

CC(=O)NCCC1 = CNc2c1cc(OC)cc2CC(=O)NCCc1c[nH]c2ccc(OC)cc12

 $\mathsf{CC}(=\!\mathbb{O})\mathsf{NCCC1} = \mathsf{CNc2c1cc}(\mathbb{OC})\mathsf{cc2CC}(=\!\mathbb{O})\mathsf{NCCc1c}[\mathsf{nH}]\mathsf{c2ccc}(\mathbb{OC})\mathsf{cc12}$

 $\label{eq:cc_constraint} \mathsf{CC}(=0)\mathsf{NCCC1} = \mathsf{CNc2c1}\mathsf{cc}(\bigcirc C)\mathsf{cc2CC}(=0)\mathsf{NCCc1}\mathsf{c[nH]c2ccc}(\bigcirc C)\mathsf{cc12}$