

201236001A

厚生労働科学研究費補助金

化学物質リスク研究事業

コンピュータシミュレーションによる化学物質の
有害性予測の迅速化・高度化に関する研究

平成24年度 総括・分担研究報告書

(H22-化学-一般-001)

研究代表者 栗原 正明

平成25(2013)年 3月

目 次

I. 総括研究報告		
コンピュータシミュレーションによる化学物質の有害性予測の迅速化・高度化に関する研究		
栗原 正明	1
II. 分担研究報告書		
1. プレカテゴライゼーション法によるQSARモデルの作成		
栗原 正明	5
2. 化学物質の構造の精密化・高度化		
出水 庸介	9

厚生労働科学研究費補助金（化学物質リスク研究事業）
総括研究報告書

コンピュータシミュレーションによる化学物質の有害性予測の
迅速化・高度化に関する研究

研究代表者：栗原正明 国立医薬品食品衛生研究所 有機化学部 部長

研究要旨

コンピュータを利用した定量的構造活性相関（QSAR）による毒性予測が化学物質管理の観点から非常に重要となってきた。QSAR法の精度を上げるためにプレカテゴライゼーション法を考案した。これは、データセットにまず適当なカテゴリ分けを行った後に、それぞれの集団ごとにQSAR式を作成する方法論で、予測精度を向上できると考えた。部分構造を用いたカテゴリ分けを行った場合、カテゴリ分けを行わない時と比較して、「特異度（specificity）」、「感度（sensitivity）」ともよい結果を与えた。

研究分担者

出水 庸介 国立医薬品食品衛生研究所
有機化学部
第二室長

A. 研究目的

国民生活の安全の観点から、化学物質の毒性に関する情報の取得が喫緊の課題である。しかし、動物を用いる安全性試験は莫大な時間と費用がかかるため、毒性が未知のすべての化学物質について動物試験により毒性を評価することは不可能である。そこで、構造活性相関、特にコンピュータを利用した定量的構造活性相関（QSAR）による毒性予測が化学物質管理の観点から非常に重要である。現在までいくつもの予測システムが存在するが、システム（予測法）の評価については統一的な

検証はない。本研究では、現在ある予測法を評価するとともに、様々な手法により、より高度な新しい予測システムを開発する、それにより、厚生労働行政のスタンダードとなる毒性予測システムを構築し、化合物の毒性予想データベースを構築する。

B. 研究方法

【データセットの作成】

構造活性相関モデルの検討に用いるデータセットを作成した。ISSTOX Chemical Toxicity Database の提供（6885件）から Ames 判定がない化合物と ModelBuilder 未対応化合物（1776件）を除いた 5089 化合物を有効母集団とした。有効母集団から任意に 80% 選択した 4072 化合物を学習母集団とした。また 20% をテ

スト母集団とした。

【プレカテゴライゼーション法による QSAR モデルの作成】

QSAR法の精度を上げるためにプレカテゴライゼーション法を考案した。これは、データセットにまず適当なカテゴライズを行った後に、それぞれの集団ごとに QSAR 式を作成する方法論で、予測精度を向上できると考えた。(図1)

QSAR 法は統合計算化学システム ADMEWORKS / ModelBuilder (富士通九州システムズ) を用いた。

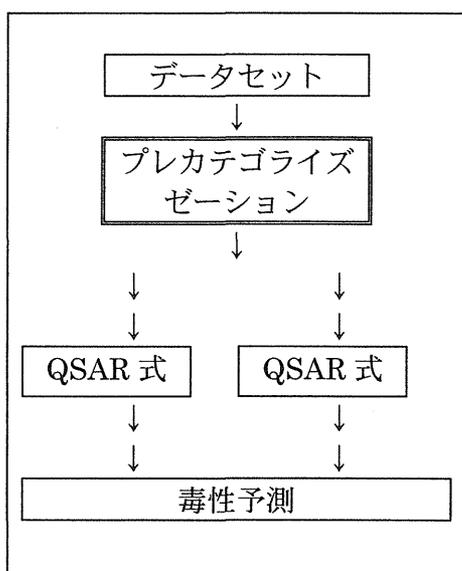


図1

化学物質の構造の精密化、高度化

本年度プレカテゴライゼーション法で使用したデータセット (418 化合物) の全ての化合物の最安定構造 (最安定コンフォーマー) を計算した。分子力学計算 (MMFF, OPLS2005 力場等) を用いたコンフォメーション探索により最安定構造を計算した。ソフトウェアはシュレディンガー社の Macromodel を用いた。

C. 研究結果

部分構造によるカテゴライズを行った。その結果、部分構造を用いたカテゴライズ

を行った場合、カテゴライズを行わない時と比較して、「特異度 (specificity)」, 「感度 (sensitivity)」ともよい結果を与えた。

本年度作成したプレカテゴライゼーション法で使用したデータセット (418 化合物) の全ての化合物の最安定構造 (最安定コンフォーマー) を計算した。

D. 考察

プレカテゴライゼーション法が予測精度の向上に有効であることが明らかとなった。今後の課題は、様々なカテゴリー分けを行って、より有効な方法を見出すことである。しかし、ここで用いた方法論でも妥当なモデルが作成できることがわかった。既存の毒性データベースにおける化合物の構造は不備が多い。2次元構造においてすら、特に構造異性体に関しては不明なものが多い。この構造を使って構造活性相関を行っても良い結果は得られない。今後、構造をどのように扱うかは重要な問題になる。

E. 結論

化学物質の有害性を予測する方法論として最も重要と考えられている QSAR (定量的構造活性相関) 法の予測精度を向上させる目的で、プレカテゴライゼーション法を考案した。これはデータセットにまず適当なカテゴライズを行った後に、それぞれの集団ごとに QSAR 式を作成する方法論で予測の精度を上げる方法論である。プレカテゴライゼーションの方法として、部分構造によるカテゴライズを行った。その結果、部分構造を用いたカテゴライズを行った場合、カテゴライズを行わない時と比較して、「特異度 (specificity)」, 「感度 (sensitivity)」ともよい結果を与えた。これは QSAR の新しい方法論となる可能性が高い。

F. 健康危機情報

特に無し.

G. 研究発表

1. 論文発表

(論文発表-参考: コンピュータシミュレーションを含むもの)

栗原正明; コンピュータシミュレーションによる違法ドラッグの活性予測;
YAKUGAKU ZASSHI, 133, 13-16 (2013)

Demizu, Y., Sano, K., Terayama, N., Hakamata, W., Sato, Y., Inoue, H., Okuda, H., Kurihara, M.; Solid-phase nucleophilic fluorination; *Synth. Commun.*, 42, 1724 (2012)

Y. Demizu, K. Okuhira, H. Motoi, A. Ohno, T. Shoda, K. Fukuhara, H. Okuda, M. Naito, M. Kurihara; Design and synthesis of estrogen receptor degradation inducer based on a protein knockdown strategy.; *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, 22, 1793 (2012)

Demizu, Y., Doi, M., Kurihara, M., Maruyama, T., Suemune, H., Tanaka, M.; One-Handed Helical Screw Direction of Homopeptide Foldamer Exclusively Induced by Cyclic α -Amino Acid Side-Chain Chiral Centers.; *Chem. Eur. J.*, 18, 2430 (2012)

Y. Demizu, Y. Yabuki, M. Doi, Y. Sato, M. Tanaka, M. Kurihara; Conformations of helical Aib peptides containing a pair of L-amino acid and D-amino acid; *J. Pept. Sci.*, 18: 466 (2012)

Anan, K., Demizu, Y., Oba, M., Kurihara, M., Doi, M., Suemune, H., Tanaka, M.; Helical structures of bicyclic α -amino acid homo-chiral oligomers with the chiral centers at the side-chain fused-ring junctions *Helv. Chim. Acta.*, 95, 1694-1713 (2012)

Demizu, Y., Nagoya, S., Doi, M., Sato, Y., Tanaka, M., Kurihara, M.; Twisted Structure of a Cyclic Hexapeptide Containing a Combination of Alternating L-Leu-D-Leu-Aib Segments; *J. Org. Chem.*, 77, 9361 (2012)

M. Kurihara, Y. Demizu, S. Nagoya, Y. Sato, M. Doi, M. Tanaka; Design of Stable Helical Peptides; *Peptide Science 2011*, 213 (2012)

Y. Demizu, S. Nagoya, Y. Sato, M. Tanaka, M. Doi, H. Okuda, M. Kurihara; Design of Stapled Helical Peptides for Catalytic Enantioselective Epoxidation of α,α -Unsaturated Ketones; *Peptide Science 2011*, 149(2012)

T. Sugiyama, Y. Imamura, Y. Demizu, M. Kurihara, M. Takano, A. Kittaka; Synthesis of Beta-Chiral Peptide Nucleic Acids and Their DNA Binding Properties; *Peptide Science 2011*, 353(2012)

Y. Hirata, M. Oba, M. Fukudome, Y. Demizu, M. Kurihara, M. Doi, M. Tanaka; Synthesis and Conformational Analysis of Peptides Composed of Chiral Five-Membered Ring Amino Acids; *Peptide Science 2011*, 101 (2012)

T. Hanada, T. Kato, E. Ikeda, Y. Demizu, M. Kurihara, M. Doi, Y. Tsuda, M. Fukudome, M. Oba, M. Tanaka; Design and Synthesis of Conformational Freedom Restricted Endomorphin-2 Analogues; *Peptide Science 2011*, 103 (2012)

2. 学会発表

栗原正明, 出水庸介, 佐藤由紀子; QSARによる化学物質の有害性予測法の開発
日本薬学会第133年会(2013/03/28-30, 横浜)

栗原正明, 佐藤由紀子, 出水庸介; コンピュータシミュレーションによる違

法ドラッグの活性予測
日本薬学会第133年会(2013/03/28-30,
横浜)

H. 知的財産権の出願・登録状況
なし

厚生労働科学研究費補助金（化学物質リスク研究事業）
分担研究報告書

分担研究課題：プレカテゴライゼーション法による QSAR モデルの作成

研究分担者：栗原正明 国立医薬品食品衛生研究所有機化学部 部長

研究要旨

プレカテゴライゼーション QSAR 法の開発を行った。プレカテゴライゼーションの方法として、部分構造によるカテゴライズを行った。本年度は ISSTOX Chemical Toxicity Database から取得した 5089 件の化合物を使って、本方法論の検証を行った。その結果、部分構造を用いたカテゴライズを行った場合、カテゴライズを行わない時と比較して、「特異度 (specificity)」, 「感度 (sensitivity)」ともよい結果を与えた。プレカテゴライゼーション QSAR 法の有効性を明らかにした。

A. 研究目的

本研究では、現在ある予測法を評価するとともに、様々な手法により、より高度な新しい予測システムを開発する、それにより、厚生労働行政のスタンダードとなる毒性予測システムを構築し、化合物の毒性予想データベースを構築する。

B. 研究方法

ISSTOX Chemical Toxicity Database から取得した有効母集団 (5089 件) から共通部分構造 (213 件) を抽出した。さらに 213 件中、有効部分構造 (11 件) の出現頻度件数は表 1 の通りである。本年度は、t-statistics の絶対値 1 番と 2 番に高い No9 (LX-C=O) と No5 (LA-NH₂) の部分構造でカテゴライズを行った。Model Builder を用いて、物理化学的パラメータ (555 件) と上記有効部分構造関連パラメータ (213 件) の合計 (768 件) を発生し

た。

C. 研究結果

各モデルについて、768 件パラメータの半分以上が欠損値のデータはサンプルから除外した。各モデルは SGP(Stochastic Gradient Perceptron)の線形学習法により、それぞれの部分構造によるカテゴリ分け (LX-C=O, LA-NH₂, LB-BZN) に対してモデルを作成した。各カテゴリ分けに対し、テスト母集団 (1071 件) の外部検証結果は以下の通りであった。(表 2)

D. 考察

部分構造によるプレカテゴライゼーション法が予測精度の向上に有効であることが明らかとなった。今後の課題は、さらに予測精度を上げるためには今回とは異なる部分構造によるカテゴリ分けを行う必要がある。

E. 結論

プレカテゴライゼーション法が予測精度の向上に有効であることが明らかとなった。

F. 健康危機情報

特になし

G. 研究発表

1. 論文発表

(論文発表-参考: コンピュータシミュレーションを含むもの)

Demizu, Y., Sano, K., Terayama, N., Hakamata, W., Sato, Y., Inoue, H., Okuda, H., Kurihara, M.; Solid-phase nucleophilic fluorination; *Synth. Commun.*, 42, 1724 (2012)

Y. Demizu, K. Okuhira, H. Motoi, A. Ohno, T. Shoda, K. Fukuhara, H. Okuda, M. Naito, M. Kurihara; Design and synthesis of estrogen receptor degradation inducer based on a protein knockdown strategy.; *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, 22, 1793 (2012)

Demizu, Y., Doi, M., Kurihara, M., Maruyama, T., Suemune, H., Tanaka, M.; One-Handed Helical Screw Direction of Homopeptide Foldamer Exclusively Induced by Cyclic α -Amino Acid Side-Chain Chiral Centers.; *Chem. Eur. J.*, 18, 2430 (2012)

Y. Demizu, Y. Yabuki, M. Doi, Y. Sato, M. Tanaka, M. Kurihara; Conformations of helical Aib peptides containing a pair of L-amino acid and D-amino acid; *J. Pept. Sci.*, 18: 466 (2012)

Anan, K., Demizu, Y., Oba, M., Kurihara, M., Doi, M., Suemune, H., Tanaka, M.; Helical structures of bicyclic α -amino acid homo-chiral oligomers with the chiral centers at the side-chain fused-ring junctions *Helv. Chim. Acta.*, 95, 1694-1713 (2012)

Demizu, Y., Nagoya, S., Doi, M., Sato, Y., Tanaka, M., Kurihara, M.; Twisted Structure

of a Cyclic Hexapeptide Containing a Combination of Alternating L-Leu-D-Leu-Aib Segments; *J. Org. Chem.*, 77, 9361 (2012)

M. Kurihara, Y. Demizu, S. Nagoya, Y. Sato, M. Doi, M. Tanaka; Design of Stable Helical Peptides; *Peptide Science 2011*, 213 (2012)

Y. Demizu, S. Nagoya, Y. Sato, M. Tanaka, M. Doi, H. Okuda, M. Kurihara; Design of Stapled Helical Peptides for Catalytic Enantioselective Epoxidation of α,α -Unsaturated Ketones; *Peptide Science 2011*, 149(2012)

T. Sugiyama, Y. Imamura, Y. Demizu, M. Kurihara, M. Takano, A. Kittaka; Synthesis of Beta-Chiral Peptide Nucleic Acids and Their DNA Binding Properties; *Peptide Science 2011*, 353(2012)

Y. Hirata, M. Oba, M. Fukudome, Y. Demizu, M. Kurihara, M. Doi, M. Tanaka; Synthesis and Conformational Analysis of Peptides Composed of Chiral Five-Membered Ring Amino Acids; *Peptide Science 2011*, 101 (2012)

T. Hanada, T. Kato, E. Ikeda, Y. Demizu, M. Kurihara, M. Doi, Y. Tsuda, M. Fukudome, M. Oba, M. Tanaka; Design and Synthesis of Conformational Freedom Restricted Endomorphin-2 Analogues; *Peptide Science 2011*, 103 (2012)

2. 学会発表

栗原正明, 出水庸介, 佐藤由紀子; QSARによる化学物質の有害性予測法の開発
日本薬学会第133年会(2013/03/28-30, 横浜)

栗原正明, 佐藤由紀子, 出水庸介; コンピュータシミュレーションによる違法ドラッグの活性予測
日本薬学会第133年会(2013/03/28-30, 横浜)

H. 知的財産権の出願・登録状況

なし

表 1

No.	有効部分構造一覧			部分構造を含まない母集団(なし)			部分構造を含む母集団(あり)		
	部分構造	部分構造名	t-statistics	陰性(-)	陽性(+)	小計	陰性(-)	陽性(+)	小計
1		SC.1.ISSTOX-V7.6-6865.2.1-LA	-4.75	810	1051	1861	1246	1982	3228
2		SC.2.ISSTOX-V7.6-6865.2.1-LA	3.5	20	15	35	2036	3018	5054
3		SC.2.ISSTOX-V7.6-6865.2.1-LX	4.03	937	1452	2389	1119	1581	2700
4		SC.3.ISSTOX-V7.6-6865.2.1-LA	8.27	782	1577	2359	1274	1456	2730
5		SC.5.ISSTOX-V7.6-6865.2.1-LA	-9.15	1166	1108	2274	890	1925	2815
6		SC.5.ISSTOX-V7.6-6865.2.1-LX	-4.59	1793	1909	3702	263	1124	1387
7		SC.6.ISSTOX-V7.6-6865.2.1-LA	6.15	1680	2777	4457	376	256	632
8		SC.11.ISSTOX-V7.6-6865.2.1-LA	6.44	1706	2582	4288	350	451	801
9		SC.22.ISSTOX-V7.6-6865.2.1-LX	11.49	1272	2252	3524	784	781	1565
10		SC.32.ISSTOX-V7.6-6865.2.1-LA	-4.16	973	958	1931	1083	2075	3158
11		SC.32.ISSTOX-V7.6-6865.2.1-LX	2.85	1306	1566	2872	750	1467	2217

表 2-1

部分構造	モデルパラメータ数	予測精度	特異度	感度
なし	61	0.79	0.70	0.85
LX-C=O	あり=57, なし=56	0.80	0.74	0.84
LA-NH2	あり=57, なし=56	0.81	0.70	0.87
LB-BZN	あり=53, なし=39	0.82	0.75	0.85

表 2-2

部分構造	モデルパラメータ数	予測精度	特異度	感度
なし	61	0.79	0.70	0.85
LX-C=O	あり=42, なし=62	0.80	0.74	0.84
LA-NH2	あり=49, なし=46	0.81	0.70	0.87
LB-BZN	あり=48, なし=49	0.82	0.75	0.85

表 2-3

部分構造	モデルパラメータ数	予測精度	特異度	感度
なし	61	0.79	0.70	0.85
LX-C=O	あり=61, なし=61	0.79	0.69	0.86
LA-NH2	あり=61, なし=61	0.81	0.74	0.85
LB-BZN	あり=61, なし=61	0.81	0.76	0.84

厚生労働科学研究費補助金（化学物質リスク研究事業）
分担研究報告書

分担研究課題：化学物質の構造の精密化、高度化に関する研究

研究分担者：出水庸介 国立医薬品食品衛生研究所有機化学部 第二室長

研究要旨

本年度はプレカテゴライゼーション QSAR 法の検討に用いるデータセットを作成した。ISSTOX Chemical Toxicity Database に収載されている化合物から Ames 判定がない化合物と ModelBuilder 未対応化合物（1776 件）を除いた 5089 化合物全ての構造を検証した。

A. 研究目的

QSAR 法を検証するためには、最適なデータセットを用意する必要がある。

ISSTOX Chemical Toxicity Database を用いてデータセットを作成することを目的とした。

B. 研究方法

構造活性相関モデルの検討に用いるデータセットを作成した。ISSTOX Chemical Toxicity Database の提供（6885 件）から Ames 判定がない化合物と ModelBuilder 未対応化合物（1776 件）を除いた 5089 化合物全ての化合物の構造が正しいか検証した。

この 5089 化合物を有効母集団とした。有効母集団から任意に 80% 選択した 4072 化合物を学習母集団とした。また 20% をテスト母集団とした。

C. 研究結果

ISSTOX Chemical Toxicity Database の提供（6885 件）から Ames 判定がない化合物

と ModelBuilder 未対応化合物（1776 件）を除いた 5089 化合物全ての化合物の構造が正しいか検証し、正しいものに変えた。5089 化合物は別紙 1 として示した。

D. 考察

データベースは曖昧な構造や間違った構造が収載されていることがあるのでデータセットに用いる場合には注意が必要である。

E. 結論

ISSTOX Chemical Toxicity Database の提供（6885 件）から Ames 判定がない化合物と ModelBuilder 未対応化合物（1776 件）を除いた 5089 化合物全ての化合物の構造を検証し、構造の正しいデータセットを作成することができた。これを用いてプレカテゴライゼーション QSAR 法の開発を行った。

F. 健康危機情報

特になし

G. 研究発表

1. 論文発表

(論文発表－参考：コンピュータシミュレーションを含むもの)

Demizu, Y., Sano, K., Terayama, N., Hakamata, W., Sato, Y., Inoue, H., Okuda, H., Kurihara, M.; Solid-phase nucleophilic fluorination; *Synth. Commun.*, 42, 1724 (2012)

Y. Demizu, K. Okuhira, H. Motoi, A. Ohno, T. Shoda, K. Fukuhara, H. Okuda, M. Naito, M. Kurihara; Design and synthesis of estrogen receptor degradation inducer based on a protein knockdown strategy; *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, 22, 1793 (2012)

Demizu, Y., Doi, M., Kurihara, M., Maruyama, T., Suemune, H., Tanaka, M.; One-Handed Helical Screw Direction of Homopeptide Foldamer Exclusively Induced by Cyclic α -Amino Acid Side-Chain Chiral Centers.; *Chem. Eur. J.*, 18, 2430 (2012)

Y. Demizu, Y. Yabuki, M. Doi, Y. Sato, M. Tanaka, M. Kurihara; Conformations of helical Aib peptides containing a pair of L-amino acid and D-amino acid; *J. Pept. Sci.*, 18: 466 (2012)

Anan, K., Demizu, Y., Oba, M., Kurihara, M., Doi, M., Suemune, H., Tanaka, M.; Helical structures of bicyclic α -amino acid homo-chiral oligomers with the chiral centers at the side-chain fused-ring junctions *Helv. Chim. Acta.*, 95, 1694-1713 (2012)

Demizu, Y., Nagoya, S., Doi, M., Sato, Y., Tanaka, M., Kurihara, M.; Twisted Structure of a Cyclic Hexapeptide Containing a Combination of Alternating L-Leu-D-Leu-Aib Segments; *J. Org. Chem.*, 77, 9361 (2012)

M. Kurihara, Y. Demizu, S. Nagoya, Y. Sato, M. Doi, M. Tanaka; Design of Stable Helical Peptides; *Peptide Science* 2011, 213 (2012)

Y. Demizu, S. Nagoya, Y. Sato, M. Tanaka, M. Doi, H. Okuda, M. Kurihara; Design of Stapled Helical Peptides for Catalytic Eenantioselective Epoxidation of α,α -Unsaturated Ketones; *Peptide Science* 2011, 149(2012)

T. Sugiyama, Y. Imamura, Y. Demizu, M. Kurihara, M. Takano, A. Kittaka; Synthesis of Beta-Chiral Peptide Nucleic Acids and Their DNA Binding Properties; *Peptide Science* 2011, 353(2012)

Y. Hirata, M. Oba, M. Fukudome, Y. Demizu, M. Kurihara, M. Doi, M. Tanaka; Synthesis and Conformational Analysis of Peptides Composed of Chiral Five-Membered Ring Amino Acids; *Peptide Science* 2011, 101 (2012)

T. Hanada, T. Kato, E. Ikeda, Y. Demizu, M. Kurihara, M. Doi, Y. Tsuda, M. Fukudome, M. Oba, M. Tanaka; Design and Synthesis of Conformational Freedom Restricted Endomorphin-2 Analogues; *Peptide Science* 2011, 103 (2012)

2. 学会発表

栗原正明, 出水庸介, 佐藤由紀子; QSARによる化学物質の有害性予測法の開発
日本薬学会第133年会(2013/03/28-30, 横浜)

栗原正明, 佐藤由紀子, 出水庸介; コンピュータシミュレーションによる違法ドラッグの活性予測
日本薬学会第133年会(2013/03/28-30, 横浜)
(2011/10, 千葉)

H. 知的財産権の出願・登録状況 なし

1	ISSSTY_v1a_7367_02May011_1	50-32-8	c12c3c4c(c5c(cc4ccc3ccc1)cccc5)cc2	3
2	ISSSTY_v1a_7367_02May011_2	1955-45-9	HC(H)C1(C(H)H)C(=O)OC1H	3
3	ISSSTY_v1a_7367_02May011_3	101-61-1	HC(H)N(c1ccc(C(H)c2ccc(N(C(H)H)C(H)H)cc2)cc1)C(H)H	1
4	ISSSTY_v1a_7367_02May011_4	612-64-6	HC(H)C(H)N(c1cccc1)N=O	1
5	ISSSTY_v1a_7367_02May011_5	90-94-8	HC(H)N(c1ccc(C(=O)c2ccc(N(C(H)H)C(H)H)cc2)cc1)C(H)H	1
6	ISSSTY_v1a_7367_02May011_6	62-75-9	HC(H)N(C(H)H)N=O	3
7	ISSSTY_v1a_7367_02May011_7	564-00-1	HC1[C@@]([C@]2C(H)O2)O1	3
8	ISSSTY_v1a_7367_02May011_8	92-87-5	c1(-c2ccc(N)cc2)ccc(N)cc1	3
9	ISSSTY_v1a_7367_02May011_9	117-81-7	HC(H)C(H)C(H)C(H)C(C(H)C(H)H)C(H)OC(=O)c1c(C(=O)OC(H)C(C(H)C(H)H)C(H)C(H)C(H)C(H)H)cccc1	1
10	ISSSTY_v1a_7367_02May011_10	92-67-1	c1(-c2ccc(N)cc2)cccc1	3
11	ISSSTY_v1a_7367_02May011_13	613-13-8	c12c(cc3c(cc(N)cc3)c1)cccc2	3
12	ISSSTY_v1a_7367_02May011_14	10605-21-7	HC(H)OC(=O)NC1=Nc2c(cccc2)N1	3
13	ISSSTY_v1a_7367_02May011_15	55-18-5	HC(H)C(H)N(C(H)C(H)H)N=O	3
14	ISSSTY_v1a_7367_02May011_16	56-72-4	HC(H)C1c2c(cc(OP(=S)(OC(H)C(H)H)OC(H)C(H)H)cc2)OC(=O)C=1Cl	1
15	ISSSTY_v1a_7367_02May011_17	5522-43-0	c12c3c4c(c(N(=O)=O)ccc4ccc3ccc1)cc2	3
16	ISSSTY_v1a_7367_02May011_18	53-96-3	HC(H)C(=O)Nc1cc2c(-c3c(cccc3)C2H)cc1	3
17	ISSSTY_v1a_7367_02May011_21	5131-60-2	c1(Cl)c(N)cc(N)cc1	3
18	ISSSTY_v1a_7367_02May011_24	303-47-9	HC(H)[C@]1C(H)c2c(C(=O)O1)c(O)c(C(=O)N[C@](C(=O)O)C(H)c1cccc1)cc2Cl	1
19	ISSSTY_v1a_7367_02May011_25	94-52-0	c12c(cc(N(=O)=O)cc1)NC=N2	3
20	ISSSTY_v1a_7367_02May011_26	71-43-2	c1cccc1	1
21	ISSSTY_v1a_7367_02May011_27	153-78-6	HC1c2c(-c3c1cc(N)cc3)cccc2	3
22	ISSSTY_v1a_7367_02May011_28	120-12-7	c12c(cc3c(cccc3)c1)cccc2	3
23	ISSSTY_v1a_7367_02May011_29	84-65-1	c12C(=O)c3c(C(=O)c1cccc2)cccc3	1
24	ISSSTY_v1a_7367_02May011_30	100-01-6	c1(N)ccc(N(=O)=O)cc1	3
25	ISSSTY_v1a_7367_02May011_31	95-53-4	HC(H)c1c(N)cccc1	1
26	ISSSTY_v1a_7367_02May011_32	121-66-4	C1(N(=O)=O)=CN=C(N)S1	1
27	ISSSTY_v1a_7367_02May011_33	107-13-1	HC=CC_N	3
28	ISSSTY_v1a_7367_02May011_34	404-86-4	HC(H)C(C(H)H)C=CC(H)C(H)C(H)C(H)C(=O)NC(H)c1cc(OC(H)H)c(O)cc1	1
29	ISSSTY_v1a_7367_02May011_36	1912-24-9	HC(H)C(H)Nc1nc(Cl)nc(NC(C(H)H)C(H)H)n1	1
30	ISSSTY_v1a_7367_02May011_37	968-81-0	HC(H)C(=O)c1ccc(S(=O)(=O)NC(=O)NC2C(H)C(H)C(H)C(H)C2H)cc1	1

31	ISSSTY_v1a_7367_02May011_38	2438-88-2	HC(H)Oc1c(Cl)c(Cl)c(N(=O)=O)c(Cl)c1Cl	1
32	ISSSTY_v1a_7367_02May011_40	100-75-4	HC1C(H)C(H)C(H)C(H)N1N=O	3
33	ISSSTY_v1a_7367_02May011_41	108-45-2	c1(N)cc(N)ccc1	3
34	ISSSTY_v1a_7367_02May011_43	80-62-6	HC(H)C(C(=O)OC(H)H)=CH	1
35	ISSSTY_v1a_7367_02May011_44	62-53-3	c1(N)ccccc1	1
36	ISSSTY_v1a_7367_02May011_45	50-00-0	HC=O	3
37	ISSSTY_v1a_7367_02May011_46	100-44-7	HC(Cl)c1ccccc1	3
38	ISSSTY_v1a_7367_02May011_47	2698-41-1	C(N)C(C_N)=Cc1c(Cl)cccc1	1
39	ISSSTY_v1a_7367_02May011_48	607-57-8	HC1c2c(-c3c1cc(N(=O)=O)cc3)cccc2	3
40	ISSSTY_v1a_7367_02May011_49	103-90-2	HC(H)C(=O)Nc1ccc(O)cc1	1
41	ISSSTY_v1a_7367_02May011_51	17804-35-2	HC(H)C(H)C(H)C(H)NC(=O)N1c2c(cccc2)N=C1NC(=O)OC(H)H	1
42	ISSSTY_v1a_7367_02May011_52	1162-65-8	HC(H)Oc1c2C3=C(C(=O)C(H)C3H)C(=O)Oc2c2c(c1)OC1C2C=CO1	3
43	ISSSTY_v1a_7367_02May011_53	95-54-5	c1(N)c(N)cccc1	3
44	ISSSTY_v1a_7367_02May011_54	117-39-5	C1(O)C(=O)c2c(O)cc(O)cc2OC=1c1cc(O)c(O)cc1	3
45	ISSSTY_v1a_7367_02May011_55	1321-74-0	HC=Cc1c(C=CH)cccc1	1
46	ISSSTY_v1a_7367_02May011_56	509-14-8	C([N+](=O)[O-])([N+](=O)[O-])([N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]	3
47	ISSSTY_v1a_7367_02May011_57	111-30-8	HC(C(H)C(H)C=O)C=O	3
48	ISSSTY_v1a_7367_02May011_58	56-53-1	HC(H)C(H)C(c1ccc(O)cc1)=C(c1ccc(O)cc1)C(H)C(H)H	1
49	ISSSTY_v1a_7367_02May011_59	75-25-2	C(Br)(Br)Br	1
50	ISSSTY_v1a_7367_02May011_60	100-21-0	C(=O)(O)c1ccc(C(=O)O)cc1	1
51	ISSSTY_v1a_7367_02May011_61	67-68-5	HC(H)S(=O)C(H)H	1
52	ISSSTY_v1a_7367_02May011_62	94-59-7	HC(c1cc2c(cc1)OC(H)O2)C=CH	1
53	ISSSTY_v1a_7367_02May011_64	7722-84-1	OO	3
54	ISSSTY_v1a_7367_02May011_65	95-80-7	HC(H)c1c(N)cc(N)cc1	3
55	ISSSTY_v1a_7367_02May011_66	100-52-7	c1(C=O)ccccc1	3
56	ISSSTY_v1a_7367_02May011_67	2642-98-0	c1(N)c2c(c3c(c4c(cccc4)cc3)c1)cccc2	3
57	ISSSTY_v1a_7367_02May011_68	930-55-2	HC1C(H)C(H)C(H)N1N=O	3
58	ISSSTY_v1a_7367_02May011_69	50-78-2	HC(H)C(=O)Oc1c(C(=O)O)cccc1	1
59	ISSSTY_v1a_7367_02May011_70	120-61-6	HC(H)OC(=O)c1ccc(C(=O)OC(H)H)cc1	1
60	ISSSTY_v1a_7367_02May011_71	5307-14-2	c1(N)c(N(=O)=O)cc(N)cc1	3

61	ISSSTY_v1a_7367_02May011_73	50-18-0	HC1C(H)C(H)NP(=O)(N(C(H)C(H)Cl)C(H)C(H)Cl)O1	3
62	ISSSTY_v1a_7367_02May011_74	56-57-5	c1([N+](=O)[O-])c2c(cccc2)[n+](c1)cc1	3
63	ISSSTY_v1a_7367_02May011_75	35796	C1(C=O)=CC=CO1	1
64	ISSSTY_v1a_7367_02May011_76	56-23-5	C(Cl)(Cl)(Cl)Cl	3
65	ISSSTY_v1a_7367_02May011_77	27639	HC(Cl)Cl	3
66	ISSSTY_v1a_7367_02May011_78	542-56-3	HC(H)C(C(H)H)C(H)ON=O	3
67	ISSSTY_v1a_7367_02May011_79	140-49-8	HC(H)C(=O)Nc1ccc(C(=O)C(H)Cl)cc1	3
68	ISSSTY_v1a_7367_02May011_81	94-75-7	HC(C(=O)O)Oc1c(Cl)cc(Cl)cc1	1
69	ISSSTY_v1a_7367_02May011_82	680-31-9	HC(H)N(C(H)H)P(=O)(N(C(H)H)C(H)H)N(C(H)H)C(H)H	1
70	ISSSTY_v1a_7367_02May011_83	133-06-2	HC1C2C(=O)N(SC(Cl)(Cl)Cl)C(=O)C2C(H)C=C1	3
71	ISSSTY_v1a_7367_02May011_84	3252-43-5	C(N)C(Br)Br	3
72	ISSSTY_v1a_7367_02May011_85	106-50-3	c1(N)ccc(N)cc1	3
73	ISSSTY_v1a_7367_02May011_86	91-20-3	c12c(cccc1)cccc2	1
74	ISSSTY_v1a_7367_02May011_87	78-93-3	HC(H)C(=O)C(H)C(H)H	1
75	ISSSTY_v1a_7367_02May011_89	51-28-5	c1(O)c([N+](=O)[O-])cc([N+](=O)[O-])cc1	1
76	ISSSTY_v1a_7367_02May011_90	100-97-0	HC1N2C(H)N3C(H)N(C(H)N1C3H)C2H	1
77	ISSSTY_v1a_7367_02May011_91	120-80-9	c1(O)c(O)cccc1	1
78	ISSSTY_v1a_7367_02May011_92	123-86-4	HC(H)C(=O)OC(H)C(H)C(H)C(H)H	1
79	ISSSTY_v1a_7367_02May011_93	518-82-1	HC(H)c1cc2C(=O)c3c(C(=O)c2c(O)c1)c(O)cc(O)c3	3
80	ISSSTY_v1a_7367_02May011_94	64091-91-4	HC(H)N(C(H)C(H)C(H)C(=O)c1cccnc1)N=O	3
81	ISSSTY_v1a_7367_02May011_95	313-67-7	HC(H)Oc1c2c(c3c(c(C(=O)O)cc4c3OC(H)O4)c(N(=O)=O)c2)ccc1	3
82	ISSSTY_v1a_7367_02May011_96	123-91-1	HC1C(H)OC(H)C(H)O1	1
83	ISSSTY_v1a_7367_02May011_98	108-30-5	HC1C(=O)OC(=O)C1H	1
84	ISSSTY_v1a_7367_02May011_99	75-27-4	C(Cl)(Cl)Br	3
85	ISSSTY_v1a_7367_02May011_100	75-07-0	HC(H)C=O	1
86	ISSSTY_v1a_7367_02May011_101	57-41-0	C1(=O)C(c2ccccc2)(c2ccccc2)NC(=O)N1	1
87	ISSSTY_v1a_7367_02May011_103	122-04-3	C(=O)(Cl)c1ccc(N(=O)=O)cc1	3
88	ISSSTY_v1a_7367_02May011_104	106-89-8	HC(Cl)C1C(H)O1	3
89	ISSSTY_v1a_7367_02May011_105	108-95-2	c1(O)cccc1	1
90	ISSSTY_v1a_7367_02May011_106	78-84-2	HC(H)C(C(H)H)C=O	3

91	ISSSTY_v1a_7367_02May011_107	106-93-4	HC(Br)C(H)Br	3
92	ISSSTY_v1a_7367_02May011_108	61-57-4	HC1C(H)N(C2=NC=C(N(=O)=O)S2)C(=O)N1	3
93	ISSSTY_v1a_7367_02May011_109	124-04-9	HC(C(=O)O)C(H)C(H)C(H)C(=O)O	1
94	ISSSTY_v1a_7367_02May011_110	100-42-5	HC=Cc1ccccc1	1
95	ISSSTY_v1a_7367_02May011_111	52315-07-8	HC(H)C1(C(H)H)C(C(=O)OC(c2cc(Oc3ccccc3)ccc2)C_N)C1C=C(Cl)Cl	1
96	ISSSTY_v1a_7367_02May011_112	97-53-0	HC(H)Oc1c(O)ccc(C(H)C=CH)c1	1
97	ISSSTY_v1a_7367_02May011_113	91-23-6	HC(H)Oc1c(N(=O)=O)cccc1	3
98	ISSSTY_v1a_7367_02May011_115	121-69-7	HC(H)N(c1ccccc1)C(H)H	1
99	ISSSTY_v1a_7367_02May011_116	99-56-9	c1(N)c(N)cc(N(=O)=O)cc1	3
100	ISSSTY_v1a_7367_02May011_118	97-18-7	c1(Cl)c(O)c(Sc2c(O)c(Cl)cc(Cl)c2)cc(Cl)c1	1
101	ISSSTY_v1a_7367_02May011_119	136911	HC(C(H)OC(=O)C=CH)OC(=O)C=CH	1
102	ISSSTY_v1a_7367_02May011_121	1634-04-4	HC(H)C(C(H)H)(C(H)H)OC(H)H	1
103	ISSSTY_v1a_7367_02May011_122	148-24-3	c1(O)c2c(cccn2)ccc1	3
104	ISSSTY_v1a_7367_02May011_123	57-97-6	HC(H)c1c2c(c(C(H)H)c3c4c(ccc13)cccc4)cccc2	3
105	ISSSTY_v1a_7367_02May011_124	17026-81-2	HC(H)C(=O)Nc1cc(N)c(OC(H)C(H)H)cc1	3
106	ISSSTY_v1a_7367_02May011_125	107-06-2	HC(Cl)C(H)Cl	3
107	ISSSTY_v1a_7367_02May011_126	99-57-0	c1(O)c(N)cc(N(=O)=O)cc1	3
108	ISSSTY_v1a_7367_02May011_127	78-83-1	HC(H)C(C(H)H)C(H)O	1
109	ISSSTY_v1a_7367_02May011_128	6638-64-8	C1(=O)c2c(-c3c(cc(N(=O)=O)cc3)O1)cccc2	3
110	ISSSTY_v1a_7367_02May011_129	107-22-2	C(=O)C=O	3
111	ISSSTY_v1a_7367_02May011_130	139-13-9	HC(C(=O)O)N(C(H)C(=O)O)C(H)C(=O)O	1
112	ISSSTY_v1a_7367_02May011_131	28861	C(Cl)(Cl)=CCl	3
113	ISSSTY_v1a_7367_02May011_133	117-79-3	c12C(=O)c3c(C(=O)c1cc(N)cc2)cccc3	3
114	ISSSTY_v1a_7367_02May011_134	58-27-5	HC(H)C1C(=O)c2c(C(=O)C=1)cccc2	3
115	ISSSTY_v1a_7367_02May011_135	52-68-6	HC(H)OP(=O)(C(O)C(Cl)(Cl)Cl)OC(H)H	1
116	ISSSTY_v1a_7367_02May011_136	56-54-2	HC(H)Oc1cc2c([C@](O)[C@]3C(H)[C@@]4C(H)C(H)N3C(H)[C@]4C=CH)ccnc2cc1	1
117	ISSSTY_v1a_7367_02May011_138	443-48-1	HC(H)C1N(C(H)C(H)O)C(N(=O)=O)=CN=1	3
118	ISSSTY_v1a_7367_02May011_139	624-83-9	HC(H)N=C=O	1
119	ISSSTY_v1a_7367_02May011_140	88-99-3	C(=O)(O)c1c(C(=O)O)cccc1	1
120	ISSSTY_v1a_7367_02May011_141	88-74-4	c1(N)c(N(=O)=O)cccc1	1

121	ISSSTY_v1a_7367_02May011_142	1330-78-5	HC(H)c1ccc(OP(=O)(Oc2ccc(C(H)H)cc2)Oc2ccc(C(H)H)cc2)cc1	1
122	ISSSTY_v1a_7367_02May011_143	106-99-0	HC=CC=CH	3
123	ISSSTY_v1a_7367_02May011_145	106-88-7	HC(H)C(H)C1C(H)O1	3
124	ISSSTY_v1a_7367_02May011_146	70-25-7	HC(H)N(C(N)=NN(=O)=O)N=O	3
125	ISSSTY_v1a_7367_02May011_147	1817-73-8	c1(Br)c(N)c([N+](=O)[O-])cc([N+](=O)[O-])c1	3
126	ISSSTY_v1a_7367_02May011_148	127-00-4	HC(H)C(O)C(H)Cl	3
127	ISSSTY_v1a_7367_02May011_149	35407	HC(Br)C(Br)C(H)Cl	3
128	ISSSTY_v1a_7367_02May011_150	27336	C(=O)(O)c1ccc(Cl)cc1	1
129	ISSSTY_v1a_7367_02May011_151	80-43-3	HC(H)C(c1ccccc1)(C(H)H)OOC(c1ccccc1)(C(H)H)C(H)H	1
130	ISSSTY_v1a_7367_02May011_152	97-90-5	HC(H)C(C(=O)OC(H)C(H)OC(=O)C(C(H)H)=CH)=CH	1
131	ISSSTY_v1a_7367_02May011_153	57-63-6	HC(H)[C@@]12[C@](O)(C.C)C(H)C(H)[C@]1[C@@]1C(H)C(H)c3c(ccc(O)c3)[C@]1C(H)C2H	1
132	ISSSTY_v1a_7367_02May011_154	91-93-0	HC(H)Oc1c(N=C=O)ccc(-c2cc(OC(H)H)c(N=C=O)cc2)c1	3
133	ISSSTY_v1a_7367_02May011_155	42397-65-9	c1([N+](=O)[O-])c2c3c4c(c([N+](=O)[O-])ccc4ccc3cc1)cc2	3
134	ISSSTY_v1a_7367_02May011_156	29135	HC=CC(=O)O	1
135	ISSSTY_v1a_7367_02May011_157	59-50-7	HC(H)c1c(Cl)ccc(O)c1	1
136	ISSSTY_v1a_7367_02May011_158	88-72-2	HC(H)c1c(N(=O)=O)cccc1	1
137	ISSSTY_v1a_7367_02May011_159	1836-77-7	c1(Cl)c(Oc2ccc(N(=O)=O)cc2)c(Cl)cc(Cl)c1	3
138	ISSSTY_v1a_7367_02May011_160	13048-33-4	HC(C(H)C(H)C(H)C(H)C(H)OC(=O)C=CH)OC(=O)C=CH	1
139	ISSSTY_v1a_7367_02May011_161	101-80-4	c1(Oc2ccc(N)cc2)ccc(N)cc1	3
140	ISSSTY_v1a_7367_02May011_162	106-49-0	HC(H)c1ccc(N)cc1	1
141	ISSSTY_v1a_7367_02May011_163	78-96-6	HC(H)C(O)C(H)N	1
142	ISSSTY_v1a_7367_02May011_164	104-40-5	HC(H)C(H)C(H)C(H)C(H)C(H)C(H)C(H)C(H)c1ccc(O)cc1	1
143	ISSSTY_v1a_7367_02May011_165	96-33-3	HC(H)OC(=O)C=CH	1
144	ISSSTY_v1a_7367_02May011_166	6623-66-1	C1(=O)c2c(-c3c(ccc(N(=O)=O)c3)O1)cccc2	3
145	ISSSTY_v1a_7367_02May011_168	1948-33-0	HC(H)C(c1c(O)ccc(O)c1)(C(H)H)C(H)H	1
146	ISSSTY_v1a_7367_02May011_169	62-23-7	C(=O)(O)c1ccc(N(=O)=O)cc1	3
147	ISSSTY_v1a_7367_02May011_170	924-42-5	HC=CC(=O)NC(H)O	1
148	ISSSTY_v1a_7367_02May011_171	78-88-6	HC(Cl)C(Cl)=CH	3
149	ISSSTY_v1a_7367_02May011_172	67-63-0	HC(H)C(O)C(H)H	1
150	ISSSTY_v1a_7367_02May011_174	91-59-8	c12c(cc(N)cc1)cccc2	3

151	ISSSTY_v1a_7367_02May011_175	156-59-2	C(Cl)=CCI	1
152	ISSSTY_v1a_7367_02May011_177	95-49-8	HC(H)c1c(Cl)cccc1	1
153	ISSSTY_v1a_7367_02May011_178	67-20-9	HC1C(=O)NC(=O)N1N=CC1=CC=C(N(=O)=O)O1	3
154	ISSSTY_v1a_7367_02May011_180	124-48-1	C(Cl)(Br)Br	1
155	ISSSTY_v1a_7367_02May011_181	67-66-3	C(Cl)(Cl)Cl	1
156	ISSSTY_v1a_7367_02May011_182	29167	HC(Cl)C(=O)O	1
157	ISSSTY_v1a_7367_02May011_183	106-46-7	c1(Cl)ccc(Cl)cc1	1
158	ISSSTY_v1a_7367_02May011_185	51-79-6	HC(H)C(H)OC(N)=O	1
159	ISSSTY_v1a_7367_02May011_186	822-36-6	HC(H)C1=CN=CN1	1
160	ISSSTY_v1a_7367_02May011_187	33229-34-4	HC(O)C(H)N(c1cc(N(=O)=O)c(NC(H)C(H)O)cc1)C(H)C(H)O	3
161	ISSSTY_v1a_7367_02May011_188	100-47-0	C(N)c1cccc1	1
162	ISSSTY_v1a_7367_02May011_189	6358-31-2	HC(H)C(=O)C(C(=O)Nc1c(OC(H)H)cccc1)N=Nc1c(OC(H)H)cc(N(=O)=O)cc1	1
163	ISSSTY_v1a_7367_02May011_190	65-85-0	C(=O)(O)c1cccc1	1
164	ISSSTY_v1a_7367_02May011_191	102-01-2	HC(H)C(=O)C(H)C(=O)Nc1cccc1	1
165	ISSSTY_v1a_7367_02May011_192	544-63-8	HC(H)C(H)C(H)C(H)C(H)C(H)C(H)C(H)C(H)C(H)C(H)C(H)C(H)C(=O)O	1
166	ISSSTY_v1a_7367_02May011_193	149-30-4	c12c(cccc1)NC(=S)S2	1
167	ISSSTY_v1a_7367_02May011_194	118-96-7	HC(H)c1c([N+](=O)[O-])cc([N+](=O)[O-])cc1N(=O)=O	3
168	ISSSTY_v1a_7367_02May011_196	88-73-3	c1(Cl)c(N(=O)=O)cccc1	3
169	ISSSTY_v1a_7367_02May011_197	621-64-7	HC(H)C(H)C(H)N(C(H)C(H)C(H)H)N=O	3
170	ISSSTY_v1a_7367_02May011_198	107-07-3	HC(Cl)C(H)O	3
171	ISSSTY_v1a_7367_02May011_200	95-46-5	HC(H)c1c(Br)cccc1	1
172	ISSSTY_v1a_7367_02May011_201	556-52-5	HC(O)C1C(H)O1	3
173	ISSSTY_v1a_7367_02May011_202	97-88-1	HC(H)C(C(=O)OC(H)C(H)C(H)C(H)H)=CH	1
174	ISSSTY_v1a_7367_02May011_204	91-17-8	HC1C(H)C(H)C(H)C2C(H)C(H)C(H)C(H)C12	1
175	ISSSTY_v1a_7367_02May011_205	123-30-8	c1(O)ccc(N)cc1	1
176	ISSSTY_v1a_7367_02May011_206	119-90-4	HC(H)Oc1c(N)ccc(-c2cc(OC(H)H)c(N)cc2)c1	3
177	ISSSTY_v1a_7367_02May011_208	77439-76-0	C1(=O)C(Cl)=C(C(Cl)Cl)C(O)O1	3
178	ISSSTY_v1a_7367_02May011_209	62-50-0	HC(H)C(H)OS(=O)(=O)C(H)H	3
179	ISSSTY_v1a_7367_02May011_210	18451	HC(H)c1c(=O)c2=C(C(=O)c1N)[C@@](C(H)OC(N)=O)[C@@]1(OC(H)H)[C@]3[C@@](C(H)N21)N3	3
180	ISSSTY_v1a_7367_02May011_211	106-43-4	HC(H)c1ccc(Cl)cc1	1

181	ISSSTY_v1a_7367_02May011_212	62-44-2	HC(H)C(=O)Nc1ccc(OC(H)C(H)H)cc1	1
182	ISSSTY_v1a_7367_02May011_213	481-72-1	HC(O)c1cc2C(=O)c3c(C(=O)c2c(O)c1)c(O)ccc3	3
183	ISSSTY_v1a_7367_02May011_214	16219-75-3	HC(H)C=C1C(H)C2C(H)C1C=C2	1
184	ISSSTY_v1a_7367_02May011_215	96-45-7	HC1C(H)NC(=S)N1	3
185	ISSSTY_v1a_7367_02May011_216	481-42-5	HC(H)C1C(=O)c2c(C(=O)C=1)c(O)ccc2	3
186	ISSSTY_v1a_7367_02May011_217	100-02-7	c1(O)ccc(N(=O)=O)cc1	1
187	ISSSTY_v1a_7367_02May011_218	126-99-8	HC=C(Cl)C=CH	1
188	ISSSTY_v1a_7367_02May011_219	52-86-8	HC(C(=O)c1ccc(F)cc1)C(H)C(H)N1C(H)C(H)C(O)(c2ccc(Cl)cc2)C(H)C1H	1
189	ISSSTY_v1a_7367_02May011_220	111-40-0	HC(N)C(H)NC(H)C(H)N	1
190	ISSSTY_v1a_7367_02May011_221	115-29-7	HC1C2C3(Cl)C(Cl)(Cl)C(Cl)(C(Cl)=C3Cl)C2C(H)OS(=O)O1	1
191	ISSSTY_v1a_7367_02May011_222	3333-52-6	HC(H)C(C(C_N)(C(H)H)C(H)H)(C_N)C(H)H	1
192	ISSSTY_v1a_7367_02May011_223	109-99-9	HC1C(H)C(H)C(H)O1	1
193	ISSSTY_v1a_7367_02May011_224	122021-01-6	HC(H)C(H)C(H)C(H)C(C(H)C(H)H)C(H)OC(=O)c1ccc(N(C(H)H)N=O)cc1	1
194	ISSSTY_v1a_7367_02May011_225	789-07-1	c12c3c4c(cc(N(=O)=O)cc4ccc3ccc1)cc2	3
195	ISSSTY_v1a_7367_02May011_226	97-00-7	c1(Cl)c([N+](=O)[O-])cc([N+](=O)[O-])cc1	3
196	ISSSTY_v1a_7367_02May011_227	96-29-7	HC(H)C(C(H)C(H)H)=NO	1
197	ISSSTY_v1a_7367_02May011_229	98-15-7	C(F)(F)(F)c1cc(Cl)ccc1	1
198	ISSSTY_v1a_7367_02May011_230	107-05-1	HC(Cl)C=CH	3
199	ISSSTY_v1a_7367_02May011_231	108-24-7	HC(H)C(=O)OC(=O)C(H)H	1
200	ISSSTY_v1a_7367_02May011_232	1477-55-0	HC(N)c1cc(C(H)N)ccc1	1
201	ISSSTY_v1a_7367_02May011_233	108-01-0	HC(H)N(C(H)H)C(H)C(H)O	1
202	ISSSTY_v1a_7367_02May011_235	84-79-7	HC(H)C(C(H)H)=CC(H)C1C(=O)C(=O)c2c(C=1O)cccc2	1
203	ISSSTY_v1a_7367_02May011_236	534-22-5	HC(H)C1=CC=CO1	1
204	ISSSTY_v1a_7367_02May011_237	115-11-7	HC(H)C(C(H)H)=CH	1
205	ISSSTY_v1a_7367_02May011_239	88-16-4	C(F)(F)(F)c1c(Cl)cccc1	1
206	ISSSTY_v1a_7367_02May011_240	90-30-2	c1(Nc2cccc2)c2c(ccc2)ccc1	1
207	ISSSTY_v1a_7367_02May011_241	79-00-5	HC(Cl)C(Cl)Cl	3
208	ISSSTY_v1a_7367_02May011_243	60599-38-4	HC(H)C(=O)C(H)N(C(H)C(=O)C(H)H)N=O	3
209	ISSSTY_v1a_7367_02May011_244	1576-35-8	HC(H)c1ccc(S(=O)(=O)NN)cc1	3
210	ISSSTY_v1a_7367_02May011_245	105-60-2	HC1C(=O)NC(H)C(H)C(H)C1H	1

211	ISSSTY_v1a_7367_02May011_246	2475-45-8	c12C(=O)c3c(C(=O)c1c(N)ccc2N)c(N)ccc3N	3
212	ISSSTY_v1a_7367_02May011_247	91-22-5	c12c(cccc1)cccn2	3
213	ISSSTY_v1a_7367_02May011_248	107-21-1	HC(O)C(H)O	1
214	ISSSTY_v1a_7367_02May011_249	58-55-9	HC(H)N1C(=O)C2=C(N(C(H)H)C1=O)N=CN2	1
215	ISSSTY_v1a_7367_02May011_250	2784-94-3	HC(H)Nc1c(N(=O)=O)cc(N(C(H)C(H)O)C(H)C(H)O)cc1	3
216	ISSSTY_v1a_7367_02May011_251	150-76-5	HC(H)Oc1ccc(O)cc1	1
217	ISSSTY_v1a_7367_02May011_252	1506-02-1	HC(H)C1(C(H)H)c2c(C(C(H)H)(C(H)H)C(H)C1C(H)H)cc(C(=O)C(H)H)c(C(H)H)c2	1
218	ISSSTY_v1a_7367_02May011_253	130-15-4	C1(=O)c2c(C(=O)C=C1)cccc2	3
219	ISSSTY_v1a_7367_02May011_254	144-62-7	C(=O)(O)C(=O)O	1
220	ISSSTY_v1a_7367_02May011_255	108-46-3	c1(O)cc(O)ccc1	1
221	ISSSTY_v1a_7367_02May011_258	42397-64-8	c1([N+](=O)[O-])c2c3c4c(c([N+](=O)[O-])ccc4cc2)ccc3cc1	3
222	ISSSTY_v1a_7367_02May011_259	1260-17-9	HC(H)c1c2C(=O)c3c(C(=O)c2cc(O)c1C(=O)O)c(O)c(O)c([C@@]1[C@](O)[C@@](O)[C@](O)[C@@](C(H)O)O1)c3O	1
223	ISSSTY_v1a_7367_02May011_260	94-36-0	C(=O)(c1ccccc1)OOC(=O)c1ccccc1	1
224	ISSSTY_v1a_7367_02May011_261	135-88-6	c12c(cc(Nc3ccccc3)cc1)cccc2	1
225	ISSSTY_v1a_7367_02May011_262	87-62-7	HC(H)c1c(N)c(C(H)H)ccc1	1
226	ISSSTY_v1a_7367_02May011_263	598-55-0	HC(H)OC(N)=O	1
227	ISSSTY_v1a_7367_02May011_264	53609-64-6	HC(H)C(O)C(H)N(C(H)C(O)C(H)H)N=O	3
228	ISSSTY_v1a_7367_02May011_265	121-88-0	c1(N)c(O)cc(N(=O)=O)cc1	3
229	ISSSTY_v1a_7367_02May011_266	933-75-5	c1(Cl)c(Cl)c(O)c(Cl)cc1	1
230	ISSSTY_v1a_7367_02May011_267	83-38-5	c1(Cl)c(C=O)c(Cl)ccc1	1
231	ISSSTY_v1a_7367_02May011_270	99-99-0	HC(H)c1ccc(N(=O)=O)cc1	1
232	ISSSTY_v1a_7367_02May011_271	121-92-6	C(=O)(O)c1cc(N(=O)=O)ccc1	3
233	ISSSTY_v1a_7367_02May011_272	14371-10-9	c1(C=CC=O)ccccc1	1
234	ISSSTY_v1a_7367_02May011_273	59-87-0	C1(C=NNC(N)=O)=CC=C(N(=O)=O)O1	3
235	ISSSTY_v1a_7367_02May011_274	100-64-1	HC1C(=NO)C(H)C(H)C(H)C1H	1
236	ISSSTY_v1a_7367_02May011_275	108-21-4	HC(H)C(=O)OC(C(H)H)C(H)H	1
237	ISSSTY_v1a_7367_02May011_277	563-47-3	HC(H)C(C(H)Cl)=CH	1
238	ISSSTY_v1a_7367_02May011_278	20830-81-3	HC(H)C(=O)[C@@]1(O)C(H)c2c(O)c3c(O)c4c(C(=O)c3c(O)c2[C@@](O)[C@@]2C(H)[C@](N)[C@](O)[C@](C(H)H)O2)C1H)c(O)C(H)H)ccc4	3
239	ISSSTY_v1a_7367_02May011_279	36405	c1(N)cc(N(=O)=O)ccc1	3
240	ISSSTY_v1a_7367_02May011_280	874-42-0	c1(Cl)c(C=O)ccc(Cl)c1	1