

Supporting information for:

CLCA: Maximum Common Molecular Substructure Queries within the MetRxn Database

Akhil Kumar¹ and Costas D. Maranas^{*2}

¹The Huck Institutes of the Life Sciences, Pennsylvania State University, University Park, PA; ²Department of Chemical Engineering, Pennsylvania State University, University Park, PA;

*corresponding author

E-mail: costas@psu.edu

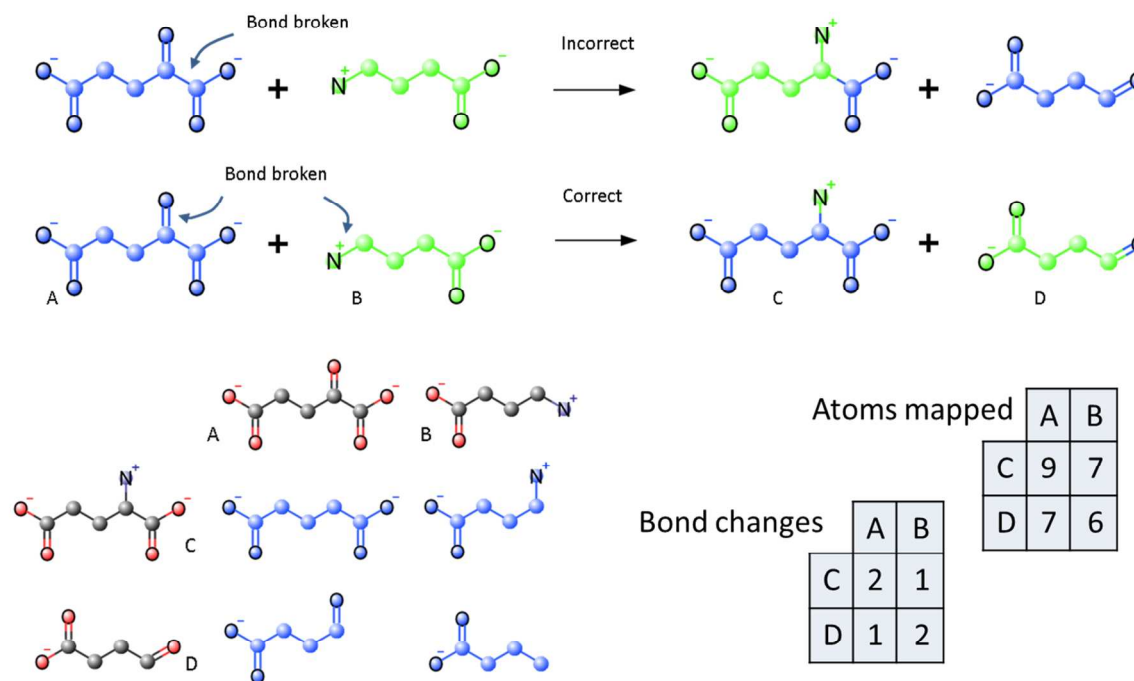
Table of Contents

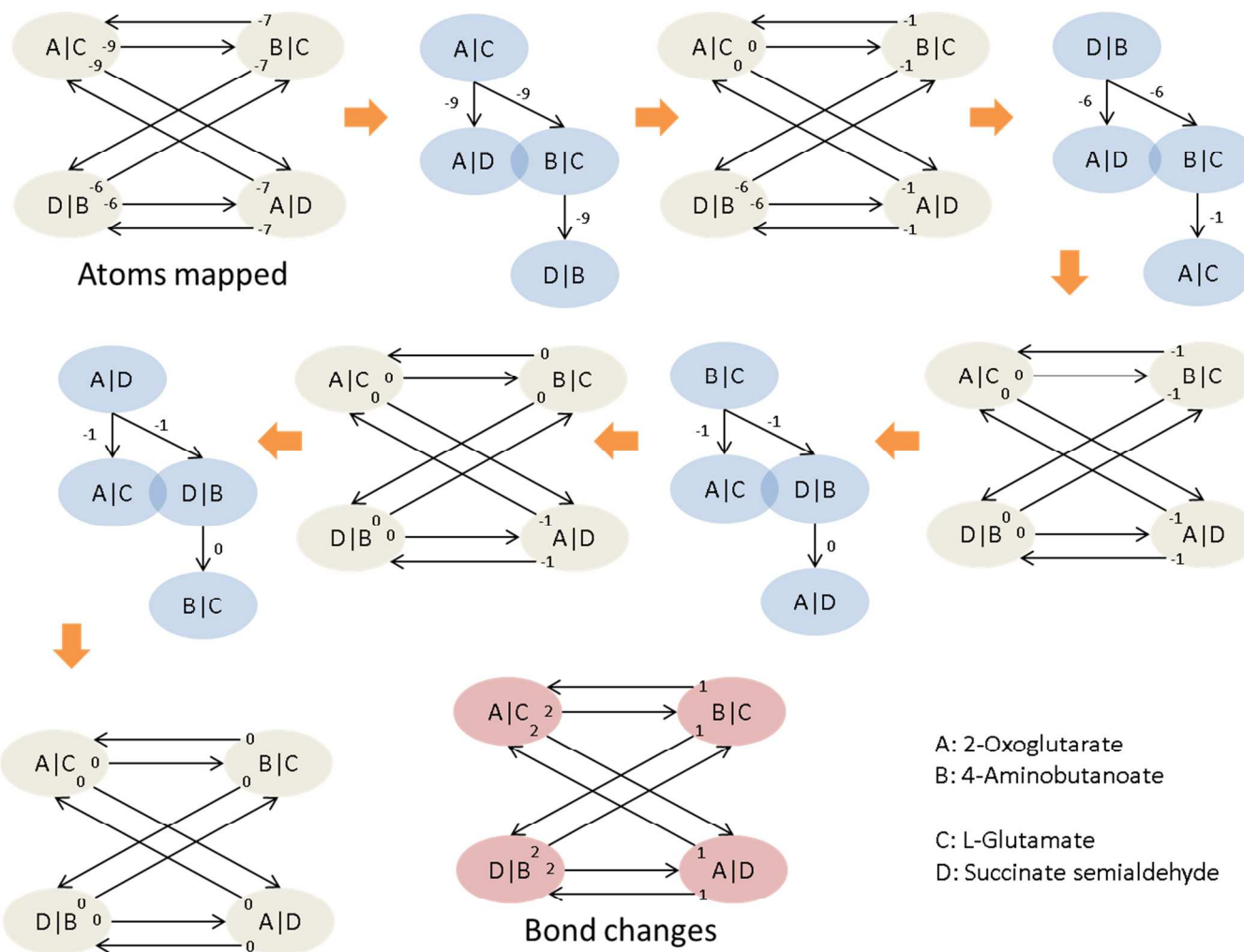
Figure S1.....	2-3
Figure S2.....	4-9
Table S1.....	10-12
Table S2.....	13-15
Table S3.....	16-21
Table S4.....	22-28

Example where maximum Bond/Atom overlap instead of minimization of bond changes is considered at each step

Figure S1. The reaction 4-aminobutanoate: 2-oxoglutarate aminotransferase has two atom mapping solutions. The first solution is identified when we apply the optimality condition for minimal bond break, while second solution is identified by the maximum number of atoms/bonds conserved. Two different solutions are identified by the order in which the reactant/product comparison proceeds. To identify the correct order of graph comparison, we use minimum spanning trees to identify the correct path of substrate comparison. Each vertex represents a comparison/operation between two molecular graphs and the edges incident from each vertex represents the reduction in solution space for the next operation. If we choose to proceed with the optimality condition for maximum number of atoms mapped, we start by applying CLCA to molecular graphs of 2-Oxoglutarate and L-glutamate. If we choose to proceed with the optimality condition of minimum bonds changes, we start by applying MCS to the molecular graphs of 4-Aminobutanoate and L-Glutamate or 2-Oxoglutarate and Succinate semialdehyde

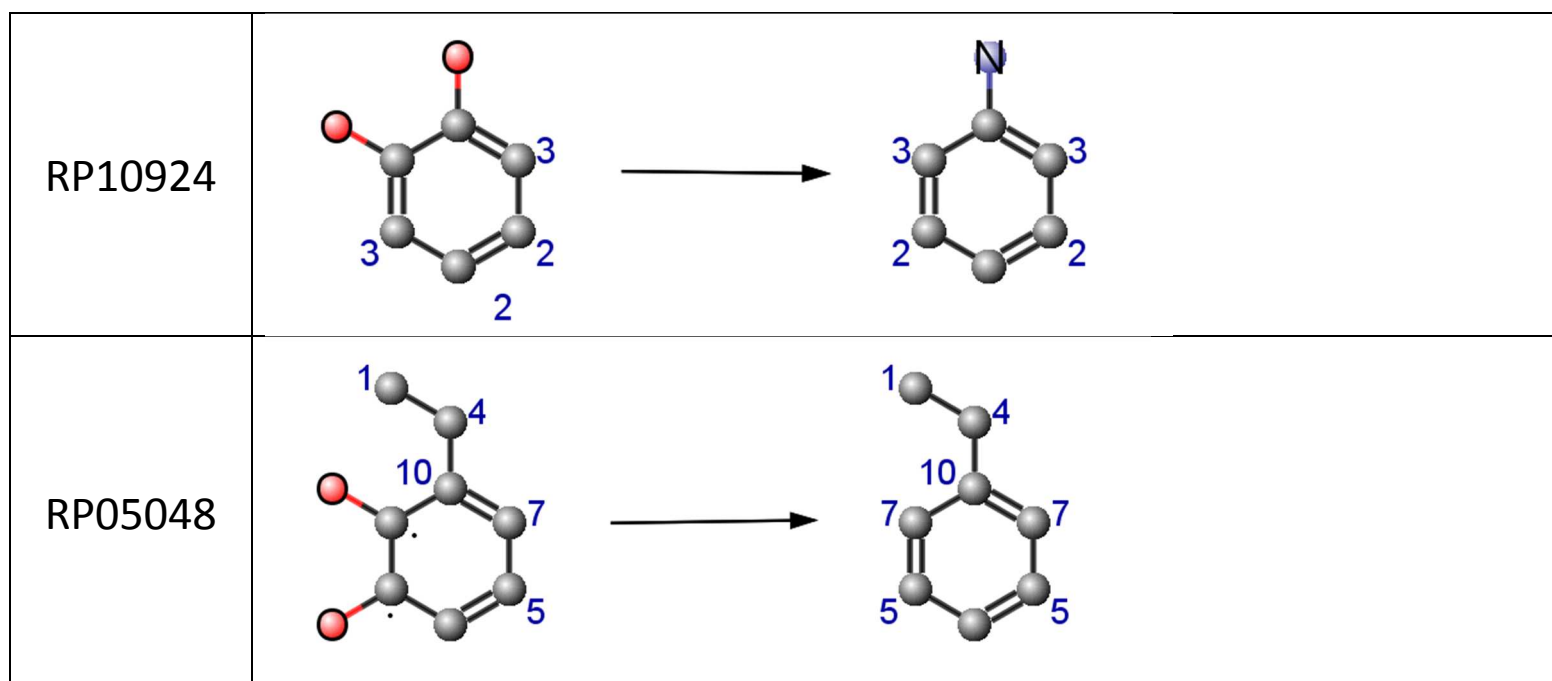
4-aminobutanoate:2-oxoglutarate aminotransferase

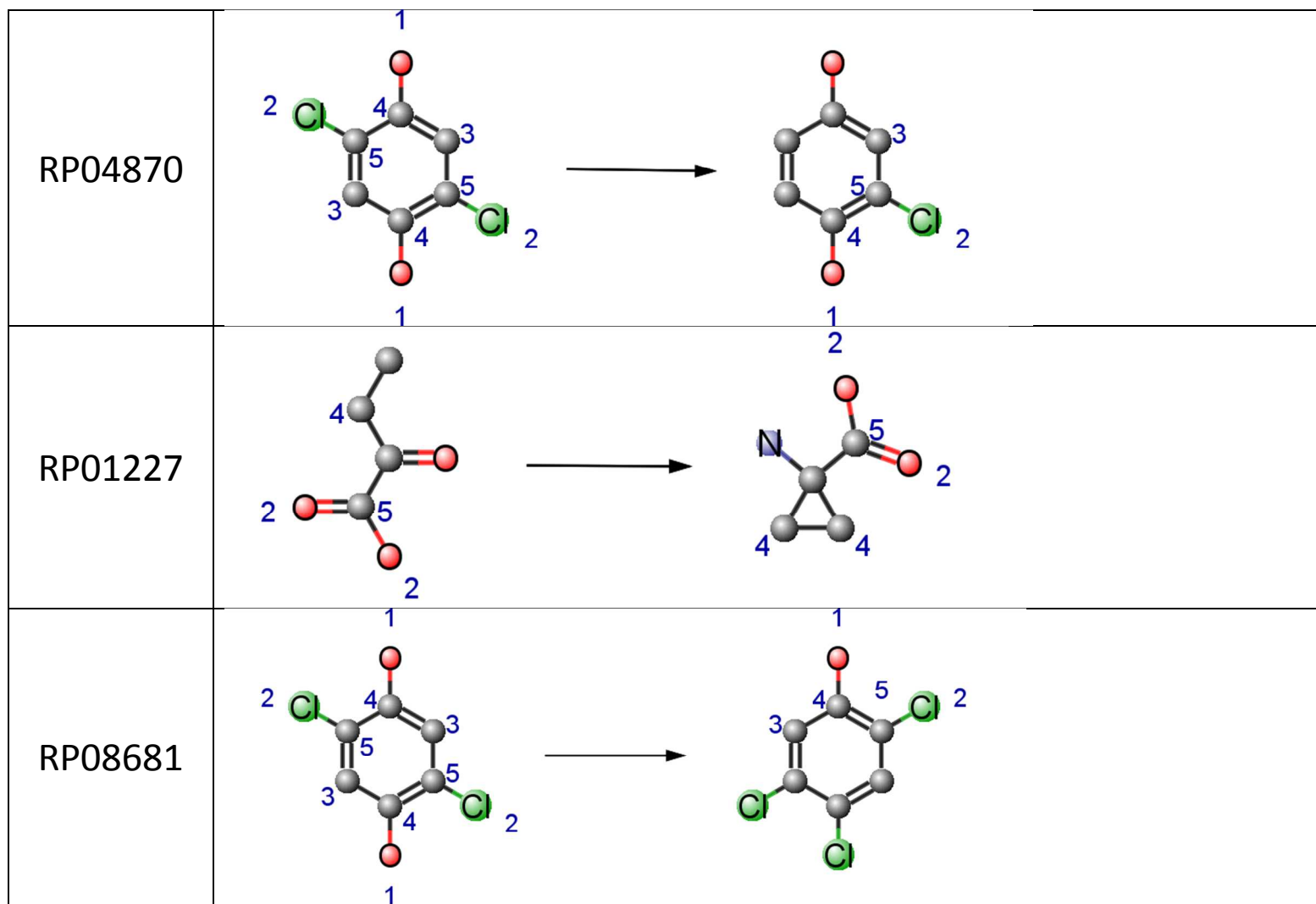




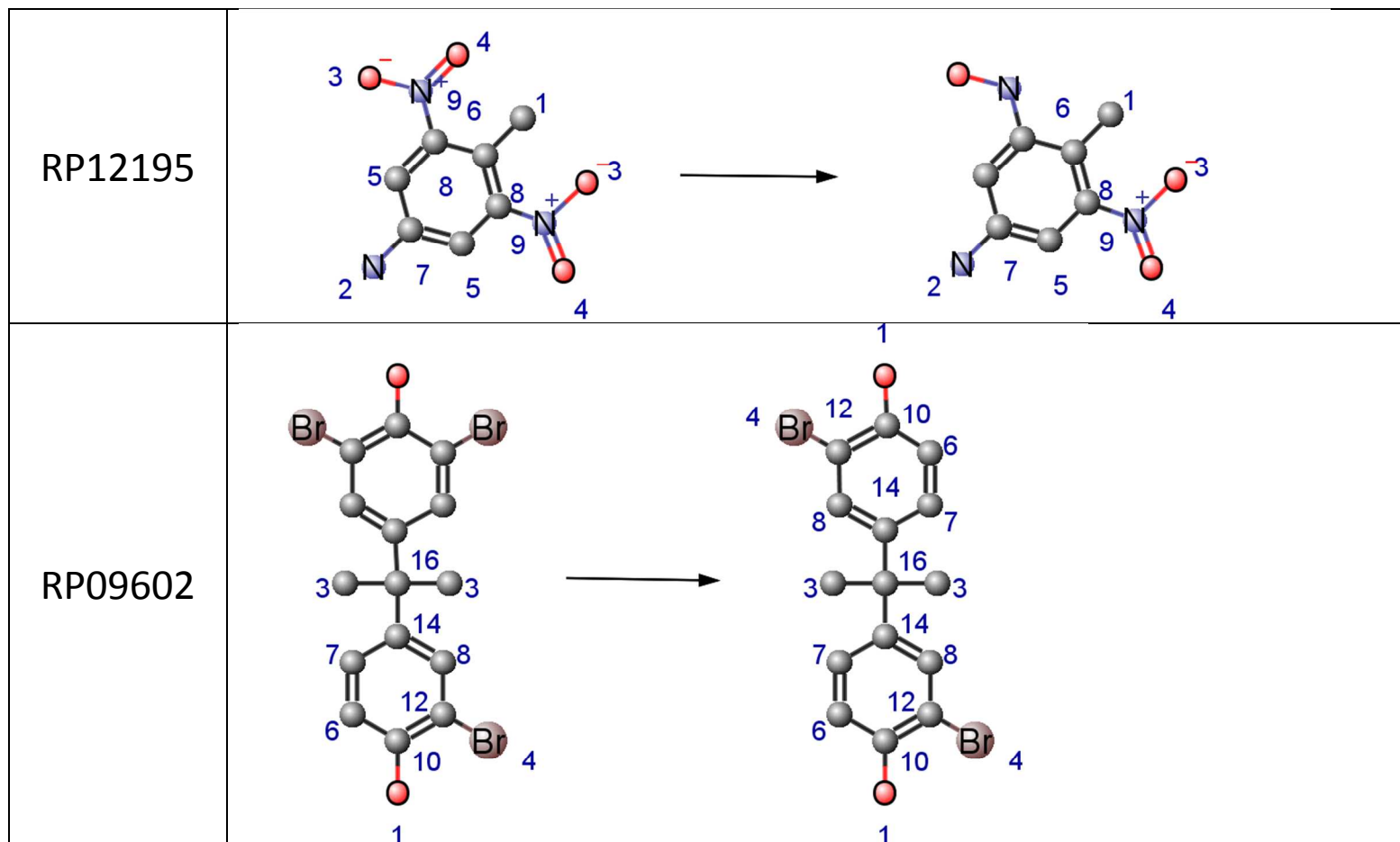
16 cases of CLCA disagreement with KEGG RPAIR, CLCA was unable to find the MCS.

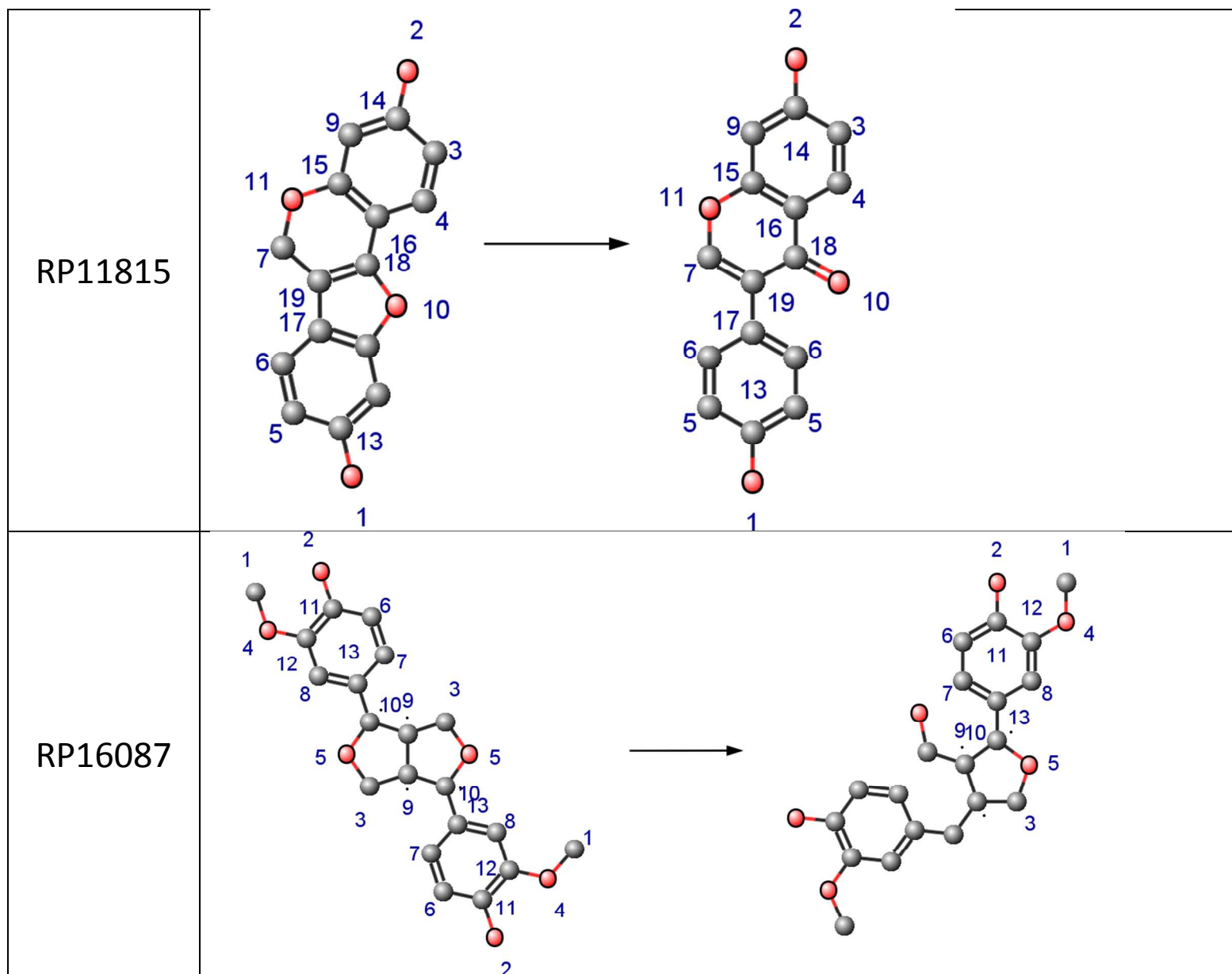
Figure S2. In most of the cases shown above, symmetry with cyclic groups on atleast one of the sides occur and CLCA and A* both cannot identify the optimal mapping solution.

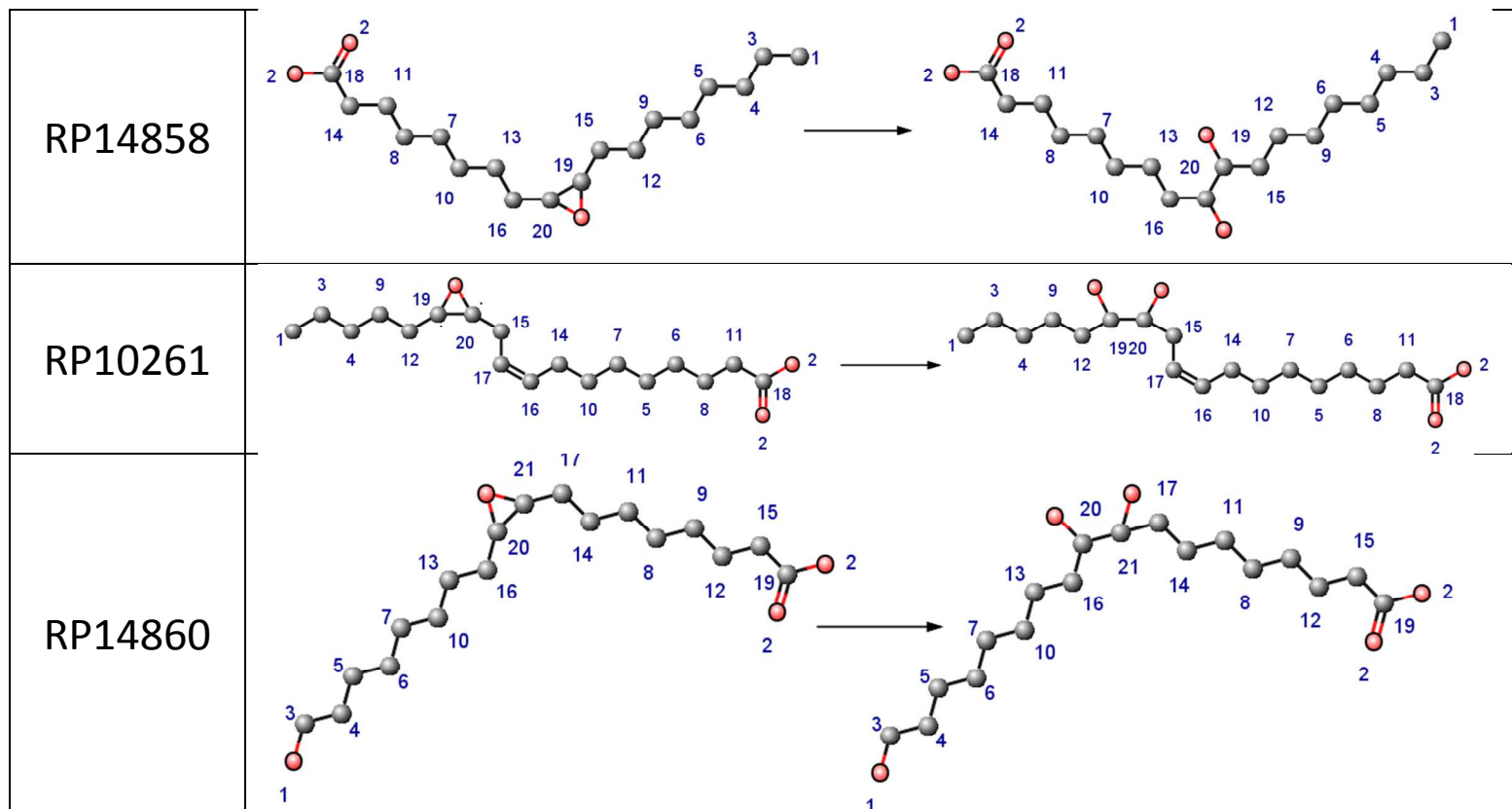




RP04995	
RP07825	
RP11838	
RP10210	







CLCA disagreement with MetaCyc. In the list mentioned below, CLCA had lesser number of bond changes for each reaction atom mapping solution.

Table S1. The table contains the reaction ids of 232 reactions from the MetaCyc Database wherein the solution suggested by MetaCyc was possibly incorrect. CLCA found better solutions for 198 reactions when compared for the number of bond changes between the reactant and the product.

MetaCyc, Possibly incorrect mappings.		
1.13.11.45-RXN	RXN-12327	RXN-5121
1.13.12.12-RXN	RXN-12329	RXN-5122
1.14.99.36-RXN	RXN-12338	RXN-5123
2.1.1.143-RXN	RXN-12366	RXN66-323
2.3.1.154-RXN	RXN-12367	RXN-7082
2.4.1.117-RXN	RXN-12394	RXN-7570
2.4.1.153-RXN	RXN-12395	RXN-7777
2.4.1.193-RXN	RXN-12396	RXN-8109
2.4.1.54-RXN	RXN-12774	RXN-8120
2.4.1.83-RXN	RXN-12823	RXN-8177
2.4.2.32-RXN	RXN-12836	RXN-8236
2.5.1.42-RXN	RXN-12844	RXN-8255
2.5.1.66-RXN	RXN-12846	RXN-8282
2.5.1.67-RXN	RXN-12983	RXN-8283
2.6.1.80-RXN	RXN-13074	RXN-8414
2.7.8.6-RXN	RXN-13137	RXN-8415
2.8.3.10-RXN	RXN-13218	RXN-8416
2.8.3.17-RXN	RXN-13230	RXN-8417
2TRANSKETO-RXN	RXN-13237	RXN-8418
3.1.1.82-RXN	RXN-13335	RXN-8419
4.1.3.26-RXN	RXN-13338	RXN-8422

5.4.1.2-RXN	RXN-13355	RXN-8423
5-HYDROXPENTANOATE-COA-TRANSFERASE-RXN	RXN-13364	RXN-8426
ALPHAALPHA-TREHALOSE-PHOSPHORYLASE-RXN	RXN-13373	RXN-8431
CALCIDIOL-1-MONOOXYGENASE-RXN	RXN-13374	RXN-8432
FRUCTOSE-6-PHOSPHATE-PHOSPHOKETOLASE-RXN	RXN-13409	RXN-8540
GALACTURIDYLYLTRANS-RXN	RXN-13420	RXN-8541
GLUTACONATE-COA-TRANSFERASE-RXN	RXN-13422	RXN-8542
LACCOA-RXN	RXN-13500	RXN-8544
LANOSTEROL-SYNTHASE-RXN	RXN-13511	RXN-8560
LIPIDADISACCHARIDESYNTH-RXN	RXN-13522	RXN-8563
LUMAZINESYN-RXN	RXN-13554	RXN-8564
METHGLYSYN-RXN	RXN-13592	RXN-8565
PENTALENE-SYNTHASE-RXN	RXN-13627	RXN-8572
PHOSPHOENOLPYRUVATE-MUTASE-RXN	RXN-13628	RXN-8573
PPENTOMUT-RXN	RXN-13630	RXN-8574
PPGPPSYN-RXN	RXN-13642	RXN-8575
PPPGPPHYDRO-RXN	RXN-13691	RXN-8577
PROPIONATE-COA-TRANSFERASE-RXN	RXN-13693	RXN-8585
PROPIONLACT-RXN	RXN-13694	RXN-8586
QUINOLINATE-SYNTHA-RXN	RXN-13761	RXN-8588
R11-RXN	RXN-13762	RXN-8589
R547-RXN	RXN-13763	RXN-8590
R8-RXN	RXN-13767	RXN-8591
RXN0-1382	RXN-13866	RXN-8592
RXN0-2001	RXN-13913	RXN-8593
RXN0-268	RXN-13914	RXN-8594
RXN0-5225	RXN-14006	RXN-8595
RXN0-5409	RXN-14137	RXN-8596
RXN0-7075	RXN-14138	RXN-8597
RXN-10063	RXN-14224	RXN-8598

RXN-10086	RXN-14266	RXN-8599
RXN-10603	RXN-14287	RXN-8600
RXN-10632	RXN-14337	RXN-8607
RXN-10635	RXN-14421	RXN-8621
RXN-10636	RXN-14894	RXN-8633
RXN-10637	RXN-14902	RXN-864
RXN-11031	RXN-14921	RXN-8807
RXN-11054	RXN-14922	RXN-8849
RXN-11078	RXN-15008	RXN-8889
RXN-11201	RXN-15090	RXN-8931
RXN-11203	RXN-15134	RXN-8987
RXN-1121	RXN-15135	RXN-9151
RXN-11262	RXN-15366	RXN-9199
RXN-11436	RXN-15391	RXN-9301
RXN-1144	RXN-15497	RXN-9357
RXN-11490	RXN1G-4355	RXN-943
RXN-11491	RXN-2543	RXN-9827
RXN-11798	RXN-2561	RXN-9829
RXN-11813	RXN3O-227	RXN-9852
RXN-11910	RXN4FS-12	RXN-9884
RXN-12028	RXN4FS-13	RXNQT-4361
RXN-12069	RXN-5101	RXNQT-4363
RXN-12078	RXN-5106	TETRAACYLDISACC4KIN-RXN
RXN-12223	RXN-5107	TREHALOSE6PSYN-RXN
RXN-12245	RXN-5109	TRYPSYN-RXN
	RXN-5110	X-METHYL-HIS-DIPEPTIDASE-RXN

Longest graph geodesic and Hash vector values for vertices corresponding to Figure 4 in manuscript

Table S2. The longest geodesic for a vertex is the longest of all the shortest paths to other vertices. FHV is calculated by values of the vertex features, i.e columns 1-6. The subscript represents the iteration. The procedure takes 6 iterations to identify the maximum common subgraph. If a bijection is identified, the prime values are fixed and products for those vertices are not calculated in the next iteration.

idx	symbol	artificial	weight	charge	longest geodesic	FHV	A	A'	B	B'	C	C'	D	D'	E	E'	F	F'	G	ORDER
1	o	10	008	0	8*6*6*6*6*6	1101528804776	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0
2	a	11	001	0	*6*6*6*6*6*6	1100615106393	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0
3	c	10	006	0	6*6*6*6*6*6	1102141857694	1	31	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0
4	a	11	001	0	*6*6*6*6*6*6	1100111807953	31	899	1	1	1	1	1	1	1	1	1	83	1	0
59	a	11	001	0	*6*6*6*6*6*6	1100111807953	31	1189	1	23	1	23	1	23	1	23	1	1909	1	0
25	p	10	015	0	15	1001423846568	2		2		2		2		2		2		2	1
52	p	10	015	0	15	1001423846568	2		2		2		2		2		2		2	1
31	o	10	008	1	8*15	1100327504643	3		3		3		3		3		3		3	2
54	o	10	008	1	8*15	1100327504643	3		3		3		3		3		3		3	2
12	c	10	006	0	6*6*6	1100513988396	5		5		5		5		5		5		5	3
40	c	10	006	0	6*6*6	1100513988396	5		5		5		5		5		5		5	3
24	a	11	001	0	*8*6*6*6*6*6	1100553066779	7		7		7		7		7		7		7	4
51	a	11	001	0	*8*6*6*6*6*6	1100553066779	7		7		7		7		7		7		7	4
22	o	10	008	0	8*6*6*6	1101319646818	11		11		11		11		11		11		11	5
42	o	10	008	0	8*6*6*6	1101319646818	11		11		11		11		11		11		11	5
15	a	11	001	0	6*6*6*6	1101798782938	13		13		13		13		13		13		13	6
37	a	11	001	0	6*6*6*6	1101798782938	13		13		13		13		13		13		13	6
30	a	11	001	0	*15	1100740988597	37	222	17		17		17		17		17		17	7
53	a	11	001	0	*15	1100740988597	37	222	17		17		17		17		17		17	7
16	o	10	008	0	8*6*6*6*6	1101689473384	41	533	19		19		19		19		19		19	8
38	o	10	008	0	8*6*6*6*6	1101689473384	41	533	19		19		19		19		19		19	8
8	o	10	008	0	8*6*6*6*6	1101689473384	41	943	23		23		23		23		23		23	9

46	o	10	008	0	8*6*6*6*6	1101689473384	41	943	23		23		23		23		23		23	9
7	o	10	008	0	8*6*6*6*6*6	1102057185826	47	1457	29		29		29		29		29		29	10
32	o	10	008	0	8*6*6*6*6*6	1102057185826	47	1457	29		29		29		29		29		29	10
21	a	11	001	0	*6*6*6	1101857886417	43	2365	31		31		31		31		31		31	11
41	a	11	001	0	*6*6*6	1101857886417	43	2365	31		31		31		31		31		31	11
23	o	10	008	0	8*6*6*6*6*6	1102057185826	47	10199	37		37		37		37		37		37	12
50	o	10	008	0	8*6*6*6*6*6	1102057185826	47	10199	37		37		37		37		37		37	12
9	a	11	001	0	*6*6*6*6	1001782211495	23	16031	41		41		41		41		41		41	13
45	a	11	001	0	*6*6*6*6	1001782211495	23	16031	41		41		41		41		41		41	13
14	c	10	006	0	6*6*6*6	1000519069986	17	218569	43		43		43		43		43		43	14
36	c	10	006	0	6*6*6*6	1000519069986	17	218569	43		43		43		43		43		43	14
10	c	10	006	0	6*6*6*6	1000519069986	17	386699	47		47		47		47		47		47	15
44	c	10	006	0	6*6*6*6	1000519069986	17	386699	47		47		47		47		47		47	15
13	a	11	001	0	*6*6*6	1101857886417	43	3655	61	13115	53		53		53		53		53	16
39	a	11	001	0	*6*6*6	1101857886417	43	3655	61	13115	53		53		53		53		53	16
11	a	11	001	0	*6*6*6	1101857886417	43	3655	61	14335	59		59		59		59		59	17
43	a	11	001	0	*6*6*6	1101857886417	43	3655	61	14335	59		59		59		59		59	17
20	a	11	001	0	*6*6*6*6*6	1100111807953	31	42253	73	191771	61		61		61		61		61	18
49	a	11	001	0	*6*6*6*6*6	1100111807953	31	42253	73	191771	61		61		61		61		61	18
18	a	11	001	0	*6*6*6*6	1001782211495	23	11339	67	223579	67		67		67		67		67	19
47	a	11	001	0	*6*6*6*6	1001782211495	23	11339	67	223579	67		67		67		67		67	19
19	c	10	006	0	6*6*6*6*6	1002042243476	29	20677	71	347261	79	322873	71		71		71		71	20
48	c	10	006	0	6*6*6*6*6	1002042243476	29	20677	71	347261	79	322873	71		71		71		71	20
6	a	11	001	0	*6*6*6*6*6	1100111807953	31	42253	73	2117	1	29	1	29	73		73		73	21
33	a	11	001	0	*6*6*6*6*6	1100111807953	31	42253	73	150307	1	2291	1	29	73		73		73	21
17	a	11	001	0	*6*6*6*6	1001782211495	23	11339	67	2881	1	43	1	43	79		79		79	22
35	a	11	001	0	*6*6*6*6	1001782211495	23	11339	67	204551	1	3397	1	43	79		79		79	22
5	c	10	006	0	6*6*6*6*6	1002042243476	29	640987	1	4891	1	1	1	1	1	5767	83		83	23
34	c	10	006	0	6*6*6*6*6	1002042243476	29	20677	71	347261	79	79	1	1	1	5767	83		83	23
27	o	10	008	0	8*15	1001479949820	19	703	53	3127	71	5183	73	5767	83	7387	89	8633	89	24
29	o	10	008	0	8*15	1001479949820	19	703	53	3127	71	5183	73	5767	83	7387	89	8633	89	24
56	o	10	008	0	8*15	1001479949820	19	703	53	3127	71	5183	73	5767	83	7387	89	8633	89	24
58	o	10	008	0	8*15	1001479949820	19	703	53	3127	71	5183	73	5767	83	7387	89	8633	89	24

26	a	11	001	0	*15	1100740988597	37	1406	59	6254	73	10366	79	11534	89	14774	97	17266	97	25
28	a	11	001	0	*15	1100740988597	37	1406	59	6254	73	10366	79	11534	89	14774	97	17266	97	25
55	a	11	001	0	*15	1100740988597	37	1406	59	6254	73	10366	79	11534	89	14774	97	17266	97	25
57	a	11	001	0	*15	1100740988597	37	1406	59	6254	73	10366	79	11534	89	14774	97	17266	97	25

Table S3. 1000 randomly chosen reactions were mapped using the ReactionMap web interface in October 2014. Solutions for 21 reactions were found to disagree with the solutions generated by CLCA. The first 20 SMILES listed below are solutions suggested by ReactionMap wherein CLCA suggested fewer bond breaks. The 21st row in red shows the incomplete CLCA mapping solution in SMILES for the reaction rxn:00004803.

#	MetRxn Id	SMILES
1	rxn:00001660	<chem>[CH3:1][C:2](=[O:3])[NH:4][CH:5]1[CH:6]([CH:7]([CH:8]([O:9][CH:10]1[O:11][CH2:12][CH:13]2[CH:14]([CH:15]([CH:16]([CH:17]([O:18]2[O:19][CH:20]3[CH:21]([O:22][CH:23]([CH:24]([CH:25]3[OH:26])[NH:27][C:28](=[O:29])[CH3:30])[O:31][CH:32]4[CH:33]([CH:34]([O:35][CH:36]([CH:37]4[OH:38])[O:39][CH:40]5[CH:41]([O:42][CH:43]([CH:44]([CH:45]5[OH:46])[OH:47])[OH:48])[CH2:49][OH:50])[CH2:51][OH:52])[OH:53])[CH2:54][OH:55])[OH:56])[O:57][CH:58]6[CH:59]([CH:60]([CH:61]([CH:62]([O:63]6[CH2:64][OH:65])[O:66][CH:67]7[CH:68]([CH:69]([CH:70]([CH:71]([O:72]7[CH2:73][OH:74])[OH:75])[OH:76])[OH:77])[OH:78])[NH:79][C:80](=[O:81])[CH3:82])[OH:83])[CH2:84][OH:85])[OH:86])[OH:87].[c:88]1[c:89][n:90]([c:91](=[O:92])[nH:93][c:94]1=[O:95])[CH:96]2[CH:97]([CH:98]([CH:99]([O:100]2)[CH2:101][O:102][P:103](=[O:104])[OH:105])[O:106][P:107](=[O:108])([OH:109])[OH:109])[OH:111])[OH:112]>>[CH3:30][C:28](=[O:29])[NH:27][CH:24]1[CH:34]([CH:33]([CH:32]([O:31][CH:23]1[O:109][P:107](=[O:108])([OH:109])[O:106][P:103](=[O:104])([OH:105])[O:102][CH2:101][CH:99]2[CH:98]([CH:97]([CH:96]([O:100]2)[n:90]3[c:89][c:88][c:94](=[O:95])[nH:93][c:91]3=[O:92])[OH:112])[OH:111])[CH2:37][OH:38])[OH:53])[OH:35].[CH3:82][C:80](=[O:81])[NH:79][CH:59]1[CH:60]([CH:61]([CH:62]([O:63]([CH:58]1[O:57][CH:15]2[CH:21]([CH:20]([O:19][CH:17]([CH:16]2[OH:56])[O:18][CH:13]3[CH:12]([O:11][CH:10]([CH:5]([CH:14]3[OH:83])[NH:4][C:2](=[O:3])[CH3:1])[O:9][CH:8]4[CH:84]([CH:36]([O:39][CH:6]([CH:7]4[OH:86])[O:87][CH:40]5[CH:41]([O:42][CH:43]([CH:44]([CH:45]5[OH:46])[OH:47])[OH:48])[CH2:49][OH:50])[CH2:51][OH:52])[OH:85])[CH2:54][OH:55])[CH2:25][OH:26])[OH:22])[CH2:64][OH:65])[O:66][CH:67]6[CH:68]([CH:69]([CH:70]([CH:71]([O:72]6[CH2:73][OH:74])[OH:75])[OH:76])[OH:77])[OH:78]</chem>
2	rxn:00002667	<chem>[CH3:1][C:2](=[O:3])[S:4][CH2:5][CH2:6][NH:7][C:8](=[O:9])[CH2:10][CH2:11][NH:12][C:13](=[O:14])[CH:15]([C:16]([CH3:17])([CH3:17])[CH2:19][O:20][P:21](=[O:22])([O:23])[O:24][P:25](=[O:26])([O:27])[O:28][CH2:29][CH:30]1[CH:31]([CH:32]([CH:33]([O:34]1[n:35]2[CH:36][n:37][c:38]3[c:39]2[n:40][CH:41][n:42][c:43]3[NH2:44])[OH:45])[O:46][P:47](=[O:48])([O:49])[O:49])[OH:51].[c:52]1[n:53][c:54]([c:55]2[c:56]([n:57]1)[n:58]([CH:59][n:60]2)[CH:61]3[CH:62]([CH:63]([CH:64]([O:65]3)[CH2:66][O:67][P:68](=[O:69])([O:70])[O:71][P:72](=[O:73])([O:74])[O:75][CH2:76][CH:77]4[CH:78]([CH:79]([CH:80]([O:81]4)[N:82]5[CH:83]=[CH:84][CH2:85][C:86](=[CH:87]5)[C:88](=[O:89])[NH2:90])[OH:91])[OH:92])[OH:93])[O:94][P:95](=[O:96])([O:97])[O:97])[NH2:99].[C:100](=[O:101])=[O:101]>>[CH3:1][C:2](=[O:3])[C:100](=[O:101])[O:101].[CH3:17][C:16]([CH3:17])([CH2:19][O:20][P:21](=[O:22])([O:23])[O:24][P:25](=[O:26])([O:27])[O:28][CH2:29][CH:30]1[CH:31]([CH:32]([CH:33]([O:34]1[n:35]2[CH:36][n:37][c:38]3[c:39]2[n:40][CH:41][n:42][c:43]3[NH2:44])[OH:45])[O:46][P:47](=[O:48])([O:49])[O:49])[CH:15]([C:13](=[O:14])[NH:12][CH2:11][CH2:10][C:8](=[O:9])[NH:7][CH2:6][CH2:5][SH:4])[OH:51].[c:84]1[CH:85][c:86]([CH:87][n+:82]([CH:83]1)[CH:80]2[CH:79]([CH:78]([CH:77]([O:81]2)[CH2:76][O:75][P:72](=[O:73])([O:74])[O:71][P:68](=[O:69])([O:70])[O:67][CH2:66][CH:64]3[CH:63]([CH:62]([CH:61]([O:65]3)[n:58]4[CH:56][n:57][c:52]5[c:59]4[n:60][CH:55][n:53][c:54]5[NH2:99])[O:94][P:95](=[O:96])([O:97])[O:97])[OH:93])[OH:92])[OH:91])[C:88](=[O:89])[NH2:90]</chem>
3	rxn:00003007	<chem>[CH3:1][C:2]([CH3:1])([CH2:4][O:5][P:6](=[O:7])([OH:8])[O:9][P:10](=[O:11])([OH:12])[O:13][CH2:14][CH:15]1[CH:16]([CH:17]([CH:18]([O:19]1)[n:20]2[CH:21][n:22][c:23]3[c:24]2[n:25][CH:26][n:27][c:28]3[NH2:29])[OH:30])[O:31][P:32](=[O:33])([OH:34])[OH:34])[CH:36]([C:37](=[O:38])[NH:39][CH2:40][CH2:41][C:42](=[O:43])[NH:44][CH2:45][CH2:46][SH:47])[OH:48].[CH3:49][C:50]([CH3:49])([CH2:52][O:53][P:54](=[O:55])([OH:56])[O:57][P:58](=[O:59])([OH:60])[O:61][CH2:62][CH:63]1[CH:64]([CH:65]([CH:66]([O:67]1)[n:68]2[CH:69][n:70][c:71]3[c:72]2[n:73][CH:74][n:75][c:76]3[NH2:77])[OH:78])[O:79][P:80](=[O:81])([OH:82])[OH:82])[CH:84]([C:85](=[O:86])[NH:87][CH2:88][CH2:89][C:90](=[O:91])[NH:92][CH2:93][CH2:94][S:95][C:96](=[O:97])[CH:98]([CH2:99][C:100](=[O:101])[OH:102])[C:103](=[O:104])[c:105]4[CH:106][CH:107][c:108]5[CH:109][CH:110][CH:111][CH:112][c:113]5[CH:114]4)[OH:115]>>[CH3:1][C:2]([CH3:1])([CH2:4][O:5][P:6](=[O:7])([OH:8])[O:9][P:10](=[O:11])([OH:12])[O:13][CH2:14][CH:15]1[CH:16]([CH:17]([CH:18]([O:19]1)[n:20]2[CH:21][n:22][c:23]3[c:24]2[n:25][CH:26][n:27][c:28]3[NH2:29])[OH:30])[O:31][P:32](=[O:33])([OH:34])[OH:34])[CH:36]([C:37](=[O:38])[NH:39][CH2:40][CH2:41][C:42](=[O:43])[NH:44][CH2:45][CH2:46][S:47][C:109](=[O:101])[CH2:110][CH2:111][C:112](=[O:102])[OH:104])[OH:48].[CH3:49][C:50]([CH3:49])([CH2:52][O:53][P:54](=[O:55])([OH:56])[O:57][P:58](=[O:59])([OH:60])[O:61][CH2:62][CH:63]1[CH:64]([CH:65]([CH:66]([O:67]1)[n:68]2[CH:69][n:70][c:71]3[c:72]2[n:73][CH:74][n:75][c:76]3[NH2:77])[OH:78])[O:79][P:80](=[O:81])([OH:82])[OH:82])[CH:84]([C:85](=[O:86])[NH:87][CH2:88][CH2:89][C:90](=[O:91])[NH:92][CH2:93][CH2:94][S:95][C:96](=[O:97])[c:98]4[CH:99][CH:100][c:114]5[CH:113][CH:108][CH:107][CH:106][c:105]5[CH:103]4)[OH:115]</chem>
4	rxn:00003015	<chem>[CH3:1][CH:2]([CH3:1])[C:4](=[CH2:5])[CH2:6][C:7](=[O:8])[CH:9]([CH3:10])[C:11](=[O:12])[S:13][CH2:14][CH2:15][NH:16][C:17](=[O:18])[CH2:19][CH2:20][NH:21][C:22](=[O:23])[CH:24]([C:25]([CH3:26])([CH3:26])[CH2:28][O:29][P:30](=[O:31])([OH:32])[O:33][P:34](=[O:35])([OH:36])[O:37][CH2:38][CH:39]1[CH:40]([CH:41]([CH:42]([O:43]1)[n:44]2[CH:45][n:46][c:47]3[c:48]2[n:49][CH:50][n:51][c:52]3[NH2:53])[OH:54])[O:55][P:56](=[O:57])([OH:58])[OH:58])[OH:60].[CH3:61][C:62]([CH3:61])([CH2:64][O:65][P:66](=[O:67])([OH:68])[O:69][P:70](=[O:71])([OH:72])[O:73][CH2:74][CH:75]1[CH:76]([CH:77]([CH:78]([O:79]1)[n:80]2[CH:81][n:82][c:83]3[c:84]2[n:85][CH:86][n:87][c:88]3[NH2:89])[OH:90])[O:91][P:92](=[O:93])([OH:94])[OH:94])[CH:96]([C:97](</chem>

		[O:98]][NH:99][CH2:100][CH2:101][C:102](=[O:103]][NH:104][CH2:105][CH2:106][SH:107]][OH:108]>>[CH3:1][CH2:2][C:1](=[O:8]][S:107][CH2:106][CH2:105][NH:104][C:102](=[O:103]][C:102][CH2:100][NH:99][C:97](=[O:98]][CH:61][C:62][CH3:96]][CH3:61][CH2:64][O:65][P:66](=[O:67]][OH:68]][O:69][P:70](=[O:71]][OH:72]][O:73][CH2:74][CH:75][CH:76][CH:77][CH:78]][O:79][n:80][CH:81][n:82][c:83][c:84][n:85][CH:86][n:87][c:88][NH2:89]][OH:90]][O:91][P:92](=[O:93]][OH:94]][OH:94]][OH:108].[CH3:4][CH:6][CH3:10]][C:7](=[CH2:5]][CH2:9][C:11](=[O:12]][S:13][CH2:14][CH2:15][NH:16][C:17](=[O:18]][CH2:19][CH2:20][NH:21][C:22](=[O:23]][CH:24][C:25][CH3:26]][CH3:26][CH2:28][O:29][P:30](=[O:31]][OH:32]][O:33][P:34](=[O:35]][OH:36]][O:37][CH2:38][CH:39][CH:40][CH:41][CH:42][O:43][n:44][CH:45][n:46][c:47][c:48][n:49][CH:50][n:51][c:52][NH2:53]][OH:54]][O:55][P:56](=[O:57]][OH:58]][OH:58]][OH:60]
5	rxn:00003177	[CH3:1][CH2:2][CH:3]=[CH:4][CH2:5][CH:6][CH:7][CH2:8][CH2:9][C:10]1=[O:11]][CH2:12][C:13](=[O:14]][CH2:15][C:16](=[O:17]][S:18][CH2:19][CH2:20][NH:21][C:22](=[O:23]][CH2:24][CH2:25][NH:26][C:27](=[O:28]][CH:29][C:30][CH3:31]][CH3:31][CH2:33][O:34][P:35](=[O:36]][OH:37]][O:38][P:39](=[O:40]][OH:41]][O:42][CH2:43][CH:44][CH:45][CH:46][CH:47][O:48][n:49][CH:50][n:51][c:52][c:53][n:54][CH:55][n:56][c:57][NH2:58]][OH:59]][O:60][P:61](=[O:62]][OH:63]][OH:63]][OH:65].[CH3:66][C:67][CH3:66]][CH2:69][O:70][P:71](=[O:72]][O:73]][O:74][P:75](=[O:76]][OH:77]][O:78][CH2:79][CH:80][CH:81][CH:82][CH:83][O:84][n:85][CH:86][n:87][c:88][c:89][n:90][CH:91][n:92][c:93][NH2:94]][OH:95]][O:96][P:97](=[O:98]][OH:99]][CH:101][C:102](=[O:103]][NH:104][CH2:105][CH2:106][C:107](=[O:108]][NH:109][CH2:110][CH2:111][SH:112]][OH:113]>>[CH3:8][CH2:1][CH:2]=[CH:3][CH2:4][CH:5][CH:13][CH2:12][CH2:7][C:6]1=[O:14]][CH2:15][C:16](=[O:17]][S:18][CH2:19][CH2:20][NH:21][C:22](=[O:23]][CH2:24][CH2:25][NH:26][C:27](=[O:28]][CH:29][C:30][CH3:31]][CH3:31][CH2:33][O:34][P:35](=[O:36]][OH:37]][O:38][P:39](=[O:40]][OH:41]][O:42][CH2:43][CH:44][CH:45][CH:46][CH:47][O:48][n:49][CH:50][n:51][c:52][c:53][n:54][CH:55][n:56][c:57][NH2:58]][OH:59]][O:60][P:61](=[O:62]][OH:63]][OH:63]][OH:65].[CH3:9][C:10](=[O:11]][S:112][CH2:111][CH2:110][NH:109][C:107](=[O:108]][CH2:106][CH2:105][NH:104][C:102](=[O:103]][CH:66][C:67][CH3:101]][CH3:66][CH2:69][O:70][P:71](=[O:72]][OH:73]][O:74][P:75](=[O:76]][OH:77]][O:78][CH2:79][CH:80][CH:81][CH:82][CH:83][O:84][n:85][CH:86][n:87][c:88][c:89][n:90][CH:91][n:92][c:93][NH2:94]][OH:95]][O:96][P:97](=[O:98]][OH:99]][OH:99]][OH:113]
6	rxn:00003179	[CH3:1][CH2:2][CH:3]=[CH:4][CH2:5][CH:6][CH:7][CH2:8][CH2:9][C:10]1=[O:11]][CH2:12][CH2:13][CH2:14][C:15](=[O:16]][CH2:17][C:18](=[O:19]][S:20][CH2:21][CH2:22][NH:23][C:24](=[O:25]][CH2:26][CH2:27][NH:28][C:29](=[O:30]][CH:31][C:32][CH3:33]][CH3:33][CH2:35][O:36][P:37](=[O:38]][OH:39]][O:40][P:41](=[O:42]][OH:43]][O:44][CH2:45][CH:46][CH:47][CH:48][CH:49][O:50][n:51][CH:52][n:53][c:54][c:55][n:56][CH:57][n:58][c:59][NH2:60]][OH:61]][O:62][P:63](=[O:64]][OH:65]][OH:65]][OH:67].[CH3:68][C:69][CH3:68]][CH2:71][O:72][P:73](=[O:74]][OH:75]][O:76][P:77](=[O:78]][OH:79]][O:80][CH2:81][CH:82][CH:83][CH:84][CH:85][O:86][n:87][CH:88][n:89][c:90][c:91][n:92][CH:93][n:94][c:95][NH2:96]][OH:97]][O:98][P:99](=[O:100]][OH:101]][OH:101]][CH:103][C:104](=[O:105]][NH:106][CH2:107][CH2:108][C:109](=[O:110]][NH:111][CH2:112][CH2:113][SH:114]][OH:115]>>[CH3:8][CH2:1][CH:2]=[CH:3][CH2:4][CH:5][CH:13][CH2:12][CH2:7][C:6]1=[O:16]][CH2:14][CH2:15][CH2:17][C:18](=[O:19]][S:20][CH2:21][CH2:22][NH:23][C:24](=[O:25]][CH2:26][CH2:27][NH:28][C:29](=[O:30]][CH:31][C:32][CH3:33]][CH3:33][CH2:35][O:36][P:37](=[O:38]][OH:39]][O:40][P:41](=[O:42]][OH:43]][O:44][CH2:45][CH:46][CH:47][CH:48][CH:49][O:50][n:51][CH:52][n:53][c:54][c:55][n:56][CH:57][n:58][c:59][NH2:60]][OH:61]][O:62][P:63](=[O:64]][OH:65]][OH:65]][OH:67].[CH3:9][C:10](=[O:11]][S:114][CH2:113][CH2:112][NH:111][C:109](=[O:110]][CH2:108][CH2:107][NH:106][C:104](=[O:105]][CH:68][C:69][CH3:103]][CH3:68][CH2:71][O:72][P:73](=[O:74]][OH:75]][O:76][P:77](=[O:78]][OH:79]][O:80][CH2:81][CH:82][CH:83][CH:84][CH:85][O:86][n:87][CH:88][n:89][c:90][c:91][n:92][CH:93][n:94][c:95][NH2:96]][OH:97]][O:98][P:99](=[O:100]][OH:101]][OH:101]][OH:115]
7	rxn:00003180	[CH3:1][CH2:2][CH:3]=[CH:4][CH2:5][CH:6][CH:7][CH2:8][CH2:9][C:10]1=[O:11]][CH2:12][CH2:13][CH2:14][CH2:15][CH2:16][C:17](=[O:18]][CH2:19][C:20](=[O:21]][S:22][CH2:23][CH2:24][NH:25][C:26](=[O:27]][CH2:28][CH2:29][NH:30][C:31](=[O:32]][CH:33][C:34][CH3:35]][CH3:35][CH2:37][O:38][P:39](=[O:40]][OH:41]][O:42][P:43](=[O:44]][OH:45]][O:46][CH2:47][CH:48][CH:49][CH:50][CH:51][O:52][n:53][CH:54][n:55][c:56][c:57][n:58][CH:59][n:60][c:61][NH2:62]][OH:63]][O:64][P:65](=[O:66]][OH:67]][OH:67]][OH:69].[CH3:70][C:71][CH3:70]][CH2:73][O:74][P:75](=[O:76]][OH:77]][O:78][P:79](=[O:80]][OH:81]][O:82][CH2:83][CH:84][CH:85][CH:86][CH:87][O:88][n:89][CH:90][n:91][c:92][c:93][n:94][CH:95][n:96][c:97][NH2:98]][OH:99]][O:100][P:101](=[O:102]][OH:103]][OH:103]][CH:105][C:106](=[O:107]][NH:108][CH2:109][CH2:110][C:111](=[O:112]][NH:113][CH2:114][CH2:115][SH:116]][OH:117]>>[CH3:8][CH2:1][CH:2]=[CH:3][CH2:4][CH:5][CH:13][CH2:12][CH2:7][C:6]1=[O:18]][CH2:14][CH2:15][CH2:16][CH2:17][CH2:19][C:20](=[O:21]][S:22][CH2:23][CH2:24][NH:25][C:26](=[O:27]][CH2:28][CH2:29][NH:30][C:31](=[O:32]][CH:33][C:34][CH3:35]][CH3:35][CH2:37][O:38][P:39](=[O:40]][OH:41]][O:42][P:43](=[O:44]][OH:45]][O:46][CH2:47][CH:48][CH:49][CH:50][CH:51][O:52][n:53][CH:54][n:55][c:56][c:57][n:58][CH:59][n:60][c:61][NH2:62]][OH:63]][O:64][P:65](=[O:66]][OH:67]][OH:67]][OH:69].[CH3:9][C:10](=[O:11]][S:116][CH2:115][CH2:114][NH:113][C:111](=[O:112]][CH2:110][CH2:109][NH:108][C:106](=[O:107]][CH:70][C:71][CH3:105]][CH3:70][CH2:73][O:74][P:75](=[O:76]][OH:77]][O:78][P:79](=[O:80]][OH:81]][O:82][CH2:83][CH:84][CH:85][CH:86][CH:87][O:88][n:89][CH:90][n:91][c:92][c:93][n:94][CH:95][n:96][c:97][NH2:98]][OH:99]][O:100][P:101](=[O:102]][OH:103]][OH:103]][OH:117]
8	rxn:00003368	[CH3:1][CH2:2][CH2:3][CH2:4][CH2:5][CH2:6][CH2:7][CH2:8][CH2:9][CH2:10][CH2:11][CH2:12][CH2:13][C:14](=[O:15]][CH:16][CH3:17]][C:18](=[O:19]][S:20][CH2:21][CH2:22][NH:23][C:24](=[O:25]][CH2:26][CH2:27][NH:28][C:29](=[O:30]][CH:31][C:32][CH3:33]][CH3:33][CH2:35][O:36][P:37](=[O:38]][OH:39]][O:40][P:41](=[O:42]][OH:43]][O:44][CH2:45][CH:46][CH:47][CH:48][CH:49][O:50][n:51][CH:52][n:53][c:54][c:55][n:56][CH:57][n:58][c:59][NH2:60]][OH:61]][O:62][P:63](=[O:64]][OH:65]][OH:65]][OH:67].[CH3:68][C:69][CH3:68]][CH2:71][O:72][P:73](=[O:74]][OH:75]][O:76][P:77](=[O:78]][OH:79]][O:80][CH2:81][CH:82][CH:83][CH:84][CH:85][O:86][n:87][CH:88][n:89][c:90][c:91][n:92][CH:93][n:94][c:95][NH2:96]][OH:97]][O:98][P:99](=[O:100]][OH:101]][OH:101]][CH:103][C:104](=[O:105]][NH:106][CH2:107][CH2:108][C:109](=[O:110]][NH:111][CH2:112][CH2:113][SH:114]][OH:115]>>[CH3:3][CH2:

		4][CH2:5][CH2:6][CH2:7][CH2:8][CH2:9][CH2:10][CH2:11][CH2:12][CH2:13][CH2:14][CH2:16][C:18](=[O:19])[S:20][CH2:21][CH2:22][NH:23][C:24](=[O:25])[CH2:26][CH2:27][NH:28][C:29](=[O:30])[CH:31]([C:32]([CH3:33])([CH3:33])[CH2:35][O:36][P:37](=[O:38])([OH:39])[O:40][P:41](=[O:42])([OH:43])[O:44][CH2:45][CH:46]1[CH:47]([CH:48]([CH:49]([O:50]1)[n:51]2[CH:52][n:53][c:54]3[c:55]2[n:56][CH:57][n:58][c:59]3[NH2:60])[OH:61])[O:62][P:63](=[O:64])([OH:65])[OH:65])[OH:67].[CH3:1][CH2:2][C:17](=[O:15])[S:114][CH2:113][CH2:112][NH:111][C:109](=[O:110])[CH2:108][CH2:107][NH:106][C:104](=[O:105])[CH:68]([C:69]([CH3:103])([CH3:68])[CH2:71][O:72][P:73](=[O:74])([OH:75])[O:76][P:77](=[O:78])([OH:79])[O:80][CH2:81][CH:82]1[CH:83]([CH:84]([CH:85]([O:86]1)[n:87]2[CH:88][n:89][c:90]3[c:91]2[n:92][CH:93][n:94][c:95]3[NH2:96])[OH:97])[O:98][P:99](=[O:100])([OH:101])[OH:101])[OH:115]
9	rxn:00004171	[CH3:1][C:2]([CH3:1])([CH2:4][O:5][P:6](=[O:7])([O:-8])[O:9][P:10](=[O:11])([O:-12])[O:13][CH2:14][CH:15]1[CH:16]([CH:17]([CH:18]([O:19]1)[n:20]2[CH:21][n:22][c:23]3[c:24]2[n:25][CH:26][n:27][c:28]3[NH2:29])[OH:30])[O:31][P:32](=[O:33])([O:-34])[O:-34])[CH:36]([C:37](=[O:38])[NH:39][CH2:40][CH2:41][C:42](=[O:43])[NH:44][CH2:45][CH2:46][SH:47])[OH:48].[CH3:49][C:50]([CH3:49])([CH2:52][O:53][P:54](=[O:55])([O:-56])[O:57][P:58](=[O:59])([O:-60])[O:61][CH2:62][CH:63]1[CH:64]([CH:65]([CH:66]([O:67]1)[n:68]2[CH:69][n:70][c:71]3[c:72]2[n:73][CH:74][n:75][c:76]3[NH2:77])[OH:78])[O:79][P:80](=[O:81])([O:-82])[O:-82])[CH:84]([C:85](=[O:86])[NH:87][CH2:88][CH2:89][C:90](=[O:91])[NH:92][CH2:93][CH2:94][S:95][C:96](=[O:97])([CH2:98][C:99](=[O:100])[c:101]4[CH:102][CH:103][c:104]([CH:103][CH:102]4)[OH:107])[OH:108]>>[CH3:102][C:103](=[O:107])[S:47][CH2:46][CH2:45][NH:44][C:42](=[O:43])[CH2:41][CH2:40][NH:39][C:37](=[O:38])[CH:1]([C:2]([CH3:36])([CH3:1])[CH2:4][O:5][P:6](=[O:7])([O:-8])[O:9][P:10](=[O:11])([O:-12])[O:13][CH2:14][CH:15]1[CH:16]([CH:17]([CH:18]([O:19]1)[n:20]2[CH:21][n:22][c:23]3[c:24]2[n:25][CH:26][n:27][c:28]3[NH2:29])[OH:30])[O:31][P:32](=[O:33])([O:-34])[O:-34])[OH:48].[CH3:49][C:50]([CH3:49])([CH2:52][O:53][P:54](=[O:55])([O:-56])[O:57][P:58](=[O:59])([O:-60])[O:61][CH2:62][CH:63]1[CH:64]([CH:65]([CH:66]([O:67]1)[n:68]2[CH:69][n:70][c:71]3[c:72]2[n:73][CH:74][n:75][c:76]3[NH2:77])[OH:78])[O:79][P:80](=[O:81])([O:-82])[O:-82])[CH:84]([C:85](=[O:86])[NH:87][CH2:88][CH2:89][C:90](=[O:91])[NH:92][CH2:93][CH2:94][S:95][C:96](=[O:97])[c:98]4[CH:104][CH:103][c:102]([CH:101][CH:99]4)[OH:100])[OH:108]
10	rxn:00004184	[CH3:1][CH:2]([CH2:3][C:4](=[O:5])[O:-6])[C:7](=[O:8])[CH2:9][C:10](=[O:11])[S:12][CH2:13][CH2:14][NH:15][C:16](=[O:17])[CH2:18][CH2:19][NH:20][C:21](=[O:22])[CH:23]([C:24]([CH3:25])([CH3:25])[CH2:27][O:28][P:29](=[O:30])[O:-31])[O:32][P:33](=[O:34])([O:-35])[O:36][CH2:37][CH:38]1[CH:39]([CH:40]([CH:41]([O:42]1)[n:43]2[CH:44][n:45][c:46]3[c:47]2[n:48][CH:49][n:50][c:51]3[NH2:52])[OH:53])[O:54][P:55](=[O:56])([O:-57])[O:-57])[OH:59].[CH3:60][C:61]([CH3:60])([CH2:63][O:64][P:65](=[O:66])([O:-67])[O:68][P:69](=[O:70])([O:-71])[O:72][CH2:73][CH:74]1[CH:75]([CH:76]([CH:77]([O:78]1)[n:79]2[CH:80][n:81][c:82]3[c:83]2[n:84][CH:85][n:86][c:87]3[NH2:88])[OH:89])[O:90][P:91](=[O:92])([O:-93])[O:-93])[CH:95]([C:96](=[O:97])[NH:98][CH2:99][CH2:100][C:101](=[O:102])[NH:103][CH2:104][CH2:105][SH:106])[OH:107]>>[CH3:1][CH:9]([CH2:7][C:2](=[O:107])[O:-6])[C:10](=[O:11])[S:12][CH2:13][CH2:14][NH:15][C:16](=[O:17])[CH2:18][CH2:19][NH:20][C:21](=[O:22])[CH:23]([C:24]([CH3:25])([CH3:25])[CH2:27][O:28][P:29](=[O:30])([O:-31])[O:32][P:33](=[O:34])([O:-35])[O:36][CH2:37][CH:38]1[CH:39]([CH:40]([CH:41]([O:42]1)[n:43]2[CH:44][n:45][c:46]3[c:47]2[n:48][CH:49][n:50][c:51]3[NH2:52])[OH:53])[O:54][P:55](=[O:56])([O:-57])[O:-57])[OH:59].[CH3:3][C:4](=[O:5])[S:106][CH2:105][CH2:104][NH:103][C:101](=[O:102])[CH2:100][CH2:99][NH:98][C:96](=[O:97])[CH:60]([C:61]([CH3:95])([CH3:60])[CH2:63][O:64][P:65](=[O:66])([O:-67])[O:68][P:69](=[O:70])([O:-71])[O:72][CH2:73][CH:74]1[CH:75]([CH:76]([CH:77]([O:78]1)[n:79]2[CH:80][n:81][c:82]3[c:83]2[n:84][CH:85][n:86][c:87]3[NH2:88])[OH:89])[O:90][P:91](=[O:92])([O:-93])[O:-93])[OH:8]
11	rxn:00004204	[CH3:1][CH2:2][CH:3]=[CH:4][CH2:5][CH:6]1[CH:7]([CH2:8][CH2:9][C:10]1=[O:11])[CH2:12][C:13](=[O:14])[CH2:15][C:16](=[O:17])[S:18][CH2:19][CH2:20][NH:21][C:22](=[O:23])[CH2:24][CH2:25][NH:26][C:27](=[O:28])[CH:29]([C:30]([CH3:31])([CH3:31])[CH2:33][O:34][P:35](=[O:36])([O:-37])[O:38][P:39](=[O:40])([O:-41])[O:42][CH2:43][CH:44]2[CH:45]([CH:46]([CH:47]([O:48]2)[n:49]3[CH:50][n:51][c:52]4[c:53]3[n:54][CH:55][n:56][c:57]4[NH2:58])[OH:59])[O:60][P:61](=[O:62])([O:-63])[O:-63])[OH:65].[CH3:66][C:67]([CH3:66])([CH2:69][O:70][P:71](=[O:72])([O:-73])[O:74][P:75](=[O:76])([O:-77])[O:78][CH2:79][CH:80]1[CH:81]([CH:82]([CH:83]([O:84]1)[n:85]2[CH:86][n:87][c:88]3[c:89]2[n:90][CH:91][n:92][c:93]3[NH2:94])[OH:95])[O:96][P:97](=[O:98])([O:-99])[O:-99])[CH:101]([C:102](=[O:103])[NH:104][CH2:105][CH2:106][C:107](=[O:108])[NH:109][CH2:110][CH2:111][SH:112])[OH:113]>>[CH3:8][CH2:1][CH:2]=[CH:3][CH2:4][CH:5]1[CH:13]([CH2:12][CH2:7][C:6]1=[O:14])[CH2:15][C:16](=[O:17])[S:18][CH2:19][CH2:20][NH:21][C:22](=[O:23])[CH2:24][CH2:25][NH:26][C:27](=[O:28])[CH:29]([C:30]([CH3:31])([CH3:31])[CH2:33][O:34][P:35](=[O:36])([O:-37])[O:38][P:39](=[O:40])([O:-41])[O:42][CH2:43][CH:44]2[CH:45]([CH:46]([CH:47]([O:48]2)[n:49]3[CH:50][n:51][c:52]4[c:53]3[n:54][CH:55][n:56][c:57]4[NH2:58])[OH:59])[O:60][P:61](=[O:62])([O:-63])[O:-63])[OH:65].[CH3:9][C:10](=[O:11])[S:112][CH2:111][CH2:110][NH:109][C:107](=[O:108])[CH2:106][CH2:105][NH:104][C:102](=[O:103])[CH:66]([C:67]([CH3:101])([CH3:66])[CH2:69][O:70][P:71](=[O:72])([O:-73])[O:74][P:75](=[O:76])([O:-76])

		:77))[O:78][CH2:79][CH:80]1[CH:81]([CH:82]([CH:83]([O:84]1)[n:85]2[ch:86][n:87][c:88]3[c:89]2[n:90][ch:91][n:92][c:93]3[NH2:94])[OH:95])[O:96][P:97](=[O:98])([O:99])[O:99])[OH:113]
12	rxn:00004205	[CH3:1][CH2:2][CH:3]=[CH:4][CH2:5][CH:6]1[CH:7]([CH2:8][CH2:9][C:10]1=[O:11])[CH2:12][CH2:13][CH2:14][C:15](=[O:16])[CH2:17][C:18](=[O:19])[S:20][CH2:21][CH2:22][NH:23][C:24](=[O:25])[CH2:26][CH2:27][NH:28][C:29](=[O:30])[CH:31]([C:32]([CH3:33])([CH2:35][O:36][P:37](=[O:38])([O:39])[O:40][P:41](=[O:42])([O:43])[O:44][CH2:45][CH:46]2[CH:47]([CH:48]([CH:49]([O:50]2)[n:51]3[ch:52][n:53][c:54]4[c:55]3[n:56][ch:57][n:58][c:59]4[NH2:60])[OH:61])[O:62][P:63](=[O:64])([O:65])[O:65])[OH:67].[CH3:68][C:69]([CH3:68])([CH2:71][O:72][P:73](=[O:74])([O:75])[O:76][P:77](=[O:78])([O:79])[O:80][CH2:81][CH:82]1[CH:83]([CH:84]([CH:85]([O:86]1)[n:87]2[ch:88][n:89][c:90]3[c:91]2[n:92][ch:93][n:94][c:95]3[NH2:96])[OH:97])[O:98][P:99](=[O:100])([O:101])[O:101])[CH:103]([C:104](=[O:105])[NH:106][CH2:107][CH2:108][C:109](=[O:110])[NH:111][CH2:112][CH2:113][SH:114])[OH:115]>>[CH3:8][CH2:1][CH:2]=[CH:3][CH2:4][CH:5]1[CH:13]([CH2:12][CH2:7][C:6]1=[O:16])[CH2:14][CH2:15][CH2:17][C:18](=[O:19])[S:20][CH2:21][CH2:22][NH:23][C:24](=[O:25])[CH2:26][CH2:27][NH:28][C:29](=[O:30])[CH:31]([C:32]([CH3:33])([CH2:35][O:36][P:37](=[O:38])([O:39])[O:40][P:41](=[O:42])([O:43])[O:44][CH2:45][CH:46]2[CH:47]([CH:48]([CH:49]([O:50]2)[n:51]3[ch:52][n:53][c:54]4[c:55]3[n:56][ch:57][n:58][c:59]4[NH2:60])[OH:61])[O:62][P:63](=[O:64])([O:65])[O:65])[OH:67].[CH3:9][C:10](=[O:11])[S:114][CH2:113][CH2:112][NH:111][C:109](=[O:110])[CH2:108][CH2:107][NH:106][C:104](=[O:105])[CH:68]([C:69]([CH3:103])([CH3:68])[CH2:71][O:72][P:73](=[O:74])([O:75])[O:76][P:77](=[O:78])([O:79])[O:80][CH2:81][CH:82]1[CH:83]([CH:84]([CH:85]([O:86]1)[n:87]2[ch:88][n:89][c:90]3[c:91]2[n:92][ch:93][n:94][c:95]3[NH2:96])[OH:97])[O:98][P:99](=[O:100])([O:101])[O:101])[OH:115]
13	rxn:00004206	[CH3:1][CH2:2][CH:3]=[CH:4][CH2:5][CH:6]1[CH:7]([CH2:8][CH2:9][C:10]1=[O:11])[CH2:12][CH2:13][CH2:14][CH2:15][CH2:16][C:17](=[O:18])[CH2:19][C:20](=[O:21])[S:22][CH2:23][CH2:24][NH:25][C:26](=[O:27])[CH2:28][CH2:29][NH:30][C:31](=[O:32])[CH:33]([C:34]([CH3:35])([CH3:35])[CH2:37][O:38][P:39](=[O:40])([O:41])[O:42][P:43](=[O:44])([O:45])[O:46][CH2:47][CH:48]2[CH:49]([CH:50]([CH:51]([O:52]2)[n:53]3[ch:54][n:55][c:56]4[c:57]3[n:58][ch:59][n:60][c:61]4[NH2:62])[OH:63])[O:64][P:65](=[O:66])([O:67])[O:67])[OH:69].[CH3:70][C:71]([CH3:70])([CH2:73][O:74][P:75](=[O:76])([O:77])[O:78][P:79](=[O:80])([O:81])[O:82][CH2:83][CH:84]1[CH:85]([CH:86]([CH:87]([O:88]1)[n:89]2[ch:90][n:91][c:92]3[c:93]2[n:94][ch:95][n:96][c:97]3[NH2:98])[OH:99])[O:100][P:101](=[O:102])([O:103])[O:103])[CH:105]([C:106](=[O:107])[NH:108][CH2:109][CH2:110][C:111](=[O:112])[NH:113][CH2:114][CH2:115][SH:116])[OH:117]>>[CH3:8][CH2:1][CH:2]=[CH:3][CH2:4][CH:5]1[CH:13]([CH2:12][CH2:7][C:6]1=[O:18])[CH2:14][CH2:15][CH2:16][CH2:17][CH2:19][C:20](=[O:21])[S:22][CH2:23][CH2:24][NH:25][C:26](=[O:27])[CH2:28][CH2:29][NH:30][C:31](=[O:32])[CH:33]([C:34]([CH3:35])([CH3:35])[CH2:37][O:38][P:39](=[O:40])([O:41])[O:42][P:43](=[O:44])([O:45])[O:46][CH2:47][CH:48]2[CH:49]([CH:50]([CH:51]([O:52]2)[n:53]3[ch:54][n:55][c:56]4[c:57]3[n:58][ch:59][n:60][c:61]4[NH2:62])[OH:63])[O:64][P:65](=[O:66])([O:67])[O:67])[OH:69].[CH3:9][C:10](=[O:11])[S:116][CH2:115][CH2:114][NH:113][C:111](=[O:112])[CH2:110][CH2:109][NH:108][C:106](=[O:107])[CH:70]([C:71]([CH3:105])([CH3:70])[CH2:73][O:74][P:75](=[O:76])([O:77])[O:78][P:79](=[O:80])([O:81])[O:82][CH2:83][CH:84]1[CH:85]([CH:86]([CH:87]([O:88]1)[n:89]2[ch:90][n:91][c:92]3[c:93]2[n:94][ch:95][n:96][c:97]3[NH2:98])[OH:99])[O:100][P:101](=[O:102])([O:103])[O:103])[OH:117]
14	rxn:00004502	[CH3:1][C:2]([CH3:1])([CH2:4][O:5][P:6](=[O:7])([O:8])[O:9][P:10](=[O:11])([O:12])[O:13][CH2:14][CH:15]1[CH:16]([CH:17]([CH:18]([O:19]1)[n:20]2[ch:21][n:22][c:23]3[c:24]2[n:25][ch:26][n:27][c:28]3[NH2:29])[OH:30])[O:31][P:32](=[O:33])([O:34])[O:34])[CH:36]([C:37](=[O:38])[NH:39][CH2:40][CH2:41][C:42](=[O:43])[NH:44][CH2:45][CH2:46][S:47][C:48](=[O:49])[c:50]4[ch:51][ch:52][c:53]([ch:54][c:55]4[Cl:56])[Cl:57])[OH:58].[ch:59]1[n:60]([c:61]([c:62]2[c:63]([n:64]1)[n:65]([CH:66][n:67]2)[CH:68]3[CH:69]([CH:70]([CH:71]([O:72]3)[CH2:73][O:74][P:75](=[O:76])([O:77])[O:78][P:79](=[O:80])([O:81])[O:82][CH2:83][CH:84]4[CH:85]([CH:86]([CH:87]([O:88]4)[n:89]5[CH:90]=[CH:91][CH2:92][C:93](=[CH:94]5)[C:95](=[O:96])[NH2:97])[OH:98])[OH:99])[OH:100])[O:101][P:102](=[O:103])([O:104])[O:104])[NH2:106]>>[CH3:1][C:2]([CH3:1])([CH2:4][O:5][P:6](=[O:7])([O:8])[O:9][P:10](=[O:11])([O:12])[O:13][CH2:14][CH:15]1[CH:16]([CH:17]([CH:18]([O:19]1)[n:20]2[ch:21][n:22][c:23]3[c:24]2[n:25][ch:26][n:27][c:28]3[NH2:29])[OH:30])[O:31][P:32](=[O:33])([O:34])[O:34])[CH:36]([C:37](=[O:38])[NH:39][CH2:40][CH2:41][C:42](=[O:43])[NH:44][CH2:45][CH2:46][S:47][C:48](=[O:49])[c:50]4[ch:51][ch:52][c:53]([ch:54][ch:55]4[Cl:57])[OH:58].[ch:91]1[ch:92][c:93]([ch:94][n:89]([ch:90]1)[CH:87]2[CH:86]([CH:85]([CH:84]([O:88]2)[CH2:83][O:82][P:79](=[O:80])([O:81])[O:78][P:75](=[O:76])([O:77])[O:74][CH2:73][CH:71]3[CH:70]([CH:69]([CH:68]([O:72]3)[n:65]4[CH:63][n:64][c:59]5[c:66]4[n:67][ch:62][n:60][c:61]5[NH2:106])[O:101][P:102](=[O:103])([O:104])[O:104])[OH:100])[OH:99])[OH:98])[C:95](=[O:96])[NH2:97].[Cl:56]
15	rxn:00008560	[CH3:1][CH:2]([C:3](=[O:4])[NH:5][CH2:6][CH2:7][CH2:8][CH2:9][CH:10]([C:11](=[O:12])[NH:13][CH:14]([CH3:15])[C:16](=[O:17])[NH:18][CH:19]([CH3:20])[C:21](=[O:22])[OH:23])[NH:24][C:25](=[O:26])[CH2:27][CH2:28][CH:29]([C:30](=[O:31])[OH:32])[NH:33][C:34](=[O:35])[CH:36]([CH3:37])[NH:38][C:39](=[O:40])[CH:41]([CH3:42])[O:43][CH:44]1[CH:45]([CH:46]([O:47])[CH:48]([CH:49]1[OH:50])[CH2:51][OH:52])[O:53][P:54](=[O:55])([OH:56])[O:57][P:58](=[O:59])([OH:60])[O:61][CH2:62][CH:63]2[CH:64]([CH:65]([CH:66]([O:67]2)[n:68]3[ch:69][ch:70][c:71](=[O:

		72))([nH:73][c:74]3=[O:75])([OH:76])([OH:77])([NH:78][C:79]=[O:80])([CH3:81])([NH2:82].[CH3:83][O:84][P:85]=[O:86])([OH:87])([O:88][CH2:89][CH:90]1[CH:91])([CH:92])([CH:93])([O:94]1)[n:95]2[cH:96][cH:97][c:98]([n:99][c:100]2=[O:101])([NH2:102])([OH:103])([O:104][P:105]=[O:106])([OH:107])([O:108][CH2:109][CH:110]3[CH:111])([CH:112])([CH:113])([O:114]3)[n:115]4[cH:116][cH:117][c:118]([n:119][c:120]4=[O:121])([NH2:122])([OH:123])([O:124][P:125]=[O:126])([OH:127])([O:128][CH2:129][CH:130]5[CH:131])([CH:132])([CH:133])([O:134]5)[n:135]6[cH:136][n:137][c:138]7[c:139]6[n:140][cH:141][n:142][c:143]7[NH2:144])([OH:145])([OH:146]>>[CH3:1][CH:2]([C:3]=[O:4])([O:146][CH:131]1[CH:130])([O:134][CH:133])([CH:132]1[OH:145])([n:135]2[cH:136][n:137][c:138]3[c:139]2[n:140][cH:141][n:142][c:143]3[NH2:144])([CH2:83][O:84][P:85]=[O:86])([OH:87])([O:88][CH:89]4[CH:90])([O:94][CH:93])([CH:92]4[OH:103])([n:95]5[cH:96][cH:97][c:98]([n:99][c:100]5=[O:101])([NH2:102])([CH2:91][O:104][P:105]=[O:106])([OH:107])([O:108][CH:109]6[CH:110])([O:114][CH:113])([CH:112]6[OH:123])([n:115]7[cH:116][cH:117][c:118]([n:119][c:120]7=[O:121])([NH2:122])([CH2:111][O:124][P:125]=[O:126])([OH:127])([O:128][CH3:129])([NH2:82].[CH3:37][CH:36]([C:34]=[O:35])([NH:33][CH:29])([CH2:28][CH2:27][C:25]=[O:26])([NH:24][CH:10])([CH2:9][CH2:8][CH2:7][CH2:6][NH2:5])([C:11]=[O:12])([NH:13][CH:14])([CH3:15])([C:16]=[O:17])([NH:18][CH:19])([CH3:20])([C:21]=[O:22])([OH:23])([C:30]=[O:31])([OH:32])([NH:38][C:39]=[O:40])([CH:41])([CH3:42])([O:43][CH:44]1[CH:45])([CH:46])([O:47][CH:48])([CH:49]1[OH:50])([CH2:51][OH:52])([O:53][P:54]=[O:55])([OH:56])([O:57][P:58]=[O:59])([OH:60])([O:61][CH2:62][CH:63]2[CH:64])([CH:65])([CH:66])([O:67]2)[n:68]3[cH:69][cH:70][c:71]=[O:72])([nH:73][c:74]3=[O:75])([OH:76])([OH:77])([NH:78][C:79]=[O:80])([CH3:81]
16	rxn:00010594	[CH3:1][C:2]12[CH2:3][C:4]3=[C:5]([C:6]([C:7]=[N:8]3)[CH:9]=[C:10]4[CH:11])([C:12])([C:13])([NH:14]4)([C:15]5=[C:16])([C:17])([C:18]=[N:19]5)[CH:20]=[C:21]([NH:22]1)[C:23]=[C:24]2[CH2:25][C:26]=[O:27])([OH:28])([CH2:29][CH2:30][C:31]=[O:32])([OH:33])([CH3:34])([CH2:35][CH2:36][C:37]=[O:38])([OH:39])([CH2:40][C:41]=[O:42])([OH:43])([CH3:44])([CH3:45])([CH2:46][C:47]=[O:48])([OH:49])([CH2:50][CH2:51][C:52]=[O:53])([OH:54])([CH3:55])([CH2:56][C:57]=[O:58])([OH:59])([CH2:60][CH2:61][C:62]=[O:63])([OH:64].[cH:65]1[n:66][c:67]([C:68]2[c:69]([n:70]1)[n:71])([CH:72][n:73]2)[CH:74]3[CH:75])([CH:76])([CH:77])([O:78]3)[CH2:79][O:80][P:81]=[O:82])([OH:83])([O:84][P:85]=[O:86])([OH:87])([O:88][CH2:89][CH:90]4[CH:91])([CH:92])([CH:93])([O:94]4)[N:95]5[CH:96]=[CH:97][CH2:98][C:99]=[CH:100]5[C:101]=[O:102])([NH2:103])([OH:104])([OH:105])([OH:106])([O:107][P:108]=[O:109])([OH:110])([OH:110])([NH2:112]>>[CH3:1][C:2]12[CH2:3][C:4]3=[C:5]([C:6]([C:7]=[N:8]3)[CH:9]=[C:10]4[CH:11])([C:12])([C:13])([NH:14]4)([CH:15]5[CH:16])([C:17])([C:18]=[N:19]5)[CH:20]=[C:21]([NH:22]1)[C:23]=[C:24]2[CH2:25][C:26]=[O:27])([OH:28])([CH2:29][CH2:30][C:31]=[O:32])([OH:33])([CH3:34])([CH2:35][CH2:36][C:37]=[O:38])([OH:39])([CH2:40][C:41]=[O:42])([OH:43])([CH3:44])([CH3:45])([CH2:46][C:47]=[O:48])([OH:49])([CH2:50][CH2:51][C:52]=[O:53])([OH:54])([CH3:55])([CH2:56][C:57]=[O:58])([OH:59])([CH2:60][CH2:61][C:62]=[O:63])([OH:64].[cH:97]1[cH:98][c:99]([cH:100][n+:95]([cH:96]1)[CH:93]2[CH:92])([CH:91])([CH:90])([O:94]2)[CH2:89][O:88][P:85]=[O:86])([OH:87])([O:84][P:81]=[O:82])([OH:83])([O:80][CH2:79][CH:77]3[CH:76])([CH:75])([CH:74])([O:78]3)[n:71]4[cH:69][n:70][c:65]5[c:72]4[n:73][cH:68][n:66][c:67]5[NH2:112])([O:107][P:108]=[O:109])([OH:110])([OH:110])([OH:106])([OH:105])([OH:104])([C:101]=[O:102])([NH2:103]
17	rxn:00010888	[CH3:1][C:2]1[C:3]([C:4]([nH:5][C:6]1[CH:7]=[C:8]2[C:9]=[C:10])([C:11]=[O:12])([NH:13]2)[CH:14]=[CH2:15])([CH3:16])([CH2:17][c:18]3[c:19])([C:20])([C:21])([nH:22]3)[CH:23]=[C:24]4[C:25]=[C:26]([C:27]=[O:28])([NH:29]4)[CH3:30])([CH:31]=[CH2:32])([CH3:33])([CH2:34][CH2:35][C:36]=[O:37])([O:38])([CH2:39][CH2:40][C:41]=[O:42])([O:43].[CH3:44][c:45]1[c:46]([C:47]([nH:48][c:49]1[CH:50]=[C:51]2[C:52]=[C:53])([C:54]=[O:55])([NH:56]2)[CH:57]=[CH2:58])([CH3:59])([CH2:60][c:61]3[c:62]([C:63]([C:64]([nH:65]3)[CH:66]=[C:67]4[C:68]=[C:69])([C:70]=[O:71])([NH:72]4)[CH3:73])([CH:74]=[CH2:75])([CH3:76])([CH2:77][CH2:78][C:79]=[O:80])([O:81][CH:82]5[CH:83])([CH:84])([CH:85])([CH:86])([O:87]5)[C:88]=[O:89])([O:90])([OH:91])([OH:92])([OH:93])([CH2:94][CH2:95][C:96]=[O:97])([O:98])([CH:99]6[CH:100])([CH:101])([CH:102])([CH:103])([O:104]6)[C:105]=[O:106])([O:107])([OH:108])([OH:109])([OH:110]>>[CH3:1][C:2]1[C:3]([C:4]([nH:5][C:6]1[CH:7]=[C:8]2[C:9]=[C:10])([C:11]=[O:12])([NH:13]2)[CH3:14])([CH:16]=[CH2:15])([CH2:17][c:18]3[c:19])([C:20])([C:21])([nH:22]3)[CH:23]=[C:24]4[C:25]=[C:26]([C:27]=[O:28])([NH:29]4)[CH:30]=[CH2:32])([CH3:31])([CH3:33])([CH2:34][CH2:35][C:36]=[O:37])([O:38][CH:99]5[CH:100])([CH:101])([CH:102])([CH:103])([O:104]5)[C:105]=[O:106])([O:107])([OH:108])([OH:109])([OH:110])([CH2:39][CH2:40][C:41]=[O:42])([O:43].[CH3:44][c:45]1[c:46]([C:47]([nH:48][c:49]1[CH:50]=[C:51]2[C:52]=[C:53])([C:54]=[O:55])([NH:56]2)[CH3:57])([CH:59]=[CH2:58])([CH2:60][c:61]3[c:62]([C:63]([C:64]([nH:65]3)[CH:66]=[C:67]4[C:68]=[C:69])([C:70]=[O:71])([NH:72]4)[CH:73]=[CH2:75])([CH3:74])([CH3:76])([CH2:77][CH2:78][C:79]=[O:80])([O:81][CH:82]5[CH:83])([CH:84])([CH:85])([CH:86])([O:87]5)[C:88]=[O:89])([O:90])([OH:91])([OH:92])([OH:93])([CH2:94][CH2:95][C:96]=[O:97])([O:98]
18	rxn:00010965	[CH3:1][C:2]1=[C:3]2[C:4]([CH:5])([C:6]3=[N+:7]2[Co:8]45[n:9]6[c:10]1[c:11])([C:12])([C:13]6[CH2:14][C:15]7=[C:16])([CH:17])([C:18]=[N+:19]74)[CH:20]=[C:21]8[N:22]5[C:23]=[C:24]3[C:25]([CH:26]8[CH2:27][CH2:28][C:29]=[O:30])([O:31])([CH3:32])([CH2:33][C:34]=[O:35])([O:36][CH2:37][C:38]=[O:39])([O:40][CH2:41][CH2:42][C:43]=[O:44])([O:45])([CH2:46][CH2:47][C:48]=[O:49])([O:50][CH2:51][C:52]=[O:53])([O:54][CH2:55][CH2:56][C:57]=[O:58])([O:59])([CH3:60])([CH2:61][C:62]=[O:63])([O:64].[cH:65]1[n:66][c:67]([C:68]2[c:69]([n:70]1)[n:71])([cH:72][n:73]2)[CH:74]3[CH:75])([CH:76])([CH:77])([O:78]3)[CH2:79][S:80][CH2:81][CH2:82][CH:83])([C:84]=[O:85])([O:86])([NH3+:87])([OH:88])([OH:89])([NH2:90]>>[CH3:1][C:2]1([CH:12])([C:13]2=[N+:9]3[C:10]1=[CH:4][c:3]4[c:55]([C:5])([C:6]5[n:7]4[Co:8]36[n:22]7[c:23]([C:25]([C:26]([C:21]7[CH:20]=[C:15]8[N:19]6[C:18]=[CH:14]2)[C:17])([CH:16]8[CH2:41][CH2:42][C:43]=[O:44])([O:45])([CH3:32])([CH2:37][C:38]=[O:39])([O:40][CH2:27][C:28]=[O:35])([O:36])([CH2:33][CH2:34][C:29]=[O:30])([O:31])([CH2:24]5)[CH2:46][CH2:47][C:48]=[O:49])([O:50][CH2:56][C:57]=[O:58])([O:59])([CH2:11][CH2:51][C:52]=[O:53])([O:54])([CH2:61][C:62]=[O:63])([O:64].[CH3:60][S+:80])([CH2:81][CH2:82][CH:83])([C:84]=[O:85])([O:86])([NH3+:87])([CH2:79][CH:77]1[CH:76])([CH:75])([CH:74])([O:78]1)[n:71]2[cH:72][n:73][c:68]3[c:69]2[n:70][cH:65][n:66][c:67]3[NH2:90])([OH:89])([OH:88]

19	rxn:00010967	[CH3:1][C:2]1=[C:3]2[C:4]([CH:5]([CH:6]([NH2+:7]2)[C:8]3[C:9]([CH:10]([C:11]=[N:12]3)[C:13]([C:14]4[C:15]([CH:16]([C:17]=[N:18]4)[CH:19]=[C:20]5[C:21]([CH:22]([C:23]1=[N:24]5)[CH2:25][CH2:26][C:27]([O:28])([O:29])([CH3:30])([CH3:30])([CH2:32][CH2:33][C:34]([O:35])([O:36])([CH3:37])([CH2:38][C:39]([O:40])([O:41])([CH3:42])([CH2:43][CH2:44][C:45]([O:46])([O:47])([CH3:48])([CH2:49][C:50]([O:51])([O:52])([CH3:53])([CH2:54][C:55]([O:56])([O:57])([CH3:58])([CH2:59][CH2:60][C:61]([O:62])([O:63]>>[CH3:1][CH:2]1[C:3]2=[N:7][C:6]([CH2:48][C:9]3=[N:12][C:13]([C:14]([C:15]4=[N:18][C:19]([CH:20]5[CH:21]([C:22]([C:23]1=[N:24]5)([CH3:30])([CH2:25][CH2:26][C:27]([O:28])([O:29])([CH2:30][C:55]([O:56])([O:57])([C:17]([CH:16]4[CH2:32][CH2:33][C:34]([O:35])([O:36])([CH3:42])([CH2:38][C:39]([O:40])([O:41])([CH3:37])([CH3:53])([C:11]([CH:10]3[CH2:43][CH2:44][C:45]([O:46])([O:47])([CH3:58])([CH2:49][C:50]([O:51])([O:52])([C:5]([C:4]2[CH2:59][CH2:60][C:61]([O:62])([O:63])([CH3:54])([CH3:8])
20	rxn:00011528	[CH3:1][CH:2]1[CH:3]([CH:4]([CH:5]([CH:6]([O:7]1)[O:8][CH:9]2[CH:10]([CH:11]([O:12][CH:13]([CH:14]2[O:15][CH:16]3[CH:17]([CH:18]([CH:19]([CH:20]([O:21]3)[CH2:22][OH:23])([O:24][CH:25]4[CH:26]([CH:27]([CH:28]([CH:29]([O:30]4)[CH2:31][O:32][CH:33]5[CH:34]([CH:35]([CH:36]([CH:37]([O:38]5)[CH2:39][OH:40])([OH:41])([OH:42])([O:43][CH:44]6[CH:45]([CH:46]([CH:47]([CH:48]([O:49]6)[CH2:50][OH:51])([OH:52])([OH:53])([NH:54][C:55]([O:56])([CH3:57])([OH:58])([O:59][CH:60]7[CH:61]([CH:62]([CH:63]([CH:64]([O:65]7)[CH2:66][OH:67])([OH:68])([OH:69])([O:70][CH:71]8[CH:72]([CH:73]([CH:74]([CH:75]([O:76]8)[CH2:77][OH:78])([OH:79])([OH:80])([NH:81][C:82]([O:83])([CH3:84])([OH:85])([OH:86])([NH:87][C:88]([O:89])([CH3:90])([CH2:91][OH:92])([OH:93])([NH:94][C:95]([O:96])([CH3:97])([OH:98])([OH:99])([OH:100].[cH:101]1[n:102][c:103]2[c:104]([O:105])([nH:106][c:107]([n:108][c:109]2[n:110]1[CH:111]3[CH:112]([CH:113]([CH:114]([O:115]3)[CH2:116][O:117][P:118]([O:119])([OH:120])([O:121][P:122]([O:123])([OH:124])([OH:124])([OH:126])([OH:127])([NH2:128]>>[CH3:1][CH:13]1[CH:91]([CH:2]([CH:3]([CH:11]([O:12]1)[O:124][P:122]([O:123])([OH:124])([O:121][P:118]([O:119])([OH:120])([O:117][CH2:116][CH:114]2[CH:113]([CH:112]([CH:111]([O:115]2)[n:110]3[cH:101][n:102][c:103]4[c:109]3[n:108][c:107]([nH:106][c:104]4=[O:105])([NH2:128])([OH:127])([OH:126])([OH:100])([OH:93])([OH:92].[CH3:97][C:95]([O:96])([NH:94][CH:5]1[CH:4]([CH:14]([CH:9]([O:8][CH:6]1[OH:7])([CH2:10][OH:98])([O:15][CH:16]2[CH:17]([CH:18]([CH:19]([CH:20]([O:21]2)[CH2:22][OH:23])([O:24][CH:25]3[CH:26]([CH:27]([CH:28]([CH:29]([O:30]3)[CH2:31][O:32][CH:33]4[CH:34]([CH:35]([CH:36]([CH:37]([O:38]4)[CH2:39][OH:40])([OH:41])([OH:42])([O:43][CH:44]5[CH:45]([CH:46]([CH:47]([CH:48]([O:49]5)[CH2:50][OH:51])([OH:52])([OH:53])([NH:54][C:55]([O:56])([CH3:57])([OH:58])([O:59][CH:60]6[CH:61]([CH:62]([CH:63]([CH:64]([O:65]6)[CH2:66][OH:67])([OH:68])([OH:69])([O:70][CH:71]7[CH:72]([CH:73]([CH:74]([CH:75]([O:76]7)[CH2:77][OH:78])([OH:79])([OH:80])([NH:81][C:82]([O:83])([CH3:84])([OH:85])([OH:86])([NH:87][C:88]([O:89])([CH3:90])([OH:99])
21	rxn:00004803	[CH3:1][C:35]([CH3:1])=[CH:25][CH2:11][CH2:17][C:37]([CH3:3])=[CH:27][CH2:13][CH2:19][C:39]([CH3:5])=[CH:29][CH2:15][CH2:21][C:41]([CH3:7])=[CH:31]C1C(O:24)[P:43]([O:9])([O:9])([O:32][P:42]([O:8])([O:8])=[O:8])C1(C)CCC=C(C)CCC=C(C)CCC=C(C)C>>[OH:24][P:43]([O:9])([O:9])([O:32][P:42]([O:8])([O:8])([O:8])=[O:8].CC(CCC=C(C)CCC=C(C)CCC=C(C)C)CC=C[CH:31]=[C:41]([CH3:7])([CH2:21][CH2:15][CH:29]=[C:39]([CH3:5])([CH2:19][CH2:13][CH:27]=[C:37]([CH3:3])([CH2:17][CH2:11][CH:25]=[C:35]([CH3:1])([CH3:1])

63	[CH3:6][C:12](=[O:8])[CH2:10][CH2:9][CH:11]=[CH2:7].C\C=C\CH:4=[O:2].[CH3:13][C:19]1=[CH:17][CH:18]=[C:20]([O:15][Si](C)(C)C)[O:16]1>>[CH3:6][C:12]1([OH:8])[CH2:10][CH2:9][CH:11]([CH:7]1[CH:4]=[O:2])\C:19]1([CH3:13])[O:16][C:20](=[O:15])[CH:18]=[CH:17]1
64	[CH3:4][C:10]([CH3:4])([C:9](=[CH2:7])[O:8][Si](C)(C)C.[O:1]1[CH:2]=[CH:3][CH:3]=[CH:2]1>>[H][C@:2]12[CH2:7][C:9](=[O:8])[C:10]([CH3:4])([CH3:4])[C@:2]([H])([O:1]1)[CH:3]=[CH:3]2
65	Cl[CH2:4][C:15](=[CH2:2])[CH2:5][CH:13]1[CH2:7][CH2:6][CH2:8][C:16](=[O:3])[CH:14]1[S:9][C:17]1=[CH:12][CH:11]=[CH:10][CH:11]=[CH:12]1>>[CH2:2]=[C:15]1[CH2:5][CH:13]2[CH2:7][CH2:6][CH2:8][C:16](=[O:3])[C:14]2([CH2:4]1)[S:9][C:17]1=[CH:12][CH:11]=[CH:10][CH:11]=[CH:12]1
66	O[CH:5]1[CH2:4][CH2:3][CH2:2][CH2:2][CH2:3][CH2:4][CH:5]1[OH:1].O[CH:5]1[CH2:4][CH2:3][CH2:2][CH2:2][CH2:3][CH2:4][CH:5]1O>>[CH2:4]1[CH2:3][CH:2]2[CH2:2][CH2:3][CH2:4][CH2:5][CH:5]1[O:1]2.[CH2:2]1[CH2:2][CH2:3]\CH:4=[CH:5]/[CH:5]=[CH:4]\CH2:3]1.[O:1]=[C:5]1[CH2:5][CH2:4][CH2:3][CH2:2][CH2:2][CH2:3][CH2:4]1
67	[NH2:1][C:5]1=[CH:4][CH:3]=[CH:2][CH:3]=[CH:4]1.[NH2:1][C:5]1=[CH:4][CH:3]=[CH:2][CH:3]=[CH:4]1>>[CH:2]1=[CH:3][CH:4]=[C:5]([CH:4]=[CH:3]1)[N:1]=[N:1][C:5]1=[CH:4][CH:3]=[CH:2][CH:3]=[CH:4]1
68	[CH3:8][C:4]1[C:3]([NH:11][C:1](=[O:12])[N:10]1[CH3:9])[C:2]1=[CH:5][CH:6]=[CH:7][CH:6]=[CH:5]1>>[CH3:8][C:4]1[C:3]([N:11](C=O)CN(CC2=CC=CC=C2)CC2=CC=CC=C2)[C:1](=[O:12])[N:10]1[CH3:9])[C:2]1=[CH:5][CH:6]=[CH:7][CH:6]=[CH:5]1
69	[CH3:1][C:6]1=[CH:5][C:7](=[O:2])[CH2:4][CH2:3]1.[CH3:1][C:6]1=[CH:5][C:7](=[O:2])[CH2:4][CH2:3]1>>[CH3:1][C:6]1[CH2:3][CH2:4][C:7]([O:2][Si]([O:2][C:6]2=[CH:5][C:7]([CH3:1])[CH2:4][CH2:3]2)(C2=CC=CC=C2)C2=CC=CC=C2)=[CH:5]1
70	[CH3:1][C:10]([CH3:1])([CH:6]=[CH:7]\C:11)([CH3:2])([CH3:2])[N+:9]([O:-3])=[O:5])[N:8]=[O:4].[CH3:1][C:10]([CH3:1])([CH:6]=[CH:7]\C:11)([CH3:2])([CH3:2])[N+:9]([O:-3])=[O:5])N=O>>[CH3:1][C:10]([CH3:1])([CH:6]=[CH:7]\C:11)([CH3:2])([CH3:2])[N+:9]([O:-3])=[O:5])[N:8]([O:4])[C:10]([CH3:1])([CH3:1])([CH:6]=[CH:7]\C:11)([CH3:2])([CH3:2])[N+:9]([O:-3])=[O:5]
71	[CH3:1][C:9](=[CH2:4])[CH:8]([O:6][Si:10]([CH3:2])([CH3:2])[CH2:5]C=C)[C:9]([CH3:1])=[CH2:4].[CH3:1][C:9](=[CH2:4])[CH:8]([O:6][Si:10]([CH3:2])([CH3:2])[CH2:5]C=C)[C:9]([CH3:1])=[CH2:4]>>[CH3:1][C:9](=[CH2:4])[C:8]1[O:6][Si:10]([CH3:2])([CH3:2])[CH2:5][CH:4]=[C:9]1[CH3:1].[CH3:1][C:9](=[CH2:4])[C:8]1[O:6][Si:10]([CH3:2])([CH3:2])[CH2:5][CH:4]=[C:9]1[CH3:1]
72	[CH3:1][CH2:5][CH2:6][CH2:7][N:9]([CH3:3])[CH:8]([CH3:2])[OH:4]>>[CH3:1][CH2:5][C:6]1[CH2:7][N:9]([CH3:3])[CH:8]([OH:4])[C:2]1C(O)C1CCCCC1
73	[CH3:1][N:8]([CH2:5][C:1]1=[CH:7][CH:6]=[C:10]([F:3])[CH:6]=[CH:7]1)[C:9]([CH3:2])=O>>[CH3:1][N:8]([CH2:5][C:1]1=[CH:7][CH:6]=[C:10]([F:3])[CH:6]=[CH:7]1)[C:9]([CH3:2])=N\N=C2=C(C(C)(O)[C]2)NC(=O)C2=CC=C(C=C2)C2=CC=CC=C2=C1
74	[CH3:1][NH:4][C:5]([CH3:2])=[O:3].O=[CH:7][C:11]1=[CH:10][CH:9]=[CH:8][CH:9]=[CH:10]1.[NH:12]1[N:17]=[N:18][C:20]2=[CH:16][CH:14]=[CH:13][CH:15]=[C:19]12>>[CH3:1][N:4]([CH:7]([N:12]1[N:17]=[N:18])[C:20]2=[C:19]1[CH:15]=[CH:13][CH:14]=[CH:16]2)[C:11]1=[CH:10][CH:9]=[CH:8][CH:9]=[CH:10]1[C:5]([CH3:2])=[O:3]
75	[CH3:1][N:9]([CH:4]=[CH:5]\C:11)1=[CH:8][CH:7]=[CH:6][CH:7]=[CH:8]1[C:10]([CH3:2])=[O:3].[CH3:1][N:9]([CH:4]=[CH:5]\C:11)1=[CH:8][CH:7]=[CH:6][CH:7]=[CH:8]1[C:10]([CH3:2])=[O:3]>>[CH3:1][N:9]([C:4]1[C:5]([C:4]([C:5]1[C:11]1=[CH:8][CH:7]=[CH:6][CH:7]=[CH:8]1)[N:9]([CH3:1])[C:10]([CH3:2])=[O:3])[C:11]1=[CH:8][CH:7]=[CH:6][CH:7]=[CH:8]1[C:10]([CH3:2])=[O:3]
76	[CH3:1][O:7][C:12](=[O:4])[CH2:6][N+:14]([O:-2])=[O:5].O=C[C:13]1=[CH:11][CH:10]=[CH:9][CH:10]=[CH:11]1.[CH3:1][O:7][C:12](=[O:4])[CH2:6][N+]([O:-])=O>>[CH3:1][O:7][C:12](=[O:4])[C:6]1[O:5][N+:14]([O:-2])=[C:6]([C:1]1=[CH:11][CH:10]=[CH:9][CH:10]=[CH:11]1)[C:12](=[O:4])[O:7][CH3:1]
77	[NH2:6][C:8]1=[CH:7][CH:7]=[C:8](N)[CH:7]=[CH:7]1.[CH3:1][C:5]([O:3])[CH2:4]Cl.[CH3:1][C:5]([O:3])[CH2:4]Cl.[NH2:6][C:8]1=[CH:7][CH:7]=[C:8](N)[CH:7]=[CH:7]1.[NH2:6][C:8]1=[CH:7][CH:7]=[C:8]([NH2:6])[CH:7]=[CH:7]1>>[CH3:1]C(=[O:3])[C:5]1=[C:4](C(C#N)=C(N)(N:6)1[C:8]1=[CH:7][CH:7]=[C:8]([CH:7]=[CH:7]1)[N:6]1C(N)=C(C#N)C(=[C:4]1[C:5]([CH3:1])=[O:3])[C:8]1=[CH:7][CH:7]=[C:8]([CH:7]=[CH:7]1)[N+:6]([O:-])=O)[C:8]1=[CH:7][CH:7]=[C:8]([CH:7]=[CH:7]1)[N+:6]([O:-])=O
78	[CH3:7][CH:15]1[CH2:11][CH2:14][CH:17]2[CH2:12][CH2:9][CH2:10][CH2:13][CH:18]2[CH:16]1[OH:8].[CH3:1][CH2:4][CH2:5][CH:6]([CH3:2])[OH:3]>>[CH3:2][CH:6]([OH:3])[CH:5]1[CH2:4][CH2:1][C@:15]2([CH2:7]1)[CH2:11][CH2:14][CH:17]1[CH2:12][CH2:9][CH2:10][CH2:13][CH:18]1[CH:16]2[OH:8]
79	CO[C:19]([O:12])[C:20]([CH2:11])[C:21]1=[CH:17][CH:15]=[CH:16][CH:18]=[C:22]1[N+:23]([O:-])=O.[CH3:1][CH2:4][O:5][C:8]([O:3])[C:7]#[C:6][CH3:2]>>[CH3:1][CH2:4][O:5][C:8]([O:3])[C:7]1=[CH:6][CH2:2][C:20]2([CH2:11]1)[C:19]([O:12])[NH:23][C:22]1=[C:21]2[CH:17]=[CH:15][CH:16]=[CH:18]1
80	[CH3:1][O:7][P:15]([O:8])[CH2:3][CH2:4][C:17]1=[C:16](I)[CH:12]=[CH:10][CH:11]=[CH:13]1)[O:9][C:18]12[CH2:6][CH:14]3[CH2:5][CH:14]([CH2:5][CH:14]([CH2:5]3)[CH2:6]1)[CH2:6]2.C[O:7][P:15]([O:8])[CH2:3][C:17]1=[C:16](I)[CH:12]=[CH:10][CH:11]=[CH:13]1)[O:9][C:18]12[CH2:6][CH:14]3[CH2:5][CH:14]([CH2:5][CH:14]([CH2:5]3)[CH2:6]1)[CH2:6]2>>[CH3:1][O:7][P:15]1([O:9])[C:18]23[CH2:6][CH:14]4[CH2:5][CH:14]([CH2:5][CH:14]([CH2:5]4)[CH2:6]2)[CH2:6]3)[O:8][CH2:3][CH2:4][C:17]2=[C:16]1[CH:12]=[CH:10][CH:11]=[CH:13]2.[CH2:6]1[CH:18]2[CH2:6][CH:14]3[CH2:5][CH:14]([CH2:5][CH:14]([CH2:5]2)[CH2:6]2)[CH2:6]3
81	[CH3:8][CH:16]1[CH2:10][CH2:11][C:18]2=[C:19]([CH:15]=[CH:13][CH:12]=[CH:14]2)[C:17]1=[O:9].CC(=O)O[CH2:4][CH:6]=[CH2:2]>>[CH3:8][C@:16]1([CH2:4][CH:6]=[CH2:2])[CH2:10][CH2:11][C:18]2=[C:19]([CH:15]=[CH:13][CH:12]=[CH:14]2)[C:17]1=[O:9]
82	[CH3:1][C:4](=[O:2])OC(C)=O.[CH3:5][C:17]1=[N:15][C:19]2=[C:20]([CH:14]=[CH:13]1)[C:22](=[O:7])[CH:16]([C:18]1=[CH:12][CH:11]=[CH:10][CH:11]=[CH:12]1)[C:21](=[O:6])[CH2:8][NH:9]2.[CH3:1][C:4](=[O:2])O[C:4]([CH3:1])=[O:2]>>[CH3:1][C:4](=[O:2])[O:6][C:21]1=[CH:8][N:9]([C:4]([CH3:1])=[O:2])[C:19]2=[C:20]([CH:14]=[CH:13][C:17]([CH3:5))=[N:15]2)[C:22]([O:7][C:4]([CH3:1])=[O:2])=[C:16]1[C:18]1=[CH:12][CH:11]=[CH:10][CH:11]=[CH:12]1
83	[CH3:1][CH2:5][O:6][P:8]([O:4])([O:6][CH2:5][CH3:1])[C:7]([CH3:2])=[O:3].[CH3:1][CH2:5][O:6][P:8]([O:4])([O:6][CH2:5][CH3:1])C(C)=O>>[CH3:1][CH2:5][O:6][P:8]([O:4])([O:6][CH2:5][CH3:1])[C:7]([CH3:2])([OH:3])[P:8]([O:4])([O:6][CH2:5][CH3:1])[O:6][CH2:5][CH3:1]
84	[S:1]=[CH:4]\CH:5=[CH:6]\CH:7=[CH:8]\CH:9=[CH:10]\CH:11=[CH:12]\CH:13=[C:15]1[S:3][C:16]([C:14]#[N:2])=[C:16]([S:3]1)[C:14]#[N:2].[S:1]=[CH:4]\CH:5=[CH:6]\CH:7=[CH:8]\CH:9=[CH:10]\CH:11=[CH:12]\CH:13=[C:15]1[S:3][C:16]([C:14]#[N:2])=[C:16]([S:3]1)[C:14]#[N:2]>>[N:2]#[C:14][C:16]1=[C:16]([S:3][C:15]([S:3]1)=[CH:13][CH:12]=[CH:11]\CH:10=[CH:9]\CH:8=[CH:7]\CH:6=[CH:5]\CH:4]1[S:1][CH:4]([S:1]1)\CH:5=[CH:6]\CH:7=[CH:8]\CH:9=[CH:10]\CH:11=[CH:12]\CH:13=[C:15]1[S:3][C:16]([C:14]#[N:2])=[C:16]([S:3]1)[C:14]#[N:2][C:14]#[N:2]
85	CS[CH2:4][CH2:5][CH:7]([CH3:2])[OH:3].CS[CH2:4][CH2:5][CH:7]([CH3:2])[OH:3]>>[CH3:2][CH:7]([OH:3])[CH:5]1[CH2:4][CH2:5][CH:7]([OH:3])[CH2:2][CH2:4]1
86	[H][C@:7]([OH:12])([C:4]([O:-10])=[O:10])[C@:6]([H])([CH2:8][C:5]([O:-11])=[O:11])[C:3]([O:-9])=[O:9]>>[O:-9][C:3]([O:-9])[CH2:6][CH2:8][C:5]([O:-11])=[O:11].[O:-10][C:4]([O:-10])[CH:7]=[O:12]

104	[CH3:1][C:21]([CH3:1])([CH2:6][OH:2])(NH:7)[S:22](=[O:5])(=[O:5])[C:18]1=[C:17]([F:4])[C:19](=[C:16]([F:3])[CH:11]=[CH:12]1)[C:20]1=[C:15]2\CH:10=[CH:10][C:15](=[N:13]2)\[C:20](=[C:14]2/[NH:8]\[C:14]\[CH:9]=[CH:9]2)=[C:20]/[C:15]2=[N:13]/[C:15]/[CH:10]=[CH:10]2)=[C:20](\[C:14]2=[CH:9][CH:9]=[C:14]\1[NH:8]2)[C:19]1=[C:16]([F:3])[CH:11]=[CH:12][C:18](=[C:17]1[F:4])[S:22](=[O:5])(=[O:5])[NH:7][C:21]([CH3:1])([CH3:1])([CH2:6][OH:2])([C:19]1=[C:16]([F:3])[CH:11]=[CH:12][C:18](=[C:17]1[F:4])[S:22](=[O:5])(=[O:5])[NH:7][C:21]([CH3:1])([CH3:1])([CH2:6][OH:2])>>[CH3:1][C:21]([CH3:1])([CH2:6][OH:2])(NH:7)[S:22](=[O:5])(=[O:5])[C:18]1=[C:17]([F:4])[C:19](=[C:16]([F:3])[CH:11]=[CH:12]1)[C:20]1=[C:15]2\CH2:10][CH2:10][C:15](=[N:13]2)\[C:20](=[C:14]2/[NH:8]\[C:14]\[CH:9]=[CH:9]2)=[C:20]/[C:15]2=[N:13]/[C:15]/[CH2:10][CH2:10]2)=[C:20](\[C:14]2=[CH:9][CH:9]=[C:14]\1[NH:8]2)[C:19]1=[C:16]([F:3])[CH:11]=[CH:12][C:18](=[C:17]1[F:4])[S:22](=[O:5])(=[O:5])[NH:7][C:21]([CH3:1])([CH3:1])([CH2:6][OH:2])[C:19]1=[C:16]([F:3])[CH:11]=[CH:12][C:18](=[C:17]1[F:4])[S:22](=[O:5])(=[O:5])[NH:7][C:21]([CH3:1])([CH3:1])([CH2:6][OH:2])\[C:19]1=[C:16]([F:3])[CH:11]=[CH:12][C:18](=[C:17]1[F:4])[S:22](=[O:5])(=[O:5])[NH:7][C:21]([CH3:1])([CH3:1])([CH2:6][OH:2])\[C:19]1=[C:16]([F:3])[CH:11]=[CH:12][C:18](=[C:17]1[F:4])[S:22](=[O:5])(=[O:5])[NH:7][C:21]([CH3:1])([CH3:1])([CH2:6][OH:2])
-----	---