

Training set

class	smiles
1	<chem>CC(C)c1onc(c1COc2ccc(N(C)Cc3cccc(c3)C(=O)[O-])c(n2)C(F)(F)F)c4c(Cl)cccc4Cl</chem>
1	<chem>CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3cccc23)C(=O)c4cccc(OCC[NH+]5CCOCC5)c4</chem>
1	<chem>CC(C)c1onc(c1COc2ccc(N(C)Cc3ccc(cc3)C(=O)[O-])c(n2)C(F)(F)F)c4c(Cl)cccc4Cl</chem>
1	<chem>CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3cc(F)ccc23)C(=O)c4ccc(OCC[NH+]5CCOCC5)cc4</chem>
1	<chem>CN(Cc1cccc(c1)C(=O)[O-])c2ccc(OCc3c(onc3c4c(Cl)cccc4Cl)C5CC5)nc2C(F)(F)F</chem>
1	<chem>CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3cccc23)C(=O)c4cccc(OCCC[NH+]5CCOCC5)c4</chem>
1	<chem>CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3cccc23)C(=O)c4cccc(OCC[NH+]5CC[NH+](C)CC5)c4</chem>
1	<chem>CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3cccc23)C(=O)c4cccc(OCC[NH+]5CCCC5)c4</chem>
1	<chem>CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3cccc23)C(=O)c4ccc(OCC[NH+]5CCOCC5)cc4</chem>
1	<chem>CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3cccc23)C(=O)c4cccc(OCC[NH+]5CCCC5)c4</chem>
1	<chem>CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3cccc23)C(=O)c4cccc(OCCC[NH+]5CCCC5)c4</chem>
1	<chem>CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3cccc23)C(=O)c4cccc(OCCC[NH+](C)C)c4</chem>
1	<chem>CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3cccc23)C(=O)c4ccc(OCCC[NH+]5CCOCC5)cc4</chem>
1	<chem>CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3cccc23)C(=O)c4cccc(OCCC[NH+]5CCCC5)c4</chem>
1	<chem>CC(C)c1onc(c1COc2ccc(N(C)Cc3cccc(c3)C(=O)NCCOP(=O)([O-])[O-])c(n2)C(F)(F)F)c4c(Cl)cccc4Cl</chem>
1	<chem>CC(C)c1onc(c1COc2ccc(N(C)Cc3ccc(OCCO)cc3)c(n2)C(F)(F)F)c4c(Cl)cccc4Cl</chem>
1	<chem>C[C@@H](N(C)c1ccc(cc1)C(=O)[O-])c2ccc(OCc3c(onc3c4c(Cl)cccc4Cl)C5CC5)nc2C(F)(F)F</chem>
1	<chem>CC(C)c1onc(COc2c(F)cccc2Cl)c1COc3ccc(\C=C\c4cccc(c4)C(=O)[O-])c(Cl)c3</chem>
1	<chem>CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3cc(F)ccc23)C(=O)c4ccc(C[NH+]5CCOCC5)cc4</chem>
1	<chem>CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3cccc23)C(=O)c4cccc(OCC[NH+](C)C)c4</chem>
1	<chem>CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3cccc23)C(=O)c4ccc(OCC[NH+]5CCCC5)cc4</chem>
1	<chem>CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3cccc23)C(=O)c4cccc(C[NH+]5CCOCC5)c4</chem>
1	<chem>CC(C)c1onc(c1COc2ccc(N(C)Cc3ccc(OCC(=O)[O-])cc3)c(n2)C(F)(F)F)c4c(Cl)cccc4Cl</chem>
1	<chem>CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3cccc23)C(=O)c4ccc(OCC[NH+]5CCCC5)cc4</chem>
1	<chem>CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3cccc23)C(=O)c4ccc(OCCC[NH+]5CCCC5)cc4</chem>
1	<chem>CC(C)c1onc(c1COc2ccc(N(C)Cc3ccc(CCC(=O)[O-])cc3)c(n2)C(F)(F)F)c4c(Cl)cccc4Cl</chem>
1	<chem>CC(C)c1onc(c1COc2ccc(N(C)Cc3cccc(c3)C(=O)N=S(=O)(C)[O-])c(n2)C(F)(F)F)c4c(Cl)cccc4Cl</chem>
1	<chem>CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3cccc23)C(=O)c4ccc(OCCC[NH+](C)C)cc4</chem>
1	<chem>C[C@H](Oc1ccc(cc1)C(=O)[O-])c2ccc(OCc3c(onc3c4c(Cl)cccc4Cl)C5CC5)nc2C(F)(F)F</chem>
1	<chem>CCN(Cc1ccc(cc1)C(=O)[O-])c2ccc(OCc3c(onc3c4c(Cl)cccc4Cl)C5CC5)nc2C(F)(F)F</chem>
1	<chem>CC(C)c1onc(c1COc2ccc(\C=C/c3cccc(c3)C(=O)[O-])c(Cl)c2)c4c(Cl)cncc4Cl</chem>
1	<chem>CC(C)c1onc(COc2c(Cl)cccc2Cl)c1COc3ccc(\C=C/c4cccc(c4)C(=O)[O-])c(Cl)c3</chem>
1	<chem>CC(C)c1onc(CNc2c(Cl)cccc2Cl)c1COc3ccc(\C=C/c4cccc(c4)C(=O)[O-])c(Cl)c3</chem>
1	<chem>CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3cccc23)C(=O)c4ccc(C[NH+]5CCOCC5)cc4</chem>
1	<chem>CC(C)c1onc(c1COc2ccc(N(C)Cc3ccc(cc3)C(=O)N=S(=O)(C)[O-])c(n2)C(F)(F)F)c4c(Cl)cccc4Cl</chem>
1	<chem>CC(C)c1onc(c1COc2cnc(N(C)Cc3cccc(c3)C(=O)[O-])c(Cl)c2)c4c(Cl)cccc4Cl</chem>
1	<chem>CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3cccc23)C(=O)c4cccc(C[NH+]5CC[NH+](C)CC5)c4</chem>

1	[O-]C(=O)c1cccc(OCc2ccc(OCc3c(onc3c4c(Cl)cccc4Cl)C5CC5)nc2C(F)(F)F)c1
1	CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3cccc23)C(=O)c4cccc(C[NH+]5CCCCC5)c4
1	CC(C)c1onc(CNC2c(Cl)c[nH+]cc2Cl)c1COc3ccc(\C=C\c4cccc(c4)C(=O)[O-])c(Cl)c3
1	CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3cccc23)C(=O)c4ccc(CC[NH+]5CCOCC5)cc4
1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(NCc3ccc(cc3)C(=O)[O-])c(n2)C(F)(F)F)c4c(Cl)cccc4Cl
1	CC(C)c1onc(COC2ccc3cccc3c2)c1COc4ccc(\C=C\c5cccc(c5)C(=O)[O-])c(Cl)c4
1	[O-]C(=O)c1cccc(\C=C/c2ccc(OCc3c(onc3c4c(Cl)cccc4Cl)C5CCCC5)cc2Cl)c1
1	CC(C)c1onc(c1COc2cnc(N(C)Cc3ccc(cc3)C(=O)[O-])c(Cl)c2)c4c(Cl)cccc4Cl
1	CC(C)c1onc(COC2ccc(Cl)cc2)c1COc3ccc(\C=C/c4cccc(c4)C(=O)[O-])c(Cl)c3
1	CC(C)c1onc(COC2c(C)cccc2Cl)c1COc3ccc(\C=C/c4cccc(c4)C(=O)[O-])c(Cl)c3
1	CC(C)c1onc(COc2cccc3cccc23)c1COc4ccc(\C=C/c5cccc(c5)C(=O)[O-])c(Cl)c4
1	[O-]C(=O)c1ccc(OCc2ccc(OCc3c(onc3c4c(Cl)cccc4Cl)C5CC5)nc2C(F)(F)F)cc1
1	CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3cccc23)C(=O)c4cccc(C[NH+]5CCCC5)c4
1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(NC(=O)c3ccc(cc3)C(=O)[O-])c(n2)C(F)(F)F)c4c(Cl)cccc4Cl
1	C[C@H](Nc1ccc(cc1)C(=O)[O-])c2ccc(OCc3c(onc3c4c(Cl)cccc4Cl)C5CC5)nc2C(F)(F)F
1	CC(C)(C)c1onc(c1COc2ccc(\C=C/c3cccc(c3)C(=O)[O-])c(Cl)c2)c4c(Cl)cccc4Cl
1	CC(C)c1onc(CS(=O)(=O)c2c(Cl)cccc2Cl)c1COc3ccc(\C=C\c4cccc(c4)C(=O)[O-])c(Cl)c3
1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(C(=O)N(Cc3cccc3)c4cccc(c4)C(=O)[O-])c(Cl)c2)c5c(Cl)cccc5Cl
1	CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3ccc(F)cc23)C(=O)c4ccc(F)c(F)c4
1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(Cn3ccc4ccc(cc34)C(=O)[O-])cc2)c5c(Cl)cccc5Cl
1	CC(C)c1onc(COC(C)(C)C)c1COc2ccc(\C=C/c3cccc(c3)C(=O)[O-])c(Cl)c2
1	CN(Cc1ccc(cc1)C(=O)NCCS(=O)(=O)[O-])c2ccc(OCc3c(onc3c4c(Cl)cccc4Cl)C5CC5)nc2C(F)(F)F
1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2)c3ccc4[nH]c(cc4c3)C(=O)[O-])c5c(Cl)cccc5Cl
1	CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2cc(C#N)[nH]c12)C(=O)c3ccc(F)c(F)c3
1	CC(C)Oc1cc(nc2ccc(cc12)c3ccc(OCc4c(onc4c5c(Cl)cccc5Cl)C(C)C)cc3)C(=O)[O-]
1	CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2cc(C#N)[nH]c12)C(=O)c3cccc(F)c3
1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2)c3ccc4c(nc4c3)C(=O)[O-])c5c(Cl)cccc5Cl
0	CCNC(=O)c1cccc(\C=C/c2ccc(OCc3c(onc3c4c(Cl)cccc4Cl)C(C)C)cc2Cl)c1
1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2)c3ccc4nc(C(=O)[O-])c(C)cc4c3)c5c(Cl)cccc5Cl
1	CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2cc(C#N)[nH]c12)C(=O)c3ccc(F)cc3
1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2)c3ccc4nc(cnc4c3)C(=O)[O-])c5c(Cl)cccc5Cl
1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(C(=O)Nc3cccc(c3)C(=O)[O-])c(Cl)c2)c4c(Cl)cccc4Cl
1	CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2cc(C#N)[nH]c12)C(=O)c3cccc(Cl)c3
1	CC(C)c1onc(CSc2nnnn2)c1COc3ccc(\C=C/c4cccc(c4)C(=O)[O-])c(Cl)c3
0	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(\C=C\c3cccc(c3)C(=O)N(Cc4cccc4)Cc5cccc5)c(Cl)c2)c6c(Cl)cccc6Cl
1	CC(C)OC(=O)[C@H]1CN(CC(C)(C)c2cc(C#N)[nH]c12)C(=O)c3cccc(F)c3
1	CC(C)OC(=O)[C@@H]1CN(CC(C)(C)c2cc(C#N)[nH]c12)C(=O)c3ccc(F)c(F)c3
1	CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2cc(C#N)[nH]c12)C(=O)c3ccc(cc3)C#N
1	CC(C)OC(=O)[C@H]1CN(CC(C)(C)c2cc(C#N)[nH]c12)C(=O)c3ccc(F)cc3
1	CC(C)OC(=O)[C@H]1CN(CC(C)(C)c2cc(C#N)[nH]c12)C(=O)c3cccc(c3)C(F)(F)F
1	[O-]C(=O)c1ccc(NC(=O)[C@@H](C2CCCC2)n3c(nc4cc(F)c(F)cc34)c5ccc(Cl)cc5)c(F)c1

1	CCC(CC)(c1ccc(OCC(=O)[O-])c(C)c1)c2ccc(OCc3c(ocn3c4c(Cl)cccc4Cl)C(C)C)c(C)c2
1	[O-]C(=O)c1ccc(NC(=O)[C@@H](C2CCCC2)n3c(nc4cc(F)c(F)cc34)c5ccc(Cl)cc5)c(Cl)c1
1	CC(C)OC(=O)[C@H]1CN(CC(C)(C)c2cc(C#N)[nH]c12)C(=O)C3CCCC3
1	CC(C)OC(=O)[C@H]1CN(CC(C)(C)c2cc(C#N)[nH]c12)C(=O)C3CCOCC3
1	CCOC(=O)C1=CN(C[C@@H](C)c2c1[nH]c3cccc23)C(=O)c4ccc(F)c(F)c4
1	[O-]C(=O)CCc1ccc(NC(=O)[C@@H](C2CCCC2)n3c(nc4cc(F)c(F)cc34)c5ccc(Cl)cc5)c(F)c1
0	CC(C)OC(=O)[C@H]1CN(CC(C)(C)c2cc(C#N)[nH]c12)C(=O)c3ccc(cc3)C#N
1	[O-]C(=O)c1cc(F)c(NC(=O)[C@@H](C2CCCC2)n3c(nc4cc(F)c(F)cc34)c5ccc(Cl)cc5)c(F)c1
1	CC(C)c1onc(c1COc2cc(C)c3cccc3n2)c4c(Cl)cccc4Cl
1	[O-]C(=O)CC1CCC(CC1)NC(=O)[C@@H](C2CCCC2)n3c(nc4cc(F)c(F)cc34)c5ccc(Cl)cc5
1	Cc1cc(ccc1NC(=O)[C@H](C2CCCC2)n3c(nc4cc(F)c(F)cc34)c5ccc(Cl)cc5)C(=O)[O-]
1	[O-]C(=O)c1ccc(NC(=O)[C@H](C2CCCC2)n3c(nc4cccc34)c5ccc(Cl)cc5)c(c1)C(F)(F)F
1	[O-]C(=O)C1CCC(CC1)NC(=O)[C@@H](C2CCCC2)n3c(nc4cc(F)c(F)cc34)c5ccc(Cl)cc5
1	Fc1cc2nc(c3ccc(Cl)cc3)n([C@@H](C4CCCC4)C(=O)Nc5ccc(cc5F)c6nnn[n-]6)c2cc1F
1	COc1ccc(c(Cl)n1)c2nc3cc(F)c(F)cc3n2[C@@H](C4CCCC4)C(=O)NC5CCC(CC5)C(=O)[O-]
0	[O-]C(=O)c1cccc(NC(=O)[C@H](C2CCCC2)n3c(nc4cc(F)c(F)cc34)c5ccc(Cl)cc5)c1
1	CC(C)c1onc(c1COc2cc(C)c(cn2)[N+](=O)[O-])c3c(Cl)cccc3Cl
0	[O-]C(=O)C1CCC(CNC(=O)[C@@H](C2CCCC2)n3c(nc4cc(F)c(F)cc34)c5ccc(Cl)cc5)CC1
1	Fc1cc2nc(c3ccc(Cl)cc3)n([C@H](C4CCCC4)C(=O)NC5CCCCC5)c2cc1Cl
1	[O-]C(=O)Cc1ccc(NC(=O)[C@H](C2CCCC2)n3c(nc4cc(F)c(F)cc34)c5ccc(Cl)cc5)cc1
1	Cc1cccc(COc2cccc(\C=C\3/C(=O)NN(C(=O)c4ccc(F)cc4)C3=O)c2)c1
0	[O-]C(=O)C1CCC(CC1)NC(=O)[C@H](C2CCCC2)n3c(nc4cc(F)c(F)cc34)c5ccc(Cl)nc5
1	OC1CCC(CC1)NC(=O)[C@@H](C2CCCC2)n3c(nc4cc(F)c(F)cc34)c5ccc(Cl)cc5
0	[O-]C(=O)c1ccc(NC(=O)[C@H](C2CCCC2)n3c(nc4cc(F)c(F)cc34)c5ccc(Cl)cc5)nc1
1	CCOC(=O)C1=CN(C[C@H](C)c2c1[nH]c3cccc23)C(=O)c4ccc(OC)cc4
0	COc1cc(ccc1NC(=O)[C@H](C2CCCC2)n3c(nc4cc(F)c(F)cc34)c5ccc(Cl)cc5)C(=O)[O-]
0	[O-]C(=O)COC1CCC(CC1)NC(=O)[C@@H](C2CCCC2)n3c(nc4cc(F)c(F)cc34)c5ccc(Cl)nc5
0	[O-]C(=O)c1cccc1NC(=O)[C@H](C2CCCC2)n3c(nc4cc(F)c(F)cc34)c5ccc(Cl)cc5
1	Cc1cccc(COc2cccc(\C=C\3/C(=O)NN(C(=O)c4ccncc4)C3=O)c2)c1
1	O=C(N1NC(=O)\C(=C/c2ccc(OCc3cccc3)cc2)\C1=O)c4cccc4
0	[O-]C(=O)c1sc(NC(=O)[C@H](C2CCCC2)n3c(nc4cc(F)c(F)cc34)c5ccc(Cl)cc5)nc1C(F)(F)F
0	[O-]C(=O)c1ccc(NC(=O)[C@@H](C2CCCC2)n3c(nc4cc(F)c(F)cc34)c5ccc(Cl)cc5)cn1
1	Fc1cccc(COc2cccc(\C=C\3/C(=O)NN(C3=O)c4cccc4)c2)c1
1	O=C(N1NC(=O)\C(=C/c2ccc(OCc3cccc3)cc2)\C1=O)c4occc4
0	Cc1cccc(COc2cccc(\C=C\3/C(=O)NN(C3=O)c4cccc4)c2)c1
0	O=C1N(N(C(=O)C1=Cc2ccc(OCc3cccc3)cc2)c4cccc4)c5cccc5
0	Cc1cccc(COc2cccc(\C=C\3/C(=O)NN(C3=O)c4cccc4[N+](=O)[O-])c2)c1
1	[O-][N+](=O)c1cccc(C=C2C(=O)N(N(C2=O)c3cccc3)c4cccc4)c1
0	CCOC(=O)C(=Cc1ccc(OCc2cccc2)cc1)C(=O)OCC
0	Cc1ccc(CN(CCC[NH+]2CCOCC2)C(=S)Nc3ccc(Cl)cc3C(F)(F)F)cc1
0	ClC(Cl)(Cl)C(=N)O[C@@H]1O[C@H](COCc2cccc2)[C@H](OCc3cccc3)[C@@H](OCc4cccc4)[C@H]1OCc5cccc5
0	CC(=O)OC1[C@@H](OC(=O)C(C)(C)C)[C@@H](OC(=O)C(C)(C)C)C(OC(=O)C)[C@H](OC(=O)

	<chem>C(C)(C)C[C@H]1OC(=O)C(C)(C)C</chem>
0	<chem>CC1(C)O[C@H]2O[C@H]([C@@H]3OC(C)(C)O[C@H]3[C@H]2O1)C(=O)Oc4ccc(Cl)cc4</chem>
0	<chem>[O-]\C(=C(\N1C=C(Cl)C=CC1=O)/C(=O)c2ccccc2)\N(Cc3ccccc3)Cc4ccccc4</chem>
0	<chem>CCOc1ccc(\C=N/c2ccc(Oc3ccc(cc3)\N=C/c4ccc(OCC)cc4)cc2)cc1</chem>
0	<chem>CSc1ccc2cc(C[NH2+])[C@H](C)c3cccc4cccc34)c(nc2c1)N5CCN(CC5)C(=O)C</chem>
1	<chem>CC[C@H]1[C@@H](O)[C@@H]2[C@@H]3CC[C@H]([C@@H](C)CCC(=O)[O-])[C@]3(C)CC[C@@H]2[C@@]4(C)CC[C@@H](O)C[C@@H]14</chem>
0	<chem>FC(F)(F)c1ccc(cc1)[C@@H]2C[C@H]2C(=O)NCCC[NH+]3CCN(CC3)c4cccc(c4)C(F)(F)F</chem>
0	<chem>CC[C@@H]1[C@@H](O)[C@H]2[C@H]3CC[C@H]([C@@H](C)C[C@H](C)C(=O)[O-])[C@@]3(C)CC[C@@H]2[C@@]4(C)CC[C@@H](O)C[C@H]14</chem>
0	<chem>C[C@@H]1CC(C)(C)C[C@]2(C1)NC(=O)N(C[NH+]3CC[NH+](Cc4cccc5cccc45)CC3)C2=O</chem>
0	<chem>Cc1oc(nc1C[NH+]2CCN(CC2)C(=O)Nc3cccc(C)c3C)c4cccc4C</chem>
0	<chem>BrC1ccc(cc1)C(=O)Nc2cccc3ccc(nc23)n4ccnc4</chem>
0	<chem>O[C@@H](CSc1nc(cc(c2cccc2)c1C#N)c3ccccc3)C[S@](=O)Cc4cccc4</chem>
0	<chem>Clc1cccc1NC(=O)C2CCC(CC2)N3C(=O)[C@@H]4[C@H]5C=C[C@H]([C@@H]6C[C@H]56)[C@@H]4C3=O</chem>
0	<chem>Cc1cc(C)c(NC(=O)Cn2cc(c3ccccc23)S(=O)(=O)Cc4cccc4Cl)c(C)c1</chem>
0	<chem>O=C(NCCCc1ccccc1)C2CCN(CC2)C(=O)c3ccc(s3)n4ccc5ccccc45</chem>
0	<chem>Clc1cc(Cl)c(NC(=O)CN2C(=O)[C@@H]3[C@H]4C[C@H](C=C4)[C@@H]3C2=O)cc1Cl</chem>
0	<chem>CCCCCCCCN1C(=O)c2cc3c(OC)c4cc5C(=O)N(CCCCCC)C(=O)c5cc4c(OC)c3cc2C1=O</chem>
0	<chem>CC[C@H]1C[C@H]2CCCC[C@@]2(C)[C@H]3CC[C@]4(C)[C@H](CC[C@@H]4[C@H]13)[C@H](C)CCC(=O)[O-]</chem>
0	<chem>O=C(CN1c2cccc3ccc(c23)S1(=O)=O)Nc4cccc4N5CCCC5</chem>
0	<chem>C[C@@H](CCC(=O)[O-])[C@@H]1CC[C@@H]2[C@@H]3[C@@H](F)C[C@H]4C[C@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C</chem>
0	<chem>Clc1ccc(Cl)c(\C=N/NC2=CN=NC(=O)[C@@H]2Br)c1Cl</chem>
0	<chem>O=C(Nc1nc2[C@H](CCc2s1)C(=O)N3CCc4cccc4C3)c5ccccc5</chem>
0	<chem>CCCCCCC(=O)Oc1ccc(cc1)N2C(=O)c3c(Cl)c(Cl)c(Cl)c(Cl)c3C2=O</chem>
0	<chem>COc1ccc(cc1)N2C(=O)[C@H]3N=NN(Cc4ccc(cc4)C(C)C)[C@H]3C2=O</chem>
0	<chem>C[C@@H](CCC(=O)[O-])[C@@H]1CC[C@H]2[C@@H]3[C@H](C)C[C@H]4C[C@H](O)CC[C@@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C</chem>
0	<chem>Oc1ccc(C(=O)N\N=C/c2c(OC(=O)c3ccc(Cl)cc3Cl)ccc4ccccc24)c([O-])c1</chem>
0	<chem>CCC[C@@H]1C[C@@H]2CCCC[C@]2(C)[C@H]3CC[C@]4(C)[C@@H](CC[C@H]4[C@H]13)[C@@H](C)CCC(=O)[O-]</chem>
0	<chem>COc1ccc(cc1)c2oc(C)c(C[NH+]3CCCN(CC3)c4ncccn4)n2</chem>
0	<chem>C1CCN(C1)c2ncc(c3cccn3)c(n2)[C@H]4CCCN(C4)c5ncccn5</chem>
0	<chem>C[C@H](C[C@H](C)C(=O)[O-])[C@H]1CC[C@@H]2[C@@H]3[C@@H](O)C[C@@H]4C[C@H](O)CC[C@]4(C)[C@@H]3CC[C@]12C</chem>
0	<chem>Clc1ccc(CSc2nnc3c(O[C@@H](Nc4cccc34)c5ccccc5)n2)cc1</chem>
0	<chem>CC1=NN(c2nc(cc(n2)C(F)(F)F)c3cccs3)[C@@](O)(C1)C(F)(F)F</chem>
0	<chem>COc1ccc(cc1OC)[C@@H](O)[C@H](C)Oc2ccc(cc2OC)[C@@H]3O[C@@H]([C@H](C)[C@H]3C)c4ccc(O[C@H](C)[C@H](O)c5ccc(OC)c(OC)c5)c(OC)c4</chem>
0	<chem>O=C(N1CC(C1)c2onc(n2)c3ccccc3)C4=CC(=O)c5ccccc5O4</chem>

0	<chem>O[C@@H]1[C@H](O)[C@H](Oc2ccc(cc2)c3sc4cc(O)ccc4c3C(=O)c5ccc(OCC[NH+])6CCCCC6)cc5)O[C@H]([C@@H]1O)C(=O)[O-]</chem>
0	<chem>C[C@@H](CCC(=O)[O-])[C@@H]1CC[C@@H]2[C@@H]3[C@@H](O)C[C@@H]4C[C@@H](O)CC[C@@]4(C)[C@@H]3CC[C@]12C</chem>
0	<chem>Clc1cccc1CN2C(=O)\C(=N/Nc3nncc4cccc34)\c5cccc25</chem>
0	<chem>[O-]S(=O)(=Nc1ccc(cc1)c2cc3cccc3[nH]2)c4cccc(Cl)c4</chem>
0	<chem>Cc1nn(C)c(Cl)c1S(=O)(=O)N[C@H]2C[C@@H]2c3cccc(Cl)c3Cl</chem>
0	<chem>CCCCc1ccc(cc1)N2C[C@@H](CC2=O)c3nc4cccc4n3CCOc5ccc(cc5)C(C)C</chem>
0	<chem>CC1=NC2=NC(=[NH+])[C@@H](N2C(=C1)[O-])c3cccc3)N4CCC(Cc5cccc5)CC4</chem>
0	<chem>Cc1c(OC[C@H](O)C[NH+](C[C@@H](O)COc2ccc3C(=CC(=O)Oc3c2C)c4cccc4)Cc5occc5)cc6C(=CC(=O)Oc16)c7cccc7</chem>
0	<chem>CC(C)(C)c1[nH]ncc1\C=C(/C#N)\C(=N/c2cccc2Br)\[O-]</chem>
0	<chem>C[C@@H]1C[C@H](C)CN(C1)S(=O)(=O)c2ccc(NC(=O)c3nc(Cl)ccc3Cl)cc2</chem>
0	<chem>[O-]S(=O)(=Nc1nc2cccc2nc1SCc3ccc(Cl)cc3)c4cc(Cl)ccc4Cl</chem>
0	<chem>[O-]C1=C([C@@H](C(C#N)C#N)c2ccc(Cl)cc2)C(=O)[C@H](C(=S)[C@H]1c3cccc3)c4cccc4</chem>
0	<chem>CC[C@@]1(C)N(C(=N/C/1=N/c2c(C)cccc2C)[S-])c3ccc(NC(=O)C)cc3</chem>
0	<chem>CC(C)c1ccc(C)cc1OCCOc2ccc(cc2)C3=NC(=O)C4=C5CCCC[C@H]5SC4=N3</chem>
0	<chem>[O-]c1c(Cl)cc(Cl)cc1CNc2ccc(Br)cc2Cl</chem>
0	<chem>O=C(CN1C[C@H](NC1=S)c2cccc2)N(Cc3ccnc3)C4(CCCCC4)C(=O)Nc5ccc(cc5)N6CCOCC6</chem>
0	<chem>CN1C(=O)N(CCCCl)C(=O)c2c1nc3n(c(C)c(C)n23)c4cccc4</chem>
0	<chem>C[C@@H](CCCO)[C@@H]1CC[C@H]2[C@@H]3[C@@H](O)C[C@@H]4C[C@H](O)CC[C@@]4(C)[C@@H]3CC[C@]12C</chem>
0	<chem>Cc1c(oc2ccc(Br)cc12)C(=O)N3CCC(CC3)C(=O)NC4CC4</chem>
0	<chem>CC(C)c1cc2C(=CC(=O)Oc2cc1C)CN3C(=O)ON=C3c4ccccn4</chem>
0	<chem>BrC1ccc(\C=C/C(=O)Nc2ccc(nc2)N3CCOCC3)s1</chem>
0	<chem>CCCC(=O)O[C@]1([C@H](C)C[C@H]2[C@H]3CCC4=CC(=O)C=C[C@]4(C)[C@]3(F)[C@@H](O)C[C@@]12C)C(=O)CCl</chem>
0	<chem>Cn1cnc(c1Cl)S(=O)(=O)NC(C)(C)c2ccc(Br)cc2</chem>
0	<chem>FC(F)Oc1ccc(NC(=O)COC(=O)c2cc(Br)c(Br)s2)cc1</chem>
0	<chem>[O-]S(=O)(=NC1=CC=C2[C@H]3C[C@@H](CN2C1=O)C[NH+](CC4CCCC4)C3)c5cccc(c5)C(F)(F)F</chem>
0	<chem>Cc1nc(nc2sc(C(=O)\N=C\3/NC(=CS3)C[NH+])4CCCCC4)c(C)c12)C5CC5</chem>
0	<chem>C\C=C\CC\C(=C/C[C@]1(O)C(=O)c2c(O)c(C)c(O)c3c(C)cc([O-])c(C1=O)c23)\C)\CC\C=C(\C)/CC[C@@H](O)C(C)(C)O</chem>
0	<chem>C[C@@H](CCCS(=O)(=O)[O-])[C@H]1CC[C@@H]2[C@@H]3[C@@H](O)C[C@H]4C[C@@H](O)CC[C@@]4(C)[C@@H]3CC[C@]12C</chem>
0	<chem>CC1(C)Cc2c(CO1)c(nc3sc4c(NCc5cccc5)ncnc4c23)c6occc6</chem>
0	<chem>CC(=C)C(=O)OCCCCCN1C(=O)[C@@H]2CC[C@@H]3S[C@H]4CCCC[C@H]4[C@H]5CC[C@H]([C@H]2[C@H]35)C1=O</chem>
0	<chem>CCN1C(=O)c2cccc3cc(cc(C1=O)c23)S(=O)(=O)Nc4cccc5cccc45</chem>
0	<chem>Cc1nn(c2ccc(Cl)cc2)c3nc4OC(=O)N(C[C@H]5CCCCO5)Cc4cc13</chem>
0	<chem>[O-]\C(=N\c1ccc(OC(F)(F)F)cc1)\C2=NN=C3[C@H]2COc4cccc34</chem>
0	<chem>CC1CC[NH+](CC1)[C@@H](c2ccc(F)cc2)c3sc4nc(nn4c3[O-])c5occc5</chem>

0	CC1=C(CC(=O)Nc2ccnc2)C(=O)Oc3c(C)c4occ(c5ccccc5)c4cc13
0	Cc1ccc(C)c(Sc2ccc(NC(=O)c3ccccc3S[C@@H]4CCS(=O)(=O)C4)cc2)c1
0	O=C(CN1C(=O)c2ccccc2C1=O)N(Cc3ccccc3)[C@@H](C(=O)Nc4ccc(cc4)N5CCOCC5)c6csnn6
0	CC(C)CC(=O)N([C@@H]([C@@H](C)c1ccccc1)\C(=N/CS(=O)(=O)c2ccc(C)cc2)\[O-])c3ccccc3
0	C[C@H](CCC(=O)NCCS(=O)(=O)[O-])[C@@H]1CC[C@@H]2[C@H]3[C@@H](C)C[C@H]4CCCC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C
0	[O-]S(=O)(=Nc1ccc(Oc2c(cccc2C#N)C#N)cc1)c3ccccc3
0	C[C@@H]1CCCN(C1)c2ccc(c3nonc23)S(=O)(=O)N4CCC[C@@H](C)C4
0	Clc1cc(NC(=O)C[C@@H]2OCCc3ccccc23)ccc1N4C(=O)c5ccccc5C4=O
0	CCCCN1N=CN(C1=O)c2ccc(cc2)N3CCN(CC3)c4ccc(OC[C@H]5CO[C@](Cn6cncn6)(O5)c7cc(Cl)cc7Cl)cc4
0	C\C(=N\N1[C@H](Nc2ccccc2C1=O)c3ccccc3Cl)\c4ccccc4[O-]
0	COc1ccc(cc1)\N=C(/ON2C(=O)C=C(C=C2c3ccccc3)c4ccccc4)\c5ccccc5C
0	C(c1ccccc1)c2nc3c4c(c5ccccc5)c(c6ccccc6)n(Cc7occc7)c4ncn3n2
0	CCN1C(=O)C(C)(C)COc2cc(NS(=O)(=O)c3c(C)cc(C)cc3C)ccc12
0	CCc1ccccc1N2C[C@H](CC2=O)c3nc4ccccc4n3CCOc5ccccc5C(C)(C)C
0	Cc1c(Cl)cccc1S(=O)(=O)Nc2cc3CCCN4C(=O)CCc(c2)c34
0	C[C@@H](Sc1nnc(CNc2ccccc2)n1CC=C)\C(=N/N=C(\C)/C34CC5CC(CC(C5)C3)C4)\[O-]
0	CCCCOc1c(Cl)cc(cc1Cl)C(=O)C2=C([O-])N(C[C@H]3CCCO3)C(=O)C(=C2C)C#N
0	COc1cc(Br)cc(Br)c1OCC(=O)N\N=C/c2ccc(Cl)cc2
0	CCCCCCCC(=O)O[C@@H]1[C@H](OC(=O)\C(=C\C)\C)C(=C2[C@@H]3OC(=O)[C@](C)(O)[C@]3(O)[C@H](C[C@@](C)(OC(=O)C)[C@@H]12)OC(=O)CCC)C
0	C[C@H]1C[C@@H](Nc2ccccc2)c3ccccc3N1C(=O)CN4C(=O)c5ccccc5C4=O
0	C[C@H]1CN2C(=O)Cc3c2c(S1)ccc3S(=O)(=O)Nc4ccc(Cl)cc4
0	Cc1cc(C(=O)[C@H]2CC(=O)Nc3c2c(C)nn3c4ccc(C)c(Cl)c4)c(C)s1
0	COc1cc(\C=C/2\S\C(=N/c3cc(ccc3Cl)C(F)(F)F)\N=C2[O-])ccc1O
0	Cc1ccccc1N2[C@@H](NC(=O)C(=C2[S-])C#N)c3oc(cc3)c4ccccc4
0	COc1ccc(cc1)S(=O)(=O)c2c(SC)nn3cc([nH]c23)c4ccc(C)cc4
0	Cc1ccc(cc1C)N2[C@@H](NC(=O)C(=C2[S-])C#N)c3oc(cc3)c4cc(Cl)ccc4Cl
0	Cc1ccc2CCCN(C(=O)Cc3cc4OCCOc4cc3[N+](=O)[O-])c2c1
0	CC(=O)N1N=C(C[C@@H]1c2cn(nc2c3ccc(C)cc3)c4ccccc4)c5cccc(O)c5
0	COc1ccc(CO[C@H]2[C@H](O[C@@H]3CO[C@@H](O[C@@H]3[C@@H]2OCc4ccc(OC)cc4)c5ccccc5)Sc6ccc(C)cc6)cc1
0	CC(C)n1ncc2cc(cnc12)N=S(=O)([O-])c3cc(Cl)ccc3Cl
0	Oc1cccc(c1)N=S(=O)([O-])c2c(Cl)cc(Br)cc2Cl
0	CCc1ccc(cc1)[C@@H]2S[C@]3(SC(=NN3c4ccc(OC)cc4)C(=O)OC)c5ccccc25
0	CC1CCN(CC1)C(=O)c2csc(c2)S(=O)(=O)Nc3ccc(C)c(C)c3
0	CC(C)c1ccc(cc1)S(=O)(=O)Nc2ccc3nc(sc3c2)S(=O)(=O)C
0	COc1cc(OC)cc(c1)C2=N\C(=C\C3csc(n3)c4occc4)\C(=O)O2
0	CCCCOc1ccc(cc1)[C@H]2N(CC[NH+](CC)CC)C(=O)C(=C2C(=O)c3oc4ccccc4c3)[O-]
0	[O-]C(=O)[C@H](Nc1ccc(Br)cc1)c2ccc(Br)s2

0	Clc1cccc1CNC2=N\C(=N/c3ccc(Br)cc3)\[N-]c4cccc24
0	COC(=O)[C@@H](Cc1cccc1)NC(=O)CO\N=C/2\CC[C@]3(C)[C@H]4[C@H](O)C[C@@]5(C)[C@H](CC[C@@]5(O)C(=O)CO)[C@H]4CCCC=C2
0	CC1CCN(CC1)S(=O)(=O)c2ccc(N3CCCC[C@@H]3C)c(c2)[N+](=O)[O-]
0	Cc1ccc(cc1C)N2C(=O)[C@H](Cc3cccc3Cl)S/C/2=C(/C#N)\C(=N/Cc4cccc4)\[O-]
0	Cc1ccc(cc1)S(=O)(=O)N2CCN(CC2)c3nc(C)cc(n3)N4CCCC4
0	CC[C@@H](C)N1C(=S)N=C([O-])c2c1nc(cc2C(F)(F)F)c3ccc(OC(F)F)c(OC)c3
0	[O-]C(=O)c1ccc(NS(=O)(=O)c2c(Cl)cc(Br)cc2Cl)s1
0	CC1(C)Cc2c(CO1)sc3ncn4nc(OCC(=O)c5cccc5)nc4c23
0	CCOc1cc(\C=C\2/SC(=NC2=O)[N-]c3ccc(OC)cc3)cc(l)c1OC
0	CC1=C(CCC(=O)NCCCCC(=O)N[C@@H](Cc2c[nH]c3cccc23)C(=O)[O-])C(=O)Oc4c(C)c5oc(C)c(C)c5cc14
0	CC[NH+](CC)CCN1[C@@H](C(=C([O-])C1=O)C(=O)c2oc3cccc3c2)c4ccc(Cl)c(Cl)c4
0	[O-]S(=O)(=Nc1ccc(CCc2nc3cccc3n2c4cccc4)cc1)c5ccc(Cl)s5
0	COC(=O)c1c(C)cccc1S(=O)(=Nc2nc3c(C)cccc3s2)[O-]
0	CC(C)(C)OC(=O)N[C@H](CCCCNC(=O)CCCC[C@@H]1SC[C@H]2NC(=O)N[C@@H]12)C(=O)NCCSS(=O)(=O)C
0	CC(C)Oc1cccc1[C@@H]2[C@@H]3C(=O)C[C@H](CC3=NC(=C2C(=O)OC4CCCCC4)C)c5ccc cc5
0	COC(=O)c1ccc2N(C)\C(=N/C(=O)c3ccc(cc3)S(=O)(=O)C)\Sc2c1
0	Cc1ccc(cc1)S(=O)(=O)c2oc(cc2)C(=O)Nc3nc4ccc(C)cc4s3
0	Cc1oc(cn1)c2ccc(cc2)N=S(=O)([O-])c3cc(Cl)ccc3C#N
0	Fc1cccc2[C@H]3C=CC[C@H]3[C@H](Nc12)c4ccc(cc4)S(=O)(=O)N5CCOCC5
0	CCOc1ccc(cc1)N=S(=O)([O-])c2ccc(NC(=O)COc3ccc(cc3)C(C)(C)CC)cc2
0	Cc1sc(NC(=O)c2ccc(Br)cc2Cl)c(C(=O)[O-])c1C
0	COc1cc2S\C(=N/C(=O)c3cc(C)n(n3)C(C)C)\N(C)c2cc1OC
0	CCCCCOCc1ccc(cc1)[C@@H]2N(Cc3cccc3Cl)C(=O)C4=C2C(=O)c5cc(C)ccc5O4
0	COc1ccc(cc1)C(=O)Nc2nc3[C@H](CC(=O)NCc4cccc4OC)[C@@]5(C)CC[C@H](O)[C@@](C)(CO)[C@H]5Cc3s2
0	COc1ccc(cc1)N2C(=O)[C@H](Cc3cccc(c3)C(F)(F)F)S/C/2=C(/C#N)/C(=N\CC=C)/[O-]
0	O=C(CSc1nc2CCCCc2cc1C#N)Nc3sc4CCCC4c3C#N
0	CCOc1cc(cc(Cl)c1[O-])[C@H]2Nc3cccc3NC4=C2C(=O)C[C@@H](C4)c5ccc(OCC(C)C)cc5
0	COc1cc(\C=C(\Cl)/C2=NC(=O)c3c(N2)sc(C)c3c4cccc4)ccc1OC(F)F
0	COc1cccc1N2C(=O)c3cnc4c(c(nn4C)c5cccc5)c3C2=O
0	COc1ccc(cc1)C2=CC(=NC(=O)N2)c3cc(Cl)cc(Br)c3[O-]
0	COC(=O)c1c(NC(=O)COc2ccc(C)cc2)sc(C)c1c3ccc(Br)cc3
0	CC(C)CCN1N=C(C2=Nc3sc4CCCCc4c3C(=O)N2)c5cccc5C1=O
0	O=C1N(C=Nc2sc3C[C@@H](CCc3c12)[NH2+][Cc4csc(Cc5cccc5)n4)C6CCCC6
0	CCN1[C@H](SCc2nc(oc2C)c3ccc(C)cc3)N=C4C(=O)N=CN=C14
0	COc1ccc(cc1Br)S(=O)(=O)NCCSCc2ccc(Cl)cc2Cl
0	BrC1ccc2N=CN(CC(=O)NC34CC5CC(CC(C5)C3)C4)C(=O)c2c1
0	CCCN1nnnc1CN2C=Nc3sc(c(C)c3C2=O)c4cccc4
0	CCOc1ccc(cc1)\C(=N/Nc2ccc(cc2S(=O)(=Nc3ccc(OC)cc3)[O-])[N+](=O)[O-])\C

0	C[NH+]1CCN(CC1)S(=O)(=O)c2ccc3N[C@@H]([C@H]4CC=C[C@H]4c3c2)c5ccc(F)cc5
0	CCCNc1ccc(cc1)S(=O)(=O)Nc2ccc(I)cc2[O-]
0	CC1=NC(=C)[C@@H]([C@H]([C@H]1C(=O)OC(C)(C)C)c2ccc(Br)s2)C(=O)OC(C)(C)C
0	CC(C)c1ccc(cc1)S(=O)(=O)Nc2cccc(c2)N3CCCS3(=O)=O[O-]
0	CCN(CC)c1ccc(cc1)[C@H]2[C@H]3C(=O)N=C(SCc4cccc4F)N=C3N=C5CC(C)(C)CC(=C25)[O-]
0	COc1ccc(cc1Cl)\N=C/2\S[C@H](CC(=O)N2C)C(=O)Nc3ccc(C)cc3C
0	Clc1cc(Cl)c2N=CN(CC(=O)Nc3ccc(Br)cc3)C(=O)c2c1
0	[O-]S(=O)(=O)Nc1ccc2N(CCCc2c1)S(=O)(=O)c3ccc(F)cc3)CCc4cccc4
0	Cc1cccc1[C@@H]2N3[N-]C(=NC3=NC4=C2C(=O)CC(C)(C)C4)SCc5cccc6cccc56
0	COc1ccc(cc1)c2oc(CN3C=Nc4nc(SC)sc4C3=O)nc2
0	Cc1ccc2nc(oc2c1)c3ccc(cc3O)\N=C/c4cc(C)cc(Br)c4[O-]
0	CC(C)c1cccc(C)c1NC(=O)CSC2=Nc3cccc3C(=O)N2c4cccc(C)c4C
0	CC1=C(C2=C([O-])N(NC(=O)c3csc(C)c3C)C(=S)N=C2S1)c4cccc4
0	COc1ccc(OC)c(c1)[C@H]2N(CCN3cccc23)C(=S)Nc4ccc(Br)cc4
0	CCC(=O)N1CCCc2cc(NS(=O)(=O)c3ccc(C)c(Cl)c3)ccc12
0	Cc1cccc1N2C(=Nc3cccc3C2=O)SCc4nnnn4C5CC5
0	CCN1C(=O)N(CC)c2cc(N=S(=O)([O-])c3cccc(Cl)c3)c(Sc4cccc4)cc12
0	Cc1ccc(C)c(c1)N2CCN(CC2)S(=O)(=O)c3ccc4SCCNc4c3
0	C[C@@H](Sc1nc2ccc(C)cc2[nH]1)c3nc([O-])c4c(csc4n3)c5cccs5
0	CCc1ccc(cc1)S(=O)(=O)N2CCCc3c(cccc23)N=S(=O)(C)[O-]
0	COC(=O)[C@@H]1[C@H](C(=C(NC1=O)SCC(=O)Nc2ccc(Br)cc2C(F)(F)F)C#N)c3ccc(OC)cc3
0	CCOC(=O)c1sc(\N=C/[O-])\C@H](CC)Sc2nnc3cc(C)c4cc(C)cc(C)c4n23)nc1C
0	[O-]c1nc(SCC(=O)N2CCOCC2)nc3scc(c4cccc4)c13
0	BrC1ccc(NC(=O)CCSc2oc(nn2)c3cccc3Br)cc1
0	CC1(C)Cc2c(CO1)sc3ncn4nc(CO\N=C/c5cccc5)nc4c23
0	CCOc1cc(cc(Cl)c1[O-])c2nc3sc4SCCCc4c3c([O-])[nH+]2
0	COc1ccc(OC)c(NC(=O)CSc2nc3ccc(Nc4nc(Nc5cccc5)nc(Nc6cccc6)n4)cc3s2)c1
0	CCOc1cccc1[C@@H]2SCC(=O)Nc3c2c(C)nn3c4nc5cccc5s4
0	C[C@@H]1CN(C(=O)C)c2cc(ccc2O1)S(=O)(=O)Nc3cc(Cl)ccc3C[O-]
0	COc1cc(ccc1OCC(C)C)[C@H]2N(CCCOC(C)C)C(=O)c3n[nH]c(c4cc(C)cc(C)c4[O-])c23
0	CCOCCN1\C(=N\c2cccc2)\S\C(=C/c3oc(cc3)c4cc(Cl)ccc4C)\C1=O
0	COc1ccc(COC(=O)[C@H]2[C@H]([C@@H]3C(=O)CC(C)(C)CC3=NC2=C)c4ccc(Cl)cc4)cc1
0	CCCOc1ccc(cc1)S(=O)(=O)Nc2ccc3CCCN(c3c2)S(=O)(=O)c4ccc(F)cc4[O-]
0	CCCCOC1ccc(cc1)[C@H]2N(C(=O)C3=C2C(=O)c4cc(Cl)ccc4O3)c5ccc(C)cc5
0	CCc1ccc(cc1)c2csc(\N=C/[O-])\c3cnn4c(C)cc(C)nc34)n2
0	CCCCOc1cccc1[C@@H]2[C@@H](C(=O)OCc3cccc3)C(=NC4=CC(C)(C)CC(=O)[C@@H]24)C
0	Cc1cnc(NC(=O)c2cc(ccc2Cl)S(=O)(=O)N3CCc4cccc34)s1
0	C\C(=C\c1cccc1)\C=C/2\SC(=S)N(CCCC(=O)Nc3nc4cccc4s3)C2=O
0	CC1(C)CC(=O)[C@H]2[C@@H]([C@H](C(=O)OC[C@H]3CCCO3)C(=C)N=C2C1)c4ccc(O)cc4
0	CC[C@@H](Sc1ncc(c([O-])n1)S(=O)(=O)c2ccc(C)cc2)C(=O)Nc3ccc(cc3)C(C)C
0	Cc1ccc(cc1)S(=O)(=O)Nc2ccc3nn(nc3c2)c4cccc4[O-]

0	COc1cc(\C=N/Nc2nc(nc(n2)N3CCCCC3)N4CCCCC4)cc(Br)c1OS(=O)(=O)c5ccc(C)cc5
0	CCCN(Cc1cccc1)C(=O)[C@H](C)SCc2nc([O-])c3c(csc3n2)c4cccc4
0	CCCc1ccc(cc1)c2csc(\N=C(\[O-])/CSc3nnc(c4ccncc4)n3CCC)n2
0	O=C(CCSCC1=Nc2sc3CCcC3c2C(=O)N1)N4CCC[C@@H]4c5cccc6cccc56
0	CCCS1=NC(=O)[C@@H]2[C@H](C3=C([O-])CC(C)(C)CC3=NC2=N1)c4oc(C)cc4
0	Cc1cccc(N2C(=Nc3cc(Cl)ccc3C2=O)SCc4nc([O-])c5ccc(C)c5n4)c1C
0	COc1ccc(cc1)C2=NN([C@H](C2)c3ccc(OC)c3OC)\C(=C/Sc4nc5cccc5s4)\[O-]
0	Cc1ccoc1C(=O)N2CCC[C@H]2c3ccc(s3)\C(=N/c4nccs4)\[O-]
0	CCCOc1c(OC)cccc1[C@H]2CC(=O)NC3=C2C(=O)C[C@H](C3)c4ccc(Cl)c(Cl)c4
0	[O-]\C(=N\c1nnc(S[C@H]2C[C@H]3C[NH+](Cc4cccc4)[C@@H]2[C@H]3Br)s1)\c5cccs5
0	COc1cc(N=S(=O)([O-])c2ccc(NC(=O)COc3c(C)cc(Br)cc3Br)cc2)nc(OC)n1
0	[S-]C1=Nc2ccc(Br)cc2C(=O)N1CCCCC(=O)N3CCC(=CC3)c4cccc4
0	CCCCCOc1ccc(cc1OCC)[C@@H]2N(C[C@@H]3CCCO3)C(=O)c4n[nH]c(c24)c5c(C)cc(C)cc5[O-]
0	COc1cccc1c2nc3c4c(C)c(C)n(c5nccs5)c4ncn3n2
0	[O-]c1nc(CSC2=Nc3sccc3C(=O)N2CC=C)nc4cccc14
0	CC[C@H](C)OC(=O)[C@@H]1[C@H]([C@@H]2C(=O)C[C@@H](CC2=NC1=C)c3ccc(OC)cc3)c4ccc(Cl)c(Cl)c4
0	[O-]S(=O)(=Nc1ccc(cc1)c2noc(Cc3ccc(Br)cc3)n2)c4cccs4
0	[O-]\C(=N\c1ncc(Cc2cccc2Cl)s1)\c3sccc3S(=O)(=O)N4CCCCC4
0	COc1ccc(Cl)cc1N=S(=O)([O-])c2ccc(cc2C)N3CCCC3=O
0	Cc1ccc(cc1)[C@H]2Nc3ccc(cc3[C@H]4C=CC[C@@H]24)S(=O)(=O)N5CCOCC5
0	Cc1cc(OCCC\C(=N/c2nnc(s2)[C@H]3CCCO3)\[O-])c(Br)c(C)c1Cl
0	CCc1ccc(cc1)S(=O)(=Nc2ccc(C)c(c2)N3CCCC3(=O)=O)[O-]
0	BrC1ccc(Sc2ccc(NC(=O)CCN3C=Nc4sccc4C3=O)cc2)cc1
0	CCCCSc1ccc(cc1)c2nn(cc2\C=C/3\SC(=S)N(CCC(=O)[O-])C3=O)c4cccc4
0	Cc1ccc(CCN2C[C@H](CC2=O)\C(=N/c3nnc(SCc4cccc4Cl)s3)\[O-])cc1
0	CCOC(=O)C1=C(C)NC2=C([C@H]1c3cc(Cl)c([O-])c(OCC)c3)C(=O)C[C@@H](C2)c4ccc(OC)c4
0	CCCCc1ccc(NC2=Nc3cccc3N4[C@H](c5ccc(O)c(OCC)c5)c6c(C)nn(c7cccc7)c6[NH+]=C24)cc1
0	Cc1ccc(cc1Cl)N=S(=O)([O-])c2ccc3N[C@@H]([C@H]4CC=C[C@H]4c3c2)c5cccc5F
0	CCCOc1cccc1[C@H]2[C@H](C(=O)OCC)C(=NC3=C[C@H](CC(=O)[C@H]23)c4ccc(Cl)cc4)C
0	CCOc1cc(ccc1OCCC(C)C)[C@@H]2[C@@H]3C(=NN=C3c4cc(C)cc(C)c4[O-])C(=O)N2CCCOCC
0	CCCN1C(=O)\C(=C/c2cc(Br)cc(Cl)c2[O-])\S/C/1=N/c3ccc(OC)cc3
0	Cc1ccc(c(C)c1)c2coc(n2)c3ccc(cc3)N=S(=O)([O-])c4ccc(Br)cc4C
0	Cc1c(oc2ccc(Br)cc12)\C(=N/c3nnc(SCc4ccc(Cl)cc4)s3)\[O-]
0	Cn1cccc1[C@H]2CCCCCN2C(=O)CSCc3nc([O-])c4c(csc4n3)c5cccs5
0	C[C@@H]1C[C@H]1c2oc(CN(C)C(=O)CSCc3nc([O-])c4c(csc4n3)c5cccs5)cc2
0	CCC(C)(C)[C@@H]1CCc2oc3ccc(cc3c2C1)N=S(=O)([O-])c4ccc(Br)cc4
0	CSc1nsc(\N=C(\[O-])/C2=CC(=O)c3cc(Br)ccc3O2)n1
0	Cc1ccc(SCC(=O)N\N=C/2\C(=Nc3ccc(Br)cc23)[O-])cc1
0	CCCCCN1C(=O)\C(=C\2/SC(=S)N(CCCC(=O)[O-])C2=O)\c3cc(Br)ccc13

0	<chem>Cn1c(SC\N\c2nc(cs2)c3ccccc3)\[O-])nnc1c4csc5CCCCCc45</chem>
0	<chem>COc1ccc(cc1OC)[C@@H]2CC(=O)C3=C(C2)N=C(C)[C@H]([C@@H]3c4cc(OC)c(OC)cc4Br)C(=O)OC5CCCCC5</chem>
0	<chem>Cc1ccc(SCC\N\c2nnc(s2)[C@H]3CN(C(=O)C3)c4ccc(C)c(Cl)c4)\[O-])cc1</chem>
0	<chem>CCCCCOC1ccc(cc1OC)[C@H]2[C@H]3C(=NN=C3c4cc(C)cc(C)c4[O-])C(=O)N2Cc5occc5</chem>
0	<chem>CCOCCOC(=O)[C@H]1[C@H](C2=C(C[C@H](CC2=O)c3ccc(OC)c(OC)c3)N=C1C)c4cc(Br)c(O)c(OC)c4</chem>
0	<chem>CCCCOC(=O)C1=C(C)N=C2C[C@H](CC(=O)[C@H]2[C@@H]1c3cc(Br)c(O)c(OC)c3)c4ccc(OC)c(OC)c4</chem>
0	<chem>CCOc1cc(cc(Br)c1O)[C@H]2[C@@H](C(=O)OCCOC(C)C)C(=NC3=C[C@@H](CC(=O)[C@@H]23)c4ccc(OC)c(OC)c4)C</chem>
0	<chem>COc1ccc(cc1OC)[C@H]2CC(=O)[C@@H]3[C@H]([C@H](C(=O)OCc4ccccc4)C(=C)N=C3C2)c5cc(Br)c(OC)c(OC)c5</chem>
0	<chem>COc1ccc(cc1OC)[C@H]2CC(=O)[C@@H]3[C@H]([C@H](C(=O)OCCOc4ccccc4)C(=C)N=C3C2)c5cc(Br)ccc5OC</chem>
0	<chem>CCSCCOC(=O)C1=C(C)N=C2C[C@@H](CC(=O)[C@H]2[C@H]1c3cc(Br)ccc3OC)c4ccc(OC)c(OC)c4</chem>
0	<chem>CCOC(=O)[C@H]1[C@H]([C@@H]2C(=O)C[C@@H](CC2=NC1=C)c3ccc(OC)c(OC)c3)c4cc(OC)c(OC)cc4Br</chem>

Test set

class	smiles
1	<chem>CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3cc(F)ccc23)C(=O)c4ccc(OCCC[NH+]5CCOCC5)cc4</chem>
1	<chem>CN(Cc1ccc(cc1)C(=O)[O-])c2ccc(OCc3c(oc3c4c(Cl)cccc4Cl)C5CC5)nc2C(F)(F)F</chem>
1	<chem>CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3ccccc23)C(=O)c4ccc(OCCC[NH+]5CC[NH+](C)CC5)c4</chem>
1	<chem>CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3ccccc23)C(=O)c4ccc(OCC[NH+]5CC[NH+](C)CC5)cc4</chem>
1	<chem>C[C@H](Oc1cccc(c1)C(=O)[O-])c2ccc(OCc3c(oc3c4c(Cl)cccc4Cl)C5CC5)nc2C(F)(F)F</chem>
1	<chem>CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3cc(F)ccc23)C(=O)c4ccc(CC[NH+]5CCOCC5)cc4</chem>
1	<chem>CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3ccccc23)C(=O)c4ccc(OCCC[NH+]5CC[NH+](C)CC5)c4</chem>
1	<chem>CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3ccccc23)C(=O)c4ccc(OCCC[NH+]5CCCC5)cc4</chem>
1	<chem>CC(C)c1onc(c1COc2ccc(N(C)C(=O)c3ccc(cc3)C(=O)[O-])c(n2)C(F)(F)F)c4c(Cl)cccc4Cl</chem>
1	<chem>CC(C)c1onc(c1COc2ccc(N(C)C(=O)c3cccc(c3)C(=O)[O-])c(n2)C(F)(F)F)c4c(Cl)cccc4Cl</chem>
1	<chem>CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3ccccc23)C(=O)c4ccc(OCC[NH+](C)C)cc4</chem>
1	<chem>CC(C)c1onc(COc2c(C)cccc2C)c1COc3ccc(\C=C/c4cccc(c4)C(=O)[O-])c(Cl)c3</chem>
1	<chem>CC(C)c1onc(c1COc2ccc(C(=O)N(C)c3cccc(c3)C(=O)[O-])c(Cl)c2)c4c(Cl)cccc4Cl</chem>
1	<chem>CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3ccccc23)C(=O)c4ccc(F)c(F)c4</chem>
1	<chem>CC(C)c1onc(c1COc2ccc(C(=O)N(CCc3ccccc3)c4cccc(c4)C(=O)[O-])c(Cl)c2)c5c(Cl)cccc5Cl</chem>
1	<chem>CC(C)c1onc(c1COc2ccc(N(C)C(=O)c3ccc(cc3)C(=O)[O-])c(C)n2)c4c(Cl)cccc4Cl</chem>
1	<chem>CCCN(C(=O)c1ccc(OCc2c(oc2c3c(Cl)cccc3Cl)C(C)C)cc1Cl)c4cccc(c4)C(=O)[O-]</chem>
1	<chem>CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2cc(C#N)[nH]c12)C(=O)c3cccc(c3)C(F)(F)F</chem>

1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2)c3ccc4nc(ccc4c3)C(=O)[O-])c5c(Cl)cccc5Cl
1	[O-]C(=O)c1cccc1OCc2ccc(OCc3c(onc3c4c(Cl)cccc4Cl)C5CC5)nc2C(F)(F)F
1	CC(C)COc1cc(nc2ccc(cc12)c3ccc(OCc4c(onc4c5c(Cl)cccc5Cl)C(C)C)cc3)C(=O)[O-]
1	CCOC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2c1[nH]c3cccc23)C(=O)c4ccc(F)c(F)c4
1	CC(C)(C)c1onc(c1COc2ccc(C(=O)Nc3cccc(c3)C(=O)[O-])c(Cl)c2)c4c(Cl)cccc4Cl
1	CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2cc(C#N)[nH]c12)C(=O)C3CCCCC3
1	CC(C)OC(=O)[C@@H]1CN(CC(C)(C)c2cc(C#N)[nH]c12)C(=O)c3cccc(Cl)c3
1	CC(C)OC(=O)[C@H]1CN(CC(C)(C)c2cc(C#N)[nH]c12)C(=O)c3ccc(Cl)cc3
1	[O-]C(=O)c1ccc(NC(=O)[C@H](C2CCCC2)n3c(nc4cc(F)c(F)cc34)c5ccc(Cl)cc5)c(c1)C(F)(F)F
1	[O-]C(=O)c1ccc(NC(=O)[C@@H](C2CCCC2)n3c(nc4cc(F)ccc34)c5ccc(Cl)cc5)c(F)c1
1	[O-]C(=O)C1(CC1)Oc2ccc(NC(=O)[C@H](C3CCCC3)n4c(nc5cc(F)c(F)cc45)c6ccc(Cl)cc6)c(F)c2
1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2)c3ccc4sc(cc4n3)C(=O)[O-])c5c(Cl)cccc5Cl
1	[O-]C(=O)CCc1ccc(NC(=O)[C@@H](C2CCCC2)n3c(nc4cc(F)c(F)cc34)c5ccc(Cl)cc5)cc1
1	COc1ccc(c(OC)n1)c2nc3cc(F)c(F)cc3n2[C@@H](C4CCCC4)C(=O)NC5CCC(CC5)C(=O)[O-]
1	[O-]C(=O)c1ccc(NC(=O)[C@@H](C2CCCC2)n3c(nc4cc(F)c(F)cc34)c5ccc(Cl)cc5)cc1
1	Fc1cc2nc(c3ccc(Cl)cc3)n([C@H](C4CCCC4)C(=O)NC5CCCCC5)c2cc1F
1	CC(C)OC(=O)C1=CN(CC(C)(C)c2cc(C#N)[nH]c12)C(=O)c3cccs3
1	CCOC(=O)C1=CN(CC2c1[nH]c3cccc23)C(=O)c4ccc(F)cc4
1	CCCCOC(=O)C1=CN(CC2c1[nH]c3cccc23)C(=O)c4ccc(F)cc4
0	FC(F)(F)c1cccc(COc2cccc(\C=C\3/C(=O)NN(C3=O)c4cccc4)c2)c1
1	FC(F)(F)c1ccc(COc2cccc(\C=C\3/C(=O)NN(C3=O)c4cccc4)c2)cc1
0	Cc1nc(NC(=O)[C@@H](C2CCCC2)n3c(nc4cc(F)c(F)cc34)c5ccc(Cl)cc5)sc1C(=O)[O-]
0	Cc1cc(Oc2ncccc2C#N)ccc1NC(=O)c3oc(Br)cc3C
0	COc1cccc1OCC[NH2+][C[C@H](O)COc2cccc3c2c4cccc4n3C[C@H](O)C[NH2+][CCOc5cccc5OC
0	Cc1cc(\C=N/NC(=O)C(=O)N2CCCCC2)c(C)n1c3ccc(Cl)c(Cl)c3
0	CC(C)C(=O)O[C@@H]1C[C@@H]2[C@@]3(C)[C@H](CC(=O)OC(C)(C)[C@H]3C[C@@H](OC(=O)C(C)C)[C@@]2(C)[C@]45O[C@@H]4C[C@H](c6cocc6)[C@]15C)OC(=O)C
0	CCc1ccc2[NH+]=C(NN=C(c3ccc(cc3)N4CCOCC4)c2c1)c5ccncc5
0	Cc1ccc(Cn2cc(cn2)n3c(S)nnc3Cn4cc(Cl)cn4)cc1
0	CC(C)(C)[C@H]1CCC2=C3C(=O)N=C(N=C3S[C@H]2C1)c4ccc(OCCCOc5cccc5)cc4
0	Cc1ccc(cc1Cl)N2N=C(C=CC2=O)N3CCC(CC3)C(=O)NC4CCCC4
0	Cn1cc(cn1)c2nnc3sc(Cc4ccc(OC(F)(F)F)cc4)nn23
0	O=C(COC(=O)c1cccc1c2nc3cccc3s2)N(CC4CCCC4)Cc5cccc5
0	Fc1ccc(cc1)N2CCN(CC2)c3nnnc4c3cnn4c5cccc5
0	C[C@@H](C[C@@H](C)C(=O)[O-])[C@@H]1CC[C@@H]2[C@@H]3[C@H](O)[C@@H](C)[C@@H]4C[C@H](O)CC[C@@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C
0	CCN(CC)c1ccc(\C=C(/NC(=O)c2cccc2)\C(=O)N\N=C\c3cc(Br)cc(Br)c3O)cc1
0	CCC(=O)O[C@@]1([C@@H](C)C[C@@H]2[C@@H]3C[C@@H](F)C4=CC(=O)C=C[C@]4(C)[C@@]3(F)[C@@H](O)C[C@]12C)C(=O)SCF
0	C[C@H]1C[C@H](C)CN(C1)c2ncc(C3=CC(=O)N(N3)c4ccc(cc4)C(F)(F)F)c(C)n2
0	CN1C(=O)N(C)c2nc(N3CCCC3)n(Cc4ccc(C)cc4)c2C1=O

0	C[C@@H](CCC(=O)[O-])[C@H]1CC[C@H]2[C@H]3CC[C@@H]4C[C@H](O)CC[C@]4(C)[C@@H]3CC[C@]12C
0	Cc1cccc1N=S(=O)([O-])c2cc3[nH]c4CC(C)(C)CC(=O)c4c3cc2C
0	BrC1ccc(Br)c(NC(=O)COc2ccc(Oc3cccn3)cc2)c1
0	[O-][N+](=O)c1nn(Cc2coc(n2)c3ccc(F)cc3)cc1Br
0	Cc1cccc1N2C[C@@H](CC2=O)c3nc4cccc4n3CCCCOc5ccc(cc5)C(C)(C)C
0	C[C@@H](NC(=O)c1oc2cc(Br)ccc2c1C)C(=O)N3CCCCC3
0	Cc1cccn1NC(=O)[C@H]2c3cccc3C(=O)N(C4CCCC4)C25CCCC5
0	CN1C(=O)[C@@](C)(Sc2cccc12)C(=O)Nc3ccc(cc3)N4CCCC4
0	COC(=O)C1=C(SC2(S1)C=C(SC3=C2c4cc(C)ccc4N(C(=O)c5ccc(Cl)cc5Cl)C3(C)C)C(=O)OC)C(=O)OC)C(=O)OC
0	CC(=O)N1CCCN(CC1)c2ccc(cn2)c3onc(n3)c4cccc4C
0	FC(F)(F)c1cnc(NC(=O)CSc2ncnc3sc(cc23)c4cccc4)c(Cl)c1
0	CCC(CC)(CC(=O)Nc1c(Br)cc(C)cc1Br)C(=O)[O-]
0	CC1(C)CC(=C2[C@@H](C3=C(CC(C)(C)CC3=O)N=C2C1)c4ccc(OCc5ccc(Cl)cc5)cc4)[O-]
0	COc1cccc(c1)c2nn(c(c2C)c3cccc(OC)c3)c4nc(c(c4)s4)c5cccc5
0	[O-]\C(=N\c1ccc(Cl)cc1)\C=C/c2cc(Br)ccc2OCc3ccc(Cl)cc3)\C#N
0	COc1ccc(OC)c(c1)c2c([C@@H]3N([C@@H](C)c4cccc4)C(=O)c5cccc35)c6cccc6n2C
0	Cn1cnnc1Sc2oc(cc2)c3nccn3c4ccc5ncsc5c4
0	Clc1cccc1[C@@H]2N(CCNC2=O)S(=O)(=O)c3ccc4CCCCc4c3
0	COc1ccc(Nc2nc(NCc3occc3)nc(N\N=C\c4cc(I)c(OCC#C)c(OC)c4)n2)cc1
0	COc1ccc(cc1)c2oc3ncn4nc(nc4c3c2c5ccc(OC)cc5)c6ccc7cccc7c6[O-]
0	C[C@@H](O[C@@H]1O[C@H]2CO[C@@H](O[C@H]2[C@H](OC(=O)C)[C@H]1NC(=O)C)c3cccc3)[C@@H](NC(=O)OCC4c5cccc5c6cccc46)C(=O)OCC=C
0	COc1ccc(cc1)N2C(=O)NC(=O)[C@@](C[NH+])3C[C@@H]4C[C@H](C3)C5=CC=CC(=O)N5C4)(Cc6cc(OC)c(OC)c(OC)c6)C2=O
0	CC1(C)C[C@@](CCNC(=O)CCC(=O)OCC(=O)[C@]2(O)CC[C@H]3[C@@H]4CCC5=CC(=O)CC[C@@]5(C)[C@@H]4[C@H](O)C[C@@]23C)(CCO1)c6cccc6
0	CCOc1ccc(cc1)N=S(=O)([O-])c2ccc(NC(=O)c3ccc(cc3)C(=O)Nc4ccc(cc4)S(=O)(=Nc5ccc(OCC)cc5)[O-])cc2
0	CCN1\C(=N\c1ccc(cc1)C(C)C)\Sc3cc4OCCOc4cc13
0	COc1ccc(C[NH+])(C)Cc2nc([O-])c3cc(Br)cc(Br)c3n2)c(OC)c1
0	CCN(CC)c1cc(Nc2ccc(cc2)N=S(=O)([O-])c3cc(Cl)ccc3Cl)nc(C)n1
0	CC(=O)N1CCSc2ccc(cc12)S(=O)(=O)Nc3cccc(Cl)c3C
0	Cc1occc1c2oc(SCC3=CC(=O)N4C=C(Cl)C=CC4=N3)nn2
0	[O-]C(=O)[C@H]1[C@@H](C=C[C@@H]([C@@H]1C(=O)Nc2ccc(Br)cc2)c3cccc3)c4cccc4
0	C[C@H](Sc1oc(nn1)c2cccc2Br)C3=Nc4cccc4C(=O)N3
0	COc1cc(Br)cc\C(=N/c2ccc(OC3ccc(F)cc3)c(c2)C(F)(F)F)c1[O-]
0	CC(=O)N1[C@H](Oc2nc(SCC=C)nn2c3cccc13)c4oc(C)cc4
0	COc1ccc(N2C[C@H](CC2=O)c3onc(n3)c4cccc4C)c(OC)c1
0	CCCCOc1ccc(cc1)[C@@H]2N(CCc3cccc3)C(=O)C4=C2C(=O)c5cc(Cl)ccc5O4
0	CC[NH+]1CC[NH+](CC1)[C@H](c2ccc(C)cc2)c3sc4nc(CC)nn4c3[O-]
0	COc1ccc(CCN2[C@@H]([C@H]3C(=NN=C3c4cc(Cl)c(C)cc4[O-])C2=O)c5ccc(cc5)C(C)C)cc1

					F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F
0	0	0	0	0	[O-]C(=Nc1ccc(NC(=O)C(C2CC2)c3ccc(F)cc3)cc1)C(F)(F)F
0	0	0	0	0	[O-]C(=Nc1cccc1F)C(=Cc2cc(Cl)ccc2OCc3ccc(Br)cc3)C#N
0	0	0	0	0	[O-]C(=O)C(Cc1c[nH+]cn1C(=O)OCC2c3cccc3c4cccc24)NC(=O)OCC5c6cccc6c7cccc57
0	0	0	0	0	[O-]C(=O)C(CCSC(c1cccc1)(c2cccc2)c3cccc3)NC(=O)OCC4c5cccc5c6cccc46
0	0	0	0	0	[O-]C(=O)C(CSC(c1cccc1)(c2cccc2)c3cccc3)NC(=O)OCC4c5cccc5c6cccc46
0	0	0	0	0	[O-]C(=O)C(Nc1ccc(Cl)cc1)c2ccc(Br)cc2F
0	0	0	0	0	[O-]C(=O)C1C(C2c3cccc3C1c4cccc24)C(=O)Nc5cccc5
0	0	0	0	0	[O-]C(=O)c1cc(Br)ccc1Nc2ncnc3scc(c4ccc(Br)cc4)c23
0	0	0	0	0	[O-]C(=O)C1CC=CCC1C(=O)Nc2c(Br)cc(F)cc2Br
0	0	0	0	0	[O-]C(=O)C1CC=CCC1C(=O)Nc2cc(cc(c2)C(F)(F)F)C(F)(F)F
0	0	0	0	0	[O-]C(=O)c1ccc2NC(C3CC(Sc4cccc4[N+](=O)[O-])C(Cl)C3c2c1)c5ccc(Cl)cc5
0	0	0	0	0	[O-]C(=O)c1ccc2NC(C3CC(Sc4cccc4[N+](=O)[O-])C(Cl)C3c2c1)c5cccc5F
0	0	0	0	0	[O-]C(=O)CC(NC(=O)OCC1c2cccc2c3cccc13)C4CCCCN4C(=O)OCC5cccc5
0	0	0	0	0	[O-]C1=C([C@@H])(NC1=O)c2ccc(Cl)cc2)C(=O)c3ccc(Br)cc3
0	0	0	0	0	[O-]C1=C([C@H])(NC1=O)c2ccc(Br)cc2)C(=O)c3ccc(Br)cc3
0	0	0	0	0	[O-]C1=C(C=NCc2cccc2)C(=O)NC1=Cc3ccc(Br)cc3
0	0	0	0	0	[O-]C1=NC(=O)N(C(=O)C1=Cc2oc(cc2)c3ccc(F)cc3)c4ccc(cc4)C56CC7CC(CC(C7)C5)C6
0	0	0	0	0	[O-]C1=NC(=S)N(C(=O)C1=Cc2cc(c3cccc3)n(c4cccc4)c2c5cccc5)c6ccc(Cl)cc6Cl
0	0	0	0	0	[O-]C1=NC(=S)N=C2NC(=CC([C@H]12)c3cccc3C(F)(F)F)c4cccc4
0	0	0	0	0	[O-]C1=Nc2ccc(Br)cc2C1=NNc3cccc4ccnnc34
0	0	0	0	0	[O-]c1c(Br)cc(Br)cc1C(=O)Nc2cc(Cl)ccc2Oc3ccc4cccc4c3Cl
0	0	0	0	0	[O-]c1c(Br)cc(Br)cc1C=C(C#N)C(=O)Nc2ccc(Cl)cc2
0	0	0	0	0	[O-]c1c(Br)cc(cc1C=Nc2ccc3oc(nc3c2)c4cc(Cl)ccc4Cl)[N+](=O)[O-]
0	0	0	0	0	[O-]c1c(Br)cccc1CNc2ccc(Br)s2
0	0	0	0	0	[O-]c1c(C=Nc2ccc3nc(oc3c2)c4ccc5cccc5c4)cc(Br)cc1[N+](=O)[O-]
0	0	0	0	0	[O-]c1c(ccc2ccnnc12)C(Nc3ccc(Cl)cc3Cl)c4cccn4
0	0	0	0	0	[O-]c1c(Cl)cc(C=C2SC(=Nc3ccc(F)cc3)NC2=O)cc1Cl

0	0	0	0	0	[O-]c1ccc(C(=O)c2ccccc2)c([O-])c1C[NH+]3CCc4ccccc4C3
0	0	0	0	0	[O-]c1ccc(NC(=O)c2ccccc2l)cc1Br
0	0	0	0	0	[O-]c1ccccc1C(=O)Nc2ccc(Br)cc2Br
0	0	0	0	0	[O-]c1ccccc1C2CC(=NN2C(=O)c3ccc(cc3)c4oc(cn4)c5ccc(cc5)c6ccc(Cl)cc6
0	0	0	0	0	[O-]c1nc(CSc2nnc(Nc3ccccc3F)s2)nc4scc(c5ccc(F)cc5)c14
0	0	0	0	0	[O-]c1nc(SCC(=O)Nc2ccc3ccccc3c2)nc4scc(c5ccc6CCCCc6c5)c14
0	0	0	0	0	[O-]c1nc(SCC(=O)OCCOc2ccccc2)nc3scc(c4ccc5CCCCc5c4)c13
0	0	0	0	0	Br1ccc(cc1)C(=C)NOCC(=O)NN=C2C(=O)N(C[NH+])3CCOCC3)c4ccc(Br)cc24
0	0	0	0	0	Br1ccc(cc1)c2nc(SCC(=O)N(c3ccccc3)c4ccccc4)nn2CC=C
0	0	0	0	0	Br1ccc(NC(=O)c2cccc(c2)S(=O)(=O)[N-]c3ccc(cc3)C(=O)Oc4ccccc4)cc1
0	0	0	0	0	C(N(Cc1ccccc1)C2(CCCC2)c3nnnn3C(c4ccccc4)c5ccccc5)c6ccccc6
0	0	0	0	0	C(N1CCOCC1)c2nc(Oc3ccc(cc3)c4ccccc4)c5c(csc5n2)c6ccccc6
0	0	0	0	0	C(OCc1ccccc1)C2OC(C(OCc3ccccc3)C2OCc4ccccc4)c5ccc(cc5
0	0	0	0	0	C(OCc1ccccc1)C2OC(C(OCc3ccccc3)C2OCc4ccccc4)c5ccc(cc5
0	0	0	0	0	C[C@@H]1N=NC(=C1Sc2ccccc2N=Cc3cc(Cl)cc(Br)c3O)C
0	0	0	0	0	C=CCn1cc(C=C2SC(=Nc3ccccc3)N(C2=O)c4ccccc4)c5ccccc15
0	0	0	0	0	CC(=C)C(=O)Oc1c(Cl)cc(cc1Cl)C(C)(C)c2cc(Cl)c(OC(=O)C(=C)C)c(Cl)c2
0	0	0	0	0	CC(=C)CSc1nc(N2CCN(Cc3cc(C)ccc3C)CC2)c4c(C)c(C)sc4n1
0	0	0	0	0	CC(=O)c1cc(C(c2ccc(cc2)[N+](=O)[O-])c3cc(C(=O)C)c([O-])c4ccccc34)c5ccccc5c1O
0	0	0	0	0	CC(=O)N(c1ccc(C)c(C)c1)c2nc(C=C3SC(=Nc4c(C)cccc4C)N=C3[O-])cs2
0	0	0	0	0	CC(=O)OC1CC[C@]2(C)C3CCC4(C)C(CCC4(C)C3CC=C2C1)C(=O)Nc5ccccc5
0	0	0	0	0	CC(=O)OCC1OC(OC2(CCl)OC(CCl)C(OC(=O)C)C2OC(=O)C)C(OC(=O)C)C(OC(=O)C)C1Cl
0	0	0	0	0	CC(C(O)CC(=O)O)C1CCC2C3C(O)CC4CC(O)CCC4(C)C3CC C12C

0	0	0	0	0	CC(C)(C)c1ccc(cc1)C(=O)N2CC(=O)Nc3ccc(Cl)cc3C2c4ccc(F)cc4
0	0	0	0	0	CC(C)(C)c1ccc(cc1)C2=NC(=Cc3ccccc3OC(=O)c4ccccc4Br)C(=O)O2
0	0	0	0	0	CC(C)(C)c1ccc(cc1)C2=NNC(=S)N2N=Cc3ccc(Br)s3
0	0	0	0	0	CC(C)(C)c1ccc(cc1)C2CC2C(=O)NN=Cc3cc(Br)cc(Br)c3[O-]
0	0	0	0	0	CC(C)(C)c1ccc(cc1)c2nnc(SCSC#N)n2c3ccc(Br)cc3
0	0	0	0	0	CC(C)(C)c1ccc(cc1)c2noc(CSc3nc([O-])c4SC(=S)N(c5cccc5)c4n3)n2
0	0	0	0	0	CC(C)(C)c1ccc(CSC2=Nc3ccccc3C(=O)N2Cc4ccc5OCOc5c4)cc1
0	0	0	0	0	CC(C)(C)C1CCc2c(C1)sc(NC(=O)c3cccs3)c2C(=O)N4CCCCC4
0	0	0	0	0	CC(C)(C)c1ccc2CCN=C(CC3CN(CCC3CC(=O)[O-])C(=O)Nc4cccc(c4)C(F)(F)F)c2c1
0	0	0	0	0	CC(C)(C)CC(C)(C)c1ccc(OP(=O)([O-])Oc2ccc(cc2)C(C)(C)C(C)(C)C)cc1
0	0	0	0	0	CC(C)C(=O)N1CCCc2ccc(NC(=O)C3(CCCC3)c4ccc(Cl)cc4)c c12
0	0	0	0	0	CC(C)C(N(Cc1ccccc1)Cc2ccccc2)c3nnnn3C(c4ccccc4)c5c cccc5
0	0	0	0	0	CC(C)C(N1C(=O)C2C(C1=O)C3(Br)c4ccccc4C2(Br)c5ccccc 35)C(=O)OCC(=O)c6ccc(cc6)[N+](=O)[O-]
0	0	0	0	0	CC(C)c1cc([N-]S(=O)(=O)c2ccc(C)cc2)cc(C(C)C)c1OS(=O)(=O)c3ccc(C)cc3
0	0	0	0	0	CC(C)c1cc(O)c(C)cc1[N-]S(=O)(=O)c2ccc(Br)cc2
0	0	0	0	0	CC(C)C1Cc2c(CO1)sc3N=C(SCc4ccccc4)N(C(=O)c23)c5cc ccc5C
0	0	0	0	0	CC(C)C1CCC(C)CC1OC(=O)C2=C(C)N=C3[N-]C=NN3C2c4c cc(Br)cc4
0	0	0	0	0	CC(C)c1ccc(C)cc1Oc2cc(NC(=O)c3cnn4C(CC(Nc34)c5cccs 5)C(F)(F)F)cc(c2)[N+](=O)[O-]
0	0	0	0	0	CC(C)c1ccc(C=C2Oc3c(C)c(OC(=O)COc4c(F)c(F)c(F)c(F)c4 F)ccc3C2=O)cc1
0	0	0	0	0	CC(C)c1ccc(cc1)N2C(=C(C#N)C(=NC(C)c3ccccc3)[O-])SC(Cc4ccc(C)c(C)c4)C2=O
0	0	0	0	0	CC(C)c1ccc(CSc2nnc(SC(C)c3nc([O-])c4c(C)c(C)sc4n3)s2) cc1
0	1	1	1	1	CC(C)c1ccccc1n2nc(C)c3C(SC(C)C(=O)Nc23)c4ccc(Oc5cc ccc5)cc4
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(C[S+](O-])c2c(Cl)cccc2Cl)c1COc3ccc(C=Cc4 cccc(c4)C(=O)O)c(Cl)c3

0	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1CCc2oc3c(Nc4cccc(c4)C(=O)O)cccc3n2)c5c(Cl)cccc5Cl
0	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1CCc2oc3ccc(cc3n2)c4cccc(c4)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1CNc2nc3ccc(cc3s2)c4cccc(c4)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2cc(C)c(C=Cc3ccc(cc3)C(=O)O)c(C)c2)c4c(Cl)cccc4Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2cc(C)c(C=Cc3cccc(c3)C(=O)O)c(C)c2)c4c(Cl)cccc4Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2cc(C)c(cn2)[N+](=O)[O-])c3c(Cl)cccc3Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2cc(C)c3ccccc3n2)c4c(Cl)cccc4Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2cc(cc(C)n2)C(F)(F)F)c3c(Cl)cccc3Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(c(C)c2)c3ccc4nc(ccc4c3)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(C=Cc3cccc(c3)C(=O)O)c(C)c2)c4c(Cl)cccc4Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(C=Cc3cccc(c3)C(=O)O)c(Cl)c2)c4c(Cl)cccc4Br
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(C=Cc3cccc(c3)C(=O)O)c(Cl)c2)c4c(Cl)cccc4Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(C=Cc3cccc(c3)C(=O)O)c(Cl)c2)c4c(Cl)cncc4Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(C=Cc3cccc(c3)C(=O)O)cc2)c4c(Cl)cccc4Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2)c3cc4ccc(nc4cc3F)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2)c3ccc4[nH]c(cc4c3)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2)c3ccc4c(c[nH]c4c3)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2)c3ccc4c(ccc4c3)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2)c3ccc4C(CCCc4c3)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2)c3ccc4c(ccnc4c3)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2)c3ccc4c(csc4c3)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2)c3ccc4c(nccc4c3)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2)c3ccc4cc([nH]c4c3)C(=O)O)c

					5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2)c3ccc4CC(Cc4c3)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2)c3ccc4cc(cnc4c3)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2)c3ccc4cc(ncc4c3)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2)c3ccc4nc(C(=O)O)c(C)cc4c3)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2)c3ccc4nc(cc(C)c4c3)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2)c3ccc4nc(cc(O)c4c3)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2)c3ccc4nc(ccc4c3)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2)c3ccc4nc(cnc4c3)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2)c3ccc4nc(nc(C)c4c3)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2)c3ccc4nc(nnc4c3)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2)c3ccc4oc(cc4c3)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2)c3ccc4sc(cc4c3)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2)c3ccc4sc(cc4n3)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
0	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2)c3nc4cccc(C(=O)O)c4[nH]3)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(cc2C)c3ccc4nc(ccc4c3)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(Cn3ccc4ccc(cc34)C(=O)O)cc2)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(N(C)C(=O)c3ccc(cc3)C(=O)O)c(C)n2)c4c(Cl)cccc4Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(N(C)C(=O)c3ccc(cc3)C(=O)O)c(n2)C(F)(F)F)c4c(Cl)cccc4Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(N(C)C(=O)c3ccc(c3)C(=O)O)c(n2)C(F)(F)F)c4c(Cl)cccc4Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(N(C)Cc3ccc(cc3)C(=O)NS(=O)(=O)C)c(n2)C(F)(F)F)c4c(Cl)cccc4Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(N(C)Cc3ccc(cc3)C(=O)O)c(n2)C(F)(F)F)c4c(Cl)cccc4Cl

1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(N(C)Cc3ccc(CCC(=O)O)cc3)c(n2)C(F)(F)F)c4c(Cl)cccc4Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(N(C)Cc3ccc(OCC(=O)O)cc3)c(n2)C(F)(F)F)c4c(Cl)cccc4Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(N(C)Cc3ccc(OCCO)cc3)c(n2)C(F)(F)F)c4c(Cl)cccc4Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(N(C)Cc3cccc(c3)C(=O)NCCOP(=O)(O)O)c(n2)C(F)(F)F)c4c(Cl)cccc4Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(N(C)Cc3cccc(c3)C(=O)NS(=O)(=O)C)c(n2)C(F)(F)F)c4c(Cl)cccc4Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(N(C)Cc3cccc(c3)C(=O)O)c(n2)C(F)(F)F)c4c(Cl)cccc4Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(NC(=O)c3ccc(cc3)C(=O)O)c(n2)C(F)(F)F)c4c(Cl)cccc4Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(NCc3ccc(cc3)C(=O)O)c(n2)C(F)(F)F)c4c(Cl)cccc4Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc(Sc3cccc4sc(cc34)C(=O)O)cc2)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc3[nH]c(cc3c2)c4cccc(c4)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
0	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc3[nH]cc(Cc4cccc(c4)C(=O)O)c3c2)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc3C(=O)N(Cc3c2)c4cccc(c4)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc3C(=O)N(CCc3c2)c4cccc(c4)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
0	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc3c(c2)ncn3Cc4cccc(c4)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc3c(Cc4cccc(c4)C(=O)O)c[nH]c3c2)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc3c(ccn3C(=O)c4cccc(c4)C(=O)O)c2)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc3c(ccn3Cc4ccc(cc4)C(=O)O)c2)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc3c(ccn3Cc4cccc(c4)C(=O)O)c2)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc3c(ccn3S(=O)(=O)c4cccc(c4)C(=O)O)c2)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc3c(Nc4cccc(c4)C(=O)O)cccc3c2)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc3cc(ccc3c2)c4ccc(cc4)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc3cc(ccc3c2)c4cccc(c4)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl

1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc3cc(sc3c2)c4ccc(cc4)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc3cc(sc3c2)c4ccc(c4)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
0	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc3CN(C(=O)Cc3c2)c4ccc(c4)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc3nc(sc3c2)c4ccc(c4)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc3sc(cc3c2)c4ccc(cc4)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2ccc3sc(cc3c2)c4ccc(c4)C(=O)O)c5c(Cl)cccc5Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2cnc(N(C)Cc3ccc(cc3)C(=O)O)c(Cl)c2)c4c(Cl)cccc4Cl
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(c1COc2cnc(N(C)Cc3cccc(c3)C(=O)O)c(Cl)c2)c4c(Cl)cccc4Cl
0	1	1	1	1	CC(C)c1onc(C2CC2c3c(Cl)cccc3Cl)c1COc4ccc(C=Cc5cccc(c5)C(=O)O)c(Cl)c4
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(Cc2cccc2)c1COc3ccc(C=Cc4cccc(c4)C(=O)O)c(Cl)c3
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(CCc2c(Cl)cccc2Cl)c1COc3ccc(C=Cc4cccc(c4)C(=O)O)c(Cl)c3
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(CCc2cccc2)c1COc3ccc(C=Cc4cccc(c4)C(=O)O)c(Cl)c3
0	1	1	1	1	CC(C)c1onc(CCCc2cccc2)c1COc3ccc(C=Cc4cccc(c4)C(=O)O)c(Cl)c3
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(CNc2c(Cl)cccc2Cl)c1COc3ccc(C=Cc4cccc(c4)C(=O)O)c(Cl)c3
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(CNc2c(Cl)cncc2Cl)c1COc3ccc(C=Cc4cccc(c4)C(=O)O)c(Cl)c3
0	0	1	1	1	CC(C)c1onc(CO)c1COc2ccc(C=Cc3cccc(c3)C(=O)O)c(Cl)c2
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(COC(C)(C)C)c1COc2ccc(C=Cc3cccc(c3)C(=O)O)c(Cl)c2
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(COc2c(C)cc(Cl)cc2C)c1COc3ccc(C=Cc4cccc(c4)C(=O)O)c(Cl)c3
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(COc2c(C)cccc2Cl)c1COc3ccc(C=Cc4cccc(c4)C(=O)O)c(Cl)c3
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(COc2c(C)cccc2Cl)c1COc3ccc(C=Cc4cccc(c4)C(=O)O)c(Cl)c3
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(COc2c(Cl)cc(Cl)cc2Cl)c1COc3ccc(C=Cc4cccc(c4)C(=O)O)c(Cl)c3
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(COc2c(Cl)cc(F)cc2Cl)c1COc3ccc(C=Cc4cccc(c4)C(=O)O)c(Cl)c3

1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(COc2c(Cl)cccc2Cl)c1COc3ccc(C=Cc4cccc(c4)C(=O)O)c(Cl)c3
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(COc2c(F)cc(F)cc2F)c1COc3ccc(C=Cc4cccc(c4)C(=O)O)c(Cl)c3
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(COc2c(F)cccc2Cl)c1COc3ccc(C=Cc4cccc(c4)C(=O)O)c(Cl)c3
0	1	1	1	1	CC(C)c1onc(COc2c(F)cccc2F)c1COc3ccc(C=Cc4cccc(c4)C(=O)O)c(Cl)c3
0	1	1	1	1	CC(C)c1onc(COc2cc(Cl)cc(Cl)c2)c1COc3ccc(C=Cc4cccc(c4)C(=O)O)c(Cl)c3
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(COc2cc(Cl)ccc2Cl)c1COc3ccc(C=Cc4cccc(c4)C(=O)O)c(Cl)c3
0	1	1	1	1	CC(C)c1onc(COc2ccc(Cl)c(Cl)c2)c1COc3ccc(C=Cc4cccc(c4)C(=O)O)c(Cl)c3
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(COc2ccc(Cl)cc2)c1COc3ccc(C=Cc4cccc(c4)C(=O)O)c(Cl)c3
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(COc2ccc(Cl)cc2Cl)c1COc3ccc(C=Cc4cccc(c4)C(=O)O)c(Cl)c3
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(COc2ccc3cccc3c2)c1COc4ccc(C=Cc5cccc(c5)C(=O)O)c(Cl)c4
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(COc2cccc(Cl)c2)c1COc3ccc(C=Cc4cccc(c4)C(=O)O)c(Cl)c3
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(COc2cccc(Cl)c2Cl)c1COc3ccc(C=Cc4cccc(c4)C(=O)O)c(Cl)c3
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(COc2cccc3cccc3)c1COc4ccc(C=Cc5cccc(c5)C(=O)O)c(Cl)c4
0	1	1	1	1	CC(C)c1onc(COc2cccc2)c1COc3ccc(C=Cc4cccc(c4)C(=O)O)c(Cl)c3
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(COc2cccc2Cl)c1COc3ccc(C=Cc4cccc(c4)C(=O)O)c(Cl)c3
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(CS(=O)(=O)c2c(Cl)cccc2Cl)c1COc3ccc(C=Cc4cccc(c4)C(=O)O)c(Cl)c3
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(CSc2c(Cl)cccc2Cl)c1COc3ccc(C=Cc4cccc(c4)C(=O)O)c(Cl)c3
1	1	1	1	1	CC(C)c1onc(CSc2nnnn2C)c1COc3ccc(C=Cc4cccc(c4)C(=O)O)c(Cl)c3
0	0	0	0	0	CC(C)CCn1c([N-]S(=O)(=O)c2ccc(cc2)[N+](=O)[O-])c(c3nc4cccc4nc13)S(=O)(=O)c5ccc(C)cc5
0	0	0	0	0	CC(C)CCSC1=Nc2sc3COC(C)(C)Cc3c2C(=O)N1c4cccc4C
0	0	0	0	0	CC(C)CCSc1ncnc2c1sc3nc(c4COC(C)(C)Cc4c23)c5cccc5
0	0	0	0	0	CC(C)CCSc1nnc2N(CCC(C)C)C3=C(C(=O)n12)C4(CCCC4)Cc5cccc35
0	0	0	0	0	CC(C)CN(CC(C)C)S(=O)(=O)c1cc(ccc1N2CCCC2)N=Cc3cc

					c(Cl)cc3Cl
0	0	0	0	0	CC(C)CN1C(=Nc2ccccc2)SC(=Cc3ccc(OCc4ccccc4C#N)cc3)C1=O
0	0	0	0	0	CC(C)COC(=C1[C@H](NC(=S)N=C1C)c2ccc(Br)s2)[O-]
1	1	1	1	1	CC(C)COc1cc(nc2ccc(cc12)c3ccc(OCc4c(onc4c5c(Cl)cccc5Cl)C(C)C)cc3)C(=O)O
0	0	0	0	0	CC(C)CSc1nc(N2CCN(Cc3ccc(C)cc3C)CC2)c4c5CC(C)(C)OCc5sc4n1
0	0	0	0	0	CC(C)OC(=O)C1=C(C)N=C2CC(CC(=O)[C@H]2C1c3ccc4ccccc4c3)c5cccs5
0	0	0	0	0	CC(C)OC(=O)C1C([C@H]2C(=O)CC(CC2=NC1=C)c3ccc(Cl)cc3)c4ccc(F)cc4
0	0	0	0	0	CC(C)OC(=O)c1c2CCCCCCCCCc2sc1NC(=O)C3C4CCC(C4)C3C(=O)[O-]
0	1	1	1	1	CC(C)OC(=O)NCCC(C)C1CCC2C3C(O)CC4CC(O)CCC4(C)C3CCC12C
1	1	1	1	1	CC(C)Oc1cc(nc2ccc(cc12)c3ccc(OCc4c(onc4c5c(Cl)cccc5Cl)C(C)C)cc3)C(=O)O
0	0	0	0	0	CC(C)Oc1cccc1C2C(C(=O)OCc3ccccc3)C(=C)N=C4CC(CC(=O)[C@@H]24)c5ccccc5
0	1	1	1	1	CC(C1CC1C(=O)O)C2CCC3C4C(O)CC5CC(O)CCC5(C)C4CC C23C
0	0	0	0	0	CC(C1CCC2C3C(O)CC4CC(O)CCC4(C)C3CCC12C)C(=O)O
0	0	0	0	1	CC(CC(C)C(=O)O)C1CCC2C3C(O)C(C)C4CC(O)CCC4(C)C3C CC12C
0	0	0	1	1	CC(CC(O)C(=O)O)C1CCC2C3C(O)CC4CC(O)CCC4(C)C3CC C12C
0	0	0	0	0	CC(Cc1ccc(Br)cc1)NCc2ccc([O-])c(Br)c2
0	0	0	0	0	CC(CCC(=O)[O-])C1C(O)CC2C3C(O)CC4CC(O)CCC4(C)C3C CC12C
0	1	1	1	1	CC(CCC(=O)NCC(=O)O)C1CCC2C3C(O)CC4CC(O)CCC4(C) C3CCC12C
0	1	1	1	1	CC(CCC(=O)NCCS(=O)(=O)O)C1CCC2C3C(O)CC4CC(O)CC C4(C)C3CCC12C
1	1	1	1	1	CC(CCC(=O)O)C1CCC2C3C(O)C(C)C4CC(O)CCC4(C)C3CCC 12C
1	1	1	1	1	CC(CCC(=O)O)C1CCC2C3C(O)C(CC#C)C4CC(O)CCC4(C)C3 CCC12C
1	1	1	1	1	CC(CCC(=O)O)C1CCC2C3C(O)C(CC=C)C4CC(O)CCC4(C)C3 CCC12C
0	0	0	0	0	CC(CCC(=O)O)C1CCC2C3C(O)C(Cc4ccccc4)C5CC(O)CCC5(C)C3CCC12C
0	0	0	0	0	CC(CCC(=O)O)C1CCC2C3C(O)C(CCO)C4CC(O)CCC4(C)C3

					CCC12C
0	1	1	1	1	CC(CCC(=O)O)C1CCC2C3C(O)C(F)C4CC(O)CCC4(C)C3CCC12C
0	0	0	0	0	CC(CCC(=O)O)C1CCC2C3C(O)C(O)C4CC(O)CCC4(C)C3CCC12C
0	0	0	0	0	CC(CCC(=O)O)C1CCC2C3C(O)CC4CC(O)CCC4(C)C3CC(O)C12C
0	1	1	1	1	CC(CCC(=O)O)C1CCC2C3C(O)CC4CC(O)CCC4(C)C3CCC12C
0	1	1	1	1	CC(CCC(=O)O)C1CCC2C3C(O)CC4CCCC4(C)C3CCC12C
0	0	1	1	1	CC(CCCOS(=O)(=O)O)C1CCC2C3C(O)CC4CC(O)CCC4(C)C3CCC12C
0	1	1	1	1	CC(CCCS(=O)(=O)O)C1CCC2C3C(O)CC4CC(O)CCC4(C)C3CCC12C
0	0	1	1	1	CC(CCN)C1CCC2C3C(O)CC4CC(O)CCC4(C)C3CCC12C
0	1	1	1	1	CC(CCN1OC(=O)NC1=O)C2CCC3C4C(O)CC5CC(O)CCC5(C)C4CCC23C
1	1	1	1	1	CC(CCNC(=O)OC1C2CC3CC(CC1C3)C2)C4CCC5C6C(O)CC7CC(O)CCC7(C)C6CCC45C
0	1	1	1	1	CC(CCNC(=O)OC1CCCCC1)C2CCC3C4C(O)CC5CC(O)CCC5(C)C4CCC23C
1	1	1	1	1	CC(CCNC(=O)OCC=Cc1cccc1)C2CCC3C4C(O)CC5CC(O)CC5(C)C4CCC23C
0	0	1	1	1	CC(CCNC(=O)OCc1ccc(cc1)C(=O)O)C2CCC3C4C(O)CC5CC(O)CCC5(C)C4CCC23C
1	1	1	1	1	CC(CCNC(=O)OCc1cccc1)C2CCC3C4C(O)CC5CC(O)CCC5(C)C4CCC23C
1	1	1	1	1	CC(CCNC(=O)OCc1cccs1)C2CCC3C4C(O)CC5CC(O)CCC5(C)C4CCC23C
1	1	1	1	1	CC(N(C)c1ccc(cc1)C(=O)O)c2ccc(OCc3c(onc3c4c(Cl)cccc4Cl)C5CC5)nc2C(F)(F)F
0	0	0	0	0	CC(N=C([O-])C(=C1SC(Cc2ccc(C)c(C)c2)C(=O)N1c3ccc(C)c(C)c3)C#N)c4cccc4
0	0	0	0	0	CC(N1C(=C(C(=O)c2sc3cc(Cl)ccc3c2Cl)C(=C(C#N)C1=O)C)[O-])c4cccc4
0	0	0	0	0	CC(N1CC(CC1=O)c2nc3cccc3n2CCCCOc4ccc(cc4)C(C)(C)C)c5cccc5
0	0	0	0	0	CC(Nc1ccc(Br)cc1)(C(=O)[O-])c2ccc(F)c(Br)c2
0	0	0	0	0	CC(Nc1ccc(C)c(l)c1)c2ccc(F)cc2[O-]
1	1	1	1	1	CC(Nc1ccc(cc1)C(=O)O)c2ccc(OCc3c(onc3c4c(Cl)cccc4Cl)C5CC5)nc2C(F)(F)F
0	0	0	0	0	CC(Nc1ccc(cc1Br)[N+](=O)[O-])c2ccc(I)cc2
0	0	0	0	0	CC(Nc1ccc(F)c([N-]S(=O)(=O)C)c1)c2ccc(Br)s2

0	0	0	0	0	CC(Nc1cccc(I)c1)c2ccc3cccc3c2[O-]
1	1	1	1	1	CC(OC1ccc(cc1)C(=O)O)c2ccc(OCc3c(oc3c4c(Cl)cccc4Cl)C5CC5)nc2C(F)(F)F
1	1	1	1	1	CC(OC1cccc(c1)C(=O)O)c2ccc(OCc3c(oc3c4c(Cl)cccc4Cl)C5CC5)nc2C(F)(F)F
0	0	0	0	0	CC(Sc1ccc(Cl)cc1)C(=NN=Cc2c(C)n(c(C)c2Br)c3c(C)cccc3C)[O-]
0	0	0	0	0	CC(Sc1ccc(Cl)cc1)C(=NN=Cc2c(C)n(c(C)c2Br)c3ccc(C)c(C)c3)[O-]
0	0	0	0	0	CC(Sc1ccc(Cl)cc1)C(=NN=Cc2cc(C)n(c2C)c3cc(Cl)cc(Cl)c3)[O-]
0	0	0	0	0	CC=C(C)C(=O)OC1CC2C(C)(C)OC(=O)CC(OC(=O)C)C2(C)C3CC(OC(=O)C(C)C)C4(C)C(CC5OC45C13C)c6cocc6
0	0	0	0	0	CC1(C)C(C)(CCC1(C)C(=O)Nc2ccc(I)cc2)C(=O)[O-]
0	0	0	0	0	CC1(C)C(N([O-])C(=O)Nc2cccc3cccc23)N(C(=O)N1CC=C)c4cccc5cccc45
0	0	0	0	0	CC1(C)C[C@]2(CCO1)N(C(=[NH+]C2=Nc3cccc3)[S-])c4cc(Br)cc4
0	0	0	0	0	CC1(C)CC(=C([C@@H](C2=C([O-])CC(C)(C)CC2=O)c3ccc(Cl)cc3)C(=O)C1)O
0	0	0	0	0	CC1(C)CC(=C2[C@H](C=C(SCC(=O)c3cccc3)N=C2C1)C#N)c4ccc(Br)cc4)[O-]
0	0	0	0	0	CC1(C)CC(=O)C2C(C(C(=O)Nc3ccc(F)cc3F)C(=C)N=C2C1)c4cccc4Cl
0	0	0	0	0	CC1(C)CC(=O)C2C(C(C(=O)Nc3cccc(F)c3)C(=C)N=C2C1)c4cccc(Cl)c4
0	0	0	0	0	CC1(C)CC(=O)C2C(C(C(=O)OCCc3cccc3)C(=C)N=C2C1)c4cccc(F)c4
0	0	0	0	0	CC1(C)CC(=O)C2C(C(C(=O)OCCc3cccc3)C(=C)N=C2C1)c4cccc(F)c4
0	0	0	0	0	CC1(C)OC2OC(C(O)CN3C(=O)N(CC(O)C4OC5OC(C)(C)OC5C4OCC=C)c6cc(Cl)ccc36)C(OCC=C)C2O1
0	0	0	0	0	CC1(C)SC2C(NC(c3cccc3)(c4cccc4)c5cccc5)C(=O)N2C1c6nnnn[n-]6
0	0	0	0	0	CC1=C(C([C@H]2C(=O)CC(CC2=N1)c3cccc3)c4ccc([O-])c(c4)[N+](=O)[O-])C(=O)OC5CCCCC5
0	0	0	0	0	CC1=C(C(C(=C(N1)SCC(=O)c2ccc(Br)cc2)C#N)c3cccs3)C(=Nc4cccc4C)[O-]
0	0	0	0	0	CC1=C(C(N2C(=N1)SC(=Cc3ccc(C)cc3)C2=O)c4cccs4)C(=O)OCc5cccc5
0	0	0	0	0	CC1=C(Cc2ccc(Cl)cc2)C(=O)N(Cc3cc(C)ccc3C)C(=N1)N4CCCC4
0	0	0	0	0	CC1=C(Cc2cccc3cccc23)C(=O)N(Cc4ccc(C)cc4C)C(=N1)

					N5CCCCC5
0	0	0	0	0	CC1=C2CC(CCC2(C)CCC(OC(=O)C(=C)C3CCC4(C)CCCC(C)(O)C4C3)O1)C(=C)C(=O)[O-]
0	0	0	0	0	CC1=NC(=C)C(C(C1C(=O)OCCNC(=O)c2cccc2O)c3cccc(c3)[N+](=O)[O-])C(=O)OCCNC(=O)c4cccc4O
0	0	0	0	0	Cc1c(Br)c([O-])c(Br)c(O)c1C=NNC(=O)Cc2cccc3cccc23
0	0	0	0	0	Cc1c(C)n(c2cc(F)cc(F)c2)c3ncnc(Nc4cccc(Br)c4)c13
0	0	0	0	0	Cc1c(sc2N=CN(Cc3cccc(Oc4cccc4)c3)C(=O)c12)C(=O)OCCc5cccc5
0	0	0	0	0	Cc1cc(C)c([N-]S(=O)(=O)c2ccc(cc2)N=Cc3c4cccc4cc5cccc35)c(C)c1
0	0	0	0	0	Cc1cc(C)c([N-]S(=O)(=O)c2ccc(NC(=S)NC(c3cccc3)c4cccc4)cc2)c(C)c1
0	0	0	0	0	Cc1cc(C)c(C=Nc2ccc(cc2)S(=O)(=O)[N-]c3ccc(I)cc3)c(C)c1
0	0	0	0	0	Cc1cc(C)c(C2Nc3ccc(cc3C4C=CCC24)S(=O)(=O)N5CCCCC5)c(C)c1
0	0	0	0	0	Cc1cc(C)c(C2Nc3ccc(cc3C4C=CCC24)S(=O)(=O)N5CCCCC5)c(C)c1
0	0	0	0	0	Cc1cc(C)c(cc1C)C(=O)CSC2=Nc3c(sc4ncccc34)C(=O)N2Cc5cccc5
0	0	0	0	0	Cc1cc(C)c(NC(=O)CC2SC(=Nc3cccc3)N(CCCCN4C(=O)C(CC(=O)Nc5c(C)cc(C)cc5C)SC4=Nc6cccc6)C2=O)c(C)c1
0	0	0	0	0	Cc1cc(C=NNC(=O)c2ccc3cccc3c2)c(C)n1c4ccc(Br)cc4
0	0	0	0	0	Cc1cc(cc(C)c1C)N=C([O-])C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F
0	0	0	0	0	Cc1cc(cc(c1C)S(=O)(=O)[N-]c2ccc(O)c(Sc3nc4cccc4s3)c2)C(C)(C)C
0	0	0	0	0	Cc1cc(ccc1Br)c2oc(C=C(C#N)C(=Nc3ccc(Br)cc3)[O-])cc2
0	0	0	0	0	Cc1cc(ccc1Br)c2oc(C=C(C#N)C(=Nc3ccc(Br)cc3C)[O-])cc2
0	0	0	0	0	Cc1ccc([N-]S(=O)(=O)c2ccc(I)cc2)c(C)c1O
0	0	0	0	0	Cc1ccc([N-]S(=O)(=O)c2ccc(NN=Cc3c(F)cccc3Cl)c(c2)[N+](=O)[O-])c(C)c1
0	0	0	0	0	Cc1ccc(c(C)c1)c2ccc(nn2)N3CCN(CC3)C(=O)CC(c4cccc4)c5cccc5
0	0	0	0	0	Cc1ccc(c(C)c1)c2coc(n2)c3ccc([N-]S(=O)(=O)c4ccc(Br)cc4)cc3
0	0	0	0	0	Cc1ccc(c(C)c1)c2coc(n2)c3ccc([N-]S(=O)(=O)c4ccc(Br)cc4)cc3
0	0	0	0	0	Cc1ccc(C)c(c1)C(=O)C2=C([O-])C(=O)N(C2c3ccc(cc3)C(C)(C)c4nc5c(C)cc(C)cc5s4
0	0	0	0	0	Cc1ccc(C)c(c1)C2Nc3ccc(cc3C4C=CCC24)S(=O)(=O)[N-]c5ccc(Br)cc5

0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(C)c(c1)n2c(C)c(Br)c(C=NNC(=O)c3cc4ccccc4cc3[O-])c2C</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(C)c(CSc2nc(N3CCN(CC=C)CC3)c4c(C)c(C)sc4n2)c1</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(C)c(NS(=O)(=O)c2cc3C(=O)c4cc(cc(c4c3c(c2)[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-])S(=O)(=O)Nc5cc(C)ccc5C)c1</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(cc1)[C@@H]2[C@H]3C(=O)N=C(SCc4cccc(Cl)c4)N=C3N=C5CC(C)(C)CC(=C25)[O-]</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(cc1)C(=O)CC(N2CCN(CC2)C(CC(=O)c3ccc(C)cc3)c4ccccc4)c5ccccc5</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(cc1)C2=CC(=O)c3cc(NC(=O)c4ccc(Br)cc4)ccc3O2</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(cc1)c2c(C)sc3nc(CSc4nnc(c5ccc(Cl)cc5)n4C)nc([O-])c23</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(cc1)c2csc3c([O-])nc(nc23)N4CCCC(C4)C(=O)NC5CCCCCCC5</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(cc1)c2csc3N=C(SCC(=O)c4oc5ccccc5c4)N(CC=C)C(=O)c23</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(cc1)C2N(CCc3c2[nH]c4ccccc34)S(=O)(=O)c5cccc(F)c5</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(cc1)C2Nc3ccc(cc3C4C=CCC24)S(=O)(=O)[N-]c5cc(Cl)cc(Cl)c5</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(cc1)C2Nc3ccc(cc3C4C=CCC24)S(=O)(=O)[N-]c5cc(Cl)c(Cl)c5C(F)(F)F</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(cc1)c2nnc(SCC(=O)NN=Cc3c([O-])ccc4ccccc34)n2C5CCCCC5</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(cc1)N=C([O-])C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(cc1)n2c(SCC(=O)NN=Cc3cc(Br)ccc3[O-])nnc2c4cc(cc4)C(C)(C)C</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(cc1)N2CC(CC2=O)c3nc4ccccc4n3CCCCOc5ccc(cc5)C(C)(C)C</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(cc1)S(=O)(=O)[N-]c2ccccc2C(=O)N=C3Sc4ccc(Cl)c(C)c4N3CC#C</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(cc1)S(=O)(=O)N(CC(=O)NN=Cc2c([O-])ccc3ccccc23)c4ccc(Cl)cc4C</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(cc1)S(=O)(=O)Nc2ccc(NC(=O)C3C(C(=O)Nc4ccc(NS(=O)(=O)c5ccc(C)cc5)cc4)C3=C)cc2</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(cc1)S(=O)(=O)Nc2ccc(O)c(c2)C(=C([O-])c3ccccc3)C(=O)c4ccccc4</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(cc1)S(=O)(=O)NCC(=O)NN=Cc2cn(nc2c3ccc(Br)cc3)c4ccc(cc4)[N+](=O)[O-]</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(cc1)N=C([O-])C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F</chem>

0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(cc1C)N2C(=O)C(=CNc3ccccc3Br)c4ccccc4C2=O</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(F)cc1N=C([O-])C(F)(OC(F)(F)C(F)(OC(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(N=C2SC(=Cc3ccc(Sc4nc(C)cc(C)n4)c(c3)[N+](=O)[O-])C(=N2)[O-])c(C)c1</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(N2C(=O)C3Cc4c([nH]c5ccccc45)C(N3C2=S)c6cccc6)c(C)c1</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(N2C(=O)C3Cc4c([nH]c5ccccc45)C(N3C2=S)c6cccc6)c(C)c1</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(NC(=O)C(=Cc2ccc([O-])c(I)c2)C#N)cc1C</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(NC(=O)C(=Cc2oc(cc2)c3ccc(Br)cc3C)C#N)cc1</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(NC(c2ccc(Br)cc2)c3ccc4ccncc4c3[O-])cc1</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(NC2=C(Cl)C(=O)N(Cc3ccc(Br)cc3)C2=O)cc1Cl</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(NCc2ccc([O-])c(Br)c2)cc1I</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(OCCOc2ccc(cc2c3nc([O-])c4c5CCCCc5sc4n3)[N+](=O)[O-])cc1C</chem>
0	0	0	0	0	<chem>CC1CCc2c(C1)sc(NC(=O)CSc3nc([O-])c4c(csc4n3)c5ccc(C)cc5)c2C#N</chem>
0	0	0	0	0	<chem>CC1CCc2c(C1)sc3N=C(SCC(=O)OC4CCCC4)N(C(=O)c23)c5ccccc5</chem>
0	0	0	0	0	<chem>CC1CCc2c(C1)sc3nc(nc([O-])c23)C(=Cc4cc(C)c(O)c(C)c4)C#N</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc2N=C([O-])C(=NNC(=O)c3ccccc3Br)c2c1</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc2nc([n-]c2c1)C(=Cc3oc(cc3)c4ccc(cc4[N+](=O)[O-])C56CC7CC(CC(C7)C5)C6)C#N</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc2oc(nc2c1)c3ccc(C)c(c3)N=Cc4cc(ccc4[O-])N=Nc5ccc(Cl)cc5</chem>
0	0	0	0	0	<chem>CC1CCc2sc(cc2C1)C(=O)NN=C3C(=Nc4ccc(Br)cc4)[O-]</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccc(C)c1N=C2SC(=Cc3oc(cc3)c4ccccc4C(=O)[O-])C(=O)N2c5ccccc5</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1cccc(c1)C2N(Cc3ccccc3n4cccc24)C(=O)Nc5ccc(C)c(F)c5</chem>
0	0	0	0	0	<chem>CC1CCCC(C1)N(C)C(=C(C(=C(Cl)Cl)Cl)[N+](=O)[O-])Sc2cccc2</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1cccc(c1)N=C([O-])C(=Cc2oc(cc2)c3ccc(cc3[N+](=O)[O-])C45CC6CC(CC(C6)C4)C5)C#N</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1cccc(CC2SC(=NN=Cc3oc(cc3)c4ccc(Br)cc4)N(CC=C)C2=O)c1</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1cccc(NS(=O)(=O)c2cc(c3cccc4C(=O)Sc2c34)S(=O)(=O)[N-]c5cccc(C)c5C)c1C</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccccc1[C@@H]2N3[N-]C(=NC3=NC4=C2C(=O)CC(C)(C)C4)SCc5cccc6ccccc56</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Cc1ccccc1N2C(=Nc3ccccc3C2=O)SCc4nc([O-])c5c(n4)c6c</chem>

					cccc6CC57CCCCC7
0	0	0	0	0	Cc1cccc1N2CC(CC2=O)c3nc4cccc4n3CCCCOc5ccc(cc5)C(C)(C)C
0	0	0	1	1	Cc1cccc1n2nc(C)c3C(SCC(=O)Nc23)c4ccc(Oc5ccccc5)cc4
0	0	0	0	0	CC1CCCCN1C(=O)CSc2ncc(c3ccc(Cl)cc3)n2CCC4=CCCCC4
0	0	0	0	0	CC1CCCN(C1)C(=O)c2c3CCC(Cc3sc2NC(=O)c4cccs4)C(C)(C)C
0	0	0	0	0	Cc1noc([N-]S(=O)(=O)c2ccc(Nc3ncnc4sc5CC(CC5c34)C(C)(C)C)cc2)c1C
1	1	1	1	1	Cc1onc(c1COc2cc(C)c(C=Cc3cccc(c3)C(=O)O)c(C)c2)c4c(Cl)cccc4Cl
1	1	1	1	1	CC1SC(c2ccc(cc2)c3ccccc3)c4c(C)nn(c4NC1=O)c5ccccc5C
0	1	1	1	1	CC1SC(c2ccc(cc2)c3cccs3)c4c(C)nn(c4NC1=O)c5ccccc5C
0	1	1	1	1	CC1SC(c2ccc(cc2)c3ccsc3)c4c(C)nn(c4NC1=O)c5ccccc5C
0	1	1	1	1	CC1SC(c2ccc(cc2)c3cocc3)c4c(C)nn(c4NC1=O)c5ccccc5C
0	1	1	1	1	CC1SC(c2ccc(cc2)c3oc4cccc4c3)c5c(C)nn(c5NC1=O)c6ccccc6C
0	1	1	1	1	CC1SC(c2ccc(cc2)c3occc3)c4c(C)nn(c4NC1=O)c5ccccc5C
0	1	1	1	1	CC1SC(c2ccc(Oc3ccccc3)cc2)c4c(C)nn(c4NC1=O)c5ccc(C)cc5
0	1	1	1	1	CC1SC(c2ccc(Oc3ccccc3)cc2)c4c(C)nn(c4NC1=O)c5cccc(C)c5
0	1	1	1	1	CC1SC(c2ccc(Oc3ccccc3)cc2)c4c(C)nn(c4NC1=O)c5ccccc5Br
0	1	1	1	1	CC1SC(c2ccc(Oc3ccccc3)cc2)c4c(C)nn(c4NC1=O)c5ccccc5C
0	1	1	1	1	CC1SC(c2ccc(Oc3ccccc3)cc2)c4c(C)nn(c4NC1=O)c5ccccc5C(F)(F)F
0	1	1	1	1	CC1SC(c2ccc(Oc3ccccc3)cc2)c4c(C)nn(c4NC1=O)c5ccccc5Cl
0	1	1	1	1	CC1SC(c2ccc(Oc3ccccc3)cc2)c4c(C)nn(c4NC1=O)c5ccccc5F
0	1	1	1	1	CC1SC(c2ccc(Oc3ccccc3)cc2)c4c(C)nn(c4NC1=O)c5ccccc5I
0	0	0	0	0	CC1SC(c2ccc(Oc3ccccc3)cc2)c4cnn(c4NC1=O)c5ccccc5C
0	0	0	0	0	Cc1sc(c1C)c2nnc(SCc3csc(n3)c4ccc(Cl)cc4)n2CC=C
0	0	0	0	0	CCC(C)(C)C1CCc2oc3c4cccc4c([N-]S(=O)(=O)c5ccc(Br)c5)cc3c2C1
0	0	0	0	0	CCC(C)c1ccc(cc1)N2C(=NC(=O)C(=Cc3oc(cc3)c4ccc(Cl)c(Cl)c4)C2=O)[O-]

0	0	0	0	0	CCC(C)c1ccc(OCC(=O)N2CCN(CC2)C(c3ccccc3)c4ccccc4)c(Br)c1
0	0	0	0	0	CCC(C)c1ccc(OCCCCn2c(nc3ccccc23)C4CN(C5CCCC5)C(=O)C4)cc1
0	0	0	0	0	CCC(C)c1ccc(OCCCCn2c(nc3ccccc23)C4CN(C5CCCC5)C(=O)C4)cc1
0	0	0	0	0	CCC(C)c1ccc(OCCCN2c(nc3ccccc23)C4CN(C(=O)C4)c5ccc(C)c5C)cc1
0	0	0	0	0	CCC(C)c1ccc(OCCCN2c(nc3ccccc23)C4CN(C5CCCC5)C(=O)C4)cc1
0	0	0	0	0	CCC(C)c1ccc(OCCCOc2ccc(Cl)cc2C=C3SC(=S)N(CC)C3=O)cc1
0	0	0	0	0	CCC(C)c1ccc(OCCN2cc(C=C3SC(=S)N(Cc4ccccc4)C3=O)c5ccccc25)cc1
0	0	0	0	0	CCC(C)c1ccc(OCCOc2ccc(cc2OC)C3=NC(=O)C4=C5CCCCC5SC4=N3)cc1
0	0	0	0	0	CCC(C)c1ccccc1OC(CC)C(=O)Nc2ccc(cc2)S(=O)(=O)[N-]c3ccc(C)cc3C
0	0	0	0	0	CCC(C)c1ccccc1OC(CC)C(=O)Nc2ccc(cc2)S(=O)(=O)[N-]c3ccc(C)cc3C
1	1	1	1	1	CCC(C)c1onc(c1COc2ccc(C=Cc3ccccc3)C(=O)O)c(Cl)c2)c4c(Cl)cccc4Cl
0	0	0	0	0	CCC(C)OC(=O)[C@@H]1[C@H](C2=C(CC(CC2=O)c3ccc(OC)c(OC)c3)N=C1C)c4ccc(Cl)cc4
0	0	0	0	0	CCC(C)OC(=O)C1=C(C)N=C2CC(CC(=O)C2C1c3cc(OC)c(OC)c3Br)c4ccc(OC)c(OC)c4
0	0	0	0	0	CCC(C)OC(=O)C1=C(C)N=C2CC(CC(=O)C2C1c3ccc(Cl)cc3)c4ccc(OC)c(OC)c4
0	0	0	0	0	CCC(C)OC(=O)C1C([C@@H]2C(=O)CC(CC2=NC1=C)c3ccc(OC)cc3)c4cccc5ccccc45
0	0	0	0	0	CCC(C)OC(=O)C1C([C@@H]2C(=O)CC(CC2=NC1=C)c3ccc(cc3)c4ccc(F)cc4
0	1	1	1	1	CCC(CC)c1onc(c1COc2ccc(C=Cc3ccccc3)C(=O)O)c(Cl)c2)c4c(Cl)cccc4Cl
0	0	0	0	0	CCC(O)c1cccc(c1)S(=O)(=O)[N-]c2ccccc2I
0	0	0	0	0	CCC1(C)Cc2c(CO1)sc3N=C(SCCc4ccccc4)N(C(=O)c23)c5cc(OC)cc5
0	0	0	0	0	CCC1(C)Cc2c(CO1)sc3nc(SC)nc(SCC(=O)c4ccc(F)cc4)c23
0	0	0	0	0	CCc1c(C)sc2nc(SCc3ccc(F)cc3)nc(N4CCN(CCCc5ccccc5)C4)c12
0	0	0	1	1	CCC1C(O)C2C(CCC3(C)C2CC(O)C3C(C)CCC(=O)[O-])C4(C)CCC(O)CC14
0	0	0	0	0	CCC1C(O)C2C3CCC(C(C)CC(C)C(=O)O)C3(C)C(O)CC2C4(C

					)CCC(O)CC14
1	1	1	1	1	CCC1C(O)C2C3CCC(C(C)CCC(=O)O)C3(C)CCC2C4(C)CCC(O)CC14
1	1	1	1	1	CCC1C(O)C2C3CCC(C(C)CCNC(=O)OCC=Cc4cccc4)C3(C)CCC2C5(C)CCC(O)CC15
1	1	1	1	1	CCc1cc(nc2ccc(cc12)c3ccc(OCc4c(onc4c5c(Cl)cccc5Cl)C(C)C)cc3)C(=O)O
0	0	0	0	0	CCc1ccc(cc1)C(=O)C(C(C2C(=O)c3cccc3C2=O)c4cccc4)C(=O)c5cccc5
0	0	0	0	0	CCc1ccc(cc1)N2C(NC(=O)C(=C2[S-])C#N)c3ccc(Cl)cc3
0	0	0	0	0	CCc1ccc(CC2SC(=C(C#N)C(=NC(C)c3cccc3)[O-])N(C2=O)c4ccc(C)c(C)c4)cc1
0	0	0	0	0	CCc1cccc1N2CC(CC2=O)c3nc4cccc4n3CCCCO5cccc6cccc56
0	1	1	1	1	CCc1cccc1n2nc(C)c3C(SC(C)C(=O)Nc23)c4ccc(Oc5cccc5)cc4
0	1	1	1	1	CCc1nn(c2NC(=O)C(C)SC(c3ccc(Oc4cccc4)cc3)c12)c5cccc5C
1	1	1	1	1	CCc1onc(c1COc2cc(C)c(C=Cc3ccc(cc3)C(=O)O)c(C)c2)c4c(Cl)cccc4Cl
1	1	1	1	1	CCc1onc(c1COc2ccc(C=Cc3cccc(c3)C(=O)O)c(Cl)c2)c4c(F)cccc4C(F)(F)F
1	1	1	1	1	CCc1onc(c1COc2ccc(C=Cc3cccc(c3)C(=O)O)c(Cl)c2)c4ccc4OC(F)(F)F
1	1	1	1	1	CCc1onc(Cc2c(Cl)cccc2Cl)c1COc3ccc(C=Cc4cccc(c4)C(=O)O)c(Cl)c3
0	1	1	1	1	CCC1SC(c2ccc(Oc3cccc3)cc2)c4c(C)nn(c4NC1=O)c5cccc5C
0	0	0	0	0	CCCC(C)c1ccc([O-])c(c1)N=Cc2c(O)c(OC)cc(Br)c2Br
0	0	0	0	0	CCCC1=C(C(N2C(=N1)SC(=Cc3cc(Cl)ccc3[O-])C2=O)c4ccc(cc4)C(C)C)C(=O)OCC
0	0	0	0	0	CCCC1=NC(=S)N[C@H](C1=C([O-])OCC)c2ccc(cc2)C(C)(C)C
0	1	1	1	1	CCCC1C(O)C2C3CCC(C(C)CCC(=O)O)C3(C)CCC2C4(C)CCC(O)CC14
0	0	0	0	0	CCCc1ccc(cc1)C(NC(=O)CCn2c([S-])nnc2c3ccc(C)cc3)c4cccs4
0	1	1	1	1	CCCc1cccc1n2nc(C)c3C(SC(C)C(=O)Nc23)c4ccc(Oc5cccc5)cc4
0	0	0	0	0	CCCC1SC(c2ccc(Oc3cccc3)cc2)c4c(C)nn(c4NC1=O)c5cccc5C
0	0	0	0	0	CCCC(CC)C1C2C(ON1c3cccc3)C(=O)N(C2=O)c4ccc(Br)cc4

0	0	0	0	0	CCCCC1=CC(=O)Oc2c(C)c3OCN(CC(c4cccc4)c5cccc5)Cc3cc12
0	0	0	0	0	CCCCc1ccc(cc1)N2C(=O)CSC23C(=O)N4c5c(cc(OCC)cc35)C(=CC4(C)C)C
0	0	0	0	0	CCCCc1ccc(cc1)N2C(=S)N=C([O-])C(=Cc3cn(Cc4ccc(F)cc4)c5cccc35)C2=O
0	0	0	0	0	CCCCc1ccc(cc1)N2C(NC(=O)C(=C2[S-])C#N)c3oc(cc3)c4cc(Cl)cc4Cl
0	0	0	0	0	CCCCc1ccc(cc1)N2CC(CC2=O)c3nc4cccc4n3CCCCOc5ccc(C)c5C
0	0	0	0	0	CCCCC1SC(=NN=Cc2ccc(C)cc2)N(Cc3cccc4cccc34)C1=O
0	0	0	0	0	CCCCC1SC(=NN=Cc2ccc(C)cc2)N(Cc3cccc4cccc34)C1=O
0	0	0	0	0	CCCCCc1ccc(cc1)S(=O)(=O)N=C2SCCN2S(=O)(=O)c3ccc(CCCC)cc3
0	0	0	0	0	CCCCC1CCN2C(C3CC=C[C@H]3c4cc(cc1c24)C(=O)[O-])c5ccc(Br)cc5
0	0	0	0	0	CCCCCc1ccc(OCCOc2ccc(C=C3SC(=S)N(CC)C3=O)cc2)cc1
0	0	0	0	0	CCCCCCCSc1nnc2N(Cc3cccc3)C(=O)c4c5CC(OCc5sc4n12)C(C)C
0	0	0	0	0	CCCCCN(C(C(=O)NC(C)(C)C)c1cc2cccc2c3cccc13)C(=O)c4cccc(O)c4[O-]
0	0	0	0	0	CCCCCN(C(C(=O)NC(C)(C)C)c1ccc(cc1)C(F)(F)F)C(=O)c2cc(ccc2[O-])[N+](=O)[O-]
0	0	0	0	0	CCCCCN(C(C(=O)NC(C)(C)CC(C)(C)C)c1ccc(O)cc1)C(=O)c2cccc2[O-]
0	0	0	0	0	CCCCCOC(=O)c1ccc(NC(c2cccs2)c3ccc4ccc(C)nc4c3[O-])cc1
0	0	0	0	0	CCCCCOc1ccc(cc1)C2N(C(=O)C3=C2C(=O)c4cccc4O3)c5ccc(C)c(C)c5
0	0	0	0	0	CCCCCOc1ccc(cc1)C2N(C3CCc4cccc34)C(=O)CN(C5CCCC5)C2=O
0	0	0	0	0	CCCCCOc1ccc(cc1)C2N(Cc3ccc(F)cc3)C(=O)C4=C2C(=O)c5cc(C)ccc5O4
0	0	0	0	0	CCCCCOc1ccc(cc1)C2N(Cc3ccc(OC)cc3)C(=O)C4=C2C(=O)c5cc(C)ccc5O4
0	0	0	0	0	CCCCCOc1ccc(cc1)C2N(CC3CCCO3)C(=O)C4=C2C(=O)c5c(C)cc(C)cc5O4
0	0	0	0	0	CCCCCOc1ccc(cc1)C2N(Cc3occc3)C(=O)C4=C2C(=O)c5c(C)cc(C)cc5O4
0	0	0	0	0	CCCCCOc1ccc(cc1)C2N(CCCCC)C(=O)c3n[nH]c(c23)c4c(C)cc(C)cc4[O-]

0	0	0	0	0	CCCCCOC1ccc(cc1)C2N(CCCOC(C)C)C(=O)C3=C2C(=O)c4c(C)cc(C)cc4O3
0	0	0	0	0	CCCCCOC1ccc(cc1)C2N(CCCOC(C)C)C(=O)C3=C2C(=O)c4cc(C)ccc4O3
0	0	0	0	0	CCCCCOC1ccc(cc1OC)C2N(C(=O)C3=C2C(=O)c4cc(C)ccc4O3)c5ccc(C)cc5
0	0	0	0	0	CCCCCOC1ccc(cc1OC)C2N(C(=O)C3=C2C(=O)c4cccc4O3)c5ccc(CC)cc5
0	0	0	0	0	CCCCCN1C(=O)N(C(N([O-])C(=O)Nc2ccc(Cl)cc2)C1(C)C)c3ccc(Cl)cc3
0	0	0	0	0	CCCCCN1C(C2=C(Oc3c(C)cc(C)cc3C2=O)C1=O)c4ccc(OC(C)(C)c(OCC)c4
0	0	0	0	0	CCCCCN1C(c2ccc(OCC=C)cc2)c3c(n[nH]c3C1=O)c4cc(Cl)c(C)cc4[O-]
0	0	0	0	0	CCCCCOC(=O)C(C)SC1=Nc2sc3CC(C)CCc3c2C(=O)N1c4ccc4
0	0	0	0	0	CCCCCOC(=O)C1C([C@@H]2C(=O)CC(C)(C)CC2=NC1=C)c3ccc(OC)c(Br)c3
0	0	0	0	0	CCCCCOC(=O)C1C([C@@H]2C(=O)CC(C)(C)CC2=NC1=C)c3ccccc3Br
0	0	0	0	0	CCCCCOC(=O)c1c(C)oc2c3cccc3c([N-]S(=O)(=O)c4cc(C)ccc4C)cc12
0	0	0	0	0	CCCCCOC(=O)c1c(C)oc2c3cccc3c([N-]S(=O)(=O)c4ccc(C)cc4)cc12
0	0	0	0	0	CCCCCOC(=O)c1c(C)oc2c3cccc3c([N-]S(=O)(=O)c4ccc(C)cc4C)cc12
0	0	0	0	0	CCCCCOC(=O)CSc1nnc2c3c4CCCCc4sc3nc(SCc5ccccc5)n12
0	0	0	0	0	CCCCCOC1ccc(cc1)[C@@H]2N(Cc3ccccc3)C(=O)C(=C2C(=O)c4cc(C)ccc4C)[O-]
0	0	0	0	0	CCCCCOC1ccc(cc1)C(=O)N=C2Sc3cc(Br)ccc3N2CC(=O)OC
0	0	0	0	0	CCCCCOC1ccc(cc1)C2N(CC=C)C(=O)c3[nH]nc(c4cc(Cl)c(C)cc4[O-])c23
0	0	0	0	0	CCCCCOC1ccc(cc1)C2N(Cc3ccc(C)cc3)C(=O)C4=C2C(=O)c5cc(Cl)ccc5O4
0	0	0	0	0	CCCCCOC1ccc(cc1)C2N(Cc3ccc(OC)cc3)C(=O)C4=C2C(=O)c5cc(C)ccc5O4
0	0	0	0	0	CCCCCOC1ccc(cc1)C2N(Cc3ccccc3)C(=O)C4=C2C(=O)c5cc(Cl)ccc5O4
0	0	0	0	0	CCCCCOC1ccc(cc1OC)C2[C@@H]3C(=NN=C3c4cc(C)cc(C)c4[O-])C(=O)N2CCCC
0	0	0	0	0	CCCCCOC1ccc(cc1OC)C2N(C(=O)C3=C2C(=O)c4cc(C)ccc4O3)c5cccc(Cl)c5

0	0	0	0	0	CCCCCOc1ccc(cc1OC)C2N(Cc3ccc(Cl)cc3)C(=O)C4=C2C(=O)c5ccccc5O4
0	0	0	0	0	CCCCCOc1ccc(cc1OC)C2N(CCCC)C(=O)c3[nH]nc(c4cc(Cl)c(C)cc4[O-])c23
0	0	0	0	0	CCCCCOc1ccc(cc1OC)C2N(CCCC)C(=O)c3n[nH]c(c4cc(Cl)ccc4[O-])c23
0	0	0	0	0	CCCCCOc1cccc(c1)C2[C@@H]3C(=NN=C3c4cc(C)cc(C)c4[O-])C(=O)N2Cc5ccc(C)cc5
0	0	0	0	0	CCCCCOc1cccc(c1)C2[C@H]3C(=NN=C3c4cc(C)cc(C)c4[O-])C(=O)N2Cc5ccc(C)cc5
0	0	0	0	0	CCCCCOc1cccc(c1)C2[C@H]3C(=NN=C3c4cc(C)cc(C)c4[O-])C(=O)N2CCCC
0	0	0	0	0	CCCCCOc1cccc(c1)C2N(C(=O)C3=C2C(=O)c4cc(Cl)ccc4O3)c5ccc(F)cc5
0	0	0	0	0	CCCCCOc1cccc(c1)C2N(Cc3ccc(C)cc3)C(=O)C4=C2C(=O)c5cc(C)c(C)cc5O4
0	0	0	0	0	CCCCN(C)S(=O)(=O)c1ccc(cc1)C(=O)N=C2Sc3cc(CCCC)cc3N2C
0	0	0	0	0	CCCCN(CC)S(=O)(=O)c1ccc(cc1)C(=O)N=C2Sc3cc(ccc3N2CC#C)C(C)C
0	0	0	0	0	CCCCN(CC)S(=O)(=O)c1ccc(cc1)C(=O)N=C2Sc3cc(CCCC)c3N2C
0	0	0	0	0	CCCCN(CC)S(=O)(=O)c1ccc(cc1)C(=O)N=C2Sc3cc(F)ccc3N2CCC
0	0	0	0	0	CCCCN(CCCC)C(=O)CSC1=NC2=C(C(=O)N1CC(=C)C)C3(CCCC3)Cc4ccccc24
0	0	0	0	0	CCCCN(CCCC)S(=O)(=O)c1ccc(cc1)C(=O)N=C2Sc3cc(C)cc(C)c3N2CC#C
0	0	0	0	0	CCCCN(CCCC)S(=O)(=O)c1ccc(cc1)C(=O)N=C2Sc3cc(CC)c3N2CCC
0	0	0	0	0	CCCCN(CCCC)S(=O)(=O)c1ccc(cc1)C(=O)N=C2Sc3cc(Cl)cc3N2C
0	0	0	0	0	CCCCN(CCCC)S(=O)(=O)c1ccc(cc1)C(=O)N=C2Sc3ccc(C)c(C)c3N2CC
0	0	0	0	0	CCCCN(CCCC)S(=O)(=O)c1ccc(cc1)C(=O)N=C2Sc3ccccc3N2CCC
0	0	0	0	0	CCCCN1C([C@H]2C(=NN=C2c3cc(C)cc(C)c3[O-])C1=O)c4ccc(OCCC(C)C)c(OCC)c4
0	0	0	0	0	CCCCN1C(=C(C(=NC1=[SH+]))[O-])C2=Nc3ccccc3SC(C2)c4ccc(cc4)C(C)C)[O-]
0	0	0	0	0	CCCCN1C(=C(C(=NC1=[SH+]))[O-])C2=Nc3ccccc3SC(C2)c4ccc(cc4)C(C)C)[O-]
0	0	0	0	0	CCCCN1C(C2=C(Oc3cc(C)c(Cl)cc3C2=O)C1=O)c4ccc(OCC(C)C)c(OC)c4

0	0	0	0	0	CCCCN1CCN(CC1)c2nc(SCc3ccc(Cl)cc3)nc4sc5COC(C)(C)Cc5c24
0	0	0	0	0	CCCCNC(=C(C#N)C(=O)c1cc(Br)ccc1l)[O-]
0	0	0	0	0	CCCCOC(=O)[C@H]1[C@H](C2=C(CC(CC2=O)c3ccc(OC)c(OC)c3)N=C1C)c4cccc(C)c4
0	0	0	0	0	CCCCOC(=O)C1=C(C)N=C2CC(CC(=O)C2C1c3ccc(OCCC)c(OC)c3)c4cccc4
0	0	0	0	0	CCCCOC(=O)C1C([C@@H]2C(=O)CC(CC2=NC1=C)c3cccc3)c4ccc(OCCC)c(OC)c4
0	0	0	0	0	CCCCOC(=O)c1ccc(cc1)N2C(C3=C(Oc4ccc(F)cc4C3=O)C2=O)c5ccc(cc5)C(C)C
0	0	0	0	0	CCCCOc1ccc(Br)cc1C(=O)Oc2ccc(cc2)C(=O)OCCOc3cccc3
0	0	0	0	0	CCCCOc1ccc(cc1)C(=O)N(CCCCN2C(=O)c3cccc3C2=O)c4ccc(C)cc4
0	0	0	0	0	CCCCOc1ccc(cc1)C2N(Cc3cccc3)C(=O)C4=C2C(=O)c5cc(Br)ccc5O4
0	0	0	0	0	CCCCOc1ccc(cc1)N2C(=O)C3C4c5cccc5C(CC)(C3C2=O)c6cccc46
0	0	0	0	0	CCCCSC1=Nc2sc3COC(C)(CC)Cc3c2C(=O)N1c4ccc(C)cc4
0	0	0	0	0	CCCCSc1nc(N2CCN(CCc3cccc3)CC2)c4c5CCCCc5sc4n1
0	0	0	0	0	CCCCSc1nc(N2CCN(CCc3cccc3)CC2)c4c(C)c(C)sc4n1
0	0	0	0	0	CCCN1C(=Nc2ccc(OCC)cc2)SC(=Cc3cccc3OCc4cccc4C#N)C1=O
1	1	1	1	1	CCCOc1cc(nc2ccc(cc12)c3ccc(OCc4c(onc4c5c(Cl)cccc5Cl)C(C)C)cc3)C(=O)O
0	0	0	0	0	CCCOc1ccc(C=C2SC3=NC(=C(C(N3C2=O)c4ccc(SC)cc4)C(=O)OCC)C)cc1
0	0	0	0	0	CCCOc1ccc(cc1)C2Oc3ccc(Br)cc3C4CC(=NN24)c5ccc(OC C=C)cc5
0	0	0	0	0	CCCOc1ccc(CN2C(=Nc3c(sc4ncccc34)C2=O)SCc5ccc(C)cc5)cc1
0	0	0	0	0	CCCS1nc(N2CCN(Cc3ccc(Cl)cc3)CC2)c4c(CC)c(C)sc4n1
0	0	0	0	0	CCCS1nc2sc3COC(C)(CC)Cc3c2c4nnc(SCCc5cccc5)n14
0	0	0	0	0	CCCS1nnc2N(Cc3cccc3)C(=O)C4=C(c5cccc5CC4(CC)C C)n12
0	0	0	0	0	CCN(C(=O)CSC1=Nc2cccc2C(=O)N1c3ccc(C)cc3)c4cccc5cccc45
0	0	0	0	0	CCN(CC)c1ccc(C=C2Oc3c(C)c4OCN(Cc5ccc(Cl)cc5)Cc4cc3C2=O)cc1
0	0	0	0	0	CCN(CC)c1ccc(cc1)[C@H]2C3=C(CC(C)(C)CC3=O)Nc4nc(SCC(C)C)nc([O-])c24
1	1	1	1	1	CCN(Cc1ccc(cc1)C(=O)O)c2ccc(OCc3c(onc3c4c(Cl)cccc4

					Cl)C5CC5)nc2C(F)(F)F
0	0	0	0	0	CCN=C1SC(=Cc2cc(Br)ccc2OCc3cccc(F)c3)C(=O)N1CC
0	0	0	0	0	CCN1C(=NC(=O)c2ccc(cc2)S(=O)(=O)N(CC(C)C)CC(C)C)Sc3cccc(C)c13
0	0	0	0	0	CCn1c(N=Cc2cc(C)ccc2O)nc3cc(Br)c(Br)cc13
0	0	0	0	0	CCN1CC2(COC)C(O)CC(OC)C34C5CC6(O)C(OC)C(O)C(OC(=O)C)(C(C(OC)C23)C14)C5C6OC(=O)c7cccc7
0	0	0	0	0	CCN1CCN(CC1)c2nc(SCc3ccc(C)cc3C)nc4sc(C)c(C)c24
0	0	0	0	0	CCn1nc(C)c(C[N-]C(=NC(=O)c2ccc(cc2)C(C)(C)Nc3ccc(c3)C(C)C)c1C
0	0	0	0	0	CCNC(C)c1cnc(s1)c2cc(Br)c([O-])c(OC)c2
0	0	0	0	0	CCOC(=O)[C@H]1[C@@H](C(=C(C)N=C1C)C(=O)OCC[NH+])2CCN(CC2)S(=O)(=O)c3cccc3)c4cccc(c4)[N+](=O)[O-]
0	0	0	0	0	CCOC(=O)[C@H]1[C@@H](C2=C(N=C1C)c3cccc3C2=O)c4cccc4OCc5cccc5F
0	0	0	0	0	CCOC(=O)C(C=C1N(C)c2cccc2C1(C)C)(c3c(C)nn(c3[O-])c4cccc4)C(F)(F)F
0	0	0	0	0	CCOC(=O)C(Cc1ccc(O)cc1)NC(=O)CCC(=O)OCC(=O)C2(O)CCC3C4CCC5=CC(=O)CCC5(C)C4C(=O)CC23C
0	0	0	0	0	CCOC(=O)C1=C(C)N(C(=NC1c2cccc2)SCc3ccc(cc3)C#N)c4cccc4
0	0	0	0	0	CCOC(=O)C1=C(C)N=C2SC(=Cc3cc(Br)c(O)c(OCC)c3)C(=O)N2[C@@H]1c4cccc4OCC
0	0	0	0	0	CCOC(=O)C1=C(C)N=C2SC(=Cc3cc(Br)c(OCC#N)c(OC)c3)C(=O)N2C1c4ccc(F)cc4
0	0	0	0	0	CCOC(=O)C1=C(C)N=C2SC(=Cc3ccc(F)cc3)C(=O)N2C1c4ccc(cc4)C(C)C
0	0	0	0	0	CCOC(=O)C1=C(C)N=C2SC(=Cc3ccc(OCC=C)cc3)C(=O)N2C1c4ccc(F)cc4
0	0	0	0	0	CCOC(=O)C1=C(C)N=C2SC(=Cc3cccc3OCC=C)C(=O)N2C1c4ccc(SC)cc4
0	0	0	0	0	CCOC(=O)C1=C(C)N=C2SC(=Cc3oc(cc3)c4cccc4[N+](=O)[O-])C(=O)N2C1c5ccc(OC(=O)C)cc5
0	0	0	0	0	CCOC(=O)C1=C(N)N2C(=O)C(=Cc3ccc(cc3)C(=O)OC)SC2=C(C1c4ccc(cc4)C(=O)OC)C(=O)OC
0	0	0	0	0	CCOC(=O)C1=C(Oc2ccc3cccc3c2C1c4cccc4)N=C([O-])COc5c(C)cccc5C
0	0	0	0	0	CCOC(=O)C1=C(Oc2ccc3cccc3c2C1c4cccc4)N=C([O-])COc5c(C)cccc5C
0	0	0	0	0	CCOC(=O)C1=C(Oc2ccc3cccc3c2C1c4cccc4)N=C([O-])COc5cccc5C
0	0	0	0	0	CCOC(=O)C1=C(SC(=C2C(=S)C(C)(C)N(C(=O)c3ccc(cc3)[N+](=O)[O-])c4ccc(C)cc24)S1)C(=O)OCC

0	0	0	0	0	CCOC(=O)C1=CC2=C(N=C3N(C=CC=C3C)C2=O)N(C(C)C)C1=NC(=O)c4cc(OCC)c(OCC)c(OCC)c4
0	0	0	0	0	CCOC(=O)C1=NN(C=C(c2ccccc2)P1(=O)SCC)c3ccc(Br)cc3
0	0	0	0	0	CCOC(=O)C1=NN(c2ccccc2OC)C3(SC(c4ccccc4)c5ccccc35)S1
0	0	0	0	0	CCOC(=O)C1C([C@@H]2C(=O)CC(CC2=NC1=C)c3ccc(OC)c(OC)c3)c4cc(OC)c(OC)cc4Br
0	0	0	0	0	CCOC(=O)c1c(NC(=O)CSC2=Nc3sc4CCCCc4c3C(=O)N2CC=C)sc1c5ccc(C)cc5
0	0	0	0	0	CCOC(=O)c1c(oc2c3ccccc3c([N-]S(=O)(=O)c4ccc5ccccc5c4)cc12)c6ccccc6
0	0	0	0	0	CCOC(=O)c1c2CCC(Cc2sc1NC(=O)C3C4CCC(C3C(=O)[O-])C4=C(C)C)C(C)C
0	0	0	0	0	CCOC(=O)c1c2CCCCCCCCc2sc1NC(=O)C3C4CCC(C3C(=O)[O-])C4=C(C)C
0	0	0	0	0	CCOC(=O)c1cc(C(=O)c2cccc3ccccc23)n4cnc(cc14)c5cccc6ccccc56
0	0	0	0	0	CCOC(=O)c1ccc(CSC2=Nc3sc(C)c(c4ccccc4)c3C(=O)N2c5ccccc5)cc1
0	0	0	0	0	CCOC(=O)Cc1csc(n1)N2N=C3[C@@H](CCCC3=Cc4ccc(F)cc4)C2c5ccc(F)cc5
0	0	0	0	0	CCOC(=O)CN1C(=NC(=O)CCSc2ccccc2)Sc3c(Cl)ccc(Cl)c13
0	0	0	0	0	CCOC(=O)COc1ccc(cc1OC)C2[C@@H](C(=O)OCC)C(=[NH+])C3SC(=Cc4ccc(OCC)c5ccccc45)C(=O)N23)C
0	1	1	1	1	CCOC(=O)NCCC(C)C1CCC2C3C(O)CC4CC(O)CCC4(C)C3CC12C
0	0	0	0	0	CCOc1c(Br)cc(C=C2SC(=NCc3cc(C)cc(C)c3)N=C2[O-])cc1OC
0	0	0	0	0	CCOc1c(l)cc(C=C2SC(=NC2=O)[N-]c3cc(C)cc(C)c3)cc1OC
0	0	0	0	0	CCOc1cc(C=C2SC(=NC2=O)[N-]c3cc(C)cc(C)c3)ccc1OCc4ccc(cc4)[N+](=O)[O-]
0	0	0	0	0	CCOc1cc(C=C2SC(=Nc3cc(Cl)ccc3C)NC2=O)cc(l)c1[O-]
0	0	0	0	0	CCOc1cc(C=C2SC(=NCC)N(CC)C2=O)cc(Br)c1OCc3ccc(F)c3
0	0	0	0	0	CCOc1cc(C=C2SC(=NCc3cc(C)cc(C)c3)N=C2[O-])ccc1OCc4ccc(cc4)[N+](=O)[O-]
0	0	0	0	0	CCOc1cc(cc(Br)c1[O-])[C@H]2C(=C(C)NC3=C2C(=O)CC(C3)c4ccc(Cl)cc4)C(=O)OCCOC
0	0	0	0	0	CCOc1cc(cc(Br)c1O)C2C(C(=O)OC(C)CC)C(=C)N=C3CC(CC(=O)[C@@H]23)c4ccc(OC)cc4
0	0	0	0	0	CCOc1cc(ccc1OCCC(C)C)C2N(C(=O)C3=C2C(=O)c4cc(C)c(C)cc4O3)c5ccc(C)cc5

1	1	1	1	1	CCOc1cc(nc2ccc(cc12)c3ccc(OCc4c(onc4c5c(Cl)cccc5Cl)C(C)C)cc3)C(=O)O
0	0	0	0	0	CCOc1cc2CC(=O)N(C(c3ccc(Cl)cc3)c2cc1OCC)c4ccc(Cl)cc4
0	0	0	0	0	CCOc1cc2CC(=O)N(C(c3cccc(C)c3)c2cc1OCC)c4ccc(CC)cc4
0	0	0	0	0	CCOc1ccc(cc1)N2C(=O)C3C(C4c5ccccc5C3c6ccc(cc46)C(C)CC)C2=O
0	0	0	0	0	CCOc1ccc(cc1)N2C(=O)C3C(CCC(C3C2=O)c4cccc4)c5cccc5
0	0	0	0	0	CCOc1ccc(cc1)N2C(=O)c3c4CCCCc4sc3N=C2Sc5ccccc5C
0	0	0	0	0	CCOc1ccc(cc1)n2c(SCc3ccc(cc3)C(C)(C)C)nnc2c4ccc(OC)cc4
0	1	1	1	1	CCOc1cccc(c1)c2ccc(cc2)C3SC(C)C(=O)Nc4c3c(C)nn4c5ccccc5C
1	1	1	1	1	CCOc1cccc(c1)c2ccc(CN(C(=O)C(C)C)c3cccc(C=CC(=O)OC)c3)cc2
1	1	1	1	1	CCOc1cccc(c1)c2ccc(CN(C(=O)C3CCCCC3)c4cccc(C=CC(=O)OC)c4)cc2
0	0	0	0	0	CCOc1cccc1N2C(=O)N=C([O-])[C@@](CN3CC4CC(C3)C5=CC=CC(=O)N5C4)(Cc6ccc(OC)cc6OC)C2=O
0	0	0	0	0	CCOc1cccc1N2C(=O)NC(=O)C(C[NH+])3CC4CC(C3)C5=CC=CC(=O)N5C4)(Cc6ccc(OC)cc6OC)C2=O
0	0	0	0	0	CCOCC=Cc1ccc(CN(C(=O)C2CCCC2)c3cccc(C=CC(=O)OC)c3)cc1
1	1	1	1	1	CCOCC=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=CC(=O)OC(C)(C)C)cc2)C(=O)C3CCCCC3
0	0	0	0	0	CCOCCN1C(=NC(=O)CCSc2ccc(F)cc2)Sc3cc(Br)ccc13
0	0	0	0	0	CCSC1=Nc2sc3CC(CCc3c2C(=O)N1c4ccc(OC)cc4)C(C)(C)C
0	0	0	0	0	CCSc1nc2sc3CCCCc3c2c4nnc(SCc5ccc(OC(C)C)cc5)n14
0	0	0	0	0	CCSCCOC(=O)[C@H]1[C@H](C2=C(CC(CC2=O)c3ccc(OC)c(OC)c3)N=C1C)c4cc(Br)c(O)c(OC)c4
0	0	0	0	0	CCSCCOC(=O)C1C([C@@H]2C(=O)CC(CC2=NC1=C)c3ccc(OC)c(OC)c3)c4cc(Br)c(O)c(OC)c4
0	0	0	0	0	ClC1(Cl)CC1C(Sc2nnc(c3ccncc3)n2C4CCCCC4)c5ccccc5
0	0	0	0	0	Clc1ccc(C2=NNC(=S)N2N=CC(=Cc3ccccc3)Br)c(Cl)c1
0	0	0	0	0	Clc1ccc(C2C(C(=O)OCCc3ccccc3)C(=C)N=C4CCCC(=O)[C@H]24)c(Cl)c1
0	0	0	0	0	Clc1ccc(C2Nc3ccc(cc3[C@H]4C=CCC24)S(=O)(=O)[N-]c5ccccc5Cl)c(Cl)c1
0	0	0	0	0	Clc1ccc(cc1)C(OC(=O)c2c3CCCCc3nc4ccccc24)C(=O)c5ccccc5

0	0	0	0	0	Clc1ccc(cc1)N(CCCCN2C(=O)c3ccccc3C2=O)C(=O)c4ccc(Br)cc4
0	0	0	0	0	Clc1ccc(cc1)S(=O)(=O)[N-]c2nc3ccccc3nc2Nc4ccc(Cl)cc4Cl
0	0	0	0	0	Clc1ccc(cc1)S(=O)(=O)[N-]c2nc3ccccc3nc2Nc4ccc(Nc5ccccc5)cc4
0	0	0	0	0	Clc1ccc(cc1)S(=O)(=O)CCCC(=O)N=C2Sc3c(Cl)ccc(Cl)c3N2CC=C
0	0	0	0	0	Clc1ccc(Cl)c(Nc2c(cnc3ccc(Cl)cc23)C(=O)N4CCCC4)c1
0	0	0	0	0	Clc1ccc(CN2C(=O)c3sccc3n4c(SCc5ccc(C=C)cc5)nnc24)c1
0	0	0	0	0	Clc1ccc(CSc2nc(N3CCN(CC=C)CC3)c4c5CCCC5sc4n2)cc1
0	0	0	0	0	Clc1ccc(CSc2nnc(SCc3ccc(Cl)c(Cl)c3)nn2)cc1Cl
0	0	0	0	0	Clc1ccc(NC(=O)N2Cc3ccccc3n4cccc4C2c5cccs5)cc1
0	0	0	0	0	Clc1ccc(NC(=O)N2CCN(CC2)C3c4ccccc4c5ccccc35)cc1Cl
0	0	0	0	0	Clc1ccc(Oc2ccc(NC(=O)c3cc4ccccc4cc3[N-]S(=O)(=O)c5ccc(Cl)cc5)cc2Cl)cc1
0	0	0	0	0	Clc1ccc(OCCCN2C(=O)c3ccccc3N=C2c4ccc(Cl)cc4)cc1
0	0	0	0	0	Clc1ccc(SCc2c(oc3ccccc23)C(=O)OCc4csc(n4)c5ccccc5)c1
0	0	0	0	0	Clc1ccc2NC(=O)C(=Cc3sc(nc3c4cccs4)N5CCCCC5)c2c1
0	0	0	0	0	Clc1cccc(c1)N=C2C(=O)N(CN3CCC(Cc4ccccc4)CC3)c5cccc25
0	0	0	0	0	Clc1cccc1c2nc(CSc3nnc(CC45CC6CC(CC(C6)C4)C5)n3CC=C)cs2
0	0	0	0	0	Clc1cccc1CN2C(=O)C(=NN(Cc3ccccc3)c4ccccc4)c5ccccc25
0	0	0	0	0	Clc1cccc1CSc2nnc(SCc3ccccc3Cl)n2N=Cc4ccccc4
0	0	0	0	0	CN(C)c1ccc(C=Nc2ccc(C=Cc3ccc(cc3)N=Cc4ccc(cc4)N(C)C)cc2)cc1
0	0	0	0	0	CN(C)c1ccc(cc1)c2ccc(CN(C(=O)C3CCCCC3)c4cccc(C=CC(=O)O)c4)cc2
0	0	0	0	0	CN(C)c1ccc(NC(=O)C(N(Cc2ccccc2C)C(=O)CN3C(=O)C(=O)c4ccccc34)c5c[nH]c6ccccc56)cc1
0	0	0	0	0	CN(C1CCCCC1)S(=O)(=O)c2ccc3NC(C4CC=CC4c3c2)c5ccc(C)s5
1	1	1	1	1	CN(Cc1ccc(cc1)C(=O)NCCS(=O)(=O)O)c2ccc(OCc3c(onc3c4c(Cl)cccc4Cl)C5CC5)nc2C(F)(F)F
1	1	1	1	1	CN(Cc1ccc(cc1)C(=O)O)c2ccc(OCc3c(onc3c4c(Cl)cccc4Cl)C5CC5)nc2C(F)(F)F
1	1	1	1	1	CN(Cc1cccc(c1)C(=O)O)c2ccc(OCc3c(onc3c4c(Cl)cccc4Cl)C5CC5)nc2C(F)(F)F
0	0	0	0	0	CN1C(=C2[C@@H])(C3=C(N=C2N(C)C1=O)c4ccccc4C3=O

					)c5ccc(OC(=O)c6sc7ccccc7c6Cl)cc5)[O-]
0	0	0	0	0	CN1C(=Nc2ccc(cc2)C(=O)[O-])SC(=Cc3cc(C)n(c3C)c4ccc(cc4)C(C)(C)C)C1=O
0	0	0	0	0	CN1C(=NN(CN2CCCCc3cc(C)ccc23)C1=S)COc4ccc(cc4)C5CCCC5
0	0	0	0	0	Cn1c(CCCOc2ccc(Cl)cc2Cl)nnc1SCc3csc(n3)c4ccc(F)cc4
0	0	0	0	0	CNc1ccc([N-]S(=O)(=O)c2ccc(Br)cc2Cl)cc1
0	0	0	0	0	COC(=C1C(NC(=S)N=C1c2ccc(Cl)cc2)c3ccc(Br)cc3)[O-]
0	0	0	0	0	COC(=O)C(Cc1c[nH]c2ccccc12)NC(=O)CON=C3CC[C@]4(C)C5CCC6(C)C(CCC6(O)C#C)C5CCC4=C3
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(C(=O)C2CCCC2)c3ccc4cccc4c3
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2cc(OC)cc(OC)c2)C(=O)C3CCCC3
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=CC(=O)OC(C)(C)C)cc2)C(=O)c3ccccc3
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=CC(=O)OC(C)(C)C)cc2)C(=O)c3occc3
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=CC(=O)OC(C)(C)C)cc2)C(=O)NC(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=Cc3c(C)cc(C)cc3C)cc2)C(=O)C(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=Cc3c(C)cc(C)cc3C)cc2)C(=O)NC(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=Cc3c(Cl)cccc3Cl)cc2)C(=O)C(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=Cc3c(Cl)cccc3Cl)cc2)C(=O)C4CCCC4
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=Cc3c(F)cccc3F)cc2)C(=O)C(C)C
0	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=Cc3cc(cc(c3)C(F)(F)F)C(F)(F)F)cc2)C(=O)C(C)C
0	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=Cc3cc(cc(c3)C(F)(F)F)C(F)(F)F)cc2)C(=O)C4CCCC4
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=Cc3ccc(F)cc3)cc2)C(=O)C(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=Cc3ccc(F)cc3)cc2)C(=O)C4CCCC4
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=Cc3ccc(F)cc3)cc2)C(=O)NC(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=Cc3ccc(OC)cc3)cc2)C(=O)C4CCCC4
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=Cc3cccc(c3)C(F)(F)F)

					cc2)C(=O)C(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=Cc3cccc(c3)C(F)(F)F)cc2)C(=O)NC(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=Cc3cccc(Cl)c3)cc2)C(=O)C(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=Cc3cccc(Cl)c3)cc2)C(=O)C4CCCCC4
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=Cc3cccc(F)c3)cc2)C(=O)C(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=Cc3cccc(F)c3)cc2)C(=O)C4CCCCC4
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=Cc3cccc(F)c3)cc2)C(=O)NC(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=Cc3cccc3)cc2)C(=O)C(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=Cc3cccc3F)cc2)C(=O)C(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=Cc3cccc3F)cc2)C(=O)C4CCCCC4
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=Cc3cccc3F)cc2)C(=O)NC(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=Cc3ccccn3)cc2)C(=O)C(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=Cc3ccccn3)cc2)C(=O)C4CCCCC4
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=Cc3scnc3C)cc2)C(=O)C(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=Cc3scnc3C)cc2)C(=O)C4CCCCC4
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3c(OC)cccc3OC)C(=O)C(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3c(OC)cccc3OC)C(=O)C4CCCCC4
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3c(OC)cccc3OC)C(=O)NC(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3cc(Cl)ccc3OC)C(=O)C(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3cc(Cl)ccc3OC)C(=O)C4CCCCC4
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3ccc(C)cc3)C(=O)C(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3ccc(C)cc3)C(=O)NC(C)C

1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3ccc(C)s3)C(=O)C4CCCCC4
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3ccc(cc3)C(C)(C)C(=O)C4CCCCC4
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3ccc(cc3)N(C)C)C(=O)C(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3ccc(cc3)N(C)C)C(=O)C4CCCCC4
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3ccc(cc3)N(C)C)C(=O)NC(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3ccc(F)c(Cl)c3)C(=O)C(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3ccc(F)c(Cl)c3)C(=O)C4CCCCC4
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3ccc(F)c(F)c3)C(=O)C4CCCCC4
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3ccc(OC(F)(F)F)cc3)C(=O)C(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3ccc(OC(F)(F)F)cc3)C(=O)C4CCCCC4
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3ccc(OC)cc3)C(=O)C(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3ccc(OC)cc3)C(=O)C4CCCCC4
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3ccc(s3)C(=O)C)C(=O)C4CCCCC4
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3ccc(SC)cc3)C(=O)C(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3ccc(SC)cc3)C(=O)C4CCCCC4
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3ccc4OCOc4c3)C(=O)C(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3ccc4OCOc4c3)C(=O)C5CCCCC5
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3ccc4OCOc4c3)C(=O)NC(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3cccc(C)c3)C(=O)C(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3cccc(C)c3)C(=O)C4CCCCC4
0	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3cccc(C)c3)C(=O)NC(C)C
1	1	1	1	1	COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3cccc(c3)C(=O)C)C(=O)C4CCCCC4

1	1	1	1	1	<chem>COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3cccc(Cl)c3)C(=O)C(C)C</chem>
1	1	1	1	1	<chem>COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3cccc(Cl)c3)C(=O)C4CCCCC4</chem>
0	1	1	1	1	<chem>COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3cccc(Cl)c3)C(=O)NC(C)C</chem>
1	1	1	1	1	<chem>COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3cccc(OC(F)(F)F)c3)C(=O)C(C)C</chem>
1	1	1	1	1	<chem>COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3cccc(OC(F)(F)F)c3)C(=O)C4CCCCC4</chem>
1	1	1	1	1	<chem>COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3cccc(OC)c3)C(=O)C(C)C</chem>
1	1	1	1	1	<chem>COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3cccc(OC)c3)C(=O)C4CCCCC4</chem>
0	1	1	1	1	<chem>COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3cccc(OC)c3)C(=O)NC(C)C</chem>
1	1	1	1	1	<chem>COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc3C=CC(C)(C)Oc3c2OC)C(=O)C4CCCCC4</chem>
1	1	1	1	1	<chem>COC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc3C4C(C(C)(C)Oc3c2OC)C4(Cl)Cl)C(=O)c5cccc5</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COC(=O)C1=C(SC2(S1)C(=C(SC3=C2c4cc(C)c(C)cc4N(C(=O)c5ccc6OCOc6c5)C3(C)C)C(=O)OC)C(=O)OC)C(=O)OC</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COC(=O)C1C([C@@H]2C(=O)CC(CC2=NC1=C)c3ccc(Cl)cc3)c4cccc4OC(C)C</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COC(=O)C1C([C@@H]2C(=O)CC(CC2=NC1=C)c3ccc(F)cc3)c4cccc4OCc5cccc5</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COC(=O)C1OC(OC(=O)NC(CC(=O)N2CCn3c(C2)nnc3C(F)(F)F)Cc4cc(F)c(F)cc4F)C(O)C(O)C1O</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COC(=O)C1OC(OC2CC(N(C)C2=O)c3cccnc3)C(OC(=O)C(C)C)C(OC(=O)C(C)C)C1OC(=O)C(C)C</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COc1c(C)cc(Br)cc1C(=O)NC(=Nc2ccc(Cl)cc2C(=O)c3cccc3)[S-]</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COC1C(CC2C[NH+]3CCc4c([nH]c5cc(OC)ccc45)C3CC2C1C(=O)OC)OC(=O)c6cc(OC)c(OC)c(OC)c6</chem>
0	0	0	1	1	<chem>COC1C(O)C2C3CCC(C(C)CCC(=O)O)C3(C)CCC2C4(C)CCC(O)CC14</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COC1C(OC2OC(C)(C)OC12)C(O)CN3C(=O)N(CC(O)C4OC5OC(C)(C)OC5C4OC)c6cc(Cl)ccc36</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COc1cc(C)ccc1N2C(=NCC3CCCO3)SC=C2c4ccc(Br)cc4</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COc1cc(C=C2SC(=S)N(CCCCCCN3C(=S)SC(=Cc4ccc(O)c(O)c4)C3=O)C2=O)ccc1O</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COc1cc(C=Nc2oc(c3cccc3)c(c4cccc4)c2C#N)cc(Br)c1[O-]</chem>

0	0	0	0	0	<chem>COc1cc(cc(Br)c1O)C2C(C(=O)OCCc3ccccc3)C(=NC4=C2C(=O)CC(C4)c5ccccc5)C</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COc1cc(cc(OC)c1OC)C2C(=C(N)N(C3=C2C(=O)CCC3)c4cc(ccc4C)[N+](=O)[O-])C(=O)c5ccc(C)cc5</chem>
0	1	1	1	1	<chem>COc1cc(ccc1Oc2ccccc2)C3SC(C)C(=O)Nc4c3c(C)nn4c5ccccc5C</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COc1cc(Cl)c(C)cc1Nc2nc3ccccc3nc2[N-]S(=O)(=O)c4ccc(Cl)cc4</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COc1cc(CNc2ccc(Br)cc2C)cc(Br)c1[O-]</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COc1cc(N2C(=Nc3ccccc3C2=O)SCc4ccccc4)c(Cl)cc1Cl</chem>
1	1	1	1	1	<chem>COc1cc(nc2ccc(cc12)c3ccc(OCc4c(onc4c5c(Cl)cccc5Cl)C(C)C)cc3)C(=O)O</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COc1ccc(C)cc1n2c(SCCOc3ccc(Br)cc3)nnc2c4cccs4</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COc1ccc(C=Nc2ccc(cc2C)c3ccc(N=Cc4ccc(OC)c(OC)c4)c(C)c3)cc1OC</chem>
0	0	0	1	1	<chem>COc1ccc(C2SC(C)C(=O)Nc3c2c(C)nn3c4ccccc4C)c(OC)c1</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COc1ccc(cc1)[C@H]2N=C([S-])NC3=C2CCCC3=C4SCCS4</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COc1ccc(cc1)[C@H]2N3C(=NC4=C2CCc5ccccc45)SC(=Cc6ccc([O-])c(c6)[N+](=O)[O-])C3=O</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COc1ccc(cc1)C2(CCNC(=O)CON=C3CC[C@]4(C)C5CCCC6(C)C(CCC6(O)C#C)C5CCC4=C3)CC(C)[NH+](C)CC2C</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COc1ccc(cc1)C2=Nc3ccccc3C(=O)N2CCCCCOc4cc(C)ccc4C(C)C</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COc1ccc(cc1)C2C(C(=O)OCC(C)C)C(=C)N=C3CC(CC(=O)[C@@H]23)c4ccc(Cl)cc4</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COc1ccc(cc1)C2CC(=O)[C@H]3C(Nc4cc(C)ccc4N=C3C2)c5ccc(F)cc5</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COc1ccc(cc1)C2CC(=O)C3C(C(C(=O)OC4CCCC4)C(=C)N=C3C2)c5ccc(Cl)cc5</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COc1ccc(cc1)C2CC(=O)C3C(C(C(=O)OCCc4ccccc4)C(=C)N=C3C2)c5ccc(OC)cc5</chem>
0	1	1	1	1	<chem>COc1ccc(cc1)c2ccc(cc2)C3SC(C)C(=O)Nc4c3c(C)nn4c5ccccc5C</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COc1ccc(cc1)C2N3[N-]C(=NC3=NC4=C2[C@H](Oc5ccccc45)c6ccc(cc6)C(C)C)SC</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COc1ccc(cc1)C2N3C(=NC(=C2C(=O)OCC=C)C)SC(=Cc4ccc(cc4)C(C)C)C3=O</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COc1ccc(cc1)c2oc3ccc(cc3n2)N=CC=Cc4ccc(Br)cc4</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COc1ccc(cc1)N=C([O-])C(F)(OC(F)(F)C(F)(OC(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F)C(F)(F)F)C(F)(F)F</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COc1ccc(cc1)n2cc(c3ccccc3)c4c(ncnc24)N5CCC(Cc6ccccc6)CC5</chem>
0	0	0	0	0	<chem>COc1ccc(cc1Br)C(=O)CSc2nc([O-])cc(CSc3ccc(Cl)cc3)n2</chem>

0	0	0	0	0	COc1ccc(cc1OC)C(=O)CSc2nc([O-])c3c(csc3n2)c4ccc5CC CCc5c4
0	0	0	0	0	COc1ccc(cc1OC)C2CC(=O)[C@H]3C(C(C(=O)OC4CCCCC4)C(=C)N=C3C2)c5cc(Br)ccc5OC
0	0	0	0	0	COc1ccc(cc1OC)C2CC(=O)C3C(C(C(=O)OCCc4cccc4)C(=C) N=C3C2)c5cc(Br)c(O)c(OC)c5
0	0	0	0	0	COc1ccc(cc1OCc2cccc2)C3Oc4cccc4C5CC(=NN35)c6cc ccc6
0	0	0	0	0	COc1ccc(CCN2C(c3ccc(cc3)C(C)(C)C)c4c(n[nH]c4C2=O)c 5cccc5[O-])cc1
0	0	0	0	0	COc1ccc(CCN2CC(=O)N3C(Cc4c([nH]c5cccc45)C3c6cc(OC)c(OC)c(OC)c6)C2=O)cc1OC
0	0	0	0	0	COc1ccc(CN2CC(=O)N3CC(c4ccc(OC(C)C)c(OC)c4)c5c([n H]c6cccc56)C3(C)C2=O)cc1OC
0	1	1	1	1	COc1ccc(COC(=O)NCCC(C)C2CCC3C4C(O)CC5CC(O)CCC5 (C)C4CCC23C)cc1
0	1	1	1	1	COc1ccc(Oc2ccc(cc2)C3SC(C)C(=O)Nc4c3c(C)nn4c5cccc 5C)cc1
0	1	1	1	1	COc1cccc(c1)c2ccc(cc2)C3SC(C)C(=O)Nc4c3c(C)nn4c5cc ccc5C
0	1	1	1	1	COc1cccc(Oc2ccc(cc2)C3SC(C)C(=O)Nc4c3c(C)nn4c5cccc c5C)c1
0	0	0	0	0	COc1cccc1C2[C@@H]3C(=O)CC(CC3=NC(=C2C(=O)OCC c4cccc4)C)c5ccc(Cl)cc5
0	0	0	0	0	COc1cccc1C2C(C(=O)OCc3cccc3)C(=C)N=C4CC(CC(=O) [C@@H]24)c5ccc(F)cc5
0	0	0	0	0	COc1cccc1C2CC(=O)[C@@H]3C(C(C(=O)OC(C)C)C(=C)N =C3C2)c4ccc(Cl)cc4
0	1	1	1	1	COc1cccc1c2ccc(cc2)C3SC(C)C(=O)Nc4c3c(C)nn4c5cccc c5C
0	0	0	0	0	COc1cccc1N=C([O-])C2=C(C)NC(=C(C#N))[C@H]2c3cccc c3)SCC(=O)Nc4cccc4C(F)(F)F
0	1	1	1	1	COc1cccc1n2nc(C)c3C(SC(C)C(=O)Nc23)c4ccc(Oc5cccc 5)cc4
0	1	1	1	1	COc1cccc1Oc2ccc(cc2)C3SC(C)C(=O)Nc4c3c(C)nn4c5cc ccc5C
1	1	1	1	1	COCC=Cc1ccc(CN(C(=O)C2CCCCC2)c3cccc(C=CC(=O)OC) c3)cc1
1	1	1	1	1	COCC=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=CC(=O)OC(C)(C)C)cc2)C(=O) C3CCCCC3
0	0	0	0	0	COCCN=C1SC=C(N1N=Cc2ccc(SC)cc2)c3ccc(Cl)cc3Cl
0	0	0	0	0	COCCN1C(=NC(=O)c2sc3cccc3c2Cl)Sc4cc(SC)ccc14
0	0	0	0	0	CS(=NC(=O)Nc1ccc(Cl)cc1)c2sc(Cl)c3CC(C)(C)CC(=O)c23

0	0	0	0	0	CSc1ccc(C=C2CCC[C@@H]3C(c4ccc(SC)cc4)n5ncnc5[NH+]=C23)cc1
0	0	0	0	0	CSc1nc(N2CCC(Cc3cccc3)CC2)c(C#N)c(n1)c4ccc(Cl)cc4
0	0	0	0	0	CSc1nc(SCCC(C)C)c2sc3nc(c4COC(C)(C)Cc4c3c2n1)c5occc5
0	0	0	0	0	CSCCN1C(=NC(=O)C(c2cccc2)c3cccc3)Sc4cc5OCOc5cc14
0	0	0	0	0	FC(F)(F)c1cc(c2cccs2)n(n1)c3ccc(cc3)C(=O)Oc4cccc5ccnc45
0	0	0	0	0	FC(F)Sc1ccc(cc1)N=C2[N-]N=C(CS2)c3c[nH]c4cccc34
0	0	0	0	0	Fc1cc(Br)ccc1NC(=O)C(=Cc2oc(cc2)c3ccc(Cl)cc3)C#N
0	0	0	0	0	Fc1ccc(cc1)C2N3C(Cc4c2[nH]c5cccc45)C(=O)N(C6CCCC6)C3=S
0	0	0	0	0	Fc1ccc(cc1)S(=O)(=O)[N-]c2cccc2C(=O)N3c4cccc4Sc5ccccc35
0	0	0	0	0	Fc1ccc(NC(=O)C2C([C@@H]3C(=O)CCCC3=NC2=C)c4ccc(Cl)cc4)c(F)c1
0	0	0	0	0	Fc1ccc(NC(=O)C2C([C@@H]3C(=O)CCCC3=NC2=C)c4ccc(Cl)cc4)c(F)c1
0	0	0	0	0	Fc1ccc(NC(=O)C2C([C@@H]3C(=O)CCCC3=NC2=C)c4ccc(Cl)cc4)c(F)c1
0	0	0	0	0	Fc1ccc(NC(=O)C2C([C@@H]3C(=O)CC(CC3=NC2=C)c4cccs4)c5cccc5)cc1
0	0	0	0	0	Fc1ccc(OC(=O)c2ccc(C=Nc3ccc(cc3)C4=Cc5cccc5OC4=O)cc2)cc1
0	0	0	0	0	Fc1cccc(F)c1NC(=O)N2CCn3cccc3C2c4ccc(Cl)cc4Cl
0	0	0	0	0	Fc1cccc1[N-]S(=O)(=O)c2ccc3NC(C4CC=C[C@@H]4c3c2)c5ccc(Cl)cc5Cl
0	0	0	0	0	Fc1cccc1COc2cccc2C=C3SC(=NCc4cccc4)N(Cc5cccc5)C3=O
0	0	0	0	0	lc1cccc([N-]S(=O)(=O)c2ccc3CCCNc3c2)c1
0	0	0	0	0	lc1cccc(c1)C(=O)Nc2ccc(cc2)N=Nc3cccc3
0	0	0	1	1	NC(=O)c1ccc(NC(=O)C(Cc2cccc2)NC(=O)c3ccc(Cl)cc3)cc1
0	0	0	0	0	O=C(C1CN(CCN1S(=O)(=O)c2cccc2)S(=O)(=O)c3cccc3)N4CC[NH+](CC4)C(c5cccc5)c6cccc6
0	0	0	0	0	O=C(CC1CC[NH2+]CC1Cc2cc(CN3CCN(CC3)c4cccc4)on2)N5CCC(CC5)N6C(=O)Nc7cccc67
0	0	0	0	0	O=C(CCC[NH+])1CCC(=CC1)N2C(=O)Nc3cccc23)c4ccc(cc4)N5CCC(=CC5)N6C(=O)Nc7cccc67
0	0	0	0	0	O=C(COc1ccc(cc1)C2Nc3c(ccc4cccc34)[C@H]5C=CCC25)N6CCCCC6
0	0	0	0	0	O=C(CSC1=NC(=O)C2=C(CSC2=N1)c3cccc3)N(c4cccc4)

					c5cccc5
0	0	0	0	0	O=C(CSC1=Nc2c(sc3cccc23)C(=O)N1CCc4cccc4)N5CCCc6cccc56
0	0	0	0	0	O=C(N1CCN(CC1)C(c2cccc2)c3cccc3)c4cccc4Oc5cccc5
0	0	0	0	0	O=C(Oc1ccc(OC(=O)C(c2cccc2)c3cccc3)cc1)C(c4cccc4)c5cccc5
0	0	0	0	0	O=C(OCC12CC3CC(CC(C3)C1)C2)c4ccc([N-]S(=O)(=O)c5cc6c(Cc7cccc67)c5)cc4
0	0	0	0	0	O=C(OCc1cccc1)C2CCC(=O)N2C3(c4cccc4)c5cccc5c6cccc36
0	0	0	0	0	O=C(OCCC(C#N)(c1cccc1)c2cccc2)c3c4CCCCc4nc5cccc35
0	0	0	0	0	O=S(=O)([N-]c1nc2cccc2nc1Nc3ccc(Oc4cccc4)cc3)c5cccc5
0	0	0	0	0	O=S(=O)(N1CCCCC1)c2ccc(cc2)N=Cc3cn(Cc4cccc4)c5cccc35
0	0	0	0	0	O=S(=O)(N1CCCCC1)c2ccc3NC(C4CC=CC4c3c2)c5cccc6cccc56
0	0	0	0	0	OC(=C1[C@H](N(C(=O)C1=O)c2cccc(c2)C(F)(F)F)c3cccc3)c4ccc(F)cc4
0	0	0	0	0	OC(=C1[C@H](N(C(=O)C1=O)c2cccc2)c3ccc(Cl)cc3)c4ccc(Cl)cc4
0	0	0	0	0	OC(=C1C(N(C(=O)C1=O)c2cccc(c2)C(F)(F)F)c3cccc3F)c4ccc(F)cc4
0	0	0	0	0	OC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(C=Cc3cccc3)cc2)C(=O)C4CCCC4
0	0	0	0	0	OC(=O)C=Cc1cccc(c1)N(Cc2ccc(cc2)c3ccc4OCOc4c3)C(=O)C5CCCCC5
1	1	1	1	1	OC(=O)c1ccc(OCc2ccc(OCc3c(onc3c4c(Cl)cccc4Cl)C5CC5)nc2C(F)(F)F)cc1
1	1	1	1	1	OC(=O)c1cccc(C=Cc2ccc(OCc3c(onc3c4c(Cl)cccc4Cl)C5CC5)cc2Cl)c1
1	1	1	1	1	OC(=O)c1cccc(C=Cc2ccc(OCc3c(onc3c4c(Cl)cccc4Cl)C5CCCC5)cc2Cl)c1
1	1	1	1	1	OC(=O)c1cccc(OCc2ccc(OCc3c(onc3c4c(Cl)cccc4Cl)C5CC5)nc2C(F)(F)F)c1
1	1	1	1	1	OC(=O)c1cccc1OCc2ccc(OCc3c(onc3c4c(Cl)cccc4Cl)C5CC5)nc2C(F)(F)F
0	0	0	0	0	OC(CC(C1=C([O-])c2cccc2OC1=O)c3cccc3)c4ccc(cc4)c5ccc(Br)cc5
0	0	0	0	0	OC1(CC(=NN1c2nc(cs2)c3ccc(F)cc3)c4ccc5cccc5c4)C(F)(F)F

0	0	0	0	0	<chem>Oc1cc([O-])c(C=Nc2sc3CCCCc3c2C#N)cc1Br</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Oc1ccc(Br)cc1C=Nc2cccc2N=Cc3cc(Br)ccc3[O-]</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Oc1ccc(Br)cc1C2Oc3cccc3C4CC(=NN24)c5ccc(F)cc5</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Oc1ccc(Br)cc1N=CC2=C([O-])CC(CC2=O)c3cccc3</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Oc1ccc(C=C(Cl)c2nc([O-])c3c4CCCCc4sc3n2)cc1Cl</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Oc1ccc(C=C2SC3=NC4=C(CCc5cccc45)C(N3C2=O)c6cccs6)cc1</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Oc1ccc(Cl)cc1C=C2SC(=NC2=O)[N-]c3ccc(Br)cc3</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Oc1ccc2cccc2c1C=Nc3ccc(Nc4ccc(cc4)N=Cc5c([O-])ccc6cccc56)cc3</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Oc1ccc2cccc2c1c3cc([N-]S(=O)(=O)c4cccc5cccc45)c6cccc6c3O</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Oc1ccccc1[N-]C2=NC(=O)C(=Cc3cccc(Br)c3)S2</chem>
0	0	0	0	0	<chem>Oc1ccccc1C2=NN3C(C2)c4cc(Br)ccc4OC3c5cccs5</chem>