1cccn1	COc1cccc(C=NNC(N)=S)c1OC(=O)c1cccn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1c2c(nn1CC(=O)Nc1cccn1)CCCC2	CC(=O)Nc1c2c(nn1CC(=O)Nc1cccn1)CCCC2	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NC(S)=NCCc2c[nH]c3ccccc23)c(OC)c1	COc1ccc(NC(S)=NCCc2c[nH]c3ccccc23)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccn2c(=O)c(O)c(NCCCCN(C)C)nc2c1	Cc1ccn2c(=O)c(O)c(NCCCCN(C)C)nc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC1NCCOc2ccccc2C=CCN(C=O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)C(C)N(C)C1=O	CC(C)CC1NCCOc2ccccc2C=CCN(C=O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)C(C)N(C)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)CC(=O)C(C=NCCN2CCN(CCN5(=O)(=O)c3ccccc3)CC2)=C(O)C1	CC1(C)CC(=O)C(C=NCCN2CCN(CCN5(=O)(=O)c3ccccc3)CC2)=C(O)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)OCCc1ccc(O)cc1	CN(C)OCCc1ccc(O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C(c2nnmn2Cc2ccccc2)N2CCc3ccccc32)cc(OC)c1OC	COc1cc(C(c2nnmn2Cc2ccccc2)N2CCc3ccccc32)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)n(-c2nc3nc(C)cc(C)n3n2)n1	Cc1cc(C)n2nc(-n3nc(C)cc3C)nc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CNc1ccc(Nc2c3ccccc3nc3ccccc23)cc1	CNc1ccc(Nc2c3ccccc3nc3ccccc23)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)(C(N)=O)N1CCC(NC(=O)Cc2ccc(CI)c(CI)c2)C1=O	CC(C)(C(N)=O)N1CCC(NC(=O)Cc2ccc(CI)c(CI)c2)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(c2sc(-c3cnc4cnc(OC5ccccc5)cn34)cc2Cl)CCS(=O)(=O)C(C)C(C)N(=N)1	CC1(c2sc(-c3cnc4cnc(OC5ccccc5)cn34)cc2Cl)CCS(=O)(=O)C(C)C(C)N(=N)1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCCCOc1ccc2ccc(=O)oc2c1)Nc1ccc(F)cc1	O=C(CCCCOc1ccc2ccc(=O)oc2c1)Nc1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)COc1cccc(-c2nnn(CC(=O)N3CC(=O)Nc4cccc(Br)cc43)n2)c1	CCOC(=O)COc1cccc(-c2nnn(CC(=O)N3CC(=O)Nc4cccc(Br)cc43)n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1ncc2nc(CCc3nc(N4CCCC4)nn3C)n(CC(C)(C)C)c2n1	CN(C)c1ncc2nc(CCc3nc(N4CCCC4)nn3C)n(CC(C)(C)C)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1csc2ncnc(NCCNC(=O)C3CCCC3)c12	Cc1csc2ncnc(NCCNC(=O)C3CCCC3)c12	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC1CCC(=O)O1	CCCCC1CCC(=O)O1	TRUE	TRUE	FALSE
CCOc1ccc(-c2cc(C(=O)Nc3ccc(C)C(C)C)c3ccccc3n2)cc1	CCOc1ccc(-c2cc(C(=O)Nc3ccc(C)C(C)C)c3c3ccccc3n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1nc(CC(=O)Nc2CC3CC(C2)N3CCCN2C(=O)c3ccccc3C2=O)c2ccccc2c1=O	Cn1nc(CC(=O)Nc2CC3CC(C2)N3CCCN2C(=O)c3ccccc3C2=O)c2ccccc2c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C(C)N(C(=O)NC(=O)c1c(F)cccc1F)c1ccc(C)cc1C	COC(=O)C(C)N(C(=O)NC(=O)c1c(F)cccc1F)c1ccc(C)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)NCC(O)COc1cccc2[nH]c3ccccc3c12	CC(C)(C)NCC(O)COc1cccc2[nH]c3ccccc3c12	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCc1nn(-c2cc(NC(=O)CC)ccc2C(F)(F)F)c(=O)n1Cc1ccc(-c2ccccc2S(=O)(=O)NC(=O)c2ccccc2Cl)cc1	CCCCc1nn(-c2cc(NC(=O)CC)ccc2C(F)(F)F)c(=O)n1Cc1ccc(-c2ccccc2S(=O)(=O)NC(=O)c2ccccc2Cl)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
NCc1ccc(OCc2ccccc2)c(I)c1	NCc1ccc(OCc2ccccc2)c(I)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc2oc(=O)c(Cc3ccc(O)c(CI)c3)cc2c1	Cc1ccc2oc(=O)c(Cc3ccc(O)c(CI)c3)cc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cc1cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c1)NCCCCCN1CCC(OCc2ccc(F)cc2)CC1	O=C(Cc1cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c1)NCCCCCN1CCC(OCc2ccc(F)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CCSc2ccc3ccccc3c21	O=C1CCSc2ccc3ccccc3c21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc2nc(-c3cccc(C(=O)O)c3)[nH]c2cc1C	Cc1cc2nc(-c3cccc(C(=O)O)c3)[nH]c2cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCc1cccn1)c1cccc(S(=O)(=O)N2CCCc3ccccc32)c1	O=C(NCc1cccn1)c1cccc(S(=O)(=O)N2CCCc3ccccc32)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c(=O)oc2cc(NS(=O)(=O)c3ccc(CI)cc3)ccc21	Cn1c(=O)oc2cc(NS(=O)(=O)c3ccc(CI)cc3)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(=O)Nc1cc(CI)ccc1N1CCOCC1	CC(C)C(=O)Nc1cc(CI)ccc1N1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=Cc1ccc(O)cc1)NC(CCC(=O)C=Cc1ccc(O)cc1O)C(=O)NC(c1ccccc1)c1ccccc1	O=C(C=Cc1ccc(O)cc1O)CCC(NC(=O)C=Cc1ccc(O)cc1)C(=O)NC(c1ccccc1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)N1C(C(=O)NO)CS1c1cc(Br)c(OCc2ccccc2)c(Br)c1	CC(=O)N1C(C(=O)NO)CS1c1cc(Br)c(OCc2ccccc2)c(Br)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cc1cccc(O)c1)c1c(O)cc(CI)cc1OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O	O=C(Cc1cccc(O)c1)c1c(O)cc(CI)cc1OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN1CCC23Cc4nc5cc(CI)ccc5cc4CC2(O)C1Cc1ccc(O)cc13	CCCN1CCC23Cc4nc5cc(CI)ccc5cc4CC2(O)C1Cc1ccc(O)cc13	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)CCCN(C(C(=O)O)Cc2c1[nH]c1ccc(OC)cc21	COC(=O)CCCN(C(C(=O)O)Cc2c1[nH]c1ccc(OC)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)OC(=O)NC(Cc1ccccc1CP(=O)(O)O)C(=O)NC1Cc2ccccc2[N+](C)C	CC(C)(C)OC(=O)NC(Cc1ccccc1CP(=O)(O)O)C(=O)NC1Cc2ccccc2[N+](C)C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=C(C(=O)O)CCCCCOC(C=O)C=Cc2ccc(OCc3ccccc3)c(OC)c2)ccc1OCc1ccccc1	COc1cc(C=C(C(=O)O)CCCCCOC(C=O)C=Cc2ccc(OCc3ccccc3)c(OC)c2)ccc1OCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ncc(Cc2cn(C)C(C)=O)N3CCC(C(=O)N4CCN(CCO)CC4)CC3)c3ccccc23)c(N)n1	COc1ncc(Cc2cn(C)C(C)=O)N3CCC(C(=O)N4CCN(CCO)CC4)CC3)c3ccccc23)c(N)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)N(CCOc1ccc(CCC(=O)O)cc1)C(C)C	CC(C)N(CCOc1ccc(CCC(=O)O)cc1)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CN=C(S)N(C)Cc2cccn2)cc1	COc1ccc(CN=C(S)N(C)Cc2cccn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1cccc(C(=O)NN=Cc2ccc(-n3ccccc3)cc2)c1	CC(=O)Nc1cccc(C(=O)NN=Cc2ccc(-n3ccccc3)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(N(CC(=O)NCCSc2cccn2)S(=O)(=O)c2ccccc2)cc1	COc1ccc(N(CC(=O)NCCSc2cccn2)S(=O)(=O)c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CI)cc1-c1cccn2nc(Nc3ccc4nc(NC(=O)C5CC5)sc4c3)nc12	COc1ccc(CI)cc1-c1cccn2nc(Nc3ccc4nc(NC(=O)C5CC5)sc4c3)nc12	TRUE	TRUE	TRUE
COCC12COCC1CN(Cc1cccn1)C2	COCC12COCC1CN(Cc1cccn1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ncnc2c1ncn2C1OC(COP(=O)(O)C(CI)(CI)P(=O)(O)O)C(O)C1O	Nc1ncnc2c1ncn2C1OC(COP(=O)(O)C(CI)(CI)P(=O)(O)O)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(CCCNC(=O)CCSc2nnc(-c3ccc[nH]3)o2)CC1	CN1CCN(CCCNC(=O)CCSc2nnc(-c3ccc[nH]3)o2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C(=O)Nc1cc(C(F)(F)F)nn1-c1ccc(F)cc1)c1cccc(C(F)(F)F)c1	CC(C(=O)Nc1cc(C(F)(F)F)nn1-c1ccc(F)cc1)c1cccc(C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(CCN(C)C(=O)cc(CNC(Cc2cc(OC)C(OC)c(OC)c2)c2ccccc3ccccc23)c1OC	COc1cc(CCN(C)C(=O)cc(CNC(Cc2cc(OC)C(OC)c(OC)c2)c2ccccc3ccccc23)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1C(=O)NCCc1cc(C(=O)N(C)CC2CCO2)no1	COc1ccccc1C(=O)NCCc1cc(C(=O)N(C)CC2CCO2)no1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1sc2ncnc(N3CCOC(Cn4cc(C(F)(F)F)cc4O)C3)c2c1C	Cc1sc2ncnc(N3CCOC(Cn4cc(C(F)(F)F)cc4O)C3)c2c1C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(=O)Nc1ccccc1N1CCOCC1	CC(C)C(=O)Nc1ccccc1N1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C2(C3CC3)CC(c3ccc(CI)cc3)=NN2C(N)=S)s1	Cc1ccc(C2(C3CC3)CC(c3ccc(CI)cc3)=NN2C(N)=S)s1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1ccc(CI)cc1)N1CCN(C(=O)c2ccc(-n3c(=O)c4ccnc4n(Cc4ccc(F)c(F)c4)c3=O)cc2)CC1	O=C(c1ccc(CI)cc1)N1CCN(C(=O)c2ccc(-n3c(=O)c4ccnc4n(Cc4ccc(F)c(F)c4)c3=O)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1nnc(NC(=O)COc2ccc(C#N)cc2)n1	CCn1nnc(NC(=O)COc2ccc(C#N)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C)C(NC(=O)C)C(NC(=O)C(N)CNC(=O)c1[nH]c2ccccc2c1CCc1ccccc1)C(C)C(C(=O)O	CCC(C)C(NC(=O)C)C(NC(=O)C(N)CNC(=O)c1[nH]c2ccccc2c1CCc1ccccc1)C(C)C(C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
c1nc(N2CCC3OCCC3C(Cc3ccc(N4CCCC4)cc3)C2)nc1	c1nc(N2CCC3OCCC3C(Cc3ccc(N4CCCC4)cc3)C2)nc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CCC1=C(CCCC(=O)Nc2CCCCCCC2O)C(=O)c2c(O)cccc2C1=O	O=C(O)CCC1=C(CCCC(=O)Nc2CCCCCCC2O)C(=O)c2c(O)cccc2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC1SC(=O)N(NC(=O)Nc2ccc(C(C)C)cc2)C1=O	CC(C)CC1SC(=O)N(NC(=O)Nc2ccc(C(C)C)cc2)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccc(CN2CCOC2)cc1F	CCc1ccc(CN2CCOC2)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)C=Cc2ccc(C(C)C)cc2)cc1	Cc1ccc(C(=O)C=Cc2ccc(C(C)C)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(COC(=O)c1cc(-c2ccccc2)nn1-c1ccccc1)NCCc1ccccc1	O=C(COC(=O)c1cc(-c2ccccc2)nn1-c1ccccc1)NCCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1cc(CO)oc(C(c2ccccc2)c2ccccc2)c1O	O=c1cc(CO)oc(C(c2ccccc2)c2ccccc2)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCOc1cccc2[n+](c1C(=O)c1ccccc1)CCc1cc(OCCOC)c(OCCOCCOCCOCCOCC)cc1-2	CCCOc1cccc2[n+](c1C(=O)c1ccccc1)CCc1cc(OCCOC)c(OCCOCCOCCOCCOCC)cc1-2	FALSE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2ccccc2C2=NCCN2)cc1	COc1ccc(-c2ccccc2C2=NCCN2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1OCCC1Cc1cc(OCO)c(OCc2ccccc2)cc1Cl	O=C1OCCC1Cc1cc(OCO)c(OCc2ccccc2)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nn(C)c(C(=O)Nc2ccc(OC3ccc(F)cc3)cc2)c1[N+](=O)[O-]	Cc1nn(C)c(C(=O)Nc2ccc(OC3ccc(F)cc3)cc2)c1[N+](=O)[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)CCC(NC(=O)C(N)Cc1ccc(O)cc1)C(=O)NCC(=O)NCC(=O)O	NC(=O)CCC(NC(=O)C(N)Cc1ccc(O)cc1)C(=O)NCC(=O)NCC(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2C3=C(COC3=O)N(CCO)c3cc4c(c32)OCO4)cc1OC	COc1ccc(C2C3=C(COC3=O)N(CCO)c3cc4c(c32)OCO4)cc1OC	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1cc[n+](c2[nH]nc(C)c2S(=O)(=O)c2ccccc2)cc1C	Cc1cc[n+](c2[nH]nc(C)c2S(=O)(=O)c2ccccc2)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1cc(NC(=O)CNCC(C)(C)CC(=O)c2sccc2C)cc(C(=O)OC)c1	COC(=O)c1cc(NC(=O)CNCC(C)(C)CC(=O)c2sccc2C)cc(C(=O)OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1ccc(-c2cc(=O)c3ccc(O)c(Br)c3o2)cc1	CN(C)c1ccc(-c2cc(=O)c3ccc(O)c(Br)c3o2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1cc(CI)cc2[nH]c(-c3cccc4ccccc34)nc12	NC(=O)c1cc(CI)cc2[nH]c(-c3cccc4ccccc34)nc12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(N)c(CI)cc1C(=O)NCC1CCC(N(C)C)CC1	COc1cc(N)c(CI)cc1C(=O)NCC1CCC(N(C)C)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1ccc(NC(=O)CSc2snc3cc(N(C)C)ccc23)cc1	CC(=O)Nc1ccc(NC(=O)CSc2snc3cc(N(C)C)ccc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(F)(F)CN1CC=C(c2[nH]c3nc(-c4cnc(C5CC5)nc4)nc(N4CCOCC4)c3c2F)CC1	CC(F)(F)CN1CC=C(c2[nH]c3nc(-c4cnc(C5CC5)nc4)nc(N4CCOCC4)c3c2F)CC1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CCOc1ccccc1CNCC(O)c1cc(C(F)(F)F)nc2c(C(F)(F)F)cccc12	CCOc1ccccc1CNCC(O)c1cc(C(F)(F)F)nc2c(C(F)(F)F)cccc12	TRUE	TRUE	TRUE
C=CC(=O)N1CCCC(COc2ncnc(N)c2-c2ccccc2OC)C1	C=CC(=O)N1CCCC(COc2ncnc(N)c2-c2ccccc2OC)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(Cc1ccccc1)C(c1ccc(Cl)cc1)c1nn[nH]n1	CCN(Cc1ccccc1)C(c1ccc(Cl)cc1)c1nn[nH]n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(C)n(C2CCCN(CC(=O)Nc3ccc(C)c(C#N)c3)C2)n1	Cc1nc(C)n(C2CCCN(CC(=O)Nc3ccc(C)c(C#N)c3)C2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NC(=O)CN2C(=O)C3C4C=CC(C4)C3C2=O)cc1OC	COc1ccc(NC(=O)CN2C(=O)C3C4C=CC(C4)C3C2=O)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)=C1C2(OC(C)(C)OC2=O)C(C)(Nc2ccccc2)C2Oc13C1(C)OC1(c1ccccc1)C(OC(C)C)=C(C2=O)C(O)C3=O	CC(C)=C1C2(OC(C)(C)OC2=O)C(C)(Nc2ccccc2)C2Oc13C1(C)OC1(C(=O)C(C)C1(c4ccccc4)OC31C)C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1C1Nc2cccc(O)c2C(=O)N1c1cc(F)c(O)c(F)c1	COc1ccccc1C1Nc2cccc(O)c2C(=O)N1c1cc(F)c(O)c(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC12C=CC(=O)C=C1CCC1C2(C)OC2(C)C1CCC2(O)C(=O)COCc1ccc(Br)cc1	CC12C=CC(=O)C=C1CCC1C2(C)CC2(C)C1CCC2(O)C(=O)COCc1ccc(Br)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1c(C)nc2c(c1-c1cccc(OC)c1)C(=O)c1ccccc1-2	CCOC(=O)c1c(C)nc2c(c1-c1cccc(OC)c1)C(=O)c1ccccc1-2	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccccc1NC(=O)c1cc(C(F)(F)F)nn1C1CCN(Cc2cccs2)CC1	CCc1ccccc1NC(=O)c1cc(C(F)(F)F)nn1C1CCN(Cc2cccs2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1cc2c(=O)n3ccccc3nc2n(CCCCCO)c1=NC(=O)c1cc(C)oc1C	CCOC(=O)c1cc2c(=O)n3ccccc3nc2n(CCCCCO)c1=NC(=O)c1cc(C)oc1C	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1ccn(C2OC(COP(=O))(NCC(=O)O)OCC3OC(n4cc(Br)nn4)C(O)C3O)C(O)C2O)c(=O)[nH]1	O=c1ccn(C2OC(COP(=O))(NCC(=O)O)OCC3OC(n4cc(Br)nn2)C(O)C1O)OCC1OC(n2ccc(=O)[nH]c2=O)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1nc(-c2ccccc2)c(Cc2ccccc2)s1	Oc1nc(-c2ccccc2)c(Cc2ccccc2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(COc1cccc(Oc2ncc(Cl)cn2)c1)N1CCC(O)(CN2CCOCC2)C1	O=C(COc1cccc(Oc2ncc(Cl)cn2)c1)N1CCC(O)(CN2CCOCC2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C#N)ccc1N1CCOc2cc(S(=O))(=O)Nc3nccs3)ccc21	COc1cc(C#N)ccc1N1CCOc2cc(S(=O))(=O)Nc3nccs3)ccc21	TRUE	TRUE	FALSE
O=[N+](([O-])c1ccc(OC(Cn2ccnc2)c2sc3ccccc3c2Br)cc1	O=[N+](([O-])c1ccc(OC(Cn2ccnc2)c2sc3ccccc3c2Br)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(c1ccc(-c2ccc(C(F)(F)F)cc2)cc1)N1CCC(N2CCC(O)C2)CC1	O=S(=O)(c1ccc(-c2ccc(C(F)(F)F)cc2)cc1)N1CCC(N2CCC(O)C2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CNC(=O)CN(c2ccc(C)cc2)S(=O))(=O)c2c(C)n[nH]c2C)cc1OC	COc1ccc(CNC(=O)CN(c2ccc(C)cc2)S(=O))(=O)c2c(C)n[nH]c2C)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC1CCCCC1)c1nc(-c2ccccc2)nc(O)c1O	O=C(NC1CCCCC1)c1nc(-c2ccccc2)nc(O)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(CO)Nc1nccc(N2C(=O)OC(C)(C)C2c2ccccc2)n1	CC(CO)Nc1nccc(N2C(=O)OC(C)(C)C2c2ccccc2)n1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)(c1ccccc1)c1cccc(N)c1	CC(C)(c1ccccc1)c1cccc(N)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCOc1cc(CN2CCN(C)CC2)cc(-c2ccc(Oc3ccc(F)cc3)cc2)c1	CCCCOc1cc(CN2CCN(C)CC2)cc(-c2ccc(Oc3ccc(F)cc3)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCNc1ccc(C(=O)Nc2ccccc2F)cn1	CCCNc1ccc(C(=O)Nc2ccccc2F)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nn(C)c(C)c1C=CC(=O)c1ccc(OCC(=O)N(C)c2ccccc2)cc1	Cc1nn(C)c(C)c1C=CC(=O)c1ccc(OCC(=O)N(C)c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2C(OC)CC3(O)c4c5c(c(O)c6c(c42)OC(C)(C)C=C5)CC3(OC(C)=O)OC(C)C1OC(CO(=O)O)c1ccc(OC)cc1	COc1ccc(C2c1nc(-c3ccccc3)no2)c(OC)c1	FALSE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2nc(-c3ccccc3)no2)c(OC)c1	COc1ccc(-c2nc(-c3ccccc3)no2)c(OC)c1	TRUE	TRUE	FALSE
CCCCN1CC(C(=O)O)=CC(c2ccccc2Cl)C1=O	CCCCN1CC(C(=O)O)=CC(c2ccccc2Cl)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1oc2ccc(S(=O))(=O)N3CCN(c4ccc(CC)cc4)CC3)cc2c1C	CCOC(=O)c1oc2ccc(S(=O))(=O)N3CCN(c4ccc(CC)cc4)CC3)cc2c1C	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+](([O-])c1ccccc1Oc1cc(-c2ccc(F)cc2)ncn1	O=[N+](([O-])c1ccccc1Oc1cc(-c2ccc(F)cc2)ncn1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCOC(C=O)C(CCCCN1C(=O)C5C1c1cc(OC)cc(OC)c1)N1C(=O)CCC1=O	CCCCCOC(C=O)C(CCCCN1C(=O)C5C1c1cc(OC)cc(OC)c1)N1C(=O)CCC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1c2ccccc2c2cc(CNC34CC5CC(C(C5)C3)C4)ccc21	CCn1c2ccccc2c2cc(CNC34CC5CC(C(C5)C3)C4)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nn(-c2ccccc2)c2nc3c4c(nn3c(=O)c12)C1CC4O1	Cc1nn(-c2ccccc2)c2nc3c4c(nn3c(=O)c12)C1CC4O1	FALSE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2ccc3cc(-c4cc5c(cc4C=O)OCO5)[nH]c3c2)cc1	Cc1ccc(-c2ccc3cc(-c4cc5c(cc4C=O)OCO5)[nH]c3c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(NC(=O)N(C)CCC(=O)NCCC12CC3CC(C(C3)C1)C2)C(=O)O)C(=O)NCC12CCC(C)(C)CC1C1=CCC3C4(C)CCC(O)C(C)(C)C4CCC3(C)C1(C)CC2	CC(C)CC(NC(=O)N(C)CCC(=O)NCCC12CC3CC(C(C3)C1)C2)C(=O)O)C(=O)NCC12CCC(C)(C)CC1C1=CCC3C4(C)CCC(O)C(C)(C)C4CCC3(C)C1(C)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cnc2c(C(=O)Nc3CCC(C)(C)(C)CC3)c(C)nc2c1	Cc1cnc2c(C(=O)Nc3CCC(C)(C)(C)CC3)c(C)nc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1OC(OC2CCCCC2OC(=O)CCC2CC(O)C(O)C(C)O2)C(O)C(O)C1O	CC1OC(CCC(=O)OC2CCCCC2OC2OC(C)C(O)C(O)C2O)CC(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(O)c1Nc1nc(-c2ccc(C)oz)cs1	COc1cccc(O)c1Nc1nc(-c2ccc(C)oz)cs1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCCc1ccc(O)c(O)c1)c1ccc(F)cc1	O=C(NCCc1ccc(O)c(O)c1)c1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1ccnc1CN1Cn2c(nc(CN3CCN(c4ccccc4)CC3)c2C2CC2)C1	Cn1ccnc1CN1Cn2c(nc(CN3CCN(c4ccccc4)CC3)c2C2CC2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1ccc(Oc2cccc(-c3ccc(C=C45C(=S)N(C)C4=O)s3)c2)cc1	CC(=O)Nc1ccc(Oc2cccc(-c3ccc(C=C45C(=S)N(C)C4=O)s3)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
FC(F)(F)c1cc(-c2cn(C3CCN(CCCNc4coc(-c5ccccc5C(F)(F)F)n4)CC3)nn2)ccc1OCc1ccccc1	FC(F)(F)c1cc(-c2cn(C3CCN(CCCNc4coc(-c5ccccc5C(F)(F)F)n4)CC3)nn2)ccc1OCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1c(C)Nc2ccc3[nH]ccc3c2)[nH]c2c(OC)cccc2c1=O	CCOC(=O)c1c(C)Nc2ccc3[nH]ccc3c2)[nH]c2c(OC)cccc2c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(COc1c(Br)cc(Br)cc1Br)NN=C1C(=O)Nc2ccccc21	O=C(COc1c(Br)cc(Br)cc1Br)NN=C1C(=O)Nc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1c(NC(=O)c2ccc(C)c(Nc3ncnc4cnc(N5CCCCC5)nc34)c2)nc2ccccc21	CCn1c(NC(=O)c2ccc(C)c(Nc3ncnc4cnc(N5CCCCC5)nc34)c2)nc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc2nc3ccccc3c(Nc3nc(O)cc(C(=O)O)n3)c12	Cc1ccccc2nc3ccccc3c(Nc3nc(O)cc(C(=O)O)n3)c12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(NC(=O)C(=O)c2c[nH]c3ccccc23)sc1-c1cccc(C(F)(F)F)c1	Cc1cc(NC(=O)C(=O)c2c[nH]c3ccccc23)sc1-c1cccc(C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1cccc(NC(=O)Nc2ccc(Cl)cc2F)c1	CC(C)(C)c1cccc(NC(=O)Nc2ccc(Cl)cc2F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(N)sc1-c1csc2c(Br)c(O)ccc12	Cc1nc(N)sc1-c1csc2c(Br)c(O)ccc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C1CCN(S(=O))(=O)c2ccnc2)CC1)N1CCN(c2ccccc2F)CC1	O=C(C1CCN(S(=O))(=O)c2ccnc2)CC1)N1CCN(c2ccccc2F)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(Cl)cc1-c1nccc2cc(S(=O))(=O)Nc3nccs3)ccc12	CCOc1ccc(Cl)cc1-c1nccc2cc(S(=O))(=O)Nc3nccs3)ccc12	TRUE	TRUE	TRUE
NC(CSCCCCC1OC2OC(CO)C(O)C2C2OC(C(=O)O)C(Oc3ccccc3)C12)C(=O)O	NC(CSCCCCC1OC2OC(CO)C(O)C2C2OC(C(=O)O)C(Oc3ccccc3)C12)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(CNC(=O)CCC(=O)N(Cc2ccnc2)C(C(=O)NC(C)(C)C)c2ccc(F)cc2)o1	Cc1ccc(CNC(=O)CCC(=O)N(Cc2ccnc2)C(C(=O)NC(C)(C)C)c2ccc(F)cc2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C=O)C(CSCC)NC(=O)C(N)CC(=O)O	CO(C=O)C(CSCC)NC(=O)C(N)CC(=O)O	TRUE	FALSE	FALSE
C=C1CCC2Oc3c(OC)ccc4c3C23CCN(C)C(C4)C3C=CC(C)(C)C(C(=O)OC)C1C32	C=C1CCC2Oc3c(OC)ccc4c3C23CCN(C)C(C4)C3C=CC(C)(C)C(C(=O)OC)C1C32	FALSE	TRUE	TRUE
CCCCc1ccc(NS(=O))(=O)c2ccc(C)c(C(=O)OC)c2)cc1	CCCCc1ccc(NS(=O))(=O)c2ccc(C)c(C(=O)OC)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2nccc(Oc3ccc4c(C(=O)Nc5ccc(F)cc5)cccc4c3)c2cc1OC	COc1cc2nccc(Oc3ccc4c(C(=O)Nc5ccc(F)cc5)cccc4c3)c2cc1OC	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)NCC(O)COc1ccc(C2c3ccccc3CCN2c2ccc(Cl)cc2)cc1	CC(C)NCC(O)COc1ccc(C2c3ccccc3CCN2c2ccc(Cl)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NCC1OC(OC2(C)N)COC(OC3CC(O)C(N)C(O)C3N)C2O)C(O)C(N)C1O	NCC1OC(OC2(C)N)COC(OC3CC(O)C(N)C(O)C3N)C2O)C(O)C(N)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cn1nc(-c2ccc(Cl)cc2)ccc1=O)Nc1cccc(S(=O))(=O)N2CCOCC2)c1	O=C(Cn1nc(-c2ccc(Cl)cc2)ccc1=O)Nc1cccc(S(=O))(=O)N2CCOCC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C=CC(=O)C(=Cc2cc(OC)c(OC)c(OC)c2)C(=O)C=Cc2cc(OC)cc(OC)cc2OC)cc1O[Si](C)(C)C(C)C)c(OC)c1	COc1cc(OC)C(=C=CC(=O)C(=Cc2cc(OC)c(OC)c(OC)c2)C(=O)C=Cc2ccc(OC)c(O[Si](C)(C)C(C)C)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)N1CCC(c2ccc(COc3ccccc3Cl)(C(F)(F)F)C(F)(F)F)cc2)[S(=O))(=O)c2ccc(F)cc2)C1	CC(C)N1CCC(c2ccc(COc3ccccc3Cl)(C(F)(F)F)C(F)(F)F)cc2)[S(=O))(=O)c2ccc(F)cc2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NC(=O)COC(=O)c2c(C)noc2C)cc1Cl	COc1ccc(NC(=O)COC(=O)c2c(C)noc2C)cc1Cl	TRUE	TRUE	FALSE
Nc1nc(SCCN2CCOCC2)nc2scc(-c3ccco3)c12	Nc1nc(SCCN2CCOCC2)nc2scc(-c3ccco3)c12	TRUE	TRUE	TRUE
NS(=O))(=O)c1ccc(NC(=O)COC(=O)C2CCN(C(=O)c3cccs3)CC2)cc1	NS(=O))(=O)c1ccc(NC(=O)COC(=O)C2CCN(C(=O)c3cccs3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(O)c(N(CC(N)Cc2ccccc2)C(=O)C2CS52)c(O)c1	Cc1cc(C)c(N(CC(N)Cc2ccccc2)C(=O)C2CS52)c(O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCC#Cc1cnc2c(c1)C(=O)N(C(C)CO)CC(C)C(CN(C)C(=O)Nc1ccc3c(c1)OCO3)O2	CCCCCCC#Cc1cnc2c(c1)C(=O)N(C(C)CO)CC(C)C(CN(C)C(=O)Nc1ccc3c(c1)OCO3)O2	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)C1CCN(C(=O)c2ccc(CN3CCCC3)cc2)CC1	NC(=O)C1CCN(C(=O)c2ccc(CN3CCCC3)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2cncc(C#N)c2Nc2ccc3[nH]ccc3c2C)cc1OC	COc1ccc(-c2cncc(C#N)c2Nc2ccc3[nH]ccc3c2C)cc1OC	TRUE	TRUE	FALSE
CN(C)CCOc1ccc(C(=O)Nc2ccnc2)cc1Br	CN(C)CCOc1ccc(C(=O)Nc2ccnc2)cc1Br	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C1=CC(=O)c2ccc(Cl)cc2C1=O)C1CCN2CCCCC2C1	CN(C1=CC(=O)c2ccc(Cl)cc2C1=O)C1CCN2CCCCC2C1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)CCCC(OC(=O)c2cnc(Cl)c(Cl)c2)C1	CC1(C)CCCC(OC(=O)c2cnc(Cl)c(Cl)c2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2nc(N3CCNCC3)nc(NCc3ccc(-c4ccc([N+](=O)[O-])cc4)cc3)c2cc1OC	COc1cc2nc(N3CCNCC3)nc(NCc3ccc(-c4ccc([N+](=O)[O-])cc4)cc3)c2cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)CCC(=O)CC(C)C(C)NC(=O)C1CCCN1C(=O)C(NC(=O)C(N)Cc1cccs1)C(C)C	CC(=O)CCC(=O)CC(C)C(C)NC(=O)C1CCCN1C(=O)C(NC(=O)C(N)Cc1cccs1)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1NC(=O)C(=Cc2ccc(-c3ccccc3)o2)S1	O=C1NC(=O)C(=Cc2ccc(-c3ccccc3)o2)S1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)(C(=O)O)S(=O))(=O)CCN1C(=O)C(c2cc(F)cc(Cl)c2)=C(c2cc3ccccc3[nH]2)C1=O	CC(C)(C(=O)O)S(=O))(=O)CCN1C(=O)C(c2cc(F)cc(Cl)c2)=C(c2cc3ccccc3[nH]2)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1cccc(Oc2nc(SC)nc(NC)n2)c1	CCc1cccc(Oc2nc(NC)nc(SC)n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(n1cnnc1-c1nc(N=C(O)c2cc(-c3ccc(Cl)cc3)oc2C(F)(F)F)cs1)C(F)(F)F	CC(n1cnnc1-c1nc(N=C(O)c2cc(-c3ccc(Cl)cc3)oc2C(F)(F)F)cs1)C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1c2ccccc2-c2cccc(C=CC(=O)Nc3CC3)c21	O=C(C=Cc1ccccc2c1C(=O)c1ccccc1-2)Nc1CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O))(=O)Nc1ccc(Nc2nccc(Oc3ccc4[nH]c(C(=O)N5CCN(C)CC5)cc4c3)n2)cc1	CN1CCN(C(=O)c2cc3cc(Oc4ccnc(Nc5ccc(NS(C(=O)=O)cc5)n4)ccc3[nH]2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(Cc2OCCn3ncc(CN4CCN(c5ccncc5)CC4)c32)cc1	c1ccc(Cc2OCCn3ncc(CN4CCN(c5ccncc5)CC4)c32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C=O)N1CCc2cc(CNC(=O)c3ccccc3)ccc2C1	CC(C=O)N1CCc2cc(CNC(=O)c3ccccc3)ccc2C1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc2nccc(NCc3cccs3)c2c1)c1ccc([N+](=O)[O-])o1	O=C(Nc1ccc2nccc(NCc3cccs3)c2c1)c1ccc([N+](=O)[O-])o1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=Cc1ccccc1)NCC(=O)N1CCCC1B(O)O	O=C(C=Cc1ccccc1)NCC(=O)N1CCCC1B(O)O	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CC(C)OC(=O)c1ccc(F)c(NC(=O)c2cc(C(=N)N(C)C)ccc2O)c1	CC(C)OC(=O)c1ccc(F)c(NC(=O)c2cc(C(=N)N(C)C)ccc2O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCOCC1CN(C(=O)c2cnc(C)cn2)Cc2cnnn2CCN(C(=O)c2C(C)C)C1	C=CCOCC1CN(C(=O)c2cnc(C)cn2)Cc2cnnn2CCN(C(=O)c2C(C)C)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=C2CCCC(=Cc3ccc(OCCN4CCOCC4)c(OC)c3)C2=O)ccc1OCCCN1CCOCC1	COc1cc(C=C2CCCC(=Cc3ccc(OCCN4CCOCC4)c(OC)c3)C2=O)ccc1OCCCN1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(N)c1cc2[nH]c(-c3cccc(OCCCC(=O)O)c3)cc2cc1-c1cnnc1	N=C(N)c1cc2[nH]c(-c3cccc(OCCCC(=O)O)c3)cc2cc1-c1cnnc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1CCCC(N(C)C(=O)C2CCN(Cc3ccc4c(c3)OCO4)CC2)C1	CCN1CCCC(N(C)C(=O)C2CCN(Cc3ccc4c(c3)OCO4)CC2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=Cc1cccn1)c1cc(Cl)ccc1O	O=C(C=Cc1cccn1)c1cc(Cl)ccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CN1CCCC1)Nc1nc(-c2cccc(Br)c2)cc(-c2ccccc2O)n1	O=C(CN1CCCC1)Nc1nc(-c2cccc(Br)c2)cc(-c2ccccc2O)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(cc1O)C(Cc1ccc(O)cc1)NCC2	COc1cc2c(cc1O)C(Cc1ccc(O)cc1)NCC2	TRUE	TRUE	FALSE
CN1C(=O)C2(c3ccccc31)c1c(N)ncnc1N(C)C1=C2S(=O)(=O)c2cnccc21	CN1C(=O)C2(C3=C(c4cnccc453(=O)=O)N(C)c3nnc(N)c32)c2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)C1=C(N)Oc2cc(O)ccc2C1c1ccoc1	NC(=O)C1=C(N)Oc2cc(O)ccc2C1c1ccoc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)CCCCCOc1ccnc2cc(Cl)ccc12	CCN(CC)CCCCCOc1ccnc2cc(Cl)ccc12	TRUE	TRUE	FALSE
COc1cccc(C=C2SC(=O)N(CCO)C2=O)c1OC(F)F	COc1cccc(C=C2SC(=O)N(CCO)C2=O)c1OC(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(F)ccc1-c1cc(C(C)C)nc2cc(C=CC(=O)NO)ccc12	Cc1cc(F)ccc1-c1cc(C(C)C)nc2cc(C=CC(=O)NO)ccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(N)CCc1c(N)c2c(c(SCc3ccccc3)c1C#N)Cc1ccccc1C2	CC(C)(N)CCc1c(N)c2c(c(SCc3ccccc3)c1C#N)Cc1ccccc1C2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCc1cccs1)c1cnc(NCCc2cccn2)c(-c2cc(Cl)cc(Cl)c2)c1	O=C(NCc1cccs1)c1cnc(NCCc2cccn2)c(-c2cc(Cl)cc(Cl)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2ccccc2OCCCN2CCN(C)CC2)c(Cc2ccccc2)c1	Cc1ccc(-c2ccccc2OCCCN2CCN(C)CC2)c(Cc2ccccc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCc1nc(Cl)c(Cc2ccc(OC)c(OC)c2C=CC(=O)O)n1Cc1ccccc1	CCCCc1nc(Cl)c(Cc2ccc(OC)c(OC)c2C=CC(=O)O)n1Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(NCCCCCCN2CCN(C)CC2)c2nccc(C)c2c1	COc1cc(NCCCCCCN2CCN(C)CC2)c2nccc(C)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
ON=C(C[n+]1ccccc1)c1ccc(Cl)cc1	ON=C(C[n+]1ccccc1)c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCN1C(=O)C(CC(=O)NCCCCC)CC2(C(=O)OC)CCCC=C12	CCCCCCCN1C(=O)C(CC(=O)NCCCCC)CC2(C(=O)OC)CCCC=C12	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C=O)c1ccccc1NC(=O)CSc1nc2c(-c3ccsc3)ccc(C)n2n1	CO(C=O)c1ccccc1NC(=O)CSc1nc2c(-c3ccsc3)ccc(C)n2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)NS(=O)(=O)c1ccc(CN=c2c(O)c(O)c2=Nc2ccccc3ccccc23)cc1	CC(C)NS(=O)(=O)c1ccc(CN=c2c(O)c(O)c2=Nc2ccccc3ccccc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CCN(C)C(S)=NCc2ccco2)cc1OC	COc1ccc(CCN(C)C(S)=NCc2ccco2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)S(=O)(=O)c1ccc(NC(=S)NC(=O)c2cnccn2)c(C)c1	CCN(CC)S(=O)(=O)c1ccc(NC(=S)NC(=O)c2cnccn2)c(C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1c(O)ccc2c1-c1ccc3c(c1C(=Cc1ccc(C=NOCCCN(C)C)cc1)O2)C(C)=CC(C)(C)N3	COc1c(O)ccc2c1-c1ccc3c(c1C(=Cc1ccc(C=NOCCCN(C)C)cc1)O2)C(C)=CC(C)(C)N3	TRUE	TRUE	TRUE
OC(CO)(CO)N=[N+]=[N-]	[N-]=[N+]=NC(CO)(CO)CO	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1c(=O)[nH]c(=O)c2nn(-c3ccc(NC(=O)C(=O)NCCCN4CCOCC4)ccc3C)cc21	CCn1c(=O)[nH]c(=O)c2nn(-c3ccc(NC(=O)C(=O)NCCCN4CCOCC4)ccc3C)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(c2ccc(-c3cc4nccn(C)c(=O)c4c(O)n3)cc2CNS(=O)(=O)c2ccc(Cl)s2)CC1	CN1CCN(c2ccc(-c3cc4nccn(C)c(=O)c4c(O)n3)cc2CNS(=O)(=O)c2ccc(Cl)s2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C=O)c1c(OCc2cc(Cl)cc(Cl)c2)cc(C(O)C(O)C(C)O)c(O)c1O	CO(C=O)c1c(OCc2cc(Cl)cc(Cl)c2)cc(C(O)C(O)C(C)O)c(O)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1noc(-c2ccc(N3CCCOCC3)c(F)c2)n1)c1ccccc1O	O=C(Nc1noc(-c2ccc(N3CCCOCC3)c(F)c2)n1)c1ccccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cnc(NCCc2ccccc2)c(=O)n1CC(=O)NCCOCCO	Cc1cnc(NCCc2ccccc2)c(=O)n1CC(=O)NCCOCCO	TRUE	TRUE	TRUE
CN(Cc1ccccc1)C1CN(C(=O)c2cc(C(C)C(C)C)nn2C)C2CCOC12	CN(Cc1ccccc1)C1CN(C(=O)c2cc(C(C)C(C)C)nn2C)C2CCOC12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1N(CC2CC2)C(Cc2ccccc2)C(O)C(O)C(Cc2ccccc2)N1Cc1ccccc1(CN2CCCC2)c1	O=C1N(CC2CC2)C(Cc2ccccc2)C(O)C(O)C(Cc2ccccc2)N1Cc1ccccc1(CN2CCCC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1nn(NC(=O)c2c(O)c3ccccc3n(CCCCCc3ccccc3)c2=O)c(=O)c1ccccc1O	CC(=O)Nc1nn(NC(=O)c2c(O)c3ccccc3n(CCCCCc3ccccc3)c2=O)c(=O)c1ccccc1O	FALSE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc2c(c1)S(=O)(=O)C=C2)c1ccc(OCcCN2CCCC2)cc1	O=C(Nc1ccc2c(c1)S(=O)(=O)C=C2)c1ccc(OCcCN2CCCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NCCn1cc(-c2cncc(Nc3ccc(C(=O)N4CC5CCC(C4)O5)c(Cl)c3)n2)cn1	CC(=O)NCCn1cc(-c2cncc(Nc3ccc(C(=O)N4CC5CCC(C4)O5)c(Cl)c3)n2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)N1CCC(NC(=O)c2cccc(COc3ccccc3C)c2)CC1	CC(=O)N1CCC(NC(=O)c2cccc(COc3ccccc3C)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc1CCOCCCO	Cc1ccccc1CCOCCCO	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(-c2cnc3c(n2)c2cccn2c2ncccc32)cc1	c1ccc(-c2cnc3c4cccn4n4ccccc4c3n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)=CCc1c(OC2OC(CO)C(O)C(O)C2O)cc(O)c2c(=O)c(-c3ccc(O)cc3)cc12	CC(C)=CCc1c(OC2OC(CO)C(O)C(O)C2O)cc(O)c2c(=O)c(-c3ccc(O)cc3)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CCC(=O)N1CCc2ccccc2C1C(=O)N1CCN(S(=O)(=O)c2ccccc2)CC1	O=C(O)CCC(=O)N1CCc2ccccc2C1C(=O)N1CCN(S(=O)(=O)c2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CNC(=O)Cc2cc(-c3ccc(Cl)cc3)n3ncc(C#N)c3n2)cc1	COc1ccc(CNC(=O)Cc2cc(-c3ccc(Cl)cc3)n3ncc(C#N)c3n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1CNC(=O)CCN1CCN(S(=O)(=O)c2ccc(F)cc2)CC1	COc1ccccc1CNC(=O)CCN1CCN(S(=O)(=O)c2ccc(F)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COCc1cc(O)c2c(=O)c(O)c(-c3ccc(OC)cc3)oc2c1	COCc1cc(O)c2c(=O)c(O)c(-c3ccc(OC)cc3)oc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(NC(=O)c2ccc(Cl)nc2)n(-c2ccccc2)n1	Cc1cc(NC(=O)c2ccc(Cl)nc2)n(-c2ccccc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c([N+])(=O)[O-])cnc1-c1nnc(NC(=O)c2ccco2)s1	Cn1c([N+])(=O)[O-])cnc1-c1nnc(NC(=O)c2ccco2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(N)NCCCC(NC(=O)C1CCCN1C(=O)C(CCCCN)NC(=O)c1ccc2c(c1)CCCC2)C(=O)NC(CCCNC(=N)N)C(=O)NCC(c1ccccc1)c1ccccc1	N=C(N)NCCCC(NC(=O)C(CCCNC(=N)N)NC(=O)C1CCCN1C(=O)C(CCCCN)NC(=O)c1ccc2c(c1)CCCC2)C(=O)NCC(c1ccccc1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCN(C)C(=O)C(=O)c1c(-c2ccc(Cl)cc2)[nH]c2ccccc12	CCCCCCCCN(C)C(=O)C(=O)c1c(-c2ccc(Cl)cc2)[nH]c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=Cc1ccc[nH]1	O=Cc1ccc[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1ccc([N+])(=O)[O-])cc1)N1CCN(c2nccn3ccc(Br)cc23)CC1	O=C(c1ccc([N+])(=O)[O-])cc1)N1CCN(c2nccn3ccc(Br)cc23)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(cc1N1CC(C)N(C)C1)N(C(=O)CCN(C)C(=O)c1cc(C)on1)CC2	COc1cc2c(cc1N1CC(C)N(C)C1)N(C(=O)CCN(C)C(=O)c1cc(C)on1)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(N)COc1ccc(N2CCCC2)cc1Oc1ccccc1	CC(N)COc1ccc(N2CCCC2)cc1Oc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Cl)cc1Nc1nc(Cl)cc(N(C)C(=O)N2CCCC(Oc3ccccc3C)CC2)n1	COc1ccc(Cl)cc1Nc1nc(Cl)cc(N(C)C(=O)N2CCCC(Oc3ccccc3C)CC2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)CCc2c(ccc3nc(CP(=O)(O)O)[nH]c23)O1	CC1(C)CCc2c(ccc3nc(CP(=O)(O)O)[nH]c23)O1	TRUE	TRUE	TRUE
OC1ccc2oc(NN=Cc3ccc(O)cc3)nc2c1	OC1ccc(C=NNc2nc3cc(O)ccc3o2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C=O)c1ccc(CNc2ccc(OC(C)C)cc2)o1	CO(C=O)c1ccc(CNc2ccc(OC(C)C)cc2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(N)=O)cc1C(=O)Nc1ccc(N2CCN(C)CC2)cc1	COc1ccc(C(N)=O)cc1C(=O)Nc1ccc(N2CCN(C)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cn1cc(-c2nc(C3(c4ccc(-c5enc(N6CCOCC6)nc5)nc4)CCC3)no2)cn1)N1CCN(c2ccc(C(F)(F)F)cn2)CC1	O=C(Cn1cc(-c2nc(C3(c4ccc(-c5enc(N6CCOCC6)nc5)nc4)CCC3)no2)cn1)N1CCN(c2ccc(C(F)(F)F)cn2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1[nH]c2ccc(O)cc2c1C(=O)c1ccc2ccccc2c1	Cc1[nH]c2ccc(O)cc2c1C(=O)c1ccc2ccccc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
COC1C(OC(C)=O)C(=CCn2cc(COC(=O)c3ccc(S(C)(=O)=O)cc3)nn2)OC1(C)C	COC1C(OC(C)=O)C(=CCn2cc(COC(=O)c3ccc(S(C)(=O)=O)cc3)nn2)OC1(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2ccccc2)c(CN2CCC3(CCC(C)N(C(=O)c4cnccn4)C3)C2=O)c1	COc1ccc(-c2ccccc2)c(CN2CCC3(CCC(C)N(C(=O)c4cnccn4)C3)C2=O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
OB(O)c1ccc(OCc2ccc(Br)cc2)cc1	OB(O)c1ccc(OCc2ccc(Br)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCc1ccccc1Cl)NN=Cc1cc2ccccc2s1	O=C(CCc1ccccc1Cl)NN=Cc1cc2ccccc2s1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(Cc2c(F)cccc2Cl)oc(N)nc1=O	Cc1c(Cc2c(F)cccc2Cl)oc(N)nc1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CSc2nnc3c(n2)[nH]c2ccccc23)cc1	COc1ccc(CSc2nnc3c(n2)[nH]c2ccccc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1ccnc1CN1CCNC(=O)C1CC(=O)NC1CCCC1	Cn1ccnc1CN1CCNC(=O)C1CC(=O)NC1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(C)C(O)Cc1c(O)cc2c(c1O)-c1c(O)c(OC)cc(C)c1CC2	C=C(C)C(O)Cc1c(O)cc2c(c1O)-c1c(O)c(OC)cc(C)c1CC2	TRUE	TRUE	TRUE
N#CC1c2c(N)nc(N)nc2-c2c1ccccc2N1CCCC1	N#CC1c2cccc(N3CCCC3)c2-c2nc(N)nc(N)c21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cnccnc1c1cccc(C)c1Oc1nccc(S(=O)(=O)N2CCCC2)c1Br	Cc1ccccc(-c2enenc2C)c1Oc1nccc(S(=O)(=O)N2CCCC2)c1Br	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=NNC(=O)c2cc(C)n(Cc3ccccc3C(F)(F)F)c2C)ccc1OCCCN1CCCCC1	COc1cc(C=NNC(=O)c2cc(C)n(Cc3ccccc3C(F)(F)F)c2C)ccc1OCCCN1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C)C(S)C(=O)NCC1(C(=O)NC(Cc2nc3ccccc3s2)C(=O)NC(Cc2CCC2)C(O)C(O)CC(C)C)CCCCC1	CCC(C)C(S)C(=O)NC1(C(=O)NC(Cc2nc3ccccc3s2)C(=O)NC(Cc2CCC2)C(O)C(O)CC(C)C)CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC1CCOCC1)c1cccc(Sc2ccc(OC(F)(F)F)cc2Cl)n1	O=C(NC1CCOCC1)c1cccc(Sc2ccc(OC(F)(F)F)cc2Cl)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(N(C)CCCCS)C(=O)Oc1c(O)cc2oc(-c3ccccc3Cl)cc(=O)c2c1O)OCc1ccccc1	O=C(N(C)CCCCS)C(=O)Oc1c(O)cc2oc(-c3ccccc3Cl)cc(=O)c2c1O)OCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cn1cnc2c(cnn2-c2cccc(Cl)c2)c1=O)NCC1ccco1	O=C(Cn1cnc2c(cnn2-c2cccc(Cl)c2)c1=O)NCC1ccco1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1OC(c2cccc([N+])(=O)[O-])c2)(c2ccccc2)C(=O)N1Cc1ccc(F)cc1	O=C1OC(c2cccc2)(c2cccc([N+])(=O)[O-])c2)C(=O)N1Cc1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1c(O)c(-c2ccc(O)cc2)oc2c(O)c(O)cc(O)c12	O=c1c(O)c(-c2ccc(O)cc2)oc2c(O)c(O)cc(O)c12	TRUE	TRUE	FALSE
COc1ccccc(NC(=O)COC(=O)CCNS(=O)(=O)c2ccc3c(c2)oc(=O)n3C)c1	COc1ccccc(NC(=O)COC(=O)CCNS(=O)(=O)c2ccc3c(c2)oc(=O)n3C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1ccc(CN2CCN(c3ccc(=O)n(CC(N)=O)n3)CC2)cc1	CC(C)c1ccc(CN2CCN(c3ccc(=O)n(CC(N)=O)n3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1CCN(c2ccc3nc(-c4ccc5ccc(C(N)=O)nc5c4)n(C4CCCC4)c3n2)CC1	CCN1CCN(c2ccc3nc(-c4ccc5ccc(C(N)=O)nc5c4)n(C4CCCC4)c3n2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(CCC(=O)NCC1nnccn1C)Cc1nc(O)c2ccccc2n1	CN(CCC(=O)NCC1nnccn1C)Cc1nc(O)c2ccccc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1ccc2c(c1)C(=O)N(C1CCCN(C(=O)COc3ccc(F)cc3)CC1)C2=O	O=C(O)c1ccc2c(c1)C(=O)N(C1CCCN(C(=O)COc3ccc(F)cc3)CC1)C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC1(c2ccccc2)NC(=O)N(CC(=O)Nc2cccc(Cl)c2Cc2ccccc2)C1=O	CC(C)CC1(c2ccccc2)NC(=O)N(CC(=O)Nc2cccc(Cl)c2Cc2ccccc2)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(N2CCC(N)C2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2cc(C)ncn2)n1	COc1cc(N2CCC(N)C2)ccc1Nc1ncc(Cl)c(Nc2cc(C)ncn2)n1	TRUE	TRUE	TRUE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CN(C(=O)CCS(C)=O)C1CCN(Cc2cccc(NC(=O)c3ccc(C(F)(F)F)cc3C(F)(F)F)c2)CC1	CN(C(=O)CCS(C)=O)C1CCN(Cc2cccc(NC(=O)c3ccc(C(F)(F)F)cc3C(F)(F)F)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1cc(Cc2n[nH]c(=O)c3cccc23)ccc1F)N1CCN(C(=O)NC2CCCC2)CC1	O=C(NC1CCCC1)N1CCN(C(=O)c2cc(Cc3n[nH]c(=O)c4cccc34)ccc2F)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1oc2cccc2c1CCC(=O)OC	CCc1oc2cccc2c1CCC(=O)OC	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(OC)c1C(=O)n1ccnc1	COc1cccc(OC)c1C(=O)n1ccnc1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1c2c(c(O)c3ncccc13)CCN(C(=O)OCc1cccc1)C2	N#Cc1c2c(c(O)c3ncccc13)CCN(C(=O)OCc1cccc1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
COC12CCC3(CC1CN)C1Cc4ccc(O)c5c4C3(CCN1CC1CC1)C2O5	COC12CCC3(CC1CN)C1Cc4ccc(O)c5c4C3(CCN1CC1CC1)C2O5	TRUE	TRUE	TRUE
ON=C(c1cccn1Oc1ccc(F)cc1)N1CCCNCC1	ON=C(c1cccn1Oc1ccc(F)cc1)N1CCCNCC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCc1ccsc1)C(=O)NCC1OCCN1S(=O)(=O)c1cccc1	O=C(NCc1ccsc1)C(=O)NCC1OCCN1S(=O)(=O)c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)ON=C1CC2(C)C(C1)c1cccc1CC2(C)C	CNC(=O)ON=C1CC2(C)C(C1)c1cccc1CC2(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1ccc(Nc2nc(Cl)nc3cccc23)c1	Clc1ccc(Nc2nc(Cl)nc3cccc23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(N)C(=O)N(C)CC(=O)NCCCCCCCN(C)CCN	CC(C)CC(N)C(=O)N(C)CC(=O)NCCCCCCCN(C)CCN	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(O)c2c(c1)OC1=CC(O)=C(P(=O))(OC)OC(C)=O)C12C	COc1cc(O)c2c(c1)OC1=CC(O)=C(P(=O))(OC)OC(C)=O)C12C	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(C(=O)c1cccc(F)c1Cl)c1nncc(-c2ccco2)s1	CCCN(C(=O)c1cccc(F)c1Cl)c1nncc(-c2ccco2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)=CCCC(C)=CC(O)((CC=C(C)C)C1CCC2(C)C1C(O)CC1C34C=CC(=O)C(C)C4CCC3(C)CCC12C	CC(C)=CCCC(C)=CC(O)((CC=C(C)C)C1CCC2(C)C1C(O)CC1C2(C)CCC2(C)CCC3C(C)(C)C(=O)C=CC312	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1[nH]cnc1Cn1cc(Cn2c(=O)n(C)CC(C)=O)O)C(=O)O)c3cccc32)nn1	Cc1[nH]cnc1Cn1cc(Cn2c(=O)n(C)CC(C)=O)O)C(=O)O)c3cccc32)nn1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c(=O)c2c(nc(OC3CCCCO3)n2C)n(C)c1-O	Cn1c(=O)c2c(nc(OC3CCCCO3)n2C)n(C)c1-O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NC(=O)Cc2nnc(SCC(=O)N3CCN(c4ccc(OC)c4)CC3)n2C)cc1OC	COc1ccc(N2CCN(C(=O)CSc3nnc(CC(=O)Nc4ccc(OC)c(OC)c4)n3C)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C2C(C#N)=C(N)Oc3c2ccc2c3sc3cccc32)cc(OC)c1OC	COc1cc(C2C(C#N)=C(N)Oc3c2ccc2c3sc3cccc32)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nn(C)c(C)c1N[S+](=O)([O-])c1ccc(CSc2nnnn2C)cc1	Cc1nn(C)c(C)c1N[S+](=O)([O-])c1ccc(CSc2nnnn2C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(C)c1-n1nnnc1C1CCCN1C(=O)c1ccc(Cl)c1Cl	Cc1cccc(C)c1-n1nnnc1C1CCCN1C(=O)c1ccc(Cl)c1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(C(NC(=O)c2c(Cl)cc3c(c2Cl)CCN(C(=O)c2cncn2)C3)C2CC2)no1	Cc1nc(C(NC(=O)c2c(Cl)cc3c(c2Cl)CCN(C(=O)c2cncn2)C3)C2CC2)no1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Cc2nnc(NC(=O)c3ccc(Cl)cc3)s2)cc1OC	COc1ccc(Cc2nnc(NC(=O)c3ccc(Cl)cc3)s2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(OC(CCN1CCC(O)(c2ccc(Cl)cc2)CC1)c1ccc(Cl)c(Cl)c1)c1cccc(Cl)c1	O=C(OC(CCN1CCC(O)(c2ccc(Cl)cc2)CC1)c1ccc(Cl)c(Cl)c1)c1cccc(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCGn1cnc2c(Nc3ccc(OC)c(OC)c3)nc(N(CCO)CCO)nc21	CCGn1cnc2c(Nc3ccc(OC)c(OC)c3)nc(N(CCO)CCO)nc21	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(Cc2nc(-c3ccc(-c4nc5cc(F)cc(F)c5s4)cc3)c(-c3cccc3)[nH]2)CC1	CN1CCN(Cc2nc(-c3ccc(-c4nc5cc(F)cc(F)c5s4)cc3)c(-c3cccc3)[nH]2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(N)c1ccc2c(c1)C(=O)N(OS(=O)(=O)c1ccc(Br)cc1)C2=O	N=C(N)c1ccc2c(c1)C(=O)N(OS(=O)(=O)c1ccc(Br)cc1)C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
OC(c1cccc1)c1nc2cccc2n1Cc1cccc1	OC(c1cccc1)c1nc2cccc2n1Cc1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)N2CCC(C(=O)NCC3COc4cccc4O3)CC2)cc1	Cc1ccc(S(=O)(=O)N2CCC(C(=O)NCC3COc4cccc4O3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(Nc1cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c1)c1ccc(Cl)s1	O=S(=O)(Nc1cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c1)c1ccc(Cl)s1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(Cc2nc3n(n2)CCNC3=O)cc1)c1ccc(C(F)(F)F)nc1	O=C(Nc1ccc(Cc2nc3n(n2)CCNC3=O)cc1)c1ccc(C(F)(F)F)nc1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1c(SCc2cccc2)nsc1-c1cccc(C(F)(F)F)c1	N#Cc1c(SCc2cccc2)nsc1-c1cccc(C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C(C(=O)OCC)c1nc2ccc(C3CCN(C(=O)COc4ccc(Cl)c(C(F)(F)F)c4)CC3)cc2s1	CCOC(=O)C(C(=O)OCC)c1nc2ccc(C3CCN(C(=O)COc4ccc(Cl)c(C(F)(F)F)c4)CC3)cc2s1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1[nH]c2cc(OCc3cccc(C(F)(F)F)c3)c(OCc3cccc(C)n3)cc2c1C(F)(F)F	CCOC(=O)c1[nH]c2cc(OCc3cccc(C(F)(F)F)c3)c(OCc3cccc(C)n3)cc2c1C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C(=O)Nc1ccc2c(c1)C(=O)c1ccc(NC(=O)C(=O)O)cc1C2=O	O=C(O)C(=O)Nc1ccc2c(c1)C(=O)c1ccc(NC(=O)C(=O)O)cc1C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)CN(c1ccc(OCC(F)(F)F)cc1)c1ccc(C(=O)CCc2ccc(C(F)(F)F)cc2)cc1	NC(=O)CN(c1ccc(OCC(F)(F)F)cc1)c1ccc(C(=O)CCc2ccc(C(F)(F)F)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(-c2ncn(CC(c3cccc3)Oc3cccc3)n2)cc1	c1ccc(OC(Cn2enc(-c3cccc3)n2)c2cccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-n2c(=O)c3c(C)c(OC)ccc3n3nc4cccc4c23)cc1	COc1ccc(-n2c(=O)c3c(C)c(OC)ccc3n3nc4cccc4c23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(Cc2cccc(OCCS(C)(=O)=O)c2)cc(-c2ccc3c(c2)CCC(CC(=O)O)O3)c1CN	Cc1nc(Cc2cccc(OCCS(C)(=O)=O)c2)cc(-c2ccc3c(c2)CCC(CC(=O)O)O3)c1CN	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)N2CCCC(Nc3ccc(Cl)cn3)C2)c(-n2ncn2)c1Oc1ccnc(C#N)c1	Cc1ccc(C(=O)N2CCCC(Nc3ccc(Cl)cn3)C2)c(-n2ncn2)c1Oc1ccnc(C#N)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C=O)CC1SC(NC(=O)c2ccc(Cl)cc2)=NC1=O	CO(C=O)CC1SC(NC(=O)c2ccc(Cl)cc2)=NC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1nc(-c2cccc(N=C(O)Nc3ccc(OC(F)(F)F)cc3)c2)cc(-c2ccn(CCOP(=O)(O)O)n2)[nH]1	O=c1nc(-c2cccc(N=C(O)Nc3ccc(OC(F)(F)F)cc3)c2)cc(-c2ccn(CCOP(=O)(O)O)n2)[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)OCC(C2OC(C)(C)C(NC(=O)C3CC3)C2O)O1	CC1(C)OCC(C2OC(C)(C)C(NC(=O)C3CC3)C2O)O1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccnc(NS(=O)(=O)c2ccc(NC(=O)c3noc4c3CCCC4)cc2)n1	COc1ccnc(NS(=O)(=O)c2ccc(NC(=O)c3noc4c3CCCC4)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
OCc1ccc(-c2c(-c3cccc3)[nH]c3ncccc23)o1	OCc1ccc(-c2c(-c3cccc3)[nH]c3ncccc23)o1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C(Cl)=C(NCCCN2CCCCc3ccnc32)C(=O)c2[nH]cnc21	O=C1C(Cl)=C(NCCCN2CCCCc3ccnc32)C(=O)c2[nH]cnc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc1C(=O)n1ccc(=N)cc1	Cc1cccc1C(=O)n1ccc(=N)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1cccc(-c2nc3ccc(N4CCNCC4)cc3[nH]2)c1	Clc1cccc(-c2nc3ccc(N4CCNCC4)cc3[nH]2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C)c(S(=O)(=O)N2CCCC2c2cc(C(=O)Nc3cc(C)ccn3)no2)c1	Cc1ccnc(NC(=O)c2cc(C3CCCCN3S(=O)(=O)c3cc(C)ccc3C)on2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
OC1cccc2c1CC21CCN(C2CCN(Cc3cccc3)CC2)CC1	OC1cccc2c1CC21CCN(C2CCN(Cc3cccc3)CC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+](([O-])c1ccc2ncnc(NCc3cccc3F)c2c1	O=[N+](([O-])c1ccc2ncnc(NCc3cccc3F)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC12CCCN(C)C1c1c(n(C)c3cccc13)O2	CC12CCCN(C)C1c1c(n(C)c3cccc13)O2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(C)c(C(=O)OCC=C(C)CCC2OC34C=CCCC23)C(=O)c2cccc2C4=O)c(C)c2c1OC(C)(C)C=C2	CC(=CCOC(=O)c1c(C)c(C)c2c(c1C)C=CC(C)(C)O2)CCC1OC23C(=O)c4cccc4C(=O)C2=CCC13	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(C(=CC2CCN(C3CCCC3)CC2)c2cc[nH]c(=O)c2)cc1)Nc1ccc(C2CC2)cc1	O=C(Nc1ccc(C(=CC2CCN(C3CCCC3)CC2)c2cc[nH]c(=O)c2)cc1)Nc1ccc(C2CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
C#CCNc1nc(SC)nc(SC(=S)N2CCCCC2)n1	C#CCNc1nc(SC)nc(SC(=S)N2CCCCC2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccCN(C)C(=O)C2CN(C(=O)c3ccco3)CCOC2C1	CCc1nnc(NC(=O)CSc2ncn2Cc2c(C)cc(C)cc2C)s1	FALSE	TRUE	TRUE
CCc1nncc(NC(=O)CSc2ncn2Cc2c(C)cc(C)cc2C)s1	COc1ccc(C=Cc2nc(C#N)c(NC(C)c3cccc3)o2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C=Cc2nc(C#N)c(NC(C)c3cccc3)o2)cc1	COc1cccc1C(C)n1cccc1C=CC(=O)CC(=O)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc1C(C)n1cccc1C=CC(=O)CC(=O)C(=O)O	O=c1c(C2=NS(=O)(=O)c3cc(NS(=O)(=O)c4ccc(Cl)cc4)ccc3N2)c(O)c2cccc2n1-c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1c(C2=NS(=O)(=O)c3cc(NS(=O)(=O)c4ccc(Cl)cc4)ccc3N2)c(O)c2cccc2n1-c1cccc1	COc1ccc(OC)c(NC(=O)Cn2c(=O)n(CC(=O)Nc3cc(OC)ccc3OC)c2cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(=O)n(CC(=O)c3cccs3)c(=O)n(CC(=O)Nc3cc(OC)ccc3OC)c2cc1OC	CN(Cc1ccnc1)C(=O)c1c[nH]nn1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(Cc1ccnc1)C(=O)c1c[nH]nn1	N#Cc1ccc2ncn(-c3ccc(F)cc3P(=O)(O)O)c(=O)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ccc2ncn(-c3ccc(F)cc3P(=O)(O)O)c(=O)c2c1	CCOc1cccc1OCc1cc(C(=O)N2CCCC(C(=O)N3CCCC3)C2)no1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1cccc1OCc1cc(C(=O)N2CCCC(C(=O)N3CCCC3)C2)no1	O=C1C2CCCC2C(=O)N1c1cccc(-c2cccc(OC3ccc(F)cc3)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C2CCCC2C(=O)N1c1cccc(-c2cccc(OC3ccc(F)cc3)c2)c1	O=C(Nc1nc(-c2cccc2F)cs1)c1ccc(S(=O)(=O)NCC2CCO2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1nc(-c2cccc2F)cs1)c1ccc(S(=O)(=O)NCC2CCO2)cc1	CC(=O)NCC1OC(=O)N2c3ccc(-c4ccc(C(C)=O)s4)cc3OCC12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NCC1OC(=O)N2c3ccc(-c4ccc(C(C)=O)s4)cc3OCC12	CO(C=O)c1c(C(F)(F)F)nn(-c2cccc(Cl)c2)c1N	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C=O)c1c(C(F)(F)F)nn(-c2cccc(Cl)c2)c1N	CN1CCC(N(C)c2sccc(-c3cccc3)[n+]-2-c2cccc2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCC(N(C)c2sccc(-c3cccc3)[n+]-2-c2cccc2)C1	Cc1nc2ccc(O)nc2n1C1CCN(Cc2nc(C(C)C)cs2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc2ccc(O)nc2n1C1CCN(Cc2nc(C(C)C)cs2)C1	CC12CCC3C(CCC4CC(=O)NCC43C)C1CC=C2OCc1cccc(-c2cccc2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC12CN(C=O)CC1CCC1C2CC2(C)C(OCc3ccc(-c4cccc4)cn3)=CCC12	Cc1c(C(=O)N2CCN(C3ccc(O)cc3)CC2)sc2nc(-c3cccs3)nn12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(C(=O)N2CCN(C3ccc(O)cc3)CC2)sc2nc(-c3cccs3)nn12	Cc1ccc(S(=O)(=O)c2nnn3c2nc(NCc2cccc(Cl)c2)c2sccc23)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1ccc(S(=O)(=O)c2nnn3c2nc(NCc2cccc(Cl)c2)c2sccc23)cc1	COc1ccc(NC(=O)CN(C(=O)Cn2c(=O)oc3cc(S(=O)(=O)N4CCCC4)ccc32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NC(=O)CN(C(=O)Cn2c(=O)oc3cc(S(=O)(=O)N4CCCC4)ccc32)cc1	CCC1NC(=O)C(C)C(C)NC(=O)C(Cc2ccc(OP(=O)(O)O)cc2)NCCOc2cccc2CCN(CC(N)=O)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCC1NC(=O)C(C)C(C)NC(=O)C(Cc2ccc(OP(=O)(O)O)cc2)NCCOc2cccc2CCN(CC(N)=O)C1=O	COc1cc(-c2ccc(O)nn2)ccc1-n1cnc(C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(-c2ccc(O)nn2)ccc1-n1cnc(C)c1	COCCc1sc(=NC(=O)c2ccc3cc4n(c3c2)C(C)(C)C2CC(C)=NN2C=N4)s1	FALSE	TRUE	TRUE
COCCc1sc(=NC(=O)c2ccc3cc4n(c3c2)C(C)(C)C2CC(C)=NN2C=N4)s1	CCOC1c2cccc2CCC1N1CCC2(CC1)C(=O)NCN2c1cccc(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC1c2cccc2CCC1N1CCC2(CC1)C(=O)NCN2c1cccc(Cl)c1	Cc1cc(C)c(C(O)=Nc2c(C)nn(C)c2C)c(C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)c(C(O)=Nc2c(C)nn(C)c2C)c(C)c1	Cc1ccc(C(=O)NNC(=S)NC(=O)c2cccc2N)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)NNC(=S)NC(=O)c2cccc2N)cc1	CC(C)=CCOc1cccc2oc(=O)cc(C)c12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)=CCOc1cccc2oc(=O)cc(C)c12	CCOc1ccc(CCN(C(=O)Cn2ccc3cc(S(=O)(=O)N4CCC(C)CC4)ccc32)cc1OCC	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(CCN(C(=O)Cn2ccc3cc(S(=O)(=O)N4CCC(C)CC4)ccc32)cc1OCC	COc1ccc(CNc2ccnc3c2NC(=O)CC3)c(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CNc2ccnc3c2NC(=O)CC3)c(OC)c1OC	COc1cccc1N1CCN(CCCCN2C(=O)CCC(=C3c4cccc4-c4cc(Cl)ccc43)C2=O)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc1N1CCN(CCCCN2C(=O)CCC(=C3c4cccc4-c4cc(Cl)ccc43)C2=O)CC1				

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CCN(CC)C(=O)Nc1ccc2c(c1)C(=C1Nc3ccc(NC(=O)NC(=O)CCN4CCN5CCCC5C4)cc3C1=O)C(=O)N2	CCN(CC)C(=O)Nc1ccc2c(c1)C(=C1Nc3ccc(NC(=O)NC(=O)CCN4CCN5CCCC5C4)cc3C1=O)C(=O)N2	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(C(Nc2c(Nc3cccc(C(F)(F)F)c3)c(=O)c2=O)C2(C)COC2)c1	COc1cccc(C(Nc2c(Nc3cccc(C(F)(F)F)c3)c(=O)c2=O)C2(C)COC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(CC(=O)Nc1cccc(-c2ccccc2)c1)C(=O)c1cc2ccccc2cc1O	CN(CC(=O)Nc1cccc(-c2ccccc2)c1)C(=O)c1cc2ccccc2cc1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOCc1cc(OC)cc(OC)CCCC(=O)N(Cc2ccc(-c3ccccc3CN)cc2)c2ccc(C(=O)O)cc2)c1	CCOCc1cc(OC)cc(OC)CCCC(=O)N(Cc2ccc(-c3ccccc3CN)cc2)c2ccc(C(=O)O)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
C1CCC(C(C)C)C(OC)COCc2sc([Si](C)(C)C)nc2C)C1	Cc1nc([Si](C)(C)C)sc1COCOC1CC(C)CCC1C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC1CCN(c2noc(C(F)(F)F)n2)CC1)c1cc2cc(Cl)ccc2[nH]1	O=C(NC1CCN(c2noc(C(F)(F)F)n2)CC1)c1cc2cc(Cl)ccc2[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CN(c2ccc3nc(C4CCC(S(C)(=O)=O)CC4)n(Cc4ccc(-c5ccc(C(F)(F)F)cc5)cc4)c3n2)CC(C)N1	CC1CN(c2ccc3nc(C4CCC(S(C)(=O)=O)CC4)n(Cc4ccc(-c5ccc(C(F)(F)F)cc5)cc4)c3n2)CC(C)N1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1nc(SCC(=O)N2CCc3ccccc3C2)c2ccccc2n1	CC(C)(C)c1nc(SCC(=O)N2CCc3ccccc3C2)c2ccccc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc(OCc2ccccc2)c2[nH]cnc2n1	Nc1nc(OCc2ccccc2)c2[nH]cnc2n1	TRUE	TRUE	FALSE
COc1ccc(Nc2cccn2)c2sc(C(=O)Nc3ccccc3)cc12	COc1ccc(Nc2cccn2)c2sc(C(=O)Nc3ccccc3)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN1CCCC(C(=O)SC(C)(C)C)C1	CCCN1CCCC(C(=O)SC(C)(C)C)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)OC(=O)NCC1CCC(Nc2nc(-c3ccccc3Cl)no2)CC1	CC(C)(C)OC(=O)NCC1CCC(Nc2nc(-c3ccccc3Cl)no2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc(=O)n(C2SC(CO)C(O)C2O)cc1F	Nc1nc(=O)n(C2SC(CO)C(O)C2O)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)N1N=C(c2ccc(Sc3nc(Nc4ccccc4)nc(O)n3)cc2)CC1c1ccc(Cl)cc1	CC(=O)N1N=C(c2ccc(Sc3nc(Nc4ccccc4)n3)cc2)CC1c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C)C)c1ccnc2c(C(=O)c3ccccc3)enn12	CO(C)C)c1ccnc2c(C(=O)c3ccccc3)enn12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NC(=O)CCC#N)cc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)CN3CCCC3)c2)ncc1Cl	COc1ccc(NC(=O)CCC#N)cc1Nc1nc(Nc2cccc(NC(=O)CN3CCCC3)c2)ncc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C(=O)C1C(c2ccc(-c3ccc(F)c(OC)c3)cc2)CC2CCC1N2C	CO(C(=O)C1C(c2ccc(-c3ccc(F)c(OC)c3)cc2)CC2CCC1N2C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1-n1nnc2ccccc21	COc1ccccc1-n1nnc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CN2C(=O)CCN(CC(=O)c3ccc(OC)c(OC)c3)C2c2ccc(Cl)cc2Cl)cc1	COc1ccc(CN2C(=O)CCN(CC(=O)c3ccc(OC)c(OC)c3)C2c2ccc(Cl)cc2Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)N1CCC(NC(=O)c2ccc(CSc3c4c(nc5ccccc35)CCCC4)cc2)CC1	CCOC(=O)N1CCC(NC(=O)c2ccc(CSc3c4c(nc5ccccc35)CCCC4)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CO)NS(=O)(=O)c1ccc2ccc3cccc4ccc1c2c34	CC(C)CO)NS(=O)(=O)c1ccc2ccc3cccc4ccc1c2c34	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1cccc2nc(NCc3ccc(NC(=O)c4ccc(C(F)(F)F)cc4)cc3)[nH]c12	CCc1cccc2nc(NCc3ccc(NC(=O)c4ccc(C(F)(F)F)cc4)cc3)[nH]c12	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccccc1CNC(=O)c1cc(S(=O)(=O)N2CCCC2)cn1CCO	CCOc1ccccc1CNC(=O)c1cc(S(=O)(=O)N2CCCC2)cn1CCO	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CC(c2ccccc2)Sc2[nH]c3ccccc3c21	O=C1CC(c2ccccc2)Sc2[nH]c3ccccc3c21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)NC2CC2)cc1-c1ccc2c(c1)NC(=O)C21CCC(O)CC1	Cc1ccc(C(=O)NC2CC2)cc1-c1ccc2c(c1)NC(=O)C21CCC(O)CC1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C(=O)c1c(O)cc(O)c(C(=O)CC)c1O	CC(C(=O)c1c(O)cc(O)c(C(=O)CC)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1ccc(OC)cc1)n1c(O)nc2cnccc21	CC(C)c1ccc(OC)cc1)n1c(O)nc2cnccc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(=O)c2cccc(C(F)(F)F)c2)cc1N1CCc2nc(Nc3ccc(C(=O)N4CCN(C)CC4)cc3)ncc2C1	Cc1ccc(NC(=O)c2cccc(C(F)(F)F)c2)cc1N1CCc2nc(Nc3ccc(C(=O)N4CCN(C)CC4)cc3)ncc2C1	TRUE	TRUE	TRUE
c1nccc(Nc2nccn3ccc(Br)cc23)c1	Brc1ccc2nccn(Nc3cccn3)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nn(Cc2nccn2C(C)C)c(C)c1Br	Cc1nn(Cc2nccn2C(C)C)c(C)c1Br	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(cc1OC)C(c1cc(OC)c(OC)c1)C1C(=O)OCC1C2N=[N+]=[N-]	COc1cc2c(cc1OC)C(c1cc(OC)c(OC)c(OC)c1)C1C(=O)OCC1C2N=[N+]=[N-]	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)Cc1c(C)nc2n(-c3ccc(C)c(C)c3)c3ncccc3c12	CCN(CC)Cc1c(C)nc2n(-c3ccc(C)c(C)c3)c3ncccc3c12	FALSE	TRUE	TRUE
O=C(NCC1CCCO1)c1ccc(-c2ccccc2)s1	O=C(NCC1CCCO1)c1ccc(-c2ccccc2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1ccc(NC(=O)OCC2Oc3c(ccc4c3C=CC(C)(C)O4)C3C(OC4OC(COC5OC(C)C(O)CC5O)C(O)C(O)C4O)COC23)cc1	CC1OC(OC)C2OC(C)OC3COC4C(COC(=O)Nc5ccc(C(C)(C)C)cc5)Oc5c(ccc6c5C=CC(C)(C)O6)C34C(C)C(O)C2O)C(O)CC1O	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)C(CCO)C1Cc1ccc(-c2ccc(-c3ccccc3NC(=O)C#CP(=O)(OCC(F)(F)F)C#Cc3ccccc3)cc2)cc1	CC1(C)C(CCO)C1Cc1ccc(-c2ccc(-c3ccccc3NC(=O)C#CP(=O)(C#Cc3ccccc3)OCC(F)(F)F)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
C=Cc1oc(O)cc1C1c2c(C)c(O)ccc2CCN1C	C=Cc1oc(O)cc1C1c2c(ccc(O)c2C)CCN1C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(NC(=O)OCc1ccccc1)C(OC)CN1CCCC1c1ccccc1	CC(NC(=O)OCc1ccccc1)C(OC)CN1CCCC1c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(C=CC(=O)OCC(=O)NCC2ccccc2)n1	Cc1cccc(C=CC(=O)OCC(=O)NCC2ccccc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(O)c(C(=O)C=Cc2cccc([N+](=O)[O-])c2)c(=O)o1	Cc1cc(O)c(C(=O)C=Cc2cccc([N+](=O)[O-])c2)c(=O)o1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(Nc1ccccc1)c1nccc1NCc1ccncc1	O=C(Nc1ccccc1)c1nccc1NCc1ccncc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(CC(C)O)cc1-c1cc2c(Nc3ccc(F)c(Cl)c3)ncnc2s1	Cc1ccc(CC(C)O)cc1-c1cc2c(Nc3ccc(F)c(Cl)c3)ncnc2s1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(c1cc(-c2ccc(CN(C)C(=O)OCC)cc2)cc(C(=O)NCc2cc(OC)ccc2OC)c1C)C1CCOCC1	CCOC(=O)N(C)Cc1ccc(-c2cc(C(=O)NCc3cc(OC)ccc3OC)c(C)c(N(CC)C3CCOCC3)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
C[n+] <sub>1</sub> ccn(C2OC(CO)C3COC23)n1	C[n+] <sub>1</sub> ccn(C2OC(CO)C3COC23)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(Nc1ncc(F)c(N2C(=O)OCC2C(C)F)n1)c1cc(C2CC2)nc(N2CCCCC2)n1	CC(Nc1ncc(F)c(N2C(=O)OCC2C(C)F)n1)c1cc(C2CC2)nc(N2CCCCC2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(O)nc2c(-c3ccccc3)enn2c1O	Cc1c(O)nc2c(-c3ccccc3)enn2c1O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=C2C=Cc3ccc(Cl)c3C2=O)cc(OC)c1	COc1cc(C=C2C=Cc3ccc(Cl)c3C2=O)cc(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)CCON=C1CC2C(C)CC1C2C=Cc1cccc(-c2cc(C)ccc2C)cn1	CCN(CC)CCON=C1CC2C(C)CC1C2C=Cc1cccc(-c2cc(C)ccc2C)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc(C(=O)C=C(C)C=C2=C(C)C)CCCC2(C)C)c1	COc1ccccc(C(=O)C=C(C)C=C2=C(C)C)CCCC2(C)C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NN=CC1CC=CCC1)c1csen1	O=C(NN=CC1CC=CCC1)c1csen1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(-c2nc3ccc4nnc5c6ccccc6n(CCN6CCOCC5)c4c3n2Cc2ccc(C)cc2)cc1	Cc1cccc(-c2nc3ccc4nnc5c6ccccc6n(CCN6CCOCC5)c4c3n2Cc2ccc(C)cc2)cc1	FALSE	TRUE	TRUE
Cc1ccc2c(OC(=O)Nc3ccc4c(c3)OCCO4)cc3c(c2n1)CCC(C)(C)O3	Cc1ccc2c(OC(=O)Nc3ccc4c(c3)OCCO4)cc3c(c2n1)CCC(C)(C)O3	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc2c(c1)c(=O)oc1cc(OC(=O)N3CCOCC3)ccc12	Cc1ccc2c(c1)c(=O)oc1cc(OC(=O)N3CCOCC3)ccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN1CC23c4c5ccc(O)c4OC2C(=O)C=CC3C1C5	CCCN1CC23c4c5ccc(O)c4OC2C(=O)C=CC3C1C5	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C(=O)C=Cc1cn(C2OC(C)C(O)C2O)c2nn(-c3ccccc3)nc12	CO(C(=O)C=Cc1cn(C2OC(CO)C(O)C2O)c2nn(-c3ccccc3)nc12	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1ccc(CNCCCNc2ccnc3cc(Cl)ccc23)cc1	Oc1ccc(CNCCCNc2ccnc3cc(Cl)ccc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)nc(Nc2ccc(OC3ccncc3-c3nc[nH]c(=O)c3C)cc2)n1	Cc1cc(C)nc(Nc2ccc(OC3ccncc3-c3nc[nH]c(=O)c3C)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C(C(=O)OCC)C(S(C(=S)N1CCCC1)S(=O)(=O)c1ccc(C)cc1	CCOC(=O)C(C(=O)OCC)C(S(C(=S)N1CCCC1)S(=O)(=O)c1ccc(C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(-c2cn(C3CCc4c(F)ccccc4N(CC(F)(F)F)C3=O)nn2)ccc1-n1cnc(C)c1	COc1cc(-c2cn(C3CCc4c(F)ccccc4N(CC(F)(F)F)C3=O)nn2)ccc1-n1cnc(C)c1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(=NNc1nccc(C(F)(F)F)cc1Cl)c1ccccc1O	CC(=NNc1nccc(C(F)(F)F)cc1Cl)c1ccccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(O)C1CCCN1C(=O)c1ccc(N2CC(F)(F)C2)c(OC)C2CC2)n1	N=C(O)C1CCCN1C(=O)c1ccc(N2CC(F)(F)C2)c(OC)C2CC2)n1	TRUE	TRUE	FALSE
C=CCc1c(C#N)c(N)nc2sc3c(c12)CCCC3	C=CCc1c(C#N)c(N)nc2sc3c(c12)CCCC3	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1n[nH]c2c1C(c1ccccc1N=C(O)c1cnccn1)N(c1ccccc(Cl)c1F)C2=O	Cc1n[nH]c2c1C(c1ccccc1N=C(O)c1cnccn1)N(c1ccccc(Cl)c1F)C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCC(CCCCCC)C(=O)CN1CC(c2ccc3c(c2)CCO3)C(C(=O)O)C1c1ccc(OC)cc1	CCCCCCCC(CCCCCC)C(=O)CN1CC(c2ccc3c(c2)CCO3)C(C(=O)O)C1c1ccc(OC)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1ccccc1-c1ccc2ccccc(OC3OC(CO)C(O)C(O)C3O)c2n1	OCC1OC(Oc2cccc3cccc(-c4ccccc4O)nc23)C(O)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)C1COC(=O)N1c1ccn2ncc(-c3ccc(-c4nccn4CCO)cc3)c2n1	CC(C)C1COC(=O)N1c1ccn2ncc(-c3ccc(-c4nccn4CCO)cc3)c2n1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(NO)C1CCCN1S(=O)(=O)c1ccc(OCc2c(F)ccccc2Cl)cc1	O=C(NO)C1CCCN1S(=O)(=O)c1ccc(OCc2c(F)ccccc2Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCOc1ccc(Nc2nc(-c3cccn3)nc3ccsc23)cc1	CN(C)CCOc1ccc(Nc2nc(-c3cccn3)nc3ccsc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2=NN(C3=NC(=O)CS3)C(c3cc(OC)c(OC)c(C)C2)cc1OC	COc1ccc(C2=NN(C3=NC(=O)CS3)C(c3cc(OC)c(OC)c(C)C2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cc1S(Cc2ccc(Cl)cc2Cl)N(CC(=O)NCCCN2CCOCC2)C1=O)NCc1ccccc2ccccc12	O=C(Cc1S(Cc2ccc(Cl)cc2Cl)N(CC(=O)NCCCN2CCOCC2)C1=O)NCc1ccccc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2ccc3nccc4c(c3n2)n(C2CCOCC2)c(=O)n4C)cn1	COc1ccc(-c2ccc3nccc4c(c3n2)n(C2CCOCC2)c(=O)n4C)cn1	TRUE	TRUE	FALSE
Cn1c(C(=O)Nc2nc3ccccc3n2Cc2ccco2)cc2sccc21	Cn1c(C(=O)Nc2nc3ccccc3n2Cc2ccco2)cc2sccc21	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2ccc3c(c2)Nc2ccc(OC)cc2C3=O)cc1	COc1ccc(-c2ccc3c(c2)O4cc(OC)ccc4[nH]c3c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)c2cc(O)ccc2NC2=NC(c3ccc(F)cc3)(c3ccsc3)C(=O)N21	CC1(C)c2cc(O)ccc2NC2=NC(c3ccc(F)cc3)(c3ccsc3)C(=O)N21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cnnn1Cc1ccccc1)c1ccc(Cl)c(S(=O)(=O)N2CCCC2)c1	O=C(Nc1cnnn1Cc1ccccc1)c1ccc(Cl)c(S(=O)(=O)N2CCCC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(O)nc(O)c1C=CC(=O)O	Cc1nc(O)nc(O)c1C=CC(=O)O	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1ccc(CN2C(=S)N(Cc3cccc(C4(C(F)(F)F)N=N4)c3)C(=O)CCC2CCNC(=S)Nc2ccccc2)cc1	Cc1ccc(CN2C(=S)N(Cc3cccc(C4(C(F)(F)F)N=N4)c3)C(=O)CCC2CCNC(=S)Nc2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(Nc1nccs1)c1ccc2c(-c3ccc(C(F)(F)F)cc3Cl)nccc2c1	O=S(=O)(Nc1nccs1)c1ccc2c(-c3ccc(C(F)(F)F)cc3Cl)nccc2c1	TRUE	TRUE	FALSE
CCN1CCC(c2nc3ccc(NC(=O)C4CC4Oc4ccc(F)cc4F)ccc3n2C2CCCC2)CC1	CCN1CCC(c2nc3ccc(NC(=O)C4CC4Oc4ccc(F)cc4F)ccc3n2C2CCCC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc1NC(=O)Nc1cc2c(C(=O)NCCCN3CCOCC3)cccc2cc1C(=O)NO	Cc1ccccc1NC(=O)Nc1cc2c(C(=O)NCCCN3CCOCC3)cccc2cc1C(=O)NO	TRUE	TRUE	TRUE
O=S1(=O)CC=C(c2ccccc2)CC1	O=S1(=O)CC=C(c2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(NC(=O)C=Cc1ccc(OP(=O)(O)O)cc1)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)NC(C)(C)C	CC(NC(=O)C=Cc1ccc(OP(=O)(O)O)cc1)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)NC(C)(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cccc(N2CCC(N3CCCC3)CC2)c1)NC12CC3CC(C(C3)C1)C2	O=C(Nc1cccc(N2CCC(N3CCCC3)CC2)c1)NC12CC3CC(C(C3)C1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
c1cc(OC)C2CN2)ccc1CCc1ccc(-c2ccccc2)cc1	c1ccc(-c2ccc(CCc3ccc(OC)C4CCN4)cc3)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
Cc1ccc2nc(N(Cc3cccn3)C(=O)c3ccc4c(c3)OCCO4)sc2c1	Cc1ccc2nc(N(Cc3cccn3)C(=O)c3ccc4c(c3)OCCO4)sc2c1	TRUE	TRUE	FALSE
COc1ccc(C(O)=Nc2cnnc(Cc3c(Cl)noc3C)c2)cc1	COc1ccc(C(O)=Nc2cnnc(Cc3c(Cl)noc3C)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C(=O)CN2C(=O)C3CCCC3C2=O)c(C)n1-c1ccc2c(c1)OCO2	Cc1cc(C(=O)CN2C(=O)C3CCCC3C2=O)c(C)n1-c1ccc2c(c1)OCO2	TRUE	TRUE	TRUE
COc1c(C)CN2CCC(N(C)Cc3nc(C4CC4)no3)CC2)nc2ccccc21	COc1c(C)CN2CCC(N(C)Cc3nc(C4CC4)no3)CC2)nc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(NC(=O)OCC1cccc1)C(=O)NC(Cc(=O)O)C(=O)COc1c(F)c(F)cc(F)c1F	CC(C)C(NC(=O)OCC1cccc1)C(=O)NC(Cc(=O)O)C(=O)COc1c(F)c(F)cc(F)c1F	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(c2ccc3[nH]c(-c4c[nH]c5ccc(-c6ccncc6)cc45)nc3c2)CC1	CN1CCN(c2ccc3[nH]c(-c4c[nH]c5ccc(-c6ccncc6)cc45)nc3c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1cc(C(=O)C2CSC(c3cccn3)N2)c(=O)c2ccccc21	CCc1cc(C(=O)C2CSC(c3cccn3)N2)c(=O)c2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(C)NC(=O)COC(=O)C=Cc2ccccc2C(F)(F)F)cc1	Cc1ccc(C(C)NC(=O)COC(=O)C=Cc2ccccc2C(F)(F)F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCN(CCCC)CC(O)c1cc2c(Cl)cc(Cl)cc2c2cc(Cl)ccc12	CCCCN(CCCC)CC(O)c1cc2c(Cl)cc(Cl)cc2c2cc(Cl)ccc12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1)OC1(C=CC(=O)C=C1)CCC2	COc1ccc2c(c1)OC1(C=CC(=O)C=C1)CCC2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O))(=O)N2Cc3cc(CNC(=O)c4c[nH]c5ccccc45)ccc3NC(=O)C2)cc1	Cc1ccc(S(=O))(=O)N2CC(=O)Nc3ccc(CNC(=O)c4c[nH]c5ccccc45)cc3C2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
FC(F)(F)c1cccc(N=c2[nH]cc(Cc3CCC(COc4cnc(Cl)cn4)CC3)o2)c1	FC(F)(F)c1cccc(N=c2[nH]cc(Cc3CCC(COc4cnc(Cl)cn4)CC3)o2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CSc1nc2sc3c(c2c(=O)n1-c1cccc2nonc12)CCCC3	O=C(O)CSc1nc2sc3c(c2c(=O)n1-c1cccc2nonc12)CCCC3	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(C)c1NC(=O)C1=C(O)c2ccccc2S(=O))(=O)N1C	Cc1cccc(C)c1NC(=O)C1=C(O)c2ccccc2S(=O))(=O)N1C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cc1CCCC1OC(=O)c1ccc([N+](=O)[O-])cc1)Nc1ccc(-c2ccc[nH]2)cc1	O=C(Cc1CCCC1OC(=O)c1ccc([N+](=O)[O-])cc1)Nc1ccc(-c2ccc[nH]2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(-c2cc(Oc3ccc4ncccc4c3)cnc2C(=O)O)c1	COc1cccc(-c2cc(Oc3ccc4ncccc4c3)cnc2C(=O)O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1cc2c(cc1C(=O)N1CCN(c3nccn3)CC1)OCO2	CCc1cc2c(cc1C(=O)N1CCN(c3nccn3)CC1)OCO2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(OCCC(C)N(C)C)cc(C)c1Cc1cc(C)c(OCC(O)CNC(C)(C)C)c1	Cc1cc(OCCC(C)N(C)C)cc(C)c1Cc1cc(C)c(OCC(O)CNC(C)(C)C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC1CCN(c2cc(Cl)ncn2)C1	CNC1CCN(c2cc(Cl)ncn2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3ccc(-c4cnc(Nc5ncc6ccccc6n5)c4)cc3)cc2)CC1	CN1CCN(c2ccc(C(=O)Nc3ccc(-c4cnc(Nc5ncc6ccccc6n5)c4)cc3)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1oc(C(=O)O)cc1COc1ccc(-c2ccc(-c3csc(N4C(=O)CSC4c4ccc(F)c(F)c4Cl)n3)o2)c(Cl)c1Cl	Cc1oc(C(=O)O)cc1COc1ccc(-c2ccc(-c3csc(N4C(=O)CSC4c4ccc(F)c(F)c4Cl)n3)o2)c(Cl)c1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2nccc(Oc3ccc(NC(=O)NN=Cc4cccn4)cc3)c2cc1OC	COc1cc2nccc(Oc3ccc(NC(=O)NN=Cc4cccn4)cc3)c2cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc1C(=O)Nc1ccccc1-C(=O)NCC(O)c1ccccc1	COc1cccc1C(=O)Nc1ccccc1C(=O)NCC(O)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(NC(=O)C(CO)NC(=O)C(CCCN=C(N)N)NC(=O)CS(C)N)=O	CC(NC(=O)C(CO)NC(=O)C(CCCN=C(N)N)NC(=O)CS(C)N)=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(NC(=O)C2(C)CCN2Cc2ccc(-c3ccccc3)o2)c1	COc1cccc(NC(=O)C2(C)CCN2Cc2ccc(-c3ccccc3)o2)c1	TRUE	TRUE	FALSE
COc1CC(=O)C(C)(C)C=CC(C)C(c2ccc(-c3cc4cccc4o3)cc2)O1	COc1CC(=O)C(C)(C)C=CC(C)C(c2ccc(-c3cc4cccc4o3)cc2)O1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1OCCN(C)C(=O)NC(C)Cc1ccc2ccccc2c1	COc1ccccc1OCCN(C)C(=O)NC(C)Cc1ccc2ccccc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C)NC(=O)c1nc(NC(=O)c2ccc(N(C)C)cc2)cn1CC	CCC(C)NC(=O)c1nc(NC(=O)c2ccc(N(C)C)cc2)cn1CC	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)n(S(=O))(=O)c2ccccc2)n1	Cc1cc(C)n(S(=O))(=O)c2ccccc2)n1	TRUE	TRUE	FALSE
CCN(CC)C(=O)c1cc[n+](C)c2ccccc12	CCN(CC)C(=O)c1cc[n+](C)c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1sc2nc(S)nc(O)c2c1-c1ccccc1	Cc1sc2nc(S)nc(O)c2c1-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1c2c(O)ccc(O)c2C(c2ccc(OCCC(O)CCCCCCCC3CCCC3)cc2)c2ccc(O)c2c1	O=C1c2c(O)ccc(O)ccc(O)c2C(c2ccc(OCCC(O)CCCCCCCC3CCCC3)cc2)c2c(O)ccc(O)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CNc2nc(C(=O)N3CCN(C(=O)NCCC4cccc4)CC3)c(OC)nc2C(C)C)cc1	COc1ccc(CNc2nc(C(=O)N3CCN(C(=O)NCCC4cccc4)CC3)c(OC)nc2C(C)C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1C(=O)Nc1ccccc1N1CCCC1	COc1ccccc1C(=O)Nc1ccccc1N1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1cccc(-c2ccc(C(=N)NO)cc2)c1	N#Cc1cccc(-c2ccc(C(=N)NO)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(NC(=O)OCc1ccccc1)P(=O)(O)O	CCC(NC(=O)OCc1ccccc1)P(=O)(O)O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCCC1=CCCCC1)c1ccc(CSc2ccccc2N2CCOCC2)cc1	O=C(NCCC1=CCCCC1)c1ccc(CSc2ccccc2N2CCOCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(NC(=O)COC(=O)C2C(=O)N(Cc3ccccc3)C2)c1	COc1cccc(NC(=O)COC(=O)C2C(=O)N(Cc3ccccc3)C2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(=O)CN(C)C(=O)c2cc3c(s2)CCCC3)cc1S(=O)(=O)N(C)C	Cc1ccc(NC(=O)CN(C)C(=O)c2cc3c(s2)CCCC3)cc1S(=O)(=O)N(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C(=O)Nc2cccc(COc3cnc4cccc4c3)c2)cc(OC)c1OC	COc1cc(C(=O)Nc2cccc(COc3cnc4cccc4c3)c2)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
S=C(NCCN1CCOCC1)N1CCCCC1	S=C(NCCN1CCOCC1)N1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1nc(-c2ccccc2)nc2c1oc1ncccc12	Oc1nc(-c2ccccc2)nc2c1oc1ncccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1n[nH]c2cc(N=C(O)NC(CO)c3ccc(F)cc3)nc(C3=CCCCC3)c12	CCOc1n[nH]c2cc(N=C(O)NC(CO)c3ccc(F)cc3)nc(C3=CCCCC3)c12	TRUE	TRUE	TRUE
c1cc(CN2CC3(CC2)COC(COc2cccn2)C3)no1	c1ccc(OCC2CC3(CCN(Cc4cccn4)CC3)CO2)nc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1n[nH]c2c(=O)nc(Cc3ccccc3)c(C(C)C)NS(=O))(=O)c3ccc(F)cc3)nc12	CC(Cc1nc2c(C(C)C)n[nH]c2c(=O)n1Cc1ccccc1)NS(=O))(=O)c1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)Nc2ccccc2-c2nc3ccccc3[nH]2)c1OC	COc1ccc(C(=O)Nc2ccccc2-c2nc3ccccc3[nH]2)cc1OC	TRUE	TRUE	FALSE
CCC(=O)NC(C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(O)CN1CC2CCCC2CC1C(=O)NC(C)(C)C(C)C	CCC(=O)NC(C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(O)CN1CC2CCCC2CC1C(=O)NC(C)(C)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(Cc1cc2c(cc1[N+](=O)[O-])OCO2)NC(=O)C(Cc(=O)O)NC(=O)Nc1ccccc1	CC(Cc1cc2c(cc1[N+](=O)[O-])OCO2)NC(=O)C(Cc(=O)O)NC(=O)Nc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCSc1nc2cc(-n3nc(C(C)N(CO)oc3=O)c(Cl)cc2s1	C=CCSc1nc2cc(-n3nc(C(C)N(CO)oc3=O)c(Cl)cc2s1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=CC(=O)NCCN2CCN(S(=O))(=O)c3ccccc3C(F)(F)F)CC2)cc([N+](=O)[O-])c1O	COc1cc(C=CC(=O)NCCN2CCN(S(=O))(=O)c3ccccc3C(F)(F)F)CC2)cc([N+](=O)[O-])c1O	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)CSc1ccc(C(=O)NCC2ccc3ccccc3c2)cc1[N+](=O)[O-]	COC(=O)CSc1ccc(C(=O)NCC2ccc3ccccc3c2)cc1[N+](=O)[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1c2c(-c3nnc(Cc4ccc(F)cc4)o3)cccc2nc(-c2ccccc2)n2n1CCC2	O=C1c2c(cccc2-c2nnc(Cc3ccc(F)cc3)o2)N=C(c2ccccc2)N2CCCN12	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCc1nc(N)c2nc(-c3cc(OCC4cccc4)ccc3F)n(CC)c2n1	CCCCc1nc(N)c2nc(-c3cc(OCC4cccc4)ccc3F)n(CC)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(N(Cc2ccccc2)C(=O)Nc2ccc(C(F)(F)F)cc2)s1)c1cccn1	O=C(Nc1ccc(N(Cc2ccccc2)C(=O)Nc2ccc(C(F)(F)F)cc2)s1)c1cccn1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)C1CC(C(=O)Nc2ccc3c(c2)-c2c(c(C(N)=O)nn2-c2ccc(S(C)(=O)=O)cc2)CC3)N(C(=O)c2cccc(OC(F)(F)F)c2)C1	CN(C)C1CC(C(=O)Nc2ccc3c(c2)-c2c(c(C(N)=O)nn2-c2ccc(S(C)(=O)=O)cc2)CC3)N(C(=O)c2cccc(OC(F)(F)F)c2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1Cc2ccccc3[nH]c(=S)n(c23)CC1(C)C	CCN1Cc2ccccc3[nH]c(=S)n(c23)CC1(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(Cl)cc1)Nc1cccc(C(=O)c2ccncc2)c1	O=C(Nc1ccc(Cl)cc1)Nc1cccc(C(=O)c2ccncc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(N(CCNc1ncnc1Cl)C1CC1c1ccccc1)c1ccc(Cl)cc1	O=C(N(CCNc1ncnc1Cl)C1CC1c1ccccc1)c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1ccc(C2c3ccc(O)cc3OC3c4cc(O)cc(O)c4OCC32)cc1	Oc1ccc(C2c3ccc(O)cc3OC3c4cc(O)cc(O)c4OCC32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1CCC(Nc2ccc(S(=O))(=O)N3CCCC3)cc2[N+](=O)[O-])CC1	CCN1CCC(Nc2ccc(S(=O))(=O)N3CCCC3)cc2[N+](=O)[O-])CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nn(C)c(c1C)c1NC(=O)CN1CCN(c2nccn2)CC1	Cc1nn(C)c(c1C)c1NC(=O)CN1CCN(c2nccn2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1cnc(-c2ccc(C3CCC3)c(Oc3nccn3)c2F)cn1	Nc1cnc(-c2ccc(C3CCC3)c(Oc3nccn3)c2F)cn1	TRUE	TRUE	FALSE
N#Cc1c(N)cc[n+](O)[O-])c1-c1cc(O)ccc1O	N#Cc1c(N)cc[n+](O)[O-])c1-c1cc(O)ccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1ccc(C2=C(c3ccc(O)cc3)C3C=CC4CCCN4C32)cc1	O=C(O)c1ccc(C2=C(c3ccc(O)cc3)C3C=CC4CCCN4C32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(C(=O)N2Cc3cnccc3C2)cc1)Nc1ccc(F)cc1F	O=C(Nc1ccc(C(=O)N2Cc3cnccc3C2)cc1)Nc1ccc(F)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc2nc(-c3ccccc3F)sc2c1	COc1cccc2nc(-c3ccccc3F)sc2c1	TRUE	TRUE	FALSE
CCCOC1(c2ccc(Br)cc2)SC=C(C)n2c1noc2=O	CCCOC1(c2ccc(Br)cc2)SC=C(C)n2c1noc2=O	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(NC1CC1)c1nc2c(s1)CCN(C(=O)c1cccc(F)c1F)CC2	O=C(NC1CC1)c1nc2c(s1)CCN(C(=O)c1cccc(F)c1F)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(NN=Cc1cccc(O)c1)c1cccc(-c2cccc(O)c2)c1	O=S(=O)(NN=Cc1cccc(O)c1)c1cccc(-c2cccc(O)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NC(Cc1c[nH]cn1)C(=O)NC(C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)OCc1ccccc1)C(C)C	CC(=O)NC(Cc1c[nH]cn1)C(=O)NC(C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(O)C(O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)OCc1ccccc1)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)OC(CCC=C(C)C)C1=CC(=O)c2c(O)ccc(O)c2C1=O	CC(=O)OC(CCC=C(C)C)C1=CC(=O)c2c(O)ccc(O)c2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(OCC2CCN(C3CCCC3)C2)nc1	c1ccc(OCC2CCN(C3CCCC3)C2)nc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O))(=O)N(C)c2ccc(OC(=O)Nc3ccccc3C)cc2)cc1	Cc1ccc(S(=O))(=O)N(C)c2ccc(OC(=O)Nc3ccccc3C)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCc1cccc(OCCCCC#Cc2ccc(NCCC(=O)O)cc2CC)c1	CCCCc1cccc(OCCCCC#Cc2ccc(NCCC(=O)O)cc2CC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(O)C(O)C(Cc1CCCCC1)NC(=O)C(Cc1c[nH]cn1)NC(=O)C(Cc1cccc1)NC(=O)C(Cc1cccc1)NC(=O)OC(C)(C)C	CC(C)CC(O)C(O)C(Cc1CCCCC1)NC(=O)C(Cc1CCCCC1)NC(=O)C(Cc1c[nH]cn1)NC(=O)C(Cc1cccc1)NC(=O)C(Cc1cccc1)NC(=O)OC(C)(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ccc2nc3c4cccn4c(=O)cc-3oc2c1	Nc1ccc2nc3c4cccn4c(=O)cc-3oc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(CNC(=O)Cn2c(=O)c3cccn3c3cccn32)c1	COc1cccc(CNC(=O)Cn2c(=O)c3cccn3c3cccn32)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C1CSc2c(C3CC3)c(Cc3cccc(-c4ccccc4)c3)cc(=O)n21	O=C(O)C1CSc2c(C3CC3)c(Cc3cccc(-c4ccccc4)c3)cc(=O)n21	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(NC(C)=O)c(OC)c(OC)c1-c1cc(C(=O)NC(=N)N)cc(OC)c1OC	COc1cc(C(=O)NC(=N)N)cc(-c2c(OC)cc(NC(C)=O)c(OC)c2OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(-c2enc3[nH]ccc3c2)cc(OC)c1OC	COc1cc(-c2enc3[nH]ccc3c2)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nn(Cc2ccc(Cl)cc2)c2nc(-c3ccccc3F)cc(C(=O)NC3CCCC3)c12	Nc1nn(Cc2ccc(Cl)cc2)c2nc(-c3ccccc3F)cc(C(=O)NC3CCCC3)c12	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCSc1nc(N)c(C#N)c(-c2ccc([N+](=O)[O-])cc2)c1C#N	CCCCSc1nc(N)c(C#N)c(-c2ccc([N+](=O)[O-])cc2)c1C#N	TRUE	TRUE	TRUE
CC(OC1ccc([N+](=O)[O-])cc1[N+](=O)[O-])C(=O)O	CC(OC1ccc([N+](=O)[O-])cc1[N+](=O)[O-])C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CCc1c(-c2ccc(O)cc2)nn2c(N)nncc12	CCc1c(-c2ccc(O)cc2)nn2c(N)nncc12	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ccc(C(=O)C=Cc2ccc(F)c(OC(F)(F)C(F)F)c2)cc1	Nc1ccc(C(=O)C=Cc2ccc(F)c(OC(F)(F)C(F)F)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1cccc(-c2nc(N3CCOCC3)c3nc4cccc4n3n2)c1	O=C(O)c1cccc(-c2nc(N3CCOCC3)c3nc4cccc4n3n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1c2cccc2nnn1-c1ccc(Br)cc1	O=c1c2cccc2nnn1-c1ccc(Br)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
c1ccc2nc(-c3csc3)c(NC3CCCCC3)cc2c1	c1ccc2nc(-c3csc3)c(NC3CCCCC3)cc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1cccc1)C1c2cccc2-c2nc3cccc3cc21	O=C(c1cccc1)C1c2cccc2-c2nc3cccc3cc21	TRUE	TRUE	TRUE
NNC(=S)Nc1ccc2ccccc12	NNC(=S)Nc1ccc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1nccc1-c1cc(C(N)=O)nc2cc(-c3cc(C4CCN(S(C)(=O)=O)CC4)ccc3F)ccc12	Cn1nccc1-c1cc(C(N)=O)nc2cc(-c3cc(C4CCN(S(C)(=O)=O)CC4)ccc3F)ccc12	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc(-c2ccccc2)cc(-c2cccn2)n1	Nc1nc(-c2ccccc2)cc(-c2cccn2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(N)NCCCC(NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)OCc1ccccc1)C(=O)c1nccs1	N=C(N)NCCCC(NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)OCc1ccccc1)C(=O)c1nccs1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=NO)Nc2cccc(C(C)C)c2)cc1	Cc1ccc(C(=NO)Nc2cccc(C(C)C)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCN(C(=O)CCC(=O)Nc1cc(C)on1)C(C(=O)NC(C)(C)C)c1ccsc1	CCCCN(C(=O)CCC(=O)Nc1cc(C)on1)C(C(=O)NC(C)(C)C)c1ccsc1	TRUE	TRUE	TRUE
C#CCN(Cc1ccc2nc(C#N)nc(O)c2c1)c1cncc(F)c1	C#CCN(Cc1ccc2nc(C#N)nc(O)c2c1)c1cncc(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(c1ccc(OC)cc1)C12CCN(CC1)C(C(=O)OC)C2	C=C(c1ccc(OC)cc1)C12CCN(CC1)C(C(=O)OC)C2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc2c(CCCCN3CCN(CC=Cc4cccc4)CC3)nc3cc4c(cc3c12)OCO4	Cc1cccc2c(CCCCN3CCN(CC=Cc4cccc4)CC3)nc3cc4c(cc3c12)OCO4	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)Oc2c(F)cc(C3=NNC(=O)CC3)cc2C(=O)N1c1cccc(COc2ccc(Cl)cc2)c1	CC1(C)Oc2c(F)cc(C3=NNC(=O)CC3)cc2C(=O)N1c1cccc(COc2ccc(Cl)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C=Cc1ccc(OCc2ccccc2)cc1	CCOC(=O)C=Cc1ccc(OCc2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
N=C1C(=Cc2ccc(Br)cc2)C(=O)N=C2SC(c3ccc(Cl)cc3)=NN12	N=C1C(=Cc2ccc(Br)cc2)C(=O)N=C2SC(c3ccc(Cl)cc3)=NN12	TRUE	TRUE	TRUE
NCP(=O)(O)O	NCP(=O)(O)O	TRUE	TRUE	FALSE
CC(O)C(N)C(=O)N1Cc2ccccc2CC1C(=O)Nc1cc(F)cc(F)c1	CC(O)C(N)C(=O)N1Cc2ccccc2CC1C(=O)Nc1cc(F)cc(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1c(l)cc(Cc2ccccc2F)c(O)c1l	Oc1c(l)cc(Cc2ccccc2F)c(O)c1l	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1NC2(CCCC2)-c2c1c1nsnc1c1nsnc21	O=C1NC2(CCCC2)c2c1c1nsnc1c1nsnc21	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc2[nH]c(-c3ccc(C(=O)NCCN4CCNCC4)cc3)cc2c2c1ncn2C1CC(CO)C(O)C1O	Nc1nc2[nH]c(-c3ccc(C(=O)NCCN4CCNCC4)cc3)cc2c2c1ncn2C1CC(CO)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)N=C(S)N=Nc1c(O)[nH]c2nnc(N)c12	CC(C)(C)N=C(S)N=Nc1c(O)[nH]c2nnc(N)c12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CCCCN1c(=O)c2ccc3c(=O)n(CC(=O)O)c(=O)c4ccc(c1=O)c4c32	O=C(O)CCCCN1c(=O)c2c3c(c(=O)n(CC(=O)O)c(=O)c4c3c(c1=O)=CC=4)=CC=2	TRUE	TRUE	TRUE
COQ(=O)c1cccc1OC1CCc2ccccc2C1=O	COQ(=O)c1cccc1OC1CCc2ccccc2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ccc(-c2cnc(N)nc2-c2ccccc2)cc1	N#Cc1ccc(-c2cnc(N)nc2-c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=CC2Cc3nc4cc(Cl)ccc4c(NCCCCCCCNC(=O)c4ccc(Br)o4)c3C(Cl)C2	CC1=CC2Cc3nc4cc(Cl)ccc4c(NCCCCCCCNC(=O)c4ccc(Br)o4)c3C(Cl)C2	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(-c2nnc(SCC(=O)Cl)o2)cc1	CCOc1ccc(-c2nnc(SCC(=O)Cl)o2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(CN1CCC(CNC(=O)c2cc3cc(Cl)ccc3[nH]2)NC(CCO)C1=O)c1ccccc1	CCC(CN1CCC(CNC(=O)c2cc3cc(Cl)ccc3[nH]2)NC(CCO)C1=O)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCSc1nncn1S(=O)(=O)c1ccc([N+](=O)[O-])cc1[N+](=O)[O-]	CCSc1nncn1S(=O)(=O)c1ccc([N+](=O)[O-])cc1[N+](=O)[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(O)c2c(O)ccc3c(C)c(O)c(O)c(c32)c1	CC1=Cc2c(O)c(O)c(C)c3ccc(O)c(c23)C(O)=C1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCNc1nc(NC=C[N+](=O)[O-])nc(N2CCCC2)n1	CN(C)CCNc1nc(NC=C[N+](=O)[O-])nc(N2CCCC2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C(=O)O)CCCC2(C)c3cc(OCc4ccc(Cl)cc4Cl)c(Cl)cc3CCCC12	CC1(C(=O)O)CCCC2(C)c3cc(OCc4ccc(Cl)cc4Cl)c(Cl)cc3CCCC12	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(=O)CCCCC1NC(=O)C2CCCCN2C(=O)C(C(C)CC)NC(=O)C(C(C)CC)NC(=O)C(C(C)C)NC1=O	CCC(=O)CCCCC1NC(=O)C2CCCCN2C(=O)C(C(C)CC)NC(=O)C(C(C)CC)NC(=O)C(C(C)C)NC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1cc2ccccc2s1)N1CCOCC1	O=C(c1cc2ccccc2s1)N1CCOCC1	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1nc(-c2ccccc2)c(C(=O)N2CCN(c3cncnc3)CC2)o1	Cc1nc(-c2ccccc2)c(C(=O)N2CCN(c3cncnc3)CC2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ccc(S(=O)(=O)NCc2cccn2)cc1	Nc1ccc(S(=O)(=O)NCc2cccn2)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)(C)c1cc(-c2ccc(O)cc2)cc(C(C)(C)C)c1O	CC(C)(C)c1cc(-c2ccc(O)cc2)cc(C(C)(C)C)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(C)c1NC(=O)C1Cc2c([nH]c3ccccc23)CN1C(C)C	Cc1cccc(C)c1NC(=O)C1Cc2c([nH]c3ccccc23)CN1C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CNCCOc1ccc(CC2COCCN2C(=O)c2ccccc2)cn1	CNCCOc1ccc(CC2COCCN2C(=O)c2ccccc2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCNC(=S)NCC=C	C=CCNC(=S)NCC=C	TRUE	TRUE	FALSE
O=C1NC(=S)NC1=Cc1cc2c(cc1Br)OCO2	O=C1NC(=S)NC1=Cc1cc2c(cc1Br)OCO2	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(C)c1cccc(C(C)C)c1OP(=O)(O)O	C=C(C)c1cccc(C(C)C)c1OP(=O)(O)O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCC(c1ccc(Cl)cc1)N1CCOCC1)c1ccccc1	O=C(NCC(c1ccc(Cl)cc1)N1CCOCC1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)C1CCN(Cc2ccc(C(=O)OC3CCOCC3)cc2)CC1	NC(=O)C1CCN(Cc2ccc(C(=O)OC3CCOCC3)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(-c2cccc(C(=O)O)n2)cc1)C1CCC(c2cc(F)cc(F)c2F)N(O)C1=O	O=C(O)c1cccc(-c2ccc(NC(=O)C3CCC(c4cc(F)cc(F)c4F)N(O)C3=O)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(OC(C)C(=O)O)c(C)c2c1CCC(O)(CCC(O)C(C)(C)O)O2	Cc1cc(OC(C)C(=O)O)c(C)c2c1CCC(C)(CCC(O)C(C)(C)O)O2	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(Cc2ccc(NC3=NCCN3)cc2)cc1	c1ccc(Cc2ccc(NC3=NCCN3)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nc(CN(C)C(=O)c2cc(C#N)[nH]n2)no1	CCc1nc(CN(C)C(=O)c2cc(C#N)[nH]n2)no1	TRUE	TRUE	TRUE
COCC1CCN(c2nccc(-c3c[nH]nc3-c3ccc(F)cc3)n2)CC1	COCC1CCN(c2nccc(-c3c[nH]nc3-c3ccc(F)cc3)n2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COOCCCCOc1ccc(OCCN(CC)CC)cc1	COOCCCCOc1ccc(OCCN(CC)CC)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C(=O)CC1c2cc(F)ccc2S(=O)(=O)N1C(C)C(=O)Nc1ccccc1F	CO(C(=O)CC1c2cc(F)ccc2S(=O)(=O)N1C(C)C(=O)Nc1ccccc1F	TRUE	TRUE	TRUE
CSCCC(NC(=O)c1c(Cl)cccc1Cl)C(=O)Nc1cc(C)on1	CSCCC(NC(=O)c1c(Cl)cccc1Cl)C(=O)Nc1cc(C)on1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(Cc1ccccc1)CC1(O)CCN(CCc2c[nH]c3ccccc23)CC1	CN(Cc1ccccc1)CC1(O)CCN(CCc2c[nH]c3ccccc23)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)n1nnnc1C(c1ccccc1)N1CCN(c2cccc3ccccc23)CC1	CC(C)(C)n1nnnc1C(c1ccccc1)N1CCN(c2cccc3ccccc23)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(=O)c2cnc(N(C)C)nc2C)cc1F	Cc1ccc(NC(=O)c2cnc(N(C)C)nc2C)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1ccc(Cl)cc1C=Nc1nc2ccccc2[nH]1	Oc1ccc(Cl)cc1C=Nc1nc2ccccc2[nH]1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(=O)N1c2ccccc2C(Nc2ccc(OC3ccccc3)cc2)CC1C	CC(=O)N1c2ccccc2C(Nc2ccc(OC3ccccc3)cc2)CC1C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CCCN2C(=O)N(C)CCc3ccc(OC)c(OC)c3)C2=O)cc1OC	COc1ccc(CCCCN2C(=O)N(C)CCc3ccc(OC)c(OC)c3)C2=O)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-n2c(=O)c3c4c(sc3n(C3OC(CO)C(O)C3O)c2=O)CCC4)cc1	COc1ccc(-n2c(=O)c3c4c(sc3n(C3OC(CO)C(O)C3O)c2=O)CCC4)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=CC(=O)C(C)=C2OC(C(C)(O)CCC=C(C)C)C(Cc1)C2C	CC(C)=CCCC(C)(O)C1OC2=C(C)C(=O)C=C(C)CCC1C2C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2cc(-c3nnc4n3CCC4)nn2-c2ccc3ccccc3n2)cc1OC	COc1ccc(-c2cc(-c3nnc4n3CCC4)nn2-c2ccc3ccccc3n2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C1COCC2CN(Cc3ccco3)CC21)N1CCCC1	O=C(C1COCC2CN(Cc3ccco3)CC21)N1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C(=O)Nc1ccc(F)cc1OC)n1nc(C)c2sc3ccccc3c2c1=O	CCC(C(=O)Nc1ccc(F)cc1OC)n1nc(C)c2sc3ccccc3c2c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(NC(=O)c2ccccc2)ccc1-c1cnco1	COc1cc(NC(=O)c2ccccc2)ccc1-c1cnco1	TRUE	TRUE	TRUE
C#Cc1cnc(Nc2ccc(CCN)cc2)nc1N	C#Cc1cnc(Nc2ccc(CCN)cc2)nc1N	TRUE	TRUE	TRUE
C1CCN2CCCC2C1	C1CCN2CCCC2C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(CNC(=O)CCc2c(C)nc3c(c(C)nn3-c3cc(C)cc(C)c3)c2C)cc1	CCOc1ccc(CNC(=O)CCc2c(C)nc3c(c(C)nn3-c3cc(C)cc(C)c3)c2C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc2c(C(=O)C)Sc3ncccn3)c[nH]c2cc1C	Cc1cc2[nH]cc(C(=O)C)Sc3ncccn3)c2cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cn2c(O)c3ccccc3n(-c3ccc(F)cc3)c2n1	Cc1cc2c(O)c3ccccc3n(-c3ccc(F)cc3)c2n1	FALSE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCC(C)(C)C(=O)OCC(O)CO	CCCCCCCCC(C)(C)C(=O)OCC(O)CO	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(Br)C(=O)NC1CCC2(O)C3Cc4ccc(O)c5c4C2(CCN3C)C1O5	C=C(Br)C(=O)NC1CCC2(O)C3Cc4ccc(O)c5c4C2(CCN3C)C1O5	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NC(=O)CSc2nc(O)c3c(n2)CCCC3)cc1	COc1ccc(NC(=O)CSc2nc(O)c3c(n2)CCCC3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCOc1cc(Cl)c(-c2nncn2C)cc1NC(=O)c1ccc(N(C)C)cc1	CCCCCCCCCOc1cc(Cl)c(-c2nncn2C)cc1NC(=O)c1ccc(N(C)C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1ccc(N2CC[Se])(=NC3CCCC3)CC2)cn1	Clc1ccc(N2CC[Se])(=NC3CCCC3)CC2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC1(c2ccccc2)CCN(CCC(CCC(=O)c2cc(F)cc(F)c2)c2ccc(Cl)cc2Cl)CC1	CCOC1(c2ccccc2)CCN(CCC(CCC(=O)c2cc(F)cc(F)c2)c2ccc(Cl)cc2Cl)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nnc2sc3c(c12)CN1CCc2cc(Cl)ccc2C1O3	Nc1nnc2sc3c(c12)CN1CCc2cc(Cl)ccc2C1O3	TRUE	TRUE	TRUE
CC(CN1CCC2(CC1)C(=O)NCN2c1ccccc1)NC(=O)C1(c2ccccc2)CC1	CC(CN1CCC2(CC1)C(=O)NCN2c1ccccc1)NC(=O)C1(c2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(S(=O)(=O)NCC2COc3ccccc3O2)cc1)c1ccc(OC(F)F)cc1	O=C(Nc1ccc(S(=O)(=O)NCC2COc3ccccc3O2)cc1)c1ccc(OC(F)F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(C(F)(F)F)cc1)c1ccc(P(=O)(O)O)cc1	O=C(Nc1ccc(C(F)(F)F)cc1)c1ccc(P(=O)(O)O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc2c(c1)C(=CC1CCC1)c1ccccc1C2=O	Cc1ccc2c(c1)C(=CC1CCC1)c1ccccc1C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1Nc2cc([N+](=O)[O-])ccc2C1=Cc1c[nH]c2ccccc12	O=C1Nc2cc([N+](=O)[O-])ccc2C1=Cc1c[nH]c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CC1Sc2ccc(S(=O)(=O)NCCCN3CCN(c4ccc(F)cc4)CC3)cc2NC1=O	CC1Sc2ccc(S(=O)(=O)NCCCN3CCN(c4ccc(F)cc4)CC3)cc2NC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
OCc1cc2c(c1NC(=O)c1cc(=O)c3ccc(Br)cc3o1)oc1ccccc12	COc1cc2c(cc1NC(=O)c1cc(=O)c3ccc(C)cc3o1)oc1ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCc1ccccc1)N1CCN(c2ccnc3cc(Cl)ccc23)CC1	O=C(NCc1ccccc1)N1CCN(c2ccnc3cc(Cl)ccc23)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NC(Cc1ccc(OP(=O)(O)O)cc1)(C=O)N1OC(COC(=O)NC(Cc2ccccc2)C(=O)O)C(O)C(O)C1O	CC(=O)NC(Cc1ccc(OP(=O)(O)O)cc1)(C(=O)N1OC(COC(=O)NC(Cc2ccccc2)C(=O)O)C(O)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc(Cc(=NOCCF)c2ccc(Br)cc2)nc2c1ncn2C1OC(COP(=O)(O)OP(=O)(O)O)C(O)C1O	Nc1nc(Cc(=NOCCF)c2ccc(Br)cc2)nc2c1ncn2C1OC(COP(=O)(O)OP(=O)(O)O)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1ccc(NC(S)=NNC(=O)c2cncn2)cc1	COC(=O)c1ccc(NC(S)=NNC(=O)c2cncn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1COC2(CCN(Cc3noc(Cc4ccccc4)n3)CC2)CN1c1ccc(-c2ccccc2)cc1	O=C1COC2(CCN(Cc3noc(Cc4ccccc4)n3)CC2)CN1c1ccc(-c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1C(=O)CCC1C(=O)NCCCc1ccccc1	CCN1C(=O)CCC1C(=O)NCCCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1nc(C2CCNCC2)nc2nc[nH]c12	Oc1nc(C2CCNCC2)nc2nc[nH]c12	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1ccc2c(c1)CC(NCC1(c3ccccc3)CCCC1)C2	Oc1ccc2c(c1)CC(NCC1(c3ccccc3)CCCC1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
CN1C2C=C(CC(O)C2)C(=O)c2ccccc21	CN1c2ccccc2C(=O)C2=CC1CC(O)C2	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc2c(c1)C(Cc1ccccc(CN(CC)C(C)=O)c1)=C(C(=O)O)C(c1ccc(OC)cc1)O2	CCOc1ccc2c(c1)C(Cc1ccccc(CN(CC)C(C)=O)c1)=C(C(=O)O)C(c1ccc(OC)cc1)O2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CCc1nc(-c2ccc(S(=O)(=O)N3CCNCC3)cc2)oc1-c1ccccc1	O=C(O)CCc1nc(-c2ccc(S(=O)(=O)N3CCNCC3)cc2)oc1-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc2c(c1)ccc[n+]2CCCCCCCCCCCN1CCOCC1	c1ccc2c(c1)ccc[n+]2CCCCCCCCCCCN1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCc1cn(C2OC(CO)C(O)C2O)nn1	CCCCCCCCCCc1cn(C2OC(CO)C(O)C2O)nn1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCCC(=O)NCCN1CCN(C(=O)c2ccnc3ccccc23)CC1)Nc1ccc2nc3n(c(=O)c2c1)CCCC3	O=C(CCCC(=O)Nc1ccc2nc3n(c(=O)c2c1)CCCC3)NCCN1CCN(C(=O)c2ccnc3ccccc23)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(CCc1ccccc1)C(=O)COC(=O)CCNC(=O)c1ccc(Cl)cc1	CN(CCc1ccccc1)C(=O)COC(=O)CCNC(=O)c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)c1nn2c(=O)c(C(=O)O)Cnc2s1	CCN(CC)c1nn2c(=O)c(C(=O)O)Cnc2s1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NSNc1nnc(N2CCCC2)s1)c1cccc(F)c1	O=C(NSNc1nnc(N2CCCC2)s1)c1cccc(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCCCc1ccccc1)c1ccc(-c2ccccc2)cc1	O=C(CCCCc1ccccc1)c1ccc(-c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CNc1cc(NC(=O)OC)c2ccccc(NC(c3ccc(-c4ccccc4)cc3)c3nccs3)c2n1	CNc1cc(NC(=O)OC)c2ccccc(NC(c3ccc(-c4ccccc4)cc3)c3nccs3)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)CCNCc1ccc(C(=O)O)c(C(=O)O)c1C(=O)O	CS(=O)(=O)CCNCc1ccc(C(=O)O)c(C(=O)O)c1C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cccc2ccccc12)c1cc([N+])(=O)[O-])ccc1N1CCCCC1	O=C(Nc1cccc2ccccc12)c1cc([N+])(=O)[O-])ccc1N1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C1CCN(c2c(C)nc3c(-c4ccccc4)cnn3c2C)CC1	COC(=O)C1CCN(c2c(C)nc3c(-c4ccccc4)cnn3c2C)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCOC(=O)c1ccc(NC(=N)N)cc1	CCCCCCCCCOC(=O)c1ccc(NC(=N)N)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)Cn1nnc(-c2nn(-c3ccccc(C(F)(F)F)cc3)cc2-c2ccccc2)n1	O=C(O)Cn1nnc(-c2nn(-c3ccccc(C(F)(F)F)cc3)cc2-c2ccccc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1ccc(-c2cc(Cl)ccc2OCc2ccc(Cl)cc2Cl)o1	CCOC(=O)c1ccc(-c2cc(Cl)ccc2OCc2ccc(Cl)cc2Cl)o1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CCN(CCn2cnnn2)CCN1CCN1CCCC1	O=C1CCN(CCn2cnnn2)CCN1CCN1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(N=c1cc[nH]cc1)Nc1cc2ccccc2cc1CS(=O)(=O)N1CCC(C(=O)O)CC1	O=C(N=c1cc[nH]cc1)Nc1cc2ccccc2cc1CS(=O)(=O)N1CCC(C(=O)O)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=Cc1ccccc1O)c1ccc(-c2ccccc2)cc1	O=C(C=Cc1ccccc1O)c1ccc(-c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
Cn1cc(C(=O)N2CCC(O)(c3ccc(C(F)(F)F)cc3)CC2)cn1	Cn1cc(C(=O)N2CCC(O)(c3ccc(C(F)(F)F)cc3)CC2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)C=CC2=C(O1)c1ccc([N+])(=O)[O-])cc1OC2(C)C	CC1(C)C=CC2=C(O1)c1ccc([N+])(=O)[O-])cc1OC2(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1ccc(NC(=O)CN2C(=O)c3ccccc4ccccc(c34)C2=O)cc1	CN(C)c1ccc(NC(=O)CN2C(=O)c3ccccc4ccccc(c34)C2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCOc1ccc(OCC(O)CN(C)C)c(OC)c1	CCCCCCCCCCCOc1ccc(OCC(O)CN(C)C)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc(C2=NO(C(C(=O)NCc3ccncc3)C2)c1	COc1ccccc(C2=NO(C(C(=O)NCc3ccncc3)C2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
c1coc(-c2ccc(-c3ccnc(NC4CCNC4)c3)s2)c1	c1coc(-c2ccc(-c3ccnc(NC4CCNC4)c3)s2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)c1ccc(C=Nc2nc3cc(Cl)ccc3[nH]2)c(O)c1	CCN(CC)c1ccc(C=Nc2nc3cc(Cl)ccc3[nH]2)c(O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc(-c2cc(C(=O)Nc3cc4ccc(OC5CCN(C(C)=O)CC5)c(C)c4oc3=O)ccc2OC)c1	COc1ccccc(-c2cc(C(=O)Nc3cc4ccc(OC5CCN(C(C)=O)CC5)c(C)c4oc3=O)ccc2OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Fc1ccc(C2CC2COc2nnc3ccccc23)cn1	Fc1ccc(C2CC2COc2nnc3ccccc23)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)OCC12C(O)CC3C(=CC4(O)CC(O)C(OC5OC(CO)C(O)C(O)C5O)CC34C)C1CCC2(O)CO	CC(=O)OCC12C(O)CC3C(=CC4(O)CC(O)C(OC5OC(CO)C(O)C(O)C5O)CC34C)C1CCC2(O)CO	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(C#N)N2CCCc3ccccc32)cc1	COc1ccc(C(C#N)N2CCCc3ccccc32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
OC1CC2=C(C1)C(c1ccc(Cl)cc1)CC21Cc2ccccc2C1	OC1CC2=C(C1)C1(Cc3ccccc3C1)CC2c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C(=O)N1CCN(C(=O)c2ccccc2)CC1)c1c[nH]c2ccccc12	O=C(C(=O)N1CCN(C(=O)c2ccccc2)CC1)c1c[nH]c2ccccc12	TRUE	TRUE	FALSE
COc1cc(N2CCN(c3nc4ccccc4s3)CC2)ccc1N	COc1cc(N2CCN(c3nc4ccccc4s3)CC2)ccc1N	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCC1CCCO1)c1cc(-c2ccco2)nc2ccccc12	O=C(NCC1CCCO1)c1cc(-c2ccco2)nc2ccccc12	TRUE	TRUE	FALSE
CS(=O)(=O)Nc1ccc(C2=Nn3c(cnn3-c3ccnc3)S2)cc1	CS(=O)(=O)Nc1ccc(C2=Nn3c(cnn3-c3ccnc3)S2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C1NC(c2ccccc2)=Nc2nc(-c3ccc(Cl)cc3)nn21	CC(C)C1NC(c2ccccc2)=Nc2nc(-c3ccc(Cl)cc3)nn21	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1esc(Nc2ccnc3cc(Cl)ccc23)n1	CCOC(=O)c1esc(Nc2ccnc3cc(Cl)ccc23)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCN(CCCOCc2ccc(NC(=O)Nc3ccccc4c3C(=O)c3ccc(N(C)C)cc3-4)cc2)CC1	CC1CCN(CCCOCc2ccc(NC(=O)Nc3ccccc4c3C(=O)c3ccc(N(C)C)cc3-4)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1ccc(CC(=O)Nc2cc(-n3ncc(C4CC4)c3N)ccc2Cl)cc1	CN(C)c1ccc(CC(=O)Nc2cc(-n3ncc(C4CC4)c3N)ccc2Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1CN(CC2CC2)CCC1c1ccc(OC)cc1	CCOC(=O)C1CN(CC2CC2)CCC1c1ccc(OC)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2nnn3c2nc(NC2CCCC2)c2ccccc23)cc1	Cc1ccc(-c2nnn3c2nc(NC2CCCC2)c2ccccc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCCN1CCCCC1)c1ccccc1Oc1ccc(Nc2ccccc2)cc1	O=C(NCCN1CCCCC1)c1ccccc1Oc1ccc(Nc2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
CCN1CCC(Nc2nc(C)c([N+])(=O)[O-])c(NC3CCCC3)n2)CC1	CCN1CCC(Nc2nc(C)c([N+])(=O)[O-])c(NC3CCCC3)n2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(Cc1cccs1)C1CCN(C(=O)Cc2ccccc(-n3cnnn3)c2)CC1	CN(Cc1cccs1)C1CCN(C(=O)Cc2ccccc(-n3cnnn3)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1OP(O)(=S)Oc1ccccc1	COc1ccccc1OP(O)(=S)Oc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1ccc2c(c1)C(O)(C(F)(F)F)c1ccccc1-2	NC(=O)c1ccc2c(c1)C(O)(C(F)(F)F)c1ccccc1-2	TRUE	TRUE	FALSE
CCC(CO)N(Cc1ccc(Cl)cc1)Cc1c(C(F)(F)F)nc2cc(C=CC(=O)NO)ccn12	CCC(CO)N(Cc1ccc(Cl)cc1)Cc1c(C(F)(F)F)nc2cc(C=CC(=O)NO)ccn12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CCCC1(CCC(C)F)CCC2C(C)OC(=O)C21C	CC(C)CCCC1(CCC(C)F)CCC2C(C)OC(=O)C21C	TRUE	TRUE	TRUE
COCC(C(C(=O)O)C)C1C(O)CC2(C)C3CC4(O)OC5OC(C4OC(=O)C34CC12C)C1(O)C5CCC(OC(C)=O)C(C)C(C)C12	CC(C)CCCC(C(C(=O)O)C)C1C(O)CC2(C)C3CC4(O)OC5OC(C4OC(=O)C34CC12C)C1(O)C5CCC(OC(C)=O)C(C)C(C)C12	FALSE	TRUE	TRUE
O=C(C1CCS(=O)(=O)CC1)N1CCN(c2ncccc(-c3ccco3)n2)CC1c1ccc(F)c(F)c1F	O=C(C1CCS(=O)(=O)CC1)N1CCN(c2ncccc(-c3ccco3)n2)CC1c1ccc(F)c(F)c1F	TRUE	TRUE	TRUE
CCGn1c(NC(=O)c2ccccc2[N+])(=O)[O-])nc2ccccc21	CCGn1c(NC(=O)c2ccccc2[N+])(=O)[O-])nc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1coc2ccc3c(Cl=O)NCCCN(C(C(=O)OC(C)(C)C)coc3c12	Cc1coc2ccc3c(Cl=O)NCCCN(C(C(=O)OC(C)(C)C)coc3c12	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+][([O-])c1ccc(O)c(C=Nn2nccc(Nc3ccccc3)n2)c1	O=[N+][([O-])c1ccc(O)c(C=Nn2nccc(Nc3ccccc3)n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)CC(=O)C2=C(C1)N(NC(=O)c1cccs1)C1=C(C(=O)CC(C)(C)C1)C2c1ccccc1OCc1ccccc(C#N)c1	CC1(C)CC(=O)C2=C(C1)N(NC(=O)c1cccs1)C1=C(C(=O)CC(C)(C)C1)C2c1ccccc1OCc1ccccc(C#N)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1ccc(CS(=O)(=O)c2ccccc2)cc1)N1CCN(c2ccccc2)CC1	O=C(c1ccc(CS(=O)(=O)c2ccccc2)cc1)N1CCN(c2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1C(=N)NC(C)(c2sc(-c3ccnc(-c4ncco4)c3)cc2Cl)CS1(=O)=O	CN1C(=N)NC(C)(c2sc(-c3ccnc(-c4ncco4)c3)cc2Cl)CS1(=O)=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C(=O)n1ccc(C(=O)NC(Cc2ccc(NC(=O)c3c(Cl)ccccc3Cl)cc2)C(=O)O)c2ccccc21	CC(C)(C(=O)n1ccc(C(=O)NC(Cc2ccc(NC(=O)c3c(Cl)ccccc3Cl)cc2)C(=O)O)c2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(C(F)(F)F)cc1)c1cc(Cl)ccc1O	O=C(Nc1ccc(C(F)(F)F)cc1)c1cc(Cl)ccc1O	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1nnc(NN=Cc2cccc(Cl)c2)nc1O	Cc1nnc(NN=Cc2cccc(Cl)c2)nc1O	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1ccc(-c2cnc3ccnn3c2)cc1	Clc1ccc(-c2cnc3ccnn3c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC(C)C(C)C1cc(OC)c(OC)cc1C(=O)O	CCCCC(C)C(C)C1cc(OC)c(OC)cc1C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(NC(=O)c1ccc(C(=O)O)c(O)c1)(C(=O)O	CC(C)C(NC(=O)c1ccc(C(=O)O)c(O)c1)(C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(SCc2cccc([N+])(=O)[O-])c2)c2oc3ccccc3c2n1	Cc1nc(SCc2cccc([N+])(=O)[O-])c2)c2oc3ccccc3c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(C)(C)c2ccccc(-c3ccnc3)c2)cc1	COc1ccc(C(C)(C)c2ccccc(-c3ccnc3)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)n1cnc2c(Nc3ccccc3-c3ccccc3)nc(NCC3CCCN3)nc21	CC(C)n1cnc2c(Nc3ccccc3-c3ccccc3)nc(NCC3CCCN3)nc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCN1CCN(CC=Cc2ccccc2)CC1)Nc1ccccc1-c1ccccc1	O=C(CCN1CCN(CC=Cc2ccccc2)CC1)Nc1ccccc1-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC(=O)N1CCCC1C(O)C(=O)Nc1ccc(C)cc1	CCCC(=O)N1CCCC1C(O)C(=O)Nc1ccc(C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NS(=O)(=O)NCCNCCC(=O)Nc1ccc(OC2ccccc2)cc1	NS(=O)(=O)NCCNCCC(=O)Nc1ccc(OC2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCc1ccccc1Cl)C1CCN(C(=O)c2ccc(-c3ccccc3)c(l)c2)CC1	O=C(NCc1ccccc1Cl)C1CCN(C(=O)c2ccc(-c3ccccc3)c(l)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(CCP(=O)(O)O)c1nnc2ccc(O)cc12	CCCN(CCP(=O)(O)O)c1nnc2ccc(O)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1cnc(-c2ccc(C3CCC3)c(OC(F)(F)F)c2F)cn1	Nc1cnc(-c2ccc(C3CCC3)c(OC(F)(F)F)c2F)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc(C(=O)N2CCN(C(=O)c3ccccc3)CC2)c1	COc1ccccc(C(=O)N2CCN(C(=O)c3ccccc3)CC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
COc1cc(-c2nnc(CSc3nc(O)cc(O)n3)n2-c2ccc(C)cc2)cc(OC)c1OC	COc1cc(-c2nnc(CSc3nc(O)cc(O)n3)n2-c2ccc(C)cc2)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O))(=O)NN=C(C)Cc2ccc(C)cn2)cc1	CC(Cc1ccc(C)cn1)=NNS(=O)(=O)c1ccc(C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O))(=O)N2CCCCC2)cc1NC(=O)CN1C(=O)NC2(CCCCC2)C1=O	Cc1ccc(S(=O))(=O)N2CCCCC2)cc1NC(=O)CN1C(=O)NC2(CCCCC2)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(-n2c(CN(C)C3CCOC(C)C3)nc3cccc3c2=O)c1	COc1cccc(-n2c(CN(C)C3CCOC(C)C3)nc3cccc3c2=O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Oc1c([N+])(=O)[O-])cc(C(C)C)C)cc1[N+](=O)[O-]	CC(=O)Oc1c([N+])(=O)[O-])cc(C(C)C)C)cc1[N+](=O)[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C(Cc1cccc1)N1C(=O)C(NC(CO(Cc2cccc2)C(=O)N2CCN(c3ccsc3)CC2)C(=O)N(c2cccc2)c2cccc21	CCOC(=O)C(Cc1cccc1)N1C(=O)C(NC(CO(Cc2cccc2)C(=O)N2CCN(c3ccsc3)CC2)C(=O)N(c2cccc2)c2cccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(CCCc2nc(C#N)c(N)o2)C=C(C)C)C)CO1	CC1(C)=CC(C)(CCCc2nc(C#N)c(N)o2)OC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C=NNC(=O)c2nn(C)cc2Br)cc1COc1ccc(F)cc1	COc1ccc(C=NNC(=O)c2nn(C)cc2Br)cc1COc1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(F)ccc1Cc1nc(N(C)c2cccc2)nn1C	Cc1cc(F)ccc1Cc1nc(N(C)c2cccc2)nn1C	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(N2CCc3c(-c4cnc(=N)[nH]c4)nc(N4CCOCC4)nc32)CCN(C(=O)C2CCCC2)C1	CC1(N2CCc3c(-c4cnc(=N)[nH]c4)nc(N4CCOCC4)nc32)CCN(C(=O)C2CCCC2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
N#CC(c1ccc(F)c(F)c1)N1CCSCC1	N#CC(c1ccc(F)c(F)c1)N1CCSCC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NC(=O)NC2CCN(c3ncccc3C(F)(F)F)C2)cc1	COc1ccc(NC(=O)NC2CCN(c3ncccc3C(F)(F)F)C2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CNCC(O)c1cc(C(F)(F)F)c2c(Cl)cccc2c1	CC(C)CNCC(O)c1cc(C(F)(F)F)c2c(Cl)cccc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1C(=O)C(NC(=O)Nc2ccc(OC)cc2OC)C(=O)N(c2cccc2)c2cccc21	CCN1C(=O)C(NC(=O)Nc2ccc(OC)cc2OC)C(=O)N(c2cccc2)c2cccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCOP(=O)(O)COC(C)C(=O)	CCOP(=O)(O)COC(C)C(=O)	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCc1cccc1)c1ccc(S(=O))(=O)NCCc2ccccn2)o1	O=C(NCc1cccc1)c1ccc(S(=O))(=O)NCCc2ccccn2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(N(CC(=O)N2CCOCC2)S(=O))(=O)c2cccc2)cc1	COc1ccc(N(CC(=O)N2CCOCC2)S(=O))(=O)c2cccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(C(=O)NC(=S)Nc2nc(C)c(C(C)=O)s2)c1	COc1cccc(C(=O)NC(=S)Nc2nc(C)c(C(C)=O)s2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
OC1ccc(C2(C(F)(F)F)N=C(N3CCCC3)OC3=C2C(=O)CC(C)(C)C3)cc1	CC1(C)CC(=O)C2=C(C1)OC(N1CCCC1)=NC2(c1ccc(O)cc1)C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1c2cccc2-c2nnc(-c3ccc(-c4nnn[nH]4)ccc3)cc21	O=C1c2cccc2-c2nnc(-c3ccc(-c4nnn[nH]4)ccc3)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nn(C)c(C)c1N[S+](=O)[O-])c1ccc(CCC2CCN(C)CC2)cc1	Cc1nn(C)c(C)c1N[S+](=O)[O-])c1ccc(CCC2CCN(C)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(F)c(NC(=O)Nc2ccc(OC3ccnc4[nH]c(=O)sc34)cc2)c1	Cc1ccc(F)c(NC(=O)Nc2ccc(OC3ccnc4[nH]c(=O)sc34)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1=C(c2cccc2O)CCN(CCCCN(C(=O)C(NC(=O)OC(C)(C)C)C(C)C)C1	CCOC(=O)C1=C(c2cccc2O)CCN(CCCCN(C(=O)C(NC(=O)OC(C)(C)C)C(C)C)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccnc(N2CCN(C(=O)c3oc4cccc4c3C)CC2)n1	CCOc1ccnc(N2CCN(C(=O)c3oc4cccc4c3C)CC2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc2c1N(C1=NCCN1)CCN2CC(C)(C)O	Cc1cccc2c1N(C1=NCCN1)CCN2CC(C)(C)O	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C(=O)C1(C)CCCC2(C)C1C(OC(=O)c1ccc(F)cc1)CC1C3=CC4CC(OC(=O)c5cccc([N+])(=O)[O-])c5)C3(C)CCC4(C)CCCC12	CO(C(=O)C1(C)CCCC2(C)C3CC4(C)CCC5(C)C=CC4CC5OC(=O)c4cccc([N+])(=O)[O-])c4)C3CC(OC(=O)c3ccc(F)cc3)C12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(NC(=O)C(=O)NCCc2c[nH]c3cccc23)ccc1[N+](=O)[O-]	Cc1cc(NC(=O)C(=O)NCCc2c[nH]c3cccc23)ccc1[N+](=O)[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC1CCN(C(=O)C)CCCN=C(N)N)NC(=O)C(C)NC(=O)C2CCN2C(=O)C(Cc2cccc2)NC(=O)OC(C)(C)C)CC1	CCCC1CCN(C(=O)C)CCCN=C(N)N)NC(=O)C(C)NC(=O)C2CCCN2C(=O)C(Cc2cccc2)NC(=O)OC(C)(C)C)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nnc(-c2ccc(Br)cc2)o1	Nc1nnc(-c2ccc(Br)cc2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
C[S+][([O-])Cc1ccc(C(=O)Nc2ccc(Cl)cc2C(=O)Nc2ccc(Cl)cn2)cc1	C[S+][([O-])Cc1ccc(C(=O)Nc2ccc(Cl)cc2C(=O)Nc2ccc(Cl)cn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CN1CCCC1)Nc1ccc(Cl)cc1C(=O)c1cccc1	O=C(CN1CCCC1)Nc1ccc(Cl)cc1C(=O)c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C)N=c1[nH]nc(-c2ccc3[nH]cc(-c4nccc(OC(F)F)n4)c3c2)o1	CCC(C)N=c1[nH]nc(-c2ccc3[nH]cc(-c4nccc(OC(F)F)n4)c3c2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc2c(cnn2CCO)c2nc(-c3ccco3)nn12	Nc1nc2c(cnn2CCO)c2nc(-c3ccco3)nn12	TRUE	TRUE	FALSE
CN1C(=O)CN=C(c2cccc2F)c2cc(Br)ccc21	CN1C(=O)CN=C(c2cccc2F)c2cc(Br)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(C[n+])2cccc(C=NNC3=NCCCN3)c2)cc1	C(=NNC1=NCCCN1)c1ccc([n+])(Cc2cccc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(c1ccc(Nc2nccc(-c3c(-c4cccc4)ncn3CCCO)n2)cc1)N1CCCC1	O=S(=O)(c1ccc(Nc2nccc(-c3c(-c4cccc4)ncn3CCCO)n2)cc1)N1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CC(CC)n1nnnc1CNc1ccc(OC)nc1	C=CC(CC)n1nnnc1CNc1ccc(OC)nc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)N(C(C)=O)c1ccc(OC(C)O)c2ccc(OC3cccc3)cc2)cc1	CC(=O)N(C(C)=O)c1ccc(OC(C)O)c2ccc(OC3cccc3)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1Cc2enccc2C2(CCN(C3CC4CCC3C4)CC2)C1	O=C1Cc2enccc2C2(CCN(C3CC4CCC3C4)CC2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(NCC(=O)N2CCN(C(=O)c3cccc3F)CC2)c2cccc2)cc1	COc1ccc(C(NCC(=O)N2CCN(C(=O)c3cccc3F)CC2)c2cccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(COc1cccc1F)NC1CN2CCC1CC2	O=C(COc1cccc1F)NC1CN2CCC1CC2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C(O)=C(C(CNCCc2c[nH]c3cccc23)c2cccc2Cl)C(=O)c2cccc21	O=C1C(O)=C(C(CNCCc2c[nH]c3cccc23)c2cccc2Cl)C(=O)c2cccc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1c2cccc2cc2n1Cc1cc3c(cc1-2)OCO3	O=c1c2cccc2cc2n1Cc1cc3c(cc1-2)OCO3	TRUE	TRUE	TRUE
CN1C2COCC1CC(N=C(O)c1cn(CCBrr)c3cccc13)C2	CN1C2COCC1CC(N=C(O)c1cn(CCBrr)c3cccc13)C2	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCn1c(Cc2cc(OC)c(OC)cc2S(=O))(=O)N(C)n[nH]c1=S	C=CCn1c(Cc2cc(OC)c(OC)cc2S(=O))(=O)N(C)n[nH]c1=S	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCCN1CCc1ccc(-c2ccc(C3(CNS(C(=O)=O)CC3)cc2)cc1	CC1CCCN1CCc1ccc(-c2ccc(C3(CNS(C(=O)=O)CC3)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC1CN(c2cc(=O)n(C)c3ccc(OC)cc23)CCN1	CCC1CN(c2cc(=O)n(C)c3ccc(OC)cc23)CCN1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C(Cl)=C(Nc2cccc([N+])(=O)[O-])c2(C)C(=O)c2ncccc21	O=C1C(Cl)=C(Nc2cccc([N+])(=O)[O-])c2(C)C(=O)c2ncccc21	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(cc1C(C)C)C(=O)OC2C1c2c(c(OC(C)=O)c3c(c2OC)OCO3)CCN1C	COc1ccc2c(cc1C(C)C)C(=O)OC2C1c2c(c(OC(C)=O)c3c(c2OC)OCO3)CCN1C	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+][([O-])c1ccc(NN=Nc2ccc(Cl)cc2)cc1	O=[N+][([O-])c1ccc(NN=Nc2ccc(Cl)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2ccc(=O)oc2c1	COc1ccc2ccc(=O)oc2c1	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1ccc(C)c(NC(=O)c2ccc3c(c2)N(Cc2cccc2)C(=O)c2cccc2S3(=O)=O)c1	Cc1ccc(C)c(NC(=O)c2ccc3c(c2)N(Cc2cccc2)C(=O)c2cccc2S3(=O)=O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(N(C)S(=O))(=O)c2ccc(C(=O)OCc3cc(=O)n4nc(C(C)C)sc4n3)cc2)cc1	COc1ccc(N(C)S(=O))(=O)c2ccc(C(=O)OCc3cc(=O)n4nc(C(C)C)sc4n3)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(S(=O))(=O)N2CCCC2C(=O)NCC(C)(C)C)cc1	COc1ccc(S(=O))(=O)N2CCCC2C(=O)NCC(C)(C)C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc2oc(=O)cc(-c3cccc3)c2c2nc3c(c(C)n12)COC(C)(C)C3		FALSE	TRUE	TRUE
CCC(Sc1nc(O)c2c[nH]nc2n1)C(=O)NCC1cccc1	CCC(Sc1nc(O)c2c[nH]nc2n1)C(=O)NCC1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCn(Cc1ccnc1)c1cc(-c2cn3nc(C(C)C)sc3n2)cnc1N		FALSE	TRUE	TRUE
COC(=O)N1Cc2c(c(-c3ccc(Cl)cc3)nn2C2c3cc(Cl)cc(Cl)c3CC2O)CC1C(N)=O	COC(=O)N1Cc2c(c(-c3ccc(Cl)cc3)nn2C2c3cc(Cl)cc(Cl)c3CC2O)CC1C(N)=O	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc(O)c2cc(CNc3ccc(C(=O)NC(CCC(=O)O)C(=O)O)cc3)ccc2n1	Nc1nc(O)c2cc(CNc3ccc(C(=O)NC(CCC(=O)O)C(=O)O)cc3)ccc2n1	TRUE	TRUE	FALSE
CC1CC(=O)N(CCC(=O)NCC2CC3C=CC2C3)c2cc3occc3cc2C1=O	CC1CC(=O)N(CCC(=O)NCC2CC3C=CC2C3)c2cc3occc3cc2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(CC2CN(C)CCO2)cc2c1OCO2	COc1cc(CC2CN(C)CCO2)cc2c1OCO2	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c(COC(c2cccc2)C(O)C(O)C(c2cccc2)c2cccc2)cc2cc(Cl)ccc21	Cn1c(COC(c2cccc2)C(O)C(O)C(c2cccc2)c2cccc2)cc2cc(Cl)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O))(=O)Nc2ccc(C(=O)OCc3cc(-c4cccc4F)on3)cc2)cc1	Cc1ccc(S(=O))(=O)Nc2ccc(C(=O)OCc3cc(-c4cccc4F)on3)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)Oc1cccc(C(=O)Nc2ccc(F)c(C34COC3S(=O))(=O)C(C)(C)C(=N)N4)c2)c1	CC(C)Oc1cccc(C(=O)Nc2ccc(F)c(C34COC3S(=O))(=O)C(C)(C)C(=N)N4)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CCc1cc(NCc2ccncc2)nc(N)n1	CC(C)CCc1cc(NCc2ccncc2)nc(N)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2oc(=O)cc3c(O)c(OC)c(O)c(c2c(=O)c1C)OC3		FALSE	TRUE	TRUE
CCS(=O))(=O)c1ccc(CC(=O)Nc2nc(-c3cccc3Cl)c(Cl)s2)cc1	CCS(=O))(=O)c1ccc(CC(=O)Nc2nc(-c3cccc3Cl)c(Cl)s2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCCN1C(=O)C2C3C=CC(C3)C2C1=O)OCC(=O)c1ccc(F)cc1	O=C(CCCN1C(=O)C2C3C=CC(C3)C2C1=O)OCC(=O)c1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(-c2nc(-c3cccc3)sc2-c2cc(OC)c(OC)c(OC)c2)cc(OC)c1OC	COc1cc(-c2nc(-c3cccc3)sc2-c2cc(OC)c(OC)c(OC)c2)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=C(N2CC2)C(=O)c2c(CCC3CC3)sc2C1=O	CC1=C(N2CC2)C(=O)c2c(CCC3CC3)sc2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
NC(Cc1CC(C)N)CN1C(=O)CC(c1cccc1)c1cccc1)C(=O)O	NC1CC(C)CC(N)C(=O)N(C(=O)N(C)O)CC(c2cccc2)c2cccc2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(C)=CC(=O)Nc1cccc(-c2nc3c(NC(=O)c4ccc(OC(C)C)cc4)cccn23)c1	COC(C)=CC(=O)Nc1cccc(-c2nc3c(NC(=O)c4ccc(OC(C)C)cc4)cccn23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1cc(-c2cccc2)oc2cc(OC(CCN3CCCC3)cc(O)c12	O=c1cc(-c2cccc2)oc2cc(OC(CCN3CCCC3)cc(O)c12	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCC(Cc2ccc(C(=O)=Nc3cccc3N3CCCCC3)cc2)CC1	CN1CCC(Cc2ccc(C(=O)=Nc3cccc3N3CCCCC3)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(Cc1ccc(C#N)cc1)C1COC2(CCC(=O)CC2)C1	CN(Cc1ccc(C#N)cc1)C1COC2(CCC(=O)CC2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(Cl)c(C)cc1NC(=O)COc1ccc(S(=O))(=O)N2CCOCC2)cc1	COc1cc(Cl)c(C)cc1NC(=O)COc1ccc(S(=O))(=O)N2CCOCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1c(C2CCCN2C(=O)C2(C#N)CCN(S(C(=O)=O)CC2)c(C)nn1C	COc1c(C2CCCN2C(=O)C2(C#N)CCN(S(C(=O)=O)CC2)c(C)nn1C	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nncc(C(C)C)n1C1CC2CCC(C1)N2CCc(NC(=O)C1CC2CCCC(C)CN2C1c1cccc1)c1cccc1	CCC1CCCCC2CC(C(=O)N(C)CCN3C4CCC3C(C)n3c(C)nn3C(C)C)C4)c3cccc3)C(c3cccc3)N12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(N(C)Cc2cc(CO)c3ccc(Cl)cc3n2)sc1C(N)=O	Cc1nc(N(C)Cc2cc(CO)c3ccc(Cl)cc3n2)sc1C(N)=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccnc(NC(=S)OCCN2C(=O)c3cccc3C2=O)c1	Cc1ccnc(NC(=S)OCCN2C(=O)c3cccc3C2=O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1cccc(NC(=O)Cs2nc3c(c(=O)[nH]2)CCC3)c1	NC(=O)c1cccc(NC(=O)Cs2nc3c(c(=O)[nH]2)CCC3)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CCN1CCCC1)c1cc(C)nc(N(CCO)C2ccc(OS(=O))(=O)CC)cc2S(=O))(=O)NC)n1	CCN(CCN1CCCC1)c1cc(C)nc(N(CCO)C2ccc(OS(=O))(=O)CC)cc2S(=O))(=O)NC)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nn(C)c(C(=O)N2CCCC(CO)(CO)C2)c1C(=O)c1cccc1	Cc1nn(C)c(C(=O)N2CCCC(CO)(CO)C2)c1C(=O)c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CC(C)CC(NC(=O)C(C)NC(=O)C(N)C(C)C)C(=O)NC(C(=O)NC(CC(C)C)C(=O)NC(CC(C)C)C(O)C1OC1C(=O)O)C(C)C	CC(C)CC(NC(=O)C(C)NC(=O)C(N)C(C)C)C(=O)NC(C(=O)NC(CC(C)C)C(=O)NC(CC(C)C)C(O)C1OC1C(=O)O)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
O=Cc1ccc(CO)c(O)c1O	O=Cc1ccc(CO)c(O)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1ccc(N=CN2CCN(Cc3ccc(Cl)s3)CC2)cc1Cl	Clc1ccc(CN2CCN(C=Nc3ccc(Cl)c(Cl)c3)CC2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)c1cccc(C(=O)Nc2cc(-c3ccnc3)ccc2O)c1	CCN(CC)c1cccc(C(=O)Nc2cc(-c3ccnc3)ccc2O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(CC2CC2)Cc2cc(OCc3ccc4cccc4n3)ccc2C(c2cc(Cl)cc(Cl)c2O)N1	CC1(CC2CC2)Cc2cc(OCc3ccc4cccc4n3)ccc2C(c2cc(Cl)cc(Cl)c2O)N1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c(=O)c(C(=O)N2CC(O)C(NC(=O)C(O)c3cccc(Cl)c3)C2)c(O)c2ccccc21	Cn1c(=O)c(C(=O)N2CC(O)C(NC(=O)C(O)c3cccc(Cl)c3)C2)c(O)c2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(Cc2ccnc2)cc1)c1cc2cc(Br)cc(Br)c2oc1=O	O=C(Nc1ccc(Cc2ccnc2)cc1)c1cc2cc(Br)cc(Br)c2oc1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1coc2cccc(OCc3c(Cl)ccc(N(C)C(=O)C(=O)c4c(F)cccc4Cl)c3Cl)c12	Cc1coc2cccc(OCc3c(Cl)ccc(N(C)C(=O)C(=O)c4c(F)cccc4Cl)c3Cl)c12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Cl)cc1Nc1nc(-c2ccc(C(=O)NCCCO)cc2)nc2[nH]ncc12	COc1ccc(Cl)cc1Nc1nc(-c2ccc(C(=O)NCCCO)cc2)nc2[nH]ncc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(O)nc2cccc(NC(=O)CN3CCCC3C)c12	Cc1cc(O)nc2cccc(NC(=O)CN3CCCC3C)c12	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(-c2ccc(Cn3cc[n+](Cc4cccc4)c3)cc2)cc1	c1ccc(C[n+]2ccn(Cc3ccc(-c4cccc4)cc3)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN=C1SC(C(C(=O)Nc2cccc(C#N)c2)C(=O)N1CC	CCN=C1SC(C(C(=O)Nc2cccc(C#N)c2)C(=O)N1CC	TRUE	TRUE	TRUE
O=S1(=O)N(Cc2ccc(Cl)cc2)c2cccc(Cl)c2-c2ncncc21	O=S1(=O)c2cnnc2-c2c(Cl)cccc2N1Cc1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NNC(=O)c1cc2cccc2s1)c1cccc1-n1cccc1	O=C(NNC(=O)c1cccc1-n1cccc1)c1cc2cccc2s1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)Oc1ccc(N=c2nc(O)n(CCC(=O)O)c(=O)n2Cc2ccc(Cl)cc2)cc1	CC(C)Oc1ccc(N=c2nc(O)n(CCC(=O)O)c(=O)n2Cc2ccc(Cl)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1CCCC1CNC(=O)c1cc(NS(=O)(=O)c2ccc(C)cc2)ccc1OC	CCN1CCCC1CNC(=O)c1cc(NS(=O)(=O)c2ccc(C)cc2)ccc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
C1CN2CCOC2=N1	C1CN2CCOC2=N1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc1CNC(=O)c1ccc2sc(CNC(=O)C3CC3)nc2c1	Cc1cccc1CNC(=O)c1ccc2sc(CNC(=O)C3CC3)nc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(Cn2c3ccc(O)cc3c3cc(CNC4CCOC4)ccc32)ccc1N	COc1cc(Cn2c3ccc(O)cc3c3cc(CNC4CCOC4)ccc32)ccc1N	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc2ccc(Br)cc2c(NC(S)=Nc2ccccc2F)c1C	Cc1nc2ccc(Br)cc2c(NC(S)=Nc2ccccc2F)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(OCCNCC2COCCO2)cc1	c1ccc(OCCNCC2COCCO2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NN=Cc1cccc1)c1ccccn1	O=C(NN=Cc1cccc1)c1ccccn1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(NC(=O)c2ccco2)cc(-c2[nH]nc(C(F)(F)F)c2C)c1	Cc1cc(NC(=O)c2ccco2)cc(-c2[nH]nc(C(F)(F)F)c2C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1ccc(OC2ccc(-c3cnc4ccnc4c3)cc2)cc1N(CCC)CCl	ClCCN(CCC)c1cc(OC2ccc(-c3cnc4ccnc4c3)cc2)ccc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)C(=O)CN1CCN(C(=O)c2cc(-c3ccc(S(C)(=O)=O)cc3)cn2C2CC2)CC1	CN(C)C(=O)CN1CCN(C(=O)c2cc(-c3ccc(S(C)(=O)=O)cc3)cn2C2CC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(COC(=O)c1cccc2cccc12)Nc1ccc(S(=O)(=O)N2CCCC2)cc1	O=C(COC(=O)c1cccc2cccc12)Nc1ccc(S(=O)(=O)N2CCCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1cn(Cc2ccc(F)cc2)c(=O)c2cc(OC)c(OC)cc12	COC(=O)c1cn(Cc2ccc(F)cc2)c(=O)c2cc(OC)c(OC)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)n1cc(NC(=O)N2CC(N)CC2C(=O)NCCNc2ncc(Cl)cn2)c2ccccc21	NC(=O)n1cc(NC(=O)N2CC(N)CC2C(=O)NCCNc2ncc(Cl)cn2)c2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc(C(=O)O)c(=O)c2cc([N+](=O)[O-])c(N3CCN(c4cccc4F)CC3)cc21	Cn1cc(C(=O)O)c(=O)c2cc([N+](=O)[O-])c(N3CCN(c4cccc4F)CC3)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(c1cccc1)c1sc2ncn(Cc3c(F)cccc3F)c(=O)c2c1-c1ccc(F)cc1	O=c1c2c(-c3ccc(F)cc3)c(S(=O)(=O)c3ccccc3)sc2ncn1Cc1c(F)cccc1F	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)Nc2cccc3[nH]ncc23)cc1	COc1ccc(C(=O)Nc2cccc3[nH]ncc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1cccc(C(=O)N(Cc2ccccc2)CC2CCO2)c1	CC(=O)Nc1cccc(C(=O)N(Cc2ccccc2)CC2CCO2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOn1c(Sc2ccc(C)cc2)c(C)[nH]c1=O	CCOn1c(Sc2ccc(C)cc2)c(C)[nH]c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)NC(=S)Nc1cccc(Br)c1	CC(C)(C)NC(=S)Nc1cccc(Br)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1[nH]c(=O)n(Cc2ccccc2)o1	O=c1[nH]c(=O)n(Cc2ccccc2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCc1ccc(Cl)cc1)c1cc(C(=O)N2CCNCC2)cc([N+](=O)[O-])c1	O=C(NCc1ccc(Cl)cc1)c1cc(C(=O)N2CCNCC2)cc([N+](=O)[O-])c1	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)Nc1ccc(Cc2nc3c(=O)[nH]c(=O)[nH]c3n2CCCc2ccccc2)cc1	CS(=O)(=O)Nc1ccc(Cc2nc3c(=O)[nH]c(=O)[nH]c3n2CCCc2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2cc3cnc(OC(C)C)nc3n2C2CC2)cc1	COc1ccc(-c2cc3cnc(OC(C)C)nc3n2C2CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
FC(F)c1c[nH]c(C2=NCCN2)n1	FC(F)c1c[nH]c(C2=NCCN2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(OC)cc2c(-c3ccccc3)cc(N(C)C3CCN(C)CC3)nc12	COc1cc(OC)c2nc(N(C)C3CCN(C)CC3)cc(-c3ccccc3)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC12CCC(O)CC1CCC1C2CCC2(C)C1CCC2(O)c1cccc(-c2ccccc2)c1	CC12CCC(O)CC1CCC1C2CCC2(C)C1CCC2(O)c1cccc(-c2ccccc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
OCC1OC(n2c(Br)nc3cc(OCc4cccc(Cl)c4)ccc32)C(O)C1O	OCC1OC(n2c(Br)nc3cc(OCc4cccc(Cl)c4)ccc32)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1ccc(CN2CCN(CCCNCc3ccc(-c4cccc4)c3)CC2)cc1	Clc1ccc(CN2CCN(CCCNCc3ccc(-c4cccc4)c3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(O)=C(C(=NNc1ccc(Cl)cc1Cl)N1CCOCC1)c1ccc(-c2ccccc2)o1	CCOC(O)=C(C(=NNc1ccc(Cl)cc1Cl)N1CCOCC1)c1cccc(-c2ccccc2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)c2c(CC(=O)Nc3nccs3)coc2c1	Cc1cc(C)c2c(CC(=O)Nc3nccs3)coc2c1	TRUE	TRUE	FALSE
COc1ccc(NC(=O)C2CC2)ccc1C1CC(=O)Nc2c1c(=O)n(C)c1cc(Br)ccc21	COc1ccc(NC(=O)C2CC2)ccc1C1CC(=O)Nc2c1c(=O)n(C)c1cc(Br)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CNc1cc(Nc2c(C#N)cncc2-c2ccc(CN3CCNCC3)cc2)ccc1C	CNc1cc(Nc2c(C#N)cncc2-c2ccc(CN3CCNCC3)cc2)ccc1C	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCc2ccccc2C1C1=NCCN1	CN1CCc2ccccc2C1C1=NCCN1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCNc1c(-c2ccc(C(F)(F)F)cc2)nc2ccc(Br)cn12	COCCNc1c(-c2ccc(C(F)(F)F)cc2)nc2ccc(Br)cn12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(COC(=O)CCC(=O)OCCc2ccc(NC(C)=O)cc2)cc1	COc1cccc(COC(=O)CCC(=O)OCCc2ccc(NC(C)=O)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1c(Nc2ncc(-c3ccn3)c(C(NC(C)C)n2)ccc2c1ncn2C(C)C	COc1c(Nc2ncc(-c3ccn3)c(C(NC(C)C)n2)ccc2c1ncn2C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C1COc2cc(Cl)ccc2CN1C(=O)c1ccc[nH]1	O=C(O)C1COc2cc(Cl)ccc2CN1C(=O)c1ccc[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
CC12CCC(O)CC1CCC1C2CCC2(C)C(C#N)CCC12	CC12CCC3C(CCC4CC(O)CCC43C)C1CCC2C#N	TRUE	TRUE	FALSE
CCN(CC)C(=O)Oc1ccc2[nH]c(C(=O)N3CCC(O)(c4cccc(OC)c4Cl)CC3)cc2c1	CCN(CC)C(=O)Oc1ccc2[nH]c(C(=O)N3CCC(O)(c4cccc(OC)c4Cl)CC3)cc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1ccc(CNC(=O)c2ccc3c(c2)nc2n3C3(CCCCC3)CC2)cc1	CN(C)c1ccc(CNC(=O)c2ccc3c(c2)nc2n3C3(CCCCC3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCCC(=O)O)c1cccs1	O=C(O)CCNC(=O)c1cccs1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(F)cc1C1SCC(=O)N1c1cc(C)nc(-c2ccc(C)cc2)n1	COc1ccc(F)cc1C1SCC(=O)N1c1cc(C)nc(-c2ccc(C)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc2cc(Br)ccc2c(=O)o1	Cc1nc2cc(Br)ccc2c(=O)o1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C1(c2ccc(-c3cc[nH]n3)cc2)CC1(F)F	O=C(O)C1(c2ccc(-c3cc[nH]n3)cc2)CC1(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(NS(=O)(=O)c2ccc3oc(=O)c(=O)[nH]c3c2)c1	Cc1cccc(NS(=O)(=O)c2ccc3oc(=O)c(=O)[nH]c3c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C1C2C3C=CC(C3)C2C(=O)N1C(=O)OCc1oc(C)nc1C	COC(=O)C1C2C3C=CC(C3)C2C(=O)N1C(=O)OCc1oc(C)nc1C	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCOC(=O)CN(Cc1cccc1)C(=O)C(C)NC(=O)C(CCCN=C(N)N)NC(=O)C(N)CCCN	CCCCOC(=O)CN(Cc1cccc1)C(=O)C(C)NC(=O)C(CCCN=C(N)N)NC(=O)C(N)CCCN	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1OCC(CCN2CCc3cc(Br)ccc3C2)N1c1ccc2ncc(-c3cccc(OC(F)(F)F)c3)cc2c1	O=C1OCC(CCN2CCc3cc(Br)ccc3C2)N1c1ccc2ncc(-c3cccc(OC(F)(F)F)c3)cc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(NCC(c1cccc1)N1CCN(c2cccn2)CC1)c1cccc1	O=S(=O)(NCC(c1cccc1)N1CCN(c2cccn2)CC1)c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Fc1ccc(Cn2c(CCOc3ccc(Cl)cc3Cl)nn2C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F)cc1	Fc1ccc(Cn2c(CCOc3ccc(Cl)cc3Cl)nn2C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)nc(N(C(=O)c2ccc(F)cc2Cl)C(C)c2ccccc2)n1	Cc1cc(C)nc(N(C(=O)c2ccc(F)cc2Cl)C(C)c2ccccc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C1CC(=O)N(c2ccc3c(c2)OCCO3)C1	COC(=O)C1CC(=O)N(c2ccc3c(c2)OCCO3)C1	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1cc(Nc2ccc(Cc3ccncc3)cc2)ccc1Nc1ccnc2cc(-c3nccn3)ccc12	Oc1cc(Nc2ccc(Cc3ccncc3)cc2)ccc1Nc1ccnc2cc(-c3nccn3)ccc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NCc2csc(-c3cncc(C)c3)n2)cc1	Cc1ccc(NCc2csc(-c3cncc(C)c3)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=Cc1cccs1	O=Cc1cccs1	TRUE	TRUE	FALSE
COc1ccc2[nH]cc(CCN(C(=O)c3ccc([N+](=O)[O-])o3)c2c1	COc1ccc2[nH]cc(CCN(C(=O)c3ccc([N+](=O)[O-])o3)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(N=Cc2ccc(N(C)C)cc2)CC1	CN1CCN(N=Cc2ccc(N(C)C)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(Cc1nc(-c2ccccc2)no1)C(=O)CN1CCCC1	CN(Cc1nc(-c2ccccc2)no1)C(=O)CN1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(O)C=CC1(O)C(C)(O)CCC2(C)C1CCC13CC(C)(CCC21)C(OC(=O)C1CCC1)C3=O	CC(C)(O)C=CC1(O)C2CCC34CC(C)(CCC3C2(C)CCC1(C)O)C(OC(=O)C1CCC1)C4=O	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(-c2ccc(CN3C(COc4cccc4)CCCC3Cc3ccc4cccnc34)cc2)cc1	c1ccc(OCC2CCCC(CCc3ccc4cccnc34)N2Cc2ccc(-c3ccccc3)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1c(SCC(=O)Nc2cccc(OC)c2OC)nnc1-c1ccnc1	CCn1c(SCC(=O)Nc2cccc(OC)c2OC)nnc1-c1ccnc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc2c(c1)NC(=O)Nc1cc(Cl)ccc1N2	Cc1ccc2[nH]c3ccc(Cl)cc3[nH]c(=O)[nH]c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
N#CC(=Cc1cccs1)c1nc2ccccc2[nH]1	N#CC(=Cc1cccs1)c1nc2ccccc2[nH]1	TRUE	TRUE	FALSE
CNc1nccc(N2CCc3nccn3CC2)n1	CNc1nccc(N2CCc3nccn3CC2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1c(Br)cc(C(O)CN2CCN(CCc3c[nH]c4cccc34)CC2)cc1Br	COc1c(Br)cc(C(O)CN2CCN(CCc3c[nH]c4cccc34)CC2)cc1Br	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c(Cc2ccc(CNc3cccc(Cl)c3)cc2)nc2ccccc21	Cn1c(Cc2ccc(CNc3cccc(Cl)c3)cc2)nc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CC1CCc2ccc3ccccc3c2N1S(=O)(=O)c1ccc(Cl)cc1)NCC1ccccc1	O=C(CC1CCc2ccc3ccccc3c2N1S(=O)(=O)c1ccc(Cl)cc1)NCC1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)P(=O)(O)c1ccc(CC2(CC(=O)O)CCCC2)cc1	CC(C)P(=O)(O)c1ccc(CC2(CC(=O)O)CCCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>COc1ccc(F)c(-n2cc(-c3ccccc3)nc2CCNC(=O)C(C)cn2c(C)c(-c3ccccc3)c(=O)[nH]c2=O)c1</chem>	<chem>COc1ccc(F)c(-n2cc(-c3ccccc3)nc2CCNC(=O)C(C)cn2c(C)c(-c3ccccc3)c(=O)[nH]c2=O)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNC(=O)c1cc(Cn2c(=O)n(-c3ccccc3)c3cc(OC)c(OC)cc32)ccc1OC</chem>	<chem>CNC(=O)c1cc(Cn2c(=O)n(-c3ccccc3)c3cc(OC)c(OC)cc32)ccc1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc2nc(-c3ccc(Br)cc3)cc(C(=O)O)c2c1</chem>	<chem>Cc1ccc2nc(-c3ccc(Br)cc3)cc(C(=O)O)c2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N=C(N)c1ccc(OCc2ccc(C(=O)NC3CS3)cc2)cc1</chem>	<chem>N=C(N)c1ccc(OCc2ccc(C(=O)NC3CS3)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C(=O)NCCNCc2ccnncn2)cc1F</chem>	<chem>COc1ccc(C(=O)NCCNCc2ccnncn2)cc1F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)c1c(S)N(C2OC(COC(C)=O)C(OC(C)=O)C(OC(C)=O)C2OC(C)=O)c(=O)[nH]c1=O</chem>	<chem>CCOC(=O)c1c(S)N(C2OC(COC(C)=O)C(OC(C)=O)C(OC(C)=O)C2OC(C)=O)c(=O)[nH]c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1cnn(CCNCC2(c3ccnc3)CC2)c1</chem>	<chem>c1cnncc(C2(CNCCn3cccn3)CC2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1sc2nc(C3(C(=O)NCC(F)(F)F)CC3)c(C)c(=O)n2c1C</chem>	<chem>Cc1sc2nc(C3(C(=O)NCC(F)(F)F)CC3)c(C)c(=O)n2c1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC#CC(C)OC(=O)N1CCC(OCc2ncnc3c2cnn3-c2ccccc2C)CC1</chem>	<chem>CC#CC(C)OC(=O)N1CCC(OCc2ncnc3c2cnn3-c2ccccc2C)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1Sc2ccccc2NC1=O</chem>	<chem>CC1Sc2ccccc2NC1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)C(=O)Cc1cnn(C)c1-c1cccc(OCCN(C)C)n1</chem>	<chem>CN(C)CCOc1cccc(-c2c(CC(=O)N(C)C)cnn2C)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)C1=CC2CC3(C=O)C4CCC(C)C4CC2(C(=O)C3C(=O)c2ccc(C(=O)c3ccccc3)cc2)C1=O</chem>	<chem>CC(C)C1=CC2CC3(C=O)C(C(=O)c4ccc(C(=O)c5ccccc5)cc4)C(=O)C2(CC2(C)CCC23)C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)c1cc(C(=O)Nc2ccccc2C(=O)O)no1</chem>	<chem>CC(C)(C)c1cc(C(=O)Nc2ccccc2C(=O)O)no1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CCCN1CCCOc1ccc(-c2ccc(=O)n(C)n2)cc1</chem>	<chem>CC1CCCN1CCCOc1ccc(-c2ccc(=O)n(C)n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CNC(=O)c1cccc1OC(C)C(=O)N1CCCC1</chem>	<chem>CNC(=O)c1cccc1OC(C)C(=O)N1CCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1cnc1Cn1c(=O)n(CCC(N)C(=O)O)c(=O)c2sc3ccccc3c21</chem>	<chem>Cn1cnc1Cn1c(=O)n(CCC(N)C(=O)O)c(=O)c2sc3ccccc3c21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=c1[nH]c(=O)n(C2OC(COP(=O)(O)OP(=O)(O)O)C(O)C2O)cc1F</chem>	<chem>O=c1[nH]c(=O)n(C2OC(COP(=O)(O)OP(=O)(O)O)C(O)C2O)cc1F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc2cc(C(=O)N3CCC(N4CCN(c5cccc(OC(C)C)c5)CC4)CC3)[nH]c2c(OC)c1OC</chem>	<chem>COc1cc2cc(C(=O)N3CCC(N4CCN(c5cccc(OC(C)C)c5)CC4)CC3)[nH]c2c(OC)c1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(CNC(=O)CN2C(=O)c3ccnc3Oc3ccc(C)cc32)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(CNC(=O)CN2C(=O)c3ccnc3Oc3ccc(C)cc32)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNC(=O)c1cccc2c1Oc1ccc(Cl)cc1O2</chem>	<chem>CNC(=O)c1cccc2c1Oc1ccc(Cl)cc1O2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)COC(=O)c1ccc(C=CC(=O)NCCCN=C(N)N)cc1</chem>	<chem>CC(C)COC(=O)c1ccc(C=CC(=O)NCCCN=C(N)N)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=S(=O)(Nc1ccnc2c1cnn2-c1ccccc1)c1ccc(Cl)c(Cl)c1</chem>	<chem>O=S(=O)(Nc1ccnc2c1cnn2-c1ccccc1)c1ccc(Cl)c(Cl)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)O)(C#Cc1ccc2c(c1)-c1nc(C(N)=O)c(CC(C)(C)C)n1CCO2)C(C)C</chem>	<chem>CC(C)O)(C#Cc1ccc2c(c1)-c1nc(C(N)=O)c(CC(C)(C)C)n1CCO2)C(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)NS(=O)(=O)c1ccc(NC(=O)C=Cc2ccco2)c([N+](=O)[O-])c1</chem>	<chem>CC(C)NS(=O)(=O)c1ccc(NC(=O)C=Cc2ccco2)c([N+](=O)[O-])c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C#CCOc1ccn2c(-c3ccc(F)cc3)c(-c3ccc(S(C)(=O)=O)cc3)nc2c1</chem>	<chem>C#CCOc1ccn2c(-c3ccc(F)cc3)c(-c3ccc(S(C)(=O)=O)cc3)nc2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)c1c(C)[nH]c(Cl=O)OCC(=O)N2CCN(C)CC2)c1C</chem>	<chem>COC(=O)c1c(C)[nH]c(Cl=O)OCC(=O)N2CCN(C)CC2)c1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COP(=S)(OC(=O)c1ccc(OC)c(OC)c(OC)c1)P(=O)(OC)OC</chem>	<chem>COc1cc(C(=O)OP(=S)(OC)P(=O)(OC)OC)cc(OC)c1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)CN1CCCNc2ccccc2C1</chem>	<chem>CC(=O)CN1CCCNc2ccccc2C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(S(=O)(=O)N2CC(NC(=O)C(C)C)n3ccnc3)CC2C(=O)NO)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(S(=O)(=O)N2CC(NC(=O)C(C)C)n3ccnc3)CC2C(=O)NO)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCc1nc2cc(C=CC(=O)NO)cnn2c1NCCCCOC</chem>	<chem>CCCCCc1nc2cc(C=CC(=O)NO)cnn2c1NCCCCOC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1sc2ncnc(S(C)(=O)=O)c2c1S(=O)(=O)N1CCC(C(=O)=O)c2c1S(=O)(=O)N1CCC(C(=O)Nc2ccc(F)cc2)CC1</chem>	<chem>Cc1sc2ncnc(S(C)(=O)=O)c2c1S(=O)(=O)N1CCC(C(=O)Nc2ccc(F)cc2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)Cn1c(=O)n(C)c(=O)c2c(Br)c(C34OCC(C)C40)sc21</chem>	<chem>CC(C)Cn1c(=O)n(C)c(=O)c2c(Br)c(C34CC(CO3)C40)sc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCN1cc(Cl)c(C(=O)NCC2CCCN2CC)n1</chem>	<chem>CCCN1cc(Cl)c(C(=O)NCC2CCCN2CC)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C(=O)c1ccc2c(c1)nc(-c1ccc(F)cc1)n2C1CCC(CN2CCCC2)CC1)C1CCNCC1</chem>	<chem>CN(C(=O)c1ccc2c(c1)nc(-c1ccc(F)cc1)n2C1CCC(CN2CCCC2)CC1)C1CCNCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCOc1ccc(C(=O)NC2CCN(C)CC2)cc1</chem>	<chem>CCCCCOc1ccc(C(=O)NC2CCN(C)CC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(S(=O)(=O)NCC(=O)N2CCN(Cc3cccc4ccccc34)CC2)cc1C</chem>	<chem>Cc1ccc(S(=O)(=O)NCC(=O)N2CCN(Cc3cccc4ccccc34)CC2)cc1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNC(=O)OC1CCCC2(C)C(=CCC3C2CC2(C)C(C)C(O)C(=O)CCN4COC(C)(C)C4)CCC32)C1</chem>	<chem>CNC(=O)OC1CCCC2(C)C(=CCC3C2CC2(C)C3CCC2(C)C(O)C(=O)CCN2COC(C)(C)C2)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1ncc(Cc2ccccc(C)F)(F)F)c2)c(=O)[nH]1</chem>	<chem>Nc1ncc(Cc2ccccc(C)F)(F)F)c2)c(=O)[nH]1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccsc1C(=CCCN1CCC(n2c(O)nc3ccccc32)CC1)c1secc1C</chem>	<chem>Cc1ccsc1C(=CCCN1CCC(n2c(O)nc3ccccc32)CC1)c1secc1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc2oc(=O)ccc2c(OC)c1O</chem>	<chem>COc1cc2oc(=O)ccc2c(OC)c1O</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CC(c1ccc(C(=O)NCc2ccncc2)o1)N1C(=O)Cc2c(F)ccc(Cl)c21</chem>	<chem>CC(c1ccc(C(=O)NCc2ccncc2)o1)N1C(=O)Cc2c(F)ccc(Cl)c21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCc1nnc(NC(=O)c2noc(C)c2[N+](=O)[O-])s1</chem>	<chem>CCCCc1nnc(NC(=O)c2noc(C)c2[N+](=O)[O-])s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(N2CCN(C)CC2)ccc1N1CCC(CN2CCCC2=O)CC1</chem>	<chem>Cc1cc(N2CCN(C)CC2)ccc1N1CCC(CN2CCCC2=O)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cccc(-c2nc3c(c4c2CC(c2ccccc(OC)c2)CC4)CNCC3)c(C)C1</chem>	<chem>COc1cccc(C2CCc3c4c(nc(-c5ccc(OC)cc5C)c3C2)CCNC4)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N=c1cc(C2=NOc(Cc(=O)NCC3ccc(F)cc3)C2)cc[nH]1</chem>	<chem>N=c1cc(C2=NOc(Cc(=O)NCC3ccc(F)cc3)C2)cc[nH]1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>OC1(c2ccc(-c3ccnc(NC4CC4)c3)cc2)CN2CCC1CC2</chem>	<chem>OC1(c2ccc(-c3ccnc(NC4CC4)c3)cc2)CN2CCC1CC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cccc(C2=CCN(C(=O)CCc3csen3)CC2)c1</chem>	<chem>Cc1cccc(C2=CCN(C(=O)CCc3csen3)CC2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C#Cc2cn(C=CC(=O)O)c(=O)[nH]c2=O)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(C#Cc2cn(C=CC(=O)O)c(=O)[nH]c2=O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC(=O)Nc1ccc(N(C)C)cc1)(C(=O)c1oc2c(C)cc(C)cc2c1C</chem>	<chem>CCN(CC(=O)Nc1ccc(N(C)C)cc1)(C(=O)c1oc2c(C)cc(C)cc2c1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1ccc(Cl)cc1)c1ccc(NC(=O)c2nsc3ccccc3c2O)cc1</chem>	<chem>O=C(Nc1ccc(Cl)cc1)c1ccc(NC(=O)c2nsc3ccccc3c2O)cc1</chem>	FALSE	TRUE	TRUE
<chem>CC#Cc1cnncc(-c2cnc3c(c2)CCC(N2CCC(C)(C)C(N)C2)O3)c1</chem>	<chem>CC#Cc1cnncc(-c2cnc3c(c2)CCC(N2CCC(C)(C)C(N)C2)O3)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(CC(=O)N1CCCC1)=NNC(=O)COc1cccc1</chem>	<chem>CC(CC(=O)N1CCCC1)=NNC(=O)COc1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nn(Cc2ccc(C(=O)Nc3cc(-c4ccccc4)ccc3C(=O)Nc3ccc(C(=O)N3CCOCC3)cc2)c(C)c1CC(=O)O</chem>	<chem>Cc1nn(Cc2ccc(C(=O)Nc3cc(-c4ccccc4)ccc3C(=O)Nc3ccc(C(=O)N3CCOCC3)cc2)c(C)c1CC(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC1OCC(COC(=O)CCCCC[n+]2ccsc2)O1</chem>	<chem>CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC1OCC(COC(=O)CCCCC[n+]2ccsc2)O1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)c1n[nH]cc1CNC12CC3CC(Cc(C3)C1)C2</chem>	<chem>CC(C)(C)c1n[nH]cc1CNC12CC3CC(Cc(C3)C1)C2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cnc(NC(=O)c2ccc3c(c2)C(=O)N(Cc2ccc[nH]c2=O)C3=O)s1</chem>	<chem>Cc1cnc(NC(=O)c2ccc3c(c2)C(=O)N(Cc2ccc[nH]c2=O)C3=O)s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)C(=O)Nc1c(-c2ccc(F)cc2)c(=O)[nH]c2ccc(Br)cc12</chem>	<chem>CC(C)(C)C(=O)Nc1c(-c2ccc(F)cc2)c(=O)[nH]c2ccc(Br)cc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)CCCC(NC(=O)c1cccc([N+](=O)[O-])cc1)C(=O)O</chem>	<chem>O=C(O)CCCC(NC(=O)c1cccc([N+](=O)[O-])cc1)C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(CNC(=O)CC2C(=O)N(c3ccc(Cl)cc3)C(=O)N2C2CCCC2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(CNC(=O)CC2C(=O)N(c3ccc(Cl)cc3)C(=O)N2C2CCCC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C(=O)c2ccn(N=C3C(=O)Nc4ccc(Cl)cc43)c2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(C(=O)c2ccn(N=C3C(=O)Nc4ccc(Cl)cc43)c2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cccc(CNS(=O)(=O)c2cc3[nH]c(=O)c(=O)[nH]c3cc2C)c1</chem>	<chem>COc1cccc(CNS(=O)(=O)c2cc3[nH]c(=O)c(=O)[nH]c3cc2C)c1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>N#Cc1c(C(=O)c2ccc(Cl)cc2)nn(-c2ccccc2)c1NCCO</chem>	<chem>N#Cc1c(C(=O)c2ccc(Cl)cc2)nn(-c2ccccc2)c1NCCO</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1ncnc2c1cnc2C1OC(COS(=O)(=O)NC(=O)c2ccccc2O)C(O)C1O</chem>	<chem>Nc1ncnc2c1cnc2C1OC(COS(=O)(=O)NC(=O)c2ccccc2O)C(O)C1O</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>Cc1c(CNCCCCCNc2c(C3CCCC3)c(=O)c2=O)c2ccc(F)cc2n1C</chem>	<chem>Cc1c(CNCCCCCNc2c(C3CCCC3)c(=O)c2=O)c2ccc(F)cc2n1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1cccc2c1C(=O)c1c(N)cccc1C2=O</chem>	<chem>Nc1cccc2c1C(=O)c1c(N)cccc1C2=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(C1CCCN1S(=O)(=O)c1cccs1)N1CCN(c2ccccc2F)CC1</chem>	<chem>O=C(C1CCCN1S(=O)(=O)c1cccs1)N1CCN(c2ccccc2F)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)CCCC(C)C1CC2C(OC(=O)c3ccccc3)CCCC12C</chem>	<chem>CC(C)CCCC(C)C1CCC2(C(OC(=O)c3ccccc3)CCCC12C</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>O=C(Nc1ccc(Cl)cc1)NC1CCN(C2CCN(Cc3ccc(OC4ccccc4)cc3)CC2)C1</chem>	<chem>O=C(Nc1ccc(Cl)cc1)NC1CCN(C2CCN(Cc3ccc(OC4ccccc4)cc3)CC2)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)c1c(N=Cc2c(C)nn(-c3ccccc3)c2N)sc2c1CCCC2</chem>	<chem>CCOC(=O)c1c(N=Cc2c(C)nn(-c3ccccc3)c2N)sc2c1CCCC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CN(C(C)CO)C(=O)Cc2cc(N5(=O)(=O)c3cccs3)ccc2OC1CN(C)CC1CCOCC1</chem>	<chem>CC1CN(C(C)CO)C(=O)Cc2cc(N5(=O)(=O)c3cccs3)ccc2OC1CN(C)CC1CCOCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Clc1ccc2c(NCCCN3CCCC3)ccnc2c1</chem>	<chem>Clc1ccc2c(NCCCN3CCCC3)ccnc2c1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>COc1cc(-c2[nH]c(SC3CCCO3)nc2-c2ccc3c(c2)OCO3)cc(OC)c1OC</chem>	<chem>COc1cc(-c2[nH]c(SC3CCCO3)nc2-c2ccc3c(c2)OCO3)cc(OC)c1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N=C(N)c1ccc(OC(=O)c2cc(Br)c(Br)[nH]2)cc1</chem>	<chem>N=C(N)c1ccc(OC(=O)c2cc(Br)c(Br)[nH]2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(C)OC(=O)Nc2ccc(-c3c(-c4ccc(F)cc4)nnc4c3CCNC4)cc21</chem>	<chem>CC1(C)OC(=O)Nc2ccc(-c3c(-c4ccc(F)cc4)nnc4c3CCNC4)cc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNc1ccnc2cc(Cl)ccc12</chem>	<chem>CNc1ccnc2cc(Cl)ccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)COc1ccc2c(c1)Cc1nn(Cc3ccccc3Cl)c(-c3ccccc3)c1-2</chem>	<chem>O=C(O)COc1ccc2c(c1)Cc1nn(Cc3ccccc3Cl)c(-c3ccccc3)c1-2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1ccc(C(=O)O)cc1)c1ccc2cc(C(=CC3CC3)c3ccc(F)c(F)c3)ccc2o1</chem>	<chem>O=C(O)c1cccc(NC(=O)c2ccc3cc(C(=CC4CC4)c4ccc(F)c(F)c4)ccc3o2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc2nc(N(CCN(C)C)C(=O)c3ccccc(S(=O)(=O)N(C)C4CCCC4)c3)sc2c1</chem>	<chem>Cc1ccc2nc(N(CCN(C)C)C(=O)c3ccccc(S(=O)(=O)N(C)C4CCCC4)c3)sc2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc2c3c4c(Cl)cc5c(c4c4c(c3[nH]c2cc1C)C(O)NC4=O)OCO5</chem>	<chem>Cc1cc2c(cc1Cl)[nH]c1c3c(c4c5c(cc(Cl)c4c12)OCO5)C(=O)NC3O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(CC=Cc1ccccc1)Nc1ccncc1</chem>	<chem>O=C(CC=Cc1ccccc1)Nc1ccncc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1n[nH]cc1CNC1CCCN(c2cc(F)c(F)cc2F)C1=O</chem>	<chem>Cc1n[nH]cc1CNC1CCCN(c2cc(F)c(F)cc2F)C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)c1c(NC(=O)c2ccc(Br)o2)sc2c1CC(C)(C)OC2</chem>	<chem>COC(=O)c1c(NC(=O)c2ccc(Br)o2)sc2c1CC(C)(C)OC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCCCN(C=O)c1cc(C)ccc1Oc1ccc(C#N)c(C(F)(F)F)c1</chem>	<chem>COCCCN(C=O)c1cc(C)ccc1Oc1ccc(C#N)c(C(F)(F)F)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>COc1ccc(Oc2ccc(S(=O)(=O)N3CCCC3)cc2[N+](=O)[O-])cc1</chem>	<chem>COc1ccc(Oc2ccc(S(=O)(=O)N3CCCC3)cc2[N+](=O)[O-])cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1noc(C)c1CN1CC(C)Oc2cccc(F)n2)C1</chem>	<chem>Cc1noc(C)c1CN1CC(C)Oc2cccc(F)n2)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1cnc(N2CCN(C3CCC(N4CCOCC4)C3)C3CS(=O)(=O)CC32)nc1</chem>	<chem>O=S1(=O)CC2C(C1)N(C1CCC(N3CCOCC3)C1)CCN2c1ncccn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)OC1CC(C)=C(C)CC(=O)CC1(C)C</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cccn1CN(C)Cc1nc(COc2ccccc2)no1</chem>	<chem>Cc1cccn1CN(C)Cc1nc(COc2ccccc2)no1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(CCNCCC(=O)Nc2ccc(F)cc2F)cc1OC</chem>	<chem>COc1ccc(CCNCCC(=O)Nc2ccc(F)cc2F)cc1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(-c2cnc(C(=O)CCc3nc4cccc4n3C)o2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(-c2cnc(C(=O)CCc3nc4cccc4n3C)o2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)CCN(C=O)c1cc(Cc(=O)O)cc(-c2ccccc2F)c1</chem>	<chem>CN(C)CCN(C=O)c1cc(Cc(=O)O)cc(-c2ccccc2F)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1C(=O)N(Cc2ccccc(OCC3nc4cccc4s3)c2)c2ccc(OC(F)(F)F)cc21</chem>	<chem>O=C1C(=O)N(Cc2ccccc(OCC3nc4cccc4s3)c2)c2ccc(OC(F)(F)F)cc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(N=C(C)C)c2cc3ccccc3c2=O)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(N=C(C)C)c2cc3ccccc3c2=O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(OC(=O)c2ccc3ccccc3c2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(OC(=O)c2ccc3ccccc3c2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(-c2csc(Nc3ccc(N4CCOCC4)cc3)n2)cc(OC)c1OC</chem>	<chem>COc1cc(-c2csc(Nc3ccc(N4CCOCC4)cc3)n2)cc(OC)c1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=CCOc1ccc(COc2ccccc2CN(CC)CC)cc1</chem>	<chem>C=CCOc1ccc(COc2ccccc2CN(CC)CC)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(CNC(=O)C(C)C(C)NC(=O)OC(C)(C)C)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(CNC(=O)C(C)C(C)NC(=O)OC(C)(C)C)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#Cc1cc(Oc2ccccc(OC(C)O)CN3CC(C)O)C3)c2ccc1C(F)(F)F</chem>	<chem>N#Cc1cc(Oc2ccccc(OC(C)O)CN3CC(C)O)C3)c2ccc1C(F)(F)F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NCc1ccc(Cl)cc1)c1c(NO)cc(-c2ccccc2)oc1=O</chem>	<chem>O=C(NCc1ccc(Cl)cc1)c1c(NO)cc(-c2ccccc2)oc1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCOCc1ccc(C(=O)NC2CCCC2)cc1COc1ccc(NC(C)=O)c(C)cc1</chem>	<chem>CCCCCCCOCc1ccc(C(=O)NC2CCCC2)cc1COc1ccc(NC(C)=O)c(C)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CS(C)=Nc1ccc2c(c1)ncn2C)NC1CCCC1</chem>	<chem>CS(C)=Nc1ccc2c(c1)ncn2C)NC1CCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(C(=O)C2CCN(C3CCOCC3)CC2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(C(=O)C2CCN(C3CCOCC3)CC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NS(=O)(=O)NC1=NN2C(=NCCC2CO)S1</chem>	<chem>NS(=O)(=O)NC1=NN2C(=NCCC2CO)S1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCn1c(=O)[nH]c2cc(C(=O)NCCCN3CCN(c4ccccc4F)CC3)ccc2c1=O</chem>	<chem>CCn1c(=O)[nH]c2cc(C(=O)NCCCN3CCN(c4ccccc4F)CC3)ccc2c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)c1cc2nccc(-c3ccc(F)cc3)n2n1</chem>	<chem>O=C(O)c1cc2nccc(-c3ccc(F)cc3)n2n1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CC1=CC=C(C(C)(O)CCCC(C)C(=O)O)CC1</chem>	<chem>CC1=CC=C(C(C)(O)CCCC(C)C(=O)O)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc2c(c1O)C1OC(COC(=O)c3ccccc(O)c3)C(OC(=O)CCCCc3ccccc3)C(OC(=O)c3ccccc3)C3OC231</chem>	<chem>COc1ccc2c(c1O)C1OC(COC(=O)c3ccccc(O)c3)C(OC(=O)CCCCc3ccccc3)C(OC(=O)c3ccccc3)C3OC213</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOc1ccc(CNC(=O)c2nn(CC)c3c2CCCC3)cc1</chem>	<chem>CCOc1ccc(CNC(=O)c2nn(CC)c3c2CCCC3)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(CN1C(=O)COc2ccccc21)N1CN(c2ncccn2)CC1</chem>	<chem>O=C(CN1C(=O)COc2ccccc21)N1CN(c2ncccn2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(C2=C(C(OC(=O)c3ccc(F)cc3)C(=O)c3ncc(-c4ccccc4)nc3C2=O)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(C2=C(C(OC(=O)c3ccc(F)cc3)C(=O)c3ncc(-c4ccccc4)nc3C2=O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(C)CCc2cc(C(=O)N=C(N)N)ccc2O1</chem>	<chem>CC1(C)CCc2cc(C(=O)N=C(N)N)ccc2O1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc(-c2cc(-c3ccoc3)c3c(n2)-c2ccccc2OC3)cc1</chem>	<chem>c1ccc(-c2cc(-c3ccoc3)c3c(n2)-c2ccccc2OC3)cc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>Cc1cc(-c2ccc(NCc3ccccc3)cc2)sc1-c1nc(-c2c(F)cccc2Cl)nn1C</chem>	<chem>Cc1cc(-c2ccc(NCc3ccccc3)cc2)sc1-c1nc(-c2c(F)cccc2Cl)nn1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CCC(Oc2cc3c(cc2C2(S(=O)(=O)c4cccc(C(F)(F)F)c4)CC2)CC(F)(F)CC3)CN1C(=O)c1cncnc1</chem>	<chem>CC1CCC(Oc2cc3c(cc2C2(S(=O)(=O)c4cccc(C(F)(F)F)c4)CC2)CC(F)(F)CC3)CN1C(=O)c1cncnc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(OC(C)(C)C(C)=O)O)nc1-c1cnc(-c2ccc(OC(C)(C)c(##N)c2)c(Cl)c1</chem>	<chem>Cc1cc(OC(C)(C)C(C)=O)O)nc1-c1cnc(-c2ccc(OC(C)(C)c(##N)c2)c(Cl)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C(CNC(=O)C(=O)Nc2ccc(Ccc2C)N2CCCCC2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(C(CNC(=O)C(=O)Nc2ccc(Ccc2C)N2CCCCC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCCNc1cncnc2c1cnc2C(C)Cc1ccccc1</chem>	<chem>COCCNc1cncnc2c1cnc2C(C)Cc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCC(=O)Nc1cc(OC(C)C)c2c(c1)C(=O)c1cc(NC(=O)CCCNC(=O)OC(C)(C)C)ccc1C2=O</chem>	<chem>CCCC(=O)Nc1cc(OC(C)C)c2c(c1)C(=O)c1cc(NC(=O)CCCN(C(=O)OC(C)(C)C)ccc1C2=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CCC2(C(=O)Nc3cccc([N+](=O)[O-])cc3)CCC3(C)C(=CCC4C5(C)CCC(OC(=O)C(I)=Cc6cccc([N+](=O)[O-])cc6)I)C(C)(C)C5CCC43C)C2C1C</chem>	<chem>CC1CCC2(C(=O)Nc3cccc([N+](=O)[O-])cc3)CCC3(C)C(=CCC4C5(C)CCC(OC(=O)C(I)=Cc6cccc([N+](=O)[O-])cc6)C(C)(C)C5CCC43C)C2C1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCN(CCC#N)C(=O)C1OC(n2cnc3c(N)nc(NC4CCCC4N)nc32)C(O)C1O</chem>	<chem>CCCCN(CCC#N)C(=O)C1OC(n2cnc3c(N)nc(NC4CCCC4N)nc32)C(O)C1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>BrC1ccc2ccc3[nH]c4ccc5ccccc5c4c3c2c1</chem>	<chem>BrC1ccc2ccc3[nH]c4ccc5ccccc5c4c3c2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCn1nc(C)c2c(NCc3cccn3)ncnc21</chem>	<chem>CCn1nc(C)c2c(NCc3cccn3)ncnc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccccc1-c1nc(NC(=O)C=Cc2ccc(Cl)c(Cl)c2)n[nH]1</chem>	<chem>COc1ccccc1-c1nc(NC(=O)C=Cc2ccc(Cl)c(Cl)c2)n[nH]1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(-c2nnc(-c3ccc(S(=O)(=O)N4CCOCC4)cc3)o2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(-c2nnc(-c3ccc(S(=O)(=O)N4CCOCC4)cc3)o2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC)c1nc(-n2ccnc2C)cc(-c2ccc(N(C)C)cc2)n1</chem>	<chem>CCN(CC)c1nc(-n2ccnc2C)cc(-c2ccnc2C)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(-c2cc3ccn(C(=O)CCC(=O)O)c(=O)c3s2)c(=O)[nH]1</chem>	<chem>Cc1ccc(-c2cc3ccn(C(=O)CCC(=O)O)c(=O)c3s2)c(=O)[nH]1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN1C(=O)C=CC2(C)C3CCG4(C)C(CCC45CCC(=O)O5)C3CCC12</chem>	<chem>CN1C(=O)C=CC2(C)C3CCG4(C)C(CCC45CCC(=O)O5)C3CCC12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccccc2nc(-c3ccc(-c4ccc(CNCc5ccccc(C)c5)cc4)s3)[nH]c12</chem>	<chem>Cc1ccccc2nc(-c3ccc(-c4ccc(CNCc5ccccc(C)c5)cc4)s3)[nH]c12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(CN2C(=O)c3ccccc3C2C(=O)NC(C)c2ccccc2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(CN2C(=O)c3ccccc3C2C(=O)NC(C)c2ccccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC(N=C(O)c1ccc(C(=O)NCc2ccccc2)n2c1COCC2)c1ccccc1</chem>	<chem>CCC(N=C(O)c1ccc(C(=O)NCc2ccccc2)n2c1COCC2)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=S(=O)(N1CC1)N1CCC(Nc2ccc(O)nc3ccc(C(c4ccc(Cl)cc4)c4ccc(Cl)cc4)cc23)CC1</chem>	<chem>O=S(=O)(N1CCC(Nc2ccc(O)nc3ccc(C(c4ccc(Cl)cc4)c4ccc(Cl)cc4)cc23)CC1)N1CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Fc1ccccc1-c1nc2cccn2c1NC1CCCC(c2ccccc2)O1</chem>	<chem>Fc1ccccc1-c1nc2cccn2c1NC1CCCC(c2ccccc2)O1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)c1ccccc(N(Cc2ccccc2)C(=O)CCC(=O)Nc2nccs2)c1</chem>	<chem>CCOC(=O)c1ccccc(N(Cc2ccccc2)C(=O)CCC(=O)Nc2nccs2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCn1c(N)c(N(CCCC)CCC)c(=O)[nH]c1=O</chem>	<chem>CCCCN(CCCC)c1c(N)n(CCCC)c(=O)[nH]c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CCCC(NC(=O)C2CCCN(S(=O)(=O)c3cccs3)C2)C1C</chem>	<chem>CC1CCCC(NC(=O)C2CCCN(S(=O)(=O)c3cccs3)C2)C1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1nnc(Cc2ccccc2)s1)C1CCCC1</chem>	<chem>O=C(Nc1nnc(Cc2ccccc2)s1)C1CCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)N1CCc2sc(C(=O)NCCc3ccc(Cl)cc3Cl)cc2C1</chem>	<chem>CC(C)N1CCc2sc(C(=O)NCCc3ccc(Cl)cc3Cl)cc2C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1cc(N)c2cc(NC(=O)c3ccccc(OC)c3)ccc2n1</chem>	<chem>CCc1cc(N)c2cc(NC(=O)c3ccccc(OC)c3)ccc2n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)NC(=O)Cc1ccccc1OC(C)O)CNC(C)(C)CO</chem>	<chem>CC(C)NC(=O)Cc1ccccc1OC(C)O)CNC(C)(C)CO</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(OC)c(NC(=O)CN2Cc3ccccc3C2=O)c1</chem>	<chem>COc1ccc(OC)c(NC(=O)CN2Cc3ccccc3C2=O)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1C2(CCCCC1O)NC(N)=Nc1c2c2nc(Cl)cccc12</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc(OCCN2CCN(c3nc4cccc4c4ccnc34)CC2)cc1</chem>	<chem>c1ccc(OCCN2CCN(c3nc4cccc4c4ccnc34)CC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(NC(=O)C(Cc1c[nH]c(-c2ccccc2)n1)NS(=O)(=O)N1CCOCC1)C(=O)NC(Cc1CCCCC1)C(O)CC(C(=O)NCCN1CCOCC1)C(C)C</chem>	<chem>CC(NC(=O)C(Cc1c[nH]c(-c2ccccc2)n1)NS(=O)(=O)N1CCOCC1)C(=O)NC(Cc1CCCCC1)C(O)CC(C(=O)NCCN1CCOCC1)C(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(CN2CCC(OC(C)=O)Nc3ccccc3)CC2)cc1C</chem>	<chem>Cc1ccc(CN2CCC(OC(C)=O)Nc3ccccc3)CC2)cc1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(CCNCc1ccccc(F)c1)NN=Cc1cc(Cl)ccc1O</chem>	<chem>O=C(CCNCc1ccccc(F)c1)NN=Cc1cc(Cl)ccc1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC)CCNC(=O)c1cn(C)c2cc(Cl)c(N3CCCS3(=O)=O)cc2c1=O</chem>	<chem>CCN(CC)CCNC(=O)c1cn(C)c2cc(Cl)c(N3CCCS3(=O)=O)cc2c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NCCc1ccccc1)C(Cc1ccccc1)NC(=O)C1CCCCC1</chem>	<chem>O=C(NC(Cc1ccccc1)C(=O)NCCc1ccccc1)C1CCCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1cc2c(o1)C(=O)c1c(O)ccc(O)c1C2=O</chem>	<chem>CCc1cc2c(o1)C(=O)c1c(O)ccc(O)c1C2=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1c(=O)c(CCCCCCCCCCCCCCCCCBr)c(O)c2ccccc21</chem>	<chem>Cn1c(=O)c(CCCCCCCCCCCCCCCCCBr)c(O)c2ccccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(NC(=O)C2C(c3ccco3)=NOC23CCCCC3)cc1C</chem>	<chem>Cc1ccc(NC(=O)C2C(c3ccco3)=NOC23CCCCC3)cc1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCN(CCCC)CCCCOCc1cc(-c2ccccc2)nc2ccccc12</chem>	<chem>CCCN(CCCC)CCCCOCc1cc(-c2ccccc2)nc2ccccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(-n2c(-c3ccccc3)c(-c3ccco3)c3c2nc2sc(C)c(C)n2c3=O)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(-n2c(-c3ccccc3)c(-c3ccco3)c3c(=O)n4c(C)c(C)sc4nc32)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1C2OC(C)(C)OC2OCc1C1OC(C)(C)O1</chem>	<chem>COc1C(C2CO(C)(C)O2)OC2OC(C)(C)OC21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1Nc2cc(C(F)(F)F)ccc2C1=NN=C1S(C(=O)N)1Cc1ccccc1</chem>	<chem>O=C1Nc2cc(C(F)(F)F)ccc2C1=NN=C1SCC(=O)N)1Cc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC1=C(O)c2c(oc(-c3ccc(OC(C)=O)c(OC)c3)cc2=O)C(CC)(CC)C1=O</chem>	<chem>CCC1=C(O)c2c(oc(-c3ccc(OC(C)=O)c(OC)c3)cc2=O)C(CC)(CC)C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCCC(=O)NC(C(=O)N)C(C(=O)N)C(C(=O)N)C(=O)C(C)C1cccc1)C(C)C</chem>	<chem>CCCCCCCCC(=O)NC(C(=O)N)C(C(=O)N)C(C(=O)N)C(=O)C(C)C1cccc1)C(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NCCCNCCCCNCCCNCCCN(C(C(=O)NO)C(=O)NCCC(=O)NCCCN(C(=O)C(CCCCN)NC(=O)Cc1c[nH]c2ccccc12</chem>	<chem>NCCCNCCCCNCCCNCCCN(C(C(=O)NO)C(=O)NCCCN(C(=O)CCN(C(=O)NO)NCCCNCCCCNCCCNCCCN</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)OC(=O)CCn1cnc2c(SC3OC(COP(=O)(O)O)C(O)C3O)nc(N)nc21</chem>	<chem>CC(C)(C)OC(=O)CCn1cnc2c(SC3OC(COP(=O)(O)O)C(O)C3O)nc(N)nc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ncc(-c2ccccc2Cl)nc1-c1ccc(N(Cc2ccccc2)C(=O)c2ccc(O)cc2O)cc1</chem>	<chem>COc1ncc(-c2ccccc2Cl)nc1-c1ccc(N(Cc2ccccc2)C(=O)c2ccc(O)cc2O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCCCN1CCC(CN(Cc2ccccc2)C(=O)Nc2ccc(C)cc2)CC1</chem>	<chem>COCCCN1CCC(CN(Cc2ccccc2)C(=O)Nc2ccc(C)cc2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)C1=C(C)N=C(C)C(=C(C)O)CC(C)C1c1ccc(NC(=O)NCCCN2CCC(c3cc(OC)c(OC)c(OC)c3)CC2)c1</chem>	<chem>CCOC(=O)C1=C(C)N=C(C)C(=C(C)O)CC(C)C1c1ccc(NC(=O)NCCCN2CCC(c3cc(OC)c(OC)c(OC)c3)CC2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(c1ccc(-c2ccc(Br)cc2)cc1)N(Cc1ccc(C(F)(F)P(=O)(O)O)c1)c1cccc2ccccc12</chem>	<chem>O=C(c1ccc(-c2ccc(Br)cc2)cc1)N(Cc1ccc(C(F)(F)P(=O)(O)O)c1)c1cccc2ccccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(C)c(NC(=O)C(=C(C)c2ccccc2OCc2ccccc2)Cn2cncn2)c1</chem>	<chem>CC(C(=C(Cn1cncn1)C(=O)Nc1cc(C)ccc1C)c1ccccc1OCc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)c1cnc(-c2cc(C)cc(C)c2)nc1ON(C(C)=O)c1ccccc1</chem>	<chem>CCOC(=O)c1cnc(-c2cc(C)cc(C)c2)nc1ON(C(C)=O)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(Nc1c(F)c(Oc2ccccc(C(=N)N)c2)nc(Oc2ccc(C(=O)NC(=N)N)c(Cl)c2Cl)c1F)C(=O)O</chem>	<chem>CC(Nc1c(F)c(Oc2ccccc(C(=N)N)c2)nc(Oc2ccc(C(=O)NC(=N)N)c(Cl)c2Cl)c1F)C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#Cc1cc2ccccc2c2nc(N)sc12</chem>	<chem>N#Cc1cc2ccccc2c2nc(N)sc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>COc1ccc(OCCOCCOc2ccc(-c3sc(-c4ccccc4)nc3C)cc2[N+](=O)[O-])cc1</chem>	<chem>COc1ccc(OCCOCCOCc2ccc(-c3sc(-c4ccccc4)nc3C)cc2[N+](=O)[O-])cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(O)(C)c1nnc(NC(=O)COc2ccccc2)s1</chem>	<chem>CC(C)(C)c1nnc(NC(=O)COc2ccccc2)s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(Cc(=O)NC(CCCCN)C(=O)NC(Cc(C)C)C(=O)Nc2ccc3sc(C(=O)NO)cc3c2)cccc1O</chem>	<chem>COc1cc(Cc(=O)NC(CCCCN)C(=O)NC(Cc(C)C)C(=O)Nc2ccc3sc(C(=O)NO)cc3c2)cccc1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(=O)NO</chem>	<chem>NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(=O)NO</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)Cc1ccc(S(=O)(=O)N(Cc2ccccc2)c2sc3ccccc3c2Br)cc1</chem>	<chem>O=C(O)Cc1ccc(S(=O)(=O)N(Cc2ccccc2)c2sc3ccccc3c2Br)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1c(Cn2c(=O)sc3ccccc32)nnc1SCC(=O)NCCc1ccccc1</chem>	<chem>Cn1c(Cn2c(=O)sc3ccccc32)nnc1SCC(=O)NCCc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CN1CCN(c2ccc(N3CC(CN=C(S)NC(C)(C)C)OC3=O)cc2F)CC1</chem>	<chem>CN1CCN(c2ccc(N3CC(CN=C(S)NC(C)(C)C)OC3=O)cc2F)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(O)(CO)C(O)Cn1ccc2ccc3ccccc3c21</chem>	<chem>CC(O)(CO)C(O)Cn1ccc2ccc3ccccc3c21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(c2cc(NC(=O)c3ccc(C#N)cn3)ccc2F)CC(C(F)(F)F)OC(=N)N1</chem>	<chem>CC1(c2cc(NC(=O)c3ccc(C#N)cn3)ccc2F)CC(C(F)(F)F)OC(=N)N1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC=C(C(CCC)C(=O)c1[nH]c2cc(N(C)S(C)(=O)=O)c(C)cc2c1C</chem>	<chem>CC=C(C(CCC)C(=O)c1[nH]c2cc(N(C)S(C)(=O)=O)c(C)cc2c1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)CCCNc1cc(NCCCN(C)C)c2c(O)c3ccccc3nc2n1</chem>	<chem>CN(C)CCCNc1cc(NCCCN(C)C)c2c(O)c3ccccc3nc2n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(c1cn(-c2ccccc2)nn1)c1cccc2ccccc12</chem>	<chem>COC(c1cn(-c2ccccc2)nn1)c1cccc2ccccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NN=CC(Br)=Cc1ccccc1)c1cccn1</chem>	<chem>O=C(NN=CC(Br)=Cc1ccccc1)c1cccn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(OCc2nc(-c3ccccc4c3CCC4NC(=O)Cc3c(C)noc3C)no2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(OCc2nc(-c3ccccc4c3CCC4NC(=O)Cc3c(C)noc3C)no2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1c(=O)c2c(nc(NN=Cc3ccc(O)cc3)n2C)n(C)c1=O</chem>	<chem>Cn1c(=O)c2c(nc(NN=Cc3ccc(O)cc3)n2C)n(C)c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc2c(c1)CCc1C(C)(C(=O)Nc3ccccc3)CCCC21C</chem>	<chem>COc1ccc2c(c1)CCc1C(C)(C(=O)Nc3ccccc3)CCCC21C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)CC(C(=O)NCCc1ccc(F)cc1)N(Cc1ccco1)C(=O)CNC(=O)C1Oc2ccccc2C2OC(C)(C)C(O1)C2O</chem>	<chem>CC(C)CC(C(=O)NCCc1ccc(F)cc1)N(Cc1ccco1)C(=O)CNC(=O)C1Oc2ccccc2C2OC(C)(C)C(O1)C2O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)N1CCN(c2nc(-c3ccccc3)cs2)CC1</chem>	<chem>CCOC(=O)N1CCN(c2nc(-c3ccccc3)cs2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c(Cc2c(C)cccc2Cl)nc(SCc2cccc([N+](=O)[O-])c2)[nH]c1=O</chem>	<chem>Cc1c(Cc2c(C)cccc2Cl)nc(SCc2cccc([N+](=O)[O-])c2)[nH]c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nc(C)c(C(=O)N(C)Cc2ccc(-c3ccccc3)cc2)s1</chem>	<chem>Cc1nc(C)c(C(=O)N(C)Cc2ccc(-c3ccccc3)cc2)s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cccc(C(=O)CCc2cn(CC(=O)Nc3ccc4c(c3)OCCO4)nn2)c1</chem>	<chem>COc1cccc(C(=O)CCc2cn(CC(=O)Nc3ccc4c(c3)OCCO4)nn2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(CC(=O)Nc1ccccc1-c1ccccc1)C(=O)c1ccc(CS(C)(=O)=O)o1</chem>	<chem>CN(CC(=O)Nc1ccccc1-c1ccccc1)C(=O)c1ccc(CS(C)(=O)=O)o1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(C=NNc2ccccc2C(=O)O)ccc1O</chem>	<chem>COc1cc(C=NNc2ccccc2C(=O)O)ccc1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1C=CCC(C=Cc2c(F)cc(O)c3c2OCO3)O1</chem>	<chem>O=C1C=CCC(C=Cc2c(F)cc(O)c3c2OCO3)O1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(c1ccc(OCCCN2CCCC2)cc1)c1c(-c2ccc(O)c(O)c2)sc2cc(O)ccc12</chem>	<chem>O=C(c1ccc(OCCCN2CCCC2)cc1)c1c(-c2ccc(O)c(O)c2)sc2cc(O)ccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(C)c(NC(=O)Cs2nc(Cc3ccccc3)nc3ccccc23)c(C)c1</chem>	<chem>Cc1cc(C)c(NC(=O)Cs2nc(Cc3ccccc3)nc3ccccc23)c(C)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(OC)c(F)c(-c2ccc(C(=O)Nc3cccn3Nc3ccc(N)cc3)c3nccnc23)c1F</chem>	<chem>COc1cc(OC)c(F)c(-c2ccc(C(=O)Nc3cccn3Nc3ccc(N)cc3)c3nccnc23)c1F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NOCCNCc1cc(=O)c2ccc(F)cc2[nH]1</chem>	<chem>NOCCNCc1cc(=O)c2ccc(F)cc2[nH]1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)c1ccc(S(=O))(=O)NCC(=O)OCc2ccco2)cc1</chem>	<chem>CC(C)c1ccc(S(=O))(=O)NCC(=O)OCc2ccco2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)C(=O)c1cc2cnc(Nc3ccc(NC(=O)CN)cn3)nc2n1C1CCCC1</chem>	<chem>CN(C)C(=O)c1cc2cnc(Nc3ccc(NC(=O)CN)cn3)nc2n1C1CCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(NC1=NS(=O))(=O)c2ccc(Cl)cc2N1)c1ccc2c(c1)OCO2</chem>	<chem>CC(NC1=NS(=O))(=O)c2ccc(Cl)cc2N1)c1ccc2c(c1)OCO2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=CCNC(=O)NC(=O)COC(=O)C=CC(=O)OC</chem>	<chem>C=CCNC(=O)NC(=O)COC(=O)C=CC(=O)OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC)CCNc1nc(N)nc(NCCO)n1</chem>	<chem>CCN(CC)CCNc1nc(N)nc(NCCO)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(Nc2ncnc3ccc(NC(=O)Nc4ccc(C(C)(C)C)cc4)cc23)cc1Cl</chem>	<chem>COc1ccc(Nc2ncnc3ccc(NC(=O)Nc4ccc(C(C)(C)C)cc4)cc23)cc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)c1coc(CN2CCN(Cc3cc4ccccc4o3)CC2)c1</chem>	<chem>CC(=O)c1coc(CN2CCN(Cc3cc4ccccc4o3)CC2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(C=C2SC(=O)NC2=O)cc(OC)c1</chem>	<chem>COc1cc(C=C2SC(=O)NC2=O)cc(OC)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNC(=O)Cc1cc(Nc2ccc(Cl)cc2F)nc(C2CCN(c3cnccn3)CC2)n1</chem>	<chem>CNC(=O)Cc1cc(Nc2ccc(Cl)cc2F)nc(C2CCN(c3cnccn3)CC2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)Oc1cccc(Nc2nccc(-c3ccccc3)n2)c1</chem>	<chem>CC(=O)Oc1cccc(Nc2nccc(-c3ccccc3)n2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCCCCCCOC(=O)C1C(OC(=O)CCCCC)CCCCCN3CCc4c([nH]c5ccccc45)C3CC21</chem>	<chem>CCCCCCCCCCCCOC(=O)C1C(OC(=O)CCCCC)CCCCCN3CCc4c([nH]c5ccccc45)C3CC21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)CCOc1ccc(Cc2COC(Cc3ccc(Br)cc3)(C(=O)O)O2)cc1</chem>	<chem>CN(C)CCOc1ccc(Cc2COC(Cc3ccc(Br)cc3)(C(=O)O)O2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)CC(NC(=O)c1c2ccccc2cc2ccccc12)C(=O)Nc1ccccc1</chem>	<chem>CC(C)CC(NC(=O)c1c2ccccc2cc2ccccc12)C(=O)Nc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)C1CCN(C(=O)CC2CCC(CNS(=O))(=O)c3cccc4nonc34)CC2)CC1</chem>	<chem>CCOC(=O)C1CCN(C(=O)CC2CCC(CNS(=O))(=O)c3cccc4nonc34)CC2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(OCc(=O)N1CCN(C(=O)c2ccco2)CC1)c1cc(S(=O))(=O)Nc2cccc(C(F)(F)F)c2)ccc1Cl</chem>	<chem>O=C(OCc(=O)N1CCN(C(=O)c2ccco2)CC1)c1cc(S(=O))(=O)Nc2cccc(C(F)(F)F)c2)ccc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C1CSCSCSCSCSCCSCSCSC1</chem>	<chem>C1CSCSCSCSCCSCSCSCSC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=CCn1c(SCc2ccccc2)nnc1-c1csc(O)n1</chem>	<chem>C=CCn1c(SCc2ccccc2)nnc1-c1csc(O)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1c(-c2cccc(NC(=O)c3ccc(F)cc3)c2)c(C#N)c(=O)c2ccccc21</chem>	<chem>Cn1c(-c2cccc(NC(=O)c3ccc(F)cc3)c2)c(C#N)c(=O)c2ccccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cccc(CNC(=O)c2cc3ccn(-c4cccc(NC(C)=O)c4)c3cn2)c1</chem>	<chem>COc1cccc(CNC(=O)c2cc3ccn(-c4cccc(NC(C)=O)c4)c3cn2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(C=Cc1ccc(O)c(O)c1)NC(Cc1ccc(O)cc1)C(=O)NCCO</chem>	<chem>O=C(C=Cc1ccc(O)c(O)c1)NC(Cc1ccc(O)cc1)C(=O)NCCO</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(OC)c(C=CS(=O))(=O)NC(=O)C=Cc2ccsc2)c(OC)c1Br</chem>	<chem>COc1cc(OC)c(C=CS(=O))(=O)NC(=O)C=Cc2ccsc2)c(OC)c1Br</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(C(=O)OC(C)C(=O)NCCc2ccc3c(c2)OCO3)c(C)o1</chem>	<chem>Cc1cc(C(=O)OC(C)C(=O)NCCc2ccc3c(c2)OCO3)c(C)o1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(CN1CCOCC1)N1CCc2ccc(NC(=O)c3ccc(-n4ccnc4)c3)c21</chem>	<chem>O=C(Nc1ccc2c(c1)N(C(=O)CN1CCOCC1)CC2)c1ccc(-n2ccnc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CCCC(C)N1C(=O)c1cc2ccc3cccn3c2s1</chem>	<chem>CC1CCCC(C)N1C(=O)c1cc2ccc3cccn3c2s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(OC(=O)CSc1nnc(CSc2nc3cc(Cl)c(C)cc3s2)o1)C(=O)c1ccccc1</chem>	<chem>CC(OC(=O)CSc1nnc(CSc2nc3cc(Cl)c(C)cc3s2)o1)C(=O)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C#CCCCC(O)C=CC1C(O)CC(O)C1CCC(O)COC(=O)N(C)CCO</chem>	<chem>C#CCCCC(O)C=CC1C(O)CC(O)C1CCC(O)COC(=O)N(C)CCO</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(C2c3cc4c(cc3C3(CSc5cccn5)OC3(O)C2C(=O)N4)cc(OC)c1OCCCN1CCCC1</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>CCC(CO)c1cc(C)n2nc(SC3ccccc3)n(Cc3ccc4ncccc4c3)c(=O)c12</chem>	<chem>CCC(CO)c1cc(C)n2nc(SC3ccccc3)n(Cc3ccc4ncccc4c3)c(=O)c12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC12C=Nc3cccc(c3)CN1C(=O)c1ccccc1C=C2</chem>	<chem>CCC12C=Nc3cccc(c3)CN1C(=O)c1ccccc1C=C2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC(CCSCc1cc(O)cc(O)c1)C(=O)O</chem>	<chem>NC(CCSCc1cc(O)cc(O)c1)C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(C(=O)NCCc2ccc(C(C)(C)C)cc2)cc(C)c1C</chem>	<chem>Cc1cc(C(=O)NCCc2ccc(C(C)(C)C)cc2)cc(C)c1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNc1cc(Cc2cc(C3OC(C(=O)O)C(O)C(O)C3O)ccc2Cl)ccn1</chem>	<chem>CNc1cc(Cc2cc(C3OC(C(=O)O)C(O)C(O)C3O)ccc2Cl)ccn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc2c(cc1OC)C(=O)C=Cc1ccc([N+](=O)[O-])cc1)N2</chem>	<chem>COc1cc2c(cc1OC)C(=O)C=Cc1ccc([N+](=O)[O-])cc1)N2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(C)c(O)cc1C=CC(=O)O</chem>	<chem>COc1cc(C)c(O)cc1C=CC(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(NC(=O)C(NC(=O)OCc1ccccc1)C(C)C)C(=O)NC(CC(=O)O)C(=O)COP(=O)(c1ccccc1)c1ccccc1</chem>	<chem>CC(NC(=O)C(NC(=O)OCc1ccccc1)C(C)C)C(=O)NC(CC(=O)O)C(=O)COP(=O)(c1ccccc1)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)c1ccc(S(=O))(=O)Oc2ccc(F)cc2)cc1Br</chem>	<chem>CN(C)c1ccc(S(=O))(=O)Oc2ccc(F)cc2)cc1Br</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCOC(=O)c1cc2ccc(C(=O)Nc3nn[nH]n3)cc2[nH]1</chem>	<chem>CCCCCOC(=O)c1cc2ccc(C(=O)Nc3nn[nH]n3)cc2[nH]1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1NC(=S)NC1=Cc1ccc(-c2ccc(F)cc2F)s1</chem>	<chem>O=C1NC(=S)NC1=Cc1ccc(-c2ccc(F)cc2F)s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(CCCNC(=O)c1ccc(Cl)cc1)Nc1ccc(N2CCCC2)cc1</chem>	<chem>O=C(CCCNC(=O)c1ccc(Cl)cc1)Nc1ccc(N2CCCC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc2sc(C(C#N)=Cc3ccc(-c4ccc(C(=O)O)cc4)o3)nc2cc1C</chem>	<chem>Cc1cc2nc(C(C#N)=Cc3ccc(-c4ccc(C(=O)O)cc4)o3)sc2cc1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C2C(C(=O)c3ccc(C)cc3)=C(O)C(=O)N2Cc2cccn2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(C2C(C(=O)c3ccc(C)cc3)=C(O)C(=O)N2Cc2cccn2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nc(CN2CCCC(CO)(CF)C2)no1</chem>	<chem>Cc1nc(CN2CCCC(CO)(CF)C2)no1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC(C)C(=O)c1c(O)cc(C)oc1=O</chem>	<chem>CCC(C)C(=O)c1c(O)cc(C)oc1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NS(=O)(=O)CCNC(=O)C(c1nc2ccc(-c3enn(C4CCNCC4)c3)cc2s1)S(=O)(=O)CCC(F)(F)F</chem>	<chem>NS(=O)(=O)CCNC(=O)C(c1nc2ccc(-c3enn(C4CCNCC4)c3)cc2s1)S(=O)(=O)CCC(F)(F)F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nc2cc(Cl)ccc2n(C)c1=O</chem>	<chem>Cc1nc2cc(Cl)ccc2n(C)c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNc1nc(Nc2ccc(C#N)cc2)nc(Oc2cc(C)nc(Nc3cccc(C#N)c3)c2)n1</chem>	<chem>CNc1nc(Nc2ccc(C#N)cc2)nc(Oc2cc(C)nc(Nc3cccc(C#N)c3)c2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC(=O)N1c2ccccc2CC1C(=O)OC</chem>	<chem>CCC(=O)N1c2ccccc2CC1C(=O)OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1=C(C(=O)OCc2ccccc2)C(c2ccccc2Br)NC(=O)N1</chem>	<chem>CC1=C(C(=O)OCc2ccccc2)C(c2ccccc2Br)NC(=O)N1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CCCCCc1cc(O)cc(O)c1C(=O)O</chem>	<chem>CCCCCc1cc(O)cc(O)c1C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>O=C(Cn1nc(Cc2cccc3ccccc32)c2ccccc2c1=O)Nc1ccc(Cl)cc1</chem>	<chem>O=C(Cn1nc(Cc2cccc3ccccc23)c2ccccc2c1=O)Nc1ccc(Cl)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccccc1CCNC(=O)c1cc(S(=O))(=O)N2CCN(c3ccccc3)CC2)ccc1C</chem>	<chem>COc1ccccc1CCNC(=O)c1cc(S(=O))(=O)N2CCN(c3ccccc3)CC2)ccc1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1noc(C)c1-c1ccc(-c2ccc(NC(=O)C3CC3)cc2)nc1</chem>	<chem>Cc1noc(C)c1-c1ccc(-c2ccc(NC(=O)C3CC3)cc2)nc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)CCNC(=O)c1ccc2c3c1nc1ccccc1c3[nH]n2CC[N+](C)(C)C</chem>	<chem>CN(C)CCNC(=O)c1ccc2c3c1nc1ccccc1c3[nH]n2CC[N+](C)(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NCc1ccccc1F)c1ccc(NS(=O))(=O)c2ccccc2)cc1</chem>	<chem>O=C(NCc1ccccc1F)c1ccc(NS(=O))(=O)c2ccccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1c(=O)c2cn(CCOCCOCCO)cc2n(C)c1=O</chem>	<chem>Cn1c(=O)c2cn(CCOCCOCCO)cc2n(C)c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CC1CCC(Cn2c(N3CCON(C)C3=O)nc3cc(-c4noc(=O)[nH]4)nc(-c4cncc(Cl)c4)c32)CC1	CC1CCC(Cn2c(N3CCON(C)C3=O)nc3cc(-c4noc(=O)[nH]4)nc(-c4cncc(Cl)c4)c32)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CN(C(C)CO)(C=O)c2cc(NC(=O)C3CC3)ccc2OC1CN(C)C(=O)Nc1ccc(F)cc1	CC1CN(C(C)CO)(C=O)c2cc(NC(=O)C3CC3)ccc2OC1CN(C)C(=O)Nc1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C(CCCCN(C(=O)CC(C)NC(=O)OCc1cccc1C)(=O)OC)NC(=O)C(Cc1c[nH]c2cccc12)NC(=O)C(CC(C)C)NC(=O)OC(C)C(C	COC(=O)C(CCC(=O)NCCCC(NC(=O)C(Cc1c[nH]c2cccc12)NC(=O)C(CC(C)C)NC(=O)OC(C)C(C)C(=O)OC)NC(=O)OCc1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(CCC)S(=O)(=O)c1ccc(C(=O)Nc2nc(-c3cccc3)ns2)cc1	CCCN(CCC)S(=O)(=O)c1ccc(C(=O)Nc2nc(-c3cccc3)ns2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(N)c1cccc(NC(=O)Nc2cccc2S(C(C(=O)O)c2ccnc2)c1	N=C(N)c1cccc(NC(=O)Nc2cccc2S(C(C(=O)O)c2ccnc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cncc(-c2cc3c(n2C(C)C)C(c2ccc(C#N)c(F)c2)N(c2ncc(Cl)cc2C)C3=O)c1F	COc1cncc(-c2cc3c(n2C(C)C)C(c2ccc(C#N)c(F)c2)N(c2ncc(Cl)cc2C)C3=O)c1F	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1nc2c(OCCCF)cccc2s1)C1CC1	O=C(c1nc2c(OCCCF)cccc2s1)C1CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCCCOc1ccc(SCc2cccc2)cc1)C(F)(F)F	O=C(CCCCOc1ccc(SCc2cccc2)cc1)C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Oc1ccc(CCN(C)CCCOc2ccc3c(=O)c4cccc(C(=O)Nc5cccc5Oc5cccc5)c4oc3c2)cc1OC(C)=O	CC(=O)Oc1ccc(CCN(C)CCCOc2ccc3c(=O)c4cccc(C(=O)Nc5cccc5Oc5cccc5)c4oc3c2)cc1OC(C)=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=Cc2ccc(NC(=O)C=Cc3ccc(OC)c(OC)c3)cc2)cc(OC)c1OC	COc1cc(C=Cc2ccc(Nc2ccc(C=Cc3cc(OC)c(OC)c(OC)c3)cc2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
C1CCN(Cc2ccc(-c3nc(N4CCOCC4)c4sccn34)cc2)CC1	c1cn2c(-c3ccc(CN4CCCC4)cc3)nc(N3CCOCC3)c2s1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C2CCN2C(=O)c2cccc(Br)c2)on1	Cc1cc(C2CCN2C(=O)c2cccc(Br)c2)on1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1nc(C(C)(C)C)c(C(N)=O)c1-c1csc(-c2cccs2)n1	Cn1nc(C(C)(C)C)c(C(N)=O)c1-c1csc(-c2cccs2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C(c1ccc(Cl)c(Cl)c1)N1Cc2ccccc2C1=O	O=C(O)C(c1ccc(Cl)c(Cl)c1)N1Cc2ccccc2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(-c2cccc(Cl)c2)ccc1OCCCN1CCOCC1	Cc1cc(-c2cccc(Cl)c2)ccc1OCCCN1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)=CCC(C)=CCc1cc2c(c(O)c1)C=Cc1(CCC(C)(C)CC1)O2	CC(C)=CCC(C)=CCc1cc(O)c2c(c1)OC1(C=C2)CCC(C)(C)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(OC(F)(F)F)cc1)c1cccc2c1C(=O)c1ccc(N3CCOCC3)cc1S2(=O)=O	O=C(Nc1ccc(OC(F)(F)F)cc1)c1cccc2c1C(=O)c1ccc(N3CCOCC3)cc1S2(=O)=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(NC(=O)CCNS(=O)(=O)c2cccc3nonc23)c1C	Cc1cccc(NC(=O)CCNS(=O)(=O)c2cccc3nonc23)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nn(C)c(=O)cc1-c1cc(C(=O)N2CCOCC2)nn1-c1ccc(F)cc1	Cc1nn(C)c(=O)cc1-c1cc(C(=O)N2CCOCC2)nn1-c1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc1S(=O)(=O)Nc1CCN(c2nnc3c2cnn3-c2ccc(Cl)cc2)CC1	Cc1cccc1S(=O)(=O)Nc1CCN(c2nnc3c2cnn3-c2ccc(Cl)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C1(C)CCCC2(C)C3CCC4(C)C(CCC4(O)C#CCOc4cccc5cccn45)C3CCC12	COC(=O)C1(C)CCCC2(C)C3CCC4(C)C(CCC4(O)C#CCOc4cccc5cccn45)C3CCC12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2nc3c(OC)cc(C(F)(F)F)cc3c(NN3CCN(CCO)CC3)c2c1	COc1ccc2nc3c(OC)cc(C(F)(F)F)cc3c(NN3CCN(CCO)CC3)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C(=O)O)c(OC(C)C)cc1NC(=O)c1coc(C)n1	COc1cc(C(=O)O)c(OC(C)C)cc1NC(=O)c1coc(C)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1c2cc(l)ccc2nc(-c2cccc2Cl)n1C1CC1	O=c1c2cc(l)ccc2nc(-c2cccc2Cl)n1C1CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cn(CCCCC(=O)O)c(=O)[nH]c1=O	Cc1cn(CCCCC(=O)O)c(=O)[nH]c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc(=O)c1cc(N2CC3C(=O)Nc4cccc4C(=O)N3C2)cc(C)c1C	COc(=O)c1cc(N2CC3C(=O)Nc4cccc4C(=O)N3C2)cc(C)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc2c1CCC(N1CCN(c3cccc3F)CC1)C2	COc1cccc2c1CCC(N1CCN(c3cccc3F)CC1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(C)C(=O)OC1CC(C)C=C2C=CC(C)C(CCC(O)CC(O)CC(O)CC(=O)O)C21	C=C(C)C(=O)OC1CC(C)C=C2C=CC(C)C(CCC(O)CC(O)CC(O)CC(=O)O)C21	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=NNC(=O)C2=C(=O)N(CN3CCCC3)C(=O)CC2)cc(OC)c1OC	COc1cc(C=NNC(=O)C2=C(=O)N(CN3CCCC3)C(=O)CC2)cc(OC)c1OC	FALSE	TRUE	TRUE
O=C(NCC(c1cccs1)N1CCN(c2ccc(F)cc2)CC1)c1cccc(C(F)(F)F)c1	O=C(NCC(c1cccs1)N1CCN(c2ccc(F)cc2)CC1)c1cccc(C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCCCCCC(C=O)NC(COP(=O)(O)O)C(O)c1cccc1	CCCCCCCCCCCCCCCC(C=O)NC(COP(=O)(O)O)C(O)c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)CNC(=O)C1CCN(S(=O)(=O)c2cn(C)cn2)CC1	CCOC(=O)CNC(=O)C1CCN(S(=O)(=O)c2cn(C)cn2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1cc2ccc(OCCCN3CCCC3)cc2s1	NC(=O)c1cc2ccc(OCCCN3CCCC3)cc2s1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN1CCC(c2ccc(Cl)c(Cl)c2)C(CO)C1	CCCN1CCC(c2ccc(Cl)c(Cl)c2)C(CO)C1	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+](O-)[c1ccc(CN2CC(C)=NCC2C(=O)Nc2cccc(C(F)(F)F)c2)cc1	O=[Nc1cccc(C(F)(F)F)c1]C1CN=C(Cl)CN1Cc1ccc([N+](=O)[O-])cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCc1cccs1)c1cccc2c3c(cccc13)CC2	O=C(NCc1cccs1)c1ccc2c3c(cccc13)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
OCC1OC(n2cnc3c(Nc4ccc(Br)cc4)nc(Cl)nc32)C(O)C1O	OCC1OC(n2cnc3c(Nc4ccc(Br)cc4)nc(Cl)nc32)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ccc(-c2nccnc2C2CN(c3ncc(-c4cccc4)cn3)C2)cc1	N#Cc1ccc(-c2nccnc2C2CN(c3ncc(-c4cccc4)cn3)C2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1ON(c2cccc2)C(c2cccc2Br)C1c1cccc1	O=C1ON(c2cccc2)C(c2cccc2Br)C1c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(Cn2cnc2C(C)C)c1	COc1cccc(Cn2cnc2C(C)C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)NCC(O)COc1c(C(C)C)cc(N)c2cccc12	CC(C)(C)NCC(O)COc1c(C(C)C)cc(N)c2cccc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(C(=O)Nc2ccc(F)cc2)c2cccc2n2cnn12	Cc1c(C(=O)Nc2ccc(F)cc2)c2cccc2n2cnn12	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1cccc1Oc1ccc2c(=O)cc(C(=O)O)oc2c1	CCc1cccc1Oc1ccc2c(=O)cc(C(=O)O)oc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1c(N)nc(SCc2cccc3cccc23)c(C#N)c1-c1ccc(O)cc1	N#Cc1c(N)nc(SCc2cccc3cccc23)c(C#N)c1-c1ccc(O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cnc2nc(CCc3nc(-c4ccncc4F)cn3C)nn12	Cc1cnc2nc(CCc3nc(-c4ccncc4F)cn3C)nn12	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(Cc2cc3cccn3n2)cc1	c1ccc(Cc2cc3cccn3n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2nc(N3CCCC(CO)C3)nc(NC3CCN(Cc4cccn4)CC3)c2cc1OC	COc1cc2nc(N3CCCC(CO)C3)nc(NC3CCN(Cc4cccn4)CC3)c2cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=C2N=C(C)C(=C(O)Oc3cccc(C)c3)C2=O)cc([N+](=O)[O-])c1O	COc1cc(C=C2N=C(C)C(=C(O)Oc3cccc(C)c3)C2=O)cc([N+](=O)[O-])c1O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(Cc1cn(Cc2cccc2)nc1CC1	CC(Cc1cn(Cc2cccc2)nc1CC1	FALSE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1enn(-c2ccc(OC)cc2)c1C1CC1CC	CCOC(=O)c1enn(-c2ccc(OC)cc2)c1C1CC1CC	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(NC(=O)CSC(=S)N2CCN(C)CC2)c(=O)n(-c2cccc2)n1C	Cc1c(NC(=O)CSC(=S)N2CCN(C)CC2)c(=O)n(-c2cccc2)n1C	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(C2CCC(Nc3nc4cnc4n3C3CC3)CC2)CC1	CN1CCN(C2CCC(Nc3nc4cnc4n3C3CC3)CC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccc(C)cc2)cc1	Cc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccc(C)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1CCCC1CNC(=O)c1cc(Cl)c(N)cc1OC	CCN1CCCC1CNC(=O)c1cc(Cl)c(N)cc1OC	TRUE	TRUE	FALSE
CC(NC(=O)C(Cc1cc(F)cc(F)c1)NS(=O)(=O)N1CCN(c2cccc2)CC1)C(=O)NC(CCC(N)=O)P(=O)(Oc1cccc1)Oc1cccc1	CC(NC(=O)C(Cc1cc(F)cc(F)c1)NS(=O)(=O)N1CCN(c2cccc2)CC1)C(=O)NC(CCC(N)=O)P(=O)(Oc1cccc1)Oc1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(C=O)c1cc(C(=O)Nc2ccc(Cl)cc(Cl)c2-n2cnnn2)cc(OCc2ncc(C)s2)c1	NC(C=O)c1cc(C(=O)Nc2ccc(Cl)cc(Cl)c2-n2cnnn2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nc2cc(Cl)ccc2c(C(=O)O)c1O	CCc1nc2cc(Cl)ccc2c(C(=O)O)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)c1ccc(C(=O)NCC(=O)NCC(c2cccs2)N2CCOCC2)cc1[N+](=O)[O-]	CS(=O)(=O)c1ccc(C(=O)NCC(=O)NCC(c2cccs2)N2CCOCC2)cc1[N+](=O)[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(=O)oc2cc(OCc3cn(CC(=O)Nc4(C)cccc4C)nn3)ccc12	Cc1cccc(C)c1NC(=O)Cn1cc(COc2ccc3c(C)cc(=O)oc3c2)nn1	TRUE	TRUE	TRUE
COCC(=O)Nc1ccc2[nH]cc(C(N)=O)c2c1	COCC(=O)Nc1ccc2[nH]cc(C(N)=O)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ncnc2c1ncn2C1CC(OP(=O)(O)O)C(COP(=O)(O)OP(=O)(O)O)O1	Nc1ncnc2c1ncn2C1CC(OP(=O)(O)O)C(COP(=O)(O)OP(=O)(O)O)O1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(C2SCC(=O)N2CC(C)C)c1O	COc1cccc(C2SCC(=O)N2CC(C)C)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)CCNC(=O)c1cc2c(=O)n(C)c3cccc3c2s1	CCN(CC)CCNC(=O)c1cc2c(=O)n(C)c3cccc3c2s1	TRUE	TRUE	FALSE
NS(=O)(=O)c1cccn1Nc1ccc(O)cc1	NS(=O)(=O)c1cccn1Nc1ccc(O)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1cc(C(=O)Nc2ccc(CN3CCNCC3)c(C(F)(F)F)c2)no1	Cc1cc(C(=O)Nc2ccc(CN3CCNCC3)c(C(F)(F)F)c2)no1	TRUE	TRUE	TRUE
NS(=O)(=O)c1ccc(NC(=O)C(O)C(Cc2cccc2)NC(=O)C(c2cccc2)c2cccc2)cc1	NS(=O)(=O)c1ccc(NC(=O)C(O)C(Cc2cccc2)NC(=O)C(c2cccc2)c2cccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCS(=O)(=O)OC1COC(n2cnc3c(N)ncnc32)C1O	CCS(=O)(=O)OC1COC(n2cnc3c(N)ncnc32)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1)CCCC2CCNC(=O)c1cc(Cl)c(N)cc1OC	COc1ccc2c(c1)CCCC2CCNC(=O)c1cc(Cl)c(N)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CCNC(=O)NC(=O)CSc1nc(-c2ccc(Cl)cc2)c2c(c1C#N)CCCC2	CCNC(=O)NC(=O)CSc1nc(-c2ccc(Cl)cc2)c2c(c1C#N)CCCC2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(COc1ccc(Br)cc1)Nc1cccc(-c2nc3ncccn3c2Br)c1	O=C(COc1ccc(Br)cc1)Nc1cccc(-c2nc3ncccn3c2Br)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC(Cc1ccc(C(=O)NCCC(=O)O)cc1)C(=O)c1cc2cc(Cl)ccc2n1-c1cccc(C(F)(F)F)c1	CCCC(Cc1ccc(C(=O)NCCC(=O)O)cc1)C(=O)c1cc2cc(Cl)ccc2n1-c1cccc(C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)(Cc1c[nH]c2cccc12)NCC(O)COc1cccc2c1CC(O)C2	CC(C)(Cc1c[nH]c2cccc12)NCC(O)COc1cccc2c1CC(O)C2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(CSCC(C)NCC(O)COc1cccc1)NCC(O)c1cc(O)c2c(c1)OC(C)C(C)CCC2	CC(CSCC(C)NCC(O)COc1cccc1)NCC(O)c1cc(O)c2c(c1)OC(C)C(C)CCC2	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1cc(CO)[nH]c2cc(-c3cccn3)ccc12	O=c1cc(CO)[nH]c2cc(-c3cccn3)ccc12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C2c3cc4c(cc3C(Nc3ccc5cnc5c3)C3COC(=O)C23)OCO4)cc(OC)c1OC	COc1cc(C2c3cc4c(cc3C(Nc3ccc5cnc5c3)C3COC(=O)C23)OCO4)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CN1CCCC(NS(=O)(=O)c2ccc3cc(Cl)ccc3c2)C1=O)Nc1ccc2c(c1C)CCCC2	O=C(CN1CCCC(NS(=O)(=O)c2ccc3cc(Cl)ccc3c2)C1=O)Nc1ccc2c(c1C)CCCC2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1onc(-c2cccc2Cl)c1C(=O)NN=Cc1cccn1	Cc1onc(-c2cccc2Cl)c1C(=O)NN=Cc1cccn1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCCN1CCOCC1)c1nc2cccc2c(-c2cccc2)c1-c1cccc1	O=C(NCCN1CCOCC1)c1nc2cccc2c(-c2cccc2)c1-c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(F)cc1F)c1ccnc(-c2c[nH]c([N+](=O)[O-])n2)c1	O=C(Nc1ccc(F)cc1F)c1ccnc(-c2c[nH]c([N+](=O)[O-])n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NC(=O)c2cc3cc(Br)ccc3[nH]2)c(OC)c1	COc1ccc(NC(=O)c2cc3cc(Br)ccc3[nH]2)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)C(=O)C(Cc1cccc1)NC(=O)CNC(=O)C(N)CC(=O)O	CCN(CC)C(=O)C(Cc1cccc1)NC(=O)CNC(=O)C(N)CC(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1ccc(C(O)C2CCCN2Cc2cccc2OCc2cccc2)cn1	CN(C)c1ccc(C(O)C2CCCN2Cc2cccc2OCc2cccc2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CC(C)(C)c1c(OC)cc(O)c2c1OC13C(=CC4CC4C1(C)C2)C(=O)C(O)(C(C)=O)C3(C)O	C=CC(C)(C)c1c(OC)cc(O)c2c1OC13C(=CC4CC4C1(C)C2)C(=O)C(O)(C(C)=O)C3(C)O	TRUE	TRUE	TRUE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CCOc1ccc(N(CC(=O)NC2CCCC2)C(=O)CCC(=O)Nc2cccn2)cc1	CCOc1ccc(N(CC(=O)NC2CCCC2)C(=O)CCC(=O)Nc2cccn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(NC1CCCC1)c1cccc(-c2cccc(-c3ncc4c5ccccc5n(C5CCCC5)c4n3)c2)c1	O=S(=O)(NC1CCCC1)c1cccc(-c2cccc(-c3ncc4c5ccccc5n(C5CCCC5)c4n3)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COCC(C)NC(=O)NCc1ccc(Cl)cc1O	COCC(C)NC(=O)NCc1ccc(Cl)cc1O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(CN1CCCC1=O)NC(=O)c1n[nH]c2ccc(-c3cnc(N4CCOCC4)nc3)cc12	CC(CN1CCCC1=O)NC(=O)c1n[nH]c2ccc(-c3cnc(N4CCOCC4)nc3)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC1CCN(Cc2ccccc2)CC1)C(c1ccccc1)C1CCCCC1	O=C(NC1CCN(Cc2ccccc2)CC1)C(c1ccccc1)C1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=Cc1ccc2c(c1)OCO2)OCC=Cc1ccccc1	O=C(C=Cc1ccc2c(c1)OCO2)OCC=Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(=O)NCCc1cc([N+])(=O)[O-])ccc1O	CC(C)CC(=O)NCCc1cc([N+])(=O)[O-])ccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(=O)N(OC)c1ccccc1Cc1cc[n+](Cc2cccc(F)c2)cc1	CCC(=O)N(OC)c1ccccc1Cc1cc[n+](Cc2cccc(F)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(S(=O)(=O)N(C)C)cc1NC(=O)COC(=O)c1ccccc1O	COc1ccc(S(=O)(=O)N(C)C)cc1NC(=O)COC(=O)c1ccccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CNc2cc(Cl)ccc2N1	O=C1CNc2cc(Cl)ccc2N1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CCC(OC(=O)C2CCCCN2S(=O)(=O)c2cc(OC)cc(OC)c2)c2cccc(OCC(=O)O)c2)cc1OC	COc1ccc(OC)cc(S(=O)(=O)N2CCCCC2C(=O)OC(Cc2cccc(OC)c(OC)c2)c2cccc(OCC(=O)O)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
OC1ccc2c(c1)C1CCOC1CN2	OC1ccc2c(c1)C1CCOC1CN2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(NNC(=O)OC(C)(C)C)n(OC(COCc2ccccc2)OCc2ccccc2)c(=O)c1C(C)C	Cc1nc(NNC(=O)OC(C)(C)C)n(OC(COCc2ccccc2)OCc2ccccc2)c(=O)c1C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C)C(NC(=O)C1CCCN1C(=O)C(NC(=O)C(O)C(C)C(C)C(C)C(=O)O	CCC(C)C(NC(=O)C1CCCN1C(=O)C(NC(=O)C(O)C(C)C(C)C(C)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc(Cl(=O)NC2CCc3ccc(F)cc32)c(=O)c2cc(O)ccc21	Cn1cc(Cl(=O)NC2CCc3ccc(F)cc32)c(=O)c2cc(O)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(Cc1ccccc1)OC(CN1CCCC1)c1ccccc1	CCC(Cc1ccccc1)OC(CN1CCCC1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(=O)c2ccc(-c3ccccc3)cc2)c(Cl(=O)OCc2nnc(-c3ccccc3)o2)c1	Cc1ccc(NC(=O)c2ccc(-c3ccccc3)cc2)c(Cl(=O)OCc2nnc(-c3ccccc3)o2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCC1=CCCN(Cc2ccc(Cl)cc2)C1	COCCC1=CCCN(Cc2ccc(Cl)cc2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)CCCN=C(S)NC(=O)c1ccc2c(c1)OCO2	CCN(CC)CCCN=C(S)NC(=O)c1ccc2c(c1)OCO2	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1c2oc3ccccc3c2nc(-c2ccccc2)n1-c1ccccc1	O=c1c2oc3ccccc3c2nc(-c2ccccc2)n1-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1ncc(-c2cc(Nc3ncc4c5cnc(F)c5n(C5CCCC5)c4n3)n[nH]2)c1C1CCN(S(C)(=O)=O)CC1	Cn1ncc(-c2cc(Nc3ncc4c5cnc(F)c5n(C5CCCC5)c4n3)n[nH]2)c1C1CCN(S(C)(=O)=O)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C)c(Cn2c(SCC=Cc3ccccc3)nc3cnc32)c1	Cc1ccc(C)c(Cn2c(SCC=Cc3ccccc3)nc3cnc32)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCN(C=O)C1CC(c2ccc(C(F)(F)F)cc2)=NO1	COCCN(C=O)C1CC(c2ccc(C(F)(F)F)cc2)=NO1	TRUE	TRUE	FALSE
COc1cc2c(Nc3ccc(Sc4nccn4C)cc3)c(C#N)cnc2cc1OCCCN1CCC(O)CC1	COc1cc2c(Nc3ccc(Sc4nccn4C)cc3)c(C#N)cnc2cc1OCCCN1CCC(O)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)c1ccc(N2CCN(CC(=O)Nc3ccc(S(=O)(=O)N4CCOCC4)cc3)CC2)cc1	CC(=O)c1ccc(N2CCN(CC(=O)Nc3ccc(S(=O)(=O)N4CCOCC4)cc3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)OCCn1cc(COc2ccc(Cl)cc2Br)nn1	CC(=O)OCCn1cc(COc2ccc(Cl)cc2Br)nn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)OC(=O)C(C=NNC(N)=O)=C(O)O1	CC1(C)OC(=O)C(C=NNC(N)=O)=C(O)O1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=CC(=O)OC2CC(C=Cc3OC4(CCC1N3C)OCCO4)=CC(O)C2O	CC1=CC(=O)OC2CC(=CC(O)C2O)C=Cc2OC3(CCC1N2C)OCCO3	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1ccc(F)cc1)C1CCN(C(S)=Nc2CCCC2)CC1	O=C(c1ccc(F)cc1)C1CCN(C(S)=Nc2CCCC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC1Cc2ccccc2C(c2cccc(Cl)c2)C1	CNC1Cc2ccccc2C(c2cccc(Cl)c2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1ccccc1Oc2nc(N3C4CCC3COC4)nc2-c2cc(N3CCOCC3)ncn2)c1	O=C(O)c1ccccc1Oc2nc(N3C4CCC3COC4)nc2-c2cc(N3CCOCC3)ncn2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NC(=O)Cn2c(-c3ccc(C(C)(C)C)cc3)nc3ccnc32)cc1	COc1ccc(NC(=O)Cn2c(-c3ccc(C(C)(C)C)cc3)nc3ccnc32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)c2c(Cl)nc3sc(-c4ccccc4)n3c2=O)cc1	Cc1ccc(S(=O)(=O)c2c(Cl)nc3sc(-c4ccccc4)n3c2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
S=C(NCCc1ccccc1)Nc1ccc2ncccc2c1	S=C(NCCc1ccccc1)Nc1ccc2ncccc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCCCN1cccn1)c1cc(-c2cccs2)nc2ccccc12	O=C(NCCCN1cccn1)c1cc(-c2cccs2)nc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1csc(CCc2nc(N3CCOCC3)nn2-c2ccc3c(c2)OCO3)n1	CC(C)c1csc(CCc2nc(N3CCOCC3)nn2-c2ccc3c(c2)OCO3)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCNC(=O)C(C)NC(=O)C(Cc1c[nH]c2ccccc12)NC(=O)C(C)NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)CNC(=O)OCCc1ccccc1	CCNC(=O)C(C)NC(=O)C(Cc1c[nH]c2ccccc12)NC(=O)C(C)NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)CNC(=O)OCCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2cn3c(n2)sc2ccccc23)cc1	COc1ccc(-c2cn3c(n2)sc2ccccc23)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C1C(=Cc2cccs2)CN(C(=O)c2cccs2)CC1=Cc1cccs1	O=C1C(=Cc2ccccc2)CN(C(=O)c2cccs2)CC1=Cc1cccs1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ncc(C2CCOCC2)cc1-c1nc2cc(-c3cnc4[nH]ncc4c3)ccc2o1	Nc1ncc(C2CCOCC2)cc1-c1nc2cc(-c3cnc4[nH]ncc4c3)ccc2o1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2C(C#N)=C(N)N(N(C)C)C3=C2C(=O)CCC3)cc1	COc1ccc(C2C(C#N)=C(N)N(N(C)C)C3=C2C(=O)CCC3)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1ccccc1N1CCN(c2ccc(Cl(=O)Nc3ccc4c(c3)Cc3ccccc3-4)cn2)CC1	Cc1ccccc1N1CCN(c2ccc(Cl(=O)Nc3ccc4c(c3)Cc3ccccc3-4)cn2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
C[S+](([O-])Cc1ccc(Cl(=O)Nc2cnc2)cc1	C[S+](([O-])Cc1ccc(Cl(=O)Nc2cnc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1ccc(C=NC(=S)N2CCN(c3ccccc3)CC2)cc1	CN(C)c1ccc(C=NC(=S)N2CCN(c3ccccc3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)N1CCC(Cl(=O)N2CCC(Cl(=O)N3CCC(n4c(=O)n(-c5ccccc5)c5ccccc54)CC3)CC2)CC1	CC(=O)N1CCC(Cl(=O)N2CCC(Cl(=O)N3CCC(n4c(=O)n(-c5ccccc5)c5ccccc54)CC3)CC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C2C(C#N)=C(N)O)c3c2ccc(O)c3OC)cc2nonc12	COc1cc(C2C(C#N)=C(N)O)c3c2ccc(O)c3OC)cc2nonc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C)c1ccc(C2CC(c3ccc(Br)cc3)=NN2C(=O)CSc2nnnn2C)cc1	CCC(C)c1ccc(C2CC(c3ccc(Br)cc3)=NN2C(=O)CSc2nnnn2C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cncc(Cl(O)=Nc2cccc(CN3CCC(Cl(O)=Nc4CCCC4)CC3)c2)c1	Cc1cncc(Cl(O)=Nc2cccc(CN3CCC(Cl(O)=Nc4CCCC4)CC3)c2)c1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C1c2ccccc2C(=O)N1CCCCCCC[n+]1ccc(Cl(=O)c2ccc(F)cc2)cc1	O=C(c1ccc(F)cc1)c1cc[n+](CCCCCCC2C(=O)c3ccccc3C2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1oc2cc(OCcN3CCN(Cc4ccccc4)CC3)ccc2c(O)c1[N+](=O)[O-]	O=c1oc2cc(OCcN3CCN(Cc4ccccc4)CC3)ccc2c(O)c1[N+](=O)[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)c1ccc(-n2cnc3c(-c4ccccc4)c(Cl)sc3c2=O)c([N+])(=O)[O-])c1	CC(=O)c1ccc(-n2cnc3c(-c4ccccc4)c(Cl)sc3c2=O)c([N+])(=O)[O-])c1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CC(Cl)CCC(O)C(C)CCOC(=O)c1cc(=O)coo1	Cc1ccccc1[P+](Cc1ccccc1)(Cl(=O)c1ccccc1)c1ccccc1	FALSE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc1[P+](Cc1ccccc1)(c1ccccc1)C(=O)c1ccccc1	Cc1ccccc1[P+](Cc1ccccc1)(Cl(=O)c1ccccc1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCCN(C(=O)c1ccccc1NC(=O)Cn1nnc2ccccc21	COCCCN(C(=O)c1ccccc1NC(=O)Cn1nnc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)CCCCCc1c(SSC)nc2cc(Cl)N)ccc2c1-c1ccccc1Cl	CCC(OC1cccc(CN(CCCOC2ccccc2)c2nc3ccccc3o2)c1)Cl(=O)O	FALSE	TRUE	TRUE
CCC(OC1cccc(CN(CCCOC2ccccc2)c2nc3ccccc3o2)c1)Cl(=O)O	COCCN(Cc1cncc1-c1ccc2c(c1)N(Cc1ccc(F)cc1)Cl(=O)CO2	TRUE	TRUE	TRUE
COCCN(Cc1cncc1-c1ccc2c(c1)N(Cc1ccc(F)cc1)Cl(=O)CO2	CC(CS)C(=O)N1CCCC1C(=O)O	TRUE	TRUE	FALSE
CC(CS)C(=O)N1CCCC1C(=O)O	COc1ccc(OC)c(NC(=O)CC2C(=O)N(c3ccc(F)cc3)C(=O)N2C2CCCC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(OC)c(NC(=O)CC2C(=O)N(c3ccc(F)cc3)C(=O)N2C2CCCC2)c1	COc1ccc(OC)c(NC(=O)CC2C(=O)N(c3ccc(F)cc3)C(=O)N2C2CCCC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(c2ccc(F)cc2)OCC(Cl(=O)Nc2ncc(Cl(=O)N(C)Cc3ccccc3)s2)O1	CN(Cc1ccccc1)Cl(=O)c1cnc(NC(=O)C2COC(C)(c3ccc(F)cc3)O2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(=O)CSC(=S)N2CCCO2)cc1Cl	Cc1ccc(NC(=O)CSC(=S)N2CCCO2)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)OC(c1cnccn1)C1CN(C(=O)c2nc3ccc(-c4ccccc4C(F)(F)F)cc3s2)CCN1C(=O)OC(C)(C)C	CC(C)(C)OC(c1cnccn1)C1CN(C(=O)c2nc3ccc(-c4ccccc4C(F)(F)F)cc3s2)CC1C(OC(C)(C)C)c1cnccn1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=CC(=O)NCCCN2CCN(c3ccc(F)cc3)CC2)ccc1O	COc1cc(C=CC(=O)NCCCN2CCN(c3ccc(F)cc3)CC2)ccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
COCC1CCCN1c1ccc(NC(C)C)nc(-n2nc(C)cc2C)n1	COCC1CCCN1c1ccc(NC(C)C)nc(-n2nc(C)cc2C)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(OCcCCOc2ccccc2Cl)ccc(Cl(=O)CC(C)C)c1O	Cc1c(OCcCCOc2ccccc2Cl)ccc(Cl(=O)CC(C)C)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C)c(CN2CCC(NC(=O)c3ccc(Sc4nccn4C)ccc3Cl)C2)c1	Cc1ccc(C)c(CN2CCC(NC(=O)c3ccc(Sc4nccn4C)ccc3Cl)C2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCOc1ccccc(-c2ccc(C=C3NC(=O)NC3=O)s2)c1	CCCOc1ccccc(-c2ccc(C=C3NC(=O)NC3=O)s2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1Cc2cccc(Cl(=O)N(C)Cc3cnn(C)c3)c2C1=O	CCN1Cc2cccc(Cl(=O)N(C)Cc3cnn(C)c3)c2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCC1=C(C)C2cc3[nH]c(cc4nc(cc5[nH]c(cc1n2)c(Cl)c5C(=O)CCCCNCCN)C(CC)=CCO4)c(Cl)c3C	CCC1=CCOc2cc3[nH]c(cc4nc(cc5[nH]c(cc1n2)c(Cl(=O)CCCCNCCN)c5C)C(CC)=C4C)c(Cl)c3C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)c1cc(C#N)c(N2CCOCC2)nc1C	CC(=O)c1cc(C#N)c(N2CCOCC2)nc1C	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1ccccc(-c2ocnc2C(O)=Nc2cnn(CCN(C)C(=N)O)c2)c1	Cc1ccccc(-c2ocnc2C(O)=Nc2cnn(CCN(C)C(=N)O)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)Cc1ccc(-c2c(COC(=O)NS(=O)(=O)c3ccc(Cl(F)(F)F)cc3)c3cc(O)ccc3n2CCCCCc2ccccc2)cc1	O=C(O)Cc1ccc(-c2c(COC(=O)NS(=O)(=O)c3ccc(Cl(F)(F)F)cc3)c3cc(O)ccc3n2CCCCCc2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
OC1CS(Cn2c(N3CCC3)nc3ccsc3c2=O)C1O	O=c1c2sc2c2nc(N2CCCC2)n1CC1SC(C)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c(-c2cccn2)nc2ncc(OC3ccccc3)nc21	Cn1c(-c2cccn2)nc2cnc(OC3ccccc3)nc21	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(c2ccc3nc(-c4cccs4)[nH]c3c2)CC1	CN1CCN(c2ccc3nc(-c4cccs4)[nH]c3c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(C)NC1=NS(=O)(=O)c2ccc(Cl)cc21	CC(C)C(C)NC1=NS(=O)(=O)c2ccc(Cl)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
CN(Cc1ccco1)S(=O)(=O)C1CC1	CN(Cc1ccco1)S(=O)(=O)C1CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCNc1[nH]cnc2nc(Cl(N)=O)nc1-2	CCCCNc1[nH]cnc2nc(Cl(N)=O)nc1-2	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C)c1ccc(OS(=O)(=O)c2ccc(N3CC(CNC(C)=O)OC3=O)cc2)cc1	CCC(C)c1ccc(OS(=O)(=O)c2ccc(N3CC(CNC(C)=O)OC3=O)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
OC(c1cnc(C#Cc2ccccc2)cn1)C1C2CC2CS1(=O)=O	O=S1(=O)CC2CC2C1C(O)c1cnc(C#Cc2ccccc2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
S=C(NCCc1ccccc1)Nc1ccc(OC(F)F)cc1	F(C(F)Oc1ccc(NC(=S)NCCc2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(c1ccc2[nH]c(O)nc2c1)N(CCCN1CCN(c2ccc(F)cc2)CC1)CC1CCCCO1	O=S(=O)(c1ccc2[nH]c(O)nc2c1)N(CCCN1CCN(c2ccc(F)cc2)CC1)CC1CCCCO1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cc2ccccc2cn1)C1CCCCC1	O=C(Nc1cc2ccccc2cn1)C1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CS(=O)(=O)N1CCC(C(=O)N2CCC(C3CCN(Cc4ccc(C#N)cc4)CC3)CC2)CC1	CS(=O)(=O)N1CCC(C(=O)N2CCC(C3CCN(Cc4ccc(C#N)cc4)CC3)CC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCOc1ccc2nc(NC(=O)CC(C)C)sc2c1	CCCCOc1ccc2nc(NC(=O)CC(C)C)sc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C(=O)Nc2ccc3c(c2)C(=O)NC3)cc(OC)c1OC	COc1cc(C(=O)Nc2ccc3c(c2)C(=O)NC3)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+](([O-])c1ccc(C)C(Nc2ccc(OC3ccc([N+](=O)[O-])cc3)cc2)c1	O=[N+](([O-])c1ccc(OC2ccc(Nc3cc([N+](=O)[O-])ccc3Cl)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1NC(c2c[nH]c3ccccc23)CN=C1c1c[nH]c2ccccc12	O=C1NC(c2c[nH]c3ccccc23)CN=C1c1c[nH]c2ccccc12	TRUE	TRUE	FALSE
CC(CN)(CC(=O)O)c1ccc(OC2ccccc2)cc1	CC(CN)(CC(=O)O)c1ccc(OC2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C(=O)O)c1ccc2c(c1)[nH]c1ccccc12	CC(C(=O)O)c1ccc2c(c1)[nH]c1ccccc12	TRUE	TRUE	FALSE
O=C1CCN(C(=O)c2cccc(S(=O)(=O)N3c4ccccc4Sc4ccccc43)c2)C(c2ccccc2)C1	O=C1CCN(C(=O)c2cccc(S(=O)(=O)N3c4ccccc4Sc4ccccc43)c2)C(c2ccccc2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc(=O)CCC(=O)N1CCN(c2cnc3ccc(l)cc3n2)CC1	COc(=O)CCC(=O)N1CCN(c2cnc3ccc(l)cc3n2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)Nc1cc(C(O)CNCCCCCCCNc2CCN(c3ccccc3C(=O)O)CC2)ccc1O	CS(=O)(=O)Nc1cc(C(O)CNCCCCCCCNc2CCN(c3ccccc3C(=O)O)CC2)ccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C1CCN(C2CCC3(Cc4ccccc4Cc4ccccc43)C2)CC1	O=C(O)C1CCN(C2CCC3(Cc4ccccc4Cc4ccccc43)C2)CC1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(c1nnn(C2Cc3ccccc32)n1)n1cncn1	CC(c1nnn(C2Cc3ccccc32)n1)n1cncn1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)CN(C)S(=O)(=O)c1ccc(Cl)s1	CCOC(=O)CN(C)S(=O)(=O)c1ccc(Cl)s1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NC(=O)Cc2csc(=Nc3cccc(N)c3)n2C)cc1	COc1ccc(NC(=O)Cc2csc(=Nc3cccc(N)c3)n2C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCCOC1CCCC1)c1nc[nH]n1	O=C(NCCOC1CCCC1)c1nc[nH]n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccc(C(=O)Nc2cc(Cl)ccc2OC)s1	CCc1ccc(C(=O)Nc2cc(Cl)ccc2OC)s1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(F)c2c(=O)n(-c3ccc(C4(C)NC(=O)N(Cc(=O)N5CCN(C(=O)C6CC6)CC5)C4=O)cc3F)sc2c1	COc1cc(F)c2c(=O)n(-c3ccc(C4(C)NC(=O)N(Cc(=O)N5CCN(C(=O)C6CC6)CC5)C4=O)cc3F)sc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C2CCCN(C(C3CCC3)c3ccc(F)cc3)C2)n[nH]1	Cc1cc(C2CCCN(C(C3CCC3)c3ccc(F)cc3)C2)n[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(CN1CCN(c2cnc3cc(Cl)ccc23)CC1)NC(=O)C(CCS(C(=O)=O)NC(=O)c1ccc([N+](=O)[O-])cc1	CC(CN1CCN(c2cnc3cc(Cl)ccc23)CC1)NC(=O)C(CCS(C(=O)=O)NC(=O)c1ccc([N+](=O)[O-])cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc(=O)Cc1ccc2c(c1)C(=O)c1ccc(Cl)cc1CO2	COc(=O)Cc1ccc2c(c1)C(=O)c1ccc(Cl)cc1CO2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)CCn1cc(NC(=O)c2cc3ccccc3n2Cc2ccccc2)cn1	CC(O)CCn1cc(NC(=O)c2cc3ccccc3n2Cc2ccccc2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(COc2ccc3nc(C4CCCC4C(=O)O)n(Cc4ccc(N5CCC(CC#N)CC5)cc4F)c3c2F)cc1	COc1ccc(COc2ccc3nc(C4CCCC4C(=O)O)n(Cc4ccc(N5CCC(CC#N)CC5)cc4F)c3c2F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=Cc1ccc(C(F)(F)F)cc1)NC(Cc1ccccc1)C(=O)O	O=C(C=Cc1ccc(C(F)(F)F)cc1)NC(Cc1ccccc1)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CNC1Cc2[nH]c3ccccc4c3c2	CNC1Cc2[nH]c3ccccc4c3c2	FALSE	TRUE	TRUE
Cc1c(-c2nnc(Nc3ccccc3)s2)nn(-c2ccc(Cl)cc2Cl)c1-c1ccc(Cl)cc1	Cc1c(-c2nnc(Nc3ccccc3)s2)nn(-c2ccc(Cl)cc2Cl)c1-c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc2c1Nc1ccccc1S2	Cc1ccccc2c1Nc1ccccc1S2	TRUE	TRUE	TRUE
CCS(=O)(=O)Nc1ccc2c(c1)S(=O)(=O)N=C(c1c(O)c3ccccc3n(Cc3ccccc3)c1=O)N2	CCS(=O)(=O)Nc1ccc2c(c1)S(=O)(=O)N=C(c1c(O)c3ccccc3n(Cc3ccccc3)c1=O)N2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(Nc1nc(Cl)nc2c1ncn2CC(COC(=O)Cc1ccccc1)COC(=O)C(C)C)c1ccccc2ccccc12	CC(Nc1nc(Cl)nc2c1ncn2CC(COC(=O)Cc1ccccc1)COC(=O)C(C)C)c1ccccc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(CNC(=O)C1(Cc2ccccc2)Cc2c(C3CCCC3)c3ccc(C(=O)O)cc3n2C1)c1ccccc1	CC(CNC(=O)C1(Cc2ccccc2)Cc2c(C3CCCC3)c3ccc(C(=O)O)cc3n2C1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1cc(N2CCOCC2)oc2[nH]c3ccc(F)cc3c12	O=c1cc(N2CCOCC2)oc2[nH]c3ccc(F)cc3c12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CN(NC(=O)OC(C)(C)C)C1=NCC(C)c2ccccc2N1	CC(C)CN(NC(=O)OC(C)(C)C)C1=NCC(C)c2ccccc2N1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1c(-c2ccc(Cl)cc2)cc(-c2ccccc2)nc1SCC(=O)O	N#Cc1c(-c2ccc(Cl)cc2)cc(-c2ccccc2)nc1SCC(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-n2ncc3cc(C)c4ncccc4c32)cc1NS(=O)(=O)c1ccc(F)cc1F	Cc1ccc(-n2ncc3cc(C)c4ncccc4c32)cc1NS(=O)(=O)c1ccc(F)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CNC(=O)CCn2nc(C)c3c(C)n(-c4ccccc4)nc3c2=O)cc1	COc1ccc(CNC(=O)CCn2nc(C)c3c(C)n(-c4ccccc4)nc3c2=O)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
CN(C)c1ccc2[nH]c(-c3ccccc3)nc2n1	CN(C)c1ccc2[nH]c(-c3ccccc3)nc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1cc2c(ccc3ccc(O)c(C(C)C=O)c32)o1	CCOC(=O)c1cc2c(ccc3ccc(O)c(C(C)C=O)c32)o1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(N(C(=O)c2ccc3c(c2)OCCO3)C(C)c2nc3ccccc3c(=O)n2N2CCN(C)CC2)c(OC)c1	COc1ccc(N(C(=O)c2ccc3c(c2)OCCO3)C(C)c2nc3ccccc3c(=O)n2N2CCN(C)CC2)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(CCOCCN1CCN(C(=O)OC(C)(C)C)CC1)C(=O)C1C(C(=O)Nc2ccc(Br)cc2)C2C=CC1C21CC1	CN(CCOCCN1CCN(C(=O)OC(C)(C)C)CC1)C(=O)C1C(C(=O)Nc2ccc(Br)cc2)C2C=CC1C21CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)S(=O)(=O)c1ccc(NC(=O)c2cc(C3CC3)nc3c2c(C)nn3-c2c(C)ccccc2C)cc1	CCN(CC)S(=O)(=O)c1ccc(NC(=O)c2cc(C3CC3)nc3c2c(C)nn3-c2c(C)ccccc2C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1cccc1NC(=O)Nc1n[nH]c(C(F)(F)F)n1	COC(=O)c1cccc1NC(=O)Nc1n[nH]c(C(F)(F)F)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN1CC(=Cc2ccc(Cl)cc2Cl)C2=C(C1)C(c1ccc(Cl)c[n+] <sup>1</sup> [O-])C(C#N)=C(N)O2	CCCN1CC(=Cc2ccc(Cl)cc2Cl)C2=C(C1)C(c1ccc(Cl)c[n+] <sup>1</sup> [O-])C(C#N)=C(N)O2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cc1ccccc1)Nc1nc(-c2cccn2)nc2cn(Cc3ccccc3)nc12	O=C(Cc1ccccc1)Nc1nc(-c2cccn2)nc2cn(Cc3ccccc3)nc12	TRUE	TRUE	TRUE
C=C1CC2C(C)(C(=O)OC)CCC2(C)C1CCC(C)=CCO	C=C1CC2C(C)(C(=O)OC)CCC2(C)C1CCC(C)=CCO	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN1CC(C(=O)Nc2ccc(C(F)(F)F)cc2)C(C(=O)Nc2ccc(-n3ccccc3=O)cc2F)C1	CCCN1CC(C(=O)Nc2ccc(C(F)(F)F)cc2)C(C(=O)Nc2ccc(-n3ccccc3=O)cc2F)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1CC2(COC)C(O)C(O)C34C5CC6(O)C(O)C(OC)C(OC(C)=O)(C5C6OC(C)=O)C(C(OC)C23)C14	CCN1CC2(COC)C(O)C(O)C34C5CC6(O)C(O)C(OC)C(OC(C)=O)(C5C6OC(C)=O)C(C(OC)C23)C14	TRUE	TRUE	TRUE
NC1CN(CCCO)CCNc1=O	NC1CN(CCCO)CCNc1=O	TRUE	TRUE	TRUE
NC1CCC(N=c2cc3n(-c4ccc(Cl)cc4)c4ccccc4nc-3cc2Nc2cccn2)CC1	NC1CCC(N=c2cc3n(-c4ccc(Cl)cc4)c4ccccc4nc-3cc2Nc2cccn2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CN(C(C)CO)S(=O)(=O)c2ccc(-c3ccccc3)cc2OC1CN(C)Cc1ccc(Cl)c(Cl)c1	CC1CN(C(C)CO)S(=O)(=O)c2ccc(-c3ccccc3)cc2OC1CN(C)Cc1ccc(Cl)c(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc2nc(C=C3C(=O)Nc4ccc(Br)cc43)[nH]c2cc1C	Cc1cc2nc(C=C3C(=O)Nc4ccc(Br)cc43)[nH]c2cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(S(=O)(=O)n2cc(Nc3ccccc3)c3ccccc32)cc1OC	COc1ccc(S(=O)(=O)n2cc(Nc3ccccc3)c3ccccc32)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)COc1ccc(-c2nnc3sc(-c4ccccc4)nn23)cc1	O=C(O)COc1ccc(-c2nnc3sc(-c4ccccc4)nn23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccc(-c2cc(C=O)c(O)c(OC)c2)o1	CCc1ccc(-c2cc(C=O)c(O)c(OC)c2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2ncc(CNCc3cccn3)cc2C(=O)NCCC2COCC2)cc1	Cc1ccc(-c2ncc(CNCc3cccn3)cc2C(=O)NCCC2COCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(CC(=O)O)c2cccn2n1Cc1ccc(-c2ccccc2)cc1	Cc1c(CC(=O)O)c2cccn2n1Cc1ccc(-c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(N)NCCCC(NC(=O)C1CCCN1)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(N)=O	N=C(N)NCCCC(NC(=O)C1CCCN1)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(N)=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)c1ccc(S(=O)(=O)N2CCN(C(=O)c3cccc(S(=O)(=O)Nc4ccc(NC(C)=O)cc4)c3)CC2)cc1	CC(=O)c1ccc(NS(=O)(=O)c2cccc(C(=O)N3CCN(S(=O)(=O)c4ccc(C(C)=O)cc4)CC3)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(Cc1ccccc1)Cc1ccc(C(=O)Nc2c(F)cccc2C(=O)O)cc1	CN(Cc1ccccc1)Cc1ccc(C(=O)Nc2c(F)cccc2C(=O)O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)C(Cc1ccc2ccccc2c1)NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)C1Cc2ccc([N+](=O)[O-])cc2CN1	NC(=O)C(Cc1ccc2ccccc2c1)NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)C1Cc2ccc([N+](=O)[O-])cc2CN1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1NcN(c2c(F)cc3c(=O)c(C(=O)O)cn4c3c2F)C(=Cc1N)C4CO	CC1NcN2C(=CC1N)C(CO)n1cc(C(=O)O)c(=O)c3cc(F)c2c(F)c31	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccccc1)c1ccc(Cn2cnnn2)cc1	O=C(Nc1ccccc1)c1ccc(Cn2cnnn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1ccccc1C1CCN(CCCN2C(=O)c3ccc(C(=O)c4ccccc4)cc3C2=O)CC1	CC(=O)Nc1ccccc1C1CCN(CCCN2C(=O)c3ccc(C(=O)c4ccccc4)cc3C2=O)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)c1ccc(NC(=O)Cn2c(=O)oc3cc(S(=O)(=O)N4CCCC4)ccc32)cc1	CCN(CC)c1ccc(NC(=O)Cn2c(=O)oc3cc(S(=O)(=O)N4CCCC4)ccc32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ccccc1NC(=O)CCCCN1C(=O)c2ccccc2C1=O	Nc1ccccc1NC(=O)CCCCN1C(=O)c2ccccc2C1=O	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(Cn1c(SCc2ccccc2Cl)nc2ccccc21)c1cccs1	O=C(Cn1c(SCc2ccccc2Cl)nc2ccccc21)c1cccs1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2nc(-c3ccccc3)cc(O)c2cc1-c1cnco1	COc1cc2nc(-c3ccccc3)cc(O)c2cc1-c1cnco1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(S)C(=O)N1C(C(=O)O)CC2CCCCC21	CC(S)C(=O)N1C(C(=O)O)CC2CCCCC21	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2ccc3c(c2)CCC(C)N3C(=O)c2ccc(O)cc2O)cc1	COc1ccc(-c2ccc3c(c2)CCC(C)N3C(=O)c2ccc(O)cc2O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)Nc1ccc2cc3ccc(NC(=O)OC)cc3nc2c1	CCOC(=O)Nc1ccc2cc3ccc(NC(=O)OC)cc3nc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1nc(C2CCc3ccccc32)[nH]c(=O)c1Oc1ccc(OC)cc1	COC(=O)c1nc(C2CCc3ccccc32)[nH]c(=O)c1Oc1ccc(OC)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)S(=O)(=O)CCN1CC2(CCN(C(=O)OC(F)(F)F)CC2)CCC1=O	CC(C)(C)S(=O)(=O)CCN1CC2(CCC1=O)CCN(C(=O)OC(F)(F)F)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)=CCc1c(C2CCN(C(C)C)CC2)oc2ccccc12	CC(O)=CCc1c(C2CCN(C(C)C)CC2)oc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(Cc2nnn[nH]2)cc1)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F	O=C(Nc1ccc(Cc2nnn[nH]2)cc1)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cn(-c2ccc3n(c2=O)CCCC3CO)c2ccc(C(=O)NCCN(C)C)cc12	Cc1cn(-c2ccc3n(c2=O)CCCC3CO)c2ccc(C(=O)NCCN(C)C)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)c1cnc(-c2ccccc2)nc1Oc1ccc(F)cc1	CNC(=O)c1cnc(-c2ccccc2)nc1Oc1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(NC(=O)CCC(NC(=O)C(N)CO)C(=O)O)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)NCc1ccc(-c2cccs2)cc1	CC(C)(NC(=O)CCC(NC(=O)C(N)CO)C(=O)O)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)NCc1ccc(-c2cccs2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)c1c(-c2ccc(F)cc2)oc2cc(N(C)S(C(=O)=O)c(-c3ccc4c(n3)-c3cc5c(F)cccc5n3(CO)O4)cc12	CNC(=O)c1c(-c2ccc(F)cc2)oc2cc(N(C)S(C(=O)=O)c(-c3ccc4c(n3)-c3cc5c(F)cccc5n3(CO)O4)cc12	TRUE	TRUE	FALSE
Oc1ncc(C=Cc2c(Br)ccc(Br)c2O)c(O)n1	Oc1ncc(C=Cc2c(Br)ccc(Br)c2O)c(O)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Cc2nnnn2C(C)(C)C)N2CCN(C(=O)c3ccco3)CC2)c(OC)c1	COc1ccc(Cc2nnnn2C(C)(C)C)N2CCN(C(=O)c3ccco3)CC2)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCO1n1c(SCC#N)nc2c(c1=O)C(C)C)CCc1cc(OC)ccc1-2	C=CCO1n1c(SCC#N)nc2c(c1=O)C(C)C)CCc1cc(OC)ccc1-2	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CCO)Cc1ccc2c(c1)CCC(NC(=O)CCc1ccc(F)cc1)C2	CCN(CCO)Cc1ccc2c(c1)CCC(NC(=O)CCc1ccc(F)cc1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)OC(=O)C2(CCC(O)(C(F)(F)F)CC2)CC1SCC(N)=O	CC1(C)OC(=O)C2(CCC(O)(C(F)(F)F)CC2)CC1SCC(N)=O	TRUE	TRUE	TRUE
[O-][S+] <sup>1</sup> C(OC2ccccc2)=NC12CCN(CCCc1c[nH]c3ccccc13)CC2	[O-][S+] <sup>1</sup> C(OC2ccccc2)=NC12CCN(CCCc1c[nH]c3ccccc13)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC(=O)OC1CCC2(C)C(=CCC3C2CCC2(C)C(C)C)CCC(CCC(C)C(C)C)CCC32)C1	CCCCC(=O)OC1CCC2(C)C(=CCC3C2CCC2(C)C(C)C)CCC(CCC(C)C(C)C)CCC32)C1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>O=C(O)c1cc(=O)c2c(o1)S(=O)(=O)c1cc(OCc3cccc(NCCc4cc(O)c(O)c(O)c4)c3)ccc1C2=O</chem>	<chem>O=C(O)c1cc(=O)c2c(o1)S(=O)(=O)c1cc(OCc3cccc(NCCc4cc(O)c(O)c(O)c4)c3)ccc1C2=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1Nc2ccc(Br)cc2C1=O</chem>	<chem>O=C1Nc2ccc(Br)cc2C1=O</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CC(NCc1ccnc1)=C1C(=O)N(C)C(=O)N(C)C1=O</chem>	<chem>CC(NCc1ccnc1)=C1C(=O)N(C)C(=O)N(C)C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=CC1CN2CCC1CC2C(OCc1cn(-c2ccc(OC)c(O)c2)nn1)c1ccnc2ccc(OC)cc12</chem>	<chem>C=CC1CN2CCC1CC2C(OCc1cn(-c2ccc(OC)c(O)c2)nn1)c1ccnc2ccc(OC)cc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(C(=O)NNC(=O)c2ccccc2Cl)nn1C</chem>	<chem>Cc1cc(C(=O)NNC(=O)c2ccccc2Cl)nn1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=NNC(=O)c1ccnc1)c1ccc(NC(=O)c2ccccc2)cc1</chem>	<chem>CC(=NNC(=O)c1ccnc1)c1ccc(NC(=O)c2ccccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc2occc(CC(=O)NC3CCcC4cc(CN5CCCC5C)ccc43)c2c1</chem>	<chem>Cc1ccc2occc(CC(=O)NC3CCcC4cc(CN5CCCC5C)ccc43)c2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(CN2CCN(CC(=O)Nc3ccc4c(c3)OCCO4)CC2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(CN2CCN(CC(=O)Nc3ccc4c(c3)OCCO4)CC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CCCCN1S(=O)(=O)c1ccc(C(=O)N2CCOCC2)cc1</chem>	<chem>CC1CCCCN1S(=O)(=O)c1ccc(C(=O)N2CCOCC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>O=P(O)(C=Cc1cc(Cl)cc(Cl)c1OC1CCCCC1)O</chem>	<chem>O=P(O)(O)C=Cc1cc(Cl)cc(Cl)c1OC1CCCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCCC(=O)N(O)CC(N+)(C)(CC)C</chem>	<chem>CCCCCCCCC(=O)N(O)CC(N+)(C)(CC)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)NC(Cc1ccc(OP(=O)(O)O)cc1)C(=O)NC(C)c1ccc(CNC(=N)N)cc1</chem>	<chem>CC(=O)NC(Cc1ccc(OP(=O)(O)O)cc1)C(=O)NC(C)c1ccc(CNC(=N)N)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1CC(c2cn(CCCF)c3ccccc23)C(=O)N1CCN1CCOCC1</chem>	<chem>O=C1CC(c2cn(CCCF)c3ccccc23)C(=O)N1CCN1CCOCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(-c2noc(CN3CCOCC3)n2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(-c2noc(CN3CCOCC3)n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CCCC(=O)OCC1OC(n2cc(F)c(=O)[nH]c2=O)C(OC(=O)CCC)C1OC(=O)CCC</chem>	<chem>CCCC(=O)OCC1OC(n2cc(F)c(=O)[nH]c2=O)C(OC(=O)CCC)C1OC(=O)CCC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)CCc1cn(Cc2ccc(Cl)cc2)c2ccccc12</chem>	<chem>O=C(O)CCc1cn(Cc2ccc(Cl)cc2)c2ccccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cccc(S(=O)(=O)CCc2cc(C(=O)N(C(=N)N)no2)c1</chem>	<chem>COc1cccc(S(=O)(=O)CCc2cc(C(=O)N(C(=N)N)no2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC(CO)C(=O)NCCCCC(NC(=O)C(N)Cc1ccc(O)cc1)C(=O)O</chem>	<chem>NC(CO)C(=O)NCCCCC(NC(=O)C(N)Cc1ccc(O)cc1)C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1nc(-c2ccc3c(c2)CN(C(=S)NCC2ccnc2)CC3=O)es1</chem>	<chem>Nc1nc(-c2ccc3c(c2)CN(C(=S)NCC2ccnc2)CC3=O)es1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCC=CC1=CC=C(CCC=C(C)C)SS1</chem>	<chem>COCC=CC1=CC=C(CCC=C(C)C)SS1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(NCC(=O)Nc1ccc(OC(F)(F)F)cc1)n1nc(C)cc1C</chem>	<chem>CC(C)(NCC(=O)Nc1ccc(OC(F)(F)F)cc1)n1nc(C)cc1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNC1CCN(CCN(C)C(=O)OCC2c3ccccc3-c3ccccc32)C1</chem>	<chem>CNC1CCN(CCN(C)C(=O)OCC2c3ccccc3-c3ccccc32)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C2Nc3ccccc3C(=O)N2c2ccc(OC)cc2OC)c(O)c1</chem>	<chem>COc1ccc(C2Nc3ccccc3C(=O)N2c2ccc(OC)cc2OC)c(O)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1nn(Cc2ccccc2F)c2ccccc12</chem>	<chem>Nc1nn(Cc2ccccc2F)c2ccccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc(-c2cc(Cl)c(CNc3nccs3)s2)cc1</chem>	<chem>Clc1cc(-c2ccccc2)sc1CNc1nccs1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1c2ccc(CO)nc2C(=O)c2c(-c3ccc(OCCN4CCNCC4)cc3)noc21</chem>	<chem>O=C1c2ccc(CO)nc2C(=O)c2c(-c3ccc(OCCN4CCNCC4)cc3)noc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCC1(c2ccccc2)CC(=O)C(C2=NS(=O)(=O)c3ccccc3N2)=C(O)O1</chem>	<chem>CCCCC1(c2ccccc2)CC(=O)C(C2=NS(=O)(=O)c3ccccc3N2)=C(O)O1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)c1nnc(NC(=O)CCC(=O)NCc2ccc3c(c2)OCO3)s1</chem>	<chem>CC(C)c1nnc(NC(=O)CCC(=O)NCc2ccc3c(c2)OCO3)s1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>COc1cccc(CNC(=O)N(C)COc2cccc(C#N)c2)c1</chem>	<chem>COc1cccc(CNC(=O)N(C)COc2cccc(C#N)c2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOc1ccc(N(C)C(=O)NC2CCCC2)S(C)(=O)=O)cc1</chem>	<chem>CCOc1ccc(N(C)C(=O)NC2CCCC2)S(C)(=O)=O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C#CC1=CC=CC(=O)O1)C1CCC2C3CCC4CC(N(C)C(=O)OCc5ccccc5)CCC4(C)C3CCCC12C</chem>	<chem>CC(C#CC1cccc(=O)o1)C1CCC2C3CCC4CC(N(C)C(=O)OCc5ccccc5)CCC4(C)C3CCCC12C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)c1cc(NC(=O)Nc2ccc(Cl)c(-c3c(Br)cnc4[nH]ncc34)c2)n(-c2ccc(Cl)cc2)n1</chem>	<chem>CC(C)(C)c1cc(NC(=O)Nc2ccc(Cl)c(-c3c(Br)cnc4[nH]ncc34)c2)n(-c2ccc(Cl)cc2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(Nc2c(C#N)cnc3cc(-c4ccc(OCCN5CCOCC5)cc4)sc23)c(Cl)cc1Cl</chem>	<chem>COc1cc(Nc2c(C#N)cnc3cc(-c4ccc(OCCN5CCOCC5)cc4)sc23)c(Cl)cc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC1CCCCN1C(=O)CCN(C(=O)Cn1ncc2c([nH]c3ccccc32)c1=O</chem>	<chem>CCC1CCCCN1C(=O)CCN(C(=O)Cn1ncc2c([nH]c3ccccc32)c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#CCC1(n2cc(C(=N)O)c(Nc3cc[nH]n3)n2)CCC(NC2CC2)CC1</chem>	<chem>N#CCC1(n2cc(C(=N)O)c(Nc3cc[nH]n3)n2)CCC(NC2CC2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(O)(C=Cc1ccc(C(=O)O)cc1)Cn1enc2c(=O)[nH]c(N)nc21</chem>	<chem>CC(O)(C=Cc1ccc(C(=O)O)cc1)Cn1enc2c(=O)[nH]c(N)nc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NCc1cc([N+](=O)[O-])ccc1O)c1ccccc1Cl</chem>	<chem>O=C(NCc1cc([N+](=O)[O-])ccc1O)c1ccccc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(CCc1ccccc1)Nc1ccc(C2CNCCO2)cc1</chem>	<chem>O=C(CCc1ccccc1)Nc1ccc(C2CNCCO2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)CC(CNCc1ccccc1)NC(=O)N1CCCC(C2CCOCC2)C1</chem>	<chem>CC(C)CC(CNCc1ccccc1)NC(=O)N1CCCC(C2CCOCC2)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#Cc1ccc(OCc2ccc(Cl)cc2C#N)c(Cl)c1</chem>	<chem>N#Cc1ccc(OCc2ccc(Cl)cc2C#N)c(Cl)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(O)c(Cl)c2c1S(=O)(=O)Nc1ccccc1-2</chem>	<chem>Cc1cc(O)c(Cl)c2c1S(=O)(=O)Nc1ccccc1-2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCOc1ccc(C(=O)Nc2ccncc2)cc1</chem>	<chem>CCCCOc1ccc(C(=O)Nc2ccncc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>O=C(NCc1ccco1)C1CCCN1S(=O)(=O)c1ccccc1</chem>	<chem>O=C(NCc1ccco1)C1CCCN1S(=O)(=O)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cccc(NC(=O)N2CCC(c3cccn3)CC2)c1</chem>	<chem>COc1cccc(NC(=O)N2CCC(c3cccn3)CC2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=CCn1sc(Nc2ccc3ccccc3c2)nc1=O</chem>	<chem>C=CCn1sc(Nc2ccc3ccccc3c2)nc1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NC(=O)c1ccccc1O)Nc1ccc(S(=O)(=O)c2ccc(F)cc2Cl)c(Cl)c1O</chem>	<chem>O=C(NC(=O)c1ccccc1O)Nc1ccc(S(=O)(=O)c2ccc(F)cc2Cl)c(Cl)c1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC=CCC1CC(C)(CC)C(=O)O1</chem>	<chem>CCC=CCC1CC(C)(CC)C(=O)O1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=c1c2cc(Br)ccc2oc2c1oc1ccc(-c3ccoc3)cc12</chem>	<chem>O=c1c2cc(Br)ccc2oc2c1oc1ccc(-c3ccoc3)cc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C(NCc2ccccc2)c2ccccc2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(C(NCc2ccccc2)c2ccccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CO(C(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)C(CS)NC(=O)NC12CC3CC(C(C3)C1)C2</chem>	<chem>CO(C(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)C(CS)NC(=O)NC12CC3CC(C(C3)C1)C2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CC(C)CC(C)C(O)C(C#CC(O)(c2ccccc2)c2ccccc2)O1</chem>	<chem>CC1CC(C)CC(C)C(O)C(C#CC(O)(c2ccccc2)c2ccccc2)C(O)C(C)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCNC(=O)N1CCCCC1CN(C)C(=O)c1ccc2c(c1)nc(CCC(C)C)n2CCCCOC</chem>	<chem>CCNC(=O)N1CCCCC1CN(C)C(=O)c1ccc2c(c1)nc(CCC(C)C)n2CCCCOC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CS(=O)(=O)N(Cc1CC2CCC1C2)c1ccccc1F)c1</chem>	<chem>CS(=O)(=O)N(Cc1CC2CCC1C2)c1ccccc1F)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(COCc1ccccc1)NC1CCCC1</chem>	<chem>O=C(COCc1ccccc1)NC1CCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCc1c(C(=O)OCCCOc2ccc3c(=O)c4ccccc4oc3c2)ccc(C(C)=O)c1O</chem>	<chem>CCCCc1c(C(=O)OCCCOc2ccc3c(=O)c4ccccc4oc3c2)ccc(C(C)=O)c1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(NC(=O)CN1C(=O)c2ccccc2C1=O)c1ccc(F)c1</chem>	<chem>CC(NC(=O)CN1C(=O)c2ccccc2C1=O)c1ccc(F)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(C(c2c(C)n(C)n(-c3ccccc3)c2=O)c2c(C)n(C)n(-c3ccccc3)c2=O)cc(OC)c1OC</chem>	<chem>COc1cc(C(c2c(C)n(C)n(-c3ccccc3)c2=O)c2c(C)n(C)n(-c3ccccc3)c2=O)cc(OC)c1OC</chem>	TRUE	FALSE	TRUE
<chem>COc1ccc(NC(=O)c2cc3c(=O)oc4ccc(C)cc4c3s2)cc1Cl</chem>	<chem>COc1ccc(NC(=O)c2cc3c(=O)oc4ccc(C)cc4c3s2)cc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOc1cc2c(cc1OCC)C(=O)C(Cl)=C(c1cc(OC)c(OC)c(O)c1)C2=O</chem>	<chem>CCOc1cc2c(cc1OCC)C(=O)C(c1cc(OC)c(OC)c(O)c1)=C(Cl)C2=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CN(C(C)CO)S(=O)(=O)c2ccccc2OC1CN(C)Cc1enn(C)c1</chem>	<chem>CC1CN(C(C)CO)S(=O)(=O)c2ccccc2OC1CN(C)Cc1enn(C)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccccc1N1CCN(C(=O)c2cc(COCc3cccc(F)c3)on2)CC1</chem>	<chem>COc1ccccc1N1CCN(C(=O)c2cc(COCc3cccc(F)c3)on2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)c1ccccc1C(=O)c1nc(-c2ccccc2)cs1</chem>	<chem>O=C(O)c1ccccc1C(=O)c1nc(-c2ccccc2)cs1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCC1=NCCN1CCc1ccc(F)cc1</chem>	<chem>CCCCCCCC1=NCCN1CCc1ccc(F)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C1CCCN(Cc2ccncc2)CCN(C2CC2)CC1</chem>	<chem>c1cc(CN2CCCCCN(C3CC3)CC2)ccn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC1(c2ccccc2)Oc2ccccc2-n2ccccc2C1=O</chem>	<chem>CCC1(c2ccccc2)Oc2ccccc2-n2ccccc2C1=O</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>O=C(Nc1ccc(N2CCCC2)nc1)c1ccc(Cl)c(S(=O)(=O)N2CCOCC2)c1</chem>	<chem>O=C(Nc1ccc(N2CCCC2)nc1)c1ccc(Cl)c(S(=O)(=O)N2CCOCC2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC(=O)c1ccccc(-n2nnc(-c3ccc(S(=O)(=O)N4CCCC4)cc3)n2)c1</chem>	<chem>NC(=O)c1ccccc(-n2nnc(-c3ccc(S(=O)(=O)N4CCCC4)cc3)n2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(C(=O)Nc2ccccc(S(=O)(=O)N3CCOCC3)c2)cc1Br</chem>	<chem>Cc1ccc(C(=O)Nc2ccccc(S(=O)(=O)N3CCOCC3)c2)cc1Br</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC12CCC3C(CCC4=CC(=O)CCC43C)C1=CC=C2c1cncc(Cl)c1</chem>	<chem>CC12CCC3C(CCC4=CC(=O)CCC43C)C1=CC=C2c1cncc(Cl)c1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CC1CCC(N2CCC(N(C(=O)Nc3ccc(F)cc3)c3ccccc3)CC2)CC1</chem>	<chem>CC1CCC(N2CCC(N(C(=O)Nc3ccc(F)cc3)c3ccccc3)CC2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C=CC(=O)CC(=O)C=Cc2ccc(OC)c(O)c2)ccc1OC</chem>	<chem>COc1ccc(C=CC(=O)CC(=O)C=Cc2ccc(OCc3ccccc3)c(O)c2)cc1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(CCCCN1CCN(c2ccccc2OCc2ccccc2)CC1)Nc1ccc(N(CCCl)CCCl)cc1</chem>	<chem>CC(CCCCN1CCN(c2ccccc2OCc2ccccc2)CC1)Nc1ccc(N(CCCl)CCCl)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C(c2nnnn2C2CCCC2)N2CCN(C)CC2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(C(c2nnnn2C2CCCC2)N2CCN(C)CC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NS(=O)(=O)c1cc(C(=O)c2ccc([N+](=O)[O-])cc2)c(Cl)cc1Cl</chem>	<chem>NS(=O)(=O)c1cc(C(=O)c2ccc([N+](=O)[O-])cc2)c(Cl)cc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)CCN(CCC(=O)O)CC(C(=O)O</chem>	<chem>O=C(O)CCN(CCC(=O)O)CC(C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=CC(C)(C)CC(=O)OC1C2CC3OC(C4=CC(=O)OC(c5ccoc5)C4=O)C4C(O)C5(C=CC(=O)C(C)=C5O)CC1OC43O2</chem>	<chem>C=CC(C)(C)CC(=O)OC1C2CC3OC(C4=CC(=O)OC(c5ccoc5)C4=O)C4C(O)C5(C=CC(=O)C(C)=C5O)CC1OC43O2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(S(=O)(=O)N2CC3CC(C2)c2ccccc(=O)n2C3)ccc1CO</chem>	<chem>Cc1cc(S(=O)(=O)N2CC3CC(C2)c2ccccc(=O)n2C3)ccc1CO</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1ccc(-c2nc3cc(NC(=O)c4ccccc4C(=O)O)ccc3o2)cc1)c1cc2ccccc2[nH]1</chem>	<chem>O=C(Nc1ccc(-c2nc3cc(NC(=O)c4ccccc4C(=O)O)ccc3o2)cc1)c1cc2ccccc2[nH]1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc(-c2nc3n(Cc4ccccc4)ccc-3n2)cc1</chem>	<chem>O=c1onc2n1CNc1cccc1-2</chem>	FALSE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1ON=C2c3ccccc3Nc1C12</chem>	<chem>O=c1onc2n1CNc1cccc1-2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CO(C(=O)c1sccc1NC(=S)N(C(=O)c1ccc(C=C2SC(=S)NC2=O)cc1</chem>	<chem>CO(C(=O)c1sccc1NC(=S)N(C(=O)c1ccc(C=C2SC(=S)NC2=O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC12NC(c3ccccc31)N(C(c1ccccc1)c1ccccc1)C2c1ccccc1</chem>	<chem>CC12NC(c3ccccc31)N(C(c1ccccc1)c1ccccc1)C2c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#Cc1c(-c2ccccc2)nc(SCCCO)[nH]c1=O</chem>	<chem>N#Cc1c(-c2ccccc2)nc(SCCCO)[nH]c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CC1CCC(C(C)C)C(OC(=O)CSc2nc(-c3ccc([N+](=O)[O-])cc3)cc(=O)[nH]2)C1	CC1CCC(C(C)C)C(OC(=O)CSc2nc(-c3ccc([N+](=O)[O-])cc3)cc(=O)[nH]2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1cnc2c(cnn2-c2ccc(S(C)(=O)=O)cc2)c1NCC1cccO1	CCOC(=O)c1cnc2c(cnn2-c2ccc(S(C)(=O)=O)cc2)c1NCC1cccO1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2c(C(=O)OCN3C(=O)c4cccc5cccc(c45)C3=O)coc2C)cc1OC	COc1ccc(-c2c(C(=O)OCN3C(=O)c4cccc5cccc(c45)C3=O)coc2C)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
COC1(c2ccc(C)cc2)C2CC(C1)c1ccc(=O)n1C2	COC1(c2ccc(C)cc2)C2C2C(C1)c1ccc(=O)n1C2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(C(=O)Nc2cccc(-n3ncnn3)c2)c1	Cc1cccc(C(=O)Nc2cccc(-n3ncnn3)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCCNc1cnc1)c1ncc2cc1Oc1cccc1O2	O=C(NCCNc1cnc1)c1ncc2cc1Oc1cccc1O2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(=O)c2cc(=O)c3ccc(C)cc3o2)cc1	Cc1ccc(NC(=O)c2cc(=O)c3ccc(C)cc3o2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CN(C(=O)COC(=O)C2CCCC2)c2cccc2N1	O=C1CN(C(=O)COC(=O)C2CCCC2)c2cccc2N1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc(-c2nc(-c3ccccc3Cl)c3n2CCOCC3)cn1	Cn1cc(-c2nc(-c3ccccc3Cl)c3n2CCOCC3)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(N)NCCCC1NC(=O)CNC(=O)C(CCCCN)NC(=O)C2CCCN2C(=O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)CNC1=O	N=C(N)NCCCC1NC(=O)CNC(=O)C(CCCCN)NC(=O)C2CCCN2C(=O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)CNC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(-c2c(-c3ccc(OC(F)(F)F)cc3)n3nc(-c4ccc(N5CCOCC5)cc4)ccc3n2C)ccn1	CCCC(=O)Nc1cc(-c2ccsc2)nc(-c2ccc(Cl)cc2)n1	FALSE	TRUE	TRUE
CCCC(=O)Nc1cc(-c2ccsc2)nc(-c2ccc(Cl)cc2)n1	CCCC(=O)Nc1cc(-c2ccsc2)nc(-c2ccc(Cl)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC1(O)C(=O)OCc2c1cc1n(c2=O)Cc2cc3c4cc5ccc(OC)cc5nc4ccc3nc2-1	CCC1(O)C(=O)OCc2c1cc1n(c2=O)Cc2cc3c(ccc4nc5cc(OC)ccc5cc43)nc2-1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1c(=O)c(S(=O)(=O)Nc2ccc(O)cc2)cc2n3cccc3nc12		FALSE	TRUE	TRUE
Cc1oc(-c2ccccc2)nc1CCOc1ccc(CC(C(=O)O)C(O)c2ccccc2C(=O)O)cc1	Cc1oc(-c2ccccc2)nc1CCOc1ccc(CC(C(=O)O)C(O)c2ccccc2C(=O)O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1cccc1COC1ccc(CNc2ccc(C(C)=NO)cn2)cc1	CCOc1cccc1COC1ccc(CNc2ccc(C(C)=NO)cn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Oc2nc(Nc3cccc(C(N)=O)c3)c(F)cc2F)cc1	COc1ccc(Oc2nc(Nc3cccc(C(N)=O)c3)c(F)cc2F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(N2CCCC2)ccc1C#Cc1c(C)[nH]c(=O)c(C#N)c1C	Cc1cc(N2CCCC2)ccc1C#Cc1c(C)[nH]c(=O)c(C#N)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1=C(N)N(c2ccccc2)C1C(=O)OC	CCOC(=O)C1=C(N)N(c2ccccc2)C1C(=O)OC	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)NC1=NCCS1	CCOC(=O)NC1=NCCS1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)NC(=O)CSc1nnc2c(n1)[nH]c1ccccc12	CC(C)NC(=O)CSc1nnc2c(n1)[nH]c1ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
FC(F)(Cl)C(OC1cncnc1)c1ccc(Cl)cc1Cl	FC(F)(Cl)C(OC1cncnc1)c1ccc(Cl)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CNc1nccn2c(Cc3cc(Cl)ccc3OC)nnc12	CNc1nccn2c(Cc3cc(Cl)ccc3OC)nnc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCCCOc1cccc(NC(=O)Nc2ccccc2C(=O)OC)c1	CCCCCCCCCCCCCOc1cccc(NC(=O)Nc2ccccc2C(=O)OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(COC(=O)CC1NC(CO)C(O)C(O)C1O)NC(=O)CNC(=O)c1c(Cl)cccc1Cl	O=C(CNC(=O)c1c(Cl)cccc1Cl)NC(=O)COC(=O)CC1NC(CO)C(O)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(N=C(O)c2ccc(-c3nc(C4CC5CC(C(=O)N5C4)n4ccnc(N)c34)cc2Cl)cccc1S(=O)(=O)NC(C)C	Cc1c(N=C(O)c2ccc(-c3nc(C4CC5CC(C(=O)N5C4)n4ccnc(N)c34)cc2Cl)cccc1S(=O)(=O)NC(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(C)C(=O)OCC(=C)C1CC(OC(C)=O)C2(CO)C(OC(C)=O)CC(=C)C2C2OC(=O)C(C)C21	C=C(C)C(=O)OCC(=C)C1CC(OC(C)=O)C2(CO)C(OC(C)=O)CC(=C)C2C2OC(=O)C(C)C21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(F)cc1)N1CCN2C(=O)c3ccccc3C12c1ccc(Cl)cc1	O=C(Nc1ccc(F)cc1)N1CCN2C(=O)c3ccccc3C12c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCC(O)CCC=CCCCCCCC(=O)N1CCCCC1	CCCCCCC(O)CCC=CCCCCCCC(=O)N1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
FC1(F)CCN(c2nc(-c3ccc4ccccc4c3)nc3c2CCCC3)CC1	FC1(F)CCN(c2nc(-c3ccc4ccccc4c3)nc3c2CCCC3)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1sc(N2N=C(c3ccc(S(C)(=O)=O)cc3)CC2c2ccc(F)cc2)nc1C	CCOC(=O)c1sc(N2N=C(c3ccc(S(C)(=O)=O)cc3)CC2c2ccc(F)cc2)nc1C	TRUE	TRUE	TRUE
NC(Cc1ccc(O)cc1)C(O)C(=O)NC1OC(CO)C(O)C(O)C1O	NC(Cc1ccc(O)cc1)C(O)C(=O)NC1OC(CO)C(O)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(NS(=O)(=O)Cc1ccccc1)C(=O)NCC1ccncc1	CC(NS(=O)(=O)Cc1ccccc1)C(=O)NCC1ccncc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C(=O)NC1(Cc2ccccc2OC)CCS(=O)(=O)C1)n1nc(C)n2c(cc3oc(C)cc32)c1=O	CC(C(=O)NC1(Cc2ccccc2OC)CCS(=O)(=O)C1)n1nc(C)n2c(cc3oc(C)cc32)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCS(=O)(=O)Nc1ccc2c(c1)OCCO2	CCCCCCCCCS(=O)(=O)Nc1ccc2c(c1)OCCO2	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCC=CCCCCCCCC(O)C(=O)NC(COC1OC(CO)C(O)C(O)C1O)C(O)CCCCCCCC=CCOC(C=CC=CC#N)CO	CCCCCCCCC=CCCCCCCCC(O)C(=O)NC(COC1OC(CO)C(O)C(O)C1O)C(O)CCCCCCCC=CCOC(C=CC=CC#N)CO	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(N2C(=O)CS2c2cc3ccccc3[nH]2)cc1Cl	Cc1ccc(N2C(=O)CS2c2cc3ccccc3[nH]2)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)C1CCC2C3CC4NC(=O)CCC4(C)C3CC12C	CC(O)C1CCC2C3CCC4NC(=O)CCC4(C)C3CCC12C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C=CC1=C(C)CCCC1(C)C)=CC=CC(C)=CC(=O)NCC1cccc1	CC(C=CC1=C(C)CCCC1(C)C)=CC=CC(C)=CC(=O)NCC1cccc1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(NC1CCCC1)Oc1cccc(C(=O)NN2CCOCC2)c1	O=C(NC1CCCC1)Oc1cccc(C(=O)NN2CCOCC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(CNC(=O)c2nn[nH]n2)c(Br)c(OC)c1OC	COc1cc(CNC(=O)c2nn[nH]n2)c(Br)c(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(C(C)(C)C)sc(=NC(=O)c2cccc(C(F)(F)F)c2Cl)n1CC1CC1	Cc1c(C(C)(C)C)sc(=NC(=O)c2cccc(C(F)(F)F)c2Cl)n1CC1CC1	TRUE	TRUE	FALSE
CCc1nc2n(n1)CC(NCCc1c(C)nn(C)c1C)CC2	CCc1nc2n(n1)CC(NCCc1c(C)nn(C)c1C)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc(C#CCNC2CCCC2)nc2c1ncn2C1OC(CO)C(O)C1O	Nc1nc(C#CCNC2CCCC2)nc2c1ncn2C1OC(CO)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(C(=O)COC(=O)CNC(=O)CSc2ccc(C(C)(C)C)cc2)c1	COc1cccc(C(=O)COC(=O)CNC(=O)CSc2ccc(C(C)(C)C)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=NNC(=O)c1ccnc1S)c1occc1C	CC(=NNC(=O)c1ccnc1S)c1occc1C	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)N(C)C(Cc2ccccc2)C(=O)NCC#N)c(=O)[nH]1	Cc1ccc(C(=O)N(C)C(Cc2ccccc2)C(=O)NCC#N)c(=O)[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCOc1ccc(C(=O)CC(=O)C(=O)N2CCCC(C(=O)OCC)C2)cc1	CCCCOc1ccc(C(=O)CC(=O)C(=O)N2CCCC(C(=O)OCC)C2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+][([O-])c1ccc(NCCNc2cnc3cc(Cl)ccc23)cc1	O=[N+][([O-])c1ccc(NCCNc2cnc3cc(Cl)ccc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1sc(C=CC(=O)NO)cc1-c1ccccc1	CCc1sc(C=CC(=O)NO)cc1-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC1(O)C(=O)OCc2c1cc1n(c2=O)Cc2c-1nc1ccccc1c2C=NN1CCCC1	CCC1(O)C(=O)OCc2c1cc1n(c2=O)Cc2c-1nc1ccccc1c2C=NN1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCC1CCCC1)c1ccc(NC(=O)N2Cc3ccnc3C2)cc1	O=C(NCC1CCCC1)c1ccc(NC(=O)N2Cc3ccnc3C2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1cc(SCc2ccccc2[N+](=O)[O-])nc(=O)n1N	Nc1cc(SCc2ccccc2[N+](=O)[O-])nc(=O)n1N	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1ccccc1)N1NC(c2ccc3ccccc3c2)CC1c1ccc(Cl)cc1Cl	O=C(c1ccccc1)N1NC(c2ccc3ccccc3c2)CC1c1ccc(Cl)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc2c(N)c(C#N)c(NCC3CCCO3)nc2n1C	Cc1cc2c(N)c(C#N)c(NCC3CCCO3)nc2n1C	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1nc(-c2ccc(OC3ccnc(-c4ccnc4)c3)nc2)so1	O=c1nc(-c2ccc(OC3ccnc(-c4ccnc4)c3)nc2)so1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)N1CC(Cc2cc3cc(-c4nn(-c5ncccn5)c(=O)cc4C)ccc3[nH]2)CC1	COC(=O)N1CC(Cc2cc3cc(-c4nn(-c5ncccn5)c(=O)cc4C)ccc3[nH]2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C1=Cc2ccccc2OC1	O=C(O)C1=Cc2ccccc2OC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)n1sc(=NCCN2CCN(Cc3cccs3)CC2)nc1=O	CC(C)n1sc(=NCCN2CCN(Cc3cccs3)CC2)nc1=O	FALSE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C=CC(=O)c2cc(OC)c(OC)c(OC)c2)cc1N	COc1ccc(C=CC(=O)c2cc(OC)c(OC)c(OC)c2)cc1N	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1ncc(C)n2nc(CCc3nc(N4CCCC4)nn3C)nc12	Cc1ncc(C)n2nc(CCc3nc(N4CCCC4)nn3C)nc12	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1ccc(Nc2ccc(C(=O)Nc3ccc(-c4nc5ccccc5o4)c(O)c3)cc2)cc1Cl	Cc1ccc(Nc2ccc(C(=O)Nc3ccc(-c4nc5ccccc5o4)c(O)c3)cc2)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(=O)N(Cc1ccc(OC)cc1)c1ccc2oc(-c3ccccc3)cc(=O)c2c1	CCC(=O)N(Cc1ccc(OC)cc1)c1ccc2oc(-c3ccccc3)cc(=O)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccncc1)C1CCN1Cc1ccc(-c2ccccc2)cc1	O=C(Nc1ccncc1)C1CCN1Cc1ccc(-c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CC(C(OC(=O)c2cc(Cl)c(N)c(Cl)c2)CC1	CN1CC(C(OC(=O)c2cc(Cl)c(N)c(Cl)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1CC2C(=NOC3OC(C(=O)O)C(O)C(O)C3O)C(O)CC2N(C)C(=O)CNC(=O)C(C(C)CC)NC(=O)CNC(=O)C(C(C)C)N(C)C1=O	CCOC(=O)C1CC2C(=NOC3OC(C(=O)O)C(O)C(O)C3O)C(O)CC2N(C)C(=O)CNC(=O)C(C(C)CC)NC(=O)CNC(=O)C(C(C)C)N(C)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1ccc(CN2CCC(N3Cc4ccccc4NC3=O)CC2)cc1	CC(=O)Nc1ccc(CN2CCC(N3Cc4ccccc4NC3=O)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(C)C(=O)Nc1ccc(Sc2ccc(C)cc2)cc1	CC(C)C(C)C(=O)Nc1ccc(Sc2ccc(C)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(N=C(O)c2cccc(C(C)(C)C#N)c2)c1	COc1cccc(N=C(O)c2cccc(C(C)(C)C#N)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCc2nn(CC(=O)N3CCC(C(=O)Nc4cccc(F)c4)CC3)cc2C1	CC1CCc2nn(CC(=O)N3CCC(C(=O)Nc4cccc(F)c4)CC3)cc2C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC(=O)OCSc1nncc(CSc2nc3c(c=Nc4ccccc4)n2CC)S(C)C3)n1C	CCCC(=O)OCSc1nncc(CSc2nc3c(c=Nc4ccccc4)n2CC)S(C)C3)n1C	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(N)NCCCC1NC(=O)C2(CCC2)NC(=O)C2CCCN2C(=O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)C(Cc2cccc(NC(=N)N)c2)NC(=O)C(Cc2c[nH]c3ccccc23)NC1=O	N=C(N)NCCCC1NC(=O)C2(CCC2)NC(=O)C2CCCN2C(=O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)C(Cc2cccc(NC(=N)N)c2)NC(=O)C(Cc2c[nH]c3ccccc23)NC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCNc1cc([N+](=O)[O-])ccc1C(=O)NC1CCCC1	CCNc1cc([N+](=O)[O-])ccc1C(=O)NC1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CN1CCN(Cc2cccc(Cl)c2)CC1)Nc1cccc(S(=O)(=O)N2CCOCC2)c1	O=C(CN1CCN(Cc2cccc(Cl)c2)CC1)Nc1cccc(S(=O)(=O)N2CCOCC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C(c2c(C)n(C)n(-c3ccccc3)c2=O)c2c(C)n(C)n(-c3ccccc3)c2=O)cc(OC)c1OC	COc1cc(C(c2c(C)n(C)n(-c3ccccc3)c2=O)c2c(C)n(C)n(-c3ccccc3)c2=O)cc(OC)c1OC	TRUE	FALSE	TRUE
COc1ccc2oc(=O)c(C#Cc3ccc(-c4ccc(C#N)cc4)cc3)c(C)c2c1	COc1ccc2oc(=O)c(C#Cc3ccc(-c4ccc(C#N)cc4)cc3)c(C)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O[N+][([O-])=C1CCCCC1=NO	[O-][N+](O)=C1CCCCC1=NO	TRUE	TRUE	TRUE
CN(Cc1ccc(F)cc1Cl)C(=O)C(c1ccccc1)C1CCCC1	CN(Cc1ccc(F)cc1Cl)C(=O)C(c1ccccc1)C1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(Cl)c(S(=O)(=O)N2CCCO2CNC(=O)C(=O)NCC2CCO2)c(C)c1Cl	Cc1cc(Cl)c(S(=O)(=O)N2CCCO2CNC(=O)C(=O)NCC2CCO2)c(C)c1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CN(CCN1CC2CN(C(=O)C3CC3)CC2C1)c1nccc(-n2cnc2)n1	CN(CCN1CC2CN(C(=O)C3CC3)CC2C1)c1nccc(-n2cnc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(COC(=O)Cc1cc(-c2ccc(Cl)c(Cl)c2)nn1-c1ccc(Cl)cc1)c1cccc(F)c1	COC(COC(=O)Cc1cc(-c2ccc(Cl)c(Cl)c2)nn1-c1ccc(Cl)cc1)c1cccc(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1csc(-c2ocnc2C(=O)NN)n1	Cc1csc(-c2ocnc2C(=O)NN)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(CCN(C=O)CN(CCOC)S(=O)(=O)c2ccc3c(c2)oc(=O)n3C)cc1OCC	CCOc1ccc(CCN(C=O)CN(CCOC)S(=O)(=O)c2ccc3c(c2)oc(=O)n3C)cc1OCC	TRUE	TRUE	TRUE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
O=S(=O)(c1ccc(-c2cnc(N3CCOCC3)c3nc(Cc4ccc5ccccc5n4)cn23)cc1)N1CCCC1	O=S(=O)(c1ccc(-c2cnc(N3CCOCC3)c3nc(Cc4ccc5ccccc5n4)cn23)cc1)N1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ccccc1N=C(O)CCCCN=C(O)C1CCCC2[nH]nc12	Nc1ccccc1N=C(O)CCCCN=C(O)C1CCCC2[nH]ncc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+](([O-])c1cn2c(n1)OCC(Oc1ccc(-c3ccccc(F)c3)s1)C2	O=[N+](([O-])c1cn2c(n1)OCC(Oc1ccc(-c3ccccc(F)c3)s1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(C)NC(=O)CN(C)C(=O)c1c(-c2ccc(C)c2)noc1C	Cc1onc(-c2ccc(C)c2)c1C(=O)N(C)CC(=O)NC(C)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C(=O)Nc2cc(Br)c(O)c(Br)c2)cc(OC)c1C	COc1cc(C(=O)Nc2cc(Br)c(O)c(Br)c2)cc(OC)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)c1ccc(C=NNC(=O)Nc2ccc(-c3cn4ccccc4n3)cc2)c(O)c1	CCN(CC)c1ccc(C=NNC(=O)Nc2ccc(-c3cn4ccccc4n3)cc2)c(O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2nccc(Oc3ccc(NC(=O)Nc4cccc(C)n4)cc3F)c2cc1OC	COc1cc2nccc(Oc3ccc(NC(=O)Nc4cccc(C)n4)cc3F)c2cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc2cc(C3C4=C(CC(C)C)CC4=O)Oc4nc(N)nc(N)c43)c(=O)oc12	COc1cccc2cc(C3C4=C(CC(C)C)CC4=O)Oc4nc(N)nc(N)c43)c(=O)oc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=NNC(=O)C(Oc1ccccc1C(F)(F)F)C(O)C(O)C(Oc1ccccc1)C(=O)NC1c2ccccc2CC1O)c1ccc(Br)cc1	CC(=NNC(=O)C(Oc1ccccc1C(F)(F)F)C(O)C(O)C(Oc1ccccc1)C(=O)NC1c2ccccc2CC1O)c1ccc(Br)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1c2cc(NS(=O)(=O)c3cccs3)ccc2-c2ccc(S(=O)(=O)N(CCO)Cc3ccccc3)cc21	O=C1c2cc(NS(=O)(=O)c3cccs3)ccc2-c2ccc(S(=O)(=O)N(CCO)Cc3ccccc3)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCNC(=O)Nc1ccc(F)c(-c2ccnc3c(C(=O)c4cccs4)cnn23)c1	CCCCNC(=O)Nc1ccc(F)c(-c2ccnc3c(C(=O)c4cccs4)cnn23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1c(N)nc(-c2ccncc2)nc1N1CCCC1c1nc(N2CCN(C)CC2)no1	CC(C)c1c(N)nc(-c2ccncc2)nc1N1CCCC1c1nc(N2CCN(C)CC2)no1	TRUE	TRUE	TRUE
NCCCNCCCCNC(=O)Nc1ccc(OC(F)(F)F)cc1	NCCCNCCCCNC(=O)Nc1ccc(OC(F)(F)F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(SC2=C(O)OC(Cc3ccccc3))(C(C)C)CC2=O)c(C(C)C)cc1NS(=O)(=O)c1ccccc1	Cc1cc(SC2=C(O)OC(Cc3ccccc3))(C(C)C)CC2=O)c(C(C)C)cc1NS(=O)(=O)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CNP(=O)(O)OCC1OC(n2cnc3c(NC4CC4)ncnc32)C(O)C1O	O=C(O)CNP(=O)(O)OCC1OC(n2cnc3c(NC4CC4)ncnc32)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccccc1)Nc1cc(C(C)C(O)cc(C2CCCN2C(=O)c2cccc3ccccc23)c1O	CC(C)(O)c1cc(NC(=O)Nc2ccccc2)c(O)c(C2CCCN2C(=O)c2cccc3ccccc23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CN(c1ccccc1F)S(=O)(=O)c1ccccc1)Nc1cc(C(F)(F)F)ccc1N1CCOCC1	O=C(CN(c1ccccc1F)S(=O)(=O)c1ccccc1)Nc1cc(C(F)(F)F)ccc1N1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CSc1cccc(NC(=O)CN2C(=O)CC(C)(C)S(=O)(=O)c3ccccc32)c1	CSc1cccc(NC(=O)CN2C(=O)CC(C)(C)S(=O)(=O)c3ccccc32)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC1(C)SC(NC2CC3CC(NC(=O)Nc4ccc(C)S4)(CC3C)C2)=NC1=O	CCCC1(C)SC(NC2CC3CC(NC(=O)Nc4ccc(C)S4)(C2)CC3C)=NC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)N1CCN(c2cc(-c3n[nH]c4ccc(NCc5ccccc5)cc34)ccn2)CC1	CS(=O)(=O)N1CCN(c2cc(-c3n[nH]c4ccc(NCc5ccccc5)cc34)ccn2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Nc2ncc3ncc(-c4ccccc4)n3n2)cc1OC	COc1ccc(Nc2ncc3ncc(-c4ccccc4)n3n2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC(=O)Nc1c2c(nc3ccccc13)CCCC2	CCCC(=O)Nc1c2c(nc3ccccc13)CCCC2	TRUE	TRUE	FALSE
CCCCOP(=O)(COCcN1cnc2c(Cl)ncnc21)OCCCC	CCCCOP(=O)(COCcN1cnc2c(Cl)ncnc21)OCCCC	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1cccc(Nc2cc(=O)[nH]c(=O)n2Cc2ccc(OS(=O)(=O)c3ccc(C)cc3)cc2)c1	CCc1cccc(Nc2cc(=O)[nH]c(=O)n2Cc2ccc(OS(=O)(=O)c3ccc(C)cc3)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NN=Cc1ccccc1Cl)c1ccc(-c2cn3ccsc3n2)cc1	O=C(NN=Cc1ccccc1Cl)c1ccc(-c2cn3ccsc3n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1CS(C(C)C=O)N1Nc1ccccc1C	CCOC(=O)C1CS(C(C)C=O)N1Nc1ccccc1C	TRUE	TRUE	TRUE
CC=C(NC(=O)CCC)C(=O)OC	CC=C(NC(=O)CCC)C(=O)OC	TRUE	TRUE	TRUE
NS(=O)(=O)c1ccccc1NS(=O)(=O)c1ccc(NCc2ccccc2)cc1	NS(=O)(=O)c1ccccc1NS(=O)(=O)c1ccc(NCc2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc(N2C(=O)c3ccccc3C2(O)c2cccc(NS(C)(=O)=O)c2F)cc(OCCOCCF)c1=O	Cn1cc(N2C(=O)c3ccccc3C2(O)c2cccc(NS(C)(=O)=O)c2F)cc(OCCOCCF)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1Cc2cc3c(cc2N1)OC(c1ccc(Cl)c(Cl)c1)CO3	O=C1Cc2cc3c(cc2N1)OC(c1ccc(Cl)c(Cl)c1)CO3	TRUE	TRUE	TRUE
COCc1cnccl(-c2nn(C(C)C)c3nnc(N)c23)c1	COCc1cnccl(-c2nn(C(C)C)c3nnc(N)c23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2C(C(=O)NCc3ccco3)CCC(=O)N2c2ccc(OC)c(OC)c2)cc1	COc1ccc(C2C(C(=O)NCc3ccco3)CCC(=O)N2c2ccc(OC)c(OC)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(NC(=O)CS)C(=O)NC(CO)C(=O)O	CC(NC(=O)CS)C(=O)NC(CO)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nncc(Br)n1-c1cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c1	Cc1nncc(Br)n1-c1cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCc1ccc(C2CCC([N+](C)(C)CCO)CC2)cc1	CCCCCCCCc1ccc(C2CCC([N+](C)(C)CCO)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1sc2nccc(-c3ccc([N+](=O)[O-])o3)c2c1-c1ccccc1	O=C(O)c1sc2nccc(-c3ccc([N+](=O)[O-])o3)c2c1-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC[n+ ]1ccc2cc(NC(=O)CCc3ccc(NC(=O)c4ccc5c(ccc6ccc(C(=O)Nc7ccc(C(=O)Nc8ccc[n+](CCC)c8)cc7)cc5[n+ ]4C)cc3)ccc2c1	CC[n+ ]1ccc2cc(NC(=O)CCc3ccc(NC(=O)c4ccc5c(ccc6ccc(C(=O)Nc7ccc(C(=O)Nc8ccc[n+](CCC)c8)cc7)cc5[n+ ]4C)cc3)ccc2c1	FALSE	TRUE	TRUE
O=C(O)Cc1ccc(OCc2cccc(C(=O)O)n2)cc1	O=C(O)Cc1ccc(OCc2cccc(C(=O)O)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(c1nnnn1C(C)(C)C)N1CCN(C2CCCC2)CC1	CC(c1nnnn1C(C)(C)C)N1CCN(C2CCCC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1cc(N(C)Cc2cnc3nc(N)nc(N)c3c2C)c(C)Cs1	CCc1cc(N(C)Cc2cnc3nc(N)nc(N)c3c2C)c(C)Cs1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(C(=O)Nc2nc3ccccc3s2)oc2ccccc12	Cc1c(C(=O)Nc2nc3ccccc3s2)oc2ccccc12	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(CC=C(c1ccccc1)c1ccccc1)N1CCOCC1	O=C(CC=C(c1ccccc1)c1ccccc1)N1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)CCNC(=O)c1ccccc1Cl	CCN(CC)CCNC(=O)c1ccccc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
C#CCOc1cccc(Nc2ncc(Br)c(NC(C)c3ccc(F)cc3)n2)c1	C#CCOc1cccc(Nc2ncc(Br)c(NC(C)c3ccc(F)cc3)n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1Cc2ccccc2N1C(=O)Cc1nc(O)cc(N2CCOCC2)n1	CC1Cc2ccccc2N1C(=O)Cc1nc(O)cc(N2CCOCC2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(-c2ccc(C(=O)N3CC=C(c4ccc(C(N)=O)cc4)CC3)c(C(F)(F)F)c2)c1	COc1cccc(-c2ccc(C(=O)N3CC=C(c4ccc(C(N)=O)cc4)CC3)c(C(F)(F)F)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C=CC1=C(C)CCCC1(C)C)=CC=CC(C)=CC(=O)Nc1ccc(Cl)cc1	CC(C=CC1=C(C)CCCC1(C)C)=CC=CC(C)=CC(=O)Nc1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
CN1C(=O)C=C2N=c3nc4ccccc4n3N2c2ccccc2)c2cc(F)ccc21	O=C1C2C3C=CC(C3)C2C(=O)N1c1ccc(Cl)c(C(F)(F)F)c1	FALSE	TRUE	TRUE
O=C1C2C3C=CC(C3)C2C(=O)N1c1ccc(Cl)c(C(F)(F)F)c1	O=C1C2C3C=CC(C3)C2C(=O)N1c1ccc(Cl)c(C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nncc(NC2CCCC2)nc1-c1ccc(-c2cnc(C(C)(C)CO)o2)cc1	Cc1nncc(NC2CCCC2)nc1-c1ccc(-c2cnc(C(C)(C)CO)o2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCNc1nc2c(=O)[nH]c(N)nc2n1C1OC(CO)C(O)C1O	CCCCNc1nc2c(=O)[nH]c(N)nc2n1C1OC(CO)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCN1C(=O)N(C)c2cc(OS(C)(=O)=O)ccc2C1O	CCCCN1C(=O)N(C)c2cc(OS(C)(=O)=O)ccc2C1O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(CC(=O)NCC(=O)N(C)c2ccc(C(C)C)cc2)o1	Cc1ccc(CC(=O)NCC(=O)N(C)c2ccc(C(C)C)cc2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCCC1C1CC2c3ccccc3Cc3ccccc3CN2O1	CN1CCCC1C1CC2c3ccccc3Cc3ccccc3CN2O1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1cccc(C(C)C)c1NC(=O)NCC1(c2nnnn2C)CC(C=Cc2ccccc2)=NO1	CC(C)c1cccc(C(C)C)c1NC(=O)NCC1(c2nnnn2C)CC(C=Cc2ccccc2)=NO1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C=C(NC(C)=O)C(=O)NC(Cc2ccccc2)C(=O)O)cc1	COc1ccc(C=C(NC(C)=O)C(=O)NC(Cc2ccccc2)C(=O)O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1N2C(=O)C(C(F)(F)F)C2C12C(=O)N(Cc1ccco1)c1ccccc12	CCOC(=O)C1N2C(=O)C(C(F)(F)F)C2C12C(=O)N(Cc1ccco1)c1ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ccc(C(=O)Nc2ccccc2-c2ccc(CN3CCCC(C(F)(F)F)C3)cc2)cc1C(F)(F)F	N#Cc1ccc(C(=O)Nc2ccccc2-c2ccc(CN3CCCC(C(F)(F)F)C3)cc2)cc1C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)CN1C(=O)CCC12CCCN(Cc1ccccc1)CC2	CCOC(=O)CN1C(=O)CCC12CCCN(Cc1ccccc1)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(C(=O)OC2CCN(C)CC2)c1	COc1cccc(C(=O)OC2CCN(C)CC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+](([O-])c1ccccc1-c1nn(-c2ccccc2)cc2c1CCS2	O=[N+](([O-])c1ccccc1-c1nn(-c2ccccc2)cc2c1CCS2	FALSE	TRUE	TRUE
CC(=O)OCCCNc1c(C=Cc2ccc(O)c(O)c2)n[nH]c1C(=O)O	CC(=O)OCCCNc1c(C=Cc2ccc(O)c(O)c2)n[nH]c1C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(Oc2ccc(C#N)cc2C(=O)Nc2nccn2Cc2ccco2)cc1	Cc1ccc(Oc2ccc(C#N)cc2C(=O)Nc2nccn2Cc2ccco2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCNC(=O)c1cc2c(=O)n3ccccc(C)c3nc2n(Cc2ccncc2)c1=N	CCNC(=O)c1cc2c(=O)n3ccccc(C)c3nc2n(Cc2ccncc2)c1=N	TRUE	TRUE	TRUE
COc1=CC2=C(C=C1)C(=O)C(C)C2	COc1ccc2c(c1)CC(C)C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2nc(N3CC(CF)C(c4ncccc4C)C3)nc(NC(C)C)c2cc1OC	COc1cc2nc(N3CC(CF)C(c4ncccc4C)C3)nc(NC(C)C)c2cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C=C(c2nc3ccccc3s2)C(=O)c2[nH]c(-c3ccccc3)n21	O=C1C=C(c2nc3ccccc3s2)C(=O)c2[nH]c(-c3ccccc3)n21	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1ccc(C(CC=C(Cl)Cl)c2ccc(N(C)C)cc2)c1	CN(O)c1ccc(C(CC=C(Cl)Cl)c2ccc(C(C)(C)C)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2nc(CN3CCCC(C(=O)O)C3)c(C)o2)cc1	COc1ccc(-c2nc(CN3CCCC(C(=O)O)C3)c(C)o2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCC(Cc1ccccc1)C(=O)NCC1ccccc1)NO	O=C(CCC(Cc1ccccc1)C(=O)NCC1ccccc1)NO	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+](([O-])c1ccc(Sc2nc(-c3ccccc3)c(-c3ccccc3)c([N+](=O)[O-])c2[N+](=O)[O-])cc1	O=[N+](([O-])c1ccc(Sc2nc(-c3ccccc3)c(-c3ccccc3)c([N+](=O)[O-])c2[N+](=O)[O-])cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOCCCN1CCN(S(=O)(=O)c2ccc(Cl)cc2)CC1	CCOCCCN1CCN(S(=O)(=O)c2ccc(Cl)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C(=O)NCC2cccc(N3CCCC3)n2)cc(O)C1OC	COc1cc(C(=O)NCC2cccc(N3CCCC3)n2)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1nc(C(=O)N2CC3CC2CN3S(=O)(=O)c2ccc(F)cc2Cl)c(O)c2ccccc12	N#Cc1nc(C(=O)N2CC3CC2CN3S(=O)(=O)c2ccc(F)cc2Cl)c(O)c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ccn2c(-c3ccccc3)c(-c3ccccc3)n2c1	N#Cc1ccn2c(-c3ccccc3)c(-c3ccccc3)n2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCCCc1ccc(NC(=O)CCCCCCCC(=O)Nc2ccc(-c3ccccc3S(N)(=O)=O)cc2)cc1	CN(C)CCCCc1ccc(NC(=O)CCCCCCCC(=O)Nc2ccc(-c3ccccc3S(N)(=O)=O)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCn1c(SCc2nc(-c3ccc(OC)c(OC)c3)no2)nc2ccccc2c1=O	COCCn1c(SCc2nc(-c3ccc(OC)c(OC)c3)no2)nc2ccccc2c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC12Cc3cnn(-c4ccc(NCCCCS(C)(=O)=O)ncn4)c3C=C1C1(C2)CC1	CC12Cc3cnn(-c4ccc(NCCCCS(C)(=O)=O)ncn4)c3C=C1C1(C2)C2	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCc1cc(C(C)=O)c(O)cc1OCC(C)C	CCCCCc1cc(C(C)=O)c(O)cc1OCC(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCNS(=O)(=O)c1ccc(N2CCN(C(=O)c3cncn3)CC2)c([N+](=O)[O-])c1	CCCCNS(=O)(=O)c1ccc(N2CCN(C(=O)c3cncn3)CC2)c([N+](=O)[O-])c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=Cc1ccco1)Nc1nncc(CSc2ccccc2Cl)s1	O=C(C=Cc1ccco1)Nc1nncc(CSc2ccccc2Cl)s1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(=O)c2nn(C)c3c2CS(=O)(=O)c2ccccc2-3)c(C)c1	Cc1ccc(NC(=O)c2nn(C)c3c2CS(=O)(=O)c2ccccc2-3)c(C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(CC2Cc3ccccc3O2)CC1	CN1CCN(CC2Cc3ccccc3O2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CC(=O)C1CCCC2C3CCC4CC(O)C(N5CCC(O)(O)C(C)C5)CC4(C)C3CCCC12C	CC(=O)C1CCCC2C3CCC4CC(O)C(N5CCC(O)(O)C(C)C5)CC4(C)C3CCCC12C	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cn(C2OC(COP(=O)(O)O)C(O)C2O)c(=O)[nH]c1=O	Cc1cn(C2OC(COP(=O)(O)O)C(O)C2O)c(=O)[nH]c1=O	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(NN=Cc1cccn1)c1ccc2ccccc2n1	O=C(NN=Cc1cccn1)c1ccc2ccccc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(NC(S)=NNC(=O)COc2ccc(F)cc2)ccc1NC(=O)c1ccccc1Cl	COc1cc(NC(S)=NNC(=O)COc2ccc(F)cc2)ccc1NC(=O)c1ccccc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
Fc1ccccc1Cc1nccc(-c2c[nH]c3ncccc23)n1	Fc1ccccc1Cc1nccc(-c2c[nH]c3ncccc23)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-n2c(=O)[nH]c3c(C)cc(C)cc3c2=O)cc1	Cc1ccc(-n2c(=O)[nH]c3c(C)cc(C)cc3c2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1NC(c2ccc(O)cc2)C(=O)C1=Cc1ccc(O)cc1	O=C1NC(c2ccc(O)cc2)C(=O)C1=Cc1ccc(O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1[nH]c2ccccc2c1C=NNC(=O)Cc1c(Cl)cncc1Cl	Cc1[nH]c2ccccc2c1C=NNC(=O)Cc1c(Cl)cncc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=C(C#N)C(O)(C(Cl)(Cl)Cl)N1C	CC1=C(C#N)C(O)(C(Cl)(Cl)Cl)N1C	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)C(=O)C1CCC2C3CCC4=CC(=O)(C)CCC4(C)C3CCCC12C	CC1=C(C#N)C(O)(C(Cl)(Cl)Cl)N1C	FALSE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(Nc2cc(C)nc3ccc4nc[nH]c4c23)cc1	Cc1ccc(Nc2cc(C)nc3ccc4nc[nH]c4c23)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1cc(l)c(O)c(Cl=O)C=Cc2ccc(Cl)cc2)c1	Cc1cc(l)c(O)c(Cl=O)C=Cc2ccc(Cl)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+][([O-])c1ccc(C(=C(OCcN2ccnc2)c2ccc(F)cc2F)n2cccc(O)2)cc1	O=[N+][([O-])c1ccc(C(=C(OCcN2ccnc2)c2ccc(F)cc2F)n2cccc2O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ccc(OCC(=NO)c2ccccc2Br)cc1	N#Cc1ccc(OCC(=NO)c2ccccc2Br)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1)c1nc3ccccc3c3cnc1c23	COc1ccc2c(c1)C1=Nc3ccccc3-c3cnc1c3-2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1nnc(NC(=O)CCC(=O)NC2CCCC2)s1	CC(C)(C)c1nnc(NC(=O)CCC(=O)NC2CCCC2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
N#CC1CCCN1C(=O)C1CCC(COC(N)=O)CC1	N#CC1CCCN1C(=O)C1CCC(COC(N)=O)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(O)CNC(=O)NCc1ccc(S(=O)(=O)C2CCOC2)cc1	CC(C)(O)CNC(=O)NCc1ccc(S(=O)(=O)C2CCOC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NOc1cccc2ccccc12)c1ccc2c(c1)nc(Cc1ccc(C(=O)NO)cc1)n2C1CCCCC1	O=C(NO)c1ccc(Cc2nc3cc(C(=O)NO)c4cccc5ccccc45)ccc3n2C2CCCCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCS(=O)(=O)c1nnc(N(Cc2cccs2)Cc2ccco2)s1	CCS(=O)(=O)c1nnc(N(Cc2ccco2)Cc2cccs2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1c(NC(=O)c2ccc([N+](=O)[O-])s2)sc2c1CCN(Cc1ccccc1)C2	NC(=O)c1c(NC(=O)c2ccc([N+](=O)[O-])s2)sc2c1CCN(Cc1ccccc1)C2	TRUE	TRUE	FALSE
COc1ccc2nc3sc4c(=O)n(-c5nccs5)cnc4c3cc2c1	COc1ccc2nc3sc4c(=O)n(-c5nccs5)cnc4c3cc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1NCc2nc(Sc3ccc(F)cc3F)ccc2N1c1c(Cl)cccc1Cl	O=C1NCc2nc(Sc3ccc(F)cc3F)ccc2N1c1c(Cl)cccc1Cl	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1ccc(Cl)cc1NC(=O)Nc1ccc(CC(=O)Nc2c(C)c(C)nn2-c2cccc(Cl)c2C)cc1	Cc1ccc(Cl)cc1NC(=O)Nc1ccc(CC(=O)Nc2c(C)c(C)nn2-c2cccc(Cl)c2C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)N(N=Nc1ccc(Br)cc1F)c1ccc(C(F)(F)F)cc1	COC(=O)N(N=Nc1ccc(Br)cc1F)c1ccc(C(F)(F)F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)c(S(=O)(=O)NC(CNC(=O)C2=NOC(CC(=O)NCCCc3ccccc3)C2)C(=O)O)c(C)C1	Cc1cc(C)c(S(=O)(=O)NC(CNC(=O)C2=NOC(CC(=O)NCCCc3ccccc3)C2)C(=O)O)c(C)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CC(=O)Nc2nc(N)n(Cc3ccc(C)cc3)n2)cc1	COc1ccc(CC(=O)Nc2nc(N)n(Cc3ccc(C)cc3)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nc2c(C)cc(C)nc2n1Cc1ccc(C(c2ccccc2)C(C(C)=O)C(=O)O)cc1	CCc1nc2c(C)cc(C)nc2n1Cc1ccc(C(c2ccccc2)C(C(C)=O)C(=O)O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1nnc2ccc(-c3ccccc3F)nn12	CC(C)c1nnc2ccc(-c3ccccc3F)nn12	TRUE	TRUE	TRUE
NCC(CC(=O)O)c1ccc(Cl)c(C=Cc2ccc(C(N)=NO)cn2)c1F	NCC(CC(=O)O)c1ccc(Cl)c(C=Cc2ccc(C(N)=NO)cn2)c1F	TRUE	TRUE	TRUE
CC1N=C(N)N=C(N)N1c1ccc(N)cc1	CC1N=C(N)N=C(N)N1c1ccc(N)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(N2CC3COC(C2)N3)nc(-n2nc(C)nc2C)n1	COc1cc(N2CC3COC(C2)N3)nc(-n2nc(C)nc2C)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COCC(=O)NC(C)Cc1ccc(C2CN(c3ccc(OCC4CC4)cc3)C2)cc1	COCC(=O)NC(C)Cc1ccc(C2CN(c3ccc(OCC4CC4)cc3)C2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(OC(F)(F)F)cc1)c1ccc(N(Cc2CC2)C2CC2)ncn1	O=C(Nc1ccc(OC(F)(F)F)cc1)c1cc(N(Cc2CC2)C2CC2)ncn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)n1nc(-c2cnc3ncccc3c2)c2c(N)ncnc21	CC(C)n1nc(-c2cnc3ncccc3c2)c2c(N)ncnc21	TRUE	TRUE	TRUE
OCC1OC(c2ccc(Cc3cc(C4OC(CO)C(O)C4O)ccc3Cl)c(Cl)cc2Cl)C(O)C(O)C1O	OCC1OC(c2ccc(Cl)c(Cc3cc(C4OC(CO)C(O)C4O)c(Cl)cc3Cl)c2)C(O)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
N#CC(=Cc1cc(O)c(O)c(O)c1)C(=O)Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1	N#CC(=Cc1cc(O)c(O)c(O)c1)C(=O)Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc(NC(=O)c2ccc(NC(=O)c3cc(NC(=O)c4cnn5ccnc45)cn3C)cc2)cc1C(=O)NCCC(=N)N	Cn1cc(NC(=O)c2ccc(NC(=O)c3cc(NC(=O)c4cnn5ccnc45)cn3C)cc2)cc1C(=O)NCCC(=N)N	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1CN(C)C(=O)c1ccc(NC(=O)Cc2ccc(Cl)cc2)cc1	COc1ccccc1CN(C)C(=O)c1ccc(NC(=O)Cc2ccc(Cl)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc2ccnc2c(=O)n1-c1ccc(Oc2cccc(C(=O)NCCO)c2)cc1	Cc1nc2ccnc2c(=O)n1-c1ccc(Oc2cccc(C(=O)NCCO)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C1C2CCC(O2)C1C(=O)Nc1ccc(Cc2ccccc2)cc1	O=C(O)C1C2CCC(O2)C1C(=O)Nc1ccc(Cc2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)OC1CC2C(C1)C1(C)CCC3C(C)(C)C(OC(=O)c4ccoc4)CCC3(C)C13CC23	CC(=O)OC1CC2C(C1)C1(C)CCC3C(C)(C)C(OC(=O)c4ccoc4)CCC3(C)C13CC23	TRUE	TRUE	TRUE
C(=CC1CCC[N+])1(CCCc1ccccc1)CCN(Cc1ccccc1)CCN1CCOCC1)c1ccccc1	C(=CC1CCC[N+])1(CCCc1ccccc1)CCN(CCN1CCOCC1)C1ccccc1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)CCn1c(=S)[nH]c2cc(C)ccc2c1=O	CCN(CC)CCn1c(=S)[nH]c2cc(C)ccc2c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)Cc1nn(-c2ccc(OC)cc2)c(=O)c2c1c1cc(Cl)ccc1n2OCC1csc(C)n1	CCOC(=O)Cc1nn(-c2ccc(OC)cc2)c(=O)c2c1c1cc(Cl)ccc1n2OCC1csc(C)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1cc(S(=O)(=O)N2CCOCC2)ccc1O	O=C(O)c1cc(S(=O)(=O)N2CCOCC2)ccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCOC(=O)c1cnc(NC(=O)CCc2ccc(OC)c(OC)c2)s1	CCCCOC(=O)c1cnc(NC(=O)CCc2ccc(OC)c(OC)c2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCc1ncc(CN2CCc3sccc3C2)cn1	COCCc1ncc(CN2CCc3sccc3C2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCCCN1C(=O)COC(=O)CCCN1=NS(=O)(=O)c2ccc([N+](=O)[O-])cc21	CC1CCCCN1C(=O)COC(=O)CCCN1=NS(=O)(=O)c2ccc([N+](=O)[O-])cc21	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1ccc(-c2nc(N3CCOCC3)nc(-n3cc4ccccc4n3)n2)cc1	CN(C)c1ccc(-c2nc(N3CCOCC3)nc(-n3cc4ccccc4n3)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)Cn1c(=O)sc2cc(S(=O)(=O)N3CCCC3)ccc21	NC(=O)Cn1c(=O)sc2cc(S(=O)(=O)N3CCCC3)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1ccc(N2CCOCC2)cc1Cl	Clc1ccc(N2CCOCC2)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Cl)CCOS(=O)(=O)O)cc1	COc1ccc(Cl)CCOS(=O)(=O)O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NS(=O)(=O)c1cc2nc(-c3ccco3)oc2cc1Cl	NS(=O)(=O)c1cc2nc(-c3ccco3)oc2cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2nccc(OC3ccc(NC(=O)Nc4cc(C)ccc4F)cc3)c2cc1OC	COc1cc2nccc(OC3ccc(NC(=O)Nc4cc(C)ccc4F)cc3)c2cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1NC(=S)NCC(C)(C)CN1CCOCC1	COc1ccccc1NC(=S)NCC(C)(C)CN1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ccc(-c2csc3c(C(=O)NCc4ccccc4)cnc(N4CCN5CCCC5C4)c23)cc1	Nc1ccc(-c2csc3c(C(=O)NCc4ccccc4)cnc(N4CCN5CCCC5C4)c23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(CS)CCN(Cc1ccccc1)C(=O)C(N)CCNC(=S)NCC(=O)O	NC(CS)CCN(Cc1ccccc1)C(=O)C(N)CCNC(=S)NCC(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
NCCCCCNc1n[nH]c(O)n1	NCCCCCNc1n[nH]c(O)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1ccc(C(=O)NN=Cc2ccnc2)s1	CC(C)(C)c1ccc(C(=O)NN=Cc2ccnc2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c2c(nn1-c1ccccc1)CS(=O)(=O)C2	Cc1c2c(nn1-c1ccccc1)CS(=O)(=O)C2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CNC(=O)c1ccccc(F)c1)NC1CCN(C2CCN(c3ccccc3)CC2)CC1	O=C(CNC(=O)c1ccccc(F)c1)NC1CCN(C2CCN(c3ccccc3)CC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COCc1cccc(-c2ccc3c(c2)CCC32N=C(N)N(C)C2=O)c1	COCc1cccc(-c2ccc3c(c2)CCC32N=C(N)N(C)C2=O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1ccc(C2(CNC(=O)COc3ccc(C(C)(C)C)cc3)CCCC2)cc1	CC(C)c1ccc(C2(CNC(=O)COc3ccc(C(C)(C)C)cc3)CCCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NN=Cc1ccc(O)c(O)c1)NC12CC3CC(C(C3)C1)C2	O=C(NN=Cc1ccc(O)c(O)c1)NC12CC3CC(C(C3)C1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCCCN1CCN(c2cccc(Cl)c2)CC1)Nc1ccc2cnccc2c1	O=C(CCCCN1CCN(c2cccc(Cl)c2)CC1)Nc1ccc2cnccc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC(=O)Nc1nnc(CC)s1	CCCCC(=O)Nc1nnc(CC)s1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(Cl)ccc1C=CC(=O)NCCc1ccc(O)cc1	COc1cc(Cl)ccc1C=CC(=O)NCCc1ccc(O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nc2c(C)cc(C)nc2n1Cc1ccc(-c2cccc(OP(=S)(O)O)c2)cc1	CCc1nc2c(C)cc(C)nc2n1Cc1ccc(-c2cccc(OP(O)(O)=S)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)=CN1C(=O)SC(=Cc2ccc(S(=O)(=O)N3CCCCC3)cc2)C1=O	CC(C)=CN1C(=O)SC(=Cc2ccc(S(=O)(=O)N3CCCCC3)cc2)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(CN(CCCc2ccccc2)CCc2cncc2)cc1	Cc1ccc(CN(CCCc2ccccc2)CCc2cncc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1sc2nc(SC(F)(F)C(F)F)nc(O)c2c1C	Cc1sc2nc(SC(F)(F)C(F)F)nc(O)c2c1C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1ccccc(NCCCCCCCCCCCCCNc1=O)c2ccc(O)cc2)c1O	O=C(NCCCCCCCCCCCCCCCNc1ccc(C(=O)O)c1O)c1ccc(O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=P(O)(O)CCCP(=O)(O)O	O=P(O)(O)CCCP(=O)(O)O	TRUE	TRUE	FALSE
CNCC1ccc(-c2ccc3c(c2)CCN3C(=O)c2ccc(O)cc2O)cc1	CNCC1ccc(-c2ccc3c(c2)CCN3C(=O)c2ccc(O)cc2O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(CNc1nc(-c2cncnc2)nc2c(Cc3ccc(F)c(F)c3)scs12)Cc1c[nH]c2ccccc12	NC(CNc1nc(-c2cncnc2)nc2c(Cc3ccc(F)c(F)c3)scs12)Cc1c[nH]c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(F)cc1)N1CCN2C(=O)OC(c3ccccc3)(c3ccccc3)C12	O=C(Nc1ccc(F)cc1)N1CCN2C(=O)OC(c3ccccc3)(c3ccccc3)C12	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(CCC)C1CCc2c(F)cccc2C1	CCCN(CCC)C1CCc2c(F)cccc2C1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1ccc(-c2nc3n(n2)CCN(C(=O)c2cccn2)C3)cc1	CC(C)(C)c1ccc(-c2nc3n(n2)CCN(C(=O)c2cccn2)C3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cn1c(SCC(=O)N2CCCc3ccccc32)nc2ccccc21)NCc1ccc2c(c1)OCO2	O=C(Cn1c(SCC(=O)N2CCCc3ccccc32)nc2ccccc21)NCc1ccc2c(c1)OCO2	TRUE	TRUE	TRUE
CCCc1cc(=O)oc2cc(OC(=O)NCCC(=O)NCc3ccccc(Cl)c3)c(Cl)cc12	CCCc1cc(=O)oc2cc(OC(=O)NCCC(=O)NCc3ccccc(Cl)c3)c(Cl)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN1CCc2ccccc3c2C1Cc1cccc(C=O)c1-3	CCCN1CCc2ccccc3c2C1Cc1cccc(C=O)c1-3	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(NC(=O)NC2CCCCCC2)c1C	Cc1cccc(NC(=O)NC2CCCCCC2)c1C	TRUE	TRUE	FALSE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
N=C(N)NCCCC(NC(=O)Cc1cccc(-c2ccccc2)c1)C(=O)NC(CCCCN)C(=O)NC(C(N)=O)c1cccc1	N=C(N)NCCCC(NC(=O)Cc1cccc(-c2ccccc2)c1)C(=O)NC(CCCCN)C(=O)NC(C(N)=O)c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCGn1cc(NCc2nnc(SCc3cc(C)c(C)c3)o2)cn1	CCGn1cc(NCc2nnc(SCc3cc(C)c(C)c3)o2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(=O)SCCCCCC(CN1CCCC1)SCC(CCCC(=O)O)SCC(N)C(=O)O	CC(C)C(=O)SCCCCCC(CN1CCCC1)SCC(CCCC(=O)O)SCC(N)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C(=O)c1noc(-c2cc(OCc3CCCC3)c(OCc3CCCC3)cc2Cl)c1C#CC(N)C(C)C	CN(C(=O)c1noc(-c2cc(OCc3CCCC3)c(OCc3CCCC3)cc2Cl)c1C#CC(N)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1nnn(-c2nonc2N)c1CSc1nc2ccccc2s1	CCOC(=O)c1nnn(-c2nonc2N)c1CSc1nc2ccccc2s1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2n[nH]c(SCC(=O)N3N=C(C(F)(F)F)CC3c3ccc(C)cc3)n2)cc1	COc1ccc(-c2n[nH]c(SCC(=O)N3N=C(C(F)(F)F)CC3c3ccc(C)cc3)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(C2c3c(-c4ccccc4O)n[nH]c3C(=O)N2Cc2ccoc2)cc1	CCOc1ccc(C2c3c(-c4ccccc4O)n[nH]c3C(=O)N2Cc2ccoc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCGn1nc(C)n(-c2cnc3ccccc3c2)c1=O	CCGn1nc(C)n(-c2cnc3ccccc3c2)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC(O)CCCCCCCCC(O)C1CCC(C2CCC(C)O)CCCCC(O)CCCCC(O)CC3=CC(C)OC3=O)O2)O1	CCCC(O)CCCCCCCCC(O)C1CCC(C2CCC(C)O)CCCCC(O)CCCCC(O)CC3=CC(C)OC3=O)O2)O1	TRUE	TRUE	TRUE
NCCCc1cn(S(=O)(=O)c2ccccc2)c2ccccc12	NCCCc1cn(S(=O)(=O)c2ccccc2)c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=Cc1ccccc1)Nc1c2c(nn1-c1ccccc1)CCSC2	O=C(C=Cc1ccccc1)Nc1c2c(nn1-c1ccccc1)CCSC2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cncc(C=NNC(=O)CCC(=O)NC2CCCC2)c1O	Cc1cncc(C=NNC(=O)CCC(=O)NC2CCCC2)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(CN)cc(Br)c1OCc1cccc([N+])(=O)[O-])c1	COc1cc(CN)cc(Br)c1OCc1cccc([N+])(=O)[O-])c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)cc(C(=O)N2CCC(Nc3ccc4[nH]c5ncccc5c4c3)C2)c1	Cc1cc(C)cc(C(=O)N2CCC(Nc3ccc4[nH]c5ncccc5c4c3)C2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1c(SCC(=O)N2CCOCC2)oc(-c2ccccc2)c1-c1ccccc1	N#Cc1c(SCC(=O)N2CCOCC2)oc(-c2ccccc2)c1-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC(NC(=O)C1CC2CN1C(=O)C(C(C)(C)C)NC(=O)CCCCc1cccc(c1)OCCC(C)(C)Oc1cccc(c1)CCN2C)C(=O)C(=O)NCC(=O)O	CCCC(NC(=O)C1CC2CN1C(=O)C(C(C)(C)C)NC(=O)CCCCc1cccc(c1)OCCC(C)(C)Oc1cccc(c1)CCN2C)C(=O)C(=O)NCC(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(N)C(=O)NC(COCc1ccccc1)c1nnnn1CCCCCO	CC(C)(N)C(=O)NC(COCc1ccccc1)c1nnnn1CCCCCO	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1C(=Cc2sc3ccccc3[n+] 2C)Sc2ccccc21	CCN1C(=Cc2sc3ccccc3[n+] 2C)Sc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCc1ccc2nc(SCC(=O)N3CCCCC3CCO)n(-c3ccccc3)c(=O)c2c1	CCCCc1ccc2nc(SCC(=O)N3CCCCC3CCO)n(-c3ccccc3)c(=O)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2ncon2)c(Nc2ncc3ccc(=O)n(-c4ccccc4Cl)c3n2)c1	COc1ccc(-c2ncon2)c(Nc2ncc3ccc(=O)n(-c4ccccc4Cl)c3n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C=CC2C(=O)O)cc2c1	COc1ccc(C=CC2C(=O)O)cc2c1	FALSE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1=C(C)N(Cc2nc3ccccc3[nH]2)C(=O)NC1c1ccc(Cl)cc1	CCOC(=O)C1=C(C)N(Cc2nc3ccccc3[nH]2)C(=O)NC1c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(C(=O)Nc2c(C)ccccc2C)Cc2c[nH]c3ccccc23)cc1	COc1ccc(C(C(=O)Nc2c(C)ccccc2C)Cc2c[nH]c3ccccc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1c(-c2cccc(C(F)(F)F)c2)nc2nc(OC3ccc(F)cc3)nc2n1CC1CCCO1	O=c1c(-c2cccc(C(F)(F)F)c2)nc2nc(OC3ccc(F)cc3)nc2n1CC1CCCO1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)c1ccc(S(=O)(=O)N2CCCC2)cc1	CC(=O)c1ccc(S(=O)(=O)N2CCCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC(Sc1nncc(-c2ccc(OC)cc2)n1Cc1ccccc1)C(=O)Nc1ccc(C(=O)OC)cc1	CCCC(Sc1nncc(-c2ccc(OC)cc2)n1Cc1ccccc1)C(=O)Nc1ccc(C(=O)OC)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CCC(c2c[nH]c3ccc(Br)cc23)=NN1	O=C1CCC(c2c[nH]c3ccc(Br)cc23)=NN1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc1NC(=O)CSc1nc2c(c(=O)[nH]1)CCCC2	Cc1ccccc1NC(=O)CSc1nc2c(c(=O)[nH]1)CCCC2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C=C2CCc3c2nc(N)c(C=O)c3-c2ccc(-c3ccccc3)cc2)c(O)c(O)c1O	Cc1cc(C=C2CCc3c2nc(N)c(C=O)c3-c2ccc(-c3ccccc3)cc2)c(O)c(O)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(CCNC(=O)CNC(=O)C2CCN(C(=O)c3ccco3)CC2)cc1	Cc1ccc(CCNC(=O)CNC(=O)C2CCN(C(=O)c3ccco3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1ccc(C(Cl)(c2ccccc2)N2CCNCC2)cc1Cl	Clc1ccc(C(Cl)(c2ccccc2)N2CCNCC2)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCGn1cnc2ccccc2c1=O	CCCCGn1cnc2ccccc2c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ncs1)c1cc(C2CCCCN2S(=O)(=O)c2ccccc2)on1	O=C(Nc1ncs1)c1cc(C2CCCCN2S(=O)(=O)c2ccccc2)on1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ncc(-c2cc3c(n2C(C)C)C(c2ccc(Cl)cc2)N(c2cc(Cl)c(=O)n(C)c2)C3=O)c(OC)n1	COc1ncc(-c2cc3c(n2C(C)C)C(c2ccc(Cl)cc2)N(c2cc(Cl)c(=O)n(C)c2)C3=O)c(OC)n1	TRUE	TRUE	FALSE
CCCCCCCCC=CCCCCCCCCOc1c(OC)cc(C=Cc2ccc3ncc4cccc5ccc2c3c45)cc1OC	CCCCCCCCC=CCCCCCCCCOc1c(OC)cc(C=Cc2ccc3ncc4cccc5ccc2c3c45)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=NC2(c3ccc(F)cc3)CN(C(C)C)CC2CS1	CC1=NC2(c3ccc(F)cc3)CN(C(C)C)CC2CS1	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1cccc(C=NNc2ncc(Cl)cc2Cl)c1O	Oc1cccc(C=NNc2ncc(Cl)cc2Cl)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
CNc1nccn2c(-c3cccc(NC(O)=Nc4cc(Cl)ccc4C)c3)cnc12	CNc1nccn2c(-c3cccc(NC(O)=Nc4cc(Cl)ccc4C)c3)cnc12	TRUE	TRUE	TRUE
NC(CCP(=O)(O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)OCc1ccccc1)C(=O)O	NC(CCP(=O)(O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)OCc1ccccc1)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1Nc2ccc(Cl)cc2C1=C1Nc2ccccc2C1=O	O=C1Nc2ccc(Cl)cc2C1=C1Nc2ccccc2C1=O	TRUE	TRUE	FALSE
O=C1N(CCCCN2CCN(c3nsc4ccccc34)CC2)CCN1Cc1cccc(Cl)c1	O=C1N(CCCCN2CCN(c3nsc4ccccc34)CC2)CCN1Cc1cccc(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2nnc(Nc3nc(-c4ccc(OC)c(OC)c4)cs3)o2)cc1	COc1ccc(-c2nnc(Nc3nc(-c4ccc(OC)c(OC)c4)cs3)o2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(c1cc(C(N)=O)cc2nc(Nc3ccc(N4CCOCC4)cc3)cc(=O)n12)N1CCN(C)CC1	CC(c1cc(C(N)=O)cc2nc(Nc3ccc(N4CCOCC4)cc3)cc(=O)n12)N1CCN(C)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(CN2C(=O)N(c3cnn(Cc4c(C)noc4C)c3)C(=O)C2(C)C)c1Br	COc1cccc(CN2C(=O)N(c3cnn(Cc4c(C)noc4C)c3)C(=O)C2(C)C)c1Br	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(=S)NC(=O)CSc2nncn2-c2ccccc2Cl)cc1	Cc1ccc(NC(=S)NC(=O)CSc2nncn2-c2ccccc2Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)OC(=O)C1=C(N)Oc2c(oc(CO)cc2=O)C1c1ccc2c(c1)OCO2	CC(O)OC(=O)C1=C(N)Oc2c(oc(CO)cc2=O)C1c1ccc2c(c1)OCO2	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC1OC(=O)C(C)C(OC2OC(C)CC(N(C)C)C2O)C(C)(OC)CC(C)C(=NOCCNCCO)C(C)C2=NCCN21	CCCC1OC(=O)C(C)C(OC2OC(C)CC(N(C)C)C2O)C(C)(OC)CC(C)C(=NOCCNCCO)C(C)C2=NCCN21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(Nc2ccccc2)c2cc(NC(=O)c3ccc(OC(F)(F)F)cc3)ccc2n1	Cc1cc(Nc2ccccc2)c2cc(NC(=O)c3ccc(OC(F)(F)F)cc3)ccc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1)Nc1cnccc1-n1ccccc1	O=C(Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1)Nc1cnccc1-n1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(-c2ccncc2)cn2ccc(-c3ccc(NC(=O)Cc4ccccc4)cc3)nc12	Cc1cc(-c2ccncc2)cn2ccc(-c3ccc(NC(=O)Cc4ccccc4)cc3)nc12	TRUE	TRUE	TRUE
c1cc(-c2nnc3n2CCCC3)cc(-c2ccc(-c3nc4ccccc4[nH]3)cc2)c1	c1cc(-c2ccc(-c3nc4ccccc4[nH]3)cc2)cc(-c2nnc3n2CCCC3)c1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCn1cc(C(=O)O)c(=O)c2cc(F)c(N3CCN(C(=O)C4CC4)CC3)cc21	C=CCn1cc(C(=O)O)c(=O)c2cc(F)c(N3CCN(C(=O)C4CC4)CC3)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
CN=C(O)Nc1ccc(-c2cc(C#N)ccc2C)cc1	CN=C(O)Nc1ccc(-c2cc(C#N)ccc2C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2(c3cn(C)c4ccccc34)NC(=N)N(C3CCOCC3)C2=O)cc1	COc1ccc(C2(c3cn(C)c4ccccc34)NC(=N)N(C3CCOCC3)C2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)OCc1ccccc1)B(O)O	CC(C)CC(NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)OCc1ccccc1)B(O)O	TRUE	FALSE	FALSE
CCC(=O)C1(c2ccccc2)CCN(CCCCN2C(=O)c3ccccc3C2=O)CC1	CCC(=O)C1(c2ccccc2)CCN(CCCCN2C(=O)c3ccccc3C2=O)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCOCOc1c(OC)cc2c3c1-c1cc4c(cc1C3CN(C)CC2)OCO4	CCCCCOCOc1c(OC)cc2c3c1-c1cc4c(cc1C3CN(C)CC2)OCO4	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2ccccc(CCN(C(=O)C(CS)NC(C)=O)c2c1	COc1ccc2ccccc(CCN(C(=O)C(CS)NC(C)=O)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCCC(C)N1CCNC(=O)c1cc2c(=O)n3ccccc3nc2s1	CC1CCCC(C)N1CCNC(=O)c1cc2c(=O)n3ccccc3nc2s1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nc(N2CCN(Cc3ccc(OC)cc3)NC2=O)ncc1F	CCc1nc(N2CCN(Cc3ccc(OC)cc3)NC2=O)ncc1F	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C(=O)C(N)CN=C(S)Nc1cccc(Br)c1C	CO(C(=O)C(N)CN=C(S)Nc1cccc(Br)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(C(CNC(=O)C(=O)N(C(C)(C)C)c2ccc(Cl)ccc2O)CC1	CN1CCN(C(CNC(=O)C(=O)N(C(C)(C)C)c2ccc(Cl)ccc2O)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCNc1nnc2c1nnc2CCNc1ccc(OC)cc1	CCCCNc1nnc2c1nnc2CCNc1ccc(OC)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
OC1CCN(Cc2ccc3c(c2)Cc2c(-c4csc(C5CCCC5)c4)n[nH]c2-3)CC1	OC1CCN(Cc2ccc3c(c2)Cc2c(-c4csc(C5CCCC5)c4)n[nH]c2-3)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
NO	NO	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c3c(c(=O)oc2c1)CC[N+](C)(CC(C)C)CC3	COc1ccc2c3c(c(=O)oc2c1)CC[N+](C)(CC(C)C)CC3	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NNC(=O)c1ccccc1O)c1ccncc1	O=C(NNC(=O)c1ccccc1O)c1ccncc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCN(c2nc3c(s2)C(=O)c2ccccc2C3=O)CC1	CC1CCN(c2nc3c(s2)C(=O)c2ccccc2C3=O)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1c(C)ccc(Cn2c(NCCCCO)nc3c2c(=O)n(C)c(=O)n3C)cc1C	COc1c(C)ccc(Cn2c(NCCCCO)nc3c2c(=O)n(C)c(=O)n3C)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)N(C(=O)N1CCn2c1nc1ccccc12)c1ccc(F)cc1	CS(=O)(=O)N(C(=O)N1CCn2c1nc1ccccc12)c1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(Cc1ccccc1)C(=O)c1cc(COc2c(F)cccc2F)on1	CN(Cc1ccccc1)C(=O)c1cc(COc2c(F)cccc2F)on1	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1ccc(CNCCCNc2nc(NCc3ccccc3)nc3c2nnc3CCCCO)cc1	OCCCNc1cnc2c(NCCCNc3ccc(Cl)cc3)nc(NCc3ccccc3)nc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCc1nc2cccc(C(=O)N3CCC(O)(c4ccc(OC(F)(F)F)cc4)CC3)c2n1Cc1ccc(-c2ccccc2-c2nnn[nH]2)cc1	CCCCc1nc2cccc(C(=O)N3CCC(O)(c4ccc(OC(F)(F)F)cc4)CC3)c2n1Cc1ccc(-c2ccccc2-c2nnn[nH]2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CSC(=S)SCCCC(=O)O	CSC(=S)SCCCC(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CN(Cc2ccc(OC)cc2)S(=O)(=O)c2ccc(Br)cc2)cc1	COc1ccc(CN(Cc2ccc(OC)cc2)S(=O)(=O)c2ccc(Br)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1C(=O)N(C(=O)c2ccco2)C2CCN(C(=O)C3CCC3)C12	CC1C(=O)N(C(=O)c2ccco2)C2CCN(C(=O)C3CCC3)C12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccn(CC2CCCN2Cc2nc(-c3ccc(C)nc3)no2)n1	Cc1ccc(-c2noc(CN3CCCC3Cn3ccc(C)n3)n2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1c2cccc(Cl)c2C(=O)N1Cc1cc(F)ccc1F	O=C1c2cccc(Cl)c2C(=O)N1Cc1cc(F)ccc1F	TRUE	TRUE	TRUE
OS(=O)(=O)Nc1ccc(-c2ccc(C=C3OCc4ccc(O)cc4C3=O)cc2)cc1	O=C1C(=Cc2ccc(-c3ccc(NS(=O)(=O)O)cc3)cc2)Oc2ccc(O)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCOc1cc(NC(=O)NCCCC)ccc1-c1nc2c(C)nn(C)c2o1	CCCCOc1cc(NC(=O)NCCCC)ccc1-c1nc2c(C)nn(C)c2o1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NCC1CN(c2ccc(N(Cc(C)=O)C(C)=O)c(F)c2)C(=O)O1	CC(=O)N(C(C)=O)c1ccc(N2CC(CNC(C)=O)OC2=O)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
NC(Cc1ccccc1)C(=O)Nc1ccc(C(=O)C=Cc2ccc(Cl)cc2)cc1	NC(Cc1ccccc1)C(=O)Nc1ccc(C(=O)C=Cc2ccc(Cl)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(C)C(O)=Nc1ccc(-c2c(-c3cncnc3)nc3cccn23)c(C#Cc2ccc3cc(Cl)cnc3c2)n1	CNC(C)C(O)=Nc1ccc(-c2c(-c3cncnc3)nc3cccn23)c(C#Cc2ccc3cc(Cl)cnc3c2)n1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>Cc1ccc(S(=O)(=O)NC(c2cccs2)C(C(=O)OC(C)(C)C)c2ccccc2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(S(=O))(=O)NC(c2cccs2)C(C(=O)OC(C)(C)C)c2ccccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCNC(=O)C(CC(N)=O)NC(=O)C(C)(C)NS(=O)(=O)c1ccc(-c2ccccc2)cc1</chem>	<chem>CCCCNC(=O)C(CC(N)=O)NC(=O)C(C)(C)NS(=O)(=O)c1ccc(-c2ccccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1Sc2ccc(F)cc2NC1=CC(=O)c1ccccc1</chem>	<chem>O=C1Sc2ccc(F)cc2NC1=CC(=O)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Cc1c(Cl)cccc1Cl)Nc1cccc2ncccc12</chem>	<chem>O=C(Cc1c(Cl)cccc1Cl)Nc1cccc2ncccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOc1cc(CN(C)C)ccc1OCc1nc(C(C)C(C)C)no1</chem>	<chem>CCOc1cc(CN(C)C)ccc1OCc1nc(C(C)C(C)C)no1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NC1CCCC1)C1CCN(c2nnc(-n3ccccc3)s2)CC1</chem>	<chem>O=C(NC1CCCC1)C1CCN(c2nnc(-n3ccccc3)s2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1CNC(=O)c2c1cc(-c1cccc(Cl)c1)c1nc3ccc(Br)cc3nc21</chem>	<chem>O=C1CNC(=O)c2c1cc(-c1cccc(Cl)c1)c1nc3ccc(Br)cc3nc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)C1=CC(C(=O)OC)C2C3=C(C(=O)C2(C)C1=O)C1(CC3OC)C(=O)OC2C(C)OC(=O)C(OC(=O)c1c(=O)OC2C</chem>	<chem>COC(=O)C1=CC(C(=O)OC)C2C3=C(C(=O)C2(C)C1=O)C1(CC3OC)C(=O)OC2C(C)OC(=O)C(OC(=O)c1c(=O)OC2C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc2c(c1)c(-c1ccc3c(c1)CCC3)c(C(=O)O)n2Cc1ccccc1</chem>	<chem>Cc1ccc2c(c1)c(-c1ccc3c(c1)CCC3)c(C(=O)O)n2Cc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CN(C(C)CO)C(=O)Cc2cc(NC(=O)CCc3ccccc3)ccc2OC1CN(C)Cc1ccc(-c2ccccc2)cc1</chem>	<chem>CC1CN(C(C)CO)C(=O)Cc2cc(NC(=O)CCc3ccccc3)ccc2OC1CN(C)Cc1ccc(-c2ccccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1cc(-c2ccccc2)ccc1O)c1csc(N=C(S)Nc2ccccc2)n1</chem>	<chem>O=C(Nc1cc(-c2ccccc2)ccc1O)c1csc(N=C(S)Nc2ccccc2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(Nc1ncc(F)c(N2C(=O)OCC2C(C)C)n1)c1nc(-c2ccccc2)ns1</chem>	<chem>CC(Nc1ncc(F)c(N2C(=O)OCC2C(C)C)n1)c1nc(-c2ccccc2)ns1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>OC(=Cc1ccccc1)c1ccc(OC(C)O)=NC2CCc3ccccc32)cc1</chem>	<chem>OC(=Cc1ccccc1)c1ccc(OC(C)O)=NC2CCc3ccccc32)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(C)C(=O)CCCC(C)C1CCC1(C)C(CCC(F)C1(C)O)C2N(C(=O)NC(=O)c1ccccc1)c1ccc(F)cc1</chem>	<chem>CC1(C)C(=O)CCCC(C)C1CCC1(C)C(CCC(F)C1(C)O)C2N(C(=O)NC(=O)c1ccccc1)c1ccc(F)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Cn1nnc(-c2ccccc2)n1)N1CCNC(=O)C1</chem>	<chem>O=C1CN(C(=O)Cn2nnc(-c3ccccc3)n2)CCN1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=C1CC23C(=O)C(O)C4C(C)C(C)C(OC(O)C4(C)C2CCC1C3OC(=O)c1ccc(Cl)s1</chem>	<chem>C=C1CC23C(=O)C(O)C4C(C)C(C)C(OC(O)C4(C)C2CCC1C3OC(=O)c1ccc(Cl)s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)c1cccc(Cc2cnc3nc(Cl)c(N)cc3c2N)c1</chem>	<chem>COC(=O)c1cccc(Cc2cnc3nc(Cl)c(N)cc3c2N)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>#CCOCCOCCOCCNCc1nc(N2CCN(C(=O)C(Cc3ccc(O)cc3)N(C)C(=O)C(C)NC(=O)OCc3ccccc3)CC2)nc(N2CCN(C(=O)C(C)C)CCn3cc(CCCN)nn3)CC2)n1</chem>	<chem>#CCOCCOCCOCCNCc1nc(N2CCN(C(=O)C(Cc3ccc(O)cc3)N(C)C(=O)C(C)NC(=O)OCc3ccccc3)CC2)nc(N2CCN(C(=O)C(C)C)CCn3cc(CCCN)nn3)CC2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nc2ccc(NS(=O)(=O)c3ccc(Cl)c(Cl)c3)cc2s1</chem>	<chem>Cc1nc2ccc(NS(=O))(=O)c3ccc(Cl)c(Cl)c3)cc2s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#Cc1ccc(Cl)c2ccc(C#N)cc2)n2ccnc2)cc1</chem>	<chem>N#Cc1ccc(Cl)c2ccc(C#N)cc2)n2ccnc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CCCCOC(=O)NS(=O)(=O)c1sc(Cc(C)C)cc1-c1ccc(Cn2cncn2)cc1</chem>	<chem>CCCCOC(=O)NS(=O))(=O)c1sc(Cc(C)C)cc1-c1ccc(Cn2cncn2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCNCNC1CCc2ccc(F)cc2C1C</chem>	<chem>CCNCNC1CCc2ccc(F)cc2C1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC1C(CO)OC(N2C(C(=O)O)=Cc3ccccc3C2c2ccc3c(c2)OCO3)C(OC)C1O</chem>	<chem>COC1C(CO)OC(N2C(C(=O)O)=Cc3ccccc3C2c2ccc3c(c2)OCO3)C(OC)C1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)n1cc(C(=O)c2cncc(NC(=O)Cn3ncnc3)c2)c2cncnc21</chem>	<chem>CC(C)n1cc(C(=O)c2cncc(NC(=O)Cn3ncnc3)c2)c2cncnc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c(C2CCCN(C(=O)CN(C)C)C2)sc(-c2ncc(CO)s2)c1C</chem>	<chem>Cc1c(-c2ncc(CO)s2)sc(C2CCCN(C(=O)CN(C)C)C2)c1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN1C(=O)C(C)(C#N)Oc2cc(NS(=O)(=O)c3ccc(Cl)cc3)ccc21</chem>	<chem>CN1C(=O)C(C)(C#N)Oc2cc(NS(=O)(=O)c3ccc(Cl)cc3)ccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc(-c2nc(-c3ccccc3)n(-c3ccnc3)n2)cc1</chem>	<chem>c1ccc(-c2nc(-c3ccccc3)n(-c3ccnc3)n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Cc1cccc(OC2ccccc2)c1)NC1CCCNc1=O</chem>	<chem>O=C(Cc1cccc(OC2ccccc2)c1)NC1CCCNc1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CS(=O)(=O)Nc1ccc(O)c(-c2csc(NC(=O)c3ccc([N+](=O)[O-])o3)n2)c1</chem>	<chem>CS(=O)(=O)Nc1ccc(O)c(-c2csc(NC(=O)c3ccc([N+](=O)[O-])o3)n2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(NP(=O)(O)O)C(=O)Nc1sc(-c2ccc(F)cc2)cc1C(=O)NC(CC(=O)O)C(=O)COCc1c(Cl)cc(C(F)(F)F)cc1Cl</chem>	<chem>CC(NP(=O)(O)O)C(=O)Nc1sc(-c2ccc(F)cc2)cc1C(=O)NC(CC(=O)O)C(=O)COCc1c(Cl)cc(C(F)(F)F)cc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC)CCOc1ccc2cc3ccc4cccc4c3nc2c1</chem>	<chem>CCN(CC)CCOc1ccc2cc3ccc4cccc4c3nc2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CCCN1C(=O)CSc1nnc(CSc2nnc(-c3ccccc3)n2-c2ccccc2)n1C</chem>	<chem>CC1CCCN1C(=O)CSc1nnc(CSc2nnc(-c3ccccc3)n2-c2ccccc2)n1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Clc1ccccc1Cc1noc(CN2CCCCC2)n1</chem>	<chem>Clc1ccccc1Cc1noc(CN2CCCCC2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)n1c(-c2ccc(C#N)cc2)nnc1C12CCC(c3nc(-c4ccc(F)c(Cl)c4)no3)(CC1)CC2</chem>	<chem>CC(C)n1c(-c2ccc(C#N)cc2)nnc1C12CCC(c3nc(-c4ccc(F)c(Cl)c4)no3)(CC1)CC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>#CCN(Cc1ccc2nc(N)nc(O)c2c1)c1ccc(C(=O)NC(CCC(=O)O)C(=O)O)cc1</chem>	<chem>#CCN(Cc1ccc2nc(N)nc(O)c2c1)c1ccc(C(=O)NC(CCC(=O)O)C(=O)O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>NC(C(=O)O)c1ccccc1</chem>	<chem>NC(C(=O)O)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>O=[N+](([O-]))c1cccc(S(=O)(=O)N2CCCC2)c1</chem>	<chem>O=[N+](([O-]))c1cccc(S(=O)(=O)N2CCCC2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)C(CC(=O)N)Cc1ccccc1C(F)(F)F</chem>	<chem>CC(C)C(CC(=O)N)Cc1ccccc1C(F)(F)F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1c2ccccc2C2(CCN(c3ccccc3)CC2)N1c1ccc(F)c(F)c1</chem>	<chem>O=C1c2ccccc2C2(CCN(c3ccccc3)CC2)N1c1ccc(F)c(F)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccccc1Oc1ccccc1C(=O)N1CCCC1</chem>	<chem>COc1ccccc1Oc1ccccc1C(=O)N1CCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCc1nsc(CN2CCCC(C(=O)c3ccc(F)cc3Cl)C2)n1</chem>	<chem>COCc1nsc(CN2CCCC(C(=O)c3ccc(F)cc3Cl)C2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)NC(C(C)C)C(=O)NC(C(=O)N)CC(C(=O)O)C(=O)NC(C(=O)N1CC(S(C)(=O)=O)CC1C(=O)NC1C(N)=O)C(c1ccccc1)c1ccccc1</chem>	<chem>CC(=O)NC(C(C)C)C(=O)NC(C(=O)N)CC(C(=O)O)C(=O)NC(C(=O)N1CC(S(C)(=O)=O)CC1C(=O)NC1C(N)=O)C(c1ccccc1)c1ccccc1</chem>	FALSE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NC1CC2CCC(C1)N2Cc1ccnc1)c1ccccc1F</chem>	<chem>O=C(NC1CC2CCC(C1)N2Cc1ccnc1)c1ccccc1F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(CO)N=c1nc(O)n(Cc2ccc(OC(F)(F)F)cc2)c(=O)[nH]1</chem>	<chem>CC(CO)N=c1nc(O)n(Cc2ccc(OC(F)(F)F)cc2)c(=O)[nH]1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)N1CC2(CC1)COc1ccccc1CN2</chem>	<chem>COC(=O)N1CC2(CC1)COc1ccccc1CN2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(-n2nc(C(C)C)cc2NC(=O)Nc2ccc(OC3ccnc(Nc4c(C)cccc4C)n3)c3ccccc23)nc1</chem>	<chem>Cc1ccc(-n2nc(C(C)C)cc2NC(=O)Nc2ccc(OC3ccnc(Nc4c(C)cccc4C)n3)c3ccccc23)nc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C(=O)O)N1CCc2c(-c3ccc(F)cc3)cc(C(F)(F)F)cc2C1=O</chem>	<chem>CC(C(=O)O)N1CCc2c(cc(C(F)(F)F)cc2-c2ccc(F)cc2)C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(C2C(C(=O)c3cnnc(-c4ccccc4)c3)=C(O)C(=O)N2Cc2ccco2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(C2C(C(=O)c3cnnc(-c4ccccc4)c3)=C(O)C(=O)N2Cc2ccco2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC#CC(O)=C1C(=O)C=C(OCc2ccccc2)CC1=O</chem>	<chem>CC#CC(O)=C1C(=O)C=C(OCc2ccccc2)CC1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1ccccc2c(-c3ccc(CN4CCOCC4)cc3)coc12</chem>	<chem>Nc1ccccc2c(-c3ccc(CN4CCOCC4)cc3)coc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)N1CCCC1c1ccc(OCc2cccc(F)c2)cc1</chem>	<chem>O=C(O)N1CCCC1c1ccc(OCc2cccc(F)c2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCN(CC)c1nc(C)nc(C(Cl)(Cl)Cl)n1</chem>	<chem>CCCCN(CC)c1nc(C)nc(C(Cl)(Cl)Cl)n1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CCN(CC)CCCOc1cc2oc(=O)ccc2cc1C(=O)C1CC1</chem>	<chem>CCN(CC)CCCOc1cc2oc(=O)ccc2cc1C(=O)C1CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(O)OCCNC1=NS(=O)(=O)c2cc(Br)ccc2N1</chem>	<chem>CC(C)OCCNC1=NS(=O)(=O)c2cc(Br)ccc2N1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(C=Cc1ccc(F)cc1)N1CCN(c2nc3ccc[nH]c-3n2)CC1</chem>	<chem>O=C(C=Cc1ccc(F)cc1)N1CCN(c2nc3ccc[nH]c-3n2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>OC1cc(O)c(-c2c(-c3ccccc3)oc3ccccc23)cc1Cl</chem>	<chem>OC1cc(O)c(-c2c(-c3ccccc3)oc3ccccc23)cc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(O)(c1ccc(S(=O)(=O)c2ccc(NCc3ccc(C(F)(F)F)cc3)cc2)cc1)C(F)(F)F</chem>	<chem>CC(O)(c1ccc(S(=O)(=O)c2ccc(NCc3ccc(C(F)(F)F)cc3)cc2)cc1)C(F)(F)F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCc1nc(-c2ccc(O)cc2)c(-c2ccccc2)n1Cc1ccc(OC(C)=O)cc1</chem>	<chem>CCCc1nc(-c2ccc(O)cc2)c(-c2ccccc2)n1Cc1ccc(OC(C)=O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=CC(Cl)C(C)C(O)C(C)C1OC(=O)C(C)(C)CC1O</chem>	<chem>C=CC(Cl)C(C)C(O)C(C)C1OC(=O)C(C)(C)CC1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCn1c(-c2ccco2)nc2cc(C(=O)NCC3CCN(CC4CC4)C3)cnc21</chem>	<chem>CCn1c(-c2ccco2)nc2cc(C(=O)NCC3CCN(CC4CC4)C3)cnc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC#CC1(O)CCC2C3CCC4=CC(=O)CCC4=C3C(c3ccc(N(C)C(=O)CCC(=O)O)cc3)CC21C</chem>	<chem>CC#CC1(O)CCC2C3CCC4=CC(=O)CCC4=C3C(c3ccc(N(C)C(=O)CCC(=O)O)cc3)CC21C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NCc1ccco1)C(c1ccc(F)cc1)N(Cc1ccc2c(c1)OCO2)C(=O)Cn1nnc2ccccc21</chem>	<chem>O=C(NCc1ccco1)C(c1ccc(F)cc1)N(Cc1ccc2c(c1)OCO2)C(=O)Cn1nnc2ccccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N=C(N)NS(=O)(=O)c1ccc(NC(=O)Nc2nnc(C(=O)Nc3ccc([N+](=O)[O-])cc3)s2)cc1</chem>	<chem>N=C(N)NS(=O)(=O)c1ccc(NC(=O)Nc2nnc(C(=O)Nc3ccc([N+](=O)[O-])cc3)s2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CSc1nc(N)n(-c2ccccc2)n1</chem>	<chem>CSc1nc(N)n(-c2ccccc2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(C)c(-c2cc(C(=O)NC(Cc3ccccc3)C(O)CNC(C)c3ccc(OC(C)C)cc3)cc(-c3ccccc3)c2)c1</chem>	<chem>Cc1ccc(C)c(-c2cc(C(=O)NC(Cc3ccccc3)C(O)CNC(C)c3ccc(OC(C)C)cc3)cc(-c3ccccc3)c2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#Cc1cn2c(n1)-c1cc(C#CC3CC3)cnc1OCC2</chem>	<chem>N#Cc1cn2c(n1)-c1cc(C#CC3CC3)cnc1OCC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(C1CCS(=O)(=O)CC1)N1CCN(c2ccc(F)cc2)CC1c1ccc(F)c(F)c1</chem>	<chem>O=C(C1CCS(=O)(=O)CC1)N1CCN(c2ccc(F)cc2)CC1c1ccc(F)c(F)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(NC(=O)c1ccccc1Cl)c1cccn1</chem>	<chem>CC(NC(=O)c1ccccc1Cl)c1cccn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCNC(=O)C1Cc2ccccc2CN1S(=O)(=O)CC</chem>	<chem>CCCCNC(=O)C1Cc2ccccc2CN1S(=O)(=O)CC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(O)=C(C(=S)NCCN1CCOCC1)C(N)=O</chem>	<chem>CCOC(O)=C(C(N)=O)C(=S)NCCN1CCOCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cncnc2nc(N=C(S)Nc3ccc(F)cc3F)c(-c3ccccc3)cc12</chem>	<chem>COc1cncnc2nc(N=C(S)Nc3ccc(F)cc3F)c(-c3ccccc3)cc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC(=O)c1ccc(-n2c(-c3ccccc3)cc(C=O)c2-c2ccc(F)cc2)cc1</chem>	<chem>NC(=O)c1ccc(-n2c(-c3ccccc3)cc(C=O)c2-c2ccc(F)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(CN1CCN(S(=O)(=O)c2ccc(F)cc2)CC1)NN=Cc1ccccc1</chem>	<chem>O=C(CN1CCN(S(=O))(=O)c2ccc(F)cc2)CC1)NN=Cc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(C)COC(c2ccc3c(NS(=O)(=O)c4ccccc4)c(C#N)c(=O)oc3c2)OC1</chem>	<chem>CC1(C)COC(c2ccc3c(NS(=O))(=O)c4ccccc4)c(C#N)c(=O)oc3c2)OC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c(C(=O)CSc2ccccc2)[n+](([O-]))c2ccccc2[n+1][O-]</chem>	<chem>Cc1c(C(=O)CSc2ccccc2)[n+](([O-]))c2ccccc2[n+1][O-]</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CCOC(=O)C1=C(C(NC(=O)CC)Sc2c1c1ccccc1n2C</chem>	<chem>CCOC(=O)C1=C(C(NC(=O)CC)Sc2c1c1ccccc1n2C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)C(CN1CCC(C)(c2ccccc(O)c2)C(C)C1)NC(=O)C1CCC(C)(C)CC1</chem>	<chem>CC(C)C(CN1CCC(C)(c2ccccc(O)c2)C(C)C1)NC(=O)C1CCC(C)(C)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>FC(F)(F)c1ccc(N=NNc2ccc(Cl)cc2)c(F)c1</chem>	<chem>Fc1cc(C(F)(F)F)ccc1N=NNc1ccc(Cl)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNC(=O)Nc1ccc(-c2nc3c(c(N4CCOCC4)n2)CNC(=O)C3(C)C)cc1</chem>	<chem>CNC(=O)Nc1ccc(-c2nc(N3CCOCC3)c3c(n2)C(C)(C)C(=O)NC3)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Clc1ccc(-c2c(-c3ccc(Cl)cc3)nc3ccc(Cl)cn23)cc1</chem>	<chem>Clc1ccc(-c2nc3ccc(Cl)cn3c2-c2ccc(Cl)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)c1ccc(Nc2cc(N3CCOCC3)nc3c(C=C4N=C(O)N=C4O)cnnc23)cc1</chem>	<chem>CC(=O)c1ccc(Nc2cc(N3CCOCC3)nc3c(C=C4N=C(O)N=C4O)cnnc23)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)C(Cc1ccccc1C)NC(=O)CNC(=O)c1ccc(S(N)(=O)=O)cc1</chem>	<chem>COC(=O)C(Cc1ccccc1C)NC(=O)CNC(=O)c1ccc(S(N)(=O)=O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC(=O)Nc1cc(NC(C)=O)cc(C(=O)OC)c1</chem>	<chem>CCC(=O)Nc1cc(NC(C)=O)cc(C(=O)OC)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CC(N)C(=O)NC(C(=O)NC1Cc2ccccc2C2CCCC(C(=O)NC(CC(=O)O)C(=O)OC(C)(C)C)N2C1=O)C(C)(C)C	CC(N)C(=O)NC(C(=O)NC1Cc2ccccc2C2CCCC(C(=O)NC(CC(=O)O)C(=O)OC(C)(C)C)N2C1=O)C(C)(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(C(C)=O)C(C)C(O)c1cc(-c2ccc(Cl)cc2)n(-c2ccc(Br)cc2)n1	CCN(C(C)=O)C(C)C(O)c1cc(-c2ccc(Cl)cc2)n(-c2ccc(Br)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(C)c1NC(=O)N1CCCC(c2nc(C)no2)C1	Cc1noc(C2CCCN(C(=O)Nc3c(Cl)cccc3C)C2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COCc1nn(Cc2ccccc2Cl)c2c1CCc1n[nH]c(-c3ccccc3SC)c1-2	COCc1nn(Cc2ccccc2Cl)c2c1CCc1n[nH]c(-c3ccccc3SC)c1-2	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(=O)N(CCC1c[nH]c2ccccc12)CC=CCN1CCCC1	CCC(=O)N(CC=CCN1CCCC1)CCc1c[nH]c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(Cc1ccc2ccccc2c1)C(N)C(=O)N1CCCC1C(=O)NCc1ccccc1	CC(Cc1ccc2ccccc2c1)C(N)C(=O)N1CCCC1C(=O)NCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(-c2c(Cl)ccc3c(O)c(O)c(OC)cc23)ccc1O	COc1cc(-c2c(Cl)ccc3c(O)c(O)c(OC)cc23)ccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2(C)C#N)=C(N)N(c3cccc(Cl)c3Cl)C3=C2C(=O)CC(C)(C)C3)cc1Cl	COc1ccc(C2(C)C#N)=C(N)N(c3cccc(Cl)c3Cl)C3=C2C(=O)CC(C)(C)C3)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C(=O)c1cc(-c2ccc(C=CC(=O)Nc3ccccc3N)cc2)ccc1Cl	CO(C(=O)c1cc(-c2ccc(C=CC(=O)Nc3ccccc3N)cc2)ccc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCCOc1ccc(C(=C(CCCCC(C#N))CCC(=O)O)c2ccccc2)c2ccccc2)c2ccc(O)cc2)cc1	CN(C)CCCOc1ccc(C(=C(CCCCC(C#N))CCC(=O)O)c2ccccc2)c2ccccc2)c2ccc(O)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=C(C)C(C(=O)O)C(C)C(O)c2c[nH]c3ccccc23)C1	CC1=C(C)C(C(=O)O)C(C)C(O)c2c[nH]c3ccccc23)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1)c(CCN(C)C)c(S(=O))(=O)c1ccccc1)n2S(=O))(=O)c1ccccc1	COc1ccc2c(c1)c(CCN(C)C)c(S(=O))(=O)c1ccccc1)n2S(=O))(=O)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1ccc(-c2cc(=O)c3ccccc3o2)cc1)N(Cc1ccccc1)Cc1ccccc1Cl	O=C(c1ccc(-c2cc(=O)c3ccccc3o2)cc1)N(Cc1ccccc1)Cc1ccccc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C2CCCN2C(=O)N1Cc1ccco1	O=C1C2CCCN2C(=O)N1Cc1ccco1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O))(=O)NN=Cc2cccn2)cc1	Cc1ccc(S(=O))(=O)NN=Cc2cccn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(F)cc1N1Cc2nc(Nc3ncc4cc(C(=O)N(C)C)n(C)c4n3)ncc2C1=O	Cc1ccc(F)cc1N1Cc2nc(Nc3ncc4cc(C(=O)N(C)C)n(C)c4n3)ncc2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(CC(=O)O)CC(c2cccc(Cl)c2)C(c2ccc(Cl)cc2)N(C(CS(=O))(=O)C(F)(F)F)C2CC2)C1=O	CC1(CC(=O)O)CC(c2cccc(Cl)c2)C(c2ccc(Cl)cc2)N(C(CS(=O))(=O)C(F)(F)F)C2CC2)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C(=O)NC(=S)NNC(=O)c2ccc(Cl)c(S(=O))(=O)N(C)C)c2)ccc1Oc1ccccc1	COc1cc(C(=O)NC(=S)NNC(=O)c2ccc(Cl)c(S(=O))(=O)N(C)C)c2)ccc1Oc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Fc1ncc(Nc2ncc(CN3CCC3)cc2-c2nnc(Nc3ccccc3)o2)cn1	Fc1ncc(Nc2ncc(CN3CCC3)cc2-c2nnc(Nc3ccccc3)o2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc2c(c1)N(Cc1ccccc1)C(=O)C(N1CCOCC1)=N2)c1ccc(CO)cc1	O=C(Nc1ccc2ncc(N3CCOCC3)c(=O)n(Cc3ccccc3)c2c1)c1ccc(CO)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(-c2nnc(SCC(=O)c3c(N)n(C)c(=O)n(C)c3=O)n2N)[nH]n1	Cc1cc(-c2nnc(SCC(=O)c3c(N)n(C)c(=O)n(C)c3=O)n2N)[nH]n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(F)c(N=C(O)C2CC3CC3N2C(=O)Cn2nc(C(=N)O)c3cc(F)cn32)c1	Cc1ccc(F)c(N=C(O)C2CC3CC3N2C(=O)Cn2nc(C(=N)O)c3cc(F)cn32)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCS(=O))(=O)N1Cc2ccc(-c3noc(C4CCN(S(C(=O)=O)CC4)n3)cc2C1	CCS(=O))(=O)N1Cc2ccc(-c3noc(C4CCN(S(C(=O)=O)CC4)n3)cc2C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCCC(=O)OC1C(C)CC(C2C3(C)CC4(O)C(OC(C(=O)C)C(C)=O)OC6C4(OC)C(C)(C)C3(O)C(OC(C)=O)C12OC(=O)CCCCCCCCCCCCC	CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC12C(OC(=O)CCCCCCCCCCC(C)C)C1C1(C)CC3(O)C(OC(C)=O)C(C)C4OC45C(OC(C)=O)C(C)(C)C(=O)OC5C3(OC)C(C)(C)C1(O)C2OC(C)=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(Nc2cc(C(F)(F)F)ccn2)nc(-c2ccc(NC3CCN(C(=O)c4ccc5c(c4)CCO5)CC3)nc2)c1	Cc1cc(Nc2cc(C(F)(F)F)ccn2)nc(-c2ccc(NC3CCN(C(=O)c4ccc5c(c4)CCO5)CC3)nc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2cnc3c4cc5c(cc4n(C)c3c2c1)OCO5	COc1ccc2cnc3c4cc5c(cc4n(C)c3c2c1)OCO5	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN2c3ccc(F)cc3Sc3ccc(Cl)cc3C2C1C#CCF	CN1CCN2c3ccc(F)cc3Sc3ccc(Cl)cc3C2C1C#CCF	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCN1CC2(CCN(Cc3cc[nH]c3)C2=O)CC1=O	CCCCN1CC2(CCN(Cc3cc[nH]c3)C2=O)CC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1occc1C(=O)N(C)CC1Oc2c(NC(=O)c3ccncc3)ccccc2C(=O)N(C(C)CO)CC1C	Cc1occc1C(=O)N(C)CC1Oc2c(NC(=O)c3ccncc3)ccccc2C(=O)N(C(C)CO)CC1C	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CCCC(=O)c1cccs1)Cc1ccccc1	CCN(CCCC(=O)c1cccs1)Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(Cc1CC1)c1cc(C(=O)Nc2ccc(C#N)cc2C)ncn1	CCCN(Cc1CC1)c1cc(C(=O)Nc2ccc(C#N)cc2C)ncn1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1COc2ccc(C3(O)c4ccccc4C(=O)N3Cc3cccc(Cl)c3F)cc2N1	O=C1COc2ccc(C3(O)c4ccccc4C(=O)N3Cc3cccc(Cl)c3F)cc2N1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nnc(Nc2c(Cl)ccc(Cl)c2C)c2ccsc12	Cc1ccc(Cl)c(Cl)c1Nc1nnc(Cl)c2scccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)OCC(=O)C1(CO)CCCC2(C)C3CCc45CC3(CCC12)C(=O)OC5=O	Cc1ccc(Cl)c(Cl)c1Nc1nnc(Cl)c2scccc12	FALSE	TRUE	TRUE
O=C(O)CCNC(=O)C(CCCC1c2ccccc2-c2ccccc21)CC(Cc1ccccc1)C(=O)O	O=C(O)CCNC(=O)C(CCCC1c2ccccc2-c2ccccc21)CC(Cc1ccccc1)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1cnc(NC(=O)Nc2ccncc2Cl)cn1	N#Cc1cnc(NC(=O)Nc2ccncc2Cl)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)COc1nc(-c2ccc(N3CCCC3)c(NC(=O)c3ccc(Cl)cc3)c2)nc2c1ncn2CC(=O)O	CC(C)COc1nc(-c2ccc(N3CCCC3)c(NC(=O)c3ccc(Cl)cc3)c2)nc2c1ncn2CC(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc1CC1CC(O)CC(Cc(=O)O)c2ccc(cc2)OC1=O	Cc1ccccc1CC1CC(O)CC(Cc(=O)O)c2ccc(cc2)OC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)C(=O)OCOP(=O)(OCOC(=O)C(C)(C)C)OCC1OC(n2ccc(N)nc2=O)C(F)C1O	CC(C)(C)C(=O)OCOP(=O)(OCOC(=O)C(C)(C)C)OCC1OC(n2ccc(N)nc2=O)C(F)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1[nH]c2ccccc2c1C(=O)C(=O)N(Cc1ccco1)Cc1cccs1	Cc1[nH]c2ccccc2c1C(=O)C(=O)N(Cc1ccco1)Cc1cccs1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(Nc2nccs2)cc(C2CCCN(C(=O)c3cn(C)cn3)C2)n1	Cc1nc(Nc2nccs2)cc(C2CCCN(C(=O)c3cn(C)cn3)C2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccc2nc3n(c(=O)c2c1)-c1c(ccc(Cl)c1C)SC3	CCc1ccc2nc3n(c(=O)c2c1)-c1c(ccc(Cl)c1C)SC3	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1OC)COC(C)C2=O	COc1ccc2c(c1OC)COC(C)C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)OC2C(CN=NC3CC=CCC3)OC(CNC(=O)Nc3cccc4ccccc34)C2O1	CC1(C)OC2C(CN=NC3CC=CCC3)OC(CNC(=O)Nc3cccc4ccccc34)C2O1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCN1C(=O)C2CCC3C(=NOCCCN4CCCC4)CC(O)C(O)C3C2C1=O	COCCN1C(=O)C2CCC3C(=NOCCCN4CCCC4)CC(O)C(O)C3C2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Cl)cc1NC(=O)COC(=O)C=Cc1c(C)nn(-c2ccccc2)c1C	COc1ccc(Cl)cc1NC(=O)COC(=O)C=Cc1c(C)nn(-c2ccccc2)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O))(=O)c1cccc(CC(=O)N2CCC3(CC2)OCCc2ccccc23)cc1	CS(=O))(=O)c1cccc(CC(=O)N2CCC3(CC2)OCCc2ccccc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cc1ccccc1)NCC1(N2CCN(C(=O)C(Cc3ccc(Cl)cc3)NC(=O)CC3CCCC3)CC2)CCCCC1	O=C(Cc1ccccc1)NCC1(N2CCN(C(=O)C(Cc3ccc(Cl)cc3)NC(=O)CC3CCCC3)CC2)CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)S(=O))(=O)OCC1CC(n2cnc3c(N)ncn(C4OC(C)C(O)C4O)c3c2=O)C(O)C1O	NC(=O)S(=O))(=O)OCC1CC(n2cnc3c(N)ncn(C4OC(C)C(O)C4O)c3c2=O)C(O)C1O	FALSE	TRUE	TRUE
Cc1[nH]nc(C(F)(F)F)c1-c1cncc(OCC2CC2c2cccc(OCC3CN=C(O)C3)n2)c1	Cc1[nH]nc(C(F)(F)F)c1-c1cncc(OCC2CC2c2cccc(OCC3CN=C(O)C3)n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C=CC(CCC(N)=O)NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)C(Cc1ccc(F)cc1)NC(=O)C(N)Cc1ccc(O)cc1	CCOC(=O)C=CC(CCC(N)=O)NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)C(Cc1ccc(F)cc1)NC(=O)C(N)Cc1ccc(O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CS(=O))(=O)CC(NC(=O)c1ccc(-c2ccccc2)cc1)C(=O)NO	CC(C)CS(=O))(=O)CC(NC(=O)c1ccc(-c2ccccc2)cc1)C(=O)NO	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(OC(F)C2C(=O)N(Cc3ccc(Cl)cc3)CCO2)c(C2=NOc(C3ccc(Cl)cc3)C2)c1	COc1ccc(OC(F)C2OCCN(Cc3ccc(Cl)cc3)C2=O)c(C2=NOc(C3ccc(Cl)cc3)C2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1NS(=O))(=O)N=C1Sc1ccc(Cl)cc1	O=C1NS(=O))(=O)N=C1Sc1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(NC(=O)Nc2sc3c(c2C(N)=O)CCCCC3)c1	COc1cccc(NC(=O)Nc2sc3c(c2C(N)=O)CCCCC3)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C(NS(=O))(=O)c1ccc(C)cc1(Nc1nc2ccccc2s1)C(F)(F)F	COC(=O)C(NS(=O))(=O)c1ccc(C)cc1(Nc1nc2ccccc2s1)C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN1cc(C(=O)CC(c2ccccc2)c2ccccc2)c2c(Cl)cccc21	CCCN1cc(C(=O)CC(c2ccccc2)c2ccccc2)c2c(Cl)cccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1noc(C)c1C(=O)N1CCOC2(CCN(Cc3ccoc3)CC2)C1	CCc1noc(C)c1C(=O)N1CCOC2(CCN(Cc3ccoc3)CC2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc(NC2CC(NC(C)=O)CN(C(O)=NCc3cccc(Cl)c3F)C2)n1	COc1ccccc(NC2CC(NC(C)=O)CN(C(O)=NCc3cccc(Cl)c3F)C2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
NS(=O))(=O)c1ccc(C=CC(=O)OCC(=O)NCc2ccco2)cc1	NS(=O))(=O)c1ccc(C=CC(=O)OCC(=O)NCc2ccco2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1oenc1C=c1[nH]c(=O)c(=Cc2ccccc2F)[nH]c1=O	CC(C)(C)c1oenc1C=c1[nH]c(=O)c(=Cc2ccccc2F)[nH]c1=O	TRUE	TRUE	FALSE
C=C(c1ccc(OC)c(F)c1OC)C12CC3C(CC(c4ccccc4)N1C)C3(C)NC2=O	C=C(c1ccc(OC)c(F)c1OC)C12CC3C(CC(c4ccccc4)N1C)C3(C)NC2=O	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C1=C(C(=O)NCCN2CCC(c3ccc(F)cc3)CC2)C(c2ccc(C(F)(F)F)cc2)C(C(=O)NCc2ccc(C(F)(F)F)cc2)=C(C)N1	COC(=O)C1=C(C(=O)NCCN2CCC(c3ccc(F)cc3)CC2)C(c2ccc(C(F)(F)F)cc2)C(C(=O)NCc2ccc(C(F)(F)F)cc2)=C(C)N1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(NC(=O)CN2C(=O)COc3ccc(S(=O))(=O)N4CCCCC4)cc32)no1	Cc1cc(NC(=O)CN2C(=O)COc3ccc(S(=O))(=O)N4CCCCC4)cc32)no1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C(NC(=O)c1ccccc1)(Nc1nc2ccccc2[nH]1)C(F)(F)F	COC(=O)C(NC(=O)c1ccccc1)(Nc1nc2ccccc2[nH]1)C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCCCC(C)CCOCC1OC(O)C(O)C(O)C1O	C=CCCCC(C)CCOCC1OC(O)C(O)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1cc2c(cn1)[nH]c1ncc(-c3ccc(-n4cccn4)cc3)cc12	N#Cc1cc2c(cn1)[nH]c1ncc(-c3ccc(-n4cccn4)cc3)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C)c(OC(C=O)OCC(=O)N2CCN(C(=O)c3ccccc3)CC2)c1	Cc1ccc(C)c(OC(C=O)OCC(=O)N2CCN(C(=O)c3ccccc3)CC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC(Cc1ccccc1)C(=O)NCCc1ccccc1Cl)c1cnc(Nc2ccc3nccsc3c2)nc1NCCCN1CCCC1	O=C(NC(Cc1ccccc1)C(=O)NCCc1ccccc1Cl)c1cnc(Nc2ccc3nccsc3c2)nc1NCCCN1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C(=O)CCCC(=O)CN(C(=O)OC(C)(C)C	CO(C(=O)CCCC(=O)CN(C(=O)OC(C)(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1c2ccc2Nc2nc(N)nc(O)c21	CCN1c2ccccc2Nc2nc(N)nc(O)c21	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc([N+](=O)[O-])c(C(=O)Nc2ccco2)n1	Cn1cc([N+](=O)[O-])c(C(=O)Nc2ccco2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
C#CCN(CC(C)O)C(=O)OC(C)c1nnc(SCC)o1	C#CCN(CC(C)O)C(=O)OC(C)c1nnc(SCC)o1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cc1ccc(F)cc1F)NS(=O))(=O)c1cccc2c(N3CCCCC3)cccc12	O=C(Cc1ccc(F)cc1F)NS(=O))(=O)c1cccc2c(N3CCCCC3)cccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CN(CCCCCC(=O)NCCCCCCCNCCCN)CCSSCCNCC(=O)C(Cc1ccc(O)cc1)=NO	CN(CCCCCC(=O)NCCCCCCCNCCCN)CCSSCCNCC(=O)C(Cc1ccc(O)cc1)=NO	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)c1cn(-c2ccc(OC3ccncc3C#CC(C)N)c(F)c2)c2c(N)C(F)c[nH]c12	CNC(=O)c1cn(-c2ccc(OC3ccncc3C#CC(C)N)c(F)c2)c2c(N)C(F)c[nH]c12	FALSE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1c(-c2ccc(OC)cc2)csc1NC(=O)CN1C(=O)CSC1=O	CCOC(=O)c1c(-c2ccc(OC)cc2)csc1NC(=O)CN1C(=O)CSC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Cn2c(SCc3cccc(Cl)c3)nnc2-c2c[nH]c3ccccc23)c(OC)c1	COc1ccc(Cn2c(SCc3cccc(Cl)c3)nnc2-c2c[nH]c3ccccc23)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)n1nc(Cc2ccc(F)c(Cl)c2)c2oc(-c3cccc(Cl)c3)nc2c1=O	CC(C)n1nc(Cc2ccc(F)c(Cl)c2)c2oc(-c3cccc(Cl)c3)nc2c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1=C(COC(=O)CCC(=O)OCC)NC(=O)NC1C	CCOC(=O)CCC(=O)OCC=C(C(=O)OCC)C(C)NC(=O)N1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(Cc1ccc(OCCCN2CC(OC(c3ccccc3)c3ccccc3)C2)cc1)C(=O)O	CCOC(Cc1ccc(OCCCN2CC(OC(c3ccccc3)c3ccccc3)C2)cc1)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O))(=O)c1ccc(-c2cc3ncnc(N4CC(C(=O)NCc5ccccc(F)c5)CC4)c3s2)cc1	CS(=O))(=O)c1ccc(-c2cc3ncnc(N4CC(C(=O)NCc5ccccc(F)c5)CC4)c3s2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NCCCC1NC(=O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)c2ccc(o2)C2CCCC(C(=O)NC(Cc3ccccc3)NC(=O)C3CCCN3C2=O)NC1=O	NCCCC1NC(=O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)c2ccc(o2)C2CCCC(C(=O)NC(Cc3ccccc3)NC(=O)C3CCCN3C2=O)NC1=O	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CCOC(=O)Nc1cc2c(c(N)n1)N=C(c1ccc(C(=O)O)cc1)C(C)N2	CCOC(=O)Nc1cc2c(c(N)n1)N=C(c1ccc(C(=O)O)cc1)C(C)N2	TRUE	TRUE	TRUE
CCOCCCN(C(=O)CN(c1ccccc1OC)S(=O)(=O)c1ccccc1	CCOCCCN(C(=O)CN(c1ccccc1OC)S(=O)(=O)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
NCCS(=O)(=O)c1nsnc1CCCCC1	NCCS(=O)(=O)c1nsnc1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1cc(C(=O)N)C2(C(=O)O)CCC2)cc(-c2ccc(OCc3cc(-c4ccccc4F)no3)cc2)n1	CCc1cc(C(=O)N)C2(C(=O)O)CCC2)cc(-c2ccc(OCc3cc(-c4ccccc4F)no3)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+][([O-])c1ccc(Sc2cccn2)c2nonc12	O=[N+][([O-])c1ccc(Sc2cccn2)c2nonc12	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1ccc(C(=O)Nc2cc(C(C)(C)C)[nH]cn2)cc1Nc1ncnc2cnc(N3CCN(CC4CCN(C)CC4)CC3)nc12	Cc1ccc(C(=O)Nc2cc(C(C)(C)C)[nH]cn2)cc1Nc1ncnc2cnc(N3CCN(CC4CCN(C)CC4)CC3)nc12	FALSE	TRUE	TRUE
COc1ncc(N2CCc3ncnc(OC4CCN(C(=O)c5cscn5)C4)c3C2)cc1C(F)(F)F	COc1ncc(N2CCc3ncnc(OC4CCN(C(=O)c5cscn5)C4)c3C2)cc1C(F)(F)F	TRUE	TRUE	FALSE
CCc1cc(C(=O)Cc2ccc(F)cc2)c(O)cc1O	CCc1cc(C(=O)Cc2ccc(F)cc2)c(O)cc1O	TRUE	TRUE	FALSE
COc1cc(N=C(S)Nc2ccccc2)c(OC)cc1N=C(S)Nc1ccc([N+](=O)[O-])cn1	COc1cc(N=C(S)Nc2ccc([N+](=O)[O-])cn2)c(OC)cc1N=C(S)Nc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cccc1C(=O)Nc1ccnn1C1CCN(CCc2ccccc2)CC1	Cn1cccc1C(=O)Nc1ccnn1C1CCN(CCc2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2CC(=O)C=C(c3ccc(-c4nnn[nH]4)cc3)C2)cn1	COc1ccc(C2CC(=O)C=C(c3ccc(-c4nnn[nH]4)cc3)C2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(Cn2nc(C(C)(C)C)cc2C(=O)Nc2ccc(S(=O)(=O)Nc3ccc(C(C)(C)C)cc3)cc2)cc1	Cc1ccc(Cn2nc(C(C)(C)C)cc2C(=O)Nc2ccc(S(=O)(=O)Nc3ccc(C(C)(C)C)cc3)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cnc(Oc2cncnc2)c1)Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1	O=C(Nc1cnc(Oc2cncnc2)c1)Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCSC(=O)N(C)C	CN(C)CCSC(=O)N(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1cc2c(OCc3ccc(C)cc3)cnnc2cc1NCCSc1nnnn1-c1ccccc1	CCOC(=O)c1cc2c(OCc3ccc(C)cc3)cnnc2cc1NCCSc1nnnn1-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)COc1ccc(Cc2cc(C3OC(CO)C(O)C(O)C3O)c3c(c2Cl)CCO3)cc1	CC(C)COc1ccc(Cc2cc(C3OC(CO)C(O)C(O)C3O)c3c(c2Cl)CCO3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1nc(C(C)(C)C)cc1NC(=O)Nc1ccccc1OCCc1ccccc1	Cn1nc(C(C)(C)C)cc1NC(=O)Nc1ccccc1OCCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(CN(O)C=O)C(=O)NC(C(=O)NC)C(C)C	CC(C)C(CN(O)C=O)C(=O)NC(C(=O)NC)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(CCC(C)C1CC2C(C)O)C3=CCOCC3=CC(=O)C21C)C(C)CO	C=C(CCC(C)C1CC2C(C)O)C3=CCOCC3=CC(=O)C12C)C(C)CO	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(C)n2c(-c3ccccc3Cl)nnc2c1C	Cc1nc(C)n2c(-c3ccccc3Cl)nnc2c1C	TRUE	TRUE	TRUE
C1=C(c2ccc(OCN3CCCC3)cc2)=CCc2ccccc21	Cc1nc(C)n2c(-c3ccccc3Cl)nnc2c1C	FALSE	TRUE	TRUE
Cc1cn(C2CC(O)C(CNC(=O)Nc3ccccc3F)O2)c(=O)[nH]c1=O	Cc1cn(C2CC(O)C(CNC(=O)Nc3ccccc3F)O2)c(=O)[nH]c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CCn1cncn1)c1ccc([N+](=O)[O-])c(C)c1	CCN(CCn1cncn1)c1ccc([N+](=O)[O-])c(C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCCC1NC(=O)CSc1nc2cc3c(cc2c(=O)n1Cc1ccccc1)OCO3	CC1CCCC1NC(=O)CSc1nc2cc3c(cc2c(=O)n1Cc1ccccc1)OCO3	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(CN2CCC(Nc3nc4cc(-c5ccncc5)ccc4o3)CC2)cc1	c1ccc(CN2CCC(Nc3nc4cc(-c5ccncc5)ccc4o3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(OC(C(=O)N)2CCN(c3ccccc3O)CC2)cc1C	COc1ccc(OC(C(=O)N)2CCN(c3ccccc3O)CC2)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(Nc2ncc3c(-c4cccn4)nn(C)c3n2)cc(OC)c1OC	COc1cc(Nc2ncc3c(-c4cccn4)nn(C)c3n2)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1cccn1)N1CCN(Cc2cc3cc2OC(CN)C3)CC1	O=C(c1cccn1)N1CCN(Cc2cc3cc2OC(CN)C3)CC1	FALSE	TRUE	TRUE
NCC(CCCCN(C(=O)Cn1cc(C(N)Cc2cc(F)c(F)cc2F)nn1)NCC(c1ccccc1)c1ccc(F)cc1	NCC(CCCCN(C(=O)Cn1cc(C(N)Cc2cc(F)c(F)cc2F)nn1)NCC(c1ccccc1)c1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1ccc2c3c1OC1C(O)c4ccccc4C(2)N(CC2CC2)CCC31	Oc1ccc2c3c1OC1C(O)c4ccccc4C(2)N(CC2CC2)CCC31	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)CC(=O)C(=CNc2ccc(C(=O)O)c2)C(=O)C1	CC1(C)CC(=O)C(=CNc2ccc(C(=O)O)c2)C(=O)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCC1(C)C(CC=C(C)C)C(=O)OC(=C(C)C(=O)C1)=O	CCCCCCCCC1(C)C(CC=C(C)C)C(=O)OC(=C(C)C(=O)C1)=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(N)c(Cl)cc1C(O)=NCCN1CCC(NC2CCCC2)CC1	COc1cc(N)c(Cl)cc1C(O)=NCCN1CCC(NC2CCCC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(O)C(F)CN=C(O)c1cnc(-n2ncc3cc(C#N)cnc32)cc1NCC#N	CC(C)(O)C(F)CN=C(O)c1cnc(-n2ncc3cc(C#N)cnc32)cc1NCC#N	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc2c1C(=O)c1c(O)c3c(c(O)c1C2=O)CC(O)(C(=O)CO)CC3OC1CC(NC(=O)C(F)(F)F)C(O)C(C)O1	COc1ccccc2c1C(=O)c1c(O)c3c(c(O)c1C2=O)CC(O)(C(=O)CO)CC3OC1CC(NC(=O)C(F)(F)F)C(O)C(C)O1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(O)c1ccc(CCc2ccccc2COc2cc(O)cc(O)c2)cc1	O=C(O)c1ccc(CCc2ccccc2COc2cc(O)cc(O)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1Nc2ccccc2C1=Cc1ccc(Oc2ccc([N+](=O)[O-])cc2)cc1	O=C1Nc2ccccc2C1=Cc1ccc(Oc2ccc([N+](=O)[O-])cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1nc(Cl)nc2nc(-c3ccco3)nn12	CN(C)c1nc(Cl)nc2nc(-c3ccco3)nn12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(COC1ncnc2ccc(Br)cc12)Nc1ccc(F)cc1	O=C(COC1ncnc2ccc(Br)cc12)Nc1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(Cn2cc(-c3cc4cc(OC)ccc4o3)nn2)c1	COc1cccc(Cn2cc(-c3cc4cc(OC)ccc4o3)nn2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2cnc(C#N)n2)cc1OC1CCN(C(=O)c2cccn2)CC1	COc1ccc(-c2cnc(C#N)n2)cc1OC1CCN(C(=O)c2cccn2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCc1c[n+](CC(C)(C)C)c(=O)[nH]c1=O	CCCCCCCCc1c[n+](CC(C)(C)C)c(=O)[nH]c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(N)c(Cl)cc1C(=O)NC1CCN2CCCC2C1	COc1cc(N)c(Cl)cc1C(=O)NC1CCN2CCCC2C1	TRUE	TRUE	FALSE
COc1cccc(-c2noc(COc3ccc4ccc(=O)oc4c3)n2)c1	COc1cccc(-c2noc(COc3ccc4ccc(=O)oc4c3)n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1cc2ncc(C(N)=O)c(Nc3ccc(C)(C)C3)c2cc1N1CCN(C)CC1	CCOc1cc2ncc(C(N)=O)c(Nc3ccc(C)(C)C3)c2cc1N1CCN(C)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC1CCC(C(=O)O)C1)c1cc(C23CC4CC(C(C4)C2)C3)c2ccccc2n1	O=C(NC1CCC(C(=O)O)C1)c1cc(C23CC4CC(C(C4)C2)C3)c2ccccc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CC(C)CN(CC(COc2ccc(C(F)(F)F)cc2)N2CCN(C(=O)C=Cc3ccccc3C(F)(F)F)CC2)C1	CC1CC(C)CN(CC(COc2ccc(C(F)(F)F)cc2)N2CCN(C(=O)C=Cc3ccccc3C(F)(F)F)CC2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1c2ccccc2-c2n[se]nc21	CN1c2ccccc2c2n[se]nc21	TRUE	TRUE	TRUE
N#CC(=C1Nc2ccccc2N1Cc1cc(Cl)ccc1O)c1ccccc1O	N#CC(=C1Nc2ccccc2N1Cc1cc(Cl)ccc1O)c1ccccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc1CCN(C(=O)c1cc2sc(Cl)c(Cl)c2[nH]1	Cc1ccccc1CCN(C(=O)c1cc2sc(Cl)c(Cl)c2[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1n[nH]c2cc(N=C(O)NC(c3ncco3)C3CC3)ncc12	CCOc1n[nH]c2cc(N=C(O)NC(c3ncco3)C3CC3)ncc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)OC1C(O)C(OC2OC(COC(=O)c3ccccc3)C(O)C(O)C2O)OC(C)(C)C1O[Si](C)(C)C(C)C	CC(=O)OC1C(O)C(OC2OC(COC(=O)c3ccccc3)C(O)C(O)C2O)OC(C)(C)C1O[Si](C)(C)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
OCc1C(O)C(O)C(O)CN1CCCCc1ccc(-c2ccc3scnc3c2)cc1	OCc1C(O)C(O)C(O)CN1CCCCc1ccc(-c2ccc3scnc3c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)c1cccc(C(C)C)c1NC(=O)NCC1(c2ccccc2)CCCCC1	CC(O)c1cccc(C(C)C)c1NC(=O)NCC1(c2ccccc2)CCCCC1	TRUE	TRUE	FALSE
COc1ccccc1Cn1c(=O)n(-c2ccc(F)c(Cl)c2)c(=O)c2oc3ccccc3c21	COc1ccccc1Cn1c(=O)n(-c2ccc(F)c(Cl)c2)c(=O)c2oc3ccccc3c21	TRUE	TRUE	TRUE
CN(CCCN(C)CC1OCc2cc(C#N)ccc2S(=O)(=O)N(C(C)C)CC1Cc1ccc(O)cc1)C1CCc2ccccc2C1	CC(C)N1CC(Cc2ccc(O)cc2)C(CN(C)CCCN(C)C2CCc3ccccc3C2)Oc2cc(C#N)ccc2S1(=O)=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C=C2SN(CCC(=O)NCCCN3CCc4ccccc4C3)C2=O)c(C)n1-c1ccc(F)cc1	Cc1cc(C=C2SN(CCC(=O)NCCCN3CCc4ccccc4C3)C2=O)c(C)n1-c1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(CCC(=O)NCCC(=O)O)c(=O)oc2cc(O)ccc12	Cc1c(CCC(=O)NCCC(=O)O)c(=O)oc2cc(O)ccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(C(=O)N)2c3ccccc3Sc3ccccc32)cc1OCC	CCOc1ccc(C(=O)N)2c3ccccc3Sc3ccccc32)cc1OCC	TRUE	TRUE	TRUE
OCC1CC(O)CCN1CCCNc1ccccc1O	OCC1CC(O)CCN1CCCNc1ccccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCSc1nnnc(NC(=O)CCc2nc3ccccc3o2)s1	CCCSc1nnnc(NC(=O)CCc2nc3ccccc3o2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)CNCC(=O)Nc1ccc(NC(=O)N2Cc3ccc(F)cc3C2)cc1	CC(O)CNCC(=O)Nc1ccc(NC(=O)N2Cc3ccc(F)cc3C2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(CC(=O)Nc1ccc(OCc2ccc3ccccc3n2)cc1)C(=O)c1cc([N+](=O)[O-])cc([N+](=O)[O-])c1	CN(CC(=O)Nc1ccc(OCc2ccc3ccccc3n2)cc1)C(=O)c1cc([N+](=O)[O-])cc([N+](=O)[O-])c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(Nc2ccc(Cl)cc2Cl)n2nncn2n1	Cc1cc(Nc2ccc(Cl)cc2Cl)n2nncn2n1	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1snn1-c1csc(Nc2ccc(Cl)c(Cl)c2)n1	Cc1snn1-c1csc(Nc2ccc(Cl)c(Cl)c2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C=C2C(=O)NN(c3ccc(F)cc3)C2=O)cc1	COc1ccc(C=C2C(=O)NN(c3ccc(F)cc3)C2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C1CCCCC1C(=O)Nc1ccc(-c2nnc3n2CCCC3)c1	O=C(O)C1CCCCC1C(=O)Nc1ccc(-c2nnc3n2CCCC3)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CC=CCN1C(=O)CCn1ccn2nc(-c3ccc(F)cc3)cc2c1=O	CC1CC=CCN1C(=O)CCn1ccn2nc(-c3ccc(F)cc3)cc2c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(-n2c(C)c3c(C)nn(-c4cccs4)c3c2C)cc1	CCOc1ccc(-n2c(C)c3c(C)nn(-c4cccs4)c3c2C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1ccc(NC(=O)C2CCC(CNS(=O)(=O)c3ccc4c(c3)CCO4)CC2)cc1	CC(C)c1ccc(NC(=O)C2CCC(CNS(=O)(=O)c3ccc4c(c3)CCO4)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCc2c(sc(Nc3nc4ccccc4[nH]3)c2C(N)=O)C1	CC1CCc2c(sc(Nc3nc4ccccc4[nH]3)c2C(N)=O)C1	TRUE	TRUE	TRUE
C[S+][([O-])c1ccc(N2CCN(CN3C(=O)C4CCCN4C3=O)CC2)cc1	C[S+][([O-])c1ccc(N2CCN(CN3C(=O)C4CCCN4C3=O)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)n1ccc2cc(-c3ccc(-c4cc5cccc(C#N)c5o4)c(F)c3)ccc21	CC(C)n1ccc2cc(-c3ccc(-c4cc5cccc(C#N)c5o4)c(F)c3)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(C=C2SC(=S)N(C(Cc3ccccc3)C(=O)O)C2=O)sc[n+1]CC(=O)c1ccc([N+](=O)[O-])cc1	Cc1c(C=C2SC(=S)N(C(Cc3ccccc3)C(=O)O)C2=O)sc[n+1]CC(=O)c1ccc([N+](=O)[O-])cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)CCNc1nc(NCCCCCNc2cnc3cc(Cl)ccc23)nc(N2CCOCC2)n1	CCN(CC)CCNc1nc(NCCCCCNc2cnc3cc(Cl)ccc23)nc(N2CCOCC2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(NC2CCCc3ccccc32)cc1C(F)(F)F	CC(C)CCNc1nc(NCCCCCNc2cnc3cc(Cl)ccc23)nc(N2CCOCC2)n1	FALSE	TRUE	TRUE
CC(C)CC1C(=O)NC(C2Cc3ccccc3C2)C(=O)N1C(C(=O)NC(C)C)c1ccc(OC(F)(F)F)cc1	CC(C)CC1C(=O)NC(C2Cc3ccccc3C2)C(=O)N1C(C(=O)NC(C)C)c1ccc(OC(F)(F)F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(-c2ccnec2)ccc1Nc1ncc2cc(C)nc(NCC(C)(C)OC)c2n1	COc1cc(-c2ccnec2)ccc1Nc1ncc2cc(C)nc(NCC(C)(C)OC)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-n2nc(C(C)(C)C)cc2NC(=O)Nc2ccc(OC3cnc(Nc4cc(OC)cc(OCN5CCOCC5)c4)n3)c3ccccc23)cc1	COc1cc(Nc2ncc(OC3ccc(NC(=O)Nc4cc(C(C)(C)C)nn4-c4ccc(C)cc4)c4ccccc34)n2)cc(OCN2CCOCC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccc(NC(=O)CC2C(=O)N(c3ccccc(OC)c3)C(=O)N2Cc2ccnec2)cc1	CCc1ccc(NC(=O)CC2C(=O)N(c3ccccc(OC)c3)C(=O)N2Cc2ccnec2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=NNc1nc(-c2ccccc2)c(-c2ccc(OC3ccccc3)cc2)s1)c1cccn1	CC(=NNc1nc(-c2ccccc2)c(-c2ccc(OC3ccccc3)cc2)s1)c1cccn1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOP(=O)(NC1=C(NCCC)C(=O)c2ccccc2C1=O)OCC	CCOP(=O)(NC1=C(NCCC)C(=O)c2ccccc2C1=O)OCC	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2=NN(C(N)=O)C(c3c[nH]c4ccccc34)C2)cc1OC	COc1ccc(C2=NN(C(N)=O)C(c3c[nH]c4ccccc34)C2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>Cc1oc(-c2ccc(Cl)cc2)nc1C[S+](O)CC(=O)NCCCN1CCN(Cc2ccccc2)CC1</chem>	<chem>Cc1oc(-c2ccc(Cl)cc2)nc1C[S+](O)CC(=O)NCCCN1CCN(Cc2ccccc2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CO(C=O)C(=O)CC(=O)CC1CCc2cccc(OC)c2-c2c1oc1cc(C)ccc21</chem>	<chem>CO(C=O)C(=O)CC(=O)CC1CCc2cccc(OC)c2-c2c1oc1cc(C)ccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1Cc2cc(S(=O)(=O)Nc3ccc(C(=O)O)cc3)ccc2N1</chem>	<chem>O=C1Cc2cc(S(=O)(=O)Nc3ccc(C(=O)O)cc3)ccc2N1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)CC1CC(Cc2ccc(-c3ccc4nc(CO)=Nc5ccc(F)cc5)cn4c3)cc2)CC1</chem>	<chem>O=C(O)CC1CCC(Cc2ccc(-c3ccc4nc(CO)=Nc5ccc(F)cc5)cn4c3)cc2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCCCCCCC[N+](C)(C)C1cccc1O</chem>	<chem>CCCCCCCCCCCCC[N+](C)(C)C1cccc1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc2c(c1)C(=O)C2=O</chem>	<chem>Cc1ccc2c(=O)c(=O)c2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)CSc1cccc1C(=O)O</chem>	<chem>O=C(O)CSc1cccc1C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>COc1ccc(S(=O)(=O)N(CC(C)C)CC(O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)OCc2cnsc2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(S(=O)(=O)N(CC(C)C)CC(O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)OCc2cnsc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)=CCn1cc2c(nc(NC(=O)Nc3cc(Cl)ccc3F)n3nc(-c4ccco4)nc23)n1</chem>	<chem>CC(C)=CCn1cc2c(nc(NC(=O)Nc3cc(Cl)ccc3F)n3nc(-c4ccco4)nc23)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C=C(NC(=O)c2cccc(C)c2)C(=O)NCCCN2CCOCC2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(C=C(NC(=O)c2cccc(C)c2)C(=O)NCCCN2CCOCC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NCC1CCC2(CCN(C(=O)CC3CC3)CC2)CO1)c1ccc2ccccc2n1</chem>	<chem>O=C(NCC1CCC2(CCN(C(=O)CC3CC3)CC2)CO1)c1ccc2ccccc2n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc2[nH]c(-c3ccncc3)c(-c3ccccc3)c2c1</chem>	<chem>COc1ccc2[nH]c(-c3ccncc3)c(-c3ccccc3)c2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1=C(N)C(=O)c2c(ccc3ccccc23)C1=O</chem>	<chem>CC1=C(N)C(=O)c2c(ccc3ccccc23)C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)OC1Cc2c(ccc3ccc(=O)oc23)OC1(C)C</chem>	<chem>CC(=O)OC1Cc2c(ccc3ccc(=O)oc23)OC1(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCc1cccc1N(C(=O)CCl)C(=N)C(C)C</chem>	<chem>CCCCc1cccc1N(C(=O)CCl)C(=N)C(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(-c2cc(C3CC4CCC3N4)cnc2F)cn1</chem>	<chem>COc1ccc(-c2cc(C3CC4CCC3N4)cnc2F)cn1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CCOc1ccc(NC(=O)N2CC(=O)N3C(Cc4c([nH]c5ccccc45)C3c3ccc4c(c3)OCO4)C2)cc1</chem>	<chem>CCOc1ccc(NC(=O)N2CC(=O)N3C(Cc4c([nH]c5ccccc45)C3c3ccc4c(c3)OCO4)C2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC=Cc1c(C2CCCC2)oc(=O)c(S(=O)(=O)NCCCN2CCN(c3ccccc3C(F)(F)F)CC2)c1O</chem>	<chem>CC=Cc1c(C2CCCC2)oc(=O)c(S(=O)(=O)NCCCN2CCN(c3ccccc3C(F)(F)F)CC2)c1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)Nc1cc(C(=O)NCCCCCCCCC)cc(C(=O)N(CCCCCC)OCCCCCCCCCCCCCCCCC)c1</chem>	<chem>CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)Nc1cc(C(=O)NCCCCCCCCC)cc(C(=O)N(CCCCCC)OCCCCCCCCCCCCCCCCC)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(C=Cc1ccc(C(F)(F)F)cc1)NNC(=O)c1ccc2ccccc2c1</chem>	<chem>O=C(C=Cc1ccc(C(F)(F)F)cc1)NNC(=O)c1ccc2ccccc2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)Cc1ccc(CSCCNc2=NS(=O)(=O)c3ccccc32)cc1</chem>	<chem>CN(C)Cc1ccc(CSCCNc2=NS(=O)(=O)c3ccccc32)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCn1c(=O)c(C(=O)Nc2c(C)cc(C)cc2C)c(O)c2ccccc21</chem>	<chem>CCCCCn1c(=O)c(C(=O)Nc2c(C)cc(C)cc2C)c(O)c2ccccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C=NNC(=O)COc2ccc3c4c(c(=O)oc3c2)CCCC4)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(C=NNC(=O)COc2ccc3c4c(c(=O)oc3c2)CCCC4)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)c1ccc2nc(-c3ccccc3F)c(-c3ccc(Cl)s3)nc2c1</chem>	<chem>O=C(O)c1ccc2nc(-c3ccccc3F)c(-c3ccc(Cl)s3)nc2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCNC(=O)C1OC(n2cnc3c(NC(=O)Nc4c(C)cccc4Cl)ncnc32)C(O)C1O</chem>	<chem>CCNC(=O)C1OC(n2cnc3c(NC(=O)Nc4c(C)cccc4Cl)ncnc32)C(O)C1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(OC(C)C(C)O)CNCCO)c(Br)c1</chem>	<chem>Cc1ccc(OC(C)C(C)O)CNCCO)c(Br)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>OC1cccc1C1=CC(c2ccc3c(c2)OCCO3)Cc2nc(SCc3ccc(Cl)cc3)ncc21</chem>	<chem>OC1cccc1C1=CC(c2ccc3c(c2)OCCO3)Cc2nc(SCc3ccc(Cl)cc3)ncc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(-c2cn(Cc3ccccc3Cl)nn2)ccc1-n1cnc(C)c1</chem>	<chem>COc1cc(-c2cn(Cc3ccccc3Cl)nn2)ccc1-n1cnc(C)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCNc1c(=O)c2ccccc2n2c(SC(C)C(=O)Nc3c(F)cccc3F)nncc12</chem>	<chem>CCCNc1c(=O)c2ccccc2n2c(SC(C)C(=O)Nc3c(F)cccc3F)nncc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cnn(CC2CC3CCC2N(CC(O)c2ccccc2)C3)c1</chem>	<chem>Cc1cnn(CC2CC3CCC2N(CC(O)c2ccccc2)C3)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)=CCCC(C)=CCCC1=CC(=O)C(c2cccc(O)c2O)=CC1=O</chem>	<chem>CC(C)=CCCC(C)=CCCC1=CC(=O)C(c2cccc(O)c2O)=CC1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>FC(F)OC1cccc1-c1ccnc2[nH]c(C3(F)CCNCC3)cc12</chem>	<chem>FC(F)OC1cccc1-c1ccnc2[nH]c(C3(F)CCNCC3)cc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>OC1cccc1C=NCCCCCN1CCC(c2noc3cc(F)ccc23)CC1</chem>	<chem>OC1cccc1C=NCCCCCN1CCC(c2noc3cc(F)ccc23)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCc1nc(C)n(Cc2ccc(-c3ccccc3-c3nn[nH]n3)cc2)c(=O)c1Cc1ccc(-c2ccccc2-c2nn[nH]n2)cc1</chem>	<chem>CCCCc1nc(C)n(Cc2ccc(-c3ccccc3-c3nn[nH]n3)cc2)c(=O)c1Cc1ccc(-c2ccccc2-c2nn[nH]n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=c1c2ccccc2oc2ccc(O)c(OCCCN3CCN(CCCNc4ccc5ccc(nc5cccn4)CC3)c12</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)CCOc1ccc(Nc2ncc3c(n2)-c2ccc(Cl)cc2CCC3)cc1</chem>	<chem>CN(C)CCOc1ccc(Nc2ncc3c(n2)-c2ccc(Cl)cc2CCC3)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1c(Cc2c(F)cccc2F)nc(SCC(=O)Nc2ccccc2C(F)(F)F)[nH]c1=O</chem>	<chem>CCc1c(Cc2c(F)cccc2F)nc(SCC(=O)Nc2ccccc2C(F)(F)F)[nH]c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(OS(=O)(=O)c2cccc(N)c2C#N)cc(C)c1Cl</chem>	<chem>Cc1cc(OS(=O)(=O)c2cccc(N)c2C#N)cc(C)c1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nsc1CN(C)C(=O)CCc1ccc(N2CCOCC2)nc1</chem>	<chem>Cc1nsc1CN(C)C(=O)CCc1ccc(N2CCOCC2)nc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(C)nc(N2CCCC(C(=O)NCC3(O)CCCC3)C2)n1</chem>	<chem>Cc1cc(C)nc(N2CCCC(C(=O)NCC3(O)CCCC3)C2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCn1cc(CN2CC3CCCN(c4cc(C)ccn4)C3C2)c(C)n1</chem>	<chem>CCn1cc(CN2CC3CCCN(c4cc(C)ccn4)C3C2)c(C)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C(=O)NO)cc1NC(=O)c1nc(C2CC2)nc1Nc1cnnc1</chem>	<chem>COc1ccc(C(=O)NO)cc1NC(=O)c1nc(C2CC2)nc1Nc1cnnc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CN(c2cc3c(cc2F)c(=O)c(C(=O)O)cn3C2CC2)CCN1</chem>	<chem>CC1CN(c2cc3c(cc2F)c(=O)c(C(=O)O)cn3C2CC2)CCN1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>O=c1c2c(OCOCO)c(Br)c(Br)c(Br)c2[nH]n1-c1ccc(Cl)cc1</chem>	<chem>O=c1c2c(OCOCO)c(Br)c(Br)c(Br)c2[nH]n1-c1ccc(Cl)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#Cc1cccc(Cl)c1-c1ccc(C(=O)Sc2ccc(C(=O)O)cc2)cc1</chem>	<chem>N#Cc1cccc(Cl)c1-c1ccc(C(=O)Sc2ccc(C(=O)O)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(CN(C(=O)CSc2nc(=O)n(Cc3cnccc3)c3c2CCC3)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(CN(C(=O)CSc2nc(=O)n(Cc3cnccc3)c3c2CCC3)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cccc1-c1cncc(Nc2cc(O)ccn2)c1</chem>	<chem>COc1cccc1-c1cncc(Nc2cc(O)ccn2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NCCCNc1nccc(-c2c(-c3ccc(F)cc3)ncn2Cc2cccc(NC(=O)c3cccc(F)c3)c2)n1</chem>	<chem>NCCCNc1nccc(-c2c(-c3ccc(F)cc3)ncn2Cc2cccc(NC(=O)c3cccc(F)c3)c2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)CN1CCN(c2c(C#N)c3cc4cccc4nc3n2-c2ccccc2)CC1</chem>	<chem>CC(C)CN1CCN(c2c(C#N)c3cc4cccc4nc3n2-c2ccccc2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(-c2csc(N3N=C(C)CC3=O)c2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(-c2csc(N3N=C(C)CC3=O)c2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)N=C(O)N1CCN2cc(C3(O)CCN(c4ccc(C(F)(F)F)cc4)CC3)cnc2C1</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>CCC(=O)N1c2ccccc2-c2nnc(SC)nc2OC1c1sccc1C</chem>	<chem>CCC(=O)N1c2ccccc2-c2nnc(SC)nc2OC1c1sccc1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cccc1C(=O)Oc1ccc(C=NNC(=O)c2ccncc2)cc1</chem>	<chem>Cc1cccc1C(=O)Oc1ccc(C=NNC(=O)c2ccncc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C=C(=O)c2ccc(OC)cc2)C(OC)c1</chem>	<chem>COc1ccc(C(=O)C=Cc2ccc(OC)cc2OC)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>OC(CC(F)(F)C(F)(F)F)c1nnc2n1-c1ccc(Cl)cc1C(c1ccccc1Cl)=NC2</chem>	<chem>OC(CC(F)(F)C(F)(F)F)c1nnc2n1-c1ccc(Cl)cc1C(c1ccccc1Cl)=NC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)c1c(-c2ccc(Cl)cc2)c2cc(Cl)ccc2n1Cc1ccc(Cl)cc1</chem>	<chem>O=C(O)c1c(-c2ccc(Cl)cc2)c2cc(Cl)ccc2n1Cc1ccc(Cl)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nc(CN(C)C(=O)NCC(O)c2ccc(NS(C(=O)=O)c(F)c2)cs1</chem>	<chem>Cc1nc(CN(C)C(=O)NCC(O)c2ccc(NS(C(=O)=O)c(F)c2)cs1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NCCO)c1ccc(NS(=O)(=O)c2ccsc2)cc1</chem>	<chem>O=C(NCCO)c1ccc(NS(=O)(=O)c2ccsc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)CC(=O)CC(=O)CS(C(=O)Nc1cccc1</chem>	<chem>CC(=O)CC(=O)CC(=O)CS(C(=O)Nc1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>OCCN(CCO)c1nnc(-c2nc(-c3ccccc3)nc(-c3ccccc3)c2-c2ccccc2)s1</chem>	<chem>OCCN(CCO)c1nnc(-c2nc(-c3ccccc3)nc(-c3ccccc3)c2-c2ccccc2)s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(Oc1ccccc1)C(=O)ON=C1C2CCn3c(=O)n(-c4ccccc4)c(=O)n3C2C(O)C2OC12</chem>	<chem>CC(Oc1ccccc1)C(=O)ON=C1C2CCn3c(=O)n(-c4ccccc4)c(=O)n3C2C(O)C2OC12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CO(C=O)CSc1nc(-c2ccc(Cl)cc2)ns1</chem>	<chem>CO(C=O)CSc1nc(-c2ccc(Cl)cc2)ns1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC=CC=CC=CC(=O)CCc1ccc(O)c(OC)c1</chem>	<chem>CC=CC=CC=CC(=O)CCc1ccc(O)c(OC)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NS(=O)(=O)c1ccc(CCN(C(=O)Nc2ccccc2)cc1</chem>	<chem>NS(=O)(=O)c1ccc(CCN(C(=O)Nc2ccccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CCSCC(C)(O)CNC(=O)Cn1ccc2ccccc2c1=O</chem>	<chem>CCSCC(C)(O)CNC(=O)Cn1ccc2ccccc2c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCN1c2ccccc2N(C)C(=O)c2cccncc21</chem>	<chem>CCCN1c2ccccc2N(C)C(=O)c2cccncc21</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>O=C(O)c1cccc(NC(=O)c2nc3ccccc3c(=O)[nH]2)c1</chem>	<chem>O=C(O)c1cccc(NC(=O)c2nc3ccccc3c(=O)[nH]2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CSc1nc(N2CCOCC2)c2c3c(sc2n1)COC(C)(C)C3</chem>	<chem>CSc1nc(N2CCOCC2)c2c3c(sc2n1)COC(C)(C)C3</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COOC1(C)CCCCC1N1CCC(N2C(=O)N(C3CC3c3ccccc3)CC2(C)C)CC1</chem>	<chem>COOC1(C)CCCCC1N1CCC(N2C(=O)N(C3CC3c3ccccc3)CC2(C)C)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1=C(C)C(C)(O)OC1=O</chem>	<chem>CC1=C(C)C(C)(O)OC1=O</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CC(C)CC1NC(=O)C(c2ccc(C[N+](C)(C)C)cc2)NC(=O)C(C)C)OC(=O)C(c2ccccc2)OCCCCCCCC=CCC1=O</chem>	<chem>CC(C)CC1NC(=O)C(c2ccc(C[N+](C)(C)C)cc2)NC(=O)C(C)C)OC(=O)C(c2ccccc2)OCCCCCCCC=CCC1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c[nH]nc1C=C1CC2C3C(=O)N(Cc4ccccc4)C(=O)C3C(C)C(C)O)=C2C(C(C)C)C1=O</chem>	<chem>Cc1c[nH]nc1C=C1CC2C(=O)C(C)C(C)C3C(=O)N(Cc4ccccc4)C(=O)C23)C(C)C(C)C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNC(=O)c1c(NC(=O)C(C)OCc2ccc(Cl)cc2Cl)sc2c1CCC2</chem>	<chem>CNC(=O)c1c(NC(=O)C(C)OCc2ccc(Cl)cc2Cl)sc2c1CCC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(OC)c(C2CC3=C4CCC(=O)C=C4CCC3=NN2C)c1</chem>	<chem>COc1ccc(OC)c(C2CC3=C4CCC(=O)C=C4CCC3=NN2C)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)C(=O)NC(CSSCCCCO)C(=O)NC(Cc1cccc1)C(=O)O</chem>	<chem>O=C(O)C(=O)NC(CSSCCCCO)C(=O)NC(Cc1cccc1)C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCCC1NC(=O)C2CCCCN2C(=O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)C(C(O)C(N)CCSC)NC(=O)C(C(C)CC)NC(=O)C(C(O)CC)NC1=O</chem>	<chem>CCCCCCCCC1NC(=O)C2CCCCN2C(=O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)C(C(O)C(N)CCSC)NC(=O)C(C(C)CC)NC(=O)C(C(O)CC)NC1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(P(=O)(O)Cc2ccc(N(C)C(C)(C(=O)O)c3ccccc23)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(P(=O)(O)Cc2ccc(N(C)C(C)(C(=O)O)c3ccccc23)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCc1ccc(N2C(=O)C3CCCN(Cc4nc(-c5ccccc5C)oc4C)C3C2=O)cc1</chem>	<chem>CCCc1ccc(N2C(=O)C3CCCN(Cc4nc(-c5ccccc5C)oc4C)C3C2=O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc2nc(N3CCN(C(=O)CC4CNc5nc(C)ccc54)CC3)nc(N)c2cc1OC</chem>	<chem>COc1cc2nc(N3CCN(C(=O)CC4CNc5nc(C)ccc54)CC3)nc(N)c2cc1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC(=O)NCC1CC2c3cccc4c3c(en4C3CCOCC3)CC2N(C)C1</chem>	<chem>CCC(=O)NCC1CC2c3cccc4c3c(en4C3CCOCC3)CC2N(C)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>OCc1ccc(C(C(=O)O)NC(=O)C2CCN(c3nc(Nc4cccc(OCc5cccc(F)c5)c4)nc(OC4CC(O)C4)n3)CC2)cc1</chem>	<chem>OCc1ccc(C(C(=O)O)NC(=O)C2CCN(c3nc(Nc4cccc(OCc5cccc(F)c5)c4)nc(OC4CC(O)C4)n3)CC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(COCc1cccc(-c2nc(N)c(C(=O)c3ccc(Cl)cc3)s2)c1)OC(=O)Nc1ccc(F)cc1</chem>	<chem>CC(COCc1cccc(-c2nc(N)c(C(=O)c3ccc(Cl)cc3)s2)c1)OC(=O)Nc1ccc(F)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)OP(=O)(OC(C)C)C(NC(=O)c1cccn1N)c1ccc(F)cc1</chem>	<chem>CC(C)OP(=O)(OC(C)C)C(NC(=O)c1cccn1N)c1ccc(F)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
OC(c1cnc2ncccc2c1Nc1cccc(Br)c1)C1CCCCN1	OC(c1cnc2ncccc2c1Nc1cccc(Br)c1)C1CCCCN1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)CCNC(C=O)C1C(C(=O)Nc2ccc(Br)cc2)C2C=CC1C21CC1	CCN(CC)CCNC(C=O)C1C(C(=O)Nc2ccc(Br)cc2)C2C=CC1C21CC1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(NCCNCCCNCNC(C=O)c1cccc1O)c1cccc1	O=C(NCCNCCCNCNC(C=O)c1cccc1O)c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCNC(=O)C1(C)CCN1C(=O)c1cccc1C1CC1	COCCNC(=O)C1(C)CCN1C(=O)c1cccc1C1CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c(=O)c2c(ncn2CCN2CCN(c3cccc(C(F)(F)F)c3)CC2)n(C)c1=O	Cn1c(=O)c2c(ncn2CCN2CCN(c3cccc(C(F)(F)F)c3)CC2)n(C)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Oc2ncccc2C(=NO)NC2CCCC2)cc1	COc1ccc(Oc2ncccc2C(=NO)NC2CCCC2)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1ccc(C)c(S(=O))(=O)NC2CCc3c2cnn3-c2ccc(F)cc2)c1	Cc1ccc(C)c(S(=O))(=O)NC2CCc3c2cnn3-c2ccc(F)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCCOC(C=O)C(CCCCN1C(=O)CCC1=O)N1CCOCC1	CCCCCCCCCCCCOC(C=O)C(CCCCN1C(=O)CCC1=O)N1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)Cn2cnc3cccc3c2=O)cc1OC	COc1ccc(C(=O)Cn2cnc3cccc3c2=O)cc1OC	TRUE	TRUE	FALSE
Clc1ccc(-c2nc(NCCN3CCCC3)c3cccc3n2)c1Cl	Clc1ccc(-c2nc(NCCN3CCCC3)c3cccc3n2)c1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)S(=O)(=O)c1cccc(OCC(=O)Nc2ncs2)c1	CCN(CC)S(=O)(=O)c1cccc(OCC(=O)Nc2ncs2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc(S(=O))(=O)N2CCOCC2)cn1	Cn1cc(S(=O))(=O)N2CCOCC2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C1cc(CN)c(O)c(CF)c1	CC(C)C1cc(CN)c(O)c(CF)c1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1ccc(-c2nn[nH]n2)cc1NCc1cccn1	NC(=O)c1ccc(-c2nn[nH]n2)cc1NCc1cccn1	TRUE	TRUE	TRUE
CNc1nc(Nc2cccc(Cl)c2C)nc(Oc2ccc3[nH]c(=O)[nH]c3c2)n1	CNc1nc(Nc2cccc(Cl)c2C)nc(Oc2ccc3[nH]c(=O)[nH]c3c2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(N)C1CCN(c2c(F)cc3c(=O)c(C(=O)O)cn(C(C)C)c3c2F)C1	CC(N)C1CCN(c2c(F)cc3c(=O)c(C(=O)O)cn(C(C)C)c3c2F)C1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCc1cccn1C1=CC(c2ccs2)CC(OCc2ccc(CO)cc2)O1	O=C(NCc1cccn1C1=CC(c2ccs2)CC(OCc2ccc(CO)cc2)O1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CCCN1nnnc1Cc1cccc1	O=C(O)CCCN1nnnc1Cc1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCc1ccc(N2CCCC2)c(C(F)(F)F)c1)c1cnc(NCCCN2CCCC2)nc1	O=C(NCc1ccc(N2CCCC2)c(C(F)(F)F)c1)c1cnc(NCCCN2CCCC2)nc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(OCOP(=O)(O)O)C1(Cc2nn[nH]n2)CCc2c(ccc3ccccc23)C1	O=C(OCOP(=O)(O)O)C1(Cc2nn[nH]n2)CCc2c(ccc3ccccc23)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCS(=O)(=O)NC(=O)c1ccc2c(c1)OC1CCN(Cc3ccccc3)CC1C2	CCS(=O)(=O)NC(=O)c1ccc2c(c1)OC1CCN(Cc3ccccc3)CC1C2	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC(=O)Nc1c(F)cccc1F)C(=O)CSc1cccc2ccccc12	CCN(CC(=O)Nc1c(F)cccc1F)C(=O)CSc1cccc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1nc(Cc2ccc(F)cc2)nc2c1CCC(Cc1ccc(F)cc1)CC2	CN(C)c1nc(Cc2ccc(F)cc2)nc2c1CCC(Cc1ccc(F)cc1)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)(c1cccc(O)c1)c1cc2cc(C#N)ccc2o1	CC(O)(c1cccc(O)c1)c1cc2cc(C#N)ccc2o1	TRUE	TRUE	TRUE
NC1CCCC(=O)N(O)C1C(=O)O	NC1CCCC(=O)N(O)C1C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-n2ncn2)c(C(=O)N2C3CCC2C(COc2ncccc2-c2nccn2)C3)n1	Cc1ccc(-n2ncn2)c(C(=O)N2C3CCC2C(COc2ncccc2-c2nccn2)C3)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C#Cc2c(N)ncnc2OC2OC(CO)C(O)C(O)C2O)c1	COc1ccc(C#Cc2c(N)ncnc2OC2OC(CO)C(O)C(O)C2O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccnc(NC(=O)CCSc2nc3ccc(C)cc3c(=O)n2CCc2ccccc2)c1	Cc1ccnc(NC(=O)CCSc2nc3ccc(C)cc3c(=O)n2CCc2ccccc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1c(O)cc2c(c1O)C13CCN(C(=O)COCC4COc5cc(OCc6ccccc6)c(O)c(CC=C(C)C)c5C4=O)C(C2)N(CC2CC2)C3CCC1C5	COc1c(O)cc2c(c1O)C13CCN(C(=O)COCC4COc5cc(OCc6ccccc6)c(O)c(CC=C(C)C)c5C4=O)C(C2)N(CC2CC2)C3CCC1C5	FALSE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1ccc(NS(=O))(=O)c2ccc(N3CCCC3=O)cc2)cc1	CCOC(=O)c1ccc(NS(=O))(=O)c2ccc(N3CCCC3=O)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2nc(-c3cccc(NCCOCCCCCNc4c5c(nc6ccc(Cl)cc46)CCCC5)c3)sc2c1	COc1ccc2nc(-c3cccc(NCCOCCCCCNc4c5c(nc6ccc(Cl)cc46)CCCC5)c3)sc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(OC(C)C(=O)N2CCCC(C)(N3CC(C)C)C3)C2)ccc1C(=O)c1cc2c(C(=O)O)cccc2o1	COc1cc(OC(C)C(=O)N2CCCC(C)(N3CC(C)C)C3)C2)ccc1C(=O)c1cc2c(C(=O)O)cccc2o1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCC(c2ccc(Cl)cc2)C(CCS(C)(=O)=O)C1	CN1CCC(c2ccc(Cl)cc2)C(CCS(C)(=O)=O)C1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCC(C(=O)OCC=C)N1C(=O)CS1c1cccn1	C=CCC(C(=O)OCC=C)N1C(=O)CS1c1cccn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)OC(=O)c1nc(-c2ccccc2Cl)c(-c2ccccc2)nc1C	Cc1nc(-c2ccccc2)c(-c2ccccc2Cl)nc1C(=O)OC(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(Nc3ccc(Sc4nc(C)no4)c(Cl)c3)ncnc2cc1OCCCN1CCOCC1	COc1cc2c(Nc3ccc(Sc4nc(C)no4)c(Cl)c3)ncnc2cc1OCCCN1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(Cl)cc1NS(=O))(=O)c1cc(C(=O)Nc2cc(C)on2)c(C)S1	Cc1cc(NC(=O)c2cc(S(=O))(=O)Nc3cc(Cl)ccc3C)sc2C)no1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2=NN(C3=NC(=O)CS3)C(c3cc(OC)ccc3O)C2)cc1	COc1ccc(C2=NN(C3=NC(=O)CS3)C(c3cc(OC)ccc3O)C2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cc1ccccc1)NCCCN1CCN(Cc2cccc(Cl)c2)CC1	O=C(Cc1ccccc1)NCCCN1CCN(Cc2cccc(Cl)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(S(=O))(=O)NNC(=O)C(C)=Cc2ccc(O)c(O)c2)cc1	COc1ccc(S(=O))(=O)NNC(=O)C(C)=Cc2ccc(O)c(O)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC1OC(C(=O)N2CCN(c3ccc(F)cc3)CC2)=CC(c2cnc2)C1CCCCO	CCOC1OC(C(=O)N2CCN(c3ccc(F)cc3)CC2)=CC(c2cnc2)C1CCCCO	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC1(O)C=C(C(O)CO)C2O(C(CO)C(O)C(O)C2O)C(=O)O1	CCCCC1(O)C=C(C(O)CO)C2O(C(CO)C(O)C(O)C2O)C(=O)O1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc(N)c(CCCS(=O))(=O)c2ccc(Cl)cc2)c(OC2CCCC2)n1	Nc1nc(N)c(CCCS(=O))(=O)c2ccc(Cl)cc2)c(OC2CCCC2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(CC(=O)Nc1ccccc1Br)C(=O)C=Cc1ccccc1	CN(CC(=O)Nc1ccccc1Br)C(=O)C=Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)NC(=O)N1C(=O)CC1SC1=NCCS1)c1ccccc1	CC(C)NC(=O)N1C(=O)CC1SC1=NCCS1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1cccc(C(F)(F)F)c1)N1CCN2C(=O)c3ccccc3C12c1ccccc1	O=C(c1cccc(C(F)(F)F)c1)N1CCN2C(=O)c3ccccc3C12c1ccccc1	TRUE	TRUE	FALSE
COc1c(O)ccc2c1OC(c1ccc(O)cc1)CC2=O	COc1c(O)ccc2c1OC(c1ccc(O)cc1)CC2=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(F)c(N2CC3C(C2)C3NCC(F)F)n2ncnc2c1-c1cnc(NC(C)C)nc1C1CC1	Cc1c(F)c(N2CC3C(C2)C3NCC(F)F)n2ncnc2c1-c1cnc(NC(C)C)nc1C1CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)OC1CC(C)(C)CC2OC3(C)OC(=O)C(O)(C13)C21CO1	CC(=O)OC1CC(C)(C)CC2OC3(C)OC(=O)C(O)(C13)C21CO1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(-c2[nH]c(C3CCN(c4cccn4)CC3)nc2-c2cnc2)cc1	c1ccc(-c2[nH]c(C3CCN(c4cccn4)CC3)nc2-c2cnc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(CNc2oc(COc3ccccc3)nc2-c2ccccc2)cc1	c1ccc(CNc2oc(COc3ccccc3)nc2-c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc(-c2cnc3nnn(C44CN(c5cnc(C6=CCN(C(=O)N(C)OCCBr)CC6)cn5)CCO4)c3n2)cn1	Cn1cc(-c2cnc3nnn(C44CN(c5cnc(C6=CCN(C(=O)N(C)OCCBr)CC6)cn5)CCO4)c3n2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1ccccc1-c2cc(-c3ccc4c(c3)CCC(=O)N4)cnc2N)c1	NC(=O)c1ccccc1-c2cc(-c3ccc4c(c3)CCC(=O)N4)cnc2N)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(NC(=O)CSc2nnnn2-c2cc(C)cc(C)c2)no1	Cc1cc(C)cc(-n2nnnc2SC(C=O)Nc2cc(C)on2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)Oc1cc2ncc(C(N)=O)c(Nc3cccc(Cl)c3F)c2cc1N1CCC(N)CC1	CC(C)Oc1cc2ncc(C(N)=O)c(Nc3cccc(Cl)c3F)c2cc1N1CCC(N)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1C2CC1CC(OC(=O)C)c1ccc(Cl)cc1)c1ccc(Cl)cc1)C2	CN1C2CC1CC(OC(=O)C)c1ccc(Cl)cc1)c1ccc(Cl)cc1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)CSc2nc(O)cc(O)n2)cc1	Cc1ccc(C(=O)CSc2nc(O)cc(O)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CC(O)C2(CCN(CCC#N)CC2)Oc2ccccc21	CN1CC(O)C2(CCN(CCC#N)CC2)Oc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC(c1ccc(C#Cc2cccc3nccn23)cc1)C(N)C(=O)N1CCC(F)C1	CC(c1ccc(C#Cc2cccc3nccn23)cc1)C(N)C(=O)N1CCC(F)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1cc(C(=O)NC2CCC(OC3ccccc3)CC2)c(O)c(CN)c1	CC(C)c1cc(CN)c(O)c(C(=O)NC2CCC(OC3ccccc3)CC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1c(-c2ccccc2)c(C)c2cc(C=NNC3=NCCS3)ccc21	CCn1c(-c2ccccc2)c(C)c2cc(C=NNC3=NCCS3)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)CC1OC(=O)c2ccccc21	CCOC(=O)CC1OC(=O)c2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
COCC(CC(=O)O)n1cc(C(=O)c2cnc3ccccc23)c2cnc21	COCC(CC(=O)O)n1cc(C(=O)c2cnc3ccccc23)c2cnc21	TRUE	TRUE	TRUE
COCCOC(=O)c1ccc(NCC(CN(C)S(=O))(=O)c2ccc(Cl)cc2)N2CCN(C(c3ccccc3)c3ccc(Cl)cc3)CC2)cc1	COCCOC(=O)c1ccc(NCC(CN(C)S(=O))(=O)c2ccc(Cl)cc2)N2CCN(C(c3ccccc3)c3ccc(Cl)cc3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc2nc(CN3CCC(F)C3)cnc2c(=O)[nH]1	Nc1nc2nc(CN3CCC(F)C3)cnc2c(=O)[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cnnn1C1CN(CCCCN2cnc2C)CC2CCCOCC21	Cc1cnnn1CCCCN1CC2CCCOCC2C(n2nnc2C)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NCCCC(NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)N1CCOCC1)C(=O)c1nnc(-c2ccco2)o1	CC(=O)NCCCC(NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)N1CCOCC1)C(=O)c1nnc(-c2ccco2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(NCCCC(NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)OCc1ccccc1)NC(=O)c1cc2ccccc2[nH]1	N=C(NCCCC(NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)OCc1ccccc1)NC(=O)c1cc2ccccc2[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(CCC(F)(F)F)c1cc(Cl)c2c(c1)CNC(CF)C2	O=S(=O)(CCC(F)(F)F)c1cc(Cl)c2c(c1)CNC(CF)C2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-n2ncn2)c(C(=O)N2C3CCC2C(COc2ncc(F)cn2)C3)n1	Cc1ccc(-n2ncn2)c(C(=O)N2C3CCC2C(COc2ncc(F)cn2)C3)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCNc1ncc(-c2c(C)nn(C)c2C)c(NC2CC(CO)C(O)C2O)n1	COCCNc1ncc(-c2c(C)nn(C)c2C)c(NC2CC(CO)C(O)C2O)n1	TRUE	TRUE	TRUE
F(C)(F)C1(Nc2cc(-c3[nH]c4ccccc4c3Sc3cccc(F)c3)ccn2)CC1Nc1ncccc1C(F)(F)F	Fc1ccccc(Sc2c(-c3cnc(NC4(C(F)(F)F)CC4Nc4ncccc4C(F)(F)F)c3)[nH]c3ccccc23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1nnc2ccc(-c3ocnc3-c3ccc(F)cc3F)cn12	CC(C)(C)c1nnc2ccc(-c3ocnc3-c3ccc(F)cc3F)cn12	TRUE	TRUE	FALSE
CC1NC(NN=Cc2ccc([N+])(=O)[O-])s2)=NCC1=O	CC1NC(NN=Cc2ccc([N+])(=O)[O-])s2)=NCC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1ccc(-c2ccc3c(c2)COC3=S)cc1	Oc1ccc(-c2ccc3c(c2)COC3=S)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)Nc1ccc(C#Cc2cc(F)cc(C(=O)NCCS(C)(=O)=O)c2)cc1	CS(=O)(=O)CCNC(=O)c1cc(F)cc(C#Cc2ccc(NS(C)(=O)=O)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)NCCCC1CCCC1NC(=O)c1ccc2cc(OC3ccc(C(F)(F)F)cn3)ccc2n1	CS(=O)(=O)NCCCC1CCCC1NC(=O)c1ccc2cc(OC3ccc(C(F)(F)F)cn3)ccc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
NCP(=O)(O)c1ccc(O)c(Br)c1	NCP(=O)(O)c1ccc(O)c(Br)c1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(CCP(=O)(O)OCc1ccccc1)C(=O)O	NC(CCP(=O)(O)OCc1ccccc1)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(OC2cc(Nc3ccc(N)cc3)nc(N)n2)cc1	COc1ccc(OC2cc(Nc3ccc(N)cc3)nc(N)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(Cc1ccon1)S(=O))(=O)c1cccc(C#N)c1	CN(Cc1ccon1)S(=O))(=O)c1cccc(C#N)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(CCCN(C)CCOc2ccc(-c3noc(C4CCCN4C(=O)OC(C)(C)C)n3)cc2)c(C(C)C)cc1OC	COc1cc(CCCN(C)CCOc2ccc(-c3noc(C4CCCN4C(=O)OC(C)(C)C)n3)cc2)c(C(C)C)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NN=Cc1ccc(Br)cc1)c1cc(-c2ccc(Cl)cc2)no1	O=C(NN=Cc1ccc(Br)cc1)c1cc(-c2ccc(Cl)cc2)no1	TRUE	TRUE	TRUE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>COC(=O)c1csc(C2CC(OC(c3ccccc3)(c3ccccc3)c3ccccc3)C(=O)O2)n1</chem>	<chem>COC(=O)c1csc(C2CC(OC(c3ccccc3)(c3ccccc3)c3ccccc3)C(=O)O2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)c1cnc(-n2nc(C)cc2NC(=O)c2cccn2)n(Cc2ccco2)c1=O</chem>	<chem>CCOC(=O)c1cnc(-n2nc(C)cc2NC(=O)c2cccn2)n(Cc2ccco2)c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOc1ccc(NC(=O)CSc2nc(=O)n(CCOc)c3c2CCC3)cc1</chem>	<chem>CCOc1ccc(NC(=O)CSc2nc(=O)n(CCOc)c3c2CCC3)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c(N2C(=O)C3C4CC(OC(C)(C)C)CC4C3C2=O)ccc(C#N)c1C(F)(F)F</chem>	<chem>Cc1c(N2C(=O)C3C4CC(OC(C)(C)C)CC4C3C2=O)ccc(C#N)c1C(F)(F)F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1C(O)=CC2=NC(OC(C)CO)=CC(=O)C2(C)C1O</chem>	<chem>CC1C(O)=CC2=NC(OC(C)CO)=CC(=O)C2(C)C1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)C1=COC(=O)C2C(=O)c3c(O)cccc3C(C(=O)O)C12</chem>	<chem>COC(=O)C1=COC(=O)C2C(=O)c3c(O)cccc3C(C(=O)O)C12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>[N-]=[N+]=NCC1C[c2c[nH]c3ccccc23]CC2CCC1N2C</chem>	<chem>CN1C2CCC1C(CN=[N+]=[N-])C(c1c[nH]c3ccccc13)C2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCC[n+ ]1cc(C2CCCC2)[n+](CCCC)c1cccc1</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(-n2nccn2)c(C(=O)N2CC3CN(c4ncccc4Cl)CC3C2)c1</chem>	<chem>Cc1ccc(-n2nccn2)c(C(=O)N2CC3CN(c4ncccc4Cl)CC3C2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)NC(=O)C1CCCCN1C(=O)C(O)(Cc1ccccc1)NC(=O)Cc1ccccc1</chem>	<chem>CC(C)(C)NC(=O)C1CCCCN1C(=O)C(O)(C(Cc1ccccc1)NC(=O)Cc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCNC(=O)Nc1nnc(-c2ccncc2)s1</chem>	<chem>CCCCCNC(=O)Nc1nnc(-c2ccncc2)s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(c1cccn1)N1CCN(C(=O)c2ccc(Cl)cc2)CC1</chem>	<chem>O=C(c1ccc(Cl)cc1)N1CCN(C(=O)c2cccn2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOP(=O)(OC)C1C(C(=O)Nc2ccc(Br)cc2)=C(C)NC(C)=C1C(=O)Nc1ccc(C)c(C)c1</chem>	<chem>CCOP(=O)(OC)C1C(C(=O)Nc2ccc(Br)cc2)=C(C)NC(C)=C1C(=O)Nc1ccc(C)c(C)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NCc1ccc(N2CCc3ccccc32)cc1)C(F)(F)F</chem>	<chem>O=C(NCc1ccc(N2CCc3ccccc32)cc1)C(F)(F)F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1C=CC=C(C)C(C(=O)NC2=CC(=O)C(NCc3ccccc(-c4ccccc4)c3)=C(CC(C)CC(OC)C(O)C(C)C=C(C)C1OC(N)=O)C2=O</chem>	<chem>COc1C=CC=C(C)C(C(=O)NC2=CC(=O)C(NCc3ccccc(-c4ccccc4)c3)=C(CC(C)CC(OC)C(O)C(C)C=C(C)C1OC(N)=O)C2=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC12CCC3C(CCC4NC(=O)CCC43C=O)C1CCC2=O</chem>	<chem>CC12CCC3C(CCC4NC(=O)CCC43C=O)C1CCC2=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCNC(=O)c1cc(S(N)(=O)=O)cn1C</chem>	<chem>CCNC(=O)c1cc(S(N)(=O)=O)cn1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(=O)oc2cc(SCCC3CCCN3)ccc12</chem>	<chem>Cc1cc(=O)oc2cc(SCCC3CCCN3)ccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(C)c(Nc2ccnc(Nc3ccc(N4CCN(C)CC4)cc3)n2)c(C)c1</chem>	<chem>Cc1cc(C)c(Nc2ccnc(Nc3ccc(N4CCN(C)CC4)cc3)n2)c(C)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(C=Cc1ccc2c(c1)CN(C(=O)c1ccccc1)C(c1ccccc1)O2)C(F)(F)F</chem>	<chem>O=C(c1ccccc1)N1Cc2cc(C=CC(=O)C(F)(F)F)ccc2OC1c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN1CCN(C(=O)CNC2=NS(=O)(=O)c3ccccc32)CC1</chem>	<chem>CN1CCN(C(=O)CNC2=NS(=O)(=O)c3ccccc32)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c(CN)c(C)nc2c(C)cccc12</chem>	<chem>Cc1nc2c(C)cccc2c(C)c1CN</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC(c1ccc(OC)cc1)c1cnnc1</chem>	<chem>CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC(c1ccc(OC)cc1)c1cnnc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)Nc1cccc(NC(=O)c2cnc(O)nc2O)c1</chem>	<chem>CC(=O)Nc1cccc(NC(=O)c2cnc(O)nc2O)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)Cn1ccnc1CN(C)C(=O)CCn1cccc1</chem>	<chem>CC(C)Cn1ccnc1CN(C)C(=O)CCn1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCOC(C(=O)N1Cc2cc(OC)ccc2CC1C(=O)O</chem>	<chem>COCOC(C(=O)N1Cc2cc(OC)ccc2CC1C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCOc1ccc(-c2ccc(OCCCN3CCOCC3)cc2)cc1</chem>	<chem>CCCOc1ccc(-c2ccc(OCCCN3CCOCC3)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)CCCCNCc1cccc2nc(O)c3ccccc3c12</chem>	<chem>O=C(O)CCCCNCc1cccc2nc(O)c3ccccc3c12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nc2cc(C(=O)NN=Cc3ccccc3[N+](=O)[O-])ccc2[nH]1</chem>	<chem>Cc1nc2cc(C(=O)NN=Cc3ccccc3[N+](=O)[O-])ccc2[nH]1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cccc(C(=O)Nc2ccnc2Cl)c1</chem>	<chem>Cc1cccc(C(=O)Nc2ccnc2Cl)c1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CNc1nc(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2)nc1C(F)(F)F</chem>	<chem>CNc1nc(Nc2ccc(N3CCN(C(C)=O)CC3)cc2)nc1C(F)(F)F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)C1=C(C(N)Oc2ccc(-c3ccc(Br)cc3)cc2C1c1cccc([N+](=O)[O-])c1</chem>	<chem>CCOC(=O)C1=C(C(N)Oc2ccc(-c3ccc(Br)cc3)cc2C1c1cccc([N+](=O)[O-])c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1nc(S(N)(=O)=O)sc1=NC(=O)CSc1nc2ccccc2s1</chem>	<chem>Cn1nc(S(N)(=O)=O)sc1=NC(=O)CSc1nc2ccccc2s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1ncc(Cl)c1-c1cc(C(=O)NC(CC(=O)O)c2ccccc2F)cc(N)c1F</chem>	<chem>Cn1ncc(Cl)c1-c1cc(C(=O)NC(CC(=O)O)c2ccccc2F)cc(N)c1F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1NC(=S)NC(=O)C1=Cc1ccc(F)cc1</chem>	<chem>O=C1NC(=S)NC(=O)C1=Cc1ccc(F)cc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>O=C(CN(C(=O)c1ccc(S(=O)(=O)N2CCOCC2)s1)c1ccc(F)cc1)NCC1CCCO1</chem>	<chem>O=C(CN(C(=O)c1ccc(S(=O)(=O)N2CCOCC2)s1)c1ccc(F)cc1)NCC1CCCO1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCN1CCc2cccc3c2C(CCC3)C1</chem>	<chem>CCCCCCCN1CCc2cccc3c2C(CCC3)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOc1cc2c3c(c1)C(C(=O)N1CCC(N4CCCC4)CC1)C(c1ccc(F)cc1)O3</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>CCCN1c(=O)c2c(nc(C3CC3)n2C(C)c2ccccc2)n(CCC)c1=O</chem>	<chem>CCCN1c(=O)c2c(nc(C3CC3)n2C(C)c2ccccc2)n(CCC)c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1nnc(C(F)F)s1)C12CC3CC(CC(C3)C1)C2</chem>	<chem>O=C(Nc1nnc(C(F)F)s1)C12CC3CC(CC(C3)C1)C2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)C1(Cc2cccc(C(F)(F)F)c2)CCN(C(=O)C(Cc2ccc(OCC(=O)O)cc2)NC(=O)C(C)(C)N)CC1</chem>	<chem>CCOC(=O)C1(Cc2cccc(C(F)(F)F)c2)CCN(C(=O)C(Cc2ccc(OCC(=O)O)cc2)NC(=O)C(C)(C)N)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(-c2cc3c(O)cccc3[nH]2)cc1Cl</chem>	<chem>COc1ccc(-c2cc3c(O)cccc3[nH]2)cc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C=CC(O)=C2C(=O)NC(=S)NC2=O)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(C=CC(O)=C2C(=O)NC(=S)NC2=O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(NC(=O)c2c(N)sc3c2CCC3)c(C)c1</chem>	<chem>COc1ccc(NC(=O)c2c(N)sc3c2CCC3)c(C)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(Br)c2c(c1)C=C(C(=O)O)C(c1ccc3c(c1)OCO3)O2</chem>	<chem>COc1cc(Br)c2c(c1)C=C(C(=O)O)C(c1ccc3c(c1)OCO3)O2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1CC(NCCO)C(=O)N1</chem>	<chem>O=C1CC(NCCO)C(=O)N1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(Oc2ccc(NC(=O)c3cccn3)cc2)ccc1N(C)S(=O)(=O)c1c(F)cccc1F</chem>	<chem>Cc1cc(Oc2ccc(NC(=O)c3cccn3)cc2)ccc1N(C)S(=O)(=O)c1c(F)cccc1F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCONC(=O)Nc1nc2cc(-c3cnc(C(C)(C)O)nc3)ccc(-c3cccn3)c2[nH]1</chem>	<chem>CCONC(=O)Nc1nc2cc(-c3cnc(C(C)(C)O)nc3)ccc(-c3cccn3)c2[nH]1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(-c2nc(C(=O)Nc3nnc(C4CCCN(CC5CCCO5)C4)s3)co2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(-c2nc(C(=O)Nc3nnc(C4CCCN(CC5CCCO5)C4)s3)co2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)NS(=O)(=O)c1ccc(NC(=O)Nc2ccc(Cl)cc2)cc1</chem>	<chem>CC(=O)NS(=O)(=O)c1ccc(NC(=O)Nc2ccc(Cl)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1NC(=O)N(c2ccc3c(c2)OCO3)C(=O)C1=Cc1cccc(Nc2cccc(C(F)(F)F)c2)n1</chem>	<chem>O=C1NC(=O)N(c2ccc3c(c2)OCO3)C(=O)C1=Cc1cccc(Nc2cccc(C(F)(F)F)c2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1ccc(N2CCOCC2)cc1)c1ccc(-n2ccnc2)c([N+](=O)[O-])c1</chem>	<chem>O=C(Nc1ccc(N2CCOCC2)cc1)c1ccc(-n2ccnc2)c([N+](=O)[O-])c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1ccc(CC(NC(=O)C2CCCN2S(=O)(=O)c2cc(Cl)cc(Cl)c2)C(=O)O)cc1)c1c(Cl)cncc1Cl</chem>	<chem>O=C(Nc1ccc(CC(NC(=O)C2CCCN2S(=O)(=O)c2cc(Cl)cc(Cl)c2)C(=O)O)cc1)c1c(Cl)cncc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CCOC(=O)C(CC)Sc1nnc(-c2ccc3[nH]cnc3c2)n1-c1ccccc1</chem>	<chem>CCOC(=O)C(CC)Sc1nnc(-c2ccc3[nH]cnc3c2)n1-c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)C1=C2SCC(=O)N2C(NC(=O)c2ccccc2)C1</chem>	<chem>COC(=O)C1=C2SCC(=O)N2C(NC(=O)c2ccccc2)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NO)C(Cc1ccc(O)c(Br)c1)C(=O)N1CCC(O)(Cc2cccc(Cl)c2)CC1</chem>	<chem>O=C(NO)C(Cc1ccc(O)c(Br)c1)C(=O)N1CCC(O)(Cc2cccc(Cl)c2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1c2c(c3ccccc31)C(NCCNC(=O)C(F)(F)F)CC(C)(C)C2</chem>	<chem>Cn1c2c(c3ccccc31)C(NCCNC(=O)C(F)(F)F)CC(C)(C)C2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=c1[nH]c2cc3nnc(Nc4ccc(C(F)(F)F)cc4)c3cc2n1CCCN1CCOCC1</chem>	<chem>O=c1[nH]c2cc3nnc(Nc4ccc(C(F)(F)F)cc4)c3cc2n1CCCN1CCOCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nccc2c3ccn(Cc4ccnc4)c3n(C3OC(CO)C(O)C3O)c12</chem>	<chem>Cc1nccc2c3ccn(Cc4ccnc4)c3n(C3OC(CO)C(O)C3O)c12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(C=Cc1ccccc1)c1ccc(NC(=O)c2ccc3ccccc3n2)cc1</chem>	<chem>O=C(C=Cc1ccccc1)c1ccc(NC(=O)c2ccc3ccccc3n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNc1nncn2cc(-c3cccc(F)c3C)sc12</chem>	<chem>CNc1nncn2cc(-c3cccc(F)c3C)sc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCS(=O)(=O)N1CCC(C(=O)Nc2ccc(N3CCCC3)cc2)CC1</chem>	<chem>CCS(=O)(=O)N1CCC(C(=O)Nc2ccc(N3CCCC3)cc2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Oc1cccc(C=NNC(=S)NC2CCCC2)c1</chem>	<chem>Oc1cccc(C=NNC(=S)NC2CCCC2)c1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CCCC(CN(O)C=O)C(=O)N1SCC1C(=O)Nc1ccc2c(c1)C(Cc1ccc(F)cc1)N(C(C)=O)CC2</chem>	<chem>CCCC(CN(O)C=O)C(=O)N1SCC1C(=O)Nc1ccc2c(c1)C(Cc1ccc(F)cc1)N(C(C)=O)CC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC(Cc1ccc2ccccc2c1)C(=O)N1Cc2ccccc2OC1c1cc(Cl)ccc1-n1cnnn1</chem>	<chem>NC(Cc1ccc2ccccc2c1)C(=O)N1Cc2ccccc2OC1c1cc(Cl)ccc1-n1cnnn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)C1=C(C)NC(C)=C(C(=O)OCC2CCCC2)C1c1cccc([N+](=O)[O-])c1</chem>	<chem>COC(=O)C1=C(C)NC(C)=C(C(=O)OCC2CCCC2)C1c1cccc([N+](=O)[O-])c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(N)cc(C)c1CN(C(=O)C1C=Cc2c(=O)n(C(CSc3ccccc3)C(=O)O)c(=O)n21</chem>	<chem>Cc1cc(N)cc(C)c1CN(C(=O)C1C=Cc2c(=O)n(C(CSc3ccccc3)C(=O)O)c(=O)n21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cccc(-c2noc(CC3CC(CNC(=O)CCC4CCCC4)=NO3)n2)c1</chem>	<chem>COc1cccc(-c2noc(CC3CC(CNC(=O)CCC4CCCC4)=NO3)n2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Clc1ccc2c(NCCCN=Cc3cc(Cl)cc(Cl)c3)ccnc2c1</chem>	<chem>Clc1cc(Cl)cc(C=NCCCNc2ccnc3cc(Cl)ccc23)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1ccc(F)cc1)C1CCCN(c2nnc3c2nc2n3CCCC2)C1</chem>	<chem>O=C(Nc1ccc(F)cc1)C1CCCN(c2nnc3c2nc2n3CCCC2)C1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>COc1ccc(Nc2nc(N3CCCC3)c3c4c(sc3n2)CCCC4)c(OC)c1</chem>	<chem>COc1ccc(Nc2nc(N3CCCC3)c3c4c(sc3n2)CCCC4)c(OC)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCS(=O)(=O)Nc1ccc(F)c(C(=O)Nc2cnc3[nH]nc(OC)c3c2)c1F</chem>	<chem>CCCS(=O)(=O)Nc1ccc(F)c(C(=O)Nc2cnc3[nH]nc(OC)c3c2)c1F</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CCc1N=C(c2ccc(Cl)cc2)c2cc(Cl)ccc2-n2c(C)nnc21</chem>	<chem>CCc1N=C(c2ccc(Cl)cc2)c2cc(Cl)ccc2-n2c(C)nnc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)c1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccc3c(c2)C2(CCCCC2)C(C(=O)OC)=C(N)O3)cc1</chem>	<chem>COC(=O)C1=C(C(N)Oc2ccc(NS(=O)(=O)c3ccc(C(=O)OC)cc3)cc2C12CCCCC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(C(CCCCN(C(=O)OCCN(C(=O)c1ccccc1)S(=O)(=O)c1ccc(OC)cc1</chem>	<chem>CCN(C(CCCCN(C(=O)OCCN(C(=O)c1ccccc1)S(=O)(=O)c1ccc(OC)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(-c2cnn(C)c2)ccc1Nc1ncc2cc[nH]c(NCCCN3CCCC3)c2n1</chem>	<chem>COc1cc(-c2cnn(C)c2)ccc1Nc1ncc2cc[nH]c(NCCCN3CCCC3)c2n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC(S)=NCCSc1nnc(-c2ccc(F)cc2)o1</chem>	<chem>NC(S)=NCCSc1nnc(-c2ccc(F)cc2)o1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1ccc(OC(C(=O)Nc2ccc3nc(SC4CCCC4)sc3c2)cc1</chem>	<chem>CCc1ccc(OC(C(=O)Nc2ccc3nc(SC4CCCC4)sc3c2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=Cc1cccc2nc(SCc3ccccc3)n(Cc3ccccc3)c12</chem>	<chem>O=Cc1cccc2nc(SCc3ccccc3)n(Cc3ccccc3)c12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1cccc(C)c1NC(=O)C(=O)C(C(=O)c1ccc(C)cc1)C1OC(=O)c2ccccc21</chem>	<chem>CCc1cccc(C)c1NC(=O)C(=O)C(C(=O)c1ccc(C)cc1)C1OC(=O)c2ccccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCOc1ccccc1-c1ncc(C(=O)O)c(=O)[nH]1</chem>	<chem>CCCCOc1ccccc1-c1ncc(C(=O)O)c(=O)[nH]1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CCOc1cc(Cc2S(C(=O)NC2=O)cc(C(C)=O)c1OCc1ccccc1</chem>	<chem>CCOc1cc(Cc2S(C(=O)NC2=O)cc(C(C)=O)c1OCc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C=Nn2cnc3c2c(=O)n(C)c(=O)n3C)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(C=Nn2cnc3c2c(=O)n(C)c(=O)n3C)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
Cc1ccc(Nc2ccc3c(c2)ncn3-c2ccc(S(N)(=O)=O)cc2)c([N+](=O)[O-])c1	Cc1ccc(Nc2ccc3c(c2)ncn3-c2ccc(S(N)(=O)=O)cc2)c([N+](=O)[O-])c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCSc1nc(Sc2cc(C)ccc2C)c2c(c1C#N)CCCC2	CCSc1nc(Sc2cc(C)ccc2C)c2c(c1C#N)CCCC2	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1sc(N)nc1=S	Cn1sc(N)nc1=S	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCCc1ccccc1)C1CC(c2ccc(F)cc2)=NO1	O=C(NCCc1ccccc1)C1CC(c2ccc(F)cc2)=NO1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C(=O)Oc1ccc(F)cc1)C1CN(C(=O)C2CCN(C(=O)C3CCC3)CC2)CC1c1ccc(Cl)cc1	CN(C(=O)Oc1ccc(F)cc1)C1CN(C(=O)C2CCN(C(=O)C3CCC3)CC2)CC1c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC12CCC3C(CCC45OC4C(=O)CCC35C)C1CCC2O	CC12CCC3C(CCC45OC4C(=O)CCC35C)C1CCC2O	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=CC2C(=O)N(C(=O)Cn3nc(-c4cccn4)cc3N)C(=O)C2CS1	CC1=CC2C(=O)N(C(=O)Cn3nc(-c4cccn4)cc3N)C(=O)C2CS1	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1c2ccccc2c2c3c(nc4ccccc4c21)CC(C)(C)NC3		FALSE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Oc2nc(C)ccc2C(=NO)N2CCOCC2)cc1	COc1ccc(Oc2nc(C)ccc2C(=NO)N2CCOCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2C(C#N)=C(N)Oc3[nH]nc(C)c32)cc1	COc1ccc(C2C(C#N)=C(N)Oc3[nH]nc(C)c32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(NC(=O)C(CCCc1ccccc1)NCC(=O)O)C(=O)O	CC(C)CC(NC(=O)C(CCCc1ccccc1)NCC(=O)O)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Oc1ccc(Br)cc1C(=O)Nc1ccc(Cl)cc1Cl)c1cccc(C(F)(F)F)c1	O=C(Oc1ccc(Br)cc1C(=O)Nc1ccc(Cl)cc1Cl)c1cccc(C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(CNCC1ccccc(F)c1)N1CCc2cc(Oc3ccc(F)cc3)ccc2C1=O	CC(CNCC1ccccc(F)c1)N1CCc2cc(Oc3ccc(F)cc3)ccc2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ccc(N=Cc2cc(F)cc(Br)c2O)cc1	N#Cc1ccc(N=Cc2cc(F)cc(Br)c2O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2ncnc(Nc3ccccc(Cl)c3F)c2cc1OCCCC(CCN)C(=O)O	COc1cc2ncnc(Nc3ccccc(Cl)c3F)c2cc1OCCCC(CCN)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(NC(=O)Nc2cc3c(cc2C(C)(C)O)[nH]c(=O)n3C)ccc1Br	Cc1cc(NC(=O)Nc2cc3c(cc2C(C)(C)O)[nH]c(=O)n3C)ccc1Br	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CN(Cc2ccccc(F)c2)CCCC12CCN(C(=O)c1ccccc1)CC2	CC1CN(Cc2ccccc(F)c2)CCCC12CCN(C(=O)c1ccccc1)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
COC=C(C(=O)OC)c1ccccc1COc1c(-c2ccc(Cl)cc2)c(=O)oc2cc(OC)c(OC)cc12	COC=C(C(=O)OC)c1ccccc1COc1c(-c2ccc(Cl)cc2)c(=O)oc2cc(OC)c(OC)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(cc1OC)C(=O)C(CC1CCN(Cc3ccc4c(c3)OCO4)CC1)C2	COc1cc2c(cc1OC)C(=O)C(CC1CCN(Cc3ccc4c(c3)OCO4)CC1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
N#CC(NCC1cn(-c2ccc(F)cc2)nn1)(C(F)(F)F)C(F)(F)F	N#CC(NCC1cn(-c2ccc(F)cc2)nn1)(C(F)(F)F)C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
CCNC(=O)N1CCC2(CCN(Cc3ccccc(Oc4ccccc4)c3)CC2)CC1	CCNC(=O)N1CCC2(CCN(Cc3ccccc(Oc4ccccc4)c3)CC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2cc3c([nH]2)c(=O)n(C)c(=O)n3C)cc1	Cc1ccc(-c2cc3c([nH]2)c(=O)n(C)c(=O)n3C)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
CCOC(=O)c1nn(-c2ccc(C(=O)c2)c(=O)c(Cl)O)CO)c1O	CCOC(=O)c1nn(-c2ccc(C(=O)c2)c(=O)c(Cl)O)CO)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCNc1nc(C)nc(N(C)C)c2ccc(l)cc2C(F)(F)F)n1	CCNc1nc(C)nc(N(C)C)c2ccc(l)cc2C(F)(F)F)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccccc1C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)O)c1cc2ccccc2[nH]1	O=C(Nc1ccccc1C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)O)c1cc2ccccc2[nH]1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C1NC2(CCCc3ccccc32)C(=O)N1S(=O)(=O)O	O=C1NC2(CCCc3ccccc32)C(=O)N1S(=O)(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2oc(=O)ccc2c1C(=O)C(C#N)=C(C)NNC(=O)c1ccccc1Cl	COc1ccc2oc(=O)ccc2c1C(=O)C(C#N)=C(C)NNC(=O)c1ccccc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
S=C(Nc1ccc(Cl)cc1)NC1CCCC1	S=C(Nc1ccc(Cl)cc1)NC1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2[nH]c(Cn3nncc(C4CCCN4C)n3)nc2cc1Cl	COc1cc2[nH]c(Cn3nncc(C4CCCN4C)n3)nc2cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCc1cc2cc(C3(c4ccccc4)CCCCN(C)C3)ccc2o1	CCCCc1cc2cc(C3(c4ccccc4)CCCCN(C)C3)ccc2o1	TRUE	TRUE	TRUE
OCc1nc2c(l)cc(l)cc2[nH]1	OCc1nc2c(l)cc(l)cc2[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C(=O)CSc1nncc(-c2ccccc2Cl)o1)C1CCCCC1	CN(C(=O)CSc1nncc(-c2ccccc2Cl)o1)C1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(c1nccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(c2)CCCC3N)nc1Cl)c1ccc2nc[nH]c2c1	CN(c1ccc2nc[nH]c2c1)c1nccccc1Nc1nc(Nc2ccc3c(c2)CCCC3N)nc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)N1CCCN2nc(CNS(=O)(=O)C3CC3)cc2C1	CCOC(=O)N1CCCN2nc(CNS(=O)(=O)C3CC3)cc2C1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(-n2cc(C=Cc3ccc(C(F)(F)F)c3)[n+](C)c2)c1	Cc1cccc(-n2cc(C=Cc3ccc(C(F)(F)F)c3)[n+](C)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C2CN(c3nc(-c4cc[nH]n4)cc(=O)n3C)CCS2)cc1	Cc1ccc(C2CN(c3nc(-c4cc[nH]n4)cc(=O)n3C)CCS2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2esc(N)c2C(=O)OCc2ccccc2)cc1	COc1ccc(-c2esc(N)c2C(=O)OCc2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C(C)=CC=C1CCCC2(C)C1CCC1C3CC(C)C(C)C(=O)N(C)CCC(C)C3(C)CCCC12	COC(=O)C(C)=CC=C1CCCC2(C)C1CCC1C3CC2(C)C(C)C(C)C(=O)N(C)CCC(C)C)CCCC12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(Cl)cc1)Nc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ncccn2)cc1	O=C(Nc1ccc(Cl)cc1)Nc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ncccn2)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
Clc1ccccc1CSc1nc2ccc(l)cc2[nH]1	Clc1ccccc1CSc1nc2ccc(l)cc2[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1ccc(-c2ccc3c(Nc4ccc(OCc5ccccc5)cc4)ccnc3c2)o1	Clc1ccc(-c2ccc3c(Nc4ccc(OCc5ccccc5)cc4)ccnc3c2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCC(C(=O)N(c2ccccc2C(=O)N2CCCC2)c2ccccc(Cl)c2)CC1	CC1CCC(C(=O)N(c2ccccc(Cl)c2)c2ccccc2C(=O)N2CCCC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)CC2(C(=O)O)CCC3(C)C(=CC4C5(C)Cc6nocc6C(C)(C)C5CCC43C)C2C1	CC1(C)CC2(C(=O)O)CCC3(C)C(=CC4C5(C)Cc6nocc6C(C)(C)C5CCC43C)C2C1	TRUE	TRUE	TRUE
CC12CCCN1CC(c1ccc(Cl)cc1Cl)C2NC(=O)CCCC1ccccc1	CC12CCCN1CC(c1ccc(Cl)cc1Cl)C2NC(=O)CCCC1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(OCcSc2nncn2-c2ccccc2)cc1	Cc1ccc(OCcSc2nncn2-c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(OC)nc(Oc2ccccc3c(C)nc(N)nc23)n1	COc1cc(OC)nc(Oc2ccccc3c(C)nc(N)nc23)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(OC)c(C=NNC(=O)CN2c3ccc(Cl)cc3Sc3ccc(C(F)(F)F)cc32)c1	COc1ccc(OC)c(C=NNC(=O)CN2c3ccc(Cl)cc3Sc3ccc(C(F)(F)F)cc32)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(CCC(OC(=O)c2cc(O)c(O)c(O)c2)c2ccccc(O)c2)oc(=O)c1	COc1cc(CCC(OC(=O)c2cc(O)c(O)c(O)c2)c2ccccc(O)c2)oc(=O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CHCCOc1cc(C(C)N(O)C(C)=O)ccc1OC	CHCCOc1cc(C(C)N(O)C(C)=O)ccc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NC(C)c1nncc(SCC(=O)Nc2ccccc2Br)n1CC1CCCO1	CC(=O)NC(C)c1nncc(SCC(=O)Nc2ccccc2Br)n1CC1CCCO1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NC(C)Cc1ccc(C#Cc2cnc(N(C)C3CC3)nc2)cc1	CC(=O)NC(C)Cc1ccc(C#Cc2cnc(N(C)C3CC3)nc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc1C=NNC(=O)c1cc(Cl)ccc1O	Cc1ccccc1C=NNC(=O)c1cc(Cl)ccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nccnn2c(CN3CCC(CF)C3)nc(-c3ccc(OCc4ccc(F)cc4F)cc3)c12	Nc1nccnn2c(CN3CCC(CF)C3)nc(-c3ccc(OCc4ccc(F)cc4F)cc3)c12	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)NC(=O)c1ccc(OC)c(OC)c1	CNC(=O)NC(=O)c1ccc(OC)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C(c1ccccc1)N1Cc2ccccc3ccccc(c23)C1	O=C(O)C(c1ccccc1)N1Cc2ccccc3ccccc(c23)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC1NC2CC(O)C(OC(OC)C(OC)CC(C)C3OC(C=CC=CCC(O)CC(O)CC(=O)O2)C(C)(O)C13	CCCC1NC2CC(O)C(OC(OC)C(OC)CC(C)C3OC(C=CC=CCC(O)CC(O)CC(=O)O2)C(C)(O)C13	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(C(C)C)c1NC(=O)CSc1nc(C(F)F)cn1N	Cc1cccc(C(C)C)c1NC(=O)CSc1nc(C(F)F)cn1N	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1[nH]cnc2c1Cc1c[nH]nc1-2	O=c1[nH]cnc2c1Cc1c[nH]nc1-2	TRUE	TRUE	TRUE
NC(N)=NCCCC(NC(=O)C(N)CNCc1ccccc1)C(=O)N1CCCC1C(=O)NC(Cc1ccc2ccccc2c1)C(N)=O	NC(=O)C(Cc1ccc2ccccc2c1)NC(=O)C1CCCN1C(=O)C(CCCN=C(N)N)NC(=O)C(N)CNCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCCc1c[nH]c2ccccc12)C1CCN(Cc2ccccc2)CC1	O=C(NCCc1c[nH]c2ccccc12)C1CCN(Cc2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	FALSE
O=c1c2ncn(C3OCC(O)(CO)C3O)c2ncn1Cc1ccccc2ccccc12	O=c1c2ncn(C3OCC(O)(CO)C3O)c2ncn1Cc1ccccc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
N#CCc1ccccc1CN1CCC(c2ccccc(-c3cc4ccc(Cl=O)O)ccc4[nH]3)c2)CC1	N#CCc1ccccc1CN1CCC(c2ccccc(-c3cc4ccc(Cl=O)O)ccc4[nH]3)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCOP(=O)(OCCCC)C(c1ccccc1)n1c(-c2ccccc2)nc2ccccc21	CCCCOP(=O)(OCCCC)C(c1ccccc1)n1c(-c2ccccc2)nc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCN(C(=O)c2ccc3ncnc(N4CCN5CC(CN6CCOCC6)OC5C4)c3c2)CC1	CC1CCN(C(=O)c2ccc3ncnc(N4CCN5CC(CN6CCOCC6)OC5C4)c3c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC(=O)NC(CCCCN)C(=O)NC(Cc1c[nH]cn1)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)NNC(=O)C(C)(C)C	CCCCC(=O)NC(CCCCN)C(=O)NC(Cc1c[nH]cn1)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)NNC(=O)C(C)(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
NCCCCN(Cc1c[nH]c2ccccc12)C1CCc2ccccc21	NCCCCN(Cc1c[nH]c2ccccc12)C1CCc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ncc(-c2cccc(Cl)c2)c(NCc2ccco2)n1	Nc1ncc(-c2cccc(Cl)c2)c(NCc2ccco2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(-c2nc(C#N)c(Nc3ccc(F)cc3)o2)cc(OC)c1OC	COc1cc(-c2nc(C#N)c(Nc3ccc(F)cc3)o2)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CNCC(O)COc2ccc(CCOc3CCC3)cc2)cc1	COc1ccc(CNCC(O)COc2ccc(CCOc3CCC3)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)CC(=O)C2=C(Cl)Nc1cc(-c3ccc(N)c(O)c3)ccc1NC2c1ccc(Cl)cc1	CC1(C)CC(=O)C2=C(Cl)Nc1cc(-c3ccc(N)c(O)c3)ccc1NC2c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=C(C#N)C(c2ccccc(Oc3cccn3)c2)C([N+](=O)[O-])C(C)(C(F)(F)F)C(=N)N1	CC1=C(C#N)C(c2ccccc(Oc3cccn3)c2)C([N+](=O)[O-])C(C)(C(F)(F)F)C(=N)N1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(cc1OC)C1CN(S(=O)(=O)c3cccs3)CC(=O)N1CC2	COc1cc2c(cc1OC)C1CN(S(=O)(=O)c3cccs3)CC(=O)N1CC2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccccc1)c1cc2nc(-c3cccs3)cc(C(F)(F)F)n2n1	O=C(Nc1ccccc1)c1cc2nc(-c3cccs3)cc(C(F)(F)F)n2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C(=O)C1OC1(C)C)C1CCC2C3C(OS(=O)(=O)O)CC4CC(OS(=O)(=O)O)CCC4(C)C3CCC12C	CC(C(=O)C1OC1(C)C)C1CCC2C3C(OS(=O)(=O)O)CC4CC(OS(=O)(=O)O)CCC4(C)C3CCC12C	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1cc(OC)c2c(c1)OC(=Cc1ccc(SC)cc1)C2=O	CCOc1cc(OC)c2c(c1)OC(=Cc1ccc(SC)cc1)C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)cc(C(=O)Nc2ccc(C(=O)Nc3ccc(-c4ccccc4)cc3)cc2)c1	Cc1cc(C)cc(C(=O)Nc2ccc(C(=O)Nc3ccc(-c4ccccc4)cc3)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=NNC(=O)c1ccc(NC2CC3C5CCN3C2)cc1)c1cccc(Br)c1	CC(=NNC(=O)c1ccc(NC2CC3C5CCN3C2)cc1)c1cccc(Br)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1NC(=O)C1=C(C)NC(=O)NC1c1ccco1	COc1ccccc1NC(=O)C1=C(C)NC(=O)NC1c1ccco1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(OCc1ccc(C=C2C(=O)NC(=S)NC2=O)cc1)c1cccc(C(F)(F)F)c1	O=C(OCc1ccc(C=C2C(=O)NC(=S)NC2=O)cc1)c1cccc(C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
OC(C1CCCCC1)CN1CCN(C2CCCCC2)CC1	OC(C1CCCCC1)CN1CCN(C2CCCCC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nc2cnn(Cc3ccc(N4CCCC4)nc3)c(=O)c2n1C1CCc2cc(-c3ccccc3-c3nn[nH]n3)ccc21	CCc1nc2cnn(Cc3ccc(N4CCCC4)nc3)c(=O)c2n1C1CCc2cc(-c3ccccc3-c3nn[nH]n3)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCCCOc1ccc(C(=O)C(C)NC(=O)OC)cc1OC	CCCCCCCCCCCCCOc1ccc(C(=O)C(C)NC(=O)OC)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nncc(NC(=O)c2cc([N+](=O)[O-])cc([N+](=O)[O-])c2)s1	CCc1nncc(NC(=O)c2cc([N+](=O)[O-])cc([N+](=O)[O-])c2)s1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CCc1cc2c(cc1CC1CC(c3ccc(Cl)cc3)=NN1C(=O)N)OCO2	CCc1cc2c(cc1CC1CC(c3ccc(Cl)cc3)=NN1C(N)=O)OCO2	TRUE	TRUE	TRUE
NCCCC(NS(=O))(=O)NCCCCc1ccccc1)C(=O)NCCCCC1CCCCC1	NCCCC(NS(=O))(=O)NCCCCc1ccccc1)C(=O)NCCCCC1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccc(S(=O))(=O)N(C)CC(=O)N2CCN(C(=O)c3ccco3)CC2)cc1	CCc1ccc(S(=O))(=O)N(C)CC(=O)N2CCN(C(=O)c3ccco3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=N2C2CC3CCCC3=CC2C1(C)O	CC1=N2C2CC3CCCC3=CC2C1(C)O	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(c1ccccc1)S(=O))(=O)c1cccc(C(=O)Nc2ccc(C(=O)N3CCOCC3)cc2)c1	CCN(c1ccccc1)S(=O))(=O)c1cccc(C(=O)Nc2ccc(C(=O)N3CCOCC3)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCS(=O))(=O)Nc1ccc(Cl)c(NC(=O)c2ccc(Nc3ccnc3C)cc2)c1	CCCS(=O))(=O)Nc1ccc(Cl)c(NC(=O)c2ccc(Nc3ccnc3C)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCCC(=O)N(C)O	CCCCCCCCCCCCC(=O)N(C)O	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc(-c2ccc3c(c2)c2ccc(C4=CCNC4)cc2n3C)cc(N)c1=O	Cn1cc(-c2ccc3c(c2)c2ccc(C4=CCNC4)cc2n3C)cc(N)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(Cl)=NO	CC(Cl)=NO	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCC(C)OC=O	CCCCCCCCCC(C)OC=O	TRUE	TRUE	TRUE
c1cncc(N2CC3COCC3(COCc3ccnc3)C2)c1	c1cncc(COCC23COCC2CN(c2ccnc2)C3)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CcC1nc(C=Cc2ccccc2)no1)Nc1ccc(Cl)cc1	O=C(CcC1nc(C=Cc2ccccc2)no1)Nc1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCOCl=C(Cl)C(=O)OC1C(Cl)CO	CCCCCCCCCOCl=C(Cl)C(=O)OC1C(Cl)CO	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O))(=O)Cc2ccc(C(=O)N3CCOCC3)o2)cc1	Cc1ccc(S(=O))(=O)Cc2ccc(C(=O)N3CCOCC3)o2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(S(=O))(=O)N2CC(C)CC2)c2ccc(C)nc12	COc1ccc(S(=O))(=O)N2CC(C)CC2)c2ccc(C)nc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C1CC(N(Cc2cccc(-c3ccccc3)c2)c2ncc[nH]2)C1	O=C(O)C1CC(N(Cc2cccc(-c3ccccc3)c2)c2ncc[nH]2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=C(C(=O)CC(=O)C=Cc2ccc(OC(C)=O)c(OC)c2)ccc1OC(C)=O	COc1cc(C=C(C(=O)CC(=O)C=Cc2ccc(OC(C)=O)c(OC)c2)ccc1OC(C)=O	TRUE	TRUE	FALSE
Cn1ncc2cc(-c3n[nH]c4ccc(S(C)(=O)=O)cc34)ccc21	Cn1ncc2cc(-c3n[nH]c4ccc(S(C)(=O)=O)cc34)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C1Cc2cc(Cl)c(OC3CCCCO3)c(Br)c2O1)N1CC(OC2ccc(Cl)c(Cl)c2)C1	O=C(C1Cc2cc(Cl)c(OC3CCCCO3)c(Br)c2O1)N1CC(OC2ccc(Cl)c(Cl)c2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
O=CC1CCC(=O)N1CC(=O)c1ccc(Br)cc1	O=CC1CCC(=O)N1CC(=O)c1ccc(Br)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=NN=C1NC(=O)C(C)S1)c1ccc(NC(=O)Cc2ccccc2)cc1	CC(=NN=C1NC(=O)C(C)S1)c1ccc(NC(=O)Cc2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NCc1ccc(-c2c[nH]c(-c3ccccc3)n2)c(F)c1	NCc1ccc(-c2c[nH]c(-c3ccccc3)n2)c(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1cn(-c2cccc(Cl)c2)nc1-c1ccnc1)N1CCCC1	O=C(c1cn(-c2cccc(Cl)c2)nc1-c1ccnc1)N1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
NN(C=O)c1ccc(COc2ccccc2Cl)o1	NN(C=O)c1ccc(COc2ccccc2Cl)o1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC(C)COc1ccc(C(NC(=O)OC)C(C)=CC(C)C(=O)NC(Cc2ccc(OC)c(OC)c2)C(=O)OC)cc1	CCCC(C)COc1ccc(C(NC(=O)OC)C(C)=CC(C)C(=O)NC(Cc2ccc(OC)c(OC)c2)C(=O)OC)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1CCN(C(=NO)c2ccc(C)nc2Oc2ccc(C)cc2)CC1	CCOC(=O)C1CCN(C(=NO)c2ccc(C)nc2Oc2ccc(C)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(cc1OC)C(CN(C)C)OCC2	COc1cc2c(cc1OC)C(CN(C)C)OCC2	TRUE	TRUE	TRUE
FC(F)(F)c1cccc(NC(Nc2ccccc2)=C(C#N)c2ccnc2)c1	N#CC(=C(Nc1ccccc1)Nc1cccc(C(F)(F)F)c1)c1ccnc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(CNC(=O)C2CC(=O)N(CcC3ccccc3)C2)c1	COc1cccc(CNC(=O)C2CC(=O)N(CcC3ccccc3)C2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)(CS(=O))(=O)c1ccc(Cl)cc1)C(=O)Nc1ccc([N+](=O)[O-])c(C(F)(F)F)c1	CC(O)(CS(=O))(=O)c1ccc(Cl)cc1)C(=O)Nc1ccc([N+](=O)[O-])c(C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CN1CCc2n[nH]cc2C1)N1CCCC1c1ccnc1	O=C(CN1CCc2n[nH]cc2C1)N1CCCC1c1ccnc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CCCOc1ccc(CCN(C=O)Cc2ccccc2-c2ccccc2)cc1	O=C(O)CCCOc1ccc(CCN(C=O)Cc2ccccc2-c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NN=C1C(=O)N(CCN2CCOCC2)c2ccccc21)c1cnccc1	O=C(NN=C1C(=O)N(CCN2CCOCC2)c2ccccc21)c1cnccc1	TRUE	TRUE	TRUE
NN=C(C(Nc1cc(Cl)nc2ccnn12)C(F)(F)F	NN=C(C(Nc1cc(Cl)nc2ccnn12)C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(N2C(=O)NSC2c2cn(C)c3ccccc23)c(OC)c1	COc1ccc(N2C(=O)NSC2c2cn(C)c3ccccc23)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)OC(=O)NC(Cc1ccccc1)C(O)CC(Cc1cc2ccccc2[nH]1)C(=O)NC1c2ccccc2CC1O	CC(C)(C)OC(=O)NC(Cc1ccccc1)C(O)CC(Cc1cc2ccccc2[nH]1)C(=O)NC1c2ccccc2CC1O	TRUE	TRUE	TRUE
CC1C(=O)C(C)C(c2cccc(C(F)(F)F)c2)NC1c1cc(F)cc(F)c1	CC1C(=O)C(C)C(c2cccc(C(F)(F)F)c2)NC1c1cc(F)cc(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)C1CCC(Nc2cc(-c3ccc(F)c(NCC4CCOCC4)n3)c(Cl)cn2)CC1	CN(C)C1CCC(Nc2cc(-c3ccc(F)c(NCC4CCOCC4)n3)c(Cl)cn2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(Nc1sccc1-c1ncc2cc(Br)ccc2s1)c1ccc(Br)cc1	O=S(=O)(Nc1sccc1-c1ncc2cc(Br)ccc2s1)c1ccc(Br)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)OC(=O)NC(Cc1ccccc1)C(O)CC(Cc1ccccc1)C(=O)NC(Cc1c[nH]cn1)C(=O)NCC1ccccc1	CC(C)(C)OC(=O)NC(Cc1ccccc1)C(O)CC(Cc1ccccc1)C(=O)NC(Cc1c[nH]cn1)C(=O)NCC1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ncc(C=C(Cc2cc(OC)c(OC)c(OC)c2)C(=O)O)n1C	CCc1ncc(C=C(Cc2cc(OC)c(OC)c(OC)c2)C(=O)O)n1C	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC1(c2ccccc2)NC(=O)N(CC(=O)Nc2cccn2)C1=O	CCCCC1(c2ccccc2)NC(=O)N(CC(=O)Nc2cccn2)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc(SCc2ccccc2)nc2c1ncc2C1OC(COS(=O))(=O)NC(=O)c2ccccc2O)C(O)C1O	Nc1nc(SCc2ccccc2)nc2c1ncc2C1OC(COS(=O))(=O)NC(=O)c2ccccc2O)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCOc1ccc(CC(NC(=O)OC(C)C(C)C(=O)NC(Cc2ccccc2)c2cc(Cl)sc2NC(=O)CN(C)C)cc1	CN(C)CCOc1ccc(CC(NC(=O)OC(C)C(C)C(=O)NC(Cc2ccccc2)c2cc(Cl)sc2NC(=O)CN(C)C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(N2C(=O)C(=Cc3ccc(OC(C=O)N4CCCC4)cc3)SC2=S)cc1	COc1ccc(N2C(=O)C(=Cc3ccc(OC(C=O)N4CCCC4)cc3)SC2=S)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=CNc1cccc(OC2ccccc2)c1	O=CNc1cccc(OC2ccccc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cn1c(-c2ccccc2Cl)nc2ccnc21)Nc1ccc2c(c1)OCCO2	O=C(Cn1c(-c2ccccc2Cl)nc2ccnc21)Nc1ccc2c(c1)OCCO2	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(cc1OC)C(C)(CCC(=O)O)C(c1cccc(O)c1OC)C2	COc1cc2c(cc1OC)C(C)(CCC(=O)O)C(c1cccc(O)c1OC)C2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(-c2nnc3sc(-c4ccc(Cl)cc4)nn23)c1	Cc1cccc(-c2nnc3sc(-c4ccc(Cl)cc4)nn23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)CC1CCN(C(=O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)c2cccc(C3CCNCC3)n2)CC1	NC(=O)CC1CCN(C(=O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)c2cccc(C3CCNCC3)n2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(SCc2c(Cl)cccc2Cl)c2oc3ccccc3c2n1	Cc1nc(SCc2c(Cl)cccc2Cl)c2oc3ccccc3c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CCCC(Sc2ccc3c(c2)OCCCO3)=C1Sc1ccccc1Cl	O=C1CCCC(Sc2ccc3c(c2)OCCCO3)=C1Sc1ccccc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCCc1ccccc1)Nc1nc(-c2ccnc2)cs1	O=C(NCCc1ccccc1)Nc1nc(-c2ccnc2)cs1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(Cn1cnnc1)n1nnc2cc3c(=O)n(CCF)cnc3cc2c1=O	CC(Cn1cnnc1)n1nnc2cc3c(=O)n(CCF)cnc3cc2c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1NC(c2ccccc2)(C1=O)C1c2c(c3ccccc3oc2=O)OC(c2ccccc2)C1O	O=C1NC(c2ccccc2)(C2c3c(c4ccccc4oc3=O)OC(c3ccccc3)C2O)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CCN(C(=O)CO)C(=O)c2cc(S(=O))(=O)N3CCc4ccccc43)ccc2N2CCOCC2)cc1OC	COc1ccc(CCN(C(=O)CO)C(=O)c2cc(S(=O))(=O)N3CCc4ccccc43)ccc2N2CCOCC2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
C(Si)(C)(C)CC(=O)c1ccc(Cl)cc1Cl	C(Si)(C)(C)CC(=O)c1ccc(Cl)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC(=O)Nc1cc(C(C)C(C)C)nn1-c1ccccc1)CC(N)=O	CCN(CC(N)=O)CC(=O)Nc1cc(C(C)C(C)C)nn1-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1NC(Cc2ccccc2)c2n(c(=O)c3ccccc2)CCCOc2c(Cl)ccc(c21)NC(Cc1ccccc1)C1CC1	O=C1NC(Cc2ccccc2)c2n(c(=O)c3ccccc2)CCCOc2c(Cl)ccc(c21)NC(Cc1ccccc1)C1CC1	FALSE	TRUE	TRUE
CCc1cc(-c2c(C)noc2C)cc2nnc(SCCOc3cccc(C)c3)n12	CCc1cc(-c2c(C)noc2C)cc2nnc(SCCOc3cccc(C)c3)n12	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C)=O)C=CC(=O)Nc1nc2ccc3ncc(-c4ccc(F)cc4)cc3c(=O)c2c1	CO(C)=O)C=CC(=O)Nc1nc2ccc3ncc(-c4ccc(F)cc4)cc3c(=O)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C=O)c1ccc(CC(NC(=O)C(Cc2c[nH]cn2)NC(=O)C(NC(=O)C(Cc2ccccc2C)NC(=O)OC(C)(C)C(C)C(=O)O)cc1	CO(C=O)c1ccc(CC(NC(=O)C(Cc2c[nH]cn2)NC(=O)C(NC(=O)C(Cc2ccccc2C)NC(=O)OC(C)(C)C(C)C(=O)O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1n[n+](([O-])c2cc3c(cc2[n+]]1[O-])CCC3	Nc1n[n+](([O-])c2cc3c(cc2[n+]]1[O-])CCC3	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1ccccc1Oc1nccc2c(C(=O)Nc3ccccc3)n(Cc3ncccc3C)c(C)c12	Cc1ccccc1Oc1nccc2c(C(=O)Nc3ccccc3)n(Cc3ncccc3C)c(C)c12	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1cc(-c2nc(-c3cccs3)c(N)s2)ccn1	CCc1cc(-c2nc(-c3cccs3)c(N)s2)ccn1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc1C=C1SC(=S)N(CCC(=O)NC2CCC(C)CC2)C1=O	Cc1ccccc1C=C1SC(=S)N(CCC(=O)NC2CCC(C)CC2)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)c1cccc(C(=O)N2CCc3c(S)nn(-c4ccccc4)c3-c3ncccc32)c1	CC(O)c1cccc(C(=O)N2CCc3c(S)nn(-c4ccccc4)c3-c3ncccc32)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccc2c(c1)c1c(n2S(=O))(=O)c2ccccc2)CCCC1	CCc1ccc2c(c1)c1c(n2S(=O))(=O)c2ccccc2)CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2NC(S)=NC(C)=C2C(=O)OCC2CCCCC2)cc1	COc1ccc(C2NC(S)=NC(C)=C2C(=O)OCC2CCCCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Fc1ccc(C2C3CNCC3c2ccc(F)cc2)c(F)c1	Fc1ccc(C23CNCC2C3c2ccc(F)cc2F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1C(=O)C(=CC=Cc2ccccc2)SC1=Nc1cccc(C(=O)O)c1	CN1C(=O)C(=CC=Cc2ccccc2)SC1=Nc1cccc(C(=O)O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(NC(=O)c1cccn1)c1nc(-c2ccccc2F)no1	CC(NC(=O)c1cccn1)c1nc(-c2ccccc2F)no1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)OC(=O)N1CCN(c2ccccc2)C(C)C1	CC(C)OC(=O)N1CCN(c2ccccc2)C(C)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(Cc1cnnc1)Cc1nccs1	CN(Cc1cnnc1)Cc1nccs1	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+](([O-])c1ccc(NCCNCCO)c2ncccc12	O=[N+](([O-])c1ccc(NCCNCCO)c2ncccc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(Cc2ccc(=O)n(Cc3ccccc3)n2)c2cc(F)ccc2n1CC(=O)O	Cc1c(Cc2ccc(=O)n(Cc3ccccc3)n2)c2cc(F)ccc2n1CC(=O)O	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(NCc1ccc(S(=O))(=O)N2CCOCC2)cc1)c1ccc2ncc(N3CCOCC3)n2c1	O=C(NCc1ccc(S(=O))(=O)N2CCOCC2)cc1)c1ccc2ncc(N3CCOCC3)n2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CN(S(=O))(=O)c2cccc(C(F)(F)F)c2)c2ccccc2N1	O=C1CN(S(=O))(=O)c2cccc(C(F)(F)F)c2)c2ccccc2N1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(CNC(=O)c2cc(COc3ccc(F)c(F)c3)on2)c1	Cc1cccc(CNC(=O)c2cc(COc3ccc(F)c(F)c3)on2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccccc1Nc1nc(C(F)(F)F)ccc1C(=O)NN=C(C)C1ccnc1	CCc1ccccc1Nc1nc(C(F)(F)F)ccc1C(=O)NN=C(C)C1ccnc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(NC(=O)C(CCC(=O)O)NC(=O)C(CCCCN(C=O)c1cc(-c2ccccc2)on1)NC(=O)OC(C)(C)C(=O)NCC(=O)NC(Cc1ccccc1)C(N)=O	CC(C)CC(NC(=O)C(CCC(=O)O)NC(=O)C(CCCCN(C=O)c1cc(-c2ccccc2)on1)NC(=O)OC(C)(C)C(=O)NCC(=O)NC(Cc1ccccc1)C(N)=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C)C(=O)NC(C(=O)O)C(=O)O	CCC(C)C(=O)NC(C(=O)O)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CC2C(COC(=O)CCCC(=O)O)C(=O)CCC2(C)C2CCC3(C)C(=CC(=O)C4C5(C)CCC(O)C(C)(C)C5CCC43C)C12	CC1CC2C(COC(=O)CCCC(=O)O)C(=O)CCC2(C)C2CCC3(C)C(=CC(=O)C4C5(C)CCC(O)C(C)(C)C5CCC43C)C12	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
O=C(NCCCC1CCCC1)C1C(C(=O)Nc2cc(-c3cccc(Cl)c3Cl)n(-c3cccc3)n2)C2C=CC1C21CC1	O=C(NCCCCN1CCCC1)C1C(C(=O)Nc2cc(-c3cccc(Cl)c3Cl)n(-c3cccc3)n2)C2C=CC1C21CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1ccc(SCCNc2ccncn2)cc1	Clc1ccc(SCCNc2ccncn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1cc(Cc2cnc(N)nc2N)ccc1OCc1cccc(-c2cccc2)c1	CCOc1cc(Cc2cnc(N)nc2N)ccc1OCc1cccc(-c2cccc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cn1cnc([N+])(=O)[O-])Nc1ccc2c(c1)CCCC2	O=C(Cn1cnc([N+])(=O)[O-])Nc1ccc2c(c1)CCCC2	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CN2CN3CC(O)C3C2)cc1OC	COc1ccc(CN2CN3CC(O)C3C2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=S)N1N=C(c2cccs2)CC1c1ccc(Cl)cc1	NC(=S)N1N=C(c2cccs2)CC1c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
CNC(=O)c1ccc(-c2cccc(OS(N)(=O)=O)c2)cc1O	CNC(=O)c1ccc(-c2cccc(OS(N)(=O)=O)c2)cc1O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1c2c(c(O)c3c1C(=O)c1c(cc(O)c(C)c1O)C3=O)-c1c(cc(CCCN(C)C)c(C(=O)O)c1O)CC2	COc1c2c(c(O)c3c1C(=O)c1c(cc(O)c(C)c1O)C3=O)-c1c(cc(CCCN(C)C)c(C(=O)O)c1O)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1nc(-c2cccc2)c2c(n1)-c1cccc1CC2	CC(=O)Nc1nc(-c2cccc2)c2c(n1)-c1cccc1CC2	TRUE	TRUE	TRUE
CCOP(=O)(Nc1ccc(-c2nc3c(NCCCc4cccc4)ncnc3o2)cc1)OCC	CCOP(=O)(Nc1ccc(-c2nc3c(NCCCc4cccc4)ncnc3o2)cc1)OCC	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CCNC(=O)c1ncc2c(cc(-c3ccc[nH]3)c(=O)n2Cc2ccc(Cl)cc2)c1O	O=C(O)CCNC(=O)c1ncc2c(cc(-c3ccc[nH]3)c(=O)n2Cc2ccc(Cl)cc2)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)CCOC(=O)c1ccc(NC(=O)CCN2CCOCC2)c(Cl)c1	CCN(CC)CCOC(=O)c1ccc(NC(=O)CCN2CCOCC2)c(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COCC(C)NC(=O)N1CCn2cc(CNc3cc(C)[nH]n3)nc2C1	COCC(C)NC(=O)N1CCn2cc(CNc3cc(C)[nH]n3)nc2C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1c(NNC(=O)c2cccc2)c(=O)enn1C	COc1c(NNC(=O)c2cccc2)c(=O)enn1C	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCN(S(=O))(=O)C(CCCN2CCN(c3cccc3OCC(F)(F)F)CC2)Cc2ccc(OS(=O)(=O)O)cc2)CC1	CC1CCN(S(=O))(=O)C(CCCN2CCN(c3cccc3OCC(F)(F)F)CC2)Cc2ccc(OS(=O)(=O)O)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(-c2ccc(F)cc2)c(-c2ccc3ncsc3c2)[nH]1	Cc1nc(-c2ccc(F)cc2)c(-c2ccc3ncsc3c2)[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(OCC2C(C(=O)NC(Cc3cccc3)C(O)CN3CCN(Cc4ccc5c(c4)OCO5)CC3)Oc3cccc3O2)cc1	Cc1ccc(OCC2Oc3cccc3OCC2C(=O)NC(Cc2cccc2)C(O)CN2CCN(Cc3ccc4c(c3)OCO4)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1ccc(C=CC(=O)c2cccc(OCc3cccc3)c2)cc1	O=C(O)c1ccc(C=CC(=O)c2cccc(OCc3cccc3)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1ccc(OC)c(C(=O)O)c1	COC(=O)c1ccc(OC)c(C(=O)O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1ccc(CSc2ncc(-c3cccc(C(=O)Nc4cccc4)c3)c(=O)[nH]2)cc1	CN(C)c1ccc(CSc2ncc(-c3cccc(C(=O)Nc4cccc4)c3)c(=O)[nH]2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(CN2C(=O)c3[nH]nc(-c4ccc(Cl)cc4)c3C2c2cccc2F)ccc1C	Cc1ccc(CN2C(=O)c3[nH]nc(-c4ccc(Cl)cc4)c3C2c2cccc2F)nc1C	TRUE	TRUE	TRUE
COC1Cc2cc(-c3ccc(F)cc3)ccc2C2(CCN(Cc3cccc3)CC2)O1	COC1Cc2cc(-c3ccc(F)cc3)ccc2C2(CCN(Cc3cccc3)CC2)O1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc1C1c2c(n[nH]c2C(C)(C)C)C(=O)N1c1ccc(-c2ccsc2)cc1	COc1cccc1C1c2c(n[nH]c2C(C)(C)C)C(=O)N1c1ccc(-c2ccsc2)cc1	TRUE	FALSE	FALSE
CC(O)c1csc(NC(=O)c2ccc([N+](=O)[O-])cc2)n1	CC(O)c1csc(NC(=O)c2ccc([N+](=O)[O-])cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCNc1ccc(C(=O)Nc2ccc(Cl)cc2C(=O)Nc2ccc(Cl)cn2)cc1	CCCNc1ccc(C(=O)Nc2ccc(Cl)cc2C(=O)Nc2ccc(Cl)cn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)n1ncc2c(NC(=O)NC3CC4CCCC(C3)N4C)cccc21	CC(C)n1ncc2c(NC(=O)NC3CC4CCCC(C3)N4C)cccc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1ccc(O)cc1O)N(C(C)O)CN1CC(C)C(OCc2ccc3c(c2)OCO3)C1)CC1CCCO1	CC1CN(CC(O)CN(CC2CCO2)C(=O)c2ccc(O)cc2O)CC1OCc1ccc2c(c1)OCO2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)N1CCc2cc(COC3CCN(C(=O)OC(C)(C)C)CC3)ccc21	CC(=O)N1CCc2cc(COC3CCN(C(=O)OC(C)(C)C)CC3)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CSc1ncccc1C(=O)OCC(=O)NC(=O)NCc1cccc1	CSc1ncccc1C(=O)OCC(=O)NC(=O)NCc1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCC(=O)N1CCC2(CCCN(c3cccc3)C2)C1	COCCC(=O)N1CCC2(CCCN(c3cccc3)C2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
OC(CN1CCN(Cc2ccc(C(F)(F)F)cc2)CC1)C(F)(F)F	OC(CN1CCN(Cc2ccc(C(F)(F)F)cc2)CC1)C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1cccs1)N(Cc1cc2c3c(c1)OCO3)C2	O=C(c1cccs1)N1Cc2cc(c3c(c2)OCO3)C1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cc1ccc(O)cc1)c1cccc1	O=C(Cc1ccc(O)cc1)c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCNc1c(=O)n(C)c(=O)c2c3c(cnc21)CCN3c1ccc(F)cc1	CCCNc1c(=O)n(C)c(=O)c2c3c(cnc21)CCN3c1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccc(C(=O)Nc2cccc(NC(=O)c3ccc(C(=N)N)cc3)c2)c(C(=O)Nc2cccc2)c1	CCc1ccc(C(=O)Nc2cccc(NC(=O)c3ccc(C(=N)N)cc3)c2)c(C(=O)Nc2cccc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)c1cccc(C2NC(=O)NC(C)=C2C(=O)Nc2ncccc2C)c1	CNC(=O)c1cccc(C2NC(=O)NC(C)=C2C(=O)Nc2ncccc2C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C1CC(CN2CC(Cc3cc(Cc4ccc(-c5ccn6nc(C7CC7)n(Cc7ccccc7)c6n5)cc4)no3)CC2)CN1	CC(=O)OCC(=O)C1CC2CCC3CCCC3C23CCC1C3	FALSE	TRUE	TRUE
CC(=O)OCC(=O)C1CC2CCC3CCCC3C23CCC1C3	CC(=O)OCC(=O)C1CC2CCC3CCCC3C23CCC1C3	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2n[nH]c(SCc3cccc3)n2)cc1	COc1ccc(-c2n[nH]c(SCc3cccc3)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)C1CN(c2ncccn2)CCN1C1CCN(C(=O)c2ccc(C)c3ccnc23)C1	CNC(=O)C1CN(c2ncccn2)CCN1C1CCN(C(=O)c2ccc(C)c3ccnc23)C1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(S(=O))(=O)Nc2cccc(C(=O)O)c2)cc1c1cccc2ncccc12	O=C(O)c1cccc(NS(=O))(=O)c2ccc(NC(=O)c3cccc4ncccc34)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2C3CSCN3(C)O)C23C(=O)N(Cc2ccc(Cl)c(Cl)c2)c2ccc(C)cc23)cc1	COc1ccc(C2C3CSCN3(C)O)C23C(=O)N(Cc2ccc(Cl)c(Cl)c2)c2ccc(C)cc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C12CCC(C)(C)CC1C1=CCC3C4(C)CC(C)C(=O)C(C)(C)C4CCC3(C)C1(C)CC2	CCOC(=O)C12CCC(C)(C)CC1C1=CCC3C4(C)CC(C)C(=O)C(C)(C)C4CCC3(C)C1(C)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(cc1OC)C1C3Cc4ccc(OC)c(OCCCCCCCCN)c4C(CNC(=O)C=Cc4cc5cccc5oc4=O)N3C(C#N)C(C2)N1C	COc1cc2c(cc1OC)C1C3Cc4ccc(OC)c(OCCCCCCCCN)c4C(CNC(=O)C=Cc4cc5cccc5oc4=O)N3C(C#N)C(C2)N1C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1ccc(Cl)c(S(=O))(=O)N2CCOCC2)c1N1CCc2cccc21	O=C(c1ccc(Cl)c(S(=O))(=O)N2CCOCC2)c1N1CCc2cccc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C(Cl)=C(N2CCCC2)C(=O)c2nc(-c3ccc(Cl)cc3)cn21	O=C1C(N2CCCC2)=C(Cl)C(=O)n2cc(-c3ccc(Cl)cc3)nc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCC1(O)C(=O)OCc2c1cc1n(c2=O)Cc2cc3c4c(ccc3nc2-1)OCO4	CCC1(O)C(=O)OCc2c1cc1n(c2=O)Cc2cc3c4c(ccc3nc2-1)OCO4	TRUE	TRUE	FALSE
CNC(=O)c1cccc1Nc1c(Cl)cccc1Cl	CNC(=O)c1cccc1Nc1c(Cl)cccc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NS(=O))(=O)C1CC1)c1cc(C2CC2)c(OCC2CC(F)(F)C2)cc1F	O=C(NS(=O))(=O)C1CC1)c1cc(C2CC2)c(OCC2CC(F)(F)C2)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)C2CCCN(C(=O)c3cc(C(C)C)no3)C2)cn1	COc1ccc(C(=O)C2CCCN(C(=O)c3cc(C(C)C)no3)C2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1cccc1)c1cc2c(=O)[nH]c(=O)n(Cc3cccc3)c2s1	O=C(c1cccc1)c1cc2c(=O)[nH]c(=O)n(Cc3cccc3)c2s1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C)cc(OP(=O)(Oc2ccc(O)c(OC)c2)C(NC(=O)C(NC(C)=O)C(C)C)C(C)C)c1	COc1cc(C)cc(OP(=O)(Oc2ccc(O)c(OC)c2)C(NC(=O)C(NC(C)=O)C(C)C)C(C)C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCNS(=O))(=O)c1cccc(C(=O)NCCCN2CCOCC2)c1	COCCNS(=O))(=O)c1cccc(C(=O)NCCCN2CCOCC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2cn(C3CC(C4CC4)OC4CC(=O)N34)nn2)cn1	COc1ccc(-c2cn(C3CC(C4CC4)OC4CC(=O)N43)nn2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)C(=O)C=C(C)C1ccc2c(c1)C(C)(C)C1[nH]c3cc(C(C)C)C(=O)N4CCC(NS(C)(=O)=O)CC4C(=C)C)ccc3c1C2=O	C=C(C)C1CC(NS(C)(=O)=O)CCN1C(=O)C(C)(C)c1ccc2c3c([nH]c2c1)C(C)(C)c1cc(C(C)=CC(=O)N(CC)CC)ccc1C3=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(C2Sc(C=Cc3cc(Br)c(C)o3)C(=O)N2c2cccc(F)c2)c1	COc1cccc(C2Sc(C=Cc3cc(Br)c(C)o3)C(=O)N2c2cccc(F)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCNc1cc2cccc2n2c(C)nnc12	CCNc1cc2cccc2n2c(C)nnc12	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ncc(-c2cccc2)n1Cc1cccc1	Nc1ncc(-c2cccc2)n1Cc1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc1COCCCOc1ccc(N2C(=O)CNCC2COCc2ccc3c(c2)OCO3)cc1	Cc1cccc1COCCCOc1ccc(N2C(=O)CNCC2COCc2ccc3c(c2)OCO3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1occc1C(=O)NN=Cc1cccc1[N+](=O)[O-]	Cc1occc1C(=O)NN=Cc1cccc1[N+](=O)[O-]	TRUE	TRUE	FALSE
CC(=O)NCCNc1cc(-c2ccc(Cl)cc2)cc(-n2c(C)nc3cccc32)n1	CC(=O)NCCNc1cc(-c2ccc(Cl)cc2)cc(-n2c(C)nc3cccc32)n1	TRUE	TRUE	TRUE
OCOC1CCOCC1Sc1cc(-c2cccc3c2CCCC3)on1	OCOC1CCOCC1Sc1cc(-c2cccc3c2CCCC3)on1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc2oc(=O)cc(CNC(=O)c3ccc(C)cc3C)c2cc1C	Cc1ccc(C(=O)NCc2cc(=O)oc3cc(C)c(C)cc23)c(C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1c(-c2cccc2)nc(-c2ccc(F)cc2)c(-c2ccc(F)cc2)c1C=CC1CC(O)CC(=O)O1	CC(C)c1c(-c2cccc2)nc(-c2ccc(F)cc2)c(-c2ccc(F)cc2)c1C=CC1CC(O)CC(=O)O1	TRUE	TRUE	TRUE
CSc1ccc(-c2cc(SC)nc(-c3ccnc3)n2)cc1	CSc1ccc(-c2cc(SC)nc(-c3ccnc3)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1ccc(Oc2ccc(NC(=O)CC(=O)Nc3cccc(C)c3)cc2)cc1	CC(=O)Nc1ccc(Oc2ccc(NC(=O)CC(=O)Nc3cccc(C)c3)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCc1cn(-c2cccc2)c2cc(Cl)ccc2c1=O)c1cccc1Sc1ccc2c(C=Cc3cccn3)n[nH]c2c1	O=C(NCc1cn(-c2cccc2)c2cc(Cl)ccc2c1=O)c1cccc1Sc1ccc2c(C=Cc3cccn3)n[nH]c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1CCC(OCc2cccc2)C1O	Nc1CCCC(OCc2cccc2)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(cc1O)C1Cc3cc(C)cc3CN1CC2	COc1cc2c(cc1O)C1Cc3cc(C)cc3CN1CC2	FALSE	TRUE	TRUE
CC(Cc1ccc(OCCC[Si])(C)(C)C)cc1NCCC(=O)O	CC(Cc1ccc(OCCC[Si])(C)(C)C)cc1NCCC(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCCN(C(=O)c1ccc(N2CCCCC2)c([N+](=O)[O-])c1)c1nccs1	CN(C)CCCN(C(=O)c1ccc(N2CCCCC2)c([N+](=O)[O-])c1)c1nccs1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)c1cn(C(C)C(=O)NCc2ccco2)c2cccc12	CC(=O)c1cn(C(C)C(=O)NCc2ccco2)c2cccc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(=O)oc2cc(OCC(=O)NCCCN3CCOCC3)ccc12	Cc1cc(=O)oc2cc(OCC(=O)NCCCN3CCOCC3)ccc12	TRUE	TRUE	FALSE
COc1ccc(S(=O))(=O)Nc2ccc(Nc3nccc(C=Cc4ccc5ncccc5c4)n3)cc2)cc1	COc1ccc(S(=O))(=O)Nc2ccc(Nc3nccc(C=Cc4ccc5ncccc5c4)n3)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CC#CCCC(=O)C(O)(c1cccc1)C12CC3CC(C(C3)C1)C2	CN(C)CC#CCCC(=O)C(O)(c1cccc1)C12CC3CC(C(C3)C1)C2	TRUE	TRUE	FALSE
CCn1cc(C(=O)N2CCC(N3CCC(C(C)(C)O)CC3)CC2)c(=O)c2ccc(C#N)cc21	CCn1cc(C(=O)N2CCC(N3CCC(C(C)(C)O)CC3)CC2)c(=O)c2ccc(C#N)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)NC1CCN(c2cc(-n3cnnc3)ccn2)CC1	CNC(=O)NC1CCN(c2cc(-n3cnnc3)ccn2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)c1nc(C)nc2c1nc(-c1cccc1)n2CCC[Si])(c1cccc1)(c1cccc1)c1cccc1	CCN(CC)c1nc(C)nc2c1nc(-c1cccc1)n2CCC[Si])(c1cccc1)(c1cccc1)c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc1Nc1c(-c2ccco2)nc2ccc(Br)cn12	COc1cccc1Nc1c(-c2ccco2)nc2ccc(Br)cn12	TRUE	TRUE	TRUE
CCON=C(OCC)C1CCN(C2(C)CCN(C(=O)c3c(C)ncnc3C)CC2)CC1	CCON=C(OCC)C1CCN(C2(C)CCN(C(=O)c3c(C)ncnc3C)CC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1cc2cc(Br)ccc2nc1O	Oc1cc2cc(Br)ccc2nc1O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc([N+](=O)[O-])nn1CC(=O)Nc1ccc2c(c1)OCCO2	Cc1cc([N+](=O)[O-])nn1CC(=O)Nc1ccc2c(c1)OCCO2	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(C(=O)c2cc3cc(Nc4nccc(-c5cc(OCC6CC6)ccn5)n4)cc(Cl)c3[nH]2)CC1	CN1CCN(C(=O)c2cc3cc(Nc4nccc(-c5cc(OCC6CC6)ccn5)n4)cc(Cl)c3[nH]2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CC1(C)C2CCCC1(CS(=O))(=O)N1C(C)(C)CCCC1(C)C(=O)C2	CC1(C)CCCC(C)(C)N1S(=O))(=O)CC12CCC(CC1=O)C2(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C(=O)N1CC(C)C(=O)OC2CCCC2)CC1)N1CCc2ccccc2C1	CC(C(=O)N1CC(C)C(=O)OC2CCCC2)CC1)N1CCc2ccccc2C1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)CN1CCN(Cc2cccc(-c3nn4ccccc4c3-c3ccnc(NC4CCCC4)n3)c2)CC1	CC(O)CN1CCN(Cc2cccc(-c3nn4ccccc4c3-c3ccnc(NC4CCCC4)n3)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCn1cc(CCc2cc(O)c3c(c2)OC(C)(C)C2CCC(C)(C)(C)CC32)nn1	CCCCCCCCn1cc(CCc2cc(O)c3c(c2)OC(C)(C)C2CCC(C)(C)(C)CC32)nn1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCN1C(=O)C(=Cc2ccc([N+](=O)[O-])o2)N(Cc2ccccc2)C1=5	C=CCN1C(=O)C(=Cc2ccc([N+](=O)[O-])o2)N(Cc2ccccc2)C1=5	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c3c1OC1C(=O)CCC4(NCCN5CCCCC5)C(C2)N(C)CCC314	COc1ccc2c3c1OC1C(=O)CCC4(NCCN5CCCCC5)C(C2)N(C)CCC314	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O))(=O)N(CC(=O)N1CCCC1COc1ccccc1)c1ccc(Cl)cc1	CS(=O))(=O)N(CC(=O)N1CCCC1COc1ccccc1)c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC=CCC=CCC=CCCCCCCC(=O)NC	CCCCC=CCC=CCC=CCCCCCCC(=O)NC	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCOCC(C)(C)C1C=C(C)C(c2ccccc2)=CC1=O	C=CCOCC(C)(C)C1C=C(C)C(c2ccccc2)=CC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)N)C2CC2)cc1-c1ccc2c(c1)NC(=O)C21CCCC1	Cc1ccc(C(=O)N)C2CC2)cc1-c1ccc2c(c1)NC(=O)C21CCCC1	TRUE	TRUE	FALSE
COc1cc(-c2cc(-c3ccccc3OCC(C)C)n(C)n2)cccc1-n1cnc(C)c1	COc1cc(-c2cc(-c3ccccc3OCC(C)C)n(C)n2)cccc1-n1cnc(C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)Nc2cc(C(C)(C)C)on2)cc1Nc1ncnc2cnc(N3CCOCC3)nc12	Cc1ccc(C(=O)Nc2cc(C(C)(C)C)on2)cc1Nc1ncnc2cnc(N3CCOCC3)nc12	TRUE	TRUE	FALSE
N#Cc1sc(N)c(C#N)c1-c1cn(-c2ccc([N+](=O)[O-])cc2)c(-c2ccccc2)n1	N#Cc1sc(N)c(C#N)c1-c1cn(-c2ccc([N+](=O)[O-])cc2)c(-c2ccccc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
NCC1CCC(Nc2cc(-c3ccc(Cl)c=Nc4c(-c5cn[nH]c5)enn4C4CC5(CCNCC5)C4)ncn3)ccn2)CC1	NCCNc1ccccc1-c1ccc(Cc2ccccc2)s1	FALSE	TRUE	TRUE
NCCNc1ccccc1-c1ccc(Cc2ccccc2)s1	NCCNc1ccccc1-c1ccc(Cc2ccccc2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)Cc1ccc(Nc2c(-c3ccccc3)nc3c(Cl)ccn23)cc1	CN(C)Cc1ccc(Nc2c(-c3ccccc3)nc3c(Cl)ccn23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCCO(C=O)C1=CC(C(=O)O)CC(C2C3=C(C(=O)C2(C)C1)C1(C)CCCC(C)(C)C1CC3	CCCCCCCCCCCCO(C=O)C1=CC(C(=O)O)CC(C2C3=C(C(=O)C2(C)C1)C1(C)CCCC(C)(C)C1CC3	TRUE	TRUE	TRUE
Cnc1nc(-c2c(C)cccc2O)ncc1[N+](=[O-])[O-]	Cnc1nc(-c2c(C)cccc2O)ncc1[N+](=[O-])[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1NC(=O)C(CCCCCP(=O)(O)O)(c2cnnn2-c2ccccc2)S1	O=C1NC(=O)C(CCCCCP(=O)(O)O)(c2cnnn2-c2ccccc2)S1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cnc(N2CCC(C3CCNCC3)CC2)nc1C1CCN(C(=O)C(c2ccccc2)c2ccccc2)CC1	Cc1cnc(N2CCC(C3CCNCC3)CC2)nc1C1CCN(C(=O)C(c2ccccc2)c2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C)c2sc(N(Cc3ccccc3)C(=O)c3ccco3)nc12	COc1ccc(C)c2sc(N(Cc3ccccc3)C(=O)c3ccco3)nc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCcn1cc(-c2ccc(CC(C#N)NC(=O)C3NC4CCC3C4)c(F)c2)cn1	CCcn1cc(-c2ccc(CC(C#N)NC(=O)C3NC4CCC3C4)c(F)c2)cn1	TRUE	TRUE	FALSE
CCOc1ccc(C(=O)C2(C=O)C(=O)N(c3nc4ccccc4s3)C2c2ccc(OC)cc2)cc1	CCOc1ccc(C(=O)C2(C=O)C(=O)N(c3nc4ccccc4s3)C2c2ccc(OC)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(S(=O))(=O)c2nnn3c2nc(NCCc2ccccc2Cl)c2sccc23)c1	Cc1cccc(S(=O))(=O)c2nnn3c2nc(NCCc2ccccc2Cl)c2sccc23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1c(CNC(=O)NC(=O)c2ccc(F)cc2F)nnc1SCCOc1ccccc1	CCn1c(CNC(=O)NC(=O)c2ccc(F)cc2F)nnc1SCCOc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)Oc1ccc(C(=O)Nc2nc(-c3ccccc3)cs2)cc1	CC(C)Oc1ccc(C(=O)Nc2nc(-c3ccccc3)cs2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(CC(=O)N1CCn2c(C3CC3)cnc2C1Cc1ccccc1)Cc1cc(F)c(F)cc1F	NC(CC(=O)N1CCn2c(C3CC3)cnc2C1Cc1ccccc1)Cc1cc(F)c(F)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(CCc2ccc(-c3cccc(C#N)c3)cc2)CC1	CN1CCN(CCc2ccc(-c3cccc(C#N)c3)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CN1CCc2ccccc2C1)Nc1ccc2nc3c4[nH]c5ccccc5c4ccn3c(=O)c2c1	O=C(CN1CCc2ccccc2C1)Nc1ccc2nc3c4[nH]c5ccccc5c4ccn3c(=O)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1[nH]c(SCc2ccccc2Cl)nc(Cc2ccc(F)cc2)c1I	O=c1[nH]c(SCc2ccccc2Cl)nc(Cc2ccc(F)cc2)c1I	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC=C1CNC(=S)N1CCc1c[nH]c2ccccc12	CCCC=C1CNC(=S)N1CCc1c[nH]c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)n1cc(-c2ccc(F)cc2)c2ccccc21	CC(=O)n1cc(-c2ccc(F)cc2)c2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)CC1C(C(=O)OCC)=C(N)Oc2ccc(-c3cccc(N(c4ccc(F)cc4)S(N)(=O)=O)c3)cc21	CCOC(=O)CC1C(C(=O)OCC)=C(N)Oc2ccc(-c3cccc(N(c4ccc(F)cc4)S(N)(=O)=O)c3)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCS(=O)(=O)c1c(C(C)C)c(CCC)c2oc(=O)cc(C(=O)O)c2c1C	CCCCCCCCS(=O)(=O)c1c(C(C)C)c(CCC)c2oc(=O)cc(C(=O)O)c2c1C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(O)Cn1cc(-c2ccc(N3CCN(Cc4cnc(N)c(C#N)c4Nc4ccc(C(=O)N5CCOCC5)cc4)C3)nc2)cn1	CC(C)(O)Cn1cc(-c2ccc(N3CCN(Cc4cnc(N)c(C#N)c4Nc4ccc(C(=O)N5CCOCC5)cc4)C3)nc2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=Cc1ccc(O)c(O)c1)OCCc1sc[n+](CC(=S)N)CCc2c[nH]c3ccccc23)c1	O=C(C=Cc1ccc(O)c(O)c1)OCCc1sc[n+](CC(=S)N)CCc2c[nH]c3ccccc23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C=O)CC(CNC(=O)c1ccc(N(C)C2CCN(Cc3ccc4ncccc4c3)CC2)c(C)c1)C(=O)OC	CO(C=O)CC(CNC(=O)c1ccc(N(C)C2CCN(Cc3ccc4ncccc4c3)CC2)c(C)c1)C(=O)OC	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)=C(C)Sc1cc(C)c2c(C)nn(NS(=O))(=O)c3ccccc3)c2n1	CC(C)=C(C)Sc1cc(C)c2c(C)nn(NS(=O))(=O)c3ccccc3)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
OCC(O)c1cnc2nc(N3CCCC33CCCC3)ccc2c1	OCC(O)c1cnc2nc(N3CCCC34CCCC4)ccc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2nc3c(c(=O)[nH]2)(C)(C(F)F)NC(c2ccc(F)cc2)=N3)cc1	COc1ccc(-c2nc3c(c(=O)[nH]2)(C)(C(F)F)NC(c2ccc(F)cc2)=N3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1ccc(CCNc2cc(-c3ccc(Br)cc3)ncn2)cc1Cl	Clc1ccc(CCNc2cc(-c3ccc(Br)cc3)ncn2)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(CN2CCC(C3(C)Cc4ccccc4O3)CC2)cc1	CC1(C2CCN(Cc3ccccc3)CC2)Cc2ccccc2O1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cnc(NS(=O))(=O)c2ccc(N=Nc3c(O)c(O)c4ccccc34)c(C)c2)n1	Cc1cnc(NS(=O))(=O)c2ccc(N=Nc3c(O)c(O)c4ccccc34)c(C)c2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC=CC(=O)OC1C(CO[Si])(C)(C)C(C)C)OC(n2cnc3c(SC)ncnc32)C1O[Si](C)(C)C(C)C	CC=CC(=O)OC1C(CO[Si])(C)(C)C(C)C)OC(n2cnc3c(SC)ncnc32)C1O[Si](C)(C)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CCNc1c(O)nn1S(C)C(=O)NC1CC2CCC1C2	CCNc1c(O)nn1S(C)C(=O)NC1CC2CCC1C2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCC1CNC(=O)c2ccccc2O1)c1cccc([N+](=O)[O-])c1	O=C(NCC1CNC(=O)c2ccccc2O1)c1cccc([N+](=O)[O-])c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C(CNC(=S)NC(=O)C1(C)CCCC2(C)c3ccc(C(C)C)cc3CCC12)N(CC)CC	CCOC(=O)C(CNC(=S)NC(=O)C1(C)CCCC2(C)c3ccc(C(C)C)cc3CCC12)N(CC)CC	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCCS)Nc1ccc(S(=O))(=O)Nc2nc3ccc(Cl)cc3s2)cc1	O=C(CCCS)Nc1ccc(S(=O))(=O)Nc2nc3ccc(Cl)cc3s2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=CCOc1ccc2ccc(=O)oc2c1)CN1CCc2cccc3cccc1c23	CC(=CCOc1ccc2ccc(=O)oc2c1)CN1CCc2cccc3cccc1c23	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(OCC)c(NC(=O)c2cccs2)c1	CCOc1ccc(OCC)c(NC(=O)c2cccs2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)N2CCc3ccccc3C2)cc1S(=O))(=O)N1CCOCC1	Cc1ccc(C(=O)N2CCc3ccccc3C2)cc1S(=O))(=O)N1CCOCC1	TRUE	TRUE	FALSE
N#CC1CC2CC2N1C(=O)C(N)C1CCN(C(=O)c2ccc3cc(F)ccc3n2)CC1	N#CC1CC2CC2N1C(=O)C(N)C1CCN(C(=O)c2ccc3cc(F)ccc3n2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cnc(Nc2ccc(C(=O)N3CCN(C(=O)N(C)C)CC3)cc2)c1	Cc1cnc(Nc2ccc(C(=O)N3CCN(C(=O)N(C)C)CC3)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCc1ccccc1Cl)C1CCN(S(=O))(=O)N2CCC3(CC2)OCCO3)CC1	O=C(NCc1ccccc1Cl)C1CCN(S(=O))(=O)N2CCC3(CC2)OCCO3)CC1	TRUE	TRUE	FALSE
CCC1(O)C(=O)OCc2c1cc1n(c2=O)C(OC2OC(COC3OC(C)C(O)C3O)C(O)C2O)c2cc3ccccc3nc2-1	CCC1(O)C(=O)OCc2c1cc1n(c2=O)C(OC2OC(COC3OC(C)C(O)C3O)C(O)C2O)c2cc3ccccc3nc2-1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(N=C2S(C=Cc3ccccc3)C(=O)N2Cc2ccc(OC)cc2)nn1	CCOc1ccc(N=C2S(C=Cc3ccccc3)C(=O)N2Cc2ccc(OC)cc2)nn1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1c(NC(=O)c2ccc(N3C(=O)CCC3=O)cc2)sc2c1CCCCC2	NC(=O)c1c(NC(=O)c2ccc(N3C(=O)CCC3=O)cc2)sc2c1CCCCC2	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C=O)c1cc(C=Cc2ccc(OC)c(C=Cc3ccc(-c4ccccc4)cc3)c2)cc(C)c1OC	CO(C=O)c1cc(C=Cc2ccc(OC)c(C=Cc3ccc(-c4ccccc4)cc3)c2)cc(C)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C(=O)N(Cc2ccc3ccccc3c2)c2ccc([N+](=O)[O-])cc21	O=C1C(=O)N(Cc2ccc3ccccc3c2)c2ccc([N+](=O)[O-])cc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)=NC1CCC(Nc2ncc(-c3cnnc(C)c3)cc2-c2cncnc2)CC1	CC(O)=NC1CCC(Nc2ncc(-c3cnnc(C)c3)cc2-c2cncnc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCc1cc2c(Nc3ccc(Cl)c(Cl)c3)ncnc2s1	CCCc1cc2c(Nc3ccc(Cl)c(Cl)c3)ncnc2s1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C1CCCCN1)N1CCc2ccnc(NC3CC3)c2CC1	O=C(C1CCCCN1)N1CCc2ccnc(NC3CC3)c2CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CONC(=O)NC(=O)c1cc(OC)cc(Br)c1OS(=O))(=O)c1cc(OC)ccc1O	CONC(=O)NC(=O)c1cc(OC)cc(Br)c1OS(=O))(=O)c1cc(OC)ccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCCCCCn1cc(-c2cccc(-c3ccccc3)n2)nn1)NO	O=C(CCCCCCn1cc(-c2cccc(-c3ccccc3)n2)nn1)NO	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nn(C(C)C(=O)NCc2ccc(OC)cc2)c(=O)c2cc3occcc3n12	CCc1nn(C(C)C(=O)NCc2ccc(OC)cc2)c(=O)c2cc3occcc3n12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)c1cc2c(c(C)C(=O)c1OC(C)=O)C1(C)CCCC(C)(C)C1CC2	CC(=O)Oc1c(C(C)=O)cc2c(c1C(C)=O)C1(C)CCCC(C)(C)C1CC2	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1cc(Cl)cc(OCc2cc(OCc3ccccc3-c3cncnc3)ccc2Br)c1	N#Cc1cc(Cl)cc(OCc2cc(OCc3ccccc3-c3cncnc3)ccc2Br)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CSc1nc(NC2OC(C)C(O)C2O)c(NC2OC(C)C(O)C)C(O)C2O)c(=O)n1C	CSc1nc(NC2OC(C)C(O)C2O)c(NC2OC(C)C(O)C)C(O)C2O)c(=O)n1C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc2oc([S+])([O-])Cc3nc4ccccc4[nH]3)cc12	COc1ccccc2oc([S+])([O-])Cc3nc4ccccc4[nH]3)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
CN=C(O)c1cc(C(O)=Nc2cc(-c3ccccc3F)c(C3(C)CS(=O))(=O)C4(CCOc4)C(=N)N3)cn2)n(C)n1	CN=C(O)c1cc(C(O)=Nc2cc(-c3ccccc3F)c(C3(C)CS(=O))(=O)C4(CCOc4)C(=N)N3)cn2)n(C)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(N[S+](=O)(O)C)cc2ccc(-c3ccc(N4CCNCC4)nc3)cc2)nc1CC(C)(C)C	Cc1cc(N[S+](=O)(O)C)cc2ccc(-c3ccc(N4CCNCC4)nc3)cc2)nc1CC(C)(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cn1ccc(=O)n(C)C(C(F)F)c2ccc(Cl)cc2Cl)c1=O)OCCOc1ccc(Cl)cc1	O=C(Cn1ccc(=O)n(C)C(C(F)F)c2ccc(Cl)cc2Cl)c1=O)OCCOc1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)CNC(=O)c1nn(-c2ccc(Cl)c(Cl)c2)c(=NO)s1	CCOC(=O)CNC(=O)c1nn(-c2ccc(Cl)c(Cl)c2)c(=NO)s1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCCC=CCN(C(C(=O)c2ccc(cc2)CNC(=O)C(Cc2ccc3ccccc3c2)NC1=O	CN1CCCC=CCN(C(C(=O)c2ccc(cc2)CNC(=O)C(Cc2ccc3ccccc3c2)NC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(Nc2ccc3ccc(C(=O)O)ccc3c2)cc1	Cc1ccc(Nc2ccc3ccc(C(=O)O)ccc3c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)N(C)Cc1ccc(Nc2ncc(Br)c(OC3cccc(C)c3)n2)nc1	CC(=O)N(C)Cc1ccc(Nc2ncc(Br)c(OC3cccc(C)c3)n2)nc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1ccccc2c1[nH]c1c(N)nc3ccccc3c12	CN(C)c1ccccc2c1[nH]c1c(N)nc3ccccc3c12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cn1cnc([N+](=O)[O-])n1)NCC=Cc1ccccc1	O=C(Cn1cnc([N+](=O)[O-])n1)NCC=Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(Cl)cccc1OC(=O)CC(C=O)n1cnc2ccccc21	Cc1c(Cl)cccc1OC(=O)CC(C=O)n1cnc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-n2c(=O)c3ccc(C)nc3n(CC(=O)NCCc3ccccc3OC)c2=O)cc1	COc1ccc(-n2c(=O)c3ccc(C)nc3n(CC(=O)NCCc3ccccc3OC)c2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1ccc2c(c1)sc1nc(-c3ccc(Br)cc3)cn12	CN(C)c1ccc2c(c1)sc1nc(-c3ccc(Br)cc3)cn12	TRUE	TRUE	TRUE
CN(Cc1cccc(NC(=O)OC(C)(C)C)c1)CC(O)COc1cccc2ccsc12	CN(Cc1cccc(NC(=O)OC(C)(C)C)c1)CC(O)COc1cccc2ccsc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)[Si](F)(Cl)OC1CCCC1	CC(C)(C)[Si](F)(Cl)OC1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
COc1cc(Cn2nnnc2C(NC(=O)NC(C)C)c2ccc(F)cc2)cc(OC)c1OC	COc1cc(Cn2nnnc2C(NC(=O)NC(C)C)c2ccc(F)cc2)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=Nc2(CCC3CN(C(=O)CC4CC4)CC3)C(=O)N1C	CC1=Nc2(CCC3CN(C(=O)CC4CC4)CC3)C(=O)N1C	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)c1cc(C)n(-c2ccc(C(=O)Nc3ccc(Oc4cnc5ccc(OCCCN6CCCC(C)C6)c(OC)cc45)c(F)c3)cc2)n1	CNC(=O)c1cc(C)n(-c2ccc(C(=O)Nc3ccc(Oc4cnc5ccc(OCCCN6CCCC(C)C6)c(OC)cc45)c(F)c3)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1ccc(C=Cc2ccc(-c3ccc(CO)cc3)o2)cc1	O=C(O)c1ccc(C=Cc2ccc(-c3ccc(CO)cc3)o2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1esc(C2CC3C(C)(O)C3OC3ccccc3)O2)n1	O=C(O)c1esc(C2CC3C(C)(O)C3OC3ccccc3)O2)n1	TRUE	TRUE	FALSE
ON=C(c1ccnc(Oc2ccc(F)c(Cl)c2)c1)N1CCSCC1	ON=C(c1ccnc(Oc2ccc(F)c(Cl)c2)c1)N1CCSCC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc2ccc(CN(CC3CC3)C(=O)N(c3ccccc3)C(C)C)cc2s1	Cc1nc2ccc(CN(CC3CC3)C(=O)N(c3ccccc3)C(C)C)cc2s1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)OC1C(C)(C)(O)CCC2(C)C3CCC(c4ccoc4)C3(C)CCC21O	CC(=O)OC1C(C)(C)(O)CCC2(C)C3CCC(c4ccoc4)C3(C)CCC21O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1nnc(SCC(Cl)=C(Cl)c2ccccc2)s1)C1CC1	O=C(Nc1nnc(SCC(Cl)=C(Cl)c2ccccc2)s1)C1CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CCCCCCCC=CC2C(C(=NOC3OCC(O)C(O)C3O)CC1O2	O=C1CCCCCCCC=CC2C(C(=NOC3OCC(O)C(O)C3O)CC1O2	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(CNC(=O)Cc2ccc(Cl)cc2)c(OC)cc1NC(=O)c1cccc1	COc1cc(CNC(=O)Cc2ccc(Cl)cc2)c(OC)cc1NC(=O)Cc1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCNC(=O)OCc1nc2ccccc2n1C1CCN(CCn2c2ccc(Cl)cc2)CC1	CCNC(=O)OCc1nc2ccccc2n1C1CCN(CCn2c2ccc(Cl)cc2)CC1	FALSE	TRUE	TRUE
CN1CCC(Nc2cc3ncc(-c4cnn(C)c4)n3n2)CC1	CN1CCC(Nc2cc3ncc(-c4cnn(C)c4)n3n2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(-n2nc(CCN#N)c(Oc3cccc(C(F)(F)F)c3)c2C)c1	Cc1cccc(-n2nc(CCN#N)c(Oc3cccc(C(F)(F)F)c3)c2C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CNc1nc(Nc2cc(Cl)c(C#N)cc2Cl)nn1N=Cc1ccc([N+](=O)[O-])cc1	CNc1nc(Nc2cc(Cl)c(C#N)cc2Cl)nn1N=Cc1ccc([N+](=O)[O-])cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1OCC(=O)Nc1ccc2nn(-c3cc(C)cc(C)c3)nc2c1	COc1ccccc1OCC(=O)Nc1ccc2nn(-c3cc(C)cc(C)c3)nc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
NCCCCNc1ccn2ncc(-c3cc(OCc4cccc4)ccc3F)c2n1	NCCCCNc1ccn2ncc(-c3cc(OCc4cccc4)ccc3F)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CC(c2ccc(O)cc2)=Nc2ccc3c(c21)NC(C)(C)c1ccc(O)cc1-3	CC1CC(c2ccc(O)cc2)=Nc2ccc3c(c21)NC(C)(C)c1ccc(O)cc1-3	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-n2cc(C(=O)c3cc4cccc4[nH]3)ccc2=O)cc1	Cc1ccc(-n2cc(C(=O)c3cc4cccc4[nH]3)ccc2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1Cc2c(C#N)c(O)nc3cccc1c23	CN1Cc2c(C#N)c(O)nc3cccc1c23	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(O)nc(SCC(=O)Nc2ccc(O)cc2C)n1	Cc1cc(O)nc(SCC(=O)Nc2ccc(O)cc2C)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc2ccccc2n1CCNC(=O)c1cccn1	Cc1cc2ccccc2n1CCNC(=O)c1cccn1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1cc(SC2CCCC2)nc(-c2ccccc2)n1	NC(=O)c1cc(SC2CCCC2)nc(-c2ccccc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc(N)c2nc(Cc3ccc4nonc4c3)cnc2n1	Nc1nc(N)c2nc(Cc3ccc4nonc4c3)cnc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1c2ccccc2S(C(=S)N1CCS(=O))(=O)O	O=c1c2ccccc2sc(=S)n1CCS(=O))(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nnc2c1ncn2C1OC(C(CO)OCP(=O)(O)O)C(O)C1O	Nc1nnc2c1ncn2C1OC(C(CO)OCP(=O)(O)O)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2nnc(SCC(=O)Nc3cccc(Cl)c3)o2)cc1	COc1ccc(-c2nnc(SCC(=O)Nc3cccc(Cl)c3)o2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(N)Cc1c[nH]c2ccccc12	CCC(N)Cc1c[nH]c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1nccc1-c1ccc2cccc(NC3CCNCC3)c2n1	Cn1nccc1-c1ccc2cccc(NC3CCNCC3)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(Cc1cc(Br)c(Oc2cc(Br)c(O)c(Br)c2)c(Br)c1)C(=O)O	NC(Cc1cc(Br)c(Oc2cc(Br)c(O)c(Br)c2)c(Br)c1)C(=O)O	TRUE	TRUE	FALSE
CCCCCCCCCCCCOCC(COP(=O)([O-])OC[N+](C)(C)C)OC(=O)CCCCCCCC	CCCCCCCCCCCCOCC(COP(=O)([O-])OC[N+](C)(C)C)OC(=O)CCCCCCCC	TRUE	TRUE	TRUE
NC(CNC(=O)c1nnc(-c2ccc(F)cc2)c1C(=O)c1ccc(Cl)cc1)C(=O)O	NC(CNC(=O)c1nnc(-c2ccc(F)cc2)c1C(=O)c1ccc(Cl)cc1)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)[c+](OCC)(c1ccccc1)c1ccc(C=Cc2cc[n+](C)cc2)cc1	CCN(CC)[c+](OCC)(c1ccccc1)c1ccc(C=Cc2cc[n+](C)cc2)cc1	FALSE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=C2C(=O)N(C)C(=O)N(C)C2=O)ccc1OCCc1cnO)cc(Cl)c1	COc1cc(C=C2C(=O)N(C)C(=O)N(C)C2=O)ccc1OCCc1cnO)cc(Cl)c1	FALSE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(=O)c2cccc(C(F)(F)F)c2)cc1-n1ncc2cc(Nc3ccccc3)ncc2c1=O	Cc1ccc(NC(=O)c2cccc(C(F)(F)F)c2)cc1-n1ncc2cc(Nc3ccccc3)ncc2c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC[S+](([O-])c1cn(C2CC(n3ncc(=O)[nH]c3=O)OC2CO)c(=O)[nH]c1=O	CC[S+](([O-])c1cn(C2CC(n3ncc(=O)[nH]c3=O)OC2CO)c(=O)[nH]c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCS(=O))(=O)N1CCOC2(CCCN(C(=O)c3ccsc3)C2)C1	CCS(=O))(=O)N1CCOC2(CCCN(C(=O)c3ccsc3)C2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1c(C=O)c(O)n(-c2ccccc2)c(=O)c1C	CCOc1c(C=O)c(O)n(-c2ccccc2)c(=O)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CC(=O)C2(C1=O)C(c1cccs1)CC(=O)CC2c1ccco1	CN1CC(=O)C2(C1=O)C(c1ccco1)CC(=O)CC2c1cccs1	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+](([O-])c1ccc(C[N+](=O)23CCC(C2)C(n2cc(-c4ccccc4)nn2)C3)cc1	O=[N+](([O-])c1ccc(C[N+](=O)23CCC(C2)C(n2cc(-c4ccccc4)nn2)C3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCc1ccccc1)Nc1ccc(OC(F)(F)F)cc1	O=C(NCc1ccccc1)Nc1ccc(OC(F)(F)F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(C2CN3CCCN(c4ncc(-n5cnnn5)cn4)CC3CO2)cc1	c1ccc(C2CN3CCCN(c4ncc(-n5cnnn5)cn4)CC3CO2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NC1=NC(c2cc(F)cc(F)c2)CO1	NC1=NC(c2cc(F)cc(F)c2)CO1	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1cc(COc2ccc(C3CCC(=O)N3C3CCN(Cc4cc5ccc(OC)nc5s4)CC3)cc2)c2ccccc2n1	COc1ccc2cc(CN3CCC(N4C(=O)CCC4c4ccc(OCc5ccc(C)nc6ccccc56)cc4)CC3)sc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(F)cc1C(O)=Nc1csc(N)n1	COc1ccc(F)cc1C(O)=Nc1csc(N)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC12CCC(=O)C=C1CC1C2CCC2(C)C(=CC=NO)CCC12	CC12CCC(=O)C=C1CC1C2CCC2(C)C(=CC=NO)CCC12	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)C(=S)C1C(=O)N(c2ccc(F)cc2)C1c1ccccc1	CN(C)C(=S)C1C(=O)N(c2ccc(F)cc2)C1c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C)S(=O)(=O)c1c(CNC(=O)c2ccoc2)c(C)nn1C	CCC(C)S(=O)(=O)c1c(CNC(=O)c2ccoc2)c(C)nn1C	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1cc2ccccc2cc1O	Oc1cc2ccccc2cc1O	TRUE	TRUE	FALSE
Nc1ncc(-c2ccc(C3(c4noc(-c5cccn5)n4)CCC3)cn2)cn1	Nc1ncc(-c2ccc(C3(c4noc(-c5cccn5)n4)CCC3)cn2)cn1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(=O)N1CCCC(NC(=O)NCCSc2ccccc2)C1	CC(=O)N1CCCC(NC(=O)NCCSc2ccccc2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
Sc1nc2sc3ccccc3c2c(=S)n1-c1ccccc1	S=c1c2c(nc(S)n1-c1ccccc1)sc1ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CSc1nc(Nc2ccc(Cl)c(Cl)c2)nc(C(F)(F)F)n1	CSc1nc(Nc2ccc(Cl)c(Cl)c2)nc(C(F)(F)F)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)OCC2=C(C(=O)O)N3C(=O)C(NC(=O)C(=NOC(C)(C)C(=O)O)c4csc(N)n4)C3S2C)cc1	Cc1ccc(C(=O)OCC2=C(C(=O)O)N3C(=O)C(NC(=O)C(=NOC(C)(C)C(=O)O)c4csc(N)n4)C3S2C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+](([O-])c1ccc(C)C(C=NNc2nc(N3CCCC3)nc(N3CCCC3)n2)c1	O=[N+](([O-])c1ccc(C)C(C=NNc2nc(N3CCCC3)nc(N3CCCC3)n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
OCCOc1ccccc1-c1nc(-c2ccc(O)cc2)no1	OCCOc1ccccc1-c1nc(-c2ccc(O)cc2)no1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc2nc(N=C(N)c3ccc(OC)cc3)sc2c1	CCOc1ccc2nc(N=C(N)c3ccc(OC)cc3)sc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
C#CCSc1nnc(N2CCOCC2)s1	C#CCSc1nnc(N2CCOCC2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C(=O)CCC1=C(Cl)C(=C(Cl)c2cn(CC3(O)CC3)c3ccccc23)C=C1	CO(C(=O)CCC1=C(Cl)C(=C(Cl)c2cn(CC3(O)CC3)c3ccccc23)C=C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC1OC2C3=C(C=C(COC(C)=O)CC3=O)COC1(C)C21CO1	CCC1OC2C3=C(C=C(COC(C)=O)CC3=O)COC1(C)C21CO1	TRUE	TRUE	TRUE
C#Cc1cncc2nnc(N3OC(COS(C)(=O)=O)C(O)C3O)c(=O)c12	C#Cc1cncc2nnc(N3OC(COS(C)(=O)=O)C(O)C3O)c(=O)c12	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ccc(-c2cccc3ccc(N)nc23)cc1	Nc1ccc(-c2cccc3ccc(N)nc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCC(=O)Nc1ccn(C2CCC(CO)O2)c(=O)n1	CCCCCCCCC(=O)Nc1ccn(C2CCC(CO)O2)c(=O)n1	TRUE	TRUE	TRUE
C=Cc1cc(OC)cc(C(C#N)=Cc2cccc(OC)c2)c1O	C=Cc1cc(OC)cc(C(C#N)=Cc2cccc(OC)c2)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1CCN(C(=O)c2ccc3[nH]c4c(c3c2)CCCC4)CC1	CCOC(=O)C1CCN(C(=O)c2ccc3[nH]c4c(c3c2)CCCC4)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(c2cc(NC(=O)c3cc(Cl)ccn3)ccc2F)CS(=O)(=O)C2(CCOCC2)C(=N)N1	CC1(c2cc(NC(=O)c3cc(Cl)ccn3)ccc2F)CS(=O)(=O)C2(CCOCC2)C(=N)N1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(C)c1NS(=O)(=O)c1cc(-c2c(C)noc2C)ccc1C	Cc1ccc(-c2c(C)noc2C)cc1S(=O)(=O)Nc1c(C)cccc1C	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCN1C(=O)C(=Cc2cc3c(cc2OC)OCO3)SC1=S	CCCCCN1C(=O)C(=Cc2cc3c(cc2OC)OCO3)SC1=S	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC(=O)c1ccccc1Cl)NC(CSCCc1cccc(O)c1)C(=O)O	O=C(NC(=O)c1ccccc1Cl)NC(CSCCc1cccc(O)c1)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1cccc(C(C)C)c1NC(=O)NCC1(N2CCN(C(=O)c3ccc(C(F)(F)F)cc3)CC2)CCCCC1	CC(C)c1cccc(C(C)C)c1NC(=O)NCC1(N2CCN(C(=O)c3ccc(C(F)(F)F)cc3)CC2)CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
C1CCCN(C(=O)Nc2ccc3c(c2)OCO3)C1	C1CCCN(C(=O)Nc2ccc3c(c2)OCO3)C1	TRUE	TRUE	TRUE
NS(=O)(=O)c1cccc(Nc2c3ccccc3nc3cc(Cl)ccc23)c1	NS(=O)(=O)c1cccc(Nc2c3ccccc3nc3cc(Cl)ccc23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)NC(=O)CN(C(=O)c1cc(C(=O)NC(Cc2ccccc2)C(O)CNC(C)(C)c2ccccc2)cc(N2CCCCS2(=O)=O)=O)c1	CC(C)(C)NC(=O)CN(C(=O)c1cc(C(=O)NC(Cc2ccccc2)C(O)CNC(C)(C)c2ccccc2)cc(N2CCCCS2(=O)=O)=O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nc2ccc(C(=O)NC(Cc3ccc(OC)c(COC)c3)C(=O)NC(C(=O)NC(CCCNC(=N)N)C(N)=O)C(C)C)cc2o1	CCc1nc2ccc(C(=O)NC(Cc3ccc(OC)c(COC)c3)C(=O)NC(C(=O)NC(CCCNC(=N)N)C(N)=O)C(C)C)cc2o1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(COc1ccc2ccccc2c1)Nc1ccccc1	O=C(COc1ccc2ccccc2c1)Nc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=NO)NS(=O)(=O)C=Cc1ccc(C(F)(F)F)cc1	NC(=NO)NS(=O)(=O)C=Cc1ccc(C(F)(F)F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1C2CCC1CC(NC(=O)c1cnn3ccccc13)C2	CN1C2CCC1CC(NC(=O)c1cnn3ccccc13)C2	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1nc2ncc(-c3ccccc3)c(NCc3ccccc3)n2n1	Cc1nc2ncc(-c3ccccc3)c(NCc3ccccc3)n2n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(OCc2csc(N3CCN(Cc4ccccc4)CC3)n2)c2cc(-c3cn4nc(OC)sc4n3)oc2c1	COc1cc(OCc2csc(N3CCN(Cc4ccccc4)CC3)n2)c2cc(-c3cn4nc(OC)sc4n3)oc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccccc1N1CCCCC1)c1ccccc1	O=C(Nc1ccccc1N1CCCCC1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cccc(OC(F)(F)F)c1)c1c[nH]c2cccc(-c3nnc4cccn34)c12	O=C(Nc1cccc(OC(F)(F)F)c1)c1c[nH]c2cccc(-c3nnc4cccn34)c12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(O)cc1)c1cnc(N2CCOCC2)c(-c2ncco2)c1	O=C(Nc1ccc(O)cc1)c1cnc(N2CCOCC2)c(-c2ncco2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC(NC(=O)c1ccc(-c2ccccc2S(N)(=O)=O)cc1)C(=O)c1ncco1	CCCCC(NC(=O)c1ccc(-c2ccccc2S(N)(=O)=O)cc1)C(=O)c1ncco1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>N=C(N)NCn1c(=O)n(-c2ccccc2)c(=O)c2ccc(Cl)ccc21</chem>	<chem>N=C(N)NCn1c(=O)n(-c2ccccc2)c(=O)c2cc(Cl)ccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(CN(c2cccn2)S(=O)(=O)c2ccc(C(C)=O)s2)c2ccccc12</chem>	<chem>COc1ccc(CN(c2cccn2)S(=O)(=O)c2ccc(C(C)=O)s2)c2ccccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc2c(c1)c(C(=O)COC(=O)COc1ccc3ccccc3c1)c(C)n2C</chem>	<chem>Cc1ccc2c(c1)c(C(=O)COC(=O)COc1ccc3ccccc3c1)c(C)n2C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(Cc2nc3ccc(C(=O)N(C(CSc4c4ccccc4)C(=O)O)cc3o2)cc(OC)c1OC</chem>	<chem>COc1cc(Cc2nc3ccc(C(=O)N(C(CSc4c4ccccc4)C(=O)O)cc3o2)cc(OC)c1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccccc1COC(=O)N1CC2CCN(c3nnc(-c4ccnc4)s3)C2C1</chem>	<chem>Cc1ccccc1COC(=O)N1CC2CCN(c3nnc(-c4ccnc4)s3)C2C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=NNC(=O)c1nnn(-c2nonc2N)c1C)c1ccc(Cl)cc1</chem>	<chem>CC(=NNC(=O)c1nnn(-c2nonc2N)c1C)c1ccc(Cl)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)c1ccc(Cl)c(S(=O)(=O)Nc2ccc(-c3nc4cc(Cl)ccc4s3)cc2)c1</chem>	<chem>O=C(O)c1ccc(Cl)c(S(=O)(=O)Nc2ccc(-c3nc4cc(Cl)ccc4s3)cc2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCSCc1nc2cc(NC(=O)NCc3ccnc3)ccc2n1C(C)C</chem>	<chem>CCSCc1nc2cc(NC(=O)NCc3ccnc3)ccc2n1C(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(C(=O)NNC(=S)Nc2ccc(Cl)cc2)cc1C</chem>	<chem>Cc1ccc(NC(=S)NNC(=O)c2ccc(Cl)c(Cl)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c(C(=O)N2CCN(c3ccc(F)cc3)CC2)sc(=S)n1Cc1cccn1</chem>	<chem>Cc1c(C(=O)N2CCN(c3ccc(F)cc3)CC2)sc(=S)n1Cc1cccn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCn1c(SCC(=O)Nc2ccccc2F)nnc1-c1cccs1</chem>	<chem>CCn1c(SCC(=O)Nc2ccccc2F)nnc1-c1cccs1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)c1cccc(Oc2nc(-c3ccccc4[nH]nnc34)ncc2Br)c1</chem>	<chem>CC(C)(C)c1cccc(Oc2nc(-c3ccccc4[nH]nnc34)ncc2Br)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)c1cc2cc(-c3ccccc3)cnc2o1</chem>	<chem>CCOC(=O)c1cc2cc(-c3ccccc3)cnc2o1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc(CSc2nc(NCc3ccc(-c4ccc(-c5nc6ccccc6[nH]5)cc4)cc3)c3ccccc3n2)cc1</chem>	<chem>c1ccc(CSc2nc(NCc3ccc(-c4ccc(-c5nc6ccccc6[nH]5)cc4)cc3)c3ccccc3n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccccc1NS(=O)(=O)c1ccc2[nH]c(CCl=C(C)C3(CC3)OC2(C)C)nc1C</chem>	<chem>COc1ccccc1NS(=O)(=O)c1ccc2[nH]c(CCl=C(C)C3(CC3)OC2(C)C)nc1C</chem>	FALSE	TRUE	TRUE
<chem>O=[N+](([O-])c1ccc(C(F)(CS2CCCC2)S(=O)(=O)c2ccccc2)cc1</chem>	<chem>O=[N+](([O-])c1ccc(C(F)(CS2CCCC2)S(=O)(=O)c2ccccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)c1c(Cc2ccc(C(=O)NCCN(C)C)cc2)c(=O)c2ccnc2n1-c1ccccc1</chem>	<chem>COC(=O)c1c(Cc2ccc(C(=O)NCCN(C)C)cc2)c(=O)c2ccnc2n1-c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)OC(C(C)C)C1CC2C3CC(C)CC4C5(CCC4(C)C3CC(OC(C)=O)C12C)O05)c1ccccc1O</chem>	<chem>CC(=O)OC(C(C)C)C1CC2C3CC(C)CC4C5(CCC4(C)C3CC(OC(C)=O)C12C)O05)c1ccccc1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(C)c(C(C(C(N)=O)N(CCC(C)C)C(=O)c2oc3ccc([N+](=O)[O-])cc3c2C)c(C)c1</chem>	<chem>Cc1cc(C)c(C(C(C(N)=O)N(CCC(C)C)C(=O)c2oc3ccc([N+](=O)[O-])cc3c2C)c(C)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)C(NC(=O)OCc1ccccc1)C(=O)N(C(Cc1ccccc1)C(=O)N(C(C=O)CC1CCN1C=O</chem>	<chem>CC(C)C(NC(=O)OCc1ccccc1)C(=O)N(C(Cc1ccccc1)C(=O)N(C(C=O)CC1CCN1C=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCn1cc(C(=O)NCc2ccs2)c(=O)c2cc(S(=O)(=O)N(C)C)ccc21</chem>	<chem>CCn1cc(C(=O)NCc2ccs2)c(=O)c2cc(S(=O)(=O)N(C)C)ccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCCN1CCN(c2ncnc3c2CN(C(=O)c2cc(C)ccc2-n2ncn2)CC3)CC1</chem>	<chem>COCCN1CCN(c2ncnc3c2CN(C(=O)c2cc(C)ccc2-n2ncn2)CC3)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc2c(c1)C(CN1CCN(C(=O)C3CCO3)CC1)CC2</chem>	<chem>COc1ccc2c(c1)C(CN1CCN(C(=O)C3CCO3)CC1)CC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CON=C1CN(c2nc3c(cc2F)c(=O)c(C(=O)O)cn3C2CC2)CC1CN</chem>	<chem>CON=C1CN(c2nc3c(cc2F)c(=O)c(C(=O)O)cn3C2CC2)CC1CN</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>N#CC(C#N)=C(O)c1ccc([N+](=O)[O-])o1</chem>	<chem>N#CC(C#N)=C(O)c1ccc([N+](=O)[O-])o1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)N(C(C(=O)NN(Cc1ccccc1)CC(O)(Cc1ccccc1)C(=O)NC(C(=O)N(C(C)c1ccccc1)C(C)(C)C(C)C(C)C</chem>	<chem>COC(=O)N(C(C(=O)NN(Cc1ccccc1)CC(O)(Cc1ccccc1)C(=O)NC(C(=O)NC(C)c1ccccc1)C(C)(C)C(C)C(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc2c(n1)CCC(N1CCNCC1)C2O</chem>	<chem>COc1ccc2c(n1)CCC(N1CCNCC1)C2O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)c1ccc(-c2cc3ccnc3c(=O)[nH]2)cc1</chem>	<chem>CC(C)c1ccc(-c2cc3ccnc3c(=O)[nH]2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNC(=O)c1cc(OCc2ccc3oc(Nc4ccc5c(cnn5C5CCOC5)n4)nc3c2)ccn1</chem>	<chem>CNC(=O)c1cc(OCc2ccc3oc(Nc4ccc5c(cnn5C5CCOC5)n4)nc3c2)ccn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#Cc1nc(Nc2ccc(C3CNCCO3)cc2F)nc1Nc1ccccc1Cl</chem>	<chem>N#Cc1nc(Nc2ccc(C3CNCCO3)cc2F)nc1Nc1ccccc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CN(C(C)CO)C(=O)CCc2nnnc2COc1CN(C)C(=O)C1CCOCC1</chem>	<chem>CC1CN(C(C)CO)C(=O)CCc2nnnc2COc1CN(C)C(=O)C1CCOCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC1C(F)CN(C(=O)Cn2nc(C(CO)c3ccccc3)c3ccc(N(C)S(=O)(=O)c4ccccc4F)nc32)C1C(=O)NO</chem>	<chem>COC1C(F)CN(C(=O)Cn2nc(C(CO)c3ccccc3)c3ccc(N(C)S(=O)(=O)c4ccccc4F)nc32)C1C(=O)NO</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(N2CC(C(=O)NCCc3ccccc3)CC2=O)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(N2CC(C(=O)NCCc3ccccc3)CC2=O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(C=Cc1ccc(Cl)c(Cl)c1CNc1ccc(F)cc1)NO</chem>	<chem>O=C(C=Cc1ccc(Cl)c(Cl)c1CNc1ccc(F)cc1)NO</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)CCN(Cc1ccc2ncccc2c1)c1ccc(C(=O)N(C(CCCN=C(N)N)C(=O)O)cc1</chem>	<chem>CC(C)CCN(Cc1ccc2ncccc2c1)c1ccc(C(=O)N(C(CCCN=C(N)N)C(=O)O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccccc1-c1nnc(S)n1N=Cc1ccc(OC)c1O</chem>	<chem>COc1ccccc1-c1nnc(S)n1N=Cc1ccc(OC)c1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC(C(=O)OCC(=O)NC(=O)c1ccco1)c1ccccc1</chem>	<chem>CCC(C(=O)OCC(=O)NC(=O)c1ccco1)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)Cc1cc(-c2ccccc2)nc(NCc2ccc(Cl)cc2Cl)n1</chem>	<chem>CC(C)Cc1cc(-c2ccccc2)nc(NCc2ccc(Cl)cc2Cl)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1Cc2ccccc2N1C(=O)CCc1nc(O)c2ccccc2n1</chem>	<chem>CC1Cc2ccccc2N1C(=O)CCc1nc(O)c2ccccc2n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccccc(C(C(=O)N)NCc2ccc(F)cc2F)N(C(=O)c2snc(C(N)=O)c2N)C2CCCC2)c1</chem>	<chem>Cc1ccccc(C(C(=O)N)NCc2ccc(F)cc2F)N(C(=O)c2snc(C(N)=O)c2N)C2CCCC2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)Cc1ccc(S(=O)(=O)NCCCNc2ccc3ccccc3c2)cc1</chem>	<chem>CC(C)Cc1ccc(S(=O)(=O)NCCCNc2ccc3ccccc3c2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)OC(CCCOCc1ccccc1)COc1ccccc1</chem>	<chem>CC(=O)OC(CCCOCc1ccccc1)COc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)C(=Cc1cc(OC)c(OC)c(OC)c1)C(=Cc1ccc2c(c1OC)C(=O)C=C(c1ccccc1)O2)C(=O)OC</chem>	<chem>COC(=O)C(=Cc1cc(OC)c(OC)c(OC)c1)C(=Cc1ccc2oc(-c3ccccc3)cc(=O)c2c1OC)C(=O)OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1ccc(C=Cc2ccc(N)c(C#N)c2)c(OC)c1</chem>	<chem>COc1cc(N)ccc1C=Cc1ccc(N)c(C#N)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCn1cc(C(=O)O)c(=O)c2c(Cl)ccccc21</chem>	<chem>CCn1cc(C(=O)O)c(=O)c2c(Cl)ccccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCN1c(=O)c2ccccc2c2nc3cc4c(cc3c21)OCOC4</chem>	<chem>CCCN1c(=O)c2ccccc2c2nc3cc4c(cc3c21)OCOC4</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(CCCCCC(=O)Nc1nc(-c2ccccc2)cs1)NO</chem>	<chem>O=C(CCCCCC(=O)Nc1nc(-c2ccccc2)cs1)NO</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)C1CCCCN1c1ccccc1C(=O)c1ccccc1</chem>	<chem>O=C(c1ccccc1)c1ccccc1N1CCCCC1C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#Cc1cc(S(=O)(=O)Nc2nnc(OCc3CCO3)s2)ccc1Oc1ccc(Cl)cc1-c1ccn[nH]1</chem>	<chem>N#Cc1cc(S(=O)(=O)Nc2nnc(OCc3CCO3)s2)ccc1Oc1ccc(Cl)cc1-c1ccn[nH]1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(N2C(=O)CN=C(SC3CCCC3)NC2=O)cc1C(F)(F)F</chem>	<chem>Cc1ccc(N2C(=O)CN=C(SC3CCCC3)NC2=O)cc1C(F)(F)F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)C(NC(=O)c1ccc(Nc2ncnc3c(=O)[nH]cnc23)cc1)C(=O)O</chem>	<chem>CC(C)C(NC(=O)c1ccc(Nc2ncnc3c(=O)[nH]cnc23)cc1)C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(c1ccc(Cl)c(S(=O)(=O)Nc2ccc(Cl)cc2)c1)N(C1CC1)C1CCS(=O)(=O)C1</chem>	<chem>O=C(c1ccc(Cl)c(S(=O)(=O)Nc2ccc(Cl)cc2)c1)N(C1CC1)C1CCS(=O)(=O)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCOc1c(OC)cc(C(C)C)cc1C(C)C</chem>	<chem>CCCCOc1c(OC)cc(C(C)C)cc1C(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(C)c(C(=O)NCCC(=O)Nc2ccnc2)o1</chem>	<chem>Cc1cc(C)c(C(=O)NCCC(=O)Nc2ccnc2)o1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(-n2cnc3c(c(NCCC(=O)O)cn4ncnc34)c2=O)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(-n2cnc3c(c(NCCC(=O)O)cn4ncnc34)c2=O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nc(CCN(C=O)c2cc(C)nc3c2c(C)nn3C)no1</chem>	<chem>Cc1cc(C(=O)NCCC2noc(C)n2)c2c(C)nn(C)c2n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOCc1ccc(-c2ccc(-c3c(C)[nH]c4ncnc(N)c34)cc2)cc1</chem>	<chem>CCOCc1ccc(-c2ccc(-c3c(C)[nH]c4ncnc(N)c34)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc2c(c1)C(=NNc1cccc(C(=O)O)c1)C(=O)N2</chem>	<chem>Cc1ccc2c(c1)C(=NNc1cccc(C(=O)O)c1)C(=O)N2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=[N+](([O-])c1c(Cl)c(Cl)cc(Cl)c1C=NNc1ccc(Br)cc1</chem>	<chem>O=[N+](([O-])c1c(Cl)c(Cl)cc(Cl)c1C=NNc1ccc(Br)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1sc2ncnc(N3CCC(COCc4ccc(F)cc4)CC3)c2c1C</chem>	<chem>Cc1sc2ncnc(N3CCC(COCc4ccc(F)cc4)CC3)c2c1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(OCcCS(C)(=O)=O)cc(C)c1-c1ccccc(C(C)(C)C(=O)O)c1</chem>	<chem>Cc1cc(OCcCS(C)(=O)=O)cc(C)c1-c1ccccc(C(C)(C)C(=O)O)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)c1ccc(C(O)(c2ccc(Cl)cc2)c2ccnc2)cc1</chem>	<chem>CN(C)c1ccc(C(O)(c2ccc(Cl)cc2)c2ccnc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C=NNC(=O)CCc2cccn2)c(OC)c1</chem>	<chem>COc1ccc(C=NNC(=O)CCc2cccn2)c(OC)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)C1(C(=O)N2CCc3ccc(C(F)(F)F)cc3C2)CCC(NC2CCOCC2)C1</chem>	<chem>CC(C)C1(C(=O)N2CCc3ccc(C(F)(F)F)cc3C2)CCC(NC2CCOCC2)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C(=O)Cn1c(=O)ccc2ccccc21)c1ccccc1</chem>	<chem>CN(C(=O)Cn1c(=O)ccc2ccccc21)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CN(C(C)CO)C(=O)c2ccccc(NC(=O)Nc3ccc(C(F)(F)F)cc3)c2OC1CN(C)S(=O)(=O)c1ccc(F)cc1</chem>	<chem>CC1CN(C(C)CO)C(=O)c2ccccc(NC(=O)Nc3ccc(C(F)(F)F)cc3)c2OC1CN(C)S(=O)(=O)c1ccc(F)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccccc1-c1cc(Cl)cc2c(OC)cc(O)cc12</chem>	<chem>COc1ccccc1-c1cc(Cl)cc2c(OC)cc(O)cc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Oc1ncc(Cc2ccc3ccccc3n2)cc1CN1CCOCC1</chem>	<chem>Oc1ncc(Cc2ccc3ccccc3n2)cc1CN1CCOCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC(=O)N1CCC(NC(=O)C(=O)NNC(=O)c2ccco2)CC1</chem>	<chem>CCC(=O)N1CCC(NC(=O)C(=O)NNC(=O)c2ccco2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NCc1ccc2c(c1)CCCN2C(=O)c1ccc(F)cc1)c1ccnc1</chem>	<chem>O=C(NCc1ccc2c(c1)CCCN2C(=O)c1ccc(F)cc1)c1ccnc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(C(=O)c2c(C)oc3c(O)c(OC)ccc23)cc(OC)c1OC</chem>	<chem>COc1cc(C(=O)c2c(C)oc3c(O)c(OC)ccc23)cc(OC)c1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)c1ccccc2nc(C34CCC(=O)C=C3C3=CCc5CC6CC(O)CCC6CC(=O)C5(S)C3CC4)[nH]c12</chem>	<chem>O=C1C=C2C3=CCc4CC5CC(O)CCC5CC(=O)C4(S)C3CCC2(c2nc3cccc(C(=O)O)c3[nH]2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#CSCCOc1ccc2ccccc2c1</chem>	<chem>N#CSCCOc1ccc2ccccc2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>OC1CCCN(c2nc(N3CCOCC3)c3c(n2)CCC3)C1</chem>	<chem>OC1CCCN(c2nc3c(c(N4CCOCC4)n2)CCC3)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=C1C(OC(C)=O)CCC2=CC(OC(C)=O)C3C(=C)C(=O)CC(C(OC(=O)CCCCCCC)C12)C3(C)C</chem>	<chem>C=C1C(OC(C)=O)CCC2=CC(OC(C)=O)C3C(=C)C(=O)CC(C(OC(=O)CCCCCCC)C12)C3(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCCn1cc(C(=O)CSc2nn(-c3ccco3)n2C(C)C)c2ccccc21</chem>	<chem>COCCn1cc(C(=O)CSc2nn(-c3ccco3)n2C(C)C)c2ccccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(c1c(F)cc2c(c1F)c(=O)c(C(=O)O)cn2C(C)C)N1CCCCC1</chem>	<chem>CC(c1c(F)cc2c(c1F)c(=O)c(C(=O)O)cn2C(C)C)N1CCCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccccc(C(C(=O)NN(C(=O)Nc2ccccc2)C(C)(C)C)c1</chem>	<chem>Cc1ccccc(C(C(=O)NN(C(=O)Nc2ccccc2)C(C)(C)C)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(SSc2cn(Cc3ccccc3)nn2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(SSc2cn(Cc3ccccc3)nn2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Oc1c(Cl)cc(-c2cnn(-c3cccc(O)c3)c2)c(Cl)c1Cl</chem>	<chem>Oc1ccccc(-n2cc(-c3cc(Cl)c(O)c(Cl)c3Cl)cn2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1c(Cl)nc(O)c(N(C)C)c1C(=O)c1cc(C)ccc1O</chem>	<chem>CCc1c(Cl)nc(O)c(N(C)C)c1C(=O)c1cc(C)ccc1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(C=Cc2ccc(NC(=O)C=Cc3ccc(O)c(OC)c3)cc2)ccc1O</chem>	<chem>COc1cc(C=CCC(=O)Nc2ccc(C=Cc3ccc(O)c(OC)c3)cc2)ccc1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1=CC2OC(C3(O)OC(C)C(OC(=O)CCc4ccc(O)cc4)C(O)C23)C2C(Cc12C)OC(=O)CCNc1ccnc2cc(Cl)ccc12</chem>	<chem>CC1=CC2OC(C3(O)OC(C)C(OC(=O)CCc4ccc(O)cc4)C(O)C23)C2C(OC(=O)CCNc3ccnc4cc(Cl)ccc34)CC12C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CC(C)c1ccc2ccc3ccccc4ccc1c2c34	CC(C)c1ccc2ccc3ccccc4ccc1c2c34	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(N=Nc2cc(C)cc(C)c2)c(=O)n(-c2ccc(F)c(C)c2)n1	Cc1cc(C)cc(N=Nc2cc(C)nn(-c3ccc(F)c(C)c3)c2=O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)OC(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)NCCNc1nc(Cl)nc2c1nncn2C1OC(CO)C(O)C1O	CC(C)(C)OC(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)NCCNc1nc(Cl)nc2c1nncn2C1OC(CO)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CN(S(C)(=O)=O)CC1NCc1cnc2c1CCCO2	CC1CN(S(C)(=O)=O)CC1NCc1cnc2c1CCCO2	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)=O)Oc1ccc(OC)c(-n2nn3ccc(N)nc32)c1	COc1ccc(OS(C)(=O)=O)cc1-n1nnc2ccc(N)nc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCC1(O)C(=O)OCc2c1cc1n(c2=O)Cc2cc3ccccc3nc2-1	CCC1(O)C(=O)OCc2c1cc1n(c2=O)Cc2cc3ccccc3nc2-1	TRUE	TRUE	FALSE
NC(=O)c1cc(CN2CCOC(Cn3cn3)C2)ccc1F	NC(=O)c1cc(CN2CCOC(Cn3cn3)C2)ccc1F	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(CN2CCCC(Nc3ccc([N+](=O)[O-])cn3)C2)o1	Cc1ccc(CN2CCCC(Nc3ccc([N+](=O)[O-])cn3)C2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(COCC(NC(=O)OC(C)(C)C)C(=O)N2CCN(C(=O)OC(C)(C)C)CC2)c(C(=O)O)c1	Cc1ccc(COCC(NC(=O)OC(C)(C)C)C(=O)N2CCN(C(=O)OC(C)(C)C)CC2)c(C(=O)O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cnc2cc(-c3ccc(N4CCOCC4)cc3)nc(N3CCC(CO)C3)c2c1=O	Cn1cnc2cc(-c3ccc(N4CCOCC4)cc3)nc(N3CCC(CO)C3)c2c1=O	TRUE	TRUE	FALSE
CC1CN(C(C)CO)C(=O)c2ccccc(NC(=O)C3CC3)c2OC1CN(C)C(=O)Nc1ccccc1	CC1CN(C(C)CO)C(=O)c2ccccc(NC(=O)C3CC3)c2OC1CN(C)C(=O)Nc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NN=Cc1ccc(Cl)c(Cl)c1)Nc1ccccc1C(F)(F)F	O=C(NN=Cc1ccc(Cl)c(Cl)c1)Nc1ccccc1C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCNc1nc(C)c(C(C)=O)s1	C=CCNc1nc(C)c(C(C)=O)s1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2=C(c3ccc(C(=O)O)cc3)CCC2)cc1[N+](=O)[O-]	COc1ccc(C2=C(c3ccc(C(=O)O)cc3)CCC2)cc1[N+](=O)[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C(c2ccccc2)CC(=O)c2ccccc21	O=C1CC(c2ccccc2)C(=O)c2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
NS(=O)(=O)c1ccccc1NS(=O)(=O)C=Cc1ccc(C(F)(F)F)cc1OCc1ccccc1	NS(=O)(=O)c1ccccc1NS(=O)(=O)C=Cc1ccc(C(F)(F)F)cc1OCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
NNc1nc2ccccc2nc1O	NNc1nc2ccccc2nc1O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)N2CCN(CCc3cccc(F)c3)CC2)cc1S(=O)(=O)Nc1ccccc1F	Cc1ccc(C(=O)N2CCN(CCc3cccc(F)c3)CC2)cc1S(=O)(=O)Nc1ccccc1F	TRUE	TRUE	TRUE
[H]C([H])([H])C(C)(COc1ccccc1)CCn1cnc2c(-n3cccn3)nc(O)nc21	CC(C)(CCn1cnc2c(-n3cccn3)nc(O)nc21)COc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)NC(=O)NC(C(=O)N1CC2C(C1c(=O)N)CC1CC1)C(=O)C(N)=O)C2(C)C(C1Cc2ccccc2C1	CC(C)(C)NC(=O)NC(C(=O)N1CC2C(C1c(=O)N)CC1CC1)C(=O)C(N)=O)C2(C)C(C1Cc2ccccc2C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2Sc3ccccc3N=(C)N2C(=O)CSc2nccn2-c2ccccc2)cc1	FALSE	TRUE	TRUE	TRUE
CC1OC(OC2CCC3(C)C(CCC4(C)C3CC(O)C3(C)C5CCC6(C)C(C)CCC67CC57CCC34C)C2(C)C)CC(O)C1O	CC1CCC23CCC24CCC2(C)C5(C)CCC6(C)(C)C(C)OC7CC(O)C(O)C(C)O7)CCC6(C)C5CC(O)C2(C)C4CCC3C1C	TRUE	TRUE	TRUE
COCl(=O)CCN1C(=O)C(=Cc2ccco2)SC1=S	COCl(=O)CCN1C(=O)C(=Cc2ccco2)SC1=S	TRUE	TRUE	TRUE
CC(NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)OCc1ccccc1)C(=O)NC(CCCNC(N)=O)C(N)=O	CC(NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)OCc1ccccc1)C(=O)NC(CCCNC(N)=O)C(N)=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(Cc1ccccc1)c1c(-c2ccccc2OC)nc2ccc(Br)cn12	CCN(Cc1ccccc1)c1c(-c2ccccc2OC)nc2ccc(Br)cn12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2=NS(=O)(=O)N(C)C(C(=O)N3CCN(c4ccc(N(C)C)cc4)CC3)=C2)cc1OC	COc1ccc(C2=NS(=O)(=O)N(C)C(C(=O)N3CCN(c4ccc(N(C)C)cc4)CC3)=C2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C=CC1=C(C)CCCC1(C)C)=CC=CC(C)=CC(=O)c1c(O)cc(C(=O)O)c(C(=O)O)c1O	CC(C=CC1=C(C)CCCC1(C)C)=CC=CC(C)=CC(=O)c1c(O)cc(C(=O)O)c(C(=O)O)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)NC(=O)CC=Cc2ccccc2)cc1	Cc1ccc(S(=O)(=O)NC(=O)CC=Cc2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)Nc2ccc3ccccc3c2)c2ccccc12	COc1ccc(C(=O)Nc2ccc3ccccc3c2)c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)c1cnc(-n2nnc(-c3cn(C)nc3-c3ccc(F)cc3)c2)nc1N	CNC(=O)c1cnc(-n2nnc(-c3cn(C)nc3-c3ccc(F)cc3)c2)nc1N	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C1=CC2CCC1c1cnc(N)nc1-2)C1CCC2C3CC(O)C4(O)CC(O)CCC4(C)C3CCC12C	CC(C1=CC2CCC1c1cnc(N)nc12)C1CCC2C3CC(O)C4(O)CC(O)CCC4(C)C3CCC12C	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc(-c2ccccc(-c3cc(O)ccc3O)c2)c2cc(C(N)=O)ccc21	Cn1cc(-c2ccccc(-c3cc(O)ccc3O)c2)c2cc(C(N)=O)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCCCOC(CN(C)S(=O)(=O)c2cccc(F)cc2)C(C)CN(C(C)CO)C(=O)c2cccc(NS(=O)(=O)c3ccc(F)cc3)c2O1	CC1CCCCOC(CN(C)S(=O)(=O)c2cccc(F)cc2)C(C)CN(C(C)CO)C(=O)c2cccc(NS(=O)(=O)c3ccc(F)cc3)c2O1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=S)N1N=C(c2ccc(Br)cc2)CC1c1ccccc1O	NC(=S)N1N=C(c2ccc(Br)cc2)CC1c1ccccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccc(N(C)CC(C)C)C(=O)n1Cc1ccc(-c2ccccc2-c2nn[nH]n2)cc1	CCc1ccc(N(C)CC(C)C)C(=O)n1Cc1ccc(-c2ccccc2-c2nn[nH]n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CNCC(C)CCC1(C)C(CC#Cc2ccccc2)CCC2(C)C(CCC3C4CCC(=O)C4(C)CCC32)C1O	CNCC(C)CCC1(C)C(CC#Cc2ccccc2)CCC2(C)C3CCC4(C)C(=O)CCC4C3CCC2C1O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C1C(=O)NC(C2Cc3ccccc3C2)C(=O)N1C(C(=O)Nc1cccn1)c1ccccc(F)c1	CC(C)C1C(=O)NC(C2Cc3ccccc3C2)C(=O)N1C(C(=O)Nc1cccn1)c1ccccc(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)NC1CCN(CCCc2cccn2)CC1	CC(C)NC1CCN(CCCc2cccn2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1C(=O)CC2(C1=O)C(=O)N(Cc1ccc(F)cc1F)C(=O)c1ccccc12	CCN1C(=O)CC2(C1=O)C(=O)N(Cc1ccc(F)cc1F)C(=O)c1ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Cn2c(=O)n(CCc3ccccc3)c(=O)c3oc4ccc(CCC(=O)N(C)C)cc4c32)cc1	COc1ccc(Cn2c(=O)n(CCc3ccccc3)c(=O)c3oc4ccc(CCC(=O)N(C)C)cc4c32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1n[nH]c2c1CC(c1ccccc1)CC2	O=C(O)c1n[nH]c2c1CC(c1ccccc1)CC2	TRUE	TRUE	FALSE
Nc1[nH]c(=S)[nH]c1C(=O)c1cccs1	Nc1[nH]c(=S)[nH]c1C(=O)c1cccs1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C2=CN(CC3CC3)Cc3ccccc32)CC(C(=O)NC1=O	CC1(C2=CN(CC3CC3)Cc3ccccc32)CC(C(=O)NC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(CC(=O)Nc1ccc2c(c1)OCCO2)=NNC(=O)c1ccc(Br)cc1	CC(CC(=O)Nc1ccc2c(c1)OCCO2)=NNC(=O)c1ccc(Br)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nn(C)c(Cl)c1C1CCCN1C(=O)c1ccnn1Cc1ccc(F)cc1	Cc1nn(C)c(Cl)c1C1CCCN1C(=O)c1ccnn1Cc1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC(C)CC(C)c1ccc(OC)c(OC2OC(COC3OC4(C)CC5C(C)CCC(C2C)C35OO4)c1	FALSE	TRUE	TRUE	TRUE
CSC(C)C(=O)NCCc1ccc2c(c1)CCC2NC(=O)c1ccc(Cl)c(Cl)[nH]1	CSC(C)C(=O)NCCc1ccc2c(c1)CCC2NC(=O)c1ccc(Cl)c(Cl)[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCCN1C1CCN(c2ccc(C(=O)c3cn(-c4ccc(NS(=O)(=O)CCN(C)(C)O)cc4)c4cccc(F)c4c3=O)cc2)C1	CC1CCCN1C1CCN(c2ccc(C(=O)c3cn(-c4ccc(NS(=O)(=O)CCN(C)(C)O)cc4)c4cccc(F)c4c3=O)cc2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1c(Cl)C(=O)OC(Cl(-c2ccc3c(c2)OCO3)n2c1CS(=O)(=O)C2	CCOC(=O)c1c(Cl)C(=O)OC(Cl(-c2ccc3c(c2)OCO3)n2c1CS(=O)(=O)C2	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC(OC(=O)CN1C(=O)COc2cc(F)c(-n3cnnn3)cc21)C(=O)NCCC1CCCCO1	CCCCC(OC(=O)CN1C(=O)COc2cc(F)c(-n3cnnn3)cc21)C(=O)NCCC1CCCCO1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1csc2nc(OC3ccc(C#N)c(F)c3)c3c(c12)CCCC3	N#Cc1ccc(OC2nc3sc(C#N)c3c3c2CCCC3)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
CCOCCOC(=O)C(C#N)C(c1ccccc1)C(C(=O)OCC)c1ccccc1	CCOCCOC(=O)C(C#N)C(c1ccccc1)C(C(=O)OCC)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)C1CCC(=NOC(=O)c2ccccc2Br)CC1	CC(C)(C)C1CCC(=NOC(=O)c2ccccc2Br)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C1CCc2cn(CCc3ccccc3)nc2C1	O=C(O)C1CCc2cn(CCc3ccccc3)nc2C1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1cnc(-c2ccc(-c3ccccc3S(=O)(=O)N3CCC(O)CC3)cc2F)cn1	Nc1cnc(-c2ccc(-c3ccccc3S(=O)(=O)N3CCC(O)CC3)cc2F)cn1	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1cc(-c2nc3ccccc(F)c3s2)cc(C)c1CN(C)CC(N)=O	Cc1cc(-c2nc3ccccc(F)c3s2)cc(C)c1CN(C)CC(N)=O	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)CCCCCN1C(=O)C(NC(=O)c2ccc3ccccc3c2)N=C(C2CCc3ccccc32)c2ccccc21	NC(=O)CCCCCN1C(=O)C(NC(=O)c2ccc3ccccc3c2)N=C(C2CCc3ccccc32)c2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(Cl)ccc1OCC(=O)N1CCN(c2cccc(C(=O)O)c2)CC1	Cc1cc(Cl)ccc1OCC(=O)N1CCN(c2cccc(C(=O)O)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCc1cc(O)c2c(c1O)C(=O)c1c(O)cncc1C2	CCCCCc1cc(O)c2c(c1O)C(=O)c1c(O)cncc1C2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC1CN2CCC1CC2)C(Cl)Cl	O=C(NC1CN2CCC1CC2)C(Cl)Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)C(=O)CSc1nncc(O)n1C1CC1	CCN(CC)C(=O)CSc1nncc(O)n1C1CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Fc1ccc(O)c(N=Nc2ccc(-c3ccc(F)cc3)cn2)c1Cl	Oc1ccc(F)c(Cl)c1N=Nc1ccc(-c2ccc(F)cc2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1nc2c(Cl)cc(-c3ccccc3)cc2s1	CC(=O)Nc1nc2c(Cl)cc(-c3ccccc3)cc2s1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCc2cc(Br)c3cccc(N(C)C)c3c2C1	CN1CCc2cc(Br)c3cccc(N(C)C)c3c2C1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(=O)CCc2c(C)nn(Cc3cccc(F)c3)c2C)c(C)c1	Cc1ccc(NC(=O)CCc2c(C)nn(Cc3cccc(F)c3)c2C)c(C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)NC2CCCC(NCc3ccc4c(c3)OCO4)C2)cc1C	Cc1ccc(S(=O)(=O)NC2CCCC(NCc3ccc4c(c3)OCO4)C2)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(N=Nc2c(N)nn3c(nc4ccccc43)c2N)cc1C	Cc1ccc(N=Nc2c(N)nn3c(nc4ccccc43)c2N)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)N(C(=O)CN1C(=O)C(NC(=O)Nc2cc(Cl)ccc2Cl)C(=O)N(c2ccccc2)c2ccccc21)c1ccccc(F)c1	CC(C)N(C(=O)CN1C(=O)C(NC(=O)Nc2cc(Cl)ccc2Cl)C(=O)N(c2ccccc2)c2ccccc21)c1ccccc(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)COc1ccc(S(=O)(=O)NCCc2ccccc2)cc1	CC(C)COc1ccc(S(=O)(=O)NCCc2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCc1nc2ccccc2c(C(=O)CCN2CCN(C)CC2)c1C	CCCCc1nc2ccccc2c(C(=O)CCN2CCN(C)CC2)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCC(C1CCCC1)C(=O)O)c1cc2cc(OCc3ccccc3)ccc2[nH]1	O=C(NCC(C1CCCC1)C(=O)O)c1cc2cc(OCc3ccccc3)ccc2[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C(=O)NCC(c2ccc(Cl)cc2)N2CCOCC2)ccc1OCN1CCCCC1	COc1cc(C(=O)NCC(c2ccc(Cl)cc2)N2CCOCC2)ccc1OCN1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(CCC)C(=O)Cn1c(=O)n(CCC)c2cc(C(=O)N3CCC(C(N)=O)(N4CCCCC4)CC3)ccc21	CCCN(CCC)C(=O)Cn1c(=O)n(CCC)c2cc(C(=O)N3CCC(C(N)=O)(N4CCCCC4)CC3)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=NC2(N=C1N)c1cc(Br)ccc1CC21CCOCC1	CC1=NC2(N=C1N)c1cc(Br)ccc1CC21CCOCC1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(=O)NCCOCc1cc(F)c(Cl(=O)NC(C)c2ccc(F)cc2)cc1C1CCN(c2cncc(N(C)C)n2)CC1	CC(=O)NCCOCc1cc(F)c(Cl(=O)NC(C)c2ccc(F)cc2)cc1C1CCN(c2cncc(N(C)C)n2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(Nc1ccc(CCNCC(O)COc2ccc(O)cc2)cc1)c1ccc(Cl)c(C(F)(F)F)c1	O=S(=O)(Nc1ccc(CCNCC(O)COc2ccc(O)cc2)cc1)c1ccc(Cl)c(C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCn1c2c(c3cc(NS(=O)(=O)c4ccccc4C)ccc31)CN(C)CC2	CCCCCn1c2c(c3cc(NS(=O)(=O)c4ccccc4C)ccc31)CN(C)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(OC)c2c(=O)n3c(nc2c1)C(OCCN(C)C)C(C1ccc2ccccc2c1))(c1cc(OC)c(OC)c(OC)c1)OC3	COc1cc(OC)c2c(=O)n3c(nc2c1)C(OCCN(C)C)C(C1cc1cc(OC)c(OC)c(OC)c1)(c1ccc2ccccc2c1)OC3	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(N)c(Cl)cc1C(=O)OCCN1CCOCC1	COc1cc(N)c(Cl)cc1C(=O)OCCN1CCOCC1	TRUE	TRUE	FALSE
COc1cc(C)ccc1COCC(CO)CC(=O)O	COc1cc(C)ccc1COCC(CO)CC(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1ccccc(Cc2nncc(O)c3c2CCCC3)c1)N1CCN(c2ncccn2)CC1	O=C(c1ccccc(Cc2nncc(O)c3c2CCCC3)c1)N1CCN(c2ncccn2)CC1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(OC(=O)c1cccs1)C(=O)N1CCN(c2ccc(C(F)(F)F)cn2)CC1	CC(OC(=O)c1cccs1)C(=O)N1CCN(c2ccc(C(F)(F)F)cn2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(c1nc(C2CC2)no1)N1CCN(c2nncc(C3CC3)s2)CC1	CC(c1nc(C2CC2)no1)N1CCN(c2nncc(C3CC3)s2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CC(CNCc1ccccc1)NCC(O)c1cccc(Cl)c1	CC(CNCc1ccccc1)NCC(O)c1cccc(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1c(S(=O)(=O)O)cc(Nc2ccc(S(=O)(=O)O)cc2N)c2c1C(=O)c1ccccc1C2=O	Nc1cc(S(=O)(=O)O)ccc1Nc1cc(S(=O)(=O)O)c(N)c2c1C(=O)c1ccccc1C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)c1ccc2cc(C(=O)NC3C4(C)CCC(C4)C3(C)C)c(=O)oc2c1	CCN(CC)c1ccc2cc(C(=O)NC3C4(C)CCC(C4)C3(C)C)c(=O)oc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)C1CN(Cc2cc3c(N)c(C)ccc3s2)CCO1	CNC(=O)C1CN(Cc2cc3c(N)c(C)ccc3s2)CCO1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)C(c2nc(Br)c(Br)c(=O)[nH]2)C1(C)C	CC1(C)C(c2nc(Br)c(Br)c(=O)[nH]2)C1(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC1CC(O)CC=CC=CC(OCc2cc(O)c(O)c(Br)c2)CC=CCC(OC)C(O)C)CC=C(C)C1	CCCCC1CC(C)=CC(C)OC)C(O)C)CC=CCC(OCc2cc(O)c(O)c(Br)c2)C=CC=CCC(O)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(CN2CC(C(=O)N3CCN(C)CC3)CCC2=O)cc(OC)c1OC	COc1cc(CN2CC(C(=O)N3CCN(C)CC3)CCC2=O)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(N2CCN(C(=O)C3CCCN(S(=O)(=O)c4c(C)noc4C)C3)CC2)cc1	COc1ccc(N2CCN(C(=O)C3CCCN(S(=O)(=O)c4c(C)noc4C)C3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
CCCCC1(CCCC)CS(=O)(=O)c2ccccc2C(C(F)(F)F)C1=O	CCCCC1(CCCC)CS(=O)(=O)c2ccccc2C(C(F)(F)F)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc2c(cc1C)-n1nnnc1C(NC(=O)c1ccccc1)B2O	Cc1cc2c(cc1C)-n1nnnc1C(NC(=O)c1ccccc1)B2O	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cnc(S(=O)(=O)N(Cc2ccc(-c3ccc(Cl)cc3)cc2)C2Cc3cc(C#N)ccc3N(Cc3cnnc3C)C2)c1	Cn1cnc(S(=O)(=O)N(Cc2ccc(-c3ccc(Cl)cc3)cc2)C2Cc3cc(C#N)ccc3N(Cc3cnnc3C)C2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)c1c(NC(C)=O)sc2c1CCCC2	CC(=O)Nc1sc2c(c1C(C)=O)CCCC2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(CS(=O)(=O)CCCN(C(=NC#N)Nc2ccc(F)c(CCc3ccc(N4CCN(C)CC4)cc3)n2)cc1	Cc1ccc(CS(=O)(=O)CCCN(C(=NC#N)Nc2ccc(F)c(CCc3ccc(N4CCN(C)CC4)cc3)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
[C-]#[N+]C1(C)CCC2C(C)C(=O)OC2C1(C)C	[C-]#[N+]C1(C)CCC2C(C)C(=O)OC2C1(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1cc(Cl)cc(-c2n[nH]c3cnc(OC4CCOC4)c23)c1	Clc1cc(Cl)cc(-c2n[nH]c3cnc(OC4CCOC4)c23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C(=Cc2ccccc2Cl)N2CCC1CC2	O=C1C(=Cc2ccccc2Cl)N2CCC1CC2	TRUE	TRUE	FALSE
Cn1ccc(C=C2Oc3ccccc3C2=O)n1	Cn1ccc(C=C2Oc3ccccc3C2=O)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CSc1cccc(OC2cccc(NC(=O)c3ccc(=O)[nH]n3)c2)c1	CSc1cccc(OC2cccc(NC(=O)c3ccc(=O)[nH]n3)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)c1ccc(-c2ccc3c(c2)oc(=O)n3CC(=O)NC2CC2)cc1	CC(=O)c1ccc(-c2ccc3c(c2)oc(=O)n3CC(=O)NC2CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)n1cc2c3c(ccc31)C1CC(C(=O)O)CN(C)C1C2	CC(C)n1cc2c3c(ccc31)C1CC(C(=O)O)CN(C)C1C2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(Cl)cc1)N1CCC(c2c(O)ccn(-c3cccc(C(F)(F)F)c3)c2=O)CC1	O=C(Nc1ccc(Cl)cc1)N1CCC(c2c(O)ccn(-c3cccc(C(F)(F)F)c3)c2=O)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(c2ncc(C(=O)Nc3cccc(Cl)c3)cc2-c2ccccc2)CC1	CN1CCN(c2ncc(C(=O)Nc3cccc(Cl)c3)cc2-c2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2n[nH]c3ccccc23)c(N2N=C3C(=Cc4ccccc4)CCCC3C2c2ccc(Cl)cc2)c1	Cc1ccc(-c2n[nH]c3ccccc23)c(N2N=C3C(=Cc4ccccc4)CCCC3C2c2ccc(Cl)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CN1Cc2ccccc2B1O	O=C(O)CN1Cc2ccccc2B1O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(Cc1ccccc1)N1CCC(O)(c2ccc(Cl)cc2)CC1	CC(Cc1ccccc1)N1CCC(O)(c2ccc(Cl)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CN1CCOCC1)Nc1nc2ccc(OC(F)(F)F)cc2s1	O=C(CN1CCOCC1)Nc1nc2ccc(OC(F)(F)F)cc2s1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(c1ccc(CN2CCC=CC2)cc1	CC(C)C(c1ccc(CN2CC=CCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
OC(=NC12CC3CC(C(C3)C1)C2)c1cccc(C2CNCCN2c2ccc(F)cc2)n1	OC(=NC12CC3CC(C(C3)C1)C2)c1cccc(C2CNCCN2c2ccc(F)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)CCC2(C(=O)O)CCC3(CCC4(C)C(=C5C6O6C6O6C(C=O)C5(C)CCC5O67OC7CCC6(C)C5CCCS43C)C2C1		FALSE	TRUE	TRUE
CCN(Cc1ccccc1)C(=O)CCc1nc2ccnc2n1C(C)C	CCN(Cc1ccccc1)C(=O)CCc1nc2ccnc2n1C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(NC(=O)N)Nc1cc(C)no1)c1cccs1	CCC(NC(=O)N)Nc1cc(C)no1)c1cccs1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC(c1ccc(C(=O)NCCC(=O)O)cc1)n1nc(-c2cc(C(F)(F)F)ccc2OC)c2ccc(-c3ccc(C(F)(F)F)nc3)cc21	CCCCC(c1ccc(C(=O)NCCC(=O)O)cc1)n1nc(-c2cc(C(F)(F)F)ccc2OC)c2ccc(-c3ccc(C(F)(F)F)nc3)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1cc(Br)c(C(=O)NC(=S)Nc2ccc(Cl)c(Cl)c2)cc1OCC	CCOc1cc(Br)c(C(=O)NC(=S)Nc2ccc(Cl)c(Cl)c2)cc1OCC	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCN1CCOCC1)Oc1ccc(Cl)cc1C(=O)c1ccccc1Cl	O=C(CCN1CCOCC1)Oc1ccc(Cl)cc1C(=O)c1ccccc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CN1Cc2ccccc2N(C(=O)CCC(=O)N)Cc2ccc(Cl)cc2)C1	CN1Cc2ccccc2N(C(=O)CCC(=O)N)Cc2ccc(Cl)cc2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(CSc2nnc(Nc3ccc4c(c3)OCCO4)nn2)cc1	c1ccc(CSc2nnc(Nc3ccc4c(c3)OCCO4)nn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1cc2c(cc1Nc1ncc(F)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)N(C(=O)CCN(C)C)CCC2	CC(=O)Nc1cc2c(cc1Nc1ncc(F)c(Nc3ccccc3S(=O)(=O)C(C)C)n1)N(C(=O)CCN(C)C)CCC2	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC1CCC2(CC1)SC(NC(C)=O)=NC2(C)C	CCCC1CCC2(CC1)SC(NC(C)=O)=NC2(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(Sc1nc2c(c(=O)n1C)SCS2)C(=O)Nc1cccc2ccccc12	CC(Sc1nc2c(c(=O)n1C)SCS2)C(=O)Nc1cccc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1c(C(Nc2ccccc2)c2c(O)ccc3ccccc23)coc2cc(OC3CCCC3)cc(O)c12	O=c1c(C(Nc2ccccc2)c2c(O)ccc3ccccc23)coc2cc(OC3CCCC3)cc(O)c12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C(C1CCNC1)c1ccc(C2(c3ccc(Cl)cc3)CCC2)cc1	O=C(O)C(C1CCNC1)c1ccc(C2(c3ccc(Cl)cc3)CCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(Nc1cccc2ccccc12)c1cc(F)cc(F)c1	O=S(=O)(Nc1cccc2ccccc12)c1cc(F)cc(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NS(=O)(=O)c2cc(C#N)ccc2C)cc1Cl	Cc1ccc(NS(=O)(=O)c2cc(C#N)ccc2C)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)CN1C(=O)C(NC(=O)OC)B1O	CNC(=O)CN1B(O)C(NC(=O)OC)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(N)nc(O)c1N=NN(CCOOP(=O)(O)NO)Cc1ccccc1	Cc1nc(N)nc(O)c1N=NN(CCOOP(=O)(O)NO)Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)c1c(C(=O)NN=Cc2ccccc2)nnn1-c1nonc1N	CC(O)c1c(C(=O)NN=Cc2ccccc2)nnn1-c1nonc1N	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CGNC(=O)c2cn(C)cn2)cc1	COc1ccc(CCN(C(=O)c2cn(C)cn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccsc1C(=O)C1CCCN(Cc2nnc(C3CC3)n2C)C1	Cc1ccsc1C(=O)C1CCCN(Cc2nnc(C3CC3)n2C)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CNc1cccc(-c2nnc3n2CCCC3)c1	CNc1cccc(-c2nnc3n2CCCC3)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1cnc(NCc2ccc3c(c2)OCO3)nc1C(CC)CC	CCOC(=O)c1cnc(NCc2ccc3c(c2)OCO3)nc1C(CC)CC	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)N(C)c1nnc2cc(N(C)C)cc(F)c12	CC(C)N(C)c1nnc2cc(N(C)C)cc(F)c12	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1[nH]ccc2ccc(-c3ccnc(NCc4ccc(Cl)cc4)n3)cc12	O=c1[nH]ccc2ccc(-c3ccnc(NCc4ccc(Cl)cc4)n3)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CC(C1CC1)n1cc(Nc2ncc(F)c(Nc3ccc(Cl)cc3)n2)cn1	CN(C)CC(C1CC1)n1cc(Nc2ncc(F)c(Nc3ccc(Cl)cc3)n2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(NC(=O)OCc1ccccc1)C(=O)NC(C=O)Cc1ccccc1	CC(C)CC(NC(=O)OCc1ccccc1)C(=O)NC(C=O)Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(O)c1cc(C(=O)O)c2cc(-c3ccc(F)cc3)n(-c3ccc(Cl)c(Cl)c3)c2c1	O=C(O)c1cc(C(=O)O)c2cc(-c3ccc(F)cc3)n(-c3ccc(Cl)c(Cl)c3)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(S(=O)(=O)Nc2scc(C)c2-c2nc3cc(C)ccc3nc2-c2ccccc2)cc1	COc1ccc(S(=O)(=O)Nc2scc(C)c2-c2nc3cc(C)ccc3nc2-c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1Sc1cc(Cl)nc(NN=Cc2ccncc2)n1	COc1ccccc1Sc1cc(Cl)nc(NN=Cc2ccncc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=C(C)C(=O)CC(c2cccc(C(F)(F)F)c2)C12C=CC(=O)C=C2	CC1=C(C)C2(C=CC(=O)C=C2)C(c2cccc(C(F)(F)F)c2)CC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C=Cc2cc3ccc(O)c(CC=C(C)C)c3oc2=O)cc1[N+](=O)[O-]	COc1ccc(C=Cc2cc3ccc(O)c(CC=C(C)C)c3oc2=O)cc1[N+](=O)[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CNC(=O)C2CC(c3ccc(F)cc3)=NO2)cc1	COc1ccc(CNC(=O)C2CC(c3ccc(F)cc3)=NO2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc2c(cc1Cl)N(C(=O)Nc1cc(Cl)cc(Cl)c1)CC2	Cc1cc2c(cc1Cl)N(C(=O)Nc1cc(Cl)cc(Cl)c1)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C)cc1NC(=O)C(NC(=O)OCc1ccccc1)c1ccccc1	COc1ccc(C)cc1NC(=O)C(NC(=O)OCc1ccccc1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(CNC(=O)CN2C(=O)C(Cc3nn[nH]n3)Oc3ccccc32)cc1	Cc1ccc(CNC(=O)CN2C(=O)C(Cc3nn[nH]n3)Oc3ccccc32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(NC(=O)C1CC(S(=O)(=O)c2cc(Cl)cc(Cl)c2)CN1C(=O)C1(c2ncc(Br)cn2)CC1)C(=O)C(=O)NCCN1CCOCC1	CCC(NC(=O)C1CC(S(=O)(=O)c2cc(Cl)cc(Cl)c2)CN1C(=O)C1(c2ncc(Br)cn2)CC1)C(=O)C(=O)NCCN1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
C#CN(Cc1ccc2nc(C)nc(O)c2c1)c1ccc(C(=O)NC(CCC(=O)O)NC(CCC(=O)O)C(=O)O)C(=O)O)cc1	C#CN(Cc1ccc2nc(C)nc(O)c2c1)c1ccc(C(=O)NC(CCC(=O)O)NC(CCC(=O)O)C(=O)O)C(=O)O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ccn(C2OC(COP(=O)(O)OP(=O)(O)OP(=O)(O)O)C(O)C2(F)CO)c(=O)n1	Nc1ccn(C2OC(COP(=O)(O)OP(=O)(O)OP(=O)(O)O)C(O)C2(F)CO)c(=O)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C1(O)CC(O)C(O)C(OCc2ccc3ccccc3c2)=C(c2nc(-c3ccccc3)cs2)C1	O=C(O)C1(O)CC(c2nc(-c3ccccc3)cs2)=C(OCc2ccc3ccccc3c2)C(O)C(O)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)N1CCCC1CNC(=O)c1ccc2ccccc2n1	CS(=O)(=O)N1CCCC1CNC(=O)c1ccc2ccccc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1=C(C)NC(=O)NC1c1c(F)cccc1F	CCOC(=O)C1=C(C)NC(=O)NC1c1c(F)cccc1F	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1)CCN(CCCCCCN1C(=O)c3cccc4cc(NC(C)=O)cc(c34)C1=O)CC2	COc1ccc2c(c1)CCN(CCCCCCN1C(=O)c3cccc4cc(NC(C)=O)cc(c34)C1=O)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)c1cc(C(=O)N2CCCC(n3cccn3)C2)cc2cn[nH]c12	CC(=O)c1cc(C(=O)N2CCCC(n3cccn3)C2)cc2cn[nH]c12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(NC(=O)N2CCC(NCc3ccnc4ccccc34)C2)c1	Cc1cccc(NC(=O)N2CCC(NCc3ccnc4ccccc34)C2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(cc1OC)CN(CCCCCCC(=O)NC13CC4CC(C(C4)C1)C3)CC2	COc1cc2c(cc1OC)CN(CCCCCCC(=O)NC13CC4CC(C(C4)C1)C3)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1ccc2nc(S)n(C3CCCC(O)C3)c2c1	O=C(O)c1ccc2nc(S)n(C3CCCC(O)C3)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(COCCO)N1CC(O)(C2COCC2)C1	O=C(COCCO)N1CC(O)(C2COCC2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1nnnc1NC(=O)c1cc(C(C)C)n[nH]1	CCn1nnnc1NC(=O)c1cc(C(C)C)n[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCN(CCCC)CCCCNc1nc(NCC)nc(NCCC(=O)O)n1	CCCCN(CCCC)CCCCNc1nc(NCC)nc(NCCC(=O)O)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc2nc(-c3ccnc(NC(=O)c4ccccc4)c3)[nH]c12	Cc1cccc2nc(-c3ccnc(NC(=O)c4ccccc4)c3)[nH]c12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=Cc1cccs1)NC(=S)Nc1ccc(C(=O)C=Cc2ccs2)cc1	O=C(C=Cc1cccs1)NC(=S)Nc1ccc(C(=O)C=Cc2ccs2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C(=Cc2ccc(Cl)c(Cl)c2)SC(=S)N1Cc1ccccc1	O=C1C(=Cc2ccc(Cl)c(Cl)c2)SC(=S)N1Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)N2CCN(c3cccc(Cl)c3)CC2)cc1[N+](=O)[O-]	Cc1ccc(C(=O)N2CCN(c3cccc(Cl)c3)CC2)cc1[N+](=O)[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
c1cc2c(cc1-c1cnnc1Cc1ccc3c(c1)OCO3)OCO2	c1cc2c(cc1Cc1cnnc1-c1ccc3c(c1)OCO3)OCO2	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(C2NCCc3c2[nH]c2ccc(Cl)cc32)c(O)c1	CCOc1ccc(C2NCCc3c2[nH]c2ccc(Cl)cc32)c(O)c1	TRUE	TRUE	TRUE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
COc1cccc(C2OC(C(=O)NCCc3c[nH]c4ccccc34)=NN2C(C)=O)c1OC	COc1cccc(C2OC(C(=O)NCCc3c[nH]c4ccccc34)=NN2C(C)=O)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(C)Cc1cccc(OCCCF)c1	CCN(C)Cc1cccc(OCCCF)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CCNC(=NO)c1ccccc1	CC(C)CCNC(=NO)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C=O)c1ccc(S(=O)(=O)N2CC(C(S(=O)(=O)c3c(OC)c(OC)cc(OC)c3OC)CC2)cc1	CO(C=O)c1ccc(S(=O)(=O)N2CC(C(S(=O)(=O)c3c(OC)c(OC)cc(OC)c3OC)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CH#CCOc1ccc(C=C(C(=O)O)c(O)c1CC=C(C)C	CH#CCOc1ccc(C=C(C(=O)O)c(O)c1CC=C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(Nc1ccc(C(C)(C)c2nccs2)cc1)c1ccccc1	CC(Nc1ccc(C(C)(C)c2nccs2)cc1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCNc1ccc2c(c1)C(c1ccc(Cl)cc1)=NN(C)C(=O)C2	CCNc1ccc2c(c1)C(c1ccc(Cl)cc1)=NN(C)C(=O)C2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccsc1CCNC(=O)Nc1ccc(-c2nc(C(C)C)no2)cc1	Cc1ccsc1CCNC(=O)Nc1ccc(-c2nc(C(C)C)no2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc1N1C(=O)C(=Cc2ccccc(O)c2)SC1=S	Cc1ccccc1N1C(=O)C(=Cc2ccccc(O)c2)SC1=S	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NNC(=S)NC1CCCCCCCCCCCCC1)c1ccccc1	O=C(NNC(=S)NC1CCCCCCCCCCCCC1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCc1c(O)n2nenc2n(-c2ccccc2)c1=O	CCCc1c(O)n2nenc2n(-c2ccccc2)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC#CCOc1ccc(S(=O)(=O)CC2(C(=O)NO)CCN(S(=O)(=O)NCCC)CC2)cc1	CC#CCOc1ccc(S(=O)(=O)CC2(C(=O)NO)CCN(S(=O)(=O)NCCC)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C=O)OC1CC2C(C)(C)C(=O)C=CC2(C)C2CCC3(C)C(=CCC3C3COC(=O)C3)C12C	CC(C=O)OC1CC2C(C)(C)C(=O)C=CC2(C)C2CCC3(C)C(=CCC3C3COC(=O)C3)C12C	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc2nc(N3CCCC(C(=O)NCCN4CCCC4)C3)cc2c1	CCOc1ccc2nc(N3CCCC(C(=O)NCCN4CCCC4)C3)cc2c1	FALSE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-n2nc([N+](=O)[O-])c(N3CCN(C)CC3)c2C)cc1	Cc1ccc(-n2nc([N+](=O)[O-])c(N3CCN(C)CC3)c2C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCc1nn(C)c(C(=O)NGc2ccc(OC)c(OC)c2)c1Cl	CCCc1nn(C)c(C(=O)NGc2ccc(OC)c(OC)c2)c1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(Cl)Cn1c(-c2ccc(C)cc2)nc2c1c(=O)n(C)c(=O)n2C	C=C(Cl)Cn1c(-c2ccc(C)cc2)nc2c1c(=O)n(C)c(=O)n2C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CCN1C(=O)SC(=Cc2cccn2)C1=O	O=C(O)CCN1C(=O)SC(=Cc2cccn2)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(NC(=O)CCc1nnc(Cc2ccc(-c3ccccc3)cc2)o1)c1ccccc1-n1cccn1	CC(NC(=O)CCc1nnc(Cc2ccc(-c3ccccc3)cc2)o1)c1ccccc1-n1cccn1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C(Cc1ccccc1)Oc1ccc(C(=C2C3C=CC4(CCCC4C3)C2O)c2ccsc2)cc1	O=C(O)C(Cc1ccccc1)Oc1ccc(C(=C2C3C=CC4(CCCC4C3)C2O)c2ccsc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(C(=O)Nc2cnc3cccn3c2)c1	COc1cccc(C(=O)Nc2cnc3cccn3c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1CCN(S(=O)(=O)c2ccc(NC3=NC4CS(=O)(=O)CC4S3)cc2)CC1	CCN1CCN(S(=O)(=O)c2ccc(NC3=NC4CS(=O)(=O)CC4S3)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(-c2nc3cccn3c2Nc2ccccc2)cc1	c1ccc(CNc2c(-c3ccccc3)nc3cccn23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C(=O)N2CC3CN(c4ncccc4F)CC3C2)on1	Cc1cc(C(=O)N2CC3CN(c4ncccc4F)CC3C2)on1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCOc1nenc2sc(-c3ccc(F)cc3)c12	CN(C)CCOc1nenc2sc(-c3ccc(F)cc3)c12	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(c2nc3c(cc2F)c(=O)c(C(=O)O)cn3-c2cccc(C(F)(F)F)c2)CC1	CN1CCN(c2nc3c(cc2F)c(=O)c(C(=O)O)cn3-c2cccc(C(F)(F)F)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1cc(Cl)c(NCc2ccc(F)cc2F)cc1O(N)=O	COC(=O)c1cc(Cl)c(NCc2ccc(F)cc2F)cc1O(N)=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(-n2ccn(CC(=O)Nc3ccc4c(c3)OCCO4)c(=O)c2=O)cc1	CCOc1ccc(-n2ccn(CC(=O)Nc3ccc4c(c3)OCCO4)c(=O)c2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)N1CC(C)CNC(=O)c2nn(C)c3ccccc23)CC1	COC(=O)N1CC(C)CNC(=O)c2nn(C)c3ccccc23)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2CC(=O)c3c(O)ccc(OC4OC(COC5OC(C)C(O)C(O)C5O)C(O)C(O)C4O)cc3O2)cc1O	COc1ccc(C2CC(=O)c3c(O)ccc(OC4OC(COC5OC(C)C(O)C(O)C5O)C(O)C(O)C4O)cc3O2)cc1O	TRUE	TRUE	FALSE
CN(c1ccc(NC(=O)Cc2ccc(F)cc2)cc1)S(C)(=O)=O	CN(c1ccc(NC(=O)Cc2ccc(F)cc2)cc1)S(C)(=O)=O	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C(=O)C1(CC2CCCCO2)CCN(c2nnc(C)c3c(C)n(-c4ccc(F)cc4)nc23)CC1	CN(C(=O)C1(CC2CCCCO2)CCN(c2nnc(C)c3c(C)n(-c4ccc(F)cc4)nc23)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ccc2nc(OC3ccc4oc(=O)c5cnc6ccc(C(F)(F)F)cc(c56)c4c3)ccc2c1	N#Cc1ccc2nc(OC3ccc4oc(=O)c5cnc6ccc(C(F)(F)F)cc5nccc(c35)C(=O)O4)ccc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCS(=O)(=O)n1c(SCC(=O)N2CCCS(=O)(=O)C2)nc2ccccc21	CCS(=O)(=O)n1c(SCC(=O)N2CCCS(=O)(=O)C2)nc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1cc(C(=O)N2CC(C)O)(c3ccc(F)cc3)C3CCCC32)ccc1OC	CCOc1cc(C(=O)N2CC(C)O)(c3ccc(F)cc3)C3CCCC32)ccc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C(O)=CC(=O)c1cn(Cc2ccccc2)c2ccccc2c1=O	CCOC(=O)C(O)=CC(=O)c1cn(Cc2ccccc2)c2ccccc2c1=O	TRUE	TRUE	FALSE
CCN(CC)c1nenc2c1enn2-c1cccc(C)c1C	CCN(CC)c1nenc2c1enn2-c1cccc(C)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CN(C(=O)C(C)(O)C(F)(F)F)CCN1c1nc2ccccc2[nH]1	CC1CN(C(=O)C(C)(O)C(F)(F)F)CCN1c1nc2ccccc2[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(C=Cc2nc3c(N)nenc3n2C2OC(CO)C(O)C2O)c1	COc1cccc(C=Cc2nc3c(N)nenc3n2C2OC(CO)C(O)C2O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(Cc1ccc([N+](=O)[O-])cc1)C(=O)NCC(=O)Nc1C(=O)NC(Cc2ccccc2)C(=O)N2CC3C(OCc4ccccc4)C(=O)N4C(Cc3ccccc3)C(=O)N124	NC(Cc1ccc([N+](=O)[O-])cc1)C(=O)NCC(=O)Nc1C(=O)NC(Cc2ccccc2)C(=O)N2CC3C(OCc4ccccc4)C(=O)N4C(Cc3ccccc3)C(=O)N124	FALSE	TRUE	TRUE
Cc1c(N(Cc2ccc(F)c(C(F)(F)F)c2)S(=O)(=O)c2cccc(C(F)(F)F)c2)nc2ccc(F)cn12	Cc1c(N(Cc2ccc(F)c(C(F)(F)F)c2)S(=O)(=O)c2cccc(C(F)(F)F)c2)nc2ccc(F)cn12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)NC(C(=O)O)c2ccccc2F)nc1-c1cccc(C)c1	COc1ccc(C(=O)NC(C(=O)O)c2ccccc2F)nc1-c1cccc(C)c1	TRUE	TRUE	FALSE
CN(CCOc1ccccc1F)Cc1ccc(-c2cc3c(Nc4c[nH]n4)nenc3[nH]2)cc1	CN(CCOc1ccccc1F)Cc1ccc(-c2cc3c(Nc4c[nH]n4)nenc3[nH]2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCCCCC(=O)NC1CCCNc1=O	CCCCCCCCCCCCCCC(=O)NC1CCCNc1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)n1c(=O)[nH]c2nc(-c3ccc(S(=O)(=O)NC)cc3)[nH]c2c1=O	CNS(=O)(=O)c1ccc(-c2nc3[nH]c(=O)n(C(C)C)c(=O)c3[nH]2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)CCCN(C)C(=O)c1cc2cc(OC)c(OC)cc2c(-c2ccccc2)n1	CNN(CCCC(=O)NC)C(=O)c1cc2cc(OC)c(OC)cc2c(-c2ccccc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)C1(C(=O)O)N=C(c2ccc3ccccc3c2)c2ccccc2NC1=O	CC(=O)C1(C(=O)O)N=C(c2ccc3ccccc3c2)c2ccccc2NC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(Cl)nc2ccc3[nH]cnc3c12	Cc1cc(Cl)nc2ccc3[nH]cnc3c12	TRUE	TRUE	TRUE
CN1C(=O)C(NC(=O)C(CCC(F)(F)F)C(C(=O)Nc2ccc(Cl)cc2F)C(=O)NO)N=C(c2ccccc2)c2ccccc21	CN1C(=O)C(NC(=O)C(CCC(F)(F)F)C(C(=O)NO)C(=O)Nc2ccc(Cl)cc2F)N=C(c2ccccc2)c2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CCN(C(=O)C(C#N)=Cc2ccc(OCC(=O)O)c(OC)c2)cc1	COc1ccc(CCN(C(=O)C(C#N)=Cc2ccc(OCC(=O)O)c(OC)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(NC(=O)C2CC(C)CNS(=O)(=O)c3ccc4c(c3)CCC(=O)N4)CC2)cc1	CCOc1ccc(NC(=O)C2CC(C)CNS(=O)(=O)c3ccc4c(c3)CCC(=O)N4)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CC1CC1(NC(=O)C1CC(OC2cc(-c3c[nH]c4cnccc34)cc3c2C(=O)N(OC)C3=O)CN1C(=O)C(NC(=O)NC(C)(C)C(C)C(C)C	O=C(O)Cc1ccc(OC2ccc(Cl)cc2)cc1	FALSE	TRUE	TRUE
O=C(O)Cc1ccc(OC2ccc(Cl)cc2)cc1	O=C(O)Cc1ccc(OC2ccc(Cl)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1ccccc1)C(O)(Cn1cncn1)c1ccc(Cl)cc1	O=C(c1ccccc1)C(O)(Cn1cncn1)c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1cccc(Cl)c1Cn1c(-c2cc3c([nH]2)C2(CC4CNCC(C4)N2)C3)nc2ccccc21	Clc1cccc(Cl)c1Cn1c(-c2cc3c([nH]2)C2(C3)CC3CNCC(C3)N2)nc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C=O)Nc1cc(-c2cn3c(-c4ccccc4)cnc3c(N)n2)ccn1	CC(C=O)Nc1cc(-c2cn3c(-c4ccccc4)cnc3c(N)n2)ccn1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2coc3cc(C)cc(C)c3c2=O)cc1	COc1ccc(-c2coc3cc(C)cc(C)c3c2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(N2CC(c3nc4ccccc4n3C)C2)nc(C2CC2)n1	Cc1cc(N2CC(c3nc4ccccc4n3C)C2)nc(C2CC2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(C(=O)NN2CCCC2)nn(-c2ccc(Cl)cc2Cl)c1-c1ccc(C2CC2)cc1	Cc1c(C(=O)NN2CCCC2)nn(-c2ccc(Cl)cc2Cl)c1-c1ccc(C2CC2)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C1CN(C(=O)c2ccccc2)CCN1CCc1ncc[nH]1	O=C1CN(C(=O)c2ccccc2)CCN1CCc1ncc[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCOc1ccc2c(=O)cc(-c3ccc([N+](=O)[O-])cc3)oc2c1	CCCCCCCCCOc1ccc2c(=O)cc(-c3ccc([N+](=O)[O-])cc3)oc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CC(C)(O)c1c(O)c(C)c(C(OC2(C)C(=C(O)C=O)C(C)(O)C3CC2(C)C32CCC(OC)C2OC)c(OC)c1O	CC(C)C1=CC2CC3(C=O)C4CCC(C)C4CC2(CC(=O)NC(C(=O)NC2CCCC2)C13C(=O)O	FALSE	TRUE	TRUE
CC(C)C1=CC2CC3(C=O)C4CCC(C)C4CC2(CC(=O)NC(C(C)C)C(=O)NC2CCCC2)C13C(=O)O	CC(C)C1=CC2CC3(C=O)C4CCC(C)C4CC2(CC(=O)NC(C(=O)NC2CCCC2)C13C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1cccc(N2CC(=O)N(c3cc(N4CC(Cn5ccnn5)OC4=O)c(F)cc3F)C2=O)c1	N#Cc1cccc(N2CC(=O)N(c3cc(N4CC(Cn5ccnn5)OC4=O)c(F)cc3F)C2=O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(=S)N(CCO)S(=O)(=O)c2ccc3ccccc3c2)cc1C	Cc1ccc(NC(=S)N(CCO)S(=O)(=O)c2ccc3ccccc3c2)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
CCOCCN1CCc2onc(C(=O)Nc3cncc(C(=O)c4cn(C(C)C)c5nenc45)c4nc(C)cc34)c2C1	CCOCCN1CCc2onc(C(=O)Nc3cncc(C(=O)c4cn(C(C)C)c5nenc45)c4nc(C)cc3-4)c2C1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(F)cc1)c1nn(-c2ccccc2)c(-c2ccc(F)cc2)c1C(=O)O	O=C(Nc1ccc(F)cc1)c1nn(-c2ccccc2)c(-c2ccc(F)cc2)c1C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1c(O)c2cc(N3CCN(C)CC3)ccc2n(C)c1=O	CCOC(=O)c1c(O)c2cc(N3CCN(C)CC3)ccc2n(C)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(C(=N)O)csc1C=C1c2ccccc2C(=O)N1c1ccc(S(C)(=O)=O)cc1C	Cc1cc(S(C)(=O)=O)ccc1N1C(=O)c2ccccc2C1=Cc1sc(C(=N)O)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
FC(F)(F)c1ccc(-c2nnc3ccc(NCc4ccccc4)nn23)cc1	FC(F)(F)c1ccc(-c2nnc3ccc(NCc4ccccc4)nn23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(NC(=O)C(C)CC1CCCC1)NC(=O)CNC(=O)c1esc(CCO)n1)C(=O)NC(CCSC)C(=O)O	CC(C)C(NC(=O)C(C)CC1CCCC1)NC(=O)CNC(=O)c1esc(CCO)n1)C(=O)NC(CCSC)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1=C(N)N(c2ccccc2)C2=C(C(=O)CCC2)C1ccl(C2CC2)oc1C	CCOC(=O)C1=C(N)N(c2ccccc2)C2=C(C(=O)CCC2)C1c1cc(C2CC2)oc1C	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCc1nc(C(N)=O)c(C)n1Cc1ccc(-c2ccccc2F)cc1	CCCCCCc1nc(C(N)=O)c(C)n1Cc1ccc(-c2ccccc2F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC1CC1)C(c1ccccc1)N1CCN(CCO)CC1	O=C(NC1CC1)C(c1ccccc1)N1CCN(CCO)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC=Cc1cnc2c(c1)c(C(O)=Nc1cc(F)c(F)c(C3(C)CS(=O)(=O)C4(CCOCC4)C(=N)N3)c1)cn2C(=N)O	CCOC=Cc1cnc2c(c1)c(C(O)=Nc1cc(F)c(F)c(C3(C)CS(=O)(=O)C4(CCOCC4)C(=N)N3)c1)cn2C(=N)O	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nenn2c(C3CCN(Cc4cccc5ccccc45)CC3)nc(-c3cnccc3)c12	Nc1nenn2c(C3CCN(Cc4cccc5ccccc45)CC3)nc(-c3cnccc3)c12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(cc1OC)C13CC([N+](C)(Cc4ccc([N+](=O)[O-])cc4)C(C2)C1(O)Cc1ccc(O)cc1C3=O	COc1cc2c(cc1OC)C13CC([N+](C)(Cc4ccc([N+](=O)[O-])cc4)C(C2)C1(O)Cc1ccc(O)cc1C3=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CC1C(=O)NCCN1S(=O)(=O)c1cccc([N+](=O)[O-])cc1)NC1CCc2ccccc21	O=C(CC1C(=O)NCCN1S(=O)(=O)c1cccc([N+](=O)[O-])cc1)NC1CCc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCOCC1CN(Cc2ccccc2)Cc2nnc(C)c21	CCOCC1CN(Cc2ccccc2)Cc2nnc(C)c21	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1ccsc1=NS(=O)(=O)c1ccccc1	Cn1ccsc1=NS(=O)(=O)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(NC(=O)c1ccc2ccccc2c1)C(=O)N1CCC(O)(c2ccc(Cl)cc2)CC1	CC(NC(=O)c1ccc2ccccc2c1)C(=O)N1CCC(O)(c2ccc(Cl)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccccc1CNC(=O)CCS(=O)(=O)c1ccccc1	CCOc1ccccc1CNC(=O)CCS(=O)(=O)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cccn1)c1ccccc(Br)c1	O=C(Nc1cccn1)c1ccccc(Br)c1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CN1CCN(C(=O)c2cccc(C(=O)c3ccc(Cl)cc3)c2)CC1	CN1CCN(C(=O)c2cccc(C(=O)c3ccc(Cl)cc3)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCNCc1c(-c2cccc3cccc3c2)sc2cccc12		FALSE	TRUE	TRUE
CC(C)C(=O)OCC(OC(=O)C(C)C)C(OC(=O)C(C)C)C(C)C(=O)C(C)C=CCC=CC=CC(=O)O	CC(C)C(=O)OCC(OC(=O)C(C)C)C(OC(=O)C(C)C)C(C)C(=O)C(C)C=CCC=CC=CC(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(F)ccc1-c1snc2c(NCc3cccc3)nc(S(C)C(O)nc12	Cc1cc(F)ccc1-c1snc2c(NCc3cccc3)nc(S(C)C(O)nc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CSc1[nH]nc2cccc12)NCC1cccc1F	O=C(CSc1[nH]nc2cccc12)NCC1cccc1F	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)Oc1cccc(CN2CC(O)CN(C(=O)c3ccco3)CCC2=O)c1	CC(C)Oc1cccc(CN2CC(O)CN(C(=O)c3ccco3)CCC2=O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1c2c(OCC#N)ccc(OCC(C)(C)C1=O)c2	COC(=O)C1=Cc2cc(Ccc2OCC#N)OCC(C)(C)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
ON=C1CCCCc2c1[nH]c1cccc21	ON=C1CCCCc2c1[nH]c1cccc21	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)NN=Cc2c[nH]c3ccccc23)cc1	COc1ccc(C(=O)NN=Cc2c[nH]c3ccccc23)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
COCc1cc(OC)nc(-c2nnc(C=Cc3ccc(Cl)cc3)o2)n1	COCc1cc(OC)nc(-c2nnc(C=Cc3ccc(Cl)cc3)o2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(OC)c(NC(=O)CN(C)C(=O)c2ccc(COc3cccc3C#N)cc2)c1	COc1ccc(OC)c(NC(=O)CN(C)C(=O)c2ccc(COc3cccc3C#N)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
FC(F)C(F)(F)n1cc(-c2ccnc2)c2cnccc21	FC(F)C(F)(F)n1cc(-c2ccnc2)c2cnccc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1csc(N2CCN(Cc3cccn3C3CCOCC3)CC2)n1	Cc1csc(N2CCN(Cc3cccn3C3CCOCC3)CC2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)CCCC1C2CCCN3CCCC(CN1Cc1cccc1)C23	COC(=O)CCCC1C2CCCN3CCCC(CN1Cc1cccc1)C23	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccc(-c2nc3cccc3o2)cc1	CCc1ccc(-c2nc3cccc3o2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1Nc2cccc2Nc2c1c(-c1ccc(F)c(F)c1)cc(O)c2O	O=C1Nc2cccc2Nc2c(O)c(O)cc(-c3ccc(F)c(F)c3)c21	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)C1CC(=O)N(C2CCCC2)C1	NC(=O)C1CC(=O)N(C2CCCC2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c(SCc2nc(-c3ccc(Cl)cc3)no2)nnc1-c1cnccc1	Cn1c(SCc2nc(-c3ccc(Cl)cc3)no2)nnc1-c1cnccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc2c(cc1-c1cnccc1)CC(C(=O)Nc1ccc(-c3cnc(O)[nH]3)cc1)O2	Cc1cc2c(cc1-c1cnccc1)CC(C(=O)Nc1ccc(-c3cnc(O)[nH]3)cc1)O2	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1cc2c(cc1N)c(O)c(Cl(=O)NCC1CCO1)c(=O)n2C	CCc1cc2c(cc1N)c(O)c(Cl(=O)NCC1CCO1)c(=O)n2C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C1OC(=O)C(C)(C)CNC(=O)C(C(C)C)NC(=O)C(Cc2ccc(O)cc2)NCCOc2cccc2C=CNC(=O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)C1C	CC(C)C1NC(=O)C(Cc2ccc(O)cc2)NCCOc2cccc2C=CNC(=O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)C(C)C(C(C)C)OC(=O)C(C)(C)CNC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
NCCCC(N)C(=O)NCCNC(=O)CC(NC(=O)C(N)CCCN=C(N)N)C(=O)O	NCCCC(N)C(=O)NCCNC(=O)CC(NC(=O)C(N)CCCN=C(N)N)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1cnn(-c2nc(C(=O)OCC)c(O)C)nc2C(=O)OCC)c1N	CCOC(=O)c1cnn(-c2nc(C(=O)OCC)c(O)C)nc2C(=O)OCC)c1N	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc2ccc(O)nc2n1-c1nc2c(F)c(F)c(-n3ccc(=O)n(C)c3=O)cc2s1	Cn1c(=O)ccn(-c2cc3sc(-n4c(N)nc5ccc(O)nc54)nc3c(F)c2F)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(N(C)C(=O)C(C)C)c2ccc(Br)cc2)cc1	CCOc1ccc(N(C)C(=O)C(C)C)c2ccc(Br)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c[nH]c2nnc(-c3ccn3C)c12		FALSE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(=O)C(=O)OCC2CCO2)c(Br)c1	Cc1ccc(NC(=O)C(=O)OCC2CCO2)c(Br)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Fc1ccc(-c2nc(N3CCN(Cc4ccc5c(c4)OCO5)CC3)c3ccc(Cl)cc3n2)c(F)c1	Fc1ccc(-c2nc(N3CCN(Cc4ccc5c(c4)OCO5)CC3)c3ccc(Cl)cc3n2)c(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1Cc2cc(Br)ccc2C(c2ccc(F)cc2)N=C1CCc1cccc1	CN1Cc2cc(Br)ccc2C(c2ccc(F)cc2)N=C1CCc1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2n[se]nc2-c2cc(OC)c(OC)c(OC)c2)cc1N	COc1ccc(-c2n[se]nc2-c2cc(OC)c(OC)c(OC)c2)cc1N	TRUE	TRUE	FALSE
CC(c1nc(C(C)(C)C)no1)N1CCN(CC(C)N2CCN(C)CC2)CC1	CC(CN1CCN(C(C)C)c2nc(C(C)(C)C)no2)CC1N1CCN(C)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)C(=O)C1(c2cccc2)CC1CN	CCN(CC)C(=O)C1(c2cccc2)CC1CN	TRUE	TRUE	FALSE
CN(C(=O)c1ccc(-c2ccc(F)cc2)cc1)C1CCN(C(=O)N2CCC(NCc3ccnc(C(F)(F)F)c3)C2)C1	CN(C(=O)c1ccc(-c2ccc(F)cc2)cc1)C1CCN(C(=O)N2CCC(NCc3ccnc(C(F)(F)F)c3)C2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCn1cnnc1SCC(=O)Nc1cc(-c2cc(OC)c(OC)c2)n[nH]1	COCCn1cnnc1SCC(=O)Nc1cc(-c2cc(OC)c(OC)c2)n[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C)C1N=C(SCc2c(F)cccc2Cl)NC1=O	CCC(C)C1N=C(SCc2c(F)cccc2Cl)NC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1cc(S(=O)(=O)N2C(=O)NC3(CC(=O)N(c4ccc(Br)cc4)C3=O)C2=O)ccc1Cl	Nc1cc(S(=O)(=O)N2C(=O)NC3(CC(=O)N(c4ccc(Br)cc4)C3=O)C2=O)ccc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1cccc1)c1cc(CSc2cccc2)c(O)c([N+](=O)[O-])c1	O=C(c1cccc1)c1cc(CSc2cccc2)c(O)c([N+](=O)[O-])c1	TRUE	TRUE	TRUE
COP(=O)(CC(=O)NCc1cccc1)OC	COP(=O)(CC(=O)NCc1cccc1)OC	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)CCc1nnc(CCN(C(=O)C2=CN(C)C(=O)C(C(C)C)CC=C2C)o1	COC(=O)CCc1nnc(CCN(C(=O)C2=CN(C)C(=O)C(C(C)C)CC=C2C)o1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)N2C3CC2C(COc2ccc(F)cn2)C3)c(-n2ncn2)n1	Cc1ccc(C(=O)N2C3CC2C(COc2ccc(F)cn2)C3)c(-n2ncn2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C2=Nc3nc4cccc4n3C(c3cccc3[N+](=O)[O-])C2)s1	Cc1ccc(C2=Nc3nc4cccc4n3C(c3cccc3[N+](=O)[O-])C2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)CCCCOc1ccc(-c2cc(-c3cc(=O)oc4cc(OCCCN(CC)CC)c(OC)cc34)c(C#N)c(-c3cccc3)c2)cc1	CCN(CC)CCCCOc1ccc(-c2cc(-c3cccc3)c(C#N)c(-c3cc(=O)oc4cc(OCCCN(CC)CC)c(OC)cc34)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nc2ccc(C(=O)NCCOc3cccn3)cn2c1N(CC)Cc1ccc(-c2ccccc2-c2nn[nH]n2)cc1	CCc1nc2ccc(C(=O)NCCOc3cccn3)cn2c1N(CC)Cc1ccc(-c2ccccc2-c2nn[nH]n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCN1CCN(C(c2cccc2)c2ccccc2)CC1	C=CCN1CCN(C(c2cccc2)c2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)CC(NC(=O)c1cccc1)c1cccc1	NC(=O)CC(NC(=O)c1cccc1)c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(CCOc1ccc(C23CC(O)CC2N(C)CC3)cc1)c1cc(CS(C)(=O)O)ncn1	CN(CCOc1ccc(C23CCN(C)C2CC(O)C3)cc1)c1cc(CS(C)(=O)O)ncn1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(CCCCC(=O)N(C)O)C(=O)NCc1cccc1	CN(O)C(=O)CCCCCN(C)C(=O)NCc1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cnc(N2CCC3(CC(=O)N(CCN(C)C)C3)CC2)nc1	Cc1cnc(N2CCC3(CC(=O)N(CCN(C)C)C3)CC2)nc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCN2c3c(cc4c(N)ncnc4c3Cl)NC3(C(O)=NC3=O)C2CC1O	CC1CCN2c3c(cc4c(N)ncnc4c3Cl)NC3(C(=O)N=C3O)C2CC1O	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)CC2CC(C)(CN2C(=O)COc2ccc(Cl)cc2Cl)C1	CC1(C)CC2CC(C)(CN2C(=O)COc2ccc(Cl)cc2Cl)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)N1CCC(Oc2ccc(-c3ccc4cc(C#N)ccc4c3)cn2)CC1	CC(C)N1CCC(Oc2ccc(-c3ccc4cc(C#N)ccc4c3)cn2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2cc(C(N)=O)c3[nH]c4cc(C(=O)N5CCCN(C)CC5)ccc4c3c2)cc1OC	COc1ccc(-c2cc(C(N)=O)c3[nH]c4cc(C(=O)N5CCCN(C)CC5)ccc4c3c2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CC12CCC(OC(=O)CCC(=O)N(C)Cc3c[nH]c4ccccc34)C(=O)O)CC1CCC1C2CCC2(C)C(C3=CC(=O)OC3)C(O)CC12O	CC12CCC(OC(=O)CCC(=O)N(C)Cc3c[nH]c4ccccc34)C(=O)O)CC1CCC1C2CCC2(C)C(C3=CC(=O)OC3)C(O)CC12O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1NC2(CCN(CCC(=O)c3cccc3C(F)(F)F)CC2)N=C1c1cccc1	O=C1NC2(CCN(CCC(=O)c3cccc3C(F)(F)F)CC2)N=C1c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)N1CCc2cc(Br)cc(S(=O)(=O)N3CCOCC3)c21	CNC(=O)N1CCc2cc(Br)cc(S(=O)(=O)N3CCOCC3)c21	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)N1CCN(c2ccc(OCc3cccc(OCc4cc(CN5CCCC5C)on4)c3)cc2)CC1	CC(=O)N1CCN(c2ccc(OCc3cccc(OCc4cc(CN5CCCC5C)on4)c3)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)N(C(=O)Cn1c(-c2ccccc2)c(C2CCCC2)c2ccc(C(=O)O)cc21)C(C)C	CC(C)N(C(=O)Cn1c(-c2ccccc2)c(C2CCCC2)c2ccc(C(=O)O)cc21)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(COC(=O)C=Cc1ccco1)NC1CCCC1	O=C(COC(=O)C=Cc1ccco1)NC1CCCC1	TRUE	TRUE	FALSE
C(=Cc1ccc2c(c1)OCO2)CN1CCOCC1	C(=Cc1ccc2c(c1)OCO2)CN1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1NC(=O)CN1CCCC(C(=O)c2c[nH]c3ccccc23)C1	COc1ccccc1NC(=O)CN1CCCC(C(=O)c2c[nH]c3ccccc23)C1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCCNC(=O)c1ccc2nc(Cl)c(NC3CCCC3)nc2c1)Nc1ccc(Cl)c(C(F)(F)F)c1	O=C(NCCNC(=O)c1ccc2nc(Cl)c(NC3CCCC3)nc2c1)Nc1ccc(Cl)c(C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccoc1C(=O)NCCc1ccc(CCC(=O)NCC(=O)N2CCCC2)cc1	Cc1ccoc1C(=O)NCCc1ccc(CCC(=O)NCC(=O)N2CCCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(-c2cccc(N3CCC(n4ccc5ccc(F)cc54)CC3)n2)cc2c1OCO2	COc1cc(-c2cccc(N3CCC(n4ccc5ccc(F)cc54)CC3)n2)cc2c1OCO2	TRUE	TRUE	TRUE
FC(F)(F)Oc1ccc(-n2c(-c3ccccc3)nc3cccc3c2=O)cc1	O=c1c2ccccc2nc(-c2ccccc2)n1-c1ccc(OC(F)(F)F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC(C)COc1cc(-c2ccc(CCC(=O)O)nc2C)ccc1C(=O)N=C(N)N	CCCC(C)COc1cc(-c2ccc(CCC(=O)O)nc2C)ccc1C(=O)N=C(N)N	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1C(=O)NC(=S)NCC1cccc1	COc1ccccc1C(=O)NC(=S)NCC1cccc1	TRUE	TRUE	FALSE
C(=C(c1ccc(C=Cc2ccccc2-c2ccccc2)nc1)c1ccc(CN2CCOCC2)cc1)c1cccc1	C(=Cc1cccc1-c1ccccc1)c1ccc(C(=Cc2ccccc2)c2ccc(CN3CCOCC3)cc2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCNC(=O)NS(=O)(=O)c1cccc1-c1ccc(Cn2c(CCCC)nc3ccc(OCC(=O)O)cc3c2=O)cc1	CCCCNC(=O)NS(=O)(=O)c1cccc1-c1ccc(Cn2c(CCCC)nc3ccc(OCC(=O)O)cc3c2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2[nH]cc(C(=O)NCCN(C)C)c(=O)c2c1	COc1ccc2[nH]cc(C(=O)NCCN(C)C)c(=O)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
#CCONC(=O)OC1CO2C(OC(=O)NCCc3ccccc3)COC12	#CCONC(=O)OC1CO2C(OC(=O)NCCc3ccccc3)COC12	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)C(=N)Nc1nc(-c2ccc(-c3cn(CC(=O)O)nn3)cc2)cs1	CN(C)C(=N)Nc1nc(-c2ccc(-c3cn(CC(=O)O)nn3)cc2)cs1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(COC(=O)c1ccccc1Br)NCCC1=CCCC1	O=C(COC(=O)c1ccccc1Br)NCCC1=CCCC1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C=O)N(C)CC(=O)NN=Cc1cc(Br)ccc1OC(=O)c1ccc(F)cc1	CC(C=O)N(C)CC(=O)NN=Cc1cc(Br)ccc1OC(=O)c1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CCNC1CC1c1ccc(Br)cc1	O=C(O)CCNC1CC1c1ccc(Br)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=S1(=O)c2ccccc2N=C(Nc2cnccc2)N1c1cccc1	O=S1(=O)c2ccccc2N=C(Nc2cnccc2)N1c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(NC(=O)c2ccc(Br)c(S(=O)(=O)N3CCCC3)c2)no1	Cc1cc(NC(=O)c2ccc(Br)c(S(=O)(=O)N3CCCC3)c2)no1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C1c2ccccc2C(Nc2cccn2)N1c1cc(F)cc(F)c1	O=C1c2ccccc2C(Nc2cccn2)N1c1cc(F)cc(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOCC1CCC(N(C)CCCN2CCCC2)CC1	CCOCC1CCC(N(C)CCCN2CCCC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2nc(N3CCC(N4CCCC4)CC3)nc(N3CCCC3)c2cc1OC	COc1cc2nc(N3CCC(N4CCCC4)CC3)nc(N3CCCC3)c2cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1)C1C(CO2)C(c2ccccc2)C2(C(=O)c3ccccc3C2=O)C1c1cccc1	COc1ccc2c(c1)C1C(CO2)C(c2ccccc2)C2(C(=O)c3ccccc3C2=O)C1c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)C(=O)Nc1ccc(C(=O)Nc2cc(-n3ccc4cc(C#N)ccc43)n[nH]2)cc1	CC(C)(C)C(=O)Nc1ccc(C(=O)Nc2cc(-n3ccc4cc(C#N)ccc43)n[nH]2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(N=c2sc3cccc3n2CCC(=O)N2CCCS(=O)(=O)C2)cc1	COc1ccc(N=c2sc3cccc3n2CCC(=O)N2CCCS(=O)(=O)C2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(F)c1CN1CC(N=C(O)c2ccc3[nH]nc(-c4ccc5nnc(C(C)C)o5c4)c3c2)CCC1C(O)=NCC(C)(C)C		FALSE	TRUE	TRUE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
ON=C1CCCC2nc(N=C(O)Nc3ccc(OC(F)(F)F)c(C(F)(F)F)c3)cnc21	ON=C1CCCc2nc(N=C(O)Nc3ccc(OC(F)(F)F)c(C(F)(F)F)c3)cnc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=CCC1OC(=O)CC1(O)C)C12OC1(C)C1=C(C(OC(C)C)CC1(O)C)C3OC(=O)C(C)C3(O)C(=O)C(=O)C1=C2(O)C		FALSE	TRUE	TRUE
CC(C)CCCCN(Cc1ccc(C2=NCCN2)cc1)c1nc2ccc(-c3ccccc3)cc2s1	CC(C)CCCCN(Cc1ccc(C2=NCCN2)cc1)c1nc2ccc(-c3ccccc3)cc2s1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1cncc(N2CC3CNC3C2)n1	NC(=O)c1cncc(N2CC3CNC3C2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(COC1ccnc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]Nc1ccc(CN2CCCc3ccccc32)cc1	O=C(COC1ccnc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]Nc1ccc(CN2CCCc3ccccc32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCNC(=O)c1cn(C2CCCC2)c(=O)c2ccccc12	CN(C)CCNC(=O)c1cn(C2CCCC2)c(=O)c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccccc1N(CCI(=O)N1CCN(Cc2ccc3c(c2)OCO3)CC1)S(=O)(=O)c1ccc(C)cc1	CCOc1ccccc1N(CCI(=O)N1CCN(Cc2ccc3c(c2)OCO3)CC1)S(=O)(=O)c1ccc(C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(OC2OC3OC(C)(C)OC3C2OCc2ccccc2)c2c(C)cc(=O)oc2c1	Cc1cc(OC2OC3OC(C)(C)OC3C2OCc2ccccc2)c2c(C)cc(=O)oc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)c(S(=O)(=O)NC(Cc2ccccc(C(=N)N)c2)C(=O)N2CCCC2C(=O)NC(Cc2csn2)C(=O)O)c(C)c1	Cc1cc(C)c(S(=O)(=O)NC(Cc2ccccc(C(=N)N)c2)C(=O)N2CCCC2C(=O)NC(Cc2csn2)C(=O)O)c(C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1ccccc(S(=O)(=O)N2CCC(C(=O)O)CC2)c1	O=C(O)c1ccccc(S(=O)(=O)N2CCC(C(=O)O)CC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)N2CCN(S(C)(=O)=O)C(C)C2)cc1OC1CCN(C(C)=O)CC1	COc1ccc(C(=O)N2CCN(S(C)(=O)=O)C(C)C2)cc1OC1CCN(C(C)=O)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1ccc(Nc2nncc(-c3ccc([N+](=O)[O-])cc3)s2)cc1C(F)(F)F	CN(C)c1ccc(Nc2nncc(-c3ccc([N+](=O)[O-])cc3)s2)cc1C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1cccn1CC1CN(CCc(F)c1)C1CCCC1	O=c1cccn1CC1C=C(F)CCN(C2CCCC2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2=NN(C(=O)CC(C)C)C(c3cc(OC)c(OC)c(OC)c3)C2)cc1OC	COc1ccc(C2=NN(C(=O)CC(C)C)C(c3cc(OC)c(OC)c(OC)c3)C2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)nc(N2C(=O)CS2c2c(Cl)cccc2Cl)n1	Cc1cc(C)nc(N2C(=O)CS2c2c(Cl)cccc2Cl)n1	TRUE	TRUE	FALSE
O=c1[nH]c(=O)n(-c2ccc3c(c2)C(=O)N(N2CCN(C(c4ccccc4)c4ccc(Cl)cc4)CC2)CC3)cc1Cl	O=C1c2cc(-n3cc(Cl)c(=O)[nH]c3=O)ccc2CCN1N1CCN(C(c2ccccc2)c2ccc(Cl)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
C[n+](1ccc(-c2ccccc2)cc1	C[n+](1ccc(-c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1c(NC(=O)c2ccc(S(=O)(=O)N3CCOCC3)cc2)[n+](([O-])c2cc(F)ccc2[n+](1[O-]	N#Cc1c(NC(=O)c2ccc(S(=O)(=O)N3CCOCC3)cc2)[n+](([O-])c2cc(F)ccc2[n+](1[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)C1CN(c2ccc(-c3cccc(C#N)c3)nn2)CCN1C(=O)C=Cc1cc(F		FALSE	TRUE	TRUE
COCl(=O)C1=C2=C3C(=O)c4ccccc4S(=O)(=O)N3CC2C(C)C(CCC=C(C)C(=O)O)C1=O	COC(=O)C1=C2=C3C(=O)c4ccccc4S(=O)(=O)N3CC2C(C)C(CCC=C(C)C(=O)O)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(N1CCN(Cc2ccc3c(c2)OCO3)CC1)C(c1ccncc1)N1CCC2(CC1)OCc1ccccc12	O=C(N1CCN(Cc2ccc3c(c2)OCO3)CC1)C(c1ccncc1)N1CCC2(CC1)OCc1ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nnc2c3c(COC(C)c4ccccc4)c4ccccc4nc3n(C3CC3)c2c1C	Cc1nnc2c3c(COC(C)c4ccccc4)c4ccccc4nc3n(C3CC3)c2c1C	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCn1c(SCC(=O)N2CCCC2)nc2c1c(=O)n(C)c(=O)n2C	CCCCn1c(SCC(=O)N2CCCC2)nc2c1c(=O)n(C)c(=O)n2C	TRUE	TRUE	FALSE
NC(Cc1ccc(OCc2cccc(C(=O)NCc3ccccc3)c2)cc1)C(=O)O	NC(Cc1ccc(OCc2cccc(C(=O)NCc3ccccc3)c2)cc1)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(NC(=O)COc2cccc(Br)c2)cc(OC)c1	COc1cc(NC(=O)COc2cccc(Br)c2)cc(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(C2=C(c3ccccc(Nc4ccccc4)c3)COc3c(-c4ccccc4)ccnc32)cc1	c1ccc(C2=C(c3ccccc(Nc4ccccc4)c3)COc3c(-c4ccccc4)ccnc32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1cncc(OCc2cccc(NC(=O)c3ccccc(F)c3)c2)c1	NC(=O)c1cncc(OCc2cccc(NC(=O)c3ccccc(F)c3)c2)c1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C(=O)OC1=C(c2ccccc2)OC(=O)C1=Cc1ccccc1)N1CCOCC1	CC(C(=O)OC1=C(c2ccccc2)OC(=O)C1=Cc1ccccc1)N1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(-c2nc(-c3ccc(OC(F)(F)C(F)F)cc3)n3c2CCOC(C)C3)cc(C)n1	Cc1cc(-c2nc(-c3ccc(OC(F)(F)C(F)F)cc3)n3c2CCOC(C)C3)cc(C)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc(C2=NN(C(N)=S)CC2)c1F	COc1ccccc(C2=NN(C(N)=S)CC2)c1F	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(N(C)C)nc1C(=O)N1CCCC(OCc2ccc(F)cc2)(C(=O)O)C1	Cc1nc(N(C)C)nc1C(=O)N1CCCC(OCc2ccc(F)cc2)(C(=O)O)C1	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(C)C1CCC2(C(=O)OCc3cn(CCOCCOCCOCCO)nn3)CCC3(C)C(CCC4C5(C)CCC(O)C(C)(C)C5CCC43C)C12	C=C(C)C1CCC2(C(=O)OCc3cn(CCOCCOCCOCCO)nn3)CCC3(C)C(CCC4C5(C)CCC(O)C(C)(C)C5CCC43C)C12	TRUE	TRUE	TRUE
COCCOCc1cc(-c2ccccc(C)c2)on1	COCCOCc1cc(-c2ccccc(C)c2)on1	TRUE	TRUE	TRUE
Cl=Cc1cccn1)c1ccsc1	Cl=Cc1cccn1)c1ccsc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCC(O)(C#Cc2ccc3c(c2)-c2nc(C(N)=O)c(C(=O)c4ccccc4F)n2CCO3)C1=O	CN1CCC(O)(C#Cc2ccc3c(c2)-c2nc(C(N)=O)c(C(=O)c4ccccc4F)n2CCO3)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ccc(-c2ccc3c(-c4ccc(Sc5ccccc5)cc4)ccccc3n2)cc1	Nc1ccc(-c2ccc3c(-c4ccc(Sc5ccccc5)cc4)ccccc3n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cn1nncc(-c2ccc(C(F)(F)F)cn2)n1)NN=Cc1ccc2c(c1)OCO2	O=C(Cn1nncc(-c2ccc(C(F)(F)F)cn2)n1)NN=Cc1ccc2c(c1)OCO2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCCN1CCCC1)c1cnn(-c2nccc(-c3ccnc3)n2)c1C1CC1	O=C(NCCN1CCCC1)c1cnn(-c2nccc(-c3ccnc3)n2)c1C1CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ncc(-c2enn(C3CCN(C4CCCCO4)CC3)c2)c2scc(-c3ccsc3)c12	Nc1ncc(-c2enn(C3CCN(C4CCCCO4)CC3)c2)c2scc(-c3ccsc3)c12	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1nnnc1SCC1=C(C(=O)[O-])N2C(=O)C(=O)CO)C2SC1	Cn1nnnc1SCC1=C(C(=O)[O-])N2C(=O)C(=O)CO)C2SC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(F)c(NCc2cc(-c3ccc(Cl)cc3Cl)no2)c1	Cc1ccc(F)c(NCc2cc(-c3ccc(Cl)cc3Cl)no2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1CCN(C(=O)COCl(=O)c2[nH]c3c(c2C)C(=O)CC(c2ccccc2)C3)CC1	CCOC(=O)C1CCN(C(=O)COCl(=O)c2[nH]c3c(c2C)C(=O)CC(c2ccccc2)C3)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1cc(-c2ccccc2)ccc1C=Cc1ccc2cc(F)ccc2n1	O=C(O)c1cc(-c2ccccc2)ccc1C=Cc1ccc2cc(F)ccc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(Cc1cc(-c2ncccc2F)c2c(c1)C(O)(C(F)(F)F)c1ccccc1-2)C(=O)C1CCCCC1	CN(Cc1cc(-c2ncccc2F)c2c(c1)C(O)(C(F)(F)F)c1ccccc1-2)C(=O)C1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
c1cncc(-c2cnc3n2CCC32C3CCCC32)c1	c1cncc(-c2cnc3n2CCC32C3CCCC32)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc(OCCCN(C(=O)C(=O)O)c1C	Cc1ccccc(OCCCN(C(=O)C(=O)O)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
C=Cc1cc(OC)cc(C(=O)N(C2(c3ccccc3)CCN(C(=O)c3ccccc3F)CC2)C2CC2)c1	C=Cc1cc(OC)cc(C(=O)N(C2CC2)C2(c3ccccc3)CCN(C(=O)c3ccccc3F)CC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CCCC(C)C1CCC2C3CC=C4CC(OC(=O)Cn5c(-c6ccc(O)cc6)nnnc5CCl)CCC4(C)C3CCCC12C		FALSE	TRUE	TRUE
CC(=Nc1nc(O)cc(O)n1)c1cccc(NC(=O)CO)c1	CC(=Nc1nc(O)cc(O)n1)c1cccc(NC(=O)CO)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCc1coc2nc(N3CCNCC3)nc(N3CCOCC3)c12)NCc1cccs1	O=C(CCc1coc2nc(N3CCNCC3)nc(N3CCOCC3)c12)NCc1cccs1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(CCN1CCN(c2ccnc3cc(Cl)ccc23)CC1)S(=O)(=O)c1cccs1	CN(CCN1CCN(c2ccnc3cc(Cl)ccc23)CC1)S(=O)(=O)c1cccs1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1=C(C)NC(=O)NC1c1ccc(NC(C)=O)cc1	CCOC(=O)C1=C(C)NC(=O)NC1c1ccc(NC(C)=O)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1nc(NC(=O)c2cc(Br)c(=O)n3c2CCCC3)sc1C	Cc1nc(NC(=O)c2cc(Br)c(=O)n3c2CCCC3)sc1C	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1c(N)nc2c(c1C#N)-c1ccccc1SC2	N#Cc1c(N)nc2c(c1C#N)-c1ccccc1SC2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(OC(F)(F)F)cc1)c1nc(N2CCNCC2)c(-c2cncnc2)c1	O=C(Nc1ccc(OC(F)(F)F)cc1)c1nc(N2CCNCC2)c(-c2cncnc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1sc2c(NCC(N)Cc3ccccc3)nc(-c3cnccc3)nc2c1-c1ccsc1	Cc1sc2c(NCC(N)Cc3ccccc3)nc(-c3cnccc3)nc2c1-c1ccsc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CN1CCN(CCN(C)C)CC1CC(=O)c1ccc(F)cc1	CC(C)CN1CCN(CCN(C)C)CC1CC(=O)c1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)N1CCC(=C2c3ccc(Cl)cc3CCc3ccccc32)CC1	CCOC(=O)N1CCC(=C2c3ccc(Cl)cc3CCc3ccccc32)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1ccccc1OCCCOc1ccc(CN2CCCC2)cc1	O=c1ccccc1OCCCOc1ccc(CN2CCCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)C2CCC1(CS(=O)(=O)N1CCC3(C=Cc4ccccc43)CC1)C(O)(C#N)C2	CC1(C)C2CCC1(CS(=O)(=O)N1CCC3(C=Cc4ccccc43)CC1)C(O)(C#N)C2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C1OC(OCCCP(=O)(O)O)C(NS(=O)(=O)C(c2ccccc2)c2ccccc2)CC1O	O=C(O)C1OC(OCCCP(=O)(O)O)C(NS(=O)(=O)C(c2ccccc2)c2ccccc2)CC1O	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCC(NC(=O)C(Cc2ccc(Cl)cc2)NC(=O)C2CCCN3c(=O)cc(C)n32)CC1	Cc1cc(=O)n2n1C(C(=O)NC(Cc1ccc(Cl)cc1)C(=O)NC1CCN(C)CC1)CCC2	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1Nc1nc2c(s1)C(=O)c1ccccc1C2=O	COc1ccccc1Nc1nc2c(s1)C(=O)c1ccccc1C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)N(C)C(=O)CCN1C(=O)NC2(CCCCC2)C1=O	CC(C)N(C)C(=O)CCN1C(=O)NC2(CCCCC2)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc(C(=O)Nn2nc(C)c(C=NNC(=S)Nc3ccc(Cl)cc3)c2-c2ccc(Cl)cc2)c1	Cc1ccccc(C(=O)Nn2nc(C)c(C=NNC(=S)Nc3ccc(Cl)cc3)c2-c2ccc(Cl)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1c(C)[nH]c(C(=O)OCCOc2ccc(C)cc2)c1C	CCOC(=O)c1c(C)[nH]c(C(=O)OCCOc2ccc(C)cc2)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1ccc(O)cc1O)N(Cc1ccccc1)c1ccc(-n2ccccc2)cc1	O=C(c1ccc(O)cc1O)N(Cc1ccccc1)c1ccc(-n2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(cc1C)NC)OCO2	CNC(C)c1cc2c(cc1OC)OCO2	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1ccccc(C2CNCCc3cc(O)nc32)c1	Oc1ccccc(C2CNCCc3cc(O)nc32)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccnc(SCC(=O)Nc2ccccc(Cl)c2)n1	Cc1ccnc(SCC(=O)Nc2ccccc(Cl)c2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(N2CCc3ncc(NCc4ccc(C(F)(F)F)c(Cl)c4)c3C2)nc1	Cc1ccc(N2CCc3ncc(NCc4ccc(C(F)(F)F)c(Cl)c4)c3C2)nc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1nc(NC(=O)CC(C)NCC(C)(O)c2ccccc2)c(Cl)c(C)c1Cl	COc1nc(NC(=O)CC(C)NCC(C)(O)c2ccccc2)c(Cl)c(C)c1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(S(=O)(=O)N(C)C)c2ccc(OC(C(=O)NCC3CCCC3)cc2)cc1	CCOc1ccc(S(=O)(=O)N(C)C)c2ccc(OC(C(=O)NCC3CCCC3)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC12C=CC(=O)NC1CCCC1C2CCC2(C)C(C(=O)C(=O)O)CCC12	CC12C=CC(=O)NC1CCCC1C2CCC2(C)C(C(=O)C(=O)O)CCC12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1csc2nc(C(C)NC(=O)C=Cc3ccccc3)oc(=O)c12	CC(C)c1csc2nc(C(C)NC(=O)C=Cc3ccccc3)oc(=O)c12	TRUE	TRUE	TRUE
COC1C(=Cc2ccc(OCFF)c(Cl)c2)Oc2c(ccc([N+](=O)[O-])c2OCCCCO)C1=O	COC1C(=O)c2ccc([N+](=O)[O-])c(OCFFO)c2OC1=Cc1ccc(OCFF)c(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nn(CCC(=O)NCC(c2ccc3c(c2)OCO3)N2CCCC2)c(C)c1Cl	Cc1nn(CCC(=O)NCC(c2ccc3c(c2)OCO3)N2CCCC2)c(C)c1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC(=O)c1ccccc1)Nc1ccc(NS(=O)(=O)c2ccc(Cl)cc2)cc1	O=C(NC(=O)c1ccccc1)Nc1ccc(NS(=O)(=O)c2ccc(Cl)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nc(C2CCCN2C(=O)c2cnc(C)c(F)c2)no1	CCc1nc(C2CCCN2C(=O)c2cnc(C)c(F)c2)no1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C)(O)CCC1=C(O)C(=O)c2c(O)cccc2C1=O	CCC(C)(O)CCC1=C(O)C(=O)c2c(O)cccc2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C(=O)N(Cc2ccco2)c2c(N)n(Cc3ccccc3)c(=O)[nH]c2=O)c(C)n1CC1CCCO1	Cc1cc(C(=O)N(Cc2ccco2)c2c(N)n(Cc3ccccc3)c(=O)[nH]c2=O)c(C)n1CC1CCCO1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C1CCCN(S(=O)(=O)c2ccc(Cl)s2)C1)N1CCCN(C2CCC2)CC1	O=C(C1CCCN(S(=O)(=O)c2ccc(Cl)s2)C1)N1CCCN(C2CCC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOCC(=O)Nc1nncc(Cc2ccc3c(c2)OCO3)s1	CCOCC(=O)Nc1nncc(Cc2ccc3c(c2)OCO3)s1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>CSCc1nc2cc(NC(C(N)=O)c3ccccc3)ccc2[nH]1</chem>	<chem>CSCc1nc2cc(NC(C(N)=O)c3ccccc3)ccc2[nH]1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nc2cc(Cl)ccn2c1-c1ccc(C(=O)NC2CC2)s1</chem>	<chem>Cc1nc2cc(Cl)ccn2c1-c1ccc(C(=O)NC2CC2)s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)C1=C(C)NC(n2cnc3ccccc32)=C(C#N)C1c1ccccc1</chem>	<chem>CCOC(=O)C1=C(C)NC(n2cnc3ccccc32)=C(C#N)C1c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(C(C)C)c(OCC(=O)NNC(=O)c2nn(C)c(=O)c3ccccc23)c1</chem>	<chem>Cc1ccc(C(C)C)c(OCC(=O)NNC(=O)c2nn(C)c(=O)c3ccccc23)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC(C)N(C)(C)C(=O)N1CCC(C)(N2CCc3c(-c4cnc(=N)[nH]c4)nc(N4CCOCC4)nc32)C1</chem>	<chem>CCC(C)N(C)(C)C(=O)N1CCC(C)(N2CCc3c(-c4cnc(=N)[nH]c4)nc(N4CCOCC4)nc32)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1cnc2ccc(-c3cccc(OCC(=O)NC(C(=O)O)C(C)(C)C)c3)nc21</chem>	<chem>Cn1cnc2ccc(-c3cccc(OCC(=O)NC(C(=O)O)C(C)(C)C)c3)nc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(-c2cc3c(OC)cc(OC)cc3nc2O)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(-c2cc3c(OC)cc(OC)cc3nc2O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>COc1cccc(CC(=O)Nc2ccc(S(=O))(=O)Nc3nccs3)cc2)c1</chem>	<chem>COc1cccc(CC(=O)Nc2ccc(S(=O))(=O)Nc3nccs3)cc2)c1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>COc1nccc2c1nnn2-c1ccc(Cl)cc1</chem>	<chem>COc1nccc2c1nnn2-c1ccc(Cl)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1cc(-c2ccc3ncc4c(c3c2)n(C2CCN(C(=O)NC3CCCC3)C2)c(=O)n4C)cn1</chem>	<chem>Cn1cc(-c2ccc3ncc4c(c3c2)n(C2CCN(C(=O)NC3CCCC3)C2)c(=O)n4C)cn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NC1CCCCC1)Oc1ccc(Cl)cc1C(=O)Nc1ccc(Cl)cc1</chem>	<chem>O=C(NC1CCCCC1)Oc1ccc(Cl)cc1C(=O)Nc1ccc(Cl)cc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>COc1cc(CN(c2cccn2)S(=O))(=O)c2cccc(Br)c2)cc(OC)c1</chem>	<chem>COc1cc(CN(c2cccn2)S(=O))(=O)c2cccc(Br)c2)cc(OC)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(S(=O))(=O)N(CC(C)C)C(Cc2ccc(OC(=O)CC(C)C)cc2)C(=O)O)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(S(=O))(=O)N(CC(C)C)C(Cc2ccc(OC(=O)CC(C)C)cc2)C(=O)O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(OC1CCCCC1)c1csc(-c2ccc(Cl)cc2)n1</chem>	<chem>O=C(OC1CCCCC1)c1csc(-c2ccc(Cl)cc2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C(=O)c1cccc(NC(=O)Cc2cccc(NC(=O)C3CCCN(C(=O)C4CC4)C3)c2)c1)C1CCCC1</chem>	<chem>CN(C(=O)c1cccc(NC(=O)Cc2cccc(NC(=O)C3CCCN(C(=O)C4CC4)C3)c2)c1)C1CCCC1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>O=C(c1cnn(-c2cccc2)c1)N1CN(C2CC(C)O)(c3cn[nH]c3)CC2)C(=O)C12CCN(c1ncccc1C(F)(F)F)CC2</chem>	<chem>O=C(c1cnn(-c2cccc2)c1)N1CN(C2CC(C)O)(c3cn[nH]c3)CC2)C(=O)C12CCN(c1ncccc1C(F)(F)F)CC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)CCCC1(c2ccc(F)c(O)c2F)CCCCC1</chem>	<chem>CN(C)CCCC1(c2ccc(F)c(O)c2F)CCCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nc(NCc2scc(S(N)(=O)=O)c2Cl)nc(SCc2ccccc2)n1</chem>	<chem>Cc1nc(NCc2scc(S(N)(=O)=O)c2Cl)nc(SCc2ccccc2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOc1cccc2sc(N=Cc3cccn3)nc12</chem>	<chem>CCOc1cccc2sc(N=Cc3cccn3)nc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CO(C=O)CC1CCc2cc(F)ccc21</chem>	<chem>CO(C=O)CC1CCc2cc(F)ccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1CC2(CCCCC2)CC(=O)N1N(CCN1CCOCC1)Cc1ccc([N+](=O)[O-])cc1</chem>	<chem>O=C1CC2(CCCCC2)CC(=O)N1N(CCN1CCOCC1)Cc1ccc([N+](=O)[O-])cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(S(=O))(=O)N2CCc3ccccc32)ccc1NC(C)=O</chem>	<chem>COc1cc(S(=O))(=O)N2CCc3ccccc32)ccc1NC(C)=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cccc2c1ccc(=O)n2CC(=O)NCC(=O)N(C)CC(=O)O</chem>	<chem>Cc1cccc2c1ccc(=O)n2CC(=O)NCC(=O)N(C)CC(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NNC1=NS(=O)(=O)c2ccccc21</chem>	<chem>NNC1=NS(=O)(=O)c2ccccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN=C(O)C(N=C(O)c1cnc(C2CC2)c(OCC2CC2)n1)C(C)(C)C</chem>	<chem>CN=C(O)C(N=C(O)c1cnc(C2CC2)c(OCC2CC2)n1)C(C)(C)C</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CN(S(=O))(=O)c1cccc(C(=O)Nc2ccc(F)cc2)c1)c1cncnc1</chem>	<chem>CN(c1cncnc1)S(=O)(=O)c1cccc(C(=O)Nc2ccc(F)cc2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NO)C12CC3CC(C(C3)C1)C2</chem>	<chem>O=C(NO)C12CC3CC(C(C3)C1)C2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCOc1ccc2ccc(Cc3cnc(N)nc3N)cc2c1</chem>	<chem>CCCOc1ccc2ccc(Cc3cnc(N)nc3N)cc2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCCc1ccc(Oc2ccc(C(=O)NCC(N)=O)cc2)c(OC)c1</chem>	<chem>COCCc1ccc(Oc2ccc(C(=O)NCC(N)=O)cc2)c(OC)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCNC(=O)Nc1ccc(-c2ccc(C(C)=O)cc2)cc1</chem>	<chem>CCNC(=O)Nc1ccc(-c2ccc(C(C)=O)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC(COCCc1cc(C(F)(F)F)ccc(C(F)(F)F)c1)(Oc1ccc(C(C)C)cc1)C(=O)O</chem>	<chem>CCC(COCCc1cc(C(F)(F)F)ccc(C(F)(F)F)c1)(Oc1ccc(C(C)C)cc1)C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC(=O)n1cc(N=C(O)N2CC(N)CC2C(O)=NCc2cccc(Cl)c2F)c2ccccc21</chem>	<chem>NC(=O)n1cc(N=C(O)N2CC(N)CC2C(O)=NCc2cccc(Cl)c2F)c2ccccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(C)CCn1c(=O)c2ccc(NC(=O)CN2CCCCC2)c2c(O)cc(C)nc21</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)c1sc(NC(=O)c2cc3c(s2)CCC3)c(C(=O)OCC)c1C</chem>	<chem>CCOC(=O)c1sc(NC(=O)c2cc3c(s2)CCC3)c(C(=O)OCC)c1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1cc(C(O)=NC2CC2)nn1-c1ccccc1)C1CN=C(O)C1</chem>	<chem>O=C(Nc1cc(C(O)=NC2CC2)nn1-c1ccccc1)C1CN=C(O)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1cc(C(F)(F)F)ccc1N1CCCC1)c1ccc2c(c1)ncn2-c1cccn1</chem>	<chem>O=C(Nc1cc(C(F)(F)F)ccc1N1CCCC1)c1ccc2c(c1)ncn2-c1cccn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1[nH]c2c(c1=O)CCC2Br</chem>	<chem>Cn1[nH]c2c(c1=O)CCC2Br</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(NC(=O)CCC1CCCCN1C(=O)CCc1cccc1)C(=O)NC(Cc1cccc1)C(=O)O</chem>	<chem>CC(NC(=O)CCC1CCCCN1C(=O)CCc1cccc1)C(=O)NC(Cc1cccc1)C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C#Cc2ccc3cc(CCN)ccc3n2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(C#Cc2ccc3cc(CCN)ccc3n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(CSc1nnc(-c2ccc(-n3cncn3)cc2)s1)N1CCN(S(=O))(=O)c2ccccc2F)CC1</chem>	<chem>O=C(CSc1nnc(-c2ccc(-n3cncn3)cc2)s1)N1CCN(S(=O))(=O)c2ccccc2F)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc2[nH]c(C(=O)N3CCC4(CC3)Cc3cnn(C(C)C)c3C(=O)N4)cc2c1</chem>	<chem>COc1ccc2[nH]c(C(=O)N3CCC4(CC3)Cc3cnn(C(C)C)c3C(=O)N4)cc2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc([N+](=O)[O-])ccc1NC(=O)CSc1nnc(-c2cncnc2)n1C</chem>	<chem>COc1cc([N+](=O)[O-])ccc1NC(=O)CSc1nnc(-c2cncnc2)n1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>S=c1sc2nc3c(=S)[nH]c(-c4ccccc4)cn3c(-c3ccc(Br)cc3)c2n1CC1CCCO1</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)N1CCC(CC#N)(n2cc(C(=N)O)c(=Nc3ccccc3)[nH]2)CC1</chem>	<chem>CCOC(=O)N1CCC(CC#N)(n2cc(C(=N)O)c(=Nc3ccccc3)[nH]2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(C=C(C(=O)NCC(=O)O)cc(S(=O))(=O)Nc2ccc3c(c2)OCO3)c1OC</chem>	<chem>COc1cc(C=C(C(=O)NCC(=O)O)cc(S(=O))(=O)Nc2ccc3c(c2)OCO3)c1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNC(=O)c1cc2sc(C3CCc4ccccc4N3C)cc2cn1</chem>	<chem>CNC(=O)c1cc2sc(C3CCc4ccccc4N3C)cc2cn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN1CCN(c2ccc(NC(=NC(=O)c3ccccc3)NC3CCN(Cc4ccccc4)CC3)cc2)CC1</chem>	<chem>CN1CCN(c2ccc(NC(=NC(=O)c3ccccc3)NC3CCN(Cc4ccccc4)CC3)cc2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nc2cccc(C(=O)O)c2n1Cc1ccc(-c2ccccc2-c2nn[nH]n2)cc1</chem>	<chem>Cc1nc2cccc(C(=O)O)c2n1Cc1ccc(-c2ccccc2-c2nn[nH]n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)c1n[nH]c2cc(NC(O)=NC(C)c3ccc(S(C(=O)=O)cc3)ncc12</chem>	<chem>CC(C)c1n[nH]c2cc(NC(O)=NC(C)c3ccc(S(C(=O)=O)cc3)ncc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(C(C(=O)Nc2ccco2)N(C(=O)c2snc(C(N)=O)c2N)c2ccccc2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(C(C(=O)Nc2ccco2)N(C(=O)c2snc(C(N)=O)c2N)c2ccccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cnc(N2CCCN(Cc3nc(C(=O)Nc4ccc(F)cc4Cl)co3)CC2)n1</chem>	<chem>Cc1cnc(N2CCCN(Cc3nc(C(=O)Nc4ccc(F)cc4Cl)co3)CC2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCCOCCOC(=O)C1=C(SC2CNC(C(=O)Nc3cccn3)C2)C(C)C2C(C(C)O)C(=O)N12</chem>	<chem>COCCOCCOC(=O)C1=C(SC2CNC(C(=O)Nc3cccn3)C2)C(C)C2C(C(C)O)C(=O)N12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=CCNC(=CC)c1ccc([N+](=O)[O-])s1</chem>	<chem>C=CCNC(=CC)c1ccc([N+](=O)[O-])s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)c1ccccc1NS(=O)(=O)c1ccc(-c2nc(CC(=O)O)c[nH]2)cc1</chem>	<chem>CCOC(=O)c1ccccc1NS(=O)(=O)c1ccc(-c2nc(CC(=O)O)c[nH]2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC1=NC(CCOc2ccc(Cl)c(Cl)c2)CO1</chem>	<chem>NC1=NC(CCOc2ccc(Cl)c(Cl)c2)CO1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>C1CCCCN1S(=O))(=O)c1ccc(NC(=O)c2cc(N3C(=O)C4CCCC4C3=O)c(Cl)cc2Cl)cc1</chem>	<chem>C1CCCCN1S(=O))(=O)c1ccc(NC(=O)c2cc(N3C(=O)C4CCCC4C3=O)c(Cl)cc2Cl)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)c1ccc(OCC(C(=O)Nc2ccc(C(=O)Nc3nc4ccccc4[nH]3)cc2)cc1</chem>	<chem>CC(C)(C)c1ccc(OCC(C(=O)Nc2ccc(C(=O)Nc3nc4ccccc4[nH]3)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOP(=O)(O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)C(CC(C)C)NC(=O)C(CC(C)C)NC(=O)OC(C)(C)C</chem>	<chem>CCOP(=O)(O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)C(CC(C)C)NC(=O)C(CC(C)C)NC(=O)OC(C)(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(C)C=Cc2c(ccc3oc4cc(O)c(CC=C5ccc(O)c(O)c5)c(O)c4c23)O1</chem>	<chem>CC1(C)C=Cc2c(ccc3oc4cc(O)c(CC=C5ccc(O)c(O)c5)c(O)c4c23)O1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#CC12CNC(Cc(c3ccccc3)(C1)c1ccccc1)N2</chem>	<chem>N#CC12CNC(Cc(c3ccccc3)(c3ccccc3)C1)N2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NC(=S)Nc1ccccc1N1CCOCC1)c1ccccc1Cl</chem>	<chem>O=C(NC(=S)Nc1ccccc1N1CCOCC1)c1ccccc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)CCN1C(=O)C(C)NC(=O)C1Cc1ccc(O)cc1</chem>	<chem>CCOC(=O)CCN1C(=O)C(C)NC(=O)C1Cc1ccc(O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(S(=O))(=O)N2CCCCC2)cc1NC(=O)CCC(=O)Nc1sc2c(c1C(=O)c1ccccc1)CC(C)OC2</chem>	<chem>Cc1ccc(S(=O))(=O)N2CCCCC2)cc1NC(=O)CCC(=O)Nc1sc2c(c1C(=O)c1ccccc1)CC(C)OC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1nc(N)c2c(n1)CCN(S(=O))(=O)c1ccccc1)C2</chem>	<chem>Nc1nc(N)c2c(n1)CCN(S(=O))(=O)c1ccccc1)C2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NS(=O))(=O)c1ccc(F)cc1F)C1CCC(Cn2c(SCc3ccccc3)nc3ccnc32)CC1</chem>	<chem>O=C(NS(=O))(=O)c1ccc(F)cc1F)C1CCC(Cn2c(SCc3ccccc3)nc3ccnc32)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Sc1nnc(COc2ccccc2)n1N=Cc1ccccc1</chem>	<chem>Sc1nnc(COc2ccccc2)n1N=Cc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CO(C=O)CN(C(=O)CN1CCC(c2ccccc2)CC1)C(C(=O)NC1CCCCC1)c1ccc(F)cc1</chem>	<chem>CO(C=O)CN(C(=O)CN1CCC(c2ccccc2)CC1)C(C(=O)NC1CCCCC1)c1ccc(F)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(Sc1nnc(-c2ccnc2)n1Cc1ccccc1)C(=O)Nc1ccccc1</chem>	<chem>CC(Sc1nnc(-c2ccnc2)n1Cc1ccccc1)C(=O)Nc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(C)cc(CNC(=O)CN2C(=O)COc3ccc(S(=O))(=O)N4CCOCC4)cc32)c1</chem>	<chem>Cc1cc(C)cc(CNC(=O)CN2C(=O)COc3ccc(S(=O))(=O)N4CCOCC4)cc32)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCCCCNCN(=O)CN1CCC(CN2CC(CCC3CCCCC3)N(C3CCCCC3)C(=O)C2=O)CC1</chem>	<chem>CCCCCCCCCCNCN(=O)CN1CCC(CN2CC(CCC3CCCCC3)N(C3CCCCC3)C(=O)C2=O)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1cc(C2CCCN2c2cc(=O)n(C)c(=O)n2C)cn1</chem>	<chem>Cn1cc(C2CCCN2c2cc(=O)n(C)c(=O)n2C)cn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(NCc1ccccc1OCc1ccccc1)C(=O)NO</chem>	<chem>CC(NCc1ccccc1OCc1ccccc1)C(=O)NO</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)NCC(Oc1ccc(C(F)(F)F)cc1)C(=O)O</chem>	<chem>CC(=O)NCC(Oc1ccc(C(F)(F)F)cc1)C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CSc1cccc(NC(S)=NNS(=O))(=O)c2ccc(F)cc2)c1</chem>	<chem>CSc1cccc(NC(S)=NNS(=O))(=O)c2ccc(F)cc2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CC2C(CC(N)=O)CCC2C2CCC3(C)C(O)CCC3C12</chem>	<chem>CC1CC2C(CC(N)=O)CCC2C2CCC3(C)C(O)CCC3C12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ncc2c(n1)CN(CC1CC1)CC2COCc1CC1</chem>	<chem>Cc1ncc2c(n1)CN(CC1CC1)CC2COCc1CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN1CCC(C(=O)N(c2ccc(Oc3ccccc3)cc2)c2cnc3c(cnn3CC3CCCCC3)c2)CC1C</chem>	<chem>Cc1CC(C(=O)N(c2ccc(Oc3ccccc3)cc2)c2cnc3c(cnn3CC3CCCCC3)c2)CCN1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(OC)cc(N(CCCN(C)C)c2ccc3ncc(-c4cnn(C(C)C)c4)nc3c2)c1</chem>	<chem>COc1cc(OC)cc(N(CCCN(C)C)c2ccc3ncc(-c4cnn(C(C)C)c4)nc3c2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(S(=O))(=O)Nc2ccc(C(=O)NC3CCOCC3)cc2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(S(=O))(=O)Nc2ccc(C(=O)NC3CCOCC3)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nc(C(F)(F)F)c(C(=O)N=c2c[nH]c3ccc(-c4cccc(CN5CCCCC5CN(C)C)c4)cc23)s1</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>CCS(=O))(=O)Nc1ccc(Oc2cncn2)cc1F</chem>	<chem>CCS(=O))(=O)Nc1ccc(Oc2cncn2)cc1F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccccc1-n1cnc(C)c1C=NO</chem>	<chem>COc1ccccc1-n1cnc(C)c1C=NO</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(O)CCNc1c([N+](=O)[O-])cc2cc(C(=O)c3cccs3)c(=O)oc2c1Cl</chem>	<chem>CC(O)CCNc1c([N+](=O)[O-])cc2cc(C(=O)c3cccs3)c(=O)oc2c1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
O=C(O)c1cccc2nc(C3CCC3)c(Cc3ccccc3F)n2c1	O=C(O)c1ccc2nc(C3CCC3)c(Cc3ccccc3F)n2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1Cc2cc(Oc3cc(-c4n[nH]c(=S)[nH]4)ccc3F)ccc2CN1C(=O)c1ccnc1	CC1Cc2cc(Oc3cc(-c4n[nH]c(=S)[nH]4)ccc3F)ccc2CN1C(=O)c1ccnc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(NC(=O)CC2C(=O)N(c3ccc(C)c(C)c3)C(=O)N2Cc2ccnc2)cc1	CCOc1ccc(NC(=O)CC2C(=O)N(c3ccc(C)c(C)c3)C(=O)N2Cc2ccnc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC(=O)Nc1nc2cc(S(=O)(=O)N(C)C)ccc2n1C	CCCCC(=O)Nc1nc2cc(S(=O)(=O)N(C)C)ccc2n1C	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1nc(-c2c(O)cc(OC)cc2-c2ccc(SC)cc2)oc1C	CCOC(=O)c1nc(-c2c(O)cc(OC)cc2-c2ccc(SC)cc2)oc1C	TRUE	TRUE	TRUE
CCS(=O)(=O)c1ccc(-c2cnc3nn2CCN3C(C)c2ccccc2)cc1Cl		FALSE	TRUE	TRUE
O=C(O)CC(NC(=O)COC1cccc1)c1cccc(C#Cc2ccc(Cl)cc2)c1	O=C(O)CC(NC(=O)COC1cccc1)c1cccc(C#Cc2ccc(Cl)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)Cc1ccc(C(C)C(=O)Nc2ccc(F)cc2)cc1	CC(C)Cc1ccc(C(C)C(=O)Nc2ccc(F)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)Cc1cc(C(=O)N2CC(CCl)c3c2cc(O)c2[nH]ccc32)ccc1O	CN(C)Cc1cc(C(=O)N2CC(CCl)c3c2cc(O)c2[nH]ccc32)ccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)N(C(=O)C1CCC2C3CCC4NC(=O)C=CC4(C)C3CCC12C)C(C)C	CC(C)N(C(=O)C1CCC2C3CCC4NC(=O)C=CC4(C)C3CCC12C)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=CC(=O)NCCCCCNc2c3c(nc4ccccc24)CCCC3)cc(Cl)c1O	COc1cc(C=CC(=O)NCCCCCNc2c3c(nc4ccccc24)CCCC3)cc(Cl)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NCCC1CCCCN1c1ccc(C(=O)NC2CCCC2)cn1	CC(=O)NCCC1CCCCN1c1ccc(C(=O)NC2CCCC2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)N1CCN(C(=O)c2c(NC(=O)C3CC3)sc3c2CCCC3)CC1	CCOC(=O)N1CCN(C(=O)c2c(NC(=O)C3CC3)sc3c2CCCC3)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)=CCCC(C)=CCCC(C)=CCCC(C)=CCCC(=Cc2cc(OCC=C(C)CCC=C(C)C)cc(O)c2C(=O)O1	CC(C)=CCCC(C)=CCCC(C)=CCCC(C)=CCCC(=Cc2cc(OCC=C(C)CCC=C(C)C)cc(O)c2c(=O)o1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cccc1)Nc1ccc(N=Cc2cccs2)cc1	O=C(Nc1cccc1)Nc1ccc(N=Cc2cccs2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(NCCN)cc(O)c2ncccc12	Cc1c(NCCN)cc(O)c2ncccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCNC(=S)NN=C(C)C	CCNC(=S)NN=C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1cn(C2CC2)c2cc(N3CCN(Cc4cn(Cc5c(F)cccc5Cl)nn4)CC3)c(F)cc2c1=O	O=C(O)c1cn(C2CC2)c2cc(N3CCN(Cc4cn(Cc5c(F)cccc5Cl)nn4)CC3)c(F)cc2c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(C(=O)NCC2CCCO2)c1OCCc1ccc(F)cc1	COc1cccc(C(=O)NCC2CCCO2)c1OCCc1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(NC(=S)N(CCN(C)CC)C(=O)c2enn3ccnc23)cc1	CCOc1ccc(NC(=S)N(CCN(C)CC)C(=O)c2enn3ccnc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1cc2nc(N)cc(NCc3ccccc3)c2cc1NC(=O)C1CC1	Nc1cc(NCc2ccccc2)c2cc(NC(=O)C3CC3)c(N)cc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(=O)N1CCCN(c2ccccc2C(=O)Nc2ccccc2F)CC1	CCC(=O)N1CCCN(c2ccccc2C(=O)Nc2ccccc2F)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CC(NC(=O)C(=Cc1ccc2c(c1)OCO2)NC(=O)c1ccc(Br)c(Cl)c1)C(=O)NC1CCCc2ccccc21	O=C(O)CC(NC(=O)C(=Cc1ccc2c(c1)OCO2)NC(=O)c1ccc(Br)c(Cl)c1)C(=O)NC1CCCc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc2cc(-n3ncc(C(=O)c4cc5ccccc5[nH]4)c3N)ccc2[nH]1	Cc1nc2cc(-n3ncc(C(=O)c4cc5ccccc5[nH]4)c3N)ccc2[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCN1CCN(CC2CC2)C2CS(=O)(=O)CC21	CN(C)CCN1CCN(CC2CC2)C2CS(=O)(=O)CC21	TRUE	TRUE	TRUE
C=CC1CN2CCC1CC2C(OC(=O)c1cccs1)c1ccnc2ccccc12	C=CC1CN2CCC1CC2C(OC(=O)c1cccs1)c1ccnc2ccccc12	TRUE	TRUE	FALSE
CC(Sc1nc(N)c(C#N)c(-c2ccco2)n1)C(=O)NC1CCCCC1	CC(Sc1nc(N)c(C#N)c(-c2ccco2)n1)C(=O)NC1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCC(=O)N(CCO)CCO)c1cc2cc(Cl)ccc2[nH]1	O=C(NCC(=O)N(CCO)CCO)c1cc2cc(Cl)ccc2[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc1C(=O)NNC(=S)NC(=O)C12CC3CC(C(C)3)C1)C2	COc1cccc1C(=O)NNC(=S)NC(=O)C12CC3CC(C(C)3)C1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)CC(=O)c2cc(-c3cnnc3)n(Cc3ccccc3F)c2C1	CC1(C)CC(=O)c2cc(-c3cnnc3)n(Cc3ccccc3F)c2C1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)C1CN(Cc2cccc(CCl(=O)NCc3ccccc(NC(=O)c4cccc(N5CCNCC5)c4)c3)c2)CCN1	NC(=O)C1CN(Cc2cccc(CCl(=O)NCc3ccccc(NC(=O)c4cccc(N5CCNCC5)c4)c3)c2)CCN1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(F)cc1C(=CCCN1CCCC(C(=O)O)C1)c1cccc1F	Cc1ccc(F)cc1C(=CCCN1CCCC(C(=O)O)C1)c1cccc1F	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCC(O)C(c1cccc1)c1cccc1)C(c1cccc1)c1cccc1	O=C(NCC(O)C(c1cccc1)c1cccc1)C(c1cccc1)c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(c1nc2ccccc2[nH]1)n1cc(-c2ccccc2)nn1	CC(c1nc2ccccc2[nH]1)n1cc(-c2ccccc2)nn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NCC1CN(C(=O)c2ccc(NS(C(=O)=O)c(F)c2)CC1CO	CC(=O)NCC1CN(C(=O)c2ccc(NS(C(=O)=O)c(F)c2)CC1CO	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1cc(-c2noc(-c3cc(C)cc(C)c3)n2)cc(C)c1OCC(O)CNC(=O)CO	CCc1cc(-c2noc(-c3cc(C)cc(C)c3)n2)cc(C)c1OCC(O)CNC(=O)CO	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(CCC(=O)O)CC(c2ccc(C(F)(F)F)cc2)C(c2ccc(C(F)(F)F)cc2F)N(C(CN)c2ccccc2F)C1=O	CC1(CCC(=O)O)CC(c2ccc(C(F)(F)F)cc2)C(c2ccc(C(F)(F)F)cc2F)N(C(CN)c2ccccc2F)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(=O)N1CCc2c(c(-c3ccc(F)cc3)nn2CC(O)CN2CCCCC2)C1	CC(C)CC(=O)N1CCc2c(c(-c3ccc(F)cc3)nn2CC(O)CN2CCCCC2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)OCCCC1OC(n2ccc(=O)[nH]c2=O)C(OC(C)=O)C1OC(C)=O	CC(=O)OCCCC1OC(n2ccc(=O)[nH]c2=O)C(OC(C)=O)C1OC(C)=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2cc3[n+][cc2c1OCCCCOc1c(OC)cccc1OC]CCc1cc2c(cc1-3)OCO2	COc1cccc(OC)c1OCCCCOc1c(OC)ccc2cc3[n+][cc12]CCc1cc2c(cc1-3)OCO2	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc1CNC(=O)c1ccc2c(c1)NC(=O)c1cccc1S2	COc1cccc1CNC(=O)c1ccc2c(c1)NC(=O)c1cccc1S2	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(CNC(=O)C(C)C2CC3C(=O)OC(4CCCC4)OC3(C)OC2=O)c1		FALSE	TRUE	TRUE
O=C(NCC1(c2ccccc2)CCC(N2CCN(C(=O)OC3CCOC3)CC2)C1)c1cc2ccccc2o1	O=C(NCC1(c2ccccc2)CCC(N2CCN(C(=O)OC3CCOC3)CC2)C1)c1cc2ccccc2o1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nnc(NS(=O)(=O)c2ccc(NC(=O)Nc3ccc(Cl)cc3Cl)cc2)s1	Cc1nnc(NS(=O)(=O)c2ccc(NC(=O)Nc3ccc(Cl)cc3Cl)cc2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NS(=O)(=O)c2ccc(Cl)cc2)cc1NS(=O)(=O)c1ccc(Cl)s1	COc1ccc(NS(=O)(=O)c2ccc(Cl)cc2)cc1NS(=O)(=O)c1ccc(Cl)s1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cc(Cl)cc2c1[nH]c1cnccc12)c1ccc2cc[nH]c2c1	O=C(Nc1cc(Cl)cc2c1[nH]c1cnccc12)c1ccc2cc[nH]c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCS(=O)(=O)CCN(C(=O)Cc1ccc(F)c(C(F)(F)F)c1)C(C)c1nc2ccc(C)c2c(=O)n1-c1cccc(C)c1	CCS(=O)(=O)CCN(C(=O)Cc1ccc(F)c(C(F)(F)F)c1)C(C)c1nc2ccc(C)c2c(=O)n1-c1cccc(C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CN2c3c(cc4c(C#Cc5cnn(Cc6cnnc6)c5)noc4c3F)CC3(C(O)=NC(=O)N=C3O)C2(C)C)O1	CC1CN2c3c(cc4c(C#Cc5cnn(Cc6cnnc6)c5)noc4c3F)CC3(C(O)=NC(=O)N=C3O)C2(C)C)O1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1cc(C=C2CN(C(=O)C(=O)c3ccccc3)CC=Cc3ccc(O)cc3)C2=O)cc(C(C)(C)C)c1O	CC(C)(C)c1cc(C=C2CN(C(=O)C(=O)c3ccccc3)CC=Cc3ccc(O)cc3)C2=O)cc(C(C)(C)C)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCOc1c(Br)cc(CN2CCC3(CC2)C(=O)N(Cc2c[nH]cn2)CN3c2ccccc2)cc1OC	CCCCOc1c(Br)cc(CN2CCC3(CC2)C(=O)N(Cc2c[nH]cn2)CN3c2ccccc2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C=CC(=O)NN=Cc2cc([N+](=O)[O-])ccc2Cl)cc1OC	COc1ccc(C=CC(=O)NN=Cc2cc([N+](=O)[O-])ccc2Cl)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
COCCOCOc1nc(N)c2nc(N3CCN(C)CC3)n(Cc3cccc4ccccc34)c2n1	COCCOCOc1nc(N)c2nc(N3CCN(C)CC3)n(Cc3cccc4ccccc34)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)Nc1ncnc2cc(NCc3ccccc(Br)c3)ccc12	CC(C)Nc1ncnc2cc(NCc3ccccc(Br)c3)ccc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc2c(s1)C(=O)C=C(Nc1cccc(Cl)c1)C2=O	Cc1nc2c(s1)C(=O)C=C(Nc1cccc(Cl)c1)C2=O	TRUE	TRUE	FALSE
CC(NC(=O)C1CCCN1C(=O)C(N)Cc1ccc(O)cc1)C(=O)NC(=O)c1cccc1	CC(NC(=O)C1CCCN1C(=O)C(N)Cc1ccc(O)cc1)C(=O)NC(=O)c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1)CCCNc2	COc1ccc2c(c1)CCCNc2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)NS(=O)(=O)c1ccc2c(c1)C(c1noc(-c3ccnc3)n1)C(=O)N2C	CC(C)NS(=O)(=O)c1ccc2c(c1)C(c1noc(-c3ccnc3)n1)C(=O)N2C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1ccn(C2OC(CO)C(O)C2(O)F)c(=O)n1	CC(=O)Nc1ccn(C2OC(CO)C(O)C2(O)F)c(=O)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1cccc1NC(=O)Nc1cccc(-c2cccc(N3CCN(C)CC3)n2)c1	CCOc1cccc1NC(=O)Nc1cccc(-c2cccc(N3CCN(C)CC3)n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C(=O)OCC1(CO)CC(=Cc2cccc(C(F)(F)F)c2)C(=O)O1)c1cccc1	CCC(C(=O)OCC1(CO)CC(=Cc2cccc(C(F)(F)F)c2)C(=O)O1)c1cccc1	TRUE	TRUE	FALSE
COc1cccc(NC(=S)N2CCN(c3noc4ccccc34)CC2)c1	COc1cccc(NC(=S)N2CCN(c3noc4ccccc34)CC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(CNc2nc3ccc([N+](=O)[O-])cc3nc2Nc2ccccc2)c1	COc1cccc(CNc2nc3ccc([N+](=O)[O-])cc3nc2Nc2ccccc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)C12CC1C(n1cnc3c(NCc4cccc(Cl)c4)nc(C#CCCCCCCC(=O)O)nc31)C(O)C2O	CNC(=O)C12CC1C(n1cnc3c(NCc4cccc(Cl)c4)nc(C#CCCCCCCC(=O)O)nc31)C(O)C2O	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CC=CC(O)=Nc1cc(-c3ccc(-n4ccnc4)c3)ccc2n1		FALSE	TRUE	TRUE
CCc1ccc(C2c3c(-c4ccccc4O)n[nH]c3C(=O)N2Cc2cnc2)cc1	CCc1ccc(C2c3c(-c4ccccc4O)n[nH]c3C(=O)N2Cc2cnc2)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
CCOc1cccc1CN1CCN(CC(O)COCCN2C(=O)CCC2=O)CC1	CCOc1cccc1CN1CCN(CC(O)COCCN2C(=O)CCC2=O)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1c(C)ccc2c1C(=O)c1c(O)cc(CCCCCO)c(O)c1C2=O	COc1c(C)ccc2c1C(=O)c1c(O)cc(CCCCCO)c(O)c1C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(CCC)CC(O)c1cc2ccc(C(F)(F)F)cc2c2ccsc12	CCCN(CCC)CC(O)c1cc2ccc(C(F)(F)F)cc2c2ccsc12	TRUE	TRUE	FALSE
CCCCOc1ccc(-c2csc(N)c2C(=O)OC)cc1OC	CCCCOc1ccc(-c2csc(N)c2C(=O)OC)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C)C(NC(=O)C(CCCNC(=N)N)NC(=O)C(N)CCCN)C(=O)NC(C(C)C)C(=O)O	CCC(C)C(NC(=O)C(CCCNC(=N)N)NC(=O)C(N)CCCN)C(=O)NC(C(C)C)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC1CCCCC1)c1nnn(Cc2ccc(F)cc2)c1NS(=O)(=O)c1cccc1	O=C(NC1CCCCC1)c1nnn(Cc2ccc(F)cc2)c1NS(=O)(=O)c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(N2CCN(C(c3ccccc3)c3nnnn3C(C)(C)C)CC2)cc1	COc1ccc(N2CCN(C(c3ccccc3)c3nnnn3C(C)(C)C)CC2)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
Fc1ccc(C2OOC3(CCCCC3)OO2)cc1	Fc1ccc(C2OOC3(CCCCC3)OO2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CS(=O)(=O)c1ccc(F)cc1)Nc1ccc(N2CCCCC2)cc1	O=C(CS(=O)(=O)c1ccc(F)cc1)Nc1ccc(N2CCCCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
N#CCN1CCC(CN=C(O)c2cc3cc(Oc4ccc(C(F)(F)F)cn4)ccc3n2Cc2ccccc2Cl)CC1	N#CCN1CCC(CN=C(O)c2cc3cc(Oc4ccc(C(F)(F)F)cn4)ccc3n2Cc2ccccc2Cl)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(-c2ccc(Cl)cc2)oc1COc1ccc2c(c1)OC1(CCCCC1)C2=O	Cc1nc(-c2ccc(Cl)cc2)oc1COc1ccc2c(c1)OC1(CCCCC1)C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc1NC(=O)Cn1c(=O)oc2cc(S(=O)(=O)NCc3ccccc3)ccc21	Cc1cccc1NC(=O)Cn1c(=O)oc2cc(S(=O)(=O)NCc3ccccc3)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(N(C(=O)C(F)(F)F)C(=S)OCCCNc2cnc2)c(Cl)c1	Cc1ccc(N(C(=O)C(F)(F)F)C(=S)OCCCNc2cnc2)c(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+][([O-])c1ccc(-c2nc(N3CCCCC3)c3ccccc3n2)cc1	O=[N+][([O-])c1ccc(-c2nc(N3CCCCC3)c3ccccc3n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1COc2c(C(=O)NC(C)c3ccccc3)cccc2O1	CC1COc2c(cccc2C(=O)NC(C)c2ccccc2)O1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)C(=O)C1CC2CN(Cc3c(C)noc3C)CC2n1C	CCN(CC)C(=O)C1CC2CN(Cc3c(C)noc3C)CC2N1C	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccc(C(=O)N3CCCC3)cc2)cc1[N+](=O)[O-]	Cc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccc(C(=O)N3CCCC3)cc2)cc1[N+](=O)[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(=O)O)c1ccc2c(c1)nc(-c1ccoc1)n2C1CCCCC1	O=C(NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(=O)O)c1ccc2c(c1)nc(-c1ccoc1)n2C1CCCCC1	TRUE	TRUE	FALSE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
Cc1ccc(-n2ncc3c(SCC(=O)O)ncnc32)cc1	Cc1ccc(-n2ncc3c(SCC(=O)O)ncnc32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccncc1)c1cnn2ccc(N3CCCC3c3cc(F)ccc3F)nc12	O=C(Nc1ccncc1)c1cnn2ccc(N3CCCC3c3cc(F)ccc3F)nc12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(NS(=O)(=O)c2ccc(OCc3cc(C)ccc3C)c(C)c2)nc(OC)n1	COc1cc(NS(=O)(=O)c2ccc(OCc3cc(C)ccc3C)c(C)c2)nc(OC)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc1CN(C(=O)c1cccc1NC(=O)c1ccc(C(C)(C)C)cc1	COc1cccc1CN(C(=O)c1cccc1NC(=O)c1ccc(C(C)(C)C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=Cc1nc2cccc2s1)c1ccc(OCc2cccc2)cc1	O=C(C=Cc1nc2cccc2s1)c1ccc(OCc2cccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ncnc2c1ncn2C1OC(C(=O)NC2CCC2)C(O)C1O	Nc1ncnc2c1ncn2C1OC(C(=O)NC2CCC2)C(O)C1O	TRUE	TRUE	FALSE
CO(C(=O)C(N)Cc1c[nH]c2ccccc12	CO(C(=O)C(N)Cc1c[nH]c2ccccc12	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1cc(OCc2nc(-c3ccc(Cl)c(Cl)c3)c(-c3ccc(OC(F)(F)F)cc3)s2)ccc1OCC(=O)O	Cc1cc(OCc2nc(-c3ccc(Cl)c(Cl)c3)c(-c3ccc(OC(F)(F)F)cc3)s2)ccc1OCC(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(Cc2c(C)nc3ccc(N)nn23)c1	COc1cccc(Cc2c(C)nc3ccc(N)nn23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCCCCC(=O)Nc1ccc(Nc2nc3cccc3[nH]2)cc1)NO	O=C(CCCCCC(=O)Nc1ccc(Nc2nc3cccc3[nH]2)cc1)NO	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Cl)cc1S(=O)(=O)N1CCN(S(=O)(=O)c2c(C)noc2C)CC1	COc1ccc(Cl)cc1S(=O)(=O)N1CCN(S(=O)(=O)c2c(C)noc2C)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(CP(=O)(O)O)C(=O)O	NC(CP(=O)(O)O)C(=O)O	TRUE	TRUE	FALSE
CO(C(=O)c1cc(-c2ccccc2)cs1	CO(C(=O)c1cc(-c2ccccc2)cs1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCN1CC(=O)N2C(Cc3ccc(O)cc3)C(=O)N(Cc3cccc4c(C(=O)N5CCC(C#N)CC5)cn(C)c34)CC2N1C(=O)NCc1cccc1	C=CCN1CC(=O)N2C(Cc3ccc(O)cc3)C(=O)N(Cc3cccc4c(C(=O)N5CCC(C#N)CC5)cn(C)c34)CC2N1C(=O)NCc1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(NC(=O)CCC(=O)N(Cc(=O)NC1CCCC1)c1cccc(-c2nc3cccc3[nH]2)c1)c1cccc1	CC(NC(=O)CCC(=O)N(Cc(=O)NC1CCCC1)c1cccc(-c2nc3cccc3[nH]2)c1)c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1nc(-c2ccccc2)c(O)c2ccccc12)c1ccc(Br)cc1	O=C(Nc1nc(-c2ccccc2)c(O)c2ccccc12)c1ccc(Br)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1c2ccc(Cl)cc2N(C)C2=C(C(=O)c3ccccc3C2=O)C1c1cc(Cl)ccc1OCc1cccc1C(F)(F)F	CN1C2=C(C(=O)c3ccccc3C2=O)C(c2cc(Cl)ccc2OCc2cccc2C(F)(F)F)N(C)c2ccc(Cl)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
#Cc1c(Oc2cccc2)c(Oc2cccc2)c(Oc2ccc(Cl)c2)c(O)c1Oc1ccc(OC)cc1	#Cc1c(Oc2ccc(OC)c2)c(O)c(O)c(Oc2ccc(Cl)c2)c(Oc2cccc2)c1Oc1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C1CCCOCC(NCc2cccc(Cl)c2)CCN1	O=C(O)C1CCCOCC(NCc2cccc(Cl)c2)CCN1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1cccc2nc3cc(Cl)ccc3nc12	CCOC(=O)c1cccc2nc3cc(Cl)ccc3nc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CN1C(=O)C(=Cc2ccc(S(C)(=O)=O)s2)SC1=Nc1cccc1Cl	CS(=O)(=O)c1ccc(C=C2SC(=Nc3ccccc3Cl)N(Cc(=O)O)C2=O)s1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C)c(NC(=O)c2ccc3nc(NC(=O)OC(C)(C)C)sc3c2)c1	Cc1ccc(C)c(NC(=O)c2ccc3nc(NC(=O)OC(C)(C)C)sc3c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)[n+][(-c2[nH]c(=O)sc2C)cc1C	Cc1cc(C)[n+][(-c2[nH]c(=O)sc2C)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
CN(CC#CC#CCO)C(=O)C1CCC(COC(N)=O)CC1	CN(CC#CC#CCO)C(=O)C1CCC(COC(N)=O)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc2c(c1)[nH]c1c(C(=O)O)ccc(OCc3ccccc3)c12	Cc1ccc2c(c1)[nH]c1c(C(=O)O)ccc(OCc3ccccc3)c12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(OC1C(O)c2c(ccc3ccc(=O)oc23)OC1c1ccc([N+](=O)[O-])cc1)c1ccco1	O=C(OC1C(O)c2c(ccc3ccc(=O)oc23)OC1c1ccc([N+](=O)[O-])cc1)c1ccco1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(OC)c(CC(=O)Nc2nc(-c3ccccc3)cs2)c1	COc1ccc(OC)c(CC(=O)Nc2nc(-c3ccccc3)cs2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1cc(=O)oc2cc(C)cc(OCcCOc3ccc(C(=O)OC4COC5C(O)CC(C)(O)C43)c12	CCc1cc(=O)oc2cc(C)cc(OCcCOc3ccc(C(=O)OC4COC5C(O)CC(C)(O)C43)c12	FALSE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CCN(C)Cc2ccc(F)cc2)cc1OC	COc1ccc(CCN(C)Cc2ccc(F)cc2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=CC(=O)NCCc2ccc(F)cc2)cc(OC)c1OC	COc1cc(C=CC(=O)NCCc2ccc(F)cc2)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1csc(-c2ccccc3cccc23)n1)N1CCC(N2CCCC2)CC1	O=C(c1csc(-c2ccccc3cccc23)n1)N1CCC(N2CCCC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1sn(CCO)cc1C1CC1	O=c1sn(CCO)cc1C1CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCNc1ccc2ncc(-c3ccc(C(F)(F)F)cc3)n2n1	CCNc1ccc2ncc(-c3ccc(C(F)(F)F)cc3)n2n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cnc(C(=O)OCC(=O)Nc2c(C)cccc2C)cn1	Cc1cnc(C(=O)OCC(=O)Nc2c(C)cccc2C)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(COc1ccc(Cl)cc1C(=O)O)Nc1cccc(N2CCN(Cc3cccc3F)CC2)c1	O=C(COc1ccc(Cl)cc1C(=O)O)Nc1cccc(N2CCN(Cc3cccc3F)CC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCC1CCC2(CC1)OOC1(O2)C2CC3CC(C2)CC1C3	CN(C)CCC1CCC2(CC1)OOC1(O2)C2CC3CC(C2)CC1C3	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1c(C(=O)c2cccc(OCC(=O)O)c2)n(CCCc2ccc(C(=O)O)c2)c2ccc(F)cc12	CCc1c(C(=O)c2cccc(OCC(=O)O)c2)n(CCCc2ccc(C(=O)O)c2)c2ccc(F)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC(Cc1cccc1)C(O)CC(Cc1CCCC1)NC(=O)c1cccc1O)C1CCC(=O)N1Cc1cccc1	O=C(NC(Cc1CCCC1)CC(O)C(Cc1cccc1)NC(=O)C1CCC(=O)N1Cc1cccc1)c1cccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
NS(=O)(=O)c1ccc(NC(=O)COC(=O)CC(F)(F)F)cc1	NS(=O)(=O)c1ccc(NC(=O)COC(=O)CC(F)(F)F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2oc3c(CC=C(C)C)c(OCc4(CNC(C)=O)CCCC4)cc(O)c3c(=O)c2O)cc1OC	COc1ccc(-c2oc3c(CC=C(C)C)c(OCc4(CNC(C)=O)CCCC4)cc(O)c3c(=O)c2O)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
Sc1nc2cc(-c3cccn3)nn2c(SCc2cccc2)n1	Sc1nc(SCc2cccc2)n2nc(-c3cccn3)cc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+][([O-])c1ccc(C(=O)N2CCN(c3nnc(Cc4cccc4)c4cccc34)CC2)cc1	O=C(c1ccc([N+](=O)[O-])cc1)N1CCN(c2nnc(Cc3cccc3)c3cccc23)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(CCC)c1cc(C)nc2c(-c3ccc(Cl)cc3Cl)c(C)nn12	CCCN(CCC)c1cc(C)nc2c(-c3ccc(Cl)cc3Cl)c(C)nn12	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CC(=O)NC2CCCC21	CN1CC(=O)NC2CCCC21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(C(F)(F)F)cc1)NC1CCC(OCc2cccc2)CC1	O=C(Nc1ccc(C(F)(F)F)cc1)NC1CCC(OCc2cccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)cc(-n2ncc3c2CCCC3NC(=O)CCc2n[nH]cc2C)c1	Cc1cc(C)cc(-n2ncc3c2CCCC3NC(=O)CCc2n[nH]cc2C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(C2CC(Cl)C(=O)N2NC(=O)c2csc(-c3ccccc3)n2)c1OC	COc1cccc(C2CC(Cl)C(=O)N2NC(=O)c2csc(-c3ccccc3)n2)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cnc(NCCC(=O)N2CCN(S(=O)(=O)c3ccc(Cl)cc3)CC2)nc1N(C)C	Cc1cnc(NCCC(=O)N2CCN(S(=O)(=O)c3ccc(Cl)cc3)CC2)nc1N(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
COCC(=O)N1CCC2C1CCN(CC(=O)N(C)C)C2C	COCC(=O)N1CCC2C(C)N(CC(=O)N(C)C)CCC21	TRUE	TRUE	TRUE
CN=c1[nH]c(Nc2ccc(C#N)c(OC(C)CO)c2)ncc1C(F)(F)F	CN=c1[nH]c(Nc2ccc(C#N)c(OC(C)CO)c2)ncc1C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
NCCc1c[nH]c2ccc(Br)cc12	NCCc1c[nH]c2ccc(Br)cc12	TRUE	TRUE	FALSE
CC1(c2ccc(O)cc2)CC(c2ccc(O)cc2)=CC=C1c1cccc1	CC1(c2ccc(O)cc2)CC(c2ccc(O)cc2)=CC=C1c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1[nH]c2ncc(Br)c(C(F)(F)F)c2[nH]1	O=c1[nH]c2ncc(Br)c(C(F)(F)F)c2[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2noc(C3CCCN(C(=O)Cc4cccc4)C3)n2)c(C)c1	COc1ccc(-c2noc(C3CCCN(C(=O)Cc4cccc4)C3)n2)c(C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CSc1nnc(-c2cc(F)cc(F)c2NCC2ccncc2)n1C	CSc1nnc(-c2cc(F)cc(F)c2NCC2ccncc2)n1C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C(=Cc2ccco2)N(Cc2cccc2Cl)C(=O)N1CCc1cccc1	O=C1C(=Cc2ccco2)N(Cc2cccc2Cl)C(=O)N1CCc1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ccc(Cn2cncc2CNC2CCN(c3ccccc3F)C2=O)c1-c1cccc2c1cnn2C	Cn1ncc2c(-c3cc(Cn4cncc4CNC4CCN(c5ccccc5F)C4=O)ccc3C#N)cccc21	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2nc(NC(=O)C3CCN(S(=O)(=O)c4cccs4)CC3)sc2c1	COc1ccc2nc(NC(=O)C3CCN(S(=O)(=O)c4cccs4)CC3)sc2c1	TRUE	TRUE	FALSE
CC1(C)CC2CC(C)C)CCC2CC(=NN2C(=O)C3=C(CCC3)C2=O)C1	CC1(C)CCC2CC(=NN3C(=O)C4=C(CCC4)C3=O)CC(C)(C)CC2C1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c(Cc2ccc(F)cc2)nnc1SCC1CCN(Cc2cccc2)CC1	Cn1c(Cc2ccc(F)cc2)nnc1SCC1CCN(Cc2cccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1ccc(OCcCC(=O)NN=Cc2ccsc2)cc1	CC(C)c1ccc(OCcCC(=O)NN=Cc2ccsc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nenc(-c2ccc(C(=O)N3CCN(C=O)CC3)c(Cl)c2)c1C#Cc1ccc(N)nc1	CCc1nenc(-c2ccc(C(=O)N3CCN(C=O)CC3)c(Cl)c2)c1C#Cc1ccc(N)nc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC1c2cccc2CC1O)C(Cc1cccc2cccc12)CC(O)CNS(=O)(=O)c1cccc1	O=C(NC1c2cccc2CC1O)C(Cc1cccc2cccc12)CC(O)CNS(=O)(=O)c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CC(C)CN(C(=O)c2cc(C(=O)N3CC(F)(F)C3)ccc2Oc2cccc(-c3ncccn3)c2)C1	CC1CC(C)CN(C(=O)c2cc(C(=O)N3CC(F)(F)C3)ccc2Oc2cccc(-c3ncccn3)c2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC=Nc1c(C#N)c(-c2c[nH]c3cccc23)c(C#N)c(=S)n1C	CCOC=Nc1c(C#N)c(-c2c[nH]c3cccc23)c(C#N)c(=S)n1C	TRUE	TRUE	TRUE
CCCS(=O)(=O)Nc1cccc(-c2ocnc2-c2cc(F)c(OC)cc2F)c1	CCCS(=O)(=O)Nc1cccc(-c2ocnc2-c2cc(F)c(OC)cc2F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(c1ccc([N+](=O)[O-])cc1C(=O)c1cccc1Cl)S(C)(=O)=O	CN(c1ccc([N+](=O)[O-])cc1C(=O)c1cccc1Cl)S(C)(=O)=O	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1cccc(-c2cc(C3CCC4(CC3)COC(N)=N4)cc(N3CC3)n2)c1	N#Cc1cccc(-c2cc(C3CCC4(CC3)COC(N)=N4)cc(N3CC3)n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(Sc1cc(Cl)cc(Cl)c1)C(=O)NN=Cc1c[nH]c2ccccc12	CC(Sc1cc(Cl)cc(Cl)c1)C(=O)NN=Cc1c[nH]c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCNC(=S)NN=C1c2cccc2-n2c(=O)cc(C)n21	CCCCNC(=S)NN=C1c2cccc2n2c(=O)cc(C)n12	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCC(=O)CC(=O)NC1CCOC1=O	CCCCCCCCC(=O)CC(=O)NC1CCOC1=O	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1ccc(C(=O)Oc2c(Cl)cccc2Cl)o1	Cc1ccc(C(=O)Oc2c(Cl)cccc2Cl)o1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(Cl)sc1C(=O)Nc1ccncc1	Cc1nc(Cl)sc1C(=O)Nc1ccncc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)C(=O)Nc1cc(-c2cccc(F)c2)nn1-c1cccc1	CC(C)(C)C(=O)Nc1cc(-c2cccc(F)c2)nn1-c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nnc2cc(-c3c(C)ncn3C)cc(C)n12	Cc1nnc(C)c1-c1cc(C)n2c(C)nnc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C=Cc1ccc(-c2ccc(F)cc2F)o1	O=C(O)C=Cc1ccc(-c2ccc(F)cc2F)o1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=CC(C)(C)Nc2ccc3c(c21)C(=Cc1cccc(F)c1)Oc1cccc1-3	CC1=CC(C)(C)Nc2ccc3c(c21)C(=Cc1cccc(F)c1)Oc1cccc1-3	TRUE	TRUE	FALSE
Cn1ncc(NC(=O)c2nc(C3CC3)enc2Nc2cnnc2)c1C(=O)NCCN1CCCCC1	Cn1ncc(NC(=O)c2nc(C3CC3)enc2Nc2cnnc2)c1C(=O)NCCN1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(NC(=O)c1cc(-c2ccc3nnc(C4CCCNc4)n3c2)n[nH]1)c1ccc(F)cc1	CC(NC(=O)c1cc(-c2ccc3nnc(C4CCCNc4)n3c2)n[nH]1)c1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1ccc(F)cc1)N1CCN(Cc2c3cccc4c3n2CCNC4=O)CC1	O=C(c1ccc(F)cc1)N1CCN(Cc2c3cccc4c3n2CCNC4=O)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=CCOP(=O)(OCC=C(C)C(=O)OC1CC2CC1(C)C2(C)OCC=C(C)CCC=C(C)C(=O)C)CC=C(C)C)OC1CC(=O)OC1(C)C	CC(=CCOP(=O)(OCC=C(C)C(=O)OC1CC2CC1(C)C2(C)OCC=C(C)CCC=C(C)C(=O)C)CC=C(C)C)OC1CC(=O)OC1(C)C	FALSE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(CN(C(=O)C)CC(C)C)Nc2nc(NCC=C(c3ccccc3)c3ccccc3)nc3c2ncn3C(C)(C)C)cc1	Cc1ccc(CN(C(=O)C)CC(C)C)Nc2nc(NCC=C(c3ccccc3)c3ccccc3)nc3c2ncn3C(C)(C)C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1cccc(NC(=O)c2ccccc2[N+](=O)[O-])c1	CC(C)(C)c1cccc(NC(=O)c2ccccc2[N+](=O)[O-])c1	TRUE	TRUE	TRUE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
N#Cc1cc(CS(=O))(=O)N2CC(=NOCc3ccc(Cl)cc3)CC2C(=O)NC2CC2)ccc1OCc1ccccc1	N#Cc1cc(CS(=O))(=O)N2CC(=NOCc3ccc(Cl)cc3)CC2C(=O)NC2CC2)ccc1OCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCc1ccc(Cl(=O)Nc2ccc(-c3ccc(N4CCOCC4)nn3)cc2)cc1	CCCCCc1ccc(Cl(=O)Nc2ccc(-c3ccc(N4CCOCC4)nn3)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCN(C(=O)COC(=O)c2ccc3c(c2)OCCO3)CC1	CC1CCN(C(=O)COC(=O)c2ccc3c(c2)OCCO3)CC1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)(C)N(C(=O)c1ccc(F)cc1)C(=O)OC	CC(C)(C)N(C(=O)c1ccc(F)cc1)C(=O)OC	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(=O)oc2cc(N(C)C)cc(OC(=O)NCCCN3CCOCC3)c12	Cc1cc(=O)oc2cc(N(C)C)cc(OC(=O)NCCCN3CCOCC3)c12	TRUE	TRUE	TRUE
CCO(C(=O)C(C)=CC(C)=CC(C)CC(C)C(O)C(C)C(C)C(O)C=C(C)CC(C)O)CC1O(C(=O)C(C)C(O)C1C)OC(C)=O	CCO(C(=O)C(C)=CC(C)=CC(C)CC(C)C(O)C(C)CC(C=C(C)C(C)O)C(C)C(C)C(C)C(C)C(C)OC(C)=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(NCc1ccc2ccccc2c1)C(=O)O	CC(C)CC(NCc1ccc2ccccc2c1)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
COC12C(COC(N)=O)C3=C(C(=O)C(C)=C(Nc4ccc(O)cc4)C3=O)N1CC1NC12	COC12C(COC(N)=O)C3=C(C(=O)C(C)=C(Nc4ccc(O)cc4)C3=O)N1CC1NC12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(c1ccc(C(O)=Nc2ccccc(S(N)(=O)=O)c2)cc1)N1CCC(CC(C)(C)O)(c2ccccc2)OC1=O	CC(c1ccc(C(O)=Nc2ccccc(S(N)(=O)=O)c2)cc1)N1CCC(CC(C)(C)O)(c2ccccc2)OC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C(c1ccc(Cl)cc1)N1C(=O)c2ccc(NC(=O)c3ccc(F)cc3)cc2NC(=S)C1c1ccc(Cl)cc1	CCOC(=O)C(c1ccc(Cl)cc1)N1C(=O)c2ccc(NC(=O)c3ccc(F)cc3)cc2NC(=S)C1c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(c1ccc(O)cc1)C(C)C(C)C1OC1Cc1ccccc1	CCC(c1ccc(O)cc1)C(C)C(C)C1OC1Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCc1ccc(Cl(=O)Nc2ccccc(CNc3nnc4c(C(N)=O)cccc34)c2)cc1	CCCCCCCCc1ccc(Cl(=O)Nc2ccccc(CNc3nnc4c(C(N)=O)cccc34)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2[nH]c(-c3ccc(OC(=C(C)C)cc3)c(C(=O)c3ccc(OCCN(C)C)cc3)c2c1	COc1ccc2[nH]c(-c3ccc(OC(=C(C)C)cc3)c(C(=O)c3ccc(OCCN(C)C)cc3)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CN(C(=O)C(C2Cc3ccccc3C2)N1	O=C1CN(C(=O)C(C2Cc3ccccc3C2)N1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Nc2c(C)sc3c(C)c(O)c(C(=O)N(C)C)nc23)cc1	COc1ccc(Nc2c(C)sc3c(C)c(O)c(C(=O)N(C)C)nc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(Cc1nc2ccccc2n1Cc1ccc(-c2ccccc2-c2nn[nH]n2)cc1Cl)C(=O)O	CC(C)(Cc1nc2ccccc2n1Cc1ccc(-c2ccccc2-c2nn[nH]n2)cc1Cl)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc2c(=O)c3cc(C#N)ccc3[nH]c12	Cc1ccccc2c(=O)c3cc(C#N)ccc3[nH]c12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(-c2cnn(C)c2C)ccc1Nc1ncc2ccnc(-c3cnc(C4COCOC4)c3)c2n1	COc1cc(-c2cnn(C)c2C)ccc1Nc1ncc2ccnc(-c3cnc(C4COCOC4)c3)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)N(CCc1ccc(OCc2ccc(-c3nc(-c4ccc(O)cc4)cs3)cc2)cc1)C(=O)Cc1c(F)cccc1F	CC(C)N(CCc1ccc(OCc2ccc(-c3nc(-c4ccc(O)cc4)cs3)cc2)cc1)C(=O)Cc1c(F)cccc1F	TRUE	TRUE	TRUE
CCNCCCCCCCCCN	CCNCCCCCCCCCN	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1nnc(-c2cccn2)o1)c1ccc(Cl)c(Cl)c1	O=C(Nc1nnc(-c2cccn2)o1)c1ccc(Cl)c(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-n2c(C)cc(C=C3SC(=S)N(c4cccc(C(=O)O)c4)C3=O)c2C)cc1	COc1ccc(-n2c(C)cc(C=C3SC(=S)N(c4cccc(C(=O)O)c4)C3=O)c2C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cnc1CN1CC(N(C2CCOCC2)S(=O))(=O)c2ccccc2F)Cc2cc(C#N)ccc21	Cn1cnc1CN1CC(N(C2CCOCC2)S(=O))(=O)c2ccccc2F)Cc2cc(C#N)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCCc1cccc(-c2cc(NC(=O)C3CNC(=O)C3)nn2-c2ccccc2)c1	CCCc1cccc(-c2cc(NC(=O)C3CNC(=O)C3)nn2-c2ccccc2)c1	TRUE	TRUE	FALSE
N#Cc1ccc(C(=O)N(Cc2ccc(N3CCCC3=O)cc2)CC2CCCO2)cc1	N#Cc1ccc(C(=O)N(Cc2ccc(N3CCCC3=O)cc2)CC2CCCO2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)c(C(S(=O))(=O)NCc2cccn2-c2ccccc2)c(Cl)c1	Cc1cc(C)c(C(S(=O))(=O)NCc2cccn2-c2ccccc2)c(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccc(NC(=O)Nc2cccc(-c3cn4ccsc4n3)c2)cc1C	CCc1ccc(NC(=O)Nc2cccc(-c3cn4ccsc4n3)c2)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1nc2c(c(-c3ccc(F)cc3Cl)c1CN)C(O)CN(C(=O)C(O)C(=O)O)C2	CC(C)c1nc2c(c(-c3ccc(F)cc3Cl)c1CN)C(O)CN(C(=O)C(O)C(=O)O)C2	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc2c(c1)CC(NCC1CCN(Cc3ccnc3)CC1)CO2	c1ccc2c(c1)CC(NCC1CCN(Cc3ccnc3)CC1)CO2	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=CC=C2C(C)(C)CCCC2(C)C12Cc1c(cc(O)c3ccc(=O)oc13)O2	CC1=CC=C2C(C)(C)CCCC2(C)C12Cc1c(cc(O)c3ccc(=O)oc13)O2	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1ccnc(Sc2c(C)(C)C)[nH]c3ccc(Br)cc23)n1	CN(C)c1ccnc(Sc2c(C)(C)C)[nH]c3ccc(Br)cc23)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1occ(Cl)c(=O)c1OCc1ccc(C#N)cc1	CC(C)(C)c1occ(Cl)c(=O)c1OCc1ccc(C#N)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1c2c(cc3ncnc13)OC(c1ccccc1)C2[n+]1ccccc1	Oc1c2c(cc3ncnc13)OC(c1ccccc1)C2[n+]1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2CC(=O)c3c(O)cc(OC(=O)Nc4oc5c(c4C)CCCC5)cc3O2)cc1	COc1ccc(C2CC(=O)c3c(O)cc(OC(=O)Nc4oc5c(c4C)CCCC5)cc3O2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CCC1=NCc1ccnc2ccccc12	O=C1CCC1=NCc1ccnc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cc(C(O)=NCCC2COC2)nn1-c1ccccc1)c1cc(-c2cccn2)c(Cl)cc1Cl	O=C(Nc1cc(C(O)=NCCC2COC2)nn1-c1ccccc1)c1cc(-c2cccn2)c(Cl)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
C#CCNc1CCc2ccc(OC(=O)N(C)C)cc21	C#CCNc1CCc2ccc(OC(=O)N(C)C)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC1Cc2cc(S(=O))(=O)N3CCC(C(=O)Nc4ccccc4)CC3)ccc2N1C(=O)C1CC1	CC1Cc2cc(S(=O))(=O)N3CCC(C(=O)Nc4ccccc4)CC3)ccc2N1C(=O)C1CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2nc3cc(C)ccc3c(C(=O)O)c2C)c(Cl)c1	COc1ccc(-c2nc3cc(C)ccc3c(C(=O)O)c2C)c(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(OC(C(=O)N(C1CCCO1)c1ccccc(Cl)c1)c1ccccc1)c1ccc(Cl)cc1	O=C(OC(C(=O)N(C1CCCO1)c1ccccc(Cl)c1)c1ccccc1)c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
C=C1C(=O)OC2C1CC(O)C(C)=C1C(OC)OC3(C)CCC=C(C)C3C12	C=C1C(=O)OC2C1CC(O)C(C)=C1C(OC)OC3(C)CCC=C(C)C3C12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(C=Cc2n(Cc3CCCC3)c3nc(N)nc3c2Br)cccc1C(F)(F)F	Cc1c(C=Cc2c(Br)c3cnc(C)n3cn2CC2CCCC2)cccc1C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
CCSc1nnc(COc2cccc(C)c2C)n1N=Cc1ccc(F)cc1	CCSc1nnc(COc2cccc(C)c2C)n1N=Cc1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)CSc1nnc(SCc2cc(=O)n3ccsc3n2)s1	COC(=O)CSc1nnc(SCc2cc(=O)n3ccsc3n2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(N+)[1](CC)CCC(CN(C)S(C)(=O)O)CC1	CCN(Cc1CC[N+](C)C(C)CC1)S(C)(=O)=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC(C)CC1(CC)CC(C)C(CC(=O)OC)OO1	CCCC(C)CC1(CC)CC(C)C(CC(=O)OC)OO1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc2nc(C(C(=O)NCCS(N)(=O)=O)S(C)(=O)=O)sc2cc1-c1ccc(C(F)(F)F)cc1	Cc1cc2nc(C(C(=O)NCCS(N)(=O)=O)S(C)(=O)=O)sc2cc1-c1ccc(C(F)(F)F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1C(=O)NC2Cc3c(Br)cccc3C1(C)C2	CN1C(=O)NC2Cc3c(Br)cccc3C1(C)C2	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1c(C)c(CC)c2[n+][c1C(=O)CCc1ccccc1)CCC2	CCc1c(C)c(CC)c(C(=O)CCc2ccccc2)[n+]2c1CCC2	TRUE	TRUE	TRUE
CCC1OC(=O)C(C)C(OC2CC(C)(OC)C(O)C(C)O2)C(C)C(OC2OC(C)CC(N(C)CCC(C)C)C2O)C(C)(C(F)(F)F)CC(C)C(=NO)C(C)C(O)C(C)O)C1(C)O	CCC1OC(=O)C(C)C(OC2CC(C)(OC)C(O)C(C)O2)C(C)C(OC2OC(C)CC(N(C)CCC(C)C)C2O)C(C)(C(F)(F)F)CC(C)C(=NO)C(C)C(O)C(C)O)C1(C)O	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(O)n1cc(N=C(O)N2CC(F)CC2C(O)=NCCCN)c2ccccc21	N=C(O)n1cc(N=C(O)N2CC(F)CC2C(O)=NCCCN)c2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1c(CN2CCN(c3cccn3)CC2)nnc1SCC(=O)N(C)C1CCS(=O))(=O)C1	CCN1c(CN2CCN(c3cccn3)CC2)nnc1SCC(=O)N(C)C1CCS(=O))(=O)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CO)cc1-c1cc(Cl)ccc2c1C(C)CN(C1COCC1)C2	COc1ccc(CO)cc1-c1cc(Cl)ccc2c1C(C)CN(C1COCC1)C2	FALSE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-n2c(C)nc3c(cnn3-c3ccc(F)cc3)c2=O)c(OC)c1	COc1ccc(-n2c(C)nc3c(cnn3-c3ccc(F)cc3)c2=O)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(NC(=O)c2ccc(S(=O))(=O)c3ccccc3)cc2)no1	Cc1cc(NC(=O)c2ccc(S(=O))(=O)c3ccccc3)cc2)no1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(F)cc1-c1cc(Cl(CC(=O)O)c2nnc(O)c3ccccc23)ccc1OC	COc1ccc(F)cc1-c1cc(Cl(CC(=O)O)c2nnc(O)c3ccccc23)ccc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1CCC(C(C)=O)C1C(=O)OCC	CCOC(=O)C1CCC(C(C)=O)C1C(=O)OCC	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(NC(=O)Nc2ccc(F)cc2Cl)n(C(C)(C)C)n1	Cc1cc(NC(=O)Nc2ccc(F)cc2Cl)n(C(C)(C)C)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C(=O)c1cn(C2CC(O)C(CO)O2)c(=O)[nH]c1=O	CO(C(=O)c1cn(C2CC(O)C(CO)O2)c(=O)[nH]c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(CNC(=O)CN(c3ccc(C)c(C)c3)S(C)(=O)=O)cc(=O)oc2c1	COc1ccc2c(CNC(=O)CN(c3ccc(C)c(C)c3)S(C)(=O)=O)cc(=O)oc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1cc(C(=O)O)c(=O)c2cc(F)c(N3CCNN(C(=S)NC(=O)c4cn(C)n(-c5ccccc5OC)c4=S)CC3)cc21	CCn1cc(C(=O)O)c(=O)c2cc(F)c(N3CCNN(C(=S)NC(=O)c4cn(C)n(-c5ccccc5OC)c4=S)CC3)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(C)NC(=O)c2cc(C(C)(C)C)nn2C)cc1OC1CCN(C(C)C)CC1	COc1ccc(C(C)NC(=O)c2cc(C(C)(C)C)nn2C)cc1OC1CCN(C(C)C)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(NC(=O)c2oc3ccccc3c2C)ccc1NC(=O)C(C)C	COc1cc(NC(=O)c2oc3ccccc3c2C)ccc1NC(=O)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C(=O)C12CN(C)CC(c3ccc(OC(F)(F)F)cc3)(C1)C(c1ccccc1C)N(C)C2c1ccccc1Cl	CO(C(=O)C12CN(C)CC(c3ccc(OC(F)(F)F)cc3)(C1)C(c1ccccc1C)N(C)C2c1ccccc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(CCC)C1CCc2cccc(O)c2C1	CCCN(CCC)C1CCc2cccc(O)c2C1	TRUE	TRUE	FALSE
NCC1OC(OC(CSCCc2ccccc2)CSCCc2ccccc2)C(OCc2ccccc2)C(OCc2ccccc2)C1OCc1ccccc1	NCC1OC(OC(CSCCc2ccccc2)CSCCc2ccccc2)C(OCc2ccccc2)C(OCc2ccccc2)C1OCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCOC(=O)N1CCN(C(=O)C(CCC(=O)O)NC(=O)c2cc(N(C)CC3CCCCC3)nc(-c3ccccc3)n2)CC1	CCCCOC(=O)N1CCN(C(=O)C(CCC(=O)O)NC(=O)c2cc(N(C)CC3CCCCC3)nc(-c3ccccc3)n2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOCc1ccc(-c2cc(Cl(=O)NCC3nc(C)no3)c(C3CC3)cc2C(=O)O)cc1	CCOCc1ccc(-c2cc(Cl(=O)NCC3nc(C)no3)c(C3CC3)cc2C(=O)O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC1CN(C)C(=O)c2ccc(NC(=O)c3cccc(C#N)c3-n3ncn3)cc2OCC(C)N(C(C)=O)CC1C	COC1CN(C)C(=O)c2ccc(NC(=O)c3cccc(C#N)c3-n3ncn3)cc2OCC(C)N(C(C)=O)CC1C	TRUE	TRUE	TRUE
COP(=O)(OC)OC(C)C	COP(=O)(OC)OC(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1ccc(Cl(c2ccc(Cl)cc2))(c2ccc(Cl)cc2)n2ccnc2)cc1	Clc1ccc(Cl(c2ccc(Cl)cc2))(c2ccc(Cl)cc2)n2ccnc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(Cl(=O)OCC23CC4C(C)CCC4C4(C=O)CC2C=C(C(C)C)C43C(=O)O)cc1C	Cc1cc(Cl(=O)OCC23CC4C(C)CCC4C4(C=O)CC2C=C(C(C)C)C43C(=O)O)c(-c2ccccc2)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1cnc(Nc2ccc(C3CNCCO3)cc2)nc1	N#Cc1cnc(Nc2ccc(C3CNCCO3)cc2)nc1	TRUE	TRUE	FALSE
Cn1ccc(COc2ccc3nc(C4CCCCC4C(=O)O)n(Cc4ccc(N5CCCCC5)cc4F)c3c2)n1	Cn1ccc(COc2ccc3nc(C4CCCCC4C(=O)O)n(Cc4ccc(N5CCCCC5)cc4F)c3c2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(O)cc(C=C(C)CCC=C(C)C)c1	COc1cc(O)cc(C=C(C)CCC=C(C)C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1CC(=O)OCn1nnc2ccccc2c1=O	COc1ccccc1CC(=O)OCn1nnc2ccccc2c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CON=C(c1ccc(Cl)cc1)c1ccccc1COc1c(C)cc(C)cc1C	CON=C(c1ccc(Cl)cc1)c1ccccc1COc1c(C)cc(C)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C1cccc(-c2cc3nc(C)c(CCC(=O)N4CCNCC4)c(C)n3n2)cc1	CC(C)C1cccc(-c2cc3nc(C)c(CCC(=O)N4CCNCC4)c(C)n3n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)CNc1nc(Cl)nc2c1nnc2Br	COC(=O)CNc1nc(Cl)nc2c1nnc2Br	TRUE	TRUE	TRUE
C=C1C(=O)C23CC1CCC2C12COC3(O)C(O)C1C(C)(C)C(O)CC2O	C=C1C(=O)C23CC1CCC2C12COC3(O)C(O)C1C(C)(C)C(O)CC2O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)Nc1nc(NCC2CCCN2CCCO)n2nnc2c1C(N)=O	CC(C)(C)Nc1nc(NCC2CCCN2CCCO)n2nnc2c1C(N)=O	TRUE	TRUE	TRUE
COC1CCC2(CC1)Cc1ccc(Br)cc1C21NC(=N)N(CC(C)O)C1=O	COC1CCC2(CC1)Cc1ccc(Br)cc1C21NC(=N)N(CC(C)O)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(N2CCN(Cc3ccc(l)cc3)CC2)cc1	COc1ccc(N2CCN(Cc3ccc(l)cc3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
C=CCn1c(C)c(C)c2ccc(C=O)Nc3ccc(C(C)C)c(C)c3)cc21	C=CCn1c(C)c(C)c2ccc(C(=O)Nc3ccc(C(C)C)c(C)c3)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1)CCNC2Cc1ccc(OC)c(OC)c1	COc1ccc2c(c1)CCNC2Cc1ccc(OC)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(CCP(=O)(O)CC(Cc1ccc(-c2ccccc2)cc1)C(=O)NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(=O)O)C(=O)O	NC(CCP(=O)(O)CC(Cc1ccc(-c2ccccc2)cc1)C(=O)NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(=O)O)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(N1CCCCC1)NC1c2ccccc2SCC2C3CCC(O3)C12	O=C(N1CCCCC1)NC1c2ccccc2SCC2C3CCC(O3)C12	TRUE	TRUE	TRUE
CCGc1cc(CN2C(=O)N(Cc3ccccc(N5(C)(=O)=O)c3)C(Cc3ccccc3)C(O)C(O)C2Cc2ccccc2)cnc1O	CCGc1cc(CN2C(=O)N(Cc3ccccc(N5(C)(=O)=O)c3)C(Cc3ccccc3)C(O)C(O)C2Cc2ccccc2)cnc1O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=Cc1ccc[nH]1)c1ccc2cc[nH]c2c1	O=C(C=Cc1ccc[nH]1)c1ccc2cc[nH]c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)N1CCCC1C(=O)NCCC1c[nH]c2ccc(F)cc12	CS(=O)(=O)N1CCCC1C(=O)NCCC1c[nH]c2ccc(F)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1cc([N+](=O)[O-])cc(N)c1	Nc1cc(N)cc([N+](=O)[O-])c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(N1CC(C(=O)O)C)c2ccc(Cl)cc2)C1(C)(F)F	CC(C)(N1CC(C(=O)O)C)c2ccc(Cl)cc2)C1(C)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
COc1O(C(CO(C=O)c2ccc(OC)cc2)C(OCc2ccccc2)C(OCc2ccccc2)C1OCc1ccccc1	COc1ccc(C(=O)OCC2OC(OC)C(OCc3ccccc3)C(OCc3ccccc3)C2OCc2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C1CCC(N2CCC(N3C(=O)Nc4c(cccc4C(F)(F)F)C3c3ccc([N+](=O)[O-])cc3)CC2)CC1	CC(C)C1CCC(N2CCC(N3C(=O)Nc4c(cccc4C(F)(F)F)C3c3ccc([N+](=O)[O-])cc3)CC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(N(Cc2ccc(-c3ccccc3)cc2)S(=O)(=O)c2ccc(C(=O)O)cc2)sc2ccccc12	Cc1c(N(Cc2ccc(-c3ccccc3)cc2)S(=O)(=O)c2ccc(C(=O)O)cc2)sc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C2C3=C(O)CC(C)(C)CC3=Nc3nc4ccccc4n32)cc1	Cc1ccc(C2C3=C(O)CC(C)(C)CC3=Nc3nc4ccccc4n32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)OCCOC(=O)c1sc2scctc1C(F)F	NC(=O)OCCOC(=O)c1sc2scctc1C(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(CCC)C1Cc2cc(O)c(O)cc2C1	CCCN(CCC)C1Cc2cc(O)c(O)cc2C1	TRUE	TRUE	FALSE
NCCNCNCCSSCCNCCCN	NCCNCNCCSSCCNCCCN	TRUE	TRUE	TRUE
OC(c1ccco1)C1CCC(CNCCc2ccccc2Cl)CC1	OC(c1ccco1)C1CCC(CNCCc2ccccc2Cl)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCOC(=O)c1ccc(O)cc1OC(C)=O	CCCCCOC(=O)c1ccc(O)cc1OC(C)=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=Cc1ccc(C(=O)O)cc1)Nc1ccc(-c2nc3ccccc3[nH]2)cc1	O=C(C=Cc1ccc(C(=O)O)cc1)Nc1ccc(-c2nc3ccccc3[nH]2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NCCCC(N)P(=O)(O)O	NCCCC(N)P(=O)(O)O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(-c2ccc(O)cc2)cc(Cc2ccc(OCCCCN(CCCN3CCCC3)Cc3ccccc3)cc2)n1-c1ccccc1	Cc1c(-c2ccc(O)cc2)cc(Cc2ccc(OCCCCN(CCCN3CCCC3)Cc3ccccc3)cc2)n1-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CN(S(=O)(=O)c2cccs2)c2ccccc2N1	O=C1CN(S(=O)(=O)c2cccs2)c2ccccc2N1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc(Nc2ncccn2)c2ncn(CCO)c2n1	Nc1nc(Nc2ncccn2)c2ncn(CCO)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC1CC(O)CC1O)c1ccc(-c2cc(F)cc(F)c2)cn1	O=C(NC1CC(O)CC1O)c1ccc(-c2cc(F)cc(F)c2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cc1ccn(C(Cc2ccc(OC3ccccc3)cc2)C(=O)O)c1)NO	O=C(Cc1ccn(C(Cc2ccc(OC3ccccc3)cc2)C(=O)O)c1)NO	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(N)c1ccccc2ccoc12	CC(C)CC(N)c1ccccc2ccoc12	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1cccc(-c2cc3cc(OCCC(C)(C)C(=O)O)ccc3o2)c1	CN(C)c1cccc(-c2cc3cc(OCCC(C)(C)C(=O)O)ccc3o2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1N1CCN(CCN2cncc2-c2ccc(C(F)(F)F)cc2)CC1	COc1ccccc1N1CCN(CCN2cncc2-c2ccc(C(F)(F)F)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)n1cc(C23C(=O)N(C)C(=O)C2(O)Oc2ccccc23)c2ccccc21	CC(=O)n1cc(C23C(=O)N(C)C(=O)C2(O)Oc2ccccc23)c2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc2c1C(=O)c1c(OC3COCC(OC(=O)C=Cc4ccc(O)cc4)C3)cc(-c3ccccc3)cc1C2=O	COc1ccccc2c1C(=O)c1c(OC3COCC(OC(=O)C=Cc4ccc(O)cc4)C3)cc(-c3ccccc3)cc1C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C(=O)O)c1ccc(-c2ccccc2)c(F)c1	CC(C(=O)O)c1ccc(-c2ccccc2)c(F)c1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(NC(=O)C(=O)c1c[nH]c2ccc([N+](=O)[O-])cc12)C(=O)O	CC(NC(=O)C(=O)c1c[nH]c2ccc([N+](=O)[O-])cc12)C(=O)O	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)CN1CCN(Cc2noc(C3CCCC3)n2)CC1CCO	CC(C)CN1CCN(Cc2noc(C3CCCC3)n2)CC1CCO	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2cc3c([N]C4CC4)c(N)ncn(C)c3c2)cn1	FALSE	FALSE	TRUE	TRUE
COCCNC(=O)c1[nH]c(C)c(C)C(=O)c1C	COCCNC(=O)c1[nH]c(C)c(C)C(=O)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
c1cc(CN2CCC(N3CCCCC3)C2)cc(-c2cc3cc(OCC4CCCC4)ccc3[nH]2)c1	c1cc(CN2CCC(N3CCCCC3)C2)cc(-c2cc3cc(OCC4CCCC4)ccc3[nH]2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1=C(C(=O)c2c(c(COc3ccc(NC(=O)CN4CCN(c5ccc(C(F)(F)F)ccc5C)CC4)cc3)cn2C)C1=O	COc1=C(C(=O)c2c(c(COc3ccc(NC(=O)CN4CCN(c5ccc(C(F)(F)F)ccc5C)CC4)cc3)cn2C)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ncc(COc2ccc(-c3cccn3)cc2)s1)c1cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c1	O=C(Nc1ncc(COc2ccc(-c3cccn3)cc2)s1)c1cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CNc1oc(-c2cccs2)nc1C#N	CNc1oc(-c2cccs2)nc1C#N	TRUE	TRUE	FALSE
O=[N+](([O-])c1ccccc1S(=O)(=O)c1ccc2c(c1)nnn2Cc1ccccc1	O=[N+](([O-])c1ccccc1S(=O)(=O)c1ccc2c(c1)nnn2Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(OCCCN2c3ccccc3c3ccccc32)cc1	c1ccc(OCCCN2c3ccccc3c3ccccc32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)Cc1ccc(C(C)C(=O)O)CC(CCC2CCCC2)NC(=O)c2ccc(Cl)s2)cc1	CC(C)Cc1ccc(C(C)C(=O)O)CC(CCC2CCCC2)NC(=O)c2ccc(Cl)s2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CSCC(CNC(=O)C1CCC(C)CC1)C(=O)N1CCN(c2ccccc2)CC1	CSCC(CNC(=O)C1CCC(C)CC1)C(=O)N1CCN(c2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1cc(-c2cccn2)[nH]c2cc(-c3ccc(-c4ccccc4)s3)ccc12	O=c1cc(-c2cccn2)[nH]c2cc(-c3ccc(-c4ccccc4)s3)ccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)N(Cc1ccc2c(c1)OCCCO2)C(=O)C1CC1	CC(C)N(Cc1ccc2c(c1)OCCCO2)C(=O)C1CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc1N1CCN(C2CCCN(C(=O)c3cc[nH]n3)C2)CC1	Cc1ccccc1N1CCN(C2CCCN(C(=O)c3cc[nH]n3)C2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1ccc(NNC(=O)c2cc(-c3ccccc3)nc3ccccc23)cc1	CCOC(=O)c1ccc(NNC(=O)c2cc(-c3ccccc3)nc3ccccc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C)c2sc(NC(=O)c3ccc(O)c(O)c3)nc12	COc1ccc(C)c2sc(NC(=O)c3ccc(O)c(O)c3)nc12	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1ccc(C=NNC(=O)c2ccncc2)c(OCc2ccc(Cl)cc2)c1	CN(C)c1ccc(C=NNC(=O)c2ccncc2)c(OCc2ccc(Cl)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CC2C=C(c3cncc(N=C(O)c4ccc(C#N)cc4)c3)CC2C1	CN1CC2C=C(c3cncc(N=C(O)c4ccc(C#N)cc4)c3)CC2C1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(c1cccc(Nc2nccn3[nH]cnc23)c1)N(Cc1cccn1)C(=O)CN(C)C	CC(c1cccc(Nc2nccn3[nH]cnc23)c1)N(Cc1cccn1)C(=O)CN(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
OC1=C2N=CN2=NC1(c1ccc(C)cc1)C1CCC=C1	OC1=C2N=CN2=NC1(c1ccc(C)cc1)C1C=C1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(c1ccccc(NS(=O)(=O)c2ccccc2)c1)c1c(O)oc2ccccc2c1=O	CC(c1ccccc(NS(=O)(=O)c2ccccc2)c1)c1c(O)oc2ccccc2c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(NC(=O)c1ccc(CNS(=O)(=O)c2cccc(C(=O)O)c2)cc1)C(=O)O	CC(C)CC(NC(=O)c1ccc(CNS(=O)(=O)c2cccc(C(=O)O)c2)cc1)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(=O)N1Cc2ccccc2CC1C(=O)O	CCC(=O)N1Cc2ccccc2CC1C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2SCC(=O)N2c2ccc(NC(=O)C=Cc3cc(Br)ccc3O)cc2)cc1	COc1ccc(C2SCC(=O)N2c2ccc(NC(=O)C=Cc3cc(Br)ccc3O)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1nc(C)O=Nc2ccc(F)c(C3(CF)N=C(N)OC4CC43)c2)c(Cl)c2ccc(OCC3CC3)cc12	N#Cc1nc(C)O=Nc2ccc(F)c(C3(CF)N=C(N)OC4CC43)c2)c(Cl)c2ccc(OCC3CC3)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
COc(=O)c1cccc(CSc2nc(-c3ccccc(OC)c3)cc(-c3cccn3)n2)c1	COc(=O)c1cccc(CSc2nc(-c3cccn3)cc(-c3ccccc(OC)c3)n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1ccccc1-c1ccccc1C(=O)NCc1ccccc1O	O=C(O)c1ccccc1-c1ccccc1C(=O)NCc1ccccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C)N1C(=O)C(C)(C)C2(C)C(=O)N(CC(=O)Oc3ccccc3C)C21	CCC(C)N1C(=O)C(C)(C)C2(C)C(=O)N(CC(=O)Oc3ccccc3C)C21	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1c2nccccc2C(=O)Nc2ccc(-c3ccc(CN4CCOCC4)cc3)nc21	CCN1c2nc(-c3ccc(CN4CCOCC4)cc3)ccc2N(C(=O)c2cccn2)1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C=C(C(=O)C=Cc2ccc(OC)c([N+](=O)[O-])c2)cc1	COc1ccc(C=C(C(=O)C=Cc2ccc(OC)c([N+](=O)[O-])c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCOC(=O)C(C#N)=C(NC)C(=O)O	C=CCOC(=O)C(C#N)=C(NC)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c(Nc2c(Cl)ccc(CNC(=O)C(C)(C)c2Cl)nc2cc(C(=O)NC3CCC(C(F)(F)F)CC3)c(N3CCC(F)(F)C3)cc21	Cn1c(Nc2c(Cl)ccc(CNC(=O)C(C)(C)c2Cl)nc2cc(C(=O)NC3CCC(C(F)(F)F)CC3)c(N3CCC(F)(F)C3)cc21	TRUE	TRUE	FALSE
CC1=Cc2(OC3CC4(C)OC(=O)C5OC3(CC(O)C5C1O)OC(=O)C4C2O)OC	CC12C=C(C(C)C)C3(C)C45OC(=O)C(C1O)C(C)(CC4O2)OC(=O)C3O5	TRUE	TRUE	TRUE
COCC(O)C#CCCCCCCC#CC=CC1COC(=O)C1	COCC(O)C#CCCCCCCC#CC=CC1COC(=O)C1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nn(CNS(=O)(=O)c2ccc(NC(=O)c3cc(Cl)ccc3Cl)cc2)s1	Cc1nn(CNS(=O)(=O)c2ccc(NC(=O)c3cc(Cl)ccc3Cl)cc2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
CC12CCC3C(CCC4=CC(=O)CCC43C)c1Cc1[nH]c3ccccc3c12	CC12CCC(C(=O)C=C1CCC1C2CCC2(C)c3c([nH]c4ccccc34)CC12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)c1cccc(-c2csc(NC(=O)C(=O)C(C#N)c3c(C)n(C)n(-c4ccccc4)c3=O)n2)c1	CC(=O)c1cccc(-c2csc(NC(=O)C(=O)C(C#N)c3c(C)n(C)n(-c4ccccc4)c3=O)n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+](([O-])c1ccc(Sc2ccccc2)c(C(F)(F)F)c1	O=[N+](([O-])c1ccc(Sc2ccccc2)c(C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1cccc(C(C)C)c1NC(=O)NCCC1c2cccc(C(C)(C)C)c2)CCOCC1	CC(C)c1cccc(C(C)C)c1NC(=O)NCCC1c2cccc(C(C)(C)C)c2)CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(C)C(O)=NN=C(C)c1cc(C)cc(C)c1Oc1ccc(OC(F)(F)F)cc1	CNC(C)C(O)=NN=C(C)c1cc(C)cc(C)c1Oc1ccc(OC(F)(F)F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)c(CNC(=O)c2cc(-c3cccn3)cc(N(C)C3CCC3)c2C)c(=O)[nH]1	Cc1cc(C)c(CNC(=O)c2cc(-c3cccn3)cc(N(C)C3CCC3)c2C)c(=O)[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1N1CC(OCc2ccc(Br)cc2)C1	COc1ccccc1N1CC(OCc2ccc(Br)cc2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCCN1CCC2(CC1)C(=O)N(Cc1ccccc1)CCN2Cc1ccc(F)c(F)c1)c1ccccc(F)c1	O=C(CCCN1CCC2(CC1)C(=O)N(Cc1ccccc1)CCN2Cc1ccc(F)c(F)c1)c1ccccc(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc1CN(C(=O)C1CCOCC1)C1CCS(=O)(=O)C1	Cc1ccccc1CN(C(=O)C1CCOCC1)C1CCS(=O)(=O)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1CNc1ncc(C(=O)Nc2cccc(C(F)(F)F)c2)c(NC2CCC(O)CC2)n1	COc1ccccc1CNc1ncc(C(=O)Nc2cccc(C(F)(F)F)c2)c(NC2CCC(O)CC2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCc1nncc2ccc(NCCc3ccccc3)nn12)N1CCCC1	O=C(CCc1nncc2ccc(NCCc3ccccc3)nn12)N1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CCc2cn(Cc3ccccc3)c3nc(=O)[nH]c(=O)c23)cc1OC	FALSE	FALSE	TRUE	TRUE
CC(C)CNc1cnc(C(Br)C(Br)Br)n1	CC(C)CNc1cnc(C(Br)C(Br)Br)n1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1cnc(Nc2cccc(O)c2)n(Cc2cccc(Cl)c2)c1=O	NC(=O)c1cnc(Nc2cccc(O)c2)n(Cc2cccc(Cl)c2)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(NS(=O)(=O)c2ccc(N3CC4CN(C(=O)Nc5ccc(Br)cc5)CC4C3)cc2)c1	COc1cccc(NS(=O)(=O)c2ccc(N3CC4CN(C(=O)Nc5ccc(Br)cc5)CC4C3)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C=C(C(=O)Nc2ccc3n[nH]c(Cc4ccccc4)c3c2)cc1	COc1ccc(C=C(C(=O)Nc2ccc3n[nH]c(Cc4ccccc4)c3c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CN1CCCc2cc(OCCN3CCCCC3)ccc2C1=O	CN1CCCc2cc(OCCN3CCCCC3)ccc2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NN=Cc1ccccc1[N+])(=O)[O-])c1cccc(S(=O)(=O)N2CCOCC2)c1	O=C(NN=Cc1ccccc1[N+])(=O)[O-])c1cccc(S(=O)(=O)N2CCOCC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(C2CCC34CCC2(OO3)C2Cc3c(n(Cc5cccc(Cl)c35)C2(C)CCC4)no1	Cc1nc(C2CCC34CCCC5(C)c6c(c7c(Cl)cccc7n6Cc6ccc(Cl)cc6)CC5C2(CC3)OO4)no1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1C(=O)NN=Cc1ccc([N+])(=O)[O-])s1	COc1ccccc1C(=O)NN=Cc1ccc([N+])(=O)[O-])s1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(O)=Nc2cccc(C(F)(F)F)c2)cc1C(=O)Nc2ccc(C)c(N(C)S(C)(=O)=O)c2)n(C)c1	Cc1ccc(C(O)=Nc2cccc(C(F)(F)F)c2)cc1C(=O)Nc1ccc(C(=O)Nc2ccc(C)c(N(C)S(C)(=O)=O)c2)n(C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nsc1c-1nnnc(SCCCN2CC3CC3(c3ccc(C(F)(F)F)cc3)C2)n1C	Cc1nsc1c-1nnnc(SCCCN2CC3CC3(c3ccc(C(F)(F)F)cc3)C2)n1C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)OC(=O)NCC(=O)Nc1cccc(-c2ncn2-c2cnc3ccccc3n2)c1	CC(C)(C)OC(=O)NCC(=O)Nc1cccc(-c2ncn2-c2cnc3ccccc3n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
C1CCC(Nc2nccc3ccccc23)c2nsc21	c1ccc2c(NC3CCCc4csnc43)nc2c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(NS(C)(=O)=O)ccc1Nc1c2ccccc2nc2cc(OCC(N)=O)ccc12	Cc1cc(NS(C)(=O)=O)ccc1Nc1c2ccccc2nc2cc(OCC(N)=O)ccc12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2C(C(=O)c3cnn(-c4ccccc4)c3C)=C(O)C(=O)N2CCN2CCOCC2)cc1	COc1ccc(C2C(C(=O)c3cnn(-c4ccccc4)c3C)=C(O)C(=O)N2CCN2CCOCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCC(NC(=O)C(Cc1ccccc1)CC(O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)OC(C)(C)C(=O)NC(C(=O)NC1CCOC1=O)C(C)C	C=CCC(NC(=O)C(Cc1ccccc1)CC(O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)OC(C)(C)C(=O)NC(C(=O)NC1CCOC1=O)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(Nc3ccc(CC(O)=Nc4ccccc4Cl)c(Cl)c3)ncnc2cc1OCC1CN(C)C(C)(C)CO1	COc1cc2c(Nc3ccc(CC(O)=Nc4ccccc4Cl)c(Cl)c3)ncnc2cc1OCC1CN(C)C(C)(C)CO1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1[S+][([O-])Cc1ccc(C(=O)Nc2ccccc2)o1	COc1ccccc1[S+][([O-])Cc1ccc(C(=O)Nc2ccccc2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1cccc(-n2nccc2C=CC(=O)NCc2cc(OC)cc(OC)c2)c1	CCOC(=O)c1cccc(-n2nccc2C=CC(=O)NCc2cc(OC)cc(OC)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1ncc([N+])(=O)[O-])s1	NC(=O)c1ncc([N+])(=O)[O-])s1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)C=Nc1ccc(N=Nc2c(O)cc(S(=O)(=O)O)c3ccc(S(=O)(=O)O)cc23)cc1	CN(C)C=Nc1ccc(N=Nc2c(O)cc(S(=O)(=O)O)c3ccc(S(=O)(=O)O)cc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2cc(S(=O)(=O)NC(Cc3ccccc3)C(=O)N3CCC(CCN(C(=N)N)CC3)ccc2c1	COc1ccc2cc(S(=O)(=O)NC(Cc3ccccc3)C(=O)N3CCC(CCN(C(=N)N)CC3)ccc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOP(=O)(OCC)C(Nc1ccc(C)cc1)(C(=O)OC)c1ccccc1	CCOP(=O)(OCC)C(Nc1ccc(C)cc1)(C(=O)OC)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cccc([N+])(=O)[O-])c1c1cc(=O)c2c(O)cccc2o1	O=C(Nc1cccc([N+])(=O)[O-])c1c1cc(=O)c2c(O)cccc2o1	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1cc(O)c2cc(c3ccccc3c2)ccc1O	OC1=CC(O)=C(O)C=Cc2cc1cc1ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C(=O)c1cccc(NC(=O)C(=O)NCC(c2ccnc2)N2CCN(C3CCCCC3)CC2)c1	CO(C(=O)c1cccc(NC(=O)C(=O)NCC(c2ccnc2)N2CCN(C3CCCCC3)CC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1cc(C)nc2c(-c3ccsc3)nn(C)c12	CCOc1cc(C)nc2c(-c3ccsc3)nn(C)c12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1ccc(OCC(=O)N)N=Cc2ccs2)cc1	CC(C)(C)c1ccc(OCC(=O)N)N=Cc2ccs2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cnc(N2CCC(c3ncn3CCO)CC2)o1	Cc1cnc(N2CCC(c3ncn3CCO)CC2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN1cc(-c2ccc(CN(C)C(=O)c3ccccc(C#N)c3)c(F)c2)cn1	CCCN1cc(-c2ccc(CN(C)C(=O)c3ccccc(C#N)c3)c(F)c2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1c2c(O)cccc2C(O)(c2ccc(O)cc2)c2cc(O)c(O)c(O)c21	O=C1c2c(O)cccc2C(O)(c2ccc(O)cc2)c2cc(O)c(O)c(O)c21	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1ccccc1Cc1cc2ccc(F)cc2oc1=O	O=c1oc2cc(F)ccc2cc1Cc1ccccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1nc(C(=O)c2ccc3c(O)c(O)c(O)nc3c2Cl)cs1	CC(=O)Nc1nc(C(=O)c2ccc3c(O)c(O)c(O)nc3c2Cl)cs1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc(C=CC(=O)NS(=O)(=O)c2cc(F)c(F)c(F)c2F)c2c3ccc(CN4CCCCC4)cc3n(C)c2c1=O	Cn1cc(C=CC(=O)NS(=O)(=O)c2cc(F)c(F)c(F)c2F)c2c3ccc(CN4CCCCC4)cc3n(C)c2c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccc2nc(-c3cnc(CN4C5CCC4CC(O)(C5)C4CC4)n3)c(C(N)=O)n2c1	CCc1ccc2nc(-c3cnc(CN4C5CCC4CC(O)(C4CC4)C5)n3)c(C(N)=O)n2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CN(Cc1cc(Cl)c2c(c1)OCCCO2)C(=O)C(C)CNc1ccccc2[nH]ccc12	CC(C)CN(Cc1cc(Cl)c2c(c1)OCCCO2)C(=O)C(C)CNc1ccccc2[nH]ccc12	TRUE	TRUE	FALSE
COc1ccc(-c2ccccc(F)c2)cc1-c1nccc2cc(S(=O)(=O)Nc3cncn3)ccc12	COc1ccc(-c2ccccc(F)c2)cc1-c1nccc2cc(S(=O)(=O)Nc3cncn3)ccc12	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)=CCc1c(CC=C(C)C)c(O)c(O)c2c(=O)c3c(O)cc(O)c4c(=O)cc(O)c(Cl)c4c3oc12	CC(C)=CCc1c(O)c(O)c2c(=O)c3c(O)cc(O)c4c(=O)cc(O)c(Cl)c4c3oc2c1CC=C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCC(=O)C(F)(F)F	CCCCCCCCCCC(=O)C(F)(F)F	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1c(O)c2c(c(C)c1O)CCC(C)(C(=O)NCCc1cccn1)O2	Cc1c(O)c2c(c(C)c1O)CCC(C)(C(=O)NCCc1cccn1)O2	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)NCCc2nnc(SCC(=O)N3CCc4ccccc43)o2)cc1OC	COc1ccc(C(=O)NCCc2nnc(SCC(=O)N3CCc4ccccc43)o2)cc1OC	TRUE	TRUE	FALSE
NCCN(C(=O)CC(C(=O)NCCSc1ccccc1	NCCN(C(=O)CC(C(=O)NCCSc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c(O)nnc1-c1cc(O)ncn1	Cn1c(O)nnc1-c1cc(O)ncn1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1CN1CCC(Cc2ccccc2)(c2ncn2Cc2ccccc2)CC1	COc1ccccc1CN1CCC(Cc2ccccc2)(c2ncn2Cc2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC12CCC(OC(=O)CCCN)CC1CCC1C2CCC2(C)C(C=CC(=O)CO)CCC12	CC12CCC3(C)CCC4CC(OC(=O)CCCN)CCC43C)C1CCC2C=CC(=O)CO	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccccc1)C1CC=CC2CCN(Cc3cnc3)C(=O)C21	O=C(Nc1ccccc1)C1CC=CC2CCN(Cc3cnc3)C(=O)C21	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCCNc1nccc(-c2[nH]c(CCCc3ccccc3)nc2-c2cnc(NCc3cccs3)n2)n1	CN(C)CCCNc1nccc(-c2[nH]c(CCCc3ccccc3)nc2-c2cnc(NCc3cccs3)n2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(=O)c1cc2c(cc1NS(=O)(=O)c1ccccc1F)OCCO2	CC(C)C(=O)c1cc2c(cc1NS(=O)(=O)c1ccccc1F)OCCO2	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCN1CCC(n2c(=O)[nH]c3cc(C(F)(F)F)c([N+])(=O)[O-])cc32)CC1	CCCCCCCCCN1CCC(n2c(=O)[nH]c3cc(C(F)(F)F)c([N+])(=O)[O-])cc32)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1cccc(Cn2c3ccc(O)cc3c3ccc(O)cc32)c1	CCOc1cccc(Cn2c3ccc(O)cc3c3ccc(O)cc32)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(N2CCCC2)nc(SCc2nc(O)c3ccccc3n2)n1	Cc1cc(N2CCCC2)nc(SCc2nc(O)c3ccccc3n2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(Nc2nccc(C(F)(F)F)n2)cc(-c2cnc(C3(O)CCCc4cc(C(=O)O)ccc43)s2)c1	Cc1cc(Nc2nccc(C(F)(F)F)n2)cc(-c2cnc(C3(O)CCCc4cc(C(=O)O)ccc43)s2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C(=O)C1Cq(OC(=O)NCC[Si]2(C)OC2OC(C)=O)C(=O)C2C1(C)CCC1C(=O)OC(c3ccoc3-c3ccoc3)CC12C	CO(C(=O)C1Cq(OC(=O)NCC[Si]2(C)OC2OC(C)=O)C(=O)C2C1(C)CCC1C(=O)OC(c3ccoc3-c3ccoc3)CC12C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(CO)(CO)Nc1nccc(-c2cc(Cc3ccccc(F)c3)c(O)cc2N2CCNCC2)n1	CC(CO)(CO)Nc1nccc(-c2cc(Cc3ccccc(F)c3)c(O)cc2N2CCNCC2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)C(=O)N1CCN2c3ccccc3CCCC2C1	CN(C)C(=O)N1CCN2c3ccccc3CCCC2C1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1ccc(OCCCc2c(C(=O)O)[nH]c3c(C)c(Br)ccc23)cc1	CC(=O)Nc1ccc(OCCCc2c(C(=O)O)[nH]c3c(C)c(Br)ccc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(N2CCN(C(=O)c3cc4sccc4n3Cc3cccc(OC)c3)CC2)cc1	COc1ccc(N2CCN(C(=O)c3cc4sccc4n3Cc3cccc(OC)c3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)OC(=O)NCC1ccc(Nc2ncc3cc(C(=N)N)ccc3n2)cc1	CC(C)(C)OC(=O)NCC1ccc(Nc2ncc3cc(C(=N)N)ccc3n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
FC(F)(F)c1ccccc1C1=NCC(Cc2ccccc2)N1	FC(F)(F)c1ccccc1C1=NCC(Cc2ccccc2)N1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cc1c[nH]c2ccccc12)NCCCN1CCN(c2ccccc2)CC1	O=C(Cc1c[nH]c2ccccc12)NCCCN1CCN(c2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(OCCOc2ccc(C)cc2)nn1	Cc1ccc(OCCOc2ccc(C)nn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=S1(=O)CCN(Cc2ccc3ccccc3c2)CC1	O=S1(=O)CCN(Cc2ccc3ccccc3c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(OC)cc(N(Cc#Cc2cccn2)c2ccc3ncc(-c4cnn(C)c4)nc3c2)c1	COc1cc(OC)cc(N(Cc#Cc2cccn2)c2ccc3ncc(-c4cnn(C)c4)nc3c2)c1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(=O)NCC1OC(=O)N2c3ccc(-c4cccs4)cc3C(=O)CC12	CC(=O)NCC1OC(=O)N2c3ccc(-c4cccs4)cc3C(=O)CC12	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C)Cc1ccc(CC(=O)Nc2cccc(CNc3nnc4c(C(N)=O)cccc34)c2)cc1	CCC(C)Cc1ccc(CC(=O)Nc2cccc(CNc3nnc4c(C(N)=O)cccc34)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc2c(c1)c13CCCCC1C(C2)(N(CCC1CO1)CC3	c1ccc2c(c1)CC1C3CCCCC23CCN1CC1CO1	TRUE	TRUE	TRUE
CCS(=O)(=O)N1CCN2C(=O)c3ccccc3C2CCCCC21	CCS(=O)(=O)N1CCN2C(=O)c3ccccc3C23CCCCC13	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc1-n1c(S)nnc1-c1c[nH]c2ccc(C)cc12	Cc1ccc2[nH]cc(-c3nnc(S)n3-c3ccccc3C)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(Nc1nccc(N2C(=O)OCC2C(C)O)n1)c1ccc(C(=O)Nc2cccc(O)c2)cc1	CC(Nc1nccc(N2C(=O)OCC2C(C)O)n1)c1ccc(C(=O)Nc2cccc(O)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(F)c1cn(-c2ccc(-c3ncc(Cl)cc3Cl)cc2)c2ccc(C(=O)NCC(C)(C)O)cc12	CC(C)(O)CNC(=O)c1ccc2c(c1)c(C(C)(F)cn2-c1ccc(-c2ncc(Cl)cc2Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(c1ccc(OC)c(OC)c1)[N+](=O)[O-]	CCC(c1ccc(OC)c(OC)c1)[N+](=O)[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NS(=O)(=O)c1ccc(NC(=O)C=CC(=O)N(C)C)cc1	CC(=O)NS(=O)(=O)c1ccc(NC(=O)C=CC(=O)N(C)C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=NNC(=O)c1cccn1)NCCc1ccccc1	O=C(C=NNC(=O)c1cccn1)NCCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCOC(=O)NS(=O)(=O)c1ccc(Cn2nc(C(=O)Nc3ccccc3)c3c2CCN(C(=O)OCC)C3)cc1Cl	CCCCOC(=O)NS(=O)(=O)c1ccc(Cn2nc(C(=O)Nc3ccccc3)c3c2CCN(C(=O)OCC)C3)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC(=O)c1cccs1)Nc1ccc(Cl)cc1	O=C(NC(=O)c1cccs1)Nc1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)OC(=O)C1CC1C(C)NC(=O)c1ccc2ccccc2n1	CC(C)OC(=O)C1CC1C(C)NC(=O)c1ccc2ccccc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)OC1CC2(C)C(CCC3(C)C2CC(OC(C)=O)C2C(C4(C)CCCC(C)(C)O4)CCC23C)C(O)C1OC(C)=O	CC(=O)OC1CC2(C)C(CCC3(C)C2CC(OC(C)=O)C2C(C4(C)CCCC(C)(C)O4)CCC23C)C(O)C1OC(C)=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)NC2CCOCC2N(C(=O)c2ccc(-n3ccccc3C)cc2)cc1	COc1ccc(C(=O)NC2CCOCC2N(C(=O)c2ccc(-n3ccccc3C)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(NC1COCCCN1CCC(C2CCCCC2)CC1)c1ccccc1	CCC(NC1COCCCN1CCC(C2CCCCC2)CC1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(C(=O)NC2CC2)c2ccnc2n1Cc1ccc(Cl)cc1	Cc1c(C(=O)NC2CC2)c2ccnc2n1Cc1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)C(=O)N(Cc1ccccc1)N=Nc1cc(C)cc(Cl)c1	CN(C)C(=O)N(Cc1ccccc1)N=Nc1cc(C)cc(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=C(O)C(C)(Cc2cc(O)c3oc4c(c3c2)C(C)C(CCC4(C)C)SC1=O	CC1=C(O)C(C)(Cc2cc(O)c3oc4c(c3c2)C(C)C(CCC4(C)C)SC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1O)CCCCC(CCCCN1CCCCC1	COc1ccc2c(c1O)CCCCC(CCCCN1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CN=C(S)CCc1cccc(Cl)c1	CN=C(S)CCc1cccc(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
S=C(CCCc1ccccc1)NNCc1cc(Br)cs1	S=C(CCCc1ccccc1)NNCc1cc(Br)cs1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CCc1ccc(=NC(=O)N2Cc3ccc(CNCC4ccc(F)cc4F)cc3C2)cc1	O=C(O)CCc1ccc(=NC(=O)N2Cc3ccc(CNCC4ccc(F)cc4F)cc3C2)cc1	FALSE	TRUE	TRUE
CC1C2(C)C=CC(=O)CC13CC2C1C(O)C3(O)CCC12O		FALSE	TRUE	TRUE
NC(=O)Nc1sc(-c2ccc(Cl)cc2)cc1C(=O)N1CCC2(CCCCN2)CC1	NC(=O)Nc1sc(-c2ccc(Cl)cc2)cc1C(=O)N1CCC2(CCCCN2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>Cn1cc2c(nc(NC(=O)NCC3ccc(O)c(Cl)c3)n3nc(-c4ccco4)nc23)n1</chem>	<chem>Cn1cc2c(nc(NC(=O)NCC3ccc(O)c(Cl)c3)n3nc(-c4ccco4)nc23)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC)c1ccc(C=NNC(=O)Cn2nc(C)c([N+](=O)[O-])c2C)cc1</chem>	<chem>CCN(CC)c1ccc(C=NNC(=O)Cn2nc(C)c([N+](=O)[O-])c2C)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(OC)c(Cl)c(-c2cc(-c3ccc(CN4CCC(O)CC4)cc3)nc(-c3ccccc3)c2)c1Cl</chem>	<chem>COc1cc(OC)c(Cl)c(-c2cc(-c3ccccc3)nc(-c3ccc(CN4CCC(O)CC4)cc3)c2)c1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N=C(N)c1ccc2nc(-c3ccccc3Oc4cc(Cl)cc(C(=N)N)c4)c3)oc2c1</chem>	<chem>N=C(N)c1cc(Cl)cc(OC2ccccc(-c3nc4ccc(Cl=O)N)cc4o3)c2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(CCN1CCCC1)N(C(=O)c1cccc1Cl)C1CC1</chem>	<chem>CC(CCN1CCCC1)N(C(=O)c1cccc1Cl)C1CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)NC(=O)CC1CCc2ccccc2N1C(=O)c1ccc(Cl)c(Cl)c1</chem>	<chem>CC(C)NC(=O)CC1CCc2ccccc2N1C(=O)c1ccc(Cl)c(Cl)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCCCNc1ccc(C(=O)c2ccc(NC(=O)CNCCCCCCCN)cc2C(=O)O)cc1</chem>	<chem>CCCCCCCCCNc1ccc(C(=O)c2ccc(NC(=O)CNCCCCCCCN)cc2C(=O)O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)N(CCCNC(=O)C1CCN(S(=O)(=O)c2c[nH]cn2)CC1)c1ccccc1</chem>	<chem>CC(C)N(CCCNC(=O)C1CCN(S(=O)(=O)c2c[nH]cn2)CC1)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)CCCC(=O)Nc1cc2nc[nH]c2cc1Cl</chem>	<chem>O=C(O)CCCC(=O)Nc1cc2nc[nH]c2cc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C2c3c(nc4ccccc4c3OC)C(=O)N2c2cc(C)on2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(C2c3c(nc4ccccc4c3OC)C(=O)N2c2cc(C)on2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCN1CCC(C(=O)Nc2ccc([N+](=O)[O-])cc2)CC1</chem>	<chem>CCCN1CCC(C(=O)Nc2ccc([N+](=O)[O-])cc2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc(-c2csc(N3CCCC3)n2)cc1</chem>	<chem>c1ccc(-c2csc(N3CCCC3)n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(-c2nc3nc(N4CCN(Cc5ccc(F)cc5)CC4)c4ccccc4c3[nH]2)o1</chem>	<chem>Cc1ccc(-c2nc3nc(N4CCN(Cc5ccc(F)cc5)CC4)c4ccccc4c3[nH]2)o1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC)S(=O)(=O)c1ccccc(NC(=O)CSc2nnc(Cn3cnc4ccccc43)n2C)c1</chem>	<chem>CCN(CC)S(=O)(=O)c1ccccc(NC(=O)CSc2nnc(Cn3cnc4ccccc43)n2C)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=[N+](([O-])c1ccc(CN2CCCC2=NO)o1</chem>	<chem>O=[N+](([O-])c1ccc(CN2CCCC2=NO)o1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(-c2ccccc2)c2c(c1OC)OC1c3cc(Br)ccc3OCC21O</chem>	<chem>COc1cc(-c2ccccc2)c2c(c1OC)OC1c3cc(Br)ccc3OCC21O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOc1ccccc1NC(=O)CN(C)C(=O)Cn1ncc2c([nH]c3ccccc32)c1=O</chem>	<chem>CCOc1ccccc1NC(=O)CN(C)C(=O)Cn1ncc2c([nH]c3ccccc32)c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C1CCN(C(C2CC2)C(c2ccccc2)C2CC2)CC1</chem>	<chem>c1ccc(C(C2CC2)C(C2CC2)N2CCCC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(OC(=O)N(CC2CCCO2)C2CCCC2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(OC(=O)N(CC2CCCO2)C2CCCC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(O)c1ccc(O)cc1</chem>	<chem>CC(O)c1ccc(O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>N#CC1=C(C(OCcOc2ccccc2[N+](=O)O)C(N)C2C(C1)C2(F)F</chem>	<chem>N#CC1=C(C(OCcOc2ccccc2[N+](=O)O)C(N)C2C(C1)C2(F)F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC(CCC1CCCC1)C(=O)NC1CCCC1NS(=O)(=O)c1ccc(Cl)c(Cl)c1</chem>	<chem>NC(CCC1CCCC1)C(=O)NC1CCCC1NS(=O)(=O)c1ccc(Cl)c(Cl)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)c1c(-c2ccccc([N+](=O)[O-])c2)csc1NC(=O)c1ccc(C#N)cc1</chem>	<chem>CCOC(=O)c1c(-c2ccccc([N+](=O)[O-])c2)csc1NC(=O)c1ccc(C#N)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1ccncc1)OC1(c2ccccc2)CCCC1</chem>	<chem>O=C(Nc1ccncc1)OC1(c2ccccc2)CCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc2[nH]c3c(c2c1)CC(=O)Nc1ccc(NC(=S)Nc2ccc(Cl)cc2)cc1-3</chem>	<chem>COc1ccc2[nH]c3c(c2c1)CC(=O)Nc1ccc(NC(=S)Nc2ccc(Cl)cc2)cc1-3</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1ccnc(N2CCCC(c3nc4ccncc4[nH]3)C2)c1</chem>	<chem>Nc1ccnc(N2CCCC(c3nc4ccncc4[nH]3)C2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1ccc(Cl)cc1)Nc1cccc(C(F)(F)F)c1</chem>	<chem>O=C(Nc1ccc(Cl)cc1)Nc1cccc(C(F)(F)F)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)c1cnc2c(c1)S(=O)(=O)C=Cc1ccc(O)c(O)c1)N2</chem>	<chem>COC(=O)c1cnc2c(c1)S(=O)(=O)C=Cc1ccc(O)c(O)c1)N2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(Cl)cc(Cl)c1OCCc1c(C)nnn1C</chem>	<chem>Cc1cc(Cl)cc(Cl)c1OCCc1c(C)nnn1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(Nc2nc3c(s2)CCCC2n[nH]cc2-3)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(Nc2nc3c(s2)CCCC2n[nH]cc2-3)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=C(CO)c1cccc(C(C)C)NC(=S)Nc2ccc3c(c2)CCC3)c1</chem>	<chem>C=C(CO)c1cccc(C(C)C)NC(=S)Nc2ccc3c(c2)CCC3)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1C=C(C(N2CC2)C(=O)c2c(O)ccccc21</chem>	<chem>O=C1C=C(C(N2CC2)C(=O)c2c(O)ccccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCn1c(C)cc(C)c1C=CC#N</chem>	<chem>CCN1c(C)cc(C)c1C=CC#N</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)CCCN=C(S)Nc1c(Cl)cc(Cl)cc1Cl</chem>	<chem>CN(C)CCCN=C(S)Nc1c(Cl)cc(Cl)cc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c(CNCC2CCN(C(=O)OC(C)(C)C)CC2)c(C(=O)O)c(C)n1-c1ccccc1</chem>	<chem>Cc1c(CNCC2CCN(C(=O)OC(C)(C)C)CC2)c(C(=O)O)c(C)n1-c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)c1ccccc(NC(=O)C(C)CCCC(=O)NO)NC(=O)CCc2ccc3c(c2)CCC3)c1</chem>	<chem>COC(=O)c1ccccc(NC(=O)C(C)CCCC(=O)NO)NC(=O)CCc2ccc3c(c2)CCC3)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)CS(=O)(=O)c1ccc(OCc2ccccc2Br)cc1</chem>	<chem>O=C(O)CS(=O)(=O)c1ccc(OCc2ccccc2Br)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(-c2sc3cc(O)ccc3c2C(=O)c2ccc(OC)cc2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(C(=O)c2c(-c3ccc(OC)cc3)sc3cc(O)ccc23)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(-c2ccccc3c(O)c(OC)ccc23)c(Cl)cc1N</chem>	<chem>COc1cc(-c2ccccc3c(O)c(OC)ccc23)c(Cl)cc1N</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=[N+](([O-])c1cc(CCO)ccc1C(F)F)F</chem>	<chem>O=[N+](([O-])c1cc(CCO)ccc1C(F)F)F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>OC1CN(C2(c3ccc(Cl)c(Cl)c3)CC2)Cc2ccccc21</chem>	<chem>OC1CN(C2(c3ccc(Cl)c(Cl)c3)CC2)Cc2ccccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(c1ccccc1)c1ccc(OCcCN2CCCC2)cc1</chem>	<chem>O=C(c1ccccc1)c1ccc(OCcCN2CCCC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CCOc1ccc(C(C)N2C(=O)NC(=Cc3ccc(OC(=O)c4ccco4)cc3)C2=O)cc1OCC</chem>	<chem>CCOc1ccc(C(C)N2C(=O)NC(=Cc3ccc(OC(=O)c4ccco4)cc3)C2=O)cc1OCC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(CNC(=O)CCC(=O)NC(=O)CCNc2cc(C(=O)O)cc(N3CCC(=C(F)F)CC3)c2)cc(OC)c1OC</chem>	<chem>COc1cc(CNC(=O)CC(C)=O)NC(=O)CCNc2cc(C(=O)O)cc(N3CCC(=C(F)F)CC3)c2)cc(OC)c1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#Cc1ccc(NC(=O)CO(C(=O)C=Cc2ccc(Cl)cc2)cc1</chem>	<chem>N#Cc1ccc(NC(=O)CO(C(=O)C=Cc2ccc(Cl)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)CC=CC(=O)Nc1ccc(Nc2nc(Nc3ccccc(NC(C)(C)C)c3)ncc2F)cc1</chem>	<chem>CN(C)CC=CC(=O)Nc1ccc(Nc2nc(Nc3ccccc(NC(C)(C)C)c3)ncc2F)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCC(=O)OC1=C(C(N(CC)CC)C(=O)C(C)CCC)c2ccccc2)=C(OC)C1=O</chem>	<chem>CCCC(=O)OC1=C(C(N(CC)CC)C(=O)C(C)CCC)c2ccccc2)=C(OC)C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1c(C(=O)NCCP(=O)(O)O)ccc1CC(N)C(=O)O</chem>	<chem>Cn1c(CC(N)C(=O)O)ccc1C(=O)NCCP(=O)(O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CS(=O)(=O)Nc1ccc(-c2ccc(N3CCC(N)CC3)nn2)cc1</chem>	<chem>CS(=O)(=O)Nc1ccc(-c2ccc(N3CCC(N)CC3)nn2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCN1CCN(C(C)C)C(CCO)C1</chem>	<chem>CCCN1CCN(C(C)C)C(CCO)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(S(C)(=O)=O)ccc1Nc1ncc2c(n1)CN(C1COCCC1C)CC2</chem>	<chem>COc1cc(S(C)(=O)=O)ccc1Nc1ncc2c(n1)CN(C1COCCC1C)CC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccccc(-c2ccccc(NCC3CCCO3)n2)c1</chem>	<chem>COc1ccccc(-c2ccccc(NCC3CCCO3)n2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc2nc(NC(=O)C(N)CS)nc(O)c2c1</chem>	<chem>COc1ccc2nc(NC(=O)C(N)CS)nc(O)c2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=c1[nH]c(=O)n(C2CC(O)C(CO)C2)cc1-c1ccc(-c2ccccc2)cc1</chem>	<chem>O=c1[nH]c(=O)n(C2CC(O)C(CO)C2)cc1-c1ccc(-c2ccccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc2cc(S(=O)(=O)NC3=NCC4(CCCCC4)S3)ccc2c1</chem>	<chem>COc1ccc2cc(S(=O)(=O)NC3=NCC4(CCCCC4)S3)ccc2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(C=Cc1ccccc1)OCC(=O)N1CCN(S(=O)(=O)C=Cc2ccccc2)CC1</chem>	<chem>O=C(C=Cc1ccccc1)OCC(=O)N1CCN(S(=O)(=O)C=Cc2ccccc2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#Cc1ccc2c1nc(O)c1ccccc12</chem>	<chem>N#Cc1ccc2c1nc(O)c1ccccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)NC1C(NC(=N)N)C=C(C(=O)O)OC1C(N)c1ccccc1</chem>	<chem>CC(=O)NC1C(NC(=N)N)C=C(C(=O)O)OC1C(N)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=CCN(C(=O)c1ccn(C)c(=O)c1Cl</chem>	<chem>C=CCN(C(=O)c1ccn(C)c(=O)c1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCN(CCCC)C(=O)c1nn(-c2ccc(C(=O)NS(=O)(=O)c3ccc4ccccc4c3)cc2C(=O)N2CCc3ccccc3C2)c(C)C1Cl</chem>	<chem>CCCCN(CCCC)C(=O)c1nn(-c2ccc(C(=O)NS(=O)(=O)c3ccc4ccccc4c3)cc2C(=O)N2CCc3ccccc3C2)c(C)C1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#Cc1ccc(C=Cc2ccccc2)cc1C=NO</chem>	<chem>N#Cc1ccc(C=Cc2ccccc2)cc1C=NO</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C#CCCCC=CC(O)CCC=CC(CO)P(=O)(O)O</chem>	<chem>C#CCCCC=CC(O)CCC=CC(CO)P(=O)(O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CN(c2cncc(C(N)=O)c2)CCN1c1ncc2c(n1)CN(C)CC2c1ccccc1Cl</chem>	<chem>CC1CN(c2cncc(C(N)=O)c2)CCN1c1ncc2c(n1)CN(C)CC2c1ccccc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCNC(=O)COC(=O)c1cc(C)n(Cc2ccccc2)c1C</chem>	<chem>CCNC(=O)COC(=O)c1cc(C)n(Cc2ccccc2)c1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(N)C(=S)NN=CCCCCCCCCCCCCN1=C(c2cc3ccccc3s2)C(=O)NC1=O</chem>	<chem>CN(N)C(=S)NN=CCCCCCCCCCCCCCCN1=C(c2cc3ccccc3s2)C(=O)NC1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC(Cc1ccc(O)cc1)C(=O)Nc1ccc2ccccc2c1</chem>	<chem>NC(Cc1ccc(O)cc1)C(=O)Nc1ccc2ccccc2c1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>COc1cc(C=Nc2ccnc3ccccc23)cc(OC)c1OCc1ccccc1</chem>	<chem>COc1cc(C=Nc2ccnc3ccccc23)cc(OC)c1OCc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(O)CC(NC(=O)c1ccc(CO[N+](=O)[O-])o1)C(=O)NC1CCCCN(Cc2ccccc2)C1=O</chem>	<chem>CC(C)CC(NC(=O)c1ccc(CO[N+](=O)[O-])o1)C(=O)NC1CCCCN(Cc2ccccc2)C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC)CCNc1ccn2c(-c3ccccc(NC(=O)Nc4ccc(F)c(C(F)(F)F)c4)c3)cn2n1</chem>	<chem>CCN(CC)CCNc1ccn2c(-c3ccccc(NC(=O)Nc4ccc(F)c(C(F)(F)F)c4)c3)cn2n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CC2C(C)C(C)C(C)CC(=O)COC3OC4OC5(C)CC6C(C)CCC(C3C)C46OO5)OC3OC4(C)CCC1C32OO4</chem>	<chem>CC1CC2C(C)C(C)C(C)CC(=O)COC3OC4OC5(C)CC6C(C)CCC(C3C)C46OO5)OC3OC4(C)CCC1C32OO4</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C#CC=CCCCC#CC=CC(C)O</chem>	<chem>C#CC=CCCCC#CC=CC(C)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc2c(cc1OC)C=C(Cc1CCN(Cc3ccccc3)CC1)C(=O)N2</chem>	<chem>COc1cc2cc(C3CCN(Cc4ccccc4)CC3)c(=O)[nH]c2cc1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)OC1CCC2(C)C(CCC3C4=C(CCC32)C(C)(C(=O)O)CCC4)C1</chem>	<chem>CC(=O)OC1CCC2(C)C(CCC3C4=C(CCC32)C(C)(C(=O)O)CCC4)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(C2OC(CO)C(O)C(O)C2O)cn2Cl</chem>	<chem>Cc1cc(C2OC(CO)C(O)C(O)C2O)cn2Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(-c2cc3nc(-c4ccccc4)nn3c(N)n2)cc1OC</chem>	<chem>COc1ccc(-c2cc3nc(-c4ccccc4)nn3c(N)n2)cc1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc(C2CC3CCC(C2)N3O2CCCCC2)cc1</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(Cc2c(-c3cc(OC)c(OC)c(OC)c3)sc3ccc(N)cc23)cc(OC)c1O</chem>	<chem>COc1cc(Cc2c(-c3cc(OC)c(OC)c(OC)c3)sc3ccc(N)cc23)cc(OC)c1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCn1c(=C2C(=O)Nc3ccc(Br)cc32)sc(=Cc2cccc(C)n2)c1=O</chem>	<chem>CCn1c(=C2C(=O)Nc3ccc(Br)cc32)sc(=Cc2cccc(C)n2)c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(Cn1cccn1)NC(=O)NCCc1noc(C(C2CCCC2)C2CC2)n1</chem>	<chem>CC(Cn1cccn1)NC(=O)NCCc1noc(C(C2CCCC2)C2CC2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)CCCCCCCCCN(Cc1ccccc1)C(=O)C(F)(F)F</chem>	<chem>O=C(O)CCCCCCCCCN(Cc1ccccc1)C(=O)C(F)(F)F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc2[nH]c(s)nc2c1</chem>	<chem>Cc1ccc2[nH]c(s)nc2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)CCOc1oc(CCc2cccc3ccccc23)nc1C#N</chem>	<chem>CN(C)CCOc1oc(CCc2cccc3ccccc23)nc1C#N</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc(Nc2nc3ccccc3n3cnnc23)cc1</chem>	<chem>c1ccc(Nc2nc3ccccc3n3cnnc23)cc1</chem>	TRUE	FALSE	FALSE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CCN1CC(C)(C)Oc2nc(N3CC4CCC(C3)O4)nc(-c3ccc(NC(O)=Nc4ccc(N(C)C)cn4)c(F)c3)c2C1=O	CCN1CC(C)(C)Oc2nc(N3CC4CCC(C3)O4)nc(-c3ccc(NC(O)=Nc4ccc(N(C)C)cn4)c(F)c3)c2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(NC(=O)CC2CCC3(CC2)OOC2COOC2O3)c(OC)cc1Cl	COc1cc(NC(=O)CC2CCC3(CC2)OOC2COOC2O3)c(OC)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c(C=CC2C3=C(CCCC3(C)C)CC3(OC3OC(=O)C(CCCCC(N)=O)NC(=O)OC(C)(C)C)N2C(=O)OC(C)(C)C)nc2cccc21	Cn1c(C=CC2C3=C(CCCC3(C)C)CC3(OC3OC(=O)C(CCCCC(N)=O)NC(=O)OC(C)(C)C)N2C(=O)OC(C)(C)C)nc2cccc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1Nc2ccc([N+](=O)[O-])[O-])cc2C1=C1Nc2cccc2C1=NO	O=C1Nc2ccc([N+](=O)[O-])[O-])cc2C1=C1Nc2cccc2C1=NO	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(F)cc1)c1nnsc1Cl	O=C(Nc1ccc(F)cc1)c1nnsc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
Sc1nnc(Cc2cccc2)o1	Sc1nnc(Cc2cccc2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
C#Cc1cn2c(-c3ccc(C(=O)NC4CC4)cc3F)ene2c(NCC(C)O)n1	C#Cc1cn2c(-c3ccc(C(=O)NC4CC4)cc3F)ene2c(NCC(C)O)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(-n2nc(C(F)(F)F)cc2C2CC2)c(F)c1)c1nc(C2CC2)cn1Nc1cnncn1	O=C(Nc1ccc(-n2nc(C(F)(F)F)cc2C2CC2)c(F)c1)c1nc(C2CC2)cn1Nc1cnncn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(NC(=O)c1ccccc1Cl)C(=O)NCC12CC3CC(CCC(C3)C1)C2	CC(C)C(NC(=O)c1ccccc1Cl)C(=O)NCC12CC3CC(CCC(C3)C1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1ccc(NC=CC(=O)c2ccc(O)cc2)cc1	CC(=O)Nc1ccc(NC=CC(=O)c2ccc(O)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2nc3cc(Cl)ccc3c(Nc3cccc(NC(C)=O)c3)c2c1	COc1ccc2nc3cc(Cl)ccc3c(Nc3cccc(NC(C)=O)c3)c2c1	TRUE	TRUE	FALSE
C=CC12CN3CCN(C(=O)c4cccn4)C(Cc4ccc(OC)cc41)C3(C)CC1(CC2)OC1=O	C=CC12CCC3(CC4(C)C(Cc5ccc(OC)cc51)N(C(=O)c1cccn1)CCN4C2)OC3=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(OC)c(CCNCCC2(c3cccc(C)c3)OCCO2)c1	COc1ccc(OC)c(CCNCCC2(c3cccc(C)c3)OCCO2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1csc(-c2nc3nc(C)cc(C)n3c2Cc2cc(Cl)ccc2OCC(=O)NCC(N)=O)n1	Cc1csc(-c2nc3nc(C)cc(C)n3c2Cc2cc(Cl)ccc2OCC(=O)NCC(N)=O)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCCOc1ccc2[nH]c3nc(O)nc-3cc2c1)Nc1cccc1C(F)(F)F	O=C(CCCOc1ccc2[nH]c3nc(O)nc-3cc2c1)Nc1cccc1C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nccn1-c1ccc(-c2cccc2F)cc1	Cc1nccn1-c1ccc(-c2cccc2F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C(=O)O)N(Cc1cccc1[N+](=O)[O-])S(=O)(=O)NC(=O)NCc1cccc1	CC(C(=O)O)N(Cc1cccc1[N+](=O)[O-])S(=O)(=O)NC(=O)NCc1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C=O)C1(C)C2CCC(C)(N2C)CC1C(=O)O	CO(C=O)C1(C)C2CCC(C)(N2C)CC1N2C	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1c(C(=O)N(C)CCOC)cc2c1-c1n[nH]c(-c3cccc(C(F)(F)F)c3)c1C2	CCn1c(C(=O)N(C)CCOC)cc2c1-c1n[nH]c(-c3cccc(C(F)(F)F)c3)c1C2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C1(O)CCC2(C)C(CCC3C4CCC(=O)C4(C)CCC32)C1	CC(C)C1(O)CCC2(C)C(CCC3C4CCC(=O)C4(C)CCC32)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC1(C)C(=O)NC(=S)NC1=O	CCCCC1(C)C(=O)NC(=S)NC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)Cc1nc(N2CCCCC2Cn2cccn2)ncc1C#N	CC(C)Cc1nc(N2CCCCC2Cn2cccn2)ncc1C#N	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)CCC(N2CCC3(CC2)C(=O)Nc2ccc(NC(=O)Nc4cccc4)cc23)c2cc(Br)ccc21	CC1(C)CCC(N2CCC3(CC2)C(=O)Nc2ccc(NC(=O)Nc4cccc4)cc23)c2cc(Br)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(C)C(S(=O)(=O)c1ccc(S(=O)(=O)N2CCN(C(=O)c3cccs3)CC2)cc1	CCN(C)C(S(=O)(=O)c1ccc(S(=O)(=O)N2CCN(C(=O)c3cccs3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC=C(C(=O)OC)c1cccc1COc1nc(OC(OC)(C(C)C)C(C)C)c(F)c(C)c1Cl	COC=C(C(=O)OC)c1cccc1COc1nc(OC(OC)(C(C)C)C(C)C)c(F)c(C)c1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1OC(COc2cccc2)CN1c1ccc(N2CCC(C(F)(F)F)CC2)cn1	O=C1OC(COc2cccc2)CN1c1ccc(N2CCC(C(F)(F)F)CC2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOCCOC(=O)CC(C)=O	CCOCCOC(=O)CC(C)=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc1OCCNCC12CCC3(O1)C1Cc4ccc(O)c5c4C3(CCN1CC1CC1)C2O5	COc1cccc1OCCNCC12CCC3(O1)C1Cc4ccc(O)c5c4C3(CCN1CC1CC1)C2O5	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(NC(=O)OC)C(=O)Nc1CCC2(O)C3Cc4ccc(O)c5c4C2(CCN3CC2CC2)C1O5	CC(C)C(NC(=O)OC)C(=O)Nc1CCC2(O)C3Cc4ccc(O)c5c4C2(CCN3CC2CC2)C1O5	TRUE	TRUE	TRUE
CCOCC1CN(C(=O)c2ccnc(F)c2)Cc2cn(CCC3CC3)nc21	CCOCC1CN(C(=O)c2ccnc(F)c2)Cc2cn(CCC3CC3)nc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C=O)n1nc(-c2ccc(Cl)cc2)nc1OCc1cccc1	CC(C=O)n1nc(-c2ccc(Cl)cc2)nc1OCc1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCc1ccc(Nc2nc(N)nc(CS(C=S)N3CCN(C)CC3)n2)cc1	CCCCc1ccc(Nc2nc(N)nc(CS(C=S)N3CCN(C)CC3)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1cccc1)N1CCCCN1CCc1cccn1	O=C(c1cccc1)N1CCCCN1CCc1cccn1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2cc(C(C)c3nn4c(F)cc(-c5ccoc5)cn34)ccc2c1	COc1ccc2cc(C(C)c3nn4c(F)cc(-c5ccoc5)cn34)ccc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)N(C)CCSCc2cccc2)C(=O)OC)cc1	COc1ccc(C(=O)N(C)CCSCc1cccc1)NC(=O)c1ccc(OC)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cccc2c(=O)cc(-c3cccc3)oc12)Nc1CCC(C)CC1	CC1CCC(NC(=O)Nc2cccc3c(=O)cc(-c4cccc4)oc23)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC#CC#Cc1nc(N)c2nnc(C3OC(CO)C(O)C3O)c2n1	CCCC#CC#Cc1nc(N)c2nnc(C3OC(CO)C(O)C3O)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cc(C(F)(F)F)c[nH]c1=O)c1ccc(Cl)cc1	O=C(Nc1cc(C(F)(F)F)c[nH]c1=O)c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C(=O)C(C(=O)C)=Nn1c(S)nnc1-c1ccco1)=C(C)NNC(=O)c1cccc1OC	CCOC(=O)C(=O)C(C(=O)C)=Nn1c(S)nnc1-c1ccco1)=C(C)NNC(=O)c1cccc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CCNC(=S)N1CCC(c2cccn2)=N1	CCNC(=S)N1CCC(c2cccn2)=N1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc2ccc(NC(=O)NCC(=O)N3CCC(Cc4ccc(F)cc4)CC3)cc2o1	Cc1nc2ccc(NC(=O)NCC(=O)N3CCC(Cc4ccc(F)cc4)CC3)cc2o1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1CCCN(C(=O)c2ccc(-c3cc(F)c(F)cc3F)s2)C1)c1ccc(OCC2CC2)nc1	O=C(Nc1CCCN(C(=O)c2ccc(-c3cc(F)c(F)cc3F)s2)C1)c1ccc(OCC2CC2)nc1	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C=O)C1Cc2c([nH]c3cccc23)C(C)(C)N1CCCl	CO(C=O)C1Cc2c([nH]c3cccc23)C(C)(C)N1CCCl	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(Sc2cccc2)cc1	c1ccc(Sc2cccc2)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
CC1(NC(=O)Cc2cccc2Cc2ccc3cccc3c2)CCS(=O)(=O)C1	CC1(NC(=O)Cc2cccc2Cc2ccc3cccc3c2)CCS(=O)(=O)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C1NC(=O)C(C)C(C)C(Cc2cccc2)NC(=O)C(C)NC(=O)C(CCCNC(=N)N)NC(=O)COc2cccc2)C(C)C)NC(C)(C)SC1=O	CC(C)C1NC(=O)C(C)C(C)C(Cc2cccc2)NC(=O)C(C)NC(=O)C(CCCNC(=N)N)NC(=O)COc2cccc2)C(C)C)NC(C)(C)SC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CN1CCN(CCc2ccc(F)cc2)CC1)NN=Cc1cccc([N+](=O)[O-])c1	O=C(CN1CCN(CCc2ccc(F)cc2)CC1)NN=Cc1cccc([N+](=O)[O-])c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1c2cccc(C(N)=O)c2N(C)C(=O)c2ccc([N+](=O)[O-])nc21	CN1C(=O)c2ccc([N+](=O)[O-])nc2N(C)c2cccc(C(N)=O)c21	TRUE	TRUE	TRUE
N#CC1(c2cccn2Oc2ccc(l)cc2)CCN(CC2CC2c2cccc2)CC1	N#CC1(c2cccn2Oc2ccc(l)cc2)CCN(CC2CC2c2cccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)SCCC(N)C(=O)NCc1ccccc1	CC(C)(C)SCCC(N)C(=O)NCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CNC(=O)N(C(=O)NCCOc2cccc(F)c2)C(C)C)c(F)c1	COc1ccc(CNC(=O)N(C(=O)NCCOc2cccc(F)c2)C(C)C)c(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nccn1-c1cc(C=O)enc1Oc1ccc(C(=O)O)cc1Cl	Cc1nccn1-c1cc(C=O)enc1Oc1ccc(C(=O)O)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1ccc(-c2csc(N3N=C(c4cccs4)CC3c3ccc4c(c3)OCO4)n2)cc1	CC(=O)Nc1ccc(-c2csc(N3N=C(c4cccs4)CC3c3ccc4c(c3)OCO4)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1cc(CNC(=O)C2CCC(=O)N2C(C)C)on1	CCc1cc(CNC(=O)C2CCC(=O)N2C(C)C)on1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1nn(-c2ccnc(N=C(O)c3ccc4cc5n(c4c3)CCNC5=O)c2)c(CN2CCC3(CC2)OCCO3)n1	CC(C)c1nc(CN2CCC3(CC2)OCCO3)n(-c2ccnc(N=C(O)c3ccc4cc5n(c4c3)CCNC5=O)c2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cn1[nH]c(=O)c2cccc2c1=O)Nc1cccc(Br)c1	O=C(Cn1[nH]c(=O)c2cccc2c1=O)Nc1cccc(Br)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCC=CC(O)C1COC(=O)N1C(=O)C(CO)NC(=O)C1CCN1C(=O)OC(C)(C)C	CCCCCCCC=CC(O)C1COC(=O)N1C(=O)C(CO)NC(=O)C1CCN1C(=O)OC(C)(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(NC(=O)C=CC(C(=O)O)Cc2cc3cc(C)ccc3n2Cc2ccc(Br)cc2)c1	COc1cccc(NC(=O)C=CC(C(=O)O)Cc2cc3cc(C)ccc3n2Cc2ccc(Br)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)OC(=O)CSc1nnc(NC(=O)c2ccc(S(=O)(=O)N(C)C3CCCC3)cc2)s1	CC(C)OC(=O)CSc1nnc(NC(=O)c2ccc(S(=O)(=O)N(C)C3CCCC3)cc2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1ccc(-c2ccc(Nc3cccc3l)c(C(=O)O)c2)c(Cl)c1	CC(C)(C)c1ccc(-c2ccc(Nc3cccc3l)c(C(=O)O)c2)c(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCNC(=S)Nn1c(SC)nnc1-c1cccc1O	C=CCNC(=S)Nn1c(SC)nnc1-c1cccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOP(C=C1SC(=O)N(CCc2cccc2)C1=O)OCC	CCOP(C=C1SC(=O)N(CCc2cccc2)C1=O)OCC	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCC2(CC1)CN(C(CCO)c1cccc1)C(=O)N2c1cccc(F)c1	CN1CCC2(CC1)CN(C(CCO)c1cccc1)C(=O)N2c1cccc(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CNc2ncc3c(n2)-c2cccc2NC(=O)C3)cc1	COc1ccc(CNc2ncc3c(n2)-c2cccc2NC(=O)C3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ccc(Cn2cncc2CN2Cc3ccc(N4CCN(CCO)C4=O)cc3CN(Cc3cccc(F)c3)C2=O)cc1	N#Cc1ccc(Cn2cncc2CN2Cc3ccc(N4CCN(CCO)C4=O)cc3CN(Cc3cccc(F)c3)C2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C=Cc2c(OC)cc(CC=C(C)C)cc2F)cc1	COc1ccc(C=Cc2c(F)cc(CC=C(C)C)cc2OC)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NN1CCC(c2cccc2)CC1)Nc12CC3CC(C(C3)C1)C2	O=C(NN1CCC(c2cccc2)CC1)Nc12CC3CC(C(C3)C1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
CC=C1(C)C(C)C(C)C2(C)C1CC1OC(=O)C(OC(=O)c3cccc(OO)c3)C3(C)=C4C=CC(C)C1C432	CC=C1(C)C(C)C(C)C2(C)C1CC1OC(=O)C(OC(=O)c3cccc(OO)c3)C3(C)=C4C=CC(C)C1C432	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)N(C)Cc1cccc(OCc2nc3cccc(OCc4cccc4)c3s2)c1	CNC(=O)N(C)Cc1cccc(OCc2nc3cccc(OCc4cccc4)c3s2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CNC(=O)Nc2ccc3c(c2)CN(C)C(=O)C3)cc1Br	COc1ccc(CNC(=O)Nc2ccc3c(c2)CN(C)C(=O)C3)cc1Br	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1c(OCc2ccc3cccc3c2)nc[nH]c1=O	CCOC(=O)c1c(OCc2ccc3cccc3c2)nc[nH]c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1onc(-c2cccc2)c1C(=O)Nc1ccc2oc(-c3cccc3)nc2c1	Cc1onc(-c2cccc2)c1C(=O)Nc1ccc2oc(-c3cccc3)nc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1cccc1)c1cn(CC2Cc3c(Cl)cccc3C2)c2ccc(O)c12	O=C(c1cccc1)c1cn(CC2Cc3cccc(Cl)c3C2)c2ccc(O)c12	TRUE	TRUE	TRUE
CN(CCOCCN(c1cccc(F)n1)c1cccc2cccc12)S(=O)(=O)c1ccc(O)cc1	CN(CCOCCN(c1cccc(F)n1)c1cccc2cccc12)S(=O)(=O)c1ccc(O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1cccc(-c2ccc3c(Nc4cccc(C(F)(F)F)c4)ncnc3c2)c1	CC(=O)Nc1cccc(-c2ccc3c(Nc4cccc(C(F)(F)F)c4)ncnc3c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCSc1nc2cccc2n1CC(=O)Nc1ccc(C)c(Cl)c1	CCCCSc1nc2cccc2n1CC(=O)Nc1ccc(C)c(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(Cc2c(Cl)nc(N)nc2O)cc(N(CCF)CCO)c1OC	COc1cc(Cc2c(O)nc(N)nc2Cl)cc(N(CCO)CCF)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1[nH]c2cccc2c1-c1cc(NC2CCN2)n2nncn2n1	Cc1[nH]c2cccc2c1-c1cc(NC2CCN2)n2nncn2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CN(c2cccc3c2c(=O)c(C(=O)O)cn3CCOc2cccc2)CC(C)O1	CC1CN(c2cccc3c2c(=O)c(C(=O)O)cn3CCOc2cccc2)CC(C)O1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1cccc(N(C)C(=S)NC(=O)c2coc3cccc3c2=O)c1	CCOc1cccc(N(C)C(=S)NC(=O)c2coc3cccc3c2=O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)COC(c2nc3cc(Cl)ccc3n2Cc2c(F)cccc2C(F)(F)F)OC1	CC1(C)COC(c2nc3cc(Cl)ccc3n2Cc2c(F)cccc2C(F)(F)F)OC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(OC1c(C=Cc2ccnc3cccc23)c(O)nc2cccc12)c1cccc2ccncc12	O=C(OC1c(C=Cc2ccnc3cccc23)c(O)nc2cccc12)c1cccc2ccncc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(CO)Nc1nc(Nc2cc(C3CC3)[nH]n2)c2nnc(C(C)C)c2n1	CC(C)C(CO)Nc1nc(Nc2cc(C3CC3)[nH]n2)c2nnc(C(C)C)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
O=C1c2ccc(Cc3cccc(Cl)c3)nc2CCN1N1CCNCC1	O=C1c2ccc(Cc3cccc(Cl)c3)nc2CCN1N1CCNCC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCC(=O)N1CCCC1)Nc1cccc2c1C(=O)c1c-2n[nH]c1C1OC(CO)C(O)C(O)C1O	O=C(CCC(=O)N1CCCC1)Nc1cccc2c1C(=O)c1c-2n[nH]c1C1OC(CO)C(O)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=C(c2cccc(C(=O)NCc3cn(Cc4cccc4)nn3)c2)[N+](=[O-])=C(c2cccc2)CC1(C)C	CC1=C(c2cccc(C(=O)NCC3cn(Cc4cccc4)nn3)c2)[N+](=[O-])=C(c2cccc2)CC1(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(Cl)c1NC(=O)c1cnc(NC(=O)c2cccc(CN)c2)cc1CCOCc1cccc1	Cc1cccc(Cl)c1NC(=O)c1cnc(NC(=O)c2cccc(CN)c2)cc1CCOCc1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Nc2ccc(NC(=O)c3cccc3OC)cc2)c2c1CCCN(C)C2	COc1cccc1C(=O)Nc1ccc(Nc2ccc(OC)c3c2CN(C)CCC3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOCCCN(C=O)CC(C)=NNC(=O)COc1cccc1	CCOCCCN(C=O)CC(C)=NNC(=O)COc1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ncccc1C(=O)Nc1ccc(Cc2ncnc3c2nnc3C2OC(CO)C(O)C2O)cc1	COc1ncccc1C(=O)Nc1ccc(Cc2ncnc3c2nnc3C2OC(CO)C(O)C2O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCc1cc2c(cn1)c(Sc1c(C)cc(C)cc1C)nc1sc(C)c(C)n12	FALSE	TRUE	TRUE	TRUE
COCCC1(CNC(=O)NCC2cccc(OC(F)(F)F)c2)CCCC1	COCCC1(CNC(=O)NCC2cccc(OC(F)(F)F)c2)CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(-c2cccc2Cl)c(F)cc1-n1c(=O)ccc2cc(S(=O)(=O)Nc3ccon3)ccc21	COc1cc(-c2cccc2Cl)c(F)cc1-n1c(=O)ccc2cc(S(=O)(=O)Nc3ccon3)ccc21	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1cc(-c2nnc(C3CN4CCSC4=CC3c3cccc3)o2)no1	Cc1cc(-c2nnc(C3CN4CCSC4=CC3c3cccc3)o2)no1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ncnc(-c2ccc(C(=O)N3CCC4(CC3)CN(C)C(=O)O4)c(C)c2)c1C#Cc1ccc(N)nc1	CCc1ncnc(-c2ccc(C(=O)N3CCC4(CC3)CN(C)C(=O)O4)c(C)c2)c1C#Cc1ccc(N)nc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCNC1=C(Cl)C(=O)c2[nH]ccc2C1=O	CCCCNC1=C(Cl)C(=O)c2[nH]ccc2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)N(CCN(C(=O)c1c(-c2cccc2)ccc2c1[nH]c1cccc12)c1cccc1)c1cccc1	CC(=O)N(CCN(C(=O)c1c(-c2cccc2)ccc2c1[nH]c1cccc12)c1cccc1)c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(N=C(O)COc1ccc(C#N)cc1)C12CC3CC(C(C3)C1)C2	CC(N=C(O)COc1ccc(C#N)cc1)C12CC3CC(C(C3)C1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(-c2cccc2OCC2CC2)ccc1-c1nc(C)c(OCc2CC2c2cccc(OCCC(=O)O)c2)c(C)c1C	Cc1cc(-c2cccc2OCC2CC2)ccc1-c1nc(C)c(OCc2CC2c2cccc(OCCC(=O)O)c2)c(C)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1cc(Br)ccc1NC(=O)Nc1ccc(OCCCN2CCC(C(N)=O)CC2)cc1	CC(C)(C)c1cc(Br)ccc1NC(=O)Nc1ccc(OCCCN2CCC(C(N)=O)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(N2CCC3CN(C(=O)c4cncc(F)c4-c4ncccn4)CC32)nn1	Cc1ccc(N2CCC3CN(C(=O)c4cncc(F)c4-c4ncccn4)CC32)nn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)n1cc(CN2CCCN(C(=O)c3ccc(-n4cnncn4)nc3)CC2)cn1	CC(C)n1cc(CN2CCCN(C(=O)c3ccc(-n4cnncn4)nc3)CC2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(CCN1CC2CN(Cc3cccc3F)CC(C1)O2)S(=O)(=O)c1cccc1	CN(CCN1CC2CN(Cc3cccc3F)CC(C1)O2)S(=O)(=O)c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CNC(=O)c2cc(F)ccc2OCc2cccc2)c(OC)c1	COc1ccc(CNC(=O)c2cc(F)ccc2OCc2cccc2)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCCCCC(=O)C1=C(O)C2(OC=C1)C(=O)N1CC=CCC12	CCCCCCCCCCCCCCC(=O)C1=C(O)C2(OC=C1)C(=O)N1CC=CCC12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(C(=O)N(C)CCc2cncnc2)cnnc1-c1ccc(Cl)cc1	Cc1c(C(=O)N(C)CCc2cncnc2)cnnc1-c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NCc1cccc1COC(=O)c1ccncc1	NCc1cccc1COC(=O)c1ccncc1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=NOC(=O)c1cc2cccc2o1)c1cccc([N+](=O)[O-])c1	NC(=NOC(=O)c1cc2cccc2o1)c1cccc([N+](=O)[O-])c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)Nc2cccc(OC(F)F)c2)cc1Nc1ncnc2cnc(N3CCCC(F)CC3)nc12	Cc1ccc(C(=O)Nc2cccc(OC(F)F)c2)cc1Nc1ncnc2cnc(N3CCCC(F)CC3)nc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(=O)c1ccc(OCCCN2CCCN(c3c(OC)cccc3OC)CC2)cc1	CCC(=O)c1ccc(OCCCN2CCCN(c3c(OC)cccc3OC)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(CCC(O)C(C)C(OC)OC1OC(C)C(O)C(O)C1O)C1CCC2(C)C3=CCC4C(C)(C)C(=O)CCC45CC35CCCC12C	CC(CCC(O)C(C)C(OC)OC1OC(C)C(O)C(O)C1O)C1CCC2(C)C3=CCC4C(C)(C)C(=O)CCC45CC35CCCC12C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(C#N)c(-c3cc[nH]n3)[nH]c2cc1C	COc1cc2c(C#N)c(-c3cc[nH]n3)[nH]c2cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)CSc1ccc(C#N)cc1	CS(=O)(=O)CSc1ccc(C#N)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C#N)c(SCC(=O)Nc2ccc(F)cc2F)n1	Cc1ccc(C#N)c(SCC(=O)Nc2ccc(F)cc2F)n1	TRUE	TRUE	TRUE
NS(=O)(=O)c1c(NS(=O)(=O)c2ccc(NC(=S)NC(=O)C=Cc3cccc3[N+](=O)[O-])cc2)cc(Cl)cc1Cl	NS(=O)(=O)c1c(NS(=O)(=O)c2ccc(NC(=S)NC(=O)C=Cc3cccc3[N+](=O)[O-])cc2)cc(Cl)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)C(=O)Nc1cc(-c2ccc(Cl)cc2)sc1C(=O)O	CC(C)(C)C(=O)Nc1cc(-c2ccc(Cl)cc2)sc1C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CSc1ccc(CCN(C(=O)c2cccc(C)c2)cc1	CSc1ccc(CCN(C(=O)c2cccc(C)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(=O)CSc2nc3c(n2)-c2cccc2N(Cc2cccc2F)S3(=O)=O)cc1	Cc1ccc(NC(=O)CSc2nc3c(n2)-c2cccc2N(Cc2cccc2F)S3(=O)=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(NN=Cc1cccs1)Nc1cccc2cccc12	N=C(NN=Cc1cccs1)Nc1cccc2cccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(O)C(O)C(Cc1CCCCC1)NC(=O)C(C)C(Cc1ccc(OCCN2CCCC2)cc1)NC(=O)C(Cc1cccc1)CS(=O)(=O)c1cccc1	CC(C)CC(O)C(O)C(Cc1CCCCC1)NC(=O)C(C)C(Cc1ccc(OCCN2CCCC2)cc1)NC(=O)C(Cc1cccc1)CS(=O)(=O)c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(CC)(CC(=O)NO)C(=O)Nc1cc(F)cc(F)c1	CCC(CC)(CC(=O)NO)C(=O)Nc1cc(F)cc(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)OC(=O)NC(CCF(F)F)C(=O)NC1CCN(c2nc3cccc3o2)CC1	CC(C)(C)OC(=O)NC(CCF(F)F)C(=O)NC1CCN(c2nc3cccc3o2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1C(C(O)CO)OC2C(OC(n3cnc4c(N)ncnc43)C(O)C2O)C1(C)C	COc1C(C(O)CO)OC2C(OC(n3cnc4c(N)ncnc43)OC2C1(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(CS(=O)(=O)CCC(=O)N2CCN(c3ncccn3)CC2)c(C)c1	Cc1ccc(CS(=O)(=O)CCC(=O)N2CCN(c3ncccn3)CC2)c(C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CSc1nc2cccc2n1CQ(=O)Nc1ccc(F)cc1F)NCCCC1=CCCCC1	O=C(CSc1nc2cccc2n1CQ(=O)Nc1ccc(F)cc1F)NCCCC1=CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
OC1ccc2c3c1OC1c4ncc(-c5cccc5)nc4CC4(O)C(C2)N(CC2CCC2)CCC314	OC1ccc2c3c1OC1c4ncc(-c5cccc5)nc4CC4(O)C(C2)N(CC2CCC2)CCC314	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(c1ccc(-c2ccc(C(F)(F)F)cc2)cc1)N1CCN=C1c1cccc1	O=S(=O)(c1ccc(-c2ccc(C(F)(F)F)cc2)cc1)N1CCN=C1c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1nc(Cc2cccc2)cc(Nc2nc3ccc(l)cc3s2)n1)N1CCCCC1	O=C(c1nc(Cc2cccc2)cc(Nc2nc3ccc(l)cc3s2)n1)N1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C=O)c1sc2cccc2c1NC(=O)c1cccc(CN2CCN(C)CC2)c1	CO(C=O)c1sc2cccc2c1NC(=O)c1cccc(CN2CCN(C)CC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)C=Cc2ccc(Br)o2)o1	Cc1ccc(C(=O)C=Cc2ccc(Br)o2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1c(C)c(OCc2ccc(CO)cc2)c(C)c(O)c1CC=C(C)C	CCOc1c(C)c(OCc2ccc(CO)cc2)c(C)c(O)c1CC=C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CN=C(Nc2ccc(F)cc2)S1	CC1CN=C(Nc2ccc(F)cc2)S1	TRUE	TRUE	FALSE
Nc1ncnc2c1ncn2C1OC(CO)C(O)C1F	Nc1ncnc2c1ncn2C1OC(CO)C(O)C1F	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(CN(Cc1cccc1)C(=O)CN(Cc1cccc1)c1cccc1)NCCc1cccc1	O=C(CN(Cc1cccc1)C(=O)CN(Cc1cccc1)c1cccc1)NCCc1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(=O)Nc2c(C)n(C)C3CCCC3)c2=O)cc1C	Cc1ccc(NC(=O)Nc2c(C)n(C)C3CCCC3)c2=O)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cc1cccs1)C12CC3CC(C(C3)C1)C2	O=C(Cc1cccs1)C12CC3CC(C(C3)C1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1ccc(C23SCN2C(Cn2cnc2)c2cccc23)cc1	Clc1ccc(C23SCN2C(Cn2cnc2)c2cccc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(OCc2ncnc2)c(OC2CCCCC2)c1	c1ccc(OC2CCCCC2)c(OCc2ncnc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCn1c(O)c(C2Nc3cccc3C(=O)N2c2cccc2)sc1=S	C=CCn1c(O)c(C2Nc3cccc3C(=O)N2c2cccc2)sc1=S	TRUE	TRUE	TRUE
NS(=O)(=O)c1ccc(CN=C(O)C(CCC(=O)O)N=C(O)C(F)=Cc2ccc(O)cc2)cc1	NS(=O)(=O)c1ccc(CN=C(O)C(CCC(=O)O)N=C(O)C(F)=Cc2ccc(O)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)CC(=O)C=C(c2cccc2Br)N1	CC1(C)CC(=O)C=C(c2cccc2Br)N1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCc1nncc(NC(=O)c2ccc(-c3cccc3)cc2)s1	COCCc1nncc(NC(=O)c2ccc(-c3cccc3)cc2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(NC(=O)OCc1cccc1)C(=O)NC(Cc1cccc1)C(=O)N1CCCC1C(=O)CCI	CC(C)CC(NC(=O)OCc1cccc1)C(=O)NC(Cc1cccc1)C(=O)N1CCCC1C(=O)CCI	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)C=C(CSc2cc(-c3cccc3)ccc2O)c2cc(C(=N)N)ccc2O1	CC1(C)C=C(CSc2cc(-c3cccc3)ccc2O)c2cc(C(=N)N)ccc2O1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(C=O)NC(=O)C(Cc1c[nH]c2cccc12)NC(=O)OCc1cccc1	CC(C)CC(C=O)NC(=O)C(Cc1c[nH]c2cccc12)NC(=O)OCc1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(S(=O)(=O)NCC(=O)NCC2ccncc2)cc1OC	COc1ccc(S(=O)(=O)NCC(=O)NCC2ccncc2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)c1cccc(-c2ccc(Cl)cc2Cl)c1	CC(=O)c1cccc(-c2ccc(Cl)cc2Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC=C(CO)C(=O)OC1CC(C)C=C2C=CC(C)C(CCC3CC(O)CC(=O)O3)C21	CC=C(CO)C(=O)OC1CC(C)C=C2C=CC(C)C(CCC3CC(O)CC(=O)O3)C21	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cnc(-c2cc3c(cn2)cnnc3-c2cccc(N3CCCC(N)C3)n2)n1	COc1cnc(-c2cc3c(cn2)cnnc3-c2cccc(N3CCCC(N)C3)n2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ncccc1C1CCCN1Cc1nc(-c2cnc3ccccn23)no1	c1cnc(-C2CCCN2Cc2nc(-c3cnc4ccccn34)no2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(CN2CCNC(=O)C2CC(=O)N(C)CC2CC2)o1	Cc1ccc(CN2CCNC(=O)C2CC(=O)N(C)CC2CC2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2nc3cc(Cl)ccc3c(N3CCN(C(=O)c4cccc4)CC3)c2c1	COc1ccc2nc3cc(Cl)ccc3c(N3CCN(C(=O)c4cccc4)CC3)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1COCCN1c1nc(N2CCOCC2C)c2ccc(-c3ccc(CN4CCOCC4)cc3)nc2n1	CC1COCCN1c1nc(N2CCOCC2C)c2ccc(-c3ccc(CN4CCOCC4)cc3)nc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(NC(=O)COc1cccc1)c1nnc2n1CCCC2	CC(NC(=O)COc1cccc1)c1nnc2n1CCCC2	TRUE	TRUE	TRUE
BC(=O)OCC(=CBr)CCC=Cc1ccc(OC)cc1	BC(=O)OCC(=CBr)CCC=Cc1ccc(OC)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NC(=O)C(=O)N2c3cc4c(cc3C(c3cc(OC)c(O)c(OC)c3)C3C(=O)OCC23)OCO4)cn1	COc1ccc(NC(=O)C(=O)N2c3cc4c(cc3C(c3cc(OC)c(O)c(OC)c3)C3C(=O)OCC23)OCO4)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(N=C(O)c2ccnc(-n3ncc(Cc4ccc(Cl)cc4Cl)c(=O)cc3=O)c2)c(C(=O)Nc2ccc(OC(F)(F)F)cc2)c1	FALSE	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1ccc(C(=O)N2CCc(-c3cc[nH]n3)cc2)cc1)N1CCN(Cc2cnc(N3CCOCC3)nc2)CC1	FALSE	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(CC(=O)O)CC(c2cccc(Cl)c2)C(c2ccc(Cl)cc2)N(C(CS(=O)(=O)NCCc2ccc(Cl)cc2)C2CC2)C1=O	CC1(CC(=O)O)CC(c2cccc(Cl)c2)C(c2ccc(Cl)cc2)N(C(CS(=O)(=O)NCCc2ccc(Cl)cc2)C2CC2)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)c1cccc(NC(=O)c2cccc(NC(=O)C3=CS4=NC(C(=O)O)=C(c5c[nH]c6cccc56)C(Cl)=N34)c2)c1	FALSE	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(Cc1cccc1)NS(=O)(=O)C(CCCCC(=O)NO)N1C(=O)c2cccc(C)c2C1=O	Cc1cccc2c1C(=O)N(C(CCCCC(=O)NO)S(=O)(=O)NC(Cc1cccc1)C(C)C)C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C=O)C1=C(C)NC(=O)N(C(=O)NCCCN2CCN(c3cccc3OC)CC2)C1c1cccc1	CO(C=O)C1=C(C)NC(=O)N(C(=O)NCCCN2CCN(c3cccc3OC)CC2)C1c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1nc(NCCc2ccc(Cl)c(Cl)c2)ncc1-c1nc2c(n1C(C)C)C(c1ccc(Cl)cc1)N(c1cc(Cl)ccc1C)C2=O	COc1nc(NCCc2ccc(Cl)c(Cl)c2)ncc1-c1nc2c(n1C(C)C)C(c1ccc(Cl)cc1)N(c1cc(Cl)ccc1C)C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2nc3ccc(-c4cc5cc(NC(=O)C(N)CCCC)ccc5oc4=O)cc3nc2-c2ccc(OC)cc2)cc1	COc1ccc(-c2nc3ccc(-c4cc5cc(NC(=O)C(N)CCCC)ccc5oc4=O)cc3nc2-c2ccc(OC)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc2nc(C3CCN(C)C3=O)oc(=O)c12	Cc1cccc2nc(C3CCN(C)C3=O)oc(=O)c12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cn1cnnc1)c1ccc(Br)cc1	O=C(Cn1cnnc1)c1ccc(Br)cc1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
COc1ccc(CCN(C)C)c2ccc(SC)cc2[N+](=O)[O-]]cc1OC	COc1ccc(CCN(C)C)c2ccc(SC)cc2[N+](=O)[O-]]cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cnc2c(c1)N(C)=O)CN1CCOCC1)c1cccc1C2)NC1CCCCC1	O=C(Nc1cnc2c(c1)N(C)=O)CN1CCOCC1)c1cccc1C2)NC1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)GNc1cc(NS(C)(=O)=O)ccc1Nc1c2ccccc2nc2cc(Br)ccc12	CC(O)GNc1cc(NS(C)(=O)=O)ccc1Nc1c2ccccc2nc2cc(Br)ccc12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1c(O)c(O)cc2oc3c(=O)c4c(c(C)C)c3c(=O)c12)C=CC(C)(C)O4	COc1c(O)c(O)cc2oc3c(=O)c4c(c(C)C)c3c(=O)c12)C=CC(C)(C)O4	FALSE	TRUE	TRUE
CCN(CC)C(=O)Oc1ccc(C2=NN(C(C)=O)C(c3ccc([N+](=O)[O-])cc3)C2)cc1	CCN(CC)C(=O)Oc1ccc(C2=NN(C(C)=O)C(c3ccc([N+](=O)[O-])cc3)C2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc2c(c1)-c1cccc3c1C(C2)N(C)CC3	Cc1ccc2c(c1)-c1cccc3c1C(C2)N(C)CC3	TRUE	TRUE	FALSE
CCOc1ccc(C(=O)Nc2c(C)ccc3c2CCC3)cc1	CCOc1ccc(C(=O)Nc2c(C)ccc3c2CCC3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(-c2n[nH]c(=O)n2-c2ccc(F)cc2)cc(C)c1Oc1ccc(C(F)(F)F)cc1	Cc1cc(-c2n[nH]c(=O)n2-c2ccc(F)cc2)cc(C)c1Oc1ccc(C(F)(F)F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nn(-c2ccnc(NC(C)C3CCOCC3)n2)c2c1CCC2	Cc1nn(-c2ccnc(NC(C)C3CCOCC3)n2)c2c1CCC2	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1c(N(C)CCc2ccc(OCc3ccc(Br)cc3)cc2)nc2cc(Cl)ccc21	CCn1c(N(C)CCc2ccc(OCc3ccc(Br)cc3)cc2)nc2cc(Cl)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)CC(=O)c2cc(C(=O)NCCc3ccccc3Cl)c(=O)n(-c3ccc4c(c3)OCO4)c2C1	CC1(C)CC(=O)c2cc(C(=O)NCCc3ccccc3Cl)c(=O)n(-c3ccc4c(c3)OCO4)c2C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2cc(-c3cc(F)cc(F)c3)n(C3OC(CO)C(O)C(O)C3O)c(=O)c2C#N)cc1	COc1ccc(-c2cc(-c3cc(F)cc(F)c3)n(C3OC(CO)C(O)C(O)C3O)c(=O)c2C#N)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCC2(OC1)OC1CC3C4CC5CC(O)CCC5(C)C4CCC3(C)C1C2C	CC1CCC2(OC1)OC1CC3C4CC5CC(O)CCC5(C)C4CCC3(C)C1C2C	TRUE	TRUE	FALSE
COC(=O)c1cc2sc(Cl)c(Cl)c2n1CC(=O)NCCCN1CCOCC1	COC(=O)c1cc2sc(Cl)c(Cl)c2n1CC(=O)NCCCN1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CSCC(=O)N1CCC(Nc2nc(C)cc(C)n2)CC1	CSCC(=O)N1CCC(Nc2nc(C)cc(C)n2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(N2CCOCC2)nc(N(C)c2cccc(F)c2)n1	Cc1cc(N2CCOCC2)nc(N(C)c2cccc(F)c2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(NC(=O)C)(C)NC(=O)CC(O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)C(NC(=O)C(C)NC(=O)C(N)C(C)C(C)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(O)C(=O)O	CC(NC(=O)CC(O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)C(NC(=O)C(C)NC(=O)C(N)C(C)C(C)C(=O)NC(C)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(O)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCc1ccccc1)C1CCN(c2nc(=O)c3cc(C(F)(F)F)cc([N+](=O)[O-])c3s2)CC1	O=C(NCc1ccccc1)C1CCN(c2nc(=O)c3cc(C(F)(F)F)cc([N+](=O)[O-])c3s2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cn(C2OC(COP(=O)(O)S)C(O)C2(F)F)c(=O)[nH]c1=O	Cc1cn(C2OC(COP(=O)(O)S)C(O)C2(F)F)c(=O)[nH]c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1nc2cc(Cl)c(Cl)cc2nc1O	Oc1nc2cc(Cl)c(Cl)cc2nc1O	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)CNc1c(Nc2c(C)cc(C)cc2C)c(=O)c1=O	CC(C)CNc1c(Nc2c(C)cc(C)cc2C)c(=O)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccc(N=Cc3ccc(C=CC(=O)c4ccc5c(c4)OCO5)cc3)cc2)cc1	Cc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccc(N=Cc3ccc(C=CC(=O)c4ccc5c(c4)OCO5)cc3)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(Nc1ccc(CCNCC(O)c2ccnc2)cc1)c1ccc(-c2noc(Cc3ccnc3)n2)cc1	O=S(=O)(Nc1ccc(CCNCC(O)c2ccnc2)cc1)c1ccc(-c2noc(Cc3ccnc3)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1C1C2C(=O)N(c3cc(C)ccc3C)C(=O)C2ON1c1ccc(C#N)cc1	COc1ccccc1C1C2C(=O)N(c3cc(C)ccc3C)C(=O)C2ON1c1ccc(C#N)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CN1CCC2(CC1)C(=O)N(CCCN1CCN(c3ccc(Cl)c(Cl)c3)CC1)c1cccc(Cl)c12	CC(C)CN1CCC2(CC1)C(=O)N(CCCN1CCN(c3ccc(Cl)c(Cl)c3)CC1)c1cccc(Cl)c12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CNc1c([N+](=O)[O-])c(=O)oc2ccccc12	CC(C)CNc1c([N+](=O)[O-])c(=O)oc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1cccc(-c2ccf(-n3nc(-c4ccccc4)cc(C(c4cc(OC)c(OC)c(OC)c4)c4ccc5c(c4OCO5)c3=O)cc2)c1	CC(=O)Nc1cccc(-c2ccf(-n3nc(-c4ccccc4)cc(C(c4cc(OC)c(OC)c(OC)c4)c4ccc5c(c4OCO5)c3=O)cc2)c1	FALSE	TRUE	TRUE
CCN(CC)CCNC(=O)c1c(C)[nH]c(C=C2C(=O)Nc3ccc(-c4csc(-c5ccccc5)n4)cc32)c1C	CCN(CC)CCNC(=O)c1c(C)[nH]c(C=C2C(=O)Nc3ccc(-c4csc(-c5ccccc5)n4)cc32)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
CSc1nnc2c(n1)OC(c1cccc(O)c1)N(C(C)=O)c1ccccc1-2	CSc1nnc2c(n1)OC(c1cccc(O)c1)N(C(C)=O)c1ccccc1-2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1ccc2nc3ccccc3c(=O)n2c1)N1CCN(c2ccc(F)cc2)CC1	O=C(c1ccc2nc3ccccc3c(=O)n2c1)N1CCN(c2ccc(F)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCCCNc1ccccc1)c1cc(OCc2ccc(C(F)(F)F)cc2)c(Cl)cn1	O=C(NCCCNc1ccccc1)c1cc(OCc2ccc(C(F)(F)F)cc2)c(Cl)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
COCC(c1ccc2c(c1)OCO2)c1c(C)nc2n(-c3c(C)n(C)n(-c4ccccc4)c3=O)c3ccccc3n12	COCC(c1ccc2c(c1)OCO2)c1c(C)nc2n(-c3c(C)n(C)n(-c4ccccc4)c3=O)c3ccccc3n12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(CC(=O)NC(C(=O)O)C(C)C)cc(=O)oc2c1	COc1ccc2c(CC(=O)NC(C(=O)O)C(C)C)cc(=O)oc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(N(CCN(C)C)Cc2c(F)ccccc2Cl)sc1C(=O)O	Cc1nc(N(CCN(C)C)Cc2c(F)ccccc2Cl)sc1C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)Nc1nc(Cl)(Cl)(Cl)nc2ccccc12	CC(C)Nc1nc(Cl)(Cl)(Cl)nc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCSCc1nncc(NC(=O)CCSc2ccccc2Cl)s1	CCSCc1nncc(NC(=O)CCSc2ccccc2Cl)s1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc(O)c2ncn(C3SC(C(=O)Nc4ccccc4Cl)C(O)C3O)c2n1	Nc1nc(O)c2ncn(C3SC(C(=O)Nc4ccccc4Cl)C(O)C3O)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)n1cc(C(O)=NCC2CCN(C(C)C)CC2)c2cc(OC3ccnc(Nc4ccc(Br)cc4)c3)ccc21	COC(=O)n1cc(C(O)=NCC2CCN(C(C)C)CC2)c2cc(OC3ccnc(Nc4ccc(Br)cc4)c3)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCc1ccc(-c2ccc3nccc(Nc4cccc(O)c4)c3c2)cc1)Nc1c(F)c(F)c(F)c(F)c1F	O=C(NCc1ccc(-c2ccc3nccc(Nc4cccc(O)c4)c3c2)cc1)Nc1c(F)c(F)c(F)c(F)c1F	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)C(=O)c1ccc(C2C3C(=O)CC(c4ccccc4)CC3=NN2c2ccccc2)cc1	CN(C)C(=O)c1ccc(C2C3C(=O)CC(c4ccccc4)CC3=NN2c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(C(=O)COC(=O)Cc2ccc(Cl)cc2)CC1	CN1CCN(C(=O)COC(=O)Cc2ccc(Cl)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
NCCCC(Nc1nc(-c2ccc(-c3nc4ccccc4o3)cc2)nc2c1ncn2C1OC(CO)C(O)C1O)C(=O)O	NCCCC(Nc1nc(-c2ccc(-c3nc4ccccc4o3)cc2)nc2c1ncn2C1OC(CO)C(O)C1O)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)Nc1n[nH]c2cc3nc(N)[nH]c(=O)c3cc12	CCOC(=O)Nc1n[nH]c2cc3nc(N)[nH]c(=O)c3cc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CN(C(=O)c2ccccc2Nc2ccc3c(C=Cc4ccccc4)n[nH]c3c2)CC(C)O1	CC1CN(C(=O)c2ccccc2Nc2ccc3c(C=Cc4ccccc4)n[nH]c3c2)CC(C)O1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(Nc2nccc(C(=O)N(C)CCCNc3ccccc3)n2)c1	Cc1cccc(Nc2nccc(C(=O)N(C)CCCNc3ccccc3)n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCC(=O)C(C)C(C)C)NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)OCc1ccccc1	CN(C)CCC(=O)C(C)C(C)C)NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)OCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CSc1ccc(-c2ccc(F)cc2)c(-c2ccnc(NCC(C)NC(=O)c3ccc(NS(C)(=O)=O)cc3)c2)o1	CSc1ccc(-c2ccc(F)cc2)c(-c2ccnc(NCC(C)NC(=O)c3ccc(NS(C)(=O)=O)cc3)c2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ccc(C(=O)N2CCC3(CC2)CCN(CCO)C3)cn1	Nc1ccc(C(=O)N2CCC3(CC2)CCN(CCO)C3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC(=O)Oc1c(OC(=O)CCC)cc2c(c1OC(=O)CCC)CC(OC(=O)CCC)C(C)(OC(=O)CCC)C2	CCCC(=O)Oc1c2c(c(OC(=O)CCC)c1OC(=O)CCC)CC(OC(=O)CCC)C(C)(OC(=O)CCC)C2	TRUE	TRUE	TRUE
OCCN1CCCC(c2ncc3sccc3n2)C1	OCCN1CCCC(c2ncc3sccc3n2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCN1C(=O)NC2(CCCC2)C1=O)Nc1nncs1	O=C(CCN1C(=O)NC2(CCCC2)C1=O)Nc1nncs1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(OC3OC(CO)C(O)C(O)C3O)c3c(c(-c4ccc5c(c4)OCO5)c2cc1OC)C(=O)OC3	COc1cc2c(OC3OC(CO)C(O)C(O)C3O)c3c(c(-c4ccc5c(c4)OCO5)c2cc1OC)C(=O)OC3	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1c(C(=O)COC(=O)CNC(=O)c2ccccc2Cl)[n+][([O-])c2ccccc2[n+]]1[O-]	Cc1c(C(=O)COC(=O)CNC(=O)c2ccccc2Cl)[n+][([O-])c2ccccc2[n+]]1[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCCN1CCN(c2cc(Cl)ccc2Cl)CC1)Nc1ccc(F)cc1F	O=C(CCCN1CCN(c2cc(Cl)ccc2Cl)CC1)Nc1ccc(F)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
COC1(C)CC(OC(=O)CNC=C2C(=O)Oc3ccccc3C2=O)C2(C)C(CCC3(C)C2CCC3(O)C=CC2OC(C=O)C(C)(C)OC(C)=O)C2OC(C)=O)C1C	COC1(C)CC(OC(=O)CNC=C2C(=O)Oc3ccccc3C2=O)C2(C)C(CCC3(C)C2CCC3(O)C=CC2OC(C=O)C(C)(C)OC(C)=O)C2OC(C)=O)C1C	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1cc(CCCc2ccccc2)oc2cc(O)cc(O)c12	O=c1cc(CCCc2ccccc2)oc2cc(O)cc(O)c12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(=O)OC(C)CCc1ccccc1)C(=O)Nc1(C(=O)Nc2ccc(C#N)cc2)CCN(Cc2ccccc2)CC1	CC(C)C(=O)OC(C)CCc1ccccc1)C(=O)Nc1(C(=O)Nc2ccc(C#N)cc2)CCN(Cc2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1cccc(-c2cc(C(=O)Nc3cc4ccc(OC5OC(CO)C(O)C(O)C5O)c(C)c4oc3=O)ccc2OC)c1	COC(=O)c1cccc(-c2cc(C(=O)Nc3cc4ccc(OC5OC(CO)C(O)C(O)C5O)c(C)c4oc3=O)ccc2OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2nncnc(OC3ccccc(NC(=O)Nc4nccs4)c3)c2cc1OCCCN1CCCC1	COc1cc2nncnc(OC3ccccc(NC(=O)Nc4nccs4)c3)c2cc1OCCCN1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(C(=O)NCC(=O)OCC(=O)N2CCCC2=O)cc1OCC	CCOc1ccc(C(=O)NCC(=O)OCC(=O)N2CCCC2=O)cc1OCC	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)c1ccc(-n2ccnc2)cn1	CNC(=O)c1ccc(-n2ccnc2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)OC1(C)C(=O)CCC2C3CCC4=CC(=O)CCC4=C3C(c3ccc(-c4cccc(C(=O)O)c4)cc3)CC21C	CC(=O)OC1(C)C(=O)CCC2C3CCC4=CC(=O)CCC4=C3C(c3ccc(-c4cccc(C(=O)O)c4)cc3)CC21C	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCn1ccc(=O)c(O)c1C	CCCCCn1ccc(=O)c(O)c1C	TRUE	TRUE	FALSE
CCCCn1c(=O)c2[nH]c(Cc3ccc(OC(=O)N(C)C)cc3)nc2n(CCCC)c1=O	CCCCn1c(=O)c2[nH]c(Cc3ccc(OC(=O)N(C)C)cc3)nc2n(CCCC)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1[nH]c(-c2ccccc2O)nc2c1Cc1cc(O)c(Cl)cc1-2	O=c1[nH]c(-c2ccccc2O)nc2c1Cc1cc(O)c(Cl)cc1-2	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(N)Nc1ccc(NC(=N)N)cc1	N=C(N)Nc1ccc(NC(=N)N)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
CCCCNS(=O)(=O)c1ccc(NC(S)=Nc2ccnc2)cc1	CCCCNS(=O)(=O)c1ccc(NC(S)=Nc2ccnc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1c2ccncn2CN(C(=O)c2ccccc(-c3ccc(l)cc3)c2)CC1C1CC1	O=C1c2ccncn2CN(C(=O)c2ccccc(-c3ccc(l)cc3)c2)CC1C1CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CON=C(C(=O)NC1C(=O)N2C(C(=O)[O-])=C(C[n+]]3ccc(CC(=O)OC)cc3)CSC12)c1csc(N)n1	CON=C(C(=O)NC1C(=O)N2C(C(=O)[O-])=C(C[n+]]3ccc(CC(=O)OC)cc3)CSC12)c1csc(N)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc1C(=O)c1ccc(OCc2cn(C3CC(NCc4ccccc4C)C(O)O3)nn2)cc1	Cc1ccccc1CNc1C1(C)n2cc(COc3ccc(C(=O)c4ccccc4C)cc3)nn2)OC1CO	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)CCCC1(C)OC2=C(C(=O)C(=O)c3ccccc32)C1C	COC(=O)CCCC1(C)OC2=C(C(=O)C(=O)c3ccccc32)C1C	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(Nc2ccccc2)cc1	c1ccc(Nc2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC1(OC)C2c3ccccc3C([n+]]3ccnc32)C1(C)CC	CCOC1(OC)C2c3ccccc3C([n+]]3ccnc32)C1(C)CC	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=Cc1[nH]cc2c1CC1CC2N1Cc1ccccc1F)NO	O=C(C=Cc1[nH]cc2c1CC1CC2N1Cc1ccccc1F)NO	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)CSc2nc(N)cc(O)n2)cc1	Cc1ccc(C(=O)CSc2nc(N)cc(O)n2)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
C=C(Br)C(=O)Nc1cc(C(=O)Nc2cc(C(=O)Nc3cc(C(=O)Nc4cc(C(=O)NCCC(=N)N)n(C)c4)n(C)c3)n(C)c2)n(C)c1	C=C(Br)C(=O)Nc1cc(C(=O)Nc2cc(C(=O)Nc3cc(C(=O)Nc4cc(C(=O)NCCC(=N)N)n(C)c4)n(C)c3)n(C)c2)n(C)c1	TRUE	TRUE	FALSE
COc1ccc(-n2[nH]c3ccccc3c2=O)cc1	COc1ccc(-n2[nH]c3ccccc3c2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nn1c(S)nnc1Cc1ccccc1	CC(=O)Nn1c(S)nnc1Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1sc2c(c1[N+](=O)[O-])CCCC2)Nc1ccc2c(c1)OCCO2	O=C(Nc1ccc2c(c1)OCCO2)Nc1sc2c(c1[N+](=O)[O-])CCCC2	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+][([O-])c1cccc(S(=O)(=O)N2CCN(c3ncccn3)CC2)c1	O=[N+][([O-])c1cccc(S(=O)(=O)N2CCN(c3ncccn3)CC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccccc1)c1ccc2cc(-c3ccnc3)[nH]c2c1	O=C(Nc1ccccc1)c1ccc2cc(-c3ccnc3)[nH]c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)n2ncc3c(Cl)nc(N)nc32)cc1	Cc1ccc(S(=O)(=O)n2ncc3c(Cl)nc(N)nc32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)CC(=O)c2cc(C(=O)Nc3cccc(Br)c3)c(=O)n(-c3ccc(Cl)cc3)c2C1	CC1(C)CC(=O)c2cc(C(=O)Nc3cccc(Br)c3)c(=O)n(-c3ccc(Cl)cc3)c2C1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CC(C)Oc1ccc2n[nH]c3c(CN4CCN(Cc5c[n+](C)cc6ccccc56)CC4)c(O)nc(c1c23)c1cnn1C	CC(C)Oc1ccc2n[nH]c3c2c1C(c1ccnn1C)=NC(O)=C3CN1CCN(Cc2c[n+](C)cc3ccccc23)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+](([O-]))c1ccc(C=NN2CCCC2)cc1	O=[N+](([O-]))c1ccc(C=NN2CCCC2)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
COC(=O)NCCCOc1ccc2c(c1)C(C)=CC(C)(C)N2S(=O)(=O)c1ccc(Cl)cc1	COC(=O)NCCCOc1ccc2c(c1)C(C)=CC(C)(C)N2S(=O)(=O)c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cc1ccccc1F)N(CCNc1ccco1)c1nc2c(F)cccc2s1	O=C(Cc1ccccc1F)N(CCNc1ccco1)c1nc2c(F)cccc2s1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc(NCCc2ccccc2Cl)c2c(n1)CCCC2	Nc1nc2c(c(CNcCc3ccccc3Cl)n1)CCCC2	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(OC)nc(N(S(=O))(=O)c2ccc(NC(C)=O)cc2)S(=O)(=O)c2ccc([N+](=O)[O-])cc2)n1	COc1cc(OC)nc(N(S(=O)(=O)c2ccc(NC(C)=O)cc2)S(=O)(=O)c2ccc([N+](=O)[O-])cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(O)C(=O)C1CCC2CN1C(=O)N2	CN(O)C(=O)C1CCC2CN1C(=O)N2	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NC(=O)CSc2nc3nn(-c4ccccc4)c(=O)c-3c3n2CCC3)cc1OC	COc1ccc(NC(=O)CSc2nc3nn(-c4ccccc4)c(=O)c-3c3n2CCC3)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCn1c2ccccc2c2cc(C(=O)NCCOC(=O)N(C(=O)C34CC5CC(C(C5)C3)C4)ccc21	CCCCn1c2ccccc2c2cc(C(=O)NCCOC(=O)N(C(=O)C34CC5CC(C(C5)C3)C4)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CS1=C(N)C(=O)c2nc(-c3ccccc3)ccc2C1=O	CS1=C(N)C(=O)c2nc(-c3ccccc3)ccc2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc2c(C(=O)c3ccccc3)c(N)nn2c(C)C1C	Cc1nc2c(C(=O)c3ccccc3)c(N)nn2c(C)C1C	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(=O)oc2c1ccc1c(O)c(C(=O)c(=O)c(=O)oc12	Cc1cc(=O)oc2c1ccc1c(O)c(C(=O)c(=O)c(=O)oc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(O)cc(C)c1CC(N)C(=O)NC(CCCNC(=N)N)C(=O)NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(=O)NC(CC(C)C)C(=O)NC(CNC(=N)N)C(=O)c1ncsc2ccccc12	Cc1cc(O)cc(C)c1CC(N)C(=O)NC(CCCNC(=N)N)C(=O)NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(=O)NC(CC(C)C)C(=O)NC(CNC(=N)N)C(=O)C1=NC=CSc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN1c(=O)c2nc(-c3cc(OCC(=O)N4CCOCC4)nn3C)[nH]c2n(CCC)c1=O	CCCN1c(=O)c2nc(-c3cc(OCC(=O)N4CCOCC4)nn3C)[nH]c2n(CCC)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc1Nc1nc2ccccc2cc1-c1nncc(C=Cc2ccccc2Cl)o1	Cc1ccccc1Nc1nc2ccccc2cc1-c1nncc(C=Cc2ccccc2Cl)o1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C=CC(=O)c2c1ncn2Cc1ccc(-c2ccc(C(=O)O)c(F)c2)c1	O=C(O)c1ccc(-c2ccc(Cn3cnc4c3C(=O)C=CC4=O)c2)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1c(CN(C)C(=O)OC(C)(C)C)c(-c2ccc(Br)cc2)c2n1CCc1cc(OC(C)C)ccc1-2	COC(=O)c1c(CN(C)C(=O)OC(C)(C)C)c(-c2ccc(Br)cc2)c2n1CCc1cc(OC(C)C)ccc1-2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc1NS(=O)(=O)c1ccc(S(=O)(=O)N2CC(C)CC2)cc1	Cc1ccccc1NS(=O)(=O)c1ccc(S(=O)(=O)N2CC(C)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CN(CCCO)C(=O)N1c1ccc(Oc2ccccc2)cc1	O=C1CN(CCCO)C(=O)N1c1ccc(Oc2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NS(=O)(=O)c1ccc(Cl)cc1Cl)c1ccc(Cl)s1	O=C(NS(=O)(=O)c1ccc(Cl)cc1Cl)c1ccc(Cl)s1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCc1ccc(NC(=O)C2CCCN(c3ccnn3C)C2)cc1	CCCCc1ccc(NC(=O)C2CCCN(c3ccnn3C)C2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(Oc1ccccc2nc(N)nc(N)c12)c1ccccc1F	CC(Oc1ccccc2nc(N)nc(N)c12)c1ccccc1F	TRUE	TRUE	TRUE
C=C1CC2(CCCl)C(O)CCC2C2C1CC(O)C2(O)CO	C=C1CC2(CCCl)C(O)CCC2C2C1CC(O)C2(O)CO	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(-c2cc(NCc3ccco3)nc(NC(C)=O)n2)c1	COc1cccc(-c2cc(NCc3ccco3)nc(NC(C)=O)n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1csc(NCCCN(C=O)c2ccc(-n3cccn3)nc2)n1	Cc1csc(NCCCN(C=O)c2ccc(-n3cccn3)nc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(C(=O)NC(O)(C(F)(F)C(F)(F)F)cccc2c1C(F)(F)F	COc1ccc2c(C(=O)NC(O)(C(F)(F)F)C(F)(F)F)cccc2c1C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nc(O)c2c(-c3ccccc3C)csc2n1	CCc1nc(O)c2c(-c3ccccc3C)csc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C(=O)Nc2sc(C(=O)c3ccc(Cl)cc3)c(C)c2C(=O)NCCC(C)C)cc(OC)c1OC	COc1cc(C(=O)Nc2sc(C(=O)c3ccc(Cl)cc3)c(C)c2C(=O)NCCC(C)C)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCn1c2ccccc2c2nnc(SCC(=O)Nc3ccc(O)cc3)nc21	C=CCn1c2ccccc2c2nnc(SCC(=O)Nc3ccc(O)cc3)nc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(NCCCNc2cc(C)nc3cnccc23)nc(Nc2ccc(Cl)c(Cl)c2)n1	Cc1cc(NCCCNc2cc(C)nc3cnccc23)nc(Nc2ccc(Cl)c(Cl)c2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc1S(=O)(=O)N(C)c1ccc(-c2ccccc2)[nH]n1	Cc1ccccc1S(=O)(=O)N(C)c1ccc(-c2ccccc2)[nH]n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccoc1C(=O)Nc1ccc(N2C(=O)COc3ccccc32)cc1	Cc1ccoc1C(=O)Nc1ccc(N2C(=O)COc3ccccc32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC12CCN(C(=O)C3CCOCC3)C(Cc3c(O)ccccc31)C2(C)C	CC12CCN(C(=O)C3CCOCC3)C(Cc3c(O)ccccc31)C2(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(N)C(=O)NC(C(=O)NCC(=O)O)C(C)C	CC(C)C(N)C(=O)NC(C(=O)NCC(=O)O)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)NC(=O)N1N=C(c2c(O)ccc3cc(Br)ccc23)CC1(O)c1ccc2c(c1)OCO2	CC(C)NC(=O)N1N=C(c2c(O)ccc3cc(Br)ccc23)CC1(O)c1ccc2c(c1)OCO2	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC1CC(=O)N(O)C1=O	CCCCC1CC(=O)N(O)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CNC(=O)Cc2n[nH]c(=O)c3ccccc23)cc1OC	COc1ccc(CNC(=O)Cc2n[nH]c(=O)c3ccccc23)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CC(N)C(=O)NCCOc1c(F)cccc1F	CC(N)C(=O)NCCOc1c(F)cccc1F	TRUE	TRUE	TRUE
CN(CCCCN1c2ccccc2OCc2ccc(Cl)cc21)CCC(=O)c1ccc(Cl)cc1	CN(CCCCN1c2cc(Cl)ccc2CCOc2ccccc21)CCC(=O)c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1ccc2c(c1)cc1c(O)c3c(c(O)c2c1)C1ccccc1-3	OC1=C2C(=C(O)c3cc1cc1cc(O)ccc31)C1ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCN1C2CCC1C(c1ccc(N(C)C)cc1)C(C(=O)OCC)C2	C=CCN1C2CCC1C(c1ccc(N(C)C)cc1)C(C(=O)OCC)C2	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(OC)c1O	COc1ccc(OC)c1O	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(O)C1OC(OCc2cccc(C(F)(F)F)c2)C(O)C(O)C1O	O=C(O)C1OC(OCc2cccc(C(F)(F)F)c2)C(O)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1C(=O)Nc1cccc(NC(=O)Nc2ccc(SC)cc2)c1	COc1ccccc1C(=O)Nc1cccc(NC(=O)Nc2ccc(SC)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)c2cn(CC(=O)Nc3ccc(Cl)cc3)c3ccc(OC(F)F)cc3c2=O)cc1	Cc1ccc(C(=O)c2cn(CC(=O)Nc3ccc(Cl)cc3)c3ccc(OC(F)F)cc3c2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)CC=C2C(=CC3C(C)(CC4C(C)(C)C(O)CC43C)C2(C)C)C1	CC1(C)CC=C2C(=CC3C4(C)CC(C)(O)C(C)C)C4CCC3(C)C2(C)C)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCNc1cc(C(c2ccc(Cl)cc2)c2cccn2)nc(N)n1	CCCCNc1cc(C(c2ccc(Cl)cc2)c2cccn2)nc(N)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CCC(=O)N1CCOc1nc(-c2ccccc2)c2cc(Br)ccc2n1	O=C1CCC(=O)N1CCOc1nc(-c2ccccc2)c2cc(Br)ccc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC1CC(=O)Nc2cc(OCc3ccccc3C#N)ccc21	CCC1CC(=O)Nc2cc(OCc3ccccc3C#N)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(N)Nc1cccc(Cl)c1	N=C(N)Nc1cccc(Cl)c1	TRUE	TRUE	FALSE
O=c1sc2ccccc2n1CCN1CCN(C23CC4CC(Cc(O)(C4)C2)C3)CC1	O=c1sc2ccccc2n1CCN1CCN(C23C4CC(Cc(O)(C4)C2)C3)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC[N+](C)(C)CCC(=O)Nc1ccc2c(c1)C(=O)c1cc(NC(=O)CC[N+](C)(C)CC)ccc1C2=O	CC[N+](C)(C)CCC(=O)Nc1ccc2c(c1)C(=O)c1cc(NC(=O)CC[N+](C)(C)CC)ccc1C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(Ccn2c(C)c(C(=O)N(C)CCc3ccccc3)C(=O)NCC(=O)O)c(=O)n2C)cc(C)c1Cl	Cc1cc(Ccn2c(C)c(C(=O)N(C)CCc3ccccc3)C(=O)NCC(=O)O)c(=O)n2C)cc(C)c1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(N)NCC(N)CCCCCCCN(C(=N)N	N=C(N)NCCCCCCCN(C)CNC(=N)N	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NCc1ccc(CNC(=O)C2(C)(F)F)CC(OC(=O)N3Cc4ccccc4C3)CN(C(=O)c3cc(C)on3)C2)cc1	CC(=O)NCc1ccc(CNC(=O)C2(C)(F)F)CC(OC(=O)N3Cc4ccccc4C3)CN(C(=O)c3cc(C)on3)C2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
OC(=Nc1cccs1)C1CCCN(C2CCCC(c3ccc(Cl)cc3)C2)C1	OC(=Nc1cccs1)C1CCCN(C2CCCC(c3ccc(Cl)cc3)C2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1c2ccccc2C(=O)N1CCN1CCN(c2nsc3ccccc23)CC1	O=C1c2ccccc2C(=O)N1CCN1CCN(c2nsc3ccccc23)CC1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(Cc1cncnc1)NN1C(=O)CSC1c1ccccc1	O=C(Cc1cncnc1)NN1C(=O)CSC1c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1C1c2c(n[nH]c2C(C)(C)C(=O)N1c1ccc(-c2ccsc2)cc1	COc1ccccc1C1c2c(n[nH]c2C(C)(C)C(=O)N1c1ccc(-c2ccsc2)cc1	TRUE	FALSE	FALSE
c1ccc(CNC2=NC3c4ccccc4C(c4ccccc4)=NC3O2)cc1	c1ccc(CNC2=NC3c4ccccc4C(c4ccccc4)=NC3O2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(=O)[nH]c(SCC(N)=O)n1	Cc1cc(=O)[nH]c(SCC(N)=O)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c2ccnc(C(=O)NCCN3CCOCC3)c2cc2c3cc(OC(=O)NCCN4CCOCC4)ccc3n(C)c12	Cc1c2ccnc(C(=O)NCCN3CCOCC3)c2cc2c3cc(OC(=O)NCCN4CCOCC4)ccc3n(C)c12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)N2CCN(C(=O)COC(=O)C=Cc3ccc(Cl)c(Cl)c3)CC2)c(C)C1	Cc1ccc(S(=O)(=O)N2CCN(C(=O)COC(=O)C=Cc3ccc(Cl)c(Cl)c3)CC2)c(C)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1cc(=O)oc2c3c(cc(OCC(=O)NCCC(C)C)c12)OC(C)(C)C=C3	CCc1cc(=O)oc2c3c(cc(OCC(=O)NCCC(C)C)c12)OC(C)(C)C=C3	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(S(=O)(=O)N(C)C(C)C)CC(O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)c2cc(C(F)F)cc(N3CCN(C)CC3)c2)cc1	COc1ccc(S(=O)(=O)N(C)C(C)C)CC(O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)c2cc(C(F)F)cc(N3CCN(C)CC3)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C1=CC(O)(c2cccc(C(F)(F)F)c2)2CCCN2C1c1ccc(OC)cc1	COC(=O)C1=CC(O)(c2cccc(C(F)(F)F)c2)2CCCN2C1c1ccc(OC)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C1C(c2ccccc2)CC2CCC1N2CCO	COC(=O)C1C(c2ccccc2)CC2CCC1N2CCO	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(c1cc(OC)c(OC)c(OC)c1)c1ccc(OC)c(OC)c(OC)c(OC)c1	C=C(c1cc(OC)c(OC)c(OC)c1)c1cc(OC)c(OC)c(OC)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOCCOc1ccc2oc(=O)c(C(=O)N3CCN(c4cc(C)ccc4C)CC3)cc2c1	CCOCCOc1ccc2oc(=O)c(C(=O)N3CCN(c4cc(C)ccc4C)CC3)cc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C(C)C(=O)C1=C(CC2CCCC2)C(=O)NC1=O	COC(=O)C(C)C(=O)C1=C(CC2CCCC2)C(=O)NC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)N2CC(C)C3(CC#CC(C)C)O3)C2)cc1F	Cc1ccc(S(=O)(=O)N2CC(C)C3(CC#CC(C)C)O3)C2)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(N)CNC1nc(-c2ccc(CCc3ccccc3F)cc2F)cc2nc(N)nc(N)c12	CC(C)(N)CNC1nc(-c2ccc(CCc3ccccc3F)cc2F)cc2nc(N)nc(N)c12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CSc1ccc2nnc(-c3ccco3)n2n1)Nc1cccc2ccccc12	O=C(CSc1ccc2nnc(-c3ccco3)n2n1)Nc1cccc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ncoc1C(=O)Nc1ccc(Cl)c(-c2nc3cc(Cl)ccc3o2)c1	Cc1ncoc1C(=O)Nc1ccc(Cl)c(-c2nc3cc(Cl)ccc3o2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CNc1nc(NCc2ccc(NC(=O)c3ccc(-c4ccc(C)cc4)o3)cc2)c2ccc(C)cc2n1	CNc1nc(NCc2ccc(NC(=O)c3ccc(-c4ccc(C)cc4)o3)cc2)c2ccc(C)cc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccccc2c(Cc3ccc(-c4ccccc4-c4nn[nH]n4)cc3)c(-c3ccc(C(N)=O)cc3)[nH]c12	CCc1ccccc2c(Cc3ccc(-c4ccccc4-c4nn[nH]n4)cc3)c(-c3ccc(C(N)=O)cc3)[nH]c12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1c(C(C)(C)C)cc(C=CC(=O)N(C)c2ccccc2C(C)(C)C)cc1C(C)(C)C	COc1c(C(C)(C)C)cc(C=CC(=O)N(C)c2ccccc2C(C)(C)C)cc1C(C)(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CCS5c1ncc(-c2ccc(C(=O)NS(=O)(=O)c3ccc(NC(C)=O)cc3)cc2)cn1	CCS5c1ncc(-c2ccc(C(=O)NS(=O)(=O)c3ccc(NC(C)=O)cc3)cc2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
O=P(O)(Oc1ccccc1)Oc1ccc(-c2cncnc2)cc1	O=P(O)(Oc1ccccc1)Oc1ccc(-c2cncnc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCc1n[nH]c2c1CCC2)c1ccc(OCC(F)(F)F)c(OC2CC2)c1	O=C(NCc1n[nH]c2c1CCC2)c1ccc(OCC(F)(F)F)c(OC2CC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(Cc1ccccc1)C(=O)c1ncc(NCc2ccccc2)n1	CN(Cc1ccccc1)C(=O)c1ncc(NCc2ccccc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1ccc2nc(-c3ccc(C(=O)NC(C)C)cc3)sc2c1	CC(=O)Nc1ccc2nc(-c3ccc(C(=O)NC(C)C)cc3)sc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1cccc(CNc2ccccc2Cl)c1	Oc1cccc(CNc2ccccc2Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>CC(=O)Nc1ncc(CN2CCCC2)s1</chem>	<chem>CC(=O)Nc1ncc(CN2CCCC2)s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(OC(=O)C=Cc2ccccc2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(OC(=O)C=Cc2ccccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>[O-][n+]1onc(-c2sccc2F)c1-c1cccc(Br)c1</chem>	<chem>[O-][n+]1onc(-c2sccc2F)c1-c1cccc(Br)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(CC(=O)NC2CC(C)(C)Oc3ncccc32)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(CC(=O)NC2CC(C)(C)Oc3ncccc32)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(CNC(=O)CCOc1ccc(Cl)cc1)OCC</chem>	<chem>CCOC(CNC(=O)CCOc1ccc(Cl)cc1)OCC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(C)OCC(COCc2ccc(NC(N)=O)cc2)O1</chem>	<chem>CC1(C)OCC(COCc2ccc(NC(N)=O)cc2)O1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCS(=O)(=O)c1nc(S(=O))(=O)c2ccc(CC)cc2)c(N(CC)CC)s1</chem>	<chem>CCc1ccc(S(=O))(=O)c2nc(S(=O))(=O)CC)sc2N(CC)CC)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCN=c1ccn(CCOCP(=O)(O)O)c(=O)[nH]1</chem>	<chem>CCCCCN=c1ccn(CCOCP(=O)(O)O)c(=O)[nH]1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(S(=O))(=O)N2CCOCC2)cc1C(=O)OCC(=O)N1CCOCC1</chem>	<chem>Cc1ccc(S(=O))(=O)N2CCOCC2)cc1C(=O)OCC(=O)N1CCOCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)C1C2CC(N)CCC21c1cccc(OC)c1</chem>	<chem>CCOC(=O)C1C2CC(N)CCC21c1cccc(OC)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=Cc1cccc1)C1CC2(C)C(O)CCC2C2O(C)(C)C(C(=O)O)C12</chem>	<chem>CC(=Cc1cccc1)C1CC2(C)C(O)CCC2C2O(C)(C)C(C(=O)O)C12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1=C2CCc3cc(C(=O)N(C)c4ccccc4C)ccc3N2CCC1=O</chem>	<chem>CC1=C2CCc3cc(C(=O)N(C)c4ccccc4C)ccc3N2CCC1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccccc1CN(C1Cc2cc(C#N)ccc2N(Cc2cncn2C)C1)S(=O)(=O)c1ccccc1</chem>	<chem>Cc1ccccc1CN(C1Cc2cc(C#N)ccc2N(Cc2cncn2C)C1)S(=O)(=O)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(Cc1ccccc1)C(=O)c1enn2ccccc12</chem>	<chem>CN(Cc1ccccc1)C(=O)c1enn2ccccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NCCc1ccccc1)C(O)C(OCc1ccccc1)C(=O)N1CCCC1COC1cc(=O)oc2ccccc12</chem>	<chem>O=C(NCCc1ccccc1)C(O)C(OCc1ccccc1)C(=O)N1CCCC1COC1cc(=O)oc2ccccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C23CC4(C2)C(CN(Cc2ccccc2)C4c2ccccc2)C3c2ccc(OC)c(OC)c2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(C23CC4(C2)C(CN(Cc2ccccc2)C4c2ccccc2)C3c2ccc(OC)c(OC)c2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C(=O)c2cn(Cc3ccc(C(F)(F)F)cc3)c3nc(C)ccc3c2=O)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(C(=O)c2cn(Cc3ccc(C(F)(F)F)cc3)c3nc(C)ccc3c2=O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1cc(CN2CCCC2)ccc1c1CCCN1CCCC1</chem>	<chem>COc1ccc(C(=O)c2cn(Cc3ccc(C(F)(F)F)cc3)c3nc(C)ccc3c2=O)cc1</chem>	FALSE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc2c(cc1OC)C(c1cccc([N+](=O)[O-])c1)=NN=C(c1ccc(Br)cc1)N2</chem>	<chem>COc1cc2c(cc1OC)C(c1cccc([N+](=O)[O-])c1)=NN=C(c1ccc(Br)cc1)N2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(NS(=O)(=O)c2ccc3c4c(c2)CCN4C(=O)CC3)cc1Cl</chem>	<chem>COc1ccc(NS(=O)(=O)c2ccc3c4c(c2)CCN4C(=O)CC3)cc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cccc(S(=O)(=O)N(C)CC(=O)NCc2ccnc2N(C)C)c1</chem>	<chem>COc1cccc(S(=O)(=O)N(C)CC(=O)NCc2ccnc2N(C)C)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=S(=O)(Oc1ccc2ccc(OC3CCCC3)cc2c1)N1CCN(Cc2cn(Cc3ccc4ccccc4c3)nn2)CC1</chem>	<chem>O=S(=O)(Oc1ccc2ccc(OC3CCCC3)cc2c1)N1CCN(Cc2cn(Cc3ccc4ccccc4c3)nn2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc(N2CCN(c3nc(-c4ccco4)nc4c3CCCC4)CC2)cc1</chem>	<chem>c1ccc(N2CCN(c3nc(-c4ccco4)nc4c3CCCC4)CC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>OC(CCCCCOCc1ccc(Cl)cc1)COCc1ccc(Cc2nc3cc(C(F)(F)F)ccc3[nH]2)cc1</chem>	<chem>OC(CCCCCOCc1ccc(Cl)cc1)COCc1ccc(Cc2nc3cc(C(F)(F)F)ccc3[nH]2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Oc1ccc(C=Cc2ccc3ccc(O)cc3c2)cc1</chem>	<chem>OCc1ccc(C=Cc2ccc3ccc(O)cc3c2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cccc(Cl)c1Nc1nc2ccccc2n1-c1cc(NC2CC2)ncn1</chem>	<chem>Cc1cccc(Cl)c1Nc1nc2ccccc2n1-c1cc(NC2CC2)ncn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNc1ncc(N(Cc2ccccc2)CC(C)C)c(C#N)n1</chem>	<chem>CNc1ncc(N(Cc2ccccc2)CC(C)C)c(C#N)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)Nc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccccc(N)n2)cc1</chem>	<chem>CC(=O)Nc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccccc(N)n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=CCc1ccc(OC)c(C(=O)NCc2nc(-c3ccccc3)cs2)c1O</chem>	<chem>C=CCc1ccc(OC)c(C(=O)NCc2nc(-c3ccccc3)cs2)c1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=CC1(C(N)C(=O)N2C(C#N)CC3CC32)CCCC1</chem>	<chem>C=CC1(C(N)C(=O)N2C(C#N)CC3CC32)CCCC1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>COc1cc(N)c(Cl)cc1C(=O)OCCN1CCC(NC(=O)C2CCN(CCCNC(=O)c3cc(Cl)c(N)cc3OC)CC2)CC1</chem>	<chem>COc1cc(N)c(Cl)cc1C(=O)OCCN1CCC(NC(=O)C2CCN(CCCNC(=O)c3cc(Cl)c(N)cc3OC)CC2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C(=O)O)c1ccc(Nc2c3ccccc3nc3ccccc23)cc1</chem>	<chem>CC(C(=O)O)c1ccc(Nc2c3ccccc3nc3ccccc23)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)c1ccc(NC(=O)c2ccc3cc(C=C4C(=O)NC(=O)NC4=O)ccc3[nH]2)cc1</chem>	<chem>O=C1NC(=O)C(=Cc2ccc3[nH]c(C(=O)Nc4ccc(C(=O)O)cc4)cc3c2)C(=O)N1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC12CCC3C4CCC(=O)C=C4CCCC3C1CCC2O</chem>	<chem>CC12CCC3C4CCC(=O)C=C4CCCC3C1CCC2O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NCCSC1CC(=O)N(Cc2ccccc2)C1=O</chem>	<chem>NCCSC1CC(=O)N(Cc2ccccc2)C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(Nc2nc(NCCc3ccc(O)cc3)c3ccccc3n2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(Nc2nc(NCCc3ccc(O)cc3)c3ccccc3n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(OCc2nc(COCc3no[n+](O-))c3S(=O)(=O)c3ccccc3)[se]c2)c2c1OC(C)(C)CC2</chem>	<chem>Cc1ccc(OCc2nc(COCc3no[n+](O-))c3S(=O)(=O)c3ccccc3)[se]c2)c2c1OC(C)(C)CC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(-c2cccs2)c2ccc3nnc(Nc4cccc(O)c4)n3c12</chem>	<chem>COc1ccc(-c2cccs2)c2ccc3nnc(Nc4cccc(O)c4)n3c12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(Cc1ccccc1)C(=O)c1sc2ncn(CC(=O)N3CCCCC3)c(=O)c2c1-c1ccccc1</chem>	<chem>CN(Cc1ccccc1)C(=O)c1sc2ncn(CC(=O)N3CCCCC3)c(=O)c2c1-c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(NC(C)CCCN(C(=O)Nc2ccc(C(C)(C)C)on2)c2ncccc2c1</chem>	<chem>COc1cc(NC(C)CCCN(C(=O)Nc2ccc(C(C)(C)C)on2)c2ncccc2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c(C(=O)O)sc2ncnc(Nc3ccc(F)cc3OC(C)CC(C)O)c12</chem>	<chem>Cc1c(C(=O)O)sc2ncnc(Nc3ccc(F)cc3OC(C)CC(C)O)c12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(Cn2cnc3c(N)nc(N)nc32)c(O)c(C(C)C)c1C</chem>	<chem>COc1cc(Cn2cnc3c(N)nc(N)nc32)c(O)c(C(C)C)c1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nncc(C)n1N=Cc1cc(Cl)ccc1O</chem>	<chem>Cc1nncc(C)n1N=Cc1cc(Cl)ccc1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)c1[nH]nc(OC2CCCC2)c1C=NOCc1cn(CC(=O)Nc2ccc(Cl)cc2)nn1</chem>	<chem>CC(C)(C)c1[nH]nc(OC2CCCC2)c1C=NOCc1cn(CC(=O)Nc2ccc(Cl)cc2)nn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(C(=O)N2CCOCC2)cc1NC(=O)c1ccc(Nc2ncc(C)c(-c3cc4ccccc4n3C)n2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(C(=O)N2CCOCC2)cc1NC(=O)c1ccc(Nc2ncc(C)c(-c3cc4ccccc4n3C)n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)Nc1nc2cc(C3(O)c4ccccc4C(=O)N3c3cccc(Cl)c3F)ccc2[nH]1</chem>	<chem>COC(=O)Nc1nc2cc(C3(O)c4ccccc4C(=O)N3c3cccc(Cl)c3F)ccc2[nH]1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CC(F)(F)c1cc(C=Nc2cnn(C)c2)cc(Br)c1OCC(N)=O</chem>	<chem>Cn1cc(N=Cc2cc(Br)c(OC(C)N)=O)c(C(C)(F)F)c2cn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(CCN1C(=O)C2C3C=CC(C3)C2C1=O)N1CCOCC1</chem>	<chem>O=C(CCN1C(=O)C2C3C=CC(C3)C2C1=O)N1CCOCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN1CCN(C2=Nc3cc(Cl)ccc3Nc3nc4ccccc4n32)CC1</chem>	<chem>CN1CCN(C2=Nc3cc(Cl)ccc3Nc3nc4ccccc4n32)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N=C(N)NCCCNCCNC(=O)C(Cc1ccc(Cl)c(Cl)c1)NC(=O)C1Cc2ccccc2CN1</chem>	<chem>N=C(N)NCCCNCCNC(=O)C(Cc1ccc(Cl)c(Cl)c1)NC(=O)C1Cc2ccccc2CN1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cn(C2C=CC(CO)O2)c(=O)n(CC(O)C(O)C(=O)O)c1=O</chem>	<chem>Cc1cn(C2C=CC(CO)O2)c(=O)n(CC(O)C(O)C(=O)O)c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccccc1-n1ccc(CN2CCCC(CN(C)c3ncnc4c3nc3n4CCCCC3)C2)c1</chem>	<chem>Cc1ccccc1-n1ccc(CN2CCCC(CN(C)c3ncnc4c3nc3n4CCCCC3)C2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C(=O)N2CCCCC2c2ccc(N3CCCC3)nc2)c(OC)c1</chem>	<chem>COc1ccc(C(=O)N2CCCCC2c2ccc(N3CCCC3)nc2)c(OC)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(S(=O)(=O)N(CC(=O)Nc2cccc(C)c2C)c2ccc(F)cc2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(S(=O)(=O)N(CC(=O)Nc2cccc(C)c2C)c2ccc(F)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(CCC(c1cccs1)N1Cc2cc([N+](=O)[O-])ccc2NC1=S)Nc1ccccc1F</chem>	<chem>O=C(CCC(c1cccs1)N1Cc2cc([N+](=O)[O-])ccc2NC1=S)Nc1ccccc1F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CS(=O)(=O)N(CC(=O)NC1CCCCC1)Cc1ccc(O)cc1</chem>	<chem>CS(=O)(=O)N(CC(=O)NC1CCCCC1)Cc1ccc(O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(Cc1ccnc1)C(=O)c1cc(C)[nH]n1</chem>	<chem>CCN(Cc1ccnc1)C(=O)c1cc(C)[nH]n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1NC(=O)C(c2c[nH]c3ccccc23)=C1Nc1ccc(C(F)(F)F)cc1</chem>	<chem>O=C1NC(=O)C(c2c[nH]c3ccccc23)=C1Nc1ccc(C(F)(F)F)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(S(=O))(=O)N2CCC(C(=O)NC3CCc4ccccc43)CC2)cc1OC</chem>	<chem>COc1ccc(S(=O))(=O)N2CCC(C(=O)NC3CCc4ccccc43)CC2)cc1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)c1[nH]c(C)C(C(=O)NCc2cccs2)c1C</chem>	<chem>CCOC(=O)c1[nH]c(C)C(C(=O)NCc2cccs2)c1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(COCc1ccc(Cl)cc1)NN=Cc1ccco1</chem>	<chem>O=C(COCc1ccc(Cl)cc1)NN=Cc1ccco1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCS(C=S)SCC(=O)c1ccc(O)cc1</chem>	<chem>CCS(C=S)SCC(=O)c1ccc(O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC)C(=O)CSc1nc(O)c2cnn(-c3ccccc3)c2n1</chem>	<chem>CCN(CC)C(=O)CSc1nc(O)c2cnn(-c3ccccc3)c2n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCC(O)c1cccc(OC=C(C)C)CCC=C(C)C)CCC=C(C)C)c1</chem>	<chem>CCCCC(O)c1cccc(OC=C(C)C)CCC=C(C)C)CCC=C(C)C)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(O)CC(NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)OCc1ccccc1)B(O)O</chem>	<chem>CC(O)CC(NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)OCc1ccccc1)B(O)O</chem>	TRUE	FALSE	FALSE
<chem>COC1(C)CCC(O)C(C)CC(C)OC(=O)C2(O)C(C)=CC(O)C1(O)C2C(C)=O</chem>	<chem>COC1(C)CCC(O)C(C)CC(C)OC(=O)C2(O)C(C)=CC(O)C1(O)C2C(C)=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)C=Cc1ccc(NC(=O)C2CCC(C(=O)Nc3ccccc(F)c3)CC2)cc1</chem>	<chem>O=C(O)C=Cc1ccc(NC(=O)C2CCC(C(=O)Nc3ccccc(F)c3)CC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCCCCCCC(=O)NC(Cc1ccc2c(c1)OCO2)C(=O)NC1C=CCNC(=O)C=CC(C(C)C)NC1=O</chem>	<chem>CCCCCCCCCCCCC(=O)NC(Cc1ccc2c(c1)OCO2)C(=O)NC1C=CCNC(=O)C=CC(C(C)C)NC1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(Cl)(Cl)C(n1ccnc1)c1ccc(Cl)c(Cl)c1</chem>	<chem>CC(Cl)(Cl)C(c1ccc(Cl)c(Cl)c1)n1ccnc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CCN(C(=O)c2ccc[nH]2)CC1N(C)C(=O)CCCc1cc(-n2ncccc2O)cnn1</chem>	<chem>O=C(NC1CCN(C(=O)c2ccc(-n3ccccc3=O)cc2)CC1)c1ccc(Cl)s1</chem>	FALSE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NC1CCN(C(=O)c2ccc(-n3ccccc3=O)cc2)CC1)c1ccc(Cl)s1</chem>	<chem>O=C(NC1CCN(C(=O)c2ccc(-n3ccccc3=O)cc2)CC1)c1ccc(Cl)s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNc1ncnc2c1ncn2C1OC(C(C)O)C(O)C1(C)O</chem>	<chem>CNc1ncnc2c1ncn2C1OC(C(C)O)C(O)C1(C)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(NC(=O)c2ccco2)c(NC(=O)c2cccc(C(F)(F)F)c2)c1</chem>	<chem>Cc1ccc(NC(=O)c2ccco2)c(NC(=O)c2cccc(C(F)(F)F)c2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(OCc2ccc(C#N)cc2CNC(N)=O)s1</chem>	<chem>Cc1ccc(OCc2ccc(C#N)cc2CNC(N)=O)s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#Cc1ccc(OCc2cc(C(=O)N(Cc3ccccc3-n3cccn3)C(C)C)no2)cc1</chem>	<chem>CC(C)N(Cc1ccccc1-n1cccn1)C(=O)c1cc(COCc2ccc(C#N)cc2)on1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ncc([N+](=O)[O-])n1CC(O)CCc1ccccc1</chem>	<chem>Cc1ncc([N+](=O)[O-])n1CC(O)CCc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1ccc(-c2cn3c(O)cc(N4CCNCC4)cc3n2)s1</chem>	<chem>CCc1ccc(-c2cn3c(O)cc(N4CCNCC4)cc3n2)s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(S(=O))(=O)N2CCc3ccccc(-c4ccccc4)c32)cc1OC</chem>	<chem>COc1ccc(S(=O))(=O)N2CCc3ccccc(-c4ccccc4)c32)cc1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>S=C(NCCCCCNc1ccnc2cc(Cl)ccc12)Nc1ccccc1</chem>	<chem>S=C(NCCCCCNc1ccnc2cc(Cl)ccc12)Nc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>OCC[n+]1ccc[n+](CCCCCCCCCCCCC[n+]2cc(C3(CC3)CCCCC)c1C=NO</chem>	<chem>OCC[n+]1ccc[n+](CCCCCCCCCCCCC[n+]2cc(C3(CC3)CCCCC)c1C=NO</chem>	FALSE	TRUE	TRUE
<chem>CCCN(C(=O)COC(=O)c1cc(Br)ccc1OC)C1CCS(=O)(=O)C1</chem>	<chem>CCCN(C(=O)COC(=O)c1cc(Br)ccc1OC)C1CCS(=O)(=O)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CSc1nc2ccnc2n1C1CCN(Cc2ccc(-c3nnn[nH]3)cc2)CC1</chem>	<chem>CSc1nc2ccnc2n1C1CCN(Cc2ccc(-c3nnn[nH]3)cc2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C[n+]1ccc2c(c1)c1ccccc1n2CCCCCCCCCn1c2ccccc2c2cc(C[n+]3ccccc3)ccc21</chem>	<chem>C[n+]1ccc2c(c1)c1ccccc1n2CCCCCCCCCn1c2ccccc2c2cc(C[n+]3ccccc3)ccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
Clc1ccc(-c2cc(-c3ccccc3)nc3c2C(c2c[nH]c4ccccc24)Sc2ccccc2-3)cc1	Clc1ccc(-c2cc(-c3ccccc3)nc3c2C(c2c[nH]c4ccccc24)Sc2ccccc2-3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C1Cc2cncn2C(c2ccc(Cl)cc2)N1	COC(=O)C1Cc2cncn2C(c2ccc(Cl)cc2)N1	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)c1cccc(CCN(C(=O)CN2C(=O)NC(CCc3ccccc3)C2=O)cc1	CS(=O)(=O)c1ccc(CCN(C(=O)CN2C(=O)NC(CCc3ccccc3)C2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccc2[nH]c(=O)c(CN(Cc3ccnc3)C(S)=NCCCN(C)C)cc2c1	CCc1ccc2[nH]c(=O)c(CN(Cc3ccnc3)C(S)=NCCCN(C)C)cc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
C=C1c2ccccc2OC2(C)C1CCC1=C(N(C)C)C3OCOC3CC12	C=C1c2ccccc2OC2(C)C1CCC1=C(N(C)C)C3OCOC3CC12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1S(=O)(=O)C(C)C(C)C(=O)Nc1ccc2c(c1)OCO2	COc1ccccc1S(=O)(=O)C(C)C(C)C(=O)Nc1ccc2c(c1)OCO2	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCCOc1ccccc1Cc1noc(CCCCc2ccccc2)n1	CN(C)CCCOc1ccccc1Cc1noc(CCCCc2ccccc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CNc1nc(Cl)nc2c1ncn2CC(O)CO	CNc1nc(Cl)nc2c1ncn2CC(O)CO	TRUE	TRUE	TRUE
S=c1[nH]nc(C(=S)Nc2ccccc2)o1	S=C(Nc1ccccc1)c1n[nH]c(=S)o1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1c2c(nc3c(C)cc(C)cc13)-c1cc(O)c(OC)c(-c3nc4ccccc4n3CC)c1C2=O	CCc1c2c(nc3c(C)cc(C)cc13)-c1cc(O)c(OC)c(-c3nc4ccccc4n3CC)c1C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
CN(CC(=O)Nc1ccccc1F)C(=O)COC(=O)c1ccccc2ccccc12	CN(CC(=O)Nc1ccccc1F)C(=O)COC(=O)c1ccccc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(OC)c(C2=NC(=O)C(=Cc3ccnc3)S2)cc1Br	COc1cc(OC)c(C2=NC(=O)C(=Cc3ccnc3)S2)cc1Br	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)OCc2cc(COc3ccc(Cl)cc3)c(-n3ccccc3)nc21	CC1(C)OCc2cc(COc3ccc(Cl)cc3)c(-n3ccccc3)nc21	TRUE	TRUE	TRUE
NS(=O)(=O)c1ccc(NC(=O)CNC(=O)c2c(F)cccc2Cl)c(Cl)c1	NS(=O)(=O)c1ccc(NC(=O)CNC(=O)c2c(F)cccc2Cl)c(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1c2ccc(CCCCO)c(O)c2C(=O)N1c1ccc(Cl)cc1	O=C1c2ccc(CCCCO)c(O)c2C(=O)N1c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1ccc(NC(=S)Nc2ccc(Br)cc2)cc1	O=C(O)c1ccc(NC(=S)Nc2ccc(Br)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(=O)O)c1ccccc(OCCNc2cc3ccccc3oc2=O)c1	O=C(NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(=O)O)c1ccccc(OCCNc2cc3ccccc3oc2=O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1ccc(C(=O)NC2CCc3ccccc32)cc1	O=C(O)c1ccc(C(=O)NC2CCc3ccccc32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CC(SC(=S)Nc2ccc(Cl)cc2Nc2ccccc2)C(=O)N1c1ccccc1	O=C1CC(SC(=S)Nc2ccc(Cl)cc2Nc2ccccc2)C(=O)N1c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC1=CC(=O)c2c(c(C(C)C)C)c(C)n2Cc2ccccc(F)c2)C1=O	CNC1=CC(=O)c2c(c(C(C)C)C)c(C)n2Cc2ccccc(F)c2)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCOCC12CCN(C(=O)c1cnccn1)CC2	CN1CCOCC12CCN(C(=O)c1cnccn1)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1cc(O)cc(-c2ccc(O)c(O)c2)c1	Oc1cc(O)cc(-c2ccc(O)c(O)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
FC(F)Oc1ccc(-c2nc(C3CCOCC3)c3[nH]nc(-c4ccncc4)c3n2)cc1	FC(F)Oc1ccc(-c2nc(C3CCOCC3)c3[nH]nc(-c4ccncc4)c3n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1cnc2scn2c1=O)N1CCOc2ccccc21	O=C(c1cnc2scn2c1=O)N1CCOc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CSCCO)NCc1cccc(Cl)c1	O=C(CSCCO)NCc1cccc(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1=CC(=O)OC(C(O)CO(C)C(=O)C1CC=C(C)C2CC3OC(=O)C=C3C3C4(C)OC3C(O)C(O)C5(C(O)C12C)C4OC5CC(=O)OC	COc1=CC(=O)OC(C(O)CO(C)C(=O)C1CC=C(C)C2CC3OC(=O)C=C3C3C4(C)OC3C(O)C(O)C5(C(O)C12C)C4OC5CC(=O)OC	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(C)C(=O)NC(C(=O)N1CC2(CCCCC2)CC1)C1CCCCC1	CNC(C)C(=O)NC(C(=O)N1CC2(CCCCC2)CC1)C1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Cl(=O)Nc2sc3c(c2C(=O)O)CCN(C)C3)cc(OC)c1OC	COc1ccc(Cl(=O)Nc2sc3c(c2C(=O)O)CCN(C)C3)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccccc1C(=O)NC(C(=O)Nc1ccc(C)cc1)c1ccccc1	CCOc1ccccc1C(=O)NC(C(=O)Nc1ccc(C)cc1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(NC(=O)CN1CCN(c2ccc(C(F)(F)F)cn2)CC1)c1ccc2scnc2c1	CC(NC(=O)CN1CCN(c2ccc(C(F)(F)F)cn2)CC1)c1ccc2scnc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1nn(Cc2ccccc2C(F)(F)F)c2ccc([N+](=O)[O-])cc12	COc1nn(Cc2ccccc2C(F)(F)F)c2ccc([N+](=O)[O-])cc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)nc(SCc2nnc(SCC(=O)c3ccccc4ccccc34)n2-c2ccccc2)n1	Cc1cc(C)nc(SCc2nnc(SCC(=O)c3ccccc4ccccc34)n2-c2ccccc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc(C)c1Oc1nc(N)nc(N)c1N=O	Cc1ccccc(C)c1Oc1nc(N)nc(N)c1N=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1c(-c2cccc(Cl)c2)coc2c1c(=O)n(-c1ccc(CCN3c4ccccc4c4ccccc43)cc1)c1ccc(F)cc21	O=c1c(-c2cccc(Cl)c2)coc2c1c(=O)n(-c1ccc(CCN3c4ccccc4c4ccccc43)cc1)c1ccc(F)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NC(CCC(N)=O)C(=O)N1CCCC1C(=O)NC(CCC(N)=O)C(=O)c1ccccc1F	CC(=O)NC(CCC(N)=O)C(=O)N1CCCC1C(=O)NC(CCC(N)=O)C(=O)c1ccccc1F	TRUE	TRUE	TRUE
CCC1OC(C)C(=CC(C)C=C2C(C)C2C=CC2OC(C(=O)O)C)CC(OC(=O)C3CCC(C)C)CC(C)C)O3)C2OC(=O)C=CC(C)OC(=O)C2CCCC2)CC=C1C	CCC1OC(C)C(=CC(C)C=C2C(C)C2C=CC2OC(C(=O)O)C)CC(OC(=O)C3CCC(C)C)CC(C)C)O3)C2OC(=O)C=CC(C)OC(=O)C2CCCC2)CC=C1C	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc2c(c1)C(N1CCN(S(=O)(=O)c3ccc4ccc(Cl)cc4s3)CC1)CCCC	Cn1cc2c(c1)C(N1CCN(S(=O)(=O)c3ccc4ccc(Cl)cc4s3)CC1)CCCC	TRUE	TRUE	TRUE
NC1(O)N=C(S)N(c2ccc(Cl)c(Cl)c2)C12CCN(c1ccc(Br)cc1)CC2	NC1(O)N=C(S)N(c2ccc(Cl)c(Cl)c2)C12CCN(c1ccc(Br)cc1)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ccccc1NC(=O)c1ccc(CNc2nnc(N3CCC(N4CCCC4)CC3)n2)cc1	Nc1ccccc1NC(=O)c1ccc(CNc2nnc(N3CCC(N4CCCC4)CC3)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(CSc2nc3sc(C)cn3[nH]2)cc1	Cc1ccc(CSc2nc3sc(C)cn3[nH]2)cc1	FALSE	TRUE	TRUE
CCOC(Cc1ccc(OCCN2CC=CCC2)cc1)C(=O)O	CCOC(Cc1ccc(OCCN2CC=CCC2)cc1)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(Cl(=S)N2CCOCC2)cc(OC)c1OC	COc1cc(Cl(=S)N2CCOCC2)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	FALSE
CCON=C(c1ccc(C(F)(F)F)cc1)C1CCN(C2(C)CCN(C(=O)c3c(C)cc[n+](([O-])c3C)CC2)CC1	CCON=C(c1ccc(C(F)(F)F)cc1)C1CCN(C2(C)CCN(C(=O)c3c(C)cc[n+](([O-])c3C)CC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCNC(=O)Nc1ccc(-c2nc3c(c(N4CC5CCN(CC(C)C)C5C4)n2)CSC3)cn1	CCNC(=O)Nc1ccc(-c2nc3c(c(N4CC5CCN(CC(C)C)C5C4)n2)CSC3)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C(=O)N1CC2(CCC1)CC1(CCC2)CN(C(=O)Nc2ccccc(Oc3ccc(F)cc3)c2)C1	CC(C(=O)N1CC2(CCC1)CC1(CCC2)CN(C(=O)Nc2ccccc(Oc3ccc(F)cc3)c2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(Cc1nnnn1Cc1ccccc1)c1ccccc1	O=S(=O)(Cc1nnnn1Cc1ccccc1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=CC(=O)NCCN(C)C)ccc1OCC(=O)Nc1cccc(F)c1C	COc1cc(C=CC(=O)NCCN(C)C)ccc1OCC(=O)Nc1cccc(F)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)C(C)C(=O)NC(C(=O)N1CCCC1C(=O)Nc1ccc(-c2ccccc2S(C)(=O)=O)cc1)C(C)C(C	CN(C)C(C)C(=O)NC(C(=O)N1CCCC1C(=O)Nc1ccc(-c2ccccc2S(C)(=O)=O)cc1)C(C)C(C	TRUE	TRUE	TRUE
NCC1CCC(c2ccc(Cl)c(-c3ccn3)c2)O1	NCC1CCC(c2ccc(Cl)c(-c3ccn3)c2)O1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(C)N1C(=O)C(=Cc2ccc(OCC(=O)O)cc2C)SC1=5	CCN(C)N1C(=O)C(=Cc2ccc(OCC(=O)O)cc2C)SC1=5	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(S(=O)(=O)NCC(Cc2ccco2)N2CCCCC2)cc1OC	COc1ccc(S(=O)(=O)NCC(Cc2ccco2)N2CCCCC2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cncc1C(c1ccc2oc(N3CCOCC3)nc2c1)c1cnn(-c2ccccc2)c1-c1ccc(Cl)cc1	Cn1cncc1C(c1ccc2oc(N3CCOCC3)nc2c1)c1cnn(-c2ccccc2)c1-c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCOC(=O)C(C)C(O)c1ccc(Cl)c(Cl)c1	COCCOC(=O)C(C)C(O)c1ccc(Cl)c(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCNc1nc(-c3ccccc3)nc2c1nnn2C1CCCCC1	CCCCNc1nc(-c2ccccc2)nc2c1nnn2C1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1oc(NC(=O)c2cccn2)c(C(N)=O)c1C	Cc1oc(NC(=O)c2cccn2)c(C(N)=O)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=CC(C)(C)Nc2c(-c3ccccc(Br)c3)cc3c(c21)Oc2ccccc2C3	CC1=CC(C)(C)Nc2c(-c3ccccc(Br)c3)cc3c(c21)Oc1ccccc1C3	TRUE	TRUE	TRUE
c1cnc2c(c1)-c1c(c(N3CCOCC3)nc3ccnnc13)CC2	c1cnc2c(c1)-c1c(c(N3CCOCC3)nc3ccnnc13)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccccc(Cc(=O)N2CCN(c3cc(C(C)C)ccn3)CC2)c1	CCc1ccccc(Cc(=O)N2CCN(c3cc(C(C)C)ccn3)CC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)C(N)CN1	CC1(C)NCC1N	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc2nc(Cn3nc(C(C)C)nc3C)cc(=O)n2c1	Cc1ccc2nc(Cn3nc(C(C)C)nc3C)cc(=O)n2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C1CCCC1C(=O)NS(=O)(=O)c1ccc2ccsc2c1)N1CCCCC1	O=C(C1CCCC1C(=O)NS(=O)(=O)c1ccc2ccsc2c1)N1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)N2Cc3cn(C)nc3CC2C(=O)Nc2ccccc2F)cc1	Cc1ccc(S(=O)(=O)N2Cc3cn(C)nc3CC2C(=O)Nc2ccccc2F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(CCOc1ccc(CC(Cc2ccccc2)C(=O)O)cc1)c1nc2ccccc2o1	CN(CCOc1ccc(CC(Cc2ccccc2)C(=O)O)cc1)c1nc2ccccc2o1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)Nc2ccccc(NC(=O)c3ccco3)c2)cc1OC	COc1ccc(C(=O)Nc2ccccc(NC(=O)c3ccco3)c2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1NC(=O)OC1CC2CCC(C1)N2C	COc1ccccc1NC(=O)OC1CC2CCC(C1)N2C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc2[nH]c3ccccc3c(=O)c12	COc1ccccc2[nH]c3ccccc3c(=O)c12	TRUE	TRUE	FALSE
Oc1nc2c(F)ccc(-c3ccc(OC(F)(F)F)cc3)c2s1	Oc1nc2c(F)ccc(-c3ccc(OC(F)(F)F)cc3)c2s1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Cc(=O)c2cc(OC)c(OC)c(OC)c2)cc1O	COc1ccc(Cc(=O)c2cc(OC)c(OC)c(OC)c2)cc1O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(cn1)CCC(NCCCc1ccccc1)C2	COc1cc2c(cn1)CCC(NCCCc1ccccc1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
CCNc1c(-c2ccc(S(=O)(=O)N)C(C)cc2)ccc1-c1ccccc1Cl	CCNc1c(-c2ccc(S(=O)(=O)N)C(C)cc2)ccc1-c1ccccc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c(-c2cccn2)c(C2CCCC2)c2ccc(C(=O)NC3(C(=O)Nc4ccc(C=CC(=O)O)cc4)CCCC3)cc21	Cn1c(-c2cccn2)c(C2CCCC2)c2ccc(C(=O)NC3(C(=O)Nc4ccc(C=CC(=O)O)cc4)CCCC3)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C2C3C(=O)Nc4ccccc4C(=O)N3C(C)(C)C2(O)c2ccccc2)on1	Cc1cc(C2C3C(=O)Nc4ccccc4C(=O)N3C(C)(C)C2(O)c2ccccc2)on1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1[nH]c2c(c1N)CCc1cnccc1-2	N#Cc1[nH]c2c(c1N)CCc1cnccc1-2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)=CCCC1C2=C(CCC3(C)C(C)C)COC(=O)CCc4ccco4)CCCC23C)C2(C)C=CC(C)(C)C=C2CCC1(C)O	CC(C)=CCCC1C2=C(CCC3(C)C(C)C)COC(=O)CCc4ccco4)CCCC23C)C2(C)C=CC(C)(C)C=C2CCC1(C)O	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)CCN(C(=O)c1cc2c(=O)[nH]c3ccccc3c2s1	CCN(CC)CCN(C(=O)c1cc2c(=O)[nH]c3ccccc3c2s1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nnc(SCC(=O)N2CCC(c3ccccc3)CC2)nc1O	Cc1nnc(SCC(=O)N2CCC(c3ccccc3)CC2)nc1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1CCCC1CNC(=O)c1cc(-c2ccc(Cl)cc2)on1	CCN1CCCC1CNC(=O)c1cc(-c2ccc(Cl)cc2)on1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc(-c2ccc3c(c2)CNC2CCCC32)cn1	Cn1cc(-c2ccc3c(c2)CNC2CCCC32)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(Oc1cc(-n2cnc3cnc(-c4ccc(F)c(Cl)c4)cc32)sc1C(N)=O)C(C)(C)O	CC(Oc1cc(-n2cnc3cnc(-c4ccc(F)c(Cl)c4)cc32)sc1C(N)=O)C(C)(C)O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1nc2ccccc2nc1-n1c2ccc(OCCCN3CCCCC3)cc2c2ccc([N+](=O)[O-])cc2c1=O	CC(C)c1nc2ccccc2nc1-n1c(=O)c2cc([N+](=O)[O-])ccc2c2cc(OCCCN3CCCCC3)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C1=CC(c2c[nH]c3cc(Br)ccc23)CC(OCc2ccc(CO)cc2)O1)N1CC2(CCC1)OC(n1cnnc1)C(=O)N2Cc1ccc(F)cc1	O=C(C1=CC(c2c[nH]c3cc(Br)ccc23)CC(OCc2ccc(CO)cc2)O1)N1CC2(CCC1)OC(n1cnnc1)C(=O)N2Cc1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc(C)c1NC(=O)C1CC(c2ccc([N+](=O)[O-])cc2)=NO1	Cc1ccccc(C)c1NC(=O)C1CC(c2ccc([N+](=O)[O-])cc2)=NO1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CN(Cc1ccc(N2CCN(C(C)C)CC2)cc1)S(=O)(=O)Cc1ccccc1	CC(C)CN(Cc1ccc(N2CCN(C(C)C)CC2)cc1)S(=O)(=O)Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
c1ccc(COC2ccc3[nH]c(-c4cccs4)nc3c2)cc1	c1ccc(COC2ccc3[nH]c(-c4cccs4)nc3c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)c(Oc2nc(NC3CC3)nc(Nc3ccc(C#N)cc3)n2)c(C)c1	Cc1cc(C)c(Oc2nc(Nc3ccc(C#N)cc3)nc(NC3CC3)n2)c(C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C(NC(=O)c1cc(NC2CC2)cc(-c2ccc(Cl)cc2)n1)C(C)C	COC(=O)C(NC(=O)c1cc(NC2CC2)cc(-c2ccc(Cl)cc2)n1)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(S(=O))(=O)N2CCCC2)cc1NC(=O)c1ccccc1C#N	COc1ccc(S(=O))(=O)N2CCCC2)cc1NC(=O)c1ccccc1C#N	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C(C)N(C)C)C)ccc1O	COc1cc(C(C)N(C)C)C)ccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1c(C(=O)NCCN2CCOCC2)c(Cl)cc2ncccc12	COc1c(C(=O)NCCN2CCOCC2)c(Cl)cc2ncccc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(OCCNc1cccn1)c1ccccc1Nc1ccnc(C(F)(F)F)c1	O=C(OCCNc1cccn1)c1ccccc1Nc1ccnc(C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(C(=O)N2Cc3cccn3Cc3cccc32)cc1)c1ccc(Cl)c([N+](=O)[O-])c1	O=C(Nc1ccc(C(=O)N2Cc3cccn3Cc3cccc32)cc1)c1ccc(Cl)c([N+](=O)[O-])c1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc(-c2cccs2)cc(-c2ccc(Cl)cc2)n1	Nc1nc(-c2ccc(Cl)cc2)cc(-c2cccs2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCC1CCCC1)c1ccc(Cn2c(=S)[nH]c3ccc(Br)cc3c2=O)cc1	O=C(NCC1CCCC1)c1ccc(Cn2c(=S)[nH]c3ccc(Br)cc3c2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1cc(C=Cc2ccc(F)cc2)on1	CCOC(=O)c1cc(C=Cc2ccc(F)cc2)on1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC1CC1)c1cc(-c2ccccc2)nc2ccccc12	O=C(NC1CC1)c1cc(-c2ccccc2)nc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CN(C(=O)C2(C(=O)Nc3ccc(Cl)cc3)CC2)CC(C)O1	CC1CN(C(=O)C2(C(=O)Nc3ccc(Cl)cc3)CC2)CC(C)O1	TRUE	TRUE	TRUE
CON=C1CC(c2cnn(C)c2C)N(C(=O)c2ccc(N3CCCC3=O)cc2)C1	CON=C1CC(c2cnn(C)c2C)N(C(=O)c2ccc(N3CCCC3=O)cc2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1ncc2c1CCCC2NCc1nc(N)c2ccccc2n1	CCn1ncc2c1CCCC2NCc1nc(N)c2ccccc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1c(F)ccc(OCc2nc3cc(Cl)ccc3nc2-c2ccccc2)c1F	NC(=O)c1c(F)ccc(OCc2nc3cc(Cl)ccc3nc2-c2ccccc2)c1F	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(CNC(=O)CS C2=C(C#N)C(c3ccccc3OC(F)F)CC(=O)N2)cc1	Cc1ccc(CNC(=O)CS C2=C(C#N)C(c3ccccc3OC(F)F)CC(=O)N2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)CCCN1c(=O)c2c(c3cc(F)ccc31)CCCC2	CCN(CC)CCCN1c(=O)c2c(c3cc(F)ccc31)CCCC2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cn(C2CC(O)C(CNC(=O)C3c4ccccc4-c4ccccc43)O2)c(=O)[nH]c1=O	Cc1cn(C2CC(O)C(CNC(=O)C3c4ccccc4-c4ccccc43)O2)c(=O)[nH]c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cccn1)c1cc(-c2ccco2)on1	O=C(Nc1cccn1)c1cc(-c2ccco2)on1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(-c2ccccc2)cc2c1NC(C)(C)C=C2C	COc1cc(-c2ccccc2)cc2c1NC(C)(C)C=C2C	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1cccc(C(O)c2nc(-c3ccc4c(c3)OCO4)cs2)c1	N#Cc1cccc(C(O)c2nc(-c3ccc4c(c3)OCO4)cs2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(=O)N(C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F)N(OC)c1ccccc1	CCC(=O)N(N(OC)c1ccccc1)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C)C(NC(=O)C(N)CO)C(=O)Nc1ccc(Br)cc1C(=O)NC(C)C(=O)O	CCC(C)C(NC(=O)C(N)CO)C(=O)Nc1ccc(Br)cc1C(=O)NC(C)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
NC(c1ccccc1-c1ccccc1)C1CCN1C(=O)Cc1ccc2c(c1)CCCC2	NC(c1ccccc1-c1ccccc1)C1CCN1C(=O)Cc1ccc2c(c1)CCCC2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)C1CCC2C3C(=O)C=C4CC(OC(=O)CCC(=O)O)CCC4(C)C3CCC12C	CC(=O)C1CCC2C3C(=O)C=C4CC(OC(=O)CCC(=O)O)CCC4(C)C3CCC12C	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1nc(NCc2ccnc2)nc(OCc2ccc(F)cc2)n1	CN(C)c1nc(NCc2ccnc2)nc(OCc2ccc(F)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1nc(-c2cccc(F)c2)[nH]c1C(=O)N1CCCC1CO	CC(C)c1nc(-c2cccc(F)c2)[nH]c1C(=O)N1CCCC1CO	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1c(Cl)nc2ccc([N+](=O)[O-])cc2c1O	CCOC(=O)c1c(Cl)nc2ccc([N+](=O)[O-])cc2c1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1CC(C(=O)NCC(=O)Nc2ccnc2)CCC1=O	CCN1CC(C(=O)NCC(=O)Nc2ccnc2)CCC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
OC(Cc1ccccc1)CN(Cc1cn(-c2ccccc2)nn1)C1CCCC2ccnc21	OC(Cc1ccccc1)CN(Cc1cn(-c2ccccc2)nn1)C1CCCC2ccnc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCn1nnnc1C(c1cc2ccc(OC)cc2nc1O)N1CCN(c2ccc(F)c(F)c2)CC1	CCCCn1nnnc1C(c1cc2ccc(OC)cc2nc1O)N1CCN(c2ccc(F)c(F)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(-c2c(C)noc2C)cc2nn(-c3cnc(OC(C)C4CN(C(C)C)CC4)cc3C)n12	Cc1cc(OC(C)C2CN(C(C)C)CC2C)nc1-c1nncc2cc(-c3c(C)noc3C)cc(C)n12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C(Cc1ccccc1)N1C(=O)C(=Cc2cccc(Br)c2)S C1=S	O=C(O)C(Cc1ccccc1)N1C(=O)C(=Cc2cccc(Br)c2)S C1=S	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)C(C)(C)N=C(O)c1cc(C#N)ccc1C1C2=C(CCC2=O)N(c2cccc(C(F)(F)F)c2)C(=O)N1CC1CCOCC1	CC(C)C(C)(C)N=C(O)c1cc(C#N)ccc1C1C2=C(CCC2=O)N(c2cccc(C(F)(F)F)c2)C(=O)N1CC1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1sc(-c2ccccc2Cl)nc1CSCC(=O)Nc1nccs1	Cc1sc(-c2ccccc2Cl)nc1CSCC(=O)Nc1nccs1	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(Nc1ccc(N2CCOCC2)nc1)c1ccc(F)c(F)c1	O=S(=O)(Nc1ccc(N2CCOCC2)nc1)c1ccc(F)c(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)CCC(C)(C)c2cc(C(C(=O)c3ccc(C(=O)O)[nH]3)c3ccccc3)ccc21	CC1(C)CCC(C)(C)c2cc(C(C(=O)c3ccc(C(=O)O)[nH]3)c3ccccc3)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)N1CCC(c2nn(CCN3CCN(Cc4ccccc4)CC3)o2)CC1	CC(C)N1CCC(c2nn(CCN3CCN(Cc4ccccc4)CC3)o2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC1(C(=O)O)CCc2ccc(OC CCOc3ccccc3C)cc2O1	CCC1(C(=O)O)CCc2ccc(OC CCOc3ccccc3C)cc2O1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ccc2[nH]c(-c3cc(NC(=O)c4ccccc4)ccc3F)nc2c1	Nc1ccc2[nH]c(-c3cc(NC(=O)c4ccccc4)ccc3F)nc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCc1ccc(Cl)c(Cl)c1)c1cnc(CN2CCCN(C3CCCC3)CC2)n1	O=C(NCc1ccc(Cl)c(Cl)c1)c1cnc(CN2CCCN(C3CCCC3)CC2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NC=CC(=O)c1ccc(Cc2ccc(Cl)c(Cl)c2)cc1	CC(=O)NC=CC(=O)c1ccc(Cc2ccc(Cl)c(Cl)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(Oc2ncccn2)ccc1-c1nc2c(n1C(C)C)C(c1ccc(Cl)cc1)CN(c1ccc(C)cn1)C2=O	COc1cc(Oc2ncccn2)ccc1-c1nc2c(n1C(C)C)C(c1ccc(Cl)cc1)CN(c1ccc(C)cn1)C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
N#CCN(C(=O)c1ccc(Cn2c(=O)c3c(F)c(F)c(F)c3n(Cc3ccc(F)cc3F)c2=O)cc1	N#CCN(C(=O)c1ccc(Cn2c(=O)c3c(F)c(F)c(F)c3n(Cc3ccc(F)cc3F)c2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1C(=S)N(c2ccc(Cl)cc2)C(=O)C1c1ccccc1	CCN1C(=S)N(c2ccc(Cl)cc2)C(=O)C1c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(NC(=O)Cc2cccc(C(F)(F)F)c2)cc(-c2nc3ccc(O)cc3[nH]2)c1O	Cc1cc(NC(=O)Cc2cccc(C(F)(F)F)c2)cc(-c2nc3ccc(O)cc3[nH]2)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1=CCN(C)CC1c1cc(OC)c(OC)c(OC)c1	CCOC(=O)C1=CCN(C)CC1c1cc(OC)c(OC)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2cc3c(c(-c4ccccc4)c2)OC(C)S(=O))(=O)C3)c(O)c1	Cc1ccc(-c2cc3c(c(-c4ccccc4)c2)OC(C)S(=O))(=O)C3)c(O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C[S+])([O-])Cc2ccc(C(=O)NCc3ccnc3)o2cc1	Cc1ccc(C[S+])([O-])Cc2ccc(C(=O)NCc3ccnc3)o2cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1ccc(NC(=O)Nc2ccc(F)c(F)c2)c(Nc2nc(-c3ccccc4[nH]ncc34)ncc2Cl)c1	NC(=O)c1ccc(NC(=O)Nc2ccc(F)c(F)c2)c(Nc2nc(-c3ccccc4[nH]ncc34)ncc2Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCN1CCSc2ccc(C(=O)Nc3ccc(C(C)=O)cc3)cc21	CCCCN1CCSc2ccc(C(=O)Nc3ccc(C(C)=O)cc3)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1ccc(Cl)c1Cl)N1CCCCC1	O=C(c1ccc(Cl)c1Cl)N1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ncnc2c1ncn2C1OC(C(=O)Nc2cccc(C(F)(F)F)c2)C(O)C1F	Nc1ncnc2c1ncn2C1OC(C(=O)Nc2cccc(C(F)(F)F)c2)C(O)C1F	TRUE	TRUE	TRUE
COC1C(O)C(O)C(Oc2ccc3c(O)cc(=O)oc3c2Cl)OC1(C)C	COC1C(O)C(O)C(Oc2ccc3c(O)cc(=O)oc3c2Cl)OC1(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CCOc1cc(C)nc(OC2cc(l))ccc2C(C)=O)c1F	CC(C)CCOc1cc(C)nc(OC2cc(l))ccc2C(C)=O)c1F	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C(=O)C12CCC(O)(C1)C1=CCC3C4(C)CCC(O(C(=O)C)(C)C4CCC3(C)C1(C)CC2	CO(C(=O)C12CCC(O)(C1)C1=CCC3C4(C)CCC(O(C(=O)C)(C)C4CCC3(C)C1(C)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(Br)cc(C)c1OCC(COCc1c(Br)cc(Br)cc1Br)OC(=O)c1ccccc1	Cc1cc(Br)cc(C)c1OCC(COCc1c(Br)cc(Br)cc1Br)OC(=O)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(Cc1ccccc1)C(=O)c1ccc(NC(=O)Cc2ccc(NC(=O)C3CCN(C(=O)CCc4ccccc4)CC3)cc2)cc1	CN(Cc1ccccc1)C(=O)c1ccc(NC(=O)Cc2ccc(NC(=O)C3CCN(C(=O)CCc4ccccc4)CC3)cc2)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
CCNC(=O)Nc1ccc2ncc(Nc3ccc(OC)c(OC)c3)nc2c1	CCNC(=O)Nc1ccc2ncc(Nc3ccc(OC)c(OC)c3)nc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(CC(=O)C(C)c1ccccc1)n1ccnc1	CC(CC(=O)C(C)c1ccccc1)n1ccnc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=CC(=O)OCC(=O)Nc2nc(C3CC3)c(l)s2)ccc1OC(F)F	COc1cc(C=CC(=O)OCC(=O)Nc2nc(C3CC3)c(l)s2)ccc1OC(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)c1csc(N2CCC(CO)(Cc3ccc(Cl)c(Cl)c3)CC2)n1	CNC(=O)c1csc(N2CCC(CO)(Cc3ccc(Cl)c(Cl)c3)CC2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1cc(-c2ccncc2)[nH][nH]1	O=c1cc(-c2ccncc2)[nH][nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1CCCc2cc(C(=O)N(C)C)c3ccc(Nc4ccnc5cc(C(F)(F)F)ccc45)cc3)ccc21	CCN1CCCc2cc(C(=O)N(C)C)c3ccc(Nc4ccnc5cc(C(F)(F)F)ccc45)cc3)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1c(C)[nH]c(C)c1S(=O))(=O)N(C)C1CCCCC1	CCOC(=O)c1c(C)[nH]c(C)c1S(=O))(=O)N(C)C1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCCN1C(=O)c2ccc(C(=O)N3CCN(C(=O)c4ccco4)C(C)C3)cc2C1=O	COCCCN1C(=O)c2ccc(C(=O)N3CCN(C(=O)c4ccco4)C(C)C3)cc2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NO)c1coc(-c2ccc(C(F)(F)F)cc2)n1	O=C(NO)c1coc(-c2ccc(C(F)(F)F)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc(NC(=O)Cn2c(=O)n(Cc3CCC(C(=O)N4CCCC4)CC3)c(=O)c3ccccc32)c1	Cc1ccccc(NC(=O)Cn2c(=O)n(Cc3CCC(C(=O)N4CCCC4)CC3)c(=O)c3ccccc32)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cn[nH]c1)c1c(C(F)(F)F)nn(-c2ccccc2)c1-n1ccccc1	O=C(Nc1cn[nH]c1)c1c(C(F)(F)F)nn(-c2ccccc2)c1-n1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCN(Cc2cc(=O)n3ccsc3n2)CC1	CC1CCN(Cc2cc(=O)n3ccsc3n2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(N2CCN(Cc3cc4ccc5ccccc5c4[nH]3)CC2)cc1	c1ccc(N2CCN(Cc3cc4ccc5ccccc5c4[nH]3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CCN(C(=O)C1C(C)(C)C1c1c(N)nn(CC(C)C)c(=O)[nH]c1=O	CC(C)CCN(C(=O)C1C(C)(C)C1c1c(N)nn(CC(C)C)c(=O)[nH]c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC12Cc3ccc(O)cc3C(O)(c3ccccc3)C1CC=C2C(=O)O	CC12Cc3ccc(O)cc3C(O)(c3ccccc3)C1CC=C2C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
NN=CCc1ccc(-c2ccc(C3CCC4CC(O)CCC4C3)cc2)c(F)c1	NN=CCc1ccc(-c2ccc(C3CCC4CC(O)CCC4C3)cc2)c(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)Cc2c(-c3ccccc3)c(C#N)c3ccc(C(F)(F)F)cc3c2CO1	CC1(C)Cc2c(-c3ccccc3)c(C#N)c3ccc(C(F)(F)F)cc3c2CO1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCc1ccc(OCCOCCOCCNS(=O))(=O)c2ccc3nc(C)sc3c2)cc1	CCCc1ccc(OCCOCCOCCNS(=O))(=O)c2ccc3nc(C)sc3c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC(C)C(=O)NC(C)CC1=NOC(C(OC(C)=O)C(COC(C)=O)OC(C)=O)O1	CCCC(C)C(=O)NC(C)CC1=NOC(C(OC(C)=O)C(COC(C)=O)OC(C)=O)O1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1ncc(-c2nc(Nc3ccc4ncccc4c3)sc2-c2ccncc2)cn1	CN(C)c1ncc(-c2nc(Nc3ccc4ncccc4c3)sc2-c2ccncc2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1cc(C(=O)N2N=C(c3ccncc3)CC2c2ccccc2Br)no1	Nc1cc(C(=O)N2N=C(c3ccncc3)CC2c2ccccc2Br)no1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nn(CC(=O)N2CCN(Cc3ccncc3)CC2)c(=O)c2cc3occc3n12	CCc1nn(CC(=O)N2CCN(Cc3ccncc3)CC2)c(=O)c2cc3occc3n12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(CSc2nc(O)c(C#N)c(-c3c(C)n[nH]c3C)n2)o1	Cc1ccc(CSc2nc(O)c(C#N)c(-c3c(C)n[nH]c3C)n2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
[C1=CC2OCC=C3CC4(O)C(CCS(O)C(=O)C(C)=CC(O(C(=O)c6ccccc6)C5(O)C(=O)C4(C(=O)O)C23c(Cl)OC		FALSE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>C=CCSc1nc2sc(C)c(C)c2c(=O)o1</chem>	<chem>C=CCSc1nc2sc(C)c(C)c2c(=O)o1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(NC(=O)C2CCC2)cc1Nc1nc2ccc(NC(=O)c3ccccc3-c3ccccc3)cc2n2cncc12</chem>	<chem>Cc1ccc(NC(=O)C2CCC2)cc1Nc1nc2ccc(NC(=O)c3ccccc3-c3ccccc3)cc2n2cncc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cccc(CGNc(=O)C(=O)NCC2OCCN2S(=O))(=O)c2ccc(C)cc2)cc1OC</chem>	<chem>COc1cccc(CCNc(=O)C(=O)NCC2OCCN2S(=O))(=O)c2ccc(C)cc2)cc1OC</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>Cc1cc(Nc2nc(Sc3ccc(NC(=O)CN4CCc(CNc(=O)CCO)C4)cc3)nn3ccccc23)n[nH]1</chem>	<chem>Cc1cc(Nc2nc(Sc3ccc(NC(=O)CN4CCc(CNc(=O)CCO)C4)cc3)nn3ccccc23)n[nH]1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Oc1ccc2c3c1OC1C(=O)CCC4(O)C(C2)N(Cc2CCC2)C1O5</chem>	<chem>O=C1CC2(=O)C3Cc4ccc(O)c5c4C2(CCN3CC2CCC2)C1O5</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>FC(F)(F)c1cccc(-c2cccc(CNc3ccc4[nH]ncc4c3)c2)c1</chem>	<chem>FC(F)(F)c1cccc(-c2cccc(CNc3ccc4[nH]ncc4c3)c2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(NC(=O)c2ccc(-c3ccccc3)cc2)cc1S(=O)(=O)N1CCOCC1</chem>	<chem>COc1ccc(NC(=O)c2ccc(-c3ccccc3)cc2)cc1S(=O)(=O)N1CCOCC1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CCCCCCCCCCCCCOP(=O)([O-])OCC[N+](1)C)CCCC1</chem>	<chem>CCCCCCCCCCCCCOP(=O)([O-])OCC[N+](1)C)CCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc2nc(-c3ccccc3)c(Nc3ccc(C)c(N=Cc4c(C)c(C)nn4C)cc3C)n2c1</chem>	<chem>Cc1ccc2nc(-c3ccccc3)c(Nc3ccc(C)c(N=Cc4c(C)c(C)nn4C)cc3C)n2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1nc2cccc(C(=O)O)c2n1Cc1ccc(-c2ccccc2-c2nn[nH]n2)cc1</chem>	<chem>CCc1nc2cccc(C(=O)O)c2n1Cc1ccc(-c2ccccc2-c2nn[nH]n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>N#Cc1ccc(Cn2cncc2CN2CCCN(C(=O)c3ccc4nc[nH]c4c3)CC2)cc1</chem>	<chem>N#Cc1ccc(Cn2cncc2CN2CCCN(C(=O)c3ccc4nc[nH]c4c3)CC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)CC(NC(=O)C(O)C(N)CCc1ccccc1)C(=O)N(C)Cc1ccc(C(C)C)cc1)C(=O)COC(=O)c1ccco1</chem>	<chem>CC(C)CC(NC(=O)C(O)C(N)CCc1ccccc1)C(=O)N(C)Cc1ccc(C(C)C)cc1)C(=O)COC(=O)c1ccco1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(C)C(C=CC=NNc2cccn2)=C(c2ccc(F)cc2F)C(=O)N1OCCCS(=O)(=O)NC1CCCC1</chem>	<chem>CC1(C)C(C=CC=NNc2cccn2)=C(c2ccc(F)cc2F)C(=O)N1OCCCS(=O)(=O)NC1CCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCS(=O)(=O)N1CCOC2CCNC21</chem>	<chem>CCS(=O)(=O)N1CCOC2CCNC21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1cc2c(cc1Nc1ncnc3[nH]cnc13)OCO2</chem>	<chem>c1nc(Nc2ccc3c(c2)OCO3)c2nc[nH]c2n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCOS([O-])(S)=O</chem>	<chem>CCCCCO[SH](=[O])([O-])S</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)Oc1ccc(S(=O)(=O)N2CCN(c2cc(Cl)ccn2)cc1</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>CN1CC2(CC1)Oc1ccc(Cl)cc1C1CC(C(F)(F)F)=NN12</chem>	<chem>CN1CCC2(CC1)Oc1ccc(Cl)cc1C1CC(C(F)(F)F)=NN12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)CCNc1nc(Cl)nc2c1ncn2CCCCOP(=O)(O)O</chem>	<chem>CN(C)CCNc1nc(Cl)nc2c1ncn2CCCCOP(=O)(O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOc1ccc(NC(=O)c2ccc(C)c(C)c2)cc1</chem>	<chem>CCOc1ccc(NC(=O)c2ccc(C)c(C)c2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccc3c(c2)C(=O)N(N(C)CO)CC(C)C(CN(C)C(=O)Nc2cccc(F)c2)OCCCC(C)O3)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccc3c(c2)C(=O)N(N(C)CO)CC(C)C(CN(C)C(=O)Nc2cccc(F)c2)OCCCC(C)O3)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=S(=O)(Nc1nccs1)c1cccc(N=c2sc(-c3ccccc(N=C=S)c3O)nn2-c2ccc(Br)cc2)c1</chem>	<chem>O=S(=O)(Nc1nccs1)c1cccc(N=c2sc(-c3ccccc(N=C=S)c3O)nn2-c2ccc(Br)cc2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)CCn1nc(-c2cnc(NCCN(C)C)n2)c2c1-c1nc(Nc3cccc(N(C)C)c3)ncc1CC2</chem>	<chem>CN(C)CCNc1nccc(-c2nn(CCN(C)C)c3c2CCc2cnc(Nc4cccc(N(C)C)c4)nc2-3)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccccc1C=CC(=O)Nc1ccco1</chem>	<chem>COc1ccccc1C=CC(=O)Nc1ccco1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1N(c2cccc(Cl)c2)c2ccccc2C1=Cc1c[nH]c2ccccc12</chem>	<chem>O=C1C(=Cc2c[nH]c3ccccc23)c2ccccc2N1c1cccc(Cl)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(-n2[nH]c(=S)n(-c3c(Cl)cc(Cl)cc3Cl)c2=S)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(-n2[nH]c(=S)n(-c3c(Cl)cc(Cl)cc3Cl)c2=S)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1ccc(-n2c3ccccc3c3ccccc32)cc1</chem>	<chem>Nc1ccc(-n2c3ccccc3c3ccccc32)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)c1ccccc(C23CC4CC(Cc(C4)C2)C3)c1</chem>	<chem>O=C(O)c1ccccc(C23CC4CC(Cc(C4)C2)C3)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)Cc1ccc(CNC(=O)C(Sc2ccc(Cl)cc2)c2ccccc(Cl)c2)cc1</chem>	<chem>O=C(O)Cc1ccc(CNC(=O)C(Sc2ccc(Cl)cc2)c2ccccc(Cl)c2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccccc(C(=O)c2cc3cc(O)ccc3o2)c1OC</chem>	<chem>COc1ccccc(C(=O)c2cc3cc(O)ccc3o2)c1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>FC(F)(F)c1cc(COCC2(c3ccccc3)CCCC2)cc(C(F)(F)F)c1</chem>	<chem>FC(F)(F)c1cc(COCC2(c3ccccc3)CCCC2)cc(C(F)(F)F)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(C=CCOC(=O)C=Cc2ccc(O)c(OC)c2)ccc1OCc1ccccc(OCc2ccc3ccccc3c2)c1</chem>	<chem>COc1cc(C=CC(=O)OCC=Cc2ccc(OCc3ccccc(OCc4cccc5ccccc5c4)c3)c(OC)c2)ccc1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCCNC(=O)c1cc(-c2ccc(NS(C)(=O)=O)cc2)enc1N</chem>	<chem>COCCNC(=O)c1cc(-c2ccc(NS(C)(=O)=O)cc2)enc1N</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(NC(=O)C1CCC(CNS(=O)(=O)c2ccc(Br)cc2)CC1)c1cccc(F)c1</chem>	<chem>CC(NC(=O)C1CCC(CNS(=O)(=O)c2ccc(Br)cc2)CC1)c1cccc(F)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCN(CCC)C(=O)Cc1cccc2c1OCC(C(=O)O)N2</chem>	<chem>CCCN(CCC)C(=O)Cc1cccc2c1OCC(C(=O)O)N2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(C(=O)NC(Cc2cc(Cl)ccc2OC)C(=O)C(=O)NCCSc2ccccc2)cc(OC)c1OC</chem>	<chem>COc1cc(C(=O)NC(Cc2cc(Cl)ccc2OC)C(=O)C(=O)NCCSc2ccccc2)cc(OC)c1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cccc(C(=O)Nc2ccc3c(c2)C(=O)N(C)C(CO)CC(C)C(CN(C)C(=O)N(C)C)OCCCC(C)O3)cc1</chem>	<chem>COc1cccc(C(=O)Nc2ccc3c(c2)C(=O)N(C)C(CO)CC(C)C(CN(C)C(=O)N(C)C)OCCCC(C)O3)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(C)cc(NC(=O)C2CCN2)c1</chem>	<chem>Cc1cc(C)cc(NC(=O)C2CCN2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=C(C)C1CC2OC3(CC4C(C)=CC(=O)C5C(C1C)C235OCC4(OC(=O)C(C)=CC)CO5</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>NCCCC(NS(=O)(=O)c1cc2c3c(c1)CCN3C(=O)C2)C(=O)O</chem>	<chem>NCCCC(NS(=O)(=O)c1cc2c3c(c1)CC(=O)N3CC2)C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CCC2(C(=O)OCc3cn(-c4ccccc4)nn3)CCC3(C)C(=CCC4C5(C)CCC(=O)C(C)(C)C5CCC43C)C2C1C</chem>	<chem>CC1CCC2(C(=O)OCc3cn(-c4ccccc4)nn3)CCC3(C)C(=CCC4C5(C)CCC(=O)C(C)(C)C5CCC43C)C2C1C</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>COc(=O)N1c2ccccc2C=Cc2ccccc21</chem>	<chem>COc(=O)N1c2ccccc2C=Cc2ccccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCCCNc(=O)CSCC(=O)N(c1ccccc1)C(C)(C)C</chem>	<chem>COCCCNc(=O)CSCC(=O)N(c1ccccc1)C(C)(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc(=O)c1c(Cc(C)C)nc2ccccc2c1-c1ccccc1C</chem>	<chem>COc(=O)c1c(Cc(C)C)nc2ccccc2c1-c1ccccc1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(NC2=Nc3cccc(O)c3Nc3ccsc32)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(NC2=Nc3cccc(O)c3Nc3ccsc32)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1nn(Cc2ccc(-c3nc4cc(F)ccc4[nH]3)cc2)c(Cc)cc1CC(=O)O</chem>	<chem>CCc1nn(Cc2ccc(-c3nc4cc(F)ccc4[nH]3)cc2)c(Cc)cc1CC(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>Nc1snc(SCC(=O)Nc2ccc(Br)cc2)c1C(=O)Nc1ccc(F)cc1</chem>	<chem>Nc1snc(SCC(=O)Nc2ccc(Br)cc2)c1C(=O)Nc1ccc(F)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)C(=O)c1ccccc(NC(=O)NC(COCC2ccccc2)C(=O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)N2CCCC2)c1</chem>	<chem>CN(C)C(=O)c1ccccc(NC(=O)NC(COCC2ccccc2)C(=O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)Nc1ccc(F)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(C=Cc1ccccc1)NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(=O)Nc1ccc(S(=O)(=O)N2CC3(CCN(C3)CC2CO)cc1</chem>	<chem>CN(C)C(=O)c1ccccc(NC(=O)NC(COCC2ccccc2)C(=O)C(Cc2ccccc2)NC(=O)N2CCCC2)c1</chem>	FALSE	TRUE	TRUE
<chem>N=C(N)NCCCC1NC(=O)C(Cc2ccc(O)cc2)NC(=O)C2CCCN2C(=O)C(Cc2c[nH]c3ccccc23)NC1=O</chem>	<chem>N=C(N)NCCCC1NC(=O)C(Cc2ccc(O)cc2)NC(=O)C2CCCN2C(=O)C(Cc2c[nH]c3ccccc23)NC1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1cccc1C(=O)NCCNS(=O)(=O)c1ccc2c(c1)OCCCCO2</chem>	<chem>Cn1cccc1C(=O)NCCNS(=O)(=O)c1ccc2c(c1)OCCCCO2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)CC1(CC(=O)O)OCCc2c1[nH]c1cc(Cl)cc(Cl)c21</chem>	<chem>O=C(O)CC1(CC(=O)O)OCCc2c1[nH]c1cc(Cl)cc(Cl)c21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)CCCNc(=O)CN(C)C1CCCC1</chem>	<chem>CN(C)CCCNc(=O)CN(C)C1CCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=C1C2CC3(C12)N=C(c1ccccc1)N(c1ccccc1C(F)(F)F)N3C(N)=O</chem>	<chem>C=C1C2CC3(N=C(c4ccccc4)N(c4ccccc4C(F)(F)F)N3C(N)=O)C12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c(C)c(C#N)c(C)c(C#N)c1Cl</chem>	<chem>Cc1c(C)c(C#N)c(C)c(C#N)c1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cn2c(-c3cn[n](CC(=O)Nc4CCCCC4)c3)cn2c(Nc2cc(CN3CCC(F)(F)C3)ns2)n1</chem>	<chem>Cc1cn2c(-c3cn[n](CC(=O)Nc4CCCCC4)c3)cn2c(Nc2cc(CN3CCC(F)(F)C3)ns2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc2nc(C3CCCN(CCOc4cccc(C#N)c4)C3)[nH]c2c1</chem>	<chem>Cc1ccc2nc(C3CCCN(CCOc4cccc(C#N)c4)C3)[nH]c2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=S(=O)(c1ccc2ncccc2c1)C(F)(F)F</chem>	<chem>O=S(=O)(c1ccc2ncccc2c1)C(F)(F)F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOc1nsnc1N1CCN(CC(=O)N2Cc3ccccc3C2)CC1</chem>	<chem>CCOc1nsnc1N1CCN(CC(=O)N2Cc3ccccc3C2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C[N+](C)(C)c1cccc(C(=O)NCCCCCCNC(=O)CCCCCCCC(=O)NC2=CC(=O)C(n3ccc(=O)[nH]c3=O)=C(C=NOc3ccccc3)C2=O)c1</chem>	<chem>C[N+](C)(C)c1cccc(C(=O)NCCCCCCNC(=O)CCCCCCCC(=O)NC2=CC(=O)C(n3ccc(=O)[nH]c3=O)=C(C=NOc3ccccc3)C2=O)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)c1ccc(C=C2SC(=S)N(Cc3ccccc3)C2=O)o1</chem>	<chem>O=C(O)c1ccc(C=C2SC(=S)N(Cc3ccccc3)C2=O)o1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1c(OC(=O)NCCCCc2ccccc2)CCC(C)OC1(C)CCc1ccoc1</chem>	<chem>COc1c(OC(=O)NCCCCc2ccccc2)CCC(C)OC1(C)CCc1ccoc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1c(SCC(=O)N2CCc3ccccc32)nn1-c1c[nH]c2ccccc12</chem>	<chem>Cn1c(SCC(=O)N2CCc3ccccc32)nn1-c1c[nH]c2ccccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(CSc1ccc(C(=O)Nc2cccc(C(F)(F)F)c2)cn1)Nc1ccc(C(F)(F)F)cc1</chem>	<chem>O=C(CSc1ccc(C(=O)Nc2cccc(C(F)(F)F)c2)cn1)Nc1ccc(C(F)(F)F)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C=C2SC(=NC(C)=O)N(NC(=O)c3ccco3)C2=O)c(OC)c1</chem>	<chem>COc1ccc(C=C2SC(=NC(C)=O)N(NC(=O)c3ccco3)C2=O)c(OC)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#Cc1ccc(Cn2cncc2CN2CCC(CN3CCC(O)(c4ccccc4F)CC3)C(C)C(C)C2)cc1</chem>	<chem>CC(C)C1CN(Cc2cncc2Cc2cccc(C#N)cc2)CCC1CN1CCC(O)(c2ccccc2F)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)N1CCN(C(=O)C(C)c2ccc(NS(=O)(=O)c3ccccc4ccnc34)cc2)CC1</chem>	<chem>CCOC(=O)N1CCN(C(=O)C(C)c2ccc(NS(=O)(=O)c3ccccc4ccnc34)cc2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(O)=CCc1c(O)cc(C=Cc2cc(O)cc(O)c2)cc1O</chem>	<chem>CC(C)=CCc1c(O)cc(C=Cc2cc(O)cc(O)c2)cc1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)c1cccc(OCc2cccc(C(=O)O)c2OCc2cccc(C(=O)O)c2)c1</chem>	<chem>CC(=O)c1cccc(OCc2cccc(C(=O)O)c2OCc2cccc(C(=O)O)c2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NC1COC1)C1CCC(CNc2c(N3CCOCC3)c(=O)c2=O)CC1</chem>	<chem>O=C(NC1COC1)C1CCC(CNc2c(N3CCOCC3)c(=O)c2=O)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1OC2(CCN(Cc(F)(F)F)CC2)c2cc(-c3ccc(Cl)cc3O)ccc21</chem>	<chem>O=C1OC2(CCN(Cc(F)(F)F)CC2)c2cc(-c3ccc(Cl)cc3O)ccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1N2CCCC2(C)C(C)(c2ccc3ccccc3c2)C12C=Cc1[nH]ccc1C2=O</chem>	<chem>CC1N2CCCC2(C)C(C)(c2ccc3ccccc3c2)C12C=Cc1[nH]ccc1C2=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOc1ccccc1C(=O)Nc1cc(C)cc(C)c1</chem>	<chem>CCOc1ccccc1C(=O)Nc1cc(C)cc(C)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=[N+](([O-])c1ccc(S(=O)(=O)Nc2nccs2)cc1</chem>	<chem>O=[N+](([O-])c1ccc(S(=O)(=O)Nc2nccs2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>O=C(O)c1ccc(OS(=O)(=O)c2ccc(Cl)cc2)c(NC(=O)c2ccc(C(=O)OC3Cc4ccccc4C3)cc2)c1</chem>	<chem>O=C(O)c1ccc(OS(=O)(=O)c2ccc(Cl)cc2)c(NC(=O)c2ccc(C(=O)OC3Cc4ccccc4C3)cc2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN1CCC(C(=O)N2CCN(c3ccccc(C(F)(F)F)c3)CC2)C1</chem>	<chem>CN1CCC(C(=O)N2CCN(c3ccccc(C(F)(F)F)c3)CC2)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(-c2ccc(CN3C(C)C(C(=O)N(Cc4cn(CCC5OCCCCO5)nn4)CCS3(=O)=O)cc2)c(C)C)c1</chem>	<chem>COc1ccc(-c2ccc(CN3C(C)C(C)C(=O)N(NC4cn(CCC5OCCCCO5)nn4)CCS3(=O)=O)cc2)c(C)C)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C12CCC3(CCCC4=CC(=O)CCC43C)C1CC(NCc1ccco1)C2</chem>	<chem>C12CCC3(CCCC4=CC(=O)CCC43C)C1CC(NCc1ccco1)C2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nn(CCN(C)C)c2nc(-c3ccco3)cc(C(F)(F)F)c12</chem>	<chem>Cc1nn(CCN(C)C)c2nc(-c3ccco3)cc(C(F)(F)F)c12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CCN(CCN(C(=O)CNC(=O)Cn2ccc3ccccc3c2=O)CC1</chem>	<chem>CC1CCN(CCN(C(=O)CNC(=O)Cn2ccc3ccccc3c2=O)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#Cc1c2n(c(=S)n(-c3ccccc3)c1=O)CCN2</chem>	<chem>N#Cc1c2n(c(=S)n(-c3ccccc3)c1=O)CCN2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1ccc2cc(CNS(=O)(=O)N3CC4(C3)OCCO4)ccc21</chem>	<chem>Cn1ccc2cc(CNS(=O)(=O)N3CC4(C3)OCCO4)ccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)CCCC(=O)Nc1ccc(Oc2ccc3ncnc(Nc4ccc(F)c(Cl)c4)c3c2)cc1</chem>	<chem>O=C(O)CCCC(=O)Nc1ccc(Oc2ccc3ncnc(Nc4ccc(F)c(Cl)c4)c3c2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
c1nc(N2CC3CNCC3C2)c2cc(-c3cccc(C4=CCNC4)c3)cnc2n1	C1=C(c2cccc(-c3cnc4ncnc(N5CC6CNCC6C5)c4c3)c2)CNCC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(Nc2nc(Sc3ccc(NC(=O)CN4CC(O)C4)cc3)nn3cccc23)n[nH]1	Cc1cc(Nc2nc(Sc3ccc(NC(=O)CN4CC(O)C4)cc3)nn3cccc23)n[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
CSc1ccc(C=CC(=O)NCc2ccc(NS(C)(=O)=O)c(F)c2)cc1	CSc1ccc(C=CC(=O)NCc2ccc(NS(C)(=O)=O)c(F)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc2c(=NNC(=O)c3ccc(OC)c3)cc(C)oc2c1	CCOc1ccc(C(=O)NN=c2cc(C)oc3cc(OC)c3)ccc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1ccc(NC(=O)C2(C)Cc3c(-c4cccc(C(N)=O)c4)ccnc3O2)cc1	CCOC(=O)c1ccc(NC(=O)C2(C)Cc3c(-c4cccc(C(N)=O)c4)ccnc3O2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCN1CCC=C(c2cccc3cccc23)C1)NCc1ccc2c(c1)OCO2	O=C(CCN1CCC=C(c2cccc3cccc23)C1)NCc1ccc2c(c1)OCO2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O))(=O)N2CCC(C(=O)OCC(=O)N(C3CCCC3)C3CS(=O)(=O)C3)CC2)cc1	Cc1ccc(S(=O))(=O)N2CCC(C(=O)OCC(=O)N(C3CCCC3)C3CS(=O)(=O)C3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1cnn2c(C(F)(F)F)cc(-c3cccn3)nc12)N1CCSCC1	O=C(c1cnn2c(C(F)(F)F)cc(-c3cccn3)nc12)N1CCSCC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2cccc(S(=O))(=O)NC3(CN4CCOCC4)CCCC3)c2)cc1	COc1ccc(-c2cccc(S(=O))(=O)NC3(CN4CCOCC4)CCCC3)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1c(OC)c(OC)c2cccc3c2c1-c1c(OC)c(OC)c(C)c(OC)c1CC3	COc1c(C)c(OC)c(OC)c2c1CCc1cccc3c(OC)c(OC)c(OC)c-2c13	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1c[nH]c2cccc12)N1CCC2(CC1)NC(=O)N(CCOc1cccc(Cl)c1)C2=O	O=C(c1c[nH]c2cccc12)N1CCC2(CC1)NC(=O)N(CCOc1cccc(Cl)c1)C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=C(C(=O)OC2CCC(C)CC2)C(c2ccsc2)C(C#N)=C(OC(=O)C(c2cccc2)c2cccc2)N1	CC1=C(C(=O)OC2CCC(C)CC2)C(c2ccsc2)C(C#N)=C(OC(=O)C(c2cccc2)c2cccc2)N1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(N2CCc3ncnc(NCc4ccc(C)c4)c3C2)nc1	Cc1ccc(N2CCc3ncnc(NCc4ccc(C)c4)c3C2)nc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1=C(C)N(Oc2cc(C)oc(=O)c2C1c1ccc(OC)cc1OC	CCOC(=O)C1=C(C)N(Oc2cc(C)oc(=O)c2C1c1ccc(OC)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
NC(C=O)c1c(-c2ccc(F)cc2)oc2cc(N(Cc3cccc3)S(C)(=O)=O)c(-c3ccc4c(n3)-c3cc5c(F)cccc5n3CO4)cc12	NC(C=O)c1c(-c2ccc(F)cc2)oc2cc(N(Cc3cccc3)S(C)(=O)=O)c(-c3ccc4c(n3)-c3cc5c(F)cccc5n3CO4)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NO)c1cnc(NCCc2cccc2)n2nc(-c3ccco3)nc12	O=C(NO)c1cnc(NCCc2cccc2)n2nc(-c3ccco3)nc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCc1nc2c(n1Cc1cccc1)C(=O)c1cccc1C2=O	CCCCc1nc2c(n1Cc1cccc1)C(=O)c1cccc1C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1coc(C(C)C)c1C(=O)C(=O)N1Cc2csc2CC1C(=O)NC(C)C(=O)O	Cc1coc(C(C)C)c1C(=O)C(=O)N1Cc2csc2CC1C(=O)NC(C)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CN1C(=O)NCC1c1ccc(Cl)cc1	CN1C(=O)NCC1c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1NC(=S)S1=Cc1ccc(O)cc1O	O=C1NC(=S)S1=Cc1ccc(O)cc1O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(=O)C2CN(c3cccc(Cl)c3)C(=O)CN2CCc2cccc2)cc1	Cc1ccc(NC(=O)C2CN(c3cccc(Cl)c3)C(=O)CN2CCc2cccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C(=O)N2CCC(CCN3CCCC(C)C3)NC(=O)Cc3c(F)cccc34)(c3ccc(Cl)c(Cl)c3)CC2)cc(OC)c1OC	COc1cc(C(=O)N2CCC(CCN3CCCC(C)C3)NC(=O)Cc3c(F)cccc34)(c3ccc(Cl)c(Cl)c3)CC2)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CSCC(=O)c1ccc(NC(=O)Cc2ccc(C)c(Cl)c2)cc1	CSCC(=O)c1ccc(NC(=O)Cc2ccc(C)c(Cl)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc2[nH]nnc2c1)C1CC1c1cccc1	O=C(Nc1ccc2[nH]nnc2c1)C1CC1c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)N(Cc1ccc2nc(O)nc(O)c2c1)c1nc2c(s1)CCC(C(C)(C)C)C2	CC(C)(C)C1CCc2sc(N(Cc3ccc4nc(O)nc(O)c4c3)S(C)(=O)=O)nc2C1	TRUE	TRUE	TRUE
COCC(NC(=O)c1ccc(CN(C)CCc2cccc2)cc1)c1ccc(N2CCCC2)cc1	COCC(NC(=O)c1ccc(CN(C)CCc2cccc2)cc1)c1ccc(N2CCCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
N#CC1=C(N)OC2=C(C(=O)CCC2)C1c1cccc(Cl)c1	N#CC1=C(N)OC2=C(C(=O)CCC2)C1c1cccc(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(=O)NC(Cc1ccc(O)cc1)C(=O)NC(SC(Cc1ccccc1)C(=O)NC(CC(C)C)C(=O)O)C(=O)O	CC(C)CC(=O)NC(Cc1ccc(O)cc1)C(=O)NC(SC(Cc1ccccc1)C(=O)NC(CC(C)C)C(=O)O)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1)C1(CN2C)CCN(C(=O)c2ccc(Cl)cc2)CC1C	COc1ccc2c(c1)C1(CCN(C(=O)c3ccc(Cl)cc3)CC1C)CN2C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1ccc(S(=O))(=O)NCC2CCC(C(=O)N3CCN(c4ncccn4)CC3)CC2)cc1	CC(=O)Nc1ccc(S(=O))(=O)NCC2CCC(C(=O)N3CCN(c4ncccn4)CC3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Cn2c(=O)cc(Nc3cccc(OC)c3)n3nc(-c4ccco4)nc23)cc1	COc1ccc(Cn2c(=O)cc(Nc3cccc(OC)c3)n3nc(-c4ccco4)nc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCCCC1(Oc2ccc(Oc3ccc(C(=O)N(C)C)cc3)cc2)C(=O)NC(=O)C(N)C1=O	COCCCCC1(Oc2ccc(Oc3ccc(C(=O)N(C)C)cc3)cc2)C(=O)NC(=O)C(N)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CC(NC(=O)C1CCN(c2nc(-c3ccc(F)cc3)cs2)CC1)c1cccc(Cl)c1	O=C(O)CC(NC(=O)C1CCN(c2nc(-c3ccc(F)cc3)cs2)CC1)c1cccc(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1cccc1COc1ncnc2sc3c(c12)CCCC3	Clc1cccc1COc1ncnc2sc3c(c12)CCCC3	TRUE	TRUE	TRUE
CCCSc1nc(N)c2ncn(C3C=CC(CO)C3)c2n1	CCCSc1nc(N)c2ncn(C3C=CC(CO)C3)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(OC#CCSc1nnc(-c2ccnc2)o1)c1cc(=O)[nH][nH]1	O=C(OC#CCSc1nnc(-c2ccnc2)o1)c1cc(=O)[nH][nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cnccc1-c1ccc2c(Nc3cccc(Br)c3)ncnc2c1	Cc1cnccc1-c1ccc2c(Nc3cccc(Br)c3)ncnc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc1S(=O)(=O)NC1CCC(c2ccc(N)cc2)c2cccc3c2N(C1=O)CC3	COc1cccc1S(=O)(=O)NC1CCC(c2ccc(N)cc2)c2cccc3c2N(C3)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1cc(C(=O)NCc2cccc2OC)ccc1=O	CCn1cc(C(=O)NCc2cccc2OC)ccc1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CC(=NNC(=O)OC(C)(C)C)C(=O)NN=Cc2ccc([N+](=O)[O-])cc2)cc1	COc1ccc(CC(=NNC(=O)OC(C)(C)C)C(=O)NN=Cc2ccc([N+](=O)[O-])cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(CCN(C(=O)c2cnc(N3CCOCC3)c3cccc23)cc1	Cc1ccc(CCN(C(=O)c2cnc(N3CCOCC3)c3cccc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
#CCOCc1ccc(CCN(C(=O)C(OC#C)c2cccc2Br)cc1OC	#CCOCc1ccc(CCN(C(=O)C(OC#C)c2cccc2Br)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC1CC1c1cccc1)S(=O)(=O)O	O=C(NC1CC1c1cccc1)S(=O)(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C(=O)c1ccc(F)c(F)c1)N1CCCC1	O=C(C(=O)c1ccc(F)c(F)c1)N1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)OCC=Cc1c[nH]c2ncc(S(=O))(=O)c3cccc(Cl)c3)c-2n1	CC(C)(C)OCC=Cc1c[nH]c2ncc(S(=O))(=O)c3cccc(Cl)c3)c-2n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc1NC(=O)COC(=O)c1cccc1	COc1cccc1NC(=O)COC(=O)c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCNc1nc(N)nc(N2CCC(NC(=O)C(O)(c3cccc3)c3cccc3)C(F)(F)C2)n1	C=CCNc1nc(N)nc(N2CCC(NC(=O)C(O)(c3cccc3)c3cccc3)C(F)(F)C2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Brc1ccc(Nc2c3cccc3nc3cccc23)cc1	Brc1ccc(Nc2c3cccc3nc3cccc23)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(=O)c1cccc(NC(=O)C(C)N2CCc3cccc3C2)c1	CC(=O)c1cccc(NC(=O)C(C)N2CCc3cccc3C2)c1	TRUE	TRUE	FALSE
COc1ccc(C(C)(NCCc2cccc(C(F)(F)F)c2)C(=O)Nc2nc3ccc(-c4cccc4S(C)(=O)=O)c(C)c3s2)cc1	COc1ccc(C(C)(NCCc2cccc(C(F)(F)F)c2)C(=O)Nc2nc3ccc(-c4cccc4S(C)(=O)=O)c(C)c3s2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(CC(=O)O)c(=O)oc2ccc(OCc3cc(-c4cccc4)on3)cc12	Cc1c(CC(=O)O)c(=O)oc2ccc(OCc3cc(-c4cccc4)on3)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1)-c1nc(-c3c(F)cccc3F)nn1CC2	COc1ccc2c(c1)-c1nc(-c3c(F)cccc3F)nn1CC2	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(N)=O	CCC(N)=O	TRUE	TRUE	FALSE
Cn1c(-c2ccc(F)cc2)c(CCC(=O)N2CCN(c3ccc(F)cc3)CC2)c2ccc(Cl)cc21	Cn1c(-c2ccc(F)cc2)c(CCC(=O)N2CCN(c3ccc(F)cc3)CC2)c2ccc(Cl)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc1CSc1n[nH]c(-c2cccc2O)n1	COc1cccc1CSc1n[nH]c(-c2cccc2O)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOP(=O)(OCC)C(CC=C(C)C)c1ccc(Cl)cc1	CCOP(=O)(OCC)C(CC=C(C)C)c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCc1ccc(OCc2cc(C(=O)N3CCNCC3)no2)cc1	CCCc1ccc(OCc2cc(C(=O)N3CCNCC3)no2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1[nH]ccc2cc(-c3ccc(Cl)cc3O)ncc12	O=c1[nH]ccc2cc(-c3ccc(Cl)cc3O)ncc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCS(=O)(=O)c1ccc(CC(=O)Nc2cnccc2-c2cccc2)cc1	CCS(=O)(=O)c1ccc(CC(=O)Nc2cnccc2-c2cccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2cc3sc(-c4cccc4)c(C)c3c(=O)o2)cc1	Cc1ccc(-c2cc3sc(-c4cccc4)c(C)c3c(=O)o2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nc(CC)n2c(O)nc(-c3cccc3)c12	CCc1nc(CC)n2c(O)nc(-c3cccc3)c12	FALSE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1nnc2n1CCS2)c1ccc(F)cc1	O=C(Nc1nnc2n1CCS2)c1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(C(=O)NCC(=O)O)c(N)c2c1CCOC2	Cc1nc(C(=O)NCC(=O)O)c(N)c2c1CCOC2	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCC(O)(c1ccc(Cl)c1)C1CCCN(C)C1	CCCCCCC(O)(c1cccc(Cl)c1)C1CCCN(C)C1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(NC=Cc2nc(O)c3cccc3c2O)c1	Cc1cccc(NC=Cc2nc(O)c3cccc3c2O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C(O)C2CCCCC2)NC(=O)C(C2=NS(=O))(=O)c3cc(NS(C)(=O)=O)ccc3N2)=C1O	CC1(C(O)C2CCCCC2)NC(=O)C(C2=NS(=O))(=O)c3cc(NS(C)(=O)=O)ccc3N2)=C1O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCc1cn(-c2ccc(F)cc2Cl)nn1)c1cccc(OC2cccc2)c1	O=C(NCc1cn(-c2ccc(F)cc2Cl)nn1)c1cccc(OC2cccc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(C(C)Nc2cc(-c3ccc4ncsc4c3)nc(C)n2)c1	COc1cccc(C(C)Nc2cc(-c3ccc4ncsc4c3)nc(C)n2)c1	TRUE	TRUE	FALSE
OCCCN1cc(-c2cnc3nnn(Cc4ccc5nonc5c4)c3n2)cn1	OCCCN1cc(-c2cnc3nnn(Cc4ccc5nonc5c4)c3n2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)OC(c2ccc(S(C)(=O)=O)cc2)=C(c2ccc(-c3ccc(Cl)cc3)c(F)c2)C1=O	CC1(C)OC(c2ccc(S(C)(=O)=O)cc2)=C(c2ccc(-c3ccc(Cl)cc3)c(F)c2)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c2n(c(=O)n(CC(=O)O)c1=O)-c1cccc1CC2	Cc1c2n(c(=O)n(CC(=O)O)c1=O)-c1cccc1CC2	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)C(=O)Cn1nc(Cc2cccc2)n(N)c1=O	CN(C)C(=O)Cn1nc(Cc2cccc2)n(N)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1CCCN(c2nc(N(C)Cc3cccc3)c3cc(OC)c(OC)cc3n2)C1	CCOC(=O)C1CCCN(c2nc(N(C)Cc3cccc3)c3cc(OC)c(OC)cc3n2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCc1nnc(NC(=O)CSc2ccc(-c3ccc(F)cc3)nn2)s1	COCCc1nnc(NC(=O)CSc2ccc(-c3ccc(F)cc3)nn2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCCCCc1nc(-c2ccc(C(=O)N3CCOCC3)cc2)no1)N1CCN(c2cccc2)CC1	O=C(CCCCCc1nc(-c2ccc(C(=O)N3CCOCC3)cc2)no1)N1CCN(c2cccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)ON1C(c2cccc(Br)c2)NC(=O)NC1(C)C	CC(=O)ON1C(c2cccc(Br)c2)NC(=O)NC1(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1cccc1OCCOc1ccc(Br)cc1	COC(=O)c1cccc1OCCOc1ccc(Br)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O))(=O)N=C2NC(=O)C(=Cc3ccc(OCc4ccc([N+](=O)[O-])cc4)cc3)S2)cc1	Cc1ccc(S(=O))(=O)N=C2NC(=O)C(=Cc3ccc(OCc4ccc([N+](=O)[O-])cc4)cc3)S2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc2nc(-c3ccc4c(c3)OCCO4)c(Cc3ccsc3)n2c1	Cc1ccc2nc(-c3ccc4c(c3)OCCO4)c(Cc3ccsc3)n2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCN1CCCC1)Nc1ccc(-c2nc3cccc3s2)cc1	O=C(CCN1CCCC1)Nc1ccc(-c2nc3cccc3s2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2nn3c(=O)cc(CN4CCN(C(=O)c5cccc5OC)CC4)nc3s2)cc1	COc1ccc(-c2nn3c(=O)cc(CN4CCN(C(=O)c5cccc5OC)CC4)nc3s2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1Cc2cccc2C(c2ccc(C#N)cc2)C1	CN1Cc2cccc2C(c2ccc(C#N)cc2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(Cl)cc1Nc1nnc(S)s1	Cc1ccc(Cl)cc1Nc1nnc(S)s1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>COc1ccc(-c2c(C)c3cc(Br)ccc3c(=O)n2N2CCOCC2)c(O)c1</chem>	<chem>COc1ccc(-c2c(C)c3ccc(Br)ccc3c(=O)n2N2CCOCC2)c(O)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=CCNC(=O)C(=O)C(CCC)NC(=O)C1C2C(CN1C(=O)C(NC(=O)NC(CN1C(=O)CC(C)(C)CC1=O)C(C)(C)C(C)(C)C)C2(C)C</chem>	<chem>C=CCNC(=O)C(=O)C(CCC)NC(=O)C1C2C(CN1C(=O)C(NC(=O)NC(CN1C(=O)CC(C)(C)CC1=O)C(C)(C)C(C)(C)C)C2(C)C</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>O=S(=O)(c1cccs1)N1CCc2ccccc2C1</chem>	<chem>O=S(=O)(c1cccs1)N1CCc2ccccc2C1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>Cc1ccc(NC(=O)c2ccc(Br)c(C)c2)c(C(=O)Nc2ccc(Cl)cn2)c1</chem>	<chem>Cc1ccc(NC(=O)c2ccc(Br)c(C)c2)c(C(=O)Nc2ccc(Cl)cn2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)CCCCCC(C(=O)Nc1ccc(-c2ccccc2O)cc1C(=O)O)n1ccccc1</chem>	<chem>O=C(O)CCCCCC(C(=O)Nc1ccc(-c2ccccc2O)cc1C(=O)O)n1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#Cc1c(OCC(=O)N2CCC(C(=O)c3ccccc3)CC2)ccn2c(=O)c(O)c(C(=O)N3CCCC3)nc12</chem>	<chem>N#Cc1c(OCC(=O)N2CCC(C(=O)c3ccccc3)CC2)ccn2c(=O)c(O)c(C(=O)N3CCCC3)nc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(C)c(cc(NC(S)=NN=Cc2ccnc2)c1</chem>	<chem>Cc1cc(C)c(cc(NC(S)=NN=Cc2ccnc2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)CCn1c(-c2ccc(P(=O)(O)O)o2)nc2c(N)c(F)cc(F)c21</chem>	<chem>CC(C)CCn1c(-c2ccc(P(=O)(O)O)o2)nc2c(N)c(F)cc(F)c21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1C=C(CN2CC(c3ccc(F)cc3)C2)C(=O)c2[nH]ccc21</chem>	<chem>O=C1C=C(CN2CC(c3ccc(F)cc3)C2)C(=O)c2[nH]ccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CON(C(=O)c1c(F)cccc1F)S(=O)(=O)c1ccc(Cl)cc1Cl</chem>	<chem>CON(C(=O)c1c(F)cccc1F)S(=O)(=O)c1ccc(Cl)cc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC(C(C)O)N1CC(C(C)C)CC1=O</chem>	<chem>CCC(C(C)O)N1CC(C(C)C)CC1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Fc1ccc(C2(c3ccc(Nc4nc(SCCOCF)nc5sc6c(c45)CCC5C6)cc3)CCC2)cc1</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=CCn1oc(=O)[nH]c1=O)c1cccc(C)c1</chem>	<chem>CC(=CCn1oc(=O)[nH]c1=O)c1cccc(C)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N=C(N)N1CCCC1c1cnccc1Oc1ccc(S(N)(=O)=O)cc1</chem>	<chem>N=C(N)N1CCCC1c1cnccc1Oc1ccc(S(N)(=O)=O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(-c2cc(C(O)CC(=O)O)[nH]n2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(-c2cc(C(O)CC(=O)O)[nH]n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc(CCNc2nc3c(Br)c(-c4nnn[nH]4)cnc3[nH]2)cc1</chem>	<chem>Brc1c(-c2nnn[nH]2)cnc2[nH]c(NCCc3ccccc3)nc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(C#N)ccc1NC(=O)C1(C1(=O)c2ccc(-n3cccn3)cc2)CCCCC1</chem>	<chem>COc1cc(C#N)ccc1NC(=O)C1(NC(=O)c2ccc(-n3cccn3)cc2)CCCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cccc(NC(=O)C(=O)Nc2ccc3c(c2)OCCO3)c1C</chem>	<chem>Cc1cccc(NC(=O)C(=O)Nc2ccc3c(c2)OCCO3)c1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=n1nc2c(cc1-c1ccccc1F)CC1CN(S(=O)(=O)C3CC3)CC21</chem>	<chem>O=S(=O)(C1CC1)N1CC2Cc3cc(-c4ccccc4F)[n+](([O-]))nc3C2C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1C(=Cc2cccn2)S(C)=S)N1c1ccccc1</chem>	<chem>O=C1C(=Cc2cccn2)S(C)=S)N1c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc2cc(-c3nc4c([nH]3)CCN4)ccc2c1</chem>	<chem>c1ccc2cc(-c3nc4c([nH]3)CCN4)ccc2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=Cc1c(O)cccc1C=CC(=O)Nc1ccccc1</chem>	<chem>O=Cc1c(O)cccc1C=CC(=O)Nc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=CCOc1ccc(CC(=O)O)cc1-c1ccc(F)c2c1CN(C(=O)OCc1ccccc1)CC2</chem>	<chem>C=CCOc1ccc(CC(=O)O)cc1-c1ccc(F)c2c1CN(C(=O)OCc1ccccc1)CC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cccc(Cn2c(=O)n(Cc3ccc(C(=O)N4CCCC4)cc3)c(=O)c3oc4ccccc4c32)c1</chem>	<chem>Cc1cccc(Cn2c(=O)n(Cc3ccc(C(=O)N4CCCC4)cc3)c(=O)c3oc4ccccc4c32)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1=NC(C)C(=O)N(C)c2cc(C=Cc3ccc(C(C)C)cc3)ccc21</chem>	<chem>CC1=NC(C)C(=O)N(C)c2cc(C=Cc3ccc(C(C)C)cc3)ccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1cccc(Cl)c1)c1ccc(-c2ccccc2)n1</chem>	<chem>O=C(Nc1cccc(Cl)c1)c1ccc(-c2ccccc2)n1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CCc1ccccc1NC(=O)CCC(CC(=O)NO)N1CCC(Cc2ccccc2)CC1</chem>	<chem>CCc1ccccc1NC(=O)CCC(CC(=O)NO)N1CCC(Cc2ccccc2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)C1=C(C(CSc2ncccc2C(=O)OCC)NC(c2ccc(C)cc2)C(C(=O)OCC)=C(C)C1=O</chem>	<chem>CCOC(=O)C1=C(C(CSc2ncccc2C(=O)OCC)NC(c2ccc(C)cc2)C(C(=O)OCC)=C(C)C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C2C3CCCCN3C3(C(=O)Nc4cc(Cl)ccc43)C23Cc2ccccc2C3=O)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(C2C3CCCCN3C3(C(=O)Nc4cc(Cl)ccc43)C23Cc2ccccc2C3=O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1c(N)nnc1SCCCN1CCCC1</chem>	<chem>Cn1c(N)nnc1SCCCN1CCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1ccc(O)c([N+](=O)[O-][O-])c1</chem>	<chem>CCc1ccc(O)c([N+](=O)[O-])c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(S(=O)(=O)N=c2[nH][nH]c(S)[nH]2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(S(=O)(=O)N=c2[nH][nH]c(S)[nH]2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nc2cccc(Cl)c2c(=O)n1N=Cc1ccc([N+](=O)[O-])s1</chem>	<chem>Cc1nc2cccc(Cl)c2c(=O)n1N=Cc1ccc([N+](=O)[O-])s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)C1C(O)=C(C(=O)NCCc2cccc(F)c2)C(=O)C2(O)C(O)=C3C(=O)c4c(O)c(NC(=O)CN5CCc6ccccc6C5)cc(F)c4C(C)(O)C3CC12</chem>	<chem>CN(C)C1C(O)=C(C(=O)NCCc2cccc(F)c2)C(=O)C2(O)C(O)=C3C(=O)c4c(O)c(NC(=O)CN5CCc6ccccc6C5)cc(F)c4C(C)(O)C3CC12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCn1c(=O)[nH]c2nc(-c3cnn(Cc4ccc(F)cc4F)c3)[nH]c2c1=O</chem>	<chem>CCn1c(=O)[nH]c2nc(-c3cnn(Cc4ccc(F)cc4F)c3)[nH]c2c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N=c1oc2ccc(O)cc2cc1-c1nc(Nc2ccc(N3CCOCC3)cc2)c2ccccc2n1</chem>	<chem>N=c1oc2ccc(O)cc2cc1-c1nc(Nc2ccc(N3CCOCC3)cc2)c2ccccc2n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1ccc(C(F)(F)F)ccc1N1CCOCC1)c1ccccc(C(=O)Nc3cc(C(=O)NCCCN4CCOCC4)n(-c4ccccc4)c3)n(-c3ccccc3)n2)c1</chem>	<chem>O=C(Nc1cc(C(=O)Nc2cc(C(=O)NCCCN3CCOCC3)n(-c3ccccc3)c2)n(-c2ccccc2)n1)c1cccc(C(=O)Nc2cc(C(F)(F)F)ccc2N2CCOCC2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1C(Oc2ccc(-c3ccccc3)cc2)C(c2ccccc2)N1c1cn1ccnc1</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(C1cnc2ccccc2c1=O)N1CCCCC1</chem>	<chem>O=C(C1cnc2ccccc2c1=O)N1CCCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(CNS(=O)(=O)Cc1ccccc1)Nc1ccccc1</chem>	<chem>O=C(CNS(=O)(=O)Cc1ccccc1)Nc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCNC(=O)c1cnc(N)c2c(Nc3cccc(Br)c3)ncnc12</chem>	<chem>CCNC(=O)c1cnc(N)c2c(Nc3cccc(Br)c3)ncnc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1cccc(CC(=O)C=Cc2ccc(OCc3ccccc3)cc2)c1</chem>	<chem>Nc1cccc(CC(=O)C=Cc2ccc(OCc3ccccc3)cc2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(N2CCC(C)(C3=NCCN3)CC2)nn1</chem>	<chem>Cc1ccc(N2CCC(C)(C3=NCCN3)CC2)nn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCCCCCC(=O)NS(=O)(=O)Oc1ccc(Cl)cc1</chem>	<chem>CCCCCCCCCCCC(=O)NS(=O)(=O)Oc1ccc(Cl)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(CCCOCCCOc1cc2c(cc1[N+](=O)[O-])NC(C(=O)c1ccc3c(c1)OCO3)C(=O)N2)NO</chem>	<chem>O=C(CCCOCCCOc1cc2c(cc1[N+](=O)[O-])NC(C(=O)c1ccc3c(c1)OCO3)C(=O)N2)NO</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N=c1oc2ccccc2cc1C(=O)Nc1ccc2ccccc2c1</chem>	<chem>N=c1oc2ccccc2cc1C(=O)Nc1ccc2ccccc2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1NC(=O)C(Cc2ccccc2)N(C(=O)C(N)Cc2ccc(O)cc2)C(CCc2ccccc2)C(=O)NCCOc2ccccc2C=CCNC1=O</chem>	<chem>CC1NC(=O)C(Cc2ccccc2)N(C(=O)C(N)Cc2ccc(O)cc2)C(CCc2ccccc2)C(=O)NCCOc2ccccc2C=CCNC1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cnc2c(-c3cnn(CC(=O)NCCN(C)C)c3)cnnc12</chem>	<chem>Cc1cnc2c(-c3cnn(CC(=O)NCCN(C)C)c3)cnnc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)CC(C)CC(C)C1CCC2C3CC=C4CC(O)CCC4(C)C3CCC12C</chem>	<chem>CC(C)CC(C)CC(C)C1CCC2C3CC=C4CC(O)CCC4(C)C3CCC12C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN1CCCC(c2ccccc(NCc3ccc(C(N)=O)cc3)c2)C1</chem>	<chem>CN1CCCC(c2ccccc(NCc3ccc(C(N)=O)cc3)c2)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(c2ccc(Cl)cc2)CC(c2ccccc2F)=Nc2ccccc2N1</chem>	<chem>CC1(c2ccc(Cl)cc2)CC(c2ccccc2F)=Nc2ccccc2N1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc2cccc(OCCCN3CCCC3)c2n1</chem>	<chem>Cc1ccc2cccc(OCCCN3CCCC3)c2n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)c1nsc(NC(=O)CSc2nnc(-c3cc4c([nH]c5ccccc54)5ccccc35)o2)n1</chem>	<chem>CC(C)(C)c1nsc(NC(=O)CSc2nnc(-c3cc4c5ccccc5[nH]c4c4ccccc34)o2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C[N+](1(C)CCCC1(CO)CCCCc1ccc(-c2ccc(Cl)cc2)cc1</chem>	<chem>C[N+](1(C)CCCC1(CO)CCCCc1ccc(-c2ccc(Cl)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(S(=O)(=O)N2CCN(C(=O)COC(=O)c3cc(NCCO)ccc3Cl)CC2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(S(=O)(=O)N2CCN(C(=O)COC(=O)c3cc(NCCO)ccc3Cl)CC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc2c(c1)OC(c1cc(OC)c3c(c1)OCO3)C(OC(=O)NC(C)(C)C)C2</chem>	<chem>COc1ccc2c(c1)OC(c1cc(OC)c3c(c1)OCO3)C(OC(=O)NC(C)(C)C)C2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=CCN1C(c2ccc(O)cc2)CC(=O)C(CC)=C1CC</chem>	<chem>C=CCN1C(CC)=C(CC)C(=O)CC1c1ccc(O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=S(=O)(c1ccccc1)N1CCcn2nnc(-c3ccc(Cl)cc3)c2C1</chem>	<chem>O=S(=O)(c1ccccc1)N1CCcn2nnc(-c3ccc(Cl)cc3)c2C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1cncc(CCC2(c3ccnc3)OCCO2)c1</chem>	<chem>c1cncc(CCC2(c3ccnc3)OCCO2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC(Sc1nnnn1-c1ccc2ccccc2c1)C(=O)NN=C1C(=O)Nc2ccc(F)cc21</chem>	<chem>CCC(Sc1nnnn1-c1ccc2ccccc2c1)C(=O)NN=C1C(=O)Nc2ccc(F)cc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC(C)C(NC(=O)N1CCCC(c2nc(-c3ccccc3C)no2)CC1)C(=O)N1CCCC1</chem>	<chem>CCC(C)C(NC(=O)N1CCCC(c2nc(-c3ccccc3C)no2)CC1)C(=O)N1CCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NO)C1C2CCC(O2)C1C(=O)NCCc1ccccc1</chem>	<chem>O=C(NO)C1C2CCC(O2)C1C(=O)NCCc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCN(C(=O)Cc1csc(Nc2cccc(C)c2)n1</chem>	<chem>CCCCCN(C(=O)Cc1csc(Nc2cccc(C)c2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)C1(Cc2ccccc2)CCCN(S(=O)(=O)c2c(C)noc2C=CN(C)C)C1</chem>	<chem>CCOC(=O)C1(Cc2ccccc2)CCCN(S(=O)(=O)c2c(C)noc2C=CN(C)C)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(NC(=O)COC(=O)c2nc(Cl)ccc2Cl)cc1S(=O)(=O)N1CCCCC1</chem>	<chem>Cc1ccc(NC(=O)COC(=O)c2nc(Cl)ccc2Cl)cc1S(=O)(=O)N1CCCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1CCNC(=O)c2cc3ccc(C(F)(F)F)cc3n21</chem>	<chem>O=C1NCCC(=O)n2c1cc1ccc(C(F)(F)F)cc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)c1cc(NC(=O)Nc2ccc(-c3cnco3)cc2)n(C)n1</chem>	<chem>Cn1nc(C(C)(C)C)cc1NC(=O)Nc1ccc(-c2cnco2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1cccc(OCCC(=O)O)c1</chem>	<chem>Nc1cccc(OCCC(=O)O)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)c1ccc(C(=O)Nc2ccccc2)cc1</chem>	<chem>COC(=O)c1ccc(C(=O)Nc2ccccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCN(CCCc1ccccc1)CC(O)c1ccc(O)c2c1OCC(=O)N2</chem>	<chem>CCCN(CCCc1ccccc1)CC(O)c1ccc(O)c2c1OCC(=O)N2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCC(NC(=O)C1C2C(CN1C(=O)C(NC(=O)NC(COC(=O)NN1C(=O)CC(C)(C)CC1=O)C(C)(C)C1(C)CCCC1)C2(C)C)C(=O)C(=O)NC1CC1</chem>	<chem>CCCC(NC(=O)C1C2C(CN1C(=O)C(NC(=O)NC(COC(=O)NN1C(=O)CC(C)(C)CC1=O)C(C)(C)CC1=O)C(C)(C)C1(C)CCCC1)C2(C)C)C(=O)C(=O)NC1CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(CN1C(=O)C2C3C=CC(C3)C2C1=O)OCC(=O)c1ccc(F)cc1</chem>	<chem>O=C(CN1C(=O)C2C3C=CC(C3)C2C1=O)OCC(=O)c1ccc(F)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=S(=O)(N(Cc1ccc(F)cc1)c1ccc2c(c1)CN(C(F)C2</chem>	<chem>O=S(=O)(N(Cc1ccc(F)cc1)c1ccc2c(c1)CN(C(F)C2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCCCCC(=O)Nc1ccc(C=Cc2nc(O)c3sc(=S)n(CCCn4cnc5c(NCC(=O)OCC)cc(C)nc54)c3n2)cc1</chem>	<chem>CCCCCCCC(=O)Nc1ccc(C=Cc2nc(O)c3sc(=S)n(CCCn4cnc5c(NCC(=O)OCC)cc(C)nc54)c3n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)CNC(=O)CCCCN(C(=O)NC12CC3CC(C(C3)C1)C2</chem>	<chem>CCOC(=O)CNC(=O)CCCCN(C(=O)NC12CC3CC(C(C3)C1)C2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ncc(C(=O)Nc2nnc(C3CC3)s2)cc1Cl</chem>	<chem>COc1ncc(C(=O)Nc2nnc(C3CC3)s2)cc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCN(C)CCC1=CC(=O)C=C(OC)C1=O</chem>	<chem>CCCCN(C)CCC1=CC(=O)C=C(OC)C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(CSc2nnc(C3CCCN3S(=O)(=O)c3ccnc3)n2C)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(CSc2nnc(C3CCCN3S(=O)(=O)c3ccnc3)n2C)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Oc1ccc(-c2nc(N3CCOCC3)c3sccc3n2)cc1</chem>	<chem>Oc1ccc(-c2nc(N3CCOCC3)c3sccc3n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC(=O)c1nc(Nc2cccc(O)c2)sc1NC(=O)C1CCCC1</chem>	<chem>NC(=O)c1nc(Nc2cccc(O)c2)sc1NC(=O)C1CCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc2c(cc1OC)C(=O)N1C=C(c3cnsc3)CC1C=N2</chem>	<chem>COc1cc2c(cc1OC)C(=O)N1C=C(c3cnsc3)CC1C=N2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)Cc1sc(-c2ccc(-c3ccc(Cl)cc3)cc2)nc1-c1ccsc1</chem>	<chem>O=C(O)Cc1sc(-c2ccc(-c3ccc(Cl)cc3)cc2)nc1-c1ccsc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)OC(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)NC(CNC(=O)OC(C)(C)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(N)=O</chem>	<chem>CC(C)(C)OC(=O)NCC(C(NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)OC(C)(C)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(N)=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
c1ccc(C2=NC(C3cccc4ccccc34)=NN2c2nc(-c3cccn3)cs2)cc1	c1ccc(-c2nc(-c3cccc4ccccc34)nn2-c2nc(-c3cccn3)cs2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)C2=C(O)C(=O)N(CC(C)C)C2c2ccc([N+](=O)[O-])cc2)cc1	Cc1ccc(C(=O)C2=C(O)C(=O)N(CC(C)C)C2c2ccc([N+](=O)[O-])cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1[nH]c2ccccc2c(=O)c1Cc1ccccc1	Cc1[nH]c2ccccc2c(=O)c1Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CNCC12C=CC(CCl)C1Cc1cc3c(cc12)OCO3	CNCC12C=CC(CCl)C1Cc1cc3c(cc12)OCO3	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)S2C(NC(=O)COc3ccccc3)C(=O)N2C1C(=O)O	CC1(C)S2C(NC(=O)COc3ccccc3)C(=O)N2C1C(=O)O	TRUE	TRUE	FALSE
N#Cc1cccc(-c2ccc3c(c2)OCC2C(Cn4ccnn4)OC(=O)N32)c1	N#Cc1cccc(-c2ccc3c(c2)OCC2C(Cn4ccnn4)OC(=O)N32)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cn2c3c(cc(C(=O)NCCCC(N)=O)cc13)N(C)S(=O)(=O)CC2C1CCCCC1	Cc1cn2c3c(cc(C(=O)NCCCC(N)=O)cc13)N(C)S(=O)(=O)CC2C1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(-c2cc3nc(N4CCOCC4)n(C)c(=O)c3s2)ccc1OCCCN1CCC(C)CC1	COc1cc(-c2cc3nc(N4CCOCC4)n(C)c(=O)c3s2)ccc1OCCCN1CCC(C)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C(=O)CC1C(C)(C)C(OC(=O)c2ccc(C)cc2)C2C=C3C4CC(=O)OC(c5ccoc5)C4(C)CCC3C1(C)C2=O	CO(C(=O)CC1C(C)(C)C(OC(=O)c2ccc(C)cc2)C2C=C3C4CC(=O)OC(c5ccoc5)C4(C)CCC3C1(C)C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cc(S(=O)(=O)N2CCOCC2)ccc1N2CCOCC2)c1cncn1	O=C(Nc1cc(S(=O)(=O)N2CCOCC2)ccc1N1CCOCC1)c1cncn1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOP(=O)(OCC)C(C#N)=Cc1cccc2c(=O)c3ccccc3oc12	CCOP(=O)(OCC)C(C#N)=Cc1cccc2c(=O)c3ccccc3oc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCN5(=O)(=O)c1ccc(Br)cc1)Nc1cccc1C(=O)N1CCCC1	O=C(CCN5(=O)(=O)c1ccc(Br)cc1)Nc1cccc1C(=O)N1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc2c(c1)C(=C1Cc3ccccc31)NCC2	c1ccc2c(c1)CC2=C1NCCc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(N(C)C)nc(Nc2ccc3nc(C)ccc3c2)n1	Cc1cc(N(C)C)nc(Nc2ccc3nc(C)ccc3c2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ccc(NC(=O)NCCOCC2CC2)cc1	N#Cc1ccc(NC(=O)NCCOCC2CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cnc2ccc(-c3ccc(N4CCOCC4=O)cc3)cc21	Cn1cnc2ccc(-c3ccc(N4CCOCC4=O)cc3)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCC1(c2cc(N=C(O)c3cnc(C(C)(C)O)cc3Cl)ccc2F)CC(C(F)(F)F)OC(=N)N1	CCC1(c2cc(N=C(O)c3cnc(C(C)(C)O)cc3Cl)ccc2F)CC(C(F)(F)F)OC(=N)N1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cn1ncc2c3ccccc3n(Cc3ccc(F)cc3F)c2c1=O)NCc1cccn1	O=C(Cn1ncc2c3ccccc3n(Cc3ccc(F)cc3F)c2c1=O)NCc1cccn1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC(=O)c1c(C)c(C(=O)O)n(Cc2ccc2)c1C	CCCC(=O)c1c(C)c(C(=O)O)n(Cc2ccc2)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
CCCOc1ccc(Br)cc1C(O)=CC(=O)C(=O)O	CCCOc1ccc(Br)cc1C(O)=CC(=O)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1oc(C(Cc2cn(C)c3ccccc23)NC(=O)C(C)(C)C)NC(=O)N2CCCC2C(N)=O)nc1C(=O)N(C(CCC(N)=O)C(N)=O	Cc1oc(C(Cc2cn(C)c3ccccc23)NC(=O)C(C)(C)C)NC(=O)N2CCCC2C(N)=O)nc1C(=O)N(C(CCC(N)=O)C(N)=O	TRUE	TRUE	TRUE
BrC1ccc2[nH]c(-c3ccc(C46CCn3C(CCN5)NC5CCC6C6)nc4)nc2c1		FALSE	TRUE	TRUE
O=C(CCN1CCCC1)OCc1ccc(NC(=O)CCN2C(=O)C(O)(CC3CCCCC3)c3ccccc32)cc1	O=C(CCCN1C(=O)C(O)(CC2CCCCC2)c2ccccc21)Nc1ccc(COC(=O)CCN2CCCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C(=O)O)ccc1NC(=O)NC1CCN(Cc2ccc(-c3nn[nH]n3)cc2)C1	COc1cc(C(=O)O)ccc1NC(=O)NC1CCN(Cc2ccc(-c3nn[nH]n3)cc2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc2c(c1)[nH]c1c[n+](Cc3ccccc4ccccc34)ccc12	c1ccc2c(C[n+])3ccc4c(c3)[nH]c3ccccc34)ccccc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NCC1CN(c2ccc(N3CCN(C(=O)[nH]c4ccc([N+](=O)[O-])o4)CC3)c(F)c2)C(=O)O1		FALSE	TRUE	TRUE
Cc1cc(Cl)cc(C(=O)NN=Cc2ccc(F)cc2)c1NC(=O)C[n+])1ccccc1	Cc1cc(Cl)cc(C(=O)NN=Cc2ccc(F)cc2)c1NC(=O)C[n+])1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1Cc2ccccc2N1C(=O)CSc1nnc(Cc2ccc(Cl)cc2)n1-c1ccccc1	CC1Cc2ccccc2N1C(=O)CSc1nnc(Cc2ccc(Cl)cc2)n1-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)(c1ccc(N(CC(O)C(=O)O)C(=O)CCc2cc(Cl)ccc2OC(=O)c2ccc(Cl)c(Cl)c2)cc1)C(F)(F)F	CC(O)(c1ccc(N(CC(O)C(=O)O)C(=O)CCc2cc(Cl)ccc2OC(=O)c2ccc(Cl)c(Cl)c2)cc1)C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nnc(N-c2ccc(Cl)cc2Cl)s1	Cc1nnc(Nc2ccc(Cl)cc2Cl)s1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1ccc(C(=O)NC2CSc3ccccc3N(CC(=O)O)C2=O)cc1[N+](=O)[O-]	CN(C)c1ccc(C(=O)NC2CSc3ccccc3N(CC(=O)O)C2=O)cc1[N+](=O)[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C(=O)C)NC(=O)c1ccc2nc(NC(=O)c3cc4ccccc4s3)sc2c1)C(C)C	CO(C(=O)C)NC(=O)c1ccc2nc(NC(=O)c3cc4ccccc4s3)sc2c1)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)S(=O)(=O)CC1CCCN(CCOCCc2ccc(F)cc2)C1	CN(C)S(=O)(=O)CC1CCCN(CCOCCc2ccc(F)cc2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C=CCN2CCN(c3ccc(C(=O)Nc4cccc(OC)c4)cc3-c3cnnc3)CC2)cc1	COc1ccc(C=CCN2CCN(c3ccc(C(=O)Nc4cccc(OC)c4)cc3-c3cnnc3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1ccc(-c2ccc(C=C3SC(=S)N(CCC(=O)O)C3=O)o2)cc1	CC(=O)Nc1ccc(-c2ccc(C=C3SC(=S)N(CCC(=O)O)C3=O)o2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN=C1SC(=Cc2cccc([N+](=O)[O-])c2)C(=O)N1C	CN=C1SC(=Cc2cccc([N+](=O)[O-])c2)C(=O)N1C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(cc1OC)C(C)N(CCCNC(=O)c1ccc(NC(=O)c3cc(OC)c(OC)c3)cc1)CC2	COc1cc2c(cc1OC)C(C)N(CCCNC(=O)c1ccc(NC(=O)c3cc(OC)c(OC)c3)cc1)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1CCS(=O)1(=O)=O		FALSE	TRUE	TRUE
Cc1ccnc1C(=O)N1CCC2(CC1)NCCc1[nH]cnc12	Cc1ccnc1C(=O)N1CCC2(CC1)NCCc1[nH]cnc12	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C(=O)c1c(C(=NNC(=S)NCc2ccccc2)c2ccccc2n1C	CO(C(=O)c1c(C(=NNC(=S)NCc2ccccc2)c2ccccc2n1C	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C)NS(=O)(=O)c1ccc(-c2cnc(C3CC3)o2)cc1	CCC(C)NS(=O)(=O)c1ccc(-c2cnc(C3CC3)o2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1NC(=O)Cn1c(=O)n(-c2c(OC)cc(Br)cc2OC)c(=O)c2c3c(sc21)CCCC3	COc1ccccc1NC(=O)Cn1c(=O)n(-c2c(OC)cc(Br)cc2OC)c(=O)c2c3c(sc21)CCCC3	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=C(C(=O)Nc2ccccc2)C(c2cccs2)NC(=O)N1	CC1=C(C(=O)Nc2ccccc2)C(c2cccs2)NC(=O)N1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(CN(Cc1ccnc1)C(=O)c1ccc(S(=O)(=O)N2CCCC2)cc1)NCc1ccccc1	O=C(CN(Cc1ccnc1)C(=O)c1ccc(S(=O)(=O)N2CCCC2)cc1)NCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COCC(C)n1c(=NC(=O)c2ccc(Cl)c(S(=O)(=O)N3CCc4ccccc4C3)c2)[nH]c2cc(C)ccc21	COCC(C)n1c(=NC(=O)c2ccc(Cl)c(S(=O)(=O)N3CCc4ccccc4C3)c2)[nH]c2cc(C)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cccc2[nH]ncc12)N1CCN(Cc2ccc3c(c2)OCO3)CC1	O=C(Nc1cccc2[nH]ncc12)N1CCN(Cc2ccc3c(c2)OCO3)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc2c(c(C)c1Br)C(=O)C=C(O)C2=O	Cc1cc2c(c(C)c1Br)C(=O)C=C(O)C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C=C2CC(C)(C)CNC2=O)cc(OCCCN(C)C)C1-c1ccc(CC(C)C)cc1	Cc1cc(C=C2CC(C)(C)CNC2=O)cc(OCCCN(C)C)C1-c1ccc(CC(C)C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C1nnnn1Cc1cccs1)N1CCN(c2ccc(F)cc2)CC1	CC(C1nnnn1Cc1cccs1)N1CCN(c2ccc(F)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCS(=O)(=O)c1nc(-c2ccc(Cl)cc2)c(C#N)c(=O)[nH]1	CCCCS(=O)(=O)c1nc(-c2ccc(Cl)cc2)c(C#N)c(=O)[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nnc2ccc(CC)nn12	CCc1ccc2nnc(CC)n2n1	TRUE	TRUE	TRUE
COC=C(C(=O)OC)c1ccccc1COc1cccc(NCc2ccccc2C)c1	COC=C(C(=O)OC)c1ccccc1COc1cccc(NCc2ccccc2C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1sc(=Nc2ccc(Br)cc2)nc1-c1ccccc1	Cn1sc(=Nc2ccc(Br)cc2)nc1-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC(=Cc1ccc(Cl)cc1)C(=O)N1CCOCC1)c1ccccc1	O=C(NC(=Cc1ccc(Cl)cc1)C(=O)N1CCOCC1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(NC1CCCCC1)Oc1ccc2c(c1)C13CCCCC1C(C2)N(CC1CCC1)CC3	O=C(NC1CCCCC1)Oc1ccc2c(c1)C13CCCCC1C(C2)N(CC1CCC1)CC3	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1nc(C#N)c2ccccc21	Cn1nc(C#N)c2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccc(C2SCC(=O)N2c2ccc(S(=O)(=O)Nc3onc(C)c3C)cc2)cc1	CCc1ccc(C2SCC(=O)N2c2ccc(S(=O)(=O)Nc3onc(C)c3C)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CNC1ccc(Nc2c3ccccc3nc3ccccc23)cc1	O=C(O)CNC1ccc(Nc2c3ccccc3nc3ccccc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(CCCCN2CCc3cc(OC)c(OC)cc3C2=O)C(=O)NC1=O	CC1(CCCCN2CCc3cc(OC)c(OC)cc3C2=O)C(=O)NC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
[O-]c1c2c[n+][([O-])ccc2c(OC(C)O)CO)c2[nH]c3ccccc3c12	[O-]c1c2c[n+][([O-])ccc2c(OC(C)O)CO)c2[nH]c3ccccc3c12	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCN(C(=O)C(Cc2ccc(C(=N)N)c2)NS(=O)(=O)c2ccc3ccccc3c2)C(C(=O)N2CCC2)C1	CC1CCN(C(=O)C(Cc2ccc(C(=N)N)c2)NS(=O)(=O)c2ccc3ccccc3c2)C(C(=O)N2CCC2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)N1CCC(CC(=O)N2CCC(c3ccc(C(OC4CC4)(C(F)(F)F)C(F)(F)F)cc3)C2)CC1	CC(=O)N1CCC(CC(=O)N2CCC(c3ccc(C(OC4CC4)(C(F)(F)F)C(F)(F)F)cc3)C2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(NC(=O)Nc2cc(-c3ccccc3)nn2-c2ccccc2C)c1	Cc1cccc(NC(=O)Nc2cc(-c3ccccc3)nn2-c2ccccc2C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)NS(=O)(=O)c1ccc2c(c1)C(=NNc1ccccc1[N+](=O)[O-])C(=O)N2	CC(C)NS(=O)(=O)c1ccc2c(c1)C(=NNc1ccccc1[N+](=O)[O-])C(=O)N2	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)CCc1cc(O)nc2nnc(SCc3nnc(S)o3)n12	CC(C)CCc1cc(O)nc2nnc(SCc3nnc(S)o3)n12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2cc(Cl)cc(C(=O)N3CC4CN(Cc5ccccc5)CC4C3)c2)c(C(=O)O)c1	Cc1ccc(-c2cc(Cl)cc(C(=O)N3CC4CN(Cc5ccccc5)CC4C3)c2)c(C(=O)O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCCC(=O)NCCCN	CCCCCCCCCCCCC(=O)NCCCN	TRUE	TRUE	FALSE
COc1ccc(NC=C2C(=O)OC(C)(C)OC2=O)cc1	COc1ccc(NC=C2C(=O)OC(C)(C)OC2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
N#CC1(CGNC2CC2c2ccccc2F)CC1	N#CC1(CGNC2CC2c2ccccc2F)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc1-c1cc(C(F)F)c(SCC(=O)O)nc1O	Cc1ccccc1-c1cc(C(F)F)c(SCC(=O)O)nc1O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Nc2ncc(Cc3ccccc3l)cc2-c2nc(C)nc(N)n2)cn1	COc1ccc(Nc2ncc(Cc3ccccc3l)cc2-c2nc(C)nc(N)n2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NC(C)Cc1ccc(C#Cc2cnc(N3CCC4(CC3)OCCCO4)nc2)cc1	CC(=O)NC(C)Cc1ccc(C#Cc2cnc(N3CCC4(CC3)OCCCO4)nc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccccc1C(=O)NN=Cc1ccc(F)cc1F)c1cccs1	O=C(Nc1ccccc1C(=O)NN=Cc1ccc(F)cc1F)c1cccs1	TRUE	TRUE	TRUE
CC12CCC(S(C)(=O)=O)CC1=CCC1C2CCC2(C)C1CCC2(C)O	CC12CCC(S(C)(=O)=O)CC1=CCC1C2CCC2(C)C1CCC2(C)O	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1cc(-c2nc3cnc(N4CCOCC4)cc3n2Cc2cccn2)cn2cc(-c3ccc(CO)o3)nc12	Nc1cc(-c2nc3cnc(N4CCOCC4)cc3n2Cc2cccn2)cn2cc(-c3ccc(CO)o3)nc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1c2ncccc2C(=O)Nc2ccnc21	CCN1c2ncccc2NC(=O)c2ccnc21	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CC(=O)O)cc1-c1ccc(F)c2c1CN(C(=O)C1CC1c1ccccc1)CC2	COc1ccc(CC(=O)O)cc1-c1ccc(F)c2c1CN(C(=O)C1CC1c1ccccc1)CC2	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1cc(-c2n[nH]c3ccc(C(=O)=NC4CCCC(O)(Cc5c(F)cncc5F)C4)cc23)ccn1	Cc1cc(-c2n[nH]c3ccc(C(=O)=NC4CCCC(O)(Cc5c(F)cncc5F)C4)cc23)ccn1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1nsc(NC(=S)NC(=O)c2ccccc2Cl)c1C	CCOC(=O)c1nsc(NC(=S)NC(=O)c2ccccc2Cl)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C(C#N)=CN1CCN(C(=O)OCC)CC1	CCOC(=O)C(C#N)=CN1CCN(C(=O)OCC)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(CC(=O)O)Cc1nc2cc(F)c(F)cc2n1Cc1ccc(Br)cc1	CC(C)(CC(=O)O)Cc1nc2cc(F)c(F)cc2n1Cc1ccc(Br)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1[nH]c(=S)[nH]cc1-c1cn2c3ccccc3n(O)c2n1	O=c1[nH]c(=S)[nH]cc1-c1cn2c3ccccc3n(O)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(OC)c(C=NN2C(=O)CS2=S)c1	COc1ccc(OC)c(C=NN2C(=O)CSC2=S)c1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>Nc1nc(C(=NOc2ccccc2)C(=O)NC2C(=O)N3C(C(=O)O)=C(Sc4nc5ccccc5s4)CSC23)cs1</chem>	<chem>Nc1nc(C(=NOc2ccccc2)C(=O)NC2C(=O)N3C(C(=O)O)=C(Sc4nc5ccccc5s4)CSC23)cs1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)CCNC(=O)c1ccc(-c2cc(OC(F)F)F)cc3)cnc2N)nc1</chem>	<chem>CN(C)CCNC(=O)c1ccc(-c2cc(OC(F)F)F)cc3)cnc2N)nc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)OCC12CCC3(C)C(CCC4C5(C)CC(=O)OC(C)(C)C5CC43C)C1(C)C(OC(C)=O)CC1CC(C)(C(=O)O1)C2</chem>	<chem>CC(=O)OCC12CCC3(C)C(CCC4C5(C)CC(=O)OC(C)(C)C5CC43C)C1(C)C(OC(C)=O)CC1CC(C)(C2)C(=O)O1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NC1CCN(CC(=O)c2c[n+][([O-])c3cc(F)ccc3[n+]]2[O-])CC1)c1ccc(Cl)s1</chem>	<chem>O=C(NC1CCN(CC(=O)c2c[n+][([O-])c3cc(F)ccc3[n+]]2[O-])CC1)c1ccc(Cl)s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1oc(-c2ccccc2)nc1S(=O)(=O)C</chem>	<chem>Cc1oc(-c2ccccc2)nc1S(=O)=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)Oc1ccc(-c2ccc(COP(=O)(O)O)cc2)cc1OC(C)=O</chem>	<chem>CC(=O)Oc1ccc(-c2ccc(COP(=O)(O)O)cc2)cc1OC(C)=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cccc(S(=O)(=O)N2CCC(C(=O)N3CCN(c4cccc4F)CC3)CC2)c1</chem>	<chem>COc1cccc(S(=O))(=O)N2CCC(C(=O)N3CCN(c4cccc4F)CC3)CC2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C=CC=C(C)C=Cc1=C(C)CCCC1(C)C)=CC=CC(C)=CP(=O)(O)C(C)C</chem>	<chem>CC(C=CC=C(C)C=Cc1=C(C)CCCC1(C)C)=CC=CC(C)=CP(=O)(O)C(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(-c2nc(SCC(=O)Nc3ccco3)c(-c3ccco3)[nH]2)cc(OC)c1OC</chem>	<chem>COc1cc(-c2nc(SCC(=O)Nc3ccco3)c(-c3ccco3)[nH]2)cc(OC)c1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NO)c1ccc2c(c1)S(=O)(=O)c1cc(Cl)c(Cl)cc1C2=O</chem>	<chem>O=C(NO)c1ccc2c(c1)S(=O)(=O)c1cc(Cl)c(Cl)cc1C2=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cccc1-c1ccc(=O)n(CC(=O)Nc2ccc(N3CCOCC3)cc2)n1</chem>	<chem>Cc1cccc1-c1ccc(=O)n(CC(=O)Nc2ccc(N3CCOCC3)cc2)n1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>COS(=O)(=O)c1ccc2oc(S)nc2c1</chem>	<chem>COS(=O)(=O)c1ccc2oc(S)nc2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1N=C2SCCN2C1=Cc1ccc(-c2ccc([N+](=O)[O-])cc2)o1</chem>	<chem>O=C1N=C2SCCN2C1=Cc1ccc(-c2ccc([N+](=O)[O-])cc2)o1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1NC(=O)C(=Cc2ccc(N3CCOCC3)cc2)N1</chem>	<chem>O=C1NC(=O)C(=Cc2ccc(N3CCOCC3)cc2)N1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(-n2nc3ccc(NC(=O)c4cccc4Cl)cc3n2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(-n2nc3ccc(NC(=O)c4cccc4Cl)cc3n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(-c2nc(SCCC(=O)O)[nH]c2-c2ccc(OC)cc2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(-c2nc(SCCC(=O)O)[nH]c2-c2ccc(OC)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Fc1ccc(-c2cnc3c(c2)c(CNCCN2CCCC2)cn3-c2ccc(Cl)cc2)cc1</chem>	<chem>Fc1ccc(-c2cnc3c(c2)c(CNCCN2CCCC2)cn3-c2ccc(Cl)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(C#CCc2c(C)nc(N)nc2N)ccc1OCCC#N</chem>	<chem>Cc1cc(C#CCc2c(C)nc(N)nc2N)ccc1OCCC#N</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(O)C1C(=O)N2C(C(=O)O)=C(c3ccc4c(c3)C(N=[N+]=[N-])c3cc(S(=O)(=O)O)ccc3-4)CC12</chem>	<chem>CC(O)C1C(=O)N2C(C(=O)O)=C(c3ccc4c(c3)C(N=[N+]=[N-])c3cc(S(=O)(=O)O)ccc3-4)CC12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=S(=O)(c1cccs1)N1CCC2(CC1)CN(Cc1ccc(Cl)c(Cl)c1)C2</chem>	<chem>O=S(=O)(c1cccs1)N1CCC2(CC1)CN(Cc1ccc(Cl)c(Cl)c1)C2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1cncc(-c2nc3ccnc(NC4CC5CCC(C4)N5)c3o2)c1</chem>	<chem>c1cncc(-c2nc3ccnc(NC4CC5CCC(C4)N5)c3o2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(N)c2cc(NC(=O)c3ccccc3)ccc2n1</chem>	<chem>Cc1cc(N)c2cc(NC(=O)c3ccccc3)ccc2n1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CNC(=O)C(=NOc1cccc1COc1c(C)cc(C)cc1C</chem>	<chem>CNC(=O)C(=NOc1cccc1COc1c(C)cc(C)cc1C</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>COc1cc2c(Nc3ccc(Cl)c(Cl)c3)ncnc2cc1OCC1CN(C)CO1</chem>	<chem>COc1cc2c(Nc3ccc(Cl)c(Cl)c3)ncnc2cc1OCC1CN(C)CO1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCc1nc(-c2ccccc2)c(CNCCN2CCN(c3cc(C)ccc3C)CC2)o1</chem>	<chem>CCCc1nc(-c2ccccc2)c(CNCCN2CCN(c3cc(C)ccc3C)CC2)o1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)C1=C(C)N(CCCC(=O)O)C(=O)NC1c1cccc1</chem>	<chem>CCOC(=O)C1=C(C)N(CCCC(=O)O)C(=O)NC1c1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)N1c2ccccc2C(N(Cc2ccc3ccccc3c2)C(=O)c2ccc(N(C)C)cc2)CC1CC</chem>	<chem>CCOC(=O)N1c2ccccc2C(N(Cc2ccc3ccccc3c2)C(=O)c2ccc(N(C)C)cc2)CC1CC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)C1=C(S)Nc2cccc(C(F)(F)F)c2C1c1c(-c2ccc(Br)cc2)nc2scn12</chem>	<chem>COC(=O)C1=C(S)Nc2cccc(C(F)(F)F)c2C1c1c(-c2ccc(Br)cc2)nc2scn12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(=O)n(C2OC(CO)C(O)C2O)cc1C=O</chem>	<chem>Cc1cc(=O)n(C2OC(CO)C(O)C2O)cc1C=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(-c2cn(C)c(=O)c3[nH]c(-c4cccc4F)nc23)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(-c2cn(C)c(=O)c3[nH]c(-c4cccc4F)nc23)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CCN(CC(=O)N2CCC3(CC2)OC(=N)c2ccccc23)c2ccccc21</chem>	<chem>CC1CCN(CC(=O)N2CCC3(CC2)OC(=N)c2ccccc23)c2ccccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=S(=O)(Nc1nccs1)c1cccc1-c1ccc(-c2cnc(N3CCOCC3)nc2)cc1</chem>	<chem>O=S(=O)(Nc1nccs1)c1cccc1-c1ccc(-c2cnc(N3CCOCC3)nc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>OCC1OC(OC2ccc3c4c(ccc3c2)OCO4)C(O)C(O)C1O</chem>	<chem>OCC1OC(OC2ccc3c4c(ccc3c2)OCO4)C(O)C(O)C1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(N=Nc2ccc(S(=O)(=O)Nc3cncc(C(=O)O)c3)cc2)cc(N2CCC(CN)CC2)c1O</chem>	<chem>Cc1cc(N=Nc2ccc(S(=O)(=O)Nc3cncc(C(=O)O)c3)cc2)cc(N2CCC(CN)CC2)c1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cncc(-c2nn(-c3ccc(N)cc3F)c(-c3ccc4c(c3)OCCO4)c2C)n1</chem>	<chem>Cc1cncc(-c2nn(-c3ccc(N)cc3F)c(-c3ccc4c(c3)OCCO4)c2C)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#Cc1cccc1-c1ccc(SCc2ccccc2)nn1</chem>	<chem>N#Cc1cccc1-c1ccc(SCc2ccccc2)nn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNC(=O)c1cn(Cc2ccccc2Cl)c2ccc(CCCC(=O)NC(C)c3ccccc3)cc2c1=O</chem>	<chem>CNC(=O)c1cn(Cc2ccccc2Cl)c2ccc(CCCC(=O)NC(C)c3ccccc3)cc2c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC(C)c1nc(NS(=O)(=O)c2ccccc2)c(OC(C=O)c2ccccc2)n1Cc1ccc(-c2ccccc2C(=O)O)cc1</chem>	<chem>CCC(C)c1nc(NS(=O)(=O)c2ccccc2)c(OC(C=O)c2ccccc2)n1Cc1ccc(-c2ccccc2C(=O)O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C#CC2(O)CCC3C4CC5=CC(=O)CC5(C)C4C(O)CC32C)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(C#CC2(O)CCC3C4CC5=CC(=O)CC5(C)C4C(O)CC32C)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOc1cccc1NC(=O)C(=O)NNC(=O)c1cccc1</chem>	<chem>CCOc1cccc1NC(=O)C(=O)NNC(=O)c1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CC(C)CN(C(=O)C2CCN(Cc3ccccc3F)CC2)C1</chem>	<chem>CC1CC(C)CN(C(=O)C2CCN(Cc3ccccc3F)CC2)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc(CNc2c(F)ccc(OCCC3CO(CNc4cccc4)(Nc4cccc4)CO3)c2Cl)nc1</chem>	<chem>Fc1ccc(OCCC2CO(CNc3ccccc3)(Nc3ccccc3)CO2)c(Cl)c1Nc1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cccc2c1S(=O)(=O)Cc1cnc(CCN3C(=O)c4cccc4C3=O)n1-2</chem>	<chem>Cc1cccc2c1S(=O)(=O)Cc1cnc(CCN3C(=O)c4cccc4C3=O)n1-2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(F)CCC(N2CCC(C(=O)N3CCC(C#Cc4ccc(OC(F)(F)F)cc4)C3)CC2)C1</chem>	<chem>CC1(F)CCC(N2CCC(C(=O)N3CCC(C#Cc4ccc(OC(F)(F)F)cc4)C3)CC2)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(C1CCNCC1)N1CCCN(c2nc(-c3cccn3)nc3ccccc23)CC1</chem>	<chem>O=C(C1CCNCC1)N1CCCN(c2nc(-c3cccn3)nc3ccccc23)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#Cc1cc(NC(=O)Cc2c[nH]cn2)cc(C(=O)c2ccncc2)c1</chem>	<chem>N#Cc1cc(NC(=O)Cc2c[nH]cn2)cc(C(=O)c2ccncc2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNc1cncc(NC(C)c2ccc(C(C)N)cc2)c1C(F)(F)F</chem>	<chem>CNc1cncc(NC(C)c2ccc(C(C)N)cc2)c1C(F)(F)F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(CCc1nc(C2CC2)no1)N1CCc2ccccc2C1c1cccn1</chem>	<chem>O=C(CCc1nc(C2CC2)no1)N1CCc2ccccc2C1c1cccn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(-c2cc(Cl)c(CNc3nc(NCC(C)O)c(C)cc3C(N)=O)s2)cc(OC)c1OC</chem>	<chem>COc1cc(-c2cc(Cl)c(CNc3nc(NCC(C)O)c(C)cc3C(N)=O)s2)cc(OC)c1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(NS(=O)(=O)c2ccc(NC(=O)c3nc(C)scc3C)cc2)nc(C)n1</chem>	<chem>Cc1cc(NS(=O)(=O)c2ccc(NC(=O)c3nc(C)scc3C)cc2)nc(C)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)n1nc2c(c1NC(=O)CSc1cccc1)C[S+][([O-])c1ccc(Cl)cc12</chem>	<chem>CC(C)(C)n1nc2c(c1NC(=O)CSc1cccc1)C[S+][([O-])c1ccc(Cl)cc1-2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc(-c2cc(-c3ccncc3)nc(-c3cccs3)c2)cc1</chem>	<chem>c1ccc(-c2cc(-c3ccncc3)nc(-c3cccs3)c2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c2c(nn1CC(=O)N1CCN(c3ccc(F)cc3F)CC1)-c1sccc1S(=O)(=O)N2</chem>	<chem>Cc1c2c(nn1CC(=O)N1CCN(c3ccc(F)cc3F)CC1)-c1sccc1S(=O)(=O)N2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cccc(-c2cn(-c3ccc4nc(NC(C)=O)sc4c3)nn2)c1</chem>	<chem>COc1cccc(-c2cn(-c3ccc4nc(NC(C)=O)sc4c3)nn2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#CC(=Cc1c(N2CCOCC2)nc2cc(Cl)ccc2c1-c1cccc1)C(=O)NC1CC1</chem>	<chem>N#CC(=Cc1c(N2CCOCC2)nc2cc(Cl)ccc2c1-c1cccc1)C(=O)NC1CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(OC)c(Cl(=O)CSc2nnc(C)n2-c2ccccc2)c1</chem>	<chem>COc1ccc(OC)c(Cl(=O)CSc2nnc(C)n2-c2ccccc2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=S(=O)(c1cccc(Cl)c1)N1CCC(OC2ncnc3[nH]ccc23)CC1</chem>	<chem>O=S(=O)(c1cccc(Cl)c1)N1CCC(OC2ncnc3[nH]ccc23)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)Cn1c(=NC(=O)c2cccc(C)c2)sc2cc3c(cc21)OCO3</chem>	<chem>COC(=O)Cn1c(=NC(=O)c2cccc(C)c2)sc2cc3c(cc21)OCO3</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(C=Nc2ccc(Cc3ccc(C)c3C)cc2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(C=Nc2ccc(Cc3ccc(C)c3C)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C(=O)N2CCC3(CC2)C(=O)N(c2ccccc2)C(=O)C3C)c(OC)c1</chem>	<chem>COc1ccc(C(=O)N2CCC3(CC2)C(=O)N(c2ccccc2)C(=O)C3C)c(OC)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)c1cnc2c(OC)cccc2c1C(=O)OCC</chem>	<chem>CCOC(=O)c1cnc2c(OC)cccc2c1C(=O)OCC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc(N2CCC3(CCC=CCC3)CC2)cc1</chem>	<chem>C1=CCCC2(CC1)CCN(c1cccc1)CC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)S(C(=S)N1CCN(c2ccc([N+](=O)[O-])cc2Cl)CC1</chem>	<chem>CC(C)S(C(=S)N1CCN(c2ccc([N+](=O)[O-])cc2Cl)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1=C(C(=O)N(C(C)C)C(C)C)CC(C(C(=O)NCCCc2ccccc2)C(=O)N1CC(C)C</chem>	<chem>CC1=C(C(=O)N(C(C)C)C(C)C)CC(C(C(=O)NCCCc2ccccc2)C(=O)N1CC(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC(C)C(CNC(CCC(=O)O)COc1ccc(C(=O)CCc2ccc(F)cc2)cc1)NCCC1CCCCC1</chem>	<chem>CCC(C)C(CNC(CCC(=O)O)COc1ccc(C(=O)CCc2ccc(F)cc2)cc1)NCCC1CCCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=NNC(=O)c1ccc(NC(=O)c2cccs2)cc1)c1cccc1</chem>	<chem>CC(=NNC(=O)c1ccc(NC(=O)c2cccs2)cc1)c1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCN1C(=O)C2(CC(C)(C)OCc3ccc(Br)cc32)N(c2cccc(CC)c2)C1=O</chem>	<chem>CCCN1C(=O)N(c2cccc(CC)c2)C2(CC(C)(C)OCc3ccc(Br)cc32)C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CCCCN1CCCN(C(=O)c1csc2c1CCCC2</chem>	<chem>CC1CCCCN1CCCN(C(=O)c1csc2c1CCCC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)C1=CCC(c2ccccc2)N(S(=O)(=O)c2ccc(C)cc2)C1c1cccc1C</chem>	<chem>CC(=O)C1=CCC(c2ccccc2)N(S(=O)(=O)c2ccc(C)cc2)C1c1cccc1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1c(N2CCOC(c3ccc(F)cc3OCC(F)(F)F)C2)nc(-c2cncn2)cc1=O</chem>	<chem>Cn1c(N2CCOC(c3ccc(F)cc3OCC(F)(F)F)C2)nc(-c2cncn2)cc1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)Nc1nnc(S(=O)(=O)N2CCCCC2)s1</chem>	<chem>CC(=O)Nc1nnc(S(=O)(=O)N2CCCCC2)s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C1=NCN(C2CCC3(CC2)OCCO3)C1</chem>	<chem>C1=NCN(C2CCC3(CC2)OCCO3)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)C1CO(C(C2CCCC2))(C2CCCC2)O01</chem>	<chem>CC(C)(C)C1CO(C(C2CCCC2))(C2CCCC2)O01</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(N(CC(=O)NCCc2ccc3c(c2)OCO3)S(C(=O)=O)cc1Cl</chem>	<chem>Cc1ccc(N(CC(=O)NCCc2ccc3c(c2)OCO3)S(C(=O)=O)cc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#Cc1cc2nc(-c3ccccc3)cc(C(F)(F)F)n2n1</chem>	<chem>N#Cc1cc2nc(-c3ccccc3)cc(C(F)(F)F)n2n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)C1C(OC(=O)c2ccccc2-c2ccccc2)CC2CCC1N2C</chem>	<chem>COC(=O)C1C(OC(=O)c2ccccc2-c2ccccc2)CC2CCC1N2C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(CSc1nc2ccccc2c(=O)n1-c1cccc1Cl)NC(Cc1cccc1)C(=O)O</chem>	<chem>O=C(CSc1nc2ccccc2c(=O)n1-c1cccc1Cl)NC(Cc1cccc1)C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC(CC)C(=N)c1cc(O)nc(O)n1</chem>	<chem>CCC(CC)C(=N)c1cc(O)nc(O)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)C(Cc1ccc(C(F)(F)F)cc1)NC(=O)c1ccc2c(c1)C(=O)c1ccc(N=CN(C)C)cc1CC2</chem>	<chem>COC(=O)C(Cc1ccc(C(F)(F)F)cc1)NC(=O)c1ccc2c(c1)C(=O)c1ccc(N=CN(C)C)cc1CC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)c1cnc2c(ccc3oc(C(C)C)cc32)c1Nc1cccc1C</chem>	<chem>CCOC(=O)c1cnc2c(ccc3oc(C(C)C)cc32)c1Nc1cccc1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>[C[N+]](C)(C)CCCCCS[N]([C](C)C</chem>	<chem>[C[N+]](C)(C)CCCCCS[N]([C](C)C</chem>	FALSE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(-c2ccc(C)c(C)c2)c(F)cc1-n1c(=O)ccc2cc(S(=O)(=O)Nc3ccon3)ccc21</chem>	<chem>COc1cc(-c2ccc(C)c(C)c2)c(F)cc1-n1c(=O)ccc2cc(S(=O)(=O)Nc3ccon3)ccc21</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>COC(=O)C1(Cc2ccccc2)C2C(=O)N(c3ccccc3)C(=O)C2C2CN=C(SCCc3cccs3)N21</chem>	<chem>COC(=O)C1(Cc2ccccc2)C2C(=O)N(c3ccccc3)C(=O)C2C2CN=C(SCCc3cccs3)N21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
O=C1CC(Nc2nccc(-n3ccc4c(N5CCCC(N6CCOCC6)CC5)nccc43)n2)CN1CC1CC1	O=C1CC(Nc2ncccc(-n3ccc4c(N5CCCC(N6CCOCC6)CC5)nccc43)n2)CN1CC1CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(S(=O)(=O)n2c(C3CCCC3)nc3cc(C(=O)NC(C)c4csc(C)n4)ccc32)cc1OC	COc1ccc(S(=O)(=O)n2c(C3CCCC3)nc3cc(C(=O)NC(C)c4csc(C)n4)ccc32)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
O=P(O)(O)Cc1cccc(Cc2ccc(Oc3ccc(C(F)(F)F)cn3)c(Oc3ccccc3)c2)s1	O=P(O)(O)Cc1cccc(Cc2ccc(Oc3ccc(C(F)(F)F)cn3)c(Oc3ccccc3)c2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2nc(SCC(=O)N3CCOCC3)c(C)o2)cc1	COc1ccc(-c2nc(SCC(=O)N3CCOCC3)c(C)o2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(Cc2cc(NC(=O)c3cccc(OC(F)(F)F)c3)cc(C(=O)Nc3ccc(-c4cc5ccccc5s4)cn3)c2)CC1	CN1CCN(Cc2cc(NC(=O)c3cccc(OC(F)(F)F)c3)cc(C(=O)Nc3ccc(-c4cc5ccccc5s4)cn3)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(CC)(COc1ccc(-c2ccc(OCc3ccsc3)cc2)cc1)C(=O)O	CCC(CC)(COc1ccc(-c2ccc(OCc3ccsc3)cc2)cc1)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(N)NCCCCC(=O)NCCCCNC(=O)C(CS)NC(=O)Cc1ccc(S(N)(=O)=O)cc1	N=C(N)NCCCCC(=O)NCCCCNC(=O)C(CS)NC(=O)Cc1ccc(S(N)(=O)=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(C)C)c(OCC(=O)N(Cc2csc(C)n2)C(C)C)c1	Cc1ccc(C(C)C)c(OCC(=O)N(Cc2csc(C)n2)C(C)C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(=O)Sc2ccccc2C(=O)O)cc1	Cc1ccc(NC(=O)Sc2ccccc2C(=O)O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C(=O)OCc2ccccc2)nc(OC)n1	COc1cc(C(=O)OCc2ccccc2)nc(OC)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1cc(-c2ccc(F)cc2)nc2ccc(-c3ccccc3)cc12	O=C(O)c1cc(-c2ccc(F)cc2)nc2ccc(-c3ccccc3)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)c1cc(C(=O)N2Cc3ccccc3C2)n(C)n1	CC(=O)c1cc(C(=O)N2Cc3ccccc3C2)n(C)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CCC(NC(=O)c1cccc(COc2ccc(-c3ccc4c(c3)OCO4)cc2)n1)C(=O)O	O=C(O)CCC(NC(=O)c1cccc(COc2ccc(-c3ccc4c(c3)OCO4)cc2)n1)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC(=O)C1=CCCC2(C)C1CCC(C)C2(C)CCc1ccoc1	CCCC(=O)C1=CCCC2(C)C1CCC(C)C2(C)CCc1ccoc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(Cc1cnnc1)C(=O)c1ccc(-c2noc(C(F)(F)F)n2)cc1	CN(Cc1cnnc1)C(=O)c1ccc(-c2noc(C(F)(F)F)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(-c2cc3c(cn2)c(=O)c2c(C#N)c[nH]c2n3C2CC2)ccc1C(C)C	COc1cc(-c2cc3c(cn2)c(=O)c2c(C#N)c[nH]c2n3C2CC2)ccc1C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCN(C(=O)c2cc(-c3ccc([N+](=O)[O-])cc3)on2)CC1	CC1CCN(C(=O)c2cc(-c3ccc([N+](=O)[O-])cc3)on2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCS(=O)(=O)N(C)CC1OC(CC=C(C)CCC=C(C)C)C=CC1O	CCCS(=O)(=O)N(C)CC1OC(CC=C(C)CCC=C(C)C)C=CC1O	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CC(=O)NN=C1c1ccc(NS(C)(=O)=O)cc1	CC1CC(=O)NN=C1c1ccc(NS(C)(=O)=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccc(CCN(C(=O)CN(c2cccc(OC)c2)S(=O)(=O)N(C)C)cc1	CCc1ccc(CCN(C(=O)CN(c2cccc(OC)c2)S(=O)(=O)N(C)C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1cc(CSC(=S)N2CCOCC2)oc2ccc(F)cc12	O=c1cc(CSC(=S)N2CCOCC2)oc2ccc(F)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CCNc2cc(C(=O)NC34CC5CC(CC(C5)C3)C4)ccc2N1	O=C1CCNc2cc(C(=O)NC34CC5CC(CC(C5)C3)C4)ccc2N1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)C=Cc1cccc2cc(CCC(=O)c3ccnnc3)ccc12	CC(=O)C=Cc1cccc2cc(CCC(=O)c3ccnnc3)ccc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(-c2ccc(N3C(=O)C(=O)C(C(=O)CC(C)C)C3c3ccc(OC4=NCCS4)cc3)cc2)no1	Cc1nc(-c2ccc(N3C(=O)C(=O)C(C(=O)CC(C)C)C3c3ccc(OC4=NCCS4)cc3)cc2)no1	TRUE	TRUE	TRUE
N#CC(C#N)=C1SC(Cc2ccccc2)C(=O)N1c1ccc(S(N)(=O)=O)cc1	N#CC(C#N)=C1SC(Cc2ccccc2)C(=O)N1c1ccc(S(N)(=O)=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCCc1cccc(Cl)c1)C(=Cc1cccc(Cl)c1)c1c1cccc1	O=C(NCCc1cccc(Cl)c1)C(=Cc1cccc(Cl)c1)c1c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CN(C)C(=O)CCc2nnc(Cc3ccnnc3)o2)cc1F	COc1ccc(CN(C)C(=O)CCc2nnc(Cc3ccnnc3)o2)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCC(Cn2c(N(CC3CC3)c3cn(CCN(C)C)nc3Br)nc3cc(-c4nc(=O)o[nH]4)nc(-c4cncc(Cl)c4)c32)CC1	CC1CCC(Cn2c(N(CC3CC3)c3cn(CCN(C)C)nc3Br)nc3cc(-c4nc(=O)o[nH]4)nc(-c4cncc(Cl)c4)c32)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)Oc2cc3[nH]c(=O)ccc3cc2C2(O)C12O	CC1(C)Oc2cc3[nH]c(=O)ccc3cc2C2(O)C12O	FALSE	TRUE	TRUE
Cc1ccnc2c(C=CC(=O)C=Cc3c(Cl)cccc3Cl)c(C)nn12	Cc1nn2c(C)ccnc2c1C=CC(=O)C=Cc1c(Cl)cccc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1(Cc2ccccc2)CCN(C(=O)CC(N)Cc2cc(F)ccc2F)CC1	CCOC(=O)C1(Cc2ccccc2)CCN(C(=O)CC(N)Cc2cc(F)ccc2F)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(OCC2=NCCO2)cc1)c1ncc2cc(Cl)ccc2n1	O=C(Nc1ccc(OCC2=NCCO2)cc1)c1ncc2cc(Cl)ccc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1[nH]c2nnc(N3CCN(C(=S)Nc4cc(C)ccc4F)CC3)c2c1C	Cc1ccc(F)c(NC(=S)N2CCN(c3nnc4[nH]c(C)c(C)c34)CC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2oc3ccc(OC4OC(C(OC)C(=O)O)C(O)C(O)C4O)c(OC)c(O)c3c(=O)c2OC2OC(CO)C(O)C(O)C2O)c(O)c1	COc1ccc(-c2oc3ccc(OC4OC(C(OC)C(=O)O)C(O)C(O)C4O)c(OC)c(O)c3c(=O)c2OC2OC(CO)C(O)C(O)C2O)c(O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=C2SC(=S)N(C3CCS(=O)(=O)C3)C2=O)cc(Cl)c1O	COc1cc(C=C2SC(=S)N(C3CCS(=O)(=O)C3)C2=O)cc(Cl)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Cl)cc1-c1cc(NCc2cccc(C(C)C)c2)ncn1	COc1ccc(Cl)cc1-c1cc(NCc2cccc(C(C)C)c2)ncn1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cc(-c2ccccc2)[nH]n1)c1ccc(F)c(S(=O)(=O)NC2CCCC2O)c1	O=C(Nc1cc(-c2ccccc2)[nH]n1)c1ccc(F)c(S(=O)(=O)NC2CCCC2O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN=c1c(O)c(O)c1=Nc1ccc(S(C)(=O)=O)cc1	CCCN=c1c(O)c(O)c1=Nc1ccc(S(C)(=O)=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(OCC12CCN(CC1)CC2)c1ccc(F)cc1	O=C(OCC12CCN(CC1)CC2)c1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(CO)N(Cc1ccccc1)c1nc(-c2ccccc2OC)nc2ccccc12	CCC(CO)N(Cc1ccccc1)c1nc(-c2ccccc2OC)nc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc2cc(Cn3nc(-c4ccncc4)c4c(N)ncnc43)n(CCCO)c(=O)c12	Cc1cccc2cc(Cn3nc(-c4ccncc4)c4c(N)ncnc43)n(CCCO)c(=O)c12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2cn3cccnnc3n2)cc1NC(=O)c1ccc(N)nc1	Cc1ccc(-c2cn3cccnnc3n2)cc1NC(=O)c1ccc(N)nc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)OCC(C[N+](C)(C)[O-])O1	CC1(C)OCC(C[N+](C)(C)[O-])O1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(OCC(=O)Nc2ccc(C)c(Cl)c2)n1	Cc1cccc(OCC(=O)Nc2ccc(C)c(Cl)c2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(O)N1CCCc2cc(-c3cncc(C#N)c3)cn21	N#Cc1cncc(-c2cnnc3c(Cc3c2=O)CCCC4)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
Clc1ccc(C=Nn2cnnc3sc4c(c3c2=O)CCCC4)cc1	O=c1c2c3c(sc2nnc1N=Cc1ccc(Cl)cc1)CCCC3	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1ccc(-c2ccncc2)cc1C	CC(=O)Nc1ccc(-c2ccncc2)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C1CC(N2CCN(c3nnc4sc(-c5ccccc5)c34)CC2)CN1)N1CCCC1CO	O=C(C1CC(N2CCN(c3nnc4sc(-c5ccccc5)c34)CC2)CN1)N1CCCC1CO	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ncc2c(C(N)=O)nn(CCc3ccccc3)c2n1	N#Cc1ncc2c(C(N)=O)nn(CCc3ccccc3)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CC1CCC(c2ccc(NC(=O)c3nc(-c4c[nH]c5ccccc45)sc3-c3ccc(C(F)(F)F)cc3)c(Cl)c2)CC1	O=C(O)CC1CCC(c2ccc(NC(=O)c3nc(-c4c[nH]c5ccccc45)sc3-c3ccc(C(F)(F)F)cc3)c(Cl)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC12CC(C)(C)C(C1O)N(C)C(=O)c1cccc12	CCOC12CC(C)(C)C(C1O)N(C)C(=O)c1cccc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(NC(=S)Nc2ccc(S(=O)(=O)Nc3cncc4ccccc4n3)cc2)n1	Cc1cccc(NC(=S)Nc2ccc(S(=O)(=O)Nc3cncc4ccccc4n3)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)N(CCOc1ccc(Cc(CCC(=O)O)NCCc2ccccc2)cc1)C(C)C	CC(C)N(CCOc1ccc(Cc(CCC(=O)O)NCCc2ccccc2)cc1)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)C1=CCC(c2ccc(Cl)cc2)N(Cc2ccccc2F)C1	O=C(O)C1=CCC(c2ccc(Cl)cc2)N(Cc2ccccc2F)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCC(=O)Nc1ccc(S(N)(=O)=O)cc1	CCCCCC(=O)Nc1ccc(S(N)(=O)=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ccc(N2C=Cc3ccccc3C2c2cc3cc(Br)ccc3nc2-c2ccccc2)cc1	N#Cc1ccc(N2C=Cc3ccccc3C2c2cc3cc(Br)ccc3nc2-c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CN(Cc1cc(Cl)c2c(c1)OCCCO2)C(=O)C1CCN(Cc2ccc3ncccc23)C1	CC(C)CN(Cc1cc(Cl)c2c(c1)OCCCO2)C(=O)C1CCN(Cc2ccc3ncccc23)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC1Oc2cc(O)c(C(=O)C=Cc3ccc4c(c3)OCO4)c(O)c2C1=O	CCCC1Oc2cc(O)c(C(=O)C=Cc3ccc4c(c3)OCO4)c(O)c2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)c1ccc(N2CCN(C(=O)c3ccc4c(c3)OCCO4)CC2)cc1	CC(=O)c1ccc(N2CCN(C(=O)c3ccc4c(c3)OCCO4)CC2)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
CO(C)(C)C#CCCCOC(C)=O	CO(C)(C)C#CCCCOC(C)=O	TRUE	TRUE	TRUE
CSC(Cc1ccc(O)cc1)c1c(O)c(C)c(O)c2c1OC(c1cccc(O)c1)CC2=O	CSC(Cc1ccc(O)cc1)c1c(O)c(C)c(O)c2c1OC(c1cccc(O)c1)CC2=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)CCCCC1c2ccccc2C2Nc3ccccc3C21	O=C(O)CCCCC1c2ccccc2C2Nc3ccccc3C21	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(C(=O)c1ccc(C(=C2CC3CCC(C2)N3CCc2ccccc2)c2ccccc2)cc1	CCCN(C(=O)c1ccc(C(=C2CC3CCC(C2)N3CCc2ccccc2)c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Nc2nnc3cc(OC)c(OC)cc23)c1	COc1ccc(Nc2nnc3cc(OC)c(OC)cc23)c1	TRUE	TRUE	FALSE
O=c1nc(-c2ccccc2)nc2n1CCS2	O=c1nc(-c2ccccc2)nc2n1CCS2	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccccc1NC(=O)C1CC2CCC1C2	CCOc1ccccc1NC(=O)C1CC2CCC1C2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)Nc2ccc(S(N)(=O)=O)cc2)cc1	Cc1ccc(C(=O)Nc2ccc(S(N)(=O)=O)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)C(=O)Cn1c2ccccc2c(=S)c2ccccc21	CCN(CC)C(=O)Cn1c2ccccc2c(=S)c2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1c(C)enc1CN1CCN(C(=O)c2cn(C)c3cccn23)CC1	CCn1c(C)enc1CN1CCN(C(=O)c2cn(C)c3cccn23)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(Cc1ccc2c(c1)OC(C(=O)OCCc1ccc(Cl)cc1)C(=O)OCC1CC1)O2)NCC(O)c1cccc(Cl)c1	CC(Cc1ccc2c(c1)OC(C(=O)OCCc1ccc(Cl)cc1)C(=O)OCC1CC1)O2)NCC(O)c1cccc(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(NC(=O)OC(C)(C)C(=O)N1CCCC1C(=O)c1noc(C(C)(O)c2cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c2)n1	CC(C)C(NC(=O)OC(C)(C)C(=O)N1CCCC1C(=O)c1noc(C(C)(O)c2cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1c(Br)cc(Br)cc1C=Nc1nc(-c2cccc(Cl)c2)cs1	Oc1c(Br)cc(Br)cc1C=Nc1nc(-c2cccc(Cl)c2)cs1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C=Cc(CCC(N)=O)NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)C(CC(C)C)NC(=O)C(NC(=O)c1ccccc1)C(C)C	CCOC(=O)C=Cc(CCC(N)=O)NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)C(CC(C)C)NC(=O)C(NC(=O)c1ccccc1)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cn(C2CC(O)C(CNC3CCCCC3)O2)c(=O)[nH]c1=O	Cc1cn(C2CC(O)C(CNC3CCCCC3)O2)c(=O)[nH]c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(OCC(=O)n2sccc2=O)c(C)c1	Cc1ccc(OCC(=O)n2sccc2=O)c(C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CC1(C)CC(=O)C2(O)C(O1)C(O)C(OC(C)=O)C1C(C)(C)CCC(O)C12C	C=CC1(C)CC(=O)C2(O)C(O1)C(O)C(OC(C)=O)C1C(C)(C)CCC(O)C12C	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(Nc1ccccc1Cl)c1cccc2c1C(=O)N(C1CCCCC1)C2	O=C(Nc1ccccc1Cl)c1cccc2c1C(=O)N(C1CCCCC1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1CCN(c2nc(Nc3ccc(NC(=O)OCC)cc3)nc(Cl)c2Cl)CC1	CCOC(=O)Nc1ccc(Nc2nc(Cl)c(Cl)c(N3CCC(C(=O)OCC)CC3)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)SN(C)C(=O)N1Cc2ccc3cc2Oc2ccccc2C=CCC(O3)Oc2ccccc21	CCN(CC)SN(C)C(=O)N1Cc2ccc3cc2Oc2ccccc2C=CCC(O3)Oc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(Nc2cc(-c3ccnnc3)ncn2)c1	Cc1cccc(Nc2cc(-c3ccnnc3)ncn2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc2ccccc2n1-c1nc(N2CCOCC2)c2nc(CN3CCOCC3)n(C)c2n1	Cc1nc2ccccc2n1-c1nc(N2CCOCC2)c2nc(CN3CCOCC3)n(C)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc2[nH]c(-c3ccc(Nc4nc5c(s4)CCNCC5)cc3)nc2c1	c1ccc2[nH]c(-c3ccc(Nc4nc5c(s4)CCNCC5)cc3)nc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C=NNC(=O)CCc2nc3ccnnc3[nH]2)cc1	COc1ccc(C=NNC(=O)CCc2nc3ccnnc3[nH]2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
Clc1ccc(Nc2c3ccccc3nc3c2[nH]c2ccccc23)cc1	Clc1ccc(Nc2c3ccccc3nc3c2[nH]c2ccccc23)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
CCS(=O)(=O)c1cccc(Nc2c3ccccc3nc3ccccc23)c1	CCS(=O)(=O)c1cccc(Nc2c3ccccc3nc3ccccc23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)OC(CC(=O)O)C1CC(=O)C2(C)C3=C(C(=O)CC12C)C1(C)CCC(=O)C(C)(C)C1CC3=O	CC(=O)OC(CCC(=O)O)C1CC(=O)C2(C)C3=C(C(=O)CC12C)C1(C)CCC(=O)C(C)(C)C1CC3=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C#Cc1cnc(Oc2cc3c(cc2C)NC(=O)C1(C(=O)Nc2cncnc2)CC3)s1)NCC(F)(F)F		FALSE	TRUE	TRUE
O=C(c1ccccc1)c1cnc(-c2nnc(Nc3ccc(Cl)cc3)s2)s1	O=C(c1ccccc1)c1cnc(-c2nnc(Nc3ccc(Cl)cc3)s2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
NS(=O)(=O)c1ccc(Nc2ncnc3sc(C(=O)NC4CCCC4)cc23)cc1	NS(=O)(=O)c1ccc(Nc2ncnc3sc(C(=O)NC4CCCC4)cc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COCC12COCC1CN(C(=O)c1cncs1)C2	COCC12COCC1CN(C(=O)c1cncs1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
NS(=O)(=O)O	NS(=O)(=O)O	TRUE	TRUE	FALSE
CCCC(=O)Nc1cc(=O)[nH]c(=O)[nH]1	CCCC(=O)Nc1cc(=O)[nH]c(=O)[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C(CO)Oc1cc(F)cc(F)c1Nc1ncnc2cc(N=S3(=O)CCOC3)cc(F)c12	CC(C)(C(CO)Oc1cc(F)cc(F)c1Nc1ncnc2cc(N=S3(=O)CCOC3)cc(F)c12	TRUE	TRUE	TRUE
COC12CCCCC1C1CC(O)CC1(CO)CCCC21O		FALSE	TRUE	TRUE
CC(C)(C(NC(=O)c1cccn1)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(O)CC(Cc1ccccc1)NC(=O)C1CN(c2ccccc2)C(=O)N1	CC(C)(C(NC(=O)c1cccn1)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(O)CC(Cc1ccccc1)NC(=O)C1CN(c2ccccc2)C(=O)N1	TRUE	TRUE	TRUE
NC1CC(CCC2CC(C)NC(=O)NC3c4ccccc4CC3O)CC2)CC1	NC1CC(CCC2CC(C)NC(=O)NC3c4ccccc4CC3O)CC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(=O)Oc2ccccc2C(=O)Nc2ccc(Cl)c(C(F)(F)F)c2)cc1	Cc1ccc(NC(=O)Oc2ccccc2C(=O)Nc2ccc(Cl)c(C(F)(F)F)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCNC(=O)Cn1c(=O)n(Cc2ccco2)c(=O)c2ccccc21	COCCNC(=O)Cn1c(=O)n(Cc2ccco2)c(=O)c2ccccc21	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1ccccc1NC(=O)C1=CC(c2cc(Cl)ccc2O)=NS(=O)(=O)N1CC	CCN1C(C(=O)Nc2ccccc2C)=CC(c2cc(Cl)ccc2O)=NS1(=O)=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(C(CCCCCOc2ccc(-c3nc4cc(C(=O)NCCCCN5CCOCC5)ccc4[nH]3)cc2)Sc2ccc(CC(=O)O)cc2C)c1	Cc1cccc(C(CCCCCOc2ccc(-c3nc4cc(C(=O)NCCCCN5CCOCC5)ccc4[nH]3)cc2)Sc2ccc(CC(=O)O)cc2C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(COc1ccc2ccccc2c1)N1CCc2ccccc21	O=C(COc1ccc2ccccc2c1)N1CCc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
C=C1C(=C)CC2(C)(ON)CCCC2(C)C1CC(O)CCO	C=C1CC2(C)(ON)CCCC2(C)C(CO)CCO)C1=C	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)C1CCC=C(C)C(=O)Nc2cc(Cl)c(OC)c(Cl)c2C(=O)N1	CNC(=O)C1CCC=C(C)C(=O)Nc2cc(Cl)c(OC)c(Cl)c2C(=O)N1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1nc(SCc2ccccc2F)ccn1C1OC(COP(=O)(NCC(F)(F)F)OCC2OCC(OCC(F)(F)F)C2O)C(O)C1O	O=c1nc(SCc2ccccc2F)ccn1C1OC(COP(=O)(NCC(F)(F)F)OCC2OCC(OCC(F)(F)F)C2O)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=NNc1ccc(N=C2C(=O)NOC(c3ccccc3)C2C)cc1)c1ccccc1	CC(=NNc1ccc(N=C2C(=O)NOC(c3ccccc3)C2C)cc1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)OC(=O)NN=C1SCCS1	CC(C)(C)OC(=O)NN=C1SCCS1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1-c1ccnc(Nc2ccnc2)n1	COc1ccccc1-c1ccnc(Nc2ccnc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C2=NCCN2c2cc(Cl)c(Cl)cc2N1Cc1ccccc1	O=C1C2=NCCN2c2cc(Cl)c(Cl)cc2N1Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc(-c2cncc(OC3CC(C)N=C(O)CCN(C(=O)C(C#N)=Cc4ccc(F)cc4)CC3)c2)cn1	Cn1cc(-c2cncc(OC3CC(C)N=C(O)CCN(C(=O)C(C#N)=Cc4ccc(F)cc4)CC3)c2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(N=C(O)Nc1cc2[nH]nc(OC3CC4COCc4(C(O)=NCC(F)F)C3)c2cn1)c1ccccc1	CC(N=C(O)Nc1cc2[nH]nc(OC3CC4COCc4(C(O)=NCC(F)F)C3)c2cn1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC(c1ccc(C(=O)NCCC(=O)O)cc1)n1nc(-c2cc(C(F)(F)F)ccc2OC)c2ccc(-c3ccc(OC(F)(F)F)cc3)cc21	CCCCC(c1ccc(C(=O)NCCC(=O)O)cc1)n1nc(-c2cc(C(F)(F)F)ccc2OC)c2ccc(-c3ccc(OC(F)(F)F)cc3)cc21	TRUE	TRUE	FALSE
CNC(=O)C1Cc2ccccc2N1C(=O)COc1ccc(Cl)cc1	CNC(=O)C1Cc2ccccc2N1C(=O)COc1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
CCn1nc(C)c(CNc2ncccc2C(=O)NC)c1C	CCn1nc(C)c(CNc2ncccc2C(=O)NC)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ncnc2c1ncn2C1OC(C=CP(=O)(O)O)C(O)C1O	Nc1ncnc2c1ncn2C1OC(C=CP(=O)(O)O)C(O)C1O	TRUE	TRUE	FALSE
CCOC(=O)C1C(N=Nc2nnnn2C)N(c2nc(-c3ccccc3)cs2)C1(C)C	CCOC(=O)C1C(N=Nc2nnnn2C)N(c2nc(-c3ccccc3)cs2)C1(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1c[nH]c(C(=O)Nc2ccc(C3CNCCO3)cc2C2=CCCC2)n1	N#Cc1c[nH]c(C(=O)Nc2ccc(C3CNCCO3)cc2C2=CCCC2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CNC(=O)c1cnn2ccc(N3CCCC3c3ccc(Cl)c3)nc12	CC(C)CNC(=O)c1cnn2ccc(N3CCCC3c3ccc(Cl)c3)nc12	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ccc(NC(=O)CSc2cc(=O)n(Cc3ccccc3)c3ccccc23)cc1	N#Cc1ccc(NC(=O)CSc2cc(=O)n(Cc3ccccc3)c3ccccc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1ccc(CNS(=O)(=O)c2ccc(Cl)cc2)cc1)N(Cc1ccnc1)Cc1ccsc1	O=C(c1ccc(CNS(=O)(=O)c2ccc(Cl)cc2)cc1)N(Cc1ccnc1)Cc1ccsc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1ccccc1-c1c(C=Cc2ccc3ccccc3c2)ccc2ccccc12	O=C(O)c1ccccc1-c1c(C=Cc2ccc3ccccc3c2)ccc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc1C1C(C(=O)c2cccs2)=C(O)C(=O)N1c1ccncc1	Cc1ccccc1C1C(C(=O)c2cccs2)=C(O)C(=O)N1c1ccncc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC1=CC2C3Cc4ccc(OC)c(OCc5ccc(=O)[nH]c5)c4C2(CCN3C)CC1=O	COC1=CC2C3Cc4ccc(OC)c(OCc5ccc(=O)[nH]c5)c4C2(CCN3C)CC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C(=O)c1c(C)oc2c1ccc(Nc1c(C)cc(C)cc1C)c1c([N+](=O)[O-])cc(=O)oc12	CO(C(=O)c1c(C)oc2c1ccc(Nc1c(C)cc(C)cc1C)c1c([N+](=O)[O-])cc(=O)oc12	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1c(-c2ccc([N+](=O)[O-])cc2)nn2c(O)cc(C)nc12	COC(=O)c1c(-c2ccc([N+](=O)[O-])cc2)nn2c(O)cc(C)nc12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=Nn2cnnc2)ccc1OCc1ccc(C#N)cc1	COc1cc(C=Nn2cnnc2)ccc1OCc1ccc(C#N)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(CC(CCN1CCC2(CC1)CN(c1ccccc1N)CC2c1ccccc1)S(=O)(=O)c1ccccc1		FALSE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(NC(=O)NCCCOc2cncnc2)c1C	Cc1cccc(NC(=O)NCCCOc2cncnc2)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
C(=Cc1cnn2ccc(C3=NCCN3)cc2c1)c1ccc(C2=NCCN2)cc1		FALSE	TRUE	TRUE
CCc1nc(NCc2ccc(N(C)C)cc2)c2c3c(sc2n1)CCC3	CCc1nc(NCc2ccc(N(C)C)cc2)c2c3c(sc2n1)CCC3	TRUE	TRUE	TRUE
COCCCN(C=O)Cn1ncc2cc(c3ccccc32)c1=O		FALSE	TRUE	TRUE
CC(C)=NNc1nc2c(c(NCC3CCNC3)n1)CNCC2	CC(C)=NNc1nc2c(c(NCC3CCNC3)n1)CNCC2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C(=O)Nc2ccccc(C)Nc3cncnc4c(C(N)=O)cc(-c5ccc(F)cc5)cc34)c2)ccc1F	Cc1cc(C(=O)Nc2ccccc(C)Nc3cncnc4c(C(N)=O)cc(-c5ccc(F)cc5)cc34)c2)ccc1F	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1c(C)c(C#N)c2nc3ccccc3n2c1NCCN1CCOCC1	CCc1c(C)c(C#N)c2nc3ccccc3n2c1NCCN1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(CNC(=O)Cn2ncc3c4ccccc4n(Cc4ccc(F)cc4)c3c2=O)c1OC	COc1cccc(CNC(=O)Cn2ncc3c4ccccc4n(Cc4ccc(F)cc4)c3c2=O)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)N1CCC(C(=O)Nc2ccsc2-c2ccccc2F)CC1	CS(=O)(=O)N1CCC(C(=O)Nc2ccsc2-c2ccccc2F)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCCCN1C(=O)CCc1nc2n(n1)CCCC2	CC1CCCCN1C(=O)CCc1nc2n(n1)CCCC2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1nc2ccccc2c(=O)n1NC(=O)c1ccc(Cl)cc1	CC(C)(C)c1nc2ccccc2c(=O)n1NC(=O)c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)n1c(S)nnc1C1CCCCC1	CC(C)n1c(S)nnc1C1CCCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NNC(=O)C1CC1c1cccc2ccccc12)c1ccc(Cl)cc1	O=C(NNC(=O)C1CC1c1cccc2ccccc12)c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCOc1ccc2c(c1)c(C)cc(=O)n2CC(=O)N(C)c1ccc(Cl)cc1Cl	CCCOc1ccc2c(c1)c(C)cc(=O)n2CC(=O)N(C)c1ccc(Cl)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)OCc1ccccc1)C(=O)SC(Cc1ccc(OCCN2CCSC2)cc1)C(=O)N1CCOCC1	CC(C)(C)OCc1ccccc1)C(=O)SC(Cc1ccc(OCCN2CCSC2)cc1)C(=O)N1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
NC1CCN(Cc2ccccc(-c3ccccc3CCN)n2)CC1	NCCc1ccccc1-c1ccccc1CN2CC(C)N)CC2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)N1CCC2(CC1)NC(=O)c1ccc(Br)cc1N2	CC(=O)N1CCC2(CC1)NC(=O)c1ccc(Br)cc1N2	TRUE	TRUE	TRUE
COCCN(C)CC1CCCC=C1CO	COCCN(C)CC1CCCC=C1CO	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc(N)c2c(n1)CCC2N1CCN(CN(CCC(F)(F)F)C(C(N)=O)C1)CC1CCCC1	NC(=O)C1CN(C2CCc3nc(N)nc(N)c32)CCN(C2CCCC2)CN1CCC(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C(N)=O)ccc1-n1nc(C(F)(F)F)c2c(-n3cnc(-c4ccccc4Cl)c3)ccnc21	Cc1cc(C(N)=O)ccc1-n1nc(C(F)(F)F)c2c(-n3cnc(-c4ccccc4Cl)c3)ccnc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CC2CC3(CCC1(C)N2C)NC(=O)CC3c1ccccc1	CC1CC2CC3(CCC1(C)N2C)NC(=O)CC3c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)N1CC2CN(c3nnc(-c4ccncc4S(C)(=O)=O)nc3NC3CCCC3)CC2C1	CC(=O)N1CC2CN(c3nnc(-c4ccncc4S(C)(=O)=O)nc3NC3CCCC3)CC2C1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2cnc(N)c(C(=O)Nc3ccccc3OC(F)(F)F)c2)o1	Cc1ccc(-c2cnc(N)c(C(=O)Nc3ccccc3OC(F)(F)F)c2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1CN1CCC(N2CCC(CNS(=O)(=O)c3ccc(F)cc3)CC2)CC1	COc1ccccc1CN1CCC(N2CCC(CNS(=O)(=O)c3ccc(F)cc3)CC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)Oc1ccc(-c2nc(-c3ccccc4c3CCCN4(C(=O)C3CCN)no2)cc1Cl		FALSE	TRUE	TRUE
O=C(O)C1=C(NCCCCF)C(=O)N(c2ccccc2)C1c1ccc(Br)cc1	O=C(O)C1=C(NCCCCF)C(=O)N(c2ccccc2)C1c1ccc(Br)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NCCCC(C)NC(=O)C1CN(C(=O)c2ccc(-c3ccc(Cl)cc3)cc2)CN1C(=O)c1ccc(C2CC2)cc1)C(=O)O	NCCCC(C)NC(=O)C1CN(C(=O)c2ccc(-c3ccc(Cl)cc3)cc2)CN1C(=O)c1ccc(C2CC2)cc1)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=CC(C2(C)C(C)CCC2(C)C)OC1=O	CC1=CC(C2(C)C(C)CCC2(C)C)OC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1cn(Cc2ccc(Cl)cc2Cl)c2nc(N(C)CCc3ccc(OC)cc3)ncc2c1=O	CCOC(=O)c1cn(Cc2ccc(Cl)cc2Cl)c2nc(N(C)CCc3ccc(OC)cc3)ncc2c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1cccc(C23CCN(C2)C(Cc2ccccc2)C3)c1	Oc1cccc(C23CCN(C2)C(Cc2ccccc2)C3)c1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ccc(Oc2ccc(S(=O)(=O)Nc3nccs3)cc2C(=O)Nc2cc[nH]c(=O)c2)cc1F	N#Cc1ccc(Oc2ccc(S(=O)(=O)Nc3nccs3)cc2C(=O)Nc2cc[nH]c(=O)c2)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nc(S)n(Cc2ccc(NC(=O)c3ccccc3Cl)cc2)n1	CCc1nc(S)n(Cc2ccc(NC(=O)c3ccccc3Cl)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ncc(CN2CCCN3nc(C(=O)N4CCCC4)cc3C2)cn1	CCc1ncc(CN2CCCN3nc(C(=O)N4CCCC4)cc3C2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)CC(O)C12C=CC(C=C1c1ccc(O)c(OC)c1)O2	CCOC(=O)CC(O)C12C=CC(C=C1c1ccc(O)c(OC)c1)O2	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCN1C(=O)C(CC(=O)Nc2CCc3ccccc32)CC2(C(=O)OCC)CCCC=C12	CCCCCCCCN1C(=O)C(CC(=O)Nc2CCc3ccccc32)CC2(C(=O)OCC)CCCC=C12	TRUE	TRUE	TRUE
CO(C(=O)C(CSSC(C)NC(=O)CC)C(=O)N(C)CCS(C)C(N)=O)NC(=O)C(NC(=O)C(C)(C)C(C)C	CO(C(=O)C(CSSC(C)NC(=O)CC)C(=O)N(C)CCS(C)C(N)=O)NC(=O)C(NC(=O)C(C)(C)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(C)CCOC(=O)N1c2ccccc2COc2ccccc21	CCN(C)CCOCOC(=O)N1c2ccccc2COc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc2nc(-c3ccc(C(=O)NN)cc3)cn2c1	Cc1ccc2nc(-c3ccc(C(=O)NN)cc3)cn2c1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc2c(c(-c3ccco3)cn2C2CC(O)C(CO)O2)c(=O)[nH]1	Nc1nc2c(c(-c3ccco3)cn2C2CC(O)C(CO)O2)c(=O)[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(c1ccccc1)c1nc(-c2cccs2)oc1N1CCOCC1	O=S(=O)(c1ccccc1)c1nc(-c2cccs2)oc1N1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
NCc1ccc2[nH]c(-c3ccc(-c4cc5ccccc5[nH]4)cc3)nc2c1	NCc1ccc2[nH]c(-c3ccc(-c4cc5ccccc5[nH]4)cc3)nc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C(=O)N2CCN(c3ccccc3F)CC2)sc1C	Cc1cc(C(=O)N2CCN(c3ccccc3F)CC2)sc1C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1cc2cc(F)ccc2o1)N1CC2CC(=O)Nc3ccc([N+](=O)[O-])ccc3C21	O=C1CC2CN(C(=O)c3cc4cc(F)ccc4o3)C2c2cc([N+](=O)[O-])ccc2N1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(CC(=O)C2CCc3ccccc32)N(C(=O)Cc2ccccc2)cc1OC	COc1ccc(C(CC(=O)C2CCc3ccccc32)N(C(=O)Cc2ccccc2)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc2sc(N(Cc3ccccc3)C(=O)c3ccccc3)nc12	Cc1ccccc2sc(N(Cc3ccccc3)C(=O)c3ccccc3)nc12	TRUE	TRUE	TRUE
NC1=NCC(c2ccccc2)CN1	NC1=NCC(c2ccccc2)CN1	TRUE	TRUE	FALSE
CN(CC1CC1)Cc1csc(NC(=O)c2cnn3ccccc23)n1	CN(CC1csc(NC(=O)c2cnn3ccccc23)n1)CC1CC1	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(C)CN1CC(C)N(C)c2ccc(C(=O)N(CC)CC)cc2)c2ccc(C(C)(C)C)cc2)CC1C	C=C(C)CN1CC(C)N(C)c2ccc(C(=O)N(CC)CC)cc2)c2ccc(C(C)(C)C)cc2)CC1C	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(-c2sc3nc[nH]c(N4CCNCC4)c4ncnc2-3)cc1		FALSE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C)n1CCCN(C(=O)CC1CC2CCC1C2	Cc1ccc(C)n1CCCN(C(=O)CC1CC2CCC1C2	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)CCC1=CCCC(C(=O)OC)C1	COC(=O)CCC1=CCCC(C(=O)OC)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C1=C(C(=O)O)C)C2N(C)c3ccccc3C23CC(=O)N(c2ccccc2)S(=O)(=O)C3=N1	COC(=O)C1=C(C(=O)O)C)C2N(C)c3ccccc3C23CC(=O)N(c2ccccc2)S(=O)(=O)C3=N1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)Cc1ccccc2n1ccc1c2ccnc2c(=O)ccnc12		FALSE	TRUE	TRUE
CN1CCC23c4c5ccc(O)c4OC2C2(Cc4CCCC4C3(C#N)C1C5)CCN2CC1CC1	CN1CCC23c4c5ccc(O)c4OC2C2(CCN2CC2CC2)Cc2ccccc2C3(C#N)C1C5	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1nc2n(-c3ccc(Cl)cc3)c3ccccc3cc-2c(=O)[nH]1	O=c1nc2n(-c3ccc(Cl)cc3)c3ccccc3cc-2c(=O)[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(CCCOc2c(C)cc(-c3noc(C(F)(F)F)n3)cc2C)on1	Cc1cc(CCCOc2c(C)cc(-c3noc(C(F)(F)F)n3)cc2C)on1	TRUE	TRUE	FALSE
CCCCCCCCN(CCCCCC)S(=O)(=O)C=Cc1ccccc1OCCCCC	CCCCCCCCN(CCCCCC)S(=O)(=O)C=Cc1ccccc1OCCCCC	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1c2cncccc2sn1-c1ccc2c(c1)CCCC2	O=c1c2cncccc2sn1-c1ccc2c(c1)CCCC2	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1c(CSc2nc(C)cc(C)c2C(N)=O)nnc1SCC(=O)c1ccc(F)cc1	CCn1c(CSc2nc(C)cc(C)c2C(N)=O)nnc1SCC(=O)c1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C(=O)N)C(c2ccco2)c2cc(Cl)c3ccccc3c2O)cc1OC	COc1ccc(C(=O)N)C(c2ccco2)c2cc(Cl)c3ccccc3c2O)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
C=C1CCC2C(C)(C)C(=O)CC2(C)C1(C)O)CC=C1C(C)O)CC2C1(C)CCC2(C)O	C=C1CCC2C(C)(C)C(=O)CC2(C)C1(C)O)CC=C1C(C)O)CC2C(C)(O)CCC12C	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)Cc2cccc(OCC(=O)NCc3ccccc3)c2O1	CC1(C)Cc2cccc(OCC(=O)NCc3ccccc3)c2O1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(CNS(=O)(=O)C(C)C)c1ccc(F)cc1	CC(CNS(=O)(=O)C(C)C)c1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCc1ccc(N2CCOCC2)cc1)c1ccc([N+](=O)[O-])o1	O=C(NCc1ccc(N2CCOCC2)cc1)c1ccc([N+](=O)[O-])o1	TRUE	TRUE	FALSE
CCc1nncnc(-c2ccc(C(=O)N3CCN(C4CC(=O)N(C)C4)CC3)c(F)c2)c1C#Cc1ccc(N)nc1	CCc1nncnc(-c2ccc(C(=O)N3CCN(C4CC(=O)N(C)C4)CC3)c(F)c2)c1C#Cc1ccc(N)nc1	TRUE	TRUE	TRUE
CSc1ccc(C2=NNC(=O)CC2)cc1	CSc1ccc(C2=NNC(=O)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)C1CCC(NC(=O)c2ccc(C(F)(F)F)cc2Cl)CC1	CN(C)C1CCC(NC(=O)c2ccc(C(F)(F)F)cc2Cl)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)=CCCC(C)=CCCC(C)=CCCC(C)=CCCC(C)=CCSCC(NC(=O)c1ccccc1)C(=O)N(C)C(C)C	CC(C)=CCCC(C)=CCCC(C)=CCCC(C)=CCCC(C)=CCCC(C)=CCSCC(NC(=O)c1ccccc1)C(=O)N(C)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1occc1C(=O)Nc1ccc(CN2CCN(Cc3ccccc3)CC2)cc1	Cc1occc1C(=O)Nc1ccc(CN2CCN(Cc3ccccc3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(C(=O)N2CCN(c3ccccc3)CC2)sc2c1c(=O)n(-c1ccccc1)c(=O)n2CC(=O)Nc1cccc(C(F)(F)F)c1	Cc1c(C(=O)N2CCN(c3ccccc3)CC2)sc2c1c(=O)n(-c1ccccc1)c(=O)n2CC(=O)Nc1cccc(C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(N2CCN(C)S)=NCc3ccccc3O(C)CC2)cc1	COc1ccc(N2CCN(C)S)=NCc3ccccc3O(C)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1NC2(CCCc3ccccc32)C(=O)N1Cc1ccccc1	O=C1NC2(CCCc3ccccc32)C(=O)N1Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(C2=CCCC2)cc1)N1CCC2(CC1)C(=O)N(c1cc(O)cc(Cl)c1)c1ccccc12	O=C(Nc1ccc(C2=CCCC2)cc1)N1CCC2(CC1)C(=O)N(c1cc(O)cc(Cl)c1)c1ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CSc1cc(Cl)c(C#N)c(Sc2nc3cc(Cl)c(Cl)cc3[nH]2)n1	CSc1cc(Cl)c(C#N)c(Sc2nc3cc(Cl)c(Cl)cc3[nH]2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C(Cc1ccc(OCc2ccccc2)cc1)N(C(=O)C(CC(C)C)NC(=O)C(CC(C)C)NC(=O)C=Cc1ccc(OCc2ccccc2)cc1	COC(=O)C(Cc1ccc(OCc2ccccc2)cc1)N(C(=O)C(CC(C)C)NC(=O)C(CC(C)C)NC(=O)C=Cc1ccc(OCc2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(C)C1CCC2(C(=O)NCCCCCCCCC(=O)N(C)C(C(=O)O)CCC3(C)C(CCC4C5(C)CCC(O)C(C)(CO)C5CCC43C)C12	C=C(C)C1CCC2(C(=O)NCCCCCCCCC(=O)N(C)C(C(=O)O)CCC3(C)C(CCC4C5(C)CCC(O)C(C)(CO)C5CCC43C)C12	TRUE	TRUE	TRUE
OCc1(Cc2ccccc2C(F)(F)F)CCN(Cc2ccccc2)CC1	OCc1(Cc2ccccc2C(F)(F)F)CCN(Cc2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1OC(=O)C(=O)C1(F)O	CC1OC(=O)C(=O)C1(O)F	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(N2CCCC2)c(N)nc2ccccc12	Cc1c(N2CCCC2)c(N)nc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCC(Nc2nc(-c3ccccc3)nc3ccccc23)CC1	CC1CCC(Nc2nc(-c3ccccc3)nc3ccccc23)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C(=O)c1nccc(NC(=O)c2ccccc2C(F)(F)F)c1)C1CCCC1	CN(C(=O)c1nccc(NC(=O)c2ccccc2C(F)(F)F)c1)C1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1CCN1CCCC(CCC(=O)N)Cc2ccc(OC)c(OC)c2)C1	COc1ccccc1CCN1CCCC(CCC(=O)N)Cc2ccc(OC)c(OC)c2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C1(c2ccccc2)CCN(CCCCOc2ccccc2C(=O)c2ccccc2)CC1	COC(=O)C1(c2ccccc2)CCN(CCCCOc2ccccc2C(=O)c2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nnc(SC(C)C(=O)N2CCN(C(=O)c3ccccc3)CC2)s1	Cc1nnc(SC(C)C(=O)N2CCN(C(=O)c3ccccc3)CC2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1C(=O)C(c2ccccc2)C(=NNc2ccc([N+](=O)[O-])cc2[N+](=O)[O-])C1=O	CN1C(=O)C(=NNc2ccc([N+](=O)[O-])cc2[N+](=O)[O-])C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1nnnc1SCC(=O)c1c[nH]c2ccccc12	CCn1nnnc1SCC(=O)c1c[nH]c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc2nc(SCC(=O)N)Cc2c1	CCOc1ccc2nc(SCC(=O)N)Cc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(C2(C(=O)c3ccco3)=C(O)C(=O)N2CCCN2CCOCC2)c1OC	COc1cccc(C2(C(=O)c3ccco3)=C(O)C(=O)N2CCCN2CCOCC2)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)Cn1c(=O)n(C)c(=O)c2c3c(sc21)COC(C)(C)C3	CC(C)Cn1c(=O)n(C)c(=O)c2c3c(sc21)COC(C)(C)C3	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1snc(N)c1-c1ccc(N2CCC(NS(=O)(=O)C=Cc3ccccc3)C2=O)c(F)c1	Cc1snc(N)c1-c1ccc(N2CCC(NS(=O)(=O)C=Cc3ccccc3)C2=O)c(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCN1C(=O)c2ccccc3cc4ccccc4c(c23)C1=O	CN(C)CCN1C(=O)c2ccccc3cc4ccccc4c(c23)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1cc(C(O)=Nc2cccc(Cc3nnc(O)c4c3CCCC4)c2)c(=O)c(-c2cccc(C(F)F)c2)c1C	CCn1cc(C(O)=Nc2cccc(Cc3nnc(O)c4c3CCCC4)c2)c(=O)c(-c2cccc(C(F)F)c2)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
ON=C(NC1CCCC1)N1CCc2ccccc21	ON=C(NC1CCCC1)N1CCc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cc(C(O)=N)Cc2nn[nH]n2)nn1-c1ccccc1)c1cc(-c2ccccc2)c(F)cc1Cl	O=C(Nc1cc(C(O)=N)Cc2nn[nH]n2)nn1-c1ccccc1)c1cc(-c2ccccc2)c(F)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc2c(CN3CCCC(C(=O)c4ccccc4F)C3)cc(=O)oc2c1O	Cc1ccc2c(CN3CCCC(C(=O)c4ccccc4F)C3)cc(=O)oc2c1O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc1C(=O)NcC1nnc(SCC(=O)NCC2CCO2)o1	Cc1ccccc1C(=O)NcC1nnc(SCC(=O)NCC2CCO2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
CCNC(=O)c1noc(-c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)c1NC(=O)c1ccc2ccoc2c1	CCNC(=O)c1noc(-c2cc(C(C)C)c(O)cc2O)c1NC(=O)c1ccc2ccoc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)cc(N(CC(=O)O)S(=O)(=O)c2ccc(NC(=O)Nc3cccc(C)c3)cc2)c1	Cc1ccccc(NC(=O)Nc2ccc(S(=O)(=O)N(CC(=O)O)c3ccc(C)cc(C)c3)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(NC(=O)C2CCCC2C)ccc1Br	Cc1cc(NC(=O)C2CCCC2C)ccc1Br	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCOc1ccc(CCC(N)cc(O)c1OCCCCC		FALSE	TRUE	TRUE
CCCC(O)C(NCc1ccc(C)nc1)C(=O)N1CCCC1C(=O)NCc1ccc(C(=N)N)cc1	CCCC(O)C(NCc1ccc(C)nc1)C(=O)N1CCCC1C(=O)NCc1ccc(C(=N)N)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC12CCC(C(=O)NCCCC(=O)O)(O1)C(C(=O)O)C2	CCC12CCC(C(=O)NCCCC(=O)O)(O1)C(C(=O)O)C2	TRUE	TRUE	TRUE
Fc1ccc(C=Nc2nn[nH]n2)c(C(F)(F)F)c1	Fc1ccc(C=Nc2nn[nH]n2)c(C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(=O)n(CC(=O)NC2CCCC2)c1	Cc1ccc(=O)n(CC(=O)NC2CCCC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
NCCS	NCCS	TRUE	TRUE	FALSE
CC1=C(C(=O)Nc2ccccc2)C(c2ccc3c(c2)OCO3)NC(=O)N1	CC1=C(C(=O)Nc2ccccc2)C(c2ccc3c(c2)OCO3)NC(=O)N1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(Cc1cnn(C)c1)CC(=O)NCc1cccc(Cl)c1Cl	CCN(CC(=O)NCc1cccc(Cl)c1Cl)Cc1cnn(C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(Nc1ccc(Cl)cc1)c1ccc(-c2ccccc2Cl)o1	N=C(Nc1ccc(Cl)cc1)c1ccc(-c2ccccc2Cl)o1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(=O)CCCCC=C(c1cc(Cl)c(OC)c(C(=O)OC)c1)c1cc(Cl)c(OC)c(C(=O)OC)c1	CCC(=O)CCCCC=C(c1cc(Cl)c(OC)c(C(=O)OC)c1)c1cc(Cl)c(OC)c(C(=O)OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nn2c(=O)ccc(-c3ccc4sccc4c3)[nH]c2c1-c1ccccc1	Nc1nn2c(=O)ccc(-c3ccc4sccc4c3)[nH]c2c1-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCc1c[nH]c2ccc(CNC3c4ccccc4CC3O)cc12	CN(C)CCc1c[nH]c2ccc(CNC3c4ccccc4CC3O)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(S(=O)(=O)N2CCOCC2)cc1NC(=O)c1ccc(-c2cccs2)nn1-c1ccccc1	CCOc1ccc(S(=O)(=O)N2CCOCC2)cc1NC(=O)c1ccc(-c2cccs2)nn1-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1C(=N)N(C)C(c2sc(-c3nnc(-c4cc(C(F)(F)F)ncn4)o3)cc2Cl)CS1(=O)=O	CN1C(=N)N(C)C(c2sc(-c3nnc(-c4cc(C(F)(F)F)ncn4)o3)cc2Cl)CS1(=O)=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCC1OC(=O)C(C)C(=O)C(C)C(OC2OC(C)CC(N(C)C)C2O)C(C)(OCC=Cc2cnc3ccc4nc(C)c(C)n4c3c2)CC(C)C(=NOC)C(C)C2OC(=O)OC12C	CCC1OC(=O)C(C)C(=O)C(C)C(OC2OC(C)CC(N(C)C)C2O)C(C)(OCC=Cc2cnc3ccc4nc(C)c(C)n4c3c2)CC(C)C(=NOC)C(C)C2OC(=O)OC12C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(NC(=O)C(F)F)c1ccccc1C(=O)O	CC(NC(=O)C(F)F)c1ccccc1C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1N(Cc2cccc(F)c2F)C(=O)C2=C(NC(c3ccc(F)c(F)c3)NC2c2cccc(F)c2)c2ccccc21	O=c1c2c(c3ccccc3c(=O)n1Cc1cccc(F)c1F)NC(c1ccc(F)c(F)c1)NC2c1cccc(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=NN(C(=O)CC)C(c2c(O)ccc3ccccc23)C1	CC1=NN(C(=O)CC)C(c2c(O)ccc3ccccc23)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC1CN(c2cc3c(cc2F)c(=O)c(C(=O)O)cn3C2CC2)CC1=NOC	CNC1CN(c2cc3c(cc2F)c(=O)c(C(=O)O)cn3C2CC2)CC1=NOC	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)Oc1ccc(-c2nc(-c3cccc4c3CCC4NC(=O)CS(C)(=O)=O)no2)cc1C#N	CC(C)Oc1ccc(-c2nc(-c3cccc4c3CCC4NC(=O)CS(C)(=O)=O)no2)cc1C#N	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCCC2CC(Cc3cn(CC(=O)O)nn3)NN12	CC1CCCC2CC(Cc3cn(CC(=O)O)nn3)NN12	TRUE	TRUE	TRUE
COCCn1c(SCc2cccc(Cl)c2)nnc1-c1ccc(OC)c(OC)c1	COCCn1c(SCc2cccc(Cl)c2)nnc1-c1ccc(OC)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
N#CC1=C(N)Oc2c(O)ccc3c2C1Cc1cc(O)c(O)cc1-3	N#CC1=C(N)Oc2c(O)ccc3c2C1Cc1cc(O)c(O)cc1-3	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)N2CCC(N)C(c3cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c3)C2)cc1C	Cc1ccc(C(=O)N2CCC(N)C(c3cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c3)C2)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE





smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CCOC(=O)c1[nH]c(C)c(CCC(=O)Nc2ccc(C)cc2)c1C	CCOC(=O)c1[nH]c(C)c(CCC(=O)Nc2ccc(C)cc2)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CSc1nnc(O)[nH]1)Nc1cccc(S(=O)(=O)N2CCOCC2)c1	O=C(CSc1nnc(O)[nH]1)Nc1cccc(S(=O)(=O)N2CCOCC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1cccc(-c2cnc3cccc(NCCO)nn23)cn1	CN(C)c1cccc(-c2cnc3cccc(NCCO)nn23)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(C(=O)NCC(=O)Nc2CC2)cc1OCC	CCOc1ccc(C(=O)NCC(=O)Nc2CC2)cc1OCC	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ncc(-c2nc3c(n2C(C)C)c(c2ccc(C#N)cc2)N(c2cc(C)nn2C)C3=O)c(OC)n1	COc1ncc(-c2nc3c(n2C(C)C)c(c2ccc(C#N)cc2)N(c2cc(C)nn2C)C3=O)c(OC)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(c2cc[n+]{([O-])cc2}CCC(=O)NC1=O	CC1(c2cc[n+]{([O-])cc2}CCC(=O)NC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC=C1C2C=C(C)CC1(OC(C)=O)c1c2[nH]c2ccc(C)cc12	CC=C1C2C=C(C)CC1(OC(C)=O)c1c2[nH]c2ccc(C)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
COC1=CC2C3Cc4ccc(OC)c5c4C2(CCN3CC2CC2)C(O5)C1=O	COC1=CC2C3Cc4ccc(OC)c5c4C2(CCN3CC2CC2)C(O5)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C(=O)NC(=O)c1ccccc1)c1nc(C(F)(F)F)c(C(=O)NN=C2CCCCC2)s1	CN(C(=O)NC(=O)c1ccccc1)c1nc(C(F)(F)F)c(C(=O)NN=C2CCCCC2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCOc1cc(Cc2cnc(N)nc2N)ccc1OCC(O)CN(CC)CC	CCCCOc1cc(Cc2cnc(N)nc2N)ccc1OCC(O)CN(CC)CC	TRUE	TRUE	TRUE
CON=C(c1ccc(Cl)cc1)c1cc2c(cc1CN1CCN(C(=O)c3cccs3)CC1)OCO2	CON=C(c1ccc(Cl)cc1)c1cc2c(cc1CN1CCN(C(=O)c3cccs3)CC1)OCO2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(Cl)cc1)Nc1cccc(C(=O)C=Cc2ccccc2C(F)(F)F)c1	O=C(Nc1ccc(Cl)cc1)Nc1cccc(C(=O)C=Cc2ccccc2C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cccc2ccccc12)c1cccc(S(=O)(=O)N2CCCCC2)c1	O=C(Nc1cccc2ccccc12)c1cccc(S(=O)(=O)N2CCCCC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=NNc1nc2ccccc2s1)C(=O)Nc1cccc(C(=O)NN=Cc2cc([N+](=O)[O-])c(C)cc2Cl)cc1	CC(=NNc1nc2ccccc2s1)C(=O)Nc1cccc(C(=O)NN=Cc2cc([N+](=O)[O-])c(C)cc2Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc(C=O)c1c(OC)cc(S(=O)(=O)Nc2c(C)nn(C)c2C)cc1Cl	COc(C=O)c1c(OC)cc(S(=O)(=O)Nc2c(C)nn(C)c2C)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
OC1CSC(c2ccccc2Cl)N1c1cccc2ccccc12	OC1CSC(c2ccccc2Cl)N1c1cccc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(CN(C)C(=O)c2ccc3c(c2)N(Cc2ccc(Cl)cc2)C(=O)c2ccccc2[Se]3)c1	COc1cccc(CN(C)C(=O)c2ccc3c(c2)N(Cc2ccc(Cl)cc2)C(=O)c2ccccc2[Se]3)c1	TRUE	TRUE	TRUE
C1=NCc2cc3ccccc3nc2N1Cc1csc2ccccc12	C1=NCc2cc3ccccc3nc2N1Cc1csc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(C(=O)CNC(C)C(=O)NC(CCCCN)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(=O)NC(CC(C)C)C(=O)O)C(C)C	CCN(C(=O)CNC(C)C(=O)NC(CCCCN)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(=O)NC(CC(C)C)C(=O)O)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
COc(C=O)C1CCN(C(=NO)c2ccnc(OC3ccc(C)C)C)cc3C)c2)CC1	COc(C=O)C1CCN(C(=NO)c2ccnc(OC3ccc(C)C)C)cc3C)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCN1CN(C(=O)c2ccccc2Cl)c2ccc(Cl)cc2S(=O)(=O)N1Cc1ccc(OC)cc1	CCCCN1CN(C(=O)c2ccccc2Cl)c2ccc(Cl)cc2S(=O)(=O)N1Cc1ccc(OC)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccccc1)C1CCOC2CCN(Cc3ccccc3)CC21	O=C(Nc1ccccc1)C1CCOC2CCN(Cc3ccccc3)CC21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)cc(NC(=O)c2cc(-c3ccc(F)c(C(F)(F)F)c3)ccc2N)c1	Cc1cc(C)cc(NC(=O)c2cc(-c3ccc(F)c(C(F)(F)F)c3)ccc2N)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1C(=O)NC(NC(C)=O)=NC1c1ccc(F)cc1	CCOC(=O)C1C(=O)NC(NC(C)=O)=NC1c1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(=O)N1N=C(c2ccccc2)OC1c1ccc(Br)cc1	CC(=O)N1N=C(c2ccccc2)OC1c1ccc(Br)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCN(C(CNC(=O)c2ccc(OC3ccccc3)cc2)c2ccccc2)CC1	CC1CCN(C(CNC(=O)c2ccc(OC3ccccc3)cc2)c2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1nc2ccc(F)cc2s1)c1nc(N2CCOCC2)[nH]c(=O)n1	O=C(Nc1nc2ccc(F)cc2s1)c1nc(N2CCOCC2)[nH]c(=O)n1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(CCCC[n+])2ccc3ccccc3c2)cc1	c1ccc(CCCC[n+])2ccc3ccccc3c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc(C=O)c1cc(S(=O)(=O)Nc2ccc(-n3cnnn3)cc2)cn1C	COc(C=O)c1cc(S(=O)(=O)Nc2ccc(-n3cnnn3)cc2)cn1C	TRUE	TRUE	TRUE
COCC(=O)c1c(C)nc(O)c(Cl)c1C	COCC(=O)c1c(C)nc(O)c(Cl)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc2oc(-c3ccc(-n4ccnc4)cc3)cc2c1	c1ccc2oc(-c3ccc(-n4ccnc4)cc3)cc2c1	TRUE	TRUE	FALSE
COc1cc(NC(=O)C(C)OC(=O)C2c3ccccc3Oc3ccccc32)cc(OC)c1OC	COc1cc(NC(=O)C(C)OC(=O)C2c3ccccc3Oc3ccccc32)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
lc1ccc(Cn2oc3ccccc3c2=NOCc2cn(Cc3ccoc3)nn2)cc1	lc1ccc(Cn2oc3ccccc3c2=NOCc2cn(Cc3ccoc3)nn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCCN1CCN(c2ccccc2)CC1)C1CC1c1ccccc1	O=C(NCCN1CCN(c2ccccc2)CC1)C1CC1c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cccc1C(=O)Nc1ccc(OCcN2CCCC2)cc1	Cn1cccc1C(=O)Nc1ccc(OCcN2CCCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C(=O)NCC1ccc(-c2ccccc2)cc1)C1CCN(c2ncnc3[nH]ccc23)C1	CN(C(=O)NCC1ccc(-c2ccccc2)cc1)C1CCN(c2ncnc3[nH]ccc23)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(O)c2c(c1)CCC1C(C)(C)C(CO)CC(O)C21C	COc1cc(O)c2c(c1)CCC1C(C)(C)C(CO)CC(O)C21C	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+]{([O-])c1ccccc1CCSc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2)n1	O=[N+]{([O-])c1ccccc1CCSc1ncc(Cl)c(Nc2ccccc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCc1ccc(OCCOc2ccc([N+](=O)[O-])cc2)cc1	CCCc1ccc(OCCOc2ccc([N+](=O)[O-])cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)=CCC=C(C)c1ccccc1C=O	CC(C)=CCC=C(C)c1ccccc1C=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(N)=O	CC(=O)NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(N)=O	TRUE	TRUE	FALSE
OC1cc(O)c2c(c1)OC(c1ccc3c(c1)OC(c1ccc(O)cc1){c4ccc(O)cc4}CC3c2ccc(O)cc1)C(O)C(O)C2	OC1cc(O)c2c(c1)OC(c1ccc3c(c1)OC(c1ccc(O)cc1){c4ccc(O)cc4}CC3c2ccc(O)cc1)C(O)C(O)C2	FALSE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(OC)c(NC(=O)C2CCCN(c3ncnc4c3nc3n4CCCC3)C2)c1	CCOc1ccc(OC)c(NC(=O)C2CCCN(c3ncnc4c3nc3n4CCCC3)C2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(F)cc1-c1ccnc2[nH]c(C3=CCN(C4CC(F)(F)C4)CC3)cc12	COc1ccc(F)cc1-c1ccnc2[nH]c(C3=CCN(C4CC(F)(F)C4)CC3)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+]{([O-])c1cccc(C=NNC(=S)NN=C2c3ccccc3C3CCCC23)c1	O=[N+]{([O-])c1cccc(C=NNC(=S)NN=C2c3ccccc3C3CCCC23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)c1cc2cc(OC)ccc2o1	CNC(=O)c1cc2cc(OC)ccc2o1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCOc1ccc(C(=Cc2cc(OCCCC(=O)O)ccc2OCC(N)=O)c2ccc(OC)cc2)cc1	CCCCOc1ccc(C(=Cc2cc(OCCCC(=O)O)ccc2OCC(N)=O)c2ccc(OC)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cn1nnc(-c2ccc(Cl)cc2Cl)n1)N1c2ccccc2Sc2ccccc21	O=C(Cn1nnc(-c2ccc(Cl)cc2Cl)n1)N1c2ccccc2Sc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)Nc2cnc(Cl)nc2)cc1	Cc1ccc(S(=O)(=O)Nc2cnc(Cl)nc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(-c2cnnc(N3CCC(c4ncccn4)C3)n2)cc1	c1ccc(-c2cnnc(N3CCC(c4ncccn4)C3)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCN(NC(=O)c1ccc(C2CC2)c(OCc2CC2)n1)c1ncc2ccccc12	CCCN(NC(=O)c1ccc(C2CC2)c(OCc2CC2)n1)c1ncc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCC1OC(=O)C(C)C2OC3(CC(C)C(CCC4C5CCC(C)C5CCCC43)C(C)C1(C)O)C(OC(=O)CCc1ccccc1)C(C)C(=O)C(C)CN(Cn1ccnc1)C(C)=CC(C)C2O	CCC1OC(=O)C(C)C2OC3(CC(C)C(CCC4C5CCC(C)C5CCCC43)C(C)C1(C)O)C(OC(=O)CCc1ccccc1)C(C)C(=O)C(C)CN(Cn1ccnc1)C(C)=CC(C)C2O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)c1ccc2c(c1)CCC1C2(C(=O)O)CCC2C(C)(C)CCCC21C	CC(=O)c1ccc2c(c1)CCC1C2(C(=O)O)CCC2C(C)(C)CCCC21C	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1cc(C=NNC(=O)c2cc3c([nH]c4ccccc43)c(-c3ccc(OC)c3)n2)cc(Br)c1O	CCOc1cc(C=NNC(=O)c2cc3c([nH]c4ccccc43)c(-c3ccc(OC)c3)n2)cc(Br)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C)C(NC(=O)N1CCn2c1nc1ccccc12)C(=O)NCC1ccco1	CCC(C)C(NC(=O)N1CCn2c1nc1ccccc12)C(=O)NCC1ccco1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)(C)C(NC(=O)OC1CCCC1)C(=O)N1CSCC1C(=O)O	CC(O)(C)C(NC(=O)OC1CCCC1)C(=O)N1CSCC1C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cn(C2CC(SCC(N)=O)C(COP(=O)(O)OP(=O)(O)O)O2)c(=O)[nH]c1=O	Cc1cn(C2CC(SCC(N)=O)C(COP(=O)(O)OP(=O)(O)O)O2)c(=O)[nH]c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CN2c3ccccc3CS2(=O)=O)cc1	COc1ccc(CN2c3ccccc3CS2(=O)=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
OCOCOCCOCCOCCOCCOCCOCCOCCSc1ccccc1COC1OC(CO)C(O)C(O)C1O	OCOCOCCOCCOCCOCCOCCOCCOCCSc1ccccc1COC1OC(CO)C(O)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)n(C(=O)CCS(=O)(=O)c2ccc(Br)cc2)n1	Cc1cc(C)n(C(=O)CCS(=O)(=O)c2ccc(Br)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)N1C2CCCC1CC(c1ccnc3c(-c4cccc(O)c4)c(-c4ccncc4)nn13)C2	CC(=O)N1C2CCCC1CC(c1ccnc3c(-c4cccc(O)c4)c(-c4ccncc4)nn13)C2	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)c2c(NC(=O)CNC(=O)c3ccccc3)sc3c2CCCC3)cc1	Cc1ccc(C(=O)c2c(NC(=O)CNC(=O)c3ccccc3)sc3c2CCCC3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c2c(c3cc(S(=O)(=O)c4ccc(OCc5ccccc5)cc4C(F)(F)F)ccc31)C1CCC(C2)N1	Cn1c2c(c3cc(S(=O)(=O)c4ccc(OCc5ccccc5)cc4C(F)(F)F)ccc31)C1CCC(C2)N1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(N2CCCCC2)c2c3c(sc2n1)CCCC3	Cc1nc(N2CCCCC2)c2c3c(sc2n1)CCCC3	TRUE	TRUE	TRUE
CC[n+])1csc(-c2nc(N)c3sccc3n2)c1N	CC[n+])1csc(-c2nc(N)c3sccc3n2)c1N	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(NC(=O)N1CCOCC1)C(=O)OC	COc(C=O)C(CC(C)C)NC(=O)N1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1ccc(N2C(=O)CSc2c2ccc(C(C)(C)C)cc2)n1	Cn1ccc(N2C(=O)CSc2c2ccc(C(C)(C)C)cc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)C(=O)CSc1ccc2nnc(CCN5(=O)(=O)c3ccc(F)cc3)n2n1	CN(C)C(=O)CSc1ccc2nnc(CCN5(=O)(=O)c3ccc(F)cc3)n2n1	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(C)C1CCC(C)(NS(=O)(=O)C=Cc2ccccc2)CC1	C=C(C)C1CCC(C)(NS(=O)(=O)C=Cc2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCOP(=O)(O)OC1CC(n2cnc3c(N)ncnc32)OC1COP(=O)(O)O	CCCCCCCCCOP(=O)(O)OC1CC(n2cnc3c(N)ncnc32)OC1COP(=O)(O)O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1csc(N2C(=O)C3CSC4(C(=O)Nc5ccccc54)N3C2=O)n1	Cc1csc(N2C(=O)C3CSC4(C(=O)Nc5ccccc54)N3C2=O)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(=C(c1ccc(OCCN2CCCCC2)cc1)c1ccc(OCCN2CCCCC2)cc1)c1ccccc1	CCC(=C(c1ccc(OCCN2CCCCC2)cc1)c1ccc(OCCN2CCCCC2)cc1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)C(C(=O)OCCCC(C)C1=CC2OC(=O)CCC2(C)C2CCC3(C)C(O)C(=Cc4ccccc4)CC3C12)C(F)(F)F	CC(C)C(C(=O)OCCCC(C)C1=CC2OC(=O)CCC2(C)C2CCC3(C)C(O)C(=Cc4ccccc4)CC3C12)C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(C(=NO)C=Cc1cccs1)c1ccc(F)cc1	CCN(C(=Cc1cccs1)=NO)c1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
OC(CN(Cc1ccccc1)c1ccccc1)C12CC3CC(CC(C3)C1)C2	OC(CN(Cc1ccccc1)c1ccccc1)C12CC3CC(CC(C3)C1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+]{([O-])C(=NNc1ccccc1)C(Cl)=C(Cl)[N+](=O)[O-]}	O=[N+]{([O-])C(=NNc1ccccc1)C(Cl)=C(Cl)[N+](=O)[O-]}	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2c(C)n(Cc3c(F)ccccc3F)c(=O)n(C(C)CNCc3ccc(F)cc3F)c2=O)cc1	COc1ccc(-c2c(C)n(Cc3c(F)ccccc3F)c(=O)n(C(C)CNCc3ccc(F)cc3F)c2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCSc1nc2n(n1)C(c1ccc(OC)cc1)N1C(=N2)SCC1=O	CCCCSc1nc2n(n1)C(c1ccc(OC)cc1)N1C(=O)CSC1=N2	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1cc(O)nc(SCC(=O)Nc2ccc3c(c2)C(=O)C(=O)N3Cc2ccccc2)n1	Nc1cc(O)nc(SCC(=O)Nc2ccc3c(c2)C(=O)C(=O)N3Cc2ccccc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1[nH]c(=O)n(C2CC(O)C(COP(=O)(O)O)O2)cc1-c1ccc(F)cc1	O=c1[nH]c(=O)n(C2CC(O)C(COP(=O)(O)O)O2)cc1-c1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(CN(C(=O)C(Cc2ccc(Cl)cc2)CP(=O)(O)Cc2ccc(C3CCCC3)cc2)C(C)(C)C)c1F	COc1cccc(CN(C(=O)C(Cc2ccc(Cl)cc2)CP(=O)(O)Cc2ccc(C3CCCC3)cc2)C(C)(C)C)c1F	TRUE	TRUE	TRUE
CN=C(O)c1cccc(Nc2cc(-n3ccn4nc(-c5ccncc5F)cc34)ncn2)c1	CN=C(O)c1cccc(Nc2cc(-n3ccn4nc(-c5ccncc5F)cc34)ncn2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCOc1ccc(-c2ccc3cc(O)cc(O)c3n2)cc1	COCCOc1ccc(-c2ccc3cc(O)cc(O)c3n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>Cc1ccc(-n2nc3c(=O)n(-c4cccc(Cl)c4)nc(C)c3c2C)c(C)c1</chem>	<chem>Cc1ccc(-n2nc3c(=O)n(-c4cccc(Cl)c4)nc(C)c3c2C)c(C)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(OC)cc(-c2cc3nc(-c4cc(OC)c(OC)c(OC)c4)sc3cn2)c1</chem>	<chem>COc1cc(OC)cc(-c2cc3nc(-c4cc(OC)c(OC)c(OC)c4)sc3cn2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=c1c2ccccc2n(Cc2ccc(Cl)cc2)c(=O)n1-c1ccc(F)cc1F</chem>	<chem>O=c1c2ccccc2n(Cc2ccc(Cl)cc2)c(=O)n1-c1ccc(F)cc1F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc(=O)C(O)=CC(=O)c1ccc2c(c1)OCO2</chem>	<chem>COc(=O)C(O)=CC(=O)c1ccc2c(c1)OCO2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CCN(C(=O)c2ccccc2)c2ccccc21</chem>	<chem>CC1CCN(C(=O)c2ccccc2)c2ccccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)Cc1c(Cc2ccccc2)n(CCc2ccccc2)c2ccc(Cl)cc12</chem>	<chem>O=C(O)Cc1c(Cc2ccccc2)n(CCc2ccccc2)c2ccc(Cl)cc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCn1c(C)cc(C(=O)CN2C(=O)NC(C)(c3ccccc3)C2=O)c1C</chem>	<chem>CCn1c(C)cc(C(=O)CN2C(=O)NC(C)(c3ccccc3)C2=O)c1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(Cl)cc1NC(=O)CN(C)C(=O)Cn1cnc2sc(C)c(S(=O)(=O)N3CCCC(C)CC3)c2c1=O</chem>	<chem>COc1ccc(Cl)cc1NC(=O)CN(C)C(=O)Cn1cnc2sc(C)c(S(=O)(=O)N3CCCC(C)CC3)c2c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(Cc(=O)Nc2nc(-c3cc(OC)c(OC)c(OC)c3)cs2)cc1OC</chem>	<chem>COc1ccc(Cc(=O)Nc2nc(-c3cc(OC)c(OC)c(OC)c3)cs2)cc1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC(=Nc1ccc(NC(=O)C2CCCC2)c1)c1ccc(Cl)cc1</chem>	<chem>NC(=Nc1ccc(NC(=O)C2CCCC2)c1)c1ccc(Cl)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)NC(CCCN=C(N)N)C(=O)NC(CC(C)C)C(N)=O</chem>	<chem>CC(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)NC(CCCN=C(N)N)C(=O)NC(CC(C)C)C(N)=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)c1ccc(C(=O)NC(Cc(=O)O)c2ccccc2Cl)cc1</chem>	<chem>CC(C)(C)c1ccc(C(=O)NC(Cc(=O)O)c2ccccc2Cl)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C)cc1-c1nnc(SCC(=O)NCc2ccccc2)n1N</chem>	<chem>COc1ccc(C)cc1-c1nnc(SCC(=O)NCc2ccccc2)n1N</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)Nc1cccc(NC(=O)Nc2cccs2)c1</chem>	<chem>CC(=O)Nc1cccc(NC(=O)Nc2cccs2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc(=O)Nc1cc2c(cc1Sc1cc(F)cc(F)c1)OCO2</chem>	<chem>CCc(=O)Nc1cc2c(cc1Sc1cc(F)cc(F)c1)OCO2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc(=O)C(Cc1ccc(O)cc1)NC(=O)Cl</chem>	<chem>COc(=O)C(Cc1ccc(O)cc1)NC(=O)Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1ccccc1OCCCCO(C)=O</chem>	<chem>CCc1ccccc1OCCCCO(C)=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Nc1nc(C(=NO)C(=O)NC2C(=O)N3C(C(=O)O)=C(CSc4nccn4-c4cccn4)CSC23)cs1</chem>	<chem>Nc1nc(C(=NO)C(=O)NC2C(=O)N3C(C(=O)O)=C(CSc4nccn4-c4cccn4)CSC23)cs1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN1CCCC1CNC(=O)C(NC(=O)c1cncc(Br)c1)c1ccccc1</chem>	<chem>CCN1CCCC1CNC(=O)C(NC(=O)c1cncc(Br)c1)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(NS(=O))(=O)c1cccs1)C(=O)NCc1ccccc1</chem>	<chem>CC(NS(=O))(=O)c1cccs1)C(=O)NCc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>S=C(NCCc1cccs1)NCc1ccccc1</chem>	<chem>S=C(NCCc1cccs1)NCc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCSc1nnc(NC(=O)CSCC(=O)Nc2ccccc2CC)s1</chem>	<chem>CCCSc1nnc(NC(=O)CSCC(=O)Nc2ccccc2CC)s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(Cc1ccccc1)c1ccc(C(=C2CC3CCC(C2)N3Cc2ccoc2)c2ccc(O)cc2)cc1</chem>	<chem>CN(Cc1ccccc1)c1ccc(C(=C2CC3CCC(C2)N3Cc2ccoc2)c2ccc(O)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCCOn1c(Sc2ccc(C(F)(F)F)cc2[N+](=O)[O-])nc2c(N)ncnc21</chem>	<chem>COCCOn1c(Sc2ccc(C(F)(F)F)cc2[N+](=O)[O-])nc2c(N)ncnc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccccc1N1CCN(C(=O)CSc2nc(N3CCOCC3)c3c(c2C#N)CC(C)(C)OC3)CC1</chem>	<chem>COc1ccccc1N1CCN(C(=O)CSc2nc(N3CCOCC3)c3c(c2C#N)CC(C)(C)OC3)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(C)CCCC2(C)C1CCC13CC4OCC4(C1)C2CC(O)C1C3(CO)C(O)C(COC(=O)c2ccccc2)CC12C</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(CCCC(NC(C)=O)C(=O)NCc2cc(C(=N)N)cc(-c3ccccc3)c2)c(OC)c1</chem>	<chem>COc1ccc(CCCC(NC(C)=O)C(=O)NCc2cc(C(=N)N)cc(-c3ccccc3)c2)c(OC)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(O)CN1CCN(c2ncc(Br)c(N)n2)CC1</chem>	<chem>CC(O)CN1CCN(c2ncc(Br)c(N)n2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NS(=O))(=O)c1ccc(Cl)cc1)c1ccc(F)cc1</chem>	<chem>O=C(NS(=O))(=O)c1ccc(Cl)cc1)c1ccc(F)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN=C(S)N(C)c1ccc(CN2CCc3ccc(OS(N)(=O)=O)cc32)cc1</chem>	<chem>CN=C(S)N(C)c1ccc(CN2CCc3ccc(OS(N)(=O)=O)cc32)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>#CCOc1ccc(CCN(C=O)C(OC#C)c2ccccc3ccccc23)cc1OC</chem>	<chem>#CCOc1ccc(CCN(C=O)C(OC#C)c2ccccc3ccccc23)cc1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#Cc1sc2nc(N3CCCC3)c3c(c2c1N)CC(C1CCCC1)OC3</chem>	<chem>N#Cc1sc2nc(N3CCCC3)c3c(c2c1N)CC(C1CCCC1)OC3</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)n1nc(-c2ccnccn2)c2ccccc21</chem>	<chem>CC(C)n1nc(-c2ccnccn2)c2ccccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCCn1c(=S)n(Cc2ccc(C(=O)O)cc2)c2ncc(-c3ccc(Cl)cc3)nc21</chem>	<chem>COCCn1c(=S)n(Cc2ccc(C(=O)O)cc2)c2ncc(-c3ccc(Cl)cc3)nc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1nc2c(c(NCc3ccccc3)n1)CCNCC2</chem>	<chem>CCc1nc2c(c(NCc3ccccc3)n1)CCNCC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1=C(C(=O)Nc2ccc3[nH]ncc3c2)C(c2ccccc2Cl)C(C(=O)Nc2ccc(F)cc2)=C(C)N1</chem>	<chem>CC1=C(C(=O)Nc2ccc(F)cc2)C(c2ccccc2Cl)C(C(=O)Nc2ccc3[nH]ncc3c2)=C(C)N1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)c1cc(C2CCCN2C)n(S(=O)(=O)c2cccs2)n1</chem>	<chem>CC(C)c1cc(C2CCCN2C)n(S(=O)(=O)c2cccs2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CCC2(C(=O)O)CCC3(C)C(=CCC4C5(C)CCC(OC(=O)CCCCCCCCCCC(=O)O)C(C)(C)C5CCC43C)C2C1(C)O</chem>	<chem>CC1CCC2(C(=O)O)CCC3(C)C(=CCC4C5(C)CCC(OC(=O)CCCCCCCCCCC(=O)O)C(C)(C)C5CCC43C)C2C1(C)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1c(C(=O)Nc2ccccc(C(F)(F)F)c2)nnccncc(-c3ccccc3)cn12)c1ccc(-c2ccccc2)cc1</chem>	<chem>O=C(Nc1c(C(=O)Nc2ccccc(C(F)(F)F)c2)nnccncc(-c3ccccc3)cn12)c1ccc(-c2ccccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CN(C(C)CO)C(=O)c2cc(NC(=O)C3CCCC3)ccc2OC1CN(C)S(=O)(=O)c1cc(Cl)ccc1Cl</chem>	<chem>CC1CN(C(C)CO)C(=O)c2cc(NC(=O)C3CCCC3)ccc2OC1CN(C)S(=O)(=O)c1cc(Cl)ccc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)Cn1c(SCC(=O)Nc2sccc2C(N)=O)nncc1-c1ccccc1</chem>	<chem>CC(C)Cn1c(SCC(=O)Nc2sccc2C(N)=O)nncc1-c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=CC1(C)CCC(C(=C)COc(=O)C(O)(CO)C(C)C)CC1C(=C)C</chem>	<chem>C=CC1(C)CCC(C(=C)COc(=O)C(O)(CO)C(C)C)CC1C(=C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1cc(OC)c(OC)cc1C(=O)Nc1ccc(C(=O)O)cc1</chem>	<chem>CCc1cc(OC)c(OC)cc1C(=O)Nc1ccc(C(=O)O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=c1c2c(ccc3ccccc13)OC(CN1CCSCC1)C2</chem>	<chem>O=c1c2c(ccc3ccccc13)OC(CN1CCSCC1)C2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc(=O)c1ccc(-c2cc(OC)cc(OC)c2)cc1</chem>	<chem>COc(=O)c1ccc(-c2cc(OC)cc(OC)c2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc(CSC(=S)NC2CCCC2)cc1</chem>	<chem>S=C(NC1CCCC1)SCCc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cccc(CCNc2c(N3CCOCC3)c(=O)c2=O)c1C</chem>	<chem>Cc1cccc(CCNc2c(N3CCOCC3)c(=O)c2=O)c1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#Cc1c(Cl)cn2c(Nc3ccccc3)c(-c3ccccc3)nc2c1Cl</chem>	<chem>N#Cc1c(Cl)cn2c(Nc3ccccc3)c(-c3ccccc3)nc2c1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNc1nc(NCc2cc3ccccc(Cl)c3nc2O)cc(-c2ccccc(=O)c2)n1</chem>	<chem>CNc1nc(NCc2cc3ccccc(Cl)c3nc2O)cc(-c2ccccc(=O)c2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)c1nc(N=C(O)c2ccccc2)sc1S(=O)(=O)Cc1ccccc1CO</chem>	<chem>CC(C)c1nc(N=C(O)c2ccccc2)sc1S(=O)(=O)Cc1ccccc1CO</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=[N+](([O-]))c1cccc(-c2nnc(-c3ccc([N+](=O)[O-])s3)s2)c1</chem>	<chem>O=[N+](([O-]))c1cccc(-c2nnc(-c3ccc([N+](=O)[O-])s3)s2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNc1ncc(O)nc1C(O)c1ccc2occc2c1</chem>	<chem>CNc1ncc(O)nc1C(O)c1ccc2occc2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)n1nc(-c2cnc(N)c(C(F)(F)F)c2)cc1C1CN(C2COC2)C1</chem>	<chem>CC(C)n1nc(-c2cnc(N)c(C(F)(F)F)c2)cc1C1CN(C2COC2)C1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CC(=O)C=C(O)C=Cc1ccc(Cl)cc1</chem>	<chem>CC(=O)C=C(O)C=Cc1ccc(Cl)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nnsc1C(=O)Nc1ccc2ccccc(OC3ccc(NC(=O)NCc4cc(C(F)(F)F)ccc4F)c(F)c3)c2n1</chem>	<chem>Cc1nnsc1C(=O)Nc1ccc2ccccc(OC3ccc(NC(=O)NCc4cc(C(F)(F)F)ccc4F)c(F)c3)c2n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc(Cn1cc(C2=C(c3ccc(Cl)cc3)C(=O)NC2=O)c2ccccc21)OC</chem>	<chem>COc(Cn1cc(C2=C(c3ccc(Cl)cc3)C(=O)NC2=O)c2ccccc21)OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>#CCN1c(=O)c(C(=O)OCCOC)c(N)c2ccccc21</chem>	<chem>#CCN1c(=O)c(C(=O)OCCOC)c(N)c2ccccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(C)c1nc2ccccc2n1CCCOc1ccc(Cc(C(=O)O)c2ccc(OC)cc2)cc1</chem>	<chem>CCN(C)c1nc2ccccc2n1CCCOc1ccc(Cc(C(=O)O)c2ccc(OC)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(Cn2ncc(Cl)c(OC3ccc(Cl)cc3Cl)c2=O)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(Cn2ncc(Cl)c(OC3ccc(Cl)cc3Cl)c2=O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(C)c(NC(=O)Cn2ncc3c([nH]c4ccccc43)c2=O)c1</chem>	<chem>Cc1ccc(C)c(NC(=O)Cn2ncc3c([nH]c4ccccc43)c2=O)c1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>N#Cc1cn(-c2ccc(C(=O)O)cc2)cc1-c1cccc(COCc2ccc(OCFF)cc2)c1</chem>	<chem>N#Cc1cn(-c2ccc(C(=O)O)cc2)cc1-c1cccc(COCc2ccc(OCFF)cc2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc(OC2ccc(Nc3cc(OCN4CCCC4)ncn3)cc2)cc1</chem>	<chem>c1ccc(OC2ccc(Nc3cc(OCN4CCCC4)ncn3)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)OC(C1CC(C)C2C(O1)C(O)C1)C3CCC4C(C)(C)C(C(=O)[O-])CCC45CC35CCC21C(C)(C)C(O</chem>	<chem>CC(=O)OC(C1CC(C)C2C(O1)C(O)C1)C3CCC4C(C)(C)C(C(=O)[O-])CCC45CC35CCC21C(C)(C)C(O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=C(CO)C1CCC2=C(C1)C(=O)C(C)(O)C(CO)=C2C(=O)O</chem>	<chem>C=C(CO)C1CCC2=C(C1)C(=O)C(C)(O)C(CO)=C2C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(O)CCN(C)S(=O)(=O)c1ccc(C(=O)Nc2ccc(F)cc2)cc1</chem>	<chem>CC(C)CCN(C)S(=O)(=O)c1ccc(C(=O)Nc2ccc(F)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCC(=O)Nc1cccc(NC(=O)CC(C)C)c1</chem>	<chem>CCCC(=O)Nc1cccc(NC(=O)CC(C)C)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc(=O)c1[nH]c2ccc(CCN3C(O)=NN=C(c4ccccc4)C3=O)cc2c1CCN(C)C</chem>	<chem>COc(=O)c1[nH]c2ccc(CCN3c(O)nncc(-c4ccccc4)c3=O)cc2c1CCN(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)C1CG2C(COP(=O)(O)O)=CC(=O)C2C1</chem>	<chem>CCOC(=O)C1CG2C(=O)C=C(COP(=O)(O)O)C2C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccccc1COc1c(C(=O)C2=C(O)C(=O)OC23CCOCC3)ccc[n+][O-]</chem>	<chem>COc1ccccc1COc1c(C(=O)C2=C(O)C(=O)OC23CCOCC3)ccc[n+][O-]</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC12CC3CC(C)(C1)CC(N=C1N(C=O)C(c4ccccc(Cl)c4)C(=Cc4ccc(Cl)cc4)N12)C3</chem>	<chem>CC12CC3CC(C)(C1)CC(N=C1N(C=O)C(c4ccccc(Cl)c4)C(=Cc4ccc(Cl)cc4)N12)C3</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NC(=O)N(S(=O)(=O)c1ccc(C)cc1)c1ccc(Cl)cc1)c1ccc(C#Cc2ccccc2)cc1</chem>	<chem>O=C(NC(=O)N(S(=O)(=O)c1ccc(C)cc1)c1ccc(Cl)cc1)c1ccc(C#Cc2ccccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC(C)C(NC(=O)C1(N)CCCC1)C(=O)NCc1cc(-c2ccc(Cl)cc2)no1</chem>	<chem>CCC(C)C(NC(=O)C1(N)CCCC1)C(=O)NCc1cc(-c2ccc(Cl)cc2)no1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1ccc(Cl)cc1)C(Cl)Cl</chem>	<chem>O=C(Nc1ccc(Cl)cc1)C(Cl)Cl</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>Cc1cc(C)c(CNC(=O)c2cc(COc3ccccc3)on2)c(=O)[nH]1</chem>	<chem>Cc1cc(C)c(CNC(=O)c2cc(COc3ccccc3)on2)c(=O)[nH]1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nc(NC(=O)CN2C(=O)NC3(CCCC3)C2=O)sc1C(N)=O</chem>	<chem>Cc1nc(NC(=O)CN2C(=O)NC3(CCCC3)C2=O)sc1C(N)=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc(=O)c1ccc(NC(=O)CN2CCN(S(=O)(=O)c3cc(OC)ccc3OC)CC2)cc1</chem>	<chem>COc(=O)c1ccc(NC(=O)CN2CCN(S(=O)(=O)c3cc(OC)ccc3OC)CC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)c1cc(C#N)c(N2CCC(C(=O)NS(=O)(=O)N(C)C)CC2)nc1C</chem>	<chem>CCOC(=O)c1cc(C#N)c(N2CCC(C(=O)NS(=O)(=O)N(C)C)CC2)nc1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1C(c2ccccc2)C1(N)C(=O)O</chem>	<chem>CC1C(c2ccccc2)C1(N)C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nnc(-c2ccccc2Oc2ccc(Nc3nc4ccccc4s3)cc2)o1</chem>	<chem>Cc1nnc(-c2ccccc2Oc2ccc(Nc3nc4ccccc4s3)cc2)o1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN1C(=O)c2nc(-c3ccc(C#CCN4CCOCC4)cc3)n(Cc3ccc(F)c(F)c3)c2N2CC(C(C)C)N=C12</chem>	<chem>CCN1C(=O)c2nc(-c3ccc(C#CCN4CCOCC4)cc3)n(Cc3ccc(F)c(F)c3)c2N2CC(C(C)C)N=C12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1oc2ccccc2c1C(=O)c1c(O)c(F)c(O)c(F)c1Cl</chem>	<chem>Cc1oc2ccccc2c1C(=O)c1c(O)c(F)c(O)c(F)c1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NCCCC(N)C(=O)Nc1ccc(Cc2ccc(NC(=O)CCC(=O)O)cc2)cc1C(=O)c1ccccc1</chem>	<chem>NCCCC(N)C(=O)Nc1ccc(Cc2ccc(NC(=O)CCC(=O)O)cc2)cc1C(=O)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1NC(=O)C(=Cc2ccc(OCc(F)(F)C(F)F)cc2)C(=O)N1</chem>	<chem>O=C1NC(=O)C(=Cc2ccc(OCc(F)(F)C(F)F)cc2)C(=O)N1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CN1CCN(CCN(C(=O)Nc2ccc(F)cc2)C2CCc3cc(C#N)ccc32)CC1	CN1CCN(CCN(C(=O)Nc2ccc(F)cc2)C2CCc3cc(C#N)ccc32)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc2c1C(=O)c1c(O)c3c(c(O)c1C2=O)CC(O)(C(C)=NOCCO)CC3OC1CC(NC(=O)CNCCN)C(O)C(C)O1	COc1ccccc2c1C(=O)c1c(O)c3c(c(O)c1C2=O)CC(O)(C(C)=NOCCO)CC3OC1CC(NC(=O)CNCCN)C(O)C(C)O1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(O)c1cc2n3c1CN(C(=O)c1cnn(-c4ccc(F)cc4)c1)CC3C(c1ccccc1F)C2	CC(C)(O)c1cc2n3c1CN(C(=O)c1cnn(-c4ccc(F)cc4)c1)CC3C(c1ccccc1F)C2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CN1C(=O)C2CCCC2C1=O)Nc1ccc(Br)cc1	O=C(CN1C(=O)C2CCCC2C1=O)Nc1ccc(Br)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)C1CCC2C3CC4CC(N=Nc5ccc(Cl)cc5)CCCC4(C)C3CCC12C	CC(=O)C1CCC2C3CC4CC(N=Nc5ccc(Cl)cc5)CCCC4(C)C3CCC12C	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C1CCN2CCc3ccccc3C2C1O)S(=O)(=O)c1ccc2ccccc2c1	CN(C1CCN2CCc3ccccc3C2C1O)S(=O)(=O)c1ccc2ccccc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cncn1CCCN(C(=S)Nc1ccc(Br)c(C)c1	Cc1cc(NC(=S)NCCCN2cnccc2C)ccc1Br	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ccc(NC(=O)c2cc(Cl)ccc2O)cc1	N#Cc1ccc(NC(=O)c2cc(Cl)ccc2O)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
N=C(N)c1ccc(CNC(=O)CNC(=O)C(CO)NS(=O)(=O)Cc2ccccc2)cc1	N=C(N)c1ccc(CNC(=O)CNC(=O)C(CO)NS(=O)(=O)Cc2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
COc1ccc(Cl)cc1N1CCN(CCCCN2C(=O)C3C4c5ccccc5C(c5ccccc54)C3C2=O)CC1	COc1ccc(Cl)cc1N1CCN(CCCCN2C(=O)C3C4c5ccccc5C(c5ccccc54)C3C2=O)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Sc1nnc2sc(-c3ccco3)nn12	Sc1nnc2sc(-c3ccco3)nn12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc(C(=O)NNC(=S)NC(=O)c2ccco2)c1	COc1ccccc(C(=O)NNC(=S)NC(=O)c2ccco2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C=CC(=O)c2ccc(OC)c(OC)c2OC)cc1	COc1ccc(C=CC(=O)c2ccc(OC)c(OC)c2OC)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(=O)OCC1OC(n2cc(-c3ccc(S(C)(=O)=O)cc3)c(=O)[nH]c2=O)CC1OC(C)=O	CC(=O)OCC1OC(n2cc(-c3ccc(S(C)(=O)=O)cc3)c(=O)[nH]c2=O)CC1OC(C)=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)NC(COC1OC(CO)C(O)C(O)C1O)C(O)C(O)CCCCCCCCCCCCCCCC	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)NC(COC1OC(CO)C(O)C(O)C1O)C(O)C(O)CCCCCCCCCCCCCCCC	TRUE	TRUE	TRUE
FC(F)(F)C1NC1c1ccccc1	FC(F)(F)C1NC1c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)CC23OCOC2(CCC1O)C1(O)C3(O)CCC1(C)C	CC1(C)CC23OCOC2(CCC1O)C1(O)C(C)(C)CCC31O	TRUE	TRUE	TRUE
OC(=Nc1ccc(Oc2cnnc3n[nH]cc23)(F)c1)Nc1ccc(CN=C(O)N2CCOCC2)cc1F	OC(=Nc1ccc(Oc2cnnc3n[nH]cc23)(c(F)c1)Nc1ccc(CN=C(O)N2CCOCC2)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1cc2ccc(OCc3cccc(Cl)c3)cc2nc1O	O=C(O)c1cc2ccc(OCc3cccc(Cl)c3)cc2nc1O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCNc1c(=O)c2ccccc2n2c(SCc3cccc(OC)c3)nnc12	CCCNc1c(=O)c2ccccc2n2c(SCc3cccc(OC)c3)nnc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1cn(CCOc2ccccc2)nn1)N1CCN(C2c3ccccc3Sc3ccccc32)CC1	O=C(c1cn(CCOc2ccccc2)nn1)N1CCN(C2c3ccccc3Sc3ccccc32)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1ccn(C2OC(CO)C(O)C2F)c(=O)[nH]1	O=c1ccn(C2OC(CO)C(O)C2F)c(=O)[nH]1	TRUE	TRUE	FALSE
N#Cc1ccccc1-c1n[nH]c2nc(-c3ccccc3C(F)(F)F)c3c(c12)CCCC3	N#Cc1ccccc1-c1n[nH]c2nc(-c3ccccc3C(F)(F)F)c3c(c12)CCCC3	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1NCC(=O)Nc1c(C)nn(C)C1C	COc1ccccc1NCC(=O)Nc1c(C)nn(C)C1C	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1ccccc1N1CCC(c2cnnc3ccc(C#Cc4ccc(Cl)cc4)cc23)CC1	Oc1ccccc1N1CCC(c2cnnc3ccc(C#Cc4ccc(Cl)cc4)cc23)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1c2ccccc2c2cc(CN3CCC(c4nc5ccc(OC)cc5s4)CC3)ccc21	CCn1c2ccccc2c2cc(CN3CCC(c4nc5ccc(OC)cc5s4)CC3)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C(=O)OC)c1ccc(Cl)s1	CC(C)(C(=O)OC)c1ccc(Cl)s1	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(CCC(C)C1CCC2C3CC(O)C4CC(OC(=O)Cc5cccc(C6CC6)c5)CCCC4(C)C3CCC12C)C(C)C	C=C(CCC(C)C1CCC2C3CC(O)C4CC(OC(=O)Cc5cccc(C6CC6)c5)CCCC4(C)C3CCC12C)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(COC(=O)C2([N+])(=O)[O-])CCON2C)cc1OC	COc1ccc(COC(=O)C2([N+])(=O)[O-])CCON2C)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CSSc1cccc(Nc2cc(Nc3ccc(OC4CCN(CCO)CC4)cc3)ncn2)c1	CSSc1cccc(Nc2cc(Nc3ccc(OC4CCN(CCO)CC4)cc3)ncn2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(C)CCCOc1cc2oc3ccc(OCCCN(C)C)c(OC)c(Cc(=O)C)C)c3c(=O)c2c(O)c1CC=C(C)C	CCN(C)CCCOc1cc2oc3ccc(OCCCN(C)C)c(OC)c(Cc(=O)C)C)c3c(=O)c2c(O)c1CC=C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
C=CC(=CC(C)C1C(O)CC2C3=CC4C(C(C)O)C5(O)CC=CC(=O)C45C)C3(C)CCC21C)C(=O)O	C=CC(=CC(C)C1C(O)CC2C3=CC4C(C(C)O)C5(O)CC=CC(=O)C45C)C3(C)CCC21C)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)Nc2cccc(C(F)(F)F)c2)cc1Nc1nnc2cnc(N3CCNCC3)nc12	Cc1ccc(C(=O)Nc2cccc(C(F)(F)F)c2)cc1Nc1nnc2cnc(N3CCNCC3)nc12	TRUE	TRUE	FALSE
CCOc1cc(CNCC2cccc(N)c2)cc(Br)c1OCc1ccccc1	CCOc1cc(CNCC2cccc(N)c2)cc(Br)c1OCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+](([O-])c1ccc(NC(=O)c2cncc(-c3cc4ncccc4o3)c2)cc1	O=C(Nc1ccc([N+])(=O)[O-])c1c1nccc(-c2cc3ncccc3o2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCC2C(C)C(CCC3OC4OC5(C)CCC6C(C)CCC(C3C)C46O05)CO)OC3OC4(C)CCCC1C32O04	CC1CCC2C(C)C(CCC3OC4OC5(C)CCC6C(C)CCC(C3C)C46O05)OC3OC4(C)CCCC1C32O04	TRUE	TRUE	FALSE
FC(F)(F)c1cc(COC2(c3ccccc3)c3ccccc3-c3cccn32)cc(C(F)(F)F)c1	FC(F)(F)c1cc(COC2(c3ccccc3)c3ccccc3-c3cccn32)cc(C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)C1(c2cccc(F)c2)CCN(C(=O)c2ccco2)CC1	CC(=O)C1(c2cccc(F)c2)CCN(C(=O)c2ccco2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(cc1OC)-c1cc(Nc3cccc(F)c3)nc(=O)n1CC2	COc1cc2c(cc1OC)-c1cc(Nc3cccc(F)c3)nc(=O)n1CC2	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1cc(C)cc(N2N=C3COc4cccc4C=C3C(CCC(=O)NCCS(N)(=O)=O)C2=O)c1	Cc1cc(C)cc(N2N=C3COc4cccc4C=C3C(CCC(=O)NCCS(N)(=O)=O)C2=O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1c(C)cc(C(=O)C2CCCN(Cc3cc(C(F)(F)F)no3)C2)cc1C	COc1c(C)cc(C(=O)C2CCCN(Cc3cc(C(F)(F)F)no3)C2)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1c(OC)cccc1C=CCCC(=O)C=Cc1ccc(O)c(O)c1	CCOc1c(C=CCCC(=O)C=Cc2ccc(O)c(O)c2)cccc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CC(c2ccccc2F)C(=O)N1CCN1CCN(c2ccccc2)CC1	O=C1CC(c2ccccc2F)C(=O)N1CCN1CCN(c2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1csc(-c2nnc(SCC(=O)O)[nH]2)c1	Cc1csc(-c2nnc(SCC(=O)O)[nH]2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(CN2C(=O)Cc3ccc(NC(=O)Nc4ccc(NC(CN5CCNCC5)c5cccn5)cc4)cc32)CC1	CN1CCN(CN2C(=O)Cc3ccc(NC(=O)Nc4ccc(NC(CN5CCNCC5)c5cccn5)cc4)cc32)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCN1CCn2nc(CNC(=O)c3cnsc3)cc2C1=O	COCCN1CCn2nc(CNC(=O)c3cnsc3)cc2C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1CCN(CS(=O)(=O)N2CCCN(Cc3scnc3-c3nc4cc(F)ccc4[nH]3)Cc3ccc(Cl)cc32)CC1	CCN1CCN(CS(=O)(=O)N2CCCN(Cc3scnc3-c3nc4cc(F)ccc4[nH]3)Cc3ccc(Cl)cc32)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1cc(-c2ccc(N3CC(CNC(C)=O)OC3=O)cc2)ccc1Br	CCc1cc(-c2ccc(N3CC(CNC(C)=O)OC3=O)cc2)ccc1Br	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C(=O)c2ccccc2C(O)=C1Cc1ccccc1	O=C1C(=O)c2ccccc2C(O)=C1Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1ccc(S(=O)(=O)N2CC(N3C(=O)C4=C(CCCC4)C3=O)c3cc([N+])(=O)[O-])ccc32)cc1	CC(C)(C)c1ccc(S(=O)(=O)N2CC(N3C(=O)C4=C(CCCC4)C3=O)c3cc([N+])(=O)[O-])ccc32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(n1ccnc(NCC2CC2)c1=O)N1CCc2ccccc2C1	O=C(N1CCc2ccccc2C1)n1ccnc(NCC2CC2)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(Cc(=O)O)n(Cc2ccc(C(=N)N)cc2)c2cc(Br)ccc12	Cc1c(Cc(=O)O)n(Cc2ccc(C(=N)N)cc2)c2cc(Br)ccc12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2nc(Cn3nc(C#CCOC(=O)C4CCCC4)c4cccc4c3=O)sc2C)cc1	COc1ccc(-c2nc(Cn3nc(C#CCOC(=O)C4CCCC4)c4cccc4c3=O)sc2C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1Cc2ccc(COc3nncc(-c4cccc4)n3)cc2N1	O=C1Cc2ccc(COc3nncc(-c4cccc4)n3)cc2N1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1c(Cc(N)=O)c2c(F)cccc2n1C(c1ccccc1)c1ccccc1	CCc1c(Cc(N)=O)c2c(F)cccc2n1C(c1ccccc1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2nc(SCC(=O)NN=Cc3cccc(OC)c3O)nc(Nc3ccccc3)c2C#N)cc1	COc1ccc(-c2nc(SCC(=O)NN=Cc3cccc(OC)c3O)nc(Nc3ccccc3)c2C#N)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(N2CCN(C=O)CC2)ccc1Nc1nccc(-c2c(-c3cccc(C(=O)Nc4c(F)cccc4F)c3Cl)nc3cccn23)n1	COc1cc(N2CCN(C=O)CC2)ccc1Nc1nccc(-c2c(-c3cccc(C(=O)Nc4c(F)cccc4F)c3Cl)nc3cccn23)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c(Nc2c(Cl)ccc(CNC(=O)C(C)(C)c2Cl)nc2cc(C(=O)NC3CCC(C(F)(F)F)CC3)c(N3CCC(F)C3)cc21	Cn1c(Nc2c(Cl)ccc(CNC(=O)C(C)(C)c2Cl)nc2cc(C(=O)NC3CCC(C(F)(F)F)CC3)c(N3CCC(F)C3)cc21	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(C1CCS(=O)(=O)CC1)N1CCN(c2ncccn2)CC1c1ccccc(F)c1	O=C(C1CCS(=O)(=O)CC1)N1CCN(c2ncccn2)CC1c1ccccc(F)c1	TRUE	TRUE	FALSE
Cc1oc(-c2ccc(Cl)cc2)nc1COc1ccc(CCC(=O)O)cc1	Cc1oc(-c2ccc(Cl)cc2)nc1COc1ccc(CCC(=O)O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2cc(-c3ccsc3)ccc2OCC(C)C)cc1	COc1ccc(-c2cc(-c3ccsc3)ccc2OCC(C)C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(Nc1cc(-c2cccc(S(C)(=O)=O)c2)ncn1)C(Cc1ccc(Cl)cc1)c1ccccc(Br)c1	CC(Nc1cc(-c2cccc(S(C)(=O)=O)c2)ncn1)C(Cc1ccc(Cl)cc1)c1ccccc(Br)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1c(F)cc(-n2ccc(C(=O)O)n2)cc1F	Nc1c(F)cc(-n2ccc(C(=O)O)n2)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
COCOC(=O)C(Cc(=O)O)NC(=O)C(N)CCCN=C(N)N	COCOC(=O)C(Cc(=O)O)NC(=O)C(N)CCCN=C(N)N	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=NNC(=O)c1ccc(Br)s1)c1ccc(N2CCOCC2)cc1	CC(=NNC(=O)c1ccc(Br)s1)c1ccc(N2CCOCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CSC1C(O)C(O)C(NC(C)=O)C(O)C1O	CSC1C(O)C(O)C(NC(C)=O)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)Oc1cccc(CN2CCC(NC(=O)c3cc2ccccc(OC(C)C)c3)C(OC(=O)Nc3cccc(C(F)(F)F)c3)C2)c1	CC(=O)Nc1ccc(S(N)(=O)=O)cc1	FALSE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1ccc(S(N)(=O)=O)cc1	CC(=O)Nc1ccc(S(N)(=O)=O)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
C=CCOC(=O)C1CN(S(C)(=O)=O)CCN1C(=O)CCC	C=CCOC(=O)C1CN(S(C)(=O)=O)CCN1C(=O)CCC	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(S(=O)(=O)c2ccc(C(=O)OC(=O)c3ccc([N+])(=O)[O-])cc3)cc2)CC1	CN1CCN(S(=O)(=O)c2ccc(C(=O)OC(=O)c3ccc([N+])(=O)[O-])cc3)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCCN(S(=O)(=O)c2ccc(F)cc2)CC1	CN1CCCN(S(=O)(=O)c2ccc(F)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+](([O-])c1ccc(S(=O)(=O)Nc2cccc(S(=O)(=O)N3CCCC3)c2)cc1	O=[N+](([O-])c1ccc(S(=O)(=O)Nc2cccc(S(=O)(=O)N3CCCC3)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COCCCN(C(=O)Nc1cccc(Cn2nc(C)c([N+])(=O)[O-])c2C)c1	COCCCN(C(=O)Nc1cccc(Cn2nc(C)c([N+])(=O)[O-])c2C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(NC(=O)c2cc([N+])(=O)[O-])ccc2N2CCOCC2)c1	Cc1cccc(NC(=O)c2cc([N+])(=O)[O-])ccc2N2CCOCC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1NC2(CCc3ccccc3C2)C(=O)N1CC(COCc1ccccc1)OCc1ccccc1	O=C1NC2(CCc3ccccc3C2)C(=O)N1CC(COCc1ccccc1)OCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1ccc(C(Cc(=O)c2ccccc2Cl)=NO)cc1	O=C(O)c1ccc(C(Cc(=O)c2ccccc2Cl)=NO)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1ccc(C(=O)OCc2cnccc2C(F)(F)F)nc1	N#Cc1ccc(C(=O)OCc2cnccc2C(F)(F)F)nc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC(CNCCc1cccc(OC(F)F)c1)N1CCC(N(Cc2ccccc2)C(=O)N2CCN(Cc3cccn3)CC2)CC1	CCCC(CNCCc1cccc(OC(F)F)c1)N1CCC(N(Cc2ccccc2)C(=O)N2CCN(Cc3cccn3)CC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C(C)C(O)c1ccc(-n2cc(C(F)(F)F)ccc2=O)cc1Cl	CCOC(=O)C(C)C(O)c1ccc(-n2cc(C(F)(F)F)ccc2=O)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
NCCc1c[nH]c2ccccc12	NCCc1c[nH]c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1c(Cl)cc(Cl)cc1C=Nc1ccccc1	Oc1c(Cl)cc(Cl)cc1C=Nc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2ccn(CCCCCCCCOC3OC4OC5(C)CCC6C(C)CCC(C3C)C46O05)c2c1	COc1ccc2ccn(CCCCCCCCOC3OC4OC5(C)CCC6C(C)CCC(C3C)C46O05)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C1CCOCC1)N1CC(F)C(OC2CC2)C1	O=C(C1CCOCC1)N1CC(F)C(OC2CC2)C1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>Cc1ccc(C(=O)N2CCC(Nc3cc(=O)oc4cc(OCc5ccccc5)ccc34)CC2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(C(=O)N2CCC(Nc3cc(=O)oc4cc(OCc5ccccc5)ccc34)CC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cccc(C(O)c2nc(-c3ccccc3)c[nH]2)c1C</chem>	<chem>Cc1cccc(C(O)c2nc(-c3ccccc3)c[nH]2)c1C</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CC1(C)CCCC2(C)C1CCC13CCoc1c2C2O(C(=O)C4OC42C2OC23C1</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(S(=O)(=O)N2CCN(C(=O)CCS(=O)(=O)c3cc(Cl)ccc3Cl)CC2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(S(=O)(=O)N2CCN(C(=O)CCS(=O)(=O)c3cc(Cl)ccc3Cl)CC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)COC(=O)c1ccc2cc(Cl(C)C)c(O)c(C(C)C)c2c(OCCC(C)C)c1O</chem>	<chem>CC(C)CCOc1c(O)c(C(=O)OCC(C)C)cc2cc(Cl(C)C)c(O)c(C(C)C)c12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=C(C(=O)OCC)C(O)c1cccc1</chem>	<chem>C=C(C(=O)OCC)C(O)c1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CN(C)c1nccc2ccc(C(=O)N3CCCC3Cn3cncn3)cc12</chem>	<chem>CN(C)c1nccc2ccc(C(=O)N3CCCC3Cn3cncn3)cc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C2=NN=C(N3CCN(c4ccc(C(C)=O)cc4)CC3)SC2)cc1OC</chem>	<chem>COc1ccc(C2=NN=C(N3CCN(c4ccc(C(C)=O)cc4)CC3)SC2)cc1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NS(=O)(=O)c1cccc1NS(=O)(=O)C=Cc1cccc(Cl)c1</chem>	<chem>NS(=O)(=O)c1cccc1NS(=O)(=O)C=Cc1cccc(Cl)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(C)CCC(C)(C)c2cc(NC(=S)c3ccc(C(=O)O)cc3)ccc21</chem>	<chem>CC1(C)CCC(C)(C)c2cc(NC(=S)c3ccc(C(=O)O)cc3)ccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1[nH]c2c(OCc3ccccc3)cccc2c1Cc1cccc1</chem>	<chem>Cc1[nH]c2c(OCc3ccccc3)cccc2c1Cc1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1c(=O)c2c(nc(OCCC3CC3)n2C)n(C)c1=O</chem>	<chem>Cn1c(=O)c2c(nc(OCCC3CC3)n2C)n(C)c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Oc1nc2c(ncn2C2CCN(CCC(C)Oc3cccc(F)c3)c3ccc(F)cc3)CC2)c(=O)n1Cc1cccc1</chem>	<chem>O=c1c2ncn(C3CCN(CCC(C)Oc4cccc(F)c4)c4ccc(F)cc4)CC3)c2nc(O)n1Cc1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N=C(N)NCCCC(NC(=O)C1CCCN1C(=O)C(Cc1cccc1)NC(=O)C1CCCN1C(=O)C(N)CCCN=C(N)N)C(=O)c1nccc1</chem>	<chem>N=C(N)NCCCC(NC(=O)C1CCCN1C(=O)C(Cc1cccc1)NC(=O)C1CCCN1C(=O)C(N)CCCN=C(N)N)C(=O)c1nccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCC(C)=NO</chem>	<chem>CCCCC(C)=NO</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>Clc1ccc2[nH]c(NCc3ccccc3)nc2c1</chem>	<chem>Clc1ccc2[nH]c(NCc3ccccc3)nc2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1c2cc(-c3ccc(C(F)(F)F)c(Cl)c3)ccc2OCCN1Cc1neon1</chem>	<chem>O=C1c2cc(-c3ccc(C(F)(F)F)c(Cl)c3)ccc2OCCN1Cc1neon1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1COC(C(=O)N2CCN(c3nc(-c4ccco4)nc4s5c(c34)CCCC5)CC2)O1</chem>	<chem>O=C1COC(C(=O)N2CCN(c3nc(-c4ccco4)nc4s5c(c34)CCCC5)CC2)O1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)CNC(=O)c1cccc1=O</chem>	<chem>CCOC(=O)CNC(=O)c1cccc1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)c1ccc(Nc2nc(NCc3ccc(F)cc3)nc(N3CCc4c([nH]c5ccccc45)C3c3ccc4c(c3)OCO4)n2)c(C(=O)NCc2c[nH]c3ccc(C(N)=O)cc23)c1</chem>	<chem>CN(C)c1ccc(Nc2nc(NCc3ccc(F)cc3)nc(N3CCc4c([nH]c5ccccc45)C3c3ccc4c(c3)OCO4)n2)c(C(=O)NCc2c[nH]c3ccc(C(N)=O)cc23)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(Cl)cc1S(=O)(=O)N(C)Cc1ccc(Cl)c(Cl)c1</chem>	<chem>COc1ccc(Cl)cc1S(=O)(=O)N(C)Cc1ccc(Cl)c(Cl)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)Nc1ccc(C2Oc3cc(C)cc(C)c3N(CCN(C)C)C2=O)cc1</chem>	<chem>CC(=O)Nc1ccc(C2Oc3cc(C)cc(C)c3N(CCN(C)C)C2=O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC(=O)N(NC(=O)c1cccc1C(=O)O)c1cc(F)cc(F)c1</chem>	<chem>NC(=O)N(NC(=O)c1cccc1C(=O)O)c1cc(F)cc(F)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCN=C(O)c1cccn1N1CCN(C(=O)c2cccc(C(F)(F)F)c2Cl)CC1</chem>	<chem>CCCN=C(O)c1cccn1N1CCN(C(=O)c2cccc(C(F)(F)F)c2Cl)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN1C2CCC3(CC2)OC(C)(c2ccsc23)CC1C</chem>	<chem>CCN1(C)CC2(C)OC3(CCC1CC3)c1sccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CNC(=O)COc1ccc(Cl)cc1C(N)=O</chem>	<chem>CNC(=O)COc1ccc(Cl)cc1C(N)=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC(O)(CC)CCCCC(=CCc1cccn1)CCC(C)(C)O</chem>	<chem>CCC(O)(CC)CCCCC(=CCc1cccn1)CCC(C)(C)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)OC(C1CC(C)C2C(O1)C(O)C1(C)C3CCC4C(C)(C)C(OC5CN(C6CCCN(C(=O)C(N)CCNC(CCC(=O)O)C6)CCO7)CCO5)CCC45CC35CC21C)C(C)C</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(C)n(Cc(=O)NN=C2CCCC2)n1</chem>	<chem>Cc1cc(C)n(Cc(=O)NN=C2CCCC2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCNc1ncc(-c2ccc(O)c(-c3cc4c(ccc5cc[nH]c5c4)nc3O)c2)[nH]1</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>NCCC(=O)Nc1ccc(C=CC(=O)c2cccc(F)c2)cc1</chem>	<chem>NCCC(=O)Nc1ccc(C=CC(=O)c2cccc(F)c2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>OC(COC(Cc1ccc(Cl)c(Cl)c1)N1CCC(Cc2ccccc2)CC1)Cn1cnc(-c2cc(F)ccc2F)c1</chem>	<chem>OC(COC(Cc1ccc(Cl)c(Cl)c1)N1CCC(Cc2ccccc2)CC1)Cn1cnc(-c2cc(F)ccc2F)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)C1C2ON=C(OCc3ccccc3)C2ONC1c1cccc1</chem>	<chem>O=C(O)C1C(c2ccccc2)NOC2C(OCc3ccccc3)=NOC21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(=O)OCc1cccc1)c1cccc1</chem>	<chem>O=C(NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(=O)OCc1cccc1)c1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(C=NNc2nc(N3CCOC3)c3cc(OC)c(OC)cc3n2)ccc1O</chem>	<chem>COc1cc(C=NNc2nc(N3CCOC3)c3cc(OC)c(OC)cc3n2)ccc1O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NCc1cn2c(n1)CN(Cc1cccc1)CC2)c1cnccn1</chem>	<chem>O=C(NCc1cn2c(n1)CN(Cc1cccc1)CC2)c1cnccn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc(=O)C(O)C1C(=O)N(O)C(=O)c2cc(Cl)cc(Cl)c21</chem>	<chem>COc(=O)C(O)C1C(=O)N(O)C(=O)c2cc(Cl)cc(Cl)c21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(N2CCN(Cc3cnc(C)c(F)c3)C(=O)C2)c(C(N)Cc2oc3ccccc23)c1</chem>	<chem>Cc1ccc(N2CCN(Cc3cnc(C)c(F)c3)C(=O)C2)c(C(N)Cc2oc3ccccc23)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1cccc1OCC(N)CO</chem>	<chem>CCc1cccc1OCC(N)CO</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cccc(CC2(C(N)=O)CCN(Cc3ccc4c(c3)OCO4)CC2O)c1</chem>	<chem>Cc1cccc(CC2(C(N)=O)CCN(Cc3ccc4c(c3)OCO4)CC2O)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NCc1cccc1)NC1CCCCC1</chem>	<chem>O=C(NCc1cccc1)NC1CCCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Nc1cccc(C(F)(F)F)c1)NC(c1cccc1)c1cccc1</chem>	<chem>O=C(Nc1cccc(C(F)(F)F)c1)NC(c1cccc1)c1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(CCN(C(=O)CCn2c(=O)c3cccn3c3cccn32)c(OC)c1</chem>	<chem>COc1ccc(CCN(C(=O)CCn2c(=O)c3cccn3c3cccn32)c(OC)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN1CCN(CCCN(C)N=Cc2ccccc2Cl)CC1</chem>	<chem>CN1CCN(CCCN(C)N=Cc2ccccc2Cl)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cccc1NC(=O)c1ccc2nc(=S)[nH]n2c1</chem>	<chem>Cc1cccc1NC(=O)c1ccc2nc(=S)[nH]n2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCN(C=O)C(=O)C(CCC)NC(=O)C1CC(C)N(C(=O)C(Cc2c[nH]c3ccccc23)NC(C=O)C(C)CC)C1</chem>	<chem>CCCCN(C=O)C(=O)C(CCC)NC(=O)C1CC(C)N(C(=O)C(Cc2c[nH]c3ccccc23)NC(C=O)C(C)CC)C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(C)OC(=O)c2c1ccn(Cc1cccc1)C(=O)NCc1cccc1)c2=O</chem>	<chem>CC1(C)OC(=O)c2c1ccn(Cc1cccc1)C(=O)NCc1cccc1)c2=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1c(C(C)C(C)C)c2c3c(c1C(C)C(C)C(N)CC3(C)C)OC21</chem>	<chem>COc1c(C(C)C(C)C)c2c3c(c1C(C)C(C)C(N)CC3(C)C)OC21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN1CCN(c2nc(N)nc3[nH]cnc23)CC1</chem>	<chem>CN1CCN(c2nc(N)nc3[nH]cnc23)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(C(=O)Sc2ccc([N+](=O)[O-])c(C)n2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(C(=O)Sc2ccc([N+](=O)[O-])c(C)n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1C2CCC3(C)CN(Cc4ccccc4)C3c3ccc(O)c3)N2C(=O)CN1C1CCCC1</chem>	<chem>O=C1C2CCC3(C)CN(Cc4ccccc4)C3c3ccc(O)c3)N2C(=O)CN1C1CCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(N2CCN(CCCSc3nc4ccccc4o3)CC2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(N2CCN(CCCSc3nc4ccccc4o3)CC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(C)n(-c2ccc(S(=O)(=O)N3CCCC3)cn2)n1</chem>	<chem>Cc1cc(C)n(-c2ccc(S(=O)(=O)N3CCCC3)cn2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1C(Cl)=C(Nc2ccc(Br)cc2)C(=O)c2ncccc21</chem>	<chem>O=C1C(Cl)=C(Nc2ccc(Br)cc2)C(=O)c2ncccc21</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>CC(C)(C)OC(=O)NC(Cc1cccc1)C(=O)NCCCCCCC(=O)NO</chem>	<chem>CC(C)(C)OC(=O)NC(Cc1cccc1)C(=O)NCCCCCCC(=O)NO</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)C(NC(=O)c1ccc(F)c1)C(=O)NC1CCCc2ccccc21</chem>	<chem>CC(C)C(NC(=O)c1ccc(F)c1)C(=O)NC1CCCc2ccccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)C(C)C(=O)CSCc1ccc(NC(=N)N)cc1</chem>	<chem>CCOC(=O)C(C)C(=O)CSCc1ccc(NC(=N)N)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCC(=O)OC(c1cccc1Cl)C(C)C)n1ccnc1</chem>	<chem>CCCC(=O)OC(c1cccc1Cl)C(C)C)n1ccnc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(CSc1nnc(CNC(=O)c2ccco2)o1)c1cccc1</chem>	<chem>O=C(CSc1nnc(CNC(=O)c2ccco2)o1)c1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>Cc1ccc(OC(C)c2nc3ccccc3c(=O)n2-c2ccc(F)cc2)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(OC(C)c2nc3ccccc3c(=O)n2-c2ccc(F)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(OCC(=O)NC(Cc2c[nH]c3ccccc23)C(=O)O)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(OCC(=O)NC(Cc2c[nH]c3ccccc23)C(=O)O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(CSCCCSc1cccc1)NCCCNCCCCNCCCCCNCCCNC(=O)Cc1ccc(O)cc1</chem>	<chem>O=C(CSCCCSc1cccc1)NCCCNCCCCNCCCCCNCCCNC(=O)Cc1ccc(O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC(Cc1cc(Br)c(OCC(=O)O)c(Br)c1)C(=O)O</chem>	<chem>NC(Cc1cc(Br)c(OCC(=O)O)c(Br)c1)C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(CCN5(=O)(=O)c2c(F)c(F)c(F)c(F)c2F)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(CCN5(=O)(=O)c2c(F)c(F)c(F)c(F)c2F)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCN1cnc2c(N=Nc3ccc(S(=O)(=O)O)cc3)nc(N3CCCC3)nc21</chem>	<chem>CCCN1cnc2c(N=Nc3ccc(S(=O)(=O)O)cc3)nc(N3CCCC3)nc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN1CC(N=C(O)c2ccc3[nH]nc(-c4cncnc4)c3c2)CCC1C(=O)NC1CCOCC1</chem>	<chem>CN1CC(N=C(O)c2ccc3[nH]nc(-c4cncnc4)c3c2)CCC1C(=O)NC1CCOCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)NC(Cc(=O)NCc1cccc1)C(=O)NC(C)c1cccc1</chem>	<chem>CC(=O)NC(Cc(=O)NCc1cccc1)C(=O)NC(C)c1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c(F)cc(-c2nc(C)nc(OC(C)C)c2C#N)cc1C(=O)O</chem>	<chem>Cc1nc(OC(C)C)c(C#N)c(-c2cc(F)c(C)c(C(=O)O)c2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=CCOCC1(CO)CCCC2(S(=O)(=O)c3ccc(Cl)cc3)c3c(F)ccc(F)c3OCC12</chem>	<chem>C=CCOCC1(CO)CCCC2(S(=O)(=O)c3ccc(Cl)cc3)c3c(F)ccc(F)c3OCC12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(-c2cc3ccccc3o2)on1</chem>	<chem>Cc1cc(-c2cc3ccccc3o2)on1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cccc(CS(=O)(=O)CC(=O)N2CCN(S(=O)(=O)c3ccc(C)c(C)c3)CC2)c1</chem>	<chem>Cc1cccc(CS(=O)(=O)CC(=O)N2CCN(S(=O)(=O)c3ccc(C)c(C)c3)CC2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)CCON=C1CC2C3=C(CCC2(C)CC(O)C1)C1(C)CC(O)C1C1=C3CC(O)C1(C)C</chem>	<chem>CN(C)CCON=C1CC2C3=C(CCC2(C)CC(O)C1)C1(C)CC(O)C1C1=C3CC(O)C1(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)C(NC(=O)OC(C)(C)C(=O)N1CCCC1C(=O)N1CCCC1C(=O)NC(Cc1cccc1)C(=O)N(C)CC(=O)OC(C)(C)C</chem>	<chem>CC(C)C(NC(=O)OC(C)(C)C(=O)N1CCCC1C(=O)N1CCCC1C(=O)N1CCCC1C(=O)NC(Cc1cccc1)C(=O)N(C)CC(=O)OC(C)(C)C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=c1cnc2cnc(N3CCCC3)nc2n1Cc1cccc1</chem>	<chem>O=c1cnc2cnc(N3CCCC3)nc2n1Cc1cccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nn(C(C)c2ccc3c(ccn3C)c2)c(C)c1CC(=O)O</chem>	<chem>Cc1nn(C(C)c2ccc3c(ccn3C)c2)c(C)c1CC(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1cccc1N1CCN(C(=O)Cn2c(-c3cccs3)cc3cc(Cl)ccc32)CC1</chem>	<chem>CCc1cccc1N1CCN(C(=O)Cn2c(-c3cccs3)cc3cc(Cl)ccc32)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCCNC(=O)c1cc(-c2ccccc2)nn1Cc1cnccc1</chem>	<chem>COCCNC(=O)c1cc(-c2ccccc2)nn1Cc1cnccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN1CCSC1=C1C=C(O)c2ccccc21</chem>	<chem>CN1CCSC1=C1C=C(O)c2ccccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)c1ccc(N(Cc2ccncc2)S(=O)(=O)c2ccc3ccccc3c2)cc1</chem>	<chem>CN(C)c1ccc(N(Cc2ccncc2)S(=O)(=O)c2ccc3ccccc3c2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1CCCC(C)N1CCCN1c(=S)[nH]c2cc3c(cc2c1=O)OCO3</chem>	<chem>CC1CCCC(C)N1CCCN1c(=S)[nH]c2cc3c(cc2c1=O)OCO3</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc2nc(CN3CCCC(COc4ccc(Cl)cc4Cl)C3)nc(C)c2c1</chem>	<chem>Cc1ccc2nc(CN3CCCC(COc4ccc(Cl)cc4Cl)C3)nc(C)c2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(Cn2cc(C=C3NC(=S)NC3=O)c3ccccc32)cc1</chem>	<chem>Cc1ccc(Cn2cc(C=C3NC(=S)NC3=O)c3ccccc32)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>N#Cc1cc2cc(CN3CCCC3)n(-c3cccc(Cl)c3)c2cn1</chem>	<chem>N#Cc1cc2cc(CN3CCCC3)n(-c3cccc(Cl)c3)c2cn1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CCc1cccc1OCC(=O)OCC(=O)NCCc1ccc(S(N)(=O)=O)cc1	CCc1cccc1OCC(=O)OCC(=O)NCCc1ccc(S(N)(=O)=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc1-n1c(Cn2nc(-c3ccc(C(F)(F)F)cc3)c3c(N)ncnc32)cc2cccc(C)c2c1=O	COc1cccc1-n1c(Cn2nc(-c3ccc(C(F)(F)F)cc3)c3c(N)ncnc32)cc2cccc(C)c2c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1cc(N)c(Cl)cc1C(=O)NCC1CN(Cc2cccc2F)CCO1	CCOc1cc(N)c(Cl)cc1C(=O)NCC1CN(Cc2cccc2F)CCO1	TRUE	TRUE	FALSE
COc1ccc(C2=C(c3cc(OC)c(OC)c(OC)c3)C(=O)OC2)cc1N	COc1ccc(C2=C(c3cc(OC)c(OC)c(OC)c3)C(=O)OC2)cc1N	TRUE	TRUE	FALSE
Clc1c(-c2cccc2)oc2cccc2c1=O	O=c1c(Cl)c(-c2cccc2)oc2cccc12	TRUE	TRUE	FALSE
CCc1ccc(CN(CC(=O)NC(C)(C)C)C(=O)c2csnn2)cc1	CCc1ccc(CN(CC(=O)NC(C)(C)C)C(=O)c2csnn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCn1c(O)c(N=Nc2cccc(F)c2)c2cccc21	CN(C)CCn1c(O)c(N=Nc2cccc(F)c2)c2cccc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CN(C(=O)COC(=O)c2cccc2Nc2cccc2)c2cccc2N1	O=C1CN(C(=O)COC(=O)c2cccc2Nc2cccc2)c2cccc2N1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)C1C(=O)N2C(C(=O)O)=C(CN3CCN(c4cccc5cc(Br)ccc45)CC3)SC12	CC(O)C1C(=O)N2C(C(=O)O)=C(CN3CCN(c4cccc5cc(Br)ccc45)CC3)SC12	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1cnc2cnc3c(OC)c(-c4ccc(Cl)cc4)ccc3c2c1Nc1cccc1C	CCOC(=O)c1cnc2cnc3c(OC)c(-c4ccc(Cl)cc4)ccc3c2c1Nc1cccc1C	TRUE	TRUE	TRUE
CC(COCc1cccc1)NS(=O)(=O)c1cccc1	CC(COCc1cccc1)NS(=O)(=O)c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1ccc(S(=O)(=O)N2CCC(C(=O)NCC3ccco3)CC2)cc1	CC(=O)Nc1ccc(S(=O)(=O)N2CCC(C(=O)NCC3ccco3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
CCN1CC2(COC3CCN(Cc4cccc5c4OCOS)CC3O2)OC(C)C1=O	CCN1CC2(COC3CCN(Cc4cccc5c4OCOS)CC3O2)OC(C)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCCc1c[nH]c2ccc(Cl)cc12)c1cccc(C(=O)N2CCC(O)CC2)n1	O=C(NCCc1c[nH]c2ccc(Cl)cc12)c1cccc(C(=O)N2CCC(O)CC2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(CC)CC(O)Cn1c2cccc2c2ccc(O)cc21	CCN(CC)CC(O)Cn1c2cccc2c2ccc(O)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCN(CCCCCCCCN(C(=O)C(N)CCCCN	CCCCCCCCCN(CCCCCCCCN(C(=O)C(N)CCCCN	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C1=C2C3=C(CC(C)(CCC2(C)O)CC1=O)C1=CC(=O)OC1N(C(=O)c1ccc([N+](=O)[O-])cc1)C3	CC(C)C1=C2C3=C(CC(C)(CCC2(C)O)CC1=O)C1=CC(=O)OC1N(C(=O)c1ccc([N+](=O)[O-])cc1)C3	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)CN(C(=O)c2nc(-c3ccc(C(F)(F)F)cc3)[nH]c2c1	CC1(C)CN(C(=O)c2nc(-c3ccc(C(F)(F)F)cc3)[nH]c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(C)CCc1c(CS(=O)(=O)C2=C(C(=O)O)N3C(=O)C(NC(=O)C(=NO)c4csc(N)n4)C3CO2)c(CO)c2n1CCCCC2	CCC(C)CCc1c(CS(=O)(=O)C2=C(C(=O)O)N3C(=O)C(NC(=O)C(=NO)c4csc(N)n4)C3CO2)c(CO)c2n1CCCCC2	TRUE	TRUE	TRUE
CN1Cc2nc(C(=O)NCC3nc(O)c4c5c(sc4n3)CCOC5)cn2C(Cc2cccc2)C1	CN1Cc2nc(C(=O)NCC3nc(O)c4c5c(sc4n3)CCOC5)cn2C(Cc2cccc2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
NS(=O)(=O)c1sc2cccc2c1C(=O)c1ccc(Cl)cc1	NS(=O)(=O)c1sc2cccc2c1C(=O)c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C)c(OC2cc(C)nc3ncc([N+](=O)[O-])cc23)c1	Cc1ccc(C)c(OC2cc(C)nc3ncc([N+](=O)[O-])cc23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(NC(=O)NC(CC(=O)NCCF)(C(N)=O)C(=O)NC(CC(=O)O)C(=O)O	CC(C)C(NC(=O)NC(CC(=O)NCCF)(C(N)=O)C(=O)NC(CC(=O)O)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1ccc(-c2c[nH]c(-c3ccc(-c4ncccn4)nc3)n2)cc1	Clc1ccc(-c2c[nH]c(-c3ccc(-c4ncccn4)nc3)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CNc1ccc([N+](=O)[O-])cc1Oc1cccc1	CNc1ccc([N+](=O)[O-])cc1Oc1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1c(Cc2cccc2)n[nH]c1Sc1cccc1	Oc1c(Cc2cccc2)n[nH]c1Sc1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
C#CC=CCCCCCCCCCC=CCCCCCCCCCC=CC(O)C#CCO	C#CC=CCCCCCCCCCC=CCCCCCCCCCC=CC(O)C#CCO	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(NC(=O)CCC(=O)N(Cc2ccco2)C(C(=O)NC2CCCC2)c2cccc2)c1	Cc1cccc(NC(=O)CCC(=O)N(Cc2ccco2)C(C(=O)NC2CCCC2)c2cccc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(cc1OC)C(c1ccc(Cl)cc1)c1ccc3c(cc1N2C)OCO3	COc1cc2c(cc1OC)C(c1ccc3c(cc1C2c1ccc(Cl)cc1)OCO3	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(S(=O)(=O)N(Cc2ccc(-c3cccc3C(=O)O)cc2)c2c(C)cc(C)cc2C(=O)NO)cc1	COc1ccc(S(=O)(=O)N(Cc2ccc(-c3cccc3C(=O)O)cc2)c2c(C)cc(C)cc2C(=O)NO)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(C(=O)NCC2nnc3ccc(-c4cccc(C#N)c4)nn23)cc2cccc12	Cc1nc(C(=O)NCC2nnc3ccc(-c4cccc(C#N)c4)nn23)cc2cccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CNCCCN(C)Cc1cn(CC(O))(Cn2cncn2)c2ccc(F)cc2F)nn1	CNCCCN(C)Cc1cn(CC(O))(Cn2cncn2)c2ccc(F)cc2F)nn1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1cnc2nc(NCc3ccnc3)oc2c1	N#Cc1cnc2nc(NCc3ccnc3)oc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+](=[O-])c1ccc(-c2nnc(Nc3ccc(Br)cc3)o2)c(O)c1	O=[N+](=[O-])c1ccc(-c2nnc(Nc3ccc(Br)cc3)o2)c(O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CSc1nc(Nc2ccc(F)cc2)c2cnn(C)c2n1	CSc1nc(Nc2ccc(F)cc2)c2cnn(C)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=C(CCN(C)CCCNc2cnc3cc(C)ccc23)C(C)(C)CCC1	CC1=C(CCN(C)CCCNc2cnc3cc(C)ccc23)C(C)(C)CCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC=CCC=CCC=CCCC(=O)OC(COC(=O)CCCCCN(C(=O)CCCC=CCCCCCCC)COC1OC(CO)C(O)C(O)C1O	CCCCC=CCC=CCC=CCCC(=O)OC(COC(=O)CCCCCN(C(=O)CCCC=CCCCCCCC)COC1OC(CO)C(O)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccsc1C1CC12CCN(C(=O)c1ccc(-n3cccc3)nc1C)C2	Cc1ccsc1C1CC12CCN(C(=O)c1ccc(-n3cccc3)nc1C)C2	TRUE	TRUE	TRUE
BrC1=Cc2ccc(Br)cc2NC(c2cccc2)N1	BrC1=Cc2ccc(Br)cc2NC(c2cccc2)N1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)NS(=O)(=O)c1ccc(C)cn1Oc1ccc(C(=O)OC)cc1C(C(=O)O	CC(C)NS(=O)(=O)c1ccc(C)cn1Oc1ccc(C(=O)OC)cc1C(C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc1C(=O)c1ccc2c(c1)c(O)nc1ccc(C(=O)O)c(O)c12	COc1cccc1C(=O)c1ccc2c(c1)c(O)nc1ccc(C(=O)O)c(O)c12	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(CC2(CN=c3[nH]n4ccc(-c5cncnc5)nc4c3-c3cccc3)CC2)cc1	c1ccc(CC2(CN=c3[nH]n4ccc(-c5cncnc5)nc4c3-c3cccc3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1ccc(C)c(NC(=O)C2CC(=O)N(c3ccc(OC)cc3)C2)c1	COC(=O)c1ccc(C)c(NC(=O)C2CC(=O)N(c3ccc(OC)cc3)C2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(c1cccc1F)N1CCN(C(=O)c2ccc3c(c2)OCCO3)CC1	CC(c1cccc1F)N1CCN(C(=O)c2ccc3c(c2)OCCO3)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cc1cccs1)N=Nc1ccc(Cl)cc1C(F)(F)F	O=C(Cc1cccs1)N=Nc1ccc(Cl)cc1C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)CC(=O)C2=C(C1)N(C1CCCC1)C(=O)C2(NC(=O)c1cccc1Cl)(C(F)(F)F	CC1(C)CC(=O)C2=C(C1)N(C1CCCC1)C(=O)C2(NC(=O)c1cccc1Cl)(C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(Cn2cc(C(=O)c3ccc(Cl)cc3)c(=O)c3cc4c(cc32)OCO4)cc1	CCOc1ccc(Cn2cc(C(=O)c3ccc(Cl)cc3)c(=O)c3cc4c(cc32)OCO4)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC1CN2CCC1CC2(C)Oc1cc(CCc2cccc2)nc2ccc(OC)cc12	CCC1CN2CCC1CC2(C)Oc1cc(CCc2cccc2)nc2ccc(OC)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1nc2c(OCc3cccc3F)cccn2c1N(C)C(=O)C(C)C	CCc1nc2c(OCc3cccc3F)cccn2c1N(C)C(=O)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NC(=O)CN2C(=O)C(c3nc4cccc4[nH]3)C(=O)N(c3ccc(OC(F)(F)F)cc3)c3cccc32)cc1	COc1ccc(NC(=O)CN2C(=O)C(c3nc4cccc4[nH]3)C(=O)N(c3ccc(OC(F)(F)F)cc3)c3cccc32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
N#Cc1cccc(CNCCOc2ccc3nc(N)nc(N)c3c2)c1	N#Cc1cccc(CNCCOc2ccc3nc(N)nc(N)c3c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CNC(=O)c1cnc2c(ccc3cccc32)n1	CNC(=O)c1cnc2c(ccc3cccc32)n1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc(C[n+ ]2cccn2)cc1	c1ccc(C[n+ ]2cccn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(Cc1ccc(O)cc1)C(=O)N1CCN(CCCOc2ccc(C(=O)C3CC3)cc2)CC1	NC(Cc1ccc(O)cc1)C(=O)N1CCN(CCCOc2ccc(C(=O)C3CC3)cc2)CC1	TRUE	TRUE	FALSE
OCC1CCCCN1Cc1cccc1	OCC1CCCCN1Cc1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)[Si](C(=O)C(CCCCN)NC(=O)OCc1cccc1)(c1cccc1)c1cccc1	CC(C)(C)[Si](C(=O)C(CCCCN)NC(=O)OCc1cccc1)(c1cccc1)c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1c(SCC(=O)NC2CCCC2)nn1C(C)C	CCn1c(SCC(=O)NC2CCCC2)nn1C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(F)c1Cn1cc(C)c2ccc(C(=O)Nc3cc(C4CCNC4)on3)cc21	Cc1cccc(F)c1Cn1cc(C)c2ccc(C(=O)Nc3cc(C4CCNC4)on3)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Cl)cc1C(=O)Nc1ccc(S(=O)(=O)Nc2nccn2)cc1	COc1ccc(Cl)cc1C(=O)Nc1ccc(S(=O)(=O)Nc2nccn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccc3c(c2)C(=O)N(C(C)CO)CC(C)C(CN(C)Cc2ccc(C(=O)Nc4cccc4N)cc2)O3)cc1	Cc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccc3c(c2)C(=O)N(C(C)CO)CC(C)C(CN(C)Cc2ccc(C(=O)Nc4cccc4N)cc2)O3)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCC1C2CCC(C)(O2)C(Oc(C)=O)C2(C)C(=O)OC(C34CC5OC5(Cc32)C(=O)O4)C1OC(C)=O	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCC1C2CCC(C)(O2)C(Oc(C)=O)C2(C)C(=O)OC(C1OC(C)=O)C13CC4OC4(CC12)C(=O)O3	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(-c2ccc(N3CCOCC3)cc2C)c1	COc1cccc(-c2ccc(N3CCOCC3)cc2C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)Cn1c(=O)oc2ccc(-c3ccc(CC(C#N)NC(=O)C4NC5CCCC45)cc3)cc21	CC(C)Cn1c(=O)oc2ccc(-c3ccc(CC(C#N)NC(=O)C4NC5CCCC45)cc3)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)NCC2CC(c3cccc3F)=NO2)cc1	Cc1ccc(C(=O)NCC2CC(c3cccc3F)=NO2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(Cc1cc(F)cc(F)c1)c1csc(Nc2ccc(C(=O)NCCc3ccccc3)cn2)n1	NC(Cc1cc(F)cc(F)c1)c1csc(Nc2ccc(C(=O)NCCc3ccccc3)cn2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CO)cc1-c1ccc(C=NO)o1	COc1ccc(CO)cc1-c1ccc(C=NO)o1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(N2C(=O)CSC23C(=O)Nc2ccc(S(=O)(=O)N(C)Cc4cccc4)cc23)c(C)c1	Cc1ccc(N2C(=O)CSC23C(=O)Nc2ccc(S(=O)(=O)N(C)Cc4cccc4)cc23)c(C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(O)=NCCN=c1cccc(OC)c1OC(c1ccc(F)cc1)c1ccc(F)cc1F	CC(O)=NCCN=C(C)O)c1OC(c1ccc(F)cc1)c1ccc(F)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C1CC2CCC(C1c1ccc(OC3ccc(F)cc3F)cc1)N2C	COC(=O)C1CC2CCC(C1c1ccc(OC3ccc(F)cc3F)cc1)N2C	TRUE	TRUE	TRUE
COCCCN1CCN(c2cc3c(cc2F)c(=O)c(C(=O)O)cn3C2CC2)CC1c1cccc1	COCCCN1CCN(c2cc3c(cc2F)c(=O)c(C(=O)O)cn3C2CC2)CC1c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1ccc(NC(=O)CSc2nc(-c3ccc4c(c3)OCO4)cc(C(F)(F)F)n2)cc1	COC(=O)c1ccc(NC(=O)CSc2nc(-c3ccc4c(c3)OCO4)cc(C(F)(F)F)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=Cc1c[nH]c2c1-c1sc(Br)cc1C(c1cccc1)O2	O=Cc1c[nH]c2c1-c1sc(Br)cc1C(c1cccc1)O2	TRUE	TRUE	TRUE
c1cc2nc(-c3ccc4cn[nH]c4c3)[nH]c2cc1OCCCN1CCOCC1	c1cc2nc(-c3ccc4cn[nH]c4c3)[nH]c2cc1OCCCN1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ccc(NC(=O)CCc2ccc(Nc3nc4cc5n(c(=O)c4cc(N)n3)CCCNCCN(CCCc3ccnc3)CCN)cc2)cc1	Nc1ccc(NC(=O)CCc2ccc(Nc3nc4cc5n(c(=O)c4cc(N)n3)CCCNCCN(CCCc3ccnc3)CCN)cc2)cc1	FALSE	TRUE	TRUE
O=C(NC1c2cc(Cl)ccc2OCC1O)C1CCC(N2CCC3(CC2)C(=O)NcN3c2cccc2)CC1	O=C(NC1c2cc(Cl)ccc2OCC1O)C1CCC(N2CCC3(CC2)C(=O)NcN3c2cccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1cccc(CNS(=O)(=O)c2cccc(-c3ccc(N)nn3)c2)c1	CN(C)c1cccc(CNS(=O)(=O)c2cccc(-c3ccc(N)nn3)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Sc1nccn1-c1cccn1	Sc1nccn1-c1cccn1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2n[nH]c3ccc(-c4ccc5c(c4)CCCSN(C)C(=O)c4c(F)cccc4F)cc23)cc1	Cc1ccc(-c2n[nH]c3ccc(-c4ccc5c(c4)CCCSN(C)C(=O)c4c(F)cccc4F)cc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)CC(=O)Nc2ccc(Br)cn2)cc1	Cc1ccc(S(=O)(=O)CC(=O)Nc2ccc(Br)cn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CNCCNc1ccc(-c2cccc2)cc1	CNCCNc1ccc(-c2cccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
N=C(N)Nc1nc(-c2cccc2)c2ccc3ccccc3c2n1	N=C(N)Nc1nc(-c2cccc2)c2ccc3ccccc3c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(N2CCN(C(CNS(=O)(=O)c3ccc(C)cc3)c3ccco3)CC2)cc1	COc1ccc(N2CCN(C(CNS(=O)(=O)c3ccc(C)cc3)c3ccco3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(N(CCc2ccc(Cl)cc2)C(=O)c2snc(-c3cccc3Cl)c2N)cc1	Cc1ccc(N(CCc2ccc(Cl)cc2)C(=O)c2snc(-c3cccc3Cl)c2N)cc1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
<chem>CCC(C(=O)N1CCCC1)n1nc(C)c2sc3ccccc3c2c1=O</chem>	<chem>CCC(C(=O)N1CCCC1)n1nc(C)c2sc3ccccc3c2c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCc1nc(SC)c2nnn(Cc3ccc(-c4ccccc4-c4nn[nH]n4)cc3)c2n1</chem>	<chem>CCCCc1nc(SC)c2nnn(Cc3ccc(-c4ccccc4-c4nn[nH]n4)cc3)c2n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc2c3c(n(CCCN4CCCC(C)C4)c(=O)c2cc1OC)-c1cc2c(cc1C3=O)OCO2</chem>	<chem>COc1cc2c3c(n(CCCN4CCCC(C)C4)c(=O)c2cc1OC)-c1cc2c(cc1C3=O)OCO2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>c1ccc(C2C3=C(OCC23c2ccc(-c3ccccc3)cc2)c2ccccc2OCCCSc2cccn2)cc1</chem>	<chem>c1ccc(-c2ccc(C34COc(C5ccccc5OCCCCSc5cccn5)=C3C4c3ccccc3)cc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1sc2nc(CN=[N+]=[N-])n(Cc3ccccc3)c(=O)c2c1C</chem>	<chem>Cc1sc2nc(CN=[N+]=[N-])n(Cc3ccccc3)c(=O)c2c1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1c(C(=O)=Nc2c(C)n(C)n(C3CCCC3)c2=O)noc1C1C2CC21</chem>	<chem>Cc1c(C(=O)=Nc2c(C)n(C)n(C3CCCC3)c2=O)noc1C1C2CC21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccc(-c2nc(-c3ccc4c(c3)CCN4C(=O)NS(C)(=O)=O)cs2)s1</chem>	<chem>Cc1ccc(-c2nc(-c3ccc4c(c3)CCN4C(=O)NS(C)(=O)=O)cs2)s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCn1cc2c(n1)C(COCC1CC1)OCC21CCN(C(=O)C(N)Cc2ccccc2)CC1</chem>	<chem>CCn1cc2c(n1)C(COCC1CC1)OCC21CCN(C(=O)C(N)Cc2ccccc2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCNC(=O)c1cc2c(=O)[nH]c3ccc(C)cc3c2s1</chem>	<chem>CCCCNC(=O)c1cc2c(=O)[nH]c3ccc(C)cc3c2s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cccc(-c2nc3n[nH]c(N)c3cc2-c2ccc3c4cccc4ccc3c2)c1</chem>	<chem>COc1cccc(-c2nc3n[nH]c(N)c3cc2-c2ccc3c(ccc4ccccc43)c2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC1(Br)CCC(Br)C(C)(C)C1=O</chem>	<chem>CC1(Br)CCC(Br)C(C)(C)C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)Cn1c(F)c2ccc(C(=O)NCc3ccc(F)cc3)cc2c1=O</chem>		FALSE	TRUE	TRUE
<chem>CN=C(S)Nc1ccc(N(C(=O)Nc2cccn2)CC2CCCO2)cc1</chem>	<chem>CN=C(S)Nc1ccc(N(CC2CCO2)C(=O)Nc2cccn2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C[N+](C)(CG#CCOC(C)(C)C)CC(=O)N1c2ccccc2C=Cc2ccccc21</chem>	<chem>CC(C)(C)OCG#CC[N+](C)(C)CC(=O)N1c2ccccc2C=Cc2ccccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C[S+](([O-]))c1nc(C(=O)=Nc2ccc3c(c2)C2(CCS(C=O)N)N2)c2cc(-c4ccnc(F)c4)nc(F)c2O3)cs1</chem>	<chem>C[S+](([O-]))c1nc(C(=O)=Nc2ccc3c(c2)C2(CCS(C=O)N)N2)c2cc(-c4ccnc(F)c4)nc(F)c2O3)cs1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc(-c2ccccc2C(F)(F)F)c(F)cc1-n1c(=O)ccc2cc(S(=O)(=O)Nc3cnco3)ccc21</chem>	<chem>COc1cc(-c2ccccc2C(F)(F)F)c(F)cc1-n1c(=O)ccc2cc(S(=O)(=O)Nc3cnco3)ccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Cc1ccccc1)NCCC(=O)N1CCN(Cc2ccccc2)CC1</chem>	<chem>O=C(Cc1ccccc1)NCCC(=O)N1CCN(Cc2ccccc2)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)C(Cc1c[nH]c2ccccc12)NCCNc1cc(-c2cccn2)nc2ccc(l)cc12</chem>	<chem>O=C(O)C(Cc1c[nH]c2ccccc12)NCCNc1cc(-c2cccn2)nc2ccc(l)cc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1cc(C=C2SC(=Nc3ccc(N4CCOCC4)cc3)N(c3cccc(C(F)(F)F)c3)C2=O)c2ccccc21</chem>	<chem>Cn1cc(C=C2SC(=Nc3ccc(N4CCOCC4)cc3)N(c3cccc(C(F)(F)F)c3)C2=O)c2ccccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(NCc1ccccc1Cl)n1sc2ccccc2c1=O</chem>	<chem>O=C(NCc1ccccc1Cl)n1sc2ccccc2c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)OC(=O)N1CC=C(C(c2[nH]c3nccc4c3c2CN(C(=O)Nc2cccn2)c2ccc(F)cc2-4)CC1</chem>	<chem>CC(C)(C)OC(=O)N1CC=C(C(c2[nH]c3nccc4c3c2CN(C(=O)Nc2cccn2)c2ccc(F)cc2-4)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(Cc1ccc(Cl)c(Cl)c1)N1CC2CN(CCC(Cc3ccc(O)cc3)C2)CC1C1CCCCC1</chem>	<chem>O=C(Cc1ccc(Cl)c(Cl)c1)N1CC2CC(Cc3ccc(O)cc3)CCN(C2)CC1C1CCCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(C=Cc1ccccc1Br)N1CCOCC1</chem>	<chem>O=C(C=Cc1ccccc1Br)N1CCOCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCS(=O)(=O)Nc1ccc(Cl)c(CN2CCC(Cc3ccc(Br)cc3)CC2)c1F</chem>	<chem>CCCS(=O)(=O)Nc1ccc(Cl)c(CN2CCC(Cc3ccc(Br)cc3)CC2)c1F</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(C)CCNc1nc(-c2ccc(NC=O)cc2)nc2ccccc12</chem>	<chem>CN(C)CCNc1nc(-c2ccc(NC=O)cc2)nc2ccccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1ncc(CNC2CCN(C3CC3)C2)c1Cl</chem>	<chem>Cn1ncc(CNC2CCN(C3CC3)C2)c1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(CSc1nncc(Nc2ccccc2)s1)NC1CCS(=O)(=O)C1</chem>	<chem>O=C(CSc1nncc(Nc2ccccc2)s1)NC1CCS(=O)(=O)C1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>Nc1ccn(C2OC(CO)C(N)C2O)c(=O)n1</chem>	<chem>Nc1ccn(C2OC(CO)C(N)C2O)c(=O)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=[N+](([O-]))c1ccc(CNc2nc(-c3cccn3)nc3ccsc23)cc1</chem>	<chem>O=[N+](([O-]))c1ccc(CNc2nc(-c3cccn3)nc3ccsc23)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)Cn1cc(C=C2Oc3cc(F)ccc3C2=O)c2cc(OCc3ccc4ccccc4n3)ccc21</chem>	<chem>O=C(O)Cn1cc(C=C2Oc3cc(F)ccc3C2=O)c2cc(OCc3ccc4ccccc4n3)ccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C(=O)C(CC(=O)c2ccccc2)c2ccccc2)cc1</chem>	<chem>COc1ccc(C(=O)C(CC(=O)c2ccccc2)c2ccccc2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)CNc1nc(N)c2ncn(C(C)C)c2n1</chem>	<chem>CC(C)CNc1nc(N)c2ncn(C(C)C)c2n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC)c1c(C)c(O)c2c(c1O)C(=O)C1=C(O)C3(O)C(=O)C(C(N)=O)=C(O)C(N(C)C)C3CC1C2</chem>	<chem>CCN(CC)c1c(C)c(O)c2c(c1O)C(=O)C1=C(O)C3(O)C(=O)C(C(N)=O)=C(O)C(N(C)C)C3CC1C2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cn1cnc2cc(-c3ccc(N4CCOCC4)cc3)nc(N3CCOCC3)c2c1=O</chem>	<chem>Cn1cnc2cc(-c3ccc(N4CCOCC4)cc3)nc(N3CCOCC3)c2c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCOC(=O)CSc1nc(-c2cccc([N+](=O)[O-])c2)cc(C(F)(F)F)n1</chem>	<chem>CCCCOC(=O)CSc1nc(-c2cccc([N+](=O)[O-])c2)cc(C(F)(F)F)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC)C(=O)N1CCCC(Oc2ccccc2F)(C(=O)O)CC1</chem>	<chem>CCN(CC)C(=O)N1CCCC(Oc2ccccc2F)(C(=O)O)CC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(CC(O)=Nc2cc(Cc3nncc(O)c4c3CCCC4)ccc2F)nc1C</chem>	<chem>COc1ccc(CC(O)=Nc2cc(Cc3nncc(O)c4c3CCCC4)ccc2F)nc1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC1OC(Cn2ccnn2)C2OC(C)C)OC12</chem>	<chem>COC1OC(Cn2ccnn2)C2OC(C)C)OC12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCc1nc2c(C)cc(-c3nc4ccc(F)cc4n3C)cc2n1Cc1ccc(-c2ccccc2-c2nn[nH]n2)cc1</chem>	<chem>CCCc1nc2c(C)cc(-c3nc4ccc(F)cc4n3C)cc2n1Cc1ccc(-c2ccccc2-c2nn[nH]n2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1oc(S(=O)(=O)N2CCCC(Cc3ccccc(Cl)c3)CC2)nc1CS(=O)(=O)c1ccc(F)cc1</chem>	<chem>Cc1oc(S(=O)(=O)N2CCCC(Cc3ccccc(Cl)c3)CC2)nc1CS(=O)(=O)c1ccc(F)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(O)CC(C1CCCCC1)n1nc(-c2ccc(F)cc2)c(-c2ccc(Cl)cc2F)c(C(=O)NC2CCOCC2)c1=O</chem>	<chem>O=C(O)CC(C1CCCCC1)n1nc(-c2ccc(F)cc2)c(-c2ccc(Cl)cc2F)c(C(=O)NC2CCOCC2)c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>S=C=NCc1ccccc1</chem>	<chem>S=C=NCc1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>NS(=O)(=O)c1ccc(C(CC2CCCC2)C(=O)Nc2ncs2)cc1</chem>	<chem>NS(=O)(=O)c1ccc(C(CC2CCCC2)C(=O)Nc2ncs2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Fc1ccc2[nH]cc(CCN3CCN(c4ccc5ncsc5c4)CC3)c2c1</chem>	<chem>Fc1ccc2[nH]cc(CCN3CCN(c4ccc5ncsc5c4)CC3)c2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)c1nn(C(=O)c2ccccc2)cc1-c1ccc(Cl)cc1</chem>	<chem>CCOC(=O)c1nn(C(=O)c2ccccc2)cc1-c1ccc(Cl)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc(C2OCC3(C(=O)O)CCC(O)C3C2c2ccc(C)cc2)cc1OC</chem>	<chem>COc1ccc(C2OCC3(C(=O)O)CCC(O)C3C2c2ccc(C)cc2)cc1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>C=C1CCCC2Nc3cc(Cl)ccc3C12CCN(CCc1ccc(OC)cc1)CC1CCCCC1</chem>	<chem>C=C1CCCC2Nc3cc(Cl)ccc3C12CCN(CCc1ccc(OC)cc1)CC1CCCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCC12CC(C(F)(F)F)=CCC1=CCc1cc(Cl)ccc12</chem>	<chem>CCC12CC(C(F)(F)F)=CCC1=CCc1cc(Cl)ccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=[N+](([O-]))c1ccc2nc(-c3ccsc3)cc(-c3ccc(Cl)cc3)c2c1</chem>	<chem>O=[N+](([O-]))c1ccc2nc(-c3ccsc3)cc(-c3ccc(Cl)cc3)c2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCON=C(C(=O)NC1C(=O)N2C(C(=O)O)=C(CSc3nnnn3C)CSC12)c1csc(N)n1</chem>	<chem>CCON=C(C(=O)NC1C(=O)N2C(C(=O)O)=C(CSc3nnnn3C)CSC12)c1csc(N)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1Nc2ccccc2C1=NNc1nc(-c2cccs2)c(-c2ccco2)s1</chem>	<chem>O=C1Nc2ccccc2C1=NNc1nc(-c2cccs2)c(-c2ccco2)s1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)C(C#N)=Cc1cn(Cc2ccccc2)CC(N=[N+]=[N-])C1</chem>	<chem>CCOC(=O)C(C#N)=CC1=CN(Cc2ccccc2)CC(N=[N+]=[N-])C1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)C1=C(N)Oc2c(O)[nH]c(=[N+](([O-]))NC(C)=O)nc2C1c1c[nH]c2ccccc12</chem>	<chem>CCOC(=O)C1=C(N)Oc2c(O)nc2c(nc(=[N+](([O-]))NC(C)=O)[nH]c2O)C1c1c[nH]c2ccccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(OC1cc(-n2cnc3ccc(C(=O)=NC4CCN(Cc5ccc(C(=O)O)cc5)CC4)cc32)sc1C(N)=O)c1ccccc1Cl</chem>	<chem>CC(OC1cc(-n2cnc3ccc(C(=O)=NC4CCN(Cc5ccc(C(=O)O)cc5)CC4)cc32)sc1C(N)=O)c1ccccc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(c1cccs1)n1cnc2c(nnn2Cc2ccc(Cl)cc2)c1=O</chem>	<chem>O=C(c1cccs1)n1cnc2c(nnn2Cc2ccc(Cl)cc2)c1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)C(C(=O)N1CC(C(N)=O)C1C(=O)N[N+](=O)[O-])c1cccc(-c2cccc(C(=O)O)c2)c1</chem>	<chem>CC(C)C(C(=O)N1CC(C(N)=O)C1C(=O)N[N+](=O)[O-])c1cccc(-c2cccc(C(=O)O)c2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(O)CC(NC(=O)C(CC(=O)O)NC(=O)C(Cc1ccc(OP(=O)(O)O)cc1)NC(=O)C(N)Cc1ccc(O)cc1)C(=O)N1CCCC1C(=O)O</chem>	<chem>CC(C)CC(NC(=O)C(CC(=O)O)NC(=O)C(Cc1ccc(OP(=O)(O)O)cc1)NC(=O)C(N)Cc1ccc(O)cc1)C(=O)N1CCCC1C(=O)O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCCCC=CCC1=C(OC)C(=O)C=C(OC)C1=O</chem>	<chem>CCCCC=CCC1=C(OC)C(=O)C=C(OC)C1=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC1=C(OC)C(C#N)(C#N)C(c2ccc(Cl)cc2)C2=C1C(=O)c1ccccc1C2=O</chem>	<chem>COC1=C(OC)C(C#N)(C#N)C(c2ccc(Cl)cc2)C2=C1C(=O)c1ccccc1C2=O</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>NC(=NOCc1ccc(Br)cc1F)c1ccccc1</chem>	<chem>NC(=NOCc1ccc(Br)cc1F)c1ccccc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=O)N1CCCc2cc(CN(C(=O)c3snc(C(N)=O)c3N)C(C)C)ccc21</chem>	<chem>CC(=O)N1CCCc2cc(CN(C(=O)c3snc(C(N)=O)c3N)C(C)C)ccc21</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCN(CC)CCNC(=O)C1=CC2c3ccccc3C1c1ccccc12</chem>	<chem>CCN(CC)CCNC(=O)C1=CC2c3ccccc3C1c1ccccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCOC(=O)c1[nH]c(C)C(C(=O)Nc2ccc(OC)c(S(N)(=O)=O)c2)c1C</chem>	<chem>CCOC(=O)c1[nH]c(C)C(C(=O)Nc2ccc(OC)c(S(N)(=O)=O)c2)c1C</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(C=Cc1cccs1)c1ccc(N2CCOCC2)cc1</chem>	<chem>O=C(C=Cc1cccs1)c1ccc(N2CCOCC2)cc1</chem>	TRUE	TRUE	FALSE
<chem>COc1ccc(C2CC(=O)C3=C(C2)Nc2ccccc2NC3c2ccccc2OC)cc1OC</chem>	<chem>COc1ccc(C2CC(=O)C3=C(C2)Nc2ccccc2NC3c2ccccc2OC)cc1OC</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1ccc2c(c1)C(=O)CC(CCN1CCN(c3cccc(C)c3C)CC1)C2</chem>	<chem>COc1ccc2c(c1)C(=O)CC(CCN1CCN(c3cccc(C)c3C)CC1)C2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN1CCN=C1c1ccc(C(=O)Nc2cc(C(=O)O)c(=O)n3ccsc23)cc1</chem>	<chem>CN1CCN=C1c1ccc(C(=O)Nc2cc(C(=O)O)c(=O)n3ccsc23)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CN(N)CCCC(=O)Nc1ccc(S(N)(=O)=O)cc1</chem>	<chem>CN(N)CCCC(=O)Nc1ccc(S(N)(=O)=O)cc1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cccc(C)c1Nc1nc2ccccc2nc1NS(=O)(=O)c1cc(Cl)ccc1Cl</chem>	<chem>Cc1cccc(C)c1Nc1nc2ccccc2nc1NS(=O)(=O)c1cc(Cl)ccc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CCc1nc(-c2ccc(F)cc2)c(-c2cnc(NC(=O)c3ccc(F)cc3)c2)n1Cc1ccc2ccc(CC(=O)O)cc2c1</chem>	<chem>CCc1nc(-c2ccc(F)cc2)c(-c2cnc(NC(=O)c3ccc(F)cc3)c2)n1Cc1ccc2ccc(CC(=O)O)cc2c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)C1=C(C)NC(=O)NC1c1cccc(OC)c1</chem>	<chem>COC(=O)C1=C(C)NC(=O)NC1c1cccc(OC)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nncc(C2CC3CN(C(=O)c4csen4)CC3O2)o1</chem>	<chem>Cc1nncc(C2CC3CN(C(=O)c4csen4)CC3O2)o1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COCcCn1ccc(Nc2ncc3c(C)nn(CC4CC4)c3n2)n1</chem>	<chem>COCcCn1ccc(Nc2ncc3c(C)nn(CC4CC4)c3n2)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COC(=O)C1=C(C)N=C(C)C(=C(C)OC)C1c1cccc(OCc2cn(Cc3cn(Cc4ccccc4)nn3)nn2)c1</chem>	<chem>COC(=O)C1=C(C)N=C(C)C(=C(C)OC)C1c1cccc(OCc2cn(Cc3cn(Cc4ccccc4)nn3)nn2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(=NN1C(=O)C2Cc3c([nH]c4ccccc34)C(c3ccccc3[N+](=O)[O-])N2C1=O)c1ccccc2ccccc12</chem>	<chem>CC(=NN1C(=O)C2Cc3c([nH]c4ccccc34)C(c3ccccc3[N+](=O)[O-])N2C1=O)c1ccccc2ccccc12</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>CC(C)(C)NC(=O)COC(=O)c1cn2c(n1)CCCC2</chem>	<chem>CC(C)(C)NC(=O)COC(=O)c1cn2c(n1)CCCC2</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>COc1cc2c(Nc3c(F)ccc(O)c3C)c(C#N)cnc2cc1OCC1CNCCO1</chem>	<chem>COc1cc2c(Nc3c(F)ccc(O)c3C)c(C#N)cnc2cc1OCC1CNCCO1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(COc1ccc(Cl)cc1)Nc1cc(Cl)ccc1C(=O)c1ccccc1Cl</chem>	<chem>O=C(COc1ccc(Cl)cc1)Nc1cc(Cl)ccc1C(=O)c1ccccc1Cl</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C(c1cnn2c(C(F)(F)F)cc(-c3ccccc3)nc12)N1CCCCC1</chem>	<chem>O=C(c1cnn2c(C(F)(F)F)cc(-c3ccccc3)nc12)N1CCCCC1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>O=C1OC(CNS(=O)(=O)c2ccc(F)c(F)c2)CN1c1ccc(N2CC3(COC3)C2)c(F)c1</chem>	<chem>O=C1OC(CNS(=O)(=O)c2ccc(F)c(F)c2)CN1c1ccc(N2CC3(COC3)C2)c(F)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1ccnc(NC(=O)c2cc(-c3ccc(F)cc3F)n[nH]2)c1</chem>	<chem>Cc1ccnc(NC(=O)c2cc(-c3ccc(F)cc3F)n[nH]2)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1nncc(-c2ccc(F)cc2)n1N=Cc1cccc(Br)c1</chem>	<chem>Cc1nncc(-c2ccc(F)cc2)n1N=Cc1cccc(Br)c1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE
<chem>Cc1cc(C2CC2c2ccs2)nc(N)n1</chem>	<chem>Cc1cc(C2CC2c2ccs2)nc(N)n1</chem>	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CC(C)c1ccc2c(c1)c1oc(Nc3ccc(F)cc3F)nc1c1nn(CCN3CCOCC3)c12	CC(C)c1ccc2c(c1)c1oc(Nc3ccc(F)cc3F)nc1c1nn(CCN3CCOCC3)c21	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)S(=O)(=O)N1CCC(OCc2cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c2)CC1	CN(C)S(=O)(=O)N1CCC(OCc2cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(-n2nc3ccccc3n2)c2cccc(S(C)(=O)=O)c2n1	Cc1cc(-n2nc3ccccc3n2)c2cccc(S(C)(=O)=O)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)N)Cc2cc(C(C)C)no2)cn1	Cc1ccc(C(=O)N)Cc2cc(C(C)C)no2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1cccc(SC(F)(F)F)c1)Nc1cccc(-c2cnnc(CCc3cncnc3)c2)c1	O=C(Nc1cccc(SC(F)(F)F)c1)Nc1cccc(-c2cnnc(CCc3cncnc3)c2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1ccc(-c2cc(-c3cccc(O)c3)nc(-c3cccc(Cl)c3)c2)cc1	Oc1ccc(-c2cc(-c3cccc(O)c3)nc(-c3cccc(Cl)c3)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1cc(C=NNC(=O)c2ccnc2)cc([N+](=O)[O-])c1O	CCOc1cc(C=NNC(=O)c2ccnc2)cc([N+](=O)[O-])c1O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1OCCN1C(=O)c1ccc(Cl)cc1	O=C1OCCN1C(=O)c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCc1nc(CCC)c(C(=O)C(N)=O)n1Cc1ccc(-c2cccc2S(=O)(=O)NC(=O)NCC2CC2)cc1	CCCCc1nc(CCC)n(Cc2ccc(-c3cccc3S(=O)(=O)NC(=O)NCC3CC3)cc2)c1C(=O)C(N)=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=C2S(C(=O)NC2=O)ccc1OCC(=O)Nc1ccc(Br)cc1	COc1cc(C=C2S(C(=O)NC2=O)ccc1OCC(=O)Nc1ccc(Br)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(Cc1ccc(OCCN2c3ccccc3CC2C)cc1)C(=O)O	CCOC(Cc1ccc(OCCN2c3ccccc3CC2C)cc1)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
NS(=O)(=O)c1ccc(-c2n[nH]c(Cc3ccc(C(c4c[nH]c5ccccc45)c4c[nH]c5ccccc45)cc3)n2)cn1	NS(=O)(=O)c1ccc(-c2n[nH]c(Cc3ccc(C(c4c[nH]c5ccccc45)c4c[nH]c5ccccc45)cc3)n2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(OC)cc(-c2nc(-c3ccccc3)c[nH]2)c1	COc1cc(OC)cc(-c2nc(-c3ccccc3)c[nH]2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1c(Br)cc(Br)cc1-c1nc2c(cc(Cc3cncnc3)n2CCCOc2ccc(Cl)cc2)cc1C#N	COc1c(Br)cc(Br)cc1-c1nc2c(cc1C#N)cc(Cc1cncnc1)n2CCCOc1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1ccc(C=NNC(=O)CSc2nc3ccccc3[nH]2)o1	CN(C)c1ccc(C=NNC(=O)CSc2nc3ccccc3[nH]2)o1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C2=Nn3c(nnc3-c3[nH]nc(-c4ccc(C(C)C)cc4)c3-c3ccc(Cl)cc3)SC2)cc1	Cc1ccc(C2=Nn3c(nnc3-c3[nH]nc(-c4ccc(C(C)C)cc4)c3-c3ccc(Cl)cc3)SC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1c(C)n(C)c2nc3c(c(N)c2c1=O)CN(C(C)=O)CC3	CCOC(=O)c1c(C)n(C)c2nc3c(c(N)c2c1=O)CN(C(C)=O)CC3	TRUE	TRUE	TRUE
COCCOC(=O)C1=C(C)N=C2sc(=Cc3cnc(N4CCOCC4)o3)c(=O)n2C1c1cccc1C(F)(F)F	COCCOC(=O)C1=C(C)N=C2sc(=Cc3cnc(N4CCOCC4)o3)c(=O)n2C1c1cccc1C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(Cl)c2oc(-c3ccc(-c4ccc(CN5CCCC5)cc4)s3)nc2c1	Cc1cc(Cl)c2oc(-c3ccc(-c4ccc(CN5CCCC5)cc4)s3)nc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
COCC1N(c2cccc(-c3cccc(C)c3O)Cc3ccc4c(c3)CCN(C3COCC3)CC4)n2)CC2CC21C(=O)O	COCC1N(c2cccc(-c3cccc(C)c3O)Cc3O)Cc3ccc4c(c3)CCN(C3COCC3)CC4)n2)CC2CC21C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1cc(F)cc2c1OC1(CCN(C(=O)C3CCOC3)CC1)C2	NC(=O)c1cc(F)cc2c1OC1(CCN(C(=O)C3CCOC3)CC1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2nccc(CCC34CCC(NCc5ccc6c(n5)NC(=O)CO6)(CC3)CO4)c2n1	COc1ccc2nccc(CCC34CCC(NCc5ccc6c(n5)NC(=O)CO6)(CC3)CO4)c2n1	TRUE	TRUE	FALSE
CCn1cc(C(=O)N)Cc2ccccc2C1)c(=O)c2cc(S(=O)(=O)N3CCCCC3)ccc21	CCn1cc(C(=O)N)Cc2ccccc2C1)c(=O)c2cc(S(=O)(=O)N3CCCCC3)ccc21	TRUE	TRUE	FALSE
CS(=O)(=O)Cc1ccc(Nc2nccc(N3CCC(Cc4cccc(F)c4)CC3)n2)cn1	CS(=O)(=O)Cc1ccc(Nc2nccc(N3CCC(Cc4cccc(F)c4)CC3)n2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Nc2nc(-c3nc(C)cs3)cs2)c(OC)c1	COc1ccc(Nc2nc(-c3nc(C)cs3)cs2)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1=C=CC2=C(C(=O)CC(C3ccc(Cl)cc3)C2)C1c1ccc(Cl)cc1	CN1=C=CC2=C(C(=O)CC(C3ccc(Cl)cc3)C2)C1c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C)c(Nc2nnc(-c3ccc(C(=O)NCCN4CCOCC4)cc3)c3ccccc23)c1	Cc1ccc(C)c(Nc2nnc(-c3ccc(C(=O)NCCN4CCOCC4)cc3)c3ccccc23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)SCC1=C(C(=O)O)N2C(=O)C(NC(=O)Cc3cccs3)C2SC1	CC(C)(C)SCC1=C(C(=O)O)N2C(=O)C(NC(=O)Cc3cccs3)C2SC1	TRUE	TRUE	TRUE
#CCN(Cc1ccc2nc(C)nc(O)c2c1)c1ccc(C(=O)N)C(CCC(=O)N)C(CCC(=O)O)C(=O)O)C(=O)O)cc1	#CCN(Cc1ccc2nc(C)nc(O)c2c1)c1ccc(C(=O)N)C(CCC(=O)N)C(CCC(=O)O)C(=O)O)C(=O)O)cc1	TRUE	FALSE	FALSE
CCCS(=O)(=O)Nc1ccc(F)c(C(=O)N)Cc2cnc3[nH]cc(C)c3c2)c1F	CCCS(=O)(=O)Nc1ccc(F)c(C(=O)N)Cc2cnc3[nH]cc(C)c3c2)c1F	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)O)c1cccc(Nc2nccc(Nc3cc(C4CC4)[nH]n3)n2)c1	CC(C)O)c1cccc(Nc2nccc(Nc3cc(C4CC4)[nH]n3)n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2n[nH]c(=S)n2N=Cc2oc3cccc(Br)c23)cc1	COc1ccc(-c2n[nH]c(=S)n2N=Cc2oc3cccc(Br)c23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C(C)NP(=O)(OCC1OC(n2cc(F)c(=O)[nH]c2=O)CC1N=[N+]=[N-])O)c1ccc(Cl)cc1	CCOC(=O)C(C)NP(=O)(OCC1OC(n2cc(F)c(=O)[nH]c2=O)CC1N=[N+]=[N-])O)c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCn1cc2c(C)nc(O)nc2n1	CCn1cc2c(C)nc(O)nc2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(C(=O)Nc2cc(C(N)=O)ccc2C)cc1	CCOc1ccc(C(=O)Nc2cc(C(N)=O)ccc2C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(Nc2ncc(Br)c(Nc3cc(C4CC4)n[nH]3)n2)cc1	Cc1ccc(Nc2ncc(Br)c(Nc3cc(C4CC4)n[nH]3)n2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(-c2ccccc2CN2C(=O)N(Cc3cccc(C(=O)N(C)Cc4cccc4)c3)C(Cc3ccccc3)C(O)C(O)C2Cc2ccccc2)cc1	Cc1ccc(-c2ccccc2CN2C(=O)N(Cc3cccc(C(=O)N(C)Cc4cccc4)c3)C(Cc3ccccc3)C(O)C(O)C2Cc2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=CC(=O)CO)C(C)C)n2nnc3ccccc3c2=O)cc(OC)c1OC	COc1cc(C=CC(=O)CO)C(C)C)n2nnc3ccccc3c2=O)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(-c2cnc(Sc3ccc(C#N)c([N+](=O)[O-])c3)n2C)cc1	CCOc1ccc(-c2cnc(Sc3ccc(C#N)c([N+](=O)[O-])c3)n2C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc(C=CC(=O)NS(=O)(=O)c2ccccc2Cl)c2c(OC3ccc4cccc4c3)ccccc21	Cn1cc(C=CC(=O)NS(=O)(=O)c2ccccc2Cl)c2c(OC3ccc4cccc4c3)ccccc21	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)Oc1c(C(=O)N)C(C)c2ccc(C(=O)O)nc2)cccc1-c1ccccc1	CC(C)Oc1c(C(=O)N)C(C)c2ccc(C(=O)O)nc2)cccc1-c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1ccc(C(=O)N)Cc2c(C(=O)c3cccc(Cl)c3Cl)sc3ccccc23)c1	O=C(O)c1ccc(C(=O)N)Cc2c(C(=O)c3cccc(Cl)c3Cl)sc3ccccc23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCCCN1CCN(c2cccn2)CC1)c1cccc(S(=O)(=O)N)Cc2ccccc3ccccc23)c1	O=C(NCCCN1CCN(c2cccn2)CC1)c1cccc(S(=O)(=O)N)Cc2ccccc3ccccc23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc([N+](=O)[O-])ccc1Nc1ncnc2ccccc12	COc1cc([N+](=O)[O-])ccc1Nc1ncnc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)Oc1ccc(CNC(=O)c2[nH]nc3ccccc23)cc1	CC(C)Oc1ccc(CNC(=O)c2[nH]nc3ccccc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1c2cc(Br)ccc2[nH]c2nc3ncnc(N4CCCC4)c3nc12	O=c1c2cc(Br)ccc2[nH]c2nc3ncnc(N4CCCC4)c3nc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCN(C(=O)CSc1nc(-c2cccc(OC)c2)c(-c2ccccc2)[nH]1)c1c(N)n(Cc2ccccc2)c(=O)[nH]c1=O	CCN(C(=O)CSc1nc(-c2cccc(OC)c2)c(-c2ccccc2)[nH]1)c1c(N)n(Cc2ccccc2)c(=O)[nH]c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc2c(c1)nnn2C1CCC(SC2=NCCN2)CC1	c1ccc2c(c1)nnn2C1CCC(SC2=NCCN2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCCN1nc(-c2nc(-c3ccccc3)no2)c2ccccc2c1=O	CN(C)CCCN1nc(-c2nc(-c3ccccc3)no2)c2ccccc2c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(Nc2ncnc3ccc(-c4ccnc4C)cc23)nc1	Cc1ccc(Nc2ncnc3ccc(-c4ccnc4C)cc23)nc1	TRUE	TRUE	TRUE
S=C(NCc1ccccc1)NN=Cc1ccncc1	S=C(NCc1ccccc1)NN=Cc1ccncc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CNC(=O)CS(=O)(=O)Cc2ccc(Cl)cc2)cc1	COc1ccc(CNC(=O)CS(=O)(=O)Cc2ccc(Cl)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCc1nc2c(C)cc(C(=O)N(C)C)cc2n1Cc1ccc(-c2ccccc2S(=O)(=O)NC(=O)C2CCC2)cc1	CCCc1nc2c(C)cc(C(=O)N(C)C)cc2n1Cc1ccc(-c2ccccc2S(=O)(=O)NC(=O)C2CCC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1ccc(-c2ccc(-c3cc4cc(Cc5ccccc5)ccc4o3)cc2)c(COc2ccccc3cncccc23)c1	O=C(O)c1ccc(-c2ccc(-c3cc4cc(Cc5ccccc5)ccc4o3)cc2)c(COc2ccccc3cncccc23)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(F)cc(C(=O)N)Cc2ccccc2N2CCN(C)CC2)c1O	Cc1cc(F)cc(C(=O)N)Cc2ccccc2N2CCN(C)CC2)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nn(C)c(C)c1N[S+](=O)(O)c1ccc(-c2cnc(NCc3ccccc3)c2)cc1	Cc1nn(C)c(C)c1N[S+](=O)(O)c1ccc(-c2cnc(NCc3ccccc3)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C(=O)N)Cc2ccc(-c3cn4ccc(C)cc4n3)cc2)n(-c2cccc(-c3csnn3)c2)n1	Cc1ccn2cc(-c3ccc(NC(=O)c4cc(C)nn4-c4cccc(-c5csnn5)c4)cc3)nc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)Cn1c(=O)oc2cc3ncnc(Nc4ccc(O)c(C(F)(F)F)c4)c3cc21	CCOC(=O)Cn1c(=O)oc2cc3ncnc(Nc4ccc(O)c(C(F)(F)F)c4)c3cc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CCCCNc1ccccc1)C(F)(F)F	O=C(CCCCNc1ccccc1)C(F)(F)F	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C)c(COCc2cc(NC(=O)c3ccc(Br)s3)ccc2N(C)S(C(=O)=O)c(C)c1	Cc1cc(C)c(COCc2cc(NC(=O)c3ccc(Br)s3)ccc2N(C)S(C(=O)=O)c(C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
c1ccc2c(c1)NCCNc3snc4ccc(Cl)cc34)ccccc2c1	Clc1ccc2nsc(NCCNc3ccccc4ccccc34)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc(C2C(C(=O)c3ccc4c(c3)CC(C)O4)=C(O)C(=O)N2CCCN2CCOCC2)c1OC	COc1ccccc(C2C(C(=O)c3ccc4c(c3)CC(C)O4)=C(O)C(=O)N2CCCN2CCOCC2)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccnc(CSc2nc(Nc3ccc(F)cc3)nc(Nc3ccc(C#N)cc3)n2)c1	Cc1ccnc(CSc2nc(Nc3ccc(F)cc3)nc(Nc3ccc(C#N)cc3)n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1sc2ncnc(N3CCC(C(=O)O)CC3)c2c1C	CCOC(=O)c1sc2ncnc(N3CCC(C(=O)O)CC3)c2c1C	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=CC2Cc3nc4cccc4c(NCCCCCCCCCN=C(N)N)c3C(C1)C2	CC1=CC2Cc3nc4cccc4c(NCCCCCCCCCN=C(N)N)c3C(C1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
CNCC1(O)CCCN(Cc2cccn2)C1=O	CNCC1(O)CCCN(Cc2cccn2)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCOC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)C(N)CC(=O)OCc1ccccc1	C=CCOC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)C(N)CC(=O)OCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC1CC2C3=CC=C(Cc4ncc(F)c4)C3(C)CC2C2(C)CCC(=O)C=C12	CCC1CC2C3=CC=C(Cc4ncc(F)c4)C3(C)CC2C2(C)CCC(=O)C=C12	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1CCN(C(c2ccc(C)c(C)c2)c2ccc(C(C)(C)C)cc(=O)c2O)CC1	CCN1CCN(C(c2ccc(C)c(C)c2)c2ccc(C(C)(C)C)cc(=O)c2O)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)CCCC1=C(Br)c2ccccc2-c2nnnn21	CC(=O)CCCC1=C(Br)c2ccccc2c2nnnn12	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1ccc(NC(=O)N)Cc2ccc([N+](=O)[O-])cc2[N+](=O)[O-])cc1	CCOC(=O)c1ccc(NC(=O)N)Cc2ccc([N+](=O)[O-])cc2[N+](=O)[O-])cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(F)c(-c2nc3ccn(CC(F)(F)F)c(=O)c3[nH]2)cc1C(=O)N1CCC(c2ccc(C#N)cc2)CC1	Cc1cc(F)c(-c2nc3ccn(CC(F)(F)F)c(=O)c3[nH]2)cc1C(=O)N1CCC(c2ccc(C#N)cc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc2c(cc1OC)C(c1ccc(-c3ccccc3)cc1)[N+](O-)=C(c1cc(OC)c(OC)c(OC)c1)O2	COc1cc2c(cc1OC)C(c1ccc(-c3ccccc3)cc1)[N+](O-)=C(c1cc(OC)c(OC)c(OC)c1)O2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1N(Cc2cccn2)C(Cc2ccccc2)C(O)C(O)C(Cc2ccc3c(c2)OCO3)N1Cc1cccc2cc[nH]c12	O=C1N(Cc2cccn2)C(Cc2ccccc2)C(O)C(O)C(Cc2ccc3c(c2)OCO3)N1Cc1cccc2cc[nH]c12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc(C(=O)c2cnnc(-c3ccc4sc(C(=O)NN5CCOCC5)cc4c3)c2N)c1	Cc1ccccc(C(=O)c2cnnc(-c3ccc4sc(C(=O)NN5CCOCC5)cc4c3)c2N)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C1=CC(C2CC2)CC(OC23CC4CC(C(C4)C2)C3)O1)N1CCc2ccccc21	O=C(C1=CC(C2CC2)CC(OC23CC4CC(C(C4)C2)C3)O1)N1CCc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCO(=O)CCCN=C(NC(=N)N)Nc1ccccc1[N+](=O)[O-]	CCCCO(=O)CCCN=C(NC(=N)N)Nc1ccccc1[N+](=O)[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
NC(C(=O)N1CCC(F)C1)C1CCCC1	NC(C(=O)N1CCC(F)C1)C1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C)ccc1OCc1cc(C(=O)N(C)c2ccccc2)no1	COc1cc(C)ccc1OCc1cc(C(=O)N(C)c2ccccc2)no1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1ccccc1)N1CC2CCC1CN(Cc1ccoc1)C2	O=C(c1ccccc1)N1CC2CCC1CN(Cc1ccoc1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
CSc1nn(Cc2ccccc2)n1C	CSc1nn(Cc2ccccc2)n1C	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CC(CC(CO)CO)N(Cc2cn(C)nc2C(F)(F)F)CC1=O	CN1CC(CC(CO)CO)N(Cc2cn(C)nc2C(F)(F)F)CC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
OC(c1ccc(Cl)c(Cl)c1)c1nc(-c2cccc(F)c2)cs1	OC(c1ccc(Cl)c(Cl)c1)c1nc(-c2cccc(F)c2)cs1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CN1CCC(COc2ncc(C(=O)NC3COCC3N3CCCC3=O)cc2-c2cc[nH]n2)CC1	CN1CCC(COc2ncc(C(=O)NC3COCC3N3CCCC3=O)cc2-c2cc[nH]n2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCNC(=O)c1ccc2c(=O)n(CCc3ccccc3)c(=O)[nH]c2c1	CN(C)CCNC(=O)c1ccc2c(=O)n(CCc3ccccc3)c(=O)[nH]c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1noc2c1CCN(Cc1cccc1)C2	Oc1noc2c1CCN(Cc1cccc1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1cc(Nc2ncc(C)C(=NC3(CN4CC(C)(F)CC4)CCC(Oc4ccc(F)cc4)CC3)[nH]2)cn1	Cn1cc(Nc2ncc(C)C(=NC3(CN4CC(C)(F)CC4)CCC(Oc4ccc(F)cc4)CC3)[nH]2)cn1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(=O)Nc2ccc3c(c2)C(=O)N(C(C)CO)CC(C)C(CN(C)Cc2ccc(C(C)(C)C)cc2)OCC(C)O	Cc1ccc(NC(=O)Nc2ccc3c(c2)C(=O)N(C(C)CO)CC(C)C(CN(C)Cc2ccc(C(C)(C)C)cc2)OCC(C)O	FALSE	TRUE	TRUE
Cc1nnc2n1-c1ccc(NC(=O)c3ccc(CN(C=O)c4cccn4C)cc(-c4ccc(F)cc4)c3)cc1CC2	Cc1nnc2n1-c1ccc(NC(=O)c3ccc(CN(C=O)c4cccn4C)cc(-c4ccc(F)cc4)c3)cc1CC2	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC1CC2C=CC(CCC3(C)CC(OC)OC3=O)C2C(OC(C)=O)C1	CCCCC1CC2C=CC(CCC3(C)CC(OC)OC3=O)C2C(OC(C)=O)C1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Oc1cccc2oc(=O)ccc12)c1ccc(-c2ccccc2)cc1	O=C(Oc1cccc2oc(=O)ccc12)c1ccc(-c2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NCCCN(CCN)CCCN(N)c1ccc([N+](=O)[O-])c2nonc12	NCCCN(CCN)CCCN(N)c1ccc([N+](=O)[O-])c2nonc12	TRUE	TRUE	TRUE
NCC(O)c1cccc(Cl)c1	NCC(O)c1cccc(Cl)c1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(Cc1ccc(C(F)(F)F)cc1)C(=O)Nc1ccc(C(F)(F)F)cc1	O=C(Cc1ccc(C(F)(F)F)cc1)C(=O)Nc1ccc(C(F)(F)F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C(C)(C)C)C(OC)c(CN2CCN(c3nc4ccccc4nc3-c3ccccc3C)CC2)c1O	COc1cc(C(C)(C)C)C(OC)c(CN2CCN(c3nc4ccccc4nc3-c3ccccc3C)CC2)c1O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC1NC(=O)C(Cc2ccc(O)cc2)NC(=O)c2cc([N+](=O)[O-])c3c(c2O1)CCCC3	CC(C)CC1NC(=O)C(Cc2ccc(O)cc2)NC(=O)c2cc([N+](=O)[O-])c3c(c2O1)CCCC3	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCn1c(=O)n(C(=O)c2ccccc2)c(=O)c2oc3cc(OC)ccc3c21	CCCCn1c(=O)n(C(=O)c2ccccc2)c(=O)c2oc3cc(OC)ccc3c21	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1cccs1)N1CCc2c(ncnc2OC2CCN(C(=O)c3ccc[nH]3)CC2)C1	O=C(c1cccs1)N1CCc2c(ncnc2OC2CCN(C(=O)c3cccs2)C3)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCCn1nc(-c2ccc(F)cc2)c2ccccc2c1=O)c1ccc(OC2CCN(CCF)CC2)cc1	O=C(NCCn1nc(-c2ccc(F)cc2)c2ccccc2c1=O)c1ccc(OC2CCN(CCF)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1)[n+](([O-])c(C(N)=O)c(C)[n+2][O-])	COc1ccc2c(c1)[n+](([O-])c(C(N)=O)c(C)[n+2][O-])	TRUE	TRUE	TRUE
C=CC(=O)Nc1cc2c(Nc3ccc(F)c(Cl)c3)ncnc2cc1OC1CCOC1	C=CC(=O)Nc1cc2c(Nc3ccc(F)c(Cl)c3)ncnc2cc1OC1CCOC1	TRUE	TRUE	FALSE
NC1(c2ccc(-c3nc4c5cc(C(=N)O)ccc5nn4cc3-c3ccccc3)cc2)CCC1	N=C(O)c1ccc2nn3cc(-c4ccccc4)c(-c4ccc(C5(N)CCCS)cc4)nc3c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)c1nn2c(=O)c(C(=O)NcC3ccc(F)cc3)cnc2s1	CN(C)c1nn2c(=O)c(C(=O)NcC3ccc(F)cc3)cnc2s1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C(C=O)O)N1C(=O)C(=C(O)c2c(O)ccc3ccccc23)SC1=S	CC(C(C=O)O)N1C(=O)C(=C(O)c2c(O)ccc3ccccc23)SC1=S	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1ccc(Sc2ccccc2)n(Cc2ccncc2)c2ccccc12	O=c1ccc(Sc2ccccc2)n(Cc2ccncc2)c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)c1cc2cc(C=CC(=O)c3ccccc3)ccc2oc1=O	CCOC(=O)c1cc2cc(C=CC(=O)c3ccccc3)ccc2oc1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Nc1cc(C(=O)N2CCCC(c3cc(C(F)(F)F)[nH]n3)C2)c2cccc(C)c2n1	CC(=O)Nc1cc(C(=O)N2CCCC(c3cc(C(F)(F)F)[nH]n3)C2)c2cccc(C)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCN(C)C(=O)n1ccc(C)n1	CCCCN(C)C(=O)n1ccc(C)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CN1C(=O)NC2(CCc3ccccc32)C1=O)Nc1cccc(F)c1	O=C(CN1C(=O)NC2(CCc3ccccc32)C1=O)Nc1cccc(F)c1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)N1CCC(c2cc(C(=O)N2CCN3CCCC3)nl(-c3cncnc3)n2)CC1	CC(C)N1CCC(c2cc(C(=O)N2CCN3CCCC3)nl(-c3cncnc3)n2)CC1	FALSE	TRUE	TRUE
Cc1nc(-c2ccccc2Cl)sc1-c1cn(C2CCNC2)nn1	Cc1nc(-c2ccccc2Cl)sc1-c1cn(C2CCNC2)nn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=NN=C1NCCN1)c1ccc([N+](=O)[O-])cc1	CC(=NN=C1NCCN1)c1ccc([N+](=O)[O-])cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCCC(n2ccc3ccc(C#Cc4ccc(CC(=O)O)cc4)cc32)C1	CN1CCCC(n2ccc3ccc(C#Cc4ccc(CC(=O)O)cc4)cc32)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1c(N2CCOCC2)cnnc(C)c1=O	CCOc1c(N2CCOCC2)cnnc(C)c1=O	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(NC1CCCC1)N(Cc1ccccc1)Cc1ccccc1	O=C(NC1CCCC1)N(Cc1ccccc1)Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CCCC(C(=O)Nc2cc(-c3ccc(OC(F)(F)F)c3)n(-c3ccccc3)n2)=C1	O=C1C=C(C(=O)Nc2cc(-c3ccc(OC(F)(F)F)c3)n(-c3ccccc3)n2)CCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=C(CC(=O)O)c2cc(F)c(F)cc2C1=Cc1ccc(C)cc1	CC1=C(CC(=O)O)c2cc(F)c(F)cc2C1=Cc1ccc(C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1cnc(CC(=S)Nc2ccccc2)c(=O)n1	Nc1cnc(CC(=S)Nc2ccccc2)c(=O)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc2c(c1)OCC1=C2Nc2ccc(Cl)cc2C1c1ccc(N(C)C)cc1	Cc1ccc2c(c1)OCC1=C2Nc2ccc(Cl)cc2C1c1ccc(N(C)C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1c(C)nc2nc(C)nn2c1N1CCC(C(=O)Nc2ccccc2)CC1	CCc1c(C)nc2nc(C)nn2c1N1CCC(C(=O)Nc2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(CN2CCCC23CCN(CCc2c[nH]cn1)C3)cs1	Cc1nc(CN2CCCC23CCN(CCc2c[nH]cn1)C3)cs1	FALSE	TRUE	TRUE
CCSC(=NO)c1cccc(l)c1	CCSC(=NO)c1cccc(l)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccccc1Nc1ccc2cccc(N)c2n1	CCc1ccccc1Nc1ccc2cccc(N)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CC12CCC3C4(C)CCCC(C)(C)C4CCC3(O1)O2)C(=CC=CC=CCN(CCC)c1ccoc1	Cc1cn(C2C=CC(COC(=O)C3CCCC3)O2)c(=O)[nH]c1=O	FALSE	TRUE	TRUE
Cc1cn(C2C=CC(COC(=O)C3CCCC3)O2)c(=O)[nH]c1=O	Cc1cn(C2C=CC(COC(=O)C3CCCC3)O2)c(=O)[nH]c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CC2CCN(CC#Cc3ccccc3)CC2)cc1	COc1ccc(CC2CCN(CC#Cc3ccccc3)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1c(=O)c(-c2ccc(C=C3C(=O)NC(=S)NC3=O)s2)c(O)c2ccc(Br)cc21	Cn1c(=O)c(-c2ccc(C=C3C(=O)NC(=S)NC3=O)s2)c(O)c2ccc(Br)cc21	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCN(c2nc3c(cc2F)c(=O)c(C(=O)O)cn3-c2cc(C(=O)O)cc(F)c2F)CC1	CN1CCN(c2nc3c(cc2F)c(=O)c(C(=O)O)cn3-c2cc(C(=O)O)cc(F)c2F)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(Sc2c([N+](=O)[O-])cc([N+](=O)[O-])c(N(C)C)c2[N+](=O)[O-])c(C(C)C)cc1N(C(C)=O)C(C)C	CC(=O)N(C1cc(C(C)C)c(Sc2c([N+](=O)[O-])cc([N+](=O)[O-])c(N(C)C)c2[N+](=O)[O-])cc1C(C)C)c2[N+](=O)[O-])cc1C(C)C(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O))(=O)N(CC(=O)Nc2ccc(C)cc2)Cc2ccco2)cc1	Cc1ccc(NC(=O)CN(Cc2ccco2)S(=O))(=O)c2ccc(C)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)C(OC(=O)N1CCC1)C(OC1cc(F)ccc1Nc1ncnc2cc(N=S3(=O)CCCC)cc(Cl)c12)C(=O)N1CCC(O)C1	CC(C)C(OC(=O)N1CCC1)C(OC1cc(F)ccc1Nc1ncnc2cc(N=S3(=O)CCCC)cc(Cl)c12)C(=O)N1CCC(O)C1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(Nc2nnc(S(C)C)s2)cc1	COc1ccc(Nc2nnc(S(C)C)s2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COCc1cc(NCc2cc(=O)oc3cc(C)ccc23)nc(O)n1	COCc1cc(NCc2cc(=O)oc3cc(C)ccc23)nc(O)n1	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(Br)C(=O)Nc1cccc(-c2cn3nc(C#Cc4ccc(OC(F)(F)F)cc4)sc3n2)c1	C=C(Br)C(=O)Nc1ccccc(-c2cn3nc(C#Cc4ccc(OC(F)(F)F)cc4)sc3n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCc1sc2ccccc2c1-c1ccc2c(c1)N(C=O)C2(C)C	CCCCc1sc2ccccc2c1-c1ccc2c(c1)N(C=O)C2(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(c2cc(NC(=O)c3nc(C#N)c[nH]3)ccc2F)CCS(C(N)=N1	CC1(c2cc(NC(=O)c3nc(C#N)c[nH]3)ccc2F)CCS(C(N)=N1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1c2cc(Br)cc(Br)c2c(-c2cccs2)nn1C1CCCCO1	O=c1c2cc(Br)cc(Br)c2c(-c2cccs2)nn1C1CCCCO1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1CC2C(CCC(=O)N2CCc2ccc(OC)cc2)O1	CCOC(=O)C1CC2C(CCC(=O)N2CCc2ccc(OC)cc2)O1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(Nc2nc(-c3ccc(O)c(O)c3)cs2)nc1	Cc1ccc(Nc2nc(-c3ccc(O)c(O)c3)cs2)nc1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C1NCC(COc2ccccc2)O1	O=C1NCC(COc2ccccc2)O1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CC1CC1)Nc1cccn1C(=O)Nc1nc2c(s1)CC(N1CCCC1)CC2	O=C(CC1CC1)Nc1cccn1C(=O)Nc1nc2c(s1)CC(N1CCCC1)CC2	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=NN=C1NC(=O)CS1)c1cccn1	CC(=NN=C1NC(=O)CS1)c1cccn1	TRUE	TRUE	FALSE
CN1CCN(CCC(=O)Nc2ccc(Cl)c(F)c2)CC1	CN1CCN(CCC(=O)Nc2ccc(Cl)c(F)c2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc(C(C(N)=O)N2CCNCC2)c1	COc1ccccc(C(C(N)=O)N2CCNCC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C1=C(C)N=C(C)C(=C(O)OC)C1c1cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c1	COC(=O)C1=C(C)N=C(C)C(=C(O)OC)C1c1cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1ccc(-c2nc3c(c[nH]n3)c(=O)n2CCC#N)cc1	CC(C)c1ccc(-c2nc3n[nH]cc3c(=O)n2CCC#N)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NC(C)C1ccc(OC2CCN(c3ncnc(OC(C)C(C)O)c3F)C2)cc1	CC(=O)NC(C)C1ccc(OC2CCN(c3ncnc(OC(C)C(C)O)c3F)C2)cc1	TRUE	FALSE	FALSE
O=C(C(=O)N1CCN(C(=O)c2ccccc2)CC1)c1c[nH]c2c(-n3ccnn3)ncccc12	O=C(C(=O)N1CCN(C(=O)c2ccccc2)CC1)c1c[nH]c2c(-n3ccnn3)ncccc12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2[nH]ncc2-c2c[nH]c3ccc([N+](=O)[O-])cc23)c(OC)c1	COc1ccc(-c2[nH]ncc2-c2c[nH]c3ccc([N+](=O)[O-])cc23)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=NNC(=O)CN2CCN(S(=O))(=O)c3ccccc3Cl)CC2)ccc1OCC(=O)O	COc1cc(C=NNC(=O)CN2CCN(S(=O))(=O)c3ccccc3Cl)CC2)ccc1OCC(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(Nc2nc(N3CCCC3)nn3c(-c4cccc(CO)c4)cnc23)sn1	Cc1cc(Nc2nc(N3CCCC3)nn3c(-c4cccc(CO)c4)cnc23)sn1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C(=O)NCCc2ncc[nH]2)cc1S(=O))(=O)N1CCOCC1	Cc1ccc(C(=O)NCCc2ncc[nH]2)cc1S(=O))(=O)N1CCOCC1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCN(C=O)C(C#N)=Cc1cn(CC(=O)OCC)c2ccccc12	C=CCN(C=O)C(C#N)=Cc1en(CC(=O)OCC)c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=CC(=O)CC(=O)C=Cc2cc(O)cc(C)c2)ccc1O	COc1cc(C=CC(=O)CC(=O)C=Cc2cc(C)cc(O)c2)ccc1O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1C1Nc2ccc(C(=O)Nc3ccccc3S)C)cc2NC2=C1C(=O)CCC2	COc1ccccc1C1Nc2ccc(C(=O)Nc3ccccc3S)C)cc2NC2=C1C(=O)CCC2	TRUE	TRUE	TRUE
CCOCc1ccc(C=CC(=O)COc2cc(OC(C)CC(C)=O)O)cc(OC(C)=O)C=C(O)C(=O)O)c2)cc1	CCOCc1ccc(C=CC(=O)COc2cc(OC(C)CC(C)=O)O)cc(OC(C)=O)C=C(O)C(=O)O)c2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(Cl)ccc1OC(C)C(=O)NN=C1C(=O)Nc2ccccc21	Cc1cc(Cl)ccc1OC(C)C(=O)NN=C1C(=O)Nc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(COc2ccccc2OC(F)(F)F)COCC(NS(C)(=O)=O)C1	CC1(COc2ccccc2OC(F)(F)F)COCC(NS(C)(=O)=O)C1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1=C(C)N(c2ccc(C(F)(F)F)c2)C(=O)N(C)C1c1ccc(C#N)cc1C(=O)N1CCC(O)(C(F)(F)F)CC1	CCOC(=O)C1=C(C)N(c2ccc(C(F)(F)F)c2)C(=O)N(C)C1c1ccc(C#N)cc1C(=O)N1CCC(O)(C(F)(F)F)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(C)C1CC(OC(C)=O)C23C(=O)C(C)=CC4C(C5G6O(C=O)CCCC6CC44C(C1OC(=O)C=Cc1cccc([N+](=O)[O-])c1)C45O)C32	CC(C)n1nc(C(F)(F)F)cc1C1CCN(CCOc2ccccc3[nH]c4ccccc4c23)CC1	FALSE	TRUE	TRUE
CC(C)n1nc(C(F)(F)F)cc1C1CCN(CCOc2ccccc3[nH]c4ccccc4c23)CC1	CC(C)n1nc(C(F)(F)F)cc1C1CCN(CCOc2ccccc3[nH]c4ccccc4c23)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(OC)c2c(c1)OC1(c3ccc(O)cc3)C(c3ccc(O)cc3)Oc3cc(OC)c(O)cc3C21	COc1cc(OC)c2c(c1)OC1(c3ccc(O)cc3)C(c3ccc(O)cc3)Oc3cc(OC)c(O)cc3C21	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C(=O)O)CCCC2(C)C1CCC13CC(CCC12)C(O)(CO)C3	CC1(C(=O)O)CCCC2(C)C3CCC4CC3(CCC12)CC4(O)CO	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(CCS(=O))(=O)c1ccc(C(F)(F)F)cn1)Nc1ccc2c(c1)OCCO2	O=C(CCS(=O))(=O)c1ccc(C(F)(F)F)cn1)Nc1ccc2c(c1)OCCO2	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C(=O)Nc1nc(-c2cccc(OCc3ccc(C(F)(F)F)cc3)c2)cs1	CCOC(=O)C(=O)Nc1nc(-c2cccc(OCc3ccc(C(F)(F)F)cc3)c2)cs1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc1C(=O)N1CCS(=O)(=O)CC1	Cc1ccccc1C(=O)N1CCS(=O)(=O)CC1	TRUE	TRUE	TRUE



smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
CC1CC(=O)N(CC(=O)Nc2cccc(C(F)(F)F)c2)c2ccccc2S1	CC1CC(=O)N(CC(=O)Nc2cccc(C(F)(F)F)c2)c2ccccc2S1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2cc3[n+](cc2c1OCCON=c1ccccc1)CCc1cc2c(cc1-3)OCO2	COc1ccc2cc3[n+](cc2c1OCCON=c1ccccc1)CCc1cc2c(cc1-3)OCO2	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1cc2cncnc2[nH]1	NC(=O)c1cc2cncnc2[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(Br)cc1)C1CC(=O)N(Cc2ccccc2)C1	O=C(Nc1ccc(Br)cc1)C1CC(=O)N(Cc2ccccc2)C1	TRUE	TRUE	TRUE
OCc1ccc(C2C(C(=O)Nc3ccccc3)=C(C)Nc3c(C(=O)Nc4ccc(C)cc4)cnn32)cc1OC	OCc1ccc(C2C(C(=O)Nc3ccccc3)=C(C)Nc3c(C(=O)Nc4ccc(C)cc4)cnn32)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C)n1-c1nnnc(Cn2nnc3ccccc32)n1C	Cc1ccc(C)n1-c1nnnc(Cn2nnc3ccccc32)n1C	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)c1ccc(CCNc2cc(-c3ccnc(N4CCN(CC#N)CC4)n3)c(Cl)cn2)cc1	CS(=O)(=O)c1ccc(CCNc2cc(-c3ccnc(N4CCN(CC#N)CC4)n3)c(Cl)cn2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=[N+]([O-])c1ccc2ccc3ccc4cccc1c4c3c25		FALSE	TRUE	TRUE
Cc1c(CCN)c2cc(OC3CCCO3)ccc2n1Cc1cccc(F)c1	Cc1c(CCN)c2cc(OC3CCCO3)ccc2n1Cc1cccc(F)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C1=C(C)NC2=C(C(=O)CC(C)(C)C2)C1c1cc2c(cc1Cl)OCO2	COC(=O)C1=C(C)NC2=C(C(=O)CC(C)(C)C2)C1c1cc2c(cc1Cl)OCO2	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCCC2C(C)CCCCC(CCC(=O)O)C(=O)O(C(CO)Cc3ccccc3)C(=O)CCN12	CC1CCCC2C(C)CCCCC(CCC(=O)O)C(=O)O(C(CO)Cc3ccccc3)C(=O)CCN12	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)=CCc1c(O)c(CC=C(C)C)c2c(c1O)OC(C)C1CC=C(C)CC21	CC(C)=CCc1c(O)c(CC=C(C)C)c2c(c1O)OC(C)C1CC=C(C)CC21	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1ccc(Cl)cc1-c1nc2ccc(-c3ccccc3)cc2s1	Nc1ccc(Cl)cc1-c1nc2ccc(-c3ccccc3)cc2s1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1CCc2c(sc(NC(=O)c3ccccc3Cl)c2C#N)C1	CCN1CCc2c(sc(NC(=O)c3ccccc3Cl)c2C#N)C1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1cccc(NC(=O)Nc2ccc(OC3ccc(-c4nccs4)cc3)cc2)c1	NC(=O)c1cccc(NC(=O)Nc2ccc(OC3ccc(-c4nccs4)cc3)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1[nH]c(=S)[nH]c2c(-c3ccccc3)csc12	O=c1[nH]c(=S)[nH]c2c(-c3ccccc3)csc12	TRUE	TRUE	TRUE
CC=C(NC(=O)C1C2C(CN1C(=O)C(NC(=O)NC(C1CCCCC1)C(=O)C(=O)NC1CC1)C2(C)C)C(=O)O		FALSE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NC(=S)NN2C(C)C(C)C(C)c3ccccc3)C2(C)C)cc1	COc1ccc(NC(=S)NN2C(C)C(C)C(C)c3ccccc3)C2(C)C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
NCC(=O)NC(=CCCCC(=O)O)C(N)=O	NCC(=O)NC(=CCCCC(=O)O)C(N)=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cn1nccc1-c1cc(C(N)=O)nc2c(F)c(-c3cnc(CCCO)c(Cl)c3)ncc12	Cn1nccc1-c1cc(C(N)=O)nc2c(F)c(-c3cnc(CCCO)c(Cl)c3)ncc12	TRUE	TRUE	TRUE
CSc1ccc(C2=C3CN(C)CC3N(C)C(c3ccco3)=C2[N+](=O)[O-])cc1O	CSc1ccc(C2=C3CN(C)CC3N(C)C(c3ccco3)=C2[N+](=O)[O-])cc1O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(NC(=O)c2cccc3cc[nH]c23)cc1)c1cccc1	O=C(Nc1ccc(NC(=O)c2cccc3cc[nH]c23)cc1)c1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc2ccc(C(=O)O)cc2n1Cc1ccc(Cl)cc1	Nc1nc2ccc(C(=O)O)cc2n1Cc1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CCC(=O)CCC2Cc3cc4c(cc3C2=O)CCC2Cc3ccccc3CN42)cc1OC	COc1ccc(CCC(=O)CCC2Cc3cc4c(cc3C2=O)CCC2Cc3ccccc3CN42)cc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)n1c2ccccc2c2c[n+]3ccccc3cc21	CC(C)n1c2ccccc2c2c[n+]3ccccc3cc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(O)c(C#N)c(C)c1CCc1cccc1	Cc1nc(O)c(C#N)c(C)c1CCc1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)n1nc(Cc2ccc3c(c2)OCO3)nc1CO	CC(C)n1nc(Cc2ccc3c(c2)OCO3)nc1CO	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2[nH]c3c(c2c1)C(C)=CC(C)(C)NC3=O	COc1ccc2[nH]c3c(c2c1)C(C)=CC(C)(C)NC3=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(C=Cc#N)cc(F)c1Nc1ccc(F)c(C2OC(CO)C(O)C(O)C2O)c1	Cc1cc(C=Cc#N)cc(F)c1Nc1ccc(F)c(C2OC(CO)C(O)C(O)C2O)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)N(C)C1CCC(NC(=O)C2CCN(S(=O)(=O)c3cccc4nonc34)CC2)CC1	CC(C)N(C)C1CCC(NC(=O)C2CCN(S(=O)(=O)c3cccc4nonc34)CC2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1C=NN1C(=O)CCSc2ccccc21	COc1ccccc1C=NN1C(=O)CCSc2ccccc21	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(Br)cc(Br)c1OC(CCN1CCC(N)CC1)1cccc1	Cc1cc(Br)cc(Br)c1OC(CCN1CCC(N)CC1)1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1nccc(-c2c(-c3cccc(C(=O)Nc4c(F)cccc4F)c3)nc3ccccc23)n1	COc1cc(N2CCN(C(C)=O)CC2)ccc1Nc1nccc(-c2c(-c3cccc(C(=O)Nc4c(F)cccc4F)c3)nc3ccccc23)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(C(=O)CO)c1	COc1cccc(C(=O)CO)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCOc1ccc2nncnc(OC3cccc(NC(=O)Nc4cc(C(C)(C)C)nn4-c4cccc4F)c3)c2c1	CN(C)CCOc1ccc2nncnc(OC3cccc(NC(=O)Nc4cc(C(C)(C)C)nn4-c4cccc4F)c3)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Cn1ccsc1=NS(=O)(=O)c1ccc(Cl)cc1)c1ccc(Cl)cc1	O=C(Cn1ccsc1=NS(=O)(=O)c1ccc(Cl)cc1)c1ccc(Cl)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1[nH]c2c(c3ccccc31)c(=O)n(-c1ccccc1)c(=O)n2Cc2ccco2)c2ccccc12	O=c1[nH]c2c(c3ccccc3)c(=O)n(-c3ccccc3)c(=O)n2Cc2ccco2)c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1)C13CCN(CC(F)(C2)O3)CC1CNc1ccc(C#N)cc1	COc1ccc2c(c1)C13CCN(CC1CNc1ccc(C#N)cc1)CC(F)(C2)O3	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCOc1cc(NC(=O)C(C)c2ccc(CC(C)C)cc2)cc(C2(C)CCCN(C)C2)c1	C=CCOc1cc(NC(=O)C(C)c2ccc(CC(C)C)cc2)cc(C2(C)CCCN(C)C2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)N(C)c1nc(-c2cncnc2)cs1	COC(=O)N(C)c1nc(-c2cncnc2)cs1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCSc1nc2c(N)ncnc2n1C1OC(COP(=O)(O)O)C(O)C1O	CCCCCSc1nc2c(N)ncnc2n1C1OC(COP(=O)(O)O)C(O)C1O	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=CCC2C(C1)c1c(O)cc(C(C)3CCCC3)cc1OC2(C)C	CC1=CCC2C(C1)c1c(O)cc(C3(C)CCCC3)cc1OC2(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCCC1Cc1cccc1	CN1CCCC1Cc1cccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C=NNc2nnc3ccccc23)cc1	Cc1ccc(C=NNc2nnc3ccccc23)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C=Cc1cccc(N(Cc2cc3ccc(C(F)(F)F)cc3[nH]c2=O)C(=O)C2CCCC2)c1	COC(=O)C=Cc1cccc(N(Cc2cc3ccc(C(F)(F)F)cc3[nH]c2=O)C(=O)C2CCCC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccccc1[N+](=O)[O-])N1CC(Cc2noc3cc(F)ccc23)CC1	O=C(Nc1ccccc1[N+](=O)[O-])N1CC(Cc2noc3cc(F)ccc23)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(C)C1CCC2(C(=O)NC(C(C)C)C(=O)N(C)CC(=O)OC)CCC3(C)C(CCC4C5(C)CCC(OC(C)=O)C(C)(C)C5CCC43C)C12	C=C(C)C1CCC2(C(=O)NC(C(C)C)C(=O)N(C)CC(=O)OC)CCC3(C)C(CCC4C5(C)CCC(OC(C)=O)C(C)(C)C5CCC43C)C12	TRUE	TRUE	TRUE
CCOCCCN(C(=O)CC1(CCC(=O)O)O)CCCC1	CCOCCCN(C(=O)CC1(CCC(=O)O)O)CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCCCSCC1CC(COC(=O)n2cc(C)c(=O)[nH]c2=O)OC1=O	CCCCCCCCCCCCCSCC1CC(COC(=O)n2cc(C)c(=O)[nH]c2=O)OC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1nc[nH]n1)NC(Cc1ccc(O)cc1)c1ccccc1	O=C(Nc1nc[nH]n1)NC(Cc1ccc(O)cc1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc2[nH]cc(CN3CCC(NC(=O)OC(C)(C)C3)c12	COc1cccc2[nH]cc(CN3CCC(NC(=O)OC(C)(C)C3)c12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=Cc1ccc(Cl)c(Cl)c1)NCCCCCN1CCC(NC(=O)Nc2ccccc2-c2ccccc2O)CC1	O=C(C=Cc1ccc(Cl)c(Cl)c1)NCCCCCN1CCC(NC(=O)Nc2ccccc2-c2ccccc2O)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(Nc1ccc(C2CCCN2)cc1)c1cnc2ccc(Cl)cc2c1O	O=C(Nc1ccc(C2CCCN2)cc1)c1cnc2ccc(Cl)cc2c1O	TRUE	TRUE	TRUE
CN=C(S)c1c[nH]c2cccc(OC(=O)N(C)C)c12	CN=C(S)c1c[nH]c2cccc(OC(=O)N(C)C)c12	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(NC(=O)CCN2CCC(O)CC2)cc1	CCOc1ccc(NC(=O)CCN2CCC(O)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(CCN2C(=O)C(CC#N)(c3ccc(Br)cc3)N=C2NCN(C)C)cc1	COc1ccc(CCN2C(=O)C(CC#N)(c3ccc(Br)cc3)N=C2NCN(C)C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
OB(O)c1ccc(-c2ccccc2)s1	OB(O)c1ccc(-c2ccccc2)s1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCCCCCCCOC(=O)C(C)[N+]12CC[N+](Cc3ccc(C[N+](CC)(CC)CC)cc3)(CC(C(C(=O)O)(CC)C1)C2		FALSE	TRUE	TRUE
CCC(CO)NC(=O)NCc1cc(OC2CC2)nn1C	CCC(CO)NC(=O)NCc1cc(OC2CC2)nn1C	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(C=CCCN2CCN(c3ncccc3O)CC2)cc(OC)c1OC	COc1cc(C=CCCN2CCN(c3ncccc3O)CC2)cc(OC)c1OC	TRUE	TRUE	TRUE
NCCCC(NC(=O)C(C#N)=Cc1ccc(-c2ccc(Cl)c(Cl)c1c2)o1)C(=O)O	N#CC(=Cc1ccc(-c2ccc(Cl)c(Cl)c2)o1)C(=O)NC(CCN)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C(CO[N+](=O)[O-])S(C)(=O)=O)CC1OC(n2cnc3c(N)ncnc32)C(O)C1O	CN(C(C1OC(n2cnc3c(N)ncnc32)C(O)C1O)CC(CO[N+](=O)[O-])S(C)(=O)=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccc(NC(=O)COC(=O)Cc2c(F)c(F)c(F)c(F)c2F)cc1	CCc1ccc(NC(=O)COC(=O)Cc2c(F)c(F)c(F)c(F)c2F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(N(Cc2ccc(-c3ccccc3S(C)(=O)O)cc2)S(=O)(=O)c2ccc(C(=O)O)cc2Cl)c2ccccc2n1CC(=O)O	Cc1c(N(Cc2ccc(-c3ccccc3S(C)(=O)O)cc2)S(=O)(=O)c2ccc(C(=O)O)cc2Cl)c2ccccc2n1CC(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CCC12CCCC3C(CC=C4CC(O)CCC43C)C1CCc1nc3ccccc3c(=O)n12	CCC12CCCC3C(CC=C4CC(O)CCC43C)C1CCc1nc3ccccc3c(=O)n12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCC1(N2CCCCC2)CCCCC1)c1cccc(C(=O)NCC2CCCCC2)n1	O=C(NCC1CCCCC1)c1cccc(C(=O)NCC2(N3CCCCC3)CCCCC2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)C(C(C)C)NC(=O)C=Cc1ccc(C(=N)N)cc1	COC(=O)C(C(C)C)NC(=O)C=Cc1ccc(C(=N)N)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc2cc(-c3ccc(C(C)(C)O)nc3)nn2c(C)C1CC(C(=O)N(C)C	Cc1nc2cc(-c3ccc(C(C)(C)O)nc3)nn2c(C)c1CCC(=O)N(C)C	TRUE	TRUE	TRUE
CC12CCC3c4cc(O)c(OCc5ccc([N+](=O)[O-])cc5)cc4CCC3C1CCC2=O	CC12CCC3c4cc(O)c(OCc5ccc([N+](=O)[O-])cc5)cc4CCC3C1CCC2=O	TRUE	TRUE	TRUE
NCCNc1cc2c(Nc3ccccc3F)ncnc2cn1	NCCNc1cc2c(Nc3ccccc3F)ncnc2cn1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(C)c(N2CCN(C(=O)CCNS(=O)(=O)c3ccccc3)CC2)c1	Cc1ccc(C)c(N2CCN(C(=O)CCNS(=O)(=O)c3ccccc3)CC2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
C=CCc1cn(CC=C(C)C)c2ccc(CCc3nc(-c4ccccc4)cn3C)cc12	C=CCc1cn(CC=C(C)C)c2ccc(CCc3nc(-c4ccccc4)cn3C)cc12	TRUE	TRUE	TRUE
CCS(=O)(=O)c1cc[n+](([O-])cc1-c1cc(-c2ccc(Cl)cc2)cnc1OC	CCS(=O)(=O)c1cc[n+](([O-])cc1-c1cc(-c2ccc(Cl)cc2)cnc1OC	TRUE	TRUE	TRUE
Nc1nc(N)c2nc(O)n(CCc3ccc(O)cc3)c2n1	Nc1nc(N)c2nc(O)n(CCc3ccc(O)cc3)c2n1	TRUE	TRUE	TRUE
Fc1ccc(-c2nc(SCCCN3CCN(c4ccc(F)c(Cl)c4)CC3)[nH]c2-c2ccc(F)cc2)cc1	Fc1ccc(-c2nc(SCCCN3CCN(c4ccc(F)c(Cl)c4)CC3)[nH]c2-c2ccc(F)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
[O-][S+](c1ccccc1)c1c(-c2ccccc2)nn(-c2ccccc2)c1N=Nc1nc2ccccc2[nH]1	[O-][S+](c1ccccc1)c1c(-c2ccccc2)nn(-c2ccccc2)c1N=Nc1nc2ccccc2[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
COC1COCCC1NC1CCC(C(=O)N2CCN(c3cccc(C(F)(F)F)c3)CC2)(C(C)C)C1	COC1COCCC1NC1CCC(C(=O)N2CCN(c3cccc(C(F)(F)F)c3)CC2)(C(C)C)C1	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(NC1CSCC1NC(=O)c1ccc2c(C3CC3)c(-c3ccc[nH]c4ccccc34)nn2c1)c1cncnc(O)c1		FALSE	TRUE	TRUE
O=c1cc(C(F)(F)F)c2cc(C3(C(F)(F)F)CC(C(F)(F)F)=NO3)ccc2o1	O=c1cc(C(F)(F)F)c2cc(C3(C(F)(F)F)CC(C(F)(F)F)=NO3)ccc2o1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)CC(c1ccc(OC)cc1)c1cc(Br)c(OC)c(OC)c1	COC(=O)CC(c1ccc(OC)cc1)c1cc(Br)c(OC)c(OC)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1Nc1ncnc2c1nnn2CC(Cl)c1ccccc1	COc1ccccc1Nc1ncnc2c1nnn2CC(Cl)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
Clc1cc(N2CCC3(CCCNC3c3ccccc3)C2)ccn1	Clc1cc(N2CCC3(CCCNC3c3ccccc3)C2)ccn1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(CC(=O)Nc1cccc(Br)c1)=NNC(=O)c1ccc(Cn2c(C)ccc2C)cc1	CC(CC(=O)Nc1cccc(Br)c1)=NNC(=O)c1ccc(Cn2c(C)ccc2C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
Nc1ncnc2c1ncn2CCc1c[nH]c2ccccc12	Nc1ncnc2c1ncn2CCc1c[nH]c2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc(N)sc1CCN	Cc1nc(N)sc1CCN	TRUE	TRUE	FALSE
Clc1ccc2nccc(NC3CCCC3)c2c1	Clc1ccc2nccc(NC3CCCC3)c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1c2ccccc2nc(C=Cc2ccncc2)n1-c1cccn1	O=c1c2ccccc2nc(C=Cc2ccncc2)n1-c1cccn1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(=O)CSc2nnc(CNC(=O)c3ccc(C)cc3Br)o2)c(C)c1	Cc1ccc(NC(=O)CSc2nnc(CNC(=O)c3ccc(C)cc3Br)o2)c(C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
NC(Cc(=O)N1CCc2nc(-c3cccs3)ncc2C1)Cc1ccc(F)cc1	NC(Cc(=O)N1CCc2nc(-c3cccs3)ncc2C1)Cc1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1c(O)c2ccccc2n(Cc2ccc(Cl)cc2Cl)c1=O	Cc1c(O)c2ccccc2n(Cc2ccc(Cl)cc2Cl)c1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc2occ(C(=O)OCCN3C(=O)c4ccccc4C3=O)c(=O)c2cc1C	Cc1cc2occ(C(=O)OCCN3C(=O)c4ccccc4C3=O)c(=O)c2cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
OCC1(O)C2Cc3ccc(O)cc3C1(O)CCN2S(=O)(=O)c1ccc(Cl)c(Cl)c1	O=S(=O)(c1ccc(Cl)c(Cl)c1)N1CCC2(O)c3cc(O)ccc3CC1C2(O)CO	TRUE	TRUE	TRUE
Fe1ccc(C[n+])2ccc(N3CCC(O)CC3)c3c(N4CCCC4)ccnc32)cc1	OC1CCN(c2cc[n+](Cc3ccc(F)cc3)c3nccc(N4CCCC4)c23)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
Oc1ccc(C2=CN(Cc3ccccc3)c3c(-c4ccccc4)c(-c4ccccc4)nn3C2)cc1	Oc1ccc(C2=CN(Cc3ccccc3)c3c(-c4ccccc4)c(-c4ccccc4)nn3C2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CS(=O)(=O)Nc1ccc2c(c1)S(=O)(=O)Nc1ccc(CCN3CCC(Cc4ccccc4)CC3)cc1C2=O	CS(=O)(=O)Nc1ccc2c(c1)S(=O)(=O)Nc1ccc(CCN3CCC(Cc4ccccc4)CC3)cc1C2=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(=O)c2oc3ccccc3c2C)c(C(=O)NCCN(C)C)c1	Cc1ccc(NC(=O)c2oc3ccccc3c2C)c(C(=O)NCCN(C)C)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCCCN1CCN(c2ccc(F)cc2)CC1)C(=O)Nc1ccc(F)cc1F	O=C(NCCCN1CCN(c2ccc(F)cc2)CC1)C(=O)Nc1ccc(F)cc1F	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1C(Cc2ccccc2)N=C(c2ccccc2)c2cc(Cl)ccc2N1CC(=O)NC1CCCC1	O=C(CN1C(=O)C(Cc2ccccc2)N=C(c2ccccc2)c2cc(Cl)ccc21)NC1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCNC(=O)NCC(NC(=O)c1cn(C2CCCC2)c(C)n1)C(=O)NC(C1ccccc1)C(O)C(=O)N1CSC(C)(C)C1C(=O)NC1c2ccccc2CC1O	CCNC(=O)NCC(NC(=O)c1cn(C2CCCC2)c(C)n1)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(O)C(=O)N1CSC(C)(C)C1C(=O)NC1c2ccccc2CC1O	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1ccc(CCN2ccnc2)cc1	CC(C)(C)c1ccc(CCN2ccnc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCCN(C(=O)C)NS(=O)(=O)c2cn(C)cn2)c2ccccc2)CC1	CN1CCCN(C(=O)C)NS(=O)(=O)c2cn(C)cn2)c2ccccc2)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)CS(C(=O)NCC(=O)Nc1ccccc1	COC(=O)CS(C(=O)NCC(=O)Nc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(OCc1c(Cl)cccc1Cl)c1ccccc1C(=O)OCc1ccc2c(c1)OCO2	O=C(OCc1ccc2c(c1)OCO2)c1ccccc1C(=O)OCc1c(Cl)cccc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc2sc3c(c2c(=O)n1-c1ccc(NC(=O)Nc2ccccc4ccccc24)cc1)CCC3	Cc1nc2sc3c(c2c(=O)n1-c1ccc(NC(=O)Nc2ccccc4ccccc24)cc1)CCC3	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC(COc1cncc(-c2cc(-c3ccccc3)no2)c1)c1ccccc1)c1ccccc1Cl	O=C(NC(COc1cncc(-c2cc(-c3ccccc3)no2)c1)c1ccccc1)c1ccccc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(NC(=O)C2CCCN(S(=O)(=O)c3c[nH]cn3)C2)cc1Cl	Cc1ccc(NC(=O)C2CCCN(S(=O)(=O)c3c[nH]cn3)C2)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CCC(O)C(O)CC=CC=CC(=O)O1	CC1CCC(O)C(O)CC=CC=CC(=O)O1	TRUE	TRUE	TRUE
NCCc1nnc(NC(=O)CC2CC(c3ccccc3)c3ccccc32)s1	NCCc1nnc(NC(=O)CC2CC(c3ccccc3)c3ccccc32)s1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2cc(=O)c3cc(C)ccc3o2)cc1	COc1ccc(-c2cc(=O)c3cc(C)ccc3o2)cc1	TRUE	TRUE	FALSE
CC(C)(Cc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccc(Cl)cc2C(=O)c2ccccc2)s1)C(=O)O	CC(C)(Cc1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccc(Cl)cc2C(=O)c2ccccc2)s1)C(=O)O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCC1OC(=O)C(C)C(OC2CC(C)(OC)C(O)C(C)O2)C(C)C(OC2OC(C)CC(N(C)C(C)C)C2O)C(C)(O)CC(C)C(=O)C(C)C2N(CC2)C(=O)O1	CCCC1OC(=O)C(C)C(OC2CC(C)(OC)C(O)C(C)O2)C(C)C(OC2OC(C)CC(N(C)C(C)C)C2O)C(C)(O)CC(C)C(=O)C(C)C2CCN2C(=O)O1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(Cl)cc1NC(=O)c1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccccc2)cc1	Cc1ccc(Cl)cc1NC(=O)c1ccc(S(=O)(=O)Nc2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(COc1ccccc1)NS(=O)(=O)c1ccco1	O=C(COc1ccccc1)NS(=O)(=O)c1ccco1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)NN=C2C(=O)Nc3ccccc32)cc1	Cc1ccc(S(=O)(=O)NN=C2C(=O)Nc3ccccc32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CN(C)CCCCCN1C(=O)CCc2cc(C#N)ccc21	CN(C)CCCCCN1C(=O)CCc2cc(C#N)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC1(O)Cc2ccccc2-n2c1nc1ccccc1c2=O	CCCCC1(O)Cc2ccccc2-n2c1nc1ccccc1c2=O	TRUE	TRUE	TRUE
COC(=O)c1sccc1-n1ccccc1C(=O)C(=O)Nc1ccc(C)cc1C	COC(=O)c1sccc1-n1ccccc1C(=O)C(=O)Nc1ccc(C)cc1C	TRUE	TRUE	TRUE
NC(=O)c1ccccc2c1CC(N(Cc1ccccc1)c1ccccc1)C2	NC(=O)c1ccccc2c1CC(N(Cc1ccccc1)c1ccccc1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc2c1OCC(CNC(=O)c1ccccc1)C2	COc1ccccc2c1OCC(CNC(=O)c1ccccc1)C2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1ccccc1NC(c1ccccc1)c1c(O)ccc2ccccc12	O=C(O)c1ccccc1NC(c1ccccc1)c1c(O)ccc2ccccc12	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(CSc1ncccn1)NC(=O)NC1CCCC1	O=C(CSc1ncccn1)NC(=O)NC1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccc(C2CC=C(C(=O)O)C(c3ccc(F)cc3)N2S(=O)(=O)c2ccc(C)cc2)cc1	CCc1ccc(C2CC=C(C(=O)O)C(c3ccc(F)cc3)N2S(=O)(=O)c2ccc(C)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc(C(C(=O)NC2CCCC2)N(C(=O)c2snc(C(N)=O)c2N)c2ccccc2)c1	COc1ccccc(C(C(=O)NC2CCCC2)N(C(=O)c2snc(C(N)=O)c2N)c2ccccc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NCC1CCCO1)c1cc2ccccc2s1	O=C(NCC1CCCO1)c1cc2ccccc2s1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCOc1ccc(S)cn1-c1ccc(C(Nc2ccc(C(=N)N)cc2)c2ccc(CN3CCCC3)cc2)cc1	CCCOc1ccc(S)cn1-c1ccc(C(Nc2ccc(C(=N)N)cc2)c2ccc(CN3CCCC3)cc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(NC(=O)CCC(NC(=O)C1C2CCCC2CN1C(=O)C(NC(=O)C(NC(=O)C(=O)NC1CC1)C(C)C)C(C)C(=O)NC(C)C(=O)O	CC(NC(=O)CCC(NC(=O)C1C2CCCC2CN1C(=O)C(NC(=O)C(NC(=O)C(=O)NC1CC1)C(C)C)C(C)C(=O)NC(C)C(=O)O	FALSE	TRUE	TRUE
CCCCn1c(CNC(=O)c2sc3ccccc3c2Cl)nnc1SCC(=O)Nc1cc(C)on1	CCCCn1c(CNC(=O)c2sc3ccccc3c2Cl)nnc1SCC(=O)Nc1cc(C)on1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)c1ccc(NC(=O)Cn2nc(-c3ccccc3Cl)ccc2=O)cc1	CC(=O)c1ccc(NC(=O)Cn2nc(-c3ccccc3Cl)ccc2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1nc2ccccc2c2cc(NC(=O)c3ccccc3OC)ccc21	Cc1nc2ccccc2c2cc(NC(=O)c3ccccc3OC)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(c1ccc(-c2ccc3nnc(-c4ccccc4)n3n2)cc1)N1CCCC1	O=S(=O)(c1ccc(-c2ccc3nnc(-c4ccccc4)n3n2)cc1)N1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCNC(=O)n1cnc(S(=O)(=O)C2CC3CCC2C3)n1	CCNC(=O)n1cnc(S(=O)(=O)C2CC3CCC2C3)n1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1ccccc1[N+](=O)[O-])c1ccccl([N+](=O)[O-])c1	O=C(c1ccccc1[N+](=O)[O-])c1ccccl([N+](=O)[O-])c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NC(C(=O)O)c1ccccc1)C(S)CC(=O)c1ccc(Br)cc1	O=C(CC(S)C(=O)NC(C(=O)O)c1ccccc1)c1ccc(Br)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
C=C(CCC12OC(C(=O)O)C(O)(C(=O)O)C(C(=O)O)(O1)C(OC(=O)CCCCCCCCCCCC)C2O)C(OC(C)=O)C(C)Cc1ccccc1	C=C(CCC12OC(C(=O)O)C(O)(C(=O)O)C(C(=O)O)(O1)C(OC(=O)CCCCCCCCCCCC)C2O)C(OC(C)=O)C(C)Cc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)c2cc(OC3CCCCO3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(O)ccc21	CC1(C)c2cc(OC3CCCCO3)ccc2C(=O)c2c1[nH]c1cc(O)ccc21	TRUE	TRUE	TRUE
C#CCOc1ccc(CCC(C)C)cc1	C#CCOc1ccc(CCC(C)C)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)OCC1OC(OCc2cccc(-c3ccccc3)c2)C(OC(C)=O)C(OC(C)=O)C1OC(C)=O	CC(=O)OCC1OC(OCc2cccc(-c3ccccc3)c2)C(OC(C)=O)C(OC(C)=O)C1OC(C)=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1ccc(OCC)c(NC(=O)Nc2ccc(N)cc2)c1	CCOc1ccc(OCC)c(NC(=O)Nc2ccc(N)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1=NN(C(C)C)C(=O)C1=Cc1ccc2c(c1)C=CC2=O	CC1=NN(C(C)C)C(=O)C1=Cc1ccc2c(c1)C=CC2=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(N2CCN(C(=O)Cn3ncc4c(C)n(-c5ccccc5)nc4c3=O)CC2)cc1	COc1ccc(N2CCN(C(=O)Cn3ncc4c(C)n(-c5ccccc5)nc4c3=O)CC2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1-c1nnc(SCC(=O)Nc2ccccc2[N+](=O)[O-])o1	COc1ccccc1-c1nnc(SCC(=O)Nc2ccccc2[N+](=O)[O-])o1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCCC(O)C1CCC(C(O)CCCCCCCCCCC(O)C(O)CC(O)CC2=CC(C)OC2=O)O1	CCCCCCCCCCCCC(O)C1CCC(C(O)CCCCCCCCCCC(O)C(O)CC(O)CC2=CC(C)OC2=O)O1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCOc1ccc(C(=O)NCC(=O)OCc2sc(N3CCOCC3)n2)c1	CCCCOc1ccc(C(=O)NCC(=O)OCc2sc(N3CCOCC3)n2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=S(=O)(NCc1ccc(C(F)(F)F)cc1)c1nc2c(C(F)(F)F)cc(F)cc2[nH]1	O=S(=O)(NCc1ccc(C(F)(F)F)cc1)c1nc2c(C(F)(F)F)cc(F)cc2[nH]1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)CC(C(=O)N1CCc2sccc2C1)N1C(=O)CCC1=O	CC(C)CC(C(=O)N1CCc2sccc2C1)N1C(=O)CCC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCC(C)C(=O)Nc1ccc(C2CCCN2C(=O)CCC)cc1	CCCCC(C)C(=O)Nc1ccc(C2CCCN2C(=O)CCC)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc(C(=O)N2CCC2(C)C(=O)NS(=O)(=O)c2ccc(Cl)cc2)c1	COc1ccccc(C(=O)N2CCC2(C)C(=O)NS(=O)(=O)c2ccc(Cl)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOc1cc(C(c2c(C)n[nH]c2O)c2c(C)n[nH]c2O)ccc1OCc1ccc(F)cc1	CCOc1cc(C(c2c(C)n[nH]c2O)c2c(C)n[nH]c2O)ccc1OCc1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2sc(N3CCN(C(=O)C=Cc4ccc(Cl)cc4Cl)CC3)nc2c1	COc1ccc2sc(N3CCN(C(=O)C=Cc4ccc(Cl)cc4Cl)CC3)nc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
NcC1ccc(Cl)cc1CN=C(O)C1CCCN1C(=O)c1ccc2nc[nH]c2c1	NcC1ccc(Cl)cc1CN=C(O)C1CCCN1C(=O)c1ccc2nc[nH]c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)c1ccc(NC(=O)N2CCCC2c2ccsc2)cc1	CC(C)c1ccc(NC(=O)N2CCCC2c2ccsc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cc(S(=O)(=O)N2CCC(C(=O)NCc3cccs3)CC2)ccc1F	Cc1cc(S(=O)(=O)N2CCC(C(=O)NCc3cccs3)CC2)ccc1F	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(c1ccccc1Nc1ccc2c(C=Cc3cccn3)n[nH]c2c1)N1CCCC1	O=C(c1ccccc1Nc1ccc2c(C=Cc3cccn3)n[nH]c2c1)N1CCCC1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc(S(=O)(=O)Oc2c3cc(C)ccc3cc(C)c2C)cc1	Cc1ccc(S(=O)(=O)Oc2c3cc(C)ccc3cc(C)c2c3)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCc1ccc(Cn2ncc3c2nc(NC(=O)CCNS(=O)(=O)c2ccsc2)n2nc(C)nc32)cc1	CCc1ccc(Cn2ncc3c2nc(NC(=O)CCNS(=O)(=O)c2ccsc2)n2nc(C)nc32)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCNC(=O)N1OC2(C)CC1(C)N(O)C(c1ccc(Cl)cc1)C2C	CCCCNC(=O)N1OC2(C)CC1(C)N(O)C(c1ccc(Cl)cc1)C2C	TRUE	TRUE	TRUE
NC(CSc1ccccc1)CSc1ccccc1	NC(CSc1ccccc1)CSc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(-c2cc(=O)n3ncc(-c4nnn[nH]4)c3[nH]2)cc1	COc1ccc(-c2cc(=O)n3ncc(-c4nnn[nH]4)c3[nH]2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCN1CCC(c2nc3ccc(NC(=O)N(C)c4ccc(F)c(OC5ccccc5)c4)cc3n2C(C)C)CC1	CCN1CCC(c2nc3ccc(NC(=O)N(C)c4ccc(F)c(OC5ccccc5)c4)cc3n2C(C)C)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOP(=O)(OCC)C1CC(C(=O)Nc2ccc(F)cc2)ON1C	CCOP(=O)(OCC)C1CC(C(=O)Nc2ccc(F)cc2)ON1C	TRUE	TRUE	FALSE
O=C(O)CCCCCOc1ccccc1OCCCCCOc1ccccc1	O=C(O)CCCCCOc1ccccc1OCCCCCOc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(C2=NN(C(=O)c3ccco3)C(O)(c3ccco3)C2)cc1	COc1ccc(C2=NN(C(=O)c3ccco3)C(O)(c3ccco3)C2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1N1C(=O)CC(N2N=C(C(F)(F)F)CC2c2ccccc2F)C1=O	COc1ccccc1N1C(=O)CC(N2N=C(C(F)(F)F)CC2c2ccccc2F)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(NC(=O)NC2N=C(c3ccccc3)c3ccccc3N(C)C2=O)cc1	COc1ccc(NC(=O)NC2N=C(c3ccccc3)c3ccccc3N(C)C2=O)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(C=Cc1ccccc1)OC1Cc2c(Cl)cc(Cl)cc2OC1c1cc(Cl)cc(Cl)c1	O=C(C=Cc1ccccc1)OC1Cc2c(Cl)cc(Cl)cc2OC1c1cc(Cl)cc(Cl)c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(OC)c(NC(=O)C(C)(C)c2cc(C(C)C)c(O)c(C(C)C)c2)cc1Cl	COc1cc(OC)c(NC(=O)C(C)(C)c2cc(C(C)C)c(O)c(C(C)C)c2)cc1Cl	TRUE	TRUE	TRUE

smiles	canonical_smiles	valid	unique	novel
Cc1c[n+](([O-])c(-c2ccc(Cl)cc2)c(NCc2ccccc2)[n+])1[O-]	Cc1c[n+](([O-])c(-c2ccc(Cl)cc2)c(NCc2ccccc2)[n+])1[O-]	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C(=O)NCC(F)(F)F)c1ccc(OCCc2cc(F)ccc2F)cc1	CC(C(=O)NCC(F)(F)F)c1ccc(OCCc2cc(F)ccc2F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc(OC)c(Nc2ncccc2-c2nnc(Nc3ccc(C)cn3)s2)c1	COc1ccc(OC)c(Nc2ncccc2-c2nnc(Nc3ccc(C)cn3)s2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccccc1-c1nnc(SCC(=O)N2CCCC(CN(C)C)C2)n1C	Cc1ccccc1-c1nnc(SCC(=O)N2CCCC(CN(C)C)C2)n1C	TRUE	TRUE	TRUE
CC1NC(=O)N(CC(=O)OCC(=O)c2ccccc2)C1=O	CC1NC(=O)N(CC(=O)OCC(=O)c2ccccc2)C1=O	TRUE	TRUE	TRUE
CCCCCCCCCCCCCNC(=O)OCC1COC(n2ccc(N)nc2=O)O1	CCCCCCCCCCCCCNC(=O)OCC1COC(n2ccc(N)nc2=O)O1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1)-c1nc3c(cccc3n1)C(=O)C2=NNc1cccc(Cl)c1Cl	COc1ccc2c(c1)-c1nc3c(cccc3n1)C(=O)C2=NNc1cccc(Cl)c1Cl	FALSE	TRUE	TRUE
COc1cc(OC)c2c(=O)c3ccccc3oc2c1CN1CCNCC1	COc1cc(OC)c2c(=O)c3ccccc3oc2c1CN1CCNCC1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C1CCCC(=O)C1=Cc1ccc2c(c1)OCO2	O=C1CCCC(=O)C1=Cc1ccc2c(c1)OCO2	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(O)c1ccc2nc(-c3ccccc3)c(-c3ccccc3)nc2c1	O=C(O)c1ccc2nc(-c3ccccc3)c(-c3ccccc3)nc2c1	TRUE	TRUE	FALSE
c1ccc2c(c1)ccn2Cc1ccc2c(-c3ccsc3)n[nH]c2c1	c1ccc2c(c1)ccn2Cc1ccc2c(-c3ccsc3)n[nH]c2c1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cccc(NC(=O)c2cn(-c3ccccc3)nc2-c2ccc(Cl)cc2)c1	COc1cccc(NC(=O)c2cn(-c3ccccc3)nc2-c2ccc(Cl)cc2)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CCOC(=O)C1CS(C(c2ccc(OC)cc2)N1C(=O)c1cccc(Br)c1	CCOC(=O)C1CS(C(c2ccc(OC)cc2)N1C(=O)c1cccc(Br)c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1CC(=O)Nc2ccccc2-c2nc3ccccc3c(=O)n21	CC1CC(=O)Nc2ccccc2-c2nc3ccccc3c(=O)n21	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(OC)c2c(=O)cc(CN3CCCC3)oc2c1	COc1cc(OC)c2c(=O)cc(CN3CCCC3)oc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)Oc1cc(OC(C)=O)c2c(=O)c(OC(C)=O)c(-c3ccc(OC(C)=O)c(OC(C)=O)c3)oc2c1	CC(=O)Oc1cc(OC(C)=O)c2c(=O)c(OC(C)=O)c(-c3ccc(OC(C)=O)c(OC(C)=O)c3)oc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(C(=O)Nc2ccc3c(c2)C(=O)OC3)c1	Cc1cccc(C(=O)Nc2ccc3c(c2)C(=O)OC3)c1	TRUE	TRUE	TRUE
O=C(NN=Cc1cc(Br)ccc1O)c1cc2c(ccc3ccccc32)oc1=O	O=C(NN=Cc1cc(Br)ccc1O)c1cc2c(ccc3ccccc32)oc1=O	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1cccc(N2CCN(C(=O)c3cc4ccc(NC5CCN(Cc6ccco6)CC5)nc4nc3O)CC2)c1C	Cc1cccc(N2CCN(C(=O)c3cc4ccc(NC5CCN(Cc6ccco6)CC5)nc4nc3O)CC2)c1C	TRUE	TRUE	TRUE
C=CC1=C(C(=O)N2CCN(c3ccc(F)cc3)CC2)CC(C(C(=O)NCCc2cccn2)C(=O)N1	C=CC1=C(C(=O)N2CCN(c3ccc(F)cc3)CC2)CC(C(C(=O)NCCc2cccn2)C(=O)N1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)(C)c1ccc(CNC(=O)C2CCC(=O)N2Cc2ccccc2)cc1	CC(C)(C)c1ccc(CNC(=O)C2CCC(=O)N2Cc2ccccc2)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccc2c(c1)CCC(=c1sc(=c3cc(N4CCNCC4)sc4ncccc32)n1-c1ccccc1C)C2=O	COc1ccc2c(c1)CCC(=c1sc(=c3cc(N4CCNCC4)sc4ncccc32)n1-c1ccccc1C)C2=O	FALSE	TRUE	TRUE
CC(C)N(C(=O)Cn1c(-c2ccccc2)nc2nc(N)cc(O)c21)c1ccccc1	CC(C)N(C(=O)Cn1c(-c2ccccc2)nc2nc(N)cc(O)c21)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
O=c1ccc(N2CCN(c3ccc(Cl)cc3)CC2)nn1-c1ccc(F)cc1	O=c1ccc(N2CCN(c3ccc(Cl)cc3)CC2)nn1-c1ccc(F)cc1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(C)N1C(=O)c2ccccc2C1C(=O)Nc1ccc2nc(NC(=O)C3CCCC3)sc2c1	CC(C)N1C(=O)c2ccccc2C1C(=O)Nc1ccc2nc(NC(=O)C3CCCC3)sc2c1	TRUE	TRUE	TRUE
CC(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)NC(CCCNC(=N)N)C(=O)NCc1ccccc1	CC(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)NC(CCCNC(=N)N)C(=O)NCc1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
CCC(CC)(CNC(=O)c1cc2c(=O)n3ccccc3nc2[nH]1)c1ccccc1	CCC(CC)(CNC(=O)c1cc2c(=O)n3ccccc3nc2[nH]1)c1ccccc1	TRUE	TRUE	TRUE
COc1cc(NC(=O)c2cccc([N+](=O)[O-])c2)ccc1NC(=O)c1cccs1	COc1cc(NC(=O)c2cccc([N+](=O)[O-])c2)ccc1NC(=O)c1cccs1	TRUE	TRUE	TRUE
CN1CCC(N(Cc2ccc(-c3ccc(CN4C(=O)c5cccc([N+](=O)[O-])c5C4=O)cc3)cc2)C(=O)Cn2c(SCc3ccc(F)cc3)nc3cc(Cl)ccc32)CC1	CN1CCC(N(Cc2ccc(-c3ccc(CN4C(=O)c5cccc([N+](=O)[O-])c5C4=O)cc3)cc2)C(=O)Cn2c(SCc3ccc(F)cc3)nc3cc(Cl)ccc32)CC1	TRUE	TRUE	TRUE
CC1(C)OC(CCO(Cc2ccccc2)c2ccc(Cl)cc2Cl)=CC1=O	CC1(C)OC(CCO(Cc2ccccc2)c2ccc(Cl)cc2Cl)=CC1=O	TRUE	TRUE	TRUE
COc1ccccc1-c1nnc(SCc2cc(O)nc(-c3ccccc3OC)n2)n1-c1ccccc1	COc1ccccc1-c1nc(O)cc(CSc2nnc(-c3ccccc3OC)n2-c2ccccc2)n1	TRUE	TRUE	TRUE
Cc1ccc2c(=O)n(CC(=O)NCc3ccco3)cnc2c1	Cc1ccc2c(=O)n(CC(=O)NCc3ccco3)cnc2c1	TRUE	TRUE	TRUE