

smiles	herg	pld	ames	mmp	dili
<chem>Cc1cc(N)ccc1c2ccc(O)cc2</chem>				1	
<chem>C=CCN(CC=C)C1C(N2C3C2c4ccccc4c5ccc</chem>				0	
<chem>OC(Cn1ccnc1</chem>	0	0			0
<chem>C(=N\c1snc2ccccc12)/c3ccccc3</chem>				0	
<chem>NC1=NC(=O)N(C=C1O)C2OC(CO)C(O)C2</chem>				0	
<chem>Cc1cnc2cc(CO)c3c(nc(N)n3C)c2n1</chem>				1	
<chem>CC1(C)OC1COc2c3OC(=O)C=Cc3cc4ccoc:</chem>				0	
<chem>COc1ccc2c(c </chem>	0	0			
<chem>CN(C)[C@H]1[C@H]2C[C@H]3C(=C(O))[C</chem>				0	
<chem>CNC[C@@H](O)c1cccc(O)c1</chem>				0	
<chem>Clc1ccc2Sc3c</chem>	1	1			
<chem>CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC\C=C(/C)\C=C\C=C(/C)\C=C</chem>					0
<chem>ClC=CCl</chem>					0
<chem>OC1C2OC2c3c(ccc4ncccc34)C1O</chem>				0	
<chem>OC(=O)c1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]</chem>				1	
<chem>Cc1ccc(cc1)C2(O)CCN(CCCC(=O)c3ccc(F)cc3)CC2</chem>					0
<chem>CN1CCN(CC1)C2=Cc3ccccc:</chem>		0			
<chem>OCc1ccccc1[N+](=O)[O-]</chem>				0	
<chem>O=C(Nc1ccccc1SSc2ccccc2NC(=O)c3ccccc3)c4ccccc4</chem>					1
<chem>C[N+](C)[C@H]2CC[C@@H]1CC(C2)OC(=O)C(CO)c3c</chem>					0
<chem>CC(=O)N(O)c1ccc2ccccc2c1</chem>				1	
<chem>CN1C(=O)N(c</chem>	0				
<chem>c1ccc2c(c1)ccc3cc4ccc5ccccc5c4cc23</chem>				1	
<chem>CC(C)CO</chem>				0	0
<chem>COc1ccc(cc1)C(OC(=O)C)C=C</chem>				1	
<chem>COc1ccc(cc1)C(=C(CCC(=O)O)C#N)c2ccc</chem>				0	
<chem>O=N(=O)c1ccc2ccc3c4ccccc4cc5ccc1c2c</chem>				1	
<chem>CC1=CC2=C(C(=O)C(=O)[C@](C)(O)[C@H</chem>				1	
<chem>Oc1ccc(Cl)cc:</chem>	0	0		0	
<chem>C[C@H](N)CN1CCc2ccc(Br</chem>		1			
<chem>CC(=O)OCNC(=O)c1ccc(Cl)cc1</chem>				0	
<chem>CCC1(C)CO1</chem>				0	
<chem>CN(C(=O)c1csc(c1)[N+](=O)[O-])c2ccccc</chem>				1	
<chem>Cc1cc(C)c2ccccc2c1</chem>				0	
<chem>CCCCOC(=O)c1ccccc1C(=O)OCCCC</chem>				0	0
<chem>C=CC1CO1</chem>				1	0
<chem>CCCCCCCC\C=C/CCCCCCCC(=O)OC(CO)CO</chem>					0
<chem>CC1=CC(=O)C</chem>	0	0			0
<chem>FC(Cl)C(F)(F)F</chem>				0	
<chem>OC(C(=O)O)[C</chem>	0	0			
<chem>CC(N)C12CC3</chem>	0	0			0
<chem>CCSC(=N)Nc1</chem>	0				

O=C1c2ccccc2C(Cc3ccncc3	1		
CCN1CCN(C(	0	0	
Oc1ccc(cc1[N+](=O)[O-])c2ccccc2			0
COC1=CC(=O)c2c(nc(C)c3c4c[nH]ccc4nc			1
CCc1cccc2c3(	0	0	
N#Cc1c2ccccc2cc3ccccc13			1
NC(=S)NNC(=S)N			0
CN(C)CCNC(=O)c1cccc2C(=O)c3ccccc3Sc			1
C[C@]12CC[C(	0	0	0
CCCC#Cc1nc	0		
CS(=O)(=O)Nc1ccc(Nc2c3ccc(cc3nc4ccc			0
COC(=O)C1=CO[C@@H](C		0	
CCC(=O)OCC(=O)[C@@]1(OC(=O)CC)[C@H](C)C[C@H			1
COc1cc\C=C	0	0	
ClC(=C(Cl)Cl)Cl			0
Cc1ccc2ccccc2n1			1
Cc1cc2ccccc2cc1N(=O)=O			0
c1ccc2[nH]ccc2c1	0		0
CCCCC\C=C\C=O			0
[O-]C(=O)C=C			0
Cc1cnc2c(ccc3c2nc(N)n3C)n1			1
CCN(CC)CCNc1ccc2ncn3c4ccc(O)cc4C(=C			1
Oc1ccc2c3ccc4ccc5ccccc6cc(c2c1)c3c4c5			1
CCCCC(CC)CC	0	0	
Cc1oc2cc(NC(=O)Nc3ccnc4			1
[O-][N+](=O)c1oc\C=C\N2CCNC2=O)cc			1
CCC(=O)N(C1	1	0	0
Oc1ccc2C(=O)C=C(Oc2c1O			0
CC(Cc1ccccc1	0	0	
CNC1C(O)C(C	0	0	
[N-]=[N+]=C1C=CC(=O)C=C1			1
BrCBr			1
CCCCCCCCC(	0	0	0
CC(C)ON(OC(=O)C)C(=O)c1ccccc1			1
O[C@@H]1OC(=O)C(=C1C(Cl)Cl)Cl			1
CCc1cc(OC)c(C[C@H](C)N)cc1OC			0
CC1(C)CC2=C(C=O)C3(CC3(C)C(O)C2(O)C			1
Oc1ccc(cc1)N=Nc2ccccc2			1
C[C@H]1C[C@]2(O[C@@I		0	
COc1ccc(cc1)C(=O)N2N=CC(=C(Cl)C2=O			0
Cc1oc(C[N+](C)(C)C)cc1		0	
OCc1cc(O)c2C(=O)c3c(O)cccc3C(=O)c2c			1
ClCc1cccc(CCl)c1			0

O=C1c2ccccc2c3ccc4ccc5ccccc5c4c13	0	
CCCN1C(=O)c2ccccc2C1=O		0
CC(=O)Nc1nc	0	0
Fc1ccc2c(c[n	1	
Oc1ccc(Cl)c(Cl)c1	0	1
O=N(=Nc1ccc2c(Cc3ccccc23)c1)c4ccc5c	0	
CN[C@@H](Cc1c[nH]c2cc	0	
CC(=C)C(=O)OCC1CO1	1	0
OC(=O)C=Cc1ccc(O)c(O)c1		0
Oc1cccc2c3cc4ccccc4cc3c5ccccc5c12	1	
CC(=O)N(O)c1ccc(Cl)cc1	0	
C[C@]12[C@	0	0
NS(=O)(=O)c	0	0
C=C[C@H]1CO1	1	
NC(C#N)C(=N)C#N	0	
Oc1ccc(Cc2ccc(O)cc2)cc1		1
Oc1cc(O)c2C(=O)C=C(Oc2	0	
Cc1nc(NS(=C	0	0
CC(C)OC(=O)CC(O)(CC(=O)O)C(=O)O	0	
CCN1CCC[C@H]1CNC(=O)c	0	
O=N(=O)c1ccc(COc2ccccc2)cc1	0	
OCc1oc(cc1)c	0	0
Brc1ccc2ncnc(NCC=C)c2c1	0	
OC[P+](CO)(CO)CO	0	
CN(C)c1ccc(NC(=O)Nc2cc(	0	
NNc1nncc2cnccc12	1	
CN(N=O)C(=N)N[N+](=O)[O-]	1	
CC(=CC(=O)C)C		0
CCCC(=O)OC(	0	0
CCCCCCCCCCCC(=O)OOC(=O)CCCCCCCCC	0	
CCCCOc1cc(C	1	1
CCCCCCCCCCCC(=O)NCCO	0	
CN1CCC(=C2c3ccccc3CC(=O)c4sccc24)CC1		0
CN1C(CCl)Nc2cc(Cl)c(cc2[	0	
Nc1cccc2nc3ccccc3cc12	1	
COc1ccc2C3C	0	0
Cc1ncc([N+](	0	0
CC1CCC2C(C)C(=O)OC3OC	0	
O=C(ON=C1C=CC(=NOC(=O)c2ccccc2)C=	1	
COc1cc(c2ncccc2c1)[N+](=O)[O-]	1	
[O-]C(=O)C(Cl)(Cl)Cl		0
CIP(=O)(N1CCOC1=O)N2CCOC2=O	1	
ClCCl	1	0

CNC(=O)N(O)C(=O)C	1				
CC(C)Cc1nccs1	1		0		
CN(C)c1ccc(cc1)N=Nc2ccc3ccccc3c2	1				
NCCCCOCCOCCOCCCN				0	
CCCCC(=O)Nc1snc2ccc(Cl)cc12	0				
CCOc1cccc1OCCN[C@H](	0				
C[C@]12C=CC3=C4CCC(=O)C=C4CC[C@H]3[C@@H]1C				0	
OC(=O)C1CN	0	0			
COc1cc2CCN(C)[C@H]3Cc	1				
CC1(C)[C@H](CC[C@@]2(C)[C@H]1CC[C@]3(C)[C@C				0	
[O-]C(=O)Cc1cccc2ccccc12				0	
OCC(O)c1cccc1				0	
CC1(C)CC2C=C(C=O)C34CC3(C2C1)C(=O)	1				
Cn1c(N=N#N)nc2ccc3ncccc3c12	1				
COc1ccc(CCO)cc1				0	
[O-][N+](=O)c1ccc2c(CCc3cc(ccc23))[N+	1				
Cc1cc(N=Nc2cccnc2)c(N)cc1N	1				
CC1=CC(=O)NO1				0	
O[C@H]([C@H](O)[C@@H](O)C(=O)O)[C@H](O)C(=O				0	
Cc1cccc(c1)C	0	0			
Nc1ccc(Oc2ccc(Cl)cc2)cc1				0	
Cc1cccc(N)c1C	1				
C1OC1c2ccc3ccccc3c2	1				
CN1C(CC2=C	0	0			
CCC(=O)c1cccc1				0	
CC(=O)Nc1cc	0	0	0	0	1
Clc1ccc(c(Cl)c1Cl)c2ccc(Cl)c(Cl)c2Cl				1	
CC1CC(=O)O1	1			0	
CC1C(=O)OC2CC34C5CC(C	0				
COC(=O)c1cc(Cl)cc(Cl)c1				0	
CC(=O)NNC(=	0	0			
COc1ccc(CCN(CCc2ccc(OC	0				
COC(=O)Nc1	0	1	1		
COc1cc(NC(=O)CC(=O)C)c(OC)cc1Cl				0	
[O-][N+](=O)c1cccc1\C=C\C=C=O	1				
O=N(=O)c1ccc2[nH]c3ccccc3c2c1	1				
Cc1c2ccccc2c(COS(=O)(=O)O)c3ccc4ccc	1				
Cc1c(O)cc(cc1N(=O)=O)N(=O)=O	0				
CC(C)[C@@H](Nc1ccc(cc1Cl)C(F)(F)F)C(=O)OC(C#N)c				1	
CCOC(=O)C1=C(C)NC(=C(C1c2cccc(c2)N(=O)=O)C(=O)				1	
C1Cc2ccc3ccc4ccccc4c3c2C1	1				
Clc1ccc(C(Cn2ccnc2)OCc3c(Cl)cccc3Cl)c(Cl)c1				0	
CO\N=C/C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C(=				0	

CCOP(=S)(OCC)OCCSCC			1		
OC\C=C\1/O	0	0			
Cc1ncc(CO)c(CO)c1O			0	0	0
CC(O)(P(=O)(O)[O-])P(=O)(O)[O-]				0	
COC1=CC(=O)C=CC1=O			0		
O1c2cccc2Sc3cccc13			0		
CCCC[C@@H](CC)COP(OC[C@H](CC)CC			0		
CCCCCCCCC	0	0		0	
Oc1cc(cc2cc(	0	0			
OCC1NCC(O)C(O)C1O			0		
CN(C)N(=O)=O			1		
Fc1ccc(cc1)C(=O)CCCN2CC			0		
CCOC(=O)C1:	0	0			
[O-]Cl=O				0	
NC(=O)C1(O[C@H]1C(=O)c2cccc2)C(=C			1		
CNC(C)[C@@	0	0			
ON(C=O)c1cccc1			0		
Cc1ccc2c(ccc3c4cccc4ccc23)c1			1		
Cc1[nH]cnc1CSCCN=C(NCC#C)NC#N			0		
CC1(C)CCC(C)	0	0		1	
ClCC(Cl)CBr			1		
CN(CCOc1ccc	1	0			
OC(=O)Cc1cccc(c1)[N+](=O)[O-]			0		
CC[N+](CC)(CC)CCC(O)(C1CCCC1)c2cccc2				0	
C[C@@H](O)CNC[C@@H](C)O			0		
N[C@H]1C(O)O[C@H](CO)[C@H](O)[C@@H]1O				0	
CCN1C=C(C(=	0	0			
[O-][N+](=O)	1				
OC1CCCCCCCCCCC1				1	
CN(C)CCOC(=	0	0		0	
C[C@@]12C	0	0			
O=C\C=C\C1ccc2OCOC2c1			0		
CC1OC(=O)C(=C1C)O				0	
O=C=Nc1ccc(Cc2ccc(cc2)N=C=O)cc1			0	0	
CCCCCCCC\C=C\CCCCCCCC(=O)O			0		
COC(=O)C(=Cc1oc(cc1)N(=O)=O)C			1		
CC1c2cccc2c3ccc(C)cc13			1		
CCC(=O)OC\C=C\C1cccc1				0	
NCCS(=O)(=C	0		0		
CNC(=O)[C@	0	0		0	
OCc1cc(O)c2C(=O)c3c(O)cc(O)cc3C(=O)			1		
NC1=NC(=O)N(C=N1)[C@H]2C[C@H](O)[C@@H](CO				0	
C[C@@H]1Cc2cccc2N1N		0			

COc1cc2N3C	0	0		
NC(=O)CCCC	0	0		0
C\C=C(\C)/C#N			0	0
COc1ccc2nc([nH]c2c1)S(=O)Cc3ncc(C)c(OC)c3C				0
C1CS1			1	0
OCC1O[C@@	0	0		
CSCC(N)C(=O)O			0	
O=C1CCCN1C	0	0		
CCN(CC)CCc1	0	0		0
O\N=C/1\C(=	1	0		
CN1C(=O)N(	0	0		0
OC1C(O)c2cc3cccc3c4ccc5cccc1c5c24			1	
Nc1cccc1SCSc2cccc2N			1	
Cc1c(N)cccc1N			1	1
Brc1ccc(CN2C3C2c4cccc4c5cccc35)cc1			1	
O=C1CCCCC1	0	0		0
CCC(=O)C=Cc1ccc(OC)cc1				0
Cc1cc(N)c(cc1Cl)S(=O)(=O)O			0	0
N=C1CC(=O)C(=O)c2cccc12			1	
CCC(C)(O)CCC=C(C)C				0
NC(CCCNC=CC=O)C(=O)O			1	
[O-][N+](=O)c1cc(Cl)ccc1Cl			1	
CCOC(=O)[C@H](CCc1cccc1)N[C@@H]			0	0
C1Cc2cccnc2C3OC13			0	
Nc1cccc2c(Cl)nsc12			1	
CNC(=O)c1cccc(NCC(=O)NCCc2ccc(OC)c			0	
CCCCCN(N=O)C(=N)N[N+](=O)[O-]			1	
C[n+]1c(cc(c2cccc2)n1C)c3cccc3				0
CC1(C)OC[C@H]2O[C@]3(OC(C)(C)O[C@H]3[C@@				0
CC1(C)SC2C(I	0	0		
CN(C)N=Nc1cccc1			1	0
Cc1cccc(C)c1	1	1		
Oc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]			0	
CCN(CC)c1ccc(cc1)C(=C2C=CC(=[N+](CC)			1	
Cc1cc(C)c(C)cc1C			0	0
CC(C)(C)N1N=CC(=C(Cl)C1=O)SCc2ccc(cc2)C(C)(C)C				1
OCCCCCO				0
C[C@H]1C[S+](=O)([O-])C		0		
CC(=C)C#N			0	0
CCOc1nc(ns1)C(Cl)(Cl)Cl				0
Cn1cnc2c(NC	0	0		
Cc1ccc2cc(C)ccc2c1				0
OCC12COC(N1C(OC2)c3ccc(cc3)[N+](=C			1	

CCCCCCCCCCCC1=C(O)C(=C	0		
Cc1cc2c3cccc3ccc2c4cccc14		1	
SC(NC(=O)NC(S)c1nc2cccc2s1)c3nc4cc		1	
C1CN1c2nc(nc(n2)N3CC3)N4CC4		1	
O=C1CCCc2c1ccc3c2ccc4cccc34		1	
CNc1ccc(cc1)N=Nc2ccc(cc2)N(C)C(=O)C		1	
Cc1c(Cl)cccc1	0	0	1
OC1C=CC2=C(C1O)c3cccc4cccc2c34		1	
CNC[C@H](O)c1ccc(O)cc1	0		
O=C1NC2(CCCC2)C(=O)N1CCN3CC3		1	
Oc1c(Cl)cc(Cl)c(Cl)c1Cl		0	1
OC(=O)C(CC1	0	0	0
CC(C)NC(=O)N[S+](=O)([O	0		
Cn1nc(c2cccc2)c1N(=O)=O		1	
CCCc1nn(C)c2c(O)nc(nc12)	0		
O=C1OCCN1N=Cc2oc(cc2)N(=O)=O		1	
FC(F)(F)[C@H](Cl)Br		0	
CCN(C(=O)\C	0	0	
CCOC(=O)CCC(=O)OCC			0
CCOC(=O)C(C)OC(=O)c1cc(Oc2ccc(cc2Cl)C(F)(F)F)ccc:			1
OC1C=Cc2ccc3c(ccc4cccc34)c2C1O		1	
CN(C)C(=O)c1nc(CNC(=O)CN)n(n1)c2ccc		0	
CC(=CCC1CCCC1=O)C		0	
CO[C@@H]1[C@@H](CC[C@]2(CO2)[C@H]1[C@@]:			0
[O-][N+](=O)c1ccc(cc1)c2csc(NC=O)n2		1	
COc1ccc(C=CC(=O)OCCC(C)C)cc1			0
CCOC(OCC)\C=C\C)/CCC=C(C)C		0	
CC(=O)OC1CCC2C3CCc4cc(	0		
OC(=O)[C@H](OC(=O)c1cccc1)[C@@H](OC(=O)c2cc			0
CCN(CCCl)c1ccc(cc1)c2nc3cc(ccc3[nH]2)		0	
CCC(=O)OC(C)(C)C1CCC(=CC1)C			0
CN1C(=O)N(Cc2occc2)c3[nH]c(C)nc3C1=O			0
CC(Cc1cccc1	0	0	0
Oc1nsc2cc(ccc12)N(=O)=O		1	
C=CCN1C(=O)N(CC=C)C(=O)N(CC=C)C1=	0		0
Cc1ccc2N=C3N(CCC3(O)C):	0		
Oc1c(Cl)ccc(Cl)c1Cl		0	1
Cc1c2ccncc2c	1		1
CC1(C)CC(CC(C)(CN=C=O)C1)N=C=O	0		0
O=Cc1ccc(cc1)C(=O)ON(OCc2cccc2)C(=		1	
CN([C@@H]1CCCC[C@@H	1		
Cc1cc(C)c(N)c(C)c1		1	
C1Cc2ccc3ncccc3c2C4OC14		1	

Clc1ccc2NC(=O)CN=C(c3ccccc3)c2c1	0	0
Fc1ccccc1C2=CC(=O)c3cc4	1	
CC(COCCO)OCCO		0
CCCCCCCCC(	0	0
[O-][N+](=O)c1oc2c(c1)cc3ccc4cccc5ccc	1	
CCOC(=O)CC(SP(=O)(OC)OC)C(=O)OCC	0	0
CN[C@H](C)(	1	
OC[C@H]1O[C@H]([C@H]	0	
CCN(CC)CCC(=O)N1c2cccc(	0	
Cc1cc(cc(c1C)N(=O)=O)N(=O)=O	0	
lc1ccc(cc1)n2nc(n[n+])2c3ccc(cc3)N(=O)	0	
CC(=O)\C(=N	0	0
Oc1ccc2CC3N(CC=C)CC[C@	1	
C[C@H]1C[C@@H]2[C@H](CC[C@@]3(C)[C@H]2CC[		0
[N-]=[N+]=NCCC1ccccc1	1	
CC1=C2C(O)C(C)(C)C=C2C(=O)C(C)(O)C1	1	
O=N(=O)c1ccc2c(CCC3c4CCCCc4ccc23)c:	1	
BrCc1c2ccccc2cc3c1ccc4ccccc34	1	
O=N(=Nc1ccccc1)c2ccccc2	1	
CC=CC=CCOC(=O)C(C)C		0
COc1cc(CC(=	0	0
CCC(CCC(C)C:	0	0
Fc1ccc(Oc2ccnc3cc(Cl)cc(Cl)c23)cc1		1
CCCN(CCCC)N=O	1	0
CCCCC(CC)COC(=O)C=C	0	0
[O-][N+](=O)c1c2CCc3cccc4ccc(c5ccccc:	1	
O[C@H]1[C@H](O)c2nc3ccc4ccccc4c3c(	0	
Nc1ccc2cc(cc(O)c2c1N=Nc3ccc(cc3)c4cc	1	
COc1cc(\C=C	0	0
NCC(O)(CS(=	0	
[O-]C(=O)C1=C(N=Nc2ccc(cc2)S(=O)(=O)[O-])C(=O)N		0
O1C=CC2OC2C=C1	0	
CC(=O)C1(C)OC12C=Cc3ccccc3C2=O	0	
CCCCCCCC\C=C/CCCCCCCC(	0	
Cc1nnc(N[S+](=O)([O-])c2	0	
CC(C)S	0	0
CCCCOc1ccc(\C=N\c2ccc(CC)cc2)cc1	1	
CCN[C@H]1CN(CCCOC)S(=O)(=O)c2sc(cc12)S(=O)(=O		0
CCCCC[C@@	0	0
CC(=CCC\C(=C\COC(=O)C)\C)C		0
CCOP(=S)(OCC)SCN1C(=O)Oc2cc(Cl)ccc1	0	
COC(=O)CC(C(=O)C)C(=O)OC		0
C[C@H]1C2C	0	0



COC(=O)C=C			0		
Cc1ccc(cc1)N(C)C	0	0			
CN(N=O)C(=O)C			1		
CCCCCCCCCCCCN(C)C				0	
Cc1cc2ccc3cc4cccc4c5ccc(c1)c2c35			1		
CN1CCC[C@H]1c2onc(C)c2		0			
CN1N(C(=O)C(=C1C)NC(=C		0		0	
CC(C)(C)NC[C@@H](O)CO		1			
Oc1cc(O)c2cccc2c1			1		
COc1ccc(cc1)[S+](=O)([O-]		0			
[O-][N+](=O)c1ccc2[C@H]3O[C@H]3c4			1		
O=N(=O)c1ccc2C3OC3c4cccc5c6cccc6c			1		
CC(C)c1ccc2c(c1)c(SC(C)(C		0			
[N-]=[N+]=Nc1ccc(Nc2c3cccc3nc4cccc			1		
COc1ccc(CN2	1	1			
C[N+](C)CCCC(C1)OC(=O)C(O)(c2cccc2)c3cccc3				0	0
CCOc1ccc(cc1)NC(=O)C(=O)Nc2cccc2CC			0		
CC(C)(C)NC(C	0	0			
CC(C)c1nnc(C)n1C2C[C@H]3CC[C@H](C2)N3CC[C@				0	
CCN(CC)CCO			0	0	
CCCCCCCCCCCCCCCCOP(=O)([O-])OC1CC[N+](C)(C)C				0	
Clc1ccc(\C=N/NC(=N)N\N=C\c2ccc(Cl)cc2)cc1				0	
O=C1Oc2ccc	0	0	1	0	
Oc1cccc1c2cccc2			0	1	
CC1CCC(=O)C1=O			0	0	
CC(C)(C)CC(C)(S)CC(C)(C)C			0		
Cc1c(cccc1N(=O)=O)N=N(=O)c2cccc(c2)			0		
NNCc1cccc(C	0				
CC(C)NCC(O)COc1cccc2ccc		1	0		
OCCN(CCO)c1ccc(cc1O)[N+](=O)[O-]			1		
CC(Br)C(=O)NCc1cccc1			1		
CNC(=O)OCc	0	0		0	
CN(C)CC\C=C\1/c2cccc2C		1	0		
CC(C)(CO)C(O)C(=O)NCCC(=O)O			0		
CC(=C)C(=O)OCCOC(=O)NNC(=O)OCCOC			0		
OCC(CO)(CO)CO			0	0	
CCC(Cl)N(=O)=O				0	
Cc1c2C3NC3c4cccc4c2c(C)c5cccc15			1		
CNc1cc(NS(=	0				
N[C@H](Cc1ccc(O)cc1)C(=		0			
CC[C@@H](C	0	0		0	
CC(=O)ON(OCc1ccc(cc1)C(C)(C)C(=O)C			1		
CCC(=O)OCCC(C)CCC=C(C)C				0	

Cc1cccc2cc3ccccc3cc12			0	
COc1ccc(cc1)	0	0		0
CCCC(=O)Nc1ccc(OC[C@H](O)CNC(C)C)c1			0	
O=NN1CCNC1=O			1	
ClCC#CCOC(=O)Nc1cccc(Cl)c1				1
CC(=CCC1=C(O)C(=O)c2ccccc2C1=O)C			0	1
[O-]C(=O)C1=C(C[n+]2ccccc2)CS[C@@H]3[C@H](NC(=O)C1)C3				0
Nc1cc(Cl)c(N)c(Cl)c1			1	0
CC(Cl)(Cl)[N+](=O)[O-]			1	
CSC1=N[C@](C)(C(=O)N1Nc2ccccc2)c3ccccc3				1
CN(C)CCCN=C1c2ccccc2Nc3c(Cl)ccc(c13)C			1	
O=C(NCCON(=O)=O)c1cccn1				0
COc1cc2CCN(C=O)c3cc4ccccc4c(c1OC)c1			1	
COC(C)C(O)(C(C)C)C(=O)O			0	
O=S(=O)(Cc1ccccc1)N2C3C2c4ccccc4c5c1ccccc5			1	
NC(=O)c1cccc(c1)N(=O)=O				0
Nc1nc(nc2c1ncn2C3OC(CO)C(O)C3O)c4ccccc4			1	
CC(C)C1=CC2=CCC3C(C)(CCC3(C)C(=O)C)C2			0	
CC(C)C1CCC(C)C1	0	0		0
CCCCCCCCCCCCCCCCC1c1			0	
[O-][N+](=O)c1ccc(c2ccc(c(c2)[N+](=O)O)cc1)C(=O)O			1	
OCc1c(cccc1N(=O)=O)N(=O)=O			0	
CCCCCCCCC=O				0
CCCC(C)C(OC(=O)CC(CC(=O)O)C(=O)O)C			0	
Clc1ccccc1C=C(C#N)C#N			1	
CCNc1snc2ccccc12			0	
CCCCCCBr				0
CCCCC\C=C/C	0	0		0
O=C1CCCc2c1cc3ccc4cccc5ccc2c3c45				1
CCCN[C@@H]1CCc2c(OC)c1			0	
CCCC(=O)OCc1ccccc1[N+](=O)[O-]			0	
Cc1ccc(O)c(C)c1			1	0
ClC(=C1C(=O)NC(=O)C1(Cl)Cl)Cl			1	
Nc1cc(cnc1O)c2ccncc2			0	
Nc1nc(O)c(B)cc1	0	0		
CC(=C)c1cccc(c1)C(=C)C				0
FC(F)(F)C(Cl)C	0	0	0	0
C[N@+]12CCCC[C@@H]1CCC(=C(c3cccs3)c4cccs4)C2				0
COc1c(O)c2N(CCC2c3cc([nH]c13)C(=O)N)C2			0	
C(=C\C1CCCC1)/c2ccccc2			0	
OC(=O)c1c(O)cc2C(=O)c3ccccc3C(=O)c2			0	
CC(C(=O)O)c1	0	0	0	0
CCN(N=O)C#N			1	

Cc1cc(N)cc(c1N)N(=O)=O	1	
CCCCCCCCS(=O)C(C)Cc1ccc2OCOc2c1	0	0
CCCCN(C)N=O	1	
C1CCC2OCCOCCOC3CCCC3OCCOCCOCC	0	
Cc1ccc(c(C)c1)N(=O)=O		0
Nc1ccc2nc3ccc(N)cc3nc2c1	1	
CC#N	0	0
Cn1cc2cccc(c2n1)[N+](=O)[O-]	1	
CCOc1cccc(c1)n2cc(nc2c3ccc(C)cc3)C(=O)N4CCN(CC4		1
NC1(CCC1)c2ccc(cc2)c3nc4C=CN5C(=O)NN=C5c4cc3c1		1
OCCNCCO	0	0
CN(C)C(=O)Nc1ccc(C)c(NC(=O)N(C)C)c1		0
CC1(C)CCCC(C)(C)N1O	0	
Nc1c2cccc2nc3ccc(cc13)[N+](=O)[O-]	1	
Nc1nc(N)c2nc(c(N)nc2n1)c3cccc3	0	0
FC(F)(F)c1cc2C(=O)CCc2c3ccc4cccc4c1	1	
Cc1cc2CCCS(=O)C(=O)Nc1ccc2	0	0
NCCc1c[nH]c1	0	0
CCC(OCCOC)OC(=O)C		0
CNC(=O)Oc1cccc2CC(C)(C)Oc12	0	0
CC(C)(C)OCC1CO1	1	0
NC(CCS\C=C\Cl)\Cl)C(=O)O	1	
CCOC(=O)C(=C)C	0	
Cc1cc(O)c2C(=O)c3c(O)cc(O)c(c3C(=O)c	0	
Fc1ccc(cc1)C(=O)C2CCN(C)C2	1	
COc1cc(O[C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)C2)O	1	
CCCCCCCC1CCC(=O)O1	0	0
C1OC1c2ccc3ccc4cccc5ccc2c3c45	1	
FC(F)(F)c1ccc(Cl)cc1	0	0
OC\C=C\C=C(=O)Nc1ccc2OC(=O)Nc1ccc2	0	0
N[C@@H](C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C(		0
CN(C)CCCNc1c2cccc2nc3cccc13	1	
Oc1ccc(cc1)c1	1	1
COc1cc(N)ccc1NC(=O)C	1	
[O-][n+]1c2cccc2c3ccc4cccc5ccc1c3c45	1	
Oc1c(cccc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	0	
ON=CC=NO		0
OC(=O)COc1c	0	0
N[C@@H](CCC(=O)N[C@@H](CS\C=C(C)C)C)C(=O)OC1CC2(COC(=O)C)C(OC3C(C)C)C2=O1	1	
CC(C)CC(=O)OC1CC2(COC(=O)C)C(OC3C(C)C)C2=O1	1	
C[C@H]1O[C@H](C[C@H](O)[C@@H]1O[C@H]2C[C@@H](O)C)C2=O1		1
CCCCCCCCCCC(=O)N(C)CC(=O)O		0
OC1C2OC2c3c(ccc4c5C=Cc6cccc(cc34)c5	1	



COc1cc(c(O)c(c1)C(C)(C)C)c2cc(OC)cc(c:	0	
Nc1ccc2cc(c(N=Nc3ccc(cc3)c4ccc(cc4)N	1	
BrC1ccc(cc1)C2OC2C(=O)c3ccccc3	0	
CC(=O)c1cnccn1		0
CC(=Nc1ccc(C=Nn2nnc3ccnc3c2O)cc1)O	1	
CC1(C)[C@H](C=C(Cl)Cl)[C@H]1C(=O)OCc2c(F)c(F)cc(		1
O=N(=O)c1ccc2ncccc2c1	1	1
NC1CONC1=(	0	0
N[C@@H](Cc1cc(CP(=O))(C		0
Oc1ccc(C2=CC(=O)c3ccccc:		0
Nc1nc(N)c2nc(CNc3ccc(cc3)C(=O)N[C@@H](CCC(=O)		0
CCCCCO		0
COc1ccc2cc3c4cc(OC)c(OC)cc4CC[n+] <sup>3</sup> cc2c1OC		1
CN1CCc2cc(N	0	0
Nc1ncnc2c1r	0	
O=N(=O)c1ccc(cc1)c2ccccc2	1	
CN\C(=N/N(=O)=O)\NCc1cnc(Cl)s1		0
Oc1ccc(cc1)S(=O)(=O)c2ccc(O)cc2	0	
CN(C(=S)Oc1ccc2CCCc2c1)c3ccccc(C)c3		0
C[C@H](O)C(=O)C1=NC2=		0
[O-][N+](=O)c1oc(\C=C\C=O)cc1		1
Cc1occc1C(=O)Nc2ccc(cc2)C(=O)N3CCC(F)(F)\C(=C/C		0
NC(CSSCC(N)	0	0
COC(=O)C1CC(=O)C(CC1=O)C(=O)OC		0
CC1CCC2C(OC(=O)C2=C)C3(C)C(=O)CC=C	0	
COC1OC2COC(OC2C(O)C1(		0
CC(=O)CCOCCCC(=O)C	0	
O[C@@H]1C[C@@](O)(C[C@H](O)[C@	0	
Oc1cccc(Nc2ccccc2)c1	0	1
O[C@@H]1COC(O)[C@H](O)[C@H]1O		0
Nc1ncnc2[nH	0	0
CCOC(=O)c1ccc(OCCN2C[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]		0
Cc1ccc(Cc2ccccc2)cc1	0	
O1C2C=Cc3cc4ccc5ccccc6ccc(c3C12)c4c5	1	
C[C@@H](Nc1[nH]cnc2nc(cc12)c3ccc(C	1	
CN1C=CN(COCCC(C)(C)[N+](=O)[O-])C1'	0	
FC(=C)F	1	
ClCC1OC(CCl)OC(CCl)O1	1	
[O-][N+](=O)c1oc(\C=N\n2cccn2)cc1	1	
Cc1onc(c1C(=	0	0
OC1Cc2cc3ccccc4ccc5ccc1c2c5c34	1	
OCC(CO)(CCBr)CCBr	1	
COc1ccc(N[S+](=O)([O-])c	1	

CN([C@H]1CC[C@@]2(CCCO2)C[C@@H]1N3CCCC3)C	0		
CC(C)(C)c1ccc(CCC=O)cc1	0		
[O-][N+](=O)	0	0	
[O-][N+](=O)c1ccc(C=C)cc1			1
CC(=O)C1CCC2C3CCC4=CC(=O)CCC4(C)C:	0		
Oc1cccc(O)c:	0	0	0
Cc1cc(ccc1N=Nc2cc(c3ccccc3c2N)S(=O)(=O)[O-])c4cc			1
CC(C(=O)O)c1ccc(Oc2nccs2)cc1	0		
CC1=CC(=O)C=C2CCC3C4CCC(=O)C4(C)C:	0		
N(c1cccc1)c2cccc3cccc23	0		
[O-][N+](=O)c1ccc(cc1)[C@@H]2O[C@	0		
CCNC(=O)NC	0	0	0
CN(N=O)C(=O)c1c(ncn1C)N(C)C(=O)OC(	1		
CN1C=C(C(=O)c2ccc(F)cc12)S(=O)C			0
CC1=C(CC(=O	0		
BrCC#N			0
Cc1c(C)[nH]	0	0	0
Cc1cc2ccccc2c3ccc4C(=O)C(=O)C=Cc4c1	1		
CN\C=C/[N+	0	0	
CN1CCC[C@H	0	0	0
Cc1ccc2nsc(NC(=O)CCl)c2c1	1		
Oc1ccc(\C=C	1	0	
Nc1cc(N)c(cc1N=Nc2ccc(cc2)c3ccc(cc3)	1		
BrC[C@](Br)(CCC#N)C#N	0		
Cc1ccc(NO)cc1C	1		
Oc1cc2ccc(c3ccc4cccc1c4c23)[N+](=O)[	1		
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCCCCCCCCCCCC(C)C			0
CCN(CC)C(=O)c1ccc(cc1)[C	0		
OC1C=Cc2ncccc2C1O	0		
CNCC[C@H](	1	1	1
CCC(C)c1cccc(c1)C(C)CC(CC)c2ccc(C[N+]	0		
COC(=O)C12OC1(C)C(O)(NC2=O)C(C)C	1		
COc1cc(Oc2ccc(Cl)cc2Cl)cc(c1)[N+](=O)	0		
C\C=C/C=C\C=C\C=C(=O)O)	0		
CC12OC1C3CCCCC3c4cccc24	0		
O=C1CCC(CC1)C2CCCC2			0
CCCN(C)C(=	0	0	0
CC(C)c1ccc(C)c2ccc(C)c2c1	0		0
CCCCC(O)C1	0	0	
Clc1c(Cl)c(oc1C(=O)CBr)N(=O)=O	1		
NC1CCCCC1	0		0
OC(=N)c1cc(N2CC2)c(cc1N(=O)=O)N(=C	1		
CC(O)COc1cc	0	0	0

[O-][N+](=O)c1oc(\C=N\c2snc3ccccc23)	1			
CCC1NC(=O)c2cc(c(Cl)cc2N1)S(=O)(=O)	0			
Cc1cc(C)nc(SC(=O)OC(C)(C)C)n1	0			
CCc1ncnc2cc	0	0		0
OC(=O)Cc1cc2ccccc2nc1C(	0			
CN1CCCC(CN	1	1		1
CC(C[N+](C)(	0	0		0
CC[C@H](NC(=O)c1c(C)c(r	0			
COc1ccc(cc1)	0	0	0	
CCC1(CC[C@@H](O1)[C@	0			
Oc1c(cc2c3ccccc3[nH]c2c1[N+](=O)[O-]	1			
CC(=O)OCCC1CCCCC1				0
CC(C)(N=O)[N+](=O)[O-]	1			
Cc1ccc(N)cc1	1		0	
c1ccc2c(c1)cc3ccc4cccc5ncc2c3c45	1			
CC(C)CN(C[C	0			
Oc1cccc(c1)[N+](=O)[O-]	1			
Nc1ccc2ccccc2c1	1		0	
OC[C@H]1O	0		1	
O=C(N1CCCC	0	0		
NCCCCC(=O	0	0		0
OC(=O)c1ccc(C=O)cc1				0
CC(=O)\C=C\C1=C(C)CCCC1(C)C				0
c1nc[n-]n1				0
C[C@@]12CC[C@@H](CC1)C(C)(C)O2	0			
O=NN1CCN(CC1)N=O	1		0	
Oc1c(cc(cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-])	1			
[O-]C(=O)CF				0
S(Sc1cccs1)c2cccs2				0
Cc1ccc(CCl)cc1	0			
COP(=O)(SC)SC	0			
[O-][N+](=O)	0	0		
Cc1ccc(cc1)S(=O)(=O)N=C=O				0
CCc1cc2C(=O)CCc2c3ccc4ccccc4c13	1			
Clc1ccc2c1oc3ccccc23	0			
Oc1ccc(C(=O)c2cc(O)c(O)c(O)c2)c(O)c1O				1
CC1(C)OC[C@	0	0		
OC(CC(=O)[O-])C(=O)[O-]				0
[O-][N+](=O)c1ccc2[nH]c3c(cccc3c2c1)[	1			
CNc1ccc(cc1)C(=O)CC(O)CCC(C)C2OC(=O)CC(O)CC(=O				1
COc1ccc2CC3	0	0		0
N[S+](=O)([O-])c1ccc(cc1)	0			
CC(=O)OC(CC(=O)O)C[N+]	0			

N[C@@H]([C@@H]1[C@H]	0			
CC(C)(N)[C@@H]1CC[C@](C)(N)CC1		0		
Cc1ccc(cc1)N(CC2(O)OCC(O)C(O)C2O)N		1		
CSCCCN=C=S			1	
CCOC(=O)NC	0	0		0
Cc1ccc(cc1N(=O)=O)N=N(=O)c2ccc(C)c(		0		
Clc1ccc2nsnc	0	0		0
COC(=O)C(C)Oc1ccc(Oc2ncc(cc2Cl)C(F)(F)F)cc1			0	1
NC(CSCCCL)C(=O)O		1		
CN1CCC(CC1)	1	0		
OC(=O)c1nn(	0	0		0
CC(=O)OCN(N=O)c1ccccc1		1		
CCOC(=O)[C@@](C)(N)Cc1ccc(O)c(O)c1			0	
Nc1nc2ccc(cc2s1)[N+](=O)[O-]		1		
CN1C(=O)N(C)c2ncn(CC(O)CO)c2C1=O			0	
CCCN(CCC)c1c(cc(cc1[N+](=O)[O-])C(F)(		1		
CC(C)(N)CO			0	
Oc1ccc(OP2(NP(NP(N2)(Oc3ccc(O)cc3)(		0		
CCCSP(=O)(OCC)SCCC			0	
CC(N)(C(=O)O)c1ccc(cc1)c		0		
Nc1cc(ccc1O)[N+](=O)[O-]		1		
Cc1ccc(C)c2c1ccc3ccccc23		1		
CC(=CCC1C(=O)C(=O)c2ccccc2C1=O)C		0		
CCCCOC(=O)CC			0	
NC1=NC(=O)NC=C1			0	
CC1=NN(C(=O)C1N=Nc2ccc(cc2)S(=O)(=O)[O-])c3cc(			0	
COC(=O)\C=C\c1oc(cc1)[N+](=O)[O-]		1		
COC(=O)[C@	0			
OC1C2OC2c3c(ccc4ccccc34)C1O		1		
Oc1c(I)cc(cc1[N+](=O)[O-])C#N		0		
COc1cc(O)c2C(=O)OC3(C)CC(O)C(O)C=C		0		
CC(=O)N(CC(	0	0		
[O-]C(=O)CCCc1ccccc1			0	
CN1[C@H]2C	0	0		
C[C@H](CN(	0	0		
O=C1NOC2=C1CCNC2			0	
CC[C@]1(O)C[C@H]2CN(C		1		
CCSCCSP(=S)(OC)OC			0	
OC1=C(Oc2ccccc2C1=O)c3		0		
Oc1ccc2c3ccccc3C(=O)c4cccc1c24		1		
FC(F)(F)c1ccccc1		0		0
OC(=O)C(=O)Nc1cccc(c1)c2nnn[nH]2			0	
OC(=O)CC(O)(CC(=O)[O-])C(=O)[O-]			0	



CN(C(CN1CCCC1)c2cccc(O	0		
OCC1OC(CC1O)N2C=C(C=CB	0		
O=C1[C@@H	1	1	
CC(C)c1ccc(C)cc1			0
CCN(CC)c1ccc(N=Nc2ccc(cc			0
NC1=NC2=C(	0	0	
CC1=C(O)C(=O)CO1			1
Clc1cccc(NS(=O)(=O)c2cc			0
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O			0
C[n+]1c2cccc2cc3cc(N)ccc			1
CCCC(=O)OCCc1cccc1			0
CC(=O)c1cc(NC(=O)Nc2ccc			0
OCC1CO1			1
[O-]C(=O)CCl			0
CN(C)[C@H]1[C@@H]2[C@		0	
OC1C=Cc2c(ccc3c2ccc4ccc			1
CC\C=C/CCCCO			0
NNc1nc(cs1)c2ccc(cc2)N			1
COc1cc(N)c(cc1N)N(=O)=			1
CN[C@H](C)Cc1cccc1			0
OCCNCCNc1c	0		1
Nc1snc2ccc(Cl)cc12			1
O=C1N(C[C@H]2CCCc3cccc1			0
COc1cc2c(C[C@@H]3N(C)		0	
COc1ccc2CC3C4C=CC(O)C5			0
[O-][N+](=O)	0	0	1
C[C@@H]1CN(C[C@H](C)N1			1
OC(=O)c1occc1			0
COc1ccc(cc1)	0	0	0
CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC			0
CO[C@H]1[C@@H](O)[C@H](			0
CC1(C)[C@@	0	0	
Oc1cccc2ccc3[nH]c4ccc5			0
CC1(C)O[C@	0	0	
ClC=C(Cl)Cl	0	0	0
C1C[C@H]2[C@@H]3CC[C@H]			0
Fc1cccc2cc3c(cc12)c4ccc			1
NC(=O)NCC=C			1
COc1cc(OC)nc(NC(=O)NS			0
ONc1ccc(cc1)c2cccc2			1
COc1cc2nc3cccc3c(O)c2			1
C=CN1CCCC1=O			0
Nc1ncnc2c1r	0		

CC1(C)O[C@	0	0	0
CCCN1CCC[C@@H]2Cc3[nH]ncc3C[C@@H]12			0
O[C@@H]1[C@H]2O[C@H]2c3cc4ccc5c		1	
CCOC(=O)OC(=O)OCC		0	
CC1(C)[C@@H]2CC[C@@H](C2)C1=C		0	
COC(=O)N		0	0
Cc1cccc(Nc2r	0	0	0
O=C1NCN(c2	1	1	0
OCCCNP(=O)(O)N(CCCl)CCCl		1	
COc1ccc(cc1N)C2=C(N)C(=O)c3ccccc3O:		1	
CN1CCN(CC(=O)N2c3ccccc		0	0
Cc1c(cc(cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-])		1	
OS(=O)(=O)c1ccc(Oc2ccc3c4ccccc4C(=C		1	
lc1ccc(cc1)C(=O)NCCN2CC		0	
CC(C)(C)c1cc(\C=C\2/SC(=N)NC2=O)cc(c1O)C(C)(C)C			1
CCCN(CCC)[C	1	0	
OCc1c2ccccc2cc3c1ccc4ccccc34		1	
CC(C)(C)OO		1	0
CC(C)CC(C)CC(C)CC(C)COC(=O)c1ccccc1C(=O)OCC(C)C			0
CN(N=O)c1c	0	0	
CSC(=[NH2+])N		0	
Oc1ccc(\C=C	0	0	
O=Nc1ccc2ccc3cc4ccccc4c5ccc1c2c35		1	
[O-][N+](=O)c1cc(c2ccccc3c4ccccc4c1c2:		1	
OC1C=Cc2cc3cc(ccc3cc2C1O)N(=O)=O		1	
Oc1cc(Cl)ccc	0	0	1
Nc1ccc(C(=O	0	0	0
COC(=O)C1=	0	0	
CC1=NC(=C[C@H]2[C@@H]1Nc3ccccc2:		1	
CCCCCCCCCCCCCCCC[N+](C)(C)CCCCC		0	
COc1cc(N)c(Cl)cc1C(=O)O		0	
Cc1cccc2c(C)c3ccc4ccccc4c3nc12		1	
COC(=O)[C@	1	0	
CC(C)(C)C(=O)CCl			0
CNC(=O)Oc1cc2ccccc2c3ccccc13		1	
O=N(=O)c1ccc2c3CCc3c4c(ccc5ccc1c2		1	
CC(C)CC(=O)OCC1=COC(OC(=O)CC(C)C)C		1	
CC(=O)Nc1nc2c3ccnc3ccc2n1C		1	
CCN(CC)N(O)N=O		1	0
CC(=O)NCc1onc(n1)c2oc(cc2)[N+](=O)[		1	
CCCCSCCC(N)C(=O)O		0	
CCC(=O)OC(OP(=O))(CCCCc1ccccc1)CC(=O)N2C[C@@H			0
CCC(=O)OCC(=O)C1(OC(=O)CC)C(C)CC2C		0	

CCCCCCCCCCCCCN(CCCCCCCCCCCC)CCCCCCCCCCCC			0
CC(=Cc1cccc1)C=O			0
CC(=C)C1CC=C(C)C(=O)C1		0	0
CC(C)(C)c1cc	0	0	1
CCOC(=O)[N-	0		0
O1C2C1c3cc4c(cc3c5cccc25)C6OC6c7c		1	
SCCOCCOCCS			0
CCOC(=O)CNC(=O)CBr		0	
NC(=O)NCC(=O)O		0	
CCCN1C(=O)N(CCC)c2nc([r		0	
Cc1ccc2c(c1)	0	1	
Cc1cc(c(N)cc1Cl)S(=O)(=O)O		1	0
Clc1ccc(cn1)C2CC3CCC2N3		0	
CCCCCCCCc1ccc(Nc2ccc(CCCCCC)cc2)c		0	
COC(=O)Nc1nc2cc(O)ccc2[nH]1		0	
OS(=O)(=O)c1cccc2C(=O)c3c(cccc3[N+]		1	
[O-][N+](=O)c1ccc2sc3cccc3c2c1		1	
CCc1cccc1[N+](=O)[O-]		0	
CCN(CC)CC		0	0
Oc1cc(O)c2cc(O)c([o+]c2c1)c3cc(O)c(O		0	
C1CN=C(N\N=C\c2c3cccc3c\C=N\NC4		1	
COc1nsc2cc(OCC3CO3)ccc12		1	
NC1=NC2=C(N(CC=C)C(=O)N2[C@@H]3O[C@H](CO)[			0
NC(=O)OC1CO1		1	
CN(C)c1ccc(\C=C\c2cccc2)cc1		1	
CC(=O)O[C@@H]1CC2CCC1(C)C2(C)C			0
NC(CO)C(=O)	0	0	1
OC1C=Cc2cc3ccc4c(ccc5ccc(c2C1O)c3c4		1	
OC1C=Cc2c(ccc3c4CCCc4ccc23)C1O		1	
CCC12CCC3C(	0	0	
CC(C)(C)OC(=O)C=C		0	0
NCCN[S+](=O)([O-])c1cccc		0	
CC(C)(C)c1csc(n1)c2oc3ccc(OCC4cccc4CC(=O)O)cc3c			1
C[C@H]1CN(C[C@@H](C)N1)c2c(F)c(N)c3C(=O)C(=Cl			0
COc1cc2CCN:	0	0	
Clc1cccc1Nc2nc(Cl)nc(Cl)n2		0	0
C[C@@H]1OCCc2cc3c(cc12)C(C)(C)[C@		0	
OC(=O)C[C@H](Cl)C(=O)O		0	
Clc1cc(Cl)cc(Cl)c1		0	0
Fc1cccc2c1ccc3cccnc23		1	
CN(C)CCCN=C1c2cccc2Nc3c(ccc(c13)N(		1	
CC1=CC(=O)C	0	0	0
[O-][N+](=O)c1cc(cs1)C(=O)Nc2cccc2B		1	



Cc1ccc(NN=NCc2ccccc2)cc1			1		
CC(=O)Oc1cc	0	0		0	
c1ccc2c(c1)c3cccc4cccc2c34			1		1
CC(Br)C(Br)COP(=O)(OCC(Br)C(C)Br)OC(			1		
CCOC(=O)c1ccc(I)cc1				0	
CC(=O)Oc1cc	0	0	0	0	
CC1CC[C@]2i	1	0			
COC(=O)\C(=C\c1oc(Br)cc1)\C#N			0		
Cc1c(cc(cc1[N+](=O)[O-])N=[N+](O-])c			1		
OC(=O)c1ccc2C(=O)OC(=O)c2c1			0	0	
CN(Cc1ccc(Cl)cc1)N=O			1		
C\C(=C(\CCO)/SSCC1CCCO1)\N(Cc2cnc(C)nc2N)C=O				0	
NC(=O)c1ccc(cc1)N(=O)=O				0	
Oc1cccc2Oc3cc4OC5OC=CC5c4c(O)c3C(:			0		
O=C1CCCCCCCCCN1				0	
CCC[C@@H](C)C[C@@H](OC(=O)C[C@			0		
CO[C@H]1[C@@H](CC(=O)O[C@H](C)CC2OC2C=CC(=				0	
CC(=O)Nc1ccc(C)c(c1)N=Nc2cc(NC(=O)(			0		
Nc1ccc(cc1)[S+](=O)([O-])		0			
CCC(=[N+](O)[O-])C			0		
Cn1c2cccc2c3nn[n+](O-])c(C(=O)OCCC			1		
CN[C@@H](C)Cc1cccc1			0	0	
CC(C)C(O)C(C)C(C)CO				0	
NC(=N)c1ccc	0	0	0	0	
OC[C@@H]1CC[C@@H](O1)n2cnc3C(=O)NC=Nc23				0	
CNC1(C)C2CCC(C2)C1(C)C		0		0	0
CCOC(=O)c1c(N)sc2CN(Cc:		0		0	
CCOC(=O)C(=NNc1ccc(cc1Cl)c2ccc(NN=			0		
BrC1cc(Br)c(c(Br)c1)c2c(Br)cc(Br)cc2Br			0		
Cc1cnc(cn1)C(=O)NCCc2ccc(cc2)S(=O)(=O)NC(=O)NC:				0	
O=N(=O)c1ccc2c(c1)c(cc3cccc(c23)N(=C			1		
OCCN(CCO)CCN(CCO)CCO				0	
CC(=O)Oc1cc	0	0		0	
COC(=O)c1cc	0				
CC1CC[C@@	0	1			
CN(C1CCN(C	1	0	0		
CSc1nc(NC(C)C)nc(N=[N+]=[N-])n1				0	
ClCCCCl				0	
ClC1(Cl)C(=O)C=CC1=O			1		
[O-][N+](=O)c1ccc2[nH]ncc2c1			1		
Fc1ccc(cc1)C2OC2C(=O)c3cccc3			0		
CC(=O)OCC(=	0	0	0	0	
CO\N=C(\C(=O)N[C@H]1[		0			

COC12C3NC3CN1c4c(O)c(C)c(N)c(O)c4C	1		
Clc1cccc2cccnc12	1		
CN(C)C1Cc2cccc3cccc(C1)c23	1		
NCCCCCCCCC	0	0	
COc1cccc2C:	0	1	
CCCC(C)CN	0		0
OC(=O)c1ccc(c(c1)N(=O)=O)N(=O)=O	1		
NCCOCCO			0
COC1=CC(=O)O[C@H](C1)\C=C\c2cccc2			0
Cc1ccc2nc3cc(C)c(N)cc3nc2c1N	1		
COc1ccc(c2C(=NCCCN(C)C)c3cccc3Nc1:	1		
CN1[C@H]2CC[C@@H]1[C@H]([C@H](C2)OC(=O)c3c			0
C[C@H]1C[C@H](CC(C)(C)C1)OC(=O)c2c	0		
CC(C(=O)O)c1ccc(cc1)C(=O)c2cccs2			0
NC(=N)Nc1ccc(Cl)cc1		0	
OCCN(CCO)c1ccc(cc1)N=Nc2ccc(nc2)N(	0		
CNC(C)[C@@H]1CC[C@@H](N)[C@@H](O[C@@H]2			0
NCc1ccc(CN)cc1	0		
OC(=O)c1cccc(Cl)c1Cl	0		0
O=C1C=C(C=C(N1N=Cc2oc(cc2)N(=O)=C	1		
COc1cc2OC3OC=CC3c2c4OC(=O)C5=C(C	1		
CC1=CC2C(C1)C3CC2C(=C3)C			0
CCC(=O)O[C@	0	0	
CCC(C)(N=NC(C)(CC)C#N)C#N			0
O=C\C=C\C1occc1			0
CC(=O)NN	1		
Cn1c(ncc1N(=O)=O)C2=NNC(=N)S2	1		
CCOC(=O)c1c(C)[nH]c2ccc:	1		
CCN(CCC#N)c1cc(NC(=O)C)c(cc1OC)n2n	1		
NCCCN1CCN(CCCN)CC1	0		0
NC(=O)CC1CO1	1		
NC(Cc1ccc(O	0	0	
Cc1nc(N)c(C)c2[nH]c3cccc3c12	1		
CN(C)C(=O)CNC(=O)Cc1cccc1			0
CC(C)(CO)N(=O)=O			0
CC(C)CC(NC(=O)CNC(=O)[C@H](Cc1ccc(O)cc1)NC(=O)			0
CC(C)C(=O)OCCOc1cccc1			0
CCCCN(C)CC	0		
Nc1ncnc2c1ncn2CC(O)CN=N#N	1		
CC(C)CCCCCOC(=O)c1cccc1C(=O)OCC	0		0
CCCCNC(=O)OCC#Cl			1
OC1(CCCCC1)C#N	0		0
C[C@]12CC[C@H](O)C[C@	1		

COc1cc2OC3OCCC3c2c4OC(=O)C5=C(CC	0		
Fc1ccc(c(F)c1)N(=O)=O			0
Cc1ccccc1CCl			0
OC[C@@H](C	0	0	
CC(=C)C(=O)OCC=C			0
CN[C@H]1C[C@@H](O[C@H]2C[C@](C	1		
CC(=O)N(O)c1ccc(Oc2ccc(Cl)cc2)cc1	1		
CC(C)(C)C(=O)OCOC(=O)[C@@H]1N2[C@H](SC1(C)C)			0
CC1(C)C2CCC3(CO3)C1C2	0		
CCCCC(CC)COC(=O)CCCC(=O)OCC(CC)C	0		
NC(=O)CN1C[C@H](O)CC1=O	0		
Oc1ccc(Cl)c2	0	0	1
CCCCCCCCC	0	0	
Nc1cc(cc(c1O)S(=O)(=O)O)[N+](=O)[O-	0		
CC(=C)[C@@H]1CC=C(C)C(=O)C1	0		0
COc1cc2ncnc(Nc3cccc(Br)c	0		
OCC1OC(Oc2ccc(O)c3C(=O)c4cccc4C(=	1		
Clc1ccccc1CNCC2CCC(CNC	1		
Clc1nccc2c1c	0	0	
COc1cccc2C(=O)c3c(O)c4C[C@](O)(C[C@H](O[C@H]!			1
CCCCC(CC)CO	0		0
Oc1cc2C[C@]3(O)COc4c(C	0		0
CCOP(=O)(NC(C)C)Oc1ccc(SC)c(C)c1	0		0
CC(=O)NBr	0	0	0
CN1C(=O)NC	0	0	
CN(C)[C@@H	0	0	
N[C@@H](C	0	0	0
N#CCc1ccccc1	0		0
Cc1ccccc(C)c1N	1		0
CC(C)[C@@H	0	0	0
O=CC=C(c1ccccc1)c2ccccc2			1
Oc1ccc(C=NN2N=Nc3c([nH]c4cccc34)C	1		
C[N+](C)(C)CCCCNCC12C	0		
CCCCCCCCCCCCCN(C)C			0
C[C@]12CC[C@H]3[C@@H	0		
COC(=O)c1ccc(C)cc1	0		0
CC(C)(NC(=O)CBr)[C@H]1	0		
OC(=O)c1oc(cc1)N(=O)=O	1		
C1NCC2CC1c3cc4nccnc4cc23			0
CC(C)(C(=O)c	0	0	0
CC[C@@H](C)CCCC(=O)N[C@H](CCN)C(=O)N[C@H]			0
Clc1ccc(Cl)c(c1)N(=O)=O	1		
CCCC(=O)OC(=O)CCC			0

Cc1cccc(C=C	0	0	0		
CC(C)CCC[C@@H](C)[C@@H]1CC[C@@			0		
Nc1ccc(Cl)c(N)c1			1	0	
CC(C)(O)C(=O)O				0	
CC(C1CC1)C(O)(Cn2cncn2)c3ccc(Cl)cc3				0	
ClC1=C(Cl)[C@]2(Cl)[C@@H]3[C@@H]4C[C@H](C=C				1	
NCCSC(=N)N	0	0			
C1CCc2c(C1)cccc2NC3=NC		0		0	
C=CCc1ccc2OCOC2c1			0	0	
O=C1CCCCCCCCCCCCC1				1	
Nc1ccc2ccc3cc4ccccc4c5ccc1c2c35			1		
COc1nsc2c(N)cccc12			1		
CC1=C(O)C(=C(C(=O)C1=O)C2=C(O)C(=C			0		
Fc1ccc(F)c2ncccc12			1		
COc1c(C)c(N)c(C)cc1N			0		
Nc1ncnc2c1r	0				
c1ccc2c(c1)c3cccc4ccc5cccc2c5c34			1	1	
Nc1cc(ccc1CO)[N+](=O)[O-]			1		
CCC1(C(=O)N	0	0	1	0	0
C\C(=C/C=C/C(=O)Nc1ccc(O)cc1)/C\C=CC2=C(C			1		
OCc1ccc2c(CO)c3ccc4ccccc4c3nc2c1			0		
O=C1c2cc(ccc2c3ccc(cc13)N(=O)=O)N(=			1		
ICCc1ccccc1			0	0	
CCc1cccc(CC)	0	0		0	
COc1ccc2c(c	0				
CC(=O)c1ccc2CCCCc2c1				0	
O=C1C[C@@	1	0			
CC(C)CC#N				0	
CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)[C@H](N)c3ccccc3)C				0	
C\C(=C(/CCOC(=O)c1ccccc1)\SC(=O)c2c			0		
OC(=O)[C@H]1C[C@H](N		0			
Clc1cccc(Cl)c1S(=O)(=O)Cl				0	
Cc1c(cc(c(N)c1N(=O)=O)N(=O)=O)N(=C			1		
NC(=O)[C@	0	0			0
CC12CCC(=O)	0	0			
NNc1nncc2ccccc12		0	1	0	
[S-]C(=S)N1C	1	0			
CC1(C)S[C@@H]2[C@H](N		0			
O[C@H]1C[C	1	0			
Cc1cccs1			0		
CCN(CC)CCO	0	0		0	
CCCCCCCCC	1	0			
CC(C)(C)c1ccc(CN2CCN(CC2)C(c3ccccc3)c4ccc(Cl)cc4)c				1	



CNCC(O)c1cccc(O)c1		0		
OC(=O)c1ccc	0	0		0
CC(=O)Nc1ccc2c(Cc3ccccc23)c1		1		1
CCN1CCC[C@H]1CNC(=O)c	0			0
OCNc1ncnc2c1ncn2C3OC(CO)C(O)C3O		1		
C[C@@H](CC(=O)O)[C@@	0			
Cc1nc(N=Nc2cc(ccc2S(=O)	0			
COc1cc(cc(OC)c1OC)C(=O)	1	0		
Cc1c(C)c2c(N)c3ccccc3nc2c4ccccc14		1		
CNC(=O)Oc1ccc2N(C)C3N(	0			
C[C@H]1O[C@H](O[C@H]2[C@H](O)[C@@H](O)[C@				0
Oc1ccc(C(=O)c2ccc(O)cc2O)c(O)c1				1
C[C@@H]1[C@@H]2Cc3ccc(O)cc3[C@@]1(C)CCN2C				0
Cc1oc(cc1)C(=O)O				0
CN(C)CCOC(=	0	0		
CCOC1CC2C(C)CC3OC(=O)C(=C)C3CC2(C)		1		
NC(CS\C=C(/Cl)\C(Cl)(Cl)Cl)\Cl)C(=O)O		1		
COC1=C[C@@H]2[C@@H]3Cc4ccc(OC)c		0		
Cn1c(ncc1N(=O)=O)C2NC(CO)(CO)CO2		1		
Oc1ccccc1C(=O)Nc2ccccc2				1
CC(C)(C)NCC(	0	0		0
CO\N=C(/C(=	0	0		
[O-][N+](=O)c1ccc(\C=C\c2cccc(c2)[N+]		1		
CN(Cc1ccc(F)cc1)N=O		1		
OC(=Nc1ccccc1F)c2csc(c2)N(=O)=O		1		
CC(O)c1ccc2ccc3ccccc4ccc1c2c34		1		
CC(N)(C(=O)O)c1cccc(CC(=	0			
OCC(O)C(O)C(OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O)		0		
CC(C)CC(O)Cc1ccccc1				0
CC(=O)Nc1snc2ccc(Cl)cc12		1		
Cc1nc(cn1c2ccc(cc2)N(=O)=O)N(=O)=O				0
Nc1ccc(N)c2C(=O)c3c(cccc3N(=O)=O)C(		1		
CCOc1ccc(NO)cc1		1		
CC(=O)OCC[N+](C)(C)C				0
CC(C)C(=O)Nc1snc2ccccc12		0		
Cc1cccc(OC[C@@H](O)CNC(C)(C)C)c1C		0		
Oc1ccccc1				0
ClCc1cc2c3ccccc3cc4ccc5ccccc1c5c24		1		
CC(C)(N)C#N				0
CC(C)N(CCCl)C(C)C				0
COc1ccc(cc1N)N(=O)=O				0
CCCCC(=O)O[C@]1(CC[C@H]2[C@@H]3CCCC4=CC(=				1
CCC(C)N	0			0

O=Nc1ccc2ccc3cccc4ccc1c2c34			1		
CCCCNc1ccc(	0	0		1	0
CC(C)(S)[C@	0	0		0	
Nc1c(cccc1N(=O)=O)N(=O)=O			1		
CC(C)CCC[C@@H](C)[C@H]1CC(=O)C2=C3CC[C@H]4C				0	
NC(=O)OC[C@@H]1[C@H](NC(=O)\C(=N/OCC(=O)[C				0	
C[C@]12CC[C(	0	0			
BrCC(Br)c1ccccc1			1		
CS(=O)(=O)c1ccc(cc1)[C@@H](O)[C@@H](CF)NC(=C				0	
Cc1ccc(O)cc1C			0	0	
COc1cc(cc(O	0	0		0	
CC(O)(C[S+](=O)([O-])c1cc		0			
CCCc1ccccc1O				1	
CCOCCOC(=O)\C=C/c1ccc(OC)cc1			0		
OC[C@H]1O[C@@H](Oc2		0			
Oc1ncnc2[nH	0	0		0	
CC(C)(Oc1ccc(cc1)[C@@H]2CC2(Cl)Cl)C			0		
CC[N+](CC)(C	1	0			
CNc1ncnc2c1	0				
C=CCOC(=O)c1ccc(C(=O)OCC=C)c(c1)C(=O)OCC=C				0	
CN(C)c1ccc(cc1)N=Nc2ccc(C=O)cc2			1		
COc1ccccc1NC(=O)C(N=Nc2ccc(cc2Cl)c3			0		
Clc1ccc(COC(=O)c2cccc3ccnc23)cc1			0		
O=C1Oc2cc3occc3cc2C=C1	0		0		
Oc1cc2c3ccccc3c4cccc(c1[N+](=O)[O-])			1		
NC(=O)C12OC1C(O)(NC2=O)c3ccccc3			0		
CCCN1C(=O)I	0				
NS(=O)(=O)c1cc2c(NC=NS2(=O)=O)cc1(			0		
FC(F)(F)c1cccc(Cl)c1			0	0	
O(P(Oc1ccccc1)Oc2ccccc2)c3ccccc3			0	0	
OC(CBr)C(O)C(O)C(O)CBr			1		
O=C1CN(\N=C\c2oc(cc2)N(=O)=O)C(=O)N1				1	
CC[C@H](C)[C@H]1O[C@@]2(C[C@@H]3C[C@@H](				1	
CCN1C[C@@]2(COC(=O)c:		0			
CCSCCSP(=O)(OC)OC			0		
CC[C@H](CC[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H			0	0	
NC(=O)Oc1c	0	0		1	
CC(C(=O)O)c:	0	0		0	
Cc1cc2C(O)C(O)C3OC3c2c4ccc5ccccc5c1			0		
NC1=NC(=O)C2=C(NCC(=N		0			
O=N(=O)c1cc(cc(c1)N(=O)=O)N(=O)=O			1		
Cc1ccc(\C=C\c2ccc(N)cc2)cc1			1		
Oc1ccc(\C=C/C#N)\C(=O)		0			

CN(C)N=Nc1ccc(cc1)C(=O)O	0		
CC(C)(O)c1ccc(CNC(=O)c2cccnc2Oc3ccc(F)cc3)cc1			0
BrC1ccc(Oc2ccccc2)cc1			0
Fc1cc2cccnc2c3cccnc13	1		
NC(CCONC(=O)C1=C(C)NC(=S)N	0	0	
CCOC(=O)C1=C(C)NC(=S)N		0	
OC(=O)c1cccc(c1)C(=O)O	0		0
CN(C)c1ccc(cc1)N=Nc2ccc(cc2)N(C)C(=O)C	1		
COc1c(C)c2C	0	0	0
OCC1OC(CC1O)N2C=C(CCCCl)C(=O)NC2=	0		
OC(=O)CN1C	0	0	0
CC1(C)[C@@H](C=C(Br)Br)[C@H]1C(=O)O[C@H](C#N			1
Cc1cccc(C)c1NC(=O)c2cc(c(Cl)cc2O)S(=O)(=O)N			0
O1C2C1c3csc3c4csc24	1		
COc1nsc2cccc(c12)[N+](=O)[O-]	1		
CCCCCCCCCCCCOC(=O)C(=C)C			0
CC(C)c1cc(F)c1	1	1	
C(CNC(c1ccccc1)c2ccccc2)		1	
Fc1ccc(cc1)C	1	0	
CCC1=C[C@@H]2CN(C1)Cc3c([nH]c4ccccc34)[C@@H](			0
CC(C)Oc1ccc2C(=O)C(=COc2c1)c3ccccc3	0		
Cc1cc2ccccc2c3cc4ccccc4cc13	1		
CC(C)CCC[C@@H](C)CCC[C@@H](C)CCC[C@]1(C)CCc1			0
BrC1ccccc1N(=O)=O	1		
OC(=O)c1c(Cl)cccc1Cl	0		0
CN(C)CCC(c1ccc(O)cc1)C	1	0	
COc1ccc(CC2N(C)CCc3cc(C)cc3)cc1		0	
NC(=O)[C@@H]1CCCN1C(=O)[C@H](Cc2c[nH]cn2)NC			0
COc1cc(NC(=O)C)ccc1NC(=O)C	0		
CCCCN(CC(O)CCO)N=O	1		
CC1(CO)C(O)CCC2(C)C(C)C		0	
C[C@@H]1CCC=C2CC[C@H](C[C@@]12C)C(=C)C			0
CC1(C)CC(N)CC(C)(C)N1O	1		
OC(=O)Cc1ccccc1Nc2c(Cl)cccc2Cl	0		1
Cc1ccc(N)c(O)c1	1		
Oc1ccccc1\C=N\NC(=O)c2		0	
CCCCC1C(=O)N(N(C1=O)c2ccc(O)cc2)c3	1		0
CCCCCCCCC(C)(C)C(=O)N		0	
COP(=S)(OC)	0	0	1
OC\C=C\CO			0
COc1cc(O)c2C(=O)c3c(OC)cc4OC5OC=C(C	1		
Oc1cccc2Oc3c4[C@@H]5C=CO[C@H]5C	1		
NON(N=O)c1ccccc1	1		

C[C@H]1COc	0	0	0
FC(F)(F)C(Cl)(Cl)Cl			0
COC(=O)c1ccc(C)cc1C2=NC(=O)C(C)(N2)C(C)C			0
C(\C=C/c1ccc	1		
Cc1ccc2Cc3cccc4ccc1c2c34		1	
C[C@H]1C[C@H]2[C@@H]3CC[C@H](C(=O)C)[C@@]			0
[O-][N+](=O)c1oc(\C=C\C=N\N2CC(=O)		1	
CC1(C)S[C@@H]2[C@@H](NC(=O)[C@		0	
C\C=C(/C)\C=C\C=C(C)C			0
OC(=O)c1cccc1C(=C2C=C(I)C(=O)C(=C2)I)c3cc(I)c(O)c			1
CN1C(C)(C)CC(O)CC1(C)C			0
CCC(CO)CO			0
CCC(C)(c1ccc(O)cc1)c2ccc(O)cc2			1
COc1ccc2C(=O)C=C(Oc2c1		0	
CC1(OC(=O)N(Nc2cccc2)C1=O)c3ccc(Oc4cccc4)cc3			1
Nc1cccc1C(=O)Oc2ccc3cccc3c2			1
CCCN1C[C@H](C)N(C[C@H		0	
CCCCCCCCCCCCC(=O)OCC(O)c1oc(O)		0	
O=C1CCCC(=O)C1			0
C[C@@H]1(C	0		
CCCCOc1ccc2nc3cc(Cl)ccc3c(NCCCNCCCC		1	
C[C@](O)(CS	0		1
COC(=O)C1O\C(C=N/O)\C(=C1Cl)Cl		0	
CCCCCCCCc1ccc(OP(=O)(Oc2cccc2)Oc		0	
COc1ccc2C(=O)c3c(OC)c(OC)cc4ccnc(c2		1	
CC(C)CN(C[C@@H](O)[C@		0	
O=N(=O)c1ccc2[nH]c3ccc(cc3c2c1)N(=C		1	
Clc1ccc(c(Cl)c1)C2(Cn3cnc		0	
Nc1ccc(O)c2C(=O)c3cccc3C(=O)c12		1	
OC(=O)CCOP(=N)(O)N(CCCl)CCCl		1	
Nc1ccc(N=Nc2ccc(cc2)S(=O)(=O)O)c(N)		1	
FC(F)(F)c1ccc(CCl)cc1		0	
CCCCC(CC)COC(=O)CCCCCCCC(=O)OCC(		0	
COc1cc(NS(=O)(=O)C)ccc1Nc2c3ccc(cc3		1	
CN(C)C(=O)N	0	0	1
[O-][S+](CCC1C(=O)N(N(C		0	
CCCCCOc1cccc1C(=O)O			0
Nc1ccc(cc1)[S+](=O)([O-])		0	
CCCCNC(=S)NCCCC			0
OCc1ccc2C(=O)c3cccc3C(=O)c2c1		0	
C1CCCCC2OC2CCCC1		0	
Cc1ccc2c(C)cccc2c1		0	
C[C@@H]1C[C@H]2OC(=O)C(=C)[C@H]		0	

CCCCCCCCCCCC[n+]1ccc(	0			1
Cc1cccc(Oc2cccc2)c1				0
Cc1ccc(cc1)S(=O)(=O)O				0
OC(C1CCN(Cc2cccc2)CC1	1			
OC(=O)c1cc(cc(c1)S(=O)(=O)[O-])C(=O)O				0
O=N(=O)c1ccc2oc3cccc3c2c1		1		
CCCCCCCC\C=C\CC1CC(=O)OC1=O				0
CC1CCC2C(C)C(O)OC3O[C@	0			
CC(C)OC1OC(=O)C(=C1Cl)Cl		1		
Nc1nc(N)c2[nH]cnc2n1		0		
CC(C)c1c(C(=O)Nc2cccc2)	0			
Cc1ccc(N)cc1O		1		
CCCNC(=O)N	0	0		0
[I+]1c2cccc2c3cccc13	0			
N#Cc1cccc1C#N		0		0
[O-][N+](=O)c1cc(cs1)C(=O)Nc2ccc(Cl)c		1		
COc1cccc(c1)C(=O)CBr		0		
CC(Cc1ccc2OCOc2c1)C=O				0
Oc1ccc(cc1)C(=O)N\C=C/c2oc(cc2)N(=O)=O				1
C[C@@H]1Cl	0	0		
ClCC(=O)c1cc	0	0		0
CN(N=O)c1ccncc1		0		
N[C@@H](Cl	0	0	0	0
[O-][N+](=O)C1CCCC1[O-]		1		
C1O[C@H]1[C@H]2CO2		1		
C1O[C@@H]1c2c3cccc3cc4cccc24		1		
CCCCC(=O)N	0	0	0	0
OC(=O)COc1c	0	0	0	0
OC(=O)CC(C(=O)O)S(=O)(=O)O				0
ClC(Cl)C(=O)C(Cl)Cl		1		
C[C@@]12N[C@@H](Cc3c	0			
O=C1OCCN1\N=C\c2oc(cc2)N(=O)=O				0
Clc1cnc(Oc2c	0	0	0	1
ClCOCl				0
Oc1ccc(Nc2ccc3cccc3c2)cc1		0		
CC1=C(CCN2c	1	0		0
Oc1cccc1C2=CC(=O)c3ccc	0			
OC(=O)C=C	0	0	0	0
Cl[C@@H](Br)C#N		1		
O=C1CCCC(=O)O1				0
[O-][N+](=O)c1ccc2NC(=O)C(=O)c2c1		1		
Nc1cccc2ncccc12		1		
Oc1c2nc3cccc3c2nnn1\N=C\c4cccc4		1		

[O-][N+](=O)c1ccc(cc1)C(=O)OCC2CO2	1		
OC(=S)c1ccccc1	0		
C[C@@]12CCCC[C@](C)([C@H]1CC[C@@]34C[C@@@H]([C@		0	
OP(=O)(O)CF	0	0	0
Nc1ccc(c2ccc(N)cc2[N+](=O)[O-])c(c1)[	1		
CCCCCCCCC(	1	0	1
OC(=O)CC1=I	0	0	0
COc1ccc2nc(	0	0	1
CC(=O)\C=C\C1C(=CCCC1(C)C)C			0
CC(C)(C)C=C	0	0	0
CC(Cc1ccc(OCC(=O)[O-])cc		0	
O\N=C/1\C(=	0	0	
Cc1ccc(C)c2c1c3ccccc3n2C		1	
NC(Cc1c[nH]c2ccc(O)cc12)C(=O)O	0		
Cc1ccn2nc(nc2n1)S(=O)(=O)Nc3c(F)cccc3F			0
CCOS(=O)(=O)c1ccc(C)cc1	1		
CC(O)Cn1c(C)ncc1N(=O)=O			0
[O-][N+](=O)c1ccc(\C=C\c2ccc(cc2)C#N	1		
CC1(C)OC2CC	0		
o1c2ccccc2c3ccccc13	0		0
CNc1ccc(O)cc1	1		1
C[C@@H](O)[C@@H](CO)NC(=O)[C@@H]1CSSC[C@			0
CCOc1ccc(cc1)C(=O)OCCN		0	
CC(=CCC\C(=C/CO)\C)C			0
[O-][N+](=O)c1ccc2c(c1)nc(\C=N\OCc3c	1		
OCC1OC(CC1O)N2CC(=O)C(=N)NC2=O	0		
Cc1cc(ccc1[N+](=O)[O-])C(=O)O	1		
CCOP(=S)(OCC)O\N=C(/C#N)\c1ccccc1			0
Nc1cc(Cl)c(NC2=NCCN2)c(Cl)c1			0
C[C@]12O[C	0	0	1
CC(=O)CC(C)(C)O	0		0
CC(=O)OCC(=O)[C@]1(CC[C@H]2[C@@	0		
C[S+](=O)([O-])OCCCCO[S		0	
O=C1NCCN1c2nccs2	1		
CCC1(CC)C(=(	0	0	0
C[C@H]1CN(	0	0	
CCOC(=O)C[C@@H](SP(=O)(OC)OC)C(=	0		
OC1COC(C(O)C1O)N(N=O)c2ccc(cc2)C(=	1		
ClCC=Cl			0
COc1ccc2C=C(Oc3ccccc1c23)N(=O)=O	1		
CC(COc1ccc(cc1)C(C)(C)C)OS(=O)OCCCl			0
CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)[C@H](C(=O)[O-])c3			0
CC(O)COCC(C)O	0		0

COC(=O)c1oc(NOC(=O)C)c(c2ccccc2)c1c	0	
OC(=O)[C@H](O)C	0	0
Nc1ccc(N=Nc2ccc(cc2)c3ccc(cc3)N=Nc4c(N)c5c(O)c(l		1
[O-][N+](=O)c1ccc2NCCc2c1	1	
CC(=O)SCC[N]	0	0
CC(=O)c1c(cc([N+](=O)[O-])n1[N+](=O)	1	
CCCC(C)C(OC(=O)CC(CC(=O)O)C(=O)O)	0	
CCCOc1ccc2[	0	
OC(=O)CCC(NC(=O)COc1cc(Cl)c(Cl)cc1Cl	0	
C[N+](=O)C1(C)CC(	0	0
NCCN[S+](=O)([O-])c1cccc	1	
O=C1c2ccccc2c3ccc(cc13)N(=O)=O	1	
Nc1nc2cc(Cl)c(Cl)cc2s1	0	
COc1ccc2[nH	0	
ONc1cc[n+](O)c2ccccc12	1	
COc1cc(cc(C(=O)NCC2CCCl	0	
Cc1cc(N)c(c(C)c1N)[N+](=O)[O-]	0	
Nc1ccccc1S(=O)(=O)O	1	
CCCCCCCCCCCCCCCCOC(=O)CCCCCCCC	0	
NC1(CCC1)C(=O)O	0	
[O-][N+](=O)c1ccc(SSc2ccc(cc2)[N+](=O)C	1	
CC1COc2c3N1C=C(C(=O)O)C(=O)c3cc(F)	0	
CN(CCCOc1c	1	0
CCC(=O)[N+](O)[O-]Cl	1	
Cc1c(ccc2ccccc12)[N+](=O)[O-]	1	
OC1C(O)c2ccc3c(ccc4ccccc34)c2C5OC15	1	
ONc1cccc2ccccc12	1	
NC(=O)[C@@H](O)C1C[C@@H](O)C2(=O)C3cc(F)ccc3	0	
COC(=O)C(C)	0	
ONc1ccccc1	1	
[O-]C(=O)c1cc(Oc2ccc(cc2Cl)C(F)(F)F)ccc1N(=O)=O	0	
OC1=C(Oc2cc(O)cc(O)c2C1=O)c3ccc(O)c	1	1
ClC(Cl)(Cl)C[C@H](O)C1CO1	1	
Cc1ccc(cc1)N(CCCl)CCCl	0	
ClC(=O)CCc1ccccc1	1	
CCc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]	0	
[O-][N+](=O)c1ccc2OC(=O)c3ccccc4ccc1c	1	
CCOc1nc(F)cc2nc(nn12)S(=O)(=O)Nc3c(Cl)cccc3Cl	0	
CNC(=O)ON(C(=O)NC)C(=O)NC	0	
COc1ccc(\C=C\C(=O)c2ccc	0	
CC(=C)C1CCC(=C)C2C1C=C(C)C(=O)C3=C	0	
CCC(=O)[N+](O)[O-]	0	
CCOC(=O)[C@H](O)C1(CCCc1ccccc1)N[C@@H](O)C2C	0	

Oc1cccc2ccc3c4ccccc4ccc3c12	1			
CC(=CCOC(=O)C)C		0		
CC1(CO1)c2ccccc2	1			
COc1cc(O)c2C(=O)c3c(O)cc(C)c(O)c3C(=	1			
Cc1cc(N=Nc2ccc(cc2)S(=O)(=O)O)c(N)c	1			
Nc1cc2ccccc2cc1N	1			
Nc1ccc(cc1)S	0	0		1
CC(C)(C)COC(=O)C=C	0			
NC1=NC(=O)c2nc(CNc3ccc(cc3)C(=O)N[C@@H](CCC(		0		
Cc1nnc(O)nc1O	0			
NC(CCC(=O)N(CC(=O)O)C(=O)C(N)CSN=	1			
[O-][S+](=O)(N1CCNCC1)c	0			
CC(=N(=O)[O-])C	1			
[O-][N+](=O)c1cccc2csnc12	1			
Clc1ccc(cc1)C(=O)ON(OCC2ccccc2)C(=O	1			
CCCCC(CC)COC(=O)c1ccc(N(C)C)c(c1)N(-	1			
C[C@@H]1CCCCN1N=O	1			
CCCCCN(N=O)C(=N)NN(=O)=O	1			
CCNC[C@H]	1			
C1Cc2scnc2c3cccnc13	0			
Oc1ccc(\C=N\c2snc3ccccc23)cc1	1			
Cc1onc(c1C(=O)N[C@H]2[C@H]3SC(C)(C)[C@@H](N:		0		
Cc1cccc(Cl)c1		0		
Cc1onc(O)c1C[C@@H](N)	0			
C[C@@]12[C@H]3CC[C@]	0			
CC(=O)Nc1nc2C3=CCCN(CC=C)C3CCc2s1	0			
OC(=O)c1ccc	0		0	
CCCCC(CC)COC(=O)c1cccc1C(=O)OCC(C	0			
CNc1ncnc2c1ncn2[C@@H]	0			
OCCc1cccc1[N+](=O)[O-]	1			
OCC(COCC=C)(COCC=C)COCC=C			0	
C[C@@H](S)C(=O)NCC(=O)O	0			
CN(C)c1ccc(C=Cc2ccc(cc2)N(=O)=O)cc1	1			
CCCCC(CC)CC	0		0	
CN(C)N=Nc1	0		0	
Cc1cc(cc(C)n1)c2cc3N(C4CC4)C5=CC(=O	1			
CC1CCN(CC[C@H]2CCCN2[	1			
BrCc1cccc2c3cccc4cccc(c12)c34	1			
CCN(CC)C(C)CN1c2ccccc2Sc3ccccc13			0	
CCCCC(CC)COC(=O)c1cccc1C(=O)O	0		0	
CCCCCCCCN1CCCC1=O			0	
ClC(Cl)(Cl)SN1C(=O)[C@@H]2CC=CC[C@	1			
CN[C@H]1CC	1		1	



CCN(CC)C(=O	0	0		
CCCC(CCC)C(=O)[O-]		0		0
CC1=CNC(=O)N(CCCN2CCN		0		
[O-][n+]1onc	1			
OC[C@H]1O[C@@H](OC(		0		
NCCCCN	0	0		
CC1(C)\C(=C\	0	0		
CCOC(=O)C[C@H](SP(=S)(OC)OC)C(=O)(			0	
Clc1cccc(c1)c2oc3ccccc3n2			0	
CCCCCCCCC(CO)CCCCC(		0		0
COc1c(nc(C	0	0		
CN(C)c1ccc2r	0	0	1	1
NC(C(=O)O)c1cc(O)ccc1Cl		0		
O1C2C1c3cc4cc5ccccc5cc4c6cccc2c36			1	
CC(CO)(CO)CO				0
O=N(=O)c1ccc2Oc3ccc(cc3Oc2c1)N(=O)			1	
BrN1C(=O)CCC1=O			1	
Cc1c(Cl)cccc1	0	0		1
Nc1cccc2cc3ccccc3cc12			1	
lc1ccc(NC(=N)NC2C3CC4C(		1		
Oc1ccc(O)cc:	0	0	0	0
OC1CCCc2c1c(c3ccc4cccc5ccc2c3c45)[N			0	
CCCCn1cc[n+](C)c1				0
CC(=O)Oc1ccc(cc1Cl)N(=O)=O				1
CC(C)NC(=N)NC(=N)Nc1cc		0		0
S(Sc1cccc1)c2cccc2				0
O=C1NC=Nc2[nH]cc(CN3CCCC3)c12				0
OC1CC(=O)c2c(O)ccc3c4ccc(O)c5C(=O)C			1	
C[C@H](Cc1c	0			
CCOC(=O)N(CCOC(=O)C)N=O			1	
CC(\C=C/C#N)\c1ccc(F)cc1)C(C#N)c2			0	
CN(C)CCC=C1c2ccccc2CCc3		1	0	
CCOC(=O)C(C#N)C1C(=C(N		0		
CN1C(=O)CN=C(c2ccccc2F)c3cc(ccc13)N			1	
CCC(C1OC(C	0	0		
CC1(C)S[C@H]2[C@@H](N		0		
CC(C)C[C@H]	0	0		0
O=C1OC(=O)c2cc(ccc12)c3ccc4C(=O)OC(=O)c4c3				0
Cc1ccc(C)c(O)c1C			0	0
Cn1cnc(c1Sc2ncnc3[nH]cnc23)N(=O)=O			1	
CCC(=O)NC1CC(c2ccccc2)c		1		
OC1C=Cc2c(cc3ccc4ccc(c5ccc2c3c45)[N-			1	
BrCc1ccc2c3cccc4cccc(c2c1)c34			1	

CO[C@H]1[C@@H](O)C[C@H](O[C@H]2[C@@H](O)	1		
ClC(=O)c1ccc(cc1)C(=O)Cl	1	0	
O=C1N(C[C@H]2CO2)C(=O)N(C[C@H]3C	1		
CCOc1ccc2nc	0		0
CCCCC(CO)CCC			0
COc1cc(CC2NCCc3cc(O)c(O)cc23)cc(OC)	0		
N[C@H](C(=O)O)c1ccc(cc1)	0		
Nc1ccc(\C=C\c2cccc(N)c2)cc1	1		
CCOc1cccc2ccnc12	0		
Fc1cccc1C2=N[C@H](NC(=O)c3cc4cccc4[nH]3)C(=C			0
CCCCCCCCCCCC[C@@H]	0		
CC(=O)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CC=C4C[C@@H](C			0
[O-][N+](=O)c1ccc(c1C=O)[N+](=O)[O-	1		
CN(C)P(=O)(N(C)C)N(C)C	0		0
CC12CCC3C(CCC4=CC(=O)NCCC34C)C1CC	0		
CCCCC\C=C/CCCCCOC(=O)C	0		
CC(C)c1ccc(cc1S(=O)(=O)C)C(=O)N=C(N)N			0
CCCC(C)(COC	0	0	0
C[C@@H]1CC[C@@]2(OC1)O[C@H]3C[C@H]4[C@@			0
CC[C@@]1(O)CC2CN(CCC3	1		
Oc1cc2ccc3cc4cccc4c5ccc(c1)c2c35	1		
CC(C)C1=CC(=O)C(=CC1=O)C	0		
Cc1cc(ccc1N)S(=O)(=O)O	0		
OCCOCCOCCOCCO			0
C\C=C/CCOC(=O)c1cccc1)\SS\C=C(\C)/N(Cc2cnc(C			0
COP(=S)(OC)OC	0		
CCNc1nc(NC(C)C)nc(SC)n1			0
CCOc1cccc1N	0		0
CC(C)(C)C(=O)Oc1ccc(cc1)	0		
CC1(C)SC2[C	0	0	
CCOC(=O)C1=	0	1	
C=COCCOCCOCCOC=C			0
CO[C@H]1[C	0	0	
NCCc1cc(O)c	0	0	1
CCOC(=O)NC(C)(C)Cc1ccc(Cl)cc1			0
COc1ccc(N)cc1N	1		1
CC#C[C@]1(C	0	1	1
C1CCNC1	0		
COP(=S)(OC)Oc1ccc(N)c(C)c1	1		
CC(=O)OCCOCCOCCOC(=O)C	1		0
CCCC[N+](C)[C@H]2CC(C[C@@H]1[C@H]3O[C@@H			0
CCN(CCO)c1cccc(C)c1			0
C1=Cc2cc3cccc4c5cccc5c6ccc1c2c6c34	1		

O[N+](=C=Cc1ccccc1)[O-]	1		
OCc1cc2ccccc2c3ccc4ccccc4c13	1		
CC[C@H](CC[C@@H](C)C1	0		
Nc1ccc(cc1Cl)[N+](=O)[O-]	1		
O=N(=O)c1cc(c2ccc3ccccc4ccc1c2c34)N(	1		
O=Nc1ccc(cc1)c2ccccc2	1		
CC(=O)Nc1ccc(Oc2ccc(cc2)N(O)C=O)cc1	1		
C[C@H]1C(=O)O[C@H]2C(	0		
COc1cc(N)c(OC)cc1N	1		
Cc1ccc(N=Nc2c(O)ccc3ccccc23)c(c1)N(=	1		
CCCCCCCCOCC1CO1			0
CC1=Nc2ccccc2C(=O)N1c3ccccc3C			0
Cc1ccc(cc1)C	0	0	0
CC(=O)Nc1ccc2ccc3c(O)ccc4ccc1c2c34	1		
O[C@H]1CCCN(C1)N=O	1		
CC(C)[C@H](N)C(=O)OCC(CO)OCn1cnc2C(=O)N=C(N)			0
CN1CC[C@@]23CCCC[C@@H]2[C@@H]1Cc4ccc(C)cc			0
Cc1cc(O)cc2OC(=O)c3c(O)cc(O)cc3c12	0		
CC(=O)c1c(O)c2C3C(Cc4ccccc5[nH]cc3c4!	0		
CCNC(=O)NC(=O)\C(=N\OC)\C#N			0
COc1cc(OC)c2cc(c3c(cc4OCOC4c3c2c1)C	0		
C[N+]1(C)[C(	0	0	
COc1cc(cc(O	0	0	
ClCCN(CCCl)F	0	0	1
CCCN(CCC)c1c(cc(cc1N(=O)=O)S(=O)(=O)N)N(=O)=O			1
NC[C@H]1O[C@H](O[C@@H]2[C@@H](N)C[C@@H			0
C=CC(=O)OCCOCCOCCOCCOC(=O)C=C	0		0
COc1ccc(\C=	0	0	0
O=N(=O)c1ccc(cc1)c2ccc(cc2)N(=O)=O	1		
CCC(CO)(CO)COCC(CC)(CO)CO			0
CC(C)(C)CC(C	1	0	0
CC(C)CC(C)CC(O)CC(C)C			0
CCN(CC)CCO(	1	1	
CCn1c(N)nc2c3cccn3ccc12	1		
COC1=CC(=O)OC(=C1)\C=C\c2ccc(OC)cc2			0
CCOc1ccc(NC(=O)N)cc1	0		0
CCC(O)OCC(C)OC(O)CC			0
[O-][N+](=O)c1cc(c2c(cc(cc2c1)[N+](=C	1		
CCCc1nc(C)c2	0		0
CC(C)(S)C(=O)N[C@@H](CS)C(=O)O			0
OCN1C(=O)C	0	0	
CCN1CCC2(CC1)COc3cc4CCN(C(=O)c5ccc(cc5)c6ccc(cc			1
ClCc1ccc2ccccc3c4ccccc4c1c23	1		

CCCC(=C)C=O	1	
CC(C)(C)C(Br)C(=O)Nc1ccccc1	0	
Cc1cccc2nccnc12		0
[O-][N+](=O)c1cccc(c1)C(=O)\N=C\2/S	1	
COc1c(cc(cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-	1	
CCCCSP(=O)(SCCCC)SCCCC		0
CCOCCOC(=O)c1cc(Cc2ccc(N)c(c2)C(=O)	0	
CC(C)(O)c1ccccc1CC[C@H](SCC2(CC(=O)[O-])CC2)c		1
C1COc1	1	0
CNc1ccc(cc1)C(=C2C=CC(=[N+](C)C)C=C	1	
CN(Cc1cnc2nc(N)nc(N)c2n1)c3ccc(cc3)C	0	
CN(C)CCN(Cc1ccc(Cl)s1)c2ccccc2	0	
COc1ccc2C(=O)c3c(O)c(OC)cc4ccnc(c2c	1	
Cc1ccc(C)c(c1)S(=O)(=O)O		0
CCN(CC)[N+](=NO)[O-]	1	
CN[C@H]1[C	0	0
C1CCN2CCCN=C2CC1		0
Cc1ccc(CN2C3C2c4ccccc4c5ccccc35)cc1	1	
COCC(O)Cn1cc(nc1Cl)N(=O)=O	1	
CC1(COc2ccc(CC3SC(=O)N	0	1
CNC(=O)Oc1ccccc1C(C)C		0
CC(C)NC[C@	0	0
Cc1ccc2[nH]nnc2c1	0	
Cc1cccc2c1cc(C)c3c4C5OC5C(O)C(O)c4c	1	
CC[C@H]1OC	0	1
CC(C)Oc1ccc	1	0
[O-][N+](=O)c1ccc2Oc3cc(Cl)c(Cl)cc3Oc	1	
COc1ccccc1N2CCN(C[C@@	0	
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O		0
OCC12OOC1(CO)c3ccccc3O2	0	
Oc1ccc(\C=N\c2snc3c(Cl)cc(Cl)cc23)cc1	1	
CC1OC(=O)C(C)OC1=O		0
CS(=O)(=O)Nc1ccc(Nc2c3ccccc3nc4ccc	1	
CC(=O)c1cccn1N(=O)=O	1	
ClC1CC2C(C1Cl)C3(Cl)C(=C(Cl)C2(Cl)C3(Cl)Cl)Cl		1
CC1(Cn2ccnn2)C(N3C(CC3=O)S1(=O)=O)	0	
CCCN1C(=O)N(CCCOC(=O)	0	
On1nnc2ccccc12	0	0
Cc1c(ccc(c1C2=NOCC2)S(=O)(=O)C)C(=O)c3cnn(C)c3C		0
BrCc1ccccc1CBr	0	
OCS(=O)(=O)[O-]		0
CC(C)(C)NCC(O)c1ccc(O)c(NC(=O)N)c1	0	
Nc1ccc2nc3ccc(N)cc3[s+]c2c1	1	

CC(=O)OC(C=C)c1ccc2OCOC2c1	1	
C=Cc1ccc(C=C)cc1		0
C[C@H]1CC(=O)O1	1	
C\C=C\C1=CC2=C(C(=O)O1)C(=O)C(O)C(	0	
Cc1ccc(NC(=O)N)cc1	0	0
CCC(O)CN	0	
CN\C(=N/C)\NCc1ccccc1		0
C[n+]1c2ccccc2nc3ccccc13	1	
OCl(=O)=O	0	
Clc1ccc2nc(NC(=O)Cc3ccccc3)cc2	0	
CCCC(=O)O	0	0
Cc1cc(C)c(C=C2C(=O)Nc3ccccc23)[nH]1		1
O=N(=O)c1ccc2c(oc3ccccc23)c1	1	
O=NN1CCC[C@@H]1c2cccnc2	1	
Cn1c(N)nc2ncc(cc12)c3ccccc3	1	
CC(=CCCC(C)(OC(=O)C)C=C)C		0
Nc1ccc2C(=O)C1=O	1	0
CCCCCCCCCO[C@@H]1O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)1		0
COc1nsc2cc(ccc12)N(=O)=O	1	
Cc1cnc(C)c(C)n1	0	0
BrC(=C)C=O	1	
CCCCCCCCCCCCCCCCn1cc[n+](C)c1		1
C1Cc2ccc3c(ccc4ccccc34)c2C1	0	
CC(C)CC(=O)Nc1snc2ccc(Cl)cc12	0	
CN(C)C#N	0	
CCCCOC(=O)N[S+](=O)([O-])C1=O	0	
CC(=C)C(=O)OCC(O)COc1ccc(cc1)C(C)(C)	0	1
NC(=O)C1CO1	1	
O=C1C=CC(=O)C1=O	0	0
OC(=O)C1C2CCC(O2)C1C(=O)O		0
CN(C(=O)C)c1c(I)c(NC(=O)C)c(I)c(C(=O)[O-])c1I		0
C1C[n+]2ccccc2c3cccc[n+]13	0	0
CCCCC(CC)COC(=O)CCCCCCCC(=O)OCC(CC)CCCC		0
CCCCCCCCCN		0
Fc1ccnc2ccccc12	1	
[O-][N+](=O)c1ccc2c3ccccc3cc(c2c1)[N-]	1	
N\C(=C/C#N	0	0
Cc1cc2ncccc2c3ncn(C)c13	0	
CN(C)CCNC(=O)c1cccc2ncc(nc12)c3ccccc3	1	
CCCCn1cc[n+](C)c1C		0
Clc1ccc2NC(=O)CSC(c3ccccc3)C1=O	1	
C[N+](C)(CCCCC[N+](C)(C)C1c2ccccc2c3ccccc13)C4c1ccc(C)O)C#N		0
CCC(C)(O)C#N	0	0

N[C@@H](C1C(C1C(=O)O)	0		
O[C@@H]1CC(=C[C@@H]	0		
CC12C3CCC(C	0	0	
CC(CCN(C(=O)O)CCOC(=O)C(=C)C)CC(C)(C		0	
CC1(C)CCC=C2C(C)(C)[C@H]3CC[C@@]12C3			0
Oc1ccc2c3C(C4OC4C(=O)c13)C5(O)CCC(		1	
ClC(Cl)Br		1	0
CSc1ccc(cc1)C(=O)C(C)(C)N2CCOCC2			0
SCCc1cnccn1		0	0
CCCCN1C2CC	1		
CCC[N+](=O)[O-]		0	
CCN(CC)C(=O	0	0	
C[N@+]1([O-	0	0	
COc1ccc(NC(=O)CC(=O)C)cc1			0
OC(=O)c1oc(c(c2cccc2)c1c3cccc3)N(=		1	
NCCC(=O)N[C@@H](Cc1c	0		
Cn1nnnc1SCC2=C(N3[C@H](SC2)[C@H](NC(=O)[C@H-			0
CCOC(=O)c1ccc(cc1)N(C)C			0
Nc1cccc1C(=O)OCC=C		0	0
CC[C@H](\C=C\[C@@H](C	0		
CCCCC=C		0	0
CCC(CO)(COCC=C)COCC=C			0
CN1C(=O)N(	0	0	0
Clc1nsc2c(cccc12)N(=O)=O		1	
Cc1c2C3NC3c4cccc4c2cc5cccc15		1	
CCCCCCCCOC(=O)c1ccc(O)cc1			1
CNC(=O)C(C)SCCSP(=O)(OC)OC		1	
CCC[C@@H]:	0	0	
Cc1cc(C)n(n1)c2[nH]nc(NN)c3c4cccc4n		0	
CC(CCl)OC(C)CCl		1	0
CC1=CCC(CC1	0	0	0
CN(C)C(=O)N(C)C=O		1	
CC(=C)C(=O)[O-]			0
COc1ccc(N)cc1		1	0
Oc1ccc(Nc2ccc(cc2N(=O)=O)N(=O)=O)c		1	
OC[C@H]1O[C@H]([C@H]	0		
CCCCCCCCc1ccc(cc1)S(=O)(=O)[O-]			0
CC(C)CCCC(C)C1CCC2C3CC(O)C4(O)CC(O		1	
OC[C@H]1O[C@H](O[C@]2(CCl)O[C@H](CCl)[C@@H-			0
CCCCC(CC)C(=O)[O-]			0
Cc1cccc2c1cc(C)c3c4cccc4ccc23		1	
COC1OC(CO)C(OC2OC(C(O		0	
Cc1cc2CCN(C(=O)Nc3ccc(Oc4ccnc4C)nc3)c2cc1C(F)(			1

CCCCOCCOCCOC(=O)C		0
NC1=NC(=O)N(C=C1)[C@H]2O[C@@H]	0	
CC(COC(=O)c1ccccc1)(COC(=O)c2ccccc2	0	
CN(C)S(=O)(=O)n1c(nc(Cl)c1c2ccc(C)cc2)C#N		1
CC1CC2C(CC[	0	0
Clc1ccc(cc1)S(=O)(=O)c2ccc(Cl)cc2	0	1
CC\C=C/CCOC(=O)\C(=C\C)\C		0
Cc1ccccc1N(=O)=O		0
Cl\C=C(\Cl)/SCc1ccccc1	1	
CC1=C(Cl)C(=O)Oc2cc(OP(	0	0
NC1CCN(CC1	0	0
CS(=O)(=O)c:	0	
Fc1ccc2c3c(ccc2c1)c4cccc5cccc3c45	1	
CC[C@]1(O)C[C@@H]2CN(Cc3c([nH]c4ccccc34)[C@		1
OC(=O)\C=C\C=C\C(=O)O	0	
COC(C)CCO	0	
CCC(CC)C(C)CCOC(=O)C		0
CN1CCc2cc(C	1	
CCN(N=O)C(=N)NN(=O)=O	1	
[O-][N+](=O)	0	0
[O-][N+](=O)c1cc(c(c2ccccc2)c(c1)[N+](	1	
O=N(=O)c1ccc(cc1)[N+]#N	1	
O[C@H]1CO[C@@H]2[C@@H](CO[C@H]12)ON(=O):		0
lc1ccc(cc1)C(=O)NC2CCN(	0	
CN(Cc1cccc(Br)c1)N=O	1	
CCOC(=O)[C@H](CCc1ccccc1)N[C@H]2CS[C@@H](CN		0
OC1\C=C\C(=O)O)\CCCC2,	0	
COC1(CCCC1)OC2CCC3C4CCC5CC6SC6CC	0	
OC(=O)CCC(=	0	0
Cc1ccc2nc3c4C=CC(O)C(O)c4ccc3c(CO)c	1	
[O-][N+](=O)c1cccc(CBr)c1	0	
CCC(N)(CO)CO		0
CC(C)(O)C1Cc2cc3C=C(C(=O)Oc3cc2O1)(	1	
CN(C)CCCNCCC#N		0
OC(=O)C1=C(	0	
CCc1ccccc1NC(=O)c2csc(c2)[N+](=O)[O-	1	
CSc1ccc(cc1N(=O)=O)N(=O)=O	1	
C(N1CCC2(CC	1	1
COc1ccc(cc1)c2nc(sc2c3cc	1	
C1OC1c2c3ccccc3cc4c2ccc5ccccc45	1	
Oc1ccc(CCNc2ccc(NCCc3cc	0	
OC(=O)CCCc1	0	0
OC(=O)c1cc(O)c2ccc(Cl)cc:	0	

CCCC(=O)c1c2cccc(O)c2c(O)c3c(O)cccc1	1	
[O-][N+](=O)c1ccc(\C=C\c2cccc(c2)C#N	1	
ClC(=C(Cl)\C(=C(/Cl)\SCc1cccc1)\Cl)Cl	1	
CC1(C)CO[C@	0	0
COc1ccc(N)c2C(=O)c3cccc3C(=O)c12	1	
NC(CSC(=CCl)Cl)C(=O)O	1	
N[C@H](CO)Cc1c[nH]cn1	0	
[O-]Cl(=O)(=O)=O	0	
CCCCCCCCC	0	0
CC(=O)Nc1c(l)c(NC(=O)C)c(l)c(C(=O)[O-])c1l		0
C[C@@H](O)CO	0	
CCOC(=O)C1=C(C)NC(=C(C	0	
CCCCCCCCC(=O)O	0	0
OCC(O)C(N=N#N)c1cccc1	1	
COC(=O)C12Oc3ccc(c(O)c3C(=C1C(=O)C	0	
ClC(=C)C=C	0	
CC(C)\N=C\1	1	0
CN(CS(=O)(=O)O)C1=C(C)N(C)N(C1=O)c	1	
C1CCc2c(C1)c3cccc4CNCCr	1	
C=CC(=O)OCCCCOC(=O)C=C	0	
OCCNc1nc(nc2cccc12)c3ccc(s3)[N+](=C	1	
CNCC(=O)N[C@@H](CCCNC(=N)N)C(=O)N[C@@H](C		0
CC(=O)c1ccc(cc1)C(=O)C		0
N\C(=C(\N)/C#N)\C#N	0	
[O-][N+](=O)c1ccc2c(c1)sc3cccc23	1	
[S-]C#N		0
COc1ccc2nc3cc(Cl)ccc3c(NC(C)CCCN(CCC	1	
CC12CCC3C(C	0	0
Nc1nc(N)nc(n1)c2oc(cc2)[N+](=O)[O-]	1	
C1CCC2(CCCCO2)OC1		0
[O-][N+](=O)c1cccc2c(cccc12)[N+](=O)	1	
Nc1cc(C(=C(Cl)Cl)Cl)c(cc1[	0	
CC(\C=C\C(O)C1CC1)C2CCC3\C(=C\C=C\C	0	
C(Oc1ccc(Cc2cccc2)cc1)C3CO3	1	
CCCN(C\C=C\l)C1CCc2ccc(	0	
CNC(=O)c1cccc1Sc2ccc3c(\C=C\c4ccccn4)n[nH]c3c2		1
COC(=O)[C@@H]1[C@@H	0	0
Fc1ccc(cc1)[	1	0
Nc1ccc2ccc3ccc(c4ccc1c2c34)N(=O)=O	1	
OCc1cc2c3cccc3c4cccc(c1)c24	0	
Oc1cccc2cccc12	0	1
C1=Cc2c3ccc4cccc5ccc(c6cccc1c26)c3c4	1	
COc1ccc2nccc(C(OC(=O)C(C)O)C3CC4CC	0	



CCCC(=O)C(=O)C			0
O=N(=O)c1ccc(Nc2ccc(cc2)N=C=S)cc1	0		
[O-]S(=O)(=O)CCS			0
C(Oc1nsc2ccccc12)C3CO3	1		
CC(O)C(C)[N+](=O)[O-]	0		
CCOC(=O)c1[nH]c2ccccc2c1\N=C\c3ccc(	1		
C[C@]12CC[C@@H]3[C@@H](CCc4cc(C	0		
COc1cc(ccc1[N+](=O)[O-])N=Nc2ccccc2	1		
NC1=CC(=O)N=C(N)N1			0
COc1ccc(N[S+](=O)([O-])c	0		
COc1ccc(\C=	0	0	
CC(C)[C@H]1[C@@H]2C[C	0		
CC(=O)c1cc(NC(=O)N)ccc1OC[C@H](O)(	1		
O=C(Nc1cccc	0		0
CP(=O)(O)CC	0	0	
CN(C)CCCN=C1c2ccccc2Nc3c(F)ccc(c13)	1		
Fc1ccccc1	1		
CC(C)(C)c1ccc	1	1	
C(Oc1ccccc1)C2CO2	1		
NC1C2CN(CC	0	0	
C[C@@H]1O	0	1	
O[N+](=CCl)[O-]	1		
NC(COC(=O)C=N#N)C(=O)O	1		
CC1=C(N2[C(	0	0	
C(N1C2C1c3ccccc3c4ccccc24)c5ccccc5	1		
Cc1c(cc2c(c1[N+](=O)[O-])C(C)(C)CC2(C	0		
Nc1cc2cccc3ccc4cccc1c4c23	1		
NC(Cc1ccc(O)c(O)c1)C(=O)O	1		
CN(C)C(=O)N(C)N=O	1		
CC(C)(C)OC(=O)O\N=C(/C#N)\c1ccccc1	0		
COP(=O)(OC)	0	0	0
CN(N)C=O	0		
CN(N=O)C(=O)c1ccccc1	1		
C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCc4cc(OC(=O)N(CCCl)C	0		
Nc1ccc(Oc2ccc(Oc3ccc(N)cc3)cc2)cc1	1		
CCC=N(=O)O	0		
CC(=O)N1C[C@H](O)C[C@H]1C(=O)O			0
C[C@H]1CO1	1		
CC(C)c1nc(nc(c2ccc(F)cc2)	0		
Cc1cc2cc3ccccc3c4ccc5cccc1c5c24	1		
COCCOC(=O)C=C	0		
CCS	0		
CCOC(=O)C12CC1\C(=N/O	0		

<chem>Cc1ccc(C)cc1</chem>	0	0	
<chem>CN(C)C(=O)Nc1ccc(Oc2ccc(Cl)cc2)cc1</chem>			1
<chem>O[C@@H]1CC(=C[C@@H](O)[C@@H]1O)</chem>	0		
<chem>O=P(Oc1ccccc1)(Oc2ccccc2)Oc3ccccc3</chem>	0		1
<chem>C[C@@H]1C[C@@H](O)C1</chem>	0	0	1
<chem>COc1ccc(cc1)</chem>	0	0	
<chem>Nc1c(Br)cc(cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]</chem>	1		
<chem>[O-][N+](=O)c1oc(\C=N\N2C(=O)C=C(C)C1(CCC(C)C)C(=O)NC(=O)NC1=O)</chem>	1		
<chem>O=C(OCCN1CCOCC1)C2(CC)C(C)C(N)C1CCC(C)(N)CC1</chem>	0		0
<chem>CN([C@@H](CN1CCCC1)c2cc)C1</chem>	0		
<chem>CCOc1ccc(cc1)N=O</chem>	1		
<chem>S=P(N1CC1)C1</chem>	0	0	1
<chem>ClC1(Cl)C2(Cl)C3(Cl)C4(Cl)C(Cl)(Cl)C5(Cl)C1</chem>	0		0
<chem>[O-]S(=O)(=O)OOS(=O)(=O)[O-]</chem>			0
<chem>O=C1c2ccccc2c3ccc4C(=O)c5ccccc5c6cc1</chem>	0		
<chem>OC(=Nc1ccc(cc1Cl)N(=O)=O)c2cc(Cl)ccc2</chem>	1		
<chem>CCCCCCCCC(=O)O</chem>			0
<chem>O=N(=O)c1ccc2ccc3cccc4c5ccccc5c1c2c</chem>	1		
<chem>OC(=O)CCCC1SCC2NC(=O)NC12</chem>	0		
<chem>Nc1nc(N)c(N)c(N)n1</chem>			1
<chem>CCC(C)C(C)CO</chem>	0		
<chem>CC(=O)C=Cc1ccccc1</chem>			0
<chem>C[C@@H](O)COC[C@@H](C)O</chem>	0		
<chem>[O-][N+](=O)c1ccc2C(=O)NSc2c1</chem>	1		
<chem>CCOC(=O)C1=C(O)C(=O)N(C)C1</chem>	0		
<chem>CCN(CC(O)C1=CC(=O)C(=N#N)C=C1)N=C1</chem>	1		
<chem>OCc1cc2ccc3ccnc3c2[nH]1</chem>	0		
<chem>OC(=O)c1nc(Cl)c(Cl)c(Cl)c1Cl</chem>			0
<chem>COc1cc(ccc1)C1</chem>	0	0	
<chem>C[n+]1c2ccccc2cc3ccc(N)cc13</chem>	1		
<chem>ClCC(=O)Cl</chem>			0
<chem>CS(=O)(=O)C</chem>	0		1
<chem>CC(C)CCC[C@@H](O)C</chem>	0	0	
<chem>CCN=NO</chem>	1		
<chem>CC(C)(CCl)c1ccccc1</chem>			0
<chem>Cc1c2ccncc2c(C)c3c4cc(N)ccc4[nH]c13</chem>	1		
<chem>CN1CCc2cc3OCOc3cc2C1O</chem>			0
<chem>OC(=O)C(Cl)(Cl)Br</chem>			0
<chem>O=C1NS(=O)C1</chem>	0		0
<chem>O=C(C1CCCC1)C1</chem>	0	0	
<chem>COC(=O)OC</chem>			0

CC(O)COC(=O)C(=C)C	0	0
COC(=O)C(=CC)C=C(C)C=C(C)C=CC=C(C)C	1	
[O-][N+](=O)c1ccc(s1)[C@@H]2NC(=O)	1	
NC(=S(=O)=O)N	1	
CC(=O)C=CC1=C(C)CCCC1(C)C		0
CC(C)C(=O)OCCc1ccccc1		0
O=C1CCc2c(O1)ccc3ccccc2	0	
CC(=C)C(=O)OC[C@H](Br)CBr	1	
CO[C@@H]1C[C@H](C[C@@H](C)[C@@H]2CC(=O)[C@H]2O)C1		1
Oc1ccc(c2C(=O)c3c(C(=O)c12)c(O)ccc3)cc1	1	
NCCNC(=O)c1ncsc1c2cccc2	0	
Oc1cc2C(CN(C)C)cc2	1	0
N[C@H](CCCN(N=O)C(=O)N)C(=O)O	1	
CN1C2CCC1C	1	
NC(=O)N(c1ccccc1)c2ccccc2	0	
CCC(C)C(=O)O[C@H]1C[C@H](O)C1	0	
Oc1cc(O)c2C(=O)C(=O)C(Oc2c1)c3ccc(C)cc3	1	
FC[C@H]1CO1	1	
COc1cc(C(O)c2ncc([N+](=O)[O-])n2C)c(O)cc1	1	
CC1=C(C)S(=O)(=O)CCS1(=O)=O		0
NCCCC1CCCC1	0	0
CN(=O)=O		0
O[C@H]1CO[C@H]([C@H](O)[C@@H]1)C	1	
Cc1nc2ccc(N)cc2nc1C	1	
CCCN1C(=O)C(=Cn2nc(N)n)C1	0	
OC(=O)C(c1ccc(Cl)cc1)c2ccc(Cl)cc2		0
C1CCN(CC1)C	0	0
CC1=C(C)C(=O)C1	0	0
OC(CN=N#N)CN=N#N	1	
OC(=Nc1ccccc1)c2csc(c2)N(=O)=O	1	
CC(C)COC(=O)c1ccccc1O		0
COc1cc2[nH]c(C)c(CCN3CCN(CC3)c4ccccc4)c2cc1OC		0
CCCCCCCCNC		0
NC(=O)c1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]	1	
COc1cc2c(CC)cc2	0	0
C[N+](C)(CCCCC[N+](C)(C)C)C	0	
Cc1cc(O)c(Cn)cc1	0	0
Cc1cc(O)c2C(=O)c3c(O)cc(O)c(O)c3C(=O)C1	1	
C[N+](C)1=CC=C(CC1)c2ccccc2	1	
OS(=O)(=O)c1ccc(NN=Nc2ccc(cc2)S(=O)(=O)C)cc1	0	
NCC(CP(=O)(O)C)C	0	0
OC(=O)c1ccc(O)cc1	0	0
FC(F)(F)C(=O)CC(=O)c1ccccc1		1

COc1cc(C=C)ccc1O	0		
CN1C(=O)c2ccccc2C1=O			0
Cc1cccc(c1)[N+](=O)[O-]	0		
CC1(CO1)c2ccc(cc2)N(=O)=O	1		
COc1ccc(cc1(	0	0	
FC(F)(F)c1cc(NC(=O)Nc2ccc(Cl)cc2)ccc1Cl			1
C=CCCCCCCC=C			0
NC1(CC1)C(=O)O		0	
CC1OC(Oc2cc(O)c3C(=O)c4c(O)cc(C)cc4	1		
Oc1ccc(Oc2ccccc2)cc1			1
CCC#C[C@@H](C)[C@@]1(CC=C)C(=O)F	0		
CNCC(=O)NC	0	0	
Oc1c(cc(cc1[	0	0	
OCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O	0		
C[C@@H]1[C	0	0	
Nc1ccc2c3cccc4cccc(c2c1)c34	1		
CN\C(=N\C#	0	0	
O[C@@H]1OCC=C2OC(=O)C=C12	0		
COc1cc2OC3OC=CC3c2c4OC(=O)C5=C(C	1		
Cc1cc(N)c2cc	0		0
CCCCOCCOC	0	0	0
COc1ccc2[C@	0	0	0
CCCCCCCC\C=C/CCCCCCCC(		0	
COc1cc2nc(nc(N)c2cc1OC)		0	
CCCCC	0		0
CCN(CCCC(=O)O)N=O	1		
[O-][N+](=O)c1cccc2c3ccc(c4cccc(c12)c	1		
[O-][N+](=O)c1cc(c2[nH]c3cnc(cc3c2c1)	1		
CC(=O)[C@@]1(O)CC[C@H]2[C@@H]3CCC4=CC(=O)(			0
O=N(=O)c1ccc2ccc3ccc(c4ccc1c2c34)N(	1		
[O-][N+](=O)c1ccc(cc1)n2nc(n[n+])2c3cc	0		
Clc1c2ccccc2cc3c1ccc4ccccc34	1		
N[C@@H](C	0	0	0
[O-][N+](=O)c1ccccc1C=O	1		
N#CSCSC#N	0		
COc1ccc2C(OC(=O)c2c1OC)C3N(C)CCc4c	0		
CC1c2ccccc2c3cccc(C)c13	1		
COc1ccc(O)c2C(=O)c3c(OC)cc4OC5OCC(	0		
Cc1cccc2cc3c(ccc4ccccc34)cc12	1		
CN(C(=O)C)c:	0	0	
Cc1cc2nc(C)c(C)nc2c3nc(N)n(C)c13	1		
COc1cc(cc(OC)c1O)C2C3C(		0	
Cc1cc(N)c(C)c2c3cc(O)ccc3[nH]c12	1		

Clc1ccccc1	0	0
[O-]C(=O)c1cccc(c1)N(=O)=O		0
CCN(N=O)C(=N)N[N+](=O)[O-]	1	
ClCC(=O)[C@H](Cc1ccccc1	0	
N[C@@H](C	0	0
OCC(O)C(O)C(O)C(O)C(=O)O	0	
CCCCC\C=C/CCC=O		0
CCC(=O)N([C@H]1CCN(CCC2CCCC2)C[C@@H]1C)c3cc		0
CCCCc1nc(Cl)	0	0
ClCc1ccc2ccc3cc4ccccc4c5ccc1c2c35	0	
CC(=C)C(=O)Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1		1
O=N(=O)c1cccc2c3ccc(c4cccc(c12)c34)N	1	
CC(O)CN(C)c1ccc(NN)nn1	1	
NC(=N)NC(=O	0	0
Cn1c(N)nc2c3cccnc3ccc12	1	0
CC(C)(C)NC(=	0	0
CC(=O)NC[C@H]1CN(C(=O)O1)c2ccc(N3CCOCC3)c(F)c		0
OCNC(=O)c1ccc(Cl)cc1	0	
COC(=O)c1oc(N(O)C(=O)C)c2cccc2)c:	0	
Oc1ccc2cccc2c1SSc3c(O)c	0	
C[N+](C)(C)[C@	0	0
Oc1ccc(c2cccnc12)S(=O)(=O)O	1	0
CO[C@@H]1	0	0
O=C(OCC(COC(=O)c1cccnc1)(COC(=O)c2cccnc2)COC(=		0
CNc1ccc2nc(C)cnc2c1C	1	
[O-][N+](=O)c1cccc(\C=C\C(=O)c2cccc:	0	
C1CC23OC2(C1)C=CC=C3	1	
C[C@H]1C\C:	0	0
Oc1ccc(Nc2cccc2)cc1		1
COc1ccc(COC(=O)C)cc1		0
Oc1cc(cc(O)c	1	0
Oc1c(cc(cc1N(=O)=O)N(=O)=O)C2CCCC2		1
CCC(C)(CC)c1cc(NC(=O)c2c(OC)cccc2OC)on1		1
CCCCCCCCCCCCOS(=O)(=O)[O-]		0
C[C@@H](O)[C@@H]1[C@H]2SC(=C(N2C1=O)C(=O)C		0
COC1CCC=CO1		0
CCCCCCCCCCCC[C@H]1CO1	0	
CCN(CC)CCNC(=O)c1ccc(N	0	0
N[S+](=O)([O-])c1cc2c(N	0	
O=N(=O)c1ccc2c(ccc3cc(ccc23)N(=O)=C	1	
NCC[C@H](C	0	0
CN(C)c1ccc(cc1)C2CC3(C)C(CCC3(O)C=C	0	
O=C1NC(=O)C2=C(NC(=O)N2)N1		0

Oc1cc2CCCN(Cc2cc1O)C(=O)C(F)(F)F	0	0	0
CC(CCC1ccc(C)N=C(O)C=Cc1oc(cc1)N(=O)=O	1	0	0
CN(C(=S)Oc1ccc2ccccc2c1)CC(C)CCNc1snc2ccccc12	0	0	0
ClNc1ccc2c(Cc3ccccc23)c1CCOC(=O)[C@H](CCc1cccCNCCc1c[nH]c(CCC(c2cccccNc1ccc2ccc3ccc(c4ccc1c2c34)[N+](=O)[CN(N=O)c1ccccc1)CC(C)c1ccc2CO[C@H](CBr)[C@H](O)[C@H](O)[C@@O-][N+](=O)c1ccc2ccc3c4c(ccc1c24)c5cClc1cccc(NN=C(C#N)C#N)c1	0	1	1
C1OC1c2ccc(cc2)c3ccccc3	1	1	1
CC(=O)Nc1ccc(cc1)C2OC2C(=O)c3ccccc3	1	1	1
COc1cc2OC3OC4OC4C3c2c5OC(=O)C6=C(O)C2C1c3c4ccccc4cc5c6ccccc6cc2c35	1	1	1
Cc1ccc2OC(=O)C=Cc2c1	0	0	0
Cc1ccc(c(C)c1)[N+](=O)[O-]	1	1	1
[O-][N+](=O)c1ccc(cc1)c2nc3SCCn3c2[NCOc1ncc(F)c2nc(nn12)S(=O)(=O)Nc3c(F)ccccc3F	0	0	0
CN1CCN(CC1)CN1C2CC(CC1C3OC23)OC(=O)C(CO)c4ccCON	0	0	0
CC1c2ccccc2c3ccc(F)cc13	1	1	1
CC1=NN=C(C(=O)N1N)c2ccccc2	0	0	0
OC(C(O)C(=O)O)C(=O)O	0	0	0
NC(CCN=[N+]=[N-])C(=O)O	1	1	1
COc1ccc(C[C@H](C)NC[C@H](O)c2ccc(O)c(NC=O)cO=C1c2ccc3ccccc3c2c4c1ccc5ccccc45	1	1	1
CC1(C)OC1COc2c3C=CC(=O)Oc3cc4occc1	0	0	0
CC(C)(C)OC(=O)C(N)CN=N#N	1	1	1
[O-][S+](=O)(N1CCNCC1)c	0	0	0
CNC(=O)Oc1cccc2OC(C)(C)Oc12	0	0	0
CC1(C)C[C@H](C)CN(C)c1ccc(N)cc1	0	0	0
Clc1cccc(C=Cc2ccc(cc2)N(=O)=O)c1	1	1	1
CCCCC(=O)OC1(CCN(CCC(=O)OC1CCCCC1)c2ccccc2C(=O)OC3CCC	0	0	0
COc1nc2ccccc(CBr)c2nc1OC	1	1	1

Cc1ccccc1N2	0			
C[C@@H](CN(C)C)CN1c2c		1		
CN=C1C=CC(=O)	1	0	0	1
[O-][N+](=O)c1ccc(\C=C\C2CCCC2)cc1			1	
COc1ccc(cc1)	0	0		
NCCCCCN			0	0
CCCCC(CC)COC(=O)OOC(C)(C)C				0
O=N(=O)c1ccn(=O)c2ccccc12			1	
CC1(C)COC1=O			1	
CC(CCCC(C)(C)O)C=C				0
C[N+](=O)[O-]CCOCC1				0
CCC(=N(=O)O)CO			0	
O=N(=O)c1cccc(c1)S(=O)(=O)OCC2CO2			1	
CC12CCC(CC1O2)C=C			0	
Clc1ccc(cc1)\C(=C\C=C\C2CCCC2)\C#N			1	
Cc1cc(ccc1N=Nc2ccnc2)N(CCO)CCO			0	
C[C@H]1[C@H]2Cc3ccc(O)cc3[C@]1(C)CCN2CC=C(C)C				0
Oc1ccc2ccccc2c1N=Nc3ccc(c4ccc(cc4S(=O)(=O)C)cc4)cc3			0	
CN1CCN(CC1)	1	1		
CCCCC(=O)\N=C\1/SN(C(=O)CCCC)c2c			1	
Cc1ccc(cc1N)N=N(=O)c2ccc(C)c(N)c2			1	
Oc1ccc2C(=O)c3c(O)ccc(O)c3C(=O)c2c1			1	
Fc1ccc2ccnc2c1			1	
COc1ccc(Cl)cc1C(=O)NCCC(=O)O		0		
CNC1C2CN3CCC(O2)C13		0		
CC1=CC(=O)c2c(O)cccc2C1		0	1	
O=C1Oc2cccc3ccc4cccc1c4c23			0	
Cc1ccccc1C(=O)Cl			1	
CC1(CN2CCC(=O)N2)C(=O)N1	1	1		
N[S+](=O)([O-])c1cc(C(=O)N)ccc1		0		
CN(CC[C@@H](O)c1ccc(cc1)C(=O)N)C(=O)O		0		
C(Oc1ccc(OCC2CO2)c1)C3CO3			1	0
COc1cc(C)ccc1O				0
c1ccc2c(c1)[nH]c3ccccc23			0	
Cc1ncc([N+](=O)[O-])n1C			1	
CC1CC2OC(=O)C3(C)C2C(OC3(C)O)C4(C)C(=O)N4			0	
Oc1ccc(cc1[S+](=O)(O)[O-])C(=O)N1		0		
Cc1csc(n1)c2nc3ccccc3n2C(=O)O		0		
CC(=CC1C(C(=O)N)C(=O)N1)C(=O)O	0	0	1	0
CC12CCC3C(Cc4cc(O)ccc34)C1CC(O)C2(=O)O			0	
Cc1ccc(C=C2C3CCC(C2=O)C3(C)C)cc1				1
CCOC(=O)c1ccc(O)cc1	0	0		0
Clc1ccc(Cl)c1	0	0		0

COP(=O)(OC)	0	1	0
CCCCCCCCCCCCCCCCOS(=O)(=O)[O-]			0
Fc1ccc(cc1)C	1	0	0
CC(C)c1cc2C	0		0
CN(Cc1ccc(cc	1		0
Cn1c2ccc3ccccc3c2c4c5ccccc5ccc14		1	
CCOC(=O)C(C)(C#N)c1snc2ccc(cc12)[N+		1	
CC1(C)S[C@	0	0	
OP(=O)(O)OC(Cn1cncn1)(Cn2cncn2)c3ccc(F)cc3F			0
CCN1CCN(CC	0	0	1
N[C@H](CCC(=O)NCC(=O)		0	
CN1C(CC(O)C1=O)c2cccnc2		0	
O=N(=O)c1ccc2nc[nH]c2c1		1	1
Cc1cc(CC(=O)	0	0	
OC(=O)CCC(=O)Nc1cc(Cl)cc(Cl)c1		0	
NC(=O)NS(=	0	0	
CO\N=C/C(=O)NC1C2SCC(=C(N2C1=O)		0	
Cn1cc2cccc(c2n1)N(=O)=O		1	
CC(C)(O\N=C/C(=O)N[C@		0	
ClC\C=C/CCl			0
COc1cccc2C(=O)c3c(O)c4CC(O)(CC(OC5		1	
CCCCCNC(=O)\C=C\c1oc(cc1)[N+](=O)[C		1	
CCN1CCC[C@H]1CNC(=O)c		0	0
FC(F)(F)c1ccccc1N(=O)=O		0	0
CC(=O)O[C@	0	0	0
Cc1ccccc1N		1	0
CCc1c(Br)c(Br)c(Br)c(Br)c1Br		0	
Oc1cc2cccc3ccc4ccc(c1c4c23)N(=O)=O		1	
CN(C)c1ccc(cc1)C2(OC(=O)c3cc(ccc23)N		0	1
CC(C)(C)NCC(	0	0	0
CCC(C)COC(=O)CC(C)C			0
CC(=O)C1(C)OC12C(=O)C=Cc3ccccc23		0	
CCCCCCCCCCC[n+]1ccn(CCCCCCCCCC)c1C			1
CCCC=C(CC)C=O			0
Cc1cccn2c1nc3ccc(NO)nc23		1	
C1COCCOCCOCCOCCOCCO1		0	
OC[C@H]1O[C@@H](Oc2		0	
OC(=O)[C@H]1CN(CCCP(=		0	
CC1(C)N(CO)C(=O)NC1=O			0
CCC(C)N1N=(	0	1	
COc1c(c(C)c(cc1C(C)(C)C)[N+](=O)[O-])		0	
C1COc2c(O1)	1	0	
CC(C)(C)C(=O)C(Cl)Cl			0



OC(=O)Cc1cc	0	0	0
CC(=O)OC1(CCC2C3C=C(Cl)C4=CC(=O)C5			0
Clc1cncc(Cl)c1			0
CCCC(=O)C1c2cccc(O)c2C(=O)c3c(O)ccc			1
CCCCN(CC(O)CC)N=O			1
CN(CC#C)Cc1	0	0	0
COP(=O)(OC)Oc1ccc(c(C)c1)N(=O)=O			1
Cc1ccc(cc1)N	1	0	0
ONC(=O)c1ccccc1			1
Oc1c(I)cc(cc1N(=O)=O)C#N			0
Oc1c(Sc2cc(Cl)cc(c2O)[N+](=O)[O-])cc1			0
O[N+](=C=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-])[O-]			1
Cc1nc(N=Nc2	0	0	
CC(O)CO	0	0	0
Cc1ccc(N)c(C)c1			1
CC12C=CC3=C4CCC(=O)CC4=CCC3C1CCC			0
CC(C)CCCC(C)C1CCC2C3CC=C4CCCCC4(C)			0
CC(=O)N(O)c1ccc(Oc2ccc(Cl)cc2Cl)cc1			1
CC(C)(C)S(=O)(=O)CC(Cc1ccccc1)C(=O)N			0
CC(C)NP(=O)	0	0	
CCCc1ccc2OCOc2c1			0
OCCN(CCO)c1ccc(N=Nc2c(Cl)cc(cc2Cl))N			1
C=COCC1CCC(COC=C)CC1			0
[O-]S(=O)CNc1ccc(cc1)S(=O)(=O)c2ccc(NCS(=O)[O-])			0
OC[C@H]1O	0		
Oc1ccc(c2C(=O)c3c(C(=O)c12)c(O)ccc3N			1
CCC(C)ON=O			1
[O-][N+](=O)c1ccc2nc3ccc(cc3nc2c1)[N			1
CS(=O)(=O)O			0
COc1c(Cl)ccc(Cl)c1C(=O)O			0
CO\N=C/C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C(=			0
CCCN(CCC)N=O			1
CC1CN(CCN1)[S+](=O)([O-		0	
CC(C)CC(NC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(=O)CN(			0
CC1CCC(=C(C)C)C(=O)C1			0
ClC(=O)c1ccccc1			1
CC(=C)CN1CC[C@]23[C@H		0	
Oc1cccc(c1N(=O)=O)N(=O)=O			1
[O-][N+](=O)c1cccc2c1c(cc3ccccc(c23)[N			1
CCC(COC(=O)C(=C)C)(COC(=O)C(=C)C)CC			1
CCCCCCCCN			0
Oc1cccc2cccn(=O)c12			0
O=N(=O)OC1COC2C(COC12)ON(=O)=O			0

CN(C)c1ccc(cc1)N=Nc2ccc3ncsc3c2			1	
COC(=O)C1Cc2c([nH]c3ccc(cc23)[N+](=O)C)C(=O)N[C@H](C)C1			1	
CC(=O)N[C@H](C)C1	0	0	1	0
CSC(=N)NCCl	0	0		
ClC(=C1OC(=O)C(=C1)Cl)Cl			1	
COc1ccc2CN(C)C1	0			0
CNS(=O)(=O)C1	0			
C[C@@H]1NC(=O)[C@@H](N)CNC(=O)[C@@H](NC(=O)C)C1				0
CCCCCOC(=O)c1ccccc1C(=O)OCCCCC	0		0	
CN(C)CC\C=C/1\c2ccccc2C		1		
CCCCNC(=O)N[S+](=O)([O-])C1		0		
CC(C)(O)C(Cl)C1	0	0		0
BrCCOC(=O)C(=O)OCCBr			1	
CN1CCN(C)CC1			0	
CCCCCCCCC(Cl)C1	0	0	0	0
CCCCCCCCCCCCCCCCOCCO(C)C1		0		
CN1CCc2cccc3c2[C@@H]1C		0		
CCCCCCCCCO				0
CC1(O)C2CCCC2C3CCCC13			1	
[O-][N+](=O)c1ccc2CCNc2c1			1	
C[C@H](COc1ccccc1)N(CCCl)Cc2ccccc2			1	
OCC(O)c1oc(O)c(O)c1O			0	
Cn1c2cccc2c3cccc13			1	
O1c2c1c3cc4cccc4cc3c5cccc25			1	
CC(=O)Nc1ccc2c(Cc3cc(O)ccc23)c1			1	
CCS(=O)(=O)CCn1c(C)ncc1[N+](=O)[O-]			1	
Cc1cc(C)c(NC)C1	0	0		
Cc1cc(C)c(C(=O)O)c(C)c1				0
OC(=O)COc1cc(Cl)c(Cl)cc1Cl			0	
CCCN1CCCC	0	0		
OC(=O)CC(O)(CC(=O)O)C(=O)O			0	0
CCOC(=O)C[C@H](S[P@@](=O)(OC)SC)C1			0	
CCCCC(CC)COP(=O)(O)OCC(CC)CCCC				1
CCOP(=S)(OCC)SCCl			0	0
ONC(=O)C1(CCOCC1)NS(=O)(=O)c2ccc(Oc3ccc(F)cc3)C1				0
NNc1ccc(cc1N(=O)=O)N(=O)=O			1	
[O-][N+](=O)c1c(Cl)cc(Cl)cc1Cl			0	
Nc1ccc2c(no[n+])2[O-]n1			1	
Oc1ncc2cccc12			0	
CC1CC(CC(C)(C)N1C)OC(=O)C(O)c2ccccc2				0
[O-][N+](=O)c1ccc(Br)cc1			1	
Cc1c(\C=N\OCc2ccc(Cl)cc2)c3cc(ccc3n1)C1			0	
C[C@H](CCCC)C1	0	0		1

Clc1c(Cl)c(Cl)c2Oc3c(Cl)c(Cl)c(Cl)c(Cl)c3	0		
Nc1cccc1C(=O)N	0	0	0
CC(C)NC[C@@H](O)COc1cccc2C[C@@H](O)C1	0		
CN(C)c1ccc(cc1)C(=C)C=C([N+](C)C)C	0		
Clc1ccc(CO)nc1	1	0	0
Clc1ccc(NC(=O)N)nc1	0	0	
CC(=O)OCc1cccc1[N+](=O)[O-]			0
CC(=O)NO	0	0	1
CN1C2=NC(=O)NC(=O)C2=Nc3cc(C)c(C)nc3			1
CC1=C(N2[C@@H](O)C(=O)N2)C(=O)N1	0	0	
COc1ccc(\C=C\C(=O)c2ccc(O)cc2)cc1		0	
BrC1ccc(cc1)C(=O)\C=C\C2CCCC2			0
C[S+](=O)([O-])OCC(O)C(C)N		0	
ClC(=O)c1c(Cl)cccc1Cl			1
Nc1ccc(CCN2C(=O)N2)cc1	1		
Cc1c(OCC(F)C)cc1	0		
CC(C)(C)N(CC(=O)c1ccc(O)c(CO)c1)Cc2ccc(O)cc2			1
COc1ccc(\C=C\C(=O)O)cc1		0	
NNc1nc2ccc3nc4cccc4c(O)c3c2s1			1
OC[C@H]1O[C@@H](O[C@H]2[C@H](O)[C@@H](O)C2)O1			0
Nc1ccc(cc1)[S+](=O)([O-])N		0	
CO[C@@H]1C(=O)N1	0		
BrC(Br)C1=C(Br)C(=O)OC1			1
COc1cc(cc(OC)c1OC)C2OCC3C2COC3c4ccc(O)cc4			0
NC(=S)c1ccc(O)cc1	0		
C1CC2CCc3cccc3C24OC4C1			0
OCCc1ccc(Nc2ccc(O)c3C(=O)c4c(O)ccc(O)c43)cc1			1
C1CC(CC=C1)c2cccc2			0
COC(=O)CCC(=O)N	0	0	0
Cn1nnnc1SC(=O)N	0	0	
CCCCCCCCCCCCO			0
CC(C)CC(C)(O)C#CC(C)(O)CC(C)C			1
Oc1cccc2ccc[n+](O)c12			0
CC(=O)C(=O)c1cccc1			0
CN(C)CCNC(=O)c1cc2cccc2c3cccnc13			1
O=C(CCCCC)N	0		0
CO[C@H]1C=CO[C@@]2(C)Oc3c(C)c(O)c4c(O)c(NC(=O)N)cc432			0
CC1COCC2cc3c(cc12)C(C)(C)C(C)C3(C)C			0
NC(=N)NC(=O)N	0	0	1
Cc1ncsc1CCO			0
C(Cc1cccc1)C2CO2			1
[O-][N+](=O)N	0	0	
CC(=O)NC[C@@H]1CN(C)C(=O)N1		0	

[O-][N+](=O)c1ccc2C(=O)NNC(=O)c2c1	1	
BrC1ccc2OCC3=NOC(=O)N	0	
CC(=O)OCc1cc(ccc1OC(=O)C)C(=O)C	1	
C=CC=C	1	
OC(=O)C1=NN(C(=O)C1)c2ccc(cc2)S(=O)(=O)O	0	
Cc1nnc2ccc(nn12)c3cccc(c	0	
COc1cc(cc(OC)c1OC)C(=O)NC2CCCNC2	0	
CN(CCON(=O)=O)N(=O)=O	1	
CCCCC(=O)N(C)C	0	0
Fc1ccc(NC(=O)c2csc(c2)N(=O)=O)cc1	1	
O=C1NC(=O)	0	0
CCCCCOC(=O)\C=C\c1oc(cc1)[N+](=O)[C	1	
[O-][N+]1=C	0	0
CC(=CCC[C@@](C)(O)[C@@H]1CCC(=CC1)C)C	0	
CCOC(=O)C(C)C(=O)C	0	
CC(=O)N(Cl)c1ccc2c(Cc3ccccc23)c1	1	
O=C1ON=C2	0	0
CC(=CC1C(C(=O)OCc2oc(CC#C)cc2)C1(C)	1	
CC(=O)C(=C)Br	1	
O[C@@H]1C	0	0
[O-]S(=O)(=O)c1cc(c2c(NC	0	
C[C@@H](N'	0	0
CC(O)C(O)C(O)C(O)C1SCCN1N=O	0	
COC(=O)COc1ccc(Cl)cc1Cl	0	0
C[C@H]1CCOS(=O)(=O)O1	1	
[O-][S+](=O)(N1CCCNCC1)	0	
[O-][N+](=O)c1oc2cc(ccc2c1)N(CCCl)CC	1	
CO[C@]1(NC(=O)CSC[C@@H](N)C(=O)[O-])[C@H]2S	0	
C[C@@H](O)c1cc2ccc3ccccc4ccc(c1)c2c:	1	
Cc1cccc(c1)N=O	0	
NC1=Nc2c(nc(Br)n2C3OC4	0	
ON(=O)=C=Cc1occc1	0	
CCCCCCCCC	0	0
CC12CCC3C(CC=C4CC(=O)CCC34)C1CCC2	0	
COC(=O)\C(=C/OP(=O)(OC)OC)\c1cc(Cl	0	
CCCC[n+]1cccc(C)c1	0	
COc1c(CN2C	0	0
CCCC\C=C/C	0	0
COc1cc2C[C@@H]3N(C)C	0	
CNC[C@@H]1CC[C@@H](N)[C@@H](O[C@@H]2[C	0	
Cc1cc(NC(=O)C(=O)O)cc(C)c1Oc2ccc(O)c3CCCC23	0	
COC(=Nc1nc2ccc(cc2[nH]1)C(=NO)c3ccc	1	
Cc1cccc(c1N)[N+](=O)[O-]	1	

C[N+](C)(C)C	0	0	0
Fc1ccc(C=O)cc1Br			0
C[n+]1ccsc1N=Nc2c(c3ccccc3)n(C)c4ccc			1
CCCCOC(O)CC			0
C[N+](C)(C)C	0	0	0
ClC1=C(Cl)[C@@]2(Cl)[C@H]3COS(=O)(			0
[N-]=[N+]=NCc1ccccc1			1
OCC(O)C1OC(=O)C(=C1O)O			0
CCN(CC[N+](C)(C)C)c1ccc(cc1)N=Nc2ccc			1
CC(=O)N\N=C\C1=CN(O)c2ccccc2N1O			1
NCCCC(N)C(=O)O		0	1
NCC(O)(C[S+](=O)(O)[O-])		0	
CN1[C@H]2CC[C@@H]1CC(O)C2			0
CCCOc1ccc2nc(NC(=O)OC)[nH]c2c1			0
CCCCOCCOC(=O)COc1ccc(Cl)cc1Cl			0
CCN(CC)c1ccc(N=O)c(O)c1			0
CCCCC(CC)OC(=O)c1cccc(c1)C(=O)OC(C			0
CC(CC1=CC(=	0	0	1
CC(C)NC(C)C	1	1	
C=C=O			1
CC1=CC(=O)N	0	0	0
[O-][N+](=O)c1ccc2c(OC(=O)c3ccccc23)			1
CN1CCN(CC1	1	0	
OC[C@@H](O)CN=[N+]=[N-]			1
c1ccc2c(c1)c3nc4ccccc4c5c6ccccc6nc2c:			0
Clc1c(Cl)c(Cl)c2C(=O)OC(=O)c2c1Cl			0
O=C1OC(=O)	0	0	
CN(Cc1cccc(c1)C(F)(F)F)N=O			1
O=N(=O)c1cc2ccccc2c3ccccc13			1
OC(=O)c1ccc	0	0	0
CC(C)COC(=O)C(=C)C			0
Cc1cc2[nH]c3cc(C)c4ccccc4c3c2c5ccccc1			1
CCOP(=S)(OCC)SCSc1cc(Cl)ccc1Cl			0
CSCNc1ccccc1C(=O)C			0
CCCCCN(N=O)C(=N)NN(O)O			1
Cc1cccc(N=Nc2c(O)ccc3ccccc23)c1C			0
C[C@@]1(CO1)c2ccc(cc2)[N+](=O)[O-]			1
BrC1cc(Br)c(OCCOc2c(Br)cc(Br)cc2Br)c(			0
Cl\C=C\c1c(Cl)c(Cl)c(Cl)c(Cl)c1Cl			0
NC(=O)C1(CC	1		0
COC(=O)\C(=C\c1occc1)\[N+](=O)[O-]			0
Cc1cccc(CN2	1	0	
Oc1nc2ccccc2n1C3CCN(CCCC(c4ccc(F)cc			0

COc1cccc(CCc2ccccc2OCC(	1		
CCCCCCCCC(	0	0	0
COc1ccc2nc3cc(Cl)ccc3c(NCCCNCCCl)c2i		1	
CC(C)c1ncc([	0	0	
O1[C@@H]2[C@H]1c3ccccc3c4c2ccc5c		1	
CC(C(=O)O)c1ccc(C2CCCC2)c3ccccc13			0
CC[C@]12CC	0	0	
CCCCC(CC)CC	0	0	0
CCN(CC)CCO(	1		
CN(N=O)C(=O)c1c(ncn1C)N(C)N=O		1	
CC(=O)Nc1nr	0		0
CN(C(=O)CN(CCO)CC(=O)N(C)C(C)(C)Cc1		0	
CCN(CC)C(=O)[C@H]1CN(C)[C@H]2Cc3c[nH]c4cccc			1
COc1c(C(=O)O)c(O)nc2ccccc12		0	
O[C@H]([C@H](O)C(=O)O)C(=O)O			0
CC1CCNC1			0
O=CC=Cc1oc(cc1)N(=O)=O		1	
CC(=O)Oc1ccc(C=C)cc1			0
Cc1ccc(cc1)S(=O)(=O)OCc2ccc(cc2)N(=C		1	
CCc1ccccc1Nc2ccc(Nc3ccccc3CC)c4C(=O		1	
Cc1ccc2cc3ccccc3cc2c1		1	
NC(Cc1ccccc1)C(=O)O		0	0
ClC1C2(Cl)C3C4C5OC5C6C4C1(Cl)C(Cl)(C		1	
CC(=O)NC(CSC(=C(Cl)Cl)Cl)C(=O)O		1	
CCN(CC)CCNc1ccc(COC(=O)c2occc2)c3S		1	
CC(=O)Nc1ccc2ccc3ccc(O)c4ccc1c2c34		1	
CC(C)N(CCC(=	1	0	
OC(=O)c1ccc(C=NN2N=Nc3c([nH]c4cccc		1	
CN(C)c1nc2c3cccnc3ccc2n1C		1	
OC1C(O)c2ccc3cccc4cc5c6ccccc6C1=c5c		0	
F\C(=C/1\CN	1	1	
CCOP(=S)(OCC)Oc1cnc2ccccc2n1		0	0
[O-]C(=O)[C(	0	0	0
O=C1NNC(=O)C=C1		1	0
OCC(=O)O		0	
OP(=O)(O)C	0	0	0
Nc1ccc2cccn2c1		1	
Nc1cccc(c1N)N(=O)=O		1	
NC(=N)NN=C1C=CC(=NNC		0	1
CC[C@H](CO)NCCN[C@H](CC)CO		0	
Cc1c(C(=O)O)c(O)cc2C(=O)c3c(O)c(O)c(		1	
COc1nnc(c2ccc[n+](O)c2)n1c3c(Cl)c(Cl)cc4NC(=O			0
CN1[C@H]2CC[C@H]1CC(C2)OC(=O)c3cc(C)cc(C)c3			0

[O-][N+](=O)c1ccccc1SSC(=C(Cl)Cl)Cl	1		
ClCc1c2ccccc2c3ccc4cccc5ccc1c3c45	0		
Oc1ccc2cc(SSc3ccc4cc(O)ccc4c3)ccc2c1	0	1	
CNC(=CN(=O)=O)NCCSCc1csc(CN(C)C)n1			0
CN(Cc1ccc(C)cc1)N=O	0		
CN(C)CCNC(=O)c1cccc2cc(oc12)c3ccccc:	1		
CC1(C)CC(=O)CC(C)(C)N1			0
CN1[C@@H] 1 1			
CCCCCCCC\C=C/CCCCCCCC(=O)OC	0	0	
CN(C)N=Nc1[nH]cnc1C(=O)N			0
ClC(Cl)C(c1ccc(Cl)cc1)c2ccc(Cl)cc2	0	1	
COc1cccc2OC3(C)OOC3(C)c12	1		
Oc1ccc2c3ccccc3[nH]c2c1[N+](=O)[O-]	0		
COc1cc2OC3OC=CC3(O)c2c4OC(=O)C5=	1		
CC(C)(O)CCc1ccccc1			0
CN(C)CCNC(=O)c1cccc2nc3ccccc3cc12	1		
CC1CC[C@@]2(NC1)O[C@ 1			
CCCC1CCOC(C)S1			0
Cl\C=C/C[N+]12CN3CN(CN(C3)C1)C2	1	0	
CN(C)CC\C=C 1 1			
CC(C)C1=C(CN(C)C(C)Cc2ccccc2)N(C)N(C1=O)c3ccccc:			0
Oc1cccc2c1ccc3[nH]c4cc(c5ccccc5c4c23	1		
COc1ccc(C=C)cc1	0		
[O-][n+]1cc2ncccc2cn1	0		
CCNC(=O)[C( 1			
C[N+](C)(C)C 0 0		0	0
OCc1c(cccc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	0		
BrC(Br)C(Br)Br	0	0	
C[C@@H]1C[C@H]2[C@@H]3CCC4=CC(=O)C=C[C@]4			0
Clc1ccc(CNC(=N)SCCCc2c[i 0			
CCCN(CCC)C( 0			
O=N(=O)c1ccc2cccc3CCc1c23	1		
CC(C)(O)C(=O)c1ccccc1			0
Cc1ccc(c(C)c1N(=O)=O)N(=O)=O	1		
ClCCOCOC(Cl			0
CC(=O)Oc1ccc(cc1)C(c2ccc 0 0			1
CC(=O)c1ccc2N=C3N(Cc2c1)C(=O)c4ccc	1		
CO[C@@H]1C[C@H](CC[C@H]1O)\C=C(/C)\[C@H]		1	
CCCCCCCC(=O)OCC=C	0	0	
Cc1cc2C(=O)c3cc(O)cc(O)c3C(=O)c2c(O	1		
CNC[C@H](C 0 0			0
CC(=O)OCC(=O)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CC[C@H]			0
OC[C@H](S)( 0 0			

<chem>Nc1ccc(Oc2ccc(cc2)N(=O)=O)cc1</chem>	1			
<chem>CC1CC2C(CCC3(C)C2CCC3(OC(=O)C)C(=C</chem>	0			
<chem>CC(=O)c1c(C)c(c(c(c1C)[N+](=O)[O-])C(</chem>	0			
<chem>CCOP(=S)(OCC)Oc1nc(Cl)c(Cl)cc1Cl</chem>	0		1	
<chem>C[C@@H](N)Cn1ccc2cc(F)</chem>	1			
<chem>CC(C)(CO)C(O)C(=O)NCCCCO</chem>	0		0	
<chem>CC(=CCCC(=CCCC(=O)C)C)C</chem>			0	
<chem>CCOC(=O)CN[C@H](C1CCCC1)C(=O)N2CC[C@H]2C(=</chem>			0	
<chem>CCCCN</chem>	0			
<chem>Cc1oc2c(NC(=O)c3c(Cl)cccc3Cl)cccc2c1C(C)(C)O</chem>				1
<chem>Nc1ccc2ccccc2n1</chem>	1			
<chem>O=N(=O)c1ccc2C=Cc3cccc1c23</chem>	1			
<chem>CCCCCCCCC(=O)NCc1cc(OC</chem>	1			
<chem>CCCCO</chem>	0	0	0	0
<chem>COc1ccc(cc1)C2OC2C</chem>			1	
<chem>FC(Cl)(Cl)Cl</chem>			0	
<chem>FC(F)(F)c1ccc(Cl)c(Cl)c1</chem>				0
<chem>C1CCCCCCCCC1</chem>				0
<chem>CCCCCCCCC</chem>	1	0	0	1
<chem>CN1C(=O)Nc</chem>	0	0		
<chem>Clc1ccc(NC(=</chem>	0	0		
<chem>NC(=NC(=O)c</chem>	1	1		
<chem>CC(C)c1ccc(C</chem>	0	0	0	
<chem>Nc1ccc(cc1)c2ccc(N)c(c2)[N+](=O)[O-]</chem>			1	
<chem>Nc1ccc(cc1)c2ccc(cc2)[N+](=O)[O-]</chem>			1	
<chem>CCCN(CCC)C1</chem>	1	0		
<chem>FC(F)(F)c1ccc(Cl)cc1Cl</chem>				0
<chem>Nc1nc(N)nc(i</chem>	0	0		0
<chem>NC1=C(Cl)C(=O)N(N=C1)c2ccccc2</chem>			0	0
<chem>CNC1CCCN(C</chem>	0	0		0
<chem>COc1cc(ccc1N=C(C)O)N(=O)=O</chem>			1	
<chem>NC(=N)c1ccc</chem>	0	0		
<chem>CC1(C)CCC(C)(C)c2cc(ccc1</chem>		0		1
<chem>ClC(=C(c1ccc(Cl)cc1)c2ccc(Cl)cc2)Cl</chem>			0	1
<chem>Cc1ccc(C)c(NO)c1</chem>			1	
<chem>CN(C)CCCl</chem>			1	
<chem>O[C@@H](C</chem>	0	0		
<chem>CCN1C[C@]2</chem>	0	0		
<chem>COc1ccc2C(=O)c3nccc4cc(OC)c(OC)c(c2</chem>			0	
<chem>CC(C(=O)OC1CC2CCC(C1)N</chem>		0		
<chem>CC(C)(O)c1ccccc1CC[C@H]</chem>		0		
<chem>Cn1c(nc2ncc(cc12)c3ccccc3)N(=O)=O</chem>			1	
<chem>BrC1ccc(NC(=O)c2cc(Br)c(i</chem>		0		1



Cc1nc2C(=O)C=CC(=O)c2c3[nH]c4ccccc4	1		
CN(C)CCN(C)CCO		0	
CC(Br)CBr	1		
CC(C)CCCO		0	
Oc1cc(O)c2C(=O)C=C(Oc2c	0	0	
COC1=CC(=O	0	0	
Oc1c(cc2ccc3cccc4ccc1c2c34)[N+](=O)[	1		
CN(Cc1ccc(cc1)C(=O)O)N=O	0		
C\C=C/1\C[C@H](C)[C@@](O)(CO)C(=C	1		
CN(C)c1nc2c	0	0	
Cc1c2ccccc2cc3ccc4ccccc4c13	1		
CCOC(=S)[S-]		0	
COC1=C[C@H]2[C@H]3CCc	0		
CCCOC(=O)c1ccccc1C(=O)OCCC		0	
CN(C)CCCN(C(=O)C=C	0		
CC[C@](C)(Cl	0	0	
Nc1nc(O)c2[nH]nnc2n1	0		
CC(=O)c1ccc(cc1)[S+](=O)	0		
O=C1C=Cc2c(cc3ccc4cccc5ccc2c3c45)C1	1		
CN1CCC[C@H	1	1	
Cc1cc(O)c2C(=C3C(=O)C4C(O)C5C6C(O)	0		
NC(=N)c1ccc(C[S+](=O)([C	0		
CN1C(=O)OC	0	0	0 1
CN(C)CCNC(=O)C1=CC=CN2C(=O)c3ccccc	1		
CC(C)(C)c1ccc(cc1)c2ccc(cc2)N=O	1		
CCOP(=O)(C)SCCN(C(C)C)C(C)C	0		
CCCCOc1ccc(N)cc1		0	
COC(=O)[C@@H](N1CCc2sccc2C1)c3ccccc3Cl		0	
Oc1ccc2c(O)cccc2c1	1		
CCCN1C(=O)I	0	0	
Nc1nc(cs1)c2cccnc2	0		
COc1ccc(cc1[N+](=O)[O-])C(=O)Nc2ccc	1		
OC(=O)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)	0	0	
[O-][N+](=O)c1oc\C=N\N	0	1	
Nc1ccc(C=C)cc1	1		
CC1Cc2c(Cl)cc(C(=O)NC(Cc3ccccc3)C(=O	0		
CNC(C)Cc1ccccc1	0		
Nc1cc(cc(Cl)c1O)[N+](=O)[O-]	1		
CCCN(CCCO)N=O	1		
c1cc2cnccc2cn1	0		
CC(C)CCCCCOC(=O)Cc1cc(Cl)c(Cl)cc1Cl	0		
OS(=O)(=O)[	0	0	0
CO[C@H]1[C	0	0	

O[C@@H]1C	0	0	0
CCCC1COC(Cn2cncn2)(O1)c3ccc(Cl)cc3Cl			0
COc1ccc2C[C@H]3N(CCC4C		0	
CC=C(C)C=O			0
CCC(=O)N(C1CCN(Cc2ccccc2)CC1)c3ccccc3			0
c1cnc2c(c1)ccc3c4cccnc4ccc23			1
OCCc1ccc(Nc2ccc(O)c3C(=O)c4c(O)ccc(c4C(=O)c23)N			1
Cc1ccc2c(c1)cc3ccc4cccc5ccc2c3c45			1
ClC(Cl)C(Cl)(Cl)SN1C(=O)C2CC=CCC2C1=			0
OCC1O[C@H	0	0	1
CS(=O)(=O)c1ccc(O)c(N)c1			0
CC(C)(C)[C@	1	1	
Nc1nc(Nc2ccccc2)nc3c1nc		0	
Oc1ccccc1Nc2ccc(cc2[N+](=O)[O-])[N+]			1
[O-][N+](=O)	0	0	1
CC(C)[C@H](CO)Nc1nc(Nc		0	
ClCc1ccc2ccc3cccc4ccc1c2c34			1
OCC1O[C@@	0	0	
CC(C)c1cccc(O)c1			1
C[C@@H]1C	0	0	
CC(=O)N(O)c1ccc(Cl)c(Cl)c1			0
CCCC(=O)O[C	0	0	
COc1ccc(C(=O)C2C3C4COC		0	
CCCCC[C@H]	0	0	0
CSCCC(NC(=O)COc1cc(Cl)c(Cl)cc1Cl)C(=		0	
CCCN(C1CCN(CC1)C(=O)C2CCNCC2)[C@@H]3CCc4ccc			0
Oc1ccc(Cl)c2C(=O)c3c(O)ccc(Cl)c3C(=O)		1	
C1CCCC1		0	0
Nc1ccc(cc1)c2ccc(cc2)c3ccc(cc3)c4ccc(N		0	
Cc1ccccc1OC	0	0	0
CC(C)(O)CCc1ccc(O)c2C(=O)c3c(O)c4C5(		1	
CCCCCCCCCCCCSC			0
C[S+](=O)([O-])Nc1ccc(cc1		0	
CN(C)CCCN=C1c2ccccc2Nc3c(ccc(c13)N(			1
NC(CSc1ccc(cc1N(=O)=O)N(=O)=O)C(=C			1
OC(=O)[C@H]1[C@@H](C(=O)O)[C@@		0	
O=Cc1cccc(Oc2ccccc2)c1			0
CC12CC(O)C3C(CCC4=CC(=O)C=CC34C)C:		0	
CCCCCCCCCCCCSCC(=O)O			0
c1ccc2c(c1)cc3c4cccc4c5cccc6ccc2c3c5		1	
CNc1ccccc1C(=O)OC		0	
Cc1cc(N)c(C)c(c1N)[N+](=O)[O-]		1	
O=C1OC(=O)c2cccc3cccc1c23			1

C[C@@H]1CCc2c1ccc3c2ccc4ccccc34	1			
OC(=O)[C@H]1NC[C@H]2	0			
CCOC(=O)\C=C/C(=O)OCC			0	
C[C@H]1C[C@@H](C)C(=O)[C@H](C1)[	0			
NCCNCCNCCI	0	0	1	0
C[C@H](CCI)O[C@H](C)CCI	1			
Nc1ccc(Br)cc1	0			0
CC(=O)Nc1ccc(cc1)[S+](=C	0			
CCc1ccc(Br)cc1				0
CNc1ncn(C)c1C(=O)N(C)N=O	1			
Cc1cc(N)c(cc1N)N(=O)=O	1			
COc1ccc(OC)c(c1)C(O)CNC(=O)CN			0	0
Cc1ccc(N=Nc2c(O)c(cc3ccccc23)C(=O)O	0			
Nc1ccc2c(Cc3cc(N)ccc23)c1	1			
Cc1c(C)c(Br)c(Br)c(Br)c1Br	0			
COC(=O)C12OC1(C)C(C)(O)NC2=O	1			
CCN(CC)CCN(	1	0		
COc1c2ccoc2nc3c(O)c4OCOc4c(CC=C(C)	0			
OCNC(=O)C=C	0			
CN(C)c1ccc(cc1)c2ccc(cc2)N(C)C	0			
CCCCOC(=O)CC#N				0
[O-][N+](=O)c1ccc2[nH]c3ccc(cc3c2c1)[	1			
BrC1cc(Oc2cc(Br)c(Br)c(Br)c2Br)c(Br)c(Br)c1Br				0
C\C=C/c1ccccc1)\N(=O)=O				1
COc1ccc(CN2C3C2c4ccccc4c5ccccc35)cc	1			
CN(C)CCC(=O)O[C@@H]1	1			
C[C@@]12CCC(=O)C=C1CC[C@@H]3[C@@H]2CC[C@@				0
CCN[C@@H](C)Cc1ccccc1				0
OCc1cccc2c3cccc4cccc(c12)c34	0			
CC(C)(C)OOC(C)(C)CCC(C)(C)OOC(C)(C)C	0			0
COC(=O)C1=(	0	0	1	0
C\C=C/1\C[C@@H](C)[C@	0			
NCCc1ccc(cc1)[S+](=O)([O	0			
CNC(=O)O\N=C(\C)/SC				0
OC1CCC(O)(CN(N=O)C(Cc2ccccc2)C(=O)	0			
C(CN1CCOCC	1	0		0
c1ccc2c(c1)ccc3ncccc23	1			
O1C2C1c3ccccc3c4ccccc24	1			
CCCCCCCCC(	0	0		
CC(=O)N(CC(	0	0		
C[C@H](C[C@H](N)C(=O)(	0			
CC1=C(SCCO1)C(=O)Nc2ccccc2	0			0
COc1ccc(C=(	0	0	1	1

Oc1ccc2ccccc2c1N=Nc3ccc(cc3)N=Nc4c	1		
Cn1c(N)nc2ccc3ncccc3c12	1		
CN(C)c1ccc(\C=C\C2ccc(cc2)N(=O)=O)cc1			0
OCCN1CCN(C	1	1	
CCOCC=O			0
CC\C=C/C\C=C=	0	0	0
CN1C[C@H](	1	1	
C[C@H](CCC(=O)O)[C@H]		0	1
NC(CSC(F)(F)C(Cl)Br)C(=O)O	1		
Cc1ccc(OCC2CO2)cc1	1		
N[C@@H](C	0		
CC1(C(Cl)Cl)C2C(Cl)C(Cl)C1(C(Cl)Cl)C(Cl)C	0		
[O-][N+](=O)c1cc(c2ccc3cccc4ccc1c2c3	1		
Oc1ccc2[nH]ccc2c1	0		
CN(CC(=O)C)N=O	1		
Oc1ccc2ccc3c4ccccc4ccc3c2c1	1		
COc1ccc2c(c1)C(=O)c3nccc4cc5OCOc5c	1		
O1C2C1c3c4c2cccc4cc5ccc6ccccc6c35	1		
COC(=O)\C(=C\C=C\C=C\C=C\C=C\C=C/C)\C	0		
CC(C)(OOC(C)(C)c1cccc1)c2cccc2	0		1
CS(=O)(=O)OCCc1ccc(OCC2ccccc2)cc1	1		
CC(C)(C)c1cccc1			0
CC(CO)(CO)N(=O)=O			0
CC(=O)OC(C)(C)C1Cc2cc3C=C(C(=O)Oc3c	0		
CC(C)(C)C(O)C(Cc1ccc(Cl)cc1)n2cncn2			0
CC(=O)Nc1cccc1C	1		0
Nc1ccc(Nc2c3ccccc3nc4ccccc24)cc1	1		
CCCCCCCC(=O)OCC(O)CO	0		0
Cc1ccc(NO)cc1	1		
CCC1(CC(=O)O)OCCc2c1[nH]c3c(cccc23)	0		
C\C(=C/C=C/C/C(=C/C(=O)Nc	0		
OC(=O)c1ccc(O)c(O)c1			0
O=C1N2Cc3c	0	0	0
Cc1noc(NS(=	0		0
C1CCC2(CC1)CO2	0		
Clc1ccc(CN2C3C2c4ccccc4c5ccccc35)cc1	1		
CC[C@H](N)c1cccc1			0
CC#CCOC(=O)C1=CCCN(C)(	0		
COC1=NC(=O)N(CC(O)CN=N#N)C=C1	1		
CCNC(=O)[C(	0		
COC(=O)[C@H]([C@H]1CCCCN1)c2ccccc	0		
COc1cc2nc(n	0	0	0
ClC(Cl)C#N	1		0

CC(=O)OCC(=O)[C@@]1(O)CC[C@H]2[C@@H]3CCCC4	0	0	0
Clc1ccc(cc1)(	0	0	
OC[C@@H](O)[C@@H](O[C@H]1O[C@	0		
OC1COC(C(O)C1O)N(N=O)c2ccc(cc2)N(:	1		
Oc1cc(O)c2C(=O)C=C(Oc2(	0		1
CCCCNC(=O)I	0		0
CCC(C)(CN(C)C)OC(=O)c1ccccc1			0
CCCCCCCCc1ccccc1C(CO)OS(=O)(=O)O	0		
CCCCOCC(=O)O	0		
CC(C)CCC[C@@H](C)CCC[C@@H](C)CCC[C@]1(C)CCc:	0		
N1C2C1c3cccc4cccc2c34	1		
CC(=C)C=O	1		
COc1cc(O)c2C(=O)C(=O)C(Oc2c1)c3ccc(	1		
[O-][N+]1=C(C(=O)c2ccccc	0		
Nc1cccc(c1CO)[N+](=O)[O-]	0		
Cc1ccc2C(=O)N3C=C(CC3C(O)Nc2c1O)\(	1		
ClCc1cccc(c1)N(=O)=O	1		0
CN(C)[C@@I	0	0	
COC(=O)Nc1	0		0
CC(C)CCC[C@@H](C)CCC[C@@H](C)CCC[C@]1(C)CCc:	0		
OC(=O)c1cccc2cccn12	0		
CC12CCC3C(Cc4cc(O)ccc34)C1CCC2O	0		
Oc1c2ccccc2nc3ccccc13	0		
O=N(=O)c1ccc2c(c1)c3cccc4cccc2c34	1		
COC(=O)C1=C(C)NC(=C(C1	0		0
CC(=O)OC12CCC3[C@](CCC4[C@@]3(C)	0		
C1CCCC2OC2CC1	0		
Oc1nnc(O)c2cc(ccc12)[N+](=O)[O-]	1		
CC1CCC2(O1)C(=CCCC2(C)C	0		
COc1cc2O[C@@H]3OC=C[C@H]3c2c4O	1		
CC(=S)N			0
COc1ccc(\C=C\c2ccc(N)cc2)cc1	1		
CCC#N	0		0
C(Oc1ccc(cc1)N(CC2CO2)CC3CO3)C4CO4			0
OC(=O)Cc1cr	0	0	0
CCOC(=O)Cc1cccc(c1)c2cc(CCCCCc3ccc(O[C@H]4O[C	0		
CC12CCC(=O)	0	0	
OC(=O)c1ccc(c(c1)[N+](=O)[O-])[N+](=	1		
CCc1cccc(C)c1			0
OC1CCOP(=O)(N1)N(CCCl)CCCl	1		
COc1cc(NCc2ccc3nc(N)nc(	0		
N[C@H]1C[C@H]([C@H])(C	0		
OCc1cc2ccccc3ccc4cc5ccccc5c1c4c23	0		



N#C\C=C/C#N	0			
COc1nncc2ccncc12	0			
CC[C@H]([C@H]1O[C@@](CC)(C[C@H]1C)[C@H]2		1		
CCN(CC)c1ccc(cc1)N=Nc2ccc(cc2)[N+](=	1			
CC(=O)N(CC(O)CO)c1c(I)c(C(=O)NCCO)c	0		0	
ClC(CBr)CBr	1			
CCCC(=O)O[C@@]1(CC[C@H]2[C@@H]3CCCC4=CC(=C			0	
COC(=O)c1ccc(\C=N\n2nnc3c4ccccc4nc:	1			
c1c[nH]cn1	0		0	
CO[C@]12[C@H]3N[C@H]3CN1C4=C([C	1			
CCCCC1C(CC(=O)OC)CCC1=O			0	
CN([C@@H]:	0	0		
CN1CCC(CN2c3ccccc3Sc4ccccc24)C1	0			
CC(=CCC\C(=C\C\C=C(/C)\C=C)\C)C			0	
Nc1c2ccccc2nc3ccc(Br)cc13	1			
COc1cccc(CN(C)N=O)c1	1			
CCC(C)c1cc(cc(c1O)[N+](=O)[O-])[N+](=	0			
[O-][N+](=O)c1ccc2c(c1)c3nc4ccccc4c5c	1			
CCCc1nc(c(C	0	0		
CCOC(C)OCC\C=C/CC			0	
Cc1c(c2ccccc2c3ccc4ccccc4c13)[N+](=O	1			
CCNC(C)Cc1cccc(c1)C(F)(F	0			
NNc1cccc1	0	0	1	0
CCCCCCCCCO	0			0
[O-][N+](=O)c1cc2cccc3c4ccccc4c(c1[N	1			
CC(C)CN(C[C@@H])(OP(=C	0			
CC1=CC(=O)C=CC1=O	0			
c1ccc(cc1)c2ccccc2c3ccccc3	0			
Clc1cccc1c2onc(n2)c3ccn	0			0
CCC(C(=O)NC	0	0		0
OCCN1CC1			1	
CCN(CC)CCO[C@H]1CC[C@]2(C)[C@H]3CC[C@@]4(C				0
Cc1c(C)c2c3C4OC4C(O)C(O)c3ccc2c5ccc	1			
OS(=O)(=O)Oc1c2ccccc2c3ccc4cccc5ccc	0			
Cc1cnc2cc3nc(N)n(C)c3c(C)c2n1	1			
OC(C(=O)c1c	0	0	0	0
CCCN1cc2CC3C(C=C(C)CN3C)c4cccc1c24	1			
CC(C)NCC(O)c1ccc(cc1)N(=O)=O				0
Cc1cccc(C)c1O	0			0
CC(=O)OC1C(C)(C)C2CCC1(C)C2				0
COC(=C1[C@H](C(=C(C)N=C1C)C(=O)OC	0			
OCCOCCO	0			0
O=C1CCCN1				0

CCOC(=O)C(=	0	0	
O=C(N[C@@H]1C[C@@H]1c2ccccc2)[C@@H]3CCC(=O)			0
CC(C)(C)NC(=	0	0	
NC(=O)CCCCn1ccc(\N=C/I		0	
CCc1ccc(C)cc1			0
CCC[C@@H]1O[C@@H]2C[C@H]3[C@@H]4CCCC5=CC			0
NC(=N)c1ccc(OCCCOc2ccc(cc2)C(=N)N)cc1			0
Oc1ccc(N=Nc2ccc(cc2)[N+](=O)[O-])c(C		0	
Clc1ccc(cc1Cl)c2ccc(Cl)c(Cl)c2Cl		0	
CC1(C)CC(O)CC(C)(C)N1[O]			0
OCC1OC(C(O)C1O)n2cnc3c(NO)ncnc23		1	
CCSC(=O)Cl		0	0
CC(=CCC\C(=C)\CC\C(=C)\C(=O)OCC(=O)C		0	
O=C1CCCCCCCCCCCC(=O)OCCO1		0	0
Clc1ccc(cc1Cl)N=Nc2ccc(Cl)c(Cl)c2		0	
CC(=O)Nc1cc	0	0	0
Oc1ccc(cc1)C	0	0	1
O=C1C=CC(=N#N)C=C1		1	
Cc1cccc(Nc2ccccc2)c1			1
COc1cc2c(CC3N(C)CCc4cc(		1	
Cc1ccc(cc1)C(=O)c2cc(O)c(O)c(c2)N(=O		0	1
C[C@@H]1Cl	0		
C(COCC1CO1)OCC2CO2		1	0
[O-][N+](=O)c1ccc2ccc3cccc4c5CCCCc5c		1	
CN1C2CCC1CC(C2)OC(c3cc		1	
C[C@H](NC[C@H](O)CP(=		0	
NC(CCC(=O)C	0	0	0
CC(=Nc1ccc(cc1)C(=O)C=Cc2ccccc2)O		0	
Oc1ccc2ccccc2c1N=O		0	
O=N(=O)c1ccc2cc(c3ccc(cc3c2c1)N(=O)		1	
CC(C)C[C@H](NC(=O)[C@		0	
Nc1ccc(Cc2ccc(N)c(c2)C(=O)O)cc1C(=O)		0	
CC(C)(N)Cc1c	0	0	
C[C@]12CCC	0	0	0
Oc1cccc(c1)C2=CC(=O)c3c		0	
CCN(CC)C(=S	0	0	0
c1ccc2cc3c4ccccc4c5ccccc5c3cc2c1		1	
[O-][N+](=O)c1ccc2ccc3c4ccccc4[n+](C		1	
CCN(CC)C=O			0
CS		0	0
CC(=O)Nc1ccc2ncccc2c1		1	
Fc1cccc(\C=C	0	0	0
N[C@@H](CCP(=O)(O)O)C		0	



CCc1ccc(NC(=O)c2csc(c2)[N+](=O)[O-])c1	1		
CCN(Cc1ccccc1)c2ccccc2	0		
CCN(CC)c1ccc2C=C(C(=O)Oc2c1)c3nc4cc	0		
Nc1ccc(N)cc:	0	0	1
ONC(=O)CS(=O)	0		0
Nc1ccc(cc1)C(=O)OCCOC(=O)c2ccc(N)c1	0		
CCCC[C@]1(C)CC1	0	0	
OC1C=Cc2c(cc3ccccc3c2N(=O)=O)C1O	1		
OS(=O)(=O)OCc1c2ccccc2c3ccc4cccc5cc	1		
C[S+](=O)([O-])c1ccc(cc1)C1=CC=CC=C1	0		
Clc1ccc(CN2CCS/C/2=N\C#N)cn1			0
CC(C)COS(=O)(=O)c1ccccc1	1		
C1CC=CCCC=C1			0
CCOC(=O)Nc1ccc(NC2CCCC2)cc1	0		0
CNCC(O)c1ccc(O)cc1			0
COC(=O)CCCC(=O)OC	0		0
Clc1ccc2C(=O)c3ccccc3C(=O)c2c1			0
Clc1cccc(N2C=CC=CC=C2)c1	1	0	
C=Cc1ccccc1	0		0
CC(C)C1=CCC(=CC1)C			0
O=C1NC(=O)C1	0	0	
CC(C)(c1ccccc1)c2ccc(O)c(c2)C(C)(C)c3ccccc3			1
O1C2C1c3ccc4c5ccccc5c6cc7cccc2c7c3c	1		
COC1COC(COCC2COC(OC)C(OS(=O)=O)C1	0		
Nc1ccc(cc1N)N(=O)=O	1		1
CC(N)Cc1ccccc1	0		
COP(=S)(OC)Oc1ccc(SC)c1	0	0	0
CC1(C)C(C=C)C1	0	0	1
OC1c(Cl)cc(Cl)c(Cl)c1N(=O)=O	0		
NC(=N)NCCNO[S+](O-):c1	0		
NC(=N)Nc1ccc2[nH]c3[C@H](O)C3	0		
Nc1ncnc2c1r	0	0	0
CNC(=O)O\N=C/C(C)(C)SC	0		
O=N(=O)OCC(CON(=O)=O)ON(=O)=O	1		
o1c(nc2ccccc12)c3ccccc3	0		
[O-][N+](=O)c1ccc(Nc2[nH]cnc3ncnc23)	0		
CC(C)(C)c1ccc1	1	0	
Fc1ccc(Br)cc1			0
O=C(C=Cc1ccccc1)c2ccc(cc2)N(=O)=O	1		
CN1C(=O)N1	1	0	
Nc1nc(cs1)c2ccccc2	1		1
BrCCC(=O)N1CCN(CC1)C(=O)N1	0	1	0
OC(CCl)COCC=C			0

CC1=CN([C@	0	0		
O=C1\C=C\2	0	0		1
CCCCNCC(O)c	0	0		0
CCN(CC)C(=O)N(CC)CC				0
CC1(C)C2CCC3(C2)[C@H]1C(=O)CCC3(C)C				0
CCCC[N+](C)CCCC1				0
N[C@H](Cc1c[nH]cn1)C(=O		0		
ClC(Cl)C(=O)Cl			1	
C[C@H]1CCC\C=C\C2C[C@		0		
CCOC(=O)c1c	0	0		0
CCOc1ccc2N(c	0	0	0	0
CC(=O)OCC(O)CO			1	
CC\C=C\C=C\C=C\C=C\C=C			0	
COP(=O)(OC)O\C=C\C(=O)OC(C)c1cccc			0	
COc1ccc(OC)	0	0		
OC(=O)c1ccc	0	0	0	1
CC(=O)N	0	0	0	0
COC(C1Cc2cc3cc(OC4CC(O		0		
C1C[C@@H]2O[C@@H]2[C@H]1O[C@			0	
COC1=CC=C2C(=CC1=O)[C(		1	0	
CC1CCc2cc(F)	0	0		
Cc1cccc(C(=O)O)c1[N+](=O)[O-]			1	
CCCCC(CC)C(O)C#C				0
CN1CCCN=C1\C=C/c2sccc2		0		
OC1=CC(=O)NC=C1Cl				0
CC(C)(C)OC(=O)c1cccc1C(=O)O				0
COc1cc(N)c(Cl)cc1C(=O)CC		0		
OC1=c2c(O)cc3cccc4ccc(c2c34)C56CCCC			1	
Nc1cccc1SCCSc2cccc2N			1	
CCN(CC)c1ccc2C(=CC(=O)Oc2c1)C(F)(F)I			0	
CS(=O)(=O)c1ccc(cc1)[C@@H](O)[C@@H](CO)NC(=O				0
O(c1cccc1)c2cccc2			0	0
Fc1ccc(OCCC	1			1
CN(C)CCOCCN(C)C				0
Oc1cccc(C[C@H]2COC(=O)[C@@H]2Cc3cccc(O)c3)c1				1
c1ccc2cc3c(ccc4ccncc34)cc2c1			1	
CC[C@H](C)[C@@H]1NC(=O)[C@H](Cc2ccc(O)cc2)N(				0
CC1(C)CC(=O)CC(C)(C)N1[O]				0
NC(CCC(=O)O)C(=O)O			0	0
C[C@@H]1O	0			
CCCCOP(=O)(O)OCCCC				0
COc1ccc(CCNC[C@H](O)c2ccc(O)cc2)cc1OC				0
Nc1ccc(cc1)c2ccc(cc2)c3ccc(N)cc3			1	

COc1cc(Cc2c	0	0	0	0
CC1(C)[C@@H]2CC[C@@]1(C)[C@H](O)C2				0
CCNC(=O)[C@@H]1CCCN1C(=O)[C@H](CCCNC(=N)N)				0
[S-]c1cccc1				0
COc1cc(C[C@@H](C)N)c(OC)cc1C				0
Cc1ccc(cc1)C	0	0		0
O=C1c2cccc2C(=O)c3c1ccc4c3[nH]c5c6			0	
NC(=O)C(Br)(Br)C#N				0
CN1C2CCCC1CC(C2)NC(=O)		0		
CN(C)CCc1c[nH]c2ccc(C[S+		0		
COc1ccc(OC)cc1			0	0
COC(=O)C1OC1c2cccc2			1	
NC(CCC(=O)NC(CSC(=C(Cl)Cl)Cl)C(=O)N(			1	
COc1ccc(cc1N=Nc2c(O)c(cc3cccc23)C(-			1	
Cc1cccc2cccnc12			1	0
Cc1ccc(cc1)[S+](=O)([O-])		0		
CCN(O)CC				0
OCC(Cl)(Cl)Cl			1	
CC1CS(=O)(=O)CCN1\N=C\c2oc(cc2)N(=O)=O				0
CC1(CO1)C(=O)Nc2cccc2			1	
Oc1ccc2C[C@H]3N(CC=C)(		0		
NC(=N)c1ccc(C=Cc2ccc(cc2O)C(=N)N)cc1				1
CN(C)CCCN			0	0
Nc1ccc(cc1)[S+](=O)([O-])		0		
COc1ccc(cc1)C(=O)Nc2nc3cccc3c(NCc4cccc4)c2C#N				1
CC(O)CN1CCN(CC(=O)[O-])CCN(CC(=O)[O-])CCN(CC(=				0
CCCCCc1ccc	0	0	0	1
N[C@@H]1CC[C@@H](N)CC1			0	
COc1ccc2CN(C)CC[C@@]3		0		
OC(COc1cccc2OC(=CC(=O)c12)C(=O)[O-])COc3cccc4C				0
CC(O)CC(C)O				0
CCCCN1C[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]1CO				0
ClCC1(CCl)C2CC(Cl)(Cl)C1(CCl)C(Cl)C2Cl			0	
CCCCCCCCCCCCCCCC1=NCCN1CCO			0	
Cc1ccc2c(Cl)cc(Cl)c(O)c2n1				1
O=Cc1oc2cccc2c1				0
Cn1cnc(c2cccc2)c1N=O			1	
OCCc1cccc1N(=O)=O			1	0
Oc1c(Cl)c(Cl)c(Cl)c(Cl)c1Cl			0	1
CC(=O)CC(=O)CCC(=O)O			0	
Cc1cc2cc3cccc3cc2c4cccc14			1	
CC(C)Cc1ccc(CCc2cc3C(=NC(C)c4nnc(C)n4c3s2)c5cccc				1
OC1C=CC2OC2C1O			1	

<chem>[O-][N+](=O)c1ccc(SC#N)c(c1)[N+](=O)</chem>	1		
<chem>CC(C)c1cc(N)cc(c1N)[N+](=O)[O-]</chem>	0		
<chem>Clc1ccc(Oc2ccc(NC=O)cc2)cc1</chem>	1		
<chem>OC[C@H]1O[C@](O)(CO)[C@@H](O)[C@@H]1O</chem>			0
<chem>NC(Cc1cc(O)C1)C1</chem>	0	0	
<chem>ClC[C@]1(C(Cl)Cl)[C@@H]2CC(Cl)(Cl)[C@H]2C1</chem>	1		
<chem>COP(=O)(C)OC</chem>	0		0
<chem>CC(C)CN(C)c1</chem>	1		
<chem>[O-]C(=O)CO</chem>	0	0	0
<chem>CC1(C)S[C@@H]2[C@H](N)C(=O)N[C@@H]1C2</chem>		0	
<chem>CC(=O)N[C@H]1C=CC1</chem>	0	0	0
<chem>Clc1ccc(Cn2cnc2)cc1</chem>	1	1	0
<chem>Sc1ncnc2[nH]cnc12</chem>	0	1	
<chem>C(CN)Cc1cccc1</chem>	0		
<chem>O1C2C1c3ccc4ccccc4c3c5ccccc25</chem>	1		
<chem>CC(C)CC(C)N(c1cccc1)c2ccc(N)cc2</chem>			1
<chem>OC(=O)CCCCl</chem>	0	0	0
<chem>CC(C)COC(=O)Cc1cccc1</chem>	0		
<chem>NC1=NC(=O)N(C=C1)C2OC(COP(=O)(O)OC)C2</chem>	0		
<chem>N#Cc1cccc1</chem>	0		0
<chem>Oc1ccc(\C=C)cc1</chem>	0	0	1
<chem>OC(=O)CCC(=O)C</chem>	0	0	0
<chem>CC1CCC23CCC(=O)C2C1(C)C(CC(C)(C=C)C(O)C3C)OC(=O)C1</chem>			0
<chem>NS(=O)(=O)O</chem>			0
<chem>COc1cc2CCN(C)[C@H]3Cc4ccc(Oc5cc(C)cc5)cc4c2</chem>	1		
<chem>CC1=Cc2nc3c(ccc4ccccc34)c(C)c2C(O)C1</chem>	1		
<chem>C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CC[C@H]4C(=O)N[C@@H](C)C4)C[C@H]12</chem>	1		
<chem>N[C@H](Cc1ccc(O)cc1)C1</chem>	0	1	
<chem>Oc1c(cc(c(O)c1N(=O)=O)N(=O)=O)N(=O)=O</chem>	0		
<chem>CO[C@]12[C@@H](O)C[C@H](O)C1</chem>	0	0	
<chem>CCCCOCCOCCOCCOCCO</chem>			0
<chem>N#Cc1ccccn1</chem>			0
<chem>CC(=O)O[C@H]1C=CC1</chem>	0		
<chem>C1CCC(CC1)SSC2CCCCC2</chem>			0
<chem>Clc1cccc(C=O)c1Cl</chem>	0		
<chem>OC(=O)c1cccc(C(=O)O)c1C(=O)O</chem>			0
<chem>COc1ccc2[nH]c(c(CCNC(=O)C)cc2)cc1</chem>	0		
<chem>Fc1ccc(CN2C3C2c4ccccc4c5ccccc35)cc1</chem>	1		
<chem>COc1cccc1NC(=O)c2csc(c2)[N+](=O)[O-]</chem>	1		
<chem>CC(CN)CC(=O)C</chem>	0	0	0
<chem>[O-][N+](=O)c1ccc2C=Cc3ccccc1c23</chem>	1		
<chem>Cc1cc2nc3cc(C)c(N)cc3[n+](c4ccccc4)c2</chem>	1		
<chem>CC(C)c1cc(cc(c1)C(C)C)C(C)C</chem>			0

CCOP(=S)(OCC)SCSc1ccc(Cl)cc1				0
Clc1ccc(CO[C	1	0		
O[C@@H]1[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](				0
COc1ccc2c(OC)c3ccoc3nc2		0		
OCc1ccc(Cl)cc1			0	
CC(C)CCCC(C)	0	0		0
OC(=O)c1cc(	0		0	0
NC(=O)N[C@@H](CCC(=O)O)C(=O)O				0
CCCC[S+](=N)([O-])CC[C@		0		
Cn1ccc2c1ccc3ccc4ccc(O)cc4c23			1	
CC(C)NC(C)C	0	0	0	0
COC(=O)[C@H]1[C@@H](		0		0
OC(=O)CBr			1	0
CCCCN(N=O)\C(=N\O)\C=O			1	
CN1CCC(=CC1)c2ccccc2			0	
C[C@H]1C[C@H]2OC(=O)C(=C)[C@H]2C			1	
Cc1ccc(c(N)c1)[N+](=O)[O-]			0	
Oc1c(cccc1[N+](=O)[O-])c2ccccc2			0	
OC1C=Cc2c(ccc3ccccc23)C1O			1	
[O-]C(=O)C(Cl)Cl				0
Nc1c(N=Nc2ccc(cc2)[N+](=O)[O-])c(cc3			1	
CCc1cc(Cc2cc(CC)cc(c2O)C(C)(C)C)c(O)c(c1)C(C)(C)C				1
C[C@@H](O)[C@H](N)C(=O)O				0
OCC1SCCN1N=O			1	
CCNC(=O)CCC(N)C(=O)O			0	
C[C@@](N)(C(=O)O)c1ccc		0		
O=N(=O)c1cccc2cnc12			1	
CCCCCCCCC	0	0		0
C[C@@H](O)CN(C[C@@H](C)O)N=O			1	
CCCC(O)C(CC	0	0	0	0
CC(C)(C)CC(C)(C)N				0
CN(Cc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-])N=O			1	
CCCCCCCCCCCCOC(=O)C(=C)C				0
CCc1ccc(O)cc1				0
CCCCCCCCC	0	0		0
CCCCCOC(=O)CCCCCCC(=O)OCCCCC				0
Oc1cccc2Oc3cc4OC5OCCC5c4c(O)c3C(=			0	
CC(O)C1NC(=	0	0		
CN1C[C@@H	0	0		
O[C@@H]1C[C@](O)(C[C@@H](OC(=O)C=Cc2ccc(O)				0
CC1CN=C(O)N1c2ncc(s2)N(=O)=O			1	
[NH-]C(=O)c1cc[n+](COC[NH+]2C=CC=C			0	
CCOC(=O)Nc	0	0		

<chem>Fc1ccc2ncccc2c1F</chem>			1	
<chem>OC(=O)CN1c:</chem>	0	0		0
<chem>CCCCCOC(=O)c1ccc(O)cc1</chem>				1
<chem>COC(F)(F)C(C</chem>	0	0	0	0
<chem>CC(=O)OC[C@H]1O[C@@H](O[C@H]2[C@H](O)[C@H]</chem>				0
<chem>BrCCCCCBr</chem>			1	0
<chem>CC(=O)CCC(=O)C</chem>			0	0
<chem>ClCCOC(=O)Cl</chem>			0	
<chem>COC(=O)C1=C(C)NC(=C([C@@H]1c2cccc(c2)N(=O)=O</chem>				1
<chem>OC(=O)Cc1cccc1[N+](=O)[O-]</chem>			1	
<chem>Cc1ccc(cc1N=O)N(=O)=O</chem>			1	
<chem>CCOC(=O)[C@@H]1O[C@]1(C)c2cccc2</chem>			0	
<chem>CCC(Cl)CCl</chem>				0
<chem>NC(Cc1ccc(cc1)N(CCCl)CCC</chem>	0		1	
<chem>COc1cc2CCN</chem>	1	0		0
<chem>Cc1cc(ccc1N:</chem>	0	0		
<chem>CC(O)(c1ccc(Cl)cc1)c2ccc(Cl)cc2</chem>				1
<chem>CC[C@]1(CCC(=O)NC1=O)c</chem>		0		
<chem>Nc1nc(N)nc(n1)c2cccc2</chem>				0
<chem>Nc1c(CC(=O)[O-])cccc1C(=O)c2cccc2</chem>				0
<chem>COc1cc2c(Nc3ccc(Br)cc3F)ncnc2cc1OCC4CCN(C)CC4</chem>				0
<chem>Oc1c(cc(cc1N(=O)=O)N(=O)=O)N(=O)=O</chem>			1	
<chem>CC(=O)Nc1cc</chem>	1	0		1
<chem>Cn1c(N)nc2c1ccc3nc(c4cccc4)c(nc23)c!</chem>			0	
<chem>C1=Cc2c3ccc4cccc4c3cc5cccc1c25</chem>			1	
<chem>CC(C)OC(=O)</chem>	0	0		1
<chem>C[C@H]1N2C</chem>	0	0		0
<chem>CCOP(=O)(OCC)C(C)NC(=O)N(CCCl)N=O</chem>			1	
<chem>CCCN1CCC[C@@H]2Cc3nc</chem>		0		0
<chem>CN(C)S(=O)(:</chem>	1			
<chem>O=S1(=O)c2cccc3ccc4c5cccc5cc1c4c23</chem>			1	
<chem>CCOC1=CC(N(O)c2cccc12)(c3cccc3)c4</chem>			0	
<chem>CC(O)CN(CC(C)O)CC(C)O</chem>			0	0
<chem>Cc1cccc2nc(O)c(O)nc12</chem>			1	
<chem>CCOC(=O)C1=C[C@@]2(C</chem>		0		
<chem>CC(C)OC(=O)CCl</chem>			0	
<chem>OCCNC(=O)C</chem>	0	0		
<chem>CC(C)CC(=O)C</chem>			0	0
<chem>OC[C@H]1O </chem>	0			
<chem>CC(Cl)CO</chem>			1	
<chem>CN(C)[C@H]:</chem>	0	0		
<chem>N=C1NC(=N)c2cc3cccc3cc12</chem>				1
<chem>CS(=O)(=O)Nc1ccc(Nc2c3ccc(cc3nc4cc(</chem>			1	

Oc1ccc2c(c1)c3cccc3c4cc5cccc5cc24	1		
CC(=CCC\C(=O)C)C(=O)C	0	0	0
CC(=O)\C=C/c1ccc2OCOC2c1		0	
COC(=O)c1cccc1OC			0
O=C(NCCCN1CCCCC1)C(C)C	1		
Clc1cccc1C=O		0	0
Cc1nc2c(C)c(C)c3c(nc(N)n3C)c2nc1C		1	
OC(=O)[C@H](Cc1ccc(O)c1)C(=O)O	0		
COc1cc2OC3(C)OC4OC4C3(C)c2c5OC(=C)C		0	
CS1ccc2Sc3c(C)cc(C)cc32	1		
CCCCCCCCCCCCn1cc[n+](C)c1			1
CC1OC(CC(N)C1O)OC2CC(O)(Cc3c(O)c4c(O)cc34)C1		1	
Cc1cccc1N=Nc2cc(C)c(N)cc2N		1	
CNC1CC(N)[C@H](O)C1	0	0	
COc1c2ccoc2[n+](O)c3cccc13		0	
ClCc1c2cccc2cc3cccc13		1	
C[C@H]1CC2C3CCC4=CC(=O)C3CC21	0		
CCCN(CC[C@H](C)O)N=O		1	
CN(C)c1ccc(Cn2cnc3CN([C@H]1)C)cc1	0		
ClC(=C)C=O		1	
CCN1\C=C\C=C\C2ccc3ccc(C)cc13	0		
CCC(O)C=CC=CC=CC=CC=O		1	
CCCCOCCOCCO		0	0
CN(C)CCCNc1c2cccc2nc3cccc(c13)[N+](=O)[O-]		1	
CN=[N+](C)[O-]		1	
CC(C)(C(=O)C)C(=O)C	0	0	0
CN1C2CCC1CC(C2)OC(=O)C		0	
CCCC(C)CC			0
COCC(=O)Nc1c(I)c(C(=O)NCC(O)CO)c(I)c(C(=O)N(C)C)cc1			0
CCCCCCCCC(C)C	0		
C1CN(CCO1)S	0	0	0
COc1ccc(CC2CO2)cc1		1	
[O-][N+](=O)c1ccc2ccc3c4cccc4nc5ccc(C)cc15		1	
CCCC(CC)COC(=O)CS			0
Fc1ccc2ncccc2c1		1	
CN1CCCC1			0
CCCc1cc(ccn1)C(=S)N	0		0
CCCN(C[C@H](O)CC)N=O		1	
CC(=O)NCCc1c(Cc2cccc2)cc1	0		
COc1ccc(cc1)C2=C(O)C(=O)C2	0		
Cc1ccc(cc1)[S+](=O)([O-])C	0		
CC(C)C[C@H]1N2C(=O)C(=O)N12	0		
CCOC(=O)C(=O)C		0	

CC(C)[C@@H]1CC[C@@H](C)CC1	0			
Cc1oc(C=O)cc1	0			
C\C=C(/C)\C(=O)OC1CCN2CC=C(CO)C12	0			
COc1nsc2cc(N)ccc12	1			
ONc1cccc(c1)c2ccccc2	0			
CN(C)C(=O)N	0	0		
ONc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]	1			
CCCC(CC)COS(=O)(=O)O	0			
Oc1ccc(cc1C(	0	0	0	
CCN[C@@H]1C[C@H](N)[C@@H](OC2OC(=CCC2N)C			0	
O[C@@H]1C=Cc2c(cc3ccc4c(ccc5ccc2c3	1			
CN(C(=O)C)c1snc2ccccc12	0			
CC(C)(C)C1=CC(=O)C=CC1=O	1			
CCOC(=O)C(F)(F)F			0	
CCN(CC)C(=C	0	0	0	
CCCC(C)CO			0	
C[C@H]1CN(CCN1N=O)N=O	1			
O=CCC=O	1			
CCCCCN(N=O)C(=O)N	1			
Cc1cc(N)ccc1NOS(=O)(=O)O	1			
NC(Cc1ccc(O)c(c1)[N+](=O)[O-])C(=O)C	0			
S(Sc1nc2cccc	0	0	1	0
CCCCOC(=O)COc1cc(Cl)c(Cl)cc1Cl	0			
CC(C)(C)c1c(N)ccc2ccccc12	0			
COc1cccc(c1)C(=O)NCCN2		0		
Clc1ccc(CC[C@H]2CO2)cc1	1			
COc1ccc2Sc3	1	1		
CC(C)(Oc1ccc	0	0	0	0
C(C(C1CCCCC1)C2CCCCC2)[C@H]3CCCCN	0			
CCc1cccc2c3CCOC(C)(CC)c3[nH]c12	0			
COc1ccc2c(c:	0	0		
O[C@@H]1C[C@](C[C@@H])(OC(=O)C=Cc2ccc(O)c(O				0
CCCCCCCCC(=O)OCCN1CCN(CCCN2c3cc	0			
CN(C)CCNCCN(C)C				0
Cc1cccc1c2ccc(N)cc2	1			
CC(C(=O)O)c:	0	0		0
OC(=O)[C@H](OC(=O)\C=C\c1ccc(O)c(O)c1)[C@@H]				0
COc1ccc(\C=C\C)c(OC)c1	0			
CNP(=O)(OC)Oc1ccc(cc1Cl)C(C)(C)C				0
CCCCCCCCSC(=O)Oc1cc(Cl)nnc1c2ccccc2				1
CC(=O)Nc1cc2Cc3ccccc3c2cc1OC(=O)c4	0			
O=C1C=CC=C2C3CNCC(C3)		0		
Clc1ccc(cc1)(	0	0		0



CCCCCCCC[N+](C)(CCCCCCCC)CCCCCCCC				1
OCCOc1cccc	0	0	0	0
CC(C)(C)c1ccc(cc1)c2ccc(NO)cc2			1	
C[C@@H]1O[C@@H]1C			1	
CNC1=C2CC(=O)C(=CC=C2c3c(CC1)cc(OC			0	
CC(Br)C(=O)N			1	
COC(=O)C1=(	0	0		
Clc1cccc(c1)N(=O)=O			0	0
CN(C)C(=N)N(C)C			0	
CCCCCCCC(CO)CCCCC				0
CCCCC\C=C/C\C=C/C\C=C/C/		0		
COc1ccc(cc1OC)[S+](=O)([		0		
O=C(c1ccc2C(=O)OC(=O)c2c1)c3ccc4C(=O)OC(=O)c4c				0
Cc1cc(O)c2C:	0	0		
CC(=O)ON(C(=O)C)c1ccc2c(Cc3cccc23)			1	
Nc1ccc(O)c(c1)N(=O)=O			1	1
CC(=O)Nc1ccc(cc1)S(=O)(=O)c2ccc(NC(=			0	
CC1(O)C=Cc2cc3c(ccc4cccc34)c5CCC1(C			1	
CC(I)C1OCC(CO)O1			1	
CCN1CCN=N1			1	
c1ccc2c(c1)ccc3cc4cnccc4cc23			1	
COC(=O)CC(C)(C)C=C				0
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC[C@H](COP(=O)([O-])OCC				0
OC(=O)c1cccc1[N+](=O)[O-]			1	
ON(=O)=C(Cl)Cl			1	
C\C=C\C			0	
CC(O)CBr			1	
CN(C)CCN(C)N=O			1	
Cc1ccc(cc1C)[N+](=O)[O-]			1	
Cc1cccc1C(=O)N2CC\C(=N/OS(=O)(=O)[O-])\c3ccc(C				0
CC[C@H]1OC(=O)[C@H](C)[C@@H](O[C@H]2C[C@@H				0
Cl\C=C\Cl				0
Oc1nc(O)nc(O)n1				0
Nc1ccc(c2ccc(N)cc2S(=O)(=O)O)c(c1)S(		0		
COC(=O)C[C@	0	0		
OC(=O)CCCOc1ccc(Cl)cc1Cl			0	
CCCCCl	0	0	0	
CCc1cccc1			0	0
COC(=O)\C(=C\C1oc(cc1)[N+](=O)[O-])\			1	
C[C@@H]1C[C@H]2[C@@H]3C[C@H](F)C4=CC(=O)C				0
NC(=O)OC[C@	0	0		
CC(C)n1c\C=C=	0	0		
CCCC[N+](C	0	0		

NCC(=O)NCC(=O)NCC(=O)NCC(=O)O	0		
CCC1CCC(CCC(=O)O)C1			0
S=C1SCN(Cc2ccccc2)CN1C	0		1
COc1cc(cc(OC)c1O)[C@H]2[C@@H]3[C@H](COC3=O			1
CN(C)OC(=O)COc1ccc(Cl)cc1Cl	0		
OCC(CN=N#N)Cc1ccccc1	1		
CCc1ccc(CCO	0	0	
BrC1cccc(c1)c2ccccc2	0		
ClC(=O)c1ccc(cc1)N(=O)=O	1		0
CCOC(=O)C(Cc1ccccc1)NC(C)C(=O)N(C	0		
CNC(=O)O\N=C\C(C)(C)S(=O)C			0
BrCC(Br)(Br)Br	1		
C[N+](C)(C)C	0	0	
NC(=O)c1ccc(N)cc1	0		
C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CC[C@H]4CC(=O)CC[C@			1
CC[C@@H]1C[C@H](N(Cc2cc(cc(c2)C(F)(F)F)C(F)(F)F			1
CCCCCCCC=O			0
[O-][N+](=O)c1ccc2c(cc3c(cccc3c2c1)[N	1		
CN(C)CCCNCCCN			0
CCC(Cl)C(Cl)C(Cl)CC(Cl)C(Cl)C(C)Cl			1
O=C(OCCN1CCCCC1)c2c[nH	0		
CNCCCC(=O)O	0		
Cc1ccnc2N(C	0	0	0
OC1C(O)c2cc3ccc(cc3cc2CC1=O)[N+](=C	0		
COc1ccc(cc1)	0	0	0
CNc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]	1		
Cc1cc(NS(=O	0	0	0
CC(=O)N(O)c1ccc(\C=C\C2ccccc2)cc1	1		
CO[C@@H]1C[C@H](C[C@@H](C)[C@@H]2CC(=O)[C			1
CCCCCCCCc1ccc(OCCOCCO)cc1			1
NNc1nc(cs1)c2ccccc2			1
CN(C)[C@H]1[C@@H]2CC3C(=C(O)[C@]2(O)C(=O)C(:			0
CCCCCCCC1CCC(=O)O1			0
CC(C)(C)NCC(O)COc1cccc2C[C@@H](O)[C@@H](O)C			0
C[C@]12CCC:	0	0	
CC1CC2=C(C3C(C=C(C)C2=O)C(CCC3=C)C	0		
C\C=C/1\[C@@H]2CC3=C(C=CC(=O)N3)[C@@]1(N)C			0
CCOC(=O)C1OC1(C)c2ccccc2	0		0
OC\C=C/1\[C	0	0	
ClCC1(C(Cl)Cl)C2CC(Cl)(Cl)C1(CC2(Cl)Cl)(	0		
CCCN(CC)C(CC)C(=O)Nc1c(C)cccc1C			0
O=C1c2cccc3ccc4cccc1c4c23	1		
O=C1N(N=Cc2ccccc2)N=Nc3c1[nH]c4ccc	1		

BrC1c(Br)c(Br)c(Br)c1Br	0	0
Nc1ccc(Cl)cc1	1	0
Cc1c(cc(N)cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O	1	
CC(CCO)CCC=C(C)C	0	0
CCCCC(CC)COC(=O)\C=C/C(=O)OCC(CC)CCCC		0
CCOc1ccc(Cc:	1	0
Cc1ccc(NO)c(C)c1	1	
Cn1c(ncc1[N+](=O)[O-])c2nnc(N)s2	1	
Cn1c(CCCC(=O	0	0
CC(C)NCC(O)	1	0
O=N(=O)c1cccc2c(cccc12)N(=O)=O	1	0
CC1(C)C2CC[O	0	0
C\C=C/1\C[C@H](C)[C@](O)(CO)C(=O)C	0	
CN1C(=O)C(=C(N=C1C(C)(C)NC(=O)c2oc(C)nn2)C(=O)		0
CC(C)C1=C(Cl)	0	0
[O-][N+](=O)c1ccc(Nc2ccc(Cl)cc2)cc1	1	
C=CC(=O)N(C[C@H]1CO1)C[C@H]2CO2	1	
CCC1Nc2cc(Cl)c(cc2[S+](=O	0	0
NC(=O)C1CC:	0	0
OC[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)CO		0
COC1=CC(=O)CC(C)C12Oc3	0	0
ClC1=C(COC1=O)C(Br)Br	1	
COc1cc(N)c(O	1	0
OCC1(CO)N2CCC(CC2)C1=C	0	
CCCCCCC(O)C	0	0
O=C1C=C(Oc:	0	0
BrCc1ccc(Br)cc1	0	0
C[C@H](CCC(O	0	0
CC\C(=N\O)\C		0
C[C@H]1[C@H](NC(=O)\C(=N\OC(C)(C)C(=O)O)\c2cs		0
O=C1NC(=O)NC(=O)N1	0	
CN1C(=O)CN	0	0
CCCCNP(=S)(N)N		0
[O-][N+](=O)	0	0
CCCCCCCCCl		0
N#CCCNCCC#N	0	0
CC(=O)c1ccc2OC3(CC3)C(=O)c2c1	0	
O=N(=O)c1ccc2c(Cc3cc4CCCCc4cc23)c:	1	
Cc1cccc(c1)c2oc3cccc3n2	0	
CC(C)(C)O	0	
O=C(OC[C@H]1CO1)[C@H]2CCCC[C@@	1	
Oc1ccc(cc1)C2Oc3cc(O)cc(O)c3C(=O)C2	1	
CC(=O)CCl	0	0

C1=Cc2cccc3cccc1c23				0
CC1\C=C(\C=C)/C(=O)OC2CC[N+](C)CC	1			
CCN(CC)CCn1nc2ccc(CO)c3c4ccc(Cl)cc4S	1			
OC(=O)Cc1ccc(CCN[S+])(=C	0			
Fc1ccc(cc1)C	1	0		0
Cc1ccc(OC[C@H]2CO2)cc1	1			
CC1=C(CC(=O	0			0
[O-][N+](=O)c1ccc(cc1)S(=O)(=O)Cl	1			
OC1=C(O)C(=	0	0		0
CC(=O)C1=CCC2C3=CCC4=CC(O)C(O)CC4	0			
CC(=O)OCN(CCCCl)N=O	1			
C[C@@H](Oc1ccc(Oc2ncc(Cl)cc2F)cc1)C(=O)OCC#C				0
CC(=CCC\C(=	0	0		1
CCCN(C(=NN=O)N)[N+](=O)[O-]	1			
C[n+]1c2cccc2c(N)c3cccc13	1			
OCC[N+](=O)[O-]	1			
NC1=NC(=O)	0	0		0
OC1C2OC2c3c(ccc4ccc5c6cccc6ccc5c34	1			
COc1ccc(CCN	1	1		
OCCOCCOCCOCCOCCO				0
OCCOCCOC(=	0	0		0
CO\N=C(/C(=	0	0		
CC(C)Sc1cc(Cc2ccc(N)c(SC(C)C)c2)ccc1N	1			
CC(=O)Nc1c(	0	0		0
CC1OC(=C(O)C1=O)C				0
Cc1cc(c(O)c(C)c1CC2=NCCN2)C(C)(C)C				0
COc1c(OC)c2occc2c3OC(=O)C=Cc13	0			
O=C(OCC1CO1)c2ccc(cc2)N(=O)=O	1			
CCCCCCCCC(	0	0		0
NC(=O)OCCC	0	0		0
CCCC(C)(O)C\C=C\[C@H]	0			0
[O-]C(=O)c1c	0	0		1
COP(=O)(OC)N1CCOCC1	0			
CO[C@H]1C=CO[C@@]2(C)Oc3c(C)c(O)c4c(O)c(NC(=				1
C1CCc2nccnc2C1				0
Fc1ccc(cc1)C	1	0		
CC(=C)c1cccc(c1)C(C)(C)N=C=O				0
OC1COC2(O)C1OC(=O)C2(O)Cc3c[nH]c4	0			
CC(C)NCC(O)	0	0	0	0
N[S+](O)Oc1cc(C(=O)O)	0			
FC(F)(F)C(=C(Cl)SSc1cccc1N(=O)=O)Cl	1			
CC(=O)NC1=NC(=NOC1)c2oc(cc2)[N+](=	1			
C=CCN(CC=C)CC=C	0			

Oc1cccc(c1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1			
OC(=O)c1cccc(O)c1			0	
CC1=NC(=CC2C1Nc3ccccc23)N	1			
CC1CCC2(OC1)OC3CC4C5CC=C6CC(O)CC(	0			
CC(C)(C)OC(=O)C(N)CN=[N+]=[N-]	1			
CCCN1C(=O)I	0	0		
N[C@@H](C	0	0		0
Cc1c(cccc1N(=O)=O)N(=O)=O	1			0
Cc1c2ccc(CO)cc2nc3c1ccc4ccccc34	1			
C1=Cc2cc3cccc4ccc5ccc1c2c5c34	1			
NC(CC(=O)c1cccc(O)c1N)C(=O)O	0			
N#N=NCCC(c1ccccc1)c2ccccc2	1			
COC(=O)C(Cl)Cl	1			
CCCN1cnc2N(	0	0		0
COc1ccc(CCC(=O)C)cc1				0
CNC(=O)O\N=C\C(C)(C)SC				0
CCN(CC)CCNc1ccc2nc(C)n3c4ccc(O)cc4C	1			
COC(=O)Nc1cccc(OC(=O)Nc2cccc(C)c2)c	1			1
OC(=O)CCCCCCCC(=O)O	0			0
CCc1cccc(CC)c1NC(=O)C	0			
COc1ccccc1c2ccccc2	0			
COC(OC)C(C)c1ccccc1				0
Nc1ccc2cc(cc(O)c2c1)S(=O)(=O)O				0
CC1(N(O)c2ccccc2/C1=N\C3CCCC3)c4c	0			
CCN=NC(C)(C)OO	0			
Cn1c(N)nc2cc(ccc12)C#N	1			
CCCOCCOCCOCCO				0
C\C1=C\C[C@@]2(C)O(	0			
COc1cc2O[C@H]3OC=C[C@H]3c2c4OC(	1			
CC(c1ccc(O)cc1)c2ccc(O)cc2				1
COc1ccc2c3CCN=C(C)c3[nH	0	0		
CC(=O)c1oc(c2ccccc2)c1c3ccccc3)[N+]	1			
C\C(=C\CCl)\Cl				0
OC(=O)c1ccc	0	0	0	0
Cc1cccc(NO)c1C	1			
[O-]C(=O)C(=O)[O-]				0
Nc1ncnc2c1r	0			
Cn1c(nc2ncc(cc12)c3ccccc3)[N+](=O)[O	1			
CCCCC(O)c1ccccc1				0
Cc1ccc(cc1NO)N(=O)=O	0			
CC1Nc2cc(Cl)c(cc2C(=O)N1c3ccccc3C)S(=O)(=O)N				0
OCCN(CCO)c1ccc(cc1)N=Nc2ccc(cc2[N+	1			
ClC1CN(CC1Cl)N=O	1			

<chem>COc1cc(C)nc1</chem>	0	0	0
<chem>COc1ccc(CNCC(O)COc2ccc3NC(=O)C=Cc3c2)cc1OC</chem>			0
<chem>NC(=O)c1ccc</chem>	0	0	
<chem>CC(C)(O)[C@@H]1[C@H]2</chem>		0	0
<chem>CNC1C(O)C(CCC1(C)O)OC2C(O)C(OC3CC</chem>			0
<chem>COc1cc2OC(=CC(=O)c2cc1</chem>		0	
<chem>COC=O</chem>			0
<chem>CC(C(=O)O)C</chem>	0	0	0
<chem>COc1cccc2C(</chem>	0	0	
<chem>Oc1ccc2ccccc2c1N=Nc3ccc(cc3[N+](=O)</chem>			1
<chem>Nc1ccc(N=Nc2cccc(c2)N=Nc3ccc(N)cc3I</chem>			1
<chem>ClCCN1CCC(C</chem>	0		
<chem>Cc1ccc(O)c(O)c1</chem>			0
<chem>CCCCCCCCCCCCCN(C)C</chem>			0
<chem>Cc1ccc(N=Nc2c(O)ccc3ccccc23)c(C)c1</chem>			1
<chem>COC(=O)CC(C)CCC=C(C)C</chem>			0
<chem>COC(=O)[C@]1(C)CCC[C@]2(C)[C@H]3CCC(=CC3=CC[</chem>			1
<chem>COC(=O)C1=</chem>	0	0	
<chem>OC(=O)CC[C@</chem>	0		
<chem>OC[C@H]1O[C@H]([C@H]</chem>		0	
<chem>[O-][n+]1ccccc1SSc2cccc[n+]2[O-]</chem>			1
<chem>OC(=O)c1c(I)cc(I)c(NC(=O)COCCOCCOCC(=O)Nc2c(I)c</chem>			0
<chem>O=C1[C@H]2[C@@H]3CC[C@H](C3)[C@H]2C(=O)F</chem>			0
<chem>Cc1cccc(c1)C(=O)Cl</chem>			1
<chem>CC(C)NCC(O)</chem>	1	0	
<chem>Nc1cc2c3ccccc3c4cccc(c1)c24</chem>			1
<chem>Oc1ccc2OC(CC(=O)c2c1)c3</chem>		0	
<chem>CNc1ccc(cc1)C(=O)CC(O)C</chem>		0	
<chem>Nc1ccc2N=C3C(=CC(=N)c4ccccc34)Oc2c</chem>			1
<chem>COc1cccc(c1)C(=O)CCN[C@@H](C)[C@H](O)c2ccccc2</chem>			0
<chem>Oc1ccc2ccccc2c1</chem>			0
<chem>BrCC1CO1</chem>			1
<chem>COc1ccc2cc(</chem>	0	0	0
<chem>Oc1ccc(cc1)C2(NC(=O)NC2=O)c3ccccc3</chem>			0
<chem>O=P1(Oc2ccccc2)OCc3ccccc3O1</chem>			1
<chem>Oc1cc2ccc(cc2cc1S(=O)(=O)[O-])S(=O)(=O)[O-]</chem>			0
<chem>COCCOC(=O)CC#N</chem>			0
<chem>OCCCCCCCCCCCCBr</chem>			1
<chem>c1ccc(cc1)c2ccc(cc2)c3ccccc3</chem>			0
<chem>COc1ccc(NC(=O)C)cc1</chem>			0
<chem>COC(=O)C1=</chem>	0	0	
<chem>CN(C)Cc1c[nH]c2ccccc12</chem>		0	
<chem>NC[C@@H]1</chem>	0	0	

C1CSCN1					1
NNc1ccc(cc1)N(=O)=O					1
ClCC(CCl)(CCl)CCl					0
CN1C=CN(CCS(=O)(=O)C)C1\C=N\O					0
COc1cc(cc(O	0	0			
Oc1c(I)cc(cc1	0	0			
CN(C)CCOC(c	1	0	0	0	0
Nc1ccc(\C=C\c2ccc(Cl)cc2)cc1					1
CC#CC(OC(=O)NC1CCCCC1)(c2ccccc2)c3					1
Nc1ccc(Oc2ccc(Cl)cc2Cl)cc1					1
COc1ccc(cc1)C(=O)C2OC2c3ccccc3					0
CCN1CCC[C@	1	0			
CCCO(=O)c1	0	0		0	
CN1CCCN(CC	1	1			
OC[C@H]1CO1					1
CC1OC(CC(N)C1O)OC2=CC(O)(Cc3c(O)c					1
CC(=O)O[C@	0	0			
OC1C=Cc2c(ccc3c(Cl)c4ccccc4cc23)C1O					1
CCCCC[C@H]	0	0			
Cc1c(N)cc(N)cc1N(=O)=O					1
CCCCCCCCC=C					0
CCC[C@H](N[C@@H](C)C(=O)N1[C@H]2CCCC[C@H];				0	
Cc1cc(C)c2cc(C)c(N)cc2n1					1
NS(=O)(=O)[O-]				0	
Cc1cc(C)cc(NO)c1					1
OCCNCCN1C(=O)c2ccccc2C3=C1c4ccccc					0
OCCCCCCCCC=C				0	
COC(C(Oc1nc	0	0			
[O-][N+](=O)c1ccc2c(ccc3ccccc23)c1					1
Nc1c(O)cccc1N(=O)=O					0
CN(C)CCNS(=O)(=O)c1cccc2cccn12					0
Clc1c2ccccc2c(C=O)c3ccccc13					1
CN(C)c1ccc(CCO)cc1					1
NC(CP(=O)(C	0	0			
Oc1ccccc1O	0	0	0	0	
C[C@]12CC[C	0	0			1
OC(=O)c1ccc(Nc2c3ccccc3nc4cc(ccc24)†					1
C[n+]1c2cc(N)ccc2cc3ccc(I		0			1
c1ccc(cc1)c2	0	0			
NC(=Nc1nc(C	0				
CC1=CCCC(C)(C)C1\C=C\C(=O)CCC=C					1
COC(=O)C1=(	1	1			
CSSc1ccoc1C					0

O1C2C1c3c4ccccc4cc5ccc6cccc2c6c35	1		
CCCC\C=C\C(=O)CCc1ccc(O)c(OC)c1	1		
C[C@H]1O[C	0	1	1
N1[C@@H]2[C@H]1c3ccccc3c4c2ccc5c	1		
NC(=N)NC(=I	0	0	0
CCCC[N+]1(C)CCCC1			0
CC[S+](=O)([O-])Nc1cccc(c		0	
CCN(C(C)C)C(=O)c1cc(C)cc(OC[C@H])(C)Nc2ccncc2)c1			0
Clc1cc2NC(=O)C3CNCCN3c		1	
O=N(=O)c1ccc2nc3cc(ccc3nc2c1)N(=O):		1	
CC(C)(C)C(=O)OCC(=O)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CC			0
NC[C@H]1O[C@H](O[C@@H]2[C@@H](N)C[C@@H			0
CC(=O)OC(OC(=O)C)c1oc(cc1)[N+](=O)[		1	
CCC(=O)c1ccc	1	1	
C[C@@H]1O[C@@H](O[C@H]2CC[C@]3(C)[C@H]4C			1
CC(C)c1c(C(=O)Nc2ccccc2)c(c3ccccc3)c(		0	
Clc1ccc(C=O)cc1N(=O)=O			0
CCCCC(=O)N(	0	0	
C[C@@H](CO)NC(=O)[C@		0	
CC\C=C\C=C\C=C\C=C\C=C\C=OCCCCO			1
Oc1ccc(c2ccc	0	0	
CC(=C)C(=O)OCC(Br)CBr			1
CC1CC(C)(C)c2cc(C(=O)C)c(C)cc2C1(C)C		0	1
CC(C)Oc1cccc(NC(=O)c2ccccc2C)c1			1
NC(C(=O)O)c1ccc(C(=O)O)		0	
CCCC(C)C1(C(	0	0	0
COc1cccc1N			1
O=C([C@H]1CCC(=O)N1)N2CCCCC2			0
O=N(=O)c1ccc2ccc3c(cccc3c2c1)N(=O)=		1	
CC(O)CN(CCCN(C)C)CCCN(C)C			0
Cc1ccc(C)c(C)c1C		0	
N[C@@H](CCCP(=O)(O)O)		0	
NCCCC(O)(P(=O)(O)O)P(=O)(O)[O-]			0
CCOC(=O)CBr		1	0
CC[C@@H]1	0	0	
O=CC=Cc1cccc1N(=O)=O			1
CC(C)CCCC(C)C1CCC2C3CC=C4CC(CCC4(C		0	
CCN1CN(CC)CN(CC)C1			0
OCc1ccc(cc1)N(=O)=O		0	
Cc1cccc2cc3ccc4ccccc4c3cc12			1
Clc1cccc(Br)c1			0
CC(=O)Nc1c(O)cc2c3ccccc3c4cccc1c24			1
CN(C)CCCNc1c2ccccc2nc3cc(ccc13)[N+]			1



CC1SC2=C(C(	0	0	0	
COC1=NC(=O)N(CC(O)CN=N#N)C=C1C			1	
CS(=O)(=O)NC(=O)c1cc(Oc2ccc(cc2Cl)C(F)(F)F)ccc1N				0
Nc1ncnc2[nH]nc(Nc3ccc(F		0		
CCCCc1cccc1				0
OC1C=Cc2cc3c(ccc4ccccc34)c(Br)c2C1O			0	
ClC\C=C/Cl			1	
NCN			1	
CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)[C@H](N=C)c3ccccc:				0
Oc1ccc(\C=C/C#N)\C(=O)		0		
CCNC(=O)[C@		0		
CCOC(=O)C(C)(C)C				0
Clc1ccc2oc3ccccc3c2c1			1	
COc1cc(ccc1c2nc3ncccc3[r		0		
Clc1ccc(CC#N)c(Cl)c1				0
CCN(CC)C(=O		0	0	0
CN1C(CC2=C\C(=N/NC(=O)N)\C(=O)C=C12)S(=O)(=O)				0
CCCOc1cc2C(=O)CCc2c3ccc4ccccc4c13			0	
CC(C)(C)NCC(O)COc1ccccc1C2CCCC2			1	
OC(=O)c1ccccc1C(=O)O			0	0
Cc1c(nn(c2cc		1		1
OC(=N)C=Cc1oc(cc1)N(=O)=O			1	
CCCCOCC(C)OCC(C)O				0
Cc1c2ccccc2c(CO)c3ccccc13			1	
CC(=O)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3C=CC4=CC(=O)CC[				0
CNC(=O)C[C@		0	0	0
COP(=S)(OC)Oc1ccc(cc1)S(=O)(=O)N				0
OCCN(=O)=O				0
COC(=O)c1cc		0	0	1
CCCCC(=O)OCC=C				0
CC(C)(C)NCC(		0	0	0
Cc1cc(C)nc(N[S+](=O))([O-			0	
CC(OP(=O)(C)Cl)C(C)(C)C				0
O=C(\C=C\C1ccc(cc1)c2ccccc2)c3ccccc3			0	
CC(C)(Sc1ccc		0	0	
CCN(CC)CC(=		0	0	0
Cc1ccc2nc3ccc(C)cc3c(N)c2c1			1	
CCCNc1ccc(cc1)C(=O)OC(			0	0
CC(=O)Oc1ccc2[C@H]3CC[C@]4(C)[C@@H](O)CC[C@				1
C\C=C/1\CC(=C)[C@@](C)(O)C(=O)OCC			1	
COc1c(N2CCI		0	0	0
Nc1nc(cs1)c2oc(cc2)[N+](=O)[O-]			1	
CCCN(=O)=O				0

Cc1cc(C)c(\C:	1	0		
OCCCCI			1	
OC1COC(O)(CN(CC(=O)O)N=O)C(O)C1O			0	
C(COc1ccccc1)Oc2ccccc2				1
COC1\C=C\O	0	0		
OS(=O)c1ccc(Cl)cc1			0	
C[S+](CCC(N)	0	0		
C(=C/c1ccccc1)/c2ccccc2				0
O=C(CCCCCN1CCN(CC1)c2c		1		
Cc1cc2Cc3ccccc3c2cc1C			0	
C1OC1c2c3ccccc3cc4ccccc24			1	
CC1CS(=O)(=O)CCN1N=Cc2oc(cc2)N(=O			1	
COC(=O)CCSCCC(=O)OC				0
CSc1nc(NC(C)C)nc(NC(C)C)n1				0
CN(CS(=O)(=	0	0		0
CC(=O)OCC1=C(N2[C@H](SC1)[C@H](NC(=O)Cc3ccccc				0
C1CCC(CC1)N	0	0	0	1
COc1ccc(O)c(c1)C(C)(C)C			0	1
CC(=O)OCc1ccc(cc1)N=Nc2ccc(COC(=O)			1	
COc1c(O)cc2OC(=CC(=O)c2c1O)c3ccc(O			0	
Nc1cccc2C(=O)c3ccccc3C(=O)c12			1	
[O-][N+](=O)c1cc(ccc1Cl)C(F)(F)F			0	
NC(=O)c1ncr	0	0	0	0
CCCN1CCC[Ci	0	0		0
CNc1cc(OC)c(cc1Cl)C(=O)N[C@H]2CCN(Cc3ccccc3)[C				0
CCCN(CCC)[C@@H]1CCc2c		0		
C[N+](C)(C)CCO		0	0	
CCN(CCCOC(=O)c1ccc(OC)c(OC)c1)C(C)Cc2ccc(OC)cc				0
OC(=O)CNC(=O)c1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]			1	
OC1C=Cc2c(C1O)c3ccc4ccccc4c3cc2[N+]			1	
CC(CCC(=O)O)C1CCC2C3CCC4CC(=O)CCC			0	
OC1C=Cc2c(ccc3cc4c(ccc5ccccc45)cc23)			1	
O=Nc1ccc2c(Cc3ccccc23)c1			1	
CC(=O)Nc1nc(NC(=O)C)nc(n1)c2oc(cc2)			1	
OS(=O)(=O)CCCN1CCOCC1				0
CO\N=C(/C(=O)NC1C2SCC(=C(N2C1=O)(			0	
[O-]S(=N)(=O)Cc1noc2ccc		0		
[O-]P(=O)([O-])OP(=O)([O-])[O-]				0
NC(=O)Cc1cccc(C(=O)c2ccccc2)c1N				0
CN1C(=O)N(i	0	0		
CC(C)NCC(O)	0	0		0
CCNCCO				0
C[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1CNC2=C(N1)C(=O)N=C(N				0

OC(Cn1cncn1	0	0	0	1
COc1cccc2C(=O)c3c(O)c4C[C@](O)(C[C@H]1O[C@@H](Oc2cccc3C(=O)c4	1			
O=C1Oc2c(C=C1)ccc3occc23	1			
NC(=O)c1cc[n+](CC2=C(N3[C@H](SC2)[C@H](NC(=O)O=N(=O)c1ccc2ccc3ccc(c4c5CCCCc5c1c2	0			
ClC1C2OC2C3C1C4(Cl)C(=C(Cl)C3(Cl)C4(Cl)Cl)Cl	1			
ClC1C(Cl)C(Cl)C(Cl)C(Cl)C(Cl)C(Cl)C(Cl)Cl	0	0	0	
CN1C2=CC(=[NH2+])C=CC2=Cc3ccccc13	1			
OCC1OC(CC1O)N2C=C(\C=C\Br)C(=O)N(CCCN(CC)CCCN(C1Cc2ccccc2	0	1	0	
CC(C)CCC[C@H](C)C(C)C	0	0		
CC1=C(Cl)C(=O)N(C(=O)N1)C(C)(C)C	0			
C[C@H]1CC2COC(=O)CNC(=O)C(C)(C)Br	0			
CCC(=O)N(O)c1ccc(cc1)c2ccccc2	1			
Cc1ccc(O)cc1	0		0	
Nc1oc(c(O)n1)cc1	0	0		
Cn1cc(C2=C(Cl)C(=O)N(C)C2)cc1	1			
NC#N	0	0	0	
Nc1ccncc1N	0	0	0	
ClC(=O)c1cc(cc(c1)N(=O)=O)N(=O)=O	1			
OC(=O)CN(CC(=O)O)CC(=O)O	0		0	
CC(C)CCO	0		0	
C[C@H](O)C(=O)C	0	0	0	
CCC(=O)c1c(cc1)C(=O)C	0	0	1	
CCCCC(C)(O)\C=C\C1C(O)CC(=O)C1\C(C)C	0			
CN1CCN(CC1)C(=O)OC2N(C)C(=O)C2	0			
CN(CCCN1c2c(C)C(=O)N1)C(=O)C2	1	1		
Cc1cccc2ccc(cc12)[N+](=O)[O-]	1			
Nc1cnc2c(c1)nc3cccn23	1			
[O-][N+](=O)c1cc(cs1)C(=O)Nc2cccc(Cl)2	1			
O=N(=O)c1ccc2cccc3c4ccccc4c1c23	1			
CCC(C)(CCC(C)C)C(=O)OC=C	0		0	
Clc1ccc(cc1)N2C(=O)CCC2=O	0			
CCCCc1ccc2[r]c(C)C(=O)C1	0			
COC(=O)C1=C(C)NC(=C(C1c2ccccc2N(=O)=O)C(=O)OC	1			
OC(=O)Cc1ccccc1N(=O)=O	1			
COc1c2CC(O)c(C)C(=O)C1	0			
CN1C2CCC1C(=O)C2	1	1		
ClC1=C(Cl)C2(Cl)C3C4CC(C)C(=O)C1	0	0		
CCCC(=O)N1N=CC(=C(Cl)C1=O)Cl	0			
Cc1c(C)c(c(c1C)[N+](=O)[O-])C(C)(C)C	0			

CCCC(=O)OCc1ccccc1			0
C[N+](O)CCCC1c2cccnc2	0		
O=Cc1ccccc1	0		0
Oc1ccc(cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	0		
Cc1ccc2nc3c(ccc4ccccc34)cc2c1	1		
CC[C@@H](C)[C@@H](N)C1=N[C@@H](CS1)C(=O)N			0
[O-][N+](=O)	0	0	
CCCCCNCCCCC	0		0
CCN(CC)C(=S)SSCC(NC(=O)C)C(=O)O	0		
CCc1ccc(C)c1N(C(C)COC)C(=O)CCl			0
COc1nc(C)nc	0	0	0
CNC(=O)\C=C(/C)\OP(=O)(OC)OC	1		0
CCOC(=O)[C@H](SP(=S)(OC)OC)c1ccccc	0		
OC(=O)CCC(=	0	0	
CC1(C)OC2CO[C@]3(CO[S-	0		
OCCn1c(CO)nc1[N+](=O)[O-]	1		
C[C@H]1CC2C3CCC4=CC(=	0		
C[C@@H]1Cl	0	0	
CCOS(=O)(=O)OCC	1		0
COC(=O)C(=C)Cl	1		
OC(=O)c1ccc(\C=N\n2nnc3c4ccccc4nc3c	1		
CN(N=O)N(C(=O)\C(=N/O)\C(=O)C)c1cc	1		
Oc1ccc(Nc2c3ccccc3nc4ccccc24)cc1	1		
CC(C)(C)C(=O)C(Oc1ccc(Cl)cc1)n2cncn2			0
C[N+](C)(CC=C)CC=C			0
COP(=O)(OC)OC	1		0
OC(=O)c1snc(Cl)c1Cl			0
CC(=O)OC1COC(Nc2ccc(cc2)[N+](=O)[O	1		
ClCCN(CCCl)P1(=O)NC(=O)CCO1	1		
NC(=O)c1ccc	0		
Cc1c(C(=O)NCCO)[n+](O)c2ccccc2[n+	1		0
CN(C)Cc1ccccc1O			0
[O-][N+](=O)c1ccc2sncc2c1	1		
CCCC\C=C(/C)	0	0	
C[C@H](CCc1ccccc1)NC[C@@H](O)c2cc	0		
COc1ccc2C[C@@H]3N(C)C	1		
COCCCOc1ccnc(C[S+](O-	0		
CC(C)OC(=O)OCOP(=O)(CO[C@H](C)Cn1cnc2c(N)ncnc			0
NNc1ccccc1[N+](=O)[O-]	1		
CCC(=O)OC(CC(=O)O)C[N+	0		
Oc1c(Cc2c(O)c(cc3ccccc23)C(=O)[O-])c4ccccc4cc1C(=			1
COC(=O)C(CN	0	0	0
C[C@H](O)[C@H]1[C@@H	0		

CNC(=O)c1c(ncn1C)N(C)N=O	0		
CC12OOC1(C)c3ccccc3O2	1		
O=C(OCC1CCC2OC2C1)C3CCC4OC4C3	1	0	
CN(C)CCC#N		0	
CC(=O)C1C(=O)C=C2Oc3c(C(=O)C)c(O)c(	0		
CN1CCN(CC1)c2ccc3ccccc3	0		
C1CCN2C[C@@H]3C[C@@	0		
CN(C)CCOC(=O)C=C	0	0	
CCO\C=C\1/N=C(OC1=O)c2ccccc2		0	
CC(=O)Nc1nnc(s1)[S+](=O	0		
CCCCC(CC)C(=O)Cl		0	
O=N(=O)c1ccc2ccccc3C=Cc1c23	1		
CCN(CC)c1cc(NC(=O)C)c(cc1OC)N=Nc2c	1		
C[C@@H]1CN[C@@H](C)O1	1		
COc1cccc(CNc2ccc3nc(c4c	0		
ClNc1nc(NCl)nc(NCl)n1	0		
Oc1cccc2c1ccc3nc4ccc5ccccc5c4cc23	0		
CC(C)NC[C@	0	0	
CC1=CC(=O)c2[nH]c(C)c3c4ccccc4nc3c2(	1		
CCCCN=C=O		0	
CCOC(=O)C1:	0	0	
C[C@@H](N)C(=O)c1ccccc1		0	
CCOc1ccc(c2:	0	0	0
CCOP(=NC(C)C)(O)Oc1ccc(SC)c(C)c1	0		
Clc1cc(I)cc(Cl	0	0	
CCCc1nc(c(C(=O)OCC2=C(C)OC(=O)O2)n1Cc3ccc(cc3)c		0	
OC(=O)c1cc(ccc1O)N=Nc2ccc(cc2)c3ccc	1		
CN(C)CCN(C)CCc1ccc(Cl)c(	1		
OC(CC(=O)OCCBr)C(=O)OCCBr	1		
CC(=O)CCC1=C(C)CCCC1(C)C		0	
CN(C)[C@H]:	0	0	
CC1(C)S[C@@H]2[C@H](N3C(=O)C(NC3(C)C)c4ccccc4		0	
NCCc1ccc(O)	0	0	1
CC(C)(C)NCC(O)COc1nsnc1N2CCOCC2	0		
OC12N=C(SC1Cc3cc(Cl)ccc23)c4ccccc4		1	
[O-][N+](=O)c1ccc2ccc3ccc(c4c5ccccc5c	1		
[O-][N+](=O)c1cccc2c3ccccc3[nH]c12	1		
CCC(Cl)CC(Cl)C(Cl)C(Cl)C(Cl)C(Cl)C(Cl)Cl		0	
OC1C=Cc2cccnc2C1O	0		
CCC(=O)O[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CCc4cc(OC(=O)		0	
Nc1nc(Cl)nc2	0	0	
Nc1c(Br)cc(Br)c2C(=O)c3ccccc3C(=O)c1	1	1	
COC1=C(Oc2c(ccc3occc23)	0		

[O-]C(=O)CNc1ccccc1			0
CCC(=O)O[C@@]1([C@H](C)C[C@H]2C3C[C@H](F)C4			1
NCC[S+](=O)(O)[O-]	0		
CN([C@H](CN1CCCC1)c2cc	0		
CC(O)CN		1	0
Nc1c(Oc2ccccc2)cc(O)c3C(=O)c4ccccc4(		1	
CC1CC(C)C(=O)C(C1)C(O)CC2CC(=O)NC(=		0	
N#N=NC(c1ccccc1)c2ccccc2		1	
CC(Cc1ccc2OCOc2c1)NO			0
CCN(CC)CCc1c[nH]c2ccccc12			0
C(Oc1ccc2ccccc2c1)C3CO3		1	
OCCO[C@H]1[C@@H](O)O[C@H](CO)[C@@H](O)[C			0
COC(=O)C(=Cc1oc(cc1)N(=O)=O)N(=O)=		1	
COC(=NN=Cc1cn(=O)c2ccccc2n1=O)O		1	
Oc1ccc2ccccc2n1		0	
CCCCCOC(=O)c1ccccc1C(=O)OCCCCC			0
COc1cccc(O)c1O			0
C[C@@H](Cc	0	0	
CC\C=C/CCOC(=O)c1ccccc1			0
COc1cc2CCN(C)C(=O)c2cc1		0	
CN1C(=O)\C(=N\NC(=S)N)\c2ccccc12			1
OC(=O)CC(=O)O		0	0
OP(=O)([O-])C(Sc1ccc(Cl)cc1)P(=O)(O)[O-]			0
OC(=O)c1ccccc1C(=O)Nc2c		0	
COc1cc2OC[C@H]3Oc4c5C		0	
CCOC(CN1CC		1	0
CC(=O)OC1C2CC(C)(C)CC2=C(C=O)C3(CC		0	
OC[C@H](O)[C@H]1OC(=O)C(=C1[O-])O			0
C[C@H]1C(=O)O[C@H]2CCN3CC=C(COC		0	
[O-][N+](=O)c1cccc2cnscc12		1	
N[S+](=O)([O-])c1cc2c(NC		0	
Cc1cc(N)c2cc		1	
CN1C(=O)N(		0	0
CC(C)(C)NC[C		0	0
Cc1cc(O)c(cc1C(C)(C)C)C(C)(C)C			1
BrCc1c2ccccc2c3ccc4cccc5ccc1c3c45		1	
O[C@@H]1C		0	0
[O-][N+](=O)\C=C\c1ccccc1		1	
[O-][N+](=O)c1ccc(OC=C)cc1		1	
COc1ccccc1CC(Cc2nc3ccccc		1	
Cc1cc(O)c2c(O)c3c(O)cccc3cc2c1		1	1
CNc1nc2c3cccnc3ccc2n1C		1	
CN(CCOc1ccc		0	0

OCCc1c[nH]c2cc(ccc12)[N+](=O)[O-]			1	
CN(Cc1ccc2N	0	0		
Oc1c(l)cc(c2c	0			0
CCCC(=O)OCC(=O)[C@H]1[C@H](C)C[C@H]2[C@@H				0
CCC(C)(O)CCCC(C)C				0
Clc1cc2Oc3cc(Cl)c(Cl)cc3Oc2cc1Cl			0	
CN(C)CCCN1c	1	1	0	
CCCCCCCCC	0	0		
CC(=O)OCCOC(=O)C				0
Nc1nc2ncnc2c[nH]1			0	
OCC1OC(O)C	0	0		
NC1=NC(=O)N(C[C@@H](CO)OCP(=O)(O)O)C=C1				0
Cc1ccc2cc3c4C=CC(O)C(O)c4ccc3c5CCc1			1	
Cc1ccc(cc1)S	0			0
COc1ccc2c(c:	0	0		
ClCc1ccccn1			1	0
[O-][N+](=O)c1c2CCCCc2c3ccc4ccc5ccc			1	
CCN1CCN(C(=O)NC(C(=O)NC2C3SC(C)(C			0	
CNC[C@H](C	0	0		0
COc1cc2CC(=O)NN=C(c3cc		0		
CN(C)CCCNc1c2cccc2nc3c(cccc13)[N+]			1	
CCCC(=O)O[C	0	0		
Oc1ccc(cc1)C	1	0		0
c1ccc2cc3cccc3cc2c1			1	1
OC1C=Cc2c(cc3ccc4c(ccc5ccc2c3c45)[N-			1	
CC(C)COS(=O)(=O)C			1	
[O-][N+](=O)\C=C\c1ccc2c		0		
NC1(C[C@H]([C@@H](C1)		0		
CS(=O)(=O)NC(=O)CCC\C=C/C[C@@H]1[C@@H](\C=				0
Cc1cc2C(O)C(O)C=Cc2c3cc4cccc4cc13			1	
CCN(CC)CCO	0	0		0
BrCC(Br)COP(=O)(OCC(Br)CBr)OCC(Br)C			1	1
CN1C(=O)[C@@H](NC(=O)c2cc3cccc3[nH]2)N=C(c4c				1
C[C@@H]1CCC2[C@@H](C)[C@@H](O)O[C@@H]3C				0
C[n+]1ccc2[C@@H]3O[C@@H]3C=Cc1			1	
CCCCN(CCO[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]			1	
CCN(CCCl)c1ccc(CCCNc2c3cccc3nc4ccc			1	
CC(O)CCC(=O)c1coccc1			0	
CC(=O)NNC(=O)c1ccccn1			0	
Cc1cccc1OCC(O)CNCCOc2		0		0
CN1CCCN=C1	1	1		
CN1N=C(S/C,	0			
C1CN(CCO1)c2nc(nc3cccc23)c4cccs4			1	

CCCCC#Cc1nc(NC)c2ncn([C	0		
N[S+](=O)([O-])c1cc(ccc1(	0		
CN1C(=O)N(	0	0	0
CC1CN1		1	0
OC[C@@H](	0	0	
CN(\C=N\c1ccc(C)cc1C)\C:	0		
COc1cc2nc3occc3c(OC)c2cc1OC		1	
CCCCOC(=O)c1ccccc1N		0	
CC(=O)O[C@@]1(CC[C@H]2[C@@H]3CCC4=CC(=O)C			0
CCCCOC(=O)c1cc2c(cn1)[n	0		
CN1C(=O)N(	0	0	
CC1=CC(=O)C=C2Oc3cc(N)	0		
CC(Cc1ccc(O)c(O)c1)C(C)C	0	0	1
CCOCc1c(O)cc2C(=O)c3ccccc3C(=O)c2c1		1	
C[C@@H](O)CCC(=O)c1cccc1		0	
CCN(CCON(=O)=O)N(=O)=O		1	
ClC(Cl)C1=C(Cl)C(=O)OC1		1	
CC(C)(C)c1cc(cc(c1O)N(=O)=O)N(=O)=O			1
CC(C)CC1NC(	0	0	0
C[C@H]1CC2	0	0	
CC(C)C1OCCN1CCOC(=O)NCCCCCNC(=O)OCCN2CCOC			0
CCc1ccc(NC(=O)c2csc(c2)N(=O)=O)cc1		1	
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O[C@@H]1CC(=C(C=C\C=C\C			0
ClC1=C(Cl)C(=O)N(N=C1)S(=O)(=O)c2cc		0	
Clc1ccc(N2C(=O)CCC2=O)c(Cl)c1Cl		0	
C[C@H](CCc1ccccc1)c2ccccc2		0	
COP(=O)(O)O		0	
COP(=O)(OC)OC(=CC(=NC)O)C		1	
CC1(C)CC(O)CC(C)(C)N1			0
CC(C)NC[C@@H](O)COc1c	0		
Nc1nc(O)c2n	0	0	
Nc1ccccc1C(F)(F)F		0	
OC(=O)CCC\C=C/C[C@@H	0		
OC1=CC(=O)(	0	0	
O=C1NC(C(=O)[N-]1)(c2ccccc2)c3ccccc3			0
COc1ccccc1N	1		0
C[N+](=O)C1CCC(CC1)[C@@H]	0		
COc1c(Cl)c(Cl)c(c(Cl)c1Cl)N(=O)=O		0	
N[S+](=O)([O-])c1cc2c(N[	0		
Oc1ccccc1\C=N\Cc2ccccc2	0		1
CCCC[C@@H]1C(=O)N(N(C1=O)c2ccc(O		1	
Cc1c(c2ccc(O)cc2)n(Cc3ccc(OCCN4CCCCC4)cc3)c5ccc			1
CC(=O)Oc1cc	0	0	1



CCOC(=O)C1=C(C)N=C(C)C(=C(O)OCC2C	0		
COc1cc(N)c(Cl)cc1C(=O)N(	0		0
O=N(=O)c1ccc2c(Cc3cccc(c23)N(=O)=O	1		
CCN(CC)C(=O)[C@@]1(C[C@@H]1CN)c2cccc2		0	1
CNC(=O)[C@	0		
FC(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)	0		0
Oc1c2c3cccc3c4ccc5ccc6cccc1c6c5c24	0		
COc1cc2C=CC(=O)Oc2c(O)	0		
CN1C(C(=O)Nc2cccn2)C(=O)c3sccc3S1(	0		
COC(=O)CCC(=O)OC	0		0
Clc1ccc(CC2C	0	0	0
C[C@]12CCC	0	0	0
O=C1c2cccc3cccc(c4ccc5ccccc5c14)c23	0		
CCC(C)Nc1snc2cccc12	0		
CC(=O)c1c(C)c(c(c1C)N(=O)=O)C(C)(C)	0		
CCCC[n+]1cccc1			0
CCN(CC)C(=O	0	0	
Cc1ccc2C(=O)c3cccc3C(=O)c2c1[N+](=	1		
CCCN1CCC[C	0		
CCCCCCCCC	0	0	
CN1CCCC(CC	1	1	
CN(CCO)C(=O)Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1	0		
COc1ccc2cc(	0	0	
C[C@H]1O[C@H](O[C@H]2[C@H](O)[C@@H](O)[C@			0
CC[C@H](C)C	0	0	1
C[C@@H]1C	0	0	
CC(=O)Nc1ccc2ccc3cccc4ccc1c2c34	1		
O[N+](=C(Cl)Cl)[O-]	1		
CCC(=O)O[C@H]1[C@H](C[C@H]2[C@@H]3CC[C@H]			0
CC1C=Cc2ccc3ccc4cccc4c3c12	0		
Cc1c(C(=O)O)c(O)cc2C(=O)c3c(O)c(O)c([C@@H]4O[C			0
CC(=O)c1cccc1	0		0
O1C2C1c3cc4c(ccc5ccccc45)cc3c6cccc2	1		
NC[C@@H]1CC[C@H](CC1)C(=O)c2ccc(	0		
Cc1cccc(c1)C2=CC(=O)c3cc	0		
OC[C@@H](O)[C@@H](O)[C@@H](O)	1		
CN1CCC=C2C1CCc3sc(N)nc23	1		
NC[C@@H]1	0	0	
ClCC1C(CCl)C2(Cl)C(=C(Cl)C1(Cl)C2(Cl)Cl	0		
NC(=N)NN(=O)=O			0
Cc1ccc(c(c1)[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1		
[O-][N+](=O)c1cccc(c1)S(=O)(=O)OC[C@	1		
COC1=CC=CC=CC1	1		

CN(C)CCN1C=CN(C)C1\C=N\O	0		
OCc1c2ccccc2c(CO)c3c1ccc4ccccc34	1		
O=C1CCCCCCCCC=CCCC1			1
NC(=S)NS(=C	0		0
COc1cc(O)c2C(=O)c3c(OC)cc4O[C@@H]	1		
CC1(C)Oc2cc	0	0	0
Oc1cc2C(=O)c3ccccc3C(=O)c2c(O)c1C=C	0		
[O-][N+](=O)c1cccc(CO\N=C\c2nc3cc(c	0		
[O-][s+]1(=O)n(CCN2CCC(=	0		
CC[N+](CCC	0	0	0
C\C(=C/C=C/C=C(\C)/C=C/C=C(\C)/C=CC1=C(C)C(=O)C			0
C1c2ccc3ccccc3c2Cc4ccc5ccccc5c14	1		
O=C1CCCC=C1	0		0
OC1C(O)c2cccnc2C3OC13	0		
CC(=O)NCCC	0	0	0
CCCCCCCCCCC#N			0
CCCCCCCCOS(=O)(=O)[O-]			0
CCNC(=O)C(C)OC(=O)Nc1ccccc1			0
CCCCCOC(=O)CCC			0
Cc1ccc2OC(=CC(=O)c2c1)c	0		
CC1(CCC2(C)C(C1)C(=O)CC3C4(C)CCCC23	0		
CCN(C)N=O	1		
[O-][N+](=O)c1ccc2CCc3ccccc1c23	1		
[O-][N+](=O)	1	0	
Nc1nc(Cl)nc2c1ncn2[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](			0
CN1CC(=CC2C1Cc3cn(CC=C)c4ccccc2c34)(	1		
Cc1nnc2CN=(	0	0	0
O=N(=O)c1oc2cc3ccc4cccc5ccc(c2c1)c3	1		
Cc1cc2N=C3C(=O)NC(=O)N	0		
S=C=NCCc1ccccc1	1		
Oc1cc(nc2C(=	0	0	1
COC(=O)c1ccccc1S(=O)(=O)NC(=O)Nc2nc(C)cc(C)n2			0
Oc1cccc2Cc3	0	0	0
CCOCC(=O)O			0
Cc1cc(cc(C)n1)c2cc3N(C4CC4)C5=CC(=O	1		
Cc1cn2c(N=O)c(nc2s1)c3ccc(cc3)N(=O):	1		
COc1ccc2[C@H](OC(=O)c2	0		0
OCCN1C[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]1CO			0
O=N(=O)c1ccn(=O)cc1	1		
COc1ccc(CCN	0		
Cc1ccc(cc1C(=O)O)[N+](=O)[O-]	1		
CC1CN(CC(C)O1)N=O	1		
OC(=O)C=Cc1cnc[nH]1	0		

[O-][N+](=O)c1cc(cs1)C(=O)Nc2ccccc2F	1		
CC[C@@H](C)NC(=O)\C=C\c1oc(cc1)[N	1		
CC(=O)[C@@	0	0	0
COc1cccc(OC	0	0	
CO\N=C\C(=	0	0	
ClCc1cc2cccc3ccc4c5ccccc5cc1c4c23	1		
OCCN1CCN(CCO)CC1			0
COC(=O)c1ccc(cc1)N=Nc2ccc(cc2)N(C)C	1		
CCCN(CC1CC1)c2c(cc(cc2N(=O)=O)C(F)(F)F)N(=O)=O			1
COc1ccc(cc1)C(=O)\C(=C/C(=O)[O-])\Br			0
COc1ccccc1N	1	1	
C[C@@H]1CC[C@H]2C(C)(C)C3C[C@@]12CC=C3C			0
C[C@@H]1O	0	0	
C[C@H]1C(=	0	0	0
CCCCCCCC(=O)N(C)C			0
C\C(=N/O)\C(=N\O)\C			0
Cc1cc2c(nc(N)n2C)c3nccnc13	1		
OC(=O)C(Cl)CCl	0		
OC1C=Cc2cc3c4ccccc4cc5c6ccccc6c(c2C	1		
CC12OOC1(CO)Oc3ccccc23	0		
CCOC(=O)[C(	0	0	0
CCC1(CC)C(=	0	0	0
CC(=O)ON(OCc1ccc(Br)cc1)C(=O)c2cccc	1		
CC1CC2C(Cc3cn(CC=C)c4cccc2c34)N(C1)	1		
CCN(CC)CCO(	0	1	0
S=C1NCCN1	1		0
CC(C)(O\N=C/C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=C			0
Cc1ccc2ccc3cc4ccccc4cc3c2c1	1		
CCC(C)(C)c1cc(c(O)c(c1)C(C)(C)CC)n2nc	0		0
C=CC(=O)OCCOCCOC(=O)C=C	0		0
N[C@@H](CN1C=C(I)C(=O		0	
COc1ccccc1C	0	0	
COP(=S)(OC)Oc1ccc(c(C)c1)N(=O)=O	0		
CCCCC1=CCCC1=O			0
N#Cc1ccc(cc	0	0	0
CCCCCN(CCCC)N=O	1		
Clc1ccc(Nc2nnc(Cc3ccncc3		0	1
C[C@H](CN1CCOCC1)C(C(=O)N2CCCC2)(c3ccccc3)c4c			0
COc1ccc(cc1)N(=O)=O	1		
Nc1cc(Cl)cc(C(=O)O)c1Cl	1		0
[O-][N+](=O)c1cccc2c(cccc12)C#N	1		
CN(C)C(N(C)C)(c1ccccc1)c2ccccc2	0		
CC(=C)C(=O)OCCCCOC(=O)C(=C)C	0		0

CCNC(=O)\C=C\c1oc(cc1)[N+](=O)[O-]	1		
OC(=Nc1cccc1Cl)c2csc(c2)N(=O)=O	1		
CCOc1ccc(Cc2nc3cc(ccc3n	0		
OC1CCC(O)(CN(CC(=O)O)N=O)C(O)C1O	0		
Oc1cccc2cc3c4cccc4c5cccc5c3cc12	1		
Clc1cncc(n1)N2CCNCC2	0		
CCC(=O)C1CC(CC=C1C)C(C)C			0
NNc1ccc(cc1)C(=O)O	0		0
OCc1cc2c3cccc3cc4ccc5cccc1c5c24	0		
O[C@@H](\C=C\[C@H]1[	0		
CCCCCCCCC	0		0
Oc1ccc2cc(ccc2c1N=Nc3ccc(cc3)S(=O)(:	0		
Clc1cccc1c2cccc2Cl			1
COC1\C=C\O	0		0
CC(C)O	0		0
Nc1cccc2c1ccc3cccc23	1		
CCC(C)(Oc1c	0		0
COc1cc(NS(=O)(=O)C)ccc1Nc2c3cccc3r	1		
CC(=O)Nc1ccc(\C=N\n2nnc3ccnc3c2O)c	1		
COc1cccc2c1OC3(C)OOC23C	1		
Oc1ccc2cc(ccc2c1N=Nc3cccc3)S(=O)(=	0		
Cc1cc(C#N	0		0
OC1(CCN(CCC	1		1
ClCCN(CCCl)P1(=O)OCCCN1CCCl	1		
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCC1(O)CC23C	0		
N(N=Nc1cccc1)c2cccc2	1		1
N[C@H](CCP(=O)(O)O)C(=	0		
CNc1ccc(cc1)N=Nc2ccc(NC)cc2	0		
CC(=O)Oc1cc	0		0
CN(C)CCc1cc(C2=C(C(=O)	0		
NC(=O)CNC(=O)C=N#N	1		
CCCCCCCCOc1cccc1NC(=O)OC(C)CN(CC)	0		
CCCCc1ccc(cc1)\N=C/c2ccc(OC)cc2	1		
CCCC\C=C\c1cccc1)\C=(	0		0
CN1CCc2cccc3c2[C@H]1C	0		0
COc1ccc(CCN(C)CCCOc2cc	1		
CCN(CC)C(=S)SC1OC(CO)C(O)C(O)C1O	0		
COc1cc(NS(=O)(=O)c2ccc(N)cc2)nc(C)n1			0
CCOc1cccc1	0		
CC(C)c1cccc(C(C)C)c1N2C(=O)c3ccc(O)cc3C2=O			1
CCCCON(OC(=O)C)C(=O)c1ccc(cc1)c2ccc	1		
CC(=O)O[C@H]1[C@@H]2OC(=O)[C@H](OC(=O)C)[C			0
N[C@]1(CC[C@@H](C1)C	0		

COc1cccc1\C=C\C=O			0
CN1CCCN=C1\C=C\c2sccc2C			0
COC(=O)c1sccc1S(=O)(=O)N			0
CCC(C)(C)C1CCC(CC1)OC			0
CC(C)(C)c1ccc(OC(=O)c2cccc2O)cc1			1
Cc1cc2c(C)c3cccc3nc2c4cccc14	1		
O=NN1CCC(CC1)c2cccc2	1		
COc1ccc2C[C@H]3N(C)CCc4cc(OC)c(Oc5	1		
CCOC(=O)C1(CCCN(C)CC1)c2cccc2			0
CCCCOP(=O)(OCCCC)Oc1cccc1	0		
O=C1NC=NC(=O)N1	0		
CC(Oc1ccc(O)cc1)(P(=O)(C	0		
Cc1cccnc1	0	0	
OCC(O)CS	0	0	0
COc1cccc2C(=O)c3c(O)c4C	1		
COCCOC(=O)c1cccc1C(=O)OCCOC	1		0
C=Cc1cccc1C=C	0		0
CC(C)C[C@H](NC(=O)OCC1c2cccc2c3cccc13)C(=O)C			0
CN(C)[C@H]1[C@@H]2CC3C(=C(O)[C@]2(O)C(=O)C(			0
CC1=CCC(=O)O1	0		
OC(=O)C1CC(	0	0	
O=N(=O)c1ccc2c3cccc(c3cc(c2c1)N(=O)	1		
CCOc1ccc(N)cc1	1		0
Oc1cccc1C(=O)c2cccc2			0
OCc1c[nH]cn1		0	
Fc1ccc(cc1)C	1	1	0
COc1ccc(cc1)C(=O)\C=C\c2cccc2	0		
O=NN1CCCCCCCCCCC1	1		
CCC\C=C\C=C\C(=O)O[C@H]1\C(=C\C(=O)OC)\C[C@H			1
lc1ccc(cc1N(=O)=O)N(=O)=O	1		
CC(=O)N(O[C@@H]1O[C@H](CO)[C@@	1		
Nc1ccc(cc1N(=O)=O)c2ccc(N)c(c2)N(=C	1		
CN1C=CN(CCC[n+])2ccc(cc2)C(=O)N)C1\	0		
COc1cccc1N2CCN(CCN(C(	0		
CC(=N(=O)O)CO	0		
O=CC=Cc1ccc(cc1)N(=O)=O	1		
CC[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=CC(	0		
[O-][N+](=O)c1ccc2ccc3c4cccc4cc5ccc	1		
C[C@@H](O)CN(C)N=O	1		
COC(=O)c1ccc(OC)cc1			0
C[C@]12CC[C@H]3[C@@I	0		
CN(C)C(=O)C	0	0	
C1CN(CCN1)c2ccc3cccc3r	0		

O=C1CCC(C2(	1	0	0
COc1ccc2C[C@@H]3[C@@H]4C=C[C@H](O)[C@@H]			0
C(OCC1CCC2OC2C1)C3CCC4OC4C3		1	
CC(=O)N1CC(	0	0	
CN(N=O)C(=O)N[C@H]1C(		0	
C[n+]1c(c2ccc(N)cc2)c3cc(N)ccc3c4ccc(		1	
C1SCCCO1		0	
COC[C@@H](N1CCN(C[C@H]1C)C2(C)CCN(CC2)C(=O)			0
CN1C2CCC1C	1	1	
O=N(=O)c1ccc2ccc3cccc(c3c2c1)N(=O)=		1	
CC(=CCCC(C)(O)C=C)C		0	0
NS(=O)(=O)c	0		
CC1=NN(C(=O)C1N=Nc2cccc2)c3ccc(cc3)S(=O)(=O)[			0
Cc1ccc(C)c(N)c1		1	
C[C@@]12CCC[C@](C)([C(		0	
NC(CCC(=O)NC(CSCC)NC(=O)CC(=O)O		1	
Nc1nc(\C=C/c2oc(cc2)[N+](=O)[O-])cs1		1	
CCOC(=O)[C(	0	0	0
OC1C2OC2c3c(ccc4c5cccc6cccc(c34)c56		1	
Oc1c(cc(cc1[N+](=O)[O-])c2cccc2)[N+]		1	
CCOc1ccc(cc1)N=N(=O)c2ccc(OCC)cc2		0	
CC(CCCCC(=O)Nc1ccc(cc1)		0	
Cn1cnc2ncnc(N)c12			0
Cc1ccc(cc1N=N(=O)c2cc(ccc2C)N(=O)=C		0	
CCC(=O)\C=C\C1C(=CCCC1(C)C)C		0	0
C=CCOc1nc(OCC=C)nc(OCC=C)n1			0
Nn1cnnc1			0
BrC(C(=O)NCc1cccc1)c2cccc2		0	
NC1=NC(=O)c2nc(Br)n([C(		0	
N[S+](=O)([O-])c1cc2c(N[		0	
Cc1cc(cc2cccc12)[N+](=O)[O-]		1	
COc1nc(C)nc(NC(=O)NS(=O)(=O)c2cccc2Cl)n1			0
OC1CC(O)(CC(O)C1O)C(=O)O		0	
CCCC[C@@H](CC)C=O		0	
OCCNC(=O)\C=C\c1cccc1		0	0
COc1c(Cl)c(Cl)c(c(Cl)c1Cl)[N+](=O)[O-]		0	
[O-][N+](=O)c1ccc(cc1)C(=O)Cl		1	
CCCN=C(O)C=Cc1oc(cc1)N(=O)=O		1	
CC(C)(C)N(NC(=O)c1ccc(Cl)cc1)C(=O)c2cccc2			1
COc1ccc2C(=O)C(=COc2c1		0	
CC(=O)\C=C\c1cccc1			0
OC(CCC1C(N(C1=O)c2ccc(F		0	
CC1C2C(=Nc3cccc23)N(C)c4cccc14		1	

NCC1CCC(CC:	0	0	0
C[C@](O)(C[S+](=O)([O-])		0	
CCC(=O)OC(C)(CCC=C(C)C)C=C			0
CCN(C(=O)N(CC)c1ccccc1)c2ccccc2		0	1
Cc1ccc(cc1)C(C)(C)O		0	0
CC1(C)[C@H](CC[C@@]2(C)C1CC[C@]3(C)[C@@H]2C			0
OC(=O)c1cc(cc(c1)N(=O)=O)C(=O)O			0
[O-][N+](=O)	0		1
CCCCCCCCC	0	0	0
Fc1ccc(cc1)C	1	1	
Cc1cc2CCN(C	0	0	
COc1cc(O)c2c(O)c3C(=O)OC(=Cc3c(OC)c		1	
N[S+](=O)([O-])c1cc2c(N[		0	
NC(CSC(=C(Cl)Cl)Cl)C(=O)O		1	
[O-]C(=O)C1=C(CSc2nncs2)CS[C@@H]3[C@H](NC(=C			0
Oc1ccccc1\C=N\NC(=O)c2		0	
CCCCOC(=O)c1ccccc1			0
Oc1ccc(cc1N(=O)=O)c2ccccc2		0	
CN(C)c1ccc(cc1)N=Nc2ccccc2CO		1	
CCOc1ccc(NC	0	0	0
CNC(C)C(O)c:	0	0	0
O=C1NC(=O)c2ccccc12		0	0
COC(C)(C)C		0	0
FC(F)(F)c1ccc(Cl)c(c1)N(=O)=O		0	0
CN(C)CCn1nnnc1SCC2=C(N3[C@H](SC2)[C@H](NC(=C			0
CCN(CC)CCNC(=O)c1cc(ccc1OC)S(=O)(=O)C			0
CC([C@H](O)	0	0	
CCCC(c1cc(c(O)cc1C)C(C)(C)C)c2cc(c(O)c		0	1
Oc1cc2ccccc2c3ccccc13		1	1
OCC1OC(Oc2cc(O)c3C(=O)		0	
CC(=O)c1ccc:	1	1	
COc1ccc(cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]		1	
CC(C)NCC(O)c1ccc(N[S+](=		0	
Cc1ncc(CO)c(	0	0	
Cn1c(NO)nc2c3ccnc3ccc12		1	
COc1nc2cc(cc(CBr)c2nc1OC)[N+](=O)[O		1	
Cc1ccc(C)c2c3cc(ccc3[nH]c12)N(=O)=O		1	
NC[C@H](CC(=O)O)c1ccc(		0	
CN(C)CCc1c[nH]c2ccccc(OP(=O)(O)O)c12			0
O=C1C[C@H]	1	0	
CS(=O)(=O)Cl			0
C\C=C/C=C\C=C/C(=O)O)\C)\C=CC1=C(C)CCCC1(C)C			1
OC1(CCN(Cc2	1	1	

CC\C=C/CCCCCCCCCOC(=O)C		0
OC1C=Cc2c(ccc3c4cccc4sc23)C1O	1	
CCOc1cccc(c1)[C@@]2(CC[C@@H](C)CC2)N3CCN(CC		0
C[C@@]1(CO)[C@H](O)CC[C@@]2(C)[C@H](C\C=C\C		0
CCCN1C(=O)I	0	0
CC(C)C=O	0	0
COc1c(C=O)c(O)cc2C(=O)c3cccc3C(=O)	0	
C[n+]1ccn(CC=C)c1		0
CC\C=C\C[C@@H](CC)C=O	0	
CC(C)(O)Cc1cccc1		0
OC1COC(C(O)C1O)N(Cc2c[nH]c3cccc2	1	
[O-][N+](=O)c1ccc2ccc3cccc4C(=O)Oc1c	1	
CC(C)OC(=O)	0	0
CC(=O)OCCN(CCOC(=O)C)c1ccc(cc1)N=Nc2ccc(cc2C#N		1
CC(C)Cc1ccc(	0	0
C[C@@H](O)c1nccc(n1)N2[C@@H](C)CN(C[C@H]2C		0
C[C@H](CCl)OP(=O)(O[C@H](C)CCl)O[C	0	
C1CC[C@H]2O[C@H]2C1	1	
Oc1cccc1C(=O)OCc2cccc2	0	
Nc1nc(CC(=O)O)cs1		0
C[C@H](O)[C	0	0
C\C=C\C(=O)Oc1c(CCCCC(C)C)cc(cc1N(=O)=O)N(=O)		1
CC(C)(C)OC(=	0	0
CN(C)CCCN1c	1	1
OC(=O)\C=C\c1ccc(O)c(O)		0
Nc1ccc(\C=C\c2ccc(cc2)C#N)cc1	1	
CCCCCCCCCCCCOC[C@H]1CO1	0	
[O-]S(=O)(=O)c1cccc2c(cccc12)S(=O)(=O)[O-]		0
C[C@]12[C@@H](O)C=C[C@@]3(OC1=	0	
COc1cc(CC(C)N)cc2OCOc12		0
C[C@H]1[C@	0	0
FC(F)(F)c1ccc(Oc2ccc(cc2)N(=O)=O)c(c1)N(=O)=O		1
CCOc1cc(CC(	0	0
CN1C2CCC1C	0	0
CC1CCC2C(OC(=O)C2=C)C3(C)C1C=CC3(=	0	
CCCCC\C=C\CCCCCCCC(=O)O		0
COCCCOc1cc[C[C@@H](C[C@H](N)[C@@H](O)C[C@		0
NC(=N)c1ccc2c(N)c([nH]c2c1)C(=N)N	0	
COc1cc(OC)nc(Oc2cccc(Oc3nc(OC)cc(OC)n3)c2C(=O)[		0
CNC(=O)[C@	0	
COc1cccc(C2:	0	0
CC1C(C)C(C)(O)C(=O)OCC2=CCN3CCC(O	0	
Nc1[nH]cnc2nc(nc12)c3ccc(cc3)[N+](=C	1	



O=C1NN=Cc2ccccc12			0
O[C@H]1C=C2c3ccc4ccccc4c3c5cccc([C(	1		
Nc1cccc(c1CO)N(=O)=O	0		
Nc1nc(c(CCO)c2ncnn12)c3ccccc3	0		
COc1cc2CCN(C)C3Cc4cc5OCOc5cc4c(c1(	0		
[O-][N+](=O)c1cccc(l)c1	0		
Oc1ccc(\C=C' 0 0			
CN1CCN(CC1)c2ccc3[nH]c(nc3c2)c4ccc5	0		
CC1=Nc2ccccc2C(=O)O1			0
OC(=O)[C@€ 0 0			0
CNC(=O)O\N=C\C(C)(C)S(=O)(=O)C			0
Nc1ccc(Sc2ccc(cc2)[N+](=O)[O-])cc1	1		
CN([C@H]1C 1 1			
CN1[C@@H] 1 1			
O=C1CC2(CCCC2)CC(=O)N1	0		
Nc1cc2[nH]c3ccccc3c2cc1N(=O)=O	1		
NCC(O)c1ccc 0 0			0
N[C@@H](Cc1cc(l)c(O)c(l)c1)C(=O)O			0
CCCSC(=O)N(CCC)CCC			0
Cc1ccc(cc1)C(=O)c2ccccc2			0
CC(=O)CC(C1=C(O)c2ccccc2OC1=O)c3ccc(Cl)cc3			1
C1O[C@@H]1c2c3ccccc3cc4c2ccc5cccc	1		
CC[C@@H](C)Nc1ccc(N[C@H](C)CC)cc1	0		
OC[C@H]1O[C@H]([C@H](O)[C@@H]1	1		
Nc1ccc(F)cc1F	1		0
[O-][N+](=O)c1cccc(c1)c2ccc(cc2[N+](=	1		
C[C@@H]1C 0 0			
Nc1ccc2C(=C3C=CC(=N)C=C3Oc2c1)c4cc	0		
CCCOc(=O)c1 0 0			1
Cc1c(Cn2ccn	0		0
CCCCCCCCCCCCS	0		0
CNc1ccc2ncc(C)nc2c1C	1		
CN(Cc1ccc(cc1)N(=O)=O)N=O	1		
OC(=O)C1Cc2c([nH]c3ccccc23)C(N1)c4c	0		
CC(=O)OC(C)(C)Cc1ccccc1			0
N1C2C1c3cc4c(ccc5ccccc45)cc3c6ccccc2	1		
CCCCCOc1cccc(NC(=O)OC2CCCCC2N3CC	0		
Cc1ccc(Cl)cc1[N+](=O)[O-]	0		
Cc1cc(ccc1N)N(=O)=O	1		0
Oc1cc(O)c2C(=O)c3ccccc3C(=O)c2c1	1		
CC(=O)N(CC(O)CN(C(=O)C)c1c(l)c(C(=O)NCC(O)CO)c(			0
Cc1ccc(cc1)S 0 0			0
[O-]C(=O)c1cccn1			0

CCCCCCCCC(=O)OCC			0
Cc1cc(C)cc(C)c1		0	0
CCCN[C@H]1	0	0	0
COc1cccc1\C=C\C(=O)C2=		0	
C[C@H](Cl)CN(C)C			1
CN1C[C@@H](C=C2[C@H]1Cc3c[nH]c			0
C[n+]1ccn(CCO)c1			0
CC12OOC1Oc3cccc23			1
CO[C@H]1C[C@](C)(O)Cc2cc3C(=O)c			1
CC1CN(N=O)C(=O)NC1=O			1
Cc1c2cccc2cc3c1ccc4cccc34			1
COc1cc(ccc1O)C2=CC(=O)c		0	
C[C@]12N[C	0	0	
OCCN(CC(=O)O)N=O			1
[O-][N+](=O)c1cc(CCl)cc(c1)[N+](=O)[O			1
COC(=O)CNC(=O)C(CSCCl)NC(=O)CCC(			1
CNC(=N)NN(=O)=O			0
CCOC(=O)N(C)C			1
CC(C)(N=NC(C)(C)C(=N)N)C(=N)N			1
CCCCCCCCCOCC(=O)C=C			0
CN1CCc2cc3OCOc3cc2[C@		0	
C[N@H+]1CC	0	0	
N\C(=N/O)\c1oc(cc1)[N+](=O)[O-]			1
COC(=O)c1c(CC(C)C)c(C2=NCCS2)c(nc1C(F)F)C(F)(F)F			0
NNc1ccc(cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]			1
CC(=O)CCC(=O)O			0
CNC(=O)Oc1cc(C)c(N(C)C)c(C)c1			0
C(Oc1ccc2sncc2c1)C3CO3			1
OCC(Cl)Cl			1
O=C1OC(CN2CCOCC2)CN1\N=C\c3oc(cc3)N(=O)=O			0
Oc1cccc2Oc3c4C5C=COC5Oc4cc(O)c3C:			1
NC(=N)N=C(N)NCCc1cccc1			0
Cc1cccc1NS(=O)(=O)c2cccc3ccnc23			0
CC1=CC(O)C2CC1C2(C)C			0
CCN(CC)c1cccc(O)c1			1
Clc1ccc(NC(=O)Nc2ccc(Cl)		0	1
Clc1ccc(cc1Cl)N2C(=O)CCC2=O			0
C[C@H](C(=C	0	0	0
CCCCCCCCCCCCC(=O)OC[C@@H](COP(=O)([O-])O			0
CC(C)CC(=O)Nc1snc2cccc12			0
CCC(C)c1cc(c(O)c(c1)C(C)(C)C(C)(C)C			1
C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCc4cc(OC(=O)N(CCCl)C			0
Cc1cc2C(=O)CCc2c3ccc4cccc4c13			1

COc1ccc(C[C@@](C)(N)C:	0		
CN(C)[P+](On1nnc2cccc12)(N(C)C)N(C)	0		
O=Cc1ccc2OCOC2c1	0		0
CCCCN(N=O)C(=N)NN(=O)=O	1		
Nc1cccc1C(=O)OCCc2cccc2	0		
CC1CC2(OC2C)C(=O)OC3CCN(C)CC=C(CC	1		
ClC(C(=O)NCc1cccc1)c2cccc2	1		
OCC(CO)NC1	0	0	
Cc1cc(O)c2C(=O)c3c(O)ccc(O)c3C(=O)c2	1		
Oc1nc(O)nc(i	0	0	0
O[N+](=C1c2cccc2C(=O)c3cccc13)[O-]	0		
OCC1=CCN2CC[C@@H](O)[C@@H]12	0		
CCCCC(CC)CC	0	0	0
OC[C@H]1O[C@@H](Oc2cc3C=CC(=O)C	0		0
CCOP(=S)(OCC)OP(=S)(OCC)OCC	1		
CN1C=CN(CCOCC#C)C1\C=N\O	0		
CN(C)CCCCC	0	0	0
NC(CSc1c(Cl)c(Cl)c(Cl)c(Cl)c1Cl)C(=O)O	0		
OC1C=CC=CC1O	1		
CCC(=CC)C(=O)NC(=O)N			0
CCCCN1CCCC1CNC(=O)c2c	1		
Cc1cnc2c(n1)c(C)cc3c2nc(N)n3C	1		
[O-][N+](=O)c1cccc2c1ccc3cccc(c23)[N-	1		
[O-][N+](=O)c1oc(C(=O)CBr)c(c2cccc2)	1		
CC[C@@]1(C	0	0	
Clc1cccc2ncccc12	1		
N\C=C(/N)\C#N)\C#N			0
OC(=O)c1ccc(cc1)[S+](=O)	0		
CCCCCCCC\C=	0	0	1
O=C1Nc2cccc2C(=O)O1			0
Oc1ccc2cccc2c1CC3=C(NC	0		
CCCCCN(CCCCC)C(=O)Cc	0		
COc1cccc(c1)N(=O)=O	0		
COS(=O)(=O)C	1		0
CC1(Cn2ccnn2)[C@@H](N	0		
Oc1[nH]nc2cccc12	0		
COc1cc(C)cc2c(OC(=O)C)c(cc(OC(=O)C)c	0		
CC1=CC(=O)[C@@H]2C[C(	0		
OCC(CO)OP(=O)([O-])[O-]			0
COC(=O)CCl	0		
CCC1CO1	1		0
OC(=O)CCl			0
N#Cc1ccncc1			0

CCC(C)c1ccc(O)cc1				1
CC1=C(C=C)c2cc3[nH]c(cc4	0			
Nc1ccc(\C=C'	0	0		
Nc1cc(Cl)ccc1O			1	
C[C@@H](NC(=O)[C@@H](NC(=O)c1nc(nc(N)c1C)[C				0
Cc1ccc2c(ccc3ccccc23)c1			1	
[O-][N+](=O)c1ccc(Cl)c(c1)[N+](=O)[O-			1	
CC1CN(CCN1N=O)N=O			1	
OC(=O)\C(=C	0	0		
CC(=CC1C(C:	1	0	1	
COc1cc2nc(nc(NC3CCN(Cc		1		
CN(C)S(=O)(=O)N(SC(F)(Cl)Cl)c1ccccc1			0	1
CCCCC(=C)C=O			1	
C1O[C@@H]1c2ccc3ccccc3c2			1	
[O-]N=O				0
COc1ccc(cc1)C2=CC(=O)c3		0		
COc1cc(ccc1N)[N+](=O)[O-]			1	
CN1C(=C(O)c2ccccc2S1(=O)=O)C(=O)Nc3ccccc3				1
C1N2CN3CN(CN1C3)C2			1	0
[O-][N+](=O)c1ccc(I)c(c1)[N+](=O)[O-]			1	
Oc1cccc2C(=O)c3ccccc3C(=O)c12			1	
C[C@@H](Cc	1	0		
COc1cc(O)c2C(=O)c3c(O)cc(C)cc3Cc2c1			1	
CCCCOC(=O)c1ccccc1C(=O)OCc2ccccc2			0	0
NC(=O)CCC1I	0	0		
BrCc1cccc(CBr)c1			0	
CNP(=S)(N1CC1)N2CC2			1	
OC1CCCc2ccccc12				0
ClCC(=O)c1ccccc1			0	0
C[C@@H]1CC2(OC3C[C@@]4(C)C5=CC[C@H]6C(C)(C				1
Cc1cc2CCCc2c3ccc4C(O)C(O)C5OC5c4c1			1	
COC1=C(Oc2cc(O)cc(O)c2(		0		
OC(=O)[C@@H](Cl)Br			1	
C[C@@]12CCC3[C@@](CCC4[C@@]3(C			0	
CC12CCC(=O)CC1=C3CC3C4C2CCC5(C)C4			0	
COC(=O)C1=C(C)NC(=C(C1c2ccccc2)N(=O)=O)C(=O)C				1
C=CC1CC2CC1C=C2			0	
Cc1ccc(cc1)C(=O)CN2C(=N		0		
CCCCCC(=O)OCCc1ccccc1				0
COC(=O)c1cc	0	0	0	0
NC(=O)COc1	0			
CCCOc1ccccc1C2=Nc3[nH]		0		0
CCCCOCCOCCOC(=O)CCCC(=O)OCCOCCOCCOCCO				0

Cc1cc(C)c(cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-	1		
C[C@@H]1O[C@@H](O[C	0		
CCCC[S+](=N)([O-])CCC(N)	0		
CCC(=C)C(=O	0	0	0
CO[C@]1(NC	0	0	0
OCCN(CCO)c1nc(nc2ccccc12)c3ccc(s3)[f	1		
OCCNCCCOc1cccc(Cl)c1Cl	1		
O=C1OC(=O)c2ccccc12	0	0	
Nc1ccc(cc1)S(=O)(=O)[O-]			0
OCNC(=O)N(CO)C1N(CO)C(=O)N(CO)C1=O			0
C[C@@H]1CC[C@H]([C@@H](O)C1)C(=C)C			0
CN(CCO[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1		
C1CCN(CCCl)[P@]1(=O)NCCCO1	1		
CN(C)CCCN=C1c2ccccc2Nc3ccc(cc13)N(:	1		
Cc1ccc(c(C)c1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-	1		
CCCNC(=O)\C=C\c1oc(cc1)[N+](=O)[O-]	1		
C\C\1=C/CC[C@@]2(C)O(	0		
O=C1c2ccccc2c3cccc4cccc1c34	1		
CN1N=C(S/C/1=N\C(=O)C)S(=O)(=O)N			0
Nc1c(O)cccc1C(=O)O	0		
C=CC#N	1		0
OC1CCCCC1N	0	0	
CCC(C)C(=O)C			0
Oc1cc(O)c2C(=O)c3c(O)c4C5C=COC5Oc4	1		
[O-][N+](=O)c1cc(cs1)C(=O)Nc2ccccc2	1		
COc1cc(C=CC)ccc1O			0
NC(C(=O)O)c	0	0	
CN(C)C1C2CC3C(=C(O)C2(O)C(=O)C(=C1	0		
CC(CO)(CO)C(=O)O			0
C1C=Cc2c1ccc3ccc4ccccc4c23	1		
CC(C)(C)c1cc(C=C(C#N)C#N	0		
O=NN1CC(=O)NC1=O	1		
CCOC(=O)C1OC1C(=O)NC(CC(C)C)C(=O)I	0		
OC(=O)[C@F	0	0	
OC(=O)c1ccc2cc(O)ccc2c1			0
CC(=O)Nc1ccc(cc1)C(=O)CCl	1		0
CCCC(=O)Nc1ncnc2c1ncn2[C@@H]3O[C@@H]4COP(			0
CC1CCc2nccnc12			0
c1ccsc1	0		0
FC(C(F)(F)F)C(F)(F)F	0		
CCCCN(N=O)C(=N)NN(=O)=O	1		0
NC(=O)Nc1ccccc1			0
Nc1ccc2c(N)c3ccccc3nc2c1	1		

CCCCCCCCCCCCOC(=O)c1ccc(O)cc1				1
O=C1C(CCS(=	0			0
Clc1ccc(cc1)(	1	0	0	1
CC(C)[C@]1(CCc2ccc(N)cc2)CC(=C(Sc3cc(C)c(CO)cc3C				0
NN(Cc1ccccc1)Cc2ccccc2				0
Oc1c(N=Nc2ccc(c3ccccc23)S(=O)(=O)O)				0
CC(=CCC\C(=C/COc1c2C=C	0			
CC(NC(=O)COc1ccc(Cl)cc1Cl)C(=O)O				0
COc1cc2c(CCN[C@]23CSC4[C@H]5[C@				1
CC1CO1				1
C[C@@H](O)CBr				1
CCc1cc(O)cc2c3CCO[C@@](CC)(CC(=O)				1
CCCCCCCCCCCCOCCOCCOCCOCCOCCOCC				0
CCN(CC)Cc1nccn1c2ccc(cc2C(=O)c3ccccc3Cl)N(=O)=O				0
C1=Cc2cc3ccccc3c4cccc1c24				1
CC1COC(=O)O1				0
OC[C@H]1O[C@@H]2O[C	0			0
ClC(=O)C(Cl)(Cl)Cl				0
OC1Cc2c(O)cc(O)cc2OC1c:	0			
CC(=O)OCC(=O)[C@@]1(O)CC[C@H]2[C@@H]3CCCC4				0
Nc1ccccc1C(=O)OC2CCCC2				0
CS(=O)(=O)C	0			0
CCCCCCC\C=C(	0	0		
Nc1ccc(Oc2cccc(Oc3ccc(N)cc3)c2)cc1				1
Nc1ccc(cc1)N=Nc2ccccc2				1
CCC(C)C1NC(	0	0		
Cc1ccc2cc3c(ccc4ccccc34)c5C(=O)Cc1c2				1
C=CCCC1CO1				1
COC(=O)CCC(	0	0		0
C1CCN2C[C@@H]3C[C@@	0			
CC1(C)C(=O)N=C2C1=C(O)				0
OC(=O)c1ccc(CCC(=O)CC#N)cc1				1
OC(=O)CCNC	0	0		
N[S+](=O)([O-])c1ccc(Cl)c				0
NC(=O)N1c2	0	0		0
CCN(CC)CCCN				0
CN([C@H](Cc1ccc(cc1)c2c				0
CC(=C)C1CCC(C)(O)CC1				0
COP(=O)(OC)OC(Br)C(Cl)(Cl)Br				0
CC(C)OC[C@H]1CO1				1
OC[C@@H]1O[C@H]2[C@	0			
COc1ccnc(CS(=O)c2nc3ccc(OC(F)F)cc3[nH]2)c1OC				0
Cc1ccc(C=Cc2ccc(cc2)N(=O)=O)cc1				1

CC(C)(CO)C(O)C(=O)NCCC(=O)NCCSSCCNC(=O)CCNC(=O)N	0		
O=N(=O)c1cc2cccc3c4ccccc4c5cccc1c5c	1		
CCCCS(=O)(=O)N[C@@H](Cc1ccc(OCCCC2CCNCC2)c1)C	0		
ClC1(Cl)[C@@]2(Cl)[C@]3(Cl)[C@@]4(Cl)C	0		
O1C2C=Cc3c(cc4ccc5cccc6ccc3c4c56)C1	1		
CN1N=CC(=C(Br)C1=O)[S+]	0		
O=C1C=Cc2ccc3C=CC(=O)c4ccc1c2c34	1		
CCCCCON=O	1		0
CC(C)CN1C(=O)N(C)C(=O)C1	0		
CCOC(=O)CNC(=O)C=[N+]=[N-]	1		
C[C@@H](C)C	0	0	
COc1c(O[C@H]2C=CC2)C	0	0	
N[C@@H]([C@H](OCc1ccc2ccccc12)C)C	0		
COc1cc(\C=C)C	1	0	1
CCCCCCCCC	0	0	0
CC(=CCCC(C)(OC(=O)c1ccccc1)C=C)C			1
Nc1cc(Cl)c(N=C2NCCN2)c1	0		
CC1(CO1)C=C	0		
Cn1c(N)nc2ccc3ccccc3cc12	1		
Nc1nc(cs1)c2cc(cs2)[N+](=O)[O-]	1		
N[C@H](CCC)C	0	0	
CCCCCCCCCCC[N+](C)(C)Cc1ccccc1			1
Cc1ccc2nsc(NC(=O)C(Cl)(Cl)Cl)c2c1	1		
CC(=O)N(O)c1ccc(Br)cc1	0		
Nc1nc(N)c(nc1)C	1	0	
O=N(=O)c1cccc2c3cccc4cccc(c12)c34	1		
CCc1nc2c(ccc3ccc4ccc(O)cc4c23)[nH]1	1		
[O-][N+](=O)c1cccc2oc3ccccc3c12	1		
[O-][N+](=O)c1ccc2c(ccc3ccc(cc23)[N+](=O)C)C	1		
CC1=NCCc2c1[nH]c3cc(O)c1	0	0	
CCCC[C@@H](CC)COC(=O)c1ccc(C(=O)C)cc1	0		
FC(F)(F)c1ccc(F)cc1	0	0	0
O=C1CCCCCO1	0		0
Fc1c(F)c(F)c(Cl)c(F)c1F	0		
O=N(=O)c1ccc(C=Cc2cccc(c2)C#N)cc1	1		
CCOC(=O)C[n+](c1ccc2ccccc12)C	0		
C[C@@H]1[C@H](O)CCC2=CC(=O)[C@H](O)C1	1		
c1ccc(cc1)c2nc(c3ccccc3)c([nH]2)c4ccccc4	1		
CC(C)[N+](C)C	0	0	0
CC(=O)OC1CCC2(C)C3CCC4	0		
Nc1ccc2cc(ccc2c1)S(=O)(=O)O			0
O=C1C=C(Oc2c1ccc3ccccc3)C	0		
CCCCCNc1snc2ccccc12	0		

CC\C=C\CCO				0
CCCCNC(=N)I	0	0		0
ClC(Br)C#N			1	
CCC(C)[C@@	0	0		
CN(C)CCCNc1c2cccc2nc3c(cccc13)N(=C			1	
CC(C)(C)c1cc(CO)cc(c1O)C(C)(C)C				1
CC(=O)[C@@H]1[C@@H]:		0		
BrCC(=O)NCc1cccc1			1	
OC[C@@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@			0	0
CCN1C(=O)C-	0	0		
C(Cc1cccc1)c2cccc2				0
CCC(=O)N1C(	0	0		
OC1C=Cc2cc3ccc(cc3cc2C1O)[N+](=O)[C			1	
O=N(=O)c1cccc1N(=O)=O			1	1
Cc1cccc1N=	0	0	1	0
CCCCCCCC\C=C/CCCCCCCCOCCO				1
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O[C@@H]1[C@@H](O)[C@				0
CCCCC(C)OC(=O)COc1ccc(Cl)c2ccnc12				0
NC(=O)n1c(C	0	0		1
CCN(CC)CCNC(=O)c1cc(ccc		0		
O=C(Nc1ccc(cc1)N(=O)=O)c2csc(c2)N(=			1	
CCCCCCCCCl				0
Oc1c(Br)cc(Br)cc1C(=O)Nc		0	0	1
CN1N(C(=O)C(=C1C)N=O)c2cccc2			1	
COc1cccc2C(=O)c3cccc3C(=O)c12			1	
COc1ccc(C(=O)c2ccc(C)cc2		0		0
NCCCCCN[S+](=O)([O-])c		0		
CN1CCc2cc3OCOc3c4c5cccc5C(O)C1c24			1	
Oc1cc(ccc1N(=O)=O)N(=O)=O			1	
COc1cc2c(CC	0	0	0	
N[C@@H]([C@H])(Cc1cccc		0		
Nc1ncnc2c1nc(Br)n2C3OC		0		
COc1cccc1[N+](=O)[O-]			1	
Oc1cc(C=C(C;	0			
COC1=C(OC)(	0	0		
c1ccc2c(c1)cc3ccc4cc5cccc5c6ccc2c3c4			1	
CCS(=O)(=O)CCSP(=O)(OC)OC				0
OC\C=C(\Cl)/C(=O)O)\C(Cl)Cl			1	
Clc1ccc(Cl)c(Cl)c1			0	0
CCCN(CCC)C1Cc2cc(OC)c(C		0		
Fc1ccc(cc1N(=O)=O)N=[N+]=[N-]			1	
CC(C)OC(=O)C(=C)C			0	
CCCCC1CCC(O)CC1				0



Cc1c2ccccc2cc3ccccc13	1		
Nc1ccc2[nH]c3ccccc3c2c1	1		
CS(=O)(=O)N1C2C1c3ccccc3c4ccccc24	1		
CCCN1C(=O)Nc2nc([nH]c2	0		
O=N(=O)c1cnc2c(c1)nc3cccn23	1		
CC(CN(C)C)CN1c2ccccc2S(=O)(=O)c3ccccc13			0
OC[C@H]1O	0	0	
Cc1cccn2c1nc3c(C)c(cnc23)[N+](=O)[O-	1		
OCC1OC(C(O)C(O)C1O)c2ccc3C(=O)c4cc	1		
c1ccc2c(c1)c3ccccc3c4cc5cnccc5cc24	1		
CNC(=S)NC			0
COc1ccc(cc1)	0	0	
COC(=O)c1ccccc1C(=O)OC	0		0
Cc1c2ccccc2c([C@@H]3CO3)c4ccccc14	1		
CC(C)C1=C(C)	0	0	0
COc1cc(O)ccc1Nc2c3ccccc3nc4ccccc24	1		
CC(CNC(=O)c	0	0	0
CC1(C)CC(N)CC(C)(CN)C1	0		0
Cc1cc(C)c(N=Nc2cc(c3ccccc3c2O)S(=O)(	0		
COc1ccc(cc1	0	0	0
N[S+](=O)([O-])c1ccc(NC(	0		
Cc1cc2ccccc2c3cc4C(O)C(O)C=Cc4cc13	1		
CCc1ccccc1N=C(O)c2csc(c2)N(=O)=O	1		
C[C@H]1CCCC(=O)CCC\C=C/c2cc(O)cc(C	0		
CN(C)c1ccc(cc1)C2CC3(C)C(CCC3(O)\C=(	0		
CN1CCN(CCC	1		
NC(CO)C(=O)O	0		
N[C@@H](COC(=O)C=[N+]=[N-])C(=O)O			0
CN1CC[C@@]2(Cc3nc4ccc	1		
Cc1cc2c3ccccc3cc4ccc5cccc1c5c24	1		
Cc1cc(c(C)c2c3cc(O)ccc3[nH]c12)[N+](=	1		
COCCNC(=O)COc1ccc(OCC	0		
[O-][N+](=O)C1CCCC1	1		
Clc1cccc(Nc2nnc(c3ccccc3	0		
COc1c2OC(=	0	0	0
CCCCOC(=O)COC(=O)c1ccccc1C(=O)OCCCC			0
CCCc1nc(C)c2C(=O)N=C(N	0		
NC(=O)Nc1ccc(Cl)cc1			0
CN(C)C(=O)C(Cl)C(=O)C			0
CCCN1C(=O)I	1		
CNC(=O)NC(	0	0	
CCCCOCCCC	0		0
COc1ccc2c(cccc2c1C(F)(F)F)C(=S)N(C)CC(=O)O			0

Oc1c(l)cc(c2cccnc12)[S+](:	0		
O=C1C(=C1c2	0	0	1
CSC(C)(C)\C=N/O		0	0
OCC1OC(C(O)C1O)n2cnc3c2ncn4ccnc34		0	
C[C@H](CCO)CCCC(=C)C			0
ClCc1ccncc1		0	
OC1C(O)c2ccc(c3c4ccccc4c5cccc1c5c23)		1	
OS(=O)(=O)c1ccc(cc1)N2N=C(CC2=O)C(=O)[O-]			0
C[C@H](NCCc1ccc(O)cc1)[C@H](O)c2ccc(O)cc2			0
COC(=O)C(C)N(C(=O)c1occc1)c2c(C)cccc2C			0
C(Oc1ccccc1C2CC2)C3=NC		0	0
COc1ccc2[nH]c(nc2c1)[S+]		0	
NC(=O)\C(=C\c1ccc(O)c(O		0	
O=N(=O)c1cc2cccc3c4ccccc4c(c1N(=O)=		1	
O=Nc1ccc(Oc2ccccc2)cc1		1	
Cc1cc2c(cc1C	0	0	1
CC1CN(CC(C)N1C(=O)c2ccccc2)N=O		0	
Cc1cc(Cn2cnc3CN([C@@H		0	
O=Nc1ccc2ccc3c4CCCCc4cc5ccc1c2c35		1	
COc1ccc2c(cc3N(C)C(=O)C(=O)c4cc5OC(		1	
CC=Cc1ccc2OCOC2c1			0
CN1C2CCC1C	1	1	
[O-]Cl	0	0	0
CC(=O)N(O)c1ccccc1C			1
[O-][S+](=O)(N1CCCNCC1)		1	
CC(=CCC\C(=C\C\C\C(=C\C		0	0
CSCC[C@H](NC(=O)[C@H](Cc1ccc(OS(=O)(=O)O)cc1)			0
COC(OC)C=C(C)CCC=C(C)C			0
CC(=O)N[C@H]([C@@H](O)CC(=O)C(=O)O)[C@@H](			0
Clc1cc2NC(=O)Cc2cc1CCN3CCN(CC3)c4nsc5ccccc45			0
ON=C1CCCCC1		1	0
COC(=O)[C@]12CCC(C)(C)C[C@H]1[C@H]3C(=O)C=C4			1
Cc1c(C)c2OC	0		1
NC1=NC(=O)c2c(CCc3ccc(cc3)C(=O)N[C@@H](CCC(=			0
Cc1ccc(N)cc1N=Nc2cc(N)ccc2C		1	
[O-]S(=O)(=O)c1cccc2ccccc12			0
C\C=C\C=C\C	0	0	0
CC(C(=O)O)c:	0	0	0
CC(=O)OC1CCC2(C)C3CCC4		1	
[O-]C(=O)C1=C(C[n+])2cccc		0	
CCCCC1CCCCC(=O)O1			0
Oc1ccc(O)c(c1)S(=O)(=O)[O-]			0
CN1Cc2ccccc2[C@H]3[C@		0	

CCCCCCCCCCCCCO				0
C1CCC(CC1)N=C=NC2CCCCC2			0	1
OCC(O)C(O)C	0	0		
CCCCCCCCCCCCC(=O)ON(C(=O)C)c1ccc:			1	
[O-][N+](=O)c1ccc(C=NN2N=Nc3c([nH]			1	
Cc1ccc(NN=NCc2ccc(cc2)N(=O)=O)cc1			1	
CCC(=O)OCCOc1ccccc1				0
OCCNC(=O)N(CCCl)N=O			1	
CC(=O)OCC=C			1	
CCC(=O)OCc1ccccc1[N+](=O)[O-]			0	
Fc1ccc(cc1)C	0	0		0
OC(CN=[N+]=[N-])CN=[N+]=[N-]			1	
CCC[C@@H](C)C1(CC=C)C(=O)NC(=O)NC1=O				0
Oc1ccc(Cn2c:	0	0		
CC(=CC1C(C=:	0	0		
Nc1cc(Cl)cc(Cl)c1			0	0
Cc1ccccc(C)c1	0	0		
FC(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)CCI				0
CC(C)(C)NC(=O)C=C				0
CN(CC(=O)COC(=O)C)N=O			1	
NC1=NC(=O)N(CC(O)CN=N#N)C=C1			1	
CCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCC(CC)CCCC				0
CC[C@H]1OC(=O)[C@H](C)[C@@H](O[C@H]2C[C@C				0
CC(C)[C@@]12CC[C@@](C)(O1)[C@H](C2)OCc3ccccc				0
CCCCCOC(=O)CCCCC				0
CCCCN(N=O)C(=O)N			1	
CCN(CC)CCCC	1	1	1	
CCCCCCCCC(C	0	0		0
O\N=C\C(=O)Nc1ccccc1			0	
N[C@@H](CCC(=O)N[C@		0		0
CC[C@]1(O)C	0			
NC[C@@H]1O[C@H](O[C@H]2[C@@H](O)[C@H](O				0
NC(=N)NC(=I	0	0		0
CC12CCC3C(C	0	1		
CC(C)CC(=O)O				0
CC(=O)[C@H	0			
CC(=O)NC1[C	0	0		
Cc1ccc(cc1N)C(=O)N				0
Nc1cccc2ccccc12			1	0
CCCOC(=O)c1	0	0		0
COc1ccc(cc1)C(=O)c2c(C)n		0		
COC(=O)c1cc2OCOc2c3c4ccccc(OC)c4cc(			1	
NCC#Cc1cccc	0			

<chem>COc1ccc(COC=O)cc1</chem>			0
<chem>CN1C(C(=O)N</chem>	0		
<chem>OC1COC2C(COC12)ON(=O)=O</chem>		0	
<chem>CN1CCC[C@@H]1Cc2c[nH]</chem>	1		
<chem>OC1C(Oc2c3ccccc3c4ccc5cccc6ccc2c4c5</chem>		0	
<chem>CC1C(C)(C)C2=C(C(=O)CCC2)C1(C)C</chem>		0	0
<chem>CCCCN(CC(O)c1ccc(O)cc1)N=O</chem>		0	
<chem>CC(=O)NC1SCCC1=O</chem>	0		
<chem>Nc1ccc(Cc2ccc(N=O)c(Cl)c2)cc1Cl</chem>		0	
<chem>NP(=O)(N)N(</chem>	0	0	0
<chem>C(CCOC[C@H]1CO1)COC[C@H]2CO2</chem>		1	
<chem>Nc1ncnc2c1r</chem>	0	0	
<chem>COc1cc2C=CC(=O)Oc2cc1C</chem>		0	
<chem>Nc1cc(N)c(cc1N=Nc2ccc(cc2)S(=O)(=O)</chem>		1	
<chem>CC1Nc2cc(Cl)c(cc2C(=O)N:</chem>		0	
<chem>CCOc1ccccc1N(=O)=O</chem>		1	
<chem>O=N(=O)c1ccc2c(c1)c3cc4ccccc4c5cccc2</chem>		1	
<chem>Nc1ccc(cc1)C</chem>	0	0	0
<chem>COC(=O)\C(=C\c1oc(Br)cc1)\[N+](=O)[C</chem>		0	
<chem>CC1=CN(C2CC(N=N#N)C(CO)O2)C(=O)N</chem>		1	
<chem>CC(Cc1ccccc1)NC(=O)N[S+</chem>		0	
<chem>CC(C)CC1NC(=O)C(C)N(C)C(=O)CNC(=O)</chem>		0	
<chem>CCN(CC)c1ccccc1</chem>		0	0
<chem>Nc1ccc2sncc2c1</chem>		1	
<chem>CC(=CC(=O)C=C(C)C)C</chem>			0
<chem>C[C@](Cc1ccc(O)c(O)c1)(N</chem>	0		
<chem>Cc1ccc2ccc3ccc(C)cc3c2c1</chem>		1	
<chem>Nn1nnc2c3ccccc3nc2c1O</chem>		1	
<chem>OC(=O)c1cccc(n1)C(=O)O</chem>			0
<chem>O=N(=O)c1ccc2c3cc4ccccc4cc3c5cccc1c</chem>		1	
<chem>CC(C)(c1cc(Br)c(OCCO)c(Br)c1)c2cc(Br)c(OCCO)c(Br)c</chem>			1
<chem>CCCCCOC(=O)C(C)CC</chem>			0
<chem>CC1=C(CCC(=O)[O-])c2cc3[</chem>		0	
<chem>CCCCC(C)O</chem>			0
<chem>CCC(=O)C=C</chem>		1	
<chem>O=S1(=O)CCCC1</chem>		0	0
<chem>CC(C)[N+]1(C</chem>	0	0	
<chem>O=N(=O)c1oc(C=Nn2cccn2)cc1</chem>		1	
<chem>S=C=Nc1ccccc1</chem>			1
<chem>CCC(O)OCCCO</chem>			0
<chem>COc1c(Cl)ccc2Oc3cc4OC5OC=CC5c4c(O</chem>		1	
<chem>CCCOP(=S)(OCCC)OP(=S)(OCCC)OCCC</chem>		0	
<chem>CCCCN(CC(=O)CC)N=O</chem>		1	

CC(OC(=O)C)OC(=O)C			0	
CC(=O)c1cc(cc2c1CCC2(C)C)C(C)(C)C	0		1	
Oc1ccc(cc1)C	0	0		
Cc1cnc2c(C)c(C)c3c(nc(N)n3C)c2n1			1	
C[C@](N)(CCP(=O)(O)O)C		0		
Cc1cc2ncccc2c3nc(N)n(C)c13			1	
Oc1nnc(O)c2cc(ccc12)N(=O)=O			1	
Oc1[nH]cnc2nccc12			0	
CN1c2cccc2C(=O)c3c(O)cc4OC(Cc4c13)			1	
Sc1c(Cl)c(Cl)c(Cl)c(Cl)c1Cl			0	
COP(=O)(OC)O\C(=C/Br)\c1ccc(Cl)cc1Cl			0	
CC(C)C1(NC(=O)C2CC3C(Cc4c[nH]c5cccc			0	
O=C1CCc2c3CCCc3c4c(ccc5cccc45)c12			0	
CN[C@H]1[C	0	0		0
CC(Cc1ccc(O)	0	0		0
CC(=CCC\C(=C/CC\C(=C/CC\C=C(\C)/CC\			0	
OC1C(O)c2c(Br)c3cccc3cc2c4cccc14			0	
C1C[C@@H]	0	0		
CN(C)C			0	0
[O-][N+](=O)c1cccc2cccc12			1	
OCCCC1CCCCC1				0
CC(N)COc1c(	0	0		0
[O-][N+](=O)c1cccc1COC(=O)c2cccc2			0	
CC(=O)OC1C(	0	0		
CCCCCCCCCCCCc1cccc1O				1
OC(=O)c1ccc(\C=C\c2oc(cc2)[N+](=O)[C			1	
[N-]=[N+]=C1C=NC(=O)NC1=O			1	
CCOC(=N)CC(=O)OCC				0
CCN1C=C(C(=	0	0	1	0
COc1cnc(NS(	0			0
CC(C)c1nc(nc	1			
COc1cc(ccc1N=C=O)c2ccc(N=C=O)c(OC)			1	0
CN1C(=NC(=O)C(C)(C2=CCCC2)C1=O)O				0
Cc1cccc2nc3c(ccc4cccc34)cc12			1	
O=C1c2cccc	0	0	1	1
OCc1ccc2cccc3c4cccc4c1c23			0	
Cc1ccc2[nH]c3c(C)ccc(C)c3c2c1			1	
COc1ccc(cc1OC)[C@@H]2CC(=O)c3c(O)cc(O[C@@H]				0
CC(CN(C)C)CN1c2cccc2CC		1		
Cc1cccc2cc(ccc12)[N+](=O)[O-]			1	
CCCCCCCCC(	0	0		0
C=CCN1CCN(CC1)c2nc3ccc		0		
COCCOCCOCCO				0

CC(=CCCC(=O)C)C			0
C(COc1ccc2OCOc2c1)CN3C	1		
O1C2C1c3c(ccc4cccc34)c5cccc25		1	
CC(=O)Nc1ccc2c3cc(O)ccc3c4cccc1c24		1	
CC(C)(C)NCC(	0		
CC(=C[C@H]1[C@H](C(=O)OCc2oc(CC#C		1	
COc1ccc2cccc(N3CCN(CCN		1	
CNCCNS(=O)	0		
CC(C)C[C@@	0	0	0
CC(=O)OCc1cccc(c1)[N+](=O)[O-]		0	
CC(=O)O[C@	0	1	
CNc1ccc2ncccc2c1N		0	
Oc1c(cc(cc1[N+](=O)[O-])C(F)(F)F)[N+]		0	
OCc1ccc(cc1)C(F)(F)F		0	
C[C@]12CC[C@H](O)C[C@		1	
CC1=NN(C(=O)C1)c2ccc(cc2)C(=O)O			0
O=C(OC[C@H]1CO1)c2cccc(c2)C(=O)OC		1	
ICI		0	
Nc1c2cccc2nc3ccc(l)cc13		1	
Clc1nc2cccc2nc1Cl		0	
CN1CCCC1c2cccnc2		0	
CCCCCCC(O)CC=CCCCCCCC(=O)O		0	
CC(=O)CN(CC(=O)C)N=O		1	0
[O-][N+](=O)c1ccc(cc1)C(=O)[C@H]2O[		1	
ClCc1cc2cc3cccc3c4ccc5cccc1c5c24		1	
ClCCN(CCCl)c1ccc2oc(cc2c1)N(=O)=O		1	
Cc1cc(C)c(O)c(C)c1			0
CC(C)c1ccc2c	0	0	
Cc1cc2c(nc(N)n2C)c3ncc(nc13)c4cccc4		1	
[O-][N+](=O)c1ccc2ncccc2c1		1	
CCCC(=O)Nc1snc2ccc(Cl)cc12		0	
O=C(C1OC1c2cccc2)c3cccc3		1	
Nc1ccc2cc3cccc3nc2c1		1	
[O-][N+](=O)c1cccc2cccnc12		1	
CCCCCOC(=O)C=C		0	0
CC[C@@H]1	0	0	
c1ccc(nc1)c2	0	0	1 0
Oc1ccc(O)c2cccc12		1	
N=C1CCCCN1			0
Cc1cncc(C=C	0	0	
CCN[C@@H]	0	0	
N#CC1(CCCCC1)N=NC2(CCCCC2)C#N			0
CC(C)(Cl)Cl		0	0

CN[C@@H]1[C@@H](O)[C@@H](O[C@H]2[C@H](N			0
COc1ccc(CC=C)cc1		0	0
Oc1ccc2C(=O)c3ccccc3C(=O)c2c1			1
CC[C@]1(O)C[C@@H](O)c2c(O)c3C(=O)		1	
[O-]c1ccc(cc1)N(=O)=O			1
NCCCCCNS(	1		
NCC1CCC(CC:	0	0	
Nc1ncc(s1)N(=O)=O			1
CC(=O)NC1[C	0	0	
O=N(=O)c1cccc(c1)C#N		1	
CN(C)S(=O)(=	0		
Nc1ccc(cc1C(=O)O)S(=O)(=O)O		0	
O=NN1CCCC1c2cccn2		1	
OC(c1ccc(Cl)cc1)(c2ccc(Cl)cc2)C(Cl)(Cl)C		0	1
Oc1ccc(Cl)cc1C2CCCC2			1
CC[C@]1(O)C(=O)OCC2=C:		0	
CCc1cc(cc(CC)c1N)c2ccccc2		0	
CC(=O)OCC(=O)[C@@]1(O)[C@@H](C[C@H]2[C@@			0
CC(CN(C)C)Cl	1	1	
NC(Cc1cccc(c1)c2ccccc2CP		0	
CC=[N+](O)[O-]		0	
Cc1cn(NC(=O)c2cnc(nc2C)c3cccn3)c4ccc(F)cc14			0
Oc1c([nH]c2ccccc12)C3=Nc4ccccc4C3=C		1	
Oc1cc2c(ccc3ccc4cccc1c4c23)[N+](=O)[		1	
CN(C)C(C)(C)CO			0
CCc1cccc(CC)c1NC(=O)CCl		1	
CCc1c2ccccc2cc3ccc4ccccc4c13		0	
COc1ccc2c(c:	1		0
CC1(C)SC2C(NC(=O)COc3ccccc3)C(=O)N		0	
CC1=NN(C(=O	0	0	1
[O-][N+](=O)c1ccc(OC[C@H]2CO2)cc1		1	
NCCS(=O)O	0		
CN(C)C1=C(C	0	0	1
CCN(CC)c1ncnc2c1ncn2[C(		0	
CC(=O)c1oc(c(Cl)c1Cl)N(=O)=O		1	
OC(=O)CNCC(=O)O			0
Nc1ccc(N)c(Cl)c1		1	1
N[S+](=O)([O-])c1cc2c(NC		0	
CC(=O)OC1Cc2cc3cccc4ccc5ccc1c2c5c34		1	
COc1cccc(c1)C(=O)ON(OCc2ccccc2)C(=O		1	
CCC(=O)O[C@@H]1CC(=O)O[C@H](C)CC=CC=C[C@H]			0
CCC1OC1c2ccccc2		0	
BrCC(Br)COC(=O)C=C		1	

Oc1ccc(cc1)N(=O)=O	0	1	
CCC1(Cc2ccccc2O1)c3ncc[i	0		
Clc1ccc2Oc3c	1	1	
COc1cc(CC(C)C)cc(OC)c1OC			0
CN(C)c1ccc(cc1)N=Nc2ccc(cc2)N(C)C	0		
NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(=O)O	0		0
Cc1ccc2cc3c(ccc4ccccc34)c5C(O)Cc1c25	1		
COC(=O)[C@]12O[C@@]1(C)[C@@H](C	1		
CCCCCCC#N			0
O=C1Oc2c3CCCN4CCc(cc2C=C1)c34	1		
C[C@]12CC[C@H]3C(=CCc4cc(O)ccc34)[C@@H]1CCC			1
BrC[C@@H](Br)[C@@H]1CC[C@@H](B	0		
[O-][N+](=O)c1ccc2c3cc4ccccc4cc3c5cc	1		
CCCCCCCNC	1		1
OC(=O)C(Cc1	0	0	0
C[C@@]12[C@H]3C[C@H](C=C3)[C@@H]1C(=O)OC2			0
CCNc1cc(O)ccc1C	1		
O=C1CCCCCCCCCCCCCO1	0		0
Oc1ccc2OCOc2c1	0		0
N[S+](=O)([O-])c1cc2c(NC	0		
CC(=O)C1=C(C(=O)C(=C1)C(C)(C)C(C)(C	0		
CCc1cc(O)cc2c3CCOC(CC)(CC(=O)O)c3[n	1		
C1Cc2c(ccc3ccnc23)C4OC14	0		
O=N(=O)C(N(=O)=O)(N(=O)=O)N(=O)=O	1		
ClCc1cnc(Cl)nc1Cl	1		
CC(=Nc1ccc(cc1)N(=O)=O)O	0		
CCN(C=O)N=O	1		
COc1ccc(Cc2nnc2C3(Cc	0		
CCCC(=O)Nc1snc2ccccc12	0		
NC1=NC(=S)NN1			0
CN(C)CCNC(=O)c1cccc2cc3ccccc3nc12	1		
COc1ccccc1C2=CC(=O)c3cc	0		
C\C=C\C1=C(	0	0	
O=C1C(C(=O)c2ccccc12)c3ccc4ccccc4n3	1		1
CCCCCOC(=O)c1ccc(O)cc1			1
CC(=O)NC(Cc	0	0	0
CNC(=O)[C@H]1O[C@H]([	0		
Nc1c(cc(c2cc	0	0	0
O=C=Nc1ccc(cc1)N=C=O	0		
C1CCNCC1			0
O=N(=O)c1cc2ccc3cc4ccccc4c5ccc(c1)c2	1		
Clc1ccncc1	0		
COc1c(c(C)c(cc1C(C)(C)C)N(=O)=O)N(=O)=O			1



ONc1ccc(Oc2ccccc2)cc1	1		
CN1C[C@@H](c2ccccc2)c3cccc(N)c3C1	0		
CC(C)NCC(O)COc1ccc(CCO	0		0
COC(=O)CCCC(=O)OC	0		0
O=N(=O)c1ccc2ccc3c4ccccc4c(c5ccc1c2	1		
CS(=O)(=O)c:	0		
O=C1c2cccc3ccc4ccc5cccc1c5c4c23	0		
O1[C@@H]2C=CC=C[C@H]12	1		
Oc1ccccc1S(=O)(=O)O			0
C1CN2CC(N=C2S1)c3ccccc:	0		
NC(C(=O)N[C	0	0	
Cc1ccc(cc1)S(=O)(=O)OCc2ccccc2	0		
N[C@@H](C	0	0	
Cn1cc(C2=C(C(=O)NC2=O)c3cn(C4CCN(Cc5ccccc5)CC4			0
Cc1c(cccc1N=C=O)N=C=O	1		0
CC(CCc1ccc2OCOc2c1)NN			0
o1ccc2c1cc3ccc4cccc5ccc2c3c45	1		
CCCCSCCCC			0
CCOP(=S)(OCC)SCSC(C)(C)C	0		
Nc1cc(ccc1C(=O)O)[N+](=O)[O-]	1		
OC(=O)C1=C	0	0	0
OC1C(O)c2cccc3ccc4cccc1c4c23	0		
CC\C=C\C=C\C=C\C=C\C=C\C=C\OC	1		
CN(C)CCc1cc:	0	0	0
COc1cc(cc(OC)c1OC)[C@H	1		
Nn1c2ccccc2c3cnccc13	1		
O=C1C(C(=O)	0	0	0
O=C1CN(CCCN2CC(=O)NC(=O)C2)CC(=O	0		
CC\C=C/C#N	0		
CN(COC(=O)C)N(=O)=O	1		
O1[C@@H]2[C@H]1c3c4ccccc4cc5c6cc	1		
COc1cccc2C(=O)c3c(O)c4C[C@](O)(C[C(	1		
Nc1ccc2cc(c(N=Nc3ccc(cc3)c4ccc(cc4)N	1		
Cc1ccnc(NS(:	0		0
CN1CCc2cccc	0	0	
CN1CC(c2ccccc2)c3cccc(N)	1		0
CC(=C)C(=O)OCCOP(=O)(O)O			0
C[C@@H]1C[C@H]2[C@@H]3CCC4=CC(=O)C=C[C@]4	1		
O=C1NC(=S)NC=C1			0
Nc1cc(c(N)cc1Cl)N(=O)=O	1		
C=C[C@H]1CCC=CC1	0		
CCC(Oc1ccccc:	0	0	
O=C(OCCCCCOC(=O)c1ccccc1)c2ccccc2			0

COC(=O)c1occc1	0	
CCNCC(O)c1cccc(O)c1		0
ClCC(=O)Nc1snc2ccc(Cl)cc12	1	
OC(=O)CCc1c	0	0
Clc1cccc(Cl)n1	0	
COc1c(OCC2OC2(C)C)ccc3c(OC)c4ccoc4	0	
Nc1nc(N)c2nc(CC(CC#C)c3ccc(cc3)C(=O)N[C@@H](C		0
O=N(=O)c1oc2c(c1)cc3ccc4cccc5ccc2c3	1	
CCC(=O)[C@	0	0
CC(N)Cc1ccc	0	0
COCCCC\C(=N/OCCN)\c1c	1	
FC(=C(F)Cl)F	0	
C1CCCNCC1	0	0
COc1cc2OC3OC=CC3c2c4OC(=O)C5=C(C	1	
CC1CCCC(=O)CCCC=Cc2cc(O)cc(O)c2C(=	0	
ON(Cc1ccccc1)Cc2ccccc2		0
OC1C=Cc2c(Br)c3ccc4cccc4c3cc2C1O	0	
Oc1cccc(C2=CC(=O)c3cccc	0	
OC1C(O)c2c3ccccc3cc4ccc5cccc1c5c24	1	
CC(C)c1ccc(NC(=O)N(C)C)cc1		0
OC1=NC(=O)N(C1)N=Cc2oc(cc2)N(=O)=	1	
OCC1OC(C(O	0	0
OC1C=Cc2cc3ccccc3c(c2C1O)[N+](=O)[C	0	
[O-]S(=O)(=O)CCCS(=O)(=O)[O-]		0
CN1CCN(CC1)C2=Nc3cc(F)	1	
NC(=N)N[C@	0	0
CC(C)(C)NCC(O)CSc1nc(cs1)c2ccc(s2)C(=O)N		1
CC(C)C[C@H]	0	0
CCCNCCC	0	0
Nc1ccc(Oc2ccc(cc2)[N+](=O)[O-])cc1	1	
CN1C(=O)C23CC4=CC=CC(O)C4N2C(=O)(	0	
COc1ccc2C(=O)C=C(Oc2c1	0	
COc1cccc(OC	1	0
NCCNCCNCCNCCN	1	
NC1=Nc2c(nc	0	0
Cc1cc(Cl)ccc1O	0	1
C[S+](=O)([O-])c1ccc(Cn2c	0	
Oc1cccc(c1)C2=CC(=O)c3c	0	
CC(=O)C(=O)	0	0
COc1ccc(O)c	0	0
Cc1ccc2cc3c(ccc4ccccc34)c5[C@@H](O	1	
CSc1nc(N)c2	0	
CN1CCN(CC1)c2ccc3[nH]c(CCCCCc4ccc	0	

CCCCOCCOC(=O)c1ccccc1C(=O)OCCOCCCC			0
CN(C)[C@H]1[C@@H]2[C@@H](O)[C@@H]3C(=C)c4			0
CCC(CC)(CC(=	0	0	1
Nc1ccc(cc1)c2ccc(N)cc2			1
Clc1ccc(COC(	1	0	0
Cc1nc2ccc(N)c(C)c2nc1C			1
CC(C)C(=O)\N=C\1/SN(C(=O)C(C)C)c2cc			1
CC1(C)[C@@	0	0	
NC(=O)c1cn(	0	0	0
Nc1ncnc2c1ncn2c3ccc(cc3)[N+](=O)[O-			1
OC(=O)CCCc1ccc(cc1)N(CC		0	1
CCC1(C(=O)N	0	0	0
COC(=O)\C=C\C=C(/C)\C=C\C=C(/C)\C=C/C=C(\C)/C=C(			0
CCCCCCC(O)CO			0
COc1cc2nc(n	0	1	
CC1Nc2cc(Cl)	0		
OC(=O)c1c[n+](([O-])c2ccccc2[n+]1[O-]			1
CC(C)n1c\C=C\C[C@@H](O)C[C@@H](O)CC(=O)O)c(c			0
COc1ccccc1C	0	0	
CC\C=C\C\CC\C=C\C=O			0
C[C@]12CCC:	0	0	
C[C@@H](N	1	0	
O=C([C@@H]1CO1)c2ccc3OCOc3c2			1
CCCCCCCCCCCCCCCCC			0
CNC(=S)[S-]			0
CCCCCCC(C)(C)C(=O)OC[C@@H]1CO1			1
Cc1c2C3OC3c4ccccc4c2nc5ccc(CO)cc15			0
CC1(C)CCC[C@@]2(C)[C@@H]3CC[C@@H]([C@H]13			0
OC(=O)CP(=C	0	0	0
CC(C)c1ccc(cc1)S(=O)(=O)[O-]			0
C[n+]1ccccc1\C=N\O			0
Oc1ccc2ccc3c(ccc4ccc1c2c34)[N+](=O)[			1
CCOC(=O)Nc1cccc(OC(=O)Nc2ccccc2)c1			1
COc1cc(ccc1	0	0	
Cc1ccccc(O)c1C			0
OC1CCCC1			0
CCCCCCC(C\C=C\CCCCCCCC(=O)OC)OC(=			0
CC(=O)Nc1ccc(cc1)S(=O)(=O)N			0
COc1ccc2C3OC3C4CCCCC4c2c1			0
ClC(=C(Cl)SSc1ccccc1N(=O)=O)Cl			1
CCCCC(CC)COCCC#N			0
CC1c2ccccc2c3ccccc13			1
OC(=O)COc1ccc(Cl)cc1Cl			0

OC(=O)[C@	0	0		
CS(=O)(=O)c:	0			0
CCOC(=O)C(Cc1ccccc1)N(		1		
C\C=C/C=O			1	
BrC1CCN(CC1Br)N=O			1	
O=C1NC(=O)C=C1			1	
CCCCCCC				0
CCN1C2=CC(=N)C=CC2=C3C=CC(=CC3=C:		1		
ClCCOCCOCCCl				0
Nc1[nH]c(nc2ncnc12)c3ccc(cc3)[N+](=C		1		
COc1ccc(cc1)S(=O)(=O)N2N=CC(=C(Cl)C		0		
C[C@@]12CCC[C@H]1[C@@H]3CC[C@H]4C[C@@H]				0
[O-][N+](=O)c1ccc2c(Cc3cc4CCCCc4cc2		1		
Cc1ccc2cc3c4ccccc4C(O)C(O)c3c5CCc1c:		1		
CN(C)[C@H]1[C@@H]2[C@H]3C(=C(O)[C@]2(O)C(=				0
O=C1CN(\N=C\c2oc(cc2)c3ccc(cc3)N(=O)=O)C(=O)[N				1
COc(=O)N(C(=O)N1CO[C@]2(Cc3cc(Cl)ccc3C2=N1)C(				1
C[C@@H](CCO)C(=O)O[C@		0		
Cc1onc(c2ccc	0	0		
CC(C)(C)c1ccc(OP(=O)(Oc2ccccc2)Oc3cc		0		
CCNc1ccc(C(=C2C=CC(=[N+](CC)CC)C=C2)c3ccc(cc3)N(				1
CN\C(=N/C#N)\NCCSCc1[nH]cnc1C				0
ClCc1ccc(Br)cc1			0	
OCCNc1ccc(cc1[N+](=O)[O-])N(CCO)CC(		1		
c1ccc2ncccc2c1		1		0
CN\C(=C/[N+	0	0		
CC(C)CCCC(C)C1CCC2C3C=CC4(CC(O)CCC		1		
CCNCCCNCCCNCCCNCC		0		
Oc1ccc2C[C@	0	0		0
Clc1ccc2CCc3ccccc3N(CCCN4CCC5(CC4)N6CCCCC6NC5				0
ClC1=C(Cl)[C@@]2(Cl)[C@@H]3[C@H]4		0		
CC(C)(C)OC(=O)NC(CN=N#N)C(=O)O		1		
CCCCCc1cc(O)c2C3CC(=CC(		0		
ClCc1cc(cc(c1)N(=O)=O)N(=O)=O		1		
CCCN(CCC)CCC		0		
CN(C)CCOC(C	0	0		0
COc(=O)C1=C(C)C(C)(O)OC1=O		0		
CN[C@@H](i	0	0		
CN(C)[C@@H]1[C@@H]2[C@H](O)[C@		0		
CNC1CCc2cc(	0	0		
CCCCC(CC)OC(=O)CCCOc1ccc(Cl)cc1Cl				0
ClC1c2cccc3ccc4c5ccccc5cc1c4c23		1		
CN(c1c(cc(cc1[N+](=O)[O-]))[N+](=O)[O		1		

CC[C@@H](C	0		
Oc1ccc(Cl)c(Cl)c1Cl	0		1
CC1=C(C(=O)	0		
ClC1=C(Cl)[C@@]2(Cl)[C@@H]3[C@H]4	0		
NCc1ccccc1			0
CCOC(=O)C(Cl)C(=O)C	0		0
CCNc1nc(NC(C)(C)C)nc(SC)n1			1
CN1CC(O)C2=C\C(=N\NC(=O)N)\C(=O)C=C12			0
BrCC1=C(Br)C(=O)OC1	1		
Cc1cc(cc(c1C)[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-	0		
Cc1ccc(c(N)c1)N(=O)=O			0
O[C@@H]1C	0	0	0
OC1CC=Cc2cccnc12	0		
COC(=O)[C@]12O[C@@]1(C)[C@@](C)	1		
CN(C)CCc1c[†	0		
Nc1ccc(c(N)c1)N(=O)=O	1		
Nc1nc(Cl)cc(Cl)n1	0		0
C[C@@H]1O	0	0	
[O-][N+](=O)c1ccc2nc3c(cccc3nc2c1)[N	1		
O=C1NC(=O)c2cc(ccc12)N(=O)=O			0
OC(=NCc1ccccc1)Cn2ccnc2N(=O)=O	1		
CCCC	0		
CN(C)CCCN1†	1		1
Nc1ccc(NOS(=O)(=O)O)cc1Cl	1		
Cn1cc2ccc(cc2n1)[N+](=O)[O-]	1		
OC(=O)Cc1cc	0	0	0
ClC(=O)c1c(Cl)c(Cl)c(C(=O)Cl)c(Cl)c1Cl			0
[O-][N+](=O)	0	0	
CCNC(=S)NCC	0		0
C\C=C\C=N\†	0	0	
NCCC[C@H](N)C(=O)O			0
CC(C)CCCC(C)C1CCC2C3CC=	0		
COC1C(N)CC(OC2CC(O)(Cc3c(O)c4C(=O)	1		
CCc1ccc(\C=C\c2ccc(cc2)[N+](=O)[O-])c	1		
CC(C)(O)C(=O)Nc1ccc(c(c1)C(F)(F)F)N(=O)=O			1
N(\C=C\C=C\C=C=N\c1ccccc1)c2ccccc2			0
CC[C@H]1NC(=O)c2cc(c(Cl	0		
CCC(CCC(C)C1CCC2C3CC=C4CC(O)CCC4(C	0		
COc1cc2C(=O)CCc2c3c(C)cc4ccccc4c13	1		
CCCC[N+](C	0	0	
CC1CCC2C(C)C3C(CC4C5CC=C6CC(O)CCC†	0		
CN(C1CCCC1)C2CCCC2			0
CN(C)C(=S)SNCCNSC(=S)N(C)C	1		



N[C@@H](C	0			
[O-][N+](=O)c1ccc2ccc3nc4ccccc4c5ccc	1			
CCOCCOCCOCCO			0	
OCCOC(=O)C=C	0		0	
CCN(CC)C(=O	1	0	0	
OCCN(C(=O)CO)c1c(l)c(C(=O)NCC(O)CO)c(l)c(C(=O)N	0		0	0
S=C1SSC2=NCCN12	0			
Clc1ccccc1C(	1	1		
CC(=O)N(O)c1ccc(C)cc1	0			
CCCCCCCCCCCCCCCC#N			0	
Cc1cccc2ccc3c4ccccc4ccc3c12	1			
Cn1cnc2C(=N)[N+](=O)[CH-]Nc12	1			
CCCC(C)C1(CC)C(=O)NC(=NC1=O)[S-]			0	
C(c1occc1)n2ccccc2			0	
Cc1ncc(CNC(:	0	0	1	0
CCN1C=C(C(=	0	0	1	0
CCc1ccccc2cc(oc12)C(O)CNC(C)(C)C	0			
CC(=O)CC(=O)\C=C\C(=O)O	0			
CC1CCC(CC1)C(C)(C)OO	1			
CCCN(N=O)C(=O)N	1			
CN([C@H](CN1CCCC1)c2cc	0			
CCCCCCCCSCN1CN(C)C=C1	0			
CCc1ccccc2c(CCO)c[nH]c12	0			
OC1C=Cc2c(ccc3c4cccc5cccc(c23)c45)C1	1			
CC(=O)Oc1cc(C=O)cc2N3CC4C(N4C(=O)	1			
N[C@@H](C	0	0		
CCC(C)C1NC(	0			
Oc1ccc(O)c2c(O)cccc12			0	
CC(C)(C)CCCCC(=O)OCC1CO1	1			
COc1cc2CC3N(C)CCc4cc5OCOc5c(c34)c2	1			
CN1CC[C@@H](CN2c3ccccc3Sc4ccccc2	0			
CC(C)[C@@H](C)\C=C\[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2'			1	
CCOP(=O)(OCC)N=C1SCCS1			0	
COC(=O)c1ccc(cc1)C(=O)OC	0		0	
CC(=O)Nc1ccc(cc1)[C@H]2O[C@H]2C(=	1			
N[C@@H](C	0	0		
Oc1ccc(cc1)C2(OC(=O)c3c	0		1	
CCN(CCCCO)N=O	1			
C[N+]1(C)[C(	0	0		
OCC(O)C(O)C(O)C(O)CO	0			0
O=C1N(SC2CCCC2)C(=O)c3ccccc13	0		1	
OC(c1ccc(Cl)cc1)(c2ccc(Cl)cc2)c3cccn3			1	
Clc1ccccc1\C=C\O	1			

CN(C)C1C2CC3C(C(=O)c4c(O)cccc4C3(C)	0	
COc1cccc1N	1	1
CC(C)Cc1ccc(	0	0
CC(=O)c1ccc(O)cc1		0
[O-][N+](=O)c1ccc2ccc3cccc4C5OC5c1c	1	
C(Nc1ncnc2nc[nH]c12)c3o		0
[O-][N+](=O)c1ccc2c(ccc3c4cccc4ccc2	1	
Oc1ccc(cc1)C	0	0
CC(N)Cc1c[nl	0	0
CCN1C=C(C(=	0	0
CC[N+](CC)(CC)CCOc1ccc(\		0
O=N(=O)c1cccc(c1)N(=O)=O	1	0
CO\N=C(\C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C(=		0
CCCC1CCC(=O)CC1		0
CCOP(=O)(OCC)OP(=O)(OCC)OCC		0
OC(C(O)C(=O)OCCBr)C(=O)OCCBr	1	
OC(=O)c1c2cccc2cc3cccc		0
O=Cc1cccc1	0	0
CC1=CCC2C(C1)C(CC=C2C)C(C)(C)C	0	
Cc1ccc(cc1)N=Nc2c(O)ccc3cccc23	0	
CC(=O)OCC1=	0	0
ClC[C@H]1CO1	1	
COc1ccc(\C=N\nc2nnc3c4cccc4nc3c2O)	1	
CCCCCCCCC(CC)c1ccc(cc1)S(=O)(=O)O		0
O[C@@H]1C=Cc2c([C@H]1O)c3ccc4ccc	1	
Nc1nc(cs1)c2ccc(s2)[N+](=O)[O-]	1	
CCCCC1C(=O)NC(=O)N(C2CCCC2)C1=O		0
C\C(=C\1/C(=O)OC(=CC1=O)C)\[O-]		0
CCCCC\C=C/C=C/C(=O)OCC		1
COC(=O)C(N)	0	0
CC(=O)Nc1ccc(Oc2ccc(NC(=O)C)cc2)cc1	0	
Nc1ccc(Sc2ccc(cc2)N(=O)=O)cc1	1	
[O-][n+]1cccc2C=CC3OC3c12	0	
CCN(N=O)C(=O)N	1	0
C\C(=C\CO)\C=C/C=C(/C)\C=C/C1=C(C)C	1	
CC(C)CCCCCCCCCCCCC(=O)O		0
Cc1cc(cc(c1O)N(=O)=O)N(=O)=O		1
OCC1OC(Oc2cccc3C(=O)c4cccc(O)c4C(=	1	
C=CCCCC1CO1	1	
CN(C)C(=O)Nc1ccc(C)c(Cl)c1	0	
CCCCCOC(=O)C(=C)C	0	
ClCCNCCCNc1c2cccc2nc3c1ccc4ccnc34	1	
CC1CN(CC(C)N1N=O)N=O	1	



CN1CCC2Nc3ccc(C)cc3C2C1			0
[O-]C(=O)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C			0
FC(Cl)(Cl)C(F)(Cl)Cl		1	0
CC[C@@H]1	0	0	
CC(C)N(CC[C	1		1
C(N1CCCCC1)N2CCCCC2			0
O[C@@H]1c2ccccc2c3ccc(cc13)[N+](=C	1		
O=N(=O)c1ccc2c(c1)sc3ccccc23	1		
ClC(Cl)(Cl)c1ccccc1	1		0
OC(=O)C1C(C(=O)O)C2(Cl)C(=C(Cl)C1(Cl	0		0
CCOC(=O)O[	0	0	0
Nc1ccc(cc1)c2cc(Cl)c(N)c(Cl)c2	1		
Oc1ccc2ccc3cc4ccccc4c5ccc1c2c35	1		
[O-][N+](=O)c1ccc(Cl)cc1	1		
CNC(C)CCC=C(C)C			0
NCCO\C=C\C	0	0	
CN(C)CC[C@@H](c1ccc(Cl)cc1)c2ccccc2			0
CCOC(=O)NCCCN(C)C			0
CC[C@]12CC	0	0	0
OC[C@H]1O[C@@H]2O[C@H]3[C@H](O)[C@@H](O			0
COc1cc(C)cc(O)c1			0
Oc1ccc(cc1)c	0		
Oc1ccc2c3ccccc3c4c(ccc5ccc1c2c45)N(=	1		
C\C=C/1\C(=O)C[C@H]2[C@@H]3CCC4=CC(=O)CC[C@			0
CCCCc1cc(C)cc(CCCC)c1O		0	
C\C=C\1/C(=	0		
CCCN(CCC)CCc1ccc(O)c(O)		0	
CCCCCCCCCCCC(=O)OC[C@@H](O)C1OC[C@H](O)[C@			0
OC(=O)Cc1c[	0	0	0
CCC(CCC(C)O)COC(=O)c1ccccc1C(=O)O			0
COc1ccc(OC)c(\C=C\C)c1			0
BrC1ccc2C3CCCCC3C4OC4c2c1			0
CCCCCN(C)CCC(O)(P(=O)(C		0	0
C[C@]12Cc3	1		
CCCC(NC(=O)C(CC(C)C)N(		0	
C[N+]1(CCF)[C@H]2CC[C@@H]1CC(C2)OC(=O)C(O)(c			0
CC(C(O)c1ccc	1	1	
CC12CCCC(C)(C1CCC34CC(CCC23)C(=C)C			0
NC1=NC(=O)	0	0	
OCCNc1ccc(cc1OCCO)N(=O)=O			0
CCOC(=O)CC(=O)CCl		0	
O=C1C=CC=C2C3CC(CN12)		0	
CCC(O)C(C)(C)C			0

OCCNc1ccc(cc1)N=Nc2ccc(cc2)N(CCO)C	0			
CNc1ccc(cc1)N(=O)=O			0	
CN(C)CCCSC(=N)N	0			
N[C@@H]([C@@H](O)c1ccc(O)c(O)c1)C(=O)O			1	
OC(=O)CCOC(=O)C=C			0	
C\C=C/C=C/	0	0		0
ClCc1c2ccccc2cc3c1ccc4ccccc34			1	
CCCCOC(=O)C			0	0
CC(=O)O[C@]	0	0		0
CCOC(=O)CC(=O)C			0	0
Oc1ccc(cc1)C2Oc3ccc4cc3C2C(=O)N5CC			1	
CN(C)CCNC(=O)c1cccc2nc(oc12)c3ccccc3			0	
COC(=O)C(C)O				0
COc1cc(ccc1[n+])2nc(nn2c3ccc(cc3)N(=O)=O)c4ccccc4				0
Nc1nc(nc2c1ncn2C3OC(CO)C(O)C3O)c4c			1	
CC(=O)OCc1c2ccccc2cc3ccccc13			1	
CN1CCC=C1N	0	0		0
CC(C)c1ccc(CO)cc1				0
Cc1c2ccccc2c(CCl)c3ccc4ccccc4c13			1	
CC(=C)C(=O)OCCO			0	0
CCCCNC(=O)\C=C\c1oc(cc1)[N+](=O)[O-]			1	
CC1=C(C=C)c:	0			
C[C@]12CC[C@]	0	1		1
CN1C(=O)N(C)	0		0	
COc1cc(\C=C\C(=O)N2CCC			0	
NC(=S)N[S+](=O)([O-])c1c			0	
ClC(Cl)C(=O)N1CCN(C1=O)c2ncc(s2)N(=			1	
COc1ccc(cc1)\C(=C/C(=O)O)\Br			1	
NCCCC(N)CC(	0	0		
O=C1Nc2c(C=C1)[nH]cc2C:			0	
CC(=O)C1C(=O)C=C2Oc3c(			0	
Oc1ccc(Cl)cc:	0	0	1	1
CC(C)[C@@H]1CC[C@@H]			0	
OCCc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]			1	
Cc1c(cc(cc1[I	0	0		
O=Nc1ccc2ccc3ccc(c4ccc1c2c34)N(=O)=			1	
Oc1ccc(cc1)c2ccc(O)cc2			0	1
C[C@H]1CN(C[C@@H](C)N1)c2c(F)c(F)c3C(=O)C(=CN				0
Clc1cnc2ccccc2c1			0	
CC1(C)S[C@@H]2[C@H](N)C(=O)N2[C@H]1C(=O)O				0
CC(=O)OC1COC(Nc2ccc(cc2)C(=O)O)C(C			0	
CC(O)C(=O)C			0	0
CCCCN(CCC(=O)OC)N=O			1	

CC1C(O)CCC2=CC(=O)C3(OC3C12C)C4OC			1	
CN1CCO[C@H]1C	0	0		
O=CC1CCC=CC1				0
NN1C(=O)c2ccccc2C1=O			0	
NC1CCN(C1)C	0	0	1	0
OCC=CCl			1	
CC1CCCN(C1)N=O			1	
NC(C(=O)O)c1ccccc1	0	0		
CCCCCN(C)CC	0	0		
OC1C(O)c2cccc3c4c(ccc5ccccc45)C6(OC			1	
CC(C)C1C(C)C(C)(C)c2cc(C)c(cc12)C(=O)O			0	
CCOP(=O)(OCC)O\C=C/Br\c1ccc(Cl)cc1			0	
OS(=O)(=O)c1ccc(cc1)N(=O)=O			0	
CS(=O)(=O)C	0		1	0
Cc1nc(N)c(C)c2c3ccccc3[nH]c12			1	
CC(=O)OCCc1ccccc1				0
C(Cc1cccc2ccccc12)C3CO3			1	
OCS(=O)[O-]				0
OC\C=C\C(=O)O		0		
c1ccc2c3ccccc3c4ccccc4c2c1			1	
COc1ccccc1OC				0
CCC(C)(C)C(=O)O	0	0		
CCOP(=S)(OCC)Oc1ccc(cc1)S(=O)C			0	0
COc1cnc(N[S+](=O)([O-])c1ccccc1		0		
OC(=O)C1CCr	0	0		
CCCCCCCCC(=O)O	0	0	0	0
[O-][N+](=O)c1oc(cc1)c2cscn2			1	
[O-]S(=O)(=O)c1ccccc1C=O				0
Cc1cn[nH]c1	0	0		0
CC(=O)c1ccc(Cl)c(Cl)c1Cl			1	
O=NN1CCOCC1			1	0
COC1=C(C#N)C(=O)N(C)C=O		0		
C[C@@H](N)C(=O)O	0	0		0
COP(=S)(OC)SCC(=O)NCC=O			0	
CC1=NN=C(c2ccc(N)cc2)c3ccccc13		0		
CC1(C)N(Cl)C(=O)N(Cl)C1=O			0	0
CC(=O)C1=C(O)C=C(C)OC1=O			0	
CC(C)(C)c1cc(C=Cc2cc(c(O)c(c2)C(C)(C)C			0	
OC(=O)CCC(=O)Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1Cl			0	
Oc1ccc(cc1S(=O)(=O)[O-])C2(OC(=O)c3c(Br)c(Br)c(Br)C2				0
O=C1NC(=O)C1	0	0	0	0
OC1ccccc1C(=O)OC2ccccc2			0	0
CC(C)[C@H]1CC[C@H](C)C[C@H]1O			0	0

CCCN(CCC)[S+](=O)([O-])c	0		
C[N+](C)(C)CC(O)CC(=O)[O-]			0
CC=N(=O)O		0	
COc1cccc(NC(=O)c2csc(c2)[N+](=O)[O-])	1		
O=N(=O)c1ccc2Oc3ccccc3Oc2c1	1		
Clc1ccc(CC[C@@H](O)C)cc1	1	0	
CC(C)NC[C@@H](O)C	0	0	
CC(=C)C(=O)OC[C@H]1CO1			1
CC(C)CNC(=O)\C=C\c1oc(cc1)[N+](=O)[O-]	1		
CC(C)CCOC(=O)c1ccc(cc1)F			0
CN1C(c2ccc(cc2)C)C1	0		0
CC(C)(CC(=O)O)C(=O)O			0
OC(=O)c1cccc(c1)N(=O)=O	1		0
CCOC(=O)c1ccc(cc1)N(O)C=O	0		
c1cnc2c(c1)ccc3cc[nH]c23	0		
Cc1cc2cccc3ccc4cc5ccccc5c1c4c23	1		
O=C1N(C[C@@H](O)C)C1	1	0	
CCCCCC=O			0
COC(=O)C(N)CSCC	1		
NCCNc1cccc(c1)C	0	1	
[NH-]c1on[nH]c1	0	0	
CC[N+](C)(C)CCC(=C(c2ccccc2)c3ccccc3)C1C			0
O=N(=O)c1cccc2ccccc12	1		1
C\C=C/CNc1ncnc2nc[nH]c12	0		
[O-]S(=O)(=O)CC=C			0
OC[C@H]1O[C@@H](O)C1	0	0	
OC[C@H]1O[C@@H](O)C1	0	0	
CCCCOc1cc(CCN(C(=O)N)C)cc1	0		
CC(C)(C)c1cc(Cc2cc(c(O)c(c2)C(C)(C)C)C)cc1	0		0
NC(=O)NNC(=O)N	0		
COc1cccc2c(NCCCNCCCl)c3ccccc3nc12	1		
CCN(C(=O)C)C	0	0	0
CCCCOS(=O)(=O)C	1		
CCCCCCCCCOC(=O)c1cccc1C(=O)OCCCCCCCCC			0
C=CC(=O)N1CCOCC1			0
O=C1c2cc(cc(c2c3c1cc(cc3N(=O)=O)N(=O)N)C)C1	1		
CC1C=C(C(=O)C(C=O)C(O)C2CC(C)(C)CC1)C1	0		
C[S+](=O)([O-])c1ccc(cc1)F	0		
CC1(CO1)C(=O)NCc2ccccc2	1		
CCOC(=O)c1cccc2ccnc12	0		
[O-][N+](=O)c1ccc2c3CCCCc3c4c(ccc5ccn5)cc2c1	1		
NS(=O)(=O)c1cccc2ccnc12	0		
COc1nsc2c(cccc12)[N+](=O)[O-]	1		

CC(=O)OC1(CCC2C3C(CCC12C)C4(C)C5CC	0		
Cc1c2ccccc2cc3c4C=CC(O)C(O)c4ccc13	1		
CCNC[C@H](	0	0	
CC1CC=C(C)C(\C=C\C(O)C)C1(C)C			0
Cc1onc(c1)C(	0		0
CNCC(=O)c1ccc(O)c(O)c1			0
OCCN(CCO)c1nc(nc2ccccc12)c3cccs3	0		
CCCCON(OC(=O)C)C(=O)c1ccc(C)cc1	1		
COc1=C(N)C(=O)c2nc(ccc2C1=O)c3nc(C	1		
FC(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)I	0		
Nc1ccc(cc1)S	0	0	0
CC1=CC[C@H]2C[C@H]1C2(C)C			0
CC1CN(CCN1	0		
[O-][N+](=O)c1ccc2ccc3cc4C=CCc4c5cc	1		
NNc1nc(cs1)c2ccc(N)cc2	1		1
[O-][N+](=O)c1ccc2nc(ccc:	0		
[O-][N+](=O)C1=Cc2cccc3ccccc(O1)c23	1		
CC1NC(Cc2c1[nH]c3ccccc23)C(=O)O	0		
CC(C)CC=O	0		0
Cc1ccc(O)cc1OP(=O)(Oc2ccc(O)cc2C)Oc	0		
Nc1c(Cl)cc(Cl)cc1Cl	0		
NCCCN1CCOCC1			0
CCCCOC(=O)COc1ccc(Cl)cc1Cl	0		0
O=C(OCC1CO1)C2CCCCC2C(=O)OCC3CO:	1		0
CNC1(CCCCC:	0	0	0
Oc1cccc2c1c(cc3[nH]c4ccc5ccccc5c4c23	1		
COc1ccc(\C=	0	0	
CC(C)c1cc(c(	0	0	
CCC[N+](CCC)(CCC)CCC			0
CCN(CCCl)Cc:	0	0	
BrCCOC(=O)C=C	1		
COP(=NC(=O)C)(O)SC	0		
COc1cc2N3C4C5C(CC3=O)OCC=C6CN7C	0		
C[C@@H](CC(=O)O)C(=O)O	0		
CCC#CC(C)C1(CC=C)C(=O)NC(=O)N(C)C1	0		
CC(C)(C)NC[C	0	0	
Cc1ccc(cc1S(=O)(=O)O)[N+](=O)[O-]	0		
C1CC2(CCO1)CO2	1		
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)N	0		
CCCCCCCCCCCCOC(=O)C(=C)C	0		0
COc1ccc(cc1)	0	0	
Nc1nnc[nH]1			0
Nc1ccc2cccc3c4ccccc4c1c23	1		

CCC(=O)N(C1CCN(CC(O)c2ccccc2)CC1)c3ccccc3			0
C[N+](C)(C)CCNC(=O)C=C	0		
OS(=O)(=O)c1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]	0		
COc1cc2OC[C@H]3Oc4c5C	0		
COc1cc(N[C@H](C)CCCN)c2ncccc2c1	1		
Oc1ccc2CC3N(CC4CC4)CC[	0		
CCn1c(N)nc2c3nc(C)cnc3ccc12	1		
CC(=O)c1ccc[nH]1	1		0
CC(=O)NCCCC	0	0	0
CC[N+](CC)(C	0	0	0
CC(Br)C(=O)NCc1ccc(Cl)cc1	1		
COc1cc2OC(=C(O)C(=O)c2cc1OC)c3ccc(	0		
CC[C@@H]1CN2CC[C@@	0		
CO[C@@H]1	1	0	
C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=C3CCC(=O)C4)[C@			0
NC(=O)CNC(=O)N(CCCl)N=O	1		
CN1CCN(CC1	0	0	1
O=N(=O)c1ccc(cc1)N(=O)=O	1		
CS(=O)(=O)Nc1ccc(Nc2c3ccccc3nc4cccc	1		
Nc1cc2c3C=C[C@@H](O)[C@H](O)c3cc	1		
CC(N)(COP(=O)(O)O)C(=O)	0		
Oc1cccc2c1ccc3[nH]c4ccc5ccccc5c4c23	1		
CC(Cl)(Cl)C(=O)[O-]			0
CC1(C)C2CCC1(C)C(=O)C2=O	0		0
CC(C)CC(=O)OCC1=CO[C@@H](OC(=O)C	1		
Cn1c(N)nc2nc3cnccc3cc12	1		
Cc1cc(C)c(C(=O)P(=O)(C(=O)c2c(C)cc(C)cc2C)c3ccccc3			0
O=C(Nc1snc2ccccc12)c3ccccc3	1		
N[C@@H]1C	0	0	
COc1cc(c(O)c(c1)C(C)(C)[N+](=O)[O-]	0		
C[C@H]1OC=C2C(=C(C(=O)O)C(=O)C(=C	0		
CCN(CC)CCSC	1	1	0
CN(C(=O)CCCl)c1snc2ccccc12	1		
OC(=O)CCCC	0	0	0
COc1cccc2OC(=CC(=O)c12	0		
ClC(=C1CC(=O)NC1=O)Cl	1		
CC(=O)O[C@H]1CC[C@]2(C)[C@H]3CC[C@@]4(C)[C@			0
CSCCC(=O)N1C(CSC1c2ccccc2O)C(=O)O	0		
CO[C@@H]1	0	0	
CC1C2CCC3C	0	0	
Fc1c(F)c(Cl)c(F)c(Cl)c1F	0		
COc1ccc2[nH]c(nc2n1)[S+]	0		
OS(=O)(=O)c1ccc(cc1[N+](=O)[O-])[N+]	0		

[O-]S(=O)(=O)[S-]			0	
CNC(=O)c1cc	1	0	1	1
CNP1(NC)NP(NC)(NC)NP(NC)(NC)N1			0	
CC\C=C/CCOC(=O)C(C)C			0	
Nc1nc(cs1)\C(=N/O)\C(=O)N[C@H]2[C@H]3SCC(=C(I			0	
CC12CCCC(C)(C1CCC34CC(CCC23)C(=C)C			0	
O=N(=O)c1ccc2c(oc3ccc(cc23)N(=O)=O			1	
c1ccc(nc1)c2cccc(n2)c3cccn3			1	
N#CC1=C(SCCS1)C#N			0	
CC(C)NC[C@@H](O)COc1c		0	0	
CC12CCC3C(CCC4=CC(=O)CCC34C)C1CCC			0	
CCOc1ccc(C[C@H]2NC(=O)CCSSC[C@H](NC(=O)[C@H			0	
BrC1c(Br)c(Br)c2C(=O)OC(=O)c2c1Br			0	
C[NH2+]CCCC		0		
CC1COc2ccccc2N1C(=O)C(Cl)Cl			0	
CC1(C)S[C@H		0	0	
COC1CC(=C(c		0	0	
CNc1cc(Oc2ccc(N)cc2)ncn1			1	
CC(=O)NNc1ccccc1			1	0
[O-][N+](=O)c1cc2[nH]c3cc(c4ccccc4c3c			1	
C(Oc1ccc(cc1)C(C(c2ccc(OCC3CO3)cc2)c4ccc(OCC5CO			0	
C[C@H]1O[C@H](C[C@H](O)[C@@H]1O[C@H]2C[C@			1	
ONC(=O)c1ccc(O)c(O)c1			1	
CC(=O)OCC1:		0	0	
N[C@@H](Cc1ccc(F)cc1)C			0	
Oc1cc(O)ncn1			0	
C[C@](N)(Cc		0	0	0
O=C(NCCc1c[		0	0	0
COc1cc(C=O)ccc1OC(=O)C(C)C			0	
OCC(O)C(O)C(O)C(NC(=O)N(CCCl)N=O)(			1	
N[C@H](C(=O)N1[C@@H](C[C@@H]2C[C@H]12)C#N			0	
O=C(O[C@H]		1	1	
Cc1ccc(cc1N(		0	0	
CC[C@@]1(O)C(=O)OCC2=			0	
O=N(=O)c1ccc(C=Cc2ccc(cc2)C#N)cc1			1	
O=C1c2ccccc2c3cc4ccccc4cc13			1	
C=O			0	
CN(C)CCNC(=O)c1cccc2cc3ccccc3cc12			1	
S=C(NC1CCC(		0	0	
CC(C)c1cccc(		0	0	1
FC(F)(F)CCl			0	
CCC(COC(=O)CCS)(COC(=O)CCS)COC(=O)CCS			0	
NS(=O)(=O)c		0		0

O=N(=O)c1ccccc1c2ccccc2	0	0
CCN	0	0
O[C@@H]1Cc2cc3cccc4ccc5ccc1c2c5c3	1	
CC1(C)CC(C(=O)O)C(C)(C)N1O	0	
C1CCN(CCCl)C1=CNC(=O)NC1=O		0
Cc1cccc(C)c1NC(=O)CN2C(	0	0
CC\C=C\C	0	
[O-][N+](=O)c1ccc(c2ccccc2[N+](=O))[O	1	
CCCC1(C)C(C#N)(C#N)C1(C	0	
CCCC1C(=O)N2N(C1=O)c3cc(C)ccc3N=C2N(C)C		0
C[C@H]1CCC	0	0
CC12CCC3C(C	0	0
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC[C@H](O)[C@H]1OC(=O)C		0
CN1CCc2c(Cl	1	
C\C=C/1\CC(C)C(C)(OC(=O)C)C(=O)OCCz	1	
CC(Cc1ccccc1	0	
CC1CC[C@@]2(OC1)O[C@	0	
ClC1=C(Cl)C(=O)C(=C(C#N)C1=O)C#N	0	
C[N+]1(C)CC(	0	0
Oc1ccc(Cc2ccccc2O)cc1	0	1
Nc1ncnc2c1ncn2[C@@H]z	0	
[O-][N+](=O)c1ccc2ccc3cccc4C(=O)C(=C	1	
N[C@@H](C	0	0
Oc1nc(Cl)nc(Cl)n1	0	
CCCCCCCCC(=O)N[O-]		0
[O-][N+](=O)c1ccc2ccc3c(cccc3c2c1)[N-	1	
O[C@H]1C=Cc2c(ccc3c4C=Cc5cccc(cc23	1	
Cn1cnc(c1c2ccccc2)[N+](=O)[O-]	0	
Nc1cc(cc(Cl)c1O)N(=O)=O	1	
C\C(=C\C=C\C	0	0
N[C@H](CCCNC(=N)N)C(=	0	
CCC\C(=N\OCC)\C1=C(O)CC(CC(C)SCC)CC1=O		0
CCCN(CCCCO)N=O	1	
ClCC1=CC(=O)OC1	1	
COc1cc(N)ccc1C	1	0
C\C(=C/C=C/C(=C/C(=O)O)/C)\C=CC1=C(C)CCCC1(C)C		1
N[S+](=O)([O-])c1ccccc2c3	0	
C[C@H]1O[C	0	1
CN1CCc2cccc3c2C1Cc4ccc(	0	
Cc1cccc(c1)C(=O)O	0	0
CCCC[C@H]	0	0
Cc1[nH]c2ccc	0	0
CC(=O)CC(=O)C	0	0





CCCC(=O)Nc1	0	0	
NC(=N)c1ccc(cc1)c2cc3ccc(cc3[nH]2)C(=O)N1=C(NC\C=C/COc2cc(CN3CCCC3)ccn2)C(=O)C1=O			0
CN(C)C1C2C(	0	0	0
CCOC(=O)C(C)O			0
CC1C(C)(C)Nc2ccccc2C1(C)C3C(C)(C)Nc4			0
ClC(Cl)C(=O)N1CCOC12CCCCC2			0
Cc1cnc2ccc3c(nc(NS(=O)(=O)O)n3C)c2n			0
CCCCCCC(O)CCOC(=O)C			0
Cc1ccc(cc1)N(N=O)C2OCC(O)C(O)C2O			1
COc1cc2nc3cc(N)ccc3nc2cc1N			1
COc1cc2C(=O)c3cccc3C(=O)c2c(OC)c1C			0
OCC#N			0
C[C@]12CCCi	0	1	
Cc1ncc2COP(=O)(O)OCc2c		0	
CCCc1c(nn(c2	0		
COc1c(O)cc2C(=O)O[C@@H]3[C@@H](O)[C@H](O)[			0
C[C@H]1CN(N=O)C(=O)NC1=O			1
COc1ccnc(CS(=O)c2nc3cc(OC(F)F)ccc3[n-]2)c1OC			0
CN1CCN(CC1)c2ccc3[nH]c(nc3c2)c4ccc5			0
C[C@H](CCC(	0	0	
NC(CCCN(N=O)C(=O)N)C(=O)O			1
Cc1ccc(O)c(N)c1			1
CC12CC3CC(C	0	0	0
C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CC[C@H]4(			1
Oc1c(cc(c(O)c1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[(			0
[O-][N+](=O)c1cc(Cl)c(Cl)c(Cl)c1Cl			0
CC(=C)C(=O)NCCC[N+](C)(C)C			0
OS(=O)(=O)C	0		
CC(=O)Nc1ccc(Cc2ccc(N)cc2)cc1			0
BrCc1c2ccccc2cc3ccc4ccccc4c13			1
Clc1ccc2c(oc3ccccc23)c1			1
CC\C=C/C\C=C=	0	0	0
CC(C(=O)O)c1ccc(\C=C\2/CCCCC2=O)cc1			0
CC(C)c1ccc(cc1)S(=O)(=O)O			0
[O-][N+](=O)c1cc2ccccc2c3ccccc13			1
COc1ccc(CC(C)NCC(O)c2cc		0	
CN(C)c1ccc(cc1)C(=C2C=CC(=N)C=C2)c3			0
BrC=C			1
Nc1ccc(CO)c(c1)[N+](=O)[O-]			1
CCOC(=O)C(=C)C#N			0
CCC(C)C1CCCCC1=O			0
CCOP(=O)(C#N)N(C)C			0

COc1cc(ccc1Cc2cn(C)c3ccc	0	1	1
O=C(C(=O)c1ccccc1)c2cccc2	0		
COc1ccc(c2c(NCCCN(C)C)c3ccccc3nc12)	1		
COc1ccc(CCC2CO2)cc1	1		
OS(=O)(=O)c1cccc(c1)N(=O)=O	0		
N[C@H]1CCN(O)C1=O	0		
CCCCCCCCC	0	0	
C(N1CCNCC1)c2cccc2		0	
NC(=O)OCC(COC(=O)N)c1c	0	0	
COc1ccc(cc1)C(=O)ON(OCc2cccc2)C(=O	1		
C[C@@H]1CCCCN1CCNCC(=O)Nc2c(C(	1		
CC1=C(O)C(=O)CC1	0		
COP(=S)(OC)Oc1cc(Cl)c(Br)cc1Cl		1	
NC1CCc2cc(C	0	0	
Clc1ccc(C=O)cc1	0		
CN(C)c1ccc2c(ccc\C=C\C3cc(C)n(c3C)c4	1		
C[C@@H]1C[C@H]2[C@@	0		
COC1[C@@H](CC(=O)O[C@H](C)CC=CC=C[C@H](O)[C	0		
COc1ccc(cn1)N=Nc2ccc(cc2)N(C)C	1		
CCCC\C=C\C=C\C=C\C=C\C=C\C=C\C=C\OC	1		
C1CN=C(N1)c	0	0	
CC(=O)Nc1cccc2Cc3ccccc3c12	1		
COc1ccccc1CC2CO2	1		
CCCNC(C)C(=O)Nc1c(C)csc1C(=O)OC		0	
C[C@@H](O	0	0	
Cc1ccc(cc1)[S+](=O)([O-])	0		
NC1CCN(O)C	0	0	
CC(C)CCOCC(=O)OCC=C	0	0	
COC1=C(Oc2cccc2C1=O)c	0		
NS(=O)(=O)c	0		
O=N(=O)c1ccc(OC2CO2)cc1	1		
O=N(=O)c1ccc2c3c1cccc3c4cccc5ccc(c2	1		
CCCCNC(=O)NCCCC		0	
C1Cc2ccc3nc4ccc5ccccc5c4cc3c2C=C1	1		
COCCC#N		0	
CC(=O)N[C@@H](CS\C=C(/Cl)\C(=C(Cl)	1		
Cc1cc(C)n(CO)n1		0	
COC(=O)c1cccc2Oc3c4C5C=COC5Oc4cc(	1		
Nc1ccc(SC#N)cc1N(=O)=O		1	
Cc1nc(N=Nc2	0	0	
[O-][N+](=O)C1=Cc2c3c1cccc3cc4ccc5cc	1		
CC(O)C1CCCC1		0	
CC(C)CC(NC(=	0	0	

CC1OC(OCC2OC(OC3=C(Oc	0	1	
CN(C)C(=O)Nc1ccc(Cl)cc1		0	0
OC(O)C(Cl)(C	0	0	1
CCN(Cc1c(F)cccc1Cl)c2c(cc(cc2N(=O)=O)C(F)(F)F)N(=			1
CCC1OC(=O)(	0	0	
Cc1c(Cl)cccc1N(=O)=O			0
CC(=O)O[C@]1(CC[C@H]2[C@@H]3CCC		0	0
CC(C)(C)c1ccc(cc1)[S+](=O		0	
CC(C)(c1ccccc1)c2ccc(Nc3ccc(cc3)C(C)(C)c4ccccc4)cc2			1
CCCCOC(=O)c	0	0	0
CC[C@H](C)[	0	0	
ONc1[nH]cnc2ncnc12			1
CO[C@@H]1[C@@H](OC(=O)N)[C@@H](O)[C@H](C			0
OP(=O)(O)O	0	0	
Cc1cc2[nH]c(C)nc2c3c1ccc4ccc(O)cc34			1
CN1C(=O)N(c	0	0	
CCN1CCN(CC1)c2cc(c3CCCCCc3n2)c4ccc(F)cc4			0
SC1CCCC1			0
ClC1=CC(=O)C=CC1=O		0	
S=C(SSC(=S)N1CCCCC1)N2CCCCC2			0
Clc1ccc(cc1)C(Cl)(Cl)Cl			1
C[C@H](O)Cr	0	0	
C1CO1			1
CCC1(C)CC(=c	0	0	0
CN1C2CCC1C	0		
Nc1nc(O)c2nc(O)n(C3OC(CO)C(O)C3O)c			0
Nc1c2C(=O)c3ccccc3C(=O)c2c(Nc4cccc(c			1
CN\C(=C\[N+](=O)[O-])\N	0	0	
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCC(O)C1OC(=c			0
CCOP(=O)(OCC)N1C2C1c3ccccc3c4ccccc			1
CCc1ccc(cc1)N(=O)=O			0
CCN1C=C(C(=	0	0	0
CC\C=C/1\OC(=O)c2ccccc12			0
COCCI			0
CCCCCCN(=O)=O			0
CCN(CC#N)c1cccc(C)c1			0
CC[C@@H]1OC(=O)[C@@		1	
NC1=NC(=O)N(C=C1)[C@H]2CS[C@@H](CO)O2			0
Nc1ccc(N)c2C(=O)c3c(cccc3[N+](=O)[O-			1
COc1cccc(OC)c1C(=O)O			0
CC(=C)C			0
CC(=O)N[S+](=O)([O-])c1c		0	
CC(C)[C@]1(NC(=O)[C@H]		0	

Cc1ccc(O)cc1O[P@](=O)(Oc2ccc(O)cc2(	0			
Cc1ncc(N(=O)=O)n1CC(O)CCI			0	
CC(C)CC(=O)OC1OC=C(COC(=O)C)C2=CC	1			
CCN(CC)CCC[C@@H](C)Nc1cc(OC)cc2cc	1			
C[C@@]12C( 0 1				
CC1CCCC(O)CCCCCc2cc(O)cc(O)c2C(=O)(	0			
COc1ccc2c3ccc4cc5OCOc5cc4c3N(C)C(=	1			
Nc1c2[nH]cnc2nc[n+] <sup>1</sup> [O-]	1			
CC1Nc2cc(Cl)c(cc2C(=O)N: 0				
Clc1cc(Cl)c(Oc2ccc(cc2)N(=O)=O)c(Cl)c1	0			
NCCN(CCCl)c1c2cccc2nc3c1ccc4cccc3'	1			
CCN(CC)c1ccc2C(=C3C=CC(=[N+](CC)CC)	1			
CCCCON(OC(=O)C)C(=O)c1cccc1	1			
Clc1ccc(OCC( 1 0			0	1
COc1cc(CNC( 0 0			0	
CCCC[CH-][N+](=O)[O-]	0			
CCC1Nc2cc(Cl)c(cc2S(=O)(=O)N1)S(=O)(=O)N			0	
ClC(Cl)Cl 0 0	0		0	
COCCOc1cc2( 0 1				1
ClCCC(=O)\N=C\1/SN(C(=O)CCCl)c2cccc	0			
OC(=O)C(F)(F)C(F)(Cl)C(F)(F)C(F)(Cl)C(F	0			
O=N(=O)c1ccc(c2ccc(c(c2)N(=O)=O)N(=	1			
Cc1cccc(C)c1NO	1			
ONc1ccc(Cl)cc1	0			
[O-][S+] <sup>1</sup> (=O)N(CCCCN2C( 0				
N#CCCSCCC#N			0	
CC1OCCC1=O			0	
CCCCCC(O)\C=C\C=O	0		0	
OC(=O)\C=C\ 0 0	0		0	
CC(C)(c1ccc(OCC(O)CCL)cc1)c2ccc(OCC(	0			
O=C1CCCCCCCCCCCCOCCCCO1			0	
CNCC[C@@H](Oc1cccc1C 1			0	1
CC1=C(CCC(=O)[O-])C2=CC3=NC(=CC4=NC(=CC5=NC(=	0			
OC(C(F)(F)F)C(F)(F)F	0			
CC1(C)OC(=C 0 0			0	
NC(=Nc1nc(CSCC\C(=N/S(=O)(=O)N)\N)cs1)N			0	
CC1=CC2CCCCC2c3cccc13	1			
CC1=CC[C@H](CC=O)C1(C)C			0	
CC(C)CCOC(=O)C=Cc1cccc1			0	
Clc1ccc(c(Cl)c1)N(=O)=O	1		0	
CO[C@H]1[C 1 0			1	
N[S+](=O)([O-])c1cc(Cl)c( 0				
OS(=O)(=O)OCc1ccc2ccc3cccc4ccc1c2c3	1			



Oc1c(Br)cc(cc1Br)C2(OS(=O)(=O)c3cccc	0		
Cc1ccc(cc1)[N+]#N	1		
OC(=O)c1cc(Cl)cc(c1Cl)N(=O)=O			0
OC[C@H]1O[C@@H](Oc2c	0		
CC(C)CCCCOC(=O)C=C	0		0
CC(=O)ON(C(=O)C)c1ccc(cc1)c2cccc2	1		
Cc1ccc(cc1)S	0	0	0
CC\C=C/CC\C=C\CO			0
F[C@@H](CO[C@@H]1CC[C@H](CC1)Nc2[nH]cnc3nr			1
C\C(=C\C(=O)O)\C=C\C1(C	0		0
CCC12COCN1COC2			0
NC(=N)NCC1COC2(CCCCC2)O1			0
CCCCC[C@H](O)\C=C/CCCCCCC(=O)C	0		
[O-][N+](=O)c1ccc(cc1)C(=O)\C=C\c2cc	1		
Cc1c[nH]cn1	0		0
CC(=O)Nc1cc	0	0	0
CC(C)[C@H](CO)Nc1nc(Nc	0		
Oc1cc(cc(c1C	0	0	
CCN(N=O)C(=O)N(C)C	1		
COc1ccc(OC)c(C[C@H](C)N)c1			0
Cc1cccc2cc3ccc4cccc5ccc(c12)c3c45	1		
Cc1c2cccc2c(C)c3c4C=CC(=O)C(=O)c4cc	0		
CCCCC(CC)C=O	0		0
CC(C)(C)C=C	0	0	
C[C@]12CC[C@H]3[C@@H]([C@H](CCCCCCCC(=O)			1
O=N(=O)c1ccc2sc3cccc3c2c1	1		
COc1cccc2c(OC)c3ccoc3nc12	1		
C[N+]1(CC=C	0	0	
FC(F)C(F)C(F)(F)F	0		
CCCS1ccc2nc(NC(=O)OC)[nH]c2c1			1
Clc1ccc(OS(=O)(=O)c2cccc2)c(Cl)c1			1
CC1(C)N(Br)C(=O)N(Cl)C1=O			0
CC1CCCCN1CCCOC(=O)c2c	0		0
CC(C)(C)c1ccc(OC[C@H]2CO2)cc1	1		
Cc1ccc2cccc2c1N(=O)=O	1		0
CCOP(=S)(OC	0	0	0
CN(N=O)C(=O)Oc1ccc(C)c(C)c1C	1		
Oc1ccc(cc1O)C2=CC(=O)c3	0		
COc1ccc(N(CCCl)CCCl)c2oc(cc12)[N+](=O	1		
CCCCCCCCC=CC1CC(=O)OC1=O	0		0
CCCC(CCC)C(=O)O	0	0	0
OC(=O)c1cc(cc(c1)C(=O)O)C(=O)O			0
CCC[C@](C)(COC(=O)N)COC(=O)NC(C)C	0		

Cc1ccc(cc1N(=O)=O)C(=O)O				0
C[C@@H]1O	0	1		
CC(=O)OCC(=O)[C@@]12OC(C)(C)O[C@@H]1C[C@H]				0
CC\C=C\C=C\C=C\C=C\C=C\C=C\SCC(O)CO			0	
CS(=N)(=O)C	0			
COC(=O)CCc1ccc(OCC(O)CNC(C)C)cc1				0
Cc1ccc(cc1)N(N)c2ccc(C)cc2			1	
CC(C)NC[C@]	0	0		
CN(C)c1ccc(cc1)N=NS(=O)(=O)[O-]				1
COS(=O)(=O)F			1	
CN1CCN(CCc2ccc(Cl)c(Cl)c		1		
COc1cc2CCN(Cc2cc1OC)N=O			1	
CCN(CC)Cc1c	0	0	0	0
CNc1ncnc2[nH]cnc12				1
CN1C(=O)CN=C(c2ccccc2)c3cc(Cl)ccc13			0	0
CCN(CC)C(=O)N[C@@H]1(		0		
CS\C(=N\OC(=O)N(C)SN(C)C(=O)O\N=C(/C)\SC)\C				0
COc1ccc(CCC(=O)c2c(O)cc(O[C@@H]3C			0	0
CCCCOC(=O)\C=C\c1oc(cc1)[N+](=O)[O-			1	
CCCCCCCCP(=O)(O)O				0
CCCC(=O)Nc1snc2cc(Cl)ccc12			0	
CC(C)(C)NC(=	0			0
[O-][N+](=O)c1cc2cccc3c4CCCCc4c5cccc			1	
CCCC(CC)COC(=O)COc1cc(Cl)c(Cl)cc1Cl				0
COc1ccc(cc1OC)C2NC(=S)N3C(NC(=S)N23)c4ccc(OC)c				0
Cc1ccc(NC(=O)c2csc(c2)[N+](=O)[O-])cc			1	
CCC(=O)N1N=CC(=C(Cl)C1=O)Cl			0	
CC(C)OC(C)C				0
OCC(O)C1CO1			1	
CCCCOc1ccc(	1	0		0
CNc1ccc(cc1)C(=C2C=CC(=NC)C=C2)c3cc			0	
CC(=O)OCC(=O)[C@@]12N=C(C)O[C@@H]1C[C@H]3				0
[O-][N+](=O)c1ccc(cc1)N=Nc2ccccc2			1	
[O-][N+](=O)C1=Cc2cccc3cccc1c23			1	
C[C@]12CC[(	0	0		
CC(C)CC(=O)O[C@@H]1OC=C(COC(=O)(			1	
CCC(=O)O[C(	0	0		
Fc1ccc(NC(=O)c2cccnc2Oc3cccc(c3)C(F)(F)F)c(F)c1				1
CCCCCCC(O)CCCCCCCCC(=O)OC				0
CC(=O)O[C@]1(C(=O)C)C(=C)C[C@H]2[C@@H]3C=C(				0
CCCCCCCCC(=	0	0		0
CC(=O)OC[C@H]1O[C@@H](Oc2cccc3C			1	
c1ccc2c(c1)ccc3c2ccc4ccnc34			1	



CCN(Cc1ccnc	0	0		0
CC(=O)Nc1ccc(cc1)c2ccccc2			1	
N1C2C1c3c(c4ccccc24)c5ccccc5c6ccccc3			1	
COc1ccc(cc1)N=Nc2ccc(cc2)N(C)C			1	
Nc1ncnc2c1ncn2[C@@H]c	0			0
Nc1ccc(cc1N(=O)=O)N(=O)=O			1	1
CC[C@@H](C)c1ccccc1O			0	
CC1c2cc(F)ccc2c3ccc(F)cc13			1	
CCCCCCCCCCCCCN1CC(C)OC(C)C1			0	0
ClC[C@H](Cl)CBr			1	
CCCCCCCCCCCC(=O)C			0	0
C1CC2OC2CC1C3CO3			1	0
COc1ccc(OC)c(c1)N=Nc2c(O)ccc3ccccc2			1	
CCC(C)(CCC(C)C)C(=O)O				0
OC[C@H]1O	0	0		0
CCC(=[N+](O)[O-])CO			0	
C1COCC2(C1)CO2			1	
Nc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]			1	
CC(=O)N[C@H]1C(O)O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]1O				0
COc1cc(N)cc(OC)c1N			0	
NC(C(O)c1cc	0	0		
Cc1cn2c(c(nc2s1)c3ccc(cc3)[N+](=O)[O-]			1	
CNc1ccc(cc1N(=O)=O)N(CCO)CCO			1	
CC[C@@]12O[C@]1(C(=O)OC)C(=O)O[C@]2			1	
N1C2C1c3cc4c(cc3c5ccccc25)C6NC6c7cc			1	
C(N1CCN(CC:	0	1		0
COc1cc2nc(nc(N)c2cc1OC)		0		0
CC(C)(c1ccc(O)cc1)c2ccc(O)cc2			0	1
[O-][N+](=O)c1csc(c1)c2csc(NC=O)n2			1	
COc1cc2ncnc	0	0		
C[C@@H](CCC=C(C)C)C=C				0
c1ccc2c(c1)cc3sc4cccc5ccc2c3c45			1	
CCN1C=C(C(=	0	0	1	0
NC(=O)C1c2c	0	0		0
CCC(=O)OCC	0	0		
CCN(CC)S(=O	0			0
OC1(CCCCC1)C(=O)c2ccccc2				0
Nc1cc2c(O)c(N=Nc3ccc(N=Nc4ccc(cc4)S			0	
CC[C@@H](CO)Nc1nc(NC		0		
CCC(C)(CCC(C)C)OC(=O)C				0
Oc1c(Cl)cc(Cl	0	0	0	1
CC1=CC(C)(C)Nc2ccccc12			0	
CCC(C)N1C(=O)NC(=C(Br)C1=O)C			0	0

CCCC(C)C(=O)O			0	
O=NN(c1ccccc1)c2ccccc2	0		0	
O=NN1CCC(=O)CC1	1			
O=C1[N-]S(=O)(=O)c2ccccc12			0	
CNC(=O)Oc1ccccc1OC(C)C	1		0	
OC[C@H]1O	0	0		
C\C=C/C=C\C=O	1			
OC[C@@H]1	0	0		
Nc1cc(ccc1c2ccc(cc2)[N+](=O)[O-])[N+]	1			
COc1ccc2C=C3N(Cc4cc5C	1			
Cc1ccc(cc1)C(C)(C)C	0		0	
CCCCOc1ccc(cn1)N=Nc2ccc(cc2)N(CC)C	1			
CN\C(=N\C#I	0	0		
Fc1ccc(cc1)C	1	1		
CNCCS(=O)(=O)[O-]			0	
Cc1ccc2nc3ccccc3c(N)c2c1	1			
ClCCSCc1ccccc1	1			
[O-][N+](=O)c1ccc2N(S\C(=N/C(=O)c3c	1			
Cc1ccc(N=Nc2c(O)ccc3ccccc23)c(c1)[N+	1			
Cn1cc2ccc(cc2n1)N(=O)=O	1			
CCC(=O)Nc1snc2ccc(C)cc12	0			
Oc1ccc(\C=C\C(=O)c2cccs;	0			
CC(=C)C(=O)OCC[N+](C)(C)C			0	
Oc1c(Cl)cc(Cl)cc1NC(=O)c2c(O)c(Cl)cc(C	0			
NC(=O)OC[C]	0	0		
CCCC(C)COCC1CO1	1		0	
COc1ccc(Cc2	0	0	0	1
CCC(=O)c1cc	1	1		
O=N(=O)c1cc2CCc3ccccc4ccc(c1)c2c34	1			
CCCCCCCCCCCCOC(=O)c1cc(O)c(O)c(O)c1			1	
CN1CCN(CC1)c2cc3N(C4CC4)C5=CC(=O)	1			
CCCCON=O	1		0	
CS(=O)(=O)Nc1cc2OC=C(NC=O)C(=O)c2cc1Oc3ccccc3			0	
CC(C)C[P+](C)(CC(C)C)CC(C)C			0	
CCCCCCCCO			0	
COc1cccc2c1cc3NC(=O)c4cc5OCOc5c2c:	1			
CC(C)C1C(=C(C(O)C2=C1C(	0			
COc1cccc(C=O)c1			0	
ClCC1(C(Cl)Cl)C2C(Cl)C(Cl)C1(C(Cl)Cl)C(C	0			
CC[C@]12CC	1	0		
Cn1cc(O)nc1	0	0		
CNC(=O)CSP(=O)(OC)OC			0	
Oc1ccc(\C=C,	0	0		

C[C@H]1[C@H]2CC[C@H]:	1		0
COC(=O)c1oc(NO)c(c2cccc2)c1c3cccc:		0	
CCCCCn1cc2CC3C(C=C(C)CN3C)c4cccc1c:		1	
Cc1cccc(C)c1N=Nc2c(O)ccc3cccc23		0	
O=C1c2ccc3nc(sc3c2C(=O)c4ccc5nc(sc5		0	
CN(CC(=O)NN)c1ccc2cccc2c1		0	
CCC(=O)C(CC(C)N(C)C)(c1cccc1)c2cccc2			0
COc1c(OCC(O)C(C)(C)O)cc		0	
c1ccc2c(c1)ccc3c2ccc4c5ccccc5ccc34		1	
Cc1cn2c(c(nc2s1)c3ccc(cc3)N(=O)=O)N(		1	
CN1CCc2cc3OCOc3cc2[C@		0	
CCCCOc1ccc2nc3cc(Cl)ccc3c(NCCCN(CC)		1	
CCN(CC)CCSC	1	0	
Clc1ccc(cn1)C2=CCCC3CCC:		0	
CC(C)c1cc(cc(C(C)C)c1N)c2cccc2		0	
CCCCCCCCC	0	0	0
O=C1C(=O)c2cc3cccc3c4ccc5cccc1c5c2		1	
C[n+]1ccn(C)c1			0
Fc1cccc(F)c1C(=O)NC(=O)Nc2cc(Cl)c(F)c(Cl)c2F			0
CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)Cc3cccc3)C(=O)N2[			0
BrC(Br)C#N		1	0
C1OC1c2cc3c4cccc4ccc3c5cccc25		1	
CC(=O)SCc1occc1			0
CC1OC1C		1	
CO[C@H]1\C	0	0	
CC(C)(C)Cl			0
Oc1cc2C(=O)	0	0	0
Oc1ccccc1F			0
OC(Cn1ccnc1)c2ccc(CCc3cccc3)cc2		0	
CC(COC(C)(C)C)OCCCO			0
CC(C)CCCC(C)	0	0	0
Nc1ccc(cc1)N=Nc2ccc(N)cc2		1	1
CC(C)(C)C(O)\C(=C/c1ccc(Cl)cc1Cl)\n2cncn2			1
CC(C)CCC[C@	0	0	0
OC(=O)CNC(=O)c1ccc(cc1)N(=O)=O		1	0
CN=C=S			0
N#CCCC#N		0	0
CCCC(CC)COC(=O)Cl			0
Oc1cccc2C(=O)C=CC(=O)c12		1	
CC1C(=O)N(C	0	0	
CCc1cnccn1		0	
OC1C(O)c2ccc3c(ccc[n+]3[O-])c2C4OC1.		0	
OC(=NN=Cc1oc(cc1)N(=O)=O)c2ccc(O)c		1	

OC(=O)Cc1c(Cl)ccc(Cl)c1Cl			0
Cc1onc(n1)c2ccc3CCN(CCC4CCC(CC4)NC(=O)\C=C\c5c			0
CN(N=O)c1ccc(cc1)N(=O)=O			0
C[n+]1c2ccccc2cc3c(N)cccc13	1		
C[CH-][N+](=O)[O-]	0		
Oc1ccnc2ccccc12	0		
C1CCC2C(C1)C=Cc3ccccc23	1		
Cc1ccc(S)cc1			0
[O-][N+](=O)c1ccc(Cl)c(Cl)c1Cl	1		
Oc1cc(O)c(C(=O)Cc2ccc(Cl	0		
COC1(COc2c	0	0	
COc1cc(OC)c(\C=C\C)cc1OC	1		
ICc1ccc(Oc2ccccc2)cc1	1		
[O-][N+](=O)OCC(CO[N+](=O)[O-])O[N-	1		
C(Cc1ccc(cc1)c2ccccc2)[C@H]3CO3	1		
CCC(C)(C)C(=O)O			0
NC(=S)c1ccc[n+](c1)[C@@	0		
C1C[C@@H]2O[C@@H]2C[C@@H]1[C(	1		
CO[C@@]1(I	1	0	
CCCCN=C(O)C=Cc1oc(cc1)N(=O)=O	1		
C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=CC(=O)CC[C@H]34			0
CCcn1cc[n+](C)c1			0
CCCC[C@@H](CC)COC(=O)\C=C\c1ccc(C	0		
O=NN1CCCCC1	1		0
NS(=O)(=O)c	0		0
CC1(C)C(C=C(Br)Br)C1C(=O)OC(C#N)c2c	0		
CCCC\C=C\C=C\C=C\C=C\C=C\C=COCC(O)CC	1		
Fc1ccc(cc1)C	1	0	
CC(C)C(NC(=	0	0	
Cc1cc(O)c2C(	1	0	
CC(C)N(N)C(C)C	1		
Clc1ccc(Cl)c(c1)c2oc(\C=C(	0		
CC[C@@]1(C	0	0	
C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=CC(=O)CC[C@]34C			0
N[S+](=O)([O-])c1cc2c(cc1	0		
O=Nc1[nH]cnc1c2ccccc2	1		
[O-][N+](=O)c1cc(cs1)C(=O)Nc2ccc(Br)c	1		
O=C(\C=C\c1ccccc1)c2ccc(cc2)c3ccccc3	0		
NC(=S)N\N=	0	0	
N[C@@H](CSSC[C@H](N)C(=O)O)C(=O)O			0
CC1=C(O)C(=O)C=CO1	1		0
Nc1ccc(N)c(c1)N(=O)=O	1		1
NC(=O)CN1C	0	0	



NCC[C@H](C	0	0	
CC[N+](CC)(CC)CCOC(=O)C(C1CCCC1)C2CCCC2			0
CC(C)(C)NC(=O)SCC(NC(=O)CCC(N)C(=O	0		
N[C@H]1CN(CC12CC2)c3c(F)cc4C(=O)C(=CN(C5C[C@	0		
ONC(=O)CNC(=O)c1ccccc1	1		
CC(C)c1cccc(C(C)C)c1N			0
OC(=O)C1CSC(N1C(=O)CCSSCCC(=O)N2(	0		
COc1ccc(cc1OC)c2nc(c3ccccc3)c([nH]2)c	1		
N[C@H](CN1C=CC(=O)C(=	0		
COC(=O)C=C(C)CCC=C(C)C			0
FC(F)(F)c1cccc(c1)N=C=O			1
NC(=N)c1ccc	0		
NNc1nnc(NN	0	0	1
CC1CC23CCC4C(C)(CCCC4(C)C(=O)O)C2C			0
[O-][N+](=O)c1ccc(Cl)c(Cl)c1	1		
CC(C)c1c(N)ccc2c1Cc3ccccc23	1		
OC(Cc1cnc2ccccc12)(P(=O)(O)O)P(=O)(O)O			0
[O-][N+](=O)c1oc2ccc3cc(ccc3c2c1)N(C	1		
O=C(Nc1ccccc1)Nc2ccccc2	0		1
Oc1c(cc(cc1N(=O)=O)c2ccccc2)N(=O)=C	1		
Cc1ccc(cc1C)S(=O)(=O)O	0		
CC(C)CCCC(C)C1CCC2C3C(OO)C=C4CC(O)	1		
Cn1c(ncc1[N+](=O)[O-])[C@H]2NC(CO)	1		
CCCCN(CCO)N=O	1		
NNC(=O)OCc1ccccc1			0
Cc1cc(O)c2cc	0	0	0
CC\C=C/C\C=C=	0	0	0
O=C(C=Cc1ccccc1N(=O)=O)c2ccccc2	0		
COc1ccc(O)c2C(=O)c3c(OC)cc4OC5OC(=	1		
OC(CN=N#N)Cn1cnc2c(Cl)ncnc12	1		
NC1(CCCC1)C(=O)O	0		
CC(C)(C)c1on	0	0	
CCN(CC)CCN:	1	1	0
Oc1cc(Cl)c(Cl)c(Cl)c1Cl	0		1
CCCCCCCCC=CC#N			0
c1ccc2c(c1)cc3ccc4cccc5ccc2c3c45	1		
OCC1OC(CC1O)n2cnc3c2ncn4ccnc34	0		
[O-][N+](=O)c1ccc2C(=O)NC(=O)c2c1	1		
CC(C)NCC1CCc2cc(CO)c(cc2N1)[N+](=O)	1		
CC12CCC=C(C=O)C1(C2)C=O	1		
CN(C)CCNC(=O)c1ccc2c(N)c3ccccc3nc2c	0		
Nc1ccc(cc1Cl)c2ccc(N)c(Cl)c2	1		
O=C(C1OC1c2ccccc2)c3ccc(cc3)N(=O)=C	1		

COc1c(C)c2C	0	0	
C[C@@]12C	0	0	
CCC(C)C(C(=O)OCC[N+](C)(CC)CC)c1cccc1			0
CCCCCCCCCCC(=O)OCC			0
Cc1ccc(C=O)cc1			0
Nc1ncnc2c1c(cn2C3CCCC3		1	
ClC(Cl)(Cl)SN1C(=O)C2CC=	0		1
OC1C(O)C(OC1COP(=O)(O)O)N2C=CC(=		0	
CC(Cc1cccc1	0	0	
Cc1c(N)cccc1N=Nc2cccc(N)c2C			1
O=NN1CCCN(CC1)N=O			1
NS(=O)(=O)c1cc2c(NC(NS2(=O)=O)C(Cl)Cl)cc1Cl			0
COc1cc(C=CC(=O)N2CCN(CC(=O)N3CCCC3)CC2)cc(OC)			0
CCOC(=O)N1	0	0	0
Nc1ccc(cc1)[S+](=O)([O-])		0	
CC(=O)c1cccc(c1)N(=O)=O			1
CC(=O)CC(C1=C(O)c2cccc2OC1=O)c3ccc(cc3)N(=O)=			1
CCCC[C@H](	0	0	
FC(F)(F)c1cccc(c1)N2CC(CCl)C(Cl)C2=O			0
ClC(=CC=O)Cl			1
Clc1cc(Cl)c(Oc2ccc(NC=O)cc2)c(Cl)c1			1
CCN(CC)CCCC(C)Nc1ccnc2cc(Cl)ccc12			1
N[C@H]1CSS	0	0	0
CCN1C=C(C=	0	0	1
O[C@@H]1[C@@H]2O[C@@H]2c3c(cc			1
CCN1C[C@]2(COC)[C@H](O)C[C@H](OC)[C@@]34[C			0
CSC(C)(C)C=NOC(=NC)O			0
Cc1c2cccc2c3ccc4cccc5ccc1c3c45			1
Clc1ccc(CS[C@@H](Cn2cc		0	
CCCC1=CC(=O)NC(=S)N1			0
CC(N)CN			0
COc1ccc(\C=N/NC(=O)c2ccncc2)c(C(=O)O)c1OC			0
CCC(=N(=O)O)Cl			1
COC(=O)Nc1nc2cc(OS(=O)(=O)c3ccc(F)c			0
OC[C@H]1O[C@H]([C@H](O)[C@@H]1			1
Cc1ccc(cc1)S(=O)(=O)N2N=CC(=C(Cl)C2			0
C[C@@H]1C		0	
OCCC(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F			0
CCCCON(OC(=O)C)C(=O)c1ccc(cc1)C(C)(			1
CC(C)Nc1ccnc1N2CCN(CC		0	
CC[C@]12CCCN3CCc4c([C@		0	
COC(=O)C(CSCC(C)Br)NC(=O)C			1
[O-][N+](=O)c1ccc2C(=O)N(CCl)C(=O)c2			1

CC(CCO)CC(C)(C)C			0
O=C1CCCC2[C@@H]3CCCN	0		
CNC(=O)O\N=C(/SC)\C(=O)N(C)C			0
COC(C)(C)OC			0
CCC1(C(=O)N	0	0	0
CCCCC(=O)O	0	0	
Cc1c(onc1C2CCN(CCc3cccc		1	
Nc1ccc(\C=C\c2ccc(N)cc2)cc1			1
C\C(=C/COC1=CC(=O)Nc2c		0	
Cc1ccc(cc1[N+](=O)[O-])N=[N+](O-)]c2			0
COC(=O)\C=C\C(=C/C=C/C(=C/C=C/C=C(		1	
CCCOC(OCCC)OCCC			0
[O-][N+](=O)c1ccc(cc1)C(=O)ON(OCc2c		1	
CC1(C)C(C=C(Cl)Cl)C1C(=O)OC(C#N)c2cc		0	0
Cc1c2cccc2c(C)c3c1ccc4cccc34		1	
Cc1ncc(CSSC	0	0	0
C[C@H](Cn1c	0	0	
CC(C)(Oc1ccc(cc1)C(=O)c2ccc(Cl)cc2)C(=			0
CO[C@@]1(I	0	0	
[O-][N+](=O)c1cccc(Cl)c1Cl			0
CC1=CC(=O)Oc2ccc3OC4(C)OOC4(C)c3c:		1	
c1ccc2nc3c(cc2c1)c4cccc5cccc3c45			0
CCCC=N(=O)O			0
CS(=O)(=O)N	0		
[O-][N+](=O)c1ccc2ccc3c4CCC=Cc4cc5c		1	
Cc1c(N)cc(N)cc1[N+](=O)[O-]		1	
C[C@H](CC[C	0	0	1
COc1cc2CCN(C)c3cc4cc5OCOc5cc4c(c1C		1	
Cc1cccc(Cc2c[nH]cn2)c1C			0
OC(=O)c1cccc1N(=O)=O		1	0
Cc1ccc(Br)cc1		0	0
OCCSN=O		1	
CC1(C)C(=C)[C@]2(Cl)C(Cl)[C@@]1(Cl)C(Cl)(Cl)C2(Cl)			1
OC[C@H]1O[C@H](O[C@]2(CO)O[C@H](CO)[C@@H			0
OC[C@H]1O[C@H](O[C@@]2(CO)O[C@@H](O)[C@			0
N[C@H](C(=O)O)c1ccc(O)		0	
CN(C)C(=S)N(C)C			0
Cc1ccc(Cl)cc1			0
CC(C)CCC[C@@H](C)[C@@H]1CC[C@@		1	
Nc1oc2ccc(Cl	0	0	0
CC(O)Cc1cc(N)cc(c1N)[N+](=O)[O-]			0
OC(=Nc1cccc1N(=O)=O)c2csc(c2)N(=O		1	
CCCCCCCCC(=O)C			0



CC(CCC1CCCC1)c2CCCC2	0		
CCCCCCCCCCCCCOS(=O)(=O)[O-]			0
CCOC(=O)c1c2c(nn[n+] <sup>1</sup> [O-])c3CCCC3n2	1		
CCCCOC(=O)C(C)CC			0
ClCCOP(=O)(OCCCl)OCCCl	0		0
CC(C)(C)[C@] <sup>1</sup> (O)C[C@@] <sup>1</sup>	0		
OC(CCN1CCC	1		0
CC(C)(C)CN=C(O)C=Cc1oc(cc1)N(=O)=O	1		
CCOC(=O)N(CCO)N=O	1		
Clc1CCCC(Cl)c1	0		0
BrCC(=O)OCc1CCCC1			0
Fc1ccc2c3ccc4CCCC4c3c5CCCC1c25	1		
O=C(C1CCCC1)N2C[C@H]3N(CCC4CCCC	0		
[O-][N+](=O)c1cc2c3CCCC3ccc2c4CCCC:	1		
COc1ccc2Oc3cc(OC)cc(OC)c3C(=O)c2c1	1		
ClC1CCCC1=O			0
COc1ccc(\C=	0		0
C#CCN[C@@	0		0
CN1[C@@H]2CC[C@@H]1	0		
O=C1C=Cc2c(ccc3c2ccc4CCCC34)C1=O	0		
CN(C)CCCNc1c2CCCC2nc3c(Cl)ccc(c13)[I	1		
CC(CCOc=O)CCC=C(C)C			0
CC(=O)N(Nc1ccc2c(Cc3CCCC23)c1)c4ccc	1		
CC(C)OC(=O)c1CCCC1C(=O)OC(C)C			0
OC(=O)C1CSN1C(=O)C2CCC(=O)N2	0		
CC1CC2(C)C(CCC3C4CCC(O)C4(C)CCC23)(	0		
NC1(CCC2cc(	0		
COc1ccc(OC)	0		0
CCC\C=N/O	1		0
COc1ccc(\C=C\c2cc(OC)cc(	0		
COc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]	1		
CCN1C=C(C(=	0		0
CCCCN(CCO)CCO			0
NCCc1ccc(O)	0		0
O=C1NCNC(=O)N1	1		
Oc1ccc(Cc2CCCC2)cc1			1
NC(=O)N(CC(=O)O)N=O	0		
COC(C)(C)CC(=O)C	0		0
Oc1ccc(cc1[N+](=O)[O-])c2CCCC(c2O)[N	0		
Clc1ccc(cc1)C(=O)c2ccc(Cl)cc2			0
OC1=C(Oc2cc	0		0
OC(=O)c1ccc(cc1)N(=O)=O	1		0
CC(C)(C)C(=O)CCc1ccc(Cl)cc1			0

<chem>Cc1ccc(cc1)S(=O)(=O)N</chem>			0
<chem>Cc1cccc(NS(=O)(=O)c2cccc3cccnc23)c1</chem>	0		
<chem>CC1=NN(C(=O)C1)c2cccc(c2)S(=O)(=O)O</chem>			0
<chem>OCC(NC(=O)C)C</chem>	0	0	0
<chem>CC1CCC(CC1)C</chem>	0	0	1
<chem>C[C@@H]1O[C@@H](O[C@H]2C[C@H](O)C[C@@H]2)[C@H](O)C1</chem>	1		
<chem>CC1=CC[C@H]2[C@H](C1)[C@H](CC=C2)C</chem>	0		
<chem>CC1SCC(NC1=O)C(=O)NC(Cc2c[nH]cn2)C</chem>	0		
<chem>O=C1c2cccc3ccc4c5ccccc5cc1c4c23</chem>	1		
<chem>CCC12CCC3C(CCC4=CC(=O)CCC34)C1CCC</chem>	0		
<chem>C[N@+]1([O-])CCC[C@@H]1c2cccnc2</chem>	0		
<chem>CN(N=O)c1cccnc1</chem>	0		
<chem>CC(C)CCC[C@H]1C</chem>	0	0	0
<chem>CC(C)OC=O</chem>			0
<chem>CC(=O)OCCCC1CCCCC1</chem>			0
<chem>C[N+](=NC[C@H]1O[C@@H](CO)[C@H](O)C1)[O-]</chem>	0		
<chem>[O-][N+](=O)c1cc2c3cccc3c4cccc(c1)c2</chem>	1		
<chem>Cc1ccc2nc3c(ccc4cccc34)c(C)c2c1</chem>	1		
<chem>CC(C)C(=O)O</chem>	1	0	
<chem>Fc1ccc(cc1)C(=O)C2OC2c3cccc3</chem>	1		
<chem>C[C@H]1[C@H](O)C</chem>	0	0	
<chem>CC(=C)C=C</chem>	0		0
<chem>S=C1SC=C(S1)c2cccc2</chem>	0		
<chem>C1CCC2C(C1)C3OC3c4cccc24</chem>	0		
<chem>NC(=O)C[S+](O)C1CCC1</chem>	0		
<chem>CNC1CC(OC2CC(O)(Cc3c(O)c4C(=O)c5ccc</chem>	1		
<chem>C[C@]12CC[C@@H]1C</chem>	0		1
<chem>COc1cccc(c1)[N+](=O)[O-]</chem>	0		
<chem>Clc1ccc2Oc3cc(Cl)ccc3Oc2c1</chem>	0		
<chem>COc1cccc1NCSC</chem>	1		
<chem>CCCN(CCC)CC</chem>	1	0	0
<chem>CN(CCN1CCCCC1)CCc2ccc</chem>		1	
<chem>CC[n+](O)C</chem>			0
<chem>CC(C)[C@@]12C[C@@H]1[C@H](C)C(=O)C1</chem>	0		
<chem>ClC1C(=O)NC(=O)C1=C(Cl)Cl</chem>	1		
<chem>COC(=O)c1cc(cc(c1)S(=O)(=O)[O-])C(=O)OC</chem>			0
<chem>CCSCC</chem>			0
<chem>N[C@H](C(=O)C)C</chem>	0	0	
<chem>CCCC[C@H]1C</chem>	0	0	0
<chem>[O-][N+](=O)c1ccc2c3ccc(cc3C(=O)c2c1</chem>	1		
<chem>CCC12OC1(C(=O)OC)C(=O)OC2C</chem>	1		
<chem>COc1cc2c(Cc3c4N(C)CCc5c</chem>		0	
<chem>CC1(C)[C@H]2CC[C@]1(C)[C@H](O)C2</chem>			0

CN(C)C(=O)C=Cc1oc(cc1)N(=O)=O	1		
O=N(=O)c1ccc(Sc2ccccc2)cc1	1		
OCc1cccc(c1)N(=O)=O	0		
OCCN1CN(CCO)CN(CCO)C1	1		
CC(C)C1NC(=O)C(NC(=O)C	0		
COC(=O)[C@]12O[C@@]1(C)[C@@](O	1		
CCCCOC(=O)CC(CC(=O)OCCCC)(OC(=O)C	0		0
COP(=O)(OC)Oc1c(Cl)cc(C)cc1Cl	0		
CCC1(O)CC(OC2CC(C(OC3CC(O)C(O)C(C)	1		
NC(CCCCCP(=	0	0	
CC(C)COC(=O)c1ccccc1N	0		
CC(CC=O)c1ccc(cc1)C(C)(C)C	0		
Clc1ccc2N(C	0	0	1
COc1ccccc1OCC(O)COC(=O)N			0
Fc1ccc(cc1)C	1	1	
CCC(C)(C)C1CCC(O)CC1			0
CNN	1		
OCC(O)CN=[N+]=[N-]	1		
OCC(Br)(CO)	0	0	0
c1cc2ccc3ccnc4ccc(c1)c2c34	1		
CN[C@@H]1[C@@H](O)[C@@H](O[C@H]2[C@H](N			0
OC(=O)CC#N			0
NC(CCC(=O)NC(CSC(=O)NCCCCI)C(=O)N	1		
COc1cc(NS(=O)(=O)C)ccc1Nc2c3ccccc3r	1		
OC1C=Cc2c(ccc3c(c4ccccc4cc23)[N+](=C	1		
COc1nncc2ccccc12	0		
Nc1ccc2C(=O)c3ccccc3C(=O)c2c1	1		1
CCCC(C)CC	0	0	0
NCCC(O)(P(=	0	0	0
[O-][N+](=O)c1cc(Cl)c(Cl)c(Cl)c1	1		
CCCC(C)C(=O)O	0		0
COC(=O)C1=C(C)NC(=C(C1c2cccc(c2)N(=O)=O)C(=O)C			1
CCN1C=C(C(=	0	0	
CCOP(=O)(OCC)SCCSCC			0
COc1ccc(cc1)	0	0	0
OC[C@H]1NC[C@H](O)[C		0	
C1O[C@@H]1c2cc3ccccc3c4ccccc24	1		
Oc1ccc(c(Cl)c1)c2ccccc2			1
CN(C)Cc1cc(CN(C)C)c(O)c(CN(C)C)c1			0
CC(=O)C=Cc1occc1			0
N[C@@H](Cc1ccc(Oc2cc(I)c(O)c(I)c2)c(I)c1)C(=O)O			0
OC(Cc1cn(N=O)c2ccccc12)C(=O)O	1		
CCCCNCCCC	0		

Cc1ncc(CO)c	0	0	0
CC(C)OC(=O)C=Cc1oc(cc1)N(=O)=O			1
COc1cc2NC(=O)NC(=O)c2cc1OC			0
O=N(=O)c1ccc(Oc2ccc(cc2)N=C=S)cc1			1
N[C@@H](Cc1cc(cc(CP(=C	0		
Cc1onc(c1)C(=O)NCCc2ccc	0		
CCN[C@H]1C[C@H](C)S(=O)(=O)c2sc(cc12)S(=O)(=O			0
CC(C)C1=CC2=CC[C@H]3[C	0		
CCCc1c(O)c(c	0		
CC(C)CC(=O)OCC=C		0	0
OC(=O)c1c(Br)c(Br)c(Br)c(Br)c1C(=O)O		0	
C\C=C\1/C[C@H]2C[C@@H]1C=C2		0	
CCOC(=O)[C@H](C)O		0	
ClCCBr		1	
Cc1ccc2cc3c4ccccc4C5OC5c3c6CCc1c26		1	
Clc1nsc2ccc(cc12)N(=O)=O		1	
NC(CSC(F)(F)C(Cl)Cl)C(=O)O		0	
O=C1c2ccccc	0	0	1
O=C1C=CC(=O)N1c2ccc(Cc3ccc(cc3)N4C		0	
Oc1c2ccccc2nc3ccc4OCCOc4c13		1	
ON(C(=O)c1ccccc1)c2ccc3c(Cc4ccccc34)		1	
NS(=O)(=O)Cc1noc2ccccc12			0
CC(=O)OCC(=	0	0	
FC(F)(F)\C(=N/OCC1OCCO1)\c2ccc(Cl)cc2			0
O1C2C=Cc3ccnc3C12		1	
[O-][N+](=O)c1ccccc1SS\C(=C/Cl)\C(=C		1	
[O-][N+](=O)c1cccc(CCl)c1		1	
[O-][N+](=O)c1ccc2nc3ccccc3nc2c1		1	
CCC(=C(CC)c1ccc(O)cc1)c2ccc(O)cc2			1
OCC(CO)(CO)N(=O)=O			0
O=C1CCCCCCCCCCCCCO1			0
[O-][N+](=O)c1ccccc1\C=C\C=C(/C#N)\c		1	
CS(=O)c1ccc(Cl)cc1		0	
CCOC(=O)\C=	0	0	
Cc1cccc(C=C)c1			0
CC[C@H]1CN2CCc3cc(OC)c(OC)cc3[C@H		0	
Fc1ccc2c3cc4ccccc4cc3c5ccccc1c25		1	
Nc1cc(c(N)cc1Cl)[N+](=O)[O-]		1	
OC(C(=O)OC1C[C@H]2CC[C@H](C1)[N+]23CCCC3)(			0
CC(Br)C(=O)NC(C)(C)C		0	
[CH2-][N+](=O)[O-]		0	
CC(C)N=C=NC(C)C		0	0
CCCCC1=NC2	0	0	

CCCN1CC2CC3C(CC(C)CN3C#N)c4cccc1c2	1		
COc1cccc2c1cc(c3c(cc4OCOC4c23)C(=O)[O-])N(=O)=C		1	
NC1=CC(=CN	0	0	0
CC(C)n1c(\C=C\[C@H](O)C[C@@H](O)C	0		
Cn1c(N)nc2ccc(cc12)C#N	1		
C[C@@H](c1ncncc1F)[C@](O)(Cn2cncn2)c3ccc(F)cc3	0		1
CNC(=O)[C@H]1O[C@H]([	0		
O=C1CCC(=N	0	0	0
COc1cc(cc(OC)c1O)C2C3C(COC3=O)C(O	0		
CC[C@@H](CO)NCCN[C@@H](CC)CO		0	
CCOC(=O)N(N=O)C(CCC=O)c1cccnc1	1		
Nc1cccnc1		0	
Nc1ccc2nc3c(N)cccc3nc2c1	1		
CC(=NN=Cc1cn(=O)c2ccccc2n1=O)O	1		
COc1ccc(cc1(	0	0	0
Cc1ncsc1CCCl		0	0
Cc1cc2CCC(=O)c2c3ccc4ccccc4c13	1		
C[C@@H](O)CN(C[C@H](O)CO)N=O	1		
C[C@]12CC[	0	1	0
Cc1ccnc(N[S+](=O)([O-])c:	0		
CC(C)(CS(=O)(=O)O)NC(=O)C=C		0	
O=N(=O)c1ccc2c3ccccc3c4ccc5ccc1c2c	1		
O=C(OCCCc1ccccc1)C=Cc2ccccc2		0	
CCCCCCCCCCCCCl		0	
CNC(=O)N(C)N=O	1		
CC(C)c1ccc(OP(=O)(Oc2ccccc2)Oc3ccccc	0		
CN(C)CCNC(=O)c1cccc2C(=O)c3ccccc3C(	1		
CN\C(=N/c1c	0	0	0
Cc1ccc(cc1)C	0	0	
Nc1cc(Cl)c(Cl)c(Cl)c1	0		
COc1ccc(O)c2C(=O)c3c(OC)cc4O[C@@H	1		
Cc1ccccc1C(=O)Nc2ccc(C(=O)N3CCCC(O)c4cc(Cl)ccc3'	1		
CCC1(OC1(C(=O)N)C(=O)OC)C(C)O	0		
O=C1NC=Nc2ccccc12		0	
CC(C)[C@H]1CC[C@@H](C	0		
CCN(CCO)CCn1c(Cc2ccccc2)nc3N(C)C(=O)N(C)C(=O)c:	0		
CN\C(=N/C#N)\NCCSCc1c:	0		0
CC(=O)Oc1cc	0	0	
COc1ccc(cc1(	0	0	
COc1ccccc1Oc2c(N[S+](=C	0		
C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CC=C4NC(=	1		
Oc1c(Br)cc\	1	0	
OC(=O)[C@	0	0	

CCCCC\C=C/CCCCCCCC(=O)O				0
CCCC(CC)CN1CN(CC(CC)CCCC)CC(C)(N)C1				0
C=Cc1ccc(cc1)N(=O)=O			1	
FC1(F)C(F)(F	0	0		0
OC(=O)c1cc(Cl)ccc1O			0	
CCCc1c(O)c(CC=O)ccc1OC(		0		
Nc1ccc(\C=C\c2ccc(cc2)[N+](=O)[O-])cc			1	
NO	0	0		
CCCCC(=O)Cl				0
COc1ccc(COC)cc1				0
CN(CC(O)CO)N=O			1	
Cc1cc(O)c2C(=O)c3c(O)ccc	0		1	1
CC1=CN([C@	0	0		0
CCN(CC)CCNC(=O)c1cc(Br)		0		0
CCCCc1ccc2[C@@H]([C@H]([C@H](c3ccc(OC)cc3C[C@				0
Nc1ccc(cc1)S(=O)(=O)O			0	
C[C@@H]1C	0	0		
COC1=CC=C2C(=CC1=O)C(Cc3cc(OC)c(C			0	
Clc1c(Cl)c(C#N)c(Cl)c(C#N)c1Cl			0	
C(C1CO1)c2cccc3cccc23			1	
Nc1nc(cs1)\C(=C\CC(=O)O)\C(=O)N[C@H]2[C@H]3S(				0
COP(=S)(OC)Oc1cc(Cl)c(Cl)cc1Cl				1
CCc1cccc2cc(oc12)[C@H](O)CNC(C)(C)C			0	
Clc1ccc(OS(=O)(=O)c2ccc(Cl)cc2)cc1				1
CCO[P@](=S)(CC)Sc1cccc1			0	
Cc1cccc2ccc3cc4cccc4cc3c12			1	
Clc1nncc2cnccc12			0	
CCc1ccc(cc1)	0	0		0
CC1(CC(O)C2(C)C(CCC3C4(C)CCCC23OC4			0	
[O-][n+]1cccc2C3OC3C=Cc12			0	
OC(Cn1cncn1)(c2ccc(F)cc2)c3cccc3F				0
OC[C@H]1O[C@H]([C@H](O)[C@@H]1O)n2cnc3c(O)				0
CC1CC(CC(C)(	1	0	0	0
OC(=O)c1ccc2cc(ccc2c1)C(=O)O				0
Cn1ccnc1N(=O)=O			1	
CC1=Nc2ccc(	0			0
Cc1ccsc1			0	
C[C@]12CCC3C(CCC4=C(Cl)		0		
O=CCCC=O		0	1	0
OC(=O)[C@@H]1C[C@H](CP(=O)(O)O)CCN1				0
COP(=S)(Cl)OC			0	0
C\C=C/C=C/C/C=C/C=C/C=C(C\C)/C=C/C=C(C			0	
[O-][N+](=O)c1ccc(N2CCN		0		

CC1(C)C2CCC1(C)C(O)C2	0		
OC(=O)C1CSCN1N=O	0		
CCC(=N(=O)O)C	0		
CCOP(=S)(OCC)SCCSCC	0	0	
[O-][N+](=O)c1ccc2Oc3cc(ccc3Oc2c1)[N	1		
CCN[C@@H]1CN(CCCOC)[	0		
OC1COC(Nc2ccc(cc2)C(=O)O)C(O)C1O	0		
CC(CN(CC(C)OC(=O)C)N=O)OC(=O)C	1		
Nc1ccccc1C(=O)OC\C=C\c2ccccc2	0		
CC(C)COCC(CN(Cc1ccccc1),	0		
OC[C@H]1O[C@H](C[C@	0		
CN1[C@H](C	1		
C[C@]12CC(=	0		0
C\C(=C/C=O)\Cl	1		
CC(=O)O[C@	0	0	
C[C@H]1CS(=O)(=O)CCN1\N=C\c2oc(cc	1		
CCOc1ccc(N\C(=N\c2ccc(OCC)cc2)\C)cc1			0
NC(=N)NC(=I	1	0	
CCOC(=O)N(C)C(=O)CSP(=S)(OCC)OCC			0
COc1cc(ccc1	0	0	0
CC(C)NNC(=C	0	0	0
CNC(=O)\C=C\c1oc(cc1)[N+](=O)[O-]	1		1
CNC1C(O)C(C	0	0	
NC1=NC(=O)C(O1)c2ccccc2			0
CNC(=O)Oc1ccccc1	0		
C1Cc2cccc3cccc1c23	0	0	
CCN(CC)CC#C	1	1	0
[O-][N+](=O)c1oc(C=O)cc1	1		
CN(C)c1cccc2c(cccc12)[S+	0		
CNC(=O)CN(CCN(CCN(CC(=O)[O-])CC(=O)NC)CC(=O)[			0
Cc1ccc(N=Nc2c(O)ccc3ccccc23)c(c1)S(=	0		
CNc1ccc(cc1)N=Nc2ccc3ncsc3c2	1		
COC(=O)C1(O)c2ccccc2c3ccccc13			0
COc1ccc(cc1[N+](=O)[O-])C2=C(C(=O)c	1		
C([C@@H]1CN2CCC1CC2)N3c4ccccc4Sc5ccccc35			0
C[C@H](CCCC(C)(C)O)[C@	1		1
COc1ccc2C[C@H]3NCC[C@@]45[C@@H](Oc1c24)[C			0
CN(C)CCCCI	1		0
Cc1c2ccccc2cc3c4C(O)C(O)C=Cc4ccc13	1		
CCN(CC)C(=O	1	0	
CCOC(=O)c1c	0	0	0
NCC1CCC(CC1)C(=O)c2ccc(CCC(=O)O)cc	0		
Cc1cccn2c1nc3ccc(N)nc23	1		

Oc1ccc(Cl)cc1C(=O)c2ccccc2				1
CC(=O)OC(C1CO1)c2ccc3OCOC3c2			1	
CCOc1ccc(N)c(c1)N(=O)=O				0
CC(=O)NCCO				0
Br\C=C\1/CC	1	0		
CC(C)C1CCC(C1)C	0	0	1	
CSC1=NN=C(C(=O)N1N)C(C)(C)C				0
Cc1ncc(N(=O)=O)n1CCO			1	0
[O-][N+](=O)\C(=C\c1ccccc1)\Br			1	
O=C(CN1CCN	1	1		0
CN1N=C(N)c1	0	1		1
CCCCCCC(=O)OCCN1CCN(CCCN2c3ccccc2			0	
CC(=Nc1ccc(C=CC(=O)c2ccccc2)cc1)O			1	
CCC1(O)CC(OC2CC(N)C(O)C(C)O2)c3c(O			1	
COc1cc(cc(O)c1)C	0	0		0
CCN1C(c2ccccc2)c3cc(N)ccc3c4ccc(N)cc			1	
COc1cc(OC)c1	0	0		0
CCCCCCCCCCC(=O)N(C)CC(=O)[O-]				0
CN(Cc1ccc(Cl)nc1)\C(=N/C#N)\C				0
Cc1nc(C)c(C)nc1C				0
Cc1cc2ccccc2c3cc(c4ccccc4c13)[N+](=O			1	
CC(=O)N[C@H](C)C	0	0		
OC(=O)c1cn(=O)c2ccccc2n1=O			1	
COCCOC(=O)C	0	0		
OC(=O)c1ccc(cc1)C	0	0		0
O1C2C1c3ccccc4C5OC5c6ccccc2c6c34			1	
CN(C)c1ccc(cc1)C	0	0	0	1
O=C(NC1CCN	1	1		0
CC(=O)Nc1nc(\C=C/c2oc(cc2)[N+](=O)[O-]			1	
N[C@H](C)[C@H](CC(=O)O)C				0
OC(=O)c1ccc(cc1)C	0	0		0
CC(=C[C@@H](C)C	0	0		0
CC1NCCOC1c	0	0		0
CCCCCCCC\C=C/CCCCCCCC(C)C			0	1
O=C1NC(=O)C	0	0		0
CCOP(=O)(SC(C)CC)N1CCSC1=O				0
OC(=O)CCSSCCC(=O)O				0
OC1C=Cc2c(ccc3c4CCC(=O)c4ccc23)C1O			1	
CCOS(=O)(=O)C			1	0
O[C@H]1C=Cc2cc3ccc4c(ccc5ccc(c2)[C@			1	
CC(=O)ON(OCc1ccc(C)cc1)C(=O)c2ccccc			1	
CC(C)COCNC(=O)C=C				0
CC(O)CN(CC(O)CO)N=O			1	



CC(C)CCCC(=O)O		0
CC(=CCO)C		0
ClC(Cl)(Br)Br		0
OC(=O)C1=CCCN(C1)N=O	1	
C\C=C\Cl	1	
COc1ccc(cc1)N=[N+](O)c2ccc(OC)cc2	1	
C(CSc1ccccc1)Sc2ccccc2	0	
Nc1cc2[nH]c3ccccc3c2cc1[N+](=O)[O-]	1	
FC(=C(F)F)F	0	
Cc1cc2c(O)cccc2c3cc4ccccc4cc13	1	
CCCCCCCCCBr		0
N[C@@H](C(=O)N[C@H]1[C@H]2CCC(=C(N2C1=O)C(		0
CCCN(C(=O)CCCl)c1snc2ccccc12	1	
OC(=Nc1cccc(Cl)c1)c2csc(c2)N(=O)=O	1	
CC(=C)[C@@H]1CCC(=CC1)C		0
C1C\C=C\CCC2OC2CC\C=C/1	0	
C[C@@H](CCN(C)C)N(C)C	0	
OC(=O)COc1ccc(CCN[S+])(=	0	
OC12CC3CC(C1)C(=O)C(C3)C2		0
CC(=O)ON(C(=O)C)c1ccccc1C	0	
[O-][N+](=O)c1ccc2C(=O)C(=O)c3cccc4c	1	
Cc1cc(Cl)ccc1OCC(=O)O	0	0
NC(=N)SCCc1ccc(OCc2ccc(	1	
[O-]C(=O)c1c	1	0
O=N(=O)c1ccc2ccc3ccccc4C5OC5c1c2c34	1	
NC(=O)c1ccc(cc1Cl)N(=O)=O		0
CCCCCCCCC	0	0
CC(C)(O)[C@	0	0
CN(C)NC(=O)CCC(=O)O	0	0
CCOc1cc(OP(=S)(OC)OC)nc(CC)n1		0
C[C@H]1CCC[C@@H](C)N1		0
Cc1cnc(S)nc1O	0	
CN(C)c1ccc2nc3cc(C)c(N)cc3[s+](c2c1	1	1
C[C@]12CCC3[C@@H](CC	0	
CC1(C)CC(=O)C(C2C3=C(CC	0	
CCN(CC)c1ccc(cc1)c2ccc(cc2)c3ccc(cc3)c	0	
Cc1cnc2c(cc(C)c3c2nc(N)n3C)n1	1	
CC(C)CCCCCc1ccc(OCCOCCO)cc1		0
Clc1ccc(Cl)nc1	0	
ON(=O)=C=Cc1ccccc1	1	
CCC(C)COC(=O)C=Cc1ccc(cc1)N=Cc2ccc(	1	
Cc1cc(cc(c1)C#N=O)C#N=O	1	
Oc1ccc2c(ccc3c4ccccc4c1c23)[N+](=O)[	1	

N#CC1(CCCC	0	0		0
Nc1ccc(cc1)c2ccc(Cl)cc2			1	
O[C@@H]1CCN(C1)N=O			1	
Cc1c(\C=N\OCc2cccc(c2)[N+](=O)[O-])c			1	
Nc1cccc1Cl			0	0
CCCCCCCCCCCCBr				0
Nc1cccc(c1O)[N+](=O)[O-]			0	
Cc1c(C)c2c(nc(N)n2C)c3nccnc13			1	
NC(=O)N[C@	0	0		
CCCCCCCCC1	1			
COc1ccc2C[C@@H]3N(C)C		0		
O=N(=O)C1=Cc2c3ccc4ccccc4c3cc5cccc1			1	
CC(=O)OCCC(C=O)c1c(O)cc2C(=O)c3cc(C			1	
OC1C(O)c2c(ccc3ccccc23)c4ccccc14			0	
OCCN(CCO)c1ccc(cc1)N=Nc2ccc(cc2N(=			1	
CN1CCN(CC1	0	0		0
C[C@]12CC[C@H](C1)C(C)(C)C2=O			0	
COc1cc(C(C)C)c2C(=O)N(COC3=CC(=O)N4C=CC=C(OC				0
c1ccc2nc3c4ccccc4c5ccccc5c3cc2c1			1	
COc1ccc(cc1OC)C2=C(O)C(		0		
Cc1c2ccc3C(O)C(O)C=Cc3c2nc4ccc(CO)c			1	
CN[C@H](CC	0	0		
COP(=S)(OC)Oc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]			1	
o1cccc1			0	0
Nc1nc(O)c2nc(CNc3ccc(cc3)C(=O)NC(CC			0	
CCc1cc(cc2OCOc12)C3=C(N(c4ccccc4C(F)(F)F)S(=O)(=				1
OC(=O)c1c(Cl)ccc2cc(Cl)cnc12				0
OCC(O)C(O)C(O)C(O)C1SCCN1N=O			1	
COC(=O)CC#N				0
CCOc1cccc(N)c1			1	0
CC(C)(Cl)OC(C)(C)Cl			1	
CCCCC(O)c1cccc(OCc2ccc		0		
CC(C)CC(C)CC(C)\C=C(/C)\C1CC(=O)OC1=O				0
CC(C)(C)C=C	1	0		
OC(=O)C(=O)O			0	0
CC\C=C\C=C\C=C\C=C\C=C\C=C\OCC(C)O			1	
CC(=CC1C(C(=O)OC2=C(C)C(CC=C)C(=O)C			1	
COC1CC(CC(C		0		
CN(N=O)C#N			1	
[O-][n+]1cc2ccncc2cn1			0	
CCCCCCCCC(=O)OC				0
NC(=O)N	0	0	0	0
CC[S+](=O)([O-])N1CCC[C(		0		

Cc1ccc(N)cc1Cl				0
CC(=O)Nc1ccc2[nH]c3c(C)c4ccncc4c(C)c	0			
CCN1C=CN(C)C1C				0
CC(Cl)(Cl)Cl				0
NC(=O)CS(=C	0			0
[O-][N+](=O)c1ccc(s1)c2nc(N3CCOCC3)	1			
C1Cc2cc3ccc4cccc5ccc(c2[C@@H]6O[C(	1			
CC(CC1=C(COC1O)C=O)C2=CCC(C)(C)C2	0			
Cc1nc2C(=O)C(=CC(=O)c2c3[nH]c4cccc	1			
CC(C)(CCC(=O)O)C(=O)O				0
CC(=O)O[C@H]1[C@H](O)[C@@H]2O[C(	0			
NC(CCN=N#N)C(=O)O	1			
NC(=O)CNC(=O)C=[N+]=[N-]	1			
Cc1onc(N[S+](=O)([O-])c2	0			
N#Cc1cccnc1				0
CC1Cc2c(O)c(C)c3C4C(CCC(=C)c3c2C1=C	0			
CCCCOC(=O)CCCCCCCC=C				0
OC(=O)C(=O)Nc1cccc(c1)c2nn[nH]n2	0			
CC(C)[C@@H](C)\C=C\[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2'	0			
OC(=O)C(=O)Cc1cccc1				0
CC1(C)CCC[C@@]2(C)[C@	0			
COc1cccc1C	0	0		
CCCCC(=O)O[C@@]1(CC[C@H]2[C@@H]3CCC4=CC(				1
Cc1cc2cccc2c3ccc4C(O)C(O)C5OC5c4c1	1			
COc1cccc1C2=C(O)C(=O)c	0			
COC(=O)C(Cc	0	0		
CN(C)CCCNc1c2cccc2nc3c(ccc(c13)[N+	1			
COC(=O)C1=	1	0		
Nc1cc2cccc2c3cccc13	1			
CC(C)CCCCCOC(=O)C(=C)C	0			
OC(=O)\C(=C(/CCl)\C=O)\Cl	1			
CC12CCC(C1)C(C)(C)C2O				0
CCC[C@H](C)C1(CC=C)C(=O)NC(=O)NC1=O				0
CC=CC(=O)OC1CC2OC3=CC(C)C(=O)CC3(	0			
O=C(Nc1cccc1)OC[C@H](	0			
O=C1CCCCC1=O	1			
Cc1ccc(cc1N)N(=O)=O	1			0
COc1ccc(C(=	1	0	0	0
O=C1CCC(N2	0	0	0	0
CCc1c2cccc2c(C)c3ccc4cccc4c13	0			
OCP(CO)(CO)CO	0			
Cc1cc2N=C3C(=O)NC(=O)N=C3N(C[C@H](O)[C@H](C				1
OCC1=CC(=O	0	0	1	0

CNCCC(Oc1c	1	1	
NCCCCN[S+](=O)([O-])c1c		0	
CC1(C)C(O)C(C)(C)C1O			0
Cc1cc(Cl)ccc1OCCCC(=O)O		0	0
[O-][N+](=O)c1ccc2oc3ccccc3c2c1		1	
Nc1cccc(N)n1		1	1
CC[C@@]1(O)C[C@H](O)[C@H]2C[C@@H]([C@H](O			1
NCCC(=O)NC	0		
CCCCOC(=O)c1ccccc1C(=O)OC2CCCCC2		0	
CCNc1cccc(O)c1		1	
COC(=O)CCC	0	0	0
CCCCCCCCC	0	0	0
CC1CNCCN1[S+](=O)([O-])		0	
CNCCc1ccc(C	0		
C=CCOC(=O)C=C		0	
[O-][N+](=O)c1ccc(N\N=C(\N=Nc2ccc(		0	
Cc1ccc2C(=O)c3ccccc3C(=O)c2c1N(=O)=		1	1
C[N+]1(C)CC	0	0	
C[C@H](CCC	0	0	
CC(=C)C1CCC(=CC1)C=O		0	
CN[C@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H]1[C@H](O)c2ccc(O			0
NCCCNCCCCNC(=O)C(O)NC(=O)CCCCCNC(=N)N			0
CSCC(NC(=O)COc1ccccc2cnccc12)C(=O)N		0	
O=C1C(=O)c2ccccc3ccccc1c23		1	
O=C1N(CCCCN2CCN(CC2)c3ncccn3)S(=O)(=O)c4ccccc:			0
Cc1ccc(cc1N=C=O)N=C=O		1	
Cc1cnc(c[n+]	0	0	0
[O-][n+]1cc2cccnc2cn1		0	
CC(C)CCCCC1ccc(O)cc1			1
CC1CN(CCN1)c2cc3N(C=C(C(=O)O)C(=O		1	0
OC[C@H]1O[C@@H](OCCc2ccc(O)cc2)[C@H](O)[C@			0
[O-]C(=O)c1cccn1			0
CSc1ncnc2c1ncn2CC(O)CN=N#N		1	
Cc1ccc(c(O)c1C(O)c2ncc([N+](=O)[O-])r		0	
CC\C=C\C=C=O		1	
COc1cc(OC)c2C(=O)CC(Oc:		0	
CCOC(=O)c1ccccc1C(=C2C=C(Br)C(=O)C(=C2)Br)c3cc(			1
CC(C)[C@@H]1CC[C@@H](C)C[C@H]1O			0
CC(=O)Oc1ccccc2cccn12		0	
Cc1oc(C)cc1		0	0
OCc1cccc(Oc2ccccc2)c1			1
CN1CCN(CC1	1	1	
CN(C)c1ccc(N=Nc2ccccc2)c(C)c1		1	

CCCCC(C)N	0	0	0
ClCC(=O)Nc1cccc1			0
CCCN[C@@H]	0	0	
COc1cc(C=O)ccc1O		0	0
Cc1c(O)cc2C(=O)c3cccc3C(=O)c2c1O			1
CCCCCCCC(=O)O			0
CCCC(=O)O[C@@]1(CC[C@H]2[C@@H]3CCCC4=CC(=O)			0
COC(=O)CC1Cc2cc3cc(OC)c(c(O)c3c(O)c		0	
ClC1(Cl)C2(Cl)C3(Cl)C4(Cl)C(=O)C5(Cl)C(		0	1
CCOc1ccc(\C=C\C(=O)c2cc		0	
CCN(C(C)C)c1nc(N)c(nc1Cl		1	
CC(=O)Nc1ccc(Cc2ccc(N)c(Cl)c2)cc1Cl			1
[O-][N+](=O)c1cccc1\C=C\c2ccccn2			1
CNC(=S)NN			0
NC(=O)c1ccc	0	0	0
CC(C)Nc1cccc2C(=O)c3cccc3C(=O)c12			1
OC(CO)c1cccc	0	0	0
FC(F)(F)c1cc	0	0	1
O=C1\C=C\c2ccsc2)\CC/C		0	
OCC1COC(CCl)O1			1
c1ccc(cc1)N=Nc2cccc2			1
C[C@H]1CN1			1
O=C[C@H]1CO1			1
CCN(CC)C(=O)C			0
Nc1c(Br)cc(Br)cc1CNC2CC		0	
c1cc2ccc3cc4cccc5ccc6cc(c1)c2c3c6c45			1
ClC1=C(Cl)C(=O)C(=C(Cl)C1=O)Cl			1
CC(O)CN(C)N=O			1
CCNCCN			0
C1CCC2CC3(CCC2C1)CO3			0
OC[C@H]1O(	0	0	
Cc1cc(C)nc(Nc2cccc2)n1			0
C1CCC2OCCOCCOC3CCCC3OCCOCCOC2		0	
O[S+](=O)([O-])c1cccc2c(c		0	
CCC(C)(C)c1cc(O)c(cc1O)C(C)(C)CC			1
CC(=O)Nc1cc2Cc3cccc3c2cc1Cl			1
Oc1ncc(N(CC	0	0	1
CN(C)C(=S)S			0
CC(C)(CO)[C(	0	0	
CCN(CC)C(=O)Cc1cccc1			0
Oc1c(CC=C)cccc1\C=N\NC		1	
S=C=Nc1cccc(c1)C2(CCCCC		1	
O1[C@H]2C=Cc3ccnc3[C@@H]12			1

CCC(C)C(=O)C	0	0	
[O-]S(=O)(=O)c1cccc1C=Cc2ccc(cc2)c3ccc(C=Cc4cccc			0
O=C(C1OC1c2ccc(cc2)c3cc	0	0	
COC(=O)c1cc	0		0
CCCCC1C(=O)	0	0	1
CC1=Nc2c(O)cccc2C(=O)N	0		
OCC(O)CCI		1	0
CN(Cc1cnc2nc(N)nc(N)c2n1)c3c(Cl)cc(cc	0		
C[C@H]1N=C(N)O[C@H]1c2cccc2			0
CC1C2C(=Nc3cccc23)N(C)c4ccc(C)cc14	1		
Nc1ncnc2c1nc(c3ccc(cc3)[N+](=O)[O-])	1		
Clc1cc2Oc3cc(Cl)c(cc3Oc2cc1Cl)N(=O)=	1		
C[C@H](N)[C	0	0	0
OC(CC(C1=C(O)c2cccc2OC1=O)c3cccc3)c4ccc(cc4)c!			1
OCCCCCCI			0
CCCCC(CC)COC(=O)c1ccc(cc1)N(C)N=O	0		
CCCCCCCCN(C)CCCCCCC			0
N[C@H](CCC	0	0	0
CC(C)c1ccc(O)c(c1)C(C)C			1
Nc1ccc(cc1)S	0		0
CCN1N=C(C(=	0	0	1
[NH3+]C(=N)	0	0	0
CC(C)NCC(O)COc1cccc2CC(COc12)ON(=	0		
Nc1c2cccc2nc3ccc(O)cc13	1		
CN1CCN(CC1	0	0	
OC1C=Cc2c(cc3cccc3c2[N+](=O)[O-])C:	1		
O=P(Oc1cccc1)Oc2cccc2			0
Cc1cccc(c1)C2=CC(=O)c3cc	0		
COc1cc2CC(CC3CCN(Cc4cccc4)CC3)C(=O)c2cc1OC			0
OC(=O)c1cccc1Cl		0	
CC(C)C(=O)C			0
CNC(=O)[C@H]1O[C@H]([	0		
COC(=O)C1=C(C)N(CC#C)C	1		
O=N(=O)c1ccc2c(c1)c3ccc(c4cccc2c34)N	1		
CO[C@H]1[C@H](O)CC(=O)O[C@H](C)CC=CC=C[C@H			0
CCCCCCCC(=O)OC(CC(=O)C	0		
OCC1O[C@H	0	0	
CCCCCCCCCCCC(=O)N(O)c1ccc2c(Cc3c	1		
COc1cccc(c1)N=C(O)c2csc(c2)N(=O)=O	1		
OC(=O)C(=O)Cc1c[nH]c2cccc12			1
Cc1cc(C)c(N)c(Cl)c1			0
Cc1cnc2cc(C)c3c(nc(N)n3C)c2n1	1		
CC(=O)Nc1ccc2c(Cc3cccc23)c1OC(=O)C	0		

CC(Cc1cccc(c1)C(F)(F)F)N(C	0			
CC(=O)N(OC1OC(CO)C(O)C(O)C1O)c2cc			1	
NCCCCCCCCCN[S+](=O)([O-	0			
NC(Cn1ccnc1)C(=O)O			1	
COc1cc2C(=O)c3cc(C)cc(O)c3C(=O)c2c(C			1	
CC(C)C[C@H]	0	0		
Cc1cccc(C)c1[N+](=O)[O-]			0	
OC[C@@H](C	0	0		0
CN1C(=O)CC(C1=O)c2cccc2				0
Nc1ncnc2c1ncn2C(c3cccc3)(c4cccc4)c			1	
CCNS(=O)(=O)c1ccc(C)cc1			0	0
CCCCC(=O)OC1(CCC2C3CCC4=CC(=O)C			0	
O1C2C=Cc3ncccc3C12			0	
NNc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]			1	
CC(C)(c1ccc(OC[C@H]2CO2)cc1)c3ccc(C			1	
[O-][N+](=O)c1cccc2c1OC(=O)c3cccc2:			1	
COC(=O)C1=C	1	0		
Nc1ccc(cc1)[S+](=O)([O-])		0		
CN1C(=O)N(C)C(=O)C(=C1N)N=O				0
CC1COc2c(N:	0	0	0	0
Oc1ccc(cc1)c2cccc2			1	
CC(CN(C)C)C(	1	0		0
COc1ccc2nc3occc3c(OC)c2c1			1	
Cc1nc(Nc2nc	0			
CC(=O)[C@H	0			0
OC(=O)CCS				0
[O-][N+](=O)c1ccc2cc3cccc3cc2c1			1	
Cc1onc(O)c1CCC(N)C(=O)C		0		
Cc1cc(C)cc(N)c1			1	0
O=N(=O)c1ccc2ccc3cc4C=CCc4c5ccc1c:			1	
Sc1cccc1			0	0
CO\N=C(/C(=	0	0		
CC(C)(C)CC(C)(C)c1cccc1O				1
CCN(CC)CCN(C	1	0		0
Cc1ccc(cc1C)N=Nc2c(O)ccc3cccc23			0	
CC[C@@H](O)\C=C\C=C\C=C\C=C\C=C=O			1	
CCOc1ccc2NC(C)(C)CC(C)c2c1				0
CCCC(C)(CO)CO				0
CC(=C)OC(=O)C			0	0
Nc1cc(Cl)c(cc1O)N(=O)=O			1	1
CN(C)CCNC(=O)c1cccc2ccc(nc12)c3cccc			1	
COc1ccc(CN=	0	0		
ClC(Cl)(Cl)Cl			0	0

NNC(=O)CP(=	0	0		
OCC1CCC(O1)n2cnc3c(O)ncnc23			1	
Clc1ccc(cc1)C	0	0		1
CCOc1ccccc1O				0
OC[C@H]1O[C@H](O[C@H]2[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]2O)[C@H](O)[C@H]1O				0
OS(=O)(=O)N	0	0		0
COc1ccc(cc1N(=O)=O)C(=O)Nc2ccccc2				1
Cc1c(N)cc(cc1N)[N+](=O)[O-]			1	
CN(C)c1ccc(c	1	0	0	1
OC(C1CO1)c2ccc3OCOc3c2			1	
CCl			1	
CC(N)C(=O)N(CCCc1cccnc1)c2c(C)cccc2C				0
C[N+](C)(C)CCOC(=O)C=C				0
Nc1cnc2ccccc2c1			1	
Cc1cc(N)c(cc1N)[N+](=O)[O-]			1	
CCCCCCCCCn1cc[n+](C)c1				1
Cc1c2ccccc2c(C)c3ccccc13			1	
CC(C)(C)C1=CC(=O)C=C(C1=O)C2=CC(=O)C=C2			1	
CC(=O)OCc1c2ccccc2c3ccc4cccc5ccc1c3			1	
CN1C(=O)CC	0	0	0	0
C[C@H]1O[C@H](C[C@H]1O)C		1		1
Cc1ccccc1C(=O)N			0	0
CN(C)[C@@H]1O[C@H](C1)C	0	0		
Cc1cc2c(nc(N)n2C)c3nc(cnc13)c4ccccc4			1	
Oc1ccc(cc1)C	0	0	0	1
CCCCOC(=O)C=C			0	0
CCCCOC(=O)Cc1ccc(OCC(=O)N(CC)CC)c(OC)c1				0
CCCC[C@@H](CC)COC(=O)CCCC(=O)O			0	
CN(C)CCCNc1c2ccccc2nc3ccc(cc13)[N+](=O)[O-]			1	
CCC(=O)OCc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]			1	
Cc1ccc(C)c2c3ccccc3[nH]c12			1	
Oc1cc2ccccc2c3ccc4ccccc4c13			0	
COc1cc(Cl)ccc1Cl				0
CC1=C(O)C(=O)C(O)CO1			1	
CCCCON(OC(=O)C)C(=O)c1ccc(Br)cc1			1	
CCNC(=O)[C@H]1O[C@H](C1)C		0		
CC(C)(C)Br			1	
CN[C@@H](C)[C@H](O)c1ccccc1				0
O1C2C1C3N=NC2C4OC34			0	0
CCN1C[C@]2(C)CC[C@H](C1)C		0		
OC1c2cccc3ccc4c5ccccc5cc1c4c23			1	
Cc1cc(ccc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]			1	
CC(=C)CS(=O)(=O)[O-]				0



CC\C=C/C[C@@H]1[C@@	0		
SC(=N\C=C\N=C(S)S)		0	
[O-][N+](=O)c1ccccc1c2ccccc2		0	
CC(=O)c1c(O)cc(O)c2C(=O)c3c(O)cc(O)c		0	
COC(=O)c1ccc(C(=O)OC)c(c1)C(=O)OC			0
C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CC(=C)C4=CC(=O)C=C[C@	0		1
C[C@H](\C=C\[C@H](C)C(C)(C)O)[C@H]1CC[C@H]2\	1		
OC(=O)c1cc2OCOC2c3c4cccc(O)c4cc(c1:	1		
COc1cccc(\C=C\c2ccc(cc2)[N+](=O)[O-]	1		
COC1CC(OC(=O)\C=C\c2cc(OC)c(OC)c(O	0		
OC(=O)CCCC(=O)O	0		0
C[C@@H]1O	0	0	
CCCCCCCCCCCCCCCC			0
CC(C)CC(C)(c1ccc(O)cc1)c2ccc(O)cc2			1
CCC(CCOCN1C=CN(C)C1\C=N\O)[N+](=C	0		
CC(=C)C(=O)OCCOC(=O)C(=C)C	0		0
OC(=O)C1=Cl	0	0	1
CN(C)C(=O)Cl			1
CN(Cc1cccc(c1)C#N)N=O			1
CC(=O)Nc1ccc(cc1)C(=O)[C@@H]2O[C@	1		
CCCCN(CCCCO)N=O	1		0
COc1cccc(OC)c1C(=O)N[C@H]2[C@H]3SC(C)(C)[C@@			0
CCC[CH-][N+](=O)[O-]	0		
ClC1CCCN(C1)N=O	1		
Nc1cccc2ccnnc12	1		
CCCCOCCOCCOCCCC	0		0
COC(=O)C1C(	1	0	
N#N=NCc1cccc1			1
CC(C)[C@@H](C)\C=C\[C@@H](C)[C@H]1CC[C@H]2'			0
Cc1cccc(n1)c2[nH]c(nc2c3'	0		
CC[C@H]([C@	0	0	1
CC1=CC(=O)Oc2c3OC4(C)OOC4(C)c3ccc:	1		
NCc1cccc(c1)C2CCN(CC2)C(=O)c3oc(cc3)C#Cc4cccc4			0
CN(C)C(=O)C	0	0	
COC(=O)c1ccc(CBr)cc1			0
OC1CCC(CC1)C2CCCC2			0
S=C(Nc1cccc	0	0	
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O'		0	
NCCCS(=O)(=O)Nc1ccc(Nc2c3ccc(cc3nc'	1		
O=S1(=O)CCCO1	1		0
C[N+]1(C)[C@H]2CC(C[C@@H]1[C@H]3O[C@@H]23			0
COc1ccc(cc1'	0	0	
C\N=C\1/NC(N(S1)c2cccc		1	



COc1ccc(cc1)c2nc([nH]c2c3ccc(OC)cc3)c	1		
O1C=C[C@H]2[C@@H]1Oc3ccccc23	1		
C[C@@H](C)O	0	0	
CC1(C)CCC2(CCC3(C)C(=CCC4C5(C)CC(O)	0		
Oc1c(cc2ccccc2c1N=Nc3cc(Cl)ccc3Cl)C(=	1		
Cc1ccc2C(=O)c3ccccc4ccc1c2c34	1		
CN(C)C1C2C(O)C3C(=C(O)C2(O)C(=O)C(=	0		
CC(C)Nc1ccc1	1		
CCc1ccccc1N=C(O)c2csc(c2)N(=O)=O	1		
Oc1ccc2OC(=CC(=O)c12)c	0		
COc1cc(cc(O)1)O	0	0	0
CCCC[C@H](CC)COCCC#N	0		
CCc1nc2ccc(NC)c(C)c2nc1CC	1		
CNC(=O)C			0
CC(=O)NCCc1	0	0	
CC(=O)OC(C(=O)c1ccccc1)c2ccccc2	0		0
O=C=NC1CCCCC1	0		
BrC(Br)(Br)N(=O)=O	1		
O=C1C[C@H]2OCC=C3Cl	0		
CCCCOc1ccc(1)O	0	0	1
CN1CCc2cc(Cl)c(O)cc2[C@H]1	0		
COCCOCCOCCOC	1		0
O=C(OC(=O)c1ccccc1)c2ccccc2			0
Nc1ccc(Cc2ccccc2)cc1	1		
NCCN1CCOCC1			0
Nc1ncnc2c1nc(Br)n2[C@@H]1	0		
CC(N)C(O)c1ccccc1			0
C(C(N1CCCCC1)c2ccccc2)c(=O)N	0		
CC(=O)Nc1cc(ccc1C)N=Nc2ccc(C)c(NC(=	0		
CC(C)(C)c1ccc(O)c(O)c1	0		1
ClC(=O)c1ccc(Cl)cc1Cl	1		
CCN(CC)CCO	1	1	
OC[C@H](O)[C@H]1O[C@@H]2O[C@H](O[C@@H]1			0
CC(C)c1c(C(=O)N)cc1	0		
CC(O)C(=O)C	0	0	0
O=C1CNC(=O)N1			0
CCCNC(=O)N1N=C(c2ccc(N)cc2)C1	0		
CCNC(=O)N1	1		0
CCN(CC)c1nc1	0		
COc1ccc(CNCC(O)COc2ccc3nc(O)ccc3c2)cc1	0		
CCCC(C)c1ccccc1O			1
O=C1CCCO1	0		0
CCN(CC)c1ccc(cc1)N=Nc2ccccc2	0		

COc1ccc(cc1)C2=C(O)C(=O	0		
CCc1cccc(C)c1N		1	0
OC(=O)Cc1ccc(cc1)N(=O)=O		1	
CNCCN[S+](=O)([O-])c1ccc	0		
CO\N=C(/C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C(=			0
CC[C@H]1OC(=O)[C@H](C)C(=O)[C@H](C)[C@@H](C			0
CCCC(=O)OCc1ccc(cc1)N(=O)=O		1	
Cc1ncc(cn1)[C@@H](CCCCCc2ccc3CCCNc3n2)CC(=O)			0
CCNC(=O)N(	0	1	
CC(=O)N(N)C(=O)C			0
C[C@H]1OC(	0	0	
Clc1cc2c3cccc3ccc2c4cccc14		1	
CC1=C(C(=O)C(C)(C)CC=C1			0
ClC1=C(Cl)C(=O)N(N=C1)S(=O)(=O)c2ccc		0	
CCC\C=C\C=O		1	0
Oc1cc(Cl)c(O)cc1Cl		0	
C\C=C/C=C\C(=O)O		0	
O=C1CC2(CCCC2)CC(=O)N1CCCCN3CCN(CC3)c4ncccc4			0
O=Nc1ccc(Nc2cccc2)cc1		1	1
NNc1nccc2cccnc12		1	
CCCCCCC(=O)OCC		0	
CC(=O)Nc1ccc(C)c(c1)N=[N+](O)c2ccc		0	
Clc1c(Cl)c(Cl)c(C=C)c(Cl)c1Cl		0	
COc1cccc(Br)c1			0
Clc1cccc(c1)C(c2ccc3nc[nH	0		
CC(C)CCCC(C)C1CCC2\C(=C	0		
CC(=O)\C(=C\C1C(=CCCC1(C)C)C)\C			0
CCCCON(OC(=O)C)C(=O)c1ccc(cc1)[N+](	1		
CC(C)C(=O)OC(C)(CCC=C(C)C)C=C			0
Cc1ccc(CC(Cc2nc3cccc3[n	0		
Cc1cccc1c2oc3cccc3n2		0	
ClCCCC(=O)\N=C\1/SN(C(=O)CCCCl)c2cc		0	
Cc1ccc(cc1N)N=[N+](O)c2ccc(C)c(N)c	1		
[O-][N+](=O)c1cc(cs1)C(=O)Nc2cccc2[	1		
CCN(CC)c1ccc(cc1)[N+]#N	1		
CC12CCC3C(CCC4=CC(=O)CCC34)C1CCC2	0		
C(CC1CO1)C2CO2		1	
Cc1ccc(cc1)N(CCO)CCO	1		0
Nc1nc(Nc2cc	0		
CC[C@@H]1'	0	0	
c1ccc2cccc2	0	0	0
CC(=CCc1c(O)cc(O)c2C(=O	0		
CC(C)(C)CNC(=O)\C=C\c1oc(cc1)[N+](=C	1		

ClCC(Cl)C(=C)Cl				1	
CCCNc1c(C(=O)O)c(Cl)ccc1[N+](=O)[O-]				0	
C[C@@H]1CC2=C(CCC(=O)C2)[C@H]3CC[C@@]4(C)[C@H](O=C(CCNNC(=O)N)C(=O)N)C(=O)N3C4	0	0	1	0	1
CC(=O)Nc1ccc(C)cc1				1	
CC(Cc1cccc1)NCC(O)c2ccc(O)c(c2)C(=O)N	0			0	0
CCCC(=O)OCc1cccc(c1)[N+](=O)[O-]				0	
CN(C)C(=O)CC(=O)C					0
[O-][N+](=O)C	0	0		0	
N[C@@H](Cl)C	0	0			
CC(C)COC(=O)C=Cc1cccc1					0
Cc1ccc(cc1)C2CO2				1	
CC(C)NCC(O)C	0	0			0
CC(C)(C)NC(=O)[C@@H]1C[C@@H]2CCCC[C@@H]2C(=O)N1					1
COC(=O)Nc1nc2ccc(Sc3cccc3)cc2[nH]1					1
CC(O)c1cccc1				0	0
COc1ccc(c(OC)c1)S(=O)(=O)N2C(=O)[C@](N3C[C@H](O)N3)C(=O)N2					0
CC(C)CCCCCOC(=O)CCCC(=O)OCCCCCCCC(C)C					0
CCCCCCCCCCCCc1cccc1					0
Cc1onc(NC(=O)c2c(O)c3ccccc3)cc1		0			
CCCCCOC(=O)C(=C)C				0	0
CC(C)(O)c1ccc(cc1)C(C)(C)O					0
COc1ccc(N(CCCl)CCl)c2cc(oc12)N(=O)C				1	
CC(C)NCC(O)C	0	0		0	0
[O-][N+](=O)c1ccc2c3ccccc3C(=O)c2c1				1	
Clc1nncc2cccnc12				1	
CC[C@@]12CCCN3CCc4c([C@H]12)C(=O)N3		0			
CC(C)C(N)C(=O)O				0	
Cc1ccc(N)c(c1)S(=O)(=O)O				0	0
CC(=O)Nc1cc2Cc3cccc3c2cc1O				0	
CC1COc2c(N3CCN(C)CC3)c(F)c(C(=O)O)c12				1	
Cc1ccc(OP(=O)(Oc2ccc(C)cc2C)Oc3ccc(C)cc1)cc1				0	
COc1ccc(cc1)C(=O)N	0				
[O-][N+](=O)c1cc(cs1)C(=O)Nc2ccc(F)cc2				1	
OC(=O)C=O				1	
NCC1CCC(N)C	0	0			
O1C=CC=Cc2c1c3cc4cccc4cc3c5cccc25				1	
Clc1ccc2ccc3cccc4ccc1c2c34				1	
CC(C)(Br)C(Br)CCl				0	
Cc1ccc(Cl)c(N)c1Cl					0
CCOP(=S)(OC)C	0	0		0	0
CC[C@H](NC)C	0	0			0
CC1(C)S[C@H](C)C1	0				0

C[C@H]1C[C	0	0			
Nc1ccc2[nH]c3ccccc3c2c1[N+](=O)[O-]			1		
Nc1ccc(N)c2c(O)c3ccccc3c(O)c12			1		
NC(=O)COc1c(F)cc(SCCN[§		0			
CC1=C(CC(=O)O)c2cc(F)cc		0			
CC1=C(Cl)C(=O)OC1O			1		
OC(C#CCN1C	1	0			
CC1(C)CC(C(=O)NC(CO)C(O)CO)C(C)(C)[I			0		
CN1[C@@H]2CC(C[C@H]1		0			
CNC(=O)NO			0		
Cc1ccc(cc1[N+](=O)[O-])C(=O)O			1		
CC(=O)Oc1cc2CN(CCc2s1)C(C(=O)C3CC3)c4ccccc4F				0	
CCCCCCCC\C=C/CCCCCCCC(=O)OC[C@@H](O)[C@H]1				0	
Cc1ccc2C(=O)c3c(cccc3[N+](=O)[O-])C(:			1		
ClCCBr			1	0	
Oc1cccc2OC(=O)C(=Cc12)[C@@H]3CCc			0		
C[C@H](CCC(=O)O)[C@H]		0		0	
CC(C)c1ccc2c(ccc3c(C)cccc23)c1			0		
CC(=O)OCN=[N+](C)[O-]			0		
OC(=O)COC(=O)Cc1cccc1		0			0
CCc1cc(ccn1)	0	0	0	0	
CC(=O)Nc1ccc(cc1)C(=O)\C=C\c2ccccc2			0		
OC(=O)CCC(=O)Nc1ccc(Cl)cc1			0		
COC(=O)c1cc2OCOc2c3c4cccc(OC)c4cc(			1		
COC(=O)[C@@]1(C)[C@H](C)C[C@H]2[C@@H]3CCC				0	
CC(=O)ON(C(=O)C)[S+](=C		0			
O=C1N(c2ccc	0			0	
OCc1c(O)c2C(=O)c3ccccc3C(=O)c2cc1O(			1		
CCN(CC)N=O			1	0	
C[C@H](CCC(=O)O)[C@H]		0			
OC(=O)c1c(Cl)c(Cl)c(Cl)c2Oc3c(Br)c(O)c			0		
CCC1(O)CC2C	0	1			
OS(=O)(=O)C(F)(F)F				0	
OCc1ccccn1	0	0		0	
CCCC=C				0	
CCN(CC(=C)C)c1c(cc(cc1N(=O)=O)C(F)(F)F)N(=O)=O				1	
CCOC(=O)Cc1cccc1				0	
OC(=O)c1oc(c(c2ccccc2)c1c3ccccc3)[N+			1		
NC(CS)C(=O)NCC(=O)O			1		
COc1ccc(cc1)C2=COc3ccc(		0			
O[C@H]1CO[C@@H]2[C@H](O)CO[C@H]12				0	
COc1ccc(cc1O)C2=CC(=O)c3c(O)cc(O[C@@H]4O[C@				0	
Oc1ccc(cc1)S(=O)(=O)O				1	

CCSCC[C@H](N)C(=O)O			0	
Cc1nc(N)sc1CCN		0		
CC(C)(C)CC(C	0	0	0	1
CC(=O)OCc1c2ccccc2c(C)c3ccccc13			1	
C[N+](C)CCCCC1				0
CCN(CC)C(=O)c1ccc(cc1)[C		1		
CNc1cc(N[S+](=O)([O-])c2		0		
C[N+](C)(C)C	0	0		
CC(C)C(=O)OCC=Cc1ccccc1				0
C[N+](C)(C)C	0	0		0
C1Cc2cc3ccc4cccc5ccc(c2C=C1)c3c45			1	
COc1cc(cc(OC)c1O)[C@H]2[C@@H]3C(COC3=O)C(O[				0
c1ccc2c(c1)c3cccc4cc5ccccc5c2c34			1	
CCOC(=O)O[C@@H]([C@@H]1C[C@@H]2CCN1C[C@				0
COc1cc(N[S+](=O)([O-])c2		0		
OS(=O)(=O)CNc1ccc(cc1)N=Nc2ccccc2			0	
C[C@@H](COc1ccccc1)N(		0		
Cc1ccccc1\C=C\C2=NCCN2		0		
COc1ccc(cc1)	0	0		0
OCCn1c(CO)ncc1N(=O)=O			1	
CCN(N=O)\C(=N\O)\C=O			1	
CCN(CC)C(=O)C(C)Oc1cccc2ccccc12				0
C[n+](C)CCCC2C3OC3C=Cc12			1	
BrCCCCBr			1	0
C1c2ccccc2c3ccc4ccc5ccccc5c4c13			1	
C[C@@]12C3CCC(O3)[C@]1(C)C(=O)OC2=O				1
Nc1ccc(NCCO)c(c1)N(=O)=O			1	1
[O-][N+](=O)c1oc(C(=O)CBr)c(Cl)c1Cl			1	
CC(C)(c1cc(Br)c(OCC=C)c(Br)c1)c2cc(Br)c(OCC=C)c(Br				0
CC(C)(COC(=O)C=C)COC(=O)C=C			0	
Cc1ccc(C=C)cc1			0	0
OC1C(O)C(OC(C1O)C(=O)O)N(O)c2ccc(c			1	
CC1=C(CC=O)C(C)(C)CCC1				0
COc1ccc(C(=	0	0		0
CC(C)c1ccc2c(cc(C(C)C)c(c2c1)S(=O)(=O)[O-])C(C)C				0
COC[C@H](O)Cn1ccnc1[N+](=O)[O-]			1	
CC(=O)C(N=Nc1ccc(cc1Cl)c2ccc(N=NC(C			0	
CCC(O)OC(O)CC				0
CC(C)(O)CCC(C)(C)O				0
CN1CCN(CC(-	0	0		0
CC1CCCCN1N=O			1	
Nc1ccc2c(Cc3cc(ccc23)N(=O)=O)c1			1	
Cc1ccccc1O)C(C)(C)C				0

CN1C(=O)N(	0	0	0
CO[C@@H]1[C@@H](C[C@H]2CN3CCc4c			0
O=NN1CCNC1=O			1
Clc1ccc([C@@H]2CS\C(=C(\C#N)/n3ccnc3)\S2)c(Cl)c			0
OC\C=C\c1cc	0	0	0
OC(=O)[C@	0	0	
CC(=O)Nc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]			0
Nc1nnc(c(N)n1)c2cccc(Cl)c		0	
Clc1ccc(CCC2CO2)cc1			1
Cc1c(C)c(N)ccc1N			0
CCOc1ccc2cc	0	0	
CCOC(=O)OCC			0
CC(=O)OCc1cocc2c(C=O)ccc12			1
CCC(CCC(=O)C)COC(=O)CCCC(=O)O			0
CC[C@@H]1NC(=O)c2cc(c(Cl)cc2N1)S(=			0
NC(CCC(=O)NNc1ccccc1)C(=O)O			1
O1[C@@H]2[C@H]1c3cccc4ccc5cc6ccc			1
CC(CN=N#N)c1ccccc1			1
C\C=C\C=C\CO			0
OC(=O)CNC(	0	0	0
OCc1c2cccc2c(COS(=O)(=O)O)c3ccc4cc			1
CC(O)CN1CC(C)OC1=O			0
CNCCN(Cc1ccc(OC)cc1)c2cccn2			0
CC1O[C@@H](O[C@@H]z		1	
Nc1cc(c2cccc(c2c1)S(=O)(=O)O)S(=O)(=			0
CN(CCOc1ccc	0	0	1
CC(C)CC=C(C=O)c1ccccc1			1
CN(C)C(=O)C	0	0	
ON(C=O)c1ccc(Cl)c(Cl)c1			0
Nc1cccc2nc3cccc(N)c3nc12			0
Sc1nc2cccc2[nH]1			0
CN(C)c1ccc(\C=C\C=O)cc1			0
Cl\C=C(/Cl)\C(Cl)Cl			1
OC(=O)c1ccc2c3nc4cccc4		0	
CCNc1nc(Cl)r	0	0	0
Oc1cccc(Cl)c1			0
CC[C@]1(O)(	0	0	
OC1C=Cc2c(ccc3c4CCC(=O)c4cc(c23)C(F			1
C[N+](C)(C)C			0
Oc1ccc(cc1[N+](=O)[O-])c2cccc(c2)[N+]			1
CNCC\C=C\c1cccnc1		0	
OCC(Cl)CCl			1
C[C@H]1O[C@H](C[C@H](O)[C@@H]1O[C@H]2C[C@			1



COc1cc(NS(=O)(=O)C)ccc1Nc2c3ccccc3r	1		
Cc1c(c2ccccc2c3ccc4ccccc4c13)N(=O)=C	1		
CC1=C(CCN2CCC(=C(c3cccc	1		
NC1=NC(=O)N(C=C1)[C@H]	0		
Nc1ccc(CO)c(c1)N(=O)=O	1		
CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)[C@H](N)c3ccc(O)cc	0		
CIS(=O)(=O)Cl	0		
NNC(=O)c1[nH]c2ccccc2c1N	1		
C[C@H]1CC2	0		
CN1C=CC(=C(C#N)C1=O)O	0		
CN(C)Nc1nc(cs1)c2oc(cc2)[N+](=O)[O-]	1		
NCCNC(=O)c:	0	0	
CN(C)\C=N\c	0	0	
CCC1=C(C)CN(C(=O)NCCc2	0		
ClC(Cl)C(=O)C(Cl)(Cl)Cl	1		
C[N+]1(C)CC	0	0	
Cc1ccc(cc1)C(=O)Cl	1		
OC(=O)CCCCCCCCC(=O)O	0		
COc1ccc(N)c(OC)c1	1		
Oc1ccccc1C=O	0	0	
CN1[C@@H](CSCC(F)(F)F)Nc2cc(Cl)c(cc	0		
CCCCN=NC(C)(C)OO	1		
CC(C)(C)CC(C	0	0	1
OCc1ccc(cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1		
C[C@@H](CN1c2ccccc2Sc3ccccc13)N(C	0		
CC(=O)Nc1ccc(c2cc(c(N=Nc3ccc(N=Nc4	0		
Cc1cc(ccc1N)C(=C2C=CC(N)C=C2)c3ccc(I	1		
CCC(Cc1c(I)c	0	0	
Oc1cc2CC3(O)COc4c(O)c(O)ccc4C3c2cc:	0		
Oc1ccc(cc1)C(=C(Cl)Cl)c2ccc(O)cc2	1		
OCCOCCN1C	1	0	
CN(C)CCOC(c	1	0	0
Oc1ccc2c3ccc(O)c4C(=O)C=C[C@@](O)	1		
[O-][N+](=O)c1cccc(NC(=O)c2csc(c2)[N	1		
c1cnc2c(c1)ccc3ncccc23	1		
O=C1NNc2ccccc12	0		
COc1ccc2ncccc([C@@H](O)[C@@H]3C(C	0	0	
Clc1cc(Cl)cc(NS(=O)(=O)c2ccccc3ccnc23	0		
OC1C(O)c2ccc3c4CCc4ccc3c2C5OC15	1		
COC(=O)\C(=C/CO)\C=C(/C)\C=C(/C)\C=	1		
Cn1ccnc1[N+](=O)[O-]	1		
CC1(C)SC2C(I	0	0	
Cn1c(N)nc2cc(O)ccc12	0		

C\C=C(\C=C/C)\c1ccc(O)c	0	
COc1ccc(cc1)	0	0
Oc1cc2OCOc2cc1N=O		1
COc1nsc2cc(ccc12)[N+](=O)[O-]		1
COc1ccc(CC2c3cc(OC)c(OC)cc3CC[N+](C)CCC(=O)OC		0
OS(=O)(=O)c1cccc2cccnc12		0
Nc1ncnc2c1ncn2C3CCC(CO)O3		1
COC1CC(O[C	0	0
C[C@H](Cc1ccc(O)c(O)c1)	0	1
CCCN1CCCC[C@H]1C(=O)N	0	
C[S+](=O)([O-])Nc1ccc(Cc	0	
O=CN1CC2CC(C1)C3=CC=C	0	
O=S(=O)(N1	0	
Oc1ccc(CC(C#N)c2ccc(O)c	0	
COc1ccc(C(=O)c2ccc(OC)cc2O)c(O)c1		1
OC(=O)c1cc2OCOc2c3c4cccc(O)c4cc(c1:	1	
Cc1c(NO)cc(NO)cc1[N+](=O)[O-]	1	
NCC(CC(=O)C	0	0
CCCc1nc2c(C	0	0
OS(=O)(=O)c1cccc2C(=O)c3c(cccc3N(=C	1	
Cn1c2cccc2c3cc(N)ccc13	1	
Cc1ccc2nc(N	0	0
CCCCCCCCCCCC[n+](c1cccc1		1
CC(=O)c1ccc2OC(C)(C)[C@H](O)[C@@H](NC(=O)c3cc		0
O=NN1CCCCCCC1	1	0
C1NCc2cccc2C1c3cccc3	0	
CNC(=O)CSP(=S)(OC)OC	1	0
CN(C(=O)C)c1ccc(cc1)N=Nc2ccc(cc2)N(	0	
O[C@H]1[C@	0	0
COC(=O)\C=C\c1cc(O)ccc1	0	
CCCCNC(=O)N[S+](=O)([O	0	
CC(C)CCCCOC(=O)CCCC(=O)OCCCCC(C)C		0
OCC1NC(Cc2c1[nH]c3cccc23)C(=O)O	0	
C[N+](C)(C)NCCC(=O)O	0	
OC[C@H]1O[C@H]([C@H]	0	
CN(Cc1cccc1)C(=O)CBr	0	
Clc1cccc2C(=O)c3c(NC(=O)c4cccc4)ccc	1	
CCC1OC(OC(	0	0
Cc1onc(c2ccc	0	
CC(=O)N1CNC(=O)N(C(=O)C)C1=O	0	
CNC1C(O)C(O)C(CO)OC1OC2C(OC3C(O)	1	
Cn1cc(CC2(O)C(=O)CC3C(O)COC23O)c4c	1	
O=N(=O)OCC(CON(=O)=O)(CON(=O)=O	0	0

NC(=O)OCC(O)COc1ccc(Cl)cc1			0
OC(=O)CCCCCC(=O)O			0
COC(=O)Cc1cccc2ccccc12			0
COCC(O)Cn1cc(nc1Cl)[N+](=O)[O-]	1		
OC(=O)\C=C\c1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]	1		
COC(=O)CCc1	0	0	
CC(=O)NCCc1ccc(O)c(c1)c2c(O)c(O)c3C	0		
NC(CSCC(=O)	0	0	0
CC(Cl)C(=O)O	0		0
CN(C)CCC=C1c2ccccc2C(C)	1		
CC1C2CC(CC2C3CCCC(O)C3)C1(C)C			1
CCCCN(CCCC)CCCC	0		0
[O-][N+](=O)c1ccc2c(oc3ccccc23)c1	1		
CCCCCCCC\C=C/CCCCCCCC(=O)OCC			0
CC(Cl)CN(C)C	1		
Clc1sc(Cl)c(Cl)c1Cl			0
Clc1ccc(C=NN2N=Nc3c([nH]c4ccccc34)C	1		
Cc1cc(Cl)cc2S\C=C\3/Sc4cc(Cl)cc(C)c4C	0		
Clc1cc2Oc3ccc(cc3Oc2cc1Cl)N(=O)=O	1		
CC(C)CCCCCCCOP(OCCCCCCCC(C)C)Oc1ccccc1			0
CCCCCCCC[N+](CCCCCCCC)(CCCCCCCC)CCCCCCCC			1
CCC(C)O			0
OC(=O)C1=NN(C(=O)C1N=Nc2ccc(cc2)S	0		
OCC(CO)N[C@H]1C[C@](O)(CO)[C@@H](O)[C@H](C			0
Oc1ccc(cc1N(=O)=O)N(=O)=O	0		1
CC(C)(O)C1C:	0	0	
C[C@]12C[C@H](O)[C@H]3[C@@H](CC	0		0
CN1N(C(=O)C(=C1C)N)c2ccccc2	0		0
CN(C1CCCCC:	0	0	0
COc1cc(Cl)c(OC)cc1Cl	1		
CC1CCC(CO)CC1			0
C=CCSSCC=C			0
CC(=O)c1ccccc1O			0
CCOC(=O)[C@@H](C)Oc1ccc(Oc2oc3cc(Cl)ccc3n2)cc1			0
NC(=O)OCC1C(NC(=O)\C(=N/OCC(=O)O	0		
COC(=O)C1=C(C)NC(=C([C(	1		
OCC(O)C(O)CO			0
Clc1ccc(cc1)†	1		
CNC(=O)c1ccccc1	0		0
COc1cc2C3CC[C@]4(C)[C@	1		
CCCCCC[C@@H](CCC)C(=O)O			0
CCCCCCCCCCCCC(=O)[N-][N+](C)(C)CC(	0		
OCC1CCC=CC1			0

CCN1CCN(C=O)N[C@@H](C=O)N[C@H]2[C@H]3SC	0
Nc1ccc(cc1N)[N+](=O)[O-]	1
CC1(C)OC[C@@H]2O[C@]3(OC(C)(C)O[C@H]3[C@@	0
COc1cccc2c(O)c3c(O)c4CC(O)(CC(=O)c4	1
OC(=O)CC(NC(=O)COc1ccc(Cl)cc1Cl)C(=	0
NC(=O)Cc1cccc2cccc12	1
CCC\C=C\C=C\C(=O)OC1\C	0
CC(=O)SCC(CC(=O)c1ccc(C)cc1)C(=O)O	0
Nc1ccc2[nH]c3cccc3c2c1N(=O)=O	1
C(Oc1cccc2cccc12)C3CO3	1
BrCC(=O)c1ccc(cc1)c2cccc2	1
CC(=O)c1ccc(s1)[N+](=O)[O-]	1
Cc1ncc[nH]1	0
CC(C)C[C@H](NC(=O)[C@@H](COC(C)(C)C)NC(=O)[C	0
CN(CCC#N)c1ccc(cc1)N=Nc2ccc3ncsc3c	1
BrC1c2cccc2cc3c1ccc4cccc34	1
ClCc1ccc2c3cccc4cccc(c2c1)c34	1
NC1=NC(=O)N(C=N1)C2C[	0
CCCCC(CC)C(=O)OCCOCCOCCOCCOC(=O)C(CC)CCCC	0
CC12CCC(=O)C=C1C3CC3C4C2CCC5(C)C4	0
CCCN1C(=O)I	0
[O-][N+](=O)c1ccc(cc1)c2cccc2	1
Cc1cc(Cc2ccc(N)c(C)c2)ccc1N	1
CCOC(=O)C(N)\C=C(/C)\CF	0
CCCCC(CC)COCCO	0
COc1ccc(CCl)cc1	0
NC(=O)c1[nH]cnc1[N+]#N	1
[O-][N+](=O)c1ccc(cc1)c2ccc(cc2[N+](=	1
CO\N=C(/C(=	0
O=C1NC=Nc2	0
OC(=O)C1Cc2c(CN1)[nH]c3cccc23	0
C[C@]12CC[C@H]3[C@@I	1
NC(Cc1ccc(F)cc1)C(=O)O	0
CC(N)C(=O)O	0
CC1(C)O[C@H]2CC(=O)OC[C@]23[C@H]4CC[C@@]5(	0
CC(=O)OCC(=	0
CNC(=O)Oc1cccc(c1)\N=C\N(C)C	0
CCCCCCCCCCCC[C@H](I	0
OC[C@H]1O	0
CC(=Nc1ccc(Nc2ccc(cc2)N(=O)=O)cc1)C	1
CN(C)c1ccc2nc(C)c(C)nc2c1C	1
OCCN(CCO)N=O	1
CO[C@H]1C[	0

CN(C)S(=O)(=O)c1cccc(c1)S(=O)(=O)[O-]	0	0	0
NCCCC[C@H]	0	0	
[O-]S(=O)(=O)c1cccc(c1)S(=O)(=O)[O-]			0
C1CN=C(N1)c2ccc3ccccc3c2			0
CC(C)[C@@H]1N2C(=O)[C		0	
C[C@H]1C[C@H]2[C@@H]3CCC4=CC(=O)C=C[C@]4(C			0
S=C1[N-]C(=S)[N-]C(=S)[N-]1			0
C[C@]12CCC	0	1	
CCCCCCCC(=O)Cl			1
C\C=C/1\NN	1	1	
CCN(CC)CCOC(=O)c1ccc(N)cc1Cl			0
COP(=O)(OC)C(OC(=O)CCl)C(Cl)(Cl)Cl			0
CCN(CC)C(=S)SSCC(NC(=O)CCC(N)C(=O)			0
Cc1ccc2cc3c4C(O)C(O)C=Cc4ccc3c5CCc1			1
Cn1c2ccccc2c3cc(ccc13)[N+](=O)[O-]			1
O=C1[N-]C(=O)c2ccccc12			0
CCCCNC(=O)n1c(NC(=O)OC)nc2ccccc12			0
C[C@H](Cc1c	0	0	
Cc1ccc(cc1)S	0	0	
OC(=O)C(=C)Br			0
CN1C=C(C(=O)C(=C1)c2ccccc2)C(F)(F)F)c3ccccc3			0
CCc1ccc(cc1)C(C(Cl)Cl)c2ccc(CC)cc2		1	1
OC(=O)c1ccccc1C(c2ccc(O)cc2)c3ccc(O)cc3			0
CCCC(CCC)C(=O)N			0
COc1cc(CCN)	0		
CN(C)CCOC(=	0	0	
NC(CCP(=O)(	0	0	
CC12CCC3C(CCc4cc(O)ccc34)C1CCC2(O)(			0
ON=C1CCCC1			0
OC(=O)C1=C(	0	0	
C=CCOC(=O)c1ccccc1C(=O)OCC=C			0
CC(C)Oc1ccc(Nc2ccccc2)cc1			0
N[C@@H](C	0	0	
COP(=S)(OC)SCN1N=Nc2ccccc2C1=O			1
Cc1cc2C(=O)[C@@H](O)Cc2c3ccc4ccccc			1
CN(C)c1ccc(\C=C\C(=O)c2ccccc2)cc1			0
NC(=O)C(Cl)Cl			0
OCCN1CC(O)	0	0	
CC(Cc1ccccc1)NCCn2cnc3N(C)C(=O)N(C)C(=O)c23			0
O=C(Oc1ccccc1)c2ccccc2)C(=O)Oc3ccccc3			0
Cc1ccc(c(c1)C(=O)O)[N+](=O)[O-]			1
CC1(C)N=C(N)N=C(N)N1c2ccc(Cl)cc2			0
CN1CCN(CC1	0	0	

O[C@H]1C[C@@](O)(C[C(	0		
CC(=O)c1cccc1[N+](=O)[O-]		0	
CC(C)c1ccc(cc1)C#N			0
CCOC(=O)c1ccc(NC(=O)CN2CCCC2)cc1			0
C[C@H](CS)[C@@H]1CC[C@@H](C)[C@	0		
CCCCN1CCC(CCC(=O)c2cc(	1		
OC(=O)CCCC	0	0	0
Cc1ccc(NN=NCc2ccc(cc2)[N+](=O)[O-])		1	
COP1(=S)OCc2ccccc2O1		1	
ClCc1cccc2cc3ccc4cccc5ccc(c12)c3c45		1	
COc1ccc2Oc3cc(OC)cc(O)c3C(=O)c2c1		1	
C[C@H](CCC(=O)[O-])[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3[C@			0
NCCCN		0	
NCCc1cc[nH]	0	0	0
COc1cccc1N	0	0	0
CO\N=C(/C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C(=			0
CC(C)NC(=NC(C)C)OCc1ccc(cc1)N(=O)=C		1	
OCC(O)C(O)C(O)C(O)CN=N#N		1	
CCCCOCCOP(=O)(OCCOCCCC)OCCOCCCC		0	0
Oc1c(Br)c2ccccc2nc1C3C(=O)c4ccccc4C3=O			1
CC(Cl)C(=C)C		1	
OC(=O)COc1	0	0	0
Oc1ccc(cc1)C(c2ccc(O)cc2)C(Cl)(Cl)Cl			1
Cc1onc(O)c1	0	0	
CN(C)CCO[C@@](C)(c1cccc1)c2cccn2		0	
O=NN1CN2CN(CN(C2)N=O)C1		1	
[O-][N+](=O)C(Cl)Cl		1	
O=C1NC(=O)\C(=C\c2ccc3		0	
C(Oc1cccc1c2ccccc2)C3CO3		1	
CCCCON(OC(=O)C)C(=O)c1ccc(Cl)cc1		1	
CCOC(=O)C1=C[C@@H](OC(CC)C)[C@H](NC(=O)C)[			0
CC(=O)Nc1ccc(Oc2ccc(cc2)N(OC(=O)C)		1	
Nc1ccc(cc1[N+](=O)[O-])c2ccc(N)c(c2)[		1	
OC1C=Cc2ccc3nc4ccc5ccccc5c4cc3c2C1		1	
COCCOc1cc2cc(C(=O)NC3CCN(CC3)C(C)C)n(CC(=O)Nc			0
COc1ccc2[nH	0	0	
CCCCC1CCC(=O)O1			0
CN(C)c1ccc(N=Nc2ccncc2)c(NC(=O)C)c1		0	
CC(CON(=O)=O)(CON(=O)=O)CON(=O)=		0	
CC(=O)OCc1c(O)cc2C(=O)c3ccccc3C(=O)		1	
NC(C(=O)O)c1ccc(C(=O)O)		0	
C[S+](=O)([O-])Nc1ccc(cc1		0	
OC(Cc1ccncc	0	0	0

CSCCI			1	
NC1CC(=CC=C	0	0		
C[C@@H]1O	1			1
OCC1OC(Oc2cc(O)cc3Oc4c(O)ccc(O)c4C			1	
CC(C)[C@@H]1CC[C@H](C)[C@@H]2CC			1	
OCCC#N			0	
CCCN(CCC)c1c(cc(c(N)c1N(=O)=O)C(F)(F)F)N(=O)=O				1
CC(C)CCCC(C)C1CCC2C3CC=C4CC(CCC4(C			0	
Nc1ccc2nc3cccn3c2n1			1	
CC1CNC(=O)N1c2ncc(s2)[N+](=O)[O-]			1	
CC1=CN(C2CC(O)C(CO)O2)C(=O)NC1=O			0	
CC(=O)OC1(CCC2C3C=C(Cl)C4=CC(=O)OC			0	
CC(C)(Oc1ccc	0	0	0	0
Cc1ccc(c(O)c1)C(C)(C)C				1
CCCCC(CC)COP(=O)(OCC(CC)CCCC)OCC(C			0	0
COc1ccc(cc1)C(=O)Nc2ccccc2CCC3CCCCN3C				0
COc1cc(\C=C	1	0		
COc1cccc2C(=O)c3c(O)c4CC(O)(CC(OC5(			1	
Oc1cc(O)c2ccccc2n1			1	
CC(=O)OCN(CCCI)N=O			1	
CN(C)C(=O)Oc1cc(C)n(n1)C(=O)N(C)C				0
ClC(=O)c1cccc(c1)N(=O)=O			1	0
CCc1c2C3OC3c4ccccc4c2cc5ccccc15			1	
Brc1ccccc1			0	0
CC(C)OC(=O)C(O)(CC(=O)O)CC(=O)O				0
OC(=O)c1oc(cc1)[N+](=O)[O-]			1	
O1C2C=Cc3c(ccc4c5C=Cc6ccccc(cc34)c56			1	
C[C@]12CC[C(	0			
CN(C)CCN(Cc1ccc(Cl)cc1)c2cccn2				0
CC(C)CC(C)N			0	0
CC[C@H]1[C(	0	0		0
OC[C@@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H](O)CO				0
CSc1nc(N)c2ncn([C@@H]:		0		
COc1cc(F)ccc1[N+](=O)[O-]			1	
COc1ccc2C=C(Oc3ccccc1c23)[N+](=O)[O-			1	
COC(COC(=O)N)C1=C(N2CC2)C(=O)C(=C			1	0
CC(=O)CC(C)(C)NC(=O)C=C			0	0
Cc1ccccc1N=O			1	0
Cc1ccc2OCC(=O)COc2c1				0
COC(=O)C1=C(C)NC(=C([C(		0		
OCCN1CCN(CCS(=O)(=O)[O-])CC1				0
CN(N=O)c1c(	0	0		
Cc1c(N)cccc1Cl			0	0

CC1(O)CCC2C3CCC4CC(=O)C(CC4(C)C3CC	0		
COc1ccc(N)c(c1)N(=O)=O			0
CCC(C)C=O	0		0
c1ccc2c(c1)ccc3c2ccc4ccc5ccccc5c34	1		
C(CN1c2ccccc2	1	1	
CN(C)CCC(c1ccc(Cl)cc1)c2c	0		0
COCC1CO1			1
NC(=N)NCCN	0	0	0 0
CC(C)CCCCOC(=O)c1ccccc1C(=O)OCCCC(C)C			0
OC(=O)CCCCCCCCCCCCC		0	
C=Cc1ccncc1			0
CCCc1ccc(N)cc1			0
C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=CC(=O)CC[C@H]34			0
Clc1ccc(c(Cl)c1)C(Cl)(Cl)Cl			1
CCCN(CCC)CC1CCCCN1CCN		1	
CC(C)C(=O)OC(=O)C(C)C			0
ClCc1ccc2c3ccccc3c4ccccc1c24			1
CCC(C)C1NC(=O)C(=C1O)C(=O)C			0
C[C@]12C[C@	0	0	0
FC(F)(Cl)C(F)(Cl)Cl			0
Nc1c(O)ccc2ccccc12			0
[O-][N+](=O)C1=Cc2c3ccc4ccccc4c3cc5c			1
BrC1ccc(Oc2ccc(Br)cc2Br)c(Br)c1			1
CC(=N)NCc1c	0	0	
[O-][N+](=O)c1cc(NS(=O)(=O)c2ccccc3cc			0
CC(C)(c1cc(Br)c(O)c(Br)c1)c2cc(Br)c(O)c			0 1
COC(=O)C1=C	1	0	
C[C@@]12CC[C@H](C[C@@H]1O2)C=C			0
CC(CCN=N#N)c1ccccc1			1
Cc1ccccc1N=Nc2c(O)ccc3ccccc23			1
Cc1cc(ccc1N(=O)=O)C(=O)O			0
O=N(=O)c1cc(c2c3CCCCc3c4cccc5ccc1c2			1
COC(=O)\C(=C\c1ccccc1Br)\C#N			0
CC(=C)C(=O)OCCCCOC(=O)C(=C)C			0
CCCN1CCC[C@@H]2Cc3n[		0	
C(C1CO1)c2ccc3OCOC3c2			1
Nc1cccc2c(O)nnc(O)c12			0 0
OS(=O)(=O)c1ccc2C(=O)c3c(cccc3[N+])(-			1
CNC(=O)ON(C(=O)C)C(=O)NC			1
Cc1ccccc1N2	0	0	
COS(=O)(=O)OC			1 0
CC(C)(C)C1=NNC(=S)N(N)C1=O			0
CN(C(=O)CCl)c1snc2ccccc12			0



CC(CCC(=O)O)C1CCC2C3CCC4CC(O)CCC4	0		
CCCCCCCCC]	1	0	
CC1C(O)CCC2=CC(=O)C3(OC3C12C)C4(C	1		
CN(C)CCNC(=O)c1cccc2c(N)c3cccc3nc1	1		
COC12C3NC3CN1C4=C(C2COC(=O)N)C(=	1		
FC1=CN(C2CCCO2)C(=O)N	0	0	0
CCC12OC1(C(=O)OC)C(=O)NC2(C)O	1		
COC(=O)Cl			0
CC1CCN(CCCC(=O)c2ccc(F)	0		0
Cc1ccc2C(=O)OC(=O)c2c1			0
COc1ccc(CO)cc1	0		0
S=C1NC=CC=N1			0
Cc1c(C)c2c(ccc3ccccc23)c4CCC(=O)c14	1		
COc1cc(O)cc	0	0	0
[O-][N+](=O)c1cccc(c1)[S+	0		
Cc1ccc(cc1)[S+](=O)([O-])	0		
Clc1ccc([C@H	1	0	
CC(C)C#N			0
CC(=CCC=C(C)C=C)C			0
CC(Cl)CCl	1		0
CCCC[C@@H](CC)COC(=O)CCCCCCCCC(=	0		
Oc1c(Br)cc(B	0	0	1
Cc1c(O)cccc1O	0		0
CCOC(=O)CCC(=O)O[C@H]1[C@H](O[C@@H]2[C@@	0		0
Clc1ccc(cc1Cl)N=N(=O)c2ccc(Cl)c(Cl)c2	0		
Oc1c(Cl)cc(Cl	0	1	
CCCC(=O)Nc1	0	0	
Clc1ccc(CN2C(=O)C(=O)c3	0		
CCC1(CCC(=O)NC1=O)c2cc	0		0
CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)COc3ccccc3)C(=O)N	0		0
Cc1ccccc1C=O	0		0
CCCCCCCCC	0		0
CC(CCC(=O)O)C1CCC2C3C(O)CC4CC(O)C	0		
CCCC[C@H]	0	0	0
[O-][n+]1ccc(cc1)N(=O)=O			0
Cc1ccc(cc1)C(=O)N2N=CC(=C(Cl)C2=O)C	0		
Cc1cc(N)c(C)c2c3ccccc3[nH]c12	1		
CC(=O)C1(CCNCC1)c2ccccc2	0		
Cn1cc(C(=O)[C@@H]2CCC	0		
CN(CC[C@@H](Oc1ccc(cc	0		
CC(C)C1CCC(	0	0	
Nc1ccc(cc1)[S+](=O)([O-])	0		
OC(=N)NN=CC(=O)O	0		

O=N(=O)c1ccc2nc3ccc(cc3nc2c1)N(=O):	1	
CN(C)CCC=C1c2ccccc2C=Cc	1	
CCCCCOC(=O)CC(CC(=O)OCCCCC)(OC(=O)CCC)C(=O)		0
CCCCCCCCCCCCCCCC		0
CN(C)CC\C=C\1/c2ccccc2C	1	
CC(=O)CCc1ccc(OC(=O)C)cc1		0
Nc1c(N=Nc2ccc(cc2)c3ccc(cc3)N=Nc4cc	1	
CC=CCC=O	1	
OC(=O)COCC	0	0
Clc1cc(Cl)c(Cl)c(Cl)c1Cl	0	0
CC1(C)S[C@H]	0	0
[O-][N+](=Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1)c2ccc(Cl)c(	0	
Clc1cc(cc(Cl)c1Cl)N2C(=O)CCC2=O	0	
Cc1ccccc1N2C(=Nc3ccc(N)cc3C2=O)CF		0
Fc1ccc(C(=O)NOCC2CC2)c(Nc3ccc(l)cc3Cl)c1F		1
OCC(CO)(CBr)CBr	1	0
Nc1ccc2c(ccc3ccccc23)c1	1	
COc1ccc2C3CCC4(C)C(CCC4(O)C#C)C3CC	0	
c1ccc(cc1)c2nnn[nH]2		0
CC(Cl)C(=O)NCc1ccccc1	0	
C1CC2OC2CCC3OC13	0	
CC(=O)OCC1:	0	0
CCC(C)C1SC(C)C(=N1)C		0
CC(C)OC(=O)\C=C\c1oc(cc1)[N+](=O)[O	1	
NCC=C	0	
O=C([C@H]1O[C@@H]1c2ccccc2)c3ccc	1	
CC[C@H](C)CCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@@		0
CCN(CC)CCNc1ccc(C)c2Sc3ccccc3C(=O)c	1	
CC(=CCCC(=C)C=C)C	0	
COc1ccc(NC(=O)c2csc(c2)[N+](=O)[O-])	1	
[O-]S(=O)(=O)c1cc(ccc1C=Cc2ccc(cc2S(=O)(=O)[O-])		0
CCCCCCCC(=O)Cl		0
Nc1ccc(cc1O)N(=O)=O	1	1
Nc1ccc2ccccc2c1N=Nc3ccccc3	0	
COc1ccc2[nH]	0	
C1CCCNCCC1		0
CCC(=O)C(=O)C	0	
NNC(=O)CNC(=O)C=N#N	1	
CC1(C)C(=O)C(C)(C)C1=O		0
C=CCN1C2C1c3ccccc3c4ccccc24	1	
CC(=O)OC1(CCC2C3CC(=C4CC(=O)CCC4(	0	
CC(C)(Cl)[N+](=O)[O-]	1	
Nc1ccc2ccc3ccccc3c2c1	1	

CC(=CCC[C@](C)(OC(=O)c1ccccc1N)C=C	0		
C1CN2C[C@H](N=C2S1)	0		
Nc1ccc(O)cc1	0		1
Cc1nc2c(ccc3ccc4ccc(O)cc4c23)n1C	1		
CCCCC1=CC=CC(=O)O1			0
CCCC[C@H]	0	0	
[O-][N+](=O)c1ccc2c(cc3ccccc3c12)[N-	1		
CCOC(=O)c1c	0	0	0
OCc1ccnc2ccccc12	0		
CCN(CC)CCO[C@H]1CC[C@	1		
COc1ccc2c(c1)C(=O)c3nccc4cc(OC)c(OC	1		
Nc1cc(cc2cc(cc(O)c12)S(=O)(=O)O)S(=O)(=O)[O-]			0
Cc1c(cc(cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-])	1		
NC(Cc1ccc(O)c(c1)N(=O)=O)C(=O)O	0		
CC(=O)c1ccc(	0	0	0
CN(C)c1ccc(cc1)N=Nc2ccccc2	1		
CS(=O)(=O)Nc1ccc(Nc2c3ccccc3nc4cc(c	1		
CN(C\C=C/c1	1	0	
Cc1ccc(cc1)S(=O)(=O)N2C3C2c4ccccc4c	1		
Cc1ccc2ccc3c4ccccc4ccc3c2c1	1		
OC[C@@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H](O)CO[CC			0
COc1cc2OCC3=C(C(=O)c4c	0		
CC1(C)CON(Cc2ccccc2Cl)C1=O			0
[O-][N+](=O)C([N+](=O)[O-])([N+](=O)[O-])N(=O)=O			0
C[C@]12CCC:	1	1	
CN1CCN=N1			1
CCCCc1ccc2cccc(c2c1)S(=O)(=O)[O-]			0
Cc1ccccc1C(=O)O		0	0
ClCC1CO1	0	0	1
CC(C)N(CC[C	1	0	
CN(C)C(=O)C(c1ccccc1)c2ccccc2			0
Cc1ccc(N)c(N)c1			1
CC(C)C(O)(C(C)O)C(=O)OCC1=CCN2CCC(		0	
CC1(C)C[C@@H]2[C@@H]		0	
C[C@@H](CSC(=O)c1ccccc1)C(=O)N2C[C@H](C[C@H			0
CC(=CCC\C(=	0	0	0
C[C@H]1C[C@H]2[C@@H]3CC[C@](O)(C(=O)COC(=C			0
OC(CNCCNC(	0	0	0
NC(=O)c1cc(	0		
CC(C)CCC[C@	0	0	0
N[C@@H](C	0	0	
O=C1N(N=Cc2ccc(cc2)N(=O)=O)N=Nc3c		1	
CCS(=O)(=O)CCn1c(C)ncc1N(=O)=O		1	0

CCS(=O)(=O)	0	0	0
CC(Br)(CBr)COP(=O)(OCC(C)(Br)CBr)OC(	0		
CS(=O)CCC(N)C(=O)O	0		
CCC(=O)OCC(=O)[C@@]1(OC(=O)CC)[C@@H](C)C[C@			1
CC(=O)c1c(cc(N(=O)=O)n1N(=O)=O)N(=	1		
N[C@@H]1CC[C@@H](C[C@@H]2CC[C	0		
[O-][N+](=O)	0	0	
CC(C)(C)C1=CC(=O)C=C(C1=O)C(C)(C)C			1
CC(=O)Nc1ccc2c(Cc3ccccc23)c1O	0		
COCC(=O)Nc	0	0	
CC(C)(Cc1c[nH]c2ccc(Cl)cc	0		
CC1(C)Cc2cccc(O)c2O1			0
CN(CCO)CCO	0		
O=S1(=O)CCCCO1	1		
CC(Oc1ccc(Cl)cc1Cl)C(=O)O	0		0
NC(=N)c1ccc	0	0	0
COc1ccc(cc1)N=N(=O)c2ccc(OC)cc2	1		
CSc1cc2CCN(C(=O)Nc3ccci	0		
CBr			1
NS(=O)Oc1c	0		
COP(=O)(OC)Oc1ccc(c(C)c1)[N+](=O)[O	1		
Oc1ccc2cc3c4ccccc4c5ccccc5c3cc2c1	1		
CC(=N)NCCC	0	0	
O=C(C1CCC1)c2ccccc2			0
CC(CCC(=O)O)C1CCC2C3CCc4cc(O)ccc4C	0		
CCO[P@](=O)(NC(C)C)Oc1ccc(SC)c(C)c1	0		
O=N(=O)c1ccc2c(ccc3ccc(cc23)N(=O)=C	1		
N[C@@H](C[S+](O)[O-])C	0		
COc1cccc(C=O)c1O	0		
CN1C[C@@H](C=C2[C@H]	0		1
COc1ccc(C)cc1N	1		0
CC1OC(CC(O)C1O)OC2C(O	1		
Cc1ccc2c(C)c3C(O)C(O)c4ccccc4c3nc2c1	0		
COc1ccc2CC3	0	0	
O=C(OCCCCOC(=O)c1ccccc1)c2ccccc2			0
OCN1C(O)C(O)N(CO)C1=O	1		
OC(=O)c1cc(	0	0	0
CN1[C@@H]2C[C@@H](C[C@H]1[C@H	0		
CC(NCCC(c1c	1	1	1
BrCc1c2ccccc2cc3ccccc13	1		
OC(c1ccc(Cl)cc1)(c2cncnc2)c3ccccc3Cl			1
CC(C)OC(=O)CC(=O)OC(C)C	0		
O[C@@H]1N=C(c2ccccc2)c3cc(Cl)ccc3NC1	0		

Cc1ccc2nsc(NC(=O)C(Cl)Cl)c2c1			1	
CC(c1cnc[nH]	0	0		
C(=Cc1ccncc1)c2ccccc2				1
BrCC#C			1	
CCC(=O)NC1CCc2cccc(OC)c1		0		
COc1cc2C=C(Oc3ccc4C=CC		0		
CCCCCCCCC(=O)OCC				0
OCC(CBr)(CBr)CBr			1	0
CC(=O)c1ccccc1N(=O)=O			0	0
CN1CCCN=C1\C=C\c2cccs2				0
COc1ccc(\C=C\c2ccc(cc2)[N+](=O)[O-])c1			1	
COc1ccc(OC)c2C(=S)c3ccc(O		0		
CC1(C)O[C@@H]2C[C@H]3[C@@H]4CCCC5=CC(=O)C=				0
OC(=O)c1ccc	1	0		
OC[C@@H]1	0	0		
CCC(=O)OC				0
Cc1ccc(OC(=O)c2ccccc2O)cc1				0
COc1cc2CC3N(C)CCc4c(CO		0		
Cc1cc2nc3c(ccc4ccccc34)c(C)c2cc1C			1	
CCOc1ccc(NC(=O)CC(=O)C)cc1				0
NCCCC(NC(Cc1ccccc1)C(=O)O)C(=O)N			0	
OC(=O)CC(C(C(=O)O)C(=O)O)C(=O)O			1	0
OC(=O)c1c(I)cc(I)c(NC(=O)CCCC(=O)Nc2c(I)cc(I)c(C(				0
O[C@H]1C=C2c3cc4ccccc4cc3c5cccc([C@			1	
CCOC(=O)C(C#N)c1snc2ccc(cc12)[N+](=			1	
Nc1cc(Cl)c(cc1Cl)c2cc(Cl)c(N)cc2Cl			1	1
O=C1OC(=O)C2CCCCC12				0
N[C@@H](CCCNC(=O)N)C		0		
CC(=C(CCO)SSC(=C(C)N(Cc1cnc(C)nc1N)C=O)CCO)N(C				0
Cc1ccc(cc1NO)[N+](=O)[O-]			0	
COc1cc2N3[C@H]4[C@@H]5[C@H](CC3=O)OCC=C6C				0
NC(=N)c1cc2ccc(Br)cc2[nH]1			0	
NC1=NC(CS1)C(=O)O			0	
BrC1CCCC(c1)N(=O)=O			1	
[O-][S+]1(=O)N(CCCN2CCF		0		
CCCCC(=O)OCC			0	0
C[S+](CC[C@	0	0		0
C[C@]12CC=	0			
OC1C2OC2c3ccc4ncccc4c3C1O			0	
CCC[C@@H]1C[C@H](N(C)C1)C(=O)N[C@H]([C@H](C				0
Cc1ccc2nsc(N)c2c1			1	
COc1ccccc1N	0	0		0
CC(=O)c1ccc2[nH]c3c(C)cc(c(C)c3c2c1)[			1	



O=C1C[C@@H]2OCC=C3CN4CC[C@@]56[C@@H]4C[				0
CN(C)N=Nc1ccc(cc1)N(=O)=O			1	
COc1cc(CC=C)cc(C(=O)NCC	0			0
CCS(=O)CCSP(=O)(OC)OC			1	
NCCCI			1	
OC1=CC2=C3c4ccc(O)c(O)c	0			
[O-]c1ccccc1N(=O)=O				0
COc1ccc(cc1)C2=COc3cc(C	0		0	
CCCCCCCCC	0	0	0	0
Cc1ccc2nc3c4C=CC(O)C(O)c4ccc3c(C)c2			1	
Cc1ccccc1N=Nc2ccc(N)c(C)c2			1	
CC(C)Oc1ccccc1OC(=O)N(C)N=O			1	
CC1=C(CCN2CCC(CC2)c3no	0			
CCOP(=O)(CC)Oc1ccc(cc1)N(=O)=O				0
CC(C\N=C\c1ccccc1O)\N=C\c2ccccc2O				0
COc1cc(ccc1N)N=Nc2ccccc2			1	
Nc1ccc(N=Nc	0	0		1
CCN(CCO)CC	0	0		0
CNC(=O)N(c1ccccc1)c2ccccc2			0	0
O=C(OCc1ccccc1)\C=C\c2c	0			
OC1CCCCC1			0	0
CN1C(=O)N(	0	0		0
CCC[C@@H](O)[C@@H](CC)CO			0	
CCCCNC(=O)I	0		0	0
CC(C)C(=O)c1	0	0		0
ONc1ccn(=O)c2ccccc12			1	
C(C1=NCCN1	0	0		0
CCN(CC)C(=S)SSC(=S)N(CC)CC			0	1
CCCC[N+](C)(CCCC)CCCC				0
OC1ccnc(O)n	0	0	0	
CC(C)[C@@H	0	0		
OC1cc2ccc(cc2cc1S(=O)(=O)O)S(=O)(=C	0			
OC(=O)\C=C\c1oc(cc1)[N+](=O)[O-]			1	
Nc1c2CCCc2r	0	0		0
CCN(CCCI)c1ccc(OCCCCCNc2c3ccccc3nc			1	
CNNC				0
CN1CCN(CC1)c2ccc3[nH]c(Cc4ccc5[nH]c			0	
CC(C)Nc1nc(Cl)nc(NC(C)C)n1			0	0
OC(=O)c1cc2OCOC2c3c4ccccc4cc(c13)N			1	
COc1ccccc1N	1	0		
CN(C)CC[C@	1	0		
c1ccc2c(c1)ccc3ccccc23				0
O[C@@H]1[C@@H](Cc2ccc(cc2)c3ccccc3)COc4cc(cc				0

CCCCCCCCC	0	0
BrC1ccc(cc1)C(=O)C2OC2c3cccc3	0	
CC1(C)[C@H]2CC[C@H](C2)C1=C		0
C[C@H](OCCC(C)(C)O)[C@H]1CC[C@H]2\C(=C\C=C/C/3		0
CC(=O)Nc1cc(O)c2ccc3cccc4ccc1c2c34	1	
Nc1nnc(S)s1	0	
O=C1C(=O)c2ccc(c3ccc4cccc1c4c23)N(=	1	
NC(=N)NC(=I	0	0
CC1N(C)C=CC	0	0
COc1ccc2cccc3C(=O)N(C)C(=O)c1c23	0	
Oc1ccc(cc1)C(=O)N\N=C\c2oc(cc2)[N+]	1	
CC(C)(C)NCC(	0	0
CC(=O)Nc1ccc(cc1)C(=O)C2OC2c3cccc3	1	
COc1cccc1NC(=O)CC(=O)C		0
C(Oc1cccc2cccc12)C3CO3	1	
Cc1cc(ccc1[C@H](N)C(=O)	0	
OS(=O)(=O)ONNCCc1cccc1	1	
COc1cc(OC)nc(Sc2cccc(Cl)c2C(=O)[O-])n1		0
C1CN(CCO1)SSN2CCOCC2	0	
CS(=O)(=O)C	0	
OC1=C(Oc2cccc2C1=O)c3	0	
NC(=S)c1c(Cl)cccc1Cl	1	0
OC(=O)C1CSCN1	0	
CCC(C)(C)c1c	1	0
COC(=O)Nc1nc2ccc(cc2[nH]1)C(=O)c3cccs3		1
CCCC(CC)COP(=O)(Oc1cccc1)Oc2cccc	0	
CC(C)(C)C(=O)CC(=O)C(C)(C)C		0
CCc1ccc2C(=O)c3cccc3C(=O)c2c1[N+](:	1	
N[C@H](COF	0	0
C1CCC2=C(C1)c3cc4cccc4c5cc6cccc6c2	1	
COc1ccc(C)cc1N(=O)=O		0
C[C@H]1C[C(	1	
[O-][N+](=O)c1ccc(cc1)c2ccc(cc2)[N+](:	1	
CC12CC(O)C3	0	0
COCc1nc(C2=NC(C)(C(C)C)C(=O)N2)c(c1)C(=O)O		0
Br\C=C\Br	1	
O=N(=O)c1ccc2ccc3nc4cccc4c5ccc1c2c	1	
CC(=O)Oc1ccc2c(OC3(C)OOC23C)c1	1	
CC(C)(O)C#CC(C)(C)O		0
CC(=O)\C(=N/O)\C	0	
Nc1nc2cccc2s1	0	0
N[C@]1(CC(C	0	0
CC(C)OC(=O)COc1ccc(Cl)cc1Cl	0	0



CC1(C)S[C@H]2[C@H](NC	0	
CCN(=O)(CC)CCn1nc2c3ccc(Cl)cc3Sc4c(C	1	
Nc1ccc(Cc2ccc(NO)c(Cl)c2)cc1Cl	1	
Cc1c(cccc1[N+](=O)[O-])N=O	0	
CCC(C)(S(=O)	0	0
NC1=NC(S)C;	0	1
CCOC(OCC)P(=O)(O)CCCN(	0	
CC(=O)Oc1cc	0	0
CC1(C)CC(C(=O)NCCCCCCCCCCC(=O)O)(	0	
CN[S+](=O)([O-])Cc1ccc2[	0	
CCCCCCCCCCCCCCCC[N+](C)(C)Cc1ccc	0	1
COc1cc2c3CCC(=O)c3cc(C)c2c4cccc14	1	
OCCN(CCO)c1nc(nc2cccc12)c3ccc(s3)N	1	
CC(C)C(=O)Nc1cccc1	0	
CCC(C)Br		0
CC(C)(O)[C@	0	0
CC(C)C1[C@H]2[C@@H](C	0	
Cc1ccc(cc1)c2oc3cccc3n2	0	
CCCCc1cc2C(=O)C(=CNc2cc1OCc3cccc3)C(=O)OC		0
NC(=N)NC[C]	0	0
N#CCCCC#N	0	0
CC(=O)OC1CCCC1C(C)(C)C		0
FC(F)(F)c1cccc(CC#N)c1		0
OC(=O)C=Cc1ccc(cc1)N(=O)=O	1	
C\C=C/C=C	0	
NC(CSC(F)(F)C(Br)Br)C(=O)O	1	
Nc1cc(ccc1S(=O)(=O)O)S(=O)(=O)O		0
Cc1cc(N)cc(N)c1	0	
CC(NN)c1cccc1		0
Clc1cc(Cl)c(Cl)c(Cl)c1	0	0
OC1C=Cc2c(ccc3c4cccc4c(cc23)[N+](=C	1	
Nc1ccc(Nc2ccc(cc2)N(=O)=O)cc1	1	
Fc1cnc2c(ccc3ncc(F)cc23)c1	0	
CC(C)(C)C(=O)Cl		0
CC(=O)OCC(=O)Nc1cc(cc(NC(=O)COC(=O)C)c1Cl)C#N		0
C1CCC(CC1)N(Sc2nc3cccc3s2)C4CCCC4		0
CCCCCCCC[N+](C)(C)CCCCCCC		1
COc1cc(cc(OC)c1OC)C(=O)OC(COCCC(C)C)CN2CCOCC2		0
CC(N)C(=O)Nc1c(C)cccc1C	0	0
Cc1ccc2cccnc2c1	1	0
CC[C@H]1CC[C@H](NCc2cc3N(C)C(=O)[C@@H]4C[C@		0
NC(CCC(=O)NC(CSCC)C(=O)NCC(=O)O	1	
C[C@H]1C2C	0	0

CC(C)NCC(O)	0	0	0	0
Clc1ccc(CN2CCN/C/2=N\N(=O)=O)cn1				0
Nc1cc(cc(c1O)[N+](=O)[O-])[N+](=O)[C			1	
COC(=O)\C=C/C(=O)OC				0
CCNc1nc(NC(C)C(C)C)nc(SC)n1				1
NC(=O)C(=O)	0	0		
Fc1cnc2c(c1)cc(F)c3ccccc23			0	
[O-][N+](=O)c1ccccc1Br			1	
CCCCCCCC\C=C\C[C@H]1CC(=O)OC1=C			0	
CCOC(=O)[C@@H]1O[C@H]1c2ccccc2			0	
Nc1ncnc2c1r	0	0		0
NNCCO			1	0
C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=CC(=O)C=C[C@]34				0
CC[N+](=C1C=CC2=Nc3c(OC2=C1)cc(N)c			1	
Cc1ccc(cc1)S(=O)(=O)NC(=O)Nc2ncc(s2			0	
Cc1ccc(c2ccccc12)N(=O)=O			1	
CCOC(=O)C(C)Oc1ccc(Oc2oc3cc(Cl)ccc3n2)cc1				0
CN[C@@H](C)[C@H]1CC(	0			
c1ccc2c(c1)c3ccc4ccc5ccccc6cc2c3c4c56			1	
CCCCC(=O)O			0	0
NC(CSC\C=C\Cl)C(=O)O			0	
COC(=O)C1=C(C)NC(=C(C1c2ccccc2))[N+			0	
CCCN				0
CCNCC(=C)C				0
CCOC(=O)c1cn2nc(OP(=S)(OCC)OCC)cc2nc1C				0
CC(C)(C)c1ccccc1O				1
CC(C)OC(=O)C(O)(c1ccc(Cl)cc1)c2ccc(Cl)cc2				1
O=NN1CCCCC1			1	0
CC1(C)CC(O)CC(C)(C)N1O			1	
CC(=O)Nc1ccc(\C=C\C(=O)c2ccccc2)cc1			1	
Cc1cn2c(N=O)c(nc2s1)c3ccc(cc3)[N+](=			1	
CCC(C)OC(=O)C=Cc1oc(cc1)N(=O)=O			1	
CCOC(=O)CCCCCCC\C=C\C\C=C\C\C=C\C\CC				1
CC[C@@H](C)N			0	
Cc1ccc(cc1)n2nc(cc2NC(=O)Nc3ccc(OCCN4CCOCC4)c5				1
CC(N)(Cc1ccc	0	0		
CN(C(=O)C(Cl)Cl)c1ccc(OC(=O)c2occc2)cc1				0
Oc1ccc(Cl)cc1Cl			0	1
[O-][N+](=O)c1ccccc1[N+](=O)[O-]			1	
COC(=O)CC(=O)C			0	0
CC(C)(OO)c1ccccc1			1	0
Nc1cccc2cccc(N)c12			1	
CNC1C(O)C(C	0	0		



CCCCC(O)(Cn1cncn1)c2ccc(Cl)cc2Cl			1
O=C(CS(=O)C	0	0	
CN(C)[C@@H]1[C@@H]2C[C@@H]3Cc4c(cc(NC(=O)CN			0
NC1=NCC2N:	1	0	0
CC(C)CCCCCOP(=O)(Oc1cccc1)Oc2cc		0	
ClCCCl		1	0
CN1CCC[C@	1		0
C1CC[C@@H](NC1)c2cccn		0	
Oc1ccc(O)c(O)c1		1	
OC(=O)CCC(=	0	0	
Cc1ccc(C)c(O)c1		0	0
Cc1nnc2cc(cr	0		
CC(C)NC[C@	0	0	
Nc1c2ncn(c2nc[n+] <sup>1</sup> [O-])C(c3cccc3)(c4		1	
Cc1ccc(C)c(c1)[N+](=O)[O-]		1	
CCN(CC)c1ccc(C(=O)c2cccc2C(=O)O)c(O)c1			0
c1ccncc1		0	0
OC[C@@H](O)[C@@H](O		0	
OC(=O)c1ccc(O)cc1O		0	0
C[N+] <sup>1</sup> 2CCC(CC1)C(C2)OC(=O)C(O)(c3cccc3)c4cccc4			0
[O-][N+] <sup>1</sup> =C2C=CC(=O)C=C2\C(=N/c3cc		0	
OC(=O)C(Cl)(	0	0	0
Nc1nc(F)nc2	0	0	
CCc1c2cccc2cc3c4C5OC5C(O)C(O)c4ccc		1	
CCCCN1CC(O	0	0	
CCCC\C=C\C=C\C=O			1
CCN[C@] <sup>1</sup> (C	0	0	
CS(=O)(=O)OC1CN(C1)C(c2cccc2)c3ccc		1	
COc1nccc(n1)c2c(ncn2C3C		0	
NC(=N)Nc1c	0	0	
Nc1ccc(cc1)[S+](=O)(N)[O		0	
Cc1cccc(C)c1C		1	
C1CC=C2C(C1)CCc3cccc23		1	
CC1(C)CCC2=C(O1)c3cccc:		0	
CC(C)C(=O)Nc1snc2cc(Cl)ccc12		0	
Cn1cnc(c1Sc2[nH]cnc3ncnc23)[N+](=O)		1	
COc1cc2CCN	0	0	
CC(C)(COC(=O)c1cccc1)COC(=O)c2cccc2			0
Nc1ccc(Cc2ccc(N)cc2[N+](=O)[O-])c(c1)		1	
CN([C@@H]:	1	1	
C[C@] <sup>1</sup> 2CC[C	0	0	0
CC12CCCC(C)(C1CCC34CC(O)(CCC23)C(=		0	
CCCCCCCCC	0	0	

OC1(O)C(=O)NC(=O)NC1=O	0		
CCN(CC)CCC(	1		
Oc1cc(ccc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1		
COCCOCCOCCOCCOC			0
COc1cc(ccc1O)C(=O)C	0		
CC(=O)OCC(=	0	0	
Clc1ccc(CC2CO2)cc1	1		
OC1OC(=O)C(=C1C(Cl)Br)Cl	1		
C[C@@H]1O	0		1
OC(=O)\C=C\c1ccc(\C=C\C(=O)O)cc1	0		
Cn1c2ccccc2c3ccc(cc13)[N+](=O)[O-]	1		
CC(=C)C1CC=C(C)C(O)C1	0		0
O[C@@H]([C@@H](COC(=O)CCC(=O)[O-])NC(=O)C(C			0
Clc1ccc(cc1)c2oc3ccccc3n2	0		
CCNc1nc(O)nc(NC(C)C)n1	0		
Nc1ccc(\C=C\c2ccccc2)cc1	1		
CN(CCC1ccc(Cl)c(Cl)c1)[C@	1		
CCCCCCC(=C	0	0	
O=N(=O)c1cc(c2c(cc(cc2c1)N(=O)=O)N(	1		
C\C=C\C1OC(=O)C=CC1O	0		
OC(C1CN2CC	1	0	
COc1ccc2c(c1)[nH]c3c(C)n	1	1	
ClCC=CCCl			0
CCCCCC(O)CC	0	0	
CN1C(CCl)Nc	0		
O=C(Cc1ccccc1)c2ccccc2			0
OC[C@H]1O	0		
[O-][N+](=O)c1ccc2ccc3ccc(N=O)c4ccc1	1		
C[C@H]1C[C@H]2OC(=O)[C@H](C)[C@	1		
Oc1ccc2ccccc2c1N=Nc3ccc4ccccc4c3S(=	0		
CCCCCCCCCCCCCCCCOCCO			0
CCN(CC)c1ccc(cc1)C(=C2C=CC(=[N+](CC)	1		1
CNC(=O)[C@@H](C)SCCSP(=O)(OC)OC	1		
CCCCOC(=O)CO			0
NCCCC[C@H](NC(=O)[C@@H]1CCCN1C(=O)[C@@H];			0
CCN(Cc1cccc(c1)S(=O)(=O)O)c2ccc(cc2)	1		
NCCCC[C@H](NC(=O)[C@@H]1CCCN1C(=O)[C@@H];			0
[O-][N+](=O)	0	0	0
Nc1ccc(cc1)S	0		0
Cc1cc2ccccc2cc1[N+](=O)[O-]	0		
CC[C@@]1(C	0	0	
CC1CCCC(=O)CCCCCc2cc(O)cc(O)c2C(=O	0		
Nc1ccc(CCC2ccc(N)cc2)cc1	1		

Nc1nc(cs1)\(	0	0		
CCCC(CCC)C(-	0	0		
CC[n+] <sub>1</sub> c(c2c	0		1	1
CCNc1nc(N)nc(Cl)n1			0	0
c1ccc(cc1)n2	0	0		0
Cc1cnc2ccc3c(nc(NC4OC(C(O)C(O)C4O)(	0			
CC(C)(C)c1cc(ccc1[N+](=O)[O-])c2ccccc:	0			
OCc1ccc2c3cccc4cccc(c2c1)c34			1	
CCC(=O)N(C1CCN(Cc2cccs2)CC1)c3ccccc3				0
CCCCCCCCCCCCN(C)N=O			1	
C[C@@H](Oc1ccc(Cl)cc1C)C(=O)O			0	
C[C@@H](O)C[N+](C)(C)NC(=O)C(=C)C			0	
COc1ccc2c(c1)c3cc(OC)ccc3c4c5ccc(OC)			1	
CN(C)[N+](=O)[O-]			1	
[O-][N+](=O)c1cc(cs1)C(=O)Nc2cccc(Br			1	
[O-][S+](=O)(NCCCCCc1c		0		
CCOS(=O)(=O)c1ccccc1			1	
CN[C@H]1[C	0	0		
COC(=O)[C@@H](N)CCCN\C(=N\N(=O)=O)\N				0
Cc1cccc(C(=O)O)c1N(=O)=O				0
Cc1c(c(C)c(c(c1N(=O)=O)C(C)(C)C)N(=O	0			1
[O-]S(=O)(=O)C(CC(=O)OC1CCCCC1)C(=O)OC2CCCCC2				0
Nc1ccc2cc3c	1	0	1	1
CN(C)c1ccc(\C=C\c2ccc(cc2)[N+](=O)[O			1	
C\C(=C)\CCO	0	0		
COc1cc2c(CC	0	0		
FC(=C(Cl)Cl)SSc1ccccc1N(=O)=O			1	
C1COCCOCCOCCOCCOCCOCCO1			0	
Cc1cc(OCCOCC[N+](C)(C)Cc2ccccc2)ccc1C(C)(C)CC(C)(				1
COC1=CC(=O)c2c(nc(C)c3c4CCCCc4[nH]c			1	
Nc1ccc(cc1Cl)c2cc(Cl)c(N)c(Cl)c2			1	
CCCCCCCCCO(=O)C				0
CCCCCCCC\C=C/CCCCCCCC(=O)N(C)CC(=O)O				0
OC1C=Cc2c(ccc3c4C=Cc5cccc(cc23)c45)(			1	
COc1c2ccoc2nc3c(O)cccc13			1	
OS(=O)(=O)c1cccc(c1)[N+](=O)[O-]			0	
OC1C=Cc2c(ccc3c(Br)c4cccc4cc23)C1O			1	
CCOc1ccccc1OCC				0
Nc1ccc(O)c(c1)[N+](=O)[O-]			1	
CCOC(=O)C(N)CS			1	
ClC(=O)c1cc(cc(c1)C(=O)Cl)C(=O)Cl				0
Cc1cc(c(O)c(	0	0		0
O\N=C\C=N\O			0	

COc1cc(CC(C)N)c(OC)cc1Br			0
NC(=O)N(CCCC(=O)O)N=O	1		
CCc1ccccc1O	0		0
Cn1cnc2ccc(cc12)[N+](=O)[O-]	1		
NCCCP(=O)(O)CC1CCCCC1	0		
Cc1cc2c3C4OC4C(O)C(O)c3ccc2c5ccccc1	0		
CC1CN(NC1=O)c2ccccc2			0
OP(=O)c1ccccc1			0
[O-][N+](=O)c1ccc2c3ccccc4ccc(c5ccccc	1		
[O-][N+](=O)c1ccc2ccc3ccccc4ccc1c2c34	1		
CC(=O)NC(CSCC)C(=O)O	1		
C[C@@H](Cc1ccccc1)NC(=O)NS(=O)(=O)c2ccc(C)cc2			0
[O-]S(=O)(=O)SSS(=O)(=O)[O-]			0
Cc1c(C)c2OC	1		
NC(=N)n1ccc	0	0	0
CC[C@H](C)[C@H](NC(=O)[C@H](Cc1ccccc1)NC(=O)[			0
N[C@@H](CO)C(=O)O	0		
OCCN1CCN(C	1	1	
c1ccc2cc3c(ccc4ccccc34)cc2c1	1		1
C[C@@H]1C[C@H]2[C@@H]3CCC4=CC(=O)C=C[C@H]4			0
CCCCCCCC(=O)Nc1snc2ccccc12	0		
O=N(=O)c1ccc2[nH]ccc2c1	1		
[O-][N+](=O)c1ccc2c3ccccc4ccccc(c12)c3	1		
FC(F)C(F)(F)Oc1c(Cl)cc(NC(=O)NC(=O)c2c(F)ccccc2F)c			1
CC(O)C#N	0		
COC1(NC(=O)CSCC(N)C(=O)O)C2SCC(=C	0		
c1ccc(cc1)C(c2ccccc2)c3ccccc3	0		
CN1CC(CBr)CC2C1Cc3c[nH]c4ccccc2c34	1		
CCCB	0		0
OC1CCCCC1c2ccccc2			0
COCCOCCOCCOCCOCCO			0
OP(=O)([O-])	0	0	0
Cc1[nH]c2C(=O)C=C(N3CC3)C(=O)c2c4n	1		
COc1ccc2c(c1)nc(N)n2C	1		
OC1=C(Oc2ccc(O)cc2C1=O	0		
CCCCC(=Cc1ccccc1)C=O			0
CO\N=C(\C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C(=			0
CN(C)CCCS\c1ccccc1NC(=O)\C=C\c2ccccc2			0
C[C@H](CN	1		
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCC			0
C[C@]1(Cc2c	0	0	
CCCC[C@@H](CC)COC(=O)C=C	0		
CCNCC	0		

COC(=O)[C@@H]1[C@@H]	1		
O=C1O[C@@]23C[C@@H]	0		0
CCCOCC(C)OCC(C)O			0
CN1CCCC1CC	1	1	
CC(N)(C=O)(	0		
CC(=O)Nc1ccnc2ccccc12			0
Nc1ccc(Cl)cc1N		1	1
O1[C@@H]2C=Cc3cc4ccc5cccc6ccc(c3(C	1		
CC1CC(CC2CCC(N)C(C)C2)CCC1N			0
CC[C@@H](C)CCCC(=O)N[C@@H](CCN)C(=O)N[C@			0
CSCCC(N)C(=	0	0	0
C[N+]1(C)[C(	0	0	
CCc1c2ccccc2cc3c1ccc4ccccc34			1
CCCCC[C@@H](O)C\C=C/CCCCCCCC(=O)OCC(O)CO			0
CCCCC[C@@H]1[C@@H]	0		
CC(C)(C)C(=O)OCOP(=O)(C	0		
OCC1OC(=O)C(O)C(O)C1O	0		
CC\C(=N/OC\C=C\Cl)\C1=C(O)CC(CC1=O)C2CCOCC2			0
CC(C)NCC(O)	0	0	0
COc1cc(cc(OC)c1OP(=O)(O)O)[C@H]2[C@@H]3C(CO			0
COc1ccc2cc(c3C=CC(=O)Oc3c2c1)[N+](=	1		
Cc1ncc(C[n+]	0	0	0
Cc1ccc(N)cc1S(=O)(=O)O			0
CC[C@]12C=I	0	0	0
OC(CCN1CCC	1		
Oc1ncc2ccc3cccc4ccc1c2c34			0
Nc1nc(O)nc2c1ncn2C3CC(O)C(CO)O3			0
CO[C@H]1[C	1		1
CC(C)(C)NCCO			0
CCCCCCCCOS(=O)(=O)[O-]			0
Oc1cc(c2ccc3cccc4ccc1c2c34)[N+](=O)[	1		
CC1C(=O)OC2CCN3CC=C(COC(=O)C(C)(C	0		
CN1C(=O)C[C	0	0	
[O-][N+](=O)c1ccccc1CCl			1
COc1ccc([C@H](OC(=O)C)C=C)c2ccccc1:	1		
CC[NH+](CC)I	1	1	
CCN(CCC#N)c1ccc(cc1)N=Nc2c(Cl)cc(cc2	1		
Nc1cc(c(N)cc1F)N(=O)=O	1		
CC(O)C(C)OC	0		
OCC=[N+](O)[O-]	1		
CC(=O)OCC1OC(Oc2cccc3C(=O)c4cccc(C	1		
[O-][N+](=O)	0	0	
OC(=O)Cc1ccccc1			0



COc1cccc1C	0	0	0	0
CC(C)(c1ccc(Oc2ccc3C(=O)OC(=O)c3c2)cc1)c4ccc(Oc5			0	
CC(=O)OCC(=	0	0		
N[C@@H](CCC(=O)N[C@@H](CS)C(=O)NCC(=O)O)C(			0	
CN1CCN(CC1	1	1		
Nc1ccc(Oc2ccc(N)c(Cl)c2)cc1Cl			1	
CCCCCCCC(=O)\N=C\1/SN(C(=O)CCCCC			1	
CC(C)NC(C)C(O)COc1ccc(C		0		
CC(C)(C)NC[C@H](O)COc1		0		
O[C@@H]1CC(=O)c2c(O)ccc3c4ccc(O)c			1	
CCCCC(=O)O	0	0		1
Cc1c2cccc2cc3c4C=C[C@@H](O)[C@H			1	
CNC[C@H](O)c1ccc(O)c(O		0		0
COc1ccc2nccc([C@H](O)[C		0		
Cc1ccc(cc1C)N(=O)=O				0
Cc1nccc2c3c	0	0	1	
[O-][N+](=O)c1ccc2ccc3cccc(c3c2c1)[N-			1	
ClCCNCCCNc1c2cccc2nc3cccc13			1	
C[C@H]1CNCCc2ccc(Cl)cc12				0
CCCCC(CC)COC(=O)CC(C(=O		0		0
CC(=O)Nc1cc	0	0	0	0
OS(=O)(=O)c1cccc1N(=O)=O			0	
OC1CC=Cc2c1cc3ccc4cccc5ccc2c3c45			1	
CN[C@@H]1C[C@@H](c2		1		
COCCCOCCOC				0
CCN(=O)=O				0
C[C@]12CC[C	0			
[O-][N+](=O)c1ccc2nsc2c1			1	
Nc1c(Cl)c(F)nc(OCC(=O)O)c1Cl				0
CC(=O)Nc1ccc(cc1)S(=O)(=O)Cl			0	
OC(=O)CC\C=C/C[C@@H]:		0		
CC1CC2OC(=O)C(C)C2CC3(C)C(O)CC(O)C			1	
Clc1ccc2Sc3c	1	1		1
[O-][N+](=O)c1ccc2cccc2c1			1	
NC(=N)NCCC	0	0		0
[O-]C(=O)CCCOc1ccc(Cl)cc1Cl				0
[O-][N+](=O)c1cc2c3cccc3sc2c4cccc1			1	
N[C@@H]([C		0		
[O-][N+](=O)c1cccc2c(Cl)nsc12			1	
COCC(C)OC(=O)C				0
C(Nc1[nH]cnc2ncnc12)c3cccc3			0	
Clc1ccc(CN(C2CCCC2)C(=O)Nc3cccc3)cc1				1
OC(=O)COc1cccc(c1)c2ocn		0		

CC(C)CN(C(=O)CCCl)c1snc2cccc12	0	
CCCC[n+] <sup>1</sup> cccc1C		0
Cc1cc(N)ccc1c2ccc(N)cc2C	1	
OC1CN(CCO1)N=O	1	
O=C(\C=C\c1ccc(Oc2cccc2)cc1)c3cccc	0	
C[C@H](I)[C@@H]1OC[C@@H](CO)O1	1	
CC(O)C1CCC2	0	1
OC(=O)CNC:	0	0
Oc1c(cccc1N(=O)=O)N(=O)=O	0	
CCOP(=O)(OCC)Oc1nc(Cl)c(Cl)cc1Cl	0	1
CC(C)N	0	
CO[C@H]1[C	1	1
Oc1ccc2C[C@@H]3[C@@H]4CCCC[C@]4(CCN3CC=C)		0
CC(C)(C)CC(C	0	0
CC(=CCC[C@@](C)(O)C=C)C	0	
CN1(=O)CCCC1c2cccnc2	0	
CCc1ccc2C(=O)c3cccc3C(=O)c2c1N(=O)	1	
CO[C@]1(NC(=O)C2SC(=C(C(=O)N)C(=O)O)S2)[C@H]		0
ClC(Cl)(Cl)SN1C(=O)c2cccc2C1=O	1	1
COc1ccc(cc1)c2nc(c3ccc(OC)cc3)c([nH]2	1	
Cc1cccc(CN2CCN(CC2)C(c3cccc3)c4ccc(Cl)cc4)c1		0
CCCCCCCCCCCC(=O)N(CC)CC		0
CN(C)CCc1c[nH]c2ccc(CS(=O))(=O)N3CCCC3)cc12		0
CC(=O)CC(C1=C([O-])c2cccc2OC1=O)c3cccc3		1
CC12CCC(CC1	0	0
CC(=O)N1CC2CC(C1)C3=CC	0	
Cc1cc(N)c(C)cc1N	1	
C1CCC2C(C1)CCc3cccc23	1	
CCC[N+] <sup>1</sup> (C)CCCC1		0
CSC(=O)c1cccc2nns12		0
O=C(Nc1ncc(s1)N(=O)=O)c2cccs2		1
OC(=O)CCc1cccc1	0	0
CCCCCNC(=N)N\N=C\c1c[r	0	0
[O-]S(=O)(=O)Oc1ccc(cc1)C(c2ccc(OS(=O))(=O)[O-])cc		0
OC(Nc1snc2cccc12)C(Cl)(Cl)Cl	0	
CC1(NCCc2cc(O)c(O)cc12)	0	
CN(C)CCc1cc(ccc1O)C(=O	1	
COc1c2ccoc2nc3cccc13	1	
CCOC(=O)N(CC)N=O	1	
OCc1cccc1C	0	0
Clc1c(Cl)c(Cl)c(Cl)c(Cl)c1Cl	0	
N[C@H](CN=[N+]=[N-])C(=O)O	1	
[O-][N+](=O)c1ccc2c3c1cccc3c4cccc5cc	1	

CN(C\C=C\C#	1	0	0		
COc1cc(CC=C)cc2OCOC12			0		0
Cc1cc(N)n(n1)c2cccc2					0
N[C@H](CCC(=O)O)C(=O)C		0			0
Cc1cc(CCC(=O)OCCOCCOCCOC(=O)CCc2cc(C)c(O)c(c2)					1
CC(C)OC(=O)N[C@@H](C(C)C)C(=O)NC(C)c1ccc(C)cc1					0
CC(=CC(C)(C)C)C					0
Oc1ccc(cc1N	0	0			
CN(C)c1ccc(cc1)C(=N)c2ccc(cc2)N(C)C			1		1
[O-][N+](=O)c1ccc2c(c1)cc(c3cccc23)[I			1		
CCNC1(CCCCC1=O)c2cccs2					0
CCCN(CCC)[C@@H]1CCc2c		0			
O=N(=O)c1ccc2[nH]ncc2c1			1		
NNOS(=O)(=O)O			1		
O[C@@H]([C@H]1CC2CC1		0			
CC(O)C(=O)NCCO			1		
COc1cc(\C=C/C#N)\C(=O)		0			
COC(=O)NC(=S)Nc1cccc1NC(=S)NC(=O			1		0
O=N(=O)c1ccc(CNc2nc[nH]c3ncnc23)cc:			0		
CN1CCOCC1			0		0
CCCOS(=O)(=O)C			1		
Nc1ncnc2c1cnn2CC(O)CN=N#N			1		
CCCC(=O)C(CC)Sc1ccoc1C					0
Clc1ccc(cn1)C(Cl)(Cl)Cl					0
Nc1ncnc2c1r	0	0			
C\C1=C/CCC(=C)[C@H]2C		0			
Oc1ccc2c(Oc3cc(O)ccc3C24OC(=O)c5ccc			0		1
COc1cc(OC2OC(CO)C(O)C(O)C2O)c3C(=O			1		
CCOC(=O)C1=	1				
Oc1cccc1C2=CC(=O)c3c(C		0			
CCN(CC)c1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]			1		
Cc1cc(C)c(cc1C)N=Nc2c(O)c(cc3cc(ccc23)S(=O)(=O)[C					0
FC(F)(F)F)C		0			1
Cc1ccc(c(C)c1)S(=O)(=O)O			0		
CN(C)[C@H]1[C@@H]2[C@@H]3[C@H](O)c4c(Cl)c					0
[N-]=[N+]=[N-]					0
COc1cccc1N(=O)=O			1		0
CCOC(=O)CC(=O)OCC					0
Nc1c(Cl)cc(cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[C			1		
CC1=C(N2[C@H](SC1)[C@H](NC(=O)[C@H](N)C3=CC					0
C\C=C\1/CC(C)C(C)(O)C(=O)OCC2=CCN3			0		
CNCCC=C1c2cccc2CCc3ccc		1			1
Cc1cc2C(=O)C(O)Cc2c3ccc4cccc4c13			1		

<chem>OC(=O)c1cc(Cl)ccc1Cl</chem>	0	0	
<chem>CCC(=O)N(O)c1ccc2ccccc2c1</chem>	1		
<chem>Oc1c(Cl)cc(Cl)c(Cl)c1[N+](=O)[O-]</chem>	0		
<chem>CCc1cccc(NC(=O)c2csc(c2)[N+](=O)[O-])</chem>	1		
<chem>Cc1c(O)cc(cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]</chem>	0		
<chem>O=C(Nc1ccc2c(Cc3ccccc23)c1)c4ccccc4</chem>	1		
<chem>Cc1cc(Nc2ccc(O)cc2)ccc1N</chem>	1	1	
<chem>COc1ccc(cc1)[C@H]2O[C@@H]2C(=O)c</chem>	1		
<chem>Oc1ccc2CC3N</chem>	1	1	
<chem>CC(=C)C(=O)OC(C)(C)C</chem>	0		
<chem>OC(=O)Cc1ccc(Cl)cc1Cl</chem>			0
<chem>CCCCC(=O)O </chem>	0	0	
<chem>Cc1cc2N=C3C(=O)NC(=O)N</chem>		0	
<chem>C1Cc2ccccc2CN1</chem>	0		0
<chem>CC(=O)Nc1ccc(C)cc1C</chem>			0
<chem>CC(C)C(OC(=O)C(C)C)C(C)(C)COC(=O)C(C)C</chem>			0
<chem>CC(=O)SC1CC</chem>	0		
<chem>CCCCCCCCS(=O)(=O)[O-]</chem>			0
<chem>CCCC1O[C@H]</chem>	0		
<chem>CC(N)Cc1ccc2OCOc2c1</chem>			0
<chem>CC(C)C(=O)O</chem>			0
<chem>FC(F)OC(F)(F</chem>	0	0	0
<chem>O=Cc1cccc2ccnnc12</chem>	1		
<chem>CCc1c2C3NC3c4ccccc4c2cc5ccccc15</chem>	1		
<chem>CC(=O)N(OC(=O)c1ccccc1)c2ccc3c(Cc4c</chem>	1		
<chem>NC1=NC(=O)N(C=C1)[C@H]</chem>	0		
<chem>Nc1nc(O)c2nc(O)n(C3CC(O)C(CO)O3)c2</chem>	0		
<chem>C[C@H](\C=C\[C@@H](O)C1CC1)[C@H]2CC[C@H]3\</chem>			1
<chem>C(OCC1CO1)C2CCC(COCC3CO3)CC2</chem>			0
<chem>CC(O)CNCC(C)O</chem>	0		0
<chem>COc1cc(NC(C)CCN)c2ncccc2c1</chem>	1	0	0
<chem>OC(C(O)C(=O)[O-])C(=O)[O-]</chem>			0
<chem>Cc1ccccc1OC[C@H]2CO2</chem>	1		
<chem>FC(F)(F)C(F)(</chem>	0	0	0
<chem>CCCCCOC(=O)CCCC</chem>			0
<chem>CC1=CC(=O)Oc2c3CCCN4CCCc(cc12)c34</chem>	1		
<chem>CSCC(NC(=O)C(C)(C)SC)C(=O)O</chem>	0		
<chem>OC1C=Cc2c(cc3c4ccccc4cc5c6ccccc6c2c:</chem>	1		
<chem>O=N(=O)C1=Cc2cc3cc4ccccc4cc3c5cccc1</chem>	1		
<chem>CCN(=O)(CC)CCNc1ccc(CO)c2Sc3ccccc3(</chem>	1		
<chem>C(Cc1ccccc1)Cc2cccn2</chem>			0
<chem>[O-][N+](=O)C1c2ccccc2C(=O)c3ccccc13</chem>	0		
<chem>CN(C)CCOC(=O)C(=C)C</chem>	1		0

Clc1ccc(Cl)c(Cl)c1Cl	0	0	0
CC[C@H]1OC(=O)[C@H](C)[C@@H](O[C@H]2C[C@H]2)C1			0
CC[N+](C)C	0	0	0
CO\N=C\C(=O)N	0	0	
Nc1ccc(cc1)[S+](=O)([O-])		0	
[O-]S(=O)(=O)c1ccc2C(=O)c3ccccc3C(=O)c2c1			0
C[C@@H](CCC(=O)O)[C@H]1CC[C@H]2	0		
CCCCCCCCOC(=O)C=C			0
CCCCCN(CCCCC)N=O	1		
CC(C)(C)c1onc(O)c1CC(N)C	0		
[O-][N+](=O)c1ccc2c3ccccc3c4ccc(c1c2)C(=O)N	1		
CCC(C)(CCC(C)C)C(=O)[O-]			0
CCOC(=O)C1=	0	0	
C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=C(O)C(=O)CC[C@]4(C)O)CC[C@]12			0
NC1=NC(=O)C2=C(NCC(CNc3ccc(cc3)C(=O)N[C@@H]1C)C)C(=O)N			0
CCCCC1ccc(N)cc1			0
CO	0	0	0
O=C1C=Cc2cccc3cccc1c23		1	
Cc1cc2N=C3C	0	0	
Cc1ccc(cc1)\C=C\C=C\C2CCCC2[N+](=O)[O-]	1		
ClCc1ccc(cc1)N(=O)=O	1		0
NC1=NC(=O)N(C=C1)[C@@H]1CCN1	0		
OCCN1CCN(C)C1	1	1	
ONC(=O)Cc1cn(cn1)N=O		1	
O=C1OC(=O)C=C1		0	0
[O-][N+](=O)c1cccc2nc3ccccc3nc12		1	
Clc1cccc1c2nnc(nn2)c3ccccc3Cl			0
COc1ccc2cc3	0	0	0
[O-][N+](=O)c1ccc2c(Cl)nsc2c1		1	
CC(=O)c1ccc(cc1)N=O		1	
CC(=O)NC1CCSC1=O			0
Fc1cccnc1		0	
CCC(Br)(CC)C(=O)NC(=O)N		0	0
[O-]N1C=CC=	1	0	
CC[N+](C)(CC)CC(=O)Nc1c		0	
C[C@H](Cc1c	0	0	
CC[C@@]12CCCN3CCc4c([C@H]13)n(C(=O)C2)c5cccc			0
Cn1cnc2c(NO)ncnc12		1	
CCOC(=O)CNC(=O)CCCCSc1[nH]cnc2ncn1		0	
CC(CCC(=O)O)(c1ccc(O)cc1)c2ccc(O)cc2			0
COC(=O)c1cc(ccc1N)c2ccc(N)c(c2)C(=O)N		1	
OC1C(O)c2cc3c(ccc4ccccc34)cc2c5ccccc		1	
C[C@]12[C@@H](O)C=C[C@@]3(OC1=O)[C@@H]4C			0

CCCCC(CC)COC(=O)COc1ccc(Cl)cc1C				0
CCOCCOCCOC(=O)C				0
Clc1cccc1NS(=O)(=O)c2cccc3cccnc23		0		
CCN(CC)C(=O)N[C@H]1C[C@H]2[C@@H](Cc3c[nH]c4				0
CCOC(=O)c1c	0	0		0
CCCCOC(=O)C(C)Oc1ccc(Oc2ccc(cnc2)C(F)(F)F)cc1				0
ClCC(=O)NCc1cccc1			1	
Nc1nc(cs1)c2ccc(cc2)N(=O)=O				1
COc1cc(OC)c(C=O)cc1OC		0		0
COS(=O)(=O)[O-]				0
CCc1ccc(O)c(c1)C(C)(C)C				1
OC(=O)C1=C(O)C(=O)C=CO1		0		
COc1c(O)cc2CCN(C)C3Cc4cccc4c1c23			1	
OCc1cccc1	0	0	0	0
COc1ccc2C=CC3CCCC3c2c1			1	
CCOc1cccc1[N+](=O)[O-]			1	
CCCC(CCC)C(=O)OC1C[C@@H]2CC[C@H](C1)[N+]2(C)				0
CCCCCCCOC(=O)c1ccc(O)cc1				1
CC(=O)Nc1ccc(N)cc1		1		0
Cc1c(N)ccc(N=Nc2cccc2)c1N		1		
COCC(C)N				0
OC(=O)CCNC	0	0		0
CCCCC1(COC(	0	0		0
CN[C@@]1(CCCCC1=O)c2cccc2Cl				0
CN1C(=O)N(c	0	0	0	0
[O-][N+](=O)\C=C\c1oc(cc1)[N+](=O)[C			1	
C[C@@H]1CN(N=O)[C@@H](C)CN1N=(			1	
Nc1cc(ccc1O)S(=O)(=O)O		0		0
CCCCCCCCCCCC				0
[O-][N+](=O)c1cccc1C(F)(F)F		0		
COC(=O)C(=Cc1oc(cc1)N(=O)=O)C#N			1	
CCCCS(=N)(=	0			
COc1cccc(N)c1			1	
Nc1c(cc(c2cccc12)S(=O)(=O)O)N=Nc3c			1	
CCOc1cccc(c1)[N+](=O)[O-]			0	
COc1ccc2C(=	0	0		0
COc1cc(O)c2C(=O)Oc3cc(O)cc(C)c3c2c1			0	
COc1cc2C(=O)c3nccc4cc(C			0	
CCN(CC)CCO(	1			
CC(=O)C[C@	0	0		
CCOP(=O)([O-])OCC				0
OC(=O)C(Br)Br		1		0
CC(=CCc1cccc2c(c[nH]c12)		0		

[O-][N+](=O)C1=Cc2cccc3c4cc5ccccc5cc	1		
O=C1Oc2cc(ccc2C=C1c3ccccc3)n4nc5ccc	0		
CC[C@H](C)[C@H]1O[C@@]2(C[C@@H]3C[C@@H](	1		
CN[N+](=O)[O-]	0		
OC1=C(C(=O)Nc2cc(Cl)ccc:	0		
[O-][N+](=O)c1ccc(COc2ccccc2)cc1	0		
O=C1C=Cc2ccc3C(=O)C=Cc4ccc1c2c34	1		
CCN(CC)c1cc(NC(=O)C)c(cc1OC)N=Nc2c	1		
COC(=O)C(=C)C#N	1		
Nc1ncnc2c1nc(c3ccc(cc3)N(=O)=O)n2c4	1		
ClC(=C(Cl)C(=C(Cl)SSc1ccccc1N(=O)=O)(	1		
Cc1ccc(C)c(c1)N(=O)=O	1	0	
BrC[C@H]1CO1	1		
CC[C@H](NC(=O)c1cc(F)ccc1[N-]S(=O)(=O)c2ccccc3cc	1		
OC1OC(=O)C(=C1CCI)Cl	1		
OC(=O)C1CCI	0	0	
CCc1ccc(cc1)	0	0	0
OC[C@H](O)	0	0	
COc1cc(ccc1	0	0	
OCCCCOC=C			0
Nc1nccs1	0	0	1 0
Nc1ccc2c(c3ccccc3C(=O)O)c4ccc(N)cc4[	0		
Nc1ccc(cc1)S	0		0
OC(=O)c1cc(Oc2ccc(cc2Cl)C(F)(F)F)ccc1N(=O)=O			0
CCOC(=O)CCc1ccccc1			0
[O-][N+](=O)c1c(Cl)cccc1c	0		
Nc1cccc(Cl)c1		0	0
CC\C=C/CCOC(=O)CC			0
Clc1cccc(c1)†	1	0	0
Fc1cccc(F)c1	0	0	1
CC(=CCl)C		1	0
O=C1NSc2ccccc12			1
O=C(OCC(COC(=O)c1ccccc1)(COC(=O)c2ccccc2)COC(=			1
Cc1ccc(cc1)S(=O)(=O)OCc2ccc(cc2)[N+]	1		
CCC(CC)c1cccc(OC(=O)N(C)N=O)c1	1		
Cc1cncn1	0		
Nc1cc(Cl)c(cc1O)[N+](=O)[O-]	1		
COc1c(O)cc2	0	0	
Cn1c(N)nc2nc3ccncc3cc12	0		
Nc1ccc(Sc2ccc(N)cc2)cc1	1		0
Clc1cccc(SC2CCNCC2)n1	0		0
CCSC(=O)Cl	1		0
Oc1ccc2C(=O)c3cccc4c(O)ccc(c2c1)c34	1		

ClCBr	1	0
CCCCN(CCON(=O)=O)N(=O)=O	1	
CC(C)CCOC(=O)c1ccccc1		0
O[C@H]1Cc2c(O)cc(O)cc2	0	
COc1cc(OC)c2C3C=COC3Oc2c1	1	
C[C@@H]1OC(=O)C[C@H](O)C[C@H](O)C[C@H](O)C		0
Fc1ccc(CCl)cc1	0	
CCC1NC(=O)C	0	0
CCOC(=O)C(C)(C)Oc1ccc(Cl)	0	0
CC(Cc1ccccc1)NCc2ccccc2	0	
OC(=O)c1ccc	0	0
CCN(CC)c1ccc2N=C3C(=CC(=[NH2+]))c4c	1	
CCCOC(=O)C=Cc1oc(cc1)N(=O)=O	1	
CN(C)CCNC(=O)c1cccc2c(O)c3ccccc3nc1	1	
CC(=O)N[C@@H](C=O)[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)		0
C[C@H](N)C(=O)c1ccccc1		0
COc1ccccc1N=C(O)c2csc(c2)N(=O)=O	1	
COC1=CC(=O)C(=O)C(=C1)C(C)(C)C	0	
CC(C)(C)C(O)(CCc1ccc(Cl)cc1)Cn2cncn2		1
O=N(=O)c1ccc2c(c1)[nH]c3ccccc23	1	
C1C=CC=C1		0
CCOC(=O)Cl		0
COc1ccc(CCN	1	0
CC(N)c1cccc	0	0
C1C2=C3C=CC=CC3=CC4=C5OC5=C(C24)C	1	
CC(C)(COC[C@H]1CO1)COC[C@H]2CO2	1	
OC1COC(NCCc2c[nH]c3ccccc23)C(O)C1C	1	
[O-][N+](=O)c1ccc(Cl)cc1Cl	1	
COC(C)C(O)(C(=O)OCC1=CCN2CCC(OC(=	1	
Cc1ccc(N)cc1N(=O)=O	1	0
C[C@@H]1Cl	1	1
CNC(=O)[C@	0	
Nc1[nH]c(nc2ncnc12)c3ccc(cc3)N(=O)=O	1	
Oc1ccc2CC3N(CC4CC4)CC	0	
OCCN=C1N=C(Nc2ccccc12)c3ccc(s3)N(=	1	
CC(CCO)CCc1ccccc1		0
Nc1ccc(N)c2ccccc12	1	1
N[C@@H](C	0	0
CCCCCCCC(Cl)CCC(Cl)CC(Cl)C(Cl)C(Cl)CC	0	
COc1cc(cc(OC)c1OC)C2C3C(COC3=O)C(C	0	
[O-][N+](=O)c1c2ccccc2c(c3ccccc13)[N-	0	
C(CCOCC1CO1)COCC2CO2	1	0
CC(=O)[C@H	0	0



COc1ccccc1N	1			
Nc1nc(O)c2n	0	0		
CN1CC(=CC2C1Cc3c[nH]c4cccc2c34)C			1	
O=C1C(=O)c2cccc3ccc4cccc1c4c23			0	
COc1ccc(cc1)	0	0		
Nc1ccc(cc1)S	0			0
C[C@@]12C	0	0		
COc1c(Cl)c(Cl)c(Cl)c(Cl)c1Cl			1	
COP(=O)(OC)	0	0	1	0
CC(=CCC\C(=	0			
C[N+](C)(C)C	0	0		
CCN=C(O)C=Cc1oc(cc1)N(=O)=O			1	
CC(=O)Nc1ccc(Oc2ccc(cc2)N=O)cc1			1	
CCOC(=O)CC	0	0	0	0
ClS(=O)(=O)c1ccccc1				0
CC(=O)c1cccc(c1)[N+](=O)[O-]			1	
OC(=O)C\C(=C/C(=O)O)\C(=O)O				0
Cc1cccc(O)c1N			0	0
Cc1c(N)cc(cc1N)N(=O)=O			1	
COc1ccc2CC3N(CCc4cc5OCOc5cc34)Cc2c1OC				1
NP(=O)(O)N(CCCl)CCCl			1	
CCCC(=O)Cl			1	0
OC[C@H]1O[C@@H](O[C		0		0
CC(C)(C)CC(C	0	0		0
CCCN=O			1	
CC(=O)NC(CSC(=C(Cl)C(=C(Cl)Cl)Cl)Cl)C:			1	
CCCN=NC(C)(C)OO			1	
CC(O)CO[C@@H]1[C@@H		0		
COO			1	
CCCCC(CC)COC(=O)COc1ccc(Cl)cc1Cl			0	0
CC(=O)C1CCC2C3CC=C4CC(=O)CCC4(C)C:			0	
CNC(C)Cc1ccc2OCOc2c1				0
COC(=O)C(C)(C)Oc1ccc(cc1)c2ccc(Cl)cc2			0	
Clc1ccc(cc1)(		1		
c1ccc2nc3ccccc3cc2c1			1	
Cc1ccc(NCC2(O)OCC(O)C(O)C2O)cc1			0	
CCC(C)OC(=O)N1CCCCC1CCO				0
CC(=O)Nc1cc	0	0	0	0
CSc1cc(SC)c(N)c(C)c1N			1	
C[C@@H](C	0	0		
CCCCCCCCCCCCOC(=O)C				0
COC(=O)c1ccccc1			0	0
CN(Cc1ccc(Br)cc1)N=O			1	

ON(C=O)c1ccc(Oc2ccc(Cl)cc2)cc1	1		
Oc1c(Cl)cc(Cl)cc1S(=O)(=O)c2cc(Cl)cc(C	0		
CC(=CCCC(=C\C=N\O)C)C			0
CC1=CCc2c1cc(C)c3c2ccc4ccccc34	1		
COC1=CC(=O)C=C/C/1=N\c2c3ccccc3nc	0		
CC1(CO1)c2ccc(cc2)[N+](=O)[O-]	1		
C[C@@](Cc1 0 0			0
Cc1ccnc2ccccc12	1		
O=Nc1ccc2ccccc2c1	1		
CCCC(C)C(=O)O			0
COC(=O)C1=C(C)NC(=C(C1c2ccccc2[N+](	0		
Oc1cccc2Cc3cc(ccc3c12)[N+](=O)[O-]	1		
Clc1ccc(\C=N 1 0			
ONC(=N)c1ccccc1	1		
CC(=O)ON(OCc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-])C	1		
O=C1N2CCc3 0 0			
CC(C)(C)N=C(O)C=Cc1oc(cc1)N(=O)=O	1		
O=C1CCc2ccccc2O1	0		0
NC(=O)c1csc(c1)[N+](=O)[O-]	1		
Nc1nc2cc(O)ccc2[nH]1	1		
OC[C@@H](O)[C@H]1OC(=O)C(=C1[O-])O			0
O\N=C\c1ccncc1	0		
CN(C)Cc1ccccc1	0		0
C[n+]1ccc(cc1)c2cc[n+](C)cc2	0		
NC(=O)NC(C 0 0			
CCCCCCC(=Cc1ccccc1)C=O			0
Cc1ccccc1NC(=N)Nc2ccccc 0			
CN1Cc2c(ncn2c3ccsc3C1=( 0			
CCC1NC(=O)( 0 0			
CC(C)[C@@]12C[C@@H]1[C@@H](C)C(=O)C2			0
CC(=C(CCOP(=O)(O)O)SC(=O)c1ccccc1)N(Cc2cnc(C)nc			0
CC(=C)C1CCC(=CC1)C 0 0			0
CC(C)NC(=O)c1ccccc1N 0			
Cc1cc(ccc1P(=O)(O)O)C(C) 0			
C1O[C@@H]1c2ccc3ccc4ccccc5ccc2c3c4. 1			
C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=C(O)C(=O)CC[C@+			0
Cn1cnc(c1Sc 0 0			
OC[C@H](Cl)CCl 1			
Oc1ccc2cc(cc(c2c1N=Nc3ccc(c4ccccc34)	0		
CC(C)(C)c1ccc(C=O)cc1 0			
COC(=O)c1cr 0 0			0
Oc1ccc2cc(cc(c2c1N=Nc3ccc(cc3)S(=O)(	0		
OC(=O)C(Br)CBr 0			

OC(=Nc1cccc(F)c1)c2csc(c2)N(=O)=O			1	
lc1cccc2c(ccc	1			
CC(=O)c1ccc2ccccc2c1			0	0
CC(C)(C)C(=O	0	0		
FC(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)CCI				0
NC(=N)NCc1	0	0		0
CCN(CC)CCNC(=O)c1ccc(N		0		
CCCCCCCCC(	0	0		0
ClC(Cl)(Cl)C=O			1	
CN1CCN=C(c2ccccc2)c3cc(Cl)ccc13			0	0
CCOC(=O)Cc1	0	0		0
Cc1ccc(cc1)N=Nc2ccc(cc2)N(CCO)CCO			0	
CC(C)[N+](C)	0	0		0
CC1(C)CCCC2(C)C1CCC3(C)C2CC=C(C=O)(			0	
CC(=C)C(=O)OCCOCCOC(=O)C(=C)C			0	0
Fc1ccc(cc1)C	1	1		1
CC(=O)NC(CS\C(=C\Cl)\Cl)C(=O)O			1	
Cc1cc(O)c2C(=O)c3c(O)cc(O)c4c5c(O)cc			0	
CCCCCCCCCCCCCCCCCN			0	
COC(=O)CSc1cc(\N=C\2/SC(=O)N3CCCN23)c(F)cc1C				0
COC(=O)C(Cl)C(=O)OC				0
OC(=O)c1cc(ccc1O)N=Nc2		0		
CCCNC(=O)N[S+](=O)([O-]		0		
CCCCCN=C(O)C=Cc1oc(cc1)N(=O)=O			1	
S=C1Nc2ccccc2N1				0
NCCCNCCCCN	0	0		
CCCCNc1c(C(=O)OCC)c(C)r		0		0
CNC(=O)Oc1ccc2N(C)C3N(		0	0	
COc1ccc(CN(	1	0	0	
CCN(CC)CCO(	0	0		0
CCN(CC)CCN(	0	0		0
CNc1ccc2ncc(C)nc2c1N			0	
O=CNNC=O				0
CC1CC2C(Cc3cn(CC4CC4)c5cc(Br)cc2c35			0	
CCOP(=O)(O(	0	0		
O=C1Oc2c(ccc3ccc4cccc1c4c23)N(=O)=(			1	
OCCOC(=O)c1ccccc1O				0
C[C@@H](CN(C[C@H](C)OC(=O)C)N=O			1	
Cc1ccc(CCC2CO2)cc1			1	
CC[C@@H](C)ON=O			1	
O[C@@H](C	0	0		0
Cc1ccncc1			0	0
CC(C)(C)c1cc	1			

C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCc4cc(O)ccc34)[C@@H]			1
NC(=S)Nc1cccc2ccccc12	1		0
N\C(=N/O)\c1ccc(O)c(O)c1	1		
CC1C(=O)OC2C(O)C34C5C(	0		
CCC[N+]1(C)CCCC1			0
C\C=C/1\CC(=C)[C@@](C)	0		
[O-]c1nc2cc(C#N)c(cc2nc1	0		
[O-][N+](=O)C(Br)(Br)Br		1	
CCOP(=O)(OCC)[C@@H](C)NC(=O)N(CC	1		
Cc1ccc(NC2OC[C@@H](O)[C@H](O)[C@	1		
OC(=Nc1ccccc1Br)c2csc(c2)N(=O)=O	1		
CCN(C)C(=O)	0	0	0
Cc1ncc(COP(	0	0	0
CCOCCOCCOC(=O)C=C			0
COCC(=O)Nc	1	0	0
OC(=O)\C(=C(/CCI)\C(=O)O)\Cl		0	
CCOc1ccc(cc	0	0	1
CC1(C)CCC(Cc2ccc(Cl)cc2)C1(O)Cn3cncn3			1
Nc1ncnc(Nc2ccc(Cl)cc2)n1			0
Clc1ccc(CC(=	0		
CCCCCCCCCCCCCCCCCNC(=O)OC1CCN(CC1)C(=O)OC(			0
COc1cc2ccnc3C(=O)c4ccccc4c(c1OC)c23	1		
CC(=O)OC1C(CC(=O)\C=C\	1		
[O-]C(=O)c1c	1	1	
Oc1cc2CC[C@H]3NCc4ccc	0		
CC(C)[C@H](	0	0	
CCOC(=O)Nc1cccc2c3c[nH]ccc3nc12		0	
CC1=C(COC(=O)C2N3C(SC2(C)C)C(NC(=C		0	
C[C@@H]1Cl	0	0	
CCCCN(CC(O)C1=CC(=[N+]=[N-])C(=O)C	1		
Nc1nc2cc(Cl)ccc2[nH]1		0	
CCc1nnc(N[S+](=O)([O-])c	0		
CCC(C1CCC(C	0	0	
NC(=S)N		0	0
Nc1ccc(\C=C/c2ccc(N)cc2S(=O)(=O)O)c		0	
OCCO		0	0
COC1=C(OC)C(=O)C(=CC1=O)C		0	
[O-]C(=O)[O-]			0
CON(C)C(=O)Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1	1		1
Fc1ccc(C=O)cc1			0
CCSC(=O)N(CC)CC			0
CCCC[P+](CCCC)(CCCC)Cc1c	0		
Clc1ccc2cc3ccccc3cc2c1		1	

CC(C)CN=C(O)C=Cc1oc(cc1)N(=O)=O	1	
CCCN(CCC)C(=O)SCC	0	0
CC(=O)[C@H] 0		
COC(=O)CN1CN(c2ccccc2) 0		
N1[C@@H]2[C@H]1c3cccc4cccc2c34	1	
CCSc1ccc2Sc3ccccc3N(CCC 0		
[O-][S+](c1ccccc1)c2ccc3n 0		
COc1cc(O)c2C(=O)c3c(O)ccc(O)c3Oc2c1	1	
Oc1noc2CNC 0 0		
OC1C(O)c2ccc(c3ccc4cccc1c4c23)N(=O)	1	
CC(=O)c1sc(C)nc1C		0
C[C@@H](Oc1ccc(CNC(=O)c2cccnc2Oc3ccc4OCOc4c3		0
CC1(C)[C@H](\C=C(/Cl)\C(F)(F)F)[C@@H]1C(=O)O[C		1
Oc1ccccc1Cl	0	0
COc1nsc2ccc(N)cc12	1	
CC(=O)OC1Cc2c(C)ccc3cc4c(ccc5ccccc45	1	
CCOC(=O)CC(SP(=O)(OC)SC)C(=O)OCC	0	
CCC(=O)C	0	0
CCCCn1cc2C[C@@H]3[C@H](C=C(C)CN	1	
Nc1ccc(cc1)c2ccc(N)cc2N(=O)=O	1	
Cc1ccc2c(C)c3ccc4ccccc4c3nc2c1	1	
Clc1cccc(Cl)c1Cl	0	0
CNc1ccc(Nc2c3ccccc3nc4ccccc24)cc1	1	
CCC(C)N=C(O)C=Cc1oc(cc1)N(=O)=O	1	
Oc1cccc2c1ccc3c4ccccc4ccc23	1	
Cc1ccc(cc1)c2nc([nH]c2c3ccc(C)cc3)c4cc	1	
[O-][N+](=O)c1cccc2nc3c(cccc3nc12)[N	0	
Oc1ccc(CCC(=O)c2c(O)cc(C 0	0	1
CC\C=C/C(=N\O)/C(=O)N\C(C)N(=O)=O		0
COc1cc(Oc2ccc(Cl)cc2Cl)cc(c1)N(=O)=O	0	
[O-][N+](=O)c1ccc(\C=N\c2snc3c(Cl)cc(	1	
COc1ccc(CN(C)N=O)cc1	0	
Clc1cc(Cl)c(OCC#Cl)cc1Cl 0		
CN(C)c1ccc(cc1)N=Nc2cccc(CCl)c2	1	
CC12OOC1(C)c3ccc4ccnnc4c3O2	0	
BrCc1ccc(CBr)cc1	0	
C[C@]12CC(C 0		
CC1=Nc2ccccc2C1(C)C	0	0
OCc1oc(C=O)cc1	1	0
CC(=O)SC[C@ 0 0		0
CCC1C(=C(C)c2cc(O)ccc12)c3ccc(O)cc3	0	
C(Nc1ncnc2c1ncn2C3CCCCO3)c4ccccc4		0
CCN1C[C@]2 0		

Cc1cc(C)c(C)c(O)c1				1
Oc1ccc2ccc3ccc(c4c5ccccc5c1c2c34)[N+			1	
NCCCC(N)CC(	0	0		
C[C@]12CC[(	0	0		
CC(=O)c1ccc(OCC(=O)N2CCCC2)cc1				0
[O-][N+](=O)c1ccc(cc1)[N+]#N			1	
Cc1cccc(C)c1Nc2ncccc2C(=O)O				1
Cc1[nH]cnc1CN2CCc3c(C2=		0		0
CCOCCn1c(nc	1	0		0
Cc1cc2ccccc2c3cc4C=CC(O)C(O)c4cc13			1	
Oc1ccc(\C=C/C#N)\C(=O)		0		
COS(=O)(=O)C(F)(F)F			1	
O=C(OOC(=C	0	0	0	0
FC(F)(F)C(F)(F)Cl			0	
Cc1ccc(Cl)c(O)c1		0		0
CCC(=O)c1ccc(Cl)cc1				0
C[C@]12CC[(	0	0		
CCC12OC1O2			1	
Oc1cc(Cl)cc(Cl)c1			0	1
CC1(CCCCC1)C(=O)Nc2ccc(O)c(Cl)c2Cl				1
CCCCN(CC(CO)OCc1ccccc1)N=O			1	
COc1ccc(O)cc1C(C)(C)C			0	
OC\C=C/1\C[N@+ ]2(CC=C)CC[C@ @]34[C@ @H]2C[C(				0
Nc1nc(N)c(s:	0	0		0
N[C@ @H]([C	0	0		
CCCC(CC)CON(=O)=O				0
CC(O)c1cc2ccc3cccc4ccc(c1)c2c34			1	
Cc1c(ccc2ccccc12)N(=O)=O			1	
COc1ncnc(N	0			0
COc1cc(c(O)c(c1)C(C)(C)C(C)(C)C				1
COc1c(O)c2OC3OC=CC3c2c4OC(=O)C5=			1	
COc1cc2N3[C@H]4[C@ @H]5[C@ @H](C			0	
CC(C)(Br)C(=O)NCc1ccccc1			0	
Clc1ccc(Br)cc1			0	
CCCCC\C=C/C=C\C=O			0	
C[C@ @H]([C@H](O)c1ccccc1)N(C)C				0
Cc1cc(O)ccc1O				0
CC(C)C(=O)N(O)c1ccc(Cl)cc1			1	
Clc1ccc2ncccc2c1			1	
CN1CCN(CC1	0	0	1	
COC1=C(N2[C@H](SC1)[C@H](NC(=O)[C@H](N)C3=C				0
C1CN(CCN1)c	0	0		0
COc1cccc(n1	1	0		

CC(=O)N1CCC[C@H]1C(=O)N(CC(=O)O)I	1		
SCc1ccccc1	0		
Fc1ccc(cc1)C	1	1	0
NC(=N)NN=C(\C=C/c1oc(cc1)[N+](=O)[O-])	1		
CCCCOCNC(=O)C=C			0
[O-][N+](=O)	0	0	1
CCOP(OCC)OCC			0
CC1(Cn2ccnn	0		
OP(=O)(O)c1ccccc1			0
CC(=O)OC(OC(=O)C)c1oc(cc1)N(=O)=O	1		
CCCC[C@@H](CC)COC[C@H]1CO1	1		
CCC(Cc1c(l)cc(l)c(N)c1l)C(=O)O			0
C\C=C/c1ccc	0	0	
CCCCOC(=O)C			0
OCC(O)COc1cccc2ccccc12		0	
N1C2C1c3cc4ccccc4c5ccc6cccc2c6c35	1		
CCOP(=O)(Oc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-])c2c	1		
OS(=O)(=O)Oc1ccc2ccc3c4ccccc4cc5ccc	0		
NC(=S)C(=S)N			0
NC(=O)c1cccc(c1)[N+](=O)[O-]	1		
CCC\C=C\C(=O)OC1C(C)(C)CC2C1(O)C=C	1		
CC(S)C(C)S			0
O=C1c2ccc3c4nc5ccccc5n4C(=O)c6ccc(c	1		
CCOC(=O)c1[nH]c2ccccc2c1\N=C\c3ccc(	1		
CCOCC(O)CO	0	0	0
Oc1ccc(NC(=	0	0	1
O[C@H](CBr	0	0	0
C[C@H]1C[C@@H](O)CC(C)(C)C1			0
NC1=N[C@@H](CS1)C(=O)O	0		
CC(c1ccc(O)cc1)(c2ccc(O)cc2)c3ccc(O)cc3			1
NC(=C(C#N)C	0	0	
CC(C)NC[C@@H]1CCc2cc(CO)c(cc2N1)[	1		
CC(C)CC(=O)OC(C)(CCC=C(C)C)C=C			0
CC(=O)c1cc(N)ccc1OCC(O)CNC(C)(C)C	0		
CCCCCOC(=O)C			0
CC(C)NC(=O)\C=C/c1oc(cc1)[N+](=O)[O	1		
CN(C)c1ccccc1			0
Cc1ccc2ccc3cc4ccccc4c5ccc1c2c35	1		
ClCCNC(=O)N	0	0	1
Oc1ccc2cc(cc(c2c1)S(=O)(=O)O)S(=O)(=	0		
Nc1ccc(Cc2ccc(N)cc2)cc1			0
CCN1C(=O)N	0	0	
ClC(=O)c1cccc(c1)C(=O)Cl			0

Fc1ccccc1C2=N[C@@H](NC(=O)c3cc4ccccc4[nH]3)C(			1
CCC1OC(CO)C(COCC2OC(COC3OC(CO)C(	0		
C[C@@H](C1=C(CCN(C)C)C(	1		0
ClC1=C(Cl)C(=O)OC1		1	
C[C@@H]1C	0		
[C-]#N	0	0	0
CN(CCCC(O)c1ccnc1)N=O		1	
CCCc1c(O)c(ccc1OCCCCc2r	0		1
CC12OOC1(COC(=O)Nc3ccc(Cl)cc3)Oc4c		1	
CC1(C)C(C(=O)OC(C#N)c2cccc(Oc3ccccc		0	
CC1CS1		0	
COc1cccc2C(=O)c3c(O)c4CC(O)(CC(O)c4		1	
CC1=C(C)C(=O)C(=C(C)C1=	0		
C=CN=Nc1ccccc1		1	
CC(C)Nc1nc(N)nc(Cl)n1	0		0
CO[C@@H]1C[C@H](C[C@@H](C)[C@@H]2CC(=O)[C			0
CCC(=O)N(C1CCN(CC1)C(C)Cc2cccs2)c3ccccc3			0
O=C1CN(CCN2CC(=O)N(CN3CCOCC3)C(=	1		
CCC1OC(=O)C(C)C(OC2CC(C)(OC)C(O)C(	0		
OC[C@H]1N(	0	0	
C1=Cc2c3cc4ccccc4cc3cc5ccccc1c25		1	
COc1ccc(cc1)C2=COc3cc(C	0		1
C1CCC(CC1)N2C3C2c4ccccc4c5ccccc35		1	
OC(=O)CCC=C			0
ClCc1ccnc1		1	0
O=N(=O)c1ccc(Oc2ccccc2)cc1		1	
CCCCCCCCCCCCCO			0
O=N(=O)c1ccc2CCc3cccc1c23		1	1
Nc1c(Cl)c(Cl)nc(C(=O)O)c1Cl	0		0
CCOC(=O)CC(=O)c1ccccc1			0
COc1ccc(cc1O)[C@@H]2CC(=O)c3c(O)cc(O[C@@H]4			0
OC(=O)CCCCCBr		1	
OC(CNCCCC	0	0	
OC(=O)c1cc(Cl)cc(Cl)c1		0	0
O=N(=O)c1ccc(c2ccccc2)c(c1)N(=O)=O		1	
OCCNCc1oc(cc1)[N+](=O)[O-]		1	
COc1ccc(CNC	1	0	
Cc1ncc([N+](	0	0	1
Oc1ccc2ccccc2c1N=Nc3ccc(cc3Cl)[N+](=		1	
CCCN(CCC(C)O)N=O		1	
CC(=O)CC(=O)Nc1ccccc1		0	0
Cc1c2C3OC3c4ccccc4c2cc5ccccc15		1	
[O-][N+](=O)c1ccccc1\C=C\C(=O)c2cccc		0	



O=C(\C=C\c1ccc(OCC2ccccc	0		
Clc1ccc(cc1)c2nc3scn3c2N=O		1	
OC(=O)c1cc(O)c2C(=O)c3c	0	1	1
C1COCCOCCOCCOCCO1		0	
CCC(CCCC(=O)O)COC(=O)c1ccccc1C(=O)		0	
C[N+](C)C2(	0	0	
Cc1cc(nnc1NCCN2CCOCC2		0	0
[O-][N+](=O)c1oc(cc1)c2csc(NC(=O)C(F		1	
OCC=Cc1ccccc1			0
COc1cc(ccc1O)C2Oc3cc(ccc3OC2CO)C4C		0	
Oc1c2nc3ccccc3c2nnn1\N=C\c4ccc(cc4)		1	
C[C@H]1CS(:	0		
CCN(CC)CCNc1ccc(CO)c2S(	0	1	
COCCOC		1	0
CC(C)(C)C(=O	0		0
CCOC(=O)c1c	0	0	0
N(c1ccccc1)c2ccc3ccccc3c2		0	
CC1C2CCC(=C3C(C2OC1=O		0	
CCCCCCC(C)(C)C(=O)OCC1CO1		1	
COc1cc(OC)c	0	0	
Oc1ccc(cc1)C2(O[S+](=O)(		0	
C[C@]12CC[(	0	0	1
CCCCCCCCCCCCCCCC(CO)\N=C(\O)/CCCCCCCCCCCCCCCC			0
COc1ccc2[nH]cc(CC(N)C(=		0	
CC12CC(=O)C3C(CCC4=CC(=O)C=CC34C)(		1	
COc1c(N2C[C@@H]3CCCN[C@@H]3C2)c(F)cc4C(=O)			0
Nc1cc(ccc1CO)N(=O)=O		1	
CC(C(=O)O)c:	0	0	0
CC(O)Cn1cnc2N(C)C(=O)N(C)C(=O)c12			0
COc1ccc2[nH]cc(CCN(C(C)C)C(C)C)c2c1			0
Oc1ccc(CC=C)cc1		0	
Cn1c(N)nc2nc3ncccc3cc12		0	
CC(C)C(O)CCC(C)C1CCC2\C=C\C=C\C3/CC		0	
CN1C(=O)CN=C(c2ccccc2F)c3cc(ccc13)[I		1	
O=C(Cn1ccnc1N(=O)=O)NCc2ccccc2			0
C[S+](([O-])c1ccc(cc1)c2nc		1	
CC1(C)C=C(C(=O)O)C(C)(C)N1O		0	
COc1ccc(cc1)C2=COc3cc(C		0	
CCc1ccnc2ccccc12		0	
COC(=O)CCCCCCCC(=O)OC			0
[O-][N+](=O)c1ccc2ccc3ccc(c4ccc1c2c3		1	
Cc1cc(C)c(c(C)c1)[S+](=O)		1	
CCCCC(=O)OCC\C=C/CC			0

OC(=O)Cc1ccccc1Oc2ccc(Cl)cc2Cl				0
Cc1cc(c(C)c2c3cc(ccc3[nH]c12)[N+](=O)	1			
CCCOc1ccc2r	0	0		1
Clc1ccc(Oc2ccc(cc2)N(=O)=O)c(Cl)c1	1			1
Cc1c[nH]c2cc	0	0		0
OC(=O)CCC(=O)Nc1cc(Cl)c(Cl)c(Cl)c1	0			
Cn1nnnc1SCC2=C(N3[C@H](SC2)[C@H](NC(=O)[C@H]				0
[O-]S(=O)(=C	0	0		
CC(C)(Oc1ccc(cc1)[C@H]2CCCC3ccccc23	0			
[O-]C(=O)c1ccccc1Nc2cc(Cl)ccc2C(=O)[O-]				0
CC(C)(C)C(=O)OCOC(=O)[C@@H]1N2[C@H](SC1(C)C)				0
OC(=O)C1CSC(N1C(=O)CCS)c2ccccc2O	0			
COc1cc2c(oc3ccccc23)cc1N				1
OC(=O)c1cc(l)cc2cccnc12	0			
COc1cc(CC=C)ccc1OC(=O)Cc2ccccc2				0
CC1=C(C=O)C(C)(C)CCC1				0
CC(=O)Nc1ccc(cc1)N=Nc2cc(C)ccc2O	1			
CC1=C(NNC(:	0	0		
NCC(O)c1ccc(O)c(O)c1				0
CCC1=C(OC)C(=O)c2c(O)c(OC)c(OC)c(O)	0			
C\C=C/C=C/	0	0		
CN(C)c1ccc(cc1)C2CC3(C)C(CCC3(O)CCC(				0
CCC(=C)C=O				1
OCC1OC(CC1O)N2C=C(COO)C(=O)NC2=(	1			
C[C@@H](O)c1ccc2ccc3ccccc4ccc1c2c34	1			
O[C@@H]1CCNC1CC(=O)	0			
ONC(=O)CCC	0	0		0
Oc1cccc2c1ccc3c4C=Cc5cccc(cc23)c45	1			
CC1(C)S[C@@H]2[C@H](\N=C\N3CCCCC3)C(=O)N2[				0
Cn1c(C(=O)Nc2cccn2)c(O		1		
CCOP(=S)(CC)Sc1ccccc1	0			0
Oc1ccc(O)c(c	0			0
FC(F)(F)[C@]1(OC(=O)Nc2ccc(Cl)cc12)C#CC3CC3				1
CC(=CCC\C(=C\C\C\C(=C\COC(=O)\C)\C)C				0
OC(=O)c1cc(,	0	0		
CC=C1CC(C)C(O)(CO)C(=O)OCC2=CCN3(:	0			
C=CC(=O)NCNC(=O)C=C	1			0
COP(=S)(OC)Oc1ccc(cc1)[S		0		
CC(=O)Nc1cc	0	0		
CC\C=C\C=C\C=C\C=C\C=C\C=C\C=OCC(O)CO	1			
Cc1ccc2ccccc2c1	0			0
CC(=O)OC(=O)C	0			0
OC(=O)c1cc2	0	0		

CCCC1c2OC(=CC(=O)c2cc3C(=O)C=C(N(CC)c13)C(=O)C				0
Clc1c(Cl)c(Cl)c2ccccc2c1Cl			0	
Sc1nnc(S)s1				0
Oc1ncnc2ccccc12			0	
CCCCCCCCOc	0	0		0
CC(=CCCC(=CC=O)C)C				0
C1CC2=CC3OC3C=C(C1)O2			0	
CCC(C)C(N)C(	0	0		0
CC(C)OC(=O)CCC(=O)OC(C)C				0
COCCOCCOC			0	0
N[C@@H](C	0	0		0
CSC(=N)N	0	0		
COc1ccnc(C[S+])([O-])c2nc			0	
BrC1ccc(Oc2cc(Br)c(Br)cc2Br)c(Br)c1			0	1
Clc1ccc(C=Cc2ccc(cc2)N(=O)=O)cc1			1	
CCOC(=O)CC(C(=O)C)C(=O)C				0
Oc1ccc2C(=O)c3cc(O)ccc3C(=O)c2c1			0	
Fc1ccc(cc1Cl)N(=O)=O				0
CCCCCCCCCCCC(=O)O				0
O=C(Oc1ccccc1)c2ccccc2				0
N\C(=N/O)\c1cc(O)c(O)c(O)c1			1	
Cc1ccc(cc1N)C(=O)O			1	
Clc1cccc2cc3ccccc3cc12			0	
C=CC(=O)OC[C@H]1CO1			1	
CCC(=O)c1c2ccccc(O)c2c(O)c3c(O)cccc13			1	
COc1ccc2[nH		0		
OCC1OC(OC2(CO)OC(CO)C(O)C2O)C(O)C			0	
Oc1ccnc(S)n:	0	0		
CC(=O)OCN(CCCCCI)N=O			1	
Cc1cc2CCc2c3ccc4C(O)C(O)C=Cc4c13			1	
NC1=NC(=O)	0	0	1	0
ClC(C(=O)Cl)c1ccccc1			1	
OCC(=C(Br)CO)Br			1	
CN1CCN(CC1	1	1	0	
CCOC(=O)N	0	0	1	0
CNC1=C(Cl)C(=O)N(N=C1)c2ccccc2)C(F)(F)F				0
CCCN1C(=O)N(CCC)c2nc([r		0		
CNCCO			0	0
C[C@@H](Cl)CCl			1	
SCCCCCCCC				0
CC1C(OC(=O)C)C2OC2C3=CC(=O)C4(CC1			1	
CCCCCCCCBr			0	0
COC(=O)c1cc2c3ccccc3[nH]c2c(n1)c4ccc			1	

Cc1ccccc1c2ccc(N)c(C)c2	1			
Cc1ccc2nc(sc2c1)c3ccc(N)cc3	1			
CC(=O)Nc1ccc(Oc2ccccc2)cc1	1			
OC(=O)c1cc(O)c2C(=O)c3c(O)cc(O)cc3C	0			
COC(=O)C1=C(C)NC(=C(C1	0			
O=C1OC(=O)c2cc3C(=O)OC(=O)c3cc12				0
COc1cc(ccc1N=Nc2cc(c3ccccc3c2O)S(=C	1			
Cc1cccc(c1C)N(=O)=O				0
Oc1c(Cl)cc(Cl)cc1[S+][[O-]	0			
CCCOc1ccc(cc1N)C(=O)OCCN(CC)CC				0
C[C@@H]1C[C@H]2C3C[C@H](F)C4=CC(=O)C=CC4(C)	1			
CC1=CC2OC3C(O)CC(C)(C34CO4)C2(CO)(	0			
Cc1ccccc1	0	0	0	0
Cc1cc(O)c2C(=C3C(=O)C4C(O)C5C6C(O)(	0			
C\C1=C\CCC(=C)[C@@H]2CC(C)(C)[C@	0			
CCCC(C)(COC	0	0	0	0
CCOC(=O)c1ccccc1				0
NC(=N)NCCN	0			
CCCCCCCCOC(=O)C				0
C\C=C/1\CC(C)C(O)(CO)C(=O)OCC2=CCN	1			
CC(C)(C)NC(=O)N				0
CCCC[P+](CC)(CCCC)CCCC				0
C[C@H]1C[C	0	0		0
OCCN1CCN(CCCN2c3ccccc:	1			
CC(C)(C)C(=O)c1ccccc1				0
COc1c2C=CC(=O)Oc2cc3oc	0	1		0
[O-][N+](=O)c1ccc2N(S\C(=N/C(=O)CCC	1			
CCC1CN2CCc3cc(OC)c(OC)cc3C2CC1CC4I	0			
CO[C@@]1(NC(=O)CSC(F)F)[C@@H]2OCC(=C(N2C1=				0
C[N+](C)(CCOc1ccccc1)Cc2cccs2				0
CC(C)COC(=O)\C=C\c1oc(cc1)[N+](=O)[(	1			
CC[C@H]1OC(=O)C[C@@H](O)[C@H](C)[C@@H](O[				0
NC(C1CC1)(C(=O)O)c2ccc(	0			
C\N=C\1/SN	1	0		
CC(C)COC(=O)C(C)C				0
OC(=O)COc1ccc2ccccc2c1	0			0
OC(C(COC(=O)CCC(=O)O)NC(=O)C(Cl)Cl)	0			
CNC(=O)N(C)c1nnc(s1)C(C)(C)C				0
Cc1ccc(cc1N=O)[N+](=O)[O-]	1			
Nc1nc(nc2c1ncn2C3OC(CO)C(O)C3O)c4(	1			
OCCNCc1ccccc1				0
CC(C)C1CCC(C)CC1	0			
CCN(CC)CCOC[C@H]1O[C@@H](O)[C@H](OCCN(CC)				0

OC(=O)C1Cc2c([nH]c3ccccc23)C(Cc4cccc	0			
[O-]c1ccccc1			0	
c1ccc2c(c1)ccc3cc4c(ccc5ccccc45)cc23	1		0	
CC1CCc2c(N3	0	0	0	
CC12OOC1(C)c3c(O2)ccc4ccccc34	0			
Clc1ccc2OC(=	0	0		
[O-][N+](=O)c1ccccc1SS\C=C(/Cl)\C(F)	1			
C\C=C\C=C\C(=O)[O-]			0	
OC(=O)C(Cc1c[nH]c2ccccc12)NC(=O)CO	0			
C\C=C\1/NC(=O)[C@H]2CSSCCC=C[C@H](CC(=O)N[C			0	
Cc1ccsc1C(=	0	0		
[O-][N+](=O)c1ccc2cccc3c4ccccc4c1c23	1			
C=Cc1cccn1	0			
CCCCOCCOC(=O)COc1cc(Cl)c(Cl)cc1Cl			0	
CCNC(=O)[C@H]1O[C@H]	0			
CCOC(=O)C(C)Oc1cccc2C(=	0			
C[C@@H]1OC(=O)C[C@H](O)C[C@H](O)CC[C@@H](			0	
C1CCC2OCCOCCOCCOC3CCCC3OCCOCC	0			
CCN(CC)c1ccc(cc1)N=Nc2cccn2	0			
NC[C@@H]1	0	0		
COc1ccc2c(c1)c(CC(=O)N3	0			
CCOC(=O)CC(=O)c1cc(F)c(Cl)nc1Cl			0	
CC(O)C[N+](C)(C)NC(=O)C(=C)C	0			
OC1OC(=O)C=C1CCl	1			
CC(=O)O[C@H](CC(=O)[O-])C[N+](C)(C)C			0	
NCCOS(=O)(=O)O			0	
CN(C=O)N=O	1			
CCCc1ccc(O)c(OC)c1			0	
CN(C)C(=O)C	0	0	0	0
CCCCON(OC(=O)C)C(=O)c1ccc2ccccc2c1	1			
CC1CCc2c1cc(C)c3c2ccc4ccccc34	1			
O=C1C(=O)c2c(ccc3ccc4ccccc1c4c23)N(=	1			
Nc1ccc2c(Cc3ccccc23)c1	1			
CCCCCC(CC)C	0			
C[C@]12CC[C	0	1		0
Cc1c2ccc3ccccc3c2nc4ccc(CO)cc14	1			
CN(C)CC\C=C	1	1		
CC(CCc1ccccc	1	1		0
O=C1Nc2ccccc2O1			0	
CCOC(=O)CC([O-])C(=O)OCC			0	
CCN(CC)S(=O)(=O)c1ccc(NC(=O)C)cc1	0			
Nc1ccc2ccc3ccccc3c2n1	1			
Cc1c2ccccc2c(CCl)c3ccccc13	1			

Cc1ccc2[nH]c(N)nc2c1				1	
CC(=O)O[C@	0	0			
COC(=O)[C@	0	0			0
O=C1CCCCC1			0		0
OCP(Cl)(CO)(CO)CO			0		
COc1ccc(C[Ci	0	0			0
O=Nc1cc2c3ccccc3ccc2c4ccccc14			1		
CN1CCCN(C)C1=O			0		
CCCCc1oc2cc	1	1			1
OC1=C(O)C23CCCC2(O3)c4cc5ccc6cccc			0		
ONc1ccc2c(Cc3ccccc23)c1			1		
Oc1ccc2C3C4OC4C(=O)c5c(O)ccc(C6C7C			1		
OC(=O)CSc1ccc2c3ccccc3C(=O)c4cccc1c			1		
COc1ccc2oc(cc2c1N(CCCl)CCl)[N+](=O)			1		
COc1cc2CCN3C(=O)N(C)\C		0			
CC(=C(CCOC(=O)c1ccccc1)SC(=O)c2cccc			0		
CC1(CO)CN(NC1=O)c2ccccc2					0
CC(C)CCC(=O)C					0
CCCCCOC(=O	0	0			
O=C1c2ccccc2Oc3ccccc13					0
O=C1NC(=O)C2=C(N1)[N-]C(=O)N2					0
OC1c2ccccc2c3ccc(cc13)[N+](=O)[O-]			1		
CO[C@ @H]1COCC[C@ @H]1[NH2+][C@ @H]2CC[C@					0
[O-][N+](=O)O[C@H]1CO[C@ @H]2[C@			0		
OC(=O)C[C@H](NC(=O)OCc1ccccc1)C(=O)O					0
OC(=O)c1cc(O)c2cccc(O)c2n1			0		
COc1ccc(CCN	1	0			0
ClC1=C(Cl)[C@]2(Cl)[C@ @H]3[C@H]4C[C@H]([C@@					1
CC(=CCc1ccc(O)c2C(=O)c3c(O)c4c(OC5C			1		
COC1C(CCC2(	0	0			
NC1=NCNc2c1ncn2C3OC(CO)C(O)C3=O			0		
[O-]S(=O)OC[C@H]1O[C@H](O[C@]2(COS(=O)[O-])C					0
CC(=O)C(N=Nc1ccc(cc1Cl)c2cccc(N=NC(C			0		
CS(=O)(=O)Nc1ccc(cc1Oc2ccccc2)N(=O)=O				1	1
NC(=O)c1ccc	1				
C1C=C[C@ @H]2[C@ @H]3C[C@ @H](C=			0		
CC(=C[C@H]1[C@H](C(=O)OCN2C(=O)C			1		
ClC#N			0		
Oc1ccc2cc(cc(c2c1N=Nc3ccccc3)S(=O)(:			0		
OC1OC(=O)C(=C1C(Cl)Cl)Cl			1		
COc1cc(C)cc2c(O)c(cc(O)c12)c3c(C)cc4c			0		
CCOC(=O)c1r	0	0			0
CC(=CCC[C@ @](C)(O)[C@H]1CCC=CC1=			1		

CC(C)(C)c1cc(c(O)c(c1)C(C)(C)C(C)(C)C				1
CC1(C)N([O])C(=[N+])([O-]	0			
Clc1ccccc1CN	1	0		
Oc1c2ccccc2cc3ccccc13			1	
C\C=C\C#N			0	
CN(C(=O)C)c:	0	0		
CN(C)CCN1C(=O)c2ccccc2N(C)c3ccccc13				0
O=C1OC(=O)c2cc(ccc12)N(=O)=O			1	0
Oc1cc(Cl)c(Cl	0	0	0	1
[O-][N+](=O)c1cccc(c1)S(=O)(=O)OCC2(			1	
CCC1=C(CC2NCCc3cc(OC)c(OC)cc23)CC4			0	
CN1N=C(S/C/1=N/C(=O)C)		0		
Nc1cc(Cl)cc(c1O)S(=O)(=O)O			0	0
CC(COc1ccccc1)NN				0
C\C(=C\c1ccccc1)\C=O			0	
OC(=O)CCc1c[nH]c2ccccc12			0	
[O-][N+](=O)c1ccc(cc1)C(=O)OC[C@H]2			1	
Cc1c(oc1c2ccc(Cl)cc2)C3(		1		
NS(=O)(=O)c	0			0
CS(=O)(=O)Nc1ccc(Nc2c3ccccc3nc4ccc(			1	
CCC(=O)Oc1ccc(cc1)\C=C(/CC)\c2ccc(O			0	1
NCCCC[C@H](NC(=O)[C@@H]1CCCN1C(=O)[C@@H]				0
COc1ccc2nc3c(cc2c1)c4cccc5cccc3c45			1	
CC(=CCOc1c2OC(=O)C=Cc2	0		1	0
Clc1ccc(Oc2ccc(NC=O)cc2)c(Cl)c1			1	
CCC(=O)C=CC				0
CC(=O)C	0	0	0	0
CC(=O)OCC[C@@H](C=O)c1c(O)cc2C(=O			1	
COC(=O)C1=C(C)NC(=C([C(		1		
CC[C@@H]1OC(=O)[C@H](C)[C@@H](C			0	
Fc1ccccc(F)c1C(=O)NC(=O)Nc2cc(Cl)c(Oc			0	1
CC1CCN=C(N	0	0		
CNC1Cc2cccc3cccc(C1)c23			1	
CC1(C)O[C@@H]2C[C@H]		0		0
CC(C)c1cc(O(	0	0		0
CCC(=O)OCCc1ccccc1				0
C\C=N\N(C)C=O			0	
CCOP(=O)(NC(C)C)Oc1ccccc1C(=O)OC(C			1	
CC(C)[N+](C)(CCOC(=O)C1,	0		0	0
CCOC(=O)c1ccc(C)cc1				0
CCOc1ccc(NC(=O)C)cc1[N+](=O)[O-]			1	
N[C@H](CS)C(=O)O			1	
CCCCNC1CC(C)(C)NC(C)(C)C1				0





COC(=O)c1ccccc1NC(=O)c:	0	
CC(C)N(C(=O)COc1nnc(s1)C(F)(F)F)c2ccc(F)cc2		0
Cc1ccccc1OCC2CO2	1	
Nc1nnnn1c2ccccc2		0
OC1CCN(C1)N=O	1	
Oc1ccc2c(Cc3cc(ccc23)N(=O)=O)c1	1	
Nc1ccc2ccccc2c1N=Nc3ccc(cc3)[N+](=C	1	
CCC(C(=O)OC	0	0
OC1=C(Oc2cc(O)ccc2C1=O	0	
Nc1ncnc2c1ncn2C(c3ccccc3)c4ccccc4	1	
CCCCCN(CCCCC)CCCCC	0	
CC(=O)O[C@	0	
OC[C@H]1O[C@H](C[C@H]1O)N2C=C(C	1	
OC1(CCN(CCC	1	0
OC(=O)C1CCN(CCC1)c2ccc(F)cc2NC(=O)NC(=O)c3cc(F)		0
CC(=[N+](O-))O-]C	1	
CNC	0	0
C[N+]1(CC2COC(O2)(c3ccccc3)c4ccccc4)CCCCC1		0
CCCCS(=O)(=O)Cl		0
CC(=O)c1nccs1		0
OCC1O[C@H	0	0
Cc1cccc2C3OC3c4cc5ccccc5cc4c12	1	
[O-][N+](=O)c1cccc2c3ccccc3cc(c12)[N-	1	
OC(=O)CCCc1c[nH]c2ccccc12	0	0
CCOc1ccc(NC(=O)C[C@@H](C)O)cc1	1	
N(c1ccccc1)c2ccccc2	0	1
CO\N=C(\C1=NOCCO1)/c2ccccc2Oc3ncnc(Oc4ccccc4(		1
CCOC(C)C(=O)C(O)O	1	
C1CN2CCN1CC2	0	0
Nc1ccc(c(N)c1)[N+](=O)[O-]	1	
CC\C=C(\c1ccccc1)/c2ccc(OCCN(C)C)cc	0	
COC(=O)C1=C	0	0
O=C1NC(=O)	1	1
CC(C)c1cc2CC[C@H]3[C@H		0
COc1ccc2C[C	0	0
C1COCOC1	1	
CC(C)COC(=O)CC(C(=O)OCC(C)C)S(=O)(=O)[O-]		0
CCCCCCC=O	0	0
OC(=O)c1cc(cc(c1)N(=O)=O)N(=O)=O	1	
CSc1nc(NC2CC2)nc(NC(C)(C)C)n1		1
NCCCC(N)(C(F)F)C(=O)O	0	
ClC1=C(Cl)C(Cl)(C(=C1Cl)Cl)C2(Cl)C=C(C	1	
OC(=O)C1CCCN1		0

CC[S+](=O)([O-])CCn1c(C)I	0		
C[C@@H]1CC[C@@H](\C=C(/C)\C(=O)O)C2=C(C)C[C@H]1C			0
CC[C@@H](C)[C@H]1CN(C)C1	0		
Oc1c(Br)cc(Br)c2cccnc12	0		0
OCCN1CCCC1=O			0
c1ccc2c(c1)cnc3ccccc23		1	
[O-][N+](=O)c1c(Cl)c(Cl)cc(Cl)c1Cl		0	
Cc1cccc2ncccc12		1	
[O-][N+](=O)	0	0	
CCCCOCCOCCSC#N		0	0
OCCN(CCO)c1ccc2ccccc2c1		1	
CCC(C)Nc1ccc(NC(C)CC)cc1		0	1
O=N(=O)c1ccc(Nc2ccccc2)cc1		0	1
CCCCCC=[N+](O)[O-]		0	
C=CC(=O)OCCCCCOC(=O)C=C		0	0
N=C(Nc1ccccc1)Nc2ccccc2	0	1	
CC(N)[C@H](C)C	0	0	
CCC(C)C		0	
Cc1ccc(Nc2ccc(cc2)[N+](=O)[O-])cc1		1	
CN1N=Nc2c(C)ccccc2	0	0	0
CC(=O)c1ccc(cc1)N(=O)=O		1	0
CN1CCN(CC1)c2cc3N(C4CC4)C5=CC(=O)C=CC5		1	
[O-][N+](=O)c1cccc(c1)C(=O)Cl		1	
COC(=O)N1C	1	0	
CC1CC2OC(=O)C(=C)C2CC3(C)C(O)OC(O)C3		1	
O[C@H]([C@@H]1CO1)c2ccc3OCOC3c2		1	
C[C@@H]1CCCC[C@H]1NC(=O)Nc2ccccc2		0	
COC(=O)CC(C)C	0	0	0
ON1C(=O)CCC1=O		0	
CCC(C)S			0
FC(F)(F)c1cccc(CN2C3C2c4ccccc4c5ccccc5)1		1	
OC1CCN(CCC)C1	1	1	
CCCCCCCCCCCC[C@H]1CO1		0	
COC(=O)c1cccc(c1)C(=O)OC			0
CCN(CCC)CCCNc1c2CCCCc2nc3ccccc13		1	
COCOC		0	
OC1C=Cc2c(cc3ccc4c(O)ccc5ccc2c3c45)C(=O)1		1	
C1CN(CCN1)c2cccc3ccccc2		1	
COC(=O)[C@@H]1[C@H](C)CC1		1	
Cc1ccc2cc3c(ccc4ccccc34)c5CCc1c25		1	1
OCCS(=O)(=O)[O-]			0
O=C1Oc2cccc3ccc4c5ccccc5cc1c4c23		1	
o1ccc2ccccc12		0	0

<chem>COC(=O)c1oc(c(Cl)c1Cl)N(=O)=O</chem>			1	
<chem>CCC(C)(C)c1ccc(O)cc1</chem>	0		0	1
<chem>Oc1ccc(\C=Cl</chem>	0	0		
<chem>Cc1c(Nc2nccc</chem>	0	0		1
<chem>CN(C)c1[nH]cnc2ncnc12</chem>			1	
<chem>CC(C)CNc1snc2ccccc12</chem>			0	
<chem>CCCCCCCCC\C=C\[C@H]1CC(=O)OC1=C</chem>			0	
<chem>NCCCCNC(=N</chem>	0	0		
<chem>OC1=NCCCN1N=Cc2oc(cc2)N(=O)=O</chem>			1	
<chem>CC(C)N1CCN(</chem>	1	1		
<chem>Cc1ccc(Nc2ccc(O)c3C(=O)c4ccccc4C(=O</chem>			0	0
<chem>CC1=C(Oc2c(</chem>	0	0	0	0
<chem>O=N(=O)c1c2ccccc2cc3ccccc13</chem>			1	1
<chem>Cc1ccc2cc3ccc4ccccc4c3cc2c1</chem>			1	
<chem>Nc1ccc(N)c(c1)S(=O)(=O)O</chem>			0	
<chem>CN1CC(O)C(O)C(O)C1CO</chem>		0		
<chem>Cc1c2c3ccccc4ccccc(c2c(C)c5ccccc15)c34</chem>			1	
<chem>Cn1cnc(c2ccccc2)c1[N+](=O)[O-]</chem>			1	
<chem>OC(=O)c1c(Cl)ccc(Cl)c1Cl</chem>				0
<chem>ClC(Cl)(Cl)N(=O)=O</chem>			1	0
<chem>CCC(C)C(C(CC(=O)N1CCCC1C(OC)C(C)C(=</chem>			0	
<chem>N#CCCCC(CCC#N)C#N</chem>				0
<chem>Cc1ccccc(C)c1</chem>			0	0
<chem>c1ccc2[nH]c(</chem>	0	0	1	0
<chem>Cc1ccccc2ccccc12</chem>			0	0
<chem>NCCCCNCCCN</chem>	0	0		
<chem>CCN(CCCO)N=O</chem>			1	
<chem>CC(=O)Oc1cc(c2ccc3ccccc4ccc1c2c34)N(=</chem>			1	
<chem>Cc1ccc2c(C)c3ccccc3c(C)c2c1</chem>			1	
<chem>ClP(Cl)(Cl)(Cl)Cl</chem>				0
<chem>O=C1C(=O)c2c(ccc3ccccc23)c4ccccc14</chem>			0	
<chem>COc1cc(Cl)c(OC)cc1N</chem>				0
<chem>CCc1ccccc(CC)c1N</chem>			1	0
<chem>O[C@H](C(=O)c1ccccc1)c2ccccc2</chem>			0	
<chem>COC(=O)C1=C(C)C(OC1=O)C(C)C</chem>			1	
<chem>[O-][N+](=O)c1ccc2[nH]ccc2c1</chem>			1	
<chem>CCC1(O)CC(O)c2c(O)c3C(=O)c4c(O)ccccc</chem>			1	
<chem>FC(F)(F)c1cc(c(Cl)c(c1)N(=O)=O)N(=O)=</chem>			0	
<chem>N[C@@H](C</chem>	0			
<chem>C[N+](C)(C)Cc1ccccc1</chem>			0	0
<chem>OC1C(O)c2cc3ccc4ccccc5ccc(c2C(O)C1S(=</chem>			0	
<chem>CCC1C(=NN=</chem>	0	0		0
<chem>COC(=O)C1=C(C(C)OC1=O)c2ccccc2</chem>			0	

[O-][N+](=O)c1ccc2snc(Cl)c2c1			1	
CCC(CO)NCCNC(CC)CO			0	
CCCC1CCCCN	0	0		0
CC(C)Oc1ccc2C(=O)c3cc(cc		0		
NC(=N)NCC1	0	0		0
Oc1ccc(c(c1)N(=O)=O)N(=O)=O			1	
CCCO(=O)c1	0	0		0
C1COCCN1			0	0
OC(=O)Cc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]			1	
Nc1ccc2C(=O)NSc2c1			0	
CCCCCOc1ccc(cc1)N=O			1	
Nc1ncnc2c1ncn2c3ccc(cc3)N(=O)=O			1	
CC1(C)[C@H](CC[C@@]2(C)[C@H]1CC[C@]3(C)[C@C				0
CCCC(CC)COC(=O)c1ccc(N(C)C)c(c1)[N-			1	
OC(=O)Cc1cccnc1C(=O)O		0		
Oc1ccc(C(=O)c2ccccc2)c(O)c1O				1
ClCc1ccccc1Cl			0	
Cc1ccccc1S				0
Oc1ccc2c(O)c3ccccc3cc2c1O			1	
CCc1c2CN3C(	0	0		1
C[C@H](Cc1ccccc1)N(C)CC		0		0
CC1CC2OC3C(O)C(O)C(C)(C34CO4)C2(CC			0	
CN(C)CCN(Cc	1	0	0	
OCC1CCC2C3CC(CC3CO)C12				0
CCSC(=O)N1CCCCC1			0	0
OCCI			1	
CN1CCN(Cc2,	0	1		1
CN(C)CCCO[C@H]1[C@H](O[C@@H]2OC(C)(C)O[C@H				0
O1[C@@H]2[C@H]1c3c(c4ccccc24)c5cc			1	
O=C(OCc1ccc	0	0		
C[C@@H]1O[C@@H](OC[		0		
CCOC(=O)\C=C\c1oc(cc1)[N+](=O)[O-]			1	
BrC\C=C/CBr			1	
CN(C)C(=N)N	0	0		0
C=CC(=O)OCC1CCCO1				0
OCc1occc1			0	0
C[C@@H](NCCc1ccc(O)cc:		0		
OS(=O)(=O)c1ccccc1			0	0
CC1(C)[C@@	0	0		
Nc1ccc(cc1Br)c2ccc(N)c(Br)c2			1	
CCCC1N(C=C(CC)C=C1CC)c2ccccc2				1
CCCCCCCC(=C	0	0	1	0
C[C@@H]1C[C@H]2[C@@H]3C[C@H](F)C4=CC(=O)C				0

CC(=O)Oc1cc	0	0	0
CCCC(=O)Nc1c(l)cc(l)c(CC(CC)C(=O)[O-])c1			0
O[C@@H]1O[C@@H](CO		0	
Cc1c(C(=O)O)c(O)cc2C(=O)c3c(O)c(O)c(	1		
NP(=O)(OCCC(=O)O)N(CCCl)CCCl	1		
ClCCOC(=O)C=C	1		0
CN[C@H](C)[C@@H](O)c1ccccc1	0		
O=N(=O)c1ccccc1Nc2ccccc2	0		0
Oc1ccccc1\C=N\c2snc3ccccc23	0		
CCC(C)NC(=O)N			0
CS(=O)C	0		0
O=N(=O)c1ccc2Oc3cc(ccc3Oc2c1)N(=O)	1		
CCCCCCCCC	0		0
C\C=C(/C)\C(=O)OCc1ccccc1			0
CCNC(=N)N(N=O)[N+](=O)[O-]	1		
O1C2C1c3c(c4ccccc24)c5ccccc5c6ccccc3	1		
CCCCCCCCCOC(=O)CCCC(=O)OCCCCCCC			0
CCCCCCCC(=O)CCc1ccc(O)c(OC)c1	0		
OC[C@@H](O)[C@@H](O[C@@H]1O[C@H](CO)[C@			0
CCBr	1		0
O=N(=O)c1ccc(OCC2CO2)cc1	1		
Nc1nc(nc2c1ncn2c3ccc(cc3)[N+](=O)[O-	1		
Nc1ncnc2c1ncn2[C@@H]3CC[C@H](CO	1		
C[C@@H]1C(C)(C)c2cc(C)c(cc2C1(C)C)C	0		
CCCCCCCCCCCCCCCCCOC(=O)CCc1cc(c(	0		
CCC(=O)O[C@@]1([C@@H](C)C[C@H]2[C@@H]3CC			1
NC1=Nc2c(ncn2[C@@H]3		0	
CC(C)OP(=O)(C)OC(C)C			0
O=N(=O)c1ccc2ccc3cc4ccccc4c5ccc1c2c	1		
ClC1=C(Cl)C1(Cl)Cl			0
CN1C(c2ccc(Cl)cc2)[S+](=C		0	
CC(C)C[C@@		0	
N1C2C1c3cccc4C5NC5c6cccc2c6c34	1		
NC(C(=O)O)c1nn[nH]1		0	
CC1(CO)C(O)CCC2(C)C1CCC3CC4CC23CC	0		
CC1=CC(=O)Oc2cc(O)cc(O)c12	0		1
NC=O	0		0
OC1C=Cc2cc3ccc4ccc(c5ccc(c2C1O)c3c4	1		
Clc1ncc2ccccc12	0		
NNCc1ccccc1			1
CC(C)CC(C)O	0		0
C(C1CCNCC1)c2c[nH]cn2		0	
CC(C)C1(O)CCC(=CC1)C			0

[O-][N+](=O)c1ccc2c3ccccc3c4cccc1c24	1	
CCN(CC)CCOC(=O)C(CC1CCCO1)Cc2cccc3ccccc23		0
Cn1c(NO)nc2ncc(cc12)c3ccccc3	1	
Cc1c(cc(cc1N(=O)=O)N(=O)=O)N(=O)=C	1	
OC(=O)c1ccccc1Nc2cc(Cl)ccc2C(=O)O	0	
N[C@@H](CCC(=O)NNc1ccccc1)C(=O)O	1	
O[C@H]1[C@@H](O)[C@	0	
CC(C)(C)C1=CC(=CC=C2C=C(C(=O)C(=C2)	0	
C[N+](C)(C)C	0	0
FC(F)(F)I	1	
OS(=O)(=O)c	0	0
COc1ccc2cc(ccc2c1)S(=O)(=O)N[C@H](CC(=O)N[C@H		1
CN(C)C(=O)C	0	0
O=C(CN1C(=O)Sc2ccccc12)OCc3ccccc3	0	
OCC(O)[C@H	0	0
Nc1c2C(=O)c3ccccc3C(=O)c2c(NC4CCCC	0	
CC(C)(c1ccc(OP(O)O)cc1)c2ccc(OP(O)O)	0	
Nc1nc(nc2c1ncn2C3CC(O)C(CO)O3)c4cc	1	
Cc1ccc2nc3c(ccc4ccccc34)c(CO)c2c1	1	
C[N+](CCC(	0	0
CCOP(=S)(OC(C)C)Oc1cnc(nc1)C(C)(C)C		0
CC[N+](([O-])(CC)CCNc1ccc(CO)c2Sc3ccc	1	
CCCC=CCC=O	1	
CS(=O)(=O)c1ccc(C(=O)C2C(=O)CCCC2=O)c(c1)N(=O):		1
C=CCCCCCCCC=O		0
CCCCN1CN(C)C=C1		0
C=CCOCC1CO1	1	0
ClC(=C)Cl	1	0
CCC1OC(=O)(	0	0
Fc1ccccc1c2ccccc2	0	0
C(C1CO1)c2ccc(Cc3ccccc3)cc2	1	
O=C(Cc1ccccc1)OCc2ccccc2		0
C(\C=C\c1ccc	1	1
O=N(=O)c1ccc(cc1)c2ccc(cc2N(=O)=O)N	1	
CCN1CCC[C@H]1CNC(=O)c2cc(ccc2OC)S(=O)(=O)N		0
CC(C)Cc1ccc(cc1)C(=O)C	0	
O1C2C1c3cc4ccccc4c5ccc6cccc2c6c35	1	
OC[C@@H](I	0	0
ClC1=C(Cl)[C@@]2(Cl)[C@H]3[C@H]4[C@H]([C@@		1
COc1cc2CC(C)(C)n3c(cc4nc		0
OC1C=Cc2cc3ccc4c(ccc5ccc(c2C1O)c3c4	1	
NCCCC(=O)O	0	0
Cc1ccc(cc1N)N=Nc2ccc(C)c(N)c2	1	

C1CN=C(N1)c2cnc3ccccc3r	0			
O=C1c2ccccc2c3ccc4ccccc4c13			0	
CS(=O)(=O)c1ccc(Cl)cc1			0	0
CC[C@](N)(CCC(=O)O)C(=	0			
Cc1cccc(c1)C#N			0	
[O-]C1=NC(=	0	0		
OC(=O)c1ccc(Cl)cc1Cl			0	0
CC(N)CCN			0	
O=Cc1ccc(cc1)N(=O)=O			1	0
CC(=O)NCCc1	0			
OC(=O)CCC(=O)Nc1ccc(cc1		0		
NC1=NC(=O)c2ncn(CCC(CO)CO)c2N1				0
Oc1ccc2C=CC	0	0		
CC(=O)OCc1occc1			1	0
C[C@@H](Cl	1	1		
C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCc4cc(OS(=O)(=O)O)cc				0
C=C(CCC#N)C#N				0
C\C=C\C=C(O)\C=C\C=C(/C)\C=CC1=C(C)CCCC1(C)C				1
CCOC(=O)C=CC(=O)O				0
Fc1ccccc1			1	0
Nc1ccc2nc3ccccc3cc2c1			1	
N1[C@@H]2[C@H]1c3c(ccc4ccccc34)c5			1	
Cc1cc(C)cc(c1)N(=O)=O				0
OC(=O)c1ccc	0	0		0
CCCCCCC(O)CCCCCCCCC(=O)O				0
CC(C)NCC(O)COc1cccc2CC(O)COc12			0	
O=C(C1OC1c2ccccc2)c3ccc(cc3)c4ccccc4			0	
CCN(CC)C(=S)[S-]				0
Cc1ccc(cc1S(=O)(=O)O)N=Nc2c(O)c(cc3		0		
CCCCCCCCC[N+](C)(C)CC(=O)[O-]				0
Nc1nc(Cl)nc2c1ncn2[C@@		0		
COc1cc(OC)nc(NC(=O)[N-]S(=O)(=O)c2ncccc2OCC(F)(				0
CCCCCCC(C)O				0
CN(C)CCOC(c	1	0	0	0
[O-][N+](=O)c1c2C=CCCc2c3ccc4cccc5c			1	
COC(=O)c1ccc2cc(ccc2c1)C(=O)OC				0
COc1ccc(cc1)C(OCCN2CCC		0		
Cc1ncc(COP(:	0	0		0
COc1ccc2c(ccc3oc(cc23)[N+](=O)[O-])c:			1	
OCCN1CCNCC1			0	0
O=N(=O)C1=Cc2cccc3cccc1c23			1	
Nc1cc(cc2cc(c(N=Nc3ccccc3)c(O)c12)S(			0	
CC(=O)[C@H	0	1		

Oc1ccc2C[C@	1	0	
CC(CN)CC(C)(C)CCN			0
NC(CCC(=O)NC(CSc1ccc(cc1[N+](=O)[O-	1		
[O-][N+](=O)c1ccc2Oc3ccccc3Oc2c1	1		
[O-][S+]1(=O)NC(=O)c2ccc	0		
CC1(C)S[C@@H]2[C@@H](NC(=O)Cc3c	0		
C[C@]12CC[C	0	0	
Cn1c(nc2c3cccnc3ccc12)N(=O)=O	1		
Nc1c(cc(c2C(=O)c3ccccc3C(=O)c12)[N+	1		
Cc1nn(c(C)c1C=NN2CCN(C	0		
CC(C)CCCCOC(=O)CCS			0
Nc1cc(ccc1O)N(=O)=O	1		1
NC(C(=O)O)c1cccc(O)c1	0		
Oc1ccc2c(cccc2c1)S(=O)(=O)O	0		
COc1cc2CCN(C)[C@H]3Cc	0		
CCC(=[N+](O)[O-])C(C)O	0		
Cc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]	0		
CO[C@@H](	0	0	
C1=Cc2c3c1cccc3cc4ccc5ccccc5c24	1		
OCC(=O)CO	1		
CC(=C)CC(C)(C)C			0
CCNC(=O)NCCCOc1cccc(CN2CCCC2)c1			0
CCCCC(=O)O[C@@]1([C@@H](C)C[C@H]2[C@@H]3			1
OC(=O)CONC(=O)c1cccc1			0
CC(C)OP(=O)	0	0	
CC(C)(C)c1ccc(cc1)C(=O)O			0
CC(Oc1ccc(Cl)cc1C)C(=O)O	0		0
Nc1ccc(c(Cl)c1)c2ccc(N)cc2Cl	1		
COc1ccc(C[C	1	0	0
C1CN(CCO1)SSc2nc3ccccc3s2			1
Oc1cc(O)c2C(=O)c3ccccc3	0	1	1
Nc1ncnc2c1r	0	0	
Nc1ccc2c3ccccc3[nH]c2c1[N+](=O)[O-]	1		
CSc1ccc(C=O)cc1			0
OCCN(CCO)c1cccc(Cl)c1			0
CC(C)(c1cccc1)c2cc(c(O)c(c2)C(C)(C)c3ccccc3)n4nc5			0
CCOP(=O)(CN(CCO)CCO)OCC			0
CCC1=C(O)C(=O)c2c(O)c(O)c(O)c(O)c2C	1		
Nc1ccc2C3=Nc4ccccc4C(=O)N3Cc2c1	1		
c1ccc2c(c1)ccc3c4ccccc4ccc23	1		0
CCOP(=S)(OCC)SC1OCCOC1SP(=S)(OCC)	1		
CCCCCCCCC(=O)N(C)C			0
Cc1cccc(c1C(O)O)[N+](=O)[O-]	1		



FC(F)(F)C(F)(F)C(Cl)Cl	0	
CC(=C)C(=O)N		0
CN(C)C1[C@H](O)C1	0	
CN1CCc2cc(Br)c(O)cc2C(C)C	0	
OC(NC(=O)N)C1=CC=CC=C1	0	0
[O-][N+](=O)c1cc2cccc(c2cc1[N+](=O)[O-])C(=O)c1cccc(Oc2cccc2)c1	1	0
Clc1ccc(COC(=O)c2cccc3cccnc23)c(Cl)c1	0	
OC1OC(=O)C(=C1Cl)Cl	1	
O=C(OCCOCCOC(=O)c1cccc1)c2cccc2Cc1nc2cccc2		0
OCC1OC(CC1O)N2C=C(l)C(=O)NC2=O	0	
Oc1ccc2ccc3ccc(c4ccc1c2c34)[N+](=O)[O-]	1	
CC(=O)OCc1c2cccc2cc3c1ccc4cccc34	1	
COC(C)C(C)C	0	0
CCN(CC)c1ccc(cc1)N=O	1	
OC(=O)c1cc(ccc1N(=O)=O)N(=O)=O	1	
CCCC(CC)COC(=O)c1ccc(cc1)C(=O)OCC1	0	0
Cc1ccc(CO)cc1	0	0
CC(=O)N1CCN(CC1)c2ccc(cc2)C	1	
CCN(CC)c1ccc(cc1)C	0	0
CCOC(=O)C1=CC=CC=C1	0	0
COc1cc2OC3OCCC3c2c4OC(=O)C5=C(C)CC1c2cccc2c3c1ccc4ccc5cccc5c34	1	0
C1c2cccc2c3c1ccc4ccc5cccc5c34	0	
[O-][N+](=O)c1ccc2c(c1)[nH]c3cccc23	1	
C1CCCCC1		0
Nc1ccc(c(Cl)c1)c2ccc(N)c(Cl)c2	1	
CC1CN(N=O)C(C)CN1N=O	1	
CC\C=C\C=C\C=C\C=C\C=C\C=C\OCC(O)c1ccc(cc1)C	1	
CC(C)[N+](=O)[O-]	1	
[O-][N+](=O)c1ccc2Oc3ccc(cc3Oc2c1)[N+](=O)[O-]	1	
CC1(C)C[C@H](C)[C@H](C)(CN=C=O)C1N#C	0	
N#CSc1ccc2c(c1)C(=O)N2	0	0
Nc1ccc(cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1	
CCC1OC(=O)C(C)C(OC2CC(C)(OC)C(O)C(=O)C(=O)O)C(=O)O	0	0
CO[C@H]1[C@@H](C[C@@H]2CN3CCc4c([nH]c5cc(C)C=C5)C=C4)C=C1	0	0
CIN1C(=O)NC(=O)N(Cl)C1=O	0	0
ClC(Cl)(Cl)[C@@H]1CO1	1	
Cc1c(cc(cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-])C(=O)c2c1O	1	
Cc1cc(O)c2C(=O)c3cccc3C(=O)c2c1O	1	
[O-][N+](=O)c1cccc2nc3cccc(c3nc12)[N+](=O)[O-]	1	
CCN(Cc1ccc(Cl)nc1)\C=C\N(=O)=O\NC		0

Cc1ccc2OC(=C(O)C(=O)c2c	0		
O[C@@H]1C=Cc2c(ccc3c4cccc4c(cc23)		1	
[O-][N+](=O)c1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]		1	
Nc1ccc(Nc2cccc2)cc1		0	0
CC(C)(N=NC(C)(C)C#N)C#N		0	0
COC(=O)C(=C)C		0	0
C[C@@H](NCc1cc(Br)cc2	0		
CC(=O)CCC1C2CC3C(CC12C)OC(=O)C3=C		0	
CC1=CN([C@H]2C[C@H](F)[C@@H](CO)O2)C(=O)NC			0
CC(C)(C)NCC(O)COc1cccc1C2=CCCC2		0	
CN1CC[C@]2	1	0	
COC1=C(OC)	0	0	
Nc1cc(ccc1Cl)C(=O)O			0
Cc1ccc(cc1)c2cccc2			0
Cc1cc(C)c(c(C)c1)[S+](=O)	0		
NC(=O)c1ncr	0	0	0
CC[C@@]1(CC(=O)O)OCCc2c1n(C)c3ccc	0		
CO\N=C\C(=	0	0	
CNC(=O)c1cc	0	0	
N[C@@H]1C	0	0	0
Cc1cc(C)c2c(ccc3cccc23)c1		1	
Clc1cccc(c1)N2CCNCC2			0
FC(F)(F)c1cci	1	0	
CN(N=O)C(=N)NN(=O)=O		1	0
[O-][N+](=O)c1ccc2c(oc3ccc(cc23)[N+](	1		
CC(C)CCOCc1cccc1			0
Cc1sc(N)c(C(=O)c2cccc(c2	0		
CCC(=O)OCc1cccc1			0
COP(=S)(OC)	0	0	
CC(C)(C)C(=O)C(Oc1ccc(Cl)	0	0	
CC(C)(C)OC(=O)N\N=C\C1=CN(O)c2cccc	1		
CCOc1ccc(NC(=O)OC(C)C)cc1OCC			0
CCCCCOCCOCCO			0
CN(C)CCNC(=O)c1ccc2ccc3cccnc3c2n1		1	
CN[C@@H]1[C@@H](O)[C@@H](O[C@@H]2[C@@			0
Clc1ccc(CSc2ccc(Cl)cc2)cc1		0	
COc1cccc2OC(CC(=O)c12)c	0		
O[C@@H]1[C@@H](O)c2cccc3c4c(ccc5	1		
CCOC(OCC)P(=O)(O)CCCN	0		
Oc1c(Cl)cc(Cl)cc1C(=O)Nc2ccc(Cl)c(Cl)c2			1
CCOC(=O)C(=NNc1ccc(cc1)c2ccc(NN=C(	0		
Cc1c2cccc2c(C3CO3)c4cccc14	1		
COc1cc(CNC(=O)C(C)Br)ccc1O	1		

OC[C@H]1O[C@@H](Oc2ccc(O)cc2)[C@H](O)[C@@	0	0
CCCCCCC[C@H]1CO1	0	
C[C@@H]1O[C@H]1c2ccccc2	0	
OC1=NCCN1N=Cc2oc(cc2)N(=O)=O	1	
CC(C)(C)OC(=O)N1C[C@@H](F)C[C@H]1C(=O)O	0	
Cc1nc(O)c(cc1c2ccncc2)C#N	0	
Oc1cc2CCN(CC=C)CC(c3ccc	0	
C=CCNCC=C	0	0
ONc1ncnc2c1ncn2Cc3ccccc3	1	
CCC(=O)OCc1cccc(c1)[N+](=O)[O-]	0	
CCCC(Cn1cncn1)(C#N)c2ccc(Cl)cc2	0	
CN(C)CCS	0	0
OC(=O)Cc1cccc(c1)N(=O)=O	0	
C(OCC1CCCC1)c2ccccc2	0	0
Nc1nc(cs1)C(	0	0
[O-][N+](=O)c1ccc(Oc2ccc(cc2)N=C=S)c	1	
COc1nsc2c(cccc12)N(=O)=O	1	
CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)Cc3ccccc3)C(=O)N2[	0	
COc1cc(\C=C	0	0
C[C@@H](O)[C@@H]1[C@H]2[C@@H](C)C(=C(N2C:	0	
CC(C)CCCCCOC(=O)c1ccc(C(=O)OCCCCC(C)C)c(c1)(	0	
CCCCCOCCO	0	
OS(=O)(=O)OCc1cc2ccccc2c3ccc4ccccc4	1	
O=C=NCC1CCCC(CN=C=O)C1	0	
C1Cc2c(C=C1)ccc3nc4ccc5ccccc5c4cc23	1	
Nc1cccc2C(=O)c3c(N)cccc3C(=O)c12	1	
CCCCC(=O)CC	0	
CCC(COC(=O)c1cc(OC)c(O(	0	
CN1C[C@@H]2[C@@H](C1)c3cc(Cl)ccc3Oc4ccccc24	0	
CC1(C)[C@@H](N2[C@@H](CC2=O)S1(=O)=O)C(=O)N	0	
O=Nc1c2ccccc2c3ccc4cccc5ccc1c3c45	1	
C\C=C(/Cl)\C=O	1	
OC(=O)\C=C\	0	0
C[C@]12CCC(	0	0
Cc1cc2c(nc(N)n2C)c3nc(C)c(C)nc13	1	
ClC(=C(Cl)c1c(Cl)c(Cl)c(Cl)c(Cl)c1Cl)Cl	0	
FC(F)(Cl)Br	0	
OCCN(C(=O)C	0	0
CC(C)(O)C1CCC(C)(O)CC1	0	
CCOP(=O)(OCC)Oc1cc(on1)c2ccccc2	0	
O=Cc1occc1	0	0
NC(=N)NN=C(C=Cc1oc(cc1)N(=O)=O)C=Cc2oc(cc2)N(:	1	
CCCCC\C=C\C	0	0

CCCCCCCCn1cc[n+](C)c1				1
OC(=O)\C=C\	0			
C[C@@H](N)	0	0		
Cc1ccc(NC(=O)c2csc(c2)N(=O)=O)cc1			1	
O=C=NCCCCCN=C=O				0
OC1(O)C(=O)c2ccccc2C1=O			0	1
CNCCS(=O)(=O)O			0	
OC(=O)COc1	0	0		0
CC(=O)OC1CCC2(C)C(CCC3		1		
C[C@@]12C	0	0		
Cc1cccc(c1C(=O)O)N(=O)=O				0
O=N(=O)c1ccc2c(cc3c(cccc3c2c1)N(=O)			1	
COc1ccc(NC(=O)C)cc1N				0
OC[C@H]1O	0	0		0
CC(C)NCC(O)	0	0		0
ONc1ccc(Cl)c(Cl)c1			0	
COP(=O)(NC(=O)C)SC			0	0
CCCCCCCCSCC				0
CC(CS)C1CCC(C)C(S)C1			0	0
CN1C(=C(O)c2ccccc2S1(=O)=O)C(=O)Nc3ncc(C)s3				1
Cc1cc(c(C)c2c3cc(ccc3[nH]c12)N(=O)=O			1	
CCCC[C@@H](CC)CN			0	
CCCCOc1cc(c	1	0		0
CC(=O)OC1Cl	0	0		
CN1CC[C@]23[C@H]4Oc5c(OC(=O)C)ccc(C[C@@H]1				0
CC(C)CN(CC(C)C)CC(C)C			0	
NC(CCC(=O)NC(CS\C(=C\Cl)\Cl)C(=O)NC			1	
C1c2cccc3ccc4c5cccc5cc1c4c23			1	
CCSCCCL				0
CC[C@H](C)[	0	0		
CCCCN(CC(O)C1=CC(=N#N)C(=O)C=C1)N			1	
CC(C)OC(=O)C1=C(C)N=C(N)C(=C(O)OC2			0	
CC1OC1P(=O	0	0		
CN(c1c(cc(cc1N(=O)=O)N(=O)=O)N(=O)			1	
O1C2C1c3c4ccc5cccc5c4cc6cccc2c36			1	
COc1ccc2c(cc3N(C)CCc4cc5OCOc5c2c34			1	
OC1C=Cc2c(C1O)c3cccc3c4cc5cccc5cc			1	
Clc1cccc1Cl	0	0	0	0
CCCCCCC\C=C\CCCC(=O)C				0
CN(C)c1ccc(cc1)N=Nc2ccc(COC(=O)C)cc			1	
CC1=CNC(=S)NC1=O				0
N1C2C1c3cccc3c4cccc24			1	
CNN=NC			1	

CNC(=O)ONC(=O)C	1		
CC(=C)C(=O)OCCOCCOCCOC(=O)C(=C)C	0		0
CCN(CC)CCO	0	0	0
CC(C)(N=C=O)c1cccc(c1)C(C)(C)N=C=O			0
Nc1cc2c3ccccc3ccc2c4ccccc14	1		
OC(c1ccc(F)cc1)(c2cncnc2)c3ccccc3Cl			0
O=C1NC2NC(=O)NC2N1			0
COc1cccc(\C=C\c2ccc(N)cc2)c1	1		
CC(C)(C)OC(=O)CN=N#N	1		
CC(Br)C(=O)Nc1ccccc1	1		
O=C(C=Cc1ccc(cc1)N(=O)=O)c2ccc(cc2)I	1		
O=C1OCCO1			0
CCC1=CN(C2CC(O)C(CO)O2)C(=O)NC1=C	0		
Cc1ccccc1S(=O)(=O)[O-]			0
ON(=C)=O	0		
Nc1ncnc2c1ncn2C3OC(CO)CC3O	1		
CNc1c2CCCC	0	0	0
CCc1ccccc1O	1	1	
CCCCCCCC			0
OC1C2OC2c3ccc(O)c4c5C(=O)C6OC6c7c	1		
Oc1ccc(N=Nc2ccc(cc2)N(=O)=O)c(O)c1	0		
BrC1=C(Br)C(=O)OC1	1		
CC(=O)O[C@@H]1C[C@H]2CC[C@]1(C)C2(C)C			0
O[C@H]1[C@	0	0	
C1COCCOCCOCCO1	0		
[O-][N+](=O)c1ccc(s1)C2NC(=O)c3ccccc	1		
Oc1c(Cl)cccc1Cl	0		0
CO[C@]12[C@H]3N[C@H]3CN1C4=C([C@H]2COC(=O			0
Cn1c(CC(=O)OCCCl)c(C(=O)O)c2ccccc12	1		
NCCS	0	0	0
FC(F)OC(Cl)C	0	0	0
CN(C)CCCN=C1c2ccccc2Nc3cc(ccc13)N(-	1		
OC(=O)C(F)(F)C(F)(Cl)C(F)(F)C(F)(Cl)C(F	0		
COc1cc(N)c(cc1N)[N+](=O)[O-]	1		
C[C@H](Oc1	0	0	
COc1ccccc1N=Nc2c(O)ccc3ccccc23	1		
CC(=O)C1CCCCC1=O			0
OC1C(O)c2ccc(c3c4ccccc4c5cccc1c5c23)	1		
[O-][N+](=O)c1ccc2N(S\C(=N/C(=O)CCC	1		
OCCSC1=C(S	0	0	
[O-][N+](=O)c1cnc(s1)N2CCCC2=O	1		
CCCCCCC(=O)c1ccccc1			0
CN(C)S(=O)(=O)N(SC(F)(Cl)Cl)c1ccc(C)cc1			1

Fc1ccc2c3c(ccc4cccc34)c5cccc1c25			1		
CN1C[C@H](C=C2[C@@H]	0				
CCOC(=O)C(Br)c1cccc1				0	
Oc1cccc(\C=N\c2snc3cccc23)c1			1		
Oc1cccc1C(=O)c2cccc2O				1	
CNC(C)C(O)c1cccc1			0		0
NC\C=C\C(=C	0	0		0	
Nc1ncnc2c1ncn2C[C@H](O)CN=[N+]=[N			1		
O=C(C1CCCC	0	0	0	0	
CC1CCCO1			0		
CC(=O)Oc1cc	0	0		0	
OCCN1CCN(CC1)C(=O)CN2C(=O)Sc3ccc(Cl)cc23				0	
FC(F)(F)c1cccc(c1)N(=O)=O			0	0	
COC1=C(Oc2ccc(OC)cc2C1:	0				
CC1(C)S[C@H]2[C@H](NC	0				
CCCCCCCCC	0	0		0	
CN(N=O)[C@H](OC(=O)C)c1cccc1			1		
CCC1(CCC(=C	0	0		0	
NOCC(=O)O	0	0			
CC(Br)Br			0		
CC1=CCCc2c1cc(C)c3c2ccc4cccc34			1		
CCCCCCCCC	1	0		1	
Oc1cccc2C(=O)c3c(O)cccc3C(=O)c12			1		
CC(C)(C)CBr			0		
Fc1cccc1C(=O)Cl			1	0	
CC(C)[C@H]1CC=C(C)C=C1				0	
O=C1Nc2ccc	0	0			
Cc1ccc(cc1)c2nn(CC(C)(C)C		1			
OC(=O)CS			0	0	
OC(=O)C1=C	0	0			
[O-][N+](=O)c1ccnc2cccc12			1		
CC(=O)N1CCN(CC1)c2ccc(C		1			1
CC(=O)Nc1ccc(Cc2ccc(NC(=O)C)cc2)cc1			0		
Oc1ccc(\C=C\c2ccc(\C=C\c		0			
CCN1C(=CC=CC=Cc2sc3cccc3[n+])2CC)Sc4cccc14				1	
CCCC(C)C				0	
Cc1nc(cc2c3cc(cc(c3[nH]c12)[N+](=O)[C			1		
OC[C@H]1O[C@H]([C@H]	0				
Cc1cccc(C)c1	0	0		0	
CCC1(O)CC2CN(Cc3c([nH]		1			
CC1(C)O[C@	0	0			
O=N(=O)c1cccc2cccnc12			1	0	
CCNc1nc(Cl)nc(NC(C)C)n1			0	0	

CCOc1ccc(O)cc1			0
CC(C)(c1cc(Cl)c(O)c(Cl)c1)c2cc(Cl)c(O)c(Cl)c2			1
COc1ccc2nc(N)s2c1	1		0
CC(Br)c1ccccc1	0		
CCCCOC(=O)CC(O)(C(C=O)	0		
CC(C)OC(=O)C	0		0
CCOc1cc(NC(	0	0	0
CC(=CCC\C=C/CCC(C)(O)C=C)\C			0
CC(=O)OCCCCCCCCC=C			0
OC(=O)C(Cc1c[nH]c2ccccc12)NC(=O)CO	0		
CCNC(=O)C1CC(C)CCC1C(C)C			0
CC1(C)C2CCC1(C)C(C)(O)C2	0		
Oc1nnc(O)c2ccccc12	0		
CCc1ccccc1N	0		
Oc1ccc2cccnc2c1	0		
C[n+]1ccn(Cc2ccccc2)c1			0
CCCCC1ccc(Cl)cc1			0
CNCCCN1c2ccccc2CCc3ccc	1	0	
CC(=O)N[C@@H](CC(=O)N[C@@H](CCC(=O)O)C(=O)			0
OC1CC23OC2(C1)C=CC=C3	0		
CC(C)COC(=O)C=Cc1oc(cc1)N(=O)=O	1		
Clc1nsc2cc(ccc12)N(=O)=O	1		
CN(C(=O)CCCCl)c1snc2ccccc12	0		
N[C@H](C(=O)O)c1ccc(C(=	0		
CC(=O)Nc1ccc(Cc2ccc(NC(=O)C)c(Cl)c2)	1		
OC(CN=N#N)CN1C=CC(=O)NC1=O	1		
OS(=O)(=O)c1cc(Nc2ccc(cc2[N+](=O)[O	1		
CN(C)c1ccc(\C=C\2/C(=O)I	0		
Nc1ccc(NC(=O)c2ccc(cc2)C(=O)O)cc1	0		
O=C(OCCOCCOCCOC(=O)c1ccccc1)c2ccccc2			0
C1Cc2cc3ccc4cccc5ccc(c2C6OC16)c3c45	1		
Cc1ccc(c(C)c1)S(=O)(=O)[O-]			0
OCCN(CCO)c1ccc(cc1)N=Nc2cccnc2	0		
Cc1ccc(OP(=O)(Oc2ccccc2)Oc3ccccc3)cc1			1
CC\C=C/c1c	1	1	
Nc1ccc(Cc2ccc(N)cc2N(=O)=O)c(c1)N(=	1		
O=C1O[C@@	0	0	
C[C@H]1C[C@H]2[C@@H]3CCC4=CC(=O)C=C[C@]4(C			0
CCCCc1ncc(\	0	0	
COc1ccc2CC3	1	1	
C[N+](C)(C)C	0	0	0
CCCCCOC(=O)CC			0
COC(=O)c1occ(c2ccccc2)c1c3ccccc3	0		

COc1cccc2C(=O)c3c(O)c4C[C@](O)(C[C(	1		
OCc1ccc[n+](	0	0	0
Nc1cccc1			0
CN1CCC(=C2c	1	1	0
C=COc1ccc(cc1)N(=O)=O			1
C(C(C1CCCC	1	1	1
Nc1ccc2ncccc2c1			0
CC(C)CCC(=O)CCC(C)C			0
CCOCCOC(=O)C			1
Cc1cc(c(C)cc1O)C2(OS(=O))(=O)c3cccc2			0
BrC1ccc(cc1)N(=O)=O			1
Fc1cccc2c1ccc3ncccc23			1
O[N+](=C)[O-]			0
CN1CCC=C(C1)C(=O)OCC#(		0	
CCCCC(CC)COC(=O)CCCC(=O)OCc1cccc1			0
Clc1ccc(cc1)S(=O)(=O)NC(=O)NN2CCCC2			0
CC1=CC(=O)N	0	0	
ClC(Cl)[C@H](c1ccc(Cl)cc1)c2cccc2Cl			0
Nc1ncnc2c1ncn2CC(O)CN=[N+]=[N-]			1
C1CC[C@H](NC1)c2cccnc2		0	0
Cc1cc(c(C)c2c3cc(O)ccc3[nH]c12)N(=O):			1
OCCc1ccncc1			0
CCOC(=O)CCCCCCCC=C			0
CCCC(=O)OCc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]			1
C[C@H]1CCCC(=O)CCCC=Cc2cc(O)cc(O)c2C(=O)O1			1
COc1cc(O)c(	0		0
N[C@@H](CN1C=CC(=O)N		0	
CCC1OC(=O)(	0	0	
CC(N\C(=N)/C	0	0	0
CC1(C)S[C@	0	0	
CN1CCN(CC1	0	0	
C1Cc2ccc3cccnc3c2C4OC14			1
C\C\1=C\C[C[	0	0	
Cl\C(=C/n1cr	0	0	0
CCC(CCC(=O)C)COC(=O)c1cccc1C(=O)O			0
CC(C)(CO)[C	0	0	0
CCCCCBr			0
Cc1cccc(O)c1			0
CC(=C)[C@H]1CCC(=CC1)C			0
Nc1ccc2c(ccc3c4cccc4ccc23)c1			1
CCCCOC(=O)c1cccc2cccnc12			0
CN1[C@@H]	0	0	
CN1[C@@H]2CCC[C@H]1CC(C2)NC(=O)c3nn(C)c4ccc			0



CCN(N=O)c1ccccc1	0	
CC(=O)Nc1nc(cs1)c2cc(cs2)[N+](=O)[O-	1	
CCCN1CC[C@H]2[C@@H]:	0	
O=NN1CCCC1	1	0
COC(=O)[C@]12O[C@@]1(C)[C@@](C)	1	
COCN(COC)c1nc(nc(n1)N(COC)COC)N(COC)COC		0
Oc1cccc(c1)C(=O)c2ccccc2		1
OC1=C(C(=O)C2CC2)C(=O)	0	
CSc1cnc(C)cn1		0
COC(=O)Nc1nc2cc(ccc2[nH]1)\C(=N\O)	1	
C[C@]12C(C	0	0
CC12CCCC(C)(C1CCC34CC(O)(CCC23)C5(	0	
CCCCC(CC)COC(=O)C=Cc1ccc(OC)cc1	0	0
COCCOCCO	0	0
CC12CCCC=C1C(=O)OC2=O		0
CSCNc1ccccc1	1	
O=N(=O)c1ccc2c(CCc3cc4c(CCc5ccccc45	1	
CN(C)\C=N\c1ccc(Cl)cc1C	0	0
ClCC=O	1	0
O[C@@H]1C=Cc2c(ccc3cc4ccccc4cc23)[	1	
CC(C)(O)C1Cc2cc3C=CC(=O)Oc3cc2O1	1	
Oc1cc2OC(=CC(=O)c2c(O)	0	
Cc1onc(c2ccccc2)c1C(=O)N[C@H]3[C@H]4SC(C)(C)[C		0
Oc1ccc2ccc3c4ccccc4cc5ccc1c2c35	1	
CCOC(=O)N1CCC(=C2c3ccc	1	
COc1ccc2c(ccc3c4CC=C(C)c4ccc23)c1	1	
COc1cc2C=CC(=O)Oc2c(O)	0	
CC(Oc1ccccc1)C(=O)N[C@H]2[C@H]3SC(C)(C)[C@@H		0
Clc1ccc(cc1)N2CCN(Cc3cc	0	
N[C@@H](CCCNC(=S)N)C(	0	
CC(=O)OCC(=	0	0
[O-]C1=NC(=O)N(Cl)C(=O)N1Cl		0
Fc1cc2ccccc2c3ncccc13	1	
C[N+]1(C)CC	0	0
OCc1oc(cc1)C(=O)NCC(=O)O		0
CC(=O)c1ccc2ccc3ccccc3c2c1		1
NC(=O)c1ccc[n+](c1)[C@	0	
CCCCOc1cc2C(=O)CCc2c3ccc4ccccc4c13	0	
COC(=O)C1=C(C)NC(=C(C1c2ccccc2)N(=O)=O)C(=O)C		1
COc1ccc(cc1N(=O)=O)N(=O)=O	1	0
COC(=C1C(C(=C(C)N=C1C)C(=O)OC)c2cc	0	
C[C@@H]1O[C@@H](O[C	0	
Oc1c2ccccc2c(O)c3c1ccc4nc5c6C(=O)c7	0	

CN(C)c1ccc(cc1)N(C)C	1	0
O=NN(Cc1ccccc1)Cc2ccccc2	0	
C\C(=C/c1ccc	0	0
CNC(=O)OCC[N+](C)(C)C	0	0
CCCOc1ccccc	0	0
CCCCCCCCCCCC[N+](C)(C)C		0
CCCCCCCC\C=C/CCCCCCCCO		0
CCCCCCCCCOC(=O)C		0
CCOC(=O)c1ncn2c1[C@@H]	0	
CSCCC(NC(=O)C(N)Cc1c[nH]c2ccccc12)C	0	
Cc1ccccc1(OC(=O)C2c3ccccc2)Oc3ccccc3)c	0	
Nc1ccccc1c2ccccc2	1	0
C1CN=C(N1)C2CC2(c3ccccc3)c4ccccc4		0
CCc1cc(N)cc(C)c1Cc2c(C)cc(N)cc2CC	0	
CCCCCCCC\C=C/CCCCCCCC(	0	
CN(C)CCNC(=O)c1ccc2nc3ccccc3c(N)c2c	0	
CCCCCCCC(=O)OC		0
COC(=O)c1cc(Cc2ccc(N)c(c2)C(=O)OC)cc	1	
NC(=O)NNc1	0	0
CCCOc(=O)C		0
CCCCCc1occc1		1
CC(=C)[C@@H]1[C@H]2O	0	
Oc1ccc(\C=C	1	
Oc1ccc(NC2=	0	0
Oc1cc(nc2nc(Cl)ccc12)c3cc	0	
CCN(CC)S(=O)(=O)c1ccc(N)cc1	0	
CO[C@@H](C)[C@](O)(C(=O)OCC1=CCN	1	
ClCC(=O)Nc1snc2ccccc12	1	
Oc1ccc(C=O)cc1	0	
CCOC(=O)CC(C)O	0	
[O-]c1c(Cl)cc(Cl)cc1Sc2cc(Cl)cc(Cl)c2[O-]		1
CC(C)NC[C@H]	0	0
C\C(=C/C=C/C(=C/C(=O)O)	0	
CCC1CCC(=O)O1		0
CC(C)Cn1cnc:	0	0
COc1cc(O)c2c(O)c3c(O)cc(C)cc3cc2c1	1	
CC(C)(C)c1cc(CC(C)(C)CO)c	0	
CC(=O)N[C@@H]1[C@@H](NC(=N)N)C=C(O[C@H]1[		0
c1ccc2cnccc2c1	0	0
CCN(CC)CCN(	0	0
C1N(\N=C\c2ccc(Oc3ccccc3)cc2)N=Nc4	0	
CC1C=C[C-]=C1		0
[O-][N+](=O)c1oc(cc1)c2csc(NNC(=O)n2	1	

[O-][N+](=O)	0		
COc1ccc(\C=C\C(=O)c2ccccc2)cc1	0		
ClC1=C(Cl)C2(Cl)[C@H]3C4C[C@H](C=C4)[C@H]3[C@		1	
CN1CC[C@]23[C@H]4Oc5c(O)ccc(C[C@@H]1[C@@H]		0	
Fc1cnc2ccccc2c1	0		
O=Cc1cccc(c1)c2ccccc2	0		
Cn1cnc2c(N)ncnc12	1		
CC(=O)C=C	1	0	
Nc1cc(CCO)c(N)c(c1)[N+](=O)[O-]	1		
CNC(=O)N(C)c1nc2ccccc2s1	0	0	
OC[C@H]1OC(=O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]1O		0	
CC(Br)(CCl)CBr	0		
CCN(CC)CCn1nc2ccc(C)c3c4ccc(Cl)cc4Sc	1		
OC[C@H](O)[C@H]1OC(=C(O)C1=O)O	0		
Cc1ccc(NO)cc1[N+](=O)[O-]	0		
O=N(=O)c1ccc(C=Cc2ccc(cc2)N(=O)=O)c	1		
OC1=NC(=O)c2cc(ccc12)N(=O)=O	1		
CCN(CC)c1ccc2C(=C3C=CC(=[N+](CC)CC)	0		
NC(=O)C=C	0	0	
NC(=O)C[C@H]1CO1	1		
CCCCC(CC)C(=O)OCCOCCOCCOC(=O)C(CC)CCCC		0	
ON(C=O)c1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]	1		
Oc1c(Cl)cc(Cl)cc1Sc2cc(Cl)	0	0	1
[O-][N+](=O)c1cc(ccc1F)N=N#N	1		
ClCCOP(OCCCl)OCCCl	1	0	
OC[C@@H]1SCCN1N=O	1		
CCC(C)(C)C1CCC(=O)CC1		0	
CC(=O)CC(=O)Nc1ccc(O)cc1	0		
[O-][N+](=O)c1cccc(c1)C(=O)ON(OCCc	1		
Nn1nnc2cccc	0	0	
CCC1CN2CCC1CC2C(O)c3cc	0		
Nc1nc(nc2c1ncn2c3ccc(cc3)N(=O)=O)c4	1		
CC(=CCC\C(=C\C=C\C(=C\C	0	0	
C[C@H]1[C@H](NC(=O)\C	0		
CC1CC2OC3C(O)C(OC(=O)C)C(C)(C34CO	0		
c1cc2ccc3ccc4ccc5ccc6ccc1c7c6c5c4c3c	1		
O=C(NCN1CC	0	0	0
Cc1cc2c(C)c3ccccc3c(C)c2cc1C	1		
CCCN(C[C@H](O)CCO)N=O	1		
Cc1cccc(OP(=O)(Oc2cccc(C)c2)Oc3cccc(	0		
OC[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)C(=O)CO		0	
Cc1cccc2c1cc3ccc4cccc5ccc2c3c45	1		
CCc1c(O)ccc2c3CCOC(CC)(CC(=O)O)c3[n	1		

CCCCCCCCO			0	0
N[C@H](Cc1ccc(F)cc1)C(=O)O			0	
COc1ccccc1C	0	0		0
CNCC(=O)O			0	
CCC(=O)Nc1c	0	0		0
CCOc1nc2cccc(C(=O)OC(C)OC(=O)OC3CCCC3)c2n1Cc				1
CN(C)c1nc(nc	0	0	0	0
ONc1ccc(cc1)N=O			1	
O=N(=O)c1ccc2nc3ccccc3nc2c1			1	
Cc1cc(Cl)ccc1N				0
C=Cc1ccccc1			1	0
CN1[C@H]2CC(C[C@@H]1[C@H]3O[C@@H]23)OC(=				0
CCCCCCCCC(=O)OC(CC=C	0			
C[C@@H](O)[C@@H]1[C(	0			
Clc1cc(Cl)c(c(Cl)c1)N(=O)=O				0
Nc1ccc(F)cc1			1	
CCOC(=O)CCCCC\C=C/C\C=C/C\C=C/C			1	
CCC(C)(C)OC			0	0
CCOC(=O)c1c(CCC)c(C=C		1		
CC[C@H](NC	0	0		
CCCC#N			0	0
CC1(C)CC2C=C(C=O)C3(CC3(C)C2C1)C=O			1	
CS(=O)(=O)c:	0			0
OC(=O)c1cccc(Cl)c1			0	
NCC(=O)Nc1ccccc1			1	
Clc1ccc(NS(=O)(=O)c2cccc3ccnc23)cc1			0	
CCOC(=O)OC(C1CC2CCN1C	0		0	
OCC1OC(CC1O)N2C=C(C(=O)NC2=O)C(F			1	
ClC1=C(Cl)C(=O)c2ccccc2C1=O			1	1
CC\C=C\C\C=C\C\C=C\C\CCCCCCC(=O)O			0	
c1ccc2c(c1)[nH]c3cnccc23			1	0
CC(=O)Nc1nc2c3ccnc3cc(C)c2n1C			1	
CC1OC(OC2C(O)C(O)C(CO)OC2OC34CCC			0	
C\C=C(/C)\C(=O)C				0
C[NH+](C)CCC(c1ccc(Cl)cc1)c2cccn2				0
Cc1ccccc1O			0	0
CCCC[C@H](CC)COC(=O)C(=C(c1ccccc			0	
CC[N+](CC)(C	0	0		
CC(O)CN(CC(=O)C)N=O			1	
O=C1CC2OCC	0	0		
CN(C)CC\C=C	0	0		
O=C1Nc2cc3ccccc3c4c5OCOc5cc1c24			1	
FC(F)(F)COC(	0	0		0

<chem>COc1ccc(C(=O)c2ccccc(O)c2)c(OC)c1</chem>			1
<chem>CC(C)(C)c1ccc1</chem>	1	0	
<chem>CC=O</chem>		0	1
<chem>CC(C)CC(N(C)</chem>	0	0	0
<chem>C(C1COc2ccc</chem>	0	0	0
<chem>CC(C)COS(=O)(=O)c1ccc(C)cc1</chem>		0	
<chem>[O-][S+](=O)(c1ccc(NC(=O</chem>		0	
<chem>OCc1c2ccccc2cc3ccccc13</chem>		1	1
<chem>CC(C)C1CCC(O)CC1</chem>			0
<chem>O=C1CCc2c1ccc3c2ccc4ccccc34</chem>		1	
<chem>CC(C)COP(=S)(OCC(C)C)SCCl</chem>		0	
<chem>Oc1c(Cl)cc(Cl)cc1Cl</chem>		0	1
<chem>C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCc4cc(O)ccc34)[C@@H</chem>			0
<chem>BrC1ccc(Oc2ccc(Br)cc2)cc1</chem>			1
<chem>COc1cccc(OC)c1</chem>			0
<chem>CC(C)COC(=O)c1ccc(O)cc1</chem>			1
<chem>COC(=O)C(CSCCBr)NC(=O)C</chem>		1	
<chem>OCC(CO)NC1CC(O)(CO)C(O)C(O)C1O</chem>		0	
<chem>CCOc1ccc2nc(N)sc2c1</chem>		1	
<chem>CCC(C)N1N=CN(C1=O)c2ccc(cc2)N3CCN(CC3)c4ccc(O</chem>			0
<chem>BrC1ccc(\C=C\C(=O)c2ccccc2)cc1</chem>		0	
<chem>Cc1c(\C=N\OCc2ccc(Cl)cc2Cl)c3cc(ccc3r</chem>		0	
<chem>CCC(C)OS(=O)(=O)C</chem>		1	
<chem>ONc1ccccc1c2ccccc2</chem>		1	
<chem>CO[C@H]1[C</chem>	0	1	
<chem>CCOC(=O)NNc1ccc(nn1)N(CC)CC(C)O</chem>			0
<chem>CCOC(=O)N(CCCC(=O)c1cccn1)N=O</chem>		1	
<chem>O[C@H](C#N)c1ccccc1</chem>		0	
<chem>OS(=O)(=O)c1ccc2cc(Oc3ccc4cc(ccc4c3)</chem>		0	
<chem>NCCCC[C@H](N[C@@H](CCc1ccccc1)C(</chem>		0	0
<chem>CC(=O)OCC1=</chem>	0	0	
<chem>COc1ccc(OC)c(CC(C)N)c1</chem>			0
<chem>CC(O)C(=O)[O-]</chem>			0
<chem>COc1cc2C[C@@](C)(O)[C@H](C)Cc3cc4OCOc4c(OC)c</chem>			0
<chem>O=C(Oc1cccc</chem>	0	0	
<chem>Cc1ccc2ccc(cc2c1)[N+](=O)[O-]</chem>		1	
<chem>O=C1C(=O)c2ccccc2c3ccccc13</chem>		0	
<chem>Fc1ccc2ccc3cccn3c2c1</chem>		1	
<chem>CC(C)COC(=O)c1ccccc1C(=O)OCC(C)C</chem>		0	0
<chem>C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CC=C4C[C@</chem>		1	
<chem>N[C@@H](C(=O)O)c1ccc(</chem>		0	
<chem>CCC(C)(C)CC</chem>			0
<chem>O=C(OCC1ccc(cc1)N(=O)=O)c2ccccc2</chem>		1	

C[C@H](NC(C)(C)C(=O)c	0				
CN1C(=O)\C(	0	0			
OC(CC(=O)OCCBr)(CC(=O)OCCBr)C(=O)C			1		
OCC=N(=O)O			1		
COc1ccc(CC(I	0	0			
ClCCOC\C(=C/Cl)\Cl			1		
COC(=O)CCC(C)C1CCC2C3[		0			
ON=C			0		
CCOC(=O)CCCCCCCC(=O)OCC				0	
CC1=CCC2CC:	0	0	0	0	
CC(C)C(=O)Nc1ccc(c(c1)C(F)(F)F)N(=O)=O				1	1
OCc1ccc(Br)cc1			0		
ClC1=CC(=O)C(Cl)(Cl)C1=O			1		
[O-][N+](=O)c1oc\C=C/c2csc(NC=O)n2			1		
C1Nc2cc[n+](Cc3cccc(C[n+		0			
CN(C)CCOC(=	0	1		0	
CN(C)CCc1c[nH]c2cccc12				0	
Oc1ccc(Sc2ccc(O)cc2)cc1				1	
C[C@@H](O)[C@@H](N)[C@H](O)[C@	0				
Nc1ccc(Oc2ccc(N)cc2)cc1			1	0	
c1ccc2c(c1)ccc3c4ccncc4ccc23			1		
CC(=O)Nc1ccc(Nc2ccc(cc2)[N+](=O)[O-]			1		
Nc1ccc(cc1)c2ccc(N)c(c2)N(=O)=O			1		
CC[C@]1(O)C(	0	1			
[O-][N+](=O)c1cccc\C=N\c2snc3cccc2			1		
COc1ccc2C(C		1			
CC(C)CCCC(C)C\C=C\C(=C(=O)OCC#C)\C				0	
CC\C=C(/C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C(=				0	
COc1cc\C=C\C(=O)O[C@H]2CC[C@]34C[C@]35CC[C@				0	
NC(=O)c1ncn([C@@H]2O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@				0	
[O-][N+](=O)c1cccc2cn[n-		0			
Cc1cncc(C)n1			1		
Oc1ccc2Oc3cc(O)cc(O)c3C(=O)c2c1			1		
NC(=O)C1CCCN1C(=O)C(Cc2c[nH]cn2)N(			0		
CCCN1CCC[C@	0	0			
NC(COC(=O)C(	0	0	1		
CCOC(=O)C=Cc1oc(cc1)N(=O)=O			1		
NC1(CCCCC1)	0	0			
CC(=O)CC(=O)OCCOC(=O)C(=C)C				0	
CCC1=CN([C@H]2C[C@H](O)[C@@H](CO)O2)C(=O)N				0	
C[C@H]1[C@@H]2CC[C@@]3(C)C=CC(=O)C(=C3[C@				0	
COC(=O)C1=C(	0	0			
Clc1nncc2ncccc12			0		

Clc1ccc2[nH]c(nc2c1)c3ccc	0			
Nc1ccnc2ccccc12			0	
CCN1CCN(C(=O)N[C@@H](C(=O)N[C@H]2[C@H]3SC				0
CC(N)Cc1c[nl	1	1		
NC(=O)c1cnc	0	0	0	0
CN(C)C(=S)S!	0	0	1	1
CC1CCC(=O)O1				0
ClCC(=O)Nc1snc2cc(Cl)ccc12			1	
CCC(=O)C(=O)CC			1	0
CCC1(CC(=O)O)OCCc2c1n(C)c3ccccc23			0	
CN(C)S(=O)(=	0			
CCCCCOC(=	0	0		0
CC(=O)OC(C)(C)C1CCC(=CC1)C				0
CCOCCc1c(nc(N)n2ncnc12)c3ccccc3			0	
CC(C)(C)c1ccc(O)c(c1)C(C)(C)C				1
ClCc1cccc(C=C)c1				0
CCCCCCCCCCCCCCCC1CO1			0	0
Nc1nc(cs1)\c	0	0		
ONS(=O)(=O)c1cccc2cccnc12			0	
CC(=O)O			0	0
ONc1cc2ccccc2[nH]1			1	
c1cnc2cnncc2c1			0	
C[C@H]1C[C@H](OC(=O)C)O[C@H](C)C			1	
OCC=O			0	
NC(=O)CC[C@@H]1NC(=O)[C@H](Cc2ccccc2)NC(=O)				0
CN(C)C(=N)N	0	0		
OCCc1ccc(cc1)N(=O)=O			1	
COc1cccc2C(	0	0		
CC(C)C(O)(c1ccc(OC(F)(F)F)cc1)c2cncnc2				0
CN(C)CCOCCO				0
COC(=O)C12CC1(C=O)C(=CC3CC(C)(C)CC			1	
CO\N=C\C(=	0	0		
OC(C1CCNCC1)(c2ccccc2)c			0	0
[O-][N+](=O)c1cc2NC(=O)		0		
CN(N=O)C(=N)NN(O)O			1	
[O-][N+](=O)c1ccc2[nH]cnc2c1			1	
BrCc1ccc2cccc3c4ccccc4c1c23			1	
Oc1ccc2c(c1)c3cc4ccccc4c5cc6ccccc6c2			1	
[S-]c1nc2ccccc2s1				1
CCCC1(O)CCC2C3CCC4CC(=O)CC(C)C4(C)			0	
OC(=O)CCCC	0	0		0
CN1CCc2cccc	1	0		
O=NN1CCSC1			1	

OS(=O)(=O)Oc1cccc2c3ccc4cccc5ccc(cc:	0		
CN1CCc2c(C1	1	0	
COC12OOC1(C)Oc3cccc23			1
CC(=O)ON(OCc1ccc(Cl)cc1)C(=O)c2cccc			1
[O-][N+](=O)c1cccc2c1ncc3cnc4cccc4c			1
ON(C=O)c1cccc(Cl)c1			0
[O-]C(=O)CN	0	0	0
CCCCCCCCCCCC1CO1			0
N[C@H](CO)C(=O)O		0	0
Nc1c([nH]c2cccc12)C(=O)N\N=C\c3ccc			0
O=C1NC(=O)C(=N#N)C=N1			1
[O-][n+]1cccc1[S-]			1
CCC(NC(C)C)(	0	0	0
NC(=O)c1sc2c(cc(cc2[n+]1		0	
CCCCCN(N=O)C(=N)N[N+](=O)[O-]			1
C[C@@H]1CC[C@H](CC1)C(C)(C)OO			1
ClSC(Cl)(Cl)Cl			1
CCCC(C)C(=O)OCC			0
Cc1cnc(C)cn1			0
C[N+]1([O-])	0	0	
Cc1cc(C)cc(O	0	0	0
Cc1ccc(cc1)c2nc3SCCn3c2[N+](=O)[O-]			1
COc1ccc2ncc	1	0	
CC(C)(C)OC(=NN=Cc1cn(=O)c2cccc2n1:			1
CC1(OC(=O)N(C1=O)c2cc(Cl)cc(Cl)c2)C=C			0
CC(C)(C)OOC(C)(C)c1cccc(c1)C(C)(C)OO(			0
Nc1ccc(cc1)c2ccc(N)cc2[N+](=O)[O-]			1
O\N=C\c1cccc[n+]1CCOCC#C			0
OC(=O)\C(=C(/Br)\C=O)\Br			1
CCOc1ccc2cccc2c1C(=O)N[C@H]3[C@H]4SC(C)(C)[C			0
[S-]C(=S)NCCNC(=S)[S-]			0
OC(=O)c1cccc1O			0
CCOC(=O)\C=C(/C)\C=CC[C@@H](C)CCCC(C)C			0
CC(C)CN(N=O)C(=N)NN(O)O			1
Cc1cc(O)c2C(=O)c3c(O)cc(O)cc3C(=O)c2			1
CSCCC=O			0
CC(C)C(NC(=O)C)C(=O)N(CC(=O)O)N=O			1
COC(=O)C1=C(C)NC(=C(C1c2cccc(Cl)c2C			0
C[N+](C)(C)C	0	0	
CC1(C)CCCC2(C)C1CC=C(C=O)C2C=O			0
OC(=O)CCC(=O)Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1			0
Cc1cccc1N2	0	0	
Oc1c(Br)c(Br)c(Br)c(Br)c1Br			0
			1



CC(C)Cc1ccc(	0	0	0	0
CN(C)c1ccc(cc1)C2CC3(C)C(CCC3(O)CCC(			0	
CC(C)c1ccc(C=O)cc1				0
[O-][N+](=O)C(Cl)(Cl)Cl			1	
Cc1cccn2c1nc3c(C)c(N)cnc23			1	
O=C1c2ccccc2c3cc(ccc13)N(=O)=O			1	
Fc1ccc(cc1)C	1	1		0
CC(=O)C1=C(O)C2C3C(Cc4ccccc5[nH]cc3c			1	
COc1ccc(cc1)n2nc(cc2c3ccc(cc3)S(=O)C)C(F)F				0
[O-]S(=O)(=O)C=C				0
CN(C)[C@H]:	0	0		
Nc1cccc2ncc(F)cc12			1	
Nc1ccc2ccc3cccc4ccc1c2c34			1	
NC(CSc1ccc(cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[			1	
c1ccc(cc1)P(c2ccccc2)c3ccccc3			0	
CC1OC(OCC2	0	0		
OC(=O)c1ccc	0	0		0
COc1cc(ccc1(	0	0		0
Clc1ccc2nn[nH]c2c1				0
Nc1nc2C3CCCN3CCc2s1			0	
CC[C@]12CC(=C)[C@H]3[C		0		1
CC(C)(COP(=	0	0		0
OC(=O)CCC(=O)OCCOC(=O)C=C				0
Cc1ccc(O)c(c	0	0		
CCN=[N+](C)[O-]			0	
OC1C=Cc2c(C1O)c3ccc4ccccc4c3cc2N(=			1	
O=C1OC(=O)C2C3CC(C=C3)C12				0
CCCCC[n+]1cccc1				0
Cc1c(cc2c(c1N(=O)=O)C(C)(C)CC2(C)C)N			0	
CCCCCCCCS				0
OC1=C(CC2=C(O)c3ccccc3(		0		1
CC(=O)Oc1cc	0	0		1
O[N+](=C=Cc1occc1)[O-]			0	
[O-][N+](=O)c1ccc2c(cc3cccc(c3c2c1)[N			1	
Oc1ccc(cc1N(=O)=O)c2cccc(c2)N(=O)=C			1	
[O-][N+](=O)c1ccc(s1)c2csc(NC=O)n2			1	
[O-][N+](=Nc1ccc2c(Cc3ccccc23)c1)c4cc			0	
ClC(=C1OC(=O)C=C1)Cl			1	
CC(C)(C)CC(C)(C)c1ccc(O)c		1		1
C[C@]12CC[C	0			
C[C@@H]1C	0	0		
CC(C)(C)OC(=O)c1ccc(O)cc1				1
COc1cc(N[S+](=O)([O-])c2		0		

<chem>C[C@@H](O)CN(C[C@@H](C)O)C[C@@</chem>	0		
<chem>Nc1c2ncn(Cc3cccc3)c2nc[n+]1[O-]</chem>	1		
<chem>CC1C(CCC(C)(</chem>	0	0	
<chem>CC1=CN([C@@H]2C[C@H](N=[N+]=[N-</chem>	1		
<chem>[O-][N+](=O)c1ccc2ccc3cccc4[C@H]5O[</chem>	1		
<chem>CN(C)c1ccc2c</chem>	1	1	
<chem>Cc1ccc(cc1)c2cc(nn2c3ccc(</chem>	0		
<chem>CC(=C[C@H]1[C@H](C(=O)O[C@@H]2C</chem>	1		
<chem>CCCC(=O)OCCC(C)CCC=C(C)C</chem>			0
<chem>OC1OCCOC1O</chem>			0
<chem>C\C=C\C1=CC(=O)C23CC2C(C)(C)OC3(O)</chem>	1		
<chem>Oc1c(l)cc(l)c2cccnc12</chem>	0		0
<chem>CC1(C)Cc2cccc(N)c2O1</chem>			0
<chem>Cc1ccc(Nc2ccc(cc2)N(=O)=O)cc1</chem>	1		
<chem>C[n+]1c2cccc2cc3cccc13</chem>	1		
<chem>CCC1=C(C(=O)OC)C(=O)OC1C</chem>	1		
<chem>CC(C)C(C)\C=C\C(C)C1CCCz</chem>	1		
<chem>CCCCCOc1c</chem>	1	0	
<chem>Nc1cccc(c1)S(=O)(=O)O</chem>	0		
<chem>COc1ccc2c(c1)C(=O)N(CCc</chem>	0		
<chem>CC1OC(CC(N)</chem>	0		1
<chem>Cc1nc(cs1)c2oc(cc2)[N+](=O)[O-]</chem>	1		
<chem>COc1cc(NCC(</chem>	0	0	
<chem>[O-][N+](=O)c1cc(cc(c1)[N+](=O)[O-])C</chem>	1		
<chem>CC(=O)c1ccncc1</chem>	0		
<chem>OCC1CCC(O1)N2C=CC(=N)NC2=O</chem>	1		
<chem>C1CN(CCN1)c2cccc2</chem>	0		
<chem>COc1cccc(c1)</chem>	0	0	0
<chem>O[C@H]1C=C[C@H]2[C@@H]3Cc4ccc(O)c5O[C@@H</chem>			0
<chem>[O-][N+](=O)c1cc2Oc3cc(Cl)c(Cl)cc3Oc2</chem>	1		
<chem>CS(=O)(=O)OC[C@@H](O)[C@H](O)CO:</chem>	1		
<chem>CCCC(C)(COC(=O)N)COC(=</chem>	0		0
<chem>OCCS</chem>	0		
<chem>Cc1cc(ccc1N=Nc2cc(c3cccc3c2N)S(=O)</chem>	0		
<chem>CCOC(=O)N(C)N=O</chem>	1		0
<chem>CNC(C)Cc1cccc1OC</chem>			0
<chem>CN(C)CCCCSC(=N)N</chem>	0		
<chem>CCOP(=S)(OCC)Oc1nc(Cl)n(n1)C(C)C</chem>	1		0
<chem>CC(=O)CC(C1</chem>	0	0	
<chem>[O-][N+](=O)</chem>	0	0	1
<chem>Cc1cc(cc(C)c1N)c2cc(C)c(N)c(C)c2</chem>	0		
<chem>CC(=O)c1cccc2c1OC3(C)OOC23C</chem>	1		
<chem>[O-][N+](=O)c1c(Cl)c(Cl)c(Cl)c(Cl)c1Cl</chem>	0		

Clc1ccc(C=O)c(Cl)c1	0	0
O=C1c2ccccc2c3c1ccc4ccccc34	1	
COc1ccccc1N2CCN(CCN3C	1	
CCCSc1ccc2[r	0	
CN1CC[C@@]23[C@H]4CC[C@H](O)[C@@H]2Oc5c((		0
C(Oc1ccc(cc1)c2ccccc2)C3CO3	1	
CC(C)[C@H](C(=O)OC(C#N)c1cccc(Oc2ccccc2)c1)c3cc		1
Nc1cnc2ccc3ccccc3c2c1	1	
c1cc2ccc3ccc4ccc5ccccc6c(c1)c2c3c4c56	1	0
Cc1ccc2ccc3ccccc3c2c1C	0	
ClCC(=O)CCl	1	
OC(=O)c1ccc	0	0
CCCCCCCCC1CO1	0	0
CCCC[C@H]1	0	0
C[C@@H](Cc	1	0
OC1C(Oc2cccc3c4ccc5ccccc6ccc(cc23)c4c	0	
[O-][N+](=O)	0	0
COc1cc(CNC(=O)CCCC\C=C	0	
COc1ccc(cc1l	0	
CCOC(=O)Cn1cccc1c2nc(c3ccc(OC)cc3)c(s2)c4ccc(OC)		0
Oc1cc2cc3ccccc3c4ccc5ccccc1c5c24	1	
Oc1ccc(CCNCC2CCc3ccccc2	0	
Cc1cccc(OCC(O)CNC(C)(C)C)c1C	0	
Nc1cccc(c1)C(F)(F)F	0	0
CCOC(=O)OC(C)OC(=O)[C@@H]1N2[C@H](SC1(C)C)[		0
Cc1ccc(cc1)C(=O)[C@@H]	0	
C[C@@H]1C(=O)O[C@H]2	0	
ClC(Cl)(Cl)C(Cl)(Cl)Cl	0	0
C\C(=N/Cc1ccccc1)\c2ccccc2O		0
CC1OC(C)OC(	0	0
Oc1cc(C=C(C	0	0
CC(N)CCCC(C	0	0
C[C@H](CSC(	0	0
CCCCOC(=O)CCCC(=O)OCCCC		0
OC(=O)C=Cc1oc(cc1)N(=O)=O	1	
Cn1c(NS(=O)(=O)O)nc2c3nc(CO)cnc3ccc	0	
O[C@@H]1[r	0	0
Oc1ccc(cc1)C(=O)c2ccc(O)cc2O		1
CC(C)OCCO		0
OC[C@H]1O[C@H]([C@H](O)[C@@H](r	1	
Oc1cccc2cccr	0	0
Nc1cccc(N)c1	1	1
CCOC(=O)\C=C\C(=O)OCC		0

CCN[C@@H]1C[C@H](C)!	0		
OC(=O)C1=NN(C(=O)[C@H]1N=Nc2ccc(	0		
CN(C)CCOc1c	1	1	
CCCCCCC\C=C/CCCCCCC(=O)NCc1ccc(O)c(OC)c1			1
CN(CCCC(=O)c1cccnc1)N=O	1		
COC(=O)[C@H]1[C@@H](C[C@@H]2CC[C@H]1N2C)			0
O=Nc1ccccc1c2ccccc2	1		
C[C@]12CCC(=O)C=C1C=C[C@@H]3[C@@H]2CC[C@			0
CC(C)CCC[C@@H](C)CCC[C@@H](C)CCC[C@]1(C)CCc			0
CC1(C)CCC(=Cc2ccc(Cl)cc2)C1(O)Cn3cncn3			0
CN1C[C@@H](CO)C=C2C1	0		
CCON=O	0	0	0
C[N+]1(C)CCOCC1	0		
CN1C(CSCC(F)(F)F)Nc2cc(Cl)c(cc2S1(=O	0		0
CN[C@H]1[C@@H](O)[C@H]2O[C@H](O[C@@H]3[C			0
CS(=N)(=O)CCC(N)C(=O)O	0		
COC(=O)c1ccccc1C			0
COc1ccc2C[C	1	1	
CIP(=O)(Cl)c1ccccc1			0
CC(O)[C@@H]1NC(=O)[C@H](CCCCN)NC(=O)[C@H](			0
CCCC(C(=O)C	1	1	
CCC(=O)OC(C)c1ccccc1			0
CC[C@]1(O)C[C@H]2CN(C	1		
OC(=O)c1ccc(cc1)C(=O)O			0
CCCSSCC=C	0		0
Nc1ccc(Cl)cc1[N+](=O)[O-]	1		
CCCCCCCCCCCCCCCCI			0
Clc1ccc2Nc3ccccc3C(=Nc2	1		
C[C@@H](C	0	0	
NC(Cc1onc(O)c1Cl)C(=O)O	0		
O\N=C\1/C2CC2(Oc3ccccc	0		
[O-][N+](=O)c1cc(c2c3CCCCc3c4ccccc5cc	1		
CCN1\C=C/C	1	1	
CC(=O)OCC(=	0	0	0
Cc1ccc2nc3c4ccccc4C(O)C(O)c3c(C)c2c1	0		
CSc1nc(N)c2ncn([C@@H]:	0		
Oc1cc2C(=O)c3ccccc3C(=O)c2c(O)c1O	1		
Cc1nnc2CN=(	0	0	0
C[C@@H]1C	0		0
CC(C)C1CC=C(C)C=C1			0
CCC(C)CCCC	0	0	0
COc1cc2OC3OC=CC3(O)c2c4oc(O)c5c(O	1		
Clc1cc2ccccc2c3ccccc13	1		

N[C@@H](C	0		
[O-][N+](=O)c1ccc2c(c1)C(=O)c3cc(cc(c	1		
[O-][N+](=O)c1c(Cl)c(Cl)c2Oc3c(Cl)c(Cl)	1		
CCCCS(=N)(=	0		
CC1(C)OC2CC	0	0	
CCCCC(=O)O			0
Fc1ccc(cc1)C	0	0	0
OCC#CCO			0
CC(C)Cc1cccc1			0
CN(C)C(=O)Oc1cc(OC(=O)N(C)C)cc(c1)C(O)CNC(C)(C)(			0
CCN(CC)C1CCCC1			0
O=Cc1ccc(cc1N(=O)=O)N(=O)=O	1		
CC1(C)O[C@@H]2CO[C@@]3(COS(=O)(=O)N)OC(C)(			0
COc1nncc2ncccc12	0		
CC(C)NCC(O)COc1cccc2CC=Cc12	0		
O=N(=O)c1cc2CCc3cc(cc4CCc(c1)c2c34)	1		
O=N(=O)c1cc2c3cccc3ccc2c4cccc14	1		
CC1(C)C(=O)NC(=O)NC1=O			0
CCOC[C@H]1CO1	1		
Clc1ccc(cc1Cl)N=C=O			1
CCCCNS(=O)(=O)c1ccc(C)cc1			0
O1C2C3OC3c4ncccc4C12	0		
ClCC1=C(Br)C(=O)OC1	1		
Clc1ccc2cccc2c1	0		0
OC(=O)Cc1cs	0	0	0
COc1ccc(CN(	0	0	0
OC(CN1CCC(	1	1	
NC[C@H]1O[C@H](O[C@@H]2[C@@H](N)C[C@@H			0
Oc1ccc2ccc3ccc(c4ccc1c2c34)N(=O)=O	1		
NC(=O)c1cc(cc(c1)N(=O)=O)N(=O)=O			0
CC(=O)Nc1ccc(cc1)c2nc3c	0		
CC(C)(C)N(CCO)CCO	0		0
CCCCCCCCCCCCC#N			0
COC(=O)C(C)CN=N#N	1		
BrCc1cccc(c1)N(=O)=O	0		
Cc1c(cccc1N(=O)=O)C(=O)O			0
CC(=O)O[C@	0	0	
CC(C)C[C@@H]1NC(=O)[C@H](CCCN)NC(=O)[C@@H			1
CC(C)OC(=O)	0	0	
NC[C@H]1O[C@H](O[C@@H]2[C@@H](N)C[C@@H			0
CCCCCCCCC	0	0	0
Cn1ccc2ccc3ccc4ccc(O)cc4c3c12	1		
C[C@@H](Br)CBr	1		

CC(=O)C(Cl)Cl	1	0	
CCCCCCCCCCCC=C	0	0	
CC(=O)[C@H	0	0	0
Cc1onc(c2ccccc2Cl)c1C(=O)N[C@H]3[C@H]4SC(C)(C)			0
NCCNCCN	0		0
CC(C)c1ccc2c(CC[C@@H]3	1		
CICCNP1(=O)OCCCN1CCCl	1		0
COc1ccc(C=NN2N=Nc3c([nH]c4ccccc34)	1		
Oc1ccc2C[C@H]3N(CC=C)(	0		0
CCCCSCCCCC			0
OC1C=Cc2c(ccc3cc4ccccc4cc23)C1O	1		
C[C@]1(O)CC[C@@H]2[C@@H]3CC[C@	0		
CN1CC[C@@H]2CN3CCc4c	0		
CN=NO	1		
OCCCl	1		0
Nc1cc(C(=C(	0		0
CC1C(C)(C)c2cc(C)c(cc2C1(C)C)C(=O)C	0		
O=C1C=C(Nc2ccccc2)C(=O)c3ccccc13	1		
Cc1cnc2ccccc2n1	0		
CCNCC#CC(C)(C)OC(=O)C(O)(C1CCCCC1)	0		
COc1ccccc1C	0		0
CCC(=O)O[C(	0	0	
C[C@H]1CC2	0	0	
OCC1OC(C(O)C1O)N(N=O)c2ccc(cc2)N(:	1		
COP(=O)(O)OC	0		0
CCN(CCCl)CCCNc1c2ccccc2nc3c1ccc4ccc	1		
CCCC(=O)Nc1ccc(OCC(O)CNC(C)C)c(c1)C	0		0
OC(C(COC(=O)CCC(=O)O)N=C(O)C(Cl)Cl)	0		
CCN(CC)CCO(	0	0	0
Nc1c2ncnc2[nH]cn1=O	1		
CC(=O)Nc1cccc(N=[N+])([O-])c2cccc(NC	0		
CCCN(CC)c1c(cc(cc1N(=O)=O)C(F)(F)F)N(=O)=O			1
Cc1ccc2c(c1)nc(N)n2C	1		
CC(C)CC(CN)(	0	0	
[O-]C(=O)c1c	0	0	0
CCCCCOC(=O)C(C)C			0
CCCC(=O)Nc1snc2ccc(C)cc12	0		
CCOP(=O)(OCC)Oc1ccc(cc1)N(=O)=O	1		0
CN(C)CCc1c[nH]c2ccc(C[C@H]3COC(=O)N3)cc12			0
OC1C=Cc2c(ccc3c4ccccc4c(cc23)N(=O)=	1		
COC(=O)N\N	0	0	0
[O-][N+](=O)c1ccc(S)cc1	1		
Oc1ccc2ccc3cccc4ccc1c2c34			1

Oc1c(l)cc(l)c	0	0	1		
OC(=O)c1cccc1C(=O)OCc2cccc2			0		
CCN1CCCC1CNC(=O)c2cc(c(N)cc2OC)S(=O)(=O)CC			0		
CC1CCOS(=O)(=O)O1			1		
ClC1=C(Cl)C(=O)NC1=O			1		
ClC[C@H](Br)CBr			1		
N[C@@H](Cc1ccc(O)c(c1)[N+](=O)[O-])			0		
COC(=O)C=Cc1oc(cc1)N(=O)=O			1		
Nc1snc2c(Cl)cc(Cl)cc12			1		
CC(=O)Oc1c(OC(=O)C)c2c(ccc3c4cccc4			1		
CC(C)(C)NCC	0	0		0	0
OCc1ccc(O)cc1			0		
BrC[C@@H](Br)COC(=O)C=C			1		
OC[C@H]1O	0	0		0	
FC(F)(F)COC=C			1		
N=NC1=NNC=C2C=CC=CC12			1		
OC(=O)C1CC	1	0			
CCNC(=O)Nc1ccc(OCC(O)CNC(C)(C)C)c			0		
CC(C)c1ccc(C)c2c(cc(C)c2c1)S(=O)(=O)C			0		
CC(O)CCCN:	0	0		0	
CCCCCCCCOC	0	0	0	0	
OC(=O)CCN(=O)=O				0	
CCC1(Cc2cccc	0	0		0	
CC(=C)C1CO1			0		
NCCCNCCCN			0		
OC[C@H]1O	0				
CNS(=O)(=O)c1ccc(NC(=O)C)cc1			0		
CCCCOC(=O)C(C)O				0	
Fc1cccc(F)n1			0		
OC(=O)c1cccc(c1)C(F)(F)F				0	
COC(=C1[C@@H](C(=C(COC(=O)N)N=C1			0		
BrC1ccc(cc1)l	0	0		0	
COC(=O)c1cccc(Cl)c1				0	
Oc1ccc(C(=O)c2ccc(O)c(O)c2)c(O)c1				1	
CO[C@H]1[C@@H](C[C@@H]2CN3CCc4c([nH]c5cc(C				0	
NC(=S)\C(=C\c1ccc(O)c(O)		0			
COc1cc\C=C\C(=O)O)ccc1O			0		
COc1cc(N[C@	0	0			
CN(N=O)C(=O)N[C@H]1[C@@H](O)O[C@H](CO)[C@				0	
CC(=O)O[C@H]1C[C@@H]		0			
CN(C)CCCNc1c2cccc2nc3c(F)ccc(c13)[N			1		
COC(=O)c1cccc1C(=O)O				0	
CC1(C)CC2=C(C1)C(C=O)C3(CC3(C)C2O)C			1		

Fc1cc2cccnc2c3ccccc13	1	
Oc1oc(cc1)C(=O)O		0
COC(=O)CCC1=C(C)C2=NC1=CC3=NC(=CC4=NC(=CC5=		1
OCC(O)C(O)C(O)C(O)C=O	0	
CO[C@H]1C[C@H](O[C@H]2[C@H](C)[C@@H](O[C@H]3		0
c1ccc2c(c1)ncc3cnc4ccccc4c23	0	
c1ccc2c(c1)ccc3[nH]c4ccc5ccccc5c4c23	1	
Brc1c(NC2=N	0	0
CN1C(=S)CN=	0	0
C\C=C/C(=C/C1=CCOC1=O)/C)\C=C\C=C	1	
[O-]C(=O)c1ccccc1		0
CC(=CCC\C(=C\COc1c2OC(	0	
CC(C)(C)C1CCC(=O)CC1		0
[O-]C(=O)Cc1	0	0
CO[C@H]1C[C@@H]2CN3CCc4c([nH]c5cc(OC)ccc45)[		0
Cc1ccc2ccc3c4ccccc4cc5ccc1c2c35	1	
CC12NC(Cc3ccccc13)c4ccc	0	
CN1[C@@H]2CC[C@@H]1	0	
[O-][N+](=O)c1ccc2c(Cc3cc(ccc23))[N+](	1	
CC(=O)N1CC[N+](C)(C)CC1	0	
CCc1ccc(\C=C/2\SC(=S)NC	0	
CC1=CC(=O)c2ccccc2C1=O	0	1
S=C=Nc1cccc2ccccc12		1
COc1cccc([C@H](O)C2CCN(CCc3ccc(F)cc3)CC2)c1OC		0
C1CCC#N		0
[O-][N+](=O)c1oc(cc1)c2csc(NC=O)n2	1	
N=C1Sc2cccc	0	
ClC(=C1OC(=O)C(=C1Cl)Cl)Cl	1	
C[C@@H](N)[C@@H](O)c1ccccc1	0	0
CC(=O)ON(OCc1ccc(cc1)c2ccccc2)C(=O)	1	
CC1C2C(=Nc3ccc(C)cc23)N(C)c4ccc(C)cc	1	
CNC(C)CC1CCCCC1		0
CC1OC=C2C(=C(C(=O)O)C(=O)C(=C2C1C)	0	
Oc1ccccc1C#N		0
NC(=N)N1CC	0	0
CCCN(CCCC)CCCOc(=O)c1	0	0
Nc1c([S+])([O-])C(F)(F)F)c1	0	
C1CCN(CCCl)CCCl	0	0
OC1C=Cc2cc3cc(ccc3cc2C1O)[N+](=O)[C	1	
OCC(O)C(O)C(O)C1SCCN1N=O	0	
Oc1ccc(c2ccccc2)N(=O)=O		1
[O-][N+](=O)c1cccc(c1)C(=	0	
COc1ccc(N(CCCl)CCCl)c2oc(cc12)N(=O)=	1	





Nc1cc(O)nc(I	0	0			
CN(C)CCNC(=O)c1cccc2c3ccccc3cnc12			1		
[O-][N+](=O)c1ccc2c(Cc3cc4c(Cc5ccc			1		
CN1CC(=O)N	0	0			
CCC(=O)C1c2cccc(O)c2C(=O)c3c(O)cccc:			1		
Nc1ccc2snc(Cl)c2c1			1		
COc1cc(cc(OC)c1O)C(=O)C			0		
CC(\C=C(\C#N)/c1ccc(Br)cc1)C(C(C#N)c:			0		
CCC(=O)O[C@	0	0			
CC(=O)Nc1nc(cs1)c2oc(cc2)[N+](=O)[O-			1		
Cc1cccc(c1C)[N+](=O)[O-]			1		
CCN(CC)C(=O	0	0	0	0	
O=C1CCc2cc(	0	0		0	
CC(C=C)C#N			0		
CC(C)C[C@H](NC(=O)N1CC		0			
Cc1ccc(cc1N(CCCl)CCl)C(O)(P(=O)(O)O			1		
CCN1C[C@]2(COC)[C@H](		0			
CC(C)(Cl)N(=O)=O			1		
CCCCCCCCc1ccc(cc1)c2ccc(		0			
C[C@H](N)C	0	0		0	0
OC1C2(Cl)C3(Cl)C4(Cl)C(Cl)(Cl)C5(Cl)C(C			0		
CSCCC(NC(=O)COc1ccc(Cl)cc1Cl)C(=O)O			0		
NC(CC(=O)c1ccccc1N)C(=C		0	0		
NCCCCCN[S+](=O)([O-])c		0			
O=N(=O)c1cccc2c1oc3ccccc23			1		
COP(=S)(OC)Oc1ccc(N=O)c(C)c1			1		
CCN(CCCOC	1	0			
CCCN(CCC)C1CCc2cccc(O)c		0			
Cn1c(N=N#N)nc2ncc(cc12)c3ccccc3			1		
CCCCCCCCCCCC(=O)OC[C@@H](O)[C@H]1OC[C@H](C				0	
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC				0	
CC12CC1(C)C(=O)N(C2=O)c3cc(Cl)cc(Cl)c3				0	
COC(=O)C12OC1(C)C(C)OC2=O			1		
CN1C(C(=O)Nc2ncc(C)s2)C		0			
CN[C@H]1CC[C@@H](c2ccc(Cl)c(Cl)c2)c3ccc(cc13)S(			1		
O=C(OCc1ccccc1)C=Cc2ccccc2				0	
OC\C=C\1/O[C@@H]2CC(=O)N2[C@H]1C(=O)[O-]				0	
CCCCc1cc(O)c2[C@@H]3C=C(C)CC[C@H]3C(C)(C)Oc:				1	
CCN=[N+](O)CC			0		
C([C@@H]1CO1)c2ccc3OCOc3c2			1		
CCC(CN)CC(C)CCNCC(O)CNCC(C)CC(C)CN				0	
CNC(=O)Oc1ccc(N(C)C)c(C)c1				0	
[O-][N+](=O)	0	0			

COC(=O)CC(=O)C(C)(C)C			0
CCCCCCCCCCCCc1cccc1	0		0
C(Oc1cccc1)C2CO2	1		
CCCN1C(=O)N(CCC)c2nc([r	0		
[O-][N+](=O)c1c(Cl)cc2Oc3cc(Cl)c(Cl)cc	0		
CC(=O)ON(Oc1ccc(Oc2cccc2)cc1)C(=C	1		
Nc1ccc2c(c1)[nH]c3cccc23	1		
Oc1ccc(Oc2	0	0	1
CCOC(=O)c1cccc1N	0		0
COC(=O)c1cc(Oc2ccc(Cl)cc2Cl)ccc1[N+](	1		
COc1ccc2[C@H]3CC[C@]4	0		
Cn1cc(C(=O)[C@@H]2CCc3nc[nH]c3C2)c4cccc14			0
CCCN(CCC)C(	0	0	
CCCCc1ccc(nc1)C(=O)O			0
CC(C)CCCC(C)C1CCC2C3CC4OC45CC(O)C(	1		
CCCCCC#CC(=O)OC			0
CCCCCCc1cc(O)c2c(OC(C)(C)c3ccc(C)cc23)c1			1
CC(C)C[C@@H](C)N	0		
CC1C=C(C)CCC1C=O			0
COc1ccc2[nH]c(l)c(CCNC(=	0		
OOC1CCCc2cccc12	1		
OC(=O)CN(CCN(CC(=O)O)(	0		0
CCOC(=O)c1c	0	0	0
C[C@]12C=CC3=C4CCC(=O)C=C4CC[C@H]3[C@@H]1C			0
COC(=O)C(C1	0	0	0
CCCCCCCC	0		0
Oc1cc2cccc2cc1C(=O)Nc3cccc(c3)N(=O)=O			1
NS(=O)(=O)c	0		0
Cc1ccc(cc1)N(=O)=O			0
OP(=N)(O)N(CCCl)CCCl	1		
C1=Cc2c3cccc3cc4cc5cccc5c1c24	1		
COc1ccc2NC(	0	0	
OC[C@H](Br)CBr	1		
CN1[C@@H]2CC[C@H]1C(	0		
NC1=NC(=O)N(C=C1)[C@@H]2CC[C@H]	1		
C\C=C\C=C\C\CCCCCO	0		0
COCCc1ccc(C	0	0	
CCCC[C@@H](CC)COC(=O)c1cccc1C(=C	0		
C(Cc1ccncc1)Cc2ccncc2			0
OC=O	0		
CCCCCCCCC(	1	1	
C[C@@H]1C(	0	0	
[O-][N+](=O)c1cccc2c1oc3cccc23	1		

COC(=O)Nc1nc2cc(ccc2[nH]1)C(=O)c3cc	0	
CCOC(=O)C(Cl)Cc1cc(N2N=C(C)N(C(F)F)C2=O)c(F)cc1		0
C[C@@H](O)	0	0
[O-][N+](=O)c1oc(\C=C\C(=O)N\N=C\c2		1
Cc1ccc(C)c2c3cc(ccc3[nH]c12)[N+](=O)[		1
C[C@@H]1COc2c(N3CCN(C)CC3)c(F)c(C		1
CCC(=O)O		0
Oc1cc(O)c2C(=O)c3c(O)c4[C@@H]5C=C		1
COc1ccc(cc1)C(O)C=C		0
Nc1cccc2nc3cccc3c(N)c12		1
CCCCC1CO1		0
CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)C(N)c3cccc3)C(=O)I		0
NCCC(=O)O		0
CCOP(=S)(OCC)SCSCC		0
OC1C=Cc2c(ccc3nc4ccc5cccc5c4cc23)C		1
OC(=O)C(Cc1ccc(O)c(O)c1)		0
COP(=S)(NC(C)C)Oc1cccc1C(=O)OC(C)C		0
COC1=CC=C2	0	1
Cc1cc2CCN3C(=O)[C@H](NC(=O)c4ccncc4)N=C(c5ccc		0
CC(C)C(=O)OC1=C(C)OC=CC1=O		0
CC(CC(=O)Cl)CC(C)(C)C		0
Cn1c(COC(=C	0	0
OC(=O)c1ccc(cc1)C#N		0
O=C(O)[C@@	1	0
COc1cc2OC3OC=CC3c2c4oc(O)c5c(O)cc(		1
CC(C)(C)C(=O)C(=O)O		0
CSCC[C@H](NC(=O)[C@H](Cc1c[nH]c2cccc12)NC(=O		0
CNc1cccc1		0
OC(=O)Cl		1
CC=C(Cl)Cl		0
CO\N=C/1\C[C@]2(C[C@@H]3C[C@@H])(CC=C(C)C[C		1
CC(C)C[C@H](CN)CC(=O)O		0
Nc1nc2ccc(cc2s1)N(=O)=O		1
CN1CCc2cc(O)c(O)cc2C(Cl		0
[O-][N+](=O)c1ccc2cccc3CCc1c23		1
CN(C)CC[C@	1	0
CCCCCCCCC		0
CC(=O)c1ccc:	1	0
CC(=O)OC1(CCN(Cc2cccc2)CC1)c3cccc3		0
CCC[C@@]1(Cc2cccc2)CC(=C([C@H](CC)c3cccc(NS(		1
CC(C)c1cc(N)c(cc1N)[N+](=O)[O-]		1
CCN(Cc1cccc(c1)S(=O)(=O)O)c2ccc(cc2)		0
CNCC[C@@F		1

Cc1ccc(cc1)S	0	
CCO[C@@H]1O[C@H](C(COCc2ccccc2)OCc3ccccc3)[C		1
CC(=O)N1N=CC(=C(Cl)C1=O)Cl	0	
Fc1ccc(F)c2c1ccc3ncccc23	1	
c1ccc2c(c1)ccc3cc4ccc5ccccc5c4nc23	1	
CCN(CC)CCNc1ccc(COS(=O)(=O)C)c2Sc3	1	
CCOC(=O)CCC(=O)C		0
COC1OC(=O)C(=C1C(Cl)Cl)Cl	1	
CC(C)(Oc1ccc	0	0
COC(=O)c1cc2OCOc2c3c1ccc4c(OC)cccc	1	
CC1=CN([C@	0	0
CC(O)(P(=O)(O)O)P(=O)(O	0	0
N[C@@H](C(=O)O)c1ccc(	0	
NCCCCNS(=C	1	
CC(C)(C)c1ccc(OC2CCCCC2OS(=O)OCC#C)cc1		1
CCCC(S)(CCC)CCCC	0	
CC\C(=N/O)\C	1	
CCC(=O)OCC(=O)[C@@]1(OC(=O)CC)[C@@H](C)C[C@	1	
O[C@]1(COC(=O)c2cccnc2)O[C@H](COC(=O)c3cccnc:	0	
CN(C)S(=O)(=	1	
Clc1ccc(cc1)C(C(=O)C2C(=O)c3ccccc3C2=O)c4ccccc4		1
Nc1nc(Cl)nc2c1ncn2C3CC(	0	
CC(C)(C)CC(C)(C)c1ccc(Nc2ccc(cc2)C(C)(C)CC(C)(C)C)c		0
C\C(=C\C(=O	0	0
NCCCCCN[S+](=O)([O-])c	0	
COC(=O)c1ccc(C=NN2N=Nc3c([nH]c4ccc	1	
CC1=NNC(=O)N(C1)\N=C\c2cccnc2		0
Oc1cc(cc(c1C	0	0
COc1ccc2C[C	1	1
CNc1c(C)cc2ncccc2c1N		0
CN(C)S(=O)(=	1	
NC1=NC(=O)N(C=C1)[C@@H]2O[C@H]	0	
Cc1c(N)cccc1[N+](=O)[O-]	1	
Oc1cc(c2ccc3ccccc4ccc1c2c34)N(=O)=O	1	
C[C@H]1O[C	0	0
O=C(NC1CCCCC1)OC(C#C)(c2ccccc2)c3cc	1	
CCCCC(CC)CN	0	
COc1ccc(cc1	0	0
CCN(CC)C=C	0	0
OC(=O)CNCP(=O)(O)O		0
NC1=NC(=O)N(C=C1)[C@+	0	
CCCC[C@H](O)\C=C\C[C@	0	0
CC(C)NCC(O)	0	0

C[C@@H]1O[C@H](C[C@H](N)[C@H]1	1		
O=C(NNCNN	0	0	
OC[C@H]1OC(O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]1O		0	0
OCC1OC(CC1O)N2C=CC(=O)NC2=O	0		
[O-]S(=O)(=O)CNNC(=O)c1ccncc1		0	
CC1(CO1)c2ccc(cc2)C#N	1		
Nc1cccc(O)c1	1	0	
Nc1cc(cc(c1)N(=O)=O)N(=O)=O	1		
C[C@@H](N	0	0	
C1Cc2cc3cccc4ccc5cc6cccc1c6c2c5c34	1		
CC(C)[C@H](N)C(=O)OCCOCn1cnc2C(=O)NC(=Nc12)N		0	
CN(C)CCN(C)C	0	0	
Clc1cc2C(=O)c3cccc3C(=O)c2c4Nc5c(Cl)cc6C(=O)c7c		0	
CCCCCCCCC=C		0	
CC1Cc2ccc(C(=O)NC(Cc3cccc3)C(=O)O)	0		
c1ccc(cc1)c2csc(n2)c3nc4c	0		
c1ccc2c(c1)ccc3c4cccnc4ccc23	1		
C1OCc2cccc12	1		
NC(=N)SCCc1	0	0	
CC1CCCC(C)N1CCCC(O)(c2cccc2)c3cccc	0		
CO[C@H]1O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]1		0	
COc1ccc(cc1)c2nc(c3cccc3)c([nH]2)c4c	1		
CCNCCCNCCCCNCCCNCC	0		
NS(=O)(=O)c	0	0	
Nc1ccc(\C=C\c2cccc(c2)C#N)cc1	1		
C[S+](=O)([O-])c1ccc(cc1)	0		
Clc1ccc(NS(=O)(=O)c2cccc3cccnc23)cc1	0		
NS(=O)(=O)c	0		
NC[C@@H]1CC[C@@H](N)[C@@H](O[C@@H]2[C@		0	
CC1=C(SSC1=S)c2cncn2	0		
Oc1c(Br)cc(\C=N\Oc2ccc(cc2N(=O)=O)N(=O)=O)cc1E		1	
CC(O)(C(=O)Nc1ccc(cc1)[S	0		
CC(NNC(=O)c	0	0	1
CC1=CC(=O)CC(C)(C)C1=O			0
Cc1ccc2cc3c4cccc4C5NC5c3c6CCc1c26	1		
C(CC[C@H]1CO1)C[C@H]2CO2	1		
OC1OC(=O)C(=C1C(Br)Br)Br	1		
CNC(=O)Oc1ccc(cc1)c2cccc2	1		
C[C@@]12CCC[C@](C)([C@H]1CC[C@]:	0		
Cc1occc1	0	0	
OC1C(O)c2ccc(c3ccc4cccc1c4c23)[N+](=	1		
O=C(Nc1cccc2C(=O)c3c(ccc4c5cc(NC(=C	0		
CO\N=C/C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C(=			0

CCOC(=O)[C@H](CCc1ccccc1)N[C@H]2CCCN3CCC[C@H]1ccc2[nH]cnc2c1	0	0	0
OC(=O)c1ccc(C(=O)O)c(c1)C(=O)O			0
C[C@@H]1O[C@@H](OC[C@H]2O[C@@H](OC3=C(C)OC1=C(C2CCCc3ccccc23)C(=O)Oc4ccccc14			1
CCNc1cc2OC3=C\C(=N/CC)\C(=CC3=C(c4CCCC(=O)OCCC(C)C	0	0	0
CCCC(C)C1(C)C	0	0	
CN1C(C)(C)C	0	0	0
COP(=S)(OC)	0		0
O=N(=O)C1=Cc2cccc3cccc(O1)c23		1	
COc1ccc2CC3	0	0	
CC(Oc1cccc(Cl)c1)C(=O)O			0
CC(C)CC(=O)OCc1cocc2c(C=O)ccc12		1	
Cc1c2ccc3ccccc3c2cc4ccc(O)c(O)c14		1	
C[C@H](C(=O)O)c1cccc(c1)	0		
OCc1c[nH]c2ccccc12			1
Cc1ccc(cc1)C(=O)ON(OCc2ccccc2)C(=O)O		1	
OC1C(O)c2ccccc3c4cc5ccccc5cc4C6(OC1c2c3c4c5c6)C(=O)O		1	
Cc1cccc2c(cccc12)[N+](=O)[O-]		1	
[O-][N+](=O)\C=C\c1occcc1		0	
OC(=O)c1ccc(Cl)c(c1)N(=O)=O		1	
NC(=O)c1cc(Cl)ccc1	0	0	
CCCCCCCCCCCCI			0
CC(C)(C)c1ccc(OCC2CO2)cc1		1	0
OC(=O)Cc1cc(Cl)c(Oc2cc(Cl)c(O)c(Cl)c2)c(Cl)c1			1
OC[C@@H](NC(=O)C(Cl)Cl)[C@H](O)c1ccc(cc1)N(=O)O			0
Cc1cnc2ccc3c(ncn3C)c2n1		0	
O[C@@H]1O[C@@H]2[C@@H](O)C(=O)O[C@@H]2C1			0
OC(=O)c1ccccc1C2=C3C=C(Br)C(=O)C(=O)C23		1	
CC(C)C1[C@H](O)C(=O)O	0	0	
Clc1ccccc1C=C		0	
CCN(CC)CCO	0	1	
CCOC(=O)CC1(C)OCC(C)O1			0
Fc1cc(F)c2cccnc2c1		1	
OCc1c(O)cc2C(=O)c3ccccc3C(=O)c2c1O		1	
Cc1cc(Cc2cc(C)cc(c2O)C(C)(C)C)c(O)c(c1)O		0	1
[O-][N+](=O)c1ccc2ccc3c(c4ccccc4c5ccc(O)C(=O)Cc1cc		1	0
C1CC[C@@H]2CCCC[C@H]2C1		0	
O=Cc1c(ccccc1N(=O)=O)N(=O)=O		1	
ClCC(Cl)(Cl)Cl		0	0
CC(C)[C@H](O)C(=O)O	0	0	

OC1=C(C(=O)	0	0			
Cc1cccc(Br)c1			0		0
OC[C@]1(O)OC[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H]1O					0
NC(=O)c1ccncc1					0
N1[C@@H]2[C@H]1c3c(c4ccccc24)c5cc			1		
COC(=O)c1ccc(c2c(NCCCN(C)C)c3ccccc3			1		
O=Nc1ccc(Sc2ccccc2)cc1			1		
CC(=O)Nc1ccc(cc1)S(=O)(=O)Nc2cc(C)on2					0
C1CC2OC2C1OC3CCC4OC34			0		
COC(=O)C12OC1(C)C(C)(O)OC2=O			1		
Nc1ccc(NC(=O)c2ccc(N)cc2)cc1					1
[O-][N+](=O)c1ccc(c2ccc(cc2[N+](=O)[C			1		
CN(C)CCNC(=O)c1cccn2cc(nc12)c3ccccc			1		
CC(C)CC(=O)OC1CC2(OC(=O)C)C(OC3C(C			0		
Cn1cnc(N=O)c1c2ccccc2			1		
CC(C#C)N(C)C(=O)Nc1ccc(Cl)cc1					0
CN(C)CCNC(=O)c1cccc2Oc3ccccc3Nc12			1		
NC(=O)c1ccccc1N					0
O=N(=O)c1ccccc1CC#N			1		0
CC1(O)CCC2C3CCC4CC(=O)\C(=C/O)\CC4			0		
O=C1Nc2ccccc2C3=NC(CN		0			
OCCc1cn(N=O)c2ccccc12			1		
NC(=O)[C@H	0	0			0
ClC(=O)Cc1ccccc1			1		
CC1=CC2OC3C(O)C(O)C(C)(C34CO4)C2(C			0		
N[S+](=O)([O-])c1cc2c(cc1		0			
CC1=CN([C@	0	0			0
CC(COc1ccccc1)N(CCCl)Cc2		0	1	1	0
CN(C)C(=S)[S-]					0
CN(C)C(=O)C	1	1			0
O=C1Oc2cc(ccc2c3ccccc13)N(=O)=O			1		
OC1C=Cc2c(ccc3cc4c(cc23)C(O)C(O)c5cc			0		
CCNC(=O)N(CCCN(C)C)C(=O)[C@@H]1C[C@H]2[C@@C					0
O=N(=O)c1ccc2c3ccccc3c4ccc(c1c24)N(			1		
CCCc1c(O)c(c	0	0			0
C\C(=C(\OCCOc1ccc(Cl)cc1)/c2ccc(Cl)cc			0		
N\C(=N/OS(=O)(=O)O)\c1ccccc1			0		
C(=C\c1cccc(\C=C\c2ccccc2)c1)/c3ccccc			0		
C[C@H](N)[C	0	0			
NNC(=S)NN					0
[O-][N+](=O)c1ccc2N(S\C(=N/C(=O)c3c			1		
CCc1cc(c2cc(cccc12)C(C)C)S(=O)(=O)[O-]					0
C1CC=CCCC=CCCC=C1					0



OC1C=Cc2c(ccc3ncccc23)C1O	0			
ClC1cccc1	1	0		
COc1cccc1OCC(O)CO		0		0
Cc1cc(c(O)c(c1)N(=O)=O)N(=O)=O		1		
CO[C@@H]1 0 0				
CC(C)CC(C)Nc1ccc(Nc2cccc2)cc1	0			
O=C(Nc1cccc1)Nc2snc3cccc23	0			
[O-][N+](=O)c1cccc2nsc12	1			
[O-][N+](=O)C1=Cc2cc3cc4cccc4cc3c5c	1			
OC(=O)\C=C\c1cccc(c1)[N+](=O)[O-]	1			
COc1nsc2c(OCC3CO3)cccc12	1			
CCCCOC(=O)C(C)OC(=O)CCC			0	
CCCC(=O)[O-] 0 0			0	
CCCCCCCCCCCCOCCO	0		0	
CCNC(=O)Nc1ncc(s1)[N+](=O)[O-]	1			
Nc1ccc(c2ccc(cc2N)[N+](=O)[O-])c(c1)[	1			
BrC(Br)Br	1	0		
O=N(=O)c1ccc2ccc3c(c4cccc4c5ccc1c2	1			
O=C1N=NNc2cccc12			0	
OC(=O)CC1CC(=NO1)c2ccc 0				
CO[C@H]1\C 0 0				
CCOC(=O)C 0 0		0		0
NC(=O)c1cc(i 0 0			1	
CCCN(Cc1cc 1 1				
Oc1ccc2ccc3ccc(c4c5cccc5c1c2c34)N(=	1			
C[C@@H]1CC2C3CCC4=CC(=O)C=C[C@]	0			
NNNNN 0				
CC1CCc2c1c(C)cc3c2ccc4cccc34	1			
CCCN1CCCC 0 0				
c1ccc(nc1)c2ccncc2	1			
Cc1noc(N[S+](=O)([O-])c2 0				
C[N+]1(C)[C@H]2CC(C[C@@H]1[C@H]3O[C@@H]23		0		
O=C1N(CC2C 0 0			1	0
CN1[C@@H] 1 1				
CO\N=C(\C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C(=			0	
CC1=CC(=O)C 0 0			0	
CCCCC(=O)N(Cc1ccc(cc1)c2cccc2c3nnn[nH]3)[C@H](			0	
CO[C@H]1[C@H](O)CC(=O)O[C@H](C)CC=CC=C[C@H			0	
Nc1cccc1O 1			1	
COC(=O)c1cc 0 0			0	
CN1C=CSC1=[N+]=Nc2c(c3cccc3)n(C)c4	1			
CC(C)C(C(=O)OC(C#N)c1cccc(Oc2cccc2	0			1
ClC1C=CC2C1C3(Cl)C(=C(Cl)C2(Cl)C3(Cl)C	0			1

CC(C)OC(=O)Cc1ccccc1	0	0	0
COP(=O)(OC)SC	0		
Cc1ccc2C(=O)c3ccccc3C(=O)c2c1O	1		
Cc1cc(C)c(CN2C3C2c4ccccc4c5ccccc35)c	1		
CCCCCCCCCCCC(=O)O	0		0
COc1cc(O)c2C(=O)c3c(O)cc(C)cc3C(=O)c	1		
CCc1nc(C)c[nH]1			0
Cc1ccc(\C=C\c2ccc(cc2)[N+](=O)[O-])cc	1		
NCCC#N	0	0	
NNS(=O)(=O)c1ccc(Oc2ccc(cc2)S(=O)(=O)NN)cc1			0
NC(=O)CN1C	0	0	0
NC(=O)C(=O)	0	0	
CCCN(CCC)c1c(cc(cc1N(=O)=O)S(=O)(=O)C)N(=O)=O			0
COc1nsc2ccccc(c12)N(=O)=O	1		
O=N(=O)c1ccc2ccc3c4CCC=Cc4cc5ccc1c	1		
ClC1=C(Cl)C(=O)C(Cl)(Cl)C1=O	0		
CC(=O)Nc1ccc(C)c(N)c1	1		
Oc1ccc2c(Cc3cc(ccc23)[N+](=O)[O-])c1	1		
O=C(Nc1ccc(cc1)N(=O)=O)Nc2ccc(cc2)N(=O)=O			1
C[C@@H]1CCc2c1cc(C)c3c2ccc4ccccc34	1		
CCN(CCCl)CCCNc1c2ccc(Cl)cc2nc3ccc(O	1		
CC1=CN(CC(O)CN=N#N)C(=O)NC1=O	1		
[O-]c1ccccc1	0	0	1
CC(C)NC(=O)N1CC(=O)N(C1=O)c2cc(Cl)cc(Cl)c2			0
CC(=O)OC[C@H](O)CO			1
CCOc1cc(OC	0	0	
C[C@@H]1[C@@H](NC(=O)C)[C@@H](OC2[C@H](C			0
Fc1cccc2ccc3ncccc3c12			1
C[C@@H](N	0	0	
CC(C)(CO)[C@@H](O)C(=O)NCCC(=O)[O-]			0
NS(=O)(=O)c	0		0
CCCN1C(=O)NC(=O)c2nc[nH]c12			0
CC(C)(C)NSc1nc2ccccc2s1			1
CC(=N)S	0		
CC(=O)C1C(=O)OC(=CC1=O)C	0		0
CC(=O)N(O)c1ccc(Oc2ccccc2)cc1	1		
OP(=O)([O-])OP(=O)(O)[O-]			0
Cc1cccc(CCN2CCC(CC2)C(=		0	
CCN(CC)CCO	1		
CCC[C@@H](C)C[C@H](OC(=O)C[C@@	0		
CC(C)(C)c1cc(CC(C)(C)C=O)		0	
CC[N+](C)(C)	0	0	0
CC(C)c1cc(Cl)	0	0	

CN(C)c1ccc(cc1)N=Nc2cccc3ccccc23	1		
COCCN(CCOC)c1cc(NC(=O)C)c(cc1OC)n2	1		
OC[C@@H](O)[C@H]1OC(=O)C(=C1O)O			0
Cc1cc2ncccc2c3nc(N=N#N)n(C)c13	1		
CC(=O)Nc1ccc(cc1)c2ccc(N)cc2	1		
CC(CCOC(=O)C)CC(C)(C)C			0
OC(=O)C(Br)(Br)Br	1		0
C[NH+](C)CCC(c1ccccc1)c2	0		0
CC(=C)C(=O)OCC(C)(C)C	0		
OC1c2ccccc2Oc3ccccc13	1		
[O-][N+](=O)c1ccc2c3ccccc(c3cc(c2c1)[N	1		
C(N1CCN(CC1)c2nc3ccccc3	0		
CC(=O)OCC(=O)[C@@]1(O)C(=C)CC2C3CCC4=CC(=O)C			0
OC1C=Cc2ccc3c4ccccc4sc3c2C1O	0		
CC(=O)NCC(O)COc1cccc2ccccc12	0		
COC(=O)\C(=C\C)\C=C(/C)\C=C(/C)\C=C'	1		
O=C(C1OC1c2ccc(Oc3ccccc3)cc2)c4ccccc	0		
[O-][N+](=O)c1cc[n+](O)c2ccccc12	1		
CC(=O)OC\C=C(/C)\C=C\C=C(/C)\C=C\C1	0		
CC(C)NC[C@	0	0	0
NC(=O)Nc1nc2ccccc2[nH]1	1		
Cl[C@@H]1[C@@H](Cl)[C@H](Cl)[C@@H](Cl)[C@H]			0
Nc1nc(O)c2n	0	0	0
Cc1ccccc1c2ccccc2	0		
CC[N+](CC)(CC)CC	0		
O=C1C=Cc2c(ccc3cc4ccccc4cc23)C1=O	0		
Nc1nc(SCc2ccc(cc2)[N+](=	0		
CC(C)COC(=O)C			0
OCC(COC(=O)CCN1CC1)(COC(=O)CCN2CC2)COC(=O)C			0
Cc1nc2ccc3c(nc(N)n3C)c2nc1C	1		
CC(=O)Oc1cc	0	0	0
NC(=O)C([C@	1	1	0
Fc1ccccc(F)c1C(=O)NC(=O)Nc2ccc(Cl)cc2	0		0
Oc1c(I)cc(Cl)c2cccnc12	0		0
O=C(\C=C\C)c1ccccc1)c2cccs	0		
Cc1ccc2oc(CN(Cc3ccccc3)C(=O)Nc4c(F)cc(F)cc4F)c(c5			1
O=C1NC2=C(CCC2)C(=O)N1C3CCCCC3	0		
C[N+](C)CCc2cc3OCOC3c	0		
N1C2C1c3c(ccc4ccccc34)c5ccccc25	1		
O[C@@H]1C=Cc2c(ccc3c2ccc4ccc(O)cc3	1		
CC1(CO1)C2CO2	1		
CC1(C)CCC(C	0	0	0
O=C(N1CCCCC1)c2ccc3OCC	0		

COc1ccc2C[C@@H]3C4CCCC[C@]4(CCN3C)c2c1			0
Cc1ccc(\C=C\2/C3CCC(C)(C	0		
CCOC(=O)CS c1ccc2c3ccccc3C(=O)c4cccc		1	
CN(N=O)c1ccccc1		1	0
N[C@@H]1CCN(O)C1=O	0		
OC1C2OC2c3c(cc4ccc5cccc6ccc3c4c56)(C		1	
COc1ccc(cc1OC)c2cc3ncc(	0		
Oc1cc2cccc3ccc4c(ccc1c4c23)[N+](=O)[		1	
Fc1ccc2cccn2c1F		1	
CC1=C(C=C)c:	0		
C\C=C/1\CN2CC[C@@]34	0		
Cc1cc2c3cc4ccccc4cc3c5cccc(c1)c25		1	
CC(=O)N(O)c1ccc2ccc3cccc4ccc1c2c34		1	
Brc1ccc(cc1)	1	0	
Cc1ccc(c2ccccc12)[N+](=O)[O-]		1	
CO[C@H]1C(	1	0	
CC(=O)CC(=O)OC(C)(C)C			0
CN(C)c1ccc(cc1)N=Nc2ccc3[nH]ncc3c2		1	
ClC(=O)c1ccccc1C(=O)Cl		1	
OCCSCCO	0	0	0
CCCC(C)C1(C(	0	0	0
Cc1ccc(cc1N=[N+](O-])c2cc(ccc2C)[N+]		0	
CC(=C)C(=O)O		0	0
NC(=Nc1nc(CSCC\C(=N)\[S	0		
CS c1ccc2Sc3	1	1	
CC1c2ccccc2c3c(C)cccc13		1	
O1c2ccccc2Oc3ccccc13		0	0
COc1cc(OC)c(Cl)c(c1)N2C(=CC(=O)C(=C		0	
NCCCNCCCCN(CCCN)N(O)†	0	1	
CN(C)C(=O)Nc1cccc(c1)C(F)(F)F		0	0
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCC1=CC=C2		1	
Cc1cccc(c1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]		1	
Cc1ccc(cc1)S(=O)(=O)NC(=O)NN2CC3CCCC3C2			0
C[N+](C)(C)CCOP(=O)([O-]	0		0
CO[C@H]1CC	0	0	
CCN(CC)CCO(	1		
FC(F)C(F)(F)F		0	
Oc1ccc2CC3†	0	0	
CC\C=C/CCOC(=O)c1ccccc1O			0
O=N(=O)c1ccc2ccc3cc4CCC=Cc4c5ccc1c:		1	
Cc1cc(O)nc(S)n1		0	
c1ccc(cc1)c2ccccc2		0	0
O=C1c2ccccc2c3ccc4c5ccc6c7ccccc7C(=		1	

COc1nc(N)nc	0	0		
OC[C@@H](O)[C@H](CO)OCn1ccnc1N(=O)=O			0	
CC(C)[C@H](CO)Nc1nc(Nc	0			
COc1ccc(c2N(Cc12)C(=O)	0			
CN(C)CCNC(=O)c1cccc2Oc3ccccc3Oc12			1	
C1CC(C2=NC(	0	0		
C1CSCSC1			1	
CC(C)CCC[C@	0	0		
C(N(Cc1ncc[r	1			
Nc1cc(ccc1Cl)C(F)(F)F			0	
FCOC(C(F)(F)	0	0		0
[O-][N+](=O)c1ccc(\C=C\C(=O)c2ccc(cc:	1			
N[C@@H](C	0	0		0
Oc1ccc2c(c1)c3cccc4c(ccc2c34)[N+](=O	1			
CC(N)C(=O)OC(C)(C)Cc1cc	1			1
Cc1ccc2c(ccc3cc4ccccc4cc23)c1	1			
C1c2cccc3ccc4ccccc1c4c23	1			
CN(C)C1=NC(=O)N(C2CCCC2)C(=O)N1C			0	
NCCCCCNCCCCCN			0	
O=Nc1cccc(c1)c2ccccc2	1			
CO[C@@H]1	0	0		
CCNC(C)Cc1ccc2OCOc2c1			0	
Nc1cc2c3C=CC(O)C(O)c3ccc2c4ccccc14	1			
Cc1onc(O)c1C[C@H](N)C(-	0			
O=C1NC(=O)[C@H]2CC=CC[C@H]12	0		0	
C1C=Cc2c1ccc3c2ccc4ccccc34	1			
CCCCC(CC)CN1C(=O)C2C3CC(C=C3)C2C1=O			1	
CCCCN(N=O)C(=N)N[N+](=O)[O-]	1			
CN1CCc2cc3OCOc3c4c5ccccc5CC1c24	1			
C=CC1CCC=CC1	0			
CCc1oc2cccc	0	0	1	1
OCCN(CCO)c1ccc(cc1)N=Nc2ccc(cc2C#N	1			
CCN1C(=O)N=C(c2cccc(Cl)	0			
O=C1CCCCCN1	0		0	
CC1(C)SSCC(NC1=O)C(=O)O	0			
COC(=O)Cc1ccccc1			0	
COP(=O)(O)OP(=O)(O)OC			0	
CC(CN1c2ccccc2Sc3ccccc1:	1	0		
CC\C(=C(\CC)	0	0	0	
OCc1c2ccccc2c3ccc4cccc5ccc1c3c45	1			
NCC[C@H](C	0	0	0	0
Nc1ccccc1N	1		1	
CN1c2ccccc2C(=O)c3c(O)cc4OC(Cc4c13)	1			

O=C1CC2CC1C3CCCC23				0
COc1cccc1N	1	1		
CC(CCl)OP(=O)(OC(C)CCl)OC(C)CCl			0	0
NCCC[C@H](N)CC(=O)N[C@H]1CNC(=O)[C@@H](NC				0
ClC1=C(CBr)COC1=O			1	
FC(F)(Cl)C(F)(F)Cl			0	
CO[C@]1(NC(=O)Cc2cccs2)[C@H]3SCC(=C(N3C1=O)C				0
Cc1ccc(\N=C\c2cccc3cccnc23)c(c1)C(=O			0	
C[C@@]12CC[C@H]3[C@H		1		
CC[C@]12CC	0	0		0
CCc1cccc(CC)c1NC(=O)CO			1	
CNCCC(Oc1cc	1	1		0
N[C@@H](C	0	0		
CN(N=O)C(=O)Oc1cccc2ccccc12			1	
C[C@H]1C[C	0	0		
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCO			0	
OCc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]			0	
OC1Cc2cc3ccc4cccc5ccc(c2C=C1)c3c45			1	
OC(=O)\C=C\Cl			1	
CN1C2CCC1CC(C2)OC(c3cc		1		
Cc1cc(ccc1N)c2ccc(N)c(C)c2			1	0
O=C1Oc2c(cccc2N(=O)=O)c3ccccc13			1	
COC(OC)(C(=O)c1cccc1)c2ccccc2				0
O=C1Oc2cc3occc3c(OCCCC		0		
C1Cc2ncccc2C3OC13			0	
CN(C)c1ccc(cc1)N=Nc2cccnc2			0	
CCCCCCC1CCC(=O)O1				0
Cc1ccc2cccc(c2c1)[N+](=O)[O-]			1	
COc1cc(Cl)ccc1Oc2ccc(Cl)cc2Cl				1
Cc1sc2ccccc2c1CC3=NCCN		0		
Fc1ccc2cc3c(cc2c1)c4cccc5cccc3c45			1	
CC(S)C(=O)N	0	0	0	0
CC(=O)OCc1ccc2OCOc2c1			0	0
Clc1ccc(c(Cl)c1Cl)N(=O)=O				0
OC(=O)CCSCCC(=O)O				0
CCCCCCCCCCCC\C=C\[C@		0		
CCCCCCCCCCCCn1cc[n+](C)c1				1
CC1(C)NC(=O)NC1=O				0
COc1cccc(\C=C\C)c1OC			1	
CNC(=O)NOC(=O)NC			1	
CC(=O)Nc1cc(ccc1C)N=[N+][[O-]]c2ccc(			0	
CCCCCCCCCOC(=O)c1cccc1C(=O)OCCCCCCCCC				0
CN1CCc2cc(O)cc3c2[C@H]		0		

CC1=CC=CN2	0	0	
CC(=CCC\C(=C\COC=O)\C)C			0
NC[C@@H]1O[C@@H](C	0		
CCOC(=O)COc1ccc2C(=O)C=C(Oc2c1)c3c		0	
Oc1ccc2c(c1)c3ccc4ccc5cccc6cc2c3c4c5		1	
COC(C(=O)O)c1cccc1			0
CC(C)CC(O)CC(C)C			0
c1cc2ccc3cncc4ccc(c1)c2c34		1	
CCCCNC(C)(C)P(=O)O			0
CCC1(C)CC(=C	0	0	0
Cc1cccc2C3NC3c4cc5cccc5cc4c12		1	
OC(=O)CNC(=O)CNC(=O)CNC(=O)CSC(=O)c1cccc1			0
O[C@@H](CC[C@@H]1[C@H](N(C1=O)c2ccc(F)cc2)c			1
C\C(=N/NC(=O)Nc1cc(F)cc(F)c1)\c2ncccc2C(=O)[O-]			0
CCN(Cc1cccc(c1)S(=O)(=O)[O-])c2ccc(cc2)C(=C3C=CC			0
COc1ccc(CC2CO2)cc1OC		1	
CCCC(=O)NC	0		
NC(=N)N\N=C\c1c(Cl)cccc1Cl			0
CC[C@]1(NC	0	0	0
CC1(C)C2CCC	0	0	0
OCCOc1cc(Cl)c(Cl)cc1Cl			0
O[C@H]1CCN2C[C@H](O)		0	
COc1ccc2OC(=CC(=O)c2c1		0	
CCCCCCC(C)Nc1ccc(Nc2cccc2)cc1			1
NCCCC(O)(P	0	0	
[O-][N+](=O)c1cccc1SSC(=C(Cl)Cl)F			1
Oc1cnnc(O)n1			1
CCCCOC(=O)[C@H](C)O			0
CC(C)C(C)(C)C(C)(C)C(C)(C)S			0
CN(CCC#N)c1ccc(cc1)N=Nc2cccc2			1
CNNCc1ccc(c	0	0	0
C1CN=C(NC(	0	0	0
O=C1CCc2ccc3c(ccc4cccc34)c12			1
[O-][N+](=O)c1cccc1CBr			0
CC(C)OC(=O)c1cccc1			0
O[C@@H]1CCCC[C@H]1N		0	
[O-][N+](=O)c1ccc2oc3ccc(cc3c2c1)[N+			1
Cc1cc2C(=O)CCCc2c3ccc4cccc4c13			1
CCCCOCCO			0
COc1ccc(cc1	0	0	
CC(C)(O)c1coc(c1)S(=O)(=O)NC(=O)Nc2c3CCCC3cc4C			0
Nc1ccc(cc1)[S+](=O)([O-])		0	
O=C(n1ccnc1)n2ccnc2			0

CCC(=O)N(O)c1ccc(\C=C\c2ccccc2)cc1	1	
CC(=O)c1cccn1		0
CN(C)CCC(c1ccccc1)c2cccc	0	
Clc1c(Cl)c(Cl)c2c(Cl)c(Cl)c(Cl)c(Cl)c2c1Cl	0	
OC1C=Cc2cc3c(ccc4ccccc34)c(Cl)c2C1O	0	
OC1C2OC2c3cc4c5ccccc5c6ccccc6c4cc3(	1	
CC(=O)CC(C1=C(O)c2ccccc2OC1=O)c3ccccc3		1
COP(=S)(OC)SCC(=O)N(C)C=O	0	
NC(CCC(=O)N	0	0
CC[N+](CC)(C	0	0
C1CCC=CC1	0	
Nc1c(Cl)c(Cl)c(Cl)c(Cl)c1Cl		0
CC(O)COC(=O)C=C	0	0
OCCCCCl	1	
COc1ccc2nccc(C(O)C3CC4CCN3CC4C=C)c	0	
CCN(CC)CCC[	1	1
CC1(C)CCC2(CCC3(C)C(=CCC4C5(C)CC(O)	0	
NC(=S)Nc1ccccc1	0	0
CC(C)N(CCC(	1	0
CN(C)\C=N\c1c(I)cc(I)c(CCC(=O)[O-])c1I		0
Oc1cc2cc(CCl	1	0
COC(=O)C(C)N(C(=O)Cc1ccccc1)c2c(C)cccc2C		0
C[C@H]1Cc2c(Cl)cc(C(=O)N[C@H])(Cc3c	0	
Cc1cc(C(=O)O)c2ncccc2c1	0	
COP(=O)(OC)Oc1ccc(cc1)N(=O)=O		0
Nc1nc(Cl)nc2	0	0
CC12CCC3C(CCc4cc(O)ccc3	1	
COc1cc(OC)c2C(=O)c3c(O)ccc(OC)c3Oc2	1	
CC1(C2CCC(C	0	0
Nc1cccc2cc3CCCCc3nc12	1	
Clc1cc(Cl)cc(c1)N2C(=O)N3C[C@H](C[Cl	1	
CC(=C)C(=O)OCCCCCCCCCOCC(=O)C(=C)C		0
CC(Br)C(Br)CCl	1	
O=C1N(CC2CO2)Sc3ccccc13	0	
NC(=O)C(Cl)(Cl)Cl		0
Oc1ccccc1Nc2ccc(cc2N(=O)=O)N(=O)=C	1	
N#N=Nc1ccc(Nc2c3ccccc3nc4ccccc24)c	1	
OCCc1c[nH]c2cc(ccc12)N(=O)=O	1	
OCc1cccn1		0
C1CN=C(N1)C2COc3ccccc3	0	1
ONc1ccc(Sc2ccccc2)cc1	1	
Cc1c(C)c(c(c1C)N(=O)=O)C(C)(C)N(=	0	
Oc1ccc(O)nn1	0	



OC(=NCCCl)Nc1ccc(s1)N(=O)=O	1		
O=N(=O)c1cc(c2ccccc2c1)N(=O)=O	1		
C[C@H](O)Cl	0	0	0
[O-][N+](=O)c1oc2cc3ccc4cccc5ccc(c2c:	1		
COCCOC(=O)C1=C(C)NC(=O	0		
N[S+](=O)([O-])c1cc(cc(N:	0		
Cc1nc(N[S+](=O)([O-])c2c:	0		
NS(=O)(=O)c	0		0
CC(=O)c1oc(c(c2ccccc2)c1c3ccccc3)N(=O	1		
CS\C(=N/OC(=O)N(C)N=O)\C	1		
CCCCCCN[S+](=O)([O-])c:	0		
COC(=O)Nc1nc2ccc(cc2[nH]1)S(=O)c3ccccc3			0
CC(C)CCOC(=O)CC(C)C	0	0	0
CC(COc1ccc(\C=C\c2ccccc2	0		
C[N+](C)CCC(C1)OC(=O)C(O)(C2CCCC2)c3ccccc3		0	0
COc1cc(C=C(i	0		
OC(=O)C1=CN(c2ccccc2C(=O)O)c3cc(Cl)c(Nc4c(F)cc(F		0	
CC[N+](C)(C)	0	0	0
BrC1CCC(Br)C(Br)CCC(Br)C(Br)CCC1Br			1
CNCCCC12CC	1	1	
Cc1cc(c(N)c(N=Nc2ccc(cc2C)c3ccc(N=N	1		
Nc1n[nH]c(N)n1	0		
Nc1ccc2nc3ccccc3nc2c1	1		
C[C@]12CCC	0	0	
Nc1ccc2Cc3ccccc3c2c1	1		
CC(C)n1c(C=CC(O)CC(O)CC(=O)O)c(c2cc	0		
Cc1cccc(C)c1NC(=O)CC23C	0		0
CC(=O)NC1=NC(=O)N(C=C1)C2COC(COC(=O)c3ccccc3			0
CCCC(=O)\N=C\1/SN(C(=O)CCC)c2ccc(cc	1		
BrCC(Br)(CCC#N)C#N	0		
COc1ccc(N)c(C)c1	1		0
CCCC1O[C@@H]2C[C@H]:	0		
COc1ccc2ncc	1	1	
COc1ccc2[C@	0	0	0
ClC(Cl)C(Cl)Cl	0		0
CC(=O)\N=C\1/SN(C(=O)C)c2ccc(cc12)[	1		
COc1ccc2c(OC)c3CCOC3nc2c1OC	1		
N[C@H](CC:	0	0	0
OC1C(O)c2c(ccc3c2ccc4ccccc34)C5OC15	1		
CC(=O)Nc1cccc2ncccc12	0		
CCCCCCCCCCCCCO	0		0
COc1cccc(c1)C2=CC(=O)c3	0		
CN1CCN(Cc2occ(c2)c3ccc4nc(O)oc4c3)[C@H](C1)c5cc			1

CC(C)COC(=O)c1ccccc1			0
Cn1cc(C(=O)C(=O)N[C@H]	0		
N[C@H](CCC(=O)N[C@H](CSc1ccc(cc1)[		1	
CCC(=O)OC1(CCN(C)CC1)c2ccccc2			0
NC1=NC(=O)	0	0	0
CC(COC(=O)c1ccccc1)OC(=O)c2ccccc2			0
CC(CCC(=O)C	0	0	
CCC1OC(=O)C	0	0	
OC(=O)\C=C/C(=O)O		0	0
OCCCNc1ccc	0	0	0
Oc1ccc2CC3N(CC4CC4)CC[		1	
Cc1ccc(O)c2r	0	0	0
CCc1cc(Cc2cc(C)c(N)c(CC)c2)cc(C)c1N		0	
Cc1cccn2c1nc3c(C)c(cnc23)N(=O)=O		1	
CN1CCC2(CCI	0	0	
CNC(=O)ON		1	
CC(N(C)C)c1ccccc1		0	
Oc1ccc(N=Nc2ccc(cc2)S(=O)(=O)O)c3cc		0	
Oc1ccc(CCNCCCCCNCCc2ccccc2)cc1O			0
CN(C)[C@@	0	0	
CCCN1CCc2c	1	0	
OC(=O)c1ccc	0		1 0
O=N(=O)c1ccc2Cc3ccccc3c2c1		1	
N\C(=N/C(=C	1	0	
CCN(CC)C(=O)\C(=C(\C)/OP(=O)(OC)OC		1	
Nc1nc(Cl)nc2c1ncn2[C@@		0	
CC(N)(CN=[N+]=[N-])C(=O)O		1	
CN(\C=N\C=N\c1ccc(C)cc1C)c2ccc(C)cc2		0	
CCCCCCCCCCCCOCC1CO1		0	0
Cc1cc(c(O)c(C)c1CN2C(=O)N(Cc3c(C)cc(c(O)c3C)C(C)(			1
COc1cc2CCNC(C)c2cc1OC		0	
Fc1ccc(cc1)C(=O)CCCN2CCC(CC2)N3C(=S)Nc4ccccc34			0
COc1cc(\C=C	0	0	
CC(F)(F)F		0	
C[N+]1(C)CCN(CC(O)(C2CCCC2)c3ccccc3)CC1			0
CNc1ccccc1N		1	
CCOP(=S)(OCC)OC(Cl)C(Cl)(Cl)Cl			1
Brc1ccc(\C=C		1	
C1Cc2c(cc3ccc4cccc5ccc2c3c45)[C@@H		1	
O=C(Cc1ccccc1)OCc2ccccc2		0	
Cc1nc(N)cc2[nH]c3ccccc3c12		1	
ClC(Cl)(Cl)C#N		1	
CCCN(CCC)C(	0	0	0

CN(C)CCCN=C1c2ccccc2Nc3c(C)ccc(c13)	1		
CSC(C)(C)C(=O)NC(CS)C(=O)O	0		
C[C@H](\C=C\C=C(\C)/[C@H]1C=CC(=O)O	0		0
CC1CN(CCN1)C(=O)O	0	0	
N[S+](=O)([O-])c1cccc2c3c(N)ccc(O)c3C(=O)O	0		
CC=C1CC(=C)C(O)(CO)C(=O)OCC2=CCN3	1		
Nc1ccc(O)c2C(=O)c3c(N)ccc(O)c3C(=O)O	1		
CCCCC(CC)COC(=O)c1ccc(O)cc1			1
OC(=O)c1cccc(c1)[N+](=O)[O-]	1		
COc1ccc(cc1)C2C(=O)c3ccc(O)cc3	0		0
CCn1ccnc1CC2COc3ccccc3(C)C(=O)O	0		0
OCCOc1cccc(OCCO)c1			0
ONc1cnc2c(c1)nc3cccn23	1		
OC1=NC(Nc2ccccc12)c3ccc(s3)N(=O)=O	1		
CCCCCCCCCCCCO			0
CCCOC(=O)c1ccc(nc1)C(=O)OCCC			0
N[C@]1(CN[C@H](C1)C(=O)O)C(=O)O	0		
CC(C)C1NC(=O)O	0		
CCOC(=O)c1ccc(O)cc1	0		0
CC(C)Oc1ccc(O)cc1	1		
O=N(=O)c1ccc2ccc3ccccc3c2c1	1		
CCSc1cc(Cc2ccc(N)c(SCC)c2)ccc1N	1		
OCC1CCC(CO)CC1			0
CN1CCC(CC1)C(=O)O	1	0	
COc1cc2nc(nc1)C(=O)O	0	0	0
CC(=O)Nc1ccc(NC(=O)C)c2C(=O)c3ccccc3c2c1	1		
CC1=CN(C(=O)O)C(=O)O	0	0	0
CCCCCCCCCCCCC(=O)OCCS(=O)(=O)O	0		
CCCCCCCCCCCCC(=O)OC1C(C)C2(O)C(C)C(=O)O	0		
CCCCC1c(O)noc1CC(N)C(=O)O	0		
Fc1ccc(cc1)C(=O)[C@H]2O[C@@H]2c3c(N)ccc(cc3)C(=O)O	1		
Nc1ccc(cc1)c2ccc(O)cc2	0	0	
COC1(C[S+](O-))c2ccccc2	1		
SCC(=O)OCCOC(=O)CS			0
CN(C)C\C=C(')C(=O)O	1		
CN(C)N	1	0	
C=CC(=O)OCCCCOC(=O)C=C	0	0	
O=N(=O)c1c2CCc3cccc4ccc(c5ccccc15)c5ccccc1	1		
CCO[C@@H]1C[C@@H]2[C@@H](C)C(=O)O	1		
C=CCOC(=O)\C=C/C(=O)OCC=C			0
CC(=CCC[C@H]1C=CC(=O)O)C(=O)O	0	0	
COc1cc(OC)c2nc3occc3c(OC)c2c1	1		

CC(C(=O)O)c1ccc(c(F)c1)c:	0	0	0
Cc1c2ccccc2cc3c4C=CC(=O)C(=O)c4ccc1	1		
OC(=NN=Cc1oc(cc1)N(=O)=O)C=Cc2oc(c	1		
Cc1ccc(Nc2n	0	0	
COc1cc2OC3OC=CC3c2c4OC(=O)C5=C(C	1		
OC(=O)COc1ccc(Cl)cc1	0		0
CC(=O)Oc1ccc2C(=CC(=O)Oc2c1)CBr	0		
OC[C@@H]1CO[C@@H](C(Cl)O)1	1		
C[C@@H](C	0	0	
CCCCCCCCC(=O)\N=C\1/SN(C(=O)CCCC	1		
COCCc1ccc(C	0	0	0
CC12CCCC(C)(C1CCC34CC(O)(CCC23)C(=	1		
COC=C	0		
CS(=O)(=O)c1cc(ccc1C(=O)c2cnoc2C3CC3)C(F)(F)F			0
OC(=O)CCCC	0	0	0
O=C1NC(=O)c2cccc3cccc1c23			1
CCC(=O)Nc1snc2cccc12	0		
CN1C(=O)N(C)c2nc([nH]c2	0		
CCCCCCCCCCCCC=O			0
O1[C@@H]2C=Cc3c(cc4ccc5cccc6ccc3c4	1		
C[C@@H]1O[C@@H]1P(=O)([O-])[O-]			0
O=N(=O)c1cc(c2cccc3c4cccc4c1c23)N(	1		
NC1=NC(=O)N(C=C1CCCl)C2CC(O)C(CO)	0		
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)C(	0		
CN			0
O=N(=O)c1cc2cccc3ccc4cccc1c4c23	1		
S=C=S	0	0	0
CC\C=C\CCCCCCCCCO(=O)C			0
Cc1cc(Cl)ccc1OCC(=O)[O-]			0
CCN1\C=C\C	1	0	
Nc1ccc2c(oc3cccc23)c1	1		
COc1cccc2C(=O)c3c(O)c4C[C@](O)(C[C@	0		
CC(C)(C)c1ccc(cc1)C(=O)ON(OCC2CCCC2	1		
COC(=O)Nc1ccc2[nH]cc(CC	0		
Oc1ccc2c(c1)c3ccc(c4cccc2c34)[N+](=O	1		
CCN(CC)CCO	1	1	
[O-]S(=O)(=C	0	0	0
CC[C@H](C)[C@H](NC(=O)	0		
N#CC(=C(C#N)C#N)C#N	0		
Cc1nc(N=Nc2	0	0	
CC(=O)Nc1ccc2c(Cc3cccc(O)c23)c1	1		
ClC1CO1	1		
NC(=O)Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1			1

Clc1ccc(C=O)cc1Cl	0		
OCC(=O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)C(=O)[O-]			0
CN(COC(=O)C)N=O		1	
OCC1(CO)CO	0	0	0
CCCCCCCCCCCC[N+](C)(C)CCCS(=O)(=O)[O-]			0
Clc1cccc(\C=N\C=N\c2cccc	0		
COc1cc2CCN	0	0	
CC(C)c1ccccc1		0	0
CC(C)(c1ccc(OCC(O)CO)cc1)c2ccc(OCC(C	0		
CC(=O)[C@H]1CC[C@@H]2[C@@H]3CC	0		
CC(C)CC(=O)CC(C)C	0		0
CC(=O)Nc1ccc2c(Cc3cc(NC(=O)C)ccc23)	1		0
C1CN=C(N1)c2oc3ccccc3c2	0		
Cc1cc2CCN(C(=O)Nc3ccc(C	0		
CC1(CO1)c2ccc(cc2)c3ccccc3		1	
O=N(=O)c1cc(c2ccccc2)c(c1)N(=O)=O		1	
COC1=CC=C(C=CC1=O)[N+](=O)[O-]		1	
O=C1CC2(CCCC2)CC(=O)N1	0		0
Cn1c(nc2c3ccnc3ccc12)[N+](=O)[O-]		1	
c1ccc2c(c1)nc3ccc4cccc5ccc2c3c45		1	
CN(C)[C@H](Cc1ccccc1)c2ccccc2			0
CCOC(=O)C=C		0	0
CC(=O)ON(C(=O)C)c1ccc(Sc2ccccc2)cc1		1	
Nc1c(Cl)cc(cc1Cl)[N+](=O)[O-]		1	
CCCCC1CCC(=O)O1			0
Cc1ccc(cc1C)	0	0	0
N\C(=N/OC1OC(C(O)C(O)C1O)C(=O)O)\		0	
CC(C)C1(C)N=C(NC1=O)c2ncccc2C(=O)O			0
CNCCC(Oc1c	1	1	
Oc1cccc(c1)N(=O)=O		1	1
CC(=C)[C@H]1CC=C(C)C(=		0	0
N#CCSc1ccccc1			0
O=N(=O)c1cccc2cccc(c12)N(=O)=O		1	
CCN(CC)c1ccc(cc1)c2ccc(cc2)c3ccc(cc3)I		1	
Nc1nc(N)nc(	0	0	0
O=C1N(CC2CO2)Sc3cc(OCC4CO4)ccc13		1	
OCc1ccc(cc1N(=O)=O)N(=O)=O		1	
NS(=O)(=O)c1ccccc1OC(F)(F)F			0
CCCCNC(=O)[C@@H]1Cc2		0	
Nc1[nH]cnc2ncnc12		1	
NCCNCCNCCI	0	0	1
C[C@@H]1[C	0		
CC(C)NCC1CCc2cc(CO)c(cc2N1)N(=O)=C		1	0

CC(=O)Nc1cc	0	0	0
COc1cccc2c1ccc3c(cc4OCOc4c23)C(=O)(		1	
CCOc1ccc(cc1)N(=O)=O		1	1
C1O[C@H]1c2ccccc2		1	
CC(C)Oc1cc(N2N=C(OC2=O)C(C)(C)C)c(Cl)cc1Cl			1
CCCCNC(=O)N			0
NCCCCC(=O)(	0	0	
Fc1ccc(cc1)C(=O)\C=C\c2ccccc2		0	
Oc1cc(O)c(Cl	0	0	
CC(\C=C\c1c	1	0	
Cc1ncc2CN=(	0	0	
OC1OC(=O)C(=C1C(Br)Br)Cl		1	
CCc1nnc(NS(	0		
CC(C)(Br)C(=O)Nc1ccccc1		0	
CNC(C)[C@@H](O)c1ccccc		0	
OCc1ccc(cc1)C#N		0	
OC(=O)C=C(C(Cl)Cl)C(Cl)Cl		1	
COc1ccc(Br)c(C)c1			0
Clc1cccc2ccccc12		1	0
CCCCCCCCC1OC1CCCCCCCC(=O)OCC(CC)(		0	
C[C@@]12CC[C@@H](C1)C(C)(C)[C@@H]2O			0
Oc1ccc(\C=Cl	0	0	
CCN(CC)CC#C	1		
COc1cc(SC)ccc1C(=O)N2C(		0	
CC(=O)C(Cl)(Cl)Cl		1	1
Cc1ccc(NCCCl)cc1		1	
ClCN1N=Nc2ccccc2C1=O			0
CCCC[P+](CCCC)(CCCC)CCCC			0
[O-][n+]1cccc2ccccc12		0	
COP(=S)(OC)Oc1c(Cl)cc(C)cc1Cl			1
COP(=S)(N)Oc1ccccc1C(=O)OC(C)C			0
Cc1cccc(N)n1			0
OCC1OC(C(O)C1O)N2CC(=O)C(=N)NC2=		0	
CCCCN(COC(=O)C)N=O		1	
CCCCCN(CCCCO)N=O		1	
OC1C(Oc2cc(	0	0	
[O-][N+](=O)c1ccc2c(Cc3ccccc23)[N+](		1	
O=C(Nc1ccccc1)C2CO2		1	
Nc1ccc2c(O)cc(cc2c1)S(=O)(=O)O			1
[O-][N+](=O)c1c2CCC=Cc2c3ccc4ccccc5c		0	
Nc1ncnc2c1ncn2[C@@H]z		0	
c1ccc2c(c1)ccc3cc4c(ccc5ccncc45)cc23		1	
NC[C@@H]1O[C@H](O[C@H]2[C@@H](O)[C@H](O			0

CCOc1ccc(N)cc1N			1	
NC(=O)N1c2c	0	0		0
OC1C=Cc2c(ccc3cc4c5C=CC(O)C(O)c5ccc			0	
OC1CCCN(C1)N=O			1	
COC(OC)OC				0
CC1(OC(=CC1	0	0		0
[O-][N+](=O)c1cccc(Cl)c1			0	
CC(=O)OCc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]			1	
Clc1cccc(c1Cl)N(=O)=O				0
Cc1ccc2ccccc2c1[N+](=O)[O-]			1	
CC(CCC=C(C)C)CC(=O)O				0
OC(=O)c1cc(i	0	0		
COC1cc(cc(C(=O)NCC2CCCN2CC=C)c1OC)S(=O)(=O)N				0
CCc1c(C)[nH]	0	0		
CCc1ccc(O)c(OC)c1				0
Nc1c(Cl)cc(cc1N(=O)=O)N(=O)=O			1	
[O-]S(=O)(=O)c1ccc2N\C(=C/3\Nc4ccc(cc4C3=O)S(=C				0
Clc1cc(NC(=O)Nc2ccccc2)ccn1				1
CC(C)COC(=O)C(=C)C#N			0	
O=N(=O)c1ccc2nc3c(cccc3nc2c1)N(=O):			1	
CCCC\C=C/CCCCCCCCC=O				0
O=C(N[C@H]1CN2CCC1CC2)c3ccc4OCCOc4c3				0
O=Cc1c2ccccc2cc3ccccc13			0	
NC(=N)c1ccc(cc1)c2cc3ccc(cc3s2)C(=N)			0	
[O-][N+](=O)c1ccccc1Nc2ccccc2			0	
CC(=O)Nc1cccc(N=Nc2cccc(NC(=O)C)c2)			0	
Oc1cc2ccc3cccc4ccc(n1)c2c34			1	
CCc1ccc(C)nc1			0	
C[C@@H]1O	0	0		0
COc1ccccc1N2CCN(CCCCN		1		
OP(=O)(O)O	0	0		0
COc1ccc(NC(=O)c2csc(c2)N(=O)=O)cc1			1	
CC1(C)SC2C(I	0	0		
Oc1nsc2ccccc12			0	
CC(Cc1ccc(cc1)C(C)C)C=O				0
C[C@]12CC[C	0	0		0
NC(CN=[N+]=[N-])C(=O)O			1	
CC1CS(=O)(=O)CCN1N=Cc2oc(cc2)[N+](			1	
OCCCC(=O)[O-]				0
Cn1c(N=N#N)nc2ccccc12			1	
CC(=O)Nc1ccc(Oc2ccc(NO)cc2)cc1			1	
CCN(CC)c1ccc2C(c3ccc(cc3Oc2c1)N(CC)(			1	
Oc1ccc(Cl)cc	0	0	1	





<chem>Fc1ccc(cc1)C</chem>	1	1		0
<chem>CC1(C)O[C@H]1</chem>	0	0		
<chem>Oc1ccc(Cl)cc1C(=O)Nc2ccc(cc2Cl)N(=O)=O</chem>				1
<chem>CC12CCCC(C)(C1CCC34CC(=C)C(CCC23))(C</chem>			1	
<chem>C(=C)\c1ccncc</chem>	0	0		
<chem>O=C1CC2SCC=CN12</chem>			0	
<chem>CC(=O)SC1CC2=CC(=O)CC[C@@]1(C)C2</chem>		0		
<chem>COC(C)CCOC(=O)C</chem>			0	
<chem>OC(=O)c1ccc(cc1C(=O)O)S(=O)(=O)O</chem>				0
<chem>Oc1ccc(cc1)C(=O)c2ccc(O)c(O)c2O</chem>				1
<chem>Clc1ccc(cc1)N(=O)=O</chem>				0
<chem>NC(=S)NCC=C</chem>	0	0	0	0
<chem>O=CNc1ccc2c(Cc3ccccc23)c1</chem>			1	
<chem>CC1C2Cc3ccc</chem>	0			
<chem>Clc1ccc(cc1Cl)N(=O)=O</chem>			1	0
<chem>CS(=O)(=O)OCCNCCCOS(=O)(=O)C</chem>			1	0
<chem>CCCCCCCCC</chem>	0	0	0	0
<chem>CC(=O)NS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1</chem>			0	0
<chem>CNc1ncnc2c1</chem>	0	0		
<chem>O[C@@H]1C=Cc2ccc3c(ccc4ccccc34)c2[C@@H]1</chem>			1	
<chem>ClCCN(CCCl)c1ccc2ccccc2c1</chem>			1	
<chem>CCOP(=O)(OCC)Oc1cc(C)nc(n1)C(C)C</chem>			1	0
<chem>Nc1c(O)cc(Cc2cc(Cl)c(N)c(OS(=O)(=O)C</chem>			0	
<chem>ONc1ccc(cc1)N(=O)=O</chem>			1	
<chem>NC(=O)NO</chem>	0		1	0
<chem>c1ccc2cnccc2c1</chem>			0	0
<chem>CC(CO)NC(=C</chem>	0	0		
<chem>NNC(=O)N</chem>	0	0	0	0
<chem>CC(C)COC(=O)C=C</chem>			0	0
<chem>FC(F)(F)Oc1ccc(NC(=O)NC(=O)c2ccccc2Cl)cc1</chem>				0
<chem>C1CCC(CC1)N</chem>	0	0	0	0
<chem>O[C@H]1[C@H](O)[C@@](O)(COP(=O)([O-])[O-])O[C@H]1</chem>				0
<chem>CC(=O)Nc1ccccc(C)c1</chem>			0	0
<chem>COc1cccc2OC(=CC(=O)c12</chem>		0		
<chem>CN1CCC2(CC</chem>	1	1		
<chem>N1C2C1c3ccc4ccccc4c3c5ccccc25</chem>			1	
<chem>Nc1c(c(nn1c</chem>	0			
<chem>CC(=O)O[C@H]([C@@H]1CO1)c2ccc3O</chem>			1	
<chem>CCOC(=O)COc1cc(N2N=CC(=C(C)C2=O)C(F)(F)F)c(F)cc1</chem>				0
<chem>Clc1cccc(Cl)c1NC2=NCCN2</chem>			0	
<chem>COc1ccc2NC(=O)C3=C(OC</chem>		0		
<chem>Nc1ccc(Cc2ccc(N)c(Cc3ccc(N)cc3)c2)cc1</chem>			1	
<chem>[O-][N+](=O)c1ccc(Sc2ccccc2)cc1</chem>			1	

CN1C(=O)N(	0		
CCCC(=O)[O-]			0
Cc1cccn1	0	0	0
C1OC1c2cccc2		1	0
CCCCOc1ccc(OCCCN2CCOC	0		
Oc1ccc2cc(ccc2c1)S(=O)(=O)[O-]			0
CNC(=N)NC(=O)Nc1c(C)cccc1C			0
CCCN(CCO)CCCC		0	
OC[C@@H](O)[C@H](O)[C@H](O)CO			0
CCOCC		0	
NCCNCCO		1	0
COc1nc(C)nc(NC(=O)NS(=O)(=O)c2cccc2OCCCl)n1			0
[O-][N+](=O)c1ccc2OC(=O)c3cccc3c2c:		1	
OC(=O)CNC:	0	0	0
O=N(=O)c1c2cccc2c(c3cccc13)N(=O)=		0	
CCC1(C(=O)N	0	0	1
C[C@]12C[C@H](O)[C@H]3[C@@H](C[C@H](F)C4=C			0
CCC[C@H]1C	0	0	
OC(C#N)c1cccc1		0	0
CCCOc1cc(N)	0	0	
Cc1ccc2cc3c4[C@H](O)[C@H](O)C=Cc4		1	
C[C@@H]1[C@H]2Cc3ccc(O)cc3[C@]1(C)CCN2C			0
CCC(C)[C@H]1O[C@@]2(C[C@@H]3C[C@@H](CC=C			1
CC1OCC(=O)C(=O)C1O		1	
COc1cc2OC3OC=CC3c2c4OC(=O)C5=C(C		1	
CC[C@H]1NC	0		
CCOC(=O)[C	0	0	
OC1=CC(=O)C(=O)c2cccc12		1	
O=N(=O)c1c2cccc2c3ccc4cccc5ccc1c3c		1	
C\C(=C(\Cl)/C(=O)O)\C=O		1	
OC(=O)CCCC[C@@H]1SC(	0		
OC(=O)C1OC1C(=O)O		0	
Nc1ccc2cc(cc(O)c2c1N=Nc3ccc(cc3S(=C		0	
NS(=O)(=O)c	0		0
OC[C@@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)C=O			0
OS(=O)(=O)c1ccc2nc([nH]c2c1)c3cccc3			0
C\C(=C/C=C/	0	0	1
CN1[C@H](C[C@@H](O)c:	0		
CCCc1ccc(OC)cc1			0
CCCCCCCCCCCCc1ccc(O)cc1			1
COc1ccc2c(C(=O)c3ccc(Cl)cc3)c(C)n(CC(=O)O)c2c1			0
OC1C(O)c2nc3ccc4cccc4c3cc2c5cccc1		0	
CC[C@]1(O)C[C@H](O)[C@@H]2C[C@H		1	

COc1cccc(\C=N\C=N\c2ccc	0			
CCN(CC)c1ccc2c(c3ccccc3C(=O)O)c4ccc(	1			
CNCCCC1c2ccccc2C=Cc3ccc	1			0
[O-][N+](=O)c1ccc2c(c1)c3ccc(c4cccc2c	1			
COc1ccccc1N	1	1		0
CC(C)C[C@H]	0	0		
C[C@@H]1C[C@H]2[C@@H]3CCC4=CC(=O)C=C[C@]			0	
BrCC=C	1		0	
CN(C(=O)C1=	0	0		0
C[C@H]1C[C@H]2[C@@H]3CC[C@](O)(C(=O)CO)[C@			0	
C1COCCOc2ccccc2OCCOCCO1	0			
Cc1occc1SSc2ccoc2C			0	
Nc1cc(N)c(c2ccccc2)c(c1)[N+](=O)[O-]	1			
CCOC(=O)C1(	1		1	0
Cc1c(Cn2ccnc2)c3cc(ccc3n1Cc4ccccc4)[F	1			
CC[N+](CC)(C	0	0		
C[C@@H](O)CCl	1			
[O-]N(=O)=C1CCCC1	1			
OC(CCCN1CCN(CC1)c2ncc(	0			
COc1ccc2[nH	0			
Cc1ccccc1C	0		0	
CC(OC(=O)C)c1ccccc1			0	
O=C=S	1			
N[C@@H]([C@@H]1CC(=NO1)Cl)C(=O)O			0	
ON1c2ccccc2\C(=N/c3ccccc3)\C1(c4ccc	0			
CC1C=C(C=O)C(=CC2CC(C)(C)CC12)C=O	0			
c1ccccc1	0			
O=C=NC1CCC(CC2CCC(CC2)N=C=O)CC1			0	
CCOCN1C=C(F)C(=O)N(C(=O)c2cccc(c2)(	0			
CC(C)CCC[C@	0	0		
CC(=O)CC(=O)Nc1ccc(C)cc1	0			
CCOP(O)OCC			0	
COc1cccc2O(	1	1		1
NCC1OC(O[C	0			
NS(=O)(=O)c	0			
C[C@H](N)Cc1c[nH]cn1	0			
CC=C1CC(C)C(O)(CO)C(=O)OCC2=CC[N+]	0			
Nc1ccc2c3ccccc3c4cccc1c24	1			
CCc1cccc2c3(	0	0		0
OCC1OC2C(OC3=NC(=N)C=CN23)C1O	0			
CC(O)CN(CCN	0	0		0
ClC(=O)c1ccccc1N(=O)=O	1			0
CCOC(=O)O(	0	0		

NC(=N)NCCC	0	0	0
CN1CCc2cc3OCOC3cc2C(=		0	
ClCC(=C)Cl			1
CCCCCN(CCCl	0	0	0
[O-][N+](=O)c1ccc(\C=C\c2cccc(Cl)c2)c			1
CC1CCCC(C)N1NC(=O)c2ccc(Cl)c(c2)S(=O)(=O)N			0
CC(C)(C)CCCCC(=O)OC[C@H]1CO1			1
CCCCCCCC[C@H]1CO1			0
CCN(CC)c1ccc2nc3ccc(cc3[o+]c2c1)N(CC			1
CC[C@H](CO	0	0	
COc1ccc(C(OC(=O)C)C=C)c2cccc12			1
CC(Cl)C(Cl)Cl			0
COC(=O)C1=C(C)NC(=C(C1c2cccc2N(=C	0		1
CCCCCCC(C)(	1	0	
CN1C(=O)N(C(=O)C=C1C(F)(F)F)c2ccc(Cl)c(c2)C(=O)C			0
C[C@@H]1CC=CC=CC=C[C@H](C[C@@H]2O[C@			0
CC(=O)Nc1ccc2cccc2n1			0
OCCNc1ccc(cc1)N=Nc2ccc(NCCO)cc2			1
CN1C2CC(C	0	0	
Cc1c2cccc2nc3c1ccc4cccc34			1
Oc1cccc2c(O	0	0	
CC(=C1CCC(=CC1)C)C			0
O[C@]12C[C	0	0	
Nc1ccc(Cl)cc1N(=O)=O			1
CC(=O)OCC=Cc1cccc1			0
COC(=O)NS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1			0
CC(C)OP(=O)(C)F			0
Cn1c(ncc1[N+](=O)[O-])C(O)c2cc(cc(c2(			0
CCCCOc1ccc(cc1)N=O			1
CCCNc1snc2cccc12			0
CCN1C(=O)NC(C1=O)c2cccc2			0
CC(=O)NC(C(=O)O)C(C)(C):		0	
CC(=O)c1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]			1
CC(C)(C)NCC(O)COc1ccc(O)cc1C2CCCC2			0
NC1CCCC1N	0	0	0
CCN(CC)CC(=O)Nc1c(C)cc(		0	0
CN(C)C(=O)Nc1cccc(OC(=O)NC(C)(C)C)c1			0
CS(=O)(=O)c1ccc(C(=O)C2C(=O)CCCC2=O)c(Cl)c1COCC			0
CC(=C\C(=N\Nc1nccc2cccc12)\C)C			1
OC(CN=N#N)C(O)C(O)C(O)C=O			1
OCC1ccc(Cl)c	0	0	0
Oc1cccc1N2	0	0	
Oc1ccc2c(ccc3c4cccc4ccc23)c1			1

Nc1c2ccccc2nc3ccccc13	0		1
CCN(CCCI)CCCNc1c2ccc(Cl)cc2nc3ccc(O		1	
COc1ccc2CC3N(CCC4cc5OC	1		
CCCC(=O)OC	1		1
CCC1(C(=O)N	0	0	0
Nc1cc(Cl)ccc1Cl		0	0
CN(C)CCC[C@]1(OCc2cc(c	0		
C[C@]12C[C@H](O)[C@H]3[C@@H](CCC4=CC(=O)C=			0
CC(=O)OCC1-	0	0	0
CCC(=O)N(C1CCN(CCc2cccs2)CC1)c3ccccc3			0
COc1ccc2c(c:	0	0	0
CCCCCNC(=O)N1C=C(F)C(	0	0	0
O=N(=O)c1ccc2ccc3c4c(ccc1c24)c5cccc	1		
OC(=O)[C@€	0	0	0
Cc1c(NO)cc(cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[	1		
Cc1ccc2c(Cc3cc(C)ccc23)c1		0	
CC(=O)OCC1OC(Oc2cc(OC	0		
C[C@]12Cc3cnoc3C=C1CC[	0		0
O=NN1CCC(=O)NC1=O		1	
COc1cc(ccc1€	0		0
CC1(C)[C@@	0	0	
C1CN(CCO1)p2(np(np(n2)(N3CC3)N4CC4)(N5CC5)N6€			0
N#CCC#N		0	
CN(C)c1cccc(O)c1		1	1
[O-][N+](=O)c1ccc2N(S\C(=N/C(=O)c3c	1		
CN1C(=O)N(€	0	0	
Nc1cccc2Cc3ccccc3c12		1	
CC(C)NCC(O)COc1ccccc1CC=C		0	
COc1ccc(CNC(=O)C(C)Br)cc1		1	
C[C@@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H]3C[C@@]12CC(=C			0
CCOCCO		0	0
NC(=N)N		0	0
NC1=NC(=O)	0	0	0
CC(C)CN(C[C@@H](O)[C@H](Cc1ccccc1)NC(=O)O[C@			0
COc1cc(OC)c(cc1OC)C2OC2C		1	
Cn1c(ncc1[N+](=O)[O-])C2NC(CO)(CO)C		1	
OC(=O)CCn1c2CC[C@H](C€	0		
CC1(C)CC2C3(C)CC3(C=O)C(=CC2(O)C1)C		1	
CC(C)(C)NCC(O)c1ccc(O)c(CO)n1			0
Cc1cc(ccc1N-	0	0	
CP(=O)([O-])	0	0	
NS(=O)(=O)c	0		0
O=C\C=C\C=C\C=C=O		1	

CC(C)(C)OC(=O)NN=Cc1c[n+][[O-]]c2ccc	1			
Nc1ccc(C=Cc2ccc(cc2)N(=O)=O)cc1	1			
CN(C)c1ccc(N(C)C)c2C(=O)c3c(O)ccc(O)	1			
Cc1c2ccccc2cc3ccc4C(=O)C(=O)C=Cc4c1	1			
CC(=O)Nc1cccc(N)c1	1			0
OC(=O)\C=C\c1ccc(Cn2ccn	0			0
NCC(C[S+](=O)(O)[O-])c1c	0			
OC1C(O)c2cc3ccc4ccccc4c3cc2C5OC15	1			
CCSC(=N)N	0	0		
CC(C)(C)c1nnc(NS(=O)(=O)c2ccccc2)s1				1
Clc1ccc(cc1)C(c2ccccc2Cl)C(Cl)(Cl)Cl				1
COc1ccc(cc1OC2CCCC2)[C@@]3(CC[C@H](CC3)C(=O)				0
CC1OCCc2cc3c(cc12)C(C)(C)C(C)C3(C)C	0			
COc1ccc(cc1OC)S(=O)(=O)N2[C@H](C(=O)N3CCC[C@				0
Clc1cc(Cl)cc(c1)N2C(=O)CCC2=O	0			
CCOC(=O)CC#N				0
Cc1ccc(O)c(\	0	0		
ClCC(Br)CCl			1	
C\C=C(\CC[C@H](C)[C@H]1CC[C@H]2C3=CC[C@H]				0
Clc1ccc(cc1)C#N				0
C[C@H]1OC[	0			
CC1CCc2c1c(C)c(C)c3c2ccc4ccccc34	1			
[O-][N+](=O)c1cnc2c(c1)nc3cccn23	1			
C(Oc1cccc2cnc12)C3CO3	1			
Oc1cc(Cl)ccc1Cl	0			1
C[S+](=N)([O-])CC[C@H](\	0			
CNc1ccc2ccc3ccc(O)cc3c2c1	1			
CC(C)(C)N(CC(O)c1ccc(O)c(CO)c1)Cc2cc	1			
CC[C@@H](C)CCCC(=O)N[C@@H](CCNCS(=O)(=O)[				0
CCN(CC)c1ccc(N)cc1	1			1
CC(=C)C1CCC2(C)OC2C1	0			
Cc1ccccc1N=Nc2ccc(N)c(C)c2N	1			
CCC1(CC)C(=O)NC(=NC1=O)[O-]				0
CCCC(C)C(O)CC				0
O=CN1CCCCC1				0
CO[C@H]1C[C@H](O[C@H]2[C@H](C)[C@@H](O[C@				0
CCCN(C\C=C\C\I)C1CCc2ccccc	0			
CC(N)(Cc1ccc	0	0		0
CC\C=C\C=C\C=C\C=C\C\OCC(O)CO			1	
CC(C)(C)Cn1nc(c2ccc(Cl)cc	0			
CN(C)CCN(Cc	1	0		0
COc1ccccc1CC(=N)N2C[C@	0			
CC(C)C(=O)c1ccccc1				0

CNC1=C[N+](=C(c2ccccc2))	0		
OC1C(O)c2ccc3ccc4ccccc4c3c2C5OC15		1	
CCOC(C)(C)C		0	
CC(C)[C@H](	1	1	
C=CC(=O)N1CCN(CC1)c2ccccc2		0	
C[N+](=O)[O-]CCC(=CC1)c2ccccc2		0	
Cc1ccc(cc1N(=O)=O)N(=O)=O	1		0
OC(=O)CC(=O)C(=O)O			0
Cc1onc(N)c1			0
Fc1cnc2ccc3cccnc3c2c1	1		
CC[C@@]12O[C@]1(C(=O)OC)C(=O)N(C	1		
Nc1ccc(CCNc	0	0	
OC(=O)[C@H]	0	0	0
CC(C)(C)C(O)C(Oc1ccc(Cl)cc1)n2cncn2			0
[O-][N+](=O)	0	0	0
Cc1c(Cl)cnc2ccccc12		0	
CC(C)CCCCCOC(=O)c1ccccc1C(=O)OCCC	0		0
Nc1cccc(c1O)N(=O)=O	0		
CCCCC	0	0	0
Nc1snc2ccc(cc12)[N+](=O)[O-]	1		
C[C@H]1CCC	0	0	
C[C@@H](O)c1ccccc1	0		
COCCCN	0		0
NNc1nccc2ccncc12	1		
Oc1ccc2ccccc2c1N(=O)=O	1		
Cc1cnc2c(n1)c(C)c(C)c3c2nc(N)n3C	1		
COc1c2[C@@H]3C=CO[C@H]3Oc2cc4O	1		
CCCC=[N+](O)[O-]	0		
CCOCC1CO1	1		
CIN1C(=O)CCC1=O			0
CC(=O)C1=C(O)[C@]2(C)C(	0		
O[C@@H](C	0	0	0
COc1cc(CC2CO2)ccc1O	1		
Clc1cc(Cl)c(cc1Cl)N(=O)=O			0
c1nnc[nH]1			0
N#CC1=Cc2cccc3cccc1c23	1		
COC(=O)[C@	0	0	0
[O-][N+](=O)c1cc2CCc3cccc4ccc(c1)c2c:	1		
CC1C=Cc2c1ccc3c2ccc4ccccc34	1		
CC[C@@H](C)[C@H](C)CO	0		
NC1c2ccccc2c3ccccc13	0		
COc1cc2OCC3Oc4c5CC(Oc5ccc4C(=O)C3	0		
CCCCCCCCCCCC[N+](C)(C	0		1

Cc1c2cccc2c(COS(=O)(=O)O)c3cccc13		1	
C[C@]12CCC	0	0	0
COC(=O)Nc1	0	1	
CC[C@H]1OC(=O)[C@H](C)[C@@H](O[C@H]2C[C@H]2)C			0
CCNc1nc(NC(C)CC)nc(OC)n1			0
Cc1cc(C)c2nc3c(ccc4cccc34)c(C)c2c1		1	
CC(=O)OCC(C	0	0	0
NC12CC3CC(CC(C3)C1)C2		0	0
OC(=O)Cc1cc	0	0	0
Cc1ccc2ncccc2c1		1	0
CC(C)CCCC(C)CCCC(C)CCCC		0	0
Oc1cc(F)ccc1c2oc\C=C\3/		0	
Cn1c(N)nc2nc3cccc3cc12		1	
O=C(OCC=Cc1cccc1)C=Cc2cccc2			0
CCCCN(CCCC)	1	1	
[O-][N+](=O)c1ccc2C(=O)OC(=O)c2c1		1	
O1OC2c3cccc3C1c4cccc24		0	
OC(=N)C(=Cc1oc(cc1)N(=O)=O)c2occc2		1	
Cc1cc(N)ccc1N		1	
CC12CCC3C(CCc4cc(O)ccc34)C15CCC2(O		0	
CCCCCCCOC(=O)CCC			0
Oc1ccc2ccc3[nH]c4ccc5cccc5c4c3c2c1		1	
CCOc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]		1	
CC(=O)NCc1c	0	0	0
COc1cc(NS(=	0		0
ON(C=O)c1ccc(cc1)N(=O)=O		1	
CCCCC1Nc2cc(c(cc2S(=O)(=O)N1)S(=O)(=O)N)C(F)(F			0
OCCNc1ccc(cc1N(=O)=O)N(CCO)CCO		1	
[O-][N+](=O)c1ccc2nc3cc(ccc3nc2c1)[N		1	
O=Nc1ccc2O	0	0	
OC1OC(=O)C(=C1CBr)Br		1	
Cc1ccc(COS(=O)(=O)c2ccc(C)cc2)cc1		0	
CC(=O)O[C@H]1Cc2cccc2		0	
CC(NC(C)(C)C)C(=O)c1cccc		0	0
O[C@@H]1C	0	0	
C\C(=C/c1cccc1)\C=C2SC(=S)N(CC(=O)O)C2=O			0
Nc1nc(O)nc2c1ncn2C3OC(CO)C(O)C3O		0	
ClCc1cc2cccc3ccc4cc5cccc5c1c4c23		1	
COC(=O)c1cccc2Oc3c4[C@@H]5C=CO[C		1	
CSc1nc2cc(Cl	1	0	1
Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1		0	0
Nc1ccc(N=Nc2cccc2)c(N)c1		1	1
NC(=O)c1cc[	0		0



Oc1ccc(\C=C\C(=O)c2ccccc2)cc1	0	
[O-][N+](=O)c1ccc(OCC2CO2)cc1	1	
CN[C@@H]1	0	0
CCOC(=O)c1[nH]c2ccccc2c1\N=C\c3ccc(	0	
CCCCCCCCCCCC(=O)OC		0
O=C1C=C2c3cc4ccccc4cc3c5cccc(C1=O)c	1	
CC(=O)OC(c1ccccc1)C(Cl)(Cl)Cl		1
O=N(=O)c1ccc(cc1)C#N	0	
NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(=	0	
CC1CC(CC(C)(	0	0
CCCCCCCCCCCC\C=C\[C@	0	
C[C@@H]1C[C@H]2[C@@H]3CCC4=CC(=O)C=C[C@]		0
CNc1ncnc2c1ncn2C3C[C@	0	
COC(=O)c1c(C)cc(O)c(C)c1O		1
O=CC(=O)c1ccccc1	1	0
COc1cc(NS(=	0	0
N#Cc1cccc2ccnc12	1	
Cc1ccc2c(ccc3[nH]c4ccc5ccccc5c4c23)c1	1	
CN(C)CCOC(=O)c1ccc2c(c1	1	
CC1=CCCC(=C)C2CC(C)(C)C2CC1	0	
CCCCCCCCOc1ccc(cc1)C(=O)O	0	1
CCCC(CC)COC(=O)CC#N		0
CC(C)NCC(O)	0	0
O=C1CC(=Nc2ccccc2)C(=O)c3ccccc13	1	
Cc1ccccc1CCO		0
CCN1C=C(C(=	0	0
CCCC\C=C/C\C=C/CCCCCCCC(=O)NC(C)c1ccccc1		0
CCCCCCCCCCCC(=O)OC		0
[O-][N+](=O)c1cnc(s1)N2CCN(C(=O)C(C	1	
CC(=O)Nc1ccc(Oc2ccc(cc2)N(O)C(=O)C)	1	
COc1ccc(C=Cc2ccc(cc2)N(=O)=O)cc1	1	
CC1(C)C[C@H]2C=C(CO)[C@]3(C[C@@]	1	
OC1C=Cc2c(ccc3c2ccc4ccccc34)C1O	1	
OC(=O)c1ccc	0	0
CCOC(=O)[C@@H](C)C[C@](C)(C[C@H]	1	
CCCCCn1cc[n+](C)c1		0
O[C@@H](CNCCOc1ccc(CC(=O)O)cc1)c2ccccc2		0
CCCC\C=C/C\C=C/CCCCCCCC(=O)OCC		0
Nc1nc2cc(ccc2[nH]1)C#N	1	
COC(=O)c1ccc(l)cc1S(=O)(=O)[N-]C(=O)Nc2nc(C)nc(C		0
CC#CCOC(=O)	0	0
OC1=NC(=O)	0	0
CC(C)CCCCOC(=O)c1ccccc1C(=O)OCCCC	0	0

C[N+]1(CC2COC(O2)(C3CC	0	0
CC(=O)N[C@	0	0
COc1cc(\C=C\C(=O)c2cccs	0	
CN(C)CCCN=C1c2ccccc2Nc3ccccc(c13)N(	1	
Nc1ccc(cc1)S	0	0
CC(N(CC1(O)CCC(O)C(O)C1O)N=O)C(=O	0	
CC(=O)Oc1cc(OC(=O)C)c2(	0	
Nc1ncnc2c1r	0	
CCCC[C@H](CC)COC(=O)c1cccc(c1)C(=O	0	
ClCCN(CCCl)c1ccc2c(ccc3oc(cc23)N(=O)	1	
Cc1cc2c(O)cccc2c3cc4C(O)C(O)C=Cc4cc	1	
C[C@]1(O)CC	0	0
N[C@@H](C	0	0
CC(C)CCCCCOC(=O)CS		0
C(SCc1ccccc1)c2ccccc2	0	
CCN(CC)CCCC	1	1
COC1=C(Oc2cc(OC)c(OC(=	0	
CCCN(CCC)c1c(cc(cc1N(=O)=O)C(F)(F)F)N(=O)=O		1
CC(=C)C(=O)OCCCCCOC(=O)C(=C)C	0	0
CC(C)C1C2CCC(C2)C1N	0	
CCOC(=O)C1OC1c2ccccc2	0	0
CC[C@H](Cc1	0	0
CC[C@@H]1C=C(C)C[C@H](C)C[C@H](OC)[C@H]2O[		0
COC(=O)C(C)Cl		1
CN1C(=O)C=(	1	0
Nc1ccc(cc1Cl)N(=O)=O		1
CC(=O)OC1CC2C3(C)CCCC(C)(C)C3CCC2(	0	
Cc1cccc(Nc2	0	0
CN(C)c1ccncc1	0	0
Nc1cccc2cns12		1
NC[C@H]1O[C@H]([C@H]	0	
CC(C)(C)OCO		0
C\C=C(/Cl)\C1=CC(=O)C23CC2C(C)(C)OC		1
COC[C@H]1OC(=O)c2coc3		0
CNC(=O)Oc1	0	0
CN\C=N\c1ccc(C)cc1C		0
COc1cc(C)c(C=C\C(C=C\C(C=C\C(C(=O)O)\C)\C)c(C)c1		0
CCCN(C(=N)N=NO)N(=O)=O		1
[O-][N+](=O)c1cccc(c1)C#N		1
O=N(=O)c1[nH]cnc1c2ccccc2		1
CO\N=C(/C(=	0	0
COc1cc(ccc1N)N(=O)=O		1
BrCC(=C)Br		1

OCCCC(O)CO			0
NC(C(=O)O)c1ccc(cc1)P(=O)(O)Nc1ccc(cc1)[S+](=O)([O-])	0	0	
CCN(CC)C(=O)c1cc(Cc2ccc(N)c(c2)C(=O)COc1ccc(NS(=O)(=O)c1cc(c2ccccc2c1)[N+](=O))CC[n+] <sub>1</sub> c2ccccc2nc3ccccc13	0	0	0
CC[n+] <sub>1</sub> c2ccccc2nc3ccccc13	1		
CCCCC(CC)COC(=O)CCCCC(=O)O	0		
OC(=O)C(=O)C(=O)O	0		
Cc1ccc(Cl)cc1N	0		
CCNS(=O)(=O)c1ccccc1C	1		
Oc1ccc(cc1)S	0	0	0
CCOC1=CC(=O)C(=NC(=O)C)CC1=O	1		
COc1ccc(cc1)N=O	1		
[O-][N+](=O)c1ccc2C=CCc2c1	1		
CCC(C)COC(=O)C			0
COc1cc(ccc1)C	0	0	
CC1(C)CC2C=C(CO)C3(CC3(C)C2C1)C=O	1		
[O-][N+](=O)C1=Cc2ccc3ccc4cccc5cc1c2	1		
COc1cc(O)c(cc1[S+](=O))(CNC1=Nc2c(nc1)C(=O)OC1C(CC(=O)N)C(=O)c1cc	0	0	0
OC1C(CC(=O)N)C(=O)c1cc	0	0	
NNC(=O)c1cc	0	0	
OS(=O)(=O)c1ccc2ccc3cccc4ccc1c2c34	1		
CC1N(CC2=NCCN2)Cc3cccc1	0		
CN(CCO)C(=O)Nc1ccccc1	0		
O=C(ON(OCc1ccccc1)C(=O)c2ccccc2)c3c	1		
OC(=O)c1cc(Br)cc2ccnc12	0		
Cc1cc(O)c(cc1Sc2cc(c(O)cc2C)C(C)(C)Clc1ccc2N3C=NNC3=CN=C(c4ccccc4)c2c	0		1
Nc1c2C(=O)c	0	0	
[O-][N+](=O)c1ccccc1CC#N	1		
CC1(C)NC(=O)C1	0	0	
ClC1=C(Cl)c2c	1	0	
NC(CCC(=O)NNc1ccc(CO)cc1)C(=O)O	1		
CCCN(Cc1cc	1	0	
Cc1ccc(cc1C)C(OC(=O)NC2CCCC2)(C#C)	1		
CNC1=Nc2ccc(Cl)cc2C(=[N+])([O-])C1)c3ccccc3			0
CCCCCCCCC	1	0	1
COc1ccc(cc1)C(=O)C			0
Oc1c(Cl)c(Cl)cc(Cl)c1Cl	0		1
Cc1nccnc1C	0		

CCCNCC(O)C	1	1		
CCN[C@@H]	0			
CC(C)C1NC(=	0	0		
CC=CC(=O)O				0
CC(C)CC(=O)C1C(=O)c2ccccc2C1=O				1
CCOP(=O)(Oc1ccc(cc1)N(=O)=O)c2ccccc			1	
CC(=O)CC(=O)c1ccccc1				0
C(Oc1ccccc1Cc2ccccc2)C3CO3			1	
Cc1c(C(=NCCO)O)n(=O)c2ccccc2n1=O			1	
CNC(=O)Oc1c	0	0	1	1
C[n+]1cc2c3OCOc3ccc2c4c		0		
Nc1cc(nc(N)	0	0		0
OC1C2OC2c3c(ccc4c5ccccc5c6ccccc6c34			1	
COc1ccc2cc(ccc2c1)[C@H]		0		0
COc1ccc(CON(OC(=O)C)C(=O)c2ccccc2)c			1	
ClCC(=C)Br			1	
CN(CCCCCC	0	0		
c1ccc(cc1)N(c2ccccc2)c3ccccc3			0	
Clc1ccc(Cn:	1			
COc1c2C3C=COC3Oc2cc4Oc5c(CCC(C)(C			1	
CCCCC1CCCC(=O)O1				0
Oc1cnc2ccccc2c1			0	
CN1C(=O)NC(=O)c2c1ncn2		0	0	0
CCCOc1ccc(N)cc1N			1	
CN(C)C(=O)C			0	0
CC[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=C\C(=N\O)\CC[C				1
COc1ccc(cc1)C(c2ccc(OC)cc2)C(Cl)(Cl)Cl			0	1
OCCN1CCN(C	1		0	
O=C1C(=O)c2	0	0		
C[C@@H](O)CN(CC(=O)C)N=O			1	
[O-][N+](=O)c1cc(cs1)C(=O)Nc2ccccc(F)c			1	
CC1=CCCC(=C)[C@H]2CC(C)(C)[C@@H]2CC1				0
C(Oc1ccc2sncc2c1)[C@H]3CO3			1	
CC(C)CP(=S)([S-])CC(C)C				0
OC(C=C)c1ccc2OCOc2c1			0	
CC1c2ccccc2c3cc(C)c(C)cc13			1	
COc1cc(ccc1O)C2=C(O)C(=O)c3c(O)cc(C			0	
Cc1ccc(cc1)\	1	0	0	0
CCC1OC(=O)C	0			
CC=C1CC(=C)C(C)(O)C(=O)OCC2=CCN3C			1	
CC(C)CC1NC(=O)CNC1=O			0	
COC(=O)c1oc(cc1)N(=O)=O			1	
CC(=O)OCC(=	0	0		

Oc1c(cc(c2ccc(cc12)S(=O)(=O)O)[N+](=	1		
O=N(=O)c1cccc(c1)c2ccc(cc2N(=O)=O)N	1		
COc1ccc2C[C@@H]3[C@@H]4CC[C@@H](O)[C@@H		0	
CC(c1ccc(C)c(C)c1)c2ccc(C)c(C)c2		0	
OC1=NC(=O)N(C1)N=CC=Cc2oc(cc2)N(=	1		
CC(=C)c1ccc(C)c2ccc(C=O)c2c1	1		
CC(=C)C(=O)OCCOc1ccccc1		0	
CC1=C(C)C(=O)C(=C(C)C1=O)C	0		
O=N(=O)c1ccc2ccc3ccc(cc3c2c1)N(=O)=	1		
COc1cc(O)c2C(=O)C(=C(Oc2c1)c3ccc(O)	1		
Cn1c(N)nc2c3ncccc3ccc12	1		
CNc1ccc(cc1[N+](=O)[O-])N(CCO)CCO	1		
CC(C)(C)C1CCC2(CC1)CO2	0		
Cc1cccc(c1N(=O)=O)N(=O)=O	1		
Oc1c(cc(c2ccc(cc12)S(=O)(=O)O)N(=O)=O)N(=O)=O		0	
[O-][N+](=O)c1ccc2c[nH]nc2c1	1		
N[C@@H](C	0	0	
CCCCNCCCC	0		0
c1ccc2scnc2c1	0		0
CN1CCc2c(Cl	0	0	
C[C@]1(O)CC	0		0
COc1cc2cc3N(C)CCc4cc(O	0		
COC(=O)c1ccc(C=O)cc1	0		0
Nc1cc(cc(c1)[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1		
OC(=O)O	0		
CO[C@H]1[C@@H](CC(=O)O[C@H](C)CC=CC=C[C@H			0
OC(=O)CN1C(=O)N(Cc2ccc(Br)cc2F)C(=O)c3ccc(Cl)cc1			0
NC(=O)Cl	0	0	0
CCCN(C)(C)C	0	0	
CCCCON(OC(=O)C)C(=O)c1ccc(OC)cc1	1		
CNC(=O)[C@H]1O[C@H]([C@H](O)[C@@H]1N)n2cn			0
CC(=O)OCC(C	0	0	
CCOC(=O)CCl	0		0
OC(=O)C=CC(=O)Nc1ccc(cc1)S(=O)(=O)Nc2nccs2			0
O=C(NCc1cccnc1)Nc2ccc(cc2)N(=O)=O			1
COC1=CC(=O)c2c([nH]cc3c4cnccc4nc23)	1		
CN(C)N=O	1		0
CCC(CC)C(=O)O			0
N[C@@H](CCC(=O)N[C@@H](CSC(=C(C	1		
CC(C)(C)NCC(O)COc1cccc2	0		
SC(=S)N1CCN	0	0	
CCC[C@@H]1C[C@H](N(C)C1)C(=O)N[C@H]([C@H](C			0
CCCN1C(=O)N(CCC)c2[nH]	0		

[O-][n+]1c2ccccc2nc3ccccc13	1		
CN(C)C(=O)c1nc2CN=C(c3ccccc3Cl)c4cc(	0		
CCCCO	1		
lc1ccc(CCNC(=N)SCCCc2c[i	1		
CC(=C)C(=O)OCCOC1CC2CC1C3C=CCC23			0
CCN(Cc1cccc(c1)S(=O)(=O)O)c2ccccc2			0
OCCOc1cc(O)c2C(=O)C(=C(Oc2c1)c3ccc(	0		
CCCCC(CC)COC(=O)c1ccc(C(=O)OCC(CC)(	0		0
CC(CCC(=O)O)C(=O)O			0
CCCCC(CC)COC(=O)c1cccc(c1)C(=O)OCC(	0		
CCC(N)(C(=O)O)c1ccc(cc1)	0		
CC(C)(O)CCc1ccc(O)c2C(=O)c3c(O)c4c(C	1		
O[C@@H]1CCO[P@](=O)(N1)N(CCCl)C(	1		
CCCC[C@@H](CC)COP(=O)(OC[C@H](C(	0		
O1C2C=CC=CC12	1		
[O-]Cl(=O)=O			0
CC(C)CN(N=O)C(=N)NN(=O)=O	1		
CC(C)C\C(=N\O)\C			0
[O-][N+](=O)c1ccc(\C=C\c2ccc(cc2)[N+]	1		
NC(=O)NC(=O	0	0	0
OCC1OC(C(O)C1O)n2cnc3c(NCC(O)COc4	0		
c1ccc2c(c1)ccc3ccnc23	1		
COc1cc2OC3OC4OC4C3c2c5oc(O)c6c(O)	1		
CCCCCOCC1CO1	1		
c1ccc(cc1)C(=O	1	0	0
OC(=O)Cc1sc(nc1c2ccccc2)	0		
CC(C)(C)c1ccc(N)cc1			0
CCOC(=O)c1c	1	0	
ONC(=O)c1ccc2ccccc2c1	1		
CCCN1CN(C)C=C1			0
COP(=O)OC	1		0
Cc1cc2c3ccccc3[nH]c2nc1NO	1		
CCCCc1ccc(Cl)cc1			0
COc1ccc2[nH]cc(C3=CCNC(	0		
Cc1cccc2sc(N)nc12	0		
Cc1c(C)c(N)c(cc1N)[N+](=O)[O-]	1		
CCCCCOCC(=O)CCCC			0
OC(=N)NN=Cc1oc(cc1)N(=O)=O	1		
C=CCN=C=S	0	0	1
BrCc1ccccc1N(=O)=O	0		
CC(=O)OCc1c2ccccc2c(C)c3ccc4ccccc4c1	1		
COC(=O)C12OC1(C)C(OC2=O)C(C)C	1		
C[N+]1(C)CC(=O	0	0	

<chem>Fc1ccc(cc1)C(OCCN2CCN(C</chem>	0		
<chem>Cc1ccc2c(cccc2c1)N(=O)=O</chem>		1	
<chem>CCCOC(C(=O)OC1CCN(C)CC</chem>	1	0	
<chem>Fc1cnc2c(ccc3ccccc23)c1</chem>		0	
<chem>NS(=O)(=O)c1cc(ccc1Cl)C2(O)NC(=O)c3ccccc23</chem>			0
<chem>Cc1ccc2cc3c(ccc4ccccc34)c5C(Cc1c25)O</chem>		1	
<chem>Clc1cccc2CN(Cc12)C3=NCC</chem>	0		
<chem>ClCCSCCl</chem>		1	
<chem>COP(=O)(N)SC</chem>			0
<chem>CN1CC(=O)N=C1NC(=O)Nc</chem>	0		1
<chem>CC(C)(Oc1ccc</chem>	0	0	0
<chem>Nc1ccc2c3ccccc3[nH]c2c1N(=O)=O</chem>		1	
<chem>C[C@H]1[C@@H]2[C@@H]</chem>	0		
<chem>CC=C</chem>		1	
<chem>Cc1cc(C)c(N)cc1C</chem>		1	0
<chem>CC(C)(C)CCCCCOC(=O)c1ccccc1C(=O)OCCCCC(C)(C</chem>			0
<chem>O=N(=O)c1ccc2ccc3c4ccccc4n(=O)c5ccc</chem>		1	
<chem>CC=CC1=C(N2[C@H](SC1)[C@H](NC(=O)[C@H](N)c3c</chem>			0
<chem>CN(C)CCc1c[nH]c2cccc(O)c12</chem>			0
<chem>CCc1ccc2c3ccccc3c4cccc1c24</chem>		0	
<chem>COc1cc2OC(=CC(=O)c2cc1</chem>	0		
<chem>OC(=O)CCCC[C@@H]1SC[C@@H]2NC(=O)N[C@H]12</chem>			0
<chem>COc1ccc2C[C@@H]3c4c(CC[N+]3(C)C)cc(OC)c(OC)c4(</chem>			0
<chem>Nc1cccc(c1)[N+](=O)[O-]</chem>		1	
<chem>Cc1ccc(N)cc1[N+](=O)[O-]</chem>		1	
<chem>BrCc1ccc2c3ccccc3c4cccc1c24</chem>		1	
<chem>CCN(CC)CCO(</chem>	1		
<chem>OCc1c(O)c2C(=O)c3ccccc3C(=O)c2cc1O(</chem>		1	
<chem>COc1ccc2cc(ccc2c1)[C@H](C)CO</chem>			0
<chem>ClC(=C(Cl)C(=C(Cl)Cl)Cl)Cl</chem>		0	0
<chem>O=S1(=O)CC=CC1</chem>		0	0
<chem>CCCCCCCCON(OC(=O)C)C(=O)c1ccccc1</chem>		1	
<chem>CC(C)(C)[N+](=O)[O-]</chem>		0	
<chem>CCCc1cc(O)n</chem>	0	0	0
<chem>Cc1ccc(C)c(O</chem>	0	0	0
<chem>Clc1ccc2C(=C</chem>	1	1	
<chem>NC(CC(=O)O)C(=O)O</chem>		0	
<chem>O=N(=O)c1ccc2sncc2c1</chem>		1	
<chem>CCCCCCCCC=CCC1CC(=O)OC1=O</chem>		0	
<chem>CC1=CC[C@H]2C[C@@H]1C2(C)C</chem>		0	0
<chem>Cc1ccccc2[nH]nnc12</chem>			0
<chem>Cc1cc(C)c(NC</chem>	0	0	0
<chem>[O-][N+](=O)c1cccc(c1)C(F)(F)F</chem>		0	

NS(=O)(=O)c1cc2c(NC(CC3CCCC3)NS2(=O)=O)cc1Cl				0
OC(=O)CCl			0	
COCCCOc1cc	0			0
CC(=O)CCc1ccc2OCOc2c1				0
COc1c2ccoc2nc3cc4OCOc4cc13			1	
CCCOCCO				0
CN=C=O			0	
CN(C)CCCN1c	1	1		0
Oc1ccc2c3ccccc3c4cc5ccccc5cc4c2c1			1	
CCOc1ccc2nc	0	0	1	1
Nc1nc2ccccc2[nH]1			0	0
NCCN	0	0	1	0
O[C@H]1C[C@](O)(C[C@@H](OC(=O))\			0	
COc1ccc2[C@	0	0		
COc1ccc(cc1OC)C(=CC(=O)N2CCOCC2)c3ccc(Cl)cc3				0
N#CSCSc1nc2ccccc2s1				1
Clc1ccc(OCC(=O)OCCNC23		0		
CC1(C)CC[C@@]2(CC[C@]		1		
CCCCS				0
CC(=O)OCC12OOC1(C)c3ccccc3O2			1	
CC(=O)Nc1cc	0	0	0	0
O[C@H]1CC[C@@]2(O)C3		0		
CCN(CC)c1ccc(cc1)N=Nc2ccc(cc2)N(=O)			1	
CCCCCCCCC	0	0		
CC[C@@]1(O)C(=O)OCC2=C1C=C3N(Cc4cc5c(cccc5nc				1
CC(C)[C@@H]1CC[C@H](CC1)C(=O)N[C@H](Cc2ccccc				0
COc1ccc2[nH]c3c(C)cc(N)c(C)c3c2c1			1	
Oc1cc2c3ccccc3cc4ccc5cccc1c5c24			1	
CN(C)c1ccc(cc1)N=Nc2ccccc2C(=O)O			1	
Brc1ccc(cc1N(=O)=O)N(=O)=O			1	
CCCCCCCc1ccc(O)cc1				1
CC1C=C(C=O)C(=CC2(O)CC(C)(C)CC12)C=			1	
NC(CCC(=O)Nc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-])C			0	
CC\C=C/CCOC(=O)C				0
CN(C)c1ccc(cc1)N=Nc2ccccc2COC(=O)C			1	
OC[C@H]1O[C@@H](Oc2cccc3[C@@H]([C@@H]4c5				0
COC1=NN(C(=O)[N-]S(=O)(=O)c2ccccc2OC(F)(F)F)C(=				0
CCO[C@H](Cc1ccc(OCCc2ccc(OS(=O)(=O)C)cc2)cc1)C				0
COc1cc(C)c(C	0	0		0
CC(=O)OC(C)(C)CCCC(=C)C=C				0
CCn1c2ccccc2c3cc(N)ccc13			1	1
CON(C)C(=O)Nc1ccc(Br)cc1			0	0
Nc1ccc(N)c2C(=O)c3ccccc3C(=O)c12			1	1



COCC=O			1	
NCC[S+](O)[O-]	0			
CN1CC[C@@]23CCCC[C@@H]2[C@@H]1Cc4ccc(O)cc				0
CC(=O)Nc1ccc(\C=C/c2ccccc2)cc1	1			
NC1=NC(=O)C(=C(N1)c2ccccc2)Br				0
CO[C@]1(NC(=O)Cc2cccs2)[C@H]3SCC(=C(N3C1=O)C				0
O=N(=O)c1ccc(c2ccc(cc2N(=O)=O)N(=C	1			
CC1CC2OC3C(O)CC(C)(C34CO4)C2(CO)C(	0			
OCC1CCC(COC=C)CC1				0
Nc1ccc(N2C(	0	0		
[O-][N+](=O)c1ccc(CCl)cc1			1	
BrC1CCCC2cc3c(ccc4ccccc34)cc12			1	
CC(COCC(C)OC(=O)c1ccccc1)OC(=O)c2ccccc2				0
Cc1ccc2cc(ccc2c1)[N+](=O)[O-]			1	
Oc1ccc(c1)C2=CC(=O)c3c	0			
Fc1ccc2ccccc2n1			0	
BrCCCCCBr				0
o1ccc2cc3ccc4cccc5ccc(c12)c3c45			1	
NC1=Nc2[nH]cnc2C(=S)N1				0
CC(=O)C1(O)CC(O)c2c(O)c3C(=O)c4c(O)	1			
CC[C@@H](C)[C@H]1O[C	0			
CCCCCCC(CO)CCCC				0
OC1N=C(c2c	0	0	0	0
CCN1CCNC(=O)C1=O			0	
COc1cc(Nc2c(cnc3cc(OCCCN4CCN(C)CC4)c(OC)cc23)C				1
Clc1cccc(n1)C(Cl)(Cl)Cl			1	0
CN(C)CCN(Cc1ccsc1)c2ccccc2			0	
OC(=O)c1cc(	0	0	0	0
O=C1C=CC(=O)C(=C1)c2ccccc2			0	
COCCOC[C@H](CC1(CCCC1)C(=O)N[C@@H]2CC[C@@				0
CC(C)NC(=O)C=C				0
CCCCCCC(CCCC)COc1ccc(cc1)c2ccc(cc2)c			0	
CN1CC(=C[C@@H]2[C@H]1Cc3cn(CC=C			1	
Cc1c(C(=O)c2ccc3ccccc3c2			0	
CN1[C@@H](CCC1=O)c2c			0	0
CC(C)C1CCC(	0	0	0	1
COc1cc(ccc1N=Nc2ccc3c(c			0	
Nc1ccc(N)c(c1)[N+](=O)[O-]			1	
Oc1c(Br)cc(B	0	0	0	1
COC(=O)C[C@H]1[C@@]2(C)[C@H](OC			0	
OC(=O)c1ccncc1				0
CC[C@]12CC	1	0		
Cc1cc(CC(=O)O)c(C)n1c2cc			0	

OCNC(=O)CCI	0	0	
[O-][N+](=O)c1cccc(COC(=O)c2ccccc2)c	0		
OC(CCN1CCCCC1)(C2CC3C	1		0
Oc1ccc(\C=C\C(=O)c2c(O)	0		
Cc1cccc(C)c1	0	0	0
[O-][N+](=O)c1cc2cccc3ccc4cccc1c4c23	1		
CNc1ccc2nc(C)c(C)nc2c1C	1		
Clc1cc2NC(=	0	0	
CC(C)(Cc1c[n	1	1	
Cc1onc(c1C(=	0	0	
COc1ccc(\C=	0	0	0
CC(C)NCC(O)	0	0	0
CCCC(=O)NC	0	1	
O=C1NC(=O)C2CC=CCC12	0		0
CC1CC(C)C(=O)C1=O			0
C1=Cc2cc3c4cccc4ccc3c5cccc1c25	1		
CNN(=O)=O	0		
Nc1cc(c(c2ccccc2)c(c1)[N+](=O)[O-])[N	1		
COC(=O)[C@@H]1CC[C@H](CC1)C(=O)OC			0
CCCCCCCC=O	0		0
CN1CCC(=C2c3ccccc3CCc4cccnc24)CC1			0
Nc1ccc(cc1)C(=C2C=CC(=N)C=C2)c3ccc(I	1		1
CC(C)(C)c1cccc(c1O)C(C)(C)C	0		1
CN([C@@H]:	1		
CCN(CC)[C@	1	0	
S=C=NCc1ccccc1			1
Oc1cc2cccc3ccc4c(ccc1c4c23)N(=O)=O	1		
CN(C)c1ccc2nc3cc(C)c(N)cc3nc2c1	1		
CCOC(=O)C=Cc1ccccc1			0
c1ccc2c(c1)cc3ccc4cccc5c6cccc6c2c3c4	1		
O=C1NC=Nc2[nH]cnc12			0
CCOC[C@@H](O)COc1ccc(NC(=O)CC[S+	0		
CCC(=O)OCc1ccc(OC)cc1			0
O=C(Oc1ccccc1)Oc2ccccc2			0
CCN1CCc2oc	0	0	0
Nc1ncc(s1)[N+](=O)[O-]	1		
NCCCP(=O)(C	0	0	
Oc1cccc2c3ccccc3c4cc5ccccc5cc4c12	0		
C[C@@H]1[C@@H]2Cc3ccc(O)cc3[C@@]1(C)CCN2C			0
CC(C)(c1ccc(OCC(O)CO)cc1)c2ccc(OCC3	1		
Nc1c(O)cccc1[N+](=O)[O-]	0		
O=C(NCc1ccccc1)C2CO2	1		
CC(C)CCCC(C)	0	0	0

CO\N=C(\C(=	0	0		
CC[C@H](C)C	0	0		0
CN1CCN(CC1	0	0		0
CCCC\C=C\C=C/C=C=O				0
OC1COC2C(COC12)O[N+](=O)[O-]			0	
S=C1NC=Nc2[nH]cnc12				0
COc1ccc(NC(=O)\C=C\c2cc	0			
O=C(OCc1ccc	0	0		0
Cc1cc2ccccc2c3ccc4C(=O)CCc4c13			1	
O=C1\C=C/C/c	0	0		
NC(=O)c1ccc	0	0	0	0
OC(=O)CCC(=	0	0		0
CC(=O)Oc1c(OC(=O)C)c2c(ccc3c4ccccc4			1	
CC1CN(CC(C)	0	0		
Cc1ccc2NCCCc2c1				0
CC(O)Cn1c(C,	0	0		
CCCCOC(=O)[C@@H](C)Oc1ccc(Oc2ccc(cc2F)C#N)cc1				0
C[C@H]1O[C@@H](Oc2cc(O)c3C(=O)c4			1	
COc1ccc2ccccc2c1				0
CC\C=C/CCO				0
CC(C)[C@H](	0	0		
CCc1cnc(C(=O)O)c(c1)C(=O)O				0
[O-][N+](=O)c1cc2ccc3cc4ccccc4c5ccc(c			1	
CC1(C)SC2C(NC(=O)C(N)c3ccccc3)C(=O)			0	
OC1CCC2Cc3ccccc3N=C12		0		
Nc1cc(ccc1C(=O)O)N(=O)=O			1	1
C=CC(=O)OCCC#N				0
Cc1cc(ccc1N)	0	0	1	1
CCCCCCCCC	0	0		
[O-][N+](=O)c1ccc2[C@H]3O[C@H]3c4			1	
C1CCc2nncn2	0	0		0
O=C(C=Cc1cccc(c1)N(=O)=O)c2ccccc2			0	
CCNN=NCC			1	
CCC1OC(=O)C[C@@H](O)[C@H](C)[C@@H](O[C@@				0
C[C@@H](O)CN(C)c1ccc(NN)nn1			1	
CCOC(=O)c1ccccc1OC				0
ClCc1ccccc1N(=O)=O			1	0
CN1CCCCC1C	0	0		0
CC(O)C(C)O			0	0
CCOc1ccc(NC	1			0
OC(=O)CC=[N+](O)[O-]			1	
CCc1c2ccccc2c(C)c3c1ccc4ccccc34			0	
O1C2C1c3nc4ccc5ccccc5c4cc3c6ccccc26			1	

Oc1ccc2c(c1)cc3ccc4cccc5ccc2c3c45	1		
CC(O)CC(=O)Nc1ccc(O)cc1	0		
CSc1ccc(cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1		
O=N(=O)c1ccc(SC#N)c(c1)N(=O)=O	1	1	
Cc1nc2cccc2s1	0	0	
OC(CC(O)\C=	0	0	
CC(C)NCC(O)COc1cccc2[nH]c3cccc3c12	0		
CC12CCC3C(CCC4CC(CCC34C)OC(=O)\C=	1		
NC(=O)c1cccc1C(=O)N	0		
Cc1cccc(N)c1N	1	1	
COc1c2OC(=O)C=Cc2c(OC)c3ccoc13	0		
CCCN(CC1CC1)c2nc(C)nc(N	1		
NNc1nccc2ncccc12	1		
C[C@H](CN1CCCC1)C(=O)c2ccc(cc2)C(F)(F)F		0	
O=C1c2cccc2c3c4OCOc4cc5ccnc1c35	1		
COc1nc(NC(C)C)nc(NC(C)C)n1		0	
C1OC1c2cc3cccc3c4cccc24	1		
CCOC(=O)COc1ccc2C(=C(CCN(CC)CC)C(=O)Oc2c1)C		0	
OC(C1CC1)(c2ccc(Cl)cc2)c3ccc(Cl)cc3	0		
Clc1ccc(CO[C@H](Cn2ccnc2)c3ccc(Cl)cc:	0		
Cl[C@@H]1CN(C[C@H]1Cl)N=O	1		
Br\C(=C/c1cccc1)\C=O	1		
CC(=O)NC(=C	0	0	0
OC1CCC(O)(CN(N=O)C(C(=O)O)C(=O)O)	0		
COC1=CC(=O	0	0	0
Cc1ccc(cc1)S(=O)(=O)Oc2ccc(cc2)N=Nc:	1		
CN(C)CCOc1c	1	1	
Nc1nc(O)c2ncn(C3CC(CO)C=C3)c2n1	0		
ON(N=O)c1cccc1	1		
Cc1cc(ccc1N)[N+](=O)[O-]	1		
OCCCN=N	1		
Cc1ccc2c(c1)c3cc4cccc4c5cc6cccc6c2c	1		
CN1CCCC(=C(	1	0	
CN\C(=C/N(=O)=O)\NCCSCc1oc(CN(C)C)cc1			0
N#CCNCC#N			0
CCN(CC)CCO(	1	0	0
CN(C)CCCN1C=CN(C)C1\C=N\O	0		
CCCC(CC)COP(OCC(CC)CCCC)OCC(CC)CC	0		
Clc1ccc(Sc2cc(Cl)c(Cl)cc2Cl)cc1			1
CCCCCCCCOC(=O)c1ccc(C(=O)OCCCCCCC)c(c1)C(=O)C			0
OCC1OC(CC1O)N2C=C(C=O)C(=O)NC2=C	0		
O=N(=O)c1ccc(c2cccc2N(=O)=O)c(c1)N	1		
CCC(=O)OCC(=O)[C@@]1(OC(=O)CC)[C@H](C)C[C@H			0

OC1C2OC2c3c(ccc4c3ccc5ccc(O)cc45)C1	1		
CN1CC[C@H]	1	1	
COC(=O)Nc1nc2ccc(cc2[nH]1)C(=O)c3ccccc3			1
OC1C2OC2c3c(ccc4nc5ccc6ccccc6c5cc34	1		
Nc1ccc2cc(cc(O)c2c1N=Nc3ccc(cc3S(=C	0		
N[C@@H](C	0	0	0
COc1ccc(Nc2c3ccccc3nc4ccccc24)cc1	1		
Cc1cc(O)c2C(=O)c3c(O)c(O)c(O)cc3C(=C	0		
CCc1c(O)ccc2c3CCO[C@@](CC)(CC(=O)(	1		
CC[S+](=O)([O-])N(C)[C@	0		
CC1[C@@H]	0	0	
O[C@H]1C=Cc2c(ccc3c4cccc5ccc(c23)c	1		
CCCCCCCCOc1ccccc1NC(=O)OCCN2CCCC	0		
CC(C)(C)OC(=O)\C=C\c1oc(cc1)[N+](=O)	1		
CC1=Nc2ccc3ccccc3c2C1(C)C			1
OC(=O)COc1ccc(cc1)N(CCCl)CCCl	1		
CCCC\C=C/C\C=C/C\C=C/	0		
CC(=O)Nc1ccc(cc1)S(=O)(=O)Nc2ccc(cc2)N(=O)=O			1
C[N+](C)(C)C	0	0	0
CCCCCCCCCCCC(=O)OCC(C)OC(=O)CCCC(=O)O			0
CCCC[C@@H](CC)CNC[C@H](CC)CCCC	0		
CC(C)(C)NCC(O)COc1cccc2CC(O)C(O)Cc1	0		
CC(=CC1C(C(=O)O)C1(C)C)C	0		
CNCC(O)c1ccc(O)c(O)c1		0	
CC(=O)Oc1ccccc1C(=O)Nc2ncc(s2)N(=O)=O			1
CCCCBr	1		0
Clc1ccc(cc1)(	0	0	0
CC1(C)SC(C)(C)SC(C)(C)S1			0
COc1cc2nc(n	0	0	
Oc1ccc(O)c2C(=O)C=CC(=O)c12	1		
O=P(c1ccccc1)(c2ccccc2)c3ccccc3			0
COc1ccc2c(OC)c3ccoc3nc2c1	1		
ClC(Cl)C(Cl)(Cl)Cl	0		0
CCCCCCCCCCCCOC(=O)CCSCCC(=O)OCCC	0		
Cc1onc(NS(=	0		0
CC(=O)OC(C)(C)C			0
Cc1cc(N=Nc2ccccc2)c(N)cc1N	1		
CCCCOCCOC(=O)C			0
CC(C)(C)NC(=O)C1CCC2C3CC=C4C=C(CCC	0		
O=C(Nc1ccccc1)Nc2cnns2			1
OC[C@@H]1CCCN2CCCC[C	0		
O=n1c2ccc3ccccc3c2cc4c5ccccc5ccc14	0		
COC(=O)c1ccccc1N	0		0

OCCBr			1	0
OC(=O)\C(=C(\C(Cl)Cl)/C(=O)O)\Cl			1	
CN1[C@H]2CC[C@@H]1CC(C2)OC(c3ccccc3)c4ccccc4				0
COc1cc2O[C@H]3OC=C[C@H]3c2c4OC(=O)c1			1	
COC(=O)C(Br)CBr				0
CC(=CCCC(=CC#N)C)C				0
O=C(OCCc1ccccc1)c2ccccc2				0
ClCC1=C(Cl)C(=O)OC1			1	
CCCN1CCc2ccccc2	1	0		
CC(C)CCC[C@H]1CC1	0	0		
NC(=O)c1ncr	0	0	0	
N1C2C1c3cc4ccccc4cc3c5ccccc25			1	
Nc1ccc(cc1)S	0			0
CCCCOC[C@H]1CO1			1	
Oc1ncc(F)c(O)n1			0	
CCOc1ccccc1	1			1
O[C@@]1(C)C	0	0		
O=C1CCN(N1)c2ccccc2				0
OC[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](O[C@@H]1O[C@H](O)C(=O)Nc1cccc2cccnc12			1	
CCCC[C@@H](CC)CO			0	
CCCCC1cc(O)cc(O)c1			0	1
CN1CCN2C(C1)c3ccccc3Cc4ccccc4		0		
CCOC(=O)Oc1ccccc1	1	0		
OCC#C			1	0
OCC(O)COP(=O)(O)O			0	
NNC(=N)N	0	0		0
NC(=O)N\N=	0		1	
COC(=O)CCC(=O)O				0
Oc1c(Cl)cc(Cl)c2cccnc12		0	0	1
OCCNc1ccc(NCCO)c2C(=O)c3c(O)ccc(O)c3			1	
CCc1cc2N(Cc3ccc(cc3)c4ccccc4)C(=O)Nc1		0		
Cn1c(N)nc2c3ccc(O)nc3ccc12			1	
ClP(=O)(Cl)Cl				0
NC(CCC(=O)NC(CS)C(=O)NCC(=O)O)C(=O)N			1	
CN1CCN(CC1)C2=CC(=O)c3[nH]c(C)c4c5ccccc54			1	
CSc1ccc(Cl)cc1			0	0
NC[C@@H]1CC1	0	0		
Cc1ccccc1n1C	0	0		
OC(=O)C=Cc1ccccc1N(=O)=O			0	
CCCCOC(=O)\C=C\c1oc(cc1)[N+](=O)[O-]			1	
ONc1ccc2ccccc2c1			1	
Nc1ccc(cc1)C	0	0		1

<chem>COc1nsc2ccc(cc12)[N+](=O)[O-]</chem>			1	
<chem>COc1ccc(Cl)cc1C</chem>				0
<chem>CC(C)(C)c1ccc(S)cc1</chem>				0
<chem>CCCCOC(=O)c</chem>	0	0	0	1
<chem>Sc1ccc(cc1)N(=O)=O</chem>			1	
<chem>O=N(=O)c1c2ccccc2cc3c1ccc4ccccc34</chem>			0	
<chem>CCCCOC(=O)\C=C/C(=O)OCCCC</chem>			0	
<chem>[O-][N+](=O)c1ccc(Nc2ccccc2)cc1</chem>			0	
<chem>CC1CCC2[C@](C)(CO)C(O)c</chem>		0		
<chem>CCN1CCCC1CNC(=O)c2cc(c</chem>		0		
<chem>COc1nncc2cccnc12</chem>			0	
<chem>O=C(\C=C\C=C\c1ccc2OCOc2c1)N3CCCC</chem>			0	
<chem>Nc1cccc2ccc3ccccc3c12</chem>			0	
<chem>Cc1cccc2c1ccc3ccccc23</chem>			1	
<chem>Oc1ccc(Cl)cc</chem>	0	0	0	1
<chem>COC(=C1[C@H](C(=C(C)N=C1C)C(=O)OC</chem>			0	
<chem>[O-][n+]1cc2ccccc2cn1</chem>			0	
<chem>CN(C)c1ccc(cc1)N=Nc2ccc(NC(=O)C)cc2</chem>			1	
<chem>[O-][N+](=O)c1ccc2N(S\C(=N/C(=O)c3c</chem>			1	
<chem>CC(=O)c1ccc([nH]1)[N+](=O)[O-]</chem>			1	
<chem>CCN1CC[C@</chem>	1	1		
<chem>COc1cc(ccc1N=Nc2cc(c3ccccc3c2O)S(=C</chem>			0	
<chem>COC(=O)C(C)(C)C</chem>				0
<chem>COc1cc2nc(n</chem>	0	0		
<chem>NC1=NC(=O)</chem>	0	0		0
<chem>Fc1cnc2ccc3ccccc3c2c1</chem>			1	
<chem>O=N(=O)c1ccc2ccccc2c1</chem>			1	
<chem>COC(=O)C1=C(C)NC(=C(C1c2ccccc2N(=C</chem>			0	0
<chem>ON(C=O)c1ccc(cc1)c2ccccc2</chem>			1	
<chem>CCN=C=S</chem>			0	
<chem>Brc1ccccc1c2ccccc2</chem>			0	0
<chem>OC(=O)Cc1c[nH]c2ccccc12</chem>			0	0
<chem>Cc1ccc(cc1)S(=O)(=O)OCC2CO2</chem>			1	
<chem>CO[C@@H]1</chem>	0	0		
<chem>CCN(CC)CCNC(=O)c1ccc(NS(=O)(=O)C)cc1</chem>				0
<chem>CCOCOC</chem>			0	
<chem>OC[C@H](O)</chem>	0	0		0
<chem>CC[N+](C)(CC</chem>	0	0		0
<chem>Fc1ccc(cc1Cl)C(=O)Cl</chem>				0
<chem>CCCC(=O)Nc1ncnc2c1ncn2</chem>		0		
<chem>Cc1cc2cc3cc(C)c(N)cc3nc2cc1N</chem>			1	
<chem>N[C@@H](CS\C(=C\Cl)\Cl)C(=O)O</chem>			1	
<chem>CCCOc1ccc2[nH]cc(C3=CC</chem>		1		

Clc1ccc(cc1)c2nc3scn3c2N(=O)=O	1		
CNC(CC(=O)O)C(=O)N(C(C(=O)N)c1ccc(NCCO	0		0
CC1(N(O)c2ccccc2C1=O)c3ccccc3	0		
CNCCCCOc1c	1	1	
CN(C)CCCO:	0	0	
Clc1ccc(Cl)cc	0	0	0
O=C1c2c(ccc3ccccc23)c4ccc5ccccc5c14	0		
O[C@@H]1CO[C@@](O)(CN(CC(=O)O)	0		
CC1=CCC[C@@]2(C)O[C@H]2[C@H]3OC(=O)C(=C)[C(Oc1ccc(cc1)C	0	0	1
Oc1cc2ccccc3ccc4c5ccccc5cc1c4c23	1		
Oc1cc2[nH]c3ccccc3c2cc1[N+](=O)[O-]	1		
Clc1ccc(CC(=O)N2CCCC2C	1		
[O-][N+](=O)c1cc(c(Cl)c(c1)[N+](=O)[O-]	1		
CC(C)[N+]1(C)C2CCC1CC(C	0		0
[O-][N+](=O)c1cccc2cccc(c12)[N+](=O)	1		
C1CCC(CC1)c2ccc3c(c2)c4C	1		
C[S+](=O)([O-])Nc1c(O)cc	0		
OS(=O)(=O)C	0		
Nc1ccc(cc1)N=Nc2cccc(N)c2N	1		
CC(=O)OCC(=	0	0	
CNc1cc(OC)c	1		
CCc1nc(N)nc	0		0
OC(=O)CCc1r	0	0	0
CN1[C@H]2CC[C@@H]1CC(C2)OC(=O)C(CO)c3ccccc3	0		0
C1CN=C(N1)c2cc3ccccc3cr	0		
NS(=O)(=O)c	0		0
CC(=O)c1ccc(C)cc1			0
COC(=O)c1ccc(CN(C)N=O)cc1	0		
CC(=O)Nc1nnc(s1)c2oc(cc2)[N+](=O)[O-]	1		
CC(C)(C)NC[C@H](O)c1ccc(O)cc1Cl			0
CCC(=O)O[C(	0	0	
Cc1cc(CC(=O	0	0	0
CC1CC2(OC3OC(CO)C(O)C(O)C3O)C=C(C	1		
O=Nc1ccc2ccc3c(ccc4ccc1c2c34)N(=O)=	1		
Oc1ccc(cc1)C2=CC(=O)c3c	0		
CC(O)COC(C)(C)C	1		0
CC(=O)OC[C(	0	0	0
c1ccc2c(c1)ccc3nc4ccc5ccccc5c4cc23	1		
CCCON(OC(=O)C)C(=O)c1ccccc1	1		
CCOcn1c(c2ccc(Cl)cc2)c(C#N)c(Br)c1C(F)(F)F			1
CCCCOC(=O)[C@@H](C)Oc1ccc(Oc2ccc(cn2)C(F)(F)F)			0



O=C1CN=C(c2ccccc2)c3cc(ccc3N1)N(=O)=O			0
c1ccc2[nH]nnc2c1	1		0
CN(C)C(=O)Oc1nc(nc(C)c1C)N(C)C			0
Nc1ncnc2c1ncn2C3CC(O)C	0	0	
CN(C)CCNC(=O)c1cccc2[nH]c(nc12)c3cc	1		
COc1cc(c(C)cc1N=Nc2c(O)ccc3cc(ccc23)			0
Nc1ccc(cc1N)c2ccc(N)c(N)c2	1		1
CC1C2C3C(C)C4C(=O)C56C(=O)c7c(O)cc(			0
Cn1cccc1	0		
CCCCCCC#CC(=O)OC			0
COc1cc(N=Nc2c(Br)cc(cc2[N+](=O)[O-])	1		
O=C1CCCCC1C2CCCCC2			0
Nc1cccc1[N+](=O)[O-]	0		
OC(=O)c1ccc	0	0	0
Fc1ccc(cc1)N	1		
[O-][N+](=O)c1ccc2c3ccccc3c4cccc5ccc:	1		
Oc1ccc(cc1)C(=O)c2cccc2			1
O=C1c2cccc2c3cccc13	0		
CCCCCCCCCO(=O)c1ccc(O)cc1			1
CCC(=O)O[C(	0	0	0
Cc1cc2c(OCC	1	0	
CC(c1c[nH]cn1)c2cccc(C)c2C			0
NC(=N)SCCc1	0	0	
COc1ccc2[nH]c(N)nc2c1	0		
Clc1c(cc(cc1N(=O)=O)N(=O)=O)N(=O)=	1		
C(N1CCN=N1)c2cccc2	1		
CC(C)CCCC(C)(C)O			0
ClCC(Cl)CCl	1		0
COc1ccc(cc1O)C2CC(=O)c3	0	0	
CC(=O)OC1C(O)C2OC3C=C(C)C(=O)C(O)(	0		
CCCSSC(=C(C)N(Cc1cnc(C)nc1N)C=O)CCO			0
O=C1NCC2(CCN(CCC3ccccc	0		0
[O-]C(=O)COc1ccc(Cl)cc1Cl			0
CCN(C(=O)C)c1ccc2c(Cc3ccccc23)c1	1		
C1CCN(CC1)C	1		
CO\N=C(\C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C(=			0
COc1ccc2c3ccccc3C(=O)c4cccc1c24	1		
Cc1ccc2C(=O)c3ccccc3C(=O)c2c1	0		1
c1ccc(cc1)c2cccc(c2)c3ccccc3	0		1
CC(C)(C)c1on	0	0	
CN1CCN2C(C	0		0
C1CCN2C[C@@H]3C[C@@H](CN4CCCC[C@H]34)[C@			0
ClC(=O)OCCOCCOC(=O)Cl			0

Clc1cccc2oc3ccccc3c12	0		
CCCC(=O)OC\C=C(/C)\CCC=C(C)C			0
CC(=O)O[C@	0		
CCC(C)C(=O)O			0
COc1c2ccoc2nc3cc(O)ccc13	0		
CCCC[C@@H](O)C1[C@@H](O)C[C@@H](O)C[C@@H](O)C1			0
OS(=O)(=O)c1ccc2N\C=C/3\Nc4ccc(cc4C3=O)S(=O)(			0
CN(C)c1ccc(cc1)N=O	1		0
CCCCCCCCCCCC[P+](CCCC)(CCCC)CCCC			1
NCc1onc(O)c	0	0	
OCC(=O)[C@	0	0	
Oc1ccc(Cl)cc	0	0	0
Cc1cc(C)nc(N	0		0
CCOc1ccc(NC(=O)C)cc1N	1		
Cc1cnc2ccccc2c1	1		
OC(=O)[C@	0	0	
CCCCCCCCCCCC(=O)O			0
CCCN(CCC)CC	1	0	
CCOC(=O)Cc1c(C(=O)O)c2ccccc2n1C	0		
CN1C(=O)C(C	0	0	0
CC(=O)Nc1cccc2cc(F)cnc12	1		
CC1CN(\N=C\c2oc(cc2)[N+](=O)[O-])C(-	1		
O=C1Oc2ccc(c3ccc4cccc1c4c23)N(=O)=O	1		
CCCCCCCCCI			0
Cc1ccc(CC2CO2)cc1	1		
COC(Cc1ccccc1)OC			0
CCOC(=O)C(SP(=S)(OC)OC)c1ccccc1	0		
CC[C@@H](CO)[N+](=O)[O-]	0		
CC(=O)c1c(C)cc(cc1C)C(C)(C)C			0
[O-][N+](=O)c1ccc(OC2CO2)cc1	1		
C[N+](1(C)CCC(=C(c2ccccc2	0		0
OC(=O)c1ccc(cc1)N=Nc2ccc(O)c(c2)C(=O	0		
C[n+](1ccc(cc1)c2ccccc2	0		
CC(C)(C)OOC(=O)c1ccccc1	1		0
O=Cc1oc(cc1)N(=O)=O	1		
CC(=O)O[C@	0	0	0
CCCc1ccc(O)cc1			1
CCCNc1cc(cc(c1O)c2ccccc2	0		
C\C(=N/O)\c1ccc(OCC(=O)N2CCCCC2)cc1			0
CN(C)C(=O)\C=C\c1oc(cc1)[N+](=O)[O-]	1		
COC(=O)[C@H]1[C@H](C[C@@H]2CC[C@H]1N2C)OC			0
CCC(C)NC(=O)C=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-]	1		
CC1=CC(=O)C=C(C)C1=O	0		

CC(=O)Nc1ccc(cc1)S(=O)(=O)c2ccc(N)cc	0		
Cc1cccc(C)c1	0	0	0
C[C@@H]1C[C@H]2OC(=O)[C@]3(C)[C@	0		
OCC(O)CN=N#N	1		
CCC(Oc1ccccc1)C(=O)N[C@H]2[C@H]3SC(C)(C)[C@@			0
CCN(CC)CCCC	1		
NC(=S)NC(=S)N			0
Nc1ccc(C=Cc2ccc(N)cc2S(=O)(=O)O)c(c1)S(=O)(=O)O			0
O=N(=O)c1cccc2c1ccc3ccccc23	1		
CCC1(O)CC(OC2CC(C(O)C(C)O2)N(C)C)c	1		
CCOC(=O)c1cncn1[C@H](C	0		
OC[C@H]1O[C@H](C[C@@H]1O)N2C=C(I)C(=O)NC2=			0
CC(=O)c1ccccn1	0		0
C1CCC(CC1)N	1	1	
CCc1nccnc1CC			0
CN(C)C1CCCCC1	0		
CCCCc1ccc(O)cc1			1
CN1CCCC(C1)OC(=O)C(O)(	0		
COc1cc2CC[N	0	0	0
Cc1cc(Nc2ccccc2C(=O)O)ccc1Cl			1
CC(C)(C)c1cc(O)ccc1O	0	0	0
NCc1cccnc1	0		0
Cl[C@@H]1[C@@H](Cl)[C@@H](Cl)[C@	0		
[O-][N+](=O)c1ccc2c(c1)c(cc3ccccc23)	1		
CN=C(O)C=Cc1oc(cc1)N(=O)=O	1		
C(Cc1ccc(cc1)c2ccccc2)C3CO3	1		
CCCCCCC(=O)OC1CC(C)(C)†	0		
CCCCCCCCC#N			0
O[S+](=O)([O-])CNNC(=O)	0		
OC(=O)CN(C	1	0	
Cc1ccc(C)c2c3C4OC4C(O)C(O)c3ccc12	1		
CN(C)c1ccc(cc1)N=NS(=O)(=O)O	1		
OC[C@H](O)Cl	1		
C\C=C\CCO	0	0	
CCC(=O)Nc1cccc(N)c1			0
OC(=O)\C=C/	0	0	
ClC(Cl)c1ccccc1	1		0
ClC(=O)OCC1c2ccccc2c3ccccc13	1		
ClCCN(CCCl)c1ccc2cc(oc2c1)N(=O)=O	1		
Fc1cccc2ncccc12	1		
C\C=C\C=C(O)\C=C/C=C(/C)\C=C/C1=C(C)	1		
CCC(C)c1nccnc1OC			0
NC(=O)[O-]			0

CCCCC(=O)Cc1cc(O)cc2Oc3c(CCCCC)c(C	0			
Nc1ccc(\C=C\C(=O)O)cc1	0			
NS(=O)(=O)c1cc2c(NC(Cc3cccc3)NS2(=O)=O)cc1Cl			0	
CCC(CCC(C)O)COC(=O)CCCC(=O)O	0			
CCC(C)(C)C(=O)O[C@@H]:	0			
CN1CC(=O)N	0	0		0
OC1C=Cc2ccc3ncccc3c2C1O			0	
IC(I)I	0	0	1	0
C[N+](C)(C)C	0			
Cc1ccc(N)nc1				0
Cc1cccc(c1)N(=O)=O			0	0
COc1ccc(cc1)C(=O)CC(=O)O		0		0
CCOC(=O)CO	1	0		
Oc1ccc2C[C@H](O)C(=O)N2	0	0		
Clc1cccc(C=O)c1			0	
CC(C)C[C@H](NC(=O)[C@H](CCc1cccc1)NC(=O)CN2C(=O)N2				0
Cc1ccc2ccc3c4ccc5c(C)cccc5c4ccc3c2c1			0	
Cn1cncc1[N+](=O)[O-]			1	
O[C@@H]1CO[C@@H]2[C@@H](CO[C@@H]1)C(=O)N2			0	
Clc1cc(Cl)nc(Cl)n1			0	0
CCOP(=O)(CC)OCC			0	
CCn1c(N)nc2c3cccnc3cc(C)c12			1	
C[C@H]1O[C@H](C[C@H](O)[C@H]1O[C@H]2C[C@H](O)C(=O)N2)C(=O)N1				1
CO[C@@H]([C@@H]1Cc2cc3cc(O[C@H]4C[C@@H](O)C(=O)N4)C(=O)N1)C(=O)N1				1
O[C@H]1C=Cc2cc3c(cc2[C@@H]1O)c4ccccc4			1	
COc1ccc2c(c1)C(=O)N2	0			
Cc1ccc(NCCO)cc1O			0	
N(c1ccc(Nc2ccc3cccc3c2)cc1)c4ccc5ccc(N)cc54		1		0
CN1CCC[C@H]1C(=O)N	1	1		0
CCCCC(=O)C				0
CN[C@H](CC)C(=O)N	0	0		
NC(CN1C=CC(=O)N(Cc2ccc(N)cc2)C(=O)N1)C(=O)N			0	
CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)[C@H](N)c3cccc3)C(=O)N2				0
CC(C)CON=O			1	0
Cc1cccc1Br			0	0
CC(\C=C/C#N)\c1ccc(Cl)c(Cl)c1)C(C#N)C(=O)N			1	
CC(C)NC(=NC(C)C)OCc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]			1	
CC(C)(C)C1CCCC1O				0
CCc1oc2cccc(N)cc2c1	0	0		1
Cn1c(N)nc2cc(Cl)ccc12			1	
N[C@@H](C)C(=O)N	0	0		
CC(=O)C(=O)O				0
OC(=O)c1cc(cc1)[N+](=O)[O-][N+](=O)[O-]			1	

COc1ncnc(N[S+](=O)([O-]))	0		
CCC(C(=O)OC	0	0	0
O=CC=O	0	0	1
OCC(COC(=O)C=C)(COC(=O)C=C)COC(=C	0		1
OC(Cc1ccncc1)C(Cl)(Cl)Cl	0		
Cc1c(C)c2c(Cl)c3cccc3nc2c4cccc14		1	
O[C@@H](C(=O)O)c1cccc1			0
CC(C)(Nc1nc(Cl)nc(NC2CC2)n1)C#N			0
C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCc4cc(O)ccc34)[C@@H			0
CCN(C(=O)CCCl)c1snc2cccc12		1	
O=C1Oc2ccc(cc2c3cccc13)N(=O)=O		1	
Oc1cc(O)c2C(=O)C[C@@H	0		
C([C@H]1CO1)c2ccc(Cc3cccc3)cc2		1	
C[C@H]1[C@H]2Cc3ccc(O)cc3[C@]1(C)CCN2CCc4ccc			0
Cc1cc(cc(c1O)[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O	0		
Clc1ccc(Nc2ccc(cc2)N(=O)=O)cc1		1	
Cn1c(N=N#N)nc2c3cccc3ccc12		1	
CC(N)(C(=O)O)c1ccc(cc1)P	0		
Cc1ccc(N=Nc2c(O)c(cc3cc(ccc23)S(=O)(		1	
CCN[C@H](C)Cc1cccc(c1)C(F)(F)F			0
CCCCCCC			0
Nc1nc(cs1)\C(=N/OCC(=O)O)\C(=O)N[C@H]2[C@H]3			0
Oc1ccc(cc1)C	0		0
CN(CCO)CC(C	0	0	0
CO[C@H]1C[C@H](O[C@H]2[C@H](C)O[C@H](C[C@			1
Cc1cc2CCc2c3ccc4cccc4c13		0	
CCCCCCCCS(=O)(=O)Cl			0
CN1CSC(=S)N(C)C1		1	0
COc1cccc1N2CCN(CCN3C		1	
CN1CCC23C4Oc5c(O)ccc(CC1C2C=CC4O)		0	
COc1ccc(CCNCC(O)COc2ccc(C)c2)cc1OC			0
Fc1ccc(F)c2c1ccc3cccnc23		1	
CC(=O)CCC(=	0	0	0
CCCCCCC#N			0
Cn1cc(NC(=C	0	0	0
[O-][N+](=O)c1ccc2ccc3c4C=CCCc4cc5c		1	
CC(C)OC(=O)C[C@@](O)(CC(=O)O)C(=C		0	
Nc1[nH]ccc2nc3cccc3c12		1	
OC(=O)CN(CCN(CC(=O)O)C	0	0	0
C1CN=C(N1)c2ccc(cc2)c3cc4ccc(cc4[nH]		0	
Brc1ccc(NC(=O)c2csc(c2)N(=O)=O)cc1		1	
N[C@@H](C(=O)O)c1ccc(c	0		
[O-][N+](=O)c1ccc2C3OC3c4cccc5c6ccc		1	

CN1[C@H]2CC[C@@H]1CC(C2)OC(=O)c3c[nH]c4cccc				0
OC[C@H]1O	0			
Cc1cccc2c1ccc3c4cccc4ccc23		1		
Nc1cccc1S(=O)(=O)c2cccc2				0
Cl[C@@H]1[C@H](Cl)[C@@H](Cl)[C@@H](Cl)[C@H]				1
N[S+](=O)([O-])Cc1noc2cc	0			
NC(=N)S(=O)O		0		0
c1ccc2nccnc2c1		1		0
O=C1Nc2ccc(cc2C1=O)N(=O)=O		1		1
CN1CCCC1=O		0		0
NC(CSCc1cccc1)C(=O)O		0		
CN1CCC(O)(C	1	0		0
ClCCOCCCl		1		0
[O-][N+](=O)c1oc2ccc(cc2c1)N(CCCl)CCl		1		
CC(C)C(Br)C:	0	0		0
CN1CCN(CC1)C(=O)C		0		
NC(=N)c1ccc2cc([nH]c2c1)C(=N)N		0		
CCC(CO)(CO)N(=O)=O				0
Cc1cccc(N)c1		0		0
CCCCOP(=O)OCCCC				0
CN1CCC[C@	0	0	0	0
CC(O)CC(C)(C)O				0
CC(C)CN		0		
CC[C@@H](C)OC(=O)\C=C\c1oc(cc1)[N-		1		
CN(C)c1ccc(cc1)N=Nc2ccc(OC3OC(CO)C		0		
Nc1ccc(Cc2cc(O)c(N)c(Cl)c2)cc1Cl		0		
CC(C)OS(=O)(=O)C		1		
BrCC(=O)Nc1cccc1		0		
Nc1ccc(cc1)S	0			0
O=C(Nc1cccc1)OCC(CN2CCCC2)OC(=O)Nc3cccc3				0
CCC(=N(=O)O)C(C)O		0		
CNC(=O)CC(N)C(=O)NC(C(=O)NC1C2SC(		0		
CCOP(=O)(OCC)Oc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-		1		
COCC(C)O				0
Oc1c(cc2c3cc(ccc3[nH]c2c1[N+](=O)[O-		1		
CCN(CC)CCO	1	1		0
Clc1cc(c(Cl)c(Cl)c1Cl)N(=O)=O		0		
CC(C)C(=O)OCC\C=C(/C)\N(Cc1cnc(C)nc1N)C(=O)\SS\				0
CCCCCCCOC(=O)C				0
[O-][N+](=O)c1cccc(C=O)c1		1		
[O-][N+](=O)c1ccc(CBr)cc1		1		
CCOC(=O)[C	0	0		
NCc1cccc1S	0	0		0

CCOC(=O)C(C)O				0
[O-][N+](=O)c1ccc(Nc2ccc(cc2)N=C=S)c			0	
CC(=C)c1cc(O)c(C)cc1O			0	
CC1(C)[C@@H](\C=C(/Cl)\C(F)(F)F)[C@H]1C(=O)O[C				1
ClC(Cl)(Cl)CC1CO1			1	
Cc1cc(O)cc(C	0	0		1
CC1OC(C)C(=N1)C				0
COC(=O)Nc1nc2cccc2[nH]1			1	0
COCCOC(=O)C			1	
COc1cccc2c1CC(c3ccc4OCoc4c23)[N+](:			1	
CC(C)c1c(O)c	0	0	0	1
CC(C)(C)c1cccc(O)c1				1
CC(=C)[C@H]1CCC(=CC1)C=O				0
O=C1NC(=O)[C@H]2[C@H]3[C@H](C=C3)[C@@H]1				0
COc1cc(CCC(=O)C)ccc1O			0	0
CCc1c([nH]c2ccc(Cl)cc12)C		0		
Nc1nc(nc2c1ncn2C3CC(O)C(CO)O3)c4cc			1	
Clc1ccc([C@I	1	0		
NC(=S)C(=Cc:	0	0		
CC(C)CCCCCN				0
Nc1ccc2cc3ccccc3cc2c1			1	1
OCN=N			1	
CC(C)(O)C#N			0	0
CCCCCCCCC(	0	0		0
CC(O)CN(CC(C)O)N=O			1	
CCCCCCC\C=	0	0		0
OC(=O)c1cc(ccc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)			1	
Nc1cc(Cl)cc(Cl)c1O			0	
Cc1cc(N)c(C)c(c1N)N(=O)=O			1	
O=N(=O)c1ccc2c(c1)cc(c3ccc(cc23)N(=C			1	
Cc1ccc(NS(=O)(=O)c2cccc3ccnc23)cc1			0	
CN(CCN1CCCC1)CCc2ccc(Cl			1	
c1cc2ccc3cccc4ncc(c1)c2c34			1	
CN(CCC1ccc(Cl)c(Cl)c1)CC(			1	
Cc1cccc1Cl			0	0
[O-][N+](=O)c1ccc2cccc3C=Cc1c23			1	
CC12CCC3C(CCC4CC(O)CCC34C)C1CCC(=			0	
O=C1CCO1	0	0	1	0
N\C(=N/O)\c1cccc1			1	
CC(C)Cc1ccc(	0	0		0
CN(C)CCc1c[nH]c2ccc(O)cc12				0
C[N+]12CCCC	1	0		
CCOC(=O)CN1C(=O)Sc2cccc(Cl)c12				0

CCCCCCCCCCCCC(=O)OCC			0	
[O-]c1cc(Cl)c(Cl)cc1Cl			1	
CCC(N)Cc1c[	0	0	1	
Cl[C@H]1CCCN(C1)N=O			1	
OC(=Nc1cccc(Br)c1)c2csc(c2)N(=O)=O			1	
CCCCCCCC(=O)OCC(C)OC(=O)CCCCCCCC			0	
Nc1nc[nH]n1			0	
CCC(C)C(=O)OCCc1cccc1			0	
C(CCC1CO1)CC2CO2			1	
CSc1nc(NC2CCCC2)c(c(NC		1		
COc1ccc2Oc3cc(O)cc(O)c3C(=O)c2c1			1	
COc1ccc(CN2	0	0		0
CCC(C)Cl				0
C[N+](C)(C)CCNCCc1ccc(cc1)N=Nc2ccc(c			1	
Nc1cccc2C(=	0	0		0
Cc1ccc(C=O)cc1			0	
CNC(=O)Nc1cccc1			0	
O[C@H]1CC[C@@]2(O)[C@H]3Cc4ccc(O)c5O[C@@+				0
CC(C)C(=O)N	0	0		
CN1CCN(CC1)C2=Nc3cc(Cl)ccc3Nc4cccc			0	1
C1CCC2CCCCC2C1				0
CC(C)CC(C)(C)C				0
O=CN1CCOCC1				0
CN(C)CCCN1c	1	1		
Oc1ccc(cc1[N+](=O)[O-])c2ccc(O)c(c2)[			0	
CC[C@@H](C	0	0		0
CC(=O)OCC(=	0			
CCCCCCCC[P+](CCCCCCCC)(CCCCCCCC)CCCCCCCC			1	
N1[C@@H]([C@H]1c2cccc2)c3cccc3			1	
CN1C(O)C(O)N(C)C1=O				0
ClC1=C(Cl)C2(Cl)C3C4CC(C=C4)C3C1(Cl)C			0	
Cc1ccc2cc(C)c3c4C5OC5C(O)C(O)c4ccc3			1	
N[S+](=O)([O-])c1cc2c(NC		0		
OC[C@H]1O[C@H](C[C@@H]1O)N2C(=			1	0
Clc1ccc(C(Cn2ccnc2)OCC(=		0		
CC(C)(C)c1ccc(OP2OCC3(COP(Oc4ccc(cc			0	
Cc1cccc(C)c1	0	0		0
CCC(=O)O[C@@]1(CCN(C)C[C@H]1C)c2cccc2				0
Oc1ccc2CC3N	1	1		
OCC1ccc(F)cc1			0	
CN1C(=O)C[C	0	0		0
OC[C@@H](O)[C@H]1O[C@@H]2O[C@@H](O[C@@				0
C[S+](O)c1ccc(\C=C/2\C		0		



Nc1ccccc1S	1		
COc1ccc(C=O)cc1	0	0	
CN(C)CCC(O)(c1ccccc1)c2ccccc2Cl		0	
CC(=O)OCc1c2ccccc2cc3ccc4ccccc4c13	1		
Oc1ccc2Cc3ccccc3c2c1		1	
CN1CCC(=C2c	1	1	
CC1(C)O[C@@H]2C[C@H]3[C@@H]4C[C@H](F)C5=C		0	
CC(=O)Nc1cc2Cc3ccccc3c2cc1OC(=O)C	0		
CC(C)NC1=C(	0	0	0
O=C1CCCC1			0
Cc1cccc(C)c1	0	0	0
COCCOC(=O)C1=C(C)NC(=C(C1c2cccc(c2)N(=O)=O)C(=			1
Fc1ccc(cc1)\C(=C\C=C\C2ccccc2)\C#N	1		
CC\C(=C(\CC)	0	0	0
Oc1ccc2SC(=	0	0	0
CCCCCCC=C	0		0
CCN1C(Nc2ccc(OCCN3CCCC3)cc2)c4ccccc4C1=O			0
Oc1cc(O)c2C[C@@H](OC(=O)c3cc(O)c(O)c(O)c3)[C@			0
ClC1=C(Cl)C(=O)N(N=C1)C(=O)c2ccccc2	0		
BrCC(=O)c1oc(c(c2ccccc2)c1c3ccccc3)N	1		
Oc1cc2ccc3c4ccccc4c5cc6ccccc1c6c2c35	0		
Nc1nc2c(ccc3ncccc23)s1	1		
COc1nccnc1N[S+](=O)([O-	0		
CCCCNc1ccccc1			0
Oc1ccccc1C(=	0	0	
Nc1ccc(cc1O)c2ccc(N)c(O)c2	1		
CC(=O)Nc1ccc2cccn2c1	1		
[O-][N+](=O)c1ccc2C=C[S+	0		
CC(=O)NNc1ccc(CO)cc1	1		
CC(C)c1ccc(C)c(O)c1	0		
Cc1cc(C)c(cc1N(=O)=O)N(=O)=O	1		
OC1=C\C(=N/c2ccc(cc2)[N+](=O)[O-])\C	1		
C(N(Cc1ccccc1)c2ccccc2)C	0		0
O=CC1CO1	1		
COc1ccc(\C=	0	0	
[O-][N+](=O)c1cc(ccc1F)N=[N+]=[N-]	1		
[O-][N+](=O)c1cccc2c3cc4ccccc5ccc6ccc(	1		
COc1cc2CC[N	0	0	0
CCcn1c(C)c(C	1		
ClCCNC(=O)Sc1[nH]cnc2ncnc12	1		
CC[N+](CC)(C	0	0	0
Cc1cnc2ccc3c(nc(N)n3C)c2n1	1		
CCC(=O)NCC(	0	0	

Nc1c2C(O)CCCc2nc3ccccc1	0	0	0
CC(=O)N[C@	0	0	
CCOC(=O)NNc1nccc2ccccc12		1	0
NC(=O)c1ccc	0	0	
CCCCC[C@	0	0	0
COC[C@H]1CO1		1	
C\C\1=C/CCC2(C)OC2[C@	0		
C=COC(=O)C=C		0	
OC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(=O)=O		1	
Clc1ccc2c(c1)	0	0	0
CN(C)CNc1oc(\C=C\c2oc(cc2)[N+](=O)[		1	
Fc1cc(F)c2ncccc2c1		1	
[O-][N+](=Nc	0	0	1
COC(=O)C(CSCC(Br)c1ccccc1)NC(=O)C		0	
C\C=C\1/C2C	0	0	
ClCl		0	
OC(CN1CCCCC1)c2cc(on2)c3ccccc3			0
CC(O)CCl		1	0
CC12C(O)C=CC3(OC1=O)C4CCC5(O)CC4(		0	
CC(C)CCCC(C)CCCC(C)CCCC	0	0	
C[N+](C)C2CCCC1CC(C2)O(	0		
[O-][N+](=O)c1ccc2ccc3ccc(cc3c2c1)[N-		1	
ClCC(=O)c1ccc(Cl)cc1Cl		1	0
ClC(Cl)C(=C(Cl)Cl)C=O		1	
Oc1ccc(\C=N\n2nnc3c4ccccc4nc3c2O)cc		1	
NC(C(=O)O)c1ccc(cc1)C(=	0		
CCCCCCCCc1	0	0	0
CC(C)(C)OC(=O)OC(=O)OC(C)(C)C		0	
CC(OP(=O)(C)F)C(C)(C)C		0	
CCCCCCCC(=O)OCCCCC			0
[O-][N+](=O)c1c(nc2SCCn12)c3ccc(Cl)cc		1	
FC(Cl)C(F)(F)C(F)(F)Cl		0	
CC(=O)OC1Cc2ccc3ccc4ccccc5cc1c2c3c45		1	
[O-][N+](=O)c1ccc(Oc2ccccc2)cc1		1	
CCOC(OCC)OCC			0
COc1ccc2ncc	1	0	0
CCOc1ccc(cc1)N(O)C(=O)C		1	
CO[C@H]1CN(CCCOc2ccc(		1	
NCC1OC(O[C@H]2[C@H](		0	
CCCCOC(CC)OC(C)COC(O)CC			0
CCCN(CCC)c1c(cc(cc1N(=O)=O)C(C)C)N(=O)=O			1
CCC1OC(=O)(	0	0	
C[S+](C)CC[C	0	0	

CC(=O)OCC1=	0	0		
CC1(C)[C@H]	0	0		
COc1ccc(NC(=O)c2ccc(cc2		1		
CNc1ccc2nccnc2c1C			1	
Nc1ccc2c3ccccc3[nH]c2n1			1	
COc1ccc2oc(cc2c1N(CCCl)CCCl)N(=O)=C			1	
OC(=O)c1ccccc1S				0
CNc1ccc2ncc(nc2c1C)c3ccccc3			1	
CN(C)N=Nc1ccc(C)cc1			1	
CCCCCCCC\C=C/CCCCCCCCCCCC(=O)O				0
CC1C2C(=Nc3ccccc23)N(C)c4c(C)cccc14			1	
O=N(=O)c1ccc(cc1)S(=O)(=O)Nc2ccccc2			0	
CC(=CCC\C=C\C\C\C\C=C\C\C\C=C\C\C1=C(C)C(=O)c2ccc				0
CC(C)(C)NC[C	0	0		
ClCC(Br)CBr			1	
Cc1cccc(c1)N=C(O)c2csc(c2)N(=O)=O			1	
O=N(=O)c1cccc2c[nH]nc12			1	
N[C@@H](C	0	0		0
OC[C@@H](NC(=O)C(Cl)Cl		0		
OC(=O)c1cc(	0	0		
Brc1ccc2[nH]	0	0		
ClC1=C(Cl)C2(Cl)C3C(C(=O)OC3=O)C1(Cl)C2(Cl)Cl				0
CC(=C)[C@H]	0	0		0
OC[C@H]1O[C@@H]([C@		0		
OP(=O)(O)Oc1ccccc1				0
CCC(=O)N(C1CCCC1N(C)C)c2ccc(Cl)c(Cl)			0	
CN(C)c1ccc(C)cc1			1	0
COc1ccc(C=O)cc1OC			0	0
C[C@@H]1CCC[C@H](C)N		0		
CC(=CCCC(=CCCC(C)(O)C=C)C)C				1
Oc1ccc(cc1O)[C@H]2CNc3c(O)c(O)ccc23				0
Oc1ccc2ccc3c(ccc4ccc1c2c34)N(=O)=O			1	
Cc1c2ccccc2c(CO)c3ccc4ccccc4c13			1	
NN(c1ccccc1)c2ccccc2			0	
Cc1cc(c(O)c(c1)C(C)(C)C(C)(C)C			0	1
CC(CC=O)CC(C)(C)C				0
Clc1ccc(cc1)[	1	0		
Cc1cc(O)c2C(=O)C=C(C(=O)c2c1)c3c(C)c			0	
Cc1nnc(NS(=	0		0	0
CCOC(=O)C(=C)C			0	0
CCN(Cc1cccnc1)C(=O)c2cccc(Cl)c2[C@]3(C)C(=O)N(C				1
[O-][N+](=O)c1ccc2c3ccccc4cccc(c5ccccc1			1	
CCCCCCCCC	0	1		

OC(=O)c1occc2cccc2)c1c3cccc3				0	
C[C@@]12CCC[C@](C)([C		0			
OS(=O)(=O)c1cc(Nc2ccc(cc2N(=O)=O)N			1		
Nc1ccc(c(O)c1)[N+](=O)[O-]			1		
CCCC1CCCC(=O)O1				0	
CN(Cc1cc(Br)	1	0			
ClC(=C)C#N			0		
ClCc1cc2c3cccc3c4cccc(c1)c24			1		
N[C@@H](C	0	0			
Nc1cccc(c1)c2cccc2			1		
Cc1nnc(SCC2	0	0			
COc1cccc1C	0	0	0	0	
O=C1CCCCO1				0	
NC(C(=O)O)c1cc(O)cc(O)c		0			
Oc1cccc1N(=O)=O			0	0	
C1CCC(CC1)(N2CCCC2)c3cc		0		1	
CCCCc1ccc2nc(NC(=O)OC)[nH]c2c1				1	
Cc1cc(C)c2nsnc2c1N			1		
Cc1ccnc(N)c1		0		0	
C(CN1CCOCC1)OCCN2CCOCC2				0	
CCCCCCC\C=C\C=O				0	
CCCCN(=O)=O				0	
OC(=O)\C=C(/Br)\C(=O)c1cccc1			1		
COC(=O)CCCC[C@@H]1SC		0			
COC(=O)\C(=C\c1oc(cc1)[N+](=O)[O-])\			1		
O=N(=O)c1ccc2ccc3c4cccc4nc5ccc1c2c			1		
OC1C2OC2c3c(ccc4nc5c(ccc6cccc56)cc			0		
CC(=C)C(=O)OCc1cccc1				0	
BrC1ccc2C3CCCCC3C=Cc2c1			0		
CC\C(=C\C(C)(O)C=C)\C				0	
CC1CC(=CC(C)C1C=O)C				0	
N[C@@H](C	0	0		1	
COC(=O)c1oc(c2cccc2)c1c3cccc3)[N			1		
[O-][N+](=O)c1ccc2cc(c(cc2c1)[N+](=O)			1		
CC(=CCC\C(=C/C#N)\C)C				0	
CN(C)CCc1c[nH]c2ccc(Cn3c		0		0	0
NNC(=O)c1ccncc1			1	0	1
O=C(C(c1ccc	0	0		1	
Cc1nc2c(OCc	0	0			
C[N+]1(C)C2	0	0			
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC[C@@H](O)[C@H]1OC[CC				0	
CN(C)c1ccc2cc3ccc(cc3nc2c1)N(C)C			1		
CCCCCCCCC(	0	0		0	

<chem>O=N(=O)c1ccc(cc1)c2nc3SCCn3c2N(=O)</chem>	1		
<chem>Clc1cccc1C2</chem>	0	0	
<chem>Nc1nnc2[nH]c3cccc3nc12</chem>	0		
<chem>BrC(Br)C(Br)(Br)Br</chem>	0		0
<chem>N\N=C\1/N=NC=C2C=CC=C[C@H]12</chem>	1		
<chem>Cc1c(cc(c(N)c1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[C</chem>	1		
<chem>CC(=O)OCC12CCC(=CC1OC3C(O)C(OC(=C</chem>	0		
<chem>c1ccc(nc1)c2cccnc2</chem>	1		
<chem>ClN1C2C1c3cccc3c4cccc24</chem>	1		
<chem>CC(C)(C#N)c1</chem>	0	0	0
<chem>COc1ccc2C(=CC(=O)Oc2c1)CBr</chem>	0		
<chem>COc1cc2nc(C</chem>	0	0	
<chem>CC12C=CC3=C4CCC(=O)C=C4CCC3C1CCC</chem>	0		
<chem>CCc1cc2cccc2c3ccc4C(O)C(O)C5OC5c4c</chem>	1		
<chem>CC(Cl)c1cccc1</chem>	0		
<chem>CN1C=CC(=O)C(=C1C)O</chem>			0
<chem>CCCCNCC</chem>	0		0
<chem>Cc1ccc(\C=C</chem>	0	0	
<chem>Nc1ccc(c2cccc12)S(=O)(=O)O</chem>	0		
<chem>Oc1cc(cc(O)c1O)C(=O)Oc2cc(cc(O)c2O)C(=O)OC[C@H</chem>			1
<chem>C(C1CO1)c2cccc2</chem>	1		
<chem>Clc1cccnc1</chem>	0		
<chem>O=N(=O)c1ccc(C=Cc2cccc(c2)N(=O)=O)c</chem>	1		
<chem>NC(=O)C1=Cl</chem>	0		
<chem>OCCSc1cccc1</chem>			0
<chem>CN(=O)(CCCl)CCCl</chem>	1		
<chem>[O-][N+](=O)c1ccc2ccc3cc4CCC=Cc4c5cc</chem>	1		
<chem>Nc1cccc2c(N)cccc12</chem>	1		1
<chem>[O-]S(=O)(=O)c1ccc2cccc2c1</chem>			0
<chem>C\C(=C/CO)\ </chem>	0	0	
<chem>CCCCOC(=O)CCC(=O)OCCCC</chem>			0
<chem>CC=C1CC2CC1C=C2</chem>	0		0
<chem>CC(C)C1CCC(c</chem>	0	0	0
<chem>CN1CCC(CC1)</chem>	1	0	
<chem>CCCC[C@H](CC)COP(=O)(Oc1cccc1)C</chem>	0		
<chem>Oc1c([nH]c2ccc(cc12)S(=O)(=O)O)C3=N</chem>	0		
<chem>CC1=C(Oc2cc(O)ccc2C1=O</chem>	0		
<chem>CN(C)c1ccc(Cc2ccc(cc2)N(C)C)cc1</chem>	1		0
<chem>CC(C)NCC(O)COc1cccc1OCC=C</chem>	0		
<chem>C=COCCOCCOC=C</chem>			0
<chem>CCCCCC=CCC(=O)OC</chem>			0
<chem>Cc1ccc(Cl)c(N</chem>	0	0	0
<chem>N[C@H](C(=O)O)c1ccc(O)cc1</chem>			0

CN1C(CNc2cc	0	0		
OC(=O)c1ccc(Cl)c(Cl)c1			0	0
Oc1ccccc1Cc2ccccc2O				1
CCOc1ccc2NC=C(C(=O)NCc3ccccc3)C(=O)c2n1				1
COc1cc(\C=C\2/CCC\C=C/	0			
CN(OC(=O)C)c1ccc(cc1)N=Nc2ccccc2			1	
CC(=O)c1cc(NC(=O)N)ccc1OCC(O)CNC(C			1	
CO\N=C(/C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C(=				0
CCN1C(=O)N	0	0		
O=C(ON(OCc1ccccc1)C(=O)c2ccccc2)c3c			1	
COC1=CC(=O)OC(CCC2ccccc2)C1				0
Oc1cn2Cc3c(	0	0		0
O=NN1CCSCC1			1	
CN([C@H]1C	0	0		
OC1CCN(CC1)N=O			1	
N[C@@H](CN1C=C(F)C(=C		0		
CCCCOC(=O)CCC			0	
CN(C)CCCNc1c2ccccc2nc3c(ccc(c13)[N+			1	
CC(=O)N(O)c1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]			1	
OCCOC[C@H	0	0		
C1OC1Oc2ccccc2			1	
OC(CC(=O)O)	0	0	0	0
Cc1cc(ccc1N(=O)=O)N(=O)=O			1	
CC(C)[C@H](NC(=O)N(C)Cc1csc(n1)C(C)C)C(=O)N[C@				0
CC(C)N1C(=O)c2ccccc2C1=O				0
CCN(CCO)N=O			1	
OCCSSCCO				0
COc1ccc(cc1)C2=NN(CCCC		0		
Oc1cccc(Cl)c1Cl			0	1
Nc1cccc2c1Cc3ccccc23			1	
COc1cc(cc(OC)c1O)[C@H]2[C@H]3[C@			1	
COC1OC1(C)C			1	
CC1CC2OC(=O)C(=C)C2C(O)C3(C)C1C=CC			0	
COC(=O)C1(OC1(C)C(O)C(C)C)C(=O)N			1	
[O-][n+]1c2ccc3ccccc3c2cc4c5ccccc5ccc			0	
Cc1ccc(cc1)[S+](=O)([O-])		0		
OCCOCCOCC	0	0	1	0
CNC(=O)[C@H]1O[C@H]([		0		
CCCO\C=C\C=C\C=C\C=C\C=C\C=C\C=C			1	
Nc1ccc(C(=O	0	0		
ClCc1ccc(cc1)C#N			0	
CC(C)(Br)C(Br)COP(=O)(OCC(Br)C(C)(C)F			0	
CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)C(C(=O)Oc3ccc4CCC				0

CCOC(=S)SSC	0	0	0
C[C@@H]1C	0	0	
Fc1ccc2OCC[	0	0	0
BrCCC(Br)Br			1
COC(=O)C12CC1(C=O)C(C=O)C=C3CC(C)(			1
N[C@@H]([C@H]1C[C@H	0		
CCCC[C@H](CC)C(=O)O			0
CC(C)[C@H]1CC[C@@H](C)CC1=O			0
OC(=O)c1ccc	0	0	0
CC1(C)COP(Oc2ccccc2)OC1			0
CC(C)(C)OOC1(C)C=C(C(=O)C(=C1)C(C)(C	0		
OCN1C(NC(=	0	0	0
O[S+](=O)([O-])CCS		0	
ClC(=O)c1ccc(Cl)cc1			0
CCc1cnc(C2=NC(C)(C(C)C)C(=O)N2)c(c1)C(=O)O			0
CCCCCCCCCCCCCS(=O)(=O)Oc1ccccc1			0
NC(CO)(CO)C	0	0	0
CCCCCCCCc1ccc(O)cc1			1
CC1=C2C(O)C(C)(CO)C=C2C(=O)C(C)(O)C			1
CC(=C)C(=O)OCC1CCCO1			0
NC(=N)NN=C	1	0	
N[C@@H](CCCCP(=O)(O)C		0	
Nc1ncnc2c1ncn2Cc3ccc(cc3)[N+](=O)[O			1
Cc1ccc2cc3ccccc3c(C)c2c1			1
Nc1ccc(Nc2ccc(cc2)[N+](=O)[O-])cc1			1
Cc1ccc(cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]			1
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OCC1=CC=C2			1
S(c1ccccc1)c2ccccc2			0
Nc1c2CCCCc2nc3ccccc13	0		1
CCN(CC)CCn1nc2c3ccc(Cl)cc3Sc4c(CO)cc			1
CSc1nc(N)c2	0		
Oc1ccc2c(OC(=O)c3c2oc4cc(O)ccc34)c1			0
O1C(C1c2ccccc2)c3ccccc3			0
OC(=O)C1=Cl	0	0	0
CC(C)OS(=O)(=O)c1ccc(C)cc1			1
CC(=CCC1C(=	0	0	
C[C@H](CCC#N)C#N			1
CCN1CCCC1CNC(=O)c2cc(c		0	
Oc1cccc(O)c:	0	0	1
Clc1cccc(Cl)c1C#N			0
CN(COC(=O)C)[N+](=O)[O-]			1
CC(C)C[C@H](NC(=O)C)C(=O)O			0
CCCCCCCCCCCCCCCC[n+]1c		0	

Oc1ccc2ccccc2c1N=Nc3ccc(cc3)S(=O)(=O)C	0		
OCCN(CCO)c1nc(Nc2ccc(cc2)S(=O)(=O)[O-])nc(Nc3ccc			0
COc1cc(C=C2CCCC(=Cc3ccc(O)c(OC)c3)C2=O)ccc1O			1
Cc1cc2nccnc2c3nc(N)n(C)c13		1	
[O-][N+](=O)c1ccc(\C=C\c2ccc(Cl)cc2)cc1		1	
c1ccc2cc3cc4ccccc4cc3cc2c1		1	
CCCCOC(=O)CCCCCCCC(=O)OCCCC			0
CCc1cccc(c1)	1	1	0
CC[C@@H](C	0	0	
CC1(C)CC(C(=O)N)C(C)(C)N1O			0
CN(C)c1ccc(c	0	0	0
Oc1c(Br)cc(Br)cc1c2cc(Br)cc(Br)c2OP(=		0	
C[C@]1(O)CC[C@H]2[C@@H]3CCC4=CC(=O)CC[C@]4			0
CN(C)CCCNc1c2ccccc2nc3c(ccc(c13)[N+		1	
COc1cc(OC)c2C3C(OC4OC34)Oc2c1		1	
CCCCC(=O)OC1(CCC2C3CCC4=C(CCC(=C		0	
O=S1(=O)OCCCCO1		1	
CCC=O		0	0
CN(C(=O)C)c1c(I)c(NC(=O)C)c(I)c(C(=O)N[C@H]2C(O)			0
Cc1ccc(N)cc1N		1	1
CCCCCCI			0
NC(=N)c1ccc(OCCCOc2ccc(cc2Br)C(=N)N)c(Br)c1			0
C1c2ccccc2c3ccccc13		0	0
C=CCCC#N			0
CCOC(=O)[C@H](CCc1ccccc1)N[C@@H](C)C(=O)N2C			0
CCC1(CC(=O)O)OCCc2c1[nH]c3c(C)cccc2		0	
C[C@]12CCC(=O)C=C1C=C[C@@H]3[C@@H]2CC[C@			0
[O-][N+](=O)c1ccc(cc1)c2nc3sccn3c2N=		1	
CNC(=O)N(O)C(=O)NC		0	
Nc1ccc(cc1)c2ccccc2		1	0
OC(=O)c1ccccc1		0	0
COc1c(O)cc2C(=O)c3ccccc3C(=O)c2c1C		1	
Nc1ccc(cc1)S	0	0	0
NC(=N)NNc1ccc(cc1)N=NC(=S)N		1	
CCN1C[C@]2(COC(=O)c3c		0	
CCCN1C(=O)I	0		
CCCC(=O)OC			0
OC1C=Cc2c(cc3ccc4c(ccc5ccc2c3c45)N(:		1	
Cn1cnc2f(F)c(Nc3ccc(Br)cc3Cl)c(cc12)C(=O)NOCCO			0
N(Nc1ccccc1)c2ccccc2		1	0
Oc1ccc(C[C@	0	0	0
CCSC(=O)N(CC(C)C)CC(C)C			0
ClCc1ccc(Cl)cc1		0	



CC(=O)Nc1ccc(Sc2ccccc2)cc1	1	
C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=CCCC[C@H]34)[C@H]1C2		1
CC(=O)CC(=O)Nc1ccccc1C	0	0
CCOO	1	
CO[C@@]1(I)C(=O)C1	0	0
Cc1ccc(cc1)[C@@H]2CO2	1	
Ic1ccccc1CN(C)C	1	1
CCC(=O)OCc1ccc(cc1)N(=O)=O	1	
CCN(N)CC	0	
CCOc1ccc(NS(=O)(=O)c2ccc(N)cc2)nn1		0
Nc1ccc(cc1)c1ccc(O)cc1	0	0
CO\N=C(/C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC(=C(N2C1=O)C(=O)N)C1=O)C(=O)N		0
Cl[C@@H]1CO1	1	
OC1C=C2c3ccc4ccccc4c3c5cccc(C1O)c25	1	
Cc1ccccc1NO	1	
COc1ccc(C=Cc2ccc(cc2)N(=O)=O)c1	1	
O=C1CSC(=S)N1	0	
CCCCCCCCCCCCOCCOS(=O)(=O)[O-]		0
CCOC(=O)C1=C(C)NC(=C(C)C)C1	0	
COc1cc(NS(=O)(=O)C)ccc1Nc2c3ccc(cc3)C(=O)N2	1	
Nc1ncnc2nc([nH]c12)c3ccc(cc3)N(=O)=O	1	
OC(=O)CCCCCCCCC(=O)O		0
CN(C)CCCN1C(=O)N1	1	1
CO[C@@H](I)C1=CC=CC=C1	0	0
CC(Br)C(=O)N(C)Cc1ccccc1	0	
[O-][N+](=O)c1cc(F)ccc1F	1	
COc1ccc2c1cc(c3c(cc4OC(=O)C4)C(=O)N2)C(=O)N1	0	1
CCCCC(CC)COP(=O)OCC(CC)CCCC		0
OC1C(O)c2cc3cc(ccc3cc2CC1=O)[N+](=O)C1=CC=CC=C1	0	
COC(=O)c1ccc(c2C(=NCCCN(C)C)c3ccccc3)cc1	1	
ON1CN(Cl)CN(Cl)C1	0	
CN(C)[S+](=O)([O-])c1cc(c1)C(=O)N	0	
CC(CO)CO		0
CCCCCCCCCCCCCCCCBr		0
OC1=C(O)c2cc(O)cc21	1	0
COc1ccc2C=C3N(Cc4cc5OCOc5cc34)Cc1	0	
CC1=C(N2[C@H](O)C(=O)N2)C(=O)N1	0	0
COC(=O)C1=C(C)NC(=C(C1c2ccccc2)N(=O)=O)C1	0	
COC(=O)c1oc(N)c(Cl)c1Cl	0	
C\C=C(\C(=C\C)\c1ccc(O)cc1)/c2ccc(O)cc2	0	1
CC(O)C1C2SC(=C(N2C1=O)C(=O)O)C3CC	0	
CC(C(=O)OCC(=O)N(C)C)c1ccc2Oc3nc(C)ccc3Cc2c1		0
CCCCC(CC)COC(=O)C		0

CN1C(=O)N(	0	0	0
OCCN(CCO)C=O			0
OC1CCCc2c1cc3ccc4ccc(c5ccc2c3c45)[N	1		
NC(=O)c1cccc1[N+](=O)[O-]	1		
Nc1ncnc2c1ncn2c3ccc(cc3[N+](=O)[O-]	1		
CC(C)CCC[C@@H](C)[C@@H]1CC[C@H]	1		
CC(=O)[C@@	0	0	
O=C1NC=CC(=O)N1			0
CN1C(=O)CN2CCc3ccccc3C		0	0
CC(C)Br	1		0
ONc1ccc(cc1)N=Nc2ccccc2	1		
CC(=O)N[C@H]1C(O)O[C@	0		0
Oc1cc2c3ccccc3ccc2c4ccccc14	1		
CC(C)NC(=O)NS(=O)(=O)c1cnccc1Nc2cc	0		0
CCC1=CN(C2(	0	0	
COc1cccc2C(=O)c3c(O)c4C(CC(O))(Cc4c(	1		
O=C(C1OC1c2ccc(cc2)N(=O)=O)c3ccccc:	0		
c1ccc2c(c1)ccc3cc4ccc5ccncc5c4cc23	1		
COc1cc(ccc1O)c2nc(c3ccccc3)c([nH]2)c4	1		
O=N(=O)O[C@@H]1CO[C@@H]2[C@H](CO[C@H]12			0
CCCOC(=O)c1cc(O)c(O)c(O)c1	0		1
N=C1NC=C(S1)N(=O)=O	1		
CCCCOC(=O)C(=C)C	0		0
CCCCN(N=O)[C@@H](CCC)OC(=O)C	1		
CCCCCCCCS(=O)[C@H](C)Cc1ccc2OCOC2	0		
NCC(=O)CCC(	0	0	0
C[C@@H](O)[C@@H]1[C(	0		0
CCC(O)c1ccc(	0	0	0
COc1ccc(CCC	1		
CN(C)CCOC(=O)C(c1cccc1)C2(O)CCCC2			0
O=C(OCc1cccc1)c2cccc3cccn23	0		
CC(=O)OCC(=O)[C@@]1(O)CCC2C3CCC4=CC(=O)CC[C			0
CC(C)(C)N	0		0
CN(C)CCO[C@H](c1cccc1)c2cccc2C	0		
Nc1cc(Cl)c(O)c(Cl)c1			1
Cc1ccc(N)cc1N=[N+](O-)]c2cc(N)ccc2C	1		
Cc1c(cc(N)cc1N(=O)=O)N(=O)=O	1		
CCCCCOC(=O)c1cccc1	0		0
O[C@@H]1C=Cc2c(ccc3c2ccc4ccccc34)[	1		
CC(=C(Cl)C=O)C	1		
Cc1onc(c1)C(	0	0	0
C[N@+]1([O-	0	0	
CC1=C(N2[C@H](SC1)[C@H](NC(=O)[C@H](N)c3ccc(			0

Oc1cc2C(CN(	1	0	
[O-]S(=O)(=C	0	0	0
ClC(=O)\C=C\C(=O)Cl			0
[O-][N+](=O)c1ccccc1C#N			0
NC(CCCP(=O)	0	0	
[O-][N+](=O)c1ccc(C=O)c(c1)[N+](=O)[(		1	
CC(C)(C)c1cci	0	1	0
CC(=O)O[C@H](C=C)c1ccc2OCOc2c1		1	
CCCCCCCCCCCCOCCOCCOC		0	
OC[C@H](O)CCl		1	
COP(=O)(OC)O\C=C/C(=O)O[C@@H](C		0	
Cc1c(N)cc(cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O		1	
CN(N=O)C(=O)NC1C(O)OC(CO)C(O)C1O		1	
CC(C)CCCCCCCOC(=O)c1ccc(C(=O)OCCCCCCCC(C)C)c(c			0
CO[C@]12C[	1	0	0
CCCCC[N+](=O)[O-]		0	
CCOC(=O)C(=O)OCC			0
ClC1=C(Cl)C2	1	0	1
O=N(=O)c1nc2ccccc2[nH]1			1
COc1nsc2ccc(OCC3CO3)cc12			1
CCSCC(N)C(=O)O			0
N=C1Nc2ccc(cc2S1)N(=O)=O			1
c1ccc2c(c1)c3cc4ccccc4c5cc6ccccc6c2c3			1
Cn1cnc2c3cccn3ccc12			1
O=C1Nc2cccr	1	1	
CCO[P@](=O)(Oc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]		1	
Nc1c(Br)cc(B	0		0
Cc1ccc(C=O)cc1C			0
NC1=CC(=O)C(=O)c2ccccc12			1
COc1ccccc1N2CCN(CC3CN		0	
CSc1nc(N)c2ncn([C@@H]:		0	
CC(=O)CN(COC(=O)C)N=O			1
OO[C@@H]1CCCC2ccccc12			1
CC[C@H](C)C(=O)O[C@H]1C[C@H](O)C=C2C=C[C@H]			0
CC(=CC(=O)O)C			0
CCC(Cl)CC(Cl)CC(C)Cl			0
COP(=O)(OC)O\C=C/Cl)\c1cc(Cl)c(Cl)cc			0
Cc1c(nn(c2ccc(Cl)cc2Cl)c1c		1	
C1COCCO1			0
O=N(=O)C1=Cc2c3c1cccc3cc4ccc5ccccc5			1
O=C=Nc1cccc2c(cccc12)N=C=O			0
OC[C@H]1NC[C@@H](O)		0	
COC(=O)c1ccccc1Cl			0

CC1(C)CCC=[I	0	0	
CCCOC(=O)c1cc(Cc2ccc(N)c(c2)C(=O)OC			0
OC(=O)c1ccc(\C=C\C(=O)CCC#N)cc1			0
CN(C(=O)c1csc(c1)N(=O)=O)c2ccccc2			1
O=C1NNC(=O)c2ccccc12			0
CCN1C=C(C(=O)O)C(=O)c2cc(F)c(c(F)c1:			0
CC[C@H]1C[C@@H]2C[C@H]3[C@H]1N(CCc4c3[n]			0
CC(=O)O[C@H]1C[C@H]2CC[C@H]3[C@H](CC[C@			0
NCCO\C=C\[C@H](N)C(=O)O			0
CCCCCCC\C=C\CCCCCCCC(=O)OCCOCC1			0
OC[C@@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)C(=			0
[O-][N+](=O)c1cc(cc(c1Cl)[N+](=O)[O-]			0
[O-][N+](=O)c1oc(\C=N\N2CCCNC2=O)c			1
CN1C(=O)N(CC=C)C(=O)c2			0
[O-][N+](=O)c1ccc2C(=O)c3ccccc3c2c1			1
OCN1C(=O)c2ccccc2C1=O			0
COc1ccccc1NC(=O)[C@H](N=Nc2ccc(cc:			0
COc1cccc(CN2C3C2c4ccccc4c5ccccc35)c			1
CN(C)c1nc(N)c(nc1Cl)C(=C			0
CC(C)CCON=	0	0	1
NCc1ccc(cc1)[S+](=O)(N)[			0
CC(=O)Nc1cc	0	0	0
c1ccc2c(c1)ccc3c4ccccc4sc23			1
Nc1cccc2nc3c(N)cccc3nc12			1
C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=CC(=O)CC[C@]34C			0
CC(C)S(=O)(=O)Cl			1
FC(F)(F)c1cc	1	0	
CC(C)C(Nc1ccc(cc1Cl)C(F)(F)F)C(=O)OC(C#N)c2cccc(C			1
CC(C)Oc1cccc(c1)N2C(=Nc			0
CN1N(C(=O)(	0	0	0
[O-][N+](=O)c1ccc(\C=C\C(=O)cc1			1
CCN1C(=CC=Cc2ccc3ccccc3[n+]2CC)C=Cc4ccccc14			1
CCC(C)c1cccc(C(C)CC)c1O			1
C\C=C\C\C=C/C/CCCCCCCCOC(=O)C			0
Oc1ccc(c(c1)[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]			1
Cc1nc2cc(Cl)ccc2[nH]1			1
Cn1c(N)nc2c3cnccc3ccc12			1
CCOc1nc2cccc(C(=O)O)c2r			0
OCC(=O)N(O)c1ccc(Cl)cc1			0
COC(=O)C1=C(C)N=C(C)C(=C(O)OCCc2cc			0
Fc1cccc(F)c1C#N			0
CCO\N=C(\CC)/C1=C(O)CC(CC1=O)c2c(C)cc(C)cc2C			0
Nc1ccc2cc(cc(O)c2c1N=Nc3ccc(cc3)c4c			1

CCCCC(C)C(OC(=O)CC(CC(=O)O)C(=O)O)	0	
BrCC(=O)c1cccc1	0	0
Cc1cc(cc(C)c1CC2=NCCN2)C(C)(C)C		0
NC(=O)\C=C\c1oc(cc1)[N+](=O)[O-]	1	
CC(C)CCOC(=O)\C=C/c1cccc1	0	
CN(C)CCNC(=O)c1cccc2oc(nc12)c3cccc:	0	
NC(=N)NS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1	0	0
CC(C)OC(=O)Nc1cccc1		0
[O-]P(=O)([O-])OP(=O)([O-])OP(=O)([O-])[O-]		0
CCCCCCCCCCCCOC(=O)C[N+](CC)(CC)CC	0	
Clc1ccc(nn1)	0	0
CCCN[C@@H](C)C(=O)Nc1	0	
Cc1ccc2cc3c(ccc4cccc34)c5CC(O)c1c25	0	
NCc1cccc(CN)c1	0	0
Cc1cc(C)cc(O)c1	0	0
C(c1cccc1)n2ccnc2	1	
CC1CCCC(=O)C1=O		0
NC1=NC2=C(N=CC(=O)N2)	0	
COc1cc(\C=C/C)ccc1O	0	
Cc1nccn1c2ccc(Sc3cccc(c3)C4(CCOCC4)C(=O)N)cc2		0
CC[C@H]1OC(=O)C[C@@H](O)[C@H](C)[C@@H](O)[		0
C[C@H](Cc1cccc1)Nc2ncr	0	
Nc1nc(N)c(n	1	
C\C=C/C=C/C=C(\C)/C=C/C=C(\C)/C=CC1=C(C)CCCC1(		0
CCC(=O)OC(=O)CC		0
ON(C=O)c1ccc2cccc2c1	1	
[O-][N+](=O)c1ccc2Cc3cccc3c2c1	1	
CC(CCC(=O)O)C1CCC2C3C(CCC12C)C4(C)	0	
CC(C)(NC(=O	1	
C[C@H](NC[C@H](O)CP(=	0	
CC1=CC(O)CC(C)(C)C1		0
Cc1ccc2cc3ccc4cccc4c3nc2c1	1	
Clc1cc(Cl)c(Cl)cc1Cl	0	0
COc1cc2c(C=O)c3N(C)CCc4	0	
O=N(=O)c1cccc2c3cccc3[nH]c12	1	
CC(=O)OCc1ccc(cc1)N(=O)=O	1	
ClC1=C(Cl)[C@@]2(Cl)[C@H]3COS(=O)OC[C@H]3[Ce		1
CCCCCCCCCCCCCCCC	0	
Cc1c(OCC(F)(F)F)ccnc1[S	0	
C[C@@H](O)C(=O)C	0	
CCCN(CCC)[C@H]1CCc2c(F	0	
CN(C)CCNC(=O)c1cccc2nc3cccc3nc12	1	
Cc1cccc1CN	0	0

S=C=Nc1ccc(	0	0	0
Fc1ccc(cc1N(=O)=O)N(=O)=O			1
OC1=C(Oc2cc	0	0	
Cc1c(N)cccc1N(=O)=O			0
Clc1ccc(NS(=O)(=O)c2cccc3cccnc23)c(Cl			0
Nc1cccc2c3cccc4cccc(c12)c34			1
CC(=O)Nc1ccc2c3ccc(O)cc3c4cccc1c24			1
[O-][N+](=O)c1ccc(cc1)C(=O)\N=C\2/SI			1
OC1(CCN(CCCC(c2ccc(F)cc2)c3ccc(F)cc3)CC1)c4ccc(Cl			1
CC(C)[C@@H]1CC=C(C)[C@H]2CC=C(C)(			0
Oc1nc(O)c2n	0	0	
OC(=O)CCCC(	0	0	0
O=N(=O)c1ccc2c(Cc3ccccc23)c1			1
COc1ccc(CN(CC[N+](C)(C)[O-])c2ccccn2			0
O=C1c2ccccc2c3c1ccc4ccc5ccccc5c34			0
CC(=O)Nc1ccc(Oc2ccc(cc2)[N+](=O)[O-]			1
CC[N+](=NC)[O-]			0
OC=Nc1nc(cs1)c2oc(cc2)N(=O)=O			1
Nc1nc(NO)c2[nH]cnc2n1			1
CN(NO)C(=O)c1ccccc1			1
CCCCN(CCC(=O)O)N=O			1
O=C(CCN1CC	1	0	0
[O-]C(=O)CC[	0		
CNC(=O)NC			0
COc1cc(cc(OC)c1O)[C@H].		0	
Cl[C@H]1OCCO[C@@H]1Cl			0
N[C@@H](Cc1ccc(cc1)N(C		0	
CN1C(=O)COc2c1cc(Cl)cc2		0	0
CCCCN(N=O)C(CCC)OC(=O)C			1
[O-][N+](=O)c1c2ccccc2cc3ccccc13			1
OC1(CCCCC1)C#C			0
CC(C)(S)C(=O)NC(CS)C(=O)O			0
CN1\C(=N\N)\Sc2ccccc12			1
CC(=O)N[C@@H](CC(=O)C		0	
OC1C(=O)C(=O)C1=O			0
COc1ccc2ncc	1	0	
O=N(=O)c1ccc2oc3ccc(cc3c2c1)N(=O)=(			1
Nc1ccc2nc3cc(N)ccc3nc2c1			1
CCC(=O)O[C@@]1([C@@H](C)C[C@H]2[C@@H]3C[C			1
NC1(C[C@H]([C@H](C1)C(		0	
Cc1cc(c(C)c2c3ccccc3[nH]c12)[N+](=O)[			1
CC(C)[C@H](	1		1
Cc1cc(C)cc(c1)N=Nc2c(O)ccc3ccccc23			0

COc1cccc2c1cc3N([C@@H]4O[C@H](C	0		
NC1=NC(=O)N(C=C1)C2CO[C@H](CO)O2			0
CIN1C(=O)N(	0	0	0
CC1OC(OCC2OC(OC3=C(Oc4cc(OCCO)cc	0		
C1CC(CCl)OP(=O)(OC(CCl)C(Cl)OC(CCl)C(Cl	1		
[O-][N+](=O)c1cccc2c1ccc3ccccc23	1		
CCSS\C=C('	1	0	
CN1CC(=C[C@@H]2[C@H]1Cc3c[nH]c4c	1		
CO\N=C(/C(=O)N[C@H]1[C@H]2SCC=C(N2C1=O)C(=C			0
Cc1ccc(cc1)S	0		0
CC(C)OCC1CO1	1		0
Cc1cc(N)sn1	1		
ClC\C=C\CCl	1		0
Cc1ccc2c(C)c3ccc4C(O)C(O)C=Cc4c3nc2c	1		
COc1cc(\C=C\C(=O)OC2CCC34CC35CCCC6	0		
OC(=O)C(Cl)Br	1		
CC(C)CC1NC(=O)C(CCCN)N	1		
CN(N=O)C(OC(=O)C)C(=O)C	1		
C[S+](C)CCC(N)C(=O)O			0
CCOc1ccc2nc(sc2c1)[S+](=	0		
CC(Cc1ccc(OCC(=O)O)cc1)NCC(O)c2csc(n2)C(F)(F)F			0
CC1(C)CC2C(O)(C1)C=C(C=O)C34CC23C(-	1		
CC=C(C)C(=O)OCCC(C)CCC=C(C)C			0
COC1CC2CN3	1		
Oc1ccc(cc1)C(=O)\C=C\c2ccccc2	0		
Oc1ccc(cc1)C2CC(=O)c3c(C	0		0
COc1ccc(cc1OC)C(=O)N2CCN(CC2)c3ccc	0		
Cn1ccnc1S	0	0	0
Oc1c2nc3ccccc3c2nnc1\N=C\c4ccc(Cl)c	1		
CNC(=NCCSCc1oc(CN(C)C)cc1)C=N(=O)C	0		
CCN(CC)C(=O	0	0	
OCC1O[C@H	0	0	
OCCCCOC(=O)C=C			0
[O-][S+](=O)(N1CCCNCC1)	0		
C[C@H](NCCc1ccc(O)cc1)[	0		
Oc1ccc2ccc3[nH]c4cc(c5ccccc5c4c3c2c1	1		
CCOC(=O)C1-	0	0	
ClCc1cccc2c3cccc4cccc(c12)c34	1		
Nc1nc(Cl)nc2	0		
CN1C(=O)C=C(NCCN(CCO)CCCc2ccc(cc2)N(=O)=O)N(C			0
COCCO	0		
Cc1cccc2cc3ccc4ccccc4c3nc12	0		
O[C@H]1C=C	0	0	0

CC1=C(CCN2CCCC(C2)c3noc4cc(F)ccc34)C(=O)N5CCCC[	0	
CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)[C@@H](c3ccccc3)S	0	
CCCCCCCC\C=C/CCCCCCCC(=O)OCCO	0	
CCC[C@H]1C	0	0
CCN(CC)CCCC(C)Nc1cc(OC)cc2cccnc12	1	
Nc1ccc(Oc2c(Cl)cc(Cl)cc2Cl)cc1	1	
CCCCc1ccc(N)cc1		0
Cc1c2C3OC3c4ccccc4c2c(C)c5ccccc15	1	
Clc1ccc(Cl)c1C=O	0	0
OC[C@@H]1	0	0
CC(O)C(CO)C(C)O		0
CC(=O)OCc1ccccc1	0	0
CCCNC(=N)NCCC[C@H](N)	0	
CCCCCCCCOC(=O)C(=C)C	0	
CCCCCCCCC	0	0
[O-][N+](=O)c1ccc2c(c1)c3cc4ccccc4c5c	1	
OS(=O)(=O)Oc1ccc2ccc3cc4ccccc4c5ccc	1	
COC(=O)c1ccccc1S(=O)(=O)NC(=O)N(C)c2nc(C)nc(OC		0
CCC(=O)NCc1ccccc1	0	
CC(C)CCOS(=O)(=O)C	1	
Fc1cccc2c3c(ccc12)c4cccc5cccc3c45	1	
[O-][N+](=O)c1ccc2nc3c(cc2c1)c4ccccc5c	1	
CN(C)CCCN(C)CCCN(C)C		0
CCN(CCCc1cc	1	0
OCc1cccc(c1)[N+](=O)[O-]	0	
Oc1ccc(Nc2ccc(cc2[N+](=O)[O-])[N+](=	1	
CN(C)CCNC(=O)N1c2ccccc2C(=O)c3ccccc	1	
CCCCOO	1	
COc1cccc2sc(N)nc12	1	1
COCC1CN(C)C2Cc3cn(C)c4cccc(C2=C1)c3	1	
CC(N)(C(=O)O)c1ccc(cc1):	0	
O=C\C=C\C1c	0	0
CC(=O)NC(CS)C(=O)O	1	
COc1ccc(cc1N=Nc2c(O)c(cc3ccccc23)C(-	1	
CN1CCOC(c2ccccc2)c3ccccc3C1		0
CCN(CC)CCOC(=O)C1(CCCC	0	
Brc1ccc(cc1)c2ccccc2	0	0
C[C@@]12C	0	0
OC(=O)c1cc2OCOc2c3c4ccccc4cc(c13)[N	1	
C1CCN(CCCl)P1(=O)OCC(=O)CO1	1	
COC(=O)c1c(O)c2ccccc2c3OC(C)(C)C=Cc	1	
CCCCCCCCCCCC=C	0	0
Cc1ccc(cn1)c	0	0



Brc1nc2ccccc2s1			0	
CCCCCCC1CO1		0		
c1ccc2c(c1)sc3ccccc23	0			0
CCCCCOC[C@H]1CO1		1		
Cc1occc1S				0
C=C1CC(=O)O1		0		
O=Cc1cccc(c1)N(=O)=O		1		0
C1COCO1		0		
CCOC(=O)C(C	0	0		
C[C@@H]1[C@H]2CC[C@H]1	0			
CCOC(=O)C(CS)NCCNC(CS)C(=O)OCC				0
CN1[C@@H]2CC[C@H]1C(C	0			
O=C(CC(=O)c1ccccc1)c2ccccc2				1
CCN(CCC)CCCNc1c2ccccc2nc3c(OC)cccc		1		
Oc1c(N=Nc2ccc(cc2)S(=O)(=O)O)c3ccc(		1		
CCCCCN(CCCOC)C(=O)C(CCC(=O)O)NC(=		0		
CCOc1ccc2C[	0	0		0
COc1ccc(cc1)C2OC2C(=O)c3ccccc3		1		
CC1=CC(=O)Oc2cc(O[C@@	0			
CCOC(=O)OC	0	0		
[O-][N+](=O)c1cc2C(=O)c3cc(cc(c3c2c(c		1		
O=N(=O)c1ccc2C3OC3c4cccc5ccc1c2c45		1		
CCOP(=O)(NC(C)CC)Oc1cc(C)ccc1[N+](=		0		
NC[C@H](O)	0	0		0
CCCC(=O)O[C	1	0		
Clc1ccccc1C2CS\C(=C(/C#N)\n3ccnc3)\S2				0
CC(C)N1C(=O)c2ccccc2NS1(=O)=O		0		
OC(CC(C1C(=	0	0		
Cc1cc(ccc1N=Nc2ccc(N)cc2)N(CCO)CCO		0		
CCN(CC)C(=C	1			
COc1ccc2nc3cc(Cl)ccc3c(NCCCNCCCl)c2c		1		
CN(C)C=O		0		0
C\C=C\C=C\C=C=O				0
CN1C(=C(O)c	0			1
C[C@](N)(Cc	0	0		0
CN1C2=CC=CC(=[NH2+])C2=Cc3ccccc13		1		
CC(C)C(O)(C(C)O)C(=O)OCC1CCN2CCCC1		0		
N[C@@H](CN1C=CC(=O)C	0			
CCOC(=O)OCC\C(=C(/C)\N(Cc1cnc(C)nc1N)C=O)\SC(=				0
CC(C)Nc1ccc(Nc2ccccc2)cc	0	0		
CCOC(=O)c1c	0	0		1
CC1OC1C2CCC3(C)OC3C2				0
Cc1c(nn(c2ccc(O)cc2)c1c3		1		

CCCC1CCC(=O)O1				0	
CCOC(=O)N1CCN(CC1)[N+]	0				
COc1ccc(C=CC)cc1				0	
Cc1ccc2cc3c4C=C[C@@H](O)[C@H](O)c			1		
CCC(C)(C)C(=O)OC1=C(C(=O)OC12CCCCC2)c3cc(Cl)cc(				1	
C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=CC(=O)CC[C@H]34				0	1
CN(C)[C@H]1[C@@H]2[C@@H](O)[C@@H]3C(=C)c4				0	
C[N@+]1([O-	0	0			
NC(=O)c1ccc	0	0	0	0	
OC(=O)CC[N-	0	0	1		
CC(C)(C)NC[C	0	0		0	
C(C1CO1)c2ccc(cc2)c3ccccc3			1		
CC(C)(C)S				0	
CN(Cc1ccccc:	0	0		0	
CC1=CC(=O)CCC1				0	
OC1C=Cc2c(cc3ccc4cccc5ccc2c3c45)C1C			1		
CCCC(=O)c1cc(O)c(O)cc1O			1		
Cc1ccc2c(CO)c3ccc4ccccc4c3nc2c1			0		
CCC(C)OC(C)CC				0	
O[C@@H]1CCCN[C@H]1CC(=O)CN2C=Nc3cc(Br)c(Cl)				0	
COc1ccc(Cc2,	0	0	1	0	
CC(C)(C)C(=O)C1C(=O)c2ccccc2C1=O			0	1	
N1c2ccccc2S	1	0	0	1	
Nc1c(cc(c2C(=O)c3ccccc3C(=O)c12)N(=			1		
COC(C)COC(C)COC(C)CO				0	
CC(C)c1ccc(Cn2ccc3c2ccc4		1			
COc1ccc2cc(ccc2c1)[C@H](C)C(=O)O				0	
Cn1c(N)nc2nc3cccnc3cc12			0		
NCC(=O)O		0	0	0	
CC(=O)[C@]1	0	0			
COC(=O)c1oc(c(Cl)c1Cl)[N+](=O)[O-]			1		
O=C1CCCc2ccccc12				0	
CCC(C)(C)C			0		
CC(=O)OC\C=C(/C)\C=C\C=C(/C)\C=CC1=C(C)CCCC1(C				0	
OC1C(O)C(OC1COP(=O)(O)O)n2cnc3c(O			0		
Cc1cccc2ccccc12)[N+](=O)[O-]			1		
CC(CCCC(C)(C	0	0		0	
c1cc2ccc3ccccc4ccc(c1)c2c34			1	1	
CC1=NN(C(=O)C1)c2ccc(cc2)S(=O)(=O)O				0	
CCC(C1OC(CC)(CC1C)C2CC[		0			
[O-][N+](=O)c1ccc2c(c1)c3ccccc4cccc2c3			1		
O=Nc1c(nc2scn12)c3ccc(cc3)N(=O)=O			1		
OC(=O)c1cc(cc2cccnc12)[N+](=O)[O-]			1		

CCOP(=O)(OCC)OCC			0	0
CC(C)C(=O)O	0	0		
[O-]S(=O)(=O)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F				0
COC1\C=C\OC2(C)Oc3c(C)		0		
OC1COC(OCC2OC(Oc3ccc4C(=O)c5ccccc			0	
CCc1ccc2Sc3	1	1		
OC(=O)c1ccc(cc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)			1	
CC(C)[C@H](NC(=O)[C@H](CC(=O)O)NC(=O)[C@H](C				0
CC1(CO1)c2ccc(Cl)cc2			1	
Oc1ccc(cc1CC=C)S(=O)(=O)c2ccc(O)c(CC=C)c2				1
BrC(Br)N(=O)=O				1
CCOP(=S)(OCC)S[C@@H]1OCCO[C@H]1			1	
CN1SC(=CC1-	0	0	1	0
CCCC[C@@H](CC)COCCCN			0	
CCCCC(CC)COCCCN			0	
CC(=O)N(O)c1ccc2c(Cc3ccccc23)c1			1	
CC(=O)CC(=O)Nc1ccc2NC(=O)Nc2c1				0
CC(=O)O[C@	0	1		1
C[C@@H]1CC[C@H]2C(C)(C)[C@H]3C[C@@]12CC[C@				1
OP(=O)(Oc1ccccc1)Oc2ccccc2				0
CCCCOP(=O)(OCCCC)OCCCC			0	0
CCCCCCCCN(C)C				0
NCCCN(CCO)CCO				0
CC(C)(C)c1cc	0	0		0
Cc1ccc(Cl)cc1Cl				0
CC12CCC3C(CCC4=C3CCC(=O)C4)C1CCC2			0	
CC(=O)CCc1ccc(O)cc1				0
CC(=O)C(C)(C)C				0
CCON(OC(=O)C)C(=O)c1ccccc1			1	
CC(C)c1ccccc1O				0
CCN(CC)CCO(	0	0		
[O-]C(=O)CS				0
CN(C)c1ccc(cc1)C(c2ccccc2)c3ccc(cc3)N			0	1
CC(=O)N(O)C	0	0		0
N[C@H]1COI	0	0		
Fc1ccc(CN(C	1	1		
Nc1ncnc2c1ncn2C3OC(CO)C(O)C3O			0	
CCOCCC(=O)OCC				0
NC\C=C/C(=C	0	0		
Nc1nc(NO)c2ncn(C3OC(CO)C(O)C3O)c2			1	
NS(=O)(=O)c	0			
N[C@@H](CCC(=O)NNc1ccc(CO)cc1)C(=			1	
CNc1ccc(cc1)N=Nc2ccccc2			1	

CC1(C)C(CC[C	0	0	
Cn1c2ccccc2c3cc(ccc13)N(=O)=O			1
O=Nn1cc(CC#N)c2ccccc12			1
CCCCOC(=O)C(=O)Nc1cccc(c1)c2nnn[nH]2			0
CC(=O)Nc1ccccc1O			0
CC(=O)NN=Cc1c[n+][[O-]]c2ccccc2[n+]1			1
NC(CCC(=O)C	0	0	
CCN(CC)CCNC(=O)c1c(C)[n		1	
CC(=O)C1CCOC1=O			0
Nc1ccc(cc1)N(=O)=O			1
Nc1ccc(cc1)C	0	0	0
C[C@H]1CCCN(C1)N=O			1
NC(=O)N(CCO)N=O			1
CC(C)(C#N)C(C)(C)C#N			0
CCCCOC(=O)C=Cc1oc(cc1)N(=O)=O			1
Cc1c(nn(c2ccc(Cl)cc2Cl)c1c		1	
OC(=O)\C(=C(/Cl)\C=O)\Cl			1
COc1cc(C=O)cc2N3C[C@H]4[C@H](N4C(=O)C)[C@@			0
CC(C)c1cc(ccc1N)c2ccccc2			1
CC(=O)Nc1cc	0		
CCCC[C@@H](CC)COC(=O)c1ccccc1C(=C	0		
c1ccc2sncc2c1			0
COC(=O)C1=CCCN(C1)N=O			1
NC(=O)C1(OC1C(=O)c2ccccc2)C(=O)N			1
CC(=O)N=C1C=CC(=O)C=C1			0
O=N(=O)c1ccc2c3cccc4ccc(c5cccc1c2			1
CNc1ccc(NCCO)c2C(=O)c3ccccc3C(=O)c:			1
NC(=N)S\C=C/C(=O)O		0	
CCCCCCCCCCCCCCCC			0
C[C@@H]1C[C@H]2[C@@H]3C[C@H](F)C4=CC(=O)C			0
O=C(CS(=O)Cc1occc1)NC\C=C/COc2cc(CN3CCCC3)cc			0
CCC12CCCN3CCC4(C(CC1)N		0	
Nc1cc(ccc1c2ccc(cc2)N(=O)=O)N(=O)=C			1
CCOC(=O)C(C	0	0	
O=Cc1ccc2ccc3cccc4ccc1c2c34			1
CN1C(=C(O)c	0		1
COc1cc(ccc1O)C2Oc3cc(O)cc(O)c3C(=O)	0		
COC(=O)\C(=C\c1oc(cc1)[N+](=O)[O-])\			1
[O-][N+](=O)c1ccc(NC(=O)c2csc(c2)[N+			1
CCOP(=S)(OCC(C)C)SCCl			0
NC(CCC(=O)NC(CSC(=O)NCCO)C(=O)NC			0
CNS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1			0
Nc1cc(N)cc(c1)C(=O)O			0

OC[C@@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@	0	0
Oc1nsc2cc(ccc12)[N+](=O)[O-]	1	
CCOC(=O)C(=NNc1ccc(cc1OC)c2ccc(NN:	0	
CC(C)CN(C[C	0	
Nc1ccc(cc1)N(c2ccc3ccccc3c2)c4ccc5cc	0	
C\C(=C(/C#N	0	0
Oc1ccc(cc1O)C2CNCc3sccc	0	
Oc1ccc2ccccc2c1[N+](=O)[O-]	1	
COC1=CC(=O)c2c([nH]cc3c4ccccc4nc23)	1	
OCCN1CC2CC(C1)C3=CC=C	0	
CCCC(=O)OCC	0	0
COc1nc(N)nc2[nH]cnc12		0
C1OC1C2CO2	1	
CC(CN)CCCN		0
CC(C)CNCC(C)C	0	0
CCN(CC)C(=O)N[C@H]1CN(C)[C@H]2Cc3c[nH]c4cccc(	1	
[O-][N+](=O)c1ccc2ccc3c(ccc4ccc1c2c3'	1	
Cc1ccccc1C#N	0	
OC(=O)c1ccccc1C(=O)[O-]		0
CC(C)C1=CC2	0	0
CCOC(=O)c1cc(nc2ccc(C)cc	0	
OC[C@H](O)	0	0
CC(C)N(C(C)C)c1ccccc1		0
CC[N+](CC)(CC)CCCNC1=CC(=C	0	
C1Cc2c(cc3ccc4cccc5ccc2c3c45)C6OC16	1	
CCCCCCCC(=O)O[C@@H]1	0	
C[C@H](CS)C	0	0
CCCN(CCCC(=O)O)N=O	1	
Nc1ccc2ncsc2c1	1	
Clc1ccc(CC#N)cc1	0	
CCCCOC(=O)C(=O)OCCCC		0
OC(=O)C(Cl)C	0	0
NCC(O)CC(=O)O		0
CC(C)CCCC(C)CCO		0
CC1CCN(CC1)N=O	1	
[O-][N+](=O)c1ccc2c(Cc3ccccc23)c1	1	
Oc1c2C(=N)CCC(=N)c2c(O)c3ccccc13	1	
CCOP(=O)(Cl)Cl		0
CC(=O)OC1(CCC2C3CCC4=C(CCC(=O)C4)(	0	
CCC1(CC)C(=C	0	0
Cc1ncc(N(=O)=O)n1C	1	0
Sc1nc2ccccc2s1	0	1
O=C1CC(=O)C1=O	0	

CCCCC(=O)C=C			0
O[C@H]1C[C@@](O)(C[C	0		
O=C(OC\C=C\C1CCCC1)\C=C\C2CCCC2		1	
CCCCCCCCCSn1cc[n+](C)c1		1	
C\C=C\1/CC(C)C(C)(O)C(=O)OCC2=CC[N		1	
CCCCCCC(=O)Oc1c(Br)cc(cc1Br)C#N			1
COc1cc(cc(O	0	0	
NNC(=O)CNc1ccc2cccc2c1		0	
CC(O)C(O)[C@H]1CNc2nc(	0		
Cc1cc(c(C)c2c3cccc3n(C)c12)[N+](=O)[		1	
CCOc1ccc(NC	0	0	1
C[C@H]1CC[	0	0	
Nc1nc(Occ2c	0	0	
CCN1N=NN(CCN2CCC(COC)(CC2)N(C(=O)CC)c3cccc3			0
CC1=CC2=C(C(=O)C(=O)C(C)(O)C(O)C2=C		1	
O=N(=O)c1ccc2CCNc2c1		1	
CCOC(=O)N(CCC=O)N=O		1	
O=C1c2cccc2Cc3cccc13		1	1
CCCO		0	0
COc1cccc1N2CCN(CCCCN	0		
Nc1ccc(NCCO)c(c1)[N+](=O)[O-]		1	
ClCCN[P@]1(	0	0	1
Clc1ccc2cccc2n1		0	
OC(=O)c1ccc(Nc2c3cccc3nc4cc(ccc24)†		1	
BrCC(=O)c1ccc(Br)cc1		0	
Cn1c(COC(=O)N)ncc1N(=O)=O			0
CC(=O)OCC1=C(N2[C@H](SC1)[C@H](N)C2=O)C(=O)C			0
CC(C)(O)C(=O)c1ccc(OCCO)cc1			0
CC\C=C\1/OC(=O)c2cccc12		1	
OC(=O)\C(=C(/C=O)\C(Cl)Cl)\Cl		1	
CC(=O)OCC(=O)[C@@]1(O)CC[C@H]2[C@@H]3CCC4			0
CCOc1ccc(NC	0	0	1
Cc1cc(NC(=O	0	0	
Clc1nccc2ccncc12		0	
CCN1CCCC1=	0	0	0
NC(=O)N(c1cccc1)c2ccc(cc2)C(=O)O		1	
COc1ccc2nc([nH]c2n1)S(=O)Cc3ncc(C)c(OC)c3C			0
Cc1c(c(C)c(c(c1[N+](=O)[O-])C(C)(C)C)[I		0	
CCCCOCCN(C(=O)C)Clc1c(CC)cccc1CC		1	
CNC(C)(C)Cc1	0	0	0
OS(=O)(=O)c1ccc(Cl)cc1			0
CC(C)[C@@]1(NC(=O)[C@		1	
Oc1cc(O)c(Cl)cc1Cl			1

CC[C@@H](C)[C@H](N)C(=O)O			0	
Oc1cc(O)cc(C	0	0	0	0
OC(=O)c1cc2ccccc2cc1O			0	
ClC[C@@H]1O[C@H](CCl)O[C@H](CCl)(			1	
NC(CCCCNCC(N)C(=O)O)C(=O)O			0	
CCc1cccc(O)c1				0
Clc1ccc(cc1)C(=O)N[C@H]	0			
CC(=O)Nc1cnc2ccccc2c1			0	
CC1(C)NC(=O)N(C1=O)c2ccc(c(c2)C(F)(F)F)N(=O)=O			0	1
OC1C=Cc2cc3c(cc2C1O)c4cccc5cccc3c45			1	
OCCN1C(=O)N(CCO)C(=O)N(CCO)C1=O			0	0
OC1=NCCN1c2ncc(s2)N(=O)=O			1	
CCCc1ccc(cc1	0	0		0
CC(=O)N1CCCC1C(=O)N(CC(=O)O)N=O			1	
Oc1ccccc1c2ccccc2O			0	
NC(CCC(=O)N)C(CSC(=O)NCCCl)C(=O)NC			1	
ClC1CCN(CC1)N=O			1	
C[C@]12CCCC(=C)[C@@H]	0			
CCNC(=O)\C=	0	0		0
CC(C)(C)c1ccc(CCOc2ncnc3ccccc23)cc1				0
COCC(=O)O			0	0
COc1cc2OC3OCCC3c2c4Oc5cccc(O)c5C(			0	
CN1C(CCC1=O)c2ccc[n+](([O-])c2			0	
COc1ccc2cc3N(C)CCc4cc(OC)c(OC)c(c2c			0	
C[C@@H](O)C(=O)O			0	0
CC1(C)SC2C(NC(=O)Cc3ccccc3)C(=O)N2(			0	
Clc1cc(Cl)c(Cl)c(c1Cl)N(=O)=O				0
Nc1cc2c(cc1N(=O)=O)[nH]c3ccccc23			1	
ClCC(Cl)C=C			0	0
NCC(O)c1ccc	0	0		0
CC(C)CCCC(C)C1CCC2C3CC=C4CC(CCC4(C			0	
Cn1cnc(CCN)	0	0		
FC(F)(F)c1ccccc1Cl			0	0
COc1c(Cl)cc2c(N(C)C3N4C(=O)C5(C)SSC			0	
Cc1c2[C@H]3N[C@H]3c4ccccc4c2cc5cc			1	
CC(CCC(=O)O)C1CCC2C3C(CCC12C)C4(C)			0	
Cc1c(C)c(N)c(cc1N)N(=O)=O			1	
O1[C@@H]2[C@H]1c3cc4c(ccc5ccccc45			1	
Oc1oc2ccccc2n1			0	
FCC1CO1			1	
COC(=O)\C(=C(/OP(=O)(OC)OC)\c1ccc(			0	
Oc1cc2CCNC	1	0		
CCCCC(=O)O[C@@]1(CC[C@H]2[C@@H]3CCCC4=CC(=				0

CC(C)c1ccc2cc(ccc2c1)C(C)C			0
CC(C)C[C@@	0	0	1
CN(C)c1ccc(\C=C\C2=CC(=C(C#N)C#N)C		1	
CCCCCOC(=O)CCCC(=O)OCCCCC			0
CC1(C)N(Br)C(=O)N(Br)C1=O			0
lc1cccc(c1)N(=O)=O			0
CC(C)Nc1snc2ccccc12		0	
Clc1c2ccccc2cc3ccccc13		1	
OC(=O)CSCC(=O)NC1CCSC1=O			0
CCCCCOC1c	0	0	1
Cc1c(CC(C)(C)C(=O)O)n(Cc		0	
COc1ccc(cc1)C2OCC3(COC		0	
O=N(=O)c1ccc2ccc3c4C=CCCc4cc5ccc1c		1	
CCCC\C=C/C	0	0	0
CCCCC(CCCCCCCCC(=O)OCC(COC(=O)C)OC(=O)C)			0
CCCCCCCCC	1	1	
CCC(C)C(=O)(	0	0	
OCC1OC(Oc2cc3C=CC(=O)(		0	
CC1c2cc(C)ccc2c3ccc(C)cc13		0	
Clc1cccc(Cl)c	1	0	0
CS(=O)(=O)C=C		0	
Cc1cc(ccc1O)C(C)(C)c2ccc(O)c(C)c2			1
OC[C@H]1O[C@H]([C@H]		0	
Cc1c2ccccc2cc3c4[C@H](O)[C@H](O)C=		1	
CN(CCCl)Cc1	0	0	
OC(=O)c1ccc	0	0	
Cc1cc2nc(N)sc2cc1C		1	
Oc1cccc2ncccc12		1	
CCOC(=O)c1	0	0	
COc1cc(\C=C(/C#N)\C(=O)		0	
ClCC1(C(Cl)Cl)C2CC(Cl)(Cl)C1(CCl)C(Cl)C2		1	
Cc1oc2c(ccc3ccc4ccc(O)cc4c23)n1		1	
Clc1ccc(cc1N(=O)=O)N(=O)=O		1	
OC(=O)c1cccc(Cl)n1			0
CN(C)c1ccc(cc1)C(=O)c2ccc(cc2)N(C)C		1	1
CNc1ccc2oc(		1	
Oc1ccc2CC3N(CC4CC4)CCC		0	
CCCC[C@H]1CN(CC2CCOCC2)C(=O)OC13CCN(CC3)C4(			0
CCC(=O)c1cc	0	0	0
Cc1ccccc1CNc2ncnc3c2ncn3[C@@H]4O[C@H](CO)[C			0
C[C@@H]1c2ccccc2c3ccc(C)cc13		1	
CC(=O)c1occc1		1	
COc1cc2OC[C@@H]3Oc4c5C[C@H](Oc		0	



CCOP(=S)(OCC)SCSP(=S)(OCC)OCC	0			
[O-][N+](=O)c1ccccc1Cl	1			
CN(C)CCNC(=O)c1cccc2C(=O)c3cccc3O	1			
CCCCCCC[N+]	1	0		0
[NH3+]O				0
CC(=O)[C@H]1[C@@H](C[C@H]2[C@@H]3CC=C4C[C@@H]1C	0	0		0
C\C=C(/C)\CCl			1	
Nc1ccc(Cl)cc1Cl	1			0
OC1C2OC2c3c(ccc4cc5ccc6ccccc6c5nc34	1			
CC1(C)C[C@@H]1C(=O)N\C(=C/CCCCSC[C@H](N)C(=O)				0
CCN[C@@H](C)Cc1cccc(c1)C(F)(F)F				0
C[C@@H]1CC(=O)C=C2CC[C@H](C[C@@]12C)C(=C)C				0
Oc1cc(Cl)c(Cl)c(Cl)c1	0			1
CC(C)(CO)CO			0	0
C[N+](C)(C)C	0	0		0
NC(CSC(F)(F)C(F)F)C(=O)O			0	
Oc1ccc(Cl)c2	0	0		1
COc1cccc2C(=O)c1	0	0		1
OC(=O)Cc1sc(nc1c2ccc(Cl)cc2)c3cccc3				1
CCOc1cc(N)c(Cl)cc1C(=O)N		0		
Cn1c(nc2cccc12)N(=O)=O			1	
Br[C@H]1CCN(C[C@@H]1Br)N=O			1	
C[C@]1(O)CC[C@H]2[C@@H]3CCC4=CC(=O)CC[C@]4				0
CCN(CCCl)CCCNc1c2cccc2nc3c1ccc4ccc			1	
Cn1c(nc2cccc12)[N+](=O)[O-]			1	
O=C1CCCCCCCCCCCC1				0
Oc1ccc(CC=C)cc1O			1	
CC(=O)Nc1snc2c(Cl)cc(Cl)cc12			0	
CC(=O)C=Cc1ccc2OCOc2c1				0
[O-][N+](=O)c1ccc(O[C@H]2CO2)cc1			1	
CO[C@@H]1[C@@H](CC[C@]2(CO2)[C@H]1[C@@H]2)O				0
CC(O)CCO				0
c1ccc2cc3c(ccc4c5ccccc5ccc34)cc2c1			0	
O=N(=O)c1ccc2cc3ccccc3cc2c1			1	
CC1=CC(=O)Oc2cc3OC4(C)OOC4(C)c3cc1			1	
C[C@]12C[C@@H]1C(=O)C2	0	0		0
Cc1cc(O)ccc1N				1
CCCCCCCCOc	0	0		
Cc1cc2ccccc2c3ccc4ccccc4c13			1	
Cc1cc2CCC[S+](=O)([O-])c1			0	
N[S+](=O)([O-])c1cc(c(NC)O)O			0	
OC[C@H]1O[C@H]2[C@@H](OC3=NC(=O)C3)O			0	

CC12CCC3C(CC=C4CC(O)CCC34C)C1CCC2	0			
O[C@@H]1COC(Nc2ccc(cc2)C(=O)O)[C@H](O)[C@H]				0
CC[C@@H]([C@@H](C)O)[N+](=O)[O-]	0			
NNC(=O)c1cccnc1				0
CC(=O)OC1CC2C3(C)CCCC(C)(C)C3CCC2(	0			
CCCCCCCCCOC(=O)c1ccccc1C(=O)OCC	0			0
OS(=O)(=O)C	0			
CCC(CC)Nc1ccc(C)c(C)c1				0
C[N+]1(CCCC	0	0		0
OCCN(CCO)CCO				0
COC1=NN(CSP(=S)(OC)OC)C(=O)S1				0
c1cnc2c(c1)c	0	0	0	0
CCC(=O)O[C@	0	1		
C\C(=C(\Cl)/C(=O)O)\C(=O)O			0	
Cc1ncc(C[n+])2csc(CCOCP(=	0			0
CN(N=O)C(=O)N			1	0
CCCCc1cc2cc	1	1		
CCCCCOc1ccc(O)cc1				1
CC(CC(=O)O)C(=O)O			0	
CCC(=O)\N=C\1/SN(C(=O)CC)c2ccc(cc1	1			
[O-][N+](=O)c1ccc(Nc2ncnc3c2ncn3c4c	1			
CC[C@H]1OC	0	0		
CCN(CC)CCO(	1	0		
OCC1OC(Oc2cccc3cccnc23		0		
CC(C)CC(=O)OCc1ccccc1				0
Clc1ccc(OCC(=O)OCCNC23CC4CC(CC(C4)C2)C3)cc1				0
CCCCN(CC(=O)C)N=O			1	
CC(=C)C1CCC	0	0		
COC[C@@H](O)Cn1cc(nc1Cl)[N+](=O)[C	1			
OC(=Nc1cccc(c1)N(=O)=O)c2csc(c2)N(=	1			
CC1=CN([C@	0	0		0
OC[C@H]1O[C@H](Oc2ccc(CCCCCc3ccc(O[C@H]4O[				0
CC(C)(C)N(=O)=O			0	
CC(=O)O[C@H]1C[C@H](CC=C1C)C(=C)C			0	
C[C@@H]1CNC(=O)N1c2ncc(s2)[N+](=	1			
Nc1ncnc2c1ncn2CCOCP(=		0		0
COCC1=C(N2[C@H](SC1)[C@H](NC(=O)\C(=N/OC)\c				0
CCOP(=S)(S)OCC				0
CC(=O)\C=C/C1=C(C)CCCC1(C)C			0	
N1C(C1c2ccccc2)c3ccccc3			1	
COC(=O)[C@	0	0		0
CCCSP(=O)(OCC)Oc1ccc(Br)cc1Cl				1
CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)NCCNC(=O)C			0	

CNP(=O)(N(C)C)N(C)C			1		
Clc1nc(Cl)c(Cl)c(Cl)c1Cl				0	
N[C@@](CC1c2ccccc2Oc3	0				0
CCCCCCCCCCCCC					0
CCOC(=O)C(C	0	0			
COC(C1Cc2cc3cc(OC4CC(O	0				
CN(N=O)C(=O)NC(C=O)C(O)C(O)C(O)CC			1		
CCCc1ncc(C[r	0	0			
O=CC1CC(=O)C(=O)CO1			1		
CCN(CC)CCC[C@@H](C)Nc1ccnc2cc(Cl)c			1		
COc1ccc(C=CC(=O)c2ccc(OC)cc2OC)cc1				1	
CN(C)c1ccc(cc1)N=Nc2cccc(C)c2			1	1	
OC(CCN1CCCCC1)(C2CCCC	0				0
OCC1OC(C(O)C1O)N(N=O)c2ccc(cc2)[N-	1				
OS(=O)(=O)F				0	
Cc1ccc(cc1C)[C@@](OC(=O)NC2CCCC2			1		
CC1OC(O[C@	0				
CC(C)C[C@@H]1NC(=O)[C@H](CCCN)NC(=O)[C@@H				1	
C(Oc1ccccc1)[C@H]2CO2			1		
CN1CCCC[C@@H]1CCN2c:	0				
NC(=O)NC1NC(=O)NC1=O				0	
Clc1ccc2NC(=O)Oc2c1				0	
CN(C)C(=S)S(	0	0			
N\C=C(\C#N)/C(=C(\N)/S		0			
CC(=O)Oc1ccc2OC3(C)OOC3(C)c2c1			1		
Cc1ccc2cc3c(ccc4ccccc34)c5CC(=O)c1c2			1		
COc1cc(CCN)cc(OC)c1OC				0	
CC(=O)OC1CC(CC=C1C)C(=C)C			0	0	
OC[C@@H]1	0	0			
O=CNc1ccccc1			0	0	
CCOC1=CC(=O)C(=CC1=O)NC(=O)C			1		
CC(C)N(C(=O)CCl)c1ccccc1				0	
CNC(=O)c1c(	0	0		0	
OC(=O)COCC(=O)O				0	
Cn1cnc2cc(ccc12)[N+](=O)[O-]			0		
CNCc1ccccc1	0	0		0	
CCc1cccc(CC)c1N(COC)C(=O)CO			0		
CC(C)\N=C/1\C=C2N(c3ccc(Cl)cc3)c4ccccc4N=C2C=C1				0	
CCN(C(=O)C=CC)c1ccccc1C				0	
CCC(N1CCCC:	0	0		0	
CCC(C)CO				0	
COC(=O)C			0	0	
CC(=O)[C@@H](N=Nc1ccc(cc1Cl)c2ccc(			0		

CN1CCCC1CCN2c3cccc3	1	0
C=CC(=O)c1ccc2OCOc2c1	0	0
Oc1ccc2C[C@H]3N(CC4CC4)CC[C@@]56[C@@H](Oc1ccc(NO)c1	1	0
CC(C)COC(=O)CCCC(=O)OCC(C)C	0	0
CC1=C(CCN2c1ccc(COC(Cn2ccnc2)c3ccc(Cl)cc3Cl)c(Cl)c1	1	0
CC1cc2C=CC(=O)Oc2cc1OC	0	0
CCCC(=O)O[C@@]1([C@@H](C)C[C@H]2[C@@H]3COc1cc2C(C)CCc2c3ccc4cccc4c13	1	1
COc1cc(C)ccc1C(C)C	0	0
Cc1ccc(C)c(C)c1	0	0
CC1C2C(=Nc3ccc(C)cc23)N(C)c4cccc14	1	0
CCN(c1cccc1)c2cc(NC)[n+]	0	0
C1=Cc2ccc3c4cccc4c5ccc1c2c35	1	0
Cc1ccc(OP(=O)(Oc2ccc(C)cc2)Oc3ccc(C)cc3)cc1	1	1
CCCCC(CC)COC(=O)\C=C\c:	0	0
[O-][N+](=O)c1cc2ccc3cc(cc4ccc(c1)c2c	1	0
O[C@H]1[C@H](O)c2cc3ccc4cccc4c3cc	1	0
CC(=O)Oc1cc(c2ccc3cccc4ccc1c2c34)[N-	1	0
CC(C)(C)OOC(C)(C)C	0	0
O=S1OCCO1	0	0
OCNC(=O)NCO	1	0
CO[C@H]1O	0	0
COc1cccc1N	0	0
CC(C)COC(=O)COc1ccc(Cl)cc1Cl	0	0
CN1CC(O)c2cc3OCOc3c4c5cccc5CC1c2	1	0
CC(=O)O[C@H]1CC[C@]2(C)[C@H]3CC[C@@]4(C)[C@	0	0
OC1OC(C(O)C(O)C1O)C(=C	0	0
CCCCCCCCCCCCCCCCBr	0	0
Fc1cccc2ccnc12	1	0
OC(=O)[C@]	0	0
CCCCCCCCCCCCC(=O)OC(C	0	0
CC1CC2C(Cc3cn(C4CCCC4)c5cccc2c35)N(	1	0
CCOC(=O)C1C(C=C(C)C)C1(C)C	0	0
N[C@H]([C@	0	0
CC(C)(C)c1ccc(\C=C\C(=O))	0	0
CCN(CC)CCN1C(=O)C(=Nc2cccc12)Cc3ccc(OC)cc3	0	0
CC(=CCCC(=CC(=O)O)C)C	0	0
O=N(=O)c1oc(C=C(C#N)C#N)cc1	1	0
CN(C)C(=O)Nc1cccc1	0	0
NCCCS(=O)(=O)Nc1ccc(Nc2c3ccc(cc3nc1	1	0
Oc1nc(Cl)c(Cl)cc1Cl	1	1

FCC(F)(F)F	0		
ClC1C(Br)C(Br)C(Br)C(Br)C1Br	0		
COc1cc2nc3cc(N)c(OC)cc3nc2cc1N	1		
C1CSCCS1	1	0	
O=N(=O)c1ccccc1	0	0	
COc1cc(C)c(\	0	0	
[O-][N+](=O)c1ccc2ccc3cc4ccccc4c5ccc:	1		
C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=C3CC	0		
CC(=C)C(=O)O[C@@H]1C[C@H]2CC[C@]1(C)C2(C)C			0
CC(Cl)COP(=O)(OCC(C)Cl)OCC(C)Cl			0
Cc1nc(oc1CO	0	0	0
Oc1ccc2C(=O)c3ccccc3C(=O	0	1	1
CN(C)C(=O)C	0	0	0
Oc1c2nc3ccccc3c2nnn1\N=C\c4ccc(cc4)	0		
Oc1ccccc1C(=O)[O-]			0
CC(C)CC(C)CC(=O)CC(C)C			0
COc1ccc2[nH	0	0	0
C[C@@]1(CCC[C@@]2(C)		0	
[O-][N+](=O)c1ccc2cn[nH		0	
COC(=O)C1CSC2N1C(=O)C(=C2Cl)Cl	1		
NC1=NC(=O)N(C=C1)C2OC(CO)C(O)C2O	0		
CCCCCOc1cc(C)c(O)c(C)c1C			1
CCCCC(=O)C=CC			0
C[C@H](O)[C	0	0	0
C[C@@H]1Cl	0	0	
CN1CCN(CCC	1	1	
ClCc1ccc(CCl)cc1	0		
COC(=O)CC(=O)OC	0	0	
CN(C)CCO	0	0	
[O-][N+](=O)c1nc2ccccc2[nH]1	1		
CC[C@@H]1Cc2cc(O)ccc2(		0	
COc1ccccc1OCC2CNC(=O)O2			0
CN=NC(C)(C)OO	1		
CCCCCCCCCCCCOS(=O)(=O)O	0	0	
C[C@@]12[C@H](O)C=C[C(		0	
CCCOC1=NN(C(=O)[N-]S(=O)(=O)c2ccccc2C(=O)OC)C			0
O=NN1CCNCC1	1	0	
O=C(C=Cc1ccc(cc1)N(=O)=O)c2ccccc2	1		
CNc1snc2ccccc12	0		
Oc1ccccc1c2oc3ccccc3n2	0		
CCC1NC(=O)C([C@H](O)[C		0	
Nc1cc2nc3ccc(Cl)cc3nc2cc1N	1		
C\C=C/1\CC(=C)[C@](O)(CO)C(=O)OCC2	1		

CCc1ccccc1OC[C@@H](O)	0		
OC(=O)c1nc(Cl)ccc1Cl			0
O=N(=O)c1ccc2NCCC2c1		1	
Clc1ccc2N(C	1	0	0
COc1cc(OC)c	0	0	0
CCOC(=O)c1c	0	0	
CN1C[C@@H]	1	0	
CNC(=O)Oc1	0	0	0 0
CC(O)\C=C\C=O		1	
CN1CCN(CCC(=O)N2c3cccc	1		
NC1CCC(CC2CCC(N)CC2)CC1			0
O=C(CN1CCN	0	0	0
COc1ccc(cc1)[C@H](OC(=O)C)C=C		1	
NCCN1CCNCC1		0	0
CO\N=C\1/C	0	0	0
COC1=CC(=O)c2[nH]c(C)c3c4ccccc4nc3c	1		
O=N(=O)c1ccc2cc(c(cc2c1)N(=O)=O)N(=	1		
ClC(Cl)(Cl)C1CO1	1		
OC(=O)CN(CC(=O)O)N=O	1		
CC1(C)OC[C@@H](COC(=O)CCc2ccc(OC[C@@H](O)Cl			0
CCNc1cc2OC(=O)C=C(C)c2cc1C	0		
NC(=O)CNCCC(c1ccccc1)c2	0		
CC1=C(N2[C	0	0	
OOC1CCOP(=O)(N1)N(CCCl)CCCl			0
CC(C)N(=O)=O			0
NC(=O)N(O)[C@H]1C[C@@H](Oc2cccc(Oc3ccc(F)cc3			0
Oc1ccc(cc1)c2nc(c3ccncc3	1		
Cc1ccccc1NC(=O)c2csc(c2)[N+](=O)[O-]	1		
COc1cc2nc(nc(N)c2cc1OC)	0		0
O=C1C=Cc2ccccc2C1=O	1		
CC(C)(S)C(N)C(=O)O	1		
O=C1c2cc(ccc2c3c1cc(cc3N(=O)=O)N(=	1		
O=C\C=C/C/c1occc1	0		
CCn1c(N)nc2c3ncc(C)nc3ccc12	1		
O=N(=O)c1ccc2c[nH]nc2c1	1		
CC(=C)c1ccc(C)c2ccc(CO)c2c1	1		
CCc1cc(c(O)c(c1)C(C)(C)C(C)(C)C	0		
ClC(=Cc1c(Cl)c(Cl)c(Cl)c(Cl)c1Cl)Cl	0		
Cc1ccc(OP(=O)(Oc2cccc(C)c2)Oc3cccc(C	0		
OCCCCN(CCO)N=O	1		
N[C@@H](CSCc1ccccc1)C(=O)O	0		
Oc1ccc2[nH]	1		
O1[C@@H]2C=Cc3c(ccc4c5C=Cc6cccc(c	1		

N[C@H](CCCP(=O)(O)O)C(	0	
C[N+](=CCl)C		0
CC1(C)S[C@	0	0
Nc1nc(O)c2ncn(C3OC(COP(=O)(O)O)C(C	0	
C=CC(=O)N(CC1CO1)CC2CO2	1	
CCC(=O)CC		0
O=N(=O)c1ccc2c3ccccc3c4cccc1c24	1	
CC(=O)O[C@@H]1[C@]2(C)C[C@]2(C=C(	1	
CO[C@H]1O[C@@H]2O[C@@]3(C)CC[C@H]4[C@H](		0
COC(=O)\C=C\C(=O)NC1C(	0	
Cc1ccccc1N=C(O)c2csc(c2)N(=O)=O	1	
CCCN(N=O)C(=N)N[N+](=O)[O-]	1	
CC(=O)O[C@	0	0
CCC(C)(C)c1ccc(O)c(c1)C(C)(C)CC		1
OC[C@H]1O[C@@H](Oc2	0	
OCCN=N#N	1	
CCC(C)c1ccccc1O	0	1
CCc1cc(SCc2sc(nc2CN3CCN(CC3)c4ccc(OC)cc4)c5ccc(		1
CSCCC(NC=O)C(=O)NC(Cc1ccccc1)C(=O)	0	
C[C@H]1C[C@H]2[C@@H]3CC[C@](O)(C(=O)COC(=C		0
OP(=O)(O)OP(=O)(O)O	0	
COC(=O)c1ccccc1CS(=O)(=O)NC(=O)Nc2nc(OC)cc(OC		0
NC1=NC(=O)N(C=C1O)C2CC(O)C(CO)O2	0	
CC(CO[N+](=O)[O-])(CO[N+](=O)[O-])C(	0	
Nc1ccc2N=C3N(Cc2c1)C(=O)c4ccccc34	1	
Nc1nc2c(cnn2CCc3ccccc3)	0	
CC\C=C/CCCCCO		0
O=N(=O)c1ccc2c(cc3ccccc3c2c1)N(=O)=	1	
C=CCN(CC=C)N=O	1	
C(Cc1ccccc1)Cc2ccncc2		1
CN[C@@H]1[C@H](O)[C@	0	0
CC(C)(c1ccccc1)c2ccc(O)cc2	0	1
COC(=O)c1c(Cl)c(Cl)c(C(=O)OC)c(Cl)c1Cl		0
CCc1cccc(CC)c1N=O	1	
CCCCOC(=O)CCC(=O)C		0
Cc1ccc(cc1)C(=O)O	0	0
[O-][N+](=O)c1cccc(NS(=O)(=O)c2ccccc3	0	
O=N(=O)c1ccc2ccc3c(ccc4ccc1c2c34)N(	1	
CC(C)[C@@]1(NC(=O)[C@	1	
CC(C)SC(=N)N	0	
COc1cc2c(CC3c4c(CC[N+]3(C)C)cc(OC)c(	0	
O=C1OC(=O)c2cc(Oc3ccc4C(=O)OC(=O)c4c3)ccc12		0
CC1(C)C(=O)I	1	

CCC(=O)N([C@@H]1CCN(Cc2ccccc2)C[C@@H]1C)c3		0
CCCCCN1C2C1c3ccccc3c4ccccc24	1	
NC(=O)c1ccc(cc1)c2nc(c3c	0	
OS(=O)(=O)O	0	0
CS(=O)(=O)c1ccc(cc1Cl)[C@@H](C[C@H]2CCCC(=O)C2		0
COc1cc(CNC(=O)CCCCCCC(	0	1
COC(=O)c1ccc(cc1)C(=O)O		0
CC1=C(O)C(=O)[C@@H]2C	0	
COc1ccccc1\C=C/C=O		1
Nc1ccc2ccccc2c1N=Nc3ccc(cc3)N(=O)=O		1
CCN1C[C@H]2(COC)[C@H](	0	
CO\S(=N/[S+](=O)([O-])c1	0	
OC(=O)CCn1c	0	0
C(c1ccccc1)c2ccccc2		0
Oc1ccc2cc3ccc4ccccc5ccc(c2c1)c3c45	1	
CC(C)(C)c1cc(cc(c1O)C(C)(C)C)N(=O)=O		1
CC1=CN(C2CC(N=[N+]=[N-])C(CO)O2)C(	1	
BrC1ccc(Br)cc1		0
OC(=O)C=Cc1ccc(C=CC(=O)O)cc1		0
NC(=O)c1cc[n+](COC[n+])2ccccc2\C=N\C	0	
CC1=C(C=C(C	0	0
Nc1ccc(O)c1[N+](=O)[O-]	0	
CCCCNc1cc(c	0	0
CC(=O)OCc1ccc2ccc3ccccc4ccc1c2c34	1	
CO[C@H]1[C@@H](C[C@H]2CN3CCc4c	0	
C[C@@H](O)COC(C)(C)C	1	
CCCOC(=O)CCCCC(=O)OCCC		0
CC(C)CN(N=O)C(=N)N[N+](=O)[O-]	1	
Oc1cc(O)c2C(=O)C(=O)C(Oc2c1)c3ccccc	0	
Cc1c2ccccc2cc3c4C5OC5C(O)C(O)c4ccc1	1	
C[S+](=O)([O-])CCNc1oc(	0	
C1c2ccccc2Cc3c1c4ccccc4c5ccccc35	1	
CNCc1oc(CSCCNC(=NCC(O)c2ccc(O)cc2)	0	
OC(=O)CC(Cl)C(=O)O	0	1
Nc1nc(NC2CC2)c3ncn([C@H]4C[C@H](CO)C=C4)c3n1		0
CCCN1C[C@H	1	0
Cc1nnc(SCC2	0	0
CCCCCCCCCCCCCCCCCNC(=O)CCCCCCCC	0	
CC(C)CC(C)(N)C#N		0
Cc1ccc2N=C(N)NC(=O)c2c1Sc3ccncc3		0
OCc1ccc2nc3c(ccc4ccccc34)c(CO)c2c1	1	
CCCCCCCCCCCC=O		0
CCOC(=O)C(C)Br	1	



Cc1cc(O)ccc1	0	0	0	1
COC(=O)[C@	0	0		0
O=C(CCC1CCN(Cc2ccccc2)CC1)c3ccc4CCCCNc4c3				0
CC(CN(CCN(CC(C)OCCO)CC(C)OCCO)CC(C)OCCO)OCCC				0
CCOC(=O)C1=C(C)NC(=C(C		0		
Nc1ccc(\C=C\c2cccc(Cl)c2)cc1			1	
Cc1ncc([N+](=O)[O-])n1CC(=O)O			1	
Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1Cl			0	
CCOC(=O)C1=Cc2cc3CCCN4CCc(c2OC1=			0	
CC(C)CCC[C@	0	0		0
O=C(N1CCN(	0	0		0
C[C@@H]1O	0			1
Cc1ccc2C(=O)c3ccccc3C(=O)c2c1N			1	1
CC[N+](C)(CC	0	0		0
CC(C)CC(NC(=O)COc1ccc(Cl)cc1Cl)C(=O)			0	
CC1CC(O)CC(	0	0		0
Sc1[nH]cnc2ncnc12			1	
CN(C(=O)CO)c1c(l)c(C(=O)NCC(O)CO)c(l)c(C(=O)NCC(				0
CC1CCCN1CCCNCC(=O)Nc2c(C(=O)c3cc			1	
CCc1cccc2ccnc12			1	
COP(=O)(OC)[C@H](O)C(Cl)(Cl)Cl			1	
O\N=C\c1cccn1			0	
OC(=O)CC=N(=O)O			1	
CN1CC(c2ccc(O)c(O)c2)c3c		0		
CC(C)(C)OC[C@H]1CO1			1	
Cn1nc(cc1N)C2CC2			1	
CC(C)n1cnc2c(cc(Cl)cc12)C		0		
CC(=O)C1=C(O)[C@@H]2[		0		
c1cc[nH]c1			0	
CN(CC1(C)CCCO1)S(=O)(=O)c2ccc(Cl)c(c2)S(=O)(=O)N				0
Clc1nc(Cl)nc(Cl)n1				0
C=CCOC(=O)CCC1CCCCC1				0
O=N(=O)OCCN(CCON(=O)=O)CCON(=O)=O				0
Cc1oncc1C(=	0	0		1
CCN(N)c1ccccc1			1	
C1CCC2OC2C1			1	0
CC(=CCO)c1cc	0	0		1
[O-][N+](=O)c1cc(cs1)C(=O)Nc2ccccc2C			1	
CC=C\C=N\NC(=O)c1ccncc1				0
CCCC(=O)Nc1	0	0	0	
Nc1nc(N)c2n	0	0		
CCC(CC)C=O				0
OCCSCSCCO				0

O=N(=O)c1ccc2c(ccc3ccccc23)c1	1	
CN[C@]1(CCCCC1=O)c2ccccc2Cl		0
Cc1cc(C)c(cc1C)N=Nc2c(O)c(cc3cc(ccc2:CC(C)Cl	0	1
CNC[C@H](C	0	0
CNC=O	0	
OC(=O)CC(=C)C(=O)O		0
CN1C(=N)Nc2[nH]cnc2C1=O		0
C[C@@H](C	0	0
NCc1ccccc1CC(=O)N[C@H]2[C@H]3SCC(=C(N3C2=O)C		0
Cc1c2ccccc2c(CBr)c3ccccc13	1	
COC(=O)\C=C(/C)\OP(=O)(OC)OC		0
Cc1nccc2c3ccc(O)cc3[nH]c	0	1
CCCCOC(=O)CCCCCCCC(=O)OCCCC	0	0
[O-][N+](=O)c1ccc(cc1)C(=O)C2OC2c3cc	1	
COC(=COC(=O)N)c1c(O)c(N2CC2)c(C)c(C	1	
CCSSCCC		0
C=CC(=O)OCCN1C(=O)N(CCOC(=O)C=C)C(=O)N(CCOC		0
Cc1ccc(O)c(c1)N(=O)=O		0
CC(C)ON([C@H](C(C)C)C(=	0	
CC(=CC=O)C	0	0
O=N(=O)c1ccc2c3ccccc3cc(c2c1)N(=O)=	1	
CC[N+]1(C)CCCC1		0
CC[C@@H]([C@H](C)O)N1N=CN(C1=O)c2ccc(cc2)N3		0
COc1ccc(Cl)cc1N=Nc2ncc[	0	
Clc1c(Cl)c(Cl)c(c(Cl)c1Cl)N(=O)=O	0	
[O-][N+](=O)c1ccc2C3OC3c4cccc5ccc1c	1	
OC(=O)\C=C\C(=O)Nc1ccc	0	
CC1=CC(=O)CC(C)(C)C1	0	0
CC1(C)C(O)C	0	0
CCc1nccnc1C		0
OCc1ccc2c3ccccc3c4cccc1c24	0	
COC1=CC=C2	0	0
CCOc1cc(C=O)ccc1O	0	0
CC(=N)NCCCC	0	0
CC1=CC(=O)[	0	0
CC(C)(C)OC(=O)[C@H](N)CN=[N+]=[N-]	1	
Oc1ccc2c(ccc3[nH]c4ccc5ccccc5c4c23)c	1	
O=C1C=CC(=O)c2ccccc12	1	
ClC1=C(Cl)C(=O)N(N=C1)S(=O)(=O)c2cc	0	
OC(=O)Cc1c[	0	0
CCCCN(CCCC)CCCCCN(CCCC)CCCC		0
COC(=O)\C(=C\c1occc1)\C#N	0	

CC(O)C(N)C(=	0	0		
NC(CCC(=O)NC(CSN=O)C(=		0	1	
Oc1cccc2OC(=O)C(=Cc12)C3CCc4cccc4(			0	
CC1(C)[C@H](CC[C@@]2(C)[C@H]1CC[C@]3(C)[C@H]2C)C3				0
c1cc(ccn1)c2ccncc2		1		0
CCC1(O)CC(OC2CC(C(O)C(C)O2)N(C)C)C(=O)C1		1		
CC[C@]1(C)C	0	0		
CC12CCC(C1)	0	0	0	0
CC(C)n1nc(c2cc3cc(O)ccc3[nH]2)c4c(N)ncnc14				0
COc1ccc2c(c1)C(=O)c3c(OC)c(OC)cc4ccr			1	
C[C@H]1O[C	0	1		
CCC(C)OC(=O)C=Cc1oc(cc1)[N+](=O)[O-			1	
BrC[C@@H](Br)COP(=O)(OC[C@H](Br)(			1	
Nc1ccc(cc1)S	0			0
CN(C)CCN(Cc1cccc1)c2cccc2			0	
COc1cc(OC)c(cc1N[S+](=O		1		
OC(=O)C\C(=C\C(=O)O)\C(=O)O			0	
O=N(=O)c1ccc2c(Cc3cc(ccc23)N(=O)=O			1	
CC(CCC1ccc(O)cc1)NCCc2c		0		
OCC(O)COc1ccc(Cl)cc1				0
CC(C)C(C)C			0	
COc1cc(ccc1N)c2ccc(N)c(OC)c2			1	1
CCNc1cc2OC3=CC(=NCC)C(=CC3=C(c4cc			0	
CN(Cc1cnc2n	0	0		0
CC(C)CC(=O)\N=C\1/SN(C(=O)CC(C)C)c2			1	
C[C@H](CSC(=O)c1cccc1)C(=O)N2C[C@H](C[C@H]2(				0
N[C@H](C(=O)O)c1cccc(O		0		
Cc1onc(c1C(=O)N[C@H]2[C@H]3SC(C)(C)[C@@H](N				0
CCCCCc1ccc(cc1)c2ccc(cc2)C#N			0	1
NC(CS)C(=O)	0	0	1	0
lc1ccc(cc1)N	1			
CP1(C)NP(C)(C)NP(C)(C)N1			0	
CCC(Oc1ccc(Cl)cc1)C(=O)C			0	
C[n+]1cccc1	0	0		
NNc1nc(cs1)c2ccc(cc2)[N+](=O)[O-]			1	
OCC1OC(CC1O)N2C=C(Br)C(=O)NC2=O			0	
CCCC[C@@H](CC)COS(=O)(=O)O			0	
CCOCCOCC			1	0
CC(CCC=C(C)C)C=C				0
OC[C@H]1O	0	0		0
CSc1cnccn1				0
CCN1\C(=C\C	0	0		
OC(=O)Cc1ccc(Cl)cc1			0	

CC(C)(c1ccc(OCC2CO2)cc1	0	1	
O=N(=O)c1ccc(C=Cc2ccccc2)cc1		1	
CO\N=C(\C(=	0	0	
Nc1cc(cc(c1O)N(=O)=O)N(=O)=O		1	1
O[S+](=O)([O-])CCC[S+](=	0		
NC(CCC(=NC(CSc1ccc(cc1N(=O)=O)N(=O)=O		1	
O=C1C=Cc2ccc3c(ccc4ccccc34)c2C1=O		1	
OC(C(=O)OC(	1	0	0
CCCCCCCCC(	1	0	1
O=C(\C=C\c1ccccc1)c2ccccc2		0	
Fc1ccc(\C=C\C(=O)c2ccccc2)cc1		0	
C=CC=O		1	0
OCc1ccccc1N(=O)=O		0	
CC[C@H](N1CCCC1=O)C(=	0		
ClCCCCC(			0
Cc1ccc2C(=O)c3ccccc3C(=O)c2c1			1
CC(O)CN(C)C	0	0	0
[O-][N+](=O)C([N+](=O)[O-])([N+](=O)[		1	
OCCc1ccccc1		0	0
CC1CC(OC(=O)C)OC(C)O1		1	0
CO[C@H]1\C	0	0	
CC1(C)[C@H]2CC[C@]1(C)C(=O)C2		0	
CC(C)(C)ON=O		1	
Nc1ccc2c(Cc3cc(ccc23)[N+](=O)[O-])c1		1	
CCC(C(=O)NC(=O)NC(=O)C)c1ccccc1			0
CNC(=NCCSc1oc(CN(C)C)cc1)C=[N+](O		0	
OC[C@H]1O[C@H]([C@H]	0		
Cc1ncc(C[n+]	0	0	0
Oc1ccc(cc1)C2(CCCC2)c3ccc(O)cc3		0	1
Oc1c2ccoc2nc3ccccc13		0	
NC(=O)N=NC(=O)N		1	
CC(OC(=O)C)OC(=O)C(C)c1ccc(c(F)c1)c2ccccc2			0
c1cnc2c(c1)ccc3c2ccc4cccn34		1	
C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=CCCC[C@H]34)[C@			1
CN\C(=N\N(=O)=O)\NCC1CCOC1			0
BrCCOc1ccccc1			0
OC1C(Oc2ccc3cc4ccc5ccccc6ccc(c3c2)c4c		0	
CCN(Cc1ccc(	0	0	
ClCC=C		1	0
CC(=O)NCC(=O)N[C@H](C	0		
CN(C)N=Nc1ccc(Cl)cc1		1	
OCc1ccc2ccc3cccc4ccc1c2c34		1	
COCC12OOC1(C)c3ccccc3O2		1	

<chem>CC(C)CCCCOC(=O)Cc1ccc(Cl)cc1Cl</chem>	0	
<chem>Nc1ccc(Sc2ccccc2)cc1</chem>	1	
<chem>CCCCCCCCOC(=O)CCCCCCCC(=O)OCCCCCCCC</chem>		0
<chem>C[N+](C)(C)CC1CO1</chem>	1	0
<chem>Nc1cc2nc3ccccc3nc2cc1O</chem>	1	
<chem>CC(=O)N[C@@H](Cc1c[nH</chem>	0	
<chem>C1Cc2c(ccc3ncccc23)C4OC14</chem>	0	
<chem>NC(=O)Nc1cccc2ccnc12</chem>	0	
<chem>C=CCCC[C@H]1CO1</chem>	1	
<chem>Oc1ccc2CC3N(CC4CC4)CC[</chem>	1	
<chem>Oc1ccc(O)c(c1)[S+](=O)(O</chem>	0	
<chem>Cc1nc(C)c(Cl)</chem>	0	0
<chem>OC1=Nc2ccc(cc2C(=NC1)c3ccccc3)N(=O</chem>	0	
<chem>OC(=O)CN=N#N</chem>	0	
<chem>CC(C)(C)NC(=O)\C=C\c1oc(cc1)[N+](=O)</chem>	1	
<chem>Cc1cc(NC2CCCC2)nc(n1)n</chem>	0	
<chem>CCC(=O)[O-]</chem>		0
<chem>FC(F)(F)C1(C</chem>	0	
<chem>CCCN(CCCC)CC(O)c1cc(Cl</chem>	1	
<chem>CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)C(C(=O)[O-])c3ccccc</chem>		0
<chem>CC(=O)OC1Cc2c3ccc4ccccc4c3cc5ccc(C)</chem>	1	
<chem>CC(Cc1cccc(c</chem>	1	0
<chem>OC1N=C(c2ccccc2Cl)c3cc(Cl)ccc3NC1=O</chem>		0
<chem>Nc1nc(NC2C</chem>	0	0
<chem>[O-][N+](=O)c1ccc2ccc3ccccc3c2c1</chem>	1	
<chem>CC(=O)Nc1ccc(cc1)S(=O)(=O)Nc2cccn2</chem>	0	
<chem>C(N1CCC2(CC1)CCc3ccccc2</chem>	0	
<chem>Cc1c(C(=O)O</chem>	0	0
<chem>OP1(=NCCCO1)N(CCCl)CCCl</chem>	1	
<chem>Nc1ccc2C(=O)c3cc(N)ccc3C(=O)c2c1</chem>	1	
<chem>OC[C@H]1O[C@@H](Oc2ccc(O)c3C(=O</chem>	1	
<chem>Nc1nc(N)nc(Cl)n1</chem>	0	0
<chem>COc1c2OC(=</chem>	0	1
<chem>OS(=O)(=O)c1ccc(cc1N(=O)=O)N(=O)=C</chem>	0	0
<chem>CN1C2CCCC1C</chem>	1	
<chem>CCOCN(C(=O)CCl)c1c(C)cccc1CC</chem>	0	
<chem>CC(C)C12CC1C(C)C(=O)C2</chem>	0	
<chem>C=CN1CCCCC1=O</chem>		0
<chem>CC(=C)CCl</chem>		0
<chem>COc1cc(N)c2C(=O)c3ccccc3C(=O)c2c1N</chem>	1	
<chem>CC(C)CCCC(C)</chem>	0	
<chem>C[C@@H]1[C@H]2[C@H](</chem>	0	0
<chem>C[S+](=O)([O-])c1ccc(cc1)</chem>	0	

OCC1COCC(C(O)C(O)C1O)c	0		
NCC(O)c1cc(i	0	0	
CC(Cl)(Cl)C(=O)O			0 0
Oc1c(N=Nc2i	0	0	0
C[C@@H](Cl	1		
CCCCCCCCCCCC[P+](CCCCC)(CCCCC)CCCCC			1
CCCCC=N(=O)O		0	
CCO		0	0
CN(C)CC[C@@H](c1ccccc1)c2ccccc2		0	
Cc1ccc(CC[C@@H]2CO2)cc1		1	
NC(CSC(F)(F)C(F)(F)C(F)F)C(=O)O		0	
Cc1ccc(cc1S(=O)(=O)O)N=Nc2c(O)ccc3c		0	
CC(C)(N=O)N(=O)=O		1	
C[C@H](CCO)CCC=C(C)C			0
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)(		0	
NC(CSC(F)(F)C(F)Cl)C(=O)O		0	
CC(=O)O[C@@H]1Cc2c3ccc4cccc4c3cc		1	
CCCCN(N)CCCC		0	
C\C=C/[C@(<	0	0	
CC(N(O)C(=O)N)c1cc2cccc		0	0
COc1c2CN(C)	0	0	
CC(O)[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CC[C@@H]4C[C@(<			0
Cc1cccc2c1ccc3cc4cccc4cc23		1	
Oc1ccc2ncccc2c1		0	
[O-]C(=O)P(=	0	0	0
C\C=C(/C)\C(=O)OC\C=C(/C)\CCC=C(C)C			0
N1C2C1c3csc3c4csc24		1	
COc1ccc(CCN	1	0	
N[C@@H](CSS(=O)(=O))[C		0	
CCCCCCC1CCOC1=O			0
CC(C)CCC[C@	0	0	
CCOC(=O)O(i	0	0	
CCCN(CCC)S(	0		0 0
OC1OCC=C2OC(=O)C=C12		0	
Nc1ccc(Oc2ccccc2)cc1		1	
CN(Cc1ccccc1)N=O		1	
ClC(=C(Cl)C=O)Cl		1	
CC(C)(NC(=O)c1cc(Cl)cc(Cl)c1)C#C			0
CCCCOCC=O		0	
CC\C=C(\c1ccc(OCCN(C)C)cc1)/c2ccc(O		0	
NC(=O)c1ccc2[nH]ccc2c1		0	
OC(=O)CF			0
O=CN1CCCCC1C2CC[C@H]:		0	

CC(C)NCC(O)COc1cccc2CC(COc12)O[N+]	0	
O=C(c1cccc1)c2cccc2	0	0
FC(F)(F)COc1	1	0
OCC(CO)N[C@@H]1C[C@](O)(CO)[C@H]	0	
CC(C)(C)c1ccc(cc1)c2ccc(cc2)[N+](=O)[C	0	
Cl[C@H]1C=C[C@@H]2[C@@H]1[C@@	0	
OCC(O)COCC=C		0
O=C(N[C@@	0	0
COc1ccc(cc1N(=O)=O)C(=Nc2cccc2)O	1	
BrC1CCCC(C=O)c1		0
Cc1c(Br)c(Br)c(Br)c(Br)c1Br	0	
CC(C)CCCC(C)C1CCC2C(=CC=C3CC(O)CCC	0	
Nc1nc2CCN(	0	0
Clc1cc(cc(Cl)c1Cl)N(=O)=O		0
OC1=C(Oc2cc(O)cc(O)c2C1	0	0
CC(C)CC(=O)Oc1ccc(C)cc1		0
CCCCN(C[C@@H](O)C1=CC(=[N+]=[N-]))	1	
C[n+]1cccc(c1)C(=O)O	0	
CC(=O)Nc1ccc(cc1)c2ccc(NC(=O)C)cc2	1	
CCCC(=O)O[C@@]1([C@@H](C)C[C@H]2[C@@H]3C		1
C1CCc2c(C1)cc3c4cccc4cc5c6cccc6c2c	1	
C\C=C\c1ccc2OCOc2c1	0	0
C[C@H](N)C(=O)O	0	
Oc1cc2cccc3ccc4ccc(c1c4c23)[N+](=O)[	1	
Nc1nc(O)c2c	0	0
OC(=O)c1ccc(cc1N(=O)=O)N(=O)=O	1	
N(c1cccc1)c2ccc(Nc3cccc3)cc2	1	1
Cc1ccc2nc3c(cc2c1)c4cccc5cccc3c45	0	
CCCCCCC(=O)	1	0
O[C@H]1C=Cc2c(ccc3c4CCC(=O)c4cc(c2	1	
NC[C@@H]1CC[C@H](CC1)C(=O)Oc2ccc(CCC(=O)O)c		0
CC(=C)c1cccc1	0	0
BrC1c(Br)c(B	0	0
C[C@@H]1CC[C@H]2[C@@H](C)C(=O)O[C@@H]3O[		0
[O-][N+](=O)c1ccc2cc(c3ccc(cc3c2c1)[N	1	
CCC(CC)CO		0
Cc1c(cccc1[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1	
COCC1CN(C(=O)O1)c2ccc3nc(sc3c2)C(O	0	
CC1OC(CC(O)	0	1
OC1C(Oc2ccc3ccc4cc5cccc5c6ccc2c3c4	0	
C1O[C@@H]1c2cc3c4cccc4ccc3c5cccc	1	
CC(=CCC\C(=C\C\C\C(=C\C(CCC(=CCCC(=O)C)C)\C)\C		0
CN(C[C@@H](CC[N+]12CCC(CC1)(CC2)C3CCCC3)c4cc		0

Nc1ccc(Oc2ccc(N)c(N)c2)cc1	1		1
CC1CCCC2(C)CCCC12O	0		
CN(Cc1cccc(C)c1)N=O	1		
COc1ccc(NOS(=O)(=O)O)cc1N	1		
C[C@@H]1CN(CC[C@]1(C(=O)O)c2ccccc2)[C@@H]3C			0
CCC(CC)Nc1c(cc(C)c(C)c1N(=O)=O)N(=O)=O			1
OS(=O)(=O)Oc1ccc2cc3ccc4cccc5ccc(c2	0		
Clc1ccc(NC(=O)c2csc(c2)N(=O)=O)cc1	1		
COP(=S)(OC)Oc1nc(Cl)c(Cl)cc1Cl	0		1
O=P1Oc2cccc2c3cccc13			0
Fc1ccc(cc1)C	1		
Oc1cc2[C@H	1	0	
NC(=O)N(CCC(=O)O)N=O		1	
CNCCCCCCCCSc1nc(ccc1C(		1	
NC(=O)c1ncr	0	0	
COCC(=O)N(	0	0	0
COc1cccc1C	1		1
CC(C)(C)c1cc(ccc1N=O)c2ccccc2		1	
C[C@H](CSC(=O)C)C(=O)N1CCC[C@H]1C(=O)N[C@@			0
CCOC(=O)CC(C)C		0	0
COC(=O)CS			0
CC(C)CN1C(=	0		
CC(C)CCC(=O	1		
O[C@H]([C@	1	0	
OC1C2OC2C3=C(C=CC4C3c5cccc6cccc4c!		1	
CC(=O)C(=O)[O-]			0
OC(=O)[C@@	0	0	0
[O-][N+](=O)c1ccc(\C=N\c2snc3ccccc23		1	
CCCCCCCCCCCCCN(OC(=O)C)c1ccc2c(Cc		1	
C(Oc1ccc(Cc2ccc(OCC3CO3)cc2)cc1)C4CO4			0
CC(CCC=C(C)C)CC=O		0	
CC1CCCC1		0	
CC#CCC(C)[C@H](O)\C=C\C1[C@H](O)C[C@@H]2\C\C			0
Nc1ccc(cc1)S(=O)(=O)Nc2cnc3c(Cl)cccc		0	
N#Cc1cccc(c1)C#N		0	0
CC[C@@H](Cl)[N+](=O)[O-]		1	
CSc1ccc(cc1)	0	0	0
CCCCOC(=O)C=C		0	
OCC1O[C@@	0	0	
Nc1ccc2C(=O)c3ccccc3C(=O)c2c1N		1	
C=CC(=O)OCCOC(=O)C=C		0	0
C[C@@H]1[C@@H]2Cc3ccc(O)cc3[C@@]1(C)CCN2C			0
CC(=O)NC(CS\C(C(=C(F))\C(F)(F)F)\F)C(=		0	



N[C@@H](Cc1ccc(O)c(O)c	0	0	0	
OC(=O)Cc1cc	0	0	0	1
[O-][n+]1cc[r	0	0	0	
CCCCCCCCCCCC(=O)O[C@@H]1[C@H		0		
CC(=C)C(=O)OCCNC(C)(C)C			0	
NC(=O)C[C@H](NC(=O)Cc:	0			
CC(=O)NC(CCC(=O)N)C(=O)O			0	
COc1c(CO)c(O)cc2C(=O)c3cccc3C(=O)c		1		
Cc1cccc1[N+](=O)[O-]		0		
OCC1OC(C(O	0	0		
COc1cc(ccc1(	0	0		
COC(=O)c1cc2ccc3cccnc3c2[nH]1			0	
CC(=O)c1c(O	0	0		
Cc1c(cccc1[N+](=O)[O-])N=[N+](			0	
OC(=O)C1=C(	0	0		
CN(C[C@H](O)CO)N=O			1	
CC(O)C(NC(=O)C(C)C(O)C(C)NC(=O)C(NC(=O)c1nc(nc(			0	
OC1C=Cc2cc3c(ccc4cccc34)c(c2C1O)[N		1		
C[N+](C)(CCC	0	0		
CC1CCCC1NC(=O)Nc2cccc2			0	1
[O-][N+](=O)c1cc(Cl)c(Cl)cc1Cl			1	
NCCCNCCSP(	0	0		0
[O-][N+](=O)c1c2cccc2cc3c1ccc4cccc:			0	
[O-][N+](=O)c1ccc(cc1)S(=O)(=O)Nc2cc			0	
Nc1nc2c(Cl)cccc2s1			0	1
NCCCC(N)C(=O)NC(Cc1c[nH]c2cccc12			0	
OC(=O)CCCc1ccc(NCCCl)cc1			1	
Cc1cccc(C)c1N(=O)=O				0
Cn1c(N)nc2c3ccncc3ccc12			1	
CC(CCC#N)C#N			1	0
Fc1cccc(\C=	0	0		
COc1cc(CC=C	0	0	0	0
CC(=O)Nc1c(l)c(NC(=O)C)c(l)c(C(=O)O)c1l				0
Oc1ccc(cc1)C2(CC3CC2C4CCCC34)c5ccc(O)cc5				1
OC(=O)\C=C\c1ccc(Cl)cc1			0	
CC(=O)\C=C\c1occc1			0	
Cc1cnc(cn1)C	0	0		
CCOC(C)OCC	0	0		0
CCCCN(CCC(=O)OCC)C(=O)C				0
CCc1c(C)c2cc3[n-]c(cc4nc(C(CCC(=O)[O-])C4C)c(CC(=				0
CCC1=C(C(C)C2cc(O)ccc12)c3ccc(O)cc3		0		
OCC(S)CS				0
CC(=O)CC(C)(C)C1CCCC1				0

COC(=O)C1CCC(CC1)C(=O)OC			0
[O-][N+](=O)c1ccc2c(c1)cc(c3ccc(cc23))	1		
COC(=O)[C@@]1(O[C@@]1(C)[C@H](C	1		
CC(C)CN(C[C@@H](O)[C@H](Cc1cccc1)NC(=O)O[C@			0
O=C1OC(=O)C2CC=CCC12			0
FC1(F)C(F)(F)C(F)(F)C2(F)C(F)(C1(F)F)C(F)(F)C(F)(F)C			0
O[C@H]1C=Cc2ccc3nc4ccc5cccc5c4cc3	1		
O1C=CC2C1Oc3cccc23	1		
CCN(CC)[S+](=O)([O-])c1c	0		
CN(C)CCCOc1	1	0	0
COC(=O)[C@H]1[C@@H](	0		
CCN(Cc1cccc(c1)S(=O)(=O)[O-])c2ccc(cc2)C(=C3C=CC			0
OC(=O)C1=CCCN(CCON=C(	0		
Cc1cc(c(C)c2c3cccc3[nH]c12)N(=O)=O	1		
COC(C)(C)CCO			0
COc1ccc(CCN	1	1	0
CCCCC\C=C\c1cccc1)\CO			1
[O-][N+](=O)c1ccc2ccc3c(ccc4ccc1c2c3	1		
CC(=O)N\N=	0	0	
C1CCc2cccc2C1			0
Cc1c(\C=N\OCc2cccc2)c3cc(ccc3n1Cc4	1		
CC1(C)C2CC3OC3(C)C1C2	0		
BrCC(Br)CBr	1		
OCCCCO			0
OCc1cc(ccc1(	1	1	
[O-]C(=O)CN	0	0	0
Nc1cc(Cl)ccc1[N+](=O)[O-]	1		
CCCCN1CCC(	1		
CN(C)CCCN1c2cccc2C(C)(	1		
ClC(=O)OCc1cccc1	0		0
Oc1ccc(\C=C'	1	0	
CC(C)C(O)C(C)(C)COC(=O)C(C)C			0
CCCCCCCCCCCCC(=O)OCCC1CCN(CCCN2c3cccc3Sc			0
NC(=O)c1cc[	0	0	
BrCc1c2cccc3ccc4cc5cccc6ccc1c(c56)c4	1		
CC(=CCC\C=C/C=O)\C)C	0		
COC(CC(C)CCCC(C)(C)O)OC			0
OC1C(COC(=O)c2cccnc2)(COC(=O)c3cccnc3)CCCC1(CC			0
C(CN1CCN(C	1	0	
CC1CCC(C(=O)C1)C(C)(C)S			0
C[C@H]1CC[	0	0	
CC1(C)O[C@	0		
CCCc1cc2cccc2c3ccc4C(O)C(O)C5OC5c	0		

CCCCCN(CCC(=O)C)N=O	1	0	
CC(=O)Oc1ccc(CCl)cc1			1
Cc1cc2c3ccccc3[nH]c2nc1N			1
Cc1cc(C)c(cc1N=Nc2cc(c3ccccc3c2O)S(=O)(=O)C1c2ccccc2C(=O)c3ccccc13			0
NC(=O)C1=CN(C=CC1)C2O		0	
OC[C@H]1O[C@H](O[C@H]2O[C@H](CO)[C@@H](C)C)NC(=O)NC(C)C			0
CNC(=NC#N)NCCSCc1nc[nH]c1		0	
CCN(CC)C(=O)Nc1ccc(OCC(O)CNC(C)C)cc1		0	0
CCOC(=O)\C=O	0	0	
Oc1c2ccccc2c3ccc4cccc5ccc1c3c45			1
Cc1cc(C(O)c2ncc([N+](=O)[O-])n2C)c(O)cc1			0
CC(C)C[C@@H](NC(=O)[C@@H](O)[C@H](N)Cc1ccccc1)C(=O)Nc1ccc2C(=O)C(=O)c3ccccc4ccc1c2			0
CC1(C)CCC[C@@]2(C)[C@H]1CC[C@@]3(C)OCC[C@H]2C3			1
CCCCCCCCOCCC#N			0
Cc1ccc2cc3c(ccc4ccccc34)cc2c1		1	
NCC1CCCC(CN)C1			0
Nc1cc2nc3ccccc3nc2cc1N		1	
COc1ccc(\C=C\C(=O)c2ccc(O)cc2)cc1		0	
Nc1ccc(N)c2C(=O)c3c(N)ccc(N)c3C(=O)O		1	
C[C@H](CO)[N+](=O)[O-]		0	
CCN(CC)C(C)C	0	0	0
OC(=O)C[C@H]([C@H](CC(=O)O)C(=O)C)C		1	
CC1CCc2c1ccc3c2ccc4ccccc34		1	
OC1C=Cc2ccc3cc4c(ccc5ccccc45)cc3c2C		1	
CCCN1CCO[C@H]1	0	0	
CN1CCNCC1			0
CN(C)[C@@H]1O[C@H](O)[C@H](O)[C@H]1O	0	0	
O[C@H]1[C@H](O)[C@H](O)[C@H]([C@H]1O)C		1	
[O-][N+](=O)c1oc(C=C(C#N)C#N)cc1		1	
CC(C)CCCC(C)CC=O			0
CCCCCCCCCCCC1CO1		0	0
OCC(O)Cl		1	
CN(C)CCCNc1c2ccccc2nc3c(C)ccc(c13)[N+](=O)[O-]		1	
O=N(=O)c1cc2c3ccccc3c4cccc(c1)c24		1	
CC1=C(CCN2C)C2	1		0
Oc1ccc(cc1)C(c2ccc(O)cc2)(C(F)(F)F)C(F)(F)F			1
Nc1on[n+](c1)N2CCOCC2		0	0
CC(=O)OC1(CCC2C3CCC4=CC(=O)CCC4(C)C)C		0	
COc1ccc(C[C@H]2COC(=O)C)cc1		0	

COc1cc2c(C)c3N(C)CCc4cc	0			
CC(=O)OC1C2OC(=O)C(OC(=O)C)C2OC1:		0		
C(SSCc1ccccc1)c2ccccc2		1		
Cc1cc(C)c(N)c(C)c1N		1		
CC1=CC(=O)Oc2cc(N)ccc12		0		
Nc1ccncc1	0	0		0
CCOc1ccccc1	0	0	0	0
CCOC(=O)CC				0
CN1CCC(CC1)	1	1		1
CS(=O)(=O)N1N=CC(=C(Cl)C1=O)Cl		1		
Nc1ccc(cc1)c2ccc(cc2)N(=O)=O		1		
[O-][N+](=O)c1cc(cc(c1)[N+](=O)[O-])[I		1		
O=N(=O)c1ccc2c(cc3ccccc3c2c1)N(=O)		1		
CC(=CCCC(C)(OC=O)C=C)C				0
NC1=Nc2c(ncn2[C@H]3C[C@H](O)[C@@H](CO)C3=C				0
CN1C=CNC1=S				0
CC1CCC2CC1C2(C)C		0		0
N#Cc1cscn1				0
COc1ccc(N(CCCl)CCCl)c2cc(oc12)[N+](=O		1		
C1CNCCN1		0		0
CCCCC1cc(O)c2C3C=C(C)CCC3C(C)(C)Oc		0		
CC[C@@H](C)[C@H]1O[C@		0		
OC(CN=N#N)c1ccccc1		1		
[O-][N+](=O)c1ccc(CN2C3C2c4ccccc4c5		1		
CCCOCC(C)O				0
NCCc1c[nH]cn1		0	0	0
FC(F)(F)C(F)(	0	0		0
CC(CCC(=O)O)(N=NC(C)(CCC(=O)O)C#N)C#N				0
O=CC=Cc1ccccc1				0
COc1cc2C(=O)CCc2c3ccc4ccccc4c13		1		
Nc1c2ncn(C(c3ccccc3)c4ccccc4)c2nc[n+]		1		
Cc1cc(C)c(C)c(C)c1		0		
CO[C@@H]1	0	0		0
Nc1ncnc(Nc2	0	0		0
OC1C=Cc2c(cc3c4ccccc4c5c6ccccc6cc2c:		1		
CCn1cc[n+](C)c1C				0
Cn1c(N)nc2ccccc12		1		
CC(C)(C)C1CCCCC1=O				0
C[C@]12CC[C@	0	1		0
OCC1OC(C(O)C1O)n2cnc3c(NCc4ccc(cc4		0		
Cc1ccccc1N2CCN(CCC3nnc4CCCCn34)CC2				0
CN(C)[S+](=O)([O-])c1ccc2		1		
OC[C@H]1O[C@H]([C@H]		0		

CCCC(CC)c1ccccc1			0
O=C1CC(=O)c2ccccc2C1=O	1		
CN(CCCCO)N=O	1		
CCCCCCCCCCCCc1ccc(cc1)S(=O)(=O)O	0		
CCOc1ccc(cc1)N=[N+][O-]c2ccc(OCC)c	0		
OC1COC(C(O)C1O)N(N=O)c2ccc(cc2)[N-	1		
OP(=O)(O)CCCI			0
CCn1nc(C)c2N=C(CNC(=O)c12)c3ccc(O)cc3			0
CO[C@H]1C=CO[C@@]2(C)Oc3c(C)c(O)c4c(O)c(NC(=			1
CCC(=O)O[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CCC4=CC(=O)C(			0
Cc1cc(ccc1N)C(=C2C=CC(=Nc3ccc(cc3S(=O)(=O)O)S(=			0
COc1cc2OC3OC=CC3c2c4OC(=O)C5=C(C	1		
Cc1cnc2c(C)cc3c(nc(N)n3C)c2n1	1		
CCCCc1c(C)nc(NCC)nc1O			0
CCOC(=O)C(C#N)c1snc2c(cccc12)[N+](=	1		
C[N+](C)(C)CCCI	0		0
OCCCCCO			0
CC(C)(CCP(=C	0	0	
OCC1CCCO1	0		0
O[C@@H]([C	1	0	
OP(=O)(OCC(Br)CBr)OCC(Br)CBr	1		
OC(=O)Cc1cc	0	0	
C1CN1	1		
[O-][N+](=O)c1[nH]cnc1c2ccccc2	1		
Oc1cc(O)c2C(=O)c3c(O)ccc(O)c3Oc2c1	1		
O=N(=O)c1ccccc1C#N	0		
CC(COc1ccccc1)NC(C)C(O)c2ccc(O)cc2			0
CC(=O)Nc1ccc(Oc2ccc(N)cc2)cc1	1		
CC(c1ncncc1I	0	0	
NC(=O)CC[C@H](Nc1ccc(cc1)N(=O)=O)C(=O)O			0
NCCc1c[nH]c	0	0	
O=C(C1CO1)c2ccc3OCOc3c2	1		
CCCCCOC(=O)NC1=NC(=O)N(C=C1F)[C@@H]2O[C@H			0
CC[C@@H](C)COC(=O)\C=C\c1ccc(cc1)\	1		
OCCN1CCNC1=O			0
CCCCCCCCCCCCI	0		0
C[C@@H](C	0	0	
CN(C)CC(=O)O	0		
CC(C)(C)NCC(O)COc1ccccc2NC(=O)CCc12			0
Nc1ccc(c2ccc(cc2N)N(=O)=O)c(c1)N(=C	1		
NC(=O)\C(=C/c1oc(cc1)[N+](=O)[O-])\c	1		
OCC(O)COP(=O)([O-])[O-]			0
CN1CCN(CC1	0	0	

CCCCC(CC)COC(=O)c1ccc(cc1)C(=O)O	0	
CCN(CC)CCC[C@@H](C)Nc1c2ccc(Cl)cc2	1	
CC1=NN(C(=O)C1N=Nc2ccccc2)c3cc(ccc3Cl)S(=O)(=O)Nc1ncnc2c1r	0	0
OC1CC(=CC(O)C1O)C(=O)O	0	
C(=C(c1ccccc1)c2ccccc2)c3ccccc3		1
NS(=O)(=O)c1ccccc1Cl		0
NC1=NC(=O)	0	0
CN(C)CCn1nr	0	0
Cn1ccc2cc3N(Cc3cc12)C(=O)Nc1ccc(Cl)c(Cl)c1	0	
CC1(CO1)C(=O)N	1	
COc1cc(N)ccc1N	1	
CN(C)CCCN(C(=O)C(=C)C		0
CCN(CC)CC#CC(C)(C)OC(=O)C(O)(C1CCCC1)O[C@H](CNCCO)c1ccc(OCC)cc1	0	
OC(CCl)CCl	1	0
CCOC(=O)CNC(=O)C(C)Br	1	
COc1ccc(NC(=O)C1CCCN(CCC)N=O)cc1	1	1
CCCCN(CCC)N=O	1	
OC(=O)CCCCCCC(=O)O		0
CCCCCOC(=O)C=Cc1oc(cc1)N(=O)=O	1	
CCOCCOCCOCC	0	
C[C@]12CCCC1	0	
O[C@](CCN1CCCC1)(C2CCCN(C)CCCO[C@H]1[C@H](OC1C(O)C(O)C(=O)COC(=O)c1ccccc1C(=O)OCC)C(C)N(C(C)C)C(=O)SCC(=C(Cl)Cl)Cl	0	
OC(=O)c1cc(Br)c(O)c(Br)c1		0
Cc1oc(C)c(C(=O)Nc2ccccc2)c1C		1
CCCCC(=O)\N=C\1/SN(C(=O)CCCC)c2ccc	1	
CC(=O)Oc1ccc(CO)cc1	0	
CCOC(=O)COc1ccc(C)cc1		0
COc1cc2OCC3Oc4c5CC(O)c1=CC(=O)C(=O)C1=O	0	0
OC1=C(O)C(=O)C1=O	0	0
CN(C)CCCO[C@H]1[C@H](OC1C(O)C(O)C(=O)COC(=O)c1ccccc1C(=O)OCC)C(C)N(C(C)C)C(=O)SCC(=C(Cl)Cl)Cl	0	
CON(C(=O)OC)c1ccccc1COc2ccn(n2)c3ccc(Cl)cc3		1
CN(C\C=C\C1CCCC1)Cc2cccc3ccccc23		0
CC(Cc1ccc(O)c(O)c1)(NN)C(=O)O	1	
CC(C)CN(C[C@@H](O)[C@H](O)C(=O)O)C(=O)O	0	
CCCC(=O)OC1CCCCC1	0	
[O-][N+](=O)c1ccc(\C=C\C=C\C=O)cc1	1	
CC(=O)c1cc(C)oc1C		0

Cc1c2ccccc2c(CBr)c3c1ccc4ccccc34			1	
BrC\C=C\CBr				0
Nc1c(CC(=O)	0	0		
C=CCSSSCC=	0	0		0
CN(C)C1CSSSC1				0
Cc1ccc(cc1)S(=O)(=O)NN			1	
C[C@H](N)Cc1cccc(c1)C(F		0		
CC(CCC(=O)O)C1CCC2C3CCC4CC(O)CCC4			0	
CC(=O)c1cccn1[N+](=O)[O-]			1	
CC(=O)C=O			1	
Nc1ncnc2c1ncn2[C@@H]		0		
CC(=O)OC1C	0	0		
CCN=N(=O)CC			0	
CCOC(=O)[C@H](CCc1ccccc1)N[C@@H](C)C(=O)N2C				0
Oc1ccc(O)c2C(=O)c3ccccc3C(=O)c12			1	1
c1ccc2cc3c(ccc4cccnc34)cc2c1			1	
Fc1cccc(Cn2c(cc3cc(F)ccc23)C(=O)Nc4ccc5[nH]ccc5c4				1
OC1c2ccccc2c3ccc(cc13)N(=O)=O			1	
NNC(=O)CNC(=O)C=[N+]=[N-]			1	
CCCCNS(=O)(=O)c1ccccc1				0
OS(=O)(=O)OCc1c2ccccc2cc3c1ccc4ccccc			1	
OC1C(O)c2c(Cl)c3ccccc3cc2c4ccccc14			0	
Clc1ccnc1Cl			1	
Cc1ccccc1OCC(=O)O				0
ClCCNCCCl			1	
N#N=Nc1nc2ccccc2[nH]1			1	
CCc1c(nn(c2ccc(Cl)cc2Cl)c1c3ccc(Br)cc3)C(=O)NN4CC				1
N[C@H]1C(O)O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@@H]1O				0
C[N+](C)(C)C	0	0		0
CCc1c(C)c(C(=O)c2cccc3c		1		
C[N+](C)(C)CCNCCc1ccc(cc1)N=Nc2ccc(c			1	
N[C@@H]1C	0	0	0	
Nc1cc(C(=O)O)c(O)c(c1)S(=O)(=O)O			0	0
BrCC(Br)CCOP(=O)(OCCC(Br)CBr)OCCC(I			0	
Oc1c(Br)cc2c(Oc3c(Br)c(O)c(Br)cc3C24			1	
CCc1c(ncc2[r		0		
CCN1C=C(C(=O)O)C(=O)c2cc(F)c(c(F)c1			1	
[O-][N+](=O)c1cccc2cc(c3ccccc3c12)[N-			1	
CCc1ccccc1N(=O)=O			0	
[O-][N+](=O)c1ccc(c2ccccc2)c(c1)[N+](			1	
COc1cc(ccc1NC(=O)C)[N+](=O)[O-]			1	
NC1=NC(=O)N(C=C1)C2C=C(CO)C(O)C2C			0	
CCC(=O)N(C1CCN(CCC2ccccc2)CC1)c3ccc(F)cc3				0

CN1C(=O)CC(C)(C1=O)c2ccccc2				0
[O-][N+](=O)c1ccc(NC(=O)NCCCl)s1	1			
Oc1cccc2cc3cccc(O)c3c(O)c12	0			1
Cl\C=C(/Cl)\c1c(Cl)c(Cl)c(Cl)c(Cl)c1Cl	0			
CC(C)(C)OC(=O)C=Cc1oc(cc1)N(=O)=O	1			
S=C(NC1CCCCC1)NC2CCCCC2	0			1
Cc1nc2ccc3ccc4ccc(O)cc4c3c2n1C	1			
Clc1ccc(cc1Cl)C(Cl)(Cl)Cl	1			
CCSCCOP(=S)(OC)OC	0			
S=C1NC=NC2N=CNC12				1
CC(C)SCc1occc1				0
ON(=O)=CCl	1			
CC[C@@H]1[C@@H]2C[C@@H]3C	0			
CCN(C(=O)CCCCl)c1snc2ccccc12	0			
OCC(O)CO	0	0	0	0
COC(=O)CCS				0
CCOC(=O)CP(=O)(OCC)OCC				0
CCCCN1C2C1c3ccccc3c4ccccc24	1			
OC(COc1ccccc1c2ccccc2)Cl	1			
C[C@@H](Cc1ccccc1)N(C)C				0
CCc1ccccc1CC				0
NNCCc1ccccc1	0			0
CC1CC2=C(CC1(C)C(=O)C)C(C)(C)CCC2				1
CCC(=O)[N-]S(=O)(=O)c1ccc(cc1)c2c(C)onc2c3ccccc3				0
Cc1cnc(cn1)C(=O)NCCc2cc	0			
CC(=O)O[C@H](C)C	0	0		
ClCc1c2ccccc2c(CCl)c3ccccc13	1			
OCC=C	0			0
Clc1ccnc2ccccc12	1			
CCCCCCCCCCCCOC(=O)c1ccccc1C(=O)O	0			
Nc1cccc(c1)N(=O)=O	1			0
FC(OC(F)(F)F)C(F)(F)Oc1ccc(NC(=O)NC(=O)c2c(F)ccc2)c1				0
[O-][N+](=O)c1ccc2N(S\C(=N/C(=O)c3ccccc3)C)C2	1			
CCN(CC)c1ccc(cc1)N=Nc2ccc(cc2Cl)[N+]	1			
OC(=O)c1ccc(Cl)c(c1)[N+](=O)[O-]	1			
CC(=C)C(=O)OCC(C)(C)COC(=O)C(=C)C	0			0
OP(=O)(OCc1ccccc1)OCc2ccccc2				0
OC(CN1CCN(C)C1)C	1			
C[S+](=O)([O-])c1ccc(cc1)C	0			
Cn1ccc2cc(NC(=O)Nc3cccr3)cc2	0			
C\C=C\C=C\C=C\C=C	0	0		
CC(=CCCC(C)(OC(=O)c1ccccc1N)C=C)C	0			0
CC(C)Nc1ccccc1	0			0



CN(Cc1ccc2N=C(C)NC(=O)c2c1)c3ccc(s3)C(=O)N[C@H](C)C1CCc2c(C)coc2C1	0	0
CC(C)CC(=O)C(=O)C		0
CCc1occc1	0	
CCN(CC)C(=S)SCC(=C)Cl	1	0
Cc1cc(C)cc(c1)[N+](=O)[O-]	1	
CN(C)c1ccc(cc1)N=Nc2ccccc2C	0	
CN(C)S(=O)(=O)CCNC(=O)N(CCCl)N=O	1	
CC(C)[C@@H]1CC[C@@H](C)CC1=O	1	0
NC(=O)CCCC(=O)N	0	0
COCC(=O)O(c1ccc(O)cc1)O	1	
CCN(CC)C(=O)C(=C(C)OP(=O)(OC)OC)Cl		0
CCCCC1ccc(c1)O	0	1
CC(COC(=O)C)OC(=O)C		0
CC[C@H]1CO1	1	
COc1cccc2C(=O)c3c(O)c4CC(O)(CC(OC5(C)C)C)C(C)C	1	0
OC[C@H]1CC[C@H](O1)n2cnc3c(O)ncnc3c(O)[O-][N+](=O)c1ccc(C=O)cc1	1	
BrCc1cc2c3ccccc3c4cccc(c1)c24	1	
CCCCCCCCC(C)C=O		0
Nc1nc(Cl)c2ncn(CC(O)CN=N#N)c2n1	1	
CC(OP(=O)(OC(C)C(Br)CBr)OC(C)C(Br)Cl)O=C1NC(=O)C(=O)C(=O)N1	1	0
COc1cc(cc(O)c1)O	0	0
NC(=NO)c1oc(cc1)N(=O)=O	1	
Nc1ccc(Cc2ccc(N)c(Cl)c2)cc1Cl	1	1
CCC1(C)NC(=O)NC1=O		0
COc1nccnc1N	0	0
COc1cc2OC3OCCC3c2c4oc(O)c5c(O)ccc5c1	1	
CC1(C)C2CCC(=C)C1C2	0	0
CN1C(C(=O)Nc2cccn2)C(=O)N	0	
CN1CN=C2C(=[N+](O)[C-]N=C12)N	1	
CCc1c2ccccc2c(CC)c3c1ccc4ccccc34	0	
CC[N+](C)(CC)O	0	0
CCCCOCC1CO1	1	0
Nc1ccc2ccc3c4ccccc4cc5ccc1c2c35	1	
CN(C)c1ccc(cc1)N=Nc2ccc(cc2)S(=O)(=O)C1=CC=CC=C1	0	
BrCCCB	0	0
CC1Nc2ccc(Cl)cc2[S+](=O)C1	0	
CC(=N)NCCCC[C@H](N)C(=O)N	0	
CCC\C=C(\CC)/C=O	0	
Nc1ccc2nc3ccccc3c(N)c2c1	1	

NC(=O)CF		0
COP(=S)(OC)Oc1ccc(cc1)N(=O)=O	1	0
C[C@@H](N)CN	0	
Oc1ccc2c3ccccc3c4c(ccc5ccc1c2c45)[N+	1	
CC(C)Cn1cnc:	0	0
CC(C)CC(NC(=O)COc1cc(Cl)c(Cl)cc1Cl)C(	0	
Nc1cc2c(cc1[N+](=O)[O-])[nH]c3ccccc2	1	
CC(=O)Nc1snc2ccccc12	1	
OC(=O)Cc1ccccc1Cl	0	
Oc1cc(Cl)cc(Cl)c1Cl	0	1
CC(C)(O)c1ccc(CNC(=O)c2cccnc2Oc3ccc4nonc4c3)cc1		0
c1ccc2c3c(ccc2c1)c4cccc5cccc3c45	1	
CC(=C)[C@@H]1CC=C(C)[C@@H](O)C1	0	
CCOc1cccc(c1)N(=O)=O	0	
CC(Cl)C(Br)CBr	1	
CC1(C)[C@@	0	0
N\C=C/C#N	0	0
CCCCC\C=C\C(=O)OC		0
OCC(O)C(O)C(O)C(O)C1SCC(N1N=O)C(=	0	
C1CCOC1	0	0
CCN1CCOCC1	1	0
CCNc1nc(Cl)nc(NC(C)(C)C#N)n1		0
CCC(C)(C)c1cc(N2Nc3ccccc3N2)c(O)c(c1	0	
COc1cc(N[S+](=O)(C)[O-])	0	
OC(=O)COCCN1CCN(CC1)C		0
Oc1c(Br)cc(cc1Br)C#N	0	
c1cc2cccc3c4cccc5cccc(c(c1)c23)c45	1	
OC(=O)c1ccc	0	0
Cc1cc(O)c(Cl)c(C)c1Cl		1
Clc1ccc(\C=C\C(=O)C2=[S]	0	
Nc1cc(cc(c1O)S(=O)(=O)O)N(=O)=O	0	
NC(CCC(=O)Nc1ccc(cc1)N(=O)=O)C(=O)	0	
N[C@@H](C	0	0
CC(C)(C)c1cc(O)c(cc1O)C(	0	1
C1=Cc2c3ccccc3cc4cccc1c24	1	
CC[C@H](O)CN	0	
Cc1ccc(cc1)S	0	
CCCCCCCCCOC(=O)c1ccccc1C(=O)OCCCCCCCC		0
CO[C@H]1C[C@H](C)CC2=	0	
CC[N+](O-)(CC)CCn1nc2c3ccc(Cl)cc3Sc	1	
CC(C)C(C)\C=	0	0
CC(C)COC(=O	0	0
Nc1cc(c(N)cc1F)[N+](=O)[O-]	1	

Nc1ccc(O)c(c	0	0	0	0
[O-][N+](=O)c1ccc2[nH]c3ccccc3c2c1			1	
COc1cc(O)c2C(=O)c3c(OC)cc4OC5OCCC!			0	
Clc1cccn1			1	0
Nc1ccc2ccccc2c1S(=O)(=O)O			1	0
CCOC(=O)C1:	1	0		
CN(C)[C@H]:	0	0		
CC(C[N+](C)(	0	0		0
CCCCC(CC)CNCC(CC)CCCC			0	0
OCc1oc(cc1)c2[nH]ccc3c4ccccc4nc23			1	
CCCCCCCCCCCC(=O)N1CC		1		
CC1(C)C2CCC(C2)C1=C			0	0
CC(C)COC(=O)OCN1C(=O)(		0		0
C[C@H]1C[C(	0	0		0
ClCN1C(=O)c2ccccc2C1=O			1	0
O=N(=O)c1cc(c(Nc2c(cc2N(=O)=O)=O)N			1	
Cc1ccc(c(c1)N(=O)=O)N(=O)=O			1	
FC1=CNC(=O	0			0
NC(CN=N#N)C(=O)O			1	
Cc1ccc(cc1)S(=O)(=O)NC2CCCCC2			0	1
CC(CO)c1ccccc1				0
CC(=O)CCc1ccccc1				0
C[C@H](N)C(	0	0		0
C[C@H]1CCC	0	0		1
OS(=O)(=O)C1=CC(=O)C(=O)c2ccccc12			1	
ClCc1c2ccccc2c(Cl)c3ccccc13			1	
CC(C)[C@H](SC(=O)C)C(=O)N[C@H]1Cc2ccccc2[C@H]				0
Clc1ccc(cc1)S(=O)(=O)c2cc(Cl)c(Cl)cc2Cl			0	1
CCCCCCC(C)OC(=O)COc1nc(F)c(Cl)c(N)c1Cl				1
C[C@H](N[C@H](CCc1ccccc1)C(=O)O)C(=O)N2CCC[C(				0
COc1ccc(CC=C)cc1OC			0	0
Nc1c(F)cc(cc1F)c2cc(F)c(N)c(F)c2			1	
CNCCc1c[nH]cn1		0		
C[C@@H]1[(	0	0		
c1ccc2cc3c(cc2c1)c4cccc5cccc3c45			1	
OC[C@H]1O	0	0		
CN1N(C(=O)(	0	0	0	0
CC1=C(C=C(C	0	0		0
CC(C)CC(NP(=	0	0		
O=N(=O)c1ccc2C=CCc2c1			1	
NCCCC[C@H](N)C(=O)O				0
C[C@@H]1CN[C@@H]2[C@@H](C1)O[C@@]3(CC[C@				0
CN(C)[C@H]1[C@@H]2[C@@H]3Cc4c(ccc(O)c4C(=				0

COC(=O)[C@	0	0		
Cn1c(N=N#N)nc2ccc3ccccc3c12			1	
COc1ccc2[C@	0	0		0
COC1C(CC2CN3CCc4c([nH]		1	0	
ClP(Cl)c1ccccc1				0
Nc1cccc2nc3ccccc3nc12			1	
COc1cc2CCN(C)Cc3c(CC(=C		0		
CC1=CC(=O)C(=CC1=O)C			0	
Cn1c(nc2ccccc12)c3nc(cs3		0		
CC(C)C1=NC(=O)C=C(C)N1				0
CCOC(=O)c1[nH]c2ccccc2c1\N=C\c3cc(C			1	
OCC1OC(C(O)C1O)n2cnc3c(S)ncnc23			1	
Cn1ccnc1	0	0		
OC1C2OC2c3c(ccc4cc5c(ccc6ccccc56)nc			1	
O=NN1CCC=CC1			1	
CC(C)N(C(C)C)C(=O)SC\C(=C\Cl)\Cl			1	
O[C@H](C=C)c1ccc2OCoc2c1			0	
SCCSCCS				0
[O-][N+](=O)c1cc(c(Nc2c(cc(cc2[N+])(=C			1	
Cc1nc2ccc(Cl)cc2[s+](=O)(		0		
N[C@H](Cc1	0	0	0	0
NS(=O)(=O)c	0			
COc1cc2C[C@@H]3N(C)C		0		
COc1c2ccoc2nc3c(OC)c4OCoc4cc13			1	
Oc1ccc(C=C(	0	0		1
OC1O[C@H]2[C@@H](O)[C@H](OC2=O)[C@@H]1O				0
CC1(C)S[C@H	0	0		
CC(C)(CO)C(C	0	0		
CC(C)CCC(=O)O[C@H]1CC[C@H]2[C@@H]3CCC4=CC(				0
CCCCN(N=O)C(=N)NN(O)O			1	
CC(Cl)Cl			0	0
O=n1cccc2ccccc12			0	
NS(=O)(=O)c	0		0	0
Nc1nc2ccc(OC(F)(F)F)cc2s		0		0
COC(=O)c1sccc1S(=O)(=O)NC(=O)Nc2nc(C)nc(OC)n2				0
NC(=O)CBr			0	
CCCC=O			0	0
Cc1c(N)cc(cc1N(=O)=O)N(=O)=O			1	
OC(C(=O)O)c	0	0		
CC(C)(c1cc(Br)c(OCC(Br)CBr)c(Br)c1)c2cc(Br)c(OCC(B				0
CCCC\C=C\C=O			1	
ClCCC(Br)CBr			0	
CCOc1ccc(cc1)C(C)(C)COCc2cccc(Oc3ccccc3)c2				0

O=C(OC1CN2	0	0	0
CCCC[C@@H](CC)COC(=O)c1ccc(N(C)C)C	1		
CC(C)CC[C@@H](C)Nc1ccc(N[C@H](C)C	0		
COc1cc(O)c2C(=O)c3cc(O)ccc3Oc2c1	1		
CCOC(=O)[C@H](O)C	0	0	0
[O-][N+](=O)c1cccc2c1cc(c3cccc(c23)[N	1		
[O-][N+](=O)c1cccc(Br)c1	1		
ClC1C[C@H]2[C@@H]([C@H]1Cl)[C@]3(Cl)C(=C(Cl)C	1		
Cc1ccc2cc3ccc4cccc5ccc(c2c1)c3c45	1		
Nc1ncnc2c1ncn2Cc3cccc3	1		
Cn1c(C(=O)Nc2ccccn2)c(O	0		
lc1cncc(OC[C@@H]2CCN2	0		
O=C(OCc1cccc1)C(=O)OCc2cccc2	0		
OC[C@H]1O[C@H]([C@H]	0		
Nc1ccc2cc(cc(O)c2c1N=Nc3cccc3C(F)(F)F)S(=O)(=O	0		
Fc1cnc2cccc(F)c2c1	0		
Cc1c(cccc1[N+](=O)[O-])C(=O)O	1		
O[C@H]1CC[	0	0	
CCCC1OC2CC3C4CCC5=CC(=O)C=CC5(C4C(CC3(C2(O1)C(=O)CO)C)O)	0		
C1CCC(C(C1)N)N.C(=O)(C(=O)[O-])[O-]	1		
Cc1ncc(n1CCO)N(=O)=O	0		
C1CCC(CC1)C(CC2CCCN2)C3CCCCC3	1		
CCCCCCCC=CCCCCCCC(=O)O.C(CO)N	0		
CCCCCN(C)CCC(O)(P(=O)(O)O)P(=O)(O)O	0		
Cc1c(C)c2OC(C)(COc3ccc(Cc4sc(O)nc4O)cc3)CCc2c(C)c1O	1		
Nc1ccc(C(O)=O)c(O)c1	1		
CC(CCC1cccc1)NCC(O)c2ccc(O)c(c2)C(N)=O	1		
CC(C)C1=C(C(=CC=C1)C(C)C)OCOP(=O)([O-])[O-]	0		
CC1=CC2=C(C=C1CC(=O)C3=C(C=CS3)S(=O)(=O)NC4=C(C(=NO4)C)C	1		
CCC(C1=CC(=CC=C1)O)C(C)CN(C)C	0		
CC1=C(C=C(C=C1)NC2=NC=CC(=N2)N(C)C3=CC4=NN(C(=C4C=C3)C)C	1		
Cc1ccc(C)c(OCCCC(C)(C)C(O)=O)c1	1		
C1=CC=C(C=C1)CN2C3=CC=CC=C3C(=N2)OCC(=O)O	1		
Cc1cc(no1)C(=O)NNCc2cccc2	1		
C[C@](N)(Cc1ccc(O)cc1)C(O)=O	0		
CC1=C(C(=O)C2=CC=CC=C2C1=O)CC=C(C)CCCC(C)CCCC(C)CCCC(C)C	0		
C(CC(=O)[O-])CO	0		
CCCCN(CCCC)CCCOc1ccc(cc1)C(=O)c1c(CCCC)oc2ccc(NS(C)(=O)=O)c	1		
CC[C[N+](C)(C)C)OC(N)=O	0		
OC(=O)Cc1csc(n1)-c2ccc(Cl)cc2	1		
C1=CC(=C2NC(=C3C=CC=CC3=O)N(N2)C4=CC=C(C=C4)C(=O)O)C(=O	1		
CC1C=CC=CCCC=CC=CC=CC=CC(CC(C)C(CC(=O)CC(C)CCC(CC(CC(CC(=O	0		
NC(=O)OCC(COC(N)=O)c1cccc1	1		

CC(C(=O)NC(C)C(=O)NC1C2C1CN(C2)C3=C(C=C4C(=O)C(=CN(C4=N3	1
C1CN(CCC1C(=O)N)CCCN2C3=CC=CC=C3SC4=C2C=C(C=C4)Cl	1
CC1=C(SC=[N+])1CC2=CN=C(N=C2N)C)CCO	0
CC(\C=C\C1=C(C)CCCC1(C)C)=C/C=C/C(C)=C\C(O)=O	1
Cn1cc[nH]c1=S	1
CCC(C)C1C(=O)NC(C(=O)NC(C(=O)NC(C(=O)NC(C(=O)NCCCC(C(=O	0
CC1C(C(C(O1)OC2C(OC(CC2O)OC3C(OC(CC3O)OC4CCC5(C(C4)CCC	0
Cn1c2nc[nH]c2c(=O)n(C)c1=O	0
[H][C@@]1(CC[C@@]2([H])[C@]3([H])[C@H](O)C[C@]4([H])C[C@	1
C(CNCCNCCN)N	0
C1CC(CCC1OP(=O)([O-])OCC(CN(CCN(CC(=O)[O-])CC(=O)[O-])CC(=	0
OC(=O)c1cn(C2CC2)c3cc(N4CCNCC4)c(F)cc3c1=O	1
CC1(C(NC(S1)C(C(=O)NCCCCC(=O)O)NC(=O)CC2=CC=CC=C2)C(=O)	0
CN1CCN(Cc2ccc(cc2)C(=O)Nc3ccc(C)c(Nc4nccc(n4)-c5cccnc5)c3)CC	1
C[Si]12OCCN(CC(O1)COCC=C)CC(O2)COCC=C	0
CC1C(C(C(C(O1)OC2C(OC(C(C2O)O)OC3C(OC(C(C3O)O)O)CO)CO)O)	1
CCC(C)C(C(=O)NC(CCC(=O)N)C(=O)NC(CC(C)C)C(=O)NC(CCSC)C(=O)	0
COCCNC(=O)CN(CCN(CCN(CC(=O)NCCOC)CC(=O)[O-])CC(=O)[O-])C	0
CCOC(=O)N1CCC(CC1)=C2c3ccc(Cl)cc3CCc4cccnc24	0
Fc1c[nH]c(=O)[nH]c1=O	0
Cc1cc2nc3c(nc(=O)[nH]c3=O)n(CC(O)C(O)C(O)CO)c2cc1C	0
C(CC(C(=O)O)N)CN=C(N)N	0
CC=C1C(=O)NC(C(=O)OC2CC(=O)NC(C(=O)NC(CSSCCC=C2)C(=O)N1	0
CCOC1C(CC(=O)O1)NC(=O)C2CCCN3N2C(=O)C(CCC3=O)NC(=O)C4=	1
NCC1CCC(CC1)C(O)=O	0
O=N[Fe--](C#N)(C#N)(C#N)(C#N)C#N	0
CCOC(C(=O)C1=CC=C(C=C1)C2=CC=CC=C2)NC3=CC=C(C=C3)C(=O)O	1
CC(C)C(=O)OC1=C(C=C(C=C1)CO)C(CCN(C(C)C)C(C)C)C2=CC=CC=C2.	0
Nc1ncnc2n(cnc12)[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]3O	0
CC12CCC3C(C1CCC2(C)O)CCC4C3(COC(=O)C4)C	1
CC(C)COc1ccc(cc1C#N)-c1nc(C)c(s1)C(O)=O	1
Cc1ncc2CN=C(c3ccccc3F)c4cc(Cl)ccc4-n12	0
CC(CC1=CC=CC=C1)N	0
CCNC(=NCCCC(C(=O)NC(CC(C)C)C(=O)NC(CCCCN=C(NCC)NCC)C(=C	0
C1=CC(=C(C=C1)CC(=O)O)N)C(=O)C2=CC=C(C=C2)Br	1
C1CC(C1)CN2CCC34C5C(CCC3(C2CC6=C4C(=C(C=C6)O)O5)O)O	0
CC1=C(C2=CC3=NC(=CC4=NC(=CC5=C(C(=C(N5)C=C1N2)C(C)OC(C)C	0
CC(C)(CC1=CC=CC=C1)N	0
Cc1cc2c(cc1C(=C)c3ccc(cc3)C(O)=O)C(C)(C)CCC2(C)C	1
Cn1cnc2n(C)c(=O)n(C)c(=O)c12	0
CCC1=C(C2=CC=CC=C2O1)C(=O)C3=CC=C(C=C3)O	1
C[C@]12C[C@H](O)[C@H]3[C@@H](CCC4=CC(=O)CC[C@]34C)[C@	0
CC(C1=CC=CC=C1)NN	1

CON=C(C1=CC=C(C=C1)C2=CC=C(O2)C3=CC=C(C=C3)C(=NOC)N)N	1
CC(=O)OC1CC2CCC3C(C2(CC1[N+]4(CCCCC4)C)C)CCC5(C3CC(C5OC(=	0
Clc1ccc-2c(c1)C(=NCc3nncn-23)c4cccc4	0
C1CC2C(=O)NC(CSSCCC(=O)NC(C(=O)NCC(=O)NC(C(=O)NC(C(=O)N	0
C1=CC(=CC=C1SC(P(=O)(O)O)P(=O)(O)O)Cl	0
CC(C)(CO)N.CN1C2=C(C(=O)N(C1=O)C)NC(=N2)Br	0
C1C(C(C(C(C1N)OC2C(C(C(C(O2)CO)O)O)N)OC3C(C(C(O3)CO)OC4C(	0
OC(=O)c1c(l)cc(l)c(NC(=O)CCCC(=O)Nc2c(l)cc(l)c(C(O)=O)c2l)c1l	0
COc1ccc2n(C(=O)c3ccc(Cl)cc3)c(C)c(CC(O)=O)c2c1	1
CCC(C)C(C(=O)NC(CO)C(=O)NC(CC(C)C)C(=O)NC(CC(=O)O)C(=O)NC	0
CN1CCC23CCCC2C1CC4=C3C=C(C=C4)O	0
CCC1=NN(C(=O)N1CCOC2=CC=CC=C2)CCCN3CCN(CC3)C4=CC(=CC=C	1
CNC1CCC2=C(C1)C3=C(N2)C=CC(=C3)C(=O)N	0
CC(CC1=CC=CC=C1)N(C)CC2=CC=CC=C2	0
CN(CCOc1ccc(NS(C)(=O)=O)cc1)CCc2ccc(NS(C)(=O)=O)cc2	0
CC(C(O)=O)c1cccc(Oc2cccc2)c1	1
CC(=O)NC1=C(C(=C(C=C1)C(=O)O)I)C(=O)NCI	0
CCC1C(C(C(C(=O)C(CC(C(C(C(C(=O)O1)C)OC2CC(C(C(O2)C)O)(C)O	1
CO[Si](C)(C)O[Si](C)(C)C	0
CC(C1=CC(=C(C=C1)N2CC=CC2)Cl)C(=O)O	1
CC(C)(C)C#CC=CCN(C)CC1=CC=CC2=CC=CC=C21	1
CCC1C(=O)N(CC(=O)N(C(C(=O)NC(C(=O)N(C(C(=O)NC(C(=O)NC(C(=	1
OC(=O)c1cc(nc2cccc12)-c3cccc3	1
CC(C)CC(CC(=O)O)CN	0
CC(=O)OC1CC2CCC3C(C2(CC1N4CCCC4)C)CCC5(C3CC(C5OC(=O)C)[	0
OC(=O)c1cc(ccc1O)-c2ccc(F)cc2F	1
Nc1ccc(cc1)S(=O)(=O)NC(O)=N	1
CCC(C)C1C(=O)NC(C(=O)NC(C(=O)NC(C(=O)NC(C(=O)NCC(=O)NC(C	0
CS(=O)(=O)OCCCCOS(C)(=O)=O	1
C1=CC=NC(=C1)NS(=O)(=O)C2=CC=C(C=C2)NN=C3C=CC(=O)C(=C3)(	1
CCCC(C1(CCC2C(O1)CC(=O)C2CCCCC(=O)O)O)(F)F	0
CC\C(c1cccc1)=C(/c2cccc2)c3ccc(OCCN(C)C)cc3	1
Nc1nc2ncc(CNc3ccc(cc3)C(=O)N[C@@H](CCC(O)=O)C(O)=O)nc2c(	0
CC1=CC(=CC=C1)CN2CCN(CC2)C(C3=CC=CC=C3)C4=CC=C(C=C4)Cl	0
CN1CCC23C4C1CC5=C2C=C(C=C5)O)OC3C(C=C4)O	0
C1CC(N(C1)C(=O)C2CSSCC(C(=O)NC(C(=O)NC(C(=O)NC(C(=O)NC(C	0
CC(=O)Oc1ccc(cc1)C(=C2CCCC2)c3ccc(OC(C)=O)cc3	1
CCC(C)C1C(=O)NC(C(=O)NCC(=O)NCC(=O)NC2CSSCC3C(=O)NC(C(=	0
CC(C)C[C@@H](NC(=O)[C@@H](Cc1cccc1)NC(=O)c2cnccn2)B(O)I	1
Oc1ccc(cc1)C1CNCCc2c(Cl)c(O)c(O)cc12	0
CN(CC(=O)O)C(=S)C1=CC=CC2=C1C=CC(=C2C(F)(F)F)OC	1
Cn1cnc(c1Sc2ncnc3nc[nH]c23)N(=O)=O	1
C1=C(NC=N1)CCN	0

Cc1ccc(cc1)C(=C/CN2CCCC2)\c3cccn3	0
Clc1ccc(cc1)[C@H]2CC[C@H](CC2)C3C(=O)C(=O)c4ccccc4C3=O	1
C1CCC(CC1)C(CCN2CCCC2)(C3=CC=CC=C3)O	0
OCC(O)COC(=O)c1ccccc1Nc2ccnc3cc(Cl)ccc23	1
C1=CC=C(C(=C1)C(C2=CC=C(C=C2)Cl)C(Cl)Cl)Cl	0
CC(C1=CC2=C(C=C1)OC(=N2)C3=CC=C(C=C3)Cl)C(=O)O	1
Oc1cn(N=Cc2ccc(o2)N(=O)=O)c(=O)[nH]1	1
Cc1ccc(Nc2c(F)cccc2Cl)c(CC(O)=O)c1	1
CCCCCCCC[C@H](C[C@H]1OC(=O)[C@H]1CCCC)OC(=O)[	1
CCCc1cc(=O)[nH]c(=S)[nH]1	1
Cc1ccccc1C(=O)Nc1ccc(C(=O)N2CCCC(O)c3cc(Cl)ccc23)c(C)c1	1
Oc1nc2cc(Cl)ccc2o1	1
CC(C)(C1=CC=C(C=C1)C(CCCN2CCC(CC2)C(C3=CC=CC=C3)(C4=CC=CC	0
CCC1C2(C(C(C(=O)C(CC(C(C(C(=O)C(C(=O)O1)C)C)OC3C(C(CC(O3)C)	1
CC(C)C(CC1=CC(=C(C=C1)OC)OCCOC)CC(C(C(C(C)C)C(=O)NCC(C)(	0
CC1C2CC3=C(C1(CCN2CC=C(C)C)C)C=C(C=C3)O	0
CC(C)C(C(=O)NCC(=O)NC(CCCCN)C(=O)NC(CCCCN)C(=O)NC(CCCNC(	0
CCCCS(=O)(=O)NC(CC1=CC=C(C=C1)OCCCC2CCNCC2)C(=O)O	0
C(C(CO[N+](=O)[O-])O[N+](=O)[O-])O[N+](=O)[O-]	0
Cn1c2ncn(CC(O)CO)c2c(=O)n(C)c1=O	0
Nc1ccn([C@H]2O[C@H](CO)[C@H](O)[C@H]2O)c(=O)n1	1
CN1CCC23C4C1CC5=C2C(=C(C=C5)OC)OC3C(C=C4)O	0
CCCCOC1=CC=C(C=C1)C2=CC=C(C=C2)C3=CC=C(C=C3)C(=O)NC4CC(	1
CCOC(=O)C1(CCN(CC1)C)C2=CC=CC=C2	0
Cl[Cu]Cl	0
NCCCC(O)(P(O)(O)=O)P(O)(O)=O	0
CC(=O)Nc1c(l)c(NC(C)=O)c(l)c(C(O)=O)c1	0
COc1cc2ncnc(Nc3ccc(F)c(Cl)c3)c2cc1OCCCN4CCOCC4	1
CC1=CC(=C(C(=C1C=CC(=CC=CC(=O)O)C)C)C)OC	1
C1=CC(=C(C(=C1C(=O)C2=CC(=C(C(=C2)O)O)O)O)O	1
CC1=C(C=C(C=C1)N2C(=O)C(=C(N2)C)NN=C3C=CC=C(C3=O)C4=CC(=	1
[O-][N+](=O)O[C@H]1CO[C@H]2[C@H](CO[C@H]12)O[N+]([(	0
CN1[C@H]2CC[C@H]1C[C@H](C2)OC(=O)C(CO)c3ccccc3	0
OC[C@H]1CC[C@H](O1)n2cnc3c2nc[nH]c3=O	1
Cn1c(CCCC(O)=O)nc2cc(ccc12)N(CCCl)CCC	0
C1CC[N+](2(C1)C3CCC2CC(C3)OC(=O)C(C4=CC=CC=C4)(C5=CC=CC=C	0
CC1=CC2=C(C=C1C)N(C=N2)C3C(C(C(O3)CO)OP(=O)(O)OC(C)CNC(=	0
CCCC(C)(COC(N)=O)COC(=O)NC(C)C	0
CC(=O)OC1(CCC2C1(CCC3C2CCC4=CC(=O)CCC34)C)C#C	0
CCOc1ccccc1OCCN[C@H](C)Cc2ccc(OC)c(c2)S(N)(=O)=O	0
COc1cc(OC)c(Cl)c2OC3(C(C)CC(=O)C=C3OC)C(=O)c12	1
CC1C(OCCN1C)C2=CC=CC=C2	0
CN(C)C1=CC(=C(C=C1)OC)CNC2CCCN2C3=CC=CC=C3	0



CC(C)C(C)C=CC(C)C1CCC2C1(CCCC2=CC=C3CC(CCC3=C)O)C	0
CCC(=O)N(C1=CC=CC=C1)C2(CCN(CC2)CCC3=CC=CS3)COC	0
C1C(C(OC1N2C=NC3=C2NC=NCC3O)CO)O	1
CN1CCC23C4C(=O)CCC2(C1CC5=C3C(=C(C=C5)OC)O4)O	0
[H]OC([H])([H])C(=O)[C@@]1(O[H])C([H])([H])C([H])([H])[C@@]2	0
CCCN(CCC)C(=O)CC1=C(N=C2N1C=C(C=C2)Cl)C3=CC=C(C=C3)Cl	1
OC(Cn1ccnc1)(P(O)(O)=O)P(O)(O)=O	0
Nc1nnc(c(N)n1)-c2cccc(Cl)c2Cl	1
C[N+]1(CCC23C4C(=O)CCC2(C1CC5=C3C(=C(C=C5)O)O4)O)CC6CC6	0
CCNC(=O)N(CCCN(C)C)C(=O)C1CC2C(CC3=CN4=CC=CC2=C34)N(C1	0
c1nc(cs1)-c2nc3cccc3[nH]2	1
CCN(CC)CCNC(=O)c1c(C)[nH]c(\C=C2/C(=O)Nc3ccc(F)cc23)c1C	1
CC(=O)Oc1cccc1C(O)=O	0
CCC12CC(=C)C3C(C1CCC2(C#C)O)CCC4=CC(=O)CCC34	1
CNCC(C(C(C(CO)O)O)O)O.C(CN(CC(=O)O)CC(=O)[O-])N(CCN(CC(=O	0
CC(C)c1cc(OC(C)=O)c(C)cc1OCCN(C)C	1
Cc1cn(C2CC(N=N#N)C(CO)O2)c(=O)[nH]c1=O	1
CC1=C(C(=O)N2CCCC(C2=N1)O)CCN3CCC(CC3)C4=NOC5=C4C=CC(=	0
CCC(C)C(C(=O)NC(CO)C(=O)NC(CC(C)C)C(=O)NC(CC(=O)O)C(=O)NC	0
CCCCN1C(=O)C(NC(=O)C12CCN(CC2)CC3=CC=C(C=C3)OC4=CC=C(C=	1
CC(CC1=CC=CC=C1)NC	0
CCCCN1CC(C(C(C1CO)O)O)O	0
C1=NC2=C(N1C3C(C(C(O3)COP(=O)(O)O)O)O)N=C(N=C2N)F	0
COC1C(CC2CN3CCC4=C(C3CC2C1C(=O)OC)NC5=C4C=CC(=C5)OC)OC	0
C(C(F)(F)F)(C(F)(F)F)(F)F	0
CCOC(=O)CNC(C1CCCC1)C(=O)N2CCC2C(=O)NCC3=CC=C(C=C3)C(=	1
CC1C=CC=C(C(=O)NC2=C(C3=C(C(=C4C(=C3C(=O)C2=CN5CCN(CC5	1
CN[C@H]1[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](CO)O[C@H]1O[C@H]2[C@	0
C1C2CC2N(C1C#N)C(=O)C(C34CC5CC(C3)CC(C5)(C4)O)N	0
CC1=CC(=C(C=C1)O)C(CCN(C(C)C)C(C)C)C2=CC=CC=C2	0
C[C@]12CC[C@H]3[C@@H](CCC4=Cc5oncc5C[C@]34C)[C@@H]1C	1
CC1(C(=O)N2C(C(=O)N3CCCC3C2(O1)O)CC4=CC=CC=C4)NC(=O)C5C	0
CC1CCN(C(C1)C(=O)O)C(=O)C(CCCN=C(N)N)NS(=O)(=O)C2=CC=CC3	0
C1=NC2=C(N1)C(=S)N=CN2	1
CC(C)(CO)C(C(=O)NCCCCO)O	0
Cc1cn([C@@H]2O[C@H](CO)C=C2)c(=O)[nH]c1=O	1
CC(=O)Oc1ccc(cc1)C2(C(=O)Nc3cccc23)c4ccc(OC(C)=O)cc4	1
CN(Cc1cnc2nc(N)nc(N)c2n1)c3ccc(cc3)C(=O)N[C@@H](CCC(O)=O)	1
CC1C(C(C(O1)OC2C(C(C(OC2OC3=C4C=C5C=C3OC6=C(C=C(C=C6)C	0
Nc1ccc(cc1)C(=O)NCC(O)=O	0
CC(O)(P(O)(O)=O)P(O)(O)=O	0
CC[C@H](C)[C@@H]1NC(=O)[C@H](Cc2ccc(O)cc2)NC(=O)[C@@H	0
CCC(C)C(C(=O)NC(CC(C)C)C(=O)N1CCCC1C(=O)N2CCCC2C(=O)NC(C	0

C=CCN.C1C(O1)CCI	0
CCOC(=O)c1cncn1C(C)c2ccccc2	0
CC1=C(C2=C(N1CC(=O)O)C=C(C=C2)OC)C(=O)C3=CC=C(C=C3)Cl	1
CCc1cccc2c3CCOC(CC)(CC(O)=O)c3[nH]c12	1
Nc1nc(O)c(o1)-c2ccccc2	1
CCC(C)C1C(=O)NC(C(=O)NC(C(=O)NC(CSSCC(C(=O)NC(C(=O)N1)CC(C1C(N(C2=C(N1)NC(=NC2=O)N)C=O)CNC3=CC=C(C=C3)C(=O)NC(CF1ccc(cc1)C(=O)CCCN2CCC(=CC2)n3c4ccccc4[nH]c3=O	0
C1=CC=C(C=C1)CC(CC(=O)CNC(=O)C2=CC=CC=C2)C(=O)O	0
CC(COC1=CC=CC=C1)NN	1
CN(C)[C@H]1[C@@H]2[C@@H]3Cc4c(ccc(O)c4C(=O)C3=C(O)[C@Cc1c(oc2c(cccc2c1=O)C(=O)OCCN3CCCC3)-c4ccccc4	0
C[N+](C)C2CC(CC1C3OC23)OC(=O)C(CO)c4ccccc4	0
CC12CCC3C(C1CCC2O)CCC4=C3C=CC(=C4)OC(=O)N(CCCl)CCCl	1
CN1C2=C(C3=CC=CC=C3S1(=O)=O)OC(=O)N(C2=O)C4=CC=CC=N4	1
C1CC1NC2=NC(=NC3=C2N=CN3C4CC(C=C4)CO)N	1
CC(=O)OC1=CC2=C(S1)CCN(C2)C(C3=CC=CC=C3F)C(=O)C4CC4	0
COc1cccc2C(=O)c3c(O)c4C[C@](O)(C[C@H](O[C@H]5C[C@H](N)[C1=NC2=C(N1C3C(C(C(O3)CO)O)F)N=C(N=C2N)Cl	0
CC1C=CC=C(C(=O)NC2=C(C3=C(C(=C4C(=C3C(=O)C2=CN5CCN(CC5CS(=O)(=O)CCNc1ccc(o1)-c2ccc3ncnc(Nc4ccc(OCc5cccc(F)c5)c(Cl)Nc1cc(nc(=N)n1O)N2CCCCC2	1
CCCCCCN(CC)CCCC(C1=CC=C(C=C1)NS(=O)(=O)C)O	0
CCCCCOC1=CC=C(C=C1)C2=CC(=NO2)C3=CC=C(C=C3)C(=O)NC4CC(CF1ccc(cc1)C(CCCN2CCC(CC2)n3c4ccccc4[nH]c3=O)c5ccc(F)cc5	0
CC1=CC(=C(C2=C1C=CC=N2)O)Br	1
C1C(N(C2=C(N1)N=C(NC2=O)N)C=O)CNC3=CC=C(C=C3)C(=O)NC(CCC(C)CC(C)CCCCCCCC(=O)NC1CC(C(NC(=O)C2C(CCN2C(=O)C(NC(=C=C1C(CC(C1CO)O)N2C=NC3=C2NC(=NC3=O)N	1
CCCC(=O)OCOC(=O)C1=C(NC(=C(C1C2=C(C(=CC=C2)Cl)Cl)C(=O)OC)(CCN(CC)C(=O)C(\C#N)=C\c1cc(O)c(O)c(c1)N(=O)=O	0
CC(N(O)C(N)=O)c1cc2ccccc2s1	1
COc1ccc(cc1)[C@@H]2Sc3ccccc3N(CCN(C)C)C(=O)[C@@H]2OC(C)CCC(C)CCCC(=O)NC(CCNCS(=O)(=O)[O-])C(=O)NC(C(C)O)C(=O)NCSSCC[C@H](NC(=O)[C@H](Cc1ccc(OS(O)(=O)=O)cc1)NC(=O)[C@@CCCC1(CC(=O)C(=C(O1)O)C(CC)C2=CC(=CC=C2)NS(=O)(=O)C3=NC(=CN(C)CCCC1C2=CC=CC=C2NC3=C1C=C(C=C3)Cl	1
C1CC2=CC=CC=C2C(C3=CC=CC=C31)[NH2+]CCCCCCC(=O)O	1
CC[C@H]([C@H](C)O)n1ncn(-c2ccc(cc2)N2CCN(CC2)c2ccc(OCC3NCCCNCCSP(O)(O)=O	0
CC1=NC(=CN1C2=CC=C(C=C2)[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	1
CC1(C)S[C@@H]2[C@H](NC(=O)COc3ccccc3)C(=O)N2[C@H]1C(O):C1=CN(C(=O)N=C1N)C2C(C(C(O2)CO)O)(F)F	0
	1

CN(C)CC=C(C1=CC=C(C=C1)Br)C2=CN=CC=C2	1
CCCC(CCC)C(=O)O.CCCC(CCC)C(=O)[O-]	1
CC(C)(C)NCC(=O)NC1=C(C2=C(CC3CC4C(C=O)C(=C(C4(C=O)C3=C2)C=CC1=CC=CC=C1S(=O)(=O)[O-])	1
OCC(NC(=O)C(Cl)Cl)C(O)c1ccc(cc1)N(=O)=O	0
C1C(=S)N(C2=C(C=C(C=C2)Cl)C(=N1)C3=CC=CC=C3F)CC(F)(F)F	0
CC(C(C1CNC2=C(N1)C(=O)N=C(N2)N)O)O	0
CC(C)NC1=NC=CC=N1	1
CN(C)CC1=CC=C(O1)CSCCNC(=C[N+](=O)[O-])NCC2=CC3=C(C=C2)O	1
C1C(=O)NC(=O)N1N=CC2=CC=C(O2)C3=CC=C(C=C3)[N+](=O)[O-]	1
C[N+](C)(C)CC([O-])=O	0
CC(C)(C)NC(=O)C1CN(CCN1CC(CC(C2=CC=CC=C2)C(=O)NC3C(CC4=CC(C)COC(=O)NCCC(=O)NC(CC1=CNC2=CC=CC=C21)C(=O)NC(CCSC)CC(C)c1nnc(C)n1[C@H]1C[C@@H]2CC[C@H](C1)N2CC[C@H](NC(=C1CCN(CC1)CCC(C2CC3CC2C=C3)(C4=CC=CC=C4)O	1
CCC(=O)NCCC1CCC2=C1C3=C(C=C2)OCC3	0
C1CN(CC2=C1SC=C2)CC3=CC=CC=C3Cl	1
CN1C2CCC1CC(C2)OC(C3=CC=CC=C3)C4=CC=CC=C4	0
CCCCCCC(C)(C)C1=CC2=C(C3CC(=O)CCC3C(O2)(C)C)C(=C1)O	0
CC(=O)Oc1ccc(cc1)C(c2ccc(OC(C)=O)cc2)c3cccn3	0
CCN(C(C)=O)c1cccc(c1)-c2ccnc3c(cnn23)C#N	0
CC[C@@]1(O)C(=O)OCc2c1cc3-c4nc5ccc(O)c(CN(C)C)c5cc4Cn3c2=COc1cccc1Oc2c(NS(=O)(=O)c3ccc(cc3)C(C)(C)C)nc(nc2OCCO)-c4n	1
CC(=O)Nc1nnc(s1)S(N)(=O)=O	1
CC1=CC(=CC(=C1OC2=NC(=NC(=C2Br)N)NC3=CC=C(C=C3)C#N)C)C#N	1
CC(C)C1NC(=O)C(NC(=O)c2ccc(C)c3oc4c(C)c(=O)c(N)c(C(=O)NC5C(NCCCCC(O)=O	1
CCCCC(C)(C=CC1C(CC(C1CC=CCCC(=O)O)O)O)O	0
CC12CCC3C(C1CCC2C(=O)NC4=C(C=CC(=C4)C(F)(F)F)C(F)(F)F)CCC5(CCCC(C)(COC(N)=O)COC(N)=O	0
CCC(C)N1C(=O)N(C=N1)C2=CC=C(C=C2)N3CCN(CC3)C4=CC=C(C=C4)CC12CCC3C(CCC4=CC(=O)CCC34C)C1CCC2O	1
CC(C(=O)[O-])O	0
C1=CC(=CC=C1S(=O)(=O)NC=NCCSCC2=CSC(=N2)N=C(N)N)Br	1
CN1CCC23C4C(=O)CCC2(C1CC5=C3C(=C(C=C5)O)O4)O	0
C(C(S)S)O	0
CN(C)C(=N)NC(N)=N	0
CC(C)(C)NCC(COC1=CC=CC=C1C2CCCC2)O	0
Oc1ccc(cc1)-c2sc3cc(O)ccc3c2C(=O)c4ccc(OCCN5CCCCC5)cc4	0
N[S+](([O-])(=O)c1cc(Cl)c(Cl)c(c1)[S+](N)([O-])=O	0
CN(C)CCC(C1=CC=C(C=C1)Br)C2=CC=CC=N2	0
CC(C(=NO)C)NCC(C)(C)CNC(C)C(=NO)C	0
CCCCOCC(CN1C(=O)C(C(=O)NC1=O)(CC)C2=CC=CC=C2)OC(=O)N.CC	1

C1CCC2(C3CC4=C(C2(C1)CCN3CC5CCC5)C=C(C=C4)O)O	0
CC(C)Cc1ccc(CC(O)=O)cc1	1
CC(CN1CCN(CCN(CCN(CCC1)CC(=O)[O-])CC(=O)[O-])CC(=O)[O-])O	0
C(N1CCCNCCNCCCNC1)c2ccc(CN3CCCNCCNCCC3)cc2	0
CC(C)CC(C(=O)NC(C(C)C)C(=O)O)NC(=O)CNC(=O)C(CCC(=O)N)NC(=	0
C1=CC=C(C=C1)C2(C(=O)N(C(=O)N2)COP(=O)(O)O)C3=CC=CC=C3	1
C1C(C(C(C(C1N)OC2C(C(C(C(O2)CN)O)O)N)OC3C(C(C(O3)CO)OC4C(	0
CCC(C)C(C(=O)N1CCCC1C(=O)NC(CCC(=O)O)C(=O)NC(CCC(=O)O)C(-	0
CN(C)CCC(C1=CC=C(C=C1)Cl)C2=CC=CC=N2	0
OC[C@H]1O[C@](O)(CO)[C@@H](O)[C@@H]1O[C@@H]2O[C@H	0
CCC(C)C(C(=O)NC(CCC(=O)O)C(=O)NC(CCC1=CNC2=CC=CC=C21)C(=C	0
CC[C@]1(O)C[C@@H]2CN(C1)CCc3c([nH]c4cccc34)[C@@](C2)(C(	0
[H][C@@]12CC[C@@](O)(C#C)[C@@]1(CC)CC[C@]3([H])[C@@]4	0
CC1(O)CCC2C3CCC4=CC(=O)CCC4(C)C3(F)C(O)CC12C	1
CCC(=O)N(C1=CC=CC=C1)C2(CCN(CC2)CCN3C(=O)N(N=N3)CC)COC	0
CN(C)CCc1c[nH]c2ccc(C[S+](O-))=O)N3CCCC3)cc12	0
C[C@H]1COc2c(N3CCN(C)CC3)c(F)cc4c2n1cc(C(O)=O)c4=O	1
CC1=C(C2=C(C1=CC3=CC=C(C=C3)S(=O)C)C=CC(=C2)F)CC(=O)O	1
CC1(CC(=O)N(C1=O)C)C2=CC=CC=C2	0
CSCC[C@H](N)C(O)=O	0
C[N+](C)(C)CC(CC(=O)[O-])O	0
C1=C(C(=O)NC(=O)N1C2C(C(C(O2)CO)O)F)I	1
OC(=O)CN(CCN(CC(O)=O)CC(O)=O)CCN(CC(O)=O)CC(O)=O	0
CC(=O)N1C2=CC=CC=C2C(C1=O)(C3=CC=C(C=C3)OC(=O)C)C4=CC=C(	1
CC(=O)NC1C(C(C(OC1O)CO)OS(=O)(=O)[O-])OC2C(C(C(C(O2)C(=O)	1
CNCC(C1=CC=C(C=C1)O)O	0
CC1=C2CCC(=O)N(C2=NC(=N1)C)CC3=CC=C(C=C3)C4=CC=CC=C4C5=	1
CC(COC1=CC=CC=C1)NC(C)C(C2=CC=C(C=C2)O)O	0
OS(=O)(=O)OC[C@H]1O[C@@H](O[C@]2(COS(O)(=O)=O)O[C@H]	0
CC1=C(C=C(C=C1)C(=O)NC2=CC(=CC(=C2)N3C=C(N=C3)C)C(F)(F)F)N	1
CC(C1=CC=CC2=CC=CC=C21)NCCCC3=CC(=CC=C3)C(F)(F)F	0
C(C(C(C(C(CO)O)O)O)O)O	0
C(C(C1C=C(C(=O)O1)O)O)O	0
CCOC(=O)c1ncn-2c1CN(C)C(=O)c3cc(F)ccc-23	0
Cc1ccc(cc1)C(=O)c2cc(O)c(O)c(c2)[N+](O-)=O	1
CNC(=O)C1=CN(N=C1)C2=NC3=C(C(=N2)N)N=CN3C4C(C(C(O4)CO)(	0
N[C@@H](Cc1cc(I)c(Oc2ccc(O)c(I)c2)c(I)c1)C(O)=O	0
[H][C@]1(CO[C@@]2([H])OCC[C@@]12[H])OC(=O)N[C@@H](Cc3	1
CN1CCN(CC1)C(c2ccccc2)c3ccc(Cl)cc3	0
CC(CCCC(C)(C)O)C1CCC2C1(CCCC2=CC=C3CC(C(C3=C)O)O)C	0
CC(C)NCC(COC1=CC=C(C=C1)CCC(=O)OC)O	0
CCC(CO)NC(=O)C1CN(C2CC3=CN(C4=CC=CC(=C34)C2=C1)C)C	0
CN(C)N=Nc1nc[nH]c1C(N)=O	1

CN1CCc2cccc-3c2[C@H]1Cc4ccc(O)c(O)c-34	0
Cc1cccc(Nc2cccc2C(O)=O)c1C	1
O=c1[nH]cnc2[nH]ncc12	1
CC1=NC2=C(N1)CCN(C3=CC=CC=C32)C(=O)C4=CC=C(C=C4)NC(=O)C	0
COc1cccc2OC[C@H]3CN(CCCCn4c(=O)[nH]c5c6nc(cnc6sc5c4=O)-c7	1
C1CN(CCN1CCOCCO)C(C2=CC=CC=C2)C3=CC=C(C=C3)Cl	0
[H][C@]12CN3C4=C(C(=O)C(N)=C(C)C4=O)[C@@]([H])(COC(N)=O)	0
CC(=O)N[C@@H](CS)C(O)=O	0
C1C2C(C2N)CN1C3=C(C=C4C(=O)C(=CN(C4=N3)C5=C(C=C(C=C5)F)F	1
CN1C(CNC2=C1C(=O)N=C(N2)N)CNC3=CC=C(C=C3)C(=O)NC(CCC(=C	0
C[N+])1(CCC2=CC(=C(C=C2)C1CC3=CC(=C(C=C3)OC)OC)OC)OC)CCC(=	0
CC(=O)OCC(=O)C1(CCC2C1(CC(=O)C3C2CCC4=CC(=O)CCC34C)C)O	0
CNCC(C(C(C(CO)O)O)O)O.C1=CC=C(C=C1)COCC(C(=O)[O-])N(CCN(C	0
CCN(CC)C(C)C(=O)C1=CC=CC=C1	0
CC(C)c1c(C(=O)Nc2cccc2)c(c(-c3ccc(F)cc3)n1CC[C@@H](O)C[C@	1
CC[C@@H](CO)NCCN[C@H](CC)CO	1
CC[C@H]1OC(=O)[C@H](C)[C@@H](O[C@H]2C[C@@](C)(OC)[C@	1
CC(CCC1=CC=C(C=C1)O)NCCC2=CC(=C(C=C2)O)O	0
CC1(C(=[N+])(C2=C1C3=CC=CC=C3C=C2)CCCCS(=O)(=O)[O-])C=CC=C	0
CC12CCC3C(C1CCC2(C)O)CCC4C3(CC(=CO)C(=O)C4)C	1
CCCC(CCC)C(O)=O	1
C[C@](N)(Cc1ccc(O)c(O)c1)C(O)=O	1
CC1CN(CCC1(C)C2=CC(=CC=C2)O)CC(CC3=CC=CC=C3)C(=O)NCC(=O)	0
Nc1ncn(C2OC(CO)C(O)C2O)c(=O)n1	1