Selected Visualization Pair SMILES:

CC(=O)O[C@H]1CC[C@]2(C)C3CC[C@@]4(C)C(CC=C4C4=CN=CC=C4)C3CC=C2C1 CC(=O)NCCCS(O)(=O)=O

Selected Visualization Pair SMILES and Plots:

 $\underline{CC(=O)O[C@H]1CC[C@]2(C)C3CC[C@@]4(C)C(CC=C4C4=CN=CC=C4)C3CC=C2C1}$

$$0 = S = 0$$

$$H_{3}C$$

$$CC(=O)NCCCS(O)(=O)=O$$

GrammarVAE Result SMILES:

CC(=O)NCCC#[PH]C=O

NC(=O)NCCOOC(=O)[O-]

CC(=O)NCC#CPC=O

CC(=O)NCOCOC=O

CC(=O)NNCC#[PH]C=O

CC(=O)NCCOOC=O

CC(=O)NNCNPC=O

CC(=O)NCC#CP(=O)=S

CC(=O)NCCCNC=O

CC(=O)NCCCOP=O

NC(=O)NCCCNC(=O)O

```
CC(=O)NCCCOC=O
```

CC(=O)NNCCOC=O

CC(=O)NSCCOC=O

CC(=O)NCC=NP(=O)=S

CC(=O)NCOCCC=O

CC(=O)NCCC=[P+]([O-])S

NC(=O)CCCOOC(=O)[O-]

CC(=O)NCSCPC=O

CC(=O)NCC=CNC=O

CC(=O)NCCCCC=O

CC(=O)NCSCNC=O

CC(=O)NNCCPC=O

CC(=O)NCOCNC=O

CC(=O)NCCCPC=O

CC(=O)NN=CCC(=O)[O-]

CC(=O)CNCCOC=O']

GrammarVAE Result SMILES and Plots:

CC(=O)NCCC#[PH]C=O

NC(=O)NCCOOC(=O)[O-]

CC(=O)NCC#CPC=O

CC(=O)NCOCOC=O

CC(=O)NNCC#[PH]C=O

$$H_3C$$
 O
 O
 O
 O

CC(=O)NCCOOC=O

CC(=O)NNCNPC=O

CC(=O)NCC#CP(=O)=S

CC(=O)NCCCNC=O

CC(=O)NCCCOP=O

$$H_2N$$
 H_2N
 H_3N
 H_4N
 H_5N
 H_5N

NC(=0)NCCCNC(=0)O

CC(=O)NCCCOC=O

CC(=O)NNCCOC=O

CC(=O)NSCCOC=O

CC(=O)NCC=NP(=O)=S

$$H_3C$$
 N
 O
 O

CC(=O)NCOCCC=O

CC(=O)NCCC=[P+]([O-])S

NC(=O)CCCOOC(=O)[O-]

CC(=O)NCSCPC=O

CC(=O)NCC=CNC=O

CC(=O)NCCCCC=O

$$H_3C$$
 N
 S
 N
 N
 O

CC(=O)NCSCNC=O

CC(=O)NNCCPC=O

CC(=O)NCOCNC=O

CC(=O)NCCCPC=O

CC(=O)NN=CCC(=O)[O-]

CC(=O)CNCCOC=O

Mol-Cycle GAN Result SMILES:

CC(=O)O[C@H]1CC[C@H]2[C@H](C)c3nc(C4CCCC4)sc3C[C@H]2[C@H]1C

CC(=O)O[C@H]1C=C[C@@H]2[C@@]3(C)CC[C@H](C)C[C@@H]3CC[C@@]12C

CC(=O)C1=CC[C@@H](Oc2nc3c(s2)CC[C@@H](C)[C@H]3C)C12CCCC2

C[C@@H]1NN=C[C@H]1CNS(=O)(=O)CCc1ccco1

CC(=O)O[C@H]1[C@H]2[C@H]([C@H]3CCCO3)CCC[C@]2(C)C2=C3N=C(C)S[C@@H]3 CC[C@H]21

CC(=O)O[C@H]1C2=C3N=C(C)S[C@H]3CC[C@H]2[C@]2(C)CCC[C@H]([C@H]3CCCO3) [C@H]12

CC(=O)O[C@@H]1CC[C@]2(C)C(=CC[C@H]3[C@@H]4CC=C([C@H]5CCCO5)[C@@]4(C)CC[C@H]32)C1

CC(=O)C1=Cc2csc(C)c2[C@H]1O[C@H]1CO[C@H]2CCCC[C@H]2C1(C)C

CC(=O)NCCCS(=O)(=O)[O-]

 $CC(=O)/N=C\setminus CCS(C)(=O)=O$

Cc1cc(C)c2c(n1)C1(CCC1)[C@@H](C(=O)OCC(=O)[O-])CC2

 $\begin{array}{l} CC(=O)O[C@@H]1C[C@H]([C@H]2CC[C@H]3CCCC=C3C2)O[C@H]2CCC[C@H](N)[C@@]21C \end{array}$

CC(=O)O[C@@H]1C2=C3N=C(C)S[C@H]3CC[C@@H]2[C@@]2(C)CCC[C@@H]([C@@H]3CCCO3)[C@@H]12

```
CC(=O)O[C@H]1C[C@H]([C@@H]2CCCC3=CCCC[C@@H]32)O[C@H]2CC[C@]3(CO3)[CO3)[CO3]
C@@]12C
CC1=CCC2(CCC3(CC2)O[C@H](C)[C@@]2(O)[C@@H](C(=O)[O-])CO[C@]32C)NC1
CC(=O)O[C@H]1CC[C@]2(C)CC[C@H]3CC[C@]4(C)C(=CC[C@H]4Br)C3=C2C1
CC(=O)O[C@H]1C2=C3N=C(C)S[C@@H]3CC[C@@]2(C)[C@H]2CC(=O)O[C@@H]12
CC(=O)O[C@@H]1CC[C@H]2[C@H](C)c3nc([C@H]4CCCCC4=O)sc3C[C@]21C
CC(=O)O[C@H]1CC[C@H]2[C@@H](C)c3nc([C@@H]4CCCC[C@H]4Br)sc3C[C@@]12C
CC(=O)NCC[C@@H](C)[S@](C)=O
C[C@]1(CNS(=O)(=O)CCCO)CN(N)CS1
CC(=O)O[C@H]1CC[C@@H]2CCO[C@@]3(OCC[C@H]3C(N)=O)[C@]2(C)[C@@H]1C
CC(=O)O[C@H]1CC[C@@H]2CC=C3C[C@@H](c4cencc4)CC[C@]3(C)[C@H]2[C@@H]1
CC(=O)Oc1cnc2c(c1C)[C@@H]([C@H]1CCCO1)C1=C(C2)C[C@H](C)CC1
CC(=O)Oc1ncc2c(c1C)[C@H]1C(=CC2)CC[C@@H]([C@@H]2CCCO2)[C@@H]1CO
CC(=O)O[C@H]1[C@H]2Cc3sc(C)nc3C[C@H]2[C@@]2(C)CCC[C@H]([C@H]3CCCO3)[C]
@H]12
CC(=O)Oc1cc2c(nc1C)CC=C1C[C@@H]([C@H]3CCCO3)CC[C@]12C
C[C@@H](C#N)OCCCN1C=NC[C@@H](C)C1=O
CC(=O)N1C[C@@H](O)[C@@H]2[C@H](c3cc(C)cs3)[C@@H](C3CCCC3)CC[C@H]21
CC(=O)O[C@H]1C[C@H]([C@@H]2CCCC3=CCCC[C@@H]32)O[C@H]2C(O)=CC[C@@]
12C
CC(C)(O)/N=C/CCCN1CNc2cccc21
CC(=N)CS(=O)(=O)CCCNC(C)=O
CC(=O)O[C@@H]1CC[C@H]2CC=C3C[C@H]([C@H]4CCCO4)CC[C@]3(C)[C@H]2[C@H]
11C
CC(=O)NCCC[S@](=O)O
CN1CNCN(CC(=O)CCO)C1
Cc1cc(C)c(NCCOC2(C)CCCC2)s1
CC1(C)[C@@H](CONC(=O)[C@H]2CCCO2)CO[C@@H]2CCCC[C@@H]21
CC(=O)CNS(C)(=O)=O
CC(=O)CNS(=O)(=O)CCCO
Cc1ccc(N2C(=O)O[C@@H]3[C@H](C\#N)[C@@H]4CC[C@@H](C)[C@H]4[C@H](C)[C@H]4[C@H](C)[C@H]4[C@H](C)[C@H]4[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C@H](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C](C)[C
H(32)o1
CC(=O)C1=CCC[C@@H]1O[C@@H](C)[C@H]1CCC[C@H]2SC3=C(CC=CC3)[C@@]12C
C[C@H]1C(=O)OC2(CCCCC2)[C@@]1(N)[C@H]1CC[C@@H]2CCC[C@@H]2C1
CCOC(=O)CCNC(C)=O
CC1(C)C(=O)O[C@@]2(C)C1=CC=C1OCC(c3nc4c(s3)CCCC4)=C12
CC(C)/N=C/CCNS(=O)(=O)Cc1ccon1
CC(=O)O[C@H]1[C@@H](C)[C@@H]([C@@H]2CCCC3=CCCC[C@H]32)OCC1(C)C
CC(=O)O[C@H]1CC(=O)[C@@H](C)[C@@]1(C)[C@@H]1CCOC2(CCCCC2)C1
CC(C)/N=C/C[C@H]1C=C(CC1)C=[NH+]1
CC(=O)NCCCC[S@@](=O)O
CC(=O)O[C@H]1CCC2=CC[C@H]3OCC[C@H](C4(Br)CCC4)[C@@H]3[C@]2(C)[C@H]1
\mathbf{C}
CC(=O)O[C@H]1C[C@H]([C@@H]2CCCC3=CCCC[C@H]32)O[C@]2(O)COCC[C@@]12C
CC1=C2[C@@H](CC1)CC[C@H]1[C@H](C)[C@@H](OC(=O)c3ccncc3)CC[C@@H]21
```

```
CC(=O)NCCC[SH](=O)(O)C[NH3+]
CC1=NC2=C3[C@@H](CC[C@@H]2S1)[C@@H](OC(=O)[C@H]1C[C@@H]2CC[C@H]1
O2)[C@H]1[C@H](C)CCC[C@@]31C
CC(=O)O[C@H]1C[C@@H]([C@@H]2CCCC3=CCCC[C@@H]32)OC2=Cc3ncccc3[C@]21
CC(=O)O[C@@H]1CC[C@H]2CC=C3[C@@H](CC[C@H]4CC[C@H]5CC=C[C@H]5[C@]3
4C)[C@@]21C
C[C@H]1[C@@H](C)[C@@H](OC(=0)[C@H]2OCOC2(C)C)CO[C@]12CCCCC21CC=CC1
CC1(C)[C@@H]2CC=C(CBr)[C@@]2(C)CC[C@@]1(C)O
CC(C)/N=C/CCNS(C)(=O)=O
Cc1cc(C)c(N2C(=O)O[C@@H]3CO[C@H]4C[C@@H]5CCCC[C@]5(C)[C@@]4(C#N)[C@
H<sub>1</sub>32)<sub>0</sub>1
CC(=O)O[C@H]1Cc2sc(C3CCC4(CCCO4)CC3)nc2[C@@H](C)[C@H]1C
CC(=O)C/N=C/C[C@@H](O)c1nc2cccc2[nH]1
CC(=O)NCCCS(C)(=O)=O
CC(=O)C1=C(C)[C@@H](O[C@H]2CCCOC23CCCCC3)[C@@]2(CCc3c(C)csc3C2)C1
CC[SH](=O)(O)CCCNC(C)=O
CC(=O)NCCC[S@@](=O)CC#N
CC(=O)O[C@H]1CCc2nc([C@H]3OCC(=O)C34CCCCC4)sc2[C@@H]1C
CC(C)=NC(C)(C)S(=O)(=O)N1CCSC1
CC(=O)O[C@H]1[C@H]2CC[C@@H]3SC(C)=NC3=C2[C@]2(C)CCC[C@@H](CO)[C@@A]
H]12
C[C@@H]1C[C@H](Br)CC[C@H]1[C@H]1[C@@](C)(O)C[C@]1(C)C1=CC=CCC1=O
CC(=O)O[C@H]1C[C@H]([C@@H]2CCCC3=CCCC[C@H]32)O[C@]2(C)CCC[C@@]12O
C[C@H](C[C@H]1CC[C@H]2CCCC=C21)[NH2+]C1CCCC1
CC(=O)/N=C\setminus CCO
CC(=O)NCCCCS(=O)(=O)O
CC1=C(CN(C)CCCOc2cccc2)CS(=O)(=O)C1
COCCCS(=O)(=O)NCC(C)(C)C1=c2cccc2=[NH+]C1
CC(=O)O[C@H]1CC=C2[C@@]3(C)Cc4nc(C)sc4C[C@@H]3CC[C@]21C
CC(=O)NCCC[S@@](=O)O']
```

Mol-Cycle GAN Result SMILES and Plot:

C[C@H]1CN(CCCS(=O)(=O)CO)C(=S)S1

 $\underline{\mathsf{CC}(=\mathsf{O})\mathsf{O}[\mathsf{C}@\mathsf{H}]\mathsf{1}\mathsf{C}\mathsf{C}[\mathsf{C}@\mathsf{H}]\mathsf{2}[\mathsf{C}@\mathsf{H}](\mathsf{C})\mathsf{c}\mathsf{3}\mathsf{n}\mathsf{c}(\mathsf{C}\mathsf{4}\mathsf{C}\mathsf{C}\mathsf{C}\mathsf{C}\mathsf{4})\mathsf{s}\mathsf{c}\mathsf{3}\mathsf{C}[\mathsf{C}@\mathsf{H}]\mathsf{2}[\mathsf{C}@\mathsf{H}]\mathsf{1}\mathsf{C}}$

 $\underline{\text{CC(=O)O[C@H]1C=C[C@@H]2[C@@]3(C)CC[C@H](C)C[C@@H]3CC[C@@]12C}}$

CC(=O)C1=CC[C@@H](Oc2nc3c(s2)CC[C@@H](C)[C@H]3C)C12CCCCC2

C[C@@H]1NN=C[C@H]1CNS(=O)(=O)CCc1ccco1

CC(=O)O[C@H]1[C@H]2[C@H]([C@H]3CCCO3)CCC[C@]2(C)C2=C3N=C(C)S[C@@H]3CC[C@H]21

 $\underline{\text{CC(=O)O[C@H]1C2=C3N=C(C)S[C@H]3CC[C@H]2[C@]2(C)CCC[C@H]([C@H]3CCCO3)[C@H]12}}$

 $\frac{\texttt{CC(=O)O[C@@H]1CC[C@]2(C)C(=CC[C@H]3[C@@H]4CC=C([C@H]5CCCO5)[C@@]4(C)CC[C@H]3}}{2)\texttt{C1}}$

CC(=O)C1=Cc2csc(C)c2[C@H]1O[C@H]1CO[C@H]2CCCC[C@H]2C1(C)C

CC(=O)NCCCS(=O)(=O)[O-]

 $CC(=O)/N=C\setminus CC(C)(=O)=O$

 $\underline{\text{Cc1cc}(C)\text{c2c}(\text{n1})\text{C1}(\text{CCC1})[\text{C@@H}](\text{C(=O)OCC(=O)[O-]})\text{CC2}}$

 $\underline{\text{CC(=O)O[C@@H]1C[C@H]([C@H]2CC[C@H]3CCCC=C3C2)O[C@H]2CCC[C@H](N)[C@@]21C}}\\$

CC1=CCC2(CCC3(CC2)O[C@H](C)[C@@]2(O)[C@@H](C(=O)[O-])CO[C@]32C)NC1

CC(=O)O[C@H]1CC[C@]2(C)CC[C@H]3CC[C@]4(C)C(=CC[C@H]4Br)C3=C2C1

 $\underline{\mathsf{CC}(=\mathsf{O})\mathsf{O}[\mathsf{C}@\mathsf{H}]\mathsf{1}\mathsf{C}\mathsf{2}=\mathsf{C}\mathsf{3}\mathsf{N}=\mathsf{C}(\mathsf{C})\mathsf{S}[\mathsf{C}@@\mathsf{H}]\mathsf{3}\mathsf{C}\mathsf{C}[\mathsf{C}@@]\mathsf{2}(\mathsf{C})[\mathsf{C}@\mathsf{H}]\mathsf{2}\mathsf{C}\mathsf{C}(=\mathsf{O})\mathsf{O}[\mathsf{C}@@\mathsf{H}]\mathsf{1}\mathsf{2}}$

CC(=O)O[C@@H]1CC[C@H]2[C@H](C)c3nc([C@H]4CCCCC4=O)sc3C[C@]21C

 $\underline{CC(=O)O[C@H]1CC[C@H]2[C@@H](C)c3nc([C@@H]4CCCC[C@H]4Br)sc3C[C@@]12C}$

CC(=O)NCC[C@@H](C)[S@](C)=O

C[C@]1(CNS(=O)(=O)CCCO)CN(N)CS1

 $\underline{CC(=O)O[C@H]1CC[C@@H]2CCO[C@@]3(OCC[C@H]3C(N)=O)[C@]2(C)[C@@H]1C}\\$

 $\underline{CC(=O)O[C@H]1CC[C@@H]2CC=C3C[C@@H](c4ccncc4)CC[C@]3(C)[C@H]2[C@@H]1C}\\$

 $\underline{\mathsf{CC}(=\mathsf{O})\mathsf{Oc}\mathsf{1cnc}\mathsf{2c}(\mathsf{c}\mathsf{1C})}\underline{[\mathsf{C@H}]}(\underline{[\mathsf{C@H}]}\mathsf{1CCCO1})\mathsf{C1}\underline{=}\mathsf{C}(\mathsf{C2})\underline{\mathsf{C}}\underline{[\mathsf{C@H}]}(\mathsf{C})\mathsf{CC1}$

 $\underline{CC(=O)Oc1ncc2c(c1C)[C@H]1C(=CC2)CC[C@@H]([C@@H]2CCCO2)[C@@H]1CO}$

 $\underline{CC(=O)O[C@H]1[C@H]2Cc3sc(C)nc3C[C@H]2[C@@]2(C)CCC[C@H]([C@H]3CCCO3)[C@H]12}\\$

CC(=O)Oc1cc2c(nc1C)CC=C1C[C@@H]([C@H]3CCCO3)CC[C@]12C

C[C@@H](C#N)OCCCN1C=NC[C@@H](C)C1=O

 $\underline{CC(=O)N1C[C@@H](O)[C@@H]2[C@H](c3cc(C)cs3)[C@@H](C3CCCC3)CC[C@H]21}$

 $\underline{\text{CC(=O)O[C@H]1C[C@H]([C@@H]2CCCC3=CCCC[C@@H]32)O[C@H]2C(O)=CC[C@@]12C(O)} \\$

CC(C)(O)/N=C/CCCN1CNc2cccc21

CC(=N)CS(=O)(=O)CCCNC(C)=O

CC(=O)NCCC[S@](=O)O

CN1CNCN(CC(=O)CCO)C1

Cc1cc(C)c(NCCOC2(C)CCCCC2)s1

$\underline{\mathsf{CC1}(\mathsf{C})}\underline{[\mathsf{C@@H]}(\mathsf{CONC}(=\mathsf{O})}\underline{[\mathsf{C@H]}2\mathsf{CCC02})\mathsf{CO}}\underline{[\mathsf{C@@H]}2\mathsf{CCCC}}\underline{[\mathsf{C@@H]}2\mathsf{1}}$

CC(=O)CNS(C)(=O)=O

CC(=O)CNS(=O)(=O)CCCO

Cc1ccc(N2C(=O)O[C@@H]3[C@H](C#N)[C@@H]4CC[C@@H](C)[C@H]4[C@H](C)[C@H]32)o1

 $\underline{\text{CC(=O)C1=CCC[C@@H]10[C@@H](C)[C@H]1CCC[C@H]2SC3=C(CC=CC3)[C@@]12CC}$

 $\underline{\mathsf{C[C@H]1C(=O)OC2(CCCC2)[C@@]1(N)[C@H]1CC[C@@H]2CCC[C@@H]2C1}}$

CCOC(=O)CCNC(C)=O

$\underline{CC1(C)C(=O)O[C@@]2(C)C1=CC=C1OCC(c3nc4c(s3)CCCC4)=C12}$

CC(C)/N=C/CCNS(=O)(=O)Cc1ccon1

$\underline{\mathsf{CC}(=\mathsf{O})\mathsf{O}[\mathsf{C@H}]\mathsf{1}[\mathsf{C@@H}](\mathsf{C})[\mathsf{C@@H}]([\mathsf{C@@H}]\mathsf{2}\mathsf{C}\mathsf{C}\mathsf{C}\mathsf{C}\mathsf{3}} = \mathsf{CCCC}[\mathsf{C@H}]\mathsf{3}\mathsf{2})\mathsf{O}\mathsf{C}\mathsf{C}\mathsf{1}(\mathsf{C})\mathsf{C}}$

$\underline{CC(=O)O[C@H]1CC(=O)[C@@H](C)[C@@]1(C)[C@@H]1CCOC2(CCCCC2)C1}$

CC(C)/N=C/C[C@H]1C=C(CCI)C=[NH+]1

CC(=O)NCCCC[S@@](=O)O

$\underline{\mathsf{CC}(=\mathsf{O})\mathsf{O}[\mathsf{C@H}]\mathsf{1}\mathsf{CCC2}} = \underline{\mathsf{CC}[\mathsf{C@H}]\mathsf{3}\mathsf{O}\mathsf{CC}[\mathsf{C@H}](\mathsf{C4}(\mathsf{Br})\mathsf{CCC4})[\mathsf{C@@H}]\mathsf{3}[\mathsf{C@}]\mathsf{2}(\mathsf{C})[\mathsf{C@H}]\mathsf{1}\mathsf{C}}$

 $\underline{\text{CC(=O)O[C@H]1C[C@H]([C@@H]2CCCC3=CCC[C@H]32)O[C@]2(O)COCC[C@@]12CCCC}}$

$\underline{\text{CC1=C2[C@@H](CC1)CC[C@H]1[C@H](C)[C@@H](OC(=O)c3ccncc3)CC[C@@H]21}}$

C[C@H]1CN(CCCS(=O)(=O)CO)C(=S)S1

CC(=O)NCCC[SH](=O)(O)C[NH3+]

CC(=O)O[C@H]1C[C@@H]([C@@H]2CCCC3=CCCC[C@@H]32)OC2=Cc3ncccc3[C@]21C

 $\frac{\texttt{CC(=O)O[C@@H]1CC[C@H]2CC=C3[C@@H](CC[C@H]4CC[C@H]5CC=C[C@H]5[C@]34C)[C@@]21}{\underline{\texttt{C}}}$

$\underline{\mathsf{C[C@H]1[C@@H](C)[C@@H](OC(=O)[C@H]2OCOC2(C)C)CO[C@]12CCCC21CC=CC1}}$

$\underline{\mathsf{CC1}(\mathsf{C})}\underline{[\mathsf{C@@H}]}\underline{\mathsf{2CC}}\underline{=}\mathsf{C}(\mathsf{CBr})\underline{[\mathsf{C@@}]}\underline{\mathsf{2}(\mathsf{C})}\allowbreak\mathsf{CC}\underline{[\mathsf{C@@}]}\underline{\mathsf{1}(\mathsf{C})}\mathsf{O}$

CC(C)/N=C/CCNS(C)(=O)=O

Cc1cc(C)c(N2C(=O)O[C@@H]3CO[C@H]4C[C@@H]5CCCC[C@]5(C)[C@@]4(C#N)[C@H]32)o1

 $\underline{\mathsf{CC}(=\mathsf{O})\mathsf{O}[\mathsf{C@H}]\mathsf{1Cc2sc}(\mathsf{C3CCC4}(\mathsf{CCCO4})\mathsf{CC3})\mathsf{nc2}[\mathsf{C@@H}](\mathsf{C})[\mathsf{C@H}]\mathsf{1C}}$

CC(=O)C/N=C/C[C@@H](O)c1nc2cccc2[nH]1

$$0 = S = 0$$

$$H_{3}C$$

$$CC(=0)NCCCS(C)(=0)=0$$

$\underline{\mathsf{CC}(=\mathsf{O})\mathsf{C1}=\mathsf{C}(\mathsf{C})[\mathsf{C@@H}](\mathsf{O}[\mathsf{C@H}]2\mathsf{CCCOC23CCCCC3})[\mathsf{C@@}]2(\mathsf{CCc3c}(\mathsf{C})\mathsf{csc3C2})\mathsf{C1}}$

CC(=O)NCCC[S@@](=O)CC#N

CC(=O)O[C@H]1CCc2nc([C@H]3OCC(=O)C34CCCCC4)sc2[C@@H]1C

CC(C)=NC(C)(C)S(=O)(=O)N1CCSC1

CC(=O)O[C@H]1[C@H]2CC[C@@H]3SC(C)=NC3=C2[C@]2(C)CCC[C@@H](CO)[C@@H]12

$\underline{C[C@@H]1C[C@H](Br)CC[C@H]1[C@H]1[C@@](C)(O)C[C@]1(C)C1=CC=CCC1=O}$

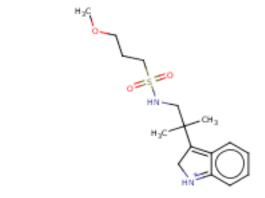
CC(=O)O[C@H]1C[C@H]([C@@H]2CCCC3=CCCC[C@H]32)O[C@]2(C)CCC[C@@]12O

C[C@H](C[C@H]1CC[C@H]2CCCC=C21)[NH2+]C1CCCC1

CC(=O)/N=C\\CCO

CC(=O)NCCCCS(=O)(=O)O

CC1=C(CN(C)CCCOc2cccc2)CS(=O)(=O)C1



COCCS(=O)(=O)NCC(C)(C)C1=c2cccc2=[NH+]C1

$\underline{\mathsf{CC}(=\mathsf{O})\mathsf{O}[\mathsf{C@H}]\mathsf{1CC}=\mathsf{C2}[\mathsf{C@@}]\mathsf{3}(\mathsf{C})\mathsf{Cc4nc}(\mathsf{C})\mathsf{sc4C}[\mathsf{C@@H}]\mathsf{3CC}[\mathsf{C@}]\mathsf{21C}}$

CC(=O)NCCC[S@@](=O)O