Angewandte Chemie
Eine Zeitschrift der Gesellschaft Deutscher Chemiker

Supporting Information

Privileged Structures Revisited

*Petra Schneider and Gisbert Schneider**

anie_201702816_sm_miscellaneous_information.pdf

SMILES (RDKit Mol) (Murcko)	N*	Welsch List	False Positives (Rishton)	False Positives (Hann)	H	Information	KL Divergence	Neural Network Score (average)	GPCR	Enzyme	Kinase	Proteinase	Nuclear Receptor	Catalytic Receptor	Ion Channel	Transporter	Protein	Unidentified Target
c1ccc2ncccc2c1	285	Yes	7%	0%	2.75	0.57	0.37	0.37	15%	25%	15%	19%	9%	0%	8%	1%	7%	0%
c1ccc(Cc2ccccc2)cc1	545	No	4%	0%	2.54	0.78	0.47	0.45	34%	22%	3%	2%	20%	1%	3%	11%	3%	1%
c1ccc(Oc2ccccc2)cc1	1184	No	3%	1%	2.46	0.86	0.87	0.41	21%	19%	0%	17%	21%	0%	1%	18%	2%	0%
c1ccc(CNc2ccccc2)cc1	245	No	1%	18%	2.39	0.93	1.40	0.15	10%	23%	0%	1%	39%	6%	1%	16%	4%	1%
c1ccc(COc2ccccc2)cc1	828	No	6%	0%	2.38	0.94	0.66	0.42	23%	35%	0%	11%	9%	0%	0%	19%	2%	1%
c1c2ccccc2[nH]c1-c1ccccc1	384	Yes	4%	0%	2.22	1.10	1.11	0.31	35%	4%	7%	10%	3%	2%	2%	0%	36%	0%
c1ccc(-c2ccccc2)cc1	1561	Yes	8%	0%	2.21	1.11	0.78	0.14	14%	25%	4%	44%	7%	1%	1%	1%	3%	0%
O=C(Nc1ccccc1)c1ccccc1	303	No	7%	0%	2.18	1.14	0.49	0.08	18%	51%	5%	12%	2%	2%	8%	0%	2%	0%
c1ccc2ccccc2c1	750	No	6%	0%	2.17	1.15	0.43	0.29	34%	30%	1%	24%	1%	0%	2%	3%	2%	3%
c1cn(Cc2ccccc2)c2ccccc12	445	Yes	5%	0%	2.16	1.16	0.96	0.20	19%	41%	0%	2%	10%	0%	0%	23%	4%	0%
c1ccc(-c2ccccn2)cc1	133	No	1%	0%	2.15	1.17	0.73	0.27	41%	13%	11%	5%	0%	1%	28%	0%	2%	0%
c1ccc(-c2nc3ccccc3[nH]2)cc1	140	Yes	0%	1%	2.12	1.20	0.54	0.24	13%	54%	13%	10%	0%	1%	4%	4%	1%	0%
c1ccsc1	113	No	24%	0%	2.08	1.24	0.54	0.20	19%	38%	12%	27%	0%	0%	1%	4%	0%	0%
c1ccc(-c2ccc3ccccc3n2)cc1	146	Yes	4%	14%	2.08	1.24	0.66	0.29	43%	16%	8%	0%	25%	1%	1%	0%	5%	0%
c1ccc(CCOc2ccccc2)cc1	196	No	2%	0%	2.07	1.25	2.32	0.34	31%	8%	0%	4%	16%	0%	2%	0%	0%	39%
c1cc2ccccc2s1	240	Yes	3%	1%	2.00	1.32	0.72	0.32	7%	57%	18%	7%	0%	3%	0%	3%	4%	0%
c1ccccc1	11048	No	17%	1%	1.96	1.36	0.68	0.23	17%	52%	1%	22%	2%	0%	3%	2%	1%	0%
c1ccc(CCc2ccccc2)cc1	160	No	3%	0%	1.93	1.39	1.64	0.29	24%	7%	1%	7%	54%	0%	1%	5%	1%	0%
c1ccc(-c2ccncc2)cc1	121	No	4%	0%	1.82	1.50	0.43	0.34	48%	21%	5%	24%	0%	0%	0%	0%	2%	0%
O=S(=O)(Nc1ccccc1)c1ccccc1	817	No	2%	0%	1.80	1.52	1.24	0.05	9%	48%	0%	16%	27%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(CCNCc2ccccc2)cc1	169	No	0%	20%	1.80	1.52	0.42	0.41	46%	34%	14%	0%	0%	0%	0%	1%	4%	2%
c1ccc2c(c1)CCN2	143	Yes	20%	1%	1.75	1.57	0.58	0.47	40%	33%	0%	22%	0%	0%	0%	5%	0%	0%
c1ccc(CCCCc2ccccc2)cc1	135	No	1%	0%	1.74	1.58	1.48	0.40	10%	46%	0%	1%	37%	5%	0%	0%	1%	0%
c1ccc(Nc2nccc(-c3ccccc3)n2)cc1	163	No	1%	0%	1.73	1.59	0.81	0.51	13%	54%	21%	0%	0%	10%	0%	0%	1%	0%
O=C(c1ccccc1)c1ccccc1	115	No	4%	2%	1.71	1.61	1.06	0.16	7%	61%	0%	22%	2%	0%	1%	3%	4%	0%
O=C(NCc1ccccc1)c1ccccc1	190	No	4%	1%	1.71	1.61	1.96	0.04	2%	30%	6%	7%	54%	0%	0%	0%	2%	0%
c1csc(-c2ccccc2)c1	182	No	2%	0%	1.70	1.62	1.36	0.19	0%	21%	27%	48%	3%	0%	0%	0%	1%	0%
c1nc2ccccc2[nH]1	344	No	8%	0%	1.70	1.62	0.81	0.39	9%	59%	21%	8%	1%	0%	1%	0%	0%	0%
c1ccc(-c2ccc3ccccc3c2)cc1	265	Yes	3%	0%	1.70	1.62	1.54	0.42	30%	15%	3%	1%	50%	0%	0%	1%	0%	0%
c1ccc(C2C=CNC=C2)cc1	187	Yes	9%	0%	1.68	1.64	2.73	0.24	3%	10%	4%	0%	25%	0%	58%	0%	1%	0%
O=C(/C=C/c1ccccc1)Nc1ccccc1	186	No	0%	2%	1.68	1.64	1.37	0.04	5%	36%	0%	49%	1%	1%	8%	0%	0%	1%
C(=C(c1ccccc1)c1ccccc1)c1ccccc1	225	No	8%	2%	1.67	1.65	2.07	0.81	8%	29%	0%	0%	55%	0%	1%	3%	0%	3%
c1ccc2c(c1)CCC2	247	No	5%	2%	1.62	1.70	0.85	0.55	18%	64%	3%	5%	9%	0%	0%	1%	0%	0%
O=S(=O)(NCCc1ccccc1)c1ccccc1	195	No	3%	0%	1.60	1.72	1.31	0.24	7%	63%	0%	6%	19%	0%	0%	0%	6%	0%
C1CCCC1	118	No	25%	0%	1.59	1.73	0.82	0.12	25%	46%	0%	28%	0%	0%	1%	0%	0%	0%
c1ccc(C2CC2)cc1	329	No	0%	0%	1.56	1.76	1.02	0.85	59%	11%	0%	0%	3%	0%	0%	26%	0%	1%
C1CCCCC1	277	No	45%	0%	1.54	1.78	1.17	0.05	9%	53%	0%	35%	1%	0%	0%	0%	1%	1%
c1ccc(-c2nn(C3CCCC3)c3ncncc23)cc1	135	No	0%	0%	1.54	1.78	1.47	0.18	0%	33%	44%	0%	0%	23%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(-c2ccncn2)cc1	160	No	1%	0%	1.54	1.78	1.52	0.73	2%	37%	1%	53%	0%	0%	4%	0%	3%	0%
c1ccc2c(c1)Cc1ccccc1-2	172	Yes	0%	0%	1.53	1.79	0.69	0.15	46%	7%	44%	2%	0%	0%	1%	0%	1%	0%
C(=C/c1ccccc1)\c1ccccc1	232	No	1%	2%	1.52	1.80	1.53	0.65	1%	68%	1%	2%	16%	0%	1%	0%	10%	0%
c1ccc(Nc2ncccn2)cc1	426	No	0%	0%	1.51	1.81	1.10	0.17	13%	24%	59%	0%	0%	4%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(Nc2ccnc3ccccc32)cc1	367	Yes	0%	0%	1.50	1.82	2.06	0.22	1%	5%	43%	0%	0%	47%	0%	0%	3%	0%
c1ccc(Sc2ccccc2)cc1	308	No	3%	0%	1.50	1.82	2.83	0.60	6%	7%	1%	6%	6%	0%	0%	73%	1%	0%
c1cc2ccccc2[nH]1	1907	Yes	6%	0%	1.49	1.83	0.54	0.34	69%	11%	0%	13%	0%	0%	2%	5%	0%	0%
c1ccc(C2NCCc3ccccc32)cc1	123	Yes	1%	4%	1.48	1.84	1.00	0.42	12%	67%	13%	0%	3%	0%	0%	0%	4%	0%
O=c1cc(-c2ccccc2)oc2ccccc12	505	Yes	16%	0%	1.48	1.84	1.35	0.22	4%	75%	3%	1%	5%	3%	0%	0%	4%	5%
O=C(Nc1cccc(Nc2nccc(-c3cccnc3)n2)c1)c1cc	148	No	0%	0%	1.47	1.85	1.95	0.07	1%	7%	50%	0%	0%	41%	0%	1%	1%	0%
c1ccc(CC2CCCCC2)cc1	215	No	0%	0%	1.46	1.86	1.72	0.50	42%	10%	0%	0%	0%	0%	0%	47%	0%	1%
O=c1ccc2ccccc2o1	228	Yes	5%	0%	1.46	1.86	1.06	0.25	5%	67%	19%	6%	3%	0%	0%	0%	0%	0%
C1CC1	193	No	18%	1%	1.43	1.89	1.15	0.01	46%	2%	0%	45%	0%	0%	7%	0%	0%	0%
O=c1c2ccccc2occ1-c1ccccc1	128	Yes	13%	1%	1.42	1.90	2.20	0.47	0%	43%	0%	0%	48%	4%	0%	0%	5%	0%
c1ccc(Nc2ccncn2)cc1	186	No	1%	1%	1.42	1.90	1.20	0.32	3%	70%	16%	0%	6%	3%	0%	0%	2%	0%
c1ccncc1	416	No	7%	0%	1.41	1.91	0.95	0.45	14%	71%	5%	8%	2%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(Cc1ccccc1)NCc1ccccc1	188	No	0%	1%	1.41	1.91	2.30	0.09	20%	20%	0%	1%	0%	0%	60%	0%	0%	0%
O=C(Nc1ccccc1)N1CCN(c2ccccn2)CC1	141	No	0%	0%	1.40	1.92	2.48	0.21	21%	12%	0%	0%	0%	0%	64%	0%	3%	0%
c1ccc(Nc2ccccc2)cc1	482	No	3%	0%	1.40	1.92	1.04	0.31	15%	70%	9%	0%	0%	0%	0%	2%	5%	0%
c1ccc(-c2n[nH]c3ncncc32)cc1	466	No	0%	0%	1.39	1.93	1.51	0.46	0%	29%	58%	0%	0%	13%	0%	0%	0%	0%
O=C(NCCc1ccccc1)c1ccccc1	206	No	18%	1%	1.39	1.93	1.27	0.11	5%	68%	0%	21%	0%	0%	4%	0%	0%	0%
c1cn(-c2ccccc2)c2ccccc12	135	Yes	1%	0%	1.38	1.94	0.81	0.33	35%	58%	0%	1%	4%	0%	2%	0%	0%	0%
c1ccc(CCN2CCC(Cc3ccccc3)CC2)cc1	114	No	0%	0%	1.36	1.96	1.17	0.80	69%	5%	0%	0%	0%	0%	18%	1%	0%	7%
c1c2ccccc2[nH]c1-c1n[nH]c2ncncc12	121	Yes	0%	0%	1.35	1.97	1.78	0.02	0%	15%	60%	0%	0%	25%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(CNc2ncnc3ccccc32)cc1	187	No	0%	2%	1.34	1.98	1.68	0.25	1%	14%	67%	0%	0%	17%	0%	0%	1%	0%
c1cc2c(ncnc2Nc2ccccc2)s1	208	No	1%	0%	1.32	2.00	1.54	0.22	0%	30%	59%	0%	0%	11%	0%	0%	0%	0%
O=C(NCCc1ccccc1)Nc1ccccc1	112	No	9%	0%	1.31	2.01	1.83	0.13	6%	55%	0%	0%	38%	0%	1%	0%	0%	0%

O=C(Nc1cccc(-n2ccnc2)c1)c1cccc(Nc2nccc(-	117	No	0%	0%	1.31	2.01	2.37	0.30	0%	8%	32%	0%	0%	60%	1%	0%	0%	0%
c1ccc(C2CCCCC2)cc1	300	No	1%	0%	1.31	2.01	1.47	0.32	61%	1%	0%	0%	1%	0%	1%	34%	1%	1%
C(#Cc1ccccc1)c1ccccc1	339	No	0%	0%	1.31	2.01	0.62	0.55	55%	38%	0%	6%	1%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc2c(c1)CCCO2	193	No	0%	0%	1.30	2.02	0.56	0.30	67%	23%	7%	0%	2%	0%	0%	0%	0%	1%
O=C(CCc1ccccc1)NCCc1ccccc1	315	No	30%	1%	1.29	2.03	1.22	0.00	43%	4%	0%	52%	0%	0%	0%	0%	1%	0%
C1CCNC1	827	No	17%	1%	1.29	2.03	1.82	0.14	7%	16%	0%	72%	0%	0%	2%	1%	1%	0%
c1ccc(-c2ccnc(-c3ccccc3)c2)cc1	128	No	0%	0%	1.28	2.04	0.55	0.11	73%	16%	5%	1%	4%	0%	0%	0%	1%	0%
O=C(Nc1nc2ccccc2s1)c1ccccc1	106	No	0%	0%	1.28	2.04	0.54	0.29	70%	17%	11%	0%	0%	1%	0%	0%	1%	0%
C1=CCCCC1	386	No	73%	0%	1.27	2.05	2.57	0.01	10%	19%	1%	0%	69%	0%	0%	0%	1%	0%
c1ccc(Oc2ccccn2)cc1	115	No	0%	0%	1.27	2.05	0.98	0.38	69%	6%	0%	3%	22%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(/C=C/c1ccccc1)c1ccccc1	142	No	1%	2%	1.26	2.06	1.52	0.06	1%	77%	0%	5%	1%	7%	1%	0%	7%	0%
c1cscn1	128	No	3%	0%	1.25	2.07	1.67	0.11	13%	17%	1%	69%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(-c2nc(-c3ccccc3)c(-c3ccncc3)[nH]2)cc1	247	No	49%	0%	1.25	2.07	1.47	0.42	9%	14%	72%	0%	0%	4%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(C2CCNCC2)cc1	451	No	6%	0%	1.24	2.08	2.43	0.28	33%	2%	0%	0%	0%	0%	0%	62%	0%	1%
O=S(=O)(c1ccccc1)c1ccccc1	104	No	0%	0%	1.23	2.09	1.17	0.12	13%	74%	1%	10%	0%	0%	0%	3%	0%	0%
c1ccc(C(c2ccccc2)c2ccccc2)cc1	276	No	0%	0%	1.21	2.11	3.10	0.28	1%	27%	1%	0%	0%	0%	2%	1%	68%	0%
O=S(=O)(NCc1ccccc1)c1ccccc1	507	No	2%	1%	1.21	2.11	1.87	0.08	1%	32%	0%	63%	0%	0%	0%	0%	4%	0%
O=S(=O)(c1ccccc1)N(Cc1ccccc1)c1ccccc1	121	No	0%	37%	1.20	2.12	1.47	0.04	37%	1%	0%	59%	3%	0%	0%	0%	0%	0%
O=c1ccc2ccccc2[nH]1	240	Yes	4%	0%	1.20	2.12	2.56	0.08	3%	32%	0%	1%	64%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(-c2nc3ccccc3o2)cc1	187	Yes	2%	1%	1.19	2.13	2.89	0.49	5%	16%	0%	0%	74%	0%	0%	0%	5%	0%
c1ccc(-c2cnc3ncncc3c2)cc1	123	No	6%	0%	1.19	2.13	2.53	0.38	0%	0%	41%	0%	0%	55%	4%	0%	0%	0%
c1nc2cncnc2[nH]1	113	Yes	12%	0%	1.17	2.15	0.92	0.61	36%	60%	0%	1%	0%	0%	3%	0%	0%	0%
c1nc(-c2ccccc2)no1	107	No	7%	0%	1.14	2.18	1.50	0.57	4%	76%	0%	13%	0%	0%	0%	0%	7%	0%
O=C(Nc1ccccc1)Nc1ccc(Oc2ccncc2)cc1	351	No	0%	0%	1.13	2.19	2.34	0.03	1%	1%	53%	0%	0%	45%	0%	0%	0%	0%
c1ccc2c(c1)Nc1ccccc1S2	262	No	2%	0%	1.12	2.20	0.78	0.91	74%	18%	0%	0%	0%	0%	0%	5%	0%	2%
O=C(Nc1ccnn1-c1ccccc1)Nc1ccc(OCCN2CC	197	No	0%	2%	1.12	2.20	2.27	0.82	0%	0%	65%	0%	0%	31%	0%	0%	4%	0%
O=c1ccn([C@H]2CCCO2)c(=O)[nH]1	193	No	56%	17%	1.11	2.21	0.82	0.02	48%	50%	0%	1%	0%	0%	0%	0%	1%	0%
O=C1Nc2ccccc2/C1=C/c1ccc[nH]1	702	Yes	0%	0%	1.10	2.22	2.33	0.02	0%	1%	57%	0%	0%	41%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(Sc2ccccc2N2CCNCC2)cc1	130	No	0%	0%	1.10	2.22	1.64	0.90	60%	2%	0%	0%	0%	0%	0%	38%	0%	0%
c1ccc(Nc2ncncn2)cc1	188	No	1%	0%	1.10	2.22	1.17	0.32	16%	76%	2%	5%	0%	0%	0%	0%	1%	0%
c1ccc2c(c1)CC1CC2CCN1	182	No	15%	0%	1.09	2.23	2.59	0.61	60%	0%	0%	1%	0%	0%	1%	0%	0%	38%
C1CCNCC1	358	No	22%	0%	1.08	2.24	1.35	0.06	9%	77%	0%	13%	0%	0%	1%	0%	0%	0%
c1ccc2c(c1)CCc1ccccc1N2	147	No	1%	0%	1.08	2.24	2.43	0.94	39%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	59%	1%	1%
c1ccc(C2=NNC(c3ccccc3)C2)cc1	112	No	0%	33%	1.07	2.25	2.14	0.11	0%	68%	0%	0%	0%	4%	0%	0%	29%	0%
O=C1C=C2CC[C@H]3[C@@H]4CCCC4CC[(	254	No	0%	2%	1.07	2.25	3.56	0.00	0%	4%	0%	0%	76%	0%	1%	0%	18%	2%
c1ccc(CCNCCOc2ccccc2)cc1	102	No	2%	0%	1.06	2.26	1.72	0.35	63%	0%	0%	0%	0%	0%	35%	0%	0%	2%
O=C(NCCCN1CCN(c2ccccc2)CC1)c1c[nH]c(-	149	Yes	0%	0%	1.06	2.26	1.47	0.29	68%	0%	0%	0%	0%	0%	3%	29%	0%	0%
c1n[nH]c2ccc(-c3ccccc3)cc12	114	Yes	0%	0%	1.06	2.26	2.28	0.08	0%	3%	73%	0%	0%	2%	23%	0%	0%	0%
c1ccc([C@@H]2CCCc3ccccc32)cc1	304	No	2%	0%	1.05	2.27	3.06	0.82	20%	3%	0%	0%	0%	0%	0%	75%	0%	2%
O=S(=O)(c1ccccc1)N1CCc2ccccc2C1	148	Yes	0%	0%	1.04	2.28	1.87	0.01	0%	44%	0%	55%	1%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(OC(c2ccccc2)C2CCNCC2)cc1	224	No	0%	0%	1.04	2.28	2.04	0.85	52%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	48%	0%	0%
c1ccc2c(c1)CC[C@H]1[C@@H]3CCCC3CC[(	347	No	10%	0%	1.04	2.28	3.24	0.58	0%	15%	0%	0%	78%	0%	0%	2%	5%	0%
O=C1CC[C@@H]2C1CC[C@@H]1c3ccccc3(	132	No	0%	0%	1.03	2.29	1.79	0.26	0%	80%	0%	1%	12%	0%	0%	2%	5%	0%
O=C(NC1CCNCC1)c1cc(-c2ccccc2Oc2ccccc2	139	No	0%	0%	1.03	2.29	2.29	0.15	0%	0%	69%	0%	0%	28%	0%	0%	3%	0%
c1[nH]c2ccccc2c1-c1ccccc1	111	Yes	23%	0%	1.02	2.30	2.73	0.20	0%	37%	0%	0%	62%	0%	0%	0%	1%	0%
O=C(Nc1ccccc1)Nc1ccc(-c2csc3c2cncc3-c2c	915	No	0%	0%	1.00	2.32	2.42	0.09	0%	0%	60%	0%	0%	40%	0%	0%	0%	0%
O=C(Oc1ccccc1)c1cccs1	162	No	0%	0%	1.00	2.32	1.85	0.14	0%	50%	0%	50%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(c1ccc(-c2ncncc2C#Cc2ccccc2)cc1)N1C	112	No	0%	0%	1.00	2.32	1.60	0.05	0%	50%	50%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(Oc1ccccc1)c1ccco1	106	No	2%	0%	1.00	2.32	1.85	0.09	0%	50%	0%	50%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
C(#Cc1cncnc1-c1ccccc1)c1cccnc1	104	No	0%	0%	1.00	2.32	1.60	0.17	0%	50%	50%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(c1ccc(-c2ncncc2C#Cc2ccccc2)cc1)N1C	263	No	0%	0%	1.00	2.32	1.60	0.14	0%	50%	50%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(Cc1cc(Nc2ncnc3ccccc32)n[nH]1)Nc1ccc	136	No	0%	0%	1.00	2.32	2.57	0.15	0%	0%	49%	0%	0%	51%	0%	0%	0%	0%
c1nn(C2CCNCC2)cc1-c1cncc(OCc2ccccc2)c	210	No	0%	0%	1.00	2.32	2.58	0.61	0%	0%	49%	0%	0%	51%	0%	0%	0%	0%
O=C(Nc1ccccc1)Nc1ccc(C2=Nc3cncnc3NCC	119	No	0%	0%	1.00	2.32	2.53	0.02	0%	0%	52%	0%	0%	48%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(Nc2ncc3c(n2)-c2ccccc2C(c2ccccc2)=N	119	No	0%	0%	1.00	2.32	2.29	0.56	0%	0%	71%	0%	0%	27%	3%	0%	0%	0%
C(#Cc1cncnc1N1CCCCC1)c1cccnc1	117	No	0%	0%	1.00	2.32	1.58	0.12	0%	53%	47%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(CN1CCNCC1)Nc1ccc(N/C(=C2\C(=O)N	185	Yes	0%	0%	1.00	2.32	2.51	0.85	0%	0%	54%	0%	0%	46%	0%	0%	0%	0%
O=C(Nc1ccccc1)C1(C(=O)Nc2ccc(Oc3ccnc4(	179	Yes	0%	0%	1.00	2.32	2.62	0.15	0%	0%	46%	0%	0%	54%	0%	0%	0%	0%
O=C(Nc1cccc(NC(=O)c2ccccc2)c1)c1ccccc1	109	No	0%	0%	0.99	2.33	3.43	0.29	3%	3%	17%	0%	0%	0%	78%	0%	0%	0%
O=C(Nc1ccccc1)Nc1ccc(-c2cncc3[nH]ncc32)(	215	No	0%	0%	0.99	2.33	2.64	0.41	0%	0%	45%	0%	0%	55%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(Nc2ncnc3ccc(OCCCN4CCOCC4)cc32)	154	No	0%	0%	0.99	2.33	2.78	0.14	0%	0%	36%	0%	0%	64%	0%	0%	1%	0%
c1cc2c(cccc2OCCCN2CCC(c3cc4ccccc4s3)C	187	Yes	0%	0%	0.99	2.33	1.97	0.33	55%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	45%	0%	0%
c1ccc(Nc2ncnc3cc(OCCCN4CCOCC4)ccc32)	147	No	0%	0%	0.99	2.33	2.65	0.09	0%	0%	44%	0%	0%	56%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(C(O[C@H]2C[C@H]3CC[C@@H](C2)N	233	No	0%	0%	0.99	2.33	2.71	0.73	34%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	65%	0%	1%
O=C(Nc1ccccc1)Nc1ccccc1	574	No	2%	0%	0.99	2.33	1.43	0.02	9%	83%	3%	1%	0%	0%	1%	0%	4%	0%
O=C1NC(=O)C(c2ccccc2)=C1c1c[nH]c2ccccc	110	Yes	0%	0%	0.98	2.34	2.47	0.24	0%	0%	57%	0%	0%	43%	0%	0%	0%	0%

c1c[nH]cn1	772	No	8%	0%	0.98	2.34	0.73	0.37	80%	14%	0%	4%	0%	0%	0%	0%	1%	0%
O=C(Nc1ccc(C2CCNCC2)cc1C1=CCCCC1)c	165	Yes	1%	0%	0.98	2.34	2.70	0.80	0%	0%	42%	0%	0%	58%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(C2CNCc3cc(OCCCN4CCCCC4)ccc32)	112	Yes	0%	0%	0.98	2.34	2.46	0.96	41%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	59%	0%	0%
c1ccc(CNc2ccc(-c3cncnc3)cc2)cc1	110	No	2%	0%	0.98	2.34	0.83	0.36	59%	41%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(NCc1ccccc1)Nc1ccccc1	142	No	1%	0%	0.97	2.35	1.58	0.03	2%	78%	0%	18%	0%	0%	1%	0%	1%	0%
O=c1[nH]c2nc(Nc3ccccc3)ncc2cc1-c1ccccc1	376	No	1%	1%	0.97	2.35	2.45	0.03	0%	0%	60%	0%	0%	40%	0%	0%	0%	0%
O=C(Cc1nc(N2CCOCC2)cc(=O)[nH]1)N1CC	102	Yes	0%	0%	0.97	2.35	1.57	0.18	0%	60%	40%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C1COc2ccc(Nc3ccnc(Nc4ccccc4)n3)nc2N	281	No	0%	0%	0.97	2.35	2.31	0.23	0%	1%	69%	0%	0%	30%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(Nc2ccnc(Nc3ccc(N4CCC(N5CCNCC5)	310	No	0%	0%	0.97	2.35	2.39	0.29	0%	0%	64%	0%	0%	35%	0%	0%	0%	0%
c1nc2cncnc2n1[C@H]1CCCO1	859	Yes	12%	1%	0.97	2.35	0.82	0.01	83%	5%	5%	0%	0%	0%	6%	0%	0%	0%
O=C(Nc1ccccc1)c1cnc(Nc2cc(N3CCNCC3)nc	246	No	0%	0%	0.96	2.36	2.44	0.13	0%	0%	61%	0%	0%	39%	0%	0%	0%	0%
O=c1[nH]c2ccccc2cc1-c1nc2ccc(N3CCNCC3	230	Yes	0%	0%	0.96	2.36	2.44	1.00	0%	0%	61%	0%	0%	39%	0%	0%	0%	0%
O=C(Nc1ccccc1)Nc1ccc(-c2cccc3c2CNC3=O	106	Yes	0%	0%	0.96	2.36	2.76	0.33	0%	0%	39%	0%	0%	61%	0%	0%	0%	0%
O=C(Nc1ccccc1)Nc1ccc(-c2csc3ccncc32)cc1	791	No	13%	0%	0.96	2.36	2.43	0.30	0%	0%	62%	0%	0%	38%	0%	0%	0%	0%
O=C(CCCN1CCC(c2ccccc2)CC1)c1ccccc1	610	No	1%	0%	0.96	2.36	1.69	0.80	77%	0%	0%	0%	0%	0%	2%	0%	0%	19%
O=C(Nc1ccc(CN2CCNCC2)cc1)Nc1ccc(Oc2c	264	No	0%	0%	0.96	2.36	2.43	0.00	0%	0%	62%	0%	0%	38%	0%	0%	0%	0%
c1c(-c2ccccc2)nc2ccccn12	212	No	0%	0%	0.95	2.37	3.79	0.31	3%	10%	0%	0%	0%	0%	5%	0%	82%	0%
O=C(Nc1ccccc1)Nc1ccc(-c2cccc3[nH]ncc32)c	500	Yes	0%	0%	0.94	2.38	2.82	0.13	0%	0%	36%	0%	0%	64%	0%	0%	0%	0%
O=C1NCc2c1c1c3ccccc3n3c1c1c2c2ccccc2n	456	Yes	0%	0%	0.94	2.38	2.28	0.01	0%	2%	72%	0%	0%	27%	0%	0%	0%	0%
c1[nH]nc2cc(Nc3ccnc(Nc4ccccc4)n3)ccc12	165	No	0%	0%	0.94	2.38	2.88	0.27	0%	1%	31%	0%	0%	68%	0%	0%	0%	0%
O=C(Nc1ccc(Sc2nc(Nc3cc[nH]n3)cc(N3CCN(	259	No	0%	0%	0.94	2.38	2.42	0.75	0%	0%	64%	0%	0%	36%	0%	0%	0%	0%
O=C(Nc1ccccc1)Nc1ccc(-c2cccc3oncc32)cc1	274	Yes	0%	0%	0.94	2.38	2.82	0.40	0%	0%	36%	0%	0%	64%	0%	0%	0%	0%
O=C(NCCc1ccccc1)[C@@H]1CCCN1	198	No	5%	6%	0.94	2.38	0.89	0.01	83%	3%	1%	9%	0%	0%	0%	0%	5%	0%
O=C(Cc1nc(N2CCOCC2)cc(=O)[nH]1)Nc1ccc	108	No	0%	0%	0.94	2.38	1.74	0.05	0%	35%	65%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1cc(-c2ccccc2)n(-c2ccccc2)n1	662	No	8%	0%	0.94	2.38	1.36	0.29	18%	78%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	4%	0%
O=C(Nc1ccccc1)Nc1ccc(-c2csc3ncncc23)cc1	548	No	0%	0%	0.93	2.39	2.86	0.53	0%	0%	34%	0%	0%	66%	0%	0%	0%	0%
c1nc2cncnc2n1C1CCCO1	111	Yes	6%	0%	0.92	2.40	0.78	0.01	83%	11%	3%	0%	0%	0%	2%	2%	0%	0%
O=C1Nc2ccccc2C1=Cc1ccc[nH]1	188	Yes	0%	0%	0.92	2.40	2.41	0.06	0%	0%	66%	0%	0%	34%	0%	0%	0%	0%
O=C(Cc1ccccc1)Nc1cccc(-c2nc3sccn3c2-c2c	123	No	0%	0%	0.92	2.40	2.41	0.27	0%	0%	67%	0%	0%	33%	0%	0%	0%	0%
O=C(NCCCN1CCN(c2ccccc2)CC1)c1cn(-c2c	289	Yes	0%	0%	0.91	2.41	1.63	0.28	67%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	33%	0%	0%
c1c(-c2ccccc2)c2cncnc2n1-c1ccccc1	104	No	4%	0%	0.91	2.41	2.18	0.67	0%	4%	78%	0%	0%	18%	0%	0%	0%	0%
c1n[nH]c2ccc(Nc3ccnc(Nc4ccc(N5CCNCC5)c	176	Yes	0%	0%	0.91	2.41	2.40	0.02	0%	0%	68%	0%	0%	32%	0%	0%	0%	0%
O=C(c1ccc(/C=C/c2n[nH]c3ccccc23)cc1)N1C	149	No	0%	0%	0.90	2.42	2.40	0.69	0%	0%	68%	0%	0%	32%	0%	0%	0%	0%
O=C(N[C@H]1CC2O[C@H](C1)n1c3ccccc3c	325	Yes	0%	0%	0.89	2.43	2.34	0.07	0%	1%	73%	0%	0%	27%	0%	0%	0%	0%
O=C(Nc1ccccc1)Nc1ccc(-c2coc3ncncc23)cc1	125	No	0%	0%	0.89	2.43	2.40	0.51	0%	0%	70%	0%	0%	30%	0%	0%	0%	0%
O=C(NCCCN1CCOCC1)c1c[nH]c(/C=C2\C(=(	204	Yes	0%	0%	0.89	2.43	2.40	0.01	0%	0%	70%	0%	0%	30%	0%	0%	0%	0%
c1ccc2oc(Nc3ccc(-c4nn(C5CCCCC5)c5ncncc	113	Yes	0%	0%	0.88	2.44	2.40	0.06	0%	0%	70%	0%	0%	30%	0%	0%	0%	0%
O=C1NCc2c1c1c3ccccc3n3c1c1c2c2ccccc2n	856	Yes	0%	0%	0.88	2.44	2.32	0.10	0%	0%	75%	0%	0%	25%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(Nc2ncnc3cc(OCC4CCNCC4)ccc32)cc1	292	No	0%	0%	0.87	2.45	2.98	0.53	0%	0%	29%	0%	0%	71%	0%	0%	0%	0%
C=C1c2ccccc2CCc2ccccc21	105	No	0%	0%	0.87	2.45	1.15	1.00	83%	1%	0%	0%	0%	1%	1%	13%	0%	1%
c1ccc(Nc2ccnc(Nc3ccc(OCCN4CCCC4)cc3)n	118	No	0%	0%	0.85	2.47	2.39	0.05	0%	0%	72%	0%	0%	28%	0%	0%	0%	0%
C(=C/c1ccccc1)\CN1CCN(C[C@@H]2ON=C3	173	No	0%	0%	0.85	2.47	1.53	0.15	72%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	28%	0%	0%
O=C(Nc1ccccc1)Nc1ccc2c(c1)CCc1sc3ncncc	137	No	0%	0%	0.85	2.47	2.39	0.94	0%	0%	72%	0%	0%	28%	0%	0%	0%	0%
c1cc2c(ncnc2-c2ccccc2)[nH]1	104	No	0%	0%	0.84	2.48	2.54	0.24	0%	0%	77%	0%	0%	1%	0%	0%	22%	0%
c1ncc(-c2ccnc(Nc3ccc(N4CCNCC4)cc3)n2)s1	129	Yes	0%	0%	0.83	2.49	2.40	0.62	0%	0%	74%	0%	0%	26%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(CNC2CCNCC2)cc1	158	No	0%	0%	0.83	2.49	3.35	0.52	0%	26%	0%	0%	0%	0%	0%	74%	0%	0%
c1ccc(C2CNCc3ccccc32)cc1	146	Yes	0%	1%	0.81	2.51	3.75	0.88	8%	0%	0%	0%	1%	0%	0%	85%	5%	0%
c1[nH]c2ccccc2c1CCNCc1ccccc1	121	Yes	0%	0%	0.80	2.52	1.37	0.02	21%	79%	0%	0%	0%	0%	1%	0%	0%	0%
c1ccc(-c2ccc(-c3ccccc3)cc2)cc1	114	Yes	2%	0%	0.80	2.52	2.41	0.07	1%	15%	0%	82%	0%	0%	0%	2%	0%	0%
c1ccc(C2CC(N3CCNCC3)c3ccccc32)cc1	182	No	1%	0%	0.80	2.52	1.46	0.36	76%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	24%	0%	0%
O=C(Nc1ccnn1-c1ccccc1)Nc1cccc2ccccc21	117	No	3%	0%	0.79	2.53	2.40	0.10	0%	0%	76%	0%	0%	24%	0%	0%	0%	0%
C1=CC2CC1CC2Nc1ccnc(Nc2ccc(N3CCNCC	101	Yes	0%	0%	0.79	2.53	2.40	0.58	0%	0%	76%	0%	0%	24%	0%	0%	0%	0%
O=C1CCC2[C@H]3CCC4CCC[C@H]4[C@@	103	Yes	22%	0%	0.78	2.54	3.78	0.00	1%	2%	0%	0%	83%	0%	0%	0%	14%	0%
O=C1NCc2c1c1c3ccccc3n3c1c1c2c2ccccc2n	150	Yes	0%	0%	0.78	2.54	2.40	0.08	0%	0%	77%	0%	0%	23%	0%	0%	0%	0%
C1C2CC3CC1CC(C2)C3	215	No	53%	0%	0.78	2.54	1.71	0.08	2%	86%	0%	10%	0%	0%	0%	0%	1%	0%
O=C1NCCN1CCN1CCC(c2cn(-c3ccccc3)c3c	109	Yes	0%	0%	0.78	2.54	1.47	0.77	77%	0%	0%	0%	0%	0%	23%	0%	0%	0%
c1ccc(C(OC2CC3CCC(C2)N3)c2ccccc2)cc1	219	No	1%	0%	0.77	2.55	3.30	0.66	22%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	78%	0%	0%
O=C(c1ccccc1)n1cnc(Nc2ccccc2)n1	112	No	0%	0%	0.77	2.55	2.40	0.18	0%	0%	78%	0%	0%	22%	0%	0%	0%	0%
c1ccc2[nH]c(-c3n[nH]c4ccccc43)nc2c1	162	Yes	0%	0%	0.76	2.56	2.40	0.79	0%	0%	78%	0%	0%	22%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(Nc2ccnc(Nc3ccc(N4CCOCC4)cc3)n2)c	109	No	0%	0%	0.76	2.56	2.41	0.11	0%	0%	78%	0%	0%	22%	0%	0%	0%	0%
O=S(=O)(c1ccccc1)N1CCCC1	100	No	5%	2%	0.76	2.56	2.56	0.07	5%	2%	0%	88%	2%	0%	0%	0%	3%	0%
c1ccc(Nc2ccnc3cc(OCCCN4CCNCC4)ccc32)	189	Yes	0%	0%	0.75	2.57	2.41	0.05	0%	0%	78%	0%	0%	22%	0%	0%	0%	0%
c1c2ccccc2oc1Cc1ccccc1	107	Yes	2%	0%	0.75	2.57	0.88	0.48	79%	21%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(Nc1cnc2[nH]cc(-c3ccccc3)c2c1)c1ccccc	117	No	0%	0%	0.75	2.57	2.41	0.56	0%	0%	79%	0%	0%	21%	0%	0%	0%	0%
c1[nH]c2ccccc2c1CCCCN1CCN(c2ccccc2)CC	120	Yes	0%	26%	0.75	2.57	1.32	0.39	83%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	16%	0%	2%
c1cc(NC2CCC2)nc(Nc2ccc3c(c2)C2CCC3N2	104	No	0%	0%	0.74	2.58	2.41	0.04	0%	0%	79%	0%	0%	21%	0%	0%	0%	0%

O=C1COc2ccc(CC3CCN(CCOc4cccc5ncccc5	130	Yes	0%	0%	0.74	2.58	1.41	0.92	79%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	21%	0%	0%
c1ccc(CCN2CCC(c3ccccc3)CC2)cc1	105	No	0%	0%	0.72	2.60	1.14	0.62	88%	1%	0%	0%	0%	0%	8%	3%	0%	1%
C(#Cc1ccccn1)c1ccccc1	142	No	1%	0%	0.72	2.60	0.99	0.71	86%	8%	0%	0%	0%	0%	6%	0%	0%	0%
O=C(Nc1ccccn1)Nc1ccnc2ccccc21	150	Yes	0%	0%	0.72	2.60	2.42	0.13	0%	0%	80%	0%	0%	20%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(Nc2ccnc(Nc3ccccc3)n2)cc1	930	No	0%	0%	0.72	2.60	2.41	0.24	0%	0%	81%	0%	0%	19%	0%	0%	0%	0%
O=C1CNC(=O)CNC(=O)CNC(=O)CNC(=O)Cl	153	No	1%	0%	0.71	2.61	1.82	0.00	4%	87%	0%	0%	0%	0%	0%	8%	1%	0%
c1cn(-c2ccccc2)c2nc(Nc3ccccc3)ncc12	135	No	0%	0%	0.71	2.61	2.42	0.41	0%	0%	81%	0%	0%	19%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(CSc2nc3ccccc3[nH]2)cc1	115	Yes	2%	0%	0.69	2.63	0.92	0.29	82%	18%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(Nc1ccccc1)Nc1ccc(-c2ccnc3[nH]ncc32)c	144	No	0%	0%	0.68	2.64	3.33	0.13	0%	0%	18%	0%	0%	82%	0%	0%	0%	0%
c1ccc2c(c1)CCCC2	858	No	9%	1%	0.68	2.64	1.07	0.50	89%	2%	0%	1%	7%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ncc(-c2nnc(SCCCN3CC4CC4(c4ccccc4)C3	252	No	6%	0%	0.68	2.64	1.39	0.95	82%	0%	0%	0%	0%	0%	18%	0%	0%	0%
c1onc(-c2ccccc2)c1-c1ccccc1	104	No	0%	0%	0.68	2.64	2.05	0.08	0%	86%	0%	0%	2%	0%	0%	0%	13%	0%
O=C(NCc1ccccc1)c1ccccn1	120	No	0%	0%	0.66	2.66	2.33	0.03	0%	3%	89%	0%	0%	4%	0%	0%	4%	0%
c1[nH]c2ncc(-c3ccccc3)cc2c1-c1ccccc1	112	No	0%	0%	0.66	2.66	2.44	0.17	0%	0%	83%	0%	0%	17%	0%	0%	0%	0%
c1ccc2c(c1)CCNC2	206	Yes	6%	0%	0.66	2.66	1.75	0.47	4%	89%	0%	4%	2%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(-c2ccnc(-c3ccccc3)n2)cc1	145	No	0%	0%	0.65	2.67	1.09	0.51	85%	0%	0%	14%	0%	0%	0%	0%	1%	0%
N=C(Nc1ccccc1)Nc1ccccc1	213	No	0%	0%	0.64	2.68	5.91	0.69	9%	0%	0%	0%	0%	0%	3%	0%	0%	88%
O=C1NC(=O)C2=C1c1cn(c3ccccc13)CCCOC	107	Yes	0%	0%	0.63	2.69	2.40	0.59	0%	1%	86%	0%	0%	13%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(Nc2ncnc3ccccc32)cc1	1275	No	2%	1%	0.63	2.69	3.47	0.34	1%	2%	7%	0%	0%	90%	0%	0%	1%	0%
c1nc2ccccc2n1-c1cc(OCc2ccccc2)cs1	153	No	0%	0%	0.63	2.69	2.45	0.15	0%	0%	84%	0%	0%	16%	0%	0%	0%	0%
c1nc2ccc(-c3nc(CNc4ccccc4)[nH]c3-c3ccccn3	102	No	0%	0%	0.63	2.69	3.42	0.36	0%	0%	16%	0%	0%	84%	0%	0%	0%	0%
C1CCOCC1	119	No	12%	0%	0.61	2.71	2.08	0.00	0%	87%	0%	1%	0%	0%	0%	0%	13%	0%
c1ccc(CCCN2CCN(c3ccccc3)CC2)cc1	108	No	0%	3%	0.61	2.71	1.35	0.31	89%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	5%	0%	6%
c1ccc(-c2ccc3nc(Nc4ccc(OCCN5CCCC5)cc4)	107	Yes	0%	0%	0.58	2.74	2.47	0.53	0%	0%	86%	0%	0%	14%	0%	0%	0%	0%
O=S(=O)(c1ccccc1)n1ccc2ccccc21	225	Yes	0%	0%	0.58	2.74	0.99	0.40	86%	14%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1cc2c(cncc2Oc2ccccc2)s1	218	No	1%	1%	0.58	2.74	4.24	0.59	0%	0%	14%	0%	0%	0%	0%	0%	86%	0%
c1ccc(-c2ccccc2-c2ccccc2)cc1	118	Yes	0%	0%	0.57	2.75	2.01	0.15	1%	88%	0%	0%	11%	0%	0%	0%	0%	0%
c1cncc(Nc2ncccc2-c2ncncn2)c1	142	No	0%	0%	0.55	2.77	1.86	0.43	0%	87%	13%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(c1ccccc1)n1ccc2ccccc21	312	Yes	2%	0%	0.54	2.78	1.76	0.56	8%	90%	0%	0%	1%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C1Cc2c3ccccc3[nH]c2-c2ccccc2N1	134	Yes	0%	0%	0.53	2.79	2.41	0.25	1%	0%	91%	0%	1%	7%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(N2C=NC=NC2)cc1	146	No	14%	0%	0.52	2.80	1.94	0.77	0%	91%	5%	0%	0%	0%	0%	0%	3%	0%
O=C1Nc2ccccc2Nc2cc(-c3ccccc3)ccc21	130	Yes	0%	0%	0.52	2.80	2.50	0.07	0%	0%	88%	0%	0%	12%	0%	0%	0%	0%
O=S(=O)(c1ccccc1)N1CCNCC1	140	No	0%	0%	0.51	2.81	2.72	0.04	0%	11%	0%	89%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1[nH]c2ncncc2c1-c1ccccc1	167	No	1%	0%	0.51	2.81	2.50	0.40	0%	0%	89%	0%	0%	11%	0%	0%	0%	0%
c1[nH]c2ncccc2c1-c1ccccc1	118	No	0%	0%	0.50	2.82	2.51	0.56	0%	0%	89%	0%	0%	11%	0%	0%	0%	0%
O=c1c(-c2ccccc2)cn(Cc2ccccc2)c(=O)n1CCc	185	No	1%	0%	0.49	2.83	1.04	0.01	89%	11%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1cc2c(cncc2-c2ccccc2)s1	157	No	0%	0%	0.48	2.84	2.52	0.59	0%	0%	90%	0%	0%	10%	0%	0%	0%	0%
c1[nH]c2ncccc2c1-c1ccnc(NCc2ccccc2)c1	119	No	0%	0%	0.47	2.85	2.53	0.31	0%	0%	90%	0%	0%	10%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(CCNCCc2ccccc2)cc1	224	No	0%	0%	0.47	2.85	1.32	0.55	92%	0%	0%	2%	0%	0%	0%	0%	0%	5%
c1cc2c(ncnc2-c2cnn(CC3CCCC3)c2)[nH]1	120	No	0%	0%	0.47	2.85	2.53	0.01	0%	0%	90%	0%	0%	10%	0%	0%	0%	0%
O=c1cc(-c2ccccc2)oc2c1cccc2C1CCNCC1	125	Yes	0%	0%	0.47	2.85	2.50	0.02	0%	1%	91%	0%	0%	8%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(-c2ccc3cccnc3n2)cc1	124	No	2%	0%	0.46	2.86	1.34	0.79	90%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	10%	0%
c1c(-c2ccccc2)nnn1-c1ccccc1	117	No	0%	3%	0.45	2.87	1.80	0.21	9%	91%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(CCc1ccccc1)NCC(=O)NCCc1ccccc1	441	No	9%	0%	0.45	2.87	1.11	0.01	93%	2%	0%	5%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1[nH]c2ncccc2c1-c1ccnc(NC2CCCCC2)n1	869	No	0%	0%	0.44	2.88	2.54	0.23	0%	0%	91%	0%	0%	9%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(-c2ccc(-c3cnccn3)cc2)cc1	176	Yes	0%	0%	0.44	2.88	4.44	0.22	0%	9%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	91%	0%
O=C(Nc1ccccc1)Nc1ccc(NC(=O)c2csc3ncncc	111	No	0%	0%	0.44	2.88	2.55	0.01	0%	0%	91%	0%	0%	9%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(N2CCNCC2)cc1	327	No	1%	0%	0.43	2.89	1.17	0.63	94%	1%	0%	1%	0%	0%	1%	0%	2%	0%
c1nc(-c2ccccc2)c(-c2ccccc2)[nH]1	116	No	1%	0%	0.42	2.90	2.01	0.43	2%	94%	0%	0%	3%	0%	0%	0%	2%	0%
O=c1cc(-c2ccccc2)oc2c3ccccc3ccc12	107	Yes	0%	0%	0.41	2.91	2.05	0.23	2%	93%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	5%	0%
c1ccc(-c2cncnc2)cc1	134	No	1%	7%	0.40	2.92	2.00	0.63	0%	94%	4%	1%	0%	0%	0%	0%	1%	0%
c1ccc2c(c1)Cc1ccccc1N1CCNCC21	100	No	1%	0%	0.40	2.92	1.31	0.74	92%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	8%	0%	0%
c1[nH]c2ncccc2c1-c1nccc(NC2CCCCC2)n1	190	No	0%	0%	0.40	2.92	2.57	0.25	0%	0%	92%	0%	0%	8%	0%	0%	0%	0%
O=C1CCc2ccc(OCCCCN3CCN(c4ccccc4)CC	171	Yes	0%	6%	0.40	2.92	1.25	0.05	95%	1%	0%	0%	0%	0%	2%	1%	0%	2%
c1ccc([C@@]23C[C@@H]2CNC3)cc1	104	No	0%	0%	0.39	2.93	4.17	0.85	8%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	92%	0%	0%
c1nc2ccccc2s1	664	No	5%	0%	0.39	2.93	1.98	0.13	2%	95%	0%	3%	1%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C1C=CC2C(=C1)CC[C@H]1[C@@H]3CC	173	No	2%	0%	0.38	2.94	4.09	0.00	0%	0%	0%	8%	92%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C1c2ccccc2C(=O)N1c1ccccc1	122	No	0%	0%	0.38	2.94	2.09	0.08	0%	93%	1%	0%	6%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(NCc1ccccc1)c1cccc(-c2ccccc2)n1	135	No	0%	0%	0.38	2.94	4.59	0.86	0%	0%	7%	0%	0%	0%	0%	0%	93%	0%
O=C(Nc1n[nH]c2ccc(-c3cn(Cc4ccccc4)nn3)cc	379	No	0%	0%	0.37	2.95	2.59	0.01	0%	0%	93%	0%	0%	7%	0%	0%	0%	0%
O=C(Nc1ccccc1)N1CCN(c2ncnc3cc(OCCCN4	114	No	0%	0%	0.37	2.95	3.80	0.68	0%	0%	7%	0%	0%	93%	0%	0%	0%	0%
O=C1CC2(CCCC2)CC(=O)N1CCCCN1CCN(	101	No	100%	0%	0.36	2.96	1.39	0.68	94%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	1%	0%	5%
c1ccc(OCC2=NCCN2)cc1	205	No	0%	0%	0.36	2.96	1.33	0.05	93%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	7%	0%
c1[nH]c2ccccc2c1C1=CCNCC1	181	Yes	5%	0%	0.35	2.97	1.31	0.79	93%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	7%	0%	0%
c1coc(-c2ccc3ncnc(Nc4ccc(OCc5ccccc5)cc4)	143	No	1%	0%	0.35	2.97	3.85	0.59	0%	3%	1%	0%	0%	95%	1%	0%	0%	0%
c1noc2ccccc12	122	No	0%	0%	0.35	2.97	2.14	0.21	0%	93%	0%	0%	7%	0%	0%	0%	0%	0%

c1ccc([C@@H]2CCCNC2)cc1	125	No	14%	0%	0.34	2.98	1.46	0.66	94%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	6%
O=C(CNC(=O)OCc1ccccc1)NCCc1ccccc1	142	No	1%	1%	0.34	2.98	3.05	0.01	1%	1%	0%	95%	0%	0%	0%	0%	4%	0%
c1n[nH]c2ccc(-c3cncc(OCCCc4ccccc4)c3)cc1	421	No	0%	0%	0.33	2.99	2.61	0.08	0%	0%	94%	0%	0%	6%	0%	0%	0%	0%
O=c1c(CCN2CCC(c3noc4ccccc43)CC2)cnc2	212	No	0%	0%	0.33	2.99	1.32	0.78	94%	0%	0%	0%	0%	0%	6%	0%	0%	0%
c1[nH]c2ccccc2c1CN1CCC(c2ccccc2)CC1	133	Yes	0%	0%	0.33	2.99	1.45	0.18	94%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	6%
O=C(Cc1ccccc)c1c[nH]c2ccccc12	105	Yes	0%	0%	0.32	3.00	1.18	0.12	94%	6%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc2c(c1)C=CCO2	117	No	0%	3%	0.31	3.01	2.16	0.05	1%	96%	0%	0%	0%	0%	1%	0%	0%	3%
O=c1[nH]c2nc(/C=C/c3ccccc3)[nH]c2c(=O)[nH	180	Yes	0%	0%	0.31	3.01	1.18	0.39	94%	6%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(Nc1ccccc1C(=O)Nc1ccccn1)c1ccccc1	109	No	4%	0%	0.31	3.01	3.13	0.06	0%	0%	0%	94%	0%	0%	6%	0%	0%	0%
c1cn(-c2ccccc2)c(-c2ccccc2)n1	147	No	0%	0%	0.30	3.02	1.98	0.53	5%	95%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(Nc1ccc(Oc2ccnc3ccccc32)cc1)c1c[nH]n	147	Yes	0%	0%	0.30	3.02	3.88	0.15	0%	0%	5%	0%	0%	95%	0%	0%	0%	0%
c1ccc2c(c1)nccc2Nc1ccc(N2CCNCC2)cc1	110	Yes	0%	0%	0.30	3.02	1.23	0.26	95%	0%	4%	0%	0%	0%	0%	0%	1%	0%
c1cc2c(s1)Nc1ccccc1N=C2N1CCNCC1	222	No	0%	0%	0.30	3.02	1.30	0.94	95%	0%	0%	0%	0%	0%	4%	1%	0%	0%
O=C1NC(=O)C(c2nc(N3CCNCC3)nc3ccccc3	182	Yes	0%	0%	0.28	3.04	2.64	0.45	0%	0%	95%	0%	0%	5%	0%	0%	0%	0%
O=C(Cc1ccccc1)N[C@H](CN1CCCC1)c1ccc	162	No	10%	0%	0.28	3.04	1.20	0.35	95%	5%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1nc2ccc(-c3ccccc3)cc2s1	149	Yes	4%	0%	0.27	3.05	2.17	0.04	0%	95%	0%	0%	5%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(Nc1cccnc1)N1CCc2ccccc21	111	Yes	0%	0%	0.26	3.06	1.22	0.20	95%	5%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C1Nc2cncc(n2)OCCCCCOc2ccccc2N1	113	No	0%	2%	0.26	3.06	2.66	0.08	0%	0%	96%	0%	0%	4%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(CC(c2ccccc2)N2CCNCC2)cc1	123	No	0%	0%	0.26	3.06	4.50	0.54	1%	2%	0%	0%	0%	0%	1%	97%	0%	0%
O=C1Nc2ccccc2/C1=N/Nc1ccccc1	143	Yes	0%	100%	0.25	3.07	2.58	0.00	0%	4%	96%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc([C@@H]2CN3CCC[C@@H]3c3ccccc3	145	Yes	0%	0%	0.25	3.07	4.44	0.90	4%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	96%	0%	0%
c1n[nH]c2c1cc(-c1c[nH]c3cncnc31)cc2-c1cc2	170	Yes	0%	0%	0.25	3.07	2.67	0.00	0%	0%	96%	0%	0%	4%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(-c2ccccc2OCC2=NCCN2)cc1	148	Yes	0%	0%	0.24	3.08	1.35	0.04	96%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	4%	0%
O=C(CCc1ccccc1)N1CCCC1	164	No	4%	0%	0.24	3.08	3.09	0.17	1%	2%	0%	97%	0%	0%	1%	0%	0%	0%
c1ccc2c(c1)N=C(N1CCNCC1)c1ccccc1O2	107	No	8%	0%	0.23	3.09	1.34	0.40	96%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	4%	0%	0%
c1ccc(CCCN2CCN(CCOC(c3ccccc3)c3ccccc	320	No	1%	0%	0.23	3.09	4.64	0.58	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	97%	0%	3%
c1cn(Cc2ccc(-c3ccccc3-c3nn[nH]n3)cc2)cn1	131	Yes	0%	0%	0.22	3.10	1.31	0.43	97%	0%	0%	1%	0%	0%	0%	2%	0%	0%
c1ncn2c1c(Nc1ccccc1)nc1ccccc12	210	Yes	0%	0%	0.21	3.11	2.69	0.28	0%	0%	97%	0%	0%	3%	0%	0%	0%	0%
c1ccc2c(c1)N=C(N1CCNCC1)c1ccccc1N2	711	No	5%	0%	0.20	3.12	1.31	0.84	98%	0%	1%	0%	0%	0%	1%	1%	0%	0%
O=C(Cc1ccccc1)Nc1ccccc1	162	No	10%	0%	0.19	3.13	2.21	0.13	0%	98%	0%	0%	1%	0%	0%	0%	1%	0%
c1ccc2c(c1)OC[C@@H]1CC=CC[C@@H]21	205	No	5%	0%	0.19	3.13	1.33	0.11	97%	0%	0%	0%	0%	3%	0%	0%	0%	0%
c1cc(-c2ccccc2)n(-c2ccccc2)c1	164	No	0%	98%	0.19	3.13	2.15	0.33	2%	98%	0%	0%	0%	0%	1%	0%	0%	0%
O=S(=O)(c1ccccc1)N1CCN(c2ccccc2)CC1	108	No	0%	2%	0.18	3.14	2.17	0.24	0%	97%	3%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1nn2nccccc2c1-c1ccnc(Nc2ccccc2)n1	110	No	0%	0%	0.18	3.14	2.73	0.59	0%	0%	97%	0%	0%	0%	0%	3%	0%	0%
c1ccc(CCN2CCC(Nc3ccccc3)CC2)cc1	130	No	12%	4%	0.18	3.14	1.34	0.09	98%	0%	0%	0%	0%	0%	2%	1%	0%	0%
c1nc2c(ncnc2NCc2ccccc2)n1[C@H]1CCCO1	443	Yes	2%	1%	0.18	3.14	1.35	0.03	97%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	3%	0%	0%
c1[nH]c2ncccc2c1-c1ccncc1	262	No	0%	0%	0.18	3.14	2.72	0.38	0%	0%	97%	0%	0%	3%	0%	0%	0%	0%
O=C1NC=NC1(c1ccccc1)c1ccccc1	114	No	0%	0%	0.18	3.14	3.15	0.23	0%	3%	0%	97%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(C2c3ccccc3C3=NCCN32)cc1	135	No	0%	0%	0.17	3.15	4.62	0.64	1%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	98%	0%	1%
c1n[nH]c2ccc(-c3nnn(Cc4ccccc4)c3-c3ccccc3	192	No	0%	0%	0.17	3.15	2.72	0.01	0%	0%	97%	0%	0%	3%	0%	0%	0%	0%
O=C(NCCCCN1CCN(c2ccccc2)CC1)c1cc2cc	183	Yes	0%	0%	0.17	3.15	1.36	0.45	98%	0%	0%	0%	0%	0%	2%	0%	0%	1%
c1onc(-c2ccccc2)c1COc1ccccn1	130	No	1%	0%	0.16	3.16	4.77	0.59	0%	0%	0%	0%	2%	0%	98%	0%	0%	0%
c1ccc(C(c2ccccc2)N2CCNCC2)cc1	277	No	0%	0%	0.16	3.16	1.34	0.50	98%	0%	0%	0%	0%	0%	1%	1%	0%	0%
c1[nH]c2cccc3c2c1C[C@H]1NCCC[C@H]31	110	Yes	0%	32%	0.15	3.17	1.33	0.50	98%	1%	0%	0%	0%	0%	1%	0%	0%	0%
O=C1CCCC1	142	No	0%	0%	0.15	3.17	1.33	0.00	98%	0%	0%	2%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(NCCCN1CCC(c2ccccc2)(c2ccccc2)CC1	195	Yes	0%	3%	0.14	3.18	1.37	0.00	98%	0%	0%	0%	0%	0%	2%	0%	0%	0%
c1ccc2c(c1)N=C(N1CCNCC1)c1ccccc1S2	119	No	7%	0%	0.14	3.18	1.38	0.78	98%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	1%	0%	1%
O=C1C=CC2C(=C1)CC[C@H]1[C@@H]3CC	104	No	0%	0%	0.14	3.18	4.44	0.00	0%	0%	0%	0%	98%	0%	0%	0%	2%	0%
c1cn(Cc2ccccc2)cn1	188	No	0%	0%	0.13	3.19	2.20	0.87	1%	98%	0%	1%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=c1c(=O)c(Nc2ccncc2)c1NCc1ccccc1	127	No	0%	0%	0.13	3.19	2.73	0.03	0%	1%	98%	0%	0%	1%	0%	0%	0%	0%
O=C(Nc1ccccc1)NC1CCNCC1	110	No	0%	0%	0.13	3.19	2.25	0.10	0%	98%	0%	0%	0%	0%	2%	0%	0%	0%
O=c1[nH]c2[nH]c(-c3ccccc3)nc2c(=O)[nH]1	446	Yes	1%	0%	0.13	3.19	1.33	0.23	98%	2%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(CNc2ncccn2)cc1	112	No	1%	0%	0.13	3.19	2.22	0.01	0%	98%	2%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(Cc1ccccc1)N[C@@H]1CCCC[C@H]1N	118	No	0%	0%	0.12	3.20	1.41	0.61	98%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	2%
c1[nH]c2cccc3c2c1C[C@H]1NCCC=C31	206	Yes	0%	15%	0.12	3.20	1.35	0.04	99%	1%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=c1[nH]c2ccccc2n1C1CCN(CCCOc2ccccc2	136	Yes	3%	0%	0.11	3.21	1.38	0.32	99%	0%	0%	0%	0%	0%	1%	0%	0%	0%
c1nc2ccccc2n1-c1nc(N2CCOCC2)nc(N2CCO	140	No	1%	0%	0.11	3.21	2.24	0.74	0%	99%	1%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C1NC(=O)C(Cc2ccc(OCCNc3ccccn3)cc2)S	166	No	0%	0%	0.11	3.21	4.43	0.35	1%	1%	0%	0%	99%	0%	0%	0%	0%	0%
c1n[nH]c2ccc(-c3cn(Cc4ccccc4)nn3)cc12	289	No	0%	0%	0.11	3.21	2.77	0.02	0%	0%	99%	0%	0%	1%	0%	0%	0%	0%
c1cc2c3c(c1)C[C@H]1NCC[C@@]34[C@H]((	291	No	0%	0%	0.10	3.22	1.41	0.07	99%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	1%
O=C(NN1CCCCC1)c1cc(-c2ccccc2)n(-c2cccc	298	No	1%	0%	0.10	3.22	1.35	0.13	99%	1%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=S1(=O)NCCc2ccsc21	150	No	0%	0%	0.10	3.22	2.27	0.50	0%	99%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	1%	0%
O=C1c2ccccc2CC1CC1CCN(Cc2ccccc2)CC1	174	Yes	0%	0%	0.10	3.22	2.26	0.25	1%	99%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	1%
O=C1C=C2CC[C@@H]3C(=C2CC1)[C@@H	287	No	2%	0%	0.10	3.22	4.45	0.01	0%	0%	0%	0%	99%	0%	0%	0%	0%	0%
c1cc2c3c(c1)C[C@H]1N(CC4CC4)CC[C@@]	236	No	0%	0%	0.10	3.22	1.39	0.00	99%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	1%	0%
O=S(=O)(Nc1cccc2cc[nH]c21)c1ccccc1	161	Yes	0%	0%	0.10	3.22	2.28	0.00	0%	99%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	1%	0%

O=C(NCc1ccccc1)c1ccc(-c2ccncc2)cc1	245	No	0%	0%	0.10	3.22	2.78	0.44	0%	0%	99%	0%	0%	1%	0%	0%	0%	0%
O=C(NCCCCN1CCN(c2ccccc2)CC1)c1ccccc	168	Yes	0%	0%	0.09	3.23	1.42	0.35	99%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	1%
O=S(=O)(N/N=C/c1cnn2ccccc12)c1ccccc1	175	No	0%	0%	0.09	3.23	2.25	0.06	0%	99%	1%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1[nH]c2ccccc2c1CCCOc1cncc(-c2ccc3cnccc	100	Yes	0%	0%	0.08	3.24	2.79	0.01	0%	0%	99%	0%	0%	1%	0%	0%	0%	0%
c1c(Cc2ccccc2)n[nH]c1C1CCN(C[C@H]2CN(	102	No	0%	0%	0.08	3.24	1.40	0.01	99%	0%	0%	0%	0%	0%	1%	0%	0%	0%
O=C1N=C(c2ccccc2)S/C1=C\c1ccccc1	103	No	0%	100%	0.08	3.24	2.29	0.00	0%	99%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	1%	0%
c1nsnc1C1=CCCNC1	210	No	9%	0%	0.08	3.24	1.42	0.60	99%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	1%
O=C(NCCN1CCC(c2ccccc2)CC1)[C@H]1Cc2	213	Yes	0%	0%	0.08	3.24	1.40	0.02	99%	0%	0%	0%	0%	0%	1%	0%	0%	0%
c1ccc(C2CCc3ccccc32)cc1	214	No	0%	0%	0.08	3.24	4.72	0.89	1%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	99%	0%	0%
O=c1[nH]c2nc(-c3ccccc3)[nH]c2c(=O)[nH]1	107	Yes	10%	0%	0.08	3.24	1.37	0.21	99%	1%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(NCCN1CCC(n2c(=O)[nH]c3ccccc32)CC	107	Yes	0%	0%	0.08	3.24	2.25	0.18	1%	99%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(NCc1ccccc1)Nc1ccc(-c2cn[nH]c2)cc1	109	No	0%	0%	0.08	3.24	2.78	0.02	0%	1%	99%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=S(=O)(Nc1nncs1)c1ccccc1	372	No	2%	0%	0.08	3.24	2.28	0.00	0%	99%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	1%	0%
O=C(CCc1ccccc1)NCC(=O)NCC(=O)NCCc1c	771	No	5%	0%	0.07	3.25	1.37	0.00	99%	1%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1cc(-c2ccncn2)[nH]c1-c1ccccc1	226	No	0%	0%	0.07	3.25	2.79	0.01	0%	0%	99%	0%	0%	1%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(NCC2=NCCN2)cc1	229	No	1%	0%	0.07	3.25	1.40	0.04	99%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	1%	0%
c1ccc(CN2CCN(c3ccccc3)CC2)cc1	115	Yes	0%	2%	0.07	3.25	1.39	0.17	99%	0%	0%	1%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1cn(-c2ccccc2)cc1-c1ccccc1	116	No	3%	0%	0.07	3.25	2.29	0.41	0%	99%	0%	0%	1%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc([C@H]2CNCCc3ccccc32)cc1	118	No	1%	1%	0.07	3.25	1.42	0.69	99%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	1%
c1ccc2c(c1)CCNCC2	238	No	0%	0%	0.07	3.25	1.38	0.91	99%	1%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc2nc3c(cc2c1)CCCC3	731	Yes	9%	0%	0.07	3.25	2.28	0.82	0%	99%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
C1O[C@@H]2COC3OCO[C@H]3[C@@H]2C	241	No	0%	0%	0.07	3.25	2.29	0.05	0%	99%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	1%	0%
c1c2cc(-c3ccccc3)ccc2oc1CCN1CCCC1	121	Yes	0%	0%	0.07	3.25	1.40	0.68	99%	0%	0%	0%	0%	0%	1%	0%	0%	0%
O=C(Nc1cccc(C2CCOC=N2)c1)c1ccccn1	124	No	2%	0%	0.07	3.25	3.28	0.01	0%	1%	0%	99%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(Nc2nnc(Cc3ccncc3)c3ccccc32)cc1	124	Yes	0%	0%	0.07	3.25	4.19	0.62	0%	0%	1%	0%	0%	99%	0%	0%	0%	0%
O=C(c1ccco1)N1CCN(c2ncc3ccccc3n2)CC1	128	No	0%	0%	0.07	3.25	1.38	0.94	99%	1%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(CN1CCN(Cc2ccccc2)CC1)N1CCc2cccc	131	Yes	0%	0%	0.06	3.26	1.40	0.52	99%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	1%	0%	0%
O=S(=O)(c1ccc(OCc2ccccc2)cc1)N1CCCCC1	132	No	0%	0%	0.06	3.26	3.30	0.08	0%	0%	0%	99%	0%	0%	0%	0%	1%	0%
O=C1NC(=O)c2c1c1c(cc2-c2ccccc2)[nH]c2cc	414	Yes	1%	0%	0.06	3.26	2.80	0.01	0%	0%	99%	0%	0%	1%	0%	0%	0%	0%
O=C(O[C@@H]1C[C@H]2CC[C@@H](C1)N	323	No	0%	0%	0.06	3.26	4.77	0.02	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	99%	0%	0%
c1cc2c(ncc3ncn(C4CCCCC4)c32)[nH]1	145	No	0%	0%	0.06	3.26	2.81	0.70	0%	0%	99%	0%	0%	1%	0%	0%	0%	0%
c1ccc2c(c1)N[C@H]1NCCC21	147	Yes	3%	0%	0.06	3.26	2.27	0.33	1%	99%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(Nc2ncnc3cnccc32)cc1	151	No	2%	0%	0.06	3.26	4.19	0.43	1%	0%	0%	0%	0%	99%	0%	0%	0%	0%
O=C(NCCCCN1CCN(c2ccccc2)CC1)c1cc2cc	152	Yes	0%	0%	0.06	3.26	1.41	0.14	99%	0%	0%	0%	0%	0%	1%	0%	0%	0%
O=S1(=O)CCCc2ccsc21	305	No	0%	0%	0.06	3.26	2.30	0.20	0%	99%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	1%	0%
c1nc(-c2ccccc2)c(-c2ccncc2)[nH]1	153	No	20%	0%	0.06	3.26	2.81	0.29	0%	0%	99%	0%	1%	0%	0%	0%	0%	0%
c1nncs1	1345	No	1%	0%	0.06	3.26	2.30	0.05	0%	99%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	1%	0%
O=C(c1c[nH]c2ccccc12)c1cccc2ccccc21	181	Yes	0%	0%	0.05	3.27	1.40	0.04	99%	1%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(c1cc2ccccc2[nH]1)N1CCNCC1	187	Yes	0%	0%	0.05	3.27	1.40	0.40	99%	1%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(NCc1ccccc1)c1cc(-c2ccccc2)nc2ccccc2	191	Yes	10%	0%	0.05	3.27	1.41	0.17	99%	0%	0%	0%	0%	0%	1%	0%	0%	0%
O=S(=O)(NCc1cccnc1)c1ccccc1	202	No	0%	0%	0.05	3.27	3.30	0.06	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
N=c1[nH]ncs1	430	No	2%	0%	0.04	3.28	2.31	0.20	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(NC[C@@H]1CCCN1)c1ccccc1	245	No	1%	0%	0.04	3.28	1.43	0.06	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(CCc1ccccc1)N1CCC[C@H]1C(=O)N[C@	271	No	1%	0%	0.04	3.28	1.41	0.01	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1nc2c(ncnc2NC2CCCC2)n1[C@H]1CCCO1	287	Yes	5%	0%	0.03	3.29	1.42	0.05	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(NCc2cnc3ncncc3n2)cc1	309	No	6%	0%	0.03	3.29	2.32	0.05	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C1CCC2[C@H]3Cc4cccc5c4[C@@]2(CCN	380	No	0%	0%	0.03	3.29	1.42	0.01	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc2c(c1)C[C@H]1NCCc3cccc-2c31	508	Yes	1%	0%	0.02	3.30	1.43	0.82	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(Cc2cncnc2)cc1	575	No	3%	0%	0.02	3.30	2.32	0.38	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(C2CC3CCC(C2)N3)cc1	870	No	2%	0%	0.00	3.32	4.82	0.15	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%
O=C(Nc1ccccc1)Nc1nc2n[nH]cc2c2nc(-c3ccc	676	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.71	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(Nc1cnccc1C1CCCCC1)c1cccc(-c2ccccc	564	No	2%	1%	0.00	3.32	2.86	0.77	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(NCc2cnc3ncncc3c2)cc1	554	No	0%	20%	0.00	3.32	2.34	0.77	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1cn(C2CCCCC2)nc1Nc1ccccc1	489	No	4%	0%	0.00	3.32	2.86	0.00	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc2c(c1)[nH]c1c2CC2[C@H]3Cc4cccc5c4	440	Yes	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.05	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C1CCCC2CC[C@H]3C(=O)O[C@H](c4ccc	376	No	6%	0%	0.00	3.32	1.44	0.00	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(NCc2ccc3ncncc3c2)cc1	363	No	11%	2%	0.00	3.32	2.34	0.37	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc2c(c1)OCc1c-2ccc2c1C=CCN2	351	Yes	1%	0%	0.00	3.32	4.56	0.69	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc([C@@H]2CC3CC[C@H](C2)N3)cc1	314	No	2%	2%	0.00	3.32	4.82	0.06	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%
O=c1n(Cc2ccc(-c3ccccc3)cc2)cnn1-c1ccccc1	303	Yes	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.04	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C1CC2(CCCC2)CC(=O)N1CCN1CCN(c2c	303	No	100%	1%	0.00	3.32	1.44	0.22	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=c1ccc2ccc(OCc3ccccc3)cc2o1	282	Yes	3%	0%	0.00	3.32	2.34	0.47	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C1CNC(=O)CNC(=O)[C@H](Cc2cnc[nH]2)	282	No	100%	0%	0.00	3.32	4.94	0.00	0%	0%	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%
c1cc2c(ccc3c2CCCC3)[nH]1	280	Yes	0%	4%	0.00	3.32	1.44	0.44	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(CCc1ccccc1)NCC(=O)NCC(=O)N[C@@	267	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.00	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C([C@@H]1CSSCCC(=O)N[C@@H](Cc2c	265	No	100%	0%	0.00	3.32	1.44	0.00	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%

O=C(CCc1ccccc1)N1CCN(c2ccccc2)CC1	262	Yes	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.15	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(CCc1ccccc1)NCC(=O)NCC(=O)N[C@@	261	Yes	2%	0%	0.00	3.32	1.44	0.00	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(NS(=O)(=O)c1ccccc1-c1ccc(Cn2cnn(-c3	260	Yes	1%	0%	0.00	3.32	1.44	0.12	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(NCc2ccc3ncncc3n2)cc1	253	No	0%	14%	0.00	3.32	2.34	0.64	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1cc2c3c(c1)C[C@@H]1C4Cc5c6c([nH]c5[C(	239	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.02	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
C(\c1ccccc1)=C1\Oc2ccccc2-c2ccc3c(c21)C=	237	Yes	0%	0%	0.00	3.32	4.56	0.73	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(Nc1cc(-c2ccccc2)n(-c2ccccc2)n1)[C@@	231	No	0%	0%	0.00	3.32	4.82	0.21	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%
O=C(CCc1ccccc1)N1CCc2ccccc2C1	227	Yes	4%	1%	0.00	3.32	1.44	0.04	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(Cc1ccccc1)Nc1nnc(CCCCc2ccc(NC(=O	215	Yes	0%	0%	0.00	3.32	2.34	0.41	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1cc2cccc(-c3ccc4c(c3)CCCN4)c2[nH]1	214	Yes	0%	0%	0.00	3.32	4.56	0.11	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(C2Oc3ccccc3-c3ccc4c(c32)C=CCN4)c	213	Yes	0%	0%	0.00	3.32	4.56	0.84	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%
C=C1CCOC1=O	209	No	56%	0%	0.00	3.32	2.86	0.00	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(Nc1cccc(CNc2ncnc3ccccc32)c1)c1cccc	209	No	0%	0%	0.00	3.32	2.86	0.12	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(=O)NCCc1cc	207	Yes	1%	1%	0.00	3.32	1.44	0.00	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1coc(-c2nc3c4c[nH]nc4ncn3n2)c1	199	No	1%	0%	0.00	3.32	1.44	0.78	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=c1cc(N2CCOCC2)oc2c(CNc3ccccc3)cccc1	199	Yes	0%	0%	0.00	3.32	2.34	0.07	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=c1[nH]c2cccc(-c3ccccc3)c2c2ccsc21	197	Yes	3%	0%	0.00	3.32	2.86	0.10	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(-c2c(-c3ccc(C4CCC4)cc3)nc3ccccn32)	197	No	2%	0%	0.00	3.32	2.86	0.79	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(CCCCCCc1ccccc1)c1ncc(-c2ccccn2)o1	197	No	9%	0%	0.00	3.32	2.34	0.51	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C1CCC2[C@H]3Cc4cccc5c4[C@@]2(CCN	196	No	1%	0%	0.00	3.32	1.44	0.00	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(c1ccccc1)N1CCc2c(ncnc2-c2ccn[nH]2)C	190	No	0%	0%	0.00	3.32	4.94	0.14	0%	0%	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%
O=C([C@@H]1CSSCCC(=O)N[C@@H](Cc2c	188	No	100%	1%	0.00	3.32	1.44	0.00	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(COc2ccccc2OCCNCCOc2ccccc2)cc1	186	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.64	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C1CCC(=O)N[C@@H](Cc2cnc[nH]2)C(=O	183	Yes	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.00	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(NCc1ccccc1)c1ccc2c(ccn2Cc2ccc(-c3cc	183	Yes	1%	1%	0.00	3.32	4.56	0.07	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc2c(c1)Cc1ccccc1N1OCCC21	180	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.41	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc2nc3c(cc2c1)CC1[C@H]2Cc4ccccc4[C(	179	Yes	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.44	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(CSc1ncccn1)c1ccccc1	172	No	0%	0%	0.00	3.32	2.34	0.31	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C1N(Cc2ccccc2)[C@H](Cc2ccccc2)CC[C(	172	No	4%	0%	0.00	3.32	3.35	0.02	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(c1cn(CC2CCOCC2)c2ccccc12)C1CC1	170	Yes	2%	0%	0.00	3.32	1.44	0.22	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1cnc2cc3c(cc2c1)CCCN3	169	Yes	2%	0%	0.00	3.32	4.56	0.62	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%
O=c1[nH]c2nc(C3CCCC3)[nH]c2c(=O)[nH]1	168	Yes	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.01	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(COc1ccc(-c2cc3[nH]c(=O)[nH]c(=O)c3[n	167	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.09	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(Cc2cnc3ncncc3c2)cc1	167	No	0%	0%	0.00	3.32	2.34	0.63	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(CNc2ccc3ncncc3c2)cc1	165	No	0%	0%	0.00	3.32	2.34	0.55	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=P(c1ccccc1)N1CCc2ccccc2C1	164	Yes	0%	0%	0.00	3.32	3.35	0.05	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C1Nc2ccc(S(=O)(=O)N3CCCC3)cc2C1=O	162	Yes	6%	0%	0.00	3.32	3.35	0.10	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(-c2ccc3c(n2)nc(N2CCOCC2)nc3N2CC	160	No	0%	0%	0.00	3.32	2.86	0.26	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc2c(c1)CNC=N2	160	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.68	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(CCc1c[nH]cn1)NCC(=O)NCC(=O)NCC(	160	Yes	99%	0%	0.00	3.32	1.44	0.00	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=S(=O)(c1cnn2cccnc12)c1ccccc1	159	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.48	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(CCNCCc2ccc(-c3ccccc3)cc2)cc1	159	Yes	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.41	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=S(=O)(Nc1ccc2c(c1)CCCC2)c1ccccc1	159	No	6%	0%	0.00	3.32	3.35	0.12	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(c1cn2c3c1cccc3OC[C@H]2CN1CCOCC	158	Yes	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.05	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(CNc2cccc(Oc3ccccc3)c2)cc1	157	No	0%	3%	0.00	3.32	5.14	0.18	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	100%	0%
O=C(N[C@@H]1CCC[C@H]1OC(=O)c1ccc(C	156	No	0%	4%	0.00	3.32	2.86	0.00	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(CC2CCCCN2)cc1	156	No	0%	0%	0.00	3.32	4.82	0.84	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%
c1nc2c(ncnc2NCc2ccccc2)n1[C@H]1CCC2C	155	Yes	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.06	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc2nc3c(cc2c1)C1CC=CC(C3)C1	154	Yes	1%	2%	0.00	3.32	2.34	0.90	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1cc2c3c(c1)C[C@@H]1C4CCC[C@H](O2)[(	153	No	28%	0%	0.00	3.32	1.44	0.01	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(C(c2ccccc2)N2CCC(c3ccccc3)CC2)cc1	153	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.85	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1nc(-c2ccccc2)cn1CCCOc1ccccc1	152	No	0%	1%	0.00	3.32	2.34	0.32	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(NCc1ccccc1)c1cccc(COc2ccccc2)c1	151	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.18	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc2c(c1)C[C@@H]1[C@@H]3CCCC[C@]	150	No	17%	3%	0.00	3.32	1.44	0.39	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc2c(c1)[nH]c1c2CC2C3Cc4cccc5c4[C@(	149	Yes	5%	0%	0.00	3.32	1.44	0.17	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1nc(CCCOc2ccccc2)c[nH]1	148	No	3%	0%	0.00	3.32	1.44	0.08	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc2c(c1)CCNCCc1ccccc1C2	147	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.76	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1coc(-c2nc3c4ccccc4ncn3n2)c1	146	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.61	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(NCc1cccc(Oc2ccccc2)c1)c1ccccc1	146	No	0%	0%	0.00	3.32	4.56	0.07	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%
O=c1c2sc3ncccc3c2ncn1-c1ccccc1	145	No	2%	0%	0.00	3.32	1.44	0.17	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=S(=O)(Nc1ccccc1Oc1ccccc1)c1ccccc1	144	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.50	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(CCc1ccccc1)N[C@@H](Cc1c[nH]cn1)C	144	No	3%	14%	0.00	3.32	3.35	0.00	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(Oc2cccc(Oc3ccccc3)n2)cc1	143	No	1%	0%	0.00	3.32	3.35	0.30	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(NC[C@@H](CCN1CCC(c2ccccc2)CC1)	142	Yes	94%	0%	0.00	3.32	1.44	0.02	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(CCc1cnc[nH]1)N[C@H](Cc1ccccc1)C(=(	142	Yes	0%	28%	0.00	3.32	1.44	0.00	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(C2CNCCc3ccccc32)cc1	141	No	2%	3%	0.00	3.32	1.44	0.61	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%

O=C(CCc1ccccc1)NCC(=O)NCC(=O)NCC(=C	141	Yes	0%	2%	0.00	3.32	1.44	0.00	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(CN2CCC(CCNCc3ccc(-c4ccccc4)cc3)C	139	Yes	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.26	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(CSc1nccc(=O)[nH]1)c1ccccc1	139	No	0%	0%	0.00	3.32	2.34	0.54	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C1c2ccccc2C[C@@H]2CNCCN12	138	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.73	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(CCc1ccccc1)NCC(=O)NCC(=O)N[C@@	138	Yes	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.00	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1coc(-c2ncnc3c2nnn3Cc2ccccc2)c1	137	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.49	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1cc(-c2ccc(-c3ccccc3)cc2)no1	137	Yes	0%	0%	0.00	3.32	3.35	0.00	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(CNC(=O)c1cccc(-c2ccccc2)n1)N1CCNC	136	No	1%	0%	0.00	3.32	1.44	0.00	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(C2(Nc3ncccn3)CC2)cc1	136	No	0%	0%	0.00	3.32	2.34	0.01	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc2c(c1)CC[C@H]1NCC[C@@H]21	133	No	3%	0%	0.00	3.32	1.44	0.74	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(CCc1c[nH]cn1)N[C@@H](Cc1ccccc1)C	133	Yes	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.00	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1n[nH]cc1-c1cccc2c1-c1ccccc1C2	131	Yes	0%	0%	0.00	3.32	2.86	0.09	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=S(=O)(c1ccccc1)c1ccc2oc3c(c2c1)CNCC3	131	Yes	1%	0%	0.00	3.32	1.44	0.43	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1sc2ncnc(N3CCC(NCCCOc4ccccc4)CC3)c2	131	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.69	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C1OCC(c2ccccc2)=C1c1ccccc1	131	No	1%	1%	0.00	3.32	2.34	0.71	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(NCC2CCc3ncncc3C2)cc1	131	No	0%	14%	0.00	3.32	2.34	0.58	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1cc2c(ncnc2N[C@@H]2CCCNC2)[nH]1	130	No	0%	0%	0.00	3.32	2.86	0.33	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(Nc2ncnc3ccc(-c4ccccc4)cc32)cc1	130	Yes	0%	0%	0.00	3.32	2.86	0.55	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(Nc1ccc(Oc2cccnc2)nc1)N1CCc2ccccc2	130	Yes	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.42	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(CN2CCC(CCOC(c3ccccc3)c3ccccc3)C	130	No	0%	0%	0.00	3.32	4.82	0.59	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%
O=C(CCCN1CCN(c2ccccc2)CC1)NCc1nc2cc	129	Yes	0%	2%	0.00	3.32	1.44	0.16	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C1CCCC(=O)NCC(=O)N[C@H](Cc2ccccc	129	Yes	1%	0%	0.00	3.32	1.44	0.00	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C1OC(c2ccccc2)CCN1Cc1ccc(-c2ccccc2)c	129	Yes	0%	0%	0.00	3.32	2.34	0.69	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc([C@@H]2C[C@H]3CC[C@@H](C2)N3	129	No	0%	0%	0.00	3.32	4.82	0.07	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%
c1c(-c2ccccc2)nnn1[C@H]1CCCCO1	128	No	0%	0%	0.00	3.32	2.34	0.00	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(Nc1cccc(C2N=CO[C@@H]3C[C@@H]3	128	No	0%	0%	0.00	3.32	3.35	0.01	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(CNS(=O)(=O)c1ccccc1)NC1=NN=C(c2c	128	No	0%	0%	0.00	3.32	3.35	0.00	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=S(=O)(c1ccccc1)N1CCSCC1	127	No	0%	0%	0.00	3.32	3.35	0.04	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
C=C(c1ccccc1)c1ccc2c(c1)CCCC2	127	No	0%	0%	0.00	3.32	4.56	0.43	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C1c2ccccc2[C@@H]2CNCCN12	126	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.42	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1cc(-c2ccccc2OCc2ccccc2)n(-c2ccccc2)c1	126	No	0%	97%	0.00	3.32	1.44	0.31	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(NN1c2ccccc2N=C(N2CCNCC2)c2ccccc	126	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.11	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1nc2cc(-c3ncccn3)ccn2c1-c1ccccc1	126	No	0%	0%	0.00	3.32	4.27	0.30	0%	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%
O=C(CCc1ccccc1)N[C@H]1CSSCCNC(=O)C	125	Yes	100%	0%	0.00	3.32	1.44	0.00	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(O[C@@H]2CCN(c3ccncn3)C2)cc1	125	No	0%	0%	0.00	3.32	2.34	0.95	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=c1[nH]cnc2ccc(CNc3ccccc3)cc21	125	No	2%	0%	0.00	3.32	2.34	0.00	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(Cc2cccc([C@H]3CCCCO3)c2)cc1	125	No	1%	0%	0.00	3.32	4.82	0.05	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%
O=S(=O)(Nc1ccccn1)c1ccc(Oc2ccccc2)cc1	125	No	0%	0%	0.00	3.32	4.82	0.50	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%
c1ccc(-c2ccc(NCc3ccccc3-c3cccnc3)cc2)cc1	124	Yes	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.78	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(COc1ccc(-c2nc3c([nH]2)[nH]c(=O)[nH]c3	124	Yes	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.04	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(C(=O)c1ccccc1)c1ccccc1	124	No	2%	100%	0.00	3.32	2.34	0.06	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
N=C(CCN1CCN(c2ccccn2)CC1)c1ccccc1	123	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.09	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(Nc1ccccc1)N[C@@H]1N=C(c2ccccc2)c	123	Yes	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.19	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=S(=O)(Nc1ccc(CCNCCCOc2ccccc2)cc1)c1	122	No	2%	0%	0.00	3.32	1.44	0.02	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(CCc1ccccc1)NCC(=O)NCC(=O)NCC(=C	122	Yes	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.00	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(NCCCN1CCC(c2ccccc2)CC1)N1C(=O)N	121	Yes	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.00	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(CCc1ccccc1)N[C@@H]1CSSCCNC(=O	121	No	100%	0%	0.00	3.32	1.44	0.00	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(Nc1ccc(C(=O)N2Cc3cccn3Cc3ccccc32)	120	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.53	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(CCc1ccccc1)N1Cc2ccccc2C[C@H]1C(=	120	Yes	3%	0%	0.00	3.32	1.44	0.00	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(NCCC1CCCCC1)N1CCC[C@@H](Cc2c	120	No	0%	0%	0.00	3.32	3.35	0.04	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1cc2c(cc1C1CC1)CCCC2	120	No	0%	0%	0.00	3.32	4.56	0.28	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc([C@@H]2CCc3ccccc32)cc1	120	No	0%	0%	0.00	3.32	4.82	0.68	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%
O=C(Nc1ccccc1)NC1N=C(c2ccccc2)c2ccccc2	119	Yes	1%	0%	0.00	3.32	1.44	0.08	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(C2C[C@H]3CC[C@H](C2)N3)cc1	119	No	0%	0%	0.00	3.32	4.82	0.06	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%
O=C(NCc1ccccc1)Nc1cc2[nH]nc(-c3ccncc3)c	118	No	0%	0%	0.00	3.32	2.86	0.14	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(Nc2ncnc3ccncc32)cc1	118	No	0%	0%	0.00	3.32	4.27	0.62	0%	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%
c1oc(-c2ccccc2)nc1CCOc1ccc2c(c1)CCC2	118	No	0%	0%	0.00	3.32	4.56	0.39	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc2c(c1)CC1CC2CCN1CC1CC1	117	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.50	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(COc1ccccc1)NC1C2CC3CC(C2)CC1C3	117	No	0%	0%	0.00	3.32	2.34	0.06	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(NS(=O)(=O)c1ccc(NCCSc2ccccc2)cc1)c	117	Yes	0%	0%	0.00	3.32	5.14	0.00	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	100%	0%
O=C(Nc1cn[nH]c1N1CCCCCC1)c1csc(-c2ccc	116	No	0%	0%	0.00	3.32	2.86	0.26	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(Nc1cc(-c2ccccc2)n(-c2ccccc2)n1)[C@H]	116	No	0%	0%	0.00	3.32	4.82	0.19	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%
c1ccc2c(c1)[nH]c1c2CC2[C@H]3Cc4cccc5c4	115	Yes	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.06	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(CCNCc1ccccc1)NCc1ccc2c(c1)OCCCO	115	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.20	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C1OC(c2ccccc2)C(Cc2ccccc2)=C1c1ccc2c	115	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.02	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(CCCCCCc1ccccc1)c1ncco1	115	No	4%	0%	0.00	3.32	2.34	0.52	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%

O=C(CCC[C@H]1CC[C@@H]2C1CC[C@@H	115	Yes	0%	0%	0.00	3.32	2.34	0.04	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(Cc1ccccc1)NCCCc1ccccc1	115	No	0%	0%	0.00	3.32	4.94	0.07	0%	0%	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%
S=C(NCCCc1ccccc1)NCc1ccccc1	115	No	0%	0%	0.00	3.32	4.94	0.03	0%	0%	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%
O=C(c1ccc(Nc2ncccn2)cc1)N1CCOCC1	114	No	0%	0%	0.00	3.32	2.86	0.21	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1nc(-c2ccccc2)c(-c2ccnc(Oc3ccccc3)n2)n1C	114	No	0%	0%	0.00	3.32	2.86	0.96	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1nc2c(ncnc2NCc2ccccc2)n1[C@H]1CCCS1	114	Yes	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.04	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1cc2c(c(N3CCN(CCC4CCCCC4)CC3)n1)CC	113	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.75	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=S(=O)(c1ccccc1)c1ccc2[nH]c3c(c2c1)C1C(	113	Yes	1%	0%	0.00	3.32	1.44	0.78	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
C1=COCCC1	113	No	3%	0%	0.00	3.32	2.34	0.00	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(CN[C@H]2CC[C@@H](C(c3ccccc3)c3	113	No	0%	2%	0.00	3.32	4.82	0.52	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%
O=c1c(=O)c(Nc2ccccc2)c1NCc1cccc1	112	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.00	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C1CCC(=O)N[C@@H](Cc2cnc[nH]2)C(=O	112	Yes	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.00	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc([C@H]2C[C@@H](c3ccc4c(c3)OCO4)(	111	No	9%	0%	0.00	3.32	1.44	0.03	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C1CNC(=O)[C@@H](Cc2c[nH]c3ccccc23)	111	Yes	100%	0%	0.00	3.32	1.44	0.00	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(CCCc1ccccc1)N1CCn2cnnc2C1	111	No	0%	0%	0.00	3.32	3.35	0.85	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(OCCCNCCOc2ccccc2)cc1	110	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.73	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=c1[nH]c2nc(-c3cnn(Cc4ccccc4)c3)[nH]c2c(	110	Yes	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.23	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=S(=O)(c1sc2ncccc2c1-c1ccccc1)c1ccccc1	110	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.08	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1[nH]c2ccc(-n3cnnc3)cc2c1CCCN1CCC(NC	109	Yes	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.65	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(CCc1c[nH]cn1)N[C@H](Cc1ccccc1)C(=(	109	Yes	37%	0%	0.00	3.32	1.44	0.00	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(Nc1ccccc1)Nc1cccc(-c2ccn[nH]2)c1	108	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.01	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(CNC(=O)c1ccccc1)NCCNCc1ccccc1	108	No	0%	2%	0.00	3.32	1.44	0.03	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(CCCCOCCCCCCNCCc2ccccc2)cc1	108	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.03	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(CNc2cnc3ncncc3c2)cc1	108	No	0%	0%	0.00	3.32	2.34	0.61	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=S(=O)(N[C@H]1CC[C@@H](N2CCN(c3cc	107	Yes	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.22	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C1Nc2cccnc2Nc2ncccc21	107	No	0%	0%	0.00	3.32	2.34	0.54	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(C[C@H]2CCCCN2)cc1	107	No	2%	2%	0.00	3.32	4.82	0.74	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%
O=C(/C=C/c1ccccc1)N[C@@]12CCC(=O)[C@	106	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.02	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(CCNc2ncncn2)cc1	106	No	0%	0%	0.00	3.32	2.34	0.46	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(Nc1cccc(C2COCC=N2)c1)c1ccccn1	106	No	0%	0%	0.00	3.32	3.35	0.01	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1n[nH]c2cccc(Nc3ncnc4ccc(-c5ccccc5)cc43)	105	Yes	3%	0%	0.00	3.32	2.86	0.54	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(NCCc1ccc(-c2ccccc2)cc1)c1ccc2c(c1)C	105	Yes	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.13	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(CCc1ccccc1)N1CCC[C@H]1C(=O)N[C@	105	Yes	4%	0%	0.00	3.32	1.44	0.00	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(CCCc1ccccc1)NCC(=O)Nc1ccccc1	105	No	2%	0%	0.00	3.32	3.35	0.01	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(Nc1ccccc1C1=CCCCC1)c1ncc[nH]1	105	No	0%	0%	0.00	3.32	4.27	0.47	0%	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%
S=C(NC1CCCCC1)N1CCC(c2cnc[nH]2)CC1	104	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.64	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=S(=O)(N[C@@H]1CCc2cc3ccccc3n2C1)c	104	Yes	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.96	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(NC/C=C/CN1CCN(c2ccccc2)CC1)c1ccc	104	Yes	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.13	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(N[C@@H]1CCC2[C@H]3Cc4cccc5c4[C	104	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.00	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(CCc1c[nH]cn1)NCC(=O)NCC(=O)NCC(	104	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.00	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=S(=O)(c1ccc(Oc2ccccc2)cc1)C1CCNCC1	104	No	0%	0%	0.00	3.32	3.35	0.04	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=S(=O)(NCC1CCNCC1)c1ccc(-c2ccccc2)cc	104	Yes	0%	0%	0.00	3.32	3.35	0.02	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(-c2ccc3nccc(NC4CCCCC4)c3c2)cc1	103	Yes	4%	0%	0.00	3.32	2.86	0.24	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(Nc1cnccc1N1CCCCC1)c1cccc(-c2ccccc	103	No	0%	3%	0.00	3.32	2.86	0.27	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(Nc1ccccc1)[C@@H]1CCCN1S(=O)(=O)	103	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.38	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C1CN[C@@](COc2ncccn2)(c2ccccc2)c2c	103	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.58	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
C=C(CCCc1ccccc1)CC[C@]12CCC(CCO1)O	103	No	100%	0%	0.00	3.32	2.34	0.00	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C1CC(c2ccccc2)N(c2ccc(-c3ccsc3)cc2)C1	103	No	2%	0%	0.00	3.32	4.94	0.00	0%	0%	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%
O=C1c2ccccc2CCc2cc(Nc3ccccc3)ccc21	102	No	2%	0%	0.00	3.32	2.86	0.53	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1cc2n(c1)CC(N1CCNCC1)c1ccccc1S2	102	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.74	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1oc2ccccc2c1C1CCN(CCC2CCCCC2)CC1	102	Yes	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.21	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1ccc(Oc2cccc(-c3ccnc4ccccc43)c2)cc1	102	Yes	0%	0%	0.00	3.32	4.56	0.23	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(CCc1ccccc1)N1CCN(CCc2ccc3ccccc3c	101	No	0%	0%	0.00	3.32	1.44	0.00	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
c1cn2ccccc2n1	101	No	0%	0%	0.00	3.32	2.34	0.51	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(NCc1ccccc1)[C@@H]1CCCN1C(=O)Nc	101	Yes	0%	0%	0.00	3.32	3.35	0.00	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%
O=C(c1cnn(-c2ccc3[nH]cnc3c2)c1)c1cc2cccc	101	Yes	0%	0%	0.00	3.32	4.27	0.01	0%	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%
O=C(CN1CCCC1)c1ccccc1	101	No	2%	2%	0.00	3.32	4.82	0.43	0%	0%	0%	0%	0%	0%	0%	100%	0%	0%
O=C(Nc1ccc(-c2ccccc2)cc1)c1ccnn1-c1ccccc	100	Yes	0%	0%	0.00	3.32	3.35	0.05	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	0%	0%	0%