



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
ΤΜΗΜΑ ΒΙΟΧΗΜΕΙΑΣ ΚΑΙ ΒΙΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ
ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ
«ΤΟΞΙΚΟΛΟΓΙΑ»



ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ
«QSAR ΓΙΑ ΤΟΝ ΑΙΜΑΤΟΕΓΚΕΦΑΛΙΚΟ ΦΡΑΓΜΟ»

Μεταπτυχιακή Φοιτήτρια: ΣΑΡΑΦΗ ΕΥΑΓΓΕΛΙΑ
Υπεύθυνος Καθηγητής: ΚΑΡΑΚΙΤΣΙΟΣ ΣΠΥΡΙΔΩΝ

ΛΑΡΙΣΑ, 2024



UNIVERSITY OF THESSALY
DEPARTMENT OF BIOCHEMISTRY AND
BIOTECHNOLOGY



«QSAR FOR BLOOD-BRAIN BARRIER»

POSTGRADUATE STUDENT: SARAFI EVANGELIA

SUPERVISOR: KARAKITSIOS SPRIRIDON

LARISSA, 2024

Τριμελής Επιτροπή

Δρ. Σπύρος Καρακίτσιος, Μεταδιδ. Τμήματος Χημικών Μηχανικών ΑΠΘ

Δημοσθένης Σαρηγιάννης, Αναπληρωτής Καθηγητή Περιβαλλοντικής Μηχανικής, Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Πολυτεχνική Σχολή, ΑΠΘ

Δημήτριος Κουρέτας , Καθηγητής Φυσιολογίας Ζωικών οργανισμών – Τοξικολογία

Περιεχόμενα

Πίνακας Συντομογραφιών	7
Ενότητα 1: Περίληψη.....	9
Ενότητα 2: Εισαγωγή.....	10
Ενότητα 3: Θεωρητικός Μέρος	12
Κεφάλαιο 1: Γλώσσα Προγραμματισμού R	12
1.1: Ιστορία της Γλώσσας Προγραμματισμού R	12
1.1.1: Η γλώσσα S.....	12
1.1.2: Η Ίδρυση του Bioconductor	15
1.2: Αποθετήρια R (Repositories).....	15
1.2.1: CRAN	16
1.2.2: Github	17
1.3: Η Πρακτικότητα της R.....	18
1.3.1: Αλληλεπίδραση δεδομένων (Data Interaction).....	18
1.3.2: Ανάλυση(Analysis).....	20
1.3.3: Οπτικοποίηση (Visualisation).....	20
1.4: Δημιουργία Κώδικα στην R: Editors and Environments	21
1.5: RStudio	23
1.6: Η R και άλλες γλώσσες προγραμματισμού	23
1.7: Πακέτα της R	25
1.8: Το πακέτο Caret (Classification and Regression Training)	27
1.9: Μέθοδοι για την Επιλογή Στατιστικά Σημαντικών Μεταβλητών	28
LASSO (Least Absolute Shrinkage and Selection Operator)	28
RFE (Recursive Feature Elimination).....	28
Κεφάλαιο 2 :Μηχανική Μάθηση (Machine Learning).....	29
2.1: Μοντέλα Μηχανικής Μάθησης	30
GLM (Generalized Linear Model).....	30
Random Forest.....	30
Treebag.....	32
Gradient Boosting Machine (GBM):	33
C5.0.....	33
Linear Discriminant Analysis (LDA).....	34
Glmnet.....	36
CART (Classification And Regression Trees)	37
Naïve Bayes	39
k nearest neighbor (kNN).....	40
2.2: Δεδομένα Εκπαίδευσης και Δοκιμής (Training and Testing Data)	44

Κεφάλαιο 3: QSAR.....	46
3.1: In Vitro	46
3.2: In Vivo	46
3.3: In silico δοκιμές	48
3.4: Τι είναι QSAR;.....	51
3.4.1: Ιστορική Αναδρομή.....	51
3.5: Δημιουργία ενός μοντέλου QSAR	55
3.6: Μεταβλητές απόκρισης (Endpoints).....	57
Κεφάλαιο 4: Νευρικό Σύστημα	58
4.1: Κύτταρα του Νευρικού Συστήματος	59
4.2:Ο Εγκέφαλος.....	61
4.3: Πρόσθιος Εγκέφαλος.....	62
4.4: Μεσεγκέφαλος.....	64
4.5: Οπίσθιος Εγκέφαλος.....	64
4.6:Υγρά, που βρίσκονται στον εγκέφαλο	65
4.6.1: Πλάσμα	65
4.6.1.1: Λειτουργίες του Πλάσματος	66
4.6.2: Εξωκυττάριο Εγκεφαλικό Υγρό (Extracellular Fluid, ECF).....	68
4.6.3: Μεσοκυττάριο υγρό (Interstitial Fluid, ISF).....	68
4.6.4: Εγκεφαλονωτιαίο Υγρό (Cerebrospinal Fluid, CSF)	68
4.6.5: Ενδοκυττάριο Υγρό (Intracellular Fluid, ICF)	71
Κεφάλαιο 5: Εγκεφαλικοί Φραγμοί	72
5.1: Φραγμός του Αίματος- CSF(BSCFB).....	73
5.2: Εγκεφαλικός Φραγμός Αίματος – Αραχνοειδούς Πλέγματος (BAB).....	73
5.3: Αιματοεγκεφαλικός Φραγμός(Blood- Brain Barrier, BBB)	74
5.3.1: Από τι αποτελείται;	74
5.3.1.1: Ενδοθήλιο(Endothelial Cells, ECs)	75
5.3.1.2: Βασική Μembrάνη	76
5.3.1.3: Αστροκύτταρα (Astrocytes).....	76
Κεφάλαιο 6: Χημικές Ενώσεις	78
6.1: Χαρακτηριστικά των Ουσιών, που μπορούν να διαπεράσουν τον Αιματοεγκεφαλικό Φραγμό	78
6.1.1: Μοριακές Ιδιότητες.....	78
6.1.2: Φυσικοχημικές Ιδιότητες	79
6.1.3: Βιοχημικές Ιδιότητες	79
6.1.4: Φαρμακοκινητικές ιδιότητες.....	80
6.2 :Μεταφορά Ουσιών.....	82

6.2.1: Μεταφορά φαρμάκων μέσω του εγκεφαλικού αγγειακού συστήματος.....	83
6.2.2: Μεταφορά Ουσιών μέσω των Εγκεφαλικών Φραγμών.....	83
6.2.2.1: Παθητική μεταφορά.....	83
6.2.2.2: Διευκολυνόμενη Μεταφορά.....	84
6.2.2.3: Κυστική Μεταφορά	84
6.2.3: Ενεργός Μεταφορά.....	85
6.2.4: Μεταβολισμός Ουσιών	86
6.3: Χημικές Ενώσεις σε Ψηφιακή Μορφή: Χημικές Περιγραφικές Μεταβλητές...	87
6.3.1: Αριθμός CAS	88
6.3.2: SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System).....	88
6.3.2.1: Μορφή των SMILES	89
6.3.3: InChi	93
8.3.3.1: Δομή των InChIs.....	94
6.3.4: InChi Key.....	95
6.4: Molecule Files.....	98
6.5: Molecular Fingerprints	99
Ενότητα 4 : Αποτελέσματα	100
Κεφάλαιο 1: Δημιουργία Βάσης Δεδομένων	100
Κεφάλαιο 2: Μετατροπή του log BB σε BBB+/BBB-	101
Κεφάλαιο 3: Μετατροπή των InChi σε SMILES	102
Κεφάλαιο 4: Εύρεση Chemical Descriptors	103
Κεφάλαιο 5: Δημιουργία Πίνακα Συσχέτισης και Εύρεση Μεταβλητών με την μεγαλύτερη Συσχέτιση.....	106
Κεφάλαιο 6: Εύρεση του Κατάλληλου Μοντέλου	108
Ενότητα 5: Συζήτηση	115
Ενότητα 6: Βιβλιογραφία.....	122
Ενότητα 7: Παράρτημα- Βάση Δεδομένων	128

Πίνακας Συντομογραφιών

Κεντρικό Νευρικό Σύστημα	ΚΝΣ
Περιφερειακό Νευρικό Σύστημα	ΠΙΝΣ
Αυτόνομο Νευρικό Σύστημα	ΑΝΣ
Σωματικό Νευρικό Σύστημα	ΣΝΣ
Ερυθρά Αιμοσφαίρια (Red Blood Cells)	RBC
Λευκά Αιμοσφαίρια (White Blood Cells)	WBC
Ρυθμός Καθίζησης Ερυθροκυττάρων (Erythrocyte Sedimentation Rate)	ESR
Εξωκυττάριο Εγκεφαλικό Υγρό (ExtraCellular Fluid)	ECF
Μεσοκυττάριο υγρό (Interstitial Fluid)	ISF
Εγκεφαλονωτιαίο Υγρό (Cerebrospinal Fluid)	CSF
Χοριοειδές Πλέγμα (Choroid Plexus)	CP
Ενδοκυττάριο Υγρό (Intracellular Fluid)	ICF
Φραγμός αίματος-CSF (Blood-CSF Barrier)	BCSFB
Φραγμός αίματος με το αραχνοειδές πλέγμα (Blood-Arachnoid Barrier)	BAB
Αιματοεγκεφαλικός φραγμός (Blood-Brain Barrier)	BBB
Ενδοθηλιακά Κύτταρα (Endothelial Cells)	ECs
Σφικτές Διασταυρώσεις (Tight Junctions)	TJs
Ολοκληρωμένο Περιβάλλον Ανάπτυξης (Integrated Development Environment)	IDE
Γραφικές Διεπαφές Χρήστη (Graphical User Interfaces)	GUIs
Γενικευμένα Γραμμικά Μοντέλα(Generalized Linear Models)	GLM
Μηχανές Ενίσχυση Κλίσης (Gradient Boosting Machines)	GBM
Γραμμική Ανάλυση Διάκρισης(Linear Discriminant Analysis)	LDA
Δέντρα ταξινόμησης και παλινδρόμησης (Classification And Regression Trees)	CART
Naïve Bayes	NB

k Nearest Neighbor	kNN
Φαρμακοκινητικό μοντέλο που παίρνει υπόψη τη φυσιολογία (Physiological based Pharmacokinetic modeling and simulation)	PBPK
Φαρμακοκινητικό Μοντέλο (Pharmakinetics)	PK
Ποσοτικές Σχέσεις Δομής-Δραστηριότητας (Quantitative Structure-Relationships)	Activity QSAR
Σχέσεις Δομής-Δραστηριότητας (Structure- Activity Relationships)	SAR
Ολοκληρωμένο δίκτυο αρχείων R (Comprehensive R Archive Network)	CRAN
Δυναδοποιημένο Νευρωνικό Δίκτυο (Binarized Neural Network)	BNN
Μέθοδος μερικών ελαχίστων τετραγώνων (Partial Least Square)	MPLS
Παλινδρόμηση Κύριου Στοιχείου (Principal Component Regression)	PCR
Ανάλυση Κυρίου Στοιχείου (Principal Component Analysis)	PCA
Γραμμική Σχέση Ελεύθερης Ενέργειας (Linear Free Energy Relationship)	LFER
Πολλαπλή Γραμμική Παλινδρόμηση (Multiple Linear Regression)	MLR
Υποστήριξη διανυσματικής μηχανής (Support Vector Machine)	SVM
Επιλογή μεταβλητής και Μοντελοποίηση βάσει Πρόβλεψης (Variable Selection and Modeling based on Prediction)	VSMP
Τεχνητό Νευρικό Δίκτυο (Artificial Neural Network)	ANN
Γενετικός Αλγόριθμός Πολλαπλής Γραμμικής Παλινδρόμησης (Genetic Algorithm-Multiple Linear Regression)	(GA)- MLR
Παλινδρόμηση Random Forest (Random Forest Regression)	RFR
Βαθύ Νευρωνικό Δίκτυο (Deep Neural Network)	DNN
Πρώτη Δοκιμή σε Άνθρωπο (First in Human)	FIH

Ενότητα 1: Περίληψη

Σκοπός της παρούσας ερευνητικής εργασίας είναι η δημιουργία ενός Read –Across μοντέλου βασισμένο σε μεθοδολογίες μηχανικής μάθησης για τον Αιματοεγκεφαλικό Φραγμό, το οποίο θα προβλέπει την διαπερατότητα των ουσιών, που είτε αποτελούν δυνητικές τοξικές ουσίες είτε θα αποτελούν την δραστική ουσία ενός φαρμάκου.

Η πρώτη ενότητα παρέχει πληροφορίες για τα τεχνικά χαρακτηριστικά του μοντέλου. Αναπτύχθηκε με γλώσσα προγραμματισμού R και στο περιβάλλον του R Studio. Η R είναι μία δημοφιλής γλώσσα προγραμματισμού για εκπόνηση προβλημάτων βιοπληροφορικής και βιοστατιστικής. Στην συνέχεια, αναλύονται οι βιβλιοθήκες της, που χρησιμοποιήθηκαν για την ανάπτυξη του μοντέλου μηχανικής μάθησης με ιδιαίτερη έμφαση να δίνεται στο *Caret*. Επίσης, επειδή η ανάπτυξη του μοντέλου απαιτεί την χρήση της μηχανικής μάθησης, δίνεται ο ορισμός της και αναλύονται τα δέκα μοντέλα μηχανικής μάθησης, που δοκιμάστηκαν. Το τελευταίο μέρος της πρώτης ενότητας είναι το QSAR, που είναι *in silico* τεχνική.

Το δεύτερο μέρος της εργασίας αφορά το βιολογικό φαινόμενο της Διαπερατότητας του Αιματοεγκεφαλικού Φραγμού. Για μία πιο ολοκληρωμένη εικόνα για το φαινόμενο, ξεκινάει η ανάλυση για το ανθρώπινο Νευρικό Σύστημα και τα είδη του, με επίκεντρο το ΚΝΣ και ιδιαίτερα για τον εγκέφαλο, τα μέρη και τα υγρά του. Το κυρίως μέρος της ενότητας αυτής είναι οι φραγμοί, που υπάρχουν στο εγκέφαλο, με μεγαλύτερη έμφαση να δίνεται στο Αιματοεγκεφαλικό φραγμό. Δίνονται πληροφορίες για την σύσταση του, αλλά και για τους τρόπους μεταφοράς ουσιών μέσω αυτού. Στο τέλος, περιλαμβάνονται τα χαρακτηριστικά των ουσιών, που απαιτούνται για την είσοδο τους στο Φραγμό. Τέλος, παρουσιάζεται η μετάβαση των ουσιών από τον κώδικα του αλφαβήτου στον κώδικα των υπολογιστών, με διάφορες μορφές.

Στο τρίτο μέρος παρατίθενται τα βήματα, που ακολουθήθηκαν για την ανάπτυξη του μοντέλου. Το αποτέλεσμα της παραπάνω διαδικασίας είναι η δημιουργία ενός μοντέλου QSAR με μοντέλο μηχανικής μάθησης **Gradient Boosted Machine**.

Στην τελευταία ενότητα, γίνεται σύγκριση του αποτελέσματος της παρούσας εργασίας με ήδη υπάρχουσες βιβλιογραφικές μελέτες. Το συμπέρασμα είναι ότι αναπτύχθηκε ένα αρκετά ικανοποιητικό μοντέλο πρόβλεψης, διότι διαθέτει **μία από τις μεγαλύτερες βάσεις δεδομένων ουσιών** (8.569 ενώσεις), χάρη της οποίας έχει μία αρκετά καλή απόδοση (f_1 score = 0,79). Τέλος, προτείνονται μελλοντικές βελτιώσεις του.

Ενότητα 2: Εισαγωγή

Ο 21^{ος} αιώνας έχει χαρακτηριστεί από πολλούς ως ο αιώνας των αλλαγών. Οι αλλαγές αυτές συμβαίνουν σε κοινωνικό, πολιτικό, οικονομικό, επιστημονικό και τεχνολογικό επίπεδο.

Όσον αφορά το επιστημονικό επίπεδο, από τη μία η ευαισθητοποίηση των ανθρώπων κατά της χρήση ζωντανών οργανισμών στα πειράματα, εξαιτίας της αλόγιστης χρήσης τους στο παρελθόν και από την άλλη η ανάγκη για μία πιο βιώσιμη επιστήμη, ανάγκασε τους δημόσιους θεσμούς να πάρουν θέση πάνω στο ζήτημα και να τροποποιήσουν την ισχύουσα νομοθεσία. Κομβικό σημείο αποτέλεσε η εργασία των Russell και Burch το 1959, οι οποίοι μίλησαν για πρώτη φορά για τα 3Rs (*Replacement, Reduction, Refinement*), για το πώς θα πρέπει να αλλάξει η διεξαγωγή των πειραμάτων και τέθηκαν οι θεμελιώδεις αρχές, στις οποίες βασίζεται η χρήση των ζώων και εναλλακτικών λύσεων στην επιστήμη σε ολόκληρο τον σύγχρονο κόσμο (Clark, 2018). Επιπροσθέτως, οι γρήγοροι ρυθμοί του τρόπου ζωής των ανθρώπων, έφερε στο προσκήνιο την εμφάνιση διαφόρων νευρολογικών ασθενειών, που μέχρι τώρα, δεν υπάρχει η ιδανική θεραπεία.

Σε αυτό το αδιέξοδο, που προέκυψε, την λύση έδωσε η επιστήμη των υπολογιστών. Έτσι, δημιουργήθηκε ένα υβρίδιο των επιστημών, που ονομάστηκε **Βιοπληροφορική**. Η βιοπληροφορική είναι η χρήση υπολογιστικής προσέγγισης για την ανάλυση, διαχείριση και αποθήκευση βιολογικών δεδομένων. Η έρευνα στη βιοτεχνολογία, ειδικά η διαχείριση των δεδομένων αλληλουχίας και ο σχεδιασμός φαρμάκων, συνέβη με γρήγορο ρυθμό λόγω της ανάπτυξης της βιοπληροφορικής. Αναπτύχθηκε και αναπτύσσεται ένας μεγάλος αριθμός εργαλείων και λογισμικού για την ανάλυση και την ερμηνεία διαφόρων βιολογικών δεδομένων (Kumar & Chordia, 2017).

Σήμερα, η τεχνολογία μας έχει παραδώσει ένα επιπλέον εργαλείο, αυτό της μηχανικής μάθησης (*Machine Learning*), το οποίο μπορεί να οριστεί εν συντομία ως ο τρόπος, που επιτρέπει στους υπολογιστές να κάνουν επιτυχημένες προβλέψεις, χρησιμοποιώντας προηγούμενες εμπειρίες. Τα τελευταία χρόνια έχει παρουσιάσει μια εντυπωσιακή εξέλιξη με τη βοήθεια της ταχείας αύξησης της χωρητικότητας αποθήκευσης και της επεξεργαστικής ισχύος των υπολογιστών. Μαζί με πολλούς άλλους κλάδους, οι μέθοδοι μηχανικής μάθησης έχουν χρησιμοποιηθεί ευρέως στη

βιοπληροφορική. Οι δυσκολίες και το κόστος των βιολογικών αναλύσεων έχουν οδηγήσει στην ανάπτυξη εξελιγμένων προσεγγίσεων μηχανικής μάθησης για αυτόν τον τομέα εφαρμογής (Baştanlar & Özuysal, 2014).

Η πρόβλεψη της χημικής βιοδραστησιότητας και των φυσικών ιδιοτήτων ήταν μια από τις πιο σημαντικές εφαρμογές των στατιστικών και πιο πρόσφατα, των μεθόδων μηχανικής μάθησης και τεχνητής νοημοσύνης στις χημικές επιστήμες. Αυτό το πεδίο έρευνας, ευρέως γνωστό ως μοντελοποίηση ποσοτικών σχέσεων δομής-δραστηριότητας (QSAR), έχει αναπτύξει πολλούς σημαντικούς αλγόριθμους και έχει βρει ένα ευρύ φάσμα εφαρμογών στη φυσική οργανική και φαρμακευτική χημεία τα τελευταία 55+ χρόνια (Muratov et al., 2020).

Στην συγκεκριμένη εργασία, το εργαλείο QSAR χρησιμοποιήθηκε για την δημιουργία ενός μοντέλου, που προβλέπει την διαπερατότητα χημικών ουσιών στον εγκέφαλο μέσω του Αιματοεγκεφαλικού φραγμού. Ο τελευταίος λειτουργεί ως αυστηρός φύλακας ανάμεσα στο αίμα και στον εγκέφαλο, ενισχύοντας τα τριχοειδή κύτταρα του εγκεφάλου με επιπλέον επιστρώσεις κυττάρων (Goldstein & Betz, 1986).

Η χρήση ενός τέτοιου μοντέλου είναι διττή. Από την μία μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την εύρεση ουσιών, που είναι τοξικές για τον εγκέφαλο (*Εκτίμηση Κινδύνου*) και από την άλλη μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την ανάπτυξη νέων φαρμάκων για ασθένειες του Κεντρικού Νευρικού Συστήματος, αφού δίνει την δυνατότητα στους επιστήμονες, πριν ακόμα συνθέσουν το φάρμακο, μέσω της προσομοίωσης του, να δουν αν μπορεί να εισέλθει στον εγκέφαλο και να μεταφερθεί στην περιοχή- στόχο.

Ενότητα 3: Θεωρητικός Μέρος

Κεφάλαιο 1: Γλώσσα Προγραμματισμού R

Από τη γέννησή της στα μέσα της δεκαετίας του 1990, η γλώσσα προγραμματισμού R έχει εξελιχθεί σε ένα θεμελιώδες υπολογιστικό εργαλείο για την έρευνα σε διάφορους τομείς, συμπεριλαμβανομένων της στατιστικής, της βιολογίας, της φυσικής, των μαθηματικών, της χημείας, της οικονομίας, της γεωλογίας και της ιατρικής. Ένα από τα θεμελιώδη χαρακτηριστικά της γλώσσας R είναι η σχετικά εύκολη καμπύλη εκμάθησής της, που υποστηρίζεται από την ενσωματωμένη λειτουργικότητα σχεδίασης, η οποία επιτρέπει ακόμη και σε έναν αρχάριο να μπορεί να παράγει γραφήματα με νόημα. Η δύναμη της R έχει επεκταθεί από μια απλή εφαρμογή στατιστικών μεθόδων σε έναν ζωντανό γαλαξία χαρακτηριστικών, με εφαρμογές που φτάνουν την τεχνητή νοημοσύνη. Παρακάτω δίνονται κάποια ιστορικά στοιχεία για την R (Giorgi et al., 2022).

1.1: Ιστορία της Γλώσσας Προγραμματισμού R

1.1.1: Η γλώσσα S

Οι ρίζες της γλώσσας προγραμματισμού R βρίσκονται στη γλώσσα S και, γενικότερα, στο έργο που εκτέλεσε ο John Chambers στα Bell Laboratories. Στα μέσα της δεκαετίας του 1970, έχοντας καθιερωθεί μερικά από τα σημαντικότερα ορόσημα του σύγχρονου λογισμικού, όπως το λειτουργικό σύστημα UNIX και οι γλώσσες προγραμματισμού C και C++, τα Bell Labs εστίασαν την προσοχή τους στη στατιστική ανάλυση. Πριν από την S, είχαν αναπτύξει μια αποτελεσματική Βιβλιοθήκη, την Statistical Computing Subroutines (SCS) για τη μεταγλωττισμένη γλώσσα προγραμματισμού Fortran, αλλά σύντομα συνειδητοποίησαν ότι οι συχνές μη τυπικές στατιστικές και καθημερινές αναλύσεις απαιτούσαν ένα πιο διαδραστικό περιβάλλον και τη δυνατότητα εξερεύνησης των δεδομένων. Έτσι, μεταξύ 1975 και 1976, οι στατιστικές ερευνητικές ομάδες Bell Labs ανέπτυξαν τη γλώσσα S (το S είναι ένα ανεπίσημο όνομα που προκύπτει από το «Statistical»), με τον εκφρασμένο στόχο, που δηλώνεται αυτολεξεί από τον Chambers, «για να μετατρέψουμε τις ιδέες σε λογισμικό, γρήγορα και πιστά». Η γλώσσα S αύξησε τη δημοτικότητα της, το εύρος και η αποτελεσματικότητά της μέχρι το 1988 και θεωρήθηκε σταθερή και πλήρως ανεπτυγμένη γλώσσα προγραμματισμού και ένα διαδραστικό περιβάλλον για

στατιστική ανάλυση. Πολλές από τις βασικές λειτουργίες της τρέχοντος R υπήρχαν ήδη στην έκδοση S του 1988 (Giorgi et al., 2022).

Στις αρχές της δεκαετίας του 1990, η S είχε γίνει πολύ δημοφιλής μεταξύ των στατιστικολόγων και λάμβαναν χώρα εκεί αρκετές εφαρμογές. Μία από αυτές ήταν το S-PLUS, το οποίο παρείχε μια διαισθητική γραφική διεπαφή χρήστη (GUI), αλλά κυκλοφόρησε με εμπορική άδεια. Στη διάρκεια αυτής της περιόδου, ο Ross Ihaka γνώρισε τον Robert Gentleman, με αποτέλεσμα αυτή η συνάντηση να οδηγήσει στην εξέλιξη μιας δικής τους γλώσσας για στατιστική ανάλυση. Αυτή η νέα γλώσσα προγραμματισμού ήταν σε μεγάλο βαθμό εμπνευσμένη από τη δομή του μινιμαλισμού και από το εύρος, την εμφάνιση και τη σύνταξη και των δύο S, εκ των οποίων η R μπορεί να θεωρηθεί υλοποίηση. Οι Ihaka και Gentleman ονόμασαν τη νέα γλώσσα «R», τόσο ως αλφαβητικό διάδοχο του «S», όσο και από τα αρχικά του ονόματός τους. Η R άρχισε να διαφημίζεται το 1993. Τεχνικά, τα περισσότερα του κώδικα S μπορούσαν (και μπορούν ακόμα) να εκτελεστούν από έναν διερμηνέα R και αντίστροφα. Καθώς η R κέρδισε δημοτικότητα τα έτη 1993–1994, πολλοί ακαδημαϊκοί χρήστες άρχισαν να προσφέρουν την εθελοντική συνεισφορά τους στο έργο. Ο Ihaka και ο Gentleman πείστηκαν από μια νεοσύστατη κοινότητα (ιδιαίτερα από τον Martin Maechler του ETH Zurich) να κυκλοφορήσουν το σύνολο της γλώσσας ως ελεύθερο λογισμικό, το οποίο έγινε και έτσι κυκλοφόρησαν τον πηγαίο κώδικα R υπό το γενικό GNU τον Ιούνιο του 1995. Αυτό διασφαλίζει, μέχρι σήμερα, ότι ο πυρήνας του λογισμικού της R παραμένει ελεύθερος για χρήση και δεν είναι εκμεταλλεύσιμος για εμπορικές χρήσεις. Εκ των υστέρων, αυτό συνέβαλε στην απόφαση να γίνει η R ελεύθερα διαθέσιμη ως εργαλείο για ολόκληρη την ανθρωπότητα και να γνωρίσει την τεράστια επιτυχία του τα επόμενα χρόνια, ξεπερνώντας τη S και οποιαδήποτε άλλη γλώσσα (Giorgi et al., 2022).

Μετά την κυκλοφορία του ως ελεύθερο λογισμικό, η R εμφανίστηκε γρήγορα ως ένα προσβάσιμο και ισχυρό εργαλείο για διαχείριση, ανάλυση και οπτικοποίηση δεδομένων. Η ανάπτυξη του Διαδικτύου επέτρεψε τη γρήγορη δημιουργία μιας διεθνούς κοινότητας χρηστών R, στατιστικών και μη. Η αυξανόμενη κοινότητα R άρχισε να παράγει αποκλειστικές επεκτάσεις στον αρχικό κώδικα R. Οι επεκτάσεις αυτές ονομάζονται βιβλιοθήκες και απαιτούσαν επίσημο σύστημα συσκευασίας και αποθήκης λογισμικού. Αυτό οδήγησε στη δημιουργία του CRAN, του *Comprehensive R Archive Network* (Ολοκληρωμένο δίκτυο αρχείων R). Ως τελευταίο βήμα για την

οικοδόμηση των γερών θεμελίων για το R, ξεκίνησε η βασική ομάδα, όπου δημιούργησε τον επίσημο ιστότοπο της R το 1999 (Giorgi et al., 2022).

Η R έφτασε στην πρώτη της σταθερή έκδοση (1.0.0) στις 29 Φεβρουαρίου 2000. Λόγω της αύξησης του μεγέθους και του εύρους της, αυξήθηκαν ωστόσο και οι απαιτήσεις για τη διατήρηση του CRAN, γι' αυτό το 2003 δημιουργήθηκε ένας μη κερδοσκοπικός οργανισμός, το R Foundation για να το υποστηρίξει. Το καταστατικό του Ιδρύματος R είναι ενεργό μέχρι σήμερα, προκειμένου να προωθήσει και να διαχειριστεί το έργο R και να λειτουργήσει ως σημείο αναφοράς για την R κοινότητα. Η R, όλα αυτά τα χρόνια, ήταν πάντα ενήμερη για τις απαιτήσεις, που υπάρχουν στον κόσμο, τόσο από την άποψη των επιστημονικών δυσκολιών (π.χ. τα μεγαλύτερα σύνολα δεδομένων του 21ου αιώνα), όσο και από άποψη τεχνικών δυνατοτήτων, που προσφέρει. Ο σκοπός ήταν η βελτίωση των λειτουργικών συστημάτων και του υλικού, στα οποία η R έτρεχε. Στις πιο πρόσφατες ενημερώσεις της, εισήχθησαν αρκετές περαιτέρω βελτιστοποιήσεις στην κατανομή μνήμης (π.χ. όταν ένα αντικείμενο αντιγράφεται σε άλλο αντικείμενο) και βελτιώσεις «ποιότητας ζωής» με εργαλεία που βοηθούν τους νέους χρήστες (Giorgi et al., 2022).

Η γλώσσα προγραμματισμού R έχει συχνές εκδόσεις ενημερώσεων και με την πιο πρόσφατη έκδοση να είναι η 4.3.2. Οι σημαντικές ενημερώσεις (2.0.0, 3.0.0 και 4.0.0) δεν έγιναν ως ριζικές αλλαγές στην R, αλλά μάλλον μαρτυρούν ότι η R είχε φτάσει σε ενοποιημένη ωριμότητα σε σχέση με την προηγούμενη κύρια έκδοση. Για παράδειγμα, η έκδοση 2.0.0, που κυκλοφόρησε το 2004, εισήγαγε τη λειτουργία lazy loading, η οποία επέτρεψε τη φόρτωση μεγάλων αρχείων στο περιβάλλον R μόνο στα τμήματα που απαιτούνται από το χρήστη, χωρίς χρήση υπερβολικής μνήμης. Αυτή η βελτίωση R επέτρεψε στη γλώσσα να είναι έτοιμη για την έκρηξη δεδομένων που συνέβη τα επόμενα χρόνια, τροφοδοτούμενη από π.χ. την τεχνολογία για ποσοτικές μετρήσεις: ένα παράδειγμα ήταν η εμφάνιση της αλληλούχισης επόμενης γενιάς στον τομέα της βιολογίας. Ως εκ τούτου, η έκδοση 3.0.0, που κυκλοφόρησε τον Απρίλιο του 2013, ολοκλήρωσε την προσπάθεια να καταστεί η R ικανή να χρησιμοποιεί πλήρως αρχιτεκτονικές 64-bit. Αυτό που το επέτρεψε ήταν ο χειρισμός αριθμών και ευρετηρίων μεγαλύτερα από 231 και η διαχείριση των μεγεθών αντικειμένων που έχουν μέγεθος μνήμης παραπάνω από 4 GB (και έως 8 TB). Ωστόσο, μέχρι την έκδοση 4.3, η R μπορεί να μεταγλωττιστεί σε συστήματα 32-bit και 64-bit και η κυκλοφορία της για Windows παρέχει στους χρήστες δομές και για τις δύο

αρχιτεκτονικές, ώστε να επιτρέπονται ακόμη και στα παλαιότερα μηχανήματα η εκτέλεση του πιο πρόσφατου κώδικα R¹ (Giorgi et al., 2022).

Επτά χρόνια μετά το R 3.0.0 και περισσότερα από είκοσι χρόνια μετά το R 1.0.0, το R 4.0.0 κυκλοφόρησε τον Απρίλιο του 2020. Εισήγαγε αρκετές περαιτέρω βελτιστοποιήσεις στην κατανομή μνήμης και προορίζεται ειδικά για νέους χρήστες. Μια πολύ καλοδεχούμενη βελτίωση της R έκδοσης 4 είναι η συμβολοσειρά. Τα δεδομένα εισάγονται τώρα ως αντικείμενα χαρακτήρων: μια προεπιλογή εξοικονόμησης μνήμης που αναπτύχθηκε νωρίς (Giorgi et al., 2022).

1.1.2: Η Ίδρυση του Bioconductor

Οι δημιουργοί της R και η βασική της ομάδα, παρακολουθώντας παράλληλα την αλματώδη ανάπτυξη της γλώσσας, από την παρθενική της εμφάνιση λάμβανε υπόψη εξωτερικές συνεισφορές, επεκτάσεις και εκ νέου προοπτικές του αρχικού έργου. Το CRAN δημιουργήθηκε το 1997 ως ένα περιβάλλον για γενικό κώδικα και πακέτα R, αλλά σύντομα έγινε φανερό ότι χρειαζόταν ένα εξειδικευμένο περιβάλλον για τους χρήστες της βιοπληροφορικής. Στις αρχές της δεκαετίας του 2000, προκλήθηκε έκρηξη λόγω των βιολογικών δεδομένων, που προέκυψαν από την ανακάλυψη των αλληλουχιών γονιδιώματος του πρώτου ευκαρυωτικού κυττάρου ανώτερου οργανισμού. Έτσι, υπό την επίβλεψη του Robert Gentleman, το 2001 ξεκίνησε η Bioconductor, με ευρύ στόχο την δημιουργία και ανάπτυξη εργαλείων R για την ανάλυση βιολογικών δεδομένων, αξιοποιήσιμων τόσο από στατιστικούς όσο και από υπολογιστικούς βιολόγους. Από την αρχή, η Bioconductor έλαβε θεσμική χρηματοδότηση και υποστήριξη και εξελίχθηκε γρήγορα, βλέποντας την πρώτη του σταθερή κυκλοφορία (1.0.0) το 2002. Το έργο Bioconductor συλλέγει τώρα χιλιάδες πακέτα και είναι ο κύριος συλλέκτης υπολογιστικών εργαλείων για την ανάλυση βιολογικών δεδομένων, ιδιαίτερα ποσοτικών δεδομένων omics (Giorgi et al., 2022).

1.2: Αποθετήρια R (Repositories)

Ο διερμηνέας (*interpreter*) R και η κονσόλα (*console*) παρέχονται ως πηγαίος κώδικας ή είναι εκτελέσιμα για τα κύρια λειτουργικά συστήματα από τον ιστότοπο

¹ <https://cran.r-project.org/bin/windows/base/>, Accessed in 15/01/2024

του CRAN². Το βασικό περιβάλλον της R περιέχει συναρτήσεις για την εκτέλεση όλων των σημαντικών στατιστικών δοκιμών, την σχεδίαση και λειτουργίες μήτρας και από την έκδοση 4.1.3, παρέχεται ως συνδυασμός 14 διαφορετικών βασικών πακέτων: *base*, *compiler*, *datasets*, *grDevices*, *graphics*, *grid*, *methods*, *parallel*, *splines*, *stats*, *stats4*, *tcltk*, *tools* και *utils*. Τα 14 βασικά πακέτα, φυσικά, δεν καλύπτουν το μεγάλο εύρος της R, που τώρα εκτείνεται από τη βιοπληροφορική έως την ανάπτυξη ιστού. Έτσι, οι χρήστες έχουν τη δυνατότητα να εγκαταστήσουν και να φορτώσουν πρόσθετα πακέτα και τις αντίστοιχες βιβλιοθήκες, τόσο από προσαρμοσμένες όσο και από επίσημες πηγές. Επί του παρόντος, υπάρχουν τρία μεγάλα αποθετήρια για πρόσθετα πακέτα R: CRAN, Bioconductor και R-Forge. Αυτά τα τρία απαιτούν ελάχιστα πρότυπα ποιότητας και διαρκής συντήρησης. Ωστόσο, πολλά χρήσιμα πακέτα υπάρχουν εκτός των τριών κύριων πόρων, συχνά σε γενικά αποθετήρια κώδικα, όπως το SourceForge και το GitHub. Μόλις εγκατασταθεί, κάθε πακέτο μπορεί στη συνέχεια να φορτωθεί με την εντολή `library()`, η οποία θα φορτώσει επίσης όλες τις συναρτήσεις (Giorgi et al., 2022).

Από αυτά που αναφέρθηκαν παραπάνω περιγράφονται αναλυτικά το CRAN και το GitHub, διότι στην παρούσα εργασία χρησιμοποιήθηκαν.

1.2.1: CRAN

Κατά την ημερομηνία συγγραφής (15 Ιανουαρίου 2024), το CRAN φιλοξενεί 20.243 πακέτα³, καλύπτοντας ένα μεγάλο εύρος εφαρμογών. Αυτά τα πακέτα επεκτείνουν τις στατιστικές δυνατότητες της R, εκτός από την υλοποίηση νέων γραφικών και τεχνικών μεθόδων, παρέχοντας νέες εκτεταμένες δυνατότητες. Η διαδικασία δημιουργίας πακέτου είναι η υποβολή του, ο έλεγχος του και τελικά η αποδοχή του από το CRAN. Η διαδικασία αυτή ενδέχεται να διαρκέσει αρκετούς μήνες και απαιτεί από τον χρήστη να γνωρίζει πλήρως την πολιτική αποθήκευσης του CRAN⁴. Τελικά, τα πακέτα στο CRAN έχουν την ενθαρρυντική τάση να είναι καλογραμμένα και τεκμηριωμένα, παρέχοντας αποτελεσματικές μεθόδους για τη σύγχρονη στατιστική ανάλυση. Πριν από την υποβολή στο CRAN, ένας συγγραφέας θα πρέπει να δοκιμάσει τοπικά το πακέτο του με την ακόλουθη εντολή, η οποία αυτόματα εντοπίζει

² <https://cran.r-project.org/>, Accessed in 15/01/2024

³ <https://cran.r-project.org/web/packages/>, Accessed in 15/01/2024

⁴ <https://cran.r-project.org/web/packages/policies.html>, Accessed in 15/01/2024

ασυνέπειες στον κώδικα, τόσο θεμελιώδεις όσο και ως προς το στυλ: ***check(args = c(' - as - cran'))***) (Giorgi et al., 2022).

Επειδή το CRAN είναι εγγενώς συνδεδεμένο με την R, η εγκατάσταση πακέτων από αυτό το αποθετήριο είναι η πιο εύκολη, μέσω της συνάρτησης `install.packages()`. Για παράδειγμα, για την εγκατάσταση του πακέτου `webchem`, που θα χρησιμοποιηθεί παρακάτω, ο χρήστης πρέπει απλά να πληκτρολογήσει: ***install.packages("webchem")***. Αυτή η λειτουργία θα εγκαταστήσει επίσης τις συναρτήσεις σε δυαδική μορφή για λειτουργικά συστήματα όπως τα Windows ή το MacOSX, ή με τη μεταγλώττιση τους σε συστήματα Linux. Το CRAN είναι επίσης άριστα ενσωματωμένο με το RStudio, το οποίο μπορεί να ελέγξει για βιβλιοθήκες που λείπουν και να τις εγκαταστήσει ο χρήστης με ένα απλό κλικ (Giorgi et al., 2022).

Αν και η συνάρτηση `install.packages()` είναι, από προεπιλογή, ρυθμισμένη για αναζήτηση μόνο στο CRAN, είναι δυνατό να ρυθμιστεί ώστε να εγκαθιστά πακέτα και στα άλλα δύο αποθετήρια (Giorgi et al., 2022).

Μία από τις ιδιόμορφες λειτουργίες του CRAN είναι το σύστημα ελέγχου πακέτων του, που αναπτύχθηκε αρχικά από τον Kurt Hornik, το οποίο χρησιμοποιεί απλά δεδομένα βασισμένα σε κείμενο και ένα ξεκάθαρο ιεραρχικό σύστημα, που επέτρεψε, εδώ και δεκαετίες, τη διατήρηση ενός υγιούς και συνεπούς αποθετηρίου. Τα πακέτα CRAN υπόκεινται σε συνεχείς δοκιμές σε πολλαπλές πλατφόρμες και λειτουργικά συστήματα (Giorgi et al., 2022).

1.2.2: Github

Πρόσφατα, μέρος της τεράστιας δουλειάς, που οδήγησε στην ανάπτυξη του κώδικα R, έχει μετακινηθεί στο γενικό περιβάλλον του GitHub, που αποτελεί αναμφισβήτητο το πιο δημοφιλές σύστημα εκδόσεων και ανάπτυξης αποθετηρίων στο Διαδίκτυο. Το GitHub περιέχει πάνω από 34.000 ενεργά έργα R, σε διάφορες καταστάσεις ανάπτυξης. Αν και μπορεί να έχει αποδοκιμαστεί από την κοινότητα του πυρήνα της R, πολλά επιστημονικά εργαλεία της R έχουν δημοσιευτεί εκτός των βασικών περιβαλλόντων CRAN ή Bioconductor. Τα πακέτα που είναι διαθέσιμα στο GitHub μπορούν μόνο να ληφθούν και να εξερευνηθούν ελεύθερα. Πρόσφατα, όμως, παρέχεται ένα πακέτο CRAN, το «devtools», που επιτρέπει την άμεση εγκατάσταση του πακέτου από το GitHub (Giorgi et al., 2022).

Το GitHub και άλλα ανεπίσημα διαδικτυακά αποθετήρια για τον κώδικα R, όπως το SourceForge, επιτρέπουν στους συγγραφείς να μοιράζονται γρήγορα τον κώδικά τους χωρίς τους αυστηρότερους κανόνες κωδικοποίησης του CRAN και Bioconductor. Το μειονέκτημα είναι ότι μέσω αυτών δεν εγγυάται η εγκυρότητα, η χρηστικότητα, η εκτέλεση και τη μακροπρόθεσμη συντήρηση οποιουδήποτε κώδικα που παρέχεται (Giorgi et al., 2022).

1.3: Η Πρακτικότητα της R

Η πρακτικότητα της R, την καθιστά ιδανική πρώτη γλώσσα προγραμματισμού για εκμάθηση, αφού δίνεται η δυνατότητα σε αρχάριους να αποκτήσουν μια άμεση οπτικοποίηση των δικών τους δεδομένων με απλά βήματα. Εννοιολογικά, η λειτουργικότητα της R μπορεί να χωριστεί σε τρεις κατηγορίες, οι οποίες από κοινού μπορεί να συνοψίσουν την συνεισφορά της στη βιοπληροφορική, τη στατιστική και την επιστήμη δεδομένων γενικά: α) η αλληλεπίδραση δεδομένων, β) η ανάλυση και γ) η οπτικοποίηση αποτελεσμάτων (Giorgi et al., 2022).

Πιο αναλυτικά:

1.3.1: Αλληλεπίδραση δεδομένων (Data Interaction)

Ο κύριος στόχος της R είναι να εξάγει χρήσιμες πληροφορίες από δεδομένα. Επομένως, το πρώτο βασικό βήμα είναι η φόρτωση των ίδιων των δεδομένων στο περιβάλλον R. Η R μπορεί να εισάγει δεδομένα από πολλούς τύπους πηγών: αρχεία κειμένου, δυαδικά αρχεία (όπως η Microsoft υπολογιστικά φύλλα), συνδέσμους ιστού ή αποκλειστικές μορφές δεδομένων R. Όσον αφορά τα αρχεία κειμένου, η R μπορεί να φορτώσει απευθείας από κλασικά αρχεία οριοθετημένα με χαρακτήρες σε ένα κοινό αντικείμενο R matrix.

Για παράδειγμα, ο παρακάτω κώδικας θα διαβάσει δεδομένα από ένα αρχείο κειμένου, όπου μια τιμή είναι διαχωρισμένη με κόμμα (CSV):

```
example <- read.csv("example.csv")
```

Η R μπορεί επίσης να φορτώσει αρχεία κειμένου με οποιοδήποτε τύπο οριοθέτησης με τον πυρήνα συνάρτησης `read.delim()`. Επίσης, δίνεται η επιλογή εισαγωγής

δεδομένων από τις κοινές μορφές του Microsoft Excel (xlsx και xls). Σε αυτήν την περίπτωση απαιτείται ένα πρόσθετο πακέτο CRAN, xlsx, και προσδιορίζοντας τον αριθμό φύλλου, μπορεί να διαβαστεί:

```
library(xlsx)
```

```
example <- read.xlsx(example.xls, sheetIndex = 1)
```

Εκτός από τη μορφή αποθήκευσης αρχείων που αναφέρθηκαν, αποτελεσματικές εναλλακτικές λύσεις για αποθήκευση και ανάγνωση δεδομένων ειδικά για την R, παρέχονται από τις εγγενείς μορφές αρχείων RDA και RDS. Η μορφή RDA μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την αποθήκευση πολλών αντικειμένων και τη φόρτωσή τους στη μνήμη με την αποθήκευση:

```
save(a,b,file = "ab.rda")
```

```
load("ab.rda")
```

Η μορφή αρχείου RDS χρησιμοποιεί τον ίδιο αλγόριθμο αρχειοθέτησης (μειώνοντας το πραγματικό μέγεθος των δεδομένων στο δίσκο) όπως αυτό του RDA, αλλά χρησιμοποιείται συνήθως για την αποθήκευση ενός μεμονωμένου αντικειμένου και στη συνέχεια, κατά τη φόρτωση, αντιστοιχίζεται σε ένα συγκεκριμένο όνομα αντικειμένου, π.χ.

```
saveRDS(example,file = "example.rds")
```

```
example <- readRDS("example.rds")
```

Το R παρέχει εύχρηστες λειτουργίες για γρήγορη οπτικοποίηση του περιεχομένου οποιουδήποτε αντικειμένου. Κάποιες από τις εντολές είναι η συνάρτηση dim(), που παρέχει πληροφορίες για το μέγεθος του αντικειμένου. Μια άλλη χρήσιμη συνάρτηση είναι η head(), η οποία απεικονίζει την αρχή οποιουδήποτε αντικειμένου (Giorgi et al., 2022).

Τόσο η μορφή αρχείων RDA, όσο και η μορφή αρχείων RDS είναι αποτελεσματικές για τη γρήγορη μεταφορά αρχείων μεταξύ συνεργατών, αλλά και για την προσβάσιμη αποθήκευση δεδομένων στην R. Η επιλογή της μορφής RDS ή RDA είναι τελικά θέμα επιλογής και της συμβατότητας του πλαισίου, που δουλεύει ο χρήστης. Τεχνικά, το RDA μπορεί να είναι επωφελές για την αποθήκευση πολλών αντικειμένων και μέσων. Στην πραγματικότητα, η αποθήκευση δύο αντικειμένων σε ένα μεμονωμένο

αντικείμενο RDA εξοικονομεί μερικά byte έναντι της αποθήκευσης τους ως δύο ξεχωριστά αρχεία RDS (Giorgi et al., 2022).

1.3.2: Ανάλυση(Analysis)

Ακόμη και σε βασικό επίπεδο, η R περιέχει δεκάδες συναρτήσεις για την εκτέλεση στατιστικής ανάλυσης, προκειμένου να εξαχθούν πληροφορίες από δεδομένα. Η συνάρτηση **summary()**, για παράδειγμα, μπορεί να παρέχει μια γενική επισκόπηση μιας αριθμητικής κατανομής, συμπεριλαμβανομένης της ελάχιστης και της μέγιστης αξίας και του μέσου όρου (Giorgi et al., 2022).

Ένα άλλο παράδειγμα της λειτουργικότητας της R είναι οι δοκιμές συσχέτισης (*correlation tests*). Οι τρεις κύριοι συντελεστές συσχέτισης (Pearson⁵, Spearman⁶ και Kendall⁷) μπορούν να υπολογιστούν με την απλή συνάρτηση **cor()** (η οποία από προεπιλογή, χωρίς επιπλέον όρισμα, υπολογίζει τον συντελεστή Pearson) (Giorgi et al., 2022).

1.3.3: Οπτικοποίηση (Visualisation)

Τα αποτελέσματα που βασίζονται σε κείμενο είναι πιο δύσκολο να ερμηνευτούν από το να οπτικοποιηθούν. Συνδυάζοντας στατιστικές μεθόδους και γραφικές απεικονίσεις στην R, μπορεί γρήγορα να φανούν τα αποτελέσματα μιας στατιστικής ανάλυσης. Η εγγενής δύναμη και το στοιχείο επιτυχίας της είναι ότι παρέχει αυτόν τον συνδυασμό σε όλα τα επίπεδα, από αυτές τις απλές δοκιμές μέχρι και εξαιρετικά πολύπλοκους

⁵ **Συντελεστής συσχέτισης του Pearson (Pearson's correlation coefficient):** Παραμετρικό τεστ που εφαρμόζεται όταν οι μεταβλητές είναι ίσων διαστημάτων ή αναλογικές και οι τιμές της κάθε μεταβλητής σχηματίζουν κανονική κατανομή. Σύμβολο: r , Cohen, I., Huang, Y., Chen, J., Benesty, J., Benesty, J., Chen, J., Huang, Y., & Cohen, I. (2009). *Pearson correlation coefficient. Noise reduction in speech processing*, 1-4.

⁶ **Συντελεστής συσχέτισης του Spearman (Spearman's correlation coefficient):** Μη παραμετρικό τεστ που εφαρμόζεται είτε όταν οι μεταβλητές είναι (ή έχουν μετατραπεί σε) ιεραρχικές είτε όταν οι μεταβλητές είναι ίσων διαστημάτων ή αναλογικές, αλλά οι τιμές της κάθε μεταβλητής δεν σχηματίζουν κανονική κατανομή. Σύμβολο: ρ ή ρ_s , Myers, L., & Sirois, M. J. (2004). *Spearman correlation coefficients, differences between. Encyclopedia of statistical sciences*, 12.

⁷ **Συντελεστής συσχέτισης του Kendall (Kendall's correlation coefficient):** Μοιάζει με τον συντελεστή Spearman ως προς το ότι υπολογίζεται με βάση την τάξη μεγέθους των παρατηρήσεων και όχι με βάση τις παρατηρήσεις αυτές καθαυτές και επιπλέον η κατανομή του δεν εξαρτάται από την κατανομή των μεταβλητών X και Y , όταν αυτές είναι ανεξάρτητες και συνεχείς Valencia, D., Lillo, R. E., & Romo, J. (2019). *A Kendall correlation coefficient between functional data. Advances in Data Analysis and Classification*, 13, 1083-1103.

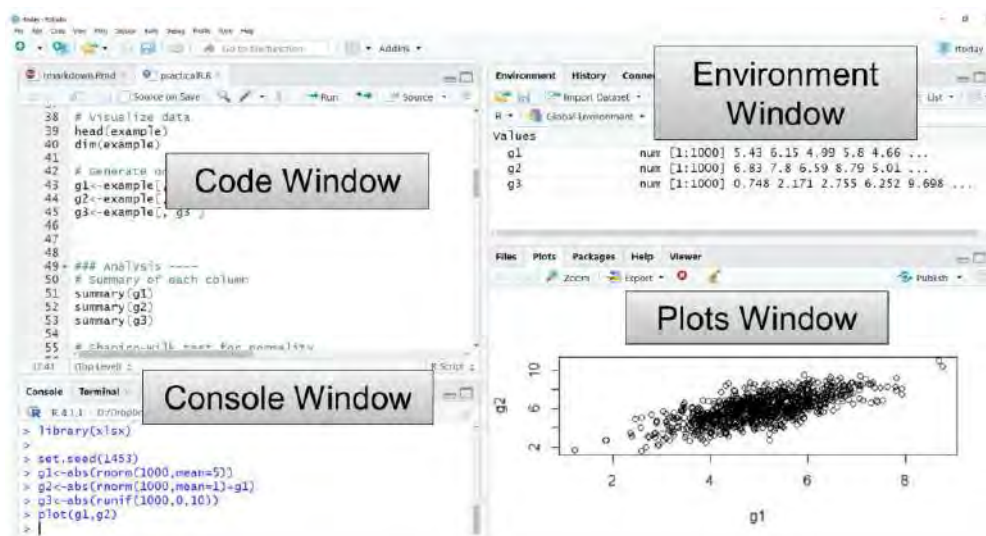
υπολογισμούς και σύνολα δεδομένων, όπως το UMAP⁸ που εκτελεί την ανάλυση μεμονωμένων κυττάρων (Giorgi et al., 2022) .

Στη συγκεκριμένη πτυχιακή χρησιμοποιήθηκε οπτικοποίηση ενός διαγράμματος συσχέτισης (correlation matrix), προκειμένου να βρεθούν οι μεταβλητές που έχουν μεγαλύτερη συσχέτιση- συγγένεια με την μελετώμενη ιδιότητα. Το αποτέλεσμα είναι μία εικόνα δύο διαστάσεων (Εικόνα 2D). Η διαδικασία που ακολουθήθηκε, καθώς και το διάγραμμα αναφέρονται σε παρακάτω ενότητα.

1.4: Δημιουργία Κώδικα στην R: Editors and Environments

Πέρα από την απλούστερη ενσωματωμένη κονσόλα R, οι χρήστες R μπορούν να επωφεληθούν από τα προγράμματα επεξεργασίας κειμένου, τα ολοκληρωμένα περιβάλλοντα ανάπτυξης (IDEs) και τις γραφικές διεπαφές χρήστη (GUI) για την υλοποίηση, εκτέλεση, δοκιμή και ανάπτυξη της εργασίας τους, χωρίς να χρειάζεται καμία επιπλέον προσπάθεια. Ειδικά τα R IDEs έχουν σχεδιαστεί έτσι ώστε να βοηθήσουν τον προγραμματιστή εμφανίζοντας, στο ίδιο παράθυρο, τον κώδικα που γράφεται, την ενεργή κονσόλα/διερμηνέας R και άλλες οπτικές διεπαφές, όπως για παράδειγμα, το περιβάλλον των μεταβλητών (που δείχνει ποιες μεταβλητές και βιβλιοθήκες φορτώνονται στη μνήμη), τις γραφικές παραστάσεις και άλλα στοιχεία που δείχνουν το σύστημα αρχείων, τις σελίδες βοήθειας, το ιστορικό εντολών που πληκτρολογήθηκαν προηγουμένως και άλλες λειτουργίες (**Εικόνα 16**) (Giorgi et al., 2022).

⁸ Η Uniform Manifold Approximation and Projection (UMAP) είναι μια τεχνική μείωσης διαστάσεων που μπορεί να χρησιμοποιηθεί για οπτικοποίηση, αλλά και για γενική μη γραμμική μείωση διαστάσεων. <https://umap-learn.readthedocs.io/en/latest/> , Accessed in 27/01/2024



Εικόνα 1: Παράδειγμα του περιβάλλοντος του RStudio. Πάνω αριστερά, βρίσκεται το παράθυρο του κώδικα, που είναι φιλικό προς τον χρήστη. Κάτω αριστερά βρίσκεται η κονσόλα και ο διερμηνέας των εντολών, όπου εκεί γίνεται και η εκτέλεση τους. Πάνω δεξιά βρίσκεται το παράθυρο του περιβάλλοντος, όπου εκεί αναγράφονται οι μεταβλητές, που χρησιμοποιούνται, οι λειτουργίες και άλλα. Τέλος κάτω δεξιά είναι το παράθυρο, όπου απεικονίζονται οι γραφικές παραστάσεις (Giorgi et al., 2022).

Μια ποικιλία από IDE και προγράμματα επεξεργασίας κειμένου είναι διαθέσιμα για χρήση ως προγραμματιστής R (Πίνακας 1).

Πίνακας 1: Λίστα με τους συντάκτες κειμένου (text editors) και τα R IDEs για την χρήστες της γλώσσας R. (Giorgi et al., 2022)

Text Editor/IDE	Release Year	Web Link
RStudio	2011	https://www.rstudio.com
Jupyter Notebook	2014	https://jupyter.org
RKward	2002	https://rkward.kde.org
Eclipse StatET	2010	https://projects.eclipse.org/projects/science.statet
Google Colab	2017	https://colab.research.google.com
Visual Studio Code	2015	https://code.visualstudio.com
vi/Vim	1976	https://www.vim.org/download.php
Emacs ESS	1997	https://ess.r-project.org/
Sublime Text	2008	https://www.sublimetext.com/
Notepad++	2003	https://notepad-plus-plus.org/downloads/

Μερικοί προορίζονται ειδικά για την R ή ένα σύνολο γλωσσών, ενώ άλλες μπορούν να υποστηριχθούν από πολλαπλές γλώσσες προγραμματισμού μέσω πρόσθετων ή

επεκτάσεων. Η επιλογή του καλύτερου εικονικού μέρους για τη δημιουργία του κώδικα R, είτε πρόκειται για πρόγραμμα επεξεργασίας κειμένου είτε για περιβάλλον IDE, είναι μια ατελείωτη συζήτηση και βασίζεται στις λειτουργίες του επεξεργαστή ή του IDE, στο πεδίο εφαρμογής, αλλά και των προσωπικών απαιτήσεων και προτιμήσεων του χρήστη (Giorgi et al., 2022).

Για την παρούσα διπλωματική εργασία χρησιμοποιήθηκε το R Studio, για αυτό αναλύεται περαιτέρω στην ακόλουθη ενότητα.

1.5: R Studio

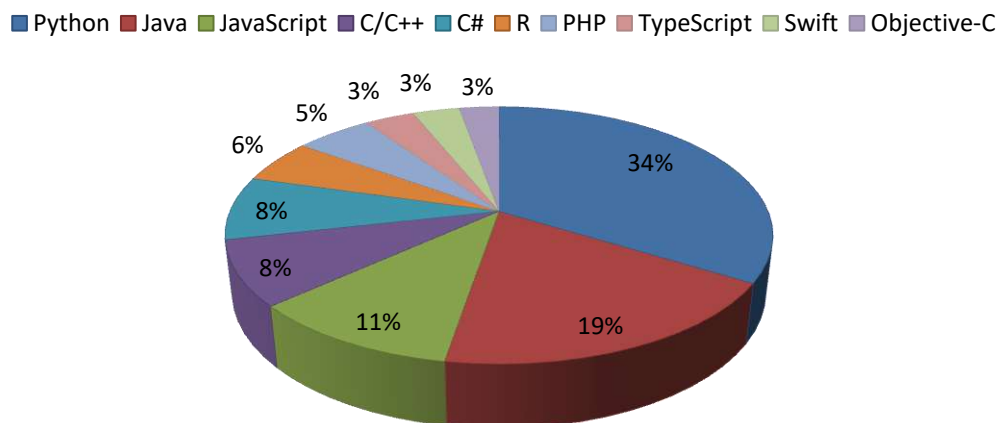
Το RStudio είναι ένα από τα πιο δημοφιλή περιβάλλοντα ανάπτυξης R, ειδικά μεταξύ των νεότερων προγραμματιστών. Το RStudio που κυκλοφόρησε στις 28-02-2011 ξεκίνησε ως ένα IDE ανοιχτού κώδικα ειδικά για R, γραμμένο κυρίως σε C++ και Java. Στη συνέχεια, έχει εξελιχθεί σε ένα δίγλωσσο περιβάλλον, εστιάζοντας στην R και την Python. Λειτουργεί σε όλες τις μεγάλες πλατφόρμες, με την ίδια διεπαφή. Συνδυάζει μια κονσόλα, ένα πρόγραμμα επεξεργασίας σύνταξης με τη δυνατότητα συμπλήρωσης καρτελών, γραφικών, ιστορικού και βοήθειας, σε έναν ενιαίο πάγκο εργασίας. Υποστηρίζει επαναλήψιμη έρευνα και εγγράμματο προγραμματισμό με ανάμειξη κώδικα και τεκμηρίωση κειμένου. Αντίστοιχα, υποστηρίζει εγγενώς μια διεπαφή, έτσι ώστε τα αποτελέσματα να μπορούν να αποδοθούν και να κοινοποιηθούν σε αναφορές HTML, PDF ή Word (Giorgi et al., 2022).

1.6: Η R και άλλες γλώσσες προγραμματισμού

Δεν υπάρχει η «καλύτερη» γλώσσα για τη βιοπληροφορική και την επιστήμη των δεδομένων. Αρκετές μελέτες έχουν προσπαθήσει να συγκρίνουν συστηματικά τις γλώσσες προγραμματισμού για τη βιοπληροφορική, όσον αφορά την ταχύτητα εκτέλεσης κοινών εργασιών, την απόδοση εισόδου/εξόδου για μεγάλα αρχεία και πιο υποκειμενικές παραμέτρους, όπως γραμμές κώδικα που απαιτούνται για κοινές εργασίες. Τελικά, η επιτυχία μιας γλώσσας σε τομείς τόσο μεγάλους και πολύπλοκους, όπως η βιοπληροφορική και η επιστήμη δεδομένων είναι ένας συνδυασμός γλωσσικού σχεδιασμού, δημοτικότητας, διαθεσιμότητας βιβλιοθηκών, ρεαλιστικών λύσεων και μιας κοινότητας που θα βοηθήσει στην απόδοση ειδικών εργασιών προγραμματισμού (Giorgi et al., 2022).

Η R, όπως είδαμε, αναπτύχθηκε ιστορικά από την διασταύρωση των υπάρχουσών γλωσσών, όπως C, S και Scheme και επέτρεπε πάντα τη χρήση του εγγενούς κώδικα C και Fortran για την εκτέλεση ορισμένων υπολογισμών. Ένα παράδειγμα είναι το πακέτο Rcpp, το οποίο αποτελεί την κύρια διεπαφή για τη σύνδεση της R με τον κώδικα C και C++. Η συνέργεια της R με άλλες γλώσσες οφείλεται στην εγγενή ενέργεια και το ανοιχτό μυαλό της κοινότητας R, που είναι πάντα έτοιμο να συγκρίνει τις λύσεις της R με αυτές που παρέχονται από άλλες γλώσσες και είναι συνεχώς σε εξέλιξη, με σκοπό να επιταχύνει τις πιο πρόσφατες τεχνολογίες στατιστικών και δεδομένων. Για παράδειγμα, παρείχε τα πρώτα εργαλεία για την εκτέλεση ανάλυσης αλληλουχίας RNA. Από άποψη δημοτικότητας, η R κατατάσσεται επί του παρόντος (Ιανουάριος 2024) ως η 6^η πιο δημοφιλής γλώσσα σύμφωνα με την Δείκτης PYPL⁹. Στον **Διάγραμμα 1** παρουσιάζονται οι δέκα (10) πιο δημοφιλείς γλώσσες προγραμματισμού (Giorgi et al., 2022).

Οι 10 πιο δημοφιλείς γλώσσες προγραμματισμού



Διάγραμμα 1: Διάγραμμα των 10 πιο δημοφιλών γλωσσών προγραμματισμού¹⁰.

Η Python και η R είναι και οι δύο δωρεάν προσβάσιμες γλώσσες, με την Python να είναι η πιο δημοφιλής γλώσσα στον κόσμο λόγω της ευελιξίας της, πέρα από την ανάλυση δεδομένων (π.χ. στη διαχείριση βάσεων δεδομένων και ανάπτυξη ιστοσελίδων). Ιστορικά, οι Python και R έχουν αναπτυχθεί σε βάρος του προηγούμενου «βασιλιά» των γλωσσών βιοπληροφορικής, την PERL, η οποία

⁹ Δείκτης PYPL (PopularitY of Programming Language): Δείκτης Δημοτικότητας Γλώσσας Προγραμματισμού <https://pypl.github.io/PYPL.html>, Accessed in 27/01/2024

¹⁰ <https://pypl.github.io/PYPL.html>, Accessed in 15/04/2024

σταδιακά εξαφανίστηκε από το 2005 στις αναζητήσεις Google και γενικά, από την επιστήμη της βιοπληροφορικής και των δεδομένων κόσμος (Giorgi et al., 2022).

Η R διατηρεί και πιθανότατα θα διατηρήσει, μια εξειδικευμένη αλλά κυρίαρχη παρουσία στο πεδίο βιοπληροφορικής, παρέχοντας έτοιμα πακέτα και λειτουργίες, παράλληλα με μία ενεργή και χρήσιμη κοινότητα στην υπολογιστική βιολογία. Όσον αφορά τις επιδόσεις, η R πέτυχε πρόσφατα εξαιρετικά σημεία αναφοράς στην ταχύτητα της σε παράλληλες πράξεις, σε σύγκριση με την Python (Giorgi et al., 2022).

1.7: Πακέτα της R

Παρακάτω αναλύονται κάποια από τα πακέτα της R, που χρησιμοποιήθηκαν για την συγκεκριμένη εργασία.

- *Chem* : Ένα πακέτο της R για ανάκτηση χημικών πληροφοριών από τον Ιστό¹¹.
- *Dplyr*¹¹ : Ένα γρήγορο, συνεπές εργαλείο για εργασία με πλαίσια δεδομένων όπως αντικείμενα, τόσο στη μνήμη όσο και εκτός μνήμης.
- *Stringr*¹¹: Ένα σταθερό, απλό και εύχρηστο σετ. Όλα τα ονόματα συναρτήσεων και ορισμάτων (και θέσεις) είναι συνεπή, όλες οι συναρτήσεις ασχολούνται με τα διανύσματα "NA" και μηδενικού μήκους με τον ίδιο τρόπο, και η έξοδος από μια συνάρτηση είναι εύκολο να τροφοδοτηθεί στην είσοδο μιας άλλης.
- *rjava*¹¹ : Διασύνδεση χαμηλού επιπέδου σε Java VM. Επιτρέπει τη δημιουργία αντικειμένων, τις μεθόδους κλήσης και την πρόσβαση σε πεδία.
- *rcdk*¹¹: Επιτρέπει στον χρήστη να έχει πρόσβαση σε λειτουργίες στο «CDK», ένα πλαίσιο Java για τη χημειοπληροφορική. Αυτό επιτρέπει στον χρήστη να φορτώνει μόρια, να αξιολογεί τα μοριακά δακτυλικά αποτυπώματα, να

¹¹ <https://cran.r-project.org/web/packages/> , Accessed in 25/01/2024

υπολογίζει χημικές περιγραφικές μεταβλητές και ούτω καθεξής. Επιπλέον, το «CDK» API επιτρέπει στο χρήστη να βλέπει δομές σε δισδιάστατες.

- *Fingerprint*¹¹: Λειτουργεί με τον χειρισμό δυαδικών δακτυλικών αποτυπωμάτων αυθαίρετου μήκους. Ένα δακτυλικό αποτύπωμα αντιπροσωπεύεται από ένα αντικείμενο της κλάσης S4, το οποίο αναπαρίσταται εσωτερικά με ένα διάνυσμα ακεραίων αριθμών, έτσι ώστε κάθε στοιχείο να αντιπροσωπεύει τη θέση στο δακτυλικό αποτύπωμα, που έχει οριστεί σε 1. Τα δακτυλικά αποτυπώματα μπορούν να μετατραπούν σε ευκλείδεια διανύσματα (δηλαδή, σημεία στη μονάδα υπερσφαίρας) και μπορούν επίσης να διπλωθούν χρησιμοποιώντας OR. Οι αυθαίρετες μορφές δακτυλικών αποτυπωμάτων μπορούν να αντιμετωπιστούν μέσω χειριστών γραμμής. Επί του παρόντος παρέχονται χειριστές για δεδομένα δακτυλικών αποτυπωμάτων CDK¹², MOE¹³ και BCI¹⁴.
- *Corrplot*¹¹: Είναι μια γραφική απεικόνιση ενός πίνακα συσχέτισης, ενός διαστήματος εμπιστοσύνης ή ενός γενικού πίνακα. Περιέχει επίσης μερικούς αλγόριθμους για την αναδιάταξη πινάκων. Επιπλέον, το corrplot είναι καλό, γιατί παρέχει επιλογές για την προσθήκη ύπαρξη λεπτομερειών, συμπεριλαμβανομένης της επιλογής χρώματος, ετικετών κειμένου, ετικετών χρώματος, διάταξης και άλλων χαρακτηριστικών.
- *Caret*: Αναλύεται ενδελεχώς παρακάτω.

¹² **CDK (Cloud Development Kit)** : Είναι ένα πλαίσιο ανάπτυξης λογισμικού ανοιχτού κώδικα που επιτρέπει να χρησιμοποιούνται οι σύγχρονες γλώσσες προγραμματισμού για τη δημιουργία υποδομής cloud(Närhi, K. (2023). AWS CDK Compared to Other IaC Tools.)

¹³ **MOE (Managed Operating Environment)**: Διαχειριζόμενο Λειτουργικό Περιβάλλον, (Scholz, C., Knorr, S., Hamacher, K., & Schmidt, B. (2015). DOCKTITE□ A Highly Versatile Step-by-Step Workflow for Covalent Docking and Virtual Screening in the Molecular Operating Environment. *Journal of chemical information and modeling*, 55(2), 398-406.)

¹⁴ **BCI (Brain-computer interface)** : Διεπαφή εγκεφάλου-υπολογιστή, Shih, J. J., Krusienski, D. J., & Wolpaw, J. R. (2012). Brain-computer interfaces in medicine. *Mayo clinic proceedings*,

1.8: Το πακέτο Caret (Classification and Regression Training)

Το πακέτο *Caret* (Classification and Regression Training), συντομογραφία της εκπαίδευσης της ταξινόμησης και της παλινδρόμησης, δημιουργήθηκε με στόχο να εξαλείψει τις συντακτικές διαφορές μεταξύ πολλών από των συναρτήσεων, που χρησιμοποιούνται για την κατασκευή και πρόβλεψη μοντέλων. Επιπλέον, στοχεύει στην ανάπτυξη ενός συνόλου ημιαυτόματων, λογικών προσεγγίσεων για τη βελτιστοποίηση των τιμών των παραμέτρων και τέλος τη δημιουργία ενός πακέτου που μπορεί εύκολα να επεκταθεί σε συστήματα παράλληλης επεξεργασίας (Kuhn, 2008).

Το *Caret* αποτελεί ένα από τα πιο ολοκληρωμένα πακέτα R και μπορεί να χρησιμοποιηθεί για το στήσιμο μιας ολοκληρωμένης εργασίας ξεκινώντας, από το ξεκαθάρισμα και την προεπεξεργασία δεδομένων, μέχρι το τελικό μοντέλο, που μπορεί να προβλέψει και δώσει την ανάλυση των αποτελεσμάτων. Έχει περιγραφεί ως το μεταβατικό πακέτο της R κοινότητας για προγνωστική μοντελοποίηση και εποπτευόμενη μάθηση με όλα τα πιο ισχυρά εργαλεία της Μηχανικής Μάθησης της R. Ορισμένα πακέτα και βιβλιοθήκες περιέχουν πιο λεπτομερείς εκδόσεις κάποιων εντολών του *caret*. Ο σκοπός της χρήσης του είναι να επιτρέψει μια πιο βελτιωμένη διαδικασία για τους μοντελιστές, καθώς πολλά πακέτα έχουν ανεπαίσθητες διαφορές που μπορεί να οδηγήσουν σε σφάλματα. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι διαφορετικά πακέτα δημιουργούν διαφορετικά μοντέλα και δεν υπάρχει κανένας καθορισμένος τρόπος για το πώς ένας προγραμματιστής πακέτων πρέπει να σχεδιάσει τις εντολές εισόδου και εξόδου. Για παράδειγμα, ένα πακέτο μπορεί να απαιτεί τον καθορισμό του ορίσματος μοντέλου ως : *modelA*($Y \sim x1 + x$), ενώ ένα άλλο πακέτο απαιτεί την γραφή της ίδιας εντολής ως *modelB*($y = Y, x = c(x1, x2)$). Έτσι, το *caret* περιλαμβάνει και τα δύο αυτά πακέτα σε μία ενιαία συνάρτηση (δηλαδή *train()*) που επιτρέπει στον μοντελιστή να έχει μια πιο καθαρή ροή εργασιών μοντελοποίησης και να επιτρέψει ένα πιο αποτελεσματικό πρωτότυπο. Για παράδειγμα, μπορεί να χρησιμοποιηθεί οποιαδήποτε από αυτές τις γενικές συναρτήσεις :

train($Y \sim x1 + x1$), *method* = "*modelA*", που είναι ο τρόπος γραφής της πρώτης μεθόδου ή *train*($Y \sim x1 + x1$), *method* = *modelB*, που είναι ο δεύτερος τρόπος γραφής.

Το πακέτο είναι χρήσιμο για τα αρχικά στάδια ενός έργου (π.χ. δεδομένα, διαχωρισμός και προεπεξεργασία), καθώς και για μεθόδους επιλογής χαρακτηριστικών, που χρησιμεύουν στον συντονισμό μοντέλων, χρησιμοποιώντας επαναδειγματοληψία, που βοηθά στη διάγνωση της υπερβολικής προσαρμογής (Kuhn, 2008).

Το caret εξαρτάται από περισσότερα από εικοσιεπτά (27) άλλα πακέτα, αν και πολλά από αυτά αναφέρονται ως "προτεινόμενα" πακέτα, δεν φορτώνονται αυτόματα όταν ξεκινά το caret. Τα πακέτα φορτώνονται μεμονωμένα όταν ένα μοντέλο εκπαιδεύεται ή προβλέπεται (Kuhn, 2008). Πληροφορίες για τον τρόπο λειτουργίας του πακέτου μπορούν να δοθούν από την επίσημη ιστοσελίδα¹⁵ (Jones et al.).

1.9: Μέθοδοι για την Επιλογή Στατιστικά Σημαντικών Μεταβλητών

LASSO (Least Absolute Shrinkage and Selection Operator): Πρόκειται για ένα τύπο γραμμικής παλινδρόμησης, που χρησιμοποιεί την συρρίκνωση. Η συρρίκνωση λαμβάνει χώρα όταν οι τιμές δεδομένων συγκεντρώνονται προς ένα κεντρικό σημείο, όπως ο μέσος όρος. Η διαδικασία LASSO χρησιμοποιείται για απλά, αραιά μοντέλα (δηλαδή μοντέλα με λίγες παραμέτρους). Αυτός ο συγκεκριμένος τύπος παλινδρόμησης είναι κατάλληλος για μοντέλα που εμφανίζουν υψηλά επίπεδα αλληλογραμμικότητας ή όταν είναι θεμιτό η αυτοματοποίηση ορισμένων μέρων της επιλογής μοντέλου, όπως επιλογή μεταβλητής/εξάλειψη παραμέτρων (Ranstam & Cook, 2018).

RFE (Recursive Feature Elimination): Το RFE είναι επίσης μια μέθοδος μείωσης των διαστάσεων μίας βάσης δεδομένων, καθώς μειώνει τον αριθμό των χαρακτηριστικών στο μοντέλο αφαιρώντας ανεπιθύμητα χαρακτηριστικά. Το RFE συνδυάζεται πάντα με διασταυρούμενη επικύρωση (cross-validation), η οποία βοηθά στην εύρεση του καλύτερου αριθμού χαρακτηριστικών (Chen & Jeong, 2007) .

¹⁵ <https://topepo.github.io/caret/index.html> , Accessed in 16/04/2024

Κεφάλαιο 2 :Μηχανική Μάθηση (Machine Learning)

Η μηχανική μάθηση είναι ένας κλάδος της επιστήμης των υπολογιστών, που στοχεύει σε γενικές γραμμές στους υπολογιστές να «μάθουν» χωρίς να είναι απευθείας προγραμματισμένοι. Έχει τις ρίζες του από το κίνημα της τεχνητής νοημοσύνης της δεκαετίας του 1950 και δίνει έμφαση σε πρακτικούς στόχους και εφαρμογές, ιδιαίτερα στην πρόβλεψη και στη βελτιστοποίηση. Οι υπολογιστές «μαθαίνουν» στη μηχανική μάθηση, βελτιώνοντας την απόδοσή τους σε εργασίες μέσω της «εμπειρίας». Στην πράξη, «εμπειρία» συνήθως σημαίνει προσαρμογή σε δεδομένα. Ως εκ τούτου, δεν υπάρχει σαφές όριο μεταξύ μηχανικής μάθησης και στατιστικών προσεγγίσεων. Πράγματι, το αν μια δεδομένη μεθοδολογία θεωρείται «μηχανική μάθηση» ή «στατιστική» αντικατοπτρίζει συχνά την ιστορία της, όσο και τις πραγματικές διαφορές και πολλοί αλγόριθμοι (π.χ. τελεστής ελάχιστης απόλυτης συρρίκνωσης και επιλογής (LASSO), σταδιακή παλινδρόμηση) δεν θεωρούνται μηχανική μάθηση. Ωστόσο, παρά τις μεθοδολογικές ομοιότητες, η μηχανική μάθηση είναι φιλοσοφικά και πρακτικά διακριτή. Με την ελευθερία της υπεραπλούστευσης, η μηχανική μάθηση, γενικά δίνει έμφαση στην προγνωστική ακρίβεια έναντι των συμπερασμάτων που βασίζονται σε υποθέσεις, συνήθως εστιάζοντας σε μεγάλα, υψηλών διαστάσεων (δηλαδή, με πολλές συμμεταβλητές) σύνολα δεδομένων. Ανεξάρτητα από την ακριβή διάκριση μεταξύ των προσεγγίσεων, στην πράξη, η μηχανική μάθηση προσφέρει στους επιστήμονες σημαντικά εργαλεία. Συγκεκριμένα, η αυξανόμενη εστίαση στον μεγάλο αριθμό δεδομένων, δίνει έμφαση σε προβλήματα και σύνολα δεδομένων για τα οποία υπερέχουν οι αλγόριθμοι μηχανικής μάθησης, ενώ οι πιο συχνά χρησιμοποιούμενες στατιστικές προσεγγίσεις δυσκολεύονται (Bi et al., 2019). Για την συγκεκριμένη εργασία δοκιμάστηκαν δέκα μοντέλα, τα οποία αναλύονται ενδελεχώς στο επόμενο κεφάλαιο.

2.1: Μοντέλα Μηχανικής Μάθησης

GLM (Generalized Linear Model) : Τα γενικευμένα γραμμικά μοντέλα παρέχουν μια κοινή προσέγγιση σε ένα ευρύ φάσμα προβλημάτων μοντελοποίησης απόκρισης. Οι κανονικές αποκρίσεις, οι αποκρίσεις Poisson και οι διωνυμικές αποκρίσεις είναι οι πιο συχνά χρησιμοποιούμενες, αλλά μπορούν να χρησιμοποιηθούν και άλλες κατανομές. Εκτός από τον καθορισμό της απόκρισης, τα GLM χρειάζονται επίσης μια συνάρτηση σύνδεσης, που επιτρέπει περαιτέρω ευελιξία στη μοντελοποίηση. Τα GLM μπορούν να εφαρμοστούν χρησιμοποιώντας μια κοινή διαδικασία και έναν διαθέσιμο μηχανισμό για τον έλεγχο υποθέσεων. Τα διαγνωστικά τους χρησιμοποιούν υπολείμματα απόκλισης και παρέχουν έναν τρόπο ελέγχου της επάρκειας των επιλεγμένων μοντέλων (Faraway, 2010).

Η χρήση ενός GLM δεν είναι καθόλου επαρκής, καθώς υπάρχουν πτυχές ανάλυσης όλων των διαφορετικών GLM, που είναι ειδικά για αυτόν τον συγκεκριμένο τύπο απόκρισης. Για παράδειγμα, ενώ μια λογιστική παλινδρόμηση είναι GLM, ο χρήστης πρέπει ακόμα να κατανοήσει τη συγκεκριμένη ερμηνεία των πιθανοτήτων σε αυτόν τον τύπο μοντέλου. Με κατηγορηματικά δεδομένα, η επιβολή ενός GLM απαιτεί μερικές φορές παραμετροποιήσεις, που είναι δύσκολο να ερμηνευτούν. Επομένως, ενώ τα GLM μπορεί να παρέχουν κάποια βολική δομή σε φαινομενικά διαφορετικά μοντέλα, πρέπει να αναγνωρίσουμε ότι δεν παρέχουν μια ολοκληρωμένη λύση (Faraway, 2010).

Το βασικό GLM έχει επεκταθεί σε πολλές κατευθύνσεις. Ο Wedderburn (1974) εισήγαγε την ιδέα της πιθανότητας, η οποία αποφεύγει να προσδιορίζει ρητά την κατανομή της απόκρισης, απαιτώντας μόνο τον προσδιορισμό των συναρτήσεων σύνδεσης και διακύμανσης. Αυτή η ιδέα επεκτάθηκε στην έννοια των γενικευμένων εξισώσεων εκτίμησης με ιδιαίτερη εφαρμογή στα διαχρονικά δεδομένα από τους Liang και Zeger (1986). Ο Lindsey (1997) δίνει ένα ευρύ φάσμα εφαρμογών των GLM ενώ οι Fahrmeir και Tutz (2001) περιγράφουν GLM για πολυμεταβλητές αποκρίσεις (Faraway, 2010).

Random Forest: Το μοντέλο Random Forest, που αναπτύχθηκε από τον Breiman, χρησιμοποιεί την τυχαιοποίηση για να δημιουργήσει έναν μεγάλο αριθμό δέντρων απόφασης (*decision trees*). Η έξοδος αυτών των μεμονωμένων δέντρων

συγκεντρώνεται σε μια ενιαία έξοδο, χρησιμοποιώντας είτε ψηφοφορία για προβλήματα ταξινόμησης, είτε τον μέσο όρο για προβλήματα παλινδρόμησης. Η τυχαιοποίηση υλοποιείται με δύο (2) τρόπους. Αρχικά, γίνεται δειγματοληψία του συνόλου δεδομένων με αντικατάσταση (*δειγματοληψία bootstrap*). Η διαδικασία συγκέντρωσης ενός νέου δείγματος με αυτόν τον τρόπο ονομάζεται "συγκέντρωση εκκίνησης" ή "συσκευασία". Δεν υπάρχει καμία εγγύηση ότι κάθε θέμα θα εμφανιστεί στο νέο δείγμα και μερικά μπορεί να εμφανιστούν περισσότερες από μία φορές. Σε ένα μεγάλο σύνολο δεδομένων με n θέματα, η πιθανότητα να μείνουμε εκτός ενός δείγματος εκκίνησης μεγέθους n , συγκλίνει στο $1/e$ ή περίπου στο 37%. Αυτά τα υποκείμενα που αφήνονται έξω, συνθέτουν ένα χρήσιμο σύνολο δεδομένων για τη δοκιμή του δέντρου αποφάσεων που αναπτύχθηκε από τα άτομα εντός του δείγματος (Rigatti, 2017).

Η δεύτερη τυχαιοποίηση λαμβάνει χώρα στους κόμβους απόφασης. Σε κάθε κόμβο επιλέγεται ένας συγκεκριμένος αριθμός προγνωστικών. Για ένα σύνολο με p predictors, ένας τυπικός αριθμός είναι η στρογγυλεμένη τετραγωνική ρίζα του p – αν και αυτή η παράμετρος μπορεί να επιλεγεί από τον αναλυτή. Στη συνέχεια, ο αλγόριθμος ελέγχει όλα τα πιθανά όρια για όλες τις επιλεγμένες μεταβλητές και επιλέγει τον συνδυασμό μεταβλητής-ουδού, που οδηγεί στον καλύτερο διαχωρισμό. Αυτή η τυχαία επιλογή μεταβλητών και ο έλεγχος κατωφλίου συνεχίζεται έως ότου επιτευχθούν είτε «καθαροί» κόμβοι (που περιέχουν μόνο περιπτώσεις ή στοιχεία ελέγχου) ή κάποιο άλλο προκαθορισμένο τελικό σημείο. Όλη αυτή η διαδικασία καλλιέργειας δέντρων επαναλαμβάνεται (συνήθως 100 έως 1000 φορές) για να αναπτυχθεί το random forest (Rigatti, 2017).

Ίσως η μεγαλύτερη δύναμη του random forest είναι η ικανότητά του να ανακαλύπτει ουσιαστικές αλληλεπιδράσεις και μη γραμμικά αποτελέσματα των προγνωστικών. Η φύση της αλληλεπίδρασης ή της μη γραμμικότητας δεν χρειάζεται να προσδιορίζεται εκ των προτέρων (Rigatti, 2017).

Μόλις κατασκευαστεί ένα random forest μοντέλο, μπορεί να χρησιμοποιηθεί για πρόβλεψη. Κάθε νέα περίπτωση αξιολογείται από καθένα από τα δέντρα του αλγόριθμου και το προβλεπόμενο αποτέλεσμα είναι, στην περίπτωση ταξινόμησης, η πλειοψηφική τάξη (αυτή που λαμβάνει τις περισσότερες «ψήφους» από τα μεμονωμένα δέντρα) ή ο μέσος όρος όλων των προβλέψεων στο περίπτωση της παλινδρόμησης. Επειδή υπάρχουν τόσα πολλά δέντρα στο «δάσος», μπορεί να είναι δύσκολο να πούμε ποιες μεταβλητές επηρεάζουν περισσότερο τις προβλέψεις.

Ευτυχώς, υπάρχουν αρκετές μαθηματικές κατασκευές, που χρησιμοποιούνται για τη μέτρηση της επίδρασης των μεταβλητών στο μοντέλο, τα λεγόμενα «μέτρα μεταβλητής σημασίας». Υπάρχουν πολλά τέτοια μέτρα και μπορεί να βασίζονται στον συντελεστή Gini¹⁶, ένα μέτρο που σχετίζεται με την περιοχή κάτω από την καμπύλη (AUC). Άλλες μέθοδοι δοκιμάζουν το μοντέλο με τις επιμέρους μεταβλητές, που έχουν παραλειφθεί για να δουν πώς επηρεάζεται το ποσοστό σφάλματος (Rigatti, 2017).

Το ποσοστό σφάλματος ενός τυχαίου δάσους είναι γενικά το μέσο ποσοστό σφάλματος όλων των μεμονωμένων δέντρων, όταν οι περιπτώσεις εκτός του πλαισίου, χρησιμοποιούνται ως περιπτώσεις δοκιμής. Για προβλήματα ταξινόμησης, αυτό είναι αρκετά απλό, καθώς μια λανθασμένη κατηγορία εντοπίζεται εύκολα. Για την παλινδρόμηση, είναι λιγότερο απλό, αφού μια πρόβλεψη σημείου για μια συνεχή τιμή είναι, μαθηματικά, πάντα λάθος. Σε αυτήν την περίπτωση, χρησιμοποιείται η συμφωνία (Harrell's C). Αυτό συγκρίνει την έξοδο του μοντέλου χρησιμοποιώντας ζεύγη περιπτώσεων (Rigatti, 2017).

Treebag: Το Treebag είναι ένα σύστημα που βασίζεται σε παράθυρο γραμμένο σε καθαρή Java (JDK 1.1). Το κύριο παράθυρο του ονομάζεται φύλλο εργασίας TREEBAG και είναι αυτό στο οποίο ο χρήστης μπορεί να δημιουργήσει διαδραστικά ένα δίκτυο στοιχείων TREEBAG. Οι διαθέσιμες κλάσεις των στοιχείων Treebag χωρίζονται σε τέσσερις κατηγορίες: τις γραμματικές δέντρων, τους μετατροπείς δέντρων, τις άλγεβρες και τις οθόνες. Ένα στιγμιότυπο μιας κλάσης ορίζεται σε ένα κείμενο με μια συγκεκριμένη σύνταξη και μπορεί να φορτωθεί στο φύλλο εργασίας, όπου αναπαρίσταται ως κόμβος. Αυτοί οι κόμβοι μπορούν να συνδεθούν μέσω ακμών για να δημιουργήσουν σχέσεις εισόδου/εξόδου. Εάν το στοιχείο-στόχος είναι μια οθόνη, θα κάνει οπτικοποίηση της τιμής των δέντρων εισόδου του σε ξεχωριστό παράθυρο. Ωστόσο, για να μπορέσει να το κάνει, πρέπει επίσης να συνδεθεί με μια άλγεβρα που καθορίζει τη σημασιολογία των δέντρων εισόδου που λαμβάνονται (Drewes & Knirsch, 2000).

Έτσι, οι τύποι αντικειμένων που μπορεί κανείς να δημιουργήσει μέσα στο Treebag καθορίζονται από τις διαθέσιμες κατηγορίες αλγεβρών. Υπάρχουν πολλές τέτοιες

¹⁶ **Συντελεστής Gini:** Ορίζεται ως η σχέση των σωρευτικών μεριδίων του πληθυσμού, που διατάσσονται σύμφωνα με το επίπεδο του ισοδύναμου διαθέσιμου εισοδήματος, με το σωρευτικό μερίδιο του ισοδύναμου συνολικού διαθέσιμου εισοδήματος που λαμβάνουν, **Lambert, P. J., & Decoster, A. (2005). The Gini coefficient reveals more. Available at SSRN 809004.**

τάξεις, οι περισσότερες ενδιαφέρουσες ίσως είναι αυτές που παράγουν γραφικά αντικείμενα: άλγεβρες με κωδικούς αλυσίδας, άλγεβρες χελωνών και άλγεβρες κολάζ. Τα δύο πρώτα είναι γραμμικά σχέδια απόδοσης. Η πιο σημαντική λειτουργία τους είναι η συνένωση γραμμικών σχεδίων (Drewes & Knirsch, 2000).

Ωστόσο, άλλες άλγεβρες είναι επίσης χρήσιμες. Ο ελεύθερος όρος άλγεβρα, που συσχετίζει με κάθε δέντρο το ίδιο το δέντρο, είναι ένας από αυτούς. Μαζί με μια οθόνη που απεικονίζει τα δέντρα σε γραφική ή κειμενική μορφή, διασφαλίζεται ότι κάποιος μπορεί να ρίξει μια ματιά στο «μη αξιολογημένο» δέντρο (Drewes & Knirsch, 2000).

Gradient Boosting Machine (GBM): Σε μηχανές ενίσχυσης κλίσης, ή απλά, GBM, η διαδικασία εκμάθησης εφαρμόζεται σε νέα μοντέλα, για να παρέχει μια πιο ακριβή εκτίμηση της απόκρισης της μεταβλητής. Η βασική ιδέα πίσω από αυτόν τον αλγόριθμο είναι η κατασκευή νέων βασικών μεταβλητών, που θα συσχετίζονται στο μέγιστο με την αρνητική κλίση της συνάρτησης απώλειας, που συνδέεται με ολόκληρο το σύνολο. Οι συναρτήσεις απώλειας, που εφαρμόζονται μπορεί να είναι αυθαίρετες, αλλά χρησιμοποιούνται προκειμένου να δώσουν μια καλύτερη διαίσθηση, εάν η συνάρτηση σφάλματος είναι η κλασική απώλεια τετραγώνου σφάλματος, οπότε η διαδικασία εκμάθησης θα οδηγήσει σε διαδοχική προσαρμογή σφαλμάτων. Γενικά, η επιλογή της συνάρτησης απώλειας εναπόκειται στον ερευνητή, προκειμένου να επιλέξει από μία τόσο πλούσια ποικιλία συναρτήσεων απώλειας, που έχουν προκύψει μέχρι τώρα και επιπλέον δίνεται η δυνατότητα υλοποίησης της δικής του απώλειας για τη συγκεκριμένη εργασία (Natekin & Knoll, 2013).

Αυτή η υψηλή ευελιξία καθιστά τα GBM εξαιρετικά προσαρμόσιμα σε οποιαδήποτε συγκεκριμένη εργασία, που βασίζεται σε δεδομένα. Εισάγει μεγάλη ελευθερία στη σχεδίαση του μοντέλου, καθιστώντας έτσι, την επιλογή της καταλληλότερης λειτουργίας απώλειας, θέμα δοκιμής και λάθους. Ωστόσο, οι αλγόριθμοι ενίσχυσης είναι σχετικά απλοί στην εφαρμογή, γεγονός που επιτρέπει σε κάποιον να πειραματιστεί με διαφορετικά σχέδια μοντέλων. Επιπλέον, τα GBM έχουν επιδείξει σημαντική επιτυχία όχι μόνο σε πρακτικές εφαρμογές, αλλά και σε διάφορες προκλήσεις μηχανικής μάθησης και εξαγωγής δεδομένων (Natekin & Knoll, 2013).

C5.0 : Ο αλγόριθμος C5.0 είναι ένας από τους αλγόριθμους, που αποτελεί βελτίωση του αλγόριθμου C4.5. Ο τελευταίος χρησιμοποιεί ένα δέντρο αναπαράστασης, όπου

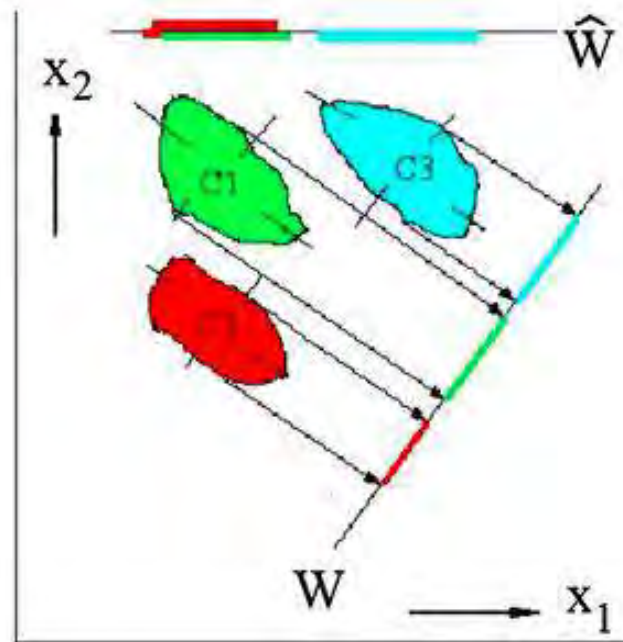
κάθε κόμβος αντιπροσωπεύει ένα χαρακτηριστικό και στη συνέχεια μία διακλάδωση αντιπροσωπεύει την τιμή του χαρακτηριστικού. Έχει ένα φύλλο (*leaf*), όπου η συνάρτηση είναι η τάξη. Η λήψη αποφάσεων βασίζεται στη μεγαλύτερη τιμή κέρδους από τον υπολογισμό όλων των γνωρισμάτων (Telaumbanua et al., 2021).

Ακολουθούν τα βήματα για τη χρήση του αλγόριθμου C5.0: Αρχικά δημιουργείται ένα σύστημα αποφάσεων, που περιλαμβάνει τα χαρακτηριστικά της συνθήκης και τα χαρακτηριστικά της απόφασης. Στη συνέχεια, το σύστημα απόφασης περιγράφεται από τον αριθμό των αντικειμένων, που αποτελείται. Έπειτα, γίνεται καταμέτρηση του αριθμού των δεδομένων στηλών, όπου ο όγκος των δεδομένων πρέπει να βασίζεται σε ορισμένα χαρακτηριστικά γνωρίσματα, των οποίων τα αποτελέσματα βασίζονται σε ορισμένες προϋποθέσεις. Επιπλέον, επιλέγεται το χαρακτηριστικό που χρησιμοποιείται ως προϋπόθεση για την δημιουργία του κόμβου και δημιουργείται διακλάδωση για κάθε μέλος του κόμβου. Έπεται ο έλεγχος της τιμής της εντροπίας κάθε μέλους του κόμβου, εάν φέρει τιμή μηδέν. Εάν η τιμή είναι μηδέν, τότε προσδιορίζεται το φύλλο, που έχει διαμορφωθεί. Εάν η τιμή εντροπίας του κάθε μέλους του κόμβου είναι εντελώς μηδέν, τότε η διαδικασία σταματά. Αν τα μέλη του κόμβου, έχουν τιμή μεγαλύτερη από μηδέν, τότε η διαδικασία επαναλαμβάνεται από την αρχή με την προϋπόθεση ότι όλα τα μέλη του κόμβου είναι μηδέν. Ο κόμβος είναι ένα χαρακτηριστικό, που έχει την υψηλότερη τιμή κέρδους από τα υπάρχοντα γνωρίσματα (Telaumbanua et al., 2021).

Linear Discriminant Analysis (LDA): Η τεχνική LDA μετατρέπει τα διανύσματα χαρακτηριστικών υψηλών διαστάσεων, που ανήκουν σε διαφορετικές τάξεις, σε χώρο χαρακτηριστικών χαμηλότερης διάστασης, προκειμένου να είναι τα προβαλλόμενα διανύσματα μεταβλητών της ίδιας τάξης σε αυτόν τον χώρο χαμηλότερων διαστάσεων και να διαχωρίζονται καλά από τα διανύσματα χαρακτηριστικών άλλων τάξεων (Sharma & Paliwal, 2015).

Αυτή η τεχνική απεικονίζεται στο **Διάγραμμα 2**, όπου τα δισδιάστατα διανύσματα χαρακτηριστικών μειώνονται σε μονοδιάστατο διάνυσμα χαρακτηριστικών. Τα διανύσματα χαρακτηριστικών ανήκουν σε τρεις διαφορετικές κατηγορίες, δηλαδή C1, C2 και C3. Πρέπει να βρεθεί ένας προσανατολισμός, όπου τα προβαλλόμενα διανύσματα χαρακτηριστικών (σε μια γραμμή) μιας τάξης πρέπει να διαχωριστούν στο μέγιστο από τα διανύσματα χαρακτηριστικών άλλων τάξεων. Μπορεί να παρατηρηθεί ότι με αυτόν τον προσανατολισμό $\hat{W}$, δεν διαχωρίζονται αρκετά καλά τα

διανύσματα των προβαλλόμενων χαρακτηριστικών. Ωστόσο, η περιστροφή της γραμμής περαιτέρω στον προσανατολισμό $\mathbf{W}$ και η προβολή δισδιάστατων διανυσμάτων χαρακτηριστικών σε αυτόν τον προσανατολισμό διαχωρίζουν τα προβαλλόμενα διανύσματα χαρακτηριστικών μιας τάξης με άλλες τάξεις. Έτσι, ο προσανατολισμός $\mathbf{W}$ είναι καλύτερη επιλογή από τον προσανατολισμό $\hat{\mathbf{W}}$. Η τιμή του W μπορεί να ληφθεί μεγιστοποιώντας τη γραμμική διάκριση του Fisher¹⁷ $J(W)$. Αυτή η συνάρτηση κριτηρίου εξαρτάται από τρεις παράγοντες: τον προσανατολισμό W , τον πίνακα διασποράς εντός της κατηγορίας (S_W) και τον πίνακα διασποράς μεταξύ των κλάσεων (S_B). Εάν η μείωση των διαστάσεων είναι από χώρο d -διάστατο σε χώρο h -διάστασης, τότε το μέγεθος του πίνακα προσανατολισμού W είναι $d \times h$ και το W έχει $h \leq \min(c-1, d)$ (όπου c είναι ο αριθμός των τάξεων) διανύσματα στήλης γνωστά ως διανύσματα βάσης (Sharma & Paliwal, 2015).



Διάγραμμα 2: Σχηματική Απεικόνιση του τρόπου με τον οποίο λειτουργεί το LDA (Sharma & Paliwal, 2015)

¹⁷ Η γραμμική διάκριση του Fisher μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως τρόπος ταξινόμησης (classifier). Ο classifier μπορεί να βρει ένα σύνολο βαρών για να χαράξει ένα όριο απόφασης, ταξινομώντας τα δεδομένα. Η γραμμική διάκριση του Fisher προσπαθεί να βρει το διάνυσμα που μεγιστοποιεί τον διαχωρισμό μεταξύ των κατηγοριών των προβαλλόμενων δεδομένων. Η μεγιστοποίηση του «χωρισμού» μπορεί να είναι διφορούμενη. Τα κριτήρια, που ακολουθεί η γραμμική διάκριση του Fisher για να το κάνει αυτό, είναι να μεγιστοποιήσει την απόσταση των προβαλλόμενων μέσων και να ελαχιστοποιήσει την προβαλλόμενη διακύμανση εντός της κατηγορίας Boardman, D., & Flynn, A. (2012). A gamma-ray identification algorithm based on Fisher linear discriminant analysis. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 60(1), 270-277.

Glmnet: Το Glmnet είναι ένα πακέτο, που εφαρμόζει σε ένα γενικευμένο γραμμικό μοντέλο μέσω περιορισμού της μέγιστης πιθανότητας. Το μονοπάτι της κανονικοποίησης είναι σχεδιασμένο για την LASSO ή το elasticnet penalty σε ένα πλέγμα τιμών με παράμετρο κανονικοποίησης, το λάμδα (λ). Ο αλγόριθμος είναι εξαιρετικά γρήγορος και μπορεί να εκμεταλλευτεί την αραιότητα στον πίνακα εισόδου x . Ταιριάζει γραμμικά, υλικοτεχνικά και πολυωνυμικά μοντέλα παλινδρόμησης, Poisson¹⁸ και Cox¹⁹. Μπορεί να οδηγήσει σε μια ποικιλία προβλέψεων από τα εφαρμοσμένα μοντέλα. Μπορεί επίσης να ταιριάζει με γραμμική παλινδρόμηση πολλαπλών αποκρίσεων. Οι συγγραφείς του glmnet είναι οι Jerome Friedman, Trevor Hastie, Rob Tibshirani και Noah Simon (Hastie & Qian, 2014).

Το glmnet λύνει την παρακάτω εξίσωση:

$$\min_{\beta_0, \beta} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w_i l(y_i, \beta_0 + \beta^T x_i) + \lambda \left[\frac{(1 - \alpha) \|\beta\|_2^2}{2} + \alpha \|\beta\|_1 \right]$$

Πάνω από ένα πλέγμα τιμών του λ , καλύπτεται ολόκληρο το εύρος. Εδώ το $l(y, \eta)$ είναι η αρνητική συνεισφορά της λογαριθμικής πιθανότητας για παρατήρηση. Το elasticnet penalty ελέγχεται από α και γεφυρώνει το κενό μεταξύ της LASSO ($\alpha = 1$, η προεπιλογή) και της κορυφογραμμής ($\alpha = 0$). Η παράμετρος συντονισμού λ ελέγχει τη συνολική ισχύ του penalty (Hastie & Qian, 2014).

Είναι γνωστό ότι το penalty της κορυφογραμμής συρρικνώνει τους συντελεστές των συσχετισμένων προγνωστικών παραγόντων μεταξύ τους, ενώ η LASSO τείνει να διαλέγει ένα από αυτά και να απορρίπτει τα άλλα. Το elasticnet penalty συνδυάζει αυτά τα δύο. Αυτή είναι μία παράμετρος υψηλότερου επιπέδου και οι χρήστες μπορούν να επιλέξουν μια τιμή εκ των προτέρων, διαφορετικά μπορούν να πειραματιστούν με μερικές διαφορετικές τιμές. Μία άλλη χρήση του α είναι για αριθμητική σταθερότητα (Hastie & Qian, 2014).

¹⁸ **Μοντέλο Poisson:** Η τυχαία μεταβλητή, που ακολουθεί την κατανομή Poisson, μετράει τη συχνότητα εμφάνισης ενός ενδεχόμενου σε συγκεκριμένα ίσα χρονικά διάστημα, αποστάσεις ή περιοχές. Η πιθανότητα εμφάνισης του ενδεχόμενου παραμένει σταθερή για ίσα διαστήματα. Τέλος, το κάθε συμβάν είναι ανεξάρτητο του άλλου **Thompson, W. J. (2001). Poisson distributions. *Computing in Science & Engineering*, 3(3), 78-82.**

¹⁹ **Μοντέλο Cox:** Χρησιμοποιείται ευρέως στην ανάλυση επιβίωσης για την εύρεση της σχέσης μεταξύ μιας μεταβλητής, που δηλώνει τον χρόνο επιβίωσης ενός ατόμου κι άλλων συμμεταβλητών, καθώς και των διαφορών στην επιβίωση που οφείλονται στο είδος της θεραπείας και σε προγνωστικούς παράγοντες σε κλινικές μελέτες. Πρόκειται για ένα ημιπαραμετρικό μοντέλο, το οποίο μοντελοποιεί τη συνάρτηση κινδύνου σε σχέση με άλλες μεταβλητές **Ζαρόγιαννη, Ε.-Σ. Θ. (2013). Το μοντέλο αναλογικών κινδύνων του Cox και εφαρμογή στην R**

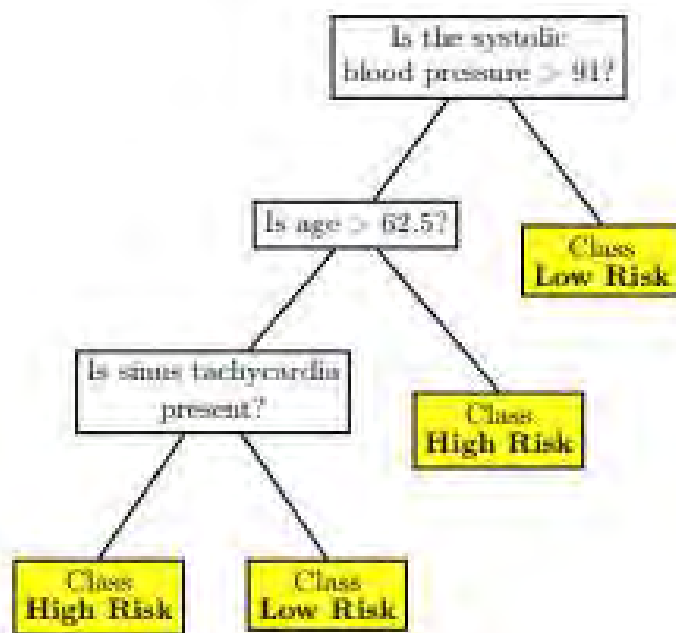
Οι αλγόριθμοι glmnet χρησιμοποιούν κυκλική κάθοδο συντεταγμένων, η οποία βελτιστοποιεί διαδοχικά την αντικειμενική συνάρτηση πάνω από κάθε παράμετρο με άλλες σταθερές και επαναλαμβανόμενους κύκλους μέχρι την σύγκλιση. Το πακέτο κάνει επίσης χρήση των ισχυρών κανόνων για αποτελεσματικό περιορισμό του ενεργού συνόλου. Λόγω των εξαιρετικά αποτελεσματικών ενημερώσεων και τεχνικών, όπως οι θερμές εκκινήσεις και η σύγκλιση ενεργών συνόλων, οι αλγόριθμοι μπορούν να υπολογίσουν τη διαδρομή λύσης πολύ γρήγορα (Hastie & Qian, 2014).

Ο κώδικας μπορεί να χειριστεί αραιές μορφές μήτρας εισόδου, καθώς και περιορισμούς εύρους στους συντελεστές. Ο πυρήνας του glmnet είναι ένα σύνολο υπορουτίνων fortran, οι οποίες κάνουν πολύ γρήγορη εκτέλεση. Το πακέτο περιλαμβάνει επίσης μεθόδους πρόβλεψης και γραφικής παράστασης, καθώς και μια συνάρτηση, που εκτελεί διασταυρούμενη επικύρωση K-fold (Hastie & Qian, 2014).

CART (Classification And Regression Trees): Τα δέντρα ταξινόμησης και παλινδρόμησης (CART) είναι μια μέθοδος ταξινόμησης, που χρησιμοποιεί δεδομένα για την κατασκευή των λεγόμενων δέντρων απόφασης (decision trees). Στη συνέχεια, τα δέντρα αποφάσεων χρησιμοποιούνται για την ταξινόμηση νέων δεδομένων. Βασική προϋπόθεση για την χρήση του CART είναι η γνώση εκ των προτέρων τον του αριθμού των τάξεων (Timofeev, 2004).

Η μεθοδολογία CART αναπτύχθηκε τη δεκαετία του '80 από τους Breiman, Friedman, Olshen, Stone στην εργασία τους «Δένδρα ταξινόμησης και παλινδρόμησης» (1984). Για την κατασκευή δέντρων απόφασης, το CART χρησιμοποιεί το λεγόμενο δείγμα εκμάθησης - ένα σύνολο ιστορικών δεδομένων με προκαθορισμένες τάξεις για όλες τις παρατηρήσεις. Τα δέντρα αποφάσεων αντιπροσωπεύονται από ένα σύνολο ερωτήσεων, που χωρίζει το δείγμα μάθησης σε όλο και μικρότερα μέρη. Το CART κάνει μόνο ερωτήσεις ναι/όχι (Timofeev, 2004).

Ο αλγόριθμος του πραγματοποιεί αναζήτηση για όλες τις πιθανές μεταβλητές και όλες τις πιθανές τιμές προκειμένου να βρεθεί ο καλύτερος διαχωρισμός, δηλαδή «κάνει» την κατάλληλη ερώτηση, που χωρίζει τα δεδομένα σε δύο μέρη με την μεγαλύτερη ομοιογένεια. Η διαδικασία, στη συνέχεια επαναλαμβάνεται για κάθε ένα από τα προκύπτοντα θραύσματα των δεδομένων. Για παράδειγμα ενός απλού δέντρου ταξινόμησης, που χρησιμοποιείται από το Ιατρικό Κέντρο του Σαν Ντιέγκο για την ταξινόμηση των ασθενών τους σε διαφορετικά επίπεδα κινδύνου είναι το εξής (Timofeev, 2004) :



Διάγραμμα 3: Ένα παράδειγμα για το πώς λειτουργεί ένα δέντρο ταξινόμησης. Στο συγκεκριμένο γίνεται ο διαχωρισμός των ασθενών του Ιατρικού Κέντρου του Σαν Ντιέγκο (Timofeev, 2004).

Στην πράξη μπορεί να υπάρχουν πολύ πιο περίπλοκα δέντρα αποφάσεων, που μπορεί να περιλαμβάνουν δεκάδες επίπεδα και εκατοντάδες μεταβλητές. Το CART μπορεί εύκολα να χειριστεί τόσο αριθμητικές όσο και κατηγορικές (ονοματικές) μεταβλητές. Μεταξύ άλλων πλεονεκτημάτων της μεθόδου CART είναι η ανθεκτικότητά της σε ακραίες τιμές. Συνήθως ο αλγόριθμος διαχωρισμού απομονώνει ακραία σημεία σε μεμονωμένους κόμβους. Μια σημαντική πρακτική ιδιότητα του CART είναι ότι η δομή των δέντρων ταξινόμησης ή παλινδρόμησης είναι αμετάβλητη ως προς τους μονοτονικούς μετασχηματισμούς ανεξάρτητων μεταβλητών. Μπορεί κανείς να αντικαταστήσει οποιαδήποτε μεταβλητή, με τον λογάριθμο ή την τετραγωνική της ρίζα, όμως η δομή του δέντρου δεν θα αλλάξει (Timofeev, 2004).

Η μεθοδολογία CART αποτελείται από μέρη δέντρου:

1. Κατασκευή μέγιστου δέντρου
2. Επιλογή του σωστού μεγέθους δέντρου
3. Ταξινόμηση νέων δεδομένων με χρήση κατασκευασμένου δέντρου (Timofeev, 2004).

Naïve Bayes: Το Naïve Bayes είναι ένας απλός αλγόριθμος εκμάθησης, που χρησιμοποιεί το θεώρημα του Bayes²⁰ μαζί με μία ισχυρή προϋπόθεση, ότι τα χαρακτηριστικά είναι υπό όρους ανεξάρτητα της δεδομένης της τάξης. Ενώ αυτή η προϋπόθεση της ανεξαρτησίας παραβιάζεται συχνά στην πράξη, το NB ωστόσο συχνά παρέχει ανταγωνιστική ακρίβεια ταξινόμησης. Σε συνδυασμό με την υπολογιστική του απόδοση και πολλά άλλα επιθυμητά χαρακτηριστικά, αυτό οδηγεί στην ευρεία εφαρμογή του (Webb et al., 2010).

Το Naïve Bayes παρέχει έναν μηχανισμό για τη χρήση των πληροφοριών σε δείγματα δεδομένων για την εκτίμηση της οπίσθιας πιθανότητας $P(y | x)$ κάθε τάξης y δεδομένου ενός αντικειμένου x (Webb et al., 2010).

Τα χαρακτηριστικά του Naïve Bayes περιλαμβάνουν τα ακόλουθα:

- *Υπολογιστική αποτελεσματικότητα:* Ο χρόνος εκπαίδευσης είναι γραμμικός ως προς τον αριθμό των παραδειγμάτων εκπαίδευσης. Ο αριθμός των χαρακτηριστικών και ο χρόνος ταξινόμησης είναι γραμμικός σε σχέση με τον αριθμό των χαρακτηριστικών και δεν επηρεάζεται από τον αριθμό των παραδειγμάτων εκπαίδευσης (Webb et al., 2010).
- *Χαμηλή διακύμανση:* Επειδή το NB δεν χρησιμοποιεί την αναζήτηση, έχει χαμηλή διακύμανση, αν και με το κόστος των υψηλών σφαλμάτων (Webb et al., 2010).
- *Αύξηση της μάθησης:* Λειτουργεί με βάση εκτιμήσεις πιθανοτήτων χαμηλής τάξης, που προκύπτουν από τα δεδομένα εκπαίδευσης. Αυτά μπορούν εύκολα να ενημερωθούν ως νέα εκπαίδευση και αποκτώντα δεδομένα (Webb et al., 2010).
- *Άμεση πρόβλεψη μεταγενέστερων πιθανοτήτων* (Webb et al., 2010)

²⁰ **Θεώρημα Bayes:** Βασίζεται στη σύγκριση μεταξύ διαφόρων αποφάσεων ταξινόμησης με βάση τις πιθανότητες και τα κόστη, που σχετίζονται με τις αποφάσεις αυτές. Θεωρεί ότι το πρόβλημα απόφασης ορίζεται με πιθανοθεωρητικούς όρους και ότι όλες οι σχετικές πιθανότητες είναι γνωστές **Joyce, J. (2003). Bayes' theorem.**

- *Δεν επηρεάζεται από το θόρυβο του υποβάθρου:* Χρησιμοποιεί πάντα όλα τα χαρακτηριστικά για όλες τις προβλέψεις και ως εκ τούτου είναι σχετικά μη ευαίσθητο στο θόρυβο, στα παραδείγματα που πρόκειται να ταξινομηθούν. Επειδή χρησιμοποιεί πιθανότητες, είναι επίσης σχετικά μη ευαίσθητο στο θόρυβο του σετ εκπαίδευσης (Webb et al., 2010).
- *Δεν επηρεάζεται από τις τιμές που λείπουν:* Επειδή το NB χρησιμοποιεί πάντα όλα τα χαρακτηριστικά για όλες τις προβλέψεις, εάν λείπει μια τιμή χαρακτηριστικού, μπορεί να πάρει τις πληροφορίες από άλλες τιμές. Τα χαρακτηριστικά εξακολουθούν να χρησιμοποιούνται, με αποτέλεσμα την υποβάθμιση της απόδοσης. Είναι επίσης σχετικά μη ευαίσθητο σε τιμές, που λείπουν, επειδή έχει εκπαιδευτεί σε ένα πιθανοτικό πλαίσιο (Webb et al., 2010).

k nearest neighbor (kNN): Η ταξινόμηση kNN είναι ένας από τους δέκα (10) κορυφαίους αλγόριθμους για την εξαγωγή δεδομένων. Έχει εφαρμοστεί ευρέως και με επιτυχία σε πολλούς τομείς, όπως η ταξινόμηση κειμένου, η αναγνώριση προτύπων και η επεξεργασία εικόνας. Η τυπική ταξινόμηση kNN προβλέπει δεδομένα δοκιμής μόνο με τους πλησιέστερους συντελεστές k του, στο σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης. Όταν σχεδιάστηκε ο αλγόριθμος ταξινόμησης kNN, χρειάστηκε μόνο απλά να επιλέξει/κατασκευάσει μια συνάρτηση απόστασης και ένας κανόνας ταξινόμησης. Πρόκειται για μια διαδικασία εκμάθησης που ενεργοποιείται με ερωτήματα, τα οποία εκτελούνται μόνο όταν υπάρχει σετ δοκιμής. Εκεί τίθεται μια κατάλληλη τιμή k και μέσω αυτόν αναζητούνται τα πλησιέστερα k από ολόκληρο τον χώρο του δείγματος σετ εκπαίδευσης. Αυτό σημαίνει ότι η ταξινόμηση kNN περιλαμβάνει ένα απλοϊκό τμήμα, τον καθορισμό της τιμής k και την αναζήτηση του. Από τη διαδικασία εκμάθησης, ο σχεδιασμός ενός αλγόριθμου ταξινόμησης kNN είναι σχεδόν ανεξάρτητος από τα σετ δοκιμής, δηλαδή, δεν εκπαιδεύει τίποτα μόνο με το σετ εκπαίδευσης πριν από την υποβολή ενός ερωτήματος. Ως εκ τούτου, η ταξινόμηση kNN αποδίδεται σε μια μη παραμετρική ή απλοϊκή μέθοδο ταξινόμησης (Zhang & Li, 2021).

Για να αντιμετωπιστεί αυτό το απλοϊκό μέρος της ταξινόμησης kNN, έγιναν πολλές προσπάθειες για τον ορισμό της τιμής k ή την αναζήτηση των πλησιέστερων k. Για

παράδειγμα, οι Gora και Wójna παρουσίασαν έναν αλγόριθμο εκμάθησης των βέλτιστων τιμών k για το σετ δοκιμής. Οι Guo et al. υποστήριξαν την αυτόματη αναζήτηση της βέλτιστης τιμής k για τα σετ δοκιμής. Οι Manocha et al. σχεδίασαν μια πιθανολογική μέθοδο για τον υπολογισμό των βέλτιστων - πλησιέστερων- K -τιμών. Οι Li et al. διευκρίνισαν ότι για τις διαφορετικές κατηγορίες χρειάζονται και διαφορετικοί αριθμοί πλησιέστερων k . Οι Sun et al. σχεδίασαν έναν προσαρμοστικό αλγόριθμο για την εύρεση των βέλτιστων τιμών k για σετ δοκιμής. Οι Zhang et al. υποστήριξαν ότι χρειάζεται ανακατασκευή του πίνακα σχέσεων και δημιούργησαν έναν υπολογισμό βέλτιστης τιμής k . Οι Gou et al. πρότειναν έναν αλγόριθμο K -πλησιέστερου a μέσω τοπικής μέσης διανυσματικής αναπαράστασης. Τέλος, οι Pan et al. παρουσίασαν έναν προσαρμοστικό αλγόριθμο kNN , ο οποίος όχι μόνο λαμβάνει υπόψη την κλάση πλειοψηφίας, αλλά επίσης λαμβάνει υπόψη τη δεύτερη πλειοψηφική τάξη των πλησιέστερων k . Ωστόσο, οι παραπάνω αλγόριθμοι ταξινόμησης kNN εξακολουθούν να είναι απλοϊκοί (Zhang & Li, 2021).

Παρακάτω παρουσιάζονται συνοπτικά τα πλεονεκτήματα και τα μειονεκτήματα της κάθε μεθόδου:

Πίνακας 2: Συγκεντρωτικός Πίνακας των δέκα (10) μοντέλων, που εφαρμόστηκαν. Παρουσιάζονται τα πλεονεκτήματα και τα μειονεκτήματα του κάθε μοντέλου.

Μοντέλο	Πλεονεκτήματα	Μειονεκτήματα
<i>GLM</i>	- Η μεταβλητή απόκρισης μπορεί να έχει οποιαδήποτε μορφή εκθετικού τύπου κατανομής - Είναι ικανό να αντιμετωπίζει κατηγορηματικούς προγνωστικούς παράγοντες - Δίνεται σχετικά εύκολα η ερμηνεία και επιτρέπεται η σαφή κατανόηση του τρόπου, με τον οποίο καθένα από τους προγνωστικούς παράγοντες επηρεάζει το αποτέλεσμα - Είναι λιγότερο επιρρεπής στην υπερφόρτωση από ότι άλλοι αλγόριθμοι ²¹	- Απαιτούνται σχετικά μεγάλα σύνολα δεδομένων. Όσο περισσότερες προγνωστικές μεταβλητές, τόσο μεγαλύτερο είναι το μέγεθος του δείγματος (N) που απαιτείται. Κατά κανόνα, ο αριθμός των μεταβλητών πρόβλεψης πρέπει να είναι μικρότερος από N/10 - Είναι ευαίσθητο σε ακραίες τιμές ²¹
<i>Random Forest</i>	- Αποτελεί έναν από τους πιο ακριβείς διαθέσιμους αλγόριθμους εκμάθησης - Μπορεί να χειριστεί πολλές μεταβλητές πρόβλεψης - Παρέχει εκτιμήσεις της σημασίας διαφορετικών μεταβλητών πρόβλεψης - Διατηρεί την ακρίβεια, ακόμα και όταν λείπει μεγάλο μέρος των δεδομένων ²²	- Μπορεί να υπερφορτώσει σύνολα δεδομένων, που φέρουν θόρυβο - Για δεδομένα που περιλαμβάνουν κατηγορικές (ονοματικές) μεταβλητές πρόβλεψης με διαφορετικό αριθμό επιπέδων, τα random forest δεν λειτουργούν υπέρ εκείνων των προγνωστικών με περισσότερα επίπεδα. Επομένως, οι τιμές μεταβλητής σημασίας δεν είναι πάντα αξιόπιστες για αυτόν τον τύπο δεδομένων ²²
<i>Treebag</i>	- Ακολουθεί τον τρόπο, που λειτουργεί ένας άνθρωπος, ενώ παίρνει οποιαδήποτε απόφαση για την πραγματική του ζωή - Μπορεί να είναι πολύ χρήσιμο για την επίλυση προβλημάτων, που σχετίζονται με αποφάσεις - Βοηθά στον υπολογισμό όλων των πιθανών αποτελεσμάτων για ένα πρόβλημα - Υπάρχει λιγότερη απαίτηση καθαρισμού δεδομένων σε σύγκριση με άλλους αλγόριθμους (Drewes & Klempien-Hinrichs, 2001).	- Περιέχει πολλά επίπεδα, γεγονός που το καθιστά περίπλοκο - Μπορεί να έχει πρόβλημα υπερφόρτωσης, το οποίο μπορεί να επιλυθεί χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο Random Forest - Για περισσότερες τάξεις, η υπολογιστική πολυπλοκότητα του δέντρου αποφάσεων μπορεί να αυξηθεί (Drewes & Klempien-Hinrichs, 2001)
<i>GBM</i>	- Μπορεί να χρησιμοποιηθεί με διάφορους τύπους απόκρισης (διωνυμική, Gaussian, Poisson), η οποία βελτιώνει την προγνωστική απόδοση - Η καλύτερη προσαρμογή των δεδομένων εντοπίζεται αυτόματα από τον αλγόριθμο - Το μοντέλο αντιπροσωπεύει την επίδραση κάθε προγνωστικού παράγοντα, αφού ληφθούν υπόψη τα αποτελέσματα των άλλων προγνωστικών - Δεν επηρεάζεται, από την ύπαρξη κενών και ακραίων τιμών ²³	Απαιτούνται τουλάχιστον 2 μεταβλητές πρόβλεψης για την εκτέλεση του ²³
<i>C5.0</i>	- Είναι επεκτάσιμο και αποτελεσματικό για μεγάλα σύνολα δεδομένων - Η ευελιξία του εκτείνεται σε μια ποικιλία τύπων δεδομένων, καθώς είναι ικανή να χειρίζεται τόσο συνεχείς όσο και κατηγορικές (ονομαστικές) ιδιότητες - Για να αποφευχθεί η υπερβολική εφαρμογή και να ενισχυθεί η γενίκευση, χρησιμοποιείται ένας ισχυρός μηχανισμός περιορισμού - Μπορεί να λειτουργήσει αποτελεσματικά σε πραγματικές καταστάσεις και είναι συγκριτικά ισχυρός σε σχέση με τα θορυβώδη δεδομένα - Είναι κατάλληλος για καταστάσεις, όπου η ερμηνεία είναι ζωτικής σημασίας, καθώς τα δέντρα	- Ισχυρά συνδεδεμένες ποιότητες μπορεί να κάνουν τον αλγόριθμο να αποδίδει λιγότερο αποτελεσματικά, καθώς μπορεί να δώσει υπερβολική έμφαση σε ένα χαρακτηριστικό σε βάρος άλλων. - Απαιτείται προσεκτική επιλογή παραμέτρων: Έχει έναν αριθμό παραμέτρων, που πρέπει να επιλεχθούν προσεκτικά, προκειμένου να μεγιστοποιηθεί η απόδοση - Είναι ευαίσθητο σε τιμές που λείπουν: Η απόδοση μπορεί να επηρεαστεί από τιμές που λείπουν στα δεδομένα και ο επιτυχής χειρισμός τους μπορεί να απαιτεί τη χρήση ορισμένων στρατηγικών

²¹ <https://support.bccvl.org.au/support/solutions/articles/6000083213-generalized-linear-model#header-page1> , Accessed in 18/01/2024

²² <https://support.bccvl.org.au/support/solutions/articles/6000083217-random-forest#header-page1> , Accessed in 18/01/2024

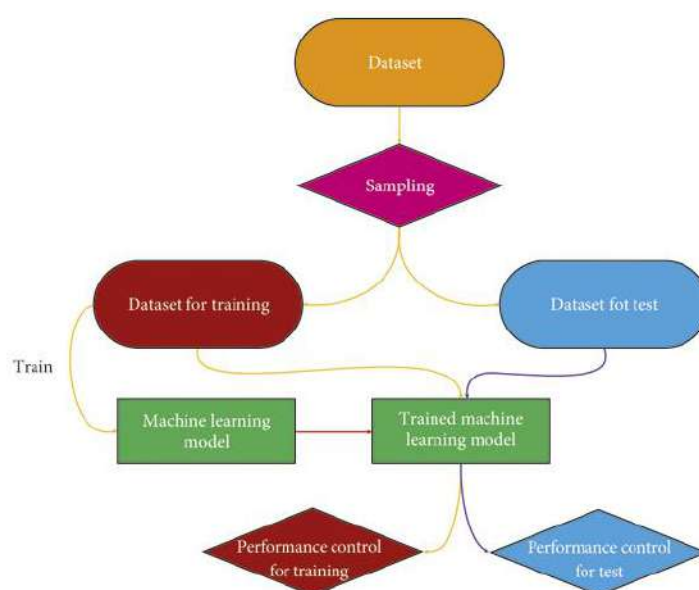
²³ <https://support.bccvl.org.au/support/solutions/articles/6000083212-generalized-boosting-model#header-page1> , Accessed in 18/01/2024

Μοντέλο	Πλεονεκτήματα	Μειονεκτήματα
	αποφάσεων είναι συχνά απλά στην κατανόηση και την ερμηνεία (Pang & Gong, 2009).	- Οι σύνθετες μη γραμμικές αλληλεπιδράσεις μπορεί να μην είναι κατάλληλες για δέντρα αποφάσεων: Τα δέντρα αποφάσεων δεν έχουν σχεδιαστεί για να λειτουργούν ικανοποιητικά για περίπλοκες μη γραμμικές σχέσεις μεταξύ μεταβλητών(Pang & Gong, 2009).
<i>LDA</i>	- Είναι ένας απλός και υπολογιστικά αποδοτικός αλγόριθμος. - Μπορεί να λειτουργήσει καλά ακόμα και όταν ο αριθμός των χαρακτηριστικών είναι πολύ μεγαλύτερος από τον αριθμό των δειγμάτων εκπαίδευσης. - Μπορεί να χειριστεί την πολυσυγγραμμικότητα (συσχέτιση μεταξύ χαρακτηριστικών) στα δεδομένα (Lopez-Bernal et al., 2021).	- Υποθέτει ότι τα δεδομένα έχουν μια κατανομή Gauss, κάτι που μπορεί να μην συμβαίνει πάντα. - Υποθέτει ότι οι πίνακες συνδιακύμανσης των διαφορετικών κλάσεων είναι ίσοι, κάτι που μπορεί να μην ισχύει σε ορισμένα σύνολα δεδομένων. - Υποθέτει ότι τα δεδομένα είναι γραμμικά διαχωρίσιμα, κάτι που μπορεί να μην ισχύει για ορισμένα σύνολα δεδομένων. - Μπορεί να μην έχει καλή απόδοση σε χώρους χαρακτηριστικών υψηλών διαστάσεων (Lopez-Bernal et al., 2021).
<i>Glmlnet</i>	- Είναι εξαιρετικά γρήγορο και μπορεί να εκμεταλλευτεί την αραιότητα στον πίνακα εισόδου x. - Μπορεί να εφαρμοστεί σε μοντέλα γραμμικής, λογιστικής και πολυωνυμικής παλινδρόμησης, poisson και Cox. - Μπορεί επίσης να λειτουργεί με γραμμική παλινδρόμηση πολλαπλών αποκρίσεων, γενικευμένα γραμμικά μοντέλα ²⁴ .	- Δεν υποστηρίζει τη σύνταξη τύπου ως η κύρια περίπτωση χρήσης για τα κανονικοποιημένα μοντέλα, όταν ο πίνακας σχεδίασης X είναι "ευρύς", δηλαδή υπάρχουν περισσότερα χαρακτηριστικά από τις παρατηρήσεις (Tay et al., 2023).
<i>CART</i>	- Τα αποτελέσματα είναι απλοϊκά. - Τα δέντρα ταξινόμησης και παλινδρόμησης είναι μη παραμετρικά και μη γραμμικά. - Τα δέντρα ταξινόμησης και παλινδρόμησης εκτελούν έμμεσα επιλογή χαρακτηριστικών. - Οι ακραίες τιμές δεν έχουν σημαντική επίδραση στο CART. - Απαιτεί ελάχιστη επίβλεψη και παράγει εύκολα κατανοητά μοντέλα (Lewis, 2000).	- Δεν μπορεί να διαχειριστεί δεδομένα, όταν γίνεται υπερφόρτωση του μοντέλου. - Υψηλή Διακύμανση. - Χαμηλά σφάλματα. - Η δομή του δέντρου μπορεί να είναι ασταθής (Lewis, 2000).
<i>Naïve Bayes</i>	- Εύκολο στην εφαρμογή και υπολογιστικά αποδοτικό. - Αποτελεσματικό σε περιπτώσεις με μεγάλο αριθμό χαρακτηριστικών. - Αποδίδει καλά ακόμα και με περιορισμένα δεδομένα εκπαίδευσης (Al-Aidaros et al., 2010).	- Υποθέτει ότι τα χαρακτηριστικά είναι ανεξάρτητα, κάτι που μπορεί να μην ισχύει πάντα για όλα τα δεδομένα. - Μπορεί να επηρεαστεί από άσχετα χαρακτηριστικά. - Μπορεί να εκχωρήσει μηδενική πιθανότητα σε μη ορατά γεγονότα, οδηγώντας σε κακή γενίκευση (Al-Aidaros et al., 2010).
<i>kNN</i>	- Εύκολο στην εφαρμογή καθώς η πολυπλοκότητα του αλγορίθμου δεν είναι τόσο υψηλή. - Σύμφωνα με τη λειτουργία του αλγορίθμου kNN, αποθηκεύει όλα τα δεδομένα κατά την αποθήκευση μνήμης και επομένως κάθε φορά, που προστίθεται ένα νέο παράδειγμα ή σημείο δεδομένων, ο αλγόριθμος προσαρμόζεται σύμφωνα με αυτό το νέο παράδειγμα και έχει τη συμβολή του και στις μελλοντικές προβλέψεις. - Οι μόνοι παράμετροι, που απαιτούνται στην εκπαίδευση ενός αλγορίθμου kNN είναι η τιμή του k και η επιλογή της μέτρησης απόστασης που θα θέλαμε να επιλέξουμε από τη μέτρηση αξιολόγησής μας (Lopez-Bernal et al., 2021).	- Δεν διαθέτει κλίμακα: Θεωρείται ένας αλγόριθμος Lazy. Η κύρια σημασία αυτού του όρου είναι ότι απαιτεί μεγάλη υπολογιστική ισχύ, καθώς και αποθήκευση δεδομένων. Αυτό καθιστά αυτόν τον αλγόριθμο τόσο χρονοβόρο, όσο και εξαντλητικό των πόρων. - Ο αλγόριθμος χρειάζεται χρόνο για να ταξινομήσει σωστά τα σημεία δεδομένων, όταν η διάσταση είναι πολύ υψηλή. - Είναι επιρρεπής σε υπερφόρτωση (Lopez-Bernal et al., 2021).

²⁴ <https://glmnet.stanford.edu/articles/glmnet.html> , Accessed in 18/04/2024

2.2: Δεδομένα Εκπαίδευσης και Δοκιμής (Training and Testing Data)

Ο πιο κρίσιμος παράγοντας, που επηρεάζει την επιτυχία της μηχανικής μάθησης είναι η διαδικασία εκπαίδευσης και δοκιμής. Μια αποτελεσματική διαδικασία εκπαίδευσης βελτιώνει την ποιότητα του ανεπτυγμένου συστήματος. Οι ερευνητές χωρίζουν τα σύνολα δεδομένων σε δύο μέρη για εκπαίδευση και δοκιμή (*training and testing data*). Ωστόσο, η διαδικασία διαχωρισμού γίνεται σύμφωνα με συγκεκριμένους κανόνες (Uçar et al., 2020).



Εικόνα 2: Σχηματική Απεικόνιση του τρόπου με τον οποίο γίνεται ο διαχωρισμός της βάσης δεδομένων σε σετ εκπαίδευσης και δοκιμής (Uçar et al., 2020).

Η επιλογή του ποσοστού της εκπαίδευσης και δοκιμής είναι ο πιο κρίσιμος παράγοντας στο ποσοστό επιτυχίας. Εάν υπάρχει υψηλή συσχέτιση μεταξύ των χαρακτηριστικών, το σετ Εκπαίδευσης-Τεστ διαιρείται σε 50%–50%. Αυτό σημαίνει ότι το 50% όλων των δεδομένων θα χρησιμοποιηθεί για την εκπαίδευση και το 50% για τη δοκιμή. Ωστόσο, εάν υπάρχει φόβος πτώσης της επιτυχίας, ο ρυθμός μπορεί να αυξηθεί. Η αναλογία εκπαίδευσης-δοκιμής, που χρησιμοποιείται στη βιβλιογραφία ποικίλλει ανάλογα με τη δομή των δεδομένων. Λιγότερο από το 50% των δεδομένων εκπαίδευσης δεν προτιμάται γιατί τα αποτελέσματα των δοκιμών θα επηρεαστούν αρνητικά (Uçar et al., 2020).

Στο μοντέλο, που αναπτύχθηκε η βάση δεδομένων χωρίστηκε σε 80% δεδομένα εκπαίδευσης και 20% σε δεδομένα δοκιμής. Ο λόγος, που προτιμήθηκε αυτό το

ζεύγος είναι, διότι στην στατιστική, όσο περισσότερα σημεία δεδομένων χρησιμοποιούνται, τόσο πιο ακριβείς είναι οι εκτιμήσεις που προκύπτουν. Από αυτή την άποψη, μπορεί να φαίνεται ότι ο καλύτερος τρόπος για τον προσδιορισμό των παράμετρων του μοντέλου, είναι να χρησιμοποιηθούν όλα τα διαθέσιμα σημεία δεδομένων. Αυτή είναι πράγματι μια καλή ιδέα, αν είμαστε απολύτως βέβαιοι ότι το μοντέλο μας περιγράφει επαρκώς το αντίστοιχο φαινόμενο (Gholamy et al., 2018).

Στην πράξη, ωστόσο, δεν υπάρχει πάντα αυτή η σιγουριά ότι το κάθε μοντέλο είναι όντως επαρκές. Σε τέτοιες περιπτώσεις, αν χρησιμοποιηθούν απλώς όλα τα διαθέσιμα δεδομένα για να προσδιοριστούν οι παράμετροι του μοντέλου, συχνά δημιουργείται υπερβολική προσαρμογή (*overfitting*) (Gholamy et al., 2018).

Πιο συγκεκριμένα η επιλογή του ζεύγους 80% -20% έγινε, διότι η εμπειρική ανάλυση έχει δείξει ότι τα καλύτερα αποτελέσματα επιτυγχάνονται, εάν διαθέσουμε το 20-30% των αρχικών δεδομένων για δοκιμές και χρησιμοποιηθεί το υπόλοιπο 70-80% για εκπαίδευση. Για αυτήν την διαίρεση, λαμβάνουμε εκτιμήσεις ακρίβειας που είναι *έγκυρες* με την έννοια ότι δεν υπερεκτιμούν την ακρίβεια (δηλαδή δεν υποτιμάται το σφάλμα προσέγγισης) και υπάρχει ακρίβεια μεταξύ των έγκυρων εκτιμήσεων – δηλαδή η υπερεκτίμησή του σφάλματος προσέγγισης να είναι η μικρότερη δυνατή (Gholamy et al., 2018).

Αφού το μοντέλο μηχανικής εκμάθησης εκπαιδευτεί σύμφωνα με τα δεδομένα εκπαίδευσης, ελέγχεται επίσης χρησιμοποιώντας τα ίδια δεδομένα εκπαίδευσης. Ο σκοπός αυτού είναι ο προσδιορισμός του αριθμού των δεδομένων, που εκπαιδεύονται. Οι διαδικασίες αξιολόγησης της απόδοσης πραγματοποιούνται σύμφωνα με συγκεκριμένα κριτήρια. Αυτά τα κριτήρια ποικίλλουν ανάλογα με τη δομή των δεδομένων (Uçar et al., 2020).

Μόλις ολοκληρωθεί η διαδικασία εκπαίδευσης, το μοντέλο μηχανικής εκμάθησης δοκιμάζεται με δεδομένα δοκιμών. Έτσι, ο ερευνητής αξιολογεί την απόδοση του μοντέλου σύμφωνα με τα κριτήρια αξιολόγησης της απόδοσης (Uçar et al., 2020).

Κεφάλαιο 3: QSAR

Παραδοσιακά, ο έλεγχος της τοξικότητας των διαφόρων ουσιών, γινόταν αρχικά με τις *in vitro* μελέτες και έπειτα με τις *in vivo* μελέτες. Τα τελευταία χρόνια όμως με την αλματώδη ανάπτυξη της τεχνολογίας, καθώς και σε συνδυασμό με τις θετικές επιστήμες, έχει προκύψει ένα νέο είδος μελετών, που ονομάζονται *in silico* μέθοδοι. Παρακάτω αναλύονται συντόμως τα τρία είδη (Κωτταρά, 2020).

3.1: In Vitro

Λατινικός όρος, που αποδίδεται στα ελληνικά «στο γυαλί», υπονοώντας τον δοκιμαστικό σωλήνα. Αφορά τεχνικές και μεθόδους, που λαμβάνουν χώρα χωρίς την εμπλοκή των ζωντανών οργανισμών και περιλαμβάνουν συνήθως την καλλιέργεια κυττάρων, ιστών ή οργάνων. Λόγω της φύσης των τεχνικών, το πείραμα μπορεί να πραγματοποιηθεί σε αυστηρά ελεγχόμενες συνθήκες. Τα πλεονεκτήματα είναι ότι δίνεται η δυνατότητα να μελετηθεί ενδελεχώς το υπό εξέταση φαινόμενο, το πείραμα μπορεί να επαναληφθεί μέχρι να επιτευχθεί το επιθυμητό αποτέλεσμα, το χαμηλό κόστος και ο άριστος έλεγχος των συνθηκών της υπό μελέτη διαδικασίας (Κωτταρά, 2020).

Η μη χρήση των ζώων, από την μία πλευρά μπορεί να θεωρηθεί ότι είναι πλεονέκτημα, από την άλλη είναι και μειονέκτημα, λόγω της απουσίας ενός οργανισμού, υπάρχει έλλειψη διασυστημικών και ενδοσυστημικών πληροφοριών, που θα οδηγούσε σε μία πιο ολοκληρωμένη απόφαση (Κωτταρά, 2020).

3.2: In Vivo

Λατινικός όρος, που στα ελληνικά μεταφράζεται «εν ζωή», παραπέμποντας στις μελέτες και δοκιμές που πραγματοποιούνται σε κύτταρα, ιστούς ή όργανα ζωντανών οργανισμών. Τα είδη, που χρησιμοποιούνται είναι φυλογενετικά κατώτεροι οργανισμοί όπως έντομα, τρωκτικά ή αμφίβια. Παρόλο, όμως, που στις τεχνικές αυτές εμπλέκεται ένας ζωντανός οργανισμός και θα ήταν αναμενόμενο τα αποτελέσματα να συμφωνούν με τα πραγματικά, στην πραγματικότητα υπάρχει αρκετά μεγάλη απόσταση από το «σύστημα ενδιαφέροντος», που είναι ο άνθρωπος, διότι τα συστήματα του ανθρώπινου οργανισμού λειτουργούν διαφορετικά σε σχέση

με τα συστήματα άλλων οργανισμών, ακόμα κάποια όργανα, που μπορεί να υπάρχουν στα ζώα, δεν υπάρχουν στον ανθρώπινο οργανισμό. Η χρήση όμως ζωντανών οργανισμών αποτελεί το αρνητικό των μεθόδων αυτών, γιατί απαιτεί χρόνο για την ανάπτυξη τους και κόστος, με αποτέλεσμα να την καθιστά μία αρκετά δαπανηρή και χρονοβόρα διαδικασία. Το σημαντικότερο όμως είναι ότι αντιτίθεται στους κανόνες της βιοηθικής (Κωτταρά, 2020).

Η Ευρωπαϊκή Ένωση προκειμένου να περιορίσει το προηγούμενο πρόβλημα, θέσπισε την Οδηγία 2010/63/ΕΕ, με βάση την οποία έχουν δημιουργηθεί τα θεμέλια για την εφαρμογή των 3Rs. Πιο συγκεκριμένα, τα 3Rs σημαίνουν (Nigsch et al., 2009):

- *Replacement* → *Αντικατάσταση*: Μέθοδοι, που αποφεύγουν ή αντικαθιστούν τη χρήση ζώων στην έρευνα (Nigsch et al., 2009).
- *Reduction* → *Μείωση*: Χρήση μεθόδων, που επιτρέπουν στους ερευνητές να αποκτήσουν συγκρίσιμα επίπεδα πληροφοριών με λιγότερα ζώα ή να λάβουν πληροφορίες, εξετάζοντας ταυτόχρονα διάφορες μεταβλητές με τον ίδιο αριθμό ζώων (Nigsch et al., 2009).
- *Refinement* → *Βελτιστοποίηση*: Χρήση μεθόδων, που ανακουφίζουν ή ελαχιστοποιούν τον πιθανό πόνο, ταλαιπωρία ή αγωνία και στοχεύουν στην ενίσχυση της καλής διαβίωσης των ζώων (Nigsch et al., 2009).



Εικόνα 3: Τα 3 R: Replacement(Αντικατάσταση), Reduction (Μείωση), Refinement (Βελτιστοποίηση)²⁵

²⁵ https://nibsc.org/about_us/our_use_of_animals/3rs.aspx, Accessed in 20/01/2024

Αυτές οι αρχές, πρώτη φορά ειπώθηκαν από τους R. L. Burch και W. M. S. Russell στο βιβλίο τους «Οι Αρχές της ανθρώπινης πειραματικής τεχνικής» (*The Principles of Humane Experimental Technique*) (1959) και στην συνέχεια συμπεριλήφθηκαν στην Οδηγία (Nigsch et al., 2009).

Σύμφωνα με αυτή, η αρχή των 3Rs πρέπει να λαμβάνεται υπόψη κατά την επιλογή προσεγγίσεων και δοκιμών, που θα χρησιμοποιηθούν στις κανονιστικές ρυθμίσεις για τις δοκιμές ανθρώπινων και κτηνιατρικών φαρμακευτικών προϊόντων, αλλά και για την εκτίμηση κινδύνου (Nigsch et al., 2009).

Λαμβάνοντας υπόψη τις παραπάνω ανάγκες, αναπτύχθηκαν εναλλακτικές μέθοδοι (*New Approach Methodologies, NAMs*). Το 2019 τα NAMs ορίζονται από τον Ευρωπαϊκό Οργανισμό Χημικών (*European Chemical Agency, ECHA*) ως ένα ευρύ πλαίσιο μεθόδων, που συμπεριλαμβάνει νέες πρακτικές και χρησιμεύουν ως εναλλακτικές λύσεις για την αντικατάσταση, μείωση ή βελτίωση των δοκιμών σε ζώα. Μέχρι σήμερα, έχουν επικυρωθεί πολλές μέθοδοι, που υπηρετούν την έννοια των 3Rs και αρκετές έχουν συμπεριληφθεί στις λίστες με μεθόδων από ρυθμιστικούς οργανισμούς (Nigsch et al., 2009).

3.3: In silico δοκιμές

Ο όρος *in silico* έκανε την παρθενική τους εμφάνιση το 1989 στο συμπόσιο «Cellular Automata: Theory and Applications» στο Λος Άλαμος του Νέου Μεξικού. Εκεί ο Pedro Miramontes, καθηγητής Μαθηματικών στο Εθνικό Ανεξάρτητο Πανεπιστήμιο του Νέου Μεξικού παρουσίασε την εργασία του με τίτλο: «DNA και RNA: Φυσικοχημικοί περιορισμοί, κυτταρικά αυτόματα και μοριακή εξέλιξη» και χρησιμοποιήθηκε ο όρος *in silico*, προκειμένου να περιγραφούν τα πειράματα, που υλοποιήθηκαν με την χρήση υπολογιστή ή μέσω προσομοίωσης σε αυτόν. Οι τεχνικές *in silico* περιλαμβάνουν αφενός μεθόδους, που μελετούν την δραστικότητα των μορίων σε συνάρτηση της δομής τους και αφετέρου με μοντέλα προσομοίωσης δράσεων, παρεμβάσεων και εξέλιξης.

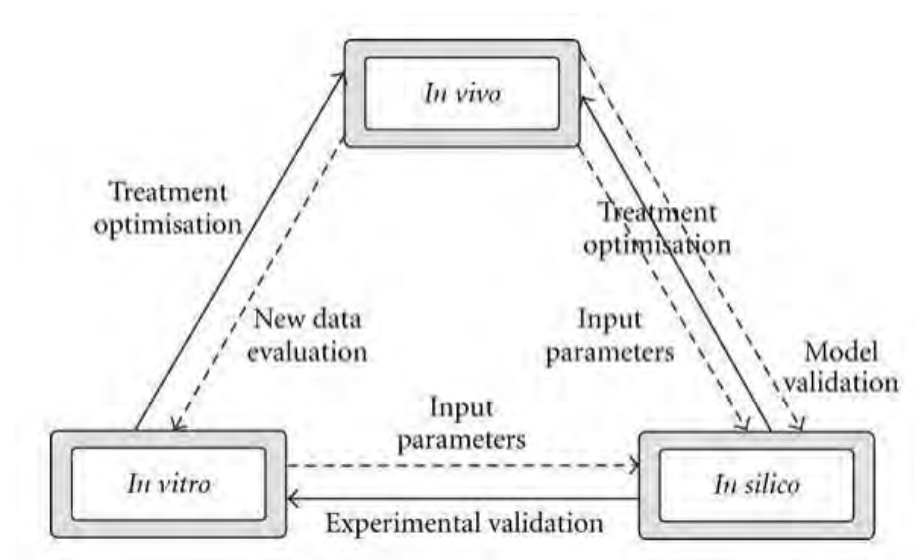
Η χρήση μαθηματικών μοντέλων προσομοίωσης στον υπολογιστή εφαρμόζεται από διάφορους τομείς της επιστήμης, με πρωταγωνιστές την ιατρική και την φαρμακοβιομηχανία για τον σχεδιασμό φαρμάκων, την ανάπτυξη νέων διαγνωστικών μεθόδων και τέλος για την αντιμετώπιση ασθενειών. Τα προηγούμενα μπορούν να

επιτευχθούν χάρη στα πλεονεκτήματα, που φέρουν αυτοί οι μέθοδοι (Κωτταρά, 2020). Αυτά είναι:

- Εύκολη αλλαγή των παραμέτρων κατά την είσοδο των τιμών, με αποτέλεσμα την εξαγωγή γρήγορων νέων αποτελεσμάτων (Κωτταρά, 2020).
- Γίνεται διαμερισματοποίηση των διαφόρων οργάνων και έτσι οι διάφοροι μηχανισμοί μπορούν να μελετηθούν ξεχωριστά, προσδιορίζοντας την συνεισφορά τους σε συγκεκριμένες λειτουργίες (Κωτταρά, 2020).
- Η χρήση των υπολογιστικών συστημάτων δίνει την δυνατότητα της εξαίρεσης ακραίων τιμών από διαφορετικές παραμέτρους, που να αποτελούν δυνητικούς περιοριστικούς παράγοντες για τη λήψη έγκυρων αποτελεσμάτων (Κωτταρά, 2020).
- Μπορούν να ληφθούν απαντήσεις σε «what-if?» ερωτήματα, κάτι που δεν είναι εφικτό με τους παραδοσιακούς τρόπους (Κωτταρά, 2020).

Λαμβάνοντας υπόψη τα προαναφερθέντα, μπορεί εύκολα να διαπιστωθεί ότι η δυναμική των *in silico* μεθόδων είναι αρκετά μεγάλη και σε συνδυασμό με τις παραδοσιακές τεχνικές *in vivo* και *in vitro* μπορεί να δώσει απίστευτα αποτελέσματα. Η «αλυσίδα *in vivo* - *in vitro* - *in silico*» (*in silico – in vitro - in vivo chain*) τον τελευταίο καιρό, βρίσκει γόνιμο έδαφος στην επιστημονική κοινότητα διαφόρων ειδικοτήτων, λόγω της ραγδαίας προόδου, που διέγραψε τα τελευταία χρόνια.

Τα μοντέλα *in silico* τροφοδοτούν δεδομένα για την διεξαγωγή *in vitro* και *in vivo* πειραμάτων (συνεχές βέλος στην **Εικόνα 4**) και αντίστροφα οι *in vitro* και *in vivo* τεχνικές ανατροφοδοτούν τα *in silico* μοντέλα για την αύξηση των εισαγόμενων δεδομένων και ως αποτέλεσμα την δημιουργία μοντέλων με μεγάλη αξιοπιστία και ακρίβεια. Η διαδικασία, που αναφέρθηκε περιγράφεται στον παρακάτω εικόνα (Κωτταρά, 2020).



Εικόνα 4: In Vitro- In Vivo- In Silico Αλυσίδα, (Κωτταρά, 2020)

Πίνακας 3: Συγκριτικός Πίνακας των μεθόδων in vitro, in vivo και in silico με βάση τέσσερις κατηγορίες

Κατηγορία	In Vitro (Saeidnia et al., 2015)	In Vivo (Saeidnia et al., 2015)	In Silico(Shaker et al., 2021)
Κόστος και Προετοιμασία	Αυτό το μοντέλο χρησιμοποιεί κύτταρα, που προέρχονται από ζώα ή κυτταρικές σειρές. Αυτά τα κύτταρα έχουν μεγάλη διάρκεια ζωής. Ως εκ τούτου, αυτά τα μοντέλα συστημάτων είναι σχετικά φθηνά, απλά στην αγορά και αποτελεσματικά	- Ακριβό γιατί περιλαμβάνει πειραματόζωα ή ανθρώπους εθελοντές - Ηθικά διλήμματα κατά την χρήση ανθρώπων και ζώων	- Μεγάλο Κόστος - Μεγάλη Προετοιμασία τόσο για την συλλογή αξιόπιστων δεδομένων, όσο και για την δημιουργία νέων τεχνολογικών μεθόδων
Ώρα	Τα αποτελέσματα είναι γρήγορα και άμεσα	Χρειάζεται περισσότερος χρόνος για την εξαγωγή αποτελεσμάτων	Τα αποτελέσματα είναι γρήγορα και άμεσα
Αποτελέσματα	Τα ευρήματα πρέπει να επιβεβαιωθούν σε ζωντανούς εθελοντές και με μεθόδους in vivo.	Πιο συγκεκριμένα και αναλυτικά	Η ευαισθησία των αποτελεσμάτων περιορίζεται σε εγγενείς βιοχημικές ιδιότητες.
Κανονισμοί Δοκιμών	Οι κυτταρικές καλλιέργειες μελετώνται στο εργαστήριο. Η ρύθμιση κανονισμών είναι πιο χαλαρή από αυτή in vivo	Αυστηροί κανονισμοί, γιατί περιλαμβάνει ζωντανούς οργανισμούς	Δεν υπάρχει κανένα τεχνικό πρότυπο στο ρυθμιστικό σύστημα της ΕΕ, ενώ η Αμερικανική Εταιρεία Μηχανολόγων Μηχανικών παρέχει το σύστημα Επαλήθευσης & Επικύρωσης 40 (ASME VV-40).
Εφαρμογές	Ανάπτυξη νέων θεραπειών και ερευνητικών πρωτοκόλλων	Ανάπτυξη νέων θεραπειών και ερευνητικών πρωτοκόλλων	Ανάπτυξη νέων θεραπειών και ερευνητικών πρωτοκόλλων

3.4: Τι είναι QSAR;

Μια κατηγορία των *in silico* μεθόδων με ευρεία χρήση είναι τα μοντέλα, που συσχετίζουν τη δραστικότητα σε συνάρτηση της δομής (Structure Activity Relationships, SAR) και τα μοντέλα, που συσχετίζουν ότι και τα SAR προσθέτοντας και ποσοτική πληροφορία στο τελικό αποτέλεσμα (Quantitative Structure Activity Relationships, QSAR). Σύμφωνα με τον Ευρωπαϊκό Οργανισμό Χημικών Προϊόντων (ECHA) πρόκειται για υπολογιστικά μοντέλα πρόβλεψης φυσικοχημικών και βιολογικών ιδιοτήτων των ενώσεων, λαμβάνοντας υπόψη την χημική δομή τους. Πατέρας του QSAR είναι ο Crum Brown και βασίζεται στην ιδέα ότι υπάρχει μια σχέση ανάμεσα στην χημική δομή και στην δραστικότητα της (Κωτταρά, 2020).

Η δημιουργία ενός QSAR μοντέλου περιλαμβάνει τη ανάπτυξη ενός μαθηματικού μοντέλου, που σχετίζει τη χημική δομή ενός συνόλου δεδομένων των μορίων με μία συγκεκριμένη φυσικοχημική, χημική ή βιολογική ιδιότητα. Απαραίτητη προϋπόθεση, για την ανάπτυξη των μοντέλων είναι ο χαρακτηρισμός των μορίων, που χρησιμοποιούν αριθμητικούς παραμέτρους και η εφαρμογή των διαφόρων στατιστικών και εργαλείων για τη δημιουργία των αλγορίθμων, που συσχετίζουν αυτές τις παραμέτρους με τη μελετώμενη ιδιότητα (Κωτταρά, 2020).

Αφότου, το μοντέλο QSAR δημιουργηθεί και επικυρωθεί, μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως εργαλείο πρόβλεψης για την ιδιότητα/δραστικότητα νέων μορίων με γνωστή χημική δομή (Κωτταρά, 2020).

3.4.1: Ιστορική Αναδρομή

Η υπόθεση, που γίνεται για την ανάπτυξη των QSAR μοντέλων είναι ότι η δομή ενός μορίου σχετίζεται με τα χαρακτηριστικά εκείνα, που είναι υπεύθυνα για τις φυσικές, χημικές ή βιολογικές ιδιότητες. Ο τρόπος με τον οποίο λειτουργούν τα μοντέλα είναι, ότι η πρόβλεψη για τον ο προσδιορισμός της βιολογικής συμπεριφοράς, ιδιότητας ή δραστικότητας μιας νέας ουσίας γίνεται με βάση τη μοριακή δομή μιας άλλης, παρόμοιας, ουσίας, της οποίας η αντίστοιχη ιδιότητα είναι **ήδη** γνωστή (Κωτταρά, 2020).

Η ιδέα για την ανάπτυξη του QSAR δεν είναι καινούρια. Η πρώτη αναφορά έγινε τον 19^ο αιώνα, πιο συγκεκριμένα το 1863, από τον Cros A.F.A, ο οποίος κατά την

εκπόνηση της διατριβής του, παρατήρησε αντίστροφη σχέση ανάμεσα στην τοξικότητα των πρωτοταγών αλειφατικών αλκοολών και την διαλυτότητά τους στο νερό. Η παρατήρηση αυτή επιβεβαιώθηκε από το θεμελιώδες αξίωμα των σχέσεων δομής – τοξικότητας, σύμφωνα με το οποίο η τοξικότητα μίας ουσίας προκύπτει από τις ιδιότητές της, ως απόρροια της χημικής της δομής (Κωτταρά, 2020).

Έπειτα από λίγα χρόνια, το 1868, οι Crum-Brown και Fraser κατά τη διεξαγωγής της έρευνάς τους σε διάφορα αλκαλοειδή, διαπίστωσαν ότι υπάρχει συσχέτιση ανάμεσα στην βιολογική δράση των χημικών ενώσεων και της χημικής δομής τους, διατυπώνοντας την παραπάνω πρώτη με μαθηματικό τρόπο (Κωτταρά, 2020):

$$\text{Βιολογική Δράση} = f(\text{Δομή}) \quad (1)$$

Στο ίδιο χρονικό διάστημα, το 1869, ο Ρώσος χημικός Dimitri Mendeleev, παρουσίασε μια πρόδρομη μορφή του γνωστού σήμερα Περιοδικού Πίνακα Χημικών Στοιχείων, ο οποίος τότε αποτελούνταν από μόλις εξήντα τρία (63) γνωστά στοιχεία. Το αξιοσημείωτο είναι ότι ο Mendeleev άφησε κενές θέσεις για τα στοιχεία, που δεν είχαν ανακαλυφθεί ακόμη. Ωστόσο προέβλεψε τις φυσικοχημικές ιδιότητες τριών χημικών στοιχείων, τα οποία ανακαλύφθηκαν λίγα χρόνια αργότερα. Με χρονολογική σειρά, το 1875 ανακαλύφθηκε πρώτα το Γάλλιο (Ga) από τον Γάλλο χημικό Lecoq de Boisbaudran, έπειτα το 1879 το Σκάνδιο (Sc) από τον Lars Fredrik Nilson και τέλος το Γερμάνιο (Ge) το 1886 από τον Clemens Winkler. Αυτή η πρωτοποριακή και διορατική ανακάλυψη του Mendeleev, ο οποίος δεν προέβλεψε απλά την ανακάλυψη των τριών αυτών χημικών στοιχείων, αλλά περιέγραψε και κάποιες από τις ιδιότητές τους, λαμβάνοντας υπόψη την θέση τους στον Περιοδικό Πίνακα, τον καθιστά ως έναν από τους πρώτους επιστήμονες, που συνέδεσαν την δομή με τη δραστικότητα των ουσιών (Κωτταρά, 2020).

Η πορεία για το σκεπτικό πίσω από το QSAR συνεχίζεται το 1890, με δύο επιστήμονες τον Hans Horst Meyer και τον Charles Ernest Overton, οι οποίοι παρόλο που δούλευαν ανεξάρτητα, συσχέτισαν την λιποφιλικότητα των οργανικών ενώσεων με την τοξικότητα τους. Η σκυτάλη δίνεται στον Richet, όπου τρία χρόνια αργότερα (1893), παρατήρησε ότι η κυτταροτοξικότητα μιας ομάδας απλών οργανικών ενώσεων, έχει αντιστρόφως ανάλογη σχέση με την διαλυτότητά τους στο νερό. Λίγο αργότερα, η σκυτάλη επιστρέφει στους Meyer (1899) και Overton (1901), που συνέχισαν το έργο, που είχαν ξεκινήσει και συνέδεσαν την λιποφιλικότητα

(εκφρασμένη με το συντελεστή κατανομής στο σύστημα ελαίου-νερού²⁶) με τη γενική αναισθητική δράση (Κωτταρά, 2020).

Αρκετά χρόνια αργότερα, το 1939 ο Ferguson, διατύπωσε την άποψη πως η διαλυτότητα ουσιών στο νερό ή την τάση ατμών, όταν οι ουσίες είναι πτητικές, μπορεί να προβλέψει την τάση ατμών των τοξικών συγκεντρώσεων (CT) μιας σειράς ενώσεων σύμφωνα με την παρακάτω εξίσωση (Κωτταρά, 2020):

$$C_T = kA^{\frac{1}{n}} \quad (2)$$

Όπου:

$C_T \rightarrow$ η τοξική συγκέντρωση

$k, n \rightarrow$ σταθερές με $n > 1$

$A \rightarrow$ η διαλυτότητα ή η τάση ατμών

Το 1948, ο Ferguson συνεργάστηκε με τον Pirie και παρουσίασαν μια γενικευμένη μορφή της παραπάνω εξίσωσης, όπου το k θα μπορούσε να αντικατασταθεί με κάποια διαφορετική φυσικοχημική ιδιότητα, όπως π.χ. ο συντελεστής κατανομής. Έτσι τέθηκαν τα θεμέλια, που θα χρησιμοποιούσαν αυτήν την γενικευμένη μορφή για να μετασχηματιστεί λογαριθμικά στη μορφή, που έχουν μέχρι και σήμερα τα μοντέλα QSAR. Ο μετασχηματισμός αυτός επιτεύχθηκε από τον Purcell και τους συνεργάτες τους το 1973, που δημιούργησαν την παρακάτω εξίσωση (Κωτταρά, 2020):

$$\log\left(\frac{1}{C}\right) = k' + n' \log A \quad (3)$$

Παράλληλα με τον Ferguson, το 1939 ο Louis Hammett έθεσε θεμελιώδεις αρχές για τις σύγχρονες μεθόδους QSAR, εισάγοντας τις ηλεκτρονιακές σταθερές. Υποστήριξε ότι αυτές αντικατοπτρίζουν την επίδραση, που ασκούν οι υποκαταστάτες των οργανικών ενώσεων στο ρυθμό πραγματοποίησης μιας χημικής αντίδρασης. Σύμφωνα με την θεωρία του Hammett, η επίδραση παραμένει σταθερή τόσο για τον κάθε υποκαταστάτη, όσο και για την κάθε αντίδραση. Στην δεκαετία του '50, η εξίσωση του Hammett υπέστη τροποποίηση, μετά από πρόταση του Taft, όπου

²⁶ **Συντελεστής Κατανομής (K_{ow}):** Δίνεται από τον τύπο $K_{ow} = \log\left(\frac{C_o}{C_w}\right)$, όπου C_o και C_w , η συγκέντρωση της ουσίας σε οργανική διαλύτη και στο νερό. Το έλαιο προσομοιάζει το λίπος των οργανισμών **Leo, A., Hansch, C., & Elkins, D. (1971). Partition coefficients and their uses. Chemical reviews, 71(6), 525-616.**

εισήχθη η στερική σταθερά υποκαταστάτη, E_s , υπολογίζοντας και τα στερικά φαινόμενα (φαινόμενα στεροχημείας), που προκαλούνται από τους υποκαταστάτες και επηρεάζουν τον ρυθμό μιας χημικής αντίδρασης (Κωτταρά, 2020).

Η προσέγγιση των Hammett και Taft αποτέλεσε το εναρκτήριο λάκτισμα για τους ερευνητές, με αποτέλεσμα το 1964, να δημιουργηθεί το πρώτο μοντέλο Ποσοτικών Σχέσεων Δομής- Δράσης από τους Hansch και Fujita. Οι τελευταίοι συνειδητοποίησαν ότι με την εξίσωση Hammett – Taft, θα μπορούσε να περιγραφθεί εκτός των άλλων και η βιολογική δράση. Διαμόρφωσαν λοιπόν την εξίσωση με τέτοιο τρόπο, ώστε η βιολογική δράση να είναι συνάρτηση τριών ιδιοτήτων: των στερικών ιδιοτήτων, των ηλεκτρονιακών ιδιοτήτων και της λιποφιλικότητας (Κωτταρά, 2020).

Βιολογική Δράση = $f(\text{λιποφιλία} + \text{ηλεκτρονιακές ιδιότητες} + \text{στερικές ιδιότητες})$ (4)

Και πιο συγκεκριμένα: $\text{Log} \frac{1}{C_{50}} = -(\log P)^2 + b \log P + \rho_s + \delta E_s + c$ (5)

Όπου:

Log 1/C₅₀ → Η έκφραση του λογαρίθμου της βιολογικής απόκρισης

logP : σταθερά μερισμού ως μέτρο της λιποφιλικότητας

σ → η ηλεκτρονιακή σταθερά του Hammett

E_s → η στερική σταθερά του Taft

a, b, ρ, δ → συντελεστές, που προκύπτουν από πολλαπλή γραμμική ανάλυση παλινδρόμησης

c → ο σταθερός όρος, που προκύπτει από πολλαπλή γραμμική ανάλυση παλινδρόμησης

Εκείνο το διάστημα, το 1964, συνεχίστηκε η προσπάθεια ποσοτικής περιγραφής των σχέσεων δομής- δραστηριότητας από τους Free και Wilson. Οι συγκεκριμένοι προσέγγισαν το φαινόμενο διαφορετικά, αντί να συνδέσουν τις φυσικοχημικές ιδιότητες με τις τιμές της βιολογικής δραστηριότητας, όπως ο Hansch, συνέδεσαν τα δομικά χαρακτηριστικά με τις βιολογικές ιδιότητες σύμφωνα με την παρακάτω εξίσωση:

$$\frac{\log 1}{C} = \mu_o + \sum \alpha_i k x_i k \quad (6)$$

Όπου:

$\alpha \rightarrow$ η συνεισφορά στη βιολογική δράση του υποκαταστάτη x στη θέση i στο μόριο k
 $\mu_o \rightarrow$ η μέση δραστηριότητα

Παρόλο, που με την πρώτη ματιά, οι δύο προσεγγίσεις δεν εμφάνιζαν κοινά χαρακτηριστικά, ωστόσο είναι στενά συνδεδεμένες μεταξύ τους, τόσο θεωρητικά όσο και πρακτικά, αφού ο συνδυασμός των δύο μοντέλων με την χρήση παραμέτρων Free – Wilson, έχει αποδείξει μέσω των αρκετών επιτυχιών, που είχε σημειώσει στο ιστορικό του, ότι το μοντέλο, που προκύπτει, αποτελεί ένα από τα ισχυρότερα εργαλεία της μεθόδου QSAR (Κωτταρά, 2020).

Η τεχνική των QSAR παρουσίασε ραγδαία ανάπτυξη τις επόμενες δεκαετίες του 1970 και το 1980, όπου αναπτύχθηκαν μοντέλα Ποσοτικών Σχέσεων Δομής - Δράσης δύο διαστάσεων (2D - QSAR, Two Dimensional Quantitative Structure - Activity Relationship). Ορόσημο έτος αποτελεί το 1988 με τον R. Cramer να εισάγει για πρώτη φορά τις Ποσοτικές Σχέσεις δομής - δράσης τριών διαστάσεων (3D - QSAR, Three Dimensional Quantitative Structure - Activity Relationship). Μετά την δημιουργία των γερών θεμελίων σε συνδυασμό με την βοήθεια της τεχνολογικής εξέλιξης, ήταν αναμενόμενο οι τεχνικές QSAR να χρησιμοποιηθούν για την διεξαγωγή επιστημονικών ερευνών και μελετών. Η χρήση τους δεν περιορίζεται σε κάποια συγκεκριμένη επιστήμη, όμως χρησιμοποιούνται κατά κόρον για τον σχεδιασμό φαρμάκων (Κωτταρά, 2020).

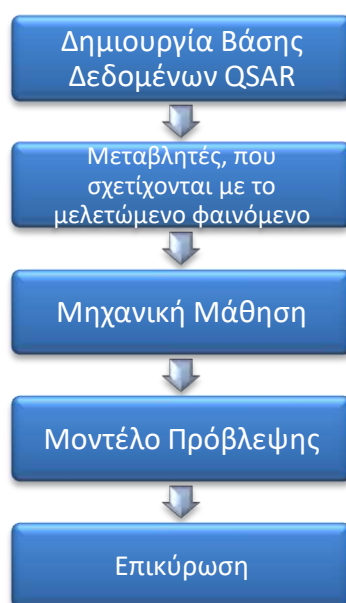
3.5: Δημιουργία ενός μοντέλου QSAR

Τα βήματα, που ακολουθούνται για την δημιουργία ενός μοντέλου QSAR είναι:

1. *Εισαγωγή των προς μελέτη ενώσεων*: Συνίσταται η επιλογή δεδομένων, από αξιόπιστες πηγές, με καλά κατανεμημένες τιμές βιολογικής δράσης ως προς την μελετώμενη ιδιότητα και με επαναληψιμότητα (Κωτταρά, 2020).
2. *Επιλογή των παραμέτρων*: Επιλογή των παραμέτρων, που έχουν καλύτερη εφαρμογή στις υπό εξέταση ενώσεις με σκοπό την ανάπτυξη ενός αξιόπιστου μοντέλου (Κωτταρά, 2020).
3. *Επιλογή του μοντέλου Μηχανικής Μάθησης*: Επιλογή της κατάλληλης μεθόδου για την μοντελοποίηση της ποσοτικής σχέσης δομής-δραστηριότητας. Η επιλογή

κάθε φορά ποικίλει και εξαρτάται από τα εισαχθέντα δεδομένα, διότι οι δυνατότητες του κάθε αλγορίθμου είναι διαφορετικές, όπως και η απόκριση και στις διαφορετικές βάσεις δεδομένων. Σε παραπάνω ενότητα αναλύθηκαν ενδελεχώς τα δέκα μοντέλα μηχανικής μάθησης και σε επόμενη παρουσιάζεται ποιο είναι αυτό εν τέλει, που θα χρησιμοποιηθεί στο δικό μας μοντέλο QSAR (Κωτταρά, 2020).

4. *Έλεγχος αξιοπιστίας και ερμηνεία του μοντέλου*: Το τελευταίο και πιο σημαντικό βήμα είναι η εξασφάλιση ότι οι προβλέψεις του μοντέλου είναι αξιόπιστες και ακριβείς (Κωτταρά, 2020). Για να επιτευχθεί αυτό, σημαντικό βήμα καθίσταται η δημιουργία ενός σωστού Applicability Domain, το οποίο είναι το Πεδίο Ορισμού του Αλγορίθμου. Αυτό μπορεί να διευρυνθεί ανάλογα με τα δεδομένα, που εισαχθούν στη βάση δεδομένων. Όσο περισσότερα είναι τα δεδομένα, τόσο πιο στοχευόμενο θα είναι και το αποτέλεσμα, άρα θα είναι πιο έγκυρο. Τα δεδομένα εισάγονται από ήδη υπάρχουσες, επικυρωμένες δημοσιεύσεις, που έχουν γίνει παλιότερα και ανανεώνονται από τις πρόσφατες. Η επιτυχία του μοντέλου σχετίζεται και την ποιότητα των δεδομένων (*weight of evidence*), διότι όσο πιο αξιόπιστη είναι μια πηγή, τόσο πιο έγκυρα θα είναι τα δεδομένα, που προκύπτουν από την μελέτη τους, άρα πιο ρεαλιστική θα είναι η πρόβλεψη (Nigsch et al., 2009).



Διάγραμμα 4: Σχηματική Αναπαράσταση των βημάτων για την ανάπτυξη ενός μοντέλου QSAR(Κωτταρά, 2020)

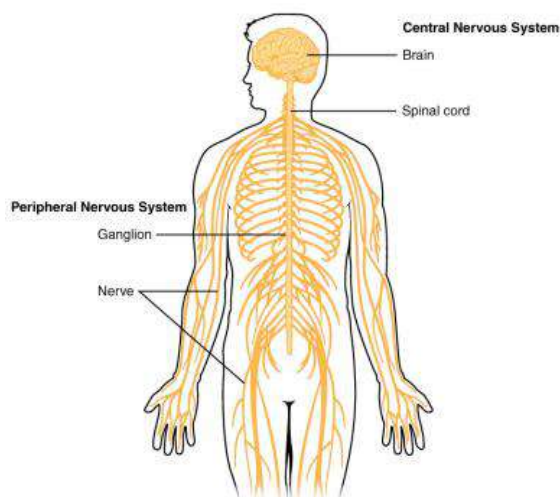
3.6: Μεταβλητές απόκρισης (Endpoints)

Ένα κρίσιμο βήμα για της αρχής της δημιουργίας ενός μοντέλου QSAR είναι η επιλογή των ουσιών και ο καθορισμός της μεταβλητής απόκρισης (endpoint). Τα βιολογικά δεδομένα, τα οποία επιλέγονται θα πρέπει να είναι τέτοια, έτσι ώστε να πληρούνται κάποιες προϋποθέσεις. Αρχικά, θα πρέπει όλες οι ουσίες να έχουν παρόμοιο τρόπο δράσης. Η βιολογική τους δράση συνίσταται να είναι εκφρασμένη σε αριθμητικά δεδομένα, όταν πρόκειται να χρησιμοποιηθούν σε πρόβλημα regression (παλινδρόμησης) ή αν χρησιμοποιηθούν σε προβλήματα classification (ταξινόμησης), θα πρέπει να υπάρχουν μη αριθμητικά δεδομένα, που όμως τις διαφοροποιούν. Επιπροσθέτως, η βιολογική δράση τους θα πρέπει να είναι κατανεμημένη με τέτοιο τρόπο, ώστε να υπάρχουν διαθέσιμα δεδομένα για όλο το εύρος της. Τα δεδομένα αυτά απορρέουν από πειράματα, τα οποία έχουν διεξαχθεί και είναι αξιόπιστα, δηλαδή θα πρέπει να παρέχονται πληροφορίες για το επίπεδο διεξαγωγής τους (για παράδειγμα σε μοριακό επίπεδο, σε κυτταρικό επίπεδο, σε όργανο, σύστημα ή οργανισμό) και αφετέρου αν υπάρχει επαναληψιμότητα ή όχι (Κωτταρά, 2020).

Κεφάλαιο 4: Νευρικό Σύστημα

Το νευρικό σύστημα απαρτίζεται από δύο μέρη:

- Το **κεντρικό νευρικό σύστημα (ΚΝΣ)** αποτελείται από τον *εγκέφαλο* και το *νωτιαίο μυελό*. Τα πολύτιμα αυτά όργανα προστατεύονται από το κρανίο και τον σπονδυλικό σωλήνα αντίστοιχα. Αποτελεί το «Κέντρο Επεξεργασίας» όλου του νευρικού συστήματος, διότι ελέγχει όλες τις σωματικές λειτουργίες, αλλά και τις νοητικές, όπως τις σκέψεις, τα συναισθήματα, τις αναμνήσεις και τις συμπεριφορές (Gomez-Molina).
- Το **περιφερικό νευρικό σύστημα (ΠΝΣ)** αποτελείται από δίκτυο *νευρώνων*. Αυτοί μεταφέρουν τα νευρικά σήματα από τα διάφορα όργανα, τα χέρια, τα πόδια και τον κορμό του σώματος στο ΚΝΣ (προσαγωγός νευρικής οδού), αλλά και το αντίστροφο, δηλαδή από τα όργανα του ΚΝΣ στο υπόλοιπο σώμα (απαγωγός νευρικής οδού). Το περιφερικό νευρικό σας σύστημα χωρίζεται και αυτό σε δύο μέρη (Gomez-Molina):
 - **Αυτόνομο νευρικό σύστημα (ΑΝΣ)**: Σε αυτό επιτυγχάνεται ο έλεγχος όλων των εσωτερικών διεργασιών του σώματός, όπως η αρτηριακή πίεση, η αναπνοή, η πέψη κλπ (Gomez-Molina).
 - **Σωματικό νευρικό σύστημα (ΣΝΣ)**: Αυτό είναι υπεύθυνο για τις συσπάσεις των μυών, καθώς και για την σηματοδότηση ερεθισμάτων από τα αυτιά, τα μάτια, το στόμα και το δέρμα στο ΚΝΣ (Gomez-Molina).



Εικόνα 5: Τα μέρη του Νευρικού Συστήματος(Gomez-Molina).

4.1: Κύτταρα του Νευρικού Συστήματος

Το κύτταρο του νευρικού συστήματος είναι οι **νευρώνες** και τα **νευρογλοιακά κύτταρα**. Αναλυτικότερα:

Ο **νευρώνας** αποτελεί τη βασική λειτουργική μονάδα του νευρικού συστήματος. Πρόκειται για ένα εξειδικευμένο κύτταρο, που μεταδίδει ηλεκτρικά σήματα είτε σε άλλα νευρικά κύτταρα, αλλά και σε μύες ή αδένες. Οι νευρώνες εμφανίζουν μια μεγάλη ποικιλία σχημάτων και μεγεθών, αλλά όλοι έχουν ένα **κύτταρο- σώμα**, τους **δενδρίτες** και έναν **άξονα** (Gomez-Molina).

Το **κύτταρο-σώμα(1)** περιέχει τον πυρήνα του νευρώνα. Μαζί με το μεγαλύτερο μέρος του κυτταροπλάσματος, διαδραματίζει σπουδαίο ρόλο, καθώς εκεί παράγονται και μεταφέρονται οι διάφορες απαραίτητες πρωτεΐνες για την κυτταρική λειτουργία (Gomez-Molina) .

Οι **δενδρίτες(2)** είναι διακλαδισμένες προεκτάσεις του κυττάρου-σώματος. Συλλέγουν τα εισερχόμενα σήματα από τους άλλους νευρώνες (Gomez-Molina).

Τα ηλεκτρικά σήματα ταξιδεύουν στον **άξονα(3)** του νευρώνα, μία άλλη προέκταση του κυττάρου- σώματος, ο οποίος μπορεί να διακλαδωθεί περαιτέρω πριν καταλήξει στις **απολήξεις του άξονα(4)**, όπου το σήμα περνάει μέσω σύναψης σε άλλα κύτταρα. Το μήκος του άξονα ποικίλει, για παράδειγμα σε ορισμένους νευρώνες, οι άξονες μπορεί να είναι μόνο ένα εκατοστό, ενώ σε άλλους μπορεί να εκτείνονται περισσότερο από ένα μέτρο (Gomez-Molina).

Το δεύτερο είδος κυττάρου του νευρικού ιστού αποτελούν τα υποστηρικτικά κύτταρα που ονομάζονται **γλοία**. Νευροεπιστήμονες πίστευαν από καιρό ότι τα γλοία υπερτερούν σε αριθμό νευρώνες κατά 10:1 (ή περισσότερο). Ωστόσο, πρόσφατες έρευνες δείχνουν ότι σε ορισμένες περιοχές του εγκεφάλου των ανθρώπων και άλλων πρωτεύοντων, αυτή η αναλογία είναι πιο κοντά προς 1:1, χωρίς αυτό να είναι απόλυτο, διότι αυτή η αναλογία μεταβάλλεται από περιοχή σε περιοχή του εγκεφάλου. Υπάρχουν τέσσερις κύριοι τύποι *γλοιακών κυττάρων*: τα **αστροκύτταρα**, **μικρογλοία**, **επενδυματικά κύτταρα** και **ολιγοδενδροκύτταρα** (Gomez-Molina).

Τα **αστροκύτταρα** σχηματίζουν ένα δίκτυο μέσα στον εγκέφαλο, το οποίο ρυθμίζει τις συγκεντρώσεις ιόντων γύρω από τους νευρώνες, με σκοπό την παροχή θρεπτικών συστατικών, αλλά και την ρύθμιση του σχηματισμού νέων συνδέσεων μεταξύ νευρώνων (Gomez-Molina).

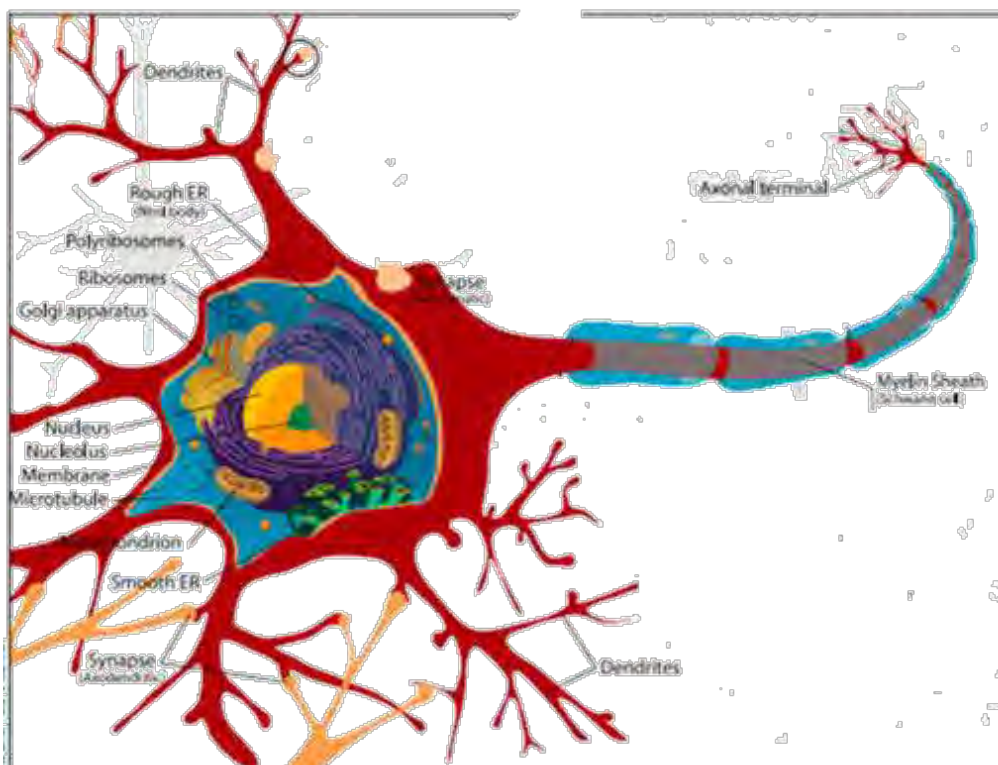
Τα **μικρογλοία** είναι τα κύρια «ανοσοποιητικά κύτταρα» του εγκεφάλου. Λειτουργούν κυρίως ως φαγοκύτταρα — βοηθώντας στην προστασία του εγκεφάλου από διάφορες παθογόνες καταστάσεις, όπως λοιμώξεις και κυτταρική βλάβη²⁷, αλλά μπορεί επίσης να ρυθμίσουν τον σχηματισμό νέων νευρωνικών συνδέσεων (Gomez-Molina).

Τα **επενδυματικά κύτταρα** παράγουν το εγκεφαλονωτιαίο υγρό, που προστατεύει τον εγκέφαλο μέσα στο κρανίο (Gomez-Molina).

Τα **ολιγοδενδροκύτταρα** βελτιώνουν την λειτουργία του νευρώνα, περιβάλλοντας τους άξονες με ένα λιπώδες περίβλημα που ονομάζεται **μυελίνη**²⁸(5)(Gomez-Molina).

²⁷ **Κυτταρική Βλάβη**: Αποτελεί την κυτταρική απάντηση σε δυσμενείς παράγοντες. Εξαρτάται από τον τύπο, τη σοβαρότητα και τη διάρκεια, το είδος της τοξικής ουσίας, η διάρκεια της έκθεσης μπορεί να προκαλέσει είτε αναστρέψιμες είτε μη αναστρέψιμες βλάβες **Πριμικήρης, Π. (2018). Μέτρηση μορίων απόπτωσης στον ορό του αίματος παιδιών με σπασμούς Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών (ΕΚΠΑ). Σχολή Επιστημών Υγείας ...**].

²⁸ **Μυελίνη** : Παράγεται από εξειδικευμένα στηρικτικά κύτταρα, τα ολιγοδενδροκύτταρα του ΚΝΣ και τα κύτταρα Schwann του ΠΝΣ. Με την κάλυψη με μυελίνη επιτυγχάνεται τόσο η μόνωση, όσο και η μείωση της ηλεκτρικής χωρητικότητας των νευραξόνων με αποτέλεσμα την αύξηση της ταχύτητας νευρικής αγωγής χωρίς σημαντική αύξηση στη διάμετρο του νευράξονα **Γκιάτας, Ι. Σ. (2018). Εκτίμηση της επίδρασης του περιφερικού νευρικού συστήματος στην διαμόρφωση των αναπτυσσόμενων σκελετικών δομών του άνω άκρου.**



Εικόνα 6: Σχηματική απεικόνιση του νευρώνα, του στοιχειώδους δομικού στοιχείου του νευρικού συστήματος. Οι νευρώνες έχουν πολλά σχήματα και μεγέθη, αλλά τα περισσότερα έχουν κάποια βασικά χαρακτηριστικά. Το κύτταρο- σώμα (1) περιέχει δομές όπως το πυρήνας. Οι δενδρίτες (2) είναι οι βραχιόνες που εκτείνονται από το κύτταρο- σώμα και λαμβάνουν σήματα από άλλους νευρώνες στις διασταυρώσεις που ονομάζονται συνάψεις. Ο νευρώνας στέλνει σήματα μέσω του άξονα (3), μία προέκταση του κυττάρου-σώματος, που καταλήγει στις απολήξεις του άξονα (4). Τα άκρα του άξονα απελευθερώνουν χημικούς αγγελιοφόρους που ονομάζονται νευροδιαβιβαστές. (Gomez-Molina)

Η παρούσα διπλωματική εργασία επικεντρώνεται περισσότερο στο Κεντρικό Νευρικό Σύστημα και ειδικότερα στον εγκέφαλο.

4.2:Ο Εγκέφαλος

Πρόκειται για το κέντρο του σώματος, όπως αναφέρθηκε και πριν. Περιέχει δισεκατομμύρια νευρώνες που μεταδίδουν πληροφορίες από το σώμα και τον έξω κόσμο και έπειτα από επεξεργασία προκύπτουν οι αποκρίσεις, οι συνειδητές και ασυνειδητές κινήσεις, σκέψεις, συναισθήματα και αναμνήσεις. Επιπλέον, ο εγκέφαλος μπορεί να κάνει αυτά τα πράγματα ταυτόχρονα. Αυτό μπορεί να επιτευχθεί χάρη στο γεγονός ότι χωρίζεται σε πολλές διακριτές περιοχές, που ειδικεύονται σε συγκεκριμένα καθήκοντα και ικανότητες (Gomez-Molina).

Είναι χωρισμένο σε δύο μεγάλα ημισφαίρια, ένα στην αριστερή πλευρά, το άλλο στη δεξιά. Τα ημισφαίρια συνδέονται μέσω δεσμών νευρικών ινών, που μεταφέρουν

πληροφορίες από μία πλευρά του εγκεφάλου σας προς την άλλη και τούμπαλιν. Η μεγαλύτερη από αυτές τις δέσμες δημιουργεί μια γέφυρα μεταξύ των εγκεφαλικών ημισφαιρίων και λέγεται μεσολόβιο (corpus callosum) (Gomez-Molina).

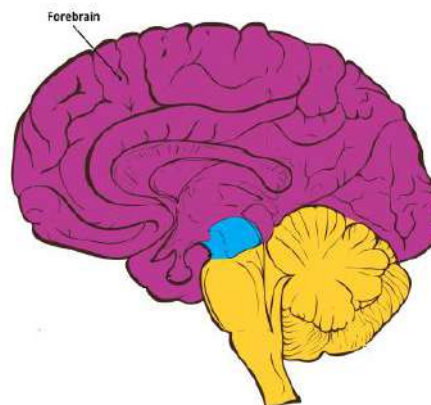
Για την καλύτερη μελέτη του εγκεφάλου, οι νευροεπιστήμονες έχουν διαιρέσει τον εγκέφαλο σε περαιτέρω μέρη (Gomez-Molina).

4.3: Πρόσθιος Εγκέφαλος

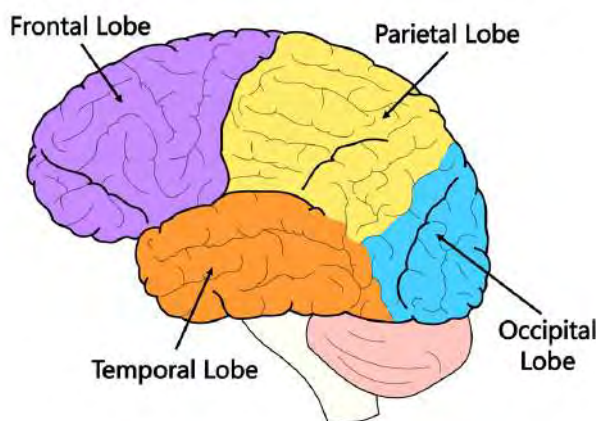
Ο πρόσθιος εγκέφαλος αποτελείται από τον *εγκεφαλικό φλοιό* και τα *τέσσερα ζεύγη λοβών*.

Η επιφάνεια του εγκεφάλου περιβάλλεται από πτυχώσεις του νευρικού ιστού, που ονομάζεται *εγκεφαλικός φλοιός*. Όσο, πιο βαθιές είναι οι πτυχώσεις, τόσο αυξάνεται η περιοχή του εγκεφαλικού φλοιού και έτσι δίνεται η δυνατότητα για τον σχηματισμό περισσότερων νευρώνων με αποτέλεσμα να αυξηθεί η επεξεργαστική δύναμη του εγκεφάλου (Gomez-Molina).

Τα τέσσερα ζεύγη λοβών είναι τα εξής: *οι μετωπιαίοι λοβοί, οι βρεγματικοί λοβοί, οι ινιακοί λοβοί και οι κροταφικοί λοβοί* (Gomez-Molina).



Εικόνα 7: Σχηματική Απεικόνιση του Πρόσθιου Εγκεφάλου με μωβ χρώμα.²⁹



Εικόνα 8: Σχηματική Απεικόνιση των τεσσάρων (4) λοβών του αριστερού ημισφαιρίου του εγκεφάλου. Με μωβ χρώμα είναι ο μετωπιαίος λοβός, με κίτρινο ο βρεγματικός λοβός, με γαλάζιο ο ινιακός και τέλος με πορτοκαλί ο κροταφιαίος λοβός (Gomez-Molina).

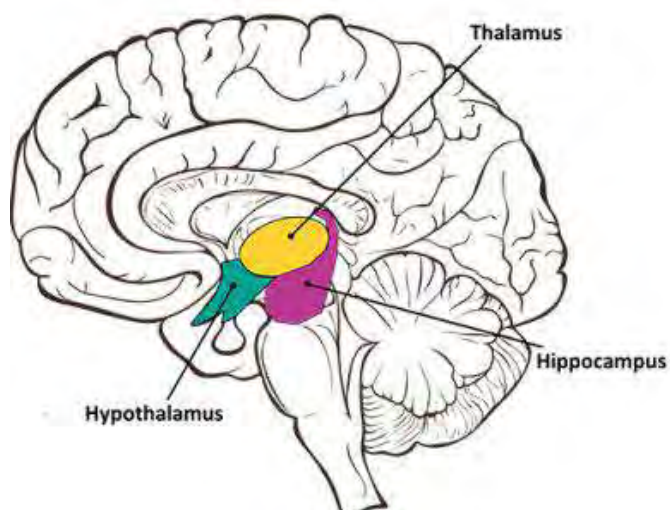
Πιο αναλυτικά:

Οι *μετωπιαίοι λοβοί* βρίσκονται στο μπροστινό μέρος του εγκεφάλου πάνω από τα μάτια. Τμήματα αυτών των λοβών συντονίζουν τις εκούσιες κινήσεις και την ομιλία, τη μνήμη, το συναίσθημα και κάποιες υψηλότερες γνωστικές δεξιότητες, όπως ο σχεδιασμός, η επίλυση προβλημάτων και πολλές πτυχές της προσωπικότητας (Gomez-Molina).

Οι **βρεγματικοί λοβοί** βρίσκονται στην κορυφή του εγκεφάλου ακριβώς πίσω από τους μετωπιαίους λοβούς. Ενσωματώνουν τα αισθητηριακά σήματα από το δέρμα (αφή), γλώσσα (γεύση) και επεξεργάζονται ορισμένους τύπους οπτικών πληροφοριών (όραση) (Gomez-Molina).

Στο πίσω μέρος του εγκεφάλου στεγάζονται οι **ινιακοί λοβοί**. Επεξεργάζονται οπτικές πληροφορίες και είναι υπεύθυνοι για την αναγνώριση χρωμάτων και σχημάτων, με σκοπό να τα ενσωματώσουν σε σύνθετα συστήματα οπτικής κατανόησης (Gomez-Molina).

Οι **κροταφικοί λοβοί** βρίσκονται στο πλαϊνό μέρος του εγκεφάλου και κάτω από το επίπεδο των ματιών. Πραγματοποιούν κάποια οπτική επεξεργασία και ερμηνεία ακουστικών πληροφοριών (Gomez-Molina).

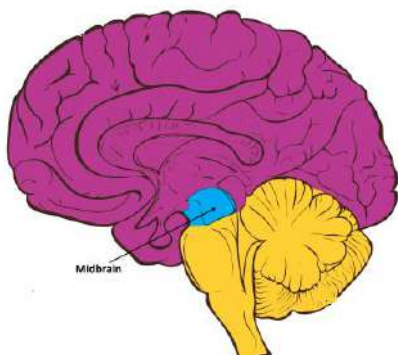


Εικόνα 9: Σχηματική απεικόνιση του μεταιχμιακού συστήματος. Με κίτρινο χρώμα απεικονίζεται ο θάλαμος, με πράσινο ο υποθάλαμος και με μωβ ο ιππόκαμπος (Gomez-Molina).

Μία περιοχή των κροταφικών λοβών, που βρίσκεται κάτω από τον εγκεφαλικό φλοιό είναι ο **ιππόκαμπος**. Ο τελευταίος αποτελείται από καμπυλωτές δομές, που κωδικοποιούν νέες μνήμες. Μία άλλη δομή του κροταφικού λοβού είναι η **αμυγδαλή**, η οποία ενσωματώνει τη μνήμη και την συγκίνηση (Gomez-Molina).

Ο ιππόκαμπος και η αμυγδαλή αποτελούν μέρος του **μεταιχμιακού συστήματος**, μιας ομάδας δομών στο εσωτερικό του εγκεφάλου, που σχετίζονται με την ρύθμιση των συναισθημάτων μας και το κίνητρο. Άλλα μέρη του μεταιχμιακού συστήματος περιλαμβάνουν: τον **θάλαμο**, ο οποίος ενσωματώνει αισθητηριακές πληροφορίες και το μεταδίδει σε άλλα μέρη του εγκεφάλου και τον **υποθάλαμο**, ο οποίος στέλνει ορμονικά σήματα στο υπόλοιπο σώμα μέσω της υπόφυσης (Gomez-Molina).

4.4: Μεσεγκέφαλος



Εικόνα 10: Σχηματική Απεικόνιση του Μεσεγκεφάλου με γαλάζιο χρώμα (Gomez-Molina)

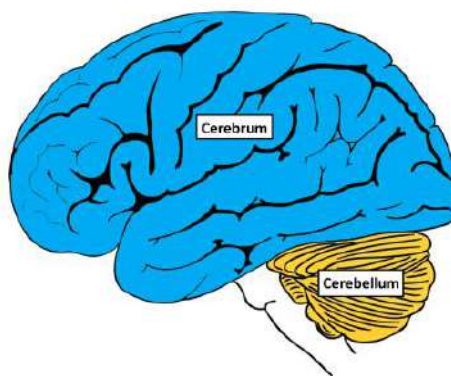
Ο **μεσεγκέφαλος** βρίσκεται κάτω από τον θάλαμο. Περιλαμβάνει ξεχωριστές ομάδες των νευρώνων που συντονίζουν τις κινήσεις των ματιών, όπως το ανοιγοκλείσιμο, η εστίαση και η πυροδότηση αντανακλαστικών στους ήχους, για παράδειγμα το ξαφνιασμένο άλμα, όταν εκπλήσσεσαι από έναν δυνατό θόρυβο. Άλλες περιοχές του μεσεγκεφάλου αναστέλλουν ανεπιθύμητες κινήσεις του σώματος και βοηθούν στο συντονισμό της αισθητηριακής εισόδου και εξόδου. Μερικές από αυτές τις περιοχές, μαζί με μέρη του πρόσθιου εγκεφάλου, συνδυάζονται και δημιουργούν τα γάγγλια²⁹, τα οποία βοηθούν στη ρύθμιση του συμπλέγματος κινήσεων του σώματος (Gomez-Molina).

4.5: Οπίσθιος Εγκέφαλος

Ο **οπίσθιος εγκέφαλος** διαδραματίζει σπουδαίο ρόλο για την ρύθμιση της γλυκόζης, τον ύπνο και περιλαμβάνει πολλές περιοχές που βοηθούν στον έλεγχο της κίνησης (Gomez-Molina).

Τα μέρη του είναι:

Η **παρεγκεφαλίδα**, η οποία βρίσκεται κάτω από τον ινιακό λοβό στο πολύ πίσω μέρος του εγκεφάλου. Είναι το δεύτερο μεγαλύτερο μέρος του εγκεφάλου σε όγκο, που περιέχει πάνω από τους μισούς νευρώνες του εγκεφάλου. Όπως ο εγκέφαλος έτσι και η παρεγκεφαλίδα έχει πολλές πτυχώσεις και είναι και αυτή χωρισμένη σε δύο ημισφαίρια. Εκτελεί μια ποικιλία λειτουργιών, για παράδειγμα συντονίζει εκούσιες κινήσεις και βοηθά τον εγκέφαλο στην απόκτηση νέων κινητικών δεξιοτήτων.



Εικόνα 11: Σχηματική Απεικόνιση του Εγκεφάλου (μπλε χρώμα) και της Παρεγκεφαλίδας (κίτρινο χρώμα)²⁹.

²⁹ **Γάγγλια:** Είναι μία ομάδα πυρήνων, που λειτουργούν συλλογικά μαζί στο κέντρο περίπου του εγκεφάλου. Αφορά λειτουργίες, όπως η κίνηση και η βραχυπρόθεσμη μνήμη, αλλά και νοητικούς και ψυχολογικούς μηχανισμούς. Αποτελούνται από έξι πυρήνες, οι οποίοι χωρίζονται βάση τους ιδιαίτερους τύπους νευρώνων τους, τα λειτουργικά τους χαρακτηριστικά και τις αλληλεπιδράσεις τους με τις εξωτερικές δομές. Περιλαμβάνουν το κέλυφος, το κερκοφόρο πυρήνα και την ωχρά σφαίρα **Τσιρογιάννης, Γ. (2009). Ανάπτυξη υπολογιστικών μοντέλων βιολογικών νευρωνικών δικτύων για τη μελέτη του ρόλου της ισχύος διασύνδεσης των νευρώνων Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο (ΕΜΠ). Σχολή Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και ...].**

Διαδραματίζει επίσης σπουδαίο ρόλο για την χωρική και χρονική αντίληψη. Η σπουδαιότητα της παρεγκεφαλίδας διαπιστώνεται, όταν κάποιος ασθενής παρουσιάσει παρεγκεφαλιδική βλάβη. Τότε συνήθως ο ασθενής έχει σπασμωδικό και άρρυθμο βάδισμα ή μπορεί να μην έχει την δύναμη να αγγίξει με ακρίβεια το δάχτυλο του στη μύτη του (Gomez-Molina). Κάτω από την παρεγκεφαλίδα είναι η *γέφυρα*³⁰, που επηρεάζει την αναπνοή και τη στάση του σώματος (Gomez-Molina).

Ένα άλλο μέρος του οπίσθιου εγκεφάλου είναι ο *μυελός*, ο οποίος φέρει νευρικές οδούς για να συνδεθεί ο εγκέφαλος με το νωτιαίο μυελό. Περιέχει νευρωνικά δίκτυα που βοηθούν στον έλεγχο βασικών λειτουργιών όπως η κατάποση, ο καρδιακός ρυθμός και η αναπνοή. Μαζί με τον μεσεγκέφαλο, την γέφυρα αποτελούν το *εγκεφαλικό στέλεχος* (Gomez-Molina).

4.6:Υγρά, που βρίσκονται στον εγκέφαλο

4.6.1: Πλάσμα

Το πλάσμα του αίματος έχει ένα ανοιχτό κιτρινωπό χρώμα. Είναι το υγρό τμήμα του αίματος μέσα στο οποίο είναι διαλυμένα τα κύτταρα του αίματος, τα ερυθροκύτταρα (RBC), τα λευκοκύτταρα (WBC) και τα θρομβοκύτταρα (αιμοπετάλια) .Ο ορός³¹ μερικές φορές λανθασμένα θεωρείται συνώνυμος με το πλάσμα. Το πλάσμα περιέχει 91% έως 92% νερό και 8% έως 9% στερεά. Αποτελείται κυρίως από:

- Τα πηκτικά, κυρίως το ινωδογόνο, που βοηθούν στην πήξη του αίματος (Mathew et al., 2018). Είναι μία πρωτεΐνη του πλάσματος, που συντίθεται στο συκώτι. Κατά τη διάρκεια της αιμόστασης, το ινωδογόνο μετατρέπεται σε Ινική με την συνεισφορά της Θρομβίνης. Πολλά μόρια Ινικής πολυμερίζονται και δημιουργούν ένα δίκτυο Ινικής, το οποίο γίνεται ακόμα πιο ισχυρό με τη

³⁰ **Γέφυρα:** Είναι το μεσαίο τμήμα του εγκεφαλικού στελέχους και συνδέει των προμήκη μυελό με τον μέσο εγκέφαλο. Είναι κεντρικός κόμβος διέλευσης πληροφοριών και μεταξύ άλλων περιλαμβάνει: α)Το δεξί και αριστερό superior olivary complex, β)Τον δεξιό και αριστερό lateral lemniscus nucleus. Ως lateral lemniscus ονομάζεται μια δέσμη νευρικών αξόνων αμφίδρομης διάδοσης ακουστικής πληροφορίας, που φτάνει ως τον μέσο εγκέφαλο και συγκεκριμένα το κάτω διδύμιο. Το όνομα ‘γέφυρα’ της δόθηκε επειδή φαίνεται να ενώνει τα δύο ημισφαίρια της παρεγκεφαλίδας. Από τη Γέφυρα διέρχονται πολλά νεύρα όπως ο Απαγωγό (οφθαλμικοί μύες), το Προσωπικό και το Στατικό-ακουστικό **Νικολάου, Γ. (2022). Απεικόνιση του εγκεφάλου με μαγνητική τομογραφία.**

³¹ **Ο ορός του αίματος είναι πλάσμα το οποίο δεν περιέχει παράγοντες πήξεως**, δηλαδή είναι το αίμα εκτός από τα κύτταρα (ερυθρά, λευκά αιμοσφαίρια) και τους παράγοντες πήξεως **Πριμικήρης, Π. (2018). Μέτρηση μορίων απόπτωσης στον ορό του αίματος παιδιών με σπασμούς Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών (ΕΚΠΑ). Σχολή Επιστημών Υγείας ...].**

δράση του παράγοντα XIII. Το αποτέλεσμα είναι η δημιουργία ενός αιμοστατικού θρόμβου, όταν υπάρξει τραυματισμός, προκειμένου να αποτραπεί η απώλεια αίματος. Τέλος, το ινωδογόνο ανήκει και στις πρωτεΐνες οξείας φάσεως, δηλαδή αυξάνεται η παραγωγή του σε οξείες και χρόνιες λοιμώξεις, φλεγμονές και άλλα χρόνια νοσήματα (Σουγλής, 2010)

- Πρωτεΐνες του πλάσματος, όπως η αλβουμίνη και η σφαιρίνη, που βοηθούν στη διατήρηση της κολλοειδούς οσμωτικής πίεσης περίπου στα 25 mmHg (Mathew et al., 2018).
- Οι ηλεκτρολύτες όπως το νάτριο, το κάλιο, το δισανθρακικό, το χλώριο και το ασβέστιο βοηθούν στη διατήρηση του pH του αίματος (Mathew et al., 2018).
- Τα αντισώματα βοηθούν στην καταπολέμηση των λοιμώξεων και διαφόρων άλλων μικρών ποσοτήτων ενζύμων, ορμονών και βιταμινών (Mathew et al., 2018).

Η προέλευση του πλάσματος, που αποτελεί το 55% του συνολικού αίματος, είναι ενδιαφέρουσα, γιατί κανένα όργανο δεν το παράγει. Αντίθετα, σχηματίζεται από νερό και άλατα που απορροφώνται μέσω του πεπτικού σωλήνα (Mathew et al., 2018).

4.6.1.1: Λειτουργίες του Πλάσματος

Καθώς το πλάσμα σχηματίζει την υγρή βάση του αίματος, οι λειτουργίες, που εκτελούνται από το πλάσμα και το αίμα, επικαλύπτονται. Το πλήθος των λειτουργιών περιλαμβάνει:

- *Πήξη*: Το ινωδογόνο παίζει σημαντικό ρόλο στην πήξη του αίματος μαζί με άλλα προπηκτικά, όπως η θρομβίνη και ο παράγοντας X (Mathew et al., 2018).
- *Άμυνα*: Οι ανοσοσφαιρίνες και τα αντισώματα στο πλάσμα παίζουν σημαντικό ρόλο στην άμυνα του οργανισμού ενάντια στα βακτήρια, τους ιούς, τους μύκητες και τα παράσιτα (Mathew et al., 2018).

- *Διατήρηση της ωσμωτικής πίεσης*: Η κολλοειδής οσμωτική πίεση διατηρείται περίπου στα 25 mmHg από τις πρωτεΐνες του πλάσματος, όπως η αλβουμίνη που συντίθεται από το ήπαρ (Mathew et al., 2018).
- *Διατροφή*: Η μεταφορά θρεπτικών συστατικών, όπως η γλυκόζη, τα αμινοξέα, τα λιπίδια και οι βιταμίνες, που απορροφώνται από το πεπτικό σύστημα σε διάφορα μέρη του σώματος, λειτουργεί ως πηγή καυσίμου για ανάπτυξη (Mathew et al., 2018).
- *Αναπνοή*: Η μεταφορά αναπνευστικών αερίων, δηλαδή μεταφορά οξυγόνου στα διάφορα όργανα και μεταφορά διοξειδίου του άνθρακα πίσω στους πνεύμονες για απέκκριση (Mathew et al., 2018).
- *Απέκκριση*: Το αίμα απομακρύνει τα αζωτούχα απόβλητα, που παράγονται μετά τον κυτταρικό μεταβολισμό και τα μεταφέρει στα νεφρά, στους πνεύμονες και στο δέρμα για απέκκριση (Mathew et al., 2018).
- *Ορμόνες*: Οι ορμόνες απελευθερώνονται στο αίμα και μεταφέρονται στα όργανα-στόχους τους (Mathew et al., 2018).
- *Ρύθμιση της ισορροπίας οξέος-βάσης*: Οι πρωτεΐνες του πλάσματος συμβάλλουν στην οξεοβασική ισορροπία μέσω της ρυθμιστικής τους δράσης (Mathew et al., 2018).
- *Ρύθμιση της θερμοκρασίας του σώματος*: Αυτή διατηρείται εξισορροπώντας την απώλεια θερμότητας και την αύξηση της θερμότητας στο σώμα (Mathew et al., 2018).
- *Ρόλος στον ρυθμό καθίζησης ερυθροκυττάρων (ESR)*: Το ινωδογόνο, ένα αντιδρών οξείας φάσης, αυξάνεται κατά τις οξείες φλεγμονώδεις καταστάσεις και συμβάλλει στην αύξηση του ESR, το οποίο χρησιμοποιείται ως διαγνωστικό και προγνωστικό εργαλείο (Mathew et al., 2018).

4.6.2: Εξωκυττάριο Εγκεφαλικό Υγρό (Extracellular Fluid, ECF)

Τα κυτταρικά συστατικά του εγκεφάλου (δηλαδή νευρώνες, αστροκύτταρα, ολιγοδενδροκύτταρα και μικρογλοία, αλλά και ενδοθήλιο επένδυμα), που αναφέρθηκαν σε προηγούμενη ενότητα αποτελούν το 80% του συνολικού όγκου του εγκεφάλου. Τα υπόλοιπα 20% απαρτίζεται από τον εξωκυττάριο υγρό (ECF), που είναι ένα διάλυμα από ιόντα, νευροδιαβιβαστές, αμινοξέα, πεπτίδια και πρωτεΐνες, αέρια (κυρίως O₂, CO₂, NO, CO), μεταβολίτες και απόβλητα. Το ECF μεσολαβεί για μια εκτεταμένη διακίνηση χημικών στα εγκεφαλικά κύτταρα, κυρίως για να εξασφαλίσουν την παροχή οξυγόνου και γλυκόζης από το αίμα στον εγκέφαλο (Brinkman et al., 2018).

Περιέχει υψηλές συγκεντρώσεις ιόντων νατρίου, χλωρίου, δισανθρακικών και πρωτεϊνών, αλλά είναι σχετικά χαμηλότερες συγκεντρώσεις σε κάλιο, μαγνήσιο και φωσφορικά άλατα (Brinkman et al., 2018).

4.6.3: Μεσοκυττάριο υγρό (Interstitial Fluid, ISF)

Το μεσοκυττάριο υγρό (ISF) παράγεται από το πλάσμα στους περισσότερους ιστούς με τη διαδικασία της διήθησης κατά μήκος του ημι-περατού τριχοειδούς ενδοθηλίου. Αποτελείται από νερό, αμινοξέα, σάκχαρα, λιπαρά οξέα, συνένζυμα, ορμόνες, νευροδιαβιβαστές, άλατα και κυτταρικά προϊόντα. Περιβάλλει τα κύτταρα του σώματος και παρέχει ένα μέσο μεταφοράς υλικών στα κύτταρα, διακυτταρικής επικοινωνίας και απομάκρυνσης των μεταβολικών αποβλήτων. Τέλος απαρτίζει το 15–25% του συνολικού σωματικού βάρους.³²

4.6.4: Εγκεφαλονωτιαίο Υγρό (Cerebrospinal Fluid, CSF)

Το εγκεφαλονωτιαίο υγρό (CSF) είναι ένα υπερδιήθημα πλάσματος, που περιέχεται στις κοιλίες του εγκεφάλου και στον υπαραχνοειδή χώρο του κρανίου και της σπονδυλικής στήλης. Εκτελεί ζωτικές λειτουργίες, συμπεριλαμβανομένης της παροχής τροφής, της απομάκρυνσης των αποβλήτων και της προστασίας του εγκεφάλου. Ο όγκος του CSF ενηλίκου εκτιμάται ότι είναι 150 ml, με κατανομή 125

³² <https://www.biologyonline.com/dictionary/interstitial-fluid>, Accessed in 04/01/2024

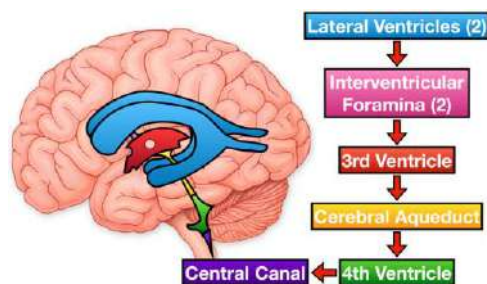
ml εντός των υπαραχνοειδών διαστημάτων και 25 ml εντός των κοιλιών. Το 0,35 mL αντικαθίσταται κάθε λεπτό. Έτσι, ο πλήρης όγκος του ανταλλάσσεται 3-4 φορές την ημέρα (Telano & Baker, 2018).

Το εβδομήντα έως ογδόντα τοις εκατό της παραγωγής CSF γίνεται μέσω ενός δικτύου τροποποιημένων επενδυματικών³³ κυττάρων, που είναι γνωστό ως χοριοειδές πλέγμα (Choroid Plexus, CP). Το CP είναι ένα εξαιρετικά εξειδικευμένο, απλό, συνεχές, κυβοειδές επιθήλιο με επενδυματικά κύτταρα, που επενδύει τις κοιλίες του εγκεφάλου. Αυτό το απλό κυβοειδές επιθήλιο περιβάλλει συστάδες τριχοειδών αγγείων και επιτρέπει τη διήθηση του πλάσματος (Telano & Baker, 2018) .

Σε σύγκριση με το πλάσμα, το CSF έχει υψηλότερη συγκέντρωση νατρίου, χλωρίου και μαγνησίου, αλλά χαμηλότερη συγκέντρωση καλίου και ασβεστίου. Σε αντίθεση με το πλάσμα, το CSF έχει μόνο ίχνη κυττάρων, πρωτεΐνης και ανοσοσφαιρινών. Ο φυσιολογικός αριθμός κυττάρων του CSF είναι γενικά χαμηλότερος από 5 κύτταρα/ml. Παρά τις αλλαγές στη σύνθεση και τη ροή του αίματος, η σύνθεση του CSF διατηρείται σταθερή, γεγονός που παρέχει ένα σταθερό ενδοκοιλιακό περιβάλλον, κρίσιμο για τη διατήρηση της φυσιολογικής νευρωνικής λειτουργίας (Telano & Baker, 2018).

³³ Τα επενδυματικά κύτταρα είναι κυρίως γνωστά ως ο κυτταρικός τύπος που καλύπτει τις κοιλίες του εγκεφάλου Reichenbach, A., & Wolburg, H. (2005). Astrocytes and ependymal glia. *Neuroglia*, 2, 19-35.

Το CSF εκκρίνεται από τα CPs που βρίσκονται εντός των κοιλιών του εγκεφάλου, με τις δύο πλάγιες κοιλίες να είναι οι κύριοι παραγωγοί. Αφού παραχθεί, ταξιδεύει μέσω του μεσοκοιλιακού τρήματος³⁴ στην τρίτη κοιλία και μέσω του εγκεφαλικού υδραγωγείου³⁵ στην τέταρτη κοιλία και στη συνέχεια μέσω του μέσου ανοίγματος (γνωστό και ως τρήμα του Magendie)³⁶ στον υπαραχνοειδή χώρο στη βάση του εγκεφάλου. Μόλις βρεθεί στον υπαραχνοειδή χώρο, το ECF αρχίζει να έχει μια ήπια πολυκατευθυντική ροή, που δημιουργεί μια εξισορρόπηση της σύνθεσης σε όλο το CSF. Το CSF ρέει πάνω από την επιφάνεια του εγκεφάλου και κατά μήκος του νωτιαίου μυελού, ενώ βρίσκεται και στον υπαραχνοειδή χώρο. Φεύγει από τον υπαραχνοειδή χώρο μέσω των αραχνοειδών λαχνών, που βρίσκονται κατά μήκος του άνω οβελιαίου φλεβικού κόλπου, των ενδοκρανιακών φλεβικών κόλπων³⁷ και γύρω από τις ρίζες των νωτιαίων νεύρων (Telano & Baker, 2018).



Εικόνα 12: Σχηματική Απεικόνιση των χώρων όπου φυλάσσεται το εγκεφαλονωτιαίο υγρό.

Με μπλε χρώμα συμβολίζονται οι πλάγιες κοιλίες, με κόκκινο χρώμα η τρίτη κοιλία και με πράσινο η τέταρτη (Telano & Baker, 2018).

Το CSF είναι ένα διαυγές υγρό με χαμηλή συγκέντρωση πρωτεΐνης με παρόμοια σύνθεση με το ECF εγκεφάλου (Telano & Baker, 2018).

³⁴ Το **μεσοκοιλιακό τρήμα**, γνωστό και ως τρήμα του Monro, είναι μέρος του κοιλιακού συστήματος και της σύνδεσης μεταξύ της τρίτης κοιλίας και της πλάγιας κοιλίας. Επιτρέπει την ροή του εγκεφαλονωτιαίου υγρού μεταξύ των πλάγιων κοιλιών και των τρίτων κοιλιών και η εξάλειψη ή η απόφραξη οδηγεί σε μη επικοινωνιακό αποφρακτικό υδροκέφαλο Jones J, Chan B, Baba Y, et al. **Interventricular foramen (of Monro)**. Reference article, Radiopaedia.org (Accessed on 30 Jan 2024) <https://doi.org/10.53347/rID-5845>

³⁵ Το **εγκεφαλικό υδραγωγείο** είναι ένας στενός αγωγός 15 mm που επιτρέπει στο εγκεφαλονωτιαίο υγρό (ENY) να ρέει μεταξύ της τρίτης κοιλίας και της τέταρτης κοιλίας Rubino, J. M., & Hogg, J. P. (2019). **Neuroanatomy, cerebral aqueduct (Sylvian)**.

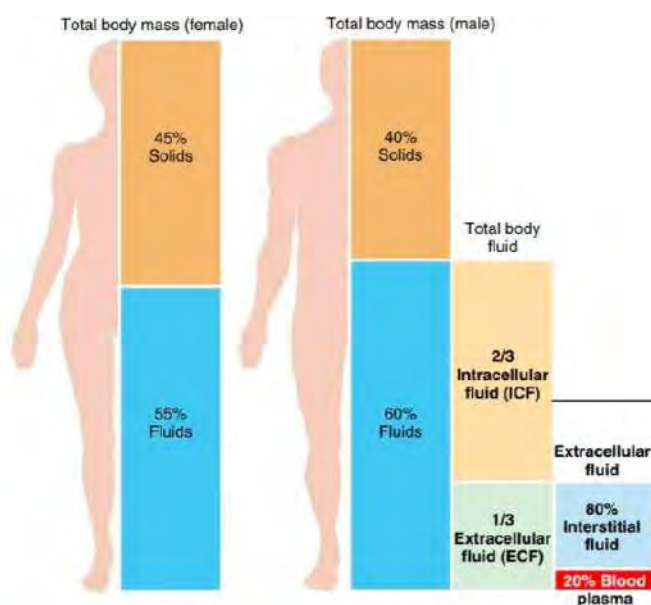
³⁶ Το **τρήμα του Magendie**, γνωστό και ως διάμεσο άνοιγμα, είναι ένα από τα τρήματα του κοιλιακού συστήματος και συνδέει την τέταρτη κοιλία και τη μεγάλη κοιλία. Είναι ένα από τα τρία σημεία που το εγκεφαλονωτιαίο υγρό μπορεί να φύγει από την τέταρτη κοιλία και να εισέλθει στον υπαραχνοειδή χώρο Jones J, Bell D, Yang R, et al. **Foramen of Magendie**. Reference article, Radiopaedia.org (Accessed on 30 Jan 2024) <https://doi.org/10.53347/rID-5848>

³⁷ Οι **ενδοφλεβικοί κόλποι** είναι φλεβικά κανάλια, που βρίσκονται ενδοκρανιακά μεταξύ των δύο στοιβάδων της σκληρής μήνιγγας (ενδοστεϊκή στιβάδα και μηνιγγική στιβάδα). Σε αντίθεση με άλλες φλέβες του σώματος, τρέχουν μόνες τους και όχι παράλληλα με τις αρτηρίες. Επιπλέον, δεν φέρουν βαλβίδες, επιτρέποντας αμφίδρομη ροή αίματος από και προς τις ενδοκρανιακές φλέβες Gaillard F, Hacking C, Al Kabbani A, et al. **Dural venous sinuses**. Reference article, Radiopaedia.org (Accessed on 30 Jan 2024) <https://doi.org/10.53347/rID-5052>.

4.6.5: Ενδοκυττάριο Υγρό (Intracellular Fluid, ICF)

Το ενδοκυττάριο υγρό είναι περίπου το 40% του συνολικού σωματικού βάρους. Είναι ο συνολικός χώρος μέσα στα κύτταρα, που ορίζεται κυρίως ως το κυτταρόπλασμα των κυττάρων. Γενικά, πρόκειται για ένα σταθερό υγρό, που δεν προσαρμόζεται εύκολα στις γρήγορες αλλαγές. Αυτός ο χώρος είναι, όπου λαμβάνουν χώρα πολλές χημικές αντιδράσεις. Ως εκ τούτου, είναι σημαντικό να διατηρείται η κατάλληλη όσμωση (Mathew et al., 2018).

Το ενδοκυττάριο υγρό απαντάται σε υψηλά επίπεδα φωσφορικών, μαγνησίου, καλίου και πρωτεϊνών, αλλά χαμηλότερα επίπεδα νατρίου, χλωρίου και δισανθρακικών (Mathew et al., 2018).



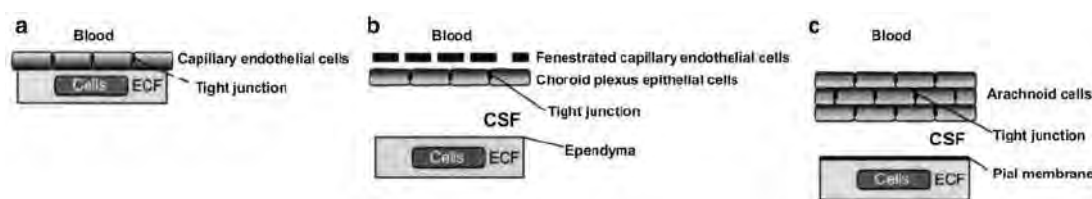
Εικόνα 13: Σχηματική Απεικόνιση της κατανομής των υγρών του σώματος στην γυναίκα (αριστερά) και στον άντρα (δεξιά) (Mathew et al., 2018).

Κεφάλαιο 5: Εγκεφαλικοί Φραγμοί

Υπάρχουν τρεις κύριοι φραγμοί στον εγκέφαλο, οι οποίοι προστατεύουν τους νευρώνες από ουσίες, που μεταδίδονται με το αίμα και βοηθούν στη διατήρηση της ομοιόστασης του νερού και ενός κατάλληλου περιβάλλοντος για τη νευρωνική λειτουργία: α) ο φραγμός αίματος-CSF (Blood-CSF Barrier, BCSFB), β) ο φραγμός αίματος με το αραχνοειδές πλέγμα (Blood-Arachnoid Barrier, BAB) και γ) ο αιματοεγκεφαλικός φραγμός (Blood-Brain Barrier, BBB). Το εγκεφαλικό ενδοθήλιο σχηματίζει τον μεγαλύτερο φραγμό στον εγκέφαλο, το BBB, ενώ τα επιθηλιακά κύτταρα του χοριοειδούς πλέγματος σχηματίζουν τον φραγμό αίματος-CSF και το αιμοφόρο αραχνοειδές επιθήλιο βρίσκεται κάτω από τη μήνιγγα και περικλείει πλήρως τον εγκέφαλο, σχηματίζοντας τον αιματικό φραγμό- CSF (Cipolla, 2009).

Υπάρχουν και άλλοι φραγμοί αίματος και νευρικού ιστού, όπως ο φραγμό αίματος-αμφιβληστροειδούς και ο φραγμός αίματος-νωτιαίου μυελού (Cipolla, 2009).

Αυτά τα «σύνορα» μέσα στο κεντρικό νευρικό σύστημα παρέχουν αρκετές προστατευτικές λειτουργίες για τον εγκέφαλο. Προστατεύουν εναντίων ανεπιθύμητων παθογόνων και ελέγχουν την ανοσολογική κατάσταση του εγκεφάλου. Αποτρέπουν επίσης τις πρωτεΐνες (λευκωματίνη) και τα κυκλοφορούντα αιμοσφαίρια (ερυθροκύτταρα, λευκοκύτταρα) να περάσουν στον εγκέφαλο, τα οποία μπορούν να βλάψουν τον νευρωνικό ιστό και να παρεμποδίσουν την αυστηρά ελεγχόμενη ομοιόσταση του νερού (Cipolla, 2009).



Εικόνα 14: Οι τρεις Εγκεφαλικοί Φραγμοί. α) Το BBB. Το BBB διαχωρίζει το αίμα από τον εγκεφαλικό ιστό, συμπεριλαμβανομένου του ECF του εγκεφάλου και των κυττάρων. Το φράγμα υπάρχει στο επίπεδο των τριχοειδών ενδοθηλιακών κυττάρων του εγκεφάλου, τα οποία συνδέονται με σφιχτές συνδέσεις (tight junctions). β) Το BCSFB. Το BCSFB διαχωρίζει το αίμα από το CSF στις κοιλίες του εγκεφάλου. Η σύσταση του φραγμού είναι τα επιθηλιακά κύτταρα του χοριοειδούς πλέγματος, που συνδέονται και αυτά με σφιχτές συνδέσεις (tight junctions). Σε αντίθεση με το BBB, το ενδοθήλιο των τριχοειδών αγγείων μεταξύ του αίματος και του CSF περιέχουν πόρους και δεν συνδέονται με σφιχτές συνδέσεις. Ένα στρώμα κυττάρων, τα επενδυματικά κύτταρα διαχωρίζουν το CSF από το ECF του εγκεφάλου. γ) Το BAB. Το BAB διαχωρίζει το αίμα από τα αιμοφόρα αγγεία της σκληρής μήνιγγας από το CSF του υποαραχνοειδούς χώρου. Η

σύσταση του περιλαμβάνει τα αραχνοειδή κύτταρα, που συνδέονται με σφιχτές συνδέσεις. Ένα στρώμα των κυττάρων της pia mater (pial κύτταρα) διαχωρίζει το CSF από το ECF του εγκεφάλου (Cipolla, 2009) .

5.1: Φραγμός του Αίματος- CSF(BSCFB)

Το BCSFB διαχωρίζει το αίμα από τα τριχοειδή του εγκεφάλου και το CSF. Ρυθμίζει την ανταλλαγή της ουσίας προκειμένου να διατηρήσει ένα σταθερό περιβάλλον για την κανονική λειτουργία του εγκεφάλου. Όπως αναφέρθηκε σε προηγούμενη ενότητα, το ECF σχηματίζεται στην πλάγια τρίτη και τέταρτη κοιλία, κυρίως από το χοριοειδές πλέγμα και τα εγκεφαλικά τριχοειδή αγγεία. Τα τριχοειδή αγγεία του χοριοειδούς πλέγματος είναι πιο διαπερατά σε σχέση με τα αγγεία άλλων φραγμών, αλλά δεν είναι στεγανά και διαρρέουν, παρόλα αυτά έχουν κάποιες δομές, που συγκρατούν το επιθήλιο και έτσι ελέγχουν την είσοδο ουσιών (Cipolla, 2009).

Τα επενδυματικά κύτταρα του χοριοειδούς πλέγματος είναι επιθηλιακά. Ιονικές αντλίες με πιο σημαντική την Na^+-K^+ ATPase, που βρίσκεται στην επιφάνεια των επενδυματικών κυττάρων, παράγει τη χημειοσμωτική ενέργεια, που είναι απαραίτητη για τον σχηματισμό υγρού από τα κύτταρα του χοριοειδούς πλέγματος και έτσι παράγεται το εγκεφαλονωτιαίο υγρό (Cipolla, 2009).

Ο όγκος του στον άνθρωπο είναι 25 mL, δηλαδή 18% της συνολικής ποσότητας του CSF (Huttunen et al., 2022).

5.2: Εγκεφαλικός Φραγμός Αίματος – Αραχνοειδούς Πλέγματος (BAB)

Ο φραγμός αίματος-αραχνοειδούς πλέγματος διαχωρίζει τα τριχοειδή αγγεία του εγκεφάλου στην σκληρή μήνιγγα³⁸ από το CSF του υποαραχνοειδούς χώρου. Το φράγμα σχηματίζεται από ένα στρώμα αραχνοειδών κυττάρων (επιθηλιακά κύτταρα που βρίσκονται μεταξύ της σκληρής μήνιγγας και του υποαραχνοειδούς χώρου), που συνδέονται με σφιχτές διασταυρώσεις (Vendel et al., 2019). Ο όγκος του στον

³⁸ Η **σκληρή μήνιγγα** αποτελείται από δύο στρώματα: το περιοστικό στρώμα, που βρίσκεται πιο κοντά στο γόνατο και το μηνιγγικό στρώμα, που βρίσκεται πιο κοντά στον εγκεφαλικό ιστό. Αυτά μαζί συμβάλλουν στο να είναι η μήνιγγα μια παχιά, πυκνή, ινώδης μεμβράνη, που είναι αρκετά ανελαστική. Η περιοστική στιβάδα αποτελείται από ινοβλάστες και οστεοβλάστες, με μεγάλη ποσότητα εξωκυτταρικού κολλαγόνου να υπάρχει στον μεσοκυττάριο χώρο της, δίνοντας στη μήνιγγα τη δύναμή της. Αυτά τα δύο στρώματα είναι ως επί το πλείστον συγχωνευμένα, διαχωρίζονται μόνο για να σχηματίσουν φλεβικούς κόλπους Ghannam, J. Y., & Al Kharazi, K. A. (2019). *Neuroanatomy, cranial meninges*.

άνθρωπο είναι 115 mL, δηλαδή 82% της συνολικής ποσότητας του CSF.(Huttunen et al., 2022)

5.3: Αιματοεγκεφαλικός Φραγμός(Blood- Brain Barrier, BBB)

Ο Αιματοεγκεφαλικός Φραγμός (BBB) είναι ένας όρος, που χρησιμοποιείται για να περιγράψει τις μοναδικές ιδιότητες για την μικροαγγείωση του ΚΝΣ. Τα αγγεία του ΚΝΣ είναι συνεχή αγγεία χωρίς πόρους, αλλά περιέχουν επίσης μια σειρά από πρόσθετες ιδιότητες, που τους επιτρέπουν να ρυθμίζουν στενά την κίνηση μορίων, ιόντων και κυττάρων μεταξύ του αίματος και του ΚΝΣ. Αυτό το βαριά περιοριστικό φράγμα επιτρέπει την ρύθμιση της ομοιόστασης του ΚΝΣ, η οποία είναι κρίσιμη για να καταστεί όσο τον δυνατόν σωστή η νευρωνική του λειτουργία, καθώς και προστασία του από τοξίνες, παθογόνα, φλεγμονές, τραυματισμούς και ασθένειες. Η σπουδαιότητα του φαίνεται από το γεγονός ότι η μη φυσιολογική του λειτουργία μπορεί να προκαλέσει την εμφάνιση διαφόρων νευρολογικών ασθενειών, όπως εγκεφαλικό επεισόδιο, σκλήρυνση κατά πλάκας, εγκεφαλικά τραύματα και νευροεκφυλιστικές διαταραχές. Επιπλέον, η δυσλειτουργία BBB μπορεί να οδηγήσει σε μη σωστή ρύθμιση της ανταλλαγής των ιόντων, αλλοιωμένη ομοιόσταση σηματοδότησης, καθώς και την είσοδο κυττάρων και μορίων του ανοσοποιητικού στο ΚΝΣ, διεργασίες που οδηγούν σε νευρωνική δυσλειτουργία και εκφυλισμό (Sprowls et al., 2021).

5.3.1: Από τι αποτελείται;

Ο Αιματοεγκεφαλικός Φραγμός (BBB) αποτελείται από ενδοθηλιακά κύτταρα (ECs), μια βασική μεμβράνη, τα περικύτταρα, τα αστροκύτταρα. Τα κύτταρα αυτά μαζί με και διάφορες πρωτεΐνες (claudins, occludins και άλλες) σχηματίζουν ένα εκτεταμένο παρακυτταρικό φράγμα μεταξύ των ενδοθηλιακών κυττάρων και των μικρών μορίων, πρωτεϊνών και κυττάρων. Παρακάτω αναλύονται τα τρία επίπεδα: 1) το **Ενδοθήλιο**, 2) **Βασική Μεμβράνη (Basement Membrane)**, 3) τα **Αστροκύτταρα (astrocytes)** (Sprowls et al., 2021).

5.3.1.1: Ενδοθήλιο(Endothelial Cells, ECs)

Τα ενδοθηλιακά κύτταρα (ECs) είναι τροποποιημένα απλά, πλακώδη, επιθηλιακά κύτταρα, που βρίσκονται μεσοδέρμια και συναντώνται στα τοιχώματα των αιμοφόρων αγγείων. Το ενδοθήλιο του ΚΝΣ έχει μοναδικές ιδιότητες σε σύγκριση με τα άλλα επιθηλιακά κύτταρα άλλων ιστών, διότι τους επιτρέπεται η ρύθμιση της κίνησης των ιόντων, των μορίων και των κυττάρων μεταξύ του αίματος και του εγκεφάλου. Συγκρατούνται μεταξύ τους με σφιχτές διασταυρώσεις (tight junctions, TJs), που περιορίζουν σε μεγάλο βαθμό την παρακυτταρική ροή των διαλυμένων ουσιών. Επιπλέον, απελευθερώνουν ένζυμα, όταν εισέρχεται κάτι ξένο, με σκοπό την αποδόμηση του (Daneman & Prat, 2015).

Αυτός ο αυστηρός παρακυτταρικός και διακυτταρικός φραγμός δημιουργεί ένα πολωμένο κύτταρο με διακριτή αυλική και κοιλιακή μεμβράνη. Προκειμένου να εισέλθουν οι ουσίες χρειάζονται μεταφορείς. Υπάρχουν δύο κύριες κατηγορίες μεταφορέων. Οι πρώτοι είναι οι μεταφορείς ροής, οι οποίοι είναι πολωμένοι στον αυλό επιφανειακά και μεταφέρουν μια μεγάλη ποικιλία λιπόφιλων μορίων, που διαφορετικά θα μπορούσαν να διαχέονται κατά μήκος της κυτταρικής μεμβράνης προς το αίμα. Οι δεύτεροι είναι εξαιρετικά εξειδικευμένοι μεταφορείς θρεπτικών ουσιών, που διευκολύνουν την μεταφορά συγκεκριμένων θρεπτικών συστατικών μέσω του BBB στο ΚΝΣ, καθώς και απομάκρυνση συγκεκριμένων αποβλήτων από το ΚΝΣ στο αίμα. Το ενδοθήλιο του ΚΝΣ περιέχει υψηλότερες ποσότητες μιτοχονδρίων σε σύγκριση με άλλα, το οποίο πιστεύεται ότι είναι κρίσιμο για την παραγωγή ATP για τις λειτουργίες μεταφοράς του ΚΝΣ (Daneman & Prat, 2015).

Τα Ενδοθηλιακά κύτταρα δεν φέρουν στην επιφάνεια τους πόρους και έτσι επιτυγχάνεται η μειωμένη διακίνηση ουσιών σε σύγκριση με τα περιφερικά αγγεία. Μαζί, τα περικύτταρα (βλέπε 5.3.1.2) και το ενδοθήλιο δημιουργούν ένα εξωκυτταρικό υπόστρωμα, το οποίο περιβάλλει τα αιμοφόρα αγγεία μέσα στον εγκέφαλο και σχηματίζει τη **βασική μεμβράνη (Basement Membrane)** (Daneman & Prat, 2015).

5.3.1.2: Βασική Μembrάνη

Το δεύτερο επίπεδο αποτελείται από την μεμβράνη βάσης. Η βασική μεμβράνη χρησιμεύει για τη διευκόλυνση της βασικής διακυτταρικής σηματοδότησης, ενώ ταυτόχρονα προωθεί την επιλεκτική κατανομή των μορίων στον εγκέφαλο παρέγχυμα. Πρόκειται για έναν συνδετικό ιστό (Daneman & Prat, 2015).

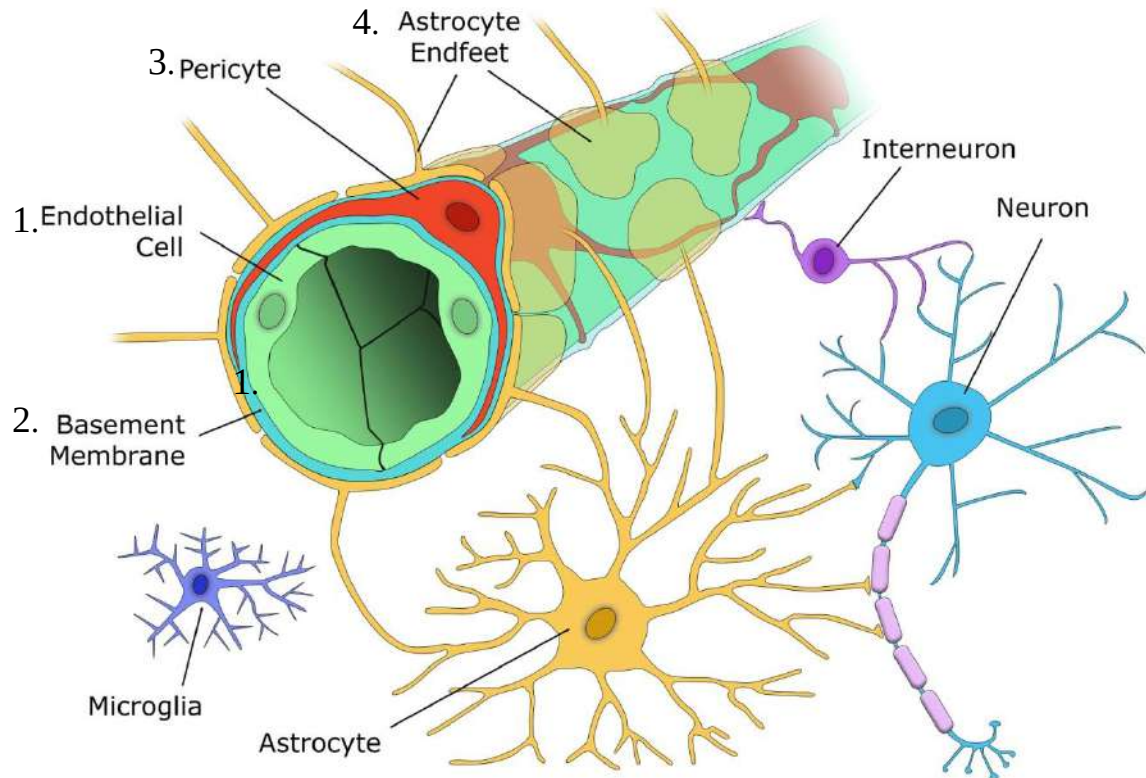
Η Βασική Μembrάνη αποτελεί άγκυρα για πολλές διεργασίες σηματοδότησης στα αγγεία, αλλά παρέχει επίσης ένα πρόσθετο φράγμα για τα μόρια και τα κύτταρα πριν από την πρόσβαση στον νευρικό ιστό. Διακοπή της από τις μεταλλοπρωτεάσες οδηγεί στην δυσλειτουργία του BBB και στη διήθηση λευκοκυττάρων, που παρατηρείται σε πολλές διαφορετικές νευρολογικές διαταραχές. Περιλαμβάνει τα **περικύτταρα** και τα **μακροφάγα** (Daneman & Prat, 2015).

- Τα **περικύτταρα**, που είναι κύτταρα τύπου ινοβλάστες (fiberblast- like), βρίσκονται στην επιφάνεια του ενδοθηλιακού σωλήνα και στη βάση της μεμβράνης. Έχουν την ικανότητα να ελέγχουν την ροή του αίματος, αφού λειτουργούν σαν αντλίες. Διαδραματίζουν σπουδαίο ρόλο στην αγγειογένεση λόγω μεταβολής της διαφοράς δυναμικού (Daneman & Prat, 2015).
- Ο ρόλος των **μακροφάγων** δεν είναι διαφορετικός από την φυσιολογική τους λειτουργία, αφού και εδώ, ως κύτταρα του ανοσοποιητικού «καταστρέφουν» οτιδήποτε ανεπιθύμητο περάσει (Daneman & Prat, 2015).

5.3.1.3: Αστροκύτταρα (Astrocytes)

Τα αστροκύτταρα σχηματίζουν το εξωτερικό στρώμα της μεμβράνης. Ανήκουν στην οικογένεια των νευρογλοιακών κυττάρων. Επεκτείνουν τις πολωμένες κυτταρικές διεργασίες, που περιβάλλουν είτε νευρωνικές διεργασίες είτε αιμοφόρα αγγεία. Καλύπτουν όλον τον αιματοεγκεφαλικό φραγμό χάρη στην συστοιχία των πρωτεϊνών, που έχουν στις απολήξεις τους. Τα αστροκύτταρα παρέχουν μια κυτταρική σύνδεση μεταξύ του νευρωνικού κυκλώματος και των αιμοφόρων αγγείων. Η νευροαγγειακή σύζευξη επιτρέπει στα αστροκύτταρα να αναμεταδίδουν σήματα, που ρυθμίζουν τη ροή του αίματος σε απόκριση στη νευρωνική δραστηριότητα. Αυτό περιλαμβάνει τη ρύθμιση της συστολής/διαστολής των αγγείων των λείων μυών, καθώς και των

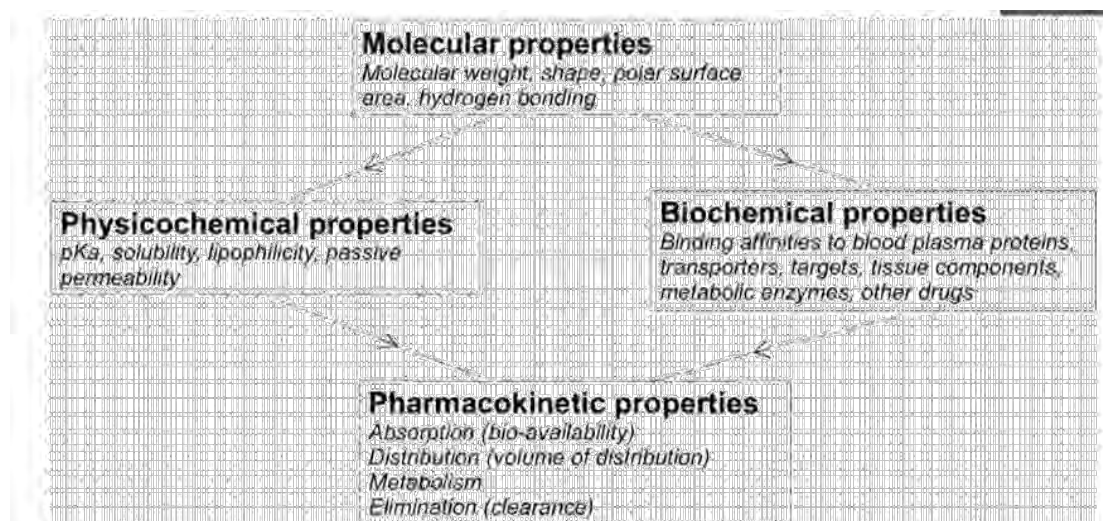
περικυττάρων, που περιβάλλουν τα τριχοειδή αγγεία. Επίσης, επεκτείνουν τις διαδικασίες πόλωσης των κυττάρων, αποτρέποντας την είσοδο πολικών μορίων. Τέλος, μεταφέρουν σήματα, που σχετίζονται με την ροή του αίματος (Daneman & Prat, 2015).



Εικόνα 15: Σχηματική Απεικόνιση των κυττάρων, που απαρτίζουν τον Αιματοεγκεφαλικό Φραγμό. Στην παρούσα εικόνα φαίνονται το ενδοθήλιο(1) στο εσωτερικό του αιμοφόρου αγγείου, η βασική μεμβράνη (2), που το περιβάλλει. Στην επιφάνεια της βρίσκονται τα περικύτταρα (3). Τέλος απεικονίζεται και ο τρόπος που λειτουργούν τα αστροκύτταρα(4), δηλαδή ο τρόπος που ενώνουν το αιμοφόρο αγγείο και τον νευρώνα (Daneman & Prat, 2015).

Κεφάλαιο 6: Χημικές Ενώσεις

6.1: Χαρακτηριστικά των Ουσιών, που μπορούν να διαπεράσουν τον Αιματοεγκεφαλικό Φραγμό



Διάγραμμα 5: Διάγραμμα των παραγόντων, που επηρεάζουν την ικανότητα των ουσιών να εισέρχονται στον Αιματοεγκεφαλικό Φραγμό (Vendel et al., 2019).

Όπως φαίνεται από το **Διάγραμμα 5**, τα χαρακτηριστικά μπορούν να χωριστούν σε τέσσερις (4) κατηγορίες:

6.1.1: Μοριακές Ιδιότητες

Μοριακό Βάρος : Όσο μικρότερο το μοριακό βάρος, τόσο πιο εύκολα μπορεί να διέλθει από το BBB ($MW \leq 500$ Da) (Vendel et al., 2019).

Σχήμα: Το σχήμα επηρεάζει τις αλληλεπιδράσεις της ουσίας με διάφορα μόρια του περιβάλλοντος, όπως πχ υποδοχείς και μπορεί να αποτελέσει τροχοπέδη για την είσοδο του (Daneman & Prat, 2015).

Πολικότητα της ενεργούς επιφάνειας: Η ύπαρξη πολικών ατόμων, όπως οξυγόνου ή αζώτου, στην επιφάνεια του μορίου καθορίζει και την περιοχή από την οποία θα εισέλθει (Daneman & Prat, 2015).

Δεσμοί Υδρογόνου: Η παρουσία ηλεκτραρνητικών ατόμων μπορεί να οδηγήσει στην δημιουργία δεσμών υδρογόνου ανάμεσα στην ουσία και στο περιβάλλον της και έτσι να μην μπορέσει να εισέλθει από το BBB (Vendel et al., 2019).

Κανόνας των 5 του Lipinski:

- Όχι πάνω από πέντε (5) δότες δεσμών υδρογόνου
- Όχι πάνω από δέκα (10) δέκτες δεσμών υδρογόνου
- Το μοριακό βάρος να μην ξεπερνά τα 500 Da
- Το $\log P_{\text{oct/wat}}$ να μην ξεπερνά το 5 (Vendel et al., 2019)

6.1.2: Φυσικοχημικές Ιδιότητες

pK_a: Κάθε ουσία έχει το δικό της pK_a. Ανάλογα το pH του περιβάλλοντος, στο οποίο βρίσκεται μπορεί να είναι φορτισμένη ή όχι. Αυτό θα καθορίσει και την είσοδο της. Γενικά ουσίες, που δεν φέρουν φορτίο διεισδύουν πιο εύκολα (Daneman & Prat, 2015).

Διαλυτότητα: Όσο πιο εύκολα διαλύεται μία ουσία στο περιβάλλον υγρό της, τόσο πιο εύκολα απορροφάται (Vendel et al., 2019).

Λιποφιλικότητα: Η λιποφιλικότητα υπολογίζεται με τον συντελεστή κατανομής $\log \frac{P_{\text{oct}}}{P_{\text{w}}}$, που είναι ο λογάριθμος του λόγου της ποσότητας της διαλυμένης ουσίας στην οκτανόλη προς την ποσότητα της ουσίας, που διαλύεται στο νερό, όταν η ουσία δεν είναι φορτισμένη. Όσο μεγαλύτερη είναι η τιμή του, τόσο πιο εύκολα μπορεί να διαπεράσει την μεμβράνη. Υπάρχει μία γραμμική σχέση ανάμεσα στο $\log P_{\text{oct/w}}$ και την παθητική διάχυση. Η γραμμικότητα αυτή παύει να υπάρχει για τις υδρόφιλες ουσίες, διότι αυτές εισέρχονται με άλλους τρόπους εκτός της παθητικής διάχυσης. (Vendel et al., 2019)

6.1.3: Βιοχημικές Ιδιότητες

Η αλληλεπίδραση της ουσίας με άλλα μόρια και πρωτεΐνες, μπορούν να μειώσουν την διαθεσιμότητα της ουσίας στο αίμα, όπως και οι δεσμοί με άλλα μόρια. Οι δεσμοί

δεν είναι απαραίτητα ομοιοπολικοί, αλλά όπως αναφέρθηκε και πριν, ακόμα και πιο ασθενείς, όπως οι δεσμοί υδρογόνου (Daneman & Prat, 2015).

6.1.4: Φαρμακοκινητικές ιδιότητες

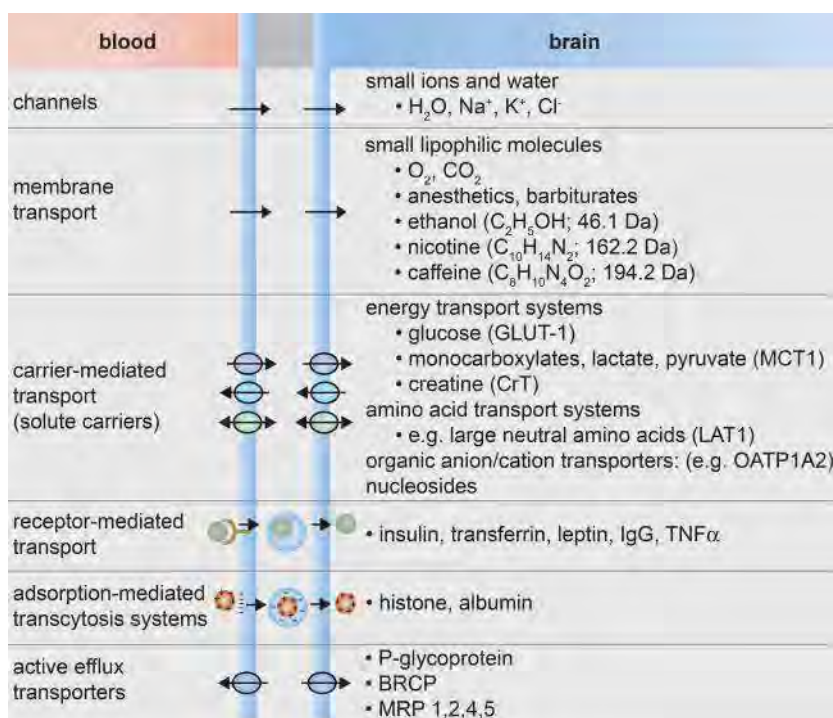
Οι φαρμακοκινητικές ιδιότητες εξαρτώνται τόσο από τις φυσικοχημικές, όσο από τις βιοχημικές ιδιότητες της ουσίας. Μέσω αυτών, ποσοτικοποιείται η διαθέσιμη ποσότητα μιας ουσίας, το οποίο περιγράφεται με το ακρωνύμιο ADME, (*Absorption* → *Απορρόφηση*, *Distribution* → *Κατανομή*, *Metabolism* → *Μεταβολισμός*, *Elimination* → *Αποβολή*). Πιο αναλυτικά:

- *Απορρόφηση*: Η απορρόφηση αναφέρεται γενικά στην απορρόφηση της ουσίας στην συστηματική κυκλοφορία (το αίμα). Η βιοδιαθεσιμότητα³⁹ είναι ένα τρόπος μέτρησης της απορρόφησης της ουσίας ή κλάσματος αυτής στο αίμα (Vendel et al., 2019).
- *Διανομή*: Η διανομή περιλαμβάνει τη μεταφορά των ουσιών μέσω φραγμών με μηχανισμούς που αναπτύσσονται ενδεδειγμένα παρακάτω (Vendel et al., 2019).
- *Μεταβολισμός*: Ο μεταβολισμός ενός φαρμάκου εξαρτάται από τη συγκέντρωση των μεταβολικών ενζύμων, τη μέγιστη ταχύτητα της αντίδρασης και της αλληλεπίδρασης της ουσίας με τα μεταβολικά ένζυμα (Vendel et al., 2019).
- *Αποβολή*: Η αποβολή μίας ουσίας αφορά τις διαδικασίες με τις οποίες μία ουσία απεκκρίνεται από το σώμα. Οι φαρμακοκινητικές ιδιότητες που σχετίζονται με την αποβολή της ουσίας είναι η εκκαθάριση⁴⁰ (clearance) και ο χρόνος ημίσειας ζωής⁴¹ (Vendel et al., 2019).

³⁹ Η **βιοδιαθεσιμότητα** : Είναι ο βαθμός και ο ρυθμός με τον οποίο το δραστικό συστατικό του φαρμάκου απορροφάται και καθίσταται διαθέσιμο στη θέση δράσης του φαρμάκου **Chow, S. C. (2014). Bioavailability and bioequivalence in drug development. Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Statistics, 6(4), 304-312.**

⁴⁰ Ως **Εκκαθάριση (Clearance)** υπολογίζεται ως ο όγκος του διαλύτη, που καθαρίζεται από το όργανο ανά μονάδα χρόνου και όχι η ποσότητα της διαλυμένης ουσίας, που αφαιρείται **(Yim, D.-S. (2017).**

Στην παρακάτω σχηματική απεικόνιση δίνονται παραδείγματα από τις ουσίες, που διαπερνούν τον αιματοεγκεφαλικό φραγμό και τον τρόπο εισόδου τους.

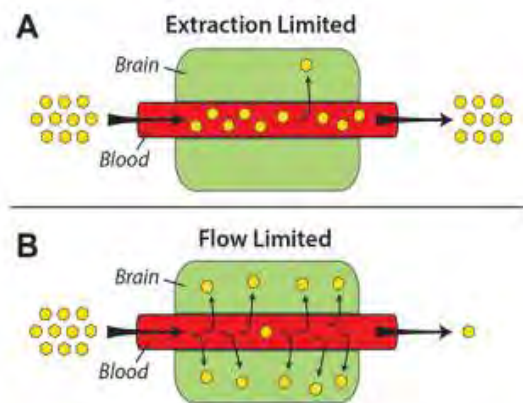


Εικόνα 16: Συστήματα μεταφοράς στον αιματοεγκεφαλικό φραγμό. (1) Μικρά ιόντα και τα μόρια του νερού μπορούν να διασχίσουν τον αιματοεγκεφαλικό φραγμό μέσω διαύλων ιόντων. (2) Μικρά λιπόφιλα μόρια, που είναι διαλυτά στην κυτταρική μεμβράνη και μπορούν να μεταφερθούν παθητικά σε όλο το κύτταρο. (3) Απαραίτητα πολικά μόρια, που δεν μπορούν να διαχυθούν μέσω της κυτταρικής μεμβράνης, μεταφέρονται κατά μήκος των κυτταρικών μεμβρανών μέσω φορέων. Αυτοί οι φορείς μπορεί να έχουν μία συγκεκριμένη κατεύθυνση, μέσα ή έξω από το κύτταρο ή αμφίδρομα. Άλλα μόρια μπορούν να μεταφερθούν στις μεμβράνες των ενδοθηλιακών κυττάρων μέσω ενεργητικής διάχυσης μέσω μεταφορέων, μέσω υποδοχέων, αλλά και με προσροφητική διακυττάρωση ή αντλίες εκροής (Sprawls et al., 2021).

Οι υδρόφιλες ενώσεις συχνά εισχωρούν στο BBB μέσω της παρακυτταρική διάχυση, ωστόσο, η παρουσία των tight junctions μεταξύ των ενδοθηλιακών κυττάρων περιορίζουν πολύ αυτή τη διαδικασία. Για να περάσει μια ένωση στον εγκέφαλο διακυτταρικά, απαιτείται μια βέλτιστη ισορροπία μεταξύ λιποφιλίας και υδροφιλίας. Το περιοριστικό βήμα για την είσοδο αυτών των μορίων στον εγκέφαλο είναι η ταχύτητα με την οποία τροφοδοτούνται στη διεπιφάνεια BBB από το αίμα. Τέτοιες ενώσεις λέγεται ότι έχουν διαπερατότητα BBB περιορισμένης ροής (*flow limit BBB permeability*). Παραδείγματα αυτών των ενώσεων είναι η αιθανόλη και η διαζεπάμη.

Tutorial for beginners: the concept of clearance explained using the example of a vacuum cleaner. *Translational and Clinical Pharmacology*, 25(1), 1-4.

⁴¹ **Χρόνος Ημίσειας Ζωής:** Το χρονικό διάστημα, που απαιτείται ώστε το 50% της ουσίας να είναι παρόν σε κάποιο άτομο, πληθυσμό ή οικοσύστημα, προκειμένου να αποδομηθεί και να εξαφανισθεί διά της φυσικής οδού. Συχνά ο όρος χρησιμοποιείται για να περιγράψει την εξαφάνιση δυνητικώς επιβλαβών ουσιών, όπως οι χημικές τοξίνες, αλλά και στα φάρμακα.
<https://www.efsa.europa.eu/el/glossary/half-life>, Accessed in 22/01/2024



Εικόνα 17: Σχηματική Απεικόνιση των τρόπων, με τους οποίους περιορίζεται η είσοδος ουσιών από το αίμα στον εγκέφαλο είτε μέσω των φυσικοχημικών ιδιοτήτων τους (A) είτε μέσω την ροή του αίματος. (Sprowls et al., 2021)

περιορισμένη διαπερατότητα BBB μεταφοράς (*extraction- limited BBB permeability*). Η μεταφορά των διαλυμένων ουσιών γίνεται σε ολόκληρη την περιοχή του τριχοειδούς δικτύου (Sprowls et al., 2021).

Αξίζει να σημειωθεί ότι τέτοιες ενώσεις περιορισμένης ροής χρησιμοποιούνται συνήθως για την μέτρηση της εγκεφαλικής ροής αίματος (Sprowls et al., 2021).

Από την άλλη, οι λιπόφιλες ενώσεις παρουσιάζουν μείωση της παθητικής διαπερατότητας στο BBB. Η είσοδος τους στον εγκεφαλικό ιστό δεν εξαρτάται από τη ροή του αίματος, αλλά από τις φυσικοχημικές ιδιότητες.

Τέτοιες ενώσεις λέγεται ότι έχουν

6.2 :Μεταφορά Ουσιών

Η κατανομή των ουσιών επηρεάζεται τόσο από τις ιδιότητες του εγκεφάλου, όσο και για τις ιδιότητες της ουσίας. Μέσα στον εγκέφαλο, η μη δεσμευμένη ουσία ανταλλάσσεται μεταξύ πολλών συστατικών, συμπεριλαμβανομένου του πλάσματος του αίματος, του ECF του εγκεφάλου, του CSF και των εγκεφαλικών κυττάρων.

Υπάρχουν διάφορα είδη μεταφορών, που λαμβάνουν χώρα και σχετίζονται με την κατανομή του ουσίας στον εγκέφαλο και αναφέρονται παρακάτω:

1. Μεταφορά ουσιών μέσω του εγκεφαλικού αγγειακού συστήματος
2. Μεταφορά ουσιών μέσω των εγκεφαλικών φραγμών
3. Μεταφορά ουσιών μέσα στα υγρά του εγκεφάλου
4. Εξω-/ενδοκυτταρική ανταλλαγή
5. Πρόσδεση Ουσιών
6. Μεταβολισμός Ουσιών (Vendel et al., 2019)

6.2.1: Μεταφορά φαρμάκων μέσω του εγκεφαλικού αγγειακού συστήματος

Οι ουσίες εντός της εγκεφαλικής κυκλοφορίας μεταφέρονται πρώτα από τα αιμοφόρα αγγεία του περιφερειακού κυκλοφορικού συστήματος και τελικά καταλήγουν στον εγκέφαλο μέσω των τριχοειδών αγγείων. Ως εκ τούτου, η ταχύτητα ροής του αίματος διαδραματίζει σπουδαίο ρόλο, αν σκεφτεί κανείς ότι στις μεγάλες αρτηρίες και φλέβες, ο ρυθμός του αίματος είναι περίπου $750 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$, ενώ εντός των εγκεφαλικών τριχοειδών, ο ρυθμός τροφοδοσίας του τριχοειδούς αγγείου είναι μόνο $6\text{--}12 \text{ nL min}^{-1}$. Μέσα στο αίμα, οι ουσίες μπορεί να συνδεθούν με τα κύτταρα του ή ιδιαίτερα, πρωτεΐνες πλάσματος, όπως π.χ την αλβουμίνη και $\alpha 1$ -όξινη γλυκοπρωτεΐνη, με αποτέλεσμα να μειώνεται σημαντικά η συγκέντρωση της μη δεσμευμένης ουσίας, η οποία σε άλλες περιπτώσεις θα διέσχιζε τον εγκεφαλικό φραγμό και θα εισερχόταν στον εγκέφαλο (Vendel et al., 2019).

6.2.2: Μεταφορά Ουσιών μέσω των Εγκεφαλικών Φραγμών

Οι ουσίες εντός του αίματος των τριχοειδών αγγείων του εγκεφάλου πρέπει να διασχίζουν τους εγκεφαλικούς φραγμούς, προκειμένου να εισέλθουν στον εγκεφαλικό ιστό. Η κίνηση των ουσιών από το πλάσμα του αίματος πέρα από τους εγκεφαλικούς φραγμούς με κατάληξη στον εγκεφαλικό ιστό περιλαμβάνει την διασταύρωση δύο διαχωρισμένων μεμβρανών σε σειρά. Η κίνηση κατά μήκος των εγκεφαλικών φραγμών μπορεί να ταξινομηθεί σε αρκετούς τρόπους μεταφοράς (Vendel et al., 2019) :

6.2.2.1: Παθητική μεταφορά

Οι ουσίες ακολουθούν μια πορεία σχετικά με την διαφορά συγκέντρωσης μεταξύ του αίματος στα τριχοειδή αγγεία του εγκεφάλου και στα υγρά του εγκεφάλου. Ο ρυθμός διάχυσης είναι ανάλογος με τη διαφορά συγκέντρωσης φαρμάκου μεταξύ και των δύο πλευρών του φράγματος. Η ευκολία διάχυσης ουσιών πέρα από το φράγμα καθορίζεται από τη διαπερατότητα του φραγμού. Η τελευταία εξαρτάται τόσο από

την εγγενή διαπερατότητα του φραγμού, όσο και από τα μοριακά χαρακτηριστικά (όπως μέγεθος, σχήμα φορτίου) της ουσίας. Μια ουσία μπορεί να διαχυθεί απευθείας μέσω των κυττάρων του φραγμού (διακυτταρική διάχυση) ή μέσω του χώρου μεταξύ των κυττάρων (παρακυτταρική διάχυση). Στο BBB, η παρακυτταρική διάχυση είναι η κύρια οδός μεταφοράς για τα υδρόφιλα μόρια, που δεν μπορούν να διασχίσουν τα κύτταρα (Vendel et al., 2019).

6.2.2.2: Διευκολυνόμενη Μεταφορά

Κατά την συγκεκριμένη περίπτωση, η μετακίνηση υποβοηθείται από πρωτεΐνες μεταφοράς. Η διαθεσιμότητα αυτών των βοηθητικών μορίων είναι περιορισμένη και ο κορεσμός των βοηθητικών μορίων μπορεί να εμφανιστεί σε αρκετά υψηλές συγκεντρώσεις ουσίες (Vendel et al., 2019).

6.2.2.3: Κυστική Μεταφορά

Σε αυτήν την κατηγορία μεταφοράς, οι ουσίες μετακινούνται μέσω κυστιδίων που σχηματίζονται εντός του φραγμού. Το φαινόμενο αυτό συμβαίνει σε μεγαλύτερο ποσοστό στο BCSFB παρά στο BBB (Vendel et al., 2019).

Υπάρχουν διάφοροι τύποι κυστικής μεταφοράς: α) *Η υγρή- φάση ενδοκυττάρωση*, β) *η προσροφητική ενδοκυττάρωση* και γ) *Η ενδοκυττάρωση με μεσολάβηση υποδοχέα*.

Αναλυτικά:

α) *Η ενδοκυττάρωση υγρής φάσης ή πινοκύττωση* είναι η ενεργειακά εξαρτώμενη πρόσληψη του ECF από κυστίδια, παίρνοντας μαζί τυχόν διαλυμένες ουσίες που κατοικούν στο υγρό (Vendel et al., 2019).

β) *Στην προσροφητική ενδοκυττάρωση*, τα θετικά φορτισμένα μόρια προσλαμβάνονται από μη ειδικά από αρνητικά κυστίδια, λόγω των ηλεκτροστατικών αλληλεπιδράσεων (Vendel et al., 2019).

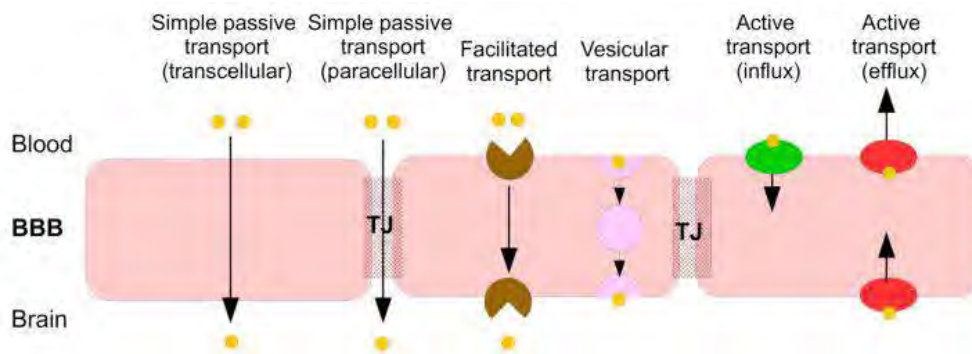
γ) *Στην ενδοκυττάρωση που προκαλείται από υποδοχείς*, σχηματίζονται κυστίδια μετά από την δέσμευση μορίων σε συγκεκριμένους υποδοχείς και στη συνέχεια μεταφέρονται εκτός του φράγματος (Vendel et al., 2019).

6.2.3: Ενεργός Μεταφορά

Στην ενεργός μεταφορά, οι ουσίες μεταφέρονται ενεργά μέσα ή έξω από τον εγκέφαλο από ειδικούς μεταφορείς. Οι ενεργοί μεταφορείς στον εγκέφαλο είναι μεταφορείς, που βρίσκονται συνδεδεμένοι στην μεμβράνη και μετακινούν ενδογενείς ή εξωγενείς ενώσεις πέρα από τα εγκεφαλικά εμπόδια. Σε αντίθεση με την διευκολυμένη μεταφορά, αυτή απαιτεί την κατανάλωση ενέργειας, γιατί οι ουσίες μεταφέρονται αντίθετα στην διαφορά συγκέντρωσης (Vendel et al., 2019).

Η συγγένεια μίας ουσίας με έναν ενεργό μεταφορέα εξαρτάται από τα μοριακά χαρακτηριστικά της, όπως για παράδειγμα την πολικότητα και τη μοριακή του επιφάνεια και άλλα που έχουν αναφερθεί σε προηγούμενη ενότητα (Vendel et al., 2019).

Η ενεργός μεταφορά έχει κατεύθυνση και μπορεί να ταξινομηθεί σε μεταφορά εισροής και μεταφορά εκροής. Οι μεταφορείς εισροής βοηθούν στον είσοδο ουσιών στον εγκέφαλο, ενώ οι μεταφορείς εκροής εκτελούν την αντίστροφη διαδρομή. Αρκετοί ενεργοί μεταφορείς εμπλέκονται στη μετακίνηση ουσιών εκτός του BBB. Τέτοιοι είναι: το οργανικό πολυπεπτίδιο 1A2 (OATP1A2) που μεταφέρει οργανικά ανιόντα, ο οργανικός μεταφορέας ανιόντων 3 (OAT3), ο μονοκαρβοξυλικός μεταφορέας 1 (MCT-1), η P-γλυκοπρωτεΐνη (P-gp), η πρωτεΐνη ανθεκτική στον καρκίνο του μαστού (BCRP) και οι πολυανθεκτικές πρωτεΐνες που σχετίζονται με 1-9 (MRP-1-9). Στο το BBB, οι περισσότεροι μεταφορείς εκροής βρίσκονται στην κορυφή της μεμβράνης του BBB (από την μεριά του αίματος). Στο BCSFB, το BCRP και το P-gp βρίσκονται στην κορυφή της μεμβράνης (από την μεριά του CSF), ενώ η MRP είναι τοποθετημένη στην πλάγια μεριά της βάσης της μεμβράνης (από την μεριά του αίματος) (Vendel et al., 2019).



Εικόνα 18: Οι πέντε (5) τρόποι μεταφοράς ουσιών μέσω των εγκεφαλικών φραγμών. Στο σχήμα φαίνεται μόνο το BBB, αλλά οι τρόποι μεταφοράς ισχύουν και για τους υπόλοιπους εγκεφαλικούς φραγμούς. Στην απλή παθητική μεταφορά, οι ουσίες διασχίζουν το BBB (ή τους άλλους εγκεφαλικούς φραγμούς) παθητικά μέσω των κυττάρων (διακυτταρικά) ή μεταξύ των κυττάρων (παρακυτταρική) με διάχυση. Στη διευκολυμένη μεταφορά, η διάχυση της ουσίας μέσω του BBB υποβοηθείται από βοηθητικά μόρια. Στη κυστική μεταφορά, τα φάρμακα κινούνται κατά μήκος του BBB μέσω κυστιδίων που σχηματίζονται εντός του φραγμού. Στην ενεργό μεταφορά, τα φάρμακα μεταφέρονται ενεργά στον εγκέφαλο με συγκεκριμένους μεταφορείς εισροής ή εκροής από τον εγκέφαλο (Vendel et al., 2019) .

6.2.4: Μεταβολισμός Ουσιών

Η μεταφορά ουσιών στον εγκέφαλο επηρεάζεται και από μεταβολικά ένζυμα που βρίσκονται στους εγκεφαλικούς φραγμούς, συμπεριλαμβανομένων των αιμοπρωτεϊνών του κυτοχρώματος P450 και 5'-διφωσφο (UDP)-γλυκουρονοσυλτρανσφεράσες ουριδίνης. Τα μεταβολικά ένζυμα μπορούν να αυξήσουν την συγκέντρωση των ουσιών στον εγκέφαλο (Vendel et al., 2019).

6.3:Χημικές Ενώσεις σε Ψηφιακή Μορφή: Χημικές Περιγραφικές Μεταβλητές

Στην υπολογιστική τοξικολογία, το όνομα και η χημική δομή των ουσιών δεν έχουν την παραδοσιακή της μορφή, αλλά αποκτούν μία πιο κωδικοποιημένη μορφή. Αυτή η κωδικοποιημένη μορφή ονομάζεται χημική περιγραφική μεταβλητή (chemical identifier).

Μία χημική περιγραφική Μεταβλητή (*Chemical Identifier*) είναι μια σειρά κειμένου, που κωδικοποιεί μια χημική ουσία. Αυτές οι κωδικοποιήσεις είναι υψίστης σημασίας, καθώς παρέχουν ένα εύκολο μέσο σύγκρισης και διάκρισης χημικών ουσιών σε ποικίλες εφαρμογές, από τον σχεδιασμό νέων υλικών μέχρι και σε νομικά και κανονιστικά θέματα. Η κύρια απαίτηση είναι ότι η κωδικοποίηση πρέπει να είναι σαφής: πρέπει να αναφέρεται ΠΑΝΤΑ η ίδια κωδικοποίηση στην ίδια ουσία, και καμία άλλη ουσία δεν μπορεί να έχει αυτήν την επιγραφή. Δύο διαφορετικές ουσίες πρέπει να έχουν διαφορετικές κωδικοποιημένες σειρές (Heller et al., 2015) .

Ο τρόπος που μπορεί να αποδοθεί μία ουσία, μπορεί να μην είναι αυστηρά μοναδικός. Η ίδια ουσία μπορεί, κατά περίπτωση, να δηλώνεται με πολλές διακριτές συνώνυμες ετικέτες (με την προϋπόθεση ότι οι κατάλογοι συνωνύμων για διαφορετικές ουσίες δεν αλληλοκαλύπτονται), κάτι το οποίο αναλύεται παρακάτω. Ένα προφανές παράδειγμα δίνεται από την IUPAC, που επιτρέπει σε κάποιον να παράγει και να χρησιμοποιεί διαφορετικά ονόματα για μια μεμονωμένη ένωση με τις εμπειρικές ονομασίες. Ωστόσο, όλα αυτά τα ονόματα προσδιορίζουν αναμφισβήτητα την ίδια χημική ένωση. Αν και, η αυστηρή μοναδικότητα είναι πάντα πολύ σημαντικό για την ύπαρξη μιας ενιαίας ετικέτας σε μια συγκεκριμένη ουσία, τις περισσότερες φορές αυτό μπορεί να μην συμβεί (Heller et al., 2015).

Για την δημιουργία της βάσης δεδομένων της εργασίας χρησιμοποιήθηκαν τρεις διαφορετικοί τύποι των chemical identifiers, κάποια από αυτά δίνουν μια πιο γενική πληροφορία και άλλα πιο ενδελεχή, όπως για παράδειγμα, για την στερεοχημεία της ουσίας. Αυτά τα οποία χρησιμοποιήθηκαν στην εργασία ήταν: ο Αριθμός CAS, τα SMILES και το InChi. Επίσης, σε κάποιες βάσεις δεδομένων, από τις οποίες συλλέχθηκαν πληροφορίες οι ενώσεις ήταν κωδικοποιημένες με την μορφή του InChi Key.

6.3.1: Αριθμός CAS

Ο αριθμός CAS (Chemical Abstracts Service) είναι ένα identifier, που έχει δημιουργηθεί από τον ομώνυμο οργανισμό Chemical Abstracts Service. Είναι μοναδικός για κάθε ένωση και αντιστοιχεί σε μία και μόνο ουσία. Αποσκοπεί στην σύνδεση της ουσίας με ένα πλήθος πληροφοριών, που αφορούν την ουσία, όμως δεν έχει καμία χημική σημασία ο τρόπος, που γράφεται, διότι είναι αριθμητικός (Heller et al., 2015).

Πίνακας 4: Παράδειγμα του αριθμού CAS της παρακεταμόλης⁴²

Όνομα Ένωσης	Αριθμός CAS
Παρακεταμόλη	103-90-2

6.3.2: SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System)

Η μορφή SMILES (Απλοποιημένο Γραμμικό Σύστημα Εισόδου Μορίων) είναι η πιο δημοφιλής σημειογραφία γραμμής, που χρησιμοποιείται σήμερα. Δημιουργήθηκε από τον David Weininger το 1986 στο Εργαστήριο Περιβαλλοντικής Έρευνας των ΗΠΑ (USEPA) και αναπτύχθηκε περαιτέρω στην εταιρεία που συνίδρυσε Daylight Chemical Information Systems. Η μορφή SMILES είναι ιδιαίτερα ελκυστική, καθώς μαθαίνεται εύκολα, είναι τόσο ευανάγνωστη και εύχρηστη από τον άνθρωπο και κωδικοποιεί τη στερεοχημεία με διαισθητικό τρόπο. Δεδομένου ότι δεν υπάρχει καμία επίσημη προδιαγραφή της μορφής SMILES, διότι δεν έχει δημοσιευτεί ποτέ, αυτό οδήγησε στην δημιουργία αρκετών ασαφειών, που οδήγησαν σε διαφορές στην εφαρμογή. Έτσι, το 2007 ο Craig James (eMolecules, Inc. και πρώην της Daylight) ξεκίνησε μια κοινοτική προσέγγιση για την ανάπτυξη μιας προδιαγραφής για το SMILES, την προδιαγραφή OpenSMILES. Η μορφή των SMILES έχει κάποια μειονεκτήματα, όπως ότι επικεντρώνεται σε μόρια των οποίων οι δεσμοί ταιριάζουν με το μοντέλο σθένους 2 ηλεκτρονίων. Επίσης, χειρίζεται μια περιορισμένη σειρά στερεοχημικών τύπων και μέχρι στιγμής δεν υπάρχει πρότυπο για το χειρισμό της αρωματικότητας. Ωστόσο, ίσως ο μεγαλύτερος περιορισμός της μορφής SMILES

⁴² National Center for Biotechnology Information (2024). PubChem Compound Summary for CID 1983, Acetaminophen. Retrieved February 21, 2024 from <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Acetaminophen>.

είναι ότι δεν υπάρχει τυπικός τρόπος δημιουργίας μιας κανονικής αναπαράστασης (O'Boyle, 2012).

Ενώ ο Weininger δημοσίευσε μια διαδικασία κανονικοποίησης για τα SMILES, η διαδικασία δεν περιελάμβανε την επεξεργασία της στερεοχημείας, μια από τις πιο δύσκολες πτυχές του προβλήματος. Το Daylight στη συνέχεια παρείχε ένα εμπορικό προϊόν για τη δημιουργία κανονικών SMILES, αλλά καθώς ο αλγόριθμος ήταν αποκλειστικός, άλλα εμπορικά και ανοιχτού κώδικα λογισμικά ανέπτυξαν τους δικούς τους αλγόριθμους για τη δημιουργία κανονικών SMILES, τα οποία όλα διέφεραν μεταξύ τους (O'Boyle, 2012).

6.3.2.1: Μορφή των SMILES

- *Άτομα*

Τα άτομα αντιπροσωπεύονται από τα ατομικά τους σύμβολα. Αυτή είναι η μόνη απαιτούμενη προϋπόθεση στα SMILES. Κάθε άτομο εκτός του υδρογόνου συμβολίζεται από το ατομικό τους σύμβολο, που κλείνεται σε αγκύλες. Το πρώτο γράμμα είναι πάντα κεφαλαίο, ενώ το δεύτερο γράμμα όταν το ατομικό σύμβολο έχει δύο γράμματα, είναι πεζό. Τα στοιχεία B, C, N, O, F, Cl, Br και I μπορεί να γράφονται χωρίς αγκύλες, εφόσον τα συνδεδεμένα υδρογόνα υπονοούνται στην απουσία αγκύλων. Οι αρωματικοί δακτύλιοι ατόμων προσδιορίζονται από μικρά γράμματα, π.χ. Ο κανονικός άνθρακας αντιπροσωπεύεται από το γράμμα C, ενώ ο αρωματικός άνθρακας με «c» (Weininger, 1988) .

C	Μεθάνιο (CH ₄)
N	Αμμωνία (NH ₃)
O	Νερό (H ₂ O)
P	Φωσφίνη (PH ₃)
S	Υδρόθειο (H ₂ S)
Cl	Υδροχλώριο (HCl)

Όταν το υδρογόνο αντιστοιχεί σε κάποια λειτουργική ομάδα, όπως και όταν υπάρχει φορτίο, τότε γράφεται μέσα σε αγκύλες (Weininger, 1988).

[H ⁺]	Πρωτόνιο
[OH ⁻]	Υδροξείδιο
[OH ³⁺]	Υδροζώνιο
[Fe ²⁺]	Δισθενές Κατιόν Σιδήρου
[NH ⁴⁺]	Κατιόν Αμμωνίου

- **Δεσμοί**

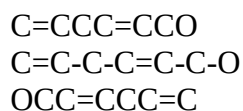
Μονοί, διπλοί, τριπλοί και αρωματικοί δεσμοί αντιπροσωπεύονται από τα σύμβολα —, =, #, και : αντίστοιχα. Οι απλοί και οι αρωματικοί δεσμοί μπορεί να παραλείπονται (Weininger, 1988).

CC	Αιθάνιο (CH ₃ CH ₃)
C=C	Αιθένιο (CH ₂ =CH ₂)
CCO	Αιθανόλη (CH ₃ CH ₂ OH)
COC	Διμεθυλεστέρας (CH ₃ OCH ₃)
C=O	Φορμαλδεϋδη (CH ₂ O)
O=C=O	Διοξείδιο του Άνθρακα (CO ₂)
O=CO	Μεθανικό Οξύ (HCOOH)
C#N	Υδροκυάνιο (HCN)
[H][H]	Μοριακό Υδρογόνο (H ₂)

Για γραμμικές δομές, ο συμβολισμός SMILES αντιστοιχεί σε συμβατική διαγραμματική σημειογραφία και τα υδρογόνα μπορούν να παραλειφθούν (Weininger, 1988).



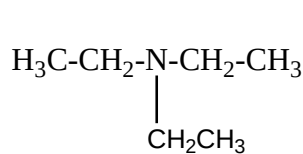
Δομή



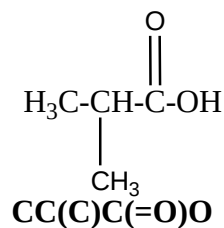
Έγκυρα SMILES

- **Διακλαδώσεις**

Οι διακλαδώσεις συμβολίζονται με παρενθέσεις (Weininger, 1988).



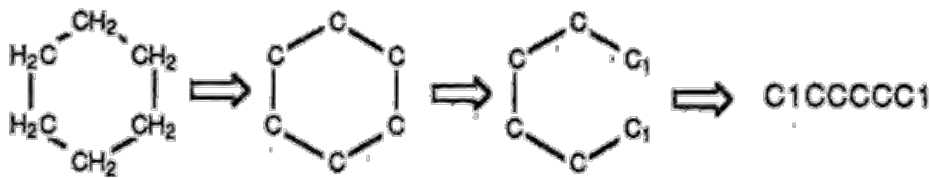
Τριαιθυλαμίνη



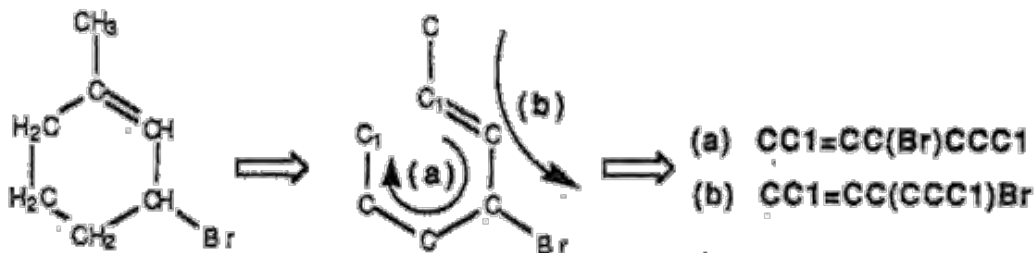
Ισοβουτυρικό Οξύ

- **Κυκλικές Δομές**

Για την αναπαράσταση των κυκλικών δομών, απαραίτητη προϋπόθεση είναι το «σπάσιμο» ενός απλού (ή αρωματικού) δεσμού σε κάθε δακτύλιο. Τα κομμάτια, που προκύπτουν αριθμούνται με οποιαδήποτε σειρά, υποδηλώνοντας το άνοιγμα του δακτυλίου (ή το κλείσιμο του δακτυλίου) με ένα ψηφίο αμέσως μετά το ατομικό σύμβολο σε κάθε κλείσιμο δακτυλίου. Παρακάτω φαίνεται το παράδειγμα του κυκλοεξανίου (Weininger, 1988):

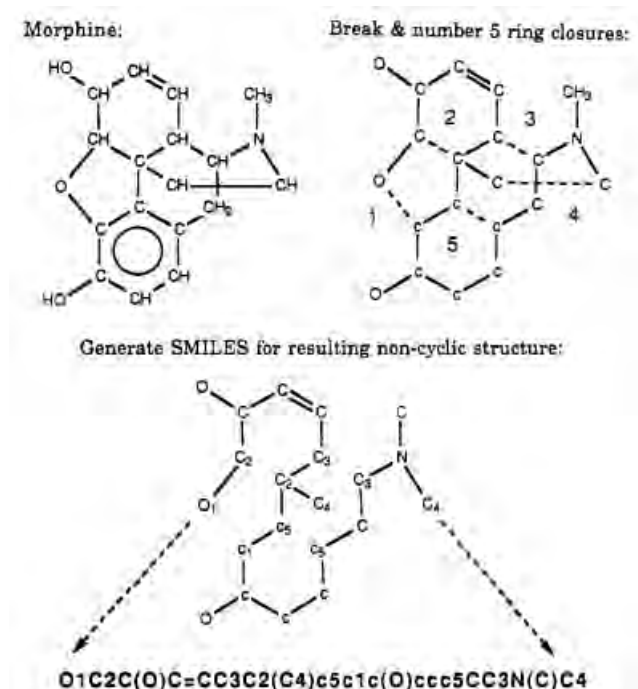


Συνήθως υπάρχουν πολλές διαφορετικές, αλλά εξίσου έγκυρες περιγραφές. Η μέθοδος SMILES δεν έχει μια προτιμώμενη καταχώριση στην είσοδο των δεδομένων. Για παράδειγμα για το 1-μεθυλ-3-βρωμο-κυκλοεξένιο υπάρχουν δύο τρόποι να γραφεί, όπως φαίνεται παρακάτω (Weininger, 1988) :



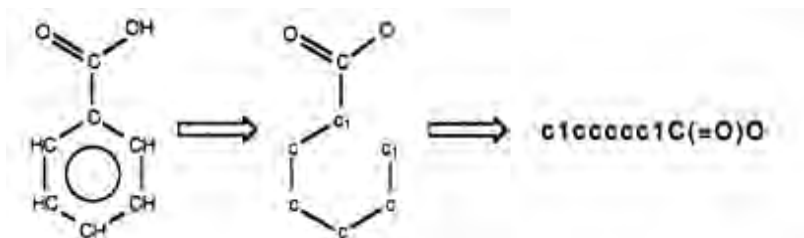
- **Μη συνδεδεμένες δομές**

Οι μη συνδεδεμένες δομές είναι γραμμένες ως μεμονωμένες δομές που χωρίζονται από μια τελεία. Η σειρά με την οποία παρατίθενται τα ιόντα ή οι υποκαταστάτες είναι αυθαίρετη (Weininger, 1988).



- **Αρωματικότητα**

Μπορούν να διακριθούν αρωματικές δομές γράφοντας τα άτομα στον αρωματικό δακτύλιο με πεζά γράμματα. Για παράδειγμα, το βενζοϊκό οξύ (Weininger, 1988) :



6.3.3: InChi

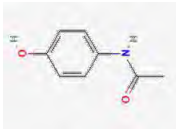
Το IUPAC International Chemical Identifier (InChI) είναι μια μηχανικά αναγνώσιμη σειρά συμβόλων, που επιτρέπει σε έναν υπολογιστή να αναπαραστήσει την ένωση με εντελώς ξεκάθαρο τρόπο. Τα InChI παράγονται μέσω υπολογιστή από δομές, που σχεδιάζονται στην οθόνη και το αντίστροφο, δηλαδή η αρχική δομή μπορεί να αναγεννηθεί από ένα InChI με κατάλληλο λογισμικό. Ένα InChI δεν είναι άμεσα κατανοητό στον αναγνώστη (και δεν σχεδιάστηκε για να είναι εύκολα κατανοητό). Είναι περισσότερο σαν γραμμωτός κώδικας (barcode) (Heller et al., 2013) .

Υπάρχουν περισσότεροι από ένας τρόποι προσδιορισμού μοριακών δομών και αυτοί που βασίζονται σε «πίνακες σύνδεσης» (προδιαγραφές ατόμων συνδεσιμότητας) είναι πιο κατάλληλοι για επεξεργασία μέσω υπολογιστή από τη συμβατική ονοματολογία, καθώς είναι αναπαραστάσεις μοριακών γραφημάτων, που διέπονται και αντιμετωπίζονται εύκολα από θεωρία γραφημάτων. Αυτό δεν σημαίνει ότι η παραδοσιακή ονοματολογία IUPAC θα αντικατασταθεί τελικά με μεθόδους υπολογιστών. Η συνεχιζόμενη ανάπτυξη της λεκτικής ονοματολογίας έγινε παράλληλα με την ανάπτυξη των InChIs (Heller et al., 2013).

Ένα InChI δημιουργείται από μια ηλεκτρονική αναπαράσταση ενός διαγράμματος μοριακής δομής, που παράγεται από λογισμικό σχεδίασης χημικών δομών. Μια πλήρης και λεπτομερής περιγραφή του InChI και του λογισμικού για την παραγωγή του είναι διαθέσιμη από τον ιστότοπο της IUPAC και περισσότερες πληροφορίες μπορούν να ληφθούν από τον ιστότοπο του InChI Trust (Heller et al., 2013).

Παράδειγμα:

Πίνακας 5: Πίνακας τους τρεις διαφορετικούς τρόπους γραφής της παρακεταμόλης⁴³

Εμπειρική Ονομασία Ουσίας	Παρακεταμόλη
Ονομασία κατά IUPAC	N-(4-υδροξυφαινυλ)ακεταμίδιο
2D Χημική Δομή	
InChi	InChI=1S/C8H9NO2/c1-6(10)9-7-2-4-8(11)5-3-7/h2-5,11H,1H3,(H,9,10)

⁴³ National Center for Biotechnology Information (2024). PubChem Compound Summary for CID 1983, Acetaminophen. Retrieved January 4, 2024 from <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Acetaminophen>

8.3.3.1: Δομή των InChIs

Η μετατροπή των δομικών πληροφοριών στο InChI βασίζεται σε ένα σύνολο συμβάσεων δομής IUPAC και στους κανόνες του έργου InChI για κανονικοποίηση (μετατροπή σε μια ενιαία, προβλέψιμη ακολουθία) μιας αναπαράστασης δομής. Το InChI, που προκύπτει είναι απλώς μια σειρά χαρακτήρων που χρησιμεύουν για να προσδιορίσουν μοναδικά τη δομή από την οποία προήλθε. Αυτή η μετατροπή της γραφικής αναπαράστασης μιας χημικής ουσίας στη μοναδική συμβολοσειρά χαρακτήρων InChI, μπορεί να πραγματοποιηθεί αυτόματα από οποιονδήποτε χρησιμοποιεί τα ελεύθερα διαθέσιμα προγράμματα και η εγκατάσταση μπορεί να ενσωματωθεί σε οποιοδήποτε πρόγραμμα, που ασχολείται με χημικές δομές. Το InChI χρησιμοποιεί μια πολυεπίπεδη μορφή για να αναπαραστήσει όλες τις διαθέσιμες δομικές πληροφορίες που σχετίζονται με την ταυτότητα της ένωσης. Τα επίπεδα InChI παρατίθενται παρακάτω. Κάθε επίπεδο σε μια αναπαράσταση InChI περιέχει έναν συγκεκριμένο τύπο δομικών πληροφοριών. Αυτά τα επίπεδα, που εξάγονται αυτόματα από τη δομή εισόδου, έχουν σχεδιαστεί έτσι ώστε κάθε διαδοχικό επίπεδο να προσθέτει επιπλέον λεπτομέρειες στο Identifier. Τα συγκεκριμένα στρώματα, που δημιουργούνται εξαρτώνται από το επίπεδο της διαθέσιμης δομικής λεπτομέρειας και από το αν λαμβάνεται υπόψη ή όχι η ταυτομέρεια. Φυσικά, εάν υπάρχουν ασάφειες ή αβεβαιότητες στην αναπαράσταση της αρχικής δομής, αυτές θα παραμείνουν στο InChI. Δεδομένου ότι ο σχεδιασμός της δομής για οποιαδήποτε συγκεκριμένη ένωση δεν γίνεται πάντα με τον ίδιο τρόπο, η 100% τελειότητα δεν θα είναι δυνατή (Heller et al., 2013).

Αυτός ο σχεδιασμός πολυεπίπεδης δομής ενός InChI προσφέρει μια σειρά από πλεονεκτήματα. Εάν δύο δομές για την ίδια ουσία σχεδιάζονται σε διαφορετικά επίπεδα λεπτομέρειας, η μία με το χαμηλότερο επίπεδο λεπτομέρειας, στην πραγματικότητα, θα περιέχεται στην άλλη. Συγκεκριμένα, εάν η μία ουσία σχεδιάζεται με στερεοδεσμούς και η άλλη χωρίς, τα στρώματα στο δεύτερο θα είναι υποσύνολο του πρώτου. Το ίδιο ισχύει για ενώσεις που αντιμετωπίζονται από έναν συγγραφέα ως ταυτομερή και από έναν άλλο ως ακριβείς δομές με όλα τα άτομα υδρογόνου σταθερά. Αυτό μπορεί να λειτουργήσει σε πιο λεπτό επίπεδο. Για παράδειγμα, εάν ένας συγγραφέας περιλαμβάνει διπλό δεσμό και τετραεδρική στεreoχημεία, αλλά ένας άλλος παραλείπει τη στεreoχημεία, το InChI για την τελευταία περιγραφή θα περιέχεται σε αυτήν για την πρώτη (Heller et al., 2013).

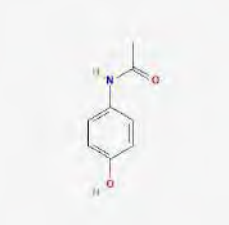
Τα διαδοχικά στρώματα ενός InChI χαρακτηρίζονται ως εξής:

- Χημική Δομή
- Σύνδεση (χωρίς την ύπαρξη δεσμών)
 - Μη συνδεδεμένα μέταλλα
 - Συνδεδεμένα μέταλλα
- Ισότοπα
- Στερεοχημεία
 - διπλός δεσμός
 - τετράεδρη δομή
- Ταυτομερή (Heller et al., 2013)

6.3.4: InChi Key

Ενώ το InChI είναι μια μοναδική συμβολοσειρά, που προσδιορίζει μια καθορισμένη χημική δομή, το μήκος της αυξάνεται με το μέγεθος της δομής που σχεδιάζεται. Μια δομή με 100+ άτομα (το InChI επιτρέπει επί του παρόντος έως και 1000 άτομα) δίνει μια πολύ μεγάλη συμβολοσειρά. Η προσπάθεια χρήσης του σε οποιαδήποτε μηχανή αναζήτησης στο Διαδίκτυο (Google, Bing, Yahoo κ.λπ.) δεν παράγει αξιόπιστα αποτελέσματα. Αυτές οι μηχανές αναζήτησης δεν χρησιμοποιούν περισσότερους από 30 χαρακτήρες. Δεν τους ενδιαφέρει η ευαισθησία πεζών-κεφαλαίων, και δεν ενδιαφέρονται για έναν αριθμό χαρακτήρων InChI όπως -, +, /, ή \. Έτσι, σε ένα σεμινάριο που έδωσαν δύο από τους συγγραφείς (SRH και SES) στο Google έγινε πολύ σαφές ότι το έργο χρειαζόταν κάτι περισσότερο από τη συμβολοσειρά InChI, εάν τα InChI χρησιμοποιούνταν για παραγωγικές και επιτυχημένες αναζητήσεις στο διαδίκτυο. Ο απλούστερος και καλύτερος τρόπος συμπίεσης μιας συμβολοσειράς ήταν να χρησιμοποιηθεί ένας πολύ γνωστός, καλά μελετημένος, καλά κατανοητός και καλά περιγραφόμενος αλγόριθμος κατακερματισμού. Έτσι δημιουργήθηκε το InChIKey. Το InChIKey είναι μια συμπαγής έκδοση 27 χαρακτήρων του InChI που προορίζεται για αναζήτηση/εύρεση στο Διαδίκτυο και σε βάσεις δεδομένων και βασίζεται σε έναν κατακερματισμό SHA-256 της συμβολοσειράς χαρακτήρων InChI. (Heller et al., 2013)

Πίνακας 6: Πίνακας με τους τέσσερις (4) διαφορετικούς τρόπους γραφής της παρακεταμόλης⁴⁴

Εμπειρική Ονομασία Ουσίας	Παρακεταμόλη
Ονομασία κατά IUPAC	N-(4-υδροξυφαινυλ)ακεταμίδιο
2D Χημική Δομή	
InChi	InChI=1S/C8H9NO2/c1-6(10)9-7-2-4-8(11)5-3-7/h2-5,11H,1H3,(H,9,10)
InChi Key	RZVAJINKPMORJF-UHFFFAOYSA-N

⁴⁴ National Center for Biotechnology Information (2024). PubChem Compound Summary for CID 1983, Acetaminophen. Retrieved January 4, 2024 from <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Acetaminophen>

Παρακάτω παρουσιάζονται τα προτερήματα και τα μειονεκτήματα των τεσσάρων chemical identifier.

Πίνακας 7: Συγκεντρωτικός Πίνακας των θετικών και των αρνητικών των τεσσάρων chemical identifiers.

Τύπος	Θετικό	Αρνητικό
Αριθμός CAS (Heller et al., 2013)	- Μοναδικότητα: Διασφαλίζουν τη μοναδικότητα και τη σαφή αναγνώριση των χημικών ουσιών. - Ανάκτηση πληροφοριών: Αποτελεί αποτελεσματικό εργαλείο για τον εντοπισμό και την ανάκτηση ακριβών πληροφοριών σχετικά με συγκεκριμένες ουσίες από εκτεταμένες βάσεις δεδομένων χημικών. - Διεθνής Τυποποίηση: Οι αριθμοί CAS παρέχουν ένα τυποποιημένο σύστημα χημικής ταυτοποίησης που υπερβαίνει τις γλωσσικές και τοπικές παραλλαγές. - Κανονιστική συμμόρφωση: Οι ρυθμιστικοί φορείς, όπως ο Οργανισμός Προστασίας του Περιβάλλοντος (EPA) και ο Ευρωπαϊκός Οργανισμός Χημικών Προϊόντων (ECHA), βασίζονται στους αριθμούς CAS για την ακριβή αναγνώριση και παρακολούθηση χημικών ουσιών.	- Περιορίζεται σε καθαρές ουσίες και όχι σε μείγματα, εμπορικά προϊόντα ή μη χημικές οντότητες όπως ζωντανούς οργανισμούς, μέταλλα ή στοιχεία. - Ενημερώσεις και Συντήρηση: Καθώς ανακαλύπτονται ή συντίθενται συνεχώς νέες ενώσεις, η βάση δεδομένων CAS απαιτεί τακτικές ενημερώσεις για να φιλοξενήσει την κεντρική εκχώρηση νέων αριθμών CAS. Μια ακριβής και ενημερωμένη βάση δεδομένων στον διαρκώς διευρυνόμενο τομέα της χημείας μπορεί να είναι πολύπλοκη και με ένταση πόρων.
SMILES (Heller et al., 2013)	- Ο τρόπος γραφής τους μαθαίνεται εύκολα, είναι τόσο ευανάγνωστα και εύχρηστη από τον άνθρωπο.	- Απόδοση των SMILES με διαφορετικό τρόπο ανάλογα με το λογισμικό, που χρησιμοποιείται - Επικεντρώνεται σε μόρια των οποίων οι δεσμοί ταιριάζουν με το μοντέλο σθένους 2 ηλεκτρονίων. - Χειρίζεται μια περιορισμένη σειρά στερεοχημικών τύπων και μέχρι στιγμής δεν υπάρχει πρότυπο για το χειρισμό της αρωματικότητας.
InChi (Heller et al., 2013)	- Αποτελεί μια μοναδική συμβολοσειρά που προσδιορίζει μια καθορισμένη χημική δομή. - Λαμβάνεται υπόψη και η στερεοχημεία των ουσιών - Είναι ο πιο έγκυρος τύπος για τον έλεγχο των ουσιών.	- Γίνεται δύσκολη η αναζήτηση μορίων, με μεγάλο αριθμό ατόμων, διότι οι μηχανές αναζήτησης χρησιμοποιούν μόνο 30 χαρακτήρες.
Inchi Key(Heller et al., 2013)	- Είναι μια συμπαγής έκδοση 27 χαρακτήρων του InChI, που προορίζεται για αναζήτηση/εύρεση στο Διαδίκτυο και σε βάσεις δεδομένων.	- Δεν έχει την ίδια ακρίβεια, που έχει το InChI.

6.4: Molecule Files

Τα molecule files (mol files) αναπτύχθηκαν από την MDL Information Systems για χρήση στα δικά της προγράμματα, αλλά εν τέλει έγινε διαθέσιμο στο ευρύ κοινό. Το molfile MDL αποτελείται από τέσσερα κύρια τμήματα:

Το πρώτο είναι μια κεφαλίδα που περιέχει πληροφορίες σχετικά με το λογισμικό δημιουργίας και τα δεδομένα που χρησιμοποιούνται για την ερμηνεία του υπόλοιπου αρχείου. Για παράδειγμα, η κεφαλίδα περιλαμβάνει πληροφορίες για το πόσες γραμμές κάθε τύπου υπάρχουν (Baumgras & Rogers, 1995).

Το δεύτερο τμήμα ονομάζεται ατομικό επίπεδο. Περιέχει μία γραμμή για κάθε άτομο της δομής και δίνει συντεταγμένες, τον τύπο του ατόμου και ορισμένες άλλες πληροφορίες για το άτομο, όπως αν φέρει φορτίο, είναι ισότοπο κ.λπ. Ορισμένες από τις πληροφορίες αυτές αντιγράφονται επίσης σε μεταγενέστερο επίπεδο και δεν χρειάζεται να εμφανίζονται και στο δεύτερο επίπεδο. Ωστόσο, περιλαμβάνεται και στις δύο θέσεις για συμβατότητα με παλαιότερο λογισμικό (Baumgras & Rogers, 1995).

Η τρίτη ενότητα περιέχει πληροφορίες για τους δεσμούς και ονομάζεται αντίστοιχα επίπεδο δεσμών. Υπάρχει μια γραμμή για κάθε δύο συνδεδεμένα άτομα. Κάθε γραμμή παρέχει πληροφορίες για τον τύπο του δεσμού (διπλό, απλό, κ.λπ.) και οποιαδήποτε σχετική στερεοχημεία. (Baumgras & Rogers, 1995).

Το τελευταίο τμήμα είναι το επίπεδο των ιδιοτήτων, το οποίο είναι το πιο περίπλοκο. Κωδικοποιημένες πληροφορίες σχετικά με τα άτομα, τους δεσμούς και ολόκληρο το μόριο υπάρχουν σε αυτό και είναι το επίπεδο, που κάνει το molfile τόσο εύρωστο. Το καθιστά επίσης επεκτάσιμο, καθώς άλλες χημικές πληροφορίες υποστηρίζονται από το molfile, επίσης μπορούν εύκολα να προστεθούν νέοι κωδικοί σε αυτήν την ενότητα για τη μεταφορά τους (Baumgras & Rogers, 1995).

Όπως αναφέρθηκε προηγουμένως, ορισμένες πληροφορίες σε προηγούμενα επίπεδα, όπως τα φορτία στα άτομα, διπλασιάζονται στο επίπεδο ιδιοτήτων (το ισότοπο, η ρίζα και τα φορτισμένα άτομα περιγράφονται με σαφήνεια στις γραμμές με την ένδειξη ISO, RAD και CHG αντίστοιχα). Είναι σημαντικό κάθε προϊόν, που ισχυρίζεται ότι υποστηρίζει το molfile να μπορεί να διαβάζει και τα δύο και να γράφει όλα αυτά τα επίπεδα με μεγάλη ακρίβεια, με πιθανή εξαίρεση τις διπλότυπες πληροφορίες (Baumgras & Rogers, 1995).

6.5: Molecular Fingerprints

Τα molecular fingerprints κωδικοποιούν ιδιότητες μικρών μορίων και αξιολογούν τις ομοιότητές τους υπολογιστικά μέσω συγκρίσεων συμβολοσειρών bit. Με βάση την ομοιότητα με ένα βιολογικά ενεργό πρότυπο, οι μέθοδοι τους επιτρέπουν τον εντοπισμό πρόσθετων ενώσεων με μεγαλύτερη πιθανότητα εμφάνισης παρόμοιων βιολογικών δραστηριοτήτων έναντι του ίδιου στόχου - μια διαδικασία που συνήθως αναφέρεται ως εικονική διαλογή (virtual selection → VS) (Muegge & Mukherjee, 2016).

Ενότητα 4 : Αποτελέσματα

Κεφάλαιο 1: Δημιουργία Βάσης Δεδομένων

Η βάση δεδομένων της παρούσας εργασίας αποτελείται από 8.569 ενώσεις. Οι πληροφορίες για τις ενώσεις προέκυψαν από την βιβλιογραφική αναζήτηση δημοσιευμένων άρθρων σε επιστημονικά περιοδικά, που παρουσιάζονται στο παρακάτω πίνακα.

Πίνακας 8: Συγκεντρωτικός Πίνακας των ερευνητικών εργασιών, από τις οποίες αντλήθηκαν δεδομένα για την κατασκευή της Βάσης Δεδομένων της παρούσας εργασίας.

Βιβλιογραφία	Αριθμός Ενώσεων	Εργασία
(Platts et al., 2001)	148	Δημιουργία ενός LFER (Σχέση γραμμικής ελεύθερης ενέργειας) μεταξύ των ουσιών, που αλληλεπιδρούν με το BBB
(Li et al., 2005)	415	Επίδραση των Molecular descriptors στην πρόβλεψη της διαπερατότητας του BBB
(Chen et al., 2009)	145	Δημιουργία Μοντέλου Πρόβλεψης της Διαπερατότητας με Artificial Neural Network (ANN)
(Vilar et al., 2010)	307	Πρόβλεψη παθητικής κατάτμησης αίματος-εγκεφάλου
(Muehlbacher et al., 2011)	362	Ποιοτική Πρόβλεψη της Διαπερατότητας του BBB
(Nikolic et al., 2013)	29	Πρόβλεψη της διαπερατότητας των α- Ανδρογόνων και Ιμιδαζολικών Υποδοχέων στο BBB
(Brito-Sánchez et al., 2015)	582	Πρόβλεψη της διαπερατότητας στο BBB για την ανάπτυξη φαρμάκων
(Garg et al., 2015)	249	Δημιουργία μοντέλου πρόβλεψης της διαπερατότητας στο BBB για την μελέτη της συνεισφοράς της πρωτεΐνης BCPR
(Dichiara et al., 2019)	328	Εύρεση tuning ιδιοτήτων για την διαπερατότητα του BBB
(Meng et al., 2021)	1.058	Δημιουργία μίας μεγάλης βάσης δεδομένων ουσιών για την διαπερατότητα του BBB
(Shin et al., 2021)	231	Ανάπτυξη ενός μοντέλου για την πρόβλεψη διαπερατότητας των βιοκτόνων από το BBB
(Mazumdar et al., 2023)	8.154	Μοντέλο μηχανική μάθησης βασισμένο σε dynamic consensus model για την πρόβλεψη της διαπερατότητας του BBB

Για την κατασκευή της βάσης δεδομένων ήταν ζητούμενα:

- Το όνομα της ουσίας (είτε εμπειρική ονομασία είτε ονομασία κατά IUPAC)
- Ο αριθμός CAS
- Το SMILES
- Το InChi
- Το BBB+/ BBB-

Όμως, η κάθε μεμονωμένη βάση δεδομένων περιείχε κάποια από τα παραπάνω ζητούμενα, για παράδειγμα υπήρχαν βάσεις που έδιναν το όνομα της ένωσης, τα SMILES, το InChi. Όμως, κάποιες άλλες περιείχαν μόνο το όνομα, το CAS number ή το InChi, ενώ σε κάποιες υπήρχε το InChi Key και τα SMILES.

Προκειμένου να υπάρχει μια ομοιομορφία στην βάση δεδομένων, συμπληρώθηκαν οι πληροφορίες, που έλειπαν για κάθε μία ουσία. Η συμπλήρωση των πληροφοριών έγινε μέσω αναζήτησης της ουσία στην Μηχανή Αναζήτησης του PubChem⁴⁵.

Ο αρχικός αριθμός των ουσιών ήταν 14.708. Ο λόγος, που μειώθηκε ο αριθμός τους ήταν, γιατί υπήρχαν διπλότυπες ουσίες, δηλαδή ουσίες που σε κάποιες βάσεις είχαν την εμπειρική τους ονομασία και σε άλλες την ονομασία κατά IUPAC ή ίδιες ουσίες γραμμένα τα SMILES τους με διαφορετικό τρόπο. Όποτε, αφότου είχαν συμπληρωθεί όλες οι ζητούμενες πληροφορίες τους, επιλέχθηκαν οι ουσίες με τα μοναδικά InChi, που όπως θα αναφέρθηκε παραπάνω είναι **ο πιο αξιόπιστος** τρόπος αναζήτησης, με την χρήση της γλώσσας προγραμματισμού R. Έτσι, δημιουργήθηκε η τελική μορφή της βάσης δεδομένων με 8.569 ενώσεις.

Κεφάλαιο 2: Μετατροπή του log BB σε BBB+/BBB-

Όπως έχει προαναφερθεί παραπάνω, σκοπός της παραπάνω εργασίας είναι η δημιουργία ενός μοντέλου μηχανικής μάθησης, που θα προβλέπει αν μία χημική ουσία θα μπορεί να διαπεράσει τον Αιματοεγκεφαλικό φραγμό (BBB+ → διέρχεται

⁴⁵<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>, Accessed in 04/01/2024

από τον Αιματοεγκεφαλικό Φραγμό, BBB- $\rightarrow$ δεν διέρχεται από τον Αιματοεγκεφαλικό Φραγμό). Σε κάποιες βάσεις δεδομένων δινόταν ποσοτική πληροφορία, που προέκυπτε από τον λογάριθμο της συγκέντρωσης της ουσίας στον εγκέφαλο, προς την συγκέντρωση της ουσίας στο αίμα ($\log \frac{C_{Brain}}{C_{Blood}}$). Κρίθηκε απαραίτητο η μετατροπή αυτής της πληροφορίας από ποσοτική σε ποιοτική, με σκοπό την αύξηση της διαθέσιμης πληροφορίας του σετ δεδομένων, που θα χρησιμοποιηθεί στην εκπαίδευση. Πιο συγκεκριμένα, μετά από βιβλιογραφική αναζήτηση (Kunwittaya et al., 2013), βρέθηκε ότι οι ουσίες με $\log BB \geq 0,3$, μπορούν να διεισδύσουν πολύ εύκολα τον Αιματοεγκεφαλικό φραγμό (BBB +), ουσίες με $\log BB$, που βρίσκεται ανάμεσα στο 0.3 και στο -1, πάλι μπορούν να το διαπεράσουν όχι όμως με μεγάλη ευκολία ($-1 < \log BB < 0.3 \rightarrow BBB+$). Τέλος, ουσίες με $\log BB \leq -1$, δεν διέρχονται και απλά διαχέονται στο αίμα (BBB-). Με βάση αυτές τις συνθήκες μετατράπηκαν οι δοθείσες πληροφορίες στις ζητούμενες. Στη βάση δεδομένων το BBB+ δίνεται με τον συμβολισμό «1» και αντίστοιχα το BBB- δίνεται με τον συμβολισμό «0».

Κεφάλαιο 3: Μετατροπή των InChi σε SMILES

Με την εύρεση των InChi, επιλύθηκε το πρόβλημα των διπλότυπων ενώσεων. Όμως, το επόμενο βήμα είναι η εύρεση των χημικών μεταβλητών (chemical descriptors), η οποία γίνεται μέσω της αναζήτησης των SMILES των ουσιών, τα οποία θα πρέπει να ήταν να γραμμένα με έναν ενιαίο τρόπο. Έτσι, η μετατροπή από InChi σε SMILES επιτεύχθηκε χάρη στο ChemSpider⁴⁶. Είναι μία δωρεάν βάση δεδομένων χημικών δομών και παρέχει γρήγορη πρόσβαση σε περισσότερες από 100 εκατομμύρια δομές, ιδιότητες και σχετικές πληροφορίες. Η αναζήτηση έγινε με την χρήση της γλώσσας προγραμματισμού R και πιο συγκεκριμένα του περιβάλλοντος του R Studio. Προκειμένου να γίνει αυτό αρχικά χρησιμοποιήθηκαν οι βιβλιοθήκες κάποιων πακέτων εντολών, που είναι απαραίτητα για να «τρέξει» ο κώδικας. Αυτά ήταν :

- Web Chem
- Dplyr

⁴⁶ <https://www.chemspider.com/>, Accessed in 15/01/2024

- Stringr
- rJava
- rcdk
- Fingerprint
- Caret

Χρησιμοποιήθηκαν API keys από το ChemSpider. Το κάθε API key χρησιμοποιείται για την αναζήτηση 1.000 ενώσεων. Για αυτό, χωρίστηκε η βάση δεδομένων σε εννέα (9) μέρη.

Αφότου έγινε η μετατροπή, τα εννέα αρχεία, που προέκυψαν ενώθηκαν σε ένα κοινό αρχείο και αφαιρέθηκαν οι κενές τιμές (NA values).

Στη συνέχεια τα SMILES μετατράπηκαν σε molecule files. Αντίστοιχα τα molecule files μετατράπηκαν σε molecular fingerprints.

Κεφάλαιο 4: Εύρεση Chemical Descriptors

Έπειτα ακολουθεί η συλλογή φυσικοχημικών ιδιοτήτων μέσω των chemical descriptors, οι οποίοι είναι:

- To alogP
- To xlogP
- To MW
- To allDescsA
- To allDescsB
- To allDescsC
- To allDescsD
- To allDescsE
- To allDescsF

Μετά από πολύωρη αναζήτηση των chemical descriptors, προέκυψαν 430 μεταβλητές και συλλέχθηκαν σε ένα ενιαίο αρχείο. Κάποιες, όμως, δεν περιείχαν κάποια πληροφορία (κενές στήλες) και έτσι ο αριθμός τους μειώθηκε στα 267.

Στόχος της προηγούμενης διαδικασίας ήταν η εύρεση των στατιστικά σημαντικών μεταβλητών, που θα μπορούσαν να συνδυαστούν με την μελετώμενη ιδιότητα της διαπερατότητας του αιματοεγκεφαλικού φραγμού. Μία τιμή είναι στατιστικά

σημαντική, όταν ένα σύνολο παρατηρούμενων δεδομένων, που περιέχει δεν είναι αποτέλεσμα τύχης αλλά μπορεί αντίθετα να αποδοθεί σε μια συγκεκριμένη αιτία ⁴⁷. Η εύρεση των μεταβλητών έγινε με την χρήση δύο μεθόδων, των LASSO και RFE.

Τα αποτελέσματα των παραπάνω διαδικασιών φαίνεται στον **Πίνακα:**

Πίνακας 9: Πίνακας, όπου παρουσιάζεται η μέθοδος για την εύρεση των στατικά σημαντικών μεταβλητών και το αποτέλεσμα της κάθε μεθόδου.

Μέθοδος	Chemical Descriptors
LASSO	BCUTw.1h, MW, nRings6, nRings9, WTPT.3, WTPT.5, VABC, MDEC.24, khs.aasN, khs.aaO, SCH.6, VCH.4, ATSc5
RFE	WTPT.5, BCUTc.1l, ATSc2

⁴⁷ <https://www.investopedia.com/terms/s/statistical-significance.asp> , Accessed in 04/01/2024

Τι αντιπροσωπεύουν οι Δεκαπέντε (15) Μεταβλητές, που προέκυψαν;

Πίνακας 10: Πίνακας, που αναγράφεται η οικογένεια, που ανήκει κάθε μία από τις προαναφερθείσες μεταβλητές, καθώς τι πληροφορίες δίνει αυτή σχετικά με την κάθε ένωση.

Κάποιες μεταβλητές ανήκουν στην ίδια οικογένεια⁴⁸.

Οικογένεια	Είδος	Πληροφορία
Autocorrelation Descriptor Charge	ATSc2, ATSc5	Κωδικοποιεί τόσο τη μοριακή δομή όσο και τις φυσικοχημικές ιδιότητες που αποδίδονται στα άτομα ως φορέα (Hollas, 2002)
BCUT Descriptor	BCUTw.1h, BCUTc.1l	Περιέχει πληροφορίες σχετικά με τη μοριακή συνδεσιμότητα/γεωμετρία και τις ατομικές ιδιότητες, όπως η ικανότητα δότη/δέκτη δεσμού υδρογόνου ή η ικανότητα πόλωσης, που είναι γνωστό ότι είναι σημαντικές για τις αλληλεπιδράσεις δέσμησης υποκαταστάτη-υποδοχέα.(Mason & Beno, 2000)
ChiChain Descriptor	SCH.6, VCH.4	Αξιολογεί τους απλούς δεσμούς (S → Simple) και δεσμούς σθένους (V → Valance) της αλυσίδας των τάξεων 3, 4, 5, 6 και 7 ⁴⁹ .
KierHallSmarts Descriptor	khs.aasN, khs.aaO	Καταμετράει τα θραύσματα, που βρίσκονται σε μία διεγερμένη κατάσταση ⁵⁰ .
MDE Descriptor	MDEC.24	Υπολογίζει την ακμή της μοριακής απόστασης. Στο συγκεκριμένο υπολογίζεται η απόσταση ανάμεσα στον δευτεροταγή και τον τεταρτοταγή άνθρακα ⁵¹ .
SmallRing Descriptor	nRings6, nRings9	Αυτά βασίζονται στην απαρίθμηση όλων των μικρών δακτυλίων (μεγέθη 3 έως 9) σε ένα μόριο, τα οποία μπορούν να ληφθούν γρήγορα ⁵² .
VABC Descriptor	VABC	Υπολογίζει τον όγκο ⁵³ .
Weight Descriptor	MW	Υπολογίζει το Μοριακό Βάρος
Weighted Path Descriptor	WTPT.3, WTPT.5	Υπολογίζει την σταθμισμένη διαδρομή (μοριακό ID), χαρακτηρίζοντας τη μοριακή διακλάδωση. (WTPT.3 → Άθροισμα μηκών διαδρομής ξεκινώντας από ετεροάτομα, WTPT.5 → άθροισμα μηκών διαδρομής ξεκινώντας από άζωτο ⁵⁴ .

⁴⁸ <https://egonw.github.io/cdkbook/appmolDESCS.html>, Accessed 04/01/2024

⁴⁹ <https://cdk.github.io/cdk/2.3/docs/api/org/openscience/cdk/qsar/descriptors/molecular/ChiChainDescriptor.html>, Accessed in 04/01/2024

⁵⁰ <https://cdk.github.io/cdk/1.5/docs/api/org/openscience/cdk/qsar/descriptors/molecular/KierHallSmartsDescriptor.html>, Accessed in 04/01/2024

⁵¹ <https://cdk.github.io/cdk/2.3/docs/api/org/openscience/cdk/qsar/descriptors/molecular/MDEDescriptor.html>, Accessed in 04/01/2024

⁵² <https://cdk.github.io/cdk/2.3/docs/api/org/openscience/cdk/qsar/descriptors/molecular/SmallRingDescriptor.html>, Accessed in 04/01/2024

⁵³ <https://cdk.github.io/cdk/1.5/docs/api/org/openscience/cdk/qsar/descriptors/molecular/VABCDescriptor.html>, Accessed in 04/01/2024

⁵⁴ <https://rdrr.io/bioc/Rcpi/man/extractDrugWeightedPath.html>, Accessed in 04/01/2024

Κεφάλαιο 5: Δημιουργία Πίνακα Συσχέτισης και Εύρεση Μεταβλητών με την μεγαλύτερη Συσχέτιση

Μετά την εύρεση των στατικά σημαντικών μεταβλητών, δημιουργήθηκε ο πίνακας συσχέτισης τους σε σχέση με την μελετώμενη ιδιότητα της διαπερατότητας του αιματοεγκεφαλικού φραγμού (BBB+/BBB-). Η διαδικασία αυτή έλαβε χώρα στο R Studio.

Ο πίνακας συσχέτισης είναι ένας πίνακας που δείχνει τη συγγένεια μεταξύ όλων των πιθανών ζευγών τιμών σε μια μορφή πίνακα⁵⁷.

Μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την σύνοψη ενός μεγάλου συνόλου δεδομένων, με σκοπό την αναγνώριση μοτίβων και την λήψη αποφάσεων σύμφωνα με αυτό. Επίσης, παρέχεται η δυνατότητα της εύρεσης της συσχέτισης μεταξύ των μελετώμενων μεταβλητών και το αποτέλεσμα να οπτικοποιηθεί⁵⁷.

Οι περισσότεροι επιστήμονες δεδομένων θεωρούν ότι αυτό είναι το κύριο βήμα πριν από τη δημιουργία οποιουδήποτε μοντέλου μηχανικής μάθησης, επειδή εάν είναι γνωστός ο τρόπος με τον οποίον οι μεταβλητές συσχετίζονται, επιτυγχάνεται καλύτερη κατανόηση του μοντέλου⁵⁷.

Είναι πολύ χρήσιμο για τεχνικές παλινδρόμησης, όπως η απλή γραμμική παλινδρόμηση, η πολλαπλή γραμμική παλινδρόμηση και τα μοντέλα παλινδρόμησης LASSO. Στην τεχνική της παλινδρόμησης υπάρχουν αρκετές ανεξάρτητες μεταβλητές και βάσει αυτών μπορεί να προβλεφθεί η εξαρτημένη μεταβλητή⁵⁷.

Ένας πίνακας συσχέτισης περιλαμβάνει έναν πίνακα σειρών και στηλών, που δείχνει τις μεταβλητές. Κάθε κελί σε έναν πίνακα περιέχει τον συντελεστή συσχέτισης. Ο πίνακας συσχέτισης είναι σε συνδυασμό με άλλους τύπους στατιστικής ανάλυσης.

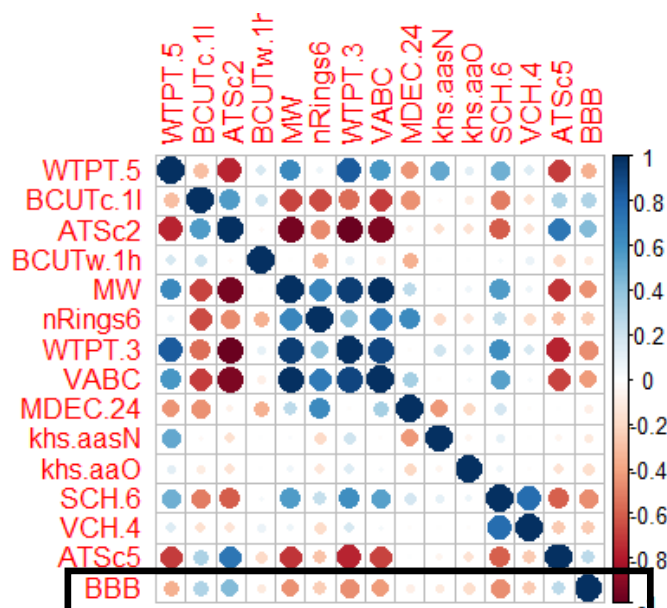
Ο πίνακας συσχέτισης είναι μια στατιστική τεχνική, που δίνει τις τιμές μεταξύ -1 και 1 που μπορείτε να προσδιορίσετε τη σχέση μεταξύ των μεταβλητών :

- Αν η σχέση είναι 1, τότε η σχέση είναι ισχυρή.
- Εάν η σχέση είναι 0, τότε σημαίνει ότι η σχέση είναι ουδέτερη.
- Εάν η σχέση είναι -1, τότε σημαίνει ότι η σχέση είναι αρνητική ή όχι ισχυρή.⁵⁵

Για την δημιουργία του πίνακα χρειάστηκε η εγκατάσταση το πακέτου *corrplot* και η φόρτωση της ομώνυμης βιβλιοθήκης.

⁵⁵ <https://builtin.com/data-science/correlation-matrix> , Accessed in 17/01/2024

Στον πίνακα συσχέτισης, που δημιουργήθηκε δεν υπάρχει ποσοτική πληροφορία, αλλά το μέγεθος της κουκίδας και η ένταση του χρώματος δηλώνει την ύπαρξη συσχέτισης ή μη.



Διάγραμμα 6: Πίνακας Συσχέτισης των δεκαπέντε (15) στατικά σημαντικών μεταβλητών με την ιδιότητα BBB. Με μπλε χρώμα δηλώνεται η θετική συσχέτιση με την ιδιότητα BBB, ενώ με κόκκινο χρώμα υποδηλώνεται η αρνητική συσχέτιση. Αύξηση της έντασης και του μεγέθους της κουκίδας σημαίνει αυξημένη συσχέτιση.

Παρατηρώντας το παραπάνω διάγραμμα μπορεί να διαπιστωθεί ότι η ιδιότητα BBB έχει θετική συσχέτιση κατά φθίνουσα σειρά με τις εξής μεταβλητές: **ATSc2**, **BcuTc.1l** και **ATSc5**, ενώ αρνητική συσχέτιση κατά φθίνουσα σειρά έχει με τις : **MW**, **WTPT.3**, **SCH.6**, **VABC** και την **WTPT.5**

Αφού έχουν βρεθεί οι οκτώ μεταβλητές, που φαίνεται να έχουν κάποια σχέση με την ιδιότητα του BBB, ακολούθησε το μέρος της εύρεσης του κατάλληλου μοντέλου, στο οποίο προσαρμόστηκαν τα δεδομένα και η εκπαίδευση του. Προτού γίνει αυτό, η βάση δεδομένων χωρίστηκε σε σετ εκπαίδευσης και σετ δοκιμής, σε ποσοστό 80% και 20% αντίστοιχα, όπως έχει αναφερθεί προωτύτερα.

Κεφάλαιο 6: Εύρεση του Κατάλληλου Μοντέλου

Το επόμενο βήμα είναι η εύρεση του κατάλληλου μοντέλου, το οποίο θα μπορεί να δώσει την πιο έγκυρη πρόβλεψη.

Χρησιμοποιήθηκαν δέκα (10) μοντέλα, τα οποία αναλύθηκαν παραπάνω:

- GLM
- Random Forest
- Treebag
- GBM
- c5.0
- LDA
- Glmnet
- CART
- Naïve Bayes
- kNN

Οι οκτώ στατικά σημαντικές μεταβλητές «έτρεξαν» και με τα δέκα μοντέλα μηχανικής μάθησης. Η επιλογή του καταλληλότερου μοντέλου έγινε με βάση το f_1 score.

Το **f_1 score** είναι ένα μέτρο του αρμονικού μέσου όρου ακρίβειας και ανάκλησης. Παλαιότερα, χρησιμοποιούνταν η *Ακρίβεια (Accuracy)*. Η ακρίβεια μετρά τον αριθμό των φορών, που ένα μοντέλο μπόρεσε να αναγνωρίσει σωστά την κατηγορία δεδομένων σε ολόκληρο το σύνολο δεδομένων. Η ακρίβεια είναι μια αξιόπιστη μέτρηση, εφόσον το σύνολο δεδομένων έχει ίσο αριθμό δειγμάτων για κάθε τάξη. Ωστόσο, αυτό το σενάριο είναι δύσκολο να υπάρξει στα σύνολα δεδομένων του πραγματικού κόσμου (Παπαδοπούλου, 2021).

Η λύση δίνεται με το f_1 score. Σε αυτό λαμβάνεται υπόψη το είδος των σφαλμάτων - ψευδώς θετικά και ψευδώς αρνητικά - και όχι μόνο ο αριθμός των προβλέψεων, που ήταν εσφαλμένες. Μέσω αυτού υπολογίζεται ο μέσος όρος της ακρίβειας και της ανάκλησης, όπου η σχετική συνεισφορά και των δύο αυτών μετρήσεων είναι ίση με τη f_1 score (Παπαδοπούλου, 2021).

Πιο συγκεκριμένα, *ακρίβεια (precision)* είναι μια μέτρηση απόδοσης μοντέλου, που αντιστοιχεί στο κλάσμα των τιμών που ανήκουν στην πραγματικότητα σε μια θετική

κατηγορία από όλες τις τιμές που προβλέπεται ότι ανήκουν στην θετική κατηγορία. Η ακρίβεια είναι επίσης γνωστή ως θετική προγνωστική αξία (PPV) (Παπαδοπούλου, 2021).

Το f_1 score χρησιμοποιεί την ακρίβεια για να πάρει το ποσοστό των **πραγματικών θετικών τιμών** μεταξύ των **θετικών συνολικών τιμών**. Η ακρίβεια υπολογίζεται ως εξής (Παπαδοπούλου, 2021):

$$\frac{\text{Αριθμός των Πραγματικών Θετικών Τιμών}}{\text{Αριθμός των Πραγματικών Θετικών Τιμών} + \text{Αριθμός των Ψευδώς Θετικών Τιμών}}$$

Η **ανάκληση (recall)** είναι μια μέτρηση απόδοσης, που αντιστοιχεί στο κλάσμα των **τιμών, που προβλέπεται ότι είναι θετικής κατηγορίας** από όλες τις τιμές που **ανήκουν πραγματικά στη θετική κατηγορία** (συμπεριλαμβανομένων των ψευδών αρνητικών) (Παπαδοπούλου, 2021).

Το f_1 score χρησιμοποιεί την ανάκληση για να πάρει το κλάσμα των αληθινών θετικών τιμών μεταξύ του συνόλου των πραγματικών θετικών τιμών. Η ανάκληση υπολογίζεται ως εξής (Παπαδοπούλου, 2021):

$$\frac{\text{Αριθμός των Πραγματικών Θετικών Τιμών}}{\text{Αριθμός των Πραγματικών Θετικών Τιμών} + \text{Αριθμός των Ψευδώς Αρνητικών Τιμών}}$$

Το **f_1 score** συνδυάζει τα δύο αυτά στοιχεία ακρίβειας και ανάκλησης και τα αναπαριστά συμμετρικά στον τύπο (Παπαδοπούλου, 2021):

$$f_1 \text{ score} = 2 * \frac{\text{Precision} * \text{Recall}}{\text{Precision} + \text{Recall}},$$

Όταν το ισούται με 1, τότε το μοντέλο είναι τέλει, ενώ αν ισούται με 0, τότε είναι το χειρότερο μοντέλο. Όσο πιο κοντά είναι η τιμή στο 1, τόσο καλύτερη εφαρμογή των δεδομένων γίνεται στο μοντέλο, άρα και πιο αποδοτικό είναι (Παπαδοπούλου, 2021).

Οι τιμές, που προέκυψαν, παρατίθενται στον **Πίνακα 11** :

Πίνακας 11: Πίνακας με τα f1 score των μοντέλων, που «έτρεξαν» με τις οκτώ μεταβλητές.

Μοντέλο	f1 Score
GLM	0,778
Random Forest	0,759
Treebag	0,755
GBM	0,775
C5.0	0,776
LDA	-
Glmnet	0,788
CART	0,784
Naïve Bayes	0,770
kNN	0,752

Διαπιστώνεται από τον παραπάνω πίνακα, ότι το μοντέλο, στο οποίο τα δεδομένα εφαρμόζουν καλύτερα είναι το **glmnet** με **f1 score 0,788**. Όμως, όταν ξεκίνησαν οι δοκιμές για την αύξηση της απόδοσης, που θα προέκυπτε είτε από τις μεμονωμένες μεταβλητές είτε από τον συνδυασμό τους, διαπιστώθηκε ότι στο glmnet απαιτείται η χρήση τουλάχιστον τριών μεταβλητών, προκειμένου να «τρέξει». Το κώλυμα αυτό ξεπεράστηκε με την χρήση του δεύτερου μοντέλου σε σειρά υψηλότερου f1 score, που ήταν το **CART** με το **0,784**.

Τα αποτελέσματα τόσο των μεμονωμένων μεταβλητών, όσο και ο συνδυασμός του, παρουσιάζεται στον **Πίνακα 13**. Για ευκολία στην ανάγνωση του Πίνακα 13, η κάθε μεταβλητή αποδόθηκε σε ένα νούμερο. Η αντιστοίχιση φαίνεται στον **Πίνακα 12**.

Πίνακας 12: Πίνακας Αντιστοίχισης των μεταβλητών με έναν αριθμό

Αριθμός	Μεταβλητές
1	ATSc2
2	BcuTc.1l
3	ATSc5
4	MW
5	WTPT.3
6	SCH.6
7	VABC
8	WTPT.5

Πίνακας 13: Πίνακας με τα f1 score των μεμονωμένων μεταβλητών και του συνδυασμό τους.

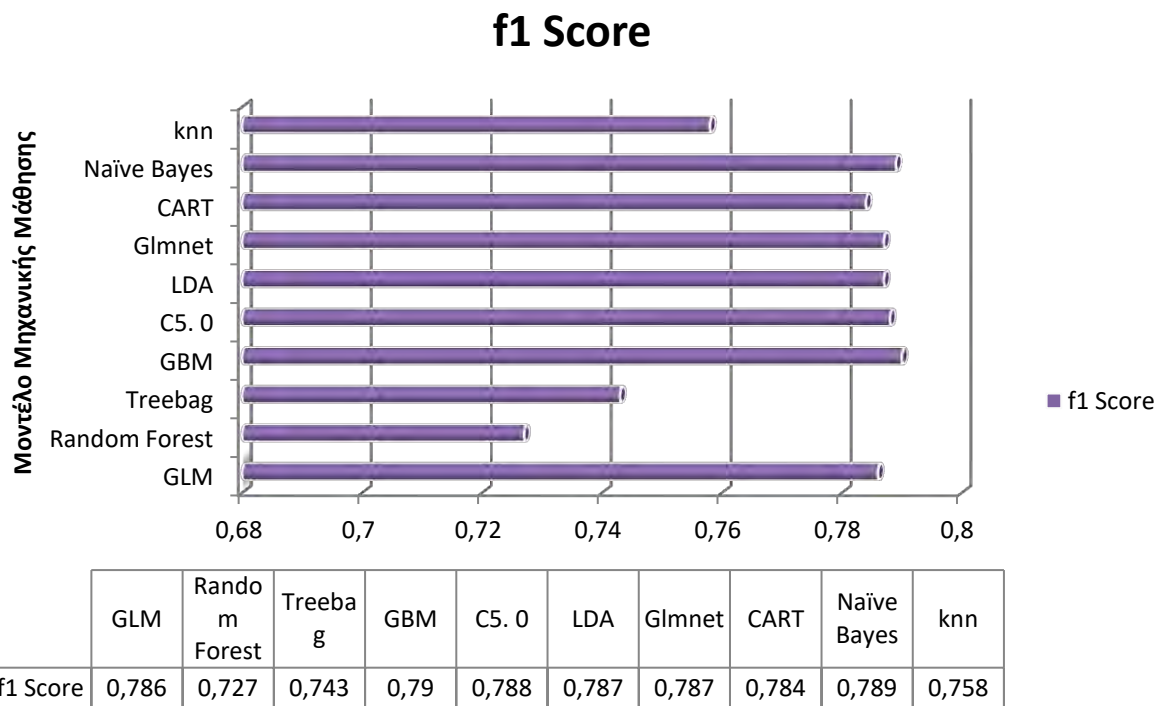
Μεταβλητή-τές	f ₁	c _p	Μεταβλητή-τές	f ₁	c _p	Μεταβλητή-τές	f ₁	c _p
1	0,784	0,00212	4,8	0,778	0,00231	2,3,5	0,776	0,00276
2	0,788	0,00231	5,6	0,782	0,00317	2,3,6	0,787	0,00372
3	0,788	0,00208	5,7	0,782	0,00231	1,6,7	0,782	0,00539
4	0,775	0,00164	5,8	0,776	0,00193	1,6,8	0,785	0,00385
5	0,779	0,00218	6,7	0,788	0,00424	1,7,8	0,787	0,00202
6	0,788	0,00077	6,8	0,781	0,00193	2,3,4	0,775	0,00244
7	0,781	0,00193	7,8	0,776	0,00254	2,3,5	0,776	0,00276
8	0,778	0,00176	1,2,3	0,7892	0,00231	2,3,6	0,787	0,00372
1,2	0,7894	0,002	1,2,4	0,785	0,00193	2,3,7	0,777	0,00193
1,3	0,781	0,00154	1,2,5	0,780	0,00347	1,6,7	0,782	0,00539
1,4	0,785	0,00231	1,2,6	0,787	0,00404	2,3,8	0,782	0,00347
1,5	0,776	0,00308	1,2,7	0,785	0,00356	2,4,5	0,779	0,00347
1,6	0,780	0,00308	1,2,8	0,784	0,0027	2,4,6	0,771	0,00308
1,7	0,782	0,00289	1,3,4	0,777	0,00327	2,4,7	0,774	0,0025
1,8	0,787	0,00289	1,3,5	0,773	0,00295	2,4,8	0,774	0,00231
2,3	0,783	0,002	1,3,6	0,780	0,00308	2,5,6	0,782	0,00231
2,4	0,774	0,00231	1,3,7	0,782	0,00327	2,5,7	0,777	0,00231
2,5	0,779	0,00347	1,3,8	0,783	0,00167	2,5,8	0,786	0,00295
2,6	0,778	0,00193	1,4,5	0,773	0,00289	2,6,7	0,766	0,00238
2,7	0,778	0,00193	1,4,6	0,777	0,00347	2,6,8	0,787	0,00347
2,8	0,783	0,00231	1,4,7	0,778	0,00347	2,7,8	0,775	0,00462
3,4	0,777	0,001637	1,4,8	0,784	0,00347	3,4,5	0,779	0,0025
3,5	0,781	0,00231	1,5,6	0,785	0,00501	3,4,6	0,776	0,00398
3,6	0,787	0,00135	1,5,7	0,774	0,00289	3,4,7	0,776	0,00501
3,7	0,771	0,00135	1,5,8	0,776	0,00327	3,4,8	0,776	0,00308
3,8	0,788	0,0018	1,6,7	0,782	0,00539	3,5,6	0,785	0,00218
4,5	0,780	0,00308	1,6,8	0,785	0,00385	3,5,7	0,773	0,0027
4,6	0,777	0,00295	1,7,8	0,787	0,00202	3,5,8	0,779	0,002002
4,7	0,778	0,00289	2,3,4	0,775	0,00244	3,6,7	0,788	0,00424

3,6,8	0,781	0,00241	1,3,5,7	0,770	0,00289	2,4,5,8	0,786	0,00295
3,7,8	0,776	0,00327	1,3,5,8	0,780	0,00308	2,4,6,7	0,770	0,00308
4,5,6	0,782	0,00254	1,3,6,7	0,782	0,00539	2,4,6,8	0,773	0,00308
4,5,7	0,779	0,00231	1,3,6,8	0,784	0,00385	2,4,7,8	0,774	0,0025
4,5,8	0,785	0,00443	1,3,7,8	0,786	0,00308	2,5,6,7	0,786	0,00321
4,6,7	0,778	0,00424	1,4,5,6	0,785	0,00501	2,5,6,8	0,784	0,00193
4,6,8	0,783	0,00462	1,4,5,7	0,774	0,00289	2,5,7,8	0,787	0,00299
4,7,8	0,783	0,00462	1,4,5,8	0,776	0,00327	2,6,7,8	0,782	0,00347
5,6,7	0,782	0,00241	1,4,6,7	0,778	0,00453	3,4,5,6	0,781	0,00308
5,6,8	0,779	0,00241	1,4,6,8	0,782	0,00732	3,4,5,7	0,773	0,00279
5,7,8	0,768	0,00187	1,4,7,8	0,784	0,00462	3,4,5,8	0,776	0,00218
6,7,8	0,771	0,0027	1,5,6,7	0,785	0,00501	3,4,6,7	0,778	0,00424
1,2,3,4	0,777	0,00244	1,5,6,8	0,785	0,00501	3,4,6,8	0,783	0,00295
1,2,3,5	0,775	0,00267	1,3,5,7	0,770	0,00289	3,4,7,8	0,784	0,00411
1,2,3,6	0,787	0,00404	1,3,5,8	0,780	0,00308	3,5,6,7	0,785	0,0025
1,2,3,7	0,785	0,00257	1,3,6,7	0,782	0,00539	3,5,6,8	0,774	0,00218
1,2,3,8	0,785	0,00231	1,3,6,8	0,784	0,00385	3,5,7,8	0,781	0,00282
1,2,4,5	0,780	0,00347	1,3,7,8	0,786	0,00308	3,6,7,8	0,781	0,00282
1,2,4,6	0,777	0,00239	1,5,7,8	0,777	0,00308	4,5,6,7	0,777	0,001974
1,2,4,7	0,784	0,00173	1,6,7,8	0,777	0,00327	4,5,6,8	0,782	0,00254
1,2,4,8	0,777	0,00212	2,3,4,5	0,776	0,00397	4,5,7,8	0,784	0,00289
1,2,5,6	0,780	0,00257	2,3,4,6	0,775	0,00385	5,6,7,8	0,779	0,00241
1,2,5,7	0,777	0,00347	2,3,4,7	0,775	0,00347	1,2,3,4,5	0,775	0,00247
1,2,5,8	0,787	0,00347	2,3,4,8	0,775	0,00385	1,2,3,4,6	0,770	0,0025
1,2,6,7	0,787	0,00404	2,3,5,6	0,782	0,00231	1,2,3,4,7	0,779	0,00141
1,2,6,8	0,786	0,00347	2,3,5,7	0,777	0,00231	1,2,3,4,8	0,777	0,0025
1,2,7,8	0,787	0,00424	2,3,5,8	0,786	0,00295	1,2,3,5,6	0,780	0,00257
1,3,4,5	0,775	0,00321	2,3,6,7	0,766	0,00231	1,2,3,5,7	0,777	0,00347
1,3,4,6	0,776	0,00398	2,3,6,8	0,787	0,00347	1,2,3,5,8	0,786	0,00347
1,3,4,7	0,778	0,00347	2,3,7,8	0,776	0,0027	1,2,3,6,7	0,787	0,00404
1,3,4,8	0,784	0,00308	2,4,5,6	0,782	0,00218	1,2,3,6,8	0,786	0,00347
1,3,5,6	0,785	0,00501	2,4,5,7	0,777	0,00231	1,2,3,7,8	0,787	0,00424

1,2,3,7,8	0,787	0,00424	2,3,5,6,7	0,786	0,00321	2,3,5,6,7,8	0,787	0,0027
1,2,4,5,6	0,780	0,00262	2,3,5,6,8	0,784	0,00193	2,4,5,6,7,8	0,787	0,0027
1,2,4,5,7	0,776	0,00231	2,3,5,7,8	0,787	0,00299	3,4,5,6,7,8	0,782	0,00308
1,2,4,5,8	0,786	0,00347	2,3,6,7,8	0,782	0,00347	1,2,3,4,5,6,7	0,784	0,00321
1,2,4,6,7	0,770	0,0025	2,4,5,6,7	0,786	0,00321	1,2,3,4,5,6,8	0,784	0,00262
1,2,4,6,8	0,773	0,00244	2,4,5,6,8	0,783	0,00231	1,2,3,4,5,7,8	0,785	0,00299
1,2,4,7,8	0,779	0,00212	2,4,5,7,8	0,787	0,0027	1,2,3,4,6,7,8	0,770	0,0025
1,2,5,6,7	0,784	0,00321	2,4,6,7,8	0,773	0,00308	1,2,3,5,6,7,8	0,785	0,00299
1,2,5,6,8	0,784	0,00257	2,5,6,7,8	0,787	0,0027	1,2,4,5,6,7,8	0,785	0,00299
1,2,5,7,8	0,783	0,00294	3,4,5,6,7	0,782	0,003008	1,3,4,5,6,7,8	0,782	0,00289
1,2,6,7,8	0,786	0,00347	3,4,5,6,8	0,785	0,00254	2,3,4,5,6,7,8	0,787	0,0027
1,3,4,5,6	0,785	0,00501	1,2,3,4,6,8	0,770	0,0025	1,2,3,4,5,6,7,8	0,785	0,00299
1,3,4,5,7	0,770	0,00284	1,2,3,4,7,8	0,778	0,0025			
1,3,4,5,8	0,775	0,00308	1,2,3,5,6,7	0,784	0,00321			
1,3,4,6,7	0,776	0,00501	1,2,3,5,6,8	0,784	0,00257			
1,3,4,6,8	0,783	0,00732	1,2,3,5,7,8	0,785	0,00299			
1,3,4,7,8	0,784	0,00462	1,2,3,6,7,8	0,786	0,003437			
1,3,5,6,7	0,785	0,00501	1,2,4,5,6,7	0,784	0,0032			
1,3,5,6,8	0,783	0,00289	1,2,4,5,6,8	0,784	0,00262			
1,3,5,7,8	0,774	0,00231	1,2,4,5,7,8	0,785	0,00299			
1,3,6,7,8	0,782	0,00616	1,2,4,6,7,8	0,770	0,0025			
1,4,5,6,7	0,785	0,00501	1,2,5,6,7,8	0,785	0,00294			
1,4,5,6,8	0,785	0,00501	1,3,4,5,6,7	0,785	0,00501			
1,4,5,7,8	0,777	0,00308	1,3,4,5,6,8	0,785	0,00501			
1,4,6,7,8	0,784	0,00462	1,3,4,5,7,8	0,774	0,0231			
1,5,6,7,8	0,782	0,00289	1,3,4,6,7,8	0,783	0,00732			
2,3,4,5,6	0,782	0,00218	1,3,5,6,7,8	0,782	0,00289			
2,3,4,5,7	0,777	0,00231	1,4,5,6,7,8	0,782	0,00289			
2,3,4,5,8	0,786	0,00295	2,3,4,5,6,7	0,786	0,00321			
2,3,4,6,7	0,775	0,00385	2,3,4,5,6,8	0,783	0,00231			
2,3,4,6,8	0,775	0,00385	2,3,4,5,7,8	0,787	0,0027			
2,3,4,7,8	0,775	0,00385	2,3,4,6,7,8	0,775	0,00385			

Μετά την ολοκλήρωση της διαδικασίας, το αποτέλεσμα που προέκυψε είναι ότι το υψηλότερο **f₁ score**, το οποίο ισούται με **0,784**, προκύπτει από τον συνδυασμό των μεταβλητών **ATSc2** και **BCUTc.1l**.

Τέλος, το ζεύγος αυτών των μεταβλητών «έτρεξε» σε όλα τα δέκα μοντέλα. Τα αποτελέσματα παρατίθενται στο **Διάγραμμα 6**.



Διάγραμμα 7: Διάγραμμα του f₁ score των μοντέλων, που «έτρεξαν» με τις δύο μεταβλητές

Η διαδικασία, που ακολουθήθηκε, κρίνεται επιτυχημένη, γιατί η τιμή της μετρικής, αυξήθηκε, το οποίο σημαίνει καλύτερη εφαρμογή δεδομένων, άρα και καλύτερη πρόβλεψη του μοντέλου. Το μοντέλο, από το οποίο προέκυψε αυτή η τιμή είναι το **GBM**.

Ενότητα 5: Συζήτηση

Συνοψίζοντας, μπορεί να εξαχθεί ως συμπέρασμα ότι η χρήση των *in silico* μεθόδων αποτελεί ένα σημαντικό εργαλείο τόσο στα χέρια των ρυθμιστικών φορέων, όσο και των φαρμακευτικών εταιρειών. Πιο συγκεκριμένα, το QSAR είναι μία μέθοδος, που μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε αρχικό στάδιο, έτσι ώστε από τα αποτελέσματα της μεθόδου να προσανατολιστούν οι επόμενες πειραματικές μελέτες και να μην γίνεται άσκοπη χρήση των αναλωσίμων και των πειραματόζων. Όσον αφορά τα φάρμακα, επειδή γίνονται πειράματα σε άνθρωπο σε επόμενα στάδια μελέτης, μέσω αυτών των μεθόδων εξασφαλίζεται η μεγαλύτερη ασφάλεια και ακρίβεια για τη σωστή πρόβλεψη της πρώτης δόσης στον άνθρωπο (*first in human*)⁵⁶. Η υπολογιστική προσέγγιση είναι μία γρήγορη και άμεση διαδικασία, που μπορεί να εκμεταλλευτεί την ήδη υπάρχουσα γνώση από πειράματα, αλλά και την αλματώδη τεχνολογική ανάπτυξης της υπολογιστικής δύναμης.

Ορμώμενοι από τις απαιτήσεις και τις ανάγκες της εποχής μας, δημιουργήθηκε ένα μοντέλο QSAR, που θα προβλέπει την διαπερατότητα χημικών ουσιών από τον Αιματοεγκεφαλικό Φραγμό. Ο τελευταίος, όπως έχει ήδη αναφερθεί, είναι ένα κρίσιμο «σύνορο» ανάμεσα στον εγκέφαλο και στο αίμα. Αποτελεί πολλές φορές τροχοπέδη για την είσοδο φαρμάκων για την αντιμετώπιση των νευροεκφυλιστικών ασθενειών⁵⁷. Σύμφωνα με έρευνα της Παγκόσμιας Ομοσπονδίας Νευρολογίας για το 2023, το 40% του πληθυσμού έχει διαγνωσθεί με κάποια από τις νευροεκφυλιστικές ασθένειες και αυτός ο αριθμός θα διπλασιαστεί το 2050⁵⁸. Διαπιστώνεται πολύ εύκολα ότι το ποσοστό είναι ήδη μεγάλο και πρόκειται να αυξηθεί ακόμα

⁵⁶ **First In Human (FIM):** Είναι η πρώτη μελέτη ενός νέου φαρμάκου σε ανθρώπους. Οι μελέτες διεξάγονται συνήθως σε υγιείς εθελοντές. Ο κύριος ρόλος τους είναι να αξιολογούν την ασφάλεια των νέων φαρμάκων. Μπορούν να ενσωματώσουν ένα σχέδιο μελέτης κλιμακώμενης δόσης (μεμονωμένη αύξουσα δόση) για τον προσδιορισμό της βέλτιστης δόσης για χρήση σε μελλοντικές δοκιμές. Χρησιμοποιούνται επίσης μελέτες. Οι μελέτες πρώτης σε άνθρωπο είναι δοκιμές φάσης 1. <https://revive.gardp.org/resource/first-in-human/?cf=encyclopaedia> , Accessed in 03/02/2024.

⁵⁷ **Νευροεκφυλιστικές Ασθένειες ή Νευρολογικές Διαταραχές:** Οι παθήσεις του κεντρικού και του περιφερικού νευρικού συστήματος. Με άλλα λόγια, ο εγκέφαλος, ο νωτιαίος μυελός, τα κρανιακά νεύρα, τα περιφερικά νεύρα, οι ρίζες των νεύρων, το αυτόνομο νευρικό σύστημα, η νευρομυϊκή σύνδεση και οι μύες. Αυτές οι διαταραχές περιλαμβάνουν την επιληψία, την νόσο Αλτσχάιμερ και άλλες άνοιες, εγκεφαλοαγγειακές παθήσεις όπως εγκεφαλικό επεισόδιο, ημικρανία και άλλες διαταραχές κεφαλαλγίας, σκλήρυνση κατά πλάκας, νόσο του Πάρκινσον, νευρολοιμώξεις, όγκους εγκεφάλου, τραυματικές διαταραχές του νευρικού συστήματος λόγω τραύματος κεφαλής και νευρολογικές διαταραχές ως αποτέλεσμα του υποσιτισμού. <https://www.who.int/news-room/questions-and-answers/item/mental-health-neurological-disorders> , Accessed in 02/02/2024

⁵⁸ <https://wfneurology.org/activities/news-events/archived-news/2023-10-16-wcn> , Accessed in 02/02/2024

περισσότερο, οπότε η δημιουργία αποτελεσματικών φαρμάκων για την αντιμετώπιση είναι επιτακτική.

Όσον αφορά την συγκεκριμένη ερευνητική εργασία, έχει δημιουργηθεί ένα μοντέλο πρόβλεψης με μια αρκετά μεγάλη βάση δεδομένων (8.569 ενώσεις) σε σχέση με την υπάρχουσα βιβλιογραφία, που αυτό του δίνει μια μεγάλη υπολογιστική δύναμη.

Η δημιουργία της βάσης δεδομένων δεν ήταν μία εύκολη υπόθεση. Αρχικά, η συγκέντρωση μοναδικών ενώσεων ήταν αρκετά απαιτητική. Η ύπαρξη ποικιλότητας στην ονομασία των ενώσεων ήταν αυτό, που δυσκόλεψε την κατάσταση. Κάποιες ενώσεις ήταν γραμμένες κατά IUPAC, ενώ κάποιες άλλες είχαν τις εμπειρικές ονομασίες. Επίσης, όπως αναφέρθηκε παραπάνω, ο τρόπος συγγραφής των SMILES δεν ήταν ενιαίος, αλλά εξαρτιόταν από ποιον γράφεται ή ακόμα. Για αυτό το λόγο, ο έλεγχος της μοναδικότητας των ουσιών έγινε με τη χρήση των InChi, που αποτελεί τον πιο αξιόπιστο τρόπο για τον έλεγχο. Επιπλέον, υπήρχε περιορισμένη πρόσβαση σε πληροφορίες, αφού πολλών ενώσεων επαναλαμβανόντουσαν σε διαφορετικές βάσεις δεδομένων

Αφότου, προέκυψαν οι 8.569 μοναδικές ενώσεις, ξεκίνησε η διαδικασία της μετατροπής τους από την μορφή των InChi σε SMILES (γραμμένα με ομοιόμορφο τρόπο, χρησιμοποιώντας την σελίδα ChemSpider), σε molecule files και τέλος σε fingerprints, προκειμένου να επιτευχθεί η εξόρυξη των χημικών μεταβλητών, που σχετίζονταν με τα δεδομένα αυτά.

Μετά από μία πολύωρη αναζήτηση προέκυψαν 430 μεταβλητές, με τις 267 να φέρουν πληροφορία. Χρησιμοποιώντας τα μοντέλα LASSO και RFE, προσδιορίστηκαν οι δεκαπέντε (15) μεταβλητές, που είναι στατιστικά σημαντικές.

Προκειμένου να περιοριστεί περαιτέρω, ο αριθμός των μεταβλητών, δημιουργήθηκε ένας πίνακας συσχέτισης. Ο τελευταίος αποτελεί ένα σύνηθες βήμα για την δημιουργία ενός μοντέλου ταξινόμησης. Μέσω αυτού του πίνακα, βρέθηκαν οι οκτώ (8) μεταβλητές, που είχαν συσχέτιση (είτε θετική είτε αρνητική) με την μελετώμενη ιδιότητα της διαπερατότητας του αιματοεγκεφαλικού φραγμού.

Ακολούθησαν διάφορες δοκιμές τόσο με τα μοντέλα, όσο και συνδυασμοί των μεταβλητών. Εν τέλει, ο καλύτερος συνδυασμός των μεταβλητών ήταν οι **ATSc2** και **BCUTc.1l** και το μοντέλο της μηχανικής μάθησης, που είχε την καλύτερη εφαρμογή στα δεδομένα είναι το **Gradient Boosted Machine (GBM)**. Αυτό χρησιμοποιεί μια στρατηγική ταξινόμησης συνόλου, η οποία βελτιώνει την απόδοση του μοντέλου σε ένα σύνολο δεδομένων με πολλά χαρακτηριστικά και ενδείκνυται (Raihan & Nahid,

2023).

Η μετρική της απόδοσης, που χρησιμοποιήθηκε είναι το f_1 score, το οποίο όπως αναφέρθηκε παραπάνω όσο πλησιάζει την μονάδα, τόσο καλύτερη πρόβλεψη γίνεται. Ο λόγος, που επιλέχθηκε αυτή η μετρική είναι, διότι είναι δημοφιλής και ευρέως χρησιμοποιούμενη μέτρηση για την αξιολόγηση της απόδοσης των μοντέλων δυαδικής ταξινόμησης, όπως το δικό μας. Επιπλέον, συνδυάζει την ακρίβεια (precision) και την ανάκληση (recall) σε μια ενιαία βαθμολογία, λαμβάνοντας υπόψη την απόδοση του μοντέλου και στις δύο κατηγορίες. Στο δικό μας μοντέλο το f_1 ισούται με **0,79**, το οποίο είναι αρκετά ικανοποιητικό, μία τιμή, που σύμφωνα με την βιβλιογραφία θεωρείται, ότι αντιστοιχεί σε καλή εφαρμογή δεδομένων στο μοντέλο ($f_1 \text{ score} \geq 0,7$)⁵⁹.

Ακολουθεί σύγκριση του προκύπτοντος μοντέλου μηχανικής μάθησης με άλλα μοντέλα παρόμοιου θέματος στον **Πίνακας 14**.

⁵⁹ <https://spotintelligence.com/2023/05/08/f1-score/#Conclusion> , Accessed in 15/2/2024

Πίνακας 14: Συγκεντρωτικός Πίνακας QSAR μελετών για τον Αιματοεγκεφαλικό Φραγμό από το 1999- 2023. Στον πίνακα παρουσιάζονται: ο τίτλος της εργασίας, ο αριθμός ενώσεων, η τιμή της μετρικής απόδοσης, καθώς και η μέθοδος, που χρησιμοποιήθηκε για την ανάπτυξη του μοντέλου. (BNN = Binarized Neural Network, PLS = Partial Least Square, PCR = Principal Component Regression, PCA = Principal Component Analysis, LFER = Linear Free Energy Relationship, MLR = Multiple Linear Regression, SVM = Support Vector Machine, VSMP = Variable Selection and Modeling based on Prediction, ANN = Artificial Neural Network, (GA)- MLR = Genetic Algorithm- Multiple Linear Regression, RFR = Random Forest Regression, DNN = Deep Neural Network)

Τίτλος Εργασίας	Αριθμός Ενώσεων	Τιμή μετρικής Απόδοσης	Μέθοδος
(Ajay et al., 1999)	275	$Q^2 = 0,71$	BNN
(Luco, 1999)	58	$^{60}Q^2 = 0,87$	PLS
(Feher et al., 2000)	61	$Q^2 = 0,83$	PCR
(Crivori et al., 2000)	120	$Q^2 = 0,65$	PCA
(Cruciani et al., 2000)	35	$Q^2 \geq 0,75$	PCA
(Platts et al., 2001)	148	$^{61}R^2 = 0,74$	LFER
(Hou & Xu, 2002)	57	$Q^2 = 0,89$	MLR
(Doniger et al., 2002)	324	$Q^2 = 0,80$	SVM
(Stanton et al., 2004)	47	$Q^2 = 0,77$	PLS
(Cabrera et al., 2004)	114	$Q^2 = 0,65$	MLR
(Narayanan & Gunturi, 2005)	88	$Q^2 = 0,85$	VSMP
(Li et al., 2005)	415	$Q^2 = 0,75$	SVM
(Wichmann et al., 2007)	103	$Q^2 = 0,68$	MLR
(Konovalov et al., 2007)	291	$Q^2 = 0,73$	kNN –MLR
(Shen et al., 2008)	151	$Q^2 = 0,82$	GAVS&Dragon
(Fu et al., 2008)	86	$Q^2 = 0,71$	MRL
(Chen et al., 2009)	145	Correlation efficacy (r) = 0,82	ANN

⁶⁰ Q^2 : Τα μοντέλα παραγωγής διαλόγου, που βασίζονται στη νευρωνική γνώση παράγουν συχνά περιεχόμενο που είναι στην πραγματικότητα ασυνεπές με τη γνώση στην οποία βασίζονται, καθιστώντας τα αναξιόπιστα και περιορίζοντας τη δυνατότητα εφαρμογής τους. Η μετρική Q^2 συγκρίνει το εύρος των απαντήσεων χρησιμοποιώντας συμπέρασμα φυσικής γλώσσας (NLI), έτσι ώστε τα αποτελέσματα του μοντέλου να έχουν σταθερά υψηλότερη συσχέτιση με τις ανθρώπινες κρίσεις Honovich, O., Choshen, L., Aharoni, R., Neeman, E., Szpektor, I., & Abend, O. (2021). Q^2 : Evaluating Factual Consistency in Knowledge-Grounded Dialogues via Question Generation and Question Answering. *arXiv preprint arXiv:2104.08202*.

⁶¹ R^2 : Είναι ένα στατιστικό μέτρο σε ένα μοντέλο παλινδρόμησης που καθορίζει το ποσοστό διακύμανσης στην εξαρτημένη μεταβλητή που μπορεί να εξηγηθεί από την ανεξάρτητη μεταβλητή Li, W., & Henry, S. (1993). Object-oriented metrics that predict maintainability. *Journal of systems and software*, 23(2), 111-122.

Τίτλος Εργασίας	Αριθμός Ενώσεων	Τιμή μετρικής Απόδοσης	Μέθοδος
(Fan et al., 2010)	193	$Q^2 = 0,72$	(GA)-MLR
(Zhang et al., 2010)	57	$Q^2 = 0,79$	PLSR
(Vilar et al.)	307	⁶² Wilk's lamda = 0,84	LDA
(Chen et al., 2011)	432	$Q^2 = 0,5$	RFR
(Muehlbacher et al., 2011)	362 (logBB)	Accuracy = 0,88	RFR
(Bujak et al., 2015)	55	$R^2 = 0,67$	MLR
(Brito-Sánchez et al., 2015)	369	$Q^2 = 0,67$	MLR
(Wang et al., 2015)	439	$R^2 = 0,64$	Knn
(Radchenko et al., 2020)	529	$Q^2 = 0,82$	NASAWIN 2.0
(Shin et al., 2021)	231 (logBB)	$R^2 = 0,9$	RFR
(Shaker et al., 2023)	1276 (LogBB)	$R^2 = 0,59$	LightGBM
(Mazumdar et al., 2023)	8153	Accuracy = 0,98	DNN

⁶² Το Wilks' lamda είναι ένα μέτρο του πόσο καλά κάθε συνάρτηση διαχωρίζει τις περιπτώσεις σε ομάδες. Είναι ίσο με το ποσοστό της συνολικής διακύμανσης στις βαθμολογίες διάκρισης, που δεν εξηγείται από τις διαφορές μεταξύ των ομάδων. Μικρότερες τιμές του λάμδα του Wilks δείχνουν μεγαλύτερη διακριτική ικανότητα της συνάρτησης, <https://www.ibm.com/docs/en/spss-statistics/27.0.0?topic=fit-wilks-lambda> , Accessed in 21/02/2024

Παρατηρώντας τον παραπάνω πίνακα, μπορεί να διαπιστώσει κανείς ότι οι πρώτες προσπάθειες για την δημιουργία QSAR για τον αιματοεγκεφαλικό φραγμό ξεκίνησαν στις αρχές του 21^{ου} αιώνα. Στην πρώτη δεκαετία, οι έρευνες με ένα εύρος αριθμό ενώσεων από 114- 415 και έχουν αρκετά μέτριες μετρικές απόδοσης από 0,65 με 0,87, ενώ εργασίες με εύρος από 35-88 ενώσεις, έχουν πιο καλές αποδόσεις με τον μέσο όρο να κυμαίνονται στο 0,80.

Στη δεύτερη δεκαετία του αιώνα, παρατηρούμε ότι ο αριθμός των ενώσεων στη βάση δεδομένων αυξάνεται (529 ενώσεις), όμως η προσαρμογή των δεδομένων στα μοντέλα κυμαίνεται στο 0,70.

Τέλος σε πρόσφατες μελέτες, που αριθμός των ενώσεων γίνεται τετραψήφιος, η απόδοση του μοντέλου του Shaker et al είναι μέτρια, ενώ από την άλλη η μελέτη του Mazumdar et al., που έχει μία αρκετά μεγάλη βάση δεδομένων, η απόδοση του είναι άριστη, αφού ισούται με Accuracy = 0,98. Βέβαια, όπως αναφέρθηκε η μετρική του Accuracy είναι σχετικά απλή, σε σχέση με το f_1 score, που χρησιμοποιήθηκε σε αυτό το μοντέλο.

Εν κατακλείδι, έγινε μία αξιολόγηση προσπάθεια και αναπτύχθηκε ένα αρκετά ικανοποιητικό μοντέλο QSAR. Όπως έχει αναφερθεί παραπάνω, η ανάπτυξη των in silico μεθόδων αποτελεί ένα κρίσιμο στοιχείο τόσο για τις διαδικασίες Εκτίμησης Κινδύνου, αλλά και για την ανάπτυξη των φαρμάκων, αφού είναι μία προκαταρκτική διαδικασία, που μπορεί να δώσει μία κατεύθυνση στα επόμενα πειραματικά στάδια. Οι τεχνικές αυτές, προάγουν τα 3Rs (Reduction- Replacemt- Refiment), κάτι πολύ σημαντικό, διότι πια γίνεται λόγος για μία πιο βιώσιμη επιστήμη. Πιο συγκεκριμένα, το μοντέλο έχει έναν μεγάλο αριθμό βάσης δεδομένων (8.569 ενώσεις) από τους μεγαλύτερους, που υπάρχουν στην βιβλιογραφία. Επιπλέον, η απόδοση του μοντέλου (f_1 score = 0,79) είναι αρκετά ικανοποιητική, αν λάβει κανείς υπόψη των αριθμό των δεδομένων, που φέρει, καθώς και ότι η μετρική που χρησιμοποιήθηκε, εξετάζει δύο παραμέτρους ταυτόχρονα. Επίσης, το f_1 score βρίσκεται πάνω από το όριο (f_1 score $\geq$ 0,70) , το οποίο κάνει το προκύπτον μοντέλο αρκετά αξιόπιστο ως προς την πρόβλεψη ενώσεων.

Κάποιες προτάσεις για μελλοντικές βελτιώσεις του μοντέλου είναι η προσθήκη ποσοτικής πληροφορίας, εκτός από την ποιοτική πληροφορία, που δίνεται τώρα, της διαπερατότητας ουσιών στον φραγμό (υπολογισμός logBB). Βέβαια, η εύρεση των logBB των ενώσεων είναι αρκετά απαιτητική διαδικασία, καθώς δεν υπάρχουν

πολλές βάσεις δεδομένων με μεγάλο αριθμό ενώσεων, που να δίνεται τέτοια πληροφορία. Τέλος, θα μπορούσε το συγκεκριμένο μοντέλο να αποτελέσει το αρχικό κομμάτι ενός πιο μεγάλου μοντέλου, που θα μελετά την φαρμακοκινητική ενώσεων για της νευροεκφυλιστικές ασθένειες.

Ενότητα 6: Βιβλιογραφία

- Ajay, Bemis, G. W., & Murcko, M. A. (1999). Designing libraries with CNS activity. *Journal of medicinal chemistry*, 42(24), 4942-4951.
- Al-Aidaroos, K. M., Bakar, A. A., & Othman, Z. (2010). Naive Bayes variants in classification learning. 2010 international conference on information retrieval & knowledge management (CAMP),
- Baştanlar, Y., & Özuysal, M. (2014). Introduction to machine learning. *miRNomics: MicroRNA biology and computational analysis*, 105-128.
- Baumgras, J. L., & Rogers, A. E. (1995). Chemical structures at the desktop: Integrating drawing tools with on-line registry files. *Journal of the American Society for Information Science*, 46(8), 623-631.
- Bi, Q., Goodman, K. E., Kaminsky, J., & Lessler, J. (2019). What is machine learning? A primer for the epidemiologist. *American journal of epidemiology*, 188(12), 2222-2239.
- Boardman, D., & Flynn, A. (2012). A gamma-ray identification algorithm based on Fisher linear discriminant analysis. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 60(1), 270-277.
- Brinkman, J. E., Dorius, B., & Sharma, S. (2018). Physiology, body fluids.
- Brito-Sánchez, Y., Marrero-Ponce, Y., Barigye, S. J., Yaber-Goenaga, I., Morell Perez, C., Le-Thi-Thu, H., & Cherkasov, A. (2015). Towards better BBB passage prediction using an extensive and curated data set. *Molecular Informatics*, 34(5), 308-330.
- Bujak, R., Struck-Lewicka, W., Kaliszan, M., Kaliszan, R., & Markuszewski, M. J. (2015). Blood–brain barrier permeability mechanisms in view of quantitative structure–activity relationships (QSAR). *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, 108, 29-37.
- Cabrera, M. A., Bermejo, M., Pérez, M., & Ramos, R. (2004). TOPS-MODE approach for the prediction of blood–brain barrier permeation. *Journal of pharmaceutical sciences*, 93(7), 1701-1717.
- Chen, H., Winiwarter, S., Fridén, M., Antonsson, M., & Engkvist, O. (2011). In silico prediction of unbound brain-to-plasma concentration ratio using machine learning algorithms. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 29(8), 985-995.
- Chen, X.-w., & Jeong, J. C. (2007). Enhanced recursive feature elimination. Sixth international conference on machine learning and applications (ICMLA 2007),
- Chow, S. C. (2014). Bioavailability and bioequivalence in drug development. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Statistics*, 6(4), 304-312.
- Cipolla, M. (2009). Chapter 6-Barriers of the CNS. *The Cerebral Circulation*. San Rafael, CA: Morgan & Claypool Life Sciences. Available online at: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/books/NBK53084/>. Accessed May, 3, 2021.
- Clark, J. M. (2018). The 3Rs in research: a contemporary approach to replacement, reduction and refinement. *British Journal of Nutrition*, 120(s1), S1-S7.
- Cohen, I., Huang, Y., Chen, J., Benesty, J., Benesty, J., Chen, J., Huang, Y., & Cohen, I. (2009). Pearson correlation coefficient. *Noise reduction in speech processing*, 1-4.
- Crivori, P., Cruciani, G., Carrupt, P.-A., & Testa, B. (2000). Predicting blood– brain barrier permeation from three-dimensional molecular structure. *Journal of medicinal chemistry*, 43(11), 2204-2216.

- Cruciani, G., Pastor, M., & Guba, W. (2000). VolSurf: a new tool for the pharmacokinetic optimization of lead compounds. *European Journal of Pharmaceutical Sciences*, 11, S29-S39.
- Daneman, R., & Prat, A. (2015). The blood–brain barrier. *Cold Spring Harbor perspectives in biology*, 7(1), a020412.
- Doniger, S., Hofmann, T., & Yeh, J. (2002). Predicting CNS permeability of drug molecules: comparison of neural network and support vector machine algorithms. *Journal of computational biology*, 9(6), 849-864.
- Drewes, F., & Klempien-Hinrichs, R. (2001). T REEBAG. Implementation and Application of Automata: 5th International Conference, CIAA 2000 London, Ontario, Canada, July 24–25, 2000 Revised Papers 5,
- Drewes, F., & Knirsch, P. (2000). TREEBAG—a Short Presentation. Applications of Graph Transformations with Industrial Relevance: International Workshop, AGTIVE'99 Kerkrade, The Netherlands, September 1–3, 1999 Proceedings 1,
- Fan, Y., Unwalla, R., Denny, R. A., Di, L., Kerns, E. H., Diller, D. J., & Humblet, C. (2010). Insights for predicting blood-brain barrier penetration of CNS targeted molecules using QSPR approaches. *Journal of chemical information and modeling*, 50(6), 1123-1133.
- Faraway, J. (2010). Generalized linear models. In *International Encyclopedia of Education* (pp. 178-183). Elsevier.
- Feher, M., Sourial, E., & Schmidt, J. M. (2000). A simple model for the prediction of blood–brain partitioning. *International journal of pharmaceutics*, 201(2), 239-247.
- Fu, X.-C., Wang, G.-P., Shan, H.-L., Liang, W.-Q., & Gao, J.-Q. (2008). Predicting blood–brain barrier penetration from molecular weight and number of polar atoms. *European journal of pharmaceutics and biopharmaceutics*, 70(2), 462-466.
- Ghannam, J. Y., & Al Kharazi, K. A. (2019). Neuroanatomy, cranial meninges.
- Gholamy, A., Kreinovich, V., & Kosheleva, O. (2018). Why 70/30 or 80/20 relation between training and testing sets: A pedagogical explanation.
- Giorgi, F. M., Ceraolo, C., & Mercatelli, D. (2022). The R language: an engine for bioinformatics and data science. *Life*, 12(5), 648.
- Goldstein, G. W., & Betz, A. L. (1986). The blood-brain barrier. *Scientific American*, 255(3), 74-83.
- Gomez-Molina, J.-F. Juan-Fernando Gomez-Molina.
- Hastie, T., & Qian, J. (2014). Glmnet vignette. Retrieved June, 9(2016), 1-30.
- Heller, S., McNaught, A., Stein, S., Tchekhovskoi, D., & Pletnev, I. (2013). InChI-the worldwide chemical structure identifier standard. *Journal of cheminformatics*, 5(1), 1-9.
- Heller, S. R., McNaught, A., Pletnev, I., Stein, S., & Tchekhovskoi, D. (2015). InChI, the IUPAC international chemical identifier. *Journal of cheminformatics*, 7(1), 1-34.
- Hollas, B. (2002). Correlation properties of the autocorrelation descriptor for molecules. *MATCH-Commun. Math. Comput. Chem*, 45, 27-33.
- Honovich, O., Choshen, L., Aharoni, R., Neeman, E., Szpektor, I., & Abend, O. (2021). Q^2 : Evaluating Factual Consistency in Knowledge-Grounded Dialogues via Question Generation and Question Answering. *arXiv preprint arXiv:2104.08202*.

- Hou, T., & Xu, X. (2002). ADME evaluation in drug discovery: 1. Applications of genetic algorithms to the prediction of blood–brain partitioning of a large set of drugs. *Molecular modeling annual*, 8, 337-349.
- Huttunen, K. M., Terasaki, T., Urtti, A., Montaser, A. B., & Uchida, Y. (2022). Pharmacoproteomics of brain barrier transporters and substrate design for the brain targeted drug delivery. *Pharmaceutical research*, 39(7), 1363-1392.
- Jones, S., Ye, Z., Xie, Z., Root, C., Prasutchai, T., Anderson, J., Roggenburg, M., & Lanham, M. A. A Proposed Data Analytics Workflow and Example Using the R Caret Package. CONFERENCE PROCEEDINGS BY TRACK,
- Joyce, J. (2003). Bayes' theorem.
- Kononov, D. A., Coomans, D., Deconinck, E., & Vander Heyden, Y. (2007). Benchmarking of QSAR models for blood-brain barrier permeation. *Journal of chemical information and modeling*, 47(4), 1648-1656.
- Kuhn, M. (2008). Building predictive models in R using the caret package. *Journal of statistical software*, 28, 1-26.
- Kumar, A., & Chordia, N. (2017). Role of bioinformatics in biotechnology. *Res Rev Biosci*, 12(1), 116.
- Kunwittaya, S., Nantasenamat, C., Treeratanapiboon, L., Srisarin, A., Isarankura-Na-Ayudhya, C., & Prachayasittikul, V. (2013). Influence of logBB cut-off on the prediction of blood-brain barrier permeability. *Biomed Appl Technol J*, 1, 16-34.
- Lambert, P. J., & Decoster, A. (2005). The Gini coefficient reveals more. *Available at SSRN 809004*.
- Leo, A., Hansch, C., & Elkins, D. (1971). Partition coefficients and their uses. *Chemical reviews*, 71(6), 525-616.
- Lewis, R. J. (2000). An introduction to classification and regression tree (CART) analysis. Annual meeting of the society for academic emergency medicine in San Francisco, California,
- Li, H., Yap, C. W., Ung, C. Y., Xue, Y., Cao, Z. W., & Chen, Y. Z. (2005). Effect of selection of molecular descriptors on the prediction of blood– brain barrier penetrating and nonpenetrating agents by statistical learning methods. *Journal of chemical information and modeling*, 45(5), 1376-1384.
- Li, W., & Henry, S. (1993). Object-oriented metrics that predict maintainability. *Journal of systems and software*, 23(2), 111-122.
- Lopez-Bernal, D., Balderas, D., Ponce, P., & Molina, A. (2021). Education 4.0: teaching the basics of KNN, LDA and simple perceptron algorithms for binary classification problems. *Future Internet*, 13(8), 193.
- Luco, J. M. (1999). Prediction of the brain– blood distribution of a large set of drugs from structurally derived descriptors using partial least-squares (PLS) modeling. *Journal of chemical information and computer sciences*, 39(2), 396-404.
- Mason, J. S., & Beno, B. R. (2000). Library design using BCUT chemistry-space descriptors and multiple four-point pharmacophore fingerprints: simultaneous optimization and structure-based diversity. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 18(4-5), 438-451.
- Mathew, J., Sankar, P., & Varacallo, M. (2018). Physiology, blood plasma.
- Meng, F., Xi, Y., Huang, J., & Ayers, P. W. (2021). A curated diverse molecular database of blood-brain barrier permeability with chemical descriptors. *Scientific Data*, 8(1), 289.

- Muegge, I., & Mukherjee, P. (2016). An overview of molecular fingerprint similarity search in virtual screening. *Expert opinion on drug discovery*, 11(2), 137-148.
- Muehlbacher, M., Spitzer, G. M., Liedl, K. R., & Kornhuber, J. (2011). Qualitative prediction of blood–brain barrier permeability on a large and refined dataset. *Journal of Computer-Aided Molecular Design*, 25, 1095-1106.
- Muratov, E. N., Bajorath, J., Sheridan, R. P., Tetko, I. V., Filimonov, D., Poroikov, V., Oprea, T. I., Baskin, I. I., Varnek, A., & Roitberg, A. (2020). QSAR without borders. *Chemical Society Reviews*, 49(11), 3525-3564.
- Myers, L., & Sirois, M. J. (2004). Spearman correlation coefficients, differences between. *Encyclopedia of statistical sciences*, 12.
- Narayanan, R., & Gunturi, S. B. (2005). In silico ADME modelling: prediction models for blood–brain barrier permeation using a systematic variable selection method. *Bioorganic & medicinal chemistry*, 13(8), 3017-3028.
- Närhi, K. (2023). AWS CDK Compared to Other IaC Tools.
- Natekin, A., & Knoll, A. (2013). Gradient boosting machines, a tutorial. *Frontiers in neurobotics*, 7, 21.
- Nigsch, F., Macaluso, N. M., Mitchell, J. B., & Zmuidinavicius, D. (2009). Computational toxicology: an overview of the sources of data and of modelling methods. *Expert Opinion on Drug Metabolism & Toxicology*, 5(1), 1-14.
- O'Boyle, N. M. (2012). Towards a Universal SMILES representation-A standard method to generate canonical SMILES based on the InChI. *Journal of cheminformatics*, 4, 1-14.
- Pang, S.-l., & Gong, J.-z. (2009). C5. 0 classification algorithm and application on individual credit evaluation of banks. *Systems Engineering-Theory & Practice*, 29(12), 94-104.
- Radchenko, E. V., Dyabina, A. S., & Palyulin, V. A. (2020). Towards deep neural network models for the prediction of the blood–brain barrier permeability for diverse organic compounds. *Molecules*, 25(24), 5901.
- Raihan, M. J., & Nahid, A.-A. (2023). Classification of histopathological colon cancer images using particle swarm optimization-based feature selection algorithm. In *Diagnostic Biomedical Signal and Image Processing Applications with Deep Learning Methods* (pp. 61-82). Elsevier.
- Ranstam, J., & Cook, J. (2018). LASSO regression. *Journal of British Surgery*, 105(10), 1348-1348.
- Reichenbach, A., & Wolburg, H. (2005). Astrocytes and ependymal glia. *Neuroglia*, 2, 19-35.
- Rigatti, S. J. (2017). Random forest. *Journal of Insurance Medicine*, 47(1), 31-39.
- Rubino, J. M., & Hogg, J. P. (2019). Neuroanatomy, cerebral aqueduct (Sylvian).
- Saeidnia, S., Manayi, A., & Abdollahi, M. (2015). From in vitro experiments to in vivo and clinical studies; pros and cons. *Current drug discovery technologies*, 12(4), 218-224.
- Scholz, C., Knorr, S., Hamacher, K., & Schmidt, B. (2015). DOCKTITE□ A Highly Versatile Step-by-Step Workflow for Covalent Docking and Virtual Screening in the Molecular Operating Environment. *Journal of chemical information and modeling*, 55(2), 398-406.
- Shaker, B., Ahmad, S., Lee, J., Jung, C., & Na, D. (2021). In silico methods and tools for drug discovery. *Computers in biology and medicine*, 137, 104851.
- Shaker, B., Lee, J., Lee, Y., Yu, M.-S., Lee, H.-M., Lee, E., Kang, H.-C., Oh, K.-S., Kim, H. W., & Na, D. (2023). A machine learning-based quantitative model

- (LogBB_Pred) to predict the blood–brain barrier permeability (logBB value) of drug compounds. *Bioinformatics*, 39(10), btad577.
- Sharma, A., & Paliwal, K. K. (2015). Linear discriminant analysis for the small sample size problem: an overview. *International Journal of Machine Learning and Cybernetics*, 6, 443-454.
- Shen, J., Du, Y., Zhao, Y., Liu, G., & Tang, Y. (2008). In silico prediction of blood–brain partitioning using a chemometric method called genetic algorithm based variable selection. *QSAR & Combinatorial Science*, 27(6), 704-717.
- Shih, J. J., Krusienski, D. J., & Wolpaw, J. R. (2012). Brain-computer interfaces in medicine. Mayo clinic proceedings,
- Sprowls, S., Saralkar, P., Arsiwala, T., Adkins, C., Blethen, K., Pizzuti, V., Shah, N., Fladeland, R., & Lockman, P. (2021). A Review of Mathematics Determining Solute Uptake at the Blood–Brain Barrier in Normal and Pathological Conditions. *Pharmaceutics* 2021, 13, 756. In: s Note: MDPI stays neu-tral with regard to jurisdictional claims in
- Stanton, D. T., Mattioni, B. E., Knittel, J. J., & Jurs, P. C. (2004). Development and use of hydrophobic surface area (hsa) descriptors for computer-assisted quantitative structure– activity and structure– property relationship studies. *Journal of chemical information and computer sciences*, 44(3), 1010-1023.
- Tay, J. K., Narasimhan, B., & Hastie, T. (2023). Elastic net regularization paths for all generalized linear models. *Journal of statistical software*, 106.
- Telano, L. N., & Baker, S. (2018). Physiology, cerebral spinal fluid.
- Telaumbanua, F., Purba, J. M., & Utomo, D. P. (2021). Analysis of Online Learning Understanding Patterns at Budi Darma University Using the C5. 0 Algorithm. *The IJICS (International Journal of Informatics and Computer Science)*, 5(2), 118-122.
- Thompson, W. J. (2001). Poisson distributions. *Computing in Science & Engineering*, 3(3), 78-82.
- Timofeev, R. (2004). Classification and regression trees (CART) theory and applications. *Humboldt University, Berlin*, 54.
- Uçar, M. K., Nour, M., Sindi, H., & Polat, K. (2020). The effect of training and testing process on machine learning in biomedical datasets. *Mathematical Problems in Engineering*, 2020.
- Valencia, D., Lillo, R. E., & Romo, J. (2019). A Kendall correlation coefficient between functional data. *Advances in Data Analysis and Classification*, 13, 1083-1103.
- Vendel, E., Rottschäfer, V., & de Lange, E. C. (2019). The need for mathematical modelling of spatial drug distribution within the brain. *Fluids and Barriers of the CNS*, 16, 1-33.
- Wang, W., Kim, M. T., Sedykh, A., & Zhu, H. (2015). Developing enhanced blood–brain barrier permeability models: integrating external bio-assay data in QSAR modeling. *Pharmaceutical research*, 32, 3055-3065.
- Webb, G. I., Keogh, E., & Miikkulainen, R. (2010). Naïve Bayes. *Encyclopedia of machine learning*, 15(1), 713-714.
- Weininger, D. (1988). SMILES, a chemical language and information system. 1. Introduction to methodology and encoding rules. *Journal of chemical information and computer sciences*, 28(1), 31-36.
- Wichmann, K., Diedenhofen, M., & Klamt, A. (2007). Prediction of blood–brain partitioning and human serum albumin binding based on COSMO-RS σ -Moments. *Journal of chemical information and modeling*, 47(1), 228-233.

- Yim, D.-S. (2017). Tutorial for beginners: the concept of clearance explained using the example of a vacuum cleaner. *Translational and Clinical Pharmacology*, 25(1), 1-4.
- Zhang, S., & Li, J. (2021). Knn classification with one-step computation. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*.
- Zhang, Y.-H., Xia, Z.-N., Qin, L.-T., & Liu, S.-S. (2010). Prediction of blood–brain partitioning: A model based on molecular electronegativity distance vector descriptors. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 29(2), 214-220.
- Γκιάτας, Ι. Σ. (2018). Εκτίμηση της επίδρασης του περιφερικού νευρικού συστήματος στην διαμόρφωση των αναπτυσσόμενων σκελετικών δομών του άνω άκρου.
- Ζαρόγιαννη, Ε.-Σ. Θ. (2013). *Το μοντέλο αναλογικών κινδύνων του Cox και εφαρμογή στην R*
- Κωτταρά, Π. (2020). Ανάπτυξη διαδικτυακής βιβλιοθήκης μοντέλων μηχανικής μάθησης για την πρόβλεψη ιδιοτήτων ναοϋλικών.
- Νικολάου, Γ. (2022). Απεικόνιση του εγκεφάλου με μαγνητική τομογραφία.
- Παπαδοπούλου, Α. Χ. (2021). *Τεχνικές υπολογιστικής νοημοσύνης και βαθιάς μάθησης στην ανάπτυξη ευφών πρακτόρων για παιχνίδια* Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης].
- Πριμικήρης, Π. (2018). *Μέτρηση μορίων απόπτωσης στον ορό του αίματος παιδιών με σπασμούς* Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών (ΕΚΠΑ). Σχολή Επιστημών Υγείας ...].
- Σουγλής, Α. (2010). *Αξιολόγηση βιοχημικών παραμέτρων μετά από αγωνιστική προσπάθεια σε αθλητές και αθλήτριες της ποδοσφαίρισης* Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών (ΕΚΠΑ). Σχολή Επιστημών Υγείας ...].
- Τσιρογιάννης, Γ. (2009). *Ανάπτυξη υπολογιστικών μοντέλων βιολογικών νευρωνικών δικτύων για τη μελέτη του ρόλου της ισχύος διασύνδεσης των νευρώνων* Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο (ΕΜΠ). Σχολή Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και ...].

Ενότητα 7: Παράρτημα- Βάση Δεδομένων

InChi	BBB	Literature
InChi=1S/2C7H8N4O2.C2H8N2/c2*1-10-5-4(8-3-9-5)6(12)11(2)7(10)13;3-1-2-4/h2*3H,1-2H3,(H,8,9);1-4H2	1	(Karelson et al., 2008)
InChi=1S/Ar	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChi=1S/C10H10BrNO2/c1-10(2)7-5-6(11)3-4-8(7)12-9(13)14-10/h3-5H,1-2H3,(H,12,13)	1	(Meng et al., 2021)
InChi=1S/C10H10Cl2N2O/c11-8-2-1-7(5-9(8)12)15-6-10-13-3-4-14-10/h1-2,5H,3-4,6H2,(H,13,14)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChi=1S/C10H10ClNO2/c11-6-5-9-12-10(13)7-3-1-2-4-8(7)14-9/h1-4,9H,5-6H2,(H,12,13)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChi=1S/C10H10ClNO2/c11-6-5-9-12-10(13)7-3-1-2-4-8(7)14-9/h1-4,9H,5-6H2,(H,12,13)/t9-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChi=1S/C10H10ClNO2/c11-6-5-9-12-10(13)7-3-1-2-4-8(7)14-9/h1-4,9H,5-6H2,(H,12,13)/t9-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChi=1S/C10H10FN3S/c1-13-9(12-14(2)10(13)15)7-4-3-5-8(11)6-7/h3-6H,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChi=1S/C10H10N2O/c1-8-7-10(13)12(11-8)9-5-3-2-4-6-9/h2-6H,7H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChi=1S/C10H10N2O/c1-8-7-10(13)12(11-8)9-5-3-2-4-6-9/h2-7,11H,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChi=1S/C10H10N2O3/c11-9(13)5-12-7-3-1-2-4-8(7)15-6-10(12)14/h1-4H,5-6H2,(H2,11,13)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChi=1S/C10H10N2O3/c11-9(13)6-12-5-7-3-1-2-4-8(7)15-10(12)14/h1-4H,5-6H2,(H2,11,13)	1	(Wu et al., 2018)
InChi=1S/C10H10N4O2S/c11-8-2-4-9(5-3-8)17(15,16)14-10-12-6-1-7-13-10/h1-7H,11H2,(H,12,13,14)	1	(Li et al., 2005)
InChi=1S/C10H10N4O2S/c11-9(12)14-10-13-6(4-17-10)5-1-2-7(15)8(16)3-5/h1-4,15-16H,(H4,11,12,13,14)	0	(Meng et al., 2021)
InChi=1S/C10H10N4S/c11-9(12)14-10-13-8(6-15-10)7-4-2-1-3-5-7/h1-6H,(H4,11,12,13,14)	1	(Meng et al., 2021)
InChi=1S/C10H10N4S/c11-9(12)14-10-13-8(6-15-10)7-4-2-1-3-5-7/h1-6H,(H4,11,12,13,14)/p+1	1	(Li et al., 2005)
InChi=1S/C10H10N6O2/c1-15-8(13-6-9(15)16(17)18)3-2-7-4-5-12-10(11)14-7/h2-6H,1H3,(H2,11,12,14)	0	(Meng et al., 2021)
InChi=1S/C10H10O4/c1-13-9(11)7-3-5-8(6-4-7)10(12)14-2/h3-6H,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChi=1S/C10H11BrN2O3/c1-3-4-10(5-6(2)11)7(14)12-9(16)13-8(10)15/h3H,1-2,4-5H2,(H2,12,13,14,15,16)	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C10H11ClF3N3.ClH/c11-9-7(10(12,13)14)1-2-8(16-9)17-5-3-15-4-6-17;/h1-2,15H,3-6H2;1H	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C10H11ClF3N3/c11-9-7(10(12,13)14)1-2-8(16-9)17-5-3-15-4-6-17/h1-2,15H,3-6H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H11ClF3N3O3/c11-10-15-7(13)5-8(16-10)17(2-14-5)9-4(12)6(19)3(1-18)20-9/h2-4,6,9,18-19H,1H2,(H2,13,15,16)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H11ClO3/c1-10(2,9(12)13)14-8-5-3-7(11)4-6-8/h3-6H,1-2H3,(H,12,13)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H11ClO3/c1-6-5-8(11)3-4-9(6)14-7(2)10(12)13/h3-5,7H,1-2H3,(H,12,13)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H11F3N2O5/c11-10(12,13)4-2-15(9(19)14-8(4)18)7-1-5(17)6(3-16)20-7/h2,5-7,16-17H,1,3H2,(H,14,18,19)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H11I2NO3/c1-2-3-16-9(14)6-13-4-7(11)10(15)8(12)5-13/h4-5H,2-3,6H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H11N3O3S/c1-7-6-10(12-16-7)13-17(14,15)9-4-2-8(11)3-5-9/h2-6H,11H2,1H3,(H,12,13)	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C10H11N5S/c11-7-3-1-2-6(4-7)8-5-16-10(14-8)15-9(12)13/h1-5H,11H2,(H4,12,13,14,15)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H11N5S/c11-7-4-2-1-3-6(7)8-5-16-10(14-8)15-9(12)13/h1-5H,11H2,(H4,12,13,14,15)	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C10H11NO4S2/c1-6(9(14)11-5-8(12)13)17-10(15)7-3-2-4-16-7/h2-4,6H,5H2,1H3,(H,11,14)(H,12,13)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H12ClN3/c1-7-2-3-9(8(11)6-7)14-10-12-4-5-13-10/h2-3,6H,4-5H2,1H3,(H2,12,13,14)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H12ClN3/c1-7-6-8(11)2-3-9(7)14-10-12-4-5-13-10/h2-3,6H,4-5H2,1H3,(H2,12,13,14)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H12ClN3O3S/c1-2-9-13-7-4-6(11)8(18(12,16)17)3-5(7)10(15)14-9/h3-4,9,13H,2H2,1H3,(H,14,15)(H2,12,16,17)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H12ClN5O3/c11-10-14-8(12)7-9(15-10)16(3-13-7)6-1-4(18)5(2-17)19-6/h3-6,17-18H,1-2H2,(H2,12,14,15)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H12ClN5O3/c11-10-14-8(12)7-9(15-10)16(3-13-7)6-1-4(18)5(2-17)19-6/h3-6,17-18H,1-2H2,(H2,12,14,15)/t4-,5-,6-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H12ClN5O3/c11-10-14-8(12)7-9(15-10)16(3-13-7)6-1-4(18)5(2-17)19-6/h3-6,17-18H,1-2H2,(H2,12,14,15)/t4-,5+,6+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H12ClN5O3/c11-10-14-8(12)7-9(15-10)16(3-13-7)6-1-4(18)5(2-17)19-6/h3-6,17-18H,1-2H2,(H2,12,14,15)/t4?,5-,6-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H12ClNO/c11-7-6-10(13)12-8-9-4-2-1-3-5-9/h1-5H,6-8H2,(H,12,13)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C10H12ClNO2/c11-8-3-1-7(2-4-8)9(12)5-6-10(13)14/h1-4,9H,5-6,12H2,(H,13,14)/t9-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H12ClNO2/c11-9-3-1-7(2-4-9)8(6-12)5-10(13)14/h1-4,8H,5-6,12H2,(H,13,14)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H12ClNO4/c11-7-1-3-9(4-2-7)15-5-8(13)6-16-10(12)14/h1-4,8,13H,5-6H2,(H2,12,14)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H12ClNO4/c11-7-1-3-9(4-2-7)15-5-8(13)6-16-10(12)14/h1-4,8,13H,5-6H2,(H2,12,14)/t8-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H12ClNO4/c11-7-1-3-9(4-2-7)15-5-8(13)6-16-10(12)14/h1-4,8,13H,5-6H2,(H2,12,14)/t8-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H12N2/c1-2-4-9(5-3-1)8-10-11-6-7-12-10/h1-5H,6-8H2,(H,11,12)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H12N2O/c1-12-9(4-5-10(12)13)8-3-2-6-11-7-8/h2-3,6-7,9H,4-5H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H12N2O/c1-12-9(4-5-10(12)13)8-3-2-6-11-7-8/h2-3,6-7,9H,4-5H2,1H3/t9-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C10H12N2O/c1-12-9(4-5-10(12)13)8-3-2-6-11-7-8/h2-3,6-7,9H,4-5H2,1H3/t9-/m1/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C10H12N2O2/c13-10(9-2-1-3-11-8-9)12-4-6-14-7-5-12/h1-3,8H,4-7H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H12N2O2S/c13-15(14)9-5-2-1-4-8(9)12-7-3-6-10(12)11-15/h1-2,4-5,10-11H,3,6-7H2/t10-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H12N2O3/c1-3-5-10(6-4-2)7(13)11-9(15)12-8(10)14/h3-4H,1-2,5-6H2,(H2,11,12,13,14,15)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H12N2O3S2/c13-6-1-8-11(6)3-5(16-8)10(15)4-12-7(14)2-9(12)17-10/h5,8-9,15H,1-4H2	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C10H12N2O3S2/c13-6-1-8-11(6)3-5(16-8)10(15)4-12-7(14)2-9(12)17-10/h5,8-9,15H,1-4H2/t5-,8-,9-,10?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H12N2O3S2/c13-6-1-8-11(6)3-5(16-8)10(15)4-12-7(14)2-9(12)17-10/h5,8-9,15H,1-4H2/t5?,8-,9-,10?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H12N2O4/c1-6-4-12(10(15)11-9(6)14)8-3-2-7(5-13)16-8/h2-4,7-8,13H,5H2,1H3,(H,11,14,15)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H12N2O4/c1-6-4-12(10(15)11-9(6)14)8-3-2-7(5-13)16-8/h2-4,7-8,13H,5H2,1H3,(H,11,14,15)/t7-,8-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H12N2O4/c1-6-4-12(10(15)11-9(6)14)8-3-2-7(5-13)16-8/h2-4,7-8,13H,5H2,1H3,(H,11,14,15)/t7-,8+/m0/s1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C10H12N2O4/c1-6-4-12(10(15)11-9(6)14)8-3-2-7(5-13)16-8/h2-4,7-8,13H,5H2,1H3,(H,11,14,15)/t7-,8+/m1/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C10H12N2O6S/c1-3(13)5-7(14)12-6(9(15)16)4(19-8(5)12)2-18-10(11)17/h3,5,8,13H,2H2,1H3,(H2,11,17)(H,15,16)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H12N2O6S/c1-3(13)5-7(14)12-6(9(15)16)4(19-8(5)12)2-18-10(11)17/h3,5,8,13H,2H2,1H3,(H2,11,17)(H,15,16)/t3-,5-,8-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H12N2O6S/c1-3(13)5-7(14)12-6(9(15)16)4(19-8(5)12)2-18-10(11)17/h3,5,8,13H,2H2,1H3,(H2,11,17)(H,15,16)/t3-,5?,8-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H12N2O6S/c1-3(13)5-7(14)12-6(9(15)16)4(19-8(5)12)2-18-10(11)17/h3,5,8,13H,2H2,1H3,(H2,11,17)(H,15,16)/t3-,5+,8-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H12N2O6S/c1-3(13)5-7(14)12-6(9(15)16)4(19-8(5)12)2-18-10(11)17/h3,5,8,13H,2H2,1H3,(H2,11,17)(H,15,16)/t3-,5+,8-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H12N4O3/c1-14-4-9(16)5-2-6(12-13-10(11)17)8(15)3-7(5)14/h2-3,9,15-16H,4H2,1H3,(H2,11,17)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H12N4O3/c15-3-6-1-2-7(17-6)14-5-13-8-9(14)11-4-12-10(8)16/h4-7,15H,1-3H2,(H,11,12,16)	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C10H12N4O3/c15-3-6-1-2-7(17-6)14-5-13-8-9(14)11-4-12-10(8)16/h4-7,15H,1-3H2,(H,11,12,16)/t6-,7-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H12N4O3/c15-3-6-1-2-7(17-6)14-5-13-8-9(14)11-4-12-10(8)16/h4-7,15H,1-3H2,(H,11,12,16)/t6-,7+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H12N4O3/c15-3-6-1-2-7(17-6)14-5-13-8-9(14)11-4-12-10(8)16/h4-7,15H,1-3H2,(H,11,12,16)/t6-,7+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H12N4O5S/c1-10(5-13-3-2-11-12-13)8(9(16)17)14-6(15)4-7(14)20(10,18)19/h2-3,7-8H,4-5H2,1H3,(H,16,17)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H12N4O5S/c1-10(5-13-3-2-11-12-13)8(9(16)17)14-6(15)4-7(14)20(10,18)19/h2-3,7-8H,4-5H2,1H3,(H,16,17)/t7-,8-,10?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H12N4O5S/c1-10(5-13-3-2-11-12-13)8(9(16)17)14-6(15)4-7(14)20(10,18)19/h2-3,7-8H,4-5H2,1H3,(H,16,17)/t7-,8+,10-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H12N4O5S/c1-10(5-13-3-2-11-12-13)8(9(16)17)14-6(15)4-7(14)20(10,18)19/h2-3,7-8H,4-5H2,1H3,(H,16,17)/t7-,8+,10+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H12N4O5S/c1-10(5-13-3-2-11-12-13)8(9(16)17)14-6(15)4-7(14)20(10,18)19/h2-3,7-8H,4-5H2,1H3,(H,16,17)/t7-,8+,10+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H12N4OS/c1-7(15)13-9-4-2-8(3-5-9)6-12-14-10(11)16/h2-6H,1H3,(H,13,15)(H3,11,14,16)	0	(Mazumdar et al., 2023)

	2023)
InChI=1S/C10H12O2/c11-10(12)8-4-7-9-5-2-1-3-6-9/h1-3,5-6H,4,7-8H2,(H,11,12)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H13CIN2/c11-9-2-1-3-10(8-9)13-6-4-12-5-7-13/h1-3,8,12H,4-7H2	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H13CIN2O3S/c1-2-7-12-10(14)13-17(15,16)9-5-3-8(11)4-6-9/h3-6H,2,7H2,1H3,(H2,12,13,14)	0 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C10H13FN2O4/c1-5-3-13(10(16)12-9(5)15)8-2-6(11)7(4-14)17-8/h3,6-8,14H,2,4H2,1H3,(H,12,15,16)	1 (Shin et al., 2021)
InChI=1S/C10H13FN2O4/c1-5-3-13(10(16)12-9(5)15)8-2-6(11)7(4-14)17-8/h3,6-8,14H,2,4H2,1H3,(H,12,15,16)/t6-,7-,8-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H13FN2O4/c1-5-3-13(10(16)12-9(5)15)8-2-6(11)7(4-14)17-8/h3,6-8,14H,2,4H2,1H3,(H,12,15,16)/t6-,7+,8+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H13FN2O4/c1-5-3-13(10(16)12-9(5)15)8-2-6(11)7(4-14)17-8/h3,6-8,14H,2,4H2,1H3,(H,12,15,16)/t6-,7+,8+/m1/s1	1 (Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C10H13FN2O5/c1-4-2-13(10(17)12-8(4)16)9-6(11)7(15)5(3-14)18-9/h2,5-7,9,14-15H,3H2,1H3,(H,12,16,17)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H13FN5O7P/c11-10-14-7(12)4-8(15-10)16(2-13-4)9-6(18)5(17)3(23-9)1-22-24(19,20)21/h2-3,5-6,9,17-18H,1H2,(H2,12,14,15)(H2,19,20,21)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H13N3/c1-8-4-2-3-5-9(8)13-10-11-6-7-12-10/h2-5H,6-7H2,1H3,(H2,11,12,13)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H13N3/c11-10(12)13-6-5-8-3-1-2-4-9(8)7-13/h1-4H,5-7H2,(H3,11,12)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H13N3O2/c11-10(12)13-5-7-6-14-8-3-1-2-4-9(8)15-7/h1-4,7H,5-6H2,(H4,11,12,13)/t7-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H13N3O3/c1-6-4-13(10(15)12-9(6)11)8-3-2-7(5-14)16-8/h2-4,7-8,14H,5H2,1H3,(H2,11,12,15)/t7-,8-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H13N3O5S/c1-8-7-19(16,17)5-4-12(8)11-6-9-2-3-10(18-9)13(14)15/h2-3,6,8H,4-5,7H2,1H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H13N5O4/c1-5-3-15(10(18)12-9(5)17)8-2-6(13-14-11)7(4-16)19-8/h3,6-8,11,16H,2,4H2,1H3/p+1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H13N5O4/c1-5-3-15(10(18)12-9(5)17)8-2-6(13-14-11)7(4-16)19-8/h3,6-8,16H,2,4H2,1H3,(H,12,17,18)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H13N5O4/c1-5-3-15(10(18)12-9(5)17)8-2-6(13-14-11)7(4-16)19-8/h3,6-8,16H,2,4H2,1H3,(H,12,17,18)/t6-,7-,8-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H13N5O4/c1-5-3-15(10(18)12-9(5)17)8-2-6(13-14-11)7(4-16)19-8/h3,6-8,16H,2,4H2,1H3,(H,12,17,18)/t6-,7+,8-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H13N5O4/c1-5-3-15(10(18)12-9(5)17)8-2-6(13-14-11)7(4-16)19-8/h3,6-8,16H,2,4H2,1H3,(H,12,17,18)/t6-,7+,8+/m0/s1	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C10H13N5O4/c11-8-5-9(13-2-12-8)15(3-14-5)10-7(18)6(17)4(1-16)19-10/h2-4,6-7,10,16-18H,1H2,(H2,11,12,13)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H13N5O4/c11-8-5-9(13-2-12-8)15(3-14-5)10-7(18)6(17)4(1-16)19-10/h2-4,6-7,10,16-18H,1H2,(H2,11,12,13)/t4-,6-,7-,10-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H13N5O4/c11-8-5-9(13-2-12-8)15(3-14-5)10-7(18)6(17)4(1-16)19-10/h2-4,6-7,10,16-18H,1H2,(H2,11,12,13)/t4-,6+,7-,10-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C10H13NO2/c1-2-7-13-10(12)8-3-5-9(11)6-4-8/h3-6H,2,7,11H2,1H3	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C10H13NO2/c1-3-13-10-6-4-9(5-7-10)11-8(2)12/h4-7H,3H2,1-2H3,(H,11,12)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C10H13NO2/c11-10(12)13-8-4-7-9-5-2-1-3-6-9/h1-3,5-6H,4,7-8H2,(H2,11,12)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H13NO3/c1-10(11,9(13)14)6-7-2-4-8(12)5-3-7/h2-5,12H,6,11H2,1H3,(H,13,14)/t10-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H13NO3/c12-6-7-14-10(13)11-8-9-4-2-1-3-5-9/h1-5,12H,6-8H2,(H,11,13)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C10H13NO4/c1-10(11,9(14)15)5-6-2-3-7(12)8(13)4-6/h2-4,12-13H,5,11H2,1H3,(H,14,15)	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C10H13NO4/c1-10(11,9(14)15)5-6-2-3-7(12)8(13)4-6/h2-4,12-13H,5,11H2,1H3,(H,14,15)/t10-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H14/c1-10(2,3)9-7-5-4-6-8-9/h4-8H,1-3H3	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C10H14ClNO3/c11-10-14-8(12)7-9(15-10)16(3-13-7)6-1-4(18)5(2-17)19-6/h3-6,8,17-18H,1-2,12H2,(H,14,15)/t4-,5-,6-,8+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H14N2/c1-12-7-3-5-10(12)9-4-2-6-11-8-9/h2,4,6,8,10H,3,5,7H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H14N2/c1-12-7-3-5-10(12)9-4-2-6-11-8-9/h2,4,6,8,10H,3,5,7H2,1H3/t10-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H14N2/c1-12-7-3-5-10(12)9-4-2-6-11-8-9/h2,4,6,8,10H,3,5,7H2,1H3/t10-/m1/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C10H14N2O/c1-3-12(4-2)10(13)9-6-5-7-11-8-9/h5-8H,3-4H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H14N2O2/c1-10(2,3)12(14)8-9-4-6-11(13)7-5-9/h4-8H,1-3H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C10H14N2O2/c1-10(2,3)12(14)8-9-4-6-11(13)7-5-9/h4-8H,1-3H3/b12-8-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H14N2O2/c1-10(2,3)12(14)8-9-4-6-11(13)7-5-9/h4-8H,1-3H3/b12-8+	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C10H14N2O3/c1-4-5-10(6(2)3)7(13)11-9(15)12-8(10)14/h4,6H,1,5H2,2-3H3,(H2,11,12,13,14,15)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H14N2O4/c1-10(12-11,9(15)16)5-6-2-3-7(13)8(14)4-6/h2-4,12-14H,5,11H2,1H3,(H,15,16)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H14N2O4/c1-10(12-11,9(15)16)5-6-2-3-7(13)8(14)4-6/h2-4,12-14H,5,11H2,1H3,(H,15,16)/t10-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H14N2O4/c1-3-4-10(5-6(2)13)7(14)11-9(16)12-8(10)15/h3,6,13H,1,4-5H2,2H3,(H2,11,12,14,15,16)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H14N2O4/c1-3-4-10(5-6(2)13)7(14)11-9(16)12-8(10)15/h3,6,13H,1,4-5H2,2H3,(H2,11,12,14,15,16)/t6-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H14N2O4S2/c11-18(15,16)10-5-3-9(4-6-10)12-7-1-2-8-17(12,13)14/h3-6H,1-2,7-8H2,(H2,11,15,16)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H14N2O5/c1-5-3-12(10(16)11-9(5)15)8-2-6(14)7(4-13)17-8/h3,6-8,13-14H,2,4H2,1H3,(H,11,15,16)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H14N4O3/c1-6(15)4-14-5-11-8-7(14)9(16)13(3)10(17)12(8)2/h5-6,15H,4H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H14N4O3/c1-6(15)4-14-5-11-8-7(14)9(16)13(3)10(17)12(8)2/h5-6,15H,4H2,1-3H3/t6-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C10H14N4O4/c1-12-8-7(9(17)13(2)10(12)18)14(5-11-8)3-6(16)4-15/h5-6,15-16H,3-4H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H14N5O4/c1-5-3-15(10(18)12-9(5)17)8-2-6(13-14-11)7(4-16)19-8/h3,5-8,11,16H,2,4H2,1H3/q+1/p+1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H14N5O7P/c11-8-5-9(13-2-12-8)15(3-14-5)10-7(17)6(16)4(22-10)1-21-23(18,19)20/h2-4,6-7,10,16-17H,1H2,(H2,11,12,13)(H2,18,19,20)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H14O3S/c1-7-5-8(12-2)9(13-3)6-10(7)14(4)11/h5-6H,1-4H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H15N/c1-10(2,11)8-9-6-4-3-5-7-9/h3-7H,8,11H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H15N/c1-9(11-2)8-10-6-4-3-5-7-10/h3-7,9,11H,8H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H15N/c1-9(11-2)8-10-6-4-3-5-7-10/h3-7,9,11H,8H2,1-2H3/t9-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H15N/c1-9(11-2)8-10-6-4-3-5-7-10/h3-7,9,11H,8H2,1-2H3/t9-/m1/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C10H15N2O2/c1-10(2,3)12(14)8-9-4-6-11(13)7-5-9/h4-8,14H,1-3H3/q+1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H15N3/c1-11-10(12-2)13-8-9-6-4-3-5-7-9/h3-7H,8H2,1-2H3,(H2,11,12,13)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H15N3/c1-9-10(12-6-5-11-9)13-7-3-2-4-8-13/h5-6H,2-4,7-8H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H15N3O/c1-14-12-10(6-11)9-7-13-4-2-8(9)3-5-13/h8-9H,2-5,7H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H15N3O/c1-14-12-10(6-11)9-7-13-4-2-8(9)3-5-13/h8-9H,2-5,7H2,1H3/b12-10-/t9-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H15N3O/c1-14-12-10(6-11)9-7-13-4-2-8(9)3-5-13/h8-9H,2-5,7H2,1H3/b12-10-/t9-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H15N3O/c1-14-12-10(6-11)9-7-13-4-2-8(9)3-5-13/h8-9H,2-5,7H2,1H3/b12-10+/t9-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H15N3O/c1-14-12-10(6-11)9-7-13-4-2-8(9)3-5-13/h8-9H,2-5,7H2,1H3/b12-10+/t9-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H15N3O/c11-10(12)13-7-4-8-14-9-5-2-1-3-6-9/h1-3,5-6H,4,7-8H2,(H4,11,12,13)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C10H15N3O4/c11-8-1-2-13(10(16)12-8)9-3-6(4-14)7(5-15)17-9/h1-2,6-7,9,14-15H,3-5H2,(H2,11,12,16)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H15N3O4/c11-8-1-2-13(10(16)12-8)9-3-6(4-14)7(5-15)17-9/h1-2,6-7,9,14-15H,3-5H2,(H2,11,12,16)/t6-,7+,9-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H15N3O4/c11-8-1-2-13(10(16)12-8)9-3-6(4-14)7(5-15)17-9/h1-2,6-7,9,14-15H,3-5H2,(H2,11,12,16)/t6-,7+,9-/m1/s1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C10H15N3O4/c11-8-1-2-13(10(16)12-8)9-3-6(4-14)7(5-15)17-9/h1-2,6-7,9,14-15H,3-5H2,(H2,11,12,16)/t6?,7?,9-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H15N3O5/c11-6(4-14)10(18)13-12-3-5-1-2-7(15)9(17)8(5)16/h1-2,6,12,14-17H,3-4,11H2,(H,13,18)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H15N3O5/c11-6(4-14)10(18)13-12-3-5-1-2-7(15)9(17)8(5)16/h1-2,6,12,14-17H,3-4,11H2,(H,13,18)/t6-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H15N3O5/c11-6(4-14)10(18)13-12-3-5-1-2-7(15)9(17)8(5)16/h1-2,6,12,14-17H,3-4,11H2,(H,13,18)/t6-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C10H15N3S/c1-2-5-13-6-3-8-9(4-7-13)14-10(11)12-8/h2H,1,3-7H2,(H2,11,12)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H15N5/c1-4-14(5-2)9-6-8(3)13-10-11-7-12-15(9)10/h6-7H,4-5H2,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H15N5/c11-9(12)15-10(13)14-7-6-8-4-2-1-3-5-8/h1-5H,6-7H2,(H6,11,12,13,14,15)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H15N5O3/c11-10-13-8-7(9(18)14-10)12-5-15(8)2-1-6(3-16)4-17/h5-6,16-17H,1-4H2,(H3,11,13,14,18)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H15N5O4/c1-5-3-15(10(18)12-9(5)17)8-2-6(13-14-11)7(4-16)19-8/h3,6-8,16H,2,4H2,1H3,(H2,11,13)(H,12,17,18)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H15NO/c1-4-11(2,3)9-6-5-7-10(12)8-9/h5-8H,4H2,1-3H3/p+1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H15NO/c1-8(11-2)10(12)9-6-4-3-5-7-9/h3-8,10-12H,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H15NO/c1-8(11-2)10(12)9-6-4-3-5-7-9/h3-8,10-12H,1-2H3/t8-,10-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H15NO/c1-8(11-2)10(12)9-6-4-3-5-7-9/h3-8,10-12H,1-2H3/t8-,10+/m0/s1	1	(Nikolic et al., 2013)
InChI=1S/C10H15NO/c1-8(11)6-9-4-3-5-10(7-9)12-2/h3-5,7-8H,6,11H2,1-2H3/t8-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H15NO2/c1-2-11-7-10(13)8-4-3-5-9(12)6-8/h3-6,10-13H,2,7H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H15NO2/c1-2-11-7-10(13)8-4-3-5-9(12)6-8/h3-6,10-13H,2,7H2,1H3/t10-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H15NO2/c1-2-11-7-10(13)8-4-3-5-9(12)6-8/h3-6,10-13H,2,7H2,1H3/t10-/m1/s1	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C10H15NO2/c1-2-6-10(13-9(11)12)7-4-3-5-8-10/h1H,3-8H2,(H2,11,12)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H15NO2/c1-3-4-6-11-7-5-9(12)10(13)8(11)2/h5,7,13H,3-4,6H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H15NO2/c1-4-10(5-2)8(12)7(3)6-11-9(10)13/h6H,4-5H2,1-3H3,(H,11,13)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H15NO2/c1-7(11-2)10(13)8-3-5-9(12)6-4-8/h3-7,10-13H,1-2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H15NO2/c1-7(11-2)10(13)8-3-5-9(12)6-4-8/h3-7,10-13H,1-2H3/t7-,10-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H15NO2/c1-7(11-2)10(13)8-3-5-9(12)6-4-8/h3-7,10-13H,1-2H3/t7-,10+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H15NO2/c1-7(11-2)10(13)8-3-5-9(12)6-4-8/h3-7,10-13H,1-2H3/t7-,10+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H15NO3/c1-6(2)11-10(14)7-3-4-8(12)9(13)5-7/h3-6,10-14H,1-2H3/t10-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H16Br2N2O2/c11-3-1-9(15)13-5-7-14(8-6-13)10(16)2-4-12/h1-8H2	0	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C10H16N2O/c1-2-7(1)9(8-3-4-8)12-10-11-5-6-13-10/h7-9H,1-6H2,(H,11,12)	1	(Nikolic et al., 2013)
InChI=1S/C10H16N2O2/c13-9-5-4-8(11-9)10(14)12-6-2-1-3-7-12/h8H,1-7H2,(H,11,13)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H16N2O2/c13-9-5-4-8(11-9)10(14)12-6-2-1-3-7-12/h8H,1-7H2,(H,11,13)/t8-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H16N2O2/c13-9-5-4-8(11-9)10(14)12-6-2-1-3-7-12/h8H,1-7H2,(H,11,13)/t8-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H16N2O3/c1-3-5-6-10(4-2)7(13)11-9(15)12-8(10)14/h3-6H2,1-2H3,(H2,11,12,13,14,15)	1	(Li et al., 2005) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H16N2O3/c1-4-6(3)10(5-2)7(13)11-9(15)12-8(10)14/h6H,4-5H2,1-3H3,(H2,11,12,13,14,15)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H16N2O3/c1-4-6(3)10(5-2)7(13)11-9(15)12-8(10)14/h6H,4-5H2,1-3H3,(H2,11,12,13,14,15)/t6-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H16N2O3/c1-4-6(3)10(5-2)7(13)11-9(15)12-8(10)14/h6H,4-5H2,1-3H3,(H2,11,12,13,14,15)/t6-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H16N2O3/c1-4-6(3)10(5-2)7(13)11-9(15)12-8(10)14/h6H,4-5H2,1-3H3,(H2,11,12,13,14,15)/t6-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H16N2O3S/c13-8(14)4-2-1-3-7-9-6(5-16-7)11-10(15)12-9/h6-7,9H,1-5H2,(H,13,14)(H2,11,12,15)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H16N2O3S/c13-8(14)4-2-1-3-7-9-6(5-16-7)11-10(15)12-9/h6-7,9H,1-5H2,(H,13,14)(H2,11,12,15)/t6-,7-,9-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H16N2O3S/c13-8(14)4-2-1-3-7-9-6(5-16-7)11-10(15)12-9/h6-7,9H,1-5H2,(H,13,14)(H2,11,12,15)/t6-,7-,9-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H16N2O3S/c13-8(14)4-2-1-3-7-9-6(5-16-7)11-10(15)12-9/h6-7,9H,1-5H2,(H,13,14)(H2,11,12,15)/t6-,7-,9+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H16N2O3S/c13-8(14)4-2-1-3-7-9-6(5-16-7)11-10(15)12-9/h6-7,9H,1-5H2,(H,13,14)(H2,11,12,15)/t6-,7+,9+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H16N2O4S3/c1-3-12-8-4-6(2)18(13,14)10-7(8)5-9(17-10)19(11,15)16/h5-6,8,12H,3-4H2,1-2H3,(H2,11,15,16)	0	(Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H16N2O4S3/c1-3-12-8-4-6(2)18(13,14)10-7(8)5-9(17-10)19(11,15)16/h5-6,8,12H,3-4H2,1-2H3,(H2,11,15,16)/t6-,8-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H16N2O8/c13-7(14)3-11(4-8(15)16)1-2-12(5-9(17)18)6-10(19)20/h1-6H2,(H,13,14)(H,15,16)(H,17,18)(H,19,20)	0	
InChI=1S/C10H16N2OS/c1-4-5-12-9(13)8(6-7(2)3)11-10(12)14/h4,7-8H,1,5-6H2,2-3H3,(H,11,14)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H16N2OS/c1-4-5-12-9(13)8(6-7(2)3)11-10(12)14/h4,7-8H,1,5-6H2,2-3H3,(H,11,14)/t8-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H16N2OS/c1-4-5-12-9(13)8(6-7(2)3)11-10(12)14/h4,7-8H,1,5-6H2,2-3H3,(H,11,14)/t8-/m1/s1	1	
InChI=1S/C10H16N5O13P3/c11-8-5-9(13-2-12-8)15(3-14-5)10-7(17)6(16)4(26-10)1-25-30(21,22)28-31(23,24)27-29(18,19)20/h2-4,6-7,10,16-17H,1H2,(H,21,22)(H,23,24)(H2,11,12,13)(H2,18,19,20)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H16N6S/c1-8-9(16-7-15-8)5-17-4-3-13-10(12-2)14-6-11/h7-8H,3-5H2,1-2H3,(H2,12,13,14)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H16N6S/c1-8-9(16-7-15-8)5-17-4-3-13-10(12-2)14-6-11/h7H,3-5H2,1-2H3,(H,15,16)(H2,12,13,14)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H16N6S/c1-8-9(16-7-15-8)5-17-4-3-13-10(12-2)14-6-11/h7H,3-5H2,1-2H3,(H,15,16)(H2,12,13,14)/p+1	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C10H16N8S2/c1-14-9(16-6-11)15-2-3-19-4-7-5-20-10(17-7)18-8(12)13/h5H,2-4H2,1H3,(H2,14,15,16)(H4,12,13,17,18)	1	(Platts et al., 2001)

InChI=1S/C10H16O/c1-9(2)7-4-5-10(9,3)8(11)6-7/h7H,4-6H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H16O/c1-9(2)7-4-5-10(9,3)8(11)6-7/h7H,4-6H2,1-3H3/t7-,10-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H16O/c1-9(2)7-4-5-10(9,3)8(11)6-7/h7H,4-6H2,1-3H3/t7-,10+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H16O/c1-9(2)7-4-5-10(9,3)8(11)6-7/h7H,4-6H2,1-3H3/t7-,10+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H17N/c11-10-4-7-1-8(5-10)3-9(2-7)6-10/h7-9H,1-6,11H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H17N3O2/c11-7-10(4-2-1-3-5-10)6-8-12-9(14)15-13-8/h1-7,11H2,(H,12,13,14)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H17N3O6S/c11-5(10(18)19)1-2-7(14)13-6(4-20)9(17)12-3-8(15)16/h5-6,20H,1-4,11H2,(H,12,17)(H,13,14)(H,15,16)(H,18,19)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H17N3S/c1-2-5-12-7-3-4-8-9(6-7)14-10(11)13-8/h7,12H,2-6H2,1H3,(H2,11,13)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H17N3S/c1-2-5-12-7-3-4-8-9(6-7)14-10(11)13-8/h7,12H,2-6H2,1H3,(H2,11,13)/t7-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H17N3S/c1-2-5-12-7-3-4-8-9(6-7)14-10(11)13-8/h7,12H,2-6H2,1H3,(H2,11,13)/t7-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H17NO2/c1-4-10(5-2)8(12)7(3)6-11-9(10)13/h7H,4-6H2,1-3H3,(H,11,13)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H17NO2/c1-4-10(5-2)8(12)7(3)6-11-9(10)13/h7H,4-6H2,1-3H3,(H,11,13)/t7-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H17NO2/c1-4-10(5-2)8(12)7(3)6-11-9(10)13/h7H,4-6H2,1-3H3,(H,11,13)/t7-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H17NOS/c1-8-12-10(7-13-8)6-11-4-2-9(10)3-5-11/h8-9H,2-7H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H18N2O/c1-12-9(4-5-10(12)13)8-3-2-6-11-7-8/h8-9,11H,2-7H2,1H3	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C10H18O21S4/c11-3-1-26-10(8(31-35(22,23)24)5(3)28-32(13,14)15)27-4-2-25-9(12)7(30-34(19,20)21)6(4)29-33(16,17)18/h3-12H,1-2H2,(H,13,14,15)(H,16,17,18)(H,19,20,21)(H,22,23,24)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H19N3O2/c11-9(12)13-6-8-7-14-10(15-8)4-2-1-3-5-10/h8H,1-7H2,(H4,11,12,13)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H19N3O2/c11-9(12)13-6-8-7-14-10(15-8)4-2-1-3-5-10/h8H,1-7H2,(H4,11,12,13)/t8-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H19N3O2/c11-9(12)13-6-8-7-14-10(15-8)4-2-1-3-5-10/h8H,1-7H2,(H4,11,12,13)/t8-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H19NO2/c1-2-9(13-10(11)12)8-6-4-3-5-7-8/h8-9H,2-7H2,1H3,(H2,11,12)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H19NO2/c1-2-9(13-10(11)12)8-6-4-3-5-7-8/h8-9H,2-7H2,1H3,(H2,11,12)/t9-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H19NO2/c1-2-9(13-10(11)12)8-6-4-3-5-7-8/h8-9H,2-7H2,1H3,(H2,11,12)/t9-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H19NO5/c1-10(2,6-12)8(15)9(16)11-5-3-4-7(13)14/h8,12,15H,3-6H2,1-2H3,(H,11,16)(H,13,14)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H19NO5/c1-10(2,6-12)8(15)9(16)11-5-3-4-7(13)14/h8,12,15H,3-6H2,1-2H3,(H,11,16)(H,13,14)/t8-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C10H19NO5/c1-10(2,6-12)8(15)9(16)11-5-3-4-7(13)14/h8,12,15H,3-6H2,1-2H3,(H,11,16)(H,13,14)/t8-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H19O6PS2/c1-5-15-9(11)7-8(10(12)16-6-2)19-17(18,13-3)14-4/h8H,5-7H2,1-4H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H20/c1-10(2,3)9-7-5-4-6-8-9/h9H,4-8H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H20/c1-3-5-7-9-10-8-6-4-2/h3H,1,4-10H2,2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H20N2/c1-12-7-3-5-10(12)9-4-2-6-11-8-9/h9-11H,2-8H2,1H3	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C10H20N2O4/c1-4-5-10(2,6-15-8(11)13)7-16-9(14)12-3/h4-7H2,1-3H3,(H2,11,13)(H,12,14)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H20N2O4/c1-4-7(2)10(3,5-15-8(11)13)6-16-9(12)14/h7H,4-6H2,1-3H3,(H2,11,13)(H2,12,14)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H20N2O4/c1-4-7(2)10(3,5-15-8(11)13)6-16-9(12)14/h7H,4-6H2,1-3H3,(H2,11,13)(H2,12,14)/t7-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H20N2S4/c1-5-11(6-2)9(13)15-16-10(14)12(7-3)8-4/h5-8H2,1-4H3	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C10H20N6S/c1-8-9(16-7-15-8)5-17-4-3-13-10(12-2)14-6-11/h8-9,15-16H,3-5,7H2,1-2H3,(H2,12,13,14)	0	Chen et al., 2009
InChI=1S/C10H20O/c1-7(2)9-5-4-8(3)6-10(9)11/h7-11H,4-6H2,1-3H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H20O/c1-8(2)10(11)9-6-4-3-5-7-9/h8-11H,3-7H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H20O/c1-8(2)10(11)9-6-4-3-5-7-9/h8-11H,3-7H2,1-2H3/t10-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H20O3/c1-7(2)10(8(3)4)12-6-9(5-11)13-10/h7-9,11H,5-6H2,1-4H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H20O3/c1-7(2)10(8(3)4)12-6-9(5-11)13-10/h7-9,11H,5-6H2,1-4H3/t9-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H20O3/c1-7(2)10(8(3)4)12-6-9(5-11)13-10/h7-9,11H,5-6H2,1-4H3/t9-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H21N/c1-9(11-2)8-10-6-4-3-5-7-10/h9-11H,3-8H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H21N/c1-9(11-2)8-10-6-4-3-5-7-10/h9-11H,3-8H2,1-2H3/t9-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H21N3O/c1-4-12(5-2)10(14)13-8-6-11(3)7-9-13/h4-9H2,1-3H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H21NO4/c1-2-3-4-11-5-8(13)10(15)9(14)7(11)6-12/h7-10,12-15H,2-6H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H21NO7/c12-2-5(3-13)11-6-1-10(18,4-14)9(17)8(16)7(6)15/h5-9,11-18H,1-4H2	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H22/c1-3-5-7-9-10-8-6-4-2/h3-10H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H22/c1-4-5-6-7-8-9-10(2)3/h10H,4-9H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H22N4/c11-10(12)13-6-9-14-7-4-2-1-3-5-8-14/h1-9H2,(H4,11,12,13)	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C10H24N2O2/c1-3-9(7-13)11-5-6-12-10(4-2)8-14/h9-14H,3-8H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H24N2O2/c1-3-9(7-13)11-5-6-12-10(4-2)8-14/h9-14H,3-8H2,1-2H3/t9-,10-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H24N2O2/c1-3-9(7-13)11-5-6-12-10(4-2)8-14/h9-14H,3-8H2,1-2H3/t9-,10-/m1/s1	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C10H24N2O2/c1-3-9(7-13)11-5-6-12-10(4-2)8-14/h9-14H,3-8H2,1-2H3/t9-,10+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H26N4/c11-5-3-9-13-7-1-2-8-14-10-4-6-12/h13-14H,1-12H2	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H5Cl2NO3.H2O/c11-4-1-5(12)9-6(2-4)13-7(10(15)16)3-8(9)14;/h1-3H,(H,13,14)(H,15,16);1H2	0	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C10H5Cl2NO3/c11-4-1-5(12)9-6(2-4)13-7(10(15)16)3-8(9)14/h1-3H,(H,13,14)(H,15,16)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H6Cl3N3/c11-7-1-2-8(9(12)3-7)10(13)4-16-6-14-5-15-16/h1-6H	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H6Cl3N3/c11-7-1-2-8(9(12)3-7)10(13)4-16-6-14-5-15-16/h1-6H/b10-4-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H6Cl3N3/c11-7-1-2-8(9(12)3-7)10(13)4-16-6-14-5-15-16/h1-6H/b10-4+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H6O4/c11-7-5-9(10(12)13)14-8-4-2-1-3-6(7)8/h1-5H,(H,12,13)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H7Cl2N3O/c11-6-1-2-7-5(9(6)12)3-15-4-8(16)14-10(15)13-7/h1-2H,3-4H2,(H,13,14,16)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H7N3S/c1-2-4-8-7(3-1)12-10(13-8)9-5-14-6-11-9/h1-6H,(H,12,13)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H7NO3/c12-9-5-8(10(13)14)11-7-4-2-1-3-6(7)9/h1-5H,(H,11,12)(H,13,14)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H8BrNO2/c11-7-3-1-2-6(4-7)8-5-9(13)12-10(8)14/h1-4,8H,5H2,(H,12,13,14)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H8BrNO2/c11-7-3-1-2-6(4-7)8-5-9(13)12-10(8)14/h1-4,8H,5H2,(H,12,13,14)/t8-/m0/s1	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C10H8BrNO2/c11-7-3-1-2-6(4-7)8-5-9(13)12-10(8)14/h1-4,8H,5H2,(H,12,13,14)/t8-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H8Cl3N3/c11-7-1-2-8(9(12)3-7)10(13)4-16-6-14-5-15-16/h1-5H,6H2,(H,14,15)/b10-4-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H8F2N4O/c11-7-2-1-3-8(12)6(7)4-16-5-9(10(13)17)14-15-16/h1-3,5H,4H2,(H2,13,17)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H8N6O/c1-6-3-2-4-16-9(6)11-5-7(10(16)17)8-12-14-15-13-8/h2-5H,1H3,(H,12,13,14,15)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H8O3/c1-6-4-10(12)13-9-5-7(11)2-3-8(6)9/h2-5,11H,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H9CIN2O2/c1-5-7-4-6(11)2-3-8(7)13-10(15)9(14)12-5/h2-4,9,14H,1H3,(H,13,15)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H9ClO4S/c11-6-1-3-7(4-2-6)16(14,15)9-5-8(9)10(12)13/h1-4,8-9H,5H2,(H,12,13)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H9ClO4S/c11-6-1-3-7(4-2-6)16(14,15)9-5-8(9)10(12)13/h1-4,8-9H,5H2,(H,12,13)/t8-,9+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H9N3O/c11-9-5-8(6-13-10(9)14)7-1-3-12-4-2-7/h1-6H,11H2,(H,13,14)	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C10H9NO2/c1-2-9(13-10(11)12)8-6-4-3-5-7-8/h1,3-7,9H,(H2,11,12)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C10H9NO2/c1-2-9(13-10(11)12)8-6-4-3-5-7-8/h1,3-7,9H,(H2,11,12)/t9-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C10H9NO2/c1-2-9(13-10(11)12)8-6-4-3-5-7-8/h1,3-7,9H,(H2,11,12)/t9-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H10BrN5/c12-9-7(17-11-15-5-6-16-11)1-2-8-10(9)14-4-3-13-8/h1-4H,5-6H2,(H2,15,16,17)	1	(Nikolic et al., 2013)
InChI=1S/C11H10Cl2N4/c1-5-9(10(14)17-11(15)16-5)6-2-3-7(12)8(13)4-6/h2-4H,1H3,(H4,14,15,16,17)	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C11H10FNO4/c1-17-9-8(11(15)16)13(10(9)14)7-4-2-3-6(12)5-7/h2-5,8-9H,1H3,(H,15,16)/t8-,9+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H10I2N2O4/c1-4(16)14-7-3-6(11(18)19)8(12)10(9(7)13)15-5(2)17/h3H,1-2H3,(H,14,16)(H,15,17)(H,18,19)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H10N2O/c12-9-4-3-5-10(8-9)13-7-2-1-6-11(13)14/h1-8H,12H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H10O2/c1-7-6-10(12)8-4-2-3-5-9(8)11(7)13/h2-6,12-13H,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H11Cl2N3O5S/c1-22(20,21)16(2-3-17)9-7(13)5(12)4-6-8(9)15-11(19)10(18)14-6/h4,17H,2-3H2,1H3,(H,14,18)(H,15,19)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H11Cl2NO3S/c1-14-10(15)4-5-18(16,17)11(14)7-2-3-8(12)9(13)6-7/h2-3,6,11H,4-5H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H11Cl2NO3S/c1-14-10(15)4-5-18(16,17)11(14)7-2-3-8(12)9(13)6-7/h2-3,6,11H,4-5H2,1H3/t11-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H11Cl2NO3S/c1-14-10(15)4-5-18(16,17)11(14)7-2-3-8(12)9(13)6-7/h2-3,6,11H,4-5H2,1H3/t11-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H11ClN4O2/c1-16-6-9(17)14-10(16)15-11(18)13-8-4-2-3-7(12)5-8/h2-5H,6H2,1H3,(H2,13,14,15,17,18)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H11ClO3/c1-2-5-15-10-4-3-8(6-9(10)12)7-11(13)14/h2-4,6H,1,5,7H2,(H,13,14)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H11F3N2O2/c12-11(13,14)7-2-1-3-8(4-7)18-9-5-16(6-9)10(15)17/h1-4,9H,5-6H2,(H2,15,17)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C11H11F3N2O3/c1-6(2)10(17)15-7-3-4-9(16(18)19)8(5-7)11(12,13)14/h3-6H,1-2H3,(H,15,17)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H11FN2O/c1-8-10(12)11(15)14(13(8)2)9-6-4-3-5-7-9/h3-7H,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H11FN2O/c1-8-7-11(15)14(13(8)2)10-5-3-9(12)4-6-10/h3-7H,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H11IN2O/c1-8-10(12)11(15)14(13(8)2)9-6-4-3-5-7-9/h3-7H,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H11N3O/c1-15-11-7-9(12)8-13-14(11)10-5-3-2-4-6-10/h2-8,12H,1H3/p+1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H11N3O2/c1-2-8-9(14-11(16)13-8)10(15)7-3-5-12-6-4-7/h3-6H,2H2,1H3,(H2,13,14,16)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H11N3O2S/c12-9-4-6-10(7-5-9)17(15,16)14-11-3-1-2-8-13-11/h1-8H,12H2,(H,13,14)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H11N5/c12-10-7-6-9(11(13)14-10)16-15-8-4-2-1-3-5-8/h1-7H,(H4,12,13,14)	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C11H11NO2/c1-12-10(13)7-9(11(12)14)8-5-3-2-4-6-8/h2-6,9H,7H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H11NO2/c1-12-10(13)7-9(11(12)14)8-5-3-2-4-6-8/h2-6,9H,7H2,1H3/t9-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C11H11NO2/c1-12-10(13)7-9(11(12)14)8-5-3-2-4-6-8/h2-6,9H,7H2,1H3/t9-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H11NO2S/c1-15(13,14)11-9(7-12)10(11)8-5-3-2-4-6-8/h2-6,9-11H,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H11NO2S/c1-15(13,14)11-9(7-12)10(11)8-5-3-2-4-6-8/h2-6,9-11H,1H3/t9-,10-,11-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H12BrNO/c1-2-13-11(14)7-6-9-4-3-5-10(12)8-9/h3-8H,2H2,1H3,(H,13,14)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H12BrNO/c1-2-13-11(14)7-6-9-4-3-5-10(12)8-9/h3-8H,2H2,1H3,(H,13,14)/b7-6-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H12BrNO/c1-2-13-11(14)7-6-9-4-3-5-10(12)8-9/h3-8H,2H2,1H3,(H,13,14)/b7-6+	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H12Cl2N2O/c1-7(11-14-5-6-15-11)16-10-8(12)3-2-4-9(10)13/h2-4,7H,5-6H2,1H3,(H,14,15)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H12Cl2N2O5/c12-10(13)11(18)14-8(5-16)9(17)6-1-3-7(4-2-6)15(19)20/h1-4,8-10,16-17H,5H2,(H,14,18)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C11H12Cl2N2O5/c12-10(13)11(18)14-8(5-16)9(17)6-1-3-7(4-2-6)15(19)20/h1-4,8-10,16-17H,5H2,(H,14,18)/t8-,9-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H12Cl2N2O5/c12-10(13)11(18)14-8(5-16)9(17)6-1-3-7(4-2-6)15(19)20/h1-4,8-10,16-17H,5H2,(H,14,18)/t8-,9-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H12Cl2N2O5/c12-10(13)11(18)14-8(5-16)9(17)6-1-3-7(4-2-6)15(19)20/h1-4,8-10,16-17H,5H2,(H,14,18)/t8-,9+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H12Cl2N2O5/c12-10(13)11(18)14-8(5-16)9(17)6-1-3-7(4-2-6)15(19)20/h1-4,8-10,16-17H,5H2,(H,14,18)/t8-,9+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H12ClF2N3/c1-6-10-7(12)3-2-4-8(10)17-11(16-6)15-5-9(13)14/h2-4,6,9H,5H2,1H3,(H2,15,16,17)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H12ClNO3S/c1-13-10(14)6-7-17(15,16)11(13)8-2-4-9(12)5-3-8/h2-5,11H,6-7H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H12ClNO3S/c1-13-10(14)6-7-17(15,16)11(13)8-2-4-9(12)5-3-8/h2-5,11H,6-7H2,1H3/t11-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H12I3NO2/c1-2-5(11(16)17)3-6-7(12)4-8(13)10(15)9(6)14/h4-5H,2-3,15H2,1H3,(H,16,17)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H12N2/c12-7-8-13-11-6-5-9-3-1-2-4-10(9)11/h1-4,11,13H,5-6,8H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H12N2/c12-7-8-13-11-6-5-9-3-1-2-4-10(9)11/h1-4,11,13H,5-6,8H2/t11-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H12N2/c12-7-8-13-11-6-5-9-3-1-2-4-10(9)11/h1-4,11,13H,5-6,8H2/t11-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H12N2O/c1-9-8-11(14)13(12(9)2)10-6-4-3-5-7-10/h3-8H,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H12N2O2/c1-13(2)11-12-10(14)9(15-11)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9H,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H12N2O2/c1-13(2)11-12-10(14)9(15-11)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9H,1-2H3/t9-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H12N2O2/c1-13(2)11-12-10(14)9(15-11)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9H,1-2H3/t9-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C11H12N2O2/c1-2-12-11-13-10(14)9(15-11)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9H,2H2,1H3,(H,12,13,14)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H12N2O2/c1-2-12-11-13-10(14)9(15-11)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9H,2H2,1H3,(H,12,13,14)/t9-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H12N2O2/c1-2-12-11-13-10(14)9(15-11)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9H,2H2,1H3,(H,12,13,14)/t9-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H12N2O2/c1-2-13-10(14)9(12-11(13)15)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9H,2H2,1H3,(H,12,15)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H12N2O2/c1-2-13-10(14)9(12-11(13)15)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9H,2H2,1H3,(H,12,15)/t9-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H12N2O2/c1-2-13-10(14)9(12-11(13)15)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9H,2H2,1H3,(H,12,15)/t9-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H12N2O2/c1-2-4-9-8(3-1)14-7-10(15-9)11-12-5-6-13-11/h1-4,10H,5-7H2,(H,12,13)	1	(Nikolic et al., 2013)
InChI=1S/C11H12N2O2/c12-9(11(14)15)5-7-6-13-10-4-2-1-3-8(7)10/h1-4,6,9,13H,5,12H2,(H,14,15)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H12N2O2/c12-9(11(14)15)5-7-6-13-10-4-2-1-3-8(7)10/h1-4,6,9,13H,5,12H2,(H,14,15)/t9-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H12N2O2S/c1-7(13(15)11(12)14)10-6-8-4-2-3-5-9(8)16-10/h2-7,15H,1H3,(H2,12,14)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H12N2O2S/c1-7(13(15)11(12)14)10-6-8-4-2-3-5-9(8)16-10/h2-7,15H,1H3,(H2,12,14)/t7-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H12N2O3/c12-9(11(15)16)3-6-5-13-10-2-1-7(14)4-8(6)10/h1-2,4-5,9,13-14H,3,12H2,(H,15,16)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H12N2O3/c12-9(11(15)16)3-6-5-13-10-2-1-7(14)4-8(6)10/h1-2,4-5,9,13-14H,3,12H2,(H,15,16)/t9-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H12N2S/c1-2-4-9(5-3-1)10-8-13-6-7-14-11(13)12-10/h1-5,10H,6-8H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H12N2S/c1-2-4-9(5-3-1)10-8-13-6-7-14-11(13)12-10/h1-5,10H,6-8H2/t10-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H12N2S/c1-2-4-9(5-3-1)10-8-13-6-7-14-11(13)12-10/h1-5,10H,6-8H2/t10-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H12N2S/c12-7-6-11-13-10(8-14-11)9-4-2-1-3-5-9/h1-5,8H,6-7,12H2	0	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C11H12N2S/c12-7-6-11-13-10(8-14-11)9-4-2-1-3-5-9/h1-5,8H,6-7,12H2/p+1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H12N4O2S/c1-8-6-7-13-11(14-8)15-18(16,17)10-4-2-9(12)3-5-10/h2-7H,12H2,1H3,(H,13,14,15)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H12N4O3S/c1-18-11-10(13-6-7-14-11)15-19(16,17)9-4-2-8(12)3-5-9/h2-7H,12H2,1H3,(H,13,15)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H12N4O3S/c1-18-11-7-6-10(13-14-11)15-19(16,17)9-4-2-8(12)3-5-9/h2-7H,12H2,1H3,(H,13,15)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H12N4O3S/c1-18-9-6-13-11(14-7-9)15-19(16,17)10-4-2-8(12)3-5-10/h2-7H,12H2,1H3,(H,13,14,15)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H13BrN2O/c12-11-8-4-7(5-13-11)6-14-9(8)2-1-3-10(14)15/h1-3,7-8,11,13H,4-6H2	1	(Wu et al., 2018)

InChI=1S/C11H13BrN2O/c12-11-8-4-7(5-13-11)6-14-9(8)2-1-3-10(14)15/h1-3,7-8,11,13H,4-6H2/t7-,8-,11-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H13BrN2O/c12-11-8-4-7(5-13-11)6-14-9(8)2-1-3-10(14)15/h1-3,7-8,11,13H,4-6H2/t7-,8-,11+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H13BrN2O/c12-9-1-2-10-8-3-7(4-13-5-8)6-14(10)11(9)15/h1-2,7-8,13H,3-6H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H13BrN2O/c12-9-1-2-10-8-3-7(4-13-5-8)6-14(10)11(9)15/h1-2,7-8,13H,3-6H2/t7-,8-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H13BrN2O/c12-9-1-2-10-8-3-7(4-13-5-8)6-14(10)11(9)15/h1-2,7-8,13H,3-6H2/t7-,8+/m0/s1	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C11H13BrN2O5/c12-2-1-6-4-14(11(18)13-10(6)17)9-3-7(16)8(5-15)19-9/h1-2,4,7-9,15-16H,3,5H2,(H,13,17,18)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H13BrN2O6/c12-2-1-5-3-14(11(19)13-9(5)18)10-8(17)7(16)6(4-15)20-10/h1-3,6-8,10,15-17H,4H2,(H,13,18,19)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H13ClF3N3O4S3/c1-18-10(4-23-5-11(13,14)15)17-7-2-6(12)8(24(16,19)20)3-9(7)25(18,21)22/h2-3,10,17H,4-5H2,1H3,(H2,16,19,20)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H13ClF3N3O4S3/c1-18-10(4-23-5-11(13,14)15)17-7-2-6(12)8(24(16,19)20)3-9(7)25(18,21)22/h2-3,10,17H,4-5H2,1H3,(H2,16,19,20)/t10-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H13ClF3N3O4S3/c1-18-10(4-23-5-11(13,14)15)17-7-2-6(12)8(24(16,19)20)3-9(7)25(18,21)22/h2-3,10,17H,4-5H2,1H3,(H2,16,19,20)/t10-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H13F2N/c12-7-10(8-14)2-1-9-3-5-11(13)6-4-9/h3-7H,1-2,8,14H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H13F2N/c12-7-10(8-14)2-1-9-3-5-11(13)6-4-9/h3-7H,1-2,8,14H2/b10-7-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H13F2N/c12-7-10(8-14)2-1-9-3-5-11(13)6-4-9/h3-7H,1-2,8,14H2/b10-7+	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H13N/c1-3-9-12(2)10-11-7-5-4-6-8-11/h1,4-8H,9-10H2,2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H13N3/c1-2-4-9(5-3-1)10-8-13-11-12-6-7-14(10)11/h1-5,10H,6-8H2,(H,12,13)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H13N3/c1-2-4-9(5-3-1)10-8-13-11-12-6-7-14(10)11/h1-5,10H,6-8H2,(H,12,13)/t10-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H13N3O2S2/c1-7-8(2)13-17-11(7)14-18(15,16)10-5-3-9(12)4-6-10/h3-6,14H,12H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H13N3O3S/c1-7-8(2)13-17-11(7)14-18(15,16)10-5-3-9(12)4-6-10/h3-6,14H,12H2,1-2H3	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C11H13N3O3S/c1-7-8(2)17-11(13-7)14-18(15,16)10-5-3-9(12)4-6-10/h3-6H,12H2,1-2H3,(H,13,14)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H13N5O5/c12-15-13-5-10(18)14-9(6-17)11(19)7-1-3-8(4-2-7)16(20)21/h1-4,9,11,17,19H,5-6H2,(H,14,18)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H13N5O5/c12-15-13-5-10(18)14-9(6-17)11(19)7-1-3-8(4-2-7)16(20)21/h1-4,9,11,17,19H,5-6H2,(H,14,18)/t9-,11-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H13N5O5/c12-15-13-5-10(18)14-9(6-17)11(19)7-1-3-8(4-2-7)16(20)21/h1-4,9,11,17,19H,5-6H2,(H,14,18)/t9-,11-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C11H13NO2/c1-8-11(14-7-10(13)12-8)9-5-3-2-4-6-9/h2-6,8,11H,7H2,1H3,(H,12,13)	2023) (Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C11H13NO2/c1-8-11(14-7-10(13)12-8)9-5-3-2-4-6-9/h2-6,8,11H,7H2,1H3,(H,12,13)/t8-,11-/m1/s1	(Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C11H13NO2/c1-8-11(14-7-10(13)12-8)9-5-3-2-4-6-9/h2-6,8,11H,7H2,1H3,(H,12,13)/t8-,11+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C11H13NO2S/c15-11-12-7-6-10(14-11)8-13-9-4-2-1-3-5-9/h1-5,10H,6-8H2,(H,12,15)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H13NO2S/c15-11-12-7-6-10(14-11)8-13-9-4-2-1-3-5-9/h1-5,10H,6-8H2,(H,12,15)/t10-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H13NO2S/c15-11-12-7-6-10(14-11)8-13-9-4-2-1-3-5-9/h1-5,10H,6-8H2,(H,12,15)/t10-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C11H13NO2S2/c1-16(13,14)10-8(9(10)11(12)15)7-5-3-2-4-6-7/h2-6,8-10H,1H3,(H2,12,15)/t8-,9+,10-/m0/s1	(Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C11H13NO3/c1-8-3-2-4-9(5-8)12-6-10(7-13)15-11(12)14/h2-5,10,13H,6-7H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H13NO3/c1-8-3-2-4-9(5-8)12-6-10(7-13)15-11(12)14/h2-5,10,13H,6-7H2,1H3/t10-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H13NO3/c1-8-3-2-4-9(5-8)12-6-10(7-13)15-11(12)14/h2-5,10,13H,6-7H2,1H3/t10-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C11H13NO4/c1-12-11(14)16-10-8-6-3-2-5(4-6)7(8)9(13)15-10/h2-3,5-8,10H,4H2,1H3,(H,12,14)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H13NO4/c1-12-11(14)16-10-8-6-3-2-5(4-6)7(8)9(13)15-10/h2-3,5-8,10H,4H2,1H3,(H,12,14)/t5-,6-,7+,8-,10-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H13NO4/c1-12-11(14)16-10-8-6-3-2-5(4-6)7(8)9(13)15-10/h2-3,5-8,10H,4H2,1H3,(H,12,14)/t5-,6+,7+,8-,10-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C11H13NO4/c1-12-11(14)16-10-8-6-3-2-5(4-6)7(8)9(13)15-10/h2-3,5-8,10H,4H2,1H3,(H,12,14)/t5-,6+,7+,8-,10+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H13NO4/c1-12-11(14)16-10-8-6-3-2-5(4-6)7(8)9(13)15-10/h2-3,5-8,10H,4H2,1H3,(H,12,14)/t5?,6?,7-,8-,10-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H13NO4/c1-14-9-4-2-3-5-10(9)15-7-8-6-12-11(13)16-8/h2-5,8H,6-7H2,1H3,(H,12,13)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H13NO4/c1-14-9-4-2-3-5-10(9)15-7-8-6-12-11(13)16-8/h2-5,8H,6-7H2,1H3,(H,12,13)/t8-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C11H13NO4/c1-14-9-4-2-3-5-10(9)15-7-8-6-12-11(13)16-8/h2-5,8H,6-7H2,1H3,(H,12,13)/t8-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H14BrN3/c1-7-5-9(12)6-8(2)10(7)15-11-13-3-4-14-11/h5-6H,3-4H2,1-2H3,(H2,13,14,15)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H14ClN5/c1-11(2)16-9(13)15-10(14)17(11)8-5-3-7(12)4-6-8/h3-6H,1-2H3,(H4,13,14,15,16)	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C11H14ClNO/c12-8-6-11(14)13-9-7-10-4-2-1-3-5-10/h1-5H,6-9H2,(H,13,14)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H14N2/c1-2-13(10-6-9-12)11-7-4-3-5-8-11/h3-5,7-8H,2,6,10H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H14N2/c12-8-4-9-13-10-7-11-5-2-1-3-6-11/h1-3,5-6,13H,4,7,9-10H2	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C11H14N2O/c14-11-3-1-2-10-9-4-8(5-12-6-9)7-13(10)11/h1-3,8-9,12H,4-7H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H14N2O/c14-11-3-1-2-10-9-4-8(5-12-6-9)7-13(10)11/h1-3,8-9,12H,4-7H2/t8-,9-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H14N2O2/c1-2-11(9(12)14,10(13)15)8-6-4-3-5-7-8/h3-7H,2H2,1H3,(H2,12,14)(H2,13,15)	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C11H14N2O2/c1-2-13-11(15)9(10(12)14)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9H,2H2,1H3,(H2,12,14)(H,13,15)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H14N2O2/c1-2-9(10(14)13-11(12)15)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9H,2H2,1H3,(H3,12,13,14,15)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H14N2O2/c1-2-9(10(14)13-11(12)15)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9H,2H2,1H3,(H3,12,13,14,15)/t9-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H14N2O2/c1-2-9(10(14)13-11(12)15)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9H,2H2,1H3,(H3,12,13,14,15)/t9-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H14N2O4/c12-10(14)16-6-9(7-17-11(13)15)8-4-2-1-3-5-8/h1-5,9H,6-7H2,(H2,12,14)(H2,13,15)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H14N2S/c1-13-8-3-7-12-11(13)6-5-10-4-2-9-14-10/h2,4-6,9H,3,7-8H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H14N2S/c1-2-4-9(5-3-1)10-8-13-6-7-14-11(13)12-10/h1-5,10-12H,6-8H2/t10-,11-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H14N4O4/c1-13-9-8(10(16)14(2)11(13)17)15(6-12-9)5-7-18-3-4-19-7/h6-7H,3-5H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H14N4S.CH6N2.CH2N2/c1-13-7-14-9-4-2-3-8(5-9)10-6-16-11(12)15-10;2*2-1-3/h2-6,13-14H,7H2,1H3,(H2,12,15);1-3H2;2H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H15BrN2O/c1-14(2)11(15)7-8-13-10-5-3-9(12)4-6-10/h3-6,13H,7-8H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H15BrN2O/c1-7-5-8(12)6-13-9(7)14-10(15)11(2,3)4/h5-6H,1-4H3,(H,13,14,15)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H15BrN2O6/c12-2-1-5-3-14(11(19)13-9(5)18)10-8(17)7(16)6(4-15)20-10/h1-2,5-8,10,15-17H,3-4H2,(H,13,18,19)/t5-,6+,7-,8+,10+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H15ClN2O2/c1-8(2)13-14-11(15)7-16-10-5-3-9(12)4-6-10/h3-6,8,13H,7H2,1-2H3,(H,14,15)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H15ClO2/c1-10(2,13)11(3,14)8-4-6-9(12)7-5-8/h4-7,13-14H,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H15ClO2/c1-10(2,13)11(3,14)8-4-6-9(12)7-5-8/h4-7,13-14H,1-3H3/t11-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H15ClO2/c1-10(2,13)11(3,14)8-5-4-6-9(12)7-8/h4-7,13-14H,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H15ClO2/c1-10(2,13)11(3,14)8-5-4-6-9(12)7-8/h4-7,13-14H,1-3H3/t11-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H15I3N2O4/c1-3(17)15-9-6(12)5(11(19)20)7(13)10(8(9)14)16-4(2)18/h5-10H,1-2H3,(H,15,17)(H,16,18)(H,19,20)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H15N/c1-2-6-11(12)9-10-7-4-3-5-8-10/h2-5,7-8,11H,1,6,9,12H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H15N/c1-2-6-11(12)9-10-7-4-3-5-8-10/h2-5,7-8,11H,1,6,9,12H2/t11-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C11H15N/c1-2-6-11(12)9-10-7-4-3-5-8-10/h2-5,7-8,11H,1,6,9,12H2/t11-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H15N/c12-11-8-4-7-10(11)9-5-2-1-3-6-9/h1-3,5-6,10-11H,4,7-8,12H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H15N/c12-11-8-4-7-10(11)9-5-2-1-3-6-9/h1-3,5-6,10-11H,4,7-8,12H2/t10-,11-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H15N/c12-11-8-4-7-10(11)9-5-2-1-3-6-9/h1-3,5-6,10-11H,4,7-8,12H2/t10-,11+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H15N3/c1-2-4-9(5-3-1)10-8-13-11-12-6-7-14(10)11/h1-5,10-13H,6-8H2/t10-,11+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H15N3/c1-8-3-4-10(9(2)7-8)14-11-12-5-6-13-11/h3-4,7H,5-6H2,1-2H3,(H2,12,13,14)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H15N5O5/c1-20-9-5-8(14-11(12)15-9)16(3-13-5)10-7(19)6(18)4(2-17)21-10/h3-4,6-7,10,17-19H,2H2,1H3,(H2,12,14,15)/t4-,6-,7+,10-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H15NO/c1-11(2,3)12(13)9-10-7-5-4-6-8-10/h4-9H,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H15NO/c1-11(2,3)12(13)9-10-7-5-4-6-8-10/h4-9H,1-3H3/b12-9-	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H15NO/c1-11(2,3)12(13)9-10-7-5-4-6-8-10/h4-9H,1-3H3/b12-9+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H15NO/c1-9-11(13-8-7-12-9)10-5-3-2-4-6-10/h2-6,9,11-12H,7-8H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H15NO/c1-9-11(13-8-7-12-9)10-5-3-2-4-6-10/h2-6,9,11-12H,7-8H2,1H3/t9-,11-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H15NO/c1-9-11(13-8-7-12-9)10-5-3-2-4-6-10/h2-6,9,11-12H,7-8H2,1H3/t9-,11-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H15NO/c1-9-11(13-8-7-12-9)10-5-3-2-4-6-10/h2-6,9,11-12H,7-8H2,1H3/t9-,11+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H15NO/c1-9(12(2)3)11(13)10-7-5-4-6-8-10/h4-9H,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H15NO/c1-9(12(2)3)11(13)10-7-5-4-6-8-10/h4-9H,1-3H3/t9-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H15NO/c1-9(12(2)3)11(13)10-7-5-4-6-8-10/h4-9H,1-3H3/t9-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H15NO2/c1-2-11(14,8-10(12)13)9-6-4-3-5-7-9/h3-7,14H,2,8H2,1H3,(H2,12,13)	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C11H15NO2/c1-2-3-8-14-11(13)9-4-6-10(12)7-5-9/h4-7H,2-3,8,12H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H15NO2/c1-8(12-2)11(13)9-4-6-10(14-3)7-5-9/h4-8,12H,1-3H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H15NO2/c1-8(12-2)11(13)9-4-6-10(14-3)7-5-9/h4-8,12H,1-3H3/t8-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H15NO2/c1-8(12-2)11(13)9-4-6-10(14-3)7-5-9/h4-8,12H,1-3H3/t8-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H15NO3/c1-2-11(14,8-15-10(12)13)9-6-4-3-5-7-9/h3-7,14H,2,8H2,1H3,(H2,12,13)	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C11H15NO3/c1-2-11(14,8-15-10(12)13)9-6-4-3-5-7-9/h3-7,14H,2,8H2,1H3,(H2,12,13)/t11-/m0/s1	2023) (Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C11H15NO3/c1-2-11(14,8-15-10(12)13)9-6-4-3-5-7-9/h3-7,14H,2,8H2,1H3,(H2,12,13)/t11-/m1/s1	(Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C11H15NO3S/c1-15-8-5-3-7(4-6-8)9-10(12)11(9)16(2,13)14/h3-6,9-11H,12H2,1-2H3/t9-,10-,11+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 0 2023)
InChI=1S/C11H15NO3S/c1-16(14,15)10-9(11(10,12)7-13)8-5-3-2-4-6-8/h2-6,9-10,13H,7,12H2,1H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H15NO3S/c1-16(14,15)10-9(11(10,12)7-13)8-5-3-2-4-6-8/h2-6,9-10,13H,7,12H2,1H3/t9-,10-,11-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H15NO5/c1-15-9-4-2-3-5-10(9)16-6-8(13)7-17-11(12)14/h2-5,8,13H,6-7H2,1H3,(H2,12,14)	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C11H15NO5/c1-15-9-4-2-3-5-10(9)16-6-8(13)7-17-11(12)14/h2-5,8,13H,6-7H2,1H3,(H2,12,14)/t8-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C11H16ClN3O4S2/c1-6(2)3-11-14-8-4-7(12)9(20(13,16)17)5-10(8)21(18,19)15-11/h4-6,11,14-15H,3H2,1-2H3,(H2,13,16,17)	0 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C11H16ClN5/c1-7(2)15-10(13)17-11(14)16-9-5-3-8(12)4-6-9/h3-7H,1-2H3,(H5,13,14,15,16,17)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H16N2O/c1-7-5-4-6-8(2)10(7)13-11(14)9(3)12/h4-6,9H,12H2,1-3H3,(H,13,14)	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 0 2023)
InChI=1S/C11H16N2O/c1-7-5-4-6-8(2)10(7)13-11(14)9(3)12/h4-6,9H,12H2,1-3H3,(H,13,14)/t9-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 0 2023)
InChI=1S/C11H16N2O2/c1-3-10-8(6-15-11(10)14)4-9-5-12-7-13(9)2/h5,7-8,10H,3-4,6H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C11H16N2O2/c1-3-15-11(14)13-12-9(2)10-7-5-4-6-8-10/h4-9,12H,3H2,1-2H3,(H,13,14)	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C11H16N2O2/c1-3-15-11(14)13-12-9(2)10-7-5-4-6-8-10/h4-9,12H,3H2,1-2H3,(H,13,14)/t9-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C11H16N2O2/c1-3-15-11(14)13-12-9(2)10-7-5-4-6-8-10/h4-9,12H,3H2,1-2H3,(H,13,14)/t9-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C11H16N2O2/c1-8-6-11(7-14)9(2)13(8)5-4-12-10(3)15/h6-7H,4-5H2,1-3H3,(H,12,15)	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C11H16N2O3/c1-4-5-11(6-7(2)3)8(14)12-10(16)13-9(11)15/h4,7H,1,5-6H2,2-3H3,(H2,12,13,14,15,16)	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C11H16N2O3/c1-4-6-11(7(3)5-2)8(14)12-10(16)13-9(11)15/h4,7H,1,5-6H2,2-3H3,(H2,12,13,14,15,16)	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C11H16N2O3/c1-4-6-11(7(3)5-2)8(14)12-10(16)13-9(11)15/h4,7H,1,5-6H2,2-3H3,(H2,12,13,14,15,16)/t7-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H16N2O3/c1-4-6-11(7(3)5-2)8(14)12-10(16)13-9(11)15/h4,7H,1,5-6H2,2-3H3,(H2,12,13,14,15,16)/t7-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H16N2O3/c1-4-6-7(3)11(5-2)8(14)12-10(16)13-9(11)15/h5,7H,2,4,6H2,1,3H3,(H2,12,13,14,15,16)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H16N2O3/c1-4-6-7(3)11(5-2)8(14)12-10(16)13-9(11)15/h5,7H,2,4,6H2,1,3H3,(H2,12,13,14,15,16)/t7-/m0/s1	1 (Mazumdar et al.,

	2023)
InChI=1S/C11H16N2O3/c1-4-6-7(3)11(5-2)8(14)12-10(16)13-9(11)15/h5,7H,2,4,6H2,1,3H3,(H2,12,13,14,15,16)/t7-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H16N2O3/c1-4-6-7(3)11(5-2)8(14)12-10(16)13-9(11)15/h6H,4-5H2,1-3H3,(H2,12,13,14,15,16)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H16N2O3/c1-4-6-7(3)11(5-2)8(14)12-10(16)13-9(11)15/h6H,4-5H2,1-3H3,(H2,12,13,14,15,16)/b7-6-	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H16N2O3/c1-4-6-7(3)11(5-2)8(14)12-10(16)13-9(11)15/h6H,4-5H2,1-3H3,(H2,12,13,14,15,16)/b7-6+	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H16N2S/c1-2-3-9-12-11(14)13-10-7-5-4-6-8-10/h4-8H,2-3,9H2,1H3,(H2,12,13,14)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H16N4O/c1-7-5-4-6-8(2)9(7)14-11(16)15-10(12)13-3/h4-6H,1-3H3,(H4,12,13,14,15,16)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H16N4O4/c1-7(15-5-10(18)13-11(19)6-15)2-14-3-8(16)12-9(17)4-14/h7H,2-6H2,1H3,(H,12,16,17)(H,13,18,19)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H16N4O4/c1-7(15-5-10(18)13-11(19)6-15)2-14-3-8(16)12-9(17)4-14/h7H,2-6H2,1H3,(H,12,16,17)(H,13,18,19)/t7-/m0/s1	0 (Li et al., 2005)
InChI=1S/C11H16N4O4/c16-3-8-6(17)1-9(19-8)15-5-14-10-7(18)2-12-4-13-11(10)15/h4-9,16-18H,1-3H2,(H,12,13)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H16N4O4/c16-3-8-6(17)1-9(19-8)15-5-14-10-7(18)2-12-4-13-11(10)15/h4-9,16-18H,1-3H2,(H,12,13)/t6-,7-,8-,9-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H16N4O4/c16-3-8-6(17)1-9(19-8)15-5-14-10-7(18)2-12-4-13-11(10)15/h4-9,16-18H,1-3H2,(H,12,13)/t6-,7-,8-,9-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H16N4O4/c16-3-8-6(17)1-9(19-8)15-5-14-10-7(18)2-12-4-13-11(10)15/h4-9,16-18H,1-3H2,(H,12,13)/t6-,7+,8+,9+/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H16N4O4/c16-3-8-6(17)1-9(19-8)15-5-14-10-7(18)2-12-4-13-11(10)15/h4-9,16-18H,1-3H2,(H,12,13)/t6?,7-,8-,9-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H16NO/c1-11(2,3)12(13)9-10-7-5-4-6-8-10/h4-9,13H,1-3H3/q+1/b12-9+	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C11H17BrN/c1-4-13(2,3)9-10-7-5-6-8-11(10)12/h5-8H,4,9H2,1-3H3/q+1	0 (Li et al., 2005)
InChI=1S/C11H17N/c1-10(12(2)3)9-11-7-5-4-6-8-11/h4-8,10H,9H2,1-3H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H17N/c1-10(12(2)3)9-11-7-5-4-6-8-11/h4-8,10H,9H2,1-3H3/t10-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H17N/c1-10(12(2)3)9-11-7-5-4-6-8-11/h4-8,10H,9H2,1-3H3/t10-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H17N3O5/c1-2-3-4-11(5-6-19-9(12)17)7(15)13-10(18)14-8(11)16/h2-6H2,1H3,(H2,12,17)(H2,13,14,15,16,18)	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C11H17N5O2/c1-13(2)5-6-16-7-12-9-8(16)10(17)15(4)11(18)14(9)3/h7H,5-6H2,1-4H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H17NO/c1-8-5-4-6-9(2)11(8)13-7-10(3)12/h4-6,10H,7,12H2,1-3H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H17NO/c1-8-5-4-6-9(2)11(8)13-7-10(3)12/h4-6,10H,7,12H2,1-3H3/t10-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H17NO/c1-8-5-4-6-9(2)11(8)13-7-10(3)12/h4-6,10H,7,12H2,1-3H3/t10-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C11H17NO2/c1-3-4-5-7-12-8-6-10(13)11(14)9(12)2/h6,8,14H,3-5,7H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H17NO3/c1-13-9-6-8(4-5-12)7-10(14-2)11(9)15-3/h6-7H,4-5,12H2,1-3H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H17NO3/c1-2-9-11(15)10(14)5-7-12(9)6-3-4-8-13/h5,7,13,15H,2-4,6,8H2,1H3	0 (Li et al., 2005)
InChI=1S/C11H17NO3/c1-7(2)12-6-11(15)8-3-4-9(13)10(14)5-8/h3-5,7,11-15H,6H2,1-2H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H17NO3/c1-7(2)12-6-11(15)8-3-4-9(13)10(14)5-8/h3-5,7,11-15H,6H2,1-2H3/t11-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H17NO3/c1-7(2)12-6-11(15)8-3-9(13)5-10(14)4-8/h3-5,7,11-15H,6H2,1-2H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H17NO3/c1-7(2)12-6-11(15)8-3-9(13)5-10(14)4-8/h3-5,7,11-15H,6H2,1-2H3/t11-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H18BrN3S.CH2N2/c1-2-13-9-14-6-7-16-8-11-10(12)4-3-5-15-11;2-1-3/h3-5,13-14H,2,6-9H2,1H3;2H2	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H18Cl2N2O5/c12-10(13)11(18)14-8(5-16)9(17)6-1-3-7(4-2-6)15(19)20/h6-10,16-17H,1-5H2,(H,14,18)/t6?,7?,8-,9-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H18ClN5S/c1-13-11-14-9(12)8(18-3)10(15-11)17-6-4-16(2)5-7-17/h4-7H2,1-3H3,(H,13,14,15)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H18FN3O2/c12-7-5-3-1-2-4-6-9-14-10-8-13-11(14)15(16)17/h8,10H,1-7,9H2	1 (Shin et al., 2021)
InChI=1S/C11H18FN3O2/c12-7-5-3-1-2-4-6-9-14-10-8-13-11(14)15(16)17/h8,10H,1-7,9H2/i12-1	1 (Li et al., 2005)
InChI=1S/C11H18N2O2S/c1-4-6-7(3)11(5-2)8(14)12-10(16)13-9(11)15/h7H,4-6H2,1-3H3,(H2,12,13,14,15,16)	1 (Shin et al., 2021)
InChI=1S/C11H18N2O2S/c1-4-6-7(3)11(5-2)8(14)12-10(16)13-9(11)15/h7H,4-6H2,1-3H3,(H2,12,13,14,15,16)/t7-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H18N2O2S/c1-4-6-7(3)11(5-2)8(14)12-10(16)13-9(11)15/h7H,4-6H2,1-3H3,(H2,12,13,14,15,16)/t7-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H18N2O3/c1-3-5-6-7-11(4-2)8(14)12-10(16)13-9(11)15/h3-7H2,1-2H3,(H2,12,13,14,15,16)	1 (Li et al., 2005)
InChI=1S/C11H18N2O3/c1-4-11(6-5-7(2)3)8(14)12-10(16)13-9(11)15/h7H,4-6H2,1-3H3,(H2,12,13,14,15,16)	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C11H18N2O3/c1-4-6-7(3)11(5-2)8(14)12-10(16)13-9(11)15/h7H,4-6H2,1-3H3,(H2,12,13,14,15,16)	1 (Kaupp, 2007)
InChI=1S/C11H18N2O3/c1-4-6-7(3)11(5-2)8(14)12-10(16)13-9(11)15/h7H,4-6H2,1-3H3,(H2,12,13,14,15,16)/t7-/m0/s1	1 (Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C11H18N2O3/c1-4-6-7(3)11(5-2)8(14)12-10(16)13-9(11)15/h7H,4-6H2,1-3H3,(H2,12,13,14,15,16)/t7-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H18N2OS/c1-4-12-6-10-9(7-15-3)5-13-8(2)11(10)14/h5,12,14H,4,6-7H2,1-3H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H20N2O2/c1-4-11(6-5-8(2)3)7-12-10(15)13-9(11)14/h8H,4-7H2,1-3H3,(H2,12,13,14,15)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H20N2O3/c1-4-6-7(3)11(5-2)8(14)12-10(16)13-9(11)15/h7,10,16H,4-6H2,1-3H3,(H,12,14)(H,13,15)/t7-,10?,11?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H20O35S8/c12-47(13,14)36-1-3-4(41-49(18,19)20)5(42-50(21,22)23)6(43-51(24,25)26)9(38-3)39-11(2-37-48(15,16)17)8(45-53(30,31)32)7(44-52(27,28)29)10(40-11)46-54(33,34)35/h3-10H,1-2H2,(H,12,13,14)(H,15,16,17)(H,18,19,20)(H,21,22,23)(H,24,25,26)(H,27,28,29)(H,30,31,32)(H,33,34,35)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H21N/c1-10(2)8-5-6-9(7-8)11(10,3)12-4/h8-9,12H,5-7H2,1-4H3	0 (Mazumdar et al.,

InChI=1S/C11H21NO2/c1-2-3-8-14-11(13)9-4-6-10(12)7-5-9/h9-10H,2-8,12H2,1H3	2023)
InChI=1S/C11H22O5/c1-2-3-4-5-6-7-10(14)16-11(15)9(13)8-12/h9,11-13,15H,2-8H2,1H3	1 (Shin et al., 2021)
InChI=1S/C11H23NO/c1-4-7-11(8-5-2,9-6-3)10(12)13/h4-9H2,1-3H3,(H2,12,13)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H6ClN3O6/c12-7-5(14-8(16)10(18)19)1-4(3-13)2-6(7)15-9(17)11(20)21/h1-2H,(H,14,16)(H,15,17)(H,18,19)(H,20,21)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H8ClNO2/c12-7-3-1-6(2-4-7)11-5-8(11)9(14)13-10(11)15/h1-4,8H,5H2,(H,13,14,15)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H8ClNO2/c12-7-3-1-6(2-4-7)11-5-8(11)9(14)13-10(11)15/h1-4,8H,5H2,(H,13,14,15)/t8-,11-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H8ClNO2/c12-7-3-1-6(2-4-7)11-5-8(11)9(14)13-10(11)15/h1-4,8H,5H2,(H,13,14,15)/t8-,11+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H8ClNO2/c12-7-3-1-6(2-4-7)11-5-8(11)9(14)13-10(11)15/h1-4,8H,5H2,(H,13,14,15)/t8-,11+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H8N2/c1-2-4-10-8(3-1)9-5-6-12-7-11(9)13-10/h1-7,13H	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H8O2/c1-7-6-10(12)8-4-2-3-5-9(8)11(7)13/h2-6H,1H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C11H9FN2O3/c12-6-1-2-8-7(5-6)11(3-4-17-8)9(15)13-10(16)14-11/h1-2,5H,3-4H2,(H2,13,14,15,16)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H9I3N2O4/c1-3(17)15-9-6(12)5(11(19)20)7(13)10(8(9)14)16-4(2)18/h1-2H3,(H,15,17)(H,16,18)(H,19,20)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C11H9N3O3/c12-11(13)10-6-5-9(17-10)7-3-1-2-4-8(7)14(15)16/h1-6H,(H3,12,13)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H10Cl2O5/c1-2-7(15)12(18)6-3-4-8(11(14)10(6)13)19-5-9(16)17/h3-4H,2,5H2,1H3,(H,16,17)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H10ClN3O/c1-8(16-5-4-14-7-16)12-10-6-9(13)2-3-11(10)17-15-12/h2-8H,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H10ClN3O/c1-8(16-5-4-14-7-16)12-10-6-9(13)2-3-11(10)17-15-12/h2-8H,1H3/t8-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H10F3N3O4/c1-11(2)9(19)17(10(20)16-11)6-3-4-8(18(21)22)7(5-6)12(13,14)15/h3-5H,1-2H3,(H,16,20)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H10N2/c1-8-12-10(6-7-13-8)9-4-2-3-5-11(9)14-12/h2-7,14H,1H3	1 (Nikolic et al., 2013)
InChI=1S/C12H10N2O/c1-7-12-10(4-5-13-7)9-3-2-8(15)6-11(9)14-12/h2-6,13-14H,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H10N2O3S/c1-18-8-2-3-10-9(6-8)12(17)14(7-13-10)5-4-11(15)16/h2-7H,1H3,(H,15,16)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H10N2O3S/c1-18-8-2-3-10-9(6-8)12(17)14(7-13-10)5-4-11(15)16/h2-7H,1H3,(H,15,16)/b5-4+	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H10N2O5/c1-2-14-7-4-9-8(18-5-19-9)3-6(7)11(15)10(13-14)12(16)17/h3-4H,2,5H2,1H3,(H,16,17)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H11ClN2O5S/c13-7-4-9(15-6-8-2-1-3-20-8)11(12(16)17)10(5-7)21(14,18)19/h1-5,15H,6H2,(H,16,17)(H2,14,18,19)	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C12H11ClN2O5S/c13-9-5-10(15-6-7-2-1-3-20-7)8(12(16)17)4-11(9)21(14,18)19/h1-5,15H,6H2,(H,16,17)(H2,14,18,19)	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C12H11ClO4/c1-16-9-6-10(14)17-12(9)11(15)7-4-2-3-5-8(7)13/h2-6,11-12,15H,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H11ClO4/c1-16-9-6-10(14)17-12(9)11(15)7-4-2-3-5-8(7)13/h2-6,11-12,15H,1H3/t11-,12-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H11ClO4/c1-16-9-6-10(14)17-12(9)11(15)7-4-2-3-5-8(7)13/h2-6,11-12,15H,1H3/t11-,12-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H11ClO4/c1-16-9-6-10(14)17-12(9)11(15)7-4-2-3-5-8(7)13/h2-6,11-12,15H,1H3/t11-,12+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H11N3/c1-3-7-11(8-4-1)13-15-14-12-9-5-2-6-10-12/h1-10H,(H,13,14)	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C12H11N3/c1-9-11(7-8-13)15-12(14-9)10-5-3-2-4-6-10/h2-6H,7H2,1H3,(H,14,15)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H11N5O/c1-8-16-11(10(5-13)12(18)17-8)15-7-9-3-2-4-14-6-9/h2-4,6H,7H2,1H3,(H2,15,16,17,18)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H11N7/c13-9-7(6-4-2-1-3-5-6)16-8-10(14)18-12(15)19-11(8)17-9/h1-5H,(H6,13,14,15,17,18,19)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H11NO/c1-10-7-8-12(14)13(9-10)11-5-3-2-4-6-11/h2-9H,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H11NO3S/c13-9-1-5-11(6-2-9)17(15,16)12-7-3-10(14)4-8-12/h1-8,14H,13H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H12Cl2N4/c1-2-9-10(11(15)18-12(16)17-9)6-3-4-7(13)8(14)5-6/h3-5H,2H2,1H3,(H4,15,16,17,18)	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C12H12N2O2/c15-10-12(14-11(16)13-10)6-5-8-3-1-2-4-9(8)7-12/h1-4H,5-7H2,(H2,13,14,15,16)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H12N2O2/c15-10-12(14-11(16)13-10)6-5-8-3-1-2-4-9(8)7-12/h1-4H,5-7H2,(H2,13,14,15,16)/t12-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H12N2O2/c15-11-10(8-4-2-1-3-5-8)16-12(14-11)13-9-6-7-9/h1-5,9-10H,6-7H2,(H,13,14,15)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H12N2O2/c15-11-10(8-4-2-1-3-5-8)16-12(14-11)13-9-6-7-9/h1-5,9-10H,6-7H2,(H,13,14,15)/t10-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H12N2O2/c15-11-10(8-4-2-1-3-5-8)16-12(14-11)13-9-6-7-9/h1-5,9-10H,6-7H2,(H,13,14,15)/t10-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H12N2O2S/c1-7-10(14-12(16)13-7)11(15)8-3-5-9(17-2)6-4-8/h3-6H,1-2H3,(H2,13,14,16)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H12N2O2S/c13-9-1-5-11(6-2-9)17(15,16)12-7-3-10(14)4-8-12/h1-8H,13-14H2	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C12H12N2O3/c1-2-12(8-6-4-3-5-7-8)9(15)13-11(17)14-10(12)16/h3-7H,2H2,1H3,(H2,13,14,15,16,17)	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C12H12N2O3/c1-3-14-6-9(12(16)17)10(15)8-5-4-7(2)13-11(8)14/h4-6H,3H2,1-2H3,(H,16,17)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H12N2O3/c1-3-14-6-9(12(16)17)10(15)8-5-4-7(2)13-11(8)14/h4-6H,3H2,1-2H3,(H,16,17)/p-1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C12H12N2O4S/c15-11-9(5-3-7-13-11)14-12(16)8-4-1-2-6-10(8)19(14,17)18/h1-2,4,6,9H,3,5,7H2,(H,13,15)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H12N2O4S/c15-11-9(5-3-7-13-11)14-12(16)8-4-1-2-6-10(8)19(14,17)18/h1-2,4,6,9H,3,5,7H2,(H,13,15)/t9-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H12N2O4S/c15-11-9(5-3-7-13-11)14-12(16)8-4-1-2-6-10(8)19(14,17)18/h1-2,4,6,9H,3,5,7H2,(H,13,15)/t9-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C12H12N4O3/c17-11(14-8-10-4-2-1-3-5-10)9-15-7-6-13-12(15)16(18)19/h1-7H,8-9H2,(H,14,17)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H13BrN4O2S/c13-9-2-1-4-14-10(9)8-20-7-6-16-12-11(17(18)19)3-5-15-12/h1-5,12,16H,6-8H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H13BrN4O2S/c13-9-2-1-4-14-10(9)8-20-7-6-16-12-11(17(18)19)3-5-15-12/h1-5,12,16H,6-8H2/t12-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H13BrN4O2S/c13-9-2-1-4-14-10(9)8-20-7-6-16-12-11(17(18)19)3-5-15-12/h1-5,15-16H,6-8H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H13BrN4O2S/c13-9-2-1-4-14-11(9)8-20-7-6-15-10-3-5-16-12(10)17(18)19/h1-5,15-16H,6-8H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H13ClN4/c1-2-9-10(11(14)17-12(15)16-9)7-3-5-8(13)6-4-7/h3-6H,2H2,1H3,(H4,14,15,16,17)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H13F3N2O2/c1-16-11(18)17-6-10(7-17)19-9-4-2-3-8(5-9)12(13,14)15/h2-5,10H,6-7H2,1H3,(H,16,18)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H13I3N2O2/c1-17(2)6-16-12-9(14)5-8(13)7(11(12)15)3-4-10(18)19/h5-6H,3-4H2,1-2H3,(H,18,19)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H13I3N2O3/c1-5(12(19)20)4-17(6(2)18)11-8(14)3-7(13)10(16)9(11)15/h3,5H,4,16H2,1-2H3,(H,19,20)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H13N/c1-2-9-13-12-8-7-10-5-3-4-6-11(10)12/h1,3-6,12-13H,7-9H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H13N/c1-2-9-13-12-8-7-10-5-3-4-6-11(10)12/h1,3-6,12-13H,7-9H2/t12-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H13N/c1-2-9-13-12-8-7-10-5-3-4-6-11(10)12/h1,3-6,12-13H,7-9H2/t12-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H13N3O2/c1-9-7-11(15-17-9)12(16)14-13-8-10-5-3-2-4-6-10/h2-7,13H,8H2,1H3,(H,14,16)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H13N5OS/c1-2-5-14-12-16-9(13)8-11(17-12)19-10(15-8)7-4-3-6-18-7/h3-4,6H,2,5H2,1H3,(H3,13,14,16,17)	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C12H13N5OS/c1-7(18)15-9-4-2-3-8(5-9)10-6-19-12(16-10)17-11(13)14/h2-6H,1H3,(H,15,18)(H4,13,14,16,17)	0	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C12H13N5OS/c1-8(18)16-10-4-2-3-9(5-10)11-6-19-12(17-11)14-7-15-13/h2-7H,13H2,1H3,(H,16,18)(H,14,15,17)	0	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C12H13NO2/c1-12(9-6-4-3-5-7-9)8-10(14)13(2)11(12)15/h3-7H,8H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H13NO2/c1-12(9-6-4-3-5-7-9)8-10(14)13(2)11(12)15/h3-7H,8H2,1-2H3/t12-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H13NO2/c1-12(9-6-4-3-5-7-9)8-10(14)13(2)11(12)15/h3-7H,8H2,1-2H3/t12-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H13NO2S/c1-2-16(14,15)12-10(8-13)11(12)9-6-4-3-5-7-9/h3-7,10-12H,2H2,1H3/t10-,11-,12-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H13NO3/c1-16-10-6-4-9(5-7-10)12(15)13-8-2-3-11(13)14/h4-7H,2-3,8H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H14Cl2FNO4S/c1-21(19,20)8-4-2-7(3-5-8)10(17)9(6-15)16-12(18)11(13)14/h2-5,9-11,17H,6H2,1H3,(H,16,18)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H14Cl2FNO4S/c1-21(19,20)8-4-2-7(3-5-8)10(17)9(6-15)16-12(18)11(13)14/h2-5,9-11,17H,6H2,1H3,(H,16,18)/t9-,10-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H14Cl2FNO4S/c1-21(19,20)8-4-2-7(3-5-8)10(17)9(6-15)16-12(18)11(13)14/h2-5,9-11,17H,6H2,1H3,(H,16,18)/t9-,10+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C12H14Cl2FNO4S/c1-21(19,20)8-4-2-7(3-5-8)10(17)9(6-15)16-12(18)11(13)14/h2-5,9-11,17H,6H2,1H3,(H,16,18)/t9-,10+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H14N2/c1-10(12-6-4-3-5-7-12)14-9-8-13-11(14)2/h3-10H,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H14N2/c1-10(12-6-4-3-5-7-12)14-9-8-13-11(14)2/h3-10H,1-2H3/t10-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H14N2/c1-10(12-6-4-3-5-7-12)14-9-8-13-11(14)2/h3-10H,1-2H3/t10-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H14N2/c1-2-5-12-10(4-1)8-11-9-13-6-3-7-14(11)12/h1-2,4-5,8,13H,3,6-7,9H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H14N2/c1-9-4-3-5-11(10(9)2)6-12-7-13-8-14-12/h3-5,7-8H,6H2,1-2H3,(H,13,14)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H14N2O2/c1-2-12(9-6-4-3-5-7-9)10(15)13-8-14-11(12)16/h3-7H,2,8H2,1H3,(H,13,15)(H,14,16)	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C12H14N2O2/c1-2-12(9-6-4-3-5-7-9)11(16)14-10(15)8-13-12/h3-7,13H,2,8H2,1H3,(H,14,15,16)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C12H14N2O2/c1-2-12(9-6-4-3-5-7-9)11(16)14-10(15)8-13-12/h3-7,13H,2,8H2,1H3,(H,14,15,16)/t12-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H14N2O2/c1-2-12(9-6-4-3-5-7-9)11(16)14-10(15)8-13-12/h3-7,13H,2,8H2,1H3,(H,14,15,16)/t12-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H14N2O2/c1-3-12(9-7-5-4-6-8-9)10(15)13-11(16)14(12)2/h4-8H,3H2,1-2H3,(H,13,15,16)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H14N2O2/c1-3-12(9-7-5-4-6-8-9)10(15)13-11(16)14(12)2/h4-8H,3H2,1-2H3,(H,13,15,16)/t12-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H14N2O2/c1-3-12(9-7-5-4-6-8-9)10(15)14(2)11(16)13-12/h4-8H,3H2,1-2H3,(H,13,16)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H14N2O2/c1-3-12(9-7-5-4-6-8-9)10(15)14(2)11(16)13-12/h4-8H,3H2,1-2H3,(H,13,16)/t12-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H14N2O2/c1-3-12(9-7-5-4-6-8-9)10(15)14(2)11(16)13-12/h4-8H,3H2,1-2H3,(H,13,16)/t12-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H14N2O3/c1-3-14-6-9(12(16)17)10(15)8-5-4-7(2)13-11(8)14/h4-5,9H,3,6H2,1-2H3,(H,16,17)/t9-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H14N2O3S/c1-17-9-5-3-8(4-6-9)10-11(18(2,15)16)12(10,14)7-13/h3-6,10-11H,14H2,1-2H3/t10-,11+,12-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H14N2O6/c1-2-3-6-4-14(12(19)13-10(6)18)11-9(17)8(16)7(5-15)20-11/h4,7-9,11,15-17H,5H2,1H3,(H,13,18,19)/t7-,8-,9-,11-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H14N4O2S/c1-8-7-12(15-9(2)14-8)16-19(17,18)11-5-3-10(13)4-6-11/h3-7H,13H2,1-2H3,(H,14,15,16)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H14N4O2S/c1-8-7-9(2)15-12(14-8)16-19(17,18)11-5-3-10(13)4-6-11/h3-7H,13H2,1-2H3,(H,14,15,16)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H14N4O2S/c17-16(18)11-4-6-14-12(11)15-7-8-19-9-10-3-1-2-5-13-10/h1-6,12,15H,7-9H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H14N4O2S/c17-16(18)11-4-6-14-12(11)15-7-8-19-9-10-3-1-2-5-13-10/h1-6,12,15H,7-9H2/t12-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C12H14N4O2S/c17-16(18)11-4-6-14-12(11)15-7-8-19-9-10-3-1-2-5-13-10/h1-6,14-15H,7-9H2	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C12H14N4O3S/c1-2-16-8-7-11(14-12(16)17)15-20(18,19)10-5-3-9(13)4-6-10/h3-8H,2,13H2,1H3,(H,14,15,17)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H14N4O4S/c1-19-10-11(14-7-15-12(10)20-2)16-21(17,18)9-5-3-8(13)4-6-9/h3-7H,13H2,1-2H3,(H,14,15,16)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H14N4O4S/c1-19-11-7-10(14-12(15-11)20-2)16-21(17,18)9-5-3-8(13)4-6-9/h3-7H,13H2,1-2H3,(H,14,15,16)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H14N6O10S2/c13-11-15-4(3-29-11)7(17-28-2-6(19)20)9(21)16-8-5(1-27-12(14)23)18(10(8)22)30(24,25)26/h3,5,8H,1-2H2,(H2,13,15)(H2,14,23)(H,16,21)(H,19,20)(H,24,25,26)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H14N6O10S2/c13-11-15-4(3-29-11)7(17-28-2-6(19)20)9(21)16-8-5(1-27-12(14)23)18(10(8)22)30(24,25)26/h3,5,8H,1-2H2,(H2,13,15)(H2,14,23)(H,16,21)(H,19,20)(H,24,25,26)/b17-7-	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H14N6O10S2/c13-11-15-4(3-29-11)7(17-28-2-6(19)20)9(21)16-8-5(1-27-12(14)23)18(10(8)22)30(24,25)26/h3,5,8H,1-2H2,(H2,13,15)(H2,14,23)(H,16,21)(H,19,20)(H,24,25,26)/b17-7-/t5-,8+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H14N6O10S2/c13-11-15-4(3-29-11)7(17-28-2-6(19)20)9(21)16-8-5(1-27-12(14)23)18(10(8)22)30(24,25)26/h3,5,8H,1-2H2,(H2,13,15)(H2,14,23)(H,16,21)(H,19,20)(H,24,25,26)/b17-7-/t5-,8+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H14N6O10S2/c13-11-15-4(3-29-11)7(17-28-2-6(19)20)9(21)16-8-5(1-27-12(14)23)18(10(8)22)30(24,25)26/h3,5,8H,1-2H2,(H2,13,15)(H2,14,23)(H,16,21)(H,19,20)(H,24,25,26)/b17-7-/t5?,8-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H14N6O10S2/c13-11-15-4(3-29-11)7(17-28-2-6(19)20)9(21)16-8-5(1-27-12(14)23)18(10(8)22)30(24,25)26/h3,5,8H,1-2H2,(H2,13,15)(H2,14,23)(H,16,21)(H,19,20)(H,24,25,26)/b17-7+	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H14N6O10S2/c13-11-15-4(3-29-11)7(17-28-2-6(19)20)9(21)16-8-5(1-27-12(14)23)18(10(8)22)30(24,25)26/h3,5,8H,1-2H2,(H2,13,15)(H2,14,23)(H,16,21)(H,19,20)(H,24,25,26)/b17-7+/t5-,8+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H14N6O10S2/c13-11-15-4(3-29-11)7(17-28-2-6(19)20)9(21)16-8-5(1-27-12(14)23)18(10(8)22)30(24,25)26/h3,5,8H,1-2H2,(H2,13,15)(H2,14,23)(H,16,21)(H,19,20)(H,24,25,26)/b17-7+/t5-,8+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H14N6O10S2/c13-11-15-4(3-29-11)7(17-28-2-6(19)20)9(21)16-8-5(1-27-12(14)23)18(10(8)22)30(24,25)26/h3,5,8H,1-2H2,(H2,13,15)(H2,14,23)(H,16,21)(H,19,20)(H,24,25,26)/b17-7+/t5?,8-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H14N6O10S2/c13-11-15-4(3-29-11)7(17-28-2-6(19)20)9(21)16-8-5(1-27-12(14)23)18(10(8)22)30(24,25)26/h3,5,8H,1-2H2,(H2,13,15)(H2,14,23)(H,16,21)(H,19,20)(H,24,25,26)/t5-,8+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H15Cl2NO5S/c1-21(19,20)8-4-2-7(3-5-8)10(17)9(6-16)15-12(18)11(13)14/h2-5,9-11,16-17H,6H2,1H3,(H,15,18)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H15Cl2NO5S/c1-21(19,20)8-4-2-7(3-5-8)10(17)9(6-16)15-12(18)11(13)14/h2-5,9-11,16-17H,6H2,1H3,(H,15,18)/t9-,10-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H15Cl2NO5S/c1-21(19,20)8-4-2-7(3-5-8)10(17)9(6-16)15-12(18)11(13)14/h2-5,9-11,16-17H,6H2,1H3,(H,15,18)/t9-,10-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H15Cl2NO5S/c1-21(19,20)8-4-2-7(3-5-8)10(17)9(6-16)15-12(18)11(13)14/h2-5,9-11,16-17H,6H2,1H3,(H,15,18)/t9-,10+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H15Cl2NO5S/c1-21(19,20)8-4-2-7(3-5-8)10(17)9(6-16)15-12(18)11(13)14/h2-5,9-11,16-17H,6H2,1H3,(H,15,18)/t9-,10+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H15ClO3/c1-4-15-11(14)12(2,3)16-10-7-5-9(13)6-8-10/h5-8H,4H2,1-3H3	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C12H15ClO3S/c1-2-17(15,16)12-10(7-14)11(12)8-3-5-9(13)6-4-8/h3-6,10-12,14H,2,7H2,1H3/t10-,11+,12+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H15FN4O/c1-17-6-4-9(5-7-17)18-10-2-3-12(15-16-14)11(13)8-10/h2-3,8-9H,4-7H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C12H15N/c1-13-9-7-12(8-10-13)11-5-3-2-4-6-11/h2-7H,8-10H2,1H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C12H15N3O2S/c1-3-6-18-8-4-5-9-10(7-8)14-11(13-9)15-12(16)17-2/h4-5,7H,3,6H2,1-2H3,(H2,13,14,15,16)	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C12H15N5O3/c1-5-6(3-18)8(19)2-7(5)17-4-14-9-10(17)15-12(13)16-11(9)20/h4,6-8,18-19H,1-3H2,(H3,13,15,16,20)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H15N5O6S/c1-5-8(11(21)17(5)23-3-7(18)19)15-10(20)9(16-22-2)6-4-24-12(13)14-6/h4-5,8H,3H2,1-2H3,(H2,13,14)(H,15,20)(H,18,19)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H15N5O6S/c1-5-8(11(21)17(5)23-3-7(18)19)15-10(20)9(16-22-2)6-4-24-12(13)14-6/h4-5,8H,3H2,1-2H3,(H2,13,14)(H,15,20)(H,18,19)/b16-9-	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H15N5O6S/c1-5-8(11(21)17(5)23-3-7(18)19)15-10(20)9(16-22-2)6-4-24-12(13)14-6/h4-5,8H,3H2,1-2H3,(H2,13,14)(H,15,20)(H,18,19)/b16-9-/t5-,8-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H15N5O6S/c1-5-8(11(21)17(5)23-3-7(18)19)15-10(20)9(16-22-2)6-4-24-12(13)14-6/h4-5,8H,3H2,1-2H3,(H2,13,14)(H,15,20)(H,18,19)/b16-9-/t5-,8-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H15N5O6S/c1-5-8(11(21)17(5)23-3-7(18)19)15-10(20)9(16-22-2)6-4-24-12(13)14-6/h4-5,8H,3H2,1-2H3,(H2,13,14)(H,15,20)(H,18,19)/b16-9-/t5-,8-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H15N5O6S/c1-5-8(11(21)17(5)23-3-7(18)19)15-10(20)9(16-22-2)6-4-24-12(13)14-6/h4-5,8H,3H2,1-2H3,(H2,13,14)(H,15,20)(H,18,19)/b16-9-/t5-,8+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H15N5O6S/c1-5-8(11(21)17(5)23-3-7(18)19)15-10(20)9(16-22-2)6-4-24-12(13)14-6/h4-5,8H,3H2,1-2H3,(H2,13,14)(H,15,20)(H,18,19)/b16-9+	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H15N5O6S/c1-5-8(11(21)17(5)23-3-7(18)19)15-10(20)9(16-22-2)6-4-24-12(13)14-6/h4-5,8H,3H2,1-2H3,(H2,13,14)(H,15,20)(H,18,19)/b16-9+/t5-,8-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H15N5O6S/c1-5-8(11(21)17(5)23-3-7(18)19)15-10(20)9(16-22-2)6-4-24-12(13)14-6/h4-5,8H,3H2,1-2H3,(H2,13,14)(H,15,20)(H,18,19)/b16-9+/t5-,8-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H15N5O6S/c1-5-8(11(21)17(5)23-3-7(18)19)15-10(20)9(16-22-2)6-4-24-12(13)14-6/h4-5,8H,3H2,1-2H3,(H2,13,14)(H,15,20)(H,18,19)/b16-9+/t5-,8-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H15N5O9S2/c1-12(2)8(10(21)17(12)26-28(22,23)24)15-9(20)7(16-25-3-6(18)19)5-4-27-11(13)14-5/h4,8H,3H2,1-2H3,(H2,13,14)(H,15,20)(H,18,19)(H,22,23,24)	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C12H15N5O9S2/c1-12(2)8(10(21)17(12)26-28(22,23)24)15-9(20)7(16-25-3-6(18)19)5-4-27-11(13)14-5/h4,8H,3H2,1-2H3,(H2,13,14)(H,15,20)(H,18,19)(H,22,23,24)/b16-7-	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H15N5O9S2/c1-12(2)8(10(21)17(12)26-28(22,23)24)15-9(20)7(16-25-3-6(18)19)5-4-27-11(13)14-5/h4,8H,3H2,1-2H3,(H2,13,14)(H,15,20)(H,18,19)(H,22,23,24)/b16-7-/t8-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H15N5O9S2/c1-12(2)8(10(21)17(12)26-28(22,23)24)15-9(20)7(16-25-3-6(18)19)5-4-27-11(13)14-5/h4,8H,3H2,1-2H3,(H2,13,14)(H,15,20)(H,18,19)(H,22,23,24)/b16-7+	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H15N5O9S2/c1-12(2)8(10(21)17(12)26-28(22,23)24)15-9(20)7(16-25-3-6(18)19)5-4-27-11(13)14-5/h4,8H,3H2,1-2H3,(H2,13,14)(H,15,20)(H,18,19)(H,22,23,24)/b16-7+/t8-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H15NO3/c1-8-3-9(2)5-10(4-8)15-7-11-6-13-12(14)16-11/h3-5,11H,6-7H2,1-2H3,(H,13,14)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H15NO3/c1-8-3-9(2)5-10(4-8)15-7-11-6-13-12(14)16-11/h3-5,11H,6-7H2,1-2H3,(H,13,14)/t11-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H15NO3/c1-8-3-9(2)5-10(4-8)15-7-11-6-13-12(14)16-11/h3-5,11H,6-7H2,1-2H3,(H,13,14)/t11-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H15NO4/c1-12-7-4-3-6(5-7)8(12)9(16-10(12)14)17-11(15)13-2/h3-4,6-9H,5H2,1-2H3,(H,13,15)	1	(Wu et al., 2018)

InChI=1S/C12H15NO4/c1-12-7-4-3-6(5-7)8(12)9(16-10(12)14)17-11(15)13-2/h3-4,6-9H,5H2,1-2H3,(H,13,15)/t6-,7+,8+,9+,12+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H15NO4/c1-12-7-4-3-6(5-7)8(12)9(16-10(12)14)17-11(15)13-2/h3-4,6-9H,5H2,1-2H3,(H,13,15)/t6?,7?,8-,9+,12+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H15NO4/c1-15-9-6-8(4-5-11(13)14)7-10(16-2)12(9)17-3/h4-7H,1-3H3,(H2,13,14)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H15NO4/c1-15-9-6-8(4-5-11(13)14)7-10(16-2)12(9)17-3/h4-7H,1-3H3,(H2,13,14)/b5-4+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H15NO5S/c1-19(15,16)11-10(12(11,13)5-14)7-2-3-8-9(4-7)18-6-17-8/h2-4,10-11,14H,5-6,13H2,1H3/t10-,11+,12-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H15NO5S/c1-5(14)7-10(15)13-8(12(16)17)9(19-11(7)13)6-3-2-4-18-6/h5-7,11,14H,2-4H2,1H3,(H,16,17)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H15NO5S/c1-5(14)7-10(15)13-8(12(16)17)9(19-11(7)13)6-3-2-4-18-6/h5-7,11,14H,2-4H2,1H3,(H,16,17)/t5-,6-,7?,11-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H15NO5S/c1-5(14)7-10(15)13-8(12(16)17)9(19-11(7)13)6-3-2-4-18-6/h5-7,11,14H,2-4H2,1H3,(H,16,17)/t5-,6-,7+,11-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H15NO5S/c1-5(14)7-10(15)13-8(12(16)17)9(19-11(7)13)6-3-2-4-18-6/h5-7,11,14H,2-4H2,1H3,(H,16,17)/t5-,6-,7+,11+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H15NO5S/c1-5(14)7-10(15)13-8(12(16)17)9(19-11(7)13)6-3-2-4-18-6/h5-7,11,14H,2-4H2,1H3,(H,16,17)/t5-,6+,7-,11-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H15NO5S3/c1-5(14)7-9(15)13-8(11(16)17)12(20-10(7)13)19-6-2-3-21(18)4-6/h5-7,10,14H,2-4H2,1H3,(H,16,17)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H15NO5S3/c1-5(14)7-9(15)13-8(11(16)17)12(20-10(7)13)19-6-2-3-21(18)4-6/h5-7,10,14H,2-4H2,1H3,(H,16,17)/t5-,6-,7?,10-,21?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H15NO5S3/c1-5(14)7-9(15)13-8(11(16)17)12(20-10(7)13)19-6-2-3-21(18)4-6/h5-7,10,14H,2-4H2,1H3,(H,16,17)/t5-,6?,7+,10-,21?/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H15NO5S3/c1-5(14)7-9(15)13-8(11(16)17)12(20-10(7)13)19-6-2-3-21(18)4-6/h5-7,10,14H,2-4H2,1H3,(H,16,17)/t5-,6+,7+,10-,21?/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H16BrN5S/c1-2-15-12(18-9-14)17-6-7-19-8-11-10(13)4-3-5-16-11/h3-5H,2,6-8H2,1H3,(H2,15,17,18)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H16ClNO2/c1-14(2)8-7-11(15)9-16-12-5-3-10(13)4-6-12/h3-6H,7-9H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H16ClNO3/c1-14(2)7-8-16-12(15)9-17-11-5-3-10(13)4-6-11/h3-6H,7-9H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H16F3N/c1-3-16-8-9(2)10-5-4-6-11(7-10)12(13,14)15/h4-7,9,16H,3,8H2,1-2H3/t9-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H16F3N/c1-3-16-9(2)7-10-5-4-6-11(8-10)12(13,14)15/h4-6,8-9,16H,3,7H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H16N2/c1-2-10(13)7-9-8-14-12-6-4-3-5-11(9)12/h3-6,8,10,14H,2,7,13H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H16N2/c1-2-10(13)7-9-8-14-12-6-4-3-5-11(9)12/h3-6,8,10,14H,2,7,13H2,1H3/t10-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H16N2/c1-2-10(13)7-9-8-14-12-6-4-3-5-11(9)12/h3-6,8,10,14H,2,7,13H2,1H3/t10-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H16N2/c1-2-4-11-10(3-1)5-7-14-8-6-13-9-12(11)14/h1-4,12-13H,5-9H2	1	(Mazumdar et al., 2023)

	2023)
InChI=1S/C12H16N2/c1-2-4-11-10(3-1)5-7-14-8-6-13-9-12(11)14/h1-4,12-13H,5-9H2/t12-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H16N2/c1-2-4-11-10(3-1)5-7-14-8-6-13-9-12(11)14/h1-4,12-13H,5-9H2/t12-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H16N2O/c1-14(2)6-5-9-8-13-12-4-3-10(15)7-11(9)12/h3-4,7-8,13,15H,5-6H2,1-2H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H16N2O/c13-7-11-6-12(15)14(9-11)8-10-4-2-1-3-5-10/h1-5,11H,6-9,13H2	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H16N2O/c13-7-11-6-12(15)14(9-11)8-10-4-2-1-3-5-10/h1-5,11H,6-9,13H2/t11-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H16N2O/c13-7-11-6-12(15)14(9-11)8-10-4-2-1-3-5-10/h1-5,11H,6-9,13H2/t11-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H16N2O2/c1-2-10(14-6-4-13-5-7-14)12-11(3-1)15-8-9-16-12/h1-3,13H,4-9H2	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H16N2O3/c1-12(8-6-4-3-5-7-8)9(15)13-11(17)14(2)10(12)16/h6H,3-5,7H2,1-2H3,(H,13,15,17)	1 (Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C12H16N2O3/c1-12(8-6-4-3-5-7-8)9(15)13-11(17)14(2)10(12)16/h6H,3-5,7H2,1-2H3,(H,13,15,17)/t12-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H16N2O3/c1-12(8-6-4-3-5-7-8)9(15)13-11(17)14(2)10(12)16/h6H,3-5,7H2,1-2H3,(H,13,15,17)/t12-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H16N2O3/c1-2-12(8-6-4-3-5-7-8)9(15)13-11(17)14-10(12)16/h6H,2-5,7H2,1H3,(H2,13,14,15,16,17)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H16N2S/c1-9-5-3-6-10(2)11(9)14-12-13-7-4-8-15-12/h3,5-6H,4,7-8H2,1-2H3,(H,13,14)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H17Cl2NO/c1-12(8-16,15(2)3)7-9-4-5-10(13)11(14)6-9/h4-6,16H,7-8H2,1-3H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H17Cl2NO/c1-12(8-16,15(2)3)7-9-4-5-10(13)11(14)6-9/h4-6,16H,7-8H2,1-3H3/t12-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H17Cl2NO/c1-12(8-16,15(2)3)7-9-4-5-10(13)11(14)6-9/h4-6,16H,7-8H2,1-3H3/t12-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H17ClN4O4S2/c13-8-5-9-11(6-10(8)22(14,18)19)23(20,21)16-12(15-9)7-17-3-1-2-4-17/h5-6,12,15-16H,1-4,7H2,(H2,14,18,19)/t12-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H17ClO2/c1-11(2,14)8-12(3,15)9-4-6-10(13)7-5-9/h4-7,14-15H,8H2,1-3H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H17ClO2/c1-11(2,14)8-12(3,15)9-4-6-10(13)7-5-9/h4-7,14-15H,8H2,1-3H3/t12-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H17N2O4P/c1-14(2)7-6-9-8-13-10-4-3-5-11(12(9)10)18-19(15,16)17/h3-5,8,13H,6-7H2,1-2H3,(H2,15,16,17)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H17N3/c1-10-6-4-5-7-11(10)13-12-14(2)8-9-15(12)3/h4-7H,8-9H2,1-3H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H17N3O4S/c1-6(16)9-7-4-8(20-3-2-14-5-13)10(12(18)19)15(7)11(9)17/h5-7,9,16H,2-4H2,1H3,(H2,13,14)(H,18,19)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H17N3O4S/c1-6(16)9-7-4-8(20-3-2-14-5-13)10(12(18)19)15(7)11(9)17/h5-7,9,16H,2-4H2,1H3,(H2,13,14)(H,18,19)/t6-,7-,9-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H17N3O4S/c1-6(16)9-7-4-8(20-3-2-14-5-13)10(12(18)19)15(7)11(9)17/h5-7,9,16H,2-4H2,1H3,(H2,13,14)(H,18,19)/t6-,7-,9-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H17N3O4S/c1-6(16)9-7-4-8(20-3-2-14-5-13)10(12(18)19)15(7)11(9)17/h5-7,9,16H,2-4H2,1H3,(H2,13,14)(H,18,19)/t6-,7-,9?/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H17N3O4S/c1-6(16)9-7-4-8(20-3-2-14-5-13)10(12(18)19)15(7)11(9)17/h5-7,9,16H,2-4H2,1H3,(H2,13,14)(H,18,19)/t6-,7-,9+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C12H17N3O4S/c1-6(16)9-7-4-8(20-3-2-14-5-13)10(12(18)19)15(7)11(9)17/h5-7,9,16H,2-4H2,1H3,(H2,13,14)(H,18,19)/t6-,7+,9+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H17N4OS/c1-8-11(3-4-17)18-7-16(8)6-10-5-14-9(2)15-12(10)13/h5,7,17H,3-4,6H2,1-2H3,(H2,13,14,15)/q+1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H17N5O8S2/c1-12(2)9(10(20)17(12)25-27(21,22)23)14-3-6(16-24-4-8(18)19)7-5-26-11(13)15-7/h5,9,14H,3-4H2,1-2H3,(H2,13,15)(H,18,19)(H,21,22,23)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H17N5O8S2/c1-12(2)9(10(20)17(12)25-27(21,22)23)14-3-6(16-24-4-8(18)19)7-5-26-11(13)15-7/h5,9,14H,3-4H2,1-2H3,(H2,13,15)(H,18,19)(H,21,22,23)/b16-6-	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H17N5O8S2/c1-12(2)9(10(20)17(12)25-27(21,22)23)14-3-6(16-24-4-8(18)19)7-5-26-11(13)15-7/h5,9,14H,3-4H2,1-2H3,(H2,13,15)(H,18,19)(H,21,22,23)/b16-6-/t9-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H17N5O8S2/c1-12(2)9(10(20)17(12)25-27(21,22)23)14-3-6(16-24-4-8(18)19)7-5-26-11(13)15-7/h5,9,14H,3-4H2,1-2H3,(H2,13,15)(H,18,19)(H,21,22,23)/b16-6+/t9-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H17NO/c1-10-12(14-9-8-13(10)2)11-6-4-3-5-7-11/h3-7,10,12H,8-9H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H17NO/c1-10-12(14-9-8-13(10)2)11-6-4-3-5-7-11/h3-7,10,12H,8-9H2,1-2H3/t10-,12-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H17NO/c1-10-12(14-9-8-13(10)2)11-6-4-3-5-7-11/h3-7,10,12H,8-9H2,1-2H3/t10-,12-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H17NO/c1-10-12(14-9-8-13(10)2)11-6-4-3-5-7-11/h3-7,10,12H,8-9H2,1-2H3/t10-,12+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H17NO/c1-9-11(13(2)3)8-10-6-4-5-7-12(10)14-9/h4-7,9,11H,8H2,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H17NO/c1-9-11(13(2)3)8-10-6-4-5-7-12(10)14-9/h4-7,9,11H,8H2,1-3H3/t9-,11-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H17NO/c1-9-11(13(2)3)8-10-6-4-5-7-12(10)14-9/h4-7,9,11H,8H2,1-3H3/t9-,11-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H17NO2/c1-9-7-11(13(15)12(14)8-9)10-5-3-2-4-6-10/h7-8,10,14H,2-6H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H17NO2/c1-9-7-11(13(15)12(14)8-9)10-5-3-2-4-6-10/h7-8,10,15H,2-6H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H17NO2/c1-9(14)13-10-5-7-11(8-6-10)15-12(2,3)4/h5-8H,1-4H3,(H,13,14)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H17NO3/c1-2-3-4-5-6-7-8-9(14)10-11(16-10)12(13)15/h2-3,5-6,10-11H,4,7-8H2,1H3,(H2,13,15)/b3-2+,6-5+	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H17NO3/c14-10-5-4-8(7-11(10)15)12(16)9-3-1-2-6-13-9/h4-5,7,9,12-16H,1-3,6H2/t9-,12-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H17NOS/c1-2-13-12(11-7-5-9-15-11)8-4-3-6-10(12)14/h5,7,9,13H,2-4,6,8H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H17NOS/c1-2-13-12(11-7-5-9-15-11)8-4-3-6-10(12)14/h5,7,9,13H,2-4,6,8H2,1H3/t12-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H18Cl2N2O/c1-12(2,3)16-6-10(17)7-4-8(13)11(15)9(14)5-7/h4-5,10,16-17H,6,15H2,1-3H3	0	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C12H18FNO/c1-12(2,3)14-8-11(15)9-6-4-5-7-10(9)13/h4-7,11,14-15H,8H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H18FNO/c1-12(2,3)14-8-11(15)9-6-4-5-7-10(9)13/h4-7,11,14-15H,8H2,1-3H3/t11-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H18FNO/c1-12(2,3)14-8-11(15)9-6-4-5-7-10(9)13/h4-7,11,14-15H,8H2,1-3H3/t11-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H18N2O2/c1-12(9-6-4-3-5-7-9)8-14(2)11(16)13-10(12)15/h6H,3-5,7-8H2,1-2H3,(H,13,15,16)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H18N2O2S/c1-4-6-8(3)12(7-5-2)9(15)13-11(17)14-10(12)16/h5,8H,2,4,6-7H2,1,3H3,(H2,13,14,15,16,17)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H18N2O2S/c1-4-6-8(3)12(7-5-2)9(15)13-11(17)14-10(12)16/h5,8H,2,4,6-7H2,1,3H3,(H2,13,14,15,16,17)/t8-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H18N2O2S/c1-4-6-8(3)12(7-5-2)9(15)13-11(17)14-10(12)16/h5,8H,2,4,6-7H2,1,3H3,(H2,13,14,15,16,17)/t8-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H18N2O3/c1-4-6-8(3)12(7-5-2)9(15)13-11(17)14-10(12)16/h5,8H,2,4,6-7H2,1,3H3,(H2,13,14,15,16,17)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H18N2O3/c1-4-6-8(3)12(7-5-2)9(15)13-11(17)14-10(12)16/h5,8H,2,4,6-7H2,1,3H3,(H2,13,14,15,16,17)/t8-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H18N2O3/c1-4-6-8(3)12(7-5-2)9(15)13-11(17)14-10(12)16/h5,8H,2,4,6-7H2,1,3H3,(H2,13,14,15,16,17)/t8-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H18N2O3/c1-5-6-12(7-11(2,3)4)8(15)13-10(17)14-9(12)16/h5H,1,6-7H2,2-4H3,(H2,13,14,15,16,17)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H18N2O3S/c1-3-4-9-13-12(15)14-18(16,17)11-7-5-10(2)6-8-11/h5-8H,3-4,9H2,1-2H3,(H2,13,14,15)	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C12H18N2O4/c1-17-8-3-4-11(18-2)9(5-8)10(15)7-14-12(16)6-13/h3-5,10,15H,6-7,13H2,1-2H3,(H,14,16)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H18N2O5/c1-6(2)7-4-14(12(18)13-11(7)17)10-3-8(16)9(5-15)19-10/h4,6,8-10,15-16H,3,5H2,1-2H3,(H,13,17,18)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H18N4O4/c17-9(7-15-5-1-3-11(15)19)13-14-10(18)8-16-6-2-4-12(16)20/h1-8H2,(H,13,17)(H,14,18)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H18O/c1-8(2)10-6-5-7-11(9(3)4)12(10)13/h5-9,13H,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H19CIN4O3/c1-19-6-4-17(7-8-3-2-5-20-8)12(18)10-9(13)11(14)16-15-10/h8H,2-7H2,1H3,(H3,14,15,16)/t8-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H19ClO6P2/c1-16-20(14,17-2)9-12(21(15,18-3)19-4)10-5-7-11(13)8-6-10/h5-8,12H,9H2,1-4H3/t12-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H19N2O2/c1-13(2)12(15)16-11-8-6-7-10(9-11)14(3,4)5/h6-9H,1-5H3/q+1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H19N3O/c1-9(2)15-12(16)11-6-4-10(5-7-11)8-14-13-3/h4-7,9,13-14H,8H2,1-3H3,(H,15,16)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C12H19NO/c1-4-7-14-10(3)11-6-5-9(2)12(13)8-11/h5-6,8,10H,4,7,13H2,1-3H3/t10-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H19NO2/c1-3-4-5-6-8-13-9-7-11(14)12(15)10(13)2/h7,9,15H,3-6,8H2,1-2H3	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C12H19NO3/c1-12(2,3)13-7-11(16)8-4-9(14)6-10(15)5-8/h4-6,11,13-16H,7H2,1-3H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H19NO3/c1-12(2,3)13-7-11(16)8-4-9(14)6-10(15)5-8/h4-6,11,13-16H,7H2,1-3H3/t11-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C12H20N2/c1-9-7-12(14(3)4)6-5-11(9)8-10(2)13/h5-7,10H,8,13H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H20N2/c1-9-7-12(14(3)4)6-5-11(9)8-10(2)13/h5-7,10H,8,13H2,1-4H3/t10-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H20N2/c1-9-7-12(14(3)4)6-5-11(9)8-10(2)13/h5-7,10H,8,13H2,1-4H3/t10-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H20N2O2/c1-2-12(9-6-4-3-5-7-9)10(15)13-8-14-11(12)16/h9H,2-8H2,1H3,(H,13,15)(H,14,16)	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C12H20N2O2S/c1-4-7-8(5-2)12(6-3)9(15)13-11(17)14-10(12)16/h8H,4-7H2,1-3H3,(H2,13,14,15,16,17)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H20N2O2S/c1-4-7-8(5-2)12(6-3)9(15)13-11(17)14-10(12)16/h8H,4-7H2,1-3H3,(H2,13,14,15,16,17)/t8-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H20N2O2S/c1-4-7-8(5-2)12(6-3)9(15)13-11(17)14-10(12)16/h8H,4-7H2,1-3H3,(H2,13,14,15,16,17)/t8-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H20N2O2S2/c1-4-5-8(2)12(6-7-18-3)9(15)13-11(17)14-10(12)16/h8H,4-7H2,1-3H3,(H2,13,14,15,16,17)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H20N2O2S2/c1-4-5-8(2)12(6-7-18-3)9(15)13-11(17)14-10(12)16/h8H,4-7H2,1-3H3,(H2,13,14,15,16,17)/t8-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H20N2O3/c1-12(2,3)13-6-11(17)8-4-5-10(16)9(7-15)14-8/h4-5,11,13,15-17H,6-7H2,1-3H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H20N2O3/c1-12(2,3)13-6-11(17)8-4-5-10(16)9(7-15)14-8/h4-5,11,13,15-17H,6-7H2,1-3H3/t11-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H20N2O3/c1-12(2,3)13-6-11(17)8-4-5-10(16)9(7-15)14-8/h4-5,11,13,15-17H,6-7H2,1-3H3/t11-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H20N2O3/c1-3-5-6-7-8-12(4-2)9(15)13-11(17)14-10(12)16/h3-8H2,1-2H3,(H2,13,14,15,16,17)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H20N2O3/c1-4-7-8(5-2)12(6-3)9(15)13-11(17)14-10(12)16/h8H,4-7H2,1-3H3,(H2,13,14,15,16,17)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H20N2O3/c1-4-7-8(5-2)12(6-3)9(15)13-11(17)14-10(12)16/h8H,4-7H2,1-3H3,(H2,13,14,15,16,17)/t8-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H20N2O3/c1-4-7-8(5-2)12(6-3)9(15)13-11(17)14-10(12)16/h8H,4-7H2,1-3H3,(H2,13,14,15,16,17)/t8-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H20N2O3S/c1-9(2)13-8-12(15)10-4-6-11(7-5-10)14-18(3,16)17/h4-7,9,12-15H,8H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H20N2O3S/c1-9(2)13-8-12(15)10-4-6-11(7-5-10)14-18(3,16)17/h4-7,9,12-15H,8H2,1-3H3/p+1/t12-/m0/s1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C12H20N2O3S/c1-9(2)13-8-12(15)10-4-6-11(7-5-10)14-18(3,16)17/h4-7,9,12-15H,8H2,1-3H3/t12-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H20N4/c1-10(2)15-11-4-3-5-14-12(11)16-8-6-13-7-9-16/h3-5,10,13,15H,6-9H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H20N4O3S/c1-13-11(9-16(17)18)14-6-7-20-12-5-4-10(19-12)8-15(2)3/h4-5,9,13-14H,6-8H2,1-3H3/b11-9-	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H20N4O3S/c1-13-11(9-16(17)18)14-6-7-20-12-5-4-10(19-12)8-15(2)3/h4-5H,6-9H2,1-3H3,(H,13,14)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H20N4O7/c1-2-7(20)14-8-10(15-12(23)16-11(8)22)13-3-5(18)9(21)6(19)4-17/h5-6,8-9,17-19,21H,2-4H2,1H3,(H,14,20)(H2,13,15,16,22,23)/t5-,6+,8-,9-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H20N4O7/c1-4(18)15-8-5(16-12(13)14)2-7(11(21)22)23-10(8)9(20)6(19)3-17/h2,5-6,8-10,17,19-	0	(Meng et al., 2021)

20H,3H2,1H3,(H,15,18)(H,21,22)(H4,13,14,16)	
InChI=1S/C12H20N4O7/c1-4(18)15-8-5(16-12(13)14)2-7(11(21)22)23-10(8)9(20)6(19)3-17/h2,5-6,8-10,17,19-20H,3H2,1H3,(H,15,18)(H,21,22)(H4,13,14,16)/t5-,6-,8-,9+,10+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H20N4O7/c1-4(18)15-8-5(16-12(13)14)2-7(11(21)22)23-10(8)9(20)6(19)3-17/h2,5-6,8-10,17,19-20H,3H2,1H3,(H,15,18)(H,21,22)(H4,13,14,16)/t5-,6+,8+,9+,10+/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H21N/c1-10-3-9-4-11(2,6-10)8-12(13,5-9)7-10/h9H,3-8,13H2,1-2H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H21N/c1-10-3-9-4-11(2,6-10)8-12(13,5-9)7-10/h9H,3-8,13H2,1-2H3/t9?,10-,11+,12?	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H21N3O5S3/c1-3-14-10-8-15(5-4-6-20-2)23(18,19)12-9(10)7-11(21-12)22(13,16)17/h7,10,14H,3-6,8H2,1-2H3,(H2,13,16,17)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H21N3O5S3/c1-3-14-10-8-15(5-4-6-20-2)23(18,19)12-9(10)7-11(21-12)22(13,16)17/h7,10,14H,3-6,8H2,1-2H3,(H2,13,16,17)/t10-/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H21N5O2S2/c1-13-11(6-17(18)19)14-4-5-20-8-10-9-21-12(15-10)7-16(2)3/h6,9,13-14H,4-5,7-8H2,1-3H3	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H21N5O2S2/c1-13-11(6-17(18)19)14-4-5-20-8-10-9-21-12(15-10)7-16(2)3/h6,9,13-14H,4-5,7-8H2,1-3H3/b11-6+	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H21N5O3/c1-4-17(8-9(3)18)11-7-6-10(13-15-11)14-16-12(19)20-5-2/h6-7,9,18H,4-5,8H2,1-3H3,(H,13,14)(H,16,19)	0 (Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C12H21NO8S/c1-10(2)18-7-5-16-12(6-17-22(13,14)15)9(8(7)19-10)20-11(3,4)21-12/h7-9H,5-6H2,1-4H3,(H2,13,14,15)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H21NO8S/c1-10(2)18-7-5-16-12(6-17-22(13,14)15)9(8(7)19-10)20-11(3,4)21-12/h7-9H,5-6H2,1-4H3,(H2,13,14,15)/t7-,8-,9-,12-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H21NO8S/c1-10(2)18-7-5-16-12(6-17-22(13,14)15)9(8(7)19-10)20-11(3,4)21-12/h7-9H,5-6H2,1-4H3,(H2,13,14,15)/t7-,8-,9-,12?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H21NO8S/c1-10(2)18-7-5-16-12(6-17-22(13,14)15)9(8(7)19-10)20-11(3,4)21-12/h7-9H,5-6H2,1-4H3,(H2,13,14,15)/t7-,8-,9+,12-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H21NO8S/c1-10(2)18-7-5-16-12(6-17-22(13,14)15)9(8(7)19-10)20-11(3,4)21-12/h7-9H,5-6H2,1-4H3,(H2,13,14,15)/t7-,8-,9+,12+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H21NO8S/c1-10(2)18-7-5-16-12(6-17-22(13,14)15)9(8(7)19-10)20-11(3,4)21-12/h7-9H,5-6H2,1-4H3,(H2,13,14,15)/t7-,8+,9-,12+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H22N2O2/c1-6-9-11(15)14(8-3)10(7-2)12(16)13(4)5/h6,9-10H,7-8H2,1-5H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H22N2O2/c1-6-9-11(15)14(8-3)10(7-2)12(16)13(4)5/h6,9-10H,7-8H2,1-5H3/b9-6+	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H22N2O2/c1-6-9-11(15)14(8-3)10(7-2)12(16)13(4)5/h6,9-10H,7-8H2,1-5H3/b9-6+/t10-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H22N2O2/c1-6-9-11(15)14(8-3)10(7-2)12(16)13(4)5/h6,9-10H,7-8H2,1-5H3/t10-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H22O11/c13-1-4-6(16)7(17)8(18)11(21-4)22-9-5(2-14)23-12(20,3-15)10(9)19/h4-11,13-20H,1-3H2	0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C12H22O11/c13-1-4-6(16)7(17)8(18)11(21-4)22-9-5(2-14)23-12(20,3-15)10(9)19/h4-11,13-20H,1-3H2/t4-,5-,6+,7-,8-,9+,10-,11-,12-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H22O11/c13-1-4-6(16)8(18)9(19)11(21-4)23-12(3-15)10(20)7(17)5(2-14)22-12/h4-11,13-20H,1-3H2/t4-,5-,6-,7-,8+,9-,10+,11-,12+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H22O11/c13-1-4-6(16)8(18)9(19)11(21-4)23-12(3-15)10(20)7(17)5(2-14)22-12/h4-11,13-20H,1-3H2/t4-,5-,6-,7-,8+,9-,10+,11+,12+/m1/s1	0	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C12H22O11/c13-1-4(16)7(18)11(5(17)2-14)23-12-10(21)9(20)8(19)6(3-15)22-12/h5-15,17-21H,1-3H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H24N2O4/c1-5-6-12(4,7-17-10(13)15)8-18-11(16)14-9(2)3/h9H,5-8H2,1-4H3,(H2,13,15)(H,14,16)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H24O/c1-8(2)10-6-5-7-11(9(3)4)12(10)13/h8-13H,5-7H2,1-4H3	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C12H24O11/c13-1-4(16)7(18)11(5(17)2-14)23-12-10(21)9(20)8(19)6(3-15)22-12/h4-21H,1-3H2	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H25NO2/c1-4-6-7-11(5-2)9-13-12(15)8-10(3)14/h10-11,14H,4-9H2,1-3H3,(H,13,15)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H25NO2/c1-4-6-7-11(5-2)9-13-12(15)8-10(3)14/h10-11,14H,4-9H2,1-3H3,(H,13,15)/t10-,11-/m0/s1	1	(2023)
InChI=1S/C12H25NO2/c1-4-6-7-11(5-2)9-13-12(15)8-10(3)14/h10-11,14H,4-9H2,1-3H3,(H,13,15)/t10-,11-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H25NO2/c1-4-6-7-11(5-2)9-13-12(15)8-10(3)14/h10-11,14H,4-9H2,1-3H3,(H,13,15)/t10-,11+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H26N4O6/c13-2-5-8(18)9(19)6(16)12(21-5)22-11-4(15)1-3(14)7(17)10(11)20/h3-12,17-20H,1-2,13-16H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H26N4O6/c13-2-5-8(18)9(19)6(16)12(21-5)22-11-4(15)1-3(14)7(17)10(11)20/h3-12,17-20H,1-2,13-16H2/t3-,4-,5-,6-,7-,8+,9-,10-,11-,12-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H26N4O6/c13-2-5-8(18)9(19)6(16)12(21-5)22-11-4(15)1-3(14)7(17)10(11)20/h3-12,17-20H,1-2,13-16H2/t3-,4+,5-,6-,7-,8-,9-,10-,11-,12-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H26N4O6/c13-2-5-8(18)9(19)6(16)12(21-5)22-11-4(15)1-3(14)7(17)10(11)20/h3-12,17-20H,1-2,13-16H2/t3-,4+,5-,6-,7+,8-,9-,10-,11-,12-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H26N4O6/c13-2-5-8(18)9(19)6(16)12(21-5)22-11-4(15)1-3(14)7(17)10(11)20/h3-12,17-20H,1-2,13-16H2/t3-,4+,5+,6+,7-,8+,9-,10-,11-,12-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H6Cl4O2S/c13-5-1-7(15)11(17)9(3-5)19-10-4-6(14)2-8(16)12(10)18/h1-4,17-18H	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H7Cl3O2/c13-7-1-3-11(9(15)5-7)17-12-4-2-8(14)6-10(12)16/h1-6,16H	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H7ClF2N2O/c13-11-4-2-8(6-16-11)17-12(18)7-1-3-9(14)10(15)5-7/h1-6H,(H,17,18)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H8Cl3FN2O/c1-17-11-7(14)5-8(15)12(18-11)19-9-4-2-3-6(13)10(9)16/h2-5H,1H3,(H,17,18)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H8O4/c1-14-12-10-8(4-5-15-10)6-7-2-3-9(13)16-11(7)12/h2-6H,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H9F3N2O2/c1-7-10(6-16-19-7)11(18)17-9-4-2-8(3-5-9)12(13,14)15/h2-6H,1H3,(H,17,18)	0	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C12H9FN2O2/c13-6-1-2-10-7(3-6)9(5-14-10)8-4-11(16)15-12(8)17/h1-3,5,8,14H,4H2,(H,15,16,17)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C12H9N3O/c1-8-11(9-2-4-14-5-3-9)6-10(7-13)12(16)15-8/h2-6H,1H3,(H,15,16)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H9N3O/c13-15-7-14-11-6-9-4-2-1-3-8(9)5-10(11)12(15)16/h1-7H,13H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H9N3O5/c16-9-3-1-8(2-4-9)12(17)14-13-7-10-5-6-11(20-10)15(18)19/h1-7,16H,(H,14,17)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H9N3O5/c16-9-3-1-8(2-4-9)12(17)14-13-7-10-5-6-11(20-10)15(18)19/h1-7,16H,(H,14,17)/b13-7-	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H9N3O5/c16-9-3-1-8(2-4-9)12(17)14-13-7-10-5-6-11(20-10)15(18)19/h1-7,16H,(H,14,17)/b13-7+	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C12H9N3O5S/c1-7(16)20-9-5-3-2-4-8(9)11(17)14-12-13-6-10(21-12)15(18)19/h2-6H,1H3,(H,13,14,17)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C12H9NO6/c1-17-13-4-7(12(15)16)11(14)6-2-9-10(3-8(6)13)19-5-18-9/h2-4H,5H2,1H3,(H,15,16)	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C12H9NS/c1-3-7-11-9(5-1)13-10-6-2-4-8-12(10)14-11/h1-8,13H	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C13H10CIN3O4S2/c1-17-10(13(19)16-9-4-2-3-5-15-9)11(18)12-7(23(17,20)21)6-8(14)22-12/h2-6,18H,1H3,(H,15,16,19)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H10N2O4/c16-10-6-5-9(11(17)14-10)15-12(18)7-3-1-2-4-8(7)13(15)19/h1-4,9H,5-6H2,(H,14,16,17)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H10N2O4/c16-10-6-5-9(11(17)14-10)15-12(18)7-3-1-2-4-8(7)13(15)19/h1-4,9H,5-6H2,(H,14,16,17)/t9-/m0/s1	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C13H10N2O4/c16-10-6-5-9(11(17)14-10)15-12(18)7-3-1-2-4-8(7)13(15)19/h1-4,9H,5-6H2,(H,14,16,17)/t9-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H10N2O4S/c1-20(16,17)12-11(13(12,5-14)6-15)8-2-3-9-10(4-8)19-7-18-9/h2-4,11-12H,7H2,1H3/t11-,12+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H10O2/c14-13(15)12-8-6-11(7-9-12)10-4-2-1-3-5-10/h1-9H,(H,14,15)	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C13H10O3/c14-12-9-5-4-8-11(12)13(15)16-10-6-2-1-3-7-10/h1-9,14H	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H10O3/c14-13(15)11-8-4-5-9-12(11)16-10-6-2-1-3-7-10/h1-9H,(H,14,15)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H10O3/c14-13(15)11-8-4-5-9-12(11)16-10-6-2-1-3-7-10/h1-9H,(H,14,15)/p-1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H11CIN2O2/c1-8-10(14)5-2-6-11(8)16-12-9(13(17)18)4-3-7-15-12/h2-7H,1H3,(H,15,16)(H,17,18)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H11N3/c14-10-3-1-8-5-9-2-4-11(15)7-13(9)16-12(8)6-10/h1-7H,14-15H2	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H11N3O3S2/c1-16-9(13(17)15-12-4-2-3-6-14-12)8-10-11(5-7-20-10)21(16,18)19/h2-8H,1H3,(H,14,15,17)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H11N3O4S2/c1-16-10(12(18)15-13-14-6-7-21-13)11(17)8-4-2-3-5-9(8)22(16,19)20/h2-7,17H,1H3,(H,14,15,18)	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C13H11N3O4S2/c1-16-10(13(18)15-9-4-2-3-6-14-9)11(17)12-8(5-7-21-12)22(16,19)20/h2-7,17H,1H3,(H,14,15,18)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H11NO3/c14-9-6-7-11(12(15)8-9)13(16)17-10-4-2-1-3-5-10/h1-8,15H,14H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H11NO5/c1-2-14-5-8(13(16)17)12(15)7-3-10-11(4-9(7)14)19-6-18-10/h3-5H,2,6H2,1H3,(H,16,17)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H11NO5S/c1-20(16,17)12-11(13(12,5-14)6-15)8-2-3-9-10(4-8)19-7-18-9/h2-4,6,11-12H,7H2,1H3/t11-,12-,13+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H12Cl2O4/c1-3-7(2)13(18)8-4-5-9(12(15)11(8)14)19-6-10(16)17/h4-5H,2-3,6H2,1H3,(H,16,17)	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C13H12F2N6O/c14-10-1-2-11(12(15)3-10)13(22,4-20-8-16-6-18-20)5-21-9-17-7-19-21/h1-3,6-9,22H,4-5H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H12N2O/c1-8-13-11(5-6-14-8)10-4-3-9(16-2)7-12(10)15-13/h3-7,15H,1-2H3	1	(Nikolic et al., 2013)
InChI=1S/C13H12N2O2/c16-13(17)6-5-11-1-3-12(4-2-11)9-15-8-7-14-10-15/h1-8,10H,9H2,(H,16,17)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H12N2O2/c16-13(17)6-5-11-1-3-12(4-2-11)9-15-8-7-14-10-15/h1-8,10H,9H2,(H,16,17)/b6-5+	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H12N2O5S/c1-21(18,19)14-12-8-7-10(15(16)17)9-13(12)20-11-5-3-2-4-6-11/h2-9,14H,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H12N6O9S2/c14-10-5-1-4(29(23,24)25)2-6-9(5)7(3-8(10)30(26,27)28)12(21)19(11(6)20)18-17-13(22)16-15/h1-3,18H,14-15H2,(H2,16,17,22)(H,23,24,25)(H,26,27,28)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H12N8O4S3/c22-7(1-20-4-14-18-19-20)16-8-10(23)21-9(12(24)25)6(2-26-11(8)21)3-27-13-17-15-5-28-13/h4-5,8,11H,1-3H2,(H,16,22)(H,24,25)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H12N8O4S3/c22-7(1-20-4-14-18-19-20)16-8-10(23)21-9(12(24)25)6(2-26-11(8)21)3-27-13-17-15-5-28-13/h4-5,8,11H,1-3H2,(H,16,22)(H,24,25)/t8-,11-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H12N8O4S3/c22-7(1-20-4-14-18-19-20)16-8-10(23)21-9(12(24)25)6(2-26-11(8)21)3-27-13-17-15-5-28-13/h4-5,8,11H,1-3H2,(H,16,22)(H,24,25)/t8-,11+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H12N8O4S3/c22-7(1-20-4-14-18-19-20)16-8-10(23)21-9(12(24)25)6(2-26-11(8)21)3-27-13-17-15-5-28-13/h4-5,8,11H,1-3H2,(H,16,22)(H,24,25)/t8?,11-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H13CIN2O2S/c1-8-4-3-5-9(14)13(8)15-10(17)6-12-16(2)11(18)7-19-12/h3-6H,7H2,1-2H3,(H,15,17)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H13CIN2O2S/c1-8-4-3-5-9(14)13(8)15-10(17)6-12-16(2)11(18)7-19-12/h3-6H,7H2,1-2H3,(H,15,17)/b12-6-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H13CIN2O2S/c1-8-4-3-5-9(14)13(8)15-10(17)6-12-16(2)11(18)7-19-12/h3-6H,7H2,1-2H3,(H,15,17)/b12-6+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H13F3N6O4S3/c1-21-12(18-19-20-21)28-3-5-2-27-10-7(9(24)22(10)8(5)11(25)26)17-6(23)4-29-13(14,15)16/h7,10H,2-4H2,1H3,(H,17,23)(H,25,26)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H13F3N6O4S3/c1-21-12(18-19-20-21)28-3-5-2-27-10-7(9(24)22(10)8(5)11(25)26)17-6(23)4-29-13(14,15)16/h7,10H,2-4H2,1H3,(H,17,23)(H,25,26)/t7-,10-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H13F3N6O4S3/c1-21-12(18-19-20-21)28-3-5-2-27-10-7(9(24)22(10)8(5)11(25)26)17-6(23)4-29-13(14,15)16/h7,10H,2-4H2,1H3,(H,17,23)(H,25,26)/t7-,10+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H13F3N6O4S3/c1-21-12(18-19-20-21)28-3-5-2-27-10-7(9(24)22(10)8(5)11(25)26)17-6(23)4-29-13(14,15)16/h7,10H,2-4H2,1H3,(H,17,23)(H,25,26)/t7?,10-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C13H13N3/c1-2-16-13-5-11-9-3-8(6-14-7-9)10(11)4-12(13)15-1/h1-2,4-5,8-9,14H,3,6-7H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H13N3/c14-13(15-11-7-3-1-4-8-11)16-12-9-5-2-6-10-12/h1-10H,(H3,14,15,16)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H13N3O3S/c14-9-1-5-11(6-2-9)20(18,19)12-7-3-10(4-8-12)16-13(15)17/h1-8H,14H2,(H3,15,16,17)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H13N3O5S2/c17-11(5-6-12(18)19)15-9-1-3-10(4-2-9)23(20,21)16-13-14-7-8-22-13/h1-4,7-8H,5-6H2,(H,14,16)(H,15,17)(H,18,19)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H13N3O6S/c1-6(17)22-4-7-5-23-12-9(15-8(18)2-3-14)11(19)16(12)10(7)13(20)21/h9,12H,2,4-5H2,1H3,(H,15,18)(H,20,21)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H13N3O6S/c1-6(17)22-4-7-5-23-12-9(15-8(18)2-3-14)11(19)16(12)10(7)13(20)21/h9,12H,2,4-5H2,1H3,(H,15,18)(H,20,21)/t9-,12-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H13N3O6S/c1-6(17)22-4-7-5-23-12-9(15-8(18)2-3-14)11(19)16(12)10(7)13(20)21/h9,12H,2,4-5H2,1H3,(H,15,18)(H,20,21)/t9-,12-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H13N3O6S/c1-6(17)22-4-7-5-23-12-9(15-8(18)2-3-14)11(19)16(12)10(7)13(20)21/h9,12H,2,4-5H2,1H3,(H,15,18)(H,20,21)/t9-,12+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H13N3O6S/c1-6(17)22-4-7-5-23-12-9(15-8(18)2-3-14)11(19)16(12)10(7)13(20)21/h9,12H,2,4-5H2,1H3,(H,15,18)(H,20,21)/t9?,12-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H13N5O5S2/c1-23-17-7(5-4-25-13(14)15-5)9(19)16-8-10(20)18-6(12(21)22)2-3-24-11(8)18/h2,4,8,11H,3H2,1H3,(H2,14,15)(H,16,19)(H,21,22)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H13N5O5S2/c1-23-17-7(5-4-25-13(14)15-5)9(19)16-8-10(20)18-6(12(21)22)2-3-24-11(8)18/h2,4,8,11H,3H2,1H3,(H2,14,15)(H,16,19)(H,21,22)/b17-7-	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H13N5O5S2/c1-23-17-7(5-4-25-13(14)15-5)9(19)16-8-10(20)18-6(12(21)22)2-3-24-11(8)18/h2,4,8,11H,3H2,1H3,(H2,14,15)(H,16,19)(H,21,22)/b17-7-/t8-,11-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H13N5O5S2/c1-23-17-7(5-4-25-13(14)15-5)9(19)16-8-10(20)18-6(12(21)22)2-3-24-11(8)18/h2,4,8,11H,3H2,1H3,(H2,14,15)(H,16,19)(H,21,22)/b17-7-/t8-,11-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H13N5O5S2/c1-23-17-7(5-4-25-13(14)15-5)9(19)16-8-10(20)18-6(12(21)22)2-3-24-11(8)18/h2,4,8,11H,3H2,1H3,(H2,14,15)(H,16,19)(H,21,22)/b17-7-/t8-,11+/m1/s1	1	(2023)
InChI=1S/C13H13N5O5S2/c1-23-17-7(5-4-25-13(14)15-5)9(19)16-8-10(20)18-6(12(21)22)2-3-24-11(8)18/h2,4,8,11H,3H2,1H3,(H2,14,15)(H,16,19)(H,21,22)/b17-7-/t8?,11-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H13N5O5S2/c1-23-17-7(5-4-25-13(14)15-5)9(19)16-8-10(20)18-6(12(21)22)2-3-24-11(8)18/h2,4,8,11H,3H2,1H3,(H2,14,15)(H,16,19)(H,21,22)/b17-7+	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H13N5O5S2/c1-23-17-7(5-4-25-13(14)15-5)9(19)16-8-10(20)18-6(12(21)22)2-3-24-11(8)18/h2,4,8,11H,3H2,1H3,(H2,14,15)(H,16,19)(H,21,22)/b17-7+/t8-,11-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H13N5O5S2/c1-23-17-7(5-4-25-13(14)15-5)9(19)16-8-10(20)18-6(12(21)22)2-3-24-11(8)18/h2,4,8,11H,3H2,1H3,(H2,14,15)(H,16,19)(H,21,22)/b17-7+/t8-,11-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H13N5O5S2/c1-23-17-7(5-4-25-13(14)15-5)9(19)16-8-10(20)18-6(12(21)22)2-3-24-11(8)18/h2,4,8,11H,3H2,1H3,(H2,14,15)(H,16,19)(H,21,22)/b17-7+/t8-,11+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H13N5O5S2/c1-23-17-7(5-4-25-13(14)15-5)9(19)16-8-10(20)18-6(12(21)22)2-3-24-	0	(Mazumdar et al., 2023)

11(8)18/h2,4,8,11H,3H2,1H3,(H2,14,15)(H,16,19)(H,21,22)/b17-7+/t8?,11-/m0/s1	2023)
InChI=1S/C13H13NO4S/c1-2-19(15,16)13-9(6-14)12(13)8-3-4-10-11(5-8)18-7-17-10/h3-5,9,12-13H,2,7H2,1H3/t9-,12-,13+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H13NO5S/c1-19-9-5-3-8(4-6-9)10-11(20(2,17)18)13(10,7-14)12(15)16/h3-6,10-11H,1-2H3,(H,15,16)/t10-,11-,13-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H14BrN3O2S/c14-10-2-1-4-15-11(10)8-20-7-6-17-12-9(13(18)19)3-5-16-12/h1-5,16-17H,6-8H2,(H,18,19)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H14Cl2O3/c1-12(2,11(16)17)18-9-5-3-8(4-6-9)10-7-13(10,14)15/h3-6,10H,7H2,1-2H3,(H,16,17)	0 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H14Cl2O3/c1-12(2,11(16)17)18-9-5-3-8(4-6-9)10-7-13(10,14)15/h3-6,10H,7H2,1-2H3,(H,16,17)/t10-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H14N2/c14-13-9-5-1-3-7-11(9)15-12-8-4-2-6-10(12)13/h1,3,5,7H,2,4,6,8H2,(H2,14,15)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H14N2O/c14-13-8-4-1-2-5-9(8)15-10-6-3-7-11(16)12(10)13/h1-2,4-5,11,16H,3,6-7H2,(H2,14,15)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H14N2O/c14-13-8-4-1-2-5-9(8)15-10-6-3-7-11(16)12(10)13/h1-2,4-5,11,16H,3,6-7H2,(H2,14,15)/t11-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H14N2O/c14-13-8-4-1-2-5-9(8)15-10-6-3-7-11(16)12(10)13/h1-2,4-5,11,16H,3,6-7H2,(H2,14,15)/t11-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H14N2O/c16-13-6-7-14-12-8-11(9-15(12)13)10-4-2-1-3-5-10/h1-5,11H,6-9H2	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H14N2O/c16-13-6-7-14-12-8-11(9-15(12)13)10-4-2-1-3-5-10/h1-5,11H,6-9H2/t11-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H14N2O/c16-13-6-7-14-12-8-11(9-15(12)13)10-4-2-1-3-5-10/h1-5,11H,6-9H2/t11-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H14N2O2/c1-10(11-6-4-3-5-7-11)15-9-14-8-12(15)13(16)17-2/h3-10H,1-2H3	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H14N2O2/c1-10(11-6-4-3-5-7-11)15-9-14-8-12(15)13(16)17-2/h3-10H,1-2H3/t10-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H14N2O2/c1-10(11-6-4-3-5-7-11)15-9-14-8-12(15)13(16)17-2/h3-10H,1-2H3/t10-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H14N2O2/c1-8-5-4-6-9(2)12(8)13(16)14-11-7-10(3)17-15-11/h4-7H,1-3H3,(H,14,15,16)	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H14N2O2/c1-9(13(14)15-16)17-12-8-4-6-10-5-2-3-7-11(10)12/h2-9,16H,1H3,(H2,14,15)	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H14N2O2/c1-9(13(14)15-16)17-12-8-4-6-10-5-2-3-7-11(10)12/h2-9,16H,1H3,(H2,14,15)/t9-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H14N2O2/c1-9(13(14)15-16)17-12-8-4-6-10-5-2-3-7-11(10)12/h2-9,16H,1H3,(H2,14,15)/t9-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H14N2O3/c1-3-13(9-7-5-4-6-8-9)10(16)14-12(18)15(2)11(13)17/h4-8H,3H2,1-2H3,(H,14,16,18)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H14N2O3/c1-3-13(9-7-5-4-6-8-9)10(16)14-12(18)15(2)11(13)17/h4-8H,3H2,1-2H3,(H,14,16,18)/t13-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H14N2O3/c1-3-13(9-7-5-4-6-8-9)10(16)14-12(18)15(2)11(13)17/h4-8H,3H2,1-2H3,(H,14,16,18)/t13-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H14N2O4/c1-8(16)14-9-2-4-10(5-3-9)19-13(18)11-6-7-12(17)15-11/h2-5,11H,6-7H2,1H3,(H,14,16)(H,15,17)	1 (2023)

InChI=1S/C13H14N2O4/c1-8(16)14-9-2-4-10(5-3-9)19-13(18)11-6-7-12(17)15-11/h2-5,11H,6-7H2,1H3,(H,14,16)(H,15,17)/t11-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H14N2O4/c1-8(16)14-9-2-4-10(5-3-9)19-13(18)11-6-7-12(17)15-11/h2-5,11H,6-7H2,1H3,(H,14,16)(H,15,17)/t11-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H14N8S/c1-17-12(18-7-14)19-9-4-2-3-8(5-9)10-6-22-13(20-10)21-11(15)16/h2-6H,1H3,(H2,17,18,19)(H4,15,16,20,21)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H15Cl2NO/c1-3-7-16(2)8-4-9-17-13-6-5-11(14)10-12(13)15/h1,5-6,10H,4,7-9H2,2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H15Cl2NO4/c1-7(18)8-2-4-9(5-3-8)11(19)10(6-17)16-13(20)12(14)15/h2-5,10-12,17,19H,6H2,1H3,(H,16,20)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H15Cl2NO4/c1-7(18)8-2-4-9(5-3-8)11(19)10(6-17)16-13(20)12(14)15/h2-5,10-12,17,19H,6H2,1H3,(H,16,20)/t10-,11-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H15Cl2NO4/c1-7(18)8-2-4-9(5-3-8)11(19)10(6-17)16-13(20)12(14)15/h2-5,10-12,17,19H,6H2,1H3,(H,16,20)/t10-,11-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H15Cl2NO4/c1-7(18)8-2-4-9(5-3-8)11(19)10(6-17)16-13(20)12(14)15/h2-5,10-12,17,19H,6H2,1H3,(H,16,20)/t10-,11+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H15Cl2NO4/c1-7(18)8-2-4-9(5-3-8)11(19)10(6-17)16-13(20)12(14)15/h2-5,10-12,17,19H,6H2,1H3,(H,16,20)/t10-,11+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H15F2N3O3S/c1-9(22(2,20)21)13(19,6-18-8-16-7-17-18)11-4-3-10(14)5-12(11)15/h3-5,7-9,19H,6H2,1-2H3/t9-,13+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H15N3/c1-2-4-12-11(3-1)5-6-13(15-12)16-9-7-14-8-10-16/h1-6,14H,7-10H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H15N3O4S/c1-19-7-8-20-11-9-14-13(15-10-11)16-21(17,18)12-5-3-2-4-6-12/h2-6,9-10H,7-8H2,1H3,(H,14,15,16)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H15N3O4S/c1-8-9(2)15-20-13(8)16(10(3)17)21(18,19)12-6-4-11(14)5-7-12/h4-7H,14H2,1-3H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H15N5O2/c1-5-9-7(2)18-6-10(11-14-8(3)20-17-11)15-13(18)16-12(9)19-4/h6H,5H2,1-4H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H15NO2/c1-13(2)14-12(15)11(16-13)9-8-10-6-4-3-5-7-10/h3-9,11H,1-2H3,(H,14,15)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H15NO2/c1-13(2)14-12(15)11(16-13)9-8-10-6-4-3-5-7-10/h3-9,11H,1-2H3,(H,14,15)/b9-8-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H15NO2/c1-13(2)14-12(15)11(16-13)9-8-10-6-4-3-5-7-10/h3-9,11H,1-2H3,(H,14,15)/b9-8-/t11-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H15NO2/c1-13(2)14-12(15)11(16-13)9-8-10-6-4-3-5-7-10/h3-9,11H,1-2H3,(H,14,15)/b9-8+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H15NO2/c1-13(2)14-12(15)11(16-13)9-8-10-6-4-3-5-7-10/h3-9,11H,1-2H3,(H,14,15)/b9-8+/t11-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H15NO2/c1-13(2)14-12(15)11(16-13)9-8-10-6-4-3-5-7-10/h3-9,11H,1-2H3,(H,14,15)/t11-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H15NO2/c1-2-13(10-6-4-3-5-7-10)9-8-11(15)14-12(13)16/h3-7H,2,8-9H2,1H3,(H,14,15,16)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C13H15NO2/c1-2-13(10-6-4-3-5-7-10)9-8-11(15)14-12(13)16/h3-7H,2,8-9H2,1H3,(H,14,15,16)/t13-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H15NO2/c1-2-13(10-6-4-3-5-7-10)9-8-11(15)14-12(13)16/h3-7H,2,8-9H2,1H3,(H,14,15,16)/t13-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C13H15NO2/c1-3-10-11(15)14-12(16)13(10,2)9-7-5-4-6-8-9/h4-8,10H,3H2,1-2H3,(H,14,15,16)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H15NO2/c1-3-10-11(15)14-12(16)13(10,2)9-7-5-4-6-8-9/h4-8,10H,3H2,1-2H3,(H,14,15,16)/t10-,13-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H15NO2/c1-3-10-11(15)14-12(16)13(10,2)9-7-5-4-6-8-9/h4-8,10H,3H2,1-2H3,(H,14,15,16)/t10-,13-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H15NO2/c1-3-10-11(15)14-12(16)13(10,2)9-7-5-4-6-8-9/h4-8,10H,3H2,1-2H3,(H,14,15,16)/t10-,13?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H15NO4S/c1-18-10-5-3-9(4-6-10)11-12(19(2,16)17)13(11,7-14)8-15/h3-6,11-12,15H,8H2,1-2H3/t11-,12+,13+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H16Cl12O8/c14-10(15,16)5(26)30-1-9(2-31-6(27)11(17,18)19,3-32-7(28)12(20,21)22)4-33-8(29)13(23,24)25/h5-8,26-29H,1-4H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H16Cl12O8/c14-10(15,16)5(26)30-1-9(2-31-6(27)11(17,18)19,3-32-7(28)12(20,21)22)4-33-8(29)13(23,24)25/h5-8,26-29H,1-4H2/t5-,6-,7-,8-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H16Cl12O8/c14-10(15,16)5(26)30-1-9(2-31-6(27)11(17,18)19,3-32-7(28)12(20,21)22)4-33-8(29)13(23,24)25/h5-8,26-29H,1-4H2/t5-,6-,7+,8+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H16ClNO/c1-15-11-7-4-8-12(16)13(11)9-5-2-3-6-10(9)14/h2-3,5-6,11,13,15H,4,7-8H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H16ClNO/c1-15-13(9-5-4-8-12(13)16)10-6-2-3-7-11(10)14/h2-3,6-7,15H,4-5,8-9H2,1H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C13H16ClNO/c1-15-13(9-5-4-8-12(13)16)10-6-2-3-7-11(10)14/h2-3,6-7,15H,4-5,8-9H2,1H3/t13-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H16F2N6O/c14-10-1-2-11(12(15)3-10)13(22,4-20-8-16-6-18-20)5-21-9-17-7-19-21/h1-3,6-7,22H,4-5,8-9H2,(H,16,18)(H,17,19)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H16N2/c1-2-6-11-10(4-1)5-3-7-12(11)13-14-8-9-15-13/h1-2,4,6,12H,3,5,7-9H2,(H,14,15)	1	(Nikolic et al., 2013)
InChI=1S/C13H16N2/c1-9-5-4-6-12(10(9)2)11(3)13-7-14-8-15-13/h4-8,11H,1-3H3,(H,14,15)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H16N2O/c1-2-13(12-14-7-8-15-12)9-10-5-3-4-6-11(10)16-13/h3-6H,2,7-9H2,1H3,(H,14,15)	1	(Nikolic et al., 2013)
InChI=1S/C13H16N2O2/c1-2-13(8-7-11(16)15-12(13)17)9-3-5-10(14)6-4-9/h3-6H,2,7-8,14H2,1H3,(H,15,16,17)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H16N2O2/c1-2-13(8-7-11(16)15-12(13)17)9-3-5-10(14)6-4-9/h3-6H,2,7-8,14H2,1H3,(H,15,16,17)/t13-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H16N2O2/c1-2-13(8-7-11(16)15-12(13)17)9-3-5-10(14)6-4-9/h3-6H,2,7-8,14H2,1H3,(H,15,16,17)/t13-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H16N2O2S/c1-2-8-13(9-6-4-3-5-7-9)10(16)14-12(18)15-11(13)17/h2,4,6,9H,1,3,5,7-8H2,(H2,14,15,16,17,18)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H16N2O2S/c1-2-8-13(9-6-4-3-5-7-9)10(16)14-12(18)15-11(13)17/h2,4,6,9H,1,3,5,7-8H2,(H2,14,15,16,17,18)/t9-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H16N2O2S/c1-2-8-13(9-6-4-3-5-7-9)10(16)14-12(18)15-11(13)17/h2,4,6,9H,1,3,5,7-8H2,(H2,14,15,16,17,18)/t9-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H16N2O3/c1-2-8-14-12(16)15-9-11(18-13(15)17)10-6-4-3-5-7-10/h3-7,11H,2,8-9H2,1H3,(H,14,16)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H16N2O3/c1-2-8-14-12(16)15-9-11(18-13(15)17)10-6-4-3-5-7-10/h3-7,11H,2,8-9H2,1H3,(H,14,16)/t11-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H16N2O3/c1-2-8-14-12(16)15-9-11(18-13(15)17)10-6-4-3-5-7-10/h3-7,11H,2,8-9H2,1H3,(H,14,16)/t11-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C13H16N2O4S/c1-9(2)14-20(18,19)8-7-15-12(16)10-5-3-4-6-11(10)13(15)17/h3-6,9,14H,7-8H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H16N4/c1-3-10-11(12(14)17-13(15)16-10)9-6-4-8(2)5-7-9/h4-7H,3H2,1-2H3,(H4,14,15,16,17)	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C13H16N4O3S/c1-8(11-3-4-20-13(19)21-11)17(7-18)6-10-5-15-9(2)16-12(10)14/h5,7H,3-4,6H2,1-2H3,(H2,14,15,16)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H16N4O3S/c1-8(11-3-4-20-13(19)21-11)17(7-18)6-10-5-15-9(2)16-12(10)14/h5,7H,3-4,6H2,1-2H3,(H2,14,15,16)/b11-8-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H16N4O3S/c1-8(11-3-4-20-13(19)21-11)17(7-18)6-10-5-15-9(2)16-12(10)14/h5,7H,3-4,6H2,1-2H3,(H2,14,15,16)/b11-8+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H16N4O4/c1-8(13-16-11(17-21-13)4-6-20-2)15-12(19)9-3-5-14-7-10(9)18/h3,5,7-8,18H,4,6H2,1-2H3,(H,15,19)/t8-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H16O6S/c1-19-9-5-3-8(4-6-9)10-11(20(2,17)18)13(10,7-14)12(15)16/h3-6,10-11,14H,7H2,1-2H3,(H,15,16)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H16O6S/c1-19-9-5-3-8(4-6-9)10-11(20(2,17)18)13(10,7-14)12(15)16/h3-6,10-11,14H,7H2,1-2H3,(H,15,16)/t10-,11+,13-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H17BrFN5/c1-2-5-20-13(17-8-18-20)7-12(19-16)10-4-3-9(14)6-11(10)15/h3-4,6,8,12,19H,2,5,7,16H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H17CIN2O2/c14-12-3-1-11(2-4-12)13(17)15-5-6-16-7-9-18-10-8-16/h1-4H,5-10H2,(H,15,17)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H17N/c1-4-10-14(3)12(2)11-13-8-6-5-7-9-13/h1,5-9,12H,10-11H2,2-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H17N/c1-4-10-14(3)12(2)11-13-8-6-5-7-9-13/h1,5-9,12H,10-11H2,2-3H3/t12-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H17N/c1-4-10-14(3)12(2)11-13-8-6-5-7-9-13/h1,5-9,12H,10-11H2,2-3H3/t12-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H17N3/c1-2-6-11-10(4-1)5-3-7-12(11)16-13-14-8-9-15-13/h3,5,7H,1-2,4,6,8-9H2,(H2,14,15,16)	1	(Nikolic et al., 2013)
InChI=1S/C13H17N3O/c1-10-12(14(2)3)13(17)16(15(10)4)11-8-6-5-7-9-11/h5-9H,1-4H3	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C13H17N3O4S/c1-10-12(14(2)9-21(18,19)20)13(17)16(15(10)3)11-7-5-4-6-8-11/h4-8H,9H2,1-3H3,(H,18,19,20)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H17N5O8S2/c1-5-7(10(20)18(5)28(23,24)25)16-9(19)8(6-4-27-12(14)15-6)17-26-13(2,3)11(21)22/h4-5,7H,1-3H3,(H2,14,15)(H,16,19)(H,21,22)(H,23,24,25)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H17N5O8S2/c1-5-7(10(20)18(5)28(23,24)25)16-9(19)8(6-4-27-12(14)15-6)17-26-13(2,3)11(21)22/h4-5,7H,1-3H3,(H2,14,15)(H,16,19)(H,21,22)(H,23,24,25)/b17-8-	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H17N5O8S2/c1-5-7(10(20)18(5)28(23,24)25)16-9(19)8(6-4-27-12(14)15-6)17-26-13(2,3)11(21)22/h4-5,7H,1-3H3,(H2,14,15)(H,16,19)(H,21,22)(H,23,24,25)/b17-8-/t5-,7-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H17N5O8S2/c1-5-7(10(20)18(5)28(23,24)25)16-9(19)8(6-4-27-12(14)15-6)17-26-13(2,3)11(21)22/h4-5,7H,1-3H3,(H2,14,15)(H,16,19)(H,21,22)(H,23,24,25)/b17-8-/t5-,7-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H17N5O8S2/c1-5-7(10(20)18(5)28(23,24)25)16-9(19)8(6-4-27-12(14)15-6)17-26-13(2,3)11(21)22/h4-5,7H,1-3H3,(H2,14,15)(H,16,19)(H,21,22)(H,23,24,25)/b17-8-/t5-,7+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H17N5O8S2/c1-5-7(10(20)18(5)28(23,24)25)16-9(19)8(6-4-27-12(14)15-6)17-26-13(2,3)11(21)22/h4-5,7H,1-3H3,(H2,14,15)(H,16,19)(H,21,22)(H,23,24,25)/b17-8+	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H17N5O8S2/c1-5-7(10(20)18(5)28(23,24)25)16-9(19)8(6-4-27-12(14)15-6)17-26-13(2,3)11(21)22/h4-5,7H,1-	0	(Meng et al., 2021)

3H3,(H2,14,15)(H,16,19)(H,21,22)(H,23,24,25)/b17-8+/t5-,7-/m0/s1	
InChI=1S/C13H17N5O8S2/c1-5-7(10(20)18(5)28(23,24)25)16-9(19)8(6-4-27-12(14)15-6)17-26-13(2,3)11(21)22/h4-5,7H,1-3H3,(H2,14,15)(H,16,19)(H,21,22)(H,23,24,25)/b17-8+/t5-,7-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H17N5O8S2/c1-5-7(10(20)18(5)28(23,24)25)16-9(19)8(6-4-27-12(14)15-6)17-26-13(2,3)11(21)22/h4-5,7H,1-3H3,(H2,14,15)(H,16,19)(H,21,22)(H,23,24,25)/b17-8+/t5-,7+/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H17N5O8S2/c1-5-7(10(20)18(5)28(23,24)25)16-9(19)8(6-4-27-12(14)15-6)17-26-13(2,3)11(21)22/h4-5,7H,1-3H3,(H2,14,15)(H,16,19)(H,21,22)(H,23,24,25)/t5-,7+/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H17NO/c1-4-8-13(15)14(5-2)12-10-7-6-9-11(12)3/h4,6-10H,5H2,1-3H3/b8-4+	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H17NO2/c1-2-16-13(15)14(12-8-9-12)10-11-6-4-3-5-7-11/h3-7,12H,2,8-10H2,1H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H17NO3S2/c1-3-19(15,16)12-10(11(12)13(14)18)8-4-6-9(17-2)7-5-8/h4-7,10-12H,3H2,1-2H3,(H2,14,18)/t10-,11-,12+/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H17NO4S/c1-2-19(15,16)13-9(6-14)12(13)8-3-4-10-11(5-8)18-7-17-10/h3-5,9,12-13H,2,6-7,14H2,1H3/t9-,12-,13+/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H17NO5S/c1-20(16,17)12-11(13(12,5-14)6-15)8-2-3-9-10(4-8)19-7-18-9/h2-4,11-12,15H,5-7,14H2,1H3/t11-,12-,13+/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H18Br2N2O/c14-9-5-8(13(16)12(15)6-9)7-17-10-1-3-11(18)4-2-10/h5-6,10-11,17-18H,1-4,7,16H2	
InChI=1S/C13H18Cl2N2O2/c14-5-7-17(8-6-15)11-3-1-10(2-4-11)9-12(16)13(18)19/h1-4,12H,5-9,16H2,(H,18,19)	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C13H18Cl2N2O2/c14-5-7-17(8-6-15)11-3-1-10(2-4-11)9-12(16)13(18)19/h1-4,12H,5-9,16H2,(H,18,19)/t12-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H18ClN3O/c1-15(2)6-7-16-8-9-17(13(16)18)12-5-3-4-11(14)10-12/h3-5,10H,6-9H2,1-2H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H18ClNO/c1-15(2)11-6-4-5-9-12(16-3)8-7-10(14)13(9)11/h7-8,11H,4-6H2,1-3H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H18ClNO/c1-15(2)11-6-4-5-9-12(16-3)8-7-10(14)13(9)11/h7-8,11H,4-6H2,1-3H3/t11-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H18ClNO/c1-15(2)11-6-4-5-9-12(16-3)8-7-10(14)13(9)11/h7-8,11H,4-6H2,1-3H3/t11-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H18ClNO/c1-9(15-13(2,3)4)12(16)10-5-7-11(14)8-6-10/h5-9,15H,1-4H3/t9-/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H18ClNO/c1-9(15-13(2,3)4)12(16)10-6-5-7-11(14)8-10/h5-9,15H,1-4H3	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C13H18ClNO/c1-9(15-13(2,3)4)12(16)10-6-5-7-11(14)8-10/h5-9,15H,1-4H3/p+1/t9-/m1/s1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C13H18ClNO/c1-9(15-13(2,3)4)12(16)10-6-5-7-11(14)8-10/h5-9,15H,1-4H3/t9-/m0/s1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C13H18ClNO/c1-9(15-13(2,3)4)12(16)10-6-5-7-11(14)8-10/h5-9,15H,1-4H3/t9-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H18ClNO2/c1-9(15)12(16)17-13(2,3)8-10-4-6-11(14)7-5-10/h4-7,9H,8,15H2,1-3H3	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C13H18ClNO2/c1-9(15)12(16)17-13(2,3)8-10-4-6-11(14)7-5-10/h4-7,9H,8,15H2,1-3H3/t9-/m0/s1	1	2023) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H18ClNO2/c1-9(15)12(16)17-13(2,3)8-10-4-6-11(14)7-5-10/h4-7,9H,8,15H2,1-3H3/t9-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H18N2/c1-9-3-4-12-10(7-9)11-8-15(2)6-5-13(11)14-12/h3-4,7,11,13-14H,5-6,8H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H18N2/c1-9-3-4-12-10(7-9)11-8-15(2)6-5-13(11)14-12/h3-4,7,11,13-14H,5-6,8H2,1-2H3/t11-,13-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H18N2/c1-9-3-4-12-10(7-9)11-8-15(2)6-5-13(11)14-12/h3-4,7,11,13-14H,5-6,8H2,1-2H3/t11-,13+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H18N2/c1-9-3-4-12-10(7-9)11-8-15(2)6-5-13(11)14-12/h3-4,7,11,13-14H,5-6,8H2,1-2H3/t11-,13+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H18N2O/c1-10(2)11-5-3-4-6-12(11)16-9-13-14-7-8-15-13/h3-6,10H,7-9H2,1-2H3,(H,14,15)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H18N2O3/c1-2-13(9-7-5-3-4-6-8-9)10(16)14-12(18)15-11(13)17/h7H,2-6,8H2,1H3,(H2,14,15,16,17,18)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H18N2O4S/c1-20(16,17)12-11(13(12,5-14)6-15)8-2-3-9-10(4-8)19-7-18-9/h2-4,11-12H,5-7,14-15H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H18N2O4S/c1-20(16,17)12-11(13(12,5-14)6-15)8-2-3-9-10(4-8)19-7-18-9/h2-4,11-12H,5-7,14-15H2,1H3/t11-,12+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H18N2O4S2/c1-4-5-20-6-7(16)14-8-10(17)15-9(12(18)19)13(2,3)21-11(8)15/h4,8-9,11H,1,5-6H2,2-3H3,(H,14,16)(H,18,19)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H18N2O4S2/c1-4-5-20-6-7(16)14-8-10(17)15-9(12(18)19)13(2,3)21-11(8)15/h4,8-9,11H,1,5-6H2,2-3H3,(H,14,16)(H,18,19)/t8-,9-,11+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H18N2O4S2/c1-4-5-20-6-7(16)14-8-10(17)15-9(12(18)19)13(2,3)21-11(8)15/h4,8-9,11H,1,5-6H2,2-3H3,(H,14,16)(H,18,19)/t8-,9+,11-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H18N2O4S2/c1-4-5-20-6-7(16)14-8-10(17)15-9(12(18)19)13(2,3)21-11(8)15/h4,8-9,11H,1,5-6H2,2-3H3,(H,14,16)(H,18,19)/t8?,9-,11-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H18N4/c1-10-12(15(2)3)13(14)17(16(10)4)11-8-6-5-7-9-11/h5-9,14H,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H18N4O3/c1-9(18)6-4-5-7-17-12(19)10-11(14-8-15(10)2)16(3)13(17)20/h8H,4-7H2,1-3H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H18N4O3S/c1-16(2)9-10-3-4-12(20-10)21-8-7-15-13-11(17(18)19)5-6-14-13/h3-6,14-15H,7-9H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H18O2/c1-9(2)8-11-4-6-12(7-5-11)10(3)13(14)15/h4-7,9-10H,8H2,1-3H3,(H,14,15)	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C13H18O2/c1-9(2)8-11-4-6-12(7-5-11)10(3)13(14)15/h4-7,9-10H,8H2,1-3H3,(H,14,15)/p-1/t10-/m1/s1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C13H18O2/c1-9(2)8-11-4-6-12(7-5-11)10(3)13(14)15/h4-7,9-10H,8H2,1-3H3,(H,14,15)/t10-/m0/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C13H18O2/c1-9(2)8-11-4-6-12(7-5-11)10(3)13(14)15/h4-7,9-10H,8H2,1-3H3,(H,14,15)/t10-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H18O7/c14-5-7-3-1-2-4-8(7)19-13-12(18)11(17)10(16)9(6-15)20-13/h1-4,9-18H,5-6H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H18O7/c14-5-7-3-1-2-4-8(7)19-13-12(18)11(17)10(16)9(6-15)20-13/h1-4,9-18H,5-6H2/t9-,10-,11-,12-,13-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C13H18O7/c14-5-7-3-1-2-4-8(7)19-13-12(18)11(17)10(16)9(6-15)20-13/h1-4,9-18H,5-6H2/t9-,10-,11+,12-,13-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H18O7/c14-5-7-3-1-2-4-8(7)19-13-12(18)11(17)10(16)9(6-15)20-13/h1-4,9-18H,5-6H2/t9-,10-,11+,12-,13-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H18O7/c14-5-7-3-1-2-4-8(7)19-13-12(18)11(17)10(16)9(6-15)20-13/h1-4,9-18H,5-6H2/t9-,10+,11-,12-,13+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H19IN2/c1-11(2)15-7-9-16(10-8-15)13-5-3-12(14)4-6-13/h3-6,11H,7-10H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H19N3/c1-10-5-6-12(11(2)9-10)14-13-15(3)7-8-16(13)4/h5-6,9H,7-8H2,1-4H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H19N5/c1-10(13(2,3)4)17-12(16-9-14)18-11-5-7-15-8-6-11/h5-8,10H,1-4H3,(H2,15,16,17,18)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H19NO/c1-4-14(5-2)11(3)13(15)12-9-7-6-8-10-12/h6-11H,4-5H2,1-3H3/t11-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H19NO2/c1-2-3-8-14-9-11-10-15-12-6-4-5-7-13(12)16-11/h4-7,11,14H,2-3,8-10H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H19NO2/c1-2-3-8-14-9-11-10-15-12-6-4-5-7-13(12)16-11/h4-7,11,14H,2-3,8-10H2,1H3/t11-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H19NO2/c1-9-4-3-5-12(10(9)2)16-13-6-7-14-8-11(13)15/h3-5,11,13-15H,6-8H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H19NO2/c1-9-4-3-5-12(10(9)2)16-13-6-7-14-8-11(13)15/h3-5,11,13-15H,6-8H2,1-2H3/t11-,13-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H19NO2/c1-9-4-3-5-12(10(9)2)16-13-6-7-14-8-11(13)15/h3-5,11,13-15H,6-8H2,1-2H3/t11-,13+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H19NO3/c1-2-15-12-5-3-4-6-13(12)17-10-11-9-14-7-8-16-11/h3-6,11,14H,2,7-10H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H19NO3/c1-2-15-12-5-3-4-6-13(12)17-10-11-9-14-7-8-16-11/h3-6,11,14H,2,7-10H2,1H3/t11-/m0/s1	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C13H19NO3/c1-2-15-12-5-3-4-6-13(12)17-10-11-9-14-7-8-16-11/h3-6,11,14H,2,7-10H2,1H3/t11-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H19NO3/c1-2-16-12-5-3-4-6-13(12)17-10-11-9-15-8-7-14-11/h3-6,11,14H,2,7-10H2,1H3/t11-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H19NO4/c1-13(2,3)14-7-11(16)8-4-5-10(15)9(6-8)12(17)18/h4-6,11,14-16H,7H2,1-3H3,(H,17,18)/t11-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H19NO4S/c1-18-10-5-3-9(4-6-10)11-12(19(2,16)17)13(11,7-14)8-15/h3-6,11-12,15H,7-8,14H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H19NO4S/c1-18-10-5-3-9(4-6-10)11-12(19(2,16)17)13(11,7-14)8-15/h3-6,11-12,15H,7-8,14H2,1-2H3/t11-,12+,13-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H19NO4S/c1-3-9-14(10-4-2)19(17,18)12-7-5-11(6-8-12)13(15)16/h5-8H,3-4,9-10H2,1-2H3,(H,15,16)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H20CIN3O/c1-3-17(4-2)8-7-16-13(18)10-5-6-12(15)11(14)9-10/h5-6,9H,3-4,7-8,15H2,1-2H3,(H,16,18)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H20N2O2/c1-3-15(4-2)9-10-17-13(16)11-5-7-12(14)8-6-11/h5-8H,3-4,9-10,14H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H20N2O2/c1-3-15(4-2)9-10-17-13(16)11-5-7-12(14)8-6-11/h5-8H,3-4,9-10,14H2,1-2H3/p+1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C13H20N2O2/c1-5-7-9(3)13(8-6-2)10(4)14-12(17)15-11(13)16/h6,9H,2,4-5,7-8H2,1,3H3,(H2,14,15,16,17)/t9-,13+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C13H20N2O2/c1-9(2)14-8-13(17)11-4-6-12(7-5-11)15-10(3)16/h4-7,9,13-14,17H,8H2,1-3H3,(H,15,16)/t13-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H20N2O2/c16-11-13(17)10-14-6-8-15(9-7-14)12-4-2-1-3-5-12/h1-5,13,16-17H,6-11H2	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H20N2O3/c1-9(2)15-13(17)8-18-11-5-3-10(4-6-11)7-12(14)16/h3-6,9,13,15,17H,7-8H2,1-2H3,(H2,14,16)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H20N2O3S/c1-3-18-11(16)9-10-14(2)12(17)13(19-10)15-7-5-4-6-8-15/h9,13H,3-8H2,1-2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H20N2O3S/c1-3-18-11(16)9-10-14(2)12(17)13(19-10)15-7-5-4-6-8-15/h9,13H,3-8H2,1-2H3/b10-9-	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H20N6O4/c1-7(2)8(14)12(21)23-4-3-22-6-19-5-16-9-10(19)17-13(15)18-11(9)20/h5,7-8H,3-4,6,14H2,1-2H3,(H3,15,17,18,20)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H20N6O4/c1-7(2)8(14)12(21)23-4-3-22-6-19-5-16-9-10(19)17-13(15)18-11(9)20/h5,7-8H,3-4,6,14H2,1-2H3,(H3,15,17,18,20)/t8-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H21N3/c1-2-5-16-6-3-4-10-7-12-11(8-13(10)16)9-14-15-12/h9-10,13H,2-8H2,1H3,(H,14,15)/t10-,13-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H21N3O/c1-3-16(4-2)10-9-15-13(17)11-5-7-12(14)8-6-11/h5-8H,3-4,9-10,14H2,1-2H3,(H,15,17)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H21N3O3/c1-13(2,3)15-7-11(18)8-4-5-10(17)9(6-8)16-12(14)19/h4-6,11,15,17-18H,7H2,1-3H3,(H3,14,16,19)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H21N3O3/c1-13(2,3)15-7-11(18)8-4-5-10(17)9(6-8)16-12(14)19/h4-6,11,15,17-18H,7H2,1-3H3,(H3,14,16,19)/t11-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H21N3O3/c1-13(2,3)15-7-11(18)8-4-5-10(17)9(6-8)16-12(14)19/h4-6,11,15,17-18H,7H2,1-3H3,(H3,14,16,19)/t11-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H21N5O2/c1-5-17(6-2)7-8-18-9-14-11-10(18)12(19)16(4)13(20)15(11)3/h9H,5-8H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H21NO2/c1-10(2)14-8-12(15)9-16-13-6-4-5-11(3)7-13/h4-7,10,12,14-15H,8-9H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H21NO2/c1-10(2)14-8-12(15)9-16-13-6-4-5-11(3)7-13/h4-7,10,12,14-15H,8-9H2,1-3H3/p+1/t12-/m0/s1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C13H21NO2/c1-10(2)14-8-12(15)9-16-13-6-4-5-11(3)7-13/h4-7,10,12,14-15H,8-9H2,1-3H3/p+1/t12-/m1/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C13H21NO2/c1-10(2)14-8-12(15)9-16-13-6-4-5-11(3)7-13/h4-7,10,12,14-15H,8-9H2,1-3H3/t12-/m0/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C13H21NO3/c1-13(2,3)14-7-12(17)9-4-5-11(16)10(6-9)8-15/h4-6,12,14-17H,7-8H2,1-3H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H21NO3/c1-13(2,3)14-7-12(17)9-4-5-11(16)10(6-9)8-15/h4-6,12,14-17H,7-8H2,1-3H3/p+1/t12-/m1/s1	0	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C13H21NO3/c1-13(2,3)14-7-12(17)9-4-5-11(16)10(6-9)8-15/h4-6,12,14-17H,7-8H2,1-3H3/t12-/m0/s1	0	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C13H21NO3/c1-13(2,3)14-7-12(17)9-4-5-11(16)10(6-9)8-15/h4-6,12,14-17H,7-8H2,1-3H3/t12-/m1/s1	0	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C13H21NO3/c1-4-10(14-8(2)3)13(17)9-5-6-11(15)12(16)7-9/h5-8,10,13-17H,4H2,1-3H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H22CIN5S/c1-9(2)15-13-16-11(14)10(20-4)12(17-13)19-7-5-18(3)6-8-19/h9H,5-8H2,1-4H3,(H,15,16,17)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H22N2O3/c1-3-5-6-7-8-9-13(4-2)10(16)14-12(18)15-11(13)17/h3-9H2,1-2H3,(H2,14,15,16,17,18)	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C13H22N2O4S/c1-10(2)14-8-12(16)9-19-13-6-4-5-11(7-13)15-20(3,17)18/h4-7,10,12,14-16H,8-9H2,1-3H3/t12-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H22N4O3S/c1-14-12(10-17(18)19)15-6-7-21-10-12-5-4-11(20-13)9-16(2)3/h5-6H,4,7-10H2,1-3H3,(H,14,15)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H22N4O3S/c1-14-13(9-17(18)19)15-6-7-21-10-12-5-4-11(20-12)8-16(2)3/h4-5,9,14-15H,6-8,10H2,1-3H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H22N4O3S/c1-14-13(9-17(18)19)15-6-7-21-10-12-5-4-11(20-12)8-16(2)3/h4-5,9,14-15H,6-8,10H2,1-3H3/b13-9-	0	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C13H22N4O3S/c1-14-13(9-17(18)19)15-6-7-21-10-12-5-4-11(20-12)8-16(2)3/h4-5,9,14-15H,6-8,10H2,1-3H3/b13-9+	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H22N4O3S/c1-14-13(9-17(18)19)15-6-7-21-10-12-5-4-11(20-12)8-16(2)3/h4-5,9,14-15H,6-8,10H2,1-3H3/p+1/b13-9+	0	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C13H22N4O3S/c1-14-13(9-17(18)19)15-6-7-21-10-12-5-4-11(20-12)8-16(2)3/h4-5H,6-10H2,1-3H3,(H,14,15)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H23N5O3/c1-5-21-13(20)17-15-11-6-7-12(16-14-11)18(9(2)3)8-10(4)19/h6-7,9-10,19H,5,8H2,1-4H3,(H,14,15)(H,17,20)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H23N5O3S/c1-14-13(16-10-18(19)20)15-4-5-22-9-11-6-12(21-8-11)7-17(2)3/h6,8H,4-5,7,9-10H2,1-3H3,(H2,14,15,16)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H24N2O2/c1-6-9-12(16)15(10-7-2)11(8-3)13(17)14(4)5/h6,9,11H,7-8,10H2,1-5H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H24N2O2/c1-6-9-12(16)15(10-7-2)11(8-3)13(17)14(4)5/h6,9,11H,7-8,10H2,1-5H3/b9-6+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H24N2O2/c1-6-9-12(16)15(10-7-2)11(8-3)13(17)14(4)5/h6,9,11H,7-8,10H2,1-5H3/b9-6+/t11-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H24N2O2/c1-6-9-12(16)15(10-7-2)11(8-3)13(17)14(4)5/h6,9,11H,7-8,10H2,1-5H3/b9-6+/t11-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H24N2O2/c1-6-9-12(16)15(10-7-2)11(8-3)13(17)14(4)5/h6,9,11H,7-8,10H2,1-5H3/t11-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H24N4O3S/c1-13(2,3)14-8-10(18)9-20-12-11(15-21-16-12)17-4-6-19-7-5-17/h10,14,18H,4-9H2,1-3H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H24N4O3S/c1-13(2,3)14-8-10(18)9-20-12-11(15-21-16-12)17-4-6-19-7-5-17/h10,14,18H,4-9H2,1-3H3/t10-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H24N4O3S/c1-14-13(9-17(18)19)15-6-7-21-10-12-5-4-11(20-12)8-16(2)3/h4-5,13-15H,6-10H2,1-3H3/t13-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H25NO2/c1-14(2)10-11-16-13(15)9-8-12-6-4-3-5-7-12/h12H,3-11H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H26N2O2/c1-3-15(4-2)9-10-17-13(16)11-5-7-12(14)8-6-11/h11-12H,3-10,14H2,1-2H3	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C13H26N2O4/c1-4-6-8-15-12(17)19-10-13(3,7-5-2)9-18-11(14)16/h4-10H2,1-3H3,(H2,14,16)(H,15,17)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H26N2O4/c1-4-6-8-15-12(17)19-10-13(3,7-5-2)9-18-11(14)16/h4-10H2,1-3H3,(H2,14,16)(H,15,17)/t13-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H26N2O4/c1-4-6-8-15-12(17)19-10-13(3,7-5-2)9-18-11(14)16/h4-10H2,1-3H3,(H2,14,16)(H,15,17)/t13-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H26N2O4/c1-6-10(4)13(5,7-18-11(14)16)8-19-12(17)15-9(2)3/h9-10H,6-8H2,1-5H3,(H2,14,16)(H,15,17)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H26N2O4/c1-6-10(4)13(5,7-18-11(14)16)8-19-12(17)15-9(2)3/h9-10H,6-8H2,1-5H3,(H2,14,16)(H,15,17)/t10-,13-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H26N2O4/c1-6-10(4)13(5,7-18-11(14)16)8-19-12(17)15-9(2)3/h9-10H,6-8H2,1-5H3,(H2,14,16)(H,15,17)/t10-,13-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)

	2023)
InChI=1S/C13H26N2O4/c1-6-10(4)13(5,7-18-11(14)16)8-19-12(17)15-9(2)3/h9-10H,6-8H2,1-5H3,(H2,14,16)(H,15,17)/t10-,13?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H7Cl5O2/c14-6-1-5(12(19)9(16)3-6)2-7-11(18)8(15)4-10(17)13(7)20/h1,3-4,19-20H,2H2	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H8Cl2N2O4/c14-7-1-4-12(18)9(5-7)13(19)16-11-3-2-8(17(20)21)6-10(11)15/h1-6,18H,(H,16,19)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H8Cl2O4S/c14-11-7(13(18)9-2-1-5-20-9)3-4-8(12(11)15)19-6-10(16)17/h1-5H,6H2,(H,16,17)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H8F2O3/c14-8-2-3-9(11(15)6-8)7-1-4-12(16)10(5-7)13(17)18/h1-6,16H,(H,17,18)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H9F3N2O2/c14-13(15,16)8-3-1-4-9(7-8)18-11-10(12(19)20)5-2-6-17-11/h1-7H,(H,17,18)(H,19,20)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C13H9IN2OS/c14-9-5-7(1-3-10(9)15)13-16-11-4-2-8(17)6-12(11)18-13/h1-6,17H,15H2	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C13H9NO/c1-2-4-12-11(3-1)9-13(15-12)10-5-7-14-8-6-10/h1-9H	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H10BrN3O/c15-9-4-5-11-10(7-9)14(17-8-13(19)18-11)12-3-1-2-6-16-12/h1-7H,8H2,(H,18,19)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H10Cl2O3/c15-10-5-6-13(11(16)8-10)19-12-4-2-1-3-9(12)7-14(17)18/h1-6,8H,7H2,(H,17,18)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H10Cl4/c15-10-7-5-9(6-8-10)13(14(17)18)11-3-1-2-4-12(11)16/h1-8,13-14H	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H10F3NO2/c15-14(16,17)9-4-3-5-10(8-9)18-12-7-2-1-6-11(12)13(19)20/h1-8,18H,(H,19,20)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H10F3NO5/c15-14(16,17)7-4-5-8(9(6-7)18(22)23)13(21)12-10(19)2-1-3-11(12)20/h4-6,12H,1-3H2	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H10N2O6/c17-11-3-1-7(5-9(11)13(19)20)15-16-8-2-4-12(18)10(6-8)14(21)22/h1-6,17-18H,(H,19,20)(H,21,22)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H10N4O5/c19-13-8-17(14(20)16-13)15-7-11-5-6-12(23-11)9-1-3-10(4-2-9)18(21)22/h1-7H,8H2,(H,16,19,20)/b15-7-	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H10N4O5/c19-13-8-17(14(20)16-13)15-7-11-5-6-12(23-11)9-1-3-10(4-2-9)18(21)22/h1-7H,8H2,(H,16,19,20)/b15-7+	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H10O2/c15-10-11-5-4-8-13(9-11)14(16)12-6-2-1-3-7-12/h1-10H	1 (Kaupp, 2007)
InChI=1S/C14H10O3/c15-10-5-1-3-8-7-9-4-2-6-11(16)13(9)14(17)12(8)10/h1-6,15-16H,7H2	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H10O4/c15-13(11-7-3-1-4-8-11)17-18-14(16)12-9-5-2-6-10-12/h1-10H	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H10O5/c15-11-7-3-1-5-9(11)14(18)19-12-8-4-2-6-10(12)13(16)17/h1-8,15H,(H,16,17)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H11Cl2NO2/c1-8-6-7-10(15)13(12(8)16)17-11-5-3-2-4-9(11)14(18)19/h2-7,17H,1H3,(H,18,19)	0 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C14H11Cl2NO2/c15-10-5-3-6-11(16)14(10)17-12-7-2-1-4-9(12)8-13(18)19/h1-7,17H,8H2,(H,18,19)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H11Cl2NO2/c15-10-5-6-13(11(16)8-10)17-12-4-2-1-3-9(12)7-14(18)19/h1-6,8,17H,7H2,(H,18,19)	1 (Mazumdar et al., 2023)

	2023)
InChI=1S/C14H11ClN2O4S/c15-11-6-5-8(7-12(11)22(16,20)21)14(19)10-4-2-1-3-9(10)13(18)17-14/h1-7,19H,(H,17,18)(H2,16,20,21)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H11ClN2O4S/c15-11-6-5-8(7-12(11)22(16,20)21)14(19)10-4-2-1-3-9(10)13(18)17-14/h1-7,19H,(H,17,18)(H2,16,20,21)/t14-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H11NO5/c1-8-2-4-9(5-3-8)13(17)10-6-11(15(19)20)14(18)12(16)7-10/h2-7,16,18H,1H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H12ClN3O3S/c15-10-7-11-9(6-12(10)22(16,20)21)14(19)18-13(17-11)8-4-2-1-3-5-8/h1-7,13,17H,(H,18,19)(H2,16,20,21)	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H12ClNO2/c1-8-13(17)12-7-18-14(11(12)6-16-8)9-2-4-10(15)5-3-9/h2-6,14,17H,7H2,1H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H12FNO3/c1-7-2-3-8-4-9(15)5-10-12(8)16(7)6-11(13(10)17)14(18)19/h4-7H,2-3H2,1H3,(H,18,19)	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H12N2O4S/c1-2-21(17,18)13-12(14(13,6-15)7-16)9-3-4-10-11(5-9)20-8-19-10/h3-5,12-13H,2,8H2,1H3/t12-,13-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H12N6O/c1-9-6-13(21)19-20-14(9)10-2-4-11(5-3-10)17-18-12(7-15)8-16/h2-5,9,17H,6H2,1H3,(H,19,21)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H12N6O/c1-9-6-13(21)19-20-14(9)10-2-4-11(5-3-10)17-18-12(7-15)8-16/h2-5,9,17H,6H2,1H3,(H,19,21)/t9-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H12O2/c15-14(13-9-5-2-6-10-13)16-11-12-7-3-1-4-8-12/h1-10H,11H2	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H12O2/c15-14(16)10-11-6-8-13(9-7-11)12-4-2-1-3-5-12/h1-9H,10H2,(H,15,16)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H12O3/c1-7-4-12(15)17-14-9(3)13-10(6-11(7)14)5-8(2)16-13/h4-6H,1-3H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H12O3S/c1-9(14(16)17)11-7-8-12(18-11)13(15)10-5-3-2-4-6-10/h2-9H,1H3,(H,16,17)	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H13N3O4S2/c1-8-7-15-14(22-8)16-13(19)11-12(18)9-5-3-4-6-10(9)23(20,21)17(11)2/h3-7,18H,1-2H3,(H,15,16,19)	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C14H13N3O5S/c1-8-7-11(16-22-8)15-14(19)12-13(18)9-5-3-4-6-10(9)23(20,21)17(12)2/h3-7,18H,1-2H3,(H,15,16,19)	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C14H13N5O5S2/c1-2-5-3-25-12-8(11(21)19(12)9(5)13(22)23)17-10(20)7(18-24)6-4-26-14(15)16-6/h2,4,8,12,24H,1,3H2,(H2,15,16)(H,17,20)(H,22,23)	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H13N5O5S2/c1-2-5-3-25-12-8(11(21)19(12)9(5)13(22)23)17-10(20)7(18-24)6-4-26-14(15)16-6/h2,4,8,12,24H,1,3H2,(H2,15,16)(H,17,20)(H,22,23)/b18-7-	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H13N5O5S2/c1-2-5-3-25-12-8(11(21)19(12)9(5)13(22)23)17-10(20)7(18-24)6-4-26-14(15)16-6/h2,4,8,12,24H,1,3H2,(H2,15,16)(H,17,20)(H,22,23)/b18-7-/t8-,12-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H13N5O5S2/c1-2-5-3-25-12-8(11(21)19(12)9(5)13(22)23)17-10(20)7(18-24)6-4-26-14(15)16-6/h2,4,8,12,24H,1,3H2,(H2,15,16)(H,17,20)(H,22,23)/b18-7-/t8-,12+/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H13N5O5S2/c1-2-5-3-25-12-8(11(21)19(12)9(5)13(22)23)17-10(20)7(18-24)6-4-26-14(15)16-6/h2,4,8,12,24H,1,3H2,(H2,15,16)(H,17,20)(H,22,23)/b18-7-/t8?,12-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H13N5O5S2/c1-2-5-3-25-12-8(11(21)19(12)9(5)13(22)23)17-10(20)7(18-24)6-4-26-14(15)16-6/h2,4,8,12,24H,1,3H2,(H2,15,16)(H,17,20)(H,22,23)/b18-7+	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C14H13N5O5S2/c1-2-5-3-25-12-8(11(21)19(12)9(5)13(22)23)17-10(20)7(18-24)6-4-26-14(15)16-6/h2,4,8,12,24H,1,3H2,(H2,15,16)(H,17,20)(H,22,23)/b18-7+/t8-,12-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H13N5O5S2/c1-2-5-3-25-12-8(11(21)19(12)9(5)13(22)23)17-10(20)7(18-24)6-4-26-14(15)16-6/h2,4,8,12,24H,1,3H2,(H2,15,16)(H,17,20)(H,22,23)/b18-7+/t8-,12+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H13N5O5S2/c1-2-5-3-25-12-8(11(21)19(12)9(5)13(22)23)17-10(20)7(18-24)6-4-26-14(15)16-6/h2,4,8,12,24H,1,3H2,(H2,15,16)(H,17,20)(H,22,23)/t8-,12-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H13NO3/c16-11-5-7-14(8-6-12(17)15-13(14)18)10-4-2-1-3-9(10)11/h1-4H,5-8H2,(H,15,17,18)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H13NO3/c16-11-5-7-14(8-6-12(17)15-13(14)18)10-4-2-1-3-9(10)11/h1-4H,5-8H2,(H,15,17,18)/t14-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H14CINS/c15-13-4-2-1-3-11(13)9-16-7-5-14-12(10-16)6-8-17-14/h1-4,6,8H,5,7,9-10H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H14N2/c1-2-7-13-11(4-1)5-3-6-12(13)10-14-15-8-9-16-14/h1-7H,8-10H2,(H,15,16)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H14N2O/c1-14(2,12-6-4-8-16-10-12)13(17)11-5-3-7-15-9-11/h3-10H,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H14N4O2/c1-9-13-14(16-15-9)17(2)11(19)8-12(20)18(13)10-6-4-3-5-7-10/h3-7H,8H2,1-2H3,(H,15,16)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H14N4O3/c19-15-9-13-1-5-17(6-2-13)11-21-12-18-7-3-14(4-8-18)10-16-20/h1-10H,11-12H2/p+2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H14N8O4S3/c1-6-17-18-14(29-6)28-4-7-3-27-12-9(11(24)22(12)10(7)13(25)26)16-8(23)2-21-5-15-19-20-21/h5,9,12H,2-4H2,1H3,(H,16,23)(H,25,26)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H14N8O4S3/c1-6-17-18-14(29-6)28-4-7-3-27-12-9(11(24)22(12)10(7)13(25)26)16-8(23)2-21-5-15-19-20-21/h5,9,12H,2-4H2,1H3,(H,16,23)(H,25,26)/t9-,12-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H14N8O4S3/c1-6-17-18-14(29-6)28-4-7-3-27-12-9(11(24)22(12)10(7)13(25)26)16-8(23)2-21-5-15-19-20-21/h5,9,12H,2-4H2,1H3,(H,16,23)(H,25,26)/t9-,12-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H14N8O4S3/c1-6-17-18-14(29-6)28-4-7-3-27-12-9(11(24)22(12)10(7)13(25)26)16-8(23)2-21-5-15-19-20-21/h5,9,12H,2-4H2,1H3,(H,16,23)(H,25,26)/t9?,12-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H14O3/c1-9(14(15)16)10-3-4-12-8-13(17-2)6-5-11(12)7-10/h3-9H,1-2H3,(H,15,16)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H14O3/c1-9(14(15)16)10-3-4-12-8-13(17-2)6-5-11(12)7-10/h3-9H,1-2H3,(H,15,16)/t9-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H15CIN2O2/c15-8-1-2-12-10(5-8)9-6-13(18)17-14(19-12)3-4-16-7-11(9)14/h1-2,5,9,11,16H,3-4,6-7H2,(H,17,18)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H15CIN2O2/c15-8-1-2-12-10(5-8)9-6-13(18)17-14(19-12)3-4-16-7-11(9)14/h1-2,5,9,11,16H,3-4,6-7H2,(H,17,18)/t9-,11-,14-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H15CIN2O2/c15-8-1-2-12-10(5-8)9-6-13(18)17-14(19-12)3-4-16-7-11(9)14/h1-2,5,9,11,16H,3-4,6-7H2,(H,17,18)/t9-,11-,14+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H15CIN2O2/c15-8-1-2-12-10(5-8)9-6-13(18)17-14(19-12)3-4-16-7-11(9)14/h1-2,5,9,11,16H,3-4,6-7H2,(H,17,18)/t9?,11-,14?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H15CIN4/c1-9-12-13(10-4-3-5-11(15)8-10)16-6-7-17-14(12)19(2)18-9/h3-5,8,17H,6-7H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H15FN2O2/c1-3-19-14(18)13-8-16-9-17(13)10(2)11-4-6-12(15)7-5-11/h4-10H,3H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H15FN2O2/c1-3-19-14(18)13-8-16-9-17(13)10(2)11-4-6-12(15)7-5-11/h4-10H,3H2,1-2H3/t10-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C14H15FN2O2/c1-3-19-14(18)13-8-16-9-17(13)10(2)11-4-6-12(15)7-5-11/h4-10H,3H2,1-2H3/t10-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H15N2O2P/c15-16-14(17)11-19(18,12-7-3-1-4-8-12)13-9-5-2-6-10-13/h1-10H,11,15H2,(H,16,17)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C14H15N3O5/c1-3-16(4-2)14(20)10(8-15)5-9-6-11(17(21)22)13(19)12(18)7-9/h5-7,18-19H,3-4H2,1-2H3/b10-5+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H15N5O2/c1-8-15-12(18-21-8)10-7-19-11-6-4-3-5-9(11)13(20-2)17-14(19)16-10/h7H,3-6H2,1-2H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C14H15N5O5S2/c1-5-3-25-12-8(11(21)19(12)9(5)13(22)23)17-10(20)7(18-24-2)6-4-26-14(15)16-6/h4,8,12H,3H2,1-2H3,(H2,15,16)(H,17,20)(H,22,23)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H15N5O5S2/c1-5-3-25-12-8(11(21)19(12)9(5)13(22)23)17-10(20)7(18-24-2)6-4-26-14(15)16-6/h4,8,12H,3H2,1-2H3,(H2,15,16)(H,17,20)(H,22,23)/b18-7-/t8-,12-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H15N5O5S2/c1-5-3-25-12-8(11(21)19(12)9(5)13(22)23)17-10(20)7(18-24-2)6-4-26-14(15)16-6/h4,8,12H,3H2,1-2H3,(H2,15,16)(H,17,20)(H,22,23)/b18-7-/t8-,12-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H15N5O5S2/c1-5-3-25-12-8(11(21)19(12)9(5)13(22)23)17-10(20)7(18-24-2)6-4-26-14(15)16-6/h4,8,12H,3H2,1-2H3,(H2,15,16)(H,17,20)(H,22,23)/b18-7-/t8-,12+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H15N5O5S2/c1-5-3-25-12-8(11(21)19(12)9(5)13(22)23)17-10(20)7(18-24-2)6-4-26-14(15)16-6/h4,8,12H,3H2,1-2H3,(H2,15,16)(H,17,20)(H,22,23)/b18-7-/t8?,12-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H15N5O5S2/c1-5-3-25-12-8(11(21)19(12)9(5)13(22)23)17-10(20)7(18-24-2)6-4-26-14(15)16-6/h4,8,12H,3H2,1-2H3,(H2,15,16)(H,17,20)(H,22,23)/b18-7+/t8-,12-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H15N5O5S2/c1-5-3-25-12-8(11(21)19(12)9(5)13(22)23)17-10(20)7(18-24-2)6-4-26-14(15)16-6/h4,8,12H,3H2,1-2H3,(H2,15,16)(H,17,20)(H,22,23)/b18-7+/t8-,12+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H15N5O6S2/c1-25-2-5-3-26-12-8(11(21)19(12)9(5)13(22)23)17-10(20)7(18-24)6-4-27-14(15)16-6/h4,8,12,24H,2-3H2,1H3,(H2,15,16)(H,17,20)(H,22,23)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H15N5O6S2/c1-25-2-5-3-26-12-8(11(21)19(12)9(5)13(22)23)17-10(20)7(18-24)6-4-27-14(15)16-6/h4,8,12,24H,2-3H2,1H3,(H2,15,16)(H,17,20)(H,22,23)/b18-7-/t8-,12-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H15N5O6S2/c1-25-2-5-3-26-12-8(11(21)19(12)9(5)13(22)23)17-10(20)7(18-24)6-4-27-14(15)16-6/h4,8,12,24H,2-3H2,1H3,(H2,15,16)(H,17,20)(H,22,23)/b18-7-/t8-,12-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H15N5O6S2/c1-25-2-5-3-26-12-8(11(21)19(12)9(5)13(22)23)17-10(20)7(18-24)6-4-27-14(15)16-6/h4,8,12,24H,2-3H2,1H3,(H2,15,16)(H,17,20)(H,22,23)/b18-7-/t8-,12+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H15N5O6S2/c1-25-2-5-3-26-12-8(11(21)19(12)9(5)13(22)23)17-10(20)7(18-24)6-4-27-14(15)16-6/h4,8,12,24H,2-3H2,1H3,(H2,15,16)(H,17,20)(H,22,23)/b18-7-/t8?,12-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H15N5O6S2/c1-25-2-5-3-26-12-8(11(21)19(12)9(5)13(22)23)17-10(20)7(18-24)6-4-27-14(15)16-6/h4,8,12,24H,2-3H2,1H3,(H2,15,16)(H,17,20)(H,22,23)/b18-7+/t8-,12-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H15N5O6S2/c1-25-2-5-3-26-12-8(11(21)19(12)9(5)13(22)23)17-10(20)7(18-24)6-4-27-14(15)16-6/h4,8,12,24H,2-3H2,1H3,(H2,15,16)(H,17,20)(H,22,23)/b18-7+/t8-,12+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H15N5O6S2/c1-25-2-5-3-26-12-8(11(21)19(12)9(5)13(22)23)17-10(20)7(18-24)6-4-27-14(15)16-6/h4,8,12,24H,2-3H2,1H3,(H2,15,16)(H,17,20)(H,22,23)/t8-,12-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H15NOS/c15-9-11-5-1-3-7-13(11)17-14-8-4-2-6-12(14)10-16/h1-8,16H,9-10,15H2	1	(Wu et al., 2018)

InChI=1S/C14H16BrNO2/c1-17-11-6-10-7-13(9-2-4-16-5-3-9)18-14(10)12(15)8-11/h6-9,16H,2-5H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H16Cl6O5/c1-8-4-2-3-5-10(8)23-6-9(25-12(22)14(18,19)20)7-24-11(21)13(15,16)17/h2-5,9,11-12,21-22H,6-7H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H16Cl6O5/c1-8-4-2-3-5-10(8)23-6-9(25-12(22)14(18,19)20)7-24-11(21)13(15,16)17/h2-5,9,11-12,21-22H,6-7H2,1H3/t9-,11-,12-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H16Cl6O5/c1-8-4-2-3-5-10(8)23-6-9(25-12(22)14(18,19)20)7-24-11(21)13(15,16)17/h2-5,9,11-12,21-22H,6-7H2,1H3/t9-,11+,12-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H16ClN3O4S2/c15-10-5-11-13(6-12(10)23(16,19)20)24(21,22)18-14(17-11)9-4-7-1-2-8(9)3-7/h1-2,5-9,14,17-18H,3-4H2,(H2,16,19,20)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H16F2N2/c1-18(2)9-3-4-13-10(7-9)11-5-8(15)6-12(16)14(11)17-13/h5-6,9,17H,3-4,7H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H16F2N2/c1-18(2)9-3-4-13-10(7-9)11-5-8(15)6-12(16)14(11)17-13/h5-6,9,17H,3-4,7H2,1-2H3/t9-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H16F2N2/c1-18(2)9-3-4-13-10(7-9)11-5-8(15)6-12(16)14(11)17-13/h5-6,9,17H,3-4,7H2,1-2H3/t9-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H16N2/c1-15-14(16-2)10-11-7-8-12-5-3-4-6-13(12)9-11/h3-9H,10H2,1-2H3,(H,15,16)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H16N2/c1-2-4-13-7-11(5-6-12(13)3-1)8-14-9-15-10-16-14/h1-4,7,10,14H,5-6,8-9H2,(H,15,16)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H16N2/c1-2-4-13-7-11(5-6-12(13)3-1)8-14-9-15-10-16-14/h1-4,7,10,14H,5-6,8-9H2,(H,15,16)/t14-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H16N2/c1-2-4-13-7-11(5-6-12(13)3-1)8-14-9-15-10-16-14/h1-4,7,15H,5-6,8-10H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H16N2/c1-2-4-13-9-11(5-6-12(13)3-1)10-14-15-7-8-16-14/h1-4,9-10,15-16H,5-8H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H16N2/c1-2-4-13-9-11(5-6-12(13)3-1)10-14-15-7-8-16-14/h1-4,9H,5-8,10H2,(H,15,16)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H16N2O2/c1-3-18-14(17)13-9-15-10-16(13)11(2)12-7-5-4-6-8-12/h4-11H,3H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H16N2O2/c1-3-18-14(17)13-9-15-10-16(13)11(2)12-7-5-4-6-8-12/h4-11H,3H2,1-2H3/t11-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H16N2O2/c1-3-18-14(17)13-9-15-10-16(13)11(2)12-7-5-4-6-8-12/h4-11H,3H2,1-2H3/t11-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H16N2O2/c17-12-6-7-15-13(12)14(18)16-11-8-10(11)9-4-2-1-3-5-9/h1-5,10-11,13,15H,6-8H2,(H,16,18)/t10?,11-,13?/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H16N2O2/c17-13-7-6-11(15-13)14(18)16-12-8-10(12)9-4-2-1-3-5-9/h1-5,10-12H,6-8H2,(H,15,17)(H,16,18)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H16N2O2/c17-13-7-6-11(15-13)14(18)16-12-8-10(12)9-4-2-1-3-5-9/h1-5,10-12H,6-8H2,(H,15,17)(H,16,18)/t10-,11-,12-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H16N2O2/c17-13-7-6-11(15-13)14(18)16-12-8-10(12)9-4-2-1-3-5-9/h1-5,10-12H,6-8H2,(H,15,17)(H,16,18)/t10-,11-,12+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C14H16N2O2/c17-13-7-6-11(15-13)14(18)16-12-8-10(12)9-4-2-1-3-5-9/h1-5,10-12H,6-8H2,(H,15,17)(H,16,18)/t10-,11+,12-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H16N2O3/c1-3-14(4-2)11(17)15-13(19)16(12(14)18)10-8-6-5-7-9-10/h5-9H,3-4H2,1-2H3,(H,15,17,19)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H16N2O4/c17-9-4-3-8(12(18)15-9)16-13(19)10-6-1-2-7(5-6)11(10)14(16)20/h6-8,10-11H,1-5H2,(H,15,17,18)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H16N2O4/c17-9-4-3-8(12(18)15-9)16-13(19)10-6-1-2-7(5-6)11(10)14(16)20/h6-8,10-11H,1-5H2,(H,15,17,18)/t6-,7-,8+,10-,11+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H16N2O4/c17-9-4-3-8(12(18)15-9)16-13(19)10-6-1-2-7(5-6)11(10)14(16)20/h6-8,10-11H,1-5H2,(H,15,17,18)/t6-,7+,8-,10+,11-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H16N2O4/c17-9-4-3-8(12(18)15-9)16-13(19)10-6-1-2-7(5-6)11(10)14(16)20/h6-8,10-11H,1-5H2,(H,15,17,18)/t6?,7?,8-,10-,11-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H16N2O6S3/c17-23(18)9-15-11-1-5-13(6-2-11)25(21,22)14-7-3-12(4-8-14)16-10-24(19)20/h1-8,15-16H,9-10H2,(H,17,18)(H,19,20)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H16N2OS/c1-10-3-4-13(15-8-10)11(2)16-14(17)7-12-5-6-18-9-12/h3-6,8-9,11H,7H2,1-2H3,(H,16,17)/t11-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H16N4/c1-9(2)7-18-8-16-12-13(18)10-5-3-4-6-11(10)17-14(12)15/h3-6,8-9H,7H2,1-2H3,(H2,15,17)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H16O7S/c1-19-6-14(13(15)16)11(12(14)22(2,17)18)8-3-4-9-10(5-8)21-7-20-9/h3-5,11-12H,6-7H2,1-2H3,(H,15,16)/t11-,12+,14-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H17N3O/c1-16-9-3-5-13-11(7-9)10-6-8(14(15)18)2-4-12(10)17-13/h2,4,6,9,16-17H,3,5,7H2,1H3,(H2,15,18)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H17N3O2S/c18-20(19,17-9-2-6-15-8-10-17)14-4-1-3-12-11-16-7-5-13(12)14/h1,3-5,7,11,15H,2,6,8-10H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H17N3O9/c1-6(18)23-5-9-11(24-7(2)19)12(25-8(3)20)13(26-9)17-14(22)16-10(21)4-15-17/h4,9,11-13H,5H2,1-3H3,(H,16,21,22)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H17N5O3/c1-2-18-8-10(13(21)22)11(20)9-7-16-14(17-12(9)18)19-5-3-15-4-6-19/h7-8,15H,2-6H2,1H3,(H,21,22)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H17NO2/c1-3-11-4-2-6-14(13(11)5-1)17-10-12-9-15-7-8-16-12/h1-2,4-6,12,15H,3,7-10H2/t12-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H17NO2/c1-3-11-4-2-6-14(13(11)5-1)17-10-12-9-15-7-8-16-12/h1-4,6,12,15H,5,7-10H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H17NO2/c1-3-11-4-2-6-14(13(11)5-1)17-10-12-9-15-7-8-16-12/h1-4,6,12,15H,5,7-10H2/t12-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H17NO2/c1-3-11-4-2-6-14(13(11)5-1)17-10-12-9-15-7-8-16-12/h1-4,6,12,15H,5,7-10H2/t12-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H17NO2/c16-14(12-4-2-1-3-5-12)17-13-10-15-8-6-11(13)7-9-15/h1-5,11,13H,6-10H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H17NO2/c16-14(12-4-2-1-3-5-12)17-13-10-15-8-6-11(13)7-9-15/h1-5,11,13H,6-10H2/t13-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H17NO2/c16-14(12-4-2-1-3-5-12)17-13-10-15-8-6-11(13)7-9-15/h1-5,11,13H,6-10H2/t13-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H17NO3S/c1-3-19(16,17)13-12(11-7-5-4-6-8-11)14(13,9-15)10-18-2/h4-8,12-13H,3,10H2,1-2H3/t12-,13-,14-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C14H17NO5S2/c1-18-6-14(13(15)21)11(12(14)22(2,16)17)8-3-4-9-10(5-8)20-7-19-9/h3-5,11-12H,6-7H2,1-2H3,(H2,15,21)/t11-,12-,14-/m0/s1	2023) (Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C14H17NO6S/c1-3-19-13(16)14(15)11(12(14)22(2,17)18)8-4-5-9-10(6-8)21-7-20-9/h4-6,11-12H,3,7,15H2,1-2H3/t11-,12-,14+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C14H18F3NO/c1-10(2)18-6-7-19-13(9-18)11-4-3-5-12(8-11)14(15,16)17/h3-5,8,10,13H,6-7,9H2,1-2H3	(Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C14H18F3NO/c1-10(2)18-6-7-19-13(9-18)11-4-3-5-12(8-11)14(15,16)17/h3-5,8,10,13H,6-7,9H2,1-2H3/t13-/m0/s1	1 2023) (Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C14H18F3NO/c1-10(2)18-6-7-19-13(9-18)11-4-3-5-12(8-11)14(15,16)17/h3-5,8,10,13H,6-7,9H2,1-2H3/t13-/m1/s1	1 2023) (Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C14H18F3NO/c1-10(2)18-7-8-19-13(9-18)11-3-5-12(6-4-11)14(15,16)17/h3-6,10,13H,7-9H2,1-2H3	1 2023)
InChI=1S/C14H18F3NO/c1-10(2)18-7-8-19-13(9-18)11-3-5-12(6-4-11)14(15,16)17/h3-6,10,13H,7-9H2,1-2H3/t13-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C14H18N2/c1-16(2)10-7-8-14-12(9-10)11-5-3-4-6-13(11)15-14/h3-6,10,15H,7-9H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H18N2/c1-16(2)10-7-8-14-12(9-10)11-5-3-4-6-13(11)15-14/h3-6,10,15H,7-9H2,1-2H3/t10-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H18N2O/c1-10(2)13-11(3)15(4)16(14(13)17)12-8-6-5-7-9-12/h5-10H,1-4H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H18N2O/c1-9(2)13-12(14(17)10(3)4)11-7-5-6-8-16(11)15-13/h5-10H,1-4H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H18N2O2/c1-10-5-3-6-11(2)14(10)15-12(17)9-16-8-4-7-13(16)18/h3,5-6H,4,7-9H2,1-2H3,(H,15,17)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H18N2O3/c1-5-7-8-10(3)14(9-6-2)11(17)15-13(19)16(4)12(14)18/h6,10H,2,5,9H2,1,3-4H3,(H,15,17,19)	1 (Li et al., 2005)
InChI=1S/C14H18N2O3/c1-5-7-8-10(3)14(9-6-2)11(17)15-13(19)16(4)12(14)18/h6,10H,2,5,9H2,1,3-4H3,(H,15,17,19)/t10-,14-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C14H18N2O3/c1-5-7-8-10(3)14(9-6-2)11(17)15-13(19)16(4)12(14)18/h6,10H,2,5,9H2,1,3-4H3,(H,15,17,19)/t10-,14+/m0/s1	1 (Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C14H18N2O3/c1-5-7-8-10(3)14(9-6-2)11(17)15-13(19)16(4)12(14)18/h6,10H,2,5,9H2,1,3-4H3,(H,15,17,19)/t10-,14+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H18N2O4/c15-11(9-10-5-2-1-3-6-10)14(19)20-16-8-4-7-12(16)13(17)18/h1-3,5-6,11-12H,4,7-9,15H2,(H,17,18)/t11-,12+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H18N2O5/c1-21-14(20)11(7-9-5-3-2-4-6-9)16-13(19)10(15)8-12(17)18/h2-6,10-11H,7-8,15H2,1H3,(H,16,19)(H,17,18)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H18N4O3/c1-19-10-5-8(6-11(20-2)12(10)21-3)4-9-7-17-14(16)18-13(9)15/h5-7H,4H2,1-3H3,(H4,15,16,17,18)	1 (Li et al., 2005) (Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C14H18N6O/c15-14-18-12(17-9-2-3-9)11-13(19-14)20(7-16-11)10-4-1-8(5-10)6-21/h1,4,7-10,21H,2-3,5-6H2,(H3,15,17,18,19)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H18N6O/c15-14-18-12(17-9-2-3-9)11-13(19-14)20(7-16-11)10-4-1-8(5-10)6-21/h1,4,7-10,21H,2-3,5-6H2,(H3,15,17,18,19)/t8-,10-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H18N6O/c15-14-18-12(17-9-2-3-9)11-13(19-14)20(7-16-11)10-4-1-8(5-10)6-21/h1,4,7-10,21H,2-3,5-6H2,(H3,15,17,18,19)/t8-,10-	1 (Mazumdar et al.,

/m1/s1	2023)
InChI=1S/C14H18N6O/c15-14-18-12(17-9-2-3-9)11-13(19-14)20(7-16-11)10-4-1-8(5-10)6-21/h1,4,7-10,21H,2-3,5-6H2,(H3,15,17,18,19)/t8-,10+/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H18O3/c1-14(2,3)13(15)7-5-10-4-6-11-12(8-10)17-9-16-11/h4-8,13,15H,9H2,1-3H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H18O3/c1-14(2,3)13(15)7-5-10-4-6-11-12(8-10)17-9-16-11/h4-8,13,15H,9H2,1-3H3/b7-5-/t13-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H18O3/c1-14(2,3)13(15)7-5-10-4-6-11-12(8-10)17-9-16-11/h4-8,13,15H,9H2,1-3H3/b7-5+	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H18O3/c1-14(2,3)13(15)7-5-10-4-6-11-12(8-10)17-9-16-11/h4-8,13,15H,9H2,1-3H3/b7-5+/t13-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H18O3/c1-14(2,3)13(15)7-5-10-4-6-11-12(8-10)17-9-16-11/h4-8,13,15H,9H2,1-3H3/t13-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H18O6S/c1-19-8-14(13(15)16)11(12(14)21(3,17)18)9-4-6-10(20-2)7-5-9/h4-7,11-12H,8H2,1-3H3,(H,15,16)/t11-,12-,14+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H19Cl2NO2/c15-8-10-17(11-9-16)13-6-4-12(5-7-13)2-1-3-14(18)19/h4-7H,1-3,8-11H2,(H,18,19)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H19ClN2O2/c15-13-4-2-12(3-5-13)14(18)16-6-1-7-17-8-10-19-11-9-17/h2-5H,1,6-11H2,(H,16,18)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H19F3N2O2/c1-4-21-13(20)19(9-8-18(2)3)12-7-5-6-11(10-12)14(15,16)17/h5-7,10H,4,8-9H2,1-3H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H19F3N4O/c15-14(16,17)11-2-1-3-12(10-11)21-8-6-20(7-9-21)5-4-19-13(18)22/h1-3,10H,4-9H2,(H3,18,19,22)	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C14H19FN2O2/c15-11-14(19)16-10-6-2-5-9-13(18)17-12-7-3-1-4-8-12/h1,3-4,7-8H,2,5-6,9-11H2,(H,16,19)(H,17,18)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H19N3O2/c1-14-6-7-16(2)12(14)17(3)11-5-4-9(8-10(11)14)19-13(15)18/h4-5,8,12H,6-7H2,1-3H3,(H2,15,18)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H19N3S/c1-16(2)9-10-17(12-13-6-5-11-18-13)14-7-3-4-8-15-14/h3-8,11H,9-10,12H2,1-2H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H19N5O2/c1-5-19-13-10(8-16-19)12(18-17-9(3)4)11(7-15-13)14(20)21-6-2/h7-8H,5-6H2,1-4H3,(H,15,18)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H19N5O4/c1-9(20)22-6-11(7-23-10(2)21)3-4-19-8-17-12-5-16-14(15)18-13(12)19/h5,8,11H,3-4,6-7H2,1-2H3,(H2,15,16,18)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H19NO2/c1-11(16)17-14(12-7-3-2-4-8-12)13-9-5-6-10-15-13/h2-4,7-8,13-15H,5-6,9-10H2,1H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H19NO2/c1-11(16)17-14(12-7-3-2-4-8-12)13-9-5-6-10-15-13/h2-4,7-8,13-15H,5-6,9-10H2,1H3/t13-,14-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H19NO2/c1-11(16)17-14(12-7-3-2-4-8-12)13-9-5-6-10-15-13/h2-4,7-8,13-15H,5-6,9-10H2,1H3/t13-,14+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H19NO2/c1-17-14(16)13(11-7-3-2-4-8-11)12-9-5-6-10-15-12/h2-4,7-8,12-13,15H,5-6,9-10H2,1H3	1 (Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C14H19NO2/c1-17-14(16)13(11-7-3-2-4-8-11)12-9-5-6-10-15-12/h2-4,7-8,12-13,15H,5-6,9-10H2,1H3/t12-,13-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H19NO2/c1-17-14(16)13(11-7-3-2-4-8-11)12-9-5-6-10-15-12/h2-4,7-8,12-13,15H,5-6,9-10H2,1H3/t12-,13-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H19NO2/c1-17-14(16)13(11-7-3-2-4-8-11)12-9-5-6-10-15-12/h2-4,7-8,12-13,15H,5-6,9-10H2,1H3/t12-,13+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C14H19NO2/c1-17-14(16)13(11-7-3-2-4-8-11)12-9-5-6-10-15-12/h2-4,7-8,12-13,15H,5-6,9-10H2,1H3/t12-,13+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H19NO4/c1-7(17)11-13-8-4-3-5-10(19-2)12(8)9(6-16)15(13)14(11)18/h6-8,10-11,13,17H,3-5H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H19NO4/c1-7(17)11-13-8-4-3-5-10(19-2)12(8)9(6-16)15(13)14(11)18/h6-8,10-11,13,17H,3-5H2,1-2H3/t7-,8-,10-,11?,13-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H19NO4/c1-7(17)11-13-8-4-3-5-10(19-2)12(8)9(6-16)15(13)14(11)18/h6-8,10-11,13,17H,3-5H2,1-2H3/t7-,8-,10-,11+,13-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H19NO4/c1-7(17)11-13-8-4-3-5-10(19-2)12(8)9(6-16)15(13)14(11)18/h6-8,10-11,13,17H,3-5H2,1-2H3/t7-,8+,10+,11-,13-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H19NO5/c1-17-11-8-10(9-12(18-2)13(11)19-3)14(16)15-4-6-20-7-5-15/h8-9H,4-7H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H19NO5/c1-6(16)9-11-7-4-3-5-8(20-2)10(7)12(14(18)19)15(11)13(9)17/h6-9,11,16H,3-5H2,1-2H3,(H,18,19)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H19NO5/c1-6(16)9-11-7-4-3-5-8(20-2)10(7)12(14(18)19)15(11)13(9)17/h6-9,11,16H,3-5H2,1-2H3,(H,18,19)/p-1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H19NO5/c1-6(16)9-11-7-4-3-5-8(20-2)10(7)12(14(18)19)15(11)13(9)17/h6-9,11,16H,3-5H2,1-2H3,(H,18,19)/t6-,7-,8-,9?,11-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H19NO5/c1-6(16)9-11-7-4-3-5-8(20-2)10(7)12(14(18)19)15(11)13(9)17/h6-9,11,16H,3-5H2,1-2H3,(H,18,19)/t6-,7+,8+,9-,11-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H20Br2N2/c1-18(12-5-3-2-4-6-12)9-10-7-11(15)8-13(16)14(10)17/h7-8,12H,2-6,9,17H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H20Cl2N2O2/c1-4-18(5-2)7-6-17-14(19)11-8-10(15)9-12(16)13(11)20-3/h8-9H,4-7H2,1-3H3,(H,17,19)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H20CIN3O3/c1-20-12-6-10(16)9(15)5-8(12)14(19)18-11-3-4-17-7-13(11)21-2/h5-6,11,13,17H,3-4,7,16H2,1-2H3,(H,18,19)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H20CIN3O3/c1-20-12-6-10(16)9(15)5-8(12)14(19)18-11-3-4-17-7-13(11)21-2/h5-6,11,13,17H,3-4,7,16H2,1-2H3,(H,18,19)/t11-,13+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H20CIN3O3S/c1-9-4-3-5-10(2)18(9)17-14(19)11-6-7-12(15)13(8-11)22(16,20)21/h6-10H,3-5H2,1-2H3,(H,17,19)(H2,16,20,21)/t9-,10+	1	(Nikolic et al., 2013)
InChI=1S/C14H20N2O/c1-10(2)12-5-4-11(3)8-13(12)17-9-14-15-6-7-16-14/h4-5,8,10H,6-7,9H2,1-3H3,(H,15,16)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H20N2O2/c1-10(2)16-8-11(17)9-18-14-5-3-4-13-12(14)6-7-15-13/h3-7,10-11,15-17H,8-9H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H20N2O2/c1-10(2)16-8-11(17)9-18-14-5-3-4-13-12(14)6-7-15-13/h3-7,10-11,15-17H,8-9H2,1-2H3/p+1/t11-/m0/s1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C14H20N2O2/c1-10(2)16-8-11(17)9-18-14-5-3-4-13-12(14)6-7-15-13/h3-7,10-11,15-17H,8-9H2,1-2H3/t11-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H20N2O2/c1-10(2)16-8-11(17)9-18-14-5-3-4-13-12(14)6-7-15-13/h3-7,10-11,15-17H,8-9H2,1-2H3/t11-/m1/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C14H20N2O2/c1-14(2,3)16-9-12(17)10-18-13-7-5-4-6-11(13)8-15/h4-7,12,16-17H,9-10H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H20N2O2/c1-14(2,3)16-9-12(17)10-18-13-7-5-4-6-11(13)8-15/h4-7,12,16-17H,9-10H2,1-3H3/t12-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H20N2O2S/c15-13-5-7-14(8-6-13)19(17,18)16-9-11-1-2-12(10-16)4-3-11/h5-8,11-12H,1-4,9-10,15H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H20N2O3/c1-4-16(5-2)10-14(18)19-13-8-6-12(7-9-13)15-11(3)17/h6-9H,4-5,10H2,1-3H3,(H,15,17)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H20N4O3S/c1-17(2)9-11-3-4-12(21-11)10-22-8-7-16-14-13(18(19)20)5-6-15-14/h3-6,14,16H,7-10H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C14H20N4O3S/c1-17(2)9-11-3-4-12(21-11)10-22-8-7-16-14-13(18(19)20)5-6-15-14/h3-6,14,16H,7-10H2,1-2H3/t14-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H20N4O3S/c1-17(2)9-11-3-4-12(21-11)10-22-8-7-16-14-13(18(19)20)5-6-15-14/h3-6,15-16H,7-10H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H21BO2/c1-4-9-14(3)10-16-15(17-11-14)13-7-5-12(2)6-8-13/h5-8H,4,9-11H2,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H21CIN2O2/c1-18-10-3-2-4-14(17-19-11-9-16)12-5-7-13(15)8-6-12/h5-8H,2-4,9-11,16H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H21CIN2O2/c1-18-10-3-2-4-14(17-19-11-9-16)12-5-7-13(15)8-6-12/h5-8H,2-4,9-11,16H2,1H3/b17-14-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H21CIN2O2/c1-18-10-3-2-4-14(17-19-11-9-16)12-5-7-13(15)8-6-12/h5-8H,2-4,9-11,16H2,1H3/b17-14+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H21CIN2O2/c1-3-17(4-2)10-9-16-14(18)11-19-13-7-5-12(15)6-8-13/h5-8H,3-4,9-11H2,1-2H3,(H,16,18)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H21IN2/c1-12(2)11-16-7-9-17(10-8-16)14-5-3-13(15)4-6-14/h3-6,12H,7-11H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H21IN2/c1-3-12(2)16-8-10-17(11-9-16)14-6-4-13(15)5-7-14/h4-7,12H,3,8-11H2,1-2H3	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C14H21IN2/c1-3-12(2)16-8-10-17(11-9-16)14-6-4-13(15)5-7-14/h4-7,12H,3,8-11H2,1-2H3/t12-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H21N/c1-2-15-14(11-7-4-8-12-14)13-9-5-3-6-10-13/h3,5-6,9-10,15H,2,4,7-8,11-12H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H21N3O2S/c1-15-20(18,19)10-11-4-5-14-13(8-11)12(9-16-14)6-7-17(2)3/h4-5,8-9,15-16H,6-7,10H2,1-3H3	0	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C14H21N3O3/c1-9(2)15-7-12-4-3-10-5-11(8-18)14(17(19)20)6-13(10)16-12/h5-6,9,12,15-16,18H,3-4,7-8H2,1-2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H21N3O3/c1-9(2)15-7-12-4-3-10-5-11(8-18)14(17(19)20)6-13(10)16-12/h5-6,9,12,15-16,18H,3-4,7-8H2,1-2H3/t12-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H21N3O3S/c1-12-6-8-13(9-7-12)21(19,20)16-14(18)15-17-10-4-2-3-5-11-17/h6-9H,2-5,10-11H2,1H3,(H2,15,16,18)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H21N3O4S/c1-17-7-3-4-10(17)9-16-14(18)12-8-11(22(15,19)20)5-6-13(12)21-2/h5-6,8,10H,3-4,7,9H2,1-2H3,(H,16,18)(H2,15,19,20)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H21N3O4S/c1-17-7-3-4-10(17)9-16-14(18)12-8-11(22(15,19)20)5-6-13(12)21-2/h5-6,8,10H,3-4,7,9H2,1-2H3,(H,16,18)(H2,15,19,20)/t10-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H21N3O4S/c1-17-7-3-4-10(17)9-16-14(18)12-8-11(22(15,19)20)5-6-13(12)21-2/h5-6,8,10H,3-4,7,9H2,1-2H3,(H,16,18)(H2,15,19,20)/t10-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H21N3O6S/c1-14(2)9(13(22)23)17-10(19)8(11(17)24-14)16-7(18)5-3-4-6(15)12(20)21/h6,8-9,11H,3-5,15H2,1-2H3,(H,16,18)(H,20,21)(H,22,23)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H21N3O6S/c1-14(2)9(13(22)23)17-10(19)8(11(17)24-14)16-7(18)5-3-4-6(15)12(20)21/h6,8-9,11H,3-5,15H2,1-2H3,(H,16,18)(H,20,21)(H,22,23)/t6-,8-,9-,11-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H21N3O6S/c1-14(2)9(13(22)23)17-10(19)8(11(17)24-14)16-7(18)5-3-4-6(15)12(20)21/h6,8-9,11H,3-5,15H2,1-2H3,(H,16,18)(H,20,21)(H,22,23)/t6-,8?,9-,11-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H21N3O6S/c1-14(2)9(13(22)23)17-10(19)8(11(17)24-14)16-7(18)5-3-4-6(15)12(20)21/h6,8-9,11H,3-5,15H2,1-2H3,(H,16,18)(H,20,21)(H,22,23)/t6-,8+,9-,11-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H21N3O6S/c1-14(2)9(13(22)23)17-10(19)8(11(17)24-14)16-7(18)5-3-4-6(15)12(20)21/h6,8-9,11H,3-5,15H2,1-	0	(Meng et al., 2021)

2H3,(H,16,18)(H,20,21)(H,22,23)/t6-,8+,9-,11+/m0/s1	
InChI=1S/C14H21N3O6S/c1-14(2)9(13(22)23)17-10(19)8(11(17)24-14)16-7(18)5-3-4-6(15)12(20)21/h6,8-9,11H,3-5,15H2,1-2H3,(H,16,18)(H,20,21)(H,22,23)/t6?,8-,9+,11-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H21N5O4/c1-9(20)22-6-11(7-23-10(2)21)3-4-19-8-17-12-5-16-14(15)18-13(12)19/h8,11H,3-7H2,1-2H3,(H3,15,16,18)	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H21NO/c1-2-15-13(14-9-6-10-16-14)11-12-7-4-3-5-8-12/h3-5,7-8,13-15H,2,6,9-11H2,1H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H21NO/c1-2-15-13(14-9-6-10-16-14)11-12-7-4-3-5-8-12/h3-5,7-8,13-15H,2,6,9-11H2,1H3/t13-,14-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H21NO/c1-2-15-13(14-9-6-10-16-14)11-12-7-4-3-5-8-12/h3-5,7-8,13-15H,2,6,9-11H2,1H3/t13-,14-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H21NO/c1-2-15-13(14-9-6-10-16-14)11-12-7-4-3-5-8-12/h3-5,7-8,13-15H,2,6,9-11H2,1H3/t13-,14+/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H21NO/c1-2-15-13(14-9-6-10-16-14)11-12-7-4-3-5-8-12/h3-5,7-8,13-15H,2,6,9-11H2,1H3/t13?,14-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H21NO2/c1-11(2)7-8-15-9-12-10-16-13-5-3-4-6-14(13)17-12/h3-6,11-12,15H,7-10H2,1-2H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H21NO2/c1-11(2)7-8-15-9-12-10-16-13-5-3-4-6-14(13)17-12/h3-6,11-12,15H,7-10H2,1-2H3/t12-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H21NO2/c1-11(2)7-8-15-9-12-10-16-13-5-3-4-6-14(13)17-12/h3-6,11-12,15H,7-10H2,1-2H3/t12-/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H21NO2/c16-13(17)12-1-2-15(12)14-6-9-3-10(7-14)5-11(4-9)8-14/h9-12H,1-8H2,(H,16,17)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H21NO2/c16-13(17)12-1-2-15(12)14-6-9-3-10(7-14)5-11(4-9)8-14/h9-12H,1-8H2,(H,16,17)/t9?,10?,11?,12-,14?/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H21NO3/c1-14(2,3)13(17)18-11-7-5-6-10(8-11)12(16)9-15-4/h5-8,12,15-16H,9H2,1-4H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H21NO3/c1-14(2,3)13(17)18-11-7-5-6-10(8-11)12(16)9-15-4/h5-8,12,15-16H,9H2,1-4H3/t12-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H21NO3/c1-14(2,3)13(17)18-11-7-5-6-10(8-11)12(16)9-15-4/h5-8,12,15-16H,9H2,1-4H3/t12-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H21NO4S/c1-18-9-14(8-15)12(13(14)20(3,16)17)10-4-6-11(19-2)7-5-10/h4-7,12-13H,8-9,15H2,1-3H3/t12-,13+,14+/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H22BrN3O2/c1-4-18(5-2)7-6-17-14(19)10-8-11(15)12(16)9-13(10)20-3/h8-9H,4-7,16H2,1-3H3,(H,17,19)	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H22CIN3O2/c1-4-18(5-2)7-6-17-14(19)10-8-11(15)12(16)9-13(10)20-3/h8-9H,4-7,16H2,1-3H3,(H,17,19)	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H22CINO/c1-11(10-16(3)4)14(2,17)9-12-5-7-13(15)8-6-12/h5-8,11,17H,9-10H2,1-4H3	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C14H22N2O/c1-5-16(6-2)10-13(17)15-14-11(3)8-7-9-12(14)4/h7-9H,5-6,10H2,1-4H3,(H,15,17)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H22N2O2/c1-6-16(5)14(17)18-13-9-7-8-12(10-13)11(2)15(3)4/h7-11H,6H2,1-5H3	

InChI=1S/C14H22N2O2/c1-6-16(5)14(17)18-13-9-7-8-12(10-13)11(2)15(3)4/h7-11H,6H2,1-5H3/t11-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H22N2O2/c1-6-16(5)14(17)18-13-9-7-8-12(10-13)11(2)15(3)4/h7-11H,6H2,1-5H3/t11-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H22N2O3/c1-10(2)15-8-13(18)9-19-14-6-4-12(5-7-14)16-11(3)17/h4-7,10,13,15,18H,8-9H2,1-3H3,(H,16,17)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H22N2O3/c1-10(2)15-8-13(18)9-19-14-6-4-12(5-7-14)16-11(3)17/h4-7,10,13,15,18H,8-9H2,1-3H3,(H,16,17)/t13-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H22N2O3/c1-10(2)16-8-12(17)9-19-13-5-3-11(4-6-13)7-14(15)18/h3-6,10,12,16-17H,7-9H2,1-2H3,(H2,15,18)	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C14H22N2O3/c1-10(2)16-8-12(17)9-19-13-5-3-11(4-6-13)7-14(15)18/h3-6,10,12,16-17H,7-9H2,1-2H3,(H2,15,18)/t12-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H22N2O3/c1-10(2)16-8-12(17)9-19-13-5-3-11(4-6-13)7-14(15)18/h3-6,10,12,16-17H,7-9H2,1-2H3,(H2,15,18)/t12-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H22N2O3/c1-5-7-8-10(3)14(9-6-2)11(17)15-13(19)16(4)12(14)18/h6,10,12-13,18-19H,2,5,9H2,1,3-4H3,(H,15,17)/t10-,12+,13+,14+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H22N2O3/c1-5-7-8-10(3)14(9-6-2)11(17)15-13(19)16(4)12(14)18/h6,10H,2,5,7-9H2,1,3-4H3,(H,15,17,19)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H22N4/c1-2-5-18-6-3-4-10-7-12-11(8-13(10)18)9-16-14(15)17-12/h9-10,13H,2-8H2,1H3,(H2,15,16,17)/t10-,13-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H22N4O2/c1-11(17-4-6-20-7-5-17)8-14(19)18-3-2-13-12(10-18)9-15-16-13/h9,11H,2-8,10H2,1H3,(H,15,16)/t11-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H22N6O5/c1-7(2)9(15)13(23)24-4-8(3-21)25-6-20-5-17-10-11(20)18-14(16)19-12(10)22/h5,7-9,21H,3-4,6,15H2,1-2H3,(H3,16,18,19,22)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H22N6O5/c1-7(2)9(15)13(23)24-4-8(3-21)25-6-20-5-17-10-11(20)18-14(16)19-12(10)22/h5,7-9,21H,3-4,6,15H2,1-2H3,(H3,16,18,19,22)/t8-,9-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H22N6O5/c1-7(2)9(15)13(23)24-4-8(3-21)25-6-20-5-17-10-11(20)18-14(16)19-12(10)22/h5,7-9,21H,3-4,6,15H2,1-2H3,(H3,16,18,19,22)/t8-,9+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H22N6O5/c1-7(2)9(15)13(23)24-4-8(3-21)25-6-20-5-17-10-11(20)18-14(16)19-12(10)22/h5,7-9,21H,3-4,6,15H2,1-2H3,(H3,16,18,19,22)/t8?,9-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H23IN2/c1-5-10(3)16-12-7-8-13(15)14(9-12)17-11(4)6-2/h7-11,16-17H,5-6H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H23IN2/c1-5-10(3)16-12-7-8-13(15)14(9-12)17-11(4)6-2/h7-11,16-17H,5-6H2,1-4H3/t10-,11-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H23N3O10/c18-10(19)5-15(1-3-16(6-11(20)21)7-12(22)23)2-4-17(8-13(24)25)9-14(26)27/h1-9H2,(H,18,19)(H,20,21)(H,22,23)(H,24,25)(H,26,27)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H23N3O3S/c1-4-17(5-2)11-10-15-14(18)12-6-8-13(9-7-12)16-21(3,19)20/h6-9,16H,4-5,10-11H2,1-3H3,(H,15,18)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H23N3OS/c1-3-4-5-6-10-18-14-13(15-19-16-14)12-8-7-9-17(2)11-12/h8H,3-7,9-11H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H23N3S2/c1-3-4-5-6-10-18-14-13(15-19-16-14)12-8-7-9-17(2)11-12/h8H,3-7,9-11H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H23NO/c1-5-14(11(2)10-15(3)4)12-7-6-8-13(16)9-12/h6-9,11,14,16H,5,10H2,1-4H3	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C14H23NO2/c1-10-7-11-3-2-5-14(8-10,9-11)15-6-4-12(15)13(16)17/h10-12H,2-9H2,1H3,(H,16,17)/t10-,11-,12-,14-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H23NO3/c1-9-6-10(8-14(2,3)7-9)18-13(17)11-4-5-12(16)15-11/h9-11H,4-8H2,1-3H3,(H,15,16)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H23NO3/c1-9-6-10(8-14(2,3)7-9)18-13(17)11-4-5-12(16)15-11/h9-11H,4-8H2,1-3H3,(H,15,16)/t9-,10-,11+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H23NO3/c1-9-6-10(8-14(2,3)7-9)18-13(17)11-4-5-12(16)15-11/h9-11H,4-8H2,1-3H3,(H,15,16)/t9-,10+,11-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H23NO3/c1-9-6-10(8-14(2,3)7-9)18-13(17)11-4-5-12(16)15-11/h9-11H,4-8H2,1-3H3,(H,15,16)/t9-,10+,11+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H24N2O3/c1-3-5-6-7-8-9-10-14(4-2)11(17)15-13(19)16-12(14)18/h3-10H2,1-2H3,(H2,15,16,17,18,19)	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C14H24N2O4/c1-4-10(5-2)20-12-7-9(14(18)19)6-11(15)13(12)16-8(3)17/h7,10-13H,4-6,15H2,1-3H3,(H,16,17)(H,18,19)/t11-,12+,13+/m0/s1	0	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C14H24N2O7/c1-5-4-6(17)14(20)13(21-5)22-12-10(19)7(15-2)9(18)8(16-3)11(12)23-14/h5,7-13,15-16,18-20H,4H2,1-3H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H25NO17S2/c1-4(16)15-7-9(18)12(6(30-13(7)21)3-29-34(25,26)27)32-14-11(20)10(19)8(17)5(31-14)2-28-33(22,23)24/h5-14,17-21H,2-3H2,1H3,(H,15,16)(H,22,23,24)(H,25,26,27)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H26N2O4/c1-4-10(5-2)20-12-7-9(14(17)18)6-11(15)13(12)16-8-19-3/h7,10-13,16H,4-6,8,15H2,1-3H3,(H,17,18)/t11-,12+,13-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H26O4/c1-6-8-11(9-7-2)12(15)17-10-18-13(16)14(3,4)5/h11H,6-10H2,1-5H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H27N3O2/c1-11(2)17(12(3)4)9-7-15-13(18)10-16-8-5-6-14(16)19/h11-12H,5-10H2,1-4H3,(H,15,18)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H28N2O/c1-5-16(6-2)10-13(17)15-14-11(3)8-7-9-12(14)4/h11-12,14H,5-10H2,1-4H3,(H,15,17)	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C14H30N2O4/c1-15(2,3)9-11-19-13(17)7-8-14(18)20-12-10-16(4,5)6/h7-12H2,1-6H3/q+2	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H30O4S/c1-2-3-4-5-6-7-8-9-10-11-12-13-14-18-19(15,16)17/h2-14H2,1H3,(H,15,16,17)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H7Cl2NO3/c15-9-3-8(4-10(16)6-9)13-17-11-2-1-7(14(18)19)5-12(11)20-13/h1-6H,(H,18,19)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H8ClN3OS/c15-9-1-2-10-11(5-9)18-13(19)6-12(17-10)14-8(7-16)3-4-20-14/h1-5H,6H2,(H,18,19)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H9Cl2F3N2O2/c15-8-2-4-12(22)11(6-8)21-13(23)20-10-5-7(14(17,18)19)1-3-9(10)16/h1-6,22H,(H2,20,21,23)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H9Cl2N3O2/c15-8-4-2-1-3-7(8)11-12-9(5-6-10(16)18-12)17-13(20)14(21)19-11/h1-6,14,21H,(H,17,20)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H9Cl2N3O2/c15-8-4-2-1-3-7(8)11-12-9(5-6-10(16)18-12)17-13(20)14(21)19-11/h1-6,14,21H,(H,17,20)/t14-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H9Cl2N3O2/c15-8-4-2-1-3-7(8)11-12-9(5-6-10(16)18-12)17-13(20)14(21)19-11/h1-6,14,21H,(H,17,20)/t14-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C14H9Cl3N2OS/c1-21-14-18-9-5-8(16)12(6-10(9)19-14)20-11-4-2-3-7(15)13(11)17/h2-6H,1H3,(H,18,19)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H9ClF3NO2/c15-9-3-4-11-10(7-9)13(14(16,17)18,21-12(20)19-11)6-5-8-1-2-8/h3-4,7-8H,1-2H2,(H,19,20)	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C14H9ClF3NO2/c15-9-3-4-11-10(7-9)13(14(16,17)18,21-12(20)19-11)6-5-8-1-2-8/h3-4,7-8H,1-2H2,(H,19,20)/t13-/m0/s1	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C14H9ClN2O3S/c15-7-3-4-9-8(6-7)11(13(19)17(9)14(16)20)12(18)10-2-1-5-21-10/h1-6,11H,(H2,16,20)/t11-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C14H9NO4/c16-11(17)7-15-13(18)9-5-1-3-8-4-2-6-10(12(8)9)14(15)19/h1-6H,7H2,(H,16,17)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H10BrClN4S/c1-8-19-20-13-7-18-14(9-4-2-3-5-11(9)17)10-6-12(16)22-15(10)21(8)13/h2-6H,7H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H10Cl2N2O/c16-9-5-6-13-11(7-9)15(18-8-14(20)19-13)10-3-1-2-4-12(10)17/h1-7H,8H2,(H,19,20)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H10Cl2N2O2/c16-8-5-6-12-10(7-8)13(19-15(21)14(20)18-12)9-3-1-2-4-11(9)17/h1-7,15,21H,(H,18,20)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H10Cl2N2O2/c16-8-5-6-12-10(7-8)13(19-15(21)14(20)18-12)9-3-1-2-4-11(9)17/h1-7,15,21H,(H,18,20)/t15-/m0/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C15H10Cl2N2O2/c16-8-5-6-12-10(7-8)13(19-15(21)14(20)18-12)9-3-1-2-4-11(9)17/h1-7,15,21H,(H,18,20)/t15-/m1/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C15H10ClN3O3/c16-12-4-2-1-3-10(12)15-11-7-9(19(21)22)5-6-13(11)18-14(20)8-17-15/h1-7H,8H2,(H,18,20)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H10O2/c16-14-11-8-4-5-9-12(11)15(17)13(14)10-6-2-1-3-7-10/h1-9,13H	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H10O4/c16-10-3-1-9(2-4-10)13-8-19-14-7-11(17)5-6-12(14)15(13)18/h1-8,16-17H	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C15H10O7/c16-7-4-10(19)12-11(5-7)22-15(14(21)13(12)20)6-1-2-8(17)9(18)3-6/h1-5,16-19,21H	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H11ClN2O/c1-10-17-13-8-4-2-6-11(13)15(19)18(10)14-9-5-3-7-12(14)16/h2-9H,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H11ClN2O/c16-11-6-7-13-12(8-11)15(17-9-14(19)18-13)10-4-2-1-3-5-10/h1-8H,9H2,(H,18,19)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H11ClN2O/c16-11-7-4-8-12-14(11)15(17-9-13(19)18-12)10-5-2-1-3-6-10/h1-8H,9H2,(H,18,19)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H11ClN2O2/c16-10-6-7-12-11(8-10)13(9-4-2-1-3-5-9)18-15(20)14(19)17-12/h1-8,15,20H,(H,17,19)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H11ClN2O2/c16-10-6-7-12-11(8-10)13(9-4-2-1-3-5-9)18-15(20)14(19)17-12/h1-8,15,20H,(H,17,19)/t15-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H11ClN2O2/c16-10-6-7-12-11(8-10)13(9-4-2-1-3-5-9)18-15(20)14(19)17-12/h1-8,15,20H,(H,17,19)/t15-/m1/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C15H11ClN2O2/c16-10-6-7-12-13(8-10)18(11-4-2-1-3-5-11)15(20)9-14(19)17-12/h1-8H,9H2,(H,17,19)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H11ClN2O2/c16-11-6-7-13-12(8-11)15(10-4-2-1-3-5-10)18(20)9-14(19)17-13/h1-8,20H,9H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H11ClN2O2/c16-11-6-7-13-12(8-11)15(10-4-2-1-3-5-10)18(20)9-14(19)17-13/h1-8H,9H2,(H,17,19)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H11I4NO4/c16-8-4-7(5-9(17)13(8)21)24-14-10(18)1-6(2-11(14)19)3-12(20)15(22)23/h1-2,4-5,12,21H,3,20H2,(H,22,23)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H11I4NO4/c16-8-4-7(5-9(17)13(8)21)24-14-10(18)1-6(2-11(14)19)3-12(20)15(22)23/h1-2,4-5,12,21H,3,20H2,(H,22,23)/t12-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H11N3O3/c19-14-9-16-15(10-4-2-1-3-5-10)12-8-11(18(20)21)6-7-13(12)17-14/h1-8H,9H2,(H,17,19)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H11N5O2/c16-8-10-11(9-22-13-5-1-2-6-18-13)19-15(17)20-14(10)12-4-3-7-21-12/h1-7H,9H2,(H2,17,19,20)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H12BrNO3/c16-11-6-4-9(5-7-11)15(20)12-3-1-2-10(14(12)17)8-13(18)19/h1-7H,8,17H2,(H,18,19)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H12I3NO4/c16-9-6-8(1-2-13(9)20)23-14-10(17)3-7(4-11(14)18)5-12(19)15(21)22/h1-4,6,12,20H,5,19H2,(H,21,22)	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C15H12I3NO4/c16-9-6-8(1-2-13(9)20)23-14-10(17)3-7(4-11(14)18)5-12(19)15(21)22/h1-4,6,12,20H,5,19H2,(H,21,22)/t12-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H12N2O/c16-15(18)17-13-7-3-1-5-11(13)9-10-12-6-2-4-8-14(12)17/h1-10H,(H2,16,18)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H12N2O/c18-15(10-17-8-7-16-11-17)14-6-5-12-3-1-2-4-13(12)9-14/h1-9,11H,10H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H12N2O2/c16-15(18)17-11-7-3-1-5-9(11)13-14(19-13)10-6-2-4-8-12(10)17/h1-8,13-14H,(H2,16,18)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H12N2O2/c16-15(18)17-11-7-3-1-5-9(11)13-14(19-13)10-6-2-4-8-12(10)17/h1-8,13-14H,(H2,16,18)/t13-,14-/m0/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C15H12N2O2/c16-15(18)17-11-7-3-1-5-9(11)13-14(19-13)10-6-2-4-8-12(10)17/h1-8,13-14H,(H2,16,18)/t13-,14-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H12N2O2/c16-15(19)17-12-7-3-1-5-10(12)9-14(18)11-6-2-4-8-13(11)17/h1-8H,9H2,(H2,16,19)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H12N2O2/c18-13-15(14(19)17-16-13,11-7-3-1-4-8-11)12-9-5-2-6-10-12/h1-10H,(H,16,18)(H,17,19)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H12N2O2/c18-13-15(17-14(19)16-13,11-7-3-1-4-8-11)12-9-5-2-6-10-12/h1-10H,(H2,16,17,18,19)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H13CIN2O/c16-11-6-7-13-14(10-11)18(15(19)8-9-17-13)12-4-2-1-3-5-12/h1-7,10,17H,8-9H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H13CIN2O2/c16-11-6-7-13-12(8-11)15(10-4-2-1-3-5-10)18(20)9-14(19)17-13/h1-8,15,20H,9H2,(H,17,19)/t15-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H13F2N3O3/c1-8(16)23-15(22)13-12-6-19(2)14(21)10-5-9(17)3-4-11(10)20(12)7-18-13/h3-5,7-8H,6H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H13F2N3O3/c1-8(16)23-15(22)13-12-6-19(2)14(21)10-5-9(17)3-4-11(10)20(12)7-18-13/h3-5,7-8H,6H2,1-2H3/t8-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H13FO2/c1-10(15(17)18)11-5-7-12(8-6-11)13-3-2-4-14(16)9-13/h2-10H,1H3,(H,17,18)/t10-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H13FO2/c1-10(15(17)18)12-7-8-13(14(16)9-12)11-5-3-2-4-6-11/h2-10H,1H3,(H,17,18)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H13FO2/c1-10(15(17)18)12-7-8-13(14(16)9-12)11-5-3-2-4-6-11/h2-10H,1H3,(H,17,18)/t10-/m1/s1	0	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C15H13N3O/c16-12-9-10-5-1-3-7-13(10)18(15(17)19)14-8-4-2-6-11(12)14/h1-8,16H,9H2,(H2,17,19)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H13N3O4S/c1-18-13(15(20)17-12-8-4-5-9-16-12)14(19)10-6-2-3-7-11(10)23(18,21)22/h2-9,19H,1H3,(H,16,17,20)	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C15H13NO3/c17-14(10-4-2-1-3-5-10)13-7-6-12-11(15(18)19)8-9-16(12)13/h1-7,11H,8-9H2,(H,18,19)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H13NO3/c17-14(10-4-2-1-3-5-10)13-7-6-12-11(15(18)19)8-9-16(12)13/h1-7,11H,8-9H2,(H,18,19)/t11-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H13NO3/c17-14(10-4-2-1-3-5-10)13-7-6-12-11(15(18)19)8-9-16(12)13/h1-7,11H,8-9H2,(H,18,19)/t11-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H13NO3S2/c1-10(7-11-5-3-2-4-6-11)8-12-14(19)16(9-13(17)18)15(20)21-12/h2-8H,9H2,1H3,(H,17,18)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H13NO3S2/c1-10(7-11-5-3-2-4-6-11)8-12-14(19)16(9-13(17)18)15(20)21-12/h2-8H,9H2,1H3,(H,17,18)/b10-7+,12-8-	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H13NO4/c1-10(17)16-11-6-8-12(9-7-11)20-15(19)13-4-2-3-5-14(13)18/h2-9,18H,1H3,(H,16,17)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H14CIN3O/c16-12-6-4-11(5-7-12)15(20,14-18-9-10-19-14)13-3-1-2-8-17-13/h1-8,20H,9-10H2,(H,18,19)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H14CIN3O/c16-12-6-4-11(5-7-12)15(20,14-18-9-10-19-14)13-3-1-2-8-17-13/h1-8,20H,9-10H2,(H,18,19)/t15-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C15H14ClN3O/c16-12-6-4-11(5-7-12)15(20,14-18-9-10-19-14)13-3-1-2-8-17-13/h1-8,20H,9-10H2,(H,18,19)/t15-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H14ClN3O4S/c16-8-6-24-14-10(13(21)19(14)11(8)15(22)23)18-12(20)9(17)7-4-2-1-3-5-7/h1-5,9-10,14H,6,17H2,(H,18,20)(H,22,23)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H14ClN3O4S/c16-8-6-24-14-10(13(21)19(14)11(8)15(22)23)18-12(20)9(17)7-4-2-1-3-5-7/h1-5,9-10,14H,6,17H2,(H,18,20)(H,22,23)/t9-,10-,14-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H14ClN3O4S/c16-8-6-24-14-10(13(21)19(14)11(8)15(22)23)18-12(20)9(17)7-4-2-1-3-5-7/h1-5,9-10,14H,6,17H2,(H,18,20)(H,22,23)/t9-,10-,14+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H14ClN3O4S/c16-8-6-24-14-10(13(21)19(14)11(8)15(22)23)18-12(20)9(17)7-4-2-1-3-5-7/h1-5,9-10,14H,6,17H2,(H,18,20)(H,22,23)/t9-,10?,14-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H14ClN3O4S/c16-8-6-24-14-10(13(21)19(14)11(8)15(22)23)18-12(20)9(17)7-4-2-1-3-5-7/h1-5,9-10,14H,6,17H2,(H,18,20)(H,22,23)/t9-,10+,14+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H14ClN3O4S3/c16-11-6-12-14(7-13(11)25(17,20)21)26(22,23)19-15(18-12)9-24-8-10-4-2-1-3-5-10/h1-7H,8-9H2,(H,18,19)(H2,17,20,21)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H14ClNO3/c1-9-7-12(8-13(18)19)17(2)14(9)15(20)10-3-5-11(16)6-4-10/h3-7H,8H2,1-2H3,(H,18,19)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H14F3N3O4S2/c16-15(17,18)10-7-11-13(8-12(10)26(19,22)23)27(24,25)21-14(20-11)6-9-4-2-1-3-5-9/h1-5,7-8,14,20-21H,6H2,(H2,19,22,23)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H14F3N3O4S2/c16-15(17,18)10-7-11-13(8-12(10)26(19,22)23)27(24,25)21-14(20-11)6-9-4-2-1-3-5-9/h1-5,7-8,14,20-21H,6H2,(H2,19,22,23)/t14-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H14FN3O3/c1-3-22-15(21)13-12-7-18(2)14(20)10-6-9(16)4-5-11(10)19(12)8-17-13/h4-6,8H,3,7H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H14IN3O3/c1-3-22-15(21)13-11-7-18(2)14(20)12-9(16)5-4-6-10(12)19(11)8-17-13/h4-6,8H,3,7H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H14N2O/c1-9-7-10(2)16-14(9)8-12-11-5-3-4-6-13(11)17-15(12)18/h3-8,16H,1-2H3,(H,17,18)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H14N2O/c1-9-7-10(2)16-14(9)8-12-11-5-3-4-6-13(11)17-15(12)18/h3-8,16H,1-2H3,(H,17,18)/b12-8-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H14N2O/c16-15(18)17-13-7-3-1-5-11(13)9-10-12-6-2-4-8-14(12)17/h1-8H,9-10H2,(H2,16,18)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H14N2O/c18-14-15(17-11-16-14,12-7-3-1-4-8-12)13-9-5-2-6-10-13/h1-10,17H,11H2,(H,16,18)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H14N2O2/c16-15(19)17-12-7-3-1-5-10(12)9-14(18)11-6-2-4-8-13(11)17/h1-8,14,18H,9H2,(H2,16,19)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H14N2O2/c16-15(19)17-12-7-3-1-5-10(12)9-14(18)11-6-2-4-8-13(11)17/h1-8,14,18H,9H2,(H2,16,19)/t14-/m1/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C15H14N2O4/c1-8(18)10-3-4-12-14(15(10)20)11(5-13(19)21-12)9-6-16-17(2)7-9/h3-4,6-7,11,20H,5H2,1-2H3/t11-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H14N2O5S/c1-8-7-12(17-22-8)16-15(19)13-9(2)23(20,21)11-6-4-3-5-10(11)14(13)18/h3-7,9,18H,1-2H3,(H,16,17,19)/t9-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H14N4O/c1-19-15(13-7-3-2-5-12(13)10-20)17-14(18-19)11-6-4-8-16-9-11/h2-9,20H,10H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H14N4O/c1-9-6-8-17-14-12(9)18-15(20)11-3-2-7-16-13(11)19(14)10-4-5-10/h2-3,6-8,10H,4-5H2,1H3,(H,18,20)	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C15H14N4O2S/c16-12-6-8-14(9-7-12)22(20,21)18-15-10-11-17-19(15)13-4-2-1-3-5-13/h1-11,18H,16H2	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H14N4O6S2/c16-15-17-7(5-27-15)6(1-2-9(20)21)11(22)18-10-12(23)19-8(14(24)25)3-4-26-13(10)19/h1,3,5,10,13H,2,4H2,(H2,16,17)(H,18,22)(H,20,21)(H,24,25)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H14N4O6S2/c16-15-17-7(5-27-15)6(1-2-9(20)21)11(22)18-10-12(23)19-8(14(24)25)3-4-26-13(10)19/h1,3,5,10,13H,2,4H2,(H2,16,17)(H,18,22)(H,20,21)(H,24,25)/b6-1-	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H14N4O6S2/c16-15-17-7(5-27-15)6(1-2-9(20)21)11(22)18-10-12(23)19-8(14(24)25)3-4-26-13(10)19/h1,3,5,10,13H,2,4H2,(H2,16,17)(H,18,22)(H,20,21)(H,24,25)/b6-1-/t10-,13-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H14N4O6S2/c16-15-17-7(5-27-15)6(1-2-9(20)21)11(22)18-10-12(23)19-8(14(24)25)3-4-26-13(10)19/h1,3,5,10,13H,2,4H2,(H2,16,17)(H,18,22)(H,20,21)(H,24,25)/b6-1-/t10?,13-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H14N4O6S2/c16-15-17-7(5-27-15)6(1-2-9(20)21)11(22)18-10-12(23)19-8(14(24)25)3-4-26-13(10)19/h1,3,5,10,13H,2,4H2,(H2,16,17)(H,18,22)(H,20,21)(H,24,25)/b6-1+/t10-,13+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H14N4O6S2/c16-15-17-7(5-27-15)6(1-2-9(20)21)11(22)18-10-12(23)19-8(14(24)25)3-4-26-13(10)19/h1,3,5,10,13H,2,4H2,(H2,16,17)(H,18,22)(H,20,21)(H,24,25)/b6-1+/t10?,13-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H14N4O6S2/c16-15-17-7(5-27-15)6(1-2-9(20)21)11(22)18-10-12(23)19-8(14(24)25)3-4-26-13(10)19/h1,3,5,10,13H,2,4H2,(H2,16,17)(H,18,22)(H,20,21)(H,24,25)/t10-,13-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H14O3/c1-11(15(16)17)12-6-5-9-14(10-12)18-13-7-3-2-4-8-13/h2-11H,1H3,(H,16,17)/t11-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H14O4/c1-9-8-14(18-10(2)16)12-6-4-5-7-13(12)15(9)19-11(3)17/h4-8H,1-3H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H15BrN2/c1-17-10-8-15(13-3-2-9-18-11-13)12-4-6-14(16)7-5-12/h2-9,11,17H,10H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H15BrN2/c1-17-10-8-15(13-3-2-9-18-11-13)12-4-6-14(16)7-5-12/h2-9,11,17H,10H2,1H3/b15-8-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H15Cl2N3O/c16-10-1-2-12(13(17)9-10)14-3-4-15(19-18-14)20-7-5-11(21)6-8-20/h1-4,9,11,21H,5-8H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H15ClN2O/c16-11-6-7-13-12(8-11)15(17-9-14(19)18-13)10-4-2-1-3-5-10/h4,6-8H,1-3,5,9H2,(H,18,19)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H15ClN2S/c16-11-6-7-15-13(10-11)18(9-3-8-17)12-4-1-2-5-14(12)19-15/h1-2,4-7,10H,3,8-9,17H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H15FN4O/c1-9-12(8-18-15(17)19-9)14(21)20-7-6-13(20)10-2-4-11(16)5-3-10/h2-5,8,13H,6-7H2,1H3,(H2,17,18,19)/t13-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H15FN4O/c1-9-13-14(10-6-4-5-7-11(10)16)17-8-12(21)19(2)15(13)20(3)18-9/h4-7H,8H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H15N3O/c1-10-14-12(9-18(10)2)17-13(19)8-16-15(14)11-6-4-3-5-7-11/h3-7,9H,8H2,1-2H3,(H,17,19)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H15N3O2/c1-10(19)17-12-8-6-11(7-9-12)15(20)18-14-5-3-2-4-13(14)16/h2-9H,16H2,1H3,(H,17,19)(H,18,20)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H15N7O4S3/c1-21-15(18-19-20-21)29-6-8-5-28-13-10(12(24)22(13)11(8)14(25)26)17-9(23)7-27-4-2-3-16/h2,4,10,13H,5-7H2,1H3,(H,17,23)(H,25,26)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H15N7O4S3/c1-21-15(18-19-20-21)29-6-8-5-28-13-10(12(24)22(13)11(8)14(25)26)17-9(23)7-27-4-2-3-16/h2,4,10,13H,5-7H2,1H3,(H,17,23)(H,25,26)/b4-2-/t10-,13-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C15H15N7O4S3/c1-21-15(18-19-20-21)29-6-8-5-28-13-10(12(24)22(13)11(8)14(25)26)17-9(23)7-27-4-2-3-16/h2,4,10,13H,5-7H2,1H3,(H,17,23)(H,25,26)/b4-2-/t10?,13-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H15N7O4S3/c1-21-15(18-19-20-21)29-6-8-5-28-13-10(12(24)22(13)11(8)14(25)26)17-9(23)7-27-4-2-3-16/h2,4,10,13H,5-7H2,1H3,(H,17,23)(H,25,26)/b4-2+/t10-,13-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H15N7O4S3/c1-21-15(18-19-20-21)29-6-8-5-28-13-10(12(24)22(13)11(8)14(25)26)17-9(23)7-27-4-2-3-16/h2,4,10,13H,5-7H2,1H3,(H,17,23)(H,25,26)/b4-2+/t10-,13+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H15N7O4S3/c1-21-15(18-19-20-21)29-6-8-5-28-13-10(12(24)22(13)11(8)14(25)26)17-9(23)7-27-4-2-3-16/h2,4,10,13H,5-7H2,1H3,(H,17,23)(H,25,26)/b4-2+/t10?,13-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H15NO2/c1-10-6-5-9-13(11(10)2)16-14-8-4-3-7-12(14)15(17)18/h3-9,16H,1-2H3,(H,17,18)	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C15H15NO2S/c16-14(17)11-19(18)15(12-7-3-1-4-8-12)13-9-5-2-6-10-13/h1-10,15H,11H2,(H2,16,17)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H15NO2S/c16-14(17)11-19(18)15(12-7-3-1-4-8-12)13-9-5-2-6-10-13/h1-10,15H,11H2,(H2,16,17)/t19-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H15NO3/c1-10-3-5-11(6-4-10)15(19)13-8-7-12(16(13)2)9-14(17)18/h3-8H,9H2,1-2H3,(H,17,18)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H16Cl3N5/c1-22-2-4-23(5-3-22)15-20-8-11(14(19)21-15)10-6-9(16)7-12(17)13(10)18/h6-8H,2-5H2,1H3,(H2,19,20,21)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H16ClFN2S/c1-19(2)9-10-5-3-4-6-14(10)20-15-8-12(17)11(16)7-13(15)18/h3-8H,9,18H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H16ClN3O/c1-10-8-12(4-5-13(10)16)15(20)19(3)11(2)14-6-7-17-9-18-14/h4-9,11H,1-3H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H16ClN3O/c1-10-8-12(4-5-13(10)16)15(20)19(3)11(2)14-6-7-17-9-18-14/h4-9,11H,1-3H3/t11-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H16ClN3O/c16-13-4-2-1-3-12(13)14-5-6-15(18-17-14)19-9-7-11(20)8-10-19/h1-6,11,20H,7-10H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H16ClN3O4S2/c1-9(10-5-3-2-4-6-10)15-18-12-7-11(16)13(24(17,20)21)8-14(12)25(22,23)19-15/h2-9,15,18-19H,1H3,(H2,17,20,21)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H16ClNO3/c1-9-7-12(8-13(18)14(9)15(19)20-2)17-11-5-3-10(16)4-6-11/h3-6,8-9,14,17H,7H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H16ClNO3/c1-9-7-12(8-13(18)14(9)15(19)20-2)17-11-5-3-10(16)4-6-11/h3-6,8-9,14,17H,7H2,1-2H3/t9-,14-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H16ClNO3/c1-9-7-12(8-13(18)14(9)15(19)20-2)17-11-5-3-10(16)4-6-11/h3-9,14,17-18H,1-2H3/t9-,14-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H16N2O/c1-10-4-3-5-11(2)14(10)17-15(18)12-6-8-13(16)9-7-12/h3-9H,16H2,1-2H3,(H,17,18)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H16N2O/c1-12(13-8-4-2-5-9-13)16-17-15(18)14-10-6-3-7-11-14/h2-12,16H,1H3,(H,17,18)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H16N2O/c1-12(13-8-4-2-5-9-13)16-17-15(18)14-10-6-3-7-11-14/h2-12,16H,1H3,(H,17,18)/t12-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H16N2O/c1-12(13-8-4-2-5-9-13)16-17-15(18)14-10-6-3-7-11-14/h2-12,16H,1H3,(H,17,18)/t12-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H16N2O5/c1-9-6-11(8-13(18)14(9)15(19)22-2)16-10-4-3-5-12(7-10)17(20)21/h3-5,7-9,14,16H,6H2,1-2H3	0	(Kaupp, 2007)

InChI=1S/C15H16N2O5/c1-9-6-11(8-13(18)14(9)15(19)22-2)16-10-4-3-5-12(7-10)17(20)21/h3-5,7-9,14,16H,6H2,1-2H3/t9-,14+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H16N2O5/c1-9-6-11(8-13(18)14(9)15(19)22-2)16-10-4-3-5-12(7-10)17(20)21/h3-9,14,16,18H,1-2H3/t9-,14-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H16N2O6S2/c1-15(2)9(14(22)23)17-11(19)8(12(17)25-15)16-10(18)7(13(20)21)6-3-4-24-5-6/h3-5,7-9,12H,1-2H3,(H,16,18)(H,20,21)(H,22,23)	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C15H16N2O6S2/c1-15(2)9(14(22)23)17-11(19)8(12(17)25-15)16-10(18)7(13(20)21)6-3-4-24-5-6/h3-5,7-9,12H,1-2H3,(H,16,18)(H,20,21)(H,22,23)/t7-,8-,9-,12+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H16N2O6S2/c1-15(2)9(14(22)23)17-11(19)8(12(17)25-15)16-10(18)7(13(20)21)6-3-4-24-5-6/h3-5,7-9,12H,1-2H3,(H,16,18)(H,20,21)(H,22,23)/t7-,8-,9+,12-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H16N2O6S2/c1-15(2)9(14(22)23)17-11(19)8(12(17)25-15)16-10(18)7(13(20)21)6-3-4-24-5-6/h3-5,7-9,12H,1-2H3,(H,16,18)(H,20,21)(H,22,23)/t7-,8-,9+,12-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H16N2O6S2/c1-15(2)9(14(22)23)17-11(19)8(12(17)25-15)16-10(18)7(13(20)21)6-3-4-24-5-6/h3-5,7-9,12H,1-2H3,(H,16,18)(H,20,21)(H,22,23)/t7-,8?,9-,12-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H16N2O6S2/c1-15(2)9(14(22)23)17-11(19)8(12(17)25-15)16-10(18)7(13(20)21)6-3-4-24-5-6/h3-5,7-9,12H,1-2H3,(H,16,18)(H,20,21)(H,22,23)/t7-,8+,9-,12-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H16N2O6S2/c1-15(2)9(14(22)23)17-11(19)8(12(17)25-15)16-10(18)7(13(20)21)6-3-4-24-5-6/h3-5,7-9,12H,1-2H3,(H,16,18)(H,20,21)(H,22,23)/t7-,8+,9-,12+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H16N2O6S2/c1-15(2)9(14(22)23)17-11(19)8(12(17)25-15)16-10(18)7(13(20)21)6-3-4-24-5-6/h3-5,7-9,12H,1-2H3,(H,16,18)(H,20,21)(H,22,23)/t7-,8+,9?,12-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H16N2S/c1-9-8-18-13-4-3-12-15(14(9)13)10-7-17(2)6-5-11(10)16-12/h3-4,8,16H,5-7H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H16N4O/c1-3-19-15-13(10(2)18-19)17-12(20)9-16-14(15)11-7-5-4-6-8-11/h4-8H,3,9H2,1-2H3,(H,17,20)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H16N4O2/c1-10-14-15(18(3)16-10)17(2)12(20)9-13(21)19(14)11-7-5-4-6-8-11/h4-8H,9H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H16N4O3/c1-10-16-14(13(19(21)22)15(20)17-10)18-8-6-11-4-2-3-5-12(11)7-9-18/h2-5H,6-9H2,1H3,(H,16,17,20)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H16O2/c1-11(16)3-4-12-5-6-14-10-15(17-2)8-7-13(14)9-12/h5-10H,3-4H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H16O2/c1-15(2,11-3-7-13(16)8-4-11)12-5-9-14(17)10-6-12/h3-10,16-17H,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H17ClF2N2O4S/c1-8-4-3-5-10(8)19-14(22)20-11-7-6-9(16)13(12(11)21)25(23,24)15(2,17)18/h4,6-7,10,21H,3,5H2,1-2H3,(H2,19,20,22)	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C15H17ClN2O2/c1-18-5-4-15-12(8-18)10(7-14(19)17-15)11-6-9(16)2-3-13(11)20-15/h2-3,6,10,12H,4-5,7-8H2,1H3,(H,17,19)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C15H17ClN2O2/c1-18-5-4-15-12(8-18)10(7-14(19)17-15)11-6-9(16)2-3-13(11)20-15/h2-3,6,10,12H,4-5,7-8H2,1H3,(H,17,19)/t10-,12+,15+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H17ClN2O2/c1-18-5-4-15-12(8-18)10(7-14(19)17-15)11-6-9(16)2-3-13(11)20-15/h2-3,6,10,12H,4-5,7-8H2,1H3,(H,17,19)/t10?,12-,15?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H17ClN2O2/c1-18-5-4-15-12(8-18)10(7-14(19)17-15)11-6-9(16)2-3-13(11)20-15/h2-3,6,10,12H,4-5,7-8H2,1H3,(H,17,19)/t10?,12?,15-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H17F3N6O7S2/c1-30-14(19-8(26)6-33-15(16,17)18)11(29)24-9(10(27)28)7(4-31-12(14)24)5-32-13-20-21-22-23(13)2-3-	0	(Mazumdar et al.,

25/h12,25H,2-6H2,1H3,(H,19,26)(H,27,28)	2023)
InChI=1S/C15H17F3N6O7S2/c1-30-14(19-8(26)6-33-15(16,17)18)11(29)24-9(10(27)28)7(4-31-12(14)24)5-32-13-20-21-22-23(13)2-3-25/h12,25H,2-6H2,1H3,(H,19,26)(H,27,28)/t12-,14-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H17F3N6O7S2/c1-30-14(19-8(26)6-33-15(16,17)18)11(29)24-9(10(27)28)7(4-31-12(14)24)5-32-13-20-21-22-23(13)2-3-25/h12,25H,2-6H2,1H3,(H,19,26)(H,27,28)/t12-,14+/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H17FN2S/c1-18(2)10-11-5-3-4-6-14(11)19-15-8-7-12(16)9-13(15)17/h3-9H,10,17H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H17FN4O2/c1-2-22-15(21)19-12-7-8-13(20-14(12)17)18-9-10-3-5-11(16)6-4-10/h3-8H,2,9H2,1H3,(H,19,21)(H3,17,18,20)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H17FN4O3/c1-2-19-8-10(15(22)23)12(21)9-7-11(16)14(18-13(9)19)20-5-3-17-4-6-20/h7-8,17H,2-6H2,1H3,(H,22,23)	0 (Li et al., 2005)
InChI=1S/C15H17N3O/c1-17-7-8-18-13-4-3-10(19-2)9-12(13)11-5-6-16-15(17)14(11)18/h3-4,9H,5-8H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H17N3O3S/c1-15(2,3)21-14(20)11-10-7-17(4)13(19)12-9(5-6-22-12)18(10)8-16-11/h5-6,8H,7H2,1-4H3	1 (Kaupp, 2007)
InChI=1S/C15H17N5O6S2/c1-25-3-6-4-27-13-9(12(22)20(13)10(6)14(23)24)18-11(21)8(19-26-2)7-5-28-15(16)17-7/h5,9,13H,3-4H2,1-2H3,(H2,16,17)(H,18,21)(H,23,24)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H17N5O6S2/c1-25-3-6-4-27-13-9(12(22)20(13)10(6)14(23)24)18-11(21)8(19-26-2)7-5-28-15(16)17-7/h5,9,13H,3-4H2,1-2H3,(H2,16,17)(H,18,21)(H,23,24)/b19-8-	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H17N5O6S2/c1-25-3-6-4-27-13-9(12(22)20(13)10(6)14(23)24)18-11(21)8(19-26-2)7-5-28-15(16)17-7/h5,9,13H,3-4H2,1-2H3,(H2,16,17)(H,18,21)(H,23,24)/b19-8-/t9-,13-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H17N5O6S2/c1-25-3-6-4-27-13-9(12(22)20(13)10(6)14(23)24)18-11(21)8(19-26-2)7-5-28-15(16)17-7/h5,9,13H,3-4H2,1-2H3,(H2,16,17)(H,18,21)(H,23,24)/b19-8-/t9?,13-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H17N5O6S2/c1-25-3-6-4-27-13-9(12(22)20(13)10(6)14(23)24)18-11(21)8(19-26-2)7-5-28-15(16)17-7/h5,9,13H,3-4H2,1-2H3,(H2,16,17)(H,18,21)(H,23,24)/b19-8+	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H17N5O6S2/c1-25-3-6-4-27-13-9(12(22)20(13)10(6)14(23)24)18-11(21)8(19-26-2)7-5-28-15(16)17-7/h5,9,13H,3-4H2,1-2H3,(H2,16,17)(H,18,21)(H,23,24)/b19-8+/t9-,13-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H17N5O6S2/c1-25-3-6-4-27-13-9(12(22)20(13)10(6)14(23)24)18-11(21)8(19-26-2)7-5-28-15(16)17-7/h5,9,13H,3-4H2,1-2H3,(H2,16,17)(H,18,21)(H,23,24)/t9-,13-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H17N5S/c1-18-8-10-19(11-9-18)14-17-12-4-2-3-5-13(12)21-15-16-6-7-20(14)15/h2-7H,8-11H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H17N7O5S3/c1-21-14(18-19-20-21)30-6-8-5-29-13-15(27-2,17-9(23)7-28-4-3-16)12(26)22(13)10(8)11(24)25/h13H,4-7H2,1-2H3,(H,17,23)(H,24,25)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H17N7O5S3/c1-21-14(18-19-20-21)30-6-8-5-29-13-15(27-2,17-9(23)7-28-4-3-16)12(26)22(13)10(8)11(24)25/h13H,4-7H2,1-2H3,(H,17,23)(H,24,25)/t13-,15-/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H17N7O5S3/c1-21-14(18-19-20-21)30-6-8-5-29-13-15(27-2,17-9(23)7-28-4-3-16)12(26)22(13)10(8)11(24)25/h13H,4-7H2,1-2H3,(H,17,23)(H,24,25)/t13-,15?/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H17N7O5S3/c1-21-14(18-19-20-21)30-6-8-5-29-13-15(27-2,17-9(23)7-28-4-3-16)12(26)22(13)10(8)11(24)25/h13H,4-7H2,1-2H3,(H,17,23)(H,24,25)/t13-,15+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H17NO3/c17-15(16-8-2-1-3-9-16)7-5-12-4-6-13-14(10-12)19-11-18-13/h4-7,10H,1-3,8-9,11H2	1 (Meng et al., 2023)

InChI=1S/C15H17NO3/c17-15(16-8-2-1-3-9-16)7-5-12-4-6-13-14(10-12)19-11-18-13/h4-7,10H,1-3,8-9,11H2/b7-5+	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H17NO5S/c1-3-22(17,18)14-13(15(14,7-16)8-19-2)10-4-5-11-12(6-10)21-9-20-11/h4-6,13-14H,3,8-9H2,1-2H3/t13-,14-,15-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H18ClNO3/c1-18(2)11-12-19(15-5-3-4-10-17-15)14-8-6-13(16)7-9-14/h3-10H,11-12H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H18ClNO3/c1-10-14(18)17-15(20-10)8-3-2-7-13(15)19-12-6-4-5-11(16)9-12/h4-6,9-10,13H,2-3,7-8H2,1H3,(H,17,18)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H18ClNO3/c1-10-14(18)17-15(20-10)8-3-2-7-13(15)19-12-6-4-5-11(16)9-12/h4-6,9-10,13H,2-3,7-8H2,1H3,(H,17,18)/t10-,13-,15-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H18ClNO3/c1-10-14(18)17-15(20-10)8-3-2-7-13(15)19-12-6-4-5-11(16)9-12/h4-6,9-10,13H,2-3,7-8H2,1H3,(H,17,18)/t10-,13-,15?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H18ClNO3/c1-10-14(18)17-15(20-10)8-3-2-7-13(15)19-12-6-4-5-11(16)9-12/h4-6,9-10,13H,2-3,7-8H2,1H3,(H,17,18)/t10-,13-,15?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H18ClNO3/c1-10-14(18)17-15(20-10)8-3-2-7-13(15)19-12-6-4-5-11(16)9-12/h4-6,9-10,13H,2-3,7-8H2,1H3,(H,17,18)/t10-,13+,15-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H18ClNO5S/c1-14(2,3)22-13(19)17-15(9-18)8-12(15)23(20,21)11-6-4-10(16)5-7-11/h4-7,9,12H,8H2,1-3H3,(H,17,19)/t12-,15+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H18F2N6O7S2/c1-29-15(18-8(25)6-31-13(16)17)11(28)23-9(10(26)27)7(4-30-12(15)23)5-32-14-19-20-21-22(14)2-3-24/h12-13,24H,2-6H2,1H3,(H,18,25)(H,26,27)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H18F2N6O7S2/c1-29-15(18-8(25)6-31-13(16)17)11(28)23-9(10(26)27)7(4-30-12(15)23)5-32-14-19-20-21-22(14)2-3-24/h12-13,24H,2-6H2,1H3,(H,18,25)(H,26,27)/t12-,15-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H18F2N6O7S2/c1-29-15(18-8(25)6-31-13(16)17)11(28)23-9(10(26)27)7(4-30-12(15)23)5-32-14-19-20-21-22(14)2-3-24/h12-13,24H,2-6H2,1H3,(H,18,25)(H,26,27)/t12-,15?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H18F2N6O7S2/c1-29-15(18-8(25)6-31-13(16)17)11(28)23-9(10(26)27)7(4-30-12(15)23)5-32-14-19-20-21-22(14)2-3-24/h12-13,24H,2-6H2,1H3,(H,18,25)(H,26,27)/t12-,15+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H18F3NO5/c1-22-9-12-8-19(14(21)24-12)10-2-4-11(5-3-10)23-7-6-13(20)15(16,17)18/h2-5,12-13,20H,6-9H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H18F3NO5/c1-22-9-12-8-19(14(21)24-12)10-2-4-11(5-3-10)23-7-6-13(20)15(16,17)18/h2-5,12-13,20H,6-9H2,1H3/t12-,13-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H18F3NO5/c1-22-9-12-8-19(14(21)24-12)10-2-4-11(5-3-10)23-7-6-13(20)15(16,17)18/h2-5,12-13,20H,6-9H2,1H3/t12-,13-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H18F3NO5/c1-22-9-12-8-19(14(21)24-12)10-2-4-11(5-3-10)23-7-6-13(20)15(16,17)18/h2-5,12-13,20H,6-9H2,1H3/t12-,13+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H18I3NO3/c1-3-5-12(20)19-14-11(17)7-10(16)9(13(14)18)6-8(4-2)15(21)22/h7-8H,3-6H2,1-2H3,(H,19,20)(H,21,22)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H18N2/c1-10-5-6-14-12(9-10)11-3-2-4-13-15(11)17(14)8-7-16-13/h5-6,9,13,16H,2-4,7-8H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H18N2/c1-10-5-6-14-12(9-10)11-3-2-4-13-15(11)17(14)8-7-16-13/h5-6,9,13,16H,2-4,7-8H2,1H3/t13-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C15H18N2/c1-10-5-6-14-12(9-10)11-3-2-4-13-15(11)17(14)8-7-16-13/h5-6,9,13,16H,2-4,7-8H2,1H3/t13-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H18N2O2/c1-3-9-19-15(18)14-10-16-11-17(14)12(2)13-7-5-4-6-8-13/h4-8,10-12H,3,9H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H18N2O2/c1-3-9-19-15(18)14-10-16-11-17(14)12(2)13-7-5-4-6-8-13/h4-8,10-12H,3,9H2,1-2H3/t12-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H18N2O2/c1-3-9-19-15(18)14-10-16-11-17(14)12(2)13-7-5-4-6-8-13/h4-8,10-12H,3,9H2,1-2H3/t12-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H18N2O2/c16-10-13-5-1-2-6-14(13)15(18)17-8-3-4-12-7-9-19-11-12/h1-2,5-6,12H,3-4,7-9,11H2,(H,17,18)/t12-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H18N4O4S/c1-7-11-10(8(2)20)14(21)19(11)12(15(22)23)13(7)24-9-3-17-5-16-6-18(17)4-9/h5-11,20H,3-4H2,1-2H3/p+1/t7-,8-,10-,11-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H18N4O4S/c1-7-11-10(8(2)20)14(21)19(11)12(15(22)23)13(7)24-9-3-17-5-16-6-18(17)4-9/h5-11,20H,3-4H2,1-2H3/t7-,8-,10-,11-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H18N4O5/c1-5-9(16)12(21)8-6(4-24-14(17)22)15(23-2)13-7(18-13)3-19(15)10(8)11(5)20/h6-7,13,18H,3-4,16H2,1-2H3,(H2,17,22)/t6-,7-,13-,15-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H18N4O5/c1-5-9(16)12(21)8-6(4-24-14(17)22)15(23-2)13-7(18-13)3-19(15)10(8)11(5)20/h6-7,13,18H,3-4,16H2,1-2H3,(H2,17,22)/t6-,7-,13-,15-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H18N4O5/c1-5-9(16)12(21)8-6(4-24-14(17)22)15(23-2)13-7(18-13)3-19(15)10(8)11(5)20/h6-7,13,18H,3-4,16H2,1-2H3,(H2,17,22)/t6-,7+,13+,15-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H18N4O5/c1-5-9(16)12(21)8-6(4-24-14(17)22)15(23-2)13-7(18-13)3-19(15)10(8)11(5)20/h6-7,13,18H,3-4,16H2,1-2H3,(H2,17,22)/t6-,7+,13+,15-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H18N4O5/c1-5-9(16)12(21)8-6(4-24-14(17)22)15(23-2)13-7(18-13)3-19(15)10(8)11(5)20/h6-7,13,18H,3-4,16H2,1-2H3,(H2,17,22)/t6-,7+,13+,15+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H18N4O5/c1-5-9(16)12(21)8-6(4-24-14(17)22)15(23-2)13-7(18-13)3-19(15)10(8)11(5)20/h6-7,13,18H,3-4,16H2,1-2H3,(H2,17,22)/t6?,7-,13-,15?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H18N8O5/c1-17-13(27)6-2-19-23(3-6)15-20-11(16)8-12(21-15)22(5-18-8)14-10(26)9(25)7(4-24)28-14/h2-3,5,7,9-10,14,24-26H,4H2,1H3,(H,17,27)(H2,16,20,21)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H18O3/c1-8-4-7-15-11(8)12-10(9(2)13(16)17-12)5-6-14(15,3)18-15/h4,10-12H,2,5-7H2,1,3H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H18O7S/c1-3-23(18,19)13-12(15(13,7-20-2)14(16)17)9-4-5-10-11(6-9)22-8-21-10/h4-6,12-13H,3,7-8H2,1-2H3,(H,16,17)/t12-,13+,15-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H19Cl2NO/c1-18(12-5-3-2-4-6-12)15(19)10-11-7-8-13(16)14(17)9-11/h7-9,12H,2-6,10H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H19N5/c1-19(2)6-5-13-8-17-15-4-3-12(7-14(13)15)9-20-11-16-10-18-20/h3-4,7-8,10-11,17H,5-6,9H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H19NO/c1-13(11-14-7-4-3-5-8-14)16(2)12-15-9-6-10-17-15/h3-10,13H,11-12H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H19NO/c1-13(11-14-7-4-3-5-8-14)16(2)12-15-9-6-10-17-15/h3-10,13H,11-12H2,1-2H3/t13-/m0/s1	1	(2023)
InChI=1S/C15H19NO3/c1-10(15(17)18)11-5-7-12(8-6-11)13-3-2-4-14(9-13)16-19/h5-8,10,13,19H,2-4,9H2,1H3,(H,17,18)/t10-,13+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H19NO6S/c1-3-20-14(17)15(16)12(13(15)23(18,19)4-2)9-5-6-10-11(7-9)22-8-21-10/h5-7,12-13H,3-4,8,16H2,1-2H3/t12-,13-	1	(Mazumdar et al., 2023)

,15+/m0/s1	2023)
InChI=1S/C15H20Cl2N2O3/c1-3-19-6-4-5-9(19)8-18-15(21)12-13(20)10(16)7-11(17)14(12)22-2/h7,9,20H,3-6,8H2,1-2H3,(H,18,21)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H20Cl2N2O3/c1-3-19-6-4-5-9(19)8-18-15(21)12-13(20)10(16)7-11(17)14(12)22-2/h7,9,20H,3-6,8H2,1-2H3,(H,18,21)/t9-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H20N2/c1-2-4-15-14(3-1)13(11-17-15)6-5-12-7-9-16-10-8-12/h1-4,11-12,16-17H,5-10H2	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H20N2O4S/c1-10(18)16-12-4-6-13(7-5-12)21-15(20)14(8-9-22-3)17-11(2)19/h4-7,14H,8-9H2,1-3H3,(H,16,18)(H,17,19)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H20N2O4S/c1-10(18)16-12-4-6-13(7-5-12)21-15(20)14(8-9-22-3)17-11(2)19/h4-7,14H,8-9H2,1-3H3,(H,16,18)(H,17,19)/t14-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H20N2O4S/c1-10(18)16-12-4-6-13(7-5-12)21-15(20)14(8-9-22-3)17-11(2)19/h4-7,14H,8-9H2,1-3H3,(H,16,18)(H,17,19)/t14-/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H20N2O4S/c1-11(18)12-7-9-14(10-8-12)22(20,21)17-15(19)16-13-5-3-2-4-6-13/h7-10,13H,2-6H2,1H3,(H2,16,17,19)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H20N4O4S/c1-7-11-10(8(2)20)14(21)19(11)12(15(22)23)13(7)24-9-3-17-5-16-6-18(17)4-9/h5,7-11,20H,3-4,6H2,1-2H3,(H,22,23)/t7-,8+,9+,10-,11-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H21Cl2N3O/c1-12(21)18-5-2-6-19-7-9-20(10-8-19)15-11-13(16)3-4-14(15)17/h3-4,11H,2,5-10H2,1H3,(H,18,21)	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C15H21ClN6/c16-14-12-19-22(13-14)7-2-1-6-20-8-10-21(11-9-20)15-17-4-3-5-18-15/h3-5,12-13H,1-2,6-11H2	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H21ClO4/c1-3-4-7-18-8-9-19-15(17)11-20-14-6-5-13(16)10-12(14)2/h5-6,10H,3-4,7-9,11H2,1-2H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H21F3N2O2/c1-21-10-3-2-4-14(20-22-11-9-19)12-5-7-13(8-6-12)15(16,17)18/h5-8H,2-4,9-11,19H2,1H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H21F3N2O2/c1-21-10-3-2-4-14(20-22-11-9-19)12-5-7-13(8-6-12)15(16,17)18/h5-8H,2-4,9-11,19H2,1H3/b20-14-	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C15H21F3N2O2/c1-21-10-3-2-4-14(20-22-11-9-19)12-5-7-13(8-6-12)15(16,17)18/h5-8H,2-4,9-11,19H2,1H3/b20-14+	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H21F3N2O2/c1-21-10-3-2-4-14(20-22-11-9-19)12-5-7-13(8-6-12)15(16,17)18/h5-8H,2-4,9-11,19H2,1H3/p+1/b20-14+	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C15H21N/c1-2-16-15-13-9-8-12(10-13)14(15)11-6-4-3-5-7-11/h3-7,12-16H,2,8-10H2,1H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H21N/c1-2-16-15-13-9-8-12(10-13)14(15)11-6-4-3-5-7-11/h3-7,12-16H,2,8-10H2,1H3/t12-,13-,14+,15-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H21N/c1-2-16-15-13-9-8-12(10-13)14(15)11-6-4-3-5-7-11/h3-7,12-16H,2,8-10H2,1H3/t12-,13+,14-,15-/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H21N/c1-2-16-15-13-9-8-12(10-13)14(15)11-6-4-3-5-7-11/h3-7,12-16H,2,8-10H2,1H3/t12?,13?,14?,15-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H21N3O2/c1-15-7-8-17(3)13(15)18(4)12-6-5-10(9-11(12)15)20-14(19)16-2/h5-6,9,13H,7-8H2,1-4H3,(H,16,19)	Chen et al., 2009
InChI=1S/C15H21N3O2/c1-15-7-8-17(3)13(15)18(4)12-6-5-10(9-11(12)15)20-14(19)16-2/h5-6,9,13H,7-8H2,1-4H3,(H,16,19)/p+1/t13-,15-/m0/s1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C15H21N3O2/c1-15-7-8-17(3)13(15)18(4)12-6-5-10(9-11(12)15)20-14(19)16-2/h5-6,9,13H,7-8H2,1-4H3,(H,16,19)/t13-,15-/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H21N3O2/c1-15-7-8-17(3)13(15)18(4)12-6-5-10(9-11(12)15)20-14(19)16-2/h5-6,9,13H,7-8H2,1-4H3,(H,16,19)/t13-,15?/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)

	2023)
InChI=1S/C15H21N3O2/c1-15-7-8-17(3)13(15)18(4)12-6-5-10(9-11(12)15)20-14(19)16-2/h5-6,9,13H,7-8H2,1-4H3,(H,16,19)/t13-,15+/m0/s1	1 (Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C15H21N3O2/c1-15-7-8-17(3)13(15)18(4)12-6-5-10(9-11(12)15)20-14(19)16-2/h5-6,9,13H,7-8H2,1-4H3,(H,16,19)/t13-,15+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H21N3O3S/c1-11-5-7-14(8-6-11)22(20,21)17-15(19)16-18-9-12-3-2-4-13(12)10-18/h5-8,12-13H,2-4,9-10H2,1H3,(H2,16,17,19)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H21N3O3S/c1-11-5-7-14(8-6-11)22(20,21)17-15(19)16-18-9-12-3-2-4-13(12)10-18/h5-8,12-13H,2-4,9-10H2,1H3,(H2,16,17,19)/t12-,13+	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H21N3O4S/c1-7(19)12-10-5-11(13(15(21)22)18(10)14(12)20)23-9-3-4-17(6-9)8(2)16/h7,9-10,12,16,19H,3-6H2,1-2H3,(H,21,22)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H21N3O4S/c1-7(19)12-10-5-11(13(15(21)22)18(10)14(12)20)23-9-3-4-17(6-9)8(2)16/h7,9-10,12,16,19H,3-6H2,1-2H3,(H,21,22)/t7-,9-,10-,12-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H21NO/c1-10-14-8-11-4-5-12(17)9-13(11)15(10,2)6-7-16(14)3/h4-5,9-10,14,17H,6-8H2,1-3H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H21NO/c1-10-14-8-11-4-5-12(17)9-13(11)15(10,2)6-7-16(14)3/h4-5,9-10,14,17H,6-8H2,1-3H3/t10-,14+,15-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H21NO/c1-10-14-8-11-4-5-12(17)9-13(11)15(10,2)6-7-16(14)3/h4-5,9-10,14,17H,6-8H2,1-3H3/t10-,14+,15-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H21NO/c1-10-14-8-11-4-5-12(17)9-13(11)15(10,2)6-7-16(14)3/h4-5,9-10,14,17H,6-8H2,1-3H3/t10-,14+,15?/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H21NO/c1-15-5-6-16(2)10-11(9-15)7-12-3-4-13(17)8-14(12)15/h3-4,8,11,17H,5-7,9-10H2,1-2H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H21NO/c1-15-5-6-16(2)10-11(9-15)7-12-3-4-13(17)8-14(12)15/h3-4,8,11,17H,5-7,9-10H2,1-2H3/t11-,15-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H21NO/c1-15-5-6-16(2)10-11(9-15)7-12-3-4-13(17)8-14(12)15/h3-4,8,11,17H,5-7,9-10H2,1-2H3/t11-,15-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H21NO/c1-15-5-6-16(2)10-11(9-15)7-12-3-4-13(17)8-14(12)15/h3-4,8,11,17H,5-7,9-10H2,1-2H3/t11-,15?/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H21NO2/c1-2-7-16-8-9-18-15-13-10-12(17)5-3-11(13)4-6-14(15)16/h3,5,10,14-15,17H,2,4,6-9H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H21NO2/c1-3-14(18)15(7-9-16(2)10-8-15)12-5-4-6-13(17)11-12/h4-6,11,17H,3,7-10H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H21NO2/c1-3-18-14(17)15(9-11-16(2)12-10-15)13-7-5-4-6-8-13/h4-8H,3,9-12H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H21NO3/c1-3-19-14(18)15(7-9-16(2)10-8-15)12-5-4-6-13(17)11-12/h4-6,11,17H,3,7-10H2,1-2H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H21NO4S2/c1-4-20-9-15(14(16)21)12(13(15)22(3,17)18)10-5-7-11(19-2)8-6-10/h5-8,12-13H,4,9H2,1-3H3,(H2,16,21)/t12-,13-,15-/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H21NO5S/c1-3-19-8-15(7-16)13(14(15)22(2,17)18)10-4-5-11-12(6-10)21-9-20-11/h4-6,13-14H,3,7-9,16H2,1-2H3/t13-,14-,15-/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H21NO5S/c1-3-19-8-15(7-16)13(14(15)22(2,17)18)10-4-5-11-12(6-10)21-9-20-11/h4-6,13-14H,3,7-9,16H2,1-2H3/t13-,14+,15-	1 (Meng et al., 2021)

/m1/s1

InChI=1S/C15H21NO6/c1-8(2)5-9(6-11(17)21-3)12-13(18)10(15(20)22-4)7-16-14(12)19/h7-9H,5-6H2,1-4H3,(H2,16,18,19)/t9-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H22FN3O6/c1-3-4-5-6-24-15(23)18-12-9(16)7-19(14(22)17-12)13-11(21)10(20)8(2)25-13/h7-8,10-11,13,20-21H,3-6H2,1-2H3,(H,17,18,22,23)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H22FN3O6/c1-3-4-5-6-24-15(23)18-12-9(16)7-19(14(22)17-12)13-11(21)10(20)8(2)25-13/h7-8,10-11,13,20-21H,3-6H2,1-2H3,(H,17,18,22,23)/t8-,10-,11-,13-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H22FN3O6/c1-3-4-5-6-24-15(23)18-12-9(16)7-19(14(22)17-12)13-11(21)10(20)8(2)25-13/h7-8,10-11,13,20-21H,3-6H2,1-2H3,(H,17,18,22,23)/t8-,10+,11+,13+/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H22N2O/c1-3-17(4-2)14(18)15(10-13(15)11-16)12-8-6-5-7-9-12/h5-9,13H,3-4,10-11,16H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H22N2O/c1-3-17(4-2)14(18)15(10-13(15)11-16)12-8-6-5-7-9-12/h5-9,13H,3-4,10-11,16H2,1-2H3/t13-,15-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H22N2O/c1-3-17(4-2)14(18)15(10-13(15)11-16)12-8-6-5-7-9-12/h5-9,13H,3-4,10-11,16H2,1-2H3/t13-,15?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H22N2O/c1-3-17(4-2)14(18)15(10-13(15)11-16)12-8-6-5-7-9-12/h5-9,13H,3-4,10-11,16H2,1-2H3/t13-,15+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H22N2O/c1-4-11-9(2)16-13-7-10-5-6-17(3)8-12(10)15(18)14(11)13/h10,12,16H,4-8H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H22N2O/c1-4-11-9(2)16-13-7-10-5-6-17(3)8-12(10)15(18)14(11)13/h10,12,16H,4-8H2,1-3H3/t10-,12-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H22N2O/c1-4-11-9(2)16-13-7-10-5-6-17(3)8-12(10)15(18)14(11)13/h10,12,16H,4-8H2,1-3H3/t10-,12+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H22N2O2/c1-17-8-3-5-12-4-2-6-14(15(12)17)19-11-13-10-16-7-9-18-13/h2,4,6,13,16H,3,5,7-11H2,1H3	1 (Mazumdar et al., 2023)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H22N2O2/c1-17-8-3-5-12-4-2-6-14(15(12)17)19-11-13-10-16-7-9-18-13/h2,4,6,13,16H,3,5,7-11H2,1H3/t13-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H22N2O2/c1-17-8-3-5-12-4-2-6-14(15(12)17)19-11-13-10-16-7-9-18-13/h2,4,6,13,16H,3,5,7-11H2,1H3/t13-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H22N2O2/c1-17(9-3-6-14-7-4-10-19-14)15(18)11-13-5-2-8-16-12-13/h2,5,8,12,14H,3-4,6-7,9-11H2,1H3/t14-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H22N2O4/c1-19-12-7-10(8-13(20-2)14(12)21-3)15(18)17-11-5-4-6-16-9-11/h7-8,11,16H,4-6,9H2,1-3H3,(H,17,18)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H22N4O2/c1-4-7-8-16-13-11-10-18-19(5-2)14(11)17-9-12(13)15(20)21-6-3/h9-10H,4-8H2,1-3H3,(H,16,17)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H22N6O5S/c1-27(3-2-7(16)15(24)25)4-8-10(22)11(23)14(26-8)21-6-20-9-12(17)18-5-19-13(9)21/h5-8,10-11,14,22-23H,2-4,16H2,1H3,(H2-,17,18,19,24,25)/p+1	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C15H22N6O5S/c1-27(3-2-7(16)15(24)25)4-8-10(22)11(23)14(26-8)21-6-20-9-12(17)18-5-19-13(9)21/h5-8,10-11,14,22-23H,2-4,16H2,1H3,(H2-,17,18,19,24,25)/p+1/t7-,8+,10+,11+,14+,27?/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H22N6O5S/c1-27(3-2-7(16)15(24)25)4-8-10(22)11(23)14(26-8)21-6-20-9-12(17)18-5-19-13(9)21/h5-8,10-11,14,22-23H,2-4,16H2,1H3,(H2-,17,18,19,24,25)/t7-,8+,10+,11+,14+,27?/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H22N6O5S/c1-27(3-2-7(16)15(24)26-27)4-8-10(22)11(23)14(25-8)21-6-20-9-12(17)18-5-19-13(9)21/h1,5-8,10-12,14,22-23H,2-4,16-17H2,(H,18,19)/t7-,8+,10+,11-,12-,14-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C15H22O3/c1-11-6-7-12(2)13(10-11)18-9-5-8-15(3,4)14(16)17/h6-7,10H,5,8-9H2,1-4H3,(H,16,17)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H22O4/c1-11(2)9-14(17)13-6-5-12(10-15(13)18)19-8-4-3-7-16/h5-6,10-11,16,18H,3-4,7-9H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H22O4/c16-10-3-1-9(2-4-10)13-8-19-14-7-11(17)5-6-12(14)15(13)18/h8-12,14,16-17H,1-7H2	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C15H23ClN2O2/c1-4-18(5-2)8-6-7-14(19)11-9-12(16)13(17)10-15(11)20-3/h9-10H,4-8,17H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H23N/c1-2-8-15(16-11-6-7-12-16)13-14-9-4-3-5-10-14/h3-5,9-10,15H,2,6-8,11-13H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H23N/c1-2-8-15(16-11-6-7-12-16)13-14-9-4-3-5-10-14/h3-5,9-10,15H,2,6-8,11-13H2,1H3/t15-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H23N3O2/c1-4-18(5-2)11-10-16-15(20)13-6-8-14(9-7-13)17-12(3)19/h6-9H,4-5,10-11H2,1-3H3,(H,16,20)(H,17,19)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H23N3O3S/c1-15(2)11(14(20)21)18-12(19)10(13(18)22-15)16-9-17-7-5-3-4-6-8-17/h9-11,13H,3-8H2,1-2H3,(H,20,21)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H23N3O3S/c1-15(2)11(14(20)21)18-12(19)10(13(18)22-15)16-9-17-7-5-3-4-6-8-17/h9-11,13H,3-8H2,1-2H3,(H,20,21)/b16-9+/t10?,11-,13-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H23N3O3S/c1-15(2)11(14(20)21)18-12(19)10(13(18)22-15)16-9-17-7-5-3-4-6-8-17/h9-11,13H,3-8H2,1-2H3,(H,20,21)/t10-,11-,13+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H23N3O3S/c1-15(2)11(14(20)21)18-12(19)10(13(18)22-15)16-9-17-7-5-3-4-6-8-17/h9-11,13H,3-8H2,1-2H3,(H,20,21)/t10-,11+,13-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H23N3O4S/c1-14(2)9(12(20)21)18-10(19)8(11(18)23-14)17-13(22)15(16)6-4-3-5-7-15/h8-9,11H,3-7,16H2,1-2H3,(H,17,22)(H,20,21)	0	(2023)
InChI=1S/C15H23N3O4S/c1-14(2)9(12(20)21)18-10(19)8(11(18)23-14)17-13(22)15(16)6-4-3-5-7-15/h8-9,11H,3-7,16H2,1-2H3,(H,17,22)(H,20,21)/t8-,9+,11-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H23N3O4S/c1-14(2)9(12(20)21)18-10(19)8(11(18)23-14)17-13(22)15(16)6-4-3-5-7-15/h8-9,11H,3-7,16H2,1-2H3,(H,17,22)(H,20,21)/t8-,9+,11+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H23N3O4S/c1-14(2)9(12(20)21)18-10(19)8(11(18)23-14)17-13(22)15(16)6-4-3-5-7-15/h8-9,11H,3-7,16H2,1-2H3,(H,17,22)(H,20,21)/t8?,9-,11-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H23N3O4S/c1-3-18-7-6-11(10-18)9-17-15(19)13-8-12(23(16,20)21)4-5-14(13)22-2/h4-5,8,11H,3,6-7,9-10H2,1-2H3,(H,17,19)(H2,16,20,21)/t11-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H23N3O4S/c1-3-18-8-4-5-11(18)10-17-15(19)13-9-12(23(16,20)21)6-7-14(13)22-2/h6-7,9,11H,3-5,8,10H2,1-2H3,(H,17,19)(H2,16,20,21)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H23N3O4S/c1-3-18-8-4-5-11(18)10-17-15(19)13-9-12(23(16,20)21)6-7-14(13)22-2/h6-7,9,11H,3-5,8,10H2,1-2H3,(H,17,19)(H2,16,20,21)/t11-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H23N3O4S/c1-3-18-8-4-5-11(18)10-17-15(19)13-9-12(23(16,20)21)6-7-14(13)22-2/h6-7,9,11H,3-5,8,10H2,1-2H3,(H,17,19)(H2,16,20,21)/t11-/m1/s1	0	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C15H23NO/c1-3-15(9-4-5-10-16(2)12-15)13-7-6-8-14(17)11-13/h6-8,11,17H,3-5,9-10,12H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H23NO/c1-3-15(9-4-5-10-16(2)12-15)13-7-6-8-14(17)11-13/h6-8,11,17H,3-5,9-10,12H2,1-2H3/t15-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H23NO2/c1-4-7-13-8-5-6-9-15(13)18-11-14(17)10-16-12(2)3/h4-6,8-9,12,14,16-17H,1,7,10-11H2,2-3H3	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C15H23NO2/c1-4-7-13-8-5-6-9-15(13)18-11-14(17)10-16-12(2)3/h4-6,8-9,12,14,16-17H,1,7,10-11H2,2-3H3/t14-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H23NO2/c17-10-5-11-18-15-7-4-6-14(12-15)13-16-8-2-1-3-9-16/h4,6-7,12,17H,1-3,5,8-11,13H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H23NO3/c1-3-5-9-16-10-12-11-18-14-8-6-7-13(17-4-2)15(14)19-12/h6-8,12,16H,3-5,9-11H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H23NO3/c1-3-5-9-16-10-12-11-18-14-8-6-7-13(17-4-2)15(14)19-12/h6-8,12,16H,3-5,9-11H2,1-2H3/t12-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H23NO3/c1-3-5-9-16-10-12-11-18-14-8-6-7-13(17-4-2)15(14)19-12/h6-8,12,16H,3-5,9-11H2,1-2H3/t12-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H23NO3/c1-4-9-18-14-7-5-6-8-15(14)19-11-13(17)10-16-12(2)3/h4-8,12-13,16-17H,1,9-11H2,2-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H23NO3/c1-4-9-18-14-7-5-6-8-15(14)19-11-13(17)10-16-12(2)3/h4-8,12-13,16-17H,1,9-11H2,2-3H3/t13-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H23NO4S/c1-4-20-10-15(9-16)13(14(15)21(3,17)18)11-5-7-12(19-2)8-6-11/h5-8,13-14H,4,9-10,16H2,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H23NO4S/c1-4-20-10-15(9-16)13(14(15)21(3,17)18)11-5-7-12(19-2)8-6-11/h5-8,13-14H,4,9-10,16H2,1-3H3/t13-,14+,15+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H24N2O3/c1-4-17(5-2)11-10-16-15(18)12-20-14-8-6-13(19-3)7-9-14/h6-9H,4-5,10-12H2,1-3H3,(H,16,18)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H24N2O4S/c1-5-17(6-2)10-9-16-15(18)13-11-12(22(4,19)20)7-8-14(13)21-3/h7-8,11H,5-6,9-10H2,1-4H3,(H,16,18)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H24N4/c1-2-3-4-5-6-7-8-10-16-14-13-9-11-17-15(13)19-12-18-14/h9,11-12H,2-8,10H2,1H3,(H2,16,17,18,19)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H24N4O/c1-3-14-6-4-5-9-19(14)12-15(20)18(2)11-13-10-16-7-8-17-13/h7-8,10,14H,3-6,9,11-12H2,1-2H3/t14-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H24N4O2S/c1-22-10-5-13(11-20)18-14(21)12-3-8-19(9-4-12)15-16-6-2-7-17-15/h2,6-7,12-13,20H,3-5,8-11H2,1H3,(H,18,21)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H24N4O2S/c1-22-10-5-13(11-20)18-14(21)12-3-8-19(9-4-12)15-16-6-2-7-17-15/h2,6-7,12-13,20H,3-5,8-11H2,1H3,(H,18,21)/t13-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H24N4S/c20-15(18-13-4-2-1-3-5-13)19-8-6-12(7-9-19)14-10-16-11-17-14/h10-13H,1-9H2,(H,16,17)(H,18,20)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H25N3O/c1-11(2)16-9-6-10-17-15(19)18-14-12(3)7-5-8-13(14)4/h5,7-8,11,16H,6,9-10H2,1-4H3,(H2,17,18,19)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H25N3O/c1-12(11-13-7-3-2-4-8-13)18-15(19)14(17)9-5-6-10-16/h2-4,7-8,12,14H,5-6,9-11,16-17H2,1H3,(H,18,19)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H25N3O/c1-3-4-5-6-15(18-19-10-9-16)13-8-7-12(2)14(17)11-13/h7-8,11H,3-6,9-10,16-17H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H25N3O/c1-3-4-5-6-15(18-19-10-9-16)13-8-7-12(2)14(17)11-13/h7-8,11H,3-6,9-10,16-17H2,1-2H3/b18-15-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H25N3O/c1-3-4-5-6-15(18-19-10-9-16)13-8-7-12(2)14(17)11-13/h7-8,11H,3-6,9-10,16-17H2,1-2H3/b18-15+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H25N5O3/c1-10(2)21-6-12(7-22-11(3)4)23-9-20-8-18-13-5-17-15(16)19-14(13)20/h5,8,10-12H,6-7,9H2,1-4H3,(H2,16,17,19)	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C15H25NO3/c1-12(2)16-10-14(17)11-19-15-6-4-13(5-7-15)8-9-18-3/h4-7,12,14,16-17H,8-11H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H25NO3/c1-12(2)16-10-14(17)11-19-15-6-4-13(5-7-15)8-9-18-3/h4-7,12,14,16-17H,8-11H2,1-3H3/t14-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H25NO3/c1-12(2)16-10-14(17)11-19-15-6-4-13(5-7-15)8-9-18-3/h4-7,12,14,16-17H,8-11H2,1-3H3/t14-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H26N4/c1-2-3-4-5-6-7-8-10-16-14-13-9-11-17-15(13)19-12-18-14/h9,11-12,14,16-17H,2-8,10H2,1H3,(H,18,19)/t14-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H26N4O/c1-9-6-8-17-14-12(9)18-15(20)11-3-2-7-16-13(11)19(14)10-4-5-10/h9-14,16-17H,2-8H2,1H3,(H,18,20)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H27N5O3/c1-10(2)21-6-12(7-22-11(3)4)23-9-20-8-18-13-5-17-15(16)19-14(13)20/h8,10-12H,5-7,9H2,1-4H3,(H3,16,17,19)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H28O2/c1-15(2,11-3-7-13(16)8-4-11)12-5-9-14(17)10-6-12/h11-14,16-17H,3-10H2,1-2H3	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C15H29N3O5/c1-8(2)7-9(10(19)13(21)18-23)12(20)17-11(14(22)16-6)15(3,4)5/h8-11,19,23H,7H2,1-6H3,(H,16,22)(H,17,20)(H,18,21)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H29NO4/c1-3-4-5-6-7-8-9-10-15(2)19-12-13(20-15)11-18-14(16)17/h13H,3-12H2,1-2H3,(H2,16,17)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H29NO4/c1-3-4-5-6-7-8-9-10-15(2)19-12-13(20-15)11-18-14(16)17/h13H,3-12H2,1-2H3,(H2,16,17)/t13-,15-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C15H29NO4/c1-3-4-5-6-7-8-9-10-15(2)19-12-13(20-15)11-18-14(16)17/h13H,3-12H2,1-2H3,(H2,16,17)/t13-,15+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H29NO4/c1-3-4-5-6-7-8-9-10-15(2)19-12-13(20-15)11-18-14(16)17/h13H,3-12H2,1-2H3,(H2,16,17)/t13-,15+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C15H32N2/c1-16(12-6-7-13-16)10-4-3-5-11-17(2)14-8-9-15-17/h3-15H2,1-2H3/q+2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H10/c1-3-11-7-9-13-5-2-6-14-10-8-12(4-1)15(11)16(13)14/h1-10H	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C16H10ClF4NO2/c1-24-13-5-3-9(17)7-11(13)15(18)10-4-2-8(16(19,20)21)6-12(10)22-14(15)23/h2-7H,1H3,(H,22,23)/t15-/m0/s1	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C16H10N2O8S2/c19-15-9-5-7(27(21,22)23)1-3-11(9)17-13(15)14-16(20)10-6-8(28(24,25)26)2-4-12(10)18-14/h1-6,17,19H,(H,21,22,23)(H,24,25,26)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H11ClF6N4O2/c1-26-11-9(12(28)27(2)13(26)29)14(15(18,19)20,16(21,22)23)25-10(24-11)7-3-5-8(17)6-4-7/h3-6H,1-2H3,(H,24,25)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C16H11ClN2O3/c17-10-6-7-12-11(8-10)13(9-4-2-1-3-5-9)19-14(16(21)22)15(20)18-12/h1-8,14H,(H,18,20)(H,21,22)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H11ClN4/c17-12-6-7-14-13(8-12)16(11-4-2-1-3-5-11)18-9-15-20-19-10-21(14)15/h1-8,10H,9H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H11F6N5O4/c1-25-11-9(12(28)26(2)13(25)29)14(15(17,18)19,16(20,21)22)24-10(23-11)7-4-3-5-8(6-7)27(30)31/h3-6H,1-2H3,(H,23,24)	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C16H12Cl2N2O2/c1-20-13-7-6-9(17)8-11(13)14(19-15(21)16(20)22)10-4-2-3-5-12(10)18/h2-8,15,21H,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H12Cl2N2O2/c1-20-13-7-6-9(17)8-11(13)14(19-15(21)16(20)22)10-4-2-3-5-12(10)18/h2-8,15,21H,1H3/t15-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H12Cl2N2O2/c1-20-13-7-6-9(17)8-11(13)14(19-15(21)16(20)22)10-4-2-3-5-12(10)18/h2-8,15,21H,1H3/t15-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H12ClF2N2O/c1-20-14-7-6-10(17)8-12(14)16(19-9-15(20)21)11-4-2-3-5-13(11)18/h2-8H,9H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)

	2023)
InChI=1S/C16H12ClFN2O2/c1-20-13-7-6-9(17)8-11(13)14(19-15(21)16(20)22)10-4-2-3-5-12(10)18/h2-8,15,21H,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H12ClFN2O2/c1-20-13-7-6-9(17)8-11(13)14(19-15(21)16(20)22)10-4-2-3-5-12(10)18/h2-8,15,21H,1H3/t15-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H12ClFN2O2/c1-20-13-7-6-9(17)8-11(13)14(19-15(21)16(20)22)10-4-2-3-5-12(10)18/h2-8,15,21H,1H3/t15-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H12ClN3O3/c1-9-16(21)19-14-7-6-10(20(22)23)8-12(14)15(18-9)11-4-2-3-5-13(11)17/h2-9H,1H3,(H,19,21)	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H12ClN3O3/c1-9-16(21)19-14-7-6-10(20(22)23)8-12(14)15(18-9)11-4-2-3-5-13(11)17/h2-9H,1H3,(H,19,21)/t9-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H12ClN3O3/c1-9-16(21)19-14-7-6-10(20(22)23)8-12(14)15(18-9)11-4-2-3-5-13(11)17/h2-9H,1H3,(H,19,21)/t9-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H12ClNO3/c1-9(16(19)20)11-4-7-14-13(8-11)18-15(21-14)10-2-5-12(17)6-3-10/h2-9H,1H3,(H,19,20)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H12FN3O3/c1-19-14-7-6-10(20(22)23)8-12(14)16(18-9-15(19)21)11-4-2-3-5-13(11)17/h2-8H,9H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H12O3/c1-19-11-8-6-10(7-9-11)14-15(17)12-4-2-3-5-13(12)16(14)18/h2-9,14H,1H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H12O4/c17-15(18)8-10-5-6-14-13(7-10)16(19)12-4-2-1-3-11(12)9-20-14/h1-7H,8-9H2,(H,17,18)	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H12O6/c1-8-4-13-15(16(18)21-8)10(6-14(17)22-13)9-2-3-11-12(5-9)20-7-19-11/h2-5,10H,6-7H2,1H3	0 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H12O6/c1-8-4-13-15(16(18)21-8)10(6-14(17)22-13)9-2-3-11-12(5-9)20-7-19-11/h2-5,10H,6-7H2,1H3/t10-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H13Cl2NO4/c17-11-5-3-6-12(18)16(11)19-13-7-2-1-4-10(13)8-15(22)23-9-14(20)21/h1-7,19H,8-9H2,(H,20,21)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H13Cl3N2OS/c17-12-1-2-13(14(18)7-12)15(8-21-5-4-20-10-21)22-9-11-3-6-23-16(11)19/h1-7,10,15H,8-9H2	1 (Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C16H13Cl3N2OS/c17-12-1-2-13(14(18)7-12)15(8-21-5-4-20-10-21)22-9-11-3-6-23-16(11)19/h1-7,10,15H,8-9H2/t15-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H13ClN2O/c1-19-14-8-7-12(17)9-13(14)16(18-10-15(19)20)11-5-3-2-4-6-11/h2-9H,10H2,1H3	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H13ClN2O/c17-12-7-5-11(6-8-12)16(20)14-4-2-1-3-13(14)15-18-9-10-19(15)16/h1-8,20H,9-10H2	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H13ClN2O/c17-12-7-5-11(6-8-12)16(20)14-4-2-1-3-13(14)15-18-9-10-19(15)16/h1-8,20H,9-10H2/t16-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H13ClN2O2/c1-18-13-8-7-11(17)9-14(13)19(16(21)10-15(18)20)12-5-3-2-4-6-12/h2-9H,10H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H13ClN2O2/c1-19-13-8-7-11(17)9-12(13)14(18-15(20)16(19)21)10-5-3-2-4-6-10/h2-9,15,20H,1H3	1 (Li et al., 2005)
InChI=1S/C16H13ClN2O2/c1-19-13-8-7-11(17)9-12(13)14(18-15(20)16(19)21)10-5-3-2-4-6-10/h2-9,15,20H,1H3/t15-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H13ClN2O2/c1-19-13-8-7-11(17)9-12(13)14(18-15(20)16(19)21)10-5-3-2-4-6-10/h2-9,15,20H,1H3/t15-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H13ClN2O4S/c17-13-8-11(24(18,22)23)6-7-14(13)19-15(20)9-12(16(19)21)10-4-2-1-3-5-10/h1-8,12H,9H2,(H2,18,22,23)	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H13ClN2O4S/c17-13-8-11(24(18,22)23)6-7-14(13)19-15(20)9-12(16(19)21)10-4-2-1-3-5-10/h1-8,12H,9H2,(H2,18,22,23)/t12-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H13ClN2O4S/c17-13-8-11(24(18,22)23)6-7-14(13)19-15(20)9-12(16(19)21)10-4-2-1-3-5-10/h1-8,12H,9H2,(H2,18,22,23)/t12-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)

[202]

InChI=1S/C16H13ClN2S/c1-19-14-8-7-12(17)9-13(14)16(18-10-15(19)20)11-5-3-2-4-6-11/h2-9H,10H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H13ClN6/c1-22-15-8-12(4-7-14(15)20-21-22)16(23-10-18-9-19-23)11-2-5-13(17)6-3-11/h2-10,16H,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H13ClN6/c1-22-15-8-12(4-7-14(15)20-21-22)16(23-10-18-9-19-23)11-2-5-13(17)6-3-11/h2-10,16H,1H3/t16-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H13ClO3S/c17-12-6-8-13(9-7-12)21(19,20)16-14(10-18)15(16)11-4-2-1-3-5-11/h1-10,14-16H/t14-,15-,16+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H13N3O3/c1-18-14-8-7-12(19(21)22)9-13(14)16(17-10-15(18)20)11-5-3-2-4-6-11/h2-9H,10H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H13N3O3/c1-22-16(21)19-15-17-12-8-7-11(9-13(12)18-15)14(20)10-5-3-2-4-6-10/h2-9H,1H3,(H2,17,18,19,21)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H13NO/c17-16(18)15-13-7-3-1-5-11(13)9-10-12-6-2-4-8-14(12)15/h1-10,15H,(H2,17,18)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H13NO2/c17-16(18)13-9-5-1-3-7-11(9)14-15(19-14)12-8-4-2-6-10(12)13/h1-8,13-15H,(H2,17,18)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H13NO2/c17-16(18)13-9-5-1-3-7-11(9)14-15(19-14)12-8-4-2-6-10(12)13/h1-8,13-15H,(H2,17,18)/t13-,14+,15-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H14ClN3O/c1-18-15-10-20(21)16(11-5-3-2-4-6-11)13-9-12(17)7-8-14(13)19-15/h2-10,18,21H,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H14ClN3O/c1-18-15-10-20(21)16(11-5-3-2-4-6-11)13-9-12(17)7-8-14(13)19-15/h2-9,21H,10H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H14ClN3O/c1-18-15-10-20(21)16(11-5-3-2-4-6-11)13-9-12(17)7-8-14(13)19-15/h2-9H,10H2,1H3,(H,18,19)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H14ClN5O2/c1-8(2)16-20-14(21-24-16)13-11-6-18-15(23)12-9(17)4-3-5-10(12)22(11)7-19-13/h3-5,7-8H,6H2,1-2H3,(H,18,23)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H14ClN5O4/c1-16(24,25)15-19-13(20-26-15)12-10-6-21(2)14(23)11-8(17)4-3-5-9(11)22(10)7-18-12/h3-5,7,24-25H,6H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H14ClNO/c17-10-5-6-16-12(7-10)14-9-18-8-13(14)11-3-1-2-4-15(11)19-16/h1-7,13-14,18H,8-9H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H14ClNO/c17-10-5-6-16-12(7-10)14-9-18-8-13(14)11-3-1-2-4-15(11)19-16/h1-7,13-14,18H,8-9H2/t13-,14-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H14ClNO/c17-10-5-6-16-12(7-10)14-9-18-8-13(14)11-3-1-2-4-15(11)19-16/h1-7,13-14,18H,8-9H2/t13-,14+/m0/s1	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C16H14ClNO2S2/c17-11-6-8-12(9-7-11)22(19,20)15-13(14(15)16(18)21)10-4-2-1-3-5-10/h1-9,13-15H,(H2,18,21)/t13-,14-,15+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H14ClNO2S2/c17-11-6-8-12(9-7-11)22(19,20)15-13(14(15)16(18)21)10-4-2-1-3-5-10/h1-9,13-15H,(H2,18,21)/t13-,14+,15-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H14F2N2O/c1-10-8-11-4-2-3-5-13(11)20(9-10)16(21)12-6-7-19-15(18)14(12)17/h2-7,10H,8-9H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H14F3N3O2S/c1-10-13(20-7-6-14(10)24-9-16(17,18)19)8-25(23)15-21-11-4-2-3-5-12(11)22-15/h2-7H,8-9H2,1H3,(H,21,22)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H14F3N3O2S/c1-10-7-20-11(6-14(10)24-9-16(17,18)19)8-25(23)15-21-12-4-2-3-5-13(12)22-15/h2-7H,8-9H2,1H3,(H,21,22)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H14F3N5O/c1-10(15-14(19)5-20-7-22-15)16(25,6-24-9-21-8-23-24)12-3-2-11(17)4-13(12)18/h2-5,7-10,25H,6H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H14F3N5O/c1-10(15-14(19)5-20-7-22-15)16(25,6-24-9-21-8-23-24)12-3-2-11(17)4-13(12)18/h2-5,7-10,25H,6H2,1H3/t10-,16+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H14F3NO3S/c1-20(8-14(21)22)15(24)11-5-6-13(16(17,18)19)12-7-9(23-2)3-4-10(11)12/h3-7H,8H2,1-2H3,(H,21,22)	1	(Meng et al., 2021)

[203]

InChI=1S/C16H14N2O/c1-11-7-3-6-10-15(11)18-12(2)17-14-9-5-4-8-13(14)16(18)19/h3-10H,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H14N2O/c17-16(19)18-14-7-3-1-5-10(14)12-9-13(12)11-6-2-4-8-15(11)18/h1-8,12-13H,9H2,(H2,17,19)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H14N2O2/c17-14(19)10-18-13-9-5-4-8-12(13)15(16(18)20)11-6-2-1-3-7-11/h1-9,15H,10H2,(H2,17,19)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H14N2O2/c17-14(19)10-18-13-9-5-4-8-12(13)15(16(18)20)11-6-2-1-3-7-11/h1-9,15H,10H2,(H2,17,19)/t15-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H14N2O2/c17-14(19)10-18-13-9-5-4-8-12(13)15(16(18)20)11-6-2-1-3-7-11/h1-9,15H,10H2,(H2,17,19)/t15-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H14N2O4/c1-7(2)8-3-4-12-9(5-8)13(19)10-6-11(16(20)21)14(17)18-15(10)22-12/h3-7H,1-2H3,(H2,17,18)(H,20,21)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H14O3/c1-11(16(18)19)13-8-5-9-14(10-13)15(17)12-6-3-2-4-7-12/h2-11H,1H3,(H,18,19)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H14O3/c1-11(16(18)19)13-8-5-9-14(10-13)15(17)12-6-3-2-4-7-12/h2-11H,1H3,(H,18,19)/t11-/m0/s1	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C16H14O3/c1-11(16(18)19)13-8-5-9-14(10-13)15(17)12-6-3-2-4-7-12/h2-11H,1H3,(H,18,19)/t11-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H14O3/c17-15(10-11-16(18)19)14-8-6-13(7-9-14)12-4-2-1-3-5-12/h1-9H,10-11H2,(H,18,19)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H14O5/c1-9-7-13-15(16(18)20-9)12(8-14(17)21-13)10-3-5-11(19-2)6-4-10/h3-7,12H,8H2,1-2H3/t12-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H14O6/c1-21-13-3-2-8(4-10(13)18)14-7-12(20)16-11(19)5-9(17)6-15(16)22-14/h2-6,14,17-19H,7H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H14O6/c17-9-3-8-4-10(7-1-2-11(18)12(19)5-7)15(21)16(22)14(8)13(20)6-9/h1-3,5-6,10,15,17-21H,4H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H15Cl2N/c1-19-16-9-13(11-4-2-3-5-12(11)16)10-6-7-14(17)15(18)8-10/h2-8,13,16,19H,9H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H15Cl2N/c1-19-16-9-13(11-4-2-3-5-12(11)16)10-6-7-14(17)15(18)8-10/h2-8,13,16,19H,9H2,1H3/t13-,16-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H15Cl2N/c1-19-16-9-13(11-4-2-3-5-12(11)16)10-6-7-14(17)15(18)8-10/h2-8,13,16,19H,9H2,1H3/t13-,16-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H15Cl2N/c1-19-16-9-13(11-4-2-3-5-12(11)16)10-6-7-14(17)15(18)8-10/h2-8,13,16,19H,9H2,1H3/t13-,16+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H15Cl2NO/c1-20-12-3-4-13-11(6-12)8-19-9-14(13)10-2-5-15(17)16(18)7-10/h2-7,14,19H,8-9H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H15ClN2/c1-19-10-9-18-16(12-5-3-2-4-6-12)14-11-13(17)7-8-15(14)19/h2-8,11H,9-10H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H15ClN2O/c17-12-7-5-11(6-8-12)16(20)14-4-2-1-3-13(14)15-18-9-10-19(15)16/h1-8,15,18,20H,9-10H2/t15-,16-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H15ClN2OS/c1-3-10-8-12-15(11-6-4-5-7-13(11)17)18-9-14(20)19(2)16(12)21-10/h4-8H,3,9H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H15ClN2S/c1-2-18-16-19-14-9-8-12(17)10-13(14)15(20-16)11-6-4-3-5-7-11/h3-10,15H,2H2,1H3,(H,18,19)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H15ClN2S/c1-2-18-16-19-14-9-8-12(17)10-13(14)15(20-16)11-6-4-3-5-7-11/h3-10,15H,2H2,1H3,(H,18,19)/t15-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C16H15ClN2S/c1-2-18-16-19-14-9-8-12(17)10-13(14)15(20-16)11-6-4-3-5-7-11/h3-10,15H,2H2,1H3,(H,18,19)/t15-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H15ClO3S/c17-12-6-8-13(9-7-12)21(19,20)16-14(10-18)15(16)11-4-2-1-3-5-11/h1-9,14-16,18H,10H2/t14-,15-,16-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H15F2N3O3/c1-2-24-16(23)14-13-8-20(6-5-17)15(22)11-7-10(18)3-4-12(11)21(13)9-19-14/h3-4,7,9H,2,5-6,8H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H15F2N3O3/c1-2-24-16(23)14-13-8-20(6-5-17)15(22)11-7-10(18)3-4-12(11)21(13)9-19-14/h3-4,7,9H,2,5-6,8H2,1H3/i17-1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H15F2N3O4S/c1-23-13-5-6-19-12(14(13)24-2)8-26(22)16-20-10-4-3-9(25-15(17)18)7-11(10)21-16/h3-7,15H,8H2,1-2H3,(H,20,21)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H15F6N5O/c17-10-6-12(19)11(18)4-8(10)3-9(23)5-14(28)26-1-2-27-13(7-26)24-25-15(27)16(20,21)22/h4,6,9H,1-3,5,7,23H2	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H15N/c1-16-13-8-4-2-6-11(13)10-15(17-16)12-7-3-5-9-14(12)16/h2-9,15,17H,10H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H15N/c1-16-13-8-4-2-6-11(13)10-15(17-16)12-7-3-5-9-14(12)16/h2-9,15,17H,10H2,1H3/p+1/t15-,16+/m1/s1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C16H15N/c1-16-13-8-4-2-6-11(13)10-15(17-16)12-7-3-5-9-14(12)16/h2-9,15,17H,10H2,1H3/t15-,16?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H15N/c1-16-13-8-4-2-6-11(13)10-15(17-16)12-7-3-5-9-14(12)16/h2-9,15,17H,10H2,1H3/t15-,16+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H15N/c1-16-13-8-4-2-6-11(13)10-15(17-16)12-7-3-5-9-14(12)16/h2-9,15,17H,10H2,1H3/t15-,16+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H15N2O5P/c19-14-16(12-7-3-1-4-8-12,13-9-5-2-6-10-13)17-15(20)18(14)11-24(21,22)23/h1-10H,11H2,(H,17,20)(H2,21,22,23)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H15N2O6P/c19-14-16(12-7-3-1-4-8-12,13-9-5-2-6-10-13)17-15(20)18(14)11-24-25(21,22)23/h1-10H,11H2,(H,17,20)(H2,21,22,23)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H15N3/c17-16-18-10-15-13-7-3-1-5-11(13)9-12-6-2-4-8-14(12)19(15)16/h1-8,15H,9-10H2,(H2,17,18)	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C16H15N5O2/c17-15(20-23)14-16(22)21(10-11-6-2-1-3-7-11)13-9-5-4-8-12(13)18-19-14/h1-9,17-19,22H,10H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H15N5O4S3/c22-10(4-9-2-1-3-26-9)19-11-13(23)21-12(15(24)25)8(5-27-14(11)21)6-28-16-17-7-18-20-16/h1-3,7,11,14H,4-6H2,(H,19,22)(H,24,25)(H,17,18,20)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H15N5O4S3/c22-10(4-9-2-1-3-26-9)19-11-13(23)21-12(15(24)25)8(5-27-14(11)21)6-28-16-17-7-18-20-16/h1-3,7,11,14H,4-6H2,(H,19,22)(H,24,25)(H,17,18,20)/t11-,14-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H15N5O4S3/c22-10(4-9-2-1-3-26-9)19-11-13(23)21-12(15(24)25)8(5-27-14(11)21)6-28-16-17-7-18-20-16/h1-3,7,11,14H,4-6H2,(H,19,22)(H,24,25)(H,17,18,20)/t11?,14-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H15N5O7S2/c1-2-6-4-29-14-10(13(25)21(14)11(6)15(26)27)19-12(24)9(20-28-3-8(22)23)7-5-30-16(17)18-7/h2,5,10,14H,1,3-4H2,(H2,17,18)(H,19,24)(H,22,23)(H,26,27)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H15N5O7S2/c1-2-6-4-29-14-10(13(25)21(14)11(6)15(26)27)19-12(24)9(20-28-3-8(22)23)7-5-30-16(17)18-7/h2,5,10,14H,1,3-4H2,(H2,17,18)(H,19,24)(H,22,23)(H,26,27)/b20-9-	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H15N5O7S2/c1-2-6-4-29-14-10(13(25)21(14)11(6)15(26)27)19-12(24)9(20-28-3-8(22)23)7-5-30-16(17)18-7/h2,5,10,14H,1,3-4H2,(H2,17,18)(H,19,24)(H,22,23)(H,26,27)/b20-9-/t10-,14-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H15N5O7S2/c1-2-6-4-29-14-10(13(25)21(14)11(6)15(26)27)19-12(24)9(20-28-3-8(22)23)7-5-30-16(17)18-7/h2,5,10,14H,1,3-	0	(Meng et al., 2021)

4H2,(H2,17,18)(H,19,24)(H,22,23)(H,26,27)/b20-9-/t10-,14+/m0/s1	
InChI=1S/C16H15N5O7S2/c1-2-6-4-29-14-10(13(25)21(14)11(6)15(26)27)19-12(24)9(20-28-3-8(22)23)7-5-30-16(17)18-7/h2,5,10,14H,1,3-4H2,(H2,17,18)(H,19,24)(H,22,23)(H,26,27)/b20-9-/t10?,14-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H15N5O7S2/c1-2-6-4-29-14-10(13(25)21(14)11(6)15(26)27)19-12(24)9(20-28-3-8(22)23)7-5-30-16(17)18-7/h2,5,10,14H,1,3-4H2,(H2,17,18)(H,19,24)(H,22,23)(H,26,27)/b20-9+	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H15N5O7S2/c1-2-6-4-29-14-10(13(25)21(14)11(6)15(26)27)19-12(24)9(20-28-3-8(22)23)7-5-30-16(17)18-7/h2,5,10,14H,1,3-4H2,(H2,17,18)(H,19,24)(H,22,23)(H,26,27)/b20-9+/t10-,14-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H15N5O7S2/c1-2-6-4-29-14-10(13(25)21(14)11(6)15(26)27)19-12(24)9(20-28-3-8(22)23)7-5-30-16(17)18-7/h2,5,10,14H,1,3-4H2,(H2,17,18)(H,19,24)(H,22,23)(H,26,27)/b20-9+/t10-,14+/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H15N5O7S2/c1-2-6-4-29-14-10(13(25)21(14)11(6)15(26)27)19-12(24)9(20-28-3-8(22)23)7-5-30-16(17)18-7/h2,5,10,14H,1,3-4H2,(H2,17,18)(H,19,24)(H,22,23)(H,26,27)/t10-,14-/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H15N7O2/c17-14-20-15(18-8-7-10-3-5-11(24)6-4-10)21-16-19-13(22-23(14)16)12-2-1-9-25-12/h1-6,9,24H,7-8H2,(H3,17,18,19,20,21,22)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H15N7O5S4/c1-28-21-9(7-5-31-16(17)19-7)12(24)20-10-13(25)23-11(15(26)27)6(4-30-14(10)23)3-29-8-2-18-22-32-8/h2,5,10,14H,3-4H2,1H3,(H2,17,19)(H,20,24)(H,26,27)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H15N7O5S4/c1-28-21-9(7-5-31-16(17)19-7)12(24)20-10-13(25)23-11(15(26)27)6(4-30-14(10)23)3-29-8-2-18-22-32-8/h2,5,10,14H,3-4H2,1H3,(H2,17,19)(H,20,24)(H,26,27)/b21-9-/t10-,14-/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H15N7O5S4/c1-28-21-9(7-5-31-16(17)19-7)12(24)20-10-13(25)23-11(15(26)27)6(4-30-14(10)23)3-29-8-2-18-22-32-8/h2,5,10,14H,3-4H2,1H3,(H2,17,19)(H,20,24)(H,26,27)/b21-9-/t10-,14-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H15N7O5S4/c1-28-21-9(7-5-31-16(17)19-7)12(24)20-10-13(25)23-11(15(26)27)6(4-30-14(10)23)3-29-8-2-18-22-32-8/h2,5,10,14H,3-4H2,1H3,(H2,17,19)(H,20,24)(H,26,27)/b21-9-/t10?,14-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H15N7O5S4/c1-28-21-9(7-5-31-16(17)19-7)12(24)20-10-13(25)23-11(15(26)27)6(4-30-14(10)23)3-29-8-2-18-22-32-8/h2,5,10,14H,3-4H2,1H3,(H2,17,19)(H,20,24)(H,26,27)/b21-9+/t10-,14-/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H15N7O5S4/c1-28-21-9(7-5-31-16(17)19-7)12(24)20-10-13(25)23-11(15(26)27)6(4-30-14(10)23)3-29-8-2-18-22-32-8/h2,5,10,14H,3-4H2,1H3,(H2,17,19)(H,20,24)(H,26,27)/b21-9+/t10-,14-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H15NO/c17-16(18)15-13-7-3-1-5-11(13)9-10-12-6-2-4-8-14(12)15/h1-8,15H,9-10H2,(H2,17,18)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H16ClN3O/c1-18-15-10-20(21)16(11-5-3-2-4-6-11)13-9-12(17)7-8-14(13)19-15/h2-9,16,21H,10H2,1H3,(H,18,19)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H16ClN3O/c1-18-15-10-20(21)16(11-5-3-2-4-6-11)13-9-12(17)7-8-14(13)19-15/h2-9,16,21H,10H2,1H3,(H,18,19)/t16-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H16ClN3O3S/c1-10-8-11-4-2-3-5-14(11)20(10)19-16(21)12-6-7-13(17)15(9-12)24(18,22)23/h2-7,9-10H,8H2,1H3,(H,19,21)(H2,18,22,23)	1 (Nikolic et al., 2013)
InChI=1S/C16H16ClN3O3S/c1-9-5-3-4-6-14(9)20-10(2)19-13-8-12(17)15(24(18,22)23)7-11(13)16(20)21/h3-8,10,19H,1-2H3,(H2,18,22,23)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H16ClN3O3S/c1-9-5-3-4-6-14(9)20-10(2)19-13-8-12(17)15(24(18,22)23)7-11(13)16(20)21/h3-8,10,19H,1-2H3,(H2,18,22,23)/t10-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C16H16ClN3O4/c17-9-6-7-10-12(15(22)20(10)13(9)16(23)24)19-14(21)11(18)8-4-2-1-3-5-8/h1-5,10-12H,6-7,18H2,(H,19,21)(H,23,24)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H16ClN3O4/c17-9-6-7-10-12(15(22)20(10)13(9)16(23)24)19-14(21)11(18)8-4-2-1-3-5-8/h1-5,10-12H,6-7,18H2,(H,19,21)(H,23,24)/t10-,11-,12-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H16ClN3O4/c17-9-6-7-10-12(15(22)20(10)13(9)16(23)24)19-14(21)11(18)8-4-2-1-3-5-8/h1-5,10-12H,6-7,18H2,(H,19,21)(H,23,24)/t10-,11-,12+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H16ClN3O4/c17-9-6-7-10-12(15(22)20(10)13(9)16(23)24)19-14(21)11(18)8-4-2-1-3-5-8/h1-5,10-12H,6-7,18H2,(H,19,21)(H,23,24)/t10-,11+,12-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H16ClN3O4/c17-9-6-7-10-12(15(22)20(10)13(9)16(23)24)19-14(21)11(18)8-4-2-1-3-5-8/h1-5,10-12H,6-7,18H2,(H,19,21)(H,23,24)/t10-,11+,12+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H16ClN3O4/c17-9-6-7-10-12(15(22)20(10)13(9)16(23)24)19-14(21)11(18)8-4-2-1-3-5-8/h1-5,10-12H,6-7,18H2,(H,19,21)(H,23,24)/t10?,11-,12-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H16ClN3O5S/c1-6-5-26-15-11(14(23)20(15)12(6)16(24)25)19-13(22)10(18)7-2-3-9(21)8(17)4-7/h2-4,10-11,15,21H,5,18H2,1H3,(H,19,22)(H,24,25)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H16ClN3O5S/c1-6-5-26-15-11(14(23)20(15)12(6)16(24)25)19-13(22)10(18)7-2-3-9(21)8(17)4-7/h2-4,10-11,15,21H,5,18H2,1H3,(H,19,22)(H,24,25)/t10-,11-,15-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H16ClN3O5S/c1-6-5-26-15-11(14(23)20(15)12(6)16(24)25)19-13(22)10(18)7-2-3-9(21)8(17)4-7/h2-4,10-11,15,21H,5,18H2,1H3,(H,19,22)(H,24,25)/t10-,11-,15+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H16ClN3O5S/c1-6-5-26-15-11(14(23)20(15)12(6)16(24)25)19-13(22)10(18)7-2-3-9(21)8(17)4-7/h2-4,10-11,15,21H,5,18H2,1H3,(H,19,22)(H,24,25)/t10-,11?,15-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H16ClNO2S/c1-20-16(19)15(12-4-2-3-5-13(12)17)18-8-6-14-11(10-18)7-9-21-14/h2-5,7,9,15H,6,8,10H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H16ClNO2S/c1-20-16(19)15(12-4-2-3-5-13(12)17)18-8-6-14-11(10-18)7-9-21-14/h2-5,7,9,15H,6,8,10H2,1H3/t15-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H16ClNO3/c17-15-11-5-6-18-8-13(9-1-3-10(19)4-2-9)12(11)7-14(20)16(15)21/h1-4,7,13,18-21H,5-6,8H2	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H16ClNO3S/c1-21-12-6-2-10(3-7-12)14-15(18)16(14)22(19,20)13-8-4-11(17)5-9-13/h2-9,14-16H,18H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H16ClNO3S/c1-21-12-6-2-10(3-7-12)14-15(18)16(14)22(19,20)13-8-4-11(17)5-9-13/h2-9,14-16H,18H2,1H3/t14-,15-,16-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H16ClNO3S/c17-12-6-8-13(9-7-12)22(20,21)15-14(16(15,18)10-19)11-4-2-1-3-5-11/h1-9,14-15,19H,10,18H2/t14-,15-,16-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H16F3NO/c17-16(18,19)13-6-8-14(9-7-13)21-15(10-11-20)12-4-2-1-3-5-12/h1-9,15H,10-11,20H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H16F3NO/c17-16(18,19)13-6-8-14(9-7-13)21-15(10-11-20)12-4-2-1-3-5-12/h1-9,15H,10-11,20H2/t15-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H16F3NO/c17-16(18,19)13-6-8-14(9-7-13)21-15(10-11-20)12-4-2-1-3-5-12/h1-9,15H,10-11,20H2/t15-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H16F3NO4/c1-9-6-11(8-13(21)14(9)15(22)23-2)20-10-4-3-5-12(7-10)24-16(17,18)19/h3-5,7-9,14,20H,6H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H16F3NO4/c1-9-6-11(8-13(21)14(9)15(22)23-2)20-10-4-3-5-12(7-10)24-16(17,18)19/h3-5,7-9,14,20H,6H2,1-2H3/t9-,14+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H16F3NO4/c1-9-6-11(8-13(21)14(9)15(22)23-2)20-10-4-3-5-12(7-10)24-16(17,18)19/h3-9,14,20-21H,1-2H3/t9-,14-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C16H16N2O3S/c1-9(2)8-21-13-5-4-11(6-12(13)7-17)15-18-10(3)14(22-15)16(19)20/h4-6,9H,8H2,1-3H3,(H,19,20)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H16N2O4S/c1-11(19)17-13-3-7-15(8-4-13)23(21,22)16-9-5-14(6-10-16)18-12(2)20/h3-10H,1-2H3,(H,17,19)(H,18,20)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H16N2O6/c1-23-12(19)6-10(9-4-3-5-17-7-9)13-14(20)11(16(22)24-2)8-18-15(13)21/h3-5,7-8,10H,6H2,1-2H3,(H2,18,20,21)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H16N2O6/c1-23-12(19)6-10(9-4-3-5-17-7-9)13-14(20)11(16(22)24-2)8-18-15(13)21/h3-5,7-8,10H,6H2,1-2H3,(H2,18,20,21)/t10-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H16N2O6S2/c1-8(19)24-6-9-7-26-15-12(14(21)18(15)13(9)16(22)23)17-11(20)5-10-3-2-4-25-10/h2-4,12,15H,5-7H2,1H3,(H,17,20)(H,22,23)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H16N2O6S2/c1-8(19)24-6-9-7-26-15-12(14(21)18(15)13(9)16(22)23)17-11(20)5-10-3-2-4-25-10/h2-4,12,15H,5-7H2,1H3,(H,17,20)(H,22,23)/t12-,15-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H16N2O6S2/c1-8(19)24-6-9-7-26-15-12(14(21)18(15)13(9)16(22)23)17-11(20)5-10-3-2-4-25-10/h2-4,12,15H,5-7H2,1H3,(H,17,20)(H,22,23)/t12-,15+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H16N2O6S2/c1-8(19)24-6-9-7-26-15-12(14(21)18(15)13(9)16(22)23)17-11(20)5-10-3-2-4-25-10/h2-4,12,15H,5-7H2,1H3,(H,17,20)(H,22,23)/t12?,15-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H16N2OS/c1-17(2)11-16(19)18-12-7-3-5-9-14(12)20-15-10-6-4-8-13(15)18/h3-10H,11H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H16N4O/c17-15(18)12-5-2-10(3-6-12)1-4-11-7-8-13(16(19)20)9-14(11)21/h1-9,21H,(H3,17,18)(H3,19,20)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H16N4O3/c1-19(2)15-7-6-14(23-15)11-4-3-5-12(10-11)18-16-13(20(21)22)8-9-17-16/h3-10,17-18H,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H16N4O8S/c1-26-19-9(8-3-2-4-27-8)12(21)18-10-13(22)20-11(15(23)24)7(5-28-16(17)25)6-29-14(10)20/h2-4,10,14H,5-6H2,1H3,(H2,17,25)(H,18,21)(H,23,24)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H16N4O8S/c1-26-19-9(8-3-2-4-27-8)12(21)18-10-13(22)20-11(15(23)24)7(5-28-16(17)25)6-29-14(10)20/h2-4,10,14H,5-6H2,1H3,(H2,17,25)(H,18,21)(H,23,24)/b19-9-	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H16N4O8S/c1-26-19-9(8-3-2-4-27-8)12(21)18-10-13(22)20-11(15(23)24)7(5-28-16(17)25)6-29-14(10)20/h2-4,10,14H,5-6H2,1H3,(H2,17,25)(H,18,21)(H,23,24)/b19-9-/t10-,14-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H16N4O8S/c1-26-19-9(8-3-2-4-27-8)12(21)18-10-13(22)20-11(15(23)24)7(5-28-16(17)25)6-29-14(10)20/h2-4,10,14H,5-6H2,1H3,(H2,17,25)(H,18,21)(H,23,24)/b19-9-/t10-,14-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H16N4O8S/c1-26-19-9(8-3-2-4-27-8)12(21)18-10-13(22)20-11(15(23)24)7(5-28-16(17)25)6-29-14(10)20/h2-4,10,14H,5-6H2,1H3,(H2,17,25)(H,18,21)(H,23,24)/b19-9-/t10?,14-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H16N4O8S/c1-26-19-9(8-3-2-4-27-8)12(21)18-10-13(22)20-11(15(23)24)7(5-28-16(17)25)6-29-14(10)20/h2-4,10,14H,5-6H2,1H3,(H2,17,25)(H,18,21)(H,23,24)/b19-9+	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H16N4O8S/c1-26-19-9(8-3-2-4-27-8)12(21)18-10-13(22)20-11(15(23)24)7(5-28-16(17)25)6-29-14(10)20/h2-4,10,14H,5-6H2,1H3,(H2,17,25)(H,18,21)(H,23,24)/b19-9+/t10-,14-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H16N4O8S/c1-26-19-9(8-3-2-4-27-8)12(21)18-10-13(22)20-11(15(23)24)7(5-28-16(17)25)6-29-14(10)20/h2-4,10,14H,5-6H2,1H3,(H2,17,25)(H,18,21)(H,23,24)/b19-9+/t10-,14-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C16H16N4O8S/c1-26-19-9(8-3-2-4-27-8)12(21)18-10-13(22)20-11(15(23)24)7(5-28-16(17)25)6-29-14(10)20/h2-4,10,14H,5-6H2,1H3,(H2,17,25)(H,18,21)(H,23,24)/b19-9+/t10?,14-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H16O5/c1-10-8-13(17)15(16(19)21-10)12(9-14(18)20-2)11-6-4-3-5-7-11/h3-8,12,17H,9H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H16O5/c1-10-8-13(17)15(16(19)21-10)12(9-14(18)20-2)11-6-4-3-5-7-11/h3-8,12,17H,9H2,1-2H3/t12-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17BrN2/c1-19(2)11-9-16(14-4-3-10-18-12-14)13-5-7-15(17)8-6-13/h3-10,12H,11H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H17BrN2/c1-19(2)11-9-16(14-4-3-10-18-12-14)13-5-7-15(17)8-6-13/h3-10,12H,11H2,1-2H3/b16-9-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H17CIN2O/c1-19-14-8-7-12(17)9-13(14)16(18-10-15(19)20)11-5-3-2-4-6-11/h5,7-9H,2-4,6,10H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17CIN2S/c1-18-10-5-11-19-13-7-2-3-8-14(13)20-15-9-4-6-12(17)16(15)19/h2-4,6-9,18H,5,10-11H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H17CIN2S/c1-18-9-4-10-19-13-5-2-3-6-15(13)20-16-8-7-12(17)11-14(16)19/h2-3,5-8,11,18H,4,9-10H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H17FN2S/c1-3-19-5-4-12-10(7-19)15-13(18-12)6-11(17)16-14(15)9(2)8-20-16/h6,8,18H,3-5,7H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H17N3/c1-2-12-18(15-7-10-17-11-8-15)19-13-9-14-5-3-4-6-16(14)19/h3-11,13H,2,12H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17N3O3/c1-18-14-8-7-12(19(21)22)9-13(14)16(17-10-15(18)20)11-5-3-2-4-6-11/h5,7-9H,2-4,6,10H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17N3O4S/c1-8-7-24-15-11(14(21)19(15)12(8)16(22)23)18-13(20)10(17)9-5-3-2-4-6-9/h2-6,10-11,15H,7,17H2,1H3,(H,18,20)(H,22,23)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17N3O4S/c1-8-7-24-15-11(14(21)19(15)12(8)16(22)23)18-13(20)10(17)9-5-3-2-4-6-9/h2-6,10-11,15H,7,17H2,1H3,(H,18,20)(H,22,23)/t10-,11-,15-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H17N3O4S/c1-8-7-24-15-11(14(21)19(15)12(8)16(22)23)18-13(20)10(17)9-5-3-2-4-6-9/h2-6,10-11,15H,7,17H2,1H3,(H,18,20)(H,22,23)/t10-,11?,15-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H17N3O5S/c1-7-6-25-15-11(14(22)19(15)12(7)16(23)24)18-13(21)10(17)8-2-4-9(20)5-3-8/h2-5,10-11,15,20H,6,17H2,1H3,(H,18,21)(H,23,24)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17N3O5S/c1-7-6-25-15-11(14(22)19(15)12(7)16(23)24)18-13(21)10(17)8-2-4-9(20)5-3-8/h2-5,10-11,15,20H,6,17H2,1H3,(H,18,21)(H,23,24)/t10-,11-,15-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17N3O5S/c1-7-6-25-15-11(14(22)19(15)12(7)16(23)24)18-13(21)10(17)8-2-4-9(20)5-3-8/h2-5,10-11,15,20H,6,17H2,1H3,(H,18,21)(H,23,24)/t10-,11-,15+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H17N3O5S/c1-7-6-25-15-11(14(22)19(15)12(7)16(23)24)18-13(21)10(17)8-2-4-9(20)5-3-8/h2-5,10-11,15,20H,6,17H2,1H3,(H,18,21)(H,23,24)/t10-,11?,15-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17N3O7S2/c1-25-16(18-10(20)5-9-3-2-4-27-9)13(23)19-11(12(21)22)8(6-26-15(17)24)7-28-14(16)19/h2-4,14H,5-7H2,1H3,(H2,17,24)(H,18,20)(H,21,22)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17N3O7S2/c1-25-16(18-10(20)5-9-3-2-4-27-9)13(23)19-11(12(21)22)8(6-26-15(17)24)7-28-14(16)19/h2-4,14H,5-7H2,1H3,(H2,17,24)(H,18,20)(H,21,22)/t14-,16-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17N3O7S2/c1-25-16(18-10(20)5-9-3-2-4-27-9)13(23)19-11(12(21)22)8(6-26-15(17)24)7-28-14(16)19/h2-4,14H,5-	0	(Mazumdar et al., 2023)

7H2,1H3,(H2,17,24)(H,18,20)(H,21,22)/t14-,16-/m1/s1	2023)
InChI=1S/C16H17N3O7S2/c1-25-16(18-10(20)5-9-3-2-4-27-9)13(23)19-11(12(21)22)8(6-26-15(17)24)7-28-14(16)19/h2-4,14H,5-7H2,1H3,(H2,17,24)(H,18,20)(H,21,22)/t14-,16?/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17N3O7S2/c1-25-16(18-10(20)5-9-3-2-4-27-9)13(23)19-11(12(21)22)8(6-26-15(17)24)7-28-14(16)19/h2-4,14H,5-7H2,1H3,(H2,17,24)(H,18,20)(H,21,22)/t14-,16+/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17N5O4S/c1-16(2)11(15(24)25)21-13(23)10(14(21)26-16)18-12(22)9(19-20-17)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9-11,14H,1-2H3,(H,18,22)(H,24,25)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17N5O4S3/c22-10(4-9-2-1-3-26-9)19-11-13(23)21-12(15(24)25)8(5-27-14(11)21)6-28-16-17-7-18-20-16/h1-3,11,14,18H,4-7H2,(H,17,20)(H,19,22)(H,24,25)/t11-,14+/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H17N5O7S2/c1-6(22)28-3-7-4-29-14-10(13(24)21(14)11(7)15(25)26)19-12(23)9(20-27-2)8-5-30-16(17)18-8/h5,10,14H,3-4H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,23)(H,25,26)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17N5O7S2/c1-6(22)28-3-7-4-29-14-10(13(24)21(14)11(7)15(25)26)19-12(23)9(20-27-2)8-5-30-16(17)18-8/h5,10,14H,3-4H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,23)(H,25,26)/b20-9-	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17N5O7S2/c1-6(22)28-3-7-4-29-14-10(13(24)21(14)11(7)15(25)26)19-12(23)9(20-27-2)8-5-30-16(17)18-8/h5,10,14H,3-4H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,23)(H,25,26)/b20-9-/t10-,14-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H17N5O7S2/c1-6(22)28-3-7-4-29-14-10(13(24)21(14)11(7)15(25)26)19-12(23)9(20-27-2)8-5-30-16(17)18-8/h5,10,14H,3-4H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,23)(H,25,26)/b20-9-/t10-,14-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17N5O7S2/c1-6(22)28-3-7-4-29-14-10(13(24)21(14)11(7)15(25)26)19-12(23)9(20-27-2)8-5-30-16(17)18-8/h5,10,14H,3-4H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,23)(H,25,26)/b20-9-/t10-,14+/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H17N5O7S2/c1-6(22)28-3-7-4-29-14-10(13(24)21(14)11(7)15(25)26)19-12(23)9(20-27-2)8-5-30-16(17)18-8/h5,10,14H,3-4H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,23)(H,25,26)/b20-9-/t10?,14-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H17N5O7S2/c1-6(22)28-3-7-4-29-14-10(13(24)21(14)11(7)15(25)26)19-12(23)9(20-27-2)8-5-30-16(17)18-8/h5,10,14H,3-4H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,23)(H,25,26)/b20-9+	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H17N5O7S2/c1-6(22)28-3-7-4-29-14-10(13(24)21(14)11(7)15(25)26)19-12(23)9(20-27-2)8-5-30-16(17)18-8/h5,10,14H,3-4H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,23)(H,25,26)/b20-9+/t10-,14-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17N5O7S2/c1-6(22)28-3-7-4-29-14-10(13(24)21(14)11(7)15(25)26)19-12(23)9(20-27-2)8-5-30-16(17)18-8/h5,10,14H,3-4H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,23)(H,25,26)/b20-9+/t10-,14-/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H17N5O7S2/c1-6(22)28-3-7-4-29-14-10(13(24)21(14)11(7)15(25)26)19-12(23)9(20-27-2)8-5-30-16(17)18-8/h5,10,14H,3-4H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,23)(H,25,26)/b20-9+/t10-,14+/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17N5O7S2/c1-6(22)28-3-7-4-29-14-10(13(24)21(14)11(7)15(25)26)19-12(23)9(20-27-2)8-5-30-16(17)18-8/h5,10,14H,3-4H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,23)(H,25,26)/b20-9+/t10?,14-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17N5O8S2/c1-6(22)29-3-7-5-31(27)14-10(13(24)21(14)11(7)15(25)26)19-12(23)9(20-28-2)8-4-30-16(17)18-8/h4,10,14H,3,5H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,23)(H,25,26)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17N5O8S2/c1-6(22)29-3-7-5-31(27)14-10(13(24)21(14)11(7)15(25)26)19-12(23)9(20-28-2)8-4-30-16(17)18-8/h4,10,14H,3,5H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,23)(H,25,26)/b20-9-/t10-,14-,31?/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17N5O8S2/c1-6(22)29-3-7-5-31(27)14-10(13(24)21(14)11(7)15(25)26)19-12(23)9(20-28-2)8-4-30-16(17)18-8/h4,10,14H,3,5H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,23)(H,25,26)/b20-9-/t10?,14-,31?/m0/s1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C16H17N5O8S2/c1-6(22)29-3-7-5-31(27)14-10(13(24)21(14)11(7)15(25)26)19-12(23)9(20-28-2)8-4-30-16(17)18-8/h4,10,14H,3,5H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,23)(H,25,26)/b20-9+/t10-,14-,31-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H17N5O8S2/c1-6(22)29-3-7-5-31(27)14-10(13(24)21(14)11(7)15(25)26)19-12(23)9(20-28-2)8-4-30-16(17)18-8/h4,10,14H,3,5H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,23)(H,25,26)/b20-9+/t10-,14-,31-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17N5O8S2/c1-6(22)29-3-7-5-31(27)14-10(13(24)21(14)11(7)15(25)26)19-12(23)9(20-28-2)8-4-30-16(17)18-8/h4,10,14H,3,5H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,23)(H,25,26)/b20-9+/t10-,14+,31+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H17N5O8S2/c1-6(22)29-3-7-5-31(27)14-10(13(24)21(14)11(7)15(25)26)19-12(23)9(20-28-2)8-4-30-16(17)18-8/h4,10,14H,3,5H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,23)(H,25,26)/b20-9+/t10?,14-,31-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H17N7OS/c1-8-9(2)21-22-16-12(8)13(17)14(25-16)15(24)20-10-5-23(6-10)11-3-18-7-19-4-11/h3-4,7,10H,5-6,17H2,1-2H3,(H,20,24)	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C16H17N7OS/c1-8-9(2)21-22-16-12(8)13(17)14(25-16)15(24)20-10-5-23(6-10)11-3-4-18-7-19-11/h3-4,7,10H,5-6,17H2,1-2H3,(H,20,24)	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C16H17N9O5S2/c1-6-20-23-24(21-6)3-7-4-31-14-10(13(27)25(14)11(7)15(28)29)19-12(26)9(22-30-2)8-5-32-16(17)18-8/h5,10,14H,3-4H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,26)(H,28,29)	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C16H17N9O5S2/c1-6-20-23-24(21-6)3-7-4-31-14-10(13(27)25(14)11(7)15(28)29)19-12(26)9(22-30-2)8-5-32-16(17)18-8/h5,10,14H,3-4H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,26)(H,28,29)/b22-9-/t10-,14-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17N9O5S2/c1-6-20-23-24(21-6)3-7-4-31-14-10(13(27)25(14)11(7)15(28)29)19-12(26)9(22-30-2)8-5-32-16(17)18-8/h5,10,14H,3-4H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,26)(H,28,29)/b22-9-/t10-,14-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17N9O5S2/c1-6-20-23-24(21-6)3-7-4-31-14-10(13(27)25(14)11(7)15(28)29)19-12(26)9(22-30-2)8-5-32-16(17)18-8/h5,10,14H,3-4H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,26)(H,28,29)/b22-9-/t10?,14-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H17N9O5S2/c1-6-20-23-24(21-6)3-7-4-31-14-10(13(27)25(14)11(7)15(28)29)19-12(26)9(22-30-2)8-5-32-16(17)18-8/h5,10,14H,3-4H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,26)(H,28,29)/b22-9+/t10-,14-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17N9O5S2/c1-6-20-23-24(21-6)3-7-4-31-14-10(13(27)25(14)11(7)15(28)29)19-12(26)9(22-30-2)8-5-32-16(17)18-8/h5,10,14H,3-4H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,26)(H,28,29)/b22-9+/t10?,14-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H17N9O5S3/c1-24-16(20-22-23-24)33-4-6-3-31-13-9(12(27)25(13)10(6)14(28)29)19-11(26)8(21-30-2)7-5-32-15(17)18-7/h5,9,13H,3-4H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,26)(H,28,29)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17N9O5S3/c1-24-16(20-22-23-24)33-4-6-3-31-13-9(12(27)25(13)10(6)14(28)29)19-11(26)8(21-30-2)7-5-32-15(17)18-7/h5,9,13H,3-4H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,26)(H,28,29)/b21-8-	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17N9O5S3/c1-24-16(20-22-23-24)33-4-6-3-31-13-9(12(27)25(13)10(6)14(28)29)19-11(26)8(21-30-2)7-5-32-15(17)18-7/h5,9,13H,3-4H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,26)(H,28,29)/b21-8-/t9-,13-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H17N9O5S3/c1-24-16(20-22-23-24)33-4-6-3-31-13-9(12(27)25(13)10(6)14(28)29)19-11(26)8(21-30-2)7-5-32-15(17)18-7/h5,9,13H,3-4H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,26)(H,28,29)/b21-8-/t9-,13-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17N9O5S3/c1-24-16(20-22-23-24)33-4-6-3-31-13-9(12(27)25(13)10(6)14(28)29)19-11(26)8(21-30-2)7-5-32-15(17)18-7/h5,9,13H,3-4H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,26)(H,28,29)/b21-8-/t9-,13+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H17N9O5S3/c1-24-16(20-22-23-24)33-4-6-3-31-13-9(12(27)25(13)10(6)14(28)29)19-11(26)8(21-30-2)7-5-32-15(17)18-7/h5,9,13H,3-4H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,26)(H,28,29)/b21-8-/t9?,13-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H17N9O5S3/c1-24-16(20-22-23-24)33-4-6-3-31-13-9(12(27)25(13)10(6)14(28)29)19-11(26)8(21-30-2)7-5-32-15(17)18-	0	(Meng et al., 2021)

7/h5,9,13H,3-4H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,26)(H,28,29)/b21-8+	
InChI=1S/C16H17N9O5S3/c1-24-16(20-22-23-24)33-4-6-3-31-13-9(12(27)25(13)10(6)14(28)29)19-11(26)8(21-30-2)7-5-32-15(17)18-7/h5,9,13H,3-4H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,26)(H,28,29)/b21-8+/t9-,13-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17N9O5S3/c1-24-16(20-22-23-24)33-4-6-3-31-13-9(12(27)25(13)10(6)14(28)29)19-11(26)8(21-30-2)7-5-32-15(17)18-7/h5,9,13H,3-4H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,26)(H,28,29)/b21-8+/t9-,13-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17N9O5S3/c1-24-16(20-22-23-24)33-4-6-3-31-13-9(12(27)25(13)10(6)14(28)29)19-11(26)8(21-30-2)7-5-32-15(17)18-7/h5,9,13H,3-4H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,26)(H,28,29)/b21-8+/t9-,13+/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17N9O5S3/c1-24-16(20-22-23-24)33-4-6-3-31-13-9(12(27)25(13)10(6)14(28)29)19-11(26)8(21-30-2)7-5-32-15(17)18-7/h5,9,13H,3-4H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,26)(H,28,29)/b21-8+/t9?,13-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17NO3/c18-11-3-1-8-7-10-9-2-4-12(19)15-16(9,5-6-17-10)13(8)14(11)20-15/h1-4,9-10,12,15,17-19H,5-7H2	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H17NO3/c18-11-3-1-8-7-10-9-2-4-12(19)15-16(9,5-6-17-10)13(8)14(11)20-15/h1-4,9-10,12,15,17-19H,5-7H2/t9-,10-,12-,15+,16+/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H17NO3/c18-11-3-1-8-7-10-9-2-4-12(19)15-16(9,5-6-17-10)13(8)14(11)20-15/h1-4,9-10,12,15,17-19H,5-7H2/t9-,10?,12+,15-,16?/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H17NO3/c18-11-3-1-8-7-10-9-2-4-12(19)15-16(9,5-6-17-10)13(8)14(11)20-15/h1-4,9-10,12,15,17-19H,5-7H2/t9-,10+,12-,15-,16-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H17NO3/c18-11-3-1-8-7-10-9-2-4-12(19)15-16(9,5-6-17-10)13(8)14(11)20-15/h1-4,9-10,12,15,17-19H,5-7H2/t9-,10+,12-,15+,16+/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H18CIN3O3/c17-13-3-1-11(2-4-13)12-7-15(22)20(8-12)10-16(23)19-6-5-18-14(21)9-19/h1-4,12H,5-10H2,(H,18,21)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H18CIN3O3/c17-13-3-1-11(2-4-13)12-7-15(22)20(8-12)10-16(23)19-6-5-18-14(21)9-19/h1-4,12H,5-10H2,(H,18,21)/t12-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H18FN3O2/c1-2-22-16(21)20-15-8-7-13(9-14(15)18)19-10-11-3-5-12(17)6-4-11/h3-9,19H,2,10,18H2,1H3,(H,20,21)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H18FN3O3/c1-2-19-9-11(16(22)23)15(21)10-7-12(17)14(8-13(10)19)20-5-3-18-4-6-20/h7-9,18H,2-6H2,1H3,(H,22,23)	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H18FN3O3/c17-11-3-1-9(2-4-11)15(10-7-12(21)8-10)18-16(23)13-5-6-14(22)20-19-13/h1-4,10,12,15,21H,5-8H2,(H,18,23)(H,20,22)/t10?,12?,15-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H18N2/c1-17-14-11-12-7-3-5-9-15(12)18(2)16-10-6-4-8-13(14)16/h3-10,14,17H,11H2,1-2H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H18N2/c1-17-14-11-12-7-3-5-9-15(12)18(2)16-10-6-4-8-13(14)16/h3-10,14,17H,11H2,1-2H3/t14-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H18N2/c1-18-10-14(12-6-3-2-4-7-12)13-8-5-9-16(17)15(13)11-18/h2-9,14H,10-11,17H2,1H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H18N2/c1-18-10-14(12-6-3-2-4-7-12)13-8-5-9-16(17)15(13)11-18/h2-9,14H,10-11,17H2,1H3/t14-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H18N2/c1-18-10-14(12-6-3-2-4-7-12)13-8-5-9-16(17)15(13)11-18/h2-9,14H,10-11,17H2,1H3/t14-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H18N2O4S/c1-16(2)12(15(21)22)18-13(20)11(14(18)23-16)17-10(19)8-9-6-4-3-5-7-9/h3-7,11-12,14H,8H2,1-2H3,(H,17,19)(H,21,22)	(Mazumdar et al., 2023)

2023)

InChI=1S/C16H18N2O4S/c1-16(2)12(15(21)22)18-13(20)11(14(18)23-16)17-10(19)8-9-6-4-3-5-7-9/h3-7,11-12,14H,8H2,1-2H3,(H,17,19)(H,21,22)/t11-,12-,14+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H18N2O4S/c1-16(2)12(15(21)22)18-13(20)11(14(18)23-16)17-10(19)8-9-6-4-3-5-7-9/h3-7,11-12,14H,8H2,1-2H3,(H,17,19)(H,21,22)/t11-,12+,14-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H18N2O4S/c1-16(2)12(15(21)22)18-13(20)11(14(18)23-16)17-10(19)8-9-6-4-3-5-7-9/h3-7,11-12,14H,8H2,1-2H3,(H,17,19)(H,21,22)/t11?,12-,14-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H18N2O4S2/c1-16(2)12(15(21)22)18-13(20)11(14(18)24-16)17-10(19)8-23-9-6-4-3-5-7-9/h3-7,11-12,14H,8H2,1-2H3,(H,17,19)(H,21,22)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H18N2O4S2/c1-16(2)12(15(21)22)18-13(20)11(14(18)24-16)17-10(19)8-23-9-6-4-3-5-7-9/h3-7,11-12,14H,8H2,1-2H3,(H,17,19)(H,21,22)/t11-,12+,14-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H18N2O4S2/c1-16(2)12(15(21)22)18-13(20)11(14(18)24-16)17-10(19)8-23-9-6-4-3-5-7-9/h3-7,11-12,14H,8H2,1-2H3,(H,17,19)(H,21,22)/t11-,12+,14+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H18N2O4S2/c1-16(2)12(15(21)22)18-13(20)11(14(18)24-16)17-10(19)8-23-9-6-4-3-5-7-9/h3-7,11-12,14H,8H2,1-2H3,(H,17,19)(H,21,22)/t11?,12-,14-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H18N2O5S/c1-16(2)12(15(21)22)18-13(20)11(14(18)24-16)17-10(19)8-23-9-6-4-3-5-7-9/h3-7,11-12,14H,8H2,1-2H3,(H,17,19)(H,21,22)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H18N2O5S/c1-16(2)12(15(21)22)18-13(20)11(14(18)24-16)17-10(19)8-23-9-6-4-3-5-7-9/h3-7,11-12,14H,8H2,1-2H3,(H,17,19)(H,21,22)/p-1/t11-,12+,14-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H18N2O5S/c1-16(2)12(15(21)22)18-13(20)11(14(18)24-16)17-10(19)8-23-9-6-4-3-5-7-9/h3-7,11-12,14H,8H2,1-2H3,(H,17,19)(H,21,22)/t11-,12-,14+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H18N2O5S/c1-16(2)12(15(21)22)18-13(20)11(14(18)24-16)17-10(19)8-23-9-6-4-3-5-7-9/h3-7,11-12,14H,8H2,1-2H3,(H,17,19)(H,21,22)/t11-,12+,14-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H18N2O5S/c1-16(2)12(15(21)22)18-13(20)11(14(18)24-16)17-10(19)8-23-9-6-4-3-5-7-9/h3-7,11-12,14H,8H2,1-2H3,(H,17,19)(H,21,22)/t11?,12-,14-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H18N2O7S2/c1-15(2)9(12(22)23)18-13(24)16(25-3,14(18)27-15)17-10(19)8(11(20)21)7-4-5-26-6-7/h4-6,8-9,14H,1-3H3,(H,17,19)(H,20,21)(H,22,23)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H18N2O7S2/c1-15(2)9(12(22)23)18-13(24)16(25-3,14(18)27-15)17-10(19)8(11(20)21)7-4-5-26-6-7/h4-6,8-9,14H,1-3H3,(H,17,19)(H,20,21)(H,22,23)/t8-,9-,14-,16-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H18N2O7S2/c1-15(2)9(12(22)23)18-13(24)16(25-3,14(18)27-15)17-10(19)8(11(20)21)7-4-5-26-6-7/h4-6,8-9,14H,1-3H3,(H,17,19)(H,20,21)(H,22,23)/t8-,9+,14-,16-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H18N2O7S2/c1-15(2)9(12(22)23)18-13(24)16(25-3,14(18)27-15)17-10(19)8(11(20)21)7-4-5-26-6-7/h4-6,8-9,14H,1-3H3,(H,17,19)(H,20,21)(H,22,23)/t8-,9+,14+,16+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H18N2O7S2/c1-15(2)9(12(22)23)18-13(24)16(25-3,14(18)27-15)17-10(19)8(11(20)21)7-4-5-26-6-7/h4-6,8-9,14H,1-3H3,(H,17,19)(H,20,21)(H,22,23)/t8?,9-,14+,16-/m0/s1	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C16H18N2O7S2/c1-16(2)11(15(21)22)18-13(20)9(14(18)26-16)17-12(19)10(27(23,24)25)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9-11,14H,1-2H3,(H,17,19)(H,21,22)(H,23,24,25)	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C16H18N2O7S2/c1-16(2)11(15(21)22)18-13(20)9(14(18)26-16)17-12(19)10(27(23,24)25)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9-11,14H,1-2H3,(H,17,19)(H,21,22)(H,23,24,25)/t9-,10-,11-,14-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H18N2O7S2/c1-16(2)11(15(21)22)18-13(20)9(14(18)26-16)17-12(19)10(27(23,24)25)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9-11,14H,1-2H3,(H,17,19)(H,21,22)(H,23,24,25)/t9-,10-,11+,14-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H18N2O7S2/c1-16(2)11(15(21)22)18-13(20)9(14(18)26-16)17-12(19)10(27(23,24)25)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9-11,14H,1-2H3,(H,17,19)(H,21,22)(H,23,24,25)/t9-,10?,11+,14-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H18N2O7S2/c1-16(2)11(15(21)22)18-13(20)9(14(18)26-16)17-12(19)10(27(23,24)25)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9-11,14H,1-2H3,(H,17,19)(H,21,22)(H,23,24,25)/t9?,10-,11-,14-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H18N2S/c1-17-11-6-12-18-13-7-2-4-9-15(13)19-16-10-5-3-8-14(16)18/h2-5,7-10,17H,6,11-12H2,1H3	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C16H18N4O2/c1-4-17-16(18-5-1)20-8-6-19(7-9-20)11-13-2-3-14-15(10-13)22-12-21-14/h1-5,10H,6-9,11-12H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H18N4O2/c21-15(18-12-13-4-2-1-3-5-13)8-11-19-20-16(22)14-6-9-17-10-7-14/h1-7,9-10,19H,8,11-12H2,(H,18,21)(H,20,22)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19BrN2/c1-19(2)12-10-15(16-5-3-4-11-18-16)13-6-8-14(17)9-7-13/h3-9,11,15H,10,12H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19ClN2/c1-19(2)12-10-15(16-5-3-4-11-18-16)13-6-8-14(17)9-7-13/h3-9,11,15H,10,12H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19ClN2/c1-2-7-19-8-5-12(6-9-19)15-11-18-16-4-3-13(17)10-14(15)16/h3-5,10-11,18H,2,6-9H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H19ClN2O/c1-19-14-8-7-12(17)9-13(14)16(18-10-15(19)20)11-5-3-2-4-6-11/h5,7-9,16,18H,2-4,6,10H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H19ClN2O/c1-19(2)11-12-20-16(15-5-3-4-10-18-15)13-6-8-14(17)9-7-13/h3-10,16H,11-12H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19FN2S/c1-19(2)14-5-3-4-6-16(14)20-15-8-7-12(9-10-17)11-13(15)18/h3-8,11H,9-10,18H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19IN2O/c17-8-1-9-19-10-6-15(7-11-19)13-20-16-4-2-14(12-18)3-5-16/h1-5,8,15H,6-7,9-11,13H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H19IN2O/c17-8-1-9-19-10-6-15(7-11-19)13-20-16-4-2-14(12-18)3-5-16/h1-5,8,15H,6-7,9-11,13H2/b8-1+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19IN6/c1-11-18-15-9-12-3-4-13(17)10-14(12)19-16(23(15)20-11)22-7-5-21(2)6-8-22/h3-4,10H,5-9H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19N3/c1-17-9-10-19-14-6-3-2-5-13(14)11-18-8-4-7-15(18)16(19)12-17/h2-8,16H,9-12H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H19N3/c1-17-9-10-19-14-6-3-2-5-13(14)11-18-8-4-7-15(18)16(19)12-17/h2-8,16H,9-12H2,1H3/t16-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H19N3/c1-17-9-10-19-14-6-3-2-5-13(14)11-18-8-4-7-15(18)16(19)12-17/h2-8,16H,9-12H2,1H3/t16-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19N3O/c1-19(2)11-12-7-9-13(10-8-12)16(20)18-15-6-4-3-5-14(15)17/h3-10H,11,17H2,1-2H3,(H,18,20)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19N3O3/c20-13-16(11-6-2-1-3-7-11,14(21)19-15(22)18-13)10-12-8-4-5-9-17-12/h1-3,6-7,12,17H,4-5,8-10H2,(H2,18,19,20,21,22)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19N3O3/c20-13-16(11-6-2-1-3-7-11,14(21)19-15(22)18-13)10-12-8-4-5-9-17-12/h1-3,6-7,12,17H,4-5,8-10H2,(H2,18,19,20,21,22)/t12-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19N3O3/c20-13-16(11-6-2-1-3-7-11,14(21)19-15(22)18-13)10-12-8-4-5-9-17-12/h1-3,6-7,12,17H,4-5,8-	1	(Mazumdar et al., 2023)

10H2,(H2,18,19,20,21,22)/t12-/m1/s1	2023)
InChI=1S/C16H19N3O4/c1-9-13(8-18-23-9)16(21)19-15(11-5-12(20)6-11)10-3-4-14(22-2)17-7-10/h3-4,7-8,11-12,15,20H,5-6H2,1-2H3,(H,19,21)/t11?,12?,15-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H19N3O4S.C8H11NO5S/c1-16(2)11(15(22)23)19-13(21)10(14(19)24-16)18-12(20)9(17)8-6-4-3-5-7-8;1-8(2)6(7(11)12)9-4(10)3-5(9)15(8,13)14/h3-7,9-11,14H,17H2,1-2H3,(H,18,20)(H,22,23);5-6H,3H2,1-2H3,(H,11,12)/t9-,10-,11+,14-;5-,6+/m11/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19N3O4S/c1-16(2)11(15(22)23)19-13(21)10(14(19)24-16)18-12(20)9(17)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9-11,14H,17H2,1-2H3,(H,18,20)(H,22,23)	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19N3O4S/c1-16(2)11(15(22)23)19-13(21)10(14(19)24-16)18-12(20)9(17)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9-11,14H,17H2,1-2H3,(H,18,20)(H,22,23)/t9-,10-,11+,14-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H19N3O4S/c1-16(2)11(15(22)23)19-13(21)10(14(19)24-16)18-12(20)9(17)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9-11,14H,17H2,1-2H3,(H,18,20)(H,22,23)/t9-,10?,11-,14-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19N3O4S/c1-16(2)11(15(22)23)19-13(21)10(14(19)24-16)18-12(20)9(17)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9-11,14H,17H2,1-2H3,(H,18,20)(H,22,23)/t9-,10+,11+,14-/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19N3O4S/c1-8-7-24-15-11(14(21)19(15)12(8)16(22)23)18-13(20)10(17)9-5-3-2-4-6-9/h2-3,6,10-11,15H,4-5,7,17H2,1H3,(H,18,20)(H,22,23)	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19N3O4S/c1-8-7-24-15-11(14(21)19(15)12(8)16(22)23)18-13(20)10(17)9-5-3-2-4-6-9/h2-3,6,10-11,15H,4-5,7,17H2,1H3,(H,18,20)(H,22,23)/t10-,11-,15-/m0/s1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C16H19N3O4S/c1-8-7-24-15-11(14(21)19(15)12(8)16(22)23)18-13(20)10(17)9-5-3-2-4-6-9/h2-3,6,10-11,15H,4-5,7,17H2,1H3,(H,18,20)(H,22,23)/t10-,11-,15-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H19N3O4S/c1-8-7-24-15-11(14(21)19(15)12(8)16(22)23)18-13(20)10(17)9-5-3-2-4-6-9/h2-3,6,10-11,15H,4-5,7,17H2,1H3,(H,18,20)(H,22,23)/t10-,11-,15+/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H19N3O4S/c1-8-7-24-15-11(14(21)19(15)12(8)16(22)23)18-13(20)10(17)9-5-3-2-4-6-9/h2-3,6,10-11,15H,4-5,7,17H2,1H3,(H,18,20)(H,22,23)/t10-,11?,15-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19N3O5S/c1-16(2)11(15(23)24)19-13(22)10(14(19)25-16)18-12(21)9(17)7-3-5-8(20)6-4-7/h3-6,9-11,14,20H,17H2,1-2H3,(H,18,21)(H,23,24)	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19N3O5S/c1-16(2)11(15(23)24)19-13(22)10(14(19)25-16)18-12(21)9(17)7-3-5-8(20)6-4-7/h3-6,9-11,14,20H,17H2,1-2H3,(H,18,21)(H,23,24)/t9-,10-,11+,14-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H19N3O5S/c1-16(2)11(15(23)24)19-13(22)10(14(19)25-16)18-12(21)9(17)7-3-5-8(20)6-4-7/h3-6,9-11,14,20H,17H2,1-2H3,(H,18,21)(H,23,24)/t9-,10?,11-,14-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19N3O5S/c1-16(2)11(15(23)24)19-13(22)10(14(19)25-16)18-12(21)9(17)7-3-5-8(20)6-4-7/h3-6,9-11,14,20H,17H2,1-2H3,(H,18,21)(H,23,24)/t9-,10+,11+,14-/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19N3O5S/c1-24-9-7-25-15-11(14(21)19(15)12(9)16(22)23)18-13(20)10(17)8-5-3-2-4-6-8/h3-6,8,10-11,15H,2,7,17H2,1H3,(H,18,20)(H,22,23)	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19N3O5S/c1-24-9-7-25-15-11(14(21)19(15)12(9)16(22)23)18-13(20)10(17)8-5-3-2-4-6-8/h3-6,8,10-11,15H,2,7,17H2,1H3,(H,18,20)(H,22,23)/t10-,11-,15-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H19N3O5S/c1-24-9-7-25-15-11(14(21)19(15)12(9)16(22)23)18-13(20)10(17)8-5-3-2-4-6-8/h3-6,8,10-11,15H,2,7,17H2,1H3,(H,18,20)(H,22,23)/t10-,11+,15-/m1/s1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C16H19N3O7S2/c1-16(2)11(15(22)23)19-13(21)10(14(19)27-16)17-12(20)9(18-28(24,25)26)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9-11,14,18H,1-2H3,(H,17,20)(H,22,23)(H,24,25,26)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H19N3O7S2/c1-16(2)11(15(22)23)19-13(21)10(14(19)27-16)17-12(20)9(18-28(24,25)26)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9-11,14,18H,1-2H3,(H,17,20)(H,22,23)(H,24,25,26)/t9-,10-,11+,14-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19N3O7S2/c1-16(2)11(15(22)23)19-13(21)10(14(19)27-16)17-12(20)9(18-28(24,25)26)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9-11,14,18H,1-2H3,(H,17,20)(H,22,23)(H,24,25,26)/t9-,10?,11-,14-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19N3O7S2/c1-16(2)11(15(22)23)19-13(21)10(14(19)27-16)17-12(20)9(18-28(24,25)26)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9-11,14,18H,1-2H3,(H,17,20)(H,22,23)(H,24,25,26)/t9-,10+,11-,14+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H19N3O7S2/c1-16(2)11(15(22)23)19-13(21)10(14(19)27-16)17-12(20)9(18-28(24,25)26)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9-11,14,18H,1-2H3,(H,17,20)(H,22,23)(H,24,25,26)/t9-,10+,11+,14+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H19N3S/c1-18(2)11-6-12-19-13-7-3-4-8-14(13)20-15-9-5-10-17-16(15)19/h3-5,7-10H,6,11-12H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H19N5O/c1-19-7-9-21(10-8-19)15-11-13-16(18-17-15)22-14-6-4-3-5-12(14)20(13)2/h3-6,11H,7-10H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H19N9O5S2/c1-6-20-23-24(21-6)3-7-4-31-14-10(13(27)25(14)11(7)15(28)29)19-12(26)9(22-30-2)8-5-32-16(17)18-8/h5,10,14,23H,3-4H2,1-2H3,(H2,17,18)(H,19,26)(H,20,21)(H,28,29)/b22-9+/t10-,14+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19NO/c1-2-4-15-11-13(5-6-14(15)3-1)12-18-16-7-9-17-10-8-16/h1-6,11,16-17H,7-10,12H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H19NO2/c1-17(2)13-16(18-14-9-5-3-6-10-14)19-15-11-7-4-8-12-15/h3-12,16H,13H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19NO2S/c1-2-6-16(19-12-14-11-17-7-8-18-14)13(4-1)10-15-5-3-9-20-15/h1-6,9,14,17H,7-8,10-12H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19NO2S/c1-2-6-16(19-12-14-11-17-7-8-18-14)13(4-1)10-15-5-3-9-20-15/h1-6,9,14,17H,7-8,10-12H2/t14-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19NO3/c1-17-7-9-3-4-12(19-2)16-15(9)14-10(8-17)5-11(18)6-13(14)20-16/h3-5,11,13-14,18H,6-8H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19NO3/c1-19-12-3-2-10-9-17-7-6-16-5-4-11(18)8-13(16)20-15(12)14(10)16/h2-5,11,13,17-18H,6-9H2,1H3/t11-,13-,16-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19NO4/c1-17-11-7-8-12(17)14(15(18)19)13(9-11)21-16(20)10-5-3-2-4-6-10/h2-6,11-14H,7-9H2,1H3,(H,18,19)/t11-,12+,13-,14+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19NO4/c1-17-11-7-8-12(17)14(15(18)19)13(9-11)21-16(20)10-5-3-2-4-6-10/h2-6,11-14H,7-9H2,1H3,(H,18,19)/t11-,12+,13+,14+/m0/s1	0	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C16H19NO4/c1-19-14-10-12(11-15(20-2)16(14)21-3)13(18)6-9-17-7-4-5-8-17/h4-6,9-11H,7-8H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H19NO4/c1-19-14-10-12(11-15(20-2)16(14)21-3)13(18)6-9-17-7-4-5-8-17/h4-6,9-11H,7-8H2,1-3H3/b9-6+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H20CIN3S/c1-10(2)4-5-19-9-12-6-13(17)7-14-15(12)20(8-11(19)3)16(21)18-14/h4,6-7,11H,5,8-9H2,1-3H3,(H,18,21)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H20CIN3S/c1-10(2)4-5-19-9-12-6-13(17)7-14-15(12)20(8-11(19)3)16(21)18-14/h4,6-7,11H,5,8-9H2,1-3H3,(H,18,21)/t11-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H20FN3O4/c1-11(21)18-9-13-10-20(16(22)24-13)12-2-3-15(14(17)8-12)19-4-6-23-7-5-19/h2-3,8,13H,4-7,9-10H2,1H3,(H,18,21)/t13-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H20N2/c1-18(2)13-11-15(14-8-4-3-5-9-14)16-10-6-7-12-17-16/h3-10,12,15H,11,13H2,1-2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)

	2023)
InChI=1S/C16H20N2/c1-18(2)13-11-15(14-8-4-3-5-9-14)16-10-6-7-12-17-16/h3-10,12,15H,11,13H2,1-2H3/t15-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H20N2/c1-18(2)13-11-15(14-8-4-3-5-9-14)16-10-6-7-12-17-16/h3-10,12,15H,11,13H2,1-2H3/t15-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H20N2O2/c19-15(12-18-9-5-2-6-10-18)14-11-16(20-17-14)13-7-3-1-4-8-13/h1,3-4,7-8,11,15,19H,2,5-6,9-10,12H2	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H20N2O2/c19-15(12-18-9-5-2-6-10-18)14-11-16(20-17-14)13-7-3-1-4-8-13/h1,3-4,7-8,11,15,19H,2,5-6,9-10,12H2/t15-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H20N2O2/c19-15(12-18-9-5-2-6-10-18)14-11-16(20-17-14)13-7-3-1-4-8-13/h1,3-4,7-8,11,15,19H,2,5-6,9-10,12H2/t15-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H20N2O3/c1-16(13-5-3-2-4-6-13)11-14(19)18(15(16)20)12-17-7-9-21-10-8-17/h2-6H,7-12H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H20N2O3/c1-16(13-5-3-2-4-6-13)11-14(19)18(15(16)20)12-17-7-9-21-10-8-17/h2-6H,7-12H2,1H3/t16-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H20N2O3/c1-16(13-5-3-2-4-6-13)11-14(19)18(15(16)20)12-17-7-9-21-10-8-17/h2-6H,7-12H2,1H3/t16-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H20N2O4S2/c1-9-15(21)13(5-19)11(3-17-9)7-23-24-8-12-4-18-10(2)16(22)14(12)6-20/h3-4,19-22H,5-8H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H20N2O5/c1-4-16(12-8-6-5-7-9-12)13(19)17(10-22-2)15(21)18(11-23-3)14(16)20/h5-9H,4,10-11H2,1-3H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H20N4O3S/c1-11(2)18-16(21)20-24(22,23)15-10-17-8-7-14(15)19-13-6-4-5-12(3)9-13/h4-11H,1-3H3,(H,17,19)(H2,18,20,21)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H20N6/c1-12-17-15-11-13-5-3-4-6-14(13)18-16(22(15)19-12)21-9-7-20(2)8-10-21/h3-6H,7-11H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H21CIN4/c1-13-11-15(19-18-13)5-6-20-7-9-21(10-8-20)16-4-2-3-14(17)12-16/h2-4,11-12H,5-10H2,1H3,(H,18,19)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H21CIN4/c1-19-13-14(12-18-19)6-7-20-8-10-21(11-9-20)16-5-3-2-4-15(16)17/h2-5,12-13H,6-11H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H21N3/c1-18(2)12-13-19(16-10-6-7-11-17-16)14-15-8-4-3-5-9-15/h3-11H,12-14H2,1-2H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H21N3/c17-13-14-1-3-15(4-2-14)19-11-7-16(8-12-19)5-9-18-10-6-16/h1-4,18H,5-12H2	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H21N3O2/c1-19(2)6-5-12-9-17-15-4-3-11(8-14(12)15)7-13-10-21-16(20)18-13/h3-4,8-9,13,17H,5-7,10H2,1-2H3,(H,18,20)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H21N3O2/c1-19(2)6-5-12-9-17-15-4-3-11(8-14(12)15)7-13-10-21-16(20)18-13/h3-4,8-9,13,17H,5-7,10H2,1-2H3,(H,18,20)/t13-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H21N3O4S/c1-16(2)11(15(22)23)19-13(21)10(14(19)24-16)18-12(20)9(17)8-6-4-3-5-7-8/h3-4,7,9-11,14H,5-6,17H2,1-2H3,(H,18,20)(H,22,23)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H21N3O4S/c1-16(2)11(15(22)23)19-13(21)10(14(19)24-16)18-12(20)9(17)8-6-4-3-5-7-8/h3-4,7,9-11,14H,5-6,17H2,1-2H3,(H,18,20)(H,22,23)/t9-,10-,11+,14-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H21N3O4S/c1-16(2)11(15(22)23)19-13(21)10(14(19)24-16)18-12(20)9(17)8-6-4-3-5-7-8/h3-4,7,9-11,14H,5-6,17H2,1-2H3,(H,18,20)(H,22,23)/t9-,10?,11-,14-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H21N3O4S/c1-16(2)11(15(22)23)19-13(21)10(14(19)24-16)18-12(20)9(17)8-6-4-3-5-7-8/h3-4,7,9-11,14H,5-6,17H2,1-2H3,(H,18,20)(H,22,23)/t9-,10+,11+,14-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C16H21N3O8S/c1-7(20)27-5-8-6-28-14-11(13(22)19(14)12(8)16(25)26)18-10(21)4-2-3-9(17)15(23)24/h9,11,14H,2-6,17H2,1H3,(H,18,21)(H,23,24)(H,25,26)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H21N3O8S/c1-7(20)27-5-8-6-28-14-11(13(22)19(14)12(8)16(25)26)18-10(21)4-2-3-9(17)15(23)24/h9,11,14H,2-6,17H2,1H3,(H,18,21)(H,23,24)(H,25,26)/t9-,11-,14-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H21N3O8S/c1-7(20)27-5-8-6-28-14-11(13(22)19(14)12(8)16(25)26)18-10(21)4-2-3-9(17)15(23)24/h9,11,14H,2-6,17H2,1H3,(H,18,21)(H,23,24)(H,25,26)/t9-,11?,14-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H21N7O7S3/c1-22-15(19-20-21-22)33-4-7-3-32-14-16(30-2,13(29)23(14)10(7)12(27)28)18-9(24)6-31-5-8(17)11(25)26/h8,14H,3-6,17H2,1-2H3,(H,18,24)(H,25,26)(H,27,28)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H21N7O7S3/c1-22-15(19-20-21-22)33-4-7-3-32-14-16(30-2,13(29)23(14)10(7)12(27)28)18-9(24)6-31-5-8(17)11(25)26/h8,14H,3-6,17H2,1-2H3,(H,18,24)(H,25,26)(H,27,28)/t8-,14-,16-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H21N7O7S3/c1-22-15(19-20-21-22)33-4-7-3-32-14-16(30-2,13(29)23(14)10(7)12(27)28)18-9(24)6-31-5-8(17)11(25)26/h8,14H,3-6,17H2,1-2H3,(H,18,24)(H,25,26)(H,27,28)/t8-,14-,16+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H21N7O7S3/c1-22-15(19-20-21-22)33-4-7-3-32-14-16(30-2,13(29)23(14)10(7)12(27)28)18-9(24)6-31-5-8(17)11(25)26/h8,14H,3-6,17H2,1-2H3,(H,18,24)(H,25,26)(H,27,28)/t8-,14+,16?/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H21N7O7S3/c1-22-15(19-20-21-22)33-4-7-3-32-14-16(30-2,13(29)23(14)10(7)12(27)28)18-9(24)6-31-5-8(17)11(25)26/h8,14H,3-6,17H2,1-2H3,(H,18,24)(H,25,26)(H,27,28)/t8-,14+,16+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H21N7OS/c1-10(2)15-18-19-16(25-15)22-6-7-23-11(9-22)8-12(20-23)13(24)14-17-4-5-21(14)3/h4-5,8,10,13,24H,6-7,9H2,1-3H3/t13-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H21NO/c1-11(2)17-12(3)16(18)15-10-6-8-13-7-4-5-9-14(13)15/h4-12,16-18H,1-3H3/t12-,16+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H21NO/c18-12-5-4-11-9-15-13-3-1-2-6-16(13,7-8-17-15)14(11)10-12/h4-5,10,13,15,17-18H,1-3,6-9H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H21NO/c18-12-5-4-11-9-15-13-3-1-2-6-16(13,7-8-17-15)14(11)10-12/h4-5,10,13,15,17-18H,1-3,6-9H2/t13-,15?,16?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H21NO/c18-12-5-4-11-9-15-13-3-1-2-6-16(13,7-8-17-15)14(11)10-12/h4-5,10,13,15,17-18H,1-3,6-9H2/t13-,15+,16+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H21NO2/c1-12(2)17-10-14(18)11-19-16-9-5-7-13-6-3-4-8-15(13)16/h3-9,12,14,17-18H,10-11H2,1-2H3	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C16H21NO2/c1-12(2)17-10-14(18)11-19-16-9-5-7-13-6-3-4-8-15(13)16/h3-9,12,14,17-18H,10-11H2,1-2H3/t14-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H21NO2/c1-12(2)17-10-14(18)11-19-16-9-5-7-13-6-3-4-8-15(13)16/h3-9,12,14,17-18H,10-11H2,1-2H3/t14-/m1/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C16H21NO2/c1-2-15(18)17-9-7-12-4-3-11-5-6-14-13(16(11)12)8-10-19-14/h5-6,12H,2-4,7-10H2,1H3,(H,17,18)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H21NO2/c1-2-15(18)17-9-7-12-4-3-11-5-6-14-13(16(11)12)8-10-19-14/h5-6,12H,2-4,7-10H2,1H3,(H,17,18)/t12-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H21NO3/c1-17-12-7-8-13(17)10-14(9-12)20-16(19)15(18)11-5-3-2-4-6-11/h2-6,12-15,18H,7-10H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H21NO3/c1-17-12-7-8-13(17)10-14(9-12)20-16(19)15(18)11-5-3-2-4-6-11/h2-6,12-15,18H,7-10H2,1H3/t12-,13-,15-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C16H21NO3/c1-17-12-7-8-13(17)10-14(9-12)20-16(19)15(18)11-5-3-2-4-6-11/h2-6,12-15,18H,7-10H2,1H3/t12-,13-,15?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H21NO3/c1-17-12-7-8-13(17)10-14(9-12)20-16(19)15(18)11-5-3-2-4-6-11/h2-6,12-15,18H,7-10H2,1H3/t12-,13-,15+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H21NO3/c1-17-12-7-8-13(17)10-14(9-12)20-16(19)15(18)11-5-3-2-4-6-11/h2-6,12-15,18H,7-10H2,1H3/t12-,13+,14?,15-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H21NO3/c1-19-14-7-6-11(12-9-16(18)17-10-12)8-15(14)20-13-4-2-3-5-13/h6-8,12-13H,2-5,9-10H2,1H3,(H,17,18)	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C16H21NO3/c1-19-14-7-6-11(12-9-16(18)17-10-12)8-15(14)20-13-4-2-3-5-13/h6-8,12-13H,2-5,9-10H2,1H3,(H,17,18)/t12-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H21NO4/c1-10(2)17-8-13(19)9-20-14-6-4-5-12-7-15(11(3)18)21-16(12)14/h4-7,10,13,17,19H,8-9H2,1-3H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H22Cl2N2O/c1-4-16(21)20(11-8-9-12(17)13(18)10-11)15-7-5-6-14(15)19(2)3/h8-10,14-15H,4-7H2,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H22Cl2N2O/c1-4-16(21)20(11-8-9-12(17)13(18)10-11)15-7-5-6-14(15)19(2)3/h8-10,14-15H,4-7H2,1-3H3/t14-,15-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H22Cl2N2O/c1-4-16(21)20(11-8-9-12(17)13(18)10-11)15-7-5-6-14(15)19(2)3/h8-10,14-15H,4-7H2,1-3H3/t14-,15-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H22Cl2N2O/c1-4-16(21)20(11-8-9-12(17)13(18)10-11)15-7-5-6-14(15)19(2)3/h8-10,14-15H,4-7H2,1-3H3/t14-,15+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H22ClN3O/c1-16(2)11-18(12-16)6-7-19-8-9-20(15(19)21)14-5-3-4-13(17)10-14/h3-5,10H,6-9,11-12H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H22FNO/c1-13-8-11-18(12-9-13)10-2-3-16(19)14-4-6-15(17)7-5-14/h4-7,13H,2-3,8-12H2,1H3	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C16H22N2O3/c1-4-12(17-9(2)3)16(21)11-5-7-13(19)15-10(11)6-8-14(20)18-15/h5-9,12,16-17,19,21H,4H2,1-3H3,(H,18,20)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H22N4O2S/c1-10-14(23-9-17-10)3-4-15(22)19-16(11-5-13(21)6-11)12-7-18-20(2)8-12/h7-9,11,13,16,21H,3-6H2,1-2H3,(H,19,22)/t11?,13?,16-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H22N4O3/c1-3-7-19-14-12(15(22)20(8-4-2)16(19)23)17-13(18-14)10-5-6-11(21)9-10/h10H,3-9H2,1-2H3,(H,17,18)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H22N4O3/c1-3-7-19-14-12(15(22)20(8-4-2)16(19)23)17-13(18-14)10-5-6-11(21)9-10/h10H,3-9H2,1-2H3,(H,17,18)/t10-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H22N4O4S/c1-10(15(25-13(4)23)5-6-24-12(3)22)20(9-21)8-14-7-18-11(2)19-16(14)17/h7,9H,5-6,8H2,1-4H3,(H2,17,18,19)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H22N4O4S/c1-10(15(25-13(4)23)5-6-24-12(3)22)20(9-21)8-14-7-18-11(2)19-16(14)17/h7,9H,5-6,8H2,1-4H3,(H2,17,18,19)/b15-10-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H22N4O4S/c1-10(15(25-13(4)23)5-6-24-12(3)22)20(9-21)8-14-7-18-11(2)19-16(14)17/h7,9H,5-6,8H2,1-4H3,(H2,17,18,19)/b15-10+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H22N6/c1-12-17-15-11-13-5-3-4-6-14(13)18-16(22(15)19-12)21-9-7-20(2)8-10-21/h3-6,15H,7-11H2,1-2H3,(H,17,19)/t15-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H23BrN2O3/c1-4-19-9-5-6-11(19)10-18-16(20)14-13(21-2)8-7-12(17)15(14)22-3/h7-8,11H,4-6,9-10H2,1-3H3,(H,18,20)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H23BrN2O3/c1-4-19-9-5-6-11(19)10-18-16(20)14-13(21-2)8-7-12(17)15(14)22-3/h7-8,11H,4-6,9-10H2,1-3H3,(H,18,20)/t11-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H23BrN2O3/c1-4-19-9-5-6-11(19)10-18-16(20)14-13(21-2)8-7-12(17)15(14)22-3/h7-8,11H,4-6,9-10H2,1-3H3,(H,18,20)/t11-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C16H23N5O/c1-3-4-5-8-18-16(17)21-20-11-12-10-19-15-7-6-13(22-2)9-14(12)15/h6-7,9-11,19H,3-5,8H2,1-2H3,(H3,17,18,21)/b20-11-	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H23N5O/c1-3-4-5-8-18-16(17)21-20-11-12-10-19-15-7-6-13(22-2)9-14(12)15/h6-7,9-11,19H,3-5,8H2,1-2H3,(H3,17,18,21)/b20-11+	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H23NO/c1-16-8-4-2-3-5-12(15(16)17)9-11-6-7-13(18)10-14(11)16/h6-7,10,12,15,18H,2-5,8-9,17H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H23NO/c1-16-8-4-2-3-5-12(15(16)17)9-11-6-7-13(18)10-14(11)16/h6-7,10,12,15,18H,2-5,8-9,17H2,1H3/t12-,15-,16-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H23NO/c1-16-8-4-2-3-5-12(15(16)17)9-11-6-7-13(18)10-14(11)16/h6-7,10,12,15,18H,2-5,8-9,17H2,1H3/t12-,15-,16+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H23NO/c1-16-8-4-2-3-5-12(15(16)17)9-11-6-7-13(18)10-14(11)16/h6-7,10,12,15,18H,2-5,8-9,17H2,1H3/t12-,15+,16-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H23NO/c1-16-8-4-2-3-5-12(15(16)17)9-11-6-7-13(18)10-14(11)16/h6-7,10,12,15,18H,2-5,8-9,17H2,1H3/t12?,15-,16+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H23NO/c1-3-14-6-8-15(9-7-14)16(18)13(2)12-17-10-4-5-11-17/h6-9,13H,3-5,10-12H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H23NO/c1-3-16(18)7-9-17-8-6-13-5-4-12(2)10-14(13)15(17)11-16/h4-5,10,15,18H,3,6-9,11H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H23NO/c1-3-16(18)7-9-17-8-6-13-5-4-12(2)10-14(13)15(17)11-16/h4-5,10,15,18H,3,6-9,11H2,1-2H3/t15-,16-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H23NO/c1-3-16(18)7-9-17-8-6-13-5-4-12(2)10-14(13)15(17)11-16/h4-5,10,15,18H,3,6-9,11H2,1-2H3/t15-,16-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H23NO/c1-3-16(18)7-9-17-8-6-13-5-4-12(2)10-14(13)15(17)11-16/h4-5,10,15,18H,3,6-9,11H2,1-2H3/t15-,16-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H23NO/c1-3-6-15(17-11-4-5-12-17)16(18)14-9-7-13(2)8-10-14/h7-10,15H,3-6,11-12H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H23NO/c1-3-6-15(17-11-4-5-12-17)16(18)14-9-7-13(2)8-10-14/h7-10,15H,3-6,11-12H2,1-2H3/t15-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H23NO/c1-3-6-15(17-11-4-5-12-17)16(18)14-9-7-13(2)8-10-14/h7-10,15H,3-6,11-12H2,1-2H3/t15-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H23NO2/c1-2-16(13-8-4-3-5-9-13)18-12-15(19-16)14-10-6-7-11-17-14/h3-5,8-9,14-15,17H,2,6-7,10-12H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H23NO2/c1-2-16(13-8-4-3-5-9-13)18-12-15(19-16)14-10-6-7-11-17-14/h3-5,8-9,14-15,17H,2,6-7,10-12H2,1H3/t14-,15-,16+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H23NO2/c1-2-16(13-8-4-3-5-9-13)18-12-15(19-16)14-10-6-7-11-17-14/h3-5,8-9,14-15,17H,2,6-7,10-12H2,1H3/t14-,15+,16-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H23NO2/c1-2-16(13-8-4-3-5-9-13)18-12-15(19-16)14-10-6-7-11-17-14/h3-5,8-9,14-15,17H,2,6-7,10-12H2,1H3/t14-,15+,16+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H23NO2/c1-4-15(18)19-16(14-8-6-5-7-9-14)10-11-17(3)12-13(16)2/h5-9,13H,4,10-12H2,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H23NO2/c1-4-15(18)19-16(14-8-6-5-7-9-14)10-11-17(3)12-13(16)2/h5-9,13H,4,10-12H2,1-3H3/t13-,16-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H23NO2/c1-4-15(18)19-16(14-8-6-5-7-9-14)10-11-17(3)12-13(16)2/h5-9,13H,4,10-12H2,1-3H3/t13-,16-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H23NO2/c1-4-15(18)19-16(14-8-6-5-7-9-14)10-11-17(3)12-13(16)2/h5-9,13H,4,10-12H2,1-3H3/t13-,16+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C16H23NO2/c1-5-11-7-6-8-12-9-14(19-15(11)12)13(18)10-17-16(2,3)4/h6-9,13,17-18H,5,10H2,1-4H3	2023)
InChI=1S/C16H23NO4S2/c1-4-21-10-16(15(17)22)13(14(16)23(18,19)5-2)11-6-8-12(20-3)9-7-11/h6-9,13-14H,4-5,10H2,1-3H3,(H2,17,22)/t13-,14+,16-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H23NO5S/c1-4-22-15(18)16(10-17)13(14(16)23(19,20)5-2)11-6-8-12(21-3)9-7-11/h6-9,13-14H,4-5,10,17H2,1-3H3/t13-,14-,16+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H23NO5S/c1-4-22-15(18)16(10-17)13(14(16)23(19,20)5-2)11-6-8-12(21-3)9-7-11/h6-9,13-14H,4-5,10,17H2,1-3H3/t13-,14-,16-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H24N2/c1-11-8-13(16(3,4)5)9-12(2)14(11)10-15-17-6-7-18-15/h8-9H,6-7,10H2,1-5H3,(H,17,18)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H24N2O/c1-10-8-13(16(3,4)5)15(19)11(2)12(10)9-14-17-6-7-18-14/h8,19H,6-7,9H2,1-5H3,(H,17,18)	1 (Nikolic et al., 2013)
InChI=1S/C16H24N2O/c1-3-8-18(9-4-2)10-7-13-5-6-15-14(11-13)12-16(19)17-15/h5-6,11H,3-4,7-10,12H2,1-2H3,(H,17,19)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H24N2O/c1-3-9-18(10-4-2)11-8-13-6-5-7-15-14(13)12-16(19)17-15/h5-7H,3-4,8-12H2,1-2H3,(H,17,19)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H24N2O/c1-3-9-18(10-4-2)11-8-13-6-5-7-15-14(13)12-16(19)17-15/h5-7H,3-4,8-12H2,1-2H3,(H,17,19)/p+1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H24N2O2/c1-3-13-11(2)17-14-5-4-12(16(19)15(13)14)10-18-6-8-20-9-7-18/h12,17H,3-10H2,1-2H3	1 (Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C16H24N2O2/c1-3-13-11(2)17-14-5-4-12(16(19)15(13)14)10-18-6-8-20-9-7-18/h12,17H,3-10H2,1-2H3/t12-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H24N2O2/c1-3-13-11(2)17-14-5-4-12(16(19)15(13)14)10-18-6-8-20-9-7-18/h12,17H,3-10H2,1-2H3/t12-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H24N2O2/c1-3-6-18(7-4-2)8-5-12-9-13-11-15(20)17-16(13)14(19)10-12/h9-10,19H,3-8,11H2,1-2H3,(H,17,20)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H24N2O2/c1-3-8-18(9-4-2)10-7-12-5-6-14(19)16-13(12)11-15(20)17-16/h5-6,19H,3-4,7-11H2,1-2H3,(H,17,20)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H24N2O3/c1-16(2,3)17-9-11(19)10-21-14-6-4-5-13-12(14)7-8-15(20)18-13/h4-6,11,17,19H,7-10H2,1-3H3,(H,18,20)	1 (Shin et al., 2021)
InChI=1S/C16H24N2O3/c1-16(2,3)17-9-11(19)10-21-14-6-4-5-13-12(14)7-8-15(20)18-13/h4-6,11,17,19H,7-10H2,1-3H3,(H,18,20)/t11-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H24N2O3/c1-20-15-3-2-11(10-17-15)16(12-8-14(19)9-12)18-13-4-6-21-7-5-13/h2-3,10,12-14,16,18-19H,4-9H2,1H3/t12?,14?,16-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H24N2O5/c1-6-18(7-2)14(19)10-17-16(20)11-8-12(21-3)15(23-5)13(9-11)22-4/h8-9H,6-7,10H2,1-5H3,(H,17,20)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H24N2O6/c1-11-16(22)13(9-19)12(8-17-11)10-24-15(21)5-4-14(20)23-7-6-18(2)3/h8,19,22H,4-7,9-10H2,1-3H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H24N4O2/c1-5-8-9-17-14-12-10-18-20(6-2)15(12)19-11(4)13(14)16(21)22-7-3/h10H,5-9H2,1-4H3,(H,17,19)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H24N4O3/c1-4-6-8-19-14-13(18(11-17-14)10-12(3)21)15(22)20(16(19)23)9-7-5-2/h11H,4-10H2,1-3H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H25IN2/c1-2-3-4-5-10-18-11-13-19(14-12-18)16-8-6-15(17)7-9-16/h6-9H,2-5,10-14H2,1H3	1 (Li et al., 2005)
InChI=1S/C16H25N3O/c1-3-8-17-15(18-9-4-2)10-12-6-5-7-14-13(12)11-16(20)19-14/h5-7,15,17-18H,3-4,8-11H2,1-2H3,(H,19,20)	1 (Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C16H25N3O4S/c1-3-8-19-9-4-5-12(19)11-18-16(20)14-10-13(24(17,21)22)6-7-15(14)23-2/h6-7,10,12H,3-5,8-9,11H2,1-2H3,(H,18,20)(H2,17,21,22)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H25N3O4S/c1-3-8-19-9-4-5-12(19)11-18-16(20)14-10-13(24(17,21)22)6-7-15(14)23-2/h6-7,10,12H,3-5,8-9,11H2,1-2H3,(H,18,20)(H2,17,21,22)/t12-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H25NO/c1-4-8-16(9-10-17(3)12-13(16)2)14-6-5-7-15(18)11-14/h5-7,11,13,18H,4,8-10,12H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H25NO/c1-4-8-16(9-10-17(3)12-13(16)2)14-6-5-7-15(18)11-14/h5-7,11,13,18H,4,8-10,12H2,1-3H3/t13-,16-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H25NO/c1-4-8-16(9-10-17(3)12-13(16)2)14-6-5-7-15(18)11-14/h5-7,11,13,18H,4,8-10,12H2,1-3H3/t13-,16+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H25NO/c1-4-8-16(9-10-17(3)12-13(16)2)14-6-5-7-15(18)11-14/h5-7,11,13,18H,4,8-10,12H2,1-3H3/t13-,16+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H25NO2/c1-17(2)12-14-7-4-5-10-16(14,18)13-8-6-9-15(11-13)19-3/h6,8-9,11,14,18H,4-5,7,10,12H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H25NO2/c1-17(2)12-14-7-4-5-10-16(14,18)13-8-6-9-15(11-13)19-3/h6,8-9,11,14,18H,4-5,7,10,12H2,1-3H3/t14-,16-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H25NO2/c1-17(2)12-14-7-4-5-10-16(14,18)13-8-6-9-15(11-13)19-3/h6,8-9,11,14,18H,4-5,7,10,12H2,1-3H3/t14-,16+/m0/s1	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C16H25NO2/c1-17(2)12-14-7-4-5-10-16(14,18)13-8-6-9-15(11-13)19-3/h6,8-9,11,14,18H,4-5,7,10,12H2,1-3H3/t14-,16+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H25NO2/c1-17(2)12-15(13-6-8-14(18)9-7-13)16(19)10-4-3-5-11-16/h6-9,15,18-19H,3-5,10-12H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H25NO3/c1-11(2)14-10-15(20-13(4)18)12(3)9-16(14)19-8-7-17(5)6/h9-11H,7-8H2,1-6H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H25NO4S/c1-4-20-11-14(18)12-21-15-7-5-13(6-8-15)17-16(19)9-10-22(2)3/h5-8,14,18H,4,9-12H2,1-3H3/p+1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H25NS/c1-13(2)14-6-8-16(9-7-14)18-12-4-5-15-10-11-17(15)3/h6-9,13,15H,4-5,10-12H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H25NS/c1-14-8-3-4-10-16(14,15-9-7-13-18-15)17-11-5-2-6-12-17/h7,9,13-14H,2-6,8,10-12H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H25NS/c1-14-8-3-4-10-16(14,15-9-7-13-18-15)17-11-5-2-6-12-17/h7,9,13-14H,2-6,8,10-12H2,1H3/t14-,16-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H25NS/c1-14-8-3-4-10-16(14,15-9-7-13-18-15)17-11-5-2-6-12-17/h7,9,13-14H,2-6,8,10-12H2,1H3/t14-,16-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H25NS/c1-14-8-3-4-10-16(14,15-9-7-13-18-15)17-11-5-2-6-12-17/h7,9,13-14H,2-6,8,10-12H2,1H3/t14-,16+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H26N2O5S/c1-16(2)8-10(16)13(19)18-12(15(22)23)6-4-3-5-7-24-9-11(17)14(20)21/h6,10-11H,3-5,7-9,17H2,1-2H3,(H,18,19)(H,20,21)(H,22,23)/b12-6+	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H26O5/c1-9-5-6-12-10(2)13(17-4)18-14-16(12)11(9)7-8-15(3,19-14)20-21-16/h9-14H,5-8H2,1-4H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H27NO3/c1-19-14-7-6-11(12-9-16(18)17-10-12)8-15(14)20-13-4-2-3-5-13/h11-15H,2-10H2,1H3,(H,17,18)	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C16H27NO4/c1-10-11-8-12(18)16(9-17-6-4-3-5-7-17)13(11)15(19-2)20-14(10)21-16/h10-15,18H,3-9H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H27NO4/c1-10-11-8-12(18)16(9-17-6-4-3-5-7-17)13(11)15(19-2)20-14(10)21-16/h10-15,18H,3-9H2,1-2H3/t10-,11-	1	(Meng et al., 2021)

,12?,13+,14?,15-,16?/m0/s1	
InChI=1S/C16H27NO4/c1-10-11-8-12(18)16(9-17-6-4-3-5-7-17)13(11)15(19-2)20-14(10)21-16/h10-15,18H,3-9H2,1-2H3/t10-,11-,12+,13-,14-,15-,16-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H27NO4/c1-10-11-8-12(18)16(9-17-6-4-3-5-7-17)13(11)15(19-2)20-14(10)21-16/h10-15,18H,3-9H2,1-2H3/t10-,11-,12+,13-,14+,15-,16-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H27NO4/c1-10-11-8-12(18)16(9-17-6-4-3-5-7-17)13(11)15(19-2)20-14(10)21-16/h10-15,18H,3-9H2,1-2H3/t10-,11?,12?,13?,14?,15-,16?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H27NO4/c1-10-11-8-12(18)16(9-17-6-4-3-5-7-17)13(11)15(19-2)20-14(10)21-16/h10-15,18H,3-9H2,1-2H3/t10-,11+,12-,13+,14-,15+,16+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H27NO4/c1-10-11-8-12(18)16(9-17-6-4-3-5-7-17)13(11)15(19-2)20-14(10)21-16/h10-15,18H,3-9H2,1-2H3/t10?,11-,12-,13+,14+,15+,16+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H28N2O4/c1-5-12(6-2)22-14-9-11(16(20)21-7-3)8-13(17)15(14)18-10(4)19/h9,12-15H,5-8,17H2,1-4H3,(H,18,19)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H28N2O4/c1-5-12(6-2)22-14-9-11(16(20)21-7-3)8-13(17)15(14)18-10(4)19/h9,12-15H,5-8,17H2,1-4H3,(H,18,19)/t13-,14-,15+/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H28N2O4/c1-5-12(6-2)22-14-9-11(16(20)21-7-3)8-13(17)15(14)18-10(4)19/h9,12-15H,5-8,17H2,1-4H3,(H,18,19)/t13-,14+,15+/m0/s1	0 (Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C16H28N2O4/c1-5-12(6-2)22-14-9-11(16(20)21-7-3)8-13(17)15(14)18-10(4)19/h9,12-15H,5-8,17H2,1-4H3,(H,18,19)/t13-,14+,15+/m1/s1	0 (Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C16H29N5O8/c1-17-12(22)7-20(10-15(26)27)5-3-19(9-14(24)25)4-6-21(11-16(28)29)8-13(23)18-2/h3-11H2,1-2H3,(H,17,22)(H,18,23)(H,24,25)(H,26,27)(H,28,29)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C16H30N2O4/c1-5-12(6-2)22-14-9-11(16(19)21-7-3)8-13(17)15(14)18-10-20-4/h9,12-15,18H,5-8,10,17H2,1-4H3/t13-,14+,15-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H31N3O.CH5NO/c1-10-11(2)13(20-12(10)3)14(4,5)19(15(6,7)17)16(8,9)18;1-2-3/h17-18H2,1-9H3;2-3H,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H31N3O/c1-10-11(2)13(20-12(10)3)14(4,5)19(15(6,7)17)16(8,9)18/h17-18H2,1-9H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H31NO2/c1-12(2)17-10-14(18)11-19-16-9-5-7-13-6-3-4-8-15(13)16/h12-18H,3-11H2,1-2H3	1 (Kaupp, 2007)
InChI=1S/C16H33NO2/c1-3-6-15(7-4-2)8-5-9-16-14-19-13-11-17(16)10-12-18/h15-16,18H,3-14H2,1-2H3/t16-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H34O/c1-2-3-4-5-6-7-8-9-10-11-12-13-14-15-16-17/h17H,2-16H2,1H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C16H38N2/c1-17(2,3)15-13-11-9-7-8-10-12-14-16-18(4,5)6/h7-16H2,1-6H3/q+2	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H10F2N6O2/c18-10-1-2-15(21-6-10)23-17(26)14-4-13(8-25-9-22-24-16(14)25)27-12-3-11(19)5-20-7-12/h1-9H,(H,21,23,26)	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C17H10F2N6O2/c18-10-1-2-15(21-6-10)24-17(26)14-4-13(8-25-16(14)22-9-23-25)27-12-3-11(19)5-20-7-12/h1-9H,(H,21,24,26)	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C17H11ClF4N2S/c18-10-5-6-14-12(7-10)16(11-3-1-2-4-13(11)19)23-8-15(25)24(14)9-17(20,21)22/h1-7H,8-9H2	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H11F6N7O/c18-16(19,20)11-5-10(6-12(7-11)17(21,22)23)15-26-9-30(29-15)4-1-14(31)28-27-13-8-24-2-3-25-13/h1-9H,(H,25,27)(H,28,31)/b4-1-	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H11N5/c18-9-13-1-5-15(6-2-13)17(22-12-20-11-21-22)16-7-3-14(10-19)4-8-16/h1-8,11-12,17H	0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C17H11N5O/c23-16(14-3-1-2-7-19-14)13-11-21-22-15(6-10-20-17(13)22)12-4-8-18-9-5-12/h1-11H	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H12Br2O3/c1-2-13-15(10-5-3-4-6-14(10)22-13)16(20)9-7-11(18)17(21)12(19)8-9/h3-8,21H,2H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H12Cl2F3N5/c1-9-23-15-11(4-6-26(15)13-3-2-10(18)8-12(13)19)16(24-9)27-7-5-14(25-27)17(20,21)22/h2-3,5,7-8H,4,6H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H12Cl2N4/c1-10-21-22-16-9-20-17(12-4-2-3-5-14(12)19)13-8-11(18)6-7-15(13)23(10)16/h2-8H,9H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H12Cl2N4/c1-10-21-22-16-9-20-17(12-4-2-3-5-14(12)19)13-8-11(18)6-7-15(13)23(10)16/h2-9,22H,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H12ClF3N2O/c18-12-6-7-14-13(8-12)16(11-4-2-1-3-5-11)22-9-15(24)23(14)10-17(19,20)21/h1-8H,9-10H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H12ClFN2O2/c18-12-3-1-11(2-4-12)15-10-21(20-16(15)9-17(22)23)14-7-5-13(19)6-8-14/h1-8,10H,9H2,(H,22,23)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H12ClFO4/c1-8(20)10-3-5-14-16(17(10)22)11(7-15(21)23-14)9-2-4-13(19)12(18)6-9/h2-6,11,22H,7H2,1H3/t11-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H12ClFO4/c1-8(20)10-3-5-14-16(17(10)22)11(7-15(21)23-14)9-2-4-13(19)12(18)6-9/h2-6,11,22H,7H2,1H3/t11-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H12ClN3O2/c1-23-15-5-3-2-4-14(15)21-17(22)12-9-19-13-7-6-10(18)8-11(13)16(12)20-21/h2-9,20H,1H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C17H13ClF4N2/c18-11-5-6-15-13(9-11)16(12-3-1-2-4-14(12)19)23-7-8-24(15)10-17(20,21)22/h1-6,9H,7-8,10H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H13ClN4/c1-11-20-21-16-10-19-17(12-5-3-2-4-6-12)14-9-13(18)7-8-15(14)22(11)16/h2-9H,10H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H13ClN4/c18-14-3-1-2-12(8-14)17(22-7-6-19-11-22)13-4-5-15-16(9-13)21-10-20-15/h1-11,17H,(H,20,21)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H13ClN4O/c1-10-20-21-16-17(23)19-15(11-5-3-2-4-6-11)13-9-12(18)7-8-14(13)22(10)16/h2-9,17,23H,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H13ClN4O/c1-10-20-21-16-17(23)19-15(11-5-3-2-4-6-11)13-9-12(18)7-8-14(13)22(10)16/h2-9,17,23H,1H3/t17-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H13ClN4O/c1-10-20-21-16-17(23)19-15(11-5-3-2-4-6-11)13-9-12(18)7-8-14(13)22(10)16/h2-9,17,23H,1H3/t17-/m1/s1	0	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C17H13ClN4O/c18-12-6-7-14-13(8-12)17(11-4-2-1-3-5-11)19-9-15-20-21-16(10-23)22(14)15/h1-8,23H,9-10H2	0	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C17H13F3N2O2/c1-21-13-8-7-11(17(18,19)20)9-14(13)22(16(24)10-15(21)23)12-5-3-2-4-6-12/h2-9H,10H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H13N3O3/c1-10-18-17(20-23-10)19-16(21)15-11-6-2-4-8-13(11)22-14-9-5-3-7-12(14)15/h2-9,15H,1H3,(H,19,20,21)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H13N3O5S2/c21-15(13-3-1-2-4-14(13)16(22)23)19-11-5-7-12(8-6-11)27(24,25)20-17-18-9-10-26-17/h1-10H,(H,18,20)(H,19,21)(H,22,23)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H14BrFN2O2/c18-11-5-6-15-13(9-11)17(12-3-1-2-4-14(12)19)21(7-8-23-17)10-16(22)20-15/h1-6,9H,7-8,10H2,(H,20,22)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H14BrFN2O2/c18-11-5-6-15-13(9-11)17(12-3-1-2-4-14(12)19)21(7-8-23-17)10-16(22)20-15/h1-6,9H,7-8,10H2,(H,20,22)/t17-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H14BrFN2O2/c18-11-5-6-15-13(9-11)17(12-3-1-2-4-14(12)19)21(7-8-23-17)10-16(22)20-15/h1-6,9H,7-8,10H2,(H,20,22)/t17-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H14Cl2F2N2O3/c18-11-6-22-7-12(19)15(11)23-16(24)10-3-4-13(26-17(20)21)14(5-10)25-8-9-1-2-9/h3-7,9,17H,1-2,8H2,(H,22,23,24)	0	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C17H14Cl2N2O2/c18-11-5-6-15-13(9-11)17(12-3-1-2-4-14(12)19)21(7-8-23-17)10-16(22)20-15/h1-6,9H,7-8,10H2,(H,20,22)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H14Cl2N2O2/c18-11-5-6-15-13(9-11)17(12-3-1-2-4-14(12)19)21(7-8-23-17)10-16(22)20-15/h1-6,9H,7-8,10H2,(H,20,22)/t17-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H14Cl2N2O3S/c1-9-15(25-8-21(9)2)3-4-24-17(23)13-7-14(22)16-11(19)5-10(18)6-12(16)20-13/h5-8H,3-4H2,1-2H3/p+1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H14ClFN2O3/c18-10-5-6-14-12(9-10)15(11-3-1-2-4-13(11)19)20-16(23)17(24)21(14)7-8-22/h1-6,9,16,22-23H,7-8H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H14ClFN2O3/c18-10-5-6-14-12(9-10)15(11-3-1-2-4-13(11)19)20-16(23)17(24)21(14)7-8-22/h1-6,9,16,22-23H,7-8H2/t16-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H14ClNO3S/c1-22-13-6-2-11(3-7-13)16-15(10-19)17(16)23(20,21)14-8-4-12(18)5-9-14/h2-9,15-17H,1H3/t15-,16+,17+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H14F3N3O2S/c1-11-2-4-12(5-3-11)15-10-16(17(18,19)20)22-23(15)13-6-8-14(9-7-13)26(21,24)25/h2-10H,1H3,(H2,21,24,25)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H14N2O3/c1-2-19-10-14(17(21)22)16(20)13-4-3-12(9-15(13)19)11-5-7-18-8-6-11/h3-10H,2H2,1H3,(H,21,22)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H14N2O6S/c1-26(22,23)19-13-8-15-12(17(21)14(9-24-15)18-10-20)7-16(13)25-11-5-3-2-4-6-11/h2-10,19H,1H3,(H,18,20)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H14N6/c1-11-8-12(5-7-19-11)13-9-15(18)23-16(10-13)21-17(22-23)14-4-2-3-6-20-14/h2-10H,18H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H14O4S/c1-22(19,20)14-9-7-12(8-10-14)15-11-21-17(18)16(15)13-5-3-2-4-6-13/h2-10H,11H2,1H3	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C17H15Cl3N2O2/c18-17(19,20)15(24)22-11-21-16(14(22)23,12-7-3-1-4-8-12)13-9-5-2-6-10-13/h1-10,15,21,24H,11H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H15Cl3N2O2/c18-17(19,20)15(24)22-11-21-16(14(22)23,12-7-3-1-4-8-12)13-9-5-2-6-10-13/h1-10,15,21,24H,11H2/t15-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H15Cl3N2O2/c18-17(19,20)15(24)22-11-21-16(14(22)23,12-7-3-1-4-8-12)13-9-5-2-6-10-13/h1-10,15,21,24H,11H2/t15-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H15ClN2O/c18-13-6-3-5-12(11-13)17(21)14-7-1-2-8-15(14)20-10-4-9-19-16(17)20/h1-3,5-8,11,21H,4,9-10H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H15ClN2O/c18-14-8-3-1-6-12(14)17(21)13-7-2-4-9-15(13)20-11-5-10-19-16(17)20/h1-4,6-9,21H,5,10-11H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H15ClN2O/c18-14-8-3-1-6-12(14)17(21)13-7-2-4-9-15(13)20-11-5-10-19-16(17)20/h1-4,6-9,21H,5,10-11H2/t17-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H15ClN2O3S/c1-23-13-6-2-11(3-7-13)15-16(17(15,20)10-19)24(21,22)14-8-4-12(18)5-9-14/h2-9,15-16H,20H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H15ClN2O3S/c1-23-13-6-2-11(3-7-13)15-16(17(15,20)10-19)24(21,22)14-8-4-12(18)5-9-14/h2-9,15-16H,20H2,1H3/t15-,16-,17+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H15ClN4S/c1-3-11-8-13-16(12-6-4-5-7-14(12)18)19-9-15-21-20-10(2)22(15)17(13)23-11/h4-8H,3,9H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H15F3N4O3S2/c1-8-9(2)23-24-16-12(8)13(21)14(28-16)15(25)22-7-10-3-5-11(6-4-10)29(26,27)17(18,19)20/h3-6H,7,21H2,1-2H3,(H,22,25)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C17H15N3O2/c1-10-6-12-7-15-16(22-9-21-15)8-14(12)17(20-19-10)11-2-4-13(18)5-3-11/h2-5,7-8H,6,9,18H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H15N3O4/c1-24-11-19-15-8-7-13(20(22)23)9-14(15)17(18-10-16(19)21)12-5-3-2-4-6-12/h2-9H,10-11H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C17H15N3O6/c21-14-6-5-12(9-13(14)17(25)26)20-19-11-3-1-10(2-4-11)16(24)18-8-7-15(22)23/h1-6,9,21H,7-8H2,(H,18,24)(H,22,23)(H,25,26)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H15N5O/c1-3-21(12(2)23)15-6-4-5-13(9-15)16-7-8-19-17-14(10-18)11-20-22(16)17/h4-9,11H,3H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H15N5O2/c1-2-22-20-17(19-21-22)18-16(23)15-11-7-3-5-9-13(11)24-14-10-6-4-8-12(14)15/h3-10,15H,2H2,1H3,(H,18,20,23)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H15N7O7S4/c1-23-16(20-21-22-23)33-5-6-4-32-15-17(31-2,14(30)24(15)8(6)11(28)29)19-9(25)13-34-12(35-13)7(3-18)10(26)27/h13,15H,4-5H2,1-2H3,(H,19,25)(H,26,27)(H,28,29)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H15N7O7S4/c1-23-16(20-21-22-23)33-5-6-4-32-15-17(31-2,14(30)24(15)8(6)11(28)29)19-9(25)13-34-12(35-13)7(3-18)10(26)27/h13,15H,4-5H2,1-2H3,(H,19,25)(H,26,27)(H,28,29)/t13?,15-,17-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H15N7O7S4/c1-23-16(20-21-22-23)33-5-6-4-32-15-17(31-2,14(30)24(15)8(6)11(28)29)19-9(25)13-34-12(35-13)7(3-18)10(26)27/h13,15H,4-5H2,1-2H3,(H,19,25)(H,26,27)(H,28,29)/t13?,15-,17-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H15N7O7S4/c1-23-16(20-21-22-23)33-5-6-4-32-15-17(31-2,14(30)24(15)8(6)11(28)29)19-9(25)13-34-12(35-13)7(3-18)10(26)27/h13,15H,4-5H2,1-2H3,(H,19,25)(H,26,27)(H,28,29)/t13?,15-,17?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H15NO3/c1-11(17(20)21)12-6-8-14(9-7-12)18-10-13-4-2-3-5-15(13)16(18)19/h2-9,11H,10H2,1H3,(H,20,21)/t11-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H15NO5/c1-11(19)18-13-7-9-14(10-8-13)23-17(21)15-5-3-4-6-16(15)22-12(2)20/h3-10H,1-2H3,(H,18,19)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H16Cl2N2O/c1-21-12(10-22)9-20-17(13-4-2-3-5-15(13)19)14-8-11(18)6-7-16(14)21/h2-8,12,22H,9-10H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H16Cl2N2O/c1-21-12(10-22)9-20-17(13-4-2-3-5-15(13)19)14-8-11(18)6-7-16(14)21/h2-8,12,22H,9-10H2,1H3/t12-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H16Cl2N2O/c1-21-12(10-22)9-20-17(13-4-2-3-5-15(13)19)14-8-11(18)6-7-16(14)21/h2-8,12,22H,9-10H2,1H3/t12-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H16Cl2N2O/c1-21-15-9-5-3-7-13(15)16(20-10-17(21,19)11-22)12-6-2-4-8-14(12)18/h2-9,22H,10-11H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H16ClFN2O2/c18-12-5-3-11(4-6-12)17(21-9-1-2-16(20)23)14-10-13(19)7-8-15(14)22/h3-8,10,22H,1-2,9H2,(H2,20,23)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H16ClFN4O2/c1-17(9-25-8-15(20)23-17)12-6-11(3-4-13(12)19)22-16(24)14-5-2-10(18)7-21-14/h2-7H,8-9H2,1H3,(H2,20,23)(H,22,24)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C17H16ClN3O/c18-12-5-6-15-13(11-12)17(21-9-7-19-8-10-21)20-14-3-1-2-4-16(14)22-15/h1-6,11,19H,7-10H2	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C17H16ClN3O2/c1-20-14-8-7-12(18)9-13(14)16(11-5-3-2-4-6-11)21(17(19)23)10-15(20)22/h2-9,16H,10H2,1H3,(H2,19,23)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H16ClN3O2/c1-20-14-8-7-12(18)9-13(14)16(11-5-3-2-4-6-11)21(17(19)23)10-15(20)22/h2-9,16H,10H2,1H3,(H2,19,23)/t16-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H16ClN5O2/c1-9(2)16-20-15(21-25-16)14-12-7-22(3)17(24)13-10(18)5-4-6-11(13)23(12)8-19-14/h4-6,8-9H,7H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H16ClN5O3/c1-17(2,25)16-20-14(21-26-16)13-11-7-22(3)15(24)12-9(18)5-4-6-10(12)23(11)8-19-13/h4-6,8,25H,7H2,1-3H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H16ClN5O4/c1-17(26,7-24)16-20-14(21-27-16)13-11-6-22(2)15(25)12-9(18)4-3-5-10(12)23(11)8-19-13/h3-5,8,24,26H,6-7H2,1-2H3	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C17H16ClN5O4/c1-17(26,7-24)16-20-14(21-27-16)13-11-6-22(2)15(25)12-9(18)4-3-5-10(12)23(11)8-19-13/h3-5,8,24,26H,6-7H2,1-2H3/t17-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H16ClNO.C4H4O4/c1-19-9-14-12-4-2-3-5-16(12)20-17-7-6-11(18)8-13(17)15(14)10-19;5-3(6)1-2-4(7)8/h2-8,14-15H,9-10H2,1H3;1-2H,(H,5,6)(H,7,8)/b;2-1-/t14-,15-;/m1./s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C17H16CINO/c1-19-9-14-12-4-2-3-5-16(12)20-17-7-6-11(18)8-13(17)15(14)10-19/h2-8,14-15H,9-10H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H16CINO/c1-19-9-14-12-4-2-3-5-16(12)20-17-7-6-11(18)8-13(17)15(14)10-19/h2-8,14-15H,9-10H2,1H3/t14-,15-/m0/s1	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C17H16CINO/c1-19-9-14-12-4-2-3-5-16(12)20-17-7-6-11(18)8-13(17)15(14)10-19/h2-8,14-15H,9-10H2,1H3/t14-,15-/m1/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C17H16CINO/c1-19-9-14-12-4-2-3-5-16(12)20-17-7-6-11(18)8-13(17)15(14)10-19/h2-8,14-15H,9-10H2,1H3/t14-,15+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H16CINO/c18-11-5-6-17-14(9-11)12-7-8-19-10-15(12)13-3-1-2-4-16(13)20-17/h1-6,9,12,15,19H,7-8,10H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H16CINO/c18-11-5-6-17-14(9-11)12-7-8-19-10-15(12)13-3-1-2-4-16(13)20-17/h1-6,9,12,15,19H,7-8,10H2/t12-,15+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H16CINO3S2/c1-22-12-6-2-10(3-7-12)14-15(17(19)23)16(14)24(20,21)13-8-4-11(18)5-9-13/h2-9,14-16H,1H3,(H2,19,23)/t14-,15+,16-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H16CINO5S/c1-24-12-6-2-10(3-7-12)14-15(17(14,19)16(20)21)25(22,23)13-8-4-11(18)5-9-13/h2-9,14-15H,19H2,1H3,(H,20,21)/t14-,15-,17+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H16F2N4O3S2/c1-8-9(2)22-23-16-12(8)13(20)14(27-16)15(24)21-7-10-3-5-11(6-4-10)28(25,26)17(18)19/h3-6,17H,7,20H2,1-2H3,(H,21,24)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C17H16F6N2O/c18-16(19,20)11-5-3-4-9-10(15(26)12-6-1-2-7-24-12)8-13(17(21,22)23)25-14(9)11/h3-5,8,12,15,24,26H,1-2,6-7H2	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C17H16F6N2O/c18-16(19,20)11-5-3-4-9-10(15(26)12-6-1-2-7-24-12)8-13(17(21,22)23)25-14(9)11/h3-5,8,12,15,24,26H,1-2,6-7H2/p+1/t12-,15+/m1/s1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C17H16F6N2O/c18-16(19,20)11-5-3-4-9-10(15(26)12-6-1-2-7-24-12)8-13(17(21,22)23)25-14(9)11/h3-5,8,12,15,24,26H,1-2,6-7H2/t12-,15-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H16F6N2O/c18-16(19,20)11-5-3-4-9-10(15(26)12-6-1-2-7-24-12)8-13(17(21,22)23)25-14(9)11/h3-5,8,12,15,24,26H,1-2,6-7H2/t12-,15+/m1/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C17H16FNOS/c1-19-8-9-21-17-10-12-4-2-3-5-15(12)20-16-7-6-13(18)11-14(16)17/h2-7,10-11,19H,8-9H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H16FNOS/c1-19-8-9-21-17-11-12-10-13(18)6-7-15(12)20-16-5-3-2-4-14(16)17/h2-7,10-11,19H,8-9H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H16N2O/c1-2-7-15(18)12-8-3-4-9-13(12)17-14-10-5-6-11-16(14)20-19-17/h2-6,8-11,15H,1,7,18H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H16N2O/c1-2-7-15(18)12-8-3-4-9-13(12)17-14-10-5-6-11-16(14)20-19-17/h2-6,8-11,15H,1,7,18H2/t15-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H16N2O/c1-3-13-8-4-7-11-16(13)19-12(2)18-15-10-6-5-9-14(15)17(19)20/h4-11H,3H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H16N2OS/c20-14-10-18-16(11-6-2-1-3-7-11)15-12-8-4-5-9-13(12)21-17(15)19-14/h1-3,6-7H,4-5,8-10H2,(H,19,20)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H16N4O4S2/c1-20(9-15-18-17(19-25-15)14-3-2-8-27-14)16(22)11-26-10-12-4-6-13(7-5-12)21(23)24/h2-8H,9-11H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H16N4S2/c1-20-4-6-21(7-5-20)17-15-10-22-8-13(15)12(2-3-18)14-9-23-11-16(14)19-17/h2,8-11H,4-7H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H16N4S2/c1-20-4-6-21(7-5-20)17-15-10-22-8-13(15)12(2-3-18)14-9-23-11-16(14)19-17/h2,8-11H,4-7H2,1H3/b12-2+	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C17H16O3S/c1-12-7-9-14(10-8-12)21(19,20)17-15(11-18)16(17)13-5-3-2-4-6-13/h2-11,15-17H,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H16O3S/c1-12-7-9-14(10-8-12)21(19,20)17-15(11-18)16(17)13-5-3-2-4-6-13/h2-11,15-17H,1H3/t15-,16+,17+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H17Cl2N/c1-20-17-9-7-12(13-4-2-3-5-14(13)17)11-6-8-15(18)16(19)10-11/h2-6,8,10,12,17,20H,7,9H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H17Cl2N/c1-20-17-9-7-12(13-4-2-3-5-14(13)17)11-6-8-15(18)16(19)10-11/h2-6,8,10,12,17,20H,7,9H2,1H3/p+1/t12-,17-/m1/s1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C17H17Cl2N/c1-20-17-9-7-12(13-4-2-3-5-14(13)17)11-6-8-15(18)16(19)10-11/h2-6,8,10,12,17,20H,7,9H2,1H3/t12-,17-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H17Cl2N/c1-20-17-9-7-12(13-4-2-3-5-14(13)17)11-6-8-15(18)16(19)10-11/h2-6,8,10,12,17,20H,7,9H2,1H3/t12-,17+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H17Cl2NO/c1-2-3-10-20-17(13-6-4-5-7-15(13)19)14-11-12(18)8-9-16(14)21/h4-9,11,21H,2-3,10H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H17Cl2NO/c1-20-9-12-7-13(21-2)4-5-14(12)15(10-20)11-3-6-16(18)17(19)8-11/h3-8,15H,9-10H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H17Cl2NO/c1-20-9-12-7-13(21-2)4-5-14(12)15(10-20)11-3-6-16(18)17(19)8-11/h3-8,15H,9-10H2,1-2H3/t15-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H17Cl2NO/c1-20-9-12-7-13(21-2)4-5-14(12)15(10-20)11-3-6-16(18)17(19)8-11/h3-8,15H,9-10H2,1-2H3/t15-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H17ClN2O/c1-3-19-16-20-15-10-9-13(18)11-14(15)17(2,21-16)12-7-5-4-6-8-12/h4-11H,3H2,1-2H3,(H,19,20)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H17ClN2O/c1-3-19-16-20-15-10-9-13(18)11-14(15)17(2,21-16)12-7-5-4-6-8-12/h4-11H,3H2,1-2H3,(H,19,20)/t17-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H17ClN2O4/c1-11-3-6-14(7-4-11)24-10-12(2)19-17(21)15-9-13(20(22)23)5-8-16(15)18/h3-9,12H,10H2,1-2H3,(H,19,21)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H17ClN2O4/c1-11-3-6-14(7-4-11)24-10-12(2)19-17(21)15-9-13(20(22)23)5-8-16(15)18/h3-9,12H,10H2,1-2H3,(H,19,21)/t12-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H17ClN6O3/c1-22-6-8-23(9-7-22)17(26)27-16-14-13(19-4-5-20-14)15(25)24(16)12-3-2-11(18)10-21-12/h2-5,10,16H,6-9H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H17ClN6O3/c1-22-6-8-23(9-7-22)17(26)27-16-14-13(19-4-5-20-14)15(25)24(16)12-3-2-11(18)10-21-12/h2-5,10,16H,6-9H2,1H3/t16-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H17ClN6O3/c1-22-6-8-23(9-7-22)17(26)27-16-14-13(19-4-5-20-14)15(25)24(16)12-3-2-11(18)10-21-12/h2-5,10,16H,6-9H2,1H3/t16-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H17ClO4S/c1-22-13-6-2-11(3-7-13)16-15(10-19)17(16)23(20,21)14-8-4-12(18)5-9-14/h2-9,15-17,19H,10H2,1H3/t15-,16-,17-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H17ClO6/c1-8-5-9(19)6-12(23-4)17(8)16(20)13-10(21-2)7-11(22-3)14(18)15(13)24-17/h6-8H,5H2,1-4H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H17F2N5O3/c1-17(16(19)27-8-13(20)24-17)10-5-9(3-4-11(10)18)23-15(25)12-6-22-14(26-2)7-21-12/h3-7,16H,8H2,1-2H3,(H2,20,24)(H,23,25)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C17H17FN4O3S2/c1-8-9(2)21-22-17-13(8)14(19)15(26-17)16(23)20-7-10-4-5-12(11(18)6-10)27(3,24)25/h4-6H,7,19H2,1-3H3,(H,20,23)	1	(Wu et al., 2018)

InChI=1S/C17H17N3O/c1-19-14-5-3-2-4-13(14)16-15(19)7-6-12(17(16)21)10-20-9-8-18-11-20/h2-5,8-9,11-12H,6-7,10H2,1H3/t12-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H17N3O2/c1-4-13-11(2)20-10-14(18-17(20)19-16(13)22-3)15(21)12-8-6-5-7-9-12/h5-10H,4H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H17N3O6S2/c1-9(21)26-6-10-7-28-16-13(15(23)20(16)14(10)17(24)25)19-12(22)8-27-11-2-4-18-5-3-11/h2-5,13,16H,6-8H2,1H3,(H,19,22)(H,24,25)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H17N3O6S2/c1-9(21)26-6-10-7-28-16-13(15(23)20(16)14(10)17(24)25)19-12(22)8-27-11-2-4-18-5-3-11/h2-5,13,16H,6-8H2,1H3,(H,19,22)(H,24,25)/t13-,16-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H17N3O6S2/c1-9(21)26-6-10-7-28-16-13(15(23)20(16)14(10)17(24)25)19-12(22)8-27-11-2-4-18-5-3-11/h2-5,13,16H,6-8H2,1H3,(H,19,22)(H,24,25)/t13?,16-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H17N3O8S/c1-8(21)28-6-9-7-29-16-12(15(23)20(16)13(9)17(24)25)18-14(22)11(19-26-2)10-4-3-5-27-10/h3-5,12,16H,6-7H2,1-2H3,(H,18,22)(H,24,25)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H17N3O8S/c1-8(21)28-6-9-7-29-16-12(15(23)20(16)13(9)17(24)25)18-14(22)11(19-26-2)10-4-3-5-27-10/h3-5,12,16H,6-7H2,1-2H3,(H,18,22)(H,24,25)/b19-11-/t12-,16-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H17N3O8S/c1-8(21)28-6-9-7-29-16-12(15(23)20(16)13(9)17(24)25)18-14(22)11(19-26-2)10-4-3-5-27-10/h3-5,12,16H,6-7H2,1-2H3,(H,18,22)(H,24,25)/b19-11-/t12-,16-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H17N3O8S/c1-8(21)28-6-9-7-29-16-12(15(23)20(16)13(9)17(24)25)18-14(22)11(19-26-2)10-4-3-5-27-10/h3-5,12,16H,6-7H2,1-2H3,(H,18,22)(H,24,25)/b19-11-/t12-,16+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H17N3O8S/c1-8(21)28-6-9-7-29-16-12(15(23)20(16)13(9)17(24)25)18-14(22)11(19-26-2)10-4-3-5-27-10/h3-5,12,16H,6-7H2,1-2H3,(H,18,22)(H,24,25)/b19-11+/t12-,16-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H17N3O8S/c1-8(21)28-6-9-7-29-16-12(15(23)20(16)13(9)17(24)25)18-14(22)11(19-26-2)10-4-3-5-27-10/h3-5,12,16H,6-7H2,1-2H3,(H,18,22)(H,24,25)/b19-11+/t12-,16-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H17N3O8S/c1-8(21)28-6-9-7-29-16-12(15(23)20(16)13(9)17(24)25)18-14(22)11(19-26-2)10-4-3-5-27-10/h3-5,12,16H,6-7H2,1-2H3,(H,18,22)(H,24,25)/b19-11+/t12?,16-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H17N5O/c1-3-21(12(2)23)15-6-4-5-13(9-15)16-7-8-19-17-14(10-18)11-20-22(16)17/h4-9,20H,3,11H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H17N7O8S4.2Na/c1-23-16(20-21-22-23)34-4-5-3-33-15-17(32-2,14(31)24(15)7(5)11(29)30)19-9(26)13-35-12(36-13)6(8(18)25)10(27)28;;/h13,15H,3-4H2,1-2H3,(H2,18,25)(H,19,26)(H,27,28)(H,29,30);;/q;2*+1/p-2/t13?,15-,17+;;/m1../s1	0	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C17H17N7O8S4/c1-23-16(20-21-22-23)34-4-5-3-33-15-17(31-2,14(30)24(15)7(5)11(28)29)19-9(25)13-35-12-6(10(26)27)8(18)32-36(12)13/h13,15H,3-4,18H2,1-2H3,(H,19,25)(H,26,27)(H,28,29)/t13-,15+,17-,36?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H17N7O8S4/c1-23-16(20-21-22-23)34-4-5-3-33-15-17(32-2,14(31)24(15)7(5)11(29)30)19-9(26)13-35-12(36-13)6(8(18)25)10(27)28/h13,15H,3-4H2,1-2H3,(H2,18,25)(H,19,26)(H,27,28)(H,29,30)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H17N7O8S4/c1-23-16(20-21-22-23)34-4-5-3-33-15-17(32-2,14(31)24(15)7(5)11(29)30)19-9(26)13-35-12(36-13)6(8(18)25)10(27)28/h13,15H,3-4H2,1-2H3,(H2,18,25)(H,19,26)(H,27,28)(H,29,30)/t13?,15-,17-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H17N7O8S4/c1-23-16(20-21-22-23)34-4-5-3-33-15-17(32-2,14(31)24(15)7(5)11(29)30)19-9(26)13-35-12(36-13)6(8(18)25)10(27)28/h13,15H,3-4H2,1-2H3,(H2,18,25)(H,19,26)(H,27,28)(H,29,30)/t13?,15-,17?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H17N7O8S4/c1-23-16(20-21-22-23)34-4-5-3-33-15-17(32-2,14(31)24(15)7(5)11(29)30)19-9(26)13-35-12(36-13)6(8(18)25)10(27)28/h13,15H,3-4H2,1-2H3,(H2,18,25)(H,19,26)(H,27,28)(H,29,30)/t13?,15-,17+/m0/s1	0	(Zhu et al., 2018)

InChI=1S/C17H17N7O8S4/c1-23-16(20-21-22-23)34-4-5-3-33-15-17(32-2,14(31)24(15)7(5)11(29)30)19-9(26)13-35-12(36-13)6(8(18)25)10(27)28/h13,15H,3-4H2,1-2H3,(H2,18,25)(H,19,26)(H,27,28)(H,29,30)/t13?,15-,17+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H17NO2/c1-11-5-4-6-12-14-9-18-10-17(14,19)13-7-2-3-8-15(13)20-16(11)12/h2-8,14,18-19H,9-10H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H17NO2/c1-18-8-7-10-3-2-4-12-15(10)13(18)9-11-5-6-14(19)17(20)16(11)12/h2-6,13,19-20H,7-9H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H17NO2/c1-18-8-7-10-3-2-4-12-15(10)13(18)9-11-5-6-14(19)17(20)16(11)12/h2-6,13,19-20H,7-9H2,1H3/t13-/m0/s1	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C17H17NO2/c1-18-8-7-10-3-2-4-12-15(10)13(18)9-11-5-6-14(19)17(20)16(11)12/h2-6,13,19-20H,7-9H2,1H3/t13-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H17NO2/c1-3-20-16-12-8-4-5-9-13(12)17(19)18(2)15-11-7-6-10-14(15)16/h4-11,16H,3H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H17NO2/c1-3-20-16-12-8-4-5-9-13(12)17(19)18(2)15-11-7-6-10-14(15)16/h4-11,16H,3H2,1-2H3/t16-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H17NO2/c1-3-20-16-12-8-4-5-9-13(12)17(19)18(2)15-11-7-6-10-14(15)16/h4-11,16H,3H2,1-2H3/t16-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H17NO2S2/c1-11-7-9-13(10-8-11)22(19,20)16-14(15(16)17(18)21)12-5-3-2-4-6-12/h2-10,14-16H,1H3,(H2,18,21)/t14-,15+,16+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H17NO3S2/c1-21-12-9-7-11(8-10-12)14-15(17(18)22)16(14)23(19,20)13-5-3-2-4-6-13/h2-10,14-16H,1H3,(H2,18,22)/t14-,15+,16-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H17NO4S/c1-11-7-9-13(10-8-11)23(21,22)15-14(17(15,18)16(19)20)12-5-3-2-4-6-12/h2-10,14-15H,18H2,1H3,(H,19,20)/t14-,15+,17-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H17NO4S/c18-9-13-16(11-6-7-14-15(8-11)22-10-21-14)17(13)23(19,20)12-4-2-1-3-5-12/h1-8,13,16-17H,9-10,18H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H17NO4S/c18-9-13-16(11-6-7-14-15(8-11)22-10-21-14)17(13)23(19,20)12-4-2-1-3-5-12/h1-8,13,16-17H,9-10,18H2/t13-,16-,17-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H17NO6/c1-23-13(19)8-11(10-6-4-3-5-7-10)14-15(20)12(17(22)24-2)9-18-16(14)21/h3-7,9,11H,8H2,1-2H3,(H2,18,20,21)/t11-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H17NO7/c1-24-13(20)7-11(9-3-5-10(19)6-4-9)14-15(21)12(17(23)25-2)8-18-16(14)22/h3-6,8,11,19H,7H2,1-2H3,(H2,18,21,22)/t11-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H17NS/c1-18(2)12-14-11-13-7-3-5-9-16(13)19-17-10-6-4-8-15(14)17/h3-11H,12H2,1-2H3	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C17H18Br2FN3O3S/c1-26-16-3-2-12(10-15(16)23-6-4-21-5-7-23)27(24,25)22-14-9-11(18)8-13(20)17(14)19/h2-3,8-10,21-22H,4-7H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H18Cl2N2O5S/c1-17(2)12(16(24)25)21-14(23)10(15(21)27-17)20-13(22)11(26-3)7-4-5-8(18)9(19)6-7/h4-6,10-12,15H,1-3H3,(H,20,22)(H,24,25)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H18Cl2N2O5S/c1-17(2)12(16(24)25)21-14(23)10(15(21)27-17)20-13(22)11(26-3)7-4-5-8(18)9(19)6-7/h4-6,10-12,15H,1-3H3,(H,20,22)(H,24,25)/t10-,11-,12+,15+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H18Cl2N2O5S/c1-17(2)12(16(24)25)21-14(23)10(15(21)27-17)20-13(22)11(26-3)7-4-5-8(18)9(19)6-7/h4-6,10-12,15H,1-	0	(Meng et al., 2021)

3H3,(H,20,22)(H,24,25)/t10-,11?,12+,15-/m1/s1	
InChI=1S/C17H18Cl2N2O5S/c1-17(2)12(16(24)25)21-14(23)10(15(21)27-17)20-13(22)11(26-3)7-4-5-8(18)9(19)6-7/h4-6,10-12,15H,1-3H3,(H,20,22)(H,24,25)/t10-,11+,12+,15-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H18Cl2N2O5S/c1-17(2)12(16(24)25)21-14(23)10(15(21)27-17)20-13(22)11(26-3)7-4-5-8(18)9(19)6-7/h4-6,10-12,15H,1-3H3,(H,20,22)(H,24,25)/t10?,11-,12-,15-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H18Cl2N4/c1-10-21-22-16-9-20-17(12-4-2-3-5-14(12)19)13-8-11(18)6-7-15(13)23(10)16/h2-5,11,13,15H,6-9H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H18ClNO/c1-19-8-7-13-9-16(18)17(20)10-14(13)15(11-19)12-5-3-2-4-6-12/h2-6,9-10,15,20H,7-8,11H2,1H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H18ClNO/c1-19-8-7-13-9-16(18)17(20)10-14(13)15(11-19)12-5-3-2-4-6-12/h2-6,9-10,15,20H,7-8,11H2,1H3/t15-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H18ClNO3S/c18-13-6-8-14(9-7-13)23(21,22)16-15(17(16,10-19)11-20)12-4-2-1-3-5-12/h1-9,15-16,20H,10-11,19H2/t15-,16+,17+/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H18F3N3O3/c1-21-4-6-22(7-5-21)15-12(19)8-10-14(13(15)20)23(3-2-18)9-11(16(10)24)17(25)26/h8-9H,2-7H2,1H3,(H,25,26)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H18F3NO/c1-21-12-11-16(13-5-3-2-4-6-13)22-15-9-7-14(8-10-15)17(18,19)20/h2-10,16,21H,11-12H2,1H3	1 (Li et al., 2005)
InChI=1S/C17H18F3NO/c1-21-12-11-16(13-5-3-2-4-6-13)22-15-9-7-14(8-10-15)17(18,19)20/h2-10,16,21H,11-12H2,1H3/p+1/t16-/m0/s1	1 (Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C17H18F3NO/c1-21-12-11-16(13-5-3-2-4-6-13)22-15-9-7-14(8-10-15)17(18,19)20/h2-10,16,21H,11-12H2,1H3/t16-/m0/s1	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C17H18F3NO/c1-21-12-11-16(13-5-3-2-4-6-13)22-15-9-7-14(8-10-15)17(18,19)20/h2-10,16,21H,11-12H2,1H3/t16-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H18FN3O3/c18-13-7-11-14(8-15(13)20-5-3-19-4-6-20)21(10-1-2-10)9-12(16(11)22)17(23)24/h7-10,19H,1-6H2,(H,23,24)	0 (Li et al., 2005)
InChI=1S/C17H18FN3O3S/c1-19-2-4-20(5-3-19)14-12(18)8-10-13-16(14)25-7-6-21(13)9-11(15(10)22)17(23)24/h8-9H,2-7H2,1H3,(H,23,24)	0 (Li et al., 2005)
InChI=1S/C17H18FN3S/c1-20-6-7-21-13(11-20)10-19-17(16-3-2-8-22-16)14-5-4-12(18)9-15(14)21/h2-5,8-9,13H,6-7,10-11H2,1H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H18FN3S/c1-20-6-7-21-13(11-20)10-19-17(16-3-2-8-22-16)14-5-4-12(18)9-15(14)21/h2-5,8-9,13H,6-7,10-11H2,1H3/t13-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H18FN3S/c1-20-6-7-21-13(11-20)10-19-17(16-3-2-8-22-16)14-5-4-12(18)9-15(14)21/h2-5,8-9,13H,6-7,10-11H2,1H3/t13-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H18N2/c1-13-18-16-11-7-6-10-15(16)12-17(19(13)2)14-8-4-3-5-9-14/h3-11,17H,12H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H18N2/c1-13-18-16-11-7-6-10-15(16)12-17(19(13)2)14-8-4-3-5-9-14/h3-11,17H,12H2,1-2H3/t17-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H18N2/c1-14(12-15-8-4-2-5-9-15)19-17(13-18)16-10-6-3-7-11-16/h2-11,14,17,19H,12H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H18N2/c1-14(12-15-8-4-2-5-9-15)19-17(13-18)16-10-6-3-7-11-16/h2-11,14,17,19H,12H2,1H3/t14-,17-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H18N2/c1-14(12-15-8-4-2-5-9-15)19-17(13-18)16-10-6-3-7-11-16/h2-11,14,17,19H,12H2,1H3/t14-,17+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H18N2O/c1-11-12(2)14-8-4-6-10-16(14)19(17(18)20)15-9-5-3-7-13(11)15/h3-12H,1-2H3,(H2,18,20)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H18N2O/c1-11-12(2)14-8-4-6-10-16(14)19(17(18)20)15-9-5-3-7-13(11)15/h3-12H,1-2H3,(H2,18,20)/t11-,12-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H18N2O3/c1-13(20)18-19-16(21)12-17(22,14-8-4-2-5-9-14)15-10-6-3-7-11-15/h2-11,22H,12H2,1H3,(H,18,20)(H,19,21)	1 (Mazumdar et al., 2023)

	2023)
InChI=1S/C17H18N2O3S/c1-9(2)16-19-18-15(23-16)8-21-12-5-6-13-10(3)11(4)17(20)22-14(13)7-12/h5-7,9H,8H2,1-4H3	(Mazumdar et al.,
InChI=1S/C17H18N2O5S/c18-25(22,23)15-11-12(17(20)21)10-14(19-8-4-5-9-19)16(15)24-13-6-2-1-3-7-13/h1-3,6-7,10-11H,4-5,8-9H2,(H,20,21)(H2,18,22,23)	1 2023)
InChI=1S/C17H18N2O6/c1-9-13(16(20)24-3)15(14(10(2)18-9)17(21)25-4)11-7-5-6-8-12(11)19(22)23/h5-8,15,18H,1-4H3	(Mazumdar et al.,
InChI=1S/C17H18N2O6/c1-9-14(17(21)24-4)15(16(10(2)18-9)25-11(3)20)12-7-5-6-8-13(12)19(22)23/h5-8,15,18H,1-4H3/t15-/m0/s1	1 2023)
InChI=1S/C17H18N2O6S/c1-17(2)11(16(24)25)19-13(21)10(14(19)26-17)18-12(20)9(15(22)23)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9-11,14H,1-2H3,(H,18,20)(H,22,23)(H,24,25)	0 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C17H18N2O6S/c1-17(2)11(16(24)25)19-13(21)10(14(19)26-17)18-12(20)9(15(22)23)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9-11,14H,1-2H3,(H,18,20)(H,22,23)(H,24,25)/t9-,10?,11-,14-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H18N2O6S/c1-17(2)11(16(24)25)19-13(21)10(14(19)26-17)18-12(20)9(15(22)23)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9-11,14H,1-2H3,(H,18,20)(H,22,23)(H,24,25)/t9-,10+,11-,14+/m0/s1	0 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C17H18N2O6S/c1-17(2)11(16(24)25)19-13(21)10(14(19)26-17)18-12(20)9(15(22)23)8-6-4-3-5-7-8/h3-7,9-11,14H,1-2H3,(H,18,20)(H,22,23)(H,24,25)/t9?,10-,11+,14-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H18N4O/c1-11-13(19-10-18-11)9-21-8-7-15-16(17(21)22)12-5-3-4-6-14(12)20(15)2/h3-6,10H,7-9H2,1-2H3,(H,18,19)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H18N4O2/c18-11-15-16(19-12-21(9-10-22)17(15)23)20-7-5-13-3-1-2-4-14(13)6-8-20/h1-4,12,22H,5-10H2	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H18N4O3/c1-20(2)11-14-6-7-16(24-14)12-4-3-5-13(10-12)19-17-15(21(22)23)8-9-18-17/h3-10,17,19H,11H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H18N4O3/c1-20(2)11-14-6-7-16(24-14)12-4-3-5-13(10-12)19-17-15(21(22)23)8-9-18-17/h3-10,17,19H,11H2,1-2H3/t17-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H18N4O3/c1-20(2)11-14-6-7-16(24-14)12-4-3-5-13(10-12)19-17-15(21(22)23)8-9-18-17/h3-10,18-19H,11H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H18N4O3S2/c1-9-10(2)20-21-17-13(9)14(18)15(25-17)16(22)19-8-11-4-6-12(7-5-11)26(3,23)24/h4-7H,8,18H2,1-3H3,(H,19,22)	0 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C17H18N4OS2/c1-9-10(2)20-21-17-13(9)14(18)15(24-17)16(22)19-8-11-4-6-12(23-3)7-5-11/h4-7H,8,18H2,1-3H3,(H,19,22)	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C17H18N4S2/c1-20-4-6-21(7-5-20)17-15-10-22-8-13(15)12(2-3-18)14-9-23-11-16(14)19-17/h9-11H,2,4-8H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H18N6/c18-7-5-15(12-3-1-2-4-12)23-10-13(9-22-23)16-14-6-8-19-17(14)21-11-20-16/h6,8-12,15H,1-5H2,(H,19,20,21)	(Mazumdar et al.,
InChI=1S/C17H18N6OS/c1-9-10(2)21-22-17-13(9)14(18)15(25-17)16(24)20-11-7-23(8-11)12-4-3-5-19-6-12/h3-6,11H,7-8,18H2,1-2H3,(H,20,24)	0 2023)
InChI=1S/C17H19CIN2S/c1-19(2)10-5-11-20-14-6-3-4-7-16(14)21-17-9-8-13(18)12-15(17)20/h3-4,6-9,12H,5,10-11H2,1-2H3	0 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C17H19CIN2S/c1-19(2)10-5-11-20-14-6-3-4-7-16(14)21-17-9-8-13(18)12-15(17)20/h3-4,6-9,12H,5,10-11H2,1-2H3/p+1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19CIN4/c18-16-8-9-17(20-19-16)22-13-11-21(12-14-22)10-4-7-15-5-2-1-3-6-15/h1-9H,10-14H2	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19CIN4/c18-16-8-9-17(20-19-16)22-13-11-21(12-14-22)10-4-7-15-5-2-1-3-6-15/h1-9H,10-14H2/b7-4+	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19CIN4O2/c1-10-7-11(2)22(17(24)20-10)6-5-19-16(23)15-9-12-8-13(18)3-4-14(12)21-15/h3-4,7-8,15,21H,5-6,9H2,1-2H3,(H,19,23)	(Mazumdar et al.,
	0 2023)

InChI=1S/C17H19CIN4O2/c1-10-7-11(2)22(17(24)20-10)6-5-19-16(23)15-9-12-8-13(18)3-4-14(12)21-15/h3-4,7-8,15,21H,5-6,9H2,1-2H3,(H,19,23)/t15-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19F2N3O3/c1-3-21-8-11(17(24)25)16(23)10-6-12(18)15(13(19)14(10)21)22-5-4-20-9(2)7-22/h6,8-9,20H,3-5,7H2,1-2H3,(H,24,25)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19F2N3O3/c1-3-21-8-11(17(24)25)16(23)10-6-12(18)15(13(19)14(10)21)22-5-4-20-9(2)7-22/h6,8-9,20H,3-5,7H2,1-2H3,(H,24,25)/t9-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19F2N3O3/c1-3-21-8-11(17(24)25)16(23)10-6-12(18)15(13(19)14(10)21)22-5-4-20-9(2)7-22/h6,8-9,20H,3-5,7H2,1-2H3,(H,24,25)/t9-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19FN4S/c1-11-9-13-16(22-7-5-21(2)6-8-22)19-15-10-12(18)3-4-14(15)20-17(13)23-11/h3-4,9-10,20H,5-8H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19N/c1-18-17-12-11-14(13-7-3-2-4-8-13)15-9-5-6-10-16(15)17/h2-10,14,17-18H,11-12H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19N/c1-18-17-12-11-14(13-7-3-2-4-8-13)15-9-5-6-10-16(15)17/h2-10,14,17-18H,11-12H2,1H3/t14-,17-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19N/c1-18-17-12-11-14(13-7-3-2-4-8-13)15-9-5-6-10-16(15)17/h2-10,14,17-18H,11-12H2,1H3/t14-,17+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19N3/c1-19-9-10-20-16(12-19)15-7-3-2-5-13(15)11-14-6-4-8-18-17(14)20/h2-8,16H,9-12H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19N3/c1-19-9-10-20-16(12-19)15-7-3-2-5-13(15)11-14-6-4-8-18-17(14)20/h2-8,16H,9-12H2,1H3/p+2/t16-/m0/s1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C17H19N3/c1-19-9-10-20-16(12-19)15-7-3-2-5-13(15)11-14-6-4-8-18-17(14)20/h2-8,16H,9-12H2,1H3/t16-/m0/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C17H19N3/c1-19-9-10-20-16(12-19)15-7-3-2-5-13(15)11-14-6-4-8-18-17(14)20/h2-8,16H,9-12H2,1H3/t16-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19N3/c1-20-10-11(5-6-18)7-14-13-3-2-4-15-17(13)12(9-19-15)8-16(14)20/h2-4,9,11,14,16,19H,5,7-8,10H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19N3/c1-20-10-11(5-6-18)7-14-13-3-2-4-15-17(13)12(9-19-15)8-16(14)20/h2-4,9,11,14,16,19H,5,7-8,10H2,1H3/t11-,14-,16-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19N3/c1-20-10-11(5-6-18)7-14-13-3-2-4-15-17(13)12(9-19-15)8-16(14)20/h2-4,9,11,14,16,19H,5,7-8,10H2,1H3/t11-,14-,16+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19N3/c1-20-10-11(5-6-18)7-14-13-3-2-4-15-17(13)12(9-19-15)8-16(14)20/h2-4,9,11,14,16,19H,5,7-8,10H2,1H3/t11-,14?,16+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19N3/c1-20-10-11(5-6-18)7-14-13-3-2-4-15-17(13)12(9-19-15)8-16(14)20/h2-4,9,11,14,16,19H,5,7-8,10H2,1H3/t11-,14+,16+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19N3/c1-20-10-11(5-6-18)7-14-13-3-2-4-15-17(13)12(9-19-15)8-16(14)20/h2-4,9,11,14,16,19H,5,7-8,10H2,1H3/t11-,14+,16+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19N3/c1-3-7-15(8-4-1)13-20(14-17-18-11-12-19-17)16-9-5-2-6-10-16/h1-10H,11-14H2,(H,18,19)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19N3O/c1-13-5-7-14(8-6-13)20(12-17-18-9-10-19-17)15-3-2-4-16(21)11-15/h2-8,11,21H,9-10,12H2,1H3,(H,18,19)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19N3O/c21-17(16-8-4-5-9-18-16)20-12-10-19(11-13-20)14-15-6-2-1-3-7-15/h1-9H,10-14H2	1	(Mazumdar et al., 2023)

	2023)
InChI=1S/C17H19N3O3/c21-12-7-11(8-12)14(13-3-1-2-6-18-13)20-17(22)15-16(10-4-5-10)23-9-19-15/h1-3,6,9-12,14,21H,4-5,7-8H2,(H,20,22)	(Mazumdar et al.,
InChI=1S/C17H19N3O3/c21-12-7-11(8-12)14(13-3-1-2-6-18-13)20-17(22)15-16(10-4-5-10)23-9-19-15/h1-3,6,9-12,14,21H,4-5,7-8H2,(H,20,22)/t11?,12?,14-/m1/s1	0 2023)
InChI=1S/C17H19N3O3S/c1-10-8-18-15(11(2)16(10)23-4)9-24(21)17-19-13-6-5-12(22-3)7-14(13)20-17/h5-8H,9H2,1-4H3,(H,19,20)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19N3O3S/c1-10-8-18-15(11(2)16(10)23-4)9-24(21)17-19-13-6-5-12(22-3)7-14(13)20-17/h5-8H,9H2,1-4H3,(H,19,20)/t24-/m1/s1	1 (Li et al., 2005)
InChI=1S/C17H19N3O4S/c1-17(2)12(16(23)24)20-14(22)11(15(20)25-17)19-13(21)10(18-3)9-7-5-4-6-8-9/h4-8,10-12,15H,3H2,1-2H3,(H,19,21)(H,23,24)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19N3O4S/c1-17(2)12(16(23)24)20-14(22)11(15(20)25-17)19-13(21)10(18-3)9-7-5-4-6-8-9/h4-8,10-12,15H,3H2,1-2H3,(H,19,21)(H,23,24)/t10-,11?,12-,15-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19N3O4S/c1-17(2)12(16(23)24)20-14(22)11(15(20)25-17)19-13(21)10(18-3)9-7-5-4-6-8-9/h4-8,10-12,15H,3H2,1-2H3,(H,19,21)(H,23,24)/t10-,11+,12-,15-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19N3O4S/c1-17(2)12(16(23)24)20-14(22)11(15(20)25-17)19-13(21)10(18-3)9-7-5-4-6-8-9/h4-8,10-12,15H,3H2,1-2H3,(H,19,21)(H,23,24)/t10-,11+,12-,15+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19N5/c1-16(2,9-18)14-5-13(8-22-12-20-11-21-22)6-15(7-14)17(3,4)10-19/h5-7,11-12H,8H2,1-4H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19N5O/c18-13-15-12-16(14-4-2-1-3-5-14)20-21-17(15)19-6-7-22-8-10-23-11-9-22/h1-5,12H,6-11H2,(H,19,21)	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C17H19N5O2/c1-3-24-17(23)21-13-9-12-15(16(18)20-13)22-14(10(2)19-12)11-7-5-4-6-8-11/h4-10,19H,3H2,1-2H3,(H3,18,20,21,23)	1 (Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C17H19N5O2/c1-9-11(6-10-7-12(23-2)4-5-13(10)24-3)8-20-16-14(9)15(18)21-17(19)22-16/h4-5,7-8H,6H2,1-3H3,(H4,18,19,20,21,22)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19N5O6S2/c1-2-3-8(9-6-30-16(18)20-9)12(23)21-10-13(24)22-11(15(25)26)7(4-28-17(19)27)5-29-14(10)22/h3,6,10,14H,2,4-5H2,1H3,(H2,18,20)(H2,19,27)(H,21,23)(H,25,26)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19N5O6S2/c1-2-3-8(9-6-30-16(18)20-9)12(23)21-10-13(24)22-11(15(25)26)7(4-28-17(19)27)5-29-14(10)22/h3,6,10,14H,2,4-5H2,1H3,(H2,18,20)(H2,19,27)(H,21,23)(H,25,26)/b8-3-/t10-,14-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19N5O6S2/c1-2-3-8(9-6-30-16(18)20-9)12(23)21-10-13(24)22-11(15(25)26)7(4-28-17(19)27)5-29-14(10)22/h3,6,10,14H,2,4-5H2,1H3,(H2,18,20)(H2,19,27)(H,21,23)(H,25,26)/b8-3-/t10?,14-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19N5O6S2/c1-2-3-8(9-6-30-16(18)20-9)12(23)21-10-13(24)22-11(15(25)26)7(4-28-17(19)27)5-29-14(10)22/h3,6,10,14H,2,4-5H2,1H3,(H2,18,20)(H2,19,27)(H,21,23)(H,25,26)/b8-3+/t10-,14-/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19N5O6S2/c1-2-3-8(9-6-30-16(18)20-9)12(23)21-10-13(24)22-11(15(25)26)7(4-28-17(19)27)5-29-14(10)22/h3,6,10,14H,2,4-5H2,1H3,(H2,18,20)(H2,19,27)(H,21,23)(H,25,26)/b8-3+/t10-,14+/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19N5O6S2/c1-2-3-8(9-6-30-16(18)20-9)12(23)21-10-13(24)22-11(15(25)26)7(4-28-17(19)27)5-29-14(10)22/h3,6,10,14H,2,4-5H2,1H3,(H2,18,20)(H2,19,27)(H,21,23)(H,25,26)/b8-3+/t10?,14-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19N5O6S2/c1-7(11(21-27-3)10-6-30-17(18)20-10)19-12-14(24)22-13(16(25)26)9(4-28-8(2)23)5-29-15(12)22/h6,12,15,19H,1,4-5H2,2-3H3,(H2,18,20)(H,25,26)/t12-,15+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19NO/c1-18-11-12-19-17(14-7-3-2-4-8-14)16-10-6-5-9-15(16)13-18/h2-10,17H,11-13H2,1H3	1 (Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C17H19NO/c1-18-11-12-19-17(14-7-3-2-4-8-14)16-10-6-5-9-15(16)13-18/h2-10,17H,11-13H2,1H3/t17-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19NO/c1-18-11-12-19-17(14-7-3-2-4-8-14)16-10-6-5-9-15(16)13-18/h2-10,17H,11-13H2,1H3/t17-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19NO2/c1-9-3-5-11-12-7-10-4-6-13(19)15-14(10)17(11,8-18(12)2)16(9)20-15/h3-4,6,11-12,16,19H,5,7-8H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19NO2/c1-9-3-5-11-12-7-10-4-6-13(19)15-14(10)17(11,8-18(12)2)16(9)20-15/h3-4,6,11-12,16,19H,5,7-8H2,1-2H3/t11-,12?,16+,17?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19NO2/c1-9-3-5-11-12-7-10-4-6-13(19)15-14(10)17(11,8-18(12)2)16(9)20-15/h3-4,6,11-12,16,19H,5,7-8H2,1-2H3/t11-,12+,16-,17+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19NO2/c1-9-3-6-13-17-8-11(18(13)2)7-10-4-5-12(19)15(14(10)17)20-16(9)17/h3-5,11,13,16,19H,6-8H2,1-2H3/t11-,13+,16-,17-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19NO2S/c1-12-7-9-14(10-8-12)21(19,20)17-15(11-18)16(17)13-5-3-2-4-6-13/h2-10,15-17H,11,18H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19NO2S/c1-12-7-9-14(10-8-12)21(19,20)17-15(11-18)16(17)13-5-3-2-4-6-13/h2-10,15-17H,11,18H2,1H3/t15-,16+,17+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19NO3/c1-18-7-6-17-10-3-5-13(20)16(17)21-15-12(19)4-2-9(14(15)17)8-11(10)18/h2-5,10-11,13,16,19-20H,6-8H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19NO3/c1-18-7-6-17-10-3-5-13(20)16(17)21-15-12(19)4-2-9(14(15)17)8-11(10)18/h2-5,10-11,13,16,19-20H,6-8H2,1H3/t10-,11?,13+,16-,17?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19NO3/c1-18-7-6-17-10-3-5-13(20)16(17)21-15-12(19)4-2-9(14(15)17)8-11(10)18/h2-5,10-11,13,16,19-20H,6-8H2,1H3/t10-,11+,13-,16-,17-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19NO3/c1-18-7-6-17-10-3-5-13(20)16(17)21-15-12(19)4-2-9(14(15)17)8-11(10)18/h2-5,10-11,13,16,19-20H,6-8H2,1H3/t10-,11+,13-,16-,17-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19NO3/c1-18-7-6-17-10-3-5-13(20)16(17)21-15-12(19)4-2-9(14(15)17)8-11(10)18/h2-5,10-11,13,16,19-20H,6-8H2,1H3/t10-,11+,13?,16-,17-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19NO3/c1-18-7-6-17-10-3-5-13(20)16(17)21-15-12(19)4-2-9(14(15)17)8-11(10)18/h2-5,10-11,13,16,19-20H,6-8H2,1H3/t10-,11+,13+,16-,17-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19NO3/c1-18-7-6-17-10-3-5-13(20)16(17)21-15-12(19)4-2-9(14(15)17)8-11(10)18/h2-5,10-11,13,16,19-20H,6-8H2,1H3/t10-,11+,13+,16-,17+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19NO3/c1-18-7-6-17-10-3-5-13(20)16(17)21-15-12(19)4-2-9(14(15)17)8-11(10)18/h2-5,10-11,13,16,19-20H,6-8H2,1H3/t10-,11+,13+,16+,17-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19NO3/c1-18-7-6-17-10-3-5-13(20)16(17)21-15-12(19)4-2-9(14(15)17)8-11(10)18/h2,4,10-11,16,19H,3,5-8H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19NO3/c1-18-7-6-17-10-3-5-13(20)16(17)21-15-12(19)4-2-9(14(15)17)8-11(10)18/h2,4,10-11,16,19H,3,5-8H2,1H3/t10-,11-,16+,17+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19NO3/c1-18-7-6-17-10-3-5-13(20)16(17)21-15-12(19)4-2-9(14(15)17)8-11(10)18/h2,4,10-11,16,19H,3,5-8H2,1H3/t10-,11?,16?,17?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C17H19NO3/c1-18-7-6-17-10-3-5-13(20)16(17)21-15-12(19)4-2-9(14(15)17)8-11(10)18/h2,4,10-11,16,19H,3,5-8H2,1H3/t10-,11+,16-,17-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19NO3/c1-18-7-6-17-10-3-5-13(20)16(17)21-15-12(19)4-2-9(14(15)17)8-11(10)18/h2,4,10-11,16,19H,3,5-8H2,1H3/t10-,11+,16-,17+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19NO3/c1-18-7-6-17-10-3-5-13(20)16(17)21-15-12(19)4-2-9(14(15)17)8-11(10)18/h2,4,10-11,16,19H,3,5-8H2,1H3/t10-,11+,16+,17-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19NO3/c1-20-13-5-2-9-8-11-10-3-4-12(19)16-17(10,6-7-18-11)14(9)15(13)21-16/h2-5,10-12,16,18-19H,6-8H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19NO3/c1-20-13-5-2-9-8-11-10-3-4-12(19)16-17(10,6-7-18-11)14(9)15(13)21-16/h2-5,10-12,16,18-19H,6-8H2,1H3/t10-,11-,12-,16+,17+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19NO3/c1-20-13-5-2-9-8-11-10-3-4-12(19)16-17(10,6-7-18-11)14(9)15(13)21-16/h2-5,10-12,16,18-19H,6-8H2,1H3/t10-,11?,12+,16-,17-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19NO3/c1-20-13-5-2-9-8-11-10-3-4-12(19)16-17(10,6-7-18-11)14(9)15(13)21-16/h2-5,10-12,16,18-19H,6-8H2,1H3/t10-,11+,12-,16-,17-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19NO3/c1-20-13-5-2-9-8-11-10-3-4-12(19)16-17(10,6-7-18-11)14(9)15(13)21-16/h2-5,10-12,16,18-19H,6-8H2,1H3/t10-,11+,12+,16-,17+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19NO3S/c1-11-3-9-14(10-4-11)22(19,20)17-15(16(17)18)12-5-7-13(21-2)8-6-12/h3-10,15-17H,18H2,1-2H3/t15-,16+,17-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19NO3S/c1-12-7-9-14(10-8-12)22(20,21)16-15(17(16,18)11-19)13-5-3-2-4-6-13/h2-10,15-16,19H,11,18H2,1H3/t15-,16-,17-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19NO4/c1-18-7-6-16-13-9-2-3-10(19)14(13)22-15(16)11(20)4-5-17(16,21)12(18)8-9/h2-3,12,15,19,21H,4-8H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19NO4/c1-18-7-6-16-13-9-2-3-10(19)14(13)22-15(16)11(20)4-5-17(16,21)12(18)8-9/h2-3,12,15,19,21H,4-8H2,1H3/t12-,15-,16+,17-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19NO4/c1-18-7-6-16-13-9-2-3-10(19)14(13)22-15(16)11(20)4-5-17(16,21)12(18)8-9/h2-3,12,15,19,21H,4-8H2,1H3/t12-,15+,16-,17-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H19NO4/c1-18-7-6-16-13-9-2-3-10(19)14(13)22-15(16)11(20)4-5-17(16,21)12(18)8-9/h2-3,12,15,19,21H,4-8H2,1H3/t12-,15+,16+,17-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19NO4/c1-18-7-6-16-13-9-2-3-10(19)14(13)22-15(16)11(20)4-5-17(16,21)12(18)8-9/h2-3,12,15,19,21H,4-8H2,1H3/t12-,15+,16+,17+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H19NO4S/c1-22-13-9-7-12(8-10-13)15-16(17(15,18)11-19)23(20,21)14-5-3-2-4-6-14/h2-10,15-16,19H,11,18H2,1H3/t15-,16-,17+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H20BrNO/c1-19(2)12-13-20-17(14-6-4-3-5-7-14)15-8-10-16(18)11-9-15/h3-11,17H,12-13H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H20BrNO/c1-19(2)12-13-20-17(14-6-4-3-5-7-14)15-8-10-16(18)11-9-15/h3-11,17H,12-13H2,1-2H3/t17-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H20CIF3N2O4S/c1-9-5-4-6-11(9)22-15(25)23-12-8-7-10(18)14(13(12)24)28(26,27)16(2,3)17(19,20)21/h5,7-8,11,24H,4,6H2,1-3H3,(H2,22,23,25)	1	(Wu et al., 2018)

InChI=1S/C17H20ClNO/c1-19(2)12-16(20)17(13-6-4-3-5-7-13)14-8-10-15(18)11-9-14/h3-11,16-17,20H,12H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H20ClNO/c1-19(2)12-16(20)17(13-6-4-3-5-7-13)14-8-10-15(18)11-9-14/h3-11,16-17,20H,12H2,1-2H3/t16-,17+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H20ClNO/c1-19(2)12-16(20)17(13-7-4-3-5-8-13)14-9-6-10-15(18)11-14/h3-11,16-17,20H,12H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H20ClNO/c1-19(2)12-16(20)17(13-7-4-3-5-8-13)14-9-6-10-15(18)11-14/h3-11,16-17,20H,12H2,1-2H3/t16-,17-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H20ClNO/c1-19(2)12-16(20)17(13-7-4-3-5-8-13)14-9-6-10-15(18)11-14/h3-11,16-17,20H,12H2,1-2H3/t16-,17+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H20F6N2O3/c18-16(19,20)9-27-12-4-5-14(28-10-17(21,22)23)13(7-12)15(26)25-8-11-3-1-2-6-24-11/h4-5,7,11,24H,1-3,6,8-10H2,(H,25,26)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H20F6N2O3/c18-16(19,20)9-27-12-4-5-14(28-10-17(21,22)23)13(7-12)15(26)25-8-11-3-1-2-6-24-11/h4-5,7,11,24H,1-3,6,8-10H2,(H,25,26)/t11-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H20FN3O3/c1-3-20-10-12(17(23)24)16(22)11-8-13(18)15(9-14(11)20)21-6-4-19(2)5-7-21/h8-10H,3-7H2,1-2H3,(H,23,24)	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C17H20N2/c18-12-5-13-19-16-8-3-1-6-14(16)10-11-15-7-2-4-9-17(15)19/h1-4,6-9H,5,10-13,18H2	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C17H20N2O/c1-17(19-16(20)13-18,15-10-6-3-7-11-15)12-14-8-4-2-5-9-14/h2-11H,12-13,18H2,1H3,(H,19,20)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H20N2O/c1-17(19-16(20)13-18,15-10-6-3-7-11-15)12-14-8-4-2-5-9-14/h2-11H,12-13,18H2,1H3,(H,19,20)/t17-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H20N2O2/c1-19-11-6-7-12(19)9-13(8-11)21-17(20)15-10-18-16-5-3-2-4-14(15)16/h2-5,10-13,18H,6-9H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H20N2O2/c1-19-11-6-7-12(19)9-13(8-11)21-17(20)15-10-18-16-5-3-2-4-14(15)16/h2-5,10-13,18H,6-9H2,1H3/t11-,12+,13?	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H20N2O2/c1-2-19(12-14-8-10-18-11-9-14)17(21)16(13-20)15-6-4-3-5-7-15/h3-11,16,20H,2,12-13H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H20N2O3S/c1-22-13-9-7-12(8-10-13)15-16(17(15,19)11-18)23(20,21)14-5-3-2-4-6-14/h2-10,15-16H,11,18-19H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H20N2O3S/c1-22-13-9-7-12(8-10-13)15-16(17(15,19)11-18)23(20,21)14-5-3-2-4-6-14/h2-10,15-16H,11,18-19H2,1H3/t15-,16-,17-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H20N2O5S/c1-2-3-9-19-14-10-12(17(20)21)11-15(25(18,22)23)16(14)24-13-7-5-4-6-8-13/h4-8,10-11,19H,2-3,9H2,1H3,(H,20,21)(H2,18,22,23)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H20N2O5S/c1-9(24-10-7-5-4-6-8-10)13(20)18-11-14(21)19-12(16(22)23)17(2,3)25-15(11)19/h4-9,11-12,15H,1-3H3,(H,18,20)(H,22,23)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H20N2O5S/c1-9(24-10-7-5-4-6-8-10)13(20)18-11-14(21)19-12(16(22)23)17(2,3)25-15(11)19/h4-9,11-12,15H,1-3H3,(H,18,20)(H,22,23)/t9-,11-,12-,15+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H20N2O5S/c1-9(24-10-7-5-4-6-8-10)13(20)18-11-14(21)19-12(16(22)23)17(2,3)25-15(11)19/h4-9,11-12,15H,1-3H3,(H,18,20)(H,22,23)/t9-,11?,12-,15-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H20N2O5S/c1-9(24-10-7-5-4-6-8-10)13(20)18-11-14(21)19-12(16(22)23)17(2,3)25-15(11)19/h4-9,11-12,15H,1-3H3,(H,18,20)(H,22,23)/t9-,11+,12-,15+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H20N2O5S/c1-9(24-10-7-5-4-6-8-10)13(20)18-11-14(21)19-12(16(22)23)17(2,3)25-15(11)19/h4-9,11-12,15H,1-3H3,(H,18,20)(H,22,23)/t9?,11-,12+,15-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C17H20N2O6S/c1-17(2)12(16(22)23)19-14(21)11(15(19)26-17)18-13(20)10-8(24-3)6-5-7-9(10)25-4/h5-7,11-12,15H,1-4H3,(H,18,20)(H,22,23)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H20N2O6S/c1-17(2)12(16(22)23)19-14(21)11(15(19)26-17)18-13(20)10-8(24-3)6-5-7-9(10)25-4/h5-7,11-12,15H,1-4H3,(H,18,20)(H,22,23)/t11-,12+,15-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H20N2O6S/c1-17(2)12(16(22)23)19-14(21)11(15(19)26-17)18-13(20)10-8(24-3)6-5-7-9(10)25-4/h5-7,11-12,15H,1-4H3,(H,18,20)(H,22,23)/t11?,12-,15-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H20N2OS/c1-18(2)12-7-13-19-14-8-3-5-10-16(14)21(20)17-11-6-4-9-15(17)19/h3-6,8-11H,7,12-13H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H20N2S/c1-13(18(2)3)12-19-14-8-4-6-10-16(14)20-17-11-7-5-9-15(17)19/h4-11,13H,12H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H20N2S/c1-13(18(2)3)12-19-14-8-4-6-10-16(14)20-17-11-7-5-9-15(17)19/h4-11,13H,12H2,1-3H3/t13-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H20N2S/c1-18(2)11-5-12-19-15-7-4-3-6-14(15)8-9-17-16(19)10-13-20-17/h3-4,6-10,13H,5,11-12H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H20N2S/c1-18(2)12-7-13-19-14-8-3-5-10-16(14)20-17-11-6-4-9-15(17)19/h3-6,8-11H,7,12-13H2,1-2H3	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C17H20N2S/c1-18(2)12-7-13-19-14-8-3-5-10-16(14)20-17-11-6-4-9-15(17)19/h3-6,8-11H,7,12-13H2,1-2H3/p+1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C17H20N4O/c1-12(20(2)3)11-21-15-9-5-4-8-14(15)19-16-13(17(21)22)7-6-10-18-16/h4-10,12H,11H2,1-3H3,(H,18,19)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H20N4O/c1-12(20(2)3)11-21-15-9-5-4-8-14(15)19-16-13(17(21)22)7-6-10-18-16/h4-10,12H,11H2,1-3H3,(H,18,19)/t12-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H20N4O/c1-12(20(2)3)11-21-15-9-5-4-8-14(15)19-16-13(17(21)22)7-6-10-18-16/h4-10,12H,11H2,1-3H3,(H,18,19)/t12-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H20N4O3/c1-3-20-12(2)18-16(15(17(20)22)21(23)24)19-10-8-13-6-4-5-7-14(13)9-11-19/h4-7H,3,8-11H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H20N4O4S/c22-15(10-21-5-6-24-17(21)23)20-4-1-2-12(9-20)8-14-18-16(19-25-14)13-3-7-26-11-13/h3,7,11-12H,1-2,4-6,8-10H2/t12-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H20N4O6/c1-7-3-9-10(4-8(7)2)21(5-11(23)14(25)12(24)6-22)15-13(18-9)16(26)20-17(27)19-15/h3-4,11-12,14,22-25H,5-6H2,1-2H3,(H,20,26,27)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H20N4O6/c1-7-3-9-10(4-8(7)2)21(5-11(23)14(25)12(24)6-22)15-13(18-9)16(26)20-17(27)19-15/h3-4,11-12,14,22-25H,5-6H2,1-2H3,(H,20,26,27)/t11-,12-,14+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H20N4O6S2/c1-8-7-28-16-12(15(23)21(16)13(8)17(24)25)19-14(22)11(18)9-4-3-5-10(6-9)20-29(2,26)27/h3-6,11-12,16,20H,7,18H2,1-2H3,(H,19,22)(H,24,25)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H20N4O6S2/c1-8-7-28-16-12(15(23)21(16)13(8)17(24)25)19-14(22)11(18)9-4-3-5-10(6-9)20-29(2,26)27/h3-6,11-12,16,20H,7,18H2,1-2H3,(H,19,22)(H,24,25)/t11-,12-,16-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H20N4O6S2/c1-8-7-28-16-12(15(23)21(16)13(8)17(24)25)19-14(22)11(18)9-4-3-5-10(6-9)20-29(2,26)27/h3-6,11-12,16,20H,7,18H2,1-2H3,(H,19,22)(H,24,25)/t11-,12-,16+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H20N4O6S2/c1-8-7-28-16-12(15(23)21(16)13(8)17(24)25)19-14(22)11(18)9-4-3-5-10(6-9)20-29(2,26)27/h3-6,11-12,16,20H,7,18H2,1-2H3,(H,19,22)(H,24,25)/t11-,12?,16-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H20N4O6S2/c1-8-7-28-16-12(15(23)21(16)13(8)17(24)25)19-14(22)11(18)9-4-3-5-10(6-9)20-29(2,26)27/h3-6,11-12,16,20H,7,18H2,1-2H3,(H,19,22)(H,24,25)/t11?,12-,16-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H20N4S/c1-12-11-13-16(21-9-7-20(2)8-10-21)18-14-5-3-4-6-15(14)19-17(13)22-12/h3-6,11,18H,7-10H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C17H20N4S/c1-12-11-13-16(21-9-7-20(2)8-10-21)18-14-5-3-4-6-15(14)19-17(13)22-12/h3-6,11,19H,7-10H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H20N4S/c1-12-11-13-16(21-9-7-20(2)8-10-21)18-14-5-3-4-6-15(14)19-17(13)22-12/h3-6,11,19H,7-10H2,1-2H3/p+1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C17H20O3/c1-19-13-6-5-11-4-2-3-8-17-9-7-12(18)10-14(17)20-16(13)15(11)17/h5-7,9,12,14,18H,2-4,8,10H2,1H3/t12-,14-,17+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H20O6/c1-9(5-7-13(18)19)4-6-11-15(20)14-12(8-23-17(14)21)10(2)16(11)22-3/h4,20H,5-8H2,1-3H3,(H,18,19)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H20O6/c1-9(5-7-13(18)19)4-6-11-15(20)14-12(8-23-17(14)21)10(2)16(11)22-3/h4,20H,5-8H2,1-3H3,(H,18,19)/b9-4+	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H21N/c1-15(13-16-9-5-3-6-10-16)18(2)14-17-11-7-4-8-12-17/h3-12,15H,13-14H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H21N/c1-15(13-16-9-5-3-6-10-16)18(2)14-17-11-7-4-8-12-17/h3-12,15H,13-14H2,1-2H3/t15-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H21N5/c1-17(2)8-6-12(7-9-17)20-16-15-14(18-11-19-16)13-5-3-4-10-22(13)21-15/h3-5,10-12H,6-9H2,1-2H3,(H,18,19,20)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C17H21N5O5/c1-20-15-14(16(26)21(2)17(20)27)22(9-19-15)6-5-18-8-13(25)10-3-4-11(23)12(24)7-10/h3-4,7,9,13,18,23-25H,5-6,8H2,1-2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H21N5O5/c1-20-15-14(16(26)21(2)17(20)27)22(9-19-15)6-5-18-8-13(25)10-3-4-11(23)12(24)7-10/h3-4,7,9,13,18,23-25H,5-6,8H2,1-2H3/t13-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21N5O5/c1-20-15-14(16(26)21(2)17(20)27)22(9-19-15)6-5-18-8-13(25)10-3-4-11(23)12(24)7-10/h3-4,7,9,13,18,23-25H,5-6,8H2,1-2H3/t13-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H21N5OS/c1-20(2)12-7-8-18-16-13(12)14-15(24-16)17(23)22(11-19-14)21-9-5-3-4-6-10-21/h7-8,11H,3-6,9-10H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO/c1-14-8-6-7-11-16(14)17(19-13-12-18-2)15-9-4-3-5-10-15/h3-11,17-18H,12-13H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H21NO/c1-14-8-6-7-11-16(14)17(19-13-12-18-2)15-9-4-3-5-10-15/h3-11,17-18H,12-13H2,1-2H3/t17-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO/c1-14-8-6-7-11-16(14)19-17(12-13-18-2)15-9-4-3-5-10-15/h3-11,17-18H,12-13H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H21NO/c1-14-8-6-7-11-16(14)19-17(12-13-18-2)15-9-4-3-5-10-15/h3-11,17-18H,12-13H2,1-2H3/t17-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H21NO/c1-14-8-6-7-11-16(14)19-17(12-13-18-2)15-9-4-3-5-10-15/h3-11,17-18H,12-13H2,1-2H3/t17-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO/c1-15(13-16-9-5-3-6-10-16)18(2,19)14-17-11-7-4-8-12-17/h3-12,15H,13-14H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H21NO/c1-15(13-16-9-5-3-6-10-16)18(2,19)14-17-11-7-4-8-12-17/h3-12,15H,13-14H2,1-2H3/t15-,18-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO/c1-15(13-16-9-5-3-6-10-16)18(2,19)14-17-11-7-4-8-12-17/h3-12,15H,13-14H2,1-2H3/t15-,18?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO/c1-18(2)13-14-19-17(15-9-5-3-6-10-15)16-11-7-4-8-12-16/h3-12,17H,13-14H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO/c1-18(2)13-14-19-17(15-9-5-3-6-10-15)16-11-7-4-8-12-16/h3-12,17H,13-14H2,1-2H3/p+1	1	(Vilar et al., 2010)

InChI=1S/C17H21NO2/c1-18-13-12-15(14-8-4-3-5-9-14)20-17-11-7-6-10-16(17)19-2/h3-11,15,18H,12-13H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H21NO2/c1-18-13-12-15(14-8-4-3-5-9-14)20-17-11-7-6-10-16(17)19-2/h3-11,15,18H,12-13H2,1-2H3/t15-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO2/c1-18-13-12-15(14-8-4-3-5-9-14)20-17-11-7-6-10-16(17)19-2/h3-11,15,18H,12-13H2,1-2H3/t15-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO2/c1-18-8-7-17-11-3-2-4-14(17)20-16-13(19)6-5-10(15(16)17)9-12(11)18/h5-6,11-12,14,19H,2-4,7-9H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H21NO2/c1-18-8-7-17-11-3-2-4-14(17)20-16-13(19)6-5-10(15(16)17)9-12(11)18/h5-6,11-12,14,19H,2-4,7-9H2,1H3/t11-,12?,14+,17?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO2/c1-18-8-7-17-11-3-2-4-14(17)20-16-13(19)6-5-10(15(16)17)9-12(11)18/h5-6,11-12,14,19H,2-4,7-9H2,1H3/t11-,12+,14-,17-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO2/c1-18-8-7-17-11-3-2-4-14(17)20-16-13(19)6-5-10(15(16)17)9-12(11)18/h5-6,11-12,14,19H,2-4,7-9H2,1H3/t11-,12+,14-,17+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO2/c1-18-8-7-17-11-3-2-4-14(17)20-16-13(19)6-5-10(15(16)17)9-12(11)18/h5-6,11-12,14,19H,2-4,7-9H2,1H3/t11-,12+,14-,17+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H21NO3/c1-12(17(21)14-4-8-16(20)9-5-14)18-11-10-13-2-6-15(19)7-3-13/h2-9,12,17-21H,10-11H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO3/c1-12(17(21)14-4-8-16(20)9-5-14)18-11-10-13-2-6-15(19)7-3-13/h2-9,12,17-21H,10-11H2,1H3/t12-,17+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H21NO3/c1-18-7-6-17-10-3-5-13(20)16(17)21-15-12(19)4-2-9(14(15)17)8-11(10)18/h2,4,10-11,13,16,19-20H,3,5-8H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO3/c1-18-7-6-17-10-3-5-13(20)16(17)21-15-12(19)4-2-9(14(15)17)8-11(10)18/h2,4,10-11,13,16,19-20H,3,5-8H2,1H3/t10-,11?,13+,16-,17?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO3/c1-18-8-7-17-6-5-12(19)9-14(17)21-16-13(20-2)4-3-11(10-18)15(16)17/h3-6,12,14,19H,7-10H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO3/c1-18-8-7-17-6-5-12(19)9-14(17)21-16-13(20-2)4-3-11(10-18)15(16)17/h3-6,12,14,19H,7-10H2,1-2H3/t12-,14-,17-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO3/c1-18-8-7-17-6-5-12(19)9-14(17)21-16-13(20-2)4-3-11(10-18)15(16)17/h3-6,12,14,19H,7-10H2,1-2H3/t12-,14+,17-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO3/c1-18-8-7-17-6-5-12(19)9-14(17)21-16-13(20-2)4-3-11(10-18)15(16)17/h3-6,12,14,19H,7-10H2,1-2H3/t12-,14+,17?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO3/c1-18-8-7-17-6-5-12(19)9-14(17)21-16-13(20-2)4-3-11(10-18)15(16)17/h3-6,12,14,19H,7-10H2,1-2H3/t12-,14+,17+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H21NO3/c1-18-8-7-17-6-5-12(19)9-14(17)21-16-13(20-2)4-3-11(10-18)15(16)17/h3-6,12,14,19H,7-10H2,1-2H3/t12-,14+,17+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO3/c1-3-11-6-5-7-12-13-8-9-21-17(4-2,10-14(19)20)16(13)18-15(11)12/h5-7,18H,3-4,8-10H2,1-2H3,(H,19,20)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO3/c1-3-11-6-5-7-12-13-8-9-21-17(4-2,10-14(19)20)16(13)18-15(11)12/h5-7,18H,3-4,8-10H2,1-2H3,(H,19,20)/t17-/m1/s1	0	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C17H21NO4/c1-11(6-12-2-4-14(19)5-3-12)18-10-17(22)13-7-15(20)9-16(21)8-13/h2-5,7-9,11,17-22H,6,10H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO4/c1-11(6-12-2-4-14(19)5-3-12)18-10-17(22)13-7-15(20)9-16(21)8-13/h2-5,7-9,11,17-22H,6,10H2,1H3/t11-,17+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C17H21NO4/c1-11(6-12-2-4-14(19)5-3-12)18-17(22)9-13-7-15(20)10-16(21)8-13/h2-5,7-8,10-11,17-22H,6,9H2,1H3/t11-,17-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO4/c1-18-12-7-8-14(18)13(10-16(19)20)15(9-12)22-17(21)11-5-3-2-4-6-11/h2-6,12-15H,7-10H2,1H3,(H,19,20)/t12-,13+,14-,15-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO4/c1-18-12-8-9-13(18)15(17(20)21-2)14(10-12)22-16(19)11-6-4-3-5-7-11/h3-7,12-15H,8-10H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO4/c1-18-12-8-9-13(18)15(17(20)21-2)14(10-12)22-16(19)11-6-4-3-5-7-11/h3-7,12-15H,8-10H2,1-2H3/t12-,13-,14-,15-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO4/c1-18-12-8-9-13(18)15(17(20)21-2)14(10-12)22-16(19)11-6-4-3-5-7-11/h3-7,12-15H,8-10H2,1-2H3/t12-,13+,14+,15+/m1/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C17H21NO4/c1-18-12-8-9-13(18)15(17(20)21-2)14(10-12)22-16(19)11-6-4-3-5-7-11/h3-7,12-15H,8-10H2,1-2H3/t12?,13?,14-,15+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO4/c1-18-13-7-11(8-14(18)16-15(13)22-16)21-17(20)12(9-19)10-5-3-2-4-6-10/h2-6,11-16,19H,7-9H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO4/c1-18-13-7-11(8-14(18)16-15(13)22-16)21-17(20)12(9-19)10-5-3-2-4-6-10/h2-6,11-16,19H,7-9H2,1H3/p+1/t11?,12-,13-,14+,15+,16-/m0/s1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C17H21NO4/c1-18-13-7-11(8-14(18)16-15(13)22-16)21-17(20)12(9-19)10-5-3-2-4-6-10/h2-6,11-16,19H,7-9H2,1H3/t11?,12-,13-,14+,15-,16-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO4/c1-18-13-7-11(8-14(18)16-15(13)22-16)21-17(20)12(9-19)10-5-3-2-4-6-10/h2-6,11-16,19H,7-9H2,1H3/t11?,12-,13-,14+,15-,16+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H21NO4/c1-18-13-7-11(8-14(18)16-15(13)22-16)21-17(20)12(9-19)10-5-3-2-4-6-10/h2-6,11-16,19H,7-9H2,1H3/t11?,12-,13?,14?,15?,16?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO4/c1-18-13-7-11(8-14(18)16-15(13)22-16)21-17(20)12(9-19)10-5-3-2-4-6-10/h2-6,11-16,19H,7-9H2,1H3/t11?,12?,13-,14-,15-,16+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO4/c1-18-13-7-11(8-14(18)16-15(13)22-16)21-17(20)12(9-19)10-5-3-2-4-6-10/h2-6,11-16,19H,7-9H2,1H3/t12-,13+,14+,15+,16+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO4/c1-18-7-6-16-13-9-2-3-10(19)14(13)22-15(16)11(20)4-5-17(16,21)12(18)8-9/h2-3,11-12,15,19-21H,4-8H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H21NO4/c1-18-7-6-16-13-9-2-3-10(19)14(13)22-15(16)11(20)4-5-17(16,21)12(18)8-9/h2-3,11-12,15,19-21H,4-8H2,1H3/t11-,12-,15+,16-,17-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO4/c1-18-7-6-16-13-9-2-3-10(19)14(13)22-15(16)11(20)4-5-17(16,21)12(18)8-9/h2-3,11-12,15,19-21H,4-8H2,1H3/t11-,12-,15+,16+,17+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO4/c1-18-7-6-16-13-9-2-3-10(19)14(13)22-15(16)11(20)4-5-17(16,21)12(18)8-9/h2-3,11-12,15,19-21H,4-8H2,1H3/t11-,12?,15+,16?,17?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO4/c1-18-7-6-16-13-9-2-3-10(19)14(13)22-15(16)11(20)4-5-17(16,21)12(18)8-9/h2-3,11-12,15,19-21H,4-8H2,1H3/t11-,12+,15-,16-,17+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H21NO4/c1-21-11-3-2-9-8-12-17(20)5-4-10(19)15-16(17,6-7-18-12)13(9)14(11)22-15/h2-3,10,12,15,18-20H,4-8H2,1H3/t10?,12?,15-,16+,17-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H21NO5/c1-2-10-4-3-5-11-12-6-7-23-17(8-13(19)20,9-14(21)22)16(12)18-15(10)11/h3-5,12,16,18H,2,6-	1	(Meng et al., 2021)

9H2,1H3,(H,19,20)(H,21,22)/t12-,16+/m0/s1

InChI=1S/C17H21NO7S/c1-16(2,3)25-15(20)18-17(8-19)13(14(17)26(4,21)22)10-5-6-11-12(7-10)24-9-23-11/h5-8,13-14H,9H2,1-4H3,(H,18,20)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H21NO7S/c1-16(2,3)25-15(20)18-17(8-19)13(14(17)26(4,21)22)10-5-6-11-12(7-10)24-9-23-11/h5-8,13-14H,9H2,1-4H3,(H,18,20)/t13-,14-,17-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H22ClFN2O4S/c1-10-5-4-6-12(10)20-16(23)21-13-8-7-11(18)15(14(13)22)26(24,25)17(2,3)9-19/h5,7-8,12,22H,4,6,9H2,1-3H3,(H2,20,21,23)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C17H22I3N3O8/c1-6(28)15(29)23-14-12(19)9(16(30)21-7(2-24)3-25)11(18)10(13(14)20)17(31)22-8(4-26)5-27/h6-8,24-28H,2-5H2,1H3,(H,21,30)(H,22,31)(H,23,29)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H22I3N3O8/c1-6(28)15(29)23-14-12(19)9(16(30)21-7(2-24)3-25)11(18)10(13(14)20)17(31)22-8(4-26)5-27/h6-8,24-28H,2-5H2,1H3,(H,21,30)(H,22,31)(H,23,29)/t6-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H22N2O/c1-17(20-14-13-19(2)3,15-9-5-4-6-10-15)16-11-7-8-12-18-16/h4-12H,13-14H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H22N2O/c1-17(20-14-13-19(2)3,15-9-5-4-6-10-15)16-11-7-8-12-18-16/h4-12H,13-14H2,1-3H3/p+1/t17-/m0/s1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C17H22N2O/c1-17(20-14-13-19(2)3,15-9-5-4-6-10-15)16-11-7-8-12-18-16/h4-12H,13-14H2,1-3H3/t17-/m0/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C17H22N2O/c1-17(20-14-13-19(2)3,15-9-5-4-6-10-15)16-11-7-8-12-18-16/h4-12H,13-14H2,1-3H3/t17-/m1/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C17H22N2OS/c1-3-4-7-12-20-17-9-6-5-8-15(17)16(13-21-2)19-11-10-18-14-19/h5-6,8-11,13-14H,3-4,7,12H2,1-2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H22N2OS/c1-3-4-7-12-20-17-9-6-5-8-15(17)16(13-21-2)19-11-10-18-14-19/h5-6,8-11,13-14H,3-4,7,12H2,1-2H3/b16-13+	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H22N4O/c1-14-13-16(15-5-3-2-4-6-15)19-20-17(14)18-7-8-21-9-11-22-12-10-21/h2-6,13H,7-12H2,1H3,(H,18,20)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H22N4O2/c1-13-12-16(14-2-4-15(22)5-3-14)19-20-17(13)18-6-7-21-8-10-23-11-9-21/h2-5,12,22H,6-11H2,1H3,(H,18,20)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H22NO/c1-18(2,15-16-9-5-3-6-10-16)13-14-19-17-11-7-4-8-12-17/h3-12H,13-15H2,1-2H3/q+1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H23Cl2NO/c1-10(2)20-16-11-3-5-12(6-4-11)17(16,21)13-7-8-14(18)15(19)9-13/h7-12,16,20-21H,3-6H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H23Cl2NO/c1-10(2)20-16-11-3-5-12(6-4-11)17(16,21)13-7-8-14(18)15(19)9-13/h7-12,16,20-21H,3-6H2,1-2H3/t11?,12?,16-,17-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H23Cl2NO/c1-10(2)20-16-11-3-5-12(6-4-11)17(16,21)13-7-8-14(18)15(19)9-13/h7-12,16,20-21H,3-6H2,1-2H3/t11?,12?,16-,17-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H23Cl2NO/c1-10(2)20-16-11-3-5-12(6-4-11)17(16,21)13-7-8-14(18)15(19)9-13/h7-12,16,20-21H,3-6H2,1-2H3/t11?,12?,16-,17+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H23FN2O/c18-15-7-5-14(6-8-15)17(21)4-2-9-19-11-12-20-10-1-3-16(20)13-19/h5-8,16H,1-4,9-13H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H23FN2O/c18-15-7-5-14(6-8-15)17(21)4-2-9-19-11-12-20-10-1-3-16(20)13-19/h5-8,16H,1-4,9-13H2/t16-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H23N3O/c1-19(2)12-13-20(17-6-4-5-11-18-17)14-15-7-9-16(21-3)10-8-15/h4-11H,12-14H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H23N3O3/c1-3-12(2)14(11-21)18-15(22)9-10-16-19-20-17(23-16)13-7-5-4-6-8-13/h4-8,12,14,21H,3,9-11H2,1-2H3,(H,18,22)/t12-	1	(Meng et al., 2021)

,14-/m1/s1

InChI=1S/C17H23N5O2/c23-15-4-5-16(24)22(15)11-13-2-3-14-12-21(9-8-20(14)10-13)17-18-6-1-7-19-17/h1,6-7,13-14H,2-5,8-12H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H23N5O2/c23-15-4-5-16(24)22(15)11-13-2-3-14-12-21(9-8-20(14)10-13)17-18-6-1-7-19-17/h1,6-7,13-14H,2-5,8-12H2/t13-,14-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H23N5O2/c23-15-4-5-16(24)22(15)11-13-2-3-14-12-21(9-8-20(14)10-13)17-18-6-1-7-19-17/h1,6-7,13-14H,2-5,8-12H2/t13-,14+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H23N7O5/c1-23-13(25)6-10(22-17(23)29)15(27)21-11(5-9-7-19-8-20-9)16(28)24-4-2-3-12(24)14(18)26/h7-8,10-12H,2-6H2,1H3,(H2,18,26)(H,19,20)(H,21,27)(H,22,29)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H23NO/c1-17(9-10-18(2)3)16-12-13-6-4-5-7-14(13)15(16)8-11-19-17/h4-7H,8-12H2,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H23NO/c1-17(9-10-18(2)3)16-12-13-6-4-5-7-14(13)15(16)8-11-19-17/h4-7H,8-12H2,1-3H3/t17-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H23NO/c1-17(9-10-18(2)3)16-14(8-11-19-17)12-13-6-4-5-7-15(13)16/h4-7H,8-12H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H23NO/c1-18-11-15-7-5-12(19)8-17(15)10-16(17)6-3-2-4-13(16)14(18)9-15/h5,7-8,13-14,19H,2-4,6,9-11H2,1H3/t13-,14-,15-,16+,17-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H23NO/c1-18-9-8-17-7-3-2-4-14(17)16(18)10-12-5-6-13(19)11-15(12)17/h5-6,11,14,16,19H,2-4,7-10H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H23NO/c1-18-9-8-17-7-3-2-4-14(17)16(18)10-12-5-6-13(19)11-15(12)17/h5-6,11,14,16,19H,2-4,7-10H2,1H3/t14-,16-,17-/m0/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C17H23NO/c1-18-9-8-17-7-3-2-4-14(17)16(18)10-12-5-6-13(19)11-15(12)17/h5-6,11,14,16,19H,2-4,7-10H2,1H3/t14-,16-,17-/m1/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C17H23NO/c1-18-9-8-17-7-3-2-4-14(17)16(18)10-12-5-6-13(19)11-15(12)17/h5-6,11,14,16,19H,2-4,7-10H2,1H3/t14-,16?,17?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H23NO/c1-18-9-8-17-7-3-2-4-14(17)16(18)10-12-5-6-13(19)11-15(12)17/h5-6,11,14,16,19H,2-4,7-10H2,1H3/t14-,16+,17-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H23NO/c1-18-9-8-17-7-3-2-4-14(17)16(18)10-12-5-6-13(19)11-15(12)17/h5-6,11,14,16,19H,2-4,7-10H2,1H3/t14-,16+,17+/m0/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C17H23NO/c1-18-9-8-17-7-3-2-4-14(17)16(18)10-12-5-6-13(19)11-15(12)17/h5-6,11,14,16,19H,2-4,7-10H2,1H3/t14-,16+,17+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H23NO2/c1-4-20-16(19)17(14-10-6-5-7-11-14)13-9-8-12-15(17)18(2)3/h5-8,10-12,15H,4,9,13H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H23NO2/c1-4-20-16(19)17(14-10-6-5-7-11-14)13-9-8-12-15(17)18(2)3/h5-8,10-12,15H,4,9,13H2,1-3H3/t15-,17-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H23NO2/c1-4-20-16(19)17(14-10-6-5-7-11-14)13-9-8-12-15(17)18(2)3/h5-8,10-12,15H,4,9,13H2,1-3H3/t15-,17?/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H23NO2/c1-4-20-16(19)17(14-10-6-5-7-11-14)13-9-8-12-15(17)18(2)3/h5-8,10-12,15H,4,9,13H2,1-3H3/t15-,17+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H23NO2/c19-16(13-4-2-1-3-5-13)11-18-17(20)10-15-9-12-6-7-14(15)8-12/h1-5,12,14-16,19H,6-11H2,(H,18,20)/t12-,14+,15+,16+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H23NO3/c1-18-13-7-8-14(18)10-15(9-13)21-17(20)16(11-19)12-5-3-2-4-6-12/h2-6,13-16,19H,7-11H2,1H3	1	Chen et al., 2009
InChI=1S/C17H23NO3/c1-18-13-7-8-14(18)10-15(9-13)21-17(20)16(11-19)12-5-3-2-4-6-12/h2-6,13-16,19H,7-11H2,1H3/t13-,14-,16-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C17H23NO3/c1-18-13-7-8-14(18)10-15(9-13)21-17(20)16(11-19)12-5-3-2-4-6-12/h2-6,13-16,19H,7-11H2,1H3/t13-,14-,16+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H23NO3/c1-18-13-7-8-14(18)10-15(9-13)21-17(20)16(11-19)12-5-3-2-4-6-12/h2-6,13-16,19H,7-11H2,1H3/t13-,14+,15?,16-/m0/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C17H23NO3/c1-18-13-7-8-14(18)10-15(9-13)21-17(20)16(11-19)12-5-3-2-4-6-12/h2-6,13-16,19H,7-11H2,1H3/t13-,14+,15?,16-/m1/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C17H23NO3/c1-18-13-7-8-14(18)10-15(9-13)21-17(20)16(11-19)12-5-3-2-4-6-12/h2-6,13-16,19H,7-11H2,1H3/t13-,14+,15?,16?	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H23NO3/c1-18-13-7-8-14(18)10-15(9-13)21-17(20)16(11-19)12-5-3-2-4-6-12/h2-6,13-16,19H,7-11H2,1H3/t13?,14?,15?,16-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H23NO4/c1-18(21)13-7-8-14(18)10-15(9-13)22-17(20)16(11-19)12-5-3-2-4-6-12/h2-6,13-16,19H,7-11H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H23NO4/c1-18(21)13-7-8-14(18)10-15(9-13)22-17(20)16(11-19)12-5-3-2-4-6-12/h2-6,13-16,19H,7-11H2,1H3/t13-,14-,15?,16-,18?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H23NO4/c1-18(21)13-7-8-14(18)10-15(9-13)22-17(20)16(11-19)12-5-3-2-4-6-12/h2-6,13-16,19H,7-11H2,1H3/t13-,14-,15?,16+,18?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H23NO4/c1-18(21)13-7-8-14(18)10-15(9-13)22-17(20)16(11-19)12-5-3-2-4-6-12/h2-6,13-16,19H,7-11H2,1H3/t13-,14+,15?,16-,18?/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H23NO4/c1-18(21)13-7-8-14(18)10-15(9-13)22-17(20)16(11-19)12-5-3-2-4-6-12/h2-6,13-16,19H,7-11H2,1H3/t13-,14+,15?,16?,18?	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H24CIN3O/c1-3-21(10-11-22)9-7-13(2)20-16-6-8-19-17-12-14(18)4-5-15(16)17/h4-6,8,12-13,22H,3,7,9-11H2,1-2H3,(H,19,20)/t13-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H24N2O2/c1-3-19(4-2)13-12-17(14-8-6-5-7-9-14)11-10-15(20)18-16(17)21/h5-9H,3-4,10-13H2,1-2H3,(H,18,20,21)/t17-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H24N2O3/c1-4-19-9-5-6-14(19)11-18-17(21)15-10-13(12(2)20)7-8-16(15)22-3/h7-8,10,14H,4-6,9,11H2,1-3H3,(H,18,21)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H24N2O3/c1-4-19-9-5-6-14(19)11-18-17(21)15-10-13(12(2)20)7-8-16(15)22-3/h7-8,10,14H,4-6,9,11H2,1-3H3,(H,18,21)/t14-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H24N2O3/c1-4-19-9-5-6-14(19)11-18-17(21)15-10-13(12(2)20)7-8-16(15)22-3/h7-8,10,14H,4-6,9,11H2,1-3H3,(H,18,21)/t14-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H24N4/c1-14-4-3-5-17(12-14)21-10-8-20(9-11-21)7-6-16-13-15(2)18-19-16/h3-5,12-13H,6-11H2,1-2H3,(H,18,19)	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C17H24N4O2S2/c1-17(2,3)12-8-19-13(23-12)10-24-14-9-20-16(25-14)21-15(22)11-4-6-18-7-5-11/h8-9,11,18H,4-7,10H2,1-3H3,(H,20,21,22)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H24N6O2/c1-10-16(12(3)24)11(2)23(21-10)9-7-15(25)22-8-5-6-14(22)17-18-13(4)19-20-17/h14H,5-9H2,1-4H3,(H,18,19,20)/t14-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H24NO3/c1-18(2)13-8-9-14(18)11-15(10-13)21-17(20)16(19)12-6-4-3-5-7-12/h3-7,13-16,19H,8-11H2,1-2H3/q+1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H24O3/c1-12-9-14(11-17(2,3)10-12)20-16(19)15(18)13-7-5-4-6-8-13/h4-8,12,14-15,18H,9-11H2,1-3H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H25N/c1-4-10-16(11-5-1)17(12-6-2-7-13-17)18-14-8-3-9-15-18/h1,4-5,10-11H,2-3,6-9,12-15H2	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C17H25N/c1-4-10-16(11-5-1)17(12-6-2-7-13-17)18-14-8-3-9-15-18/h1,4-5,10-11H,2-3,6-9,12-15H2/p+1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C17H25N3O2/c18-9-14-2-1-3-20(14)15(21)10-19-16-5-12-4-13(6-16)8-17(22,7-12)11-16/h12-14,19,22H,1-8,10-11H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H25N3O2S/c1-18-23(21,22)10-7-13-3-4-16-15(11-13)12-17(19-16)14-5-8-20(2)9-6-14/h3-4,11-12,14,18-19H,5-10H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H25N3O2S/c1-18-23(21,22)10-7-13-3-4-17-15(11-13)16(12-19-17)14-5-8-20(2)9-6-14/h3-4,11-12,14,18-19H,5-10H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H25N3O2S/c1-19(2)10-7-15-12-18-17-6-5-14(11-16(15)17)13-23(21,22)20-8-3-4-9-20/h5-6,11-12,18H,3-4,7-10,13H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H25N3O5S/c1-4-7-20-8-5-6-12(20)11-19-17(21)14-9-13(26(18,22)23)10-15(24-2)16(14)25-3/h4,9-10,12H,1,5-8,11H2,2-3H3,(H,19,21)(H2,18,22,23)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H25N3O5S/c1-4-7-20-8-5-6-12(20)11-19-17(21)14-9-13(26(18,22)23)10-15(24-2)16(14)25-3/h4,9-10,12H,1,5-8,11H2,2-3H3,(H,19,21)(H2,18,22,23)/t12-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H25N3O5S/c1-4-7-20-8-5-6-12(20)11-19-17(21)14-9-13(26(18,22)23)10-15(24-2)16(14)25-3/h4,9-10,12H,1,5-8,11H2,2-3H3,(H,19,21)(H2,18,22,23)/t12-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H25N3O5S/c1-7-12-11(8(2)21)16(23)20(12)13(17(24)25)14(7)26-10-6-5-9(18-10)15(22)19(3)4/h7-12,18,21H,5-6H2,1-4H3,(H,24,25)/t7-,8-,9+,10+,11+,12+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H25N3O5S/c1-7-12-11(8(2)21)16(23)20(12)13(17(24)25)14(7)26-9-5-10(18-6-9)15(22)19(3)4/h7-12,18,21H,5-6H2,1-4H3,(H,24,25)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H25N3O5S/c1-7-12-11(8(2)21)16(23)20(12)13(17(24)25)14(7)26-9-5-10(18-6-9)15(22)19(3)4/h7-12,18,21H,5-6H2,1-4H3,(H,24,25)/t7-,8-,9-,10-,11-,12+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H25N3O5S/c1-7-12-11(8(2)21)16(23)20(12)13(17(24)25)14(7)26-9-5-10(18-6-9)15(22)19(3)4/h7-12,18,21H,5-6H2,1-4H3,(H,24,25)/t7-,8-,9-,10-,11+,12+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H25N3O5S/c1-7-12-11(8(2)21)16(23)20(12)13(17(24)25)14(7)26-9-5-10(18-6-9)15(22)19(3)4/h7-12,18,21H,5-6H2,1-4H3,(H,24,25)/t7-,8-,9+,10+,11-,12-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H25N3O5S/c1-7-12-11(8(2)21)16(23)20(12)13(17(24)25)14(7)26-9-5-10(18-6-9)15(22)19(3)4/h7-12,18,21H,5-6H2,1-4H3,(H,24,25)/t7-,8+,9-,10+,11-,12+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H25N3O5S/c1-7-12-11(8(2)21)16(23)20(12)13(17(24)25)14(7)26-9-5-10(18-6-9)15(22)19(3)4/h7-12,18,21H,5-6H2,1-4H3,(H,24,25)/t7-,8+,9+,10+,11-,12-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H25N3O5S/c1-7-12-11(8(2)21)16(23)20(12)13(17(24)25)14(7)26-9-5-10(18-6-9)15(22)19(3)4/h7-12,18,21H,5-6H2,1-4H3,(H,24,25)/t7-,8+,9+,10+,11?,12?/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H25N5O/c1-2-16-18-9-13-20(16)14-17(23)22-11-4-3-6-15(22)7-12-21-10-5-8-19-21/h5,8-10,13,15H,2-4,6-7,11-12,14H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H25N5O/c1-2-16-18-9-13-20(16)14-17(23)22-11-4-3-6-15(22)7-12-21-10-5-8-19-21/h5,8-10,13,15H,2-4,6-7,11-12,14H2,1H3/t15-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H25NO/c19-17-9-5-4-8-16(17)18-12-10-15(11-13-18)14-6-2-1-3-7-14/h1-3,6-7,15-17,19H,4-5,8-13H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H25NO2.ClH/c1-4-5-6-18-10-13-7-12-8-16(19-2)17(20-3)9-14(12)15(13)11-18;/h8-9,13,15H,4-7,10-11H2,1-3H3;1H	1	(2023)
InChI=1S/C17H25NO2/c1-4-14-13-18(3)12-11-17(14,20-16(19)5-2)15-9-7-6-8-10-15/h6-10,14H,4-5,11-13H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C17H25NO2/c1-4-14-13-18(3)12-11-17(14,20-16(19)5-2)15-9-7-6-8-10-15/h6-10,14H,4-5,11-13H2,1-3H3/t14-,17-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H25NO2/c1-4-14-13-18(3)12-11-17(14,20-16(19)5-2)15-9-7-6-8-10-15/h6-10,14H,4-5,11-13H2,1-3H3/t14-,17?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H25NO2/c1-4-14-13-18(3)12-11-17(14,20-16(19)5-2)15-9-7-6-8-10-15/h6-10,14H,4-5,11-13H2,1-3H3/t14-,17+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H25NO2/c1-4-5-6-18-10-13-7-12-8-16(19-2)17(20-3)9-14(12)15(13)11-18/h8-9,13,15H,4-7,10-11H2,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H25NO2/c1-4-5-6-18-10-13-7-12-8-16(19-2)17(20-3)9-14(12)15(13)11-18/h8-9,13,15H,4-7,10-11H2,1-3H3/t13-,15+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H25NO3/c1-17(2,3)18-10-12(19)11-21-16-9-5-6-13-14(16)7-4-8-15(13)20/h5-6,9,12,18-19H,4,7-8,10-11H2,1-3H3/t12-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H25NO3/c1-18(2)12-13-21-16(19)15(14-8-4-3-5-9-14)17(20)10-6-7-11-17/h3-5,8-9,15,20H,6-7,10-13H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H25NO4/c1-20-14-11-13(12-15(21-2)16(14)22-3)17(19)18-9-7-5-4-6-8-10-18/h11-12H,4-10H2,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H26ClN/c1-13(2)12-16(19(3)4)17(10-5-11-17)14-6-8-15(18)9-7-14/h6-9,13,16H,5,10-12H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H26ClN/c1-13(2)12-16(19(3)4)17(10-5-11-17)14-6-8-15(18)9-7-14/h6-9,13,16H,5,10-12H2,1-4H3/t16-/m0/s1	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C17H26ClN/c1-13(2)12-16(19(3)4)17(10-5-11-17)14-6-8-15(18)9-7-14/h6-9,13,16H,5,10-12H2,1-4H3/t16-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H26F6N2O/c18-16(19,20)11-5-3-4-9-10(15(26)12-6-1-2-7-24-12)8-13(17(21,22)23)25-14(9)11/h9-15,24-26H,1-8H2	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C17H26FNO2/c1-13(2)16(6-4-3-5-7-17(20)21)19-12-14-8-10-15(18)11-9-14/h8-11,13,16,19H,3-7,12H2,1-2H3,(H,20,21)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H26FNO2/c1-13(2)16(6-4-3-5-7-17(20)21)19-12-14-8-10-15(18)11-9-14/h8-11,13,16,19H,3-7,12H2,1-2H3,(H,20,21)/t16-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H26FNO2/c1-13(2)16(6-4-3-5-7-17(20)21)19-12-14-8-10-15(18)11-9-14/h8-11,13,16,19H,3-7,12H2,1-2H3,(H,20,21)/t16-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H26N2O/c1-4-11-19-12-6-5-10-15(19)17(20)18-16-13(2)8-7-9-14(16)3/h7-9,15H,4-6,10-12H2,1-3H3,(H,18,20)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H26N2O/c1-4-9-19(10-5-2)11-8-14-6-7-16(20)17-15(14)12-13(3)18-17/h6-7,18,20H,3-5,8-12H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H26N2O/c1-4-9-19(10-5-2)11-8-14-6-7-16(20)17-15(14)12-13(3)18-17/h6-7,20H,4-5,8-12H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H26N2O2/c1-15(20)18-9-6-12-21-17-8-5-7-16(13-17)14-19-10-3-2-4-11-19/h5,7-8,13H,2-4,6,9-12,14H2,1H3,(H,18,20)	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C17H26N2O3S/c1-14-5-9-18(10-6-14)11-7-15-8-12-19(15)23(21,22)17-4-2-3-16(20)13-17/h2-4,13-15,20H,5-12H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H26N2O4S/c1-4-19-10-6-7-13(19)12-18-17(20)15-11-14(24(21,22)5-2)8-9-16(15)23-3/h8-9,11,13H,4-7,10,12H2,1-3H3,(H,18,20)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H26N2O4S/c1-4-19-10-6-7-13(19)12-18-17(20)15-11-14(24(21,22)5-2)8-9-16(15)23-3/h8-9,11,13H,4-7,10,12H2,1-3H3,(H,18,20)/t13-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H26N2O4S/c1-4-19-10-6-7-13(19)12-18-17(20)15-11-14(24(21,22)5-2)8-9-16(15)23-3/h8-9,11,13H,4-7,10,12H2,1-3H3,(H,18,20)/t13-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H26N4O.2ClH/c1-2-6-16-14(5-1)7-8-15(22-16)13-18-9-3-10-19-17-20-11-4-12-21-17;;/h1-2,5-6,15,18H,3-4,7-	1	(Kaupp, 2007)

13H2,(H2,19,20,21);2*1H/t15-;;/m1../s1	
InChI=1S/C17H26N4O/c1-2-6-16-14(5-1)7-8-15(22-16)13-18-9-3-10-19-17-20-11-4-12-21-17/h1-2,5-6,15,18H,3-4,7-13H2,(H2,19,20,21)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H26N4O/c1-3-22-14-13-21-16-8-5-4-7-15(16)18-17(21)20-10-6-9-19(2)11-12-20/h4-5,7-8H,3,6,9-14H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H26N4O3S2/c1-12(16(5-6-22)26-25-10-15-4-3-7-24-15)21(11-23)9-14-8-19-13(2)20-17(14)18/h8,11,15,22H,3-7,9-10H2,1-2H3,(H2,18,19,20)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H26N4O3S2/c1-12(16(5-6-22)26-25-10-15-4-3-7-24-15)21(11-23)9-14-8-19-13(2)20-17(14)18/h8,11,15,22H,3-7,9-10H2,1-2H3,(H2,18,19,20)/b16-12+	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H26N4O3S2/c1-12(16(5-6-22)26-25-10-15-4-3-7-24-15)21(11-23)9-14-8-19-13(2)20-17(14)18/h8,11,15,22H,3-7,9-10H2,1-2H3,(H2,18,19,20)/b16-12+/t15-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H26N4O3S2/c1-12(16(5-6-22)26-25-10-15-4-3-7-24-15)21(11-23)9-14-8-19-13(2)20-17(14)18/h8,11,15,22H,3-7,9-10H2,1-2H3,(H2,18,19,20)/t15-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H26N4O4S/c1-4-7-21-8-5-6-12(21)11-20-17(22)13-9-16(26(23,24)19-2)14(18)10-15(13)25-3/h4,9-10,12,19H,1,5-8,11,18H2,2-3H3,(H,20,22)	1 (Meng et al., 2021) 1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H26N4O4S/c1-4-7-21-8-5-6-12(21)11-20-17(22)13-9-16(26(23,24)19-2)14(18)10-15(13)25-3/h4,9-10,12,19H,1,5-8,11,18H2,2-3H3,(H,20,22)/t12-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H26N4O4S/c1-4-7-21-8-5-6-12(21)11-20-17(22)13-9-16(26(23,24)19-2)14(18)10-15(13)25-3/h4,9-10,12,19H,1,5-8,11,18H2,2-3H3,(H,20,22)/t12-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H27N/c1-18(2)14-13-17(15-9-5-3-6-10-15)16-11-7-4-8-12-16/h3,5-6,9-10,16-17H,4,7-8,11-14H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H27N/c1-18(2)14-13-17(15-9-5-3-6-10-15)16-11-7-4-8-12-16/h3,5-6,9-10,16-17H,4,7-8,11-14H2,1-2H3/t17-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H27N/c1-18(2)14-13-17(15-9-5-3-6-10-15)16-11-7-4-8-12-16/h3,5-6,9-10,16-17H,4,7-8,11-14H2,1-2H3/t17-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H27N3O4S/c1-4-20-8-6-7-12(20)11-19-17(21)13-9-16(25(22,23)5-2)14(18)10-15(13)24-3/h9-10,12H,4-8,11,18H2,1-3H3,(H,19,21)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H27N3O4S/c1-4-20-8-6-7-12(20)11-19-17(21)13-9-16(25(22,23)5-2)14(18)10-15(13)24-3/h9-10,12H,4-8,11,18H2,1-3H3,(H,19,21)/t12-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H27N7S/c1-4-7-23(8-5-2)10-14-11-24(13-21-14)16-9-15(19-12-20-16)22-17(25)18-6-3/h9,11-13H,4-8,10H2,1-3H3,(H2,18,19,20,22,25)	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C17H27NO/c1-15(2)10-13-19-17(14-18-11-6-7-12-18)16-8-4-3-5-9-16/h3-5,8-9,15,17H,6-7,10-14H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H27NO/c1-15(2)10-13-19-17(14-18-11-6-7-12-18)16-8-4-3-5-9-16/h3-5,8-9,15,17H,6-7,10-14H2,1-2H3/t17-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H27NO/c1-15(2)10-13-19-17(14-18-11-6-7-12-18)16-8-4-3-5-9-16/h3-5,8-9,15,17H,6-7,10-14H2,1-2H3/t17-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H27NO2/c1-18(2)13-16(17(19)11-5-4-6-12-17)14-7-9-15(20-3)10-8-14/h7-10,16,19H,4-6,11-13H2,1-3H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H27NO2/c1-18(2)13-16(17(19)11-5-4-6-12-17)14-7-9-15(20-3)10-8-14/h7-10,16,19H,4-6,11-13H2,1-3H3/t16-/m0/s1	1 (Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C17H27NO2/c1-18(2)13-16(17(19)11-5-4-6-12-17)14-7-9-15(20-3)10-8-14/h7-10,16,19H,4-6,11-13H2,1-3H3/t16-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C17H27NO3/c1-4-17(5-2,13-18-16(20)10-7-11-19)14-8-6-9-15(12-14)21-3/h6,8-9,12,19H,4-5,7,10-11,13H2,1-3H3,(H,18,20)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H27NO4/c1-17(2,3)18-9-12(19)10-22-16-6-4-5-11-7-14(20)15(21)8-13(11)16/h4-6,12,14-15,18-21H,7-10H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H27NO4/c1-17(2,3)18-9-12(19)10-22-16-6-4-5-11-7-14(20)15(21)8-13(11)16/h4-6,12,14-15,18-21H,7-10H2,1-3H3/t12-,14-,15-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H27NO4/c1-17(2,3)18-9-12(19)10-22-16-6-4-5-11-7-14(20)15(21)8-13(11)16/h4-6,12,14-15,18-21H,7-10H2,1-3H3/t12-,14-,15+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H27NO4/c1-17(2,3)18-9-12(19)10-22-16-6-4-5-11-7-14(20)15(21)8-13(11)16/h4-6,12,14-15,18-21H,7-10H2,1-3H3/t12-,14+,15+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H27NO4/c1-17(2,3)18-9-12(19)10-22-16-6-4-5-11-7-14(20)15(21)8-13(11)16/h4-6,12,14-15,18-21H,7-10H2,1-3H3/t12?,14-,15+/m1/s1	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C17H28N2O2/c1-5-18(6-2)16(20)14-12-9-10-13(11-12)15(14)17(21)19(7-3)8-4/h9-10,12-15H,5-8,11H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H28N2O2/c1-5-18(6-2)16(20)14-12-9-10-13(11-12)15(14)17(21)19(7-3)8-4/h9-10,12-15H,5-8,11H2,1-4H3/t12-,13-,14-,15+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H28N2O2/c1-5-18(6-2)16(20)14-12-9-10-13(11-12)15(14)17(21)19(7-3)8-4/h9-10,12-15H,5-8,11H2,1-4H3/t12-,13+,14-,15-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H28N2O2/c1-5-18(6-2)16(20)14-12-9-10-13(11-12)15(14)17(21)19(7-3)8-4/h9-10,12-15H,5-8,11H2,1-4H3/t12-,13+,14-,15+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H28N2O2/c1-5-18(6-2)16(20)14-12-9-10-13(11-12)15(14)17(21)19(7-3)8-4/h9-10,12-15H,5-8,11H2,1-4H3/t12?,13?,14-,15-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H28N2O3/c1-4-7-11-21-16-13-14(8-9-15(16)18)17(20)22-12-10-19(5-2)6-3/h8-9,13H,4-7,10-12,18H2,1-3H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H28N2O3S/c1-14-5-9-18(10-6-14)11-7-15-8-12-19(15)23(21,22)17-4-2-3-16(20)13-17/h3,13-15,20H,2,4-12H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H28N2O5/c1-3-6-12(16(21)22)18-10(2)15(20)19-13-8-5-4-7-11(13)9-14(19)17(23)24/h10-14,18H,3-9H2,1-2H3,(H,21,22)(H,23,24)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H29N3O3S/c1-4-19(17-9-6-5-7-10-17)12-8-11-18-24(21,22)20-13-15(2)23-16(3)14-20/h5-7,9-10,15-16,18H,4,8,11-14H2,1-3H3/t15-,16-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H30N2O7/c1-4-5-6-8-7-9(20)17(23)16(24-8)25-15-13(22)10(18-2)12(21)11(19-3)14(15)26-17/h8,10-16,18-19,21-23H,4-7H2,1-3H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H30N2O7/c1-4-5-6-8-7-9(20)17(23)16(24-8)25-15-13(22)10(18-2)12(21)11(19-3)14(15)26-17/h8,10-16,18-19,21-23H,4-7H2,1-3H3/t8-,10-,11-,12-,13-,14-,15-,16-,17-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H30N2O7/c1-4-5-6-8-7-9(20)17(23)16(24-8)25-15-13(22)10(18-2)12(21)11(19-3)14(15)26-17/h8,10-16,18-19,21-23H,4-7H2,1-3H3/t8-,10-,11+,12-,13+,14-,15-,16+,17-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H30N2O7/c1-4-5-6-8-7-9(20)17(23)16(24-8)25-15-13(22)10(18-2)12(21)11(19-3)14(15)26-17/h8,10-16,18-19,21-23H,4-7H2,1-3H3/t8-,10-,11+,12+,13+,14-,15-,16+,17+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H30N2O7/c1-4-5-6-8-7-9(20)17(23)16(24-8)25-15-13(22)10(18-2)12(21)11(19-3)14(15)26-17/h8,10-16,18-19,21-23H,4-7H2,1-3H3/t8-,10+,11-,12+,13-,14-,15+,16+,17+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H31N/c1-4-10-16(11-5-1)17(12-6-2-7-13-17)18-14-8-3-9-15-18/h16H,1-15H2	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C17H32NO2/c1-5-7-13(8-6-2)17(19)20-16-11-14-9-10-15(12-16)18(14,3)4/h13-16H,5-12H2,1-4H3/q+1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C17H35N5O6/c1-7(19)9-5-4-8(20)17(27-9)28-15-11(21)13(24)16(26-3)12(14(15)25)22(2)10(23)6-18/h7-9,11-17,24-25H,4-6,18-	0	(Meng et al., 2021)

21H2,1-3H3	
InChI=1S/C17H35N5O6/c1-7(19)9-5-4-8(20)17(27-9)28-15-11(21)13(24)16(26-3)12(14(15)25)22(2)10(23)6-18/h7-9,11-17,24-25H,4-6,18-21H2,1-3H3/t7-,8-,9-,11-,12-,13-,14-,15-,16-,17-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H35N5O6/c1-7(19)9-5-4-8(20)17(27-9)28-15-11(21)13(24)16(26-3)12(14(15)25)22(2)10(23)6-18/h7-9,11-17,24-25H,4-6,18-21H2,1-3H3/t7-,8-,9-,11-,12+,13-,14+,15+,16-,17+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H35N5O6/c1-7(19)9-5-4-8(20)17(27-9)28-15-11(21)13(24)16(26-3)12(14(15)25)22(2)10(23)6-18/h7-9,11-17,24-25H,4-6,18-21H2,1-3H3/t7-,8+,9+,11+,12-,13-,14-,15-,16-,17-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H35N5O6/c1-7(19)9-5-4-8(20)17(27-9)28-15-11(21)13(24)16(26-3)12(14(15)25)22(2)10(23)6-18/h7-9,11-17,24-25H,4-6,18-21H2,1-3H3/t7?,8-,9+,11+,12?,13+,14-,15-,16-,17-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H35N5O6/c1-7(19)9-5-4-8(20)17(27-9)28-15-11(21)13(24)16(26-3)12(14(15)25)22(2)10(23)6-18/h7-9,11-17,24-25H,4-6,18-21H2,1-3H3/t7?,8-,9+,11+,12+,13+,14-,15-,16-,17-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C17H9Cl3N4O2/c18-10-3-1-9(2-4-10)12(7-21)16-13(19)5-11(6-14(16)20)24-17(26)23-15(25)8-22-24/h1-6,8,12H,(H,23,25,26)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H11F3N2O3/c19-18(20,21)14-9-25-17(22-14)23-16(24)15-10-5-1-3-7-12(10)26-13-8-4-2-6-11(13)15/h1-9,15H,(H,22,23,24)	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H11F6N3O2/c19-17(20,21)10-3-1-9(2-4-10)8-25-15-14(16(28)29)26-12-6-5-11(18(22,23)24)7-13(12)27-15/h1-7H,8H2,(H,25,27)(H,28,29)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H11N3O2S/c19-9-11-10-24-18(20-11)21-17(22)16-12-5-1-3-7-14(12)23-15-8-4-2-6-13(15)16/h1-8,10,16H,(H,20,21,22)	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H12N2O2/c1-19-17(11-13-3-7-15(21)8-4-13)18(20-2)12-14-5-9-16(22)10-6-14/h3-12,21-22H	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H12N2O2/c1-19-17(11-13-3-7-15(21)8-4-13)18(20-2)12-14-5-9-16(22)10-6-14/h3-12,21-22H/b17-11-,18-12-	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H12N2O2/c19-11-15(9-13-1-5-17(21)6-2-13)16(12-20)10-14-3-7-18(22)8-4-14/h1-10,21-22H	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H12N2O2/c19-11-15(9-13-1-5-17(21)6-2-13)16(12-20)10-14-3-7-18(22)8-4-14/h1-10,21-22H/b15-9-,16-10-	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H12N2O2/c19-11-15(9-13-1-5-17(21)6-2-13)16(12-20)10-14-3-7-18(22)8-4-14/h1-10,21-22H/b15-9-,16-10?	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H12N2O2/c19-11-15(9-13-1-5-17(21)6-2-13)16(12-20)10-14-3-7-18(22)8-4-14/h1-10,21-22H/b15-9+,16-10+	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H13Cl2N3/c1-11-21-9-13-10-22-18(14-4-2-3-5-16(14)20)15-8-12(19)6-7-17(15)23(11)13/h2-9H,10H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H13Cl2N3O2/c19-11-5-6-15-13(9-11)17(12-3-1-2-4-14(12)20)21-7-8-23(15)18-22-16(24)10-25-18/h1-6,9H,7-8,10H2	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H13Cl4N3O/c19-13-2-1-12(16(21)7-13)10-26-24-18(9-25-6-5-23-11-25)15-4-3-14(20)8-17(15)22/h1-8,11H,9-10H2	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H13Cl4N3O/c19-13-2-1-12(16(21)7-13)10-26-24-18(9-25-6-5-23-11-25)15-4-3-14(20)8-17(15)22/h1-8,11H,9-10H2/b24-18-	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H13Cl4N3O/c19-13-2-1-12(16(21)7-13)10-26-24-18(9-25-6-5-23-11-25)15-4-3-14(20)8-17(15)22/h1-8,11H,9-10H2/b24-18+	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H13ClFN3/c1-11-21-9-13-10-22-18(14-4-2-3-5-16(14)20)15-8-12(19)6-7-17(15)23(11)13/h2-9H,10H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C18H13ClFN3O/c1-10-21-9-16-18(24)22-17(12-4-2-3-5-14(12)20)13-8-11(19)6-7-15(13)23(10)16/h2-9,18,24H,1H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H13ClFN3O/c1-10-21-9-16-18(24)22-17(12-4-2-3-5-14(12)20)13-8-11(19)6-7-15(13)23(10)16/h2-9,18,24H,1H3/t18-/m0/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C18H13ClFN3O/c1-10-21-9-16-18(24)22-17(12-4-2-3-5-14(12)20)13-8-11(19)6-7-15(13)23(10)16/h2-9,18,24H,1H3/t18-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H13ClFN3O/c19-11-5-6-16-14(7-11)18(13-3-1-2-4-15(13)20)22-9-12-8-21-17(10-24)23(12)16/h1-8,24H,9-10H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H13ClFN3O2/c19-11-6-7-15-13(10-11)16(12-4-1-2-5-14(12)20)22-17(24)18(25)23(15)9-3-8-21/h1-2,4-7,10,17,24H,3,9H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H13ClFN3O2/c19-11-6-7-15-13(10-11)16(12-4-1-2-5-14(12)20)22-17(24)18(25)23(15)9-3-8-21/h1-2,4-7,10,17,24H,3,9H2/t17-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H13ClFN3O2/c19-11-6-7-15-13(10-11)16(12-4-1-2-5-14(12)20)22-17(24)18(25)23(15)9-3-8-21/h1-2,4-7,10,17,24H,3,9H2/t17-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H13ClN2O/c1-2-10-21-16-9-8-14(19)11-15(16)18(20-12-17(21)22)13-6-4-3-5-7-13/h1,3-9,11H,10,12H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H13ClN2O3S/c1-24-14-6-2-12(3-7-14)16-17(18(16,10-20)11-21)25(22,23)15-8-4-13(19)5-9-15/h2-9,16-17H,1H3/t16-,17+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H14Cl2N2/c19-14-9-13-6-5-12-3-1-2-4-15(12)18(17(13)16(20)10-14)22-8-7-21-11-22/h1-4,7-11,18H,5-6H2	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H14Cl4N2O/c19-13-2-1-12(16(21)7-13)10-25-18(9-24-6-5-23-11-24)15-4-3-14(20)8-17(15)22/h1-8,11,18H,9-10H2	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H14Cl4N2O/c19-13-2-1-12(16(21)7-13)10-25-18(9-24-6-5-23-11-24)15-4-3-14(20)8-17(15)22/h1-8,11,18H,9-10H2/t18-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H14Cl4N2O/c19-13-2-1-12(16(21)7-13)10-25-18(9-24-6-5-23-11-24)15-4-3-14(20)8-17(15)22/h1-8,11,18H,9-10H2/t18-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H14ClFN2O3/c1-2-25-18(24)16-17(23)21-14-8-7-10(19)9-12(14)15(22-16)11-5-3-4-6-13(11)20/h3-9,16H,2H2,1H3,(H,21,23)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H14ClFN2O3/c1-2-25-18(24)16-17(23)21-14-8-7-10(19)9-12(14)15(22-16)11-5-3-4-6-13(11)20/h3-9,16H,2H2,1H3,(H,21,23)/t16-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H14ClFN2O3/c1-2-25-18(24)16-17(23)21-14-8-7-10(19)9-12(14)15(22-16)11-5-3-4-6-13(11)20/h3-9,16H,2H2,1H3,(H,21,23)/t16-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H14ClNO7/c1-2-24-18(23)10-6-20-17(22)14-9(5-13(21)27-15(10)14)8-3-11(19)16-12(4-8)25-7-26-16/h3-4,6,9H,2,5,7H2,1H3,(H,20,22)/t9-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H14F4N2O4S/c1-17(26,10-29(27,28)14-6-3-12(19)4-7-14)16(25)24-13-5-2-11(9-23)15(8-13)18(20,21)22/h2-8,26H,10H2,1H3,(H,24,25)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H14F4N2O4S/c1-17(26,10-29(27,28)14-6-3-12(19)4-7-14)16(25)24-13-5-2-11(9-23)15(8-13)18(20,21)22/h2-8,26H,10H2,1H3,(H,24,25)/t17-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H14N4O5S/c23-16-9-6-13(11-15(16)18(24)25)21-20-12-4-7-14(8-5-12)28(26,27)22-17-3-1-2-10-19-17/h1-11,23H,(H,19,22)(H,24,25)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H15Cl2N3O/c1-2-9-24-23-17-11-21-18(13-5-3-4-6-15(13)20)14-10-12(19)7-8-16(14)22-17/h2-8,10H,1,9,11H2,(H,22,23)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H15Cl2N5O5S3/c1-7-22-23-18(33-7)32-6-8-5-31-16-12(15(28)25(16)13(8)17(29)30)21-11(26)4-24-2-9(19)14(27)10(20)3-24/h2-	0	(Mazumdar et al., 2023)

3,12,16H,4-6H2,1H3,(H,21,26)(H,29,30)	2023)
InChI=1S/C18H15Cl2N5O5S3/c1-7-22-23-18(33-7)32-6-8-5-31-16-12(15(28)25(16)13(8)17(29)30)21-11(26)4-24-2-9(19)14(27)10(20)3-24/h2-3,12,16H,4-6H2,1H3,(H,21,26)(H,29,30)/t12-,16-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H15Cl2N5O5S3/c1-7-22-23-18(33-7)32-6-8-5-31-16-12(15(28)25(16)13(8)17(29)30)21-11(26)4-24-2-9(19)14(27)10(20)3-24/h2-3,12,16H,4-6H2,1H3,(H,21,26)(H,29,30)/t12?,16-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H15Cl3N2O/c19-14-3-1-13(2-4-14)11-24-18(10-23-8-7-22-12-23)16-6-5-15(20)9-17(16)21/h1-9,12,18H,10-11H2	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H15Cl3N2O/c19-14-3-1-13(2-4-14)11-24-18(10-23-8-7-22-12-23)16-6-5-15(20)9-17(16)21/h1-9,12,18H,10-11H2/t18-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H15Cl3N2S/c19-14-3-1-13(2-4-14)11-24-18(10-23-8-7-22-12-23)16-6-5-15(20)9-17(16)21/h1-9,12,18H,10-11H2	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H15ClFN3O/c1-18(24)22-10-12-9-21-17(13-4-2-3-5-15(13)20)14-8-11(19)6-7-16(14)23(12)18/h2-8,10,22,24H,9H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H15ClN2O2S/c1-12-3-4-14(10-20-12)18-17(9-15(19)11-21-18)13-5-7-16(8-6-13)24(2,22)23/h3-11H,1-2H3	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H15ClN2O3S/c1-12-3-4-14(10-20-12)18-17(9-15(19)11-21-18)22)13-5-7-16(8-6-13)25(2,23)24/h3-11H,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H15ClN2O6S2/c1-9-5-13-14(26-8-25-13)7-11(9)6-12(22)17-15(3-4-28-17)29(23,24)21-18-16(19)10(2)20-27-18/h3-5,7,21H,6,8H2,1-2H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H15F2N5O2/c1-18(17(20)27-9-15(22)25-18)12-6-11(3-4-13(12)19)24-16(26)14-5-2-10(7-21)8-23-14/h2-6,8,17H,9H2,1H3,(H2,22,25)(H,24,26)	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H15FN4O/c1-22-9-14(8-21-22)12-4-5-13(16(19)7-12)10-23-11-17-15(18(23)24)3-2-6-20-17/h2-9H,10-11H2,1H3	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H15N3O3/c1-23-12-5-3-11(4-6-12)21-18(22)15-10-19-16-9-13(24-2)7-8-14(16)17(15)20-21/h3-10,20H,1-2H3	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H15NO3/c20-16(21)12-11-15-19-17(13-7-3-1-4-8-13)18(22-15)14-9-5-2-6-10-14/h1-10H,11-12H2,(H,20,21)	0 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H15NO4/c1-23-14-7-8-16-15(10-14)13(9-17(20)21)11-19(16)18(22)12-5-3-2-4-6-12/h2-8,10-11H,9H2,1H3,(H,20,21)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H15NO4S/c1-23-14-9-7-13(8-10-14)16-17(18(16,11-19)12-20)24(21,22)15-5-3-2-4-6-15/h2-10,12,16-17H,1H3/t16-,17+,18+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H15NO5S/c1-24-13-9-7-12(8-10-13)15-16(18(15,11-19)17(20)21)25(22,23)14-5-3-2-4-6-14/h2-10,15-16H,1H3,(H,20,21)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H15NO6/c1-22-13-6-5-12-14(15(13)23-2)18(21)25-16(12)19-10-3-4-11-9(7-10)8-24-17(11)20/h3-7,16,19H,8H2,1-2H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H15NO6/c1-22-13-6-5-12-14(15(13)23-2)18(21)25-16(12)19-10-3-4-11-9(7-10)8-24-17(11)20/h3-7,16,19H,8H2,1-2H3/t16-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H16Cl2N2O2/c1-11-10-24-18(13-4-2-3-5-15(13)20)14-8-12(19)6-7-16(14)21-17(23)9-22(11)18/h2-8,11H,9-10H2,1H3,(H,21,23)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H16Cl2N2O2/c1-11-10-24-18(13-4-2-3-5-15(13)20)14-8-12(19)6-7-16(14)21-17(23)9-22(11)18/h2-8,11H,9-10H2,1H3,(H,21,23)/t11-,18-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H16Cl2N2O2/c1-11-10-24-18(13-4-2-3-5-15(13)20)14-8-12(19)6-7-16(14)21-17(23)9-22(11)18/h2-8,11H,9-10H2,1H3,(H,21,23)/t11-,18?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C18H16Cl2N2O2/c1-11-10-24-18(13-4-2-3-5-15(13)20)14-8-12(19)6-7-16(14)21-17(23)9-22(11)18/h2-8,11H,9-10H2,1H3,(H,21,23)/t11-,18+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H16ClFN2O3/c19-11-5-6-16-14(7-11)18(13-3-1-2-4-15(13)20)21-8-17(25)22(16)9-12(24)10-23/h1-7,12,23-24H,8-10H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H16ClFN2O3/c19-11-5-6-16-14(7-11)18(13-3-1-2-4-15(13)20)21-8-17(25)22(16)9-12(24)10-23/h1-7,12,23-24H,8-10H2/t12-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H16ClFN2O3/c19-11-5-6-16-14(7-11)18(13-3-1-2-4-15(13)20)21-8-17(25)22(16)9-12(24)10-23/h1-7,12,23-24H,8-10H2/t12-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H16CIN5O2/c1-2-11-9-22-18(23-10-11)26-15-6-5-12(8-13(15)19)24-17(25)16-14(20)4-3-7-21-16/h3-10H,2,20H2,1H3,(H,24,25)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H16CINO3S/c1-23-12-18(11-20)16(13-5-3-2-4-6-13)17(18)24(21,22)15-9-7-14(19)8-10-15/h2-10,16-17H,12H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H16CINO3S/c1-23-12-18(11-20)16(13-5-3-2-4-6-13)17(18)24(21,22)15-9-7-14(19)8-10-15/h2-10,16-17H,12H2,1H3/t16-,17+,18-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H16CINO4S/c1-24-14-6-2-12(3-7-14)16-17(18(16,10-20)11-21)25(22,23)15-8-4-13(19)5-9-15/h2-9,16-17,21H,11H2,1H3/t16-,17-,18+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H16CINO8/c1-25-13(21)5-9(8-3-11(19)16-12(4-8)27-7-28-16)14-15(22)10(18(24)26-2)6-20-17(14)23/h3-4,6,9H,5,7H2,1-2H3,(H2,20,22,23)/t9-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H16N2O/c1-10-15-9-20(3)7-6-13(15)11(2)18-17(10)14-8-12(21)4-5-16(14)19-18/h4-9,21H,1-3H3/p+1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H16N2O/c19-12-13-4-3-7-17(10-13)20-18(21)16-9-8-14-5-1-2-6-15(14)11-16/h1-11H,12,19H2,(H,20,21)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H16N2O3/c1-2-20-11-15(18(22)23)16(21)14-9-8-13(19-17(14)20)10-12-6-4-3-5-7-12/h3-9,11H,2,10H2,1H3,(H,22,23)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H16N4O2/c1-22-17(24)11-15(13-7-9-19-10-8-13)21-18(22)20-12-16(23)14-5-3-2-4-6-14/h2-11H,12H2,1H3,(H,20,21)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H16N4O6S/c1-18(2)12(17(27)28)22-14(24)11(15(22)29-18)21-13(23)9-10(16(25)26)20-8-6-4-3-5-7(8)19-9/h3-6,11-12,15H,1-2H3,(H,21,23)(H,25,26)(H,27,28)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H16N4O6S/c1-18(2)12(17(27)28)22-14(24)11(15(22)29-18)21-13(23)9-10(16(25)26)20-8-6-4-3-5-7(8)19-9/h3-6,11-12,15H,1-2H3,(H,21,23)(H,25,26)(H,27,28)/t11-,12-,15-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H16N4O6S/c1-18(2)12(17(27)28)22-14(24)11(15(22)29-18)21-13(23)9-10(16(25)26)20-8-6-4-3-5-7(8)19-9/h3-6,11-12,15H,1-2H3,(H,21,23)(H,25,26)(H,27,28)/t11-,12+,15-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H16N4O6S/c1-18(2)12(17(27)28)22-14(24)11(15(22)29-18)21-13(23)9-10(16(25)26)20-8-6-4-3-5-7(8)19-9/h3-6,11-12,15H,1-2H3,(H,21,23)(H,25,26)(H,27,28)/t11?,12-,15-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H16O3/c1-12(2)21-14-8-9-15-17(10-14)20-11-16(18(15)19)13-6-4-3-5-7-13/h3-12H,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H16O3/c1-2-13(12-8-4-3-5-9-12)16-17(19)14-10-6-7-11-15(14)21-18(16)20/h3-11,13,19H,2H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H16O3/c1-2-13(12-8-4-3-5-9-12)16-17(19)14-10-6-7-11-15(14)21-18(16)20/h3-11,13,19H,2H2,1H3/t13-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H16O4/c19-17(20)15-7-3-4-8-16(15)18(21)22-14-10-9-12-5-1-2-6-13(12)11-14/h1-8,14H,9-11H2,(H,19,20)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H16O7/c1-21-18(20)6-11(10-2-3-14-15(4-10)23-8-22-14)12-5-16-17(7-13(12)19)25-9-24-16/h2-5,7,11,19H,6,8-9H2,1H3/t11-	1	(Mazumdar et al., 2023)

/m0/s1	2023)
InChI=1S/C18H16O7/c1-21-18(20)6-11(10-2-3-14-15(4-10)23-8-22-14)12-5-16-17(7-13(12)19)25-9-24-16/h2-5,7,11,19H,6,8-9H2,1H3/t11-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H17Cl2N3O2S/c19-13-2-1-3-14(12-13)26(24,25)23-9-6-15-17(23)5-4-16(20)18(15)22-10-7-21-8-11-22/h1-6,9,12,21H,7-8,10-11H2	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H17Cl2N3O3/c1-23(17(25)10-22-16(24)9-21)15-7-6-11(19)8-13(15)18(26)12-4-2-3-5-14(12)20/h2-8H,9-10,21H2,1H3,(H,22,24)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H17ClN2O/c1-20-16-7-6-13(19)10-15(16)18-14-5-3-2-4-12(14)8-9-21(18)11-17(20)22/h2-7,10,18H,8-9,11H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H17ClN2O/c1-20-16-7-6-13(19)10-15(16)18-14-5-3-2-4-12(14)8-9-21(18)11-17(20)22/h2-7,10,18H,8-9,11H2,1H3/t18-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H17ClN2O2/c1-11-7-13-9-16(22-2)17(23-3)10-15(13)18(21-20-11)12-5-4-6-14(19)8-12/h4-6,8-10H,7H2,1-3H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H17ClN2O2/c1-12-10-21-11-17(22)20-16-8-7-14(19)9-15(16)18(21,23-12)13-5-3-2-4-6-13/h2-9,12H,10-11H2,1H3,(H,20,22)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H17ClN2O2/c1-12-10-21-11-17(22)20-16-8-7-14(19)9-15(16)18(21,23-12)13-5-3-2-4-6-13/h2-9,12H,10-11H2,1H3,(H,20,22)/t12-,18-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H17ClN2O2/c1-12-10-21-11-17(22)20-16-8-7-14(19)9-15(16)18(21,23-12)13-5-3-2-4-6-13/h2-9,12H,10-11H2,1H3,(H,20,22)/t12-,18?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H17ClN2O2/c1-12-10-21-11-17(22)20-16-8-7-14(19)9-15(16)18(21,23-12)13-5-3-2-4-6-13/h2-9,12H,10-11H2,1H3,(H,20,22)/t12-,18+/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H17ClN2O3/c1-2-24-18(23)20-11-10-17(22)21(14-6-4-3-5-7-14)16-12-13(19)8-9-15(16)20/h3-9,12H,2,10-11H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H17F2N5OS/c1-8-9(2)23-24-18-13(8)15(21)16(27-18)17(26)22-10-6-25(7-10)12-5-3-4-11(19)14(12)20/h3-5,10H,6-7,21H2,1-2H3,(H,22,26)	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H17F3N2O3/c19-18(20,21)15-7-3-5-13(11-15)17(14-6-4-9-22-12-14)23-26-10-2-1-8-16(24)25/h3-7,9,11-12H,1-2,8,10H2,(H,24,25)/b23-17-	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H17F3N2O3/c19-18(20,21)15-7-3-5-13(11-15)17(14-6-4-9-22-12-14)23-26-10-2-1-8-16(24)25/h3-7,9,11-12H,1-2,8,10H2,(H,24,25)/b23-17+	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H17F3N4O/c1-12-23-16(15(10-22)17(26)25(12)11-18(19,20)21)24-8-6-13-4-2-3-5-14(13)7-9-24/h2-5H,6-9,11H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H17F3N4O2/c1-3-15(12-4-6-13(7-5-12)27-18(19,20)21)24-17(26)14-9-23-25-10-11(2)8-22-16(14)25/h4-10,15H,3H2,1-2H3,(H,24,26)	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H17F3N6OS/c1-8-9(2)25-26-17-13(8)14(22)15(29-17)16(28)24-10-6-27(7-10)11-3-4-12(23-5-11)18(19,20)21/h3-5,10H,6-7,22H2,1-2H3,(H,24,28)	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H17N5O2/c1-10(2)23-13-6-4-3-5-12(13)22-9-19-14(15(22)18(23)24)16-20-17(25-21-16)11-7-8-11/h3-6,9-11H,7-8H2,1-2H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H17N5O2/c1-11(2)23-21-18(20-22-23)19-17(24)16-12-7-3-5-9-14(12)25-15-10-6-4-8-13(15)16/h3-11,16H,1-2H3,(H,19,21,24)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H17N7OS2/c1-8-9(2)23-24-17-12(8)13(19)14(27-17)15(26)21-10-6-25(7-10)18-22-11-4-3-5-20-16(11)28-18/h3-5,10H,6-7,19H2,1-2H3,(H,21,26)	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H17NO3/c1-11(20)22-16-10-12-6-2-3-7-13(12)17(18(19)21)15-9-5-4-8-14(15)16/h2-9,16-17H,10H2,1H3,(H2,19,21)/t16-	1 (Meng et al., 2021)

,17+/m0/s1

InChI=1S/C18H17NO3/c1-2-15(18(21)22)12-7-9-14(10-8-12)19-11-13-5-3-4-6-16(13)17(19)20/h3-10,15H,2,11H2,1H3,(H,21,22)/t15-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H17NO3S/c1-12-3-9-15(10-4-12)23(20,21)18-16(11-19)17(18)13-5-7-14(22-2)8-6-13/h3-10,16-18H,1-2H3/t16-,17-,18-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18BrCIN2O/c1-22-13(11-23-2)10-21-18(14-5-3-4-6-16(14)20)15-9-12(19)7-8-17(15)22/h3-9,13H,10-11H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H18BrCIN2O/c1-22-13(11-23-2)10-21-18(14-5-3-4-6-16(14)20)15-9-12(19)7-8-17(15)22/h3-9,13H,10-11H2,1-2H3/t13-/m0/s1	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H18BrCIN2O/c1-22-13(11-23-2)10-21-18(14-5-3-4-6-16(14)20)15-9-12(19)7-8-17(15)22/h3-9,13H,10-11H2,1-2H3/t13-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H18CIN2O2P/c1-24(2,23)12-21-16-9-8-14(19)10-15(16)18(20-11-17(21)22)13-6-4-3-5-7-13/h3-10H,11-12H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H18CIN3O/c1-21-8-10-22(11-9-21)18-14-12-13(19)6-7-16(14)23-17-5-3-2-4-15(17)20-18/h2-7,12H,8-11H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18CIN3S/c1-21-8-10-22(11-9-21)18-14-12-13(19)6-7-16(14)23-17-5-3-2-4-15(17)20-18/h2-7,12H,8-11H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18CIN5O4/c1-18(7-25,8-26)17-21-15(22-28-17)14-12-6-23(2)16(27)13-10(19)4-3-5-11(13)24(12)9-20-14/h3-5,9,25-26H,6-8H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18CINO/c1-20-9-8-13-15-10-12(19)6-7-18(15)21-17-5-3-2-4-14(17)16(13)11-20/h2-7,10,13,16H,8-9,11H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18CINO/c1-20-9-8-13-15-10-12(19)6-7-18(15)21-17-5-3-2-4-14(17)16(13)11-20/h2-7,10,13,16H,8-9,11H2,1H3/t13-,16+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18CINO2/c1-20-9-8-18(21)14-4-2-3-5-17(14)22-16-7-6-12(19)10-13(16)15(18)11-20/h2-7,10,15,21H,8-9,11H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18CINOS/c1-20(2)9-10-21-16-11-13-5-3-4-6-17(13)22-18-8-7-14(19)12-15(16)18/h3-8,11-12H,9-10H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18CINOS/c1-20(2)9-10-21-16-12-13-11-14(19)7-8-17(13)22-18-6-4-3-5-15(16)18/h3-8,11-12H,9-10H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18CINS/c1-20(2)11-5-7-14-15-6-3-4-8-17(15)21-18-10-9-13(19)12-16(14)18/h3-4,6-10,12H,5,11H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18CINS/c1-20(2)11-5-7-14-15-6-3-4-8-17(15)21-18-10-9-13(19)12-16(14)18/h3-4,6-10,12H,5,11H2,1-2H3/b14-7-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18CINS/c1-20(2)11-5-7-14-15-6-3-4-8-17(15)21-18-10-9-13(19)12-16(14)18/h3-4,6-10,12H,5,11H2,1-2H3/b14-7+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18FN3/c19-14-1-2-17-15(11-14)16-12-22(10-6-18(16)21-17)9-5-13-3-7-20-8-4-13/h1-4,7-8,11,21H,5-6,9-10,12H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H18FN3O/c19-14-7-5-13(6-8-14)12-22-16-4-2-1-3-15(16)21-18(22)17-11-20-9-10-23-17/h1-8,17,20H,9-12H2/t17-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18FN3S/c19-14-7-5-13(6-8-14)12-22-16-4-2-1-3-15(16)21-18(22)17-11-20-9-10-23-17/h1-8,17,20H,9-12H2/t17-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18N2/c1-2-6-13(7-3-1)12-17-18-14-8-4-5-9-15(14)20-16(18)10-11-19-17/h1-7,9,17,19H,8,10-12H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18N2/c1-2-6-13(7-3-1)12-17-18-14-8-4-5-9-15(14)20-16(18)10-11-19-17/h1-7,9,17,19H,8,10-12H2/t17-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H18N2/c1-2-6-13(7-3-1)12-17-18-15(10-11-19-17)14-8-4-5-9-16(14)20-18/h1-9,17,19-20H,10-12H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H18N2/c1-2-6-13(7-3-1)12-17-18-15(10-11-19-17)14-8-4-5-9-16(14)20-18/h1-9,17,19-20H,10-12H2/t17-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)

	2023)
InChI=1S/C18H18N2O/c1-12(2)20-16-11-13(3)9-10-15(16)17(19-18(20)21)14-7-5-4-6-8-14/h4-12H,1-3H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18N2O/c1-19-12-13-21-20-18-16-8-4-2-6-14(16)10-11-15-7-3-5-9-17(15)18/h2-11,19H,12-13H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18N2O2/c1-19-17(11-13-3-7-15(21)8-4-13)18(20-2)12-14-5-9-16(22)10-6-14/h3-12,21-22H,1-2H3/b17-11-,18-12-	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18N2O2/c1-2-9-16-17(21)19(14-10-5-3-6-11-14)20(18(16)22)15-12-7-4-8-13-15/h3-8,10-13,16H,2,9H2,1H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18N2O2/c1-20(2)11-12-6-8-13(9-7-12)15-10-19-18(22)14-4-3-5-16(21)17(14)15/h3-10,21H,11H2,1-2H3,(H,19,22)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18N2O2/c1-22-14-8-6-13(7-9-14)17-12-18(19-10-11-21)15-4-2-3-5-16(15)20-17/h2-9,12,21H,10-11H2,1H3,(H,19,20)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18N2O6S/c1-10(21)26-8-12-9-27-17-14(16(23)20(17)15(12)18(24)25)19-13(22)7-11-5-3-2-4-6-11/h2-6,14,17H,7-9H2,1H3,(H,19,22)(H,24,25)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H18N2O6S/c1-10(21)26-8-12-9-27-17-14(16(23)20(17)15(12)18(24)25)19-13(22)7-11-5-3-2-4-6-11/h2-6,14,17H,7-9H2,1H3,(H,19,22)(H,24,25)/t14-,17-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18N2O6S/c1-10(21)26-8-12-9-27-17-14(16(23)20(17)15(12)18(24)25)19-13(22)7-11-5-3-2-4-6-11/h2-6,14,17H,7-9H2,1H3,(H,19,22)(H,24,25)/t14-,17+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18N2O6S/c1-10(21)26-8-12-9-27-17-14(16(23)20(17)15(12)18(24)25)19-13(22)7-11-5-3-2-4-6-11/h2-6,14,17H,7-9H2,1H3,(H,19,22)(H,24,25)/t14?,17-/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H18N4O2/c1-14(12-15-8-4-2-5-9-15)22-13-17(24-21-22)20-18(23)19-16-10-6-3-7-11-16/h2-11,13-14H,12H2,1H3,(H-,19,20,21,23)/p+1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H18N4O2/c1-14(12-15-8-4-2-5-9-15)22-13-17(24-21-22)20-18(23)19-16-10-6-3-7-11-16/h2-11,13-14H,12H2,1H3,(H-,19,20,21,23)/p+1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H18N4O2S/c23-22(24)17-12-16(14-6-2-1-3-7-14)21-18(17)20-10-11-25-13-15-8-4-5-9-19-15/h1-9,12,20-21H,10-11,13H2	1 (Kaupp, 2007)
InChI=1S/C18H18N6O2S/c1-9-10(2)22-23-17-13(9)14(19)15(27-17)16(25)21-12-7-24(8-12)18(26)11-3-5-20-6-4-11/h3-6,12H,7-8,19H2,1-2H3,(H,21,25)	0 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H18N6O5S2/c1-23-18(20-21-22-23)31-8-10-7-30-16-11(15(27)24(16)12(10)17(28)29)19-14(26)13(25)9-5-3-2-4-6-9/h2-6,11,13,16,25H,7-8H2,1H3,(H,19,26)(H,28,29)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18N6O5S2/c1-23-18(20-21-22-23)31-8-10-7-30-16-11(15(27)24(16)12(10)17(28)29)19-14(26)13(25)9-5-3-2-4-6-9/h2-6,11,13,16,25H,7-8H2,1H3,(H,19,26)(H,28,29)/t11-,13-,16-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H18N6O5S2/c1-23-18(20-21-22-23)31-8-10-7-30-16-11(15(27)24(16)12(10)17(28)29)19-14(26)13(25)9-5-3-2-4-6-9/h2-6,11,13,16,25H,7-8H2,1H3,(H,19,26)(H,28,29)/t11-,13+,16+/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H18N6O5S2/c1-23-18(20-21-22-23)31-8-10-7-30-16-11(15(27)24(16)12(10)17(28)29)19-14(26)13(25)9-5-3-2-4-6-9/h2-6,11,13,16,25H,7-8H2,1H3,(H,19,26)(H,28,29)/t11?,13-,16-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18N6O5S2/c19-12(8-1-3-10(25)4-2-8)15(26)21-13-16(27)24-14(18(28)29)9(7-31-17(13)24)6-30-11-5-20-23-22-11/h1-5,12-13,17,25H,6-7,19H2,(H,21,26)(H,28,29)(H,20,22,23)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H18N6O5S2/c19-12(8-1-3-10(25)4-2-8)15(26)21-13-16(27)24-14(18(28)29)9(7-31-17(13)24)6-30-11-5-20-23-22-11/h1-5,12-13,17,25H,6-7,19H2,(H,21,26)(H,28,29)(H,20,22,23)/t12-,13-,17-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H18N6O5S2/c19-12(8-1-3-10(25)4-2-8)15(26)21-13-16(27)24-14(18(28)29)9(7-31-17(13)24)6-30-11-5-20-23-22-11/h1-5,12-	0 (Meng et al., 2021)

13,17,25H,6-7,19H2,(H,21,26)(H,28,29)(H,20,22,23)/t12-,13-,17+/m1/s1	
InChI=1S/C18H18N6O5S2/c19-12(8-1-3-10(25)4-2-8)15(26)21-13-16(27)24-14(18(28)29)9(7-31-17(13)24)6-30-11-5-20-23-22-11/h1-5,12-13,17,25H,6-7,19H2,(H,21,26)(H,28,29)(H,20,22,23)/t12-,13?,17-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18N6O5S2/c19-12(8-1-3-10(25)4-2-8)15(26)21-13-16(27)24-14(18(28)29)9(7-31-17(13)24)6-30-11-5-20-23-22-11/h1-5,12-13,17,25H,6-7,19H2,(H,21,26)(H,28,29)(H,20,22,23)/t12-,13+,17+/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H18N6O5S2/c19-12(8-1-3-10(25)4-2-8)15(26)21-13-16(27)24-14(18(28)29)9(7-31-17(13)24)6-30-11-5-20-23-22-11/h1-5,12-13,17,25H,6-7,19H2,(H,21,26)(H,28,29)(H,20,22,23)/t12?,13-,17-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18N6O8S3/c25-13(9-4-2-1-3-5-9)14(26)19-11-15(27)24-12(17(28)29)10(6-33-16(11)24)7-34-18-20-21-22-23(18)8-35(30,31)32/h1-5,11,13,16,25H,6-8H2,(H,19,26)(H,28,29)(H,30,31,32)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H18N6O8S3/c25-13(9-4-2-1-3-5-9)14(26)19-11-15(27)24-12(17(28)29)10(6-33-16(11)24)7-34-18-20-21-22-23(18)8-35(30,31)32/h1-5,11,13,16,25H,6-8H2,(H,19,26)(H,28,29)(H,30,31,32)/t11-,13-,16-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18N6O8S3/c25-13(9-4-2-1-3-5-9)14(26)19-11-15(27)24-12(17(28)29)10(6-33-16(11)24)7-34-18-20-21-22-23(18)8-35(30,31)32/h1-5,11,13,16,25H,6-8H2,(H,19,26)(H,28,29)(H,30,31,32)/t11-,13?,16-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H18N6O8S3/c25-13(9-4-2-1-3-5-9)14(26)19-11-15(27)24-12(17(28)29)10(6-33-16(11)24)7-34-18-20-21-22-23(18)8-35(30,31)32/h1-5,11,13,16,25H,6-8H2,(H,19,26)(H,28,29)(H,30,31,32)/t11-,13+,16-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18N6O8S3/c25-13(9-4-2-1-3-5-9)14(26)19-11-15(27)24-12(17(28)29)10(6-33-16(11)24)7-34-18-20-21-22-23(18)8-35(30,31)32/h1-5,11,13,16,25H,6-8H2,(H,19,26)(H,28,29)(H,30,31,32)/t11-,13+,16-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18N6O8S3/c25-13(9-4-2-1-3-5-9)14(26)19-11-15(27)24-12(17(28)29)10(6-33-16(11)24)7-34-18-20-21-22-23(18)8-35(30,31)32/h1-5,11,13,16,25H,6-8H2,(H,19,26)(H,28,29)(H,30,31,32)/t11?,13-,16-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18N8O7S3/c1-25-18(22-12(28)13(29)23-25)36-4-6-3-34-15-9(14(30)26(15)10(6)16(31)32)21-11(27)8(24-33-2)7-5-35-17(19)20-7/h5,9,15H,3-4H2,1-2H3,(H2,19,20)(H,21,27)(H,23,29)(H,31,32)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18N8O7S3/c1-25-18(22-12(28)13(29)23-25)36-4-6-3-34-15-9(14(30)26(15)10(6)16(31)32)21-11(27)8(24-33-2)7-5-35-17(19)20-7/h5,9,15H,3-4H2,1-2H3,(H2,19,20)(H,21,27)(H,23,29)(H,31,32)/b24-8-/t9-,15-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18N8O7S3/c1-25-18(22-12(28)13(29)23-25)36-4-6-3-34-15-9(14(30)26(15)10(6)16(31)32)21-11(27)8(24-33-2)7-5-35-17(19)20-7/h5,9,15H,3-4H2,1-2H3,(H2,19,20)(H,21,27)(H,23,29)(H,31,32)/b24-8-/t9-,15-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H18N8O7S3/c1-25-18(22-12(28)13(29)23-25)36-4-6-3-34-15-9(14(30)26(15)10(6)16(31)32)21-11(27)8(24-33-2)7-5-35-17(19)20-7/h5,9,15H,3-4H2,1-2H3,(H2,19,20)(H,21,27)(H,23,29)(H,31,32)/b24-8-/t9-,15+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18N8O7S3/c1-25-18(22-12(28)13(29)23-25)36-4-6-3-34-15-9(14(30)26(15)10(6)16(31)32)21-11(27)8(24-33-2)7-5-35-17(19)20-7/h5,9,15H,3-4H2,1-2H3,(H2,19,20)(H,21,27)(H,23,29)(H,31,32)/b24-8-/t9?,15-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H18N8O7S3/c1-25-18(22-12(28)13(29)23-25)36-4-6-3-34-15-9(14(30)26(15)10(6)16(31)32)21-11(27)8(24-33-2)7-5-35-17(19)20-7/h5,9,15H,3-4H2,1-2H3,(H2,19,20)(H,21,27)(H,23,29)(H,31,32)/b24-8+/t9-,15-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18N8O7S3/c1-25-18(22-12(28)13(29)23-25)36-4-6-3-34-15-9(14(30)26(15)10(6)16(31)32)21-11(27)8(24-33-2)7-5-35-17(19)20-7/h5,9,15H,3-4H2,1-2H3,(H2,19,20)(H,21,27)(H,23,29)(H,31,32)/b24-8+/t9-,15-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H18N8O7S3/c1-25-18(22-12(28)13(29)23-25)36-4-6-3-34-15-9(14(30)26(15)10(6)16(31)32)21-11(27)8(24-33-2)7-5-35-17(19)20-7/h5,9,15H,3-4H2,1-2H3,(H2,19,20)(H,21,27)(H,23,29)(H,31,32)/b24-8+/t9-,15-/m0/s1	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H18N8O7S3/c1-25-18(22-12(28)13(29)23-25)36-4-6-3-34-15-9(14(30)26(15)10(6)16(31)32)21-11(27)8(24-33-2)7-5-35-17(19)20-7/h5,9,15H,3-4H2,1-2H3,(H2,19,20)(H,21,27)(H,23,29)(H,31,32)/t9-,15-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18N8O7S3/c1-25-18(22-12(28)13(29)23-25)36-4-6-3-34-15-9(14(30)26(15)10(6)16(31)32)21-11(27)8(24-33-2)7-5-35-17(19)20-7/h5,9,15H,3-4H2,1-2H3,(H2,19,20)(H,21,27)(H,23,29)(H,31,32)/t9-,15-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C18H18N8O7S3/c1-25-18(22-12(28)13(29)23-25)36-4-6-3-34-15-9(14(30)26(15)10(6)16(31)32)21-11(27)8(24-33-2)7-5-35-17(19)20-7/h5,9,15H,3-4H2,1-2H3,(H5,19,20,21,23,27,29,31,32)/p+1/b24-8-	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H18O2/c1-3-17(13-5-9-15(19)10-6-13)18(4-2)14-7-11-16(20)12-8-14/h3-12,19-20H,1-2H3/b17-3-,18-4-	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H18O5S/c1-11-3-9-14(10-4-11)24(21,22)17-15(16(17)18(19)20)12-5-7-13(23-2)8-6-12/h3-10,15-17H,1-2H3,(H,19,20)/t15-,16-,17-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H18O6S/c1-24-13-9-7-12(8-10-13)15-16(18(15,11-19)17(20)21)25(22,23)14-5-3-2-4-6-14/h2-10,15-16,19H,11H2,1H3,(H,20,21)/t15-,16-,18+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H19Cl2NO4/c1-5-25-18(23)14-10(3)21-9(2)13(17(22)24-4)15(14)11-7-6-8-12(19)16(11)20/h6-8,15,21H,5H2,1-4H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H19Cl2NO4/c1-5-25-18(23)14-10(3)21-9(2)13(17(22)24-4)15(14)11-7-6-8-12(19)16(11)20/h6-8,15,21H,5H2,1-4H3/t15-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H19Cl2NO4/c1-5-25-18(23)14-10(3)21-9(2)13(17(22)24-4)15(14)11-7-6-8-12(19)16(11)20/h6-8,15,21H,5H2,1-4H3/t15-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H19ClN2O3/c1-20-10-17-11-21(18(22)24-17)15-5-7-16(8-6-15)23-12-13-3-2-4-14(19)9-13/h2-9,17,20H,10-12H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H19ClN2O3/c1-20-10-17-11-21(18(22)24-17)15-5-7-16(8-6-15)23-12-13-3-2-4-14(19)9-13/h2-9,17,20H,10-12H2,1H3/t17-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H19ClN2O3/c1-20-10-17-11-21(18(22)24-17)15-5-7-16(8-6-15)23-12-13-3-2-4-14(19)9-13/h2-9,17,20H,10-12H2,1H3/t17-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H19ClN2O3/c1-4-17(14-7-5-11(2)9-12(14)3)20-18(22)15-10-13(21(23)24)6-8-16(15)19/h5-10,17H,4H2,1-3H3,(H,20,22)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H19ClN2O3/c1-4-17(14-7-5-11(2)9-12(14)3)20-18(22)15-10-13(21(23)24)6-8-16(15)19/h5-10,17H,4H2,1-3H3,(H,20,22)/t17-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H19ClN2O3/c1-4-17(14-7-5-11(2)9-12(14)3)20-18(22)15-10-13(21(23)24)6-8-16(15)19/h5-10,17H,4H2,1-3H3,(H,20,22)/t17-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H19ClN2O4/c1-2-25-15-8-5-13(6-9-15)4-3-11-20-18(22)16-12-14(21(23)24)7-10-17(16)19/h5-10,12H,2-4,11H2,1H3,(H,20,22)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H19ClN2O5/c1-4-15(11-5-8-16(25-2)17(9-11)26-3)20-18(22)13-10-12(21(23)24)6-7-14(13)19/h5-10,15H,4H2,1-3H3,(H,20,22)/t15-/m1/s1	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C18H19ClN4/c1-22-8-10-23(11-9-22)18-14-4-2-3-5-15(14)20-16-7-6-13(19)12-17(16)21-18/h2-7,12,20H,8-11H2,1H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H19ClN4/c19-15-3-5-16(6-4-15)23-10-8-22(9-11-23)13-14-12-21-18-17(14)2-1-7-20-18/h1-7,12H,8-11,13H2,(H,20,21)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H19ClN4/c19-16-4-6-17(7-5-16)22-11-9-21(10-12-22)14-15-13-20-23-8-2-1-3-18(15)23/h1-8,13H,9-12,14H2	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H19ClN4OS/c1-11-12(2)25-18-16(11)17(21-10-22-18)23-7-5-13(6-8-23)24-14-3-4-15(19)20-9-14/h3-4,9-10,13H,5-8H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H19ClO5S/c1-24-14-6-2-12(3-7-14)16-17(18(16,10-20)11-21)25(22,23)15-8-4-13(19)5-9-15/h2-9,16-17,20-21H,10-11H2,1H3/t16-,17+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H19F2N3O3/c19-18(20)26-14-3-1-2-12(8-14)17(25)22-6-7-23-13(10-22)9-15(21-23)16(24)11-4-5-11/h1-3,8-9,11,16,18,24H,4-7,10H2/t16-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H19F3N2S/c1-22(2)10-5-11-23-14-6-3-4-7-16(14)24-17-9-8-13(12-15(17)23)18(19,20)21/h3-4,6-9,12H,5,10-11H2,1-2H3		

InChI=1S/C18H19F3N2S/c1-22(2)10-5-11-23-14-6-3-4-7-16(14)24-17-9-8-13(12-15(17)23)18(19,20)21/h3-4,6-9,12H,5,10-11H2,1-2H3/p+1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C18H19FN4OS/c1-11-12(2)25-18-16(11)17(21-10-22-18)23-7-5-13(6-8-23)24-14-3-4-15(19)20-9-14/h3-4,9-10,13H,5-8H2,1-2H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H19N/c1-19-12-18-11-10-13(14-6-2-4-8-16(14)18)15-7-3-5-9-17(15)18/h2-9,13,19H,10-12H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H19N3O/c1-12-19-9-10-21(12)11-13-7-8-16-17(18(13)22)14-5-3-4-6-15(14)20(16)2/h3-6,9-10,13H,7-8,11H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H19N3O/c1-12-19-9-10-21(12)11-13-7-8-16-17(18(13)22)14-5-3-4-6-15(14)20(16)2/h3-6,9-10,13H,7-8,11H2,1-2H3/t13-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H19N3O2/c1-11-8-13-9-16(22-2)17(23-3)10-15(13)18(21-20-11)12-4-6-14(19)7-5-12/h4-7,9-10H,8,19H2,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H19N3O3S/c1-21(16-4-2-3-9-19-16)10-11-24-14-7-5-13(6-8-14)12-15-17(22)20-18(23)25-15/h2-9,15H,10-12H2,1H3,(H,20,22,23)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H19N3O5S/c1-2-3-10-8-27-17-13(16(24)21(17)14(10)18(25)26)20-15(23)12(19)9-4-6-11(22)7-5-9/h2-7,12-13,17,22H,8,19H2,1H3,(H,20,23)(H,25,26)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H19N3O5S/c1-2-3-10-8-27-17-13(16(24)21(17)14(10)18(25)26)20-15(23)12(19)9-4-6-11(22)7-5-9/h2-7,12-13,17,22H,8,19H2,1H3,(H,20,23)(H,25,26)/b3-2+	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H19N3O5S/c1-2-3-10-8-27-17-13(16(24)21(17)14(10)18(25)26)20-15(23)12(19)9-4-6-11(22)7-5-9/h2-7,12-13,17,22H,8,19H2,1H3,(H,20,23)(H,25,26)/b3-2+/t12-,13-,17-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H19N3O5S/c1-2-3-10-8-27-17-13(16(24)21(17)14(10)18(25)26)20-15(23)12(19)9-4-6-11(22)7-5-9/h2-7,12-13,17,22H,8,19H2,1H3,(H,20,23)(H,25,26)/b3-2+/t12-,13?,17-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H19N3O6S/c1-9(22)27-7-11-8-28-17-13(16(24)21(17)14(11)18(25)26)20-15(23)12(19)10-5-3-2-4-6-10/h2-6,12-13,17H,7-8,19H2,1H3,(H,20,23)(H,25,26)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H19N3O6S/c1-9(22)27-7-11-8-28-17-13(16(24)21(17)14(11)18(25)26)20-15(23)12(19)10-5-3-2-4-6-10/h2-6,12-13,17H,7-8,19H2,1H3,(H,20,23)(H,25,26)/t12-,13-,17-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H19N3O6S/c1-9(22)27-7-11-8-28-17-13(16(24)21(17)14(11)18(25)26)20-15(23)12(19)10-5-3-2-4-6-10/h2-6,12-13,17H,7-8,19H2,1H3,(H,20,23)(H,25,26)/t12-,13-,17+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H19N3O6S/c1-9(22)27-7-11-8-28-17-13(16(24)21(17)14(11)18(25)26)20-15(23)12(19)10-5-3-2-4-6-10/h2-6,12-13,17H,7-8,19H2,1H3,(H,20,23)(H,25,26)/t12-,13?,17-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H19N5O2/c1-22(2)12-13-6-8-19-16(10-13)14-4-3-5-15(11-14)21-18-17(23(24)25)7-9-20-18/h3-11,18,21H,12H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H19N5O2/c1-22(2)12-13-6-8-19-16(10-13)14-4-3-5-15(11-14)21-18-17(23(24)25)7-9-20-18/h3-11,18,21H,12H2,1-2H3/t18-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H19N5O2/c1-22(2)12-13-6-8-19-16(10-13)14-4-3-5-15(11-14)21-18-17(23(24)25)7-9-20-18/h3-11,20-21H,12H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H19N5O3/c1-26-16-4-3-11(10-20-16)17(12-7-13(24)8-12)21-18(25)14-9-15-19-5-2-6-23(15)22-14/h2-6,9-10,12-13,17,24H,7-8H2,1H3,(H,21,25)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H19N5O3/c1-26-16-4-3-11(10-20-16)17(12-7-13(24)8-12)21-18(25)14-9-15-19-5-2-6-23(15)22-14/h2-6,9-10,12-13,17,24H,7-8H2,1H3,(H,21,25)/t12?,13?,17-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H19N5O4/c1-18(8-24,9-25)17-20-15(21-27-17)14-13-7-22(2)16(26)11-5-3-4-6-12(11)23(13)10-19-14/h3-6,10,24-25H,7-9H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H19N5OS/c1-10-11(2)21-22-18-14(10)15(19)16(25-18)17(24)20-12-8-23(9-12)13-6-4-3-5-7-13/h3-7,12H,8-9,19H2,1-2H3,(H,20,24)	1	(Wu et al., 2018)

InChI=1S/C18H19NO2/c1-12-5-4-6-13-15-11-19-10-9-18(15,20)14-7-2-3-8-16(14)21-17(12)13/h2-8,15,19-20H,9-11H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H19NO2/c1-12-5-4-6-13-15-11-19-10-9-18(15,20)14-7-2-3-8-16(14)21-17(12)13/h2-8,15,19-20H,9-11H2,1H3/t15-,18-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H19NO2/c1-12-5-4-6-13-15-11-19-10-9-18(15,20)14-7-2-3-8-16(14)21-17(12)13/h2-8,15,19-20H,9-11H2,1H3/t15-,18?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H19NO2/c1-12-5-4-6-13-15-11-19-10-9-18(15,20)14-7-2-3-8-16(14)21-17(12)13/h2-8,15,19-20H,9-11H2,1H3/t15-,18+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H19NO3/c1-19-8-5-11-9-14(22-2)17(21)16-15(11)13(19)10-18(16)6-3-12(20)4-7-18/h3-4,6-7,9,13,21H,5,8,10H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H19NO3/c1-19-8-5-11-9-14(22-2)17(21)16-15(11)13(19)10-18(16)6-3-12(20)4-7-18/h3-4,6-7,9,13,21H,5,8,10H2,1-2H3/t13-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H19NO3/c1-19-8-5-11-9-14(22-2)17(21)16-15(11)13(19)10-18(16)6-3-12(20)4-7-18/h3-4,6-7,9,13,21H,5,8,10H2,1-2H3/t13-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H19NOS/c1-19-12-11-17(18-10-5-13-21-18)20-16-9-4-7-14-6-2-3-8-15(14)16/h2-10,13,17,19H,11-12H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H19NOS/c1-19-12-11-17(18-10-5-13-21-18)20-16-9-4-7-14-6-2-3-8-15(14)16/h2-10,13,17,19H,11-12H2,1H3/t17-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H19NOS/c1-19-12-11-17(18-10-5-13-21-18)20-16-9-4-7-14-6-2-3-8-15(14)16/h2-10,13,17,19H,11-12H2,1H3/t17-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H19NS/c1-19(2)13-7-10-14-15-8-3-5-11-17(15)20-18-12-6-4-9-16(14)18/h3-6,8-12H,7,13H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H20CINO/c1-20(2)11-6-12-21-16-10-9-14(19)13-17(16)22(18(21)23)15-7-4-3-5-8-15/h3-5,7-10,13H,6,11-12H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H20CINO2/c19-16-8-6-15(7-9-16)12-20-10-11-21-18(13-20)14-22-17-4-2-1-3-5-17/h1-9,18H,10-14H2	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H20CINO4S/c1-23-11-18(20)16(12-3-7-14(24-2)8-4-12)17(18)25(21,22)15-9-5-13(19)6-10-15/h3-10,16-17H,11,20H2,1-2H3/t16-,17+,18-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H20CINO4S/c1-24-14-6-2-12(3-7-14)16-17(18(16,10-20)11-21)25(22,23)15-8-4-13(19)5-9-15/h2-9,16-17,21H,10-11,20H2,1H3/t16-,17-,18-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H20FN3O3/c1-25-15-5-4-10(9-14(15)19)16(11-7-12(23)8-11)22-18-13(17(20)24)3-2-6-21-18/h2-6,9,11-12,16,23H,7-8H2,1H3,(H2,20,24)(H,21,22)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H20FN3O3/c1-25-15-5-4-10(9-14(15)19)16(11-7-12(23)8-11)22-18-13(17(20)24)3-2-6-21-18/h2-6,9,11-12,16,23H,7-8H2,1H3,(H2,20,24)(H,21,22)/t11?,12?,16-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H20FN3O4/c1-10-9-26-17-14-11(16(23)12(18(24)25)8-22(10)14)7-13(19)15(17)21-5-3-20(2)4-6-21/h7-8,10H,3-6,9H2,1-2H3,(H,24,25)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H20FN3O4/c1-10-9-26-17-14-11(16(23)12(18(24)25)8-22(10)14)7-13(19)15(17)21-5-3-20(2)4-6-21/h7-8,10H,3-6,9H2,1-2H3,(H,24,25)/t10-/m0/s1	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C18H20FN3O4/c1-10-9-26-17-15-12(11(23)3-4-22(10)15)13(18(24)25)14(19)16(17)21-7-5-20(2)6-8-21/h3-4,10H,5-9H2,1-2H3,(H,24,25)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H20FN3O4/c1-10-9-26-17-15-12(11(23)3-4-22(10)15)13(18(24)25)14(19)16(17)21-7-5-20(2)6-8-21/h3-4,10H,5-9H2,1-2H3,(H,24,25)/t10-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H20FN5O4/c1-28-22-14-8-23(6-9(14)5-20)17-13(19)4-11-15(25)12(18(26)27)7-24(10-2-3-10)16(11)21-17/h4,7,9-10H,2-3,5-	0	(Mazumdar et al.,

6,8,20H ₂ ,1H ₃ , (H,26,27)	2023)
InChI=1S/C18H20FN5O4/c1-28-22-14-8-23(6-9(14)5-20)17-13(19)4-11-15(25)12(18(26)27)7-24(10-2-3-10)16(11)21-17/h4,7,9-10H,2-3,5-6,8,20H ₂ ,1H ₃ , (H,26,27)/b22-14-	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H20FN5O4/c1-28-22-14-8-23(6-9(14)5-20)17-13(19)4-11-15(25)12(18(26)27)7-24(10-2-3-10)16(11)21-17/h4,7,9-10H,2-3,5-6,8,20H ₂ ,1H ₃ , (H,26,27)/b22-14+	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H20N2/c1-19-10-11-20-17-9-5-3-7-15(17)12-14-6-2-4-8-16(14)18(20)13-19/h2-9,18H,10-13H ₂ ,1H ₃	1 (Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C18H20N2/c1-19-10-11-20-17-9-5-3-7-15(17)12-14-6-2-4-8-16(14)18(20)13-19/h2-9,18H,10-13H ₂ ,1H ₃ /t18-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H20N2/c1-19-10-11-20-17-9-5-3-7-15(17)12-14-6-2-4-8-16(14)18(20)13-19/h2-9,18H,10-13H ₂ ,1H ₃ /t18-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H20N2/c1-19-16-11-12-20-17-8-3-2-5-13(17)9-10-14-6-4-7-15(16)18(14)20/h2-8,16,19H,9-12H ₂ ,1H ₃	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H20N2/c1-19-16-11-12-20-17-8-3-2-5-13(17)9-10-14-6-4-7-15(16)18(14)20/h2-8,16,19H,9-12H ₂ ,1H ₃ /t16-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H20N2/c1-2-6-13(7-3-1)12-17-18-14-8-4-5-9-15(14)20-16(18)10-11-19-17/h1-7,17,19-20H,8-12H ₂ /t17-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H20N2O/c1-19(2)12-7-13-20-17-11-6-5-9-15(17)14-8-3-4-10-16(14)18(20)21/h3-6,8-11H,7,12-13H ₂ ,1-2H ₃	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H20N2O6/c1-5-26-18(22)15-11(3)19-10(2)14(17(21)25-4)16(15)12-7-6-8-13(9-12)20(23)24/h6-9,16,19H,5H ₂ ,1-4H ₃	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H20N2O6/c1-5-26-18(22)15-11(3)19-10(2)14(17(21)25-4)16(15)12-7-6-8-13(9-12)20(23)24/h6-9,16,19H,5H ₂ ,1-4H ₃ /t16-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H20N2O6/c1-5-26-18(22)15-11(3)19-10(2)14(17(21)25-4)16(15)12-7-6-8-13(9-12)20(23)24/h6-9,16,19H,5H ₂ ,1-4H ₃ /t16-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H20N2S/c1-19-11-10-14(12-19)13-20-15-6-2-4-8-17(15)21-18-9-5-3-7-16(18)20/h2-9,14H,10-13H ₂ ,1H ₃	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H20N4O2/c1-14(12-15-8-4-2-5-9-15)22-13-17(24-21-22)20-18(23)19-16-10-6-3-7-11-16/h2-11,13-14,21H,12H ₂ ,1H ₃ , (H ₂ ,19,20,23)/t14-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H20N4O2/c1-3-24-15(23)10-13-9-14-17(18(19)21-13)22-16(11(2)20-14)12-7-5-4-6-8-12/h4-9,11,20H,3,10H ₂ ,1-2H ₃ , (H ₂ ,19,21)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H20N4O2/c23-16(20-11-15-10-12-1-2-14(15)9-12)3-4-17-21-18(22-24-17)13-5-7-19-8-6-13/h1-2,5-8,12,14-15H,3-4,9-11H ₂ , (H,20,23)/t12-,14-,15+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H20N6O2S/c1-9-10(2)22-23-18-14(9)15(19)16(27-18)17(25)21-11-7-24(8-11)12-4-13(26-3)6-20-5-12/h4-6,11H,7-8,19H ₂ ,1-3H ₃ , (H,21,25)	0 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H20O2/c1-18-9-8-14-13-5-3-12(19)10-11(13)2-4-15(14)16(18)6-7-17(18)20/h3-5,10,14,16,19H,2,6-9H ₂ ,1H ₃	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H20O2/c1-18-9-8-14-13-5-3-12(19)10-11(13)2-4-15(14)16(18)6-7-17(18)20/h3-5,10,14,16,19H,2,6-9H ₂ ,1H ₃ /t14-,16+,18+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H20O2/c1-3-17(13-5-9-15(19)10-6-13)18(4-2)14-7-11-16(20)12-8-14/h5-12,19-20H,3-4H ₂ ,1-2H ₃	1 (Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C18H20O2/c1-3-17(13-5-9-15(19)10-6-13)18(4-2)14-7-11-16(20)12-8-14/h5-12,19-20H,3-4H2,1-2H3/b18-17+	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H20O4S/c1-12-3-9-15(10-4-12)23(20,21)18-16(11-19)17(18)13-5-7-14(22-2)8-6-13/h3-10,16-19H,11H2,1-2H3/t16-,17+,18-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H21Cl2N5O/c19-14-4-3-13(9-15(14)20)10-17(26)24-7-8-25-18(21-12-22-25)16(24)11-23-5-1-2-6-23/h3-4,9,12,16H,1-2,5-8,10-11H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H21Cl2N5O/c19-14-4-3-13(9-15(14)20)10-17(26)24-7-8-25-18(21-12-22-25)16(24)11-23-5-1-2-6-23/h3-4,9,12,16H,1-2,5-8,10-11H2/t16-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21Cl2N5O/c19-14-4-3-13(9-15(14)20)10-17(26)24-7-8-25-18(21-12-22-25)16(24)11-23-5-1-2-6-23/h3-4,9,12,16H,1-2,5-8,10-11H2/t16-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21ClN2/c1-20-11-13-21(14-12-20)18(15-5-3-2-4-6-15)16-7-9-17(19)10-8-16/h2-10,18H,11-14H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H21ClN2/c1-20-11-13-21(14-12-20)18(15-5-3-2-4-6-15)16-7-9-17(19)10-8-16/h2-10,18H,11-14H2,1H3/t18-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H21ClN2/c1-20-11-13-21(14-12-20)18(15-5-3-2-4-6-15)16-7-9-17(19)10-8-16/h2-10,18H,11-14H2,1H3/t18-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H21ClN2/c1-21(2)11-5-7-14-15-6-3-4-8-17(15)20-18-10-9-13(19)12-16(14)18/h3-4,6,8-10,12,14,20H,5,7,11H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H21ClN2/c1-21(2)11-5-7-14-15-6-3-4-8-17(15)20-18-10-9-13(19)12-16(14)18/h3-4,6,8-10,12,14,20H,5,7,11H2,1-2H3/t14-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H21ClN2O3S/c1-24-14-6-2-12(3-7-14)16-17(18(16,10-20)11-21)25(22,23)15-8-4-13(19)5-9-15/h2-9,16-17H,10-11,20-21H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21ClN2O3S/c1-24-14-6-2-12(3-7-14)16-17(18(16,10-20)11-21)25(22,23)15-8-4-13(19)5-9-15/h2-9,16-17H,10-11,20-21H2,1H3/t16-,17-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H21ClN2O3S/c1-24-14-6-2-12(3-7-14)16-17(18(16,10-20)11-21)25(22,23)15-8-4-13(19)5-9-15/h2-9,16-17H,10-11,20-21H2,1H3/t16-,17+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21FN2O2/c1-12(9-19)20-10-13(22)11-23-17-8-4-7-16-18(17)14-5-2-3-6-15(14)21-16/h2-8,12-13,20-22H,9-11H2,1H3/t12?,13-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21N3O/c1-19(2)12-13-21-17-11-7-6-10-16(17)20(3)15-9-5-4-8-14(15)18(21)22/h4-11H,12-13H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21N3O2/c1-20-11-12(10-16(20)22)7-9-21-14-5-3-2-4-13(14)17-15(21)6-8-19-18(17)23/h2-5,12H,6-11H2,1H3,(H,19,23)/t12-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21N3O3S/c1-13-16(19-9-8-17(13)24-11-5-10-23-2)12-25(22)18-20-14-6-3-4-7-15(14)21-18/h3-4,6-9H,5,10-12H2,1-2H3,(H,20,21)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H21N5O2/c1-21-17(24)9-16(22-8-4-7-15(20)12-22)23(18(21)25)11-14-6-3-2-5-13(14)10-19/h2-3,5-6,9,15H,4,7-8,11-12,20H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H21N5O2/c1-22(2)12-13-6-8-19-16(10-13)14-4-3-5-15(11-14)21-18-17(23(24)25)7-9-20-18/h3-11,17-18,20-21H,12H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21N5O3S/c24-17-15-5-1-2-6-16(15)27(25,26)23(17)10-4-9-21-11-13-22(14-12-21)18-19-7-3-8-20-18/h1-3,5-8H,4,9-14H2	1	(Mazumdar et al., 2023)

	2023)
InChI=1S/C18H21N5OS/c1-11-12(2)25-18-16(11)17(21-10-22-18)23-6-4-14(5-7-23)24-15-8-19-13(3)20-9-15/h8-10,14H,4-7H2,1-3H3	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H21N5OS/c1-23(2)17-21-18(25-22-17)20-16(12-8-14(24)9-12)13-7-11-5-3-4-6-15(11)19-10-13/h3-7,10,12,14,16,24H,8-9H2,1-2H3,(H,20,21,22)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H21N5OS/c1-23(2)17-21-18(25-22-17)20-16(12-8-14(24)9-12)13-7-11-5-3-4-6-15(11)19-10-13/h3-7,10,12,14,16,24H,8-9H2,1-2H3,(H,20,21,22)/t12?,14?,16-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H21NO/c20-18(15-7-3-1-4-8-15,16-9-5-2-6-10-16)17-11-13-19-14-12-17/h1-10,17,19-20H,11-14H2	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H21NO/c20-18(15-9-3-1-4-10-15,16-11-5-2-6-12-16)17-13-7-8-14-19-17/h1-6,9-12,17,19-20H,7-8,13-14H2	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H21NO/c20-18(15-9-3-1-4-10-15,16-11-5-2-6-12-16)17-13-7-8-14-19-17/h1-6,9-12,17,19-20H,7-8,13-14H2/t17-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21NO/c20-18(15-9-3-1-4-10-15,16-11-5-2-6-12-16)17-13-7-8-14-19-17/h1-6,9-12,17,19-20H,7-8,13-14H2/t17-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21NO2/c1-10-3-5-12-13-9-11-4-6-14(20)16-15(11)18(12,17(10)21-16)7-8-19(13)2/h3-4,6,12-13,17,20H,5,7-9H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21NO2/c1-10-3-5-12-13-9-11-4-6-14(20)16-15(11)18(12,17(10)21-16)7-8-19(13)2/h3-4,6,12-13,17,20H,5,7-9H2,1-2H3/t12-,13?,17+,18?/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21NO2/c1-10-3-5-12-13-9-11-4-6-14(20)16-15(11)18(12,17(10)21-16)7-8-19(13)2/h3-4,6,12-13,17,20H,5,7-9H2,1-2H3/t12-,13+,17-,18-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H21NO2/c1-12-10-19(2)11-14-9-16-15-6-4-3-5-13(15)7-8-17(16)21-18(12,14)20/h3-8,12,14,20H,9-11H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21NO2/c1-12-10-19(2)11-14-9-16-15-6-4-3-5-13(15)7-8-17(16)21-18(12,14)20/h3-8,12,14,20H,9-11H2,1-2H3/t12-,14-,18?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21NO2/c1-12-10-19(2)11-14-9-16-15-6-4-3-5-13(15)7-8-17(16)21-18(12,14)20/h3-8,12,14,20H,9-11H2,1-2H3/t12-,14+,18-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21NO2S/c1-15-7-9-16(10-8-15)21-13-12-19-18(20)11-14-22-17-5-3-2-4-6-17/h2-10H,11-14H2,1H3,(H,19,20)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21NO3/c1-17-14(21)6-4-11-12-9-10-3-5-13(20)16(22-17)15(10)18(11,17)7-8-19(12)2/h3,5,11-12,20H,4,6-9H2,1-2H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H21NO3/c1-17-14(21)6-4-11-12-9-10-3-5-13(20)16(22-17)15(10)18(11,17)7-8-19(12)2/h3,5,11-12,20H,4,6-9H2,1-2H3/t11-,12-,17-,18+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21NO3/c1-17-14(21)6-4-11-12-9-10-3-5-13(20)16(22-17)15(10)18(11,17)7-8-19(12)2/h3,5,11-12,20H,4,6-9H2,1-2H3/t11-,12?,17?,18?/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21NO3/c1-17-14(21)6-4-11-12-9-10-3-5-13(20)16(22-17)15(10)18(11,17)7-8-19(12)2/h3,5,11-12,20H,4,6-9H2,1-2H3/t11-,12+,17-,18-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21NO3/c1-17-14(21)6-4-11-12-9-10-3-5-13(20)16(22-17)15(10)18(11,17)7-8-19(12)2/h3,5,11-12,20H,4,6-9H2,1-2H3/t11-,12+,17-,18+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21NO3/c1-19-8-7-18-11-4-5-13(20)17(18)22-16-14(21-2)6-3-10(15(16)18)9-12(11)19/h3-6,10-12,15,17H,7-9H2,1-2H3/t10?,11-,12+,15?,17-,18-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21NO3/c1-19-8-7-18-11-4-5-13(20)17(18)22-16-14(21-2)6-3-10(15(16)18)9-12(11)19/h3-6,11-13,17,20H,7-9H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C18H21NO3/c1-19-8-7-18-11-4-5-13(20)17(18)22-16-14(21-2)6-3-10(15(16)18)9-12(11)19/h3-6,11-13,17,20H,7-9H2,1-2H3/t11-,12-,13+,17-,18+/m0/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C18H21NO3/c1-19-8-7-18-11-4-5-13(20)17(18)22-16-14(21-2)6-3-10(15(16)18)9-12(11)19/h3-6,11-13,17,20H,7-9H2,1-2H3/t11-,12?,13-,17-,18?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21NO3/c1-19-8-7-18-11-4-5-13(20)17(18)22-16-14(21-2)6-3-10(15(16)18)9-12(11)19/h3-6,11-13,17,20H,7-9H2,1-2H3/t11-,12?,13+,17-,18?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21NO3/c1-19-8-7-18-11-4-5-13(20)17(18)22-16-14(21-2)6-3-10(15(16)18)9-12(11)19/h3-6,11-13,17,20H,7-9H2,1-2H3/t11-,12+,13-,17-,18-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21NO3/c1-19-8-7-18-11-4-5-13(20)17(18)22-16-14(21-2)6-3-10(15(16)18)9-12(11)19/h3-6,11-13,17,20H,7-9H2,1-2H3/t11-,12+,13+,17-,18-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21NO3/c1-19-8-7-18-11-4-5-13(20)17(18)22-16-14(21-2)6-3-10(15(16)18)9-12(11)19/h3-6,11-13,17,20H,7-9H2,1-2H3/t11-,12+,13+,17-,18-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21NO3/c1-19-8-7-18-11-4-5-13(20)17(18)22-16-14(21-2)6-3-10(15(16)18)9-12(11)19/h3-6,11-13,17,20H,7-9H2,1-2H3/t11-,12+,13+,17-,18+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21NO3/c1-19-8-7-18-11-4-5-13(20)17(18)22-16-14(21-2)6-3-10(15(16)18)9-12(11)19/h3-6,11-13,17,20H,7-9H2,1-2H3/t11-,12+,13+,17+,18-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21NO3/c1-19-8-7-18-11-4-5-13(20)17(18)22-16-14(21-2)6-3-10(15(16)18)9-12(11)19/h3,6,11-12,17H,4-5,7-9H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H21NO3/c1-19-8-7-18-11-4-5-13(20)17(18)22-16-14(21-2)6-3-10(15(16)18)9-12(11)19/h3,6,11-12,17H,4-5,7-9H2,1-2H3/t11-,12?,17?,18?/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H21NO3/c1-19-8-7-18-11-4-5-13(20)17(18)22-16-14(21-2)6-3-10(15(16)18)9-12(11)19/h3,6,11-12,17H,4-5,7-9H2,1-2H3/t11-,12+,17-,18-/m0/s1	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C18H21NO3/c1-19-8-7-18-11-4-5-13(20)17(18)22-16-14(21-2)6-3-10(15(16)18)9-12(11)19/h3,6,11-12,17H,4-5,7-9H2,1-2H3/t11-,12+,17-,18-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21NO3/c1-19-8-7-18-11-4-5-13(20)17(18)22-16-14(21-2)6-3-10(15(16)18)9-12(11)19/h3,6,11-12,17H,4-5,7-9H2,1-2H3/t11-,12+,17-,18+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H21NO3/c1-19-8-7-18-11-4-5-13(20)17(18)22-16-14(21-2)6-3-10(15(16)18)9-12(11)19/h3,6,11-12,17H,4-5,7-9H2,1-2H3/t11?,12-,17+,18+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21NO3S/c1-13-8-10-15(11-9-13)23(20,21)17-16(18(17,19)12-22-2)14-6-4-3-5-7-14/h3-11,16-17H,12,19H2,1-2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H21NO3S/c1-13-8-10-15(11-9-13)23(20,21)17-16(18(17,19)12-22-2)14-6-4-3-5-7-14/h3-11,16-17H,12,19H2,1-2H3/t16-,17+,18-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21NO4.ClH/c1-19-8-7-17-14-10-3-4-12(22-2)15(14)23-16(17)11(20)5-6-18(17,21)13(19)9-10;/h3-4,13,16,21H,5-9H2,1-2H3;1H/t13-,16+,17+,18-;/m1./s1	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C18H21NO4/c1-19-8-7-17-14-10-3-4-12(22-2)15(14)23-16(17)11(20)5-6-18(17,21)13(19)9-10/h3-4,13,16,21H,5-9H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21NO4/c1-19-8-7-17-14-10-3-4-12(22-2)15(14)23-16(17)11(20)5-6-18(17,21)13(19)9-10/h3-4,13,16,21H,5-9H2,1-2H3/t13-,16+,17-,18-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C18H21NO4/c1-19-8-7-17-14-10-3-4-12(22-2)15(14)23-16(17)11(20)5-6-18(17,21)13(19)9-10/h3-4,13,16,21H,5-9H2,1-2H3/t13-,16+,17+,18-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21NO4/c1-19-8-7-17-14-10-3-4-12(22-2)15(14)23-16(17)11(20)5-6-18(17,21)13(19)9-10/h3-4,13,16,21H,5-9H2,1-2H3/t13-,16+,17+,18-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21NO4/c1-19-8-7-17-14-10-3-4-12(22-2)15(14)23-16(17)11(20)5-6-18(17,21)13(19)9-10/h3-4,13,16,21H,5-9H2,1-2H3/t13-,16+,17+,18+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21NO4/c1-19-8-7-17-14-10-3-4-12(22-2)15(14)23-16(17)11(20)5-6-18(17,21)13(19)9-10/h3-4,13,16,21H,5-9H2,1-2H3/t13?,16-,17?,18?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H21NO5/c1-11(6-12-2-5-17-18(7-12)24-10-23-17)19-9-16(22)13-3-4-14(20)15(21)8-13/h2-5,7-8,11,16,19-22H,6,9-10H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H22ClNO/c1-16(15-21-18-10-6-3-7-11-18)20(13-12-19)14-17-8-4-2-5-9-17/h2-11,16H,12-15H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H22ClNO/c1-16(15-21-18-10-6-3-7-11-18)20(13-12-19)14-17-8-4-2-5-9-17/h2-11,16H,12-15H2,1H3/t16-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H22ClNO/c1-18(21-14-13-20(2)3,15-7-5-4-6-8-15)16-9-11-17(19)12-10-16/h4-12H,13-14H2,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H22ClNO/c1-18(21-14-13-20(2)3,15-7-5-4-6-8-15)16-9-11-17(19)12-10-16/h4-12H,13-14H2,1-3H3/t18-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H22ClNO/c1-18(21-14-13-20(2)3,15-7-5-4-6-8-15)16-9-11-17(19)12-10-16/h4-12H,13-14H2,1-3H3/t18-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H22I3N3O8/c1-5(26)22-12-9(19)8(10(20)14(11(12)21)24(3)6(2)27)17(30)23-13-16(29)15(28)7(4-25)32-18(13)31/h7,13,15-16,18,25,28-29,31H,4H2,1-3H3,(H,22,26)(H,23,30)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H22N2/c1-15-7-8-17(14-16-5-3-2-4-6-16)18(13-15)20-11-9-19-10-12-20/h2-8,13,19H,9-12,14H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H22N2/c1-19-11-13-20(14-12-19)18-10-6-5-9-17(18)15-16-7-3-2-4-8-16/h2-10H,11-15H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H22N2/c1-19-11-6-12-20-14-17-9-3-2-7-15(17)13-16-8-4-5-10-18(16)20/h2-5,7-10,19H,6,11-14H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H22N2/c1-19-12-14-20(15-13-19)18(16-8-4-2-5-9-16)17-10-6-3-7-11-17/h2-11,18H,12-15H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H22N2/c1-19-13-6-14-20-17-9-4-2-7-15(17)11-12-16-8-3-5-10-18(16)20/h2-5,7-10,19H,6,11-14H2,1H3	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C18H22N2/c1-19-13-6-14-20-17-9-4-2-7-15(17)11-12-16-8-3-5-10-18(16)20/h2-5,7-10,19H,6,11-14H2,1H3/p+1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H22N2/c1-19(2)12-7-13-20-17-10-5-3-8-15(17)14-16-9-4-6-11-18(16)20/h3-6,8-11H,7,12-14H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H22N2/c1-4-15-8-6-10-17(12-15)19-14(3)20-18-11-7-9-16(5-2)13-18/h6-13H,4-5H2,1-3H3,(H,19,20)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H22N2O/c1-19-11-4-12-20-17-6-3-2-5-14(17)7-8-15-13-16(21)9-10-18(15)20/h2-3,5-6,9-10,13,19,21H,4,7-8,11-12H2,1H3	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C18H22N2O/c1-19-11-4-12-20-17-6-3-2-5-14(17)7-8-15-13-16(21)9-10-18(15)20/h2-3,5-6,9-10,13,19,21H,4,7-8,11-12H2,1H3/p+1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C18H22N2O2/c1-19-11-16(15-5-3-4-6-17(15)19)18(21)22-14-9-12-7-8-13(10-14)20(12)2/h3-6,11-14H,7-10H2,1-2H3/t12-,13-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H22N2O2S/c1-13-7-9-15(10-8-13)23(21,22)17-16(18(17,11-19)12-20)14-5-3-2-4-6-14/h2-10,16-17H,11-12,19-20H2,1H3/t16-,17-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C18H22N2O2S/c1-13-7-9-15(10-8-13)23(21,22)17-16(18(17,11-19)12-20)14-5-3-2-4-6-14/h2-10,16-17H,11-12,19-20H2,1H3/t16-,17+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H22N2O2S/c1-14(12-19(2)3)13-20-15-8-4-6-10-17(15)23(21,22)18-11-7-5-9-16(18)20/h4-11,14H,12-13H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H22N2O2S/c1-14(12-19(2)3)13-20-15-8-4-6-10-17(15)23(21,22)18-11-7-5-9-16(18)20/h4-11,14H,12-13H2,1-3H3/t14-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H22N2O2S/c1-14(12-19(2)3)13-20-15-8-4-6-10-17(15)23(21,22)18-11-7-5-9-16(18)20/h4-11,14H,12-13H2,1-3H3/t14-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H22N2O3S/c1-13-5-7-14(8-6-13)12-24(22,23)20-18(15-10-16(21)11-15)17-4-2-3-9-19-17/h2-9,15-16,18,20-21H,10-12H2,1H3/t15?,16?,18-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H22N2O5S/c1-17(2,25-10-8-6-5-7-9-10)16(24)19-11-13(21)20-12(15(22)23)18(3,4)26-14(11)20/h5-9,11-12,14H,1-4H3,(H,19,24)(H,22,23)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H22N2O5S/c1-17(2,25-10-8-6-5-7-9-10)16(24)19-11-13(21)20-12(15(22)23)18(3,4)26-14(11)20/h5-9,11-12,14H,1-4H3,(H,19,24)(H,22,23)/t11-,12+,14-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H22N2O5S/c1-17(2,25-10-8-6-5-7-9-10)16(24)19-11-13(21)20-12(15(22)23)18(3,4)26-14(11)20/h5-9,11-12,14H,1-4H3,(H,19,24)(H,22,23)/t11?,12-,14-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H22N2O5S/c1-4-11(25-10-8-6-5-7-9-10)14(21)19-12-15(22)20-13(17(23)24)18(2,3)26-16(12)20/h5-9,11-13,16H,4H2,1-3H3,(H,19,21)(H,23,24)	0	(Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H22N2O5S/c1-4-11(25-10-8-6-5-7-9-10)14(21)19-12-15(22)20-13(17(23)24)18(2,3)26-16(12)20/h5-9,11-13,16H,4H2,1-3H3,(H,19,21)(H,23,24)/t11-,12?,13-,16-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H22N2O5S/c1-4-11(25-10-8-6-5-7-9-10)14(21)19-12-15(22)20-13(17(23)24)18(2,3)26-16(12)20/h5-9,11-13,16H,4H2,1-3H3,(H,19,21)(H,23,24)/t11-,12+,13-,16+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H22N2O5S/c1-4-11(25-10-8-6-5-7-9-10)14(21)19-12-15(22)20-13(17(23)24)18(2,3)26-16(12)20/h5-9,11-13,16H,4H2,1-3H3,(H,19,21)(H,23,24)/t11-,12+,13+,16+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H22N2O5S/c1-4-11(25-10-8-6-5-7-9-10)14(21)19-12-15(22)20-13(17(23)24)18(2,3)26-16(12)20/h5-9,11-13,16H,4H2,1-3H3,(H,19,21)(H,23,24)/t11?,12-,13+,16-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H22N2OS/c1-19(2)11-6-12-20-15-7-4-5-8-17(15)22-18-10-9-14(21-3)13-16(18)20/h4-5,7-10,13H,6,11-12H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H22N2S/c1-14(12-19(2)3)13-20-15-8-4-6-10-17(15)21-18-11-7-5-9-16(18)20/h4-11,14H,12-13H2,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H22N2S/c1-14(12-19(2)3)13-20-15-8-4-6-10-17(15)21-18-11-7-5-9-16(18)20/h4-11,14H,12-13H2,1-3H3/t14-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H22N2S/c1-14(12-19(2)3)13-20-15-8-4-6-10-17(15)21-18-11-7-5-9-16(18)20/h4-11,14H,12-13H2,1-3H3/t14-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H22N2S/c1-3-19(4-2)13-14-20-15-9-5-7-11-17(15)21-18-12-8-6-10-16(18)20/h5-12H,3-4,13-14H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H22N2S2/c1-19(2)11-6-12-20-15-7-4-5-8-17(15)22-18-10-9-14(21-3)13-16(18)20/h4-5,7-10,13H,6,11-12H2,1-3H3	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C18H22N4O2/c1-14(12-15-8-4-2-5-9-15)22-13-17(24-21-22)20-18(23)19-16-10-6-3-7-11-16/h2-11,14,17,21H,12-	1	(Meng et al., 2021)

13H2,1H3,(H2,19,20,23)/q+1	
InChI=1S/C18H22N4O2/c23-18(24-13-16-4-2-1-3-5-16)22-10-7-15(8-11-22)12-20-17-6-9-19-14-21-17/h1-6,9,14-15H,7-8,10-13H2,(H,19,20,21)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H22N4O2/c23-18(24-14-16-5-2-1-3-6-16)22-11-7-15(8-12-22)13-21-17-19-9-4-10-20-17/h1-6,9-10,15H,7-8,11-14H2,(H,19,20,21)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H22N4OS/c1-21(2)13-9-10-19-17-14(13)15-16(24-17)18(23)22(11-20-15)12-7-5-3-4-6-8-12/h9-12H,3-8H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H22O2/c1-18-9-8-14-13-5-3-12(19)10-11(13)2-4-15(14)16(18)6-7-17(18)20/h3,5,10,14-16,19H,2,4,6-9H2,1H3	0 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H22O2/c1-18-9-8-14-13-5-3-12(19)10-11(13)2-4-15(14)16(18)6-7-17(18)20/h3,5,10,14-16,19H,2,4,6-9H2,1H3/t14-,15-,16+,18+/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H22O2/c1-18-9-8-14-13-5-3-12(19)10-11(13)2-4-15(14)16(18)6-7-17(18)20/h3,5,10,14-16,19H,2,4,6-9H2,1H3/t14-,15+,16+,18+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H22O5S/c1-18-9-8-14-13-5-3-12(23-24(20,21)22)10-11(13)2-4-15(14)16(18)6-7-17(18)19/h3,5,10,14-16H,2,4,6-9H2,1H3,(H,20,21,22)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H23ClN2O5S/c1-11-4-3-5-13(11)20-17(23)21-14-7-6-12(19)16(15(14)22)27(24,25)18(2)8-9-26-10-18/h4,6-7,13,22H,3,5,8-10H2,1-2H3,(H2,20,21,23)	0 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H23FINO2/c1-23-18(22)17-15(12-3-5-13(20)6-4-12)11-14-7-8-16(17)21(14)10-2-9-19/h3-6,14-17H,2,7-11H2,1H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H23FN2O2/c19-16-8-7-14(18(20)22)15-9-13(10-23-17(15)16)21(11-3-1-4-11)12-5-2-6-12/h7-8,11-13H,1-6,9-10H2,(H2,20,22)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23FN2O2/c19-16-8-7-14(18(20)22)15-9-13(10-23-17(15)16)21(11-3-1-4-11)12-5-2-6-12/h7-8,11-13H,1-6,9-10H2,(H2,20,22)/t13-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23FN2O2/c19-16-8-7-14(18(20)22)15-9-13(10-23-17(15)16)21(11-3-1-4-11)12-5-2-6-12/h7-8,11-13H,1-6,9-10H2,(H2,20,22)/t13-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H23FO2/c1-18-7-6-13-12-5-3-11(20)8-10(12)2-4-14(13)15(18)9-16(19)17(18)21/h3,5,8,13-17,20-21H,2,4,6-7,9H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23FO2/c1-18-7-6-13-12-5-3-11(20)8-10(12)2-4-14(13)15(18)9-16(19)17(18)21/h3,5,8,13-17,20-21H,2,4,6-7,9H2,1H3/t13-,14-,15+,16+,17+,18+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23FO2/c1-18-7-6-13-12-5-3-11(20)8-10(12)2-4-14(13)15(18)9-16(19)17(18)21/h3,5,8,13-17,20-21H,2,4,6-7,9H2,1H3/t13-,14+,15+,16+,17+,18+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23N3O/c1-4-21(5-2)14-10-11-17(13(3)12-14)20-18(22)15-8-6-7-9-16(15)19/h6-12H,4-5,19H2,1-3H3,(H,20,22)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23N3O4/c1-3-11(2)14(10-22)20-18(23)13-9-19-21-17(13)12-4-5-15-16(8-12)25-7-6-24-15/h4-5,8-9,11,14,22H,3,6-7,10H2,1-2H3,(H,19,21)(H,20,23)/t11-,14-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23N3O4S/c1-11-6-5-7-13(11)20-17(23)21-14-9-8-12(10-19)16(15(14)22)26(24,25)18(2,3)4/h6,8-9,13,22H,5,7H2,1-4H3,(H2,20,21,23)	0 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H23N5O2/c1-13(11-14-7-5-4-6-8-14)19-9-10-23-12-20-16-15(23)17(24)22(3)18(25)21(16)2/h4-8,12-13,19H,9-11H2,1-3H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H23N5O2/c1-13(11-14-7-5-4-6-8-14)19-9-10-23-12-20-16-15(23)17(24)22(3)18(25)21(16)2/h4-8,12-13,19H,9-11H2,1-3H3/t13-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H23N5O3/c1-12(15(24)13-7-5-4-6-8-13)19-9-10-23-11-20-16-14(23)17(25)22(3)18(26)21(16)2/h4-8,11-12,15,19,24H,9-10H2,1-	1 (Meng et al., 2021)

3H3

InChI=1S/C18H23N5O3/c1-12(15(24)13-7-5-4-6-8-13)19-9-10-23-11-20-16-14(23)17(25)22(3)18(26)21(16)2/h4-8,11-12,15,19,24H,9-10H2,1-3H3/t12-,15+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23N5O3/c1-12(15(24)13-7-5-4-6-8-13)19-9-10-23-11-20-16-14(23)17(25)22(3)18(26)21(16)2/h4-8,11-12,15,19,24H,9-10H2,1-3H3/t12-,15+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23N5O5/c1-21-16-15(17(27)22(2)18(21)28)23(10-20-16)5-3-4-19-9-14(26)11-6-12(24)8-13(25)7-11/h6-8,10,14,19,24-26H,3-5,9H2,1-2H3/t14-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H23N9O4S3/c1-25(2)3-4-26-18(22-23-24-26)34-7-9-6-32-15-12(14(29)27(15)13(9)16(30)31)21-11(28)5-10-8-33-17(19)20-10/h8,12,15H,3-7H2,1-2H3,(H2,19,20)(H,21,28)(H,30,31)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23N9O4S3/c1-25(2)3-4-26-18(22-23-24-26)34-7-9-6-32-15-12(14(29)27(15)13(9)16(30)31)21-11(28)5-10-8-33-17(19)20-10/h8,12,15H,3-7H2,1-2H3,(H2,19,20)(H,21,28)(H,30,31)/t12-,15-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23N9O4S3/c1-25(2)3-4-26-18(22-23-24-26)34-7-9-6-32-15-12(14(29)27(15)13(9)16(30)31)21-11(28)5-10-8-33-17(19)20-10/h8,12,15H,3-7H2,1-2H3,(H2,19,20)(H,21,28)(H,30,31)/t12-,15+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H23N9O4S3/c1-25(2)3-4-26-18(22-23-24-26)34-7-9-6-32-15-12(14(29)27(15)13(9)16(30)31)21-11(28)5-10-8-33-17(19)20-10/h8,12,15H,3-7H2,1-2H3,(H2,19,20)(H,21,28)(H,30,31)/t12?,15-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H23NO/c1-15-9-7-8-12-17(15)18(20-14-13-19(2)3)16-10-5-4-6-11-16/h4-12,18H,13-14H2,1-3H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H23NO/c1-15-9-7-8-12-17(15)18(20-14-13-19(2)3)16-10-5-4-6-11-16/h4-12,18H,13-14H2,1-3H3/t18-/m0/s1	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H23NO/c1-19-13-7-8-14-20-18-12-6-5-11-17(18)15-16-9-3-2-4-10-16/h2-6,9-12,19H,7-8,13-15H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23NO2/c1-11-16-17(21)14-6-5-13(20)9-15(14)18(11,2)7-8-19(16)10-12-3-4-12/h5-6,9,11-12,16,20H,3-4,7-8,10H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H23NO2/c1-11-16-17(21)14-6-5-13(20)9-15(14)18(11,2)7-8-19(16)10-12-3-4-12/h5-6,9,11-12,16,20H,3-4,7-8,10H2,1-2H3/t11-,16-,18-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H23NO2/c1-11-16-17(21)14-6-5-13(20)9-15(14)18(11,2)7-8-19(16)10-12-3-4-12/h5-6,9,11-12,16,20H,3-4,7-8,10H2,1-2H3/t11-,16-,18+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23NO2/c1-11-16-17(21)14-6-5-13(20)9-15(14)18(11,2)7-8-19(16)10-12-3-4-12/h5-6,9,11-12,16,20H,3-4,7-8,10H2,1-2H3/t11-,16+,18?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23NO2/c1-11-16-17(21)14-6-5-13(20)9-15(14)18(11,2)7-8-19(16)10-12-3-4-12/h5-6,9,11-12,16,20H,3-4,7-8,10H2,1-2H3/t11-,16+,18+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23NO2/c1-11-16-17(21)14-6-5-13(20)9-15(14)18(11,2)7-8-19(16)10-12-3-4-12/h5-6,9,11-12,16,20H,3-4,7-8,10H2,1-2H3/t11?,16-,18+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H23NO3/c1-13(12-22-17-6-4-3-5-7-17)19-14(2)18(21)15-8-10-16(20)11-9-15/h3-11,13-14,18-21H,12H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23NO3/c1-17(21)6-5-11-12-9-10-3-4-13(20)15-14(10)18(11,16(17)22-15)7-8-19(12)2/h3-4,11-12,16,20-21H,5-9H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23NO3/c1-17(21)6-5-11-12-9-10-3-4-13(20)15-14(10)18(11,16(17)22-15)7-8-19(12)2/h3-4,11-12,16,20-21H,5-9H2,1-2H3/t11-,12-,16+,17+,18+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23NO3/c1-17(21)6-5-11-12-9-10-3-4-13(20)15-14(10)18(11,16(17)22-15)7-8-19(12)2/h3-4,11-12,16,20-21H,5-9H2,1-2H3/t11-	1	(Meng et al., 2021)

,12?,16?,17?,18?/m1/s1	
InChI=1S/C18H23NO3/c1-17(21)6-5-11-12-9-10-3-4-13(20)15-14(10)18(11,16(17)22-15)7-8-19(12)2/h3-4,11-12,16,20-21H,5-9H2,1-2H3/t11-,12+,16-,17-,18-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23NO3/c1-17(21)6-5-11-12-9-10-3-4-13(20)15-14(10)18(11,16(17)22-15)7-8-19(12)2/h3-4,11-12,16,20-21H,5-9H2,1-2H3/t11-,12+,16-,17-,18+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23NO3/c1-19-8-7-18-11-4-5-13(20)17(18)22-16-14(21-2)6-3-10(15(16)18)9-12(11)19/h3,6,11-13,17,20H,4-5,7-9H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23NO3/c1-19-8-7-18-11-4-5-13(20)17(18)22-16-14(21-2)6-3-10(15(16)18)9-12(11)19/h3,6,11-13,17,20H,4-5,7-9H2,1-2H3/t11-,12?,13+,17-,18?/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23NO3/c1-19-8-7-18-11-4-5-13(20)17(18)22-16-14(21-2)6-3-10(15(16)18)9-12(11)19/h3,6,11-13,17,20H,4-5,7-9H2,1-2H3/t11-,12+,13-,17-,18-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23NO3/c1-19-8-7-18-11-4-5-13(20)17(18)22-16-14(21-2)6-3-10(15(16)18)9-12(11)19/h3,6,11-13,17,20H,4-5,7-9H2,1-2H3/t11-,12+,13+,17-,18-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23NO3/c1-19-8-7-18-11-4-5-13(20)17(18)22-16-14(21-2)6-3-10(15(16)18)9-12(11)19/h3,6,11-13,17,20H,4-5,7-9H2,1-2H3/t11-,12+,13+,17-,18+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23NO3/c1-19-8-7-18-11-4-5-13(20)17(18)22-16-14(21-2)6-3-10(15(16)18)9-12(11)19/h3,6,11-13,17,20H,4-5,7-9H2,1-2H3/t11-,12+,13+,17+,18-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23NO3/c1-19-8-7-18-11-4-5-13(20)17(18)22-16-14(21-2)6-3-10(15(16)18)9-12(11)19/h3,6,11-13,17,20H,4-5,7-9H2,1-2H3/t11-,12+,13+,17+,18-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23NO3/c1-19-8-7-18-11-4-5-13(20)17(18)22-16-14(21-2)6-3-10(15(16)18)9-12(11)19/h3,6,11-13,17,20H,4-5,7-9H2,1-2H3/t11?,12?,13-,17?,18-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H23NO3/c1-19-8-7-18-11-4-6-14(21-2)17(18)22-16-13(20)5-3-10(15(16)18)9-12(11)19/h3,5,11-12,14,17,20H,4,6-9H2,1-2H3	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H23NO3/c1-19-8-7-18-11-4-6-14(21-2)17(18)22-16-13(20)5-3-10(15(16)18)9-12(11)19/h3,5,11-12,14,17,20H,4,6-9H2,1-2H3/t11-,12?,14+,17-,18?/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23NO3/c1-19-8-7-18-11-4-6-14(21-2)17(18)22-16-13(20)5-3-10(15(16)18)9-12(11)19/h3,5,11-12,14,17,20H,4,6-9H2,1-2H3/t11-,12+,14-,17-,18-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23NO3/c1-2-19-8-7-18-11-4-6-14(21)17(18)22-16-13(20)5-3-10(15(16)18)9-12(11)19/h3-6,10-12,14-15,17,20-21H,2,7-9H2,1H3/t10-,11-,12+,14+,15+,17+,18-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H23NO4/c1-19-8-7-17-14-10-3-4-12(22-2)15(14)23-16(17)11(20)5-6-18(17,21)13(19)9-10/h3-4,11,13,16,20-21H,5-9H2,1-2H3/t11-,13?,16+,17+,18-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H23NO4/c1-22-17-8-3-13(11-18(17)23-2)9-10-19-12-16(21)14-4-6-15(20)7-5-14/h3-8,11,16,19-21H,9-10,12H2,1-2H3	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H23NO4/c1-22-17-8-3-13(11-18(17)23-2)9-10-19-12-16(21)14-4-6-15(20)7-5-14/h3-8,11,16,19-21H,9-10,12H2,1-2H3/t16-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H24Cl2N2O/c19-16-7-6-14(11-17(16)20)12-18(23)22-10-2-1-5-15(22)13-21-8-3-4-9-21/h6-7,11,15H,1-5,8-10,12-13H2	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H24Cl2N2O/c19-16-7-6-14(11-17(16)20)12-18(23)22-10-2-1-5-15(22)13-21-8-3-4-9-21/h6-7,11,15H,1-5,8-10,12-13H2/t15-/m0/s1	1 (Li et al., 2005)
InChI=1S/C18H24ClF3N4O/c19-15-12-14(18(20,21)22)13-16(23-15)25-10-8-24(9-11-25)5-1-2-6-26-7-3-4-17(26)27/h12-13H,1-11H2	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H24ClN3O2/c19-14-7-13(17(8-15(14)20)24-10-11-1-2-11)18(23)21-16-9-22-5-3-12(16)4-6-22/h7-8,11-12,16H,1-6,9-10,20H2,(H,21,23)	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C18H24ClN3O2/c19-14-7-13(17(8-15(14)20)24-10-11-1-2-11)18(23)21-16-9-22-5-3-12(16)4-6-22/h7-8,11-12,16H,1-6,9-10,20H2,(H,21,23)/t16-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H24ClN3O2/c19-14-7-13(17(8-15(14)20)24-10-11-1-2-11)18(23)21-16-9-22-5-3-12(16)4-6-22/h7-8,11-12,16H,1-6,9-10,20H2,(H,21,23)/t16-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H24FNO/c19-17-9-7-16(8-10-17)18(21)2-1-11-20-12-14-3-4-15(13-20)6-5-14/h7-10,14-15H,1-6,11-13H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H24I3N3O9/c19-13-11(17(32)22-3-8(29)5-26)14(20)16(24(1-2-25)10(31)7-28)15(21)12(13)18(33)23-4-9(30)6-27/h8-9,25-30H,1-7H2,(H,22,32)(H,23,33)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H24N2/c1-4-15-8-6-10-17(12-15)19-14(3)20-18-11-7-9-16(5-2)13-18/h6-14,19-20H,4-5H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H24N2O5/c1-11(2)13-7-6-12(3)9-15(13)24-16(21)10-20-18(22)25-17(19-20)14-5-4-8-23-14/h4-5,8,11-13,15H,6-7,9-10H2,1-3H3/t12-,13+,15+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H24N2O5/c1-12(16(21)20-11-5-8-15(20)18(24)25)19-14(17(22)23)10-9-13-6-3-2-4-7-13/h2-4,6-7,12,14-15,19H,5,8-11H2,1H3,(H,22,23)(H,24,25)/t12-,14-,15-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H24N2O5S/c1-13-7-8-14(18(11-13)26(19,22)23)15(21)12-20-9-10-25-17-6-4-3-5-16(17)24-2/h3-8,11,15,20-21H,9-10,12H2,1-2H3,(H2,19,22,23)/t15-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H24N4O/c1-21-13-6-5-7-14(21)11-12(10-13)19-18(23)17-15-8-3-4-9-16(15)22(2)20-17/h3-4,8-9,12-14H,5-7,10-11H2,1-2H3,(H,19,23)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H24N4O/c1-21-13-6-5-7-14(21)11-12(10-13)19-18(23)17-15-8-3-4-9-16(15)22(2)20-17/h3-4,8-9,12-14H,5-7,10-11H2,1-2H3,(H,19,23)/t12?,13-,14+	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C18H24N4O/c1-21-13-6-5-7-14(21)11-12(10-13)19-18(23)17-15-8-3-4-9-16(15)22(2)20-17/h3-4,8-9,12-14H,5-7,10-11H2,1-2H3,(H,19,23)/t13-,14-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H24N4O2/c1-2-16-20-8-10-22(16)9-6-17(24)21-18(13-11-14(23)12-13)15-5-3-4-7-19-15/h3-5,7-8,10,13-14,18,23H,2,6,9,11-12H2,1H3,(H,21,24)/t13?,14?,18-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H24N4OS/c1-12-13(2)24-17-15(12)16(19-11-20-17)21-9-5-14(6-10-21)18(23)22-7-3-4-8-22/h11,14H,3-10H2,1-2H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H24O2/c1-18-9-8-14-13-5-3-12(19)10-11(13)2-4-15(14)16(18)6-7-17(18)20/h3,5,10,14-17,19-20H,2,4,6-9H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H24O2/c1-18-9-8-14-13-5-3-12(19)10-11(13)2-4-15(14)16(18)6-7-17(18)20/h3,5,10,14-17,19-20H,2,4,6-9H2,1H3/t14-,15-,16+,17+,18+/m1/s1	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C18H24O2/c1-18-9-8-14-13-5-3-12(19)10-11(13)2-4-15(14)16(18)6-7-17(18)20/h3,5,10,14-17,19-20H,2,4,6-9H2,1H3/t14-,15+,16-,17+,18-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H24O2/c1-18-9-8-14-13-5-3-12(19)10-11(13)2-4-15(14)16(18)6-7-17(18)20/h3,5,10,14-17,19-20H,2,4,6-9H2,1H3/t14-,15+,16+,17-,18+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H24O2/c1-18-9-8-14-13-5-3-12(19)10-11(13)2-4-15(14)16(18)6-7-17(18)20/h3,5,10,14-17,19-20H,2,4,6-9H2,1H3/t14-,15+,16+,17?,18?/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H24O3/c1-18-7-6-13-12-5-3-11(19)8-10(12)2-4-14(13)15(18)9-16(20)17(18)21/h3,5,8,13-17,19-21H,2,4,6-7,9H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H25Cl2N3O/c1-21-8-9-23(15(12-21)13-22-6-2-3-7-22)18(24)11-14-4-5-16(19)17(20)10-14/h4-5,10,15H,2-3,6-9,11-13H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C18H25Cl2N3O/c1-21-8-9-23(15(12-21)13-22-6-2-3-7-22)18(24)11-14-4-5-16(19)17(20)10-14/h4-5,10,15H,2-3,6-9,11-13H2,1H3/t15-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H25Cl2N3O/c1-21-8-9-23(15(12-21)13-22-6-2-3-7-22)18(24)11-14-4-5-16(19)17(20)10-14/h4-5,10,15H,2-3,6-9,11-13H2,1H3/t15-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H25F3N4O/c19-18(20,21)15-5-6-22-16(14-15)24-12-10-23(11-13-24)7-1-2-8-25-9-3-4-17(25)26/h5-6,14H,1-4,7-13H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H25N/c1-13-6-7-14-12-17-15-5-3-4-8-18(15,16(14)11-13)9-10-19(17)2/h6-7,11,15,17H,3-5,8-10,12H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H25N/c1-13-6-7-14-12-17-15-5-3-4-8-18(15,16(14)11-13)9-10-19(17)2/h6-7,11,15,17H,3-5,8-10,12H2,1-2H3/t15-,17-,18-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H25N/c1-13-6-7-14-12-17-15-5-3-4-8-18(15,16(14)11-13)9-10-19(17)2/h6-7,11,15,17H,3-5,8-10,12H2,1-2H3/t15-,17?,18?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H25N/c1-13-6-7-14-12-17-15-5-3-4-8-18(15,16(14)11-13)9-10-19(17)2/h6-7,11,15,17H,3-5,8-10,12H2,1-2H3/t15-,17+,18-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H25N/c1-13-6-7-14-12-17-15-5-3-4-8-18(15,16(14)11-13)9-10-19(17)2/h6-7,11,15,17H,3-5,8-10,12H2,1-2H3/t15-,17+,18+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H25N3O2/c19-8-13-2-12-3-14(12)21(13)16(22)15(20)17-4-10-1-11(5-17)7-18(23,6-10)9-17/h10-15,23H,1-7,9,20H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H25N3O3/c22-18-19-8-12-21(18)14-5-9-20(10-6-14)11-7-15-13-23-16-3-1-2-4-17(16)24-15/h1-4,14-15H,5-13H2,(H,19,22)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H25N3O3/c22-18-19-8-12-21(18)14-5-9-20(10-6-14)11-7-15-13-23-16-3-1-2-4-17(16)24-15/h1-4,14-15H,5-13H2,(H,19,22)/t15-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H25N3OS/c1-2-10-21(11-3-1)15-16-6-4-7-17(14-16)22-12-5-8-19-18-20-9-13-23-18/h4,6-7,9,13-14H,1-3,5,8,10-12,15H2,(H,19,20)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H25N5O8S/c1-9-13(21-15(26)14(22-28-5)10-8-32-17(19)20-10)16(27)23(9)30-7-11(24)29-6-12(25)31-18(2,3)4/h8-9,13H,6-7H2,1-5H3,(H2,19,20)(H,21,26)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H25N5O8S/c1-9-13(21-15(26)14(22-28-5)10-8-32-17(19)20-10)16(27)23(9)30-7-11(24)29-6-12(25)31-18(2,3)4/h8-9,13H,6-7H2,1-5H3,(H2,19,20)(H,21,26)/b22-14-	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H25N5O8S/c1-9-13(21-15(26)14(22-28-5)10-8-32-17(19)20-10)16(27)23(9)30-7-11(24)29-6-12(25)31-18(2,3)4/h8-9,13H,6-7H2,1-5H3,(H2,19,20)(H,21,26)/b22-14-/t9-,13-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H25N5O8S/c1-9-13(21-15(26)14(22-28-5)10-8-32-17(19)20-10)16(27)23(9)30-7-11(24)29-6-12(25)31-18(2,3)4/h8-9,13H,6-7H2,1-5H3,(H2,19,20)(H,21,26)/b22-14-/t9-,13-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H25N5O8S/c1-9-13(21-15(26)14(22-28-5)10-8-32-17(19)20-10)16(27)23(9)30-7-11(24)29-6-12(25)31-18(2,3)4/h8-9,13H,6-7H2,1-5H3,(H2,19,20)(H,21,26)/b22-14-/t9-,13+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H25N5O8S/c1-9-13(21-15(26)14(22-28-5)10-8-32-17(19)20-10)16(27)23(9)30-7-11(24)29-6-12(25)31-18(2,3)4/h8-9,13H,6-7H2,1-5H3,(H2,19,20)(H,21,26)/b22-14+	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H25N5O8S/c1-9-13(21-15(26)14(22-28-5)10-8-32-17(19)20-10)16(27)23(9)30-7-11(24)29-6-12(25)31-18(2,3)4/h8-9,13H,6-7H2,1-5H3,(H2,19,20)(H,21,26)/b22-14+/t9-,13-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H25N5O8S/c1-9-13(21-15(26)14(22-28-5)10-8-32-17(19)20-10)16(27)23(9)30-7-11(24)29-6-12(25)31-18(2,3)4/h8-9,13H,6-7H2,1-5H3,(H2,19,20)(H,21,26)/b22-14+/t9-,13-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H25N5O8S/c1-9-13(21-15(26)14(22-28-5)10-8-32-17(19)20-10)16(27)23(9)30-7-11(24)29-6-12(25)31-18(2,3)4/h8-9,13H,6-7H2,1-	0	(Meng et al., 2021)

5H3,(H2,19,20)(H,21,26)/b22-14+/t9-,13?/m0/s1	
InChI=1S/C18H25NO/c1-12-17-9-14-5-6-15(20)10-16(14)18(12,2)7-8-19(17)11-13-3-4-13/h5-6,10,12-13,17,20H,3-4,7-9,11H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H25NO/c1-12-17-9-14-5-6-15(20)10-16(14)18(12,2)7-8-19(17)11-13-3-4-13/h5-6,10,12-13,17,20H,3-4,7-9,11H2,1-2H3/t12-,17-,18-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H25NO/c1-12-17-9-14-5-6-15(20)10-16(14)18(12,2)7-8-19(17)11-13-3-4-13/h5-6,10,12-13,17,20H,3-4,7-9,11H2,1-2H3/t12-,17+,18-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H25NO/c1-12-17-9-14-5-6-15(20)10-16(14)18(12,2)7-8-19(17)11-13-3-4-13/h5-6,10,12-13,17,20H,3-4,7-9,11H2,1-2H3/t12-,17+,18-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H25NO/c1-12-17-9-14-5-6-15(20)10-16(14)18(12,2)7-8-19(17)11-13-3-4-13/h5-6,10,12-13,17,20H,3-4,7-9,11H2,1-2H3/t12-,17+,18?/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H25NO/c1-19-10-9-18-8-4-3-5-15(18)17(19)11-13-6-7-14(20-2)12-16(13)18/h6-7,12,15,17H,3-5,8-11H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H25NO/c1-19-10-9-18-8-4-3-5-15(18)17(19)11-13-6-7-14(20-2)12-16(13)18/h6-7,12,15,17H,3-5,8-11H2,1-2H3/t15-,17-,18-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H25NO/c1-19-10-9-18-8-4-3-5-15(18)17(19)11-13-6-7-14(20-2)12-16(13)18/h6-7,12,15,17H,3-5,8-11H2,1-2H3/t15-,17?,18?/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H25NO/c1-19-10-9-18-8-4-3-5-15(18)17(19)11-13-6-7-14(20-2)12-16(13)18/h6-7,12,15,17H,3-5,8-11H2,1-2H3/t15-,17+,18+/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H25NO/c1-19-10-9-18-8-4-3-5-15(18)17(19)11-13-6-7-14(20-2)12-16(13)18/h6-7,12,15,17H,3-5,8-11H2,1-2H3/t15-,17+,18+/m1/s1	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H25NO/c1-19-12-16-8-6-13(20-2)9-18(16)11-17(18)7-4-3-5-14(17)15(19)10-16/h6,8-9,14-15H,3-5,7,10-12H2,1-2H3/t14-,15-,16-,17+,18-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H25NO/c1-4-10-17(20)18(15-11-6-5-7-12-15)14-9-8-13-16(18)19(2)3/h5-8,11-13,16H,4,9-10,14H2,1-3H3/t16-,18-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H25NO3/c1-18(12-20,13-6-4-3-5-7-13)17(21)22-16-10-14-8-9-15(11-16)19(14)2/h3-7,14-16,20H,8-12H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H25NO3/c1-18(12-20,13-6-4-3-5-7-13)17(21)22-16-10-14-8-9-15(11-16)19(14)2/h3-7,14-16,20H,8-12H2,1-2H3/t14-,15-,18-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H25NO3/c1-18(12-20,13-6-4-3-5-7-13)17(21)22-16-10-14-8-9-15(11-16)19(14)2/h3-7,14-16,20H,8-12H2,1-2H3/t14-,15-,18?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H25NO3/c1-18(12-20,13-6-4-3-5-7-13)17(21)22-16-10-14-8-9-15(11-16)19(14)2/h3-7,14-16,20H,8-12H2,1-2H3/t14-,15+,16?,18-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H26Cl2N2O/c1-13(2)17(12-22-8-4-5-9-22)21(3)18(23)11-14-6-7-15(19)16(20)10-14/h6-7,10,13,17H,4-5,8-9,11-12H2,1-3H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H26Cl2N2O/c1-13(2)17(12-22-8-4-5-9-22)21(3)18(23)11-14-6-7-15(19)16(20)10-14/h6-7,10,13,17H,4-5,8-9,11-12H2,1-3H3/t17-/m0/s1	1 (Li et al., 2005)
InChI=1S/C18H26Cl2N2O/c1-13(2)17(12-22-8-4-5-9-22)21(3)18(23)11-14-6-7-15(19)16(20)10-14/h6-7,10,13,17H,4-5,8-9,11-12H2,1-3H3/t17-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H26ClN3/c1-4-22(5-2)12-6-7-14(3)21-17-10-11-20-18-13-15(19)8-9-16(17)18/h8-11,13-14H,4-7,12H2,1-3H3,(H,20,21)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H26ClN3/c1-4-22(5-2)12-6-7-14(3)21-17-10-11-20-18-13-15(19)8-9-16(17)18/h8-11,13-14H,4-7,12H2,1-3H3,(H,20,21)/t14-/m0/s1	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C18H26ClN3/c1-4-22(5-2)12-6-7-14(3)21-17-10-11-20-18-13-15(19)8-9-16(17)18/h8-11,13-14H,4-7,12H2,1-3H3,(H,20,21)/t14-/m1/s1	1 (Li et al., 2005)

InChI=1S/C18H26ClN3/c1-4-22(5-2)13-7-6-12-21(3)18-10-11-20-17-14-15(19)8-9-16(17)18/h8-11,14H,4-7,12-13H2,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H26ClN3O/c1-3-22(11-12-23)10-4-5-14(2)21-17-8-9-20-18-13-15(19)6-7-16(17)18/h6-9,13-14,23H,3-5,10-12H2,1-2H3,(H,20,21)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H26ClN3O3/c1-24-9-2-6-22-7-3-12(4-8-22)21-18(23)14-11-15(19)16(20)13-5-10-25-17(13)14/h11-12H,2-10,20H2,1H3,(H,21,23)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H26N2O4/c1-3-12-20(13-4-2)18(24)15(10-11-16(21)22)19-17(23)14-8-6-5-7-9-14/h5-9,15H,3-4,10-13H2,1-2H3,(H,19,23)(H,21,22)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H26N2O4S/c1-11-5-7-12(8-6-11)25(23,24)20-16(22)19-14-13-9-10-18(4,15(14)21)17(13,2)3/h5-8,13-15,21H,9-10H2,1-4H3,(H2,19,20,22)/t13-,14-,15+,18-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H26N2OS/c1-14(21)17-13-22-18-9-4-3-8-16(18)20(17)12-10-15-7-5-6-11-19(15)2/h3-4,8-9,15,17H,5-7,10-13H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H26N2S/c1-5-20-16-9-7-6-8-14(16)15-10-13-21-18(2,17(15)20)11-12-19(3)4/h6-9H,5,10-13H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H26N2S/c1-5-20-16-9-7-6-8-14(16)15-10-13-21-18(2,17(15)20)11-12-19(3)4/h6-9H,5,10-13H2,1-4H3/t18-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H26N4O2S/c1-20(2)25(23,24)19-13-9-15-14-6-5-7-16-18(14)12(10-21(16)3)8-17(15)22(4)11-13/h5-7,10,13,15,17,19H,8-9,11H2,1-4H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H26N4O2S/c1-20(2)25(23,24)19-13-9-15-14-6-5-7-16-18(14)12(10-21(16)3)8-17(15)22(4)11-13/h5-7,10,13,15,17,19H,8-9,11H2,1-4H3/t13-,15-,17-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H26N4O2S/c1-20(2)25(23,24)19-13-9-15-14-6-5-7-16-18(14)12(10-21(16)3)8-17(15)22(4)11-13/h5-7,10,13,15,17,19H,8-9,11H2,1-4H3/t13-,15-,17-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H26N4O2S/c1-20(2)25(23,24)19-13-9-15-14-6-5-7-16-18(14)12(10-21(16)3)8-17(15)22(4)11-13/h5-7,10,13,15,17,19H,8-9,11H2,1-4H3/t13-,15+,17-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H26N4O2S/c1-20(2)25(23,24)19-13-9-15-14-6-5-7-16-18(14)12(10-21(16)3)8-17(15)22(4)11-13/h5-7,10,13,15,17,19H,8-9,11H2,1-4H3/t13-,15+,17+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H26N4O6S/c1-5-26-17(24)28-8-7-15(29-18(25)27-6-2)12(3)22(11-23)10-14-9-20-13(4)21-16(14)19/h9,11H,5-8,10H2,1-4H3,(H2,19,20,21)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H26N4O6S/c1-5-26-17(24)28-8-7-15(29-18(25)27-6-2)12(3)22(11-23)10-14-9-20-13(4)21-16(14)19/h9,11H,5-8,10H2,1-4H3,(H2,19,20,21)/b15-12-	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H26N4O6S/c1-5-26-17(24)28-8-7-15(29-18(25)27-6-2)12(3)22(11-23)10-14-9-20-13(4)21-16(14)19/h9,11H,5-8,10H2,1-4H3,(H2,19,20,21)/b15-12+	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H26O2/c1-18-9-8-14-13-5-3-12(19)10-11(13)2-4-15(14)16(18)6-7-17(18)20/h10,13-17,20H,2-9H2,1H3/t13-,14-,15+,16+,17?,18?/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H26O2/c1-18-9-8-14-13-5-3-12(19)10-11(13)2-4-15(14)16(18)6-7-17(18)20/h10,13-17,20H,2-9H2,1H3/t13-,14+,15+,16-,17-,18-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H27Cl2NO2/c1-18(2,3)23-17(22)6-4-5-15-7-9-16(10-8-15)21(13-11-19)14-12-20/h7-10H,4-6,11-14H2,1-3H3	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C18H27IN2/c19-18-8-7-16(14-20-9-3-1-4-10-20)13-17(18)15-21-11-5-2-6-12-21/h7-8,13H,1-6,9-12,14-15H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H27NO2/c1-2-3-15-21-17-9-7-16(8-10-17)18(20)11-14-19-12-5-4-6-13-19/h7-10H,2-6,11-15H2,1H3	0	(Wu et al., 2018)

InChI=1S/C18H27NO3/c1-14(2)8-6-4-5-7-9-18(21)19-13-15-10-11-16(20)17(12-15)22-3/h6,8,10-12,14,20H,4-5,7,9,13H2,1-3H3,(H,19,21)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H27NO3/c1-14(2)8-6-4-5-7-9-18(21)19-13-15-10-11-16(20)17(12-15)22-3/h6,8,10-12,14,20H,4-5,7,9,13H2,1-3H3,(H,19,21)/b8-6+	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H27NO5/c1-5-10-23-18(21)12-14-8-9-15(16(11-14)22-4)24-13-17(20)19(6-2)7-3/h8-9,11H,5-7,10,12-13H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H28ClNO/c1-3-20(4-2)14-15-21-18(12-6-5-7-13-18)16-8-10-17(19)11-9-16/h8-11H,3-7,12-15H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H28N2O/c1-4-5-12-20-13-7-6-11-16(20)18(21)19-17-14(2)9-8-10-15(17)3/h8-10,16H,4-7,11-13H2,1-3H3,(H,19,21)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H28N2O3S.ClH/c1-15-7-11-19(12-8-15)13-9-16-4-3-10-20(16)24(22,23)18-6-2-5-17(21)14-18;/h2,5-6,14-16,21H,3-4,7-13H2,1H3;1H/t16-;/m1./s1	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C18H28N2O3S/c1-15-7-11-19(12-8-15)13-9-16-4-3-10-20(16)24(22,23)18-6-2-5-17(21)14-18/h2,5-6,14-16,21H,3-4,7-13H2,1H3/t16-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H28N2O4/c1-5-6-18(23)20-14-7-8-17(16(9-14)13(4)21)24-11-15(22)10-19-12(2)3/h7-9,12,15,19,22H,5-6,10-11H2,1-4H3,(H,20,23)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H28N2O4/c1-5-6-18(23)20-14-7-8-17(16(9-14)13(4)21)24-11-15(22)10-19-12(2)3/h7-9,12,15,19,22H,5-6,10-11H2,1-4H3,(H,20,23)/p+1/t15-/m1/s1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C18H28N2O4/c1-5-6-18(23)20-14-7-8-17(16(9-14)13(4)21)24-11-15(22)10-19-12(2)3/h7-9,12,15,19,22H,5-6,10-11H2,1-4H3,(H,20,23)/t15-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H28N2O4/c1-5-6-18(23)20-14-7-8-17(16(9-14)13(4)21)24-11-15(22)10-19-12(2)3/h7-9,12,15,19,22H,5-6,10-11H2,1-4H3,(H,20,23)/t15-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H29N3O5/c1-18(2,3)19-11-15(22)12-8-13(25-16(23)20(4)5)10-14(9-12)26-17(24)21(6)7/h8-10,15,19,22H,11H2,1-7H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H29N3O5S/c1-8-14-13(9(2)22)17(24)21(14)15(18(25)26)16(8)27-10-6-11(20-7-10)12(23)4-5-19-3/h8-14,19-20,22-23H,4-7H2,1-3H3,(H,25,26)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H29N3O5S/c1-8-14-13(9(2)22)17(24)21(14)15(18(25)26)16(8)27-10-6-11(20-7-10)12(23)4-5-19-3/h8-14,19-20,22-23H,4-7H2,1-3H3,(H,25,26)/t8-,9-,10-,11-,12-,13?,14+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H29N3O5S/c1-8-14-13(9(2)22)17(24)21(14)15(18(25)26)16(8)27-10-6-11(20-7-10)12(23)4-5-19-3/h8-14,19-20,22-23H,4-7H2,1-3H3,(H,25,26)/t8-,9-,10+,11+,12-,13-,14-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H29N3O5S/c1-8-14-13(9(2)22)17(24)21(14)15(18(25)26)16(8)27-10-6-11(20-7-10)12(23)4-5-19-3/h8-14,19-20,22-23H,4-7H2,1-3H3,(H,25,26)/t8-,9+,10-,11+,12-,13+,14+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H29N3O5S/c1-8-14-13(9(2)22)17(24)21(14)15(18(25)26)16(8)27-10-6-11(20-7-10)12(23)4-5-19-3/h8-14,19-20,22-23H,4-7H2,1-3H3,(H,25,26)/t8-,9+,10+,11+,12-,13-,14+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H29NO2/c1-18(2,3)19-12-15(20)13-21-17-11-7-6-10-16(17)14-8-4-5-9-14/h6-7,10-11,14-15,19-20H,4-5,8-9,12-13H2,1-3H3/t15-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H29NO3/c1-14(2)19-11-17(20)13-22-18-7-5-15(6-8-18)9-10-21-12-16-3-4-16/h5-8,14,16-17,19-20H,3-4,9-13H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H29NO3/c1-14(2)19-11-17(20)13-22-18-7-5-15(6-8-18)9-10-21-12-16-3-4-16/h5-8,14,16-17,19-20H,3-4,9-13H2,1-2H3/p+1/t17-/m1/s1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C18H29NO3/c1-14(2)19-11-17(20)13-22-18-7-5-15(6-8-18)9-10-21-12-16-3-4-16/h5-8,14,16-17,19-20H,3-4,9-13H2,1-2H3/t17-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C18H30N2O/c1-16(2)19-10-7-13-21-18-9-6-8-17(14-18)15-20-11-4-3-5-12-20/h6,8-9,14,16,19H,3-5,7,10-13,15H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H31NO4/c1-14(2)19-11-17(20)13-23-18-7-5-16(6-8-18)12-21-9-10-22-15(3)4/h5-8,14-15,17,19-20H,9-13H2,1-4H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H31NO4/c1-14(2)19-11-17(20)13-23-18-7-5-16(6-8-18)12-21-9-10-22-15(3)4/h5-8,14-15,17,19-20H,9-13H2,1-4H3/t17-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H32O16/c19-1-5-8(22)11(25)13(27)16(31-5)30-3-7-9(23)12(26)14(28)17(32-7)34-18(4-21)15(29)10(24)6(2-20)33-18/h5-17,19-29H,1-4H2/t5-,6-,7-,8+,9+,10-,11-,12-,13-,14-,15-,16+,17-,18-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H33CIN2O5S/c1-5-6-10-7-11(21(3)8-10)17(25)20-12(9(2)19)16-14(23)13(22)15(24)18(26-16)27-4/h9-16,18,22-24H,5-8H2,1-4H3,(H,20,25)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H33CIN2O5S/c1-5-6-10-7-11(21(3)8-10)17(25)20-12(9(2)19)16-14(23)13(22)15(24)18(26-16)27-4/h9-16,18,22-24H,5-8H2,1-4H3,(H,20,25)/t9-,10-,11-,12+,13-,14-,15-,16-,18-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H33CIN2O5S/c1-5-6-10-7-11(21(3)8-10)17(25)20-12(9(2)19)16-14(23)13(22)15(24)18(26-16)27-4/h9-16,18,22-24H,5-8H2,1-4H3,(H,20,25)/t9-,10-,11-,12+,13-,14-,15+,16+,18+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H33CIN2O5S/c1-5-6-10-7-11(21(3)8-10)17(25)20-12(9(2)19)16-14(23)13(22)15(24)18(26-16)27-4/h9-16,18,22-24H,5-8H2,1-4H3,(H,20,25)/t9-,10+,11-,12+,13-,14+,15-,16-,18+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H33CIN2O5S/c1-5-6-10-7-11(21(3)8-10)17(25)20-12(9(2)19)16-14(23)13(22)15(24)18(26-16)27-4/h9-16,18,22-24H,5-8H2,1-4H3,(H,20,25)/t9-,10+,11-,12+,13-,14+,15+,16+,18+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H33CIN2O5S/c1-5-6-10-7-11(21(3)8-10)17(25)20-12(9(2)19)16-14(23)13(22)15(24)18(26-16)27-4/h9-16,18,22-24H,5-8H2,1-4H3,(H,20,25)/t9-,10+,11+,12-,13-,14-,15-,16-,18-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H33CIN2O5S/c1-5-6-10-7-11(21(3)8-10)17(25)20-12(9(2)19)16-14(23)13(22)15(24)18(26-16)27-4/h9-16,18,22-24H,5-8H2,1-4H3,(H,20,25)/t9?,10-,11+,12?,13+,14-,15-,16-,18-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H34CIN2O8PS/c1-5-6-10-7-11(21(3)8-10)17(24)20-12(9(2)19)15-13(22)14(23)16(18(28-15)31-4)29-30(25,26)27/h9-16,18,22-23H,5-8H2,1-4H3,(H,20,24)(H2,25,26,27)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H34CIN2O8PS/c1-5-6-10-7-11(21(3)8-10)17(24)20-12(9(2)19)15-13(22)14(23)16(18(28-15)31-4)29-30(25,26)27/h9-16,18,22-23H,5-8H2,1-4H3,(H,20,24)(H2,25,26,27)/t9-,10-,11-,12-,13-,14-,15+,16+,18-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H34CIN2O8PS/c1-5-6-10-7-11(21(3)8-10)17(24)20-12(9(2)19)15-13(22)14(23)16(18(28-15)31-4)29-30(25,26)27/h9-16,18,22-23H,5-8H2,1-4H3,(H,20,24)(H2,25,26,27)/t9-,10-,11-,12+,13-,14-,15-,16-,18-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H34CIN2O8PS/c1-5-6-10-7-11(21(3)8-10)17(24)20-12(9(2)19)15-13(22)14(23)16(18(28-15)31-4)29-30(25,26)27/h9-16,18,22-23H,5-8H2,1-4H3,(H,20,24)(H2,25,26,27)/t9-,10+,11-,12+,13+,14-,15-,16+,18+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H34CIN2O8PS/c1-5-6-10-7-11(21(3)8-10)17(24)20-12(9(2)19)15-13(22)14(23)16(18(28-15)31-4)29-30(25,26)27/h9-16,18,22-23H,5-8H2,1-4H3,(H,20,24)(H2,25,26,27)/t9?,10-,11+,12?,13-,14+,15-,16-,18-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H34N2O6S/c1-5-6-10-7-11(20(3)8-10)17(25)19-12(9(2)21)16-14(23)13(22)15(24)18(26-16)27-4/h9-16,18,21-24H,5-8H2,1-4H3,(H,19,25)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H34N2O6S/c1-5-6-10-7-11(20(3)8-10)17(25)19-12(9(2)21)16-14(23)13(22)15(24)18(26-16)27-4/h9-16,18,21-24H,5-8H2,1-4H3,(H,19,25)/t9-,10-,11-,12-,13-,14-,15-,16-,18-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H34N2O6S/c1-5-6-10-7-11(20(3)8-10)17(25)19-12(9(2)21)16-14(23)13(22)15(24)18(26-16)27-4/h9-16,18,21-24H,5-8H2,1-4H3,(H,19,25)/t9-,10-,11-,12-,13-,14?,15-,16-,18-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H34N2O6S/c1-5-6-10-7-11(20(3)8-10)17(25)19-12(9(2)21)16-14(23)13(22)15(24)18(26-16)27-4/h9-16,18,21-24H,5-8H2,1-	0	(Meng et al., 2021)

4H3,(H,19,25)/t9-,10-,11+,12+,13+,14+,15-,16-,18-/m0/s1	
InChI=1S/C18H34N2O6S/c1-5-6-10-7-11(20(3)8-10)17(25)19-12(9(2)21)16-14(23)13(22)15(24)18(26-16)27-4/h9-16,18,21-24H,5-8H2,1-4H3,(H,19,25)/t9-,10+,11-,12+,13-,14+,15-,16-,18-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H34N2O6S/c1-5-6-10-7-11(20(3)8-10)17(25)19-12(9(2)21)16-14(23)13(22)15(24)18(26-16)27-4/h9-16,18,21-24H,5-8H2,1-4H3,(H,19,25)/t9-,10+,11+,12-,13-,14-,15-,16-,18-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H34N2O6S/c1-5-6-10-7-11(20(3)8-10)17(25)19-12(9(2)21)16-14(23)13(22)15(24)18(26-16)27-4/h9-16,18,21-24H,5-8H2,1-4H3,(H,19,25)/t9?,10-,11+,12?,13+,14-,15-,16-,18-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H34N5O2/c1-11-10-22-25-15(14(11)24)13(19)9-12(2)17(6,7)23(16(3,4)5)18(8,20)21/h10,12-13,19H,9,20-21H2,1-8H3/p+1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H35N5O2/c1-11-10-22-25-15(14(11)24)13(19)9-12(2)17(6,7)23(16(3,4)5)18(8,20)21/h10,12-13H,9,19-21H2,1-8H3/p+1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H36N4O11/c19-2-6-10(25)12(27)13(28)18(30-6)33-16-5(21)1-4(20)15(14(16)29)32-17-11(26)8(22)9(24)7(3-23)31-17/h4-18,23-29H,1-3,19-22H2	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H36N4O11/c19-2-6-10(25)12(27)13(28)18(30-6)33-16-5(21)1-4(20)15(14(16)29)32-17-11(26)8(22)9(24)7(3-23)31-17/h4-18,23-29H,1-3,19-22H2/t4-,5-,6-,7-,8-,9+,10+,11-,12-,13-,14-,15-,16-,17+,18-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H36N4O11/c19-2-6-10(25)12(27)13(28)18(30-6)33-16-5(21)1-4(20)15(14(16)29)32-17-11(26)8(22)9(24)7(3-23)31-17/h4-18,23-29H,1-3,19-22H2/t4-,5-,6-,7+,8-,9+,10+,11-,12+,13+,14-,15+,16-,17+,18-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H36N4O11/c19-2-6-10(25)12(27)13(28)18(30-6)33-16-5(21)1-4(20)15(14(16)29)32-17-11(26)8(22)9(24)7(3-23)31-17/h4-18,23-29H,1-3,19-22H2/t4-,5+,6-,7-,8+,9-,10-,11-,12+,13-,14-,15+,16-,17?,18-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H36N4O11/c19-2-6-10(25)12(27)13(28)18(30-6)33-16-5(21)1-4(20)15(14(16)29)32-17-11(26)8(22)9(24)7(3-23)31-17/h4-18,23-29H,1-3,19-22H2/t4-,5+,6-,7-,8+,9-,10-,11-,12+,13-,14?,15+,16-,17-,18-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H36N4O11/c19-2-6-10(25)12(27)13(28)18(30-6)33-16-5(21)1-4(20)15(14(16)29)32-17-11(26)8(22)9(24)7(3-23)31-17/h4-18,23-29H,1-3,19-22H2/t4-,5+,6+,7-,8-,9-,10+,11-,12+,13+,14-,15+,16-,17+,18-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H37N5O10/c19-2-6-11(26)12(27)9(23)17(30-6)32-15-4(20)1-5(21)16(14(15)29)33-18-13(28)8(22)10(25)7(3-24)31-18/h4-18,24-29H,1-3,19-23H2	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H37N5O10/c19-2-6-11(26)12(27)9(23)17(30-6)32-15-4(20)1-5(21)16(14(15)29)33-18-13(28)8(22)10(25)7(3-24)31-18/h4-18,24-29H,1-3,19-23H2/t4-,5-,6-,7-,8-,9-,10+,11+,12-,13-,14-,15-,16-,17-,18+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H37N5O10/c19-2-6-11(26)12(27)9(23)17(30-6)32-15-4(20)1-5(21)16(14(15)29)33-18-13(28)8(22)10(25)7(3-24)31-18/h4-18,24-29H,1-3,19-23H2/t4-,5+,6-,7+,8-,9-,10+,11-,12+,13+,14-,15+,16-,17+,18-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H37N5O10/c19-2-6-11(26)12(27)9(23)17(30-6)32-15-4(20)1-5(21)16(14(15)29)33-18-13(28)8(22)10(25)7(3-24)31-18/h4-18,24-29H,1-3,19-23H2/t4-,5+,6+,7-,8-,9+,10+,11+,12+,13+,14-,15+,16-,17+,18+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H37N5O10/c19-2-6-11(26)12(27)9(23)17(30-6)32-15-4(20)1-5(21)16(14(15)29)33-18-13(28)8(22)10(25)7(3-24)31-18/h4-18,24-29H,1-3,19-23H2/t4-,5+,6+,7+,8-,9+,10+,11+,12+,13+,14-,15+,16-,17+,18+/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H37N5O8/c19-4-6-1-2-7(20)17(28-6)30-15-8(21)3-9(22)16(14(15)27)31-18-13(26)11(23)12(25)10(5-24)29-18/h6-18,24-27H,1-5,19-23H2	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H37N5O8/c19-4-6-1-2-7(20)17(28-6)30-15-8(21)3-9(22)16(14(15)27)31-18-13(26)11(23)12(25)10(5-24)29-18/h6-18,24-27H,1-5,19-23H2/t6-,7-,8-,9-,10-,11-,12+,13-,14-,15-,16-,17-,18+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H37N5O8/c19-4-6-1-2-7(20)17(28-6)30-15-8(21)3-9(22)16(14(15)27)31-18-13(26)11(23)12(25)10(5-24)29-18/h6-18,24-27H,1-	0 (Meng et al., 2021)

5,19-23H ₂ /t ₆ -,7-,8+,9+,10-,11+,12-,13+,14-,15+,16-,17+,18-/m ₁ /s ₁	
InChI=1S/C18H37N5O8/c19-4-6-1-2-7(20)17(28-6)30-15-8(21)3-9(22)16(14(15)27)31-18-13(26)11(23)12(25)10(5-24)29-18/h6-18,24-27H,1-5,19-23H ₂ /t ₆ -,7+,8-,9+,10+,11-,12+,13+,14-,15+,16-,17+,18+/m ₀ /s ₁	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C18H37N5O8/c19-4-6-1-2-7(20)17(28-6)30-15-8(21)3-9(22)16(14(15)27)31-18-13(26)11(23)12(25)10(5-24)29-18/h6-18,24-27H,1-5,19-23H ₂ /t ₆ -,7+,8-,9+,10+,11+,12+,13+,14-,15+,16-,17+,18-/m ₁ /s ₁	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H37N5O9/c19-3-9-8(25)2-7(22)17(29-9)31-15-5(20)1-6(21)16(14(15)28)32-18-13(27)11(23)12(26)10(4-24)30-18/h5-18,24-28H,1-4,19-23H ₂	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H37N5O9/c19-3-9-8(25)2-7(22)17(29-9)31-15-5(20)1-6(21)16(14(15)28)32-18-13(27)11(23)12(26)10(4-24)30-18/h5-18,24-28H,1-4,19-23H ₂ /t ₅ -,6-,7-,8-,9-,10-,11-,12+,13-,14-,15-,16-,17-,18+/m ₀ /s ₁	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H37N5O9/c19-3-9-8(25)2-7(22)17(29-9)31-15-5(20)1-6(21)16(14(15)28)32-18-13(27)11(23)12(26)10(4-24)30-18/h5-18,24-28H,1-4,19-23H ₂ /t ₅ -,6-,7-,8-,9-,10-,11-,12+,13-,14-,15+,16-,17-,18-/m ₀ /s ₁	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H37N5O9/c19-3-9-8(25)2-7(22)17(29-9)31-15-5(20)1-6(21)16(14(15)28)32-18-13(27)11(23)12(26)10(4-24)30-18/h5-18,24-28H,1-4,19-23H ₂ /t ₅ -,6-,7-,8-,9+,10+,11+,12-,13-,14+,15-,16-,17+,18+/m ₀ /s ₁	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H37N5O9/c19-3-9-8(25)2-7(22)17(29-9)31-15-5(20)1-6(21)16(14(15)28)32-18-13(27)11(23)12(26)10(4-24)30-18/h5-18,24-28H,1-4,19-23H ₂ /t ₅ -,6+,7-,8+,9-,10+,11+,12+,13+,14-,15+,16-,17+,18-/m ₁ /s ₁	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H37N5O9/c19-3-9-8(25)2-7(22)17(29-9)31-15-5(20)1-6(21)16(14(15)28)32-18-13(27)11(23)12(26)10(4-24)30-18/h5-18,24-28H,1-4,19-23H ₂ /t ₅ -,6+,7+,8-,9+,10+,11-,12+,13+,14-,15+,16-,17+,18+/m ₀ /s ₁	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C18H37N5O9/c19-3-9-8(25)2-7(22)17(29-9)31-15-5(20)1-6(21)16(14(15)28)32-18-13(27)11(23)12(26)10(4-24)30-18/h5-18,24-28H,1-4,19-23H ₂ /t ₅ -,6+,7+,8-,9+,10+,11-,12+,13+,14-,15+,16?,17+,18+/m ₀ /s ₁	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H12O6/c20-16-10-5-1-3-7-14(10)24-18(22)12(16)9-13-17(21)11-6-2-4-8-15(11)25-19(13)23/h1-8,20-21H,9H ₂	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H12O8/c1-8(20)26-13-5-3-4-11-15(13)18(23)16-12(17(11)22)6-10(19(24)25)7-14(16)27-9(2)21/h3-7H,1-2H ₃ (H,24,25)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H14F2N6O/c1-27-18(22-8-23-27)15-16(9-2-4-10(20)5-3-9)24-13-7-11(21)6-12-14(13)17(15)25-26-19(12)28/h2-8,15-16,24H,1H ₃ (H,26,28)/t ₁₅ -,16-/m ₁ /s ₁	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H15ClN2O4/c20-13-7-5-11(6-8-13)18(24)22-16(19(25)26)9-12-10-17(23)21-15-4-2-1-3-14(12)15/h1-8,10,16H,9H ₂ (H,21,23)(H,22,24)(H,25,26)	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H15F3N4O3/c20-9-1-2-15(13(21)5-9)26-8-12(19(28)29)16(27)11-6-14(22)18(24-17(11)26)25-4-3-10(23)7-25/h1-2,5-6,8,10H,3-4,7,23H ₂ (H,28,29)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H15N3O/c1-21-16-9-5-3-7-14(16)19(23)22-11-10-13-12-6-2-4-8-15(12)20-17(13)18(21)22/h2-9H,10-11H ₂ ,1H ₃	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H15NO6/c1-11(21)10-15(12-6-8-13(9-7-12)20(24)25)17-18(22)14-4-2-3-5-16(14)26-19(17)23/h2-9,15,22H,10H ₂ ,1H ₃	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H15NO6/c1-9-5-15-17(19(23)25-9)12(8-16(21)26-15)13-6-10-3-4-11(24-2)7-14(10)20-18(13)22/h3-7,12H,8H ₂ ,1-2H ₃ (H,20,22)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H15NO6/c1-9-5-15-17(19(23)25-9)12(8-16(21)26-15)13-6-10-3-4-11(24-2)7-14(10)20-18(13)22/h3-7,12H,8H ₂ ,1-2H ₃ (H,20,22)/t ₁₂ -/m ₀ /s ₁	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H16ClFN2O/c20-13-7-8-17-15(9-13)19(14-3-1-2-4-16(14)21)22-10-18(24)23(17)11-12-5-6-12/h1-4,7-9,12H,5-6,10-11H ₂	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C19H16ClNO4/c1-11-15(10-18(22)23)16-9-14(25-2)7-8-17(16)21(11)19(24)12-3-5-13(20)6-4-12/h3-9H,10H2,1-2H3,(H,22,23)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H16ClNO4/c1-11-15(10-18(22)23)16-9-14(25-2)7-8-17(16)21(11)19(24)12-3-5-13(20)6-4-12/h3-9H,10H2,1-2H3,(H,22,23)/p-1	0	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C19H16N2O4/c1-2-19(14-11-7-4-8-12-14)16(23)20-18(25)21(17(19)24)15(22)13-9-5-3-6-10-13/h3-12H,2H2,1H3,(H,20,23,25)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H16N2O4/c1-2-19(14-11-7-4-8-12-14)16(23)20-18(25)21(17(19)24)15(22)13-9-5-3-6-10-13/h3-12H,2H2,1H3,(H,20,23,25)/t19-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H16N2O4/c1-2-19(14-11-7-4-8-12-14)16(23)20-18(25)21(17(19)24)15(22)13-9-5-3-6-10-13/h3-12H,2H2,1H3,(H,20,23,25)/t19-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H16N2O4S/c1-2-26(24)16-8-15-17-12(7-11-5-3-4-6-14(11)20-17)9-21(15)18(22)13(16)10-25-19(26)23/h3-8,24H,2,9-10H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H16O4/c1-12(20)11-15(13-7-3-2-4-8-13)17-18(21)14-9-5-6-10-16(14)23-19(17)22/h2-10,15,21H,11H2,1H3	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C19H16O4/c1-12(20)11-15(13-7-3-2-4-8-13)17-18(21)14-9-5-6-10-16(14)23-19(17)22/h2-10,15,21H,11H2,1H3/t15-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H17BrN4O2S/c20-17-5-4-16(27-17)13-7-14(22-21-13)19(26)23-8-11-6-12(10-23)15-2-1-3-18(25)24(15)9-11/h1-5,7,11-12H,6,8-10H2,(H,21,22)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H17BrN4O2S/c20-17-5-4-16(27-17)13-7-14(22-21-13)19(26)23-8-11-6-12(10-23)15-2-1-3-18(25)24(15)9-11/h1-5,7,11-12H,6,8-10H2,(H,21,22)/t11-,12+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H17Cl2N3O5S/c1-7-10(12(23-29-7)11-8(20)5-4-6-9(11)21)15(25)22-13-16(26)24-14(18(27)28)19(2,3)30-17(13)24/h4-6,13-14,17H,1-3H3,(H,22,25)(H,27,28)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H17Cl2N3O5S/c1-7-10(12(23-29-7)11-8(20)5-4-6-9(11)21)15(25)22-13-16(26)24-14(18(27)28)19(2,3)30-17(13)24/h4-6,13-14,17H,1-3H3,(H,22,25)(H,27,28)/t13-,14+,17-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H17Cl2N3O5S/c1-7-10(12(23-29-7)11-8(20)5-4-6-9(11)21)15(25)22-13-16(26)24-14(18(27)28)19(2,3)30-17(13)24/h4-6,13-14,17H,1-3H3,(H,22,25)(H,27,28)/t13-,14+,17-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H17Cl2N3O5S/c1-7-10(12(23-29-7)11-8(20)5-4-6-9(11)21)15(25)22-13-16(26)24-14(18(27)28)19(2,3)30-17(13)24/h4-6,13-14,17H,1-3H3,(H,22,25)(H,27,28)/t13-,14+,17-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H17Cl2N3O5S/c1-7-10(12(23-29-7)11-8(20)5-4-6-9(11)21)15(25)22-13-16(26)24-14(18(27)28)19(2,3)30-17(13)24/h4-6,13-14,17H,1-3H3,(H,22,25)(H,27,28)/t13-,14-,17-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H17Cl3N2S/c20-15-7-4-14(5-8-15)6-9-16(12-24-11-10-23-13-24)25-19-17(21)2-1-3-18(19)22/h1-5,7-8,10-11,13,16H,6,9,12H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H17ClFN3O5S/c1-7-10(12(23-29-7)11-8(20)5-4-6-9(11)21)15(25)22-13-16(26)24-14(18(27)28)19(2,3)30-17(13)24/h4-6,13-14,17H,1-3H3,(H,22,25)(H,27,28)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H17ClFN3O5S/c1-7-10(12(23-29-7)11-8(20)5-4-6-9(11)21)15(25)22-13-16(26)24-14(18(27)28)19(2,3)30-17(13)24/h4-6,13-14,17H,1-3H3,(H,22,25)(H,27,28)/t13-,14-,17+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H17ClFN3O5S/c1-7-10(12(23-29-7)11-8(20)5-4-6-9(11)21)15(25)22-13-16(26)24-14(18(27)28)19(2,3)30-17(13)24/h4-6,13-14,17H,1-3H3,(H,22,25)(H,27,28)/t13-,14-,17+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H17ClFN3O5S/c1-7-10(12(23-29-7)11-8(20)5-4-6-9(11)21)15(25)22-13-16(26)24-14(18(27)28)19(2,3)30-17(13)24/h4-6,13-14,17H,1-3H3,(H,22,25)(H,27,28)/t13-,14+,17-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H17ClFN3O5S/c1-7-10(12(23-29-7)11-8(20)5-4-6-9(11)21)15(25)22-13-16(26)24-14(18(27)28)19(2,3)30-17(13)24/h4-6,13-14,17H,1-3H3,(H,22,25)(H,27,28)/t13-,14+,17-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C19H17ClFN3O5S/c1-7-10(12(23-29-7)11-8(20)5-4-6-9(11)21)15(25)22-13-16(26)24-14(18(27)28)19(2,3)30-17(13)24/h4-6,13-14,17H,1-3H3,(H,22,25)(H,27,28)/t13?,14-,17-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H17ClN2O/c20-15-8-9-17-16(10-15)19(14-4-2-1-3-5-14)21-11-18(23)22(17)12-13-6-7-13/h1-5,8-10,13H,6-7,11-12H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H17N3O4S2/c23-14(9-13-5-4-8-27-13)20-15-17(24)22-16(19(25)26)12(11-28-18(15)22)10-21-6-2-1-3-7-21/h1-8,15,18H,9-11H2,(H,20,23,25,26)/p+1/t15-,18-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H17N3O4S2/c23-14(9-13-5-4-8-27-13)20-15-17(24)22-16(19(25)26)12(11-28-18(15)22)10-21-6-2-1-3-7-21/h1-8,15,18H,9-11H2,(H,20,23,25,26)/t15-,18-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H17N5O7S3/c1-30-23-11(9-7-34-19(20)21-9)14(25)22-12-15(26)24-13(17(27)28)8(5-32-16(12)24)6-33-18(29)10-3-2-4-31-10/h2-4,7,12,16H,5-6H2,1H3,(H2,20,21)(H,22,25)(H,27,28)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H17N5O7S3/c1-30-23-11(9-7-34-19(20)21-9)14(25)22-12-15(26)24-13(17(27)28)8(5-32-16(12)24)6-33-18(29)10-3-2-4-31-10/h2-4,7,12,16H,5-6H2,1H3,(H2,20,21)(H,22,25)(H,27,28)/b23-11-/t12-,16-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H17N5O7S3/c1-30-23-11(9-7-34-19(20)21-9)14(25)22-12-15(26)24-13(17(27)28)8(5-32-16(12)24)6-33-18(29)10-3-2-4-31-10/h2-4,7,12,16H,5-6H2,1H3,(H2,20,21)(H,22,25)(H,27,28)/b23-11-/t12-,16+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H17N5O7S3/c1-30-23-11(9-7-34-19(20)21-9)14(25)22-12-15(26)24-13(17(27)28)8(5-32-16(12)24)6-33-18(29)10-3-2-4-31-10/h2-4,7,12,16H,5-6H2,1H3,(H2,20,21)(H,22,25)(H,27,28)/b23-11-/t12?,16-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H17N5O7S3/c1-30-23-11(9-7-34-19(20)21-9)14(25)22-12-15(26)24-13(17(27)28)8(5-32-16(12)24)6-33-18(29)10-3-2-4-31-10/h2-4,7,12,16H,5-6H2,1H3,(H2,20,21)(H,22,25)(H,27,28)/b23-11+/t12-,16-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H17N5O7S3/c1-30-23-11(9-7-34-19(20)21-9)14(25)22-12-15(26)24-13(17(27)28)8(5-32-16(12)24)6-33-18(29)10-3-2-4-31-10/h2-4,7,12,16H,5-6H2,1H3,(H2,20,21)(H,22,25)(H,27,28)/b23-11+/t12?,16-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H17N9O5S2/c1-33-24-11(14-23-19(20)35-25-14)15(29)22-12-16(30)28-13(18(31)32)9(8-34-17(12)28)7-26-5-6-27-10(26)3-2-4-21-27/h2-6,12,17H,7-8H2,1H3,(H3-,20,22,23,25,29,31,32)/b24-11+/t12-,17-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H17N9O5S2/c1-33-24-11(14-23-19(20)35-25-14)15(29)22-12-16(30)28-13(18(31)32)9(8-34-17(12)28)7-26-5-6-27-10(26)3-2-4-21-27/h2-6,12,17H,7-8H2,1H3,(H3-,20,22,23,25,29,31,32)/p+1/b24-11-/t12-,17-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H17N9O5S2/c1-33-24-11(14-23-19(20)35-25-14)15(29)22-12-16(30)28-13(18(31)32)9(8-34-17(12)28)7-26-5-6-27-10(26)3-2-4-21-27/h2-6,12,17H,7-8H2,1H3,(H3-,20,22,23,25,29,31,32)/p+1/b24-11+/t12-,17-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H17N4O5S/c1-13-3-9-16(10-4-13)25(22,23)18-17(19(18,11-20)12-21)14-5-7-15(24-2)8-6-14/h3-10,12,17-18H,1-2H3/t17-,18+,19+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H17N5O5S/c1-12-3-9-15(10-4-12)26(23,24)17-16(19(17,11-20)18(21)22)13-5-7-14(25-2)8-6-13/h3-10,16-17H,1-2H3,(H,21,22)/t16-,17+,19+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H17N5O5S/c1-23-11-19(10-20)17(13-7-8-15-16(9-13)25-12-24-15)18(19)26(21,22)14-5-3-2-4-6-14/h2-9,17-18H,11-12H2,1H3/t17-,18+,19+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H17NO7/c1-3-5-9-16-10(13(21)7-12(18(23)24)20(16)4-2)6-11-14(22)8-15(19(25)26)27-17(9)11/h6-8H,3-5H2,1-2H3,(H,23,24)(H,25,26)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H17NOS/c1-14-6-5-9-17(12-14)20(2)19(22)21-18-11-10-15-7-3-4-8-16(15)13-18/h3-13H,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C19H18BrN3O2S/c1-12-6-8-16(9-7-12)26-13(2)19(24)21-11-17-22-18(23-25-17)14-4-3-5-15(20)10-14/h3-10,13H,11H2,1-2H3,(H,21,24)/t13-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H18Cl2N2O2/c1-23(18(24)11-22-13-7-8-13)17-9-6-12(20)10-15(17)19(25)14-4-2-3-5-16(14)21/h2-6,9-10,13,22H,7-8,11H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H18Cl2N4O4S/c1-8-7-22-25(13-9(20)5-4-6-10(13)21)12(8)15(26)23-11-16(27)24-14(18(28)29)19(2,3)30-17(11)24/h4-7,11,14,17H,1-3H3,(H,23,26)(H,28,29)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H18Cl2N4O4S/c1-8-7-22-25(13-9(20)5-4-6-10(13)21)12(8)15(26)23-11-16(27)24-14(18(28)29)19(2,3)30-17(11)24/h4-7,11,14,17H,1-3H3,(H,23,26)(H,28,29)/t11-,14+,17-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H18Cl2N4O4S/c1-8-7-22-25(13-9(20)5-4-6-10(13)21)12(8)15(26)23-11-16(27)24-14(18(28)29)19(2,3)30-17(11)24/h4-7,11,14,17H,1-3H3,(H,23,26)(H,28,29)/t11-,14+,17-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H18Cl2N4O4S/c1-8-7-22-25(13-9(20)5-4-6-10(13)21)12(8)15(26)23-11-16(27)24-14(18(28)29)19(2,3)30-17(11)24/h4-7,11,14,17H,1-3H3,(H,23,26)(H,28,29)/t11?,14-,17-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H18ClFN2O3/c20-13-5-6-17-15(11-13)19(14-3-1-2-4-16(14)21)22(8-10-26-19)12-18(25)23(17)7-9-24/h1-6,11,24H,7-10,12H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H18ClFN2O3/c20-13-5-6-17-15(11-13)19(14-3-1-2-4-16(14)21)22(8-10-26-19)12-18(25)23(17)7-9-24/h1-6,11,24H,7-10,12H2/t19-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H18ClFN2O3/c20-13-5-6-17-15(11-13)19(14-3-1-2-4-16(14)21)22(8-10-26-19)12-18(25)23(17)7-9-24/h1-6,11,24H,7-10,12H2/t19-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H18ClFN2O3S/c1-2-27(25,26)10-9-23-17-8-7-13(20)11-15(17)19(22-12-18(23)24)14-5-3-4-6-16(14)21/h3-8,11H,2,9-10,12H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H18ClN3O/c20-15-8-9-17-16(10-15)19(14-4-2-1-3-5-14)23(24)12-18(22-17)21-11-13-6-7-13/h1-5,8-10,12-13,21,24H,6-7,11H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H18ClN3O/c20-15-8-9-17-16(10-15)19(14-4-2-1-3-5-14)23(24)12-18(22-17)21-11-13-6-7-13/h1-5,8-10,13,24H,6-7,11-12H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H18ClN3O/c20-15-8-9-17-16(10-15)19(14-4-2-1-3-5-14)23(24)12-18(22-17)21-11-13-6-7-13/h1-5,8-10,13H,6-7,11-12H2,(H,21,22)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H18ClN3O2S/c1-12-7-9-14(10-8-12)26-13(2)19(24)21-11-17-22-18(23-25-17)15-5-3-4-6-16(15)20/h3-10,13H,11H2,1-2H3,(H,21,24)/t13-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H18ClN3O2S/c1-13-3-2-4-14(11-13)19-22-18(25-23-19)12-21-17(24)9-10-26-16-7-5-15(20)6-8-16/h2-8,11H,9-10,12H2,1H3,(H,21,24)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H18ClN3O3/c1-22(2)19(25)26-17-18(24)23(3)15-10-9-13(20)11-14(15)16(21-17)12-7-5-4-6-8-12/h4-11,17H,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H18ClN3O3/c1-22(2)19(25)26-17-18(24)23(3)15-10-9-13(20)11-14(15)16(21-17)12-7-5-4-6-8-12/h4-11,17H,1-3H3/t17-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H18ClN3O3/c1-22(2)19(25)26-17-18(24)23(3)15-10-9-13(20)11-14(15)16(21-17)12-7-5-4-6-8-12/h4-11,17H,1-3H3/t17-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H18ClN3O3S/c1-25-16-7-5-14(6-8-16)19-22-18(26-23-19)10-21-17(24)12-27-11-13-3-2-4-15(20)9-13/h2-9H,10-12H2,1H3,(H,21,24)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H18ClN3O5S/c1-8-11(12(22-28-8)9-6-4-5-7-10(9)20)15(24)21-13-16(25)23-14(18(26)27)19(2,3)29-17(13)23/h4-7,13-14,17H,1-3H3,(H,21,24)(H,26,27)	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C19H18CIN3O5S/c1-8-11(12(22-28-8)9-6-4-5-7-10(9)20)15(24)21-13-16(25)23-14(18(26)27)19(2,3)29-17(13)23/h4-7,13-14,17H,1-3H3,(H,21,24)(H,26,27)/t13-,14+,17-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H18CIN3O5S/c1-8-11(12(22-28-8)9-6-4-5-7-10(9)20)15(24)21-13-16(25)23-14(18(26)27)19(2,3)29-17(13)23/h4-7,13-14,17H,1-3H3,(H,21,24)(H,26,27)/t13-,14+,17-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H18CIN3O5S/c1-8-11(12(22-28-8)9-6-4-5-7-10(9)20)15(24)21-13-16(25)23-14(18(26)27)19(2,3)29-17(13)23/h4-7,13-14,17H,1-3H3,(H,21,24)(H,26,27)/t13-,14+,17+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H18CIN3O5S/c1-8-11(12(22-28-8)9-6-4-5-7-10(9)20)15(24)21-13-16(25)23-14(18(26)27)19(2,3)29-17(13)23/h4-7,13-14,17H,1-3H3,(H,21,24)(H,26,27)/t13?,14-,17-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H18CIN3O5S/c20-16-6-5-15(29-16)18(25)21-9-14-10-23(19(26)28-14)13-3-1-12(2-4-13)22-7-8-27-11-17(22)24/h1-6,14H,7-11H2,(H,21,25)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H18CIN5/c1-24(2)12-18-23-22-17-11-21-19(13-6-4-3-5-7-13)15-10-14(20)8-9-16(15)25(17)18/h3-10H,11-12H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H18CINO/c1-21-10-8-13(9-11-21)19-15-4-2-3-5-17(15)22-18-7-6-14(20)12-16(18)19/h2-7,12H,8-11H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H18CINO3S/c1-2-24-13-19(12-21)17(14-6-4-3-5-7-14)18(19)25(22,23)16-10-8-15(20)9-11-16/h3-11,17-18H,2,13H2,1H3/t17-,18-,19-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H18CINO4/c1-11-15(10-18(22)23)16-9-14(25-2)7-8-17(16)21(11)19(24)12-3-5-13(20)6-4-12/h3-9,11,15H,10H2,1-2H3,(H,22,23)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H18CINO4/c1-11-15(10-18(22)23)16-9-14(25-2)7-8-17(16)21(11)19(24)12-3-5-13(20)6-4-12/h3-9,11,15H,10H2,1-2H3,(H,22,23)/t11-,15-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H18CINO4/c1-11-15(10-18(22)23)16-9-14(25-2)7-8-17(16)21(11)19(24)12-3-5-13(20)6-4-12/h3-9,11,15H,10H2,1-2H3,(H,22,23)/t11-,15+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H18F4N4O5/c1-30-9-14(10-3-4-15(12(20)5-10)32-19(21,22)23)26-18(29)27-8-16(28)25-13-6-11(31-2)7-24-17(13)27/h3-7,14H,8-9H2,1-2H3,(H,25,28)(H,26,29)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C19H18N2O4/c1-23-13-18-11-21(19(22)25-18)16-5-7-17(8-6-16)24-12-15-4-2-3-14(9-15)10-20/h2-9,18H,11-13H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H18N2O4/c1-23-13-18-11-21(19(22)25-18)16-5-7-17(8-6-16)24-12-15-4-2-3-14(9-15)10-20/h2-9,18H,11-13H2,1H3/t18-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H18N2O4/c1-23-13-18-11-21(19(22)25-18)16-5-7-17(8-6-16)24-12-15-4-2-3-14(9-15)10-20/h2-9,18H,11-13H2,1H3/t18-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H18N3O/c1-21-16-9-5-3-7-14(16)19(23)22-11-10-13-12-6-2-4-8-15(12)20-17(13)18(21)22/h2-9,13,17,20H,10-11H2,1H3/q+1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H18N4O2S/c1-13-17(20-8-7-18(13)25-2)12-26(24)19-21-15-6-5-14(11-16(15)22-19)23-9-3-4-10-23/h3-11H,12H2,1-2H3,(H,21,22)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H18N4O5S3/c1-9-21-22-19(31-9)30-8-11-7-29-17-12(16(26)23(17)13(11)18(27)28)20-15(25)14(24)10-5-3-2-4-6-10/h2-6,12,14,17,24H,7-8H2,1H3,(H,20,25)(H,27,28)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H18N4O5S3/c1-9-21-22-19(31-9)30-8-11-7-29-17-12(16(26)23(17)13(11)18(27)28)20-15(25)14(24)10-5-3-2-4-6-10/h2-6,12,14,17,24H,7-8H2,1H3,(H,20,25)(H,27,28)/t12-,14-,17-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H18N4O5S3/c1-9-21-22-19(31-9)30-8-11-7-29-17-12(16(26)23(17)13(11)18(27)28)20-15(25)14(24)10-5-3-2-4-6-10/h2-	0	(Mazumdar et al., 2023)

6,12,14,17,24H,7-8H2,1H3,(H,20,25)(H,27,28)/t12-,14+,17-/m1/s1	2023)
InChI=1S/C19H18N4O5S3/c1-9-21-22-19(31-9)30-8-11-7-29-17-12(16(26)23(17)13(11)18(27)28)20-15(25)14(24)10-5-3-2-4-6-10/h2-6,12,14,17,24H,7-8H2,1H3,(H,20,25)(H,27,28)/t12?,14-,17-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H18N4OS/c1-4-12-5-7-13(8-6-12)23-11-21-16-15-14(22(2)3)9-10-20-18(15)25-17(16)19(23)24/h5-11H,4H2,1-3H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H18N6O5S2/c1-30-23-12(11-9-32-19(20)21-11)15(26)22-13-16(27)25-14(18(28)29)10(8-31-17(13)25)7-24-5-3-2-4-6-24/h2-6,9,13,17H,7-8H2,1H3,(H3-,20,21,22,26,28,29)/p+1/b23-12-/t13-,17+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H18N6O5S3/c1-8-11(33-7-21-8)4-3-9-5-31-17-13(16(27)25(17)14(9)18(28)29)23-15(26)12(24-30-2)10-6-32-19(20)22-10/h3-4,6-7,13,17H,5H2,1-2H3,(H2,20,22)(H,23,26)(H,28,29)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H18N6O5S3/c1-8-11(33-7-21-8)4-3-9-5-31-17-13(16(27)25(17)14(9)18(28)29)23-15(26)12(24-30-2)10-6-32-19(20)22-10/h3-4,6-7,13,17H,5H2,1-2H3,(H2,20,22)(H,23,26)(H,28,29)/b4-3-,24-12-/t13-,17-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H18N6O5S3/c1-8-11(33-7-21-8)4-3-9-5-31-17-13(16(27)25(17)14(9)18(28)29)23-15(26)12(24-30-2)10-6-32-19(20)22-10/h3-4,6-7,13,17H,5H2,1-2H3,(H2,20,22)(H,23,26)(H,28,29)/b4-3-,24-12-/t13?,17-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H18N6O5S3/c1-8-11(33-7-21-8)4-3-9-5-31-17-13(16(27)25(17)14(9)18(28)29)23-15(26)12(24-30-2)10-6-32-19(20)22-10/h3-4,6-7,13,17H,5H2,1-2H3,(H2,20,22)(H,23,26)(H,28,29)/b4-3-,24-12-/t13?,17-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H18N6O5S3/c1-8-11(33-7-21-8)4-3-9-5-31-17-13(16(27)25(17)14(9)18(28)29)23-15(26)12(24-30-2)10-6-32-19(20)22-10/h3-4,6-7,13,17H,5H2,1-2H3,(H2,20,22)(H,23,26)(H,28,29)/b4-3-,24-12+/t13-,17-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H18N6O5S3/c1-8-11(33-7-21-8)4-3-9-5-31-17-13(16(27)25(17)14(9)18(28)29)23-15(26)12(24-30-2)10-6-32-19(20)22-10/h3-4,6-7,13,17H,5H2,1-2H3,(H2,20,22)(H,23,26)(H,28,29)/b4-3-,24-12+/t13?,17-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H18N6O5S3/c1-8-11(33-7-21-8)4-3-9-5-31-17-13(16(27)25(17)14(9)18(28)29)23-15(26)12(24-30-2)10-6-32-19(20)22-10/h3-4,6-7,13,17H,5H2,1-2H3,(H2,20,22)(H,23,26)(H,28,29)/b4-3?,24-12+/t13-,17-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H18N6O5S3/c1-8-11(33-7-21-8)4-3-9-5-31-17-13(16(27)25(17)14(9)18(28)29)23-15(26)12(24-30-2)10-6-32-19(20)22-10/h3-4,6-7,13,17H,5H2,1-2H3,(H2,20,22)(H,23,26)(H,28,29)/b4-3+,24-12-/t13-,17-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H18N6O5S3/c1-8-11(33-7-21-8)4-3-9-5-31-17-13(16(27)25(17)14(9)18(28)29)23-15(26)12(24-30-2)10-6-32-19(20)22-10/h3-4,6-7,13,17H,5H2,1-2H3,(H2,20,22)(H,23,26)(H,28,29)/b4-3+,24-12+/t13?,17-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H18N6O6S2/c1-24-19(21-22-23-24)33-8-11-7-32-17-12(16(28)25(17)13(11)18(29)30)20-15(27)14(31-9-26)10-5-3-2-4-6-10/h2-6,9,12,14,17H,7-8H2,1H3,(H,20,27)(H,29,30)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H18N6O6S2/c1-24-19(21-22-23-24)33-8-11-7-32-17-12(16(28)25(17)13(11)18(29)30)20-15(27)14(31-9-26)10-5-3-2-4-6-10/h2-6,9,12,14,17H,7-8H2,1H3,(H,20,27)(H,29,30)/t12-,14-,17-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H19BrClNO2/c1-22-4-2-11-7-17(21)18(23)9-14(11)16(10-22)15-8-13(20)6-12-3-5-24-19(12)15/h6-9,16,23H,2-5,10H2,1H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H19BrClNO2/c1-22-4-2-11-7-17(21)18(23)9-14(11)16(10-22)15-8-13(20)6-12-3-5-24-19(12)15/h6-9,16,23H,2-5,10H2,1H3/t16-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H19BrClNO2/c1-22-4-2-11-7-17(21)18(23)9-14(11)16(10-22)15-8-13(20)6-12-3-5-24-19(12)15/h6-9,16,23H,2-5,10H2,1H3/t16-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C19H19ClN2/c20-16-5-6-17-15(12-16)4-3-14-2-1-9-22-19(14)18(17)13-7-10-21-11-8-13/h1-2,5-6,9,12,21H,3-4,7-8,10-11H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H19ClN4O4S/c1-23(12-17-21-19(22-28-17)14-6-4-3-5-7-14)18(25)13-24(29(2,26)27)16-10-8-15(20)9-11-16/h3-11H,12-13H2,1-2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H19ClO6S/c1-25-11-19(18(21)22)16(12-3-7-14(26-2)8-4-12)17(19)27(23,24)15-9-5-13(20)6-10-15/h3-10,16-17H,11H2,1-2H3,(H,21,22)/t16-,17+,19+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H19F2N7O/c1-19(2,3)13-8-15-24-25-17(12-7-11(20)5-6-14(12)21)28(15)26-18(13)29-9-16-22-10-23-27(16)4/h5-8,10H,9H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H19FN4O/c1-13-2-4-16(11-21-13)25-15-6-8-24(9-7-15)19-17-10-14(20)3-5-18(17)22-12-23-19/h2-5,10-12,15H,6-9H2,1H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C19H19N/c1-20-11-10-18-16-8-4-2-6-14(16)12-15-7-3-5-9-17(15)19(18)13-20/h2-9H,10-13H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H19N/c1-20-12-11-16-15-9-5-6-10-17(15)19(18(16)13-20)14-7-3-2-4-8-14/h2-10,19H,11-13H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H19N3/c1-2-6-15(7-3-1)19-17-9-5-4-8-16(17)14-18(21-19)22-12-10-20-11-13-22/h1-9,14,20H,10-13H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H19N3O4S2/c23-14(9-13-5-4-8-27-13)20-15-17(24)22-16(19(25)26)12(11-28-18(15)22)10-21-6-2-1-3-7-21/h2-8,15,18H,1,9-11H2,(H,20,23)(H,25,26)/t15-,18+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H19N3O5S/c1-9-11(12(21-27-9)10-7-5-4-6-8-10)15(23)20-13-16(24)22-14(18(25)26)19(2,3)28-17(13)22/h4-8,13-14,17H,1-3H3,(H,20,23)(H,25,26)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H19N3O5S/c1-9-11(12(21-27-9)10-7-5-4-6-8-10)15(23)20-13-16(24)22-14(18(25)26)19(2,3)28-17(13)22/h4-8,13-14,17H,1-3H3,(H,20,23)(H,25,26)/t13-,14-,17+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H19N3O5S/c1-9-11(12(21-27-9)10-7-5-4-6-8-10)15(23)20-13-16(24)22-14(18(25)26)19(2,3)28-17(13)22/h4-8,13-14,17H,1-3H3,(H,20,23)(H,25,26)/t13-,14-,17-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H19N3O5S/c1-9-11(12(21-27-9)10-7-5-4-6-8-10)15(23)20-13-16(24)22-14(18(25)26)19(2,3)28-17(13)22/h4-8,13-14,17H,1-3H3,(H,20,23)(H,25,26)/t13-,14+,17-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H19N3O5S/c1-9-11(12(21-27-9)10-7-5-4-6-8-10)15(23)20-13-16(24)22-14(18(25)26)19(2,3)28-17(13)22/h4-8,13-14,17H,1-3H3,(H,20,23)(H,25,26)/t13-,14+,17+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H19N3O5S/c1-9-11(12(21-27-9)10-7-5-4-6-8-10)15(23)20-13-16(24)22-14(18(25)26)19(2,3)28-17(13)22/h4-8,13-14,17H,1-3H3,(H,20,23)(H,25,26)/t13?,14-,17-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H19N3O6/c1-10(2)28-19(24)15-11(3)21-14(9-20)17(18(23)27-4)16(15)12-6-5-7-13(8-12)22(25)26/h5-8,10,16,21H,1-4H3/t16-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H19N5O5S3/c1-8-22-23-19(32-8)31-7-10-6-30-17-13(16(27)24(17)14(10)18(28)29)21-15(26)12(20)9-2-4-11(25)5-3-9/h2-5,12-13,17,25H,6-7,20H2,1H3,(H,21,26)(H,28,29)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H19N5O5S3/c1-8-22-23-19(32-8)31-7-10-6-30-17-13(16(27)24(17)14(10)18(28)29)21-15(26)12(20)9-2-4-11(25)5-3-9/h2-5,12-13,17,25H,6-7,20H2,1H3,(H,21,26)(H,28,29)/t12-,13-,17-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H19N5O5S3/c1-8-22-23-19(32-8)31-7-10-6-30-17-13(16(27)24(17)14(10)18(28)29)21-15(26)12(20)9-2-4-11(25)5-3-9/h2-5,12-13,17,25H,6-7,20H2,1H3,(H,21,26)(H,28,29)/t12-,13-,17-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H19N5O5S3/c1-8-22-23-19(32-8)31-7-10-6-30-17-13(16(27)24(17)14(10)18(28)29)21-15(26)12(20)9-2-4-11(25)5-3-9/h2-5,12-13,17,25H,6-7,20H2,1H3,(H,21,26)(H,28,29)/t12-,13?,17-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H19N5O5S3/c1-8-22-23-19(32-8)31-7-10-6-30-17-13(16(27)24(17)14(10)18(28)29)21-15(26)12(20)9-2-4-11(25)5-3-9/h2-5,12-	0	(Mazumdar et al.,

13,17,25H,6-7,20H2,1H3,(H,21,26)(H,28,29)/t12?,13-,17-/m1/s1	2023)
InChI=1S/C19H19N7O6/c20-19-25-15-14(17(30)26-19)23-11(8-22-15)7-21-10-3-1-9(2-4-10)16(29)24-12(18(31)32)5-6-13(27)28/h1-4,8,12,21H,5-7H2,(H,24,29)(H,27,28)(H,31,32)(H3,20,22,25,26,30)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H19N7O6/c20-19-25-15-14(17(30)26-19)23-11(8-22-15)7-21-10-3-1-9(2-4-10)16(29)24-12(18(31)32)5-6-13(27)28/h1-4,8,12,21H,5-7H2,(H,24,29)(H,27,28)(H,31,32)(H3,20,22,25,26,30)/t12-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H19N9O5S2/c1-33-24-11(14-23-19(20)35-25-14)15(29)22-12-16(30)28-13(18(31)32)9(8-34-17(12)28)7-26-5-6-27-10(26)3-2-4-21-27/h2-6,10,12,17H,7-8H2,1H3,(H,22,29)(H,31,32)(H2,20,23,25)/b24-11+/t10-,12+,17+/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H19NO/c1-20-12-10-14-15(11-13-20)17-7-3-5-9-19(17)21-18-8-4-2-6-16(14)18/h2-9H,10-13H2,1H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H19NOS/c1-20-9-6-13(7-10-20)18-15-5-3-2-4-14(15)12-17(21)19-16(18)8-11-22-19/h2-5,8,11H,6-7,9-10,12H2,1H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H19NS/c1-20-12-10-14(11-13-20)19-15-6-2-4-8-17(15)21-18-9-5-3-7-16(18)19/h2-9H,10-13H2,1H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H20BrN3O3/c1-19(2,3)26-18(25)15-16-13-8-5-9-22(13)17(24)14-11(20)6-4-7-12(14)23(16)10-21-15/h4,6-7,10,13H,5,8-9H2,1-3H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H20BrN3O3/c1-19(2,3)26-18(25)15-16-13-8-5-9-22(13)17(24)14-11(20)6-4-7-12(14)23(16)10-21-15/h4,6-7,10,13H,5,8-9H2,1-3H3/t13-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H20BrN3O3/c1-19(2,3)26-18(25)15-16-13-8-5-9-22(13)17(24)14-11(20)6-4-7-12(14)23(16)10-21-15/h4,6-7,10,13H,5,8-9H2,1-3H3/t13-/m1/s1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C19H20BrN3O3/c1-19(2,3)26-18(25)15-16-14-5-4-8-22(14)17(24)12-9-11(20)6-7-13(12)23(16)10-21-15/h6-7,9-10,14H,4-5,8H2,1-3H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H20BrN3O3/c1-19(2,3)26-18(25)15-16-14-5-4-8-22(14)17(24)12-9-11(20)6-7-13(12)23(16)10-21-15/h6-7,9-10,14H,4-5,8H2,1-3H3/t14-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H20CIN/c1-21-11-15-9-14-7-8-16(20)10-17(14)19(18(15)12-21)13-5-3-2-4-6-13/h2-8,10,15,18-19H,9,11-12H2,1H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H20CIN/c1-21-11-15-9-14-7-8-16(20)10-17(14)19(18(15)12-21)13-5-3-2-4-6-13/h2-8,10,15,18-19H,9,11-12H2,1H3/t15-,18-,19-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H20CIN/c1-21-11-15-9-14-7-8-16(20)10-17(14)19(18(15)12-21)13-5-3-2-4-6-13/h2-8,10,15,18-19H,9,11-12H2,1H3/t15-,18-,19+/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H20CIN/c1-21-11-15-9-14-7-8-16(20)10-17(14)19(18(15)12-21)13-5-3-2-4-6-13/h2-8,10,15,18-19H,9,11-12H2,1H3/t15-,18+,19-/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H20CIN/c1-21-11-15-9-14-7-8-16(20)10-17(14)19(18(15)12-21)13-5-3-2-4-6-13/h2-8,10,15,18-19H,9,11-12H2,1H3/t15-,18+,19+/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H20CIN3O/c1-3-6-18(24)22(2)13-16-19(14-8-10-15(20)11-9-14)21-17-7-4-5-12-23(16)17/h4-5,7-12H,3,6,13H2,1-2H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H20CIN3O/c20-15-8-9-17-16(10-15)19(14-4-2-1-3-5-14)23(24)12-18(22-17)21-11-13-6-7-13/h1-5,8-10,13,19,24H,6-7,11-12H2,(H,21,22)/t19-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H20CINO2/c1-21-7-5-13-9-17(20)18(22)10-15(13)16(11-21)14-4-2-3-12-6-8-23-19(12)14/h2-4,9-10,16,22H,5-8,11H2,1H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H20CINO2/c1-21-7-5-13-9-17(20)18(22)10-15(13)16(11-21)14-4-2-3-12-6-8-23-19(12)14/h2-4,9-10,16,22H,5-8,11H2,1H3/t16-/m0/s1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C19H20ClNO2/c1-21-7-5-13-9-17(20)18(22)10-15(13)16(11-21)14-4-2-3-12-6-8-23-19(12)14/h2-4,9-10,16,22H,5-8,11H2,1H3/t16-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H20ClNO4/c1-19(2,18(23)24)25-16-9-3-13(4-10-16)11-12-21-17(22)14-5-7-15(20)8-6-14/h3-10H,11-12H2,1-2H3,(H,21,22)(H,23,24)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H20F3N3O3/c20-19(21,22)14-3-1-4-15(13-14)24-17-16(5-2-6-23-17)18(26)28-12-9-25-7-10-27-11-8-25/h1-6,13H,7-12H2,(H,23,24)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H20F3NO2/c1-14(12-15-6-5-9-17(13-15)19(20,21)22)23-10-11-25-18(24)16-7-3-2-4-8-16/h2-9,13-14,23H,10-12H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H20FN3/c1-22-8-10-23(11-9-22)19-17-5-3-2-4-14(17)12-15-6-7-16(20)13-18(15)21-19/h2-7,13H,8-12H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H20FN3/c20-15-5-6-18-16(11-15)17-13-23(10-7-19(17)22-18)9-2-4-14-3-1-8-21-12-14/h1,3,5-6,8,11-12,22H,2,4,7,9-10,13H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H20FN3/c20-16-9-7-14(8-10-16)13-23-18-6-2-1-5-17(18)22-19(23)15-4-3-11-21-12-15/h1-2,5-10,15,21H,3-4,11-13H2	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C19H20FN3/c20-16-9-7-14(8-10-16)13-23-18-6-2-1-5-17(18)22-19(23)15-4-3-11-21-12-15/h1-2,5-10,15,21H,3-4,11-13H2/t15-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H20FNO3/c20-15-3-1-13(2-4-15)17-7-8-21-10-14(17)11-22-16-5-6-18-19(9-16)24-12-23-18/h1-6,9,14,17,21H,7-8,10-12H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H20FNO3/c20-15-3-1-13(2-4-15)17-7-8-21-10-14(17)11-22-16-5-6-18-19(9-16)24-12-23-18/h1-6,9,14,17,21H,7-8,10-12H2/t14-,17-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H20FNO3/c20-15-3-1-13(2-4-15)17-7-8-21-10-14(17)11-22-16-5-6-18-19(9-16)24-12-23-18/h1-6,9,14,17,21H,7-8,10-12H2/t14-,17-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H20FNO3/c20-15-3-1-13(2-4-15)17-7-8-21-10-14(17)11-22-16-5-6-18-19(9-16)24-12-23-18/h1-6,9,14,17,21H,7-8,10-12H2/t14-,17+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H20FNO3/c20-15-3-1-13(2-4-15)17-7-8-21-10-14(17)11-22-16-5-6-18-19(9-16)24-12-23-18/h1-6,9,14,17,21H,7-8,10-12H2/t14?,17-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H20N2O/c1-12-13(9-10-20-12)11-14-7-8-17-18(19(14)22)15-5-3-4-6-16(15)21(17)2/h3-6,10,14H,7-9,11H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H20N2O/c22-19(14-21-13-12-20-15-21)18-10-8-17(9-11-18)7-6-16-4-2-1-3-5-16/h1-5,8-13,15,19,22H,6-7,14H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H20N2O/c22-19(14-21-13-12-20-15-21)18-10-8-17(9-11-18)7-6-16-4-2-1-3-5-16/h1-5,8-13,15,19,22H,6-7,14H2/t19-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H20N2O/c22-19(14-21-13-12-20-15-21)18-10-8-17(9-11-18)7-6-16-4-2-1-3-5-16/h1-5,8-13,15,19,22H,6-7,14H2/t19-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H20N2O2.2ClH/c1-22-17-8-7-14(18(12-17)23-2)11-15-5-4-10-21-19(15)16-6-3-9-20-13-16;;/h3,6-9,11-13H,4-5,10H2,1-2H3;2*1H/b15-11+;;	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C19H20N2O2/c1-2-3-14-17-18(22)19(23)21(16-12-8-5-9-13-16)20(17)15-10-6-4-7-11-15/h4-13,17H,2-3,14H2,1H3/t17-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H20N2O2/c1-2-3-14-17-18(22)20(15-10-6-4-7-11-15)21(19(17)23)16-12-8-5-9-13-16/h4-13,17H,2-3,14H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H20N2O2/c1-2-3-14-17-18(22)20(15-10-6-4-7-11-15)21(19(17)23)16-12-8-5-9-13-16/h4-13,22H,2-3,14H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H20N2O2/c1-22-17-8-7-14(18(12-17)23-2)11-15-5-4-10-21-19(15)16-6-3-9-20-13-16/h3,6-9,11-13H,4-5,10H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H20N2O3/c1-2-3-9-17-18(23)20(14-7-5-4-6-8-14)21(19(17)24)15-10-12-16(22)13-11-15/h4-8,10-13,17,22H,2-3,9H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C19H20N2O3/c1-2-3-9-17-18(23)20(14-7-5-4-6-8-14)21(19(17)24)15-10-12-16(22)13-11-15/h4-8,10-13,17,22H,2-3,9H2,1H3/t17-/m1/s1	2023) (Mazumdar et al., 2023) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H20N2O3/c22-18-10-21-12-5-11(18)6-13(21)8-14(7-12)24-19(23)16-9-20-17-4-2-1-3-15(16)17/h1-4,9,11-14,20H,5-8,10H2 InChI=1S/C19H20N2O3/c22-18-10-21-12-5-11(18)6-13(21)8-14(7-12)24-19(23)16-9-20-17-4-2-1-3-15(16)17/h1-4,9,11-14,20H,5-8,10H2/t11?,12-,13+,14?	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H20N2O3S/c1-2-13-3-6-15(20-12-13)9-10-24-16-7-4-14(5-8-16)11-17-18(22)21-19(23)25-17/h3-8,12,17H,2,9-11H2,1H3,(H,21,22,23)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H20N4O2/c24-14-9-12(10-14)17(11-13-5-3-4-8-20-13)21-19(25)18-15-6-1-2-7-16(15)22-23-18/h1-8,12,14,17,24H,9-11H2,(H,21,25)(H,22,23)/t12?,14?,17-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H20N4O2S/c24-23(25)18-16(12-15-6-2-1-3-7-15)13-22-19(18)21-10-11-26-14-17-8-4-5-9-20-17/h1-9,13,21-22H,10-12,14H2 InChI=1S/C19H20N4O3S2/c1-10-11(2)22-23-19-15(10)16(20)17(27-19)18(24)21-9-12-3-5-13(6-4-12)28(25,26)14-7-8-14/h3-6,14H,7-9,20H2,1-2H3,(H,21,24)	1 (Li et al., 2005)
InChI=1S/C19H20N4OS/c24-18(12-16-14-25-19(21-16)22-9-3-4-10-22)23-11-2-1-7-17(23)15-6-5-8-20-13-15/h3-6,8-10,13-14,17H,1-2,7,11-12H2 InChI=1S/C19H20N4OS/c24-18(12-16-14-25-19(21-16)22-9-3-4-10-22)23-11-2-1-7-17(23)15-6-5-8-20-13-15/h3-6,8-10,13-14,17H,1-2,7,11-12H2/t17-/m0/s1	0 (Wu et al., 2018) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H20N6/c1-15-14-17(16-6-3-2-4-7-16)22-23-18(15)24-10-12-25(13-11-24)19-20-8-5-9-21-19/h2-9,14H,10-13H2,1H3 InChI=1S/C19H20N6O3/c1-28-19(27)23-18-21-14-6-5-13(12-15(14)22-18)17(26)25-10-8-24(9-11-25)16-4-2-3-7-20-16/h2-7,12H,8-11H2,1H3,(H2,21,22,23,27)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21ClFN3O3/c20-15-16-12(18(25)13(19(26)27)9-24(16)11-4-5-11)7-14(21)17(15)23-6-2-1-3-10(22)8-23/h7,9-11H,1-6,8,22H2,(H,26,27)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21ClN2/c1-22(2)11-5-8-17-16-7-4-3-6-14(16)13-21-19-12-15(20)9-10-18(17)19/h3-4,6-10,12,21H,5,11,13H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21ClN2/c1-22(2)11-5-8-17-16-7-4-3-6-14(16)13-21-19-12-15(20)9-10-18(17)19/h3-4,6-10,12,21H,5,11,13H2,1-2H3/b17-8-	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H21ClN2/c1-22(2)11-5-8-17-16-7-4-3-6-14(16)13-21-19-12-15(20)9-10-18(17)19/h3-4,6-10,12,21H,5,11,13H2,1-2H3/b17-8+	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21ClN2/c1-3-22(4-2)12-11-15-16-7-5-6-8-18(16)21-19-13-14(20)9-10-17(15)19/h5-11,13,21H,3-4,12H2,1-2H3	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C19H21ClN2/c1-3-22(4-2)12-11-15-16-7-5-6-8-18(16)21-19-13-14(20)9-10-17(15)19/h5-11,13,21H,3-4,12H2,1-2H3/b15-11-	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H21ClN2O4/c1-2-12-26-18-8-4-3-6-14(18)7-5-11-21-19(23)16-10-9-15(22(24)25)13-17(16)20/h3-4,6,8-10,13H,2,5,7,11-12H2,1H3,(H,21,23)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H21ClN2S/c1-21-8-10-22(11-9-21)17-12-14-4-2-3-5-18(14)23-19-7-6-15(20)13-16(17)19/h2-7,13,17H,8-12H2,1H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H21ClN2S/c1-21-8-10-22(11-9-21)17-12-14-4-2-3-5-18(14)23-19-7-6-15(20)13-16(17)19/h2-7,13,17H,8-12H2,1H3/t17-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C19H21F3N2S/c1-13(11-23(2)3)12-24-15-6-4-5-7-17(15)25-18-9-8-14(10-16(18)24)19(20,21)22/h4-10,13H,11-12H2,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H21F3N2S/c1-13(11-23(2)3)12-24-15-6-4-5-7-17(15)25-18-9-8-14(10-16(18)24)19(20,21)22/h4-10,13H,11-12H2,1-3H3/t13-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21F3N2S/c1-13(11-23(2)3)12-24-15-6-4-5-7-17(15)25-18-9-8-14(10-16(18)24)19(20,21)22/h4-10,13H,11-12H2,1-3H3/t13-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21FN2O4/c1-10-2-3-12-16-13(18(24)14(19(25)26)9-22(10)16)8-15(20)17(12)21-6-4-11(23)5-7-21/h8-11,23H,2-7H2,1H3,(H,25,26)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21FN2O5/c1-26-16-4-3-10(7-13(16)20)18(11-5-12(23)6-11)22-19(25)14-8-15(24)17(27-2)9-21-14/h3-4,7-9,11-12,18,23H,5-6H2,1-2H3,(H,21,24)(H,22,25)/t11?,12?,18-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21FN4O3/c1-19-5-14(21)12(19)7-23(8-19)17-13(20)4-10-15(25)11(18(26)27)6-24(9-2-3-9)16(10)22-17/h4,6,9,12,14H,2-3,5,7-8,21H2,1H3,(H,26,27)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21FN4O3/c1-19-5-14(21)12(19)7-23(8-19)17-13(20)4-10-15(25)11(18(26)27)6-24(9-2-3-9)16(10)22-17/h4,6,9,12,14H,2-3,5,7-8,21H2,1H3,(H,26,27)/t12-,14-,19-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H21FN4O3/c1-19-5-14(21)12(19)7-23(8-19)17-13(20)4-10-15(25)11(18(26)27)6-24(9-2-3-9)16(10)22-17/h4,6,9,12,14H,2-3,5,7-8,21H2,1H3,(H,26,27)/t12-,14?,19-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21FN4O3/c1-19-5-14(21)12(19)7-23(8-19)17-13(20)4-10-15(25)11(18(26)27)6-24(9-2-3-9)16(10)22-17/h4,6,9,12,14H,2-3,5,7-8,21H2,1H3,(H,26,27)/t12-,14+,19+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21N/c1-2-20-14-13-18(15-20)19(16-9-5-3-6-10-16)17-11-7-4-8-12-17/h3-12H,2,13-15H2,1H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C19H21N/c1-20-14-6-11-19-17-9-4-2-7-15(17)12-13-16-8-3-5-10-18(16)19/h2-5,7-10,12-13,19-20H,6,11,14H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21N/c1-20-14-6-11-19-17-9-4-2-7-15(17)12-13-16-8-3-5-10-18(16)19/h2-5,7-11,20H,6,12-14H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21N/c1-20(2)15-14-19(17-9-4-3-5-10-17)13-12-16-8-6-7-11-18(16)19/h3-13H,14-15H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H21N/c1-20(2)15-14-19(17-9-4-3-5-10-17)13-12-16-8-6-7-11-18(16)19/h3-13H,14-15H2,1-2H3/t19-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H21N/c1-20(2)15-14-19(17-9-4-3-5-10-17)13-12-16-8-6-7-11-18(16)19/h3-13H,14-15H2,1-2H3/t19-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21N3/c1-21-10-12-22(13-11-21)19-17-8-4-2-6-15(17)14-16-7-3-5-9-18(16)20-19/h2-9H,10-14H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H21N3O/c1-13-5-8-15(9-6-13)19-16(11-18(23)21(3)4)22-12-14(2)7-10-17(22)20-19/h5-10,12H,11H2,1-4H3	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C19H21N3O/c1-14-6-8-15(9-7-14)13-22-17-5-3-2-4-16(17)21-19(22)18-12-20-10-11-23-18/h2-9,18,20H,10-13H2,1H3/t18-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21N3O2/c1-22(2)16-8-9-18(24)14(10-16)11-20-17-5-3-4-13-6-7-15(12-23)21-19(13)17/h3-10,20,23-24H,11-12H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21N3O5/c1-9(2)26-19(24)15-11(4)20-10(3)14(18(23)25-5)16(15)12-7-6-8-13-17(12)22-27-21-13/h6-9,16,20H,1-5H3/t16-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H21N3O5S2/c1-20(2)29(26,27)17-7-8-18-15(11-17)9-10-21(18)19(23)13-28-12-14-3-5-16(6-4-14)22(24)25/h3-8,11H,9-10,12-13H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H21N3S/c1-14-7-8-17-15(13-14)19(22-11-9-21(2)10-12-22)20-16-5-3-4-6-18(16)23-17/h3-8,13H,9-12H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C19H21N3S/c1-14(12-21(2)3)13-22-16-6-4-5-7-18(16)23-19-9-8-15(11-20)10-17(19)22/h4-10,14H,12-13H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21N3S/c1-14(12-21(2)3)13-22-16-6-4-5-7-18(16)23-19-9-8-15(11-20)10-17(19)22/h4-10,14H,12-13H2,1-3H3/t14-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H21N3S/c1-14(12-21(2)3)13-22-16-6-4-5-7-18(16)23-19-9-8-15(11-20)10-17(19)22/h4-10,14H,12-13H2,1-3H3/t14-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H21N5O2/c1-22-9-11-23(12-10-22)13-17(25)24-16-7-3-2-5-14(16)19(26)21-15-6-4-8-20-18(15)24/h2-8H,9-13H2,1H3,(H,21,26)	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C19H21N5O2S/c25-27(26,14-5-2-1-3-6-14)17-13-21-24-18(17)22-16-8-4-7-15(16)19(24)23-11-9-20-10-12-23/h1-3,5-6,13,20H,4,7-12H2	0	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C19H21N5O4/c1-26-15-10-12-13(11-16(15)27-2)21-19(22-17(12)20)24-7-5-23(6-8-24)18(25)14-4-3-9-28-14/h3-4,9-11H,5-8H2,1-2H3,(H2,20,21,22)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21NO/c1-20(2)13-7-11-17-16-9-4-3-8-15(16)14-21-19-12-6-5-10-18(17)19/h3-6,8-12H,7,13-14H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21NO/c1-20(2)13-7-11-17-16-9-4-3-8-15(16)14-21-19-12-6-5-10-18(17)19/h3-6,8-12H,7,13-14H2,1-2H3/b17-11-	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H21NO/c1-20(2)13-7-11-17-16-9-4-3-8-15(16)14-21-19-12-6-5-10-18(17)19/h3-6,8-12H,7,13-14H2,1-2H3/b17-11+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21NO2/c1-13-6-5-7-14-16-12-20(2)11-10-19(16,21)15-8-3-4-9-17(15)22-18(13)14/h3-9,16,21H,10-12H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H21NO2/c1-13-6-5-7-14-16-12-20(2)11-10-19(16,21)15-8-3-4-9-17(15)22-18(13)14/h3-9,16,21H,10-12H2,1-2H3/t16-,19-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21NO2/c1-13-6-5-7-14-16-12-20(2)11-10-19(16,21)15-8-3-4-9-17(15)22-18(13)14/h3-9,16,21H,10-12H2,1-2H3/t16-,19-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21NO2/c1-13-6-5-7-14-16-12-20(2)11-10-19(16,21)15-8-3-4-9-17(15)22-18(13)14/h3-9,16,21H,10-12H2,1-2H3/t16-,19?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21NO2/c1-13-6-5-7-14-16-12-20(2)11-10-19(16,21)15-8-3-4-9-17(15)22-18(13)14/h3-9,16,21H,10-12H2,1-2H3/t16-,19+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21NO2/c1-20(2)12-6-8-15-16-7-4-5-9-18(16)22-19-11-10-14(21-3)13-17(15)19/h4-5,7-11,13H,6,12H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21NO2/c1-20(2)12-6-8-15-16-7-4-5-9-18(16)22-19-11-10-14(21-3)13-17(15)19/h4-5,7-11,13H,6,12H2,1-3H3/b15-8-	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H21NO2/c1-20(2)12-6-8-15-16-7-4-5-9-18(16)22-19-11-10-14(21-3)13-17(15)19/h4-5,7-11,13H,6,12H2,1-3H3/b15-8+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21NO2/c1-20(2)18(21)13-22-19-16-9-5-3-7-14(16)11-12-15-8-4-6-10-17(15)19/h3-10,19H,11-13H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H21NO3/c1-2-8-20-9-7-19-12-4-6-15(22)18(19)23-17-14(21)5-3-11(16(17)19)10-13(12)20/h2-6,12-13,15,18,21-22H,1,7-10H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21NO3/c1-2-8-20-9-7-19-12-4-6-15(22)18(19)23-17-14(21)5-3-11(16(17)19)10-13(12)20/h2-6,12-13,15,18,21-22H,1,7-10H2/t12-,13?,15+,18-,19?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21NO3/c1-2-8-20-9-7-19-12-4-6-15(22)18(19)23-17-14(21)5-3-11(16(17)19)10-13(12)20/h2-6,12-13,15,18,21-22H,1,7-10H2/t12-,13+,15-,18-,19-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H21NO3/c1-2-8-20-9-7-19-12-4-6-15(22)18(19)23-17-14(21)5-3-11(16(17)19)10-13(12)20/h2-6,12-13,15,18,21-22H,1,7-10H2/t12-,13+,15+,18-,19-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21NO3/c1-20-9-8-19-12-5-7-15(22-3)18(19)23-17-14(21-2)6-4-11(16(17)19)10-13(12)20/h4-7,13,18H,8-10H2,1-3H3	1	(Wu et al., 2018)

InChI=1S/C19H21NO3/c1-20-9-8-19-12-5-7-15(22-3)18(19)23-17-14(21-2)6-4-11(16(17)19)10-13(12)20/h4-7,13,18H,8-10H2,1-3H3/t13-,18+,19+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H21NO3/c1-20-9-8-19-12-5-7-15(22-3)18(19)23-17-14(21-2)6-4-11(16(17)19)10-13(12)20/h4-7,13,18H,8-10H2,1-3H3/t13?,18-,19?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21NO3/c1-20(2)11-15-13-22-19(23-15)16-8-4-3-7-14(16)12-21-18-10-6-5-9-17(18)19/h3-10,15H,11-13H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21NO3/c1-20(2)11-15-13-22-19(23-15)16-8-4-3-7-14(16)12-21-18-10-6-5-9-17(18)19/h3-10,15H,11-13H2,1-2H3/t15-,19-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H21NO3/c1-20(2)11-15-13-22-19(23-15)16-8-4-3-7-14(16)12-21-18-10-6-5-9-17(18)19/h3-10,15H,11-13H2,1-2H3/t15-,19?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21NO3/c1-20(2)11-15-13-22-19(23-15)16-8-4-3-7-14(16)12-21-18-10-6-5-9-17(18)19/h3-10,15H,11-13H2,1-2H3/t15-,19+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21NO4/c1-19(2,18(22)23)24-16-10-8-14(9-11-16)12-13-20-17(21)15-6-4-3-5-7-15/h3-11H,12-13H2,1-2H3,(H,20,21)(H,22,23)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21NO4/c1-2-8-20-9-7-18-15-11-3-4-12(21)16(15)24-17(18)13(22)5-6-19(18,23)14(20)10-11/h2-4,14,17,21,23H,1,5-10H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21NO4/c1-2-8-20-9-7-18-15-11-3-4-12(21)16(15)24-17(18)13(22)5-6-19(18,23)14(20)10-11/h2-4,14,17,21,23H,1,5-10H2/t14-,17-,18+,19+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21NO4/c1-2-8-20-9-7-18-15-11-3-4-12(21)16(15)24-17(18)13(22)5-6-19(18,23)14(20)10-11/h2-4,14,17,21,23H,1,5-10H2/t14-,17+,18-,19-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21NO4/c1-2-8-20-9-7-18-15-11-3-4-12(21)16(15)24-17(18)13(22)5-6-19(18,23)14(20)10-11/h2-4,14,17,21,23H,1,5-10H2/t14-,17+,18+,19-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H21NO4/c1-2-8-20-9-7-18-15-11-3-4-12(21)16(15)24-17(18)13(22)5-6-19(18,23)14(20)10-11/h2-4,14,17,21,23H,1,5-10H2/t14-,17+,18+,19+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H21NO4/c1-2-8-20-9-7-18-15-11-3-4-12(21)16(15)24-17(18)13(22)5-6-19(18,23)14(20)10-11/h2-4,14,17,21,23H,1,5-10H2/t14?,17-,18?,19?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21NO4S/c1-3-24-18(21)19(20)16(14-7-5-4-6-8-14)17(19)25(22,23)15-11-9-13(2)10-12-15/h4-12,16-17H,3,20H2,1-2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H21NO4S/c1-3-24-18(21)19(20)16(14-7-5-4-6-8-14)17(19)25(22,23)15-11-9-13(2)10-12-15/h4-12,16-17H,3,20H2,1-2H3/t16-,17-,19+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H21NO4S2/c1-23-12-19(18(20)25)16(13-8-10-14(24-2)11-9-13)17(19)26(21,22)15-6-4-3-5-7-15/h3-11,16-17H,12H2,1-2H3,(H2,20,25)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H21NS/c1-20-11-8-15(9-12-20)19-16-5-3-2-4-14(16)6-7-18-17(19)10-13-21-18/h2-5,10,13H,6-9,11-12H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H21NS/c1-20(2)13-7-11-17-16-9-4-3-8-15(16)14-21-19-12-6-5-10-18(17)19/h3-6,8-12H,7,13-14H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H21NS/c1-20(2)13-7-11-17-16-9-4-3-8-15(16)14-21-19-12-6-5-10-18(17)19/h3-6,8-12H,7,13-14H2,1-2H3/b17-11-	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H21NS/c1-20(2)13-7-11-17-16-9-4-3-8-15(16)14-21-19-12-6-5-10-18(17)19/h3-6,8-12H,7,13-14H2,1-2H3/b17-11+	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H22Cl2N4O/c20-14-4-3-13(9-15(14)21)10-18(26)25-8-5-16-19(23-12-22-16)17(25)11-24-6-1-2-7-24/h3-4,9,12,17H,1-2,5-8,10-	0	(Meng et al., 2021)

11H ₂ , (H, 22, 23)	
InChI=1S/C19H22Cl2N4O/c20-14-4-3-13(9-15(14)21)10-18(26)25-8-5-16-19(23-12-22-16)17(25)11-24-6-1-2-7-24/h3-4,9,12,17H,1-2,5-8,10-11H ₂ , (H, 22, 23)/t17-/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H22Cl2N4O/c20-14-4-3-13(9-15(14)21)10-18(26)25-8-5-16-19(23-12-22-16)17(25)11-24-6-1-2-7-24/h3-4,9,12,17H,1-2,5-8,10-11H ₂ , (H, 22, 23)/t17-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22Cl2N4O/c20-15-4-3-14(11-16(15)21)12-18(26)25-10-9-24-8-5-22-19(24)17(25)13-23-6-1-2-7-23/h3-5,8,11,17H,1-2,6-7,9-10,12-13H ₂	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H22Cl2N4O/c20-15-4-3-14(11-16(15)21)12-18(26)25-10-9-24-8-5-22-19(24)17(25)13-23-6-1-2-7-23/h3-5,8,11,17H,1-2,6-7,9-10,12-13H ₂ /t17-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H22Cl2N4O/c20-15-4-3-14(11-16(15)21)12-18(26)25-10-9-24-8-5-22-19(24)17(25)13-23-6-1-2-7-23/h3-5,8,11,17H,1-2,6-7,9-10,12-13H ₂ /t17-/m1/s1	1 (Li et al., 2005)
InChI=1S/C19H22Cl2N4O ₂ /c20-14-2-1-12(7-15(14)21)8-18(27)25-6-4-16-19(23-11-22-16)17(25)10-24-5-3-13(26)9-24/h1-2,7,11,13,17,26H,3-6,8-10H ₂ , (H, 22, 23)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22Cl2N4O ₂ /c20-14-2-1-12(7-15(14)21)8-18(27)25-6-4-16-19(23-11-22-16)17(25)10-24-5-3-13(26)9-24/h1-2,7,11,13,17,26H,3-6,8-10H ₂ , (H, 22, 23)/t13-,17-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22Cl2N4O ₂ /c20-14-2-1-12(7-15(14)21)8-18(27)25-6-4-16-19(23-11-22-16)17(25)10-24-5-3-13(26)9-24/h1-2,7,11,13,17,26H,3-6,8-10H ₂ , (H, 22, 23)/t13-,17-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22Cl2N4O ₂ /c20-15-2-1-13(9-16(15)21)10-18(27)25-8-7-24-6-4-22-19(24)17(25)12-23-5-3-14(26)11-23/h1-2,4,6,9,14,17,26H,3,5,7-8,10-12H ₂	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22Cl2N4O ₂ /c20-15-2-1-13(9-16(15)21)10-18(27)25-8-7-24-6-4-22-19(24)17(25)12-23-5-3-14(26)11-23/h1-2,4,6,9,14,17,26H,3,5,7-8,10-12H ₂ /t14-,17-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22Cl2N4O ₂ /c20-15-2-1-13(9-16(15)21)10-18(27)25-8-7-24-6-4-22-19(24)17(25)12-23-5-3-14(26)11-23/h1-2,4,6,9,14,17,26H,3,5,7-8,10-12H ₂ /t14-,17-/m1/s1	0 (Li et al., 2005)
InChI=1S/C19H22ClN5O/c20-16-5-3-6-17(15-16)23-13-11-22(12-14-23)8-4-10-25-19(26)24-9-2-1-7-18(24)21-25/h1-3,5-7,9,15H,4,8,10-14H ₂	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22ClNO ₂ /c20-18-8-6-17(7-9-18)19(16-4-2-1-3-5-16)23-15-12-21-10-13-22-14-11-21/h1-9,19H,10-15H ₂	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22ClNO ₂ /c20-18-8-6-17(7-9-18)19(16-4-2-1-3-5-16)23-15-12-21-10-13-22-14-11-21/h1-9,19H,10-15H ₂ /t19-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H22ClNO ₂ S/c1-23-18-7-3-2-5-16(18)6-4-12-21-19(22)14-24-13-15-8-10-17(20)11-9-15/h2-3,5,7-11H,4,6,12-14H ₂ ,1H ₃ , (H, 21, 22)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22ClNO ₂ S/c1-23-18-9-7-15(8-10-18)5-3-11-21-19(22)14-24-13-16-4-2-6-17(20)12-16/h2,4,6-10,12H,3,5,11,13-14H ₂ ,1H ₃ , (H, 21, 22)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H22ClNO ₄ S/c1-24-12-19(11-21)17(13-3-7-15(25-2)8-4-13)18(19)26(22,23)16-9-5-14(20)6-10-16/h3-10,17-18H,11-12,21H ₂ ,1-2H ₃ /t17-,18-,19-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22F2N4O ₃ /c1-8-5-24(6-9(2)23-8)17-13(20)15(22)12-16(14(17)21)25(10-3-4-10)7-11(18(12)26)19(27)28/h7-10,23H,3-6,22H ₂ ,1-2H ₃ , (H, 27, 28)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22F2N4O ₃ /c1-8-5-24(6-9(2)23-8)17-13(20)15(22)12-16(14(17)21)25(10-3-4-10)7-11(18(12)26)19(27)28/h7-10,23H,3-6,22H ₂ ,1-2H ₃ , (H, 27, 28)/t8-,9-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C19H22F2N4O3/c1-8-5-24(6-9(2)23-8)17-13(20)15(22)12-16(14(17)21)25(10-3-4-10)7-11(18(12)26)19(27)28/h7-10,23H,3-6,22H2,1-2H3,(H,27,28)/t8-,9+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22F3N5O2S/c1-10-14(11-6-7-24-13(9-11)18(2,3)19(20,21)22)30-16(25-10)26-17(29)27-8-4-5-12(27)15(23)28/h6-7,9,12H,4-5,8H2,1-3H3,(H2,23,28)(H,25,26,29)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H22F3N5O2S/c1-10-14(11-6-7-24-13(9-11)18(2,3)19(20,21)22)30-16(25-10)26-17(29)27-8-4-5-12(27)15(23)28/h6-7,9,12H,4-5,8H2,1-3H3,(H2,23,28)(H,25,26,29)/t12-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22FN3O/c20-17-8-6-16(7-9-17)18(24)4-3-11-22-12-14-23(15-13-22)19-5-1-2-10-21-19/h1-2,5-10H,3-4,11-15H2	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C19H22FN3O3/c1-10-8-22(6-5-21-10)15-7-14-16(11(2)17(15)20)18(24)13(19(25)26)9-23(14)12-3-4-12/h7,9-10,12,21H,3-6,8H2,1-2H3,(H,25,26)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22FN3O3/c1-10-8-22(6-5-21-10)15-7-14-16(11(2)17(15)20)18(24)13(19(25)26)9-23(14)12-3-4-12/h7,9-10,12,21H,3-6,8H2,1-2H3,(H,25,26)/t10-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H22FN3O4/c1-10-8-22(6-5-21-10)16-14(20)7-12-15(18(16)27-2)23(11-3-4-11)9-13(17(12)24)19(25)26/h7,9-11,21H,3-6,8H2,1-2H3,(H,25,26)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22FN3O4/c1-10-8-22(6-5-21-10)16-14(20)7-12-15(18(16)27-2)23(11-3-4-11)9-13(17(12)24)19(25)26/h7,9-11,21H,3-6,8H2,1-2H3,(H,25,26)/t10-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22FN3O4/c20-13-1-2-15-12(9-13)10-14(22-15)11-21-16(24)3-6-19(8-5-18(26)27)7-4-17(25)23-19/h1-2,9-10,22H,3-8,11H2,(H,21,24)(H,23,25)(H,26,27)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H22FN3O4/c20-13-1-2-15-12(9-13)10-14(22-15)11-21-16(24)3-6-19(8-5-18(26)27)7-4-17(25)23-19/h1-2,9-10,22H,3-8,11H2,(H,21,24)(H,23,25)(H,26,27)/t19-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22FN3O4/c20-13-1-2-15-12(9-13)10-14(22-15)11-21-16(24)3-6-19(8-5-18(26)27)7-4-17(25)23-19/h1-2,9-10,22H,3-8,11H2,(H,21,24)(H,23,25)(H,26,27)/t19-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22N2/c1-16-7-9-17(10-8-16)18(19-6-2-3-12-20-19)11-15-21-13-4-5-14-21/h2-3,6-12H,4-5,13-15H2,1H3/b18-11-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22N2/c1-20(2)14-7-15-21-18-10-5-3-8-16(18)12-13-17-9-4-6-11-19(17)21/h3-6,8-13H,7,14-15H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22N2O/c1-19(13-8-14-20-2)16-11-6-7-12-17(16)21(18(19)22)15-9-4-3-5-10-15/h3-7,9-12,20H,8,13-14H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22N2O/c1-19(13-8-14-20-2)16-11-6-7-12-17(16)21(18(19)22)15-9-4-3-5-10-15/h3-7,9-12,20H,8,13-14H2,1-2H3/t19-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H22N2O/c1-2-13-12-21-10-8-14(13)11-18(21)19(22)16-7-9-20-17-6-4-3-5-15(16)17/h2-7,9,13-14,18-19,22H,1,8,10-12H2/t13-,14-,18+,19+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H22N2O/c1-20(2)12-7-13-21-17-10-5-3-8-15(17)14-19(22)16-9-4-6-11-18(16)21/h3-6,8-11H,7,12-14H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H22N2O/c1-21(2)13-14-22-20-19-17-9-5-3-7-15(17)11-12-16-8-4-6-10-18(16)19/h3-10H,11-14H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22N2O2/c1-13-17(9-10-20)18-11-15(22)5-8-19(18)21(13)12-14-3-6-16(23-2)7-4-14/h3-8,11,22H,9-10,12,20H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22N2O3/c1-5-17(15-7-6-12(2)13(3)10-15)20-19(22)16-8-9-18(21(23)24)14(4)11-16/h6-11,17H,5H2,1-4H3,(H,20,22)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H22N2O3/c1-5-17(15-7-6-12(2)13(3)10-15)20-19(22)16-8-9-18(21(23)24)14(4)11-16/h6-11,17H,5H2,1-4H3,(H,20,22)/t17-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C19H22N2O4S/c1-14-5-3-4-6-18(14)25-11-15(2)20-19(22)13-26-12-16-7-9-17(10-8-16)21(23)24/h3-10,15H,11-13H2,1-2H3,(H,20,22)/t15-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H22N2O6/c20-17(24)10-15(12-1-3-13(22)4-2-12)19-18(25)16(23)9-14(27-19)11-21-5-7-26-8-6-21/h1-4,9,15,22,25H,5-8,10-11H2,(H2,20,24)/t15-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H22N2O6/c20-17(24)10-15(12-1-3-13(22)4-2-12)19-18(25)16(23)9-14(27-19)11-21-5-7-26-8-6-21/h1-4,9,15,22,25H,5-8,10-11H2,(H2,20,24)/t15-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22N2O6S/c1-11(22)26-10-27-18(25)15-19(2,3)28-17-14(16(24)21(15)17)20-13(23)9-12-7-5-4-6-8-12/h4-8,14-15,17H,9-10H2,1-3H3,(H,20,23)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H22N2O6S/c1-11(22)26-10-27-18(25)15-19(2,3)28-17-14(16(24)21(15)17)20-13(23)9-12-7-5-4-6-8-12/h4-8,14-15,17H,9-10H2,1-3H3,(H,20,23)/t14-,15-,17-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22N2O6S/c1-11(22)26-10-27-18(25)15-19(2,3)28-17-14(16(24)21(15)17)20-13(23)9-12-7-5-4-6-8-12/h4-8,14-15,17H,9-10H2,1-3H3,(H,20,23)/t14-,15-,17+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22N2O6S/c1-11(22)26-10-27-18(25)15-19(2,3)28-17-14(16(24)21(15)17)20-13(23)9-12-7-5-4-6-8-12/h4-8,14-15,17H,9-10H2,1-3H3,(H,20,23)/t14-,15+,17-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22N2O6S/c1-11(22)26-10-27-18(25)15-19(2,3)28-17-14(16(24)21(15)17)20-13(23)9-12-7-5-4-6-8-12/h4-8,14-15,17H,9-10H2,1-3H3,(H,20,23)/t14?,15-,17-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22N2OS/c1-13(20(3)4)12-21-16-7-5-6-8-18(16)23-19-10-9-15(14(2)22)11-17(19)21/h5-11,13H,12H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22N2OS/c1-13(20(3)4)12-21-16-7-5-6-8-18(16)23-19-10-9-15(14(2)22)11-17(19)21/h5-11,13H,12H2,1-4H3/t13-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22N2OS/c1-14(22)15-9-10-19-17(13-15)21(12-6-11-20(2)3)16-7-4-5-8-18(16)23-19/h4-5,7-10,13H,6,11-12H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22N2OS/c1-20(2)12-13-21-16-10-6-7-11-17(16)23-18(14-19(21)22)15-8-4-3-5-9-15/h3-11,18H,12-14H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22N2OS/c1-20(2)12-13-21-16-10-6-7-11-17(16)23-18(14-19(21)22)15-8-4-3-5-9-15/h3-11,18H,12-14H2,1-2H3/t18-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22N2OS/c1-20(2)12-13-21-16-10-6-7-11-17(16)23-18(14-19(21)22)15-8-4-3-5-9-15/h3-11,18H,12-14H2,1-2H3/t18-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22N2S/c1-19(11-12-20(2)13-19)14-21-15-7-3-5-9-17(15)22-18-10-6-4-8-16(18)21/h3-10H,11-14H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H22N2S/c1-19(11-12-20(2)13-19)14-21-15-7-3-5-9-17(15)22-18-10-6-4-8-16(18)21/h3-10H,11-14H2,1-2H3/t19-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H22N2S/c1-19(11-12-20(2)13-19)14-21-15-7-3-5-9-17(15)22-18-10-6-4-8-16(18)21/h3-10H,11-14H2,1-2H3/t19-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H22N2S/c1-20-12-6-7-15(13-20)14-21-16-8-2-4-10-18(16)22-19-11-5-3-9-17(19)21/h2-5,8-11,15H,6-7,12-14H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22N2S/c1-20-12-6-7-15(13-20)14-21-16-8-2-4-10-18(16)22-19-11-5-3-9-17(19)21/h2-5,8-11,15H,6-7,12-14H2,1H3/t15-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22N2S/c1-20-12-6-7-15(13-20)14-21-16-8-2-4-10-18(16)22-19-11-5-3-9-17(19)21/h2-5,8-11,15H,6-7,12-14H2,1H3/t15-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22N4O/c1-22(2)13-14-6-5-7-16(12-14)19-20-18(21-23(19)3)15-8-10-17(24-4)11-9-15/h5-12H,13H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22N4O3S2/c1-10(2)28(25,26)14-7-5-13(6-8-14)9-21-18(24)17-16(20)15-11(3)12(4)22-23-19(15)27-17/h5-8,10H,9,20H2,1-4H3,(H,21,24)	0	(Wu et al., 2018)

InChI=1S/C19H22N4OS/c1-12-4-5-16(10-20-12)24-15-6-8-23(9-7-15)18-17-13(2)14(3)25-19(17)22-11-21-18/h4-5,10-11,15H,6-9H2,1-3H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C19H22N8O6S2/c1-33-24-12(10-8-35-19(21)22-10)15(29)23-13-16(30)27-14(18(31)32)9(7-34-17(13)27)6-25-3-2-11(20)26(25)4-5-28/h2-3,8,13,17,20,28H,4-7H2,1H3,(H4,21,22,23,29,31,32)/b24-12-/t13-,17-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H22N8O6S2/c1-33-24-12(10-8-35-19(21)22-10)15(29)23-13-16(30)27-14(18(31)32)9(7-34-17(13)27)6-25-3-2-11(20)26(25)4-5-28/h2-3,8,13,17,20,28H,4-7H2,1H3,(H4,21,22,23,29,31,32)/p+1/b24-12-/t13-,17-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H22N8O6S2/c1-33-24-12(10-8-35-19(21)22-10)15(29)23-13-16(30)27-14(18(31)32)9(7-34-17(13)27)6-25-3-2-11(20)26(25)4-5-28/h2-3,8,13,17,20,28H,4-7H2,1H3,(H4,21,22,23,29,31,32)/p+1/b24-12+/t13-,17-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H22O8/c1-10-6-13(20)18(19(22)27-10)12(8-17(21)26-5)11-7-15(24-3)16(25-4)9-14(11)23-2/h6-7,9,12,20H,8H2,1-5H3/t12-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23CIN2/c1-21-12-5-13-22(15-14-21)19(16-6-3-2-4-7-16)17-8-10-18(20)11-9-17/h2-4,6-11,19H,5,12-15H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H23CIN2/c1-21-12-5-13-22(15-14-21)19(16-6-3-2-4-7-16)17-8-10-18(20)11-9-17/h2-4,6-11,19H,5,12-15H2,1H3/t19-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23CIN2/c1-21-12-5-13-22(15-14-21)19(16-6-3-2-4-7-16)17-8-10-18(20)11-9-17/h2-4,6-11,19H,5,12-15H2,1H3/t19-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23CIN2/c1-21(2)12-5-13-22-18-7-4-3-6-15(18)8-9-16-10-11-17(20)14-19(16)22/h3-4,6-7,10-11,14H,5,8-9,12-13H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23FN2O3/c1-21-17(24)13-19(18(21)25)8-11-22(12-9-19)10-2-3-16(23)14-4-6-15(20)7-5-14/h4-7H,2-3,8-13H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23FN4O4/c1-13-21-18(17(24(26)27)19(25)23(13)11-12-28-2)22-9-7-15(8-10-22)14-3-5-16(20)6-4-14/h3-6,15H,7-12H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23N3/c1-20(2)13-14-21(3)22-15-18(16-9-5-4-6-10-16)17-11-7-8-12-19(17)22/h4-12,15H,13-14H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23N3O/c1-13-5-8-15(9-6-13)19-16(11-18(23)21(3)4)22-12-14(2)7-10-17(22)20-19/h5-10,12,17,20H,11H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23N3O/c1-13-5-8-15(9-6-13)19-16(11-18(23)21(3)4)22-12-14(2)7-10-17(22)20-19/h5-10,12,17,20H,11H2,1-4H3/t17-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23N3O/c1-21(2)13-8-14-23-19-17-11-6-7-12-18(17)22(20-19)15-16-9-4-3-5-10-16/h3-7,9-12H,8,13-15H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H23N3O2/c23-19(24-15-17-4-2-1-3-5-17)22-12-8-16(9-13-22)14-21-18-6-10-20-11-7-18/h1-7,10-11,16H,8-9,12-15H2,(H,20,21)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23N3O2/c23-19(24-15-17-6-2-1-3-7-17)22-12-9-16(10-13-22)14-21-18-8-4-5-11-20-18/h1-8,11,16H,9-10,12-15H2,(H,20,21)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23N3O4S/c1-18(2)13(17(25)26)21-15(24)12(16(21)27-18)22-14(23)11(20-19(22,3)4)10-8-6-5-7-9-10/h5-9,11-13,16,20H,1-4H3,(H,25,26)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23N3O4S/c1-18(2)13(17(25)26)21-15(24)12(16(21)27-18)22-14(23)11(20-19(22,3)4)10-8-6-5-7-9-10/h5-9,11-13,16,20H,1-4H3,(H,25,26)/t11-,12-,13-,16-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23N3O4S/c1-18(2)13(17(25)26)21-15(24)12(16(21)27-18)22-14(23)11(20-19(22,3)4)10-8-6-5-7-9-10/h5-9,11-13,16,20H,1-4H3,(H,25,26)/t11-,12-,13+,16-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23N3O4S/c1-18(2)13(17(25)26)21-15(24)12(16(21)27-18)22-14(23)11(20-19(22,3)4)10-8-6-5-7-9-10/h5-9,11-13,16,20H,1-4H3,(H,25,26)/t11-,12+,13-,16+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23N3O4S/c1-18(2)13(17(25)26)21-15(24)12(16(21)27-18)22-14(23)11(20-19(22,3)4)10-8-6-5-7-9-10/h5-9,11-13,16,20H,1-4H3,(H,25,26)/t11?,12?,13-,16-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23N3O5S/c1-18(2)13(17(26)27)21-15(25)12(16(21)28-18)22-14(24)11(20-19(22,3)4)9-5-7-10(23)8-6-9/h5-8,11-13,16,20,23H,1-4H3,(H,26,27)	0	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C19H23N3O5S/c1-18(2)13(17(26)27)21-15(25)12(16(21)28-18)22-14(24)11(20-19(22,3)4)9-5-7-10(23)8-6-9/h5-8,11-13,16,20,23H,1-4H3,(H,26,27)/p+1/t11?,12-,13+,16-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H23N3O5S/c1-18(2)13(17(26)27)21-15(25)12(16(21)28-18)22-14(24)11(20-19(22,3)4)9-5-7-10(23)8-6-9/h5-8,11-13,16,20,23H,1-4H3,(H,26,27)/t11-,12-,13+,16-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23N3O5S/c1-18(2)13(17(26)27)21-15(25)12(16(21)28-18)22-14(24)11(20-19(22,3)4)9-5-7-10(23)8-6-9/h5-8,11-13,16,20,23H,1-4H3,(H,26,27)/t11-,12?,13-,16-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23N3O5S/c1-18(2)13(17(26)27)21-15(25)12(16(21)28-18)22-14(24)11(20-19(22,3)4)9-5-7-10(23)8-6-9/h5-8,11-13,16,20,23H,1-4H3,(H,26,27)/t11-,12+,13-,16+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23N3O5S/c1-18(2)13(17(26)27)21-15(25)12(16(21)28-18)22-14(24)11(20-19(22,3)4)9-5-7-10(23)8-6-9/h5-8,11-13,16,20,23H,1-4H3,(H,26,27)/t11-,12+,13+,16+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23N3O5S/c1-18(2)13(17(26)27)21-15(25)12(16(21)28-18)22-14(24)11(20-19(22,3)4)9-5-7-10(23)8-6-9/h5-8,11-13,16,20,23H,1-4H3,(H,26,27)/t11?,12-,13-,16+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23N3O5S/c1-18(2)13(17(26)27)21-15(25)12(16(21)28-18)22-14(24)11(20-19(22,3)4)9-5-7-10(23)8-6-9/h5-8,11-13,16,20,23H,1-4H3,(H,26,27)/t11?,12?,13-,16-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23N4O6PS/c1-13(23(12-24)11-16-10-21-14(2)22-18(16)20)17(8-9-29-30(26,27)28)31-19(25)15-6-4-3-5-7-15/h3-7,10,12H,8-9,11H2,1-2H3,(H2,20,21,22)(H2,26,27,28)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23N4O6PS/c1-13(23(12-24)11-16-10-21-14(2)22-18(16)20)17(8-9-29-30(26,27)28)31-19(25)15-6-4-3-5-7-15/h3-7,10,12H,8-9,11H2,1-2H3,(H2,20,21,22)(H2,26,27,28)/b17-13-	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H23N4O6PS/c1-13(23(12-24)11-16-10-21-14(2)22-18(16)20)17(8-9-29-30(26,27)28)31-19(25)15-6-4-3-5-7-15/h3-7,10,12H,8-9,11H2,1-2H3,(H2,20,21,22)(H2,26,27,28)/b17-13+	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H23N5O/c1-12-4-5-16-19(14(12)3)24-17(23-16)6-7-18(25)22-13(2)10-15-11-20-8-9-21-15/h4-5,8-9,11,13H,6-7,10H2,1-3H3,(H,22,25)(H,23,24)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H23N5O/c1-12-4-5-16-19(14(12)3)24-17(23-16)6-7-18(25)22-13(2)10-15-11-20-8-9-21-15/h4-5,8-9,11,13H,6-7,10H2,1-3H3,(H,22,25)(H,23,24)/t13-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23N5O/c1-13-6-11-24-18(13)19(21-15(3)22-24)23-9-7-16(8-10-23)25-17-5-4-14(2)20-12-17/h4-6,11-12,16H,7-10H2,1-3H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C19H23N5O3/c1-10-11(5-6-13-16(10)18(20)24-19(21)23-13)9-22-12-7-14(25-2)17(27-4)15(8-12)26-3/h5-8,22H,9H2,1-4H3,(H4,20,21,23,24)	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C19H23N5O3S/c25-18-16-6-1-2-7-17(16)28(26,27)24(18)11-4-3-10-22-12-14-23(15-13-22)19-20-8-5-9-21-19/h1-2,5-9H,3-4,10-15H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23N7O6/c20-19-25-15-14(17(30)26-19)23-11(8-22-15)7-21-10-3-1-9(2-4-10)16(29)24-12(18(31)32)5-6-13(27)28/h1-4,11-12,21,23H,5-8H2,(H,24,29)(H,27,28)(H,31,32)(H4,20,22,25,26,30)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H23NO/c1-20-14-12-18(13-15-20)21-19(16-8-4-2-5-9-16)17-10-6-3-7-11-17/h2-11,18-19H,12-15H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23NO/c1-20(2)13-7-11-17-16-9-4-3-8-15(16)14-21-19-12-6-5-10-18(17)19/h3-6,8-10,12,17H,7,11,13-14H2,1-2H3/t17-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23NO2/c1-20-10-9-15-11-18(21-2)19(22-3)12-16(15)17(13-20)14-7-5-4-6-8-14/h4-8,11-12,17H,9-10,13H2,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H23NO2/c1-20-10-9-15-11-18(21-2)19(22-3)12-16(15)17(13-20)14-7-5-4-6-8-14/h4-8,11-12,17H,9-10,13H2,1-3H3/t17-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C19H23NO2/c1-20-10-9-15-11-18(21-2)19(22-3)12-16(15)17(13-20)14-7-5-4-6-8-14/h4-8,11-12,17H,9-10,13H2,1-3H3/t17-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H23NO2S/c1-14-9-7-8-12-18(14)22-13-15(2)20-19(21)16(3)23-17-10-5-4-6-11-17/h4-12,15-16H,13H2,1-3H3,(H,20,21)/t15-,16-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23NO2S/c1-15-8-10-18(11-9-15)22-13-12-20-19(21)16(2)23-14-17-6-4-3-5-7-17/h3-11,16H,12-14H2,1-2H3,(H,20,21)/t16-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H23NO2S/c1-20(2)12-6-11-19(21)15-7-4-5-8-17(15)23-18-10-9-14(22-3)13-16(18)19/h4-5,7-10,13,21H,6,11-12H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23NO2S/c1-20(2)12-6-11-19(21)15-7-4-5-8-17(15)23-18-10-9-14(22-3)13-16(18)19/h4-5,7-10,13,21H,6,11-12H2,1-3H3/t19-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23NO2S/c1-20(2)12-6-11-19(21)15-7-4-5-8-17(15)23-18-10-9-14(22-3)13-16(18)19/h4-5,7-10,13,21H,6,11-12H2,1-3H3/t19-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H23NO2S/c1-22-18-12-6-5-8-16(18)9-7-14-20-19(21)13-15-23-17-10-3-2-4-11-17/h2-6,8,10-12H,7,9,13-15H2,1H3,(H,20,21)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23NO3/c1-14(19(22)15-7-4-3-5-8-15)20-12-11-18(21)16-9-6-10-17(13-16)23-2/h3-10,13-14,19-20,22H,11-12H2,1-2H3/t14-,19+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H23NO3/c1-2-21-16-10-6-7-11-17(16)23-19(15-8-4-3-5-9-15)18-14-20-12-13-22-18/h3-11,18-20H,2,12-14H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23NO3/c1-2-21-16-10-6-7-11-17(16)23-19(15-8-4-3-5-9-15)18-14-20-12-13-22-18/h3-11,18-20H,2,12-14H2,1H3/t18-,19-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23NO3/c1-2-21-16-10-6-7-11-17(16)23-19(15-8-4-3-5-9-15)18-14-20-12-13-22-18/h3-11,18-20H,2,12-14H2,1H3/t18-,19-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H23NO3/c1-2-21-16-10-6-7-11-17(16)23-19(15-8-4-3-5-9-15)18-14-20-12-13-22-18/h3-11,18-20H,2,12-14H2,1H3/t18-,19+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H23NO4S/c1-3-24-13-19(20)17(14-9-11-15(23-2)12-10-14)18(19)25(21,22)16-7-5-4-6-8-16/h4-12,17-18H,3,13,20H2,1-2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H23NO4S/c1-3-24-13-19(20)17(14-9-11-15(23-2)12-10-14)18(19)25(21,22)16-7-5-4-6-8-16/h4-12,17-18H,3,13,20H2,1-2H3/t17-,18-,19-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H23NO4S/c1-3-24-13-19(20)17(14-9-11-15(23-2)12-10-14)18(19)25(21,22)16-7-5-4-6-8-16/h4-12,17-18H,3,13,20H2,1-2H3/t17-,18-,19+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23NO5/c1-24-9-8-20-7-6-18-15-11-2-3-12(21)16(15)25-17(18)13(22)4-5-19(18,23)14(20)10-11/h2-3,14,17,21,23H,4-10H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23NO5/c1-24-9-8-20-7-6-18-15-11-2-3-12(21)16(15)25-17(18)13(22)4-5-19(18,23)14(20)10-11/h2-3,14,17,21,23H,4-10H2,1H3/t14-,17-,18+,19+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23NO5/c1-24-9-8-20-7-6-18-15-11-2-3-12(21)16(15)25-17(18)13(22)4-5-19(18,23)14(20)10-11/h2-3,14,17,21,23H,4-10H2,1H3/t14-,17+,18-,19-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23NO5/c1-24-9-8-20-7-6-18-15-11-2-3-12(21)16(15)25-17(18)13(22)4-5-19(18,23)14(20)10-11/h2-3,14,17,21,23H,4-10H2,1H3/t14-,17+,18+,19-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H23NOS/c1-14-9-10-17(13-15(14)2)16(3)20-19(21)11-12-22-18-7-5-4-6-8-18/h4-10,13,16H,11-12H2,1-3H3,(H,20,21)/t16-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H23NOS/c1-14-9-10-17(13-15(14)2)16(3)20-19(21)11-12-22-18-7-5-4-6-8-18/h4-10,13,16H,11-12H2,1-3H3,(H,20,21)/t16-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C19H24ClN5O/c20-16-5-3-6-17(15-16)23-13-11-22(12-14-23)8-4-10-25-19(26)24-9-2-1-7-18(24)21-25/h1-3,5-7,9,15,18,21H,4,8,10-14H2/t18-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H24ClNO/c1-15(14-21(3)4)22-19(2,16-8-6-5-7-9-16)17-10-12-18(20)13-11-17/h5-13,15H,14H2,1-4H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H24ClNO/c1-15(14-21(3)4)22-19(2,16-8-6-5-7-9-16)17-10-12-18(20)13-11-17/h5-13,15H,14H2,1-4H3/t15-,19-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H24ClNO/c1-15(14-21(3)4)22-19(2,16-8-6-5-7-9-16)17-10-12-18(20)13-11-17/h5-13,15H,14H2,1-4H3/t15-,19?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H24ClNO/c1-15(14-21(3)4)22-19(2,16-8-6-5-7-9-16)17-10-12-18(20)13-11-17/h5-13,15H,14H2,1-4H3/t15-,19+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H24N2/c1-19(13-8-14-20-2)15-21(16-9-4-3-5-10-16)18-12-7-6-11-17(18)19/h3-7,9-12,20H,8,13-15H2,1-2H3	1	2023) (Mazumdar et al.,
InChI=1S/C19H24N2/c1-19(13-8-14-20-2)15-21(16-9-4-3-5-10-16)18-12-7-6-11-17(18)19/h3-7,9-12,20H,8,13-15H2,1-2H3/t19-/m0/s1	1	2023) (Mazumdar et al.,
InChI=1S/C19H24N2/c1-19(2)15-9-4-6-11-17(15)21(14-8-13-20-3)18-12-7-5-10-16(18)19/h4-7,9-12,20H,8,13-14H2,1-3H3	1	2023) (Mazumdar et al.,
InChI=1S/C19H24N2/c1-20(2)12-7-13-21-15-18-10-4-3-8-16(18)14-17-9-5-6-11-19(17)21/h3-6,8-11H,7,12-15H2,1-2H3	1	2023)
InChI=1S/C19H24N2/c1-20(2)14-7-15-21-18-10-5-3-8-16(18)12-13-17-9-4-6-11-19(17)21/h3-6,8-11H,7,12-15H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H24N2/c1-20(2)14-7-15-21-18-10-5-3-8-16(18)12-13-17-9-4-6-11-19(17)21/h3-6,8-11H,7,12-15H2,1-2H3/p+1	1	(Vilar et al., 2010) (Mazumdar et al.,
InChI=1S/C19H24N2O/c1-21(2,22)15-7-14-20-18-10-5-3-8-16(18)12-13-17-9-4-6-11-19(17)20/h3-6,8-11H,7,12-15H2,1-2H3	1	2023)
InChI=1S/C19H24N2O/c1-22-18-12-6-5-10-16(18)14-21-17-11-7-13-20-19(17)15-8-3-2-4-9-15/h2-6,8-10,12,17,19-21H,7,11,13-14H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H24N2O/c1-22-18-12-6-5-10-16(18)14-21-17-11-7-13-20-19(17)15-8-3-2-4-9-15/h2-6,8-10,12,17,19-21H,7,11,13-14H2,1H3/t17-,19-/m0/s1	1	(Mazumdar et al.,
InChI=1S/C19H24N2O/c22-19-16-6-2-4-14-3-1-5-15(18(14)16)11-21(19)17-12-20-9-7-13(17)8-10-20/h2,4,6,13,15,17H,1,3,5,7-12H2	1	2023) (Mazumdar et al.,
InChI=1S/C19H24N2O2/c22-18-13-20(19(23)15-7-2-1-3-8-15)12-17-16-9-5-4-6-14(16)10-11-21(17)18/h4-6,9,15,17H,1-3,7-8,10-13H2	1	2023)
InChI=1S/C19H24N2O2/c22-18-13-20(19(23)15-7-2-1-3-8-15)12-17-16-9-5-4-6-14(16)10-11-21(17)18/h4-6,9,15,17H,1-3,7-8,10-13H2/t17-/m0/s1	1	(Mazumdar et al.,
InChI=1S/C19H24N2O2/c22-18-13-20(19(23)15-7-2-1-3-8-15)12-17-16-9-5-4-6-14(16)10-11-21(17)18/h4-6,9,15,17H,1-3,7-8,10-13H2/t17-/m1/s1	1	2023) (Mazumdar et al.,
InChI=1S/C19H24N2O3/c1-13(7-8-14-5-3-2-4-6-14)21-12-18(23)15-9-10-17(22)16(11-15)19(20)24/h2-6,9-11,13,18,21-23H,7-8,12H2,1H3,(H2,20,24)	0	2023) (Mazumdar et al.,
InChI=1S/C19H24N2O3/c1-13(7-8-14-5-3-2-4-6-14)21-12-18(23)15-9-10-17(22)16(11-15)19(20)24/h2-6,9-11,13,18,21-23H,7-8,12H2,1H3,(H2,20,24)/t13-,18+/m0/s1	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C19H24N2O4/c1-13(9-14-3-6-16(25-2)7-4-14)20-11-19(24)15-5-8-18(23)17(10-15)21-12-22/h3-8,10,12-13,19-20,23-24H,9,11H2,1-2H3,(H,21,22)	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C19H24N2O4/c1-13(9-14-3-6-16(25-2)7-4-14)20-11-19(24)15-5-8-18(23)17(10-15)21-12-22/h3-8,10,12-13,19-20,23-24H,9,11H2,1-2H3,(H,21,22)/t13-,19+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H24N2O4/c1-14-4-2-3-5-18(14)25-13-16(22)12-21-10-11-24-17-8-6-15(7-9-17)19(20)23/h2-9,16,21-22H,10-13H2,1H3,(H2,20,23)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H24N2O7S/c1-9(2)8-11(28-18(26)10-6-5-7-27-10)14(22)20-12-15(23)21-13(17(24)25)19(3,4)29-16(12)21/h5-7,9,11-13,16H,8H2,1-4H3,(H,20,22)(H,24,25)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H24N2O7S/c1-9(2)8-11(28-18(26)10-6-5-7-27-10)14(22)20-12-15(23)21-13(17(24)25)19(3,4)29-16(12)21/h5-7,9,11-13,16H,8H2,1-4H3,(H,20,22)(H,24,25)/t11-,12-,13+,16-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H24N2O7S/c1-9(2)8-11(28-18(26)10-6-5-7-27-10)14(22)20-12-15(23)21-13(17(24)25)19(3,4)29-16(12)21/h5-7,9,11-13,16H,8H2,1-4H3,(H,20,22)(H,24,25)/t11-,12?,13-,16-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H24N2O7S/c1-9(2)8-11(28-18(26)10-6-5-7-27-10)14(22)20-12-15(23)21-13(17(24)25)19(3,4)29-16(12)21/h5-7,9,11-13,16H,8H2,1-4H3,(H,20,22)(H,24,25)/t11-,12+,13-,16+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H24N2O7S/c1-9(2)8-11(28-18(26)10-6-5-7-27-10)14(22)20-12-15(23)21-13(17(24)25)19(3,4)29-16(12)21/h5-7,9,11-13,16H,8H2,1-4H3,(H,20,22)(H,24,25)/t11-,12+,13+,16+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H24N2O7S/c1-9(2)8-11(28-18(26)10-6-5-7-27-10)14(22)20-12-15(23)21-13(17(24)25)19(3,4)29-16(12)21/h5-7,9,11-13,16H,8H2,1-4H3,(H,20,22)(H,24,25)/t11?,12-,13+,16-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H24N2OS/c1-14(12-20(2)3)13-21-16-7-5-6-8-18(16)23-19-10-9-15(22-4)11-17(19)21/h5-11,14H,12-13H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H24N2OS/c1-14(12-20(2)3)13-21-16-7-5-6-8-18(16)23-19-10-9-15(22-4)11-17(19)21/h5-11,14H,12-13H2,1-4H3/t14-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H24N2OS/c1-14(12-20(2)3)13-21-16-7-5-6-8-18(16)23-19-10-9-15(22-4)11-17(19)21/h5-11,14H,12-13H2,1-4H3/t14-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H24N2S/c1-4-20(5-2)15(3)14-21-16-10-6-8-12-18(16)22-19-13-9-7-11-17(19)21/h6-13,15H,4-5,14H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H24N2S/c1-4-20(5-2)15(3)14-21-16-10-6-8-12-18(16)22-19-13-9-7-11-17(19)21/h6-13,15H,4-5,14H2,1-3H3/t15-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H24N2S/c1-4-20(5-2)15(3)14-21-16-10-6-8-12-18(16)22-19-13-9-7-11-17(19)21/h6-13,15H,4-5,14H2,1-3H3/t15-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H24N2S2/c1-14(12-20(2)3)13-21-16-7-5-6-8-18(16)23-19-10-9-15(22-4)11-17(19)21/h5-11,14H,12-13H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H24N2S2/c1-14(12-20(2)3)13-21-16-7-5-6-8-18(16)23-19-10-9-15(22-4)11-17(19)21/h5-11,14H,12-13H2,1-4H3/t14-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H24N2S2/c1-14(12-20(2)3)13-21-16-7-5-6-8-18(16)23-19-10-9-15(22-4)11-17(19)21/h5-11,14H,12-13H2,1-4H3/t14-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H24N4O/c24-19(18-15-8-2-1-3-9-16(15)21-22-18)23-12-5-4-10-17(23)14-7-6-11-20-13-14/h6-7,11,13,17H,1-5,8-10,12H2,(H,21,22)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H24N4O/c24-19(18-15-8-2-1-3-9-16(15)21-22-18)23-12-5-4-10-17(23)14-7-6-11-20-13-14/h6-7,11,13,17H,1-5,8-10,12H2,(H,21,22)/t17-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H24N4O2/c20-18(21)14-4-8-16(9-5-14)24-12-2-1-3-13-25-17-10-6-15(7-11-17)19(22)23/h4-11H,1-3,12-13H2,(H3,20,21)(H3,22,23)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H24N6O3/c1-3-28-19(26)25-16-8-15-17(18(20)24-16)23-13(11-22-15)10-21-9-12-4-6-14(27-2)7-5-12/h4-8,21-22H,3,9-11H2,1-2H3,(H3,20,24,25,26)	1	(Zhang et al., 2019)

InChI=1S/C19H24N6O3/c1-4-28-19(26)24-16-9-15-17(18(20)23-16)22-12(10-21-15)11-25(2)13-5-7-14(27-3)8-6-13/h5-9,21H,4,10-11H2,1-3H3,(H3,20,23,24,26)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H24N6O5S2/c1-25(5-3-4-6-25)7-10-8-31-17-13(16(27)24(17)14(10)18(28)29)22-15(26)12(23-30-2)11-9-32-19(20)21-11/h9,13,17H,3-8H2,1-2H3,(H3-,20,21,22,26,28,29)/b23-12-/t13-,17-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H24N6O5S2/c1-25(5-3-4-6-25)7-10-8-31-17-13(16(27)24(17)14(10)18(28)29)22-15(26)12(23-30-2)11-9-32-19(20)21-11/h9,13,17H,3-8H2,1-2H3,(H3-,20,21,22,26,28,29)/p+1/b23-12-/t13-,17-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H24N6O5S2/c1-25(5-3-4-6-25)7-10-8-31-17-13(16(27)24(17)14(10)18(28)29)22-15(26)12(23-30-2)11-9-32-19(20)21-11/h9,13,17H,3-8H2,1-2H3,(H3-,20,21,22,26,28,29)/p+1/b23-12+/t13-,17-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H24N8O6S2/c1-33-24-12(10-8-35-19(21)22-10)15(29)23-13-16(30)27-14(18(31)32)9(7-34-17(13)27)6-25-3-2-11(20)26(25)4-5-28/h2,8,13,17,28H,3-7,20H2,1H3,(H2,21,22)(H,23,29)(H,31,32)/b24-12+/t13-,17-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H24O3/c1-18-9-7-13(20)11-12(18)3-4-14-15(18)8-10-19(2)16(14)5-6-17(21)22-19/h7,9,11,14-16H,3-6,8,10H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H24O3/c1-18-9-7-13(20)11-12(18)3-4-14-15(18)8-10-19(2)16(14)5-6-17(21)22-19/h7,9,11,14-16H,3-6,8,10H2,1-2H3/t14-,15-,16-,18?,19?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H24O3/c1-18-9-7-13(20)11-12(18)3-4-14-15(18)8-10-19(2)16(14)5-6-17(21)22-19/h7,9,11,14-16H,3-6,8,10H2,1-2H3/t14-,15+,16+,18+,19+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H25Cl2N3O2/c1-14(25)23-8-9-24(16(13-23)12-22-6-2-3-7-22)19(26)11-15-4-5-17(20)18(21)10-15/h4-5,10,16H,2-3,6-9,11-13H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H25Cl2N3O2/c1-14(25)23-8-9-24(16(13-23)12-22-6-2-3-7-22)19(26)11-15-4-5-17(20)18(21)10-15/h4-5,10,16H,2-3,6-9,11-13H2,1H3/t16-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H25Cl2N3O3/c1-13(25)23-6-7-24(15(11-23)10-22-5-4-16(26)12-22)19(27)9-14-2-3-17(20)18(21)8-14/h2-3,8,15-16,26H,4-7,9-12H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H25Cl2N3O3/c1-13(25)23-6-7-24(15(11-23)10-22-5-4-16(26)12-22)19(27)9-14-2-3-17(20)18(21)8-14/h2-3,8,15-16,26H,4-7,9-12H2,1H3/t15-,16-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H25Cl2N3O3/c1-13(25)23-6-7-24(15(11-23)10-22-5-4-16(26)12-22)19(27)9-14-2-3-17(20)18(21)8-14/h2-3,8,15-16,26H,4-7,9-12H2,1H3/t15-,16+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H25Cl2N3O3/c1-27-19(26)23-8-9-24(15(13-23)12-22-6-2-3-7-22)18(25)11-14-4-5-16(20)17(21)10-14/h4-5,10,15H,2-3,6-9,11-13H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H25Cl2N3O3/c1-27-19(26)23-8-9-24(15(13-23)12-22-6-2-3-7-22)18(25)11-14-4-5-16(20)17(21)10-14/h4-5,10,15H,2-3,6-9,11-13H2,1H3/t15-/m0/s1	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C19H25F2N3O3/c1-13(25)23-4-5-24(17(11-23)10-22-3-2-18(26)12-22)19(27)8-14-6-15(20)9-16(21)7-14/h6-7,9,17-18,26H,2-5,8,10-12H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H25F2N3O3/c1-13(25)23-4-5-24(17(11-23)10-22-3-2-18(26)12-22)19(27)8-14-6-15(20)9-16(21)7-14/h6-7,9,17-18,26H,2-5,8,10-12H2,1H3/t17-,18-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H25F2N3O3/c1-13(25)23-4-5-24(17(11-23)10-22-3-2-18(26)12-22)19(27)8-14-6-15(20)9-16(21)7-14/h6-7,9,17-18,26H,2-5,8,10-12H2,1H3/t17-,18+/m0/s1	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C19H25F3N2O/c20-19(21,22)16-8-6-15(7-9-16)13-18(25)24-12-2-1-5-17(24)14-23-10-3-4-11-23/h6-9,17H,1-5,10-14H2	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C19H25F3N2O/c20-19(21,22)16-8-6-15(7-9-16)13-18(25)24-12-2-1-5-17(24)14-23-10-3-4-11-23/h6-9,17H,1-5,10-14H2/t17-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H25N3O/c1-17-7-2-3-8-18(17)22-14-12-21(13-15-22)11-6-16-23-19-9-4-5-10-20-19/h2-5,7-10H,6,11-16H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H25N3O5/c1-21-11-13(10-20-21)15(9-17(24)26-2)19-18(25)16(23)8-14(27-19)12-22-6-4-3-5-7-22/h8,10-11,15,25H,3-7,9,12H2,1-2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H25N3O5/c1-21-11-13(10-20-21)15(9-17(24)26-2)19-18(25)16(23)8-14(27-19)12-22-6-4-3-5-7-22/h8,10-11,15,25H,3-7,9,12H2,1-2H3/t15-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H25N3S/c1-20(2)13-15(21(3)4)14-22-16-9-5-7-11-18(16)23-19-12-8-6-10-17(19)22/h5-12,15H,13-14H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H25N3S/c1-20(2)13-15(21(3)4)14-22-16-9-5-7-11-18(16)23-19-12-8-6-10-17(19)22/h5-12,15H,13-14H2,1-4H3/t15-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H25N3S/c1-20(2)13-15(21(3)4)14-22-16-9-5-7-11-18(16)23-19-12-8-6-10-17(19)22/h5-12,15H,13-14H2,1-4H3/t15-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H25N5O2/c25-14-5-9-24(10-6-14)17-4-8-21-19(22-17)23-18(13-11-15(26)12-13)16-3-1-2-7-20-16/h1-4,7-8,13-15,18,25-26H,5-6,9-12H2,(H,21,22,23)/t13?,15?,18-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H25N5O4/c1-26-15-10-12-13(11-16(15)27-2)21-19(22-17(12)20)24-7-5-23(6-8-24)18(25)14-4-3-9-28-14/h10-11,14H,3-9H2,1-2H3,(H2,20,21,22)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H25N5O4/c1-26-15-10-12-13(11-16(15)27-2)21-19(22-17(12)20)24-7-5-23(6-8-24)18(25)14-4-3-9-28-14/h10-11,14H,3-9H2,1-2H3,(H2,20,21,22)/t14-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H25NO/c1-2-10-20-11-9-19-8-4-3-5-16(19)18(20)12-14-6-7-15(21)13-17(14)19/h2,6-7,13,16,18,21H,1,3-5,8-12H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H25NO/c1-2-10-20-11-9-19-8-4-3-5-16(19)18(20)12-14-6-7-15(21)13-17(14)19/h2,6-7,13,16,18,21H,1,3-5,8-12H2/t16-,18-,19-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H25NO/c1-2-10-20-11-9-19-8-4-3-5-16(19)18(20)12-14-6-7-15(21)13-17(14)19/h2,6-7,13,16,18,21H,1,3-5,8-12H2/t16-,18-,19-/m1/s1	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C19H25NO/c1-2-10-20-11-9-19-8-4-3-5-16(19)18(20)12-14-6-7-15(21)13-17(14)19/h2,6-7,13,16,18,21H,1,3-5,8-12H2/t16-,18?,19?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H25NO/c1-2-10-20-11-9-19-8-4-3-5-16(19)18(20)12-14-6-7-15(21)13-17(14)19/h2,6-7,13,16,18,21H,1,3-5,8-12H2/t16-,18+,19+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H25NO/c1-2-3-6-15-18(20)19(21,16-11-7-4-8-12-16)17-13-9-5-10-14-17/h4-5,7-14,18,21H,2-3,6,15,20H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H25NO/c1-2-3-6-15-18(20)19(21,16-11-7-4-8-12-16)17-13-9-5-10-14-17/h4-5,7-14,18,21H,2-3,6,15,20H2,1H3/t18-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H25NO/c1-3-8-20(9-4-2)17-10-14-6-5-7-15-12-18(21)13-16(11-17)19(14)15/h5-7,12-13,17,21H,3-4,8-11H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H25NO/c1-3-8-20(9-4-2)17-10-14-6-5-7-15-12-18(21)13-16(11-17)19(14)15/h5-7,12-13,17,21H,3-4,8-11H2,1-2H3/t17-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H25NO2/c1-14(8-9-16-6-4-3-5-7-16)20-15(2)19(22)17-10-12-18(21)13-11-17/h3-7,10-15,19-22H,8-9H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H25NO2/c1-14(8-9-16-6-4-3-5-7-16)20-15(2)19(22)17-10-12-18(21)13-11-17/h3-7,10-15,19-22H,8-9H2,1-2H3/t14-,15-,19+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C19H25NO2/c21-15-4-3-14-9-18-16-5-8-22-12-19(16,17(14)10-15)6-7-20(18)11-13-1-2-13/h3-4,10,13,16,18,21H,1-2,5-9,11-12H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H25NO2/c21-15-4-3-14-9-18-16-5-8-22-12-19(16,17(14)10-15)6-7-20(18)11-13-1-2-13/h3-4,10,13,16,18,21H,1-2,5-9,11-12H2/t16-,18?,19?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H25NO2/c21-15-4-3-14-9-18-16-5-8-22-12-19(16,17(14)10-15)6-7-20(18)11-13-1-2-13/h3-4,10,13,16,18,21H,1-2,5-9,11-12H2/t16-,18+,19-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H25NO3/c21-16-2-1-12(8-17(16)22)3-4-20-18(23)19-9-13-5-14(10-19)7-15(6-13)11-19/h1-2,8,13-15,21-22H,3-7,9-11H2,(H,20,23)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H25NO3/c21-18(20-12-15-8-4-5-9-16(15)13-20)11-17(19(22)23)10-14-6-2-1-3-7-14/h1-3,6-7,15-17H,4-5,8-13H2,(H,22,23)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H25NOS/c1-2-11-20(12-10-17-6-4-13-22-17)16-8-9-18-15(14-16)5-3-7-19(18)21/h3-7,13,16,21H,2,8-12,14H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H26Cl2N2O/c1-22(19(24)13-14-8-9-15(20)16(21)12-14)17-6-2-3-7-18(17)23-10-4-5-11-23/h8-9,12,17-18H,2-7,10-11,13H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H26Cl2N2O/c1-22(19(24)13-14-8-9-15(20)16(21)12-14)17-6-2-3-7-18(17)23-10-4-5-11-23/h8-9,12,17-18H,2-7,10-11,13H2,1H3/t17-,18-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H26Cl2N2O/c1-22(19(24)13-14-8-9-15(20)16(21)12-14)17-6-2-3-7-18(17)23-10-4-5-11-23/h8-9,12,17-18H,2-7,10-11,13H2,1H3/t17-,18-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H26Cl2N2O/c1-22(19(24)13-14-8-9-15(20)16(21)12-14)17-6-2-3-7-18(17)23-10-4-5-11-23/h8-9,12,17-18H,2-7,10-11,13H2,1H3/t17-,18+/m0/s1	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C19H26Cl2N2O/c1-22(19(24)13-14-8-9-15(20)16(21)12-14)17-6-2-3-7-18(17)23-10-4-5-11-23/h8-9,12,17-18H,2-7,10-11,13H2,1H3/t17?,18-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H26ClN3O4S/c1-11-5-4-6-15(11)21-19(25)22-16-8-7-14(20)18(17(16)24)28(26,27)13-9-12(10-13)23(2)3/h5,7-8,12-13,15,24H,4,6,9-10H2,1-3H3,(H2,21,22,25)	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C19H26I3N3O9/c1-8(29)25(4-11(32)7-28)17-15(21)12(18(33)23-2-9(30)5-26)14(20)13(16(17)22)19(34)24-3-10(31)6-27/h9-11,26-28,30-32H,2-7H2,1H3,(H,23,33)(H,24,34)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H26I3N3O9/c1-8(29)25(4-11(32)7-28)17-15(21)12(18(33)23-2-9(30)5-26)14(20)13(16(17)22)19(34)24-3-10(31)6-27/h9-11,26-28,30-32H,2-7H2,1H3,(H,23,33)(H,24,34)/t9-,10-,11-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H26N2O3/c22-16(20-12-15-10-13-3-4-14(15)9-13)5-8-21-17(23)11-19(18(21)24)6-1-2-7-19/h3-4,13-15H,1-2,5-12H2,(H,20,22)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H26N2O3/c22-16(20-12-15-10-13-3-4-14(15)9-13)5-8-21-17(23)11-19(18(21)24)6-1-2-7-19/h3-4,13-15H,1-2,5-12H2,(H,20,22)/t13-,14+,15-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H26N2S/c1-3-7-21-11-13(12-22-2)8-16-15-5-4-6-17-19(15)14(10-20-17)9-18(16)21/h4-6,10,13,16,18,20H,3,7-9,11-12H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H26N2S/c1-3-7-21-11-13(12-22-2)8-16-15-5-4-6-17-19(15)14(10-20-17)9-18(16)21/h4-6,10,13,16,18,20H,3,7-9,11-12H2,1-2H3/t13-,16-,18-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H26N2S/c1-3-7-21-11-13(12-22-2)8-16-15-5-4-6-17-19(15)14(10-20-17)9-18(16)21/h4-6,10,13,16,18,20H,3,7-9,11-12H2,1-2H3/t13-,16-,18-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C19H26N2S/c1-3-7-21-11-13(12-22-2)8-16-15-5-4-6-17-19(15)14(10-20-17)9-18(16)21/h4-6,10,13,16,18,20H,3,7-9,11-12H2,1-2H3/t13-,16-,18-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H26N2S/c1-3-7-21-11-13(12-22-2)8-16-15-5-4-6-17-19(15)14(10-20-17)9-18(16)21/h4-6,10,13,16,18,20H,3,7-9,11-12H2,1-2H3/t13-,16?,18-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H26N4O/c1-22-18-8-4-3-7-15(18)17(21-22)12-19(24)20-16-9-11-23(2)10-5-6-14(16)13-23/h3-4,7-8,14,16H,5-6,9-13H2,1-2H3/p+1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H26N4O5/c1-14(24)21-7-8-22(17(12-21)11-20-6-5-18(25)13-20)19(26)10-15-3-2-4-16(9-15)23(27)28/h2-4,9,17-18,25H,5-8,10-13H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H26N4O5/c1-14(24)21-7-8-22(17(12-21)11-20-6-5-18(25)13-20)19(26)10-15-3-2-4-16(9-15)23(27)28/h2-4,9,17-18,25H,5-8,10-13H2,1H3/t17-,18-/m0/s1	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C19H26N4O5/c1-14(24)21-8-9-22(17(12-21)11-20-7-6-18(25)13-20)19(26)10-15-2-4-16(5-3-15)23(27)28/h2-5,17-18,25H,6-13H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H26N4O5/c1-14(24)21-8-9-22(17(12-21)11-20-7-6-18(25)13-20)19(26)10-15-2-4-16(5-3-15)23(27)28/h2-5,17-18,25H,6-13H2,1H3/t17-,18-/m0/s1	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C19H26N6O/c1-4-15(11-26)22-19-23-17(20-10-14-8-6-5-7-9-14)16-18(24-19)25(12-21-16)13(2)3/h5-9,12-13,15,26H,4,10-11H2,1-3H3,(H2,20,22,23,24)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H26N6O/c1-4-15(11-26)22-19-23-17(20-10-14-8-6-5-7-9-14)16-18(24-19)25(12-21-16)13(2)3/h5-9,12-13,15,26H,4,10-11H2,1-3H3,(H2,20,22,23,24)/t15-/m0/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C19H26NO4/c1-3-20(2)15-9-13(10-16(20)18-17(15)24-18)23-19(22)14(11-21)12-7-5-4-6-8-12/h4-8,13-18,21H,3,9-11H2,1-2H3/q+1/t13-,14-,15+,16+,17+,18-,20?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H26O3/c1-18-10-8-15(20)17(22)14(18)4-3-11-12-5-6-16(21)19(12,2)9-7-13(11)18/h11-13,22H,3-10H2,1-2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H27Cl2N3O3/c20-17-2-1-14(9-18(17)21)10-19(27)24-6-5-22(7-8-25)11-15(24)12-23-4-3-16(26)13-23/h1-2,9,15-16,25-26H,3-8,10-13H2	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H27Cl2N3O3/c20-17-2-1-14(9-18(17)21)10-19(27)24-6-5-22(7-8-25)11-15(24)12-23-4-3-16(26)13-23/h1-2,9,15-16,25-26H,3-8,10-13H2/t15-,16-/m1/s1	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C19H27Cl2N3O3/c20-17-2-1-14(9-18(17)21)10-19(27)24-6-5-22(7-8-25)11-15(24)12-23-4-3-16(26)13-23/h1-2,9,15-16,25-26H,3-8,10-13H2/t15-,16+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H27FN2O3/c1-14(2)21-19(24)25-17-9-12-22(13-10-17)11-3-4-18(23)15-5-7-16(20)8-6-15/h5-8,14,17H,3-4,9-13H2,1-2H3,(H,21,24)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H27N3O/c1-19(2)12-22(17-7-5-4-6-16(17)19)18(23)20-13-10-14-8-9-15(11-13)21(14)3/h4-7,13-15H,8-12H2,1-3H3,(H,20,23)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H27N3O/c1-19(2)12-22(17-7-5-4-6-16(17)19)18(23)20-13-10-14-8-9-15(11-13)21(14)3/h4-7,13-15H,8-12H2,1-3H3,(H,20,23)/t13?,14-,15+	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H27N3O/c1-19(2)12-22(17-7-5-4-6-16(17)19)18(23)20-13-10-14-8-9-15(11-13)21(14)3/h4-7,13-15H,8-12H2,1-3H3,(H,20,23)/t14-,15-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H27N3O3/c1-15(23)21-9-10-22(19(25)11-16-5-3-2-4-6-16)17(13-21)12-20-8-7-18(24)14-20/h2-6,17-18,24H,7-14H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C19H27N3O3/c1-15(23)21-9-10-22(19(25)11-16-5-3-2-4-6-16)17(13-21)12-20-8-7-18(24)14-20/h2-6,17-18,24H,7-14H2,1H3/t17-,18-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H27N3O3/c1-15(23)21-9-10-22(19(25)11-16-5-3-2-4-6-16)17(13-21)12-20-8-7-18(24)14-20/h2-6,17-18,24H,7-14H2,1H3/t17-,18+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H27N3O4S/c1-17(2)12(15(24)25)22-13(23)11(14(22)27-17)21-16(26)18-4-9-3-10(5-18)7-19(20,6-9)8-18/h9-12,14H,3-8,20H2,1-2H3,(H,21,26)(H,24,25)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H27N3O4S/c1-17(2)12(15(24)25)22-13(23)11(14(22)27-17)21-16(26)18-4-9-3-10(5-18)7-19(20,6-9)8-18/h9-12,14H,3-8,20H2,1-2H3,(H,21,26)(H,24,25)/t9-,10-,11-,12+,14-,18?,19?/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H27N3O4S/c1-17(2)12(15(24)25)22-13(23)11(14(22)27-17)21-16(26)18-4-9-3-10(5-18)7-19(20,6-9)8-18/h9-12,14H,3-8,20H2,1-2H3,(H,21,26)(H,24,25)/t9-,10-,11?,12-,14-,18?,19?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H27N3O4S/c1-17(2)12(15(24)25)22-13(23)11(14(22)27-17)21-16(26)18-4-9-3-10(5-18)7-19(20,6-9)8-18/h9-12,14H,3-8,20H2,1-2H3,(H,21,26)(H,24,25)/t9-,10+,11-,12+,14-,18?,19?/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H27N3O4S/c1-17(2)12(15(24)25)22-13(23)11(14(22)27-17)21-16(26)18-4-9-3-10(5-18)7-19(20,6-9)8-18/h9-12,14H,3-8,20H2,1-2H3,(H,21,26)(H,24,25)/t9?,10?,11-,12+,14-,18?,19?/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H27N3O5S2/c1-22(13-12-16-4-6-17(7-5-16)20-28(2,23)24)14-15-27-19-10-8-18(9-11-19)21-29(3,25)26/h4-11,20-21H,12-15H2,1-3H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H27N5/c1-16-6-2-3-7-17(16)23-14-12-22(13-15-23)11-9-19-21-20-18-8-4-5-10-24(18)19/h2-3,6-7H,4-5,8-15H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H27N5O3/c1-21-17(26)15-16(23-14(11-20)24-18(15)27-10-9-25)22-12-13-3-7-19(8-4-13)5-2-6-19/h13,25H,2-10,12H2,1H3,(H,21,26)(H,22,23,24)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H27N5O3/c1-4-6-17(25)23-7-5-8-24(10-9-23)19-21-14-12-16(27-3)15(26-2)11-13(14)18(20)22-19/h11-12H,4-10H2,1-3H3,(H2,20,21,22)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H27N5O4/c1-24(8-5-7-21-18(25)14-6-4-9-28-14)19-22-13-11-16(27-3)15(26-2)10-12(13)17(20)23-19/h10-11,14H,4-9H2,1-3H3,(H,21,25)(H2,20,22,23)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H27N5O5/c1-21-17(14-18(26)22(2)19(21)27)20-9-11-23(12-13-25)10-3-4-15-5-7-16(8-6-15)24(28)29/h5-8,14,20,25H,3-4,9-13H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H27NO/c1-13(2)7-9-20-10-8-19(4)14(3)18(20)11-15-5-6-16(21)12-17(15)19/h5-7,12,14,18,21H,8-11H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H27NO/c1-13(2)7-9-20-10-8-19(4)14(3)18(20)11-15-5-6-16(21)12-17(15)19/h5-7,12,14,18,21H,8-11H2,1-4H3/t14-,18-,19-/m0/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C19H27NO/c1-13(2)7-9-20-10-8-19(4)14(3)18(20)11-15-5-6-16(21)12-17(15)19/h5-7,12,14,18,21H,8-11H2,1-4H3/t14-,18-,19-/m1/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C19H27NO/c1-13(2)7-9-20-10-8-19(4)14(3)18(20)11-15-5-6-16(21)12-17(15)19/h5-7,12,14,18,21H,8-11H2,1-4H3/t14-,18-,19+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H27NO/c1-13(2)7-9-20-10-8-19(4)14(3)18(20)11-15-5-6-16(21)12-17(15)19/h5-7,12,14,18,21H,8-11H2,1-4H3/t14-,18+,19-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H27NO/c1-13(2)7-9-20-10-8-19(4)14(3)18(20)11-15-5-6-16(21)12-17(15)19/h5-7,12,14,18,21H,8-11H2,1-4H3/t14-,18+,19-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H27NO/c1-13(2)7-9-20-10-8-19(4)14(3)18(20)11-15-5-6-16(21)12-17(15)19/h5-7,12,14,18,21H,8-11H2,1-4H3/t14-,18+,19?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H27NO/c1-13(2)7-9-20-10-8-19(4)14(3)18(20)11-15-5-6-16(21)12-17(15)19/h5-7,12,14,18,21H,8-11H2,1-4H3/t14-,18+,19+/m0/s1	1	(Muehlbacher et al.,

InChI=1S/C19H27NO/c1-13(2)7-9-20-10-8-19(4)14(3)18(20)11-15-5-6-16(21)12-17(15)19/h5-7,12,14,18,21H,8-11H2,1-4H3/t14?,18?,19-/m1/s1	2011)	
InChI=1S/C19H27NO3/c1-12(2)7-14-11-20-6-5-13-8-18(22-3)19(23-4)9-15(13)16(20)10-17(14)21/h8-9,12,14,16H,5-7,10-11H2,1-4H3	1 (Meng et al., 2021)	
InChI=1S/C19H27NO3/c1-12(2)7-14-11-20-6-5-13-8-18(22-3)19(23-4)9-15(13)16(20)10-17(14)21/h8-9,12,14,16H,5-7,10-11H2,1-4H3/t14-,16-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)	
InChI=1S/C19H27NO3/c1-12(2)7-14-11-20-6-5-13-8-18(22-3)19(23-4)9-15(13)16(20)10-17(14)21/h8-9,12,14,16H,5-7,10-11H2,1-4H3/t14-,16+/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)	
InChI=1S/C19H27NO3/c1-13(2)15-8-10-16(11-9-15)18(21)20-17(19(22)23)12-14-6-4-3-5-7-14/h3-7,13,15-17H,8-12H2,1-2H3,(H,20,21)(H,22,23)	1 (Mazumdar et al., 2023)	
InChI=1S/C19H27NO3/c1-13(2)15-8-10-16(11-9-15)18(21)20-17(19(22)23)12-14-6-4-3-5-7-14/h3-7,13,15-17H,8-12H2,1-2H3,(H,20,21)(H,22,23)/t15?,16?,17-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)	
InChI=1S/C19H27NO4/c1-20-9-8-18-11-13(21)6-7-19(18,22)15(20)10-12-4-5-14(23-2)17(24-3)16(12)18/h4-5,13,15,21-22H,6-11H2,1-3H3	1 (Mazumdar et al., 2023)	
InChI=1S/C19H27NO4/c1-20-9-8-18-11-13(21)6-7-19(18,22)15(20)10-12-4-5-14(23-2)17(24-3)16(12)18/h4-5,13,15,21-22H,6-11H2,1-3H3/t13-,15-,18-,19-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)	
InChI=1S/C19H27NO4/c1-20-9-8-18-11-13(21)6-7-19(18,22)15(20)10-12-4-5-14(23-2)17(24-3)16(12)18/h4-5,13,15,21-22H,6-11H2,1-3H3/t13-,15?,18?,19?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)	
InChI=1S/C19H27NO4/c1-20-9-8-18-11-13(21)6-7-19(18,22)15(20)10-12-4-5-14(23-2)17(24-3)16(12)18/h4-5,13,15,21-22H,6-11H2,1-3H3/t13-,15+,18+,19+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)	
InChI=1S/C19H27NO4/c1-22-16-13-15(14-17(23-2)19(16)24-3)9-10-18(21)20-11-7-5-4-6-8-12-20/h9-10,13-14H,4-8,11-12H2,1-3H3	1 (Meng et al., 2021)	
InChI=1S/C19H27NO4/c1-22-16-13-15(14-17(23-2)19(16)24-3)9-10-18(21)20-11-7-5-4-6-8-12-20/h9-10,13-14H,4-8,11-12H2,1-3H3/b10-9+	1 (Meng et al., 2021)	
InChI=1S/C19H28CIN5O/c1-3-18-21-25(19(26)24(18)4-2)10-6-9-22-11-13-23(14-12-22)17-8-5-7-16(20)15-17/h5,7-8,15H,3-4,6,9-14H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)	
InChI=1S/C19H28N2/c1-20(2)14-9-15-21-18-12-6-4-3-5-10-16(18)17-11-7-8-13-19(17)21/h7-8,11,13H,3-6,9-10,12,14-15H2,1-2H3	1 (Mazumdar et al., 2023)	
InChI=1S/C19H28N2O4/c1-16(22)25-15-19(23)20-9-6-12-24-18-8-5-7-17(13-18)14-21-10-3-2-4-11-21/h5,7-8,13H,2-4,6,9-12,14-15H2,1H3,(H,20,23)	0 (Mazumdar et al., 2023)	
InChI=1S/C19H28N4O2S/c1-12-10-16(22-14(3)13(12)2)19(6,7)26-18(4,5)11-21-17-15(23(24)25)8-9-20-17/h8-10,20-21H,11H2,1-7H3	1 (Meng et al., 2021)	
InChI=1S/C19H28N4O2S/c1-4-23(5-2)26(24,25)21-14-10-16-15-7-6-8-17-19(15)13(11-20-17)9-18(16)22(3)12-14/h6-8,11,14,16,18,20-21H,4-5,9-10,12H2,1-3H3	1 (Mazumdar et al., 2023)	
InChI=1S/C19H28N4O2S/c1-4-23(5-2)26(24,25)21-14-10-16-15-7-6-8-17-19(15)13(11-20-17)9-18(16)22(3)12-14/h6-8,11,14,16,18,20-21H,4-5,9-10,12H2,1-3H3/t14-,16-,18-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)	
InChI=1S/C19H28N4O2S/c1-4-23(5-2)26(24,25)21-14-10-16-15-7-6-8-17-19(15)13(11-20-17)9-18(16)22(3)12-14/h6-8,11,14,16,18,20-21H,4-5,9-10,12H2,1-3H3/t14-,16-,18+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)	
InChI=1S/C19H28N4O2S/c1-4-23(5-2)26(24,25)21-14-10-16-15-7-6-8-17-19(15)13(11-20-17)9-18(16)22(3)12-14/h6-8,11,14,16,18,20-21H,4-5,9-	1 (Meng et al., 2021)	

10,12H ₂ ,1-3H ₃ /t14-,16-,18+/m1/s1	
InChI=1S/C19H28N4O2S/c1-4-23(5-2)26(24,25)21-14-10-16-15-7-6-8-17-19(15)13(11-20-17)9-18(16)22(3)12-14/h6-8,11,14,16,18,20-21H,4-5,9-10,12H ₂ ,1-3H ₃ /t14-,16+,18+/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H28NO ₃ /c1-20(2)13-12-17(14-20)23-18(21)19(22,16-10-6-7-11-16)15-8-4-3-5-9-15/h3-5,8-9,16-17,22H,6-7,10-14H ₂ ,1-2H ₃ /q+1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C19H28NO ₃ /c1-20(2)13-12-17(14-20)23-18(21)19(22,16-10-6-7-11-16)15-8-4-3-5-9-15/h3-5,8-9,16-17,22H,6-7,10-14H ₂ ,1-2H ₃ /q+1/t17-,19+/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H28O/c1-18-9-3-4-16(18)15-6-5-13-12-14(20)7-11-19(13,2)17(15)8-10-18/h12,15-17H,3-11H ₂ ,1-2H ₃ /t15-,16-,17-,18-,19-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H28O ₂ /c1-18-9-7-13(20)11-12(18)3-4-14-15-5-6-17(21)19(15,2)10-8-16(14)18/h11,14-17,21H,3-10H ₂ ,1-2H ₃	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H28O ₂ /c1-18-9-7-13(20)11-12(18)3-4-14-15-5-6-17(21)19(15,2)10-8-16(14)18/h11,14-17,21H,3-10H ₂ ,1-2H ₃ /t14-,15-,16-,17-,18-,19-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H28O ₂ /c1-18-9-7-13(20)11-12(18)3-4-14-15-5-6-17(21)19(15,2)10-8-16(14)18/h11,14-17,21H,3-10H ₂ ,1-2H ₃ /t14-,15-,16-,17-,18-,19-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H28O ₂ /c1-18-9-7-13(20)11-12(18)3-4-14-15-5-6-17(21)19(15,2)10-8-16(14)18/h11,14-17,21H,3-10H ₂ ,1-2H ₃ /t14-,15-,16-,17-,18+,19-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H28O ₂ /c1-18-9-7-13(20)11-12(18)3-4-14-15-5-6-17(21)19(15,2)10-8-16(14)18/h11,14-17,21H,3-10H ₂ ,1-2H ₃ /t14-,15+,16+,17?,18?,19?/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H29Cl ₂ N ₃ O ₂ S/c1-27(25,26)22-16-7-5-15(6-8-16)9-10-23-11-13-24(14-12-23)18-4-2-3-17(20)19(18)21/h2-4,15-16,22H,5-14H ₂ ,1H ₃	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H29IO ₂ /c1-3-22-19(21)15-9-7-5-4-6-8-12-16(2)17-13-10-11-14-18(17)20/h10-11,13-14,16H,3-9,12,15H ₂ ,1-2H ₃	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H29N ₅ O ₂ /c1-19(2)14-16(25)24(17(26)15-19)9-4-3-8-22-10-12-23(13-11-22)18-20-6-5-7-21-18/h5-7H,3-4,8-15H ₂ ,1-2H ₃	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H29NO/c21-19(17-9-3-1-4-10-17,18-11-5-2-6-12-18)13-16-20-14-7-8-15-20/h1,3-4,9-10,18,21H,2,5-8,11-16H ₂	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H29NO/c21-19(17-9-3-1-4-10-17,18-11-5-2-6-12-18)13-16-20-14-7-8-15-20/h1,3-4,9-10,18,21H,2,5-8,11-16H ₂ /t19-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H29NO ₅ /c1-18(2,3)16(22)24-14-9-8-12(13(21)11-20-7)10-15(14)25-17(23)19(4,5)6/h8-10,13,20-21H,11H ₂ ,1-7H ₃	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H29NO ₅ /c1-18(2,3)16(22)24-14-9-8-12(13(21)11-20-7)10-15(14)25-17(23)19(4,5)6/h8-10,13,20-21H,11H ₂ ,1-7H ₃ /t13-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H29NO ₅ /c1-18(2,3)16(22)24-14-9-8-12(13(21)11-20-7)10-15(14)25-17(23)19(4,5)6/h8-10,13,20-21H,11H ₂ ,1-7H ₃ /t13-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H30N ₂ O ₆ S/c1-12(11-19(2,3)21(4)5)20-18(22)16-9-13-8-14(25-6)15(26-7)10-17(13)28(23,24)27-16/h8,10,12,16H,9,11H ₂ ,1-7H ₃ ,(H,20,22)	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H30N ₂ O ₆ S/c1-12(11-19(2,3)21(4)5)20-18(22)16-9-13-8-14(25-6)15(26-7)10-17(13)28(23,24)27-16/h8,10,12,16H,9,11H ₂ ,1-7H ₃ ,(H,20,22)/t12-,16-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H30N ₂ O ₆ S/c1-12(11-19(2,3)21(4)5)20-18(22)16-9-13-8-14(25-6)15(26-7)10-17(13)28(23,24)27-16/h8,10,12,16H,9,11H ₂ ,1-7H ₃ ,(H,20,22)/t12-,16-/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H30N ₂ O ₆ S/c1-12(11-19(2,3)21(4)5)20-18(22)16-9-13-8-14(25-6)15(26-7)10-17(13)28(23,24)27-16/h8,10,12,16H,9,11H ₂ ,1-	(Meng et al., 2021)

7H3,(H,20,22)/t12-,16+/m0/s1	
InChI=1S/C19H30NO2/c1-5-15(2)18(16-9-7-6-8-10-16)19(21)22-17-11-13-20(3,4)14-12-17/h6-10,15,17-18H,5,11-14H2,1-4H3/q+1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H30NO2/c1-5-15(2)18(16-9-7-6-8-10-16)19(21)22-17-11-13-20(3,4)14-12-17/h6-10,15,17-18H,5,11-14H2,1-4H3/q+1/t15-,18-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H30O3/c1-17-11-22-16(20)10-12(17)4-5-13-14(17)6-8-18(2)15(13)7-9-19(18,3)21/h12-15,21H,4-11H2,1-3H3	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H30O3/c1-17-11-22-16(20)10-12(17)4-5-13-14(17)6-8-18(2)15(13)7-9-19(18,3)21/h12-15,21H,4-11H2,1-3H3/t12-,13-,14-,15-,17?,18?,19?/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H30O3/c1-17-11-22-16(20)10-12(17)4-5-13-14(17)6-8-18(2)15(13)7-9-19(18,3)21/h12-15,21H,4-11H2,1-3H3/t12-,13+,14-,15-,17-,18-,19-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H30O5/c1-14-15(12-10-8-6-4-5-7-9-11-13-20)17(22)19(24-3)18(23-2)16(14)21/h20H,4-13H2,1-3H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H31N5O3/c1-21(2)18(26)12-17(25)16-11-15-13-23(9-10-24(15)20-16)19(27)14-22-7-5-3-4-6-8-22/h11,17,25H,3-10,12-14H2,1-2H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H31N5O3/c1-21(2)18(26)12-17(25)16-11-15-13-23(9-10-24(15)20-16)19(27)14-22-7-5-3-4-6-8-22/h11,17,25H,3-10,12-14H2,1-2H3/t17-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H31NO4/c1-4-5-6-7-8-9-10-11-12-24-18-16(22-2)13-15(19(20)21)14-17(18)23-3/h13-14H,4-12H2,1-3H3,(H2,20,21)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H32N2O5/c1-4-8-14(19(25)26-5-2)20-12(3)17(22)21-15-10-7-6-9-13(15)11-16(21)18(23)24/h12-16,20H,4-11H2,1-3H3,(H,23,24)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H32N2O5/c1-4-8-14(19(25)26-5-2)20-12(3)17(22)21-15-10-7-6-9-13(15)11-16(21)18(23)24/h12-16,20H,4-11H2,1-3H3,(H,23,24)/t12-,13-,14-,15-,16-/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H32N2O5/c1-4-8-14(19(25)26-5-2)20-12(3)17(22)21-15-10-7-6-9-13(15)11-16(21)18(23)24/h12-16,20H,4-11H2,1-3H3,(H,23,24)/t12-,13+,14-,15+,16+/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H35ClN2O5S/c1-4-5-6-7-11-8-12(21-9-11)18(26)22-13(10(2)20)17-15(24)14(23)16(25)19(27-17)28-3/h10-17,19,21,23-25H,4-9H2,1-3H3,(H,22,26)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H35ClN2O5S/c1-4-5-6-7-11-8-12(21-9-11)18(26)22-13(10(2)20)17-15(24)14(23)16(25)19(27-17)28-3/h10-17,19,21,23-25H,4-9H2,1-3H3,(H,22,26)/t10-,11-,12-,13+,14-,15-,16-,17-,19-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H35ClN2O5S/c1-4-5-6-7-11-8-12(21-9-11)18(26)22-13(10(2)20)17-15(24)14(23)16(25)19(27-17)28-3/h10-17,19,21,23-25H,4-9H2,1-3H3,(H,22,26)/t10-,11-,12+,13+,14-,15+,16-,17-,19+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H35ClN2O5S/c1-4-5-6-7-11-8-12(21-9-11)18(26)22-13(10(2)20)17-15(24)14(23)16(25)19(27-17)28-3/h10-17,19,21,23-25H,4-9H2,1-3H3,(H,22,26)/t10-,11-,12+,13+,14+,15+,16-,17-,19+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H35ClN2O5S/c1-4-5-6-7-11-8-12(21-9-11)18(26)22-13(10(2)20)17-15(24)14(23)16(25)19(27-17)28-3/h10-17,19,21,23-25H,4-9H2,1-3H3,(H,22,26)/t10?,11?,12-,13?,14-,15+,16+,17+,19+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H35N/c1-3-9-16(10-4-1)19(17-11-5-2-6-12-17)15-18-13-7-8-14-20-18/h16-20H,1-15H2	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H35NO2/c1-3-20(4-2)15-16-22-18(21)19(13-9-6-10-14-19)17-11-7-5-8-12-17/h17H,3-16H2,1-2H3	0 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C19H37N5O7/c1-19(27)7-28-18(13(26)16(19)24-2)31-15-11(23)5-10(22)14(12(15)25)30-17-9(21)4-3-8(6-20)29-17/h3,9-18,24-27H,4-	0 (Meng et al., 2021)

7,20-23H ₂ ,1-2H ₃	
InChI=1S/C19H37N5O7/c1-19(27)7-28-18(13(26)16(19)24-2)31-15-11(23)5-10(22)14(12(15)25)30-17-9(21)4-3-8(6-20)29-17/h3,9-18,24-27H,4-7,20-23H ₂ ,1-2H ₃ /t9-,10-,11-,12-,13-,14-,15-,16-,17+,18-,19-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H37N5O7/c1-19(27)7-28-18(13(26)16(19)24-2)31-15-11(23)5-10(22)14(12(15)25)30-17-9(21)4-3-8(6-20)29-17/h3,9-18,24-27H,4-7,20-23H ₂ ,1-2H ₃ /t9-,10-,11+,12-,13-,14+,15-,16-,17+,18-,19+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H37N5O7/c1-19(27)7-28-18(13(26)16(19)24-2)31-15-11(23)5-10(22)14(12(15)25)30-17-9(21)4-3-8(6-20)29-17/h3,9-18,24-27H,4-7,20-23H ₂ ,1-2H ₃ /t9-,10+,11-,12+,13-,14-,15+,16-,17-,18-,19+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H37N5O7/c1-19(27)7-28-18(13(26)16(19)24-2)31-15-11(23)5-10(22)14(12(15)25)30-17-9(21)4-3-8(6-20)29-17/h3,9-18,24-27H,4-7,20-23H ₂ ,1-2H ₃ /t9-,10+,11+,12-,13-,14+,15+,16-,17-,18-,19+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H37NO ₂ /c1-2-3-4-5-6-7-8-9-10-11-12-13-14-15-16-19(20,17-21)18-22/h9-10,17,22H,2-8,11-16,18,20H ₂ ,1H ₃ /b10-9+	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H39N5O7/c1-19(27)7-28-18(13(26)16(19)24-2)31-15-11(23)5-10(22)14(12(15)25)30-17-9(21)4-3-8(6-20)29-17/h8-18,24-27H,3-7,20-23H ₂ ,1-2H ₃	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H39N5O7/c1-19(27)7-28-18(13(26)16(19)24-2)31-15-11(23)5-10(22)14(12(15)25)30-17-9(21)4-3-8(6-20)29-17/h8-18,24-27H,3-7,20-23H ₂ ,1-2H ₃ /t8-,9-,10-,11-,12-,13-,14-,15-,16-,17-,18-,19-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C19H39N5O7/c1-19(27)7-28-18(13(26)16(19)24-2)31-15-11(23)5-10(22)14(12(15)25)30-17-9(21)4-3-8(6-20)29-17/h8-18,24-27H,3-7,20-23H ₂ ,1-2H ₃ /t8-,9+,10-,11+,12-,13+,14+,15-,16+,17+,18+,19-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H39N5O7/c1-19(27)7-28-18(13(26)16(19)24-2)31-15-11(23)5-10(22)14(12(15)25)30-17-9(21)4-3-8(6-20)29-17/h8-18,24-27H,3-7,20-23H ₂ ,1-2H ₃ /t8-,9+,10-,11+,12+,13-,14+,15-,16+,17+,18+,19-/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C19H39N5O7/c1-19(27)7-28-18(13(26)16(19)24-2)31-15-11(23)5-10(22)14(12(15)25)30-17-9(21)4-3-8(6-20)29-17/h8-18,24-27H,3-7,20-23H ₂ ,1-2H ₃ /t8-,9+,10+,11-,12+,13+,14-,15+,16+,17-,18+,19-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H12O ₅ /c21-11-5-7-15-17(9-11)24-18-10-12(22)6-8-16(18)20(15)14-4-2-1-3-13(14)19(23)25-20/h1-10,21-22H	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H13ClN ₄ O ₃ /c21-14-10-11(24-18(26)17-15(22)6-3-9-23-17)7-8-16(14)25-19(27)12-4-1-2-5-13(12)20(25)28/h1-10H,22H ₂ ,(H,24,26)	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C20H14ClN ₃ O/c21-16-7-6-15(12-17(16)25)19-18(13-8-10-22-11-9-13)23-20(24-19)14-4-2-1-3-5-14/h1-12,25H,(H,23,24)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H14O ₄ /c21-15-9-5-13(6-10-15)20(14-7-11-16(22)12-8-14)18-4-2-1-3-17(18)19(23)24-20/h1-12,21-22H	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H15BrN ₆ O/c1-11-7-14(10-23)8-12(2)17(11)28-19-16(21)18(24)26-20(27-19)25-15-5-3-13(9-22)4-6-15/h3-8H,1-2H ₃ ,(H ₃ ,24,25,26,27)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H15Cl ₃ N ₂ O ₅ /c21-14-4-5-16(18(23)8-14)19(9-25-7-6-24-12-25)26-10-13-11-27-20-15(13)2-1-3-17(20)22/h1-8,11-12,19H,9-10H ₂	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H15ClN ₄ /c21-15-5-7-16(8-6-15)23-20-18-4-2-1-3-17(18)19(24-25-20)13-14-9-11-22-12-10-14/h1-12H,13H ₂ ,(H,23,25)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H15F ₃ N ₄ O ₃ /c21-8-1-2-15(13(22)3-8)27-7-12(20(29)30)17(28)9-4-14(23)19(25-18(9)27)26-5-10-11(6-26)16(10)24/h1-4,7,10-11,16H,5-6,24H ₂ ,(H,29,30)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H15F ₃ N ₄ O ₃ /c21-8-1-2-15(13(22)3-8)27-7-12(20(29)30)17(28)9-4-14(23)19(25-18(9)27)26-5-10-11(6-26)16(10)24/h1-4,7,10-11,16H,5-6,24H ₂ ,(H,29,30)/t10-,11-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H15F ₃ N ₄ O ₃ /c21-8-1-2-15(13(22)3-8)27-7-12(20(29)30)17(28)9-4-14(23)19(25-18(9)27)26-5-10-11(6-26)16(10)24/h1-4,7,10-11,16H,5-6,24H ₂ ,(H,29,30)/t10-,11-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C20H15F3N4O3/c21-8-1-2-15(13(22)3-8)27-7-12(20(29)30)17(28)9-4-14(23)19(25-18(9)27)26-5-10-11(6-26)16(10)24/h1-4,7,10-11,16H,5-6,24H2,(H,29,30)/t10-,11+,16?	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H16ClNO3/c1-24-19-10-9-15(12-18(19)21)22-20(23)17(13-16-8-5-11-25-16)14-6-3-2-4-7-14/h2-13H,1H3,(H,22,23)/b17-13+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H16F2N2O3/c21-14-6-4-13(5-7-14)20(25)24-9-8-17-18(11-24)27-19(23-17)12-26-16-3-1-2-15(22)10-16/h1-7,10H,8-9,11-12H2	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C20H16N2O4/c1-2-20(25)14-8-16-17-12(7-11-5-3-4-6-15(11)21-17)9-22(16)18(23)13(14)10-26-19(20)24/h3-8,25H,2,9-10H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H16N2O4/c1-2-20(25)14-8-16-17-12(7-11-5-3-4-6-15(11)21-17)9-22(16)18(23)13(14)10-26-19(20)24/h3-8,25H,2,9-10H2,1H3/t20-/m0/s1	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C20H16N4O2/c1-14(25)13-24-18(26)11-10-16(21-24)19-17-9-5-6-12-23(17)22-20(19)15-7-3-2-4-8-15/h2-12H,13H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H17ClN2O3/c1-13-10-18(24)23-12-19(25)22(2)17-9-8-15(21)11-16(17)20(23,26-13)14-6-4-3-5-7-14/h3-11H,12H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H17ClN2O3/c1-13-10-18(24)23-12-19(25)22(2)17-9-8-15(21)11-16(17)20(23,26-13)14-6-4-3-5-7-14/h3-11H,12H2,1-2H3/t20-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H17F3N2O4/c1-19(28,16-9-12-5-2-3-8-15(12)29-16)11-24-17(26)18(27)25-14-7-4-6-13(10-14)20(21,22)23/h2-10,28H,11H2,1H3,(H,24,26)(H,25,27)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H17F3N2O4/c1-19(28,16-9-12-5-2-3-8-15(12)29-16)11-24-17(26)18(27)25-14-7-4-6-13(10-14)20(21,22)23/h2-10,28H,11H2,1H3,(H,24,26)(H,25,27)/t19-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H17F3N2O4/c21-20(22,23)15-6-3-5-13-17(8-9-24-18(13)15)25-16-7-2-1-4-14(16)19(28)29-11-12(27)10-26/h1-9,12,26-27H,10-11H2,(H,24,25)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H17FO3S/c1-12-17(9-13-3-6-15(7-4-13)25(2)24)16-8-5-14(21)10-19(16)18(12)11-20(22)23/h3-10H,11H2,1-2H3,(H,22,23)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H17FO3S/c1-12-17(9-13-3-6-15(7-4-13)25(2)24)16-8-5-14(21)10-19(16)18(12)11-20(22)23/h3-10H,11H2,1-2H3,(H,22,23)/b17-9+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H17N5O3/c26-20(18-14-7-4-9-21-19(14)24-23-18)25-10-8-15-16(11-25)28-17(22-15)12-27-13-5-2-1-3-6-13/h1-7,9H,8,10-12H2,(H,21,23,24)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C20H18BrClN4S/c21-16-10-14-18(13-8-4-5-9-15(13)22)23-11-17-24-25-19(26(17)20(14)27-16)12-6-2-1-3-7-12/h4-5,8-10,12H,1-3,6-7,11H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H18ClNO5S/c1-3-27-19(23)20(12-22)17(13-4-8-15(26-2)9-5-13)18(20)28(24,25)16-10-6-14(21)7-11-16/h4-11,17-18H,3H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H18ClNO5S/c1-3-27-19(23)20(12-22)17(13-4-8-15(26-2)9-5-13)18(20)28(24,25)16-10-6-14(21)7-11-16/h4-11,17-18H,3H2,1-2H3/t17-,18+,20+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H18N2O2S/c1-12(2)15-11-25-20(21-15)22-19(23)18-13-7-3-5-9-16(13)24-17-10-6-4-8-14(17)18/h3-12,18H,1-2H3,(H,21,22,23)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C20H18N2O2S/c1-13(23)11-14-4-6-15(7-5-14)20(24)22-18-12-16(8-9-17(18)21)19-3-2-10-25-19/h2-10,12H,11,21H2,1H3,(H,22,24)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H18N2S/c1-22-10-8-15-16(9-11-22)18-12-14(13-21)6-7-20(18)23-19-5-3-2-4-17(15)19/h2-7,12H,8-11H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H18N4O5S2/c21-17(26)11-3-5-23(6-4-11)9-12-10-31-19-15(18(27)24(19)16(12)20(28)29)22-14(25)8-13-2-1-7-30-13/h1-7,15,19H,8-10H2,(H3-,21,22,25,26,28,29)/p+1/t15-,19-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C20H18N4O5S2/c21-17(26)11-3-5-23(6-4-11)9-12-10-31-19-15(18(27)24(19)16(12)20(28)29)22-14(25)8-13-2-1-7-30-13/h1-7,15,19H,8-10H2,(H3-,21,22,25,26,28,29)/t15-,19-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H18N8O8S3/c1-36-26-10(9-7-39-19(21)22-9)13(30)23-11-15(32)28-12(18(34)35)8(6-38-17(11)28)2-5-37-20-25-24-14(31)16(33)27(20)3-4-29/h2,4-5,7,11,17H,3,6H2,1H3,(H2,21,22)(H,23,30)(H,24,31)(H,34,35)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H18N8O8S3/c1-36-26-10(9-7-39-19(21)22-9)13(30)23-11-15(32)28-12(18(34)35)8(6-38-17(11)28)2-5-37-20-25-24-14(31)16(33)27(20)3-4-29/h2,4-5,7,11,17H,3,6H2,1H3,(H2,21,22)(H,23,30)(H,24,31)(H,34,35)/b5-2?,26-10+/t11-,17-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H18N8O8S3/c1-36-26-10(9-7-39-19(21)22-9)13(30)23-11-15(32)28-12(18(34)35)8(6-38-17(11)28)2-5-37-20-25-24-14(31)16(33)27(20)3-4-29/h2,4-5,7,11,17H,3,6H2,1H3,(H2,21,22)(H,23,30)(H,24,31)(H,34,35)/b5-2+,26-10-/t11-,17-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H18N8O8S3/c1-36-26-10(9-7-39-19(21)22-9)13(30)23-11-15(32)28-12(18(34)35)8(6-38-17(11)28)2-5-37-20-25-24-14(31)16(33)27(20)3-4-29/h2,4-5,7,11,17H,3,6H2,1H3,(H2,21,22)(H,23,30)(H,24,31)(H,34,35)/b5-2+,26-10-/t11?,17-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H18N8O8S3/c1-36-26-10(9-7-39-19(21)22-9)13(30)23-11-15(32)28-12(18(34)35)8(6-38-17(11)28)2-5-37-20-25-24-14(31)16(33)27(20)3-4-29/h2,4-5,7,11,17H,3,6H2,1H3,(H2,21,22)(H,23,30)(H,24,31)(H,34,35)/b5-2+,26-10+/t11-,17-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H18N8O8S3/c1-36-26-10(9-7-39-19(21)22-9)13(30)23-11-15(32)28-12(18(34)35)8(6-38-17(11)28)2-5-37-20-25-24-14(31)16(33)27(20)3-4-29/h2,4-5,7,11,17H,3,6H2,1H3,(H2,21,22)(H,23,30)(H,24,31)(H,34,35)/b5-2+,26-10+/t11-,17+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H18N8O8S3/c1-36-26-10(9-7-39-19(21)22-9)13(30)23-11-15(32)28-12(18(34)35)8(6-38-17(11)28)2-5-37-20-25-24-14(31)16(33)27(20)3-4-29/h2,4-5,7,11,17H,3,6H2,1H3,(H2,21,22)(H,23,30)(H,24,31)(H,34,35)/b5-2+,26-10+/t11?,17-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H19CIN2O3/c1-20(2,3)19(25)26-18-17(24)22-15-10-9-13(21)11-14(15)16(23-18)12-7-5-4-6-8-12/h4-11,18H,1-3H3,(H,22,24)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H19CIN2O3/c1-20(2,3)19(25)26-18-17(24)22-15-10-9-13(21)11-14(15)16(23-18)12-7-5-4-6-8-12/h4-11,18H,1-3H3,(H,22,24)/t18-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H19CIN2O3/c1-20(2,3)19(25)26-18-17(24)22-15-10-9-13(21)11-14(15)16(23-18)12-7-5-4-6-8-12/h4-11,18H,1-3H3,(H,22,24)/t18-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H19N3O6/c1-4-28-19(26)12-9-21-18(25)16-11(8-15(24)29-17(12)16)10-5-6-13-14(7-10)23(3)20(27)22(13)2/h5-7,9,11H,4,8H2,1-3H3,(H,21,25)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H19N3O6/c1-4-28-19(26)12-9-21-18(25)16-11(8-15(24)29-17(12)16)10-5-6-13-14(7-10)23(3)20(27)22(13)2/h5-7,9,11H,4,8H2,1-3H3,(H,21,25)/t11-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H19NO4/c1-24-17-8-3-14(4-9-17)20(16(13-21)7-12-19(22)23)15-5-10-18(25-2)11-6-15/h3-6,8-11H,7,12H2,1-2H3,(H,22,23)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H20CIN3O2S/c1-13-8-10-15(11-9-13)27-14(2)20(25)24(3)12-18-22-19(23-26-18)16-6-4-5-7-17(16)21/h4-11,14H,12H2,1-3H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H20CIN3O2S/c1-13-8-10-15(11-9-13)27-14(2)20(25)24(3)12-18-22-19(23-26-18)16-6-4-5-7-17(16)21/h4-11,14H,12H2,1-3H3/t14-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H20CIN5O3S2/c1-24-6-8-25(9-7-24)20(28)29-19-16-15(30-10-11-31-16)18(27)26(19)14-5-3-12-2-4-13(21)22-17(12)23-14/h2-5,19H,6-11H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H20CIN5O3S2/c1-24-6-8-25(9-7-24)20(28)29-19-16-15(30-10-11-31-16)18(27)26(19)14-5-3-12-2-4-13(21)22-17(12)23-14/h2-5,19H,6-11H2,1H3/t19-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H20CINO/c1-22(2,23)14-6-10-17-16-8-4-3-7-15(16)12-13-19-18(17)9-5-11-20(19)21/h3-5,7-13H,6,14H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C20H20ClNO/c1-22(2,23)14-6-10-17-16-8-4-3-7-15(16)12-13-19-18(17)9-5-11-20(19)21/h3-5,7-13H,6,14H2,1-2H3/b17-10-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H20F2N2O2S/c21-17-4-3-16(20(22)13-17)7-10-24-11-8-19(9-12-24)27(25,26)18-5-1-15(14-23)2-6-18/h1-6,13,19H,7-12H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H20FNO3S/c1-12(23)25-18-10-14-11-22(9-8-17(14)26-18)19(20(24)13-6-7-13)15-4-2-3-5-16(15)21/h2-5,10,13,19H,6-9,11H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H20N2O2/c1-15(2)13-14-18-19(23)21(16-9-5-3-6-10-16)22(20(18)24)17-11-7-4-8-12-17/h3-13,18H,14H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H20N2O2/c23-20(19-14-17-8-4-5-9-18(17)24-19)22-12-10-21(11-13-22)15-16-6-2-1-3-7-16/h1-9,14H,10-13,15H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H20N2O7S/c1-26-16-8-11(4-7-15(16)29-10-18(25)28-3)12(9-17(24)27-2)19-14(23)6-5-13-20(19)22-30-21-13/h4-8,12,22H,9-10H2,1-3H3/t12-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H20N2O7S/c1-26-16-8-11(4-7-15(16)29-10-18(25)28-3)12(9-17(24)27-2)19-14(23)6-5-13-20(19)22-30-21-13/h4-8,12,23H,9-10H2,1-3H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H20N2O7S/c1-26-16-8-11(4-7-15(16)29-10-18(25)28-3)12(9-17(24)27-2)19-14(23)6-5-13-20(19)22-30-21-13/h4-8,12,23H,9-10H2,1-3H3/t12-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H20N4O5S2/c21-17(26)11-3-5-23(6-4-11)9-12-10-31-19-15(18(27)24(19)16(12)20(28)29)22-14(25)8-13-2-1-7-30-13/h1-7,11,15,19H,8-10H2,(H2,21,26)(H,22,25)(H,28,29)/t15-,19+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H20N6O7S4/c1-7-10(3-11(27)28)37-20(22-7)36-5-8-4-34-17-13(16(30)26(17)14(8)18(31)32)24-15(29)12(25-33-2)9-6-35-19(21)23-9/h6,13,17H,3-5H2,1-2H3,(H2,21,23)(H,24,29)(H,27,28)(H,31,32)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H20N6O7S4/c1-7-10(3-11(27)28)37-20(22-7)36-5-8-4-34-17-13(16(30)26(17)14(8)18(31)32)24-15(29)12(25-33-2)9-6-35-19(21)23-9/h6,13,17H,3-5H2,1-2H3,(H2,21,23)(H,24,29)(H,27,28)(H,31,32)/b25-12-/t13-,17-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H20N6O7S4/c1-7-10(3-11(27)28)37-20(22-7)36-5-8-4-34-17-13(16(30)26(17)14(8)18(31)32)24-15(29)12(25-33-2)9-6-35-19(21)23-9/h6,13,17H,3-5H2,1-2H3,(H2,21,23)(H,24,29)(H,27,28)(H,31,32)/b25-12-/t13-,17-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H20N6O7S4/c1-7-10(3-11(27)28)37-20(22-7)36-5-8-4-34-17-13(16(30)26(17)14(8)18(31)32)24-15(29)12(25-33-2)9-6-35-19(21)23-9/h6,13,17H,3-5H2,1-2H3,(H2,21,23)(H,24,29)(H,27,28)(H,31,32)/b25-12-/t13-,17+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H20N6O7S4/c1-7-10(3-11(27)28)37-20(22-7)36-5-8-4-34-17-13(16(30)26(17)14(8)18(31)32)24-15(29)12(25-33-2)9-6-35-19(21)23-9/h6,13,17H,3-5H2,1-2H3,(H2,21,23)(H,24,29)(H,27,28)(H,31,32)/b25-12+/t13-,17-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H20N6O7S4/c1-7-10(3-11(27)28)37-20(22-7)36-5-8-4-34-17-13(16(30)26(17)14(8)18(31)32)24-15(29)12(25-33-2)9-6-35-19(21)23-9/h6,13,17H,3-5H2,1-2H3,(H2,21,23)(H,24,29)(H,27,28)(H,31,32)/b25-12+/t13?,17-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H20N6O7S4/c1-7-10(3-11(27)28)37-20(22-7)36-5-8-4-34-17-13(16(30)26(17)14(8)18(31)32)24-15(29)12(25-33-2)9-6-35-19(21)23-9/h6,13,17H,3-5H2,1-2H3,(H2,21,23)(H,24,29)(H,27,28)(H,31,32)/t13-,17-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H20N6O9S/c1-25-19(22-23-24-25)36-8-10-7-35-18-20(34-2,17(33)26(18)13(10)16(31)32)21-14(28)12(15(29)30)9-3-5-11(27)6-4-9/h3-6,12,18,27H,7-8H2,1-2H3,(H,21,28)(H,29,30)(H,31,32)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H20N6O9S/c1-25-19(22-23-24-25)36-8-10-7-35-18-20(34-2,17(33)26(18)13(10)16(31)32)21-14(28)12(15(29)30)9-3-5-11(27)6-4-9/h3-6,12,18,27H,7-8H2,1-2H3,(H,21,28)(H,29,30)(H,31,32)/t12-,18-,20-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H20N6O9S/c1-25-19(22-23-24-25)36-8-10-7-35-18-20(34-2,17(33)26(18)13(10)16(31)32)21-14(28)12(15(29)30)9-3-5-11(27)6-4-9/h3-6,12,18,27H,7-8H2,1-2H3,(H,21,28)(H,29,30)(H,31,32)/t12-,18-,20?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H20N6O9S/c1-25-19(22-23-24-25)36-8-10-7-35-18-20(34-2,17(33)26(18)13(10)16(31)32)21-14(28)12(15(29)30)9-3-5-11(27)6-4-9/h3-6,12,18,27H,7-8H2,1-2H3,(H,21,28)(H,29,30)(H,31,32)/t12?,18-,20+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C20H21BrFNO2/c21-17-5-3-16(4-6-17)20(25)10-13-23(14-11-20)12-9-19(24)15-1-7-18(22)8-2-15/h1-8,25H,9-14H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H21ClN2O2/c1-14(2)12-22-13-19(24)23(3)18-10-9-16(21)11-17(18)20(25)15-7-5-4-6-8-15/h4-11,22H,1,12-13H2,2-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H21ClN2O4/c21-16-2-4-17(5-3-16)25-13-20(24)23-9-7-22(8-10-23)12-15-1-6-18-19(11-15)27-14-26-18/h1-6,11H,7-10,12-14H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H21ClN4O2/c21-14-2-3-17-16(10-14)20(24-23-17)22-15-5-7-25(8-6-15)11-13-1-4-18-19(9-13)27-12-26-18/h1-4,9-10,15H,5-8,11-12H2,(H2,22,23,24)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H21ClO4/c1-13(2)24-19(23)20(3,4)25-17-11-7-15(8-12-17)18(22)14-5-9-16(21)10-6-14/h5-13H,1-4H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H21F3N2OS/c1-3-24(4-2)12-11-19(26)25-15-7-5-6-8-17(15)27-18-10-9-14(13-16(18)25)20(21,22)23/h5-10,13H,3-4,11-12H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H21F3N2OS/c1-3-24(4-2)12-11-19(26)25-15-7-5-6-8-17(15)27-18-10-9-14(13-16(18)25)20(21,22)23/h5-11,13,26H,3-4,12H2,1-2H3/b19-11-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H21F5N2O2/c21-19(22)28-17-9-8-15(29-20(23,24)25)11-14(17)12-27-16-7-4-10-26-18(16)13-5-2-1-3-6-13/h1-3,5-6,8-9,11,16,18-19,26-27H,4,7,10,12H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H21F5N2O2/c21-19(22)28-17-9-8-15(29-20(23,24)25)11-14(17)12-27-16-7-4-10-26-18(16)13-5-2-1-3-6-13/h1-3,5-6,8-9,11,16,18-19,26-27H,4,7,10,12H2/t16-,18-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H21FN2O/c1-23(2)11-3-10-20(17-5-7-18(21)8-6-17)19-9-4-15(13-22)12-16(19)14-24-20/h4-9,12H,3,10-11,14H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H21FN2O/c1-23(2)11-3-10-20(17-5-7-18(21)8-6-17)19-9-4-15(13-22)12-16(19)14-24-20/h4-9,12H,3,10-11,14H2,1-2H3/t20-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H21FN2O/c1-23(2)11-3-10-20(17-5-7-18(21)8-6-17)19-9-4-15(13-22)12-16(19)14-24-20/h4-9,12H,3,10-11,14H2,1-2H3/t20-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H21FN4O2/c1-27-20-22-11-10-17(24-20)19-18(13-2-4-14(21)5-3-13)23-12-25(19)15-6-8-16(26)9-7-15/h2-5,10-12,15-16,26H,6-9H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H21N/c1-21-12-6-11-16-14-7-2-4-9-17(14)19-13-20(19)18-10-5-3-8-15(16)18/h2-5,7-11,19-21H,6,12-13H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H21N/c1-21-12-6-11-16-14-7-2-4-9-17(14)19-13-20(19)18-10-5-3-8-15(16)18/h2-5,7-11,19-21H,6,12-13H2,1H3/t19-,20+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H21N/c1-21(2)13-7-11-19-15-17-9-4-3-8-16(17)14-18-10-5-6-12-20(18)19/h3-6,8-12,14-15H,7,13H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H21N/c1-21(2)15-7-12-20-18-10-5-3-8-16(18)13-14-17-9-4-6-11-19(17)20/h3-6,8-14H,7,15H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H21N3O/c1-16-22-13-15-23(16)14-12-20(19(21)24,17-8-4-2-5-9-17)18-10-6-3-7-11-18/h2-11,13,15H,12,14H2,1H3,(H2,21,24)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H21N3O/c1-22-17-9-3-2-7-15(17)13-19(22)20(24)23-12-5-4-10-18(23)16-8-6-11-21-14-16/h2-3,6-9,11,13-14,18H,4-5,10,12H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H21N3O/c1-22-17-9-3-2-7-15(17)13-19(22)20(24)23-12-5-4-10-18(23)16-8-6-11-21-14-16/h2-3,6-9,11,13-14,18H,4-5,10,12H2,1H3/t18-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H21N3O5S/c1-20(2,3)19(25)28-17-13-9-5-6-10-14(13)29(26,27)23(4)16(17)18(24)22-15-11-7-8-12-21-15/h5-12H,1-	0	(Mazumdar et al., 2023)

4H3,(H,21,22,24)	2023)
InChI=1S/C20H21N3OS/c1-23(2)13-14-5-7-15(8-6-14)20(24)22-18-12-16(9-10-17(18)21)19-4-3-11-25-19/h3-12H,13,21H2,1-2H3,(H,22,24)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H21N5O6/c21-20-24-16-15(18(29)25-20)12(9-22-16)6-3-10-1-4-11(5-2-10)17(28)23-13(19(30)31)7-8-14(26)27/h1-2,4-5,9,13H,3,6-8H2,(H,23,28)(H,26,27)(H,30,31)(H4,21,22,24,25,29)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H21N7O6S2/c21-6-11-4-2-1-3-10(11)5-13(28)22-15-17(31)27-16(19(32)33)12(8-34-18(15)27)9-35-20-23-24-25-26(20)7-14(29)30/h1-4,15,18H,5-9,21H2,(H,22,28)(H,29,30)(H,32,33)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H21N7O6S2/c21-6-11-4-2-1-3-10(11)5-13(28)22-15-17(31)27-16(19(32)33)12(8-34-18(15)27)9-35-20-23-24-25-26(20)7-14(29)30/h1-4,15,18H,5-9,21H2,(H,22,28)(H,29,30)(H,32,33)/t15-,18-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H21N7O6S2/c21-6-11-4-2-1-3-10(11)5-13(28)22-15-17(31)27-16(19(32)33)12(8-34-18(15)27)9-35-20-23-24-25-26(20)7-14(29)30/h1-4,15,18H,5-9,21H2,(H,22,28)(H,29,30)(H,32,33)/t15-,18-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H21N7O6S2/c21-6-11-4-2-1-3-10(11)5-13(28)22-15-17(31)27-16(19(32)33)12(8-34-18(15)27)9-35-20-23-24-25-26(20)7-14(29)30/h1-4,15,18H,5-9,21H2,(H,22,28)(H,29,30)(H,32,33)/t15-,18+/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H21N7O6S2/c21-6-11-4-2-1-3-10(11)5-13(28)22-15-17(31)27-16(19(32)33)12(8-34-18(15)27)9-35-20-23-24-25-26(20)7-14(29)30/h1-4,15,18H,5-9,21H2,(H,22,28)(H,29,30)(H,32,33)/t15?,18-/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H21NO/c1-21-12-10-14(11-13-21)19-15-6-2-4-8-17(15)20(22)18-9-5-3-7-16(18)19/h2-9,20,22H,10-13H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H21NO/c1-21(2)14-17(22)13-20-18-9-5-3-7-15(18)11-12-16-8-4-6-10-19(16)20/h3-10,13H,11-12,14H2,1-2H3	0 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C20H21NO4/c1-22-17-6-5-13(10-18(17)23-2)9-16-15-12-20(25-4)19(24-3)11-14(15)7-8-21-16/h5-8,10-12H,9H2,1-4H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H21NO9/c1-26-13-6-10(7-14-18(13)30-5-4-29-14)11(8-15(22)27-2)16-17(23)12(20(25)28-3)9-21-19(16)24/h6-7,9,11H,4-5,8H2,1-3H3,(H2,21,23,24)/t11-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H22Cl2N2O2/c21-16-4-3-14(11-17(16)22)12-20(25)24-9-5-19-15(6-10-26-19)18(24)13-23-7-1-2-8-23/h3-4,6,10-11,18H,1-2,5,7-9,12-13H2	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H22Cl2N2O2/c21-16-4-3-14(11-17(16)22)12-20(25)24-9-5-19-15(6-10-26-19)18(24)13-23-7-1-2-8-23/h3-4,6,10-11,18H,1-2,5,7-9,12-13H2/t18-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H22Cl2N2O3/c21-16-2-1-13(9-17(16)22)10-20(26)24-7-4-19-15(5-8-27-19)18(24)12-23-6-3-14(25)11-23/h1-2,5,8-9,14,18,25H,3-4,6-7,10-12H2	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H22Cl2N2O3/c21-16-2-1-13(9-17(16)22)10-20(26)24-7-4-19-15(5-8-27-19)18(24)12-23-6-3-14(25)11-23/h1-2,5,8-9,14,18,25H,3-4,6-7,10-12H2/t14-,18-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H22Cl2N2O3/c21-16-2-1-13(9-17(16)22)10-20(26)24-7-4-19-15(5-8-27-19)18(24)12-23-6-3-14(25)11-23/h1-2,5,8-9,14,18,25H,3-4,6-7,10-12H2/t14?,18-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H22Cl2N2O4/c1-23(19(27)13-24(8-10-25)9-11-26)18-7-6-14(21)12-16(18)20(28)15-4-2-3-5-17(15)22/h2-7,12,25-26H,8-11,13H2,1H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H22Cl2N2OS/c21-16-4-3-14(11-17(16)22)12-19(25)24-9-5-15-6-10-26-20(15)18(24)13-23-7-1-2-8-23/h3-4,6,10-11,18H,1-2,5,7-9,12-13H2	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H22Cl2N2OS/c21-16-4-3-14(11-17(16)22)12-19(25)24-9-5-15-6-10-26-20(15)18(24)13-23-7-1-2-8-23/h3-4,6,10-11,18H,1-2,5,7-9,12-13H2/t18-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C20H22Cl2N2OS/c21-16-4-3-14(11-17(16)22)12-19(25)24-9-5-15-6-10-26-20(15)18(24)13-23-7-1-2-8-23/h3-4,6,10-11,18H,1-2,5,7-9,12-13H2/t18-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H22Cl2N2OS/c21-16-4-3-14(11-17(16)22)12-20(25)24-9-5-19-15(6-10-26-19)18(24)13-23-7-1-2-8-23/h3-4,6,10-11,18H,1-2,5,7-9,12-13H2	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H22Cl2N2OS/c21-16-4-3-14(11-17(16)22)12-20(25)24-9-5-19-15(6-10-26-19)18(24)13-23-7-1-2-8-23/h3-4,6,10-11,18H,1-2,5,7-9,12-13H2/t18-/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H22ClN3O/c1-3-24(4-2)13-14-11-16(6-8-20(14)25)23-18-9-10-22-19-12-15(21)5-7-17(18)19/h5-12,25H,3-4,13H2,1-2H3,(H,22,23)	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H22ClN3O3S2/c1-13-16-11-14(21)3-6-19(16)28-20(13)29(25,26)23-15-4-5-18(27-2)17(12-15)24-9-7-22-8-10-24/h3-6,11-12,22-23H,7-10H2,1-2H3	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C20H22F2N2O3S/c21-16-4-1-14(19(22)13-16)7-10-24-11-8-18(9-12-24)28(26,27)17-5-2-15(3-6-17)20(23)25/h1-6,13,18H,7-12H2,(H2,23,25)	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H22FN3/c1-23-12-4-5-16(14-23)20-22-18-6-2-3-7-19(18)24(20)13-15-8-10-17(21)11-9-15/h2-3,6-11,16H,4-5,12-14H2,1H3/t16-/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H22N2/c1-21-13-11-15-16(12-14-21)18-8-4-6-10-20(18)22(2)19-9-5-3-7-17(15)19/h3-10H,11-14H2,1-2H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H22N2/c1-22-13-10-16(11-14-22)19-18-7-3-2-5-15(18)8-9-17-6-4-12-21-20(17)19/h2-7,12H,8-11,13-14H2,1H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H22N2O2/c1-21-9-11-22(12-10-21)18-13-15-5-3-4-6-19(15)24-20-8-7-16(23-2)14-17(18)20/h3-8,13-14H,9-12H2,1-2H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H22N2O4S/c23-20-16-8-2-4-10-18(16)27(24,25)22(20)14-6-5-13-21-19-12-11-15-7-1-3-9-17(15)26-19/h1-4,7-10,19,21H,5-6,11-14H2/t19-/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H22N2S/c1-3-7-19-17(5-1)22(18-6-2-4-8-20(18)23-19)14-16-13-21-11-9-15(16)10-12-21/h1-8,15-16H,9-14H2	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C20H22N2S/c1-3-7-19-17(5-1)22(18-6-2-4-8-20(18)23-19)14-16-13-21-11-9-15(16)10-12-21/h1-8,15-16H,9-14H2/t16-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H22N2S/c1-3-7-19-17(5-1)22(18-6-2-4-8-20(18)23-19)14-16-13-21-11-9-15(16)10-12-21/h1-8,15-16H,9-14H2/t16-/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H22N4O/c1-14-3-6-19-18(11-14)20(23-13-22-19)24-9-7-16(8-10-24)25-17-5-4-15(2)21-12-17/h3-6,11-13,16H,7-10H2,1-2H3	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C20H22N4O10S/c1-9(25)33-10(2)34-19(28)15-11(7-32-20(21)29)8-35-18-14(17(27)24(15)18)22-16(26)13(23-30-3)12-5-4-6-31-12/h4-6,10,14,18H,7-8H2,1-3H3,(H2,21,29)(H,22,26)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H22N4O10S/c1-9(25)33-10(2)34-19(28)15-11(7-32-20(21)29)8-35-18-14(17(27)24(15)18)22-16(26)13(23-30-3)12-5-4-6-31-12/h4-6,10,14,18H,7-8H2,1-3H3,(H2,21,29)(H,22,26)/b23-13-	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H22N4O10S/c1-9(25)33-10(2)34-19(28)15-11(7-32-20(21)29)8-35-18-14(17(27)24(15)18)22-16(26)13(23-30-3)12-5-4-6-31-12/h4-6,10,14,18H,7-8H2,1-3H3,(H2,21,29)(H,22,26)/b23-13-/t10-,14?,18-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H22N4O10S/c1-9(25)33-10(2)34-19(28)15-11(7-32-20(21)29)8-35-18-14(17(27)24(15)18)22-16(26)13(23-30-3)12-5-4-6-31-12/h4-6,10,14,18H,7-8H2,1-3H3,(H2,21,29)(H,22,26)/b23-13-/t10-,14+,18-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H22N4O10S/c1-9(25)33-10(2)34-19(28)15-11(7-32-20(21)29)8-35-18-14(17(27)24(15)18)22-16(26)13(23-30-3)12-5-4-6-31-12/h4-6,10,14,18H,7-8H2,1-3H3,(H2,21,29)(H,22,26)/b23-13-/t10-,14+,18+/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H22N4O10S/c1-9(25)33-10(2)34-19(28)15-11(7-32-20(21)29)8-35-18-14(17(27)24(15)18)22-16(26)13(23-30-3)12-5-4-6-31-12/h4-6,10,14,18H,7-8H2,1-3H3,(H2,21,29)(H,22,26)/b23-13-/t10?,14-,18-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C20H22N4O10S/c1-9(25)33-10(2)34-19(28)15-11(7-32-20(21)29)8-35-18-14(17(27)24(15)18)22-16(26)13(23-30-3)12-5-4-6-31-12/h4-6,10,14,18H,7-8H2,1-3H3,(H2,21,29)(H,22,26)/b23-13+	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H22N4O10S/c1-9(25)33-10(2)34-19(28)15-11(7-32-20(21)29)8-35-18-14(17(27)24(15)18)22-16(26)13(23-30-3)12-5-4-6-31-12/h4-6,10,14,18H,7-8H2,1-3H3,(H2,21,29)(H,22,26)/b23-13+/t10-,14?,18-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H22N4O10S/c1-9(25)33-10(2)34-19(28)15-11(7-32-20(21)29)8-35-18-14(17(27)24(15)18)22-16(26)13(23-30-3)12-5-4-6-31-12/h4-6,10,14,18H,7-8H2,1-3H3,(H2,21,29)(H,22,26)/b23-13+/t10-,14+,18-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H22N4O10S/c1-9(25)33-10(2)34-19(28)15-11(7-32-20(21)29)8-35-18-14(17(27)24(15)18)22-16(26)13(23-30-3)12-5-4-6-31-12/h4-6,10,14,18H,7-8H2,1-3H3,(H2,21,29)(H,22,26)/b23-13+/t10-,14+,18+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H22N4O10S/c1-9(25)33-10(2)34-19(28)15-11(7-32-20(21)29)8-35-18-14(17(27)24(15)18)22-16(26)13(23-30-3)12-5-4-6-31-12/h4-6,10,14,18H,7-8H2,1-3H3,(H2,21,29)(H,22,26)/b23-13+/t10?,14-,18-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H22N4O2/c1-23-8-12(9-24-10-18(25)22-19(26)11-24)5-15-14-3-2-4-16-20(14)13(7-21-16)6-17(15)23/h2-5,7,12,17,21H,6,8-11H2,1H3,(H,22,25,26)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H22N4O2/c1-23-8-12(9-24-10-18(25)22-19(26)11-24)5-15-14-3-2-4-16-20(14)13(7-21-16)6-17(15)23/h2-5,7,12,17,21H,6,8-11H2,1H3,(H,22,25,26)/t12-,17-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H22N4O2/c1-23-8-12(9-24-10-18(25)22-19(26)11-24)5-15-14-3-2-4-16-20(14)13(7-21-16)6-17(15)23/h2-5,7,12,17,21H,6,8-11H2,1H3,(H,22,25,26)/t12-,17+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H22N4O2/c1-23-8-12(9-24-10-18(25)22-19(26)11-24)5-15-14-3-2-4-16-20(14)13(7-21-16)6-17(15)23/h2-5,7,12,17,21H,6,8-11H2,1H3,(H,22,25,26)/t12-,17+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H22N4O4/c1-13-14-11-17(26-2)18(27-3)12-15(14)22-20(21-13)24-8-6-23(7-9-24)19(25)16-5-4-10-28-16/h4-5,10-12H,6-9H2,1-3H3	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C20H22N4O4S/c1-11-10-29-19-15(18(26)24(19)16(11)20(27)28)23-14(25)9-12-3-5-13(6-4-12)17-21-7-2-8-22-17/h3-6,15,19H,2,7-10H2,1H3,(H,21,22)(H,23,25)(H,27,28)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H22N4O4S/c1-11-10-29-19-15(18(26)24(19)16(11)20(27)28)23-14(25)9-12-3-5-13(6-4-12)17-21-7-2-8-22-17/h3-6,15,19H,2,7-10H2,1H3,(H,21,22)(H,23,25)(H,27,28)/t15-,19-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H22N4O4S/c1-11-10-29-19-15(18(26)24(19)16(11)20(27)28)23-14(25)9-12-3-5-13(6-4-12)17-21-7-2-8-22-17/h3-6,15,19H,2,7-10H2,1H3,(H,21,22)(H,23,25)(H,27,28)/t15-,19+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H22N4O4S/c1-11-10-29-19-15(18(26)24(19)16(11)20(27)28)23-14(25)9-12-3-5-13(6-4-12)17-21-7-2-8-22-17/h3-6,15,19H,2,7-10H2,1H3,(H,21,22)(H,23,25)(H,27,28)/t15?,19-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H22N8O5/c1-28(9-11-8-23-17-15(24-11)16(21)26-20(22)27-17)12-4-2-10(3-5-12)18(31)25-13(19(32)33)6-7-14(29)30/h2-5,8,13H,6-7,9H2,1H3,(H,25,31)(H,29,30)(H,32,33)(H4,21,22,23,26,27)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H22N8O5/c1-28(9-11-8-23-17-15(24-11)16(21)26-20(22)27-17)12-4-2-10(3-5-12)18(31)25-13(19(32)33)6-7-14(29)30/h2-5,8,13H,6-7,9H2,1H3,(H,25,31)(H,29,30)(H,32,33)(H4,21,22,23,26,27)/p-2/t13-/m1/s1	0	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C20H22N8O5/c1-28(9-11-8-23-17-15(24-11)16(21)26-20(22)27-17)12-4-2-10(3-5-12)18(31)25-13(19(32)33)6-7-14(29)30/h2-5,8,13H,6-7,9H2,1H3,(H,25,31)(H,29,30)(H,32,33)(H4,21,22,23,26,27)/t13-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H22N8O5/c1-28(9-11-8-23-17-15(24-11)16(21)26-20(22)27-17)12-4-2-10(3-5-12)18(31)25-13(19(32)33)6-7-14(29)30/h2-5,8,13H,6-7,9H2,1H3,(H,25,31)(H,29,30)(H,32,33)(H4,21,22,23,26,27)/t13-/m1/s1	0	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C20H22O6S/c1-13-4-10-16(11-5-13)27(23,24)18-17(20(18,12-25-2)19(21)22)14-6-8-15(26-3)9-7-14/h4-11,17-18H,12H2,1-3H3,(H,21,22)	0	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C20H22O6S/c1-13-4-10-16(11-5-13)27(23,24)18-17(20(18,12-25-2)19(21)22)14-6-8-15(26-3)9-7-14/h4-11,17-18H,12H2,1-3H3,(H,21,22)/t17-,18-,20+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H23CIN2O4S/c1-22-16-8-5-6-9-17(16)23(13-7-3-2-4-10-20(24)25)18-12-11-15(21)14-19(18)28(22,26)27/h5-6,8-9,11-12,14H,2-4,7,10,13H2,1H3,(H,24,25)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H23F3N2O2/c1-26-18-10-9-16(27-20(21,22)23)12-15(18)13-25-17-8-5-11-24-19(17)14-6-3-2-4-7-14/h2-4,6-7,9-10,12,17,19,24-25H,5,8,11,13H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H23F3N2O2/c1-26-18-10-9-16(27-20(21,22)23)12-15(18)13-25-17-8-5-11-24-19(17)14-6-3-2-4-7-14/h2-4,6-7,9-10,12,17,19,24-25H,5,8,11,13H2,1H3/t17-,19-/m0/s1	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C20H23F3N2O2/c1-26-18-10-9-16(27-20(21,22)23)12-15(18)13-25-17-8-5-11-24-19(17)14-6-3-2-4-7-14/h2-4,6-7,9-10,12,17,19,24-25H,5,8,11,13H2,1H3/t17-,19+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H23N/c1-20(2)18-12-6-4-9-16(18)15(11-8-14-21-3)17-10-5-7-13-19(17)20/h4-7,9-13,21H,8,14H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H23N/c1-21-14-6-12-20-13-11-15(16-7-2-4-9-18(16)20)17-8-3-5-10-19(17)20/h2-5,7-10,15,21H,6,11-14H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H23N/c1-21(2)15-7-12-20-18-10-5-3-8-16(18)13-14-17-9-4-6-11-19(17)20/h3-6,8-12H,7,13-15H2,1-2H3	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C20H23N3/c1-22(2)12-5-13-23-19-7-4-3-6-17(19)10-11-18-9-8-16(15-21)14-20(18)23/h3-4,6-9,14H,5,10-13H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H23N3/c1-22(2)14-9-15-23-16-19(17-10-5-3-6-11-17)20(21-23)18-12-7-4-8-13-18/h3-8,10-13,16H,9,14-15H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H23N3O2/c1-20-11-12-22(2)18(20)23(3)17-10-9-15(13-16(17)20)25-19(24)21-14-7-5-4-6-8-14/h4-10,13,18H,11-12H2,1-3H3,(H,21,24)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H23N3O2/c1-20-11-12-22(2)18(20)23(3)17-10-9-15(13-16(17)20)25-19(24)21-14-7-5-4-6-8-14/h4-10,13,18H,11-12H2,1-3H3,(H,21,24)/t18-,20-/m0/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C20H23N3O2/c1-20-11-12-22(2)18(20)23(3)17-10-9-15(13-16(17)20)25-19(24)21-14-7-5-4-6-8-14/h4-10,13,18H,11-12H2,1-3H3,(H,21,24)/t18-,20?/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H23N3O2/c1-20-11-12-22(2)18(20)23(3)17-10-9-15(13-16(17)20)25-19(24)21-14-7-5-4-6-8-14/h4-10,13,18H,11-12H2,1-3H3,(H,21,24)/t18-,20+/m1/s1	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C20H23N3O2/c24-20-21-18-8-4-5-9-19(18)23(20)16-10-12-22(13-11-16)14-15-25-17-6-2-1-3-7-17/h1-9,16H,10-15H2,(H,21,24)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H23N3O3/c1-15-14-17(9-10-18(15)23(25)26)20(24)21-11-5-13-22-12-4-7-16-6-2-3-8-19(16)22/h2-3,6,8-10,14H,4-5,7,11-13H2,1H3,(H,21,24)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H23N5O2S2/c1-28-19-17(29(26,27)14-6-3-2-4-7-14)18-22-16-9-5-8-15(16)20(25(18)23-19)24-12-10-21-11-13-24/h2-4,6-7,21H,5,8-13H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H23N5O6S/c1-20(2)13(17(28)29)25-15(27)12(16(25)32-20)22-14(26)11(10-6-4-3-5-7-10)23-19(31)24-9-8-21-18(24)30/h3-7,11-13,16H,8-9H2,1-2H3,(H,21,30)(H,22,26)(H,23,31)(H,28,29)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H23N5O6S/c1-20(2)13(17(28)29)25-15(27)12(16(25)32-20)22-14(26)11(10-6-4-3-5-7-10)23-19(31)24-9-8-21-18(24)30/h3-7,11-13,16H,8-9H2,1-2H3,(H,21,30)(H,22,26)(H,23,31)(H,28,29)/t11-,12-,13+,16-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H23N7O7/c21-20-25-16-15(18(32)26-20)27(9-28)12(8-23-16)7-22-11-3-1-10(2-4-11)17(31)24-13(19(33)34)5-6-14(29)30/h1-4,9,12-13,22H,5-8H2,(H,24,31)(H,29,30)(H,33,34)(H4,21,23,25,26,32)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C20H23N7O7/c21-20-25-16-15(18(32)26-20)27(9-28)12(8-23-16)7-22-11-3-1-10(2-4-11)17(31)24-13(19(33)34)5-6-14(29)30/h1-4,9,12-	1	(Li et al., 2005)

13,22H,5-8H ₂ , (H,24,31)(H,29,30)(H,33,34)(H ₄ ,21,23,25,26,32)/p-2/t12-,13+/m1/s1	
InChI=1S/C20H23N7O7/c21-20-25-16-15(18(32)26-20)27(9-28)12(8-23-16)7-22-11-3-1-10(2-4-11)17(31)24-13(19(33)34)5-6-14(29)30/h1-4,9,12-13,22H,5-8H ₂ , (H,24,31)(H,29,30)(H,33,34)(H ₄ ,21,23,25,26,32)/t12-,13-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H23N7O7/c21-20-25-16-15(18(32)26-20)27(9-28)12(8-23-16)7-22-11-3-1-10(2-4-11)17(31)24-13(19(33)34)5-6-14(29)30/h1-4,9,12-13,22H,5-8H ₂ , (H,24,31)(H,29,30)(H,33,34)(H ₄ ,21,23,25,26,32)/t12-,13+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H23NO/c1-21-13-14(22)12-20-11-10-15(16-6-2-4-8-18(16)20)17-7-3-5-9-19(17)20/h2-9,14-15,21-22H,10-13H ₂ ,1H ₃	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H23NO/c1-21-13-14(22)12-20-11-10-15(16-6-2-4-8-18(16)20)17-7-3-5-9-19(17)20/h2-9,14-15,21-22H,10-13H ₂ ,1H ₃ /t14-,15?,20?/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H23NO/c1-21-13-14(22)12-20-11-10-15(16-6-2-4-8-18(16)20)17-7-3-5-9-19(17)20/h2-9,14-15,21-22H,10-13H ₂ ,1H ₃ /t14-,15?,20?/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H23NO/c1-21(2)15-14-20(17-9-4-3-5-10-17)13-12-16-8-6-7-11-18(16)19(20)22/h3-11H,12-15H ₂ ,1-2H ₃	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H23NO/c1-21(2)15-14-20(17-9-4-3-5-10-17)13-12-16-8-6-7-11-18(16)19(20)22/h3-11H,12-15H ₂ ,1-2H ₃ /t20-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H23NO/c1-21(2,22)15-7-12-20-18-10-5-3-8-16(18)13-14-17-9-4-6-11-19(17)20/h3-6,8-12H,7,13-15H ₂ ,1-2H ₃	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H23NO ₂ /c1-3-9-16(10-4-1)20(17-11-5-2-6-12-17)22-15-19(23-20)18-13-7-8-14-21-18/h1-6,9-12,18-19,21H,7-8,13-15H ₂	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H23NO ₂ /c1-3-9-16(10-4-1)20(17-11-5-2-6-12-17)22-15-19(23-20)18-13-7-8-14-21-18/h1-6,9-12,18-19,21H,7-8,13-15H ₂ /t18-,19-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H23NO ₂ /c1-3-9-16(10-4-1)20(17-11-5-2-6-12-17)22-15-19(23-20)18-13-7-8-14-21-18/h1-6,9-12,18-19,21H,7-8,13-15H ₂ /t18-,19+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H23NO ₂ /c1-3-9-16(10-4-1)20(17-11-5-2-6-12-17)22-15-19(23-20)18-13-7-8-14-21-18/h1-6,9-12,18-19,21H,7-8,13-15H ₂ /t18-,19+/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H23NO ₄ /c1-11(22)24-16-7-5-13-14-10-12-4-6-15(23-3)18-17(12)20(13,19(16)25-18)8-9-21(14)2/h4,6-7,13-14,19H,5,8-10H ₂ ,1-3H ₃	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H23NO ₄ /c1-11(22)24-16-7-5-13-14-10-12-4-6-15(23-3)18-17(12)20(13,19(16)25-18)8-9-21(14)2/h4,6-7,13-14,19H,5,8-10H ₂ ,1-3H ₃ /t13-,14-,19+,20+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H23NO ₄ /c1-11(22)24-16-7-5-13-14-10-12-4-6-15(23-3)18-17(12)20(13,19(16)25-18)8-9-21(14)2/h4,6-7,13-14,19H,5,8-10H ₂ ,1-3H ₃ /t13-,14?,19-,20?/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H23NO ₄ /c1-11(22)24-16-7-5-13-14-10-12-4-6-15(23-3)18-17(12)20(13,19(16)25-18)8-9-21(14)2/h4,6-7,13-14,19H,5,8-10H ₂ ,1-3H ₃ /t13-,14+,19-,20?/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H23NO ₄ /c1-11(22)24-16-7-5-13-14-10-12-4-6-15(23-3)18-17(12)20(13,19(16)25-18)8-9-21(14)2/h4,6-7,13-14,19H,5,8-10H ₂ ,1-3H ₃ /t13-,14+,19-,20+/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H23NO ₄ /c22-13-4-3-12-9-15-20(24)6-5-14(23)18-19(20,16(12)17(13)25-18)7-8-21(15)10-11-1-2-11/h3-4,11,15,18,22,24H,1-2,5-10H ₂	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H23NO ₄ /c22-13-4-3-12-9-15-20(24)6-5-14(23)18-19(20,16(12)17(13)25-18)7-8-21(15)10-11-1-2-11/h3-4,11,15,18,22,24H,1-2,5-10H ₂ /t15-,18-,19-,20+/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H23NO ₄ /c22-13-4-3-12-9-15-20(24)6-5-14(23)18-19(20,16(12)17(13)25-18)7-8-21(15)10-11-1-2-11/h3-4,11,15,18,22,24H,1-2,5-	1 (Mazumdar et al., 2023)

10H2/t15-,18+,19-,20-/m1/s1	2023)
InChI=1S/C20H23NO4/c22-13-4-3-12-9-15-20(24)6-5-14(23)18-19(20,16(12)17(13)25-18)7-8-21(15)10-11-1-2-11/h3-4,11,15,18,22,24H,1-2,5-10H2/t15-,18+,19+,20-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H23NO4/c22-13-4-3-12-9-15-20(24)6-5-14(23)18-19(20,16(12)17(13)25-18)7-8-21(15)10-11-1-2-11/h3-4,11,15,18,22,24H,1-2,5-10H2/t15-,18+,19+,20-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H23NO4/c22-13-4-3-12-9-15-20(24)6-5-14(23)18-19(20,16(12)17(13)25-18)7-8-21(15)10-11-1-2-11/h3-4,11,15,18,22,24H,1-2,5-10H2/t15-,18+,19+,20+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H23NO4S2/c1-3-25-13-20(19(21)26)17(14-9-11-15(24-2)12-10-14)18(20)27(22,23)16-7-5-4-6-8-16/h4-12,17-18H,3,13H2,1-2H3,(H2,21,26)/t17-,18-,20+/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H23NO5S/c1-3-24-11-20(21)18(14-6-9-16-17(10-14)26-12-25-16)19(20)27(22,23)15-7-4-13(2)5-8-15/h4-10,18-19H,3,11-12,21H2,1-2H3/t18-,19-,20+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H23NS/c1-21-12-6-7-15(14-21)13-18-16-8-2-4-10-19(16)22-20-11-5-3-9-17(18)20/h2-5,8-11,15,18H,6-7,12-14H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H24Cl2N4/c1-3-9-25(12-14-4-5-14)19-16-8-10-26(20(16)24-13(2)23-19)18-7-6-15(21)11-17(18)22/h6-7,11,14H,3-5,8-10,12H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H24Cl2N4O3/c21-15-4-3-13(9-16(15)22)10-17(27)26-8-5-20(18(28)23-19(29)24-20)11-14(26)12-25-6-1-2-7-25/h3-4,9,14H,1-2,5-8,10-12H2,(H2,23,24,28,29)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H24Cl2N4O3/c21-15-4-3-13(9-16(15)22)10-17(27)26-8-5-20(18(28)23-19(29)24-20)11-14(26)12-25-6-1-2-7-25/h3-4,9,14H,1-2,5-8,10-12H2,(H2,23,24,28,29)/t14-,20-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H24Cl2N4O3/c21-15-4-3-13(9-16(15)22)10-17(27)26-8-5-20(18(28)23-19(29)24-20)11-14(26)12-25-6-1-2-7-25/h3-4,9,14H,1-2,5-8,10-12H2,(H2,23,24,28,29)/t14-,20+/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H24Cl2N4O3/c21-15-4-3-13(9-16(15)22)10-17(27)26-8-5-20(18(28)23-19(29)24-20)11-14(26)12-25-6-1-2-7-25/h3-4,9,14H,1-2,5-8,10-12H2,(H2,23,24,28,29)/t14-,20+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H24ClN3O2/c1-26-19-12-18(22)17(21)11-16(19)20(25)23-15-7-9-24(10-8-15)13-14-5-3-2-4-6-14/h2-6,11-12,15H,7-10,13,22H2,1H3,(H,23,25)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H24ClN3S/c1-22-11-13-23(14-12-22)9-4-10-24-17-5-2-3-6-19(17)25-20-8-7-16(21)15-18(20)24/h2-3,5-8,15H,4,9-14H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H24F3N3OS2/c21-20(22,23)15-2-3-18-17(14-15)26(16-4-13-28-19(16)29-18)6-1-5-24-7-9-25(10-8-24)11-12-27/h2-4,13-14,27H,1,5-12H2	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H24FN3O4S/c1-28-19-9-8-17(29(22,26)27)11-18(19)20(25)23-12-16-3-2-10-24(16)13-14-4-6-15(21)7-5-14/h4-9,11,16H,2-3,10,12-13H2,1H3,(H,23,25)(H2,22,26,27)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H24FN3O4S/c1-28-19-9-8-17(29(22,26)27)11-18(19)20(25)23-12-16-3-2-10-24(16)13-14-4-6-15(21)7-5-14/h4-9,11,16H,2-3,10,12-13H2,1H3,(H,23,25)(H2,22,26,27)/t16-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H24FN3O4S/c1-28-19-9-8-17(29(22,26)27)11-18(19)20(25)23-12-16-3-2-10-24(16)13-14-4-6-15(21)7-5-14/h4-9,11,16H,2-3,10,12-13H2,1H3,(H,23,25)(H2,22,26,27)/t16-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H24N/c1-21(2)15-13-19(14-16-21)20(17-9-5-3-6-10-17)18-11-7-4-8-12-18/h3-12H,13-16H2,1-2H3/q+1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H24N2/c1-15(19-10-6-7-12-21-19)20-17(11-13-22(2)3)14-16-8-4-5-9-18(16)20/h4-10,12,15H,11,13-14H2,1-3H3	1 (Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C20H24N2/c1-16-18-10-5-4-9-17(18)15-22(14-8-13-21(2)3)20-12-7-6-11-19(16)20/h4-7,9-12H,1,8,13-15H2,2-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H24N2O/c1-14(2)22-13-7-12-20(19(21)23)17-10-5-3-8-15(17)16-9-4-6-11-18(16)20/h3-6,8-11,14,22H,7,12-13H2,1-2H3,(H2,21,23)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H24N2O2/c1-3-13-12-22-9-7-14(13)10-19(22)20(23)16-6-8-21-18-5-4-15(24-2)11-17(16)18/h3-6,8,11,13-14,19-20,23H,1,7,9-10,12H2,2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H24N2O2/c1-3-13-12-22-9-7-14(13)10-19(22)20(23)16-6-8-21-18-5-4-15(24-2)11-17(16)18/h3-6,8,11,13-14,19-20,23H,1,7,9-10,12H2,2H3/t13-,14-,19-,20-/m0/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C20H24N2O2/c1-3-13-12-22-9-7-14(13)10-19(22)20(23)16-6-8-21-18-5-4-15(24-2)11-17(16)18/h3-6,8,11,13-14,19-20,23H,1,7,9-10,12H2,2H3/t13-,14-,19-,20+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H24N2O2/c1-3-13-12-22-9-7-14(13)10-19(22)20(23)16-6-8-21-18-5-4-15(24-2)11-17(16)18/h3-6,8,11,13-14,19-20,23H,1,7,9-10,12H2,2H3/t13-,14-,19+,20-/m0/s1	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C20H24N2O2/c1-3-13-12-22-9-7-14(13)10-19(22)20(23)16-6-8-21-18-5-4-15(24-2)11-17(16)18/h3-6,8,11,13-14,19-20,23H,1,7,9-10,12H2,2H3/t13-,14?,19+,20-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H24N2O2/c1-3-13-12-22-9-7-14(13)10-19(22)20(23)16-6-8-21-18-5-4-15(24-2)11-17(16)18/h3-6,8,11,13-14,19-20,23H,1,7,9-10,12H2,2H3/t13-,14+,19-,20-/m1/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C20H24N2O2/c1-3-13-12-22-9-7-14(13)10-19(22)20(23)16-6-8-21-18-5-4-15(24-2)11-17(16)18/h3-6,8,11,13-14,19-20,23H,1,7,9-10,12H2,2H3/t13-,14+,19-,20+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H24N2O2/c1-3-13-12-22-9-7-14(13)10-19(22)20(23)16-6-8-21-18-5-4-15(24-2)11-17(16)18/h3-6,8,11,13-14,19-20,23H,1,7,9-10,12H2,2H3/t13-,14+,19+,20-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H24N2O2/c1-3-13-12-22-9-7-14(13)10-19(22)20(23)16-6-8-21-18-5-4-15(24-2)11-17(16)18/h3-6,8,11,13-14,19-20,23H,1,7,9-10,12H2,2H3/t13?,14?,19-,20-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H24N2O2/c1-3-13-12-22-9-7-14(13)10-19(22)20(23)16-6-8-21-18-5-4-15(24-2)11-17(16)18/h3-6,8,11,13-14,19-20,23H,1,7,9-10,12H2,2H3/t13?,14?,19?,20-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H24N2O6/c1-11(2)10-28-20(24)17-13(4)21-12(3)16(19(23)27-5)18(17)14-8-6-7-9-15(14)22(25)26/h6-9,11,18,21H,10H2,1-5H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H24N2O6/c1-11(2)10-28-20(24)17-13(4)21-12(3)16(19(23)27-5)18(17)14-8-6-7-9-15(14)22(25)26/h6-9,11,18,21H,10H2,1-5H3/t18-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H24N2OS/c1-4-22(5-2)13-12-21-16-11-10-14(3)20-18(16)19(23)15-8-6-7-9-17(15)24-20/h6-11,21H,4-5,12-13H2,1-3H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H24N2OS/c1-5-18(23)15-10-11-20-17(12-15)22(13-14(2)21(3)4)16-8-6-7-9-19(16)24-20/h6-12,14H,5,13H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H24N2OS/c1-5-18(23)15-10-11-20-17(12-15)22(13-14(2)21(3)4)16-8-6-7-9-19(16)24-20/h6-12,14H,5,13H2,1-4H3/t14-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H24N2OS/c1-5-18(23)15-10-11-20-17(12-15)22(13-14(2)21(3)4)16-8-6-7-9-19(16)24-20/h6-12,14H,5,13H2,1-4H3/t14-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H24N2S2/c1-21-9-11-22(12-10-21)18-13-15-5-3-4-6-19(15)24-20-8-7-16(23-2)14-17(18)20/h3-8,14,18H,9-13H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H24N2S2/c1-21-9-11-22(12-10-21)18-13-15-5-3-4-6-19(15)24-20-8-7-16(23-2)14-17(18)20/h3-8,14,18H,9-13H2,1-2H3/t18-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C20H24N2S2/c1-23-16-8-9-20-18(13-16)22(12-10-15-5-4-11-21-14-15)17-6-2-3-7-19(17)24-20/h2-3,6-9,13,15,21H,4-5,10-12,14H2,1H3	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C20H24N2S2/c1-23-16-8-9-20-18(13-16)22(12-10-15-5-4-11-21-14-15)17-6-2-3-7-19(17)24-20/h2-3,6-9,13,15,21H,4-5,10-12,14H2,1H3/t15-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H24N2S2/c1-23-16-8-9-20-18(13-16)22(12-10-15-5-4-11-21-14-15)17-6-2-3-7-19(17)24-20/h2-3,6-9,13,15,21H,4-5,10-12,14H2,1H3/t15-/m1/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C20H24N2S2/c1-23-16-9-10-20-18(14-16)22(13-11-15-6-4-5-12-21-15)17-7-2-3-8-19(17)24-20/h2-3,7-10,14-15,21H,4-6,11-13H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H24N2S2/c1-23-16-9-10-20-18(14-16)22(13-11-15-6-4-5-12-21-15)17-7-2-3-8-19(17)24-20/h2-3,7-10,14-15,21H,4-6,11-13H2,1H3/t15-/m0/s1	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C20H24N4O2/c1-23(2)13-15-6-5-7-17(12-15)20-21-19(22-24(20)14-25-3)16-8-10-18(26-4)11-9-16/h5-12H,13-14H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H24N4O2/c1-23(2)14-15-5-4-6-17(13-15)20-21-19(22-24(20)11-12-25)16-7-9-18(26-3)10-8-16/h4-10,13,25H,11-12,14H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H24N4O3S/c1-23(2)14-17-8-9-18(27-17)28-11-10-21-20-19(24(25)26)16(13-22-20)12-15-6-4-3-5-7-15/h3-9,13,21-22H,10-12,14H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H24N4O3S2/c1-11-12(2)23-24-19-15(11)16(21)17(28-19)18(25)22-10-13-6-8-14(9-7-13)29(26,27)20(3,4)5/h6-9H,10,21H2,1-5H3,(H,22,25)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C20H24O2/c1-12-10-14-15-4-5-18(22)20(15,3)9-7-16(14)19(2)8-6-13(21)11-17(12)19/h6,8,11,14-16H,1,4-5,7,9-10H2,2-3H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H24O2/c1-3-20(22)11-9-18-17-6-4-13-12-14(21)5-7-15(13)16(17)8-10-19(18,20)2/h1,5,7,12,16-18,21-22H,4,6,8-11H2,2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H24O2/c1-3-20(22)11-9-18-17-6-4-13-12-14(21)5-7-15(13)16(17)8-10-19(18,20)2/h1,5,7,12,16-18,21-22H,4,6,8-11H2,2H3/t16-,18+,19+,20+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H24O2/c1-3-20(22)11-9-18-17-6-4-13-12-14(21)5-7-15(13)16(17)8-10-19(18,20)2/h1,5,7,12,16-18,21-22H,4,6,8-11H2,2H3/t16-,17+,18+,19-,20+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H24O2/c1-3-20(22)11-9-18-17-6-4-13-12-14(21)5-7-15(13)16(17)8-10-19(18,20)2/h1,5,7,12,16-18,21-22H,4,6,8-11H2,2H3/t16-,17+,18+,19?,20?/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H24O7S/c1-3-25-19(20(21)22)14-16-6-8-17(9-7-16)26-13-12-15-4-10-18(11-5-15)27-28(2,23)24/h4-11,19H,3,12-14H2,1-2H3,(H,21,22)/t19-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H25CIN2O/c21-17-5-2-14(3-6-17)19-15-1-4-16(13-15)20(19)8-7-18(22-20)23-9-11-24-12-10-23/h2-3,5-6,15-16,19H,1,4,7-13H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25CIN2O/c21-17-5-2-14(3-6-17)19-15-1-4-16(13-15)20(19)8-7-18(22-20)23-9-11-24-12-10-23/h2-3,5-6,15-16,19H,1,4,7-13H2/t15-,16-,19-,20-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H25CIN2O/c21-17-5-2-14(3-6-17)19-15-1-4-16(13-15)20(19)8-7-18(22-20)23-9-11-24-12-10-23/h2-3,5-6,15-16,19H,1,4,7-13H2/t15-,16-,19+,20?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H25CIN2O/c21-17-5-2-14(3-6-17)19-15-1-4-16(13-15)20(19)8-7-18(22-20)23-9-11-24-12-10-23/h2-3,5-6,15-16,19H,1,4,7-13H2/t15-,16+,19-,20+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H25CIN2O2/c1-24-19-7-6-16(14-20(19)25-2)8-9-22-10-12-23(13-11-22)18-5-3-4-17(21)15-18/h3-7,14-15H,8-13H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C20H25CIN2O2/c1-24-19-8-7-16(15-20(19)25-2)9-10-22-11-13-23(14-12-22)18-6-4-3-5-17(18)21/h3-8,15H,9-14H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25CIN2O5/c1-4-28-20(25)18-15(11-27-10-9-22)23-12(2)16(19(24)26-3)17(18)13-7-5-6-8-14(13)21/h5-8,17,23H,4,9-11,22H2,1-3H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25CIN4OS/c21-16-14-19-20(22-15-16)25(17-4-1-2-5-18(17)27-19)7-3-6-23-8-10-24(11-9-23)12-13-26/h1-2,4-5,14-15,26H,3,6-13H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25FN4O/c1-16(23-20(26)17-3-2-9-22-15-17)8-10-24-11-13-25(14-12-24)19-6-4-18(21)5-7-19/h2-7,9,15-16H,8,10-14H2,1H3,(H,23,26)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25FN4O/c1-16(23-20(26)17-3-2-9-22-15-17)8-10-24-11-13-25(14-12-24)19-6-4-18(21)5-7-19/h2-7,9,15-16H,8,10-14H2,1H3,(H,23,26)/t16-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H25FN8O6S2/c1-3-29(2,7-11(22)30)6-4-5-10-8-36-18-13(17(32)28(18)14(10)19(33)34)24-16(31)12(26-35-9-21)15-25-20(23)37-27-15/h4-5,13,18H,3,6-9H2,1-2H3,(H5-,22,23,24,25,27,30,31,33,34)/b5-4+,26-12+/t13-,18-,29?/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25FN8O6S2/c1-3-29(2,7-11(22)30)6-4-5-10-8-36-18-13(17(32)28(18)14(10)19(33)34)24-16(31)12(26-35-9-21)15-25-20(23)37-27-15/h4-5,13,18H,3,6-9H2,1-2H3,(H5-,22,23,24,25,27,30,31,33,34)/p+1/b5-4+,26-12-/t13-,18-,29?/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25FN8O6S2/c1-3-29(2,7-11(22)30)6-4-5-10-8-36-18-13(17(32)28(18)14(10)19(33)34)24-16(31)12(26-35-9-21)15-25-20(23)37-27-15/h4-5,13,18H,3,6-9H2,1-2H3,(H5-,22,23,24,25,27,30,31,33,34)/p+1/b5-4+,26-12+/t13-,18-,29?/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H25FN8O6S2/c1-3-29(2,7-11(22)30)6-4-5-10-8-36-18-13(17(32)28(18)14(10)19(33)34)24-16(31)12(26-35-9-21)15-25-20(23)37-27-15/h4-5,13,18H,3,6-9H2,1-2H3,(H5-,22,23,24,25,27,30,31,33,34)/p+1/t13-,18-,29?/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25N3O2/c1-3-14(11-24)22-20(25)13-7-16-15-5-4-6-17-19(15)12(9-21-17)8-18(16)23(2)10-13/h4-7,9,13-14,18,21,24H,3,8,10-11H2,1-2H3,(H,22,25)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25N3O2/c1-3-14(11-24)22-20(25)13-7-16-15-5-4-6-17-19(15)12(9-21-17)8-18(16)23(2)10-13/h4-7,9,13-14,18,21,24H,3,8,10-11H2,1-2H3,(H,22,25)/t13-,14+,18-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25N3O2/c1-3-14(11-24)22-20(25)13-7-16-15-5-4-6-17-19(15)12(9-21-17)8-18(16)23(2)10-13/h4-7,9,13-14,18,21,24H,3,8,10-11H2,1-2H3,(H,22,25)/t13-,14+,18-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25N3S/c1-21-13-15-22(16-14-21)11-6-12-23-17-7-2-4-9-19(17)24-20-10-5-3-8-18(20)23/h2-5,7-10H,6,11-16H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H25N5O7S2/c1-9-6-33-16-12(23-14(26)11(24-30-5)10-7-34-19(21)22-10)15(27)25(16)13(9)17(28)31-8-32-18(29)20(2,3)4/h7,12,16H,6,8H2,1-5H3,(H2,21,22)(H,23,26)/b24-11-/t12-,16-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25N5O7S2/c1-9-6-33-16-12(23-14(26)11(24-30-5)10-7-34-19(21)22-10)15(27)25(16)13(9)17(28)31-8-32-18(29)20(2,3)4/h7,12,16H,6,8H2,1-5H3,(H2,21,22)(H,23,26)/b24-11+/t12-,16-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H25N7O2/c1-13-10-26(12-17-21-5-2-6-22-17)11-16(13)18-24-19-15(20(28)25-18)9-23-27(19)14-3-7-29-8-4-14/h2,5-6,9,13-14,16H,3-4,7-8,10-12H2,1H3,(H,24,25,28)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H25NO/c1-19(2)17-12-7-8-13-18(17)20(22-19,14-9-15-21-3)16-10-5-4-6-11-16/h4-8,10-13,21H,9,14-15H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H25NO/c1-19(2)17-12-7-8-13-18(17)20(22-19,14-9-15-21-3)16-10-5-4-6-11-16/h4-8,10-13,21H,9,14-15H2,1-3H3/t20-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25NO/c1-2-3-4-11-16-21-20(22)19(17-12-7-5-8-13-17)18-14-9-6-10-15-18/h5-10,12-15,19H,2-4,11,16H2,1H3,(H,21,22)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H25NO/c1-4-19(22)20(15-16-21(2)3,17-11-7-5-8-12-17)18-13-9-6-10-14-18/h5-14H,4,15-16H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C20H25NO2/c1-19-8-6-16-15-5-3-14(22)12-13(15)2-4-17(16)18(19)7-9-20(19,23)10-11-21/h12,17-18,23H,2-10H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H25NO2/c1-19-8-6-16-15-5-3-14(22)12-13(15)2-4-17(16)18(19)7-9-20(19,23)10-11-21/h12,17-18,23H,2-10H2,1H3/t17-18+,19+,20-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25NO2/c1-21-13-12-20(16-6-4-3-5-7-16)17(14-21)15-23-19-10-8-18(22-2)9-11-19/h3-11,17,20H,12-15H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25NO2/c1-21-13-12-20(16-6-4-3-5-7-16)17(14-21)15-23-19-10-8-18(22-2)9-11-19/h3-11,17,20H,12-15H2,1-2H3/t17-,20-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25NO2/c1-21-13-12-20(16-6-4-3-5-7-16)17(14-21)15-23-19-10-8-18(22-2)9-11-19/h3-11,17,20H,12-15H2,1-2H3/t17-,20+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H25NO2/c1-21-13-12-20(16-6-4-3-5-7-16)17(14-21)15-23-19-10-8-18(22-2)9-11-19/h3-11,17,20H,12-15H2,1-2H3/t17-,20+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25NO2/c1-21-13-12-20(16-6-4-3-5-7-16)17(14-21)15-23-19-10-8-18(22-2)9-11-19/h3-11,17,20H,12-15H2,1-2H3/t17-,20+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H25NO2/c1-4-14-11-17-12-16(7-10-19(17)21-13(14)2)20(22)15-5-8-18(23-3)9-6-15/h7,10-12,15,18H,4-6,8-9H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H25NO2/c22-15-6-7-16-17-10-14-2-1-3-18(23)19(14)20(16,11-15)8-9-21(17)12-13-4-5-13/h1-3,13,16-17,23H,4-12H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25NO2/c22-15-6-7-16-17-10-14-2-1-3-18(23)19(14)20(16,11-15)8-9-21(17)12-13-4-5-13/h1-3,13,16-17,23H,4-12H2/t16-,17-,20+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H25NO2/c22-15-6-7-16-17-10-14-2-1-3-18(23)19(14)20(16,11-15)8-9-21(17)12-13-4-5-13/h1-3,13,16-17,23H,4-12H2/t16-,17?,20+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H25NO2/c22-15-6-7-16-17-10-14-2-1-3-18(23)19(14)20(16,11-15)8-9-21(17)12-13-4-5-13/h1-3,13,16-17,23H,4-12H2/t16-,17+,20-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25NO2S/c1-16(24-15-17-9-4-3-5-10-17)20(22)21-14-8-12-18-11-6-7-13-19(18)23-2/h3-7,9-11,13,16H,8,12,14-15H2,1-2H3,(H,21,22)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25NO2S/c1-16(24-15-17-9-4-3-5-10-17)20(22)21-14-8-12-18-11-6-7-13-19(18)23-2/h3-7,9-11,13,16H,8,12,14-15H2,1-2H3,(H,21,22)/t16-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25NO2S2/c1-14-7-11-24-18(14)17(19-15(2)8-12-25-19)6-4-10-21-9-3-5-16(13-21)20(22)23/h6-8,11-12,16H,3-5,9-10,13H2,1-2H3,(H,22,23)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25NO2S2/c1-14-7-11-24-18(14)17(19-15(2)8-12-25-19)6-4-10-21-9-3-5-16(13-21)20(22)23/h6-8,11-12,16H,3-5,9-10,13H2,1-2H3,(H,22,23)/t16-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H25NO2S2/c1-14-7-11-24-18(14)17(19-15(2)8-12-25-19)6-4-10-21-9-3-5-16(13-21)20(22)23/h6-8,11-12,16H,3-5,9-10,13H2,1-2H3,(H,22,23)/t16-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H25NO3/c1-3-21(4-2)15-16-24-19(22)20(23,17-11-7-5-8-12-17)18-13-9-6-10-14-18/h5-14,23H,3-4,15-16H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25NO3S2/c1-4-19(17-10-12-18(13-11-17)26(3,23)24)21-20(22)15(2)25-14-16-8-6-5-7-9-16/h5-13,15,19H,4,14H2,1-3H3,(H,21,22)/t15-,19+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H25NO3S2/c1-5-19(16-8-12-18(13-9-16)26(4,23)24)21-20(22)15(3)25-17-10-6-14(2)7-11-17/h6-13,15,19H,5H2,1-4H3,(H,21,22)/t15-,19-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C20H25NO4/c1-24-17-7-6-15(12-18(17)25-16-4-2-3-5-16)20(13-21)10-8-14(9-11-20)19(22)23/h6-7,12,14,16H,2-5,8-11H2,1H3,(H,22,23)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25NOS/c1-14-10-11-15(2)19(12-14)16(3)21-20(22)17(4)23-13-18-8-6-5-7-9-18/h5-12,16-17H,13H2,1-4H3,(H,21,22)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25NOS/c1-14-10-11-15(2)19(12-14)16(3)21-20(22)17(4)23-13-18-8-6-5-7-9-18/h5-12,16-17H,13H2,1-4H3,(H,21,22)/t16-,17-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H25NOS/c1-14-10-11-19(12-15(14)2)16(3)21-20(22)17(4)23-13-18-8-6-5-7-9-18/h5-12,16-17H,13H2,1-4H3,(H,21,22)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25NOS/c1-14-10-11-19(12-15(14)2)16(3)21-20(22)17(4)23-13-18-8-6-5-7-9-18/h5-12,16-17H,13H2,1-4H3,(H,21,22)/t16-,17-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25NOS/c1-4-19(17-11-10-15(2)16(3)14-17)21-20(22)12-13-23-18-8-6-5-7-9-18/h5-11,14,19H,4,12-13H2,1-3H3,(H,21,22)/t19-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25NOS/c1-5-19(18-12-11-14(2)13-15(18)3)21-20(22)16(4)23-17-9-7-6-8-10-17/h6-13,16,19H,5H2,1-4H3,(H,21,22)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25NOS/c1-5-19(18-12-11-14(2)13-15(18)3)21-20(22)16(4)23-17-9-7-6-8-10-17/h6-13,16,19H,5H2,1-4H3,(H,21,22)/t16-,19+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H25NS/c1-19(2)17-12-7-8-13-18(17)20(22-19,14-9-15-21-3)16-10-5-4-6-11-16/h4-8,10-13,21H,9,14-15H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H25NS/c1-19(2)17-12-7-8-13-18(17)20(22-19,14-9-15-21-3)16-10-5-4-6-11-16/h4-8,10-13,21H,9,14-15H2,1-3H3/t20-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H25NS/c1-19(2)17-12-7-8-13-18(17)20(22-19,14-9-15-21-3)16-10-5-4-6-11-16/h4-8,10-13,21H,9,14-15H2,1-3H3/t20-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H26Cl2N10/c21-13-3-7-15(8-4-13)29-19(25)31-17(23)27-11-1-2-12-28-18(24)32-20(26)30-16-9-5-14(22)6-10-16/h3-10H,1-2,11-12H2,(H5,23,25,27,29,31)(H5,24,26,28,30,32)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H26ClN3O3/c1-13(2)18-11-16(27-23-18)12-22-20(25)14-4-5-17(21)19(10-14)26-15-6-8-24(3)9-7-15/h4-5,10-11,13,15H,6-9,12H2,1-3H3,(H,22,25)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C20H26ClNO3/c21-17-1-3-18(4-2-17)25-13-19(23)24-6-5-22-20-10-14-7-15(11-20)9-16(8-14)12-20/h1-4,14-16,22H,5-13H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H26F3N3O3/c1-14(27)25-8-9-26(17(12-25)11-24-7-6-18(28)13-24)19(29)10-15-2-4-16(5-3-15)20(21,22)23/h2-5,17-18,28H,6-13H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H26F3N3O3/c1-14(27)25-8-9-26(17(12-25)11-24-7-6-18(28)13-24)19(29)10-15-2-4-16(5-3-15)20(21,22)23/h2-5,17-18,28H,6-13H2,1H3/t17-,18-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H26F3N3O3/c1-14(27)25-8-9-26(17(12-25)11-24-7-6-18(28)13-24)19(29)10-15-2-4-16(5-3-15)20(21,22)23/h2-5,17-18,28H,6-13H2,1H3/t17-,18+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H26N2/c1-16(14-21(2)3)15-22-19-10-6-4-8-17(19)12-13-18-9-5-7-11-20(18)22/h4-11,16H,12-15H2,1-3H3	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C20H26N2/c1-16(14-21(2)3)15-22-19-10-6-4-8-17(19)12-13-18-9-5-7-11-20(18)22/h4-11,16H,12-15H2,1-3H3/t16-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H26N2/c1-16(14-21(2)3)15-22-19-10-6-4-8-17(19)12-13-18-9-5-7-11-20(18)22/h4-11,16H,12-15H2,1-3H3/t16-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H26N2/c1-20(2)16-10-5-7-12-18(16)22(15-9-14-21(3)4)19-13-8-6-11-17(19)20/h5-8,10-13H,9,14-15H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C20H26N2O/c1-3-15-14-21-11-9-16(15)5-4-6-17-10-12-22-20-8-7-18(23-2)13-19(17)20/h3,7-8,10,12-13,15-16,21H,1,4-6,9,11,14H2,2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H26N2O/c1-3-15-14-21-11-9-16(15)5-4-6-17-10-12-22-20-8-7-18(23-2)13-19(17)20/h3,7-8,10,12-13,15-16,21H,1,4-6,9,11,14H2,2H3/t15-,16-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H26N2O/c1-3-15-14-21-11-9-16(15)5-4-6-17-10-12-22-20-8-7-18(23-2)13-19(17)20/h3,7-8,10,12-13,15-16,21H,1,4-6,9,11,14H2,2H3/t15-,16+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H26N2O/c1-3-15-14-21-11-9-16(15)5-4-6-17-10-12-22-20-8-7-18(23-2)13-19(17)20/h3,7-8,10,12-13,15-16,21H,1,4-6,9,11,14H2,2H3/t15-,16+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H26N2O2/c1-3-10-11-8-14-17-20(12-6-4-5-7-13(12)21(17)2)9-15(16(11)18(20)23)22(14)19(10)24/h4-7,10-11,14-19,23-24H,3,8-9H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H26N2O3S/c1-25-19-11-10-17(26(2,23)24)13-16(19)14-22-18-9-6-12-21-20(18)15-7-4-3-5-8-15/h3-5,7-8,10-11,13,18,20-22H,6,9,12,14H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H26N2O3S/c1-25-19-11-10-17(26(2,23)24)13-16(19)14-22-18-9-6-12-21-20(18)15-7-4-3-5-8-15/h3-5,7-8,10-11,13,18,20-22H,6,9,12,14H2,1-2H3/t18-,20-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H26N2O4/c23-18-11-20(7-3-4-8-20)12-19(24)22(18)10-9-21-13-15-14-25-16-5-1-2-6-17(16)26-15/h1-2,5-6,15,21H,3-4,7-14H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H26N2O4/c23-18-11-20(7-3-4-8-20)12-19(24)22(18)10-9-21-13-15-14-25-16-5-1-2-6-17(16)26-15/h1-2,5-6,15,21H,3-4,7-14H2/t15-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H26N2O4/c23-18-11-20(7-3-4-8-20)12-19(24)22(18)10-9-21-13-15-14-25-16-5-1-2-6-17(16)26-15/h1-2,5-6,15,21H,3-4,7-14H2/t15-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H26N2S/c1-5-16-10-11-20-18(12-16)22(14-15(2)13-21(3)4)17-8-6-7-9-19(17)23-20/h6-12,15H,5,13-14H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H26N2S/c1-5-16-10-11-20-18(12-16)22(14-15(2)13-21(3)4)17-8-6-7-9-19(17)23-20/h6-12,15H,5,13-14H2,1-4H3/t15-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H26N2S/c1-5-16-10-11-20-18(12-16)22(14-15(2)13-21(3)4)17-8-6-7-9-19(17)23-20/h6-12,15H,5,13-14H2,1-4H3/t15-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H26N4O/c1-4-24(5-2)20(25)22-14-10-16-15-7-6-8-17-19(15)13(11-21-17)9-18(16)23(3)12-14/h6-8,10-11,14,18,21H,4-5,9,12H2,1-3H3,(H,22,25)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H26N4O/c1-4-24(5-2)20(25)22-14-10-16-15-7-6-8-17-19(15)13(11-21-17)9-18(16)23(3)12-14/h6-8,10-11,14,18,21H,4-5,9,12H2,1-3H3,(H,22,25)/t14-,18-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H26N4O/c1-4-24(5-2)20(25)22-14-10-16-15-7-6-8-17-19(15)13(11-21-17)9-18(16)23(3)12-14/h6-8,10-11,14,18,21H,4-5,9,12H2,1-3H3,(H,22,25)/t14-,18+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H26N4O/c1-4-24(5-2)20(25)22-14-10-16-15-7-6-8-17-19(15)13(11-21-17)9-18(16)23(3)12-14/h6-8,10-11,14,18,21H,4-5,9,12H2,1-3H3,(H,22,25)/t14-,18+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H26N4O5S/c1-14-13-18(23-29-14)19(25)21-12-11-15-7-9-17(10-8-15)30(27,28)24-20(26)22-16-5-3-2-4-6-16/h7-10,13,16H,2-6,11-12H2,1H3,(H,21,25)(H,22,24,26)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H26O2/c1-3-20(22)11-9-18-17-6-4-13-12-14(21)5-7-15(13)16(17)8-10-19(18,20)2/h1,12,15-18,22H,4-11H2,2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H26O2/c1-3-20(22)11-9-18-17-6-4-13-12-14(21)5-7-15(13)16(17)8-10-19(18,20)2/h1,12,15-18,22H,4-11H2,2H3/t15-,16-	1	(Mazumdar et al., 2023)

,17+,18+,19-,20+/m0/s1	2023)
InChI=1S/C20H26O2/c1-3-20(22)11-9-18-17-6-4-13-12-14(21)5-7-15(13)16(17)8-10-19(18,20)2/h1,12,15-18,22H,4-11H2,2H3/t15-,16-,17+,18+,19?,20?/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H26O2/c1-3-20(22)11-9-18-17-6-4-13-12-14(21)5-7-15(13)16(17)8-10-19(18,20)2/h1,12,15-18,22H,4-11H2,2H3/t15-,16+,17+,18-,19-,20-/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H26O2/c1-3-20(22)9-8-17-18(20)7-6-16-15-5-4-14(21)11-13(15)10-12(2)19(16)17/h1,12,16-19,22H,4-11H2,2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H27Cl2N3O3/c1-2-28-20(27)24-9-10-25(16(14-24)13-23-7-3-4-8-23)19(26)12-15-5-6-17(21)18(22)11-15/h5-6,11,16H,2-4,7-10,12-14H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H27Cl2N3O3/c1-2-28-20(27)24-9-10-25(16(14-24)13-23-7-3-4-8-23)19(26)12-15-5-6-17(21)18(22)11-15/h5-6,11,16H,2-4,7-10,12-14H2,1H3/t16-/m0/s1	1 (Li et al., 2005)
InChI=1S/C20H27ClN2O5S/c1-12-5-4-6-15(12)22-19(25)23-16-8-7-14(21)18(17(16)24)29(26,27)20(2,3)13-9-10-28-11-13/h5,7-8,13,15,24H,4,6,9-11H2,1-3H3,(H2,22,23,25)	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C20H27F3N6OS/c1-19(2,3)17-25-14(20(21,22)23)13-15(26-17)29-10-8-28(9-11-29)7-4-12-31-18-24-6-5-16(30)27-18/h5-6,13H,4,7-12H2,1-3H3,(H,24,27,30)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H27N3O/c1-4-13-23(14-5-1)17-18-8-6-9-19(16-18)24-15-7-12-22-20-10-2-3-11-21-20/h2-3,6,8-11,16H,1,4-5,7,12-15,17H2,(H,21,22)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H27N3O5/c24-18-15(8-4-12-22-13-5-9-17(20(27)28)23(18)22)21-16(19(25)26)11-10-14-6-2-1-3-7-14/h1-3,6-7,15-17,21H,4-5,8-13H2,(H,25,26)(H,27,28)/t15-,16+,17+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H27N3O6/c1-3-5-11-28-13-15(29-18(21)26)12-23-17(25)20(4-2,16(24)22-19(23)27)14-9-7-6-8-10-14/h6-10,15H,3-5,11-13H2,1-2H3,(H2,21,26)(H,22,24,27)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H27N3O6/c1-3-5-11-28-13-15(29-18(21)26)12-23-17(25)20(4-2,16(24)22-19(23)27)14-9-7-6-8-10-14/h6-10,15H,3-5,11-13H2,1-2H3,(H2,21,26)(H,22,24,27)/t15-,20-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H27N3O6/c1-3-5-11-28-13-15(29-18(21)26)12-23-17(25)20(4-2,16(24)22-19(23)27)14-9-7-6-8-10-14/h6-10,15H,3-5,11-13H2,1-2H3,(H2,21,26)(H,22,24,27)/t15-,20?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H27N3O6/c1-3-5-11-28-13-15(29-18(21)26)12-23-17(25)20(4-2,16(24)22-19(23)27)14-9-7-6-8-10-14/h6-10,15H,3-5,11-13H2,1-2H3,(H2,21,26)(H,22,24,27)/t15-,20+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H27N3O6/c1-4-29-19(27)15(11-10-14-8-6-5-7-9-14)21-13(2)17(24)23-16(18(25)26)12-22(3)20(23)28/h5-9,13,15-16,21H,4,10-12H2,1-3H3,(H,25,26)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H27N5O2/c26-20-12-9-15-14-17(10-11-18(15)21-20)27-13-5-4-8-19-22-23-24-25(19)16-6-2-1-3-7-16/h10-11,14,16H,1-9,12-13H2,(H,21,26)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H27N5O3/c1-4-24(12-13-26)10-11-25-16(14-15-8-6-5-7-9-15)21-18-17(25)19(27)23(3)20(28)22(18)2/h5-9,26H,4,10-14H2,1-3H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H27N5O5S/c1-15-14-18(23-30-15)19(26)21-11-10-16-6-8-17(9-7-16)31(28,29)24-20(27)22-25-12-4-2-3-5-13-25/h6-9,14H,2-5,10-13H2,1H3,(H,21,26)(H2,22,24,27)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H27NO11/c21-6-10(9-4-2-1-3-5-9)30-20-18(28)16(26)14(24)12(32-20)8-29-19-17(27)15(25)13(23)11(7-22)31-19/h1-5,10-20,22-28H,7-8H2/t10-,11-,12-,13+,14+,15-,16-,17-,18-,19+,20+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C20H27NO2/c22-16-6-5-15-11-18-20(23)8-2-1-7-19(20,17(15)12-16)9-10-21(18)13-14-3-4-14/h5-6,12,14,18,22-23H,1-4,7-11,13H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H27NO2/c22-16-6-5-15-11-18-20(23)8-2-1-7-19(20,17(15)12-16)9-10-21(18)13-14-3-4-14/h5-6,12,14,18,22-23H,1-4,7-11,13H2/t18-,19+,20-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H27NO2/c22-16-6-5-15-11-18-20(23)8-2-1-7-19(20,17(15)12-16)9-10-21(18)13-14-3-4-14/h5-6,12,14,18,22-23H,1-4,7-11,13H2/t18-,19+,20-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H27NO3/c1-18-7-6-14-12(13(18)3-4-15(18)22)5-8-20-17(24-20)16(23)11(10-21)9-19(14,20)2/h11-15,17,22H,3-9H2,1-2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H27NO3/c1-18-7-6-14-12(13(18)3-4-15(18)22)5-8-20-17(24-20)16(23)11(10-21)9-19(14,20)2/h12-15,17,22-23H,3-9H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H27NO4/c1-15-5-4-6-18(11-15)25-14-17(22)13-21-10-9-16-7-8-19(23-2)20(12-16)24-3/h4-8,11-12,17,21-22H,9-10,13-14H2,1-3H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H28Cl2N2O/c1-20(2)7-10-24(16(13-20)14-23-8-3-4-9-23)19(25)12-15-5-6-17(21)18(22)11-15/h5-6,11,16H,3-4,7-10,12-14H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H28Cl2N2O/c1-20(2)7-10-24(16(13-20)14-23-8-3-4-9-23)19(25)12-15-5-6-17(21)18(22)11-15/h5-6,11,16H,3-4,7-10,12-14H2,1-2H3/t16-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H28Cl2N2O/c1-20(2)7-10-24(16(13-20)14-23-8-3-4-9-23)19(25)12-15-5-6-17(21)18(22)11-15/h5-6,11,16H,3-4,7-10,12-14H2,1-2H3/t16-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H28N/c1-5-21(3,4)17(2)16-20(18-12-8-6-9-13-18)19-14-10-7-11-15-19/h6-15,17,20H,5,16H2,1-4H3/q+1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H28N2O3/c1-22-14-8-13-21-18(22)15-25-19(23)20(24,16-9-4-2-5-10-16)17-11-6-3-7-12-17/h2,4-5,9-10,17,24H,3,6-8,11-15H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H28N2O5/c1-3-27-20(26)16(12-11-15-8-5-4-6-9-15)21-14(2)18(23)22-13-7-10-17(22)19(24)25/h4-6,8-9,14,16-17,21H,3,7,10-13H2,1-2H3,(H,24,25)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H28N2O5/c1-3-27-20(26)16(12-11-15-8-5-4-6-9-15)21-14(2)18(23)22-13-7-10-17(22)19(24)25/h4-6,8-9,14,16-17,21H,3,7,10-13H2,1-2H3,(H,24,25)/t14-,16-,17-/m0/s1	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C20H28N2O5/c1-4-17(23)22(16-8-6-5-7-9-16)20(19(25)27-3)11-14-21(15-12-20)13-10-18(24)26-2/h5-9H,4,10-15H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H28N2O5S/c1-4-26-17-7-5-6-8-18(17)27-12-11-22-15(2)13-16-9-10-19(25-3)20(14-16)28(21,23)24/h5-10,14-15,22H,4,11-13H2,1-3H3,(H2,21,23,24)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H28N2O5S/c1-4-26-17-7-5-6-8-18(17)27-12-11-22-15(2)13-16-9-10-19(25-3)20(14-16)28(21,23)24/h5-10,14-15,22H,4,11-13H2,1-3H3,(H2,21,23,24)/t15-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H28N2O5S/c1-4-26-17-7-5-6-8-18(17)27-12-11-22-15(2)13-16-9-10-19(25-3)20(14-16)28(21,23)24/h5-10,14-15,22H,4,11-13H2,1-3H3,(H2,21,23,24)/t15-/m1/s1	1	(Nikolic et al., 2013)
InChI=1S/C20H28N4O/c1-4-24(5-2)20(25)22-14-10-16-15-7-6-8-17-19(15)13(11-21-17)9-18(16)23(3)12-14/h6-8,11,14,16,18,21H,4-5,9-10,12H2,1-3H3,(H,22,25)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H28N4O/c1-4-24(5-2)20(25)22-14-10-16-15-7-6-8-17-19(15)13(11-21-17)9-18(16)23(3)12-14/h6-8,11,14,16,18,21H,4-5,9-10,12H2,1-3H3,(H,22,25)/t14-,16-,18-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H28N4O/c1-4-24(5-2)20(25)22-14-10-16-15-7-6-8-17-19(15)13(11-21-17)9-18(16)23(3)12-14/h6-8,11,14,16,18,21H,4-5,9-10,12H2,1-3H3,(H,22,25)/t14-,16-,18+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C20H28N4O/c1-4-24(5-2)20(25)22-14-10-16-15-7-6-8-17-19(15)13(11-21-17)9-18(16)23(3)12-14/h6-8,11,14,16,18,21H,4-5,9-10,12H2,1-3H3,(H,22,25)/t14-,16?,18+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H28N4O/c1-4-24(5-2)20(25)22-14-10-16-15-7-6-8-17-19(15)13(11-21-17)9-18(16)23(3)12-14/h6-8,11,14,16,18,21H,4-5,9-10,12H2,1-3H3,(H,22,25)/t14-,16+,18-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H28N4O/c1-4-24(5-2)20(25)22-14-10-16-15-7-6-8-17-19(15)13(11-21-17)9-18(16)23(3)12-14/h6-8,11,14,16,18,21H,4-5,9-10,12H2,1-3H3,(H,22,25)/t14-,16+,18+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H28O/c1-3-20(21)13-11-18-17-9-8-14-6-4-5-7-15(14)16(17)10-12-19(18,20)2/h1,6,15-18,21H,4-5,7-13H2,2H3/t15-,16-,17+,18+,19-,20+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H28O2/c1-15(8-6-9-16(2)14-19(21)22)11-12-18-17(3)10-7-13-20(18,4)5/h6,8-9,11-12,14H,7,10,13H2,1-5H3,(H,21,22)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C20H28O2/c1-15(8-6-9-16(2)14-19(21)22)11-12-18-17(3)10-7-13-20(18,4)5/h6,8-9,11-12,14H,7,10,13H2,1-5H3,(H,21,22)/b9-6+,12-11-,15-8-,16-14?	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H28O2/c1-15(8-6-9-16(2)14-19(21)22)11-12-18-17(3)10-7-13-20(18,4)5/h6,8-9,11-12,14H,7,10,13H2,1-5H3,(H,21,22)/b9-6+,12-11+,15-8+,16-14-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H28O2/c1-15(8-6-9-16(2)14-19(21)22)11-12-18-17(3)10-7-13-20(18,4)5/h6,8-9,11-12,14H,7,10,13H2,1-5H3,(H,21,22)/b9-6+,12-11+,15-8+,16-14+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H28O2/c1-15(8-6-9-16(2)14-19(21)22)11-12-18-17(3)10-7-13-20(18,4)5/h6,8-9,11-12,14H,7,10,13H2,1-5H3,(H,21,22)/p-1/b9-6+,12-11+,15-8-,16-14-	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C20H28O5S/c1-12(2)14-10-13-6-7-17-19(3,8-5-9-20(17,4)18(21)22)15(13)11-16(14)26(23,24)25/h10-12,17H,5-9H2,1-4H3,(H,21,22)(H,23,24,25)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H29Cl2N3O/c1-15(26)23-17-7-5-16(6-8-17)9-10-24-11-13-25(14-12-24)19-4-2-3-18(21)20(19)22/h2-4,16-17H,5-14H2,1H3,(H,23,26)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H29FN6O3/c1-4-25-20(29)26(23-22-25)12-11-24-10-9-17(15(2)13-24)27(19(28)14-30-3)18-8-6-5-7-16(18)21/h5-8,15,17H,4,9-14H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H29FN6O3/c1-4-25-20(29)26(23-22-25)12-11-24-10-9-17(15(2)13-24)27(19(28)14-30-3)18-8-6-5-7-16(18)21/h5-8,15,17H,4,9-14H2,1-3H3/t15-,17-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H29FN6O3/c1-4-25-20(29)26(23-22-25)12-11-24-10-9-17(15(2)13-24)27(19(28)14-30-3)18-8-6-5-7-16(18)21/h5-8,15,17H,4,9-14H2,1-3H3/t15-,17-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H29FN6O3/c1-4-25-20(29)26(23-22-25)12-11-24-10-9-17(15(2)13-24)27(19(28)14-30-3)18-8-6-5-7-16(18)21/h5-8,15,17H,4,9-14H2,1-3H3/t15-,17+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H29FO3/c1-17-8-6-13(22)10-12(17)4-5-15-14-7-9-19(3,24)18(14,2)11-16(23)20(15,17)21/h10,14-16,23-24H,4-9,11H2,1-3H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H29FO3/c1-17-8-6-13(22)10-12(17)4-5-15-14-7-9-19(3,24)18(14,2)11-16(23)20(15,17)21/h10,14-16,23-24H,4-9,11H2,1-3H3/t14-,15-,16-,17-,18-,19-,20-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H29N3O2/c1-4-7-14-25-19-15-17(16-10-8-9-11-18(16)22-19)20(24)21-12-13-23(5-2)6-3/h8-11,15H,4-7,12-14H2,1-3H3,(H,21,24)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H29N3O3S/c1-15(24)22-9-10-23(17(13-22)12-21-8-7-18(25)14-21)20(26)11-16-3-5-19(27-2)6-4-16/h3-6,17-18,25H,7-14H2,1-2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C20H29N3O3S/c1-15(24)22-9-10-23(17(13-22)12-21-8-7-18(25)14-21)20(26)11-16-3-5-19(27-2)6-4-16/h3-6,17-18,25H,7-14H2,1-2H3/t17-,18-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H29N3O3S/c1-15(24)22-9-10-23(17(13-22)12-21-8-7-18(25)14-21)20(26)11-16-3-5-19(27-2)6-4-16/h3-6,17-18,25H,7-14H2,1-2H3/t17-,18+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H29N3O4/c1-15(24)22-8-9-23(17(13-22)12-21-7-6-18(25)14-21)20(26)11-16-4-3-5-19(10-16)27-2/h3-5,10,17-18,25H,6-9,11-14H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H29N3O4/c1-15(24)22-8-9-23(17(13-22)12-21-7-6-18(25)14-21)20(26)11-16-4-3-5-19(10-16)27-2/h3-5,10,17-18,25H,6-9,11-14H2,1-2H3/t17-,18-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H29N3O4/c1-15(24)22-8-9-23(17(13-22)12-21-7-6-18(25)14-21)20(26)11-16-4-3-5-19(10-16)27-2/h3-5,10,17-18,25H,6-9,11-14H2,1-2H3/t17-,18+/m0/s1	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C20H29N3O4/c1-15(24)22-9-10-23(17(13-22)12-21-8-7-18(25)14-21)20(26)11-16-3-5-19(27-2)6-4-16/h3-6,17-18,25H,7-14H2,1-2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H29N3O4/c1-15(24)22-9-10-23(17(13-22)12-21-8-7-18(25)14-21)20(26)11-16-3-5-19(27-2)6-4-16/h3-6,17-18,25H,7-14H2,1-2H3/t17-,18-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H29N3O4/c1-15(24)22-9-10-23(17(13-22)12-21-8-7-18(25)14-21)20(26)11-16-3-5-19(27-2)6-4-16/h3-6,17-18,25H,7-14H2,1-2H3/t17-,18+/m0/s1	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C20H29N3O4S/c1-15(24)22-9-10-23(17(13-22)12-21-8-7-18(25)14-21)20(26)11-16-3-5-19(6-4-16)28(2)27/h3-6,17-18,25H,7-14H2,1-2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H29N3O4S/c1-15(24)22-9-10-23(17(13-22)12-21-8-7-18(25)14-21)20(26)11-16-3-5-19(6-4-16)28(2)27/h3-6,17-18,25H,7-14H2,1-2H3/t17-,18-,28-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H29N3O4S/c1-15(24)22-9-10-23(17(13-22)12-21-8-7-18(25)14-21)20(26)11-16-3-5-19(6-4-16)28(2)27/h3-6,17-18,25H,7-14H2,1-2H3/t17-,18-,28?/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H29N3O4S/c1-15(24)22-9-10-23(17(13-22)12-21-8-7-18(25)14-21)20(26)11-16-3-5-19(6-4-16)28(2)27/h3-6,17-18,25H,7-14H2,1-2H3/t17-,18-,28+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H29N3O5S/c1-15(24)22-9-10-23(17(13-22)12-21-8-7-18(25)14-21)20(26)11-16-3-5-19(6-4-16)29(2,27)28/h3-6,17-18,25H,7-14H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H29N3O5S/c1-15(24)22-9-10-23(17(13-22)12-21-8-7-18(25)14-21)20(26)11-16-3-5-19(6-4-16)29(2,27)28/h3-6,17-18,25H,7-14H2,1-2H3/t17-,18-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H29N5O/c1-4-18-15(2)23-25(16(18)3)14-20(26)22-12-17-8-7-11-24(13-17)19-9-5-6-10-21-19/h5-6,9-10,17H,4,7-8,11-14H2,1-3H3,(H,22,26)/t17-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H29N5O3/c1-22-18(15-19(26)23(2)20(22)27)21-9-6-10-24-11-13-25(14-12-24)16-7-4-5-8-17(16)28-3/h4-5,7-8,15,21H,6,9-14H2,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H29NO/c1-4-20-9-10-21(13-14-5-6-14)18(19(20,2)3)11-15-7-8-16(22)12-17(15)20/h7-8,12,14,18,22H,4-6,9-11,13H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H29NO/c1-4-20-9-10-21(13-14-5-6-14)18(19(20,2)3)11-15-7-8-16(22)12-17(15)20/h7-8,12,14,18,22H,4-6,9-11,13H2,1-3H3/t18-,20-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H29NO/c1-4-20-9-10-21(13-14-5-6-14)18(19(20,2)3)11-15-7-8-16(22)12-17(15)20/h7-8,12,14,18,22H,4-6,9-11,13H2,1-3H3/t18-,20?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C20H29NO/c1-4-20-9-10-21(13-14-5-6-14)18(19(20,2)3)11-15-7-8-16(22)12-17(15)20/h7-8,12,14,18,22H,4-6,9-11,13H2,1-3H3/t18-,20+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H29NO2/c1-4-20-9-10-21(13-19(23)7-8-19)17(18(20,2)3)11-14-5-6-15(22)12-16(14)20/h5-6,12,17,22-23H,4,7-11,13H2,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H29NO2/c1-4-20-9-10-21(13-19(23)7-8-19)17(18(20,2)3)11-14-5-6-15(22)12-16(14)20/h5-6,12,17,22-23H,4,7-11,13H2,1-3H3/t17-,20?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H29NO2/c1-4-20-9-10-21(13-19(23)7-8-19)17(18(20,2)3)11-14-5-6-15(22)12-16(14)20/h5-6,12,17,22-23H,4,7-11,13H2,1-3H3/t17-,20+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H29NO2/c1-4-20-9-10-21(13-19(23)7-8-19)17(18(20,2)3)11-14-5-6-15(22)12-16(14)20/h5-6,12,17,22-23H,4,7-11,13H2,1-3H3/t17-,20+/m1/s1	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C20H29NO6S/c1-21(10-5-11-28(24,25)26)16-8-9-17(21)13-18(12-16)27-20(23)19(14-22)15-6-3-2-4-7-15/h2-4,6-7,16-19,22H,5,8-14H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H29NO6S/c1-21(10-5-11-28(24,25)26)16-8-9-17(21)13-18(12-16)27-20(23)19(14-22)15-6-3-2-4-7-15/h2-4,6-7,16-19,22H,5,8-14H2,1H3/p+1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H30N6O3S/c1-15-19(16(2)29-23-15)30(27,28)26-12-10-24(11-13-26)17-6-7-18(22-21-17)25-9-5-8-20(3,4)14-25/h6-7H,5,8-14H2,1-4H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C20H30NO3/c1-14(2)21(3)16-9-10-17(21)12-18(11-16)24-20(23)19(13-22)15-7-5-4-6-8-15/h4-8,14,16-19,22H,9-13H2,1-3H3/q+1	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C20H30NO3/c1-14(2)21(3)16-9-10-17(21)12-18(11-16)24-20(23)19(13-22)15-7-5-4-6-8-15/h4-8,14,16-19,22H,9-13H2,1-3H3/q+1/t16-,17-,18?,19+,21?/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H30NO3/c1-14(2)21(3)16-9-10-17(21)12-18(11-16)24-20(23)19(13-22)15-7-5-4-6-8-15/h4-8,14,16-19,22H,9-13H2,1-3H3/q+1/t16-,17+,18?,19-,21?/m0/s1	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C20H30O/c1-16(8-6-9-17(2)13-15-21)11-12-19-18(3)10-7-14-20(19,4)5/h6,8-9,11-13,21H,7,10,14-15H2,1-5H3/b9-6+,12-11+,16-8-,17-13?	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H30O2/c1-18-9-6-14(21)12-13(18)4-5-15-16(18)7-10-19(2)17(15)8-11-20(19,3)22/h12,15-17,22H,4-11H2,1-3H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H30O2/c1-18-9-6-14(21)12-13(18)4-5-15-16(18)7-10-19(2)17(15)8-11-20(19,3)22/h12,15-17,22H,4-11H2,1-3H3/t15-,16-,17-,18?,19?,20?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H30O2/c1-18-9-6-14(21)12-13(18)4-5-15-16(18)7-10-19(2)17(15)8-11-20(19,3)22/h12,15-17,22H,4-11H2,1-3H3/t15-,16+,17+,18+,19+,20+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H31N3O6S/c1-5-27-19(26)29-13(2)28-18(25)15-20(3,4)30-17-14(16(24)23(15)17)21-12-22-10-8-6-7-9-11-22/h12-15,17H,5-11H2,1-4H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H31N3O6S/c1-5-27-19(26)29-13(2)28-18(25)15-20(3,4)30-17-14(16(24)23(15)17)21-12-22-10-8-6-7-9-11-22/h12-15,17H,5-11H2,1-4H3/b21-12+/t13-,14?,15-,17-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H31N3O6S/c1-5-27-19(26)29-13(2)28-18(25)15-20(3,4)30-17-14(16(24)23(15)17)21-12-22-10-8-6-7-9-11-22/h12-15,17H,5-11H2,1-4H3/b21-12+/t13-,14+,15-,17+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H31N3O6S/c1-5-27-19(26)29-13(2)28-18(25)15-20(3,4)30-17-14(16(24)23(15)17)21-12-22-10-8-6-7-9-11-22/h12-15,17H,5-11H2,1-4H3/t13-,14-,15-,17-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C20H31N3O6S/c1-5-27-19(26)29-13(2)28-18(25)15-20(3,4)30-17-14(16(24)23(15)17)21-12-22-10-8-6-7-9-11-22/h12-15,17H,5-11H2,1-4H3/t13?,14-,15+,17-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H31NO/c22-20(18-10-4-1-5-11-18,19-12-6-2-7-13-19)14-17-21-15-8-3-9-16-21/h1,4-5,10-11,19,22H,2-3,6-9,12-17H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H31NO/c22-20(18-10-4-1-5-11-18,19-12-6-2-7-13-19)14-17-21-15-8-3-9-16-21/h1,4-5,10-11,19,22H,2-3,6-9,12-17H2/t20-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H31NO3/c1-3-21(4-2)14-15-23-16-17-24-19(22)20(12-8-9-13-20)18-10-6-5-7-11-18/h5-7,10-11H,3-4,8-9,12-17H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H31NO4/c1-23-19-8-7-15(13-20(19)24-2)10-12-25-18-6-4-3-5-17(18)21-11-9-16(22)14-21/h7-8,13,16-18,22H,3-6,9-12,14H2,1-2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H32F2O5/c1-2-3-11-19(21,22)20(26)12-10-15-14(16(23)13-17(15)27-20)8-6-4-5-7-9-18(24)25/h14-15,17,26H,2-13H2,1H3,(H,24,25)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H32N2/c1-21(2)15-8-16-22-19-11-5-3-4-9-17(19)13-14-18-10-6-7-12-20(18)22/h6-7,10,12,17,19H,3-5,8-9,11,13-16H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H32N5O8P/c1-19(2,3)17(26)30-11-32-34(28,33-12-31-18(27)20(4,5)6)13-29-8-7-25-10-24-14-15(21)22-9-23-16(14)25/h9-10H,7-8,11-13H2,1-6H3,(H2,21,22,23)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H32O/c1-3-20(21)13-11-18-17-9-8-14-6-4-5-7-15(14)16(17)10-12-19(18,20)2/h6,15-18,21H,3-5,7-13H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H32O2/c1-12-11-20(3)13(10-17(12)21)4-5-14-15-6-7-18(22)19(15,2)9-8-16(14)20/h12-16,18,22H,4-11H2,1-3H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H32O5/c1-2-3-4-7-14(21)10-11-16-17-12-15(8-5-6-9-20(23)24)25-19(17)13-18(16)22/h8,10-11,14,16-19,21-22H,2-7,9,12-13H2,1H3,(H,23,24)/b11-10+,15-8-/t14-,16+,17+,18+,19-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H32O5/c1-2-3-6-9-15(21)12-13-17-16(18(22)14-19(17)23)10-7-4-5-8-11-20(24)25/h4,7,12-13,15-17,19,21,23H,2-3,5-6,8-11,14H2,1H3,(H,24,25)/b7-4-,13-12+/t15-,16+,17+,19+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H33N2O/c1-22(2)15-13-21(14-16-22)17-20(23,18-9-5-3-6-10-18)19-11-7-4-8-12-19/h3,5-6,9-10,19,23H,4,7-8,11-17H2,1-2H3/q+1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H33N3O3/c1-20(2,3)21-13-17(24)14-26-18-11-9-16(10-12-18)23-19(25)22-15-7-5-4-6-8-15/h9-12,15,17,21,24H,4-8,13-14H2,1-3H3,(H2,22,23,25)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H33N3O3S/c1-4-10-22-14-17(21-27(25,26)23(5-2)6-3)11-16-12-18-15(13-19(16)22)8-7-9-20(18)24/h7-9,16-17,19,21,24H,4-6,10-14H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H33N3O3S/c1-4-10-22-14-17(21-27(25,26)23(5-2)6-3)11-16-12-18-15(13-19(16)22)8-7-9-20(18)24/h7-9,16-17,19,21,24H,4-6,10-14H2,1-3H3/t16-,17-,19+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H33N3O3S/c1-4-10-22-14-17(21-27(25,26)23(5-2)6-3)11-16-12-18-15(13-19(16)22)8-7-9-20(18)24/h7-9,16-17,19,21,24H,4-6,10-14H2,1-3H3/t16-,17+,19?/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H33N3O3S/c1-4-10-22-14-17(21-27(25,26)23(5-2)6-3)11-16-12-18-15(13-19(16)22)8-7-9-20(18)24/h7-9,16-17,19,21,24H,4-6,10-14H2,1-3H3/t16-,17+,19+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H33N3O3S/c1-4-10-22-14-17(21-27(25,26)23(5-2)6-3)11-16-12-18-15(13-19(16)22)8-7-9-20(18)24/h7-9,16-17,19,21,24H,4-6,10-14H2,1-3H3/t16-,17+,19+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H33N3O4/c1-7-23(8-2)19(26)22-15-9-10-18(17(11-15)14(3)24)27-13-16(25)12-21-20(4,5)6/h9-11,16,21,25H,7-8,12-13H2,1-6H3,(H,22,26)	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C20H33N3O4/c1-7-23(8-2)19(26)22-15-9-10-18(17(11-15)14(3)24)27-13-16(25)12-21-20(4,5)6/h9-11,16,21,25H,7-8,12-13H2,1-6H3,(H,22,26)/t16-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C20H33N3O4/c1-7-23(8-2)19(26)22-15-9-10-18(17(11-15)14(3)24)27-13-16(25)12-21-20(4,5)6/h9-11,16,21,25H,7-8,12-13H2,1-6H3,(H,22,26)/t16-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H33N7O3/c1-6-26(7-2)20(30)27-13-11-25(12-14-27)10-8-9-15-21-17-16(22(15)3)18(28)24(5)19(29)23(17)4/h6-14H2,1-5H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H34O5/c1-2-3-6-9-15(21)12-13-17-16(18(22)14-19(17)23)10-7-4-5-8-11-20(24)25/h12-13,15-17,19,21,23H,2-11,14H2,1H3,(H,24,25)	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C20H34O5/c1-2-3-6-9-15(21)12-13-17-16(18(22)14-19(17)23)10-7-4-5-8-11-20(24)25/h12-13,15-17,19,21,23H,2-11,14H2,1H3,(H,24,25)/b13-12+/t15-,16-,17-,19-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H34O5/c1-2-3-6-9-15(21)12-13-17-16(18(22)14-19(17)23)10-7-4-5-8-11-20(24)25/h12-13,15-17,19,21,23H,2-11,14H2,1H3,(H,24,25)/b13-12+/t15-,16+,17+,19+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H36N2O3S/c1-4-6-7-8-9-16-22(5-2)17-10-11-20(23)18-12-14-19(15-13-18)21-26(3,24)25/h12-15,20-21,23H,4-11,16-17H2,1-3H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C20H36N2O3S/c1-4-6-7-8-9-16-22(5-2)17-10-11-20(23)18-12-14-19(15-13-18)21-26(3,24)25/h12-15,20-21,23H,4-11,16-17H2,1-3H3/t20-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H38N4O12/c1-5(26)24-3-8-12(28)14(30)15(31)20(33-8)36-18-7(22)2-6(21)17(16(18)32)35-19-13(29)10(23)11(27)9(4-25)34-19/h6-20,25,27-32H,2-4,21-23H2,1H3,(H,24,26)/t6-,7-,8-,9-,10-,11+,12+,13-,14-,15-,16-,17-,18-,19-,20-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C20H40N4O7/c1-4-9-5-6-10(21)18(29-9)30-15-11(22)7-12(23)16(13(15)25)31-19-14(26)17(24-3)20(2,27)8-28-19/h9-19,24-27H,4-8,21-23H2,1-3H3/t9-,10+,11+,12+,13+,14+,15-,16+,17-,18+,19+,20-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H13ClF6N4O3/c1-35-13-4-2-3-10(9-13)15-29-16-14(19(31-15,20(23,24)25)21(26,27)28)17(33)30-18(34)32(16)12-7-5-11(22)6-8-12/h2-9H,1H3,(H,29,31)(H,30,33,34)	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C21H13F3O6/c1-7-3-13(26)29-20-15(7)19(28)16(8(2)25)21-17(20)10(6-14(27)30-21)9-4-11(22)18(24)12(23)5-9/h3-5,10,28H,6H2,1-2H3/t10-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H13FN4O/c22-17-4-2-1-3-16(17)13-5-6-18-20(10-13)26-21(27)11-19(25-18)14-7-8-24-15(9-14)12-23/h1-10H,11H2,(H,26,27)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H14ClNO3/c22-14-9-10-17-18(12-14)23-21(25)19(20(17)24)13-5-4-8-16(11-13)26-15-6-2-1-3-7-15/h1-12H,(H2,23,24,25)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H15ClF4N4O3/c1-27-19(31)18-10-13(6-7-28-18)33-12-3-5-17(16(23)9-12)30-20(32)29-11-2-4-15(22)14(8-11)21(24,25)26/h2-10H,1H3,(H,27,31)(H2,29,30,32)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H15N3O4/c25-17-7-3-1-5-15(17)19-22-20(16-6-2-4-8-18(16)26)24(23-19)14-11-9-13(10-12-14)21(27)28/h1-12,25-26H,(H,27,28)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H16ClF3N4O3/c1-26-19(30)18-11-15(8-9-27-18)32-14-5-2-12(3-6-14)28-20(31)29-13-4-7-17(22)16(10-13)21(23,24)25/h2-11H,1H3,(H,26,30)(H2,28,29,31)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H17F2N5O/c1-26-11-15-14(3-2-4-19(15)25-26)13-9-17(22)16(18(23)10-13)12-27-7-5-20-24-6-8-28(20)21(27)29/h2-5,7,9-11H,6,8,12H2,1H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C21H17F2N5O/c1-26-11-15-8-13(2-3-19(15)25-26)14-9-17(22)16(18(23)10-14)12-27-6-7-28-20(21(27)29)4-5-24-28/h2-5,8-11H,6-7,12H2,1H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C21H18ClN3O7S/c1-9-14(15(24-32-9)12-5-3-4-6-13(12)22)18(27)23-16-19(28)25-17(21(29)30)11(7-31-10(2)26)8-33-20(16)25/h3-6,16,20H,7-8H2,1-2H3,(H,23,27)(H,29,30)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H18ClN3O7S/c1-9-14(15(24-32-9)12-5-3-4-6-13(12)22)18(27)23-16-19(28)25-17(21(29)30)11(7-31-10(2)26)8-33-20(16)25/h3-	0	(Meng et al., 2021)

6,16,20H,7-8H2,1-2H3,(H,23,27)(H,29,30)/t16-,20-/m1/s1	
InChI=1S/C21H18ClN3O7S/c1-9-14(15(24-32-9)12-5-3-4-6-13(12)22)18(27)23-16-19(28)25-17(21(29)30)11(7-31-10(2)26)8-33-20(16)25/h3-6,16,20H,7-8H2,1-2H3,(H,23,27)(H,29,30)/t16-,20+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H18ClN3O7S/c1-9-14(15(24-32-9)12-5-3-4-6-13(12)22)18(27)23-16-19(28)25-17(21(29)30)11(7-31-10(2)26)8-33-20(16)25/h3-6,16,20H,7-8H2,1-2H3,(H,23,27)(H,29,30)/t16?,20-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H18ClNO2S/c22-17-8-10-19(11-9-17)26-14-12-23-21(24)20(15-18-7-4-13-25-18)16-5-2-1-3-6-16/h1-11,13,15H,12,14H2,(H,23,24)/b20-15+	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H18ClNO6/c1-12-16(10-20(26)29-11-19(24)25)17-9-15(28-2)7-8-18(17)23(12)21(27)13-3-5-14(22)6-4-13/h3-9H,10-11H2,1-2H3,(H,24,25)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H18F3N3O3/c1-11-9-26(5-4-25-11)19-8-18-13(7-16(19)24)20(28)14(21(29)30)10-27(18)17-3-2-12(22)6-15(17)23/h2-3,6-8,10-11,25H,4-5,9H2,1H3,(H,29,30)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H18FN5OS/c1-11-12(2)26-27-21-16(11)17(23)18(29-21)20(28)25-10-13-5-7-14(8-6-13)15-4-3-9-24-19(15)22/h3-9H,10,23H2,1-2H3,(H,25,28)	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C21H18FN5OS/c1-11-12(2)26-27-21-17(11)18(23)19(29-21)20(28)25-10-13-3-5-14(6-4-13)15-7-8-24-16(22)9-15/h3-9H,10,23H2,1-2H3,(H,25,28)	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C21H18FN5OS/c1-11-12(2)26-27-21-17(11)18(23)19(29-21)20(28)25-9-13-3-5-14(6-4-13)15-7-8-16(22)24-10-15/h3-8,10H,9,23H2,1-2H3,(H,25,28)	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C21H18O9/c1-30-11-4-2-3-8-14(11)20(28)16-15(17(8)25)18(26)9-5-21(29,12(24)7-22)6-10(23)13(9)19(16)27/h2-4,10,22-23,26-27,29H,5-7H2,1H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H18O9/c1-30-11-4-2-3-8-14(11)20(28)16-15(17(8)25)18(26)9-5-21(29,12(24)7-22)6-10(23)13(9)19(16)27/h2-4,10,22-23,26-27,29H,5-7H2,1H3/t10-,21?/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H19F2N3O3/c1-24-6-8-25(9-7-24)19-11-18-15(10-17(19)23)20(27)16(21(28)29)12-26(18)14-4-2-13(22)3-5-14/h2-5,10-12H,6-9H2,1H3,(H,28,29)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H19FN4O/c1-14-2-4-18(13-24-14)27-17-6-8-26(9-7-17)21-15(11-23)12-25-20-5-3-16(22)10-19(20)21/h2-5,10,12-13,17H,6-9H2,1H3	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C21H19N/c1-22(2)16-8-7-13-21-19-11-5-3-9-17(19)14-15-18-10-4-6-12-20(18)21/h3-6,9-15H,16H2,1-2H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H19N3O3S/c1-27-20-13-14(24-28(2,25)26)11-12-19(20)23-21-15-7-3-5-9-17(15)22-18-10-6-4-8-16(18)21/h3-13,24H,1-2H3,(H,22,23)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H19N3O3S/c1-3-27-17-10-6-16(7-11-17)21-20(19-5-4-14-22-24(19)23-21)15-8-12-18(13-9-15)28(2,25)26/h4-14H,3H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H19N5O2/c1-24(2)19(28)14-26-18(27)12-11-16(22-26)20-17-10-6-7-13-25(17)23-21(20)15-8-4-3-5-9-15/h3-13H,14H2,1-2H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H19N5OS/c1-12-13(2)25-26-21-17(12)18(22)19(28-21)20(27)24-11-14-3-5-15(6-4-14)16-7-9-23-10-8-16/h3-10H,11,22H2,1-2H3,(H,24,27)	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C21H19NO/c23-21(17-7-3-1-4-8-17,18-9-5-2-6-10-18)20-15-19(20)16-11-13-22-14-12-16/h1-14,19-20,23H,15H2	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H19NO/c23-21(17-7-3-1-4-8-17,18-9-5-2-6-10-18)20-15-19(20)16-11-13-22-14-12-16/h1-14,19-20,23H,15H2/t19-,20-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)

	2023)
InChI=1S/C21H19NO/c23-21(17-7-3-1-4-8-17,18-9-5-2-6-10-18)20-15-19(20)16-11-13-22-14-12-16/h1-14,19-20,23H,15H2/t19-,20?/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H19NO/c23-21(17-7-3-1-4-8-17,18-9-5-2-6-10-18)20-15-19(20)16-11-13-22-14-12-16/h1-14,19-20,23H,15H2/t19-,20+/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H19NO5/c1-24-17-11-16-19(21(26-3)20(17)25-2)14(10-18(23)27-16)12-6-7-15-13(9-12)5-4-8-22-15/h4-9,11,14H,10H2,1-3H3/t14-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H20Cl2N6O3/c1-28(2)21(32)20-26-17(11-25-18(30)10-24)29(27-20)16-8-7-12(22)9-14(16)19(31)13-5-3-4-6-15(13)23/h3-9H,10-11,24H2,1-2H3,(H,25,30)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H20Cl2O3/c1-21(2)17(12-18(22)23)19(21)20(24)25-13-14-7-6-10-16(11-14)26-15-8-4-3-5-9-15/h3-12,17,19H,13H2,1-2H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H20ClNO5/c1-23-7-6-12(17(27)10-23)19-14(24)8-15(25)20-16(26)9-18(28-21(19)20)11-4-2-3-5-13(11)22/h2-5,8-9,12,17,24-25,27H,6-7,10H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H20CINS/c22-16-5-6-21-19(12-16)18(17-3-1-2-4-20(17)24-21)11-15-13-23-9-7-14(15)8-10-23/h1-6,11-12,14-15H,7-10,13H2	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H20CINS/c22-16-5-6-21-19(12-16)18(17-3-1-2-4-20(17)24-21)11-15-13-23-9-7-14(15)8-10-23/h1-6,11-12,14-15H,7-10,13H2/b18-11-	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H20CINS/c22-16-5-6-21-19(12-16)18(17-3-1-2-4-20(17)24-21)11-15-13-23-9-7-14(15)8-10-23/h1-6,11-12,14-15H,7-10,13H2/b18-11-/t15-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H20CINS/c22-16-5-6-21-19(12-16)18(17-3-1-2-4-20(17)24-21)11-15-13-23-9-7-14(15)8-10-23/h1-6,11-12,14-15H,7-10,13H2/b18-11+	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H20CINS/c22-16-5-6-21-19(12-16)18(17-3-1-2-4-20(17)24-21)11-15-13-23-9-7-14(15)8-10-23/h1-6,11-12,14-15H,7-10,13H2/b18-11+/t15-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H20CINS/c22-16-5-6-21-19(12-16)18(17-3-1-2-4-20(17)24-21)11-15-13-23-9-7-14(15)8-10-23/h1-6,11-12,14-15H,7-10,13H2/b18-11+/t15-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H20FN3O6S/c1-10-16(31-21(29)30-10)9-23-3-5-24(6-4-23)15-8-14-12(7-13(15)22)18(26)17(20(27)28)19-25(14)11(2)32-19/h7-8,11H,3-6,9H2,1-2H3,(H,27,28)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H20N4O2/c1-21(2,27)14-25-18(26)12-11-16(22-25)19-17-10-6-7-13-24(17)23-20(19)15-8-4-3-5-9-15/h3-13,27H,14H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H20O11.ClH/c22-7-16-17(27)18(28)19(29)21(32-16)31-15-6-10-12(25)4-9(23)5-14(10)30-20(15)8-1-2-11(24)13(26)3-8;/h1-6,16-19,21-22,27-29H,7H2,(H3-,23,24,25,26);1H/t16-,17-,18+,19-,21-;/m1./s1	1 (Kaupp, 2007)
InChI=1S/C21H20O11/c22-7-16-17(27)18(28)19(29)21(32-16)31-15-6-10-12(25)4-9(23)5-14(10)30-20(15)8-1-2-11(24)13(26)3-8/h1-6,16-19,21-22,27-29H,7H2,(H3-,23,24,25,26)/p+1/t16-,17-,18+,19-,21-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H20O12/c22-6-13-15(27)17(29)18(30)21(32-13)33-20-16(28)14-11(26)4-8(23)5-12(14)31-19(20)7-1-2-9(24)10(25)3-7/h1-5,13,15,17-18,21-27,29-30H,6H2	0 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C21H20O12/c22-6-13-15(27)17(29)18(30)21(32-13)33-20-16(28)14-11(26)4-8(23)5-12(14)31-19(20)7-1-2-9(24)10(25)3-7/h1-5,13,15,17-18,21-27,29-30H,6H2/t13-,15-,17+,18-,21+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H20O12/c22-6-13-15(27)17(29)18(30)21(32-13)33-20-16(28)14-11(26)4-8(23)5-12(14)31-19(20)7-1-2-9(24)10(25)3-7/h1-5,13,15,17-18,21-27,29-30H,6H2/t13-,15+,17-,18-,21-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C21H20O9/c1-30-11-4-2-3-8-14(11)20(28)16-15(17(8)25)18(26)9-5-21(29,12(24)7-22)6-10(23)13(9)19(16)27/h2-4,10,12,22-24,26-27,29H,5-7H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H20O9/c1-30-11-4-2-3-8-14(11)20(28)16-15(17(8)25)18(26)9-5-21(29,12(24)7-22)6-10(23)13(9)19(16)27/h2-4,10,12,22-24,26-27,29H,5-7H2,1H3/t10-,12-,21-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H20O9/c1-30-11-4-2-3-8-14(11)20(28)16-15(17(8)25)18(26)9-5-21(29,12(24)7-22)6-10(23)13(9)19(16)27/h2-4,10,12,22-24,26-27,29H,5-7H2,1H3/t10-,12?,21-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H20O9/c1-30-11-4-2-3-8-14(11)20(28)16-15(17(8)25)18(26)9-5-21(29,12(24)7-22)6-10(23)13(9)19(16)27/h2-4,10,12,22-24,26-27,29H,5-7H2,1H3/t10-,12+,21-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H20O9/c1-30-11-4-2-3-8-14(11)20(28)16-15(17(8)25)18(26)9-5-21(29,12(24)7-22)6-10(23)13(9)19(16)27/h2-4,10,12,22-24,26-27,29H,5-7H2,1H3/t10-,12+,21+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H21ClF3N3O2/c1-14(10-11-24)25(2)13-20(27)26(3)19-9-8-15(22)12-17(19)21(28)16-6-4-5-7-18(16)23/h4-9,12,14H,10,13H2,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H21ClF3N3O2/c1-14(10-11-24)25(2)13-20(27)26(3)19-9-8-15(22)12-17(19)21(28)16-6-4-5-7-18(16)23/h4-9,12,14H,10,13H2,1-3H3/t14-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H21ClN2O/c1-4-14(2)24(3)21(25)19-13-15-9-5-6-10-16(15)20(23-19)17-11-7-8-12-18(17)22/h5-14H,4H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H21ClN2O/c1-4-14(2)24(3)21(25)19-13-15-9-5-6-10-16(15)20(23-19)17-11-7-8-12-18(17)22/h5-14H,4H2,1-3H3/t14-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H21ClN2O2/c22-17-8-9-19-18(12-17)21(16-4-2-1-3-5-16)23-13-20(25)24(19)10-11-26-14-15-6-7-15/h1-5,8-9,12,15H,6-7,10-11,13-14H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H21ClN2O8/c1-24(2)14-7-5-6-10(16(27)12-9(25)4-3-8(22)11(12)15(6)26)18(29)21(7,32)19(30)13(17(14)28)20(23)31/h3-4,6-7,14-15,25-26,28-29,32H,5H2,1-2H3,(H2,23,31)/t6-,7-,14-,15-,21-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H21ClN2O8/c1-24(2)14-7-5-6-10(16(27)12-9(25)4-3-8(22)11(12)15(6)26)18(29)21(7,32)19(30)13(17(14)28)20(23)31/h3-4,6-7,14-15,25-27,30,32H,5H2,1-2H3,(H2,23,31)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H21ClN2O8/c1-24(2)14-7-5-6-10(16(27)12-9(25)4-3-8(22)11(12)15(6)26)18(29)21(7,32)19(30)13(17(14)28)20(23)31/h3-4,6-7,14-15,25-27,30,32H,5H2,1-2H3,(H2,23,31)/t6-,7-,14-,15-,21-/m0/s1	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C21H21ClN2O8/c1-24(2)14-7-5-6-10(16(27)12-9(25)4-3-8(22)11(12)15(6)26)18(29)21(7,32)19(30)13(17(14)28)20(23)31/h3-4,6-7,14-15,25-27,30,32H,5H2,1-2H3,(H2,23,31)/t6-,7-,14-,15-,21-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H21ClN2O8/c1-24(2)14-7-5-6-10(16(27)12-9(25)4-3-8(22)11(12)15(6)26)18(29)21(7,32)19(30)13(17(14)28)20(23)31/h3-4,6-7,14-15,25-27,30,32H,5H2,1-2H3,(H2,23,31)/t6-,7-,14-,15-,21+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H21ClN2O8/c1-24(2)14-7-5-6-10(16(27)12-9(25)4-3-8(22)11(12)15(6)26)18(29)21(7,32)19(30)13(17(14)28)20(23)31/h3-4,6-7,14-15,25-27,30,32H,5H2,1-2H3,(H2,23,31)/t6-,7-,14+,15+,21-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H21ClN4O3/c1-3-24(4-2)14-20-23-11-12-25(20)19-10-9-15(26(28)29)13-17(19)21(27)16-7-5-6-8-18(16)22/h5-13H,3-4,14H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H21ClN4O3/c22-18-7-5-16(6-8-18)20-24-19(29-25-20)13-23-21(27)17-3-1-15(2-4-17)14-26-9-11-28-12-10-26/h1-8H,9-14H2,(H,23,27)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H21ClN4O5/c22-17-13-18-15(12-20(27)23-18)11-14(17)5-6-25-7-9-26(10-8-25)21-16-3-1-2-4-19(16)28-24-21/h1-4,11-13,23,27H,5-10H2	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C21H21ClN4OS/c22-17-13-18-15(12-20(27)23-18)11-14(17)5-6-25-7-9-26(10-8-25)21-16-3-1-2-4-19(16)28-24-21/h1-4,11,13H,5-10,12H2,(H,23,27)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H21N/c1-22-14-12-18(13-15-22)21-19-8-4-2-6-16(19)10-11-17-7-3-5-9-20(17)21/h2-11H,12-15H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H21N/c1-22(16-8-11-18-9-3-2-4-10-18)17-20-14-7-13-19-12-5-6-15-21(19)20/h2-15H,16-17H2,1H3/b11-8+	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H21N3O/c1-23-14-15-7-9-17(10-8-15)21(25)24-20-13-18(11-12-19(20)22)16-5-3-2-4-6-16/h2-13,23H,14,22H2,1H3,(H,24,25)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H21N3O6S/c1-21(2)16(20(28)29)24-18(27)15(19(24)31-21)23-17(26)14(11-5-7-12(25)8-6-11)22-10-13-4-3-9-30-13/h3-10,14-16,19,25H,1-2H3,(H,23,26)(H,28,29)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H21N3O6S/c1-21(2)16(20(28)29)24-18(27)15(19(24)31-21)23-17(26)14(11-5-7-12(25)8-6-11)22-10-13-4-3-9-30-13/h3-10,14-16,19,25H,1-2H3,(H,23,26)(H,28,29)/b22-10-/t14-,15?,16-,19-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H21N3O6S/c1-21(2)16(20(28)29)24-18(27)15(19(24)31-21)23-17(26)14(11-5-7-12(25)8-6-11)22-10-13-4-3-9-30-13/h3-10,14-16,19,25H,1-2H3,(H,23,26)(H,28,29)/b22-10+/t14-,15-,16+,19+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H21N3O6S/c1-21(2)16(20(28)29)24-18(27)15(19(24)31-21)23-17(26)14(11-5-7-12(25)8-6-11)22-10-13-4-3-9-30-13/h3-10,14-16,19,25H,1-2H3,(H,23,26)(H,28,29)/b22-10+/t14-,15?,16-,19-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H21N3O6S/c1-21(2)16(20(28)29)24-18(27)15(19(24)31-21)23-17(26)14(11-5-7-12(25)8-6-11)22-10-13-4-3-9-30-13/h3-10,14-16,19,25H,1-2H3,(H,23,26)(H,28,29)/t14-,15+,16-,19+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H21N3O6S/c1-21(2)16(20(28)29)24-18(27)15(19(24)31-21)23-17(26)14(11-5-7-12(25)8-6-11)22-10-13-4-3-9-30-13/h3-10,14-16,19,25H,1-2H3,(H,23,26)(H,28,29)/t14?,15-,16+,19-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H21N3O9/c1-23(2)15-9-6-7-5-8-10(24(32)33)3-4-11(25)13(8)16(26)12(7)18(28)21(9,31)19(29)14(17(15)27)20(22)30/h3-4,7,9,15,25-26,29,31H,5-6H2,1-2H3,(H2,22,30)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H21N3O9/c1-23(2)15-9-6-7-5-8-10(24(32)33)3-4-11(25)13(8)16(26)12(7)18(28)21(9,31)19(29)14(17(15)27)20(22)30/h3-4,7,9,15,25-26,29,31H,5-6H2,1-2H3,(H2,22,30)/t7-,9-,15-,21-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H21N3O9/c1-23(2)15-9-6-7-5-8-10(24(32)33)3-4-11(25)13(8)16(26)12(7)18(28)21(9,31)19(29)14(17(15)27)20(22)30/h3-4,7,9,15,25-26,29,31H,5-6H2,1-2H3,(H2,22,30)/t7-,9+,15+,21?/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H21N3O9/c1-23(2)15-9-6-7-5-8-10(24(32)33)3-4-11(25)13(8)16(26)12(7)18(28)21(9,31)19(29)14(17(15)27)20(22)30/h3-4,7,9,15,25,27-28,31H,5-6H2,1-2H3,(H2,22,30)/t7-,9-,15+,21-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H21N3O9/c1-23(2)15-9-6-7-5-8-10(24(32)33)3-4-11(25)13(8)16(26)12(7)18(28)21(9,31)19(29)14(17(15)27)20(22)30/h3-4,7,9,15,25,27-28,31H,5-6H2,1-2H3,(H2,22,30)/t7-,9-,15+,21+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H21N3S/c1-24-12-14(13-25-20-7-2-3-8-22-20)9-17-16-5-4-6-18-21(16)15(11-23-18)10-19(17)24/h2-9,11,14,19,23H,10,12-13H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H21N3S/c1-24-12-14(13-25-20-7-2-3-8-22-20)9-17-16-5-4-6-18-21(16)15(11-23-18)10-19(17)24/h2-9,11,14,19,23H,10,12-13H2,1H3/t14-,19-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H21N3S/c1-24-12-14(13-25-20-7-2-3-8-22-20)9-17-16-5-4-6-18-21(16)15(11-23-18)10-19(17)24/h2-9,11,14,19,23H,10,12-13H2,1H3/t14-,19-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H21N3S/c1-24-12-14(13-25-20-7-2-3-8-22-20)9-17-16-5-4-6-18-21(16)15(11-23-18)10-19(17)24/h2-9,11,14,19,23H,10,12-13H2,1H3/t14-,19+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C21H21N3S/c1-24-12-14(13-25-20-7-2-3-8-22-20)9-17-16-5-4-6-18-21(16)15(11-23-18)10-19(17)24/h2-9,11,14,19,23H,10,12-13H2,1H3/t14-,19+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H21NO2S/c1-4-24-20(23)16-7-9-17(22-14-16)8-5-15-6-10-19-18(13-15)21(2,3)11-12-25-19/h6-7,9-10,13-14H,4,11-12H2,1-3H3 InChI=1S/C21H21NO5/c1-15(23)26-19-10-8-18(14-20(19)27-16(2)24)9-11-21(25)22-13-12-17-6-4-3-5-7-17/h3-11,14H,12-13H2,1-2H3,(H,22,25)/b11-9+	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H22Cl2FN5O/c1-12(19-16(22)2-3-17(24)20(19)23)30-18-8-13(9-27-21(18)25)14-10-28-29(11-14)15-4-6-26-7-5-15/h2-3,8-12,15,26H,4-7H2,1H3,(H2,25,27)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H22Cl2N6O3/c1-28(2)21(32)20-26-17(11-25-18(30)10-24)29(27-20)16-8-7-12(22)9-14(16)19(31)13-5-3-4-6-15(13)23/h3-9,17H,10-11,24H2,1-2H3,(H,25,30)(H,26,27)/t17-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H22ClFN4O2/c22-15-3-6-19-18(13-15)25-21(29)27(19)17-7-10-26(11-8-17)12-9-24-20(28)14-1-4-16(23)5-2-14/h1-6,13,17H,7-12H2,(H,24,28)(H,25,29)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H22ClN3O3/c22-14-5-6-18-17(11-14)23-21(26)25(18)15-7-9-24(10-8-15)12-16-13-27-19-3-1-2-4-20(19)28-16/h1-6,11,15-16H,7-10,12-13H2,(H,23,26)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H22ClN3O3/c22-14-5-6-18-17(11-14)23-21(26)25(18)15-7-9-24(10-8-15)12-16-13-27-19-3-1-2-4-20(19)28-16/h1-6,11,15-16H,7-10,12-13H2,(H,23,26)/t16-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H22ClN7/c1-13-4-3-5-15(22)19(13)27-20-17-10-23-12-29(17)21-16(25-20)6-7-18(26-21)28-9-8-24-14(2)11-28/h3-7,10,12,14,24H,8-9,11H2,1-2H3,(H,25,27)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H22ClN7/c1-13-4-3-5-15(22)19(13)27-20-17-10-23-12-29(17)21-16(25-20)6-7-18(26-21)28-9-8-24-14(2)11-28/h3-7,10,12,14,24H,8-9,11H2,1-2H3,(H,25,27)/t14-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H22F3N3OS/c1-25-10-12-26(13-11-25)9-8-20(28)27-16-4-2-3-5-18(16)29-19-7-6-15(14-17(19)27)21(22,23)24/h2-7,14H,8-13H2,1H3	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C21H22FN3O/c1-14-3-5-18(13-23-14)26-17-7-9-25(10-8-17)21-11-15(2)24-20-6-4-16(22)12-19(20)21/h3-6,11-13,17H,7-10H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H22N2O5S/c1-4-28-13-10-9-11-7-5-6-8-12(11)14(13)17(24)22-15-18(25)23-16(20(26)27)21(2,3)29-19(15)23/h5-10,15-16,19H,4H2,1-3H3,(H,22,24)(H,26,27)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C21H22N2O5S/c1-4-28-13-10-9-11-7-5-6-8-12(11)14(13)17(24)22-15-18(25)23-16(20(26)27)21(2,3)29-19(15)23/h5-10,15-16,19H,4H2,1-3H3,(H,22,24)(H,26,27)/t15-,16-,19+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H22N2O5S/c1-4-28-13-10-9-11-7-5-6-8-12(11)14(13)17(24)22-15-18(25)23-16(20(26)27)21(2,3)29-19(15)23/h5-10,15-16,19H,4H2,1-3H3,(H,22,24)(H,26,27)/t15-,16+,19-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H22N2O5S/c1-4-28-13-10-9-11-7-5-6-8-12(11)14(13)17(24)22-15-18(25)23-16(20(26)27)21(2,3)29-19(15)23/h5-10,15-16,19H,4H2,1-3H3,(H,22,24)(H,26,27)/t15-,16+,19-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H22N2O5S/c1-4-28-13-10-9-11-7-5-6-8-12(11)14(13)17(24)22-15-18(25)23-16(20(26)27)21(2,3)29-19(15)23/h5-10,15-16,19H,4H2,1-3H3,(H,22,24)(H,26,27)/t15-,16+,19-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H22N2O5S/c1-4-28-13-10-9-11-7-5-6-8-12(11)14(13)17(24)22-15-18(25)23-16(20(26)27)21(2,3)29-19(15)23/h5-10,15-16,19H,4H2,1-3H3,(H,22,24)(H,26,27)/t15?,16-,19-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H22N2O5S/c1-4-28-13-10-9-11-7-5-6-8-12(11)15(13)22-17(24)14-18(25)23-16(20(26)27)21(2,3)29-19(14)23/h5-10,14,16,19H,4H2,1-3H3,(H,22,24)(H,26,27)	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C21H22N2O8/c1-23(2)14-9-6-8-12(16(26)11-7(15(8)25)4-3-5-10(11)24)18(28)21(9,31)19(29)13(17(14)27)20(22)30/h3-5,8-9,14-15,24-25,27-28,31H,6H2,1-2H3,(H2,22,30)/t8-,9-,14-,15+,21+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H22N2O8/c1-23(2)14-9-6-8-12(16(26)11-7(15(8)25)4-3-5-10(11)24)18(28)21(9,31)19(29)13(17(14)27)20(22)30/h3-5,8-9,14-15,24-25,27-28,31H,6H2,1-2H3,(H2,22,30)/t8-,9-,14+,15-,21-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H22N2O8/c1-23(2)14-9-6-8-12(16(26)11-7(15(8)25)4-3-5-10(11)24)18(28)21(9,31)19(29)13(17(14)27)20(22)30/h3-5,8-9,14-15,24-26,29,31H,6H2,1-2H3,(H2,22,30)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H22N2O8/c1-23(2)14-9-6-8-12(16(26)11-7(15(8)25)4-3-5-10(11)24)18(28)21(9,31)19(29)13(17(14)27)20(22)30/h3-5,8-9,14-15,24-26,29,31H,6H2,1-2H3,(H2,22,30)/t8-,9-,14-,15+,21-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H22N2O8/c1-23(2)14-9-6-8-12(16(26)11-7(15(8)25)4-3-5-10(11)24)18(28)21(9,31)19(29)13(17(14)27)20(22)30/h3-5,8-9,14-15,24-26,29,31H,6H2,1-2H3,(H2,22,30)/t8-,9-,14-,15+,21+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H22N4O6S/c1-11-22-14-4-3-12(9-13(14)19(28)23-11)10-25(2)17-7-6-16(32-17)20(29)24-15(21(30)31)5-8-18(26)27/h3-4,6-7,9,15H,5,8,10H2,1-2H3,(H,24,29)(H,26,27)(H,30,31)(H,22,23,28)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H22O11/c22-7-16-17(27)18(28)19(29)21(32-16)31-15-6-10-12(25)4-9(23)5-14(10)30-20(15)8-1-2-11(24)13(26)3-8/h1-6,14,16-19,21-29H,7H2/t14?,16-,17-,18+,19-,21+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H23BrFNO2/c22-18-7-5-17(6-8-18)21(26)11-14-24(15-12-21)13-1-2-20(25)16-3-9-19(23)10-4-16/h3-10,26H,1-2,11-15H2	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C21H23Cl2N3O/c1-3-11-25(12-4-2)20(27)13-18-21(15-5-7-16(22)8-6-15)24-19-10-9-17(23)14-26(18)19/h5-10,14H,3-4,11-13H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H23Cl2N7O2S/c1-13-25-17(11-18(26-13)30-7-5-29(6-8-30)9-10-31)27-21-24-12-16(33-21)20(32)28-19-14(22)3-2-4-15(19)23/h2-4,11-12,31H,5-10H2,1H3,(H,28,32)(H,24,25,26,27)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H23Cl2NO6/c1-5-7-15(25)29-10-30-21(27)17-12(3)24-11(2)16(20(26)28-4)18(17)13-8-6-9-14(22)19(13)23/h6,8-9,18,24H,5,7,10H2,1-4H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H23ClFN3O/c1-3-25(4-2)11-12-26-19-10-9-15(22)13-17(19)21(24-14-20(26)27)16-7-5-6-8-18(16)23/h5-10,13H,3-4,11-12,14H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H23ClFNO2/c22-18-4-1-3-17(15-18)21(26)10-13-24(14-11-21)12-2-5-20(25)16-6-8-19(23)9-7-16/h1,3-4,6-9,15,26H,2,5,10-14H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H23ClFNO2/c22-18-7-5-17(6-8-18)21(26)11-14-24(15-12-21)13-1-2-20(25)16-3-9-19(23)10-4-16/h3-10,26H,1-2,11-15H2	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C21H23ClN2O4/c1-13-17(22)6-3-7-18(13)24-20(26)19(25)23-12-21(27)10-4-5-14-11-15(28-2)8-9-16(14)21/h3,6-9,11,27H,4-5,10,12H2,1-2H3,(H,23,25)(H,24,26)/t21-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H23ClN4O2/c22-16-5-3-6-17(15-16)25-13-11-24(12-14-25)9-4-10-26-20(27)18-7-1-2-8-19(18)23-21(26)28/h1-3,5-8,15H,4,9-14H2,(H,23,28)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H23F3N6O/c1-31-18-10-9-16(30-20(21(22,23)24)27-28-29-30)12-15(18)13-26-17-8-5-11-25-19(17)14-6-3-2-4-7-14/h2-4,6-7,9-10,12,17,19,25-26H,5,8,11,13H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H23F3N6O/c1-31-18-10-9-16(30-20(21(22,23)24)27-28-29-30)12-15(18)13-26-17-8-5-11-25-19(17)14-6-3-2-4-7-14/h2-4,6-7,9-10,12,17,19,25-26H,5,8,11,13H2,1H3/t17-,19-/m0/s1	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C21H23F3N6O/c1-31-18-10-9-16(30-20(21(22,23)24)27-28-29-30)12-15(18)13-26-17-8-5-11-25-19(17)14-6-3-2-4-7-14/h2-4,6-7,9-10,12,17,19,25-26H,5,8,11,13H2,1H3/t17-,19+/m1/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C21H23FN2O3S/c22-17-3-1-15(2-4-17)13-16-7-9-24(10-8-16)11-12-28(26)18-5-6-19-20(14-18)27-21(25)23-19/h1-6,14,16H,7-	1	(Meng et al., 2021)

13H2,(H,23,25)

InChI=1S/C21H23N/c1-2-8-17-15(6-1)11-12-16-7-5-9-18-20-10-3-4-13-22(20)14-19(17)21(16)18/h1-2,5-9,19-20H,3-4,10-14H2

1 (Meng et al., 2021)
(Mazumdar et al.,
1 2023)

InChI=1S/C21H23N/c1-2-8-17-15(6-1)11-12-16-7-5-9-18-20-10-3-4-13-22(20)14-19(17)21(16)18/h1-2,5-9,19-20H,3-4,10-14H2/t19-,20-/m0/s1

1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C21H23N/c1-2-8-17-15(6-1)11-12-16-7-5-9-18-20-10-3-4-13-22(20)14-19(17)21(16)18/h1-2,5-9,19-20H,3-4,10-14H2/t19-,20-/m1/s1

1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C21H23N/c1-2-8-17-15(6-1)11-12-16-7-5-9-18-20-10-3-4-13-22(20)14-19(17)21(16)18/h1-2,5-9,19-20H,3-4,10-14H2/t19-,20+/m1/s1

1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C21H23N3O2S/c1-13-14(2)27-21-19(13)20(22-12-23-21)24-8-5-16(6-9-24)26-17-3-4-18-15(11-17)7-10-25-18/h3-4,11-12,16H,5-10H2,1-2H3

1 (Wu et al., 2018)
(Mazumdar et al.,
1 2023)

InChI=1S/C21H23N3O3/c1-14(25)19-11-16-13-23(9-10-24(16)22-19)21(27)12-18-17(7-8-20(18)26)15-5-3-2-4-6-15/h2-6,11,14,25H,7-10,12-13H2,1H3

1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C21H23N3O3/c1-14(25)19-11-16-13-23(9-10-24(16)22-19)21(27)12-18-17(7-8-20(18)26)15-5-3-2-4-6-15/h2-6,11,14,25H,7-10,12-13H2,1H3/t14-/m1/s1

1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C21H23N3O4S/c1-14-6-4-5-7-15(14)12-29-13-19(25)22-11-20-23-21(24-28-20)17-9-8-16(26-2)10-18(17)27-3/h4-10H,11-13H2,1-3H3,(H,22,25)

0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C21H23N3O7/c1-24(2)14-9-6-8-5-7-3-4-10(22)15(25)11(7)16(26)12(8)18(28)21(9,31)19(29)13(17(14)27)20(23)30/h3-4,8-9,14,25-26,29,31H,5-6,22H2,1-2H3,(H2,23,30)

0 (Meng et al., 2021)
(Mazumdar et al.,
0 2023)

InChI=1S/C21H23N3O7/c1-24(2)14-9-6-8-5-7-3-4-10(22)15(25)11(7)16(26)12(8)18(28)21(9,31)19(29)13(17(14)27)20(23)30/h3-4,8-9,14,25-26,29,31H,5-6,22H2,1-2H3,(H2,23,30)/t8-,9-,14-,21-/m0/s1

(Mazumdar et al.,
0 2023)

InChI=1S/C21H23N3O7/c1-24(2)14-9-6-8-5-7-3-4-10(22)15(25)11(7)16(26)12(8)18(28)21(9,31)19(29)13(17(14)27)20(23)30/h3-4,8-9,14,25-26,29,31H,5-6,22H2,1-2H3,(H2,23,30)/t8-,9-,14-,21+/m0/s1

0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C21H23N3O7/c1-24(2)14-9-6-8-5-7-3-4-10(22)15(25)11(7)16(26)12(8)18(28)21(9,31)19(29)13(17(14)27)20(23)30/h3-4,8-9,14,25-26,29,31H,5-6,22H2,1-2H3,(H2,23,30)/t8-,9+,14+,21-/m1/s1

0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C21H23N3O7/c1-24(2)14-9-6-8-5-7-3-4-10(22)15(25)11(7)16(26)12(8)18(28)21(9,31)19(29)13(17(14)27)20(23)30/h3-4,8-9,14,25,27-28,31H,5-6,22H2,1-2H3,(H2,23,30)/t8-,9-,14+,21-/m0/s1

0 (Meng et al., 2021)
(Mazumdar et al.,
0 2023)

InChI=1S/C21H23N3O7/c1-24(2)14-9-6-8-5-7-3-4-10(22)15(25)11(7)16(26)12(8)18(28)21(9,31)19(29)13(17(14)27)20(23)30/h3-4,8-9,14,25,27-28,31H,5-6,22H2,1-2H3,(H2,23,30)/t8-,9+,14+,21-/m1/s1

0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C21H23N3O7S/c1-10-12(31-20(28)30-10)9-29-19(27)15-21(2,3)32-18-14(17(26)24(15)18)23-16(25)13(22)11-7-5-4-6-8-11/h4-8,13-15,18H,9,22H2,1-3H3,(H,23,25)

0 (Meng et al., 2021)
(Mazumdar et al.,
0 2023)

InChI=1S/C21H23N3O7S/c1-10-12(31-20(28)30-10)9-29-19(27)15-21(2,3)32-18-14(17(26)24(15)18)23-16(25)13(22)11-7-5-4-6-8-11/h4-8,13-15,18H,9,22H2,1-3H3,(H,23,25)/t13-,14-,15-,18-/m1/s1

0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C21H23N3O7S/c1-10-12(31-20(28)30-10)9-29-19(27)15-21(2,3)32-18-14(17(26)24(15)18)23-16(25)13(22)11-7-5-4-6-8-11/h4-8,13-15,18H,9,22H2,1-3H3,(H,23,25)/t13-,14-,15+,18-/m1/s1

0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C21H23N3O7S/c1-10-12(31-20(28)30-10)9-29-19(27)15-21(2,3)32-18-14(17(26)24(15)18)23-16(25)13(22)11-7-5-4-6-8-11/h4-8,13-15,18H,9,22H2,1-3H3,(H,23,25)/t13-,14?,15-,18-/m0/s1

0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C21H23N3O7S/c1-10-12(31-20(28)30-10)9-29-19(27)15-21(2,3)32-18-14(17(26)24(15)18)23-16(25)13(22)11-7-5-4-6-8-11/h4-8,13-15,18H,9,22H2,1-3H3,(H,23,25)/t13-,14+,15+,18-/m0/s1

0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C21H23N3OS/c22-15-16-6-7-21-19(14-16)24(18-4-1-2-5-20(18)26-21)11-3-10-23-12-8-17(25)9-13-23/h1-2,4-7,14,17,25H,3,8-13H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H23NO/c1-22(2)20(18-10-4-3-5-11-18)15-16-23-21-14-8-12-17-9-6-7-13-19(17)21/h3-14,20H,15-16H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H23NO/c1-22(2)20(18-10-4-3-5-11-18)15-16-23-21-14-8-12-17-9-6-7-13-19(17)21/h3-14,20H,15-16H2,1-2H3/t20-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H23NO3/c1-22(2)11-5-8-18-17-7-4-3-6-16(17)14-25-20-10-9-15(12-19(18)20)13-21(23)24/h3-4,6-10,12H,5,11,13-14H2,1-2H3,(H,23,24)/b18-8-	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H23NO4S/c1-16(23)27-15-19(12-17-8-4-2-5-9-17)21(25)22-13-20(24)26-14-18-10-6-3-7-11-18/h2-11,19H,12-15H2,1H3,(H,22,25)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H23NO4S/c1-16(23)27-15-19(12-17-8-4-2-5-9-17)21(25)22-13-20(24)26-14-18-10-6-3-7-11-18/h2-11,19H,12-15H2,1H3,(H,22,25)/t19-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H23NO5/c1-11(23)25-16-6-4-13-10-15-14-5-7-17(26-12(2)24)20-21(14,8-9-22(15)3)18(13)19(16)27-20/h4-7,14-15,17,20H,8-10H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H23NO5/c1-11(23)25-16-6-4-13-10-15-14-5-7-17(26-12(2)24)20-21(14,8-9-22(15)3)18(13)19(16)27-20/h4-7,14-15,17,20H,8-10H2,1-3H3/t14-,15?,17?,20-,21?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H23NO5/c1-11(23)25-16-6-4-13-10-15-14-5-7-17(26-12(2)24)20-21(14,8-9-22(15)3)18(13)19(16)27-20/h4-7,14-15,17,20H,8-10H2,1-3H3/t14-,15+,17-,20-,21-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H23NO5/c1-11(23)25-16-6-4-13-10-15-14-5-7-17(26-12(2)24)20-21(14,8-9-22(15)3)18(13)19(16)27-20/h4-7,14-15,17,20H,8-10H2,1-3H3/t14-,15+,17+,20-,21-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H23NO5/c1-11(23)25-16-6-4-13-10-15-14-5-7-17(26-12(2)24)20-21(14,8-9-22(15)3)18(13)19(16)27-20/h4-7,14-15,17,20H,8-10H2,1-3H3/t14-,15+,17+,20-,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H24BrN5O/c1-14-9-18(22)13-25-19(14)5-3-4-8-23-21-26-12-17(20(28)27-21)10-16-7-6-15(2)24-11-16/h6-7,9,11-13H,3-5,8,10H2,1-2H3,(H2,23,26,27,28)	0	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C21H24Cl2N2O/c1-24(21(26)14-16-9-10-18(22)19(23)13-16)20(15-25-11-5-6-12-25)17-7-3-2-4-8-17/h2-4,7-10,13,20H,5-6,11-12,14-15H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H24Cl2N2O/c1-24(21(26)14-16-9-10-18(22)19(23)13-16)20(15-25-11-5-6-12-25)17-7-3-2-4-8-17/h2-4,7-10,13,20H,5-6,11-12,14-15H2,1H3/t20-/m0/s1	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C21H24Cl2N2O/c1-24(21(26)14-16-9-10-18(22)19(23)13-16)20(15-25-11-5-6-12-25)17-7-3-2-4-8-17/h2-4,7-10,13,20H,5-6,11-12,14-15H2,1H3/t20-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H24Cl2N4O3S/c1-26-10-19(25-12-26)31(29,30)27-8-15-16(9-27)21(15,7-13-2-3-13)11-24-20(28)14-4-5-17(22)18(23)6-14/h4-6,10,12-13,15-16H,2-3,7-9,11H2,1H3,(H,24,28)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C21H24Cl2N4O3S/c1-26-10-19(25-12-26)31(29,30)27-8-16-17(9-27)21(16,7-13-2-3-13)11-24-20(28)15-5-4-14(22)6-18(15)23/h4-6,10,12-13,16-17H,2-3,7-9,11H2,1H3,(H,24,28)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C21H24Cl2N4O3S/c1-26-10-19(25-12-26)31(29,30)27-8-17-18(9-27)21(17,7-13-2-3-13)11-24-20(28)14-4-15(22)6-16(23)5-14/h4-6,10,12-13,17-18H,2-3,7-9,11H2,1H3,(H,24,28)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C21H24ClFN2O/c22-18-6-10-20(11-7-18)25-14-2-13-24(15-16-25)12-1-3-21(26)17-4-8-19(23)9-5-17/h4-11H,1-3,12-16H2	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C21H24ClN3O3/c1-24(15-20(26)25-10-12-28-13-11-25)14-17-18(22)8-5-9-19(17)23-21(27)16-6-3-2-4-7-16/h2-9H,10-15H2,1H3,(H,23,27)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H24ClNO3S2/c1-3-14-5-7-15(8-6-14)18-19(21(18,20(23)27)13-26-4-2)28(24,25)17-11-9-16(22)10-12-17/h5-12,18-19H,3-4,13H2,1-2H3,(H2,23,27)/t18-,19+,21-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H24F3N/c1-14-16-7-4-5-8-18(16)19(9-6-12-25(2)3)20-13-15(21(22,23)24)10-11-17(14)20/h4-5,7-8,10-11,13-14,19H,6,9,12H2,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H24F3N/c1-14-16-7-4-5-8-18(16)19(9-6-12-25(2)3)20-13-15(21(22,23)24)10-11-17(14)20/h4-5,7-8,10-11,13-14,19H,6,9,12H2,1-3H3/t14-,19-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H24F3N/c1-14-16-7-4-5-8-18(16)19(9-6-12-25(2)3)20-13-15(21(22,23)24)10-11-17(14)20/h4-5,7-8,10-11,13-14,19H,6,9,12H2,1-3H3/t14-,19+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H24F3N/c1-14-16-7-4-5-8-18(16)19(9-6-12-25(2)3)20-13-15(21(22,23)24)10-11-17(14)20/h4-5,7-8,10-11,13-14,19H,6,9,12H2,1-3H3/t14-,19+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H24F3N3S/c1-25-11-13-26(14-12-25)9-4-10-27-17-5-2-3-6-19(17)28-20-8-7-16(15-18(20)27)21(22,23)24/h2-3,5-8,15H,4,9-14H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H24F3N3S/c1-25-11-13-26(14-12-25)9-4-10-27-17-5-2-3-6-19(17)28-20-8-7-16(15-18(20)27)21(22,23)24/h2-3,5-8,15H,4,9-14H2,1H3/p+2	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C21H24F3N3S/c1-25-12-14-26(15-13-25)10-5-11-27-17-7-2-3-8-18(17)28-19-9-4-6-16(20(19)27)21(22,23)24/h2-4,6-9H,5,10-15H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H24FN3O2S/c1-14-18(20(27)25-12-13-28-21(25)23-14)8-11-24-9-6-16(7-10-24)19(26)15-2-4-17(22)5-3-15/h2-5,16H,6-13H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H24FN3O4/c1-29-20-17-13(19(26)14(21(27)28)9-25(17)12-4-5-12)7-15(22)18(20)24-8-11-3-2-6-23-16(11)10-24/h7,9,11-12,16,23H,2-6,8,10H2,1H3,(H,27,28)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H24FN3O4/c1-29-20-17-13(19(26)14(21(27)28)9-25(17)12-4-5-12)7-15(22)18(20)24-8-11-3-2-6-23-16(11)10-24/h7,9,11-12,16,23H,2-6,8,10H2,1H3,(H,27,28)/t11-,16+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H24N2/c1-3-7-19-16(5-1)9-10-17-6-2-4-8-20(17)23(19)21-15-22-13-11-18(21)12-14-22/h1-8,18,21H,9-15H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H24N2/c1-3-7-19-16(5-1)9-10-17-6-2-4-8-20(17)23(19)21-15-22-13-11-18(21)12-14-22/h1-8,18,21H,9-15H2/t21-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H24N2O3/c1-12-16-10-23-8-7-14-13-5-3-4-6-18(13)22-20(14)19(23)9-15(16)17(11-26-12)21(24)25-2/h3-6,11-12,15-16,19,22H,7-10H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H24N2O4/c24-19(22-17-9-3-1-4-10-17)26-15-21(13-7-8-14-21)16-27-20(25)23-18-11-5-2-6-12-18/h1-6,9-12H,7-8,13-16H2,(H,22,24)(H,23,25)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H24N2O4S/c1-14-4-9-17-18(11-21(2,3)27-19(17)10-14)22-20(24)13-28-12-15-5-7-16(8-6-15)23(25)26/h4-10,18H,11-13H2,1-3H3,(H,22,24)/t18-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H24N2O4S/c1-14-4-9-17-18(11-21(2,3)27-19(17)10-14)22-20(24)13-28-12-15-5-7-16(8-6-15)23(25)26/h4-10,18H,11-13H2,1-3H3,(H,22,24)/t18-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H24N2O4S/c24-21-18-8-2-4-10-20(18)28(25,26)23(21)14-6-5-13-22-15-17-12-11-16-7-1-3-9-19(16)27-17/h1-4,7-10,17,22H,5-6,11-15H2	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C21H24N4O2S/c22-21-25-18(14-28-21)12-20(27)24-17-8-6-15(7-9-17)10-11-23-13-19(26)16-4-2-1-3-5-16/h1-9,14,19,23,26H,10-	1	(Mazumdar et al., 2023)

13H2,(H2,22,25)(H,24,27)	2023)
InChI=1S/C21H24N4O3/c1-26-16-3-4-18-17(11-16)21(24-23-18)22-15-6-8-25(9-7-15)12-14-2-5-19-20(10-14)28-13-27-19/h2-5,10-11,15H,6-9,12-13H2,1H3,(H2,22,23,24)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H24N4O7S/c1-13(25(12-26)10-16-9-23-14(2)24-20(16)22)18(33-21(29)17-5-4-7-30-17)6-8-31-19(28)11-32-15(3)27/h4-5,7,9,12H,6,8,10-11H2,1-3H3,(H2,22,23,24)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H24N4O7S/c1-13(25(12-26)10-16-9-23-14(2)24-20(16)22)18(33-21(29)17-5-4-7-30-17)6-8-31-19(28)11-32-15(3)27/h4-5,7,9,12H,6,8,10-11H2,1-3H3,(H2,22,23,24)/b18-13+	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H24N6O2/c1-15-13-26(16-4-6-17(29-3)7-5-16)10-11-27(15)21-24-19(12-20(28)25(21)2)18-8-9-22-14-23-18/h4-9,12,14-15H,10-11,13H2,1-3H3	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C21H24O2/c1-3-20-11-9-17-16-8-6-15(22)13-14(16)5-7-18(17)19(20)10-12-21(20,23)4-2/h2,9,11,13,18-19,23H,3,5-8,10,12H2,1H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25BrF2O5/c1-18-8-16(27)21(24)11(10(18)3-4-20(18,29)17(28)9-25)5-14(23)12-6-15(26)13(22)7-19(12,21)2/h6-7,10-11,14,16,25,27,29H,3-5,8-9H2,1-2H3/t10-,11-,14-,16-,18?,19?,20?,21?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25BrF2O5/c1-18-8-16(27)21(24)11(10(18)3-4-20(18,29)17(28)9-25)5-14(23)12-6-15(26)13(22)7-19(12,21)2/h6-7,10-11,14,16,25,27,29H,3-5,8-9H2,1-2H3/t10-,11-,14+,16-,18-,19-,20?,21?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25BrF2O5/c1-18-8-16(27)21(24)11(10(18)3-4-20(18,29)17(28)9-25)5-14(23)12-6-15(26)13(22)7-19(12,21)2/h6-7,10-11,14,16,25,27,29H,3-5,8-9H2,1-2H3/t10-,11?,14+,16-,18-,19?,20-,21-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25CIN2O3/c22-17-8-6-16(7-9-17)21(19-4-1-2-12-23-19)27-18-10-14-24(15-11-18)13-3-5-20(25)26/h1-2,4,6-9,12,18,21H,3,5,10-11,13-15H2,(H,25,26)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25CIN2O3/c22-19-8-6-18(7-9-19)21(17-4-2-1-3-5-17)24-12-10-23(11-13-24)14-15-27-16-20(25)26/h1-9,21H,10-16H2,(H,25,26)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25CIN2O3/c22-19-8-6-18(7-9-19)21(17-4-2-1-3-5-17)24-12-10-23(11-13-24)14-15-27-16-20(25)26/h1-9,21H,10-16H2,(H,25,26)/p+1/t21-/m1/s1	0 (Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C21H25CIN2O3/c22-19-8-6-18(7-9-19)21(17-4-2-1-3-5-17)24-12-10-23(11-13-24)14-15-27-16-20(25)26/h1-9,21H,10-16H2,(H,25,26)/t21-/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H25CIN2O3/c22-19-8-6-18(7-9-19)21(17-4-2-1-3-5-17)24-12-10-23(11-13-24)14-15-27-16-20(25)26/h1-9,21H,10-16H2,(H,25,26)/t21-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25CIN2O4S/c1-20(2,3)28-19(25)24-21(13-23)17(14-7-5-4-6-8-14)18(21)29(26,27)16-11-9-15(22)10-12-16/h4-12,17-18H,13,23H2,1-3H3,(H,24,25)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H25CIN2O4S/c1-20(2,3)28-19(25)24-21(13-23)17(14-7-5-4-6-8-14)18(21)29(26,27)16-11-9-15(22)10-12-16/h4-12,17-18H,13,23H2,1-3H3,(H,24,25)/t17-,18+,21+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25CIN2O4S/c1-24-18-9-6-5-8-16(18)21(23-13-7-3-2-4-10-20(25)26)17-12-11-15(22)14-19(17)29(24,27)28/h5-6,8-9,11-12,14,21,23H,2-4,7,10,13H2,1H3,(H,25,26)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25CIN2O4S/c1-24-18-9-6-5-8-16(18)21(23-13-7-3-2-4-10-20(25)26)17-12-11-15(22)14-19(17)29(24,27)28/h5-6,8-9,11-12,14,21,23H,2-4,7,10,13H2,1H3,(H,25,26)/t21-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H25CIN2O4S/c1-24-18-9-6-5-8-16(18)21(23-13-7-3-2-4-10-20(25)26)17-12-11-15(22)14-19(17)29(24,27)28/h5-6,8-9,11-12,14,21,23H,2-4,7,10,13H2,1H3,(H,25,26)/t21-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H25CIN4O3S/c1-25-11-19(24-13-25)30(28,29)26-9-16-17(10-26)21(16,8-14-6-7-14)12-23-20(27)15-4-2-3-5-18(15)22/h2-5,11,13-	1 (Wu et al., 2018)

14,16-17H,6-10,12H ₂ ,1H ₃ , (H,23,27)	
InChI=1S/C21H25ClN4O3S/c1-25-11-19(24-13-25)30(28,29)26-9-17-18(10-26)21(17,8-14-2-3-14)12-23-20(27)15-4-6-16(22)7-5-15/h4-7,11,13-14,17-18H,2-3,8-10,12H ₂ ,1H ₃ , (H,23,27)	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C21H25ClO5/c1-19-5-3-11(24)7-14(19)15(22)8-12-13-4-6-21(27,17(26)10-23)20(13,2)9-16(25)18(12)19/h3,5,7-8,12-13,16,18,23,25,27H,4,6,9-10H ₂ ,1-2H ₃	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25ClO5/c1-19-5-3-11(24)7-14(19)15(22)8-12-13-4-6-21(27,17(26)10-23)20(13,2)9-16(25)18(12)19/h3,5,7-8,12-13,16,18,23,25,27H,4,6,9-10H ₂ ,1-2H ₃ /t12-,13-,16-,18+,19-,20-,21-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H25ClO5/c1-19-5-3-11(24)7-14(19)15(22)8-12-13-4-6-21(27,17(26)10-23)20(13,2)9-16(25)18(12)19/h3,5,7-8,12-13,16,18,23,25,27H,4,6,9-10H ₂ ,1-2H ₃ /t12-,13-,16-,18+,19-,20+,21+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25ClO5/c1-19-5-3-11(24)7-14(19)15(22)8-12-13-4-6-21(27,17(26)10-23)20(13,2)9-16(25)18(12)19/h3,5,7-8,12-13,16,18,23,25,27H,4,6,9-10H ₂ ,1-2H ₃ /t12-,13-,16-,18+,19?,20?,21+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25ClO5/c1-19-5-3-11(24)7-14(19)15(22)8-12-13-4-6-21(27,17(26)10-23)20(13,2)9-16(25)18(12)19/h3,5,7-8,12-13,16,18,23,25,27H,4,6,9-10H ₂ ,1-2H ₃ /t12-,13+,16-,18-,19+,20-,21+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25ClO5/c1-19-5-3-11(24)7-14(19)15(22)8-12-13-4-6-21(27,17(26)10-23)20(13,2)9-16(25)18(12)19/h3,5,7-8,12-13,16,18,23,25,27H,4,6,9-10H ₂ ,1-2H ₃ /t12?,13-,16-,18+,19-,20-,21-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25ClO5/c1-19-5-3-11(24)7-14(19)15(22)8-12-13-4-6-21(27,17(26)10-23)20(13,2)9-16(25)18(12)19/h3,5,7-8,12-13,15,18,23,27H,4,6,8-10H ₂ ,1-2H ₃	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25ClO5/c1-19-5-3-11(24)7-14(19)15(22)8-12-13-4-6-21(27,17(26)10-23)20(13,2)9-16(25)18(12)19/h3,5,7,12-13,15,18,23,27H,4,6,8-10H ₂ ,1-2H ₃ /t12-,13-,15-,18+,19?,20?,21+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25ClO5/c1-19-5-3-11(24)7-14(19)15(22)8-12-13-4-6-21(27,17(26)10-23)20(13,2)9-16(25)18(12)19/h3,5,7,12-13,15,18,23,27H,4,6,8-10H ₂ ,1-2H ₃ /t12-,13-,15-,18+,19+,20+,21+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25ClO5/c1-19-5-3-11(24)7-14(19)15(22)8-12-13-4-6-21(27,17(26)10-23)20(13,2)9-16(25)18(12)19/h3,5,7,12-13,15,18,23,27H,4,6,8-10H ₂ ,1-2H ₃ /t12-,13+,15+,18-,19+,20-,21+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25ClO5/c1-19-5-3-11(24)7-14(19)15(22)8-12-13-4-6-21(27,17(26)10-23)20(13,2)9-16(25)18(12)19/h3,5,7,12-13,15,18,23,27H,4,6,8-10H ₂ ,1-2H ₃ /t12?,13?,15-,18?,19-,20-,21-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25ClO6/c1-2-27-15-6-3-12(4-7-15)9-14-10-13(5-8-16(14)22)21-20(26)19(25)18(24)17(11-23)28-21/h3-8,10,17-21,23-26H,2,9,11H ₂ ,1H ₃	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25FN2O2/c1-26-21-7-3-2-5-19(21)24-15-13-23(14-16-24)12-4-6-20(25)17-8-10-18(22)11-9-17/h2-3,5,7-11H,4,6,12-16H ₂ ,1H ₃	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25N/c1-21(2)19-13-7-5-10-17(19)16(12-9-15-22(3)4)18-11-6-8-14-20(18)21/h5-8,10-14H,9,15H ₂ ,1-4H ₃	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H25N/c1-21(2,3)15-8-5-9-16-22(4)17-19-13-10-12-18-11-6-7-14-20(18)19/h5-7,9-14H,16-17H ₂ ,1-4H ₃	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25N/c1-21(2,3)15-8-5-9-16-22(4)17-19-13-10-12-18-11-6-7-14-20(18)19/h5-7,9-14H,16-17H ₂ ,1-4H ₃ /b9-5+	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25N3O2/c1-14-24-18-11-16(19(25-2)12-20(18)26-14)13-23-17-9-6-10-22-21(17)15-7-4-3-5-8-15/h3-5,7-8,11-12,17,21-23H,6,9-10,13H ₂ ,1-2H ₃	1 (Kaupp, 2007)
InChI=1S/C21H25N3O2/c1-14-24-18-11-16(19(25-2)12-20(18)26-14)13-23-17-9-6-10-22-21(17)15-7-4-3-5-8-15/h3-5,7-8,11-12,17,21-23H,6,9-10,13H ₂ ,1-2H ₃ /t17-,21-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C21H25N3O2S/c25-14-16-26-15-13-23-9-11-24(12-10-23)21-17-5-1-3-7-19(17)27-20-8-4-2-6-18(20)22-21/h1-8,25H,9-16H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25N3OS/c1-14-24-18-11-16(19(25-2)12-20(18)26-14)13-23-17-9-6-10-22-21(17)15-7-4-3-5-8-15/h3-5,7-8,11-12,17,21-23H,6,9-10,13H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25N3OS/c1-14-24-18-11-16(19(25-2)12-20(18)26-14)13-23-17-9-6-10-22-21(17)15-7-4-3-5-8-15/h3-5,7-8,11-12,17,21-23H,6,9-10,13H2,1-2H3/t17-,21-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H25N5O2.3ClH/c1-15-8-9-16(13-24-15)12-17-14-25-21(26-20(17)27)23-10-4-3-6-18-19(28-2)7-5-11-22-18;;;/h5,7-9,11,13-14H,3-4,6,10,12H2,1-2H3,(H2,23,25,26,27);3*1H	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25N5O2/c1-15-7-5-8-17(25-15)13-16-14-24-21(26-20(16)27)23-11-4-3-9-18-19(28-2)10-6-12-22-18/h5-8,10,12,14H,3-4,9,11,13H2,1-2H3,(H2,23,24,26,27)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25N5O2/c1-15-8-9-16(13-24-15)12-17-14-25-21(26-20(17)27)23-10-4-3-6-18-19(28-2)7-5-11-22-18/h5,7-9,11,13-14,17H,3-4,6,10,12H2,1-2H3,(H,23,26,27)/t17-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25N5O2/c1-15-8-9-16(13-24-15)12-17-14-25-21(26-20(17)27)23-10-4-3-6-18-19(28-2)7-5-11-22-18/h5,7-9,11,13-14H,3-4,6,10,12H2,1-2H3,(H2,23,25,26,27)	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C21H25N5O2/c1-3-22-18-5-4-8-23-20(18)25-9-11-26(12-10-25)21(27)19-14-15-13-16(28-2)6-7-17(15)24-19/h4-8,13-14,22,24H,3,9-12H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25N5O8S2/c1-21(2)14(18(29)30)26-16(28)13(17(26)35-21)22-15(27)12(11-7-5-4-6-8-11)23-19(31)24-9-10-25(20(24)32)36(3,33)34/h4-8,12-14,17H,9-10H2,1-3H3,(H,22,27)(H,23,31)(H,29,30)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25N5O8S2/c1-21(2)14(18(29)30)26-16(28)13(17(26)35-21)22-15(27)12(11-7-5-4-6-8-11)23-19(31)24-9-10-25(20(24)32)36(3,33)34/h4-8,12-14,17H,9-10H2,1-3H3,(H,22,27)(H,23,31)(H,29,30)/t12-,13-,14+,17-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25N5O8S2/c1-21(2)14(18(29)30)26-16(28)13(17(26)35-21)22-15(27)12(11-7-5-4-6-8-11)23-19(31)24-9-10-25(20(24)32)36(3,33)34/h4-8,12-14,17H,9-10H2,1-3H3,(H,22,27)(H,23,31)(H,29,30)/t12-,13-,14+,17-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25N5O8S2/c1-21(2)14(18(29)30)26-16(28)13(17(26)35-21)22-15(27)12(11-7-5-4-6-8-11)23-19(31)24-9-10-25(20(24)32)36(3,33)34/h4-8,12-14,17H,9-10H2,1-3H3,(H,22,27)(H,23,31)(H,29,30)/t12-,13?,14-,17-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25N5O8S2/c1-21(2)14(18(29)30)26-16(28)13(17(26)35-21)22-15(27)12(11-7-5-4-6-8-11)23-19(31)24-9-10-25(20(24)32)36(3,33)34/h4-8,12-14,17H,9-10H2,1-3H3,(H,22,27)(H,23,31)(H,29,30)/t12-,13+,14-,17+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H25N5S/c1-14-12-19(17-10-6-7-11-18(17)22-14)25-20(24-16-8-4-3-5-9-16)26-21-23-15(2)13-27-21/h6-7,10-13,16H,3-5,8-9H2,1-2H3,(H2,22,23,24,25,26)	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C21H25NO/c1-22-14-12-18(13-15-22)23-21-19-8-4-2-6-16(19)10-11-17-7-3-5-9-20(17)21/h2-9,18,21H,10-15H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25NO/c1-22-18-12-13-19(22)15-20(14-18)23-21(16-8-4-2-5-9-16)17-10-6-3-7-11-17/h2-11,18-21H,12-15H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25NO/c1-22-18-12-13-19(22)15-20(14-18)23-21(16-8-4-2-5-9-16)17-10-6-3-7-11-17/h2-11,18-21H,12-15H2,1H3/t18-,19-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25NO/c1-22-18-12-13-19(22)15-20(14-18)23-21(16-8-4-2-5-9-16)17-10-6-3-7-11-17/h2-11,18-21H,12-15H2,1H3/t18-,19+,20?	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H25NO2/c1-3-13-10-15-5-4-14(13)11-18(15)21(23)17-8-9-22-20-7-6-16(24-2)12-19(17)20/h3,6-9,12-15,18,21,23H,1,4-5,10-11H2,2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25NO2/c1-3-13-10-15-5-4-14(13)11-18(15)21(23)17-8-9-22-20-7-6-16(24-2)12-19(17)20/h3,6-9,12-15,18,21,23H,1,4-5,10-11H2,2H3/t13?,14-,15-,18-,21-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C21H25NO2S/c1-14-10-11-19-17(12-14)18(13-21(3,4)24-19)22-20(23)15(2)25-16-8-6-5-7-9-16/h5-12,15,18H,13H2,1-4H3,(H,22,23)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H25NO2S/c1-14-10-11-19-17(12-14)18(13-21(3,4)24-19)22-20(23)15(2)25-16-8-6-5-7-9-16/h5-12,15,18H,13H2,1-4H3,(H,22,23)/t15-,18-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25NO2S/c1-15-9-10-17-18(14-21(2,3)24-19(17)13-15)22-20(23)11-12-25-16-7-5-4-6-8-16/h4-10,13,18H,11-12,14H2,1-3H3,(H,22,23)/t18-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H25NO3.C8H16O/c1-24-20-10-19(11-20)15-8-13-4-5-14(23)17-16(13)21(19,18(20)25-17)6-7-22(15)9-12-2-3-12;1-6-8(5,9)7(2,3)4/h4-5,12,15,18,23H,2-3,6-11H2,1H3;6,9H,1H2,2-5H3/t15-,18+,19?,20?,21+;8-/m10/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25NO3/c1-12-6-7-21(24)16-10-14-4-5-15(23)18-17(14)20(21,19(12)25-18)8-9-22(16)11-13-2-3-13/h4-5,13,16,19,23-24H,1-3,6-11H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25NO3/c1-12-6-7-21(24)16-10-14-4-5-15(23)18-17(14)20(21,19(12)25-18)8-9-22(16)11-13-2-3-13/h4-5,13,16,19,23-24H,1-3,6-11H2/t16-,19+,20-,21-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25NO3/c1-12-6-7-21(24)16-10-14-4-5-15(23)18-17(14)20(21,19(12)25-18)8-9-22(16)11-13-2-3-13/h4-5,13,16,19,23-24H,1-3,6-11H2/t16-,19+,20+,21-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H25NO3/c1-12-6-7-21(24)16-10-14-4-5-15(23)18-17(14)20(21,19(12)25-18)8-9-22(16)11-13-2-3-13/h4-5,13,16,19,23-24H,1-3,6-11H2/t16-,19+,20+,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25NO3/c23-20(25-17-16-22-14-8-3-9-15-22)21(24,18-10-4-1-5-11-18)19-12-6-2-7-13-19/h1-2,4-7,10-13,24H,3,8-9,14-17H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25NO4/c1-12(2)6-9-22-10-8-20-17-13-3-4-14(23)18(17)26-19(20)15(24)5-7-21(20,25)16(22)11-13/h3-4,6,16,19,23,25H,5,7-11H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H25NO4/c1-12(2)6-9-22-10-8-20-17-13-3-4-14(23)18(17)26-19(20)15(24)5-7-21(20,25)16(22)11-13/h3-4,6,16,19,23,25H,5,7-11H2,1-2H3/t16-,19+,20-,21-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25NO4/c1-12(2)6-9-22-10-8-20-17-13-3-4-14(23)18(17)26-19(20)15(24)5-7-21(20,25)16(22)11-13/h3-4,6,16,19,23,25H,5,7-11H2,1-2H3/t16-,19+,20+,21-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25NO4/c1-12(2)6-9-22-10-8-20-17-13-3-4-14(23)18(17)26-19(20)15(24)5-7-21(20,25)16(22)11-13/h3-4,6,16,19,23,25H,5,7-11H2,1-2H3/t16-,19+,20+,21+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25NO4/c1-12(2)6-9-22-10-8-20-17-13-3-4-14(23)18(17)26-19(20)15(24)5-7-21(20,25)16(22)11-13/h3-4,6,16,19,23,25H,5,7-11H2,1-2H3/t16?,19-,20?,21?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25NO4/c1-22(11-12-2-3-12)9-8-20-17-13-4-5-14(23)18(17)26-19(20)15(24)6-7-21(20,25)16(22)10-13/h4-5,12,16,19,25H,2-3,6-11H2,1H3/p+1/t16-,19+,20+,21-,22?/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25NO4/c1-23-18-6-5-13-9-17-15-11-20(25-3)19(24-2)10-14(15)7-8-22(17)12-16(13)21(18)26-4/h5-6,10-11,17H,7-9,12H2,1-4H3/t17-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H25NO4/c1-23-18-6-5-13-9-17-15-11-20(25-3)19(24-2)10-14(15)7-8-22(17)12-16(13)21(18)26-4/h5-6,10-11,17H,7-9,12H2,1-4H3/t17-/m1/s1	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C21H26Cl2O4/c1-18-7-5-13(25)9-12(18)3-4-15-14-6-8-20(27,17(26)11-24)19(14,2)10-16(22)21(15,18)23/h5,7,9,14-16,24,27H,3-4,6,8,10-11H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26Cl2O4/c1-18-7-5-13(25)9-12(18)3-4-15-14-6-8-20(27,17(26)11-24)19(14,2)10-16(22)21(15,18)23/h5,7,9,14-16,24,27H,3-4,6,8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,16-,18?,19?,20?,21?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C21H26Cl2O4/c1-18-7-5-13(25)9-12(18)3-4-15-14-6-8-20(27,17(26)11-24)19(14,2)10-16(22)21(15,18)23/h5,7,9,14-16,24,27H,3-4,6,8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,16+,18-,19+,20+,21-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26Cl2O4/c1-18-7-5-13(25)9-12(18)3-4-15-14-6-8-20(27,17(26)11-24)19(14,2)10-16(22)21(15,18)23/h5,7,9,14-16,24,27H,3-4,6,8,10-11H2,1-2H3/t14-,15+,16+,18-,19-,20-,21+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26Cl2O4/c1-18-7-5-13(25)9-12(18)3-4-15-14-6-8-20(27,17(26)11-24)19(14,2)10-16(22)21(15,18)23/h5,7,9,14-16,24,27H,3-4,6,8,10-11H2,1-2H3/t14?,15?,16-,18-,19-,20-,21-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26Cl2O4/c1-18-7-5-13(25)9-12(18)3-4-15-14-6-8-20(27,17(26)11-24)19(14,2)10-16(22)21(15,18)23/h5,7,9,14-16,24,27H,3-4,6,8,10-11H2,1-2H3/t14?,15?,16?,18?,19?,20-,21-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H26ClN3O2/c1-14-18(9-10-25(14)13-15-7-5-4-6-8-15)24-21(26)16-11-17(22)19(23-2)12-20(16)27-3/h4-8,11-12,14,18,23H,9-10,13H2,1-3H3,(H,24,26)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H26ClN3O2/c1-14-18(9-10-25(14)13-15-7-5-4-6-8-15)24-21(26)16-11-17(22)19(23-2)12-20(16)27-3/h4-8,11-12,14,18,23H,9-10,13H2,1-3H3,(H,24,26)/t14-,18-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H26ClN3O2/c1-14-18(9-10-25(14)13-15-7-5-4-6-8-15)24-21(26)16-11-17(22)19(23-2)12-20(16)27-3/h4-8,11-12,14,18,23H,9-10,13H2,1-3H3,(H,24,26)/t14-,18-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H26ClN3O2/c1-14-18(9-10-25(14)13-15-7-5-4-6-8-15)24-21(26)16-11-17(22)19(23-2)12-20(16)27-3/h4-8,11-12,14,18,23H,9-10,13H2,1-3H3,(H,24,26)/t14-,18+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H26ClN3OS/c22-17-6-7-21-19(16-17)25(18-4-1-2-5-20(18)27-21)9-3-8-23-10-12-24(13-11-23)14-15-26/h1-2,4-7,16,26H,3,8-15H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26ClNO/c1-21(17-7-4-3-5-8-17,18-10-12-19(22)13-11-18)24-16-14-20-9-6-15-23(20)2/h3-5,7-8,10-13,20H,6,9,14-16H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H26ClNO/c1-21(17-7-4-3-5-8-17,18-10-12-19(22)13-11-18)24-16-14-20-9-6-15-23(20)2/h3-5,7-8,10-13,20H,6,9,14-16H2,1-2H3/t20-,21-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H26F2O6/c1-18-4-3-10(25)5-13(18)14(22)6-12-11-7-15(26)21(29,17(28)9-24)19(11,2)8-16(27)20(12,18)23/h3-5,11-12,14-16,24,26-27,29H,6-9H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26F2O6/c1-18-4-3-10(25)5-13(18)14(22)6-12-11-7-15(26)21(29,17(28)9-24)19(11,2)8-16(27)20(12,18)23/h3-5,11-12,14-16,24,26-27,29H,6-9H2,1-2H3/t11-,12-,14-,15-,16-,18?,19?,20?,21?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26F2O6/c1-18-4-3-10(25)5-13(18)14(22)6-12-11-7-15(26)21(29,17(28)9-24)19(11,2)8-16(27)20(12,18)23/h3-5,11-12,14-16,24,26-27,29H,6-9H2,1-2H3/t11-,12-,14-,15-,16+,18-,19-,20-,21-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H26F2O6/c1-18-4-3-10(25)5-13(18)14(22)6-12-11-7-15(26)21(29,17(28)9-24)19(11,2)8-16(27)20(12,18)23/h3-5,11-12,14-16,24,26-27,29H,6-9H2,1-2H3/t11-,12-,14-,15+,16-,18-,19-,20-,21-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H26F2O6/c1-18-4-3-10(25)5-13(18)14(22)6-12-11-7-15(26)21(29,17(28)9-24)19(11,2)8-16(27)20(12,18)23/h3-5,11-12,14-16,24,26-27,29H,6-9H2,1-2H3/t11-,12+,14+,15+,16+,18-,19-,20+,21-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26F2O6/c1-18-4-3-10(25)5-13(18)14(22)6-12-11-7-15(26)21(29,17(28)9-24)19(11,2)8-16(27)20(12,18)23/h3-5,11-12,14-16,24,26-27,29H,6-9H2,1-2H3/t11?,12?,14-,15+,16-,18-,19-,20-,21-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26F3N5/c22-21(23,24)16-4-2-5-17(13-16)28-11-9-27(10-12-28)8-7-19-25-26-20-18-6-1-3-15(18)14-29(19)20/h2,4-5,13,15,18H,1,3,6-12,14H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H26F3N5/c22-21(23,24)16-4-2-5-17(13-16)28-11-9-27(10-12-28)8-7-19-25-26-20-18-6-1-3-15(18)14-29(19)20/h2,4-5,13,15,18H,1,3,6-12,14H2/t15-,18-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C21H26F3N5/c22-21(23,24)16-4-2-5-17(13-16)28-11-9-27(10-12-28)8-7-19-25-26-20-18-6-1-3-15(18)14-29(19)20/h2,4-5,13,15,18H,1,3,6-12,14H2/t15-,18-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26F3N5/c22-21(23,24)16-4-2-5-17(13-16)28-11-9-27(10-12-28)8-7-19-25-26-20-18-6-1-3-15(18)14-29(19)20/h2,4-5,13,15,18H,1,3,6-12,14H2/t15-,18+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26F3N5/c22-21(23,24)16-4-2-5-17(13-16)28-11-9-27(10-12-28)8-7-19-25-26-20-18-6-1-3-15(18)14-29(19)20/h2,4-5,13,15,18H,1,3,6-12,14H2/t15-,18+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26N2O2/c1-24-18-12-16-9-11-25-21(16)17(13-18)14-23-19-8-5-10-22-20(19)15-6-3-2-4-7-15/h2-4,6-7,12-13,19-20,22-23H,5,8-11,14H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26N2O2/c1-24-18-12-16-9-11-25-21(16)17(13-18)14-23-19-8-5-10-22-20(19)15-6-3-2-4-7-15/h2-4,6-7,12-13,19-20,22-23H,5,8-11,14H2,1H3/t19-,20-/m0/s1	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C21H26N2O2/c1-24-18-12-16-9-11-25-21(16)17(13-18)14-23-19-8-5-10-22-20(19)15-6-3-2-4-7-15/h2-4,6-7,12-13,19-20,22-23H,5,8-11,14H2,1H3/t19-,20+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26N2O2/c1-24-18-12-16-9-11-25-21(16)17(13-18)14-23-19-8-5-10-22-20(19)15-6-3-2-4-7-15/h2-4,6-7,12-13,19-20,22-23H,5,8-11,14H2,1H3/t19-,20+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26N2O2S2/c1-22-13-6-5-7-16(22)12-14-23-18-8-3-4-9-20(18)26-21-11-10-17(15-19(21)23)27(2,24)25/h3-4,8-11,15-16H,5-7,12-14H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26N2O2S2/c1-22-13-6-5-7-16(22)12-14-23-18-8-3-4-9-20(18)26-21-11-10-17(15-19(21)23)27(2,24)25/h3-4,8-11,15-16H,5-7,12-14H2,1-2H3/t16-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26N2O2S2/c1-22-13-6-5-7-16(22)12-14-23-18-8-3-4-9-20(18)26-21-11-10-17(15-19(21)23)27(2,24)25/h3-4,8-11,15-16H,5-7,12-14H2,1-2H3/t16-/m1/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C21H26N2O3/c1-26-21(25)19-15-10-17-20-14(13-4-2-3-5-16(13)22-20)8-9-23(17)11-12(15)6-7-18(19)24/h2-5,12,15,17-19,22,24H,6-11H2,1H3	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C21H26N2O3/c1-26-21(25)19-15-10-17-20-14(13-4-2-3-5-16(13)22-20)8-9-23(17)11-12(15)6-7-18(19)24/h2-5,12,15,17-19,22,24H,6-11H2,1H3/t12-,15-,17-,18-,19+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H26N2O3/c1-26-21(25)19-15-10-17-20-14(13-4-2-3-5-16(13)22-20)8-9-23(17)11-12(15)6-7-18(19)24/h2-5,12,15,17-19,22,24H,6-11H2,1H3/t12-,15+,17+,18+,19+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26N2O3/c1-3-20-10-6-11-22-12-9-15-14-7-4-5-8-16(14)23(17(15)18(20)22)21(25,13-20)19(24)26-2/h4-5,7-8,18,25H,3,6,9-13H2,1-2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H26N2O4/c1-26-20-9-8-16(14-21(20)27-2)19(25)15-22-10-12-23(13-11-22)17-6-4-3-5-7-18(17)24/h3-9,14,19,25H,10-13,15H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26N2O4/c1-26-20-9-8-16(14-21(20)27-2)19(25)15-22-10-12-23(13-11-22)17-6-4-3-5-7-18(17)24/h3-9,14,19,25H,10-13,15H2,1-2H3/t19-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H26N2O4/c1-26-20-9-8-16(14-21(20)27-2)19(25)15-22-10-12-23(13-11-22)17-6-4-3-5-7-18(17)24/h3-9,14,19,25H,10-13,15H2,1-2H3/t19-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H26N2O7/c1-12(2)30-21(25)18-14(4)22-13(3)17(20(24)29-10-9-28-5)19(18)15-7-6-8-16(11-15)23(26)27/h6-8,11-12,19,22H,9-10H2,1-5H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26N2OS/c1-22-13-6-5-7-16(22)12-14-23-18-8-3-4-9-20(18)25-21-11-10-17(24-2)15-19(21)23/h3-4,8-11,15-16H,5-7,12-14H2,1-	1	(Mazumdar et al., 2023)

2H3	2023)
InChI=1S/C21H26N2OS/c1-22-13-6-5-7-16(22)12-14-23-18-8-3-4-9-20(18)25-21-11-10-17(24-2)15-19(21)23/h3-4,8-11,15-16H,5-7,12-14H2,1-2H3/t16-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26N2OS/c1-22-13-6-5-7-16(22)12-14-23-18-8-3-4-9-20(18)25-21-11-10-17(24-2)15-19(21)23/h3-4,8-11,15-16H,5-7,12-14H2,1-2H3/t16-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H26N2OS2/c1-22-13-6-5-7-16(22)12-14-23-18-8-3-4-9-20(18)25-21-11-10-17(26(2)24)15-19(21)23/h3-4,8-11,15-16H,5-7,12-14H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26N2OS2/c1-22-13-6-5-7-16(22)12-14-23-18-8-3-4-9-20(18)25-21-11-10-17(26(2)24)15-19(21)23/h3-4,8-11,15-16H,5-7,12-14H2,1-2H3/t16-,26-/m1/s1	1 (Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C21H26N2OS2/c1-22-13-6-5-7-16(22)12-14-23-18-8-3-4-9-20(18)25-21-11-10-17(26(2)24)15-19(21)23/h3-4,8-11,15-16H,5-7,12-14H2,1-2H3/t16-,26+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26N2OS2/c1-22-13-6-5-7-16(22)12-14-23-18-8-3-4-9-20(18)25-21-11-10-17(26(2)24)15-19(21)23/h3-4,8-11,15-16H,5-7,12-14H2,1-2H3/t16-,26+/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H26N2S2/c1-22-13-6-5-7-16(22)12-14-23-18-8-3-4-9-20(18)25-21-11-10-17(24-2)15-19(21)23/h3-4,8-11,15-16H,5-7,12-14H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26N2S2/c1-22-13-6-5-7-16(22)12-14-23-18-8-3-4-9-20(18)25-21-11-10-17(24-2)15-19(21)23/h3-4,8-11,15-16H,5-7,12-14H2,1-2H3/t16-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26N2S2/c1-22-13-6-5-7-16(22)12-14-23-18-8-3-4-9-20(18)25-21-11-10-17(24-2)15-19(21)23/h3-4,8-11,15-16H,5-7,12-14H2,1-2H3/t16-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26N4O3S/c1-24(2)14-18-8-9-19(28-18)15-29-11-10-22-21-20(25(26)27)17(13-23-21)12-16-6-4-3-5-7-16/h3-9,13,22-23H,10-12,14-15H2,1-2H3	1 (Li et al., 2005)
InChI=1S/C21H26N6O3S/c1-3-22-18-5-4-8-23-20(18)26-9-11-27(12-10-26)21(28)19-14-15-13-16(25-31(2,29)30)6-7-17(15)24-19/h4-8,13-14,22,24-25H,3,9-12H2,1-2H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26N8O6S2/c1-35-26-11(14-25-20(23)37-27-14)15(30)24-12-16(31)28-13(18(32)33)10(9-36-17(12)28)8-29-5-2-21(3-6-29,4-7-29)19(22)34/h12,17H,2-9H2,1H3,(H5-,22,23,24,25,27,30,32,33,34)/b26-11-/t12-,17-,21?,29?/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H26N8O6S2/c1-35-26-11(14-25-20(23)37-27-14)15(30)24-12-16(31)28-13(18(32)33)10(9-36-17(12)28)8-29-5-2-21(3-6-29,4-7-29)19(22)34/h12,17H,2-9H2,1H3,(H5-,22,23,24,25,27,30,32,33,34)/p+1/b26-11-/t12-,17-,21?,29?/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26N8O6S2/c1-35-26-11(14-25-20(23)37-27-14)15(30)24-12-16(31)28-13(18(32)33)10(9-36-17(12)28)8-29-5-2-21(3-6-29,4-7-29)19(22)34/h12,17H,2-9H2,1H3,(H5-,22,23,24,25,27,30,32,33,34)/p+1/b26-11+/t12-,17-,21?,29?/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H26NO3/c1-22(2)15-9-14-19(16-22)25-20(23)21(24,17-10-5-3-6-11-17)18-12-7-4-8-13-18/h3-8,10-13,19,24H,9,14-16H2,1-2H3/q+1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26NO3/c1-22(2)15-9-14-19(16-22)25-20(23)21(24,17-10-5-3-6-11-17)18-12-7-4-8-13-18/h3-8,10-13,19,24H,9,14-16H2,1-2H3/q+2	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26NO3/c1-22(2)15-9-14-19(16-22)25-20(23)21(24,17-10-5-3-6-11-17)18-12-7-4-8-13-18/h3-8,10-13,19,24H,9,14-16H2,1-2H3/q+2/t19-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26NO3/c1-22(2)15-9-14-19(22)16-25-20(23)21(24,17-10-5-3-6-11-17)18-12-7-4-8-13-18/h3-8,10-13,19,24H,9,14-16H2,1-2H3/q+1/t19-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C21H26NO3/c1-4-22(3,5-2)14-15-24-21(23)20-16-10-6-8-12-18(16)25-19-13-9-7-11-17(19)20/h6-13,20H,4-5,14-15H2,1-3H3/q+1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H26O2/c1-3-20-11-9-17-16-8-6-15(22)13-14(16)5-7-18(17)19(20)10-12-21(20,23)4-2/h2,10,12-13,16-19,23H,3,5-9,11H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26O2/c1-3-20-11-9-17-16-8-6-15(22)13-14(16)5-7-18(17)19(20)10-12-21(20,23)4-2/h2,10,12-13,16-19,23H,3,5-9,11H2,1H3/t16-,17-,18+,19+,20-,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26O2/c1-3-20-11-9-17-16-8-6-15(22)13-14(16)5-7-18(17)19(20)10-12-21(20,23)4-2/h2,9,11,13,16-19,23H,3,5-8,10,12H2,1H3/t16-,17-,18+,19+,20-,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26O2/c1-4-21(22)12-10-19-18-7-5-14-13-15(23-3)6-8-16(14)17(18)9-11-20(19,21)2/h1,6,8,13,17-19,22H,5,7,9-12H2,2-3H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H26O2/c1-4-21(22)12-10-19-18-7-5-14-13-15(23-3)6-8-16(14)17(18)9-11-20(19,21)2/h1,6,8,13,17-19,22H,5,7,9-12H2,2-3H3/t17-,18-,19+,20+,21+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26O2/c1-4-21(22)12-10-19-18-7-5-14-13-15(23-3)6-8-16(14)17(18)9-11-20(19,21)2/h1,6,8,13,17-19,22H,5,7,9-12H2,2-3H3/t17-,18+,19+,20-,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26O2/c1-4-21(22)12-10-19-18-7-5-14-13-15(23-3)6-8-16(14)17(18)9-11-20(19,21)2/h1,6,8,13,17-19,22H,5,7,9-12H2,2-3H3/t17-,18+,19+,20?,21?/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26O3/c1-14(8-7-9-15(2)12-21(22)23)10-11-19-16(3)13-20(24-6)18(5)17(19)4/h7-13H,1-6H3,(H,22,23)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H26O3/c1-14(8-7-9-15(2)12-21(22)23)10-11-19-16(3)13-20(24-6)18(5)17(19)4/h7-13H,1-6H3,(H,22,23)/b9-7+,11-10+,14-8+,15-12?	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H26O3/c1-14(8-7-9-15(2)12-21(22)23)10-11-19-16(3)13-20(24-6)18(5)17(19)4/h7-13H,1-6H3,(H,22,23)/b9-7+,11-10+,14-8+,15-12+	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H26O5/c1-19-7-5-13(23)9-12(19)3-4-14-15-6-8-21(26,17(25)11-22)20(15,2)10-16(24)18(14)19/h5,7,9,14-15,18,22,26H,3-4,6,8,10-11H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26O5/c1-19-7-5-13(23)9-12(19)3-4-14-15-6-8-21(26,17(25)11-22)20(15,2)10-16(24)18(14)19/h5,7,9,14-15,18,22,26H,3-4,6,8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,18+,19-,20-,21-/m0/s1	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C21H26O5/c1-19-7-5-13(23)9-12(19)3-4-14-15-6-8-21(26,17(25)11-22)20(15,2)10-16(24)18(14)19/h5,7,9,14-15,18,22,26H,3-4,6,8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,18+,19-,20-,21?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26O5/c1-19-7-5-13(23)9-12(19)3-4-14-15-6-8-21(26,17(25)11-22)20(15,2)10-16(24)18(14)19/h5,7,9,14-15,18,22,26H,3-4,6,8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,18+,19-,20+,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26O5/c1-19-7-5-13(23)9-12(19)3-4-14-15-6-8-21(26,17(25)11-22)20(15,2)10-16(24)18(14)19/h5,7,9,14-15,18,22,26H,3-4,6,8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,18+,19?,20?,21?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H26O5/c1-19-7-5-13(23)9-12(19)3-4-14-15-6-8-21(26,17(25)11-22)20(15,2)10-16(24)18(14)19/h5,7,9,14-15,18,22,26H,3-4,6,8,10-11H2,1-2H3/t14-,15+,18-,19+,20-,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27CIN2O2/c22-20-8-6-19(7-9-20)21(18-4-2-1-3-5-18)24-12-10-23(11-13-24)14-16-26-17-15-25/h1-9,21,25H,10-17H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27CIN2O2/c22-20-8-6-19(7-9-20)21(18-4-2-1-3-5-18)24-12-10-23(11-13-24)14-16-26-17-15-25/h1-9,21,25H,10-17H2/t21-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27CIN2O2/c22-20-8-6-19(7-9-20)21(18-4-2-1-3-5-18)24-12-10-23(11-13-24)14-16-26-17-15-25/h1-9,21,25H,10-17H2/t21-/m1/s1	1	(Zhu et al., 2018)

InChI=1S/C21H27ClO5/c1-19-7-5-13(23)9-12(19)3-4-14-15-6-8-21(26,18(25)27-11-22)20(15,2)10-16(24)17(14)19/h5,7,9,14-17,24,26H,3-4,6,8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,16-,17+,19-,20-,21-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H27FN2O2/c1-26-21-7-3-2-5-19(21)24-15-13-23(14-16-24)12-4-6-20(25)17-8-10-18(22)11-9-17/h2-3,5,7-11,20,25H,4,6,12-16H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27FN2O2/c1-26-21-7-3-2-5-19(21)24-15-13-23(14-16-24)12-4-6-20(25)17-8-10-18(22)11-9-17/h2-3,5,7-11,20,25H,4,6,12-16H2,1H3/t20-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27FN2O2/c1-26-21-7-3-2-5-19(21)24-15-13-23(14-16-24)12-4-6-20(25)17-8-10-18(22)11-9-17/h2-3,5,7-11,20,25H,4,6,12-16H2,1H3/t20-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27FO5/c1-11(23)21(27)16(25)9-15-14-5-4-12-8-13(24)6-7-18(12,2)20(14,22)17(26)10-19(15,21)3/h6-8,14-17,25-27H,4-5,9-10H2,1-3H3/t14-,15-,16?,17-,18?,19?,20?,21?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27FO5/c1-11(23)21(27)16(25)9-15-14-5-4-12-8-13(24)6-7-18(12,2)20(14,22)17(26)10-19(15,21)3/h6-8,14-17,25-27H,4-5,9-10H2,1-3H3/t14-,15-,16+,17-,18-,19-,20-,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27FO5/c1-18-7-5-13(24)9-12(18)3-4-15-14-6-8-20(27,17(26)11-23)19(14,2)10-16(25)21(15,18)22/h5,7,9,14-16,23,25,27H,3-4,6,8,10-11H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27FO5/c1-18-7-5-13(24)9-12(18)3-4-15-14-6-8-20(27,17(26)11-23)19(14,2)10-16(25)21(15,18)22/h5,7,9,14-16,23,25,27H,3-4,6,8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,16-,18-,19-,20-,21-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27FO5/c1-18-7-5-13(24)9-12(18)3-4-15-14-6-8-20(27,17(26)11-23)19(14,2)10-16(25)21(15,18)22/h5,7,9,14-16,23,25,27H,3-4,6,8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,16-,18?,19?,20?,21?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27FO5/c1-18-7-5-13(24)9-12(18)3-4-15-14-6-8-20(27,17(26)11-23)19(14,2)10-16(25)21(15,18)22/h5,7,9,14-16,23,25,27H,3-4,6,8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,16+,18-,19-,20-,21-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27FO5/c1-18-7-5-13(24)9-12(18)3-4-15-14-6-8-20(27,17(26)11-23)19(14,2)10-16(25)21(15,18)22/h5,7,9,14-16,23,25,27H,3-4,6,8,10-11H2,1-2H3/t14-,15+,16+,18-,19-,20-,21+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27FO5/c1-19-5-3-11(24)7-14(19)15(22)8-12-13-4-6-21(27,17(26)10-23)20(13,2)9-16(25)18(12)19/h3,5,7,12-13,15-16,18,23,25,27H,4,6,8-10H2,1-2H3/t12-,13-,15-,16-,18+,19-,20-,21-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H27FO5/c1-19-5-3-11(24)7-14(19)15(22)8-12-13-4-6-21(27,17(26)10-23)20(13,2)9-16(25)18(12)19/h3,5,7,12-13,15-16,18,23,25,27H,4,6,8-10H2,1-2H3/t12-,13-,15-,16-,18+,19?,20?,21?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27FO5/c1-19-5-3-11(24)7-14(19)15(22)8-12-13-4-6-21(27,17(26)10-23)20(13,2)9-16(25)18(12)19/h3,5,7,12-13,15-16,18,23,25,27H,4,6,8-10H2,1-2H3/t12-,13-,15-,16+,18+,19-,20-,21-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27FO5/c1-19-5-3-11(24)7-14(19)15(22)8-12-13-4-6-21(27,17(26)10-23)20(13,2)9-16(25)18(12)19/h3,5,7,12-13,15-16,18,23,25,27H,4,6,8-10H2,1-2H3/t12-,13+,15+,16-,18-,19+,20-,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27FO6/c1-18-6-5-12(24)7-11(18)3-4-13-14-8-15(25)21(28,17(27)10-23)19(14,2)9-16(26)20(13,18)22/h5-7,13-16,23,25-26,28H,3-4,8-10H2,1-2H3/t13-,14-,15-,16-,18-,19-,20+,21-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27FO6/c1-18-6-5-12(24)7-11(18)3-4-13-14-8-15(25)21(28,17(27)10-23)19(14,2)9-16(26)20(13,18)22/h5-7,13-16,23,25-26,28H,3-4,8-10H2,1-2H3/t13-,14-,15-,16-,18?,19?,20?,21?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27FO6/c1-18-6-5-12(24)7-11(18)3-4-13-14-8-15(25)21(28,17(27)10-23)19(14,2)9-16(26)20(13,18)22/h5-7,13-16,23,25-26,28H,3-4,8-10H2,1-2H3/t13-,14-,15-,16+,18-,19-,20-,21-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27FO6/c1-18-6-5-12(24)7-11(18)3-4-13-14-8-15(25)21(28,17(27)10-23)19(14,2)9-16(26)20(13,18)22/h5-7,13-16,23,25-26,28H,3-	0	(Wu et al., 2018)

4,8-10H2,1-2H3/t13-,14-,15+,16-,18-,19-,20-,21-/m0/s1	
InChI=1S/C21H27FO6/c1-18-6-5-12(24)7-11(18)3-4-13-14-8-15(25)21(28,17(27)10-23)19(14,2)9-16(26)20(13,18)22/h5-7,13-16,23,25-26,28H,3-4,8-10H2,1-2H3/t13-,14+,15-,16-,18+,19+,20-,21+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27N/c1-16(15-22(2)3)14-21-19-10-6-4-8-17(19)12-13-18-9-5-7-11-20(18)21/h4-11,16,21H,12-15H2,1-3H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H27N/c1-16(15-22(2)3)14-21-19-10-6-4-8-17(19)12-13-18-9-5-7-11-20(18)21/h4-11,16,21H,12-15H2,1-3H3/t16-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H27N/c1-20(2,3)22-16-14-21(15-17-22,18-10-6-4-7-11-18)19-12-8-5-9-13-19/h4-13H,14-17H2,1-3H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27N3/c1-16-14-23(15-17(2)22-16)12-7-13-24-20-10-5-3-8-18(20)19-9-4-6-11-21(19)24/h3-6,8-11,16-17,22H,7,12-15H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27N3/c1-16-14-23(15-17(2)22-16)12-7-13-24-20-10-5-3-8-18(20)19-9-4-6-11-21(19)24/h3-6,8-11,16-17,22H,7,12-15H2,1-2H3/t16-,17-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H27N3/c1-16-14-23(15-17(2)22-16)12-7-13-24-20-10-5-3-8-18(20)19-9-4-6-11-21(19)24/h3-6,8-11,16-17,22H,7,12-15H2,1-2H3/t16-,17+	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27N3O2/c1-23(21(26)13-17-9-5-6-10-19(17)22)20(16-7-3-2-4-8-16)15-24-12-11-18(25)14-24/h2-10,18,20,25H,11-15,22H2,1H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27N3O2/c1-23(21(26)13-17-9-5-6-10-19(17)22)20(16-7-3-2-4-8-16)15-24-12-11-18(25)14-24/h2-10,18,20,25H,11-15,22H2,1H3/t18-,20-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27N3O2/c1-23(21(26)13-17-9-5-6-10-19(17)22)20(16-7-3-2-4-8-16)15-24-12-11-18(25)14-24/h2-10,18,20,25H,11-15,22H2,1H3/t18-,20+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27N3O2/c1-23(21(26)13-17-9-5-6-10-19(17)22)20(16-7-3-2-4-8-16)15-24-12-11-18(25)14-24/h2-10,18,20,25H,11-15,22H2,1H3/t18-,20+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27N3O2/c1-4-15(12-25)22-21(26)14-8-17-16-6-5-7-18-20(16)13(10-23(18)2)9-19(17)24(3)11-14/h5-8,10,14-15,19,25H,4,9,11-12H2,1-3H3,(H,22,26)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27N3O2/c1-4-15(12-25)22-21(26)14-8-17-16-6-5-7-18-20(16)13(10-23(18)2)9-19(17)24(3)11-14/h5-8,10,14-15,19,25H,4,9,11-12H2,1-3H3,(H,22,26)/t14-,15+,19-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27N3O5S/c1-20(2)15(19(27)29-11-28-5)23-17(26)14(18(23)30-20)24-16(25)13(22-21(24,3)4)12-9-7-6-8-10-12/h6-10,13-15,18,22H,11H2,1-5H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H27N3O5S/c1-20(2)15(19(27)29-11-28-5)23-17(26)14(18(23)30-20)24-16(25)13(22-21(24,3)4)12-9-7-6-8-10-12/h6-10,13-15,18,22H,11H2,1-5H3/t13-,14+,15+,18+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27N3O5S/c1-20(2)15(19(27)29-11-28-5)23-17(26)14(18(23)30-20)24-16(25)13(22-21(24,3)4)12-9-7-6-8-10-12/h6-10,13-15,18,22H,11H2,1-5H3/t13?,14-,15+,18-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27N3O5S/c1-20(2)15(19(27)29-11-28-5)23-17(26)14(18(23)30-20)24-16(25)13(22-21(24,3)4)12-9-7-6-8-10-12/h6-10,13-15,18,22H,11H2,1-5H3/t13?,14?,15-,18-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27N3O6S/c1-20(2)15(19(28)30-10-29-5)23-17(27)14(18(23)31-20)24-16(26)13(22-21(24,3)4)11-6-8-12(25)9-7-11/h6-9,13-15,18,22,25H,10H2,1-5H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H27N3O6S/c1-20(2)15(19(28)30-10-29-5)23-17(27)14(18(23)31-20)24-16(26)13(22-21(24,3)4)11-6-8-12(25)9-7-11/h6-9,13-15,18,22,25H,10H2,1-5H3/t13-,14+,15+,18+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C21H27N3O6S/c1-20(2)15(19(28)30-10-29-5)23-17(27)14(18(23)31-20)24-16(26)13(22-21(24,3)4)11-6-8-12(25)9-7-11/h6-9,13-15,18,22,25H,10H2,1-5H3/t13-,14+,15+,18+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27N3O6S/c1-20(2)15(19(28)30-10-29-5)23-17(27)14(18(23)31-20)24-16(26)13(22-21(24,3)4)11-6-8-12(25)9-7-11/h6-9,13-15,18,22,25H,10H2,1-5H3/t13?,14-,15-,18-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27N3O6S/c1-20(2)15(19(28)30-10-29-5)23-17(27)14(18(23)31-20)24-16(26)13(22-21(24,3)4)11-6-8-12(25)9-7-11/h6-9,13-15,18,22,25H,10H2,1-5H3/t13?,14-,15+,18-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H27N3O7S/c1-5-29-20(28)31-11(2)30-19(27)15-21(3,4)32-18-14(17(26)24(15)18)23-16(25)13(22)12-9-7-6-8-10-12/h6-11,13-15,18H,5,22H2,1-4H3,(H,23,25)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H27N3OS/c1-24(2)15-19-8-9-20(25-19)16-26-11-10-22-21-13-18(14-23-21)12-17-6-4-3-5-7-17/h3-9,13-14,22-23H,10-12,15-16H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27N3OS/c1-24(2)15-19-8-9-20(25-19)16-26-13-12-23-21-18(10-11-22-21)14-17-6-4-3-5-7-17/h3-11,22-23H,12-16H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27N5O2S/c1-14-4-5-15(11-24-14)10-16-12-25-20(26-19(16)27)23-8-9-29-13-17-6-7-18(28-17)21(2,3)22/h4-7,11-12H,8-10,13,22H2,1-3H3,(H2,23,25,26,27)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27N5O2S/c1-15-4-5-16(11-23-15)10-17-12-24-21(25-20(17)27)22-8-9-29-14-19-7-6-18(28-19)13-26(2)3/h4-7,11-12H,8-10,13-14H2,1-3H3,(H2,22,24,25,27)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27N5O4S/c1-15-13-24-19(14-23-15)20(27)22-12-11-16-7-9-18(10-8-16)31(29,30)26-21(28)25-17-5-3-2-4-6-17/h7-10,13-14,17H,2-6,11-12H2,1H3,(H,22,27)(H2,25,26,28)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27N5O7S/c1-21(2)15(20(32)33)26-18(31)14(19(26)34-21)25-17(30)13(9-4-6-10(27)7-5-9)24-16(29)11(22)8-12(28)23-3/h4-7,11,13-15,19,27H,8,22H2,1-3H3,(H,23,28)(H,24,29)(H,25,30)(H,32,33)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27N5O7S/c1-21(2)15(20(32)33)26-18(31)14(19(26)34-21)25-17(30)13(9-4-6-10(27)7-5-9)24-16(29)11(22)8-12(28)23-3/h4-7,11,13-15,19,27H,8,22H2,1-3H3,(H,23,28)(H,24,29)(H,25,30)(H,32,33)/t11-,13-,14-,15-,19-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27N5O7S/c1-21(2)15(20(32)33)26-18(31)14(19(26)34-21)25-17(30)13(9-4-6-10(27)7-5-9)24-16(29)11(22)8-12(28)23-3/h4-7,11,13-15,19,27H,8,22H2,1-3H3,(H,23,28)(H,24,29)(H,25,30)(H,32,33)/t11-,13-,14-,15+,19-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H27N5O7S/c1-21(2)15(20(32)33)26-18(31)14(19(26)34-21)25-17(30)13(9-4-6-10(27)7-5-9)24-16(29)11(22)8-12(28)23-3/h4-7,11,13-15,19,27H,8,22H2,1-3H3,(H,23,28)(H,24,29)(H,25,30)(H,32,33)/t11-,13-,14?,15-,19-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27N5O7S/c1-21(2)15(20(32)33)26-18(31)14(19(26)34-21)25-17(30)13(9-4-6-10(27)7-5-9)24-16(29)11(22)8-12(28)23-3/h4-7,11,13-15,19,27H,8,22H2,1-3H3,(H,23,28)(H,24,29)(H,25,30)(H,32,33)/t11-,13+,14-,15+,19-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27N5O7S/c1-21(2)15(20(32)33)26-18(31)14(19(26)34-21)25-17(30)13(9-4-6-10(27)7-5-9)24-16(29)11(22)8-12(28)23-3/h4-7,11,13-15,19,27H,8,22H2,1-3H3,(H,23,28)(H,24,29)(H,25,30)(H,32,33)/t11-,13+,14+,15-,19+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H27N5O9S2/c1-9(2)33-21(30)35-10(3)34-19(29)15-11(6-31-4)7-36-18-14(17(28)26(15)18)24-16(27)13(25-32-5)12-8-37-20(22)23-12/h8-10,14,18H,6-7H2,1-5H3,(H2,22,23)(H,24,27)/t10-,14-,18-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27NO/c1-5-20(23)21(16-17(2)22(3)4,18-12-8-6-9-13-18)19-14-10-7-11-15-19/h6-15,17H,5,16H2,1-4H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H27NO/c1-5-20(23)21(16-17(2)22(3)4,18-12-8-6-9-13-18)19-14-10-7-11-15-19/h6-15,17H,5,16H2,1-4H3/t17-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H27NO/c1-5-20(23)21(17(2)16-22(3)4,18-12-8-6-9-13-18)19-14-10-7-11-15-19/h6-15,17H,5,16H2,1-4H3	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C21H27NO/c1-5-20(23)21(17(2)16-22(3)4,18-12-8-6-9-13-18)19-14-10-7-11-15-19/h6-15,17H,5,16H2,1-4H3/t17-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H27NO/c1-5-20(23)21(17(2)16-22(3)4,18-12-8-6-9-13-18)19-14-10-7-11-15-19/h6-15,17H,5,16H2,1-4H3/t17-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H27NO2/c1-16(21(24)19-7-9-20(23)10-8-19)22-13-11-18(12-14-22)15-17-5-3-2-4-6-17/h2-10,16,18,21,23-24H,11-15H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27NO2S/c1-3-24-20-13-11-18(12-14-20)10-7-15-22-21(23)17(2)25-16-19-8-5-4-6-9-19/h4-6,8-9,11-14,17H,3,7,10,15-16H2,1-2H3,(H,22,23)/t17-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H27NO2S/c1-4-24-19-11-9-18(10-12-19)6-5-15-22-21(23)17(3)25-20-13-7-16(2)8-14-20/h7-14,17H,4-6,15H2,1-3H3,(H,22,23)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H27NO2S/c1-4-24-19-11-9-18(10-12-19)6-5-15-22-21(23)17(3)25-20-13-7-16(2)8-14-20/h7-14,17H,4-6,15H2,1-3H3,(H,22,23)/t17-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H27NO2S/c1-5-20(18-9-6-15(2)16(3)12-18)22-21(23)14-25-13-17-7-10-19(24-4)11-8-17/h6-12,20H,5,13-14H2,1-4H3,(H,22,23)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H27NO2S/c1-5-20(18-9-6-15(2)16(3)12-18)22-21(23)14-25-13-17-7-10-19(24-4)11-8-17/h6-12,20H,5,13-14H2,1-4H3,(H,22,23)/t20-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27NO3/c1-2-14-22-15-18(23)16-25-21-11-7-6-10-19(21)20(24)13-12-17-8-4-3-5-9-17/h3-11,18,22-23H,2,12-16H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H27NO3/c1-2-14-22-15-18(23)16-25-21-11-7-6-10-19(21)20(24)13-12-17-8-4-3-5-9-17/h3-11,18,22-23H,2,12-16H2,1H3/t18-/m0/s1	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C21H27NO3S/c1-14(2)25-19-11-8-17(12-20(19)24-5)13-22-21(23)16(4)26-18-9-6-15(3)7-10-18/h6-12,14,16H,13H2,1-5H3,(H,22,23)/t16-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H27NO3S/c1-5-18(17-11-12-19(24-3)20(13-17)25-4)22-21(23)15(2)26-14-16-9-7-6-8-10-16/h6-13,15,18H,5,14H2,1-4H3,(H,22,23)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27NO3S/c1-5-18(17-11-12-19(24-3)20(13-17)25-4)22-21(23)15(2)26-14-16-9-7-6-8-10-16/h6-13,15,18H,5,14H2,1-4H3,(H,22,23)/t15-,18+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27NO4/c23-14-5-4-13-10-16-21(25)7-6-15(24)19-20(21,17(13)18(14)26-19)8-9-22(16)11-12-2-1-3-12/h4-5,12,15-16,19,23-25H,1-3,6-11H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27NO4/c23-14-5-4-13-10-16-21(25)7-6-15(24)19-20(21,17(13)18(14)26-19)8-9-22(16)11-12-2-1-3-12/h4-5,12,15-16,19,23-25H,1-3,6-11H2/t15-,16-,19+,20+,21+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27NO4/c23-14-5-4-13-10-16-21(25)7-6-15(24)19-20(21,17(13)18(14)26-19)8-9-22(16)11-12-2-1-3-12/h4-5,12,15-16,19,23-25H,1-3,6-11H2/t15-,16?,19+,20?,21?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27NO4/c23-14-5-4-13-10-16-21(25)7-6-15(24)19-20(21,17(13)18(14)26-19)8-9-22(16)11-12-2-1-3-12/h4-5,12,15-16,19,23-25H,1-3,6-11H2/t15-,16+,19-,20-,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27NO4/c23-14-5-4-13-10-16-21(25)7-6-15(24)19-20(21,17(13)18(14)26-19)8-9-22(16)11-12-2-1-3-12/h4-5,12,15-16,19,23-25H,1-3,6-11H2/t15-,16+,19+,20-,21?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H27NO4/c23-14-5-4-13-10-16-21(25)7-6-15(24)19-20(21,17(13)18(14)26-19)8-9-22(16)11-12-2-1-3-12/h4-5,12,15-16,19,23-25H,1-3,6-11H2/t15-,16+,19+,20+,21-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C21H27NO4/c23-14-5-4-13-10-16-21(25)7-6-15(24)19-20(21,17(13)18(14)26-19)8-9-22(16)11-12-2-1-3-12/h4-5,12,15-16,19,23-25H,1-3,6-11H2/t15-,16+,19+,20+,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28BrN5O/c1-14-9-18(22)13-25-19(14)5-3-4-8-23-21-26-12-17(20(28)27-21)10-16-7-6-15(2)24-11-16/h6-7,9,11,13,17,21,23,26H,3-5,8,10,12H2,1-2H3,(H,27,28)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28CIN3O4S/c1-13-5-4-6-17(13)23-21(27)24-18-8-7-16(22)20(19(18)26)30(28,29)15-11-14(12-15)25-9-2-3-10-25/h5,7-8,14-15,17,26H,2-4,6,9-12H2,1H3,(H2,23,24,27)	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C21H28F2N4O2/c1-14-24-27(21(28)25(14)2)12-17(23)11-26-18-6-7-19(26)10-20(9-18)29-13-15-4-3-5-16(22)8-15/h3-5,8,17-20H,6-7,9-13H2,1-2H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C21H28N2O5/c1-23(2)10-11-28-17-8-6-15(7-9-17)14-22-21(24)16-12-18(25-3)20(27-5)19(13-16)26-4/h6-9,12-13H,10-11,14H2,1-5H3,(H,22,24)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H28N2OS/c1-22(18-8-2-3-9-19(18)23-12-4-5-13-23)21(24)15-16-7-6-10-20-17(16)11-14-25-20/h6-7,10-11,14,18-19H,2-5,8-9,12-13,15H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28N2OS/c1-22(18-8-2-3-9-19(18)23-12-4-5-13-23)21(24)15-16-7-6-10-20-17(16)11-14-25-20/h6-7,10-11,14,18-19H,2-5,8-9,12-13,15H2,1H3/t18-,19-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H28O2/c1-13(22)17-6-7-18-16-5-4-14-12-15(23)8-10-20(14,2)19(16)9-11-21(17,18)3/h4-5,12,16-19H,6-11H2,1-3H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28O2/c1-3-20-11-9-17-16-8-6-15(22)13-14(16)5-7-18(17)19(20)10-12-21(20,23)4-2/h2,13,16-19,23H,3,5-12H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H28O2/c1-3-20-11-9-17-16-8-6-15(22)13-14(16)5-7-18(17)19(20)10-12-21(20,23)4-2/h2,13,16-19,23H,3,5-12H2,1H3/t16-,17-,18+,19+,20-,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28O2/c1-3-20-11-9-17-16-8-6-15(22)13-14(16)5-7-18(17)19(20)10-12-21(20,23)4-2/h2,13,16-19,23H,3,5-12H2,1H3/t16-,17+,18+,19-,20-,21-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28O2/c1-4-21(23)10-8-18-19-13(2)11-14-12-15(22)5-6-16(14)17(19)7-9-20(18,21)3/h1,13,17-19,23H,5-12H2,2-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28O2/c1-4-21(23)10-8-18-19-13(2)11-14-12-15(22)5-6-16(14)17(19)7-9-20(18,21)3/h1,13,17-19,23H,5-12H2,2-3H3/t13-,17-,18+,19-,20-,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28O2/c1-4-21(23)10-8-18-19-13(2)11-14-12-15(22)5-6-16(14)17(19)7-9-20(18,21)3/h1,13,17-19,23H,5-12H2,2-3H3/t13-,17-,18+,19-,20+,21-/m1/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C21H28O2/c1-4-21(23)10-8-18-19-13(2)11-14-12-15(22)5-6-16(14)17(19)7-9-20(18,21)3/h1,13,17-19,23H,5-12H2,2-3H3/t13-,17-,18+,19-,20+,21+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H28O2/c1-4-21(23)10-8-18-19-13(2)11-14-12-15(22)5-6-16(14)17(19)7-9-20(18,21)3/h1,13,17-19,23H,5-12H2,2-3H3/t13-,17+,18-,19-,20?,21?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28O2/c1-4-21(23)10-8-18-19-13(2)11-14-12-15(22)5-6-16(14)17(19)7-9-20(18,21)3/h1,13,17-19,23H,5-12H2,2-3H3/t13-,17+,18-,19+,20-,21+/m1/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C21H28O2/c1-4-21(23)10-8-18-19-13(2)11-14-12-15(22)5-6-16(14)17(19)7-9-20(18,21)3/h1,13,17-19,23H,5-12H2,2-3H3/t13-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28O4/c1-12(22)21(25)9-7-16-15-5-4-13-10-14(23)6-8-19(13,2)18(15)17(24)11-20(16,21)3/h6,8,10,15-18,24-25H,4-5,7,9,11H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C21H28O4/c1-12(22)21(25)9-7-16-15-5-4-13-10-14(23)6-8-19(13,2)18(15)17(24)11-20(16,21)3/h6,8,10,15-18,24-25H,4-5,7,9,11H2,1-3H3/t15-,16-,17-,18+,19-,20+,21+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H28O4/c1-12(22)21(25)9-7-16-15-5-4-13-10-14(23)6-8-19(13,2)18(15)17(24)11-20(16,21)3/h6,8,10,15-18,24-25H,4-5,7,9,11H2,1-3H3/t15-,16-,17-,18+,19?,20?,21?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28O4/c1-12(22)21(25)9-7-16-15-5-4-13-10-14(23)6-8-19(13,2)18(15)17(24)11-20(16,21)3/h6,8,10,15-18,24-25H,4-5,7,9,11H2,1-3H3/t15-,16+,17-,18-,19-,20-,21+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28O4/c1-12(22)21(25)9-7-16-15-5-4-13-10-14(23)6-8-19(13,2)18(15)17(24)11-20(16,21)3/h6,8,10,15-18,24-25H,4-5,7,9,11H2,1-3H3/t15?,16?,17-,18?,19-,20-,21-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H28O5/c1-19-7-5-13(23)9-12(19)3-4-14-15-6-8-21(26,17(25)11-22)20(15,2)10-16(24)18(14)19/h5,7,9,14-16,18,22,24,26H,3-4,6,8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,16-,18+,19-,20-,21-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28O5/c1-19-7-5-13(23)9-12(19)3-4-14-15-6-8-21(26,17(25)11-22)20(15,2)10-16(24)18(14)19/h5,7,9,14-16,18,22,24,26H,3-4,6,8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,16-,18+,19-,20-,21-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H28O5/c1-19-7-5-13(23)9-12(19)3-4-14-15-6-8-21(26,17(25)11-22)20(15,2)10-16(24)18(14)19/h5,7,9,14-16,18,22,24,26H,3-4,6,8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,16-,18+,19-,20+,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28O5/c1-19-7-5-13(23)9-12(19)3-4-14-15-6-8-21(26,17(25)11-22)20(15,2)10-16(24)18(14)19/h5,7,9,14-16,18,22,24,26H,3-4,6,8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,16-,18+,19?,20?,21?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28O5/c1-19-7-5-13(23)9-12(19)3-4-14-15-6-8-21(26,17(25)11-22)20(15,2)10-16(24)18(14)19/h5,7,9,14-16,18,22,24,26H,3-4,6,8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,16?,18+,19-,20-,21-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28O5/c1-19-7-5-13(23)9-12(19)3-4-14-15-6-8-21(26,17(25)11-22)20(15,2)10-16(24)18(14)19/h5,7,9,14-16,18,22,24,26H,3-4,6,8,10-11H2,1-2H3/t14-,15+,16-,18-,19+,20-,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28O5/c1-19-7-5-13(23)9-12(19)3-4-14-15-6-8-21(26,17(25)11-22)20(15,2)10-16(24)18(14)19/h9,14-15,18,22,26H,3-8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,18+,19-,20-,21-/m0/s1	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C21H28O5/c1-19-7-5-13(23)9-12(19)3-4-14-15-6-8-21(26,17(25)11-22)20(15,2)10-16(24)18(14)19/h9,14-15,18,22,26H,3-8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,18+,19?,20?,21?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28O5/c1-19-7-5-13(23)9-12(19)3-4-14-15-6-8-21(26,17(25)11-22)20(15,2)10-16(24)18(14)19/h9,14-15,18,22,26H,3-8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,18+,19+,20+,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28O5/c1-19-7-5-13(23)9-12(19)3-4-14-15-6-8-21(26,17(25)11-22)20(15,2)10-16(24)18(14)19/h9,14-15,18,22,26H,3-8,10-11H2,1-2H3/t14-,15+,18-,19+,20-,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28O5/c1-20-7-6-12(23)8-11(20)2-3-13-14-4-5-15(16(24)10-22)21(14)9-17(18(13)20)26-19(21)25/h8,13-15,17-19,22,25H,2-7,9-10H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28O5/c1-20-7-6-12(23)8-11(20)2-3-13-14-4-5-15(16(24)10-22)21(14)9-17(18(13)20)26-19(21)25/h8,13-15,17-19,22,25H,2-7,9-10H2,1H3/t13-,14-,15-,17+,18+,19+,20-,21-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28O5/c1-20-7-6-12(23)8-11(20)2-3-13-14-4-5-15(16(24)10-22)21(14)9-17(18(13)20)26-19(21)25/h8,13-15,17-19,22,25H,2-7,9-10H2,1H3/t13-,14-,15?,17-,18+,19-,20?,21?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28O5/c1-20-7-6-12(23)8-11(20)2-3-13-14-4-5-15(16(24)10-22)21(14)9-17(18(13)20)26-19(21)25/h8,13-15,17-19,22,25H,2-7,9-10H2,1H3/t13-,14+,15-,17+,18-,19-,20+,21+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28O5/c1-20-7-6-13(24)8-12(20)2-3-14-15-4-5-16(18(26)10-22)21(15,11-23)9-17(25)19(14)20/h8,11,14-17,19,22,25H,2-7,9-	0	(Meng et al., 2021)

10H2,1H3

InChI=1S/C21H28O5/c1-20-7-6-13(24)8-12(20)2-3-14-15-4-5-16(18(26)10-22)21(15,11-23)9-17(25)19(14)20/h8,11,14-17,19,22,25H,2-7,9-10H2,1H3/t14-,15-,16+,17-,19+,20-,21+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28O5/c1-20-7-6-13(24)8-12(20)2-3-14-15-4-5-16(18(26)10-22)21(15,11-23)9-17(25)19(14)20/h8,11,14-17,19,22,25H,2-7,9-10H2,1H3/t14-,15-,16+,17?,19+,20?,21?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28O5/c1-20-7-6-13(24)8-12(20)2-3-14-15-4-5-16(18(26)10-22)21(15,11-23)9-17(25)19(14)20/h8,11,14-17,19,22,25H,2-7,9-10H2,1H3/t14-,15?,16+,17-,19?,20-,21?/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H28O5/c1-20-7-6-13(24)8-12(20)2-3-14-15-4-5-16(18(26)10-22)21(15,11-23)9-17(25)19(14)20/h8,11,14-17,19,22,25H,2-7,9-10H2,1H3/t14-,15+,16+,17-,19+,20-,21-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28O6/c1-19-7-6-14(24)18(19)13(23)4-3-11-12-5-8-21(27,16(26)10-22)20(12,2)9-15(25)17(11)19/h6-7,11-12,15,17-18,22,25,27H,3-5,8-10H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28O6/c1-19-7-6-14(24)18(19)13(23)4-3-11-12-5-8-21(27,16(26)10-22)20(12,2)9-15(25)17(11)19/h6-7,11-12,15,17-18,22,25,27H,3-5,8-10H2,1-2H3/t11-,12-,15-,17+,18-,19?,20?,21?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28O6/c1-19-7-6-14(24)18(19)13(23)4-3-11-12-5-8-21(27,16(26)10-22)20(12,2)9-15(25)17(11)19/h6-7,11-12,15,17-18,22,25,27H,3-5,8-10H2,1-2H3/t11-,12-,15-,17+,18?,19+,20-,21-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H28O6/c1-19-7-6-14(24)18(19)13(23)4-3-11-12-5-8-21(27,16(26)10-22)20(12,2)9-15(25)17(11)19/h6-7,11-12,15,17-18,22,25,27H,3-5,8-10H2,1-2H3/t11-,12+,15-,17-,18+,19-,20-,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28O6/c1-19-7-6-14(24)18(19)13(23)4-3-11-12-5-8-21(27,16(26)10-22)20(12,2)9-15(25)17(11)19/h6-7,11-12,15,17-18,22,25,27H,3-5,8-10H2,1-2H3/t11-,12+,15+,17+,18-,19+,20+,21+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28O6/c1-19-8-7-14(23)17(19)13(22)5-4-11-12-6-9-21(26,18(25)27-3)20(12,2)10-15(24)16(11)19/h7-8,11-12,15-17,24,26H,4-6,9-10H2,1-3H3/t11-,12-,15-,16+,17-,19?,20?,21?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H28O6/c1-19-8-7-14(23)17(19)13(22)5-4-11-12-6-9-21(26,18(25)27-3)20(12,2)10-15(24)16(11)19/h7-8,11-12,15-17,24,26H,4-6,9-10H2,1-3H3/t11?,12-,15?,16+,17?,19?,20?,21-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H29Cl2N3O3/c1-2-11-29-21(28)25-9-10-26(17(15-25)14-24-7-3-4-8-24)20(27)13-16-5-6-18(22)19(23)12-16/h5-6,12,17H,2-4,7-11,13-15H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H29Cl2N3O3/c1-2-11-29-21(28)25-9-10-26(17(15-25)14-24-7-3-4-8-24)20(27)13-16-5-6-18(22)19(23)12-16/h5-6,12,17H,2-4,7-11,13-15H2,1H3/t17-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H29FN2O2/c1-2-21(10-4-3-5-11-21)26-17-20(25)16-23-12-14-24(15-13-23)19-8-6-18(22)7-9-19/h1,6-9,20,25H,3-5,10-17H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H29FN2O2/c1-2-21(10-4-3-5-11-21)26-17-20(25)16-23-12-14-24(15-13-23)19-8-6-18(22)7-9-19/h1,6-9,20,25H,3-5,10-17H2/t20-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H29FN2O2/c1-2-21(10-4-3-5-11-21)26-17-20(25)16-23-12-14-24(15-13-23)19-8-6-18(22)7-9-19/h1,6-9,20,25H,3-5,10-17H2/t20-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H29FN2O3/c22-18-10-8-17(9-11-18)20(25)7-4-12-23-13-15-24(16-14-23)21(26)27-19-5-2-1-3-6-19/h8-11,19H,1-7,12-16H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H29FO5/c1-18-7-5-13(24)9-12(18)3-4-15-14-6-8-20(27,17(26)11-23)19(14,2)10-16(25)21(15,18)22/h9,14-16,23,25,27H,3-8,10-11H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H29FO5/c1-18-7-5-13(24)9-12(18)3-4-15-14-6-8-20(27,17(26)11-23)19(14,2)10-16(25)21(15,18)22/h9,14-16,23,25,27H,3-8,10-	1	(Mazumdar et al., 2023)

11H2,1-2H3/t14-,15-,16-,18-,19-,20-,21-/m0/s1	2023)
InChI=1S/C21H29FO5/c1-18-7-5-13(24)9-12(18)3-4-15-14-6-8-20(27,17(26)11-23)19(14,2)10-16(25)21(15,18)22/h9,14-16,23,25,27H,3-8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,16-,18?,19?,20?,21?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H29FO5/c1-18-7-5-13(24)9-12(18)3-4-15-14-6-8-20(27,17(26)11-23)19(14,2)10-16(25)21(15,18)22/h9,14-16,23,25,27H,3-8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,16+,18-,19-,20-,21-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H29FO5/c1-18-7-5-13(24)9-12(18)3-4-15-14-6-8-20(27,17(26)11-23)19(14,2)10-16(25)21(15,18)22/h9,14-16,23,25,27H,3-8,10-11H2,1-2H3/t14-,15+,16+,18-,19-,20-,21+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H29N3O/c1-16(2)24(17(3)4)14-12-21(20(22)25,18-9-6-5-7-10-18)19-11-8-13-23-15-19/h5-11,13,15-17H,12,14H2,1-4H3,(H2,22,25)/t21-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H29N3O/c1-16(2)24(17(3)4)15-13-21(20(22)25,18-10-6-5-7-11-18)19-12-8-9-14-23-19/h5-12,14,16-17H,13,15H2,1-4H3,(H2,22,25)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H29N3O4/c1-14(2)18-12-17(28-23-18)13-22-21(25)15-5-6-19(26-4)20(11-15)27-16-7-9-24(3)10-8-16/h5-6,11-12,14,16H,7-10,13H2,1-4H3,(H,22,25)	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C21H29N5O2/c27-19-17-15-4-5-16(14-15)18(17)20(28)26(19)9-2-1-8-24-10-12-25(13-11-24)21-22-6-3-7-23-21/h3,6-7,15-18H,1-2,4-5,8-14H2	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H29N5O2/c27-19-17-15-4-5-16(14-15)18(17)20(28)26(19)9-2-1-8-24-10-12-25(13-11-24)21-22-6-3-7-23-21/h3,6-7,15-18H,1-2,4-5,8-14H2/t15-,16-,17+,18+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H29N5O2/c27-19-17-15-4-5-16(14-15)18(17)20(28)26(19)9-2-1-8-24-10-12-25(13-11-24)21-22-6-3-7-23-21/h3,6-7,15-18H,1-2,4-5,8-14H2/t15-,16+,17-,18+	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H29N5O2/c27-19-17-15-4-5-16(14-15)18(17)20(28)26(19)9-2-1-8-24-10-12-25(13-11-24)21-22-6-3-7-23-21/h3,6-7,15-18H,1-2,4-5,8-14H2/t15-,16+,17+,18-	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H29N5O2/c27-19-17-15-4-5-16(14-15)18(17)20(28)26(19)9-2-1-8-24-10-12-25(13-11-24)21-22-6-3-7-23-21/h3,6-7,15-18H,1-2,4-5,8-14H2/t15?,16?,17-,18-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H29N5OS/c1-16-4-5-17(11-23-16)10-18-12-24-21(25-13-18)22-8-9-28-15-20-7-6-19(27-20)14-26(2)3/h4-7,11-12H,8-10,13-15H2,1-3H3,(H2,22,24,25)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H29NO/c1-21(2,3)19-14-10-9-13-18(19)20(23-16-15-22(4)5)17-11-7-6-8-12-17/h6-14,20H,15-16H2,1-5H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H29NO/c1-21(2,3)19-14-10-9-13-18(19)20(23-16-15-22(4)5)17-11-7-6-8-12-17/h6-14,20H,15-16H2,1-5H3/t20-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H29NO/c1-21(2,3)19-14-10-9-13-18(19)20(23-16-15-22(4)5)17-11-7-6-8-12-17/h6-14,20H,15-16H2,1-5H3/t20-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H29NO/c1-5-20(23)21(16-17(2)22(3)4,18-12-8-6-9-13-18)19-14-10-7-11-15-19/h6-15,17,20,23H,5,16H2,1-4H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H29NO/c1-5-20(23)21(16-17(2)22(3)4,18-12-8-6-9-13-18)19-14-10-7-11-15-19/h6-15,17,20,23H,5,16H2,1-4H3/t17-,20-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H29NO/c1-5-20(23)21(16-17(2)22(3)4,18-12-8-6-9-13-18)19-14-10-7-11-15-19/h6-15,17,20,23H,5,16H2,1-4H3/t17-,20-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H29NO/c1-5-20(23)21(16-17(2)22(3)4,18-12-8-6-9-13-18)19-14-10-7-11-15-19/h6-15,17,20,23H,5,16H2,1-4H3/t17-,20+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H29NO/c1-5-22(16(2)3)14-13-19(18-9-7-6-8-10-18)20-15-17(4)11-12-21(20)23/h6-12,15-16,19,23H,5,13-14H2,1-4H3	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C21H29NO/c23-21(19-7-3-1-4-8-19,11-14-22-12-5-2-6-13-22)20-16-17-9-10-18(20)15-17/h1,3-4,7-10,17-18,20,23H,2,5-6,11-16H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H29NO/c23-21(19-7-3-1-4-8-19,11-14-22-12-5-2-6-13-22)20-16-17-9-10-18(20)15-17/h1,3-4,7-10,17-18,20,23H,2,5-6,11-16H2/p+1/t17-,18+,20-,21+/m1/s1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C21H29NO/c23-21(19-7-3-1-4-8-19,11-14-22-12-5-2-6-13-22)20-16-17-9-10-18(20)15-17/h1,3-4,7-10,17-18,20,23H,2,5-6,11-16H2/t17-,18-,20+,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H29NO/c23-21(19-7-3-1-4-8-19,11-14-22-12-5-2-6-13-22)20-16-17-9-10-18(20)15-17/h1,3-4,7-10,17-18,20,23H,2,5-6,11-16H2/t17-,18+,20+,21-/m1/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C21H29NO2/c1-3-20-11-9-17-16-8-6-15(22-24)13-14(16)5-7-18(17)19(20)10-12-21(20,23)4-2/h2,13,16-19,23-24H,3,5-12H2,1H3/b22-15-	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H29NO2/c23-17-7-6-16-12-19-21(24)9-2-1-8-20(21,18(16)13-17)10-11-22(19)14-15-4-3-5-15/h6-7,13,15,19,23-24H,1-5,8-12,14H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H29NO2/c23-17-7-6-16-12-19-21(24)9-2-1-8-20(21,18(16)13-17)10-11-22(19)14-15-4-3-5-15/h6-7,13,15,19,23-24H,1-5,8-12,14H2/t19-,20+,21-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H29NO2/c23-17-7-6-16-12-19-21(24)9-2-1-8-20(21,18(16)13-17)10-11-22(19)14-15-4-3-5-15/h6-7,13,15,19,23-24H,1-5,8-12,14H2/t19-,20+,21-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H29NS2/c1-4-5-16-23-20-13-11-19(12-14-20)21(24-17-15-22(2)3)18-9-7-6-8-10-18/h6-14,21H,4-5,15-17H2,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H29NS2/c1-4-5-16-23-20-13-11-19(12-14-20)21(24-17-15-22(2)3)18-9-7-6-8-10-18/h6-14,21H,4-5,15-17H2,1-3H3/t21-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H29O4S/c1-19-7-5-13(22)9-12(19)3-4-14-15-6-8-21(25,17(24)11-26)20(15,2)10-16(23)18(14)19/h9,14-16,18,23,25H,3-8,10-11H2,1-2H3/t14-,15+,16-,18-,19+,20-,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30FN3O2/c22-18-8-6-17(7-9-18)19(26)5-4-12-24-15-10-21(11-16-24,20(23)27)25-13-2-1-3-14-25/h6-9H,1-5,10-16H2,(H2,23,27)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30N/c1-6-18-9-13-20(14-10-18)17(2)7-8-19-11-15-21(16-12-19)22(3,4)5/h9-17H,6-8H2,1-5H3/q+1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H30N2O8S/c1-5-28-20(26)30-17-8-7-15(13-18(17)31-21(27)29-6-2)9-11-22-19(25)16(10-12-32-4)23-14(3)24/h7-8,13,16H,5-6,9-12H2,1-4H3,(H,22,25)(H,23,24)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H30N4O4/c1-2-29-20-13-18(22)19(25(27)28)12-17(20)21(26)23-16-8-10-24(11-9-16)14-15-6-4-3-5-7-15/h3-4,12-13,15-16H,2,5-11,14,22H2,1H3,(H,23,26)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H30N4O4/c1-2-29-20-13-18(22)19(25(27)28)12-17(20)21(26)23-16-8-10-24(11-9-16)14-15-6-4-3-5-7-15/h3-4,12-13,15-16H,2,5-11,14,22H2,1H3,(H,23,26)/t15-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H30N4O4/c1-2-29-20-13-18(22)19(25(27)28)12-17(20)21(26)23-16-8-10-24(11-9-16)14-15-6-4-3-5-7-15/h3-4,12-13,15-16H,2,5-11,14,22H2,1H3,(H,23,26)/t15-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H30NO4/c1-3-4-10-22(2)17-11-15(12-18(22)20-19(17)26-20)25-21(24)16(13-23)14-8-6-5-7-9-14/h5-9,15-20,23H,3-4,10-13H2,1-2H3/q+1/t15?,16-,17+,18+,19-,20+,22?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O2/c1-13(22)17-6-7-18-16-5-4-14-12-15(23)8-10-20(14,2)19(16)9-11-21(17,18)3/h12,16-19H,4-11H2,1-3H3/t16-,17-,18+,19+,20-,21-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O2/c1-13(22)17-6-7-18-16-5-4-14-12-15(23)8-10-20(14,2)19(16)9-11-21(17,18)3/h12,16-19H,4-11H2,1-3H3/t16-,17?,18-,19-,20?,21?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C21H30O2/c1-13(22)17-6-7-18-16-5-4-14-12-15(23)8-10-20(14,2)19(16)9-11-21(17,18)3/h12,16-19H,4-11H2,1-3H3/t16-,17+,18-,19-,20-,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O2/c1-5-6-7-8-15-12-18(22)20-16-11-14(2)9-10-17(16)21(3,4)23-19(20)13-15/h11-13,16-17,22H,5-10H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O2/c1-5-6-7-8-15-12-18(22)20-16-11-14(2)9-10-17(16)21(3,4)23-19(20)13-15/h11-13,16-17,22H,5-10H2,1-4H3/t16-,17-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O2/c1-5-6-7-8-15-12-18(22)20-16-11-14(2)9-10-17(16)21(3,4)23-19(20)13-15/h11-13,16-17,22H,5-10H2,1-4H3/t16-,17-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O2/c1-5-6-7-8-16-12-19(22)21(20(23)13-16)18-11-15(4)9-10-17(18)14(2)3/h11-13,17-18,22-23H,2,5-10H2,1,3-4H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C21H30O2/c1-5-6-7-8-16-12-19(22)21(20(23)13-16)18-11-15(4)9-10-17(18)14(2)3/h11-13,17-18,22-23H,2,5-10H2,1,3-4H3/t17-,18?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O2/c1-5-6-7-8-16-12-19(22)21(20(23)13-16)18-11-15(4)9-10-17(18)14(2)3/h11-13,17-18,22-23H,2,5-10H2,1,3-4H3/t17-,18+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H30O4/c1-11-8-13-14-4-5-15(19(24)25)21(14,3)10-17(23)18(13)20(2)7-6-12(22)9-16(11)20/h9,11,13-15,17-18,23H,4-8,10H2,1-3H3,(H,24,25)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O4/c1-11-8-13-14-4-5-15(19(24)25)21(14,3)10-17(23)18(13)20(2)7-6-12(22)9-16(11)20/h9,11,13-15,17-18,23H,4-8,10H2,1-3H3,(H,24,25)/t11-,13-,14-,15-,17+,18-,20-,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O4/c1-11-8-13-14-4-5-15(19(24)25)21(14,3)10-17(23)18(13)20(2)7-6-12(22)9-16(11)20/h9,11,13-15,17-18,23H,4-8,10H2,1-3H3,(H,24,25)/t11-,13-,14-,15+,17-,18+,20?,21?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O4/c1-11-8-13-14-4-5-15(19(24)25)21(14,3)10-17(23)18(13)20(2)7-6-12(22)9-16(11)20/h9,11,13-15,17-18,23H,4-8,10H2,1-3H3,(H,24,25)/t11-,13-,14+,15-,17-,18-,20-,21-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O4/c1-12(22)21(25)18(24)11-17-15-5-4-13-10-14(23)6-8-19(13,2)16(15)7-9-20(17,21)3/h10,15-18,24-25H,4-9,11H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O4/c1-12(22)21(25)18(24)11-17-15-5-4-13-10-14(23)6-8-19(13,2)16(15)7-9-20(17,21)3/h10,15-18,24-25H,4-9,11H2,1-3H3/t15-,16-,17-,18-,19?,20?,21?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O4/c1-12(22)21(25)18(24)11-17-15-5-4-13-10-14(23)6-8-19(13,2)16(15)7-9-20(17,21)3/h10,15-18,24-25H,4-9,11H2,1-3H3/t15-,16-,17-,18+,19+,20+,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O4/c1-12(22)21(25)18(24)11-17-15-5-4-13-10-14(23)6-8-19(13,2)16(15)7-9-20(17,21)3/h10,15-18,24-25H,4-9,11H2,1-3H3/t15-,16+,17+,18-,19-,20-,21+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O4/c1-12(22)21(25)18(24)11-17-15-5-4-13-10-14(23)6-8-19(13,2)16(15)7-9-20(17,21)3/h10,15-18,24-25H,4-9,11H2,1-3H3/t15-,16+,17+,18-,19+,20+,21-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H30O4/c1-19-8-5-14(23)11-13(19)3-4-15-16(19)6-9-20(2)17(15)7-10-21(20,25)18(24)12-22/h11,15-17,22,25H,3-10,12H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O4/c1-19-8-5-14(23)11-13(19)3-4-15-16(19)6-9-20(2)17(15)7-10-21(20,25)18(24)12-22/h11,15-17,22,25H,3-10,12H2,1-2H3/t15-,16-,17-,19?,20?,21?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O4/c1-19-8-5-14(23)11-13(19)3-4-15-16(19)6-9-20(2)17(15)7-10-21(20,25)18(24)12-22/h11,15-17,22,25H,3-10,12H2,1-2H3/t15-,16+,17-,19+,20-,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O4/c1-19-8-5-14(23)11-13(19)3-4-15-16(19)6-9-20(2)17(15)7-10-21(20,25)18(24)12-22/h11,15-17,22,25H,3-10,12H2,1-2H3/t15-,16+,17+,19+,20-,21-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O4/c1-19-8-5-14(23)11-13(19)3-4-15-16(19)6-9-20(2)17(15)7-10-21(20,25)18(24)12-22/h11,15-17,22,25H,3-10,12H2,1-2H3/t15-,16+,17+,19+,20+,21+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C21H30O4/c1-20-8-7-13(23)9-12(20)3-4-14-15-5-6-16(18(25)11-22)21(15,2)10-17(24)19(14)20/h9,14-17,19,22,24H,3-8,10-11H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O4/c1-20-8-7-13(23)9-12(20)3-4-14-15-5-6-16(18(25)11-22)21(15,2)10-17(24)19(14)20/h9,14-17,19,22,24H,3-8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,16-,17-,19+,20-,21-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O4/c1-20-8-7-13(23)9-12(20)3-4-14-15-5-6-16(18(25)11-22)21(15,2)10-17(24)19(14)20/h9,14-17,19,22,24H,3-8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,16+,17-,19+,20-,21-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O4/c1-20-8-7-13(23)9-12(20)3-4-14-15-5-6-16(18(25)11-22)21(15,2)10-17(24)19(14)20/h9,14-17,19,22,24H,3-8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,16+,17-,19+,20?,21?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O4/c1-20-8-7-13(23)9-12(20)3-4-14-15-5-6-16(18(25)11-22)21(15,2)10-17(24)19(14)20/h9,14-17,19,22,24H,3-8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,16+,17+,19+,20-,21-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O4S/c1-19-7-5-13(22)9-12(19)3-4-14-15-6-8-21(25,17(24)11-26)20(15,2)10-16(23)18(14)19/h9,14-16,18,23,25-26H,3-8,10-11H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O4S/c1-19-7-5-13(22)9-12(19)3-4-14-15-6-8-21(25,17(24)11-26)20(15,2)10-16(23)18(14)19/h9,14-16,18,23,25-26H,3-8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,16-,18+,19-,20-,21-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H30O4S/c1-19-7-5-13(22)9-12(19)3-4-14-15-6-8-21(25,17(24)11-26)20(15,2)10-16(23)18(14)19/h9,14-16,18,23,25-26H,3-8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,16-,18+,19?,20?,21?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O4S/c1-19-7-5-13(22)9-12(19)3-4-14-15-6-8-21(25,17(24)11-26)20(15,2)10-16(23)18(14)19/h9,14-16,18,23,25-26H,3-8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,16+,18+,19-,20+,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O5/c1-19-7-5-13(23)9-12(19)3-4-14-15-6-8-21(26,17(25)11-22)20(15,2)10-16(24)18(14)19/h9,14-16,18,22,24,26H,3-8,10-11H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O5/c1-19-7-5-13(23)9-12(19)3-4-14-15-6-8-21(26,17(25)11-22)20(15,2)10-16(24)18(14)19/h9,14-16,18,22,24,26H,3-8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,16-,18+,19-,20-,21-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O5/c1-19-7-5-13(23)9-12(19)3-4-14-15-6-8-21(26,17(25)11-22)20(15,2)10-16(24)18(14)19/h9,14-16,18,22,24,26H,3-8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,16-,18+,19-,20-,21-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O5/c1-19-7-5-13(23)9-12(19)3-4-14-15-6-8-21(26,17(25)11-22)20(15,2)10-16(24)18(14)19/h9,14-16,18,22,24,26H,3-8,10-11H2,1-2H3/t14-,15-,16-,18+,19?,20?,21?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H30O5/c1-19-7-5-13(23)9-12(19)3-4-14-15-6-8-21(26,17(25)11-22)20(15,2)10-16(24)18(14)19/h9,14-16,18,22,24,26H,3-8,10-11H2,1-2H3/t14-,15+,16+,18-,19+,20+,21+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H31Cl2N3O/c1-2-20(27)24-17-8-6-16(7-9-17)10-11-25-12-14-26(15-13-25)19-5-3-4-18(22)21(19)23/h3-5,16-17H,2,6-15H2,1H3,(H,24,27)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H31N3O5/c22-13-5-4-9-16(19(25)24-14-6-10-18(24)21(28)29)23-17(20(26)27)12-11-15-7-2-1-3-8-15/h1-3,7-8,16-18,23H,4-6,9-14,22H2,(H,26,27)(H,28,29)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H31N3O5/c22-13-5-4-9-16(19(25)24-14-6-10-18(24)21(28)29)23-17(20(26)27)12-11-15-7-2-1-3-8-15/h1-3,7-8,16-18,23H,4-6,9-14,22H2,(H,26,27)(H,28,29)/t16-,17-,18-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H31N5O/c27-19(21-13-16-10-17(14-21)12-18(11-16)15-21)22-4-5-25-6-8-26(9-7-25)20-23-2-1-3-24-20/h1-3,16-18H,4-15H2,(H,22,27)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H31N5O2/c27-18-16-21(6-1-2-7-21)17-19(28)26(18)11-4-3-10-24-12-14-25(15-13-24)20-22-8-5-9-23-20/h5,8-9H,1-4,6-7,10-17H2	1	(Muehlbacher et al.,

2011)

InChI=1S/C21H31N5O2/c27-18-16-21(6-1-2-7-21)17-19(28)26(18)11-4-3-10-24-12-14-25(15-13-24)20-22-8-5-9-23-20/h5,8-9H,1-4,6-7,10-17H2/p+1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C21H31NO/c1-4-21-10-11-22(14-15-6-5-7-15)19(20(21,2)3)12-16-8-9-17(23)13-18(16)21/h8-9,13,15,19,23H,4-7,10-12,14H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H31NO/c1-4-21-10-11-22(14-15-6-5-7-15)19(20(21,2)3)12-16-8-9-17(23)13-18(16)21/h8-9,13,15,19,23H,4-7,10-12,14H2,1-3H3/t19-,21-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H31NO/c1-4-21-10-11-22(14-15-6-5-7-15)19(20(21,2)3)12-16-8-9-17(23)13-18(16)21/h8-9,13,15,19,23H,4-7,10-12,14H2,1-3H3/t19-,21?/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H31NO/c1-4-21-10-11-22(14-15-6-5-7-15)19(20(21,2)3)12-16-8-9-17(23)13-18(16)21/h8-9,13,15,19,23H,4-7,10-12,14H2,1-3H3/t19-,21+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H31NO2/c1-3-22(4-2)13-8-14-24-20(23)21(18-9-6-5-7-10-18)16-17-11-12-19(21)15-17/h5-7,9-10,17,19H,3-4,8,11-16H2,1-2H3/t17-,19-,21-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H32N2O/c1-19-11-13-12-22-23-18(13)10-14(19)4-5-15-16(19)6-8-20(2)17(15)7-9-21(20,3)24/h12,14-17,24H,4-11H2,1-3H3,(H,22,23)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H32N2O/c1-19-11-13-12-22-23-18(13)10-14(19)4-5-15-16(19)6-8-20(2)17(15)7-9-21(20,3)24/h12,14-17,24H,4-11H2,1-3H3,(H,22,23)/t14-,15-,16-,17-,19?,20?,21?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H32N2O/c1-19-11-13-12-22-23-18(13)10-14(19)4-5-15-16(19)6-8-20(2)17(15)7-9-21(20,3)24/h12,14-17,24H,4-11H2,1-3H3,(H,22,23)/t14-,15+,16-,17-,19-,20-,21-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H32N2O/c1-2-3-7-18-12-16-22(17-13-18)14-6-15-23-20-9-5-4-8-19(20)10-11-21(23)24/h4-5,8-9,18H,2-3,6-7,10-17H2,1H3	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C21H32N6O3/c1-4-19(28)27(18-9-7-6-8-10-18)21(17-30-3)11-13-24(14-12-21)15-16-26-20(29)25(5-2)22-23-26/h6-10H,4-5,11-17H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H32O/c1-3-12-21(22)14-11-19-18-9-8-15-6-4-5-7-16(15)17(18)10-13-20(19,21)2/h3,6,16-19,22H,1,4-5,7-14H2,2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H32O2/c1-12(22)15-4-5-16-14-10-18(23)21-11-13(21)6-9-20(21,3)17(14)7-8-19(15,16)2/h13-18,23H,4-11H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H32O2/c1-12(22)15-4-5-16-14-10-18(23)21-11-13(21)6-9-20(21,3)17(14)7-8-19(15,16)2/h13-18,23H,4-11H2,1-3H3/t13-,14-,15-,16+,17+,18+,19+,20+,21-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H32O2/c1-12(22)15-4-5-16-14-10-18(23)21-11-13(21)6-9-20(21,3)17(14)7-8-19(15,16)2/h13-18,23H,4-11H2,1-3H3/t13-,14?,15-,16?,17?,18-,19-,20-,21?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H32O2/c1-12(22)15-4-5-16-14-10-18(23)21-11-13(21)6-9-20(21,3)17(14)7-8-19(15,16)2/h13-18,23H,4-11H2,1-3H3/t13-,14+,15-,16+,17+,18+,19-,20-,21+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H32O2/c1-12(22)15-4-5-16-14-10-18(23)21-11-13(21)6-9-20(21,3)17(14)7-8-19(15,16)2/h13-18,23H,4-11H2,1-3H3/t13?,14-,15?,16-,17-,18-,19?,20?,21?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H32O2/c1-12(22)15-4-5-16-14-10-18(23)21-11-13(21)6-9-20(21,3)17(14)7-8-19(15,16)2/h13-18,23H,4-11H2,1-3H3/t13?,14-,15+,16-,17-,18+,19+,20+,21?/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H32O2/c1-13-11-14-12-15(22)5-8-19(14,2)16-6-9-20(3)17(18(13)16)7-10-21(20,4)23/h12-13,16-18,23H,5-11H2,1-4H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H32O2/c1-13(22)17-6-7-18-16-5-4-14-12-15(23)8-10-20(14,2)19(16)9-11-21(17,18)3/h4,15-19,23H,5-12H2,1-3H3/t15-,16-,17+,18-,19-,20-,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C21H32O3/c1-12(22)16-6-7-17-15-5-4-13-10-14(23)8-9-20(13,2)19(15)18(24)11-21(16,17)3/h13-17,19,23H,4-11H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H32O3/c1-12(22)16-6-7-17-15-5-4-13-10-14(23)8-9-20(13,2)19(15)18(24)11-21(16,17)3/h13-17,19,23H,4-11H2,1-3H3/t13-,14-,15-,16+,17-,19+,20-,21+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H32O3/c1-12(22)16-6-7-17-15-5-4-13-10-14(23)8-9-20(13,2)19(15)18(24)11-21(16,17)3/h13-17,19,23H,4-11H2,1-3H3/t13-,14-,15-,16+,17-,19+,20?,21?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H32O3/c1-12(22)16-6-7-17-15-5-4-13-10-14(23)8-9-20(13,2)19(15)18(24)11-21(16,17)3/h13-17,19,23H,4-11H2,1-3H3/t13-,14-,15?,16-,17?,19?,20+,21-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H32O3/c1-12(22)16-6-7-17-15-5-4-13-10-14(23)8-9-20(13,2)19(15)18(24)11-21(16,17)3/h13-17,19,23H,4-11H2,1-3H3/t13-,14-,15-,16+,17-,19+,20-,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H32O3/c1-12(22)16-6-7-17-15-5-4-13-10-14(23)8-9-20(13,2)19(15)18(24)11-21(16,17)3/h13-17,19,23H,4-11H2,1-3H3/t13-,14+,15-,16+,17-,19+,20+,21-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H32O4/c1-20-8-7-13(23)9-12(20)3-4-14-15-5-6-16(18(25)11-22)21(15,2)10-17(24)19(14)20/h12-16,19,22-23H,3-11H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H32O4/c1-20-8-7-13(23)9-12(20)3-4-14-15-5-6-16(18(25)11-22)21(15,2)10-17(24)19(14)20/h12-16,19,22-23H,3-11H2,1-2H3/t12-,13-,14-,15-,16-,19+,20-,21-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H32O4/c1-20-8-7-13(23)9-12(20)3-4-14-15-5-6-16(18(25)11-22)21(15,2)10-17(24)19(14)20/h12-16,19,22-23H,3-11H2,1-2H3/t12-,13-,14-,15-,16+,19+,20?,21?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H32O4/c1-20-8-7-13(23)9-12(20)3-4-14-15-5-6-16(18(25)11-22)21(15,2)10-17(24)19(14)20/h12-16,19,22-23H,3-11H2,1-2H3/t12-,13+,14-,15-,16+,19+,20-,21-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H32O4/c1-20-8-7-13(23)9-12(20)3-4-14-15-5-6-16(18(25)11-22)21(15,2)10-17(24)19(14)20/h12-16,19,22-23H,3-11H2,1-2H3/t12-,13+,14?,15-,16?,19+,20?,21?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H32O4/c1-20-8-7-13(23)9-12(20)3-4-14-15-5-6-16(18(25)11-22)21(15,2)10-17(24)19(14)20/h12-16,19,22-23H,3-11H2,1-2H3/t12-,13+,14+,15-,16+,19+,20-,21+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H33N3O2/c1-5-6-7-8-9-13-22-20(25)26-16-10-11-18-17(15-16)21(2)12-14-23(3)19(21)24(18)4/h10-11,15,19H,5-9,12-14H2,1-4H3,(H,22,25)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H33N3O2/c1-5-6-7-8-9-13-22-20(25)26-16-10-11-18-17(15-16)21(2)12-14-23(3)19(21)24(18)4/h10-11,15,19H,5-9,12-14H2,1-4H3,(H,22,25)/t19-,21?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H33N3O2/c1-5-6-7-8-9-13-22-20(25)26-16-10-11-18-17(15-16)21(2)12-14-23(3)19(21)24(18)4/h10-11,15,19H,5-9,12-14H2,1-4H3,(H,22,25)/t19-,21+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H33N3O5S/c1-20(2,3)19(27)29-13-28-18(26)15-21(4,5)30-17-14(16(25)24(15)17)22-12-23-10-8-6-7-9-11-23/h12,14-15,17H,6-11,13H2,1-5H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H33N3O5S/c1-20(2,3)19(27)29-13-28-18(26)15-21(4,5)30-17-14(16(25)24(15)17)22-12-23-10-8-6-7-9-11-23/h12,14-15,17H,6-11,13H2,1-5H3/b22-12+/t14?,15-,17-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H33N3O5S/c1-20(2,3)19(27)29-13-28-18(26)15-21(4,5)30-17-14(16(25)24(15)17)22-12-23-10-8-6-7-9-11-23/h12,14-15,17H,6-11,13H2,1-5H3/t14-,15-,17-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H33N3O5S/c1-20(2,3)19(27)29-13-28-18(26)15-21(4,5)30-17-14(16(25)24(15)17)22-12-23-10-8-6-7-9-11-23/h12,14-15,17H,6-11,13H2,1-5H3/t14-,15?,17-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C21H33N3O5S/c1-20(2,3)19(27)29-13-28-18(26)15-21(4,5)30-17-14(16(25)24(15)17)22-12-23-10-8-6-7-9-11-23/h12,14-15,17H,6-11,13H2,1-5H3/t14-,15+,17-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H33NO/c1-19(2)18-11-12-20(19,3)21(16-18,23-14-13-22(4)5)15-17-9-7-6-8-10-17/h6-10,18H,11-16H2,1-5H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H33NO/c1-19(2)18-11-12-20(19,3)21(16-18,23-14-13-22(4)5)15-17-9-7-6-8-10-17/h6-10,18H,11-16H2,1-5H3/t18-,20-,21+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H33NO/c1-19(2)18-11-12-20(19,3)21(16-18,23-14-13-22(4)5)15-17-9-7-6-8-10-17/h6-10,18H,11-16H2,1-5H3/t18-,20-,21+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H33NO/c1-19(2)18-11-12-20(19,3)21(16-18,23-14-13-22(4)5)15-17-9-7-6-8-10-17/h6-10,18H,11-16H2,1-5H3/t18-,20+,21-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H34N2O/c1-4-6-7-11-16-23-17-14-21(15-18-23,20(24)22(3)5-2)19-12-9-8-10-13-19/h8-10,12-13H,4-7,11,14-18H2,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H34NO3/c1-4-22(3,5-2)16-17-25-20(23)21(24,18-12-8-6-9-13-18)19-14-10-7-11-15-19/h6,8-9,12-13,19,24H,4-5,7,10-11,14-17H2,1-3H3/q+1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H34O2/c1-13(22)17-6-7-18-16-5-4-14-12-15(23)8-10-20(14,2)19(16)9-11-21(17,18)3/h14-19,23H,4-12H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H34O2/c1-13(22)17-6-7-18-16-5-4-14-12-15(23)8-10-20(14,2)19(16)9-11-21(17,18)3/h14-19,23H,4-12H2,1-3H3/t14-,15-,16-,17-,18-,19+,20-,21-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H34O2/c1-13(22)17-6-7-18-16-5-4-14-12-15(23)8-10-20(14,2)19(16)9-11-21(17,18)3/h14-19,23H,4-12H2,1-3H3/t14-,15-,16+,17-,18+,19+,20+,21-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H34O2/c1-13(22)17-6-7-18-16-5-4-14-12-15(23)8-10-20(14,2)19(16)9-11-21(17,18)3/h14-19,23H,4-12H2,1-3H3/t14-,15-,16+,17+,18-,19-,20?,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H34O2/c1-13(22)17-6-7-18-16-5-4-14-12-15(23)8-10-20(14,2)19(16)9-11-21(17,18)3/h14-19,23H,4-12H2,1-3H3/t14-,15+,16+,17+,18-,19-,20+,21-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H36N4O8/c1-4-5-6-7-8-9-16(28)32-11-14(27)18(31-3)19-17(24-12(2)26)13(25-21(22)23)10-15(33-19)20(29)30/h10,13-14,17-19,27H,4-9,11H2,1-3H3,(H,24,26)(H,29,30)(H4,22,23,25)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H36NO/c1-4-22(5-2,6-3)18-17-21(23,19-13-9-7-10-14-19)20-15-11-8-12-16-20/h7,9-10,13-14,20,23H,4-6,8,11-12,15-18H2,1-3H3/q+1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H39N7O12/c1-5-21(36,4-30)16(40-17-9(26-2)13(34)10(31)6(3-29)38-17)18(37-5)39-15-8(28-20(24)25)11(32)7(27-19(22)23)12(33)14(15)35/h4-18,26,29,31-36H,3H2,1-2H3,(H4,22,23,27)(H4,24,25,28)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H39N7O12/c1-5-21(36,4-30)16(40-17-9(26-2)13(34)10(31)6(3-29)38-17)18(37-5)39-15-8(28-20(24)25)11(32)7(27-19(22)23)12(33)14(15)35/h4-18,26,29,31-36H,3H2,1-2H3,(H4,22,23,27)(H4,24,25,28)/t5-,6-,7-,8-,9-,10+,11-,12-,13-,14-,15-,16+,17-,18+,21+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H39N7O12/c1-5-21(36,4-30)16(40-17-9(26-2)13(34)10(31)6(3-29)38-17)18(37-5)39-15-8(28-20(24)25)11(32)7(27-19(22)23)12(33)14(15)35/h4-18,26,29,31-36H,3H2,1-2H3,(H4,22,23,27)(H4,24,25,28)/t5-,6-,7-,8-,9-,10+,11+,12-,13-,14-,15+,16-,17-,18+,21-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H39N7O12/c1-5-21(36,4-30)16(40-17-9(26-2)13(34)10(31)6(3-29)38-17)18(37-5)39-15-8(28-20(24)25)11(32)7(27-19(22)23)12(33)14(15)35/h4-18,26,29,31-36H,3H2,1-2H3,(H4,22,23,27)(H4,24,25,28)/t5-,6-,7+,8-,9-,10-,11+,12-,13-,14+,15+,16-,17-,18-,21+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H39N7O12/c1-5-21(36,4-30)16(40-17-9(26-2)13(34)10(31)6(3-29)38-17)18(37-5)39-15-8(28-20(24)25)11(32)7(27-	0	(Meng et al., 2021)

19(22)23)12(33)14(15)35/h4-18,26,29,31-36H,3H2,1-2H3,(H4,22,23,27)(H4,24,25,28)/t5-,6-,7+,8-,9+,10-,11+,12-,13+,14-,15-,16+,17+,18+,21+/m1/s1 InChI=1S/C21H39N7O12/c1-5-21(36,4-30)16(40-17-9(26-2)13(34)10(31)6(3-29)38-17)18(37-5)39-15-8(28-20(24)25)11(32)7(27-19(22)23)12(33)14(15)35/h4-18,26,29,31-36H,3H2,1-2H3,(H4,22,23,27)(H4,24,25,28)/t5-,6-,7-,8-,9-,10+,11-,12-,13-,14-,15-,16+,17-,18+,21-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H41N5O11/c1-26-11-14(30)18-8(33-20(11)37-21-16(32)13(29)10(25)9(4-27)34-21)3-7(24)19(36-18)35-17-6(23)2-5(22)12(28)15(17)31/h5-21,26-32H,2-4,22-25H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H41N5O11/c1-26-11-14(30)18-8(33-20(11)37-21-16(32)13(29)10(25)9(4-27)34-21)3-7(24)19(36-18)35-17-6(23)2-5(22)12(28)15(17)31/h5-21,26-32H,2-4,22-25H2,1H3/t5-,6-,7-,8-,9+,10+,11-,12-,13-,14-,15-,16-,17-,18+,19-,20-,21-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H41N5O11/c1-26-11-14(30)18-8(33-20(11)37-21-16(32)13(29)10(25)9(4-27)34-21)3-7(24)19(36-18)35-17-6(23)2-5(22)12(28)15(17)31/h5-21,26-32H,2-4,22-25H2,1H3/t5-,6+,7-,8?,9-,10-,11+,12+,13+,14-,15-,16-,17-,18+,19+,20-,21-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H41N5O11/c1-26-11-14(30)18-8(33-20(11)37-21-16(32)13(29)10(25)9(4-27)34-21)3-7(24)19(36-18)35-17-6(23)2-5(22)12(28)15(17)31/h5-21,26-32H,2-4,22-25H2,1H3/t5-,6+,7-,8+,9-,10-,11+,12+,13+,14-,15-,16-,17-,18+,19-,20-,21-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H41N5O11/c1-26-11-14(30)18-8(33-20(11)37-21-16(32)13(29)10(25)9(4-27)34-21)3-7(24)19(36-18)35-17-6(23)2-5(22)12(28)15(17)31/h5-21,26-32H,2-4,22-25H2,1H3/t5-,6+,7+,8+,9-,10-,11-,12-,13-,14-,15-,16-,17-,18-,19+,20-,21+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H41N5O11/c1-26-11-14(30)18-8(33-20(11)37-21-16(32)13(29)10(25)9(4-27)34-21)3-7(24)19(36-18)35-17-6(23)2-5(22)12(28)15(17)31/h5-21,26-32H,2-4,22-25H2,1H3/t5-,6+,7+,8+,9-,10+,11-,12+,13-,14-,15+,16+,17+,18-,19+,20-,21+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H41N5O7/c1-4-26-13-7-12(24)16(32-19-11(23)6-5-10(8-22)31-19)14(27)17(13)33-20-15(28)18(25-3)21(2,29)9-30-20/h5,11-20,25-29H,4,6-9,22-24H2,1-3H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H41N5O7/c1-4-26-13-7-12(24)16(32-19-11(23)6-5-10(8-22)31-19)14(27)17(13)33-20-15(28)18(25-3)21(2,29)9-30-20/h5,11-20,25-29H,4,6-9,22-24H2,1-3H3/t11-,12-,13-,14-,15-,16-,17-,18-,19+,20-,21-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H41N5O7/c1-4-26-13-7-12(24)16(32-19-11(23)6-5-10(8-22)31-19)14(27)17(13)33-20-15(28)18(25-3)21(2,29)9-30-20/h5,11-20,25-29H,4,6-9,22-24H2,1-3H3/t11-,12-,13-,14-,15-,16+,17-,18-,19+,20+,21+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H41N5O7/c1-4-26-13-7-12(24)16(32-19-11(23)6-5-10(8-22)31-19)14(27)17(13)33-20-15(28)18(25-3)21(2,29)9-30-20/h5,11-20,25-29H,4,6-9,22-24H2,1-3H3/t11-,12-,13-,14+,15+,16+,17-,18+,19-,20+,21-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H41N5O7/c1-4-26-13-7-12(24)16(32-19-11(23)6-5-10(8-22)31-19)15(28)17(13)33-20-21(2,29)18(25-3)14(27)9-30-20/h5,11-20,25-29H,4,6-9,22-24H2,1-3H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H41N5O7/c1-4-26-13-7-12(24)17(32-14-6-10(23)5-11(8-22)31-14)15(27)18(13)33-20-16(28)19(25-3)21(2,29)9-30-20/h5,10,12-20,25-29H,4,6-9,22-24H2,1-3H3/t10-,12-,13+,14+,15-,16-,17-,18+,19-,20-,21+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H41N7O12/c1-5-21(36,4-30)16(40-17-9(26-2)13(34)10(31)6(3-29)38-17)18(37-5)39-15-8(28-20(24)25)11(32)7(27-19(22)23)12(33)14(15)35/h5-18,26,29-36H,3-4H2,1-2H3,(H4,22,23,27)(H4,24,25,28)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H41N7O12/c1-5-21(36,4-30)16(40-17-9(26-2)13(34)10(31)6(3-29)38-17)18(37-5)39-15-8(28-20(24)25)11(32)7(27-19(22)23)12(33)14(15)35/h5-18,26,29-36H,3-4H2,1-2H3,(H4,22,23,27)(H4,24,25,28)/t5-,6-,7-,8-,9-,10+,11-,12-,13-,14-,15-,16+,17-,18?,21-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H41N7O12/c1-5-21(36,4-30)16(40-17-9(26-2)13(34)10(31)6(3-29)38-17)18(37-5)39-15-8(28-20(24)25)11(32)7(27-	0	(Meng et al., 2021)

19(22)23)12(33)14(15)35/h5-18,26,29-36H,3-4H2,1-2H3,(H4,22,23,27)(H4,24,25,28)/t5-,6-,7-,8-,9-,10+,11-,12-,13-,14-,15-,16+,17-,18+,21+/m0/s1	
InChI=1S/C21H41N7O12/c1-5-21(36,4-30)16(40-17-9(26-2)13(34)10(31)6(3-29)38-17)18(37-5)39-15-8(28-20(24)25)11(32)7(27-19(22)23)12(33)14(15)35/h5-18,26,29-36H,3-4H2,1-2H3,(H4,22,23,27)(H4,24,25,28)/t5-,6-,7-,8+,9-,10-,11-,12+,13-,14-,15-,16-,17-,18-,21+/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H41N7O12/c1-5-21(36,4-30)16(40-17-9(26-2)13(34)10(31)6(3-29)38-17)18(37-5)39-15-8(28-20(24)25)11(32)7(27-19(22)23)12(33)14(15)35/h5-18,26,29-36H,3-4H2,1-2H3,(H4,22,23,27)(H4,24,25,28)/t5-,6-,7+,8-,9-,10-,11+,12-,13-,14+,15+,16-,17-,18-,21+/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H41N7O12/c1-5-21(36,4-30)16(40-17-9(26-2)13(34)10(31)6(3-29)38-17)18(37-5)39-15-8(28-20(24)25)11(32)7(27-19(22)23)12(33)14(15)35/h5-18,26,29-36H,3-4H2,1-2H3,(H4,22,23,27)(H4,24,25,28)/t5-,6-,7+,8-,9+,10-,11+,12-,13+,14-,15-,16+,17+,18+,21+/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H43N5O12/c22-2-9-14(31)15(32)12(25)20(35-9)37-18-7(23)1-8(26-6(3-27)4-28)19(17(18)34)38-21-16(33)11(24)13(30)10(5-29)36-21/h6-21,26-34H,1-5,22-25H2	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H43N5O12/c22-2-9-14(31)15(32)12(25)20(35-9)37-18-7(23)1-8(26-6(3-27)4-28)19(17(18)34)38-21-16(33)11(24)13(30)10(5-29)36-21/h6-21,26-34H,1-5,22-25H2/t7-,8-,9-,10-,11-,12-,13+,14+,15-,16-,17-,18-,19-,20-,21+/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H43N5O12/c22-2-9-14(31)15(32)12(25)20(35-9)37-18-7(23)1-8(26-6(3-27)4-28)19(17(18)34)38-21-16(33)11(24)13(30)10(5-29)36-21/h6-21,26-34H,1-5,22-25H2/t7-,8-,9-,10+,11+,12-,13+,14-,15+,16+,17-,18+,19-,20+,21-/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H43N5O12/c22-2-9-14(31)15(32)12(25)20(35-9)37-18-7(23)1-8(26-6(3-27)4-28)19(17(18)34)38-21-16(33)11(24)13(30)10(5-29)36-21/h6-21,26-34H,1-5,22-25H2/t7-,8+,9-,10-,11+,12+,13-,14+,15+,16-,17-,18+,19-,20-,21-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H43N5O12/c22-2-9-14(31)15(32)12(25)20(35-9)37-18-7(23)1-8(26-6(3-27)4-28)19(17(18)34)38-21-16(33)11(24)13(30)10(5-29)36-21/h6-21,26-34H,1-5,22-25H2/t7-,8+,9+,10+,11-,12+,13+,14+,15+,16+,17-,18+,19-,20+,21+/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C21H43N5O7/c1-9(25-3)13-6-5-10(22)19(31-13)32-16-11(23)7-12(24)17(14(16)27)33-20-15(28)18(26-4)21(2,29)8-30-20/h9-20,25-29H,5-8,22-24H2,1-4H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H43N5O7/c1-9(25-3)13-6-5-10(22)19(31-13)32-16-11(23)7-12(24)17(14(16)27)33-20-15(28)18(26-4)21(2,29)8-30-20/h9-20,25-29H,5-8,22-24H2,1-4H3/t9-,10-,11-,12-,13-,14-,15-,16-,17-,18-,19-,20-,21+/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H43N5O7/c1-9(25-3)13-6-5-10(22)19(31-13)32-16-11(23)7-12(24)17(14(16)27)33-20-15(28)18(26-4)21(2,29)8-30-20/h9-20,25-29H,5-8,22-24H2,1-4H3/t9-,10-,11-,12-,13+,14-,15-,16-,17-,18-,19-,20-,21+/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H46N04P/c1-5-6-7-8-9-10-11-12-13-14-15-16-17-18-20-25-27(23,24)26-21-19-22(2,3)4/h5-21H2,1-4H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C21H46N04P/c1-5-6-7-8-9-10-11-12-13-14-15-16-17-18-20-25-27(23,24)26-21-19-22(2,3)4/h5-21H2,1-4H3/p+1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H15ClF6N2O/c1-31(12-13-8-14(21(24,25)26)10-15(9-13)22(27,28)29)20(32)18-11-30-7-6-16(18)17-4-2-3-5-19(17)23/h2-11H,12H2,1H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H15F2N5O/c1-28-10-16-14(3-2-4-20(16)27-28)13-7-18(23)17(19(24)8-13)11-29-12-26-21-9-25-6-5-15(21)22(29)30/h2-10,12H,11H2,1H3	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C22H15F2N5O/c1-28-11-15-7-13(4-5-19(15)27-28)14-8-17(23)16(18(24)9-14)12-29-20-3-2-6-25-22(20)26-10-21(29)30/h2-11H,12H2,1H3	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C22H16F2N2/c23-19-12-10-18(11-13-19)22(26-15-14-25-16-26,17-6-2-1-3-7-17)20-8-4-5-9-21(20)24/h1-16H	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C22H16O8/c1-2-28-20(25)15(16-18(23)11-7-3-5-9-13(11)29-21(16)26)17-19(24)12-8-4-6-10-14(12)30-22(17)27/h3-10,15,23-24H,2H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H17ClN2/c23-21-14-8-7-13-20(21)22(25-16-15-24-17-25,18-9-3-1-4-10-18)19-11-5-2-6-12-19/h1-17H	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H17N3O/c1-16-8-2-5-12-20(16)25-21(14-13-17-9-6-7-15-23-17)24-19-11-4-3-10-18(19)22(25)26/h2-15H,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H17N3O/c1-16-8-2-5-12-20(16)25-21(14-13-17-9-6-7-15-23-17)24-19-11-4-3-10-18(19)22(25)26/h2-15H,1H3/b14-13-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H17N3O/c1-16-8-2-5-12-20(16)25-21(14-13-17-9-6-7-15-23-17)24-19-11-4-3-10-18(19)22(25)26/h2-15H,1H3/b14-13+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H18I6N2O9/c23-9-5-11(25)19(17(27)15(9)21(33)34)29-13(31)7-38-3-1-37-2-4-39-8-14(32)30-20-12(26)6-10(24)16(18(20)28)22(35)36/h5-6H,1-4,7-8H2,(H,29,31)(H,30,32)(H,33,34)(H,35,36)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H18N2/c1-3-7-18(8-4-1)19-11-13-21(14-12-19)22(24-16-15-23-17-24)20-9-5-2-6-10-20/h1-17,22H	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H18N4OS/c1-23-22(27)18-7-2-3-8-21(18)28-16-10-11-17-19(25-26-20(17)14-16)12-9-15-6-4-5-13-24-15/h2-14H,1H3,(H,23,27)(H,25,26)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H18N4OS/c1-23-22(27)18-7-2-3-8-21(18)28-16-10-11-17-19(25-26-20(17)14-16)12-9-15-6-4-5-13-24-15/h2-14H,1H3,(H,23,27)(H,25,26)/b12-9+	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H18N6/c1-15-12-18(4-3-10-23)13-16(2)21(15)27-20-9-11-25-22(28-20)26-19-7-5-17(14-24)6-8-19/h3-9,11-13H,1-2H3,(H2,25,26,27,28)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H18N6/c1-15-12-18(4-3-10-23)13-16(2)21(15)27-20-9-11-25-22(28-20)26-19-7-5-17(14-24)6-8-19/h3-9,11-13H,1-2H3,(H2,25,26,27,28)/b4-3+	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H19ClO3/c23-16-11-9-14(10-12-16)13-5-7-15(8-6-13)19-20(24)17-3-1-2-4-18(17)21(25)22(19)26/h1-4,9-13,15,24H,5-8H2	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C22H19N3O4/c1-24-10-19(26)25-16(22(24)27)9-14-13-4-2-3-5-15(13)23-20(14)21(25)12-6-7-17-18(8-12)29-11-28-17/h2-8,16,21,23H,9-11H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H19N5/c1-15-12-27(14-25-15)18-7-4-6-17(11-18)26-22-20-10-9-16-5-2-3-8-19(16)21(20)23-13-24-22/h2-8,11-14H,9-10H2,1H3,(H,23,24,26)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H19NO4/c1-15(24)26-19-10-6-17(7-11-19)22(21-5-3-4-14-23-21)18-8-12-20(13-9-18)27-16(2)25/h3-14,22H,1-2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H20ClN3/c1-25-10-12-26(13-11-25)22-15-16-14-17(23)6-7-18(16)20(8-9-24)19-4-2-3-5-21(19)22/h2-8,14-15H,10-13H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H20ClN3/c1-25-10-12-26(13-11-25)22-15-16-14-17(23)6-7-18(16)20(8-9-24)19-4-2-3-5-21(19)22/h2-8,14-15H,10-13H2,1H3/b20-8-	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H20ClN3/c1-25-10-12-26(13-11-25)22-15-16-14-17(23)6-7-18(16)20(8-9-24)19-4-2-3-5-21(19)22/h2-8,14-15H,10-13H2,1H3/b20-8+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H20FN3O2/c1-26-18(13-25-22(27)16-9-10-28-14-16)12-24-21(15-5-3-2-4-6-15)19-8-7-17(23)11-20(19)26/h2-11,14,18H,12-13H2,1H3,(H,25,27)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H20FN3O2/c1-26-18(13-25-22(27)16-9-10-28-14-16)12-24-21(15-5-3-2-4-6-15)19-8-7-17(23)11-20(19)26/h2-11,14,18H,12-13H2,1H3,(H,25,27)/t18-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C22H20FN3O2/c1-26-18(13-25-22(27)16-9-10-28-14-16)12-24-21(15-5-3-2-4-6-15)19-8-7-17(23)11-20(19)26/h2-11,14,18H,12-13H2,1H3,(H,25,27)/t18-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H20FN3OS/c1-26-16(13-25-22(27)15-10-11-28-14-15)12-24-21(17-6-2-4-8-19(17)23)18-7-3-5-9-20(18)26/h2-11,14,16H,12-13H2,1H3,(H,25,27)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H20FN3OS/c1-26-16(13-25-22(27)15-10-11-28-14-15)12-24-21(17-6-2-4-8-19(17)23)18-7-3-5-9-20(18)26/h2-11,14,16H,12-13H2,1H3,(H,25,27)/t16-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H20FN5O3S/c23-16-1-6-20-19(11-16)21(15(12-24)13-26-20)28-9-7-14(8-10-28)22(29)27-17-2-4-18(5-3-17)32(25,30)31/h1-6,11,13-14H,7-10H2,(H,27,29)(H2,25,30,31)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C22H20N2/c1-2-6-19(7-3-1)16-24-17-20(21-8-4-5-9-22(21)24)11-10-18-12-14-23-15-13-18/h1-9,12-15,17H,10-11,16H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H20N4O8S2/c23-18(27)13-6-8-25(9-7-13)10-14-11-35-21-15(20(29)26(21)16(14)22(30)31)24-19(28)17(36(32,33)34)12-4-2-1-3-5-12/h1-9,15,17,21H,10-11H2,(H4-,23,24,27,28,30,31,32,33,34)/p+1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H20N4O8S2/c23-18(27)13-6-8-25(9-7-13)10-14-11-35-21-15(20(29)26(21)16(14)22(30)31)24-19(28)17(36(32,33)34)12-4-2-1-3-5-12/h1-9,15,17,21H,10-11H2,(H4-,23,24,27,28,30,31,32,33,34)/p+1/t15-,17-,21-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H20N4O8S2/c23-18(27)13-6-8-25(9-7-13)10-14-11-35-21-15(20(29)26(21)16(14)22(30)31)24-19(28)17(36(32,33)34)12-4-2-1-3-5-12/h1-9,15,17,21H,10-11H2,(H4-,23,24,27,28,30,31,32,33,34)/t15-,17-,21-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H20O5/c1-24-18-12-17-20(22(26-3)21(18)25-2)16(11-19(23)27-17)15-10-6-8-13-7-4-5-9-14(13)15/h4-10,12,16H,11H2,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H20O5/c1-24-18-12-17-20(22(26-3)21(18)25-2)16(11-19(23)27-17)15-10-6-8-13-7-4-5-9-14(13)15/h4-10,12,16H,11H2,1-3H3/t16-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H20O8S2/c1-29-15(23)7-13(11-3-5-31-9-11)17-19(25)21(27)18(22(28)20(17)26)14(8-16(24)30-2)12-4-6-32-10-12/h3-6,9-10,13-14,25,28H,7-8H2,1-2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H20O8S2/c1-29-15(23)7-13(11-3-5-31-9-11)17-19(25)21(27)18(22(28)20(17)26)14(8-16(24)30-2)12-4-6-32-10-12/h3-6,9-10,13-14,25,28H,7-8H2,1-2H3/t13-,14+	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H21Cl2N5O3S/c1-28-11-20(27-13-28)33(31,32)29-9-16-17(10-29)22(16,19-4-2-3-7-25-19)12-26-21(30)15-6-5-14(23)8-18(15)24/h2-8,11,13,16-17H,9-10,12H2,1H3,(H,26,30)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C22H21Cl3N4O/c1-14-20(22(30)27-28-11-3-2-4-12-28)26-29(19-10-9-17(24)13-18(19)25)21(14)15-5-7-16(23)8-6-15/h5-10,13H,2-4,11-12H2,1H3,(H,27,30)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H21ClN2O8/c1-6-9-7(23)4-5-8(26)11(9)16(27)12-10(6)17(28)14-15(25(2)3)18(29)13(21(24)32)20(31)22(14,33)19(12)30/h4-5,10,14-15,17,26-28,31,33H,1H2,2-3H3,(H2,24,32)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H21ClN2O8/c1-6-9-7(23)4-5-8(26)11(9)16(27)12-10(6)17(28)14-15(25(2)3)18(29)13(21(24)32)20(31)22(14,33)19(12)30/h4-5,10,14-15,17,26-28,31,33H,1H2,2-3H3,(H2,24,32)/t10-,14-,15-,17-,22?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H21ClN2O8/c1-6-9-7(23)4-5-8(26)11(9)16(27)12-10(6)17(28)14-15(25(2)3)18(29)13(21(24)32)20(31)22(14,33)19(12)30/h4-5,10,14-15,17,26-28,31,33H,1H2,2-3H3,(H2,24,32)/t10-,14-,15-,17+,22+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H21ClN2O8/c1-6-9-7(23)4-5-8(26)11(9)16(27)12-10(6)17(28)14-15(25(2)3)18(29)13(21(24)32)20(31)22(14,33)19(12)30/h4-5,10,14-15,17,26-28,31,33H,1H2,2-3H3,(H2,24,32)/t10-,14-,15+,17+,22+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H21ClN2O8/c1-6-9-7(23)4-5-8(26)11(9)16(27)12-10(6)17(28)14-15(25(2)3)18(29)13(21(24)32)20(31)22(14,33)19(12)30/h4-	0	(Meng et al., 2021)

5,10,14-15,17,26,28-30,33H,1H2,2-3H3,(H2,24,32)/t10-,14-,15-,17-,22-/m1/s1	
InChI=1S/C22H21ClN2O8/c1-6-9-7(23)4-5-8(26)11(9)16(27)12-10(6)17(28)14-15(25(2)3)18(29)13(21(24)32)20(31)22(14,33)19(12)30/h4-5,10,14-15,17,26,28-30,33H,1H2,2-3H3,(H2,24,32)/t10-,14-,15-,17-,22-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H21N3O3/c23-19-8-4-5-9-20(19)25-21(26)18-12-10-16(11-13-18)14-24-22(27)28-15-17-6-2-1-3-7-17/h1-13H,14-15,23H2,(H,24,27)(H,25,26)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H21N3OS/c26-22(25-15-5-7-20(25)19-6-1-3-13-23-19)18-11-9-17(10-12-18)16-27-21-8-2-4-14-24-21/h1-4,6,8-14,20H,5,7,15-16H2/t20-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H21N7O6S2/c23-22-25-8-13(37-22)14(27-35-12-4-5-24-17(12)30)18(31)26-15-19(32)29-16(21(33)34)11(10-36-20(15)29)9-28-6-2-1-3-7-28/h1-3,6-8,12,15,20H,4-5,9-10H2,(H4-,23,24,25,26,27,30,31,33,34)/p+1/t12?,15-,20-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H21N7O6S2/c23-22-25-8-13(37-22)14(27-35-12-4-5-24-17(12)30)18(31)26-15-19(32)29-16(21(33)34)11(10-36-20(15)29)9-28-6-2-1-3-7-28/h1-3,6-8,12,15,20H,4-5,9-10H2,(H4-,23,24,25,26,27,30,31,33,34)/t12?,15-,20-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H21NO2S/c24-22(23-13-15-26-17-18-8-3-1-4-9-18)21(16-20-12-7-14-25-20)19-10-5-2-6-11-19/h1-12,14,16H,13,15,17H2,(H,23,24)/b21-16+	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H21NO4/c24-17-12-22(8-2-1-3-9-22)27-21-15(17)6-7-18-20(21)16(11-19(25)26-18)14-5-4-10-23-13-14/h4-7,10,13,16H,1-3,8-9,11-12H2/t16-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H21NO7/c1-7-4-5-10-8(2)11-6-12-16(23)19(27)13(9(3)24)20(28)22(12,30)21(29)15(11)18(26)14(10)17(7)25/h4-5,12,16,24-26,30H,6,23H2,1-3H3/b13-9-/t12-,16-,22-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H21NO7/c1-7-4-5-10-8(2)11-6-12-16(23)19(27)13(9(3)24)20(28)22(12,30)21(29)15(11)18(26)14(10)17(7)25/h4-5,12,16,24-26,30H,6,23H2,1-3H3/b13-9+/t12-,16-,22-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H21NO7/c1-7-4-5-10-8(2)11-6-12-16(23)19(27)13(9(3)24)20(28)22(12,30)21(29)15(11)18(26)14(10)17(7)25/h4-5,12,16,25-26,28,30H,6,23H2,1-3H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H21NO7/c1-7-4-5-10-8(2)11-6-12-16(23)19(27)13(9(3)24)20(28)22(12,30)21(29)15(11)18(26)14(10)17(7)25/h4-5,12,16,25-26,28,30H,6,23H2,1-3H3/t12-,16-,22-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H21NO7/c1-7-4-5-10-8(2)11-6-12-16(23)19(27)13(9(3)24)20(28)22(12,30)21(29)15(11)18(26)14(10)17(7)25/h4-5,12,16,25-26,28,30H,6,23H2,1-3H3/t12-,16+,22+/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H21NO7/c1-7-4-5-10-8(2)11-6-12-16(23)19(27)13(9(3)24)20(28)22(12,30)21(29)15(11)18(26)14(10)17(7)25/h4-5,12,16,25-27,30H,6,23H2,1-3H3/t12-,16-,22+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H22ClF3N2/c23-18-7-8-19-16(12-27-21(19)11-18)13-28-10-9-22(25,26)17(14-28)6-5-15-3-1-2-4-20(15)24/h1-4,7-8,11-12,17,27H,5-6,9-10,13-14H2	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C22H22ClF4NO2/c23-19-8-5-16(14-18(19)22(25,26)27)21(30)9-12-28(13-10-21)11-1-2-20(29)15-3-6-17(24)7-4-15/h3-8,14,30H,1-2,9-13H2	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H22ClN5O4S2/c1-2-16(29)26-7-9-27(10-8-26)22(31)32-21-18-17(33-11-12-34-18)20(30)28(21)15-6-4-13-3-5-14(23)24-19(13)25-15/h3-6,21H,2,7-12H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H22ClN5O4S2/c1-2-16(29)26-7-9-27(10-8-26)22(31)32-21-18-17(33-11-12-34-18)20(30)28(21)15-6-4-13-3-5-14(23)24-19(13)25-15/h3-6,21H,2,7-12H2,1H3/t21-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H22ClN5O4S2/c1-2-16(29)26-7-9-27(10-8-26)22(31)32-21-18-17(33-11-12-34-18)20(30)28(21)15-6-4-13-3-5-14(23)24-19(13)25-15/h3-6,21H,2,7-12H2,1H3/t21-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C22H22F4N2/c23-18-5-2-15(3-6-18)1-4-17-14-28(10-9-22(17,25)26)13-16-12-27-21-11-19(24)7-8-20(16)21/h2-3,5-8,11-12,17,27H,1,4,9-10,13-14H2	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C22H22F4N2/c23-18-7-8-19-16(12-27-21(19)11-18)13-28-10-9-22(25,26)17(14-28)6-5-15-3-1-2-4-20(15)24/h1-4,7-8,11-12,17,27H,5-6,9-10,13-14H2	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C22H22FN3O2/c23-16-7-5-14(6-8-16)18-11-15-12-25(13-19(15)18)9-10-26-21(27)17-3-1-2-4-20(17)24-22(26)28/h1-8,15,18-19H,9-13H2,(H,24,28)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H22FN3O2/c23-16-7-5-14(6-8-16)18-11-15-12-25(13-19(15)18)9-10-26-21(27)17-3-1-2-4-20(17)24-22(26)28/h1-8,15,18-19H,9-13H2,(H,24,28)/t15-,18-,19+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H22FN3O2/c23-16-7-5-14(6-8-16)18-11-15-12-25(13-19(15)18)9-10-26-21(27)17-3-1-2-4-20(17)24-22(26)28/h1-8,15,18-19H,9-13H2,(H,24,28)/t15-,18?,19-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H22FN3O2/c23-16-7-5-14(6-8-16)18-11-15-12-25(13-19(15)18)9-10-26-21(27)17-3-1-2-4-20(17)24-22(26)28/h1-8,15,18-19H,9-13H2,(H,24,28)/t15-,18+,19+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H22FN3O2/c23-17-9-7-16(8-10-17)21(27)6-3-13-25-14-11-18(12-15-25)26-20-5-2-1-4-19(20)24-22(26)28/h1-2,4-5,7-11H,3,6,12-15H2,(H,24,28)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H22FN3O3/c23-17-7-5-15(6-8-17)20(27)16-9-11-25(12-10-16)13-14-26-21(28)18-3-1-2-4-19(18)24-22(26)29/h1-8,16H,9-14H2,(H,24,29)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H22N2O3/c25-21(11-10-18-6-1-5-17-7-2-12-23-22(17)18)24(15-19-8-3-13-26-19)16-20-9-4-14-27-20/h1-3,5-8,10-13,20H,4,9,14-16H2/b11-10-/t20-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H22N2O3/c25-22(18-7-3-6-17(14-18)21-10-5-13-27-21)24(16-20-9-4-12-26-20)15-19-8-1-2-11-23-19/h1-3,5-8,10-11,13-14,20H,4,9,12,15-16H2/t20-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H22N2O5S/c1-22(2)17(21(27)28)24-19(26)15(20(24)30-22)23-18(25)16(13-9-5-3-6-10-13)29-14-11-7-4-8-12-14/h3-12,15-17,20H,1-2H3,(H,23,25)(H,27,28)	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C22H22N2O5S/c1-22(2)17(21(27)28)24-19(26)15(20(24)30-22)23-18(25)16(13-9-5-3-6-10-13)29-14-11-7-4-8-12-14/h3-12,15-17,20H,1-2H3,(H,23,25)(H,27,28)/t15-,16?,17+,20-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H22N2O5S/c1-22(2)17(21(27)28)24-19(26)15(20(24)30-22)23-18(25)16(13-9-5-3-6-10-13)29-14-11-7-4-8-12-14/h3-12,15-17,20H,1-2H3,(H,23,25)(H,27,28)/t15?,16-,17-,20-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H22N2O8/c1-7-8-5-4-6-9(25)11(8)16(26)12-10(7)17(27)14-15(24(2)3)18(28)13(21(23)31)20(30)22(14,32)19(12)29/h4-6,10,14-15,17,25-27,30,32H,1H2,2-3H3,(H2,23,31)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H22N2O8/c1-7-8-5-4-6-9(25)11(8)16(26)12-10(7)17(27)14-15(24(2)3)18(28)13(21(23)31)20(30)22(14,32)19(12)29/h4-6,10,14-15,17,25-27,30,32H,1H2,2-3H3,(H2,23,31)/t10-,14-,15-,17-,22-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H22N2O8/c1-7-8-5-4-6-9(25)11(8)16(26)12-10(7)17(27)14-15(24(2)3)18(28)13(21(23)31)20(30)22(14,32)19(12)29/h4-6,10,14-15,17,25-27,30,32H,1H2,2-3H3,(H2,23,31)/t10-,14-,15-,17+,22+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H22N2O8/c1-7-8-5-4-6-9(25)11(8)16(26)12-10(7)17(27)14-15(24(2)3)18(28)13(21(23)31)20(30)22(14,32)19(12)29/h4-6,10,14-15,17,25-27,30,32H,1H2,2-3H3,(H2,23,31)/t10-,14-,15+,17+,22+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H22N2O8/c1-7-8-5-4-6-9(25)11(8)16(26)12-10(7)17(27)14-15(24(2)3)18(28)13(21(23)31)20(30)22(14,32)19(12)29/h4-6,10,14-15,17,25,27-29,32H,1H2,2-3H3,(H2,23,31)/t10-,14-,15-,17-,22-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H22N2O8/c1-7-8-5-4-6-9(25)11(8)16(26)12-10(7)17(27)14-15(24(2)3)18(28)13(21(23)31)20(30)22(14,32)19(12)29/h4-6,10,14-	0	(Meng et al., 2021)

15,17,25,27-29,32H,1H2,2-3H3,(H2,23,31)/t10-,14-,15-,17-,22?/m0/s1	
InChI=1S/C22H22N6O5S2/c1-33-26-15(13-10-35-22(23)24-13)18(29)25-16-19(30)28-17(21(31)32)12(9-34-20(16)28)8-27-7-3-5-11-4-2-6-14(11)27/h3,5,7,10,16,20H,2,4,6,8-9H2,1H3,(H3-,23,24,25,29,31,32)/b26-15+/t16-,20-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H22N6O5S2/c1-33-26-15(13-10-35-22(23)24-13)18(29)25-16-19(30)28-17(21(31)32)12(9-34-20(16)28)8-27-7-3-5-11-4-2-6-14(11)27/h3,5,7,10,16,20H,2,4,6,8-9H2,1H3,(H3-,23,24,25,29,31,32)/p+1/b26-15-/t16-,20-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H22N6O5S2/c1-33-26-15(13-10-35-22(23)24-13)18(29)25-16-19(30)28-17(21(31)32)12(9-34-20(16)28)8-27-7-3-5-11-4-2-6-14(11)27/h3,5,7,10,16,20H,2,4,6,8-9H2,1H3,(H3-,23,24,25,29,31,32)/p+1/b26-15+/t16-,20-/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H22N6O7S2/c1-22(2,20(33)34)35-26-13(12-10-37-21(23)24-12)16(29)25-14-17(30)28-15(19(31)32)11(9-36-18(14)28)8-27-6-4-3-5-7-27/h3-7,10,14,18H,8-9H2,1-2H3,(H4-,23,24,25,29,31,32,33,34)/b26-13+/t14-,18-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H22N6O7S2/c1-22(2,20(33)34)35-26-13(12-10-37-21(23)24-12)16(29)25-14-17(30)28-15(19(31)32)11(9-36-18(14)28)8-27-6-4-3-5-7-27/h3-7,10,14,18H,8-9H2,1-2H3,(H4-,23,24,25,29,31,32,33,34)/p+1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H22N6O7S2/c1-22(2,20(33)34)35-26-13(12-10-37-21(23)24-12)16(29)25-14-17(30)28-15(19(31)32)11(9-36-18(14)28)8-27-6-4-3-5-7-27/h3-7,10,14,18H,8-9H2,1-2H3,(H4-,23,24,25,29,31,32,33,34)/p+1/b26-13-	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H22N6O7S2/c1-22(2,20(33)34)35-26-13(12-10-37-21(23)24-12)16(29)25-14-17(30)28-15(19(31)32)11(9-36-18(14)28)8-27-6-4-3-5-7-27/h3-7,10,14,18H,8-9H2,1-2H3,(H4-,23,24,25,29,31,32,33,34)/p+1/b26-13-/t14-,18-/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H22N6O7S2/c1-22(2,20(33)34)35-26-13(12-10-37-21(23)24-12)16(29)25-14-17(30)28-15(19(31)32)11(9-36-18(14)28)8-27-6-4-3-5-7-27/h3-7,10,14,18H,8-9H2,1-2H3,(H4-,23,24,25,29,31,32,33,34)/p+1/b26-13-/t14-,18+/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H22N6O7S2/c1-22(2,20(33)34)35-26-13(12-10-37-21(23)24-12)16(29)25-14-17(30)28-15(19(31)32)11(9-36-18(14)28)8-27-6-4-3-5-7-27/h3-7,10,14,18H,8-9H2,1-2H3,(H4-,23,24,25,29,31,32,33,34)/p+1/b26-13+	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H22N6O7S2/c1-22(2,20(33)34)35-26-13(12-10-37-21(23)24-12)16(29)25-14-17(30)28-15(19(31)32)11(9-36-18(14)28)8-27-6-4-3-5-7-27/h3-7,10,14,18H,8-9H2,1-2H3,(H4-,23,24,25,29,31,32,33,34)/p+1/b26-13+/t14-,18-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H22N6O7S2/c1-22(2,20(33)34)35-26-13(12-10-37-21(23)24-12)16(29)25-14-17(30)28-15(19(31)32)11(9-36-18(14)28)8-27-6-4-3-5-7-27/h3-7,10,14,18H,8-9H2,1-2H3,(H4-,23,24,25,29,31,32,33,34)/p+1/b26-13+/t14-,18+/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H22N8/c1-2-6-16-15(5-1)19(13-27-29-21-23-9-10-24-21)17-7-3-4-8-18(17)20(16)14-28-30-22-25-11-12-26-22/h1-8,13-14H,9-12H2,(H2,23,24,29)(H2,25,26,30)/b27-13-,28-14-	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H22N8/c1-2-6-16-15(5-1)19(13-27-29-21-23-9-10-24-21)17-7-3-4-8-18(17)20(16)14-28-30-22-25-11-12-26-22/h1-8,13-14H,9-12H2,(H2,23,24,29)(H2,25,26,30)/b27-13+,28-14+	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H22O8/c1-25-16-4-10(5-17(26-2)21(16)27-3)18-11-6-14-15(30-9-29-14)7-12(11)20(23)13-8-28-22(24)19(13)18/h4-7,13,18-20,23H,8-9H2,1-3H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H23ClFN3O2/c23-17-4-7-20-19(14-17)25-22(29)27(20)11-1-10-26-12-8-16(9-13-26)21(28)15-2-5-18(24)6-3-15/h2-7,14,16H,1,8-13H2,(H,25,29)	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H23ClFNO2/c23-19-7-3-17(4-8-19)22(27)18-11-14-25(15-12-18)13-1-2-21(26)16-5-9-20(24)10-6-16/h3-10,18H,1-2,11-15H2	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H23ClN2O2/c1-2-27-22(26)25-12-9-15(10-13-25)20-19-8-7-18(23)14-17(19)6-5-16-4-3-11-24-21(16)20/h3-4,7-8,11,14H,2,5-6,9-10,12-13H2,1H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H23ClN2O8/c1-21(32)7-6-8-15(25(2)3)17(28)13(20(24)31)19(30)22(8,33)18(29)11(7)16(27)12-10(26)5-4-9(23)14(12)21/h4-5,7-8,15,26-27,30,32-33H,6H2,1-3H3,(H2,24,31)	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C22H23CIN2O8/c1-21(32)7-6-8-15(25(2)3)17(28)13(20(24)31)19(30)22(8,33)18(29)11(7)16(27)12-10(26)5-4-9(23)14(12)21/h4-5,7-8,15,26-27,30,32-33H,6H2,1-3H3,(H2,24,31)/t7-,8-,15-,21-,22-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H23CIN2O8/c1-21(32)7-6-8-15(25(2)3)17(28)13(20(24)31)19(30)22(8,33)18(29)11(7)16(27)12-10(26)5-4-9(23)14(12)21/h4-5,7-8,15,26-27,30,32-33H,6H2,1-3H3,(H2,24,31)/t7-,8-,15-,21?,22?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H23CIN2O8/c1-21(32)7-6-8-15(25(2)3)17(28)13(20(24)31)19(30)22(8,33)18(29)11(7)16(27)12-10(26)5-4-9(23)14(12)21/h4-5,7-8,15,26-27,30,32-33H,6H2,1-3H3,(H2,24,31)/t7-,8-,15+,21-,22-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H23CIN2O8/c1-21(32)7-6-8-15(25(2)3)17(28)13(20(24)31)19(30)22(8,33)18(29)11(7)16(27)12-10(26)5-4-9(23)14(12)21/h4-5,7-8,15,26-27,30,32-33H,6H2,1-3H3,(H2,24,31)/t7-,8-,15+,21+,22+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H23CIN6O/c1-2-3-8-20-24-21(23)19(14-30)29(20)13-15-9-11-16(12-10-15)17-6-4-5-7-18(17)22-25-27-28-26-22/h4-7,9-12,30H,2-3,8,13-14H2,1H3,(H,25,26,27,28)	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C22H23F2NO2/c23-19-7-3-16(4-8-19)21(26)2-1-13-25-14-11-18(12-15-25)22(27)17-5-9-20(24)10-6-17/h3-10,18H,1-2,11-15H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H23F4NO2/c23-19-8-6-16(7-9-19)20(28)5-2-12-27-13-10-21(29,11-14-27)17-3-1-4-18(15-17)22(24,25)26/h1,3-4,6-9,15,29H,2,5,10-14H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H23FN4/c1-14-15(2)24-22(25-19-10-8-18(23)9-11-19)26-21(14)27-13-12-17-6-4-5-7-20(17)16(27)3/h4-11,16H,12-13H2,1-3H3,(H,24,25,26)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H23FN4/c1-14-15(2)24-22(25-19-10-8-18(23)9-11-19)26-21(14)27-13-12-17-6-4-5-7-20(17)16(27)3/h4-11,16H,12-13H2,1-3H3,(H,24,25,26)/t16-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H23FN4O2/c23-15-7-8-17-18(25-29-21(17)14-15)5-3-11-26-12-9-16(10-13-26)27-20-6-2-1-4-19(20)24-22(27)28/h1-2,4,6-8,14,16H,3,5,9-13H2,(H,24,28)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H23N3O/c1-25(2)15-16-8-10-18(11-9-16)22(26)24-21-14-19(12-13-20(21)23)17-6-4-3-5-7-17/h3-14H,15,23H2,1-2H3,(H,24,26)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H23N3O4/c1-4-16-6-5-7-17(12-16)25-22-18-13-20(28-10-8-26-2)21(29-11-9-27-3)14-19(18)23-15-24-22/h1,5-7,12-15H,8-11H2,2-3H3,(H,23,24,25)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H23N3O5/c23-20(27)12-17(15-5-6-24-18-4-2-1-3-16(15)18)22-21(28)19(26)11-14(30-22)13-25-7-9-29-10-8-25/h1-6,11,17,28H,7-10,12-13H2,(H2,23,27)/t17-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H23N3O5/c23-20(27)12-17(15-5-6-24-18-4-2-1-3-16(15)18)22-21(28)19(26)11-14(30-22)13-25-7-9-29-10-8-25/h1-6,11,17,28H,7-10,12-13H2,(H2,23,27)/t17-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H23N3O5S/c1-4-31(29)19-8-17-20-14(10-25(17)21(27)15(19)11-30-22(31)28)6-12-5-13(9-24(2)3)18(26)7-16(12)23-20/h5-8,26,29H,4,9-11H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H23N7O6S2/c23-22-25-8-13(37-22)14(27-35-12-4-5-24-17(12)30)18(31)26-15-19(32)29-16(21(33)34)11(10-36-20(15)29)9-28-6-2-1-3-7-28/h2-3,6-8,12,15,20H,1,4-5,9-10H2,(H2,23,25)(H,24,30)(H,26,31)(H,33,34)/b27-14+/t12-,15+,20-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H23NO7/c1-23-8-7-11-9-14-20(29-10-28-14)21(27-4)15(11)17(23)18-12-5-6-13(25-2)19(26-3)16(12)22(24)30-18/h5-6,9,17-18H,7-8,10H2,1-4H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H23NO7/c1-23-8-7-11-9-14-20(29-10-28-14)21(27-4)15(11)17(23)18-12-5-6-13(25-2)19(26-3)16(12)22(24)30-18/h5-6,9,17-18H,7-8,10H2,1-4H3/t17-,18-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H23NO7/c1-23-8-7-11-9-14-20(29-10-28-14)21(27-4)15(11)17(23)18-12-5-6-13(25-2)19(26-3)16(12)22(24)30-18/h5-6,9,17-18H,7-8,10H2,1-4H3/t17-,18+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C22H23NO7/c1-23-8-7-11-9-14-20(29-10-28-14)21(27-4)15(11)17(23)18-12-5-6-13(25-2)19(26-3)16(12)22(24)30-18/h5-6,9,17-18H,7-8,10H2,1-4H3/t17-,18+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H24Cl2N2O/c23-19-8-7-16(13-20(19)24)14-22(27)26-12-9-17-5-1-2-6-18(17)21(26)15-25-10-3-4-11-25/h1-2,5-8,13,21H,3-4,9-12,14-15H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H24Cl2N2O/c23-19-8-7-16(13-20(19)24)14-22(27)26-12-9-17-5-1-2-6-18(17)21(26)15-25-10-3-4-11-25/h1-2,5-8,13,21H,3-4,9-12,14-15H2/t21-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H24ClFN4O3/c1-29-20-13-19-16(12-21(20)31-8-2-5-28-6-9-30-10-7-28)22(26-14-25-19)27-15-3-4-18(24)17(23)11-15/h3-4,11-14H,2,5-10H2,1H3,(H,25,26,27)	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C22H24ClN3O/c23-19-9-4-8-18-21(19)24-20(25-22(18)27)10-5-13-26-14-11-17(12-15-26)16-6-2-1-3-7-16/h1-4,6-9,17H,5,10-15H2,(H,24,25,27)	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C22H24ClN3OS2/c23-16-6-7-20-18(14-16)26(17-4-1-2-5-19(17)29-20)11-3-10-25-12-8-22(9-13-25)24-21(27)15-28-22/h1-2,4-7,14H,3,8-13,15H2,(H,24,27)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H24ClN5O2/c23-15-6-7-20-18(14-15)25-22(30)28(20)16-8-12-26(13-9-16)10-3-11-27-19-5-2-1-4-17(19)24-21(27)29/h1-2,4-7,14,16H,3,8-13H2,(H,24,29)(H,25,30)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H24ClN5O2/c23-15-6-7-20-18(14-15)25-22(30)28(20)16-8-12-26(13-9-16)10-3-11-27-19-5-2-1-4-17(19)24-21(27)29/h1-2,4-7,14,16H,3,8-13H2,(H,24,29)(H,25,30)/p+1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C22H24ClNO6S/c1-21(2,3)30-20(26)24-22(13-25)18(14-5-9-16(29-4)10-6-14)19(22)31(27,28)17-11-7-15(23)8-12-17/h5-13,18-19H,1-4H3,(H,24,26)/t18-,19-,22+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H24F3N3O2S/c23-22(24,25)16-5-6-20-18(15-16)28(17-3-1-2-4-19(17)31-20)21(30)7-8-26-9-11-27(12-10-26)13-14-29/h1-6,15,29H,7-14H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H24F4N2O/c23-17-4-1-15(2-5-17)19-14-21(28-9-7-27(8-10-28)11-12-29)20-13-16(22(24,25)26)3-6-18(19)20/h1-6,13,19,21,29H,7-12,14H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H24F4N2O/c23-17-4-1-15(2-5-17)19-14-21(28-9-7-27(8-10-28)11-12-29)20-13-16(22(24,25)26)3-6-18(19)20/h1-6,13,19,21,29H,7-12,14H2/t19-,21-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H24F4N2O/c23-17-4-1-15(2-5-17)19-14-21(28-9-7-27(8-10-28)11-12-29)20-13-16(22(24,25)26)3-6-18(19)20/h1-6,13,19,21,29H,7-12,14H2/t19-,21+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H24F4N2O/c23-17-4-1-15(2-5-17)19-14-21(28-9-7-27(8-10-28)11-12-29)20-13-16(22(24,25)26)3-6-18(19)20/h1-6,13,19,21,29H,7-12,14H2/t19-,21+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H24FN3O2/c23-17-9-7-16(8-10-17)21(27)6-3-13-25-14-11-18(12-15-25)26-20-5-2-1-4-19(20)24-22(26)28/h1-2,4-5,7-10,18H,3,6,11-15H2,(H,24,28)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H24FN3O2/c23-18-8-6-16(7-9-18)21(27)17-10-14-25(15-11-17)12-3-13-26-20-5-2-1-4-19(20)24-22(26)28/h1-2,4-9,17H,3,10-15H2,(H,24,28)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H24FN3O3/c1-28-19-5-3-2-4-18(19)26-14-12-25(13-15-26)11-10-20-21(24-22(27)29-20)16-6-8-17(23)9-7-16/h2-9H,10-15H2,1H3,(H,24,27)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H24FN3OS/c23-17-9-7-16(8-10-17)21(27)6-3-13-25-14-11-18(12-15-25)26-20-5-2-1-4-19(20)24-22(26)28/h1-2,4-5,7-10,18H,3,6,11-15H2,(H,24,28)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H24N2/c1-2-6-18(7-3-1)22-16-19(11-10-17-12-14-23-15-13-17)20-8-4-5-9-21(20)24-22/h1-9,16-17,23H,10-15H2	1	(Mazumdar et al., 2023)

2023)

InChI=1S/C22H24N2O2/c1-14-2-5-18(22(26)24-19-10-11-19)12-20(14)16-6-8-17(9-7-16)21(25)23-13-15-3-4-15/h2,5-9,12,15,19H,3-4,10-11,13H2,1H3,(H,23,25)(H,24,26)

1 (Zhang et al., 2019)
(Mazumdar et al.,
1 2023)

InChI=1S/C22H24N2O2/c1-17-7-9-18(10-8-17)20(13-16-24-14-2-3-15-24)21-6-4-5-19(23-21)11-12-22(25)26/h4-13H,2-3,14-16H2,1H3,(H,25,26)/b12-11+,20-13?

InChI=1S/C22H24N2O2/c1-17-7-9-18(10-8-17)20(13-16-24-14-2-3-15-24)21-6-4-5-19(23-21)11-12-22(25)26/h4-13H,2-3,14-16H2,1H3,(H,25,26)/b12-11+,20-13+

0 (Meng et al., 2021)
(Mazumdar et al.,
1 2023)

InChI=1S/C22H24N2O4/c1-23-9-11-24(12-10-23)13-17-19(25)7-8-20-21(17)18(14-28-20)22(26)15-3-5-16(27-2)6-4-15/h3-8,14,25H,9-13H2,1-2H3

(Mazumdar et al.,
0 2023)

InChI=1S/C22H24N2O6/c1-28-16-5-6-17-15(10-16)3-2-8-22(17,27)12-24-21(26)20(25)23-11-14-4-7-18-19(9-14)30-13-29-18/h4-7,9-10,27H,2-3,8,11-13H2,1H3,(H,23,25)(H,24,26)/t22-/m0/s1

(Mazumdar et al.,
0 2023)

InChI=1S/C22H24N2O8.H2O/c1-7-8-5-4-6-9(25)11(8)16(26)12-10(7)17(27)14-15(24(2)3)18(28)13(21(23)31)20(30)22(14,32)19(12)29;/h4-7,10,14-15,17,25-27,30,32H,1-3H3,(H2,23,31);1H2/t7-,10+,14+,15-,17-,22-;/m0./s1

(Mazumdar et al.,
0 2023)

InChI=1S/C22H24N2O8/c1-21(31)8-5-4-6-11(25)12(8)16(26)13-9(21)7-10-15(24(2)3)17(27)14(20(23)30)19(29)22(10,32)18(13)28/h4-6,9-10,15,25-26,29,31-32H,7H2,1-3H3,(H2,23,30)

(Meng et al., 2021)
(Mazumdar et al.,
0 2023)

InChI=1S/C22H24N2O8/c1-21(31)8-5-4-6-11(25)12(8)16(26)13-9(21)7-10-15(24(2)3)17(27)14(20(23)30)19(29)22(10,32)18(13)28/h4-6,9-10,15,25-26,29,31-32H,7H2,1-3H3,(H2,23,30)/t9-,10-,15-,21?,22?/m0/s1

(Mazumdar et al.,
0 2023)

InChI=1S/C22H24N2O8/c1-21(31)8-5-4-6-11(25)12(8)16(26)13-9(21)7-10-15(24(2)3)17(27)14(20(23)30)19(29)22(10,32)18(13)28/h4-6,9-10,15,25-26,29,31-32H,7H2,1-3H3,(H2,23,30)/t9-,10-,15-,21+,22-/m0/s1

(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C22H24N2O8/c1-21(31)8-5-4-6-11(25)12(8)16(26)13-9(21)7-10-15(24(2)3)17(27)14(20(23)30)19(29)22(10,32)18(13)28/h4-6,9-10,15,25-26,29,31-32H,7H2,1-3H3,(H2,23,30)/t9-,10-,15-,21+,22-/m1/s1

(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C22H24N2O8/c1-21(31)8-5-4-6-11(25)12(8)16(26)13-9(21)7-10-15(24(2)3)17(27)14(20(23)30)19(29)22(10,32)18(13)28/h4-6,9-10,15,25-26,29,31-32H,7H2,1-3H3,(H2,23,30)/t9-,10-,15+,21+,22-/m0/s1

(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C22H24N2O8/c1-21(31)8-5-4-6-11(25)12(8)16(26)13-9(21)7-10-15(24(2)3)17(27)14(20(23)30)19(29)22(10,32)18(13)28/h4-6,9-10,15,25,27-28,31-32H,7H2,1-3H3,(H2,23,30)/t9-,10-,15-,21?,22?/m0/s1

(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C22H24N2O8/c1-7-8-5-4-6-9(25)11(8)16(26)12-10(7)17(27)14-15(24(2)3)18(28)13(21(23)31)20(30)22(14,32)19(12)29/h4-7,10,14-15,17,25-27,30,32H,1-3H3,(H2,23,31)/t7-,10-,14-,15-,17-,22+/m0/s1

(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C22H24N2O8/c1-7-8-5-4-6-9(25)11(8)16(26)12-10(7)17(27)14-15(24(2)3)18(28)13(21(23)31)20(30)22(14,32)19(12)29/h4-7,10,14-15,17,25-27,30,32H,1-3H3,(H2,23,31)/t7-,10-,14-,15-,17+,22+/m0/s1

(Li et al., 2005)

InChI=1S/C22H24N2O8/c1-7-8-5-4-6-9(25)11(8)16(26)12-10(7)17(27)14-15(24(2)3)18(28)13(21(23)31)20(30)22(14,32)19(12)29/h4-7,10,14-15,17,25-27,30,32H,1-3H3,(H2,23,31)/t7-,10+,14+,15-,17-,22-/m0/s1

(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C22H24N2O8/c1-7-8-5-4-6-9(25)11(8)16(26)12-10(7)17(27)14-15(24(2)3)18(28)13(21(23)31)20(30)22(14,32)19(12)29/h4-7,10,14-15,17,25-28,32H,1-3H3,(H2,23,31)/t7-,10+,14+,15+,17+,22?/m1/s1

(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C22H24N2O8/c1-7-8-5-4-6-9(25)11(8)16(26)12-10(7)17(27)14-15(24(2)3)18(28)13(21(23)31)20(30)22(14,32)19(12)29/h4-7,10,14-15,17,25,27-29,32H,1-3H3,(H2,23,31)/t7-,10+,14+,15+,17+,22?/m1/s1

(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C22H24N2O8S/c1-29-16-7-5-13(11-15(16)24-9-4-10-33(24,27)28)23-19(25)12-18-14-6-8-17(30-2)21(31-3)20(14)22(26)32-18/h5-8,11,18H,4-9-10,12H2,1-3H3,(H,23,25)/t18-/m0/s1

InChI=1S/C22H24N2O8S/c1-29-16-7-5-13(11-15(16)24-9-4-10-33(24,27)28)23-19(25)12-18-14-6-8-17(30-2)21(31-3)20(14)22(26)32-18/h5-8,11,18H,4,9-10,12H2,1-3H3,(H,23,25)/t18-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H24N2O9/c1-21(32)7-5-4-6-8(25)9(7)15(26)10-12(21)17(28)13-14(24(2)3)16(27)11(20(23)31)19(30)22(13,33)18(10)29/h4-6,12-14,17,25-26,28,30,32-33H,1-3H3,(H2,23,31)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H24N2O9/c1-21(32)7-5-4-6-8(25)9(7)15(26)10-12(21)17(28)13-14(24(2)3)16(27)11(20(23)31)19(30)22(13,33)18(10)29/h4-6,12-14,17,25-26,28,30,32-33H,1-3H3,(H2,23,31)/t12-,13-,14-,17-,21-,22+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H24N2O9/c1-21(32)7-5-4-6-8(25)9(7)15(26)10-12(21)17(28)13-14(24(2)3)16(27)11(20(23)31)19(30)22(13,33)18(10)29/h4-6,12-14,17,25-26,28,30,32-33H,1-3H3,(H2,23,31)/t12-,13-,14-,17-,21?,22?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H24N2O9/c1-21(32)7-5-4-6-8(25)9(7)15(26)10-12(21)17(28)13-14(24(2)3)16(27)11(20(23)31)19(30)22(13,33)18(10)29/h4-6,12-14,17,25-26,28,30,32-33H,1-3H3,(H2,23,31)/t12-,13-,14-,17+,21-,22+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H24N2O9/c1-21(32)7-5-4-6-8(25)9(7)15(26)10-12(21)17(28)13-14(24(2)3)16(27)11(20(23)31)19(30)22(13,33)18(10)29/h4-6,12-14,17,25-26,28,30,32-33H,1-3H3,(H2,23,31)/t12-,13-,14-,17+,21-,22+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H24N2O9/c1-21(32)7-5-4-6-8(25)9(7)15(26)10-12(21)17(28)13-14(24(2)3)16(27)11(20(23)31)19(30)22(13,33)18(10)29/h4-6,12-14,17,25-26,28,30,32-33H,1-3H3,(H2,23,31)/t12-,13-,14-,17-,21?,22?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H24N2O9/c1-21(32)7-5-4-6-8(25)9(7)15(26)10-12(21)17(28)13-14(24(2)3)16(27)11(20(23)31)19(30)22(13,33)18(10)29/h4-6,12-14,17,25-26,28,30,32-33H,1-3H3,(H2,23,31)/t12?,13-,14+,17+,21-,22+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H24N2O9/c1-21(32)7-5-4-6-8(25)9(7)15(26)10-12(21)17(28)13-14(24(2)3)16(27)11(20(23)31)19(30)22(13,33)18(10)29/h4-6,12-14,17,25,27-29,32-33H,1-3H3,(H2,23,31)/t12-,13-,14-,17-,21?,22?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H24N4O2/c27-22(20-7-4-16-28-20)26(21-17-23-11-12-24-21)19-9-14-25(15-10-19)13-8-18-5-2-1-3-6-18/h1-7,11-12,16-17,19H,8-10,13-15H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H24N4O8S2/c23-18(27)13-6-8-25(9-7-13)10-14-11-35-21-15(20(29)26(21)16(14)22(30)31)24-19(28)17(36(32,33)34)12-4-2-1-3-5-12/h1-9,13-17,21H,10-11H2,(H2,23,27)(H,24,28)(H,30,31)(H,32,33,34)/t14-,15-,16+,17-,21+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H24N6O5S2/c1-33-26-15(13-10-35-22(23)24-13)18(29)25-16-19(30)28-17(21(31)32)12(9-34-20(16)28)8-27-7-3-5-11-4-2-6-14(11)27/h3,7,10,16,20H,2,4-6,8-9H2,1H3,(H2,23,24)(H,25,29)(H,31,32)/b26-15+/t16-,20-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H24N6O7S2/c1-22(2,20(33)34)35-26-13(12-10-37-21(23)24-12)16(29)25-14-17(30)28-15(19(31)32)11(9-36-18(14)28)8-27-6-4-3-5-7-27/h4-7,10,14,18H,3,8-9H2,1-2H3,(H2,23,24)(H,25,29)(H,31,32)(H,33,34)/b26-13+/t14-,18+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H24O7S/c1-4-28-20(23)22(21(24)29-5-2)18(15-11-13-16(27-3)14-12-15)19(22)30(25,26)17-9-7-6-8-10-17/h6-14,18-19H,4-5H2,1-3H3/t18-,19-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H25BrN2O3S/c1-5-28-22(27)20-18(13-29-14-9-7-6-8-10-14)25(4)17-11-16(23)21(26)15(19(17)20)12-24(2)3/h6-11,26H,5,12-13H2,1-4H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H25ClN2OS/c23-17-7-8-22-20(16-17)18(19-4-1-2-6-21(19)27-22)5-3-9-24-10-12-25(13-11-24)14-15-26/h1-2,4-8,16,26H,3,9-15H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H25ClN2OS/c23-17-7-8-22-20(16-17)18(19-4-1-2-6-21(19)27-22)5-3-9-24-10-12-25(13-11-24)14-15-26/h1-2,4-8,16,26H,3,9-15H2/b18-5-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H25ClN2OS/c23-17-7-8-22-20(16-17)18(19-4-1-2-6-21(19)27-22)5-3-9-24-10-12-25(13-11-24)14-15-26/h1-2,4-8,16,26H,3,9-15H2/b18-5+	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H25ClN6O2/c23-15-6-7-20-18(14-15)25-22(31)29(20)26-16-8-12-27(13-9-16)10-3-11-28-19-5-2-1-4-17(19)24-21(28)30/h1-2,4-7,14,16,26H,3,8-13H2,(H,24,30)(H,25,31)	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C22H25ClO7/c1-2-28-16-6-3-13(4-7-16)9-14-10-15(5-8-17(14)23)22-20(27)18(25)19(26)21(11-24,30-22)12-29-22/h3-8,10,18-20,24-27H,2,9,11-12H2,1H3/t18-,19-,20+,21-,22-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H25F2N3O2S/c1-26(22-25-20-4-2-3-5-21(20)30-22)15-8-10-27(11-9-15)13-16(28)14-29-17-6-7-18(23)19(24)12-17/h2-7,12,15-16,28H,8-11,13-14H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H25F2N3O2S/c1-26(22-25-20-4-2-3-5-21(20)30-22)15-8-10-27(11-9-15)13-16(28)14-29-17-6-7-18(23)19(24)12-17/h2-7,12,15-16,28H,8-11,13-14H2,1H3/t16-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H25F2NO4/c23-15-3-7-19-13(9-15)1-5-21(28-19)17(26)11-25-12-18(27)22-6-2-14-10-16(24)4-8-20(14)29-22/h3-4,7-10,17-18,21-22,25-27H,1-2,5-6,11-12H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H25F3N2S/c1-16-9-13-26(14-10-16)11-4-12-27-18-5-2-3-6-20(18)28-21-8-7-17(15-19(21)27)22(23,24)25/h2-3,5-8,15-16H,4,9-14H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H25F3N4O3S/c1-28-11-19(27-13-28)33(31,32)29-9-17-18(10-29)21(17,8-14-5-6-14)12-26-20(30)15-3-2-4-16(7-15)22(23,24)25/h2-4,7,11,13-14,17-18H,5-6,8-10,12H2,1H3,(H,26,30)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C22H25F3N4O3S/c1-28-11-19(27-13-28)33(31,32)29-9-17-18(10-29)21(17,8-14-6-7-14)12-26-20(30)15-4-2-3-5-16(15)22(23,24)25/h2-5,11,13-14,17-18H,6-10,12H2,1H3,(H,26,30)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C22H25N2OS/c25-22-23(14-17-8-3-1-4-9-17)19-16-26-13-7-12-20(26)21(19)24(22)15-18-10-5-2-6-11-18/h1-6,8-11,19-21H,7,12-16H2/q+1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H25N3O3/c1-28-19-9-7-18(8-10-19)25-15-17(13-21(25)26)22(27)24-12-3-2-6-20(24)16-5-4-11-23-14-16/h4-5,7-11,14,17,20H,2-3,6,12-13,15H2,1H3/t17-,20+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H25N3O3/c26-21-22(25(16-23-21)17-6-2-1-3-7-17)10-12-24(13-11-22)14-18-15-27-19-8-4-5-9-20(19)28-18/h1-9,18H,10-16H2,(H,23,26)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H25N3O3/c26-21-22(25(16-23-21)17-6-2-1-3-7-17)10-12-24(13-11-22)14-18-15-27-19-8-4-5-9-20(19)28-18/h1-9,18H,10-16H2,(H,23,26)/t18-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H25N3O3/c26-21-22(25(16-23-21)17-6-2-1-3-7-17)10-12-24(13-11-22)14-18-15-27-19-8-4-5-9-20(19)28-18/h1-9,18H,10-16H2,(H,23,26)/t18-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H25N3O4/c1-28-19-7-3-16(14-20(19)29-2)22(27)25-11-9-24(10-12-25)17-5-6-18-15(13-17)4-8-21(26)23-18/h3,5-7,13-14H,4,8-12H2,1-2H3,(H,23,26)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H25N3O4S/c1-15(30-14-16-8-6-5-7-9-16)22(26)25(2)13-20-23-21(24-29-20)18-11-10-17(27-3)12-19(18)28-4/h5-12,15H,13-14H2,1-4H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H25N3O4S/c1-15(30-14-16-8-6-5-7-9-16)22(26)25(2)13-20-23-21(24-29-20)18-11-10-17(27-3)12-19(18)28-4/h5-12,15H,13-14H2,1-4H3/t15-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H25N3O4S/c1-2-29-22(27)23-16-7-8-20-18(15-16)25(17-5-3-4-6-19(17)30-20)21(26)9-10-24-11-13-28-14-12-24/h3-8,15H,2,9-14H2,1H3,(H,23,27)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H25N3OS/c1-26-20-10-9-17(22-24-12-13-27-22)14-18(20)15-25-19-8-5-11-23-21(19)16-6-3-2-4-7-16/h2-4,6-7,9-10,12-14,19,21,23,25H,5,8,11,15H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H25N3OS/c1-26-20-10-9-17(22-24-12-13-27-22)14-18(20)15-25-19-8-5-11-23-21(19)16-6-3-2-4-7-16/h2-4,6-7,9-10,12-14,19,21,23,25H,5,8,11,15H2,1H3/t19-,21-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H25NO2/c1-2-5-16(6-3-1)17-11-12-23(13-17)14-18-7-4-8-20-19(18)9-10-21-22(20)25-15-24-21/h1-3,5-6,9-10,17-18H,4,7-8,11-	1	(Mazumdar et al., 2023)

15H2	2023)
InChI=1S/C22H25NO2/c1-2-5-16(6-3-1)17-11-12-23(13-17)14-18-7-4-8-20-19(18)9-10-21-22(20)25-15-24-21/h1-3,5-6,9-10,17-18H,4,7-8,11-15H2/t17-,18-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H25NO2/c1-2-5-16(6-3-1)17-11-12-23(13-17)14-18-7-4-8-20-19(18)9-10-21-22(20)25-15-24-21/h1-3,5-6,9-10,17-18H,4,7-8,11-15H2/t17-,18-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H25NO2/c1-2-5-16(6-3-1)17-11-12-23(13-17)14-18-7-4-8-20-19(18)9-10-21-22(20)25-15-24-21/h1-3,5-6,9-10,17-18H,4,7-8,11-15H2/t17-,18+/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H25NO3/c1-21(2)11-12-22(3,4)18-13-16(9-10-17(18)21)23-19(24)14-5-7-15(8-6-14)20(25)26/h5-10,13H,11-12H2,1-4H3,(H,23,24)(H,25,26)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H25NO5/c1-12(24)26-17-7-5-14-11-16-15-6-8-18(27-13(2)25)21-22(15,9-4-10-23(16)3)19(14)20(17)28-21/h5-8,15-16,18,21H,4,9-11H2,1-3H3/t15-,16-,18+,21-,22-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H25NO5S/c1-15-10-12-17(13-11-15)29(26,27)19-18(16-8-6-5-7-9-16)22(19,14-24)23-20(25)28-21(2,3)4/h5-14,18-19H,1-4H3,(H,23,25)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H25NO5S/c1-15-10-12-17(13-11-15)29(26,27)19-18(16-8-6-5-7-9-16)22(19,14-24)23-20(25)28-21(2,3)4/h5-14,18-19H,1-4H3,(H,23,25)/t18-,19+,22-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H25NO6/c1-12(24)23-16-8-6-13-10-19(27-3)21(28-4)22(29-5)20(13)14-7-9-18(26-2)17(25)11-15(14)16/h7,9-11,16H,6,8H2,1-5H3,(H,23,24)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H25NO6/c1-12(24)23-16-8-6-13-10-19(27-3)21(28-4)22(29-5)20(13)14-7-9-18(26-2)17(25)11-15(14)16/h7,9-11,16H,6,8H2,1-5H3,(H,23,24)/t16-/m0/s1	1 (Kaupp, 2007)
InChI=1S/C22H25NO6/c1-12(24)23-16-8-6-13-10-19(27-3)21(28-4)22(29-5)20(13)14-7-9-18(26-2)17(25)11-15(14)16/h7,9-11,16H,6,8H2,1-5H3,(H,23,24)/t16-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H26ClFO4/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,24)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-23/h6-7,9,12,15-16,28H,4-5,8,10-11H2,1-3H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H26ClFO4/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,24)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-23/h6-7,9,12,15-16,28H,4-5,8,10-11H2,1-3H3/t12-,15-,16-,19-,20-,21-,22-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H26ClFO4/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,24)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-23/h6-7,9,12,15-16,28H,4-5,8,10-11H2,1-3H3/t12-,15-,16-,19?,20?,21?,22?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H26ClFO4/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,24)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-23/h6-7,9,12,15-16,28H,4-5,8,10-11H2,1-3H3/t12-,15?,16-,19-,20-,21-,22-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H26ClFO4/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,24)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-23/h6-7,9,12,15-16,28H,4-5,8,10-11H2,1-3H3/t12-,15+,16-,19+,20+,21-,22-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H26ClFO4/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,24)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-23/h6-7,9,12,15-16,28H,4-5,8,10-11H2,1-3H3/t12-,15+,16+,19+,20-,21+,22-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H26ClN3O/c1-25-13-4-5-18(12-14-25)26-22(27)20-7-3-2-6-19(20)21(24-26)15-16-8-10-17(23)11-9-16/h2-3,6-11,18,21,24H,4-5,12-15H2,1H3/t18-,21+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H26ClN7O2S/c1-14-4-3-5-16(23)20(14)28-21(32)17-13-24-22(33-17)27-18-12-19(26-15(2)25-18)30-8-6-29(7-9-30)10-11-31/h3-5,12-13,31H,6-11H2,1-2H3,(H,28,32)(H,24,25,26,27)	0 (Zhang et al., 2019)

InChI=1S/C22H26F3N3O5/c23-22(24,25)17-6-7-21-19(16-17)28(18-4-1-2-5-20(18)30-21)9-3-8-26-10-12-27(13-11-26)14-15-29/h1-2,4-7,16,29H,3,8-15H2	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C22H26F3N3O5/c23-22(24,25)17-6-7-21-19(16-17)28(18-4-1-2-5-20(18)30-21)9-3-8-26-10-12-27(13-11-26)14-15-29/h1-2,4-7,16,29H,3,8-15H2/p+2	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C22H26FN3O2/c23-18-7-9-20(10-8-18)28-16-4-13-25-14-11-22(12-15-25)21(27)24-17-26(22)19-5-2-1-3-6-19/h1-3,5-10H,4,11-17H2,(H,24,27)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H26FN3O2S/c1-25(22-24-20-4-2-3-5-21(20)29-22)17-10-12-26(13-11-17)14-18(27)15-28-19-8-6-16(23)7-9-19/h2-9,17-18,27H,10-15H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H26FN3O2S/c1-25(22-24-20-4-2-3-5-21(20)29-22)17-10-12-26(13-11-17)14-18(27)15-28-19-8-6-16(23)7-9-19/h2-9,17-18,27H,10-15H2,1H3/t18-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H26FN3O2S/c1-25(22-24-20-4-2-3-5-21(20)29-22)17-10-12-26(13-11-17)14-18(27)15-28-19-8-6-16(23)7-9-19/h2-9,17-18,27H,10-15H2,1H3/t18-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H26FN3O4/c1-30-21-18-13(20(27)14(22(28)29)8-16(18)25-12-4-5-12)7-15(23)19(21)26-9-11-3-2-6-24-17(11)10-26/h7-8,11-12,16-17,24-25H,2-6,9-10H2,1H3,(H,28,29)/t11-,16-,17+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H26FN3O4/c23-17-6-4-16(5-7-17)22(28)24-8-9-25-10-12-26(13-11-25)19-2-1-3-20-21(19)29-15-18(14-27)30-20/h1-7,18,27H,8-15H2,(H,24,28)	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C22H26FN3O4/c23-17-6-4-16(5-7-17)22(28)24-8-9-25-10-12-26(13-11-25)19-2-1-3-20-21(19)29-15-18(14-27)30-20/h1-7,18,27H,8-15H2,(H,24,28)/p+1/t18-/m0/s1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C22H26FN3O4/c23-17-6-4-16(5-7-17)22(28)24-8-9-25-10-12-26(13-11-25)19-2-1-3-20-21(19)29-15-18(14-27)30-20/h1-7,18,27H,8-15H2,(H,24,28)/t18-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H26FNO2/c1-17-4-8-19(9-5-17)22(26)12-15-24(16-13-22)14-2-3-21(25)18-6-10-20(23)11-7-18/h4-11,26H,2-3,12-16H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H26IN3O2S/c1-24-16-26(17-6-3-2-4-7-17)22(21(24)28)11-14-25(15-12-22)13-5-8-18(27)19-9-10-20(23)29-19/h2-4,6-7,9-10H,5,8,11-16H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H26IN3O2S/c1-24-16-26(17-6-3-2-4-7-17)22(21(24)28)11-14-25(15-12-22)13-5-8-18(27)19-9-10-20(23)29-19/h2-4,6-7,9-10H,5,8,11-16H2,1H3/i23-4	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H26IN3O2S/c1-24-16-26(18-6-3-2-4-7-18)22(21(24)28)9-12-25(13-10-22)11-5-8-19(27)17-14-20(23)29-15-17/h2-4,6-7,14-15H,5,8-13,16H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H26N2O2/c1-3-22-11-7-12-23-13-10-16-15-8-5-6-9-17(15)24(19(16)20(22)23)18(14-22)21(25)26-4-2/h5-6,8-9,14,20H,3-4,7,10-13H2,1-2H3/t20-,22+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H26N2O2S/c1-24-12-5-6-19(24)15-18-16-23-22-10-9-17(14-21(18)22)11-13-27(25,26)20-7-3-2-4-8-20/h2-4,7-10,14,16,19,23H,5-6,11-13,15H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H26N2O2S/c1-24-12-5-6-19(24)15-18-16-23-22-10-9-17(14-21(18)22)11-13-27(25,26)20-7-3-2-4-8-20/h2-4,7-10,14,16,19,23H,5-6,11-13,15H2,1H3/t19-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H26N2O2S/c1-24-12-5-6-19(24)15-18-16-23-22-10-9-17(14-21(18)22)11-13-27(25,26)20-7-3-2-4-8-20/h2-4,7-10,14,16,19,23H,5-6,11-13,15H2,1H3/t19-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H26N2O4/c1-7-15-13(2)23-24-22(14-8-9-18(25-3)19(10-14)26-4)17-12-21(28-6)20(27-5)11-16(15)17/h8-12,15H,7H2,1-6H3	1	(Mazumdar et al.,

InChI=1S/C22H26N2O4/c1-7-15-13(2)23-24-22(14-8-9-18(25-3)19(10-14)26-4)17-12-21(28-6)20(27-5)11-16(15)17/h8-12,15H,7H2,1-6H3/t15-/m0/s1	2023)
InChI=1S/C22H26N2O4/c1-7-15-13(2)23-24-22(14-8-9-18(25-3)19(10-14)26-4)17-12-21(28-6)20(27-5)11-16(15)17/h8-12,15H,7H2,1-6H3/t15-/m1/s1	(Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C22H26N2O4/c1-7-15-13(2)24(23)22(14-8-9-18(25-3)19(10-14)26-4)17-12-21(28-6)20(27-5)11-16(15)17/h8-12,23H,7H2,1-6H3	(Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C22H26N2O4S/c1-15(25)28-20-21(16-9-11-17(27-4)12-10-16)29-19-8-6-5-7-18(19)24(22(20)26)14-13-23(2)3/h5-12,20-21H,13-14H2,1-4H3	(Mazumdar et al., 1 2023)
InChI=1S/C22H26N2O4S/c1-15(25)28-20-21(16-9-11-17(27-4)12-10-16)29-19-8-6-5-7-18(19)24(22(20)26)14-13-23(2)3/h5-12,20-21H,13-14H2,1-4H3/t20-,21+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H26N2O4S/c1-15(25)28-20-21(16-9-11-17(27-4)12-10-16)29-19-8-6-5-7-18(19)24(22(20)26)14-13-23(2)3/h5-12,20-21H,13-14H2,1-4H3/t20-,21+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H26N6O2/c1-25-20-19(21(29)26(2)22(25)30)28(14-24-20)12-11-27-9-7-15(8-10-27)17-13-23-18-6-4-3-5-16(17)18/h3-6,13-15,23H,7-12H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H26NO3/c1-23-14-12-17(13-15-23)20(16-23)26-21(24)22(25,18-8-4-2-5-9-18)19-10-6-3-7-11-19/h2-11,17,20,25H,12-16H2,1H3/q+1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27ClF2O3/c1-11-6-13-14-8-16(24)15-7-12(27)4-5-21(15,3)22(14,23)18(25)9-20(13,2)19(11)17(28)10-26/h4-5,7,11,13-14,16,18-19,26H,6,8-10H2,1-3H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27ClF2O3/c1-11-6-13-14-8-16(24)15-7-12(27)4-5-21(15,3)22(14,23)18(25)9-20(13,2)19(11)17(28)10-26/h4-5,7,11,13-14,16,18-19,26H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13-,14-,16-,18-,19?,20?,21?,22?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27ClF2O3/c1-11-6-13-14-8-16(24)15-7-12(27)4-5-21(15,3)22(14,23)18(25)9-20(13,2)19(11)17(28)10-26/h4-5,7,11,13-14,16,18-19,26H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13-,14-,16-,18-,19+,20?,21?,22?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27ClF2O3/c1-11-6-13-14-8-16(24)15-7-12(27)4-5-21(15,3)22(14,23)18(25)9-20(13,2)19(11)17(28)10-26/h4-5,7,11,13-14,16,18-19,26H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13-,14+,16-,18+,19+,20+,21+,22-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27ClF2O3/c1-11-6-13-14-8-16(24)15-7-12(27)4-5-21(15,3)22(14,23)18(25)9-20(13,2)19(11)17(28)10-26/h4-5,7,11,13-14,16,18-19,26H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13+,14?,16+,18+,19-,20+,21+,22+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27ClF2O3/c1-11-6-13-14-8-16(24)15-7-12(27)4-5-21(15,3)22(14,23)18(25)9-20(13,2)19(11)17(28)10-26/h4-5,7,11,13-14,16,18-19,26H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13+,14+,16-,18-,19+,20-,21+,22+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27ClF2O3/c1-11-6-13-14-8-16(24)15-7-12(27)4-5-21(15,3)22(14,23)18(25)9-20(13,2)19(11)17(28)10-26/h4-5,7,11,13-14,16,18-19,26H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13+,14+,16+,18+,19-,20+,21+,22?/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27ClF2O4/c1-11-6-13-14-8-16(24)15-7-12(26)4-5-19(15,2)21(14,25)17(27)9-20(13,3)22(11,29)18(28)10-23/h4-5,7,11,13-14,16-17,27,29H,6,8-10H2,1-3H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27ClF2O4/c1-11-6-13-14-8-16(24)15-7-12(26)4-5-19(15,2)21(14,25)17(27)9-20(13,3)22(11,29)18(28)10-23/h4-5,7,11,13-14,16-17,27,29H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13-,14-,16-,17-,19?,20?,21?,22?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27ClF2O4/c1-11-6-13-14-8-16(24)15-7-12(26)4-5-19(15,2)21(14,25)17(27)9-20(13,3)22(11,29)18(28)10-23/h4-5,7,11,13-14,16-17,27,29H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13-,14+,16-,17+,19+,20+,21-,22-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C22H27ClF2O4/c1-11-6-13-14-8-16(24)15-7-12(26)4-5-19(15,2)21(14,25)17(27)9-20(13,3)22(11,29)18(28)10-23/h4-5,7,11,13-14,16-17,27,29H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13+,14+,16+,17-,19+,20+,21+,22+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27ClF2O4S/c1-11-6-13-14-8-16(24)15-7-12(26)4-5-19(15,2)21(14,25)17(27)9-20(13,3)22(11,29)18(28)30-10-23/h4-5,7,11,13-14,16-17,27,29H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13+,14+,16+,17+,19+,20+,21+,22+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H27ClF2O5/c1-10-4-11-12-5-15(24)13-6-16(27)14(23)7-19(13,2)21(12,25)17(28)8-20(11,3)22(10,30)18(29)9-26/h6-7,10-12,15,17,26,28,30H,4-5,8-9H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27ClF2O5/c1-10-4-11-12-5-15(24)13-6-16(27)14(23)7-19(13,2)21(12,25)17(28)8-20(11,3)22(10,30)18(29)9-26/h6-7,10-12,15,17,26,28,30H,4-5,8-9H2,1-3H3/t10-,11-,12-,15-,17-,19?,20?,21?,22?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27ClF2O5/c1-10-4-11-12-5-15(24)13-6-16(27)14(23)7-19(13,2)21(12,25)17(28)8-20(11,3)22(10,30)18(29)9-26/h6-7,10-12,15,17,26,28,30H,4-5,8-9H2,1-3H3/t10-,11-,12+,15-,17+,19+,20+,21-,22-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27ClF2O5/c1-10-4-11-12-5-15(24)13-6-16(27)14(23)7-19(13,2)21(12,25)17(28)8-20(11,3)22(10,30)18(29)9-26/h6-7,10-12,15,17,26,28,30H,4-5,8-9H2,1-3H3/t10-,11?,12+,15+,17+,19+,20+,21+,22+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27ClF2O5/c1-10-4-11-12-5-15(24)13-6-16(27)14(23)7-19(13,2)21(12,25)17(28)8-20(11,3)22(10,30)18(29)9-26/h6-7,10-12,15,17,26,28,30H,4-5,8-9H2,1-3H3/t10-,11+,12+,15+,17-,19+,20-,21+,22-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27ClF2O5/c1-10-4-11-12-5-15(24)13-6-16(27)14(23)7-19(13,2)21(12,25)17(28)8-20(11,3)22(10,30)18(29)9-26/h6-7,10-12,15,17,26,28,30H,4-5,8-9H2,1-3H3/t10-,11+,12+,15+,17+,19+,20+,21+,22+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27ClN2O/c1-17(2)24-14-12-21(13-15-24)25(20-10-8-19(23)9-11-20)22(26)16-18-6-4-3-5-7-18/h3-11,17,21H,12-16H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27ClN4O3/c1-27(20(28)14-26-22(30)18(25)9-5-6-12-24)19-11-10-16(23)13-17(19)21(29)15-7-3-2-4-8-15/h2-4,7-8,10-11,13,18H,5-6,9,12,14,24-25H2,1H3,(H,26,30)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H27ClN4O3/c1-27(20(28)14-26-22(30)18(25)9-5-6-12-24)19-11-10-16(23)13-17(19)21(29)15-7-3-2-4-8-15/h2-4,7-8,10-11,13,18H,5-6,9,12,14,24-25H2,1H3,(H,26,30)/t18-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H27ClN4O3/c1-27(20(28)14-26-22(30)18(25)9-5-6-12-24)19-11-10-16(23)13-17(19)21(29)15-7-3-2-4-8-15/h2-4,7-8,10-11,13,18H,5-6,9,12,14,24-25H2,1H3,(H,26,30)/t18-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H27F2N/c1-17-8-9-20(14-18(17)2)15-25-13-12-22(23,24)21(16-25)11-10-19-6-4-3-5-7-19/h3-9,14,21H,10-13,15-16H2,1-2H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C22H27F3N2O2/c1-15(2)28-20-11-10-18(29-22(23,24)25)13-17(20)14-27-19-9-6-12-26-21(19)16-7-4-3-5-8-16/h3-5,7-8,10-11,13,15,19,21,26-27H,6,9,12,14H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27F3N2O2/c1-15(2)28-20-11-10-18(29-22(23,24)25)13-17(20)14-27-19-9-6-12-26-21(19)16-7-4-3-5-8-16/h3-5,7-8,10-11,13,15,19,21,26-27H,6,9,12,14H2,1-2H3/t19-,21-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27F3O4S/c1-11-6-13-14-8-16(24)15-7-12(26)4-5-19(15,2)21(14,25)17(27)9-20(13,3)22(11,29)18(28)30-10-23/h4-5,7,11,13-14,16-17,27,29H,6,8-10H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27F3O4S/c1-11-6-13-14-8-16(24)15-7-12(26)4-5-19(15,2)21(14,25)17(27)9-20(13,3)22(11,29)18(28)30-10-23/h4-5,7,11,13-14,16-17,27,29H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13-,14-,16-,17-,19?,20?,21?,22?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27F3O4S/c1-11-6-13-14-8-16(24)15-7-12(26)4-5-19(15,2)21(14,25)17(27)9-20(13,3)22(11,29)18(28)30-10-23/h4-5,7,11,13-14,16-17,27,29H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13-,14-,16-,17+,19-,20-,21-,22-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27F3O4S/c1-11-6-13-14-8-16(24)15-7-12(26)4-5-19(15,2)21(14,25)17(27)9-20(13,3)22(11,29)18(28)30-10-23/h4-5,7,11,13-14,16-17,27,29H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13-,14+,16-,17+,19+,20+,21-,22-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C22H27F3O4S/c1-11-6-13-14-8-16(24)15-7-12(26)4-5-19(15,2)21(14,25)17(27)9-20(13,3)22(11,29)18(28)30-10-23/h4-5,7,11,13-14,16-17,27,29H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13+,14+,16+,17+,19+,20+,21+,22+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27F3O5/c1-11-6-13-14-8-20(23,24)15-7-12(27)4-5-18(15,2)21(14,25)16(28)9-19(13,3)22(11,30)17(29)10-26/h4-5,7,11,13-14,16,26,28,30H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13-,14-,16-,18?,19?,21?,22?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27F3O5/c1-11-6-13-14-8-20(23,24)15-7-12(27)4-5-18(15,2)21(14,25)16(28)9-19(13,3)22(11,30)17(29)10-26/h4-5,7,11,13-14,16,26,28,30H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13-,14+,16+,18+,19+,21-,22-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27F3O5/c1-11-6-13-14-8-20(23,24)15-7-12(27)4-5-18(15,2)21(14,25)16(28)9-19(13,3)22(11,30)17(29)10-26/h4-5,7,11,13-14,16,26,28,30H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13+,14?,16+,18+,19+,21+,22+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27F3O5/c1-11-6-13-14-8-20(23,24)15-7-12(27)4-5-18(15,2)21(14,25)16(28)9-19(13,3)22(11,30)17(29)10-26/h4-5,7,11,13-14,16,26,28,30H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13+,14+,16-,18+,19+,21+,22+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27F3O5/c1-11-6-13-14-8-20(23,24)15-7-12(27)4-5-18(15,2)21(14,25)16(28)9-19(13,3)22(11,30)17(29)10-26/h4-5,7,11,13-14,16,26,28,30H,6,8-10H2,1-3H3/t11?,13?,14?,16?,18-,19?,21?,22?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27FN2O2/c1-27-17-22(26)25(21-10-6-5-9-20(21)23)19-12-15-24(16-13-19)14-11-18-7-3-2-4-8-18/h2-10,19H,11-17H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27FN4O2/c1-5-27(6-2)10-9-24-22(29)20-13(3)19(25-14(20)4)12-17-16-11-15(23)7-8-18(16)26-21(17)28/h7-8,11-12,25H,5-6,9-10H2,1-4H3,(H,24,29)(H,26,28)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27FN4O2/c1-5-27(6-2)10-9-24-22(29)20-13(3)19(25-14(20)4)12-17-16-11-15(23)7-8-18(16)26-21(17)28/h7-8,11-12,25H,5-6,9-10H2,1-4H3,(H,24,29)(H,26,28)/b17-12-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27FO5/c1-10-6-13-12-8-15(23)14-7-11(24)4-5-21(14,2)18(12)16(25)9-22(13,3)17(10)19(26)20(27)28/h4-5,7,10,12-13,15-18,25H,6,8-9H2,1-3H3,(H,27,28)/t10-,12?,13?,15+,16+,17-,18?,21+,22+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27FO5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,23)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-24/h6-7,9,15-17,24,26,28H,1,4-5,8,10-11H2,2-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27FO5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,23)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-24/h6-7,9,15-17,24,26,28H,1,4-5,8,10-11H2,2-3H3/t15-,16-,17-,19?,20?,21?,22?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27FO5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,23)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-24/h6-7,9,15-17,24,26,28H,1,4-5,8,10-11H2,2-3H3/t15-,16-,17?,19-,20-,21-,22-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27FO5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,23)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-24/h6-7,9,15-17,24,26,28H,1,4-5,8,10-11H2,2-3H3/t15-,16-,17+,19-,20-,21-,22-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27FO5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,23)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-24/h6-7,9,15-17,24,26,28H,1,4-5,8,10-11H2,2-3H3/t15-,16+,17-,19+,20+,21-,22+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27FO5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,23)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-24/h6-7,9,15-17,24,26,28H,1,4-5,8,10-11H2,2-3H3/t15?,16?,17-,19-,20-,21-,22-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27N3O2/c1-4-13-25(14-5-1)17-18-8-6-9-19(16-18)26-15-7-12-23-22-24-20-10-2-3-11-21(20)27-22/h2-3,6,8-11,16H,1,4-5,7,12-15,17H2,(H,23,24)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27N3O3S2/c1-30(27,28)17-7-8-21-19(15-17)25(18-5-2-3-6-20(18)29-21)12-4-11-24-13-9-16(10-14-24)22(23)26/h2-3,5-8,15-16H,4,9-14H2,1H3,(H2,23,26)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27N3O6S/c1-12-11-32-20-16(24-18(27)15(23)13-8-6-5-7-9-13)19(28)25(20)17(12)21(29)30-10-14(26)31-22(2,3)4/h5-9,15-16,20H,10-11,23H2,1-4H3,(H,24,27)	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C22H27N3O6S/c1-12-11-32-20-16(24-18(27)15(23)13-8-6-5-7-9-13)19(28)25(20)17(12)21(29)30-10-14(26)31-22(2,3)4/h5-9,15-16,20H,10-11,23H2,1-4H3,(H,24,27)/t15-,16-,20-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27N3O6S/c1-12-11-32-20-16(24-18(27)15(23)13-8-6-5-7-9-13)19(28)25(20)17(12)21(29)30-10-14(26)31-22(2,3)4/h5-9,15-16,20H,10-11,23H2,1-4H3,(H,24,27)/t15-,16?,20-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27N3O6S/c1-12-11-32-20-16(24-18(27)15(23)13-8-6-5-7-9-13)19(28)25(20)17(12)21(29)30-10-14(26)31-22(2,3)4/h5-9,15-16,20H,10-11,23H2,1-4H3,(H,24,27)/t15-,16+,20+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27N3OS/c1-2-11-23-22(26)17-9-10-21-19(16-17)25(15-14-24-12-5-6-13-24)18-7-3-4-8-20(18)27-21/h3-4,7-10,16H,2,5-6,11-15H2,1H3,(H,23,26)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27N3OS/c1-4-13-25(14-5-1)17-18-8-6-9-19(16-18)26-15-7-12-23-22-24-20-10-2-3-11-21(20)27-22/h2-3,6,8-11,16H,1,4-5,7,12-15,17H2,(H,23,24)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27N5O4/c1-4-16-18-19(27(3)25-16)22(29)24-20(23-18)15-11-12(6-7-17(15)31-5-2)8-13-9-14(10-13)21(28)26-30/h6-7,11,13-14,30H,4-5,8-10H2,1-3H3,(H,26,28)(H,23,24,29)	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C22H27NO/c1-16-21-14-18-8-9-19(24)15-20(18)22(16,2)11-13-23(21)12-10-17-6-4-3-5-7-17/h3-9,15-16,21,24H,10-14H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H27NO/c1-16-21-14-18-8-9-19(24)15-20(18)22(16,2)11-13-23(21)12-10-17-6-4-3-5-7-17/h3-9,15-16,21,24H,10-14H2,1-2H3/t16-,21-,22-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H27NO/c1-16-21-14-18-8-9-19(24)15-20(18)22(16,2)11-13-23(21)12-10-17-6-4-3-5-7-17/h3-9,15-16,21,24H,10-14H2,1-2H3/t16-,21+,22-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27NO/c1-16-21-14-18-8-9-19(24)15-20(18)22(16,2)11-13-23(21)12-10-17-6-4-3-5-7-17/h3-9,15-16,21,24H,10-14H2,1-2H3/t16-,21+,22?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27NO2/c1-23-19(15-21(24)17-9-4-2-5-10-17)13-8-14-20(23)16-22(25)18-11-6-3-7-12-18/h2-7,9-12,19-21,24H,8,13-16H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H27NO2/c1-23-19(15-21(24)17-9-4-2-5-10-17)13-8-14-20(23)16-22(25)18-11-6-3-7-12-18/h2-7,9-12,19-21,24H,8,13-16H2,1H3/t19-,20-,21-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H27NO2/c1-23-19(15-21(24)17-9-4-2-5-10-17)13-8-14-20(23)16-22(25)18-11-6-3-7-12-18/h2-7,9-12,19-21,24H,8,13-16H2,1H3/t19-,20+,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27NO2/c1-4-22(24)10-8-18-16-6-5-15-11-19-14(13-23-25-19)12-20(15,2)17(16)7-9-21(18,22)3/h1,11,13,16-18,24H,5-10,12H2,2-3H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27NO2/c24-21(25)13-3-1-2-8-16-23-22-19-11-6-4-9-17(19)14-15-18-10-5-7-12-20(18)22/h4-7,9-12,22-23H,1-3,8,13-16H2,(H,24,25)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27NO2S/c1-14-6-9-17(10-7-14)26-16(3)21(24)23-19-13-22(4,5)25-20-11-8-15(2)12-18(19)20/h6-12,16,19H,13H2,1-5H3,(H,23,24)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H27NO2S/c1-14-6-9-17(10-7-14)26-16(3)21(24)23-19-13-22(4,5)25-20-11-8-15(2)12-18(19)20/h6-12,16,19H,13H2,1-5H3,(H,23,24)/t16-,19+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H27NO4S/c1-22(2)12-19(18-10-9-17(26-4)11-20(18)27-22)23-21(24)14-28-13-15-5-7-16(25-3)8-6-15/h5-11,19H,12-14H2,1-4H3,(H,23,24)/t19-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H27NO5/c1-13-7-8-15-16(12-22(2,3)28-17(15)9-13)23-21(24)14-10-18(25-4)20(27-6)19(11-14)26-5/h7-11,16H,12H2,1-	1	(Mazumdar et al., 2023)

6H3,(H,23,24)/t16-/m1/s1	2023)
InChI=1S/C22H28Cl2O4/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,24)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-23/h6-7,9,12,15-17,26,28H,4-5,8,10-11H2,1-3H3/t12-,15-,16-,17-,19?,20?,21?,22?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28Cl2O4/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,24)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-23/h6-7,9,12,15-17,26,28H,4-5,8,10-11H2,1-3H3/t12-,15+,16+,17+,19+,20+,21+,22+/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H28Cl2O4/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(26)6-7-19(13,2)21(15,24)17(23)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-25/h6-7,9,12,15-17,25,28H,4-5,8,10-11H2,1-3H3/t12-,15-,16-,17-,19?,20?,21?,22?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28Cl2O4/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(26)6-7-19(13,2)21(15,24)17(23)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-25/h6-7,9,12,15-17,25,28H,4-5,8,10-11H2,1-3H3/t12-,15?,16?,17?,19?,20?,21+,22+/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H28Cl2O4/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(26)6-7-19(13,2)21(15,24)17(23)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-25/h6-7,9,12,15-17,25,28H,4-5,8,10-11H2,1-3H3/t12-,15+,16+,17+,19+,20+,21+,22+/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H28ClFO4/c1-11-6-13-14-8-16(24)15-7-12(26)4-5-21(15,3)22(14,23)18(28)9-20(13,2)19(11)17(27)10-25/h4-5,7,11,13-14,16,18-19,25,28H,6,8-10H2,1-3H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28ClFO4/c1-11-6-13-14-8-16(24)15-7-12(26)4-5-21(15,3)22(14,23)18(28)9-20(13,2)19(11)17(27)10-25/h4-5,7,11,13-14,16,18-19,25,28H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13-,14-,16-,18-,19?,20?,21?,22?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28ClFO4/c1-11-6-13-14-8-16(24)15-7-12(26)4-5-21(15,3)22(14,23)18(28)9-20(13,2)19(11)17(27)10-25/h4-5,7,11,13-14,16,18-19,25,28H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13-,14+,16-,18+,19+,20+,21+,22-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28ClFO4/c1-11-6-13-14-8-16(24)15-7-12(26)4-5-21(15,3)22(14,23)18(28)9-20(13,2)19(11)17(27)10-25/h4-5,7,11,13-14,16,18-19,25,28H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13?,14?,16+,18?,19?,20?,21?,22+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28ClFO4/c1-11-6-13-14-8-16(24)15-7-12(26)4-5-21(15,3)22(14,23)18(28)9-20(13,2)19(11)17(27)10-25/h4-5,7,11,13-14,16,18-19,25,28H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13+,14+,16-,18-,19+,20-,21+,22+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28ClFO4/c1-11-6-13-14-8-16(24)15-7-12(26)4-5-21(15,3)22(14,23)18(28)9-20(13,2)19(11)17(27)10-25/h4-5,7,11,13-14,16,18-19,25,28H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13+,14+,16+,18+,19-,20+,21+,22+/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H28ClFO4/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,24)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-23/h6-7,9,12,15-17,26,28H,4-5,8,10-11H2,1-3H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28ClFO4/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,24)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-23/h6-7,9,12,15-17,26,28H,4-5,8,10-11H2,1-3H3/t12-,15-,16-,17-,19?,20?,21?,22?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28ClFO4/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,24)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-23/h6-7,9,12,15-17,26,28H,4-5,8,10-11H2,1-3H3/t12-,15?,16-,17-,19-,20-,21-,22-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28ClFO4/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,24)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-23/h6-7,9,12,15-17,26,28H,4-5,8,10-11H2,1-3H3/t12-,15+,16-,17+,19+,20+,21-,22-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28ClFO4/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,24)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-23/h6-7,9,12,15-17,26,28H,4-5,8,10-11H2,1-3H3/t12-,15+,16+,17-,19+,20-,21+,22-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28ClFO4/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,24)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-23/h6-7,9,12,15-17,26,28H,4-5,8,10-11H2,1-3H3/t12?,15?,16?,17?,19?,20?,21-,22-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28F2O4/c1-11-6-13-14-8-16(23)15-7-12(26)4-5-21(15,3)22(14,24)18(28)9-20(13,2)19(11)17(27)10-25/h4-5,7,11,13-14,16,18-19,25,28H,6,8-10H2,1-3H3	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C22H28F2O4/c1-11-6-13-14-8-16(23)15-7-12(26)4-5-21(15,3)22(14,24)18(28)9-20(13,2)19(11)17(27)10-25/h4-5,7,11,13-14,16,18-19,25,28H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13-,14-,16-,18-,19?,20?,21?,22?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28F2O4/c1-11-6-13-14-8-16(23)15-7-12(26)4-5-21(15,3)22(14,24)18(28)9-20(13,2)19(11)17(27)10-25/h4-5,7,11,13-14,16,18-19,25,28H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13-,14-,16-,18-,19+,20-,21-,22-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28F2O4/c1-11-6-13-14-8-16(23)15-7-12(26)4-5-21(15,3)22(14,24)18(28)9-20(13,2)19(11)17(27)10-25/h4-5,7,11,13-14,16,18-19,25,28H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13-,14+,16-,18+,19+,20+,21+,22-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28F2O4/c1-11-6-13-14-8-16(23)15-7-12(26)4-5-21(15,3)22(14,24)18(28)9-20(13,2)19(11)17(27)10-25/h4-5,7,11,13-14,16,18-19,25,28H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13?,14?,16+,18?,19?,20?,21?,22+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28F2O4/c1-11-6-13-14-8-16(23)15-7-12(26)4-5-21(15,3)22(14,24)18(28)9-20(13,2)19(11)17(27)10-25/h4-5,7,11,13-14,16,18-19,25,28H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13+,14?,16+,18+,19-,20+,21+,22+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28F2O4S/c1-11-7-13-14-9-16(23)15-8-12(25)5-6-19(15,2)21(14,24)17(26)10-20(13,3)22(11,28)18(27)29-4/h5-6,8,11,13-14,16-17,26,28H,7,9-10H2,1-4H3/t11-,13+,14+,16+,17+,19+,20+,21+,22+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28F2O5/c1-11-6-13-14-8-16(23)15-7-12(26)4-5-19(15,2)21(14,24)17(27)9-20(13,3)22(11,29)18(28)10-25/h4-5,7,11,13-14,16-17,25,27,29H,6,8-10H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28F2O5/c1-11-6-13-14-8-16(23)15-7-12(26)4-5-19(15,2)21(14,24)17(27)9-20(13,3)22(11,29)18(28)10-25/h4-5,7,11,13-14,16-17,25,27,29H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13-,14-,16-,17-,19?,20?,21?,22?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28F2O5/c1-11-6-13-14-8-16(23)15-7-12(26)4-5-19(15,2)21(14,24)17(27)9-20(13,3)22(11,29)18(28)10-25/h4-5,7,11,13-14,16-17,25,27,29H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13-,14?,16-,17-,19-,20-,21-,22-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H28F2O5/c1-11-6-13-14-8-16(23)15-7-12(26)4-5-19(15,2)21(14,24)17(27)9-20(13,3)22(11,29)18(28)10-25/h4-5,7,11,13-14,16-17,25,27,29H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13-,14+,16-,17+,19+,20+,21-,22-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28F2O5/c1-11-6-13-14-8-16(23)15-7-12(26)4-5-19(15,2)21(14,24)17(27)9-20(13,3)22(11,29)18(28)10-25/h4-5,7,11,13-14,16-17,25,27,29H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13?,14?,16+,17+,19+,20+,21+,22+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H28F2O5/c1-11-6-13-14-8-16(23)15-7-12(26)4-5-19(15,2)21(14,24)17(27)9-20(13,3)22(11,29)18(28)10-25/h4-5,7,11,13-14,16-17,25,27,29H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13+,14+,16+,17-,19+,20-,21+,22-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28F2O5/c1-11-6-13-14-8-16(23)15-7-12(26)4-5-19(15,2)21(14,24)17(27)9-20(13,3)22(11,29)18(28)10-25/h4-5,7,11,13-14,16-17,25,27,29H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13+,14+,16+,17+,19+,20+,21+,22+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H28F2O5/c1-11-6-13-14-8-16(23)15-7-12(26)4-5-19(15,2)21(14,24)17(27)9-20(13,3)22(11,29)18(28)10-25/h4-5,7,11,13-14,16-17,25,27,29H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13+,14+,16+,17+,19+,20+,21+,22+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28F2O5/c1-11-6-13-14-8-16(23)15-7-12(26)4-5-19(15,2)21(14,24)17(27)9-20(13,3)22(11,29)18(28)10-25/h4-5,7,11,13-14,16-17,25,27,29H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13+,14+,16+,17+,19+,20+,21+,22+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H28FN3O6S/c1-13(2)20-18(10-9-16(27)11-17(28)12-19(29)30)21(14-5-7-15(23)8-6-14)25-22(24-20)26(3)33(4,31)32/h5-10,13,16-17,27-28H,11-12H2,1-4H3,(H,29,30)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H28FN3O6S/c1-13(2)20-18(10-9-16(27)11-17(28)12-19(29)30)21(14-5-7-15(23)8-6-14)25-22(24-20)26(3)33(4,31)32/h5-10,13,16-17,27-28H,11-12H2,1-4H3,(H,29,30)/b10-9+	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28FN3O6S/c1-13(2)20-18(10-9-16(27)11-17(28)12-19(29)30)21(14-5-7-15(23)8-6-14)25-22(24-20)26(3)33(4,31)32/h5-10,13,16-17,27-28H,11-12H2,1-4H3,(H,29,30)/b10-9+/t16-,17-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28N/c1-4-23(5-2)17-16-21(18(23)3)22(19-12-8-6-9-13-19)20-14-10-7-11-15-20/h6-15,18H,4-5,16-17H2,1-3H3/q+1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H28N2O/c1-2-22(25)24(20-11-7-4-8-12-20)21-14-17-23(18-15-21)16-13-19-9-5-3-6-10-19/h3-12,21H,2,13-18H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28N2O2/c1-17(16-24-14-6-3-7-15-24)20-8-4-5-9-21(20)23-22(25)18-10-12-19(26-2)13-11-18/h4-5,8-13,17H,3,6-7,14-16H2,1-2H3,(H,23,25)	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C22H28N2O2/c1-2-26-21(25)22(19-6-4-3-5-7-19)13-16-24(17-14-22)15-12-18-8-10-20(23)11-9-18/h3-11H,2,12-17,23H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28N2O2/c25-22(20-10-3-1-4-11-20)23-13-8-16-26-21-12-7-9-19(17-21)18-24-14-5-2-6-15-24/h1,3-4,7,9-12,17H,2,5-6,8,13-16,18H2,(H,23,25)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28N2O2S/c1-16(14-23-11-9-17(25)10-12-23)15-24-19-5-3-4-6-21(19)27-22-8-7-18(26-2)13-20(22)24/h3-8,13,16-17,25H,9-12,14-15H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H28N2O2S/c1-16(14-23-11-9-17(25)10-12-23)15-24-19-5-3-4-6-21(19)27-22-8-7-18(26-2)13-20(22)24/h3-8,13,16-17,25H,9-12,14-15H2,1-2H3/t16-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28N2O2S/c1-16(14-23-11-9-17(25)10-12-23)15-24-19-5-3-4-6-21(19)27-22-8-7-18(26-2)13-20(22)24/h3-8,13,16-17,25H,9-12,14-15H2,1-2H3/t16-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H28N2O3/c1-16-13-17(2)18(3)21(14-16)27-15-22(25)24-11-9-23(10-12-24)19-7-5-6-8-20(19)26-4/h5-8,13-14H,9-12,15H2,1-4H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28N2O3/c1-24-12-10-22-18-14-5-6-15(25)19(18)27-20(22)16(26)7-9-21(22,17(24)13-14)8-3-2-4-11-23/h5-7,9,17,20,25H,2-4,8,10-13,23H2,1H3/t17-,20+,21+,22+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28N2O3/c1-3-4-5-11-23-22-9-8-16(26)20-21(22)10-12-24(2)17(22)13-14-6-7-15(25)19(27-20)18(14)21/h6-9,17,20,23,25H,3-5,10-13H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28N2O3/c1-3-4-5-11-23-22-9-8-16(26)20-21(22)10-12-24(2)17(22)13-14-6-7-15(25)19(27-20)18(14)21/h6-9,17,20,23,25H,3-5,10-13H2,1-2H3/t17-,20-,21+,22+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28N2O3/c1-3-4-5-11-23-22-9-8-16(26)20-21(22)10-12-24(2)17(22)13-14-6-7-15(25)19(27-20)18(14)21/h6-9,17,20,23,25H,3-5,10-13H2,1-2H3/t17-,20+,21+,22-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28N2O3/c1-3-4-5-11-23-22-9-8-16(26)20-21(22)10-12-24(2)17(22)13-14-6-7-15(25)19(27-20)18(14)21/h6-9,17,20,23,25H,3-5,10-13H2,1-2H3/t17-,20+,21+,22+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28N2O4/c1-26-19-14-17(15-20(27-2)21(19)28-3)22(25)23-11-7-13-24-12-6-9-16-8-4-5-10-18(16)24/h4-5,8,10,14-15H,6-7,9,11-13H2,1-3H3,(H,23,25)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28N2O4/c1-7-15-13(2)24(23)22(14-8-9-18(25-3)19(10-14)26-4)17-12-21(28-6)20(27-5)11-16(15)17/h8-12,16H,7,23H2,1-6H3/t16-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28N4O6/c27-11-9-23-5-7-25-13-1-2-14(26-8-6-24-10-12-28)18-17(13)21(31)19-15(29)3-4-16(30)20(19)22(18)32/h1-4,23-30H,5-12H2	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H28N6O3S/c1-15(2)24-19-5-4-8-23-21(19)27-9-11-28(12-10-27)22(29)20-14-16-13-17(26-32(3,30)31)6-7-18(16)25-20/h4-8,13-15,24-26H,9-12H2,1-3H3	0	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C22H28N6O8S2/c1-10(23)15(29)26-21-24-11(8-38-21)13(27-34-5)16(30)25-14-17(31)28-12(6-7-37-18(14)28)19(32)35-9-36-20(33)22(2,3)4/h6,8,10,14,18H,7,9,23H2,1-5H3,(H,25,30)(H,24,26,29)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H28N6O8S2/c1-10(23)15(29)26-21-24-11(8-38-21)13(27-34-5)16(30)25-14-17(31)28-12(6-7-37-18(14)28)19(32)35-9-36-20(33)22(2,3)4/h6,8,10,14,18H,7,9,23H2,1-5H3,(H,25,30)(H,24,26,29)/b27-13-/t10-,14+,18+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H28N6O8S2/c1-10(23)15(29)26-21-24-11(8-38-21)13(27-34-5)16(30)25-14-17(31)28-12(6-7-37-18(14)28)19(32)35-9-36-20(33)22(2,3)4/h6,8,10,14,18H,7,9,23H2,1-5H3,(H,25,30)(H,24,26,29)/b27-13+/t10-,14?,18-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28N6O8S2/c1-10(23)15(29)26-21-24-11(8-38-21)13(27-34-5)16(30)25-14-17(31)28-12(6-7-37-18(14)28)19(32)35-9-36-20(33)22(2,3)4/h6,8,10,14,18H,7,9,23H2,1-5H3,(H,25,30)(H,24,26,29)/b27-13+/t10-,14+,18-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C22H28N6O8S2/c1-10(23)15(29)26-21-24-11(8-38-21)13(27-34-5)16(30)25-14-17(31)28-12(6-7-37-18(14)28)19(32)35-9-36-20(33)22(2,3)4/h6,8,10,14,18H,7,9,23H2,1-5H3,(H,25,30)(H,24,26,29)/b27-13+/t10-,14+,18+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H28N6O8S2/c1-10(23)15(29)26-21-24-11(8-38-21)13(27-34-5)16(30)25-14-17(31)28-12(6-7-37-18(14)28)19(32)35-9-36-20(33)22(2,3)4/h6,8,10,14,18H,7,9,23H2,1-5H3,(H,25,30)(H,24,26,29)/b27-13+/t10-,14+,18+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28NO3/c1-23(2)16-10-9-15-20(23)17-26-21(24)22(25,18-11-5-3-6-12-18)19-13-7-4-8-14-19/h3-8,11-14,20,25H,9-10,15-17H2,1-2H3/q+1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H28O2/c1-4-21-13-14(3)20-17-9-7-16(23)12-15(17)6-8-18(20)19(21)10-11-22(21,24)5-2/h2,12,17-20,24H,3-4,6-11,13H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28O5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(24)6-7-20(13,2)19(15)17(25)10-21(16,3)22(12,27)18(26)11-23/h4-5,9,15-17,19,23,25,27H,1,6-8,10-11H2,2-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28O5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(24)6-7-20(13,2)19(15)17(25)10-21(16,3)22(12,27)18(26)11-23/h4-5,9,15-17,19,23,25,27H,1,6-8,10-11H2,2-3H3/t15-,16-,17?,19+,20?,21?,22?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28O5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(24)6-7-20(13,2)19(15)17(25)10-21(16,3)22(12,27)18(26)11-23/h4-5,9,15-17,19,23,25,27H,1,6-8,10-11H2,2-3H3/t15-,16-,17+,19-,20-,21-,22-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28O5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(24)6-7-20(13,2)19(15)17(25)10-21(16,3)22(12,27)18(26)11-23/h4-5,9,15-17,19,23,25,27H,1,6-8,10-11H2,2-3H3/t15-,16+,17-,19-,20+,21-,22+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28O5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(24)6-7-20(13,2)19(15)17(25)10-21(16,3)22(12,27)18(26)11-23/h4-5,9,15-17,19,23,25,27H,1,6-8,10-11H2,2-3H3/t15?,16?,17-,19?,20-,21-,22-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28O5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(24)6-7-20(13,2)19(15)17(25)10-21(16,3)22(12,27)18(26)11-23/h4-5,9,15-17,19,23,25,27H,1,6-8,10-11H2,2-3H3/t15?,16?,17?,19?,20?,21?,22-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28O5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(24)6-7-20(13,2)19(15)17(25)10-21(16,3)22(12,27)18(26)11-23/h6-7,9,12,15-16,19,23,27H,4-5,8,10-11H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28O5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(24)6-7-20(13,2)19(15)17(25)10-21(16,3)22(12,27)18(26)11-23/h6-7,9,12,15-16,19,23,27H,4-5,8,10-11H2,1-3H3/t12-,15-,16-,19+,20-,21-,22-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28O5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(24)6-7-20(13,2)19(15)17(25)10-21(16,3)22(12,27)18(26)11-23/h6-7,9,12,15-16,19,23,27H,4-5,8,10-11H2,1-3H3/t12-,15-,16-,19+,20?,21?,22?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28O5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(24)6-7-20(13,2)19(15)17(25)10-21(16,3)22(12,27)18(26)11-23/h6-7,9,12,15-16,19,23,27H,4-5,8,10-11H2,1-3H3/t12-,15+,16-,19+,20+,21+,22-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28O5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(24)6-7-20(13,2)19(15)17(25)10-21(16,3)22(12,27)18(26)11-23/h6-7,9,12,15-16,19,23,27H,4-5,8,10-11H2,1-3H3/t12-,15+,16+,19-,20-,21-,22-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28O5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(24)6-7-20(13,2)19(15)17(25)10-21(16,3)22(12,27)18(26)11-23/h6-7,9,15-17,19,23,25,27H,1,4-5,8,10-11H2,2-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28O5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(24)6-7-20(13,2)19(15)17(25)10-21(16,3)22(12,27)18(26)11-23/h6-7,9,15-17,19,23,25,27H,1,4-5,8,10-11H2,2-3H3/t15-,16-,17-,19+,20-,21+,22+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28O5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(24)6-7-20(13,2)19(15)17(25)10-21(16,3)22(12,27)18(26)11-23/h6-7,9,15-17,19,23,25,27H,1,4-5,8,10-11H2,2-3H3/t15-,16-,17-,19+,20?,21?,22?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H28O5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(24)6-7-20(13,2)19(15)17(25)10-21(16,3)22(12,27)18(26)11-23/h6-7,9,15-17,19,23,25,27H,1,4-5,8,10-11H2,2-3H3/t15-,16+,17-,19-,20+,21-,22+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C22H28O5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(24)6-7-20(13,2)19(15)17(25)10-21(16,3)22(12,27)18(26)11-23/h6-7,9,15-17,19,23,25,27H,1,4-5,8,10-11H2,2-3H3/t15?,16?,17-,19?,20-,21-,22-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29ClO5/c1-11-6-14-18-15(23)8-12-7-13(25)4-5-20(12,2)19(18)16(26)9-21(14,3)22(11,28)17(27)10-24/h4-5,7,11,14-16,18-19,24,26,28H,6,8-10H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29ClO5/c1-11-6-14-18-15(23)8-12-7-13(25)4-5-20(12,2)19(18)16(26)9-21(14,3)22(11,28)17(27)10-24/h4-5,7,11,14-16,18-19,24,26,28H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,14-,15-,16-,18+,19-,20?,21?,22?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29ClO5/c1-11-6-14-18-15(23)8-12-7-13(25)4-5-20(12,2)19(18)16(26)9-21(14,3)22(11,28)17(27)10-24/h4-5,7,11,14-16,18-19,24,26,28H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,14-,15+,16+,18-,19-,20+,21+,22-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29ClO5/c1-11-6-14-18-15(23)8-12-7-13(25)4-5-20(12,2)19(18)16(26)9-21(14,3)22(11,28)17(27)10-24/h4-5,7,11,14-16,18-19,24,26,28H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,14+,15-,16+,18-,19+,20+,21+,22+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29ClO5/c1-11-6-14-18-15(23)8-12-7-13(25)4-5-20(12,2)19(18)16(26)9-21(14,3)22(11,28)17(27)10-24/h4-5,7,11,14-16,18-19,24,26,28H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,14+,15+,16+,18-,19+,20+,21-,22-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29ClO5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,23)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-24/h6-7,9,12,15-17,24,26,28H,4-5,8,10-11H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29ClO5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,23)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-24/h6-7,9,12,15-17,24,26,28H,4-5,8,10-11H2,1-3H3/t12-,15-,16-,17-,19-,20-,21-,22-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29ClO5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,23)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-24/h6-7,9,12,15-17,24,26,28H,4-5,8,10-11H2,1-3H3/t12-,15-,16-,17-,19?,20?,21?,22?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29ClO5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,23)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-24/h6-7,9,12,15-17,24,26,28H,4-5,8,10-11H2,1-3H3/t12-,15+,16-,17+,19+,20+,21-,22-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29ClO5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,23)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-24/h6-7,9,12,15-17,24,26,28H,4-5,8,10-11H2,1-3H3/t12-,15+,16+,17-,19+,20-,21+,22-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FN3O9P/c1-13(2)33-19(29)14(3)25-36(31,35-15-8-6-5-7-9-15)32-12-16-18(28)22(4,23)20(34-16)26-11-10-17(27)24-21(26)30/h5-11,13-14,16,18,20,28H,12H2,1-4H3,(H,25,31)(H,24,27,30)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FO4/c1-11-6-14-13-8-16(23)15-7-12(25)4-5-21(15,2)20(13)17(26)9-22(14,3)19(11)18(27)10-24/h4-5,7,11,13-14,16-17,19-20,24,26H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13-,14-,16-,17-,19?,20+,21?,22?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FO4/c1-11-6-14-13-8-16(23)15-7-12(25)4-5-21(15,2)20(13)17(26)9-22(14,3)19(11)18(27)10-24/h4-5,7,11,13-14,16-17,19-20,24,26H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13-,14-,16-,17+,19+,20-,21-,22-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FO4/c1-11-6-14-13-8-16(23)15-7-12(25)4-5-21(15,2)20(13)17(26)9-22(14,3)19(11)18(27)10-24/h4-5,7,11,13-14,16-17,19-20,24,26H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13?,14?,16+,17+,19-,20?,21+,22+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FO4/c1-11-6-14-13-8-16(23)15-7-12(25)4-5-21(15,2)20(13)17(26)9-22(14,3)19(11)18(27)10-24/h4-5,7,11,13-14,16-17,19-20,24,26H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13+,14-,16-,17+,19+,20+,21+,22+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FO4/c1-11-6-14-13-8-16(23)15-7-12(25)4-5-21(15,2)20(13)17(26)9-22(14,3)19(11)18(27)10-24/h4-5,7,11,13-14,16-17,19-20,24,26H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13+,14+,16+,17+,19-,20-,21+,22+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FO4/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-21(13,3)22(15,23)18(27)10-20(16,2)19(12)17(26)11-24/h6-7,9,12,15-16,18-19,24,27H,4-5,8,10-11H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FO4/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-21(13,3)22(15,23)18(27)10-20(16,2)19(12)17(26)11-24/h6-7,9,12,15-16,18-	1	(Meng et al., 2021)

19,24,27H,4-5,8,10-11H ₂ ,1-3H ₃ /t12-,15-,16-,18-,19?,20?,21?,22?/m0/s1	
InChI=1S/C22H29FO4/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-21(13,3)22(15,23)18(27)10-20(16,2)19(12)17(26)11-24/h6-7,9,12,15-16,18-19,24,27H,4-5,8,10-11H ₂ ,1-3H ₃ /t12-,15+,16-,18+,19+,20+,21+,22-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FO4/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-21(13,3)22(15,23)18(27)10-20(16,2)19(12)17(26)11-24/h6-7,9,12,15-16,18-19,24,27H,4-5,8,10-11H ₂ ,1-3H ₃ /t12-,15+,16+,18-,19-,20+,21+,22+/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H29FO4/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-21(13,3)22(15,23)18(27)10-20(16,2)19(12)17(26)11-24/h6-7,9,12,15-16,18-19,24,27H,4-5,8,10-11H ₂ ,1-3H ₃ /t12-,15+,16+,18+,19-,20+,21+,22+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FO4/c1-12-9-17-15-6-8-21(27,13(2)24)20(15,4)11-18(26)22(17,23)19(3)7-5-14(25)10-16(12)19/h5,7,10,12,15,17-18,26-27H,6,8-9,11H ₂ ,1-4H ₃	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FO4/c1-12-9-17-15-6-8-21(27,13(2)24)20(15,4)11-18(26)22(17,23)19(3)7-5-14(25)10-16(12)19/h5,7,10,12,15,17-18,26-27H,6,8-9,11H ₂ ,1-4H ₃ /t12-,15-,17-,18-,19-,20-,21-,22-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FO4/c1-12-9-17-15-6-8-21(27,13(2)24)20(15,4)11-18(26)22(17,23)19(3)7-5-14(25)10-16(12)19/h5,7,10,12,15,17-18,26-27H,6,8-9,11H ₂ ,1-4H ₃ /t12-,15-,17-,18-,19?,20?,21?,22?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FO4/c1-12-9-17-15-6-8-21(27,13(2)24)20(15,4)11-18(26)22(17,23)19(3)7-5-14(25)10-16(12)19/h5,7,10,12,15,17-18,26-27H,6,8-9,11H ₂ ,1-4H ₃ /t12-,15-,17-,18+,19-,20-,21-,22-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FO4/c1-12-9-17-15-6-8-21(27,13(2)24)20(15,4)11-18(26)22(17,23)19(3)7-5-14(25)10-16(12)19/h5,7,10,12,15,17-18,26-27H,6,8-9,11H ₂ ,1-4H ₃ /t12-,15+,17-,18-,19-,20-,21+,22+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FO4/c1-12-9-17-16-6-5-14-10-15(25)7-8-19(14,3)21(16,23)18(26)11-20(17,4)22(12,27)13(2)24/h7-8,10,12,16-18,26-27H,5-6,9,11H ₂ ,1-4H ₃	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FO4/c1-12-9-17-16-6-5-14-10-15(25)7-8-19(14,3)21(16,23)18(26)11-20(17,4)22(12,27)13(2)24/h7-8,10,12,16-18,26-27H,5-6,9,11H ₂ ,1-4H ₃ /t12-,16-,17-,18-,19-,20-,21-,22-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H29FO4/c1-12-9-17-16-6-5-14-10-15(25)7-8-19(14,3)21(16,23)18(26)11-20(17,4)22(12,27)13(2)24/h7-8,10,12,16-18,26-27H,5-6,9,11H ₂ ,1-4H ₃ /t12-,16-,17-,18-,19?,20?,21?,22?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FO4/c1-12-9-17-16-6-5-14-10-15(25)7-8-19(14,3)21(16,23)18(26)11-20(17,4)22(12,27)13(2)24/h7-8,10,12,16-18,26-27H,5-6,9,11H ₂ ,1-4H ₃ /t12-,16?,17?,18-,19-,20-,21-,22-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H29FO4/c1-12-9-17-16-6-5-14-10-15(25)7-8-19(14,3)21(16,23)18(26)11-20(17,4)22(12,27)13(2)24/h7-8,10,12,16-18,26-27H,5-6,9,11H ₂ ,1-4H ₃ /t12-,16+,17-,18+,19+,20+,21-,22-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FO4/c1-12-9-17-16-6-5-14-10-15(25)7-8-19(14,3)21(16,23)18(26)11-20(17,4)22(12,27)13(2)24/h7-8,10,12,16-18,26-27H,5-6,9,11H ₂ ,1-4H ₃ /t12-,16+,17+,18-,19+,20-,21+,22-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FO4S/c1-12-9-16-15-6-5-13-10-14(24)7-8-19(13,2)21(15,23)17(25)11-20(16,3)22(12,27)18(26)28-4/h7-8,10,12,15-17,25,27H,5-6,9,11H ₂ ,1-4H ₃	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FO4S/c1-12-9-16-15-6-5-13-10-14(24)7-8-19(13,2)21(15,23)17(25)11-20(16,3)22(12,27)18(26)28-4/h7-8,10,12,15-17,25,27H,5-6,9,11H ₂ ,1-4H ₃ /t12-,15-,16-,17-,19-,20-,21-,22-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H29FO4S/c1-12-9-16-15-6-5-13-10-14(24)7-8-19(13,2)21(15,23)17(25)11-20(16,3)22(12,27)18(26)28-4/h7-8,10,12,15-17,25,27H,5-6,9,11H ₂ ,1-4H ₃ /t12-,15-,16-,17-,19?,20?,21?,22?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FO4S/c1-12-9-16-15-6-5-13-10-14(24)7-8-19(13,2)21(15,23)17(25)11-20(16,3)22(12,27)18(26)28-4/h7-8,10,12,15-17,25,27H,5-6,9,11H ₂ ,1-4H ₃ /t12-,15-,16-,17+,19-,20-,21-,22-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C22H29FO4S/c1-12-9-16-15-6-5-13-10-14(24)7-8-19(13,2)21(15,23)17(25)11-20(16,3)22(12,27)18(26)28-4/h7-8,10,12,15-17,25,27H,5-6,9,11H2,1-4H3/t12-,15-,16+,17-,19-,20-,21+,22+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FO5/c1-11-6-14-13-8-16(23)15-7-12(25)4-5-20(15,2)19(13)17(26)9-21(14,3)22(11,28)18(27)10-24/h4-5,7,11,13-14,16-17,19,24,26,28H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13-,14-,16-,17-,19+,20?,21?,22?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FO5/c1-11-6-14-13-8-16(23)15-7-12(25)4-5-20(15,2)19(13)17(26)9-21(14,3)22(11,28)18(27)10-24/h4-5,7,11,13-14,16-17,19,24,26,28H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13+,14-,16-,17+,19+,20+,21+,22-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FO5/c1-11-6-14-13-8-16(23)15-7-12(25)4-5-20(15,2)19(13)17(26)9-21(14,3)22(11,28)18(27)10-24/h4-5,7,11,13-14,16-17,19,24,26,28H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13+,14+,16+,17+,19-,20+,21-,22-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FO5/c1-11-6-14-13-8-16(23)15-7-12(25)4-5-20(15,2)19(13)17(26)9-21(14,3)22(11,28)18(27)10-24/h4-5,7,11,13-14,16-17,19,24,26,28H,6,8-10H2,1-3H3/t11-,13+,14+,16+,17+,19-,20+,21+,22+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FO5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,23)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-24/h6-7,9,12,15-17,24,26,28H,4-5,8,10-11H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FO5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,23)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-24/h6-7,9,12,15-17,24,26,28H,4-5,8,10-11H2,1-3H3/t12-,15-,16-,17-,19-,20-,21-,22-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H29FO5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,23)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-24/h6-7,9,12,15-17,24,26,28H,4-5,8,10-11H2,1-3H3/t12-,15-,16-,17-,19-,20-,21-,22-/m0/s1	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C22H29FO5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,23)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-24/h6-7,9,12,15-17,24,26,28H,4-5,8,10-11H2,1-3H3/t12-,15-,16-,17-,19?,20?,21?,22?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FO5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,23)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-24/h6-7,9,12,15-17,24,26,28H,4-5,8,10-11H2,1-3H3/t12-,15+,16-,17+,19+,20+,21-,22+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FO5/c1-12-8-16-15-5-4-13-9-14(25)6-7-19(13,2)21(15,23)17(26)10-20(16,3)22(12,28)18(27)11-24/h6-7,9,12,15-17,24,26,28H,4-5,8,10-11H2,1-3H3/t12-,15+,16+,17+,19+,20+,21+,22+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29FO5/c1-12(24)18(27)21(28)9-7-15-16-5-4-13-10-14(25)6-8-19(13,2)22(16,23)17(26)11-20(15,21)3/h6,8,10,12,15-17,24,26,28H,4-5,7,9,11H2,1-3H3/t12?,15-,16-,17-,19-,20-,21-,22-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29N3O4S/c26-21(18-30(27)17-20-7-6-14-28-20)23-9-2-5-13-29-22-15-19(8-10-24-22)16-25-11-3-1-4-12-25/h2,5-8,10,14-15H,1,3-4,9,11-13,16-18H2,(H,23,26)/b5-2+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29N3O6S/c1-21(2,3)20(29)31-11-30-19(28)15-22(4,5)32-18-14(17(27)25(15)18)24-16(26)13(23)12-9-7-6-8-10-12/h6-10,13-15,18H,11,23H2,1-5H3,(H,24,26)/b5-2+	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H29N3O6S/c1-21(2,3)20(29)31-11-30-19(28)15-22(4,5)32-18-14(17(27)25(15)18)24-16(26)13(23)12-9-7-6-8-10-12/h6-10,13-15,18H,11,23H2,1-5H3,(H,24,26)/t13-,14-,15-,18-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29N3O6S/c1-21(2,3)20(29)31-11-30-19(28)15-22(4,5)32-18-14(17(27)25(15)18)24-16(26)13(23)12-9-7-6-8-10-12/h6-10,13-15,18H,11,23H2,1-5H3,(H,24,26)/t13-,14-,15+,18-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29N3O6S/c1-21(2,3)20(29)31-11-30-19(28)15-22(4,5)32-18-14(17(27)25(15)18)24-16(26)13(23)12-9-7-6-8-10-12/h6-10,13-15,18H,11,23H2,1-5H3,(H,24,26)/t13-,14?,15-,18-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29N3O6S/c1-21(2,3)20(29)31-11-30-19(28)15-22(4,5)32-18-14(17(27)25(15)18)24-16(26)13(23)12-9-7-6-8-10-12/h6-10,13-15,18H,11,23H2,1-5H3,(H,24,26)/t13-,14+,15+,18+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29N3S2/c1-3-26-18-9-10-22-20(17-18)25(19-7-4-5-8-21(19)27-22)12-6-11-24-15-13-23(2)14-16-24/h4-5,7-10,17H,3,6,11-16H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H29N5S/c1-5-10-27(19-7-6-15(2)23-13-19)18-8-11-26(12-9-18)21-20-16(3)17(4)28-22(20)25-14-24-21/h6-7,13-14,18H,5,8-12H2,1-	1	(Wu et al., 2018)

4H3

InChI=1S/C22H29N7O5/c1-28(2)19-17-20(25-10-24-19)29(11-26-17)22-18(31)16(15(9-30)34-22)27-21(32)14(23)8-12-4-6-13(33-3)7-5-12/h4-7,10-11,14-16,18,22,30-31H,8-9,23H2,1-3H3,(H,27,32)

InChI=1S/C22H29N7O5/c1-28(2)19-17-20(25-10-24-19)29(11-26-17)22-18(31)16(15(9-30)34-22)27-21(32)14(23)8-12-4-6-13(33-3)7-5-12/h4-7,10-11,14-16,18,22,30-31H,8-9,23H2,1-3H3,(H,27,32)/t14-,15+,16?,18+,22+/m0/s1

InChI=1S/C22H29N7O5/c1-28(2)19-17-20(25-10-24-19)29(11-26-17)22-18(31)16(15(9-30)34-22)27-21(32)14(23)8-12-4-6-13(33-3)7-5-12/h4-7,10-11,14-16,18,22,30-31H,8-9,23H2,1-3H3,(H,27,32)/t14-,15+,16+,18-,22-/m0/s1

InChI=1S/C22H29NO2/c1-5-21(24)25-22(18(2)17-23(3)4,20-14-10-7-11-15-20)16-19-12-8-6-9-13-19/h6-15,18H,5,16-17H2,1-4H3

InChI=1S/C22H29NO2/c1-5-21(24)25-22(18(2)17-23(3)4,20-14-10-7-11-15-20)16-19-12-8-6-9-13-19/h6-15,18H,5,16-17H2,1-4H3/t18-,22-/m0/s1

InChI=1S/C22H29NO2/c1-5-21(24)25-22(18(2)17-23(3)4,20-14-10-7-11-15-20)16-19-12-8-6-9-13-19/h6-15,18H,5,16-17H2,1-4H3/t18-,22-/m1/s1

InChI=1S/C22H29NO2/c1-5-21(24)25-22(18(2)17-23(3)4,20-14-10-7-11-15-20)16-19-12-8-6-9-13-19/h6-15,18H,5,16-17H2,1-4H3/t18-,22?/m1/s1

InChI=1S/C22H29NO2/c1-5-21(24)25-22(18(2)17-23(3)4,20-14-10-7-11-15-20)16-19-12-8-6-9-13-19/h6-15,18H,5,16-17H2,1-4H3/t18-,22+/m0/s1

InChI=1S/C22H29NO2/c1-5-21(24)25-22(18(2)17-23(3)4,20-14-10-7-11-15-20)16-19-12-8-6-9-13-19/h6-15,18H,5,16-17H2,1-4H3/t18-,22+/m1/s1

InChI=1S/C22H29NO2S/c1-16(2)25-20-11-9-19(10-12-20)6-5-15-23-22(24)18(4)26-21-13-7-17(3)8-14-21/h7-14,16,18H,5-6,15H2,1-4H3,(H,23,24)/t18-/m1/s1

InChI=1S/C22H29NO2S/c1-17(2)25-21-13-7-11-19(15-21)12-8-14-23-22(24)18(3)26-16-20-9-5-4-6-10-20/h4-7,9-11,13,15,17-18H,8,12,14,16H2,1-3H3,(H,23,24)

InChI=1S/C22H29NO2S/c1-17(2)25-21-13-7-11-19(15-21)12-8-14-23-22(24)18(3)26-16-20-9-5-4-6-10-20/h4-7,9-11,13,15,17-18H,8,12,14,16H2,1-3H3,(H,23,24)/t18-/m1/s1

InChI=1S/C22H29NO3S/c1-3-15-26-21-9-5-4-7-19(21)8-6-14-23-22(24)17-27-16-18-10-12-20(25-2)13-11-18/h4-5,7,9-13H,3,6,8,14-17H2,1-2H3,(H,23,24)

InChI=1S/C22H29NOS/c1-17(2)21-13-11-19(12-14-21)10-7-15-23-22(24)18(3)25-16-20-8-5-4-6-9-20/h4-6,8-9,11-14,17-18H,7,10,15-16H2,1-3H3,(H,23,24)/t18-/m1/s1

InChI=1S/C22H30Cl2N10/c23-15-5-9-17(10-6-15)31-21(27)33-19(25)29-13-3-1-2-4-14-30-20(26)34-22(28)32-18-11-7-16(24)8-12-18/h5-12H,1-4,13-14H2,(H5,25,27,29,31,33)(H5,26,28,30,32,34)

InChI=1S/C22H30Cl2N2O2/c1-25(21(27)14-16-5-6-17(23)18(24)13-16)19-7-9-22(8-4-12-28-22)15-20(19)26-10-2-3-11-26/h5-6,13,19-20H,2-4,7-12,14-15H2,1H3

InChI=1S/C22H30Cl2N2O2/c1-25(21(27)14-16-5-6-17(23)18(24)13-16)19-7-9-22(8-4-12-28-22)15-20(19)26-10-2-3-11-26/h5-6,13,19-20H,2-4,7-12,14-15H2,1H3/t19-,20-,22-/m0/s1

InChI=1S/C22H30Cl2N2O2/c1-25(21(27)14-16-5-6-17(23)18(24)13-16)19-7-9-22(8-4-12-28-22)15-20(19)26-10-2-3-11-26/h5-6,13,19-20H,2-4,7-12,14-15H2,1H3/t19-,20-,22?/m0/s1

0 (Wu et al., 2018)

(Mazumdar et al.,

0 2023)

(Mazumdar et al.,

0 2023)

(Mazumdar et al.,

1 2023)

1 (Meng et al., 2021)

(Mazumdar et al.,

1 2023)

1 (Meng et al., 2021)

1 (Meng et al., 2021)

(Mazumdar et al.,

1 2023)

1 (Meng et al., 2021)

(Mazumdar et al.,

1 2023)

(Mazumdar et al.,

1 2023)

0 2023)

1 (Meng et al., 2021)

(Mazumdar et al.,

0 2023)

1 (Meng et al., 2021)

(Mazumdar et al.,

1 2023)

(Mazumdar et al.,

1 2023)

InChI=1S/C22H30Cl2N2O2/c1-25(21(27)14-16-5-6-17(23)18(24)13-16)19-7-9-22(8-4-12-28-22)15-20(19)26-10-2-3-11-26/h5-6,13,19-20H,2-4,7-12,14-15H2,1H3/t19-,20-,22+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H30Cl2N2O2/c1-25(21(27)14-16-5-6-17(23)18(24)13-16)19-7-9-22(8-4-12-28-22)15-20(19)26-10-2-3-11-26/h5-6,13,19-20H,2-4,7-12,14-15H2,1H3/t19-,20+,22-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H30N2O/c1-16(2)18-11-12-21(25-3)19(14-18)15-24-20-10-7-13-23-22(20)17-8-5-4-6-9-17/h4-6,8-9,11-12,14,16,20,22-24H,7,10,13,15H2,1-3H3	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C22H30N2O/c1-16(2)18-11-12-21(25-3)19(14-18)15-24-20-10-7-13-23-22(20)17-8-5-4-6-9-17/h4-6,8-9,11-12,14,16,20,22-24H,7,10,13,15H2,1-3H3/t20-,22-/m0/s1	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C22H30N2O/c1-16(2)18-11-12-21(25-3)19(14-18)15-24-20-10-7-13-23-22(20)17-8-5-4-6-9-17/h4-6,8-9,11-12,14,16,20,22-24H,7,10,13,15H2,1-3H3/t20-,22-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H30N2O/c1-18-10-8-11-19(2)24(18)17-9-15-22(25,20-12-4-3-5-13-20)21-14-6-7-16-23-21/h3-7,12-14,16,18-19,25H,8-11,15,17H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H30N2O2S/c1-3-21(25)24(19-8-5-4-6-9-19)22(18-26-2)12-15-23(16-13-22)14-11-20-10-7-17-27-20/h4-10,17H,3,11-16,18H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H30N2O4S/c1-6-17-11-9-10-16(4)21(17)23-22(25)20(7-2)24(29(5,26)27)18-12-14-19(15-13-18)28-8-3/h9-15,20H,6-8H2,1-5H3,(H,23,25)/t20-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H30N2O4S/c25-22(18-29(26)17-21-9-5-13-28-21)23-10-6-14-27-20-8-4-7-19(15-20)16-24-11-2-1-3-12-24/h4-5,7-9,13,15H,1-3,6,10-12,14,16-18H2,(H,23,25)	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C22H30N2O5S2/c1-3-29-21(28)17(10-9-16-7-5-4-6-8-16)23-15(2)19(25)24-14-22(30-11-12-31-22)13-18(24)20(26)27/h4-8,15,17-18,23H,3,9-14H2,1-2H3,(H,26,27)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H30N4O2S2/c1-23(2)30(27,28)18-9-10-22-20(17-18)26(19-7-4-5-8-21(19)29-22)12-6-11-25-15-13-24(3)14-16-25/h4-5,7-10,17H,6,11-16H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H30N6O/c1-15-4-3-5-19-21(15)26-22(25-17-8-11-27(12-9-17)13-10-23)28(19)14-18-20(29)7-6-16(2)24-18/h3-7,17,29H,8-14,23H2,1-2H3,(H,25,26)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H30N6O4S/c1-5-7-17-19-20(27(4)25-17)22(29)24-21(23-19)16-14-15(8-9-18(16)32-6-2)33(30,31)28-12-10-26(3)11-13-28/h8-9,14H,5-7,10-13H2,1-4H3,(H,23,24,29)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H30O/c1-4-21-14-15(3)20-17-9-7-6-8-16(17)10-11-18(20)19(21)12-13-22(21,23)5-2/h2,8,17-20,23H,3-4,6-7,9-14H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H30O/c1-4-21-14-15(3)20-17-9-7-6-8-16(17)10-11-18(20)19(21)12-13-22(21,23)5-2/h2,8,17-20,23H,3-4,6-7,9-14H2,1H3/t17-,18-,19-,20-,21+,22+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H30O3/c1-12-9-15-17-6-5-16(13(2)23)22(17,4)11-19(25)20(15)21(3)8-7-14(24)10-18(12)21/h7-8,10,12,15-17,19-20,25H,5-6,9,11H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H30O3/c1-12-9-15-17-6-5-16(13(2)23)22(17,4)11-19(25)20(15)21(3)8-7-14(24)10-18(12)21/h7-8,10,12,15-17,19-20,25H,5-6,9,11H2,1-4H3/t12-,15-,16-,17-,19-,20+,21+,22-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H30O3/c1-12-9-15-17-6-5-16(13(2)23)22(17,4)11-19(25)20(15)21(3)8-7-14(24)10-18(12)21/h7-8,10,12,15-17,19-20,25H,5-6,9,11H2,1-4H3/t12-,15-,16-,17+,19-,20-,21-,22+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H30O3/c1-12-9-15-17-6-5-16(13(2)23)22(17,4)11-19(25)20(15)21(3)8-7-14(24)10-18(12)21/h7-8,10,12,15-17,19-20,25H,5-6,9,11H2,1-4H3/t12-,15-,16?,17-,19-,20+,21?,22?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C22H30O3/c1-12-9-15-17-6-5-16(13(2)23)22(17,4)11-19(25)20(15)21(3)8-7-14(24)10-18(12)21/h7-8,10,12,15-17,19-20,25H,5-6,9,11H2,1-4H3/t12-,15-,16+,17-,19-,20+,21-,22+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H30O3/c1-13-11-16-17(20(3)8-5-15(24)12-19(13)20)6-9-21(4)18(16)7-10-22(21,25)14(2)23/h11-12,16-18,25H,5-10H2,1-4H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H30O5/c1-12-8-14-15-5-7-22(27,18(26)11-23)21(15,3)10-17(25)19(14)20(2)6-4-13(24)9-16(12)20/h4,6,9,12,14-15,17,19,23,25,27H,5,7-8,10-11H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H30O5/c1-12-8-14-15-5-7-22(27,18(26)11-23)21(15,3)10-17(25)19(14)20(2)6-4-13(24)9-16(12)20/h4,6,9,12,14-15,17,19,23,25,27H,5,7-8,10-11H2,1-3H3/t12-,14-,15-,17-,19+,20-,21-,22-/m0/s1	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C22H30O5/c1-12-8-14-15-5-7-22(27,18(26)11-23)21(15,3)10-17(25)19(14)20(2)6-4-13(24)9-16(12)20/h4,6,9,12,14-15,17,19,23,25,27H,5,7-8,10-11H2,1-3H3/t12-,14-,15-,17-,19+,20-,21+,22+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H30O5/c1-12-8-14-15-5-7-22(27,18(26)11-23)21(15,3)10-17(25)19(14)20(2)6-4-13(24)9-16(12)20/h4,6,9,12,14-15,17,19,23,25,27H,5,7-8,10-11H2,1-3H3/t12-,14-,15-,17-,19+,20?,21?,22?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H30O5/c1-12-8-14-15-5-7-22(27,18(26)11-23)21(15,3)10-17(25)19(14)20(2)6-4-13(24)9-16(12)20/h4,6,9,12,14-15,17,19,23,25,27H,5,7-8,10-11H2,1-3H3/t12-,14-,15+,17-,19-,20-,21-,22+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H30O5/c1-12-8-14-15-5-7-22(27,18(26)11-23)21(15,3)10-17(25)19(14)20(2)6-4-13(24)9-16(12)20/h4,6,9,12,14-15,17,19,23,25,27H,5,7-8,10-11H2,1-3H3/t12-,14+,15+,17+,19+,20+,21+,22+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H30O5/c1-3-4-5-6-15(2)20(23)8-7-18-19-12-16(9-10-27-14-22(25)26)11-17(19)13-21(18)24/h9,15,17-21,23-24H,3,6,10-14H2,1-2H3,(H,25,26)/b16-9-/t15-,17+,18+,19-,20-,21-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H30O8/c1-12(2)6-18(24)29-17-8-16-15(9-26-14(5)23)10-27-21(20(16)22(17)11-28-22)30-19(25)7-13(3)4/h8,10,12-13,17,20-21H,6-7,9,11H2,1-5H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H30O8/c1-12(2)6-18(24)29-17-8-16-15(9-26-14(5)23)10-27-21(20(16)22(17)11-28-22)30-19(25)7-13(3)4/h8,10,12-13,17,20-21H,6-7,9,11H2,1-5H3/t17-,20-,21-,22+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H30O8/c1-12(2)6-18(24)29-17-8-16-15(9-26-14(5)23)10-27-21(20(16)22(17)11-28-22)30-19(25)7-13(3)4/h8,10,12-13,17,20-21H,6-7,9,11H2,1-5H3/t17-,20+,21-,22-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H30O8/c1-12(2)6-18(24)29-17-8-16-15(9-26-14(5)23)10-27-21(20(16)22(17)11-28-22)30-19(25)7-13(3)4/h8,10,12-13,17,20-21H,6-7,9,11H2,1-5H3/t17-,20+,21-,22?/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H30O8/c1-12(2)6-18(24)29-17-8-16-15(9-26-14(5)23)10-27-21(20(16)22(17)11-28-22)30-19(25)7-13(3)4/h8,10,12-13,17,20-21H,6-7,9,11H2,1-5H3/t17-,20+,21-,22+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H31FO2S2/c1-5-27-21(26-4)11-9-16-17-7-6-14-12-15(24)8-10-19(14,2)22(17,23)18(25)13-20(16,21)3/h8,10,12,16-18,25H,5-7,9,11,13H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H31FO2S2/c1-5-27-21(26-4)11-9-16-17-7-6-14-12-15(24)8-10-19(14,2)22(17,23)18(25)13-20(16,21)3/h8,10,12,16-18,25H,5-7,9,11,13H2,1-4H3/t16-,17-,18-,19-,20-,21+,22-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H31FO2S2/c1-5-27-21(26-4)11-9-16-17-7-6-14-12-15(24)8-10-19(14,2)22(17,23)18(25)13-20(16,21)3/h8,10,12,16-18,25H,5-7,9,11,13H2,1-4H3/t16-,17-,18-,19?,20?,21?,22?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H31FO2S2/c1-5-27-21(26-4)11-9-16-17-7-6-14-12-15(24)8-10-19(14,2)22(17,23)18(25)13-20(16,21)3/h8,10,12,16-18,25H,5-7,9,11,13H2,1-4H3/t16-,17-,18+,19-,20-,21+,22-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H31FO2S2/c1-5-27-21(26-4)11-9-16-17-7-6-14-12-15(24)8-10-19(14,2)22(17,23)18(25)13-20(16,21)3/h8,10,12,16-18,25H,5-	1	(Meng et al., 2021)

7,9,11,13H ₂ ,1-4H ₃ /t16-,17+,18+,19+,20+,21+,22-/m0/s1	
InChI=1S/C22H31N3O11/c26-18(27)10-23(6-7-24(11-19(28)29)12-20(30)31)8-9-25(13-21(32)33)17(22(34)35)15-36-14-16-4-2-1-3-5-16/h1-5,17H,6-15H ₂ , (H,26,27)(H,28,29)(H,30,31)(H,32,33)(H,34,35)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H31N3O5/c1-2-30-22(29)18(13-12-16-8-4-3-5-9-16)23-17-10-6-14-24-15-7-11-19(21(27)28)25(24)20(17)26/h3-5,8-9,17-19,23H,2,6-7,10-15H ₂ ,1H ₃ , (H,27,28)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H31N3O5/c1-2-30-22(29)18(13-12-16-8-4-3-5-9-16)23-17-10-6-14-24-15-7-11-19(21(27)28)25(24)20(17)26/h3-5,8-9,17-19,23H,2,6-7,10-15H ₂ ,1H ₃ , (H,27,28)/t17-,18+,19+/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H31N3O6S2/c1-11-15-14(12(2)26)18(27)25(15)16(19(28)30-10-31-20(29)22(3,4)5)17(11)33-13-8-24(9-13)21-23-6-7-32-21/h11-15,26H,6-10H ₂ ,1-5H ₃	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H31NO/c1-16(2)23(17(3)4)14-13-20(19-9-7-6-8-10-19)21-15-18(5)11-12-22(21)24/h6-12,15-17,20,24H,13-14H ₂ ,1-5H ₃ /t20-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H31NO/c1-16(2)23(17(3)4)14-13-20(19-9-7-6-8-10-19)21-15-18(5)11-12-22(21)24/h6-12,15-17,20,24H,13-14H ₂ ,1-5H ₃ /t20-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H31NO3/c1-23-14-12-17(13-15-23)20(16-23)26-21(24)22(25,18-8-4-2-5-9-18)19-10-6-3-7-11-19/h2,4-5,8-9,17,20,25H,3,6-7,10-16H ₂ ,1H ₃ /q+2	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H31NO3/c1-23-14-12-17(13-15-23)20(16-23)26-21(24)22(25,18-8-4-2-5-9-18)19-10-6-3-7-11-19/h2,4-5,8-9,17,20,25H,3,6-7,10-16H ₂ ,1H ₃ /q+2/t17?,20-,22?,23?/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H31NO3/c1-3-23(4-2)17-11-12-18-26-21(24)22(25,19-13-7-5-8-14-19)20-15-9-6-10-16-20/h5,7-8,13-14,20,25H,3-4,6,9-10,15-18H ₂ ,1-2H ₃	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H31NO3/c1-3-23(4-2)17-11-12-18-26-21(24)22(25,19-13-7-5-8-14-19)20-15-9-6-10-16-20/h5,7-8,13-14,20,25H,3-4,6,9-10,15-18H ₂ ,1-2H ₃ /t22-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H32N2O5/c1-6-23(7-2)22(26)17-13-24-9-8-15-10-20(27-4)21(28-5)11-16(15)18(24)12-19(17)29-14(3)25/h10-11,17-19H,6-9,12-13H ₂ ,1-5H ₃	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H32N2O5/c1-6-23(7-2)22(26)17-13-24-9-8-15-10-20(27-4)21(28-5)11-16(15)18(24)12-19(17)29-14(3)25/h10-11,17-19H,6-9,12-13H ₂ ,1-5H ₃ /t17-,18-,19-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H32N2O5/c1-6-23(7-2)22(26)17-13-24-9-8-15-10-20(27-4)21(28-5)11-16(15)18(24)12-19(17)29-14(3)25/h10-11,17-19H,6-9,12-13H ₂ ,1-5H ₃ /t17-,18+,19-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H32N2O5/c1-6-23(7-2)22(26)17-13-24-9-8-15-10-20(27-4)21(28-5)11-16(15)18(24)12-19(17)29-14(3)25/h10-11,17-19H,6-9,12-13H ₂ ,1-5H ₃ /t17-,18+,19+/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H32N2O6/c25-17-7-5-15(11-19(17)27)21(29)13-23-9-3-1-2-4-10-24-14-22(30)16-6-8-18(26)20(28)12-16/h5-8,11-12,21-30H,1-4,9-10,13-14H ₂	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H32N4O4/c1-23-13-9-11-19(17-23)29-21(27)25(3)15-7-5-6-8-16-26(4)22(28)30-20-12-10-14-24(2)18-20/h9-14,17-18H,5-8,15-16H ₂ ,1-4H ₃ /q+2	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H32N6/c1-8-10-27(11-9-2)20-13-16(4)24-22-21(17(5)25-28(20)22)18-14-23-19(26(6)7)12-15(18)3/h12-14H,8-11H ₂ ,1-7H ₃	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H32O3/c1-12-9-15-17-6-5-16(13(2)23)22(17,4)11-19(25)20(15)21(3)8-7-14(24)10-18(12)21/h10,12,15-17,19-20,25H,5-9,11H ₂ ,1-4H ₃ /t12-,15-,16?,17-,19-,20+,21?,22?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C22H32O3/c1-12-9-15-17-6-5-16(13(2)23)22(17,4)11-19(25)20(15)21(3)8-7-14(24)10-18(12)21/h10,12,15-17,19-20,25H,5-9,11H2,1-4H3/t12-,15-,16+,17-,19-,20+,21-,22+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H32O3/c1-13-11-16-17(20(3)8-5-15(24)12-19(13)20)6-9-21(4)18(16)7-10-22(21,25)14(2)23/h12-13,16-18,25H,5-11H2,1-4H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H32O3/c1-13-11-16-17(20(3)8-5-15(24)12-19(13)20)6-9-21(4)18(16)7-10-22(21,25)14(2)23/h12-13,16-18,25H,5-11H2,1-4H3/t13-,16+,17-,18-,20+,21-,22-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H32O4/c1-4-18(25)22(26)10-8-16-15-6-5-13-11-14(23)7-9-20(13,2)19(15)17(24)12-21(16,22)3/h11,15-17,19,24,26H,4-10,12H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H32O4/c1-4-18(25)22(26)10-8-16-15-6-5-13-11-14(23)7-9-20(13,2)19(15)17(24)12-21(16,22)3/h11,15-17,19,24,26H,4-10,12H2,1-3H3/t15-,16-,17-,19+,20-,21-,22-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H32O4/c1-4-18(25)22(26)10-8-16-15-6-5-13-11-14(23)7-9-20(13,2)19(15)17(24)12-21(16,22)3/h11,15-17,19,24,26H,4-10,12H2,1-3H3/t15-,16-,17-,19+,20?,21?,22?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H32O4/c1-4-18(25)22(26)10-8-16-15-6-5-13-11-14(23)7-9-20(13,2)19(15)17(24)12-21(16,22)3/h11,15-17,19,24,26H,4-10,12H2,1-3H3/t15-,16-,17+,19+,20-,21+,22+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H32O4/c1-4-18(25)22(26)10-8-16-15-6-5-13-11-14(23)7-9-20(13,2)19(15)17(24)12-21(16,22)3/h11,15-17,19,24,26H,4-10,12H2,1-3H3/t15-,16+,17-,19-,20-,21-,22+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H32O8/c1-12(2)6-18(24)26-9-15-10-27-21(30-19(25)7-13(3)4)20-16(15)8-17(29-14(5)23)22(20)11-28-22/h10,12-13,16-17,20-21H,6-9,11H2,1-5H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H32O8/c1-12(2)6-18(24)26-9-15-10-27-21(30-19(25)7-13(3)4)20-16(15)8-17(29-14(5)23)22(20)11-28-22/h10,12-13,16-17,20-21H,6-9,11H2,1-5H3/t16-,17-,20+,21+,22-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H32O8/c1-12(2)6-18(24)26-9-15-10-27-21(30-19(25)7-13(3)4)20-16(15)8-17(29-14(5)23)22(20)11-28-22/h10,12-13,16-17,20-21H,6-9,11H2,1-5H3/t16-,17+,20-,21+,22-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H32O8/c1-12(2)6-18(24)26-9-15-10-27-21(30-19(25)7-13(3)4)20-16(15)8-17(29-14(5)23)22(20)11-28-22/h10,12-13,16-17,20-21H,6-9,11H2,1-5H3/t16-,17+,20-,21+,22?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H32O8/c1-12(2)6-18(24)26-9-15-10-27-21(30-19(25)7-13(3)4)20-16(15)8-17(29-14(5)23)22(20)11-28-22/h10,12-13,16-17,20-21H,6-9,11H2,1-5H3/t16-,17+,20+,21-,22-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H34N4O10/c1-15(2)11-33-21(31)35-13-25-17(27)7-23(8-18(25)28)5-6-24-9-19(29)26(20(30)10-24)14-36-22(32)34-12-16(3)4/h15-16H,5-14H2,1-4H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H34N6O3/c1-4-9-20(29)28(19-10-7-6-8-11-19)22(18-31-3)12-14-25(15-13-22)16-17-27-21(30)26(5-2)23-24-27/h6-8,10-11H,4-5,9,12-18H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H34O2/c1-3-5-6-7-8-9-10-11-12-13-14-15-16-17-18-19-20-21-22(23)24-4-2/h5-6,8-9,11-12,14-15,17-18H,3-4,7,10,13,16,19-21H2,1-2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H34O2/c1-3-5-6-7-8-9-10-11-12-13-14-15-16-17-18-19-20-21-22(23)24-4-2/h5-6,8-9,11-12,14-15,17-18H,3-4,7,10,13,16,19-21H2,1-2H3/b6-5+,9-8+,12-11+,15-14+,18-17+	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H36ClN5O2/c23-15-6-7-20-18(14-15)25-22(30)28(20)16-8-12-26(13-9-16)10-3-11-27-19-5-2-1-4-17(19)24-21(27)29/h15-20H,1-14H2,(H,24,29)(H,25,30)	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C22H36N2O5S/c1-2-3-16-30(27,28)24-21(22(25)26)17-19-7-9-20(10-8-19)29-15-5-4-6-18-11-13-23-14-12-18/h7-10,18,21,23-24H,2-6,11-17H2,1H3,(H,25,26)	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C22H36O2/c1-14(23)17-7-8-18-16-6-5-15-13-20(2,24)11-12-21(15,3)19(16)9-10-22(17,18)4/h15-19,24H,5-13H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H36O2/c1-14(23)17-7-8-18-16-6-5-15-13-20(2,24)11-12-21(15,3)19(16)9-10-22(17,18)4/h15-19,24H,5-13H2,1-4H3/t15-,16-,17-,18-,19+,20+,21-,22-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H36O2/c1-14(23)17-7-8-18-16-6-5-15-13-20(2,24)11-12-21(15,3)19(16)9-10-22(17,18)4/h15-19,24H,5-13H2,1-4H3/t15-,16-,17+,18-,19-,20+,21-,22+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H36O2/c1-14(23)17-7-8-18-16-6-5-15-13-20(2,24)11-12-21(15,3)19(16)9-10-22(17,18)4/h15-19,24H,5-13H2,1-4H3/t15-,16?,17+,18?,19?,20+,21-,22+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H36O2/c1-14(23)17-7-8-18-16-6-5-15-13-20(2,24)11-12-21(15,3)19(16)9-10-22(17,18)4/h15-19,24H,5-13H2,1-4H3/t15-,16+,17+,18-,19-,20-,21+,22-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H36O2/c1-14(23)17-7-8-18-16-6-5-15-13-20(2,24)11-12-21(15,3)19(16)9-10-22(17,18)4/h15-19,24H,5-13H2,1-4H3/t15-,16+,17+,18-,19-,20?,21?,22?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H38O5/c1-4-5-14-22(2,26)15-10-12-18-17(19(23)16-20(18)24)11-8-6-7-9-13-21(25)27-3/h10,12,17-18,20,24,26H,4-9,11,13-16H2,1-3H3/b12-10+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H38O5/c1-4-5-14-22(2,26)15-10-12-18-17(19(23)16-20(18)24)11-8-6-7-9-13-21(25)27-3/h10,12,17-18,20,24,26H,4-9,11,13-16H2,1-3H3/b12-10+/t17-,18+,20+,22-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H43N5O12/c1-22(35)6-36-20(15(33)18(22)26-2)39-17-8(27-19(34)9(28)4-23)3-7(25)16(14(17)32)38-21-13(31)12(30)11(29)10(5-24)37-21/h7-18,20-21,26,28-33,35H,3-6,23-25H2,1-2H3,(H,27,34)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H43N5O12/c1-22(35)6-36-20(15(33)18(22)26-2)39-17-8(27-19(34)9(28)4-23)3-7(25)16(14(17)32)38-21-13(31)12(30)11(29)10(5-24)37-21/h7-18,20-21,26,28-33,35H,3-6,23-25H2,1-2H3,(H,27,34)/t7-,8-,9-,10-,11+,12-,13-,14-,15-,16-,17-,18-,20-,21-,22?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H43N5O12/c1-22(35)6-36-20(15(33)18(22)26-2)39-17-8(27-19(34)9(28)4-23)3-7(25)16(14(17)32)38-21-13(31)12(30)11(29)10(5-24)37-21/h7-18,20-21,26,28-33,35H,3-6,23-25H2,1-2H3,(H,27,34)/t7-,8-,9?,10+,11+,12-,13+,14-,15+,16+,17-,18-,20?,21?,22-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H43N5O12/c1-22(35)6-36-20(15(33)18(22)26-2)39-17-8(27-19(34)9(28)4-23)3-7(25)16(14(17)32)38-21-13(31)12(30)11(29)10(5-24)37-21/h7-18,20-21,26,28-33,35H,3-6,23-25H2,1-2H3,(H,27,34)/t7-,8-,9+,10+,11-,12+,13-,14+,15+,16+,17+,18+,20-,21-,22+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H43N5O12/c1-22(35)6-36-20(15(33)18(22)26-2)39-17-8(27-19(34)9(28)4-23)3-7(25)16(14(17)32)38-21-13(31)12(30)11(29)10(5-24)37-21/h7-18,20-21,26,28-33,35H,3-6,23-25H2,1-2H3,(H,27,34)/t7-,8+,9+,10-,11-,12-,13-,14-,15-,16+,17-,18-,20-,21+,22+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H43N5O13/c23-2-1-8(29)20(36)27-7-3-6(25)18(39-22-16(34)15(33)13(31)9(4-24)37-22)17(35)19(7)40-21-14(32)11(26)12(30)10(5-28)38-21/h6-19,21-22,28-35H,1-5,23-26H2,(H,27,36)/t6-,7-,8-,9-,10-,11-,12-,13-,14-,15-,16-,17-,18+,19-,21+,22+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H43N5O13/c23-2-1-8(29)20(36)27-7-3-6(25)18(39-22-16(34)15(33)13(31)9(4-24)37-22)17(35)19(7)40-21-14(32)11(26)12(30)10(5-28)38-21/h6-19,21-22,28-35H,1-5,23-26H2,(H,27,36)/t6-,7-,8-,9-,10-,11-,12+,13+,14-,15-,16-,17-,18-,19-,21+,22-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H43N5O13/c23-2-1-8(29)20(36)27-7-3-6(25)18(39-22-16(34)15(33)13(31)9(4-24)37-22)17(35)19(7)40-21-14(32)11(26)12(30)10(5-28)38-21/h6-19,21-22,28-35H,1-5,23-26H2,(H,27,36)/t6-,7+,8-,9+,10-,11-,12+,13-,14-,15+,16+,17-,18+,19-,21+,22-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H43N5O13/c23-2-1-8(29)20(36)27-7-3-6(25)18(39-22-16(34)15(33)13(31)9(4-24)37-22)17(35)19(7)40-21-14(32)11(26)12(30)10(5-28)38-21/h6-19,21-22,28-35H,1-5,23-26H2,(H,27,36)/t6-,7+,8-,9+,10+,11-,12+,13+,14+,15-,16+,17-,18+,19-,21?,22?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H43N5O13/c23-2-1-8(29)20(36)27-7-3-6(25)18(39-22-16(34)15(33)13(31)9(4-24)37-22)17(35)19(7)40-21-14(32)11(26)12(30)10(5-28)38-21/h6-19,21-22,28-35H,1-5,23-26H2,(H,27,36)/t6-,7+,8-,9+,10+,11-,12+,13+,14+,15-,16+,17-,18+,19-,21+,22+/m0/s1	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C22H43N5O13/c23-2-1-8(29)20(36)27-7-3-6(25)18(39-22-16(34)15(33)13(31)9(4-24)37-22)17(35)19(7)40-21-14(32)11(26)12(30)10(5-28)38-21/h6-19,21-22,28-35H,1-5,23-26H2,(H,27,36)/t6-,7+,8+,9-,10-,11-,12+,13+,14-,15-,16-,17-,18-,19+,21-,22-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C22H44N6O10/c23-4-3-12(30)20(34)28-11-5-10(26)18(37-21-9(25)2-1-8(6-24)35-21)17(33)19(11)38-22-16(32)14(27)15(31)13(7-29)36-22/h8-19,21-22,29-33H,1-7,23-27H2,(H,28,34)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H44N6O10/c23-4-3-12(30)20(34)28-11-5-10(26)18(37-21-9(25)2-1-8(6-24)35-21)17(33)19(11)38-22-16(32)14(27)15(31)13(7-29)36-22/h8-19,21-22,29-33H,1-7,23-27H2,(H,28,34)/t8-,9-,10-,11-,12-,13-,14-,15+,16-,17-,18-,19-,21-,22+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H44N6O10/c23-4-3-12(30)20(34)28-11-5-10(26)18(37-21-9(25)2-1-8(6-24)35-21)17(33)19(11)38-22-16(32)14(27)15(31)13(7-29)36-22/h8-19,21-22,29-33H,1-7,23-27H2,(H,28,34)/t8-,9+,10-,11+,12-,13+,14-,15+,16+,17-,18+,19-,21+,22+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H44N6O10/c23-4-3-12(30)20(34)28-11-5-10(26)18(37-21-9(25)2-1-8(6-24)35-21)17(33)19(11)38-22-16(32)14(27)15(31)13(7-29)36-22/h8-19,21-22,29-33H,1-7,23-27H2,(H,28,34)/t8-,9+,10-,11+,12-,13+,14-,15+,16+,17+,18+,19+,21-,22+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H44N6O10/c23-4-3-12(30)20(34)28-11-5-10(26)18(37-21-9(25)2-1-8(6-24)35-21)17(33)19(11)38-22-16(32)14(27)15(31)13(7-29)36-22/h8-19,21-22,29-33H,1-7,23-27H2,(H,28,34)/t8-,9+,10+,11-,12-,13+,14+,15-,16+,17+,18+,19-,21+,22+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H44N6O10/c23-4-3-12(30)20(34)28-11-5-10(26)18(37-21-9(25)2-1-8(6-24)35-21)17(33)19(11)38-22-16(32)14(27)15(31)13(7-29)36-22/h8-19,21-22,29-33H,1-7,23-27H2,(H,28,34)/t8-,9+,10+,11+,12+,13+,14+,15+,16+,17+,18-,19+,21-,22-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H45N5O12/c23-2-1-7(29)5-27-9-3-8(25)19(38-22-17(34)16(33)14(31)10(4-24)36-22)18(35)20(9)39-21-15(32)12(26)13(30)11(6-28)37-21/h7-22,27-35H,1-6,23-26H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H45N5O12/c23-2-1-7(29)5-27-9-3-8(25)19(38-22-17(34)16(33)14(31)10(4-24)36-22)18(35)20(9)39-21-15(32)12(26)13(30)11(6-28)37-21/h7-22,27-35H,1-6,23-26H2/t7-,8-,9-,10-,11-,12-,13-,14-,15-,16-,17-,18-,19+,20-,21+,22+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H45N5O12/c23-2-1-7(29)5-27-9-3-8(25)19(38-22-17(34)16(33)14(31)10(4-24)36-22)18(35)20(9)39-21-15(32)12(26)13(30)11(6-28)37-21/h7-22,27-35H,1-6,23-26H2/t7-,8-,9-,10-,11-,12-,13+,14+,15-,16-,17-,18-,19-,20-,21+,22-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H45N5O12/c23-2-1-7(29)5-27-9-3-8(25)19(38-22-17(34)16(33)14(31)10(4-24)36-22)18(35)20(9)39-21-15(32)12(26)13(30)11(6-28)37-21/h7-22,27-35H,1-6,23-26H2/t7-,8-,9+,10-,11-,12+,13-,14-,15-,16-,17-,18-,19+,20-,21+,22-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C22H45N5O12/c23-2-1-7(29)5-27-9-3-8(25)19(38-22-17(34)16(33)14(31)10(4-24)36-22)18(35)20(9)39-21-15(32)12(26)13(30)11(6-28)37-21/h7-22,27-35H,1-6,23-26H2/t7-,8+,9-,10-,11-,12+,13-,14-,15-,16+,17-,18+,19-,20+,21-,22-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C22H46O/c1-2-3-4-5-6-7-8-9-10-11-12-13-14-15-16-17-18-19-20-21-22-23/h23H,2-22H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H14F2N4O/c24-20-8-17(14-1-2-16-10-26-5-3-15(16)7-14)9-21(25)19(20)12-29-13-28-22-11-27-6-4-18(22)23(29)30/h1-11,13H,12H2	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C23H15F2NO2/c1-13-21(23(27)28)18-12-16(24)10-11-20(18)26-22(13)15-8-6-14(7-9-15)17-4-2-3-5-19(17)25/h2-12H,1H3,(H,27,28)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H16F2N4O/c1-28-11-17-15(6-4-8-22(17)27-28)14-9-19(24)18(20(25)10-14)12-29-13-26-21-7-3-2-5-16(21)23(29)30/h2-11,13H,12H2,1H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C23H16F2N4O/c1-28-12-16-15(5-4-7-20(16)27-28)14-9-18(24)17(19(25)10-14)13-29-22-8-3-2-6-21(22)26-11-23(29)30/h2-12H,13H2,1H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C23H16O10/c24-9-13-7-14(26)21-16(3-1-5-18(21)32-13)30-10-12(25)11-31-17-4-2-6-19-22(17)15(27)8-20(33-19)23(28)29/h1-9,12,25H,10-11H2,(H,28,29)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H16O11/c24-11(9-31-12-4-5-16-13(6-12)14(25)7-19(33-16)22(27)28)10-32-17-2-1-3-18-21(17)15(26)8-20(34-18)23(29)30/h1-8,11,24H,9-10H2,(H,27,28)(H,29,30)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H16O11/c24-11(9-31-12-4-5-16-13(6-12)14(25)7-19(33-16)22(27)28)10-32-17-2-1-3-18-21(17)15(26)8-20(34-18)23(29)30/h1-8,11,24H,9-10H2,(H,27,28)(H,29,30)/t11-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C23H16O11/c24-11(9-31-14-3-1-5-16-20(14)12(25)7-18(33-16)22(27)28)10-32-15-4-2-6-17-21(15)13(26)8-19(34-17)23(29)30/h1-8,11,24H,9-10H2,(H,27,28)(H,29,30)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H18ClF2N3O3S/c1-2-9-33(31,32)29-19-8-7-18(25)20(21(19)26)22(30)17-12-28-23-16(17)10-14(11-27-23)13-3-5-15(24)6-4-13/h3-8,10-12,29H,2,9H2,1H3,(H,27,28)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H18F2N4O/c1-28-12-17-15(4-2-6-22(17)27-28)14-10-19(24)18(20(25)11-14)13-29-9-7-21-16(23(29)30)5-3-8-26-21/h2-6,8,10-12H,7,9,13H2,1H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C23H18F3N3O2/c1-14(13-15-7-3-2-4-8-15)29-21(16-9-5-6-10-18(16)30)28-17-11-12-27-20(23(24,25)26)19(17)22(29)31/h2-12,14,30H,13H2,1H3/t14-/m1/s1	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C23H18F6N2O/c1-14-5-3-4-6-18(14)19-7-8-30-12-20(19)21(32)31(2)13-15-9-16(22(24,25)26)11-17(10-15)23(27,28)29/h3-12H,13H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H18N4/c1-3-19-21(26-9-1)22-20(4-2-10-27-22)23(19,15-17-5-11-24-12-6-17)16-18-7-13-25-14-8-18/h1-14H,15-16H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H18N4/c1-4-18(16-25-9-1)15-23(14-17-7-12-24-13-8-17)19-5-2-10-26-21(19)22-20(23)6-3-11-27-22/h1-13,16H,14-15H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H18O2/c1-2-25-22-15-14-21(18-11-5-6-12-19(18)22)23(24)20-13-7-9-16-8-3-4-10-17(16)20/h3-15H,2H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H20F3N3O2/c24-23(25,26)20-10-9-17-15-29(12-11-27-22(17)28-20)21(30)14-16-5-4-8-19(13-16)31-18-6-2-1-3-7-18/h1-10,13H,11-12,14-15H2,(H,27,28)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C23H20F6N2O3/c24-22(25,26)16-10-15(11-17(12-16)23(27,28)29)19(32)31-8-6-21(7-9-31)18(13-30-20(33)34-21)14-4-2-1-3-5-14/h1-5,10-12,18H,6-9,13H2,(H,30,33)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H20N2O3S/c26-22-21(16-17-29(28)20-14-8-3-9-15-20)23(27)25(19-12-6-2-7-13-19)24(22)18-10-4-1-5-11-18/h1-15,21H,16-17H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H20N2O5/c26-19-12-6-15(7-13-19)14-20(25-21(27)16-4-2-1-3-5-16)22(28)24-18-10-8-17(9-11-18)23(29)30/h1-13,20,26H,14H2,(H,24,28)(H,25,27)(H,29,30)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H21ClN2O4/c1-13(2)29-23(27)22-16(12-28-3)20-18(11-25-22)26-17-5-4-6-19(21(17)20)30-15-9-7-14(24)8-10-15/h4-11,13,26H,12H2,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H21ClN6O3/c1-27-8-10-28(11-9-27)14-19-23(31)29-20-7-6-15(30(32)33)12-17(20)22(25-13-21(29)26-19)16-4-2-3-5-18(16)24/h2-7,12,14H,8-11,13H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H21ClN6O3/c1-27-8-10-28(11-9-27)14-19-23(31)29-20-7-6-15(30(32)33)12-17(20)22(25-13-21(29)26-19)16-4-2-3-5-18(16)24/h2-7,12,14H,8-11,13H2,1H3/b19-14-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H21ClO3/c1-25-19-10-4-16(5-11-19)22(17-6-12-20(26-2)13-7-17)23(24)18-8-14-21(27-3)15-9-18/h4-15H,1-3H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H21F7N4O3/c1-12(14-8-15(22(25,26)27)10-16(9-14)23(28,29)30)37-20-19(13-2-4-17(24)5-3-13)34(6-7-36-20)11-18-31-21(35)33-32-18/h2-5,8-10,12,19-20H,6-7,11H2,1H3,(H2,31,32,33,35)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H21F7N4O3/c1-12(14-8-15(22(25,26)27)10-16(9-14)23(28,29)30)37-20-19(13-2-4-17(24)5-3-13)34(6-7-36-20)11-18-31-21(35)33-32-18/h2-5,8-10,12,19-20H,6-7,11H2,1H3,(H2,31,32,33,35)/t12-,19+,20-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H21N7/c1-2-5-19(6-3-1)22-20(18-7-11-24-12-8-18)17-21(27-28-22)29-13-15-30(16-14-29)23-25-9-4-10-26-23/h1-12,17H,13-16H2	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C23H21N7O/c1-14-18-11-12-21(31)30(23(18)25-15(2)24-14)13-16-7-9-17(10-8-16)19-5-3-4-6-20(19)22-26-28-29-27-22/h3-10H,11-13H2,1-2H3,(H,26,27,28,29)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H22ClN3O2/c1-14(2)7-10-16(28)13-19-17-5-3-4-6-18(17)23(29)27(19)21-12-9-15-8-11-20(24)25-22(15)26-21/h3-6,8-9,11-12,14,19H,7,10,13H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C23H22CIN3O2/c1-14(2)7-10-16(28)13-19-17-5-3-4-6-18(17)23(29)27(19)21-12-9-15-8-11-20(24)25-22(15)26-21/h3-6,8-9,11-12,14,19H,7,10,13H2,1-2H3/t19-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H22CIN3O2/c1-14(2)7-10-16(28)13-19-17-5-3-4-6-18(17)23(29)27(19)21-12-9-15-8-11-20(24)25-22(15)26-21/h3-6,8-9,11-12,14,19H,7,10,13H2,1-2H3/t19-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H22F3N5O3S/c1-30-12-20(29-14-30)35(33,34)31-10-17-18(11-31)22(17,19-8-4-5-9-27-19)13-28-21(32)15-6-2-3-7-16(15)23(24,25)26/h2-9,12,14,17-18H,10-11,13H2,1H3,(H,28,32)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C23H22FN3O/c24-19-6-4-17(5-7-19)21-9-8-20(25-21)16-26-11-13-27(14-12-26)22-3-1-2-18-10-15-28-23(18)22/h1-10,15,25H,11-14,16H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H22N2O4S/c26-23(22(18-20-10-7-17-29-20)19-8-3-1-4-9-19)24-13-15-25(16-14-24)30(27,28)21-11-5-2-6-12-21/h1-12,17-18H,13-16H2/b22-18+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H22N2O6S/c1-23(2)17(21(28)29)25-19(27)16(20(25)32-23)24-18(26)15(13-9-5-3-6-10-13)22(30)31-14-11-7-4-8-12-14/h3-12,15-17,20H,1-2H3,(H,24,26)(H,28,29)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H22N2O6S/c1-23(2)17(21(28)29)25-19(27)16(20(25)32-23)24-18(26)15(13-9-5-3-6-10-13)22(30)31-14-11-7-4-8-12-14/h3-12,15-17,20H,1-2H3,(H,24,26)(H,28,29)/t15-,16-,17-,20+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H22N2O6S/c1-23(2)17(21(28)29)25-19(27)16(20(25)32-23)24-18(26)15(13-9-5-3-6-10-13)22(30)31-14-11-7-4-8-12-14/h3-12,15-17,20H,1-2H3,(H,24,26)(H,28,29)/t15-,16?,17-,20-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H22N2O6S/c1-23(2)17(21(28)29)25-19(27)16(20(25)32-23)24-18(26)15(13-9-5-3-6-10-13)22(30)31-14-11-7-4-8-12-14/h3-12,15-17,20H,1-2H3,(H,24,26)(H,28,29)/t15-,16+,17-,20+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H22N2O6S/c1-23(2)17(21(28)29)25-19(27)16(20(25)32-23)24-18(26)15(13-9-5-3-6-10-13)22(30)31-14-11-7-4-8-12-14/h3-12,15-17,20H,1-2H3,(H,24,26)(H,28,29)/t15?,16-,17+,20-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H23CIN2O2/c24-18-8-9-22-20(15-18)21(16-23(27)28-22)25-19-10-13-26(14-11-19)12-4-7-17-5-2-1-3-6-17/h1-9,15-16,19,25H,10-14H2/b7-4+	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H23CIN2O3/c24-17-2-4-22-19(12-17)20(13-23(27)29-22)25-18-5-8-26(9-6-18)14-15-1-3-21-16(11-15)7-10-28-21/h1-4,11-13,18,25H,5-10,14H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H23F3N2O4/c1-30-18-12-15(13-19(31-2)22(18)32-3)8-9-21(29)27-10-11-28-17-7-5-4-6-16(17)14-20(28)23(24,25)26/h4-9,12-14H,10-11H2,1-3H3,(H,27,29)/b9-8+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H23N3O5/c1-4-23(30)16-8-18-20-12(9-26(18)21(28)15(16)11-31-22(23)29)7-13-14(10-25(2)3)19(27)6-5-17(13)24-20/h5-8,27,30H,4,9-11H2,1-3H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C23H23N3O5/c1-4-23(30)16-8-18-20-12(9-26(18)21(28)15(16)11-31-22(23)29)7-13-14(10-25(2)3)19(27)6-5-17(13)24-20/h5-8,27,30H,4,9-11H2,1-3H3/t23-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H23N5O/c1-26-15-12-18(13-16-26)28-21(29)11-10-19(24-28)22-20-9-5-6-14-27(20)25-23(22)17-7-3-2-4-8-17/h2-11,14,18H,12-13,15-16H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H23N7O5/c1-2-3-14(10-15-11-26-20-18(27-15)19(24)29-23(25)30-20)12-4-6-13(7-5-12)21(33)28-16(22(34)35)8-9-17(31)32/h1,4-7,11,14,16H,3,8-10H2,(H,28,33)(H,31,32)(H,34,35)(H4,24,25,26,29,30)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H23NO2S/c1-18-7-5-8-19(15-18)17-27-14-12-24-23(25)22(16-21-11-6-13-26-21)20-9-3-2-4-10-20/h2-11,13,15-16H,12,14,17H2,1H3,(H,24,25)/b22-16+	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H23NO3/c1-17-10-12-20(13-11-17)27-16-18(2)24-23(25)22(15-21-9-6-14-26-21)19-7-4-3-5-8-19/h3-15,18H,16H2,1-	0	(Meng et al., 2021)

2H3,(H,24,25)/b22-15+/t18-/m1/s1	
InChI=1S/C23H23NO5S/c1-23(2)16(22(27)28)15-18(25)17(20(15)30-23)24-21(26)19(13-9-5-3-6-10-13)29-14-11-7-4-8-12-14/h3-12,15-17,19-20H,1-2H3,(H,24,26)(H,27,28)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H23NO5S/c1-23(2)16(22(27)28)15-18(25)17(20(15)30-23)24-21(26)19(13-9-5-3-6-10-13)29-14-11-7-4-8-12-14/h3-12,15-17,19-20H,1-2H3,(H,24,26)(H,27,28)/t15-,16-,17?,19-,20-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H23NO5S/c1-23(2)16(22(27)28)15-18(25)17(20(15)30-23)24-21(26)19(13-9-5-3-6-10-13)29-14-11-7-4-8-12-14/h3-12,15-17,19-20H,1-2H3,(H,24,26)(H,27,28)/t15-,16-,17+,19-,20-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H23NO5S/c1-23(2)16(22(27)28)15-18(25)17(20(15)30-23)24-21(26)19(13-9-5-3-6-10-13)29-14-11-7-4-8-12-14/h3-12,15-17,19-20H,1-2H3,(H,24,26)(H,27,28)/t15-,16+,17+,19+,20-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H24FN3O/c24-21-9-7-18(8-10-21)22(28)6-3-11-26-12-14-27(15-13-26)23-16-19-4-1-2-5-20(19)17-25-23/h1-2,4-5,7-10,16-17H,3,6,11-15H2	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H24FN3O3/c1-30-21-7-2-16(15-25)14-20(21)23(29)26-10-13-27-11-8-18(9-12-27)22(28)17-3-5-19(24)6-4-17/h2-7,14,18H,8-13H2,1H3,(H,26,29)	1 (Meng et al., 2023)
InChI=1S/C23H24FN5/c1-17-14-25-29(15-17)20-10-12-27(13-11-20)23-26-21-4-2-3-5-22(21)28(23)16-18-6-8-19(24)9-7-18/h2-9,14-15,20H,10-13,16H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H24N2O4S/c1-2-3-6-21-24-14-19(12-18(23(28)29)13-20-5-4-11-30-20)25(21)15-16-7-9-17(10-8-16)22(26)27/h4-5,7-12,14H,2-3,6,13,15H2,1H3,(H,26,27)(H,28,29)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H24N2O4S/c1-2-3-6-21-24-14-19(12-18(23(28)29)13-20-5-4-11-30-20)25(21)15-16-7-9-17(10-8-16)22(26)27/h4-5,7-12,14H,2-3,6,13,15H2,1H3,(H,26,27)(H,28,29)/b18-12-	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H24N2O4S/c1-2-3-6-21-24-14-19(12-18(23(28)29)13-20-5-4-11-30-20)25(21)15-16-7-9-17(10-8-16)22(26)27/h4-5,7-12,14H,2-3,6,13,15H2,1H3,(H,26,27)(H,28,29)/b18-12+	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H24N4/c1-26(2)16-9-17-27-21-14-7-6-12-19(21)22(18-10-4-3-5-11-18)25-20-13-8-15-24-23(20)27/h3-8,10-15H,9,16-17H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H24N6O5S2/c1-34-27-16(14-11-36-23(24)25-14)19(30)26-17-20(31)29-18(22(32)33)13(10-35-21(17)29)9-28-8-4-6-12-5-2-3-7-15(12)28/h4,6,8,11,17,21H,2-3,5,7,9-10H2,1H3,(H3-,24,25,26,30,32,33)/b27-16-/t17-,21-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H24N6O5S2/c1-34-27-16(14-11-36-23(24)25-14)19(30)26-17-20(31)29-18(22(32)33)13(10-35-21(17)29)9-28-8-4-6-12-5-2-3-7-15(12)28/h4,6,8,11,17,21H,2-3,5,7,9-10H2,1H3,(H3-,24,25,26,30,32,33)/p+1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H24N6O5S2/c1-34-27-16(14-11-36-23(24)25-14)19(30)26-17-20(31)29-18(22(32)33)13(10-35-21(17)29)9-28-8-4-6-12-5-2-3-7-15(12)28/h4,6,8,11,17,21H,2-3,5,7,9-10H2,1H3,(H3-,24,25,26,30,32,33)/p+1/b27-16-/t17-,21-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H24N6O5S2/c1-34-27-16(14-11-36-23(24)25-14)19(30)26-17-20(31)29-18(22(32)33)13(10-35-21(17)29)9-28-8-4-6-12-5-2-3-7-15(12)28/h4,6,8,11,17,21H,2-3,5,7,9-10H2,1H3,(H3-,24,25,26,30,32,33)/p+1/b27-16+/t17-,21-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H24O4/c1-16(24)26-21-12-8-19(9-13-21)23(18-6-4-3-5-7-18)20-10-14-22(15-11-20)27-17(2)25/h8-15H,3-7H2,1-2H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H25BrFN3O2/c24-18-5-9-20(10-6-18)28-16-26-22(30)23(28)11-14-27(15-12-23)13-1-2-21(29)17-3-7-19(25)8-4-17/h3-10H,1-2,11-16H2,(H,26,30)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H25CIN2O8/c1-22(33)11-7-10-13(26(2)3)6-9(21(32)25-8-27)19(30)23(10,34)20(31)15(11)18(29)16-14(28)5-4-12(24)17(16)22/h4-6,10-11,13,27-28,31,33-34H,7-8H2,1-3H3,(H,25,32)	0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C23H25CIN2O9/c1-22(34)8-6-9-16(26(2)3)18(30)14(21(33)25-7-27)20(32)23(9,35)19(31)12(8)17(29)13-11(28)5-4-10(24)15(13)22/h4-5,8-9,16,27-28,30-31,34-35H,6-7H2,1-3H3,(H,25,33)/t8-,9-,16-,22-,23+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H25CIN2O9/c1-22(34)8-6-9-16(26(2)3)18(30)14(21(33)25-7-27)20(32)23(9,35)19(31)12(8)17(29)13-11(28)5-4-10(24)15(13)22/h4-5,8-9,16,27-28,30-31,34-35H,6-7H2,1-3H3,(H,25,33)/t8-,9-,16-,22?,23?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H25CIN2O9/c1-22(34)8-6-9-16(26(2)3)18(30)14(21(33)25-7-27)20(32)23(9,35)19(31)12(8)17(29)13-11(28)5-4-10(24)15(13)22/h4-5,8-9,16,27-28,30-31,34-35H,6-7H2,1-3H3,(H,25,33)/t8-,9-,16+,22-,23-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H25CIN2O9/c1-22(34)8-6-9-16(26(2)3)18(30)14(21(33)25-7-27)20(32)23(9,35)19(31)12(8)17(29)13-11(28)5-4-10(24)15(13)22/h4-5,8-9,16,27-29,32,34-35H,6-7H2,1-3H3,(H,25,33)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H25CIN2O9/c1-22(34)8-6-9-16(26(2)3)18(30)14(21(33)25-7-27)20(32)23(9,35)19(31)12(8)17(29)13-11(28)5-4-10(24)15(13)22/h4-5,8-9,16,27-29,32,34-35H,6-7H2,1-3H3,(H,25,33)/t8-,9-,16-,22-,23-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H25CIN2O9/c1-22(34)8-6-9-16(26(2)3)18(30)14(21(33)25-7-27)20(32)23(9,35)19(31)12(8)17(29)13-11(28)5-4-10(24)15(13)22/h4-5,8-9,16,27-29,32,34-35H,6-7H2,1-3H3,(H,25,33)/t8-,9-,16-,22?,23?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H25F2N3O2/c24-18-5-3-17(4-6-18)21(29)2-1-13-27-14-11-23(12-15-27)22(30)26-16-28(23)20-9-7-19(25)8-10-20/h3-10H,1-2,11-16H2,(H,26,30)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H25F3N2O/c1-29-20-7-8-21-17(13-27-22(21)12-20)14-28-10-9-23(25,26)18(15-28)6-5-16-3-2-4-19(24)11-16/h2-4,7-8,11-13,18,27H,5-6,9-10,14-15H2,1H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C23H25F3N2O/c1-29-20-8-9-21-17(13-27-22(21)12-20)14-28-11-10-23(25,26)18(15-28)5-2-16-3-6-19(24)7-4-16/h3-4,6-9,12-13,18,27H,2,5,10-11,14-15H2,1H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C23H25F3N2OS/c24-23(25,26)17-7-8-22-20(16-17)18(19-4-1-2-6-21(19)30-22)5-3-9-27-10-12-28(13-11-27)14-15-29/h1-2,4-8,16,29H,3,9-15H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H25F3N2OS/c24-23(25,26)17-7-8-22-20(16-17)18(19-4-1-2-6-21(19)30-22)5-3-9-27-10-12-28(13-11-27)14-15-29/h1-2,4-8,16,29H,3,9-15H2/b18-5-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H25F3N2OS/c24-23(25,26)17-7-8-22-20(16-17)18(19-4-1-2-6-21(19)30-22)5-3-9-27-10-12-28(13-11-27)14-15-29/h1-2,4-8,16,29H,3,9-15H2/b18-5+	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C23H25F3N4O3S/c1-2-29(15-17-5-3-4-6-20(17)23(24,25)26)22(31)16-9-11-30(12-10-16)34(32,33)19-7-8-21-18(13-19)14-27-28-21/h3-8,13-14,16H,2,9-12,15H2,1H3,(H,27,28)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C23H25N5O2S/c1-14-5-6-17(11-21(14)31(24,29)30)12-22-25-10-9-23(27-22)28(4)18-7-8-19-15(2)16(3)26-20(19)13-18/h5-11,13,16H,12H2,1-4H3,(H2,24,29,30)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H25N5O5/c1-30-18-11-14-15(12-19(18)31-2)25-23(26-21(14)24)28-9-7-27(8-10-28)22(29)20-13-32-16-5-3-4-6-17(16)33-20/h3-6,11-12,20H,7-10,13H2,1-2H3,(H2,24,25,26)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H25N5O5/c1-30-18-11-14-15(12-19(18)31-2)25-23(26-21(14)24)28-9-7-27(8-10-28)22(29)20-13-32-16-5-3-4-6-17(16)33-20/h3-6,11-12,20H,7-10,13H2,1-2H3,(H2,24,25,26)/t20-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H25NO5/c1-4-10-24-11-9-23-16-6-8-19(28-14(3)26)22(23)29-21-18(27-13(2)25)7-5-15(20(21)23)12-17(16)24/h4-8,16-17,19,22H,1,9-12H2,2-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H25NO5/c1-4-10-24-11-9-23-16-6-8-19(28-14(3)26)22(23)29-21-18(27-13(2)25)7-5-15(20(21)23)12-17(16)24/h4-8,16-17,19,22H,1,9-12H2,2-3H3/t16-,17?,19?,22-,23?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H25NO5/c1-4-10-24-11-9-23-16-6-8-19(28-14(3)26)22(23)29-21-18(27-13(2)25)7-5-15(20(21)23)12-17(16)24/h4-8,16-	1	(Meng et al., 2021)

17,19,22H,1,9-12H2,2-3H3/t16-,17+,19-,22+,23+/m0/s1	
InChI=1S/C23H25NO5/c1-4-10-24-11-9-23-16-6-8-19(28-14(3)26)22(23)29-21-18(27-13(2)25)7-5-15(20(21)23)12-17(16)24/h4-8,16-17,19,22H,1,9-12H2,2-3H3/t16-,17+,19-,22-,23-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H26BrF3N2O2/c24-19-8-6-17(7-9-19)22(30)28-12-1-2-13-29-14-10-20(11-15-29)31-21-5-3-4-18(16-21)23(25,26)27/h3-9,16,20H,1-2,10-15H2,(H,28,30)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H26Cl2N2O4/c1-26(22(28)12-16-7-8-19(24)20(25)11-16)21(14-27-9-2-3-10-27)17-5-4-6-18(13-17)31-15-23(29)30/h4-8,11,13,21H,2-3,9-10,12,14-15H2,1H3,(H,29,30)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H26ClN7O3/c1-34-19-6-5-15(10-18(19)24)11-27-21-17(22(33)28-13-20-25-7-3-8-26-20)12-29-23(30-21)31-9-2-4-16(31)14-32/h3,5-8,10,12,16,32H,2,4,9,11,13-14H2,1H3,(H,28,33)(H,27,29,30)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H26F3N3S/c24-23(25,26)17-6-9-22-20(16-17)29(19-4-1-2-5-21(19)30-22)11-3-10-27-12-14-28(15-13-27)18-7-8-18/h1-2,4-6,9,16,18H,3,7-8,10-15H2	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H26F4N2OS/c24-17-4-5-19-18(2-1-7-28-8-10-29(11-9-28)12-13-30)20-14-16(23(25,26)27)3-6-21(20)31-22(19)15-17/h3-6,14-15,18,30H,1-2,7-13H2	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H26F4N2OS/c24-17-4-5-19-18(2-1-7-28-8-10-29(11-9-28)12-13-30)20-14-16(23(25,26)27)3-6-21(20)31-22(19)15-17/h3-6,14-15,18,30H,1-2,7-13H2/t18-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H26F4N2OS/c24-17-4-5-19-18(2-1-7-28-8-10-29(11-9-28)12-13-30)20-14-16(23(25,26)27)3-6-21(20)31-22(19)15-17/h3-6,14-15,18,30H,1-2,7-13H2/t18-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H26FN3O2/c24-19-10-8-18(9-11-19)21(28)7-4-14-26-15-12-23(13-16-26)22(29)25-17-27(23)20-5-2-1-3-6-20/h1-3,5-6,8-11H,4,7,12-17H2,(H,25,29)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H26FN6O9P/c1-23(2)21(31)30(11-38-40(32,33)34)20-14(39-23)6-7-17(28-20)27-19-13(24)10-25-22(29-19)26-12-8-15(35-3)18(37-5)16(9-12)36-4/h6-10H,11H2,1-5H3,(H2,32,33,34)(H2,25,26,27,28,29)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H26N2O.CH4O3S/c26-21-9-10-23-22(16-21)20(17-24-23)8-4-5-13-25-14-11-19(12-15-25)18-6-2-1-3-7-18;1-5(2,3)4/h1-3,6-7,9-11,16-17,24,26H,4-5,8,12-15H2;1H3,(H,2,3,4)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H26N2O/c26-21-9-10-23-22(16-21)20(17-24-23)8-4-5-13-25-14-11-19(12-15-25)18-6-2-1-3-7-18/h1-3,6-7,9-11,16-17,24,26H,4-5,8,12-15H2	1 (Li et al., 2005)
InChI=1S/C23H26N2O2/c26-23(27-21-16-24-13-10-18(21)11-14-24)25-15-12-17-6-4-5-9-20(17)22(25)19-7-2-1-3-8-19/h1-9,18,21-22H,10-16H2	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H26N2O4/c1-16-13-18-7-5-6-8-19(18)25(16)12-11-24-22(26)10-9-17-14-20(27-2)23(29-4)21(15-17)28-3/h5-10,13-15H,11-12H2,1-4H3,(H,24,26)/b10-9+	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H26N2O6/c1-28-18-5-3-17(4-6-18)25-14-19(31-22(25)26)13-24-10-8-23(27,9-11-24)16-2-7-20-21(12-16)30-15-29-20/h2-7,12,19,27H,8-11,13-15H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H26N2O6/c1-28-18-5-3-17(4-6-18)25-14-19(31-22(25)26)13-24-10-8-23(27,9-11-24)16-2-7-20-21(12-16)30-15-29-20/h2-7,12,19,27H,8-11,13-15H2,1H3/t19-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H26N2O6/c1-28-18-5-3-17(4-6-18)25-14-19(31-22(25)26)13-24-10-8-23(27,9-11-24)16-2-7-20-21(12-16)30-15-29-20/h2-7,12,19,27H,8-11,13-15H2,1H3/t19-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H26N6O5S2/c1-34-27-16(14-11-36-23(24)25-14)19(30)26-17-20(31)29-18(22(32)33)13(10-35-21(17)29)9-28-8-4-6-12-5-2-3-7-15(12)28/h4,8,11,17,21H,2-3,5-7,9-10H2,1H3,(H2,24,25)(H,26,30)(H,32,33)/b27-16+/t17-,21+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C23H27BrF3N3O/c24-19-8-6-17(7-9-19)22(31)28-12-1-2-13-30-14-10-20(11-15-30)29-21-5-3-4-18(16-21)23(25,26)27/h3-9,16,20,29H,1-2,10-15H2,(H,28,31)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H27Cl2N3O2/c24-19-4-3-5-21(23(19)25)28-13-11-27(12-14-28)10-1-2-15-30-18-8-6-17-7-9-22(29)26-20(17)16-18/h3-6,8,16H,1-2,7,9-15H2,(H,26,29)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H27ClN2O2/c24-19-7-8-23-22(16-19)21(20-5-2-1-4-18(20)17-28-23)6-3-9-25-10-12-26(13-11-25)14-15-27/h1-2,4-8,16,27H,3,9-15,17H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H27ClN2O2/c24-19-7-8-23-22(16-19)21(20-5-2-1-4-18(20)17-28-23)6-3-9-25-10-12-26(13-11-25)14-15-27/h1-2,4-8,16,27H,3,9-15,17H2/b21-6-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H27ClN2O2/c24-19-7-8-23-22(16-19)21(20-5-2-1-4-18(20)17-28-23)6-3-9-25-10-12-26(13-11-25)14-15-27/h1-2,4-8,16,27H,3,9-15,17H2/b21-6+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H27ClO6/c1-12(25)30-11-19(28)23(29)7-5-15-14-9-17(24)16-8-13(26)4-6-21(16,2)20(14)18(27)10-22(15,23)3/h4,6,8,14-15,17,20,29H,5,7,9-11H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H27ClO6/c1-12(25)30-11-19(28)23(29)7-5-15-14-9-17(24)16-8-13(26)4-6-21(16,2)20(14)18(27)10-22(15,23)3/h4,6,8,14-15,17,20,29H,5,7,9-11H2,1-3H3/t14-,15-,17-,20+,21-,22-,23-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H27ClO6/c1-12(25)30-11-19(28)23(29)7-5-15-14-9-17(24)16-8-13(26)4-6-21(16,2)20(14)18(27)10-22(15,23)3/h4,6,8,14-15,17,20,29H,5,7,9-11H2,1-3H3/t14-,15-,17-,20+,21?,22?,23?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H27ClO6/c1-12(25)30-11-19(28)23(29)7-5-15-14-9-17(24)16-8-13(26)4-6-21(16,2)20(14)18(27)10-22(15,23)3/h4,6,8,14-15,17,20,29H,5,7,9-11H2,1-3H3/t14-,15-,17-,20+,21+,22+,23+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H27ClO6/c1-12(25)30-11-19(28)23(29)7-5-15-14-9-17(24)16-8-13(26)4-6-21(16,2)20(14)18(27)10-22(15,23)3/h4,6,8,14-15,17,20,29H,5,7,9-11H2,1-3H3/t14-,15+,17+,20-,21-,22-,23+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H27ClO6/c1-12(25)30-11-19(28)23(29)7-5-15-14-9-17(24)16-8-13(26)4-6-21(16,2)20(14)18(27)10-22(15,23)3/h4,6,8,14-15,17,20,29H,5,7,9-11H2,1-3H3/t14?,15?,17-,20?,21-,22-,23-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H27F3N2O2S/c24-23(25,26)17-6-7-22-20(16-17)28(19-4-1-2-5-21(19)31-22)11-3-10-27-12-8-18(9-13-27)30-15-14-29/h1-2,4-7,16,18,29H,3,8-15H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H27FN4O2/c1-15-18(23(29)28-10-3-2-4-21(28)25-15)9-13-27-11-7-16(8-12-27)22-19-6-5-17(24)14-20(19)30-26-22/h5-6,14,16H,2-4,7-13H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H27FN4O3/c1-14-17(23(30)28-9-2-3-19(29)22(28)25-14)8-12-27-10-6-15(7-11-27)21-18-5-4-16(24)13-20(18)31-26-21/h4-5,13,15,19,29H,2-3,6-12H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H27FN4O3/c1-14-17(23(30)28-9-2-3-19(29)22(28)25-14)8-12-27-10-6-15(7-11-27)21-18-5-4-16(24)13-20(18)31-26-21/h4-5,13,15,19,29H,2-3,6-12H2,1H3/t19-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H27FN4O3/c1-14-17(23(30)28-9-2-3-19(29)22(28)25-14)8-12-27-10-6-15(7-11-27)21-18-5-4-16(24)13-20(18)31-26-21/h4-5,13,15,19,29H,2-3,6-12H2,1H3/t19-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H27FN4O3/c1-14-18(23(30)28-13-17(29)3-5-21(28)25-14)8-11-27-9-6-15(7-10-27)22-19-4-2-16(24)12-20(19)31-26-22/h2,4,12,15,17,29H,3,5-11,13H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H27FN4O3/c1-14-18(23(30)28-13-17(29)3-5-21(28)25-14)8-11-27-9-6-15(7-10-27)22-19-4-2-16(24)12-20(19)31-26-22/h2,4,12,15,17,29H,3,5-11,13H2,1H3/p+1/t17-/m1/s1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C23H27FN4O3/c1-14-18(23(30)28-13-17(29)3-5-21(28)25-14)8-11-27-9-6-15(7-10-27)22-19-4-2-16(24)12-20(19)31-26-	1	(Meng et al., 2021)

22/h2,4,12,15,17,29H,3,5-11,13H2,1H3/t17-/m0/s1	
InChI=1S/C23H27N3O2/c1-23-11-13-24(2)21(23)25(3)20-9-8-18(14-19(20)23)28-22(27)26-12-10-16-6-4-5-7-17(16)15-26/h4-9,14,21H,10-13,15H2,1-3H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H27N3O2/c1-23-11-13-24(2)21(23)25(3)20-9-8-18(14-19(20)23)28-22(27)26-12-10-16-6-4-5-7-17(16)15-26/h4-9,14,21H,10-13,15H2,1-3H3/t21-,23?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H27N3O2/c1-23-11-13-24(2)21(23)25(3)20-9-8-18(14-19(20)23)28-22(27)26-12-10-16-6-4-5-7-17(16)15-26/h4-9,14,21H,10-13,15H2,1-3H3/t21-,23+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H27N3O2/c1-23-11-13-24(2)21(23)25(3)20-9-8-18(14-19(20)23)28-22(27)26-12-10-16-6-4-5-7-17(16)15-26/h4-9,14,21H,10-13,15H2,1-3H3/t21?,23-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H27N3O2S/c1-25-13-11-20(12-14-25)24-22(28)18-7-9-19(10-8-18)23-26(21(27)16-29-23)15-17-5-3-2-4-6-17/h2-10,20,23H,11-16H2,1H3,(H,24,28)/t23-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H27N3O7/c1-25(2)12-5-6-13(27)15-10(12)7-9-8-11-17(26(3)4)19(29)16(22(24)32)21(31)23(11,33)20(30)14(9)18(15)28/h5-6,9,11,17,27-28,31,33H,7-8H2,1-4H3,(H2,24,32)	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C23H27N3O7/c1-25(2)12-5-6-13(27)15-10(12)7-9-8-11-17(26(3)4)19(29)16(22(24)32)21(31)23(11,33)20(30)14(9)18(15)28/h5-6,9,11,17,27-28,31,33H,7-8H2,1-4H3,(H2,24,32)/t9-,11-,17-,23-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H27N3O7/c1-25(2)12-5-6-13(27)15-10(12)7-9-8-11-17(26(3)4)19(29)16(22(24)32)21(31)23(11,33)20(30)14(9)18(15)28/h5-6,9,11,17,27-28,31,33H,7-8H2,1-4H3,(H2,24,32)/t9-,11-,17+,23-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H27N3O7/c1-25(2)12-5-6-13(27)15-10(12)7-9-8-11-17(26(3)4)19(29)16(22(24)32)21(31)23(11,33)20(30)14(9)18(15)28/h5-6,9,11,17,27-28,31,33H,7-8H2,1-4H3,(H2,24,32)/t9-,11-,17+,23+/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H27N3O7/c1-25(2)12-5-6-13(27)15-10(12)7-9-8-11-17(26(3)4)19(29)16(22(24)32)21(31)23(11,33)20(30)14(9)18(15)28/h5-6,9,11,17,27,29-30,33H,7-8H2,1-4H3,(H2,24,32)/t9-,11+,17+,23?/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H27N3OS/c1-27-20-13-21-19(26-23(28-21)16-9-10-16)12-17(20)14-25-18-8-5-11-24-22(18)15-6-3-2-4-7-15/h2-4,6-7,12-13,16,18,22,24-25H,5,8-11,14H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H27N3OS/c1-27-20-13-21-19(26-23(28-21)16-9-10-16)12-17(20)14-25-18-8-5-11-24-22(18)15-6-3-2-4-7-15/h2-4,6-7,12-13,16,18,22,24-25H,5,8-11,14H2,1H3/t18-,22-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H27N5O7S/c1-4-26-10-11-27(19(32)18(26)31)22(35)25-13(12-8-6-5-7-9-12)16(29)24-14-17(30)28-15(21(33)34)23(2,3)36-20(14)28/h5-9,13-15,20H,4,10-11H2,1-3H3,(H,24,29)(H,25,35)(H,33,34)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H27N5O7S/c1-4-26-10-11-27(19(32)18(26)31)22(35)25-13(12-8-6-5-7-9-12)16(29)24-14-17(30)28-15(21(33)34)23(2,3)36-20(14)28/h5-9,13-15,20H,4,10-11H2,1-3H3,(H,24,29)(H,25,35)(H,33,34)/t13-,14-,15-,20-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H27N5O7S/c1-4-26-10-11-27(19(32)18(26)31)22(35)25-13(12-8-6-5-7-9-12)16(29)24-14-17(30)28-15(21(33)34)23(2,3)36-20(14)28/h5-9,13-15,20H,4,10-11H2,1-3H3,(H,24,29)(H,25,35)(H,33,34)/t13-,14-,15+,20-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H27N5O7S/c1-4-26-10-11-27(19(32)18(26)31)22(35)25-13(12-8-6-5-7-9-12)16(29)24-14-17(30)28-15(21(33)34)23(2,3)36-20(14)28/h5-9,13-15,20H,4,10-11H2,1-3H3,(H,24,29)(H,25,35)(H,33,34)/t13-,14?,15-,20-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H27N5O7S/c1-4-26-10-11-27(19(32)18(26)31)22(35)25-13(12-8-6-5-7-9-12)16(29)24-14-17(30)28-15(21(33)34)23(2,3)36-20(14)28/h5-9,13-15,20H,4,10-11H2,1-3H3,(H,24,29)(H,25,35)(H,33,34)/t13-,14+,15-,20+/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H27N5S/c1-17-9-11-18(12-10-17)27-14-6-8-20(27)22-21(19-7-4-5-13-24-19)25-23(29)28(22)16-15-26(2)3/h4-14,21-22H,15-16H2,1-3H3,(H,25,29)	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C23H27N5S/c1-17-9-11-18(12-10-17)27-14-6-8-20(27)22-21(19-7-4-5-13-24-19)25-23(29)28(22)16-15-26(2)3/h4-14,21-22H,15-16H2,1-3H3,(H,25,29)/t21-,22-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H27NO4/c1-16-12-19(14-23(2,3)13-16)27-22(26)20(17-8-5-4-6-9-17)28-21(25)18-10-7-11-24-15-18/h4-11,15-16,19-20H,12-14H2,1-3H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H27NO9/c1-24-7-6-23-10-3-4-12(25)20(23)32-18-13(5-2-9(14(18)23)8-11(10)24)31-22-17(28)15(26)16(27)19(33-22)21(29)30/h2-5,10-12,15-17,19-20,22,25-28H,6-8H2,1H3,(H,29,30)/t10-,11+,12-,15-,16-,17+,19-,20-,22?,23-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H27NO9/c1-24-7-6-23-10-3-5-13(31-22-17(28)15(26)16(27)19(33-22)21(29)30)20(23)32-18-12(25)4-2-9(14(18)23)8-11(10)24/h2-5,10-11,13,15-17,19-20,22,25-28H,6-8H2,1H3,(H,29,30)/t10-,11+,13-,15-,16-,17+,19-,20-,22?,23-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H28Cl2FN3O4S/c1-5-21(23(31)27-15(2)3)28(13-16-8-6-7-9-18(16)24)22(30)14-29(34(4,32)33)17-10-11-20(26)19(25)12-17/h6-12,15,21H,5,13-14H2,1-4H3,(H,27,31)/t21-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H28Cl2O4/c1-13(26)10-19(28)22(29)9-7-16-17-5-4-14-11-15(27)6-8-20(14,2)23(17,25)18(24)12-21(16,22)3/h6,8,11,16-18,29H,4-5,7,9-10,12H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H28Cl2O4/c1-13(26)10-19(28)22(29)9-7-16-17-5-4-14-11-15(27)6-8-20(14,2)23(17,25)18(24)12-21(16,22)3/h6,8,11,16-18,29H,4-5,7,9-10,12H2,1-3H3/t16-,17-,18-,20?,21?,22?,23?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H28Cl2O4/c1-13(26)10-19(28)22(29)9-7-16-17-5-4-14-11-15(27)6-8-20(14,2)23(17,25)18(24)12-21(16,22)3/h6,8,11,16-18,29H,4-5,7,9-10,12H2,1-3H3/t16-,17-,18+,20-,21+,22+,23-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H28Cl2O4/c1-13(26)10-19(28)22(29)9-7-16-17-5-4-14-11-15(27)6-8-20(14,2)23(17,25)18(24)12-21(16,22)3/h6,8,11,16-18,29H,4-5,7,9-10,12H2,1-3H3/t16-,17+,18+,20+,21+,22-,23-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H28Cl2O5/c1-13(26)30-12-19(28)22(29)9-7-16-17-5-4-14-10-15(27)6-8-20(14,2)23(17,25)18(24)11-21(16,22)3/h6,8,10,16-18,29H,4-5,7,9,11-12H2,1-3H3/t16-,17-,18-,20?,21?,22?,23?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H28Cl2O5/c1-13(26)30-12-19(28)22(29)9-7-16-17-5-4-14-10-15(27)6-8-20(14,2)23(17,25)18(24)11-21(16,22)3/h6,8,10,16-18,29H,4-5,7,9,11-12H2,1-3H3/t16?,17?,18-,20-,21-,22-,23-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H28Cl2O5/c1-13(26)30-12-19(28)22(29)9-7-16-17-5-4-14-10-15(27)6-8-20(14,2)23(17,25)18(24)11-21(16,22)3/h6,8,10,16-18,29H,4-5,7,9,11-12H2,1-3H3/t16?,17?,18?,20?,21?,22-,23-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H28ClN3O2S/c1-18(28)29-16-15-26-13-11-25(12-14-26)9-4-10-27-20-5-2-3-6-22(20)30-23-8-7-19(24)17-21(23)27/h2-3,5-8,17H,4,9-16H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H28ClN3O5S/c1-32-21-12-9-17(24)15-20(21)22(28)25-14-13-16-7-10-19(11-8-16)33(30,31)27-23(29)26-18-5-3-2-4-6-18/h7-12,15,18H,2-6,13-14H2,1H3,(H,25,28)(H2,26,27,29)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H28ClN5O3/c1-26-12-14-27(15-13-26)10-2-3-11-28-22(30)17-29(23(28)31)25-16-20-8-9-21(32-20)18-4-6-19(24)7-5-18/h4-9,16H,2-3,10-15,17H2,1H3/b25-16-	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H28ClN5O3/c1-26-12-14-27(15-13-26)10-2-3-11-28-22(30)17-29(23(28)31)25-16-20-8-9-21(32-20)18-4-6-19(24)7-5-18/h4-9,16H,2-3,10-15,17H2,1H3/b25-16+	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H28F2N6O4S/c1-2-7-36-23-27-21(26-15-9-12(15)11-3-4-13(24)14(25)8-11)18-22(28-23)31(30-29-18)16-10-17(35-6-5-32)20(34)19(16)33/h3-4,8,12,15-17,19-20,32-34H,2,5-7,9-10H2,1H3,(H,26,27,28)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H28F3N3OS/c24-23(25,26)18-7-8-20-22(17-18)31-21-6-2-1-5-19(21)29(20)12-4-11-27-9-3-10-28(14-13-27)15-16-30/h1-2,5-8,17,30H,3-4,9-16H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H28F3N3OS/c24-23(25,26)18-7-8-22-20(17-18)29(19-5-1-2-6-21(19)31-22)12-4-11-27-9-3-10-28(14-13-27)15-16-30/h1-2,5-	1	(Mazumdar et al., 2023)

8,17,30H,3-4,9-16H2	2023)
InChI=1S/C23H28N2O3/c1-16-13-19-20(25-16)11-8-12-21(19)27-15-18(14-24-23(2,3)4)28-22(26)17-9-6-5-7-10-17/h5-13,18,24-25H,14-15H2,1-4H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H28N2O3/c1-27-21-10-6-9-20(22(21)28-2)23(26)24-17-13-18-11-12-19(14-17)25(18)15-16-7-4-3-5-8-16/h3-10,17-19H,11-15H2,1-2H3,(H,24,26)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H28N2O3/c1-27-21-10-6-9-20(22(21)28-2)23(26)24-17-13-18-11-12-19(14-17)25(18)15-16-7-4-3-5-8-16/h3-10,17-19H,11-15H2,1-2H3,(H,24,26)/t17?,18-,19+	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H28N2O3/c1-27-21-10-6-9-20(22(21)28-2)23(26)24-17-13-18-11-12-19(14-17)25(18)15-16-7-4-3-5-8-16/h3-10,17-19H,11-15H2,1-2H3,(H,24,26)/t18-,19-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H28N2O3S/c1-3-23(4-2,22(27)28)14-20(26)24-18-10-5-7-16(13-18)11-12-21-25-19(15-29-21)17-8-6-9-17/h5,7,10-13,15,17H,3-4,6,8-9,14H2,1-2H3,(H,24,26)(H,27,28)/b12-11+	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H28N2O5S2/c1-2-30-23(29)17(11-10-16-7-4-3-5-8-16)24-18-15-32-20(19-9-6-12-31-19)13-25(22(18)28)14-21(26)27/h3-9,12,17-18,20,24H,2,10-11,13-15H2,1H3,(H,26,27)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H28N4O11S/c1-11(38-21(31)23(2,3)33-4)37-20(30)16-12(9-36-22(24)32)10-39-19-15(18(29)27(16)19)25-17(28)14(26-34-5)13-7-6-8-35-13/h6-8,11,15,19H,9-10H2,1-5H3,(H2,24,32)(H,25,28)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H28N4O11S/c1-11(38-21(31)23(2,3)33-4)37-20(30)16-12(9-36-22(24)32)10-39-19-15(18(29)27(16)19)25-17(28)14(26-34-5)13-7-6-8-35-13/h6-8,11,15,19H,9-10H2,1-5H3,(H2,24,32)(H,25,28)/b26-14-/t11?,15-,19-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H28N4O11S/c1-11(38-21(31)23(2,3)33-4)37-20(30)16-12(9-36-22(24)32)10-39-19-15(18(29)27(16)19)25-17(28)14(26-34-5)13-7-6-8-35-13/h6-8,11,15,19H,9-10H2,1-5H3,(H2,24,32)(H,25,28)/b26-14+/t11-,15-,19-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H28N4O11S/c1-11(38-21(31)23(2,3)33-4)37-20(30)16-12(9-36-22(24)32)10-39-19-15(18(29)27(16)19)25-17(28)14(26-34-5)13-7-6-8-35-13/h6-8,11,15,19H,9-10H2,1-5H3,(H2,24,32)(H,25,28)/b26-14+/t11-,15?,19-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H28N4O11S/c1-11(38-21(31)23(2,3)33-4)37-20(30)16-12(9-36-22(24)32)10-39-19-15(18(29)27(16)19)25-17(28)14(26-34-5)13-7-6-8-35-13/h6-8,11,15,19H,9-10H2,1-5H3,(H2,24,32)(H,25,28)/b26-14+/t11-,15+,19-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H28N4O11S/c1-11(38-21(31)23(2,3)33-4)37-20(30)16-12(9-36-22(24)32)10-39-19-15(18(29)27(16)19)25-17(28)14(26-34-5)13-7-6-8-35-13/h6-8,11,15,19H,9-10H2,1-5H3,(H2,24,32)(H,25,28)/b26-14+/t11?,15-,19-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H28N4O11S/c1-12(37-15(28)7-5-8-33-2)38-22(31)18-13(10-36-23(24)32)11-39-21-17(20(30)27(18)21)25-19(29)16(26-34-3)14-6-4-9-35-14/h4,6,9,12,17,21H,5,7-8,10-11H2,1-3H3,(H2,24,32)(H,25,29)/b26-16-/t12-,17?,21-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H28N4O11S/c1-12(37-15(28)7-5-8-33-2)38-22(31)18-13(10-36-23(24)32)11-39-21-17(20(30)27(18)21)25-19(29)16(26-34-3)14-6-4-9-35-14/h4,6,9,12,17,21H,5,7-8,10-11H2,1-3H3,(H2,24,32)(H,25,29)/b26-16+/t12?,17-,21-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H28N4O2/c1-2-7-20-10-6-11-21(23(20)29)16-24-25-22(28)18-27-14-12-26(13-15-27)17-19-8-4-3-5-9-19/h2-6,8-11,16,29H,1,7,12-15,17-18H2,(H,25,28)/b24-16-	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H28N8/c1-3-5-11-21-25-22(12-6-4-2)31(28-21)16-17-13-14-20(24-15-17)18-9-7-8-10-19(18)23-26-29-30-27-23/h7-10,13-15H,3-6,11-12,16H2,1-2H3,(H,26,27,29,30)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H29ClFN3O4/c1-30-21-13-19(26)18(24)12-17(21)23(29)27-20-8-10-28(14-22(20)31-2)9-3-11-32-16-6-4-15(25)5-7-16/h4-7,12-13,20,22H,3,8-11,14,26H2,1-2H3,(H,27,29)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H29ClFN3O4/c1-30-21-13-19(26)18(24)12-17(21)23(29)27-20-8-10-28(14-22(20)31-2)9-3-11-32-16-6-4-15(25)5-7-16/h4-7,12-13,20,22H,3,8-11,14,26H2,1-2H3,(H,27,29)/t20-,22-/m0/s1	1 (Li et al., 2005)

InChI=1S/C23H29ClFN3O4/c1-30-21-13-19(26)18(24)12-17(21)23(29)27-20-8-10-28(14-22(20)31-2)9-3-11-32-16-6-4-15(25)5-7-16/h4-7,12-13,20,22H,3,8-11,14,26H2,1-2H3,(H,27,29)/t20-,22+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H29ClN2OS/c24-18-8-9-23-21(17-18)19(20-5-1-2-7-22(20)28-23)6-3-10-25-12-14-26(15-13-25)11-4-16-27/h1-2,5,7-9,17,19,27H,3-4,6,10-16H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H29ClN2OS/c24-18-8-9-23-21(17-18)19(20-5-1-2-7-22(20)28-23)6-3-10-25-12-14-26(15-13-25)11-4-16-27/h1-2,5,7-9,17,19,27H,3-4,6,10-16H2/t19-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H29F2N3O/c1-2-26-23(29)28-16-14-27(15-17-28)13-3-4-22(18-5-9-20(24)10-6-18)19-7-11-21(25)12-8-19/h5-12,22H,2-4,13-17H2,1H3,(H,26,29)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H29F3N2O/c1-22(2,3)18-11-12-20(29-23(24,25)26)17(14-18)15-28-19-10-7-13-27-21(19)16-8-5-4-6-9-16/h4-6,8-9,11-12,14,19,21,27-28H,7,10,13,15H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H29F3N2O/c1-22(2,3)18-11-12-20(29-23(24,25)26)17(14-18)15-28-19-10-7-13-27-21(19)16-8-5-4-6-9-16/h4-6,8-9,11-12,14,19,21,27-28H,7,10,13,15H2,1-3H3/t19-,21-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H29FO6/c1-13(25)30-12-19(28)22(29)9-7-16-17-5-4-14-10-15(26)6-8-20(14,2)23(17,24)18(27)11-21(16,22)3/h6,8,10,16-18,27,29H,4-5,7,9,11-12H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H29FO6/c1-13(25)30-12-19(28)22(29)9-7-16-17-5-4-14-10-15(26)6-8-20(14,2)23(17,24)18(27)11-21(16,22)3/h6,8,10,16-18,27,29H,4-5,7,9,11-12H2,1-3H3/t16-,17-,18-,20-,21-,22-,23-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H29FO6/c1-13(25)30-12-19(28)22(29)9-7-16-17-5-4-14-10-15(26)6-8-20(14,2)23(17,24)18(27)11-21(16,22)3/h6,8,10,16-18,27,29H,4-5,7,9,11-12H2,1-3H3/t16-,17-,18-,20?,21?,22?,23?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H29FO6/c1-13(25)30-12-19(28)22(29)9-7-16-17-5-4-14-10-15(26)6-8-20(14,2)23(17,24)18(27)11-21(16,22)3/h6,8,10,16-18,27,29H,4-5,7,9,11-12H2,1-3H3/t16-,17-,18+,20-,21-,22-,23-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H29FO6/c1-13(25)30-12-19(28)22(29)9-7-16-17-5-4-14-10-15(26)6-8-20(14,2)23(17,24)18(27)11-21(16,22)3/h6,8,10,16-18,27,29H,4-5,7,9,11-12H2,1-3H3/t16-,17+,18+,20+,21+,22-,23-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H29FO6/c1-20(2)29-19-9-16-15-6-4-12-8-13(26)5-7-14(12)22(15,24)17(27)10-21(16,3)23(19,30-20)18(28)11-25/h5,7-8,14-17,19,25,27H,4,6,9-11H2,1-3H3/t14-,15+,16+,17-,19+,21+,22-,23+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H29FO7/c1-12(25)31-11-19(29)23(30)17(27)9-16-15-5-4-13-8-14(26)6-7-20(13,2)22(15,24)18(28)10-21(16,23)3/h6-8,15-18,27-28,30H,4-5,9-11H2,1-3H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H29N3O/c1-5-13-25(14-6-2)22(27)15-20-23(19-10-7-17(3)8-11-19)24-21-12-9-18(4)16-26(20)21/h7-12,16H,5-6,13-15H2,1-4H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H29N3O/c27-19-18-25-16-14-24(15-17-25)12-5-13-26-22-8-3-1-6-20(22)10-11-21-7-2-4-9-23(21)26/h1-4,6-11,27H,5,12-19H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H29N3O2/c1-17-19(20-15-22(27-2)23(28-3)16-21(20)24-17)9-10-25-11-13-26(14-12-25)18-7-5-4-6-8-18/h4-8,15-16,24H,9-14H2,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H29N3O2/c1-28-21-12-11-19(26-14-6-10-22(26)27)15-18(21)16-25-20-9-5-13-24-23(20)17-7-3-2-4-8-17/h2-4,7-8,11-12,15,20,23-25H,5-6,9-10,13-14,16H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H29N3O2/c1-28-21-12-11-19(26-14-6-10-22(26)27)15-18(21)16-25-20-9-5-13-24-23(20)17-7-3-2-4-8-17/h2-4,7-8,11-12,15,20,23-25H,5-6,9-10,13-14,16H2,1H3/t20-,23-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H29N3O2S/c1-18(28)19-7-8-21-23(17-19)29-22-6-3-2-5-20(22)26(21)10-4-9-24-11-13-25(14-12-24)15-16-27/h2-3,5-8,17,27H,4,9-	1	(Mazumdar et al., 2023)

16H2,1H3	2023)
InChI=1S/C23H29N3O2S/c1-18(28)19-7-8-23-21(17-19)26(20-5-2-3-6-22(20)29-23)10-4-9-24-11-13-25(14-12-24)15-16-27/h2-3,5-8,17,27H,4,9-16H2,1H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H29N3O2S2/c1-24(2)30(27,28)18-10-11-23-21(17-18)19(20-7-4-5-9-22(20)29-23)8-6-12-26-15-13-25(3)14-16-26/h4-5,7-11,17H,6,12-16H2,1-3H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H29N3O2S2/c1-24(2)30(27,28)18-10-11-23-21(17-18)19(20-7-4-5-9-22(20)29-23)8-6-12-26-15-13-25(3)14-16-26/h4-5,7-11,17H,6,12-16H2,1-3H3/b19-8-	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H29N3O2S2/c1-24(2)30(27,28)18-10-11-23-21(17-18)19(20-7-4-5-9-22(20)29-23)8-6-12-26-15-13-25(3)14-16-26/h4-5,7-11,17H,6,12-16H2,1-3H3/b19-8+	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H29N3OS/c1-15(2)27-21-13-22-20(26-16(3)28-22)12-18(21)14-25-19-10-7-11-24-23(19)17-8-5-4-6-9-17/h4-6,8-9,12-13,15,19,23-25H,7,10-11,14H2,1-3H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H29N3OS/c1-15(2)27-21-13-22-20(26-16(3)28-22)12-18(21)14-25-19-10-7-11-24-23(19)17-8-5-4-6-9-17/h4-6,8-9,12-13,15,19,23-25H,7,10-11,14H2,1-3H3/t19-,23-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H29N3OS/c1-3-12-24-23(27)18-10-11-22-20(15-18)26(17(2)16-25-13-6-7-14-25)19-8-4-5-9-21(19)28-22/h4-5,8-11,15,17H,3,6-7,12-14,16H2,1-2H3,(H,24,27)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H29N3OS/c1-3-12-24-23(27)18-10-11-22-20(15-18)26(17(2)16-25-13-6-7-14-25)19-8-4-5-9-21(19)28-22/h4-5,8-11,15,17H,3,6-7,12-14,16H2,1-2H3,(H,24,27)/t17-/m0/s1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C23H29N3OS/c1-3-12-24-23(27)18-10-11-22-20(15-18)26(17(2)16-25-13-6-7-14-25)19-8-4-5-9-21(19)28-22/h4-5,8-11,15,17H,3,6-7,12-14,16H2,1-2H3,(H,24,27)/t17-/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H29N5O4S/c1-2-4-19-5-3-6-20(23(19)30)15-25-26-22(29)17-28-13-11-27(12-14-28)16-18-7-9-21(10-8-18)33(24,31)32/h2-3,5-10,15,30H,1,4,11-14,16-17H2,(H,26,29)(H2,24,31,32)/b25-15-	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H29N5O4S/c1-2-4-19-5-3-6-20(23(19)30)15-25-26-22(29)17-28-13-11-27(12-14-28)16-18-7-9-21(10-8-18)33(24,31)32/h2-3,5-10,15,30H,1,4,11-14,16-17H2,(H,26,29)(H2,24,31,32)/b25-15+	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H29NO3/c1-2-27-22(26)23(20-11-7-4-8-12-20)14-17-24(18-15-23)16-13-21(25)19-9-5-3-6-10-19/h3-12,21,25H,2,13-18H2,1H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H29NO3/c1-3-14-11-17(25)22-23-8-9-24(12-13-4-5-13)16(19(14)23)10-15-6-7-18(26-2)21(27-22)20(15)23/h6-7,13-14,16,19,22H,3-5,8-12H2,1-2H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H29NO3/c1-3-14-11-17(25)22-23-8-9-24(12-13-4-5-13)16(19(14)23)10-15-6-7-18(26-2)21(27-22)20(15)23/h6-7,13-14,16,19,22H,3-5,8-12H2,1-2H3/t14-,16?,19-,22-,23-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H29NO3/c1-3-14-11-17(25)22-23-8-9-24(12-13-4-5-13)16(19(14)23)10-15-6-7-18(26-2)21(27-22)20(15)23/h6-7,13-14,16,19,22H,3-5,8-12H2,1-2H3/t14-,16?,19+,22?,23?/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H29NO3/c1-3-14-11-17(25)22-23-8-9-24(12-13-4-5-13)16(19(14)23)10-15-6-7-18(26-2)21(27-22)20(15)23/h6-7,13-14,16,19,22H,3-5,8-12H2,1-2H3/t14-,16+,19-,22-,23-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H29NO3/c1-3-14-11-17(25)22-23-8-9-24(12-13-4-5-13)16(19(14)23)10-15-6-7-18(26-2)21(27-22)20(15)23/h6-7,13-14,16,19,22H,3-5,8-12H2,1-2H3/t14-,16+,19-,22-,23-/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H29NO3/c1-3-14-11-17(25)22-23-8-9-24(12-13-4-5-13)16(19(14)23)10-15-6-7-18(26-2)21(27-22)20(15)23/h6-7,13-14,16,19,22H,3-5,8-12H2,1-2H3/t14-,16+,19-,22+,23-/m0/s1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C23H29NO3/c1-3-14-11-17(25)22-23-8-9-24(12-13-4-5-13)16(19(14)23)10-15-6-7-18(26-2)21(27-22)20(15)23/h6-7,13-14,16,19,22H,3-5,8-12H2,1-2H3/t14?,16?,19-,22?,23?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H29NO3/c1-3-18-26-23(19-10-6-4-7-11-19,20-12-8-5-9-13-20)22(25)27-21-14-16-24(2)17-15-21/h4-13,21H,3,14-18H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H29NO3/c1-3-21(19-10-6-4-7-11-19)23(25)27-17-15-24-14-16-26-22(18(24)2)20-12-8-5-9-13-20/h4-13,18,21-22H,3,14-17H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H29NO3/c1-3-21(19-10-6-4-7-11-19)23(25)27-17-15-24-14-16-26-22(18(24)2)20-12-8-5-9-13-20/h4-13,18,21-22H,3,14-17H2,1-2H3/t18-,21-,22+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H29NO3/c1-3-21(19-10-6-4-7-11-19)23(25)27-17-15-24-14-16-26-22(18(24)2)20-12-8-5-9-13-20/h4-13,18,21-22H,3,14-17H2,1-2H3/t18-,21+,22+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H30CIN3O/c1-5-27(6-2)13-7-8-16(3)25-23-19-11-9-17(24)14-22(19)26-21-12-10-18(28-4)15-20(21)23/h9-12,14-16H,5-8,13H2,1-4H3,(H,25,26)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H30FN3/c1-2-26-13-15-27(16-14-26)23-17-21(18-9-11-19(24)12-10-18)20-7-5-3-4-6-8-22(20)25-23/h9-12,17H,2-8,13-16H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H30N2O2/c1-2-27-22(26)23(20-10-5-3-6-11-20)14-18-25(19-15-23)17-9-16-24-21-12-7-4-8-13-21/h3-8,10-13,24H,2,9,14-19H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H30N2O6/c1-13-17(20(26)30-22(3,4)5)19(15-10-9-11-16(12-15)25(28)29)18(14(2)24-13)21(27)31-23(6,7)8/h9-12,19,24H,1-8H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H30N2OS/c1-18-12-15-25(16-13-18)21-10-8-20(9-11-21)19(2)24-23(26)14-17-27-22-6-4-3-5-7-22/h3-11,18-19H,12-17H2,1-2H3,(H,24,26)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H30N2OS/c1-18-12-15-25(16-13-18)21-10-8-20(9-11-21)19(2)24-23(26)14-17-27-22-6-4-3-5-7-22/h3-11,18-19H,12-17H2,1-2H3,(H,24,26)/t19-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H30N4O2S/c28-22-17-7-1-2-8-18(17)23(29)27(22)12-6-5-11-25-13-15-26(16-14-25)21-19-9-3-4-10-20(19)30-24-21/h3-4,9-10,17-18H,1-2,5-8,11-16H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H30N4O2S/c28-22-17-7-1-2-8-18(17)23(29)27(22)12-6-5-11-25-13-15-26(16-14-25)21-19-9-3-4-10-20(19)30-24-21/h3-4,9-10,17-18H,1-2,5-8,11-16H2/t17-,18-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H30N4O2S/c28-22-17-7-1-2-8-18(17)23(29)27(22)12-6-5-11-25-13-15-26(16-14-25)21-19-9-3-4-10-20(19)30-24-21/h3-4,9-10,17-18H,1-2,5-8,11-16H2/t17-,18+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H30N6O4/c1-12(2)18(11-30)26-19-10-17(13-5-6-13)27-23-20(21(24)31)22(28-29(19)23)25-14-7-15(32-3)9-16(8-14)33-4/h7-10,12-13,18,26,30H,5-6,11H2,1-4H3,(H2,24,31)(H,25,28)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H30NO3/c1-16(2)24(5,17(3)4)14-15-26-23(25)22-18-10-6-8-12-20(18)27-21-13-9-7-11-19(21)22/h6-13,16-17,22H,14-15H2,1-5H3/q+1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H30O3/c1-8-26-23(24)14-17(3)11-9-10-16(2)12-13-21-18(4)15-22(25-7)20(6)19(21)5/h9-15H,8H2,1-7H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H30O3/c1-8-26-23(24)14-17(3)11-9-10-16(2)12-13-21-18(4)15-22(25-7)20(6)19(21)5/h9-15H,8H2,1-7H3/b11-9+,13-12+,16-10+,17-14+	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H30O4/c1-14(24)23(27-15(2)25)12-9-20-18-6-5-16-13-17(26)7-10-21(16,3)19(18)8-11-22(20,23)4/h5-6,13,18-20H,7-12H2,1-4H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H30O6/c1-13(24)29-12-19(27)23(28)9-7-17-16-5-4-14-10-15(25)6-8-21(14,2)20(16)18(26)11-22(17,23)3/h10,16-17,20,28H,4-9,11-12H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C23H30O6/c1-13(24)29-12-19(27)23(28)9-7-17-16-5-4-14-10-15(25)6-8-21(14,2)20(16)18(26)11-22(17,23)3/h10,16-17,20,28H,4-9,11-12H2,1-3H3/t16-,17-,20+,21-,22-,23-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H30O6/c1-13(24)29-12-19(27)23(28)9-7-17-16-5-4-14-10-15(25)6-8-21(14,2)20(16)18(26)11-22(17,23)3/h10,16-17,20,28H,4-9,11-12H2,1-3H3/t16-,17-,20+,21-,22+,23+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H30O6/c1-13(24)29-12-19(27)23(28)9-7-17-16-5-4-14-10-15(25)6-8-21(14,2)20(16)18(26)11-22(17,23)3/h10,16-17,20,28H,4-9,11-12H2,1-3H3/t16-,17-,20+,21?,22?,23?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H30O6/c1-13(24)29-12-19(27)23(28)9-7-17-16-5-4-14-10-15(25)6-8-21(14,2)20(16)18(26)11-22(17,23)3/h10,16-17,20,28H,4-9,11-12H2,1-3H3/t16-,17+,20-,21-,22-,23+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H30O6/c1-13(24)29-12-19(27)23(28)9-7-17-16-5-4-14-10-15(25)6-8-21(14,2)20(16)18(26)11-22(17,23)3/h10,16-17,20,28H,4-9,11-12H2,1-3H3/t16?,17-,20+,21-,22-,23-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H30O6/c1-13(24)29-12-19(27)23(28)9-7-17-16-5-4-14-10-15(25)6-8-21(14,2)20(16)18(26)11-22(17,23)3/h6,8,10,16-18,20,26,28H,4-5,7,9,11-12H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H30O6/c1-13(24)29-12-19(27)23(28)9-7-17-16-5-4-14-10-15(25)6-8-21(14,2)20(16)18(26)11-22(17,23)3/h6,8,10,16-18,20,26,28H,4-5,7,9,11-12H2,1-3H3/t16-,17-,18-,20+,21-,22-,23-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H30O6/c1-13(24)29-12-19(27)23(28)9-7-17-16-5-4-14-10-15(25)6-8-21(14,2)20(16)18(26)11-22(17,23)3/h6,8,10,16-18,20,26,28H,4-5,7,9,11-12H2,1-3H3/t16-,17-,18-,20+,21-,22+,23+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H30O6/c1-13(24)29-12-19(27)23(28)9-7-17-16-5-4-14-10-15(25)6-8-21(14,2)20(16)18(26)11-22(17,23)3/h6,8,10,16-18,20,26,28H,4-5,7,9,11-12H2,1-3H3/t16-,17-,18-,20+,21?,22?,23?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H30O6/c1-13(24)29-12-19(27)23(28)9-7-17-16-5-4-14-10-15(25)6-8-21(14,2)20(16)18(26)11-22(17,23)3/h6,8,10,16-18,20,26,28H,4-5,7,9,11-12H2,1-3H3/t16-,17+,18-,20-,21-,22-,23+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H31Cl2NO3/c1-23-9-8-18-17-5-3-16(29-22(28)26(12-10-24)13-11-25)14-15(17)2-4-19(18)20(23)6-7-21(23)27/h3,5,14,18-21,27H,2,4,6-13H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H31Cl2NO3/c1-23-9-8-18-17-5-3-16(29-22(28)26(12-10-24)13-11-25)14-15(17)2-4-19(18)20(23)6-7-21(23)27/h3,5,14,18-21,27H,2,4,6-13H2,1H3/t18-,19-,20+,21+,23+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H31Cl2NO3/c1-23-9-8-18-17-5-3-16(29-22(28)26(12-10-24)13-11-25)14-15(17)2-4-19(18)20(23)6-7-21(23)27/h3,5,14,18-21,27H,2,4,6-13H2,1H3/t18-,19+,20-,21+,23-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H31ClN2O3/c24-22-8-6-21(7-9-22)23(20-4-2-1-3-5-20)26-12-10-25(11-13-26)14-16-28-18-19-29-17-15-27/h1-9,23,27H,10-19H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H31ClN2O3/c24-22-8-6-21(7-9-22)23(20-4-2-1-3-5-20)26-12-10-25(11-13-26)14-16-28-18-19-29-17-15-27/h1-9,23,27H,10-19H2/t23-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H31ClN2O3/c24-22-8-6-21(7-9-22)23(20-4-2-1-3-5-20)26-12-10-25(11-13-26)14-16-28-18-19-29-17-15-27/h1-9,23,27H,10-19H2/t23-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H31FO4/c1-13-9-17-16-6-5-14-10-15(26)7-8-20(14,2)23(16,24)18(27)11-21(17,3)22(13,4)19(28)12-25/h7-8,10,13,16-18,25,27H,5-6,9,11-12H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H31FO4/c1-13-9-17-16-6-5-14-10-15(26)7-8-20(14,2)23(16,24)18(27)11-21(17,3)22(13,4)19(28)12-25/h7-8,10,13,16-18,25,27H,5-6,9,11-12H2,1-4H3/t13-,16-,17-,18?,20?,21?,22?,23?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H31FO4/c1-13-9-17-16-6-5-14-10-15(26)7-8-20(14,2)23(16,24)18(27)11-21(17,3)22(13,4)19(28)12-25/h7-8,10,13,16-18,25,27H,5-6,9,11-12H2,1-4H3/t13-,16-,17-,18+,20-,21-,22+,23-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C23H31FO4/c1-13-9-17-16-6-5-14-10-15(26)7-8-20(14,2)23(16,24)18(27)11-21(17,3)22(13,4)19(28)12-25/h7-8,10,13,16-18,25,27H,5-6,9,11-12H2,1-4H3/t13-,16?,17?,18+,20+,21+,22-,23+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H31FO4/c1-13-9-17-16-6-5-14-10-15(26)7-8-20(14,2)23(16,24)18(27)11-21(17,3)22(13,4)19(28)12-25/h7-8,10,13,16-18,25,27H,5-6,9,11-12H2,1-4H3/t13-,16+,17-,18+,20+,21+,22+,23-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H31FO4/c1-13-9-17-16-6-5-14-10-15(26)7-8-20(14,2)23(16,24)18(27)11-21(17,3)22(13,4)19(28)12-25/h7-8,10,13,16-18,25,27H,5-6,9,11-12H2,1-4H3/t13-,16+,17+,18+,20+,21+,22-,23+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H31FO6/c1-13(25)30-12-19(28)22(29)9-7-16-17-5-4-14-10-15(26)6-8-20(14,2)23(17,24)18(27)11-21(16,22)3/h10,16-18,27,29H,4-9,11-12H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H31FO6/c1-13(25)30-12-19(28)22(29)9-7-16-17-5-4-14-10-15(26)6-8-20(14,2)23(17,24)18(27)11-21(16,22)3/h10,16-18,27,29H,4-9,11-12H2,1-3H3/t16-,17-,18-,20-,21-,22-,23-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H31FO6/c1-13(25)30-12-19(28)22(29)9-7-16-17-5-4-14-10-15(26)6-8-20(14,2)23(17,24)18(27)11-21(16,22)3/h10,16-18,27,29H,4-9,11-12H2,1-3H3/t16-,17-,18-,20?,21?,22?,23?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H31FO6/c1-13(25)30-12-19(28)22(29)9-7-16-17-5-4-14-10-15(26)6-8-20(14,2)23(17,24)18(27)11-21(16,22)3/h10,16-18,27,29H,4-9,11-12H2,1-3H3/t16-,17-,18+,20-,21-,22-,23-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H31FO6/c1-13(25)30-12-19(28)22(29)9-7-16-17-5-4-14-10-15(26)6-8-20(14,2)23(17,24)18(27)11-21(16,22)3/h10,16-18,27,29H,4-9,11-12H2,1-3H3/t16-,17+,18+,20+,21+,22-,23-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H31FO6/c1-13(25)30-12-19(28)22(29)9-7-16-17-5-4-14-10-15(26)6-8-20(14,2)23(17,24)18(27)11-21(16,22)3/h10,16-18,27,29H,4-9,11-12H2,1-3H3/t16-,17+,18+,20+,21+,22+,23-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H31FO6/c1-13(25)30-12-19(28)22(29)9-7-16-17-5-4-14-10-15(26)6-8-20(14,2)23(17,24)18(27)11-21(16,22)3/h10,16-18,27,29H,4-9,11-12H2,1-3H3/t16?,17?,18-,20-,21-,22-,23-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H31IN2O2/c1-27-22-10-9-19(18-23(22)28-2)11-13-26-16-14-25(15-17-26)12-5-7-20-6-3-4-8-21(20)24/h3-4,6,8-10,18H,5,7,11-17H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H31N3O3S/c1-16-12-18-14-22(29-2)19(13-21(18)26(16)30(3,27)28)15-25-20-10-7-11-24-23(20)17-8-5-4-6-9-17/h4-6,8-9,13-14,16,20,23-25H,7,10-12,15H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H31N3O3S/c1-16-12-18-14-22(29-2)19(13-21(18)26(16)30(3,27)28)15-25-20-10-7-11-24-23(20)17-8-5-4-6-9-17/h4-6,8-9,13-14,16,20,23-25H,7,10-12,15H2,1-3H3/t16-,20-,23-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H31N5S/c1-5-6-11-28(20-8-7-16(2)24-14-20)19-9-12-27(13-10-19)22-21-17(3)18(4)29-23(21)26-15-25-22/h7-8,14-15,19H,5-6,9-13H2,1-4H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C23H31NO/c1-15-10-16(2)22-21-11-18-6-7-19(25)12-20(18)23(22,13-15)8-9-24(21)14-17-4-3-5-17/h6-7,12,16-17,21-22,25H,1,3-5,8-11,13-14H2,2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H31NO/c1-15-10-16(2)22-21-11-18-6-7-19(25)12-20(18)23(22,13-15)8-9-24(21)14-17-4-3-5-17/h6-7,12,16-17,21-22,25H,1,3-5,8-11,13-14H2,2H3/t16-,21-,22-,23-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H31NO/c1-15-10-16(2)22-21-11-18-6-7-19(25)12-20(18)23(22,13-15)8-9-24(21)14-17-4-3-5-17/h6-7,12,16-17,21-22,25H,1,3-5,8-11,13-14H2,2H3/t16-,21-,22+,23-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H31NO/c1-15-10-16(2)22-21-11-18-6-7-19(25)12-20(18)23(22,13-15)8-9-24(21)14-17-4-3-5-17/h6-7,12,16-17,21-22,25H,1,3-5,8-11,13-14H2,2H3/t16-,21?,22+,23?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H31NO/c1-15-10-16(2)22-21-11-18-6-7-19(25)12-20(18)23(22,13-15)8-9-24(21)14-17-4-3-5-17/h6-7,12,16-17,21-22,25H,1,3-5,8-	1	(Mazumdar et al.,

11,13-14H ₂ ,2H ₃ /t16-,21+,22-,23+/m0/s1	2023)
InChI=1S/C23H31NO2/c1-6-22(26-19(3)25)23(17-18(2)24(4)5,20-13-9-7-10-14-20)21-15-11-8-12-16-21/h7-16,18,22H,6,17H ₂ ,1-5H ₃	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H31NO2/c1-6-22(26-19(3)25)23(17-18(2)24(4)5,20-13-9-7-10-14-20)21-15-11-8-12-16-21/h7-16,18,22H,6,17H ₂ ,1-5H ₃ /t18-,22-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H31NO2/c1-6-22(26-19(3)25)23(17-18(2)24(4)5,20-13-9-7-10-14-20)21-15-11-8-12-16-21/h7-16,18,22H,6,17H ₂ ,1-5H ₃ /t18-,22-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H31NO2/c1-6-22(26-19(3)25)23(17-18(2)24(4)5,20-13-9-7-10-14-20)21-15-11-8-12-16-21/h7-16,18,22H,6,17H ₂ ,1-5H ₃ /t18-,22+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H31NO2/c1-6-22(26-19(3)25)23(17-18(2)24(4)5,20-13-9-7-10-14-20)21-15-11-8-12-16-21/h7-16,18,22H,6,17H ₂ ,1-5H ₃ /t18-,22+/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H31NO3/c1-4-22-12-10-19-18-9-7-17(24-26)14-16(18)6-8-20(19)21(22)11-13-23(22,5-2)27-15(3)25/h2,14,18-21,26H,4,6-13H ₂ ,1,3H ₃ /b24-17-	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H31NO3/c1-4-22-12-10-19-18-9-7-17(24-26)14-16(18)6-8-20(19)21(22)11-13-23(22,5-2)27-15(3)25/h2,14,18-21,26H,4,6-13H ₂ ,1,3H ₃ /t18-,19-,20+,21+,22-,23+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H31NO7/c1-15(5-7-19(25)30-13-10-24-8-11-29-12-9-24)4-6-17-21(26)20-18(14-31-23(20)27)16(2)22(17)28-3/h4,26H,5-14H ₂ ,1-3H ₃	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H31NO7/c1-15(5-7-19(25)30-13-10-24-8-11-29-12-9-24)4-6-17-21(26)20-18(14-31-23(20)27)16(2)22(17)28-3/h4,26H,5-14H ₂ ,1-3H ₃ /b15-4+	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H32F3N5O/c1-17-7-10-31(20(32)15-17)9-6-5-8-29-11-13-30(14-12-29)19-16-18(23(24,25)26)27-21(28-19)22(2,3)4/h7,10,15-16H,5-6,8-9,11-14H ₂ ,1-4H ₃	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H32N2O/c1-18(2)25(5,19(3)4)17-16-23(22(24)26,20-12-8-6-9-13-20)21-14-10-7-11-15-21/h6-15,18-19H,16-17H ₂ ,1-5H ₃ , (H-,24,26)/p+1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H32N2O/c1-23(2,3)19-12-13-21(26-4)18(15-19)16-25-20-11-8-14-24-22(20)17-9-6-5-7-10-17/h5-7,9-10,12-13,15,20,22,24-25H,8,11,14,16H ₂ ,1-4H ₃	1 (Kaupp, 2007)
InChI=1S/C23H32N2O/c1-23(2,3)19-12-13-21(26-4)18(15-19)16-25-20-11-8-14-24-22(20)17-9-6-5-7-10-17/h5-7,9-10,12-13,15,20,22,24-25H,8,11,14,16H ₂ ,1-4H ₃ /t20-,22-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H32N2O3S/c1-8-21(23(26)24-19(6)20-12-11-16(3)18(5)14-20)25(29(7,27)28)22-13-15(2)9-10-17(22)4/h9-14,19,21H,8H ₂ ,1-7H ₃ , (H,24,26)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H32N2O3S/c1-8-21(23(26)24-19(6)20-12-11-16(3)18(5)14-20)25(29(7,27)28)22-13-15(2)9-10-17(22)4/h9-14,19,21H,8H ₂ ,1-7H ₃ , (H,24,26)/t19-,21+/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H32N2O5/c1-3-30-23(29)18(13-12-16-8-5-4-6-9-16)24-15(2)21(26)25-19-11-7-10-17(19)14-20(25)22(27)28/h4-6,8-9,15,17-20,24H,3,7,10-14H ₂ ,1-2H ₃ , (H,27,28)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H32N2O5/c1-3-30-23(29)18(13-12-16-8-5-4-6-9-16)24-15(2)21(26)25-19-11-7-10-17(19)14-20(25)22(27)28/h4-6,8-9,15,17-20,24H,3,7,10-14H ₂ ,1-2H ₃ , (H,27,28)/t15-,17-,18-,19-,20-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H32N2O5/c1-3-30-23(29)18(13-12-16-8-5-4-6-9-16)24-15(2)21(26)25-19-11-7-10-17(19)14-20(25)22(27)28/h4-6,8-9,15,17-20,24H,3,7,10-14H ₂ ,1-2H ₃ , (H,27,28)/t15-,17+,18-,19+,20+/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C23H32N2O6/c1-27-20-8-6-5-7-19(20)25-11-9-24(10-12-25)15-17(26)16-31-18-13-21(28-2)23(30-4)22(14-18)29-3/h5-8,13-14,17,26H,9-12,15-16H2,1-4H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H32N2O6/c1-27-20-8-6-5-7-19(20)25-11-9-24(10-12-25)15-17(26)16-31-18-13-21(28-2)23(30-4)22(14-18)29-3/h5-8,13-14,17,26H,9-12,15-16H2,1-4H3/t17-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H32N2O6/c1-27-20-8-6-5-7-19(20)25-11-9-24(10-12-25)15-17(26)16-31-18-13-21(28-2)23(30-4)22(14-18)29-3/h5-8,13-14,17,26H,9-12,15-16H2,1-4H3/t17-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H32N6O4S/c1-5-8-20-24-16(4)21-23(30)25-22(26-29(20)21)18-15-17(9-10-19(18)33-7-3)34(31,32)28-13-11-27(6-2)12-14-28/h9-10,15H,5-8,11-14H2,1-4H3,(H,25,26,30)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H32O3/c1-3-4-5-22(25)26-21-11-10-20-19-8-6-15-14-16(24)7-9-17(15)18(19)12-13-23(20,21)2/h7,9,14,18-21,24H,3-6,8,10-13H2,1-2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H32O3/c1-3-4-5-22(25)26-21-11-10-20-19-8-6-15-14-16(24)7-9-17(15)18(19)12-13-23(20,21)2/h7,9,14,18-21,24H,3-6,8,10-13H2,1-2H3/t18-,19-,20+,21+,23+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H32O6/c1-13(24)29-12-19(27)23(28)9-7-17-16-5-4-14-10-15(25)6-8-21(14,2)20(16)18(26)11-22(17,23)3/h10,16-18,20,26,28H,4-9,11-12H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H32O6/c1-13(24)29-12-19(27)23(28)9-7-17-16-5-4-14-10-15(25)6-8-21(14,2)20(16)18(26)11-22(17,23)3/h10,16-18,20,26,28H,4-9,11-12H2,1-3H3/t16-,17-,18-,20+,21-,22-,23-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H32O6/c1-13(24)29-12-19(27)23(28)9-7-17-16-5-4-14-10-15(25)6-8-21(14,2)20(16)18(26)11-22(17,23)3/h10,16-18,20,26,28H,4-9,11-12H2,1-3H3/t16-,17-,18-,20+,21?,22?,23?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H32O6/c1-13(24)29-12-19(27)23(28)9-7-17-16-5-4-14-10-15(25)6-8-21(14,2)20(16)18(26)11-22(17,23)3/h10,16-18,20,26,28H,4-9,11-12H2,1-3H3/t16-,17-,18+,20+,21-,22+,23+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H32O6/c1-13(24)29-12-19(27)23(28)9-7-17-16-5-4-14-10-15(25)6-8-21(14,2)20(16)18(26)11-22(17,23)3/h10,16-18,20,26,28H,4-9,11-12H2,1-3H3/t16-,17+,18-,20-,21-,22-,23+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H33FN2O2/c1-2-22(28)23(26-15-4-3-5-16-26)12-17-25(18-13-23)14-6-7-21(27)19-8-10-20(24)11-9-19/h8-11H,2-7,12-18H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H33N3O6S/c1-7-25(8-2)12-13-32-22(29)18-23(3,4)33-21-17(20(28)26(18)21)24-19(27)16-14(30-5)10-9-11-15(16)31-6/h9-11,17-18,21H,7-8,12-13H2,1-6H3,(H,24,27)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H33N3O6S/c1-7-25(8-2)12-13-32-22(29)18-23(3,4)33-21-17(20(28)26(18)21)24-19(27)16-14(30-5)10-9-11-15(16)31-6/h9-11,17-18,21H,7-8,12-13H2,1-6H3,(H,24,27)/t17-,18-,21-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H33N3O6S/c1-7-25(8-2)12-13-32-22(29)18-23(3,4)33-21-17(20(28)26(18)21)24-19(27)16-14(30-5)10-9-11-15(16)31-6/h9-11,17-18,21H,7-8,12-13H2,1-6H3,(H,24,27)/t17-,18+,21-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H33N3O6S/c1-7-25(8-2)12-13-32-22(29)18-23(3,4)33-21-17(20(28)26(18)21)24-19(27)16-14(30-5)10-9-11-15(16)31-6/h9-11,17-18,21H,7-8,12-13H2,1-6H3,(H,24,27)/t17-,18+,21-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H33N3O6S/c1-7-25(8-2)12-13-32-22(29)18-23(3,4)33-21-17(20(28)26(18)21)24-19(27)16-14(30-5)10-9-11-15(16)31-6/h9-11,17-18,21H,7-8,12-13H2,1-6H3,(H,24,27)/t17?,18-,21-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H34N6O2/c1-25-21(30)19-20(27-14-16-3-9-23(10-4-16)7-2-8-23)28-18(13-24)29-22(19)31-15-17-5-11-26-12-6-17/h16-17,26H,2-12,14-15H2,1H3,(H,25,30)(H,27,28,29)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H34O5/c1-2-3-4-7-17(24)9-10-18-19-11-15-6-5-8-22(28-14-23(26)27)20(15)12-16(19)13-21(18)25/h5-6,8,16-19,21,24-25H,2-4,7,9-	0	(Mazumdar et al., 2023)

14H ₂ ,1H ₃ , (H,26,27)	2023)
InChI=1S/C23H34O5/c1-4-14(2)23(26)28-20-7-5-6-16-9-8-15(3)19(22(16)20)11-10-18-12-17(24)13-21(25)27-18/h6,8-9,14-15,17-20,22,24H,4-5,7,10-13H ₂ ,1-3H ₃	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H34O5/c1-4-14(2)23(26)28-20-7-5-6-16-9-8-15(3)19(22(16)20)11-10-18-12-17(24)13-21(25)27-18/h6,8-9,14-15,17-20,22,24H,4-5,7,10-13H ₂ ,1-3H ₃ /t14-,15-,17-,18-,19-,20-,22+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H34O5/c1-4-14(2)23(26)28-20-7-5-6-16-9-8-15(3)19(22(16)20)11-10-18-12-17(24)13-21(25)27-18/h6,8-9,14-15,17-20,22,24H,4-5,7,10-13H ₂ ,1-3H ₃ /t14-,15-,17-,18-,19+,20-,22-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H34O5/c1-4-14(2)23(26)28-20-7-5-6-16-9-8-15(3)19(22(16)20)11-10-18-12-17(24)13-21(25)27-18/h6,8-9,14-15,17-20,22,24H,4-5,7,10-13H ₂ ,1-3H ₃ /t14-,15-,17+,18+,19-,20-,22-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H34O5/c1-4-14(2)23(26)28-20-7-5-6-16-9-8-15(3)19(22(16)20)11-10-18-12-17(24)13-21(25)27-18/h6,8-9,14-15,17-20,22,24H,4-5,7,10-13H ₂ ,1-3H ₃ /t14-,15+,17+,18-,19-,20+,22-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H35NO3/c1-4-31-22(30)27-12-7-18(8-13-27)16-26-14-9-23(10-15-26)17-28(21(29)25(2)3)20-19(23)6-5-11-24-20/h5-6,11,18H,4,7-10,12-17H ₂ ,1-3H ₃	1 (Wu et al., 2018)
	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H35NO2/c1-5-6-7-8-18(25)11-12-23(3)21-15-17-9-10-19(26)16-20(17)22(23,2)13-14-24(21)4/h9-10,16,21,26H,5-8,11-15H ₂ ,1-4H ₃	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H35NO2/c1-5-6-7-8-18(25)11-12-23(3)21-15-17-9-10-19(26)16-20(17)22(23,2)13-14-24(21)4/h9-10,16,21,26H,5-8,11-15H ₂ ,1-4H ₃ /t21-,22-,23+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H35NO2/c1-5-6-7-8-18(25)11-12-23(3)21-15-17-9-10-19(26)16-20(17)22(23,2)13-14-24(21)4/h9-10,16,21,26H,5-8,11-15H ₂ ,1-4H ₃ /t21-,22-,23+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H35NO2/c1-5-6-7-8-18(25)11-12-23(3)21-15-17-9-10-19(26)16-20(17)22(23,2)13-14-24(21)4/h9-10,16,21,26H,5-8,11-15H ₂ ,1-4H ₃ /t21-,22?,23?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H35NO2/c1-5-6-7-8-18(25)11-12-23(3)21-15-17-9-10-19(26)16-20(17)22(23,2)13-14-24(21)4/h9-10,16,21,26H,5-8,11-15H ₂ ,1-4H ₃ /t21-,22+,23?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H35NO2/c1-5-6-7-8-18(25)11-12-23(3)21-15-17-9-10-19(26)16-20(17)22(23,2)13-14-24(21)4/h9-10,16,21,26H,5-8,11-15H ₂ ,1-4H ₃ /t21-,22+,23+/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H36N2O2/c1-21(2,3)25-20(27)17-8-7-15-14-6-9-18-23(5,13-11-19(26)24-18)16(14)10-12-22(15,17)4/h11,13-18H,6-10,12H ₂ ,1-5H ₃ , (H,24,26)(H,25,27)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H36N2O2/c1-21(2,3)25-20(27)17-8-7-15-14-6-9-18-23(5,13-11-19(26)24-18)16(14)10-12-22(15,17)4/h11,13-18H,6-10,12H ₂ ,1-5H ₃ , (H,24,26)(H,25,27)/t14-,15+,16+,17-,18-,22+,23-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H36N6O5S/c1-14-8-10-29(18(12-14)22(31)32)21(30)17(6-4-9-26-23(24)25)28-35(33,34)19-7-3-5-16-11-15(2)13-27-20(16)19/h3,5,7,14-15,17-18,27-28H,4,6,8-13H ₂ ,1-2H ₃ , (H,31,32)(H4,24,25,26)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H36N6O5S/c1-14-8-10-29(18(12-14)22(31)32)21(30)17(6-4-9-26-23(24)25)28-35(33,34)19-7-3-5-16-11-15(2)13-27-20(16)19/h3,5,7,14-15,17-18,27-28H,4,6,8-13H ₂ ,1-2H ₃ , (H,31,32)(H4,24,25,26)/t14-,15?,17+,18-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H36O7/c1-4-13(2)23(29)30-20-11-17(25)9-15-6-5-14(3)19(22(15)20)8-7-16(24)10-18(26)12-21(27)28/h5-6,9,13-14,16-20,22,24-26H,4,7-8,10-12H ₂ ,1-3H ₃ , (H,27,28)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H36O7/c1-4-13(2)23(29)30-20-11-17(25)9-15-6-5-14(3)19(22(15)20)8-7-16(24)10-18(26)12-21(27)28/h5-6,9,13-14,16-20,22,24-26H,4,7-8,10-12H ₂ ,1-3H ₃ , (H,27,28)/t13-,14-,16-,17+,18-,19-,20-,22+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C23H36O7/c1-4-13(2)23(29)30-20-11-17(25)9-15-6-5-14(3)19(22(15)20)8-7-16(24)10-18(26)12-21(27)28/h5-6,9,13-14,16-20,22,24-26H,4,7-8,10-12H2,1-3H3,(H,27,28)/t13-,14-,16+,17-,18+,19-,20-,22-/m0/s1	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C23H36O7/c1-4-13(2)23(29)30-20-11-17(25)9-15-6-5-14(3)19(22(15)20)8-7-16(24)10-18(26)12-21(27)28/h5-6,9,13-14,16-20,22,24-26H,4,7-8,10-12H2,1-3H3,(H,27,28)/t13-,14-,16+,17+,18+,19-,20-,22-/m0/s1	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C23H45N5O14/c24-2-7-13(32)15(34)10(27)21(37-7)41-19-9(4-30)39-23(17(19)36)42-20-12(31)5(25)1-6(26)18(20)40-22-11(28)16(35)14(33)8(3-29)38-22/h5-23,29-36H,1-4,24-28H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H46N6O13/c24-2-7-13(32)15(34)10(28)21(37-7)40-18-6(27)1-5(26)12(31)20(18)42-23-17(36)19(9(4-30)39-23)41-22-11(29)16(35)14(33)8(3-25)38-22/h5-23,30-36H,1-4,24-29H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H46N6O13/c24-2-7-13(32)15(34)10(28)21(37-7)40-18-6(27)1-5(26)12(31)20(18)42-23-17(36)19(9(4-30)39-23)41-22-11(29)16(35)14(33)8(3-25)38-22/h5-23,30-36H,1-4,24-29H2/t5-,6-,7-,8-,9?,10-,11-,12-,13+,14+,15-,16-,17-,18-,19+,20-,21-,22-,23-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H46N6O13/c24-2-7-13(32)15(34)10(28)21(37-7)40-18-6(27)1-5(26)12(31)20(18)42-23-17(36)19(9(4-30)39-23)41-22-11(29)16(35)14(33)8(3-25)38-22/h5-23,30-36H,1-4,24-29H2/t5-,6+,7-,8+,9-,10-,11-,12+,13-,14-,15-,16-,17-,18-,19-,20-,21-,22-,23+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H46N6O13/c24-2-7-13(32)15(34)10(28)21(37-7)40-18-6(27)1-5(26)12(31)20(18)42-23-17(36)19(9(4-30)39-23)41-22-11(29)16(35)14(33)8(3-25)38-22/h5-23,30-36H,1-4,24-29H2/t5-,6+,7-,8+,9+,10-,11-,12+,13-,14-,15-,16-,17+,18-,19+,20-,21-,22-,23-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C23H46N6O13/c24-2-7-13(32)15(34)10(28)21(37-7)40-18-6(27)1-5(26)12(31)20(18)42-23-17(36)19(9(4-30)39-23)41-22-11(29)16(35)14(33)8(3-25)38-22/h5-23,30-36H,1-4,24-29H2/t5-,6+,7+,8+,9+,10+,11-,12-,13+,14-,15-,16+,17-,18-,19+,20+,21-,22+,23+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C23H46N6O13/c24-2-7-13(32)15(34)10(28)21(37-7)40-18-6(27)1-5(26)12(31)20(18)42-23-17(36)19(9(4-30)39-23)41-22-11(29)16(35)14(33)8(3-25)38-22/h5-23,30-36H,1-4,24-29H2/t5-,6+,7+,8+,9+,10+,11-,12+,13+,14-,15+,16-,17-,18-,19+,20-,21-,22-,23+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H15N3O/c25-16-19-7-4-8-20(13-19)22-15-24(28)27-23-14-18(11-12-21(23)26-22)10-9-17-5-2-1-3-6-17/h1-8,11-14H,15H2,(H,27,28)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H17ClF2N2O2/c1-14-12-16(7-8-19(14)25)24-18-5-3-2-4-17(18)23(31)29(24)11-10-28(24)22(30)15-6-9-20(26)21(27)13-15/h2-9,12-13H,10-11H2,1H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C24H18ClF3N4O3/c1-15-14-22(32(31-15)20-8-4-2-6-18(20)25)34-21-9-5-3-7-19(21)30-23(33)29-16-10-12-17(13-11-16)35-24(26,27)28/h2-14H,1H3,(H2,29,30,33)	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C24H20Cl2N2O3S/c1-16-6-9-18(10-7-16)32(30,31)13-12-28-22-11-8-17(25)14-20(22)24(27-15-23(28)29)19-4-2-3-5-21(19)26/h2-11,14H,12-13,15H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H20Cl2N2OS/c25-19-8-11-22(23(26)14-19)24(15-28-13-12-27-17-28)29-16-18-6-9-21(10-7-18)30-20-4-2-1-3-5-20/h1-14,17,24H,15-16H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H20N2O3/c1-17-7-5-9-19(13-17)16-29-21-12-6-8-18(14-21)15-22-23(27)25-26(24(22)28)20-10-3-2-4-11-20/h2-15H,16H2,1H3,(H,25,27)/b22-15+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H20N6O3/c1-2-33-24-25-20-9-5-8-19(23(31)32)21(20)30(24)14-15-10-12-16(13-11-15)17-6-3-4-7-18(17)22-26-28-29-27-22/h3-13H,2,14H2,1H3,(H,31,32)(H,26,27,28,29)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H20O8/c1-27-18-6-4-5-14(23(18)28-2)11-21-22(25)17-9-7-15(12-20(17)32-21)30-13-16-8-10-19(31-16)24(26)29-3/h4-12H,13H2,1-3H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H20O8/c1-27-18-6-4-5-14(23(18)28-2)11-21-22(25)17-9-7-15(12-20(17)32-21)30-13-16-8-10-19(31-16)24(26)29-3/h4-12H,13H2,1-3H3/b21-11-	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H21F2NO3/c25-17-5-1-15(2-6-17)22(29)14-13-21-23(16-3-11-20(28)12-4-16)27(24(21)30)19-9-7-18(26)8-10-19/h1-12,21-23,28-	0	(Mazumdar et al., 2023)

29H,13-14H2	2023)
InChI=1S/C24H21NO3/c26-24(25-17-10-12-19(13-11-17)27-18-6-2-3-7-18)23-15-21-20-8-4-1-5-16(20)9-14-22(21)28-23/h1,4-5,8-15,18H,2-3,6-7H2,(H,25,26)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H21NO9/c1-10-6-17(28)33-23-19(10)22(30)20(11(2)26)24-21(23)13(8-18(29)34-24)12-4-5-14(31-3)15(7-12)32-9-16(25)27/h4-7,13,30H,8-9H2,1-3H3,(H2,25,27)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H21NO9/c1-10-6-17(28)33-23-19(10)22(30)20(11(2)26)24-21(23)13(8-18(29)34-24)12-4-5-14(31-3)15(7-12)32-9-16(25)27/h4-7,13,30H,8-9H2,1-3H3,(H2,25,27)/t13-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H22F2N4O2/c1-32-22-5-2-15(10-20(22)26)13-29-24(31)16-6-8-30(9-7-16)23-17(12-27)14-28-21-4-3-18(25)11-19(21)23/h2-5,10-11,14,16H,6-9,13H2,1H3,(H,29,31)	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C24H22F2N4O2/c25-19-5-6-21(20(26)11-19)32-23-12-22(27-15-28-23)29-9-7-16(8-10-29)24(31)30-13-17-3-1-2-4-18(17)14-30/h1-6,11-12,15-16H,7-10,13-14H2	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C24H22F3N/c25-24(26,27)23-7-3-6-22(17-23)20-11-14-28(15-12-20)13-10-18-8-9-19-4-1-2-5-21(19)16-18/h1-9,11,16-17H,10,12-15H2	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H22N2O6/c1-25-20(27)17-18-15-11-7-8-12-16(15)31-13-24(18,22(28)30-3)19(14-9-5-4-6-10-14)32-21(17)26(2)23(25)29/h4-12,18-19H,13H2,1-3H3/t18-,19-,24+/m0/s1	1 (Kaupp, 2007)
InChI=1S/C24H22N6/c1-3-8-19(9-4-1)21-18-22(20-10-5-2-6-11-20)27-28-23(21)29-14-16-30(17-15-29)24-25-12-7-13-26-24/h1-13,18H,14-17H2	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H22O6/c1-15-13-20-22(24(26)29-15)18(14-21(25)30-20)17-9-6-10-19(27-2)23(17)28-12-11-16-7-4-3-5-8-16/h3-10,13,18H,11-12,14H2,1-2H3	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H22O6/c1-15-13-20-22(24(26)29-15)18(14-21(25)30-20)17-9-6-10-19(27-2)23(17)28-12-11-16-7-4-3-5-8-16/h3-10,13,18H,11-12,14H2,1-2H3/t18-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H23N3O6S/c1-24(2)17(22(31)33-23-14-11-7-6-10-13(14)21(30)32-23)27-19(29)16(20(27)34-24)26-18(28)15(25)12-8-4-3-5-9-12/h3-11,15-17,20,23H,25H2,1-2H3,(H,26,28)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H23N3O6S/c1-24(2)17(22(31)33-23-14-11-7-6-10-13(14)21(30)32-23)27-19(29)16(20(27)34-24)26-18(28)15(25)12-8-4-3-5-9-12/h3-11,15-17,20,23H,25H2,1-2H3,(H,26,28)/t15-,16-,17+,20-,23-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H23N3O6S/c1-24(2)17(22(31)33-23-14-11-7-6-10-13(14)21(30)32-23)27-19(29)16(20(27)34-24)26-18(28)15(25)12-8-4-3-5-9-12/h3-11,15-17,20,23H,25H2,1-2H3,(H,26,28)/t15-,16-,17+,20-,23?/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H23N3O6S/c1-24(2)17(22(31)33-23-14-11-7-6-10-13(14)21(30)32-23)27-19(29)16(20(27)34-24)26-18(28)15(25)12-8-4-3-5-9-12/h3-11,15-17,20,23H,25H2,1-2H3,(H,26,28)/t15-,16?,17-,20-,23-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H23N3O6S/c1-24(2)17(22(31)33-23-14-11-7-6-10-13(14)21(30)32-23)27-19(29)16(20(27)34-24)26-18(28)15(25)12-8-4-3-5-9-12/h3-11,15-17,20,23H,25H2,1-2H3,(H,26,28)/t15-,16+,17-,20-,23+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H24ClN3O/c25-21-8-4-7-20-22(21)26-23(27-24(20)29)18-9-10-19(15-18)28-13-11-17(12-14-28)16-5-2-1-3-6-16/h1-8,15,17,19H,9-14H2,(H,26,27,29)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H24N2O4/c1-15(2)30-24(27)23-19(14-28-3)22-18-11-17(29-13-16-7-5-4-6-8-16)9-10-20(18)26-21(22)12-25-23/h4-12,15,26H,13-14H2,1-3H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H24N2O5/c1-16-8-10-17(11-9-16)24(29)19-13-12-18(26(19)2)14-22(27)25-15-23(28)31-21-7-5-4-6-20(21)30-3/h4-13H,14-15H2,1-3H3,(H,25,27)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H25F4NOS/c25-18-4-5-20-19(2-1-10-29-11-7-16(8-12-29)9-13-30)21-14-17(24(26,27)28)3-6-22(21)31-23(20)15-18/h2-6,14-	1 (Meng et al., 2021)

16,30H,1,7-13H2

InChI=1S/C24H25F4NOS/c25-18-4-5-20-19(2-1-10-29-11-7-16(8-12-29)9-13-30)21-14-17(24(26,27)28)3-6-22(21)31-23(20)15-18/h2-6,14-16,30H,1,7-13H2/b19-2-

InChI=1S/C24H25F4NOS/c25-18-4-5-20-19(2-1-10-29-11-7-16(8-12-29)9-13-30)21-14-17(24(26,27)28)3-6-22(21)31-23(20)15-18/h2-6,14-16,30H,1,7-13H2/b19-2+

InChI=1S/C24H25FN4O2/c1-15-4-3-10-29-23(15)26-16(2)19(24(29)30)9-13-28-11-7-17(8-12-28)22-20-6-5-18(25)14-21(20)31-27-22/h3-6,10,14,17H,7-9,11-13H2,1-2H3

InChI=1S/C24H25FN6O/c1-29(23-26-13-10-22(32)28-23)19-11-14-30(15-12-19)24-27-20-4-2-3-5-21(20)31(24)16-17-6-8-18(25)9-7-17/h2-10,13,19H,11-12,14-16H2,1H3,(H,26,28,32)

InChI=1S/C24H25N3O2/c28-23(20-7-2-1-3-8-20)26-24(29)25-22-12-14-27(15-13-22)17-18-10-11-19-6-4-5-9-21(19)16-18/h1-11,16,22H,12-15,17H2,(H2,25,26,28,29)

InChI=1S/C24H25N5O/c30-22-13-12-20(25-29(22)18-17-27-14-6-2-7-15-27)23-21-11-5-8-16-28(21)26-24(23)19-9-3-1-4-10-19/h1,3-5,8-13,16H,2,6-7,14-15,17-18H2

InChI=1S/C24H25NO4/c1-17-21(26)19-11-8-12-20(23(19)29-22(17)18-9-4-2-5-10-18)24(27)28-16-15-25-13-6-3-7-14-25/h2,4-5,8-12H,3,6-7,13-16H2,1H3

InChI=1S/C24H25NS/c1-18(17-19-9-3-2-4-10-19)25-16-15-20-21-11-5-7-13-23(21)26-24-14-8-6-12-22(20)24/h2-14,18,20,25H,15-17H2,1H3

InChI=1S/C24H25NS/c1-18(17-19-9-3-2-4-10-19)25-16-15-20-21-11-5-7-13-23(21)26-24-14-8-6-12-22(20)24/h2-14,18,20,25H,15-17H2,1H3/t18-/m0/s1

InChI=1S/C24H25NS/c1-18(17-19-9-3-2-4-10-19)25-16-15-20-21-11-5-7-13-23(21)26-24-14-8-6-12-22(20)24/h2-14,18,20,25H,15-17H2,1H3/t18-/m1/s1

InChI=1S/C24H26BrN3O3/c1-27-13-17-8-21-24(30-3,19-5-4-6-20(27)22(17)19)9-15(12-28(21)2)14-31-23(29)16-7-18(25)11-26-10-16/h4-7,10-11,13,15,21H,8-9,12,14H2,1-3H3

InChI=1S/C24H26BrN3O3/c1-27-13-17-8-21-24(30-3,19-5-4-6-20(27)22(17)19)9-15(12-28(21)2)14-31-23(29)16-7-18(25)11-26-10-16/h4-7,10-11,13,15,21H,8-9,12,14H2,1-3H3/t15-,21-,24+/m1/s1

InChI=1S/C24H26ClFN4O/c25-18-1-6-23-21(15-18)22(16-30(23)20-4-2-19(26)3-5-20)17-7-10-28(11-8-17)13-14-29-12-9-27-24(29)31/h1-6,15-17H,7-14H2,(H,27,31)

InChI=1S/C24H26FN3O/c25-18-9-7-17(8-10-18)24(29)6-3-11-27-12-13-28-16-23-21(14-19(28)15-27)20-4-1-2-5-22(20)26-23/h1-2,4-5,7-10,19,26H,3,6,11-16H2

InChI=1S/C24H26FN3O/c25-18-9-7-17(8-10-18)24(29)6-3-11-27-12-13-28-16-23-21(14-19(28)15-27)20-4-1-2-5-22(20)26-23/h1-2,4-5,7-10,19,26H,3,6,11-16H2/t19-/m0/s1

InChI=1S/C24H26FNO4/c1-15(2)26-21-6-4-3-5-20(21)24(16-7-9-17(25)10-8-16)22(26)12-11-18(27)13-19(28)14-23(29)30/h3-12,15,18-19,27-28H,13-14H2,1-2H3,(H,29,30)

InChI=1S/C24H26FNO4/c1-15(2)26-21-6-4-3-5-20(21)24(16-7-9-17(25)10-8-16)22(26)12-11-18(27)13-19(28)14-23(29)30/h3-12,15,18-19,27-28H,13-14H2,1-2H3,(H,29,30)/b12-11+

InChI=1S/C24H26FNO4/c1-15(2)26-21-6-4-3-5-20(21)24(16-7-9-17(25)10-8-16)22(26)12-11-18(27)13-19(28)14-23(29)30/h3-12,15,18-19,27-28H,13-14H2,1-2H3,(H,29,30)/b12-11+/t18-,19-/m0/s1

1 (Meng et al., 2021)
(Mazumdar et al.,
1 2023)

1 (Meng et al., 2021)
(Mazumdar et al.,
0 2023)
(Mazumdar et al.,
1 2023)

1 (Meng et al., 2021)
(Mazumdar et al.,
0 2023)
(Mazumdar et al.,
1 2023)

1 (Meng et al., 2021)
(Mazumdar et al.,
1 2023)
(Mazumdar et al.,
1 2023)
(Mazumdar et al.,
1 2023)

1 (Meng et al., 2021)
(Mazumdar et al.,
1 2023)

1 (Meng et al., 2021)
(Mazumdar et al.,
1 2023)
(Mazumdar et al.,
0 2023)
(Mazumdar et al.,
1 2023)

InChI=1S/C24H26FNO4/c1-15(2)26-21-6-4-3-5-20(21)24(16-7-9-17(25)10-8-16)22(26)12-11-18(27)13-19(28)14-23(29)30/h3-12,15,18-19,27-28H,13-14H2,1-2H3,(H,29,30)/b12-11+/t18-,19-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H26FNO4/c1-15(2)26-21-6-4-3-5-20(21)24(16-7-9-17(25)10-8-16)22(26)12-11-18(27)13-19(28)14-23(29)30/h3-12,15,18-19,27-28H,13-14H2,1-2H3,(H,29,30)/b12-11+/t18-,19+/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H26FNO4/c1-15(2)26-21-6-4-3-5-20(21)24(16-7-9-17(25)10-8-16)22(26)12-11-18(27)13-19(28)14-23(29)30/h3-12,15,18-19,27-28H,13-14H2,1-2H3,(H,29,30)/b12-11+/t18-,19+/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H26N2O2/c27-24(28)20-9-10-23-22(16-20)21(17-25-23)8-4-5-13-26-14-11-19(12-15-26)18-6-2-1-3-7-18/h1-3,6-7,9-11,16-17,25H,4-5,8,12-15H2,(H,27,28)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H26N2O4/c1-26-11-9-24-16-6-8-19(29-23(27)15-4-3-10-25-13-15)22(24)30-21-18(28-2)7-5-14(20(21)24)12-17(16)26/h3-5,7,10,13,16-17,19,22H,6,8-9,11-12H2,1-2H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H26N2O4/c1-26-11-9-24-16-6-8-19(29-23(27)15-4-3-10-25-13-15)22(24)30-21-18(28-2)7-5-14(20(21)24)12-17(16)26/h3-5,7,10,13,16-17,19,22H,6,8-9,11-12H2,1-2H3/t16-,17-,19-,22+,24+/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H26N2O4/c1-26-11-9-24-16-6-8-19(29-23(27)15-4-3-10-25-13-15)22(24)30-21-18(28-2)7-5-14(20(21)24)12-17(16)26/h3-5,7,10,13,16-17,19,22H,6,8-9,11-12H2,1-2H3/t16-,17?,19?,22-,24?/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H26N2O4/c1-26-11-9-24-16-6-8-19(29-23(27)15-4-3-10-25-13-15)22(24)30-21-18(28-2)7-5-14(20(21)24)12-17(16)26/h3-5,7,10,13,16-17,19,22H,6,8-9,11-12H2,1-2H3/t16-,17+,19-,22-,24-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H26N2O4/c1-26-11-9-24-16-6-8-19(29-23(27)15-4-3-10-25-13-15)22(24)30-21-18(28-2)7-5-14(20(21)24)12-17(16)26/h3-5,7,10,13,16-17,19,22H,6,8-9,11-12H2,1-2H3/t16-,17+,19+,22-,24+/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H26N2O4/c1-28-21-10-4-5-11-22(21)29-14-13-25-15-17(27)16-30-23-12-6-9-20-24(23)18-7-2-3-8-19(18)26-20/h2-12,17,25-27H,13-16H2,1H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H26N2O4/c1-28-21-11-4-5-12-22(21)29-14-13-25-15-23(27)30-16-17-7-6-10-20-24(17)18-8-2-3-9-19(18)26-20/h2-12,23,25-27H,13-16H2,1H3/t23-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H26N4/c1-20-9-8-14-23(26-20)19-25-28-17-15-27(16-18-28)24(21-10-4-2-5-11-21)22-12-6-3-7-13-22/h2-14,19,24H,15-18H2,1H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H26N4/c1-20-9-8-14-23(26-20)19-25-28-17-15-27(16-18-28)24(21-10-4-2-5-11-21)22-12-6-3-7-13-22/h2-14,19,24H,15-18H2,1H3/b25-19-	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H26N4/c1-20-9-8-14-23(26-20)19-25-28-17-15-27(16-18-28)24(21-10-4-2-5-11-21)22-12-6-3-7-13-22/h2-14,19,24H,15-18H2,1H3/b25-19+	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H26N6O3/c1-4-7-19-25-21(24(2,3)33)20(23(31)32)30(19)14-15-10-12-16(13-11-15)17-8-5-6-9-18(17)22-26-28-29-27-22/h5-6,8-13,33H,4,7,14H2,1-3H3,(H,31,32)(H,26,27,28,29)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H26N6O5S/c1-24(2)18(23(34)35)30-21(33)17(22(30)36-24)29-20(32)16(13-6-4-3-5-7-13)28-15(31)12-27-19(25)14-8-10-26-11-9-14/h3-11,16-18,22H,12H2,1-2H3,(H2,25,27)(H,28,31)(H,29,32)(H,34,35)	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H26N6O5S/c1-24(2)18(23(34)35)30-21(33)17(22(30)36-24)29-20(32)16(13-6-4-3-5-7-13)28-15(31)12-27-19(25)14-8-10-26-11-9-14/h3-11,16-18,22H,12H2,1-2H3,(H2,25,27)(H,28,31)(H,29,32)(H,34,35)/t16-,17-,18-,22-/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H26N6O5S/c1-24(2)18(23(34)35)30-21(33)17(22(30)36-24)29-20(32)16(13-6-4-3-5-7-13)28-15(31)12-27-19(25)14-8-10-26-11-9-14/h3-11,16-18,22H,12H2,1-2H3,(H2,25,27)(H,28,31)(H,29,32)(H,34,35)/t16-,17-,18+,22-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H26N6O5S/c1-24(2)18(23(34)35)30-21(33)17(22(30)36-24)29-20(32)16(13-6-4-3-5-7-13)28-15(31)12-27-19(25)14-8-10-26-11-9-14/h3-11,16-18,22H,12H2,1-2H3,(H2,25,27)(H,28,31)(H,29,32)(H,34,35)/t16-,17?,18-,22-/m0/s1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C24H26N6O5S/c1-24(2)18(23(34)35)30-21(33)17(22(30)36-24)29-20(32)16(13-6-4-3-5-7-13)28-15(31)12-27-19(25)14-8-10-26-11-9-14/h3-11,16-18,22H,12H2,1-2H3,(H2,25,27)(H,28,31)(H,29,32)(H,34,35)/t16-,17+,18-,22+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H26N6O5S/c1-24(2)18(23(34)35)30-21(33)17(22(30)36-24)29(19(26)14-8-10-27-11-9-14)16(13-6-4-3-5-7-13)20(32)28-15(31)12-25/h3-11,16-18,22,26H,12,25H2,1-2H3,(H,34,35)(H,28,31,32)	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C24H26N6O5S/c1-24(2)18(23(34)35)30-21(33)17(22(30)36-24)29(19(26)14-8-10-27-11-9-14)16(13-6-4-3-5-7-13)20(32)28-15(31)12-25/h3-11,16-18,22,26H,12,25H2,1-2H3,(H,34,35)(H,28,31,32)/t16-,17?,18-,22-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H26N6O5S/c1-24(2)18(23(34)35)30-21(33)17(22(30)36-24)29(19(26)14-8-10-27-11-9-14)16(13-6-4-3-5-7-13)20(32)28-15(31)12-25/h3-11,16-18,22,26H,12,25H2,1-2H3,(H,34,35)(H,28,31,32)/t16-,17?,18?,22?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H26O6/c1-16(2)13-21(25)20-9-8-18(14-22(20)26)28-11-3-4-12-29-19-7-5-17-6-10-24(27)30-23(17)15-19/h5-10,14-16,26H,3-4,11-13H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H27BrFN3O2/c1-27-17-29(21-10-6-19(25)7-11-21)24(23(27)31)12-15-28(16-13-24)14-2-3-22(30)18-4-8-20(26)9-5-18/h4-11H,2-3,12-17H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H27ClN2O3S/c25-17-6-7-22-20(16-17)27(19-4-1-2-5-21(19)31-22)12-3-11-26-13-9-24(29,10-14-26)18-8-15-30-23(18)28/h1-2,4-7,16,18,29H,3,8-15H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H27ClN2O3S/c25-17-6-7-22-20(16-17)27(19-4-1-2-5-21(19)31-22)12-3-11-26-13-9-24(29,10-14-26)18-8-15-30-23(18)28/h1-2,4-7,16,18,29H,3,8-15H2/t18-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H27ClN2O3S/c25-17-6-7-22-20(16-17)27(19-4-1-2-5-21(19)31-22)12-3-11-26-13-9-24(29,10-14-26)18-8-15-30-23(18)28/h1-2,4-7,16,18,29H,3,8-15H2/t18-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H27ClOS/c25-19-12-13-24-22(16-19)20(21-5-1-2-7-23(21)27-24)6-3-4-17-8-10-18(11-9-17)14-15-26/h1-2,5-7,12-13,16-18,26H,3-4,8-11,14-15H2/b20-6+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H27FN2O4/c1-16(28)18-4-7-21(23(14-18)29-2)30-13-3-10-27-11-8-17(9-12-27)24-20-6-5-19(25)15-22(20)31-26-24/h4-7,14-15,17H,3,8-13H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H27FN4O2/c1-15-4-3-10-29-23(15)26-16(2)19(24(29)30)9-13-28-11-7-17(8-12-28)22-20-6-5-18(25)14-21(20)31-27-22/h3-6,10,14,17,23,26H,7-9,11-13H2,1-2H3/t23-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H27N3O/c28-20-19-26-14-5-13-25(17-18-26)15-6-16-27-23-9-3-1-7-21(23)11-12-22-8-2-4-10-24(22)27/h1-5,7-13,17-18,28H,6,14-16,19-20H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H27NO2/c1-3-5-12-19(4-2)18-27-24(26)22(17-25)23(20-13-8-6-9-14-20)21-15-10-7-11-16-21/h6-11,13-16,19H,3-5,12,18H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H27NO2/c26-19-10-9-18-14-22-20-8-4-5-11-24(20,21(18)15-19)12-13-25(22)16-23(27)17-6-2-1-3-7-17/h1-3,6-7,9-10,15,20,22,26H,4-5,8,11-14,16H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H27NO2/c26-19-10-9-18-14-22-20-8-4-5-11-24(20,21(18)15-19)12-13-25(22)16-23(27)17-6-2-1-3-7-17/h1-3,6-7,9-10,15,20,22,26H,4-5,8,11-14,16H2/t20-,22-,24-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H27NO2/c26-19-10-9-18-14-22-20-8-4-5-11-24(20,21(18)15-19)12-13-25(22)16-23(27)17-6-2-1-3-7-17/h1-3,6-7,9-10,15,20,22,26H,4-5,8,11-14,16H2/t20-,22?,24?/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H27NO2/c26-19-10-9-18-14-22-20-8-4-5-11-24(20,21(18)15-19)12-13-25(22)16-23(27)17-6-2-1-3-7-17/h1-3,6-7,9-10,15,20,22,26H,4-5,8,11-14,16H2/t20-,22+,24+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H28Cl2F2O4/c1-20(2)31-19-9-13-14-8-16(28)15-7-12(29)5-6-21(15,3)23(14,26)17(25)10-22(13,4)24(19,32-20)18(30)11-27/h5-7,13-14,16-17,19H,8-11H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C24H28Cl2F2O4/c1-20(2)31-19-9-13-14-8-16(28)15-7-12(29)5-6-21(15,3)23(14,26)17(25)10-22(13,4)24(19,32-20)18(30)11-27/h5-7,13-14,16-17,19H,8-11H2,1-4H3/t13-,14-,16-,17-,19-,21?,22?,23?,24?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H28Cl2F2O4/c1-20(2)31-19-9-13-14-8-16(28)15-7-12(29)5-6-21(15,3)23(14,26)17(25)10-22(13,4)24(19,32-20)18(30)11-27/h5-7,13-14,16-17,19H,8-11H2,1-4H3/t13-,14-,16+,17+,19+,21-,22-,23-,24+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H28Cl2F2O4/c1-20(2)31-19-9-13-14-8-16(28)15-7-12(29)5-6-21(15,3)23(14,26)17(25)10-22(13,4)24(19,32-20)18(30)11-27/h5-7,13-14,16-17,19H,8-11H2,1-4H3/t13-,14?,16-,17-,19+,21-,22-,23-,24+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H28Cl2F2O4/c1-20(2)31-19-9-13-14-8-16(28)15-7-12(29)5-6-21(15,3)23(14,26)17(25)10-22(13,4)24(19,32-20)18(30)11-27/h5-7,13-14,16-17,19H,8-11H2,1-4H3/t13-,14+,16-,17+,19-,21+,22+,23-,24+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H28Cl2F2O4/c1-20(2)31-19-9-13-14-8-16(28)15-7-12(29)5-6-21(15,3)23(14,26)17(25)10-22(13,4)24(19,32-20)18(30)11-27/h5-7,13-14,16-17,19H,8-11H2,1-4H3/t13?,14?,16-,17-,19+,21?,22?,23-,24+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H28Cl3FO4/c1-20(2)31-19-9-13-14-8-16(28)15-7-12(29)5-6-21(15,3)23(14,27)17(26)10-22(13,4)24(19,32-20)18(30)11-25/h5-7,13-14,16-17,19H,8-11H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H28Cl3FO4/c1-20(2)31-19-9-13-14-8-16(28)15-7-12(29)5-6-21(15,3)23(14,27)17(26)10-22(13,4)24(19,32-20)18(30)11-25/h5-7,13-14,16-17,19H,8-11H2,1-4H3/t13-,14-,16-,17-,19-,21?,22?,23?,24?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H28Cl3FO4/c1-20(2)31-19-9-13-14-8-16(28)15-7-12(29)5-6-21(15,3)23(14,27)17(26)10-22(13,4)24(19,32-20)18(30)11-25/h5-7,13-14,16-17,19H,8-11H2,1-4H3/t13-,14-,16-,17-,19+,21-,22-,23-,24+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H28Cl3FO4/c1-20(2)31-19-9-13-14-8-16(28)15-7-12(29)5-6-21(15,3)23(14,27)17(26)10-22(13,4)24(19,32-20)18(30)11-25/h5-7,13-14,16-17,19H,8-11H2,1-4H3/t13-,14-,16+,17+,19+,21-,22-,23-,24+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H28Cl3FO4/c1-20(2)31-19-9-13-14-8-16(28)15-7-12(29)5-6-21(15,3)23(14,27)17(26)10-22(13,4)24(19,32-20)18(30)11-25/h5-7,13-14,16-17,19H,8-11H2,1-4H3/t13-,14?,16-,17-,19+,21?,22?,23-,24+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H28Cl3FO4/c1-20(2)31-19-9-13-14-8-16(28)15-7-12(29)5-6-21(15,3)23(14,27)17(26)10-22(13,4)24(19,32-20)18(30)11-25/h5-7,13-14,16-17,19H,8-11H2,1-4H3/t13-,14+,16-,17+,19-,21+,22+,23-,24+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H28Cl3FO4/c1-20(2)31-19-9-13-14-8-16(28)15-7-12(29)5-6-21(15,3)23(14,27)17(26)10-22(13,4)24(19,32-20)18(30)11-25/h5-7,13-14,16-17,19H,8-11H2,1-4H3/t13-,14+,16-,17+,19-,21+,22+,23-,24+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H28ClFN2O2/c1-27(2)23(30)24(19-7-9-20(25)10-8-19)13-16-28(17-14-24)15-3-4-22(29)18-5-11-21(26)12-6-18/h5-12H,3-4,13-17H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H28ClN3OS/c1-26-24(29)10-12-28-15-13-27(14-16-28)11-4-6-19-20-5-2-3-7-22(20)30-23-9-8-18(25)17-21(19)23/h2-3,5-9,17H,4,10-16H2,1H3,(H,26,29)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H28ClN3OS/c1-26-24(29)10-12-28-15-13-27(14-16-28)11-4-6-19-20-5-2-3-7-22(20)30-23-9-8-18(25)17-21(19)23/h2-3,5-9,17H,4,10-16H2,1H3,(H,26,29)/b19-6-	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H28ClN3OS/c1-26-24(29)10-12-28-15-13-27(14-16-28)11-4-6-19-20-5-2-3-7-22(20)30-23-9-8-18(25)17-21(19)23/h2-3,5-9,17H,4,10-16H2,1H3,(H,26,29)/b19-6+	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H28F3N3O3/c1-14-11-20(32-4)30-22-18(29-15(2)7-6-10-28)13-19(31-3)23(21(14)22)33-17-9-5-8-16(12-17)24(25,26)27/h5,8-9,11-13,15,29H,6-7,10,28H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H28FN3O/c1-19(20-9-11-21(25)12-10-20)6-5-15-27-16-13-24(14-17-27)23(29)26-18-28(24)22-7-3-2-4-8-22/h2-4,6-12H,5,13-18H2,1H3,(H,26,29)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H28FN3O/c1-19(20-9-11-21(25)12-10-20)6-5-15-27-16-13-24(14-17-27)23(29)26-18-28(24)22-7-3-2-4-8-22/h2-4,6-12H,5,13-18H2,1H3,(H,26,29)/b19-6-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H28FN3O/c1-19(20-9-11-21(25)12-10-20)6-5-15-27-16-13-24(14-17-27)23(29)26-18-28(24)22-7-3-2-4-8-22/h2-4,6-12H,5,13-	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H28FN3O/c1-19(20-9-11-21(25)12-10-20)6-5-15-27-16-13-24(14-17-27)23(29)26-18-28(24)22-7-3-2-4-8-22/h2-4,6-12H,5,13-	1	(Meng et al., 2021)

18H2,1H3,(H,26,29)/b19-6+	
InChI=1S/C24H28FN3O2/c1-16-19(24(29)28-10-3-2-4-23(28)26-16)9-13-27-11-7-17(8-12-27)21-15-30-22-14-18(25)5-6-20(21)22/h5-6,14-15,17H,2-4,7-13H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H28FN3O2/c1-26-18-28(21-6-3-2-4-7-21)24(23(26)30)13-16-27(17-14-24)15-5-8-22(29)19-9-11-20(25)12-10-19/h2-4,6-7,9-12H,5,8,13-18H2,1H3	1 (Shin et al., 2021)
InChI=1S/C24H28FN3O3/c1-15-18(24(30)28-9-2-3-21(29)23(28)26-15)8-12-27-10-6-16(7-11-27)20-14-31-22-13-17(25)4-5-19(20)22/h4-5,13-14,16,21,29H,2-3,6-12H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H28N2O3/c1-23(2,3)16-11-17(24(4,5)6)20(27)12-19(16)26-22(29)15-13-25-18-10-8-7-9-14(18)21(15)28/h7-13,27H,1-6H3,(H,25,28)(H,26,29)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H28N2O3/c1-3-14-9-16-11-18(12-17(16)10-15(14)4-2)25-13-22(28)19-5-7-21(27)24-20(19)6-8-23(29)26-24/h5-10,18,22,25,27-28H,3-4,11-13H2,1-2H3,(H,26,29)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H28N2O5/c1-18-16-20-4-2-3-5-21(20)26(18)11-10-25-24(29)9-7-19-6-8-22(30-14-12-27)23(17-19)31-15-13-28/h2-9,16-17,27-28H,10-15H2,1H3,(H,25,29)/b9-7+	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H28N2O5/c1-2-31-24(30)20(14-12-17-8-4-3-5-9-17)25-19-15-13-18-10-6-7-11-21(18)26(23(19)29)16-22(27)28/h3-11,19-20,25H,2,12-16H2,1H3,(H,27,28)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H28N2O5/c1-2-31-24(30)20(14-12-17-8-4-3-5-9-17)25-19-15-13-18-10-6-7-11-21(18)26(23(19)29)16-22(27)28/h3-11,19-20,25H,2,12-16H2,1H3,(H,27,28)/t19-,20-/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H28O2/c1-15-13-20-21(24(5,6)12-11-23(20,3)4)14-19(15)16(2)17-7-9-18(10-8-17)22(25)26/h7-10,13-14H,2,11-12H2,1,3-6H3,(H,25,26)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H29Cl2FO5/c1-20(2)31-19-9-13-14-8-16(27)15-7-12(29)5-6-21(15,3)23(14,26)17(25)10-22(13,4)24(19,32-20)18(30)11-28/h5-7,13-14,16-17,19,28H,8-11H2,1-4H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H29Cl2FO5/c1-20(2)31-19-9-13-14-8-16(27)15-7-12(29)5-6-21(15,3)23(14,26)17(25)10-22(13,4)24(19,32-20)18(30)11-28/h5-7,13-14,16-17,19,28H,8-11H2,1-4H3/t13-,14-,16-,17-,19-,21?,22?,23?,24?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H29Cl2FO5/c1-20(2)31-19-9-13-14-8-16(27)15-7-12(29)5-6-21(15,3)23(14,26)17(25)10-22(13,4)24(19,32-20)18(30)11-28/h5-7,13-14,16-17,19,28H,8-11H2,1-4H3/t13-,14-,16+,17+,19+,21-,22-,23-,24+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H29Cl2FO5/c1-20(2)31-19-9-13-14-8-16(27)15-7-12(29)5-6-21(15,3)23(14,26)17(25)10-22(13,4)24(19,32-20)18(30)11-28/h5-7,13-14,16-17,19,28H,8-11H2,1-4H3/t13-,14+,16-,17+,19-,21+,22+,23-,24+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H29Cl2FO5/c1-20(2)31-19-9-13-14-8-16(27)15-7-12(29)5-6-21(15,3)23(14,26)17(25)10-22(13,4)24(19,32-20)18(30)11-28/h5-7,13-14,16-17,19,28H,8-11H2,1-4H3/t13?,14?,16-,17-,19+,21-,22-,23-,24+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H29Cl2FO5/c1-20(2)31-19-9-13-14-8-16(27)15-7-12(29)5-6-21(15,3)23(14,26)17(25)10-22(13,4)24(19,32-20)18(30)11-28/h5-7,13-14,16-17,19,28H,8-11H2,1-4H3/t13?,14?,16-,17?,19+,21?,22?,23-,24+/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H29ClO4/c1-12(26)24(29-13(2)27)8-6-16-14-10-20(25)19-11-21(28)15-9-18(15)23(19,4)17(14)5-7-22(16,24)3/h10-11,14-18H,5-9H2,1-4H3	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H29ClO4/c1-12(26)24(29-13(2)27)8-6-16-14-10-20(25)19-11-21(28)15-9-18(15)23(19,4)17(14)5-7-22(16,24)3/h10-11,14-18H,5-9H2,1-4H3/t14-,15-,16+,17+,18-,22-,23-,24-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H29F2NO/c1-2-3-14-27-21-12-13-22(27)16-23(15-21)28-24(17-4-8-19(25)9-5-17)18-6-10-20(26)11-7-18/h4-11,21-24H,2-3,12-16H2,1H3/t21-,22?,23-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C24H29F2NO/c1-2-3-14-27-21-12-13-22(27)16-23(15-21)28-24(17-4-8-19(25)9-5-17)18-6-10-20(26)11-7-18/h4-11,21-24H,2-3,12-16H2,1H3/t21-,22+,23?	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H29F3O6/c1-12-7-15-16-9-22(25,26)17-8-14(29)5-6-20(17,3)23(16,27)18(30)10-21(15,4)24(12,32)19(31)11-33-13(2)28/h5-6,8,12,15-16,18,30,32H,7,9-11H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H29F3O6/c1-12-7-15-16-9-22(25,26)17-8-14(29)5-6-20(17,3)23(16,27)18(30)10-21(15,4)24(12,32)19(31)11-33-13(2)28/h5-6,8,12,15-16,18,30,32H,7,9-11H2,1-4H3/t12-,15-,16-,18-,20?,21?,23?,24?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H29F3O6/c1-12-7-15-16-9-22(25,26)17-8-14(29)5-6-20(17,3)23(16,27)18(30)10-21(15,4)24(12,32)19(31)11-33-13(2)28/h5-6,8,12,15-16,18,30,32H,7,9-11H2,1-4H3/t12-,15-,16+,18+,20+,21+,23-,24-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H29F3O6/c1-12-7-15-16-9-22(25,26)17-8-14(29)5-6-20(17,3)23(16,27)18(30)10-21(15,4)24(12,32)19(31)11-33-13(2)28/h5-6,8,12,15-16,18,30,32H,7,9-11H2,1-4H3/t12-,15+,16?,18+,20+,21+,23+,24+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H29F3O6/c1-12-7-15-16-9-22(25,26)17-8-14(29)5-6-20(17,3)23(16,27)18(30)10-21(15,4)24(12,32)19(31)11-33-13(2)28/h5-6,8,12,15-16,18,30,32H,7,9-11H2,1-4H3/t12-,15+,16+,18-,20+,21-,23+,24-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H29FN2O2/c1-19(28)26-18-24(21-6-3-2-4-7-21)13-16-27(17-14-24)15-5-8-23(29)20-9-11-22(25)12-10-20/h2-4,6-7,9-12H,5,8,13-18H2,1H3,(H,26,28)	1 1	(Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H29FO6/c1-4-20-30-19-10-16-15-6-5-13-9-14(27)7-8-21(13,2)23(15,25)17(28)11-22(16,3)24(19,31-20)18(29)12-26/h4,7-9,15-17,19-20,26,28H,1,5-6,10-12H2,2-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H29FO6/c1-4-20-30-19-10-16-15-6-5-13-9-14(27)7-8-21(13,2)23(15,25)17(28)11-22(16,3)24(19,31-20)18(29)12-26/h4,7-9,15-17,19-20,26,28H,1,5-6,10-12H2,2-3H3/t15-,16-,17-,19-,20-,21+,22-,23+,24-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H29FO6/c1-4-20-30-19-10-16-15-6-5-13-9-14(27)7-8-21(13,2)23(15,25)17(28)11-22(16,3)24(19,31-20)18(29)12-26/h4,7-9,15-17,19-20,26,28H,1,5-6,10-12H2,2-3H3/t15-,16-,17-,19+,20?,21-,22-,23-,24+/m0/s1	1 1	(Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H29FO6/c1-4-20-30-19-10-16-15-6-5-13-9-14(27)7-8-21(13,2)23(15,25)17(28)11-22(16,3)24(19,31-20)18(29)12-26/h4,7-9,15-17,19-20,26,28H,1,5-6,10-12H2,2-3H3/t15-,16-,17?,19-,20?,21?,22?,23?,24?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H29FO6/c1-4-20-30-19-10-16-15-6-5-13-9-14(27)7-8-21(13,2)23(15,25)17(28)11-22(16,3)24(19,31-20)18(29)12-26/h4,7-9,15-17,19-20,26,28H,1,5-6,10-12H2,2-3H3/t15-,16+,17-,19+,20-,21+,22+,23-,24+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H29FO6/c1-4-20-30-19-10-16-15-6-5-13-9-14(27)7-8-21(13,2)23(15,25)17(28)11-22(16,3)24(19,31-20)18(29)12-26/h4,7-9,15-17,19-20,26,28H,1,5-6,10-12H2,2-3H3/t15?,16?,17?,19-,20?,21?,22?,23?,24-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H29N3O8/c1-26(2)18-13-8-11-7-12-10(9-27(3)35-4)5-6-14(28)16(12)19(29)15(11)21(31)24(13,34)22(32)17(20(18)30)23(25)33/h5-6,11,13,18,28-29,32,34H,7-9H2,1-4H3,(H2,25,33)/t11-,13-,18-,24-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H29N5O2/c30-22-20-18-6-7-19(17-5-4-16(17)18)21(20)23(31)29(22)11-2-1-10-27-12-14-28(15-13-27)24-25-8-3-9-26-24/h3-9,16-21H,1-2,10-15H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H29N5O2/c30-22-20-18-6-7-19(17-5-4-16(17)18)21(20)23(31)29(22)11-2-1-10-27-12-14-28(15-13-27)24-25-8-3-9-26-24/h3-9,16-21H,1-2,10-15H2/t16-,17-,18-,19-,20-,21?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H29N5O2/c30-22-20-18-6-7-19(17-5-4-16(17)18)21(20)23(31)29(22)11-2-1-10-27-12-14-28(15-13-27)24-25-8-3-9-26-24/h3-9,16-21H,1-2,10-15H2/t16-,17+,18-,19-,20+,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H29N5O2/c30-22-20-18-6-7-19(17-5-4-16(17)18)21(20)23(31)29(22)11-2-1-10-27-12-14-28(15-13-27)24-25-8-3-9-26-24/h3-9,16-21H,1-2,10-15H2/t16-,17+,18-,19+,20-,21+	1 1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H29N5O2/c30-22-20-18-6-7-19(17-5-4-16(17)18)21(20)23(31)29(22)11-2-1-10-27-12-14-28(15-13-27)24-25-8-3-9-26-24/h3-9,16-	1	(Mazumdar et al., 2023)

21H,1-2,10-15H2/t16-,17+,18-,19+,20+,21-	2023)
InChI=1S/C24H29N5O2/c30-22-20-18-6-7-19(17-5-4-16(17)18)21(20)23(31)29(22)11-2-1-10-27-12-14-28(15-13-27)24-25-8-3-9-26-24/h3-9,16-21H,1-2,10-15H2/t16-,17+,18+,19-,20+,21-	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H29N5O3/c1-4-5-10-21(30)29(22(16(2)3)24(31)32)15-17-11-13-18(14-12-17)19-8-6-7-9-20(19)23-25-27-28-26-23/h6-9,11-14,16,22H,4-5,10,15H2,1-3H3,(H,31,32)(H,25,26,27,28)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H29N5O3/c1-4-5-10-21(30)29(22(16(2)3)24(31)32)15-17-11-13-18(14-12-17)19-8-6-7-9-20(19)23-25-27-28-26-23/h6-9,11-14,16,22H,4-5,10,15H2,1-3H3,(H,31,32)(H,25,26,27,28)/t22-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H29N7O3/c1-16-11-17(6-7-20(16)34-2)12-27-22-19(23(33)28-14-21-25-8-4-9-26-21)13-29-24(30-22)31-10-3-5-18(31)15-32/h4,6-9,11,13,18,32H,3,5,10,12,14-15H2,1-2H3,(H,28,33)(H,27,29,30)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H29NO/c1-16(2)24(26)12-13-25-15-21-19-8-4-3-6-17(19)10-11-18-7-5-9-20(23(18)21)22(25)14-24/h3-9,16,21-22,26H,10-15H2,1-2H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H29NO/c1-16(2)24(26)12-13-25-15-21-19-8-4-3-6-17(19)10-11-18-7-5-9-20(23(18)21)22(25)14-24/h3-9,16,21-22,26H,10-15H2,1-2H3/t21-,22-,24-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H29NO/c1-16(2)24(26)12-13-25-15-21-19-8-4-3-6-17(19)10-11-18-7-5-9-20(23(18)21)22(25)14-24/h3-9,16,21-22,26H,10-15H2,1-2H3/t21-,22-,24-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H29NO/c1-16(2)24(26)12-13-25-15-21-19-8-4-3-6-17(19)10-11-18-7-5-9-20(23(18)21)22(25)14-24/h3-9,16,21-22,26H,10-15H2,1-2H3/t21-,22+,24+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H29NO/c1-16(2)24(26)12-13-25-15-21-19-8-4-3-6-17(19)10-11-18-7-5-9-20(23(18)21)22(25)14-24/h3-9,16,21-22,26H,10-15H2,1-2H3/t21-,22+,24+/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H29NO/c26-20-10-9-19-16-23-21-8-4-5-12-24(21,22(19)17-20)13-15-25(23)14-11-18-6-2-1-3-7-18/h1-3,6-7,9-10,17,21,23,26H,4-5,8,11-16H2	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H29NO/c26-20-10-9-19-16-23-21-8-4-5-12-24(21,22(19)17-20)13-15-25(23)14-11-18-6-2-1-3-7-18/h1-3,6-7,9-10,17,21,23,26H,4-5,8,11-16H2/t21-,23?,24-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H29NO/c26-20-10-9-19-16-23-21-8-4-5-12-24(21,22(19)17-20)13-15-25(23)14-11-18-6-2-1-3-7-18/h1-3,6-7,9-10,17,21,23,26H,4-5,8,11-16H2/t21-,23+,24+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H29NO3/c1-27-22-14-19-13-20(24(26)21(19)15-23(22)28-2)12-17-8-10-25(11-9-17)16-18-6-4-3-5-7-18/h3-7,14-15,17,20H,8-13,16H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H29NO3/c1-27-22-14-19-13-20(24(26)21(19)15-23(22)28-2)12-17-8-10-25(11-9-17)16-18-6-4-3-5-7-18/h3-7,14-15,17,20H,8-13,16H2,1-2H3/p+1/t20-/m1/s1	1 (Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C24H29NO3/c1-27-22-14-19-13-20(24(26)21(19)15-23(22)28-2)12-17-8-10-25(11-9-17)16-18-6-4-3-5-7-18/h3-7,14-15,17,20H,8-13,16H2,1-2H3/t20-/m0/s1	1 (Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C24H29NO3/c1-27-22-14-19-13-20(24(26)21(19)15-23(22)28-2)12-17-8-10-25(11-9-17)16-18-6-4-3-5-7-18/h3-7,14-15,17,20H,8-13,16H2,1-2H3/t20-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H30ClFO5/c1-12-7-15-16-9-18(26)17-8-14(28)5-6-23(17,4)24(16,25)20(30)10-22(15,3)21(12)19(29)11-31-13(2)27/h5-6,8,12,15-16,18,20-21,30H,7,9-11H2,1-4H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H30ClFO5/c1-12-7-15-16-9-18(26)17-8-14(28)5-6-23(17,4)24(16,25)20(30)10-22(15,3)21(12)19(29)11-31-13(2)27/h5-6,8,12,15-16,18,20-21,30H,7,9-11H2,1-4H3/t12-,15-,16-,18-,20-,21?,22?,23?,24-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C24H30ClFO5/c1-12-7-15-16-9-18(26)17-8-14(28)5-6-23(17,4)24(16,25)20(30)10-22(15,3)21(12)19(29)11-31-13(2)27/h5-6,8,12,15-16,18,20-21,30H,7,9-11H2,1-4H3/t12-,15-,16+,18-,20+,21+,22+,23+,24-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H30ClFO5/c1-12-7-15-16-9-18(26)17-8-14(28)5-6-23(17,4)24(16,25)20(30)10-22(15,3)21(12)19(29)11-31-13(2)27/h5-6,8,12,15-16,18,20-21,30H,7,9-11H2,1-4H3/t12-,15+,16?,18+,20+,21-,22+,23+,24+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H30ClFO5/c1-12-7-15-16-9-18(26)17-8-14(28)5-6-23(17,4)24(16,25)20(30)10-22(15,3)21(12)19(29)11-31-13(2)27/h5-6,8,12,15-16,18,20-21,30H,7,9-11H2,1-4H3/t12-,15+,16+,18-,20-,21+,22-,23+,24+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H30ClFO5/c1-12-7-15-16-9-18(26)17-8-14(28)5-6-23(17,4)24(16,25)20(30)10-22(15,3)21(12)19(29)11-31-13(2)27/h5-6,8,12,15-16,18,20-21,30H,7,9-11H2,1-4H3/t12-,15+,16+,18+,20+,21-,22+,23+,24?/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H30ClN7O2S/c1-30(2)35(33,34)22-7-5-4-6-21(22)28-23-20(25)16-26-24(29-23)27-19-10-8-18(9-11-19)17-32-14-12-31(3)13-15-32/h4-11,16H,12-15,17H2,1-3H3,(H2,26,27,28,29)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H30ClN7O4S/c1-31(2)24(36)13-4-6-15(27-20(33)21(34)30-19-7-5-14(25)11-26-19)17(10-13)28-22(35)23-29-16-8-9-32(3)12-18(16)37-23/h5,7,11,13,15,17H,4,6,8-10,12H2,1-3H3,(H,27,33)(H,28,35)(H,26,30,34)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H30F2N4O2/c25-23(26)12-9-18(15-23)24(32,17-5-2-1-3-6-17)22(31)29-19-10-13-30(14-11-19)16-20-7-4-8-21(27)28-20/h1-8,18-19,32H,9-16H2,(H2,27,28)(H,29,31)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H30F2N4O2/c25-23(26)12-9-18(15-23)24(32,17-5-2-1-3-6-17)22(31)29-19-10-13-30(14-11-19)16-20-7-4-8-21(27)28-20/h1-8,18-19,32H,9-16H2,(H2,27,28)(H,29,31)/t18-,24?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H30F2N4O2/c25-23(26)12-9-18(15-23)24(32,17-5-2-1-3-6-17)22(31)29-19-10-13-30(14-11-19)16-20-7-4-8-21(27)28-20/h1-8,18-19,32H,9-16H2,(H2,27,28)(H,29,31)/t18-,24+/m1/s1	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C24H30F2O6/c1-20(2)31-19-9-13-14-8-16(25)15-7-12(28)5-6-21(15,3)23(14,26)17(29)10-22(13,4)24(19,32-20)18(30)11-27/h5-7,13-14,16-17,19,27,29H,8-11H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H30F2O6/c1-20(2)31-19-9-13-14-8-16(25)15-7-12(28)5-6-21(15,3)23(14,26)17(29)10-22(13,4)24(19,32-20)18(30)11-27/h5-7,13-14,16-17,19,27,29H,8-11H2,1-4H3/t13-,14-,16-,17-,19+,21-,22-,23-,24+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H30F2O6/c1-20(2)31-19-9-13-14-8-16(25)15-7-12(28)5-6-21(15,3)23(14,26)17(29)10-22(13,4)24(19,32-20)18(30)11-27/h5-7,13-14,16-17,19,27,29H,8-11H2,1-4H3/t13-,14-,16-,17-,19+,21+,22-,23+,24+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H30F2O6/c1-20(2)31-19-9-13-14-8-16(25)15-7-12(28)5-6-21(15,3)23(14,26)17(29)10-22(13,4)24(19,32-20)18(30)11-27/h5-7,13-14,16-17,19,27,29H,8-11H2,1-4H3/t13-,14-,16-,17?,19-,21?,22?,23?,24?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H30F2O6/c1-20(2)31-19-9-13-14-8-16(25)15-7-12(28)5-6-21(15,3)23(14,26)17(29)10-22(13,4)24(19,32-20)18(30)11-27/h5-7,13-14,16-17,19,27,29H,8-11H2,1-4H3/t13-,14+,16-,17+,19-,21+,22+,23-,24+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H30F2O6/c1-20(2)31-19-9-13-14-8-16(25)15-7-12(28)5-6-21(15,3)23(14,26)17(29)10-22(13,4)24(19,32-20)18(30)11-27/h5-7,13-14,16-17,19,27,29H,8-11H2,1-4H3/t13?,14?,16-,17-,19+,21-,22-,23-,24+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H30N2O2/c1-2-26-19-22(13-14-25-15-17-28-18-16-25)24(23(26)27,20-9-5-3-6-10-20)21-11-7-4-8-12-21/h3-12,22H,2,13-19H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H30N2O2/c1-2-26-19-22(13-14-25-15-17-28-18-16-25)24(23(26)27,20-9-5-3-6-10-20)21-11-7-4-8-12-21/h3-12,22H,2,13-19H2,1H3/t22-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H30N2O2S/c1-18(28)20-7-8-24-22(17-20)26(21-5-2-3-6-23(21)29-24)13-4-12-25-14-9-19(10-15-25)11-16-27/h2-3,5-8,17,19,27H,4,9-16H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H30N2O3/c1-15-16(2)22-20(23(27)24(4,5)29-22)17(3)21(15)26-13-11-25(12-14-26)18-7-9-19(28-6)10-8-18/h7-10H,11-14H2,1-6H3	1	(Wu et al., 2018)

InChI=1S/C24H30N2O3/c1-3-22(27)26(21-12-8-5-9-13-21)24(23(28)29-2)15-18-25(19-16-24)17-14-20-10-6-4-7-11-20/h4-13H,3,14-19H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H30N4O/c1-17-14-18(2)28(27-17)21-11-12-23(29-3)20(15-21)16-26-22-10-7-13-25-24(22)19-8-5-4-6-9-19/h4-6,8-9,11-12,14-15,22,24-26H,7,10,13,16H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H30N4O/c1-17-14-18(2)28(27-17)21-11-12-23(29-3)20(15-21)16-26-22-10-7-13-25-24(22)19-8-5-4-6-9-19/h4-6,8-9,11-12,14-15,22,24-26H,7,10,13,16H2,1-3H3/t22-,24-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H30O3/c1-22-6-3-12(25)9-17(22)13-10-14(13)20-16(22)4-7-23(2)21(20)15-11-18(15)24(23)8-5-19(26)27-24/h9,13-16,18,20-21H,3-8,10-11H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H30O6/c1-21-7-4-14(25)10-13(21)11-15(20(27)28-3)19-16-5-8-23(9-6-18(26)30-23)22(16,2)12-17-24(19,21)29-17/h10,15-17,19H,4-9,11-12H2,1-3H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H30O7/c1-16(2)13-22(26)20-9-8-19(15-23(20)27)31-12-4-3-11-30-18-7-5-17(21(25)14-18)6-10-24(28)29/h5,7-9,14-16,25,27H,3-4,6,10-13H2,1-2H3,(H,28,29)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31ClO7/c1-4-30-21(29)32-24(20(28)31-13-25)10-8-17-16-6-5-14-11-15(26)7-9-22(14,2)19(16)18(27)12-23(17,24)3/h7,9,11,16-19,27H,4-6,8,10,12-13H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31ClO7/c1-4-30-21(29)32-24(20(28)31-13-25)10-8-17-16-6-5-14-11-15(26)7-9-22(14,2)19(16)18(27)12-23(17,24)3/h7,9,11,16-19,27H,4-6,8,10,12-13H2,1-3H3/t16-,17-,18-,19+,22-,23-,24-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31ClO7/c1-4-30-21(29)32-24(20(28)31-13-25)10-8-17-16-6-5-14-11-15(26)7-9-22(14,2)19(16)18(27)12-23(17,24)3/h7,9,11,16-19,27H,4-6,8,10,12-13H2,1-3H3/t16-,17-,18-,19+,22+,23+,24+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31ClO7/c1-4-30-21(29)32-24(20(28)31-13-25)10-8-17-16-6-5-14-11-15(26)7-9-22(14,2)19(16)18(27)12-23(17,24)3/h7,9,11,16-19,27H,4-6,8,10,12-13H2,1-3H3/t16-,17-,18?,19+,22?,23?,24?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31ClO7/c1-4-30-21(29)32-24(20(28)31-13-25)10-8-17-16-6-5-14-11-15(26)7-9-22(14,2)19(16)18(27)12-23(17,24)3/h7,9,11,16-19,27H,4-6,8,10,12-13H2,1-3H3/t16-,17+,18-,19-,22-,23-,24+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO5/c1-13-10-19-17-7-9-23(14(2)26,30-15(3)27)22(17,5)12-20(29)24(19,25)21(4)8-6-16(28)11-18(13)21/h6,8,11,13,17,19-20,29H,7,9-10,12H2,1-5H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO5/c1-13-10-19-17-7-9-23(14(2)26,30-15(3)27)22(17,5)12-20(29)24(19,25)21(4)8-6-16(28)11-18(13)21/h6,8,11,13,17,19-20,29H,7,9-10,12H2,1-5H3/t13-,17-,19-,20-,21-,22-,23-,24-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO5/c1-13-10-19-17-7-9-23(14(2)26,30-15(3)27)22(17,5)12-20(29)24(19,25)21(4)8-6-16(28)11-18(13)21/h6,8,11,13,17,19-20,29H,7,9-10,12H2,1-5H3/t13-,17-,19-,20-,21?,22?,23?,24?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO5/c1-13-10-19-17-7-9-23(14(2)26,30-15(3)27)22(17,5)12-20(29)24(19,25)21(4)8-6-16(28)11-18(13)21/h6,8,11,13,17,19-20,29H,7,9-10,12H2,1-5H3/t13-,17-,19-,20+,21-,22-,23-,24-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H31FO5/c1-13-10-19-17-7-9-23(14(2)26,30-15(3)27)22(17,5)12-20(29)24(19,25)21(4)8-6-16(28)11-18(13)21/h6,8,11,13,17,19-20,29H,7,9-10,12H2,1-5H3/t13-,17?,19?,20-,21-,22-,23-,24-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H31FO5/c1-13-10-19-17-7-9-23(14(2)26,30-15(3)27)22(17,5)12-20(29)24(19,25)21(4)8-6-16(28)11-18(13)21/h6,8,11,13,17,19-20,29H,7,9-10,12H2,1-5H3/t13-,17+,19-,20-,21-,22-,23+,24+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO5/c1-13(26)24-19(29-20(2,3)30-24)11-17-16-7-6-14-10-15(27)8-9-21(14,4)23(16,25)18(28)12-22(17,24)5/h8-10,16-19,28H,6-7,11-12H2,1-5H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO5/c1-13(26)24-19(29-20(2,3)30-24)11-17-16-7-6-14-10-15(27)8-9-21(14,4)23(16,25)18(28)12-22(17,24)5/h8-10,16-19,28H,6-7,11-12H2,1-5H3/t16-,17-,18-,19+,21-,22-,23-,24+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C24H31FO5/c1-13(26)24-19(29-20(2,3)30-24)11-17-16-7-6-14-10-15(27)8-9-21(14,4)23(16,25)18(28)12-22(17,24)5/h8-10,16-19,28H,6-7,11-12H2,1-5H3/t16-,17-,18?,19-,21?,22?,23?,24?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO5/c1-13(26)24-19(29-20(2,3)30-24)11-17-16-7-6-14-10-15(27)8-9-21(14,4)23(16,25)18(28)12-22(17,24)5/h8-10,16-19,28H,6-7,11-12H2,1-5H3/t16-,17-,18+,19-,21-,22-,23-,24-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO5/c1-13(26)24-19(29-20(2,3)30-24)11-17-16-7-6-14-10-15(27)8-9-21(14,4)23(16,25)18(28)12-22(17,24)5/h8-10,16-19,28H,6-7,11-12H2,1-5H3/t16-,17+,18-,19+,21-,22-,23+,24-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO5S/c1-13-10-18-17-7-6-15-11-16(27)8-9-21(15,3)23(17,25)19(28)12-22(18,4)24(13,20(29)31-5)30-14(2)26/h8-9,11,13,17-19,28H,6-7,10,12H2,1-5H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO5S/c1-13-10-18-17-7-6-15-11-16(27)8-9-21(15,3)23(17,25)19(28)12-22(18,4)24(13,20(29)31-5)30-14(2)26/h8-9,11,13,17-19,28H,6-7,10,12H2,1-5H3/t13-,17-,18-,19-,21-,22-,23-,24-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H31FO5S/c1-13-10-18-17-7-6-15-11-16(27)8-9-21(15,3)23(17,25)19(28)12-22(18,4)24(13,20(29)31-5)30-14(2)26/h8-9,11,13,17-19,28H,6-7,10,12H2,1-5H3/t13-,17-,18-,19-,21-,22-,23?,24?/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H31FO5S/c1-13-10-18-17-7-6-15-11-16(27)8-9-21(15,3)23(17,25)19(28)12-22(18,4)24(13,20(29)31-5)30-14(2)26/h8-9,11,13,17-19,28H,6-7,10,12H2,1-5H3/t13-,17-,18-,19?,21?,22?,23?,24?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO5S/c1-13-10-18-17-7-6-15-11-16(27)8-9-21(15,3)23(17,25)19(28)12-22(18,4)24(13,20(29)31-5)30-14(2)26/h8-9,11,13,17-19,28H,6-7,10,12H2,1-5H3/t13-,17-,18+,19-,21-,22-,23+,24+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO5S/c1-13-10-18-17-7-6-15-11-16(27)8-9-21(15,3)23(17,25)19(28)12-22(18,4)24(13,20(29)31-5)30-14(2)26/h8-9,11,13,17-19,28H,6-7,10,12H2,1-5H3/t13-,17+,18+,19-,21+,22+,23+,24+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO6/c1-12-7-16-15-9-18(25)17-8-14(27)5-6-22(17,3)21(15)19(28)10-23(16,4)24(12,30)20(29)11-31-13(2)26/h5-6,8,12,15-16,18-19,21,28,30H,7,9-11H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO6/c1-12-7-16-15-9-18(25)17-8-14(27)5-6-22(17,3)21(15)19(28)10-23(16,4)24(12,30)20(29)11-31-13(2)26/h5-6,8,12,15-16,18-19,21,28,30H,7,9-11H2,1-4H3/t12-,15-,16-,18-,19-,21+,22?,23?,24?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO6/c1-12-7-16-15-9-18(25)17-8-14(27)5-6-22(17,3)21(15)19(28)10-23(16,4)24(12,30)20(29)11-31-13(2)26/h5-6,8,12,15-16,18-19,21,28,30H,7,9-11H2,1-4H3/t12-,15-,16-,18-,19?,21+,22?,23?,24?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO6/c1-12-7-16-15-9-18(25)17-8-14(27)5-6-22(17,3)21(15)19(28)10-23(16,4)24(12,30)20(29)11-31-13(2)26/h5-6,8,12,15-16,18-19,21,28,30H,7,9-11H2,1-4H3/t12-,15?,16+,18+,19+,21-,22+,23+,24+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO6/c1-12-7-16-15-9-18(25)17-8-14(27)5-6-22(17,3)21(15)19(28)10-23(16,4)24(12,30)20(29)11-31-13(2)26/h5-6,8,12,15-16,18-19,21,28,30H,7,9-11H2,1-4H3/t12-,15+,16-,18-,19+,21+,22+,23+,24-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO6/c1-12-7-16-15-9-18(25)17-8-14(27)5-6-22(17,3)21(15)19(28)10-23(16,4)24(12,30)20(29)11-31-13(2)26/h5-6,8,12,15-16,18-19,21,28,30H,7,9-11H2,1-4H3/t12-,15+,16+,18+,19+,21-,22+,23-,24-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO6/c1-12-7-16-15-9-18(25)17-8-14(27)5-6-22(17,3)21(15)19(28)10-23(16,4)24(12,30)20(29)11-31-13(2)26/h5-6,8,12,15-16,18-19,21,28,30H,7,9-11H2,1-4H3/t12-,15+,16+,18+,19+,21-,22+,23+,24+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO6/c1-13-9-18-17-6-5-15-10-16(27)7-8-21(15,3)23(17,25)19(28)11-22(18,4)24(13,30)20(29)12-31-14(2)26/h7-8,10,13,17-19,28,30H,5-6,9,11-12H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO6/c1-13-9-18-17-6-5-15-10-16(27)7-8-21(15,3)23(17,25)19(28)11-22(18,4)24(13,30)20(29)12-31-14(2)26/h7-8,10,13,17-19,28,30H,5-6,9,11-12H2,1-4H3/t13-,17-,18-,19-,21-,22-,23-,24-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H31FO6/c1-13-9-18-17-6-5-15-10-16(27)7-8-21(15,3)23(17,25)19(28)11-22(18,4)24(13,30)20(29)12-31-14(2)26/h7-8,10,13,17-	1	(Meng et al., 2021)

19,28,30H,5-6,9,11-12H2,1-4H3/t13-,17-,18-,19-,21?,22?,23?,24?/m0/s1	
InChI=1S/C24H31FO6/c1-13-9-18-17-6-5-15-10-16(27)7-8-21(15,3)23(17,25)19(28)11-22(18,4)24(13,30)20(29)12-31-14(2)26/h7-8,10,13,17-19,28,30H,5-6,9,11-12H2,1-4H3/t13-,17-,18-,19+,21-,22-,23-,24-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO6/c1-13-9-18-17-6-5-15-10-16(27)7-8-21(15,3)23(17,25)19(28)11-22(18,4)24(13,30)20(29)12-31-14(2)26/h7-8,10,13,17-19,28,30H,5-6,9,11-12H2,1-4H3/t13-,17?,18?,19+,21+,22+,23+,24+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO6/c1-13-9-18-17-6-5-15-10-16(27)7-8-21(15,3)23(17,25)19(28)11-22(18,4)24(13,30)20(29)12-31-14(2)26/h7-8,10,13,17-19,28,30H,5-6,9,11-12H2,1-4H3/t13-,17+,18-,19+,21+,22+,23-,24-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO6/c1-13(31-14(2)26)20(29)23(30)10-8-17-18-6-5-15-11-16(27)7-9-21(15,3)24(18,25)19(28)12-22(17,23)4/h7,9,11,13,17-19,28,30H,5-6,8,10,12H2,1-4H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO6/c1-13(31-14(2)26)20(29)23(30)10-8-17-18-6-5-15-11-16(27)7-9-21(15,3)24(18,25)19(28)12-22(17,23)4/h7,9,11,13,17-19,28,30H,5-6,8,10,12H2,1-4H3/t13-,17-,18-,19-,21-,22-,23-,24-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H31FO6/c1-13(31-14(2)26)20(29)23(30)10-8-17-18-6-5-15-11-16(27)7-9-21(15,3)24(18,25)19(28)12-22(17,23)4/h7,9,11,13,17-19,28,30H,5-6,8,10,12H2,1-4H3/t13-,17-,18-,19-,21?,22?,23?,24?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO6/c1-13(31-14(2)26)20(29)23(30)10-8-17-18-6-5-15-11-16(27)7-9-21(15,3)24(18,25)19(28)12-22(17,23)4/h7,9,11,13,17-19,28,30H,5-6,8,10,12H2,1-4H3/t13-,17+,18-,19-,21-,22-,23+,24+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO6/c1-13(31-14(2)26)20(29)23(30)10-8-17-18-6-5-15-11-16(27)7-9-21(15,3)24(18,25)19(28)12-22(17,23)4/h7,9,11,13,17-19,28,30H,5-6,8,10,12H2,1-4H3/t13-,17+,18+,19-,21+,22-,23-,24+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO6/c1-20(2)30-19-10-16-15-6-5-13-9-14(27)7-8-21(13,3)23(15,25)17(28)11-22(16,4)24(19,31-20)18(29)12-26/h7-9,15-17,19,26,28H,5-6,10-12H2,1-4H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO6/c1-20(2)30-19-10-16-15-6-5-13-9-14(27)7-8-21(13,3)23(15,25)17(28)11-22(16,4)24(19,31-20)18(29)12-26/h7-9,15-17,19,26,28H,5-6,10-12H2,1-4H3/t15-,16-,17-,19+,21-,22-,23-,24+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO6/c1-20(2)30-19-10-16-15-6-5-13-9-14(27)7-8-21(13,3)23(15,25)17(28)11-22(16,4)24(19,31-20)18(29)12-26/h7-9,15-17,19,26,28H,5-6,10-12H2,1-4H3/t15-,16-,17?,19-,21?,22?,23?,24?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO6/c1-20(2)30-19-10-16-15-6-5-13-9-14(27)7-8-21(13,3)23(15,25)17(28)11-22(16,4)24(19,31-20)18(29)12-26/h7-9,15-17,19,26,28H,5-6,10-12H2,1-4H3/t15-,16-,17+,19+,21-,22-,23-,24+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO6/c1-20(2)30-19-10-16-15-6-5-13-9-14(27)7-8-21(13,3)23(15,25)17(28)11-22(16,4)24(19,31-20)18(29)12-26/h7-9,15-17,19,26,28H,5-6,10-12H2,1-4H3/t15-,16+,17-,19+,21-,22-,23+,24-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO6/c1-21(2)30-19-9-14-13-8-16(25)15-7-12(27)5-6-22(15,3)20(13)17(28)10-23(14,4)24(19,31-21)18(29)11-26/h5-7,13-14,16-17,19-20,26,28H,8-11H2,1-4H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO6/c1-21(2)30-19-9-14-13-8-16(25)15-7-12(27)5-6-22(15,3)20(13)17(28)10-23(14,4)24(19,31-21)18(29)11-26/h5-7,13-14,16-17,19-20,26,28H,8-11H2,1-4H3/t13-,14-,16-,17-,19+,20+,22-,23-,24+/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H31FO6/c1-21(2)30-19-9-14-13-8-16(25)15-7-12(27)5-6-22(15,3)20(13)17(28)10-23(14,4)24(19,31-21)18(29)11-26/h5-7,13-14,16-17,19-20,26,28H,8-11H2,1-4H3/t13-,14-,16-,17-,19+,20+,22+,23+,24+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO6/c1-21(2)30-19-9-14-13-8-16(25)15-7-12(27)5-6-22(15,3)20(13)17(28)10-23(14,4)24(19,31-21)18(29)11-26/h5-7,13-14,16-17,19-20,26,28H,8-11H2,1-4H3/t13-,14-,16-,17?,19-,20+,22?,23?,24?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO6/c1-21(2)30-19-9-14-13-8-16(25)15-7-12(27)5-6-22(15,3)20(13)17(28)10-23(14,4)24(19,31-21)18(29)11-26/h5-7,13-14,16-17,19-20,26,28H,8-11H2,1-4H3/t13-,14-,16-,17+,19-,20+,22-,23+,24-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C24H31FO6/c1-21(2)30-19-9-14-13-8-16(25)15-7-12(27)5-6-22(15,3)20(13)17(28)10-23(14,4)24(19,31-21)18(29)11-26/h5-7,13-14,16-17,19-20,26,28H,8-11H2,1-4H3/t13-,14?,16-,17-,19+,20+,22?,23-,24+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO6/c1-21(2)30-19-9-14-13-8-16(25)15-7-12(27)5-6-22(15,3)20(13)17(28)10-23(14,4)24(19,31-21)18(29)11-26/h5-7,13-14,16-17,19-20,26,28H,8-11H2,1-4H3/t13-,14+,16+,17-,19+,20-,22-,23-,24-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31FO6/c1-21(2)30-19-9-14-13-8-16(25)15-7-12(27)5-6-22(15,3)20(13)17(28)10-23(14,4)24(19,31-21)18(29)11-26/h5-7,13-14,16-17,19-20,26,28H,8-11H2,1-4H3/t13?,14?,16-,17-,19+,20?,22-,23-,24+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31N3O/c28-20-19-26-14-5-13-25(17-18-26)15-6-16-27-23-9-3-1-7-21(23)11-12-22-8-2-4-10-24(22)27/h1-4,7-12,28H,5-6,13-20H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31N3O2/c1-26-18-11-12-19(26)14-16(13-18)25-24(29)21-15-27(17-7-3-2-4-8-17)22-10-6-5-9-20(22)23(21)28/h5-6,9-10,15-19H,2-4,7-8,11-14H2,1H3,(H,25,29)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31N3O2/c1-26-18-11-12-19(26)14-16(13-18)25-24(29)21-15-27(17-7-3-2-4-8-17)22-10-6-5-9-20(22)23(21)28/h5-6,9-10,15-19H,2-4,7-8,11-14H2,1H3,(H,25,29)/t16?,18-,19+	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H31N3O2/c1-26-18-11-12-19(26)14-16(13-18)25-24(29)21-15-27(17-7-3-2-4-8-17)22-10-6-5-9-20(22)23(21)28/h5-6,9-10,15-19H,2-4,7-8,11-14H2,1H3,(H,25,29)/t18-,19-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31N3O2S/c1-2-22(29)19-8-9-24-21(18-19)27(20-6-3-4-7-23(20)30-24)11-5-10-25-12-14-26(15-13-25)16-17-28/h3-4,6-9,18,28H,2,5,10-17H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H31N3O3/c1-17-18(19-15-23(29-3)24(30-4)16-20(19)25-17)9-10-26-11-13-27(14-12-26)21-7-5-6-8-22(21)28-2/h5-8,15-16,25H,9-14H2,1-4H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H31N3OS/c1-24(2,3)23-27-19-13-17(20(28-4)14-21(19)29-23)15-26-18-11-8-12-25-22(18)16-9-6-5-7-10-16/h5-7,9-10,13-14,18,22,25-26H,8,11-12,15H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31N3OS/c1-24(2,3)23-27-19-13-17(20(28-4)14-21(19)29-23)15-26-18-11-8-12-25-22(18)16-9-6-5-7-10-16/h5-7,9-10,13-14,18,22,25-26H,8,11-12,15H2,1-4H3/t18-,22-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H31N3OS/c1-3-7-22(28)19-10-11-24-21(18-19)27(20-8-4-5-9-23(20)29-24)13-6-12-26-16-14-25(2)15-17-26/h4-5,8-11,18H,3,6-7,12-17H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31NO/c1-3-23(26)24(21-13-7-4-8-14-21,22-15-9-5-10-16-22)19-20(2)25-17-11-6-12-18-25/h4-5,7-10,13-16,20H,3,6,11-12,17-19H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31NO4/c1-5-26-21-10-9-17(14-22(21)27-6-2)13-20-19-16-24(29-8-4)23(28-7-3)15-18(19)11-12-25-20/h9-10,13-16,25H,5-8,11-12H2,1-4H3/b20-13-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31NO4/c1-5-26-21-10-9-17(14-22(21)27-6-2)13-20-19-16-24(29-8-4)23(28-7-3)15-18(19)11-12-25-20/h9-10,14-16H,5-8,11-13H2,1-4H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H31NO6/c1-25(2)16-21(31-24(28)14-13-23(26)27)17-30-22-10-5-4-8-19(22)12-11-18-7-6-9-20(15-18)29-3/h4-10,15,21H,11-14,16-17H2,1-3H3,(H,26,27)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H32ClFO5/c1-20(2)30-19-10-16-15-6-5-13-9-14(27)7-8-21(13,3)23(15,26)17(28)11-22(16,4)24(19,31-20)18(29)12-25/h9,15-17,19,28H,5-8,10-12H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H32ClFO5/c1-20(2)30-19-10-16-15-6-5-13-9-14(27)7-8-21(13,3)23(15,26)17(28)11-22(16,4)24(19,31-20)18(29)12-25/h9,15-17,19,28H,5-8,10-12H2,1-4H3/t15-,16-,17-,19+,21-,22-,23-,24+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H32ClFO5/c1-20(2)30-19-10-16-15-6-5-13-9-14(27)7-8-21(13,3)23(15,26)17(28)11-22(16,4)24(19,31-20)18(29)12-25/h9,15-17,19,28H,5-8,10-12H2,1-4H3/t15-,16-,17?,19-,21?,22?,23?,24?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C24H32ClFO5/c1-20(2)30-19-10-16-15-6-5-13-9-14(27)7-8-21(13,3)23(15,26)17(28)11-22(16,4)24(19,31-20)18(29)12-25/h9,15-17,19,28H,5-8,10-12H2,1-4H3/t15-,16-,17+,19+,21-,22+,23-,24+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H32ClFO5/c1-20(2)30-19-10-16-15-6-5-13-9-14(27)7-8-21(13,3)23(15,26)17(28)11-22(16,4)24(19,31-20)18(29)12-25/h9,15-17,19,28H,5-8,10-12H2,1-4H3/t15-,16+,17-,19+,21-,22-,23+,24-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H32ClFO5/c1-20(2)30-19-10-16-15-6-5-13-9-14(27)7-8-21(13,3)23(15,26)17(28)11-22(16,4)24(19,31-20)18(29)12-25/h9,15-17,19,28H,5-8,10-12H2,1-4H3/t15?,16?,17-,19+,21-,22-,23-,24+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H32N2O2/c1-16-17(2)23-21(15-24(4,5)28-23)18(3)22(16)26-13-11-25(12-14-26)19-7-9-20(27-6)10-8-19/h7-10H,11-15H2,1-6H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C24H32N2O5/c1-28-14-5-6-15-16-7-8-26-12-13-9-20(29-2)23(30-3)21(24(27)31-4)17(13)11-19(26)22(16)25-18(15)10-14/h5-6,10,13,17,19-21,23,25H,7-9,11-12H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H32N2O5/c1-28-14-5-6-15-16-7-8-26-12-13-9-20(29-2)23(30-3)21(24(27)31-4)17(13)11-19(26)22(16)25-18(15)10-14/h5-6,10,13,17,19-21,23,25H,7-9,11-12H2,1-4H3/t13-,17-,19-,20-,21+,23+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H32N2O5/c1-28-14-5-6-15-16-7-8-26-12-13-9-20(29-2)23(30-3)21(24(27)31-4)17(13)11-19(26)22(16)25-18(15)10-14/h5-6,10,13,17,19-21,23,25H,7-9,11-12H2,1-4H3/t13-,17+,19-,20+,21+,23+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H32N2O5/c1-28-14-5-6-15-16-7-8-26-12-13-9-20(29-2)23(30-3)21(24(27)31-4)17(13)11-19(26)22(16)25-18(15)10-14/h5-6,10,13,17,19-21,23,25H,7-9,11-12H2,1-4H3/t13-,17+,19+,20-,21+,23-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H32N2O5/c1-28-14-5-6-15-16-7-8-26-12-13-9-20(29-2)23(30-3)21(24(27)31-4)17(13)11-19(26)22(16)25-18(15)10-14/h5-6,10,13,17,19-21,23,25H,7-9,11-12H2,1-4H3/t13-,17+,19+,20+,21+,23-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H32N2OS/c1-18-6-12-23(13-7-18)28-16-14-24(27)25-20(3)21-8-10-22(11-9-21)26-15-4-5-19(2)17-26/h6-13,19-20H,4-5,14-17H2,1-3H3,(H,25,27)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H32N2OS/c1-18-6-12-23(13-7-18)28-16-14-24(27)25-20(3)21-8-10-22(11-9-21)26-15-4-5-19(2)17-26/h6-13,19-20H,4-5,14-17H2,1-3H3,(H,25,27)/t19-,20+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H32N4O2S/c29-21-17-24(9-3-4-10-24)18-22(30)28(21)12-6-5-11-26-13-15-27(16-14-26)23-19-7-1-2-8-20(19)31-25-23/h1-2,7-8H,3-6,9-18H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H32O10/c1-13(2)7-19(27)32-18-8-17-16(10-29-14(3)25)11-30-22(21(17)24(18)12-31-24)33-20(28)9-23(5,6)34-15(4)26/h8,11,13,18,21-22H,7,9-10,12H2,1-6H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H32O10/c1-13(2)7-19(27)32-18-8-17-16(10-29-14(3)25)11-30-22(21(17)24(18)12-31-24)33-20(28)9-23(5,6)34-15(4)26/h8,11,13,18,21-22H,7,9-10,12H2,1-6H3/t18-,21-,22-,24+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H32O10/c1-13(2)7-19(27)32-18-8-17-16(10-29-14(3)25)11-30-22(21(17)24(18)12-31-24)33-20(28)9-23(5,6)34-15(4)26/h8,11,13,18,21-22H,7,9-10,12H2,1-6H3/t18-,21+,22-,24?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H32O10/c1-13(2)7-19(27)32-18-8-17-16(10-29-14(3)25)11-30-22(21(17)24(18)12-31-24)33-20(28)9-23(5,6)34-15(4)26/h8,11,13,18,21-22H,7,9-10,12H2,1-6H3/t18-,21+,22+,24-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H32O10/c1-13(2)7-19(27)33-22-21-17(16(11-30-22)10-29-14(3)25)8-18(24(21)12-31-24)32-20(28)9-23(5,6)34-15(4)26/h8,11,13,18,21-22H,7,9-10,12H2,1-6H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C24H32O10/c1-13(2)7-19(27)33-22-21-17(16(11-30-22)10-29-14(3)25)8-18(24(21)12-31-24)32-20(28)9-23(5,6)34-15(4)26/h8,11,13,18,21-22H,7,9-10,12H2,1-6H3/t18-,21+,22-,24?/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H32O10/c1-13(2)7-19(27)33-22-21-17(16(11-30-22)10-29-14(3)25)8-18(24(21)12-31-24)32-20(28)9-23(5,6)34-15(4)26/h8,11,13,18,21-22H,7,9-10,12H2,1-6H3/t18-,21+,22-,24+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C24H32O4/c1-14-12-18-19(22(4)9-6-17(27)13-21(14)22)7-10-23(5)20(18)8-11-24(23,15(2)25)28-16(3)26/h12-13,18-20H,6-11H2,1-5H3/t18-,19-,20+,22-,23+,24-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H32O4/c1-14-12-18-19(22(4)9-6-17(27)13-21(14)22)7-10-23(5)20(18)8-11-24(23,15(2)25)28-16(3)26/h12-13,18-20H,6-11H2,1-5H3/t18-,19+,20+,22-,23+,24+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H32O4/c1-5-24(28-16(3)26)13-11-22-21-8-6-17-14-18(27-15(2)25)7-9-19(17)20(21)10-12-23(22,24)4/h1,14,18-22H,6-13H2,2-4H3/t18-,19-,20-,21+,22+,23-,24+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H32O4S/c1-14(25)29-19-13-15-12-16(26)4-8-22(15,2)17-5-9-23(3)18(21(17)19)6-10-24(23)11-7-20(27)28-24/h12,17-19,21H,4-11,13H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H32O4S/c1-14(25)29-19-13-15-12-16(26)4-8-22(15,2)17-5-9-23(3)18(21(17)19)6-10-24(23)11-7-20(27)28-24/h12,17-19,21H,4-11,13H2,1-3H3/t17-,18-,19-,21-,22?,23?,24?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H32O4S/c1-14(25)29-19-13-15-12-16(26)4-8-22(15,2)17-5-9-23(3)18(21(17)19)6-10-24(23)11-7-20(27)28-24/h12,17-19,21H,4-11,13H2,1-3H3/t17-,18-,19+,21+,22-,23-,24+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H32O6/c1-13-9-16-17-6-8-24(29,20(28)12-30-14(2)25)23(17,4)11-19(27)21(16)22(3)7-5-15(26)10-18(13)22/h5,7,10,13,16-17,19,21,27,29H,6,8-9,11-12H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H32O6/c1-13-9-16-17-6-8-24(29,20(28)12-30-14(2)25)23(17,4)11-19(27)21(16)22(3)7-5-15(26)10-18(13)22/h5,7,10,13,16-17,19,21,27,29H,6,8-9,11-12H2,1-4H3/t13-,16-,17-,19-,21+,22-,23-,24-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H32O6/c1-13-9-16-17-6-8-24(29,20(28)12-30-14(2)25)23(17,4)11-19(27)21(16)22(3)7-5-15(26)10-18(13)22/h5,7,10,13,16-17,19,21,27,29H,6,8-9,11-12H2,1-4H3/t13-,16-,17-,19-,21+,22-,23+,24+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H32O6/c1-13-9-16-17-6-8-24(29,20(28)12-30-14(2)25)23(17,4)11-19(27)21(16)22(3)7-5-15(26)10-18(13)22/h5,7,10,13,16-17,19,21,27,29H,6,8-9,11-12H2,1-4H3/t13-,16-,17-,19-,21+,22?,23?,24?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H32O6/c1-13-9-16-17-6-8-24(29,20(28)12-30-14(2)25)23(17,4)11-19(27)21(16)22(3)7-5-15(26)10-18(13)22/h5,7,10,13,16-17,19,21,27,29H,6,8-9,11-12H2,1-4H3/t13-,16-,17+,19-,21-,22-,23-,24+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H32O6/c1-21(2)29-19-10-16-15-6-5-13-9-14(26)7-8-22(13,3)20(15)17(27)11-23(16,4)24(19,30-21)18(28)12-25/h7-9,15-17,19-20,25,27H,5-6,10-12H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H32O6/c1-21(2)29-19-10-16-15-6-5-13-9-14(26)7-8-22(13,3)20(15)17(27)11-23(16,4)24(19,30-21)18(28)12-25/h7-9,15-17,19-20,25,27H,5-6,10-12H2,1-4H3/t15-,16-,17-,19-,20+,22?,23?,24?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H32O6/c1-21(2)29-19-10-16-15-6-5-13-9-14(26)7-8-22(13,3)20(15)17(27)11-23(16,4)24(19,30-21)18(28)12-25/h7-9,15-17,19-20,25,27H,5-6,10-12H2,1-4H3/t15-,16-,17-,19+,20+,22-,23-,24+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H32O6/c1-21(2)29-19-10-16-15-6-5-13-9-14(26)7-8-22(13,3)20(15)17(27)11-23(16,4)24(19,30-21)18(28)12-25/h7-9,15-17,19-20,25,27H,5-6,10-12H2,1-4H3/t15-,16-,17-,19+,20+,22+,23+,24+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H32O6/c1-21(2)29-19-10-16-15-6-5-13-9-14(26)7-8-22(13,3)20(15)17(27)11-23(16,4)24(19,30-21)18(28)12-25/h7-9,15-17,19-20,25,27H,5-6,10-12H2,1-4H3/t15-,16-,17?,19-,20+,22?,23?,24?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H32O6/c1-21(2)29-19-10-16-15-6-5-13-9-14(26)7-8-22(13,3)20(15)17(27)11-23(16,4)24(19,30-21)18(28)12-25/h7-9,15-17,19-20,25,27H,5-6,10-12H2,1-4H3/t15-,16+,17-,19+,20-,22-,23-,24-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H32O6/c1-21(2)29-19-10-16-15-6-5-13-9-14(26)7-8-22(13,3)20(15)17(27)11-23(16,4)24(19,30-21)18(28)12-25/h7-9,15-17,19-20,25,27H,5-6,10-12H2,1-4H3/t15?,16-,17?,19+,20+,22?,23?,24+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C24H33FO6/c1-21(2)30-19-9-14-13-8-16(25)15-7-12(27)5-6-22(15,3)20(13)17(28)10-23(14,4)24(19,31-21)18(29)11-26/h7,13-14,16-17,19-20,26,28H,5-6,8-11H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H33FO6/c1-21(2)30-19-9-14-13-8-16(25)15-7-12(27)5-6-22(15,3)20(13)17(28)10-23(14,4)24(19,31-21)18(29)11-26/h7,13-14,16-17,19-20,26,28H,5-6,8-11H2,1-4H3/t13-,14-,16-,17-,19-,20+,22?,23?,24?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H33FO6/c1-21(2)30-19-9-14-13-8-16(25)15-7-12(27)5-6-22(15,3)20(13)17(28)10-23(14,4)24(19,31-21)18(29)11-26/h7,13-14,16-17,19-20,26,28H,5-6,8-11H2,1-4H3/t13-,14-,16-,17-,19+,20+,22-,23-,24+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H33FO6/c1-21(2)30-19-9-14-13-8-16(25)15-7-12(27)5-6-22(15,3)20(13)17(28)10-23(14,4)24(19,31-21)18(29)11-26/h7,13-14,16-17,19-20,26,28H,5-6,8-11H2,1-4H3/t13-,14-,16-,17-,19+,20+,22+,23+,24+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H33FO6/c1-21(2)30-19-9-14-13-8-16(25)15-7-12(27)5-6-22(15,3)20(13)17(28)10-23(14,4)24(19,31-21)18(29)11-26/h7,13-14,16-17,19-20,26,28H,5-6,8-11H2,1-4H3/t13-,14+,16+,17-,19+,20-,22-,23-,24-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H33FO6/c1-21(2)30-19-9-14-13-8-16(25)15-7-12(27)5-6-22(15,3)20(13)17(28)10-23(14,4)24(19,31-21)18(29)11-26/h7,13-14,16-17,19-20,26,28H,5-6,8-11H2,1-4H3/t13?,14?,16-,17-,19+,20?,22-,23-,24+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H33N3O2S/c1-20(18-26-12-10-25(11-13-26)14-16-29-17-15-28)19-27-21-6-2-4-8-23(21)30-24-9-5-3-7-22(24)27/h2-9,20,28H,10-19H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H33N3O2S/c1-20(18-26-12-10-25(11-13-26)14-16-29-17-15-28)19-27-21-6-2-4-8-23(21)30-24-9-5-3-7-22(24)27/h2-9,20,28H,10-19H2,1H3/t20-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H33N3O3S2/c1-25(2)32(29,30)20-8-9-24-22(18-20)27(21-6-3-4-7-23(21)31-24)14-5-13-26-15-10-19(11-16-26)12-17-28/h3-4,6-9,18-19,28H,5,10-17H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H33NO3/c1-3-25(4-2)13-15-28-24(26)22(18-23-10-7-14-27-23)17-19-11-12-20-8-5-6-9-21(20)16-19/h5-6,8-9,11-12,16,22-23H,3-4,7,10,13-15,17-18H2,1-2H3/t22-,23-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H34N2O/c1-21(2)19-27-20-24(18-25-15-9-10-16-25)26(23-13-7-4-8-14-23)17-22-11-5-3-6-12-22/h3-8,11-14,21,24H,9-10,15-20H2,1-2H3/t24-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H34N2O/c1-21(2)19-27-20-24(25-15-9-10-16-25)18-26(23-13-7-4-8-14-23)17-22-11-5-3-6-12-22/h3-8,11-14,21,24H,9-10,15-20H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H34N2O/c1-21(2)19-27-20-24(25-15-9-10-16-25)18-26(23-13-7-4-8-14-23)17-22-11-5-3-6-12-22/h3-8,11-14,21,24H,9-10,15-20H2,1-2H3/t24-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H34N2O/c1-21(2)19-27-20-24(25-15-9-10-16-25)18-26(23-13-7-4-8-14-23)17-22-11-5-3-6-12-22/h3-8,11-14,21,24H,9-10,15-20H2,1-2H3/t24-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H34N2O5/c1-3-31-24(30)19(14-13-17-9-5-4-6-10-17)25-16(2)22(27)26-20-12-8-7-11-18(20)15-21(26)23(28)29/h4-6,9-10,16,18-21,25H,3,7-8,11-15H2,1-2H3,(H,28,29)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H34N2O5/c1-3-31-24(30)19(14-13-17-9-5-4-6-10-17)25-16(2)22(27)26-20-12-8-7-11-18(20)15-21(26)23(28)29/h4-6,9-10,16,18-21,25H,3,7-8,11-15H2,1-2H3,(H,28,29)/t16-,18+,19-,20-,21-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H34N2O5/c1-3-31-24(30)19(14-13-17-9-5-4-6-10-17)25-16(2)22(27)26-20-12-8-7-11-18(20)15-21(26)23(28)29/h4-6,9-10,16,18-21,25H,3,7-8,11-15H2,1-2H3,(H,28,29)/t16-,18+,19-,20+,21+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H34N4O5S/c1-4-21-17(3)15-28(22(21)29)24(31)25-14-13-18-7-11-20(12-8-18)34(32,33)27-23(30)26-19-9-5-16(2)6-10-19/h7-8,11-12,16,19H,4-6,9-10,13-15H2,1-3H3,(H,25,31)(H2,26,27,30)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H34O3/c1-6-20(27)24(5)14(2)11-18-17-8-7-15-12-16(25)9-10-22(15,3)21(17)19(26)13-23(18,24)4/h9-10,12,14,17-19,21,26H,6-	1	(Meng et al., 2021)

8,11,13H2,1-5H3	
InChI=1S/C24H34O3/c1-6-20(27)24(5)14(2)11-18-17-8-7-15-12-16(25)9-10-22(15,3)21(17)19(26)13-23(18,24)4/h9-10,12,14,17-19,21,26H,6-8,11,13H2,1-5H3/t14-,17-,18-,19-,21+,22?,23?,24?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H34O3/c1-6-20(27)24(5)14(2)11-18-17-8-7-15-12-16(25)9-10-22(15,3)21(17)19(26)13-23(18,24)4/h9-10,12,14,17-19,21,26H,6-8,11,13H2,1-5H3/t14-,17-,18+,19-,21-,22-,23-,24-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H34O3/c1-6-20(27)24(5)14(2)11-18-17-8-7-15-12-16(25)9-10-22(15,3)21(17)19(26)13-23(18,24)4/h9-10,12,14,17-19,21,26H,6-8,11,13H2,1-5H3/t14-,17?,18?,19+,21?,22+,23+,24-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H34O3/c1-6-20(27)24(5)14(2)11-18-17-8-7-15-12-16(25)9-10-22(15,3)21(17)19(26)13-23(18,24)4/h9-10,12,14,17-19,21,26H,6-8,11,13H2,1-5H3/t14-,17+,18+,19+,21-,22-,23-,24+/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H34O3/c1-6-20(27)24(5)14(2)11-18-17-8-7-15-12-16(25)9-10-22(15,3)21(17)19(26)13-23(18,24)4/h9-10,12,14,17-19,21,26H,6-8,11,13H2,1-5H3/t14-,17+,18+,19+,21-,22+,23+,24-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H34O4/c1-14-12-18-19(22(4)9-6-17(27)13-21(14)22)7-10-23(5)20(18)8-11-24(23,15(2)25)28-16(3)26/h13-14,18-20H,6-12H2,1-5H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H34O4/c1-14(25)24-20(27-21(2,3)28-24)13-19-17-7-6-15-12-16(26)8-10-22(15,4)18(17)9-11-23(19,24)5/h12,17-20H,6-11,13H2,1-5H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H34O4/c1-14(25)24-20(27-21(2,3)28-24)13-19-17-7-6-15-12-16(26)8-10-22(15,4)18(17)9-11-23(19,24)5/h12,17-20H,6-11,13H2,1-5H3/t17-,18-,19-,20-,22?,23?,24?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H34O4/c1-14(25)24-20(27-21(2,3)28-24)13-19-17-7-6-15-12-16(26)8-10-22(15,4)18(17)9-11-23(19,24)5/h12,17-20H,6-11,13H2,1-5H3/t17-,18-,19-,20-,22+,23+,24+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H34O4/c1-14(25)24-20(27-21(2,3)28-24)13-19-17-7-6-15-12-16(26)8-10-22(15,4)18(17)9-11-23(19,24)5/h12,17-20H,6-11,13H2,1-5H3/t17-,18-,19+,20-,22+,23-,24-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H34O4/c1-14(25)24-20(27-21(2,3)28-24)13-19-17-7-6-15-12-16(26)8-10-22(15,4)18(17)9-11-23(19,24)5/h12,17-20H,6-11,13H2,1-5H3/t17-,18+,19+,20-,22+,23+,24-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H34O5/c1-13(4-7-21(28)29)16-5-6-17-22-18(12-20(27)24(16,17)3)23(2)9-8-15(25)10-14(23)11-19(22)26/h13-14,16-18,22H,4-12H2,1-3H3,(H,28,29)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H34O5/c1-13(4-7-21(28)29)16-5-6-17-22-18(12-20(27)24(16,17)3)23(2)9-8-15(25)10-14(23)11-19(22)26/h13-14,16-18,22H,4-12H2,1-3H3,(H,28,29)/t13-,14+,16-,17+,18+,22+,23+,24-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H34O5/c1-13(4-7-21(28)29)16-5-6-17-22-18(12-20(27)24(16,17)3)23(2)9-8-15(25)10-14(23)11-19(22)26/h13-14,16-18,22H,4-12H2,1-3H3,(H,28,29)/t13?,14-,16-,17-,18-,22+,23?,24?/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H35FO6/c1-20(2)30-19-10-16-15-6-5-13-9-14(27)7-8-21(13,3)23(15,25)17(28)11-22(16,4)24(19,31-20)18(29)12-26/h13,15-17,19,26,28H,5-12H2,1-4H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H35FO6/c1-20(2)30-19-10-16-15-6-5-13-9-14(27)7-8-21(13,3)23(15,25)17(28)11-22(16,4)24(19,31-20)18(29)12-26/h13,15-17,19,26,28H,5-12H2,1-4H3/t13-,15-,16-,17-,19-,21?,22?,23?,24?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H35FO6/c1-20(2)30-19-10-16-15-6-5-13-9-14(27)7-8-21(13,3)23(15,25)17(28)11-22(16,4)24(19,31-20)18(29)12-26/h13,15-17,19,26,28H,5-12H2,1-4H3/t13-,15-,16-,17?,19-,21?,22?,23?,24?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H35FO6/c1-20(2)30-19-10-16-15-6-5-13-9-14(27)7-8-21(13,3)23(15,25)17(28)11-22(16,4)24(19,31-20)18(29)12-26/h13,15-17,19,26,28H,5-12H2,1-4H3/t13-,15-,16-,17+,19+,21-,22+,23-,24+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C24H35FO6/c1-20(2)30-19-10-16-15-6-5-13-9-14(27)7-8-21(13,3)23(15,25)17(28)11-22(16,4)24(19,31-20)18(29)12-26/h13,15-17,19,26,28H,5-12H2,1-4H3/t13-,15?,16?,17-,19+,21-,22-,23-,24+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H35FO6/c1-20(2)30-19-10-16-15-6-5-13-9-14(27)7-8-21(13,3)23(15,25)17(28)11-22(16,4)24(19,31-20)18(29)12-26/h13,15-17,19,26,28H,5-12H2,1-4H3/t13-,15+,16-,17+,19-,21+,22+,23-,24+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H35FO6/c1-20(2)30-19-10-16-15-6-5-13-9-14(27)7-8-21(13,3)23(15,25)17(28)11-22(16,4)24(19,31-20)18(29)12-26/h13,15-17,19,26,28H,5-12H2,1-4H3/t13?,15?,16-,17-,19+,21?,22?,23-,24+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H35NO5/c1-2-34-20(30)15-26-21(17-6-4-3-5-7-17)24(32)29-13-12-19(29)23(31)27-14-16-8-10-18(11-9-16)22(25)28-33/h8-11,17,19,21,26,33H,2-7,12-15H2,1H3,(H2,25,28)(H,27,31)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H36NO2/c1-26-22(31)20-21(27-15-17-4-10-24(11-5-17)8-3-9-24)28-19(14-25)29-23(20)32-16-18-6-12-30(2)13-7-18/h17-18H,3-13,15-16H2,1-2H3,(H,26,31)(H,27,28,29)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H36O3/c1-6-7-8-9-12-23(2,3)16-13-20(26)22-18-15-17(25)10-11-19(18)24(4,5)27-21(22)14-16/h13-14,18-19,26H,6-12,15H2,1-5H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H36O3/c1-6-7-8-9-12-23(2,3)16-13-20(26)22-18-15-17(25)10-11-19(18)24(4,5)27-21(22)14-16/h13-14,18-19,26H,6-12,15H2,1-5H3/t18-,19-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H36O3/c1-6-7-8-9-12-23(2,3)16-13-20(26)22-18-15-17(25)10-11-19(18)24(4,5)27-21(22)14-16/h13-14,18-19,26H,6-12,15H2,1-5H3/t18-,19-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H36O3/c1-6-7-8-9-12-23(2,3)16-13-20(26)22-18-15-17(25)10-11-19(18)24(4,5)27-21(22)14-16/h13-14,18-19,26H,6-12,15H2,1-5H3/t18-,19+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H36O5/c1-5-15(3)24(27)29-21-11-14(2)10-17-7-6-16(4)20(23(17)21)9-8-19-12-18(25)13-22(26)28-19/h6-7,10,14-16,18-21,23,25H,5,8-9,11-13H2,1-4H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H36O5/c1-5-15(3)24(27)29-21-11-14(2)10-17-7-6-16(4)20(23(17)21)9-8-19-12-18(25)13-22(26)28-19/h6-7,10,14-16,18-21,23,25H,5,8-9,11-13H2,1-4H3/t14-,15-,16-,18+,19+,20-,21-,23-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H36O5/c1-5-15(3)24(27)29-21-11-14(2)10-17-7-6-16(4)20(23(17)21)9-8-19-12-18(25)13-22(26)28-19/h6-7,10,14-16,18-21,23,25H,5,8-9,11-13H2,1-4H3/t14-,15+,16+,18-,19-,20+,21+,23+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H40N8O4/c33-15-11-31(12-16-34)23-26-20-19(21(27-23)29-7-3-1-4-8-29)25-24(32(13-17-35)14-18-36)28-22(20)30-9-5-2-6-10-30/h33-36H,1-18H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C24H40O4/c1-14(4-7-21(27)28)17-5-6-18-22-19(9-11-24(17,18)3)23(2)10-8-16(25)12-15(23)13-20(22)26/h14-20,22,25-26H,4-13H2,1-3H3,(H,27,28)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C24H48N6O13/c25-2-8-15(33)17(35)12(29)11(39-8)5-38-21-10(4-31)41-24(19(21)37)43-22-14(32)6(27)1-7(28)20(22)42-23-13(30)18(36)16(34)9(3-26)40-23/h6-24,31-37H,1-5,25-30H2/t6-,7-,8-,9-,10+,11-,12+,13-,14-,15+,16+,17-,18-,19+,20-,21-,22+,23-,24-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H16F2N4O9S/c1-39-21-8-13(2-6-20(21)40-19-7-4-15(30(35)36)11-18(19)31(37)38)9-22-24(33)29(25(34)41-22)12-23(32)28-17-5-3-14(26)10-16(17)27/h2-11H,12H2,1H3,(H,28,32)/b22-9+	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H19F3N2O3/c1-14-11-16(7-8-21(14)33-2)25-18-6-4-3-5-17(18)24(32)30(25)10-9-29(25)23(31)15-12-19(26)22(28)20(27)13-15/h3-8,11-13H,9-10H2,1-2H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C25H20N4O/c1-29-16-23(18-12-14-26-15-13-18)25(28-29)20-7-10-22(11-8-20)30-17-21-9-6-19-4-2-3-5-24(19)27-21/h2-16H,17H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H22BrF3N4O4S/c1-2-19-31-21(14-8-9-14)22(24(30)34)33(19)12-13-7-10-18-16(11-13)20(26)23(37-18)15-5-3-4-6-17(15)32-38(35,36)25(27,28)29/h3-7,10-11,14,32H,2,8-9,12H2,1H3,(H2,30,34)	0	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C25H22ClF3N6O3/c1-13-8-9-35(34-13)20-11-16(26)6-7-17(20)22(25(27,28)29)38-21-12-19(32-24(31)33-21)15-4-2-14(3-5-15)10-18(30)23(36)37/h2-9,11-12,18,22H,10,30H2,1H3,(H,36,37)(H2,31,32,33)/t18-,22+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H22N2O2/c1-2-20(17-11-5-3-6-12-17)27-25(29)22-19-15-9-10-16-21(19)26-23(24(22)28)18-13-7-4-8-14-18/h3-16,20,28H,2H2,1H3,(H,27,29)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H22N2O2/c1-2-20(17-11-5-3-6-12-17)27-25(29)22-19-15-9-10-16-21(19)26-23(24(22)28)18-13-7-4-8-14-18/h3-16,20,28H,2H2,1H3,(H,27,29)/t20-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H22N4O4/c1-14-10-11-19(12-15(14)2)29-24(31)22(16(3)28-29)27-26-21-9-5-8-20(23(21)30)17-6-4-7-18(13-17)25(32)33/h4-13,28,30H,1-3H3,(H,32,33)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H23ClN4O4/c26-20-7-5-16-6-8-21(28-23(16)27-20)30-19(17-3-1-2-4-18(17)24(30)32)15-22(31)29-11-9-25(10-12-29)33-13-14-34-25/h1-8,19H,9-15H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H23ClN4O4/c26-20-7-5-16-6-8-21(28-23(16)27-20)30-19(17-3-1-2-4-18(17)24(30)32)15-22(31)29-11-9-25(10-12-29)33-13-14-34-25/h1-8,19H,9-15H2/t19-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H23ClN4O4/c26-20-7-5-16-6-8-21(28-23(16)27-20)30-19(17-3-1-2-4-18(17)24(30)32)15-22(31)29-11-9-25(10-12-29)33-13-14-34-25/h1-8,19H,9-15H2/t19-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H23N5O6S/c1-25(2)19(24(35)36)30-22(34)17(23(30)37-25)29-21(33)15(12-7-4-3-5-8-12)28-20(32)13-11-27-14-9-6-10-26-16(14)18(13)31/h3-11,15,17,19,23H,1-2H3,(H,27,31)(H,28,32)(H,29,33)(H,35,36)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H23N5O6S/c1-25(2)19(24(35)36)30-22(34)17(23(30)37-25)29-21(33)15(12-7-4-3-5-8-12)28-20(32)13-11-27-14-9-6-10-26-16(14)18(13)31/h3-11,15,17,19,23H,1-2H3,(H,27,31)(H,28,32)(H,29,33)(H,35,36)/t15-,17-,19+,23-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H23N5O6S/c1-25(2)19(24(35)36)30-22(34)17(23(30)37-25)29-21(33)15(12-7-4-3-5-8-12)28-20(32)13-11-27-14-9-6-10-26-16(14)18(13)31/h3-11,15,17,19,23H,1-2H3,(H,27,31)(H,28,32)(H,29,33)(H,35,36)/t15-,17?,19-,23-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H23N5O6S/c1-25(2)19(24(35)36)30-22(34)17(23(30)37-25)29-21(33)15(12-7-4-3-5-8-12)28-20(32)13-11-27-14-9-6-10-26-16(14)18(13)31/h3-11,15,17,19,23H,1-2H3,(H,27,31)(H,28,32)(H,29,33)(H,35,36)/t15-,17?,19+,23-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H23N5O6S/c1-25(2)19(24(35)36)30-22(34)17(23(30)37-25)29-21(33)15(12-7-4-3-5-8-12)28-20(32)13-11-27-14-9-6-10-26-16(14)18(13)31/h3-11,15,17,19,23H,1-2H3,(H,27,31)(H,28,32)(H,29,33)(H,35,36)/t15-,17+,19-,23+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H23N5O6S/c1-25(2)19(24(35)36)30-22(34)17(23(30)37-25)29-21(33)15(12-7-4-3-5-8-12)28-20(32)13-11-27-14-9-6-10-26-16(14)18(13)31/h3-11,15,17,19,23H,1-2H3,(H,27,31)(H,28,32)(H,29,33)(H,35,36)/t15-,17+,19+,23+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H23N5OS/c1-3-17-7-9-19(10-8-17)30-16-28-22-21-20(11-14-27-24(21)32-23(22)25(30)31)29(2)15-12-18-6-4-5-13-26-18/h4-11,13-14,16H,3,12,15H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H24ClN3O3S/c1-31-22-14-19(8-9-21(22)32-13-12-28-10-2-3-11-28)29-16-27-20-15-23(33-24(20)25(29)30)17-4-6-18(26)7-5-17/h4-9,14-16H,2-3,10-13H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H24N8O7S2/c1-11-7-16(35)15(8-26-11)20(36)27-17(12-3-5-14(34)6-4-12)21(37)28-18-22(38)33-19(24(39)40)13(9-41-23(18)33)10-42-25-29-30-31-32(25)2/h3-8,17-18,23,34H,9-10H2,1-2H3,(H,26,35)(H,27,36)(H,28,37)(H,39,40)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H24N8O7S2/c1-11-7-16(35)15(8-26-11)20(36)27-17(12-3-5-14(34)6-4-12)21(37)28-18-22(38)33-19(24(39)40)13(9-41-23(18)33)10-42-25-29-30-31-32(25)2/h3-8,17-18,23,34H,9-10H2,1-2H3,(H,26,35)(H,27,36)(H,28,37)(H,39,40)/t17-,18-,23-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H24N8O7S2/c1-11-7-16(35)15(8-26-11)20(36)27-17(12-3-5-14(34)6-4-12)21(37)28-18-22(38)33-19(24(39)40)13(9-41-23(18)33)10-42-25-29-30-31-32(25)2/h3-8,17-18,23,34H,9-10H2,1-2H3,(H,26,35)(H,27,36)(H,28,37)(H,39,40)/t17-,18-,23-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H24N8O7S2/c1-11-7-16(35)15(8-26-11)20(36)27-17(12-3-5-14(34)6-4-12)21(37)28-18-22(38)33-19(24(39)40)13(9-41-23(18)33)10-	0	(Mazumdar et al.,

42-25-29-30-31-32(25)2/h3-8,17-18,23,34H,9-10H2,1-2H3,(H,26,35)(H,27,36)(H,28,37)(H,39,40)/t17-,18-,23+/m1/s1	2023)
InChI=1S/C25H24N8O7S2/c1-11-7-16(35)15(8-26-11)20(36)27-17(12-3-5-14(34)6-4-12)21(37)28-18-22(38)33-19(24(39)40)13(9-41-23(18)33)10-42-25-29-30-31-32(25)2/h3-8,17-18,23,34H,9-10H2,1-2H3,(H,26,35)(H,27,36)(H,28,37)(H,39,40)/t17-,18?,23-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H24N8O7S2/c1-11-7-16(35)15(8-26-11)20(36)27-17(12-3-5-14(34)6-4-12)21(37)28-18-22(38)33-19(24(39)40)13(9-41-23(18)33)10-42-25-29-30-31-32(25)2/h3-8,17-18,23,34H,9-10H2,1-2H3,(H,26,35)(H,27,36)(H,28,37)(H,39,40)/t17-,18?,23-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H24N8O7S2/c1-11-7-16(35)15(8-26-11)20(36)27-17(12-3-5-14(34)6-4-12)21(37)28-18-22(38)33-19(24(39)40)13(9-41-23(18)33)10-42-25-29-30-31-32(25)2/h3-8,17-18,23,34H,9-10H2,1-2H3,(H,26,35)(H,27,36)(H,28,37)(H,39,40)/t17-,18+,23+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H25FN4O2/c26-21-7-3-4-8-22(21)32-24-15-23(27-17-28-24)29-12-10-19(11-13-29)25(31)30-14-9-18-5-1-2-6-20(18)16-30/h1-8,15,17,19H,9-14,16H2	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C25H25N5O4/c1-34-19-11-9-18(10-12-19)30-23-20(22(27-30)24(26)32)13-15-29(25(23)33)17-7-5-16(6-8-17)28-14-3-2-4-21(28)31/h5-12H,2-4,13-15H2,1H3,(H2,26,32)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H25NO4/c1-25(2)16-22(21-14-18(28-3)11-12-23(21)30-25)26-24(27)20(15-19-10-7-13-29-19)17-8-5-4-6-9-17/h4-15,22H,16H2,1-3H3,(H,26,27)/b20-15+/t22-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H25NO9/c1-10(27)25(26)7-13-18(16(8-25)35-17-6-14(28)15(29)9-34-17)24(33)20-19(23(13)32)21(30)11-4-2-3-5-12(11)22(20)31/h2-5,14-17,28-29,32-33H,6-9,26H2,1H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H25NO9/c1-10(27)25(26)7-13-18(16(8-25)35-17-6-14(28)15(29)9-34-17)24(33)20-19(23(13)32)21(30)11-4-2-3-5-12(11)22(20)31/h2-5,14-17,28-29,32-33H,6-9,26H2,1H3/t14-,15-,16-,17-,25?/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H25NO9/c1-10(27)25(26)7-13-18(16(8-25)35-17-6-14(28)15(29)9-34-17)24(33)20-19(23(13)32)21(30)11-4-2-3-5-12(11)22(20)31/h2-5,14-17,28-29,32-33H,6-9,26H2,1H3/t14-,15+,16-,17-,25-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H25NO9/c1-10(27)25(26)7-13-18(16(8-25)35-17-6-14(28)15(29)9-34-17)24(33)20-19(23(13)32)21(30)11-4-2-3-5-12(11)22(20)31/h2-5,14-17,28-29,32-33H,6-9,26H2,1H3/t14-,15+,16-,17+,25+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H25NO9/c1-10(27)25(26)7-13-18(16(8-25)35-17-6-14(28)15(29)9-34-17)24(33)20-19(23(13)32)21(30)11-4-2-3-5-12(11)22(20)31/h2-5,14-17,28-29,32-33H,6-9,26H2,1H3/t14-,15+,16+,17-,25-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H26ClNOS/c1-4-24(21-8-5-17(2)18(3)15-21)27-25(28)20-9-6-19(7-10-20)16-29-23-13-11-22(26)12-14-23/h5-15,24H,4,16H2,1-3H3,(H,27,28)/t24-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H26N2O/c26-16-19-9-10-25-23(15-19)21-12-14-27(17-18-5-1-2-6-18)13-11-20(21)22-7-3-4-8-24(22)28-25/h3-4,7-10,15,18H,1-2,5-6,11-14,17H2	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H27Cl2N5O4S2/c1-13(2)37-38-22(14(3)32(12-33)11-16-10-29-15(4)30-24(16)28)5-6-36-25(35)20-9-21(34)23-18(27)7-17(26)8-19(23)31-20/h7-10,12-13H,5-6,11H2,1-4H3,(H,31,34)(H2,28,29,30)/b22-14-	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H27ClN2/c1-20-6-5-7-21(18-20)19-27-14-16-28(17-15-27)25(22-8-3-2-4-9-22)23-10-12-24(26)13-11-23/h2-13,18,25H,14-17,19H2,1H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H27FN4O2/c1-32-23-7-3-2-6-22(23)29-17-14-28(15-18-29)16-19-30(24-8-4-5-13-27-24)25(31)20-9-11-21(26)12-10-20/h2-13H,14-19H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H27N9O8S2/c1-3-32-8-9-33(21(39)20(32)38)24(42)27-15(12-4-6-14(35)7-5-12)18(36)26-16-19(37)34-17(23(40)41)13(10-43-22(16)34)11-44-25-28-29-30-31(25)2/h4-7,15-16,22,35H,3,8-11H2,1-2H3,(H,26,36)(H,27,42)(H,40,41)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H27N9O8S2/c1-3-32-8-9-33(21(39)20(32)38)24(42)27-15(12-4-6-14(35)7-5-12)18(36)26-16-19(37)34-17(23(40)41)13(10-43-22(16)34)11-44-25-28-29-30-31(25)2/h4-7,15-16,22,35H,3,8-11H2,1-2H3,(H,26,36)(H,27,42)(H,40,41)/t15-,16-,22-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C25H27N9O8S2/c1-3-32-8-9-33(21(39)20(32)38)24(42)27-15(12-4-6-14(35)7-5-12)18(36)26-16-19(37)34-17(23(40)41)13(10-43-22(16)34)11-44-25-28-29-30-31(25)2/h4-7,15-16,22,35H,3,8-11H2,1-2H3,(H,26,36)(H,27,42)(H,40,41)/t15-,16-,22+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H27N9O8S2/c1-3-32-8-9-33(21(39)20(32)38)24(42)27-15(12-4-6-14(35)7-5-12)18(36)26-16-19(37)34-17(23(40)41)13(10-43-22(16)34)11-44-25-28-29-30-31(25)2/h4-7,15-16,22,35H,3,8-11H2,1-2H3,(H,26,36)(H,27,42)(H,40,41)/t15-,16?,22-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H27N9O8S2/c1-3-32-8-9-33(21(39)20(32)38)24(42)27-15(12-4-6-14(35)7-5-12)18(36)26-16-19(37)34-17(23(40)41)13(10-43-22(16)34)11-44-25-28-29-30-31(25)2/h4-7,15-16,22,35H,3,8-11H2,1-2H3,(H,26,36)(H,27,42)(H,40,41)/t15-,16+,22+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H27NO/c1-26(19-11-14-22-12-5-2-6-13-22)20-21-27-25(23-15-7-3-8-16-23)24-17-9-4-10-18-24/h2-18,25H,19-21H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H27NO/c1-26(19-11-14-22-12-5-2-6-13-22)20-21-27-25(23-15-7-3-8-16-23)24-17-9-4-10-18-24/h2-18,25H,19-21H2,1H3/b14-11+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H28N2O2/c28-23-13-16-25(24(29)26-23,21-11-5-2-6-12-21)22-14-18-27(19-15-22)17-7-10-20-8-3-1-4-9-20/h1-12,22H,13-19H2,(H,26,28,29)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H28N2O2/c28-23-13-16-25(24(29)26-23,21-11-5-2-6-12-21)22-14-18-27(19-15-22)17-7-10-20-8-3-1-4-9-20/h1-12,22H,13-19H2,(H,26,28,29)/b10-7+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H28N2O2/c28-23-13-16-25(24(29)26-23,21-11-5-2-6-12-21)22-14-18-27(19-15-22)17-7-10-20-8-3-1-4-9-20/h1-12,22H,13-19H2,(H,26,28,29)/b10-7+/t25-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H28N4O/c1-28-13-15-29(16-14-28)18-19-7-9-21(10-8-19)25(30)27-24-17-22(11-12-23(24)26)20-5-3-2-4-6-20/h2-12,17H,13-16,18,26H2,1H3,(H,27,30)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H28N4O2S/c1-29(2)16-22-9-10-23(31-22)17-32-12-11-26-25-27-15-21(24(30)28-25)14-18-7-8-19-5-3-4-6-20(19)13-18/h3-10,13,15H,11-12,14,16-17H2,1-2H3,(H2,26,27,28,30)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H28N6O/c1-2-3-10-22-26-25(15-6-7-16-25)24(32)31(22)17-18-11-13-19(14-12-18)20-8-4-5-9-21(20)23-27-29-30-28-23/h4-5,8-9,11-14H,2-3,6-7,10,15-17H2,1H3,(H,27,28,29,30)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H28N6O7S3/c1-12-15(41-10-27-12)7-6-13-8-39-21-17(29-19(32)16(30-36-5)14-9-40-24(26)28-14)20(33)31(21)18(13)22(34)37-11-38-23(35)25(2,3)4/h6-7,9-10,17,21H,8,11H2,1-5H3,(H2,26,28)(H,29,32)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H28N6O7S3/c1-12-15(41-10-27-12)7-6-13-8-39-21-17(29-19(32)16(30-36-5)14-9-40-24(26)28-14)20(33)31(21)18(13)22(34)37-11-38-23(35)25(2,3)4/h6-7,9-10,17,21H,8,11H2,1-5H3,(H2,26,28)(H,29,32)/b7-6+,30-16-	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H28N6O7S3/c1-12-15(41-10-27-12)7-6-13-8-39-21-17(29-19(32)16(30-36-5)14-9-40-24(26)28-14)20(33)31(21)18(13)22(34)37-11-38-23(35)25(2,3)4/h6-7,9-10,17,21H,8,11H2,1-5H3,(H2,26,28)(H,29,32)/b7-6+,30-16+	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H28N8O2/c1-4-5-13-32-21-22(29-24(32)31-12-8-9-17(26)14-31)30(3)25(35)33(23(21)34)15-20-27-16(2)18-10-6-7-11-19(18)28-20/h6-7,10-11,17H,8-9,12-15,26H2,1-3H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H29BrF2O7/c1-12(29)34-11-21(33)24(35-13(2)30)6-5-14-15-7-18(27)16-8-19(31)17(26)9-23(16,4)25(15,28)20(32)10-22(14,24)3/h8-9,14-15,18,20,32H,5-7,10-11H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H29BrF2O7/c1-12(29)34-11-21(33)24(35-13(2)30)6-5-14-15-7-18(27)16-8-19(31)17(26)9-23(16,4)25(15,28)20(32)10-22(14,24)3/h8-9,14-15,18,20,32H,5-7,10-11H2,1-4H3/t14-,15-,18-,20-,22?,23?,24?,25?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H29BrF2O7/c1-12(29)34-11-21(33)24(35-13(2)30)6-5-14-15-7-18(27)16-8-19(31)17(26)9-23(16,4)25(15,28)20(32)10-22(14,24)3/h8-9,14-15,18,20,32H,5-7,10-11H2,1-4H3/t14-,15-,18-,20+,22-,23-,24-,25-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H29BrF2O7/c1-12(29)34-11-21(33)24(35-13(2)30)6-5-14-15-7-18(27)16-8-19(31)17(26)9-23(16,4)25(15,28)20(32)10-22(14,24)3/h8-9,14-15,18,20,32H,5-7,10-11H2,1-4H3/t14-,15?,18+,20-,22-,23?,24-,25-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C25H29BrF2O7/c1-12(29)34-11-21(33)24(35-13(2)30)6-5-14-15-7-18(27)16-8-19(31)17(26)9-23(16,4)25(15,28)20(32)10-22(14,24)3/h8-9,14-15,18,20,32H,5-7,10-11H2,1-4H3/t14-,15+,18-,20+,22+,23+,24+,25-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H29BrFN3O2/c1-2-29-18-30(22-11-7-20(26)8-12-22)25(24(29)32)13-16-28(17-14-25)15-3-4-23(31)19-5-9-21(27)10-6-19/h5-12H,2-4,13-18H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H29F2N3O3/c1-18-4-2-11-28(18)12-3-15-33-21-8-6-20(7-9-21)30-14-13-29(17-24(30)31)25(32)22-10-5-19(26)16-23(22)27/h5-10,16,18H,2-4,11-15,17H2,1H3/t18-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H29FN2O2/c1-17-25(22-10-9-21(30-2)16-23(22)27-17)19-11-14-28(15-12-19)13-3-4-24(29)18-5-7-20(26)8-6-18/h5-10,16,19,27H,3-4,11-15H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H29I2NO3/c1-4-7-11-22-23(18-10-8-9-12-21(18)31-22)24(29)17-15-19(26)25(20(27)16-17)30-14-13-28(5-2)6-3/h8-10,12,15-16H,4-7,11,13-14H2,1-3H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H29N3O5/c1-15(2)16-5-7-19(8-6-16)28-24(30)20(26-25(28)31)13-23(29)27-10-9-17-11-21(32-3)22(33-4)12-18(17)14-27/h5-8,11-12,15,20H,9-10,13-14H2,1-4H3,(H,26,31)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H29N3O5/c1-15(2)16-5-7-19(8-6-16)28-24(30)20(26-25(28)31)13-23(29)27-10-9-17-11-21(32-3)22(33-4)12-18(17)14-27/h5-8,11-12,15,20H,9-10,13-14H2,1-4H3,(H,26,31)/t20-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H30CIN3O3S/c26-20-3-1-5-23(17-20)32-22-10-15-28(16-11-22)14-9-21-4-2-13-29(21)33(30,31)24-7-6-19-8-12-27-25(19)18-24/h1,3,5-8,12,17-18,21-22,27H,2,4,9-11,13-16H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H30CIN3O3S/c26-20-3-1-5-23(17-20)32-22-10-15-28(16-11-22)14-9-21-4-2-13-29(21)33(30,31)24-7-6-19-8-12-27-25(19)18-24/h1,3,5-8,12,17-18,21-22,27H,2,4,9-11,13-16H2/t21-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H30CIN3O3S/c26-20-4-6-22(7-5-20)32-23-11-16-28(17-12-23)15-10-21-2-1-14-29(21)33(30,31)24-8-3-19-9-13-27-25(19)18-24/h3-9,13,18,21,23,27H,1-2,10-12,14-17H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H30CIN3O3S/c26-20-4-6-22(7-5-20)32-23-11-16-28(17-12-23)15-10-21-2-1-14-29(21)33(30,31)24-8-3-19-9-13-27-25(19)18-24/h3-9,13,18,21,23,27H,1-2,10-12,14-17H2/t21-/m1/s1	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C25H30FN3O2/c1-2-28-19-29(22-7-4-3-5-8-22)25(24(28)31)14-17-27(18-15-25)16-6-9-23(30)20-10-12-21(26)13-11-20/h3-5,7-8,10-13H,2,6,9,14-19H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H30FN3O3/c26-21-7-5-20(6-8-21)25(31)28-16-17-29(24(30)19-28)22-9-11-23(12-10-22)32-18-4-15-27-13-2-1-3-14-27/h5-12H,1-4,13-19H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H30FNO6/c1-13-27-25(20(31)12-32-14(2)28)21(33-13)10-18-17-6-5-15-9-16(29)7-8-22(15,3)24(17,26)19(30)11-23(18,25)4/h7-9,17-19,21,30H,5-6,10-12H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H30FNO6/c1-13-27-25(20(31)12-32-14(2)28)21(33-13)10-18-17-6-5-15-9-16(29)7-8-22(15,3)24(17,26)19(30)11-23(18,25)4/h7-9,17-19,21,30H,5-6,10-12H2,1-4H3/t17-,18-,19-,21+,22-,23-,24-,25+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H30FNO6/c1-13-27-25(20(31)12-32-14(2)28)21(33-13)10-18-17-6-5-15-9-16(29)7-8-22(15,3)24(17,26)19(30)11-23(18,25)4/h7-9,17-19,21,30H,5-6,10-12H2,1-4H3/t17-,18-,19?,21-,22?,23?,24?,25?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H30FNO6/c1-13-27-25(20(31)12-32-14(2)28)21(33-13)10-18-17-6-5-15-9-16(29)7-8-22(15,3)24(17,26)19(30)11-23(18,25)4/h7-9,17-19,21,30H,5-6,10-12H2,1-4H3/t17-,18-,19+,21-,22-,23-,24-,25+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H30FNO6/c1-13-27-25(20(31)12-32-14(2)28)21(33-13)10-18-17-6-5-15-9-16(29)7-8-22(15,3)24(17,26)19(30)11-23(18,25)4/h7-9,17-19,21,30H,5-6,10-12H2,1-4H3/t17-,18+,19-,21+,22-,23-,24+,25-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H30FNO6/c1-13-27-25(20(31)12-32-14(2)28)21(33-13)10-18-17-6-5-15-9-16(29)7-8-22(15,3)24(17,26)19(30)11-23(18,25)4/h7-	1	(Meng et al., 2021)

9,17-19,21,30H,5-6,10-12H ₂ ,1-4H ₃ /t17?,18?,19?,21?,22?,23?,24-,25?/m0/s1	
InChI=1S/C25H30N2O5/c1-3-32-25(31)21(14-13-18-9-5-4-6-10-18)26-17(2)23(28)27-16-20-12-8-7-11-19(20)15-22(27)24(29)30/h4-12,17,21-22,26H,3,13-16H ₂ ,1-2H ₃ ,(H,29,30)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H30N2O5/c1-3-32-25(31)21(14-13-18-9-5-4-6-10-18)26-17(2)23(28)27-16-20-12-8-7-11-19(20)15-22(27)24(29)30/h4-12,17,21-22,26H,3,13-16H ₂ ,1-2H ₃ ,(H,29,30)/t17-,21-,22-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H30N2O7/c1-15(26-19(24(29)30)10-9-16-7-5-4-6-8-16)23(28)27-14-18-13-22(34-3)21(33-2)12-17(18)11-20(27)25(31)32/h4-8,12-13,15,19-20,26H,9-11,14H ₂ ,1-3H ₃ ,(H,29,30)(H,31,32)/t15-,19-,20-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H30N3/c1-26(2)22-13-7-19(8-14-22)25(20-9-15-23(16-10-20)27(3)4)21-11-17-24(18-12-21)28(5)6/h7-18H,1-6H ₃ /q+1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H30N4O9S2/c1-24(2)17(29-20(32)16(21(29)39-24)27-19(31)15(26)12-8-6-5-7-9-12)22(33)37-11-38-23(34)18-25(3,4)40(35,36)14-10-13(30)28(14)18/h5-9,14-18,21H,10-11,26H ₂ ,1-4H ₃ ,(H,27,31)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H30N4O9S2/c1-24(2)17(29-20(32)16(21(29)39-24)27-19(31)15(26)12-8-6-5-7-9-12)22(33)37-11-38-23(34)18-25(3,4)40(35,36)14-10-13(30)28(14)18/h5-9,14-18,21H,10-11,26H ₂ ,1-4H ₃ ,(H,27,31)/t14-,15-,16-,17+,18-,21-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H30N4O9S2/c1-24(2)17(29-20(32)16(21(29)39-24)27-19(31)15(26)12-8-6-5-7-9-12)22(33)37-11-38-23(34)18-25(3,4)40(35,36)14-10-13(30)28(14)18/h5-9,14-18,21H,10-11,26H ₂ ,1-4H ₃ ,(H,27,31)/t14-,15-,16-,17+,18+,21-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H30N4O9S2/c1-24(2)17(29-20(32)16(21(29)39-24)27-19(31)15(26)12-8-6-5-7-9-12)22(33)37-11-38-23(34)18-25(3,4)40(35,36)14-10-13(30)28(14)18/h5-9,14-18,21H,10-11,26H ₂ ,1-4H ₃ ,(H,27,31)/t14-,15-,16?,17-,18-,21-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H30N4O9S2/c1-24(2)17(29-20(32)16(21(29)39-24)27-19(31)15(26)12-8-6-5-7-9-12)22(33)37-11-38-23(34)18-25(3,4)40(35,36)14-10-13(30)28(14)18/h5-9,14-18,21H,10-11,26H ₂ ,1-4H ₃ ,(H,27,31)/t14-,15+,16-,17-,18-,21-/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H30N6O2/c1-17(2)26-8-9-31(20-10-21(32-4)13-22(11-20)33-5)19-6-7-23-24(12-19)29-25(15-27-23)18-14-28-30(3)16-18/h6-7,10-17,26H,8-9H ₂ ,1-5H ₃	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H30NO3/c27-24(25(28,19-9-3-1-4-10-19)20-11-5-2-6-12-20)29-23-17-21-13-14-22(18-23)26(21)15-7-8-16-26/h1-6,9-12,21-23,28H,7-8,13-18H ₂ /q+1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H31ClF2O5/c1-5-21(32)33-25(20(31)12-26)13(2)8-15-16-10-18(27)17-9-14(29)6-7-22(17,3)24(16,28)19(30)11-23(15,25)4/h6-7,9,13,15-16,18-19,30H,5,8,10-12H ₂ ,1-4H ₃ /t13-,15?,16?,18-,19-,22-,23-,24-,25-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H31ClF2O5S/c1-5-20(31)33-25(21(32)34-12-26)13(2)8-15-16-10-18(27)17-9-14(29)6-7-22(17,3)24(16,28)19(30)11-23(15,25)4/h6-7,9,13,15-16,18-19,30H,5,8,10-12H ₂ ,1-4H ₃	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H31ClF2O5S/c1-5-20(31)33-25(21(32)34-12-26)13(2)8-15-16-10-18(27)17-9-14(29)6-7-22(17,3)24(16,28)19(30)11-23(15,25)4/h6-7,9,13,15-16,18-19,30H,5,8,10-12H ₂ ,1-4H ₃ /t13-,15-,16-,18-,19-,22?,23?,24?,25?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H31ClF2O5S/c1-5-20(31)33-25(21(32)34-12-26)13(2)8-15-16-10-18(27)17-9-14(29)6-7-22(17,3)24(16,28)19(30)11-23(15,25)4/h6-7,9,13,15-16,18-19,30H,5,8,10-12H ₂ ,1-4H ₃ /t13-,15-,16-,18-,19?,22?,23?,24?,25?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H31ClF2O5S/c1-5-20(31)33-25(21(32)34-12-26)13(2)8-15-16-10-18(27)17-9-14(29)6-7-22(17,3)24(16,28)19(30)11-23(15,25)4/h6-7,9,13,15-16,18-19,30H,5,8,10-12H ₂ ,1-4H ₃ /t13-,15+,16-,18+,19-,22-,23-,24+,25-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H31ClF2O5S/c1-5-20(31)33-25(21(32)34-12-26)13(2)8-15-16-10-18(27)17-9-14(29)6-7-22(17,3)24(16,28)19(30)11-23(15,25)4/h6-7,9,13,15-16,18-19,30H,5,8,10-12H ₂ ,1-4H ₃ /t13-,15+,16?,18+,19+,22+,23+,24+,25+/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H31ClF2O5S/c1-5-20(31)33-25(21(32)34-12-26)13(2)8-15-16-10-18(27)17-9-14(29)6-7-22(17,3)24(16,28)19(30)11-23(15,25)4/h6-7,9,13,15-16,18-19,30H,5,8,10-12H ₂ ,1-4H ₃ /t13-,15+,16+,18+,19-,22+,23+,24+,25+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C25H31ClF2O5S/c1-5-20(31)33-25(21(32)34-12-26)13(2)8-15-16-10-18(27)17-9-14(29)6-7-22(17,3)24(16,28)19(30)11-23(15,25)4/h6-7,9,13,15-16,18-19,30H,5,8,10-12H2,1-4H3/t13-,15+,16+,18+,19+,22+,23+,24+,25+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H31ClN4O2/c1-5-27-14-19-6-8-20(9-7-19)25(31)28-24-12-18(4)30(29-24)15-21-13-22(26)10-11-23(21)32-16-17(2)3/h6-13,17,27H,5,14-16H2,1-4H3,(H,28,29,31)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H31F3O5S/c1-5-20(31)33-25(21(32)34-12-26)13(2)8-15-16-10-18(27)17-9-14(29)6-7-22(17,3)24(16,28)19(30)11-23(15,25)4/h6-7,9,13,15-16,18-19,30H,5,8,10-12H2,1-4H3/t13-,15-,16-,18-,19-,22?,23?,24?,25?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H31F3O5S/c1-5-20(31)33-25(21(32)34-12-26)13(2)8-15-16-10-18(27)17-9-14(29)6-7-22(17,3)24(16,28)19(30)11-23(15,25)4/h6-7,9,13,15-16,18-19,30H,5,8,10-12H2,1-4H3/t13-,15-,16-,18-,19?,22?,23?,24?,25?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H31F3O5S/c1-5-20(31)33-25(21(32)34-12-26)13(2)8-15-16-10-18(27)17-9-14(29)6-7-22(17,3)24(16,28)19(30)11-23(15,25)4/h6-7,9,13,15-16,18-19,30H,5,8,10-12H2,1-4H3/t13-,15+,16-,18+,19-,22-,23-,24+,25-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H31F3O5S/c1-5-20(31)33-25(21(32)34-12-26)13(2)8-15-16-10-18(27)17-9-14(29)6-7-22(17,3)24(16,28)19(30)11-23(15,25)4/h6-7,9,13,15-16,18-19,30H,5,8,10-12H2,1-4H3/t13-,15+,16+,18+,19-,22+,23+,24+,25+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H31F3O5S/c1-5-20(31)33-25(21(32)34-12-26)13(2)8-15-16-10-18(27)17-9-14(29)6-7-22(17,3)24(16,28)19(30)11-23(15,25)4/h6-7,9,13,15-16,18-19,30H,5,8,10-12H2,1-4H3/t13-,15+,16+,18+,19+,22+,23+,24+,25+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H31FN6O2/c1-3-23(33)32(22-13-9-8-12-21(22)26)25(20-10-6-5-7-11-20)14-16-29(17-15-25)18-19-31-24(34)30(4-2)27-28-31/h5-13H,3-4,14-19H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H31FO8/c1-13(27)33-12-20(31)25(32)21(34-14(2)28)10-18-17-6-5-15-9-16(29)7-8-22(15,3)24(17,26)19(30)11-23(18,25)4/h7-9,17-19,21,30,32H,5-6,10-12H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H31FO8/c1-13(27)33-12-20(31)25(32)21(34-14(2)28)10-18-17-6-5-15-9-16(29)7-8-22(15,3)24(17,26)19(30)11-23(18,25)4/h7-9,17-19,21,30,32H,5-6,10-12H2,1-4H3/t17-,18-,19-,21-,22?,23?,24?,25?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H31FO8/c1-13(27)33-12-20(31)25(32)21(34-14(2)28)10-18-17-6-5-15-9-16(29)7-8-22(15,3)24(17,26)19(30)11-23(18,25)4/h7-9,17-19,21,30,32H,5-6,10-12H2,1-4H3/t17-,18-,19-,21+,22-,23-,24-,25+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H31FO8/c1-13(27)33-12-20(31)25(32)21(34-14(2)28)10-18-17-6-5-15-9-16(29)7-8-22(15,3)24(17,26)19(30)11-23(18,25)4/h7-9,17-19,21,30,32H,5-6,10-12H2,1-4H3/t17-,18-,19+,21-,22-,23-,24-,25+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H31FO8/c1-13(27)33-12-20(31)25(32)21(34-14(2)28)10-18-17-6-5-15-9-16(29)7-8-22(15,3)24(17,26)19(30)11-23(18,25)4/h7-9,17-19,21,30,32H,5-6,10-12H2,1-4H3/t17-,18+,19-,21-,22-,23-,24+,25-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H31FO8/c1-13(27)33-12-20(31)25(32)21(34-14(2)28)10-18-17-6-5-15-9-16(29)7-8-22(15,3)24(17,26)19(30)11-23(18,25)4/h7-9,17-19,21,30,32H,5-6,10-12H2,1-4H3/t17?,18-,19-,21+,22-,23-,24-,25+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H31N3O4/c1-4-32-25(29)24-19(20-16-22(30-2)23(31-3)17-21(20)26-24)10-11-27-12-14-28(15-13-27)18-8-6-5-7-9-18/h5-9,16-17,26H,4,10-15H2,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H31NO/c1-24(2,3)25(27)13-14-26-16-21-19-9-5-4-7-17(19)11-12-18-8-6-10-20(23(18)21)22(26)15-25/h4-10,21-22,27H,11-16H2,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H31NO/c1-24(2,3)25(27)13-14-26-16-21-19-9-5-4-7-17(19)11-12-18-8-6-10-20(23(18)21)22(26)15-25/h4-10,21-22,27H,11-16H2,1-3H3/t21-,22-,25-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H31NO/c1-24(2,3)25(27)13-14-26-16-21-19-9-5-4-7-17(19)11-12-18-8-6-10-20(23(18)21)22(26)15-25/h4-10,21-22,27H,11-16H2,1-3H3/t21-,22-,25-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H31NO/c1-24(2,3)25(27)13-14-26-16-21-19-9-5-4-7-17(19)11-12-18-8-6-10-20(23(18)21)22(26)15-25/h4-10,21-22,27H,11-16H2,1-	1	(Meng et al., 2021)

3H3/t21-,22-,25?/m0/s1	
InChI=1S/C25H31NO/c1-24(2,3)25(27)13-14-26-16-21-19-9-5-4-7-17(19)11-12-18-8-6-10-20(23(18)21)22(26)15-25/h4-10,21-22,27H,11-16H2,1-3H3/t21-,22+,25+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H31NO6/c1-13-26-25(20(30)12-31-14(2)27)21(32-13)10-18-17-6-5-15-9-16(28)7-8-23(15,3)22(17)19(29)11-24(18,25)4/h7-9,17-19,21-22,29H,5-6,10-12H2,1-4H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H31NO6/c1-13-26-25(20(30)12-31-14(2)27)21(32-13)10-18-17-6-5-15-9-16(28)7-8-23(15,3)22(17)19(29)11-24(18,25)4/h7-9,17-19,21-22,29H,5-6,10-12H2,1-4H3/t17-,18-,19-,21-,22+,23-,24+,25-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H31NO6/c1-13-26-25(20(30)12-31-14(2)27)21(32-13)10-18-17-6-5-15-9-16(28)7-8-23(15,3)22(17)19(29)11-24(18,25)4/h7-9,17-19,21-22,29H,5-6,10-12H2,1-4H3/t17-,18-,19-,21+,22+,23-,24-,25+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H31NO6/c1-13-26-25(20(30)12-31-14(2)27)21(32-13)10-18-17-6-5-15-9-16(28)7-8-23(15,3)22(17)19(29)11-24(18,25)4/h7-9,17-19,21-22,29H,5-6,10-12H2,1-4H3/t17-,18-,19?,21-,22+,23?,24?,25?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H31NO6/c1-13-26-25(20(30)12-31-14(2)27)21(32-13)10-18-17-6-5-15-9-16(28)7-8-23(15,3)22(17)19(29)11-24(18,25)4/h7-9,17-19,21-22,29H,5-6,10-12H2,1-4H3/t17-,18+,19-,21+,22-,23-,24-,25-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H31NO6/c1-13-26-25(20(30)12-31-14(2)27)21(32-13)10-18-17-6-5-15-9-16(28)7-8-23(15,3)22(17)19(29)11-24(18,25)4/h7-9,17-19,21-22,29H,5-6,10-12H2,1-4H3/t17?,18?,19-,21+,22?,23-,24-,25+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021) 1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H32ClFO5/c1-5-21(31)32-25(20(30)13-26)14(2)10-18-17-7-6-15-11-16(28)8-9-22(15,3)24(17,27)19(29)12-23(18,25)4/h8-9,11,14,17-19,29H,5-7,10,12-13H2,1-4H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H32ClFO5/c1-5-21(31)32-25(20(30)13-26)14(2)10-18-17-7-6-15-11-16(28)8-9-22(15,3)24(17,27)19(29)12-23(18,25)4/h8-9,11,14,17-19,29H,5-7,10,12-13H2,1-4H3/t14-,17-,18-,19-,22-,23-,24-,25-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H32ClFO5/c1-5-21(31)32-25(20(30)13-26)14(2)10-18-17-7-6-15-11-16(28)8-9-22(15,3)24(17,27)19(29)12-23(18,25)4/h8-9,11,14,17-19,29H,5-7,10,12-13H2,1-4H3/t14-,17-,18-,19-,22?,23?,24?,25?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H32ClFO5/c1-5-21(31)32-25(20(30)13-26)14(2)10-18-17-7-6-15-11-16(28)8-9-22(15,3)24(17,27)19(29)12-23(18,25)4/h8-9,11,14,17-19,29H,5-7,10,12-13H2,1-4H3/t14-,17-,18+,19-,22-,23-,24+,25-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H32ClFO5/c1-5-21(31)32-25(20(30)13-26)14(2)10-18-17-7-6-15-11-16(28)8-9-22(15,3)24(17,27)19(29)12-23(18,25)4/h8-9,11,14,17-19,29H,5-7,10,12-13H2,1-4H3/t14-,17+,18+,19-,22+,23+,24+,25+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H32CIN3O3S/c26-20-3-1-5-23(17-20)32-22-10-15-28(16-11-22)14-9-21-4-2-13-29(21)33(30,31)24-7-6-19-8-12-27-25(19)18-24/h1,3,5-8,12,17-18,21-22,27,33H,2,4,9-11,13-16H2,(H,30,31)	1 (Meng et al., 2021) 1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H32CIN5O2/c1-2-24-27-31(25(32)30(24)18-19-33-23-10-4-3-5-11-23)13-7-12-28-14-16-29(17-15-28)22-9-6-8-21(26)20-22/h3-6,8-11,20H,2,7,12-19H2,1H3	
InChI=1S/C25H32CIN5OS/c1-27-11-17-30(25(27)32)18-16-29-14-12-28(13-15-29)9-4-10-31-21-5-2-3-6-23(21)33-24-8-7-20(26)19-22(24)31/h2-3,5-8,19H,4,9-18H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H32F2O5S/c1-6-20(30)32-25(21(31)33-5)13(2)9-15-16-11-18(26)17-10-14(28)7-8-22(17,3)24(16,27)19(29)12-23(15,25)4/h7-8,10,13,15-16,18-19,29H,6,9,11-12H2,1-5H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H32F2O5S/c1-6-20(30)32-25(21(31)33-5)13(2)9-15-16-11-18(26)17-10-14(28)7-8-22(17,3)24(16,27)19(29)12-23(15,25)4/h7-8,10,13,15-16,18-19,29H,6,9,11-12H2,1-5H3/t13-,15-,16-,18-,19-,22?,23?,24?,25?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H32F2O5S/c1-6-20(30)32-25(21(31)33-5)13(2)9-15-16-11-18(26)17-10-14(28)7-8-22(17,3)24(16,27)19(29)12-23(15,25)4/h7-8,10,13,15-16,18-19,29H,6,9,11-12H2,1-5H3/t13-,15-,16-,18-,19?,22?,23?,24?,25?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C25H32F2O5S/c1-6-20(30)32-25(21(31)33-5)13(2)9-15-16-11-18(26)17-10-14(28)7-8-22(17,3)24(16,27)19(29)12-23(15,25)4/h7-8,10,13,15-16,18-19,29H,6,9,11-12H2,1-5H3/t13-,15?,16?,18+,19+,22?,23+,24+,25+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H32F2O5S/c1-6-20(30)32-25(21(31)33-5)13(2)9-15-16-11-18(26)17-10-14(28)7-8-22(17,3)24(16,27)19(29)12-23(15,25)4/h7-8,10,13,15-16,18-19,29H,6,9,11-12H2,1-5H3/t13-,15+,16-,18+,19-,22-,23-,24+,25-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H32F2O5S/c1-6-20(30)32-25(21(31)33-5)13(2)9-15-16-11-18(26)17-10-14(28)7-8-22(17,3)24(16,27)19(29)12-23(15,25)4/h7-8,10,13,15-16,18-19,29H,6,9,11-12H2,1-5H3/t13-,15+,16+,18+,19-,22+,23+,24+,25+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H32F2O5S/c1-6-20(30)32-25(21(31)33-5)13(2)9-15-16-11-18(26)17-10-14(28)7-8-22(17,3)24(16,27)19(29)12-23(15,25)4/h7-8,10,13,15-16,18-19,29H,6,9,11-12H2,1-5H3/t13-,15+,16+,18+,19+,22+,23+,24+,25+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H32F3N3O4/c1-17(30-8-12-34-21-5-2-3-6-22(21)35-16-25(26,27)28)13-18-14-19-7-10-31(9-4-11-32)23(19)20(15-18)24(29)33/h2-3,5-6,14-15,17,30,32H,4,7-13,16H2,1H3,(H2,29,33)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H32N2O/c28-25(23-11-10-22-8-4-5-15-26-24(22)18-23)12-9-20-13-16-27(17-14-20)19-21-6-2-1-3-7-21/h1-3,6-7,10-11,18,20,26H,4-5,8-9,12-17,19H2	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C25H32N2O2/c1-21(20-26-16-18-29-19-17-26)25(22-10-4-2-5-11-22,23-12-6-3-7-13-23)24(28)27-14-8-9-15-27/h2-7,10-13,21H,8-9,14-20H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H32N2O2/c1-21(20-26-16-18-29-19-17-26)25(22-10-4-2-5-11-22,23-12-6-3-7-13-23)24(28)27-14-8-9-15-27/h2-7,10-13,21H,8-9,14-20H2,1H3/t21-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H32N2O2/c1-21(20-26-16-18-29-19-17-26)25(22-10-4-2-5-11-22,23-12-6-3-7-13-23)24(28)27-14-8-9-15-27/h2-7,10-13,21H,8-9,14-20H2,1H3/t21-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H32N2O3/c1-4-23(28)27(22-13-9-6-10-14-22)25(24(29)30-3)16-18-26(19-20(25)2)17-15-21-11-7-5-8-12-21/h5-14,20H,4,15-19H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H32N2O3/c1-4-23(28)27(22-13-9-6-10-14-22)25(24(29)30-3)16-18-26(19-20(25)2)17-15-21-11-7-5-8-12-21/h5-14,20H,4,15-19H2,1-3H3/t20-,25?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H32N2O3/c1-4-23(28)27(22-13-9-6-10-14-22)25(24(29)30-3)16-18-26(19-20(25)2)17-15-21-11-7-5-8-12-21/h5-14,20H,4,15-19H2,1-3H3/t20-,25+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H32N2O3/c1-4-23(28)27(22-13-9-6-10-14-22)25(24(29)30-3)16-18-26(19-20(25)2)17-15-21-11-7-5-8-12-21/h5-14,20H,4,15-19H2,1-3H3/t20-,25+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H32N4O2S/c1-2-19-32-23-12-6-5-11-22(23)28-17-15-27(16-18-28)13-7-8-14-29-24(30)20-9-3-4-10-21(20)26-25(29)31/h3-6,9-12H,2,7-8,13-19H2,1H3,(H,26,31)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H32N4O3S2/c1-17-18(2)33-25(28-17)29(34(4,30)31)21-12-13-23(32-3)20(15-21)16-27-22-11-8-14-26-24(22)19-9-6-5-7-10-19/h5-7,9-10,12-13,15,22,24,26-27H,8,11,14,16H2,1-4H3	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C25H32N4O3S2/c1-17-18(2)33-25(28-17)29(34(4,30)31)21-12-13-23(32-3)20(15-21)16-27-22-11-8-14-26-24(22)19-9-6-5-7-10-19/h5-7,9-10,12-13,15,22,24,26-27H,8,11,14,16H2,1-4H3/t22-,24-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H32O2/c1-3-25(26)15-13-23-22-10-8-17-16-19(27-18-6-4-5-7-18)9-11-20(17)21(22)12-14-24(23,25)2/h1,9,11,16,18,21-23,26H,4-8,10,12-15H2,2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H32O7/c1-16(2)14-22(27)20-9-10-23(17(3)25(20)30)32-13-5-4-12-31-19-8-6-18(21(26)15-19)7-11-24(28)29/h6,8-10,15-16,26,30H,4-5,7,11-14H2,1-3H3,(H,28,29)	0	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C25H32O8/c1-23-9-7-15(26)11-14(23)3-4-16-17-8-10-25(32,24(17,2)12-18(27)22(16)23)19(28)13-33-21(31)6-5-20(29)30/h7,9,11,16-	1	(Meng et al., 2021)

18,22,27,32H,3-6,8,10,12-13H ₂ ,1-2H ₃ , (H,29,30)	
InChI=1S/C25H32O8/c1-23-9-7-15(26)11-14(23)3-4-16-17-8-10-25(32,24(17,2)12-18(27)22(16)23)19(28)13-33-21(31)6-5-20(29)30/h7,9,11,16-18,22,27,32H,3-6,8,10,12-13H ₂ ,1-2H ₃ , (H,29,30)/t16-,17-,18-,22+,23-,24-,25-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H32O8/c1-23-9-7-15(26)11-14(23)3-4-16-17-8-10-25(32,24(17,2)12-18(27)22(16)23)19(28)13-33-21(31)6-5-20(29)30/h7,9,11,16-18,22,27,32H,3-6,8,10,12-13H ₂ ,1-2H ₃ , (H,29,30)/t16-,17-,18-,22+,23-,24+,25+/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H32O8/c1-23-9-7-15(26)11-14(23)3-4-16-17-8-10-25(32,24(17,2)12-18(27)22(16)23)19(28)13-33-21(31)6-5-20(29)30/h7,9,11,16-18,22,27,32H,3-6,8,10,12-13H ₂ ,1-2H ₃ , (H,29,30)/t16-,17-,18-,22+,23?,24?,25?/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H32O8/c1-23-9-7-15(26)11-14(23)3-4-16-17-8-10-25(32,24(17,2)12-18(27)22(16)23)19(28)13-33-21(31)6-5-20(29)30/h7,9,11,16-18,22,27,32H,3-6,8,10,12-13H ₂ ,1-2H ₃ , (H,29,30)/t16-,17+,18-,22+,23+,24+,25+/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H33N3O/c1-3-11-28-23-7-6-20(25(29)27-13-8-18(2)9-14-27)15-21(23)22-17-26(12-10-24(22)28)16-19-4-5-19/h3,6-7,15,18-19H,1,4-5,8-14,16-17H ₂ ,2H ₃	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H33NO4/c1-5-8-22(2,28)17-14-23-9-10-25(17,29-4)21-24(23)11-12-26(3)18(23)13-15-6-7-16(27)20(30-21)19(15)24/h6-7,9-10,17-18,21,27-28H,5,8,11-14H ₂ ,1-4H ₃	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H33NO4/c1-5-8-22(2,28)17-14-23-9-10-25(17,29-4)21-24(23)11-12-26(3)18(23)13-15-6-7-16(27)20(30-21)19(15)24/h6-7,9-10,17-18,21,27-28H,5,8,11-14H ₂ ,1-4H ₃ /t17-,18-,21-,22+,23+,24+,25+/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H33NO4/c1-5-8-22(2,28)17-14-23-9-10-25(17,29-4)21-24(23)11-12-26(3)18(23)13-15-6-7-16(27)20(30-21)19(15)24/h6-7,9-10,17-18,21,27-28H,5,8,11-14H ₂ ,1-4H ₃ /t17-,18-,21+,22-,23+,24+,25+/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H33NO4/c1-5-8-22(2,28)17-14-23-9-10-25(17,29-4)21-24(23)11-12-26(3)18(23)13-15-6-7-16(27)20(30-21)19(15)24/h6-7,9-10,17-18,21,27-28H,5,8,11-14H ₂ ,1-4H ₃ /t17-,18?,21-,22?,23?,24?,25?/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H33NO4/c1-5-8-22(2,28)17-14-23-9-10-25(17,29-4)21-24(23)11-12-26(3)18(23)13-15-6-7-16(27)20(30-21)19(15)24/h6-7,9-10,17-18,21,27-28H,5,8,11-14H ₂ ,1-4H ₃ /t17?,18-,21-,22+,23-,24+,25-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H34F2O5/c1-18(2)32-24(30)13-9-4-3-8-12-20-21(23(29)16-22(20)28)14-15-25(26,27)17-31-19-10-6-5-7-11-19/h3,5-8,10-11,14-15,18,20-23,28-29H,4,9,12-13,16-17H ₂ ,1-2H ₃ /b8-3+,15-14+	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H34F2O6/c1-4-5-21-32-20-10-14-15-9-17(26)16-8-13(29)6-7-22(16,2)24(15,27)18(30)11-23(14,3)25(20,33-21)19(31)12-28/h8,14-15,17-18,20-21,28,30H,4-7,9-12H ₂ ,1-3H ₃	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H34F2O6/c1-4-5-21-32-20-10-14-15-9-17(26)16-8-13(29)6-7-22(16,2)24(15,27)18(30)11-23(14,3)25(20,33-21)19(31)12-28/h8,14-15,17-18,20-21,28,30H,4-7,9-12H ₂ ,1-3H ₃ /t14-,15-,17-,18-,20+,21+,22-,23-,24-,25+/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H34F2O6/c1-4-5-21-32-20-10-14-15-9-17(26)16-8-13(29)6-7-22(16,2)24(15,27)18(30)11-23(14,3)25(20,33-21)19(31)12-28/h8,14-15,17-18,20-21,28,30H,4-7,9-12H ₂ ,1-3H ₃ /t14-,15-,17-,18?,20-,21-,22?,23?,24?,25?/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H34F2O6/c1-4-5-21-32-20-10-14-15-9-17(26)16-8-13(29)6-7-22(16,2)24(15,27)18(30)11-23(14,3)25(20,33-21)19(31)12-28/h8,14-15,17-18,20-21,28,30H,4-7,9-12H ₂ ,1-3H ₃ /t14-,15-,17-,18+,20-,21-,22-,23-,24-,25-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H34F2O6/c1-4-5-21-32-20-10-14-15-9-17(26)16-8-13(29)6-7-22(16,2)24(15,27)18(30)11-23(14,3)25(20,33-21)19(31)12-28/h8,14-15,17-18,20-21,28,30H,4-7,9-12H ₂ ,1-3H ₃ /t14-,15+,17-,18+,20-,21-,22+,23+,24-,25+/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H34O6/c1-4-5-21-30-20-11-17-16-7-6-14-10-15(27)8-9-23(14,2)22(16)18(28)12-24(17,3)25(20,31-21)19(29)13-26/h8-10,16-18,20-22,26,28H,4-7,11-13H ₂ ,1-3H ₃ /t16-,17-,18-,20-,21-,22+,23?,24?,25?/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H34O6/c1-4-5-21-30-20-11-17-16-7-6-14-10-15(27)8-9-23(14,2)22(16)18(28)12-24(17,3)25(20,31-21)19(29)13-26/h8-10,16-18,20-22,26,28H,4-7,11-13H ₂ ,1-3H ₃ /t16-,17-,18-,20+,21?,22+,23-,24-,25+/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C25H34O6/c1-4-5-21-30-20-11-17-16-7-6-14-10-15(27)8-9-23(14,2)22(16)18(28)12-24(17,3)25(20,31-21)19(29)13-26/h8-10,16-18,20-22,26,28H,4-7,11-13H2,1-3H3/t16-,17-,18-,20+,21+,22+,23-,24+,25+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H34O6/c1-4-5-21-30-20-11-17-16-7-6-14-10-15(27)8-9-23(14,2)22(16)18(28)12-24(17,3)25(20,31-21)19(29)13-26/h8-10,16-18,20-22,26,28H,4-7,11-13H2,1-3H3/t16-,17-,18?,20-,21-,22+,23?,24?,25?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H34O6/c1-4-5-21-30-20-11-17-16-7-6-14-10-15(27)8-9-23(14,2)22(16)18(28)12-24(17,3)25(20,31-21)19(29)13-26/h8-10,16-18,20-22,26,28H,4-7,11-13H2,1-3H3/t16-,17+,18-,20+,21+,22-,23-,24-,25-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H34O6/c1-4-5-21-30-20-11-17-16-7-6-14-10-15(27)8-9-23(14,2)22(16)18(28)12-24(17,3)25(20,31-21)19(29)13-26/h8-10,16-18,20-22,26,28H,4-7,11-13H2,1-3H3/t16-,17+,18-,20+,21+,22-,23-,24-,25+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H34O6/c1-4-5-21-30-20-11-17-16-7-6-14-10-15(27)8-9-23(14,2)22(16)18(28)12-24(17,3)25(20,31-21)19(29)13-26/h8-10,16-18,20-22,26,28H,4-7,11-13H2,1-3H3/t16?,17?,18-,20-,21?,22?,23-,24-,25+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H34O6/c1-7-12(2)22(29)31-21-13(3)10-24-14(4)8-17-18(23(17,5)6)16(20(24)28)9-15(11-26)19(27)25(21,24)30/h7,9-10,14,16-19,21,26-27,30H,8,11H2,1-6H3/b12-7+	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H34O8.H2O/c1-23-9-7-15(26)11-14(23)3-4-16-17-8-10-25(32,24(17,2)12-18(27)22(16)23)19(28)13-33-21(31)6-5-20(29)30;/h11,16-18,22,27,32H,3-10,12-13H2,1-2H3,(H,29,30);1H2/t16-,17-,18-,22+,23-,24-,25-;/m0./s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H34O8/c1-23-9-7-15(26)11-14(23)3-4-16-17-8-10-25(32,24(17,2)12-18(27)22(16)23)19(28)13-33-21(31)6-5-20(29)30/h11,16-18,22,27,32H,3-10,12-13H2,1-2H3,(H,29,30)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H34O8/c1-23-9-7-15(26)11-14(23)3-4-16-17-8-10-25(32,24(17,2)12-18(27)22(16)23)19(28)13-33-21(31)6-5-20(29)30/h11,16-18,22,27,32H,3-10,12-13H2,1-2H3,(H,29,30)/t16-,17-,18-,22+,23-,24-,25-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H34O8/c1-23-9-7-15(26)11-14(23)3-4-16-17-8-10-25(32,24(17,2)12-18(27)22(16)23)19(28)13-33-21(31)6-5-20(29)30/h11,16-18,22,27,32H,3-10,12-13H2,1-2H3,(H,29,30)/t16-,17-,18-,22+,23?,24?,25?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H34O8/c1-23-9-7-15(26)11-14(23)3-4-16-17-8-10-25(32,24(17,2)12-18(27)22(16)23)19(28)13-33-21(31)6-5-20(29)30/h11,16-18,22,27,32H,3-10,12-13H2,1-2H3,(H,29,30)/t16-,17-,18+,22+,23-,24+,25+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H34O8/c1-23-9-7-15(26)11-14(23)3-4-16-17-8-10-25(32,24(17,2)12-18(27)22(16)23)19(28)13-33-21(31)6-5-20(29)30/h11,16-18,22,27,32H,3-10,12-13H2,1-2H3,(H,29,30)/t16-,17+,18-,22-,23+,24-,25+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H35N3O/c1-16(2)28-15-17-13-23-21(20-10-7-11-22(28)24(17)20)12-18(14-27(23)3)25(29)26-19-8-5-4-6-9-19/h7,10-11,15-16,18-19,21,23H,4-6,8-9,12-14H2,1-3H3,(H,26,29)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H35N3O/c1-16(2)28-15-17-13-23-21(20-10-7-11-22(28)24(17)20)12-18(14-27(23)3)25(29)26-19-8-5-4-6-9-19/h7,10-11,15-16,18-19,21,23H,4-6,8-9,12-14H2,1-3H3,(H,26,29)/t18-,21-,23-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H35N3O/c1-16(2)28-15-17-13-23-21(20-10-7-11-22(28)24(17)20)12-18(14-27(23)3)25(29)26-19-8-5-4-6-9-19/h7,10-11,15-16,18-19,21,23H,4-6,8-9,12-14H2,1-3H3,(H,26,29)/t18-,21-,23-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H35N3O/c1-16(2)28-15-17-13-23-21(20-10-7-11-22(28)24(17)20)12-18(14-27(23)3)25(29)26-19-8-5-4-6-9-19/h7,10-11,15-16,18-19,21,23H,4-6,8-9,12-14H2,1-3H3,(H,26,29)/t18-,21-,23+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H35N3O/c1-16(2)28-15-17-13-23-21(20-10-7-11-22(28)24(17)20)12-18(14-27(23)3)25(29)26-19-8-5-4-6-9-19/h7,10-11,15-16,18-19,21,23H,4-6,8-9,12-14H2,1-3H3,(H,26,29)/t18-,21?,23?/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H35N3O/c1-16(2)28-15-17-13-23-21(20-10-7-11-22(28)24(17)20)12-18(14-27(23)3)25(29)26-19-8-5-4-6-9-19/h7,10-11,15-16,18-19,21,23H,4-6,8-9,12-14H2,1-3H3,(H,26,29)/t18-,21+,23-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H35N3O4S/c1-3-33(30,31)28-23-5-4-19(25(29)26-11-6-18(2)7-12-26)16-21(23)22-17-27(13-8-24(22)28)20-9-14-32-15-10-20/h4-	0	(Meng et al., 2021)

5,16,18,20H,3,6-15,17H2,1-2H3

InChI=1S/C25H35N3O6S/c1-18(2)15-28(35(31,32)22-10-8-20(26)9-11-22)16-24(29)23(14-19-6-4-3-5-7-19)27-25(30)34-21-12-13-33-17-21/h3-11,18,21,23-24,29H,12-17,26H2,1-2H3,(H,27,30)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H35N3O6S/c1-18(2)15-28(35(31,32)22-10-8-20(26)9-11-22)16-24(29)23(14-19-6-4-3-5-7-19)27-25(30)34-21-12-13-33-17-21/h3-11,18,21,23-24,29H,12-17,26H2,1-2H3,(H,27,30)/t21-,23-,24-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H35N3O6S/c1-18(2)15-28(35(31,32)22-10-8-20(26)9-11-22)16-24(29)23(14-19-6-4-3-5-7-19)27-25(30)34-21-12-13-33-17-21/h3-11,18,21,23-24,29H,12-17,26H2,1-2H3,(H,27,30)/t21-,23+,24-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H35N3O6S/c1-18(2)15-28(35(31,32)22-10-8-20(26)9-11-22)16-24(29)23(14-19-6-4-3-5-7-19)27-25(30)34-21-12-13-33-17-21/h3-11,18,21,23-24,29H,12-17,26H2,1-2H3,(H,27,30)/t21?,23-,24-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H35NO5/c1-6-26(19(2)17-20-9-12-22(28-3)13-10-20)15-7-8-16-31-25(27)21-11-14-23(29-4)24(18-21)30-5/h9-14,18-19H,6-8,15-17H2,1-5H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H35NO5/c1-6-26(19(2)17-20-9-12-22(28-3)13-10-20)15-7-8-16-31-25(27)21-11-14-23(29-4)24(18-21)30-5/h9-14,18-19H,6-8,15-17H2,1-5H3/t19-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H36N3O9PS/c1-18(2)15-28(39(33,34)22-10-8-20(26)9-11-22)16-24(37-38(30,31)32)23(14-19-6-4-3-5-7-19)27-25(29)36-21-12-13-35-17-21/h3-11,18,21,23-24H,12-17,26H2,1-2H3,(H,27,29)(H2,30,31,32)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C25H36N6O3/c1-17(32)31-12-6-19(7-13-31)16-34-24-21(23(33)27-2)22(29-20(14-26)30-24)28-15-18-4-10-25(11-5-18)8-3-9-25/h18-19H,3-13,15-16H2,1-2H3,(H,27,33)(H,28,29,30)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H36N6O4S/c1-5-8-20-22-23(31(4)29-20)25(32)28-24(27-22)19-16-18(10-11-21(19)35-15-6-2)36(33,34)26-13-12-17-9-7-14-30(17)3/h10-11,16-17,26H,5-9,12-15H2,1-4H3,(H,27,28,32)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H36O5/c1-15(26)19-6-7-20-18-5-4-16-14-17(30-23(29)9-8-22(27)28)10-12-24(16,2)21(18)11-13-25(19,20)3/h4,17-21H,5-14H2,1-3H3,(H,27,28)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H36O5/c1-15(26)19-6-7-20-18-5-4-16-14-17(30-23(29)9-8-22(27)28)10-12-24(16,2)21(18)11-13-25(19,20)3/h4,17-21H,5-14H2,1-3H3,(H,27,28)/t17-,18-,19-,20+,21+,24-,25+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H36O5/c1-15(26)19-6-7-20-18-5-4-16-14-17(30-23(29)9-8-22(27)28)10-12-24(16,2)21(18)11-13-25(19,20)3/h4,17-21H,5-14H2,1-3H3,(H,27,28)/t17-,18-,19?,20-,21-,24?,25?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H36O5/c1-15(26)19-6-7-20-18-5-4-16-14-17(30-23(29)9-8-22(27)28)10-12-24(16,2)21(18)11-13-25(19,20)3/h4,17-21H,5-14H2,1-3H3,(H,27,28)/t17-,18-,19+,20-,21-,24-,25+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H36O5/c1-15(26)19-6-7-20-18-5-4-16-14-17(30-23(29)9-8-22(27)28)10-12-24(16,2)21(18)11-13-25(19,20)3/h4,17-21H,5-14H2,1-3H3,(H,27,28)/t17-,18+,19+,20-,21-,24+,25+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H36O6/c1-4-5-21(30)31-25(20(29)14-26)11-9-18-17-7-6-15-12-16(27)8-10-23(15,2)22(17)19(28)13-24(18,25)3/h12,17-19,22,26,28H,4-11,13-14H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H36O6/c1-4-5-21(30)31-25(20(29)14-26)11-9-18-17-7-6-15-12-16(27)8-10-23(15,2)22(17)19(28)13-24(18,25)3/h12,17-19,22,26,28H,4-11,13-14H2,1-3H3/t17-,18-,19-,22+,23-,24-,25-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H36O6/c1-4-5-21(30)31-25(20(29)14-26)11-9-18-17-7-6-15-12-16(27)8-10-23(15,2)22(17)19(28)13-24(18,25)3/h12,17-19,22,26,28H,4-11,13-14H2,1-3H3/t17-,18-,19-,22+,23?,24?,25?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H36O6/c1-4-5-21(30)31-25(20(29)14-26)11-9-18-17-7-6-15-12-16(27)8-10-23(15,2)22(17)19(28)13-24(18,25)3/h12,17-19,22,26,28H,4-11,13-14H2,1-3H3/t17-,18-,19+,22-,23-,24-,25-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C25H36O6/c1-4-5-21(30)31-25(20(29)14-26)11-9-18-17-7-6-15-12-16(27)8-10-23(15,2)22(17)19(28)13-24(18,25)3/h12,17-19,22,26,28H,4-11,13-14H2,1-3H3/t17-,18+,19-,22-,23-,24-,25+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H37NO4/c27-20-23-18-22(13-14-24(23)28)25(29)19-26-15-7-1-2-8-16-30-17-9-6-12-21-10-4-3-5-11-21/h3-5,10-11,13-14,18,25-29H,1-2,6-9,12,15-17,19-20H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H38O5/c1-6-25(4,5)24(28)30-21-12-15(2)11-17-8-7-16(3)20(23(17)21)10-9-19-13-18(26)14-22(27)29-19/h7-8,11,15-16,18-21,23,26H,6,9-10,12-14H2,1-5H3/t15-,16-,18+,19-,20+,21-,23+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H38O5/c1-6-25(4,5)24(28)30-21-12-15(2)11-17-8-7-16(3)20(23(17)21)10-9-19-13-18(26)14-22(27)29-19/h7-8,11,15-16,18-21,23,26H,6,9-10,12-14H2,1-5H3/t15-,16-,18+,19+,20-,21-,23-/m0/s1	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C25H38O5/c1-6-25(4,5)24(28)30-21-12-15(2)11-17-8-7-16(3)20(23(17)21)10-9-19-13-18(26)14-22(27)29-19/h7-8,11,15-16,18-21,23,26H,6,9-10,12-14H2,1-5H3/t15-,16+,18+,19+,20-,21+,23+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H38O5/c1-6-25(4,5)24(28)30-21-12-15(2)11-17-8-7-16(3)20(23(17)21)10-9-19-13-18(26)14-22(27)29-19/h7-8,11,15-16,18-21,23,26H,6,9-10,12-14H2,1-5H3/t15-,16+,18+,19+,20+,21+,23-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H40O6/c1-6-25(4,5)24(30)31-21-12-15(2)11-17-8-7-16(3)20(23(17)21)10-9-18(26)13-19(27)14-22(28)29/h7-8,11,15-16,18-21,23,26-27H,6,9-10,12-14H2,1-5H3,(H,28,29)/t15-,16-,18+,19+,20-,21-,23-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H43NO18/c1-6-11(26-8-2-7(3-27)12(30)15(33)13(8)31)14(32)19(37)24(40-6)43-22-10(5-29)42-25(20(38)17(22)35)44-21-9(4-28)41-23(39)18(36)16(21)34/h2,6,8-39H,3-5H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H43NO18/c1-6-11(26-8-2-7(3-27)12(30)15(33)13(8)31)14(32)19(37)24(40-6)43-22-10(5-29)42-25(20(38)17(22)35)44-21-9(4-28)41-23(39)18(36)16(21)34/h2,6,8-39H,3-5H2,1H3/t6-,8+,9-,10-,11-,12-,13+,14+,15+,16-,17-,18-,19-,20-,21-,22-,23?,24-,25-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H43NO18/c1-6-11(26-8-2-7(3-27)12(30)15(33)13(8)31)14(32)19(37)24(40-6)43-22-10(5-29)42-25(20(38)17(22)35)44-21-9(4-28)41-23(39)18(36)16(21)34/h2,6,8-39H,3-5H2,1H3/t6-,8+,9+,10+,11+,12-,13-,14-,15-,16-,17-,18-,19-,20-,21+,22+,23-,24-,25-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H43NO3/c1-7-29-22-14-24(3)16(12-21(22)28)8-9-17-19-11-10-18(15(2)27)25(19,4)13-20(23(17)24)26(5)6/h16-23,28H,7-14H2,1-6H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H43NO3/c1-7-29-22-14-24(3)16(12-21(22)28)8-9-17-19-11-10-18(15(2)27)25(19,4)13-20(23(17)24)26(5)6/h16-23,28H,7-14H2,1-6H3/t16-,17-,18-,19+,20+,21-,22-,23-,24-,25+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H43NO3/c1-7-29-22-14-24(3)16(12-21(22)28)8-9-17-19-11-10-18(15(2)27)25(19,4)13-20(23(17)24)26(5)6/h16-23,28H,7-14H2,1-6H3/t16-,17-,18+,19-,20-,21-,22-,23+,24?,25?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H43NO3/c1-7-29-22-14-24(3)16(12-21(22)28)8-9-17-19-11-10-18(15(2)27)25(19,4)13-20(23(17)24)26(5)6/h16-23,28H,7-14H2,1-6H3/t16-,17-,18+,19-,20-,21+,22+,23-,24-,25+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H43NO3/c1-7-29-22-14-24(3)16(12-21(22)28)8-9-17-19-11-10-18(15(2)27)25(19,4)13-20(23(17)24)26(5)6/h16-23,28H,7-14H2,1-6H3/t16-,17-,18+,19-,20+,21-,22-,23+,24-,25+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C25H48N6O8/c1-21(32)29(37)18-9-3-6-16-27-22(33)12-14-25(36)31(39)20-10-4-7-17-28-23(34)11-13-24(35)30(38)19-8-2-5-15-26/h37-39H,2-20,26H2,1H3,(H,27,33)(H,28,34)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H21N3O/c30-25-26(18-20-10-14-27-15-11-20,19-21-12-16-28-17-13-21)23-8-4-5-9-24(23)29(25)22-6-2-1-3-7-22/h1-17H,18-19H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H23FIN5O4/c1-13-22-21(23(31(3)24(13)35)30-20-10-7-15(28)11-19(20)27)25(36)33(17-8-9-17)26(37)32(22)18-6-4-5-16(12-18)29-14(2)34/h4-7,10-12,17,30H,8-9H2,1-3H3,(H,29,34)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H23N7O2/c1-2-6-21(34)32-15-5-7-19(32)25-31-22(23-24(27)29-14-16-33(23)25)17-9-11-18(12-10-17)26(35)30-20-8-3-4-13-28-	0	(Mazumdar et al.,

20/h3-4,8-14,16,19H,5,7,15H2,1H3,(H2,27,29)(H,28,30,35)	2023)
InChI=1S/C26H23N7O2/c1-2-6-21(34)32-15-5-7-19(32)25-31-22(23-24(27)29-14-16-33(23)25)17-9-11-18(12-10-17)26(35)30-20-8-3-4-13-28-20/h3-4,8-14,16,19H,5,7,15H2,1H3,(H2,27,29)(H,28,30,35)/t19-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H24F6N2O/c1-15-7-5-6-8-20(15)21-10-9-19(33)14-22(21)34(4)23(35)24(2,3)16-11-17(25(27,28)29)13-18(12-16)26(30,31)32/h5-14H,33H2,1-4H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H24N2O/c1-3-22(19-12-6-4-7-13-19)28-26(29)24-18(2)25(20-14-8-5-9-15-20)27-23-17-11-10-16-21(23)24/h4-17,22H,3H2,1-2H3,(H,28,29)	1 (Shin et al., 2021)
InChI=1S/C26H24N2O/c1-3-22(19-12-6-4-7-13-19)28-26(29)24-18(2)25(20-14-8-5-9-15-20)27-23-17-11-10-16-21(23)24/h4-17,22H,3H2,1-2H3,(H,28,29)/t22-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H24N2O/c1-3-22(19-12-6-4-7-13-19)28-26(29)24-18(2)25(20-14-8-5-9-15-20)27-23-17-11-10-16-21(23)24/h4-17,22H,3H2,1-2H3,(H,28,29)/t22-/m1/s1	1 (Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C26H25CIN2O3/c1-16-6-3-4-7-20(16)25(31)28-19-10-11-21(17(2)14-19)26(32)29-13-5-8-24(30)22-15-18(27)9-12-23(22)29/h3-4,6-7,9-12,14-15,24,30H,5,8,13H2,1-2H3,(H,28,31)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H25CIN2O3/c1-2-32-20-11-12-28(16-20)25(30)23-15-22(17-6-4-3-5-7-17)26(31)29-13-10-18-8-9-19(27)14-21(18)24(23)29/h3-9,14-15,20H,2,10-13,16H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H25CIN2O3/c1-2-32-20-11-12-28(16-20)25(30)23-15-22(17-6-4-3-5-7-17)26(31)29-13-10-18-8-9-19(27)14-21(18)24(23)29/h3-9,14-15,20H,2,10-13,16H2,1H3/t20-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H25CIN2O3/c1-2-32-20-11-12-28(16-20)25(30)23-15-22(17-6-4-3-5-7-17)26(31)29-13-10-18-8-9-19(27)14-21(18)24(23)29/h3-9,14-15,20H,2,10-13,16H2,1H3/t20-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H25FN2O2S/c27-23-14-8-19(9-15-23)7-4-16-28-25(31)21-10-12-22(13-11-21)26-29(24(30)18-32-26)17-20-5-2-1-3-6-20/h1-3,5-6,8-15,26H,4,7,16-18H2,(H,28,31)/t26-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H25FN4O2/c1-33-22-4-2-19-16-31(11-8-18(19)12-22)26(32)17-6-9-30(10-7-17)25-20(14-28)15-29-24-5-3-21(27)13-23(24)25/h2-5,12-13,15,17H,6-11,16H2,1H3	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C26H26F2N2/c27-24-12-8-22(9-13-24)26(23-10-14-25(28)15-11-23)30-19-17-29(18-20-30)16-4-7-21-5-2-1-3-6-21/h1-15,26H,16-20H2	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H26F2N2/c27-24-12-8-22(9-13-24)26(23-10-14-25(28)15-11-23)30-19-17-29(18-20-30)16-4-7-21-5-2-1-3-6-21/h1-15,26H,16-20H2/b7-4+	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H26FN3O/c1-17-4-7-20(8-5-17)26(31)29-16-22-15-28-25(19-9-11-21(27)12-10-19)23-13-6-18(2)14-24(23)30(22)3/h4-14,22H,15-16H2,1-3H3,(H,29,31)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H26FN3O/c1-17-4-7-20(8-5-17)26(31)29-16-22-15-28-25(19-9-11-21(27)12-10-19)23-13-6-18(2)14-24(23)30(22)3/h4-14,22H,15-16H2,1-3H3,(H,29,31)/t22-/m1/s1	1 (Li et al., 2005)
InChI=1S/C26H26N2/c1-27(19-20-8-3-2-4-9-20)17-16-24-18-23-12-7-11-22-15-14-21-10-5-6-13-25(21)28(24)26(22)23/h2-13,18H,14-17,19H2,1H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H26N2O6S/c1-26(2)20(24(31)32)28-22(30)19(23(28)35-26)27-21(29)18(15-7-4-3-5-8-15)25(33)34-17-12-11-14-9-6-10-16(14)13-17/h3-5,7-8,11-13,18-20,23H,6,9-10H2,1-2H3,(H,27,29)(H,31,32)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H26N2O6S/c1-26(2)20(24(31)32)28-22(30)19(23(28)35-26)27-21(29)18(15-7-4-3-5-8-15)25(33)34-17-12-11-14-9-6-10-16(14)13-17/h3-5,7-8,11-13,18-20,23H,6,9-10H2,1-2H3,(H,27,29)(H,31,32)/t18-,19?,20-,23-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C26H26N2O6S/c1-26(2)20(24(31)32)28-22(30)19(23(28)35-26)27-21(29)18(15-7-4-3-5-8-15)25(33)34-17-12-11-14-9-6-10-16(14)13-17/h3-5,7-8,11-13,18-20,23H,6,9-10H2,1-2H3,(H,27,29)(H,31,32)/t18-,19+,20-,23+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H26N2O6S/c1-26(2)20(24(31)32)28-22(30)19(23(28)35-26)27-21(29)18(15-7-4-3-5-8-15)25(33)34-17-12-11-14-9-6-10-16(14)13-17/h3-5,7-8,11-13,18-20,23H,6,9-10H2,1-2H3,(H,27,29)(H,31,32)/t18-,19+,20+,23-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H26N2O6S/c1-26(2)20(24(31)32)28-22(30)19(23(28)35-26)27-21(29)18(15-7-4-3-5-8-15)25(33)34-17-12-11-14-9-6-10-16(14)13-17/h3-5,7-8,11-13,18-20,23H,6,9-10H2,1-2H3,(H,27,29)(H,31,32)/t18?,19-,20+,23-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H26N4O4S/c1-18(30(17-31)16-22-15-28-19(2)29-24(22)27)23(35-26(33)21-11-7-4-8-12-21)13-14-34-25(32)20-9-5-3-6-10-20/h3-12,15,17H,13-14,16H2,1-2H3,(H2,27,28,29)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H26N4O4S/c1-18(30(17-31)16-22-15-28-19(2)29-24(22)27)23(35-26(33)21-11-7-4-8-12-21)13-14-34-25(32)20-9-5-3-6-10-20/h3-12,15,17H,13-14,16H2,1-2H3,(H2,27,28,29)/b23-18-	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H26N4O4S/c1-18(30(17-31)16-22-15-28-19(2)29-24(22)27)23(35-26(33)21-11-7-4-8-12-21)13-14-34-25(32)20-9-5-3-6-10-20/h3-12,15,17H,13-14,16H2,1-2H3,(H2,27,28,29)/b23-18+	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H27CIN2O/c1-28(19-26(30)22-13-15-23(27)16-14-22)17-6-18-29-24-9-4-2-7-20(24)11-12-21-8-3-5-10-25(21)29/h2-5,7-10,13-16H,6,11-12,17-19H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H27N3OS/c1-30-23-16-24-22(29-26(31-24)19-11-6-3-7-12-19)15-20(23)17-28-21-13-8-14-27-25(21)18-9-4-2-5-10-18/h2-7,9-12,15-16,21,25,27-28H,8,13-14,17H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H27N3OS/c1-30-23-16-24-22(29-26(31-24)19-11-6-3-7-12-19)15-20(23)17-28-21-13-8-14-27-25(21)18-9-4-2-5-10-18/h2-7,9-12,15-16,21,25,27-28H,8,13-14,17H2,1H3/t21-,25-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H27N5O2/c27-16-18-4-6-23-22(13-18)19(17-29-23)3-1-2-8-30-9-11-31(12-10-30)21-5-7-24-20(14-21)15-25(33-24)26(28)32/h4-7,13-15,17,29H,1-3,8-12H2,(H2,28,32)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H27NO10/c1-10-21(30)14(27)6-17(36-10)37-15-8-26(35,16(29)9-28)7-13-18(15)25(34)20-19(24(13)33)22(31)11-4-2-3-5-12(11)23(20)32/h2-5,10,14-15,17,21,28,30,33-35H,6-9,27H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H27NO10/c1-10-21(30)14(27)6-17(36-10)37-15-8-26(35,16(29)9-28)7-13-18(15)25(34)20-19(24(13)33)22(31)11-4-2-3-5-12(11)23(20)32/h2-5,10,14-15,17,21,28,30,33-35H,6-9,27H2,1H3/t10-,14-,15-,17-,21+,26-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H27NO10/c1-10-21(30)14(27)6-17(36-10)37-15-8-26(35,16(29)9-28)7-13-18(15)25(34)20-19(24(13)33)22(31)11-4-2-3-5-12(11)23(20)32/h2-5,10,14-15,17,21,28,30,33-35H,6-9,27H2,1H3/t10-,14-,15-,17+,21-,26+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H27NO10/c1-10-21(30)14(27)6-17(36-10)37-15-8-26(35,16(29)9-28)7-13-18(15)25(34)20-19(24(13)33)22(31)11-4-2-3-5-12(11)23(20)32/h2-5,10,14-15,17,21,28,30,33-35H,6-9,27H2,1H3/t10-,14-,15-,17+,21+,26-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H27NO10/c1-10-21(30)14(27)6-17(36-10)37-15-8-26(35,16(29)9-28)7-13-18(15)25(34)20-19(24(13)33)22(31)11-4-2-3-5-12(11)23(20)32/h2-5,10,14-15,17,21,28,30,33-35H,6-9,27H2,1H3/t10-,14+,15+,17-,21-,26+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H27NO10/c1-9-21(30)13(27)6-16(36-9)37-15-8-26(35,10(2)28)7-12-18(15)25(34)20-19(23(12)32)22(31)11-4-3-5-14(29)17(11)24(20)33/h3-5,9,13,15-16,21,29-30,32,34-35H,6-8,27H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H27NO10/c1-9-21(30)13(27)6-16(36-9)37-15-8-26(35,10(2)28)7-12-18(15)25(34)20-19(23(12)32)22(31)11-4-3-5-14(29)17(11)24(20)33/h3-5,9,13,15-16,21,29-30,32,34-35H,6-8,27H2,1-2H3/t9-,13-,15-,16-,21-,26-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H27NO10/c1-9-21(30)13(27)6-16(36-9)37-15-8-26(35,10(2)28)7-12-18(15)25(34)20-19(23(12)32)22(31)11-4-3-5-14(29)17(11)24(20)33/h3-5,9,13,15-16,21,29-30,32,34-35H,6-8,27H2,1-2H3/t9-,13-,15-,16-,21+,26-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H27NO10/c1-9-21(30)13(27)6-16(36-9)37-15-8-26(35,10(2)28)7-12-18(15)25(34)20-19(23(12)32)22(31)11-4-3-5-	0	(Meng et al., 2021)

14(29)17(11)24(20)33/h3-5,9,13,15-16,21,29-30,32,34-35H,6-8,27H2,1-2H3/t9-,13-,15-,16+,21+,26-/m0/s1	
InChI=1S/C26H27NO10/c1-9-21(30)13(27)6-16(36-9)37-15-8-26(35,10(2)28)7-12-18(15)25(34)20-19(23(12)32)22(31)11-4-3-5-14(29)17(11)24(20)33/h3-5,9,13,15-16,21,29-30,32,34-35H,6-8,27H2,1-2H3/t9-,13+,15+,16-,21-,26+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H27NO10/c1-9-21(30)13(27)6-16(36-9)37-15-8-26(35,10(2)28)7-12-18(15)25(34)20-19(23(12)32)22(31)11-4-3-5-14(29)17(11)24(20)33/h3-5,9,13,15-16,21,29-30,32,34-35H,6-8,27H2,1-2H3/t9?,13?,15?,16?,21?,26-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H27NO9/c1-10-21(29)15(27)7-17(35-10)36-16-9-26(34,11(2)28)8-14-18(16)25(33)20-19(24(14)32)22(30)12-5-3-4-6-13(12)23(20)31/h3-6,10,15-17,21,29,32-34H,7-9,27H2,1-2H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H27NO9/c1-10-21(29)15(27)7-17(35-10)36-16-9-26(34,11(2)28)8-14-18(16)25(33)20-19(24(14)32)22(30)12-5-3-4-6-13(12)23(20)31/h3-6,10,15-17,21,29,32-34H,7-9,27H2,1-2H3/t10-,15-,16-,17-,21-,26-/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H27NO9/c1-10-21(29)15(27)7-17(35-10)36-16-9-26(34,11(2)28)8-14-18(16)25(33)20-19(24(14)32)22(30)12-5-3-4-6-13(12)23(20)31/h3-6,10,15-17,21,29,32-34H,7-9,27H2,1-2H3/t10-,15-,16-,17-,21+,26-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H27NO9/c1-10-21(29)15(27)7-17(35-10)36-16-9-26(34,11(2)28)8-14-18(16)25(33)20-19(24(14)32)22(30)12-5-3-4-6-13(12)23(20)31/h3-6,10,15-17,21,29,32-34H,7-9,27H2,1-2H3/t10-,15-,16-,17+,21+,26-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H27NO9/c1-10-21(29)15(27)7-17(35-10)36-16-9-26(34,11(2)28)8-14-18(16)25(33)20-19(24(14)32)22(30)12-5-3-4-6-13(12)23(20)31/h3-6,10,15-17,21,29,32-34H,7-9,27H2,1-2H3/t10-,15-,16+,17-,21+,26+/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H27NO9/c1-10-21(29)15(27)7-17(35-10)36-16-9-26(34,11(2)28)8-14-18(16)25(33)20-19(24(14)32)22(30)12-5-3-4-6-13(12)23(20)31/h3-6,10,15-17,21,29,32-34H,7-9,27H2,1-2H3/t10-,15+,16+,17-,21-,26+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H28Cl2N4O4/c1-19(33)31-10-12-32(13-11-31)21-3-5-22(6-4-21)34-15-23-16-35-26(36-23,17-30-9-8-29-18-30)24-7-2-20(27)14-25(24)28/h2-9,14,18,23H,10-13,15-17H2,1H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H28Cl2N4O4/c1-19(33)31-10-12-32(13-11-31)21-3-5-22(6-4-21)34-15-23-16-35-26(36-23,17-30-9-8-29-18-30)24-7-2-20(27)14-25(24)28/h2-9,14,18,23H,10-13,15-17H2,1H3/t23-,26-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H28Cl2N4O4/c1-19(33)31-10-12-32(13-11-31)21-3-5-22(6-4-21)34-15-23-16-35-26(36-23,17-30-9-8-29-18-30)24-7-2-20(27)14-25(24)28/h2-9,14,18,23H,10-13,15-17H2,1H3/t23-,26-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H28Cl2N4O4/c1-19(33)31-10-12-32(13-11-31)21-3-5-22(6-4-21)34-15-23-16-35-26(36-23,17-30-9-8-29-18-30)24-7-2-20(27)14-25(24)28/h2-9,14,18,23H,10-13,15-17H2,1H3/t23-,26-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H28Cl2N4O4/c1-19(33)31-10-12-32(13-11-31)21-3-5-22(6-4-21)34-15-23-16-35-26(36-23,17-30-9-8-29-18-30)24-7-2-20(27)14-25(24)28/h2-9,14,18,23H,10-13,15-17H2,1H3/t23?,26-/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H28Cl2N4O4/c1-19(33)31-10-12-32(13-11-31)21-3-5-22(6-4-21)34-15-23-16-35-26(36-23,17-30-9-8-29-18-30)24-7-2-20(27)14-25(24)28/h2-9,14,18,23H,10-13,15-17H2,1H3/t23?,26-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H28ClN3O6S/c1-25(2,36-16-12-10-15(27)11-13-16)24(35)29-17(14-8-6-5-7-9-14)20(31)28-18-21(32)30-19(23(33)34)26(3,4)37-22(18)30/h5-13,17-19,22H,1-4H3,(H,28,31)(H,29,35)(H,33,34)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H28ClN3O6S/c1-25(2,36-16-12-10-15(27)11-13-16)24(35)29-17(14-8-6-5-7-9-14)20(31)28-18-21(32)30-19(23(33)34)26(3,4)37-22(18)30/h5-13,17-19,22H,1-4H3,(H,28,31)(H,29,35)(H,33,34)/t17-,18-,19+,22-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H28ClN3O6S/c1-25(2,36-16-12-10-15(27)11-13-16)24(35)29-17(14-8-6-5-7-9-14)20(31)28-18-21(32)30-19(23(33)34)26(3,4)37-22(18)30/h5-13,17-19,22H,1-4H3,(H,28,31)(H,29,35)(H,33,34)/t17-,18?,19-,22-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H28ClN3O6S/c1-25(2,36-16-12-10-15(27)11-13-16)24(35)29-17(14-8-6-5-7-9-14)20(31)28-18-21(32)30-19(23(33)34)26(3,4)37-22(18)30/h5-13,17-19,22H,1-4H3,(H,28,31)(H,29,35)(H,33,34)/t17-,18+,19-,22+/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C26H28ClN3O6S/c1-25(2,36-16-12-10-15(27)11-13-16)24(35)29-17(14-8-6-5-7-9-14)20(31)28-18-21(32)30-19(23(33)34)26(3,4)37-22(18)30/h5-13,17-19,22H,1-4H3,(H,28,31)(H,29,35)(H,33,34)/t17-,18+,19+,22+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H28ClN3O6S/c1-25(2,36-16-12-10-15(27)11-13-16)24(35)29-17(14-8-6-5-7-9-14)20(31)28-18-21(32)30-19(23(33)34)26(3,4)37-22(18)30/h5-13,17-19,22H,1-4H3,(H,28,31)(H,29,35)(H,33,34)/t17?,18-,19+,22-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H28ClNO/c1-28(2)19-20-29-24-15-13-23(14-16-24)26(22-11-7-4-8-12-22)25(17-18-27)21-9-5-3-6-10-21/h3-16H,17-20H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H28ClNO/c1-28(2)19-20-29-24-15-13-23(14-16-24)26(22-11-7-4-8-12-22)25(17-18-27)21-9-5-3-6-10-21/h3-16H,17-20H2,1-2H3/b26-25-	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H28ClNO/c1-3-28(4-2)19-20-29-24-17-15-22(16-18-24)25(21-11-7-5-8-12-21)26(27)23-13-9-6-10-14-23/h5-18H,3-4,19-20H2,1-2H3/b26-25+	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H28F2N2/c27-24-12-8-22(9-13-24)26(23-10-14-25(28)15-11-23)30-19-17-29(18-20-30)16-4-7-21-5-2-1-3-6-21/h1-3,5-6,8-15,26H,4,7,16-20H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H28F3N3O2/c27-26(28,29)19-6-5-7-21(18-19)34-20-11-16-32(17-12-20)15-4-3-13-31-25(33)23-10-14-30-24-9-2-1-8-22(23)24/h1-2,5-10,14,18,20H,3-4,11-13,15-17H2,(H,31,33)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H28F6N2O2/c1-24-11-10-14-15(3-8-20-16(14)4-9-22(35)33-20)17(24)6-7-19(24)23(36)34-21-12-13(25(27,28)29)2-5-18(21)26(30,31)32/h2,4-5,9,12,14-17,19-20H,3,6-8,10-11H2,1H3,(H,33,35)(H,34,36)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H28N2/c1-4-11-23(12-5-1)13-10-18-27-19-21-28(22-20-27)26(24-14-6-2-7-15-24)25-16-8-3-9-17-25/h1-17,26H,18-22H2/b13-10+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H28N2O2/c1-27(17-20-9-13-25(30-2)14-10-20)26(29)23-11-7-21(8-12-23)18-28-16-15-22-5-3-4-6-24(22)19-28/h3-14H,15-19H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H28N3/c1-19-17-21(20(2)29(19)24-9-7-6-8-10-24)11-13-23-14-12-22-18-25(27(3)4)15-16-26(22)28(23)5/h6-18H,1-5H3/q+1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H29Cl2N5O3/c1-32-6-8-33(9-7-32)5-4-10-36-25-13-21-18(11-24(25)35-3)26(17(15-29)16-30-21)31-22-14-23(34-2)20(28)12-19(22)27/h11-14,16H,4-10H2,1-3H3,(H,30,31)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H29F2N7/c1-3-13-29-24-31-25(30-14-4-2)33-26(32-24)35-17-15-34(16-18-35)23(19-5-9-21(27)10-6-19)20-7-11-22(28)12-8-20/h3-12,23H,1-2,13-18H2,(H2,29,30,31,32,33)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H29FN2O2.ClH/c1-19-17-29(16-15-26(19,24(30)31)21-5-3-2-4-6-21)23-11-13-25(18-28,14-12-23)20-7-9-22(27)10-8-20;/h2-10,19,23H,11-17H2,1H3,(H,30,31);1H/t19-,23?,25?,26-;/m1./s1	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C26H29FN2O2/c1-19-17-29(16-15-26(19,24(30)31)21-5-3-2-4-6-21)23-11-13-25(18-28,14-12-23)20-7-9-22(27)10-8-20/h2-10,19,23H,11-17H2,1H3,(H,30,31)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H29FN2O2/c1-19-17-29(16-15-26(19,24(30)31)21-5-3-2-4-6-21)23-11-13-25(18-28,14-12-23)20-7-9-22(27)10-8-20/h2-10,19,23H,11-17H2,1H3,(H,30,31)/t19-,23?,25?,26-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H29N3O3/c1-18-5-7-21-22(27-18)3-2-4-24(21)31-14-13-29-11-9-19(10-12-29)15-20-6-8-25-23(16-20)28-26(30)17-32-25/h2-8,16,19H,9-15,17H2,1H3,(H,28,30)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H29N3O6/c1-17-22(25(30)34-4)24(20-11-8-12-21(15-20)29(32)33)23(18(2)27-17)26(31)35-14-13-28(3)16-19-9-6-5-7-10-19/h5-12,15,24,27H,13-14,16H2,1-4H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H29N3O6/c1-17-22(25(30)34-4)24(20-11-8-12-21(15-20)29(32)33)23(18(2)27-17)26(31)35-14-13-28(3)16-19-9-6-5-7-10-19/h5-12,15,24,27H,13-14,16H2,1-4H3/t24-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C26H29N3O6/c1-17-22(25(30)34-4)24(20-11-8-12-21(15-20)29(32)33)23(18(2)27-17)26(31)35-14-13-28(3)16-19-9-6-5-7-10-19/h5-12,15,24,27H,13-14,16H2,1-4H3/t24-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H29N5O/c1-19-6-5-7-20(2)25(19)29-26-24-16-27-18-31(24)23(17-28-26)21-8-10-22(11-9-21)32-15-14-30-12-3-4-13-30/h5-11,16-18H,3-4,12-15H2,1-2H3,(H,28,29)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H29N5O/c1-19-7-5-8-20(2)25(19)29-26-24-16-27-18-31(24)23(17-28-26)21-9-6-10-22(15-21)32-14-13-30-11-3-4-12-30/h5-10,15-18H,3-4,11-14H2,1-2H3,(H,28,29)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H29NO/c1-4-25(21-11-7-5-8-12-21)26(22-13-9-6-10-14-22)23-15-17-24(18-16-23)28-20-19-27(2)3/h5-18H,4,19-20H2,1-3H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C26H29NO/c1-4-25(21-11-7-5-8-12-21)26(22-13-9-6-10-14-22)23-15-17-24(18-16-23)28-20-19-27(2)3/h5-18H,4,19-20H2,1-3H3/b26-25-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H29NO/c1-4-25(21-11-7-5-8-12-21)26(22-13-9-6-10-14-22)23-15-17-24(18-16-23)28-20-19-27(2)3/h5-18H,4,19-20H2,1-3H3/b26-25+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H29NO7/c1-16-12-22(30)25(26(32)27(16)11-10-17-4-7-20(29)8-5-17)21(14-24(31)34-3)18-6-9-23(33-2)19(13-18)15-28/h4-9,12-13,21,28-30H,10-11,14-15H2,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H29NO7/c1-16-12-22(30)25(26(32)27(16)11-10-17-4-7-20(29)8-5-17)21(14-24(31)34-3)18-6-9-23(33-2)19(13-18)15-28/h4-9,12-13,21,28-30H,10-11,14-15H2,1-3H3/t21-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H30Cl2F3NO/c1-3-5-10-32(11-6-4-2)12-9-25(33)23-16-22-21(14-18(27)15-24(22)28)20-13-17(26(29,30)31)7-8-19(20)23/h7-8,13-16,25,33H,3-6,9-12H2,1-2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H30ClN3O3/c27-20-6-4-19(5-7-20)26(32)29-16-17-30(25(31)18-29)22-8-10-23(11-9-22)33-24-12-14-28(15-13-24)21-2-1-3-21/h4-11,21,24H,1-3,12-18H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H30N8O5/c1-4-19-21-22(33(3)31-19)25(36)30-23(29-21)18-12-17(6-7-20(18)38-5-2)39-16-8-10-34(11-9-16)26-27-13-15(14-28-26)24(35)32-37/h6-7,12-14,16,37H,4-5,8-11H2,1-3H3,(H,32,35)(H,29,30,36)	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C26H30NO4S2/c28-25(26(29,23-9-4-17-32-23)24-10-5-18-33-24)31-22-19-27(14-11-20(22)12-15-27)13-6-16-30-21-7-2-1-3-8-21/h1-5,7-10,17-18,20,22,29H,6,11-16,19H2/q+1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H31BrFN3O2/c1-2-15-30-19-31(23-11-7-21(27)8-12-23)26(25(30)33)13-17-29(18-14-26)16-3-4-24(32)20-5-9-22(28)10-6-20/h5-12H,2-4,13-19H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H31Cl2N5O3/c1-19(2)31-9-11-32(12-10-31)21-4-6-22(7-5-21)34-14-23-15-35-26(36-23,16-33-18-29-17-30-33)24-8-3-20(27)13-25(24)28/h3-8,13,17-19,23H,9-12,14-16H2,1-2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H31Cl2N5O3/c1-19(2)31-9-11-32(12-10-31)21-4-6-22(7-5-21)34-14-23-15-35-26(36-23,16-33-18-29-17-30-33)24-8-3-20(27)13-25(24)28/h3-8,13,17-19,23H,9-12,14-16H2,1-2H3/t23-,26-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H31Cl2N5O3/c1-19(2)31-9-11-32(12-10-31)21-4-6-22(7-5-21)34-14-23-15-35-26(36-23,16-33-18-29-17-30-33)24-8-3-20(27)13-25(24)28/h3-8,13,17-19,23H,9-12,14-16H2,1-2H3/t23-,26?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H31N3O2/c1-31-25-11-5-4-10-24(25)29-18-16-28(17-19-29)15-7-6-14-27-26(30)23-13-12-21-8-2-3-9-22(21)20-23/h2-5,8-13,20H,6-7,14-19H2,1H3,(H,27,30)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H32ClFO5/c1-5-6-22(32)33-26(21(31)14-27)15(2)11-19-18-8-7-16-12-17(29)9-10-23(16,3)25(18,28)20(30)13-24(19,26)4/h9-10,12,15,18-19H,5-8,11,13-14H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H32ClFO5/c1-5-6-22(32)33-26(21(31)14-27)15(2)11-19-18-8-7-16-12-17(29)9-10-23(16,3)25(18,28)20(30)13-24(19,26)4/h9-10,12,15,18-19H,5-8,11,13-14H2,1-4H3/t15-,18-,19-,23-,24-,25-,26-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C26H32ClFO5/c1-5-6-22(32)33-26(21(31)14-27)15(2)11-19-18-8-7-16-12-17(29)9-10-23(16,3)25(18,28)20(30)13-24(19,26)4/h9-10,12,15,18-19H,5-8,11,13-14H2,1-4H3/t15-,18-,19-,23?,24?,25?,26-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H32ClFO5/c1-5-6-22(32)33-26(21(31)14-27)15(2)11-19-18-8-7-16-12-17(29)9-10-23(16,3)25(18,28)20(30)13-24(19,26)4/h9-10,12,15,18-19H,5-8,11,13-14H2,1-4H3/t15-,18-,19+,23-,24-,25+,26-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H32ClFO5/c1-5-6-22(32)33-26(21(31)14-27)15(2)11-19-18-8-7-16-12-17(29)9-10-23(16,3)25(18,28)20(30)13-24(19,26)4/h9-10,12,15,18-19H,5-8,11,13-14H2,1-4H3/t15-,18+,19+,23+,24-,25+,26-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H32F2O7/c1-13-8-17-18-10-20(27)19-9-16(31)6-7-23(19,4)25(18,28)21(32)11-24(17,5)26(13,35-15(3)30)22(33)12-34-14(2)29/h6-7,9,13,17-18,20-21,32H,8,10-12H2,1-5H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H32F2O7/c1-13-8-17-18-10-20(27)19-9-16(31)6-7-23(19,4)25(18,28)21(32)11-24(17,5)26(13,35-15(3)30)22(33)12-34-14(2)29/h6-7,9,13,17-18,20-21,32H,8,10-12H2,1-5H3/t13-,17-,18-,20-,21-,23-,24-,25-,26-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H32F2O7/c1-13-8-17-18-10-20(27)19-9-16(31)6-7-23(19,4)25(18,28)21(32)11-24(17,5)26(13,35-15(3)30)22(33)12-34-14(2)29/h6-7,9,13,17-18,20-21,32H,8,10-12H2,1-5H3/t13-,17-,18-,20-,21-,23?,24?,25?,26-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H32F2O7/c1-13-8-17-18-10-20(27)19-9-16(31)6-7-23(19,4)25(18,28)21(32)11-24(17,5)26(13,35-15(3)30)22(33)12-34-14(2)29/h6-7,9,13,17-18,20-21,32H,8,10-12H2,1-5H3/t13-,17-,18-,20-,21+,23-,24-,25-,26-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H32F2O7/c1-13-8-17-18-10-20(27)19-9-16(31)6-7-23(19,4)25(18,28)21(32)11-24(17,5)26(13,35-15(3)30)22(33)12-34-14(2)29/h6-7,9,13,17-18,20-21,32H,8,10-12H2,1-5H3/t13-,17-,18?,20-,21-,23-,24-,25-,26-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H32F2O7/c1-13-8-17-18-10-20(27)19-9-16(31)6-7-23(19,4)25(18,28)21(32)11-24(17,5)26(13,35-15(3)30)22(33)12-34-14(2)29/h6-7,9,13,17-18,20-21,32H,8,10-12H2,1-5H3/t13-,17-,18+,20-,21+,23+,24+,25-,26-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H32F2O7/c1-13(29)33-12-20(32)26-21(34-22(2,3)35-26)10-15-16-9-18(27)17-8-14(30)6-7-23(17,4)25(16,28)19(31)11-24(15,26)5/h6-8,15-16,18-19,21,31H,9-12H2,1-5H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H32F2O7/c1-13(29)33-12-20(32)26-21(34-22(2,3)35-26)10-15-16-9-18(27)17-8-14(30)6-7-23(17,4)25(16,28)19(31)11-24(15,26)5/h6-8,15-16,18-19,21,31H,9-12H2,1-5H3/t15-,16-,18-,19-,21+,23-,24-,25-,26+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H32F2O7/c1-13(29)33-12-20(32)26-21(34-22(2,3)35-26)10-15-16-9-18(27)17-8-14(30)6-7-23(17,4)25(16,28)19(31)11-24(15,26)5/h6-8,15-16,18-19,21,31H,9-12H2,1-5H3/t15-,16-,18-,19?,21-,23?,24?,25?,26-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H32F2O7/c1-13(29)33-12-20(32)26-21(34-22(2,3)35-26)10-15-16-9-18(27)17-8-14(30)6-7-23(17,4)25(16,28)19(31)11-24(15,26)5/h6-8,15-16,18-19,21,31H,9-12H2,1-5H3/t15-,16-,18-,19+,21+,23-,24-,25-,26-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H32F2O7/c1-13(29)33-12-20(32)26-21(34-22(2,3)35-26)10-15-16-9-18(27)17-8-14(30)6-7-23(17,4)25(16,28)19(31)11-24(15,26)5/h6-8,15-16,18-19,21,31H,9-12H2,1-5H3/t15-,16+,18-,19+,21-,23+,24+,25-,26+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H32F2O7/c1-13(29)33-12-20(32)26-21(34-22(2,3)35-26)10-15-16-9-18(27)17-8-14(30)6-7-23(17,4)25(16,28)19(31)11-24(15,26)5/h6-8,15-16,18-19,21,31H,9-12H2,1-5H3/t15?,16?,18-,19-,21+,23-,24-,25-,26+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H32F3N3O2S/c27-26(28,29)20-7-8-24-22(19-20)32(21-5-1-2-6-23(21)35-24)11-3-10-30-13-15-31(16-14-30)12-9-25-33-17-4-18-34-25/h1-2,5-8,19,25H,3-4,9-18H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H32N2O5/c1-18-19(2)26(29)33-23-17-24(31-4)25(16-20(18)23)32-15-7-10-27-11-13-28(14-12-27)21-8-5-6-9-22(21)30-3/h5-6,8-9,16-17H,7,10-15H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H32N2O5/c1-3-33-26(32)23(14-13-19-9-5-4-6-10-19)27-18(2)25(31)28(17-24(29)30)22-15-20-11-7-8-12-21(20)16-22/h4-12,18,22-23,27H,3,13-17H2,1-2H3,(H,29,30)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H32N4O4S/c1-20(2)30(16-10-11-17-34-19-24(31)29-35(3,32)33)23-18-27-25(21-12-6-4-7-13-21)26(28-23)22-14-8-5-9-15-22/h4-	0	(Mazumdar et al.,

9,12-15,18,20H,10-11,16-17,19H2,1-3H3,(H,29,31)	2023)
InChI=1S/C26H33FO7/c1-13(28)32-12-20(31)26-21(33-23(2,3)34-26)10-16-15-9-18(27)17-8-14(29)6-7-24(17,4)22(15)19(30)11-25(16,26)5/h6-8,15-16,18-19,21-22,30H,9-12H2,1-5H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H33FO7/c1-13(28)32-12-20(31)26-21(33-23(2,3)34-26)10-16-15-9-18(27)17-8-14(29)6-7-24(17,4)22(15)19(30)11-25(16,26)5/h6-8,15-16,18-19,21-22,30H,9-12H2,1-5H3/t15-,16-,18-,19-,21+,22+,24-,25+,26+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H33FO7/c1-13(28)32-12-20(31)26-21(33-23(2,3)34-26)10-16-15-9-18(27)17-8-14(29)6-7-24(17,4)22(15)19(30)11-25(16,26)5/h6-8,15-16,18-19,21-22,30H,9-12H2,1-5H3/t15-,16-,18-,19?,21-,22+,24?,25?,26?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H33FO7/c1-13(28)32-12-20(31)26-21(33-23(2,3)34-26)10-16-15-9-18(27)17-8-14(29)6-7-24(17,4)22(15)19(30)11-25(16,26)5/h6-8,15-16,18-19,21-22,30H,9-12H2,1-5H3/t15-,16+,18+,19-,21+,22-,24-,25-,26-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H33FO7/c1-13(28)32-12-20(31)26-21(33-23(2,3)34-26)10-16-15-9-18(27)17-8-14(29)6-7-24(17,4)22(15)19(30)11-25(16,26)5/h6-8,15-16,18-19,21-22,30H,9-12H2,1-5H3/t15?,16?,18-,19-,21+,22?,24-,25-,26+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H33FO7/c1-13(28)32-12-20(31)26-21(33-23(2,3)34-26)10-16-15-9-18(27)17-8-14(29)6-7-24(17,4)22(15)19(30)11-25(16,26)5/h6-8,15-16,18-19,21-22,30H,9-12H2,1-5H3/t15?,16?,18-,19?,21+,22+,24?,25?,26+/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H33NO4/c1-23(2,29)18-13-24-8-9-26(18,30-3)22-25(24)10-11-27(14-15-4-5-15)19(24)12-16-6-7-17(28)21(31-22)20(16)25/h6-9,15,18-19,22,28-29H,4-5,10-14H2,1-3H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H33NO4/c1-23(2,29)18-13-24-8-9-26(18,30-3)22-25(24)10-11-27(14-15-4-5-15)19(24)12-16-6-7-17(28)21(31-22)20(16)25/h6-9,15,18-19,22,28-29H,4-5,10-14H2,1-3H3/t18-,19-,22-,24+,25+,26+/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H33NO4/c1-23(2,29)18-13-24-8-9-26(18,30-3)22-25(24)10-11-27(14-15-4-5-15)19(24)12-16-6-7-17(28)21(31-22)20(16)25/h6-9,15,18-19,22,28-29H,4-5,10-14H2,1-3H3/t18-,19?,22-,24?,25?,26?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H33NO4/c1-23(2,29)18-13-24-8-9-26(18,30-3)22-25(24)10-11-27(14-15-4-5-15)19(24)12-16-6-7-17(28)21(31-22)20(16)25/h6-9,15,18-19,22,28-29H,4-5,10-14H2,1-3H3/t18-,19+,22-,24+,25+,26-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H33NO4/c1-23(2,29)18-13-24-8-9-26(18,30-3)22-25(24)10-11-27(14-15-4-5-15)19(24)12-16-6-7-17(28)21(31-22)20(16)25/h6-9,15,18-19,22,28-29H,4-5,10-14H2,1-3H3/t18?,19-,22-,24-,25+,26+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H33NO4/c1-23(2,29)18-13-24-8-9-26(18,30-3)22-25(24)10-11-27(14-15-4-5-15)19(24)12-16-6-7-17(28)21(31-22)20(16)25/h6-9,15,18-19,22,28-29H,4-5,10-14H2,1-3H3/t18?,19-,22-,24?,25+,26?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H33NO6/c1-8-31-24(29)21-16(3)27-17(4)22(25(30)32-9-2)23(21)19-13-11-10-12-18(19)14-15-20(28)33-26(5,6)7/h10-15,23,27H,8-9H2,1-7H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H33NO6/c1-8-31-24(29)21-16(3)27-17(4)22(25(30)32-9-2)23(21)19-13-11-10-12-18(19)14-15-20(28)33-26(5,6)7/h10-15,23,27H,8-9H2,1-7H3/b15-14+	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H34F2O7/c1-22(2)34-19-11-14-15-10-17(27)16-9-13(29)7-8-23(16,3)25(15,28)18(30)12-24(14,4)26(19,35-22)20(31)21(32-5)33-6/h7-9,14-15,17-19,21,30H,10-12H2,1-6H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H34F2O7/c1-22(2)34-19-11-14-15-10-17(27)16-9-13(29)7-8-23(16,3)25(15,28)18(30)12-24(14,4)26(19,35-22)20(31)21(32-5)33-6/h7-9,14-15,17-19,21,30H,10-12H2,1-6H3/t14-,15-,17-,18-,19+,23+,24+,25+,26-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H34F2O7/c1-22(2)34-19-11-14-15-10-17(27)16-9-13(29)7-8-23(16,3)25(15,28)18(30)12-24(14,4)26(19,35-22)20(31)21(32-5)33-6/h7-9,14-15,17-19,21,30H,10-12H2,1-6H3/t14-,15-,17-,18?,19-,23?,24?,25?,26?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H34F2O7/c1-22(2)34-19-11-14-15-10-17(27)16-9-13(29)7-8-23(16,3)25(15,28)18(30)12-24(14,4)26(19,35-22)20(31)21(32-5)33-6/h7-9,14-15,17-19,21,30H,10-12H2,1-6H3/t14-,15+,17-,18+,19-,23+,24+,25-,26-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C26H34F2O7/c1-22(2)34-19-11-14-15-10-17(27)16-9-13(29)7-8-23(16,3)25(15,28)18(30)12-24(14,4)26(19,35-22)20(31)21(32-5)33-6/h7-9,14-15,17-19,21,30H,10-12H2,1-6H3/t14?,15?,17-,18-,19+,23-,24-,25-,26-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H34F2O7/c1-22(2)34-19-11-14-15-10-17(27)16-9-13(29)7-8-23(16,3)25(15,28)18(30)12-24(14,4)26(19,35-22)20(31)21(32-5)33-6/h7-9,14-15,17-19,21,30H,10-12H2,1-6H3/t14?,15?,17-,18?,19+,23?,24?,25-,26-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H34FNO5/c1-15(2)25-21(11-10-19(29)12-20(30)13-23(31)32)24(17-6-8-18(27)9-7-17)22(14-33-5)26(28-25)16(3)4/h6-11,15-16,19-20,29-30H,12-14H2,1-5H3,(H,31,32)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H34FNO5/c1-15(2)25-21(11-10-19(29)12-20(30)13-23(31)32)24(17-6-8-18(27)9-7-17)22(14-33-5)26(28-25)16(3)4/h6-11,15-16,19-20,29-30H,12-14H2,1-5H3,(H,31,32)/b11-10+/t19-,20-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H34FNO5/c1-15(2)25-21(11-10-19(29)12-20(30)13-23(31)32)24(17-6-8-18(27)9-7-17)22(14-33-5)26(28-25)16(3)4/h6-11,15-16,19-20,29-30H,12-14H2,1-5H3,(H,31,32)/b11-10+/t19-,20-/m1/s1	0	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C26H34FNO5/c1-15(2)25-21(11-10-19(29)12-20(30)13-23(31)32)24(17-6-8-18(27)9-7-17)22(14-33-5)26(28-25)16(3)4/h6-11,15-16,19-20,29-30H,12-14H2,1-5H3,(H,31,32)/b11-10+/t19-,20+/m1/s1	0	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C26H34N4O2/c1-17(2)29-14-8-11-19(29)15-27-25(31)21-16-30(18-9-4-5-10-18)26(32)24-23(21)20-12-6-7-13-22(20)28(24)3/h6-7,12-13,16-19H,4-5,8-11,14-15H2,1-3H3,(H,27,31)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C26H34N6O6S/c27-26(28)31-11-3-4-17(15-31)14-29-23(33)13-22(25(36)32(16-24(34)35)20-8-9-20)30-39(37,38)21-10-7-18-5-1-2-6-19(18)12-21/h1-2,5-7,10,12,17,20,22,30H,3-4,8-9,11,13-16H2,(H3,27,28)(H,29,33)(H,34,35)/t17-,22-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H34NO3/c1-3-23-19-24(18-20(2)27(23)16-10-11-17-27)30-25(28)26(29,21-12-6-4-7-13-21)22-14-8-5-9-15-22/h4-9,12-15,20,23-24,29H,3,10-11,16-19H2,1-2H3/q+1/t20-,23+,24+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H34O7/c1-4-31-25-17-21(9-7-19(25)8-12-26(29)30)33-14-6-5-13-32-20-10-11-22(24(28)16-20)23(27)15-18(2)3/h7,9-11,16-18,28H,4-6,8,12-15H2,1-3H3,(H,29,30)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H34O8/c1-14-10-16-17-7-9-26(33,20(29)13-34-22(32)5-4-21(30)31)25(17,3)12-19(28)23(16)24(2)8-6-15(27)11-18(14)24/h6,8,11,14,16-17,19,23,28,33H,4-5,7,9-10,12-13H2,1-3H3,(H,30,31)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H34O8/c1-14-10-16-17-7-9-26(33,20(29)13-34-22(32)5-4-21(30)31)25(17,3)12-19(28)23(16)24(2)8-6-15(27)11-18(14)24/h6,8,11,14,16-17,19,23,28,33H,4-5,7,9-10,12-13H2,1-3H3,(H,30,31)/t14-,16-,17-,19-,23+,24-,25-,26-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H34O8/c1-14-10-16-17-7-9-26(33,20(29)13-34-22(32)5-4-21(30)31)25(17,3)12-19(28)23(16)24(2)8-6-15(27)11-18(14)24/h6,8,11,14,16-17,19,23,28,33H,4-5,7,9-10,12-13H2,1-3H3,(H,30,31)/t14-,16-,17-,19-,23+,24-,25+,26+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H34O8/c1-14-10-16-17-7-9-26(33,20(29)13-34-22(32)5-4-21(30)31)25(17,3)12-19(28)23(16)24(2)8-6-15(27)11-18(14)24/h6,8,11,14,16-17,19,23,28,33H,4-5,7,9-10,12-13H2,1-3H3,(H,30,31)/t14-,16-,17-,19-,23+,24?,25?,26?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H34O8/c1-14-10-16-17-7-9-26(33,20(29)13-34-22(32)5-4-21(30)31)25(17,3)12-19(28)23(16)24(2)8-6-15(27)11-18(14)24/h6,8,11,14,16-17,19,23,28,33H,4-5,7,9-10,12-13H2,1-3H3,(H,30,31)/t14-,16-,17+,19-,23-,24-,25-,26+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H34O8/c1-14-10-16-17-7-9-26(33,20(29)13-34-22(32)5-4-21(30)31)25(17,3)12-19(28)23(16)24(2)8-6-15(27)11-18(14)24/h6,8,11,14,16-17,19,23,28,33H,4-5,7,9-10,12-13H2,1-3H3,(H,30,31)/t14-,16?,17-,19-,23+,24-,25-,26-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H35F3O6/c1-17(2)35-25(33)11-6-4-3-5-10-21-22(24(32)15-23(21)31)13-12-19(30)16-34-20-9-7-8-18(14-20)26(27,28)29/h3,5,7-9,12-14,17,19,21-24,30-32H,4,6,10-11,15-16H2,1-2H3/b5-3+,13-12+	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H35FO5/c1-5-6-9-32-24(31)23(30)21-14(2)10-17-16-12-19(27)18-11-15(28)7-8-25(18,3)22(16)20(29)13-26(17,21)4/h7-8,11,14,16-17,19-22,29H,5-6,9-10,12-13H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H35FO5/c1-5-6-9-32-24(31)23(30)21-14(2)10-17-16-12-19(27)18-11-15(28)7-8-25(18,3)22(16)20(29)13-26(17,21)4/h7-8,11,14,16-	1	(Meng et al., 2021)

17,19-22,29H,5-6,9-10,12-13H ₂ ,1-4H ₃ /t14-,16-,17-,19-,20?,21?,22+,25?,26-/m0/s1	
InChI=1S/C26H35FO5/c1-5-6-9-32-24(31)23(30)21-14(2)10-17-16-12-19(27)18-11-15(28)7-8-25(18,3)22(16)20(29)13-26(17,21)4/h7-8,11,14,16-17,19-22,29H,5-6,9-10,12-13H ₂ ,1-4H ₃ /t14-,16-,17-,19-,20+,21+,22-,25-,26-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H35FO5/c1-5-6-9-32-24(31)23(30)21-14(2)10-17-16-12-19(27)18-11-15(28)7-8-25(18,3)22(16)20(29)13-26(17,21)4/h7-8,11,14,16-17,19-22,29H,5-6,9-10,12-13H ₂ ,1-4H ₃ /t14-,16-,17+,19+,20-,21-,22-,25-,26-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H35FO5/c1-5-6-9-32-24(31)23(30)21-14(2)10-17-16-12-19(27)18-11-15(28)7-8-25(18,3)22(16)20(29)13-26(17,21)4/h7-8,11,14,16-17,19-22,29H,5-6,9-10,12-13H ₂ ,1-4H ₃ /t14-,16?,17?,19+,20+,21-,22?,25+,26+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H35FO5/c1-5-6-9-32-24(31)23(30)21-14(2)10-17-16-12-19(27)18-11-15(28)7-8-25(18,3)22(16)20(29)13-26(17,21)4/h7-8,11,14,16-17,19-22,29H,5-6,9-10,12-13H ₂ ,1-4H ₃ /t14-,16+,17+,19+,20+,21-,22-,25+,26+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H35FO6/c1-4-5-6-22(32)33-26(21(31)14-28)10-8-17-16-12-19(27)18-11-15(29)7-9-24(18,2)23(16)20(30)13-25(17,26)3/h7,9,11,16-17,19-20,23,28,30H,4-6,8,10,12-14H ₂ ,1-3H ₃	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H35FO6/c1-4-5-6-22(32)33-26(21(31)14-28)10-8-17-16-12-19(27)18-11-15(29)7-9-24(18,2)23(16)20(30)13-25(17,26)3/h7,9,11,16-17,19-20,23,28,30H,4-6,8,10,12-14H ₂ ,1-3H ₃ /t16-,17-,19-,20-,23+,24-,25-,26-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H35FO6/c1-4-5-6-22(32)33-26(21(31)14-28)10-8-17-16-12-19(27)18-11-15(29)7-9-24(18,2)23(16)20(30)13-25(17,26)3/h7,9,11,16-17,19-20,23,28,30H,4-6,8,10,12-14H ₂ ,1-3H ₃ /t16-,17-,19-,20-,23+,24?,25?,26-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H35FO6/c1-4-5-6-22(32)33-26(21(31)14-28)10-8-17-16-12-19(27)18-11-15(29)7-9-24(18,2)23(16)20(30)13-25(17,26)3/h7,9,11,16-17,19-20,23,28,30H,4-6,8,10,12-14H ₂ ,1-3H ₃ /t16-,17-,19-,20+,23-,24-,25+,26+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H35FO6/c1-4-5-6-22(32)33-26(21(31)14-28)10-8-17-16-12-19(27)18-11-15(29)7-9-24(18,2)23(16)20(30)13-25(17,26)3/h7,9,11,16-17,19-20,23,28,30H,4-6,8,10,12-14H ₂ ,1-3H ₃ /t16-,17+,19+,20-,23-,24-,25-,26+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H35FO6/c1-4-5-6-22(32)33-26(21(31)14-28)10-8-17-16-12-19(27)18-11-15(29)7-9-24(18,2)23(16)20(30)13-25(17,26)3/h7,9,11,16-17,19-20,23,28,30H,4-6,8,10,12-14H ₂ ,1-3H ₃ /t16?,17?,19?,20?,23?,24?,25?,26-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H35FO6/c1-5-24(6-2)32-21-12-18-17-8-7-15-11-16(29)9-10-22(15,3)25(17,27)19(30)13-23(18,4)26(21,33-24)20(31)14-28/h9-11,17-19,21,28,30H,5-8,12-14H ₂ ,1-4H ₃	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H35FO6/c1-5-24(6-2)32-21-12-18-17-8-7-15-11-16(29)9-10-22(15,3)25(17,27)19(30)13-23(18,4)26(21,33-24)20(31)14-28/h9-11,17-19,21,28,30H,5-8,12-14H ₂ ,1-4H ₃ /t17-,18-,19-,21+,22-,23-,25-,26+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H35FO6/c1-5-24(6-2)32-21-12-18-17-8-7-15-11-16(29)9-10-22(15,3)25(17,27)19(30)13-23(18,4)26(21,33-24)20(31)14-28/h9-11,17-19,21,28,30H,5-8,12-14H ₂ ,1-4H ₃ /t17-,18-,19?,21-,22?,23?,25?,26-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H35FO6/c1-5-24(6-2)32-21-12-18-17-8-7-15-11-16(29)9-10-22(15,3)25(17,27)19(30)13-23(18,4)26(21,33-24)20(31)14-28/h9-11,17-19,21,28,30H,5-8,12-14H ₂ ,1-4H ₃ /t17-,18-,19+,21+,22-,23+,25-,26+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H35FO6/c1-5-24(6-2)32-21-12-18-17-8-7-15-11-16(29)9-10-22(15,3)25(17,27)19(30)13-23(18,4)26(21,33-24)20(31)14-28/h9-11,17-19,21,28,30H,5-8,12-14H ₂ ,1-4H ₃ /t17-,18+,19-,21+,22-,23-,25+,26-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H35FO6/c1-5-24(6-2)32-21-12-18-17-8-7-15-11-16(29)9-10-22(15,3)25(17,27)19(30)13-23(18,4)26(21,33-24)20(31)14-28/h9-11,17-19,21,28,30H,5-8,12-14H ₂ ,1-4H ₃ /t17?,18-,19-,21+,22?,23?,25-,26+/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H35FO6/c1-6-22(31)33-26(21(30)14-32-5)15(2)11-19-18-8-7-16-12-17(28)9-10-23(16,3)25(18,27)20(29)13-24(19,26)4/h9-10,12,15,18-20,29H,6-8,11,13-14H ₂ ,1-5H ₃	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H35FO6/c1-6-22(31)33-26(21(30)14-32-5)15(2)11-19-18-8-7-16-12-17(28)9-10-23(16,3)25(18,27)20(29)13-24(19,26)4/h9-10,12,15,18-20,29H,6-8,11,13-14H ₂ ,1-5H ₃ /t15-,18-,19-,20-,23-,24-,25-,26-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C26H35FO6/c1-6-22(31)33-26(21(30)14-32-5)15(2)11-19-18-8-7-16-12-17(28)9-10-23(16,3)25(18,27)20(29)13-24(19,26)4/h9-10,12,15,18-20,29H,6-8,11,13-14H2,1-5H3/t15-,18-,19-,20-,23?,24?,25?,26-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H35FO6/c1-6-22(31)33-26(21(30)14-32-5)15(2)11-19-18-8-7-16-12-17(28)9-10-23(16,3)25(18,27)20(29)13-24(19,26)4/h9-10,12,15,18-20,29H,6-8,11,13-14H2,1-5H3/t15-,18-,19-,20+,23-,24+,25-,26+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H35FO6/c1-6-22(31)33-26(21(30)14-32-5)15(2)11-19-18-8-7-16-12-17(28)9-10-23(16,3)25(18,27)20(29)13-24(19,26)4/h9-10,12,15,18-20,29H,6-8,11,13-14H2,1-5H3/t15-,18-,19+,20-,23-,24-,25+,26-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H35NO2/c1-21(2)31-25-12-5-4-11-24(25)28-17-15-27(16-18-28)20-22-9-8-10-23(19-22)26(30)29-13-6-3-7-14-29/h4-5,8-12,19,21H,3,6-7,13-18,20H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H35NO4/c1-23(2,29)18-13-24-8-9-26(18,30-3)22-25(24)10-11-27(14-15-4-5-15)19(24)12-16-6-7-17(28)21(31-22)20(16)25/h6-7,15,18-19,22,28-29H,4-5,8-14H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H35NO4/c1-23(2,29)18-13-24-8-9-26(18,30-3)22-25(24)10-11-27(14-15-4-5-15)19(24)12-16-6-7-17(28)21(31-22)20(16)25/h6-7,15,18-19,22,28-29H,4-5,8-14H2,1-3H3/t18-,19-,22-,24-,25+,26-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H35NO4/c1-23(2,29)18-13-24-8-9-26(18,30-3)22-25(24)10-11-27(14-15-4-5-15)19(24)12-16-6-7-17(28)21(31-22)20(16)25/h6-7,15,18-19,22,28-29H,4-5,8-14H2,1-3H3/t18-,19-,22-,24-,25+,26+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H35NO4/c1-23(2,29)18-13-24-8-9-26(18,30-3)22-25(24)10-11-27(14-15-4-5-15)19(24)12-16-6-7-17(28)21(31-22)20(16)25/h6-7,15,18-19,22,28-29H,4-5,8-14H2,1-3H3/t18-,19?,22-,24?,25?,26-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H35NO4/c1-23(2,29)18-13-24-8-9-26(18,30-3)22-25(24)10-11-27(14-15-4-5-15)19(24)12-16-6-7-17(28)21(31-22)20(16)25/h6-7,15,18-19,22,28-29H,4-5,8-14H2,1-3H3/t18-,19+,22-,24+,25-,26+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H35NO4/c1-23(2,29)18-13-24-8-9-26(18,30-3)22-25(24)10-11-27(14-15-4-5-15)19(24)12-16-6-7-17(28)21(31-22)20(16)25/h6-7,15,18-19,22,28-29H,4-5,8-14H2,1-3H3/t18-,19+,22-,24+,25+,26-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H35NO4/c1-23(2,29)18-13-24-8-9-26(18,30-3)22-25(24)10-11-27(14-15-4-5-15)19(24)12-16-6-7-17(28)21(31-22)20(16)25/h6-7,15,18-19,22,28-29H,4-5,8-14H2,1-3H3/t18?,19?,22-,24?,25?,26-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H36N2O4/c1-19(2)26(18-27,21-9-11-23(30-4)25(17-21)32-6)13-7-14-28-15-12-20-8-10-22(29-3)24(16-20)31-5/h8-11,16-17,19,28H,7,12-15H2,1-6H3	1	(Meng et al., 2021) (Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C26H36N2O4/c1-19(2)26(18-27,21-9-11-23(30-4)25(17-21)32-6)13-7-14-28-15-12-20-8-10-22(29-3)24(16-20)31-5/h8-11,16-17,19,28H,7,12-15H2,1-6H3/p+1/t26-/m0/s1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C26H36N2O4/c1-19(2)26(18-27,21-9-11-23(30-4)25(17-21)32-6)13-7-14-28-15-12-20-8-10-22(29-3)24(16-20)31-5/h8-11,16-17,19,28H,7,12-15H2,1-6H3/t26-/m0/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C26H36N2O5/c1-27(13-9-19-7-8-22(30-2)23(15-19)31-3)11-6-12-28-14-10-20-16-24(32-4)25(33-5)17-21(20)18-26(28)29/h7-8,15-17H,6,9-14,18H2,1-5H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H36O5/c1-5-7-22(30)31-26(16(2)27)12-6-8-20-19-10-9-17-14-18(28)11-13-24(17,3)23(19)21(29)15-25(20,26)4/h11,13-14,19-21,23,29H,5-10,12,15H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H36O5/c1-5-7-22(30)31-26(16(2)27)12-6-8-20-19-10-9-17-14-18(28)11-13-24(17,3)23(19)21(29)15-25(20,26)4/h11,13-14,19-21,23,29H,5-10,12,15H2,1-4H3/t19-,20-,21-,23+,24-,25-,26-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H36O5/c1-5-7-22(30)31-26(16(2)27)12-6-8-20-19-10-9-17-14-18(28)11-13-24(17,3)23(19)21(29)15-25(20,26)4/h11,13-14,19-21,23,29H,5-10,12,15H2,1-4H3/t19-,20-,21?,23+,24?,25?,26-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H36O5/c1-5-7-22(30)31-26(16(2)27)12-6-8-20-19-10-9-17-14-18(28)11-13-24(17,3)23(19)21(29)15-25(20,26)4/h11,13-14,19-	1	(Meng et al., 2021)

21,23,29H,5-10,12,15H2,1-4H3/t19-,20-,21+,23+,24-,25-,26-/m1/s1	
InChI=1S/C26H36O5/c1-5-7-22(30)31-26(16(2)27)12-6-8-20-19-10-9-17-14-18(28)11-13-24(17,3)23(19)21(29)15-25(20,26)4/h11,13-14,19-21,23,29H,5-10,12,15H2,1-4H3/t19-,20+,21-,23-,24-,25-,26+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H36O6/c1-4-5-6-22(31)32-26(21(30)15-27)12-10-19-18-8-7-16-13-17(28)9-11-24(16,2)23(18)20(29)14-25(19,26)3/h9,11,13,18-20,23,27,29H,4-8,10,12,14-15H2,1-3H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H36O6/c1-4-5-6-22(31)32-26(21(30)15-27)12-10-19-18-8-7-16-13-17(28)9-11-24(16,2)23(18)20(29)14-25(19,26)3/h9,11,13,18-20,23,27,29H,4-8,10,12,14-15H2,1-3H3/t18-,19-,20-,23+,24-,25-,26-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H36O6/c1-4-5-6-22(31)32-26(21(30)15-27)12-10-19-18-8-7-16-13-17(28)9-11-24(16,2)23(18)20(29)14-25(19,26)3/h9,11,13,18-20,23,27,29H,4-8,10,12,14-15H2,1-3H3/t18-,19-,20-,23+,24?,25?,26?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H36O6/c1-4-5-6-22(31)32-26(21(30)15-27)12-10-19-18-8-7-16-13-17(28)9-11-24(16,2)23(18)20(29)14-25(19,26)3/h9,11,13,18-20,23,27,29H,4-8,10,12,14-15H2,1-3H3/t18-,19-,20+,23+,24-,25+,26-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H36O6/c1-4-5-6-22(31)32-26(21(30)15-27)12-10-19-18-8-7-16-13-17(28)9-11-24(16,2)23(18)20(29)14-25(19,26)3/h9,11,13,18-20,23,27,29H,4-8,10,12,14-15H2,1-3H3/t18-,19+,20-,23-,24-,25-,26+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H36O7/c1-5-22(31)33-26(21(30)14-32-15(2)27)11-9-19-18-7-6-16-12-17(28)8-10-24(16,3)23(18)20(29)13-25(19,26)4/h12,18-20,23,29H,5-11,13-14H2,1-4H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H36O7/c1-5-22(31)33-26(21(30)14-32-15(2)27)11-9-19-18-7-6-16-12-17(28)8-10-24(16,3)23(18)20(29)13-25(19,26)4/h12,18-20,23,29H,5-11,13-14H2,1-4H3/t18-,19-,20-,23+,24-,25-,26-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H36O7/c1-5-22(31)33-26(21(30)14-32-15(2)27)11-9-19-18-7-6-16-12-17(28)8-10-24(16,3)23(18)20(29)13-25(19,26)4/h12,18-20,23,29H,5-11,13-14H2,1-4H3/t18-,19-,20-,23+,24?,25?,26?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H36O7/c1-5-22(31)33-26(21(30)14-32-15(2)27)11-9-19-18-7-6-16-12-17(28)8-10-24(16,3)23(18)20(29)13-25(19,26)4/h12,18-20,23,29H,5-11,13-14H2,1-4H3/t18-,19-,20+,23-,24-,25-,26-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H36O7/c1-5-22(31)33-26(21(30)14-32-15(2)27)11-9-19-18-7-6-16-12-17(28)8-10-24(16,3)23(18)20(29)13-25(19,26)4/h12,18-20,23,29H,5-11,13-14H2,1-4H3/t18-,19+,20-,23-,24-,25-,26+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H37N5O2/c1-5-11-30-17-19(25(32)31(26(33)27-6-2)13-8-12-29(3)4)14-21-20-9-7-10-22-24(20)18(16-28-22)15-23(21)30/h5,7,9-10,16,19,21,23,28H,1,6,8,11-15,17H2,2-4H3,(H,27,33)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H37N5O2/c1-5-11-30-17-19(25(32)31(26(33)27-6-2)13-8-12-29(3)4)14-21-20-9-7-10-22-24(20)18(16-28-22)15-23(21)30/h5,7,9-10,16,19,21,23,28H,1,6,8,11-15,17H2,2-4H3,(H,27,33)/t19-,21-,23-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H37N5O2/c1-5-11-30-17-19(25(32)31(26(33)27-6-2)13-8-12-29(3)4)14-21-20-9-7-10-22-24(20)18(16-28-22)15-23(21)30/h5,7,9-10,16,19,21,23,28H,1,6,8,11-15,17H2,2-4H3,(H,27,33)/t19-,21-,23-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H37N5O2/c1-5-11-30-17-19(25(32)31(26(33)27-6-2)13-8-12-29(3)4)14-21-20-9-7-10-22-24(20)18(16-28-22)15-23(21)30/h5,7,9-10,16,19,21,23,28H,1,6,8,11-15,17H2,2-4H3,(H,27,33)/t19-,21-,23+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H37N5O2/c1-5-11-30-17-19(25(32)31(26(33)27-6-2)13-8-12-29(3)4)14-21-20-9-7-10-22-24(20)18(16-28-22)15-23(21)30/h5,7,9-10,16,19,21,23,28H,1,6,8,11-15,17H2,2-4H3,(H,27,33)/t19-,21-,23+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H37NO3/c1-18(2)26(29)30-25-13-12-21(17-28)16-24(25)23(22-10-8-7-9-11-22)14-15-27(19(3)4)20(5)6/h7-13,16,18-20,23,28H,14-15,17H2,1-6H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H38N2O4/c1-24-8-6-18(29)14-17(24)4-5-19-20-7-9-26(32,25(20,2)15-21(30)23(19)24)22(31)16-28-12-10-27(3)11-13-28/h6,8,14,19-21,23,30,32H,4-5,7,9-13,15-16H2,1-3H3	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C26H38N2O4/c1-24-8-6-18(29)14-17(24)4-5-19-20-7-9-26(32,25(20,2)15-21(30)23(19)24)22(31)16-28-12-10-27(3)11-13-28/h6,8,14,19-21,23,30,32H,4-5,7,9-13,15-16H2,1-3H3/t19-,20-,21-,23+,24-,25-,26-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H38N2O4/c1-24-8-6-18(29)14-17(24)4-5-19-20-7-9-26(32,25(20,2)15-21(30)23(19)24)22(31)16-28-12-10-27(3)11-13-28/h6,8,14,19-21,23,30,32H,4-5,7,9-13,15-16H2,1-3H3/t19-,20-,21-,23+,24?,25?,26?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H38N2O4/c1-24-8-6-18(29)14-17(24)4-5-19-20-7-9-26(32,25(20,2)15-21(30)23(19)24)22(31)16-28-12-10-27(3)11-13-28/h6,8,14,19-21,23,30,32H,4-5,7,9-13,15-16H2,1-3H3/t19-,20-,21+,23-,24-,25-,26-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H38N2O4/c1-24-8-6-18(29)14-17(24)4-5-19-20-7-9-26(32,25(20,2)15-21(30)23(19)24)22(31)16-28-12-10-27(3)11-13-28/h6,8,14,19-21,23,30,32H,4-5,7,9-13,15-16H2,1-3H3/t19-,20+,21-,23-,24-,25-,26+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H38N2O4/c1-3-13-27(20-16-21-22(31-2)9-8-10-23(21)32-19-20)14-6-7-15-28-24(29)17-26(18-25(28)30)11-4-5-12-26/h8-10,20H,3-7,11-19H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H38N2O4/c1-3-13-27(20-16-21-22(31-2)9-8-10-23(21)32-19-20)14-6-7-15-28-24(29)17-26(18-25(28)30)11-4-5-12-26/h8-10,20H,3-7,11-19H2,1-2H3/t20-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C26H38N2O4/c1-31-22-9-6-10-23-21(22)16-20(19-32-23)8-7-14-27-13-4-5-15-28-24(29)17-26(18-25(28)30)11-2-3-12-26/h6,9-10,20,27H,2-5,7-8,11-19H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H38N2O4/c1-31-22-9-6-10-23-21(22)16-20(19-32-23)8-7-14-27-13-4-5-15-28-24(29)17-26(18-25(28)30)11-2-3-12-26/h6,9-10,20,27H,2-5,7-8,11-19H2,1H3/t20-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H38O5S/c1-23(2,3)22(30)31-26(20(29)14-32)11-9-18-17-7-6-15-12-16(27)8-10-24(15,4)21(17)19(28)13-25(18,26)5/h12,17-19,21,28,32H,6-11,13-14H2,1-5H3/t17-,18-,19-,21+,24-,25-,26-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H38O5S/c1-23(2,3)22(30)32-14-20(29)26(31)11-9-18-17-7-6-15-12-16(27)8-10-24(15,4)21(17)19(28)13-25(18,26)5/h12,17-19,21,28,31H,6-11,13-14H2,1-5H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H38O5S/c1-23(2,3)22(30)32-14-20(29)26(31)11-9-18-17-7-6-15-12-16(27)8-10-24(15,4)21(17)19(28)13-25(18,26)5/h12,17-19,21,28,31H,6-11,13-14H2,1-5H3/t17-,18-,19-,21+,24-,25-,26-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H38O5S/c1-23(2,3)22(30)32-14-20(29)26(31)11-9-18-17-7-6-15-12-16(27)8-10-24(15,4)21(17)19(28)13-25(18,26)5/h12,17-19,21,28,31H,6-11,13-14H2,1-5H3/t17-,18-,19-,21+,24?,25?,26?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H38O5S/c1-23(2,3)22(30)32-14-20(29)26(31)11-9-18-17-7-6-15-12-16(27)8-10-24(15,4)21(17)19(28)13-25(18,26)5/h12,17-19,21,28,31H,6-11,13-14H2,1-5H3/t17-,18-,19-,21+,24+,25+,26+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H38O5S/c1-23(2,3)22(30)32-14-20(29)26(31)11-9-18-17-7-6-15-12-16(27)8-10-24(15,4)21(17)19(28)13-25(18,26)5/h12,17-19,21,28,31H,6-11,13-14H2,1-5H3/t17-,18+,19-,21-,24-,25-,26+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H38O6/c1-4-5-6-22(31)32-26(21(30)15-27)12-10-19-18-8-7-16-13-17(28)9-11-24(16,2)23(18)20(29)14-25(19,26)3/h13,18-20,23,27,29H,4-12,14-15H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H38O6/c1-4-5-6-22(31)32-26(21(30)15-27)12-10-19-18-8-7-16-13-17(28)9-11-24(16,2)23(18)20(29)14-25(19,26)3/h13,18-20,23,27,29H,4-12,14-15H2,1-3H3/t18-,19-,20-,23+,24-,25-,26-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H38O6/c1-4-5-6-22(31)32-26(21(30)15-27)12-10-19-18-8-7-16-13-17(28)9-11-24(16,2)23(18)20(29)14-25(19,26)3/h13,18-20,23,27,29H,4-12,14-15H2,1-3H3/t18-,19-,20-,23+,24?,25?,26?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H38O6/c1-4-5-6-22(31)32-26(21(30)15-27)12-10-19-18-8-7-16-13-17(28)9-11-24(16,2)23(18)20(29)14-25(19,26)3/h13,18-20,23,27,29H,4-12,14-15H2,1-3H3/t18-,19-,20+,23+,24-,25-,26-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H38O6/c1-4-5-6-22(31)32-26(21(30)15-27)12-10-19-18-8-7-16-13-17(28)9-11-24(16,2)23(18)20(29)14-25(19,26)3/h13,18-	1	(Meng et al., 2021)

20,23,27,29H,4-12,14-15H2,1-3H3/t18-,19+,20-,23-,24-,25-,26+/m1/s1	
InChI=1S/C26H38O6/c1-4-5-6-22(31)32-26(21(30)15-27)12-10-19-18-8-7-16-13-17(28)9-11-24(16,2)23(18)20(29)14-25(19,26)3/h13,18-20,23,27,29H,4-12,14-15H2,1-3H3/t18?,19?,20?,23?,24?,25?,26-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H40N6O2/c1-18(2)32-13-7-20(8-14-32)17-34-25-22(24(33)28-3)23(30-21(15-27)31-25)29-16-19-5-11-26(12-6-19)9-4-10-26/h18-20H,4-14,16-17H2,1-3H3,(H,28,33)(H,29,30,31)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H40N6O2/c1-24(2)13-18(14-25(3,4)32-24)34-23-20(22(33)28-5)21(30-19(15-27)31-23)29-16-17-7-11-26(12-8-17)9-6-10-26/h17-18,32H,6-14,16H2,1-5H3,(H,28,33)(H,29,30,31)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H40O5/c1-19(2)31-26(30)13-9-4-3-8-12-22-23(25(29)18-24(22)28)17-16-21(27)15-14-20-10-6-5-7-11-20/h3,5-8,10-11,19,21-25,27-29H,4,9,12-18H2,1-2H3/b8-3+	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H41BrNO4/c1-26(2)21-6-5-19(22(26)16-21)7-11-31-12-8-28(9-13-32-14-10-28)18-20-15-24(29-3)25(30-4)17-23(20)27/h15,17,19,21-22H,5-14,16,18H2,1-4H3/q+1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H44O9/c1-16(13-23(30)33-11-9-7-5-4-6-8-10-22(28)29)12-20-25(32)24(31)19(15-34-20)14-21-26(35-21)17(2)18(3)27/h13,17-21,24-27,31-32H,4-12,14-15H2,1-3H3,(H,28,29)/b16-13+	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H44O9/c1-16(13-23(30)33-11-9-7-5-4-6-8-10-22(28)29)12-20-25(32)24(31)19(15-34-20)14-21-26(35-21)17(2)18(3)27/h13,17-21,24-27,31-32H,4-12,14-15H2,1-3H3,(H,28,29)/b16-13+/t17-,18-,19-,20-,21-,24+,25-,26-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C26H45NO6S/c1-16(4-7-23(30)27-12-13-34(31,32)33)19-5-6-20-24-21(9-11-26(19,20)3)25(2)10-8-18(28)14-17(25)15-22(24)29/h16-22,24,28-29H,4-15H2,1-3H3,(H,27,30)(H,31,32,33)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H22Cl2N4/c1-17(2)30-24-16-27-25(15-23(24)31-20-11-7-18(28)8-12-20)32-22-5-3-4-6-26(22)33(27)21-13-9-19(29)10-14-21/h3-17,31H,1-2H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H23N5O4/c33-23-17-25(26-29-31-32-30-26)36-24-16-20(11-14-22(23)24)28-27(34)19-9-12-21(13-10-19)35-15-5-4-8-18-6-2-1-3-7-18/h1-3,6-7,9-14,16-17H,4-5,8,15H2,(H,28,34)(H,29,30,31,32)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H24Cl2N4/c1-17(2)30-24-16-27-25(15-23(24)31-20-11-7-18(28)8-12-20)32-22-5-3-4-6-26(22)33(27)21-13-9-19(29)10-14-21/h3-17,23,31-32H,1-2H3/b30-24+/t23-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H24N2O4/c1-2-21(18-11-5-3-6-12-18)29-27(32)24-20-15-9-10-16-22(20)28-25(19-13-7-4-8-14-19)26(24)33-17-23(30)31/h3-16,21H,2,17H2,1H3,(H,29,32)(H,30,31)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H24N2O4/c1-2-21(18-11-5-3-6-12-18)29-27(32)24-20-15-9-10-16-22(20)28-25(19-13-7-4-8-14-19)26(24)33-17-23(30)31/h3-16,21H,2,17H2,1H3,(H,29,32)(H,30,31)/t21-/m0/s1	0 (Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C27H25F2N3OS/c1-18-24(26(33)32-16-17-34-27(32)30-18)12-15-31-13-10-21(11-14-31)25(19-2-6-22(28)7-3-19)20-4-8-23(29)9-5-20/h2-9,16-17H,10-15H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H25F2NO4/c28-21-5-1-18(2-6-21)24-11-12-30(15-25(31)19-3-7-22(29)8-4-19)14-20(24)16-32-23-9-10-26-27(13-23)34-17-33-26/h1-10,13,20,24H,11-12,14-17H2	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H25F2NO4/c28-21-5-1-18(2-6-21)24-11-12-30(15-25(31)19-3-7-22(29)8-4-19)14-20(24)16-32-23-9-10-26-27(13-23)34-17-33-26/h1-10,13,20,24H,11-12,14-17H2/t20-,24-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H25F2NO4/c28-21-5-1-18(2-6-21)24-11-12-30(15-25(31)19-3-7-22(29)8-4-19)14-20(24)16-32-23-9-10-26-27(13-23)34-17-33-26/h1-10,13,20,24H,11-12,14-17H2/t20-,24+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H25F3N2O/c28-19-5-3-18(4-6-19)27(33)2-1-14-31-15-13-26-24(17-31)23-16-21(30)9-12-25(23)32(26)22-10-7-20(29)8-11-22/h3-12,16,27,33H,1-2,13-15,17H2	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C27H25F3N2O/c28-19-5-3-18(4-6-19)27(33)2-1-14-31-15-13-26-24(17-31)23-16-21(30)9-12-25(23)32(26)22-10-7-20(29)8-11-22/h3-12,16,27,33H,1-2,13-15,17H2/t27-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H25F3N2O/c28-19-5-3-18(4-6-19)27(33)2-1-14-31-15-13-26-24(17-31)23-16-21(30)9-12-25(23)32(26)22-10-7-20(29)8-11-22/h3-12,16,27,33H,1-2,13-15,17H2/t27-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H25NO/c1-3-25(21-14-8-5-9-15-21)28-27(29)26-19(2)24(20-12-6-4-7-13-20)18-22-16-10-11-17-23(22)26/h4-18,25H,3H2,1-2H3,(H,28,29)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H25NO7/c1-16-13-22(30)25(27(33)28(16)12-11-17-7-9-18(29)10-8-17)20(14-24(31)34-2)21-15-35-23-6-4-3-5-19(23)26(21)32/h3-10,13,15,20,29-30H,11-12,14H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H25NO7/c1-16-13-22(30)25(27(33)28(16)12-11-17-7-9-18(29)10-8-17)20(14-24(31)34-2)21-15-35-23-6-4-3-5-19(23)26(21)32/h3-10,13,15,20,29-30H,11-12,14H2,1-2H3/t20-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H26N2O5/c1-17-15-24(31)26(27(33)29(17)14-12-18-7-9-19(30)10-8-18)22(16-25(32)34-2)20-11-13-28-23-6-4-3-5-21(20)23/h3-11,13,15,22,30-31H,12,14,16H2,1-2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H26N2O5/c1-17-15-24(31)26(27(33)29(17)14-12-18-7-9-19(30)10-8-18)22(16-25(32)34-2)20-11-13-28-23-6-4-3-5-21(20)23/h3-11,13,15,22,30-31H,12,14,16H2,1-2H3/t22-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H27BrN2O6/c1-35-25(33)11-21(17-4-2-5-19(28)9-17)27-26(34)23(31)10-20(36-27)15-29-12-16-8-18(14-29)22-6-3-7-24(32)30(22)13-16/h2-7,9-10,16,18,21,34H,8,11-15H2,1H3/t16-,18+,21-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H27BrN2O6/c1-35-25(33)11-21(17-4-2-5-19(28)9-17)27-26(34)23(31)10-20(36-27)15-29-12-16-8-18(14-29)22-6-3-7-24(32)30(22)13-16/h2-7,9-10,16,18,21,34H,8,11-15H2,1H3/t16-,18+,21+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H27ClN4O2/c1-19-14-25(27(33)30-24-11-8-20(9-12-24)16-29-2)31-32(19)17-22-15-23(28)10-13-26(22)34-18-21-6-4-3-5-7-21/h3-15,29H,16-18H2,1-2H3,(H,30,33)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H27F2N3O/c28-21-9-5-19(6-10-21)24(20-7-11-22(29)12-8-20)15-18-31-16-13-23(14-17-31)32-26-4-2-1-3-25(26)30-27(32)33/h1-12,23-24H,13-18H2,(H,30,33)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H27N5O2/c1-32(2)15-16-34-22-7-3-19(4-8-22)27-29-25(18-11-13-28-14-12-18)26(30-27)21-5-9-23-20(17-21)6-10-24(23)31-33/h3-5,7-9,11-14,17,33H,6,10,15-16H2,1-2H3,(H,29,30)	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C27H27N5O9S3/c1-12(28)24(35)41-20(15-7-5-4-6-8-15)21(33)29-18-22(34)32-19(25(36)38-9-17-13(2)39-27(37)40-17)16(10-42-23(18)32)11-43-26-31-30-14(3)44-26/h4-8,12,18,20,23H,9-11,28H2,1-3H3,(H,29,33)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H27N5O9S3/c1-12(28)24(35)41-20(15-7-5-4-6-8-15)21(33)29-18-22(34)32-19(25(36)38-9-17-13(2)39-27(37)40-17)16(10-42-23(18)32)11-43-26-31-30-14(3)44-26/h4-8,12,18,20,23H,9-11,28H2,1-3H3,(H,29,33)/t12-,18-,20+,23-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H27N5O9S3/c1-12(28)24(35)41-20(15-7-5-4-6-8-15)21(33)29-18-22(34)32-19(25(36)38-9-17-13(2)39-27(37)40-17)16(10-42-23(18)32)11-43-26-31-30-14(3)44-26/h4-8,12,18,20,23H,9-11,28H2,1-3H3,(H,29,33)/t12-,18?,20-,23-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H27N5O9S3/c1-12(28)24(35)41-20(15-7-5-4-6-8-15)21(33)29-18-22(34)32-19(25(36)38-9-17-13(2)39-27(37)40-17)16(10-42-23(18)32)11-43-26-31-30-14(3)44-26/h4-8,12,18,20,23H,9-11,28H2,1-3H3,(H,29,33)/t12-,18+,20+,23+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H28N8O9S2/c1-27(2)19(24(40)41)35-22(39)18(23(35)45-27)32-21(38)17(12-3-7-14(36)8-4-12)33-26(42)31-16-11-29-25(34-20(16)37)30-13-5-9-15(10-6-13)46(28,43)44/h3-11,17-19,23,36H,1-2H3,(H,32,38)(H,40,41)(H2,28,43,44)(H2,31,33,42)(H2,29,30,34,37)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H28N8O9S2/c1-27(2)19(24(40)41)35-22(39)18(23(35)45-27)32-21(38)17(12-3-7-14(36)8-4-12)33-26(42)31-16-11-29-25(34-20(16)37)30-13-5-9-15(10-6-13)46(28,43)44/h3-11,17-19,23,36H,1-2H3,(H,32,38)(H,40,41)(H2,28,43,44)(H2,31,33,42)(H2,29,30,34,37)/t17-,18-,19+,23-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C27H28N8O9S2/c1-27(2)19(24(40)41)35-22(39)18(23(35)45-27)32-21(38)17(12-3-7-14(36)8-4-12)33-26(42)31-16-11-29-25(34-20(16)37)30-13-5-9-15(10-6-13)46(28,43)44/h3-11,17-19,23,36H,1-2H3,(H,32,38)(H,40,41)(H2,28,43,44)(H2,31,33,42)(H2,29,30,34,37)/t17-,18-,19+,23-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H28N8O9S2/c1-27(2)19(24(40)41)35-22(39)18(23(35)45-27)32-21(38)17(12-3-7-14(36)8-4-12)33-26(42)31-16-11-29-25(34-20(16)37)30-13-5-9-15(10-6-13)46(28,43)44/h3-11,17-19,23,36H,1-2H3,(H,32,38)(H,40,41)(H2,28,43,44)(H2,31,33,42)(H2,29,30,34,37)/t17-,18?,19-,23-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H28N8O9S2/c1-27(2)19(24(40)41)35-22(39)18(23(35)45-27)32-21(38)17(12-3-7-14(36)8-4-12)33-26(42)31-16-11-29-25(34-20(16)37)30-13-5-9-15(10-6-13)46(28,43)44/h3-11,17-19,23,36H,1-2H3,(H,32,38)(H,40,41)(H2,28,43,44)(H2,31,33,42)(H2,29,30,34,37)/t17-,18+,19-,23+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H29N3O2/c1-19-9-4-5-10-22(19)26(31)28-21-16-14-20(15-17-21)27(32)30-18-8-13-24(29(2)3)23-11-6-7-12-25(23)30/h4-7,9-12,14-17,24H,8,13,18H2,1-3H3,(H,28,31)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H29N5O6S/c1-27(2,3)18-10-12-19(13-11-18)39(34,35)32-23-22(38-21-9-6-5-8-20(21)36-4)26(37-17-16-33)31-25(30-23)24-28-14-7-15-29-24/h5-15,33H,16-17H2,1-4H3,(H,30,31,32)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H29NO10/c1-10-22(30)14(28)7-17(37-10)38-16-9-27(35,11(2)29)8-13-19(16)26(34)21-20(24(13)32)23(31)12-5-4-6-15(36-3)18(12)25(21)33/h4-6,10,14,16-17,22,30,32,34-35H,7-9,28H2,1-3H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H29NO10/c1-10-22(30)14(28)7-17(37-10)38-16-9-27(35,11(2)29)8-13-19(16)26(34)21-20(24(13)32)23(31)12-5-4-6-15(36-3)18(12)25(21)33/h4-6,10,14,16-17,22,30,32,34-35H,7-9,28H2,1-3H3/t10-,14-,16-,17-,22+,27-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H29NO10/c1-10-22(30)14(28)7-17(37-10)38-16-9-27(35,11(2)29)8-13-19(16)26(34)21-20(24(13)32)23(31)12-5-4-6-15(36-3)18(12)25(21)33/h4-6,10,14,16-17,22,30,32,34-35H,7-9,28H2,1-3H3/t10-,14-,16-,17+,22+,27?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H29NO10/c1-10-22(30)14(28)7-17(37-10)38-16-9-27(35,11(2)29)8-13-19(16)26(34)21-20(24(13)32)23(31)12-5-4-6-15(36-3)18(12)25(21)33/h4-6,10,14,16-17,22,30,32,34-35H,7-9,28H2,1-3H3/t10-,14-,16+,17-,22-,27-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H29NO10/c1-10-22(30)14(28)7-17(37-10)38-16-9-27(35,11(2)29)8-13-19(16)26(34)21-20(24(13)32)23(31)12-5-4-6-15(36-3)18(12)25(21)33/h4-6,10,14,16-17,22,30,32,34-35H,7-9,28H2,1-3H3/t10-,14-,16+,17-,22+,27+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H29NO10/c1-11-6-12(28)7-18(37-11)38-16-9-27(35,17(30)10-29)8-14-20(16)26(34)22-21(24(14)32)23(31)13-4-3-5-15(36-2)19(13)25(22)33/h3-5,11-12,16,18,29,32,34-35H,6-10,28H2,1-2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H29NO10/c1-11-6-12(28)7-18(37-11)38-16-9-27(35,17(30)10-29)8-14-20(16)26(34)22-21(24(14)32)23(31)13-4-3-5-15(36-2)19(13)25(22)33/h3-5,11-12,16,18,29,32,34-35H,6-10,28H2,1-2H3/t11-,12-,16-,18-,27?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H29NO10/c1-11-6-12(28)7-18(37-11)38-16-9-27(35,17(30)10-29)8-14-20(16)26(34)22-21(24(14)32)23(31)13-4-3-5-15(36-2)19(13)25(22)33/h3-5,11-12,16,18,29,32,34-35H,6-10,28H2,1-2H3/t11-,12+,16-,18-,27-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H29NO10/c1-11-6-12(28)7-18(37-11)38-16-9-27(35,17(30)10-29)8-14-20(16)26(34)22-21(24(14)32)23(31)13-4-3-5-15(36-2)19(13)25(22)33/h3-5,11-12,16,18,29,32,34-35H,6-10,28H2,1-2H3/t11-,12+,16-,18+,27+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H29NO10/c1-11-6-12(28)7-18(37-11)38-16-9-27(35,17(30)10-29)8-14-20(16)26(34)22-21(24(14)32)23(31)13-4-3-5-15(36-2)19(13)25(22)33/h3-5,11-12,16,18,29,32,34-35H,6-10,28H2,1-2H3/t11-,12+,16+,18-,27+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H29NO10/c1-11-6-12(28)7-18(37-11)38-16-9-27(35,17(30)10-29)8-14-20(16)26(34)22-21(24(14)32)23(31)13-4-3-5-15(36-2)19(13)25(22)33/h3-5,11-12,16,18,29,32,34-35H,6-10,28H2,1-2H3/t11?,12?,16-,18?,27-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H29NO11/c1-10-22(31)13(28)6-17(38-10)39-15-8-27(36,16(30)9-29)7-12-19(15)26(35)21-20(24(12)33)23(32)11-4-3-5-14(37-2)18(11)25(21)34/h3-5,10,13,15,17,22,29,31,33,35-36H,6-9,28H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C27H29NO11/c1-10-22(31)13(28)6-17(38-10)39-15-8-27(36,16(30)9-29)7-12-19(15)26(35)21-20(24(12)33)23(32)11-4-3-5-14(37-2)18(11)25(21)34/h3-5,10,13,15,17,22,29,31,33,35-36H,6-9,28H2,1-2H3/t10-,13-,15-,17-,22-,27-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H29NO11/c1-10-22(31)13(28)6-17(38-10)39-15-8-27(36,16(30)9-29)7-12-19(15)26(35)21-20(24(12)33)23(32)11-4-3-5-14(37-2)18(11)25(21)34/h3-5,10,13,15,17,22,29,31,33,35-36H,6-9,28H2,1-2H3/t10-,13-,15-,17-,22+,27-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H29NO11/c1-10-22(31)13(28)6-17(38-10)39-15-8-27(36,16(30)9-29)7-12-19(15)26(35)21-20(24(12)33)23(32)11-4-3-5-14(37-2)18(11)25(21)34/h3-5,10,13,15,17,22,29,31,33,35-36H,6-9,28H2,1-2H3/t10-,13-,15-,17+,22+,27-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H29NO11/c1-10-22(31)13(28)6-17(38-10)39-15-8-27(36,16(30)9-29)7-12-19(15)26(35)21-20(24(12)33)23(32)11-4-3-5-14(37-2)18(11)25(21)34/h3-5,10,13,15,17,22,29,31,33,35-36H,6-9,28H2,1-2H3/t10-,13-,15+,17-,22-,27+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H29NO11/c1-10-22(31)13(28)6-17(38-10)39-15-8-27(36,16(30)9-29)7-12-19(15)26(35)21-20(24(12)33)23(32)11-4-3-5-14(37-2)18(11)25(21)34/h3-5,10,13,15,17,22,29,31,33,35-36H,6-9,28H2,1-2H3/t10-,13-,15+,17-,22+,27+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H30Cl2O6/c1-15-11-19-18-7-6-16-12-17(30)8-9-24(16,2)26(18,29)21(31)13-25(19,3)27(15,22(32)14-28)35-23(33)20-5-4-10-34-20/h4-5,8-10,12,15,18-19,21,31H,6-7,11,13-14H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H30Cl2O6/c1-15-11-19-18-7-6-16-12-17(30)8-9-24(16,2)26(18,29)21(31)13-25(19,3)27(15,22(32)14-28)35-23(33)20-5-4-10-34-20/h4-5,8-10,12,15,18-19,21,31H,6-7,11,13-14H2,1-3H3/t15-,18-,19-,21-,24?,25?,26?,27-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H30Cl2O6/c1-15-11-19-18-7-6-16-12-17(30)8-9-24(16,2)26(18,29)21(31)13-25(19,3)27(15,22(32)14-28)35-23(33)20-5-4-10-34-20/h4-5,8-10,12,15,18-19,21,31H,6-7,11,13-14H2,1-3H3/t15-,18?,19?,21+,24+,25+,26+,27+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H30Cl2O6/c1-15-11-19-18-7-6-16-12-17(30)8-9-24(16,2)26(18,29)21(31)13-25(19,3)27(15,22(32)14-28)35-23(33)20-5-4-10-34-20/h4-5,8-10,12,15,18-19,21,31H,6-7,11,13-14H2,1-3H3/t15-,18+,19-,21+,24+,25+,26-,27-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H30Cl2O6/c1-15-11-19-18-7-6-16-12-17(30)8-9-24(16,2)26(18,29)21(31)13-25(19,3)27(15,22(32)14-28)35-23(33)20-5-4-10-34-20/h4-5,8-10,12,15,18-19,21,31H,6-7,11,13-14H2,1-3H3/t15-,18+,19+,21+,24+,25-,26+,27+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H30F6N2O2/c1-24-11-9-17-15(4-8-21-25(17,2)12-10-22(36)35-21)16(24)6-7-19(24)23(37)34-20-13-14(26(28,29)30)3-5-18(20)27(31,32)33/h3,5,10,12-13,15-17,19,21H,4,6-9,11H2,1-2H3,(H,34,37)(H,35,36)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H30N2O2/c1-20-8-6-16-29(19-20)24-14-12-22(13-15-24)21(2)28-27(30)26(18-25-11-7-17-31-25)23-9-4-3-5-10-23/h3-5,7,9-15,17-18,20-21H,6,8,16,19H2,1-2H3,(H,28,30)/b26-18+/t20-,21-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H30N2O2/c1-28(25(21-11-5-2-6-12-21)20-29-18-17-24(30)19-29)27(31)26(22-13-7-3-8-14-22)23-15-9-4-10-16-23/h2-16,24-26,30H,17-20H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H30N2O2/c1-28(25(21-11-5-2-6-12-21)20-29-18-17-24(30)19-29)27(31)26(22-13-7-3-8-14-22)23-15-9-4-10-16-23/h2-16,24-26,30H,17-20H2,1H3/t24-,25-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H30N2O2/c1-28(25(21-11-5-2-6-12-21)20-29-18-17-24(30)19-29)27(31)26(22-13-7-3-8-14-22)23-15-9-4-10-16-23/h2-16,24-26,30H,17-20H2,1H3/t24-,25+/m0/s1	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C27H30N2O2/c1-28(25(21-11-5-2-6-12-21)20-29-18-17-24(30)19-29)27(31)26(22-13-7-3-8-14-22)23-15-9-4-10-16-23/h2-16,24-26,30H,17-20H2,1H3/t24-,25+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H30N2O2/c1-28(25(21-11-5-2-6-12-21)20-29-18-17-24(30)19-29)27(31)26(22-13-7-3-8-14-22)23-15-9-4-10-16-23/h2-16,24-26,30H,17-20H2,1H3/t24?,25-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H30N2O6S/c1-16(2)25(32)34-15-18-11-8-12-19(13-18)35-26(33)22-27(3,4)36-24-21(23(31)29(22)24)28-20(30)14-17-9-6-5-7-10-17/h5-13,16,21-22,24H,14-15H2,1-4H3,(H,28,30)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H30N2O6S/c1-16(2)25(32)34-15-18-11-8-12-19(13-18)35-26(33)22-27(3,4)36-24-21(23(31)29(22)24)28-20(30)14-17-9-6-5-7-10-	0	(Meng et al., 2021)

17/h5-13,16,21-22,24H,14-15H2,1-4H3,(H,28,30)/t21-,22-,24-/m0/s1	
InChI=1S/C27H30N2O6S/c1-16(2)25(32)34-15-18-11-8-12-19(13-18)35-26(33)22-27(3,4)36-24-21(23(31)29(22)24)28-20(30)14-17-9-6-5-7-10-17/h5-13,16,21-22,24H,14-15H2,1-4H3,(H,28,30)/t21-,22-,24-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H30N2O6S/c1-16(2)25(32)34-15-18-11-8-12-19(13-18)35-26(33)22-27(3,4)36-24-21(23(31)29(22)24)28-20(30)14-17-9-6-5-7-10-17/h5-13,16,21-22,24H,14-15H2,1-4H3,(H,28,30)/t21-,22+,24-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H30N2O6S/c1-16(2)25(32)34-15-18-11-8-12-19(13-18)35-26(33)22-27(3,4)36-24-21(23(31)29(22)24)28-20(30)14-17-9-6-5-7-10-17/h5-13,16,21-22,24H,14-15H2,1-4H3,(H,28,30)/t21?,22-,24-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H30N4O/c32-27-28-24-14-7-8-15-25(24)31(27)17-9-16-29-18-20-30(21-19-29)26(22-10-3-1-4-11-22)23-12-5-2-6-13-23/h1-8,10-15,26H,9,16-21H2,(H,28,32)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H30N4O2/c1-2-20-7-9-24(10-8-20)33-26-17-25(28-19-29-26)30-14-12-22(13-15-30)27(32)31-16-11-21-5-3-4-6-23(21)18-31/h3-10,17,19,22H,2,11-16,18H2,1H3	1 (Wu et al., 2018)
InChI=1S/C27H30N4O3/c28-18-20-4-6-21(7-5-20)27(33)30-16-17-31(26(32)19-30)23-8-10-24(11-9-23)34-25-12-14-29(15-13-25)22-2-1-3-22/h4-11,22,25H,1-3,12-17,19H2	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H31N3O3/c1-19-6-8-22-23(28-19)4-3-5-25(22)32-15-14-30-12-10-20(11-13-30)16-21-7-9-26-24(17-21)29(2)27(31)18-33-26/h3-9,17,20H,10-16,18H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H31N3O6/c1-17-13-22(30(33)34)25(27(32)36-12-11-29(4)16-20-9-7-6-8-10-20)24(23(17)26(31)35-5)21-14-18(2)28-19(3)15-21/h6-10,13-15,21,28H,11-12,16H2,1-5H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H31N7O5/c1-5-6-11-24-28-18(2)23(16-25(36)33(3)4)27(35)34(24)17-19-12-14-20(15-13-19)21-9-7-8-10-22(21)26-29-31-32-30-26/h7-10,12-15H,5-6,11,16-17H2,1-4H3,(H,29,30,31,32)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H32N2O3/c1-31-25-14-13-23(19-26(25)32-2)24(30)20-28-15-17-29(18-16-28)27(21-9-5-3-6-10-21)22-11-7-4-8-12-22/h3-14,19,24,27,30H,15-18,20H2,1-2H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H32N2O3/c1-31-25-14-13-23(19-26(25)32-2)24(30)20-28-15-17-29(18-16-28)27(21-9-5-3-6-10-21)22-11-7-4-8-12-22/h3-14,19,24,27,30H,15-18,20H2,1-2H3/t24-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H32N2O6S2/c1-5-28(6-2)22-13-9-20(10-14-22)27(21-11-15-23(16-12-21)29(7-3)8-4)25-19-24(36(30,31)32)17-18-26(25)37(33,34)35/h9-19H,5-8H2,1-4H3,(H-,30,31,32,33,34,35)/p+1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H32N4O/c1-30(2)24-14-16-31(17-15-24)19-20-8-10-22(11-9-20)27(32)29-26-18-23(12-13-25(26)28)21-6-4-3-5-7-21/h3-13,18,24H,14-17,19,28H2,1-2H3,(H,29,32)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H32N4O3S2/c1-3-34-23-13-11-21(28-18-23)16-26-29-24-17-22(30(2)36(32,33)27-10-7-15-35-27)12-14-25(24)31(26)19-20-8-5-4-6-9-20/h7,10-15,17-18,20H,3-6,8-9,16,19H2,1-2H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H32N6/c1-3-32-13-15-33(16-14-32)18-21-9-11-23(12-10-21)25-17-24-26(28-19-29-27(24)31-25)30-20(2)22-7-5-4-6-8-22/h4-12,17,19-20H,3,13-16,18H2,1-2H3,(H2,28,29,30,31)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H33CIN4O2/c1-19(2)18-34-25-11-10-24(28)15-23(25)17-32-20(3)14-26(30-32)29-27(33)22-8-6-21(7-9-22)16-31-12-4-5-13-31/h6-11,14-15,19H,4-5,12-13,16-18H2,1-3H3,(H,29,30,33)	1 (Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C27H33FN2O2/c1-21-6-4-7-23(20-21)27(26(32)30-16-2-3-17-30)13-18-29(19-14-27)15-5-8-25(31)22-9-11-24(28)12-10-22/h4,6-7,9-12,20H,2-3,5,8,13-19H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H33N3O6S/c1-27(2)23-14-11-20(36-3)17-22(23)24(31)30(25(27)32)16-15-18-9-12-21(13-10-18)37(34,35)29-26(33)28-19-7-5-4-6-8-19/h9-14,17,19H,4-8,15-16H2,1-3H3,(H2,28,29,33)	0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C27H33N3O8/c1-26(37)13-7-6-8-16(31)17(13)21(32)18-14(26)11-15-20(29(2)3)22(33)19(24(35)27(15,38)23(18)34)25(36)28-12-30-9-4-5-10-30/h6-8,14-15,20,31-32,35,37-38H,4-5,9-12H2,1-3H3,(H,28,36)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H33N3O8/c1-26(37)13-7-6-8-16(31)17(13)21(32)18-14(26)11-15-20(29(2)3)22(33)19(24(35)27(15,38)23(18)34)25(36)28-12-30-9-4-5-10-30/h6-8,14-15,20,31-32,35,37-38H,4-5,9-12H2,1-3H3,(H,28,36)/t14-,15-,20-,26?,27?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H33N3O8/c1-26(37)13-7-6-8-16(31)17(13)21(32)18-14(26)11-15-20(29(2)3)22(33)19(24(35)27(15,38)23(18)34)25(36)28-12-30-9-4-5-10-30/h6-8,14-15,20,31-32,35,37-38H,4-5,9-12H2,1-3H3,(H,28,36)/t14-,15-,20-,26+,27-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H33N3O8/c1-26(37)13-7-6-8-16(31)17(13)21(32)18-14(26)11-15-20(29(2)3)22(33)19(24(35)27(15,38)23(18)34)25(36)28-12-30-9-4-5-10-30/h6-8,14-15,20,31-32,35,37-38H,4-5,9-12H2,1-3H3,(H,28,36)/t14-,15-,20-,26+,27-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H33N3O8/c1-26(37)13-7-6-8-16(31)17(13)21(32)18-14(26)11-15-20(29(2)3)22(33)19(24(35)27(15,38)23(18)34)25(36)28-12-30-9-4-5-10-30/h6-8,14-15,20,31-32,35,37-38H,4-5,9-12H2,1-3H3,(H,28,36)/t14-,15-,20+,26+,27-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H33N3O8/c1-26(37)13-7-6-8-16(31)17(13)21(32)18-14(26)11-15-20(29(2)3)22(33)19(24(35)27(15,38)23(18)34)25(36)28-12-30-9-4-5-10-30/h6-8,14-15,20,31,33-34,37-38H,4-5,9-12H2,1-3H3,(H,28,36)/t14-,15-,20-,26?,27?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H34F2O7/c1-5-6-23(34)36-26(22(33)14-35-15(2)30)10-8-17-18-12-20(28)19-11-16(31)7-9-24(19,3)27(18,29)21(32)13-25(17,26)4/h7,9,11,17-18,20-21,32H,5-6,8,10,12-14H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H34F2O7/c1-5-6-23(34)36-26(22(33)14-35-15(2)30)10-8-17-18-12-20(28)19-11-16(31)7-9-24(19,3)27(18,29)21(32)13-25(17,26)4/h7,9,11,17-18,20-21,32H,5-6,8,10,12-14H2,1-4H3/t17-,18-,20-,21-,24-,25-,26-,27-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H34F2O7/c1-5-6-23(34)36-26(22(33)14-35-15(2)30)10-8-17-18-12-20(28)19-11-16(31)7-9-24(19,3)27(18,29)21(32)13-25(17,26)4/h7,9,11,17-18,20-21,32H,5-6,8,10,12-14H2,1-4H3/t17-,18-,20-,21-,24?,25?,26?,27?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H34F2O7/c1-5-6-23(34)36-26(22(33)14-35-15(2)30)10-8-17-18-12-20(28)19-11-16(31)7-9-24(19,3)27(18,29)21(32)13-25(17,26)4/h7,9,11,17-18,20-21,32H,5-6,8,10,12-14H2,1-4H3/t17-,18-,20-,21?,24?,25?,26?,27?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H34F2O7/c1-5-6-23(34)36-26(22(33)14-35-15(2)30)10-8-17-18-12-20(28)19-11-16(31)7-9-24(19,3)27(18,29)21(32)13-25(17,26)4/h7,9,11,17-18,20-21,32H,5-6,8,10,12-14H2,1-4H3/t17-,18-,20-,21+,24-,25-,26-,27-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H34F2O7/c1-5-6-23(34)36-26(22(33)14-35-15(2)30)10-8-17-18-12-20(28)19-11-16(31)7-9-24(19,3)27(18,29)21(32)13-25(17,26)4/h7,9,11,17-18,20-21,32H,5-6,8,10,12-14H2,1-4H3/t17-,18?,20-,21-,24-,25-,26-,27-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H34F2O7/c1-5-6-23(34)36-26(22(33)14-35-15(2)30)10-8-17-18-12-20(28)19-11-16(31)7-9-24(19,3)27(18,29)21(32)13-25(17,26)4/h7,9,11,17-18,20-21,32H,5-6,8,10,12-14H2,1-4H3/t17-,18+,20-,21+,24+,25+,26-,27-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H34F2O7/c1-6-22(33)34-13-20(32)27-21(35-23(2,3)36-27)11-15-16-10-18(28)17-9-14(30)7-8-24(17,4)26(16,29)19(31)12-25(15,27)5/h7-9,15-16,18-19,21,31H,6,10-13H2,1-5H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H34F2O7/c1-6-22(33)34-13-20(32)27-21(35-23(2,3)36-27)11-15-16-10-18(28)17-9-14(30)7-8-24(17,4)26(16,29)19(31)12-25(15,27)5/h7-9,15-16,18-19,21,31H,6,10-13H2,1-5H3/t15-,16-,18-,19-,21+,24-,25-,26-,27+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H34F2O7/c1-6-22(33)34-13-20(32)27-21(35-23(2,3)36-27)11-15-16-10-18(28)17-9-14(30)7-8-24(17,4)26(16,29)19(31)12-25(15,27)5/h7-9,15-16,18-19,21,31H,6,10-13H2,1-5H3/t15-,16-,18-,19?,21-,24?,25?,26?,27?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H34F2O7/c1-6-22(33)34-13-20(32)27-21(35-23(2,3)36-27)11-15-16-10-18(28)17-9-14(30)7-8-24(17,4)26(16,29)19(31)12-25(15,27)5/h7-9,15-16,18-19,21,31H,6,10-13H2,1-5H3/t15-,16-,18-,19+,21-,24-,25-,26-,27-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H34F2O7/c1-6-22(33)34-13-20(32)27-21(35-23(2,3)36-27)11-15-16-10-18(28)17-9-14(30)7-8-24(17,4)26(16,29)19(31)12-25(15,27)5/h7-9,15-16,18-19,21,31H,6,10-13H2,1-5H3/t15-,16+,18-,19+,21-,24+,25+,26-,27+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H34F2O7/c1-6-22(33)34-13-20(32)27-21(35-23(2,3)36-27)11-15-16-10-18(28)17-9-14(30)7-8-24(17,4)26(16,29)19(31)12-25(15,27)5/h7-9,15-16,18-19,21,31H,6,10-13H2,1-5H3/t15-,16+,18-,19+,21-,24+,25+,26-,27+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

25(15,27)5/h7-9,15-16,18-19,21,31H,6,10-13H2,1-5H3/t15?,16?,18-,19?,21+,24?,25?,26-,27+/m0/s1	
InChI=1S/C27H34N2O7/c1-5-36-27(33)21(12-11-18-9-7-6-8-10-18)28-17(2)25(30)29-16-20-15-24(35-4)23(34-3)14-19(20)13-22(29)26(31)32/h6-10,14-15,17,21-22,28H,5,11-13,16H2,1-4H3,(H,31,32)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H34N2O7/c1-5-36-27(33)21(12-11-18-9-7-6-8-10-18)28-17(2)25(30)29-16-20-15-24(35-4)23(34-3)14-19(20)13-22(29)26(31)32/h6-10,14-15,17,21-22,28H,5,11-13,16H2,1-4H3,(H,31,32)/t17-,21-,22-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H34N4O/c28-22-26(23-10-4-1-5-11-23,24-12-6-2-7-13-24)14-19-30-20-15-27(16-21-30,25(29)32)31-17-8-3-9-18-31/h1-2,4-7,10-13H,3,8-9,14-21H2,(H2,29,32)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H34O3/c1-27-16-15-22-21-11-9-20(28)17-19(21)8-10-23(22)24(27)12-13-25(27)30-26(29)14-7-18-5-3-2-4-6-18/h2-6,17,21-25H,7-16H2,1H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H35NO4/c1-29-24-5-3-4-21(17-24)16-20-10-14-28(15-11-20)23-8-12-27(30-2,13-9-23)22-6-7-25-26(18-22)32-19-31-25/h3-7,17-18,20,23H,8-16,19H2,1-2H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H35NO4/c1-5-9-24(3,30)19-16-25-10-11-27(19,31-4)23-26(25)12-14-28(13-6-2)20(25)15-17-7-8-18(29)22(32-23)21(17)26/h6-8,10-11,19-20,23,29-30H,2,5,9,12-16H2,1,3-4H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H35NO4/c1-5-9-24(3,30)19-16-25-10-11-27(19,31-4)23-26(25)12-14-28(13-6-2)20(25)15-17-7-8-18(29)22(32-23)21(17)26/h6-8,10-11,19-20,23,29-30H,2,5,9,12-16H2,1,3-4H3/t19-,20-,23+,24-,25+,26+,27+/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H35NO4/c1-5-9-24(3,30)19-16-25-10-11-27(19,31-4)23-26(25)12-14-28(13-6-2)20(25)15-17-7-8-18(29)22(32-23)21(17)26/h6-8,10-11,19-20,23,29-30H,2,5,9,12-16H2,1,3-4H3/t19-,20?,23-,24?,25?,26?,27?/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H35NO4/c1-5-9-24(3,30)19-16-25-10-11-27(19,31-4)23-26(25)12-14-28(13-6-2)20(25)15-17-7-8-18(29)22(32-23)21(17)26/h6-8,10-11,19-20,23,29-30H,2,5,9,12-16H2,1,3-4H3/t19-,20?,23-,24?,25?,26?,27?/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H35NO4/c1-5-9-24(3,30)19-16-25-10-11-27(19,31-4)23-26(25)12-14-28(13-6-2)20(25)15-17-7-8-18(29)22(32-23)21(17)26/h6-8,10-11,19-20,23,29-30H,2,5,9,12-16H2,1,3-4H3/t19?,20?,23-,24?,25?,26?,27?/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H35NO4/c1-5-9-24(3,30)19-16-25-10-11-27(19,31-4)23-26(25)12-14-28(13-6-2)20(25)15-17-7-8-18(29)22(32-23)21(17)26/h6-8,10-11,19-20,23,29-30H,2,5,9,12-16H2,1,3-4H3/t19?,20?,23?,24-,25?,26?,27?/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H35NO4/c1-5-9-26(30)19-16-24-10-11-27(19,32-4)23(31-3)25(24)12-14-28(13-6-2)20(24)15-17-7-8-18(29)22(26)21(17)25/h6-8,10-11,19-20,23,29-30H,2,5,9,12-16H2,1,3-4H3/t19-,20-,23-,24+,25+,26+,27+/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H35NO5/c1-6-9-24(3,30)19-15-25-10-11-27(19,31-5)23-26(25)12-13-28(4)20(25)14-17-7-8-18(32-16(2)29)22(33-23)21(17)26/h7-8,10-11,19-20,23,30H,6,9,12-15H2,1-5H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H35NO5/c1-6-9-24(3,30)19-15-25-10-11-27(19,31-5)23-26(25)12-13-28(4)20(25)14-17-7-8-18(32-16(2)29)22(33-23)21(17)26/h7-8,10-11,19-20,23,30H,6,9,12-15H2,1-5H3/t19-,20-,23+,24-,25+,26+,27+/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H35NO5/c1-6-9-24(3,30)19-15-25-10-11-27(19,31-5)23-26(25)12-13-28(4)20(25)14-17-7-8-18(32-16(2)29)22(33-23)21(17)26/h7-8,10-11,19-20,23,30H,6,9,12-15H2,1-5H3/t19-,20?,23-,24?,25?,26?,27?/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H35NO5/c1-6-9-24(3,30)19-15-25-10-11-27(19,31-5)23-26(25)12-13-28(4)20(25)14-17-7-8-18(32-16(2)29)22(33-23)21(17)26/h7-8,10-11,19-20,23,30H,6,9,12-15H2,1-5H3/t19-,20?,23+,24-,25?,26?,27?/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H35NO5/c1-6-9-24(3,30)19-15-25-10-11-27(19,31-5)23-26(25)12-13-28(4)20(25)14-17-7-8-18(32-16(2)29)22(33-23)21(17)26/h7-8,10-11,19-20,23,30H,6,9,12-15H2,1-5H3/t19?,20?,23-,24?,25?,26?,27?/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H35NO5/c1-6-9-26(30)19-15-24-10-11-27(19,32-5)23(26)25(24)12-13-28(3)20(24)14-17-7-8-18(33-16(2)29)22(31-4)21(17)25/h7-8,10-11,19-20,23,30H,6,9,12-15H2,1-5H3/t19-,20-,23+,24+,25+,26+,27+/m1/s1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C27H35NO8/c1-15-7-10-20(31)11-8-16(2)13-23(28-25(33)18(4)29)27(6)24(32)17(3)22(36-26(27)34)14-21(12-9-15)35-19(5)30/h7-9,11-13,17,20-23,31H,10,14H2,1-6H3,(H,28,33)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H35NO8/c1-15-7-10-20(31)11-8-16(2)13-23(28-25(33)18(4)29)27(6)24(32)17(3)22(36-26(27)34)14-21(12-9-15)35-19(5)30/h7-9,11-13,17,20-23,31H,10,14H2,1-6H3,(H,28,33)/b11-8+,12-9-,15-7-,16-13-/t17-,20+,21-,22-,23-,27+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H35NO8/c1-15-7-10-20(31)11-8-16(2)13-23(28-25(33)18(4)29)27(6)24(32)17(3)22(36-26(27)34)14-21(12-9-15)35-19(5)30/h7-9,11-13,17,20-23,31H,10,14H2,1-6H3,(H,28,33)/b11-8+,12-9+,15-7+,16-13+	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H35NO8/c1-15-7-10-20(31)11-8-16(2)13-23(28-25(33)18(4)29)27(6)24(32)17(3)22(36-26(27)34)14-21(12-9-15)35-19(5)30/h7-9,11-13,17,20-23,31H,10,14H2,1-6H3,(H,28,33)/b11-8+,12-9+,15-7+,16-13+/t17-,20-,21+,22-,23-,27?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H35NO8/c1-15-7-10-20(31)11-8-16(2)13-23(28-25(33)18(4)29)27(6)24(32)17(3)22(36-26(27)34)14-21(12-9-15)35-19(5)30/h7-9,11-13,17,20-23,31H,10,14H2,1-6H3,(H,28,33)/t17-,20+,21-,22-,23-,27+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H35NO8/c1-15-7-10-20(31)11-8-16(2)13-23(28-25(33)18(4)29)27(6)24(32)17(3)22(36-26(27)34)14-21(12-9-15)35-19(5)30/h7-9,11-13,17,20-23,31H,10,14H2,1-6H3,(H,28,33)/t17-,20+,21+,22+,23-,27+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H36ClFO5/c1-14-9-16-17-11-19(29)18-10-15(30)7-8-26(18,6)27(17,28)21(32)12-25(16,5)22(14)20(31)13-34-23(33)24(2,3)4/h7-8,10,14,16-17,19,21-22,32H,9,11-13H2,1-6H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H36ClFO5/c1-14-9-16-17-11-19(29)18-10-15(30)7-8-26(18,6)27(17,28)21(32)12-25(16,5)22(14)20(31)13-34-23(33)24(2,3)4/h7-8,10,14,16-17,19,21-22,32H,9,11-13H2,1-6H3/t14-,16-,17-,19-,21?,22?,25?,26?,27?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H36ClFO5/c1-14-9-16-17-11-19(29)18-10-15(30)7-8-26(18,6)27(17,28)21(32)12-25(16,5)22(14)20(31)13-34-23(33)24(2,3)4/h7-8,10,14,16-17,19,21-22,32H,9,11-13H2,1-6H3/t14-,16-,17+,19-,21+,22+,25+,26+,27-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H36ClFO5/c1-14-9-16-17-11-19(29)18-10-15(30)7-8-26(18,6)27(17,28)21(32)12-25(16,5)22(14)20(31)13-34-23(33)24(2,3)4/h7-8,10,14,16-17,19,21-22,32H,9,11-13H2,1-6H3/t14-,16?,17?,19+,21?,22?,25?,26?,27+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H36ClFO5/c1-14-9-16-17-11-19(29)18-10-15(30)7-8-26(18,6)27(17,28)21(32)12-25(16,5)22(14)20(31)13-34-23(33)24(2,3)4/h7-8,10,14,16-17,19,21-22,32H,9,11-13H2,1-6H3/t14-,16+,17?,19+,21+,22-,25+,26+,27+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H36ClFO5/c1-14-9-16-17-11-19(29)18-10-15(30)7-8-26(18,6)27(17,28)21(32)12-25(16,5)22(14)20(31)13-34-23(33)24(2,3)4/h7-8,10,14,16-17,19,21-22,32H,9,11-13H2,1-6H3/t14-,16+,17+,19-,21-,22+,25-,26+,27+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H36F2O5/c1-14-9-16-17-11-19(28)18-10-15(30)7-8-26(18,6)27(17,29)21(32)12-25(16,5)22(14)20(31)13-34-23(33)24(2,3)4/h7-8,10,14,16-17,19,21-22,32H,9,11-13H2,1-6H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H36F2O5/c1-14-9-16-17-11-19(28)18-10-15(30)7-8-26(18,6)27(17,29)21(32)12-25(16,5)22(14)20(31)13-34-23(33)24(2,3)4/h7-8,10,14,16-17,19,21-22,32H,9,11-13H2,1-6H3/t14-,16-,17-,19-,21?,22?,25?,26?,27?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H36F2O5/c1-14-9-16-17-11-19(28)18-10-15(30)7-8-26(18,6)27(17,29)21(32)12-25(16,5)22(14)20(31)13-34-23(33)24(2,3)4/h7-8,10,14,16-17,19,21-22,32H,9,11-13H2,1-6H3/t14-,16-,17-,19-,21+,22+,25-,26-,27-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H36F2O5/c1-14-9-16-17-11-19(28)18-10-15(30)7-8-26(18,6)27(17,29)21(32)12-25(16,5)22(14)20(31)13-34-23(33)24(2,3)4/h7-8,10,14,16-17,19,21-22,32H,9,11-13H2,1-6H3/t14-,16-,17+,19-,21+,22+,25+,26+,27-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H36F2O5/c1-14-9-16-17-11-19(28)18-10-15(30)7-8-26(18,6)27(17,29)21(32)12-25(16,5)22(14)20(31)13-34-23(33)24(2,3)4/h7-8,10,14,16-17,19,21-22,32H,9,11-13H2,1-6H3/t14-,16+,17?,19+,21+,22-,25+,26+,27+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H36F2O5/c1-14-9-16-17-11-19(28)18-10-15(30)7-8-26(18,6)27(17,29)21(32)12-25(16,5)22(14)20(31)13-34-23(33)24(2,3)4/h7-8,10,14,16-17,19,21-22,32H,9,11-13H2,1-6H3/t14-,16+,17+,19+,21+,22-,25+,26+,27+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H36F2O6/c1-14-9-16-17-11-19(28)18-10-15(30)7-8-24(18,5)26(17,29)20(31)12-25(16,6)27(14,34)21(32)13-35-22(33)23(2,3)4/h7-	1	(Meng et al., 2021)

8,10,14,16-17,19-20,31,34H,9,11-13H2,1-6H3

InChI=1S/C27H36F2O6/c1-14-9-16-17-11-19(28)18-10-15(30)7-8-24(18,5)26(17,29)20(31)12-25(16,6)27(14,34)21(32)13-35-22(33)23(2,3)4/h7-8,10,14,16-17,19-20,31,34H,9,11-13H2,1-6H3/t14-,16-,17-,19-,20-,24?,25?,26?,27?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H36F2O6/c1-14-9-16-17-11-19(28)18-10-15(30)7-8-24(18,5)26(17,29)20(31)12-25(16,6)27(14,34)21(32)13-35-22(33)23(2,3)4/h7-8,10,14,16-17,19-20,31,34H,9,11-13H2,1-6H3/t14-,16-,17+,19-,20+,24+,25+,26-,27-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H36F2O6/c1-14-9-16-17-11-19(28)18-10-15(30)7-8-24(18,5)26(17,29)20(31)12-25(16,6)27(14,34)21(32)13-35-22(33)23(2,3)4/h7-8,10,14,16-17,19-20,31,34H,9,11-13H2,1-6H3/t14-,16?,17?,19+,20+,24+,25+,26+,27+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H36F2O6/c1-14-9-16-17-11-19(28)18-10-15(30)7-8-24(18,5)26(17,29)20(31)12-25(16,6)27(14,34)21(32)13-35-22(33)23(2,3)4/h7-8,10,14,16-17,19-20,31,34H,9,11-13H2,1-6H3/t14-,16+,17?,19+,20+,24?,25?,26+,27+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H36F2O6/c1-14-9-16-17-11-19(28)18-10-15(30)7-8-24(18,5)26(17,29)20(31)12-25(16,6)27(14,34)21(32)13-35-22(33)23(2,3)4/h7-8,10,14,16-17,19-20,31,34H,9,11-13H2,1-6H3/t14-,16+,17+,19+,20-,24+,25-,26+,27-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H36FN3O/c1-3-29(4-2)19-22-5-8-24-18-26(12-9-23(24)17-22)31-16-15-30(20-27(31)32)14-13-21-6-10-25(28)11-7-21/h5-8,10-11,17,26H,3-4,9,12-16,18-20H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H36N2O4/c1-4-33-25-17-20(12-13-22(25)27(31)32)18-26(30)28-23(16-19(2)3)21-10-6-7-11-24(21)29-14-8-5-9-15-29/h6-7,10-13,17,19,23H,4-5,8-9,14-16,18H2,1-3H3,(H,28,30)(H,31,32)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H36N2O4/c1-4-33-25-17-20(12-13-22(25)27(31)32)18-26(30)28-23(16-19(2)3)21-10-6-7-11-24(21)29-14-8-5-9-15-29/h6-7,10-13,17,19,23H,4-5,8-9,14-16,18H2,1-3H3,(H,28,30)(H,31,32)/t23-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H36N2O4/c1-4-33-25-17-20(12-13-22(25)27(31)32)18-26(30)28-23(16-19(2)3)21-10-6-7-11-24(21)29-14-8-5-9-15-29/h6-7,10-13,17,19,23H,4-5,8-9,14-16,18H2,1-3H3,(H,28,30)(H,31,32)/t23-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H36O7/c1-6-23(32)34-27(22(31)14-33-16(3)28)10-8-19-18-11-15(2)20-12-17(29)7-9-25(20,4)24(18)21(30)13-26(19,27)5/h7,9,12,15,18-19,21,24,30H,6,8,10-11,13-14H2,1-5H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H36O7/c1-6-23(32)34-27(22(31)14-33-16(3)28)10-8-19-18-11-15(2)20-12-17(29)7-9-25(20,4)24(18)21(30)13-26(19,27)5/h7,9,12,15,18-19,21,24,30H,6,8,10-11,13-14H2,1-5H3/t15-,18-,19-,21-,24+,25-,26-,27-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H36O7/c1-6-23(32)34-27(22(31)14-33-16(3)28)10-8-19-18-11-15(2)20-12-17(29)7-9-25(20,4)24(18)21(30)13-26(19,27)5/h7,9,12,15,18-19,21,24,30H,6,8,10-11,13-14H2,1-5H3/t15-,18-,19-,21-,24+,25?,26?,27?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H36O7/c1-6-23(32)34-27(22(31)14-33-16(3)28)10-8-19-18-11-15(2)20-12-17(29)7-9-25(20,4)24(18)21(30)13-26(19,27)5/h7,9,12,15,18-19,21,24,30H,6,8,10-11,13-14H2,1-5H3/t15-,18-,19-,21?,24+,25?,26?,27?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H36O7/c1-6-23(32)34-27(22(31)14-33-16(3)28)10-8-19-18-11-15(2)20-12-17(29)7-9-25(20,4)24(18)21(30)13-26(19,27)5/h7,9,12,15,18-19,21,24,30H,6,8,10-11,13-14H2,1-5H3/t15-,18-,19-,21+,24-,25-,26-,27-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H36O7/c1-6-23(32)34-27(22(31)14-33-16(3)28)10-8-19-18-11-15(2)20-12-17(29)7-9-25(20,4)24(18)21(30)13-26(19,27)5/h7,9,12,15,18-19,21,24,30H,6,8,10-11,13-14H2,1-5H3/t15-,18+,19-,21+,24+,25+,26+,27-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H36O8/c1-5-22(31)34-15-21(30)27(35-24(32)33-6-2)12-10-19-18-8-7-16-13-17(28)9-11-25(16,3)23(18)20(29)14-26(19,27)4/h9,11,13,18-20,23,29H,5-8,10,12,14-15H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H36O8/c1-5-22(31)34-15-21(30)27(35-24(32)33-6-2)12-10-19-18-8-7-16-13-17(28)9-11-25(16,3)23(18)20(29)14-26(19,27)4/h9,11,13,18-20,23,29H,5-8,10,12,14-15H2,1-4H3/t18-,19-,20-,23+,25-,26-,27-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H36O8/c1-5-22(31)34-15-21(30)27(35-24(32)33-6-2)12-10-19-18-8-7-16-13-17(28)9-11-25(16,3)23(18)20(29)14-26(19,27)4/h9,11,13,18-20,23,29H,5-8,10,12,14-15H2,1-4H3/t18-,19-,20-,23+,25?,26?,27?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C27H36O8/c1-5-22(31)34-15-21(30)27(35-24(32)33-6-2)12-10-19-18-8-7-16-13-17(28)9-11-25(16,3)23(18)20(29)14-26(19,27)4/h9,11,13,18-20,23,29H,5-8,10,12,14-15H2,1-4H3/t18-,19-,20-,23+,25+,26+,27-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H36O8/c1-5-22(31)34-15-21(30)27(35-24(32)33-6-2)12-10-19-18-8-7-16-13-17(28)9-11-25(16,3)23(18)20(29)14-26(19,27)4/h9,11,13,18-20,23,29H,5-8,10,12,14-15H2,1-4H3/t18-,19-,20-,23-,25-,26-,27+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H37FO6/c1-5-6-7-23(33)34-27(22(32)15-29)16(2)12-20-19-9-8-17-13-18(30)10-11-24(17,3)26(19,28)21(31)14-25(20,27)4/h10-11,13,16,19-21,29,31H,5-9,12,14-15H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H37FO6/c1-5-6-7-23(33)34-27(22(32)15-29)16(2)12-20-19-9-8-17-13-18(30)10-11-24(17,3)26(19,28)21(31)14-25(20,27)4/h10-11,13,16,19-21,29,31H,5-9,12,14-15H2,1-4H3/t16-,19-,20-,21-,24-,25-,26-,27-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H37FO6/c1-5-6-7-23(33)34-27(22(32)15-29)16(2)12-20-19-9-8-17-13-18(30)10-11-24(17,3)26(19,28)21(31)14-25(20,27)4/h10-11,13,16,19-21,29,31H,5-9,12,14-15H2,1-4H3/t16-,19-,20-,21-,24?,25?,26?,27?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H37FO6/c1-5-6-7-23(33)34-27(22(32)15-29)16(2)12-20-19-9-8-17-13-18(30)10-11-24(17,3)26(19,28)21(31)14-25(20,27)4/h10-11,13,16,19-21,29,31H,5-9,12,14-15H2,1-4H3/t16-,19-,20+,21-,24-,25-,26+,27-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H37FO6/c1-5-6-7-23(33)34-27(22(32)15-29)16(2)12-20-19-9-8-17-13-18(30)10-11-24(17,3)26(19,28)21(31)14-25(20,27)4/h10-11,13,16,19-21,29,31H,5-9,12,14-15H2,1-4H3/t16-,19+,20+,21-,24+,25+,26+,27+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H37N3O7S/c1-18(2)15-30(38(33,34)21-10-8-20(28)9-11-21)16-24(31)23(14-19-6-4-3-5-7-19)29-27(32)37-25-17-36-26-22(25)12-13-35-26/h3-11,18,22-26,31H,12-17,28H2,1-2H3,(H,29,32)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H37N7O2/c1-29-25-12-4-3-11-24(25)26(35)30-14-15-32-27(33-21-28)31-13-8-18-36-23-10-7-9-22(19-23)20-34-16-5-2-6-17-34/h3-4,7,9-12,19,29H,2,5-6,8,13-18,20H2,1H3,(H,30,35)(H2,31,32,33)	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C27H38N2O4/c1-20(2)27(19-28,22-10-12-24(31-5)26(18-22)33-7)14-8-15-29(3)16-13-21-9-11-23(30-4)25(17-21)32-6/h9-12,17-18,20H,8,13-16H2,1-7H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H38N2O4/c1-20(2)27(19-28,22-10-12-24(31-5)26(18-22)33-7)14-8-15-29(3)16-13-21-9-11-23(30-4)25(17-21)32-6/h9-12,17-18,20H,8,13-16H2,1-7H3/p+1/t27-/m1/s1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C27H38N2O4/c1-20(2)27(19-28,22-10-12-24(31-5)26(18-22)33-7)14-8-15-29(3)16-13-21-9-11-23(30-4)25(17-21)32-6/h9-12,17-18,20H,8,13-16H2,1-7H3/t27-/m0/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C27H38N2O4/c1-20(2)27(19-28,22-10-12-24(31-5)26(18-22)33-7)14-8-15-29(3)16-13-21-9-11-23(30-4)25(17-21)32-6/h9-12,17-18,20H,8,13-16H2,1-7H3/t27-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H38O4/c1-5-6-7-8-24(30)31-27(18(2)28)16-13-23-21-10-9-19-17-20(29)11-14-25(19,3)22(21)12-15-26(23,27)4/h9-10,17,21-23H,5-8,11-16H2,1-4H3/t21-,22-,23-,25+,26+,27+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H38O6/c1-24(2,3)14-22(31)33-15-21(30)27(32)11-9-19-18-7-6-16-12-17(28)8-10-25(16,4)23(18)20(29)13-26(19,27)5/h8,10,12,18-20,23,29,32H,6-7,9,11,13-15H2,1-5H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H38O6/c1-24(2,3)14-22(31)33-15-21(30)27(32)11-9-19-18-7-6-16-12-17(28)8-10-25(16,4)23(18)20(29)13-26(19,27)5/h8,10,12,18-20,23,29,32H,6-7,9,11,13-15H2,1-5H3/t18-,19-,20-,23+,25-,26-,27-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H38O6/c1-24(2,3)14-22(31)33-15-21(30)27(32)11-9-19-18-7-6-16-12-17(28)8-10-25(16,4)23(18)20(29)13-26(19,27)5/h8,10,12,18-20,23,29,32H,6-7,9,11,13-15H2,1-5H3/t18-,19-,20-,23+,25-,26+,27+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H38O6/c1-24(2,3)14-22(31)33-15-21(30)27(32)11-9-19-18-7-6-16-12-17(28)8-10-25(16,4)23(18)20(29)13-26(19,27)5/h8,10,12,18-20,23,29,32H,6-7,9,11,13-15H2,1-5H3/t18-,19-,20-,23+,25?,26?,27?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H38O6/c1-24(2,3)14-22(31)33-15-21(30)27(32)11-9-19-18-7-6-16-12-17(28)8-10-25(16,4)23(18)20(29)13-26(19,27)5/h8,10,12,18-	1	(Meng et al., 2021)

20,23,29,32H,6-7,9,11,13-15H ₂ ,1-5H ₃ /t18-,19-,20?,23+,25?,26?,27?/m0/s1	
InChI=1S/C27H38O6/c1-24(2,3)14-22(31)33-15-21(30)27(32)11-9-19-18-7-6-16-12-17(28)8-10-25(16,4)23(18)20(29)13-26(19,27)5/h8,10,12,18-20,23,29,32H,6-7,9,11,13-15H ₂ ,1-5H ₃ /t18-,19+,20-,23-,25-,26-,27+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H39ClN2O2/c1-26(2,3)22-15-19(16-23(25(22)32)27(4,5)6)17-29-11-13-30(14-12-29)18-24(31)20-7-9-21(28)10-8-20/h7-10,15-16,24,31-32H,11-14,17-18H ₂ ,1-6H ₃	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H39NO6/c1-5-28(6-2)15-23(32)34-16-22(31)27(33)12-10-20-19-8-7-17-13-18(29)9-11-25(17,3)24(19)21(30)14-26(20,27)4/h9,11,13,19-21,24,30,33H,5-8,10,12,14-16H ₂ ,1-4H ₃	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H39NO6/c1-5-28(6-2)15-23(32)34-16-22(31)27(33)12-10-20-19-8-7-17-13-18(29)9-11-25(17,3)24(19)21(30)14-26(20,27)4/h9,11,13,19-21,24,30,33H,5-8,10,12,14-16H ₂ ,1-4H ₃ /t19-,20-,21-,24+,25?,26?,27?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H39NO6/c1-5-28(6-2)15-23(32)34-16-22(31)27(33)12-10-20-19-8-7-17-13-18(29)9-11-25(17,3)24(19)21(30)14-26(20,27)4/h9,11,13,19-21,24,30,33H,5-8,10,12,14-16H ₂ ,1-4H ₃ /t19-,20-,21?,24+,25?,26?,27?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H39NO6/c1-5-28(6-2)15-23(32)34-16-22(31)27(33)12-10-20-19-8-7-17-13-18(29)9-11-25(17,3)24(19)21(30)14-26(20,27)4/h9,11,13,19-21,24,30,33H,5-8,10,12,14-16H ₂ ,1-4H ₃ /t19-,20-,21+,24+,25+,26-,27-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H39NO6/c1-5-28(6-2)15-23(32)34-16-22(31)27(33)12-10-20-19-8-7-17-13-18(29)9-11-25(17,3)24(19)21(30)14-26(20,27)4/h9,11,13,19-21,24,30,33H,5-8,10,12,14-16H ₂ ,1-4H ₃ /t19-,20+,21-,24-,25-,26-,27+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H39NO6/c1-5-28(6-2)15-23(32)34-16-22(31)27(33)12-10-20-19-8-7-17-13-18(29)9-11-25(17,3)24(19)21(30)14-26(20,27)4/h9,11,13,19-21,24,30,33H,5-8,10,12,14-16H ₂ ,1-4H ₃ /t19?,20?,21-,24?,25-,26-,27-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H40O3/c1-17(6-13-25(29)20-8-9-20)23-11-12-24-19(5-4-14-27(23,24)3)7-10-21-15-22(28)16-26(30)18(21)2/h6-7,10,13,17,20,22-26,28-30H,2,4-5,8-9,11-12,14-16H ₂ ,1,3H ₃ /b13-6+,19-7+,21-10+	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H41NO6/c1-5-28(6-2)15-23(32)34-16-22(31)27(33)12-10-20-19-8-7-17-13-18(29)9-11-25(17,3)24(19)21(30)14-26(20,27)4/h13,19-21,24,30,33H,5-12,14-16H ₂ ,1-4H ₃	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H41NO6/c1-5-28(6-2)15-23(32)34-16-22(31)27(33)12-10-20-19-8-7-17-13-18(29)9-11-25(17,3)24(19)21(30)14-26(20,27)4/h13,19-21,24,30,33H,5-12,14-16H ₂ ,1-4H ₃ /t19-,20-,21-,24+,25-,26-,27-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H41NO6/c1-5-28(6-2)15-23(32)34-16-22(31)27(33)12-10-20-19-8-7-17-13-18(29)9-11-25(17,3)24(19)21(30)14-26(20,27)4/h13,19-21,24,30,33H,5-12,14-16H ₂ ,1-4H ₃ /t19-,20-,21-,24+,25?,26?,27?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H41NO6/c1-5-28(6-2)15-23(32)34-16-22(31)27(33)12-10-20-19-8-7-17-13-18(29)9-11-25(17,3)24(19)21(30)14-26(20,27)4/h13,19-21,24,30,33H,5-12,14-16H ₂ ,1-4H ₃ /t19-,20-,21-,24+,25+,26+,27+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H41NO6/c1-5-28(6-2)15-23(32)34-16-22(31)27(33)12-10-20-19-8-7-17-13-18(29)9-11-25(17,3)24(19)21(30)14-26(20,27)4/h13,19-21,24,30,33H,5-12,14-16H ₂ ,1-4H ₃ /t19-,20+,21-,24-,25-,26-,27+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H41NO6/c1-5-28(6-2)15-23(32)34-16-22(31)27(33)12-10-20-19-8-7-17-13-18(29)9-11-25(17,3)24(19)21(30)14-26(20,27)4/h13,19-21,24,30,33H,5-12,14-16H ₂ ,1-4H ₃ /t19?,20?,21-,24?,25-,26-,27-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H42Cl2N2O6/c1-2-3-4-5-6-7-8-9-10-11-12-13-14-15-24(32)37-20-23(30-27(34)26(28)29)25(33)21-16-18-22(19-17-21)31(35)36/h16-19,23,25-26,33H,2-15,20H ₂ ,1H ₃ , (H,30,34)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H42N2O5S/c1-15-9-8-10-27(7)22(34-27)12-20(16(2)11-19-14-35-18(4)28-19)29-23(31)13-21(30)26(5,6)25(33)17(3)24(15)32/h11,14-15,17,20-22,24,30,32H,8-10,12-13H ₂ ,1-7H ₃ , (H,29,31)/b16-11+	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H44O/c1-19(2)8-6-9-21(4)25-15-16-26-22(10-7-17-27(25,26)5)12-13-23-18-24(28)14-11-20(23)3/h12-13,19,21,24-26,28H,3,6-11,14-18H ₂ ,1-2,4-5H ₃	0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C27H44O/c1-19(2)8-6-9-21(4)25-15-16-26-22(10-7-17-27(25,26)5)12-13-23-18-24(28)14-11-20(23)3/h12-13,19,21,24-26,28H,3,6-11,14-18H2,1-2,4-5H3/b22-12+,23-13-/t21-,24+,25-,26+,27-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H44O/c1-19(2)8-6-9-21(4)25-15-16-26-22(10-7-17-27(25,26)5)12-13-23-18-24(28)14-11-20(23)3/h12-13,19,21,24-26,28H,3,6-11,14-18H2,1-2,4-5H3/b22-12+,23-13+	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H44O2/c1-18(2)8-6-9-19(3)24-13-14-25-21(10-7-15-27(24,25)5)11-12-22-16-23(28)17-26(29)20(22)4/h11-12,18-19,23-26,28-29H,4,6-10,13-17H2,1-3,5H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H44O2/c1-18(2)8-6-9-19(3)24-13-14-25-21(10-7-15-27(24,25)5)11-12-22-16-23(28)17-26(29)20(22)4/h11-12,18-19,23-26,28-29H,4,6-10,13-17H2,1-3,5H3/b21-11+,22-12-/t19-,23-,24-,25+,26+,27-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H44O2/c1-18(2)8-6-9-19(3)24-13-14-25-21(10-7-15-27(24,25)5)11-12-22-16-23(28)17-26(29)20(22)4/h11-12,18-19,23-26,28-29H,4,6-10,13-17H2,1-3,5H3/b21-11+,22-12+	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H44O2/c1-19-10-13-23(28)18-22(19)12-11-21-9-7-17-27(5)24(14-15-25(21)27)20(2)8-6-16-26(3,4)29/h11-12,20,23-25,28-29H,1,6-10,13-18H2,2-5H3/b21-11+,22-12+	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H44O3/c1-18(8-6-14-26(3,4)30)23-12-13-24-20(9-7-15-27(23,24)5)10-11-21-16-22(28)17-25(29)19(21)2/h10-11,18,22-25,28-30H,2,6-9,12-17H2,1,3-5H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H44O3/c1-18(8-6-14-26(3,4)30)23-12-13-24-20(9-7-15-27(23,24)5)10-11-21-16-22(28)17-25(29)19(21)2/h10-11,18,22-25,28-30H,2,6-9,12-17H2,1,3-5H3/b20-10+,21-11-/t18-,22-,23-,24+,25+,27-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H44O3/c1-18(8-6-14-26(3,4)30)23-12-13-24-20(9-7-15-27(23,24)5)10-11-21-16-22(28)17-25(29)19(21)2/h10-11,18,22-25,28-30H,2,6-9,12-17H2,1,3-5H3/b20-10+,21-11+	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H44O3/c1-18(8-9-19(2)26(3,4)30)24-12-13-25-21(7-6-14-27(24,25)5)11-10-20-15-22(28)17-23(29)16-20/h8-11,18-19,22-25,28-30H,6-7,12-17H2,1-5H3/b9-8+,20-10?,21-11+	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C27H45N5O5/c1-25(2,3)20(30-24(37)31-26(4,5)6)23(36)32-13-15-17(27(15,7)8)18(32)22(35)29-16(19(33)21(28)34)12-14-10-9-11-14/h14-18,20H,9-13H2,1-8H3,(H2,28,34)(H,29,35)(H2,30,31,37)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H46O/c1-18(2)7-6-8-19(3)23-11-12-24-22-10-9-20-17-21(28)13-15-26(20,4)25(22)14-16-27(23,24)5/h9,18-19,21-25,28H,6-8,10-17H2,1-5H3/t19-,21-,22-,23-,24+,25+,26-,27+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C27H50N2O4/c1-20(2)27(19-28,22-10-12-24(31-5)26(18-22)33-7)14-8-15-29(3)16-13-21-9-11-23(30-4)25(17-21)32-6/h20-26H,8-18H2,1-7H3	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C27H58NO6P/c1-6-7-8-9-10-11-12-13-14-15-16-17-18-19-20-21-23-32-25-27(31-5)26-34-35(29,30)33-24-22-28(2,3)4/h27H,6-26H2,1-5H3	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C27H58NO6P/c1-6-7-8-9-10-11-12-13-14-15-16-17-18-19-20-21-23-32-25-27(31-5)26-34-35(29,30)33-24-22-28(2,3)4/h27H,6-26H2,1-5H3/p+1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H22F3N7O/c1-17-5-6-19(10-25(17)37-27-33-9-7-24(36-27)20-4-3-8-32-14-20)26(39)35-22-11-21(28(29,30)31)12-23(13-22)38-15-18(2)34-16-38/h3-16H,1-2H3,(H,35,39)(H,33,36,37)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H24N2O7/c1-15-10-24-26(28(34)30(15)7-6-16-2-4-18(31)5-3-16)19(13-25(32)37-24)20-11-17-12-22-23(36-9-8-35-22)14-21(17)29-27(20)33/h2-5,10-12,14,19,31H,6-9,13H2,1H3,(H,29,33)/t19-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C28H24O8/c1-31-17-7-5-15(6-8-17)19-13-25(29)35-20-10-9-18-27(30)24(36-28(18)26(19)20)12-16-11-22(33-3)23(34-4)14-21(16)32-2/h5-12,14,19H,13H2,1-4H3/b24-12+/t19-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H26F4N2OS/c29-22-9-6-19(7-10-22)27(35)20-12-16-33(17-13-20)14-3-15-34-23-4-1-2-5-25(23)36-26-11-8-21(18-	1	(Mazumdar et al.,

24(26)34)28(30,31)32/h1-2,4-11,18,20H,3,12-17H2	2023)
InChI=1S/C28H26N6O10S2/c35-23(18(16-4-2-1-3-5-16)31-24(36)19-20(27(38)39)30-14-29-19)32-21-25(37)34-22(28(40)41)17(13-45-26(21)34)12-33-9-6-15(7-10-33)8-11-46(42,43)44/h1-7,9-10,14,18,21,26H,8,11-13H2,(H5-,29,30,31,32,35,36,38,39,40,41,42,43,44)/p+1/t18-,21-,26-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C28H26N6O10S2/c35-23(18(16-4-2-1-3-5-16)31-24(36)19-20(27(38)39)30-14-29-19)32-21-25(37)34-22(28(40)41)17(13-45-26(21)34)12-33-9-6-15(7-10-33)8-11-46(42,43)44/h1-7,9-10,14,18,21,26H,8,11-13H2,(H5-,29,30,31,32,35,36,38,39,40,41,42,43,44)/t18-,21-,26-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C28H27ClF5NO/c29-26-12-7-21(18-25(26)28(32,33)34)27(36)13-16-35(17-14-27)15-1-2-24(19-3-8-22(30)9-4-19)20-5-10-23(31)11-6-20/h3-12,18,24,36H,1-2,13-17H2	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C28H27NO4S/c30-21-8-4-20(5-9-21)28-26(24-13-10-22(31)18-25(24)34-28)27(32)19-6-11-23(12-7-19)33-17-16-29-14-2-1-3-15-29/h4-13,18,30-31H,1-3,14-17H2	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H28ClF2N3O/c29-21-7-12-27-26(18-21)32-28(35)34(27)24-13-16-33(17-14-24)15-1-2-25(19-3-8-22(30)9-4-19)20-5-10-23(31)11-6-20/h3-12,18,24-25H,1-2,13-17H2,(H,32,35)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H28N2O2/c29-22-28(24-12-6-2-7-13-24,25-14-8-3-9-15-25)18-21-30-19-16-27(17-20-30,26(31)32)23-10-4-1-5-11-23/h1-15H,16-21H2,(H,31,32)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C28H28N6O10S2/c35-23(18(16-4-2-1-3-5-16)31-24(36)19-20(27(38)39)30-14-29-19)32-21-25(37)34-22(28(40)41)17(13-45-26(21)34)12-33-9-6-15(7-10-33)8-11-46(42,43)44/h1-7,9-10,14-15,18,21,26H,8,11-13H2,(H,29,30)(H,31,36)(H,32,35)(H,38,39)(H,40,41)(H,42,43,44)/t18-,21-,26+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H28O3/c1-31-26-7-6-23(21-2-3-22-12-24(27(29)30)5-4-20(22)11-21)13-25(26)28-14-17-8-18(15-28)10-19(9-17)16-28/h2-7,11-13,17-19H,8-10,14-16H2,1H3,(H,29,30)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C28H29F2N3O/c29-22-11-7-20(8-12-22)25(21-9-13-23(30)14-10-21)4-3-17-32-18-15-24(16-19-32)33-27-6-2-1-5-26(27)31-28(33)34/h1-2,5-14,24-25H,3-4,15-19H2,(H,31,34)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C28H29N5O2/c1-33(2)15-16-35-23-7-3-20(4-8-23)28-31-26(19-11-13-29-14-12-19)27(32-28)22-5-9-24-21(17-22)6-10-25(24)30-18-34/h3-5,7-9,11-14,17,34H,6,10,15-16,18H2,1-2H3,(H,31,32)/b30-25+	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H30N2O2/c29-27(31)28(23-7-3-1-4-8-23,24-9-5-2-6-10-24)25-14-17-30(20-25)16-13-21-11-12-26-22(19-21)15-18-32-26/h1-12,19,25H,13-18,20H2,(H2,29,31)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H30N2O2/c29-27(31)28(23-7-3-1-4-8-23,24-9-5-2-6-10-24)25-14-17-30(20-25)16-13-21-11-12-26-22(19-21)15-18-32-26/h1-12,19,25H,13-18,20H2,(H2,29,31)/t25-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H30N4O.2ClH/c29-18-21-5-8-23-19-32(16-13-22(23)17-21)15-12-20-6-9-24(10-7-20)31-28(33)26-11-14-30-27-4-2-1-3-25(26)27;;/h1-5,8,11,14,17,20,24H,6-7,9-10,12-13,15-16,19H2,(H,31,33);2*1H	1 (Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C28H30N4O/c29-18-21-5-8-23-19-32(16-13-22(23)17-21)15-12-20-6-9-24(10-7-20)31-28(33)26-11-14-30-27-4-2-1-3-25(26)27/h1-5,8,11,14,17,20,24H,6-7,9-10,12-13,15-16,19H2,(H,31,33)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H30N4O2/c33-28(18-22-8-12-26(13-9-22)34-21-23-6-2-1-3-7-23)30-25-11-10-24-20-29-32(27(24)19-25)17-16-31-14-4-5-15-31/h1-3,6-13,19-20H,4-5,14-18,21H2,(H,30,33)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H31FN2O/c1-4-28(32)14-12-24-22-10-5-19-15-25-18(16-26(19,2)23(22)11-13-27(24,28)3)17-30-31(25)21-8-6-20(29)7-9-21/h1,6-9,15,17,22-24,32H,5,10-14,16H2,2-3H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H31FN2O/c1-4-28(32)14-12-24-22-10-5-19-15-25-18(16-26(19,2)23(22)11-13-27(24,28)3)17-30-31(25)21-8-6-20(29)7-9-21/h1,6-	1 (Meng et al., 2021)

9,15,17,22-24,32H,5,10-14,16H2,2-3H3/t22-,23-,24-,26?,27?,28-/m0/s1	
InChI=1S/C28H31FN2O/c1-4-28(32)14-12-24-22-10-5-19-15-25-18(16-26(19,2)23(22)11-13-27(24,28)3)17-30-31(25)21-8-6-20(29)7-9-21/h1,6-9,15,17,22-24,32H,5,10-14,16H2,2-3H3/t22-,23+,24-,26+,27-,28-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H31FN2O/c1-4-28(32)14-12-24-22-10-5-19-15-25-18(16-26(19,2)23(22)11-13-27(24,28)3)17-30-31(25)21-8-6-20(29)7-9-21/h1,6-9,15,17,22-24,32H,5,10-14,16H2,2-3H3/t22-,23+,24+,26+,27-,28+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H31FN2O/c1-4-28(32)14-12-24-22-10-5-19-15-25-18(16-26(19,2)23(22)11-13-27(24,28)3)17-30-31(25)21-8-6-20(29)7-9-21/h1,6-9,15,17,22-24,32H,5,10-14,16H2,2-3H3/t22-,23+,24+,26+,27+,28+/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C28H31FN2O/c1-4-28(32)14-12-24-22-10-5-19-15-25-18(16-26(19,2)23(22)11-13-27(24,28)3)17-30-31(25)21-8-6-20(29)7-9-21/h1,6-9,15,17,22-24,32H,5,10-14,16H2,2-3H3/t22?,23-,24-,26?,27?,28-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H31FN4O/c1-34-25-12-8-21(9-13-25)14-17-32-18-15-24(16-19-32)30-28-31-26-4-2-3-5-27(26)33(28)20-22-6-10-23(29)11-7-22/h2-13,24H,14-20H2,1H3,(H,30,31)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H31FO5/c1-2-33-26(32)18-22(31)17-21(30)13-14-24-27(19-9-11-20(29)12-10-19)23-7-3-4-8-25(23)34-28(24)15-5-6-16-28/h3-4,7-14,21-22,30-31H,2,5-6,15-18H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H31FO5/c1-2-33-26(32)18-22(31)17-21(30)13-14-24-27(19-9-11-20(29)12-10-19)23-7-3-4-8-25(23)34-28(24)15-5-6-16-28/h3-4,7-14,21-22,30-31H,2,5-6,15-18H2,1H3/b14-13-/t21-,22+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H31FO5/c1-2-33-26(32)18-22(31)17-21(30)13-14-24-27(19-9-11-20(29)12-10-19)23-7-3-4-8-25(23)34-28(24)15-5-6-16-28/h3-4,7-14,21-22,30-31H,2,5-6,15-18H2,1H3/b14-13+	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C28H31FO5/c1-2-33-26(32)18-22(31)17-21(30)13-14-24-27(19-9-11-20(29)12-10-19)23-7-3-4-8-25(23)34-28(24)15-5-6-16-28/h3-4,7-14,21-22,30-31H,2,5-6,15-18H2,1H3/b14-13+/t21-,22-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C28H31FO5/c1-2-33-26(32)18-22(31)17-21(30)13-14-24-27(19-9-11-20(29)12-10-19)23-7-3-4-8-25(23)34-28(24)15-5-6-16-28/h3-4,7-14,21-22,30-31H,2,5-6,15-18H2,1H3/b14-13+/t21-,22-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H31FO5/c1-2-33-26(32)18-22(31)17-21(30)13-14-24-27(19-9-11-20(29)12-10-19)23-7-3-4-8-25(23)34-28(24)15-5-6-16-28/h3-4,7-14,21-22,30-31H,2,5-6,15-18H2,1H3/b14-13+/t21-,22+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H31FO5/c1-2-33-26(32)18-22(31)17-21(30)13-14-24-27(19-9-11-20(29)12-10-19)23-7-3-4-8-25(23)34-28(24)15-5-6-16-28/h3-4,7-14,21-22,30-31H,2,5-6,15-18H2,1H3/t21-,22-/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C28H31N5O5S/c1-28(2)22(27(37)38)33-25(36)21(26(33)39-28)32-24(35)20(17-7-4-3-5-8-17)31-19(34)15-16-9-11-18(12-10-16)23-29-13-6-14-30-23/h3-5,7-12,20-22,26H,6,13-15H2,1-2H3,(H,29,30)(H,31,34)(H,32,35)(H,37,38)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C28H31N5O5S/c1-28(2)22(27(37)38)33-25(36)21(26(33)39-28)32-24(35)20(17-7-4-3-5-8-17)31-19(34)15-16-9-11-18(12-10-16)23-29-13-6-14-30-23/h3-5,7-12,20-22,26H,6,13-15H2,1-2H3,(H,29,30)(H,31,34)(H,32,35)(H,37,38)/t20-,21-,22+,26-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H31N5O5S/c1-28(2)22(27(37)38)33-25(36)21(26(33)39-28)32-24(35)20(17-7-4-3-5-8-17)31-19(34)15-16-9-11-18(12-10-16)23-29-13-6-14-30-23/h3-5,7-12,20-22,26H,6,13-15H2,1-2H3,(H,29,30)(H,31,34)(H,32,35)(H,37,38)/t20-,21?,22-,26-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H31N5O5S/c1-28(2)22(27(37)38)33-25(36)21(26(33)39-28)32-24(35)20(17-7-4-3-5-8-17)31-19(34)15-16-9-11-18(12-10-16)23-29-13-6-14-30-23/h3-5,7-12,20-22,26H,6,13-15H2,1-2H3,(H,29,30)(H,31,34)(H,32,35)(H,37,38)/t20-,21+,22-,26+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H31N5O5S/c1-28(2)22(27(37)38)33-25(36)21(26(33)39-28)32-24(35)20(17-7-4-3-5-8-17)31-19(34)15-16-9-11-18(12-10-16)23-29-13-6-14-30-23/h3-5,7-12,20-22,26H,6,13-15H2,1-2H3,(H,29,30)(H,31,34)(H,32,35)(H,37,38)/t20-,21+,22+,26-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H32N2O/c1-31-25-15-9-8-14-24(25)20-29-27-23-16-18-30(19-17-23)28(27)26(21-10-4-2-5-11-21)22-12-6-3-7-13-22/h2-15,23,26-29H,16-20H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C28H32O15/c1-10-21(32)23(34)25(36)27(40-10)39-9-19-22(33)24(35)26(37)28(43-19)41-12-6-14(30)20-15(31)8-17(42-18(20)7-12)11-3-4-16(38-2)13(29)5-11/h3-8,10,19,21-30,32-37H,9H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H32O15/c1-10-21(32)23(34)25(36)27(40-10)39-9-19-22(33)24(35)26(37)28(43-19)41-12-6-14(30)20-15(31)8-17(42-18(20)7-12)11-3-4-16(38-2)13(29)5-11/h3-8,10,19,21-30,32-37H,9H2,1-2H3/t10-,19-,21+,22+,23-,24-,25-,26-,27-,28+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H32O15/c1-10-21(32)23(34)25(36)27(40-10)39-9-19-22(33)24(35)26(37)28(43-19)41-12-6-14(30)20-15(31)8-17(42-18(20)7-12)11-3-4-16(38-2)13(29)5-11/h3-8,10,19,21-30,32-37H,9H2,1-2H3/t10-,19+,21-,22+,23+,24-,25+,26+,27+,28+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H32O15/c1-10-21(32)23(34)25(36)27(40-10)39-9-19-22(33)24(35)26(37)28(43-19)41-12-6-14(30)20-15(31)8-17(42-18(20)7-12)11-3-4-16(38-2)13(29)5-11/h3-8,10,19,21-30,32-37H,9H2,1-2H3/t10-,19+,21+,22+,23-,24-,25-,26+,27-,28-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H32O15/c1-10-21(32)23(34)25(36)27(40-10)39-9-19-22(33)24(35)26(37)28(43-19)41-12-6-14(30)20-15(31)8-17(42-18(20)7-12)11-3-4-16(38-2)13(29)5-11/h3-8,10,19,21-30,32-37H,9H2,1-2H3/t10-,19+,21+,22+,23+,24+,25+,26+,27+,28+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H33CIN2/c1-28(2,3)25-13-9-22(10-14-25)21-30-17-19-31(20-18-30)27(23-7-5-4-6-8-23)24-11-15-26(29)16-12-24/h4-16,27H,17-21H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C28H33CIN2/c1-28(2,3)25-13-9-22(10-14-25)21-30-17-19-31(20-18-30)27(23-7-5-4-6-8-23)24-11-15-26(29)16-12-24/h4-16,27H,17-21H2,1-3H3/t27-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H33CIN2/c1-28(2,3)25-13-9-22(10-14-25)21-30-17-19-31(20-18-30)27(23-7-5-4-6-8-23)24-11-15-26(29)16-12-24/h4-16,27H,17-21H2,1-3H3/t27-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C28H33F2N3/c29-25-12-8-23(9-13-25)28(24-10-14-26(30)15-11-24)7-4-17-32-19-21-33(22-20-32)18-16-31-27-5-2-1-3-6-27/h1-3,5-6,8-15,28,31H,4,7,16-22H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C28H34F2O7/c1-24(2)36-22-11-16-17-10-19(29)18-9-15(31)7-8-25(18,3)27(17,30)20(32)12-26(16,4)28(22,37-24)21(33)13-35-23(34)14-5-6-14/h7-9,14,16-17,19-20,22,32H,5-6,10-13H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H34F2O7/c1-24(2)36-22-11-16-17-10-19(29)18-9-15(31)7-8-25(18,3)27(17,30)20(32)12-26(16,4)28(22,37-24)21(33)13-35-23(34)14-5-6-14/h7-9,14,16-17,19-20,22,32H,5-6,10-13H2,1-4H3/t16-,17-,19-,20-,22+,25+,26-,27+,28-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H34F2O7/c1-24(2)36-22-11-16-17-10-19(29)18-9-15(31)7-8-25(18,3)27(17,30)20(32)12-26(16,4)28(22,37-24)21(33)13-35-23(34)14-5-6-14/h7-9,14,16-17,19-20,22,32H,5-6,10-13H2,1-4H3/t16-,17-,19-,20?,22-,25?,26?,27?,28?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H34F2O7/c1-24(2)36-22-11-16-17-10-19(29)18-9-15(31)7-8-25(18,3)27(17,30)20(32)12-26(16,4)28(22,37-24)21(33)13-35-23(34)14-5-6-14/h7-9,14,16-17,19-20,22,32H,5-6,10-13H2,1-4H3/t16-,17?,19-,20-,22+,25-,26-,27-,28+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C28H34F2O7/c1-24(2)36-22-11-16-17-10-19(29)18-9-15(31)7-8-25(18,3)27(17,30)20(32)12-26(16,4)28(22,37-24)21(33)13-35-23(34)14-5-6-14/h7-9,14,16-17,19-20,22,32H,5-6,10-13H2,1-4H3/t16-,17+,19-,20+,22-,25+,26+,27-,28+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H34N4O2/c1-18-5-8-24-23(11-18)30-27(28(2,3)33)32(24)25-9-10-31(17-26(25)34-4)16-20-13-21-7-6-19(15-29)12-22(21)14-20/h5-8,11-12,20,25-26,33H,9-10,13-14,16-17H2,1-4H3/t20?,25?,26-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H35CIN4O/c29-23-12-11-22-10-9-21-6-1-2-7-24(21)32(25(22)20-23)16-5-15-31-18-13-28(14-19-31)27(34)30-26-8-3-4-17-33(26)28/h1-2,6-7,11-12,20,26H,3-5,8-10,13-19H2,(H,30,34)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H35CIN4O/c29-23-12-11-22-10-9-21-6-1-2-7-24(21)32(25(22)20-23)16-5-15-31-18-13-28(14-19-31)27(34)30-26-8-3-4-17-33(26)28/h1-2,6-7,11-12,20,26H,3-5,8-10,13-19H2,(H,30,34)/t26-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H35FO7/c1-16(30)34-15-22(33)28-23(35-26(36-28)9-4-5-10-26)13-20-19-7-6-17-12-18(31)8-11-24(17,2)27(19,29)21(32)14-25(20,28)3/h8,11-12,19-21,23,32H,4-7,9-10,13-15H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H35FO7/c1-16(30)34-15-22(33)28-23(35-26(36-28)9-4-5-10-26)13-20-19-7-6-17-12-18(31)8-11-24(17,2)27(19,29)21(32)14-	1	(Meng et al., 2021)

25(20,28)3/h8,11-12,19-21,23,32H,4-7,9-10,13-15H2,1-3H3/t19-,20-,21-,23-,24?,25?,27?,28?/m0/s1	
InChI=1S/C28H35FO7/c1-16(30)34-15-22(33)28-23(35-26(36-28)9-4-5-10-26)13-20-19-7-6-17-12-18(31)8-11-24(17,2)27(19,29)21(32)14-25(20,28)3/h8,11-12,19-21,23,32H,4-7,9-10,13-15H2,1-3H3/t19-,20-,21-,23+,24-,25-,27-,28+/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C28H35FO7/c1-16(30)34-15-22(33)28-23(35-26(36-28)9-4-5-10-26)13-20-19-7-6-17-12-18(31)8-11-24(17,2)27(19,29)21(32)14-25(20,28)3/h8,11-12,19-21,23,32H,4-7,9-10,13-15H2,1-3H3/t19-,20-,21-,23+,24+,25+,27+,28-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H35FO7/c1-16(30)34-15-22(33)28-23(35-26(36-28)9-4-5-10-26)13-20-19-7-6-17-12-18(31)8-11-24(17,2)27(19,29)21(32)14-25(20,28)3/h8,11-12,19-21,23,32H,4-7,9-10,13-15H2,1-3H3/t19-,20-,21?,23-,24?,25?,27?,28?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H35FO7/c1-16(30)34-15-22(33)28-23(35-26(36-28)9-4-5-10-26)13-20-19-7-6-17-12-18(31)8-11-24(17,2)27(19,29)21(32)14-25(20,28)3/h8,11-12,19-21,23,32H,4-7,9-10,13-15H2,1-3H3/t19-,20+,21-,23+,24-,25-,27+,28-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H35N3O7/c1-17(2)26-19(4)9-10-24(34)29-11-5-7-18(3)13-20(32)14-21(33)15-25-30-22(16-37-25)27(35)31-12-6-8-23(31)28(36)38-26/h5,7-10,13,16-17,19-20,26,32H,6,11-12,14-15H2,1-4H3,(H,29,34)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H35N3O7/c1-17(2)26-19(4)9-10-24(34)29-11-5-7-18(3)13-20(32)14-21(33)15-25-30-22(16-37-25)27(35)31-12-6-8-23(31)28(36)38-26/h5,7-10,13,16-17,19-20,26,32H,6,11-12,14-15H2,1-4H3,(H,29,34)/b7-5-,10-9-,18-13-	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H35N3O7/c1-17(2)26-19(4)9-10-24(34)29-11-5-7-18(3)13-20(32)14-21(33)15-25-30-22(16-37-25)27(35)31-12-6-8-23(31)28(36)38-26/h5,7-10,13,16-17,19-20,26,32H,6,11-12,14-15H2,1-4H3,(H,29,34)/b7-5-,10-9-,18-13-/t19-,20+,26-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H35N3O7/c1-17(2)26-19(4)9-10-24(34)29-11-5-7-18(3)13-20(32)14-21(33)15-25-30-22(16-37-25)27(35)31-12-6-8-23(31)28(36)38-26/h5,7-10,13,16-17,19-20,26,32H,6,11-12,14-15H2,1-4H3,(H,29,34)/b7-5+,10-9+,18-13-/t19-,20-,26+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H35N3O7/c1-17(2)26-19(4)9-10-24(34)29-11-5-7-18(3)13-20(32)14-21(33)15-25-30-22(16-37-25)27(35)31-12-6-8-23(31)28(36)38-26/h5,7-10,13,16-17,19-20,26,32H,6,11-12,14-15H2,1-4H3,(H,29,34)/b7-5+,10-9+,18-13+/t19-,20+,26-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H35N3O7/c1-17(2)26-19(4)9-10-24(34)29-11-5-7-18(3)13-20(32)14-21(33)15-25-30-22(16-37-25)27(35)31-12-6-8-23(31)28(36)38-26/h5,7-10,13,16-17,19-20,26,32H,6,11-12,14-15H2,1-4H3,(H,29,34)/t19-,20-,26-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C28H35N3O7/c1-17(2)26-19(4)9-10-24(34)29-11-5-7-18(3)13-20(32)14-21(33)15-25-30-22(16-37-25)27(35)31-12-6-8-23(31)28(36)38-26/h5,7-10,13,16-17,19-20,26,32H,6,11-12,14-15H2,1-4H3,(H,29,34)/t19-,20+,26+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H35NO2/c1-5-28(31)15-14-25-23-12-8-19-16-21(30)11-13-22(19)26(23)24(17-27(25,28)2)18-6-9-20(10-7-18)29(3)4/h1,6-7,9-10,19,23-25,31H,8,11-17H2,2-4H3/t19-,23+,24+,25-,27+,28-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H36O6/c1-5-26(3,24(29)30)33-22-14-10-20(11-15-22)28(18-8-7-9-19-28)21-12-16-23(17-13-21)34-27(4,6-2)25(31)32/h10-17H,5-9,18-19H2,1-4H3,(H,29,30)(H,31,32)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H37ClN4O/c29-24-12-11-23-10-9-22-7-2-3-8-25(22)33(26(23)21-24)18-6-15-31-19-13-28(14-20-31,27(30)34)32-16-4-1-5-17-32/h2-3,7-8,11-12,21H,1,4-6,9-10,13-20H2,(H2,30,34)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C28H37ClO7/c1-6-22(33)35-14-21(32)28(36-23(34)7-2)15(3)10-18-24-19(29)12-16-11-17(30)8-9-26(16,4)25(24)20(31)13-27(18,28)5/h8-9,11,15,18-20,24-25,31H,6-7,10,12-14H2,1-5H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H37ClO7/c1-6-22(33)35-14-21(32)28(36-23(34)7-2)15(3)10-18-24-19(29)12-16-11-17(30)8-9-26(16,4)25(24)20(31)13-27(18,28)5/h8-9,11,15,18-20,24-25,31H,6-7,10,12-14H2,1-5H3/t15-,18-,19-,20-,24+,25-,26?,27?,28?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H37ClO7/c1-6-22(33)35-14-21(32)28(36-23(34)7-2)15(3)10-18-24-19(29)12-16-11-17(30)8-9-26(16,4)25(24)20(31)13-27(18,28)5/h8-9,11,15,18-20,24-25,31H,6-7,10,12-14H2,1-5H3/t15-,18+,19-,20-,24-,25-,26+,27+,28+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H37ClO7/c1-6-22(33)35-14-21(32)28(36-23(34)7-2)15(3)10-18-24-19(29)12-16-11-17(30)8-9-26(16,4)25(24)20(31)13-27(18,28)5/h8-9,11,15,18-20,24-25,31H,6-7,10,12-14H2,1-5H3/t15-,18+,19-,20-,24+,25+,26-,27-,28+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C28H37ClO7/c1-6-22(33)35-14-21(32)28(36-23(34)7-2)15(3)10-18-24-19(29)12-16-11-17(30)8-9-26(16,4)25(24)20(31)13-27(18,28)5/h8-9,11,15,18-20,24-25,31H,6-7,10,12-14H2,1-5H3/t15-,18+,19-,20+,24-,25+,26+,27+,28+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H37ClO7/c1-6-23(33)35-15-22(32)28(36-24(34)7-2)16(3)12-20-19-9-8-17-13-18(30)10-11-25(17,4)27(19,29)21(31)14-26(20,28)5/h10-11,13,16,19-21,31H,6-9,12,14-15H2,1-5H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H37ClO7/c1-6-23(33)35-15-22(32)28(36-24(34)7-2)16(3)12-20-19-9-8-17-13-18(30)10-11-25(17,4)27(19,29)21(31)14-26(20,28)5/h10-11,13,16,19-21,31H,6-9,12,14-15H2,1-5H3/t16-,19-,20-,21-,25-,26-,27-,28-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C28H37ClO7/c1-6-23(33)35-15-22(32)28(36-24(34)7-2)16(3)12-20-19-9-8-17-13-18(30)10-11-25(17,4)27(19,29)21(31)14-26(20,28)5/h10-11,13,16,19-21,31H,6-9,12,14-15H2,1-5H3/t16-,19-,20-,21-,25-,26+,27-,28-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H37ClO7/c1-6-23(33)35-15-22(32)28(36-24(34)7-2)16(3)12-20-19-9-8-17-13-18(30)10-11-25(17,4)27(19,29)21(31)14-26(20,28)5/h10-11,13,16,19-21,31H,6-9,12,14-15H2,1-5H3/t16-,19-,20-,21-,25?,26?,27?,28?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H37ClO7/c1-6-23(33)35-15-22(32)28(36-24(34)7-2)16(3)12-20-19-9-8-17-13-18(30)10-11-25(17,4)27(19,29)21(31)14-26(20,28)5/h10-11,13,16,19-21,31H,6-9,12,14-15H2,1-5H3/t16-,19-,20+,21-,25-,26-,27+,28+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H37ClO7/c1-6-7-24(34)36-28(23(33)15-35-17(3)30)16(2)12-21-20-9-8-18-13-19(31)10-11-25(18,4)27(20,29)22(32)14-26(21,28)5/h10-11,13,16,20-22,32H,6-9,12,14-15H2,1-5H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H37ClO7/c1-6-7-24(34)36-28(23(33)15-35-17(3)30)16(2)12-21-20-9-8-18-13-19(31)10-11-25(18,4)27(20,29)22(32)14-26(21,28)5/h10-11,13,16,20-22,32H,6-9,12,14-15H2,1-5H3/t16-,20-,21-,22-,25?,26?,27?,28?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H37ClO7/c1-6-7-24(34)36-28(23(33)15-35-17(3)30)16(2)12-21-20-9-8-18-13-19(31)10-11-25(18,4)27(20,29)22(32)14-26(21,28)5/h10-11,13,16,20-22,32H,6-9,12,14-15H2,1-5H3/t16-,20-,21-,22+,25-,26+,27-,28+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H37ClO7/c1-6-7-24(34)36-28(23(33)15-35-17(3)30)16(2)12-21-20-9-8-18-13-19(31)10-11-25(18,4)27(20,29)22(32)14-26(21,28)5/h10-11,13,16,20-22,32H,6-9,12,14-15H2,1-5H3/t16-,20-,21+,22-,25-,26-,27+,28-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H37ClO7/c1-6-7-24(34)36-28(23(33)15-35-17(3)30)16(2)12-21-20-9-8-18-13-19(31)10-11-25(18,4)27(20,29)22(32)14-26(21,28)5/h10-11,13,16,20-22,32H,6-9,12,14-15H2,1-5H3/t16-,20+,21+,22+,25+,26+,27+,28+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C28H37FO7/c1-15(2)24(34)36-28(23(33)14-35-17(4)30)16(3)11-21-20-8-7-18-12-19(31)9-10-25(18,5)27(20,29)22(32)13-26(21,28)6/h9-10,12,15-16,20-22,32H,7-8,11,13-14H2,1-6H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H37FO7/c1-15(2)24(34)36-28(23(33)14-35-17(4)30)16(3)11-21-20-8-7-18-12-19(31)9-10-25(18,5)27(20,29)22(32)13-26(21,28)6/h9-10,12,15-16,20-22,32H,7-8,11,13-14H2,1-6H3/t16-,20-,21-,22-,25-,26-,27-,28-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H37FO7/c1-15(2)24(34)36-28(23(33)14-35-17(4)30)16(3)11-21-20-8-7-18-12-19(31)9-10-25(18,5)27(20,29)22(32)13-26(21,28)6/h9-10,12,15-16,20-22,32H,7-8,11,13-14H2,1-6H3/t16-,20-,21-,22-,25?,26?,27?,28?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H37FO7/c1-15(2)24(34)36-28(23(33)14-35-17(4)30)16(3)11-21-20-8-7-18-12-19(31)9-10-25(18,5)27(20,29)22(32)13-26(21,28)6/h9-10,12,15-16,20-22,32H,7-8,11,13-14H2,1-6H3/t16-,20-,21+,22-,25-,26-,27+,28-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H37FO7/c1-15(2)24(34)36-28(23(33)14-35-17(4)30)16(3)11-21-20-8-7-18-12-19(31)9-10-25(18,5)27(20,29)22(32)13-26(21,28)6/h9-10,12,15-16,20-22,32H,7-8,11,13-14H2,1-6H3/t16-,20+,21+,22-,25+,26-,27+,28-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H37FO7/c1-6-23(33)35-15-22(32)28(36-24(34)7-2)16(3)12-20-19-9-8-17-13-18(30)10-11-25(17,4)27(19,29)21(31)14-26(20,28)5/h10-11,13,16,19-21,31H,6-9,12,14-15H2,1-5H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H37FO7/c1-6-23(33)35-15-22(32)28(36-24(34)7-2)16(3)12-20-19-9-8-17-13-18(30)10-11-25(17,4)27(19,29)21(31)14-26(20,28)5/h10-11,13,16,19-21,31H,6-9,12,14-15H2,1-5H3/t16-,19-,20-,21-,25-,26-,27-,28-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C28H37FO7/c1-6-23(33)35-15-22(32)28(36-24(34)7-2)16(3)12-20-19-9-8-17-13-18(30)10-11-25(17,4)27(19,29)21(31)14-	1	(Meng et al., 2021)

26(20,28)5/h10-11,13,16,19-21,31H,6-9,12,14-15H2,1-5H3/t16-,19-,20-,21-,25?,26?,27?,28?/m0/s1	
InChI=1S/C28H37FO7/c1-6-23(33)35-15-22(32)28(36-24(34)7-2)16(3)12-20-19-9-8-17-13-18(30)10-11-25(17,4)27(19,29)21(31)14-26(20,28)5/h10-11,13,16,19-21,31H,6-9,12,14-15H2,1-5H3/t16-,19-,20-,21+,25-,26+,27-,28+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H37FO7/c1-6-23(33)35-15-22(32)28(36-24(34)7-2)16(3)12-20-19-9-8-17-13-18(30)10-11-25(17,4)27(19,29)21(31)14-26(20,28)5/h10-11,13,16,19-21,31H,6-9,12,14-15H2,1-5H3/t16-,19-,20+,21-,25-,26-,27+,28+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H37FO7/c1-6-23(33)35-15-22(32)28(36-24(34)7-2)16(3)12-20-19-9-8-17-13-18(30)10-11-25(17,4)27(19,29)21(31)14-26(20,28)5/h10-11,13,16,19-21,31H,6-9,12,14-15H2,1-5H3/t16-,19?,20?,21+,25+,26+,27+,28+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H37N3O3/c1-4-34-20-19-31-25-8-6-5-7-24(25)29-26(31)22-14-17-30(18-15-22)16-13-21-9-11-23(12-10-21)28(2,3)27(32)33/h5-12,22H,4,13-20H2,1-3H3,(H,32,33)	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C28H37N5O7/c1-17(2)12-23(28(39)40)33-27(38)22(14-18-6-4-3-5-7-18)32-25(36)16-30-24(35)15-31-26(37)21(29)13-19-8-10-20(34)11-9-19/h3-11,17,21-23,34H,12-16,29H2,1-2H3,(H,30,35)(H,31,37)(H,32,36)(H,33,38)(H,39,40)/t21-,22-,23-/m0/s1	0 (Platts et al., 2001)
InChI=1S/C28H37NO4/c1-5-25(2,30)20-15-26-10-11-28(20,32-4)24-27(26)12-13-29(16-17-6-7-17)21(26)14-18-8-9-19(31-3)23(33-24)22(18)27/h8-11,17,20-21,24,30H,5-7,12-16H2,1-4H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H37NO4/c1-5-25(2,30)20-15-26-10-11-28(20,32-4)24-27(26)12-13-29(16-17-6-7-17)21(26)14-18-8-9-19(31-3)23(33-24)22(18)27/h8-11,17,20-21,24,30H,5-7,12-16H2,1-4H3/t20-,21-,24+,25-,26+,27+,28+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H37NO4/c1-5-25(2,30)20-15-26-10-11-28(20,32-4)24-27(26)12-13-29(16-17-6-7-17)21(26)14-18-8-9-19(31-3)23(33-24)22(18)27/h8-11,17,20-21,24,30H,5-7,12-16H2,1-4H3/t20?,21?,24-,25?,26?,27?,28?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H37NO4/c1-5-25(2,30)23-21-17-13-27(17)19-12-16-8-9-18(31-3)22-20(16)26(27,24(33-22)28(21,23)32-4)10-11-29(19)14-15-6-7-15/h8-9,15,17,19,21,23-24,30H,5-7,10-14H2,1-4H3/t17-,19-,21+,23-,24+,25-,26-,27-,28-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H38N4O/c29-27(33)28(31-18-6-1-7-19-31)15-21-30(22-16-28)17-8-20-32-25-11-4-2-9-23(25)13-14-24-10-3-5-12-26(24)32/h2-5,9-12H,1,6-8,13-22H2,(H2,29,33)	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C28H38N6O6/c1-16(2)24(25(30)37)34-28(40)22(14-18-7-5-4-6-8-18)33-23(36)15-31-26(38)17(3)32-27(39)21(29)13-19-9-11-20(35)12-10-19/h4-12,16-17,21-22,24,35H,13-15,29H2,1-3H3,(H2,30,37)(H,31,38)(H,32,39)(H,33,36)(H,34,40)/t17-,21-,22-,24-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H38N6O6/c1-16(2)24(25(30)37)34-28(40)22(14-18-7-5-4-6-8-18)33-23(36)15-31-26(38)17(3)32-27(39)21(29)13-19-9-11-20(35)12-10-19/h4-12,16-17,21-22,24,35H,13-15,29H2,1-3H3,(H2,30,37)(H,31,38)(H,32,39)(H,33,36)(H,34,40)/t17-,21+,22+,24+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H39FO5/c1-5-6-7-8-24(33)34-15-23(32)25-16(2)11-19-18-13-21(29)20-12-17(30)9-10-27(20,3)26(18)22(31)14-28(19,25)4/h9-10,12,16,18-19,21-22,25-26,31H,5-8,11,13-15H2,1-4H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H39FO5/c1-5-6-7-8-24(33)34-15-23(32)25-16(2)11-19-18-13-21(29)20-12-17(30)9-10-27(20,3)26(18)22(31)14-28(19,25)4/h9-10,12,16,18-19,21-22,25-26,31H,5-8,11,13-15H2,1-4H3/t16-,18-,19-,21-,22?,25?,26+,27?,28?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H39FO5/c1-5-6-7-8-24(33)34-15-23(32)25-16(2)11-19-18-13-21(29)20-12-17(30)9-10-27(20,3)26(18)22(31)14-28(19,25)4/h9-10,12,16,18-19,21-22,25-26,31H,5-8,11,13-15H2,1-4H3/t16-,18-,19-,21-,22+,25+,26-,27-,28-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H39FO5/c1-5-6-7-8-24(33)34-15-23(32)25-16(2)11-19-18-13-21(29)20-12-17(30)9-10-27(20,3)26(18)22(31)14-28(19,25)4/h9-10,12,16,18-19,21-22,25-26,31H,5-8,11,13-15H2,1-4H3/t16-,18-,19+,21+,22-,25-,26-,27-,28-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H39FO5/c1-5-6-7-8-24(33)34-15-23(32)25-16(2)11-19-18-13-21(29)20-12-17(30)9-10-27(20,3)26(18)22(31)14-28(19,25)4/h9-10,12,16,18-19,21-22,25-26,31H,5-8,11,13-15H2,1-4H3/t16-,18?,19?,21+,22+,25-,26?,27+,28+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C28H40N2O5/c1-20(2)28(19-29,22-17-25(33-6)27(35-8)26(18-22)34-7)13-9-14-30(3)15-12-21-10-11-23(31-4)24(16-21)32-5/h10-11,16-18,20H,9,12-15H2,1-8H3/t28-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C28H40N4O5/c1-27(2,3)32-25(35)21-23(33)31(24(34)22(26(32)36)28(21,4)5)14-10-9-13-29-15-17-30(18-16-29)19-11-7-8-12-20(19)37-6/h7-8,11-12,21-22H,9-10,13-18H2,1-6H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H40N4O5/c1-27(2,3)32-25(35)21-23(33)31(24(34)22(26(32)36)28(21,4)5)14-10-9-13-29-15-17-30(18-16-29)19-11-7-8-12-20(19)37-6/h7-8,11-12,21-22H,9-10,13-18H2,1-6H3/t21-,22-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H40N4O5/c1-27(2,3)32-25(35)21-23(33)31(24(34)22(26(32)36)28(21,4)5)14-10-9-13-29-15-17-30(18-16-29)19-11-7-8-12-20(19)37-6/h7-8,11-12,21-22H,9-10,13-18H2,1-6H3/t21-,22-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H40N4O5/c1-27(2,3)32-25(35)21-23(33)31(24(34)22(26(32)36)28(21,4)5)14-10-9-13-29-15-17-30(18-16-29)19-11-7-8-12-20(19)37-6/h7-8,11-12,21-22H,9-10,13-18H2,1-6H3/t21-,22+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H40N4O5/c1-5-6-14-31-24(33)22-26(35)32(27(36)23(25(31)34)28(22,2)3)15-10-9-13-29-16-18-30(19-17-29)20-11-7-8-12-21(20)37-4/h7-8,11-12,22-23H,5-6,9-10,13-19H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H40N4O5/c1-5-6-14-31-24(33)22-26(35)32(27(36)23(25(31)34)28(22,2)3)15-10-9-13-29-16-18-30(19-17-29)20-11-7-8-12-21(20)37-4/h7-8,11-12,22-23H,5-6,9-10,13-19H2,1-4H3/t22-,23-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H40O7/c1-5-7-24(33)34-16-22(31)28(35-23(32)6-2)13-11-20-19-9-8-17-14-18(29)10-12-26(17,3)25(19)21(30)15-27(20,28)4/h14,19-21,25,30H,5-13,15-16H2,1-4H3/t19-,20-,21-,25+,26-,27-,28-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H40O7/c1-5-7-24(33)35-28(22(31)16-34-23(32)6-2)13-11-20-19-9-8-17-14-18(29)10-12-26(17,3)25(19)21(30)15-27(20,28)4/h14,19-21,25,30H,5-13,15-16H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H40O7/c1-5-7-24(33)35-28(22(31)16-34-23(32)6-2)13-11-20-19-9-8-17-14-18(29)10-12-26(17,3)25(19)21(30)15-27(20,28)4/h14,19-21,25,30H,5-13,15-16H2,1-4H3/t19-,20-,21-,25+,26-,27-,28-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H40O7/c1-5-7-24(33)35-28(22(31)16-34-23(32)6-2)13-11-20-19-9-8-17-14-18(29)10-12-26(17,3)25(19)21(30)15-27(20,28)4/h14,19-21,25,30H,5-13,15-16H2,1-4H3/t19-,20-,21-,25+,26?,27?,28?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H40O7/c1-5-7-24(33)35-28(22(31)16-34-23(32)6-2)13-11-20-19-9-8-17-14-18(29)10-12-26(17,3)25(19)21(30)15-27(20,28)4/h14,19-21,25,30H,5-13,15-16H2,1-4H3/t19-,20-,21+,25+,26+,27-,28-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H40O7/c1-5-7-24(33)35-28(22(31)16-34-23(32)6-2)13-11-20-19-9-8-17-14-18(29)10-12-26(17,3)25(19)21(30)15-27(20,28)4/h14,19-21,25,30H,5-13,15-16H2,1-4H3/t19-,20+,21-,25-,26-,27-,28+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H40O7/c1-6-7-24(33)35-28(23(32)15-34-17(3)29)11-9-20-19-12-16(2)21-13-18(30)8-10-26(21,4)25(19)22(31)14-27(20,28)5/h13,16,19-20,22,25,31H,6-12,14-15H2,1-5H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H40O7/c1-6-7-24(33)35-28(23(32)15-34-17(3)29)11-9-20-19-12-16(2)21-13-18(30)8-10-26(21,4)25(19)22(31)14-27(20,28)5/h13,16,19-20,22,25,31H,6-12,14-15H2,1-5H3/t16-,19-,20-,22-,25+,26-,27-,28-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H40O7/c1-6-7-24(33)35-28(23(32)15-34-17(3)29)11-9-20-19-12-16(2)21-13-18(30)8-10-26(21,4)25(19)22(31)14-27(20,28)5/h13,16,19-20,22,25,31H,6-12,14-15H2,1-5H3/t16-,19-,20-,22-,25+,26?,27?,28?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H40O7/c1-6-7-24(33)35-28(23(32)15-34-17(3)29)11-9-20-19-12-16(2)21-13-18(30)8-10-26(21,4)25(19)22(31)14-27(20,28)5/h13,16,19-20,22,25,31H,6-12,14-15H2,1-5H3/t16-,19-,20-,22+,25+,26-,27-,28-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H40O7/c1-6-7-24(33)35-28(23(32)15-34-17(3)29)11-9-20-19-12-16(2)21-13-18(30)8-10-26(21,4)25(19)22(31)14-27(20,28)5/h13,16,19-20,22,25,31H,6-12,14-15H2,1-5H3/t16-,19+,20-,22+,25+,26+,27+,28-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H42N4O9/c1-4-7-14-38-18-21(40-25(29)35)16-31-23(33)28(6-3,20-12-10-9-11-13-20)24(34)32(27(31)37)17-22(41-26(30)36)19-39-15-8-5-2/h9-13,21-22H,4-8,14-19H2,1-3H3,(H2,29,35)(H2,30,36)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H42N4O9/c1-4-7-14-38-18-21(40-25(29)35)16-31-23(33)28(6-3,20-12-10-9-11-13-20)24(34)32(27(31)37)17-22(41-26(30)36)19-39-	1	(Meng et al., 2021)

15-8-5-2/h9-13,21-22H,4-8,14-19H2,1-3H3,(H2,29,35)(H2,30,36)/t21-,22-/m0/s1	
InChI=1S/C28H42N4O9/c1-4-7-14-38-18-21(40-25(29)35)16-31-23(33)28(6-3,20-12-10-9-11-13-20)24(34)32(27(31)37)17-22(41-26(30)36)19-39-15-8-5-2/h9-13,21-22H,4-8,14-19H2,1-3H3,(H2,29,35)(H2,30,36)/t21-,22-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H42N4O9/c1-4-7-14-38-18-21(40-25(29)35)16-31-23(33)28(6-3,20-12-10-9-11-13-20)24(34)32(27(31)37)17-22(41-26(30)36)19-39-15-8-5-2/h9-13,21-22H,4-8,14-19H2,1-3H3,(H2,29,35)(H2,30,36)/t21-,22+,28?	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H44O/c1-19(2)20(3)9-10-22(5)26-15-16-27-23(8-7-17-28(26,27)6)12-13-24-18-25(29)14-11-21(24)4/h9-10,12-13,19-20,22,25-27,29H,4,7-8,11,14-18H2,1-3,5-6H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H44O/c1-19(2)20(3)9-10-22(5)26-15-16-27-23(8-7-17-28(26,27)6)12-13-24-18-25(29)14-11-21(24)4/h9-10,12-13,19-20,22,25-27,29H,4,7-8,11,14-18H2,1-3,5-6H3/b10-9+,23-12+,24-13+	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H44O2/c1-18(2)19(3)9-10-20(4)25-13-14-26-22(8-7-15-28(25,26)6)11-12-23-16-24(29)17-27(30)21(23)5/h9-12,18-20,24-27,29-30H,5,7-8,13-17H2,1-4,6H3/b10-9+,22-11+,23-12+	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H44O3/c1-3-4-5-6-7-8-9-10-27(30)31-26-16-15-25-24-13-11-20-19-21(29)12-14-22(20)23(24)17-18-28(25,26)2/h19,22-26H,3-18H2,1-2H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H46O/c1-19(2)20(3)9-10-22(5)26-15-16-27-23(8-7-17-28(26,27)6)12-13-24-18-25(29)14-11-21(24)4/h9-10,12-13,19-22,25-27,29H,7-8,11,14-18H2,1-6H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H46O/c1-19(2)20(3)9-10-22(5)26-15-16-27-23(8-7-17-28(26,27)6)12-13-24-18-25(29)14-11-21(24)4/h9-10,12-13,19-22,25-27,29H,7-8,11,14-18H2,1-6H3/b10-9+,23-12+,24-13+	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C28H54N8/c1-9-29-15-17-31-13-3-21-35(23-19-33-11-1)25-27-5-7-28(8-6-27)26-36-22-4-14-32-18-16-30-10-2-12-34-20-24-36/h5-8,29-34H,1-4,9-26H2	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C29H25N3O5/c1-32-13-10-29-20-7-9-23(36-28(34)19-5-3-12-31-16-19)26(29)37-25-22(8-6-17(24(25)29)14-21(20)32)35-27(33)18-4-2-11-30-15-18/h2-9,11-12,15-16,20-21,23,26H,10,13-14H2,1H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C29H25N3O5/c1-32-13-10-29-20-7-9-23(36-28(34)19-5-3-12-31-16-19)26(29)37-25-22(8-6-17(24(25)29)14-21(20)32)35-27(33)18-4-2-11-30-15-18/h2-9,11-12,15-16,20-21,23,26H,10,13-14H2,1H3/t20-,21?,23?,26-,29-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H25N3O5/c1-32-13-10-29-20-7-9-23(36-28(34)19-5-3-12-31-16-19)26(29)37-25-22(8-6-17(24(25)29)14-21(20)32)35-27(33)18-4-2-11-30-15-18/h2-9,11-12,15-16,20-21,23,26H,10,13-14H2,1H3/t20-,21+,23-,26-,29-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C29H25N3O5/c1-32-13-10-29-20-7-9-23(36-28(34)19-5-3-12-31-16-19)26(29)37-25-22(8-6-17(24(25)29)14-21(20)32)35-27(33)18-4-2-11-30-15-18/h2-9,11-12,15-16,20-21,23,26H,10,13-14H2,1H3/t20-,21+,23+,26-,29-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H25N3O5/c1-32-13-10-29-20-7-9-23(36-28(34)19-5-3-12-31-16-19)26(29)37-25-22(8-6-17(24(25)29)14-21(20)32)35-27(33)18-4-2-11-30-15-18/h2-9,11-12,15-16,20-21,23,26H,10,13-14H2,1H3/t20-,21+,23+,26-,29+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H26ClFN4O4S/c1-40(36,37)12-11-32-16-23-7-10-27(39-23)20-5-8-26-24(14-20)29(34-18-33-26)35-22-6-9-28(25(30)15-22)38-17-19-3-2-4-21(31)13-19/h2-10,13-15,18,32H,11-12,16-17H2,1H3,(H,33,34,35)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H26N4O/c1-2-25(21-11-5-3-6-12-21)32-29(34)27-23-15-9-10-16-26(23)31-28(22-13-7-4-8-14-22)24(27)19-33-18-17-30-20-33/h3-18,20,25H,2,19H2,1H3,(H,32,34)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H26N4O/c1-2-25(21-11-5-3-6-12-21)32-29(34)27-23-15-9-10-16-26(23)31-28(22-13-7-4-8-14-22)24(27)19-33-18-17-30-20-33/h3-18,20,25H,2,19H2,1H3,(H,32,34)/t25-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H27F2NO3/c30-27-13-5-21(19-28(27)31)25-11-4-20-18-22(33)6-12-26(20)29(25)35-24-9-7-23(8-10-24)34-17-16-32-14-2-1-3-15-32/h4-13,18-19,33H,1-3,14-17H2	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C29H27F3N6O/c1-20-5-6-22(16-21(20)8-10-25-18-33-27-4-3-11-34-38(25)27)28(39)35-24-9-7-23(26(17-24)29(30,31)32)19-37-14-12-36(2)13-15-37/h3-7,9,11,16-18H,12-15,19H2,1-2H3,(H,35,39)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H28F4N4O4/c1-40-20-6-3-5-19(16-20)35-11-13-36(14-12-35)28-34-27-21(7-4-8-22(27)30)23(17-26(38)39)37(28)24-15-18(29(31,32)33)9-10-25(24)41-2/h3-10,15-16,23H,11-14,17H2,1-2H3,(H,38,39)/t23-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H28FNO3/c30-23-6-4-5-21(19-23)27-13-7-22-20-24(32)8-14-28(22)29(27)34-26-11-9-25(10-12-26)33-18-17-31-15-2-1-3-16-31/h4-14,19-20,32H,1-3,15-18H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H28FNO3/c30-23-7-4-21(5-8-23)27-14-6-22-20-24(32)9-15-28(22)29(27)34-26-12-10-25(11-13-26)33-19-18-31-16-2-1-3-17-31/h4-15,20,32H,1-3,16-19H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H28N2O4/c1-2-23(20-12-5-3-6-13-20)31-29(34)26-22-16-9-10-17-24(22)30-27(21-14-7-4-8-15-21)28(26)35-19-11-18-25(32)33/h3-10,12-17,23H,2,11,18-19H2,1H3,(H,31,34)(H,32,33)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C29H28N2O4/c1-2-23(20-12-5-3-6-13-20)31-29(34)26-22-16-9-10-17-24(22)30-27(21-14-7-4-8-15-21)28(26)35-19-11-18-25(32)33/h3-10,12-17,23H,2,11,18-19H2,1H3,(H,31,34)(H,32,33)/t23-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H28O8/c1-33-19-13-11-18(12-14-19)15-16-36-28-20(8-6-10-24(28)34-2)22(17-25(30)35-3)26-27(31)21-7-4-5-9-23(21)37-29(26)32/h4-14,22,31H,15-17H2,1-3H3/t22-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C29H29NO4/c31-23-6-4-5-21(19-23)27-13-7-22-20-24(32)8-14-28(22)29(27)34-26-11-9-25(10-12-26)33-18-17-30-15-2-1-3-16-30/h4-14,19-20,31-32H,1-3,15-18H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H29NO4/c31-23-7-4-21(5-8-23)27-14-6-22-20-24(32)9-15-28(22)29(27)34-26-12-10-25(11-13-26)33-19-18-30-16-2-1-3-17-30/h4-15,20,31-32H,1-3,16-19H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H30F3N5/c1-19(20-7-4-3-5-8-20)35-25-18-23(13-16-34-25)27-26(22-9-6-10-24(17-22)29(30,31)32)36-28(37(27)2)21-11-14-33-15-12-21/h3-10,13,16-19,21,33H,11-12,14-15H2,1-2H3,(H,34,35)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C29H30F3N5/c1-19(20-7-4-3-5-8-20)35-25-18-23(13-16-34-25)27-26(22-9-6-10-24(17-22)29(30,31)32)36-28(37(27)2)21-11-14-33-15-12-21/h3-10,13,16-19,21,33H,11-12,14-15H2,1-2H3,(H,34,35)/t19-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H30N2O9/c1-36-23-7-17(8-24-29(23)39-15-38-24)20(10-26(34)37-2)28-27(35)22(32)9-19(40-28)14-30-11-16-6-18(13-30)21-4-3-5-25(33)31(21)12-16/h3-5,7-9,16,18,20,35H,6,10-15H2,1-2H3/t16-,18+,20+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C29H30N6O6/c1-5-8-23-30-25(29(3,4)38)24(27(36)39-16-22-17(2)40-28(37)41-22)35(23)15-18-11-13-19(14-12-18)20-9-6-7-10-21(20)26-31-33-34-32-26/h6-7,9-14,38H,5,8,15-16H2,1-4H3,(H,31,32,33,34)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H31F2N3O/c30-24-12-8-22(9-13-24)27(23-10-14-25(31)15-11-23)7-4-18-33-19-16-29(17-20-33)28(35)32-21-34(29)26-5-2-1-3-6-26/h1-3,5-6,8-15,27H,4,7,16-21H2,(H,32,35)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H31N3O2/c33-29(20-23-8-12-27(13-9-23)34-22-24-6-2-1-3-7-24)30-26-11-10-25-14-17-32(28(25)21-26)19-18-31-15-4-5-16-31/h1-3,6-14,17,21H,4-5,15-16,18-20,22H2,(H,30,33)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H31N7O/c1-21-5-10-25(18-27(21)34-29-31-13-11-26(33-29)24-4-3-12-30-19-24)32-28(37)23-8-6-22(7-9-23)20-36-16-14-35(2)15-17-36/h3-13,18-19H,14-17,20H2,1-2H3,(H,32,37)(H,31,33,34)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H32O13/c1-11-36-9-20-27(40-11)24(31)25(32)29(41-20)42-26-14-7-17-16(38-10-39-17)6-13(14)21(22-15(26)8-37-28(22)33)12-4-18(34-2)23(30)19(5-12)35-3/h4-7,11,15,20-22,24-27,29-32H,8-10H2,1-3H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H32O13/c1-11-36-9-20-27(40-11)24(31)25(32)29(41-20)42-26-14-7-17-16(38-10-39-17)6-13(14)21(22-15(26)8-37-28(22)33)12-4-18(34-2)23(30)19(5-12)35-3/h4-7,11,15,20-22,24-27,29-32H,8-10H2,1-3H3/t11-,15-,20-,21-,22+,24+,25-,26+,27+,29+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H32O13/c1-11-36-9-20-27(40-11)24(31)25(32)29(41-20)42-26-14-7-17-16(38-10-39-17)6-13(14)21(22-15(26)8-37-28(22)33)12-4-	0	(Meng et al., 2021)

18(34-2)23(30)19(5-12)35-3/h4-7,11,15,20-22,24-27,29-32H,8-10H2,1-3H3/t11-,15-,20+,21+,22-,24+,25+,26+,27+,29-/m0/s1	
InChI=1S/C29H32O13/c1-11-36-9-20-27(40-11)24(31)25(32)29(41-20)42-26-14-7-17-16(38-10-39-17)6-13(14)21(22-15(26)8-37-28(22)33)12-4-18(34-2)23(30)19(5-12)35-3/h4-7,11,15,20-22,24-27,29-32H,8-10H2,1-3H3/t11-,15?,20-,21-,22+,24-,25-,26-,27-,29+/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C29H32O13/c1-11-36-9-20-27(40-11)24(31)25(32)29(41-20)42-26-14-7-17-16(38-10-39-17)6-13(14)21(22-15(26)8-37-28(22)33)12-4-18(34-2)23(30)19(5-12)35-3/h4-7,11,15,20-22,24-27,29-32H,8-10H2,1-3H3/t11-,15+,20-,21-,22+,24-,25-,26-,27-,29+/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H32O13/c1-11-36-9-20-27(40-11)24(31)25(32)29(41-20)42-26-14-7-17-16(38-10-39-17)6-13(14)21(22-15(26)8-37-28(22)33)12-4-18(34-2)23(30)19(5-12)35-3/h4-7,11,15,20-22,24-27,29-32H,8-10H2,1-3H3/t11-,15+,20-,21-,22+,24-,25-,26+,27+,29+/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H32O13/c1-11-36-9-20-27(40-11)24(31)25(32)29(41-20)42-26-14-7-17-16(38-10-39-17)6-13(14)21(22-15(26)8-37-28(22)33)12-4-18(34-2)23(30)19(5-12)35-3/h4-7,11,15,20-22,24-27,29-32H,8-10H2,1-3H3/t11-,15+,20-,21+,22+,24-,25-,26+,27-,29+/m1/s1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C29H32O13/c1-11-36-9-20-27(40-11)24(31)25(32)29(41-20)42-26-14-7-17-16(38-10-39-17)6-13(14)21(22-15(26)8-37-28(22)33)12-4-18(34-2)23(30)19(5-12)35-3/h4-7,11,15,20-22,24-27,29-32H,8-10H2,1-3H3/t11-,15+,20-,21+,22+,24+,25+,26+,27-,29+/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H33CIN2O2/c1-31(2)27(33)29(24-9-5-3-6-10-24,25-11-7-4-8-12-25)19-22-32-20-17-28(34,18-21-32)23-13-15-26(30)16-14-23/h3-16,34H,17-22H2,1-2H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H33FO4/c1-26-10-9-21(32)12-19(26)7-8-22-23-13-20-11-17-5-3-4-6-18(17)14-28(20,25(34)16-31)27(23,2)15-24(33)29(22,26)30/h3-6,9-10,12,20,22-24,31,33H,7-8,11,13-16H2,1-2H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H33FO4/c1-26-10-9-21(32)12-19(26)7-8-22-23-13-20-11-17-5-3-4-6-18(17)14-28(20,25(34)16-31)27(23,2)15-24(33)29(22,26)30/h3-6,9-10,12,20,22-24,31,33H,7-8,11,13-16H2,1-2H3/t20-,22-,23-,24-,26+,27+,28-,29+/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H33FO4/c1-26-10-9-21(32)12-19(26)7-8-22-23-13-20-11-17-5-3-4-6-18(17)14-28(20,25(34)16-31)27(23,2)15-24(33)29(22,26)30/h3-6,9-10,12,20,22-24,31,33H,7-8,11,13-16H2,1-2H3/t20-,22+,23-,24+,26-,27-,28-,29+/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H33FO4/c1-26-10-9-21(32)12-19(26)7-8-22-23-13-20-11-17-5-3-4-6-18(17)14-28(20,25(34)16-31)27(23,2)15-24(33)29(22,26)30/h3-6,9-10,12,20,22-24,31,33H,7-8,11,13-16H2,1-2H3/t20-,22+,23+,24+,26?,27?,28?,29?/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H33FO4/c1-26-10-9-21(32)12-19(26)7-8-22-23-13-20-11-17-5-3-4-6-18(17)14-28(20,25(34)16-31)27(23,2)15-24(33)29(22,26)30/h3-6,9-10,12,20,22-24,31,33H,7-8,11,13-16H2,1-2H3/t20-,22+,23+,24+,26+,27+,28-,29+/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H33FO6/c1-17-13-22-21-10-9-19-14-20(32)11-12-26(19,2)28(21,30)23(33)15-27(22,3)29(17,24(34)16-31)36-25(35)18-7-5-4-6-8-18/h4-8,11-12,14,17,21-23,31,33H,9-10,13,15-16H2,1-3H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H33FO6/c1-17-13-22-21-10-9-19-14-20(32)11-12-26(19,2)28(21,30)23(33)15-27(22,3)29(17,24(34)16-31)36-25(35)18-7-5-4-6-8-18/h4-8,11-12,14,17,21-23,31,33H,9-10,13,15-16H2,1-3H3/t17-,21-,22-,23-,26-,27-,28-,29-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C29H33FO6/c1-17-13-22-21-10-9-19-14-20(32)11-12-26(19,2)28(21,30)23(33)15-27(22,3)29(17,24(34)16-31)36-25(35)18-7-5-4-6-8-18/h4-8,11-12,14,17,21-23,31,33H,9-10,13,15-16H2,1-3H3/t17-,21-,22-,23-,26?,27?,28?,29?/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H33FO6/c1-17-13-22-21-10-9-19-14-20(32)11-12-26(19,2)28(21,30)23(33)15-27(22,3)29(17,24(34)16-31)36-25(35)18-7-5-4-6-8-18/h4-8,11-12,14,17,21-23,31,33H,9-10,13,15-16H2,1-3H3/t17-,21+,22-,23+,26+,27+,28-,29-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H33FO6/c1-17-13-22-21-10-9-19-14-20(32)11-12-26(19,2)28(21,30)23(33)15-27(22,3)29(17,24(34)16-31)36-25(35)18-7-5-4-6-8-18/h4-8,11-12,14,17,21-23,31,33H,9-10,13,15-16H2,1-3H3/t17-,21+,22+,23-,26+,27-,28+,29-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H33FO6/c1-25-12-11-19(32)13-18(25)9-10-20-21-14-24-29(23(34)16-31,26(21,2)15-22(33)28(20,25)30)36-27(3,35-24)17-7-5-4-6-8-17/h4-8,11-13,20-22,24,31,33H,9-10,14-16H2,1-3H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H33FO6/c1-25-12-11-19(32)13-18(25)9-10-20-21-14-24-29(23(34)16-31,26(21,2)15-22(33)28(20,25)30)36-27(3,35-24)17-7-5-4-6-8-17/h4-8,11-13,20-22,24,31,33H,9-10,14-16H2,1-3H3/t20-,21-,22-,24+,25-,26-,27?,28-,29+/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C29H33FO6/c1-25-12-11-19(32)13-18(25)9-10-20-21-14-24-29(23(34)16-31,26(21,2)15-22(33)28(20,25)30)36-27(3,35-24)17-7-5-4-6-8-17/h4-8,11-13,20-22,24,31,33H,9-10,14-16H2,1-3H3/t20-,21-,22?,24-,25?,26?,27?,28?,29?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H33FO6/c1-25-12-11-19(32)13-18(25)9-10-20-21-14-24-29(23(34)16-31,26(21,2)15-22(33)28(20,25)30)36-27(3,35-24)17-7-5-4-6-8-17/h4-8,11-13,20-22,24,31,33H,9-10,14-16H2,1-3H3/t20-,21-,22+,24+,25-,26+,27-,28-,29+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H33FO6/c1-25-12-11-19(32)13-18(25)9-10-20-21-14-24-29(23(34)16-31,26(21,2)15-22(33)28(20,25)30)36-27(3,35-24)17-7-5-4-6-8-17/h4-8,11-13,20-22,24,31,33H,9-10,14-16H2,1-3H3/t20-,21+,22-,24+,25-,26-,27+,28+,29-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H33FO6/c1-25-12-11-19(32)13-18(25)9-10-20-21-14-24-29(23(34)16-31,26(21,2)15-22(33)28(20,25)30)36-27(3,35-24)17-7-5-4-6-8-17/h4-8,11-13,20-22,24,31,33H,9-10,14-16H2,1-3H3/t20?,21-,22-,24+,25?,26?,27+,28-,29+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H33FO8/c1-16-12-21-20-8-7-18-13-19(32)9-10-26(18,3)28(20,30)23(33)14-27(21,4)29(16,24(34)15-37-17(2)31)38-25(35)22-6-5-11-36-22/h5-6,9-11,13,16,20-21,23,33H,7-8,12,14-15H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H33FO8/c1-16-12-21-20-8-7-18-13-19(32)9-10-26(18,3)28(20,30)23(33)14-27(21,4)29(16,24(34)15-37-17(2)31)38-25(35)22-6-5-11-36-22/h5-6,9-11,13,16,20-21,23,33H,7-8,12,14-15H2,1-4H3/t16-,20-,21-,23-,26?,27?,28?,29?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H33FO8/c1-16-12-21-20-8-7-18-13-19(32)9-10-26(18,3)28(20,30)23(33)14-27(21,4)29(16,24(34)15-37-17(2)31)38-25(35)22-6-5-11-36-22/h5-6,9-11,13,16,20-21,23,33H,7-8,12,14-15H2,1-4H3/t16-,20?,21+,23+,26+,27+,28+,29+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H33FO8/c1-16-12-21-20-8-7-18-13-19(32)9-10-26(18,3)28(20,30)23(33)14-27(21,4)29(16,24(34)15-37-17(2)31)38-25(35)22-6-5-11-36-22/h5-6,9-11,13,16,20-21,23,33H,7-8,12,14-15H2,1-4H3/t16-,20+,21-,23+,26+,27+,28-,29-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H33FO8/c1-16-12-21-20-8-7-18-13-19(32)9-10-26(18,3)28(20,30)23(33)14-27(21,4)29(16,24(34)15-37-17(2)31)38-25(35)22-6-5-11-36-22/h5-6,9-11,13,16,20-21,23,33H,7-8,12,14-15H2,1-4H3/t16-,20+,21+,23-,26+,27-,28+,29-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H33FO8/c1-16-12-21-20-8-7-18-13-19(32)9-10-26(18,3)28(20,30)23(33)14-27(21,4)29(16,24(34)15-37-17(2)31)38-25(35)22-6-5-11-36-22/h5-6,9-11,13,16,20-21,23,33H,7-8,12,14-15H2,1-4H3/t16-,20+,21+,23+,26+,27+,28+,29+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H34N4O/c1-32-17-5-14-29(32)15-18-33(19-16-29)21-22-8-10-24(11-9-22)28(34)31-27-20-25(12-13-26(27)30)23-6-3-2-4-7-23/h2-4,6-13,20H,5,14-19,21,30H2,1H3,(H,31,34)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H35N3O10/c1-28(41)14-7-4-8-17(33)18(14)22(34)19-15(28)10-16-21(31(2)3)23(35)20(25(37)29(16,42)24(19)36)26(38)30-12-32-9-5-6-13(11-32)27(39)40/h4,7-8,13,15-16,21,33-34,37,41-42H,5-6,9-12H2,1-3H3,(H,30,38)(H,39,40)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H35N3O10/c1-28(41)14-7-4-8-17(33)18(14)22(34)19-15(28)10-16-21(31(2)3)23(35)20(25(37)29(16,42)24(19)36)26(38)30-12-32-9-5-6-13(11-32)27(39)40/h4,7-8,13,15-16,21,33-34,37,41-42H,5-6,9-12H2,1-3H3,(H,30,38)(H,39,40)/t13-,15-,16-,21-,28?,29?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H35N3O10/c1-28(41)14-7-4-8-17(33)18(14)22(34)19-15(28)10-16-21(31(2)3)23(35)20(25(37)29(16,42)24(19)36)26(38)30-12-32-9-5-6-13(11-32)27(39)40/h4,7-8,13,15-16,21,33-34,37,41-42H,5-6,9-12H2,1-3H3,(H,30,38)(H,39,40)/t13?,15-,16-,21-,28+,29-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C29H35N3O10/c1-28(41)14-7-4-8-17(33)18(14)22(34)19-15(28)10-16-21(31(2)3)23(35)20(25(37)29(16,42)24(19)36)26(38)30-12-32-9-5-6-13(11-32)27(39)40/h4,7-8,13,15-16,21,33,35-36,41-42H,5-6,9-12H2,1-3H3,(H,30,38)(H,39,40)/t13-,15-,16-,21-,28-,29-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H35N3O10/c1-28(41)14-7-4-8-17(33)18(14)22(34)19-15(28)10-16-21(31(2)3)23(35)20(25(37)29(16,42)24(19)36)26(38)30-12-32-9-5-6-13(11-32)27(39)40/h4,7-8,13,15-16,21,33,35-36,41-42H,5-6,9-12H2,1-3H3,(H,30,38)(H,39,40)/t13-,15-,16-,21-,28?,29?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H35N3O10/c1-28(41)14-7-4-8-17(33)18(14)22(34)19-15(28)10-16-21(31(2)3)23(35)20(25(37)29(16,42)24(19)36)26(38)30-12-32-9-5-6-13(11-32)27(39)40/h4,7-8,13,15-16,21,33,35-36,41-42H,5-6,9-12H2,1-3H3,(H,30,38)(H,39,40)/t13-,15-,16-,21+,28+,29-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H35NO2/c1-5-15-29(32)16-14-26-24-12-8-20-17-22(31)11-13-23(20)27(24)25(18-28(26,29)2)19-6-9-21(10-7-19)30(3)4/h6-7,9-10,17,24-26,32H,8,11-14,16,18H2,1-4H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H35NO2/c1-5-15-29(32)16-14-26-24-12-8-20-17-22(31)11-13-23(20)27(24)25(18-28(26,29)2)19-6-9-21(10-7-19)30(3)4/h6-7,9-	0	(Meng et al., 2021)

10,17,24-26,32H,8,11-14,16,18H2,1-4H3/t24-,25-,26-,28?,29?/m0/s1	
InChI=1S/C29H35NO2/c1-5-15-29(32)16-14-26-24-12-8-20-17-22(31)11-13-23(20)27(24)25(18-28(26,29)2)19-6-9-21(10-7-19)30(3)4/h6-7,9-10,17,24-26,32H,8,11-14,16,18H2,1-4H3/t24-,25+,26-,28-,29-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H37ClFNO6/c1-16(33)10-22(34)29-24(37-25(2,3)38-29)13-20-21-11-17(15-32)19-12-18(36-9-8-30)6-7-26(19,4)28(21,31)23(35)14-27(20,29)5/h12,20-21,23-24,35H,6-11,13-14H2,1-5H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H37ClFNO6/c1-16(33)10-22(34)29-24(37-25(2,3)38-29)13-20-21-11-17(15-32)19-12-18(36-9-8-30)6-7-26(19,4)28(21,31)23(35)14-27(20,29)5/h12,20-21,23-24,35H,6-11,13-14H2,1-5H3/t20-,21-,23?,24-,26?,27?,28?,29?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H37ClFNO6/c1-16(33)10-22(34)29-24(37-25(2,3)38-29)13-20-21-11-17(15-32)19-12-18(36-9-8-30)6-7-26(19,4)28(21,31)23(35)14-27(20,29)5/h12,20-21,23-24,35H,6-11,13-14H2,1-5H3/t20-,21-,23+,24-,26-,27+,28-,29-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H37ClFNO6/c1-16(33)10-22(34)29-24(37-25(2,3)38-29)13-20-21-11-17(15-32)19-12-18(36-9-8-30)6-7-26(19,4)28(21,31)23(35)14-27(20,29)5/h12,20-21,23-24,35H,6-11,13-14H2,1-5H3/t20-,21+,23+,24-,26+,27+,28-,29+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H37ClFNO7/c1-16(33)37-15-23(35)29-24(38-25(2,3)39-29)12-20-21-10-17(14-32)19-11-18(36-9-8-30)6-7-26(19,4)28(21,31)22(34)13-27(20,29)5/h11,20-22,24,34H,6-10,12-13,15H2,1-5H3/t20-,21-,22?,24-,26?,27?,28?,29?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H37ClFNO7/c1-16(33)37-15-23(35)29-24(38-25(2,3)39-29)12-20-21-10-17(14-32)19-11-18(36-9-8-30)6-7-26(19,4)28(21,31)22(34)13-27(20,29)5/h11,20-22,24,34H,6-10,12-13,15H2,1-5H3/t20-,21?,22-,24+,26-,27-,28-,29+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H37ClFNO7/c1-16(33)37-15-23(35)29-24(38-25(2,3)39-29)12-20-21-10-17(14-32)19-11-18(36-9-8-30)6-7-26(19,4)28(21,31)22(34)13-27(20,29)5/h11,20-22,24,34H,6-10,12-13,15H2,1-5H3/t20-,21?,22?,24+,26?,27?,28-,29+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H38ClFO8/c1-16(33)37-15-23(35)29-24(38-25(2,3)39-29)12-20-21-10-17(14-32)19-11-18(36-9-8-30)6-7-26(19,4)28(21,31)22(34)13-27(20,29)5/h11,14,20-22,24,34H,6-10,12-13,15H2,1-5H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H38ClFO8/c1-16(33)37-15-23(35)29-24(38-25(2,3)39-29)12-20-21-10-17(14-32)19-11-18(36-9-8-30)6-7-26(19,4)28(21,31)22(34)13-27(20,29)5/h11,14,20-22,24,34H,6-10,12-13,15H2,1-5H3/t20-,21-,22?,24-,26?,27?,28?,29?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H38ClFO8/c1-16(33)37-15-23(35)29-24(38-25(2,3)39-29)12-20-21-10-17(14-32)19-11-18(36-9-8-30)6-7-26(19,4)28(21,31)22(34)13-27(20,29)5/h11,14,20-22,24,34H,6-10,12-13,15H2,1-5H3/t20-,21-,22+,24+,26+,27+,28-,29+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H38ClFO8/c1-16(33)37-15-23(35)29-24(38-25(2,3)39-29)12-20-21-10-17(14-32)19-11-18(36-9-8-30)6-7-26(19,4)28(21,31)22(34)13-27(20,29)5/h11,14,20-22,24,34H,6-10,12-13,15H2,1-5H3/t20-,21+,22+,24-,26+,27+,28-,29+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H38ClFO8/c1-16(33)37-15-23(35)29-24(38-25(2,3)39-29)12-20-21-10-17(14-32)19-11-18(36-9-8-30)6-7-26(19,4)28(21,31)22(34)13-27(20,29)5/h11,14,20-22,24,34H,6-10,12-13,15H2,1-5H3/t20?,21?,22-,24+,26-,27-,28-,29+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H38ClFO8/c1-16(33)37-15-23(35)29-24(38-25(2,3)39-29)12-20-21-10-17(14-32)19-11-18(36-9-8-30)6-7-26(19,4)28(21,31)22(34)13-27(20,29)5/h11,14,20-22,24,34H,6-10,12-13,15H2,1-5H3/t20?,21?,22?,24-,26?,27?,28+,29-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H38F2O9/c1-6-8-23-39-22-13-17-18-12-20(30)19-11-16(32)9-10-26(19,4)28(18,31)21(33)14-27(17,5)29(22,40-23)24(34)37-15(3)38-25(35)36-7-2/h9-11,15,17-18,20-23,33H,6-8,12-14H2,1-5H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H38F2O9/c1-6-8-23-39-22-13-17-18-12-20(30)19-11-16(32)9-10-26(19,4)28(18,31)21(33)14-27(17,5)29(22,40-23)24(34)37-15(3)38-25(35)36-7-2/h9-11,15,17-18,20-23,33H,6-8,12-14H2,1-5H3/t15-,17-,18-,20-,21-,22+,23+,26-,27-,28?,29-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H38F2O9/c1-6-8-23-39-22-13-17-18-12-20(30)19-11-16(32)9-10-26(19,4)28(18,31)21(33)14-27(17,5)29(22,40-23)24(34)37-15(3)38-25(35)36-7-2/h9-11,15,17-18,20-23,33H,6-8,12-14H2,1-5H3/t15-,17-,18-,20-,21?,22-,23-,26?,27?,28?,29?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H38F2O9/c1-6-8-23-39-22-13-17-18-12-20(30)19-11-16(32)9-10-26(19,4)28(18,31)21(33)14-27(17,5)29(22,40-23)24(34)37-15(3)38-25(35)36-7-2/h9-11,15,17-18,20-23,33H,6-8,12-14H2,1-5H3/t15-,17-,18+,20-,21+,22-,23-,26+,27+,28-,29-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C29H38F2O9/c1-6-8-23-39-22-13-17-18-12-20(30)19-11-16(32)9-10-26(19,4)28(18,31)21(33)14-27(17,5)29(22,40-23)24(34)37-15(3)38-25(35)36-7-2/h9-11,15,17-18,20-23,33H,6-8,12-14H2,1-5H3/t15-,17?,18?,20-,21-,22+,23+,26-,27-,28-,29-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H38F2O9/c1-6-8-23-39-22-13-17-18-12-20(30)19-11-16(32)9-10-26(19,4)28(18,31)21(33)14-27(17,5)29(22,40-23)24(34)37-15(3)38-25(35)36-7-2/h9-11,15,17-18,20-23,33H,6-8,12-14H2,1-5H3/t15-,17+,18+,20+,21-,22+,23+,26-,27+,28-,29-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H38F3N3O2S/c1-2-3-4-5-11-28(36)37-21-20-34-18-16-33(17-19-34)14-8-15-35-24-9-6-7-10-26(24)38-27-13-12-23(22-25(27)35)29(30,31)32/h6-7,9-10,12-13,22H,2-5,8,11,14-21H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C29H38FN3O2/c1-5-27(34)35-29(15-14-21-19-22(30)12-13-23(21)28(29)20(2)3)16-18-33(4)17-8-11-26-31-24-9-6-7-10-25(24)32-26/h6-7,9-10,12-13,19-20,28H,5,8,11,14-18H2,1-4H3,(H,31,32)/t28-,29+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H38FN3O3/c1-20(2)28-23-12-11-22(30)18-21(23)13-14-29(28,36-27(34)19-35-4)15-17-33(3)16-7-10-26-31-24-8-5-6-9-25(24)32-26/h5-6,8-9,11-12,18,20,28H,7,10,13-17,19H2,1-4H3,(H,31,32)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C29H38FN3O3/c1-20(2)28-23-12-11-22(30)18-21(23)13-14-29(28,36-27(34)19-35-4)15-17-33(3)16-7-10-26-31-24-8-5-6-9-25(24)32-26/h5-6,8-9,11-12,18,20,28H,7,10,13-17,19H2,1-4H3,(H,31,32)/t28-,29-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C29H38FN3O3/c1-20(2)28-23-12-11-22(30)18-21(23)13-14-29(28,36-27(34)19-35-4)15-17-33(3)16-7-10-26-31-24-8-5-6-9-25(24)32-26/h5-6,8-9,11-12,18,20,28H,7,10,13-17,19H2,1-4H3,(H,31,32)/t28-,29-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C29H38FN3O3/c1-20(2)28-23-12-11-22(30)18-21(23)13-14-29(28,36-27(34)19-35-4)15-17-33(3)16-7-10-26-31-24-8-5-6-9-25(24)32-26/h5-6,8-9,11-12,18,20,28H,7,10,13-17,19H2,1-4H3,(H,31,32)/t28-,29?/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C29H38FN3O3/c1-20(2)28-23-12-11-22(30)18-21(23)13-14-29(28,36-27(34)19-35-4)15-17-33(3)16-7-10-26-31-24-8-5-6-9-25(24)32-26/h5-6,8-9,11-12,18,20,28H,7,10,13-17,19H2,1-4H3,(H,31,32)/t28-,29+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H38N4O10/c1-28(42)13-7-6-9-17(34)18(13)22(35)19-14(28)11-15-21(33(2)3)23(36)20(25(38)29(15,43)24(19)37)26(39)32-12-31-10-5-4-8-16(30)27(40)41/h6-7,9,14-16,21,31,34-35,38,42-43H,4-5,8,10-12,30H2,1-3H3,(H,32,39)(H,40,41)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H38N4O10/c1-28(42)13-7-6-9-17(34)18(13)22(35)19-14(28)11-15-21(33(2)3)23(36)20(25(38)29(15,43)24(19)37)26(39)32-12-31-10-5-4-8-16(30)27(40)41/h6-7,9,14-16,21,31,34-35,38,42-43H,4-5,8,10-12,30H2,1-3H3,(H,32,39)(H,40,41)/t14-,15-,16?,21-,28+,29-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H38N4O10/c1-28(42)13-7-6-9-17(34)18(13)22(35)19-14(28)11-15-21(33(2)3)23(36)20(25(38)29(15,43)24(19)37)26(39)32-12-31-10-5-4-8-16(30)27(40)41/h6-7,9,14-16,21,31,34,36-37,42-43H,4-5,8,10-12,30H2,1-3H3,(H,32,39)(H,40,41)/t14-,15-,16-,21-,28?,29?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H38N4O10/c1-28(42)13-7-6-9-17(34)18(13)22(35)19-14(28)11-15-21(33(2)3)23(36)20(25(38)29(15,43)24(19)37)26(39)32-12-31-10-5-4-8-16(30)27(40)41/h6-7,9,14-16,21,31,34,36-37,42-43H,4-5,8,10-12,30H2,1-3H3,(H,32,39)(H,40,41)/t14-,15-,16-,21-,28+,29+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H38N4O10/c1-28(42)13-7-6-9-17(34)18(13)22(35)19-14(28)11-15-21(33(2)3)23(36)20(25(38)29(15,43)24(19)37)26(39)32-12-31-10-5-4-8-16(30)27(40)41/h6-7,9,14-16,21,31,34,36-37,42-43H,4-5,8,10-12,30H2,1-3H3,(H,32,39)(H,40,41)/t14-,15-,16-,21+,28+,29-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H38N4O2/c1-18(2)29(34)31-24-8-7-22-13-21(14-23(22)15-24)16-32-11-10-27(28(17-32)35-5)33-20(4)30-25-12-19(3)6-9-26(25)33/h6-9,12,15,18,21,27-28H,10-11,13-14,16-17H2,1-5H3,(H,31,34)/t21?,27?,28-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H38N4O9/c1-28(41)15-5-4-6-18(35)19(15)23(36)20-16(28)13-17-22(31(2)3)24(37)21(26(39)29(17,42)25(20)38)27(40)30-14-33-9-7-32(8-10-33)11-12-34/h4-6,16-17,22,34-35,37-38,41-42H,7-14H2,1-3H3,(H,30,40)/t16-,17-,22-,28?,29?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H38N4O9/c1-28(41)15-5-4-6-18(35)19(15)23(36)20-16(28)13-17-22(31(2)3)24(37)21(26(39)29(17,42)25(20)38)27(40)30-14-33-9-7-32(8-10-33)11-12-34/h4-6,16-17,22,34-35,37-38,41-42H,7-14H2,1-3H3,(H,30,40)/t16-,17-,22+,28+,29-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H38N4O9/c1-28(41)15-5-4-6-18(35)19(15)23(36)20-16(28)13-17-22(31(2)3)24(37)21(26(39)29(17,42)25(20)38)27(40)30-14-33-9-7-32(8-10-33)11-12-34/h4-6,16-17,22,34-35,37-38,41-42H,7-14H2,1-3H3,(H,30,40)/t16-,17-,22+,28+,29-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H38N4O9/c1-28(41)15-5-4-6-18(35)19(15)23(36)20-16(28)13-17-22(31(2)3)24(37)21(26(39)29(17,42)25(20)38)27(40)30-14-33-9-	0	(Meng et al., 2021)

7-32(8-10-33)11-12-34/h4-6,16-17,22,34-36,39,41-42H,7-14H2,1-3H3,(H,30,40)	
InChI=1S/C29H38N4O9/c1-28(41)15-5-4-6-18(35)19(15)23(36)20-16(28)13-17-22(31(2)3)24(37)21(26(39)29(17,42)25(20)38)27(40)30-14-33-9-7-32(8-10-33)11-12-34/h4-6,16-17,22,34-36,39,41-42H,7-14H2,1-3H3,(H,30,40)/t16-,17-,22-,28?,29?/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H38N4O9/c1-28(41)15-5-4-6-18(35)19(15)23(36)20-16(28)13-17-22(31(2)3)24(37)21(26(39)29(17,42)25(20)38)27(40)30-14-33-9-7-32(8-10-33)11-12-34/h4-6,16-17,22,34-36,39,41-42H,7-14H2,1-3H3,(H,30,40)/t16-,17-,22-,28+,29-/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C29H38N8O8/c1-28(44)13-5-4-6-16(38)17(13)21(39)18-14(28)11-15-20(35(2)3)22(40)19(24(42)29(15,45)23(18)41)25(43)33-12-36-7-9-37(10-8-36)27(32)34-26(30)31/h4-6,14-15,20,38-39,42,44-45H,7-12H2,1-3H3,(H,33,43)(H5,30,31,32,34)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H38N8O8/c1-28(44)13-5-4-6-16(38)17(13)21(39)18-14(28)11-15-20(35(2)3)22(40)19(24(42)29(15,45)23(18)41)25(43)33-12-36-7-9-37(10-8-36)27(32)34-26(30)31/h4-6,14-15,20,38-39,42,44-45H,7-12H2,1-3H3,(H,33,43)(H5,30,31,32,34)/t14-,15-,20-,28?,29?/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H38N8O8/c1-28(44)13-5-4-6-16(38)17(13)21(39)18-14(28)11-15-20(35(2)3)22(40)19(24(42)29(15,45)23(18)41)25(43)33-12-36-7-9-37(10-8-36)27(32)34-26(30)31/h4-6,14-15,20,38-39,42,44-45H,7-12H2,1-3H3,(H,33,43)(H5,30,31,32,34)/t14-,15-,20-,28+,29-/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C29H38N8O8/c1-28(44)13-5-4-6-16(38)17(13)21(39)18-14(28)11-15-20(35(2)3)22(40)19(24(42)29(15,45)23(18)41)25(43)33-12-36-7-9-37(10-8-36)27(32)34-26(30)31/h4-6,14-15,20,38,40-41,44-45H,7-12H2,1-3H3,(H,33,43)(H5,30,31,32,34)/t14-,15-,20-,28?,29?/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H38N8O8/c1-28(44)13-5-4-6-16(38)17(13)21(39)18-14(28)11-15-20(35(2)3)22(40)19(24(42)29(15,45)23(18)41)25(43)33-12-36-7-9-37(10-8-36)27(32)34-26(30)31/h4-6,14-15,20,38,40-41,44-45H,7-12H2,1-3H3,(H,33,43)(H5,30,31,32,34)/t14-,15-,20+,28+,29-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H39FO7/c1-24(2,3)14-23(34)35-15-21(33)29-22(36-25(4,5)37-29)12-18-19-11-16-10-17(31)8-9-26(16,6)28(19,30)20(32)13-27(18,29)7/h8-10,18-20,22,32H,11-15H2,1-7H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H39FO7/c1-24(2,3)14-23(34)35-15-21(33)29-22(36-25(4,5)37-29)12-18-19-11-16-10-17(31)8-9-26(16,6)28(19,30)20(32)13-27(18,29)7/h8-10,18-20,22,32H,11-15H2,1-7H3/t18-,19-,20-,22-,26?,27?,28?,29?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H39FO7/c1-24(2,3)14-23(34)35-15-21(33)29-22(36-25(4,5)37-29)12-18-19-11-16-10-17(31)8-9-26(16,6)28(19,30)20(32)13-27(18,29)7/h8-10,18-20,22,32H,11-15H2,1-7H3/t18-,19-,20+,22+,26-,27+,28-,29+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H39FO7/c1-24(2,3)14-23(34)35-15-21(33)29-22(36-25(4,5)37-29)12-18-19-11-16-10-17(31)8-9-26(16,6)28(19,30)20(32)13-27(18,29)7/h8-10,18-20,22,32H,11-15H2,1-7H3/t18-,19+,20+,22-,26+,27+,28-,29+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H39N3O2/c1-21(2)23-13-15-24(16-14-23)28(33)31-26(19-22-9-4-3-5-10-22)29(34)32-18-7-6-12-27(32)25-11-8-17-30-20-25/h3-5,8-11,17,20-21,23-24,26-27H,6-7,12-16,18-19H2,1-2H3,(H,31,33)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C29H39N3O2/c1-21(2)23-13-15-24(16-14-23)28(33)31-26(19-22-9-4-3-5-10-22)29(34)32-18-7-6-12-27(32)25-11-8-17-30-20-25/h3-5,8-11,17,20-21,23-24,26-27H,6-7,12-16,18-19H2,1-2H3,(H,31,33)/t23?,24?,26-,27-/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C29H39N3O3/c1-29(2,3)24-10-8-23(9-11-24)28(34)31-19-20-32(27(33)22-31)25-12-14-26(15-13-25)35-21-7-18-30-16-5-4-6-17-30/h8-15H,4-7,16-22H2,1-3H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H39N5O8/c1-28(2,3)31-11-17(35)32-15-10-16(33(4)5)13-8-12-9-14-21(34(6)7)24(38)20(27(30)41)26(40)29(14,42)25(39)18(12)23(37)19(13)22(15)36/h10,12,14,21,31,36-37,40,42H,8-9,11H2,1-7H3,(H2,30,41)(H,32,35)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C29H40N2O4/c1-6-18-17-31-10-8-20-14-27(33-3)29(35-5)16-23(20)25(31)12-21(18)11-24-22-15-28(34-4)26(32-2)13-19(22)7-9-30-24/h13-16,18,21,24-25,30H,6-12,17H2,1-5H3	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C29H40N2O4/c1-6-18-17-31-10-8-20-14-27(33-3)29(35-5)16-23(20)25(31)12-21(18)11-24-22-15-28(34-4)26(32-2)13-19(22)7-9-30-24/h13-16,18,21,24-25,30H,6-12,17H2,1-5H3/t18-,21-,24-,25-/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C29H40N2O4/c1-6-18-17-31-10-8-20-14-27(33-3)29(35-5)16-23(20)25(31)12-21(18)11-24-22-15-28(34-4)26(32-2)13-19(22)7-9-30-	0 (Mazumdar et al., 2023)

24/h13-16,18,21,24-25,30H,6-12,17H2,1-5H3/t18-,21-,24+,25-/m0/s1	2023)
InChI=1S/C29H40N2O4/c1-6-18-17-31-10-8-20-14-27(33-3)29(35-5)16-23(20)25(31)12-21(18)11-24-22-15-28(34-4)26(32-2)13-19(22)7-9-30-24/h13-16,18,21,24-25,30H,6-12,17H2,1-5H3/t18-,21+,24+,25+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H40N2O4/c1-6-18-17-31-10-8-20-14-27(33-3)29(35-5)16-23(20)25(31)12-21(18)11-24-22-15-28(34-4)26(32-2)13-19(22)7-9-30-24/h13-16,18,21,24-25,30H,6-12,17H2,1-5H3/t18-,21+,24+,25+/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C29H40N4O7/c1-28(2,3)12-31-11-14-10-17(32(4)5)15-8-13-9-16-21(33(6)7)24(36)20(27(30)39)26(38)29(16,40)25(37)18(13)23(35)19(15)22(14)34/h10,13,16,21,31,34-35,38,40H,8-9,11-12H2,1-7H3,(H2,30,39)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C29H40N4O7/c1-28(2,3)12-31-11-14-10-17(32(4)5)15-8-13-9-16-21(33(6)7)24(36)20(27(30)39)26(38)29(16,40)25(37)18(13)23(35)19(15)22(14)34/h10,13,16,21,31,34-35,38,40H,8-9,11-12H2,1-7H3,(H2,30,39)/t13-,16-,21-,29-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H41F2N5O/c1-19(2)27-34-33-20(3)36(27)25-17-23-9-10-24(18-25)35(23)16-13-26(21-7-5-4-6-8-21)32-28(37)22-11-14-29(30,31)15-12-22/h4-8,19,22-26H,9-18H2,1-3H3,(H,32,37)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H41NO4/c1-25(2,3)26(4,32)20-15-27-10-11-29(20,33-5)24-28(27)12-13-30(16-17-6-7-17)21(27)14-18-8-9-19(31)23(34-24)22(18)28/h8-9,17,20-21,24,31-32H,6-7,10-16H2,1-5H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H41NO4/c1-25(2,3)26(4,32)20-15-27-10-11-29(20,33-5)24-28(27)12-13-30(16-17-6-7-17)21(27)14-18-8-9-19(31)23(34-24)22(18)28/h8-9,17,20-21,24,31-32H,6-7,10-16H2,1-5H3/t20-,21-,24-,26+,27-,28+,29-/m1/s1	1 (Li et al., 2005)
InChI=1S/C29H41NO4/c1-25(2,3)26(4,32)20-15-27-10-11-29(20,33-5)24-28(27)12-13-30(16-17-6-7-17)21(27)14-18-8-9-19(31)23(34-24)22(18)28/h8-9,17,20-21,24,31-32H,6-7,10-16H2,1-5H3/t20-,21+,24-,26?,27-,28+,29?/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H41NO4/c1-25(2,3)26(4,32)20-15-27-10-11-29(20,33-5)24-28(27)12-13-30(16-17-6-7-17)21(27)14-18-8-9-19(31)23(34-24)22(18)28/h8-9,17,20-21,24,31-32H,6-7,10-16H2,1-5H3/t20-,21+,24-,26+,27+,28+,29-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H41NO4/c1-25(2,3)26(4,32)20-15-27-10-11-29(20,33-5)24-28(27)12-13-30(16-17-6-7-17)21(27)14-18-8-9-19(31)23(34-24)22(18)28/h8-9,17,20-21,24,31-32H,6-7,10-16H2,1-5H3/t20?,21?,24-,26?,27?,28?,29?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H41NO7/c1-35-15-16-36-19-23(27(33)37-25-12-9-20-5-4-6-22(20)17-25)18-29(13-2-3-14-29)28(34)30-24-10-7-21(8-11-24)26(31)32/h9,12,17,21,23-24H,2-8,10-11,13-16,18-19H2,1H3,(H,30,34)(H,31,32)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C29H42N2O4/c1-5-8-9-10-11-14-22-34-27-16-13-12-15-26(27)28(32)30-25-19-17-24(18-20-25)29(33)35-23-21-31(4,6-2)7-3/h12-13,15-20H,5-11,14,21-23H2,1-4H3/p+1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H42O6/c1-27-13-11-20(30)15-19(27)8-9-21-22-12-14-29(34,28(22,2)16-23(31)26(21)27)24(32)17-35-25(33)10-7-18-5-3-4-6-18/h15,18,21-23,26,31,34H,3-14,16-17H2,1-2H3/t21-,22-,23-,26+,27-,28-,29-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C29H42O6/c1-27-13-11-20(30)15-19(27)8-9-21-22-12-14-29(34,28(22,2)16-23(31)26(21)27)24(32)17-35-25(33)10-7-18-5-3-4-6-18/h15,18,21-23,26,31,34H,3-14,16-17H2,1-2H3/t21-,22-,23-,26+,27?,28?,29?/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H42O6/c1-27-13-11-20(30)15-19(27)8-9-21-22-12-14-29(34,28(22,2)16-23(31)26(21)27)24(32)17-35-25(33)10-7-18-5-3-4-6-18/h15,18,21-23,26,31,34H,3-14,16-17H2,1-2H3/t21-,22-,23+,26+,27-,28+,29+/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H42O6/c1-27-13-11-20(30)15-19(27)8-9-21-22-12-14-29(34,28(22,2)16-23(31)26(21)27)24(32)17-35-25(33)10-7-18-5-3-4-6-18/h15,18,21-23,26,31,34H,3-14,16-17H2,1-2H3/t21-,22+,23-,26-,27+,28-,29+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H44N2O7S2/c1-18(2)39-40-24(19(3)31(10)17-32)13-14-36-25(33)21(30)15-20-11-12-22(37-26(34)28(4,5)6)23(16-20)38-27(35)29(7,8)9/h11-12,16-18,21H,13-15,30H2,1-10H3/b24-19-	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H44O12/c1-13-22(34)23(35)24(36)25(40-13)41-15-8-19(32)28(12-30)21-17(3-5-27(28,37)9-15)29(38)6-4-16(14-7-20(33)39-11-	0 (Meng et al., 2021)

14)26(29,2)10-18(21)31/h7,13,15-19,21-25,30-32,34-38H,3-6,8-12H2,1-2H3	
InChI=1S/C29H48Br2O2/c1-17(2)8-7-9-18(3)21-10-11-22-20-16-24(30)26-27(31)25(33-19(4)32)13-15-29(26,6)23(20)12-14-28(21,22)5/h17-18,20-27H,7-16H2,1-6H3/t18-,20+,21-,22+,23+,24-,25?,26?,27-,28-,29-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C29H48Br2O2/c1-17(2)8-7-9-18(3)21-10-11-22-20-16-24(30)26-27(31)25(33-19(4)32)13-15-29(26,6)23(20)12-14-28(21,22)5/h17-18,20-27H,7-16H2,1-6H3/t18?,20-,21?,22-,23-,24-,25-,26-,27+,28?,29?/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H48Br2O2/c1-18(2)8-7-9-19(3)23-10-11-24-22-16-26(30)29(31)17-21(33-20(4)32)12-15-28(29,6)25(22)13-14-27(23,24)5/h18-19,21-26H,7-17H2,1-6H3	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H48Br2O2/c1-18(2)8-7-9-19(3)23-10-11-24-22-16-26(30)29(31)17-21(33-20(4)32)12-15-28(29,6)25(22)13-14-27(23,24)5/h18-19,21-26H,7-17H2,1-6H3/t19-,21-,22-,23-,24-,25+,26-,27-,28+,29-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H48Br2O2/c1-18(2)8-7-9-19(3)23-10-11-24-22-16-26(30)29(31)17-21(33-20(4)32)12-15-28(29,6)25(22)13-14-27(23,24)5/h18-19,21-26H,7-17H2,1-6H3/t19-,21+,22?,23-,24?,25?,26-,27-,28-,29+/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C29H48Br2O2/c1-18(2)8-7-9-19(3)23-10-11-24-22-16-26(30)29(31)17-21(33-20(4)32)12-15-28(29,6)25(22)13-14-27(23,24)5/h18-19,21-26H,7-17H2,1-6H3/t19-,21+,22+,23+,24-,25-,26-,27-,28-,29-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H48Br2O2/c1-18(2)8-7-9-19(3)23-10-11-24-22-16-26(30)29(31)17-21(33-20(4)32)12-15-28(29,6)25(22)13-14-27(23,24)5/h18-19,21-26H,7-17H2,1-6H3/t19?,21-,22-,23?,24-,25-,26-,27?,28?,29?/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H50O2/c1-20(2)12-9-13-21(3)14-10-15-22(4)16-11-18-29(8)19-17-26-25(7)27(30)23(5)24(6)28(26)31-29/h20-22,30H,9-19H2,1-8H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C29H50O2/c1-20(2)12-9-13-21(3)14-10-15-22(4)16-11-18-29(8)19-17-26-25(7)27(30)23(5)24(6)28(26)31-29/h20-22,30H,9-19H2,1-8H3/t21-,22-,29-/m0/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H50O2/c1-20(2)12-9-13-21(3)14-10-15-22(4)16-11-18-29(8)19-17-26-25(7)27(30)23(5)24(6)28(26)31-29/h20-22,30H,9-19H2,1-8H3/t21-,22-,29-/m1/s1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C29H53NO5/c1-5-7-9-11-12-13-14-15-16-18-24(34-29(33)26(30-22-31)20-23(3)4)21-27-25(28(32)35-27)19-17-10-8-6-2/h22-27H,5-21H2,1-4H3,(H,30,31)	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C2Cl2F4/c3-1(5,6)2(4,7)8	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C2Cl4/c3-1(4)2(5)6	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C2H2Cl2/c3-1-2-4/h1-2H	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C2H2Cl2/c3-1-2-4/h1-2H/b2-1-	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C2H2Cl2/c3-1-2-4/h1-2H/b2-1+	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C2H2Cl2O2/c3-1(4)2(5)6/h1H,(H,5,6)	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C2H2Cl3F/c3-2(4,5)1-6/h1H2	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C2H2Cl4/c3-1-2(4,5)6/h1H2	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C2H2ClF3/c3-1-2(4,5)6/h1H2	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C2H2F4/c3-1-2(4,5)6/h1H2	(Wu et al., 2018)

InChI=1S/C2H3Br3O/c3-1-2(4,5)6/h6H,1H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C2H3Br3O/c3-2(4,5)1-6/h6H,1H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C2H3Cl3/c1-2(3,4)5/h1H3	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C2H3Cl3/c3-1-2(4)5/h2H,1H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C2H3Cl3O2/c3-2(4,5)1(6)7/h1,6-7H	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C2H4/c1-2/h1-2H2	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C2H4Cl2/c1-2(3)4/h2H,1H3	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C2H4Cl2/c3-1-2-4/h1-2H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C2H4Cl3O4P/c3-2(4,5)1-9-10(6,7)8/h1H2,(H2,6,7,8)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C2H4O/c1-2-3-1/h1-2H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C2H5Cl/c1-2-3/h2H2,1H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C2H5NO2/c1-2(4)3-5/h5H,1H3,(H,3,4)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C2H5NO2/c3-1-2(4)5/h1,3H2,(H,4,5)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C2H6N2S/c1-5-2(3)4/h1H3,(H3,3,4)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C2H6O/c1-2-3/h3H,2H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C2H6O3S2/c3-7(4,5)2-1-6/h6H,1-2H2,(H,3,4,5)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C2H6O3S2/c3-7(4,5)2-1-6/h6H,1-2H2,(H,3,4,5)/p-1	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C2H7NS/c3-1-2-4/h4H,1-3H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C2H8O7P2/c1-2(3,10(4,5)6)11(7,8)9/h3H,1H3,(H2,4,5,6)(H2,7,8,9)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C2HBrClF3/c3-1(4)2(5,6)7/h1H	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C2HBrClF3/c3-1(4)2(5,6)7/h1H/t1-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C2HBrClF3/c3-1(4)2(5,6)7/h1H/t1-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C2HBrF4/c3-1(4)2(5,6)7/h1H	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C2HBrF4/c3-1(4)2(5,6)7/h1H/t1-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C2HBrF4/c3-1(4)2(5,6)7/h1H/t1-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C2HCl3/c3-1-2(4)5/h1H	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C2HClF2/c3-1-2(4)5/h1H	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H23NO8/c1-35-17-7-9-21-16(11-17)12-20(30(34)31-21)19-14-25(32)38-22-10-8-18-27(33)24(39-29(18)26(19)22)13-15-5-4-6-23(36-2)28(15)37-3/h4-13,19H,14H2,1-3H3,(H,31,34)/b24-13-/t19-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C30H25Cl2N3O5/c1-28(2,3)34-26(38)30(23-21-13-10-19(32)14-22(21)33-24(23)25(36)37)29(27(39)35(29)30)17-6-11-20(12-7-17)40-15-16-4-8-18(31)9-5-16/h4-14,33H,15H2,1-3H3,(H,34,38)(H,36,37)/t29-,30+,35?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H26F6N4O2/c31-29(32,33)20-4-3-5-22(18-20)40-14-12-39(13-15-40)16-17-42-28(41)24-6-1-2-7-25(24)38-26-10-11-37-27-19-21(30(34,35)36)8-9-23(26)27/h1-11,18-19H,12-17H2,(H,37,38)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C30H28N2O3/c31-21-22-5-4-6-23(19-22)28-13-7-24-20-25(33)8-14-29(24)30(28)35-27-11-9-26(10-12-27)34-18-17-32-15-2-1-3-16-32/h4-14,19-20,33H,1-3,15-18H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H28O10/c1-33-20-14-22(35-3)21(34-2)11-16(20)12-23-28(32)17-7-8-19-27(29(17)40-23)18(13-26(31)39-19)15-9-24(36-4)30(38-6)25(10-15)37-5/h7-12,14,18H,13H2,1-6H3/b23-12+/t18-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C30H29N3O4/c1-20(21-10-4-3-5-11-21)32-28(34)30(2,17-23-18-31-26-14-8-7-13-25(23)26)33-29(35)36-19-24-16-22-12-6-9-15-27(22)37-24/h3-16,18,20,31H,17,19H2,1-2H3,(H,32,34)(H,33,35)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C30H31NO5S/c1-37(33,34)27-13-5-22(6-14-27)28-15-7-23-21-24(32)8-16-29(23)30(28)36-26-11-9-25(10-12-26)35-20-19-31-17-3-2-4-18-31/h5-16,21,32H,2-4,17-20H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H33N3O2/c1-4-25(22-14-7-5-8-15-22)32-30(34)27-24-18-11-12-19-26(24)31-28(23-16-9-6-10-17-23)29(27)35-21-13-20-33(2)3/h5-12,14-19,25H,4,13,20-21H2,1-3H3,(H,32,34)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H33N3O2/c1-4-25(22-14-7-5-8-15-22)32-30(34)27-24-18-11-12-19-26(24)31-28(23-16-9-6-10-17-23)29(27)35-21-13-20-33(2)3/h5-12,14-19,25H,4,13,20-21H2,1-3H3,(H,32,34)/t25-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H34N2O3/c1-22-28-20-26(34)12-15-29(28)32(30(22)24-8-10-25(33)11-9-24)21-23-6-13-27(14-7-23)35-19-18-31-16-4-2-3-5-17-31/h6-15,20,33-34H,2-5,16-19,21H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H34N2O6/c1-18(2)20-7-9-21(10-8-20)24(13-28(35)37-3)30-29(36)26(33)12-23(38-30)17-31-14-19-11-22(16-31)25-5-4-6-27(34)32(25)15-19/h4-10,12,18-19,22,24,36H,11,13-17H2,1-3H3/t19-,22+,24+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C30H35ClN2O2/c1-32(2)28(34)30(25-10-5-3-6-11-25,26-12-7-4-8-13-26)18-9-21-33-22-19-29(35,20-23-33)24-14-16-27(31)17-15-24/h3-8,10-17,35H,9,18-23H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H35F2N3O/c1-22-5-3-6-23(2)30(22)33-29(36)21-35-19-17-34(18-20-35)16-4-7-28(24-8-12-26(31)13-9-24)25-10-14-27(32)15-11-25/h3,5-6,8-15,28H,4,7,16-21H2,1-2H3,(H,33,36)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C30H35F7N4O2/c1-18-13-24(31)5-6-26(18)27-17-25(40-11-9-39(10-12-40)20(3)42)7-8-41(27)28(43)38(4)19(2)21-14-22(29(32,33)34)16-23(15-21)30(35,36)37/h5-6,13-16,19,25,27H,7-12,17H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H35F7N4O2/c1-18-13-24(31)5-6-26(18)27-17-25(40-11-9-39(10-12-40)20(3)42)7-8-41(27)28(43)38(4)19(2)21-14-22(29(32,33)34)16-23(15-21)30(35,36)37/h5-6,13-16,19,25,27H,7-12,17H2,1-4H3/t19-,25+,27-/m0/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C30H35N3O3S/c1-36-27-18-23-14-16-33(37(2,34)35)26(23)17-25(27)19-31-29-24-13-15-32(20-24)30(29)28(21-9-5-3-6-10-21)22-11-7-4-8-12-22/h3-12,17-18,24,28-31H,13-16,19-20H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H35N3O3S/c1-36-27-18-23-14-16-33(37(2,34)35)26(23)17-25(27)19-31-29-24-13-15-32(20-24)30(29)28(21-9-5-3-6-10-21)22-11-7-4-8-12-22/h3-12,17-18,24,28-31H,13-16,19-20H2,1-2H3/t24?,29-,30?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H35NO11/c1-3-30(39)12-17(42-18-11-15(24(33)13(2)41-18)31-7-9-40-10-8-31)20-23(29(30)38)28(37)21-22(27(20)36)26(35)19-14(25(21)34)5-4-6-16(19)32/h4-6,13,15,17-18,24,29,32-33,36-39H,3,7-12H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C30H35NO11/c1-3-30(39)12-17(42-18-11-15(24(33)13(2)41-18)31-7-9-40-10-8-31)20-23(29(30)38)28(37)21-22(27(20)36)26(35)19-14(25(21)34)5-4-6-16(19)32/h4-6,13,15,17-18,24,29,32-33,36-39H,3,7-12H2,1-2H3/t13-,15-,17-,18-,24+,29+,30+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H36N4O4/c35-28-21-33(30(37)23-7-5-22(6-8-23)29(36)32-15-2-16-32)19-20-34(28)25-9-11-26(12-10-25)38-27-13-17-31(18-14-27)24-3-1-4-24/h5-12,24,27H,1-4,13-21H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H38N4O11/c1-29(44)14-5-4-6-17(36)18(14)22(37)19-15(29)13-16-21(32(2)3)23(38)20(25(40)30(16,45)24(19)39)27(41)31-26(28(42)43)34-9-7-33(8-10-34)11-12-35/h4-6,15-16,21,26,35-36,38-39,44-45H,7-13H2,1-3H3,(H,31,41)(H,42,43)/t15-,16-,21-,26-,29?,30?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H38N4O11/c1-29(44)14-5-4-6-17(36)18(14)22(37)19-15(29)13-16-21(32(2)3)23(38)20(25(40)30(16,45)24(19)39)27(41)31-26(28(42)43)34-9-7-33(8-10-34)11-12-35/h4-6,15-16,21,26,35-36,38-39,44-45H,7-13H2,1-3H3,(H,31,41)(H,42,43)/t15-,16-,21-,26+,29+,30+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H38N4O11/c1-29(44)14-5-4-6-17(36)18(14)22(37)19-15(29)13-16-21(32(2)3)23(38)20(25(40)30(16,45)24(19)39)27(41)31-26(28(42)43)34-9-7-33(8-10-34)11-12-35/h4-6,15-16,21,26,35-36,38-39,44-45H,7-13H2,1-3H3,(H,31,41)(H,42,43)/t15-,16-,21+,26-,29+,30-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H38N4O11/c1-29(44)14-5-4-6-17(36)18(14)22(37)19-15(29)13-16-21(32(2)3)23(38)20(25(40)30(16,45)24(19)39)27(41)31-26(28(42)43)34-9-7-33(8-10-34)11-12-35/h4-6,15-16,21,26,35-37,40,44-45H,7-13H2,1-3H3,(H,31,41)(H,42,43)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H38N4O11/c1-29(44)14-5-4-6-17(36)18(14)22(37)19-15(29)13-16-21(32(2)3)23(38)20(25(40)30(16,45)24(19)39)27(41)31-26(28(42)43)34-9-7-33(8-10-34)11-12-35/h4-6,15-16,21,26,35-37,40,44-45H,7-13H2,1-3H3,(H,31,41)(H,42,43)/t15-,16-,21-,26-,29?,30?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H38N4O11/c1-29(44)14-5-4-6-17(36)18(14)22(37)19-15(29)13-16-21(32(2)3)23(38)20(25(40)30(16,45)24(19)39)27(41)31-26(28(42)43)34-9-7-33(8-10-34)11-12-35/h4-6,15-16,21,26,35-37,40,44-45H,7-13H2,1-3H3,(H,31,41)(H,42,43)/t15-,16-,21-,26?,29+,30-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C30H38O5/c1-3-4-10-21(2)27(31)16-15-25-26-18-22(17-24(26)19-28(25)32)11-8-9-14-30(34)35-20-29(33)23-12-6-5-7-13-23/h5-7,11-13,15-16,21,24-28,31-32H,8-10,14,17-20H2,1-2H3/b16-15+,22-11-	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H39N5O7S2/c1-29(2)23(34-25(38)20(31)14-18-10-12-19(36)13-11-18)27(40)32-16-22(37)33-21(15-17-8-6-5-7-9-17)26(39)35-24(28(41)42)30(3,4)44-43-29/h5-13,20-21,23-24,36H,14-16,31H2,1-4H3,(H,32,40)(H,33,37)(H,34,38)(H,35,39)(H,41,42)/t20-,21-,23-,24-/m0/s1	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C30H39N5O7S2/c1-29(2)23(34-25(38)20(31)14-18-10-12-19(36)13-11-18)27(40)32-16-22(37)33-21(15-17-8-6-5-7-9-17)26(39)35-24(28(41)42)30(3,4)44-43-29/h5-13,20-21,23-24,36H,14-16,31H2,1-4H3,(H,32,40)(H,33,37)(H,34,38)(H,35,39)(H,41,42)/t20?,21?,23-,24+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H40Cl2O6/c1-6-8-25(35)37-17-24(34)30(38-26(36)9-7-2)18(3)14-22-21-11-10-19-15-20(33)12-13-27(19,4)29(21,32)23(31)16-28(22,30)5/h12-13,15,18,21-23H,6-11,14,16-17H2,1-5H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H40Cl2O6/c1-6-8-25(35)37-17-24(34)30(38-26(36)9-7-2)18(3)14-22-21-11-10-19-15-20(33)12-13-27(19,4)29(21,32)23(31)16-28(22,30)5/h12-13,15,18,21-23H,6-11,14,16-17H2,1-5H3/t18-,21-,22-,23-,27?,28?,29?,30?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H40Cl2O6/c1-6-8-25(35)37-17-24(34)30(38-26(36)9-7-2)18(3)14-22-21-11-10-19-15-20(33)12-13-27(19,4)29(21,32)23(31)16-28(22,30)5/h12-13,15,18,21-23H,6-11,14,16-17H2,1-5H3/t18-,21-,22-,23+,27-,28+,29-,30+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H40Cl2O6/c1-6-8-25(35)37-17-24(34)30(38-26(36)9-7-2)18(3)14-22-21-11-10-19-15-20(33)12-13-27(19,4)29(21,32)23(31)16-28(22,30)5/h12-13,15,18,21-23H,6-11,14,16-17H2,1-5H3/t18-,21-,22+,23-,27-,28-,29+,30+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H40Cl2O6/c1-6-8-25(35)37-17-24(34)30(38-26(36)9-7-2)18(3)14-22-21-11-10-19-15-20(33)12-13-27(19,4)29(21,32)23(31)16-28(22,30)5/h12-13,15,18,21-23H,6-11,14,16-17H2,1-5H3/t18-,21+,22+,23+,27+,28+,29+,30+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H40N4O2/c1-3-23-7-9-24(10-8-23)25-11-13-26(14-12-25)29(35)31(2)27-15-19-33(21-27)30(36)34-20-16-28(22-34)32-17-5-4-6-18-32/h7-14,27-28H,3-6,15-22H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C30H41FO7/c1-25(2,3)15-24(35)36-16-22(34)30-23(37-26(4,5)38-30)13-20-19-9-8-17-12-18(32)10-11-27(17,6)29(19,31)21(33)14-28(20,30)7/h10-12,19-21,23,33H,8-9,13-16H2,1-7H3/t19-,20-,21-,23+,27-,28-,29-,30+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H41FO7/c1-25(2,3)15-24(35)36-16-22(34)30-23(37-26(4,5)38-30)13-20-19-9-8-17-12-18(32)10-11-27(17,6)29(19,31)21(33)14-28(20,30)7/h10-12,19-21,23,33H,8-9,13-16H2,1-7H3/t19-,20-,21?,23-,27?,28?,29?,30?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H42O8/c1-16-24(32)25(33)26(34)27(37-16)38-19-8-11-28(2)18(14-19)5-6-22-21(28)9-12-29(3)20(10-13-30(22,29)35)17-4-7-23(31)36-15-17/h4,7,14-16,19-22,24-27,32-35H,5-6,8-13H2,1-3H3/t16-,19-,20?,21-,22-,24+,25-,26-,27+,28?,29?,30?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H42O8/c1-16-24(32)25(33)26(34)27(37-16)38-19-8-11-28(2)18(14-19)5-6-22-21(28)9-12-29(3)20(10-13-30(22,29)35)17-4-7-23(31)36-15-17/h4,7,14-16,19-22,24-27,32-35H,5-6,8-13H2,1-3H3/t16-,19-,20+,21-,22+,24-,25+,26+,27-,28-,29+,30-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H42O8/c1-16-24(32)25(33)26(34)27(37-16)38-19-8-11-28(2)18(14-19)5-6-22-21(28)9-12-29(3)20(10-13-30(22,29)35)17-4-7-23(31)36-15-17/h4,7,14-16,19-22,24-27,32-35H,5-6,8-13H2,1-3H3/t16?,19-,20+,21-,22+,24?,25?,26?,27?,28-,29+,30-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H46Cl2O19/c31-27(32,33)23(46)55-8-4-50-1-2-52-12-14-11-15(60-26(49)30(40,41)42)17(43)22(58-14)61-19-16(13-53-6-10-57-25(48)29(37,38)39)59-21(45)18(44)20(19)54-7-3-51-5-9-56-24(47)28(34,35)36/h14-26,43-49H,1-13H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H46Cl2O19/c31-27(32,33)23(46)55-8-4-50-1-2-52-12-14-11-15(60-26(49)30(40,41)42)17(43)22(58-14)61-19-16(13-53-6-10-57-25(48)29(37,38)39)59-21(45)18(44)20(19)54-7-3-51-5-9-56-24(47)28(34,35)36/h14-26,43-49H,1-13H2/t14-,15-,16-,17-,18-,19-,20-,21+,22+,23+,24-,25-,26+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H46Cl2O19/c31-27(32,33)23(46)55-8-4-50-1-2-52-12-14-11-15(60-26(49)30(40,41)42)17(43)22(58-14)61-19-16(13-53-6-10-57-25(48)29(37,38)39)59-21(45)18(44)20(19)54-7-3-51-5-9-56-24(47)28(34,35)36/h14-26,43-49H,1-13H2/t14-,15-,16+,17+,18+,19-,20+,21+,22-,23+,24+,25+,26+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H46Cl2O19/c31-27(32,33)23(46)55-8-4-50-1-2-52-12-14-11-15(60-26(49)30(40,41)42)17(43)22(58-14)61-19-16(13-53-6-10-57-25(48)29(37,38)39)59-21(45)18(44)20(19)54-7-3-51-5-9-56-24(47)28(34,35)36/h14-26,43-49H,1-13H2/t14-,15-,16+,17+,18+,19+,20+,21+,22-,23?,24?,25?,26?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H46NO7P/c1-4-28(33)37-30(22(2)3)38-39(36,18-12-11-15-23-13-7-5-8-14-23)21-27(32)31-20-25(19-26(31)29(34)35)24-16-9-6-10-17-24/h5,7-8,13-14,22,24-26,30H,4,6,9-12,15-21H2,1-3H3,(H,34,35)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H46O4/c1-25(2)21-8-11-30(7)23(28(21,5)10-9-22(25)32)20(31)16-18-19-17-27(4,24(33)34)13-12-26(19,3)14-15-29(18,30)6/h16,19,21-23,32H,8-15,17H2,1-7H3,(H,33,34)	0	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C30H46O4/c1-25(2)21-8-11-30(7)23(28(21,5)10-9-22(25)32)20(31)16-18-19-17-27(4,24(33)34)13-12-26(19,3)14-15-29(18,30)6/h16,19,21-23,32H,8-15,17H2,1-7H3,(H,33,34)/t19-,21-,22+,23+,26?,27?,28?,29?,30?/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H47NO4S/c1-7-28(4)16-24(35-25(33)17-36-22-14-20-8-9-21(15-22)31(20)6)29(5)18(2)10-12-30(19(3)27(28)34)13-11-23(32)26(29)30/h7,18-22,24,26-27,34H,1,8-17H2,2-6H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H50O5/c1-20(9-6-15-29(3,4)34)24-13-14-25-22(10-7-16-30(24,25)5)11-12-23-19-26(32)28(27(33)21(23)2)35-18-8-17-31/h11-12,20,24-28,31-34H,2,6-10,13-19H2,1,3-5H3/b22-11+,23-12+	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H53N3O6/c1-19(2)22(14-21-10-11-26(38-8)27(15-21)39-13-9-12-37-7)16-24(31)25(34)17-23(20(3)4)28(35)33-18-30(5,6)29(32)36/h10-11,15,19-20,22-25,34H,9,12-14,16-18,31H2,1-8H3,(H2,32,36)(H,33,35)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H53NO11/c1-3-4-9-31-29-7-5-28(6-8-29)30(32)42-27-26-41-25-24-40-23-22-39-21-20-38-19-18-37-17-16-36-15-14-35-13-12-34-11-10-33-2/h5-8,31H,3-4,9-27H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C30H60N3O3/c1-10-31(11-2,12-3)22-25-34-28-20-19-21-29(35-26-23-32(13-4,14-5)15-6)30(28)36-27-24-33(16-7,17-8)18-9/h19-21H,10-18,22-27H2,1-9H3/q+3	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C31H28O11/c1-15(32)40-31-25(38-5)9-16(10-26(31)39-6)19-13-27(33)41-20-8-7-18-29(34)24(42-30(18)28(19)20)12-17-11-22(36-3)23(37-4)14-21(17)35-2/h7-12,14,19H,13H2,1-6H3/b24-12+/t19-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C31H30O13S/c1-37-19-6-12(5-16(32)24(19)33)22-13-7-17-18(41-11-40-17)8-14(13)27(15-9-38-29(36)23(15)22)43-31-26(35)25(34)28-20(42-31)10-39-30(44-28)21-3-2-4-45-21/h2-8,15,20,22-23,25-28,30-35H,9-11H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C31H30O13S/c1-37-19-6-12(5-16(32)24(19)33)22-13-7-17-18(41-11-40-17)8-14(13)27(15-9-38-29(36)23(15)22)43-31-26(35)25(34)28-20(42-31)10-39-30(44-28)21-3-2-4-45-21/h2-8,15,20,22-23,25-28,30-35H,9-11H2,1H3/t15-,20-,22-,23-,25-,26-,27-,28-,30-,31+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C31H33F3N2O5S/c1-3-16-30(17-15-21-9-6-5-7-10-21)19-26(37)28(29(38)41-30)25(4-2)22-11-8-12-24(18-22)36-42(39,40)27-14-13-23(20-35-27)31(32,33)34/h5-14,18,20,25,36-37H,3-4,15-17,19H2,1-2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C31H33N3O6S/c1-20-8-4-7-11-29(20)41(37,38)33-30(35)22-13-12-21(28(17-22)39-3)16-23-19-34(2)27-15-14-24(18-26(23)27)32-31(36)40-25-9-5-6-10-25/h4,7-8,11-15,17-19,25H,5-6,9-10,16H2,1-3H3,(H,32,36)(H,33,35)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C31H33N5O4/c1-34-15-17-36(18-16-34)20-27(37)35(2)24-12-10-23(11-13-24)32-29(21-7-5-4-6-8-21)28-25-14-9-22(31(39)40-3)19-26(25)33-30(28)38/h4-14,19,33,38H,15-18,20H2,1-3H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C31H33NO5S/c1-2-38(34,35)28-14-6-23(7-15-28)29-16-8-24-22-25(33)9-17-30(24)31(29)37-27-12-10-26(11-13-27)36-21-20-32-18-4-3-5-19-32/h6-17,22,33H,2-5,18-21H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C31H34N2O5S/c1-32(2)39(35,36)28-14-6-23(7-15-28)29-16-8-24-22-25(34)9-17-30(24)31(29)38-27-12-10-26(11-13-27)37-21-20-33-18-4-3-5-19-33/h6-17,22,34H,3-5,18-21H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C31H36ClN3O5S/c1-37-26-19-22(20-27(38-2)30(26)39-3)31(36)40-18-17-34-15-13-33(14-16-34)11-6-12-35-24-7-4-5-8-28(24)41-29-10-9-23(32)21-25(29)35/h4-5,7-10,19-21H,6,11-18H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C31H36N2O11/c1-14(2)7-8-16-13-17(9-11-19(16)34)27(37)33-21-22(35)18-10-12-20(15(3)24(18)42-28(21)38)41-29-23(36)25(43-30(32)39)26(40-6)31(4,5)44-29/h7,9-13,23,25-26,29,34-36H,8H2,1-6H3,(H2,32,39)(H,33,37)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C31H36N2O11/c1-14(2)7-8-16-13-17(9-11-19(16)34)27(37)33-21-22(35)18-10-12-20(15(3)24(18)42-28(21)38)41-29-23(36)25(43-30(32)39)26(40-6)31(4,5)44-29/h7,9-13,23,25-26,29,34-36H,8H2,1-6H3,(H2,32,39)(H,33,37)/t23-,25-,26-,29-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C31H36N2O11/c1-14(2)7-8-16-13-17(9-11-19(16)34)27(37)33-21-22(35)18-10-12-20(15(3)24(18)42-28(21)38)41-29-23(36)25(43-30(32)39)26(40-6)31(4,5)44-29/h7,9-13,23,25-26,29,34-36H,8H2,1-6H3,(H2,32,39)(H,33,37)/t23-,25-,26+,29+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C31H36N2O11/c1-14(2)7-8-16-13-17(9-11-19(16)34)27(37)33-21-22(35)18-10-12-20(15(3)24(18)42-28(21)38)41-29-23(36)25(43-30(32)39)26(40-6)31(4,5)44-29/h7,9-13,23,25-26,29,34-36H,8H2,1-6H3,(H2,32,39)(H,33,37)/t23-,25+,26-,29-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C31H36N2O11/c1-14(2)7-8-16-13-17(9-11-19(16)34)27(37)33-21-22(35)18-10-12-20(15(3)24(18)42-28(21)38)41-29-23(36)25(43-30(32)39)26(40-6)31(4,5)44-29/h7,9-13,23,25-26,29,34-36H,8H2,1-6H3,(H2,32,39)(H,33,37)/t23-,25+,26-,29+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C31H37N5O2/c1-24(37)35-16-14-28-10-11-29(22-30(28)35)36(31(38)12-9-26-7-4-8-27(21-26)23-32)34-19-17-33(18-20-34)15-13-25-5-2-3-6-25/h4,7-12,21-22,25H,2-3,5-6,13-20H2,1H3/b12-9+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C31H37NO7/c1-4-5-25-38-30-12-13-31(39-25,24(35)18-37-27(36)19-9-14-32-15-10-19)29(30,3)17-23(34)26-22(30)7-6-20-16-21(33)8-11-28(20,26)2/h4-5,9-10,14-16,22-23,25-26,34H,6-8,11-13,17-18H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C31H37NO7/c1-4-5-25-38-30-12-13-31(39-25,24(35)18-37-27(36)19-9-14-32-15-10-19)29(30,3)17-23(34)26-22(30)7-6-20-16-21(33)8-11-28(20,26)2/h4-5,9-10,14-16,22-23,25-26,34H,6-8,11-13,17-18H2,1-3H3/b5-4-/t22-,23-,25-,26+,28?,29?,30?,31?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C31H37NO7/c1-4-5-25-38-30-12-13-31(39-25,24(35)18-37-27(36)19-9-14-32-15-10-19)29(30,3)17-23(34)26-22(30)7-6-20-16-21(33)8-11-28(20,26)2/h4-5,9-10,14-16,22-23,25-26,34H,6-8,11-13,17-18H2,1-3H3/b5-4-/t22-,23+,25?,26-,28+,29+,30-,31+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C31H37NO7/c1-4-5-25-38-30-12-13-31(39-25,24(35)18-37-27(36)19-9-14-32-15-10-19)29(30,3)17-23(34)26-22(30)7-6-20-16-21(33)8-	1	(Meng et al., 2021)

11-28(20,26)2/h4-5,9-10,14-16,22-23,25-26,34H,6-8,11-13,17-18H2,1-3H3/b5-4+/t22-,23-,25-,26+,28?,29?,30?,31?/m0/s1	
InChI=1S/C31H37NO7/c1-4-5-25-38-30-12-13-31(39-25,24(35)18-37-27(36)19-9-14-32-15-10-19)29(30,3)17-23(34)26-22(30)7-6-20-16-21(33)8-11-28(20,26)2/h4-5,9-10,14-16,22-23,25-26,34H,6-8,11-13,17-18H2,1-3H3/b5-4+/t22-,23+,25+,26-,28-,29+,30-,31-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C31H37NO7/c1-5-6-26-38-18-31(39-26)23-8-7-21-15-22(33)9-12-29(21,3)27(23)24(34)16-30(31,4)19(2)25(35)17-37-28(36)20-10-13-32-14-11-20/h5-6,10-11,13-15,23-24,26-27,34H,2,7-9,12,16-18H2,1,3-4H3/b6-5+/t23-,24-,26+,27-,29+,30+,31-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C31H38N2O/c1-22(2)26-14-15-28(34-3)27(20-26)21-32-30-25-16-18-33(19-17-25)31(30)29(23-10-6-4-7-11-23)24-12-8-5-9-13-24/h4-15,20,22,25,29-32H,16-19,21H2,1-3H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C31H38N2O/c1-22(2)26-14-15-28(34-3)27(20-26)21-32-30-25-16-18-33(19-17-25)31(30)29(23-10-6-4-7-11-23)24-12-8-5-9-13-24/h4-15,20,22,25,29-32H,16-19,21H2,1-3H3/t30-,31-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C31H38N2O2/c1-31(2,34)26-14-15-27(35-3)25(20-26)21-32-29-24-16-18-33(19-17-24)30(29)28(22-10-6-4-7-11-22)23-12-8-5-9-13-23/h4-15,20,24,28-30,32,34H,16-19,21H2,1-3H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C31H38N2O2/c1-31(2,34)26-14-15-27(35-3)25(20-26)21-32-29-24-16-18-33(19-17-24)30(29)28(22-10-6-4-7-11-22)23-12-8-5-9-13-23/h4-15,20,24,28-30,32,34H,16-19,21H2,1-3H3/t29-,30-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C31H40O2/c1-22(2)12-9-13-23(3)14-10-15-24(4)16-11-17-25(5)20-21-27-26(6)30(32)28-18-7-8-19-29(28)31(27)33/h7-8,12,14,16,18-20H,9-11,13,15,17,21H2,1-6H3	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C31H41BrFNO3/c1-2-3-4-5-6-7-8-11-30(36)37-31(26-14-16-27(32)17-15-26)20-23-34(24-21-31)22-9-10-29(35)25-12-18-28(33)19-13-25/h12-19H,2-11,20-24H2,1H3	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C31H41ClFNO3/c1-2-3-4-5-6-7-8-11-30(36)37-31(26-14-16-27(32)17-15-26)20-23-34(24-21-31)22-9-10-29(35)25-12-18-28(33)19-13-25/h12-19H,2-11,20-24H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C31H43N3O4S/c1-20(2)32-31(38)27-16-22-10-7-8-11-23(22)17-34(27)18-29(36)26(19-39-24-12-5-4-6-13-24)33-30(37)25-14-9-15-28(35)21(25)3/h4-6,9,12-15,20,22-23,26-27,29,35-36H,7-8,10-11,16-19H2,1-3H3,(H,32,38)(H,33,37)/t22-,23+,26-,27-,29+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C31H44N2O5S/c1-5-8-12-29-30(27-23-25(32-39(4,35)36)15-18-28(27)38-29)31(34)24-13-16-26(17-14-24)37-22-11-21-33(19-9-6-2)20-10-7-3/h13-18,23,32H,5-12,19-22H2,1-4H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C31H46O2/c1-22(2)12-9-13-23(3)14-10-15-24(4)16-11-17-25(5)20-21-27-26(6)30(32)28-18-7-8-19-29(28)31(27)33/h7-8,18-20,22-24H,9-17,21H2,1-6H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C31H46O7/c1-20-16-22(18-24(26(20)33)29(3,4)5)31(9,28(35)38-15-14-37-13-12-36-11-10-32)23-17-21(2)27(34)25(19-23)30(6,7)8/h16-19,32-34H,10-15H2,1-9H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C31H46O8/c1-5-29-11-6-20(39-26-15-24(36-4)27(33)18(2)38-26)16-30(29,34)12-8-23-22(29)7-10-28(3)21(9-13-31(23,28)35)19-14-25(32)37-17-19/h5,14,18,20-24,26-27,33-35H,1,6-13,15-17H2,2-4H3/t18-,20+,21-,22-,23+,24+,26-,27-,28+,29-,30+,31+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C31H48O2S2/c1-27(2,3)21-15-19(16-22(25(21)32)28(4,5)6)34-31(13,14)35-20-17-23(29(7,8)9)26(33)24(18-20)30(10,11)12/h15-18,32-33H,1-14H3	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C31H48O6/c1-17(2)9-8-10-20(28(35)36)26-22-15-24(34)27-29(5)13-12-23(33)18(3)21(29)11-14-30(27,6)31(22,7)16-25(26)37-19(4)32/h9,18,21-25,27,33-34H,8,10-16H2,1-7H3,(H,35,36)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C31H48O6/c1-17(2)9-8-10-20(28(35)36)26-22-15-24(34)27-29(5)13-12-23(33)18(3)21(29)11-14-30(27,6)31(22,7)16-25(26)37-19(4)32/h9,18,21-25,27,33-34H,8,10-16H2,1-7H3,(H,35,36)/b26-20-/t18-,21-,22-,23+,24+,25-,27-,29-,30-,31-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C31H48O6/c1-17(2)9-8-10-20(28(35)36)26-22-15-24(34)27-29(5)13-12-23(33)18(3)21(29)11-14-30(27,6)31(22,7)16-25(26)37-19(4)32/h9,18,21-25,27,33-34H,8,10-16H2,1-7H3,(H,35,36)/b26-20-/t18-,21-,22+,23-,24-,25-,27+,29+,30-,31-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C31H48O6/c1-17(2)9-8-10-20(28(35)36)26-22-15-24(34)27-29(5)13-12-23(33)18(3)21(29)11-14-30(27,6)31(22,7)16-25(26)37-19(4)32/h9,18,21-25,27,33-34H,8,10-16H2,1-7H3,(H,35,36)/b26-20-/t18-,21-,22+,23-,24-,25?,27-,29?,30?,31?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C31H48O6/c1-17(2)9-8-10-20(28(35)36)26-22-15-24(34)27-29(5)13-12-23(33)18(3)21(29)11-14-30(27,6)31(22,7)16-25(26)37-19(4)32/h9,18,21-25,27,33-34H,8,10-16H2,1-7H3,(H,35,36)/b26-20+/t18-,21-,22-,23+,24+,25-,27?,29-,30-,31-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C31H48O6/c1-17(2)9-8-10-20(28(35)36)26-22-15-24(34)27-29(5)13-12-23(33)18(3)21(29)11-14-30(27,6)31(22,7)16-25(26)37-19(4)32/h9,18,21-25,27,33-34H,8,10-16H2,1-7H3,(H,35,36)/b26-20+/t18-,21-,22-,23+,24+,25-,27?,29-,30-,31-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C31H48O6/c1-17(2)9-8-10-20(28(35)36)26-22-15-24(34)27-29(5)13-12-23(33)18(3)21(29)11-14-30(27,6)31(22,7)16-25(26)37-19(4)32/h9,18,21-25,27,33-34H,8,10-16H2,1-7H3,(H,35,36)/b26-20+/t18-,21-,22-,23+,24+,25-,27+,29+,30+,31-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C31H48O6/c1-17(2)9-8-10-20(28(35)36)26-22-15-24(34)27-29(5)13-12-23(33)18(3)21(29)11-14-30(27,6)31(22,7)16-25(26)37-19(4)32/h9,18,21-25,27,33-34H,8,10-16H2,1-7H3,(H,35,36)/b26-20+/t18-,21-,22+,23-,24-,25-,27-,29?,30?,31?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C31H48O6/c1-17(2)9-8-10-20(28(35)36)26-22-15-24(34)27-29(5)13-12-23(33)18(3)21(29)11-14-30(27,6)31(22,7)16-25(26)37-19(4)32/h9,18,21-25,27,33-34H,8,10-16H2,1-7H3,(H,35,36)/t18-,21+,22+,23-,24-,25-,27+,29+,30+,31-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C31H51NO9/c1-9-25-20(5)29-31(6,41-29)12-10-23(34)17(2)14-21(11-13-33)28(19(4)24(35)16-26(36)39-25)40-30-27(37)22(32(7)8)15-18(3)38-30/h10,12-13,17-22,24-25,27-30,35,37H,9,11,14-16H2,1-8H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H26N4O2/c1-21-33-28-19-20-36(29-14-8-7-13-27(29)30(28)34-21)32(38)23-15-17-24(18-16-23)35-31(37)26-12-6-5-11-25(26)22-9-3-2-4-10-22/h2-18H,19-20H2,1H3,(H,33,34)(H,35,37)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H32O13S/c1-37-19-6-13(7-20(38-2)25(19)33)23-14-8-17-18(42-12-41-17)9-15(14)28(16-10-39-30(36)24(16)23)44-32-27(35)26(34)29-21(43-32)11-40-31(45-29)22-4-3-5-46-22/h3-9,16,21,23-24,26-29,31-35H,10-12H2,1-2H3/t16-,21?,23+,24-,26?,27?,28+,29?,31?,32?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H32O13S/c1-37-19-6-13(7-20(38-2)25(19)33)23-14-8-17-18(42-12-41-17)9-15(14)28(16-10-39-30(36)24(16)23)44-32-27(35)26(34)29-21(43-32)11-40-31(45-29)22-4-3-5-46-22/h3-9,16,21,23-24,26-29,31-35H,10-12H2,1-2H3/t16-,21+,23+,24-,26+,27+,28-,29-,31+,32-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H32O13S/c1-37-19-6-13(7-20(38-2)25(19)33)23-14-8-17-18(42-12-41-17)9-15(14)28(16-10-39-30(36)24(16)23)44-32-27(35)26(34)29-21(43-32)11-40-31(45-29)22-4-3-5-46-22/h3-9,16,21,23-24,26-29,31-35H,10-12H2,1-2H3/t16-,21+,23+,24-,26+,27+,28+,29+,31+,32-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H33FO8/c1-28(2)40-26-14-20-21-13-18-12-19(34)9-10-29(18,3)31(21,33)24(35)15-30(20,4)32(26,41-28)25(36)16-38-27(37)23-11-17-7-5-6-8-22(17)39-23/h5-12,20-21,24,26,35H,13-16H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H33FO8/c1-28(2)40-26-14-20-21-13-18-12-19(34)9-10-29(18,3)31(21,33)24(35)15-30(20,4)32(26,41-28)25(36)16-38-27(37)23-11-17-7-5-6-8-22(17)39-23/h5-12,20-21,24,26,35H,13-16H2,1-4H3/t20-,21-,24-,26-,29?,30?,31?,32?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H33FO8/c1-28(2)40-26-14-20-21-13-18-12-19(34)9-10-29(18,3)31(21,33)24(35)15-30(20,4)32(26,41-28)25(36)16-38-27(37)23-11-17-7-5-6-8-22(17)39-23/h5-12,20-21,24,26,35H,13-16H2,1-4H3/t20-,21-,24-,26+,29-,30+,31-,32+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H33FO8/c1-28(2)40-26-14-20-21-13-18-12-19(34)9-10-29(18,3)31(21,33)24(35)15-30(20,4)32(26,41-28)25(36)16-38-27(37)23-11-17-7-5-6-8-22(17)39-23/h5-12,20-21,24,26,35H,13-16H2,1-4H3/t20-,21+,24-,26-,29+,30+,31-,32+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H34N2O14/c1-43-19-7-5-15(9-21(19)47-13-23(33)35)17(11-25(37)45-3)27-29(39)31(41)28(32(42)30(27)40)18(12-26(38)46-4)16-6-8-20(44-2)22(10-16)48-14-24(34)36/h5-10,17-18,39,42H,11-14H2,1-4H3,(H2,33,35)(H2,34,36)/t17-,18-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H34N4O3/c1-2-25(22-12-5-3-6-13-22)36-32(38)28-24-16-9-10-17-26(24)35-29(23-14-7-4-8-15-23)30(28)39-21-20-34-31(37)27-18-11-19-33-27/h3-10,12-17,25,27,33H,2,11,18-21H2,1H3,(H,34,37)(H,36,38)	0	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C32H34N4O3/c1-2-25(22-12-5-3-6-13-22)36-32(38)28-24-16-9-10-17-26(24)35-29(23-14-7-4-8-15-23)30(28)39-21-20-34-31(37)27-18-11-19-33-27/h3-10,12-17,25,27,33H,2,11,18-21H2,1H3,(H,34,37)(H,36,38)/t25-,27-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H34N4O4/c1-22(23-11-5-4-6-12-23)34-30(37)32(21-36(2)3,18-25-19-33-28-15-9-8-14-27(25)28)35-31(38)39-20-26-17-24-13-7-10-16-29(24)40-26/h4-17,19,22,33H,18,20-21H2,1-3H3,(H,34,37)(H,35,38)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C32H35N5O11S2/c1-32(2)25(31(45)46)37-29(44)24(30(37)49-32)35-28(43)23(18-3-7-19(40)8-4-18)34-27(42)21-11-12-22(33-26(21)41)17-5-9-20(10-6-17)50(47,48)36(13-15-38)14-16-39/h3-12,23-25,30,38-40H,13-16H2,1-2H3,(H,33,41)(H,34,42)(H,35,43)(H,45,46)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H35N5O11S2/c1-32(2)25(31(45)46)37-29(44)24(30(37)49-32)35-28(43)23(18-3-7-19(40)8-4-18)34-27(42)21-11-12-22(33-26(21)41)17-5-9-20(10-6-17)50(47,48)36(13-15-38)14-16-39/h3-12,23-25,30,38-40H,13-16H2,1-2H3,(H,33,41)(H,34,42)(H,35,43)(H,45,46)/t23-,24-,25+,30-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C32H35N5O11S2/c1-32(2)25(31(45)46)37-29(44)24(30(37)49-32)35-28(43)23(18-3-7-19(40)8-4-18)34-27(42)21-11-12-22(33-26(21)41)17-5-9-20(10-6-17)50(47,48)36(13-15-38)14-16-39/h3-12,23-25,30,38-40H,13-16H2,1-2H3,(H,33,41)(H,34,42)(H,35,43)(H,45,46)/t23-,24?,25-,30-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H35N5O11S2/c1-32(2)25(31(45)46)37-29(44)24(30(37)49-32)35-28(43)23(18-3-7-19(40)8-4-18)34-27(42)21-11-12-22(33-26(21)41)17-5-9-20(10-6-17)50(47,48)36(13-15-38)14-16-39/h3-12,23-25,30,38-40H,13-16H2,1-2H3,(H,33,41)(H,34,42)(H,35,43)(H,45,46)/t23-,24+,25-,30+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H35N5O11S2/c1-32(2)25(31(45)46)37-29(44)24(30(37)49-32)35-28(43)23(18-3-7-19(40)8-4-18)34-27(42)21-11-12-22(33-26(21)41)17-5-9-20(10-6-17)50(47,48)36(13-15-38)14-16-39/h3-12,23-25,30,38-40H,13-16H2,1-2H3,(H,33,41)(H,34,42)(H,35,43)(H,45,46)/t23-,24+,25+,30-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H37CIN2O8/c1-38-24-10-16(11-25(39-2)29(24)40-3)31(36)43-26-12-17-15-35-9-8-19-21-13-18(33)6-7-22(21)34-28(19)23(35)14-20(17)27(30(26)41-4)32(37)42-5/h6-7,10-11,13,17,20,23,26-27,30,34H,8-9,12,14-15H2,1-5H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H37CIN2O8/c1-38-24-10-16(11-25(39-2)29(24)40-3)31(36)43-26-12-17-15-35-9-8-19-21-13-18(33)6-7-22(21)34-28(19)23(35)14-20(17)27(30(26)41-4)32(37)42-5/h6-7,10-11,13,17,20,23,26-27,30,34H,8-9,12,14-15H2,1-5H3/t17-,20-,23+,26-,27+,30+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H37CIN2O8/c1-38-24-10-16(11-25(39-2)29(24)40-3)31(36)43-26-12-17-15-35-9-8-19-21-13-18(33)6-7-22(21)34-28(19)23(35)14-20(17)27(30(26)41-4)32(37)42-5/h6-7,10-11,13,17,20,23,26-27,30,34H,8-9,12,14-15H2,1-5H3/t17-,20+,23-,26-,27+,30+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H37CIN2O8/c1-38-24-10-16(11-25(39-2)29(24)40-3)31(36)43-26-12-17-15-35-9-8-19-21-13-18(33)6-7-22(21)34-28(19)23(35)14-20(17)27(30(26)41-4)32(37)42-5/h6-7,10-11,13,17,20,23,26-27,30,34H,8-9,12,14-15H2,1-5H3/t17-,20+,23+,26+,27+,30-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H37CIN2O8/c1-38-24-10-16(11-25(39-2)29(24)40-3)31(36)43-26-12-17-15-35-9-8-19-21-13-18(33)6-7-22(21)34-28(19)23(35)14-20(17)27(30(26)41-4)32(37)42-5/h6-7,10-11,13,17,20,23,26-27,30,34H,8-9,12,14-15H2,1-5H3/t17-,20+,23+,26+,27+,30-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H37NO12/c1-14-31(45-21-8-3-4-9-42-21)17(33)10-22(43-14)44-19-12-32(40,20(35)13-34)11-16-24(19)30(39)26-25(28(16)37)27(36)15-6-5-7-18(41-2)23(15)29(26)38/h5-7,14,17,19,21-22,31,34,37,39-40H,3-4,8-13,33H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H37NO12/c1-14-31(45-21-8-3-4-9-42-21)17(33)10-22(43-14)44-19-12-32(40,20(35)13-34)11-16-24(19)30(39)26-25(28(16)37)27(36)15-6-5-7-18(41-2)23(15)29(26)38/h5-7,14,17,19,21-22,31,34,37,39-40H,3-4,8-13,33H2,1-2H3/t14-,17-,19-,21-,22-,31+,32-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H37NO12/c1-14-31(45-21-8-3-4-9-42-21)17(33)10-22(43-14)44-19-12-32(40,20(35)13-34)11-16-24(19)30(39)26-25(28(16)37)27(36)15-6-5-7-18(41-2)23(15)29(26)38/h5-7,14,17,19,21-22,31,34,37,39-40H,3-4,8-13,33H2,1-2H3/t14-,17-,19-,21-,22+,31+,32?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H37NO12/c1-14-31(45-21-8-3-4-9-42-21)17(33)10-22(43-14)44-19-12-32(40,20(35)13-34)11-16-24(19)30(39)26-	0	(Meng et al., 2021)

25(28(16)37)27(36)15-6-5-7-18(41-2)23(15)29(26)38/h5-7,14,17,19,21-22,31,34,37,39-40H,3-4,8-13,33H2,1-2H3/t14-,17-,19+,21-,22-,31-,32+/m0/s1 InChI=1S/C32H37NO12/c1-14-31(45-21-8-3-4-9-42-21)17(33)10-22(43-14)44-19-12-32(40,20(35)13-34)11-16-24(19)30(39)26-25(28(16)37)27(36)15-6-5-7-18(41-2)23(15)29(26)38/h5-7,14,17,19,21-22,31,34,37,39-40H,3-4,8-13,33H2,1-2H3/t14-,17+,19+,21-,22-,31+,32-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H37NO4/c1-32(2,31(35)36)27-17-15-24(16-18-27)29(34)14-9-21-33-22-19-28(20-23-33)37-30(25-10-5-3-6-11-25)26-12-7-4-8-13-26/h3-8,10-13,15-18,28,30H,9,14,19-23H2,1-2H3,(H,35,36)	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C32H38N2O5/c1-18-11-23-25-12-19(2)32(38,28(37)17-39-20(3)35)31(25,5)15-27(36)29(23)30(4)14-21-16-33-34(26(21)13-24(18)30)22-9-7-6-8-10-22/h6-11,13,16,19,23,25,27,29,36,38H,12,14-15,17H2,1-5H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H38N2O5/c1-18-11-23-25-12-19(2)32(38,28(37)17-39-20(3)35)31(25,5)15-27(36)29(23)30(4)14-21-16-33-34(26(21)13-24(18)30)22-9-7-6-8-10-22/h6-11,13,16,19,23,25,27,29,36,38H,12,14-15,17H2,1-5H3/t19-,23-,25-,27-,29+,30?,31?,32?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H38N2O5/c1-18-11-23-25-12-19(2)32(38,28(37)17-39-20(3)35)31(25,5)15-27(36)29(23)30(4)14-21-16-33-34(26(21)13-24(18)30)22-9-7-6-8-10-22/h6-11,13,16,19,23,25,27,29,36,38H,12,14-15,17H2,1-5H3/t19-,23?,25+,27+,29-,30+,31+,32+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H38N2O5/c1-18-11-23-25-12-19(2)32(38,28(37)17-39-20(3)35)31(25,5)15-27(36)29(23)30(4)14-21-16-33-34(26(21)13-24(18)30)22-9-7-6-8-10-22/h6-11,13,16,19,23,25,27,29,36,38H,12,14-15,17H2,1-5H3/t19-,23+,25-,27+,29+,30+,31+,32-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H38N2O5/c1-18-11-23-25-12-19(2)32(38,28(37)17-39-20(3)35)31(25,5)15-27(36)29(23)30(4)14-21-16-33-34(26(21)13-24(18)30)22-9-7-6-8-10-22/h6-11,13,16,19,23,25,27,29,36,38H,12,14-15,17H2,1-5H3/t19-,23+,25+,27+,29-,30+,31+,32+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H38N2O5/c1-18-11-23-25-12-19(2)32(38,28(37)17-39-20(3)35)31(25,5)15-27(36)29(23)30(4)14-21-16-33-34(26(21)13-24(18)30)22-9-7-6-8-10-22/h6-11,13,16,19,23,25,27,29,36,38H,12,14-15,17H2,1-5H3/t19-,23+,25+,27+,29-,30+,31-,32-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H38N2O8/c1-37-24-12-17(13-25(38-2)29(24)39-3)31(35)42-26-14-18-16-34-11-10-20-19-8-6-7-9-22(19)33-28(20)23(34)15-21(18)27(30(26)40-4)32(36)41-5/h6-9,12-13,18,21,23,26-27,30,33H,10-11,14-16H2,1-5H3/t18-,21-,23+,26-,27+,30+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H38N2O8/c1-37-24-12-17(13-25(38-2)29(24)39-3)31(35)42-26-14-18-16-34-11-10-20-19-8-6-7-9-22(19)33-28(20)23(34)15-21(18)27(30(26)40-4)32(36)41-5/h6-9,12-13,18,21,23,26-27,30,33H,10-11,14-16H2,1-5H3/t18-,21-,23+,26+,27-,30-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C32H38N2O8/c1-37-24-12-17(13-25(38-2)29(24)39-3)31(35)42-26-14-18-16-34-11-10-20-19-8-6-7-9-22(19)33-28(20)23(34)15-21(18)27(30(26)40-4)32(36)41-5/h6-9,12-13,18,21,23,26-27,30,33H,10-11,14-16H2,1-5H3/t18-,21+,23-,26-,27+,30+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C32H38N2O8/c1-37-24-12-17(13-25(38-2)29(24)39-3)31(35)42-26-14-18-16-34-11-10-20-19-8-6-7-9-22(19)33-28(20)23(34)15-21(18)27(30(26)40-4)32(36)41-5/h6-9,12-13,18,21,23,26-27,30,33H,10-11,14-16H2,1-5H3/t18-,21+,23+,26+,27+,30-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H38N2O8/c1-37-24-12-17(13-25(38-2)29(24)39-3)31(35)42-26-14-18-16-34-11-10-20-19-8-6-7-9-22(19)33-28(20)23(34)15-21(18)27(30(26)40-4)32(36)41-5/h6-9,12-13,18,21,23,26-27,30,33H,10-11,14-16H2,1-5H3/t18-,21+,23+,26+,27+,30-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C32H38N4O2/c1-24(37)35-20-14-28-10-11-30(22-31(28)35)36(32(38)12-9-26-7-4-8-27(21-26)23-33)29-15-18-34(19-16-29)17-13-25-5-2-3-6-25/h4,7-12,21-22,25,29H,2-3,5-6,13-20H2,1H3/b12-9+	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C32H39NO2/c1-32(2,3)28-18-16-25(17-19-28)30(34)15-10-22-33-23-20-29(21-24-33)35-31(26-11-6-4-7-12-26)27-13-8-5-9-14-27/h4-9,11-14,16-19,29,31H,10,15,20-24H2,1-3H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H39NO4/c1-31(2,30(35)36)25-17-15-24(16-18-25)29(34)14-9-21-33-22-19-28(20-23-33)32(37,26-10-5-3-6-11-26)27-12-7-4-8-13-27/h3-8,10-13,15-18,28-29,34,37H,9,14,19-23H2,1-2H3,(H,35,36)	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C32H39NO4/c1-31(2,30(35)36)25-17-15-24(16-18-25)29(34)14-9-21-33-22-19-28(20-23-33)32(37,26-10-5-3-6-11-26)27-12-7-4-8-13-27/h3-8,10-13,15-18,28-29,34,37H,9,14,19-23H2,1-2H3,(H,35,36)/t29-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C32H39NO4/c1-31(2,30(35)36)25-17-15-24(16-18-25)29(34)14-9-21-33-22-19-28(20-23-33)32(37,26-10-5-3-6-11-26)27-12-7-4-8-13-27/h3-8,10-13,15-18,28-29,34,37H,9,14,19-23H2,1-2H3,(H,35,36)/t29-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H40BrN5O4/c1-16(2)12-25-29(40)37-11-7-10-23(37)30-38(25)31(41)32(42-30,17(3)4)35-28(39)18-13-20-19-8-6-9-22-26(19)21(27(33)34-22)14-24(20)36(5)15-18/h6,8-9,13,16-18,23-25,30,34H,7,10-12,14-15H2,1-5H3,(H,35,39)/t18-,23+,24-,25?,30?,32-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H40BrN5O5/c1-16(2)12-24-29(40)37-11-7-10-25(37)32(42)38(24)30(41)31(43-32,17(3)4)35-28(39)18-13-20-19-8-6-9-22-26(19)21(27(33)34-22)14-23(20)36(5)15-18/h6,8-9,13,16-18,23-25,34,42H,7,10-12,14-15H2,1-5H3,(H,35,39)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H40BrN5O5/c1-16(2)12-24-29(40)37-11-7-10-25(37)32(42)38(24)30(41)31(43-32,17(3)4)35-28(39)18-13-20-19-8-6-9-22-26(19)21(27(33)34-22)14-23(20)36(5)15-18/h6,8-9,13,16-18,23-25,34,42H,7,10-12,14-15H2,1-5H3,(H,35,39)/p+1/t18-,23-,24+,25+,31-,32+/m1/s1	0	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C32H40BrN5O5/c1-16(2)12-24-29(40)37-11-7-10-25(37)32(42)38(24)30(41)31(43-32,17(3)4)35-28(39)18-13-20-19-8-6-9-22-26(19)21(27(33)34-22)14-23(20)36(5)15-18/h6,8-9,13,16-18,23-25,34,42H,7,10-12,14-15H2,1-5H3,(H,35,39)/t18-,23-,24-,25-,31?,32?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H40BrN5O5/c1-16(2)12-24-29(40)37-11-7-10-25(37)32(42)38(24)30(41)31(43-32,17(3)4)35-28(39)18-13-20-19-8-6-9-22-26(19)21(27(33)34-22)14-23(20)36(5)15-18/h6,8-9,13,16-18,23-25,34,42H,7,10-12,14-15H2,1-5H3,(H,35,39)/t18-,23-,24+,25-,31-,32+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C32H40BrN5O5/c1-16(2)12-24-29(40)37-11-7-10-25(37)32(42)38(24)30(41)31(43-32,17(3)4)35-28(39)18-13-20-19-8-6-9-22-26(19)21(27(33)34-22)14-23(20)36(5)15-18/h6,8-9,13,16-18,23-25,34,42H,7,10-12,14-15H2,1-5H3,(H,35,39)/t18-,23-,24+,25?,31-,32+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C32H40BrN5O5/c1-16(2)12-24-29(40)37-11-7-10-25(37)32(42)38(24)30(41)31(43-32,17(3)4)35-28(39)18-13-20-19-8-6-9-22-26(19)21(27(33)34-22)14-23(20)36(5)15-18/h6,8-9,13,16-18,23-25,34,42H,7,10-12,14-15H2,1-5H3,(H,35,39)/t18-,23-,24+,25+,31-,32+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H40N2O/c1-32(2,3)27-15-16-28(35-4)26(21-27)22-33-30-25-17-19-34(20-18-25)31(30)29(23-11-7-5-8-12-23)24-13-9-6-10-14-24/h5-16,21,25,29-31,33H,17-20,22H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H40N2O/c1-32(2,3)27-15-16-28(35-4)26(21-27)22-33-30-25-17-19-34(20-18-25)31(30)29(23-11-7-5-8-12-23)24-13-9-6-10-14-24/h5-16,21,25,29-31,33H,17-20,22H2,1-4H3/t30-,31?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H41NO2/c1-31(2,3)26-18-16-25(17-19-26)30(34)15-10-22-33-23-20-29(21-24-33)32(35,27-11-6-4-7-12-27)28-13-8-5-9-14-28/h4-9,11-14,16-19,29-30,34-35H,10,15,20-24H2,1-3H3	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C32H41NO2/c1-31(2,3)26-18-16-25(17-19-26)30(34)15-10-22-33-23-20-29(21-24-33)32(35,27-11-6-4-7-12-27)28-13-8-5-9-14-28/h4-9,11-14,16-19,29-30,34-35H,10,15,20-24H2,1-3H3/p+1/t30-/m1/s1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C32H41NO2/c1-31(2,3)26-18-16-25(17-19-26)30(34)15-10-22-33-23-20-29(21-24-33)32(35,27-11-6-4-7-12-27)28-13-8-5-9-14-28/h4-9,11-14,16-19,29-30,34-35H,10,15,20-24H2,1-3H3/t30-/m0/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C32H41NO2/c1-31(2,3)26-18-16-25(17-19-26)30(34)15-10-22-33-23-20-29(21-24-33)32(35,27-11-6-4-7-12-27)28-13-8-5-9-14-28/h4-9,11-14,16-19,29-30,34-35H,10,15,20-24H2,1-3H3/t30-/m1/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C32H43N5O5/c1-17(2)12-25-29(39)36-11-7-10-26(36)32(41)37(25)30(40)31(42-32,18(3)4)34-28(38)20-13-22-21-8-6-9-23-27(21)19(15-33-23)14-24(22)35(5)16-20/h6,8-9,15,17-18,20,22,24-26,33,41H,7,10-14,16H2,1-5H3,(H,34,38)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H44O7/c1-18(2)28(36)37-17-25(35)32-26(38-29(39-32)19-8-6-5-7-9-19)15-23-22-11-10-20-14-21(33)12-13-30(20,3)27(22)24(34)16-31(23,32)4/h12-14,18-19,22-24,26-27,29,34H,5-11,15-17H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H44O7/c1-18(2)28(36)37-17-25(35)32-26(38-29(39-32)19-8-6-5-7-9-19)15-23-22-11-10-20-14-21(33)12-13-30(20,3)27(22)24(34)16-31(23,32)4/h12-14,18-19,22-24,26-27,29,34H,5-11,15-17H2,1-4H3/t22-,23-,24-,26+,27+,29+,30-,31-,32+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H44O7/c1-18(2)28(36)37-17-25(35)32-26(38-29(39-32)19-8-6-5-7-9-19)15-23-22-11-10-20-14-21(33)12-13-30(20,3)27(22)24(34)16-31(23,32)4/h12-14,18-19,22-24,26-27,29,34H,5-11,15-17H2,1-4H3/t22-,23-,24?,26-,27+,29-,30?,31?,32?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C32H44O7/c1-18(2)28(36)37-17-25(35)32-26(38-29(39-32)19-8-6-5-7-9-19)15-23-22-11-10-20-14-21(33)12-13-30(20,3)27(22)24(34)16-31(23,32)4/h12-14,18-19,22-24,26-27,29,34H,5-11,15-17H2,1-4H3/t22-,23-,24+,26-,27-,29-,30-,31-,32+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H44O7/c1-18(2)28(36)37-17-25(35)32-26(38-29(39-32)19-8-6-5-7-9-19)15-23-22-11-10-20-14-21(33)12-13-30(20,3)27(22)24(34)16-31(23,32)4/h12-14,18-19,22-24,26-27,29,34H,5-11,15-17H2,1-4H3/t22-,23+,24-,26+,27-,29-,30-,31-,32-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H45N3O4S.CH4O3S/c1-21-25(15-10-16-28(21)36)30(38)33-26(20-40-24-13-6-5-7-14-24)29(37)19-35-18-23-12-9-8-11-22(23)17-27(35)31(39)34-32(2,3)4;1-5(2,3)4/h5-7,10,13-16,22-23,26-27,29,36-37H,8-9,11-12,17-20H2,1-4H3,(H,33,38)(H,34,39);1H3,(H,2,3,4)/t22-,23+,26-,27-,29+;/m0./s1	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C32H45N3O4S/c1-21-25(15-10-16-28(21)36)30(38)33-26(20-40-24-13-6-5-7-14-24)29(37)19-35-18-23-12-9-8-11-22(23)17-27(35)31(39)34-32(2,3)4/h5-7,10,13-16,22-23,26-27,29,36-37H,8-9,11-12,17-20H2,1-4H3,(H,33,38)(H,34,39)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H45N3O4S/c1-21-25(15-10-16-28(21)36)30(38)33-26(20-40-24-13-6-5-7-14-24)29(37)19-35-18-23-12-9-8-11-22(23)17-27(35)31(39)34-32(2,3)4/h5-7,10,13-16,22-23,26-27,29,36-37H,8-9,11-12,17-20H2,1-4H3,(H,33,38)(H,34,39)/t22-,23-,26-,27-,29+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H45N3O4S/c1-21-25(15-10-16-28(21)36)30(38)33-26(20-40-24-13-6-5-7-14-24)29(37)19-35-18-23-12-9-8-11-22(23)17-27(35)31(39)34-32(2,3)4/h5-7,10,13-16,22-23,26-27,29,36-37H,8-9,11-12,17-20H2,1-4H3,(H,33,38)(H,34,39)/t22-,23+,26-,27-,29+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H45N3O4S/c1-21-25(15-10-16-28(21)36)30(38)33-26(20-40-24-13-6-5-7-14-24)29(37)19-35-18-23-12-9-8-11-22(23)17-27(35)31(39)34-32(2,3)4/h5-7,10,13-16,22-23,26-27,29,36-37H,8-9,11-12,17-20H2,1-4H3,(H,33,38)(H,34,39)/t22-,23+,26+,27-,29-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H47F5O3S/c1-30-17-15-26-25-12-11-24(38)21-23(25)20-22(29(26)27(30)13-14-28(30)39)10-7-5-3-2-4-6-8-18-41(40)19-9-16-31(33,34)32(35,36)37/h11-12,21-22,26-29,38-39H,2-10,13-20H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H48N4O8/c1-18-14-22-27(34-12-13-36(5)6)24(37)17-23(29(22)39)35-31(40)19(2)10-9-11-25(42-7)30(44-32(33)41)21(4)16-20(3)28(38)26(15-18)43-8/h9-11,16-18,20,25-26,28,30,34,38H,12-15H2,1-8H3,(H2,33,41)(H,35,40)/b11-9-,19-10-,21-16-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H48N4O8/c1-18-14-22-27(34-12-13-36(5)6)24(37)17-23(29(22)39)35-31(40)19(2)10-9-11-25(42-7)30(44-32(33)41)21(4)16-20(3)28(38)26(15-18)43-8/h9-11,16-18,20,25-26,28,30,34,38H,12-15H2,1-8H3,(H2,33,41)(H,35,40)/b11-9-,19-10+,21-16+/t18-,20+,25-,26+,28-,30-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C32H53N2O4/c1-5-14-34(15-6-7-16-34)28-20-26-24-9-8-23-19-29(36)27(33-12-17-37-18-13-33)21-32(23,4)25(24)10-11-31(26,3)30(28)38-22(2)35/h5,23-30,36H,1,6-21H2,2-4H3/q+1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C32H53N2O4/c1-5-14-34(15-6-7-16-34)28-20-26-24-9-8-23-19-29(36)27(33-12-17-37-18-13-33)21-32(23,4)25(24)10-11-31(26,3)30(28)38-22(2)35/h5,23-30,36H,1,6-21H2,2-4H3/q+1/t23-,24+,25-,26-,27-,28-,29-,30-,31-,32-/m0/s1	0	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C32H55N4O/c1-5-6-7-8-9-10-11-12-13-14-15-16-17-18-27-36(2,3)28-26-35(32-33-24-19-25-34-32)29-30-20-22-31(37-4)23-21-30/h19-25H,5-18,26-29H2,1-4H3/q+1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C33H30N4O2/c1-4-9-30-35-31-21(2)18-24(32-34-27-12-7-8-13-28(27)36(32)3)19-29(31)37(30)20-22-14-16-23(17-15-22)25-10-5-6-11-26(25)33(38)39/h5-8,10-19H,4,9,20H2,1-3H3,(H,38,39)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C33H32N4O2/c1-4-9-30-35-31-21(2)18-24(32-34-27-12-7-8-13-28(27)36(32)3)19-29(31)37(30)20-22-14-16-23(17-15-22)25-10-5-6-11-26(25)33(38)39/h5-8,10-17,19,24H,4,9,18,20H2,1-3H3,(H,38,39)/t24-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C33H33N3O5S2/c1-5-42-15-17-7-9-22-19(11-17)26-27-21(14-34-30(27)37)25-20-12-18(16-43-6-2)8-10-23(20)36-29(25)28(26)35(22)24-13-33(39,31(38)40-4)32(36,3)41-24/h7-12,24,39H,5-6,13-16H2,1-4H3,(H,34,37)/t24?,32?,33-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C33H34N6O6/c1-3-42-32-34-28-15-9-14-27(31(40)43-21(2)44-33(41)45-24-10-5-4-6-11-24)29(28)39(32)20-22-16-18-23(19-17-22)25-12-7-8-13-26(25)30-35-37-38-36-30/h7-9,12-19,21,24H,3-6,10-11,20H2,1-2H3,(H,35,36,37,38)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C33H34O13S/c1-37-20-7-14(8-21(38-2)29(20)39-3)24-15-9-18-19(43-13-42-18)10-16(15)28(17-11-40-31(36)25(17)24)45-33-	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C33H38O6/c34-31(22-10-19-27-13-4-1-5-14-27)37-25-30(39-33(36)24-12-21-29-17-8-3-9-18-29)26-38-32(35)23-11-20-28-15-6-2-7-16-28/h1-9,13-18,30H,10-12,19-26H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C33H39NO14/c1-5-44-32(45-6-2)31(41)46-13-20(35)33(42)11-16-23(19(12-33)48-21-10-17(34)26(36)14(3)47-21)30(40)25-24(28(16)38)27(37)15-8-7-9-18(43-4)22(15)29(25)39/h7-9,14,17,19,21,26,32,36,38,40,42H,5-6,10-13,34H2,1-4H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C33H39NO14/c1-5-44-32(45-6-2)31(41)46-13-20(35)33(42)11-16-23(19(12-33)48-21-10-17(34)26(36)14(3)47-21)30(40)25-24(28(16)38)27(37)15-8-7-9-18(43-4)22(15)29(25)39/h7-9,14,17,19,21,26,32,36,38,40,42H,5-6,10-13,34H2,1-4H3/t14-,17-,19-,21-,26+,33-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C33H39NO14/c1-5-44-32(45-6-2)31(41)46-13-20(35)33(42)11-16-23(19(12-33)48-21-10-17(34)26(36)14(3)47-21)30(40)25-24(28(16)38)27(37)15-8-7-9-18(43-4)22(15)29(25)39/h7-9,14,17,19,21,26,32,36,38,40,42H,5-6,10-13,34H2,1-4H3/t14-,17-,19-,21+,26+,33-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C33H39NO14/c1-5-44-32(45-6-2)31(41)46-13-20(35)33(42)11-16-23(19(12-33)48-21-10-17(34)26(36)14(3)47-21)30(40)25-24(28(16)38)27(37)15-8-7-9-18(43-4)22(15)29(25)39/h7-9,14,17,19,21,26,32,36,38,40,42H,5-6,10-13,34H2,1-4H3/t14-,17-,19+,21-,26-,33-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C33H39NO14/c1-5-44-32(45-6-2)31(41)46-13-20(35)33(42)11-16-23(19(12-33)48-21-10-17(34)26(36)14(3)47-21)30(40)25-24(28(16)38)27(37)15-8-7-9-18(43-4)22(15)29(25)39/h7-9,14,17,19,21,26,32,36,38,40,42H,5-6,10-13,34H2,1-4H3/t14-,17-,19+,21-,26+,33-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C33H40N2O12/c1-13(2)8-17(34)32(43)35-18-9-22(46-14(3)27(18)38)47-20-11-33(44,21(37)12-36)10-16-24(20)31(42)26-25(29(16)40)28(39)15-6-5-7-19(45-4)23(15)30(26)41/h5-7,13-14,17-18,20,22,27,36,38,40,42,44H,8-12,34H2,1-4H3,(H,35,43)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C33H40N2O12/c1-13(2)8-17(34)32(43)35-18-9-22(46-14(3)27(18)38)47-20-11-33(44,21(37)12-36)10-16-24(20)31(42)26-25(29(16)40)28(39)15-6-5-7-19(45-4)23(15)30(26)41/h5-7,13-14,17-18,20,22,27,36,38,40,42,44H,8-12,34H2,1-4H3,(H,35,43)/t14-,17-,18-,20-,22-,27+,33-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C33H40N2O12/c1-13(2)8-17(34)32(43)35-18-9-22(46-14(3)27(18)38)47-20-11-33(44,21(37)12-36)10-16-24(20)31(42)26-25(29(16)40)28(39)15-6-5-7-19(45-4)23(15)30(26)41/h5-7,13-14,17-18,20,22,27,36,38,40,42,44H,8-12,34H2,1-4H3,(H,35,43)/t14-,17-,18-,20-,22+,27+,33-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C33H40N2O12/c1-13(2)8-17(34)32(43)35-18-9-22(46-14(3)27(18)38)47-20-11-33(44,21(37)12-36)10-16-24(20)31(42)26-25(29(16)40)28(39)15-6-5-7-19(45-4)23(15)30(26)41/h5-7,13-14,17-18,20,22,27,36,38,40,42,44H,8-12,34H2,1-4H3,(H,35,43)/t14-,17-,18+,20-,22+,27-,33+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C33H40N2O12/c1-13(2)8-17(34)32(43)35-18-9-22(46-14(3)27(18)38)47-20-11-33(44,21(37)12-36)10-16-24(20)31(42)26-25(29(16)40)28(39)15-6-5-7-19(45-4)23(15)30(26)41/h5-7,13-14,17-18,20,22,27,36,38,40,42,44H,8-12,34H2,1-4H3,(H,35,43)/t14-,17+,18+,20+,22-,27+,33+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C33H40N2O9/c1-17(36)43-30-23-15-25-29-22(21-8-7-20(38-2)14-24(21)34-29)9-10-35(25)16-19(23)13-28(32(30)42-6)44-33(37)18-11-26(39-3)31(41-5)27(12-18)40-4/h7-8,11-12,14,19,23,25,28,30,32,34H,9-10,13,15-16H2,1-6H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C33H40N2O9/c1-17(36)43-30-23-15-25-29-22(21-8-7-20(38-2)14-24(21)34-29)9-10-35(25)16-19(23)13-28(32(30)42-6)44-33(37)18-11-26(39-3)31(41-5)27(12-18)40-4/h7-8,11-12,14,19,23,25,28,30,32,34H,9-10,13,15-16H2,1-6H3/t19-,23-,25-,28-,30+,32+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C33H40N2O9/c1-17(36)43-30-23-15-25-29-22(21-8-7-20(38-2)14-24(21)34-29)9-10-35(25)16-19(23)13-28(32(30)42-6)44-33(37)18-11-26(39-3)31(41-5)27(12-18)40-4/h7-8,11-12,14,19,23,25,28,30,32,34H,9-10,13,15-16H2,1-6H3/t19-,23+,25+,28+,30+,32-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C33H40N2O9/c1-17(36)43-30-23-15-25-29-22(21-8-7-20(38-2)14-24(21)34-29)9-10-35(25)16-19(23)13-28(32(30)42-6)44-33(37)18-11-	1	(Meng et al., 2021)

26(39-3)31(41-5)27(12-18)40-4/h7-8,11-12,14,19,23,25,28,30,32,34H,9-10,13,15-16H2,1-6H3/t19-,23+,25+,28+,30+,32+/m1/s1	
InChI=1S/C33H40N2O9/c1-38-19-7-8-20-21-9-10-35-16-18-13-27(44-32(36)17-11-25(39-2)30(41-4)26(12-17)40-3)31(42-5)28(33(37)43-6)22(18)15-24(35)29(21)34-23(20)14-19/h7-8,11-12,14,18,22,24,27-28,31,34H,9-10,13,15-16H2,1-6H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C33H40N2O9/c1-38-19-7-8-20-21-9-10-35-16-18-13-27(44-32(36)17-11-25(39-2)30(41-4)26(12-17)40-3)31(42-5)28(33(37)43-6)22(18)15-24(35)29(21)34-23(20)14-19/h7-8,11-12,14,18,22,24,27-28,31,34H,9-10,13,15-16H2,1-6H3/t18-,22+,24-,27-,28+,31+/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C33H40N2O9/c1-38-19-7-8-20-21-9-10-35-16-18-13-27(44-32(36)17-11-25(39-2)30(41-4)26(12-17)40-3)31(42-5)28(33(37)43-6)22(18)15-24(35)29(21)34-23(20)14-19/h7-8,11-12,14,18,22,24,27-28,31,34H,9-10,13,15-16H2,1-6H3/t18-,22+,24+,27+,28+,31-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C33H47N3O4S/c1-22-26(15-10-16-29(22)37)32(40)35-27(21-41-25-13-6-5-7-14-25)31(39)20-36-19-24-12-9-8-11-23(24)17-28(36)30(38)18-34-33(2,3)4/h5-7,10,13-16,23-24,27-28,31,34,37,39H,8-9,11-12,17-21H2,1-4H3,(H,35,40)/t23?,24?,27-,28-,31-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C33H47NO13/c1-18-10-8-6-4-3-5-7-9-11-21(45-32-30(39)28(34)29(38)19(2)44-32)15-25-27(31(40)41)22(36)17-33(42,47-25)16-20(35)14-24-23(46-24)12-13-26(37)43-18/h3-9,11-13,18-25,27-30,32,35-36,38-39,42H,10,14-17,34H2,1-2H3,(H,40,41)/b4-3+,7-5-,8-6-,11-9-,13-12-	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C33H50N4O6S/c1-33(2,3)44(42,43)20-25(16-22-10-6-4-7-11-22)31(40)37-28(18-26-19-34-21-35-26)32(41)36-27(17-23-12-8-5-9-13-23)30(39)29(38)24-14-15-24/h4,6-7,10-11,19,21,23-25,27-30,38-39H,5,8-9,12-18,20H2,1-3H3,(H,34,35)(H,36,41)(H,37,40)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C33H50N4O6S/c1-33(2,3)44(42,43)20-25(16-22-10-6-4-7-11-22)31(40)37-28(18-26-19-34-21-35-26)32(41)36-27(17-23-12-8-5-9-13-23)30(39)29(38)24-14-15-24/h4,6-7,10-11,19,21,23-25,27-30,38-39H,5,8-9,12-18,20H2,1-3H3,(H,34,35)(H,36,41)(H,37,40)/t25-,27+,28+,29+,30-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C34H32N4O3/c1-2-28(24-13-5-3-6-14-24)38-34(40)31-27-18-9-10-19-29(27)37-32(25-15-7-4-8-16-25)33(31)41-22-21-36-30(39)23-26-17-11-12-20-35-26/h3-20,28H,2,21-23H2,1H3,(H,36,39)(H,38,40)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C34H32N4O3/c1-2-28(24-13-5-3-6-14-24)38-34(40)31-27-18-9-10-19-29(27)37-32(25-15-7-4-8-16-25)33(31)41-22-21-36-30(39)23-26-17-11-12-20-35-26/h3-20,28H,2,21-23H2,1H3,(H,36,39)(H,38,40)/t28-/m0/s1	0 (Li et al., 2005)
InChI=1S/C34H33N3O5/c1-40-28-9-5-7-26-32(28)36-31-25(33(26)38)6-4-8-27(31)34(39)35-24-12-10-21(11-13-24)14-16-37-17-15-22-18-29(41-2)30(42-3)19-23(22)20-37/h4-13,18-19H,14-17,20H2,1-3H3,(H,35,39)(H,36,38)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C34H35N3O10/c1-15-28(38)20(35)12-23(46-15)47-22-14-34(44,16(2)36-37-33(43)17-8-5-4-6-9-17)13-19-25(22)32(42)27-26(30(19)40)29(39)18-10-7-11-21(45-3)24(18)31(27)41/h4-11,15,20,22-23,28,38,40,42,44H,12-14,35H2,1-3H3,(H,37,43)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C34H35N3O10/c1-15-28(38)20(35)12-23(46-15)47-22-14-34(44,16(2)36-37-33(43)17-8-5-4-6-9-17)13-19-25(22)32(42)27-26(30(19)40)29(39)18-10-7-11-21(45-3)24(18)31(27)41/h4-11,15,20,22-23,28,38,40,42,44H,12-14,35H2,1-3H3,(H,37,43)/b36-16-/t15-,20-,22-,23-,28+,34-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C34H35N3O10/c1-15-28(38)20(35)12-23(46-15)47-22-14-34(44,16(2)36-37-33(43)17-8-5-4-6-9-17)13-19-25(22)32(42)27-26(30(19)40)29(39)18-10-7-11-21(45-3)24(18)31(27)41/h4-11,15,20,22-23,28,38,40,42,44H,12-14,35H2,1-3H3,(H,37,43)/b36-16+/t15-,20-,22-,23-,28+,34-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C34H35N3O10/c1-15-28(38)20(35)12-23(46-15)47-22-14-34(44,16(2)36-37-33(43)17-8-5-4-6-9-17)13-19-25(22)32(42)27-26(30(19)40)29(39)18-10-7-11-21(45-3)24(18)31(27)41/h4-11,15,20,22-23,28,38,40,42,44H,12-14,35H2,1-3H3,(H,37,43)/b36-16+/t15-,20-,22-,23+,28+,34?/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C34H35N3O10/c1-15-28(38)20(35)12-23(46-15)47-22-14-34(44,16(2)36-37-33(43)17-8-5-4-6-9-17)13-19-25(22)32(42)27-26(30(19)40)29(39)18-10-7-11-21(45-3)24(18)31(27)41/h4-11,15,20,22-23,28,38,40,42,44H,12-14,35H2,1-3H3,(H,37,43)/b36-16+/t15-,20+,22-,23+,28+,34+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C34H35N3O10/c1-15-28(38)20(35)12-23(46-15)47-22-14-34(44,16(2)36-37-33(43)17-8-5-4-6-9-17)13-19-25(22)32(42)27-26(30(19)40)29(39)18-10-7-11-21(45-3)24(18)31(27)41/h4-11,15,20,22-23,28,38,40,42,44H,12-14,35H2,1-3H3,(H,37,43)/t15-,20-,22+,23-,28+,34+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C34H36F3NO13/c1-4-5-9-21(40)49-13-20(39)33(47)11-16-24(19(12-33)51-22-10-17(27(41)14(2)50-22)38-32(46)34(35,36)37)31(45)26-25(29(16)43)28(42)15-7-6-8-18(48-3)23(15)30(26)44/h6-8,14,17,19,22,27,41,43,45,47H,4-5,9-13H2,1-3H3,(H,38,46)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C34H39N5O5/c1-33(32(42)39-27(16-20-8-4-3-5-9-20)31(41)38-15-7-12-28(38)34(39,43)44-33)36-30(40)22-17-24-23-10-6-11-25-29(23)21(13-14-35-25)18-26(24)37(2)19-22/h3-6,8-11,13-14,22,24-28,35,43H,7,12,15-19H2,1-2H3,(H,36,40)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C34H40ClNO4/c1-23(2)9-7-10-24(3)11-8-12-25(4)19-20-40-33(37)22-30-26(5)36(32-18-17-29(39-6)21-31(30)32)34(38)27-13-15-28(35)16-14-27/h9,11,13-19,21H,7-8,10,12,20,22H2,1-6H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C34H41N7O5/c1-4-6-7-10-21-46-34(44)39-32(35)24-12-15-26(16-13-24)37-23-30-38-27-22-25(14-17-28(27)40(30)3)33(43)41(20-18-31(42)45-5-2)29-11-8-9-19-36-29/h8-9,11-17,19,22,37H,4-7,10,18,20-21,23H2,1-3H3,(H2,35,39,44)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C34H50N4O9S/c1-7-37(8-2)16-17-48(44,45)28-13-15-38-31(28)34(43)47-32(22(3)4)24(6)11-12-29(41)35-14-9-10-23(5)18-25(39)19-26(40)20-30-36-27(21-46-30)33(38)42/h9-12,18,21-22,24-25,28,31-32,39H,7-8,13-17,19-20H2,1-6H3,(H,35,41)/b10-9-,12-11-,23-18-	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C34H50O7/c1-29(2)23-10-13-34(7)27(32(23,5)12-11-24(29)41-26(38)9-8-25(36)37)22(35)18-20-21-19-31(4,28(39)40)15-14-30(21,3)16-17-33(20,34)6/h18,21,23-24,27H,8-17,19H2,1-7H3,(H,36,37)(H,39,40)/t21-,23-,24-,27+,30+,31-,32-,33+,34+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C34H57N2O4.BrH/c1-23(37)39-31-20-25-12-13-26-27(34(25,4)22-29(31)35-16-8-6-9-17-35)14-15-33(3)28(26)21-30(32(33)40-24(2)38)36(5)18-10-7-11-19-36;/h25-32H,6-22H2,1-5H3;1H/q+1;/p-1/t25-,26+,27-,28-,29-,30-,31-,32-,33-,34-;/m0./s1	0	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C34H57N2O4/c1-23(37)39-31-20-25-12-13-26-27(34(25,4)22-29(31)35-16-8-6-9-17-35)14-15-33(3)28(26)21-30(32(33)40-24(2)38)36(5)18-10-7-11-19-36/h25-32H,6-22H2,1-5H3/q+1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C34H57N2O4/c1-23(37)39-31-20-25-12-13-26-27(34(25,4)22-29(31)35-16-8-6-9-17-35)14-15-33(3)28(26)21-30(32(33)40-24(2)38)36(5)18-10-7-11-19-36/h25-32H,6-22H2,1-5H3/q+1/t25-,26-,27-,28-,29+,30-,31-,32-,33-,34+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C34H57N2O4/c1-23(37)39-31-20-25-12-13-26-27(34(25,4)22-29(31)35-16-8-6-9-17-35)14-15-33(3)28(26)21-30(32(33)40-24(2)38)36(5)18-10-7-11-19-36/h25-32H,6-22H2,1-5H3/q+1/t25-,26+,27-,28-,29-,30-,31-,32-,33-,34-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C34H63ClN2O6S/c1-6-8-9-10-11-12-13-14-15-16-17-18-19-21-27(38)42-32-30(40)29(39)31(43-34(32)44-5)28(24(3)35)36-33(41)26-22-25(20-7-2)23-37(26)4/h24-26,28-32,34,39-40H,6-23H2,1-5H3,(H,36,41)/t24-,25+,26-,28+,29+,30-,31+,32+,34+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H25N3O3/c39-31(27-18-8-12-22-10-4-6-16-25(22)27)20-29-30(21-32(40)28-19-9-13-23-11-5-7-17-26(23)28)36-34-33(29)35(41)38(37-34)24-14-2-1-3-15-24/h1-19,34,37H,20-21H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H38Cl2N8O4/c1-3-25(2)45-34(46)44(24-40-45)29-7-5-27(6-8-29)41-14-16-42(17-15-41)28-9-11-30(12-10-28)47-19-31-20-48-35(49-31,21-43-23-38-22-39-43)32-13-4-26(36)18-33(32)37/h4-13,18,22-25,31H,3,14-17,19-21H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H38Cl2N8O4/c1-3-25(2)45-34(46)44(24-40-45)29-7-5-27(6-8-29)41-14-16-42(17-15-41)28-9-11-30(12-10-28)47-19-31-20-48-35(49-31,21-43-23-38-22-39-43)32-13-4-26(36)18-33(32)37/h4-13,18,22-25,31H,3,14-17,19-21H2,1-2H3/t25-,31-,35-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C35H38Cl2N8O4/c1-3-25(2)45-34(46)44(24-40-45)29-7-5-27(6-8-29)41-14-16-42(17-15-41)28-9-11-30(12-10-28)47-19-31-20-48-35(49-31,21-43-23-38-22-39-43)32-13-4-26(36)18-33(32)37/h4-13,18,22-25,31H,3,14-17,19-21H2,1-2H3/t25-,31-,35-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C35H38Cl2N8O4/c1-3-25(2)45-34(46)44(24-40-45)29-7-5-27(6-8-29)41-14-16-42(17-15-41)28-9-11-30(12-10-28)47-19-31-20-48-35(49-31,21-43-23-38-22-39-43)32-13-4-26(36)18-33(32)37/h4-13,18,22-25,31H,3,14-17,19-21H2,1-2H3/t25-,31-,35?/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C35H38Cl2N8O4/c1-3-25(2)45-34(46)44(24-40-45)29-7-5-27(6-8-29)41-14-16-42(17-15-41)28-9-11-30(12-10-28)47-19-31-20-48-35(49-31,21-43-23-38-22-39-43)32-13-4-26(36)18-33(32)37/h4-13,18,22-25,31H,3,14-17,19-21H2,1-2H3/t25-,31+,35+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C35H38Cl2N8O4/c1-3-25(2)45-34(46)44(24-40-45)29-7-5-27(6-8-29)41-14-16-42(17-15-41)28-9-11-30(12-10-28)47-19-31-20-48-35(49-31,21-43-23-38-22-39-43)32-13-4-26(36)18-33(32)37/h4-13,18,22-25,31H,3,14-17,19-21H2,1-2H3/t25?,31-,35-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C35H40Cl2N8O4/c1-3-25(2)45-34(46)44(24-40-45)29-7-5-27(6-8-29)41-14-16-42(17-15-41)28-9-11-30(12-10-28)47-19-31-20-48-35(49-31,21-43-23-38-22-39-43)32-13-4-26(36)18-33(32)37/h4-13,18,22,24-25,31H,3,14-17,19-21,23H2,1-2H3,(H,38,39)/t25-,31-,35-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H42FNO8/c1-20(18-37-29(41)21-9-7-6-8-10-21)30(42)43-19-27(40)35-28(44-31(2,3)45-35)16-25-24-12-11-22-15-23(38)13-14-32(22,4)34(24,36)26(39)17-33(25,35)5/h6-10,13-15,20,24-26,28,39H,11-12,16-19H2,1-5H3,(H,37,41)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H42FNO8/c1-20(18-37-29(41)21-9-7-6-8-10-21)30(42)43-19-27(40)35-28(44-31(2,3)45-35)16-25-24-12-11-22-15-23(38)13-14-32(22,4)34(24,36)26(39)17-33(25,35)5/h6-10,13-15,20,24-26,28,39H,11-12,16-19H2,1-5H3,(H,37,41)/t20-,24-,25-,26?,28-,32?,33?,34?,35?/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H42FNO8/c1-20(18-37-29(41)21-9-7-6-8-10-21)30(42)43-19-27(40)35-28(44-31(2,3)45-35)16-25-24-12-11-22-15-23(38)13-14-32(22,4)34(24,36)26(39)17-33(25,35)5/h6-10,13-15,20,24-26,28,39H,11-12,16-19H2,1-5H3,(H,37,41)/t20-,24+,25-,26+,28-,32+,33+,34-,35+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H42FNO8/c1-20(18-37-29(41)21-9-7-6-8-10-21)30(42)43-19-27(40)35-28(44-31(2,3)45-35)16-25-24-12-11-22-15-23(38)13-14-32(22,4)34(24,36)26(39)17-33(25,35)5/h6-10,13-15,20,24-26,28,39H,11-12,16-19H2,1-5H3,(H,37,41)/t20-,24+,25+,26+,28+,32-,33+,34-,35+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H42FNO8/c1-20(18-37-29(41)21-9-7-6-8-10-21)30(42)43-19-27(40)35-28(44-31(2,3)45-35)16-25-24-12-11-22-15-23(38)13-14-32(22,4)34(24,36)26(39)17-33(25,35)5/h6-10,13-15,20,24-26,28,39H,11-12,16-19H2,1-5H3,(H,37,41)/t20?,24-,25-,26-,28+,32-,33-,34-,35+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H42N2O9/c1-40-21-8-9-22-23-11-12-37-18-20-15-29(46-30(38)10-7-19-13-27(41-2)33(43-4)28(14-19)42-3)34(44-5)31(35(39)45-6)24(20)17-26(37)32(23)36-25(22)16-21/h7-10,13-14,16,20,24,26,29,31,34,36H,11-12,15,17-18H2,1-6H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H42N2O9/c1-40-21-8-9-22-23-11-12-37-18-20-15-29(46-30(38)10-7-19-13-27(41-2)33(43-4)28(14-19)42-3)34(44-5)31(35(39)45-6)24(20)17-26(37)32(23)36-25(22)16-21/h7-10,13-14,16,20,24,26,29,31,34,36H,11-12,15,17-18H2,1-6H3/b10-7+	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C35H42N2O9/c1-40-21-8-9-22-23-11-12-37-18-20-15-29(46-30(38)10-7-19-13-27(41-2)33(43-4)28(14-19)42-3)34(44-5)31(35(39)45-6)24(20)17-26(37)32(23)36-25(22)16-21/h7-10,13-14,16,20,24,26,29,31,34,36H,11-12,15,17-18H2,1-6H3/b10-7+/t20-,24+,26-,29-,31+,34+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H42N2O9/c1-40-21-8-9-22-23-11-12-37-18-20-15-29(46-30(38)10-7-19-13-27(41-2)33(43-4)28(14-19)42-3)34(44-5)31(35(39)45-6)24(20)17-26(37)32(23)36-25(22)16-21/h7-10,13-14,16,20,24,26,29,31,34,36H,11-12,15,17-18H2,1-6H3/b10-7+/t20-,24+,26+,29+,31+,34-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H55NO3/c1-7-8-11-15-26(3)27(4)28-23-31(38-33(37)16-14-21-36-19-12-9-10-13-20-36)34-29-22-25(2)17-18-30(29)35(5,6)39-32(34)24-28/h23-27H,7-22H2,1-6H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H55NO3/c1-7-8-11-15-26(3)27(4)28-23-31(38-33(37)16-14-21-36-19-12-9-10-13-20-36)34-29-22-25(2)17-18-30(29)35(5,6)39-32(34)24-28/h23-27H,7-22H2,1-6H3/t25-,26-,27-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H55NO3/c1-7-8-11-15-26(3)27(4)28-23-31(38-33(37)16-14-21-36-19-12-9-10-13-20-36)34-29-22-25(2)17-18-30(29)35(5,6)39-32(34)24-28/h23-27H,7-22H2,1-6H3/t25-,26+,27+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H55NO3/c1-7-8-11-15-26(3)27(4)28-23-31(38-33(37)16-14-21-36-19-12-9-10-13-20-36)34-29-22-25(2)17-18-30(29)35(5,6)39-32(34)24-28/h23-27H,7-22H2,1-6H3/t25-,26+,27+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C35H58N8O6/c1-22(2)19-26(38)31(45)40-27(13-8-16-36)32(46)42-30(23(3)4)34(48)41-28(14-9-17-37)35(49)43-18-10-15-	0	(Meng et al., 2021)

29(43)33(47)39-25(21-44)20-24-11-6-5-7-12-24/h5-7,11-12,21-23,25-30H,8-10,13-20,36-38H2,1-4H3,(H,39,47)(H,40,45)(H,41,48)(H,42,46) InChI=1S/C35H58N8O6/c1-22(2)19-26(38)31(45)40-27(13-8-16-36)32(46)42-30(23(3)4)34(48)41-28(14-9-17-37)35(49)43-18-10-15-29(43)33(47)39-25(21-44)20-24-11-6-5-7-12-24/h5-7,11-12,21-23,25-30H,8-10,13-20,36-38H2,1-4H3,(H,39,47)(H,40,45)(H,41,48)(H,42,46)/t25-,26-,27-,28-,29-,30-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H58N8O6/c1-22(2)19-26(38)31(45)40-27(13-8-16-36)32(46)42-30(23(3)4)34(48)41-28(14-9-17-37)35(49)43-18-10-15-29(43)33(47)39-25(21-44)20-24-11-6-5-7-12-24/h5-7,11-12,21-23,25-30H,8-10,13-20,36-38H2,1-4H3,(H,39,47)(H,40,45)(H,41,48)(H,42,46)/t25-,26-,27-,28-,29-,30+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H58N8O6/c1-22(2)19-26(38)31(45)40-27(13-8-16-36)32(46)42-30(23(3)4)34(48)41-28(14-9-17-37)35(49)43-18-10-15-29(43)33(47)39-25(21-44)20-24-11-6-5-7-12-24/h5-7,11-12,21-23,25-30H,8-10,13-20,36-38H2,1-4H3,(H,39,47)(H,40,45)(H,41,48)(H,42,46)/t25-,26-,27-,28-,29+,30-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H58N8O6/c1-22(2)19-26(38)31(45)40-27(13-8-16-36)32(46)42-30(23(3)4)34(48)41-28(14-9-17-37)35(49)43-18-10-15-29(43)33(47)39-25(21-44)20-24-11-6-5-7-12-24/h5-7,11-12,21-23,25-30H,8-10,13-20,36-38H2,1-4H3,(H,39,47)(H,40,45)(H,41,48)(H,42,46)/t25-,26+,27+,28+,29+,30+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H59NO13/c1-19-16-23(14-15-37)31(32(44-8)25(39)17-26(40)45-20(2)12-10-9-11-13-24(19)38)49-34-29(41)28(36(6)7)30(21(3)47-34)48-27-18-35(5,43)33(42)22(4)46-27/h9-11,13,15,19-25,27-34,38-39,41-43H,12,14,16-18H2,1-8H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H59NO13/c1-19-16-23(14-15-37)31(32(44-8)25(39)17-26(40)45-20(2)12-10-9-11-13-24(19)38)49-34-29(41)28(36(6)7)30(21(3)47-34)48-27-18-35(5,43)33(42)22(4)46-27/h9-11,13,15,19-25,27-34,38-39,41-43H,12,14,16-18H2,1-8H3/b10-9-,13-11+/t19-,20+,21+,22-,23-,24-,25-,27+,28-,29-,30+,31+,32+,33-,34+,35+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H59NO13/c1-19-16-23(14-15-37)31(32(44-8)25(39)17-26(40)45-20(2)12-10-9-11-13-24(19)38)49-34-29(41)28(36(6)7)30(21(3)47-34)48-27-18-35(5,43)33(42)22(4)46-27/h9-11,13,15,19-25,27-34,38-39,41-43H,12,14,16-18H2,1-8H3/b10-9+,13-11+/t19-,20-,21-,22-,23+,24+,25-,27-,28-,29-,30+,31-,32-,33-,34-,35-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H59NO13/c1-19-16-23(14-15-37)31(32(44-8)25(39)17-26(40)45-20(2)12-10-9-11-13-24(19)38)49-34-29(41)28(36(6)7)30(21(3)47-34)48-27-18-35(5,43)33(42)22(4)46-27/h9-11,13,15,19-25,27-34,38-39,41-43H,12,14,16-18H2,1-8H3/t19-,20-,21-,22+,23-,24+,25-,27+,28+,29+,30-,31-,32+,33-,34-,35-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H59NO13/c1-19-16-23(14-15-37)31(32(44-8)25(39)17-26(40)45-20(2)12-10-9-11-13-24(19)38)49-34-29(41)28(36(6)7)30(21(3)47-34)48-27-18-35(5,43)33(42)22(4)46-27/h9-11,13,15,19-25,27-34,38-39,41-43H,12,14,16-18H2,1-8H3/t19-,20-,21-,22+,23+,24+,25-,27+,28-,29-,30-,31+,32+,33+,34?,35-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H60N2O4/c1-24(38)40-32-21-26-13-14-27-28(35(26,4)23-31(32)37(6)19-11-8-12-20-37)15-16-34(3)29(27)22-30(33(34)41-25(2)39)36(5)17-9-7-10-18-36/h26-33H,7-23H2,1-6H3/q+2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H60N2O4/c1-24(38)40-32-21-26-13-14-27-28(35(26,4)23-31(32)37(6)19-11-8-12-20-37)15-16-34(3)29(27)22-30(33(34)41-25(2)39)36(5)17-9-7-10-18-36/h26-33H,7-23H2,1-6H3/q+2/t26-,27-,28-,29-,30-,31+,32-,33-,34-,35+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H60N2O4/c1-24(38)40-32-21-26-13-14-27-28(35(26,4)23-31(32)37(6)19-11-8-12-20-37)15-16-34(3)29(27)22-30(33(34)41-25(2)39)36(5)17-9-7-10-18-36/h26-33H,7-23H2,1-6H3/q+2/t26-,27+,28-,29-,30-,31-,32-,33-,34-,35-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H61NO12/c1-16-14-35(15-43-35)32(40)19(4)27(37)18(3)22(7)46-33(41)21(6)31(47-26-13-25(42-11)28(38)23(8)45-26)20(5)30(16)48-34-29(39)24(36(9)10)12-17(2)44-34/h16-31,34,37-39H,12-15H2,1-11H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H61NO12/c1-16-14-35(15-43-35)32(40)19(4)27(37)18(3)22(7)46-33(41)21(6)31(47-26-13-25(42-11)28(38)23(8)45-26)20(5)30(16)48-34-29(39)24(36(9)10)12-17(2)44-34/h16-31,34,37-39H,12-15H2,1-11H3/t16-,17-,18-,19-,20-,21-,22+,23-,24-,25+,26+,27-	0	(Meng et al., 2021)

,28+,29+,30+,31+,34-,35-/m1/s1	
InChI=1S/C35H61NO12/c1-16-14-35(15-43-35)32(40)19(4)27(37)18(3)22(7)46-33(41)21(6)31(47-26-13-25(42-11)28(38)23(8)45-26)20(5)30(16)48-34-29(39)24(36(9)10)12-17(2)44-34/h16-31,34,37-39H,12-15H2,1-11H3/t16-,17-,18+,19-,20-,21-,22-,23-,24-,25-,26+,27-,28-,29-,30-,31-,34-,35?/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H61NO12/c1-16-14-35(15-43-35)32(40)19(4)27(37)18(3)22(7)46-33(41)21(6)31(47-26-13-25(42-11)28(38)23(8)45-26)20(5)30(16)48-34-29(39)24(36(9)10)12-17(2)44-34/h16-31,34,37-39H,12-15H2,1-11H3/t16-,17?,18-,19+,20+,21+,22+,23?,24?,25?,26?,27-,28?,29?,30-,31-,34?,35-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H61NO12/c1-16-14-35(15-43-35)32(40)19(4)27(37)18(3)22(7)46-33(41)21(6)31(47-26-13-25(42-11)28(38)23(8)45-26)20(5)30(16)48-34-29(39)24(36(9)10)12-17(2)44-34/h16-31,34,37-39H,12-15H2,1-11H3/t16-,17+,18-,19+,20+,21+,22+,23-,24-,25-,26-,27-,28-,29+,30-,31-,34-,35+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H61NO12/c1-16-14-35(15-43-35)32(40)19(4)27(37)18(3)22(7)46-33(41)21(6)31(47-26-13-25(42-11)28(38)23(8)45-26)20(5)30(16)48-34-29(39)24(36(9)10)12-17(2)44-34/h16-31,34,37-39H,12-15H2,1-11H3/t16-,17+,18+,19-,20+,21+,22+,23-,24+,25+,26-,27-,28+,29-,30-,31+,34-,35+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H62N4O4/c1-24(40)42-32-21-26-9-10-27-28(35(26,4)23-31(32)37-15-19-39(7,8)20-16-37)11-12-34(3)29(27)22-30(33(34)43-25(2)41)36-13-17-38(5,6)18-14-36/h26-33H,9-23H2,1-8H3/q+2	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C35H62N4O4/c1-24(40)42-32-21-26-9-10-27-28(35(26,4)23-31(32)37-15-19-39(7,8)20-16-37)11-12-34(3)29(27)22-30(33(34)43-25(2)41)36-13-17-38(5,6)18-14-36/h26-33H,9-23H2,1-8H3/q+2/t26-,27+,28-,29-,30-,31-,32-,33-,34-,35-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C36H33N3O5/c1-2-29(24-13-5-3-6-14-24)39-35(41)32-28-19-11-12-20-30(28)38-33(25-15-7-4-8-16-25)34(32)44-22-21-37-31(40)23-26-17-9-10-18-27(26)36(42)43/h3-20,29H,2,21-23H2,1H3,(H,37,40)(H,39,41)(H,42,43)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C36H33N3O5/c1-2-29(24-13-5-3-6-14-24)39-35(41)32-28-19-11-12-20-30(28)38-33(25-15-7-4-8-16-25)34(32)44-22-21-37-31(40)23-26-17-9-10-18-27(26)36(42)43/h3-20,29H,2,21-23H2,1H3,(H,37,40)(H,39,41)(H,42,43)/t29-/m0/s1	0 (Li et al., 2005)
InChI=1S/C36H41ClN8O4S/c1-4-26(2)45-35(46)44(25-39-45)31-11-9-29(10-12-31)42-17-19-43(20-18-42)30-13-15-32(16-14-30)47-21-33-22-48-36(49-33,27-5-7-28(37)8-6-27)23-50-34-40-38-24-41(34)3/h5-16,24-26,33H,4,17-23H2,1-3H3/t26-,33-,36-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C36H41N3O6/c1-24-31(34(40)44-6)33(28-18-13-19-29(22-28)39(42)43)32(25(2)37-24)35(41)45-36(3,4)23-38(5)21-20-30(26-14-9-7-10-15-26)27-16-11-8-12-17-27/h7-19,22,30,33,37H,20-21,23H2,1-6H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C36H42N2/c1-37(2,35-31-21-11-7-17-27(31)28-18-8-12-22-32(28)35)25-15-5-6-16-26-38(3,4)36-33-23-13-9-19-29(33)30-20-10-14-24-34(30)36/h7-14,17-24,35-36H,5-6,15-16,25-26H2,1-4H3/q+2	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C36H45N5O5S2/c1-24(2)34-39-29(22-47-34)20-41(4)35(44)38-25(3)32(42)17-28(15-26-11-7-5-8-12-26)18-33(43)31(16-27-13-9-6-10-14-27)40-36(45)46-21-30-19-37-23-48-30/h5-14,19,22-25,28,31,33,43H,15-18,20-21H2,1-4H3,(H,38,44)(H,40,45)/t25-,28+,31-,33-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C36H47N5O4/c1-36(2,3)39-35(45)31-24-40(22-26-12-9-15-37-21-26)16-17-41(31)23-29(42)19-28(18-25-10-5-4-6-11-25)34(44)38-33-30-14-8-7-13-27(30)20-32(33)43/h4-15,21,28-29,31-33,42-43H,16-20,22-24H2,1-3H3,(H,38,44)(H,39,45)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C36H47N5O4/c1-36(2,3)39-35(45)31-24-40(22-26-12-9-15-37-21-26)16-17-41(31)23-29(42)19-28(18-25-10-5-4-6-11-25)34(44)38-33-30-14-8-7-13-27(30)20-32(33)43/h4-15,21,28-29,31-33,42-43H,16-20,22-24H2,1-3H3,(H,38,44)(H,39,45)/p+2/t28-,29+,31+,32-,33+/m1/s1	1 (Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C36H47N5O4/c1-36(2,3)39-35(45)31-24-40(22-26-12-9-15-37-21-26)16-17-41(31)23-29(42)19-28(18-25-10-5-4-6-11-25)34(44)38-33-30-14-8-7-13-27(30)20-32(33)43/h4-15,21,28-29,31-33,42-43H,16-20,22-24H2,1-3H3,(H,38,44)(H,39,45)/t28-,29-,31-,32?,33-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C36H47N5O4/c1-36(2,3)39-35(45)31-24-40(22-26-12-9-15-37-21-26)16-17-41(31)23-29(42)19-28(18-25-10-5-4-6-11-25)34(44)38-33-30-14-8-7-13-27(30)20-32(33)43/h4-15,21,28-29,31-33,42-43H,16-20,22-24H2,1-3H3,(H,38,44)(H,39,45)/t28-,29-,31-,32+,33-/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C36H47N5O4/c1-36(2,3)39-35(45)31-24-40(22-26-12-9-15-37-21-26)16-17-41(31)23-29(42)19-28(18-25-10-5-4-6-11-25)34(44)38-33-30-14-8-7-13-27(30)20-32(33)43/h4-15,21,28-29,31-33,42-43H,16-20,22-24H2,1-3H3,(H,38,44)(H,39,45)/t28-,29-,31-,32+,33+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C36H47N5O4/c1-36(2,3)39-35(45)31-24-40(22-26-12-9-15-37-21-26)16-17-41(31)23-29(42)19-28(18-25-10-5-4-6-11-25)34(44)38-33-30-14-8-7-13-27(30)20-32(33)43/h4-15,21,28-29,31-33,42-43H,16-20,22-24H2,1-3H3,(H,38,44)(H,39,45)/t28-,29+,31-,32+,33+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C36H47N5O4/c1-36(2,3)39-35(45)31-24-40(22-26-12-9-15-37-21-26)16-17-41(31)23-29(42)19-28(18-25-10-5-4-6-11-25)34(44)38-33-30-14-8-7-13-27(30)20-32(33)43/h4-15,21,28-29,31-33,42-43H,16-20,22-24H2,1-3H3,(H,38,44)(H,39,45)/t28-,29+,31+,32-,33+/m1/s1	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C36H53N7O6/c1-5-10-25(29(44)34(48)39-23-15-16-23)40-33(47)28-24-14-9-13-22(24)20-43(28)35(49)30(36(2,3)4)42-32(46)27(21-11-7-6-8-12-21)41-31(45)26-19-37-17-18-38-26/h17-19,21-25,27-28,30H,5-16,20H2,1-4H3,(H,39,48)(H,40,47)(H,41,45)(H,42,46)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C36H60O2/c1-7-8-9-10-11-12-13-14-15-16-17-18-19-25-35(37)38-30-28-32(3)23-20-22-31(2)26-27-34-33(4)24-21-29-36(34,5)6/h20,22-23,26-28H,7-19,21,24-25,29-30H2,1-6H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C37H40N2O6/c1-38-14-12-24-19-32(42-4)33-21-27(24)28(38)16-22-6-9-26(10-7-22)44-37-35-25(20-34(43-5)36(37)41)13-15-39(2,3)29(35)17-23-8-11-30(40)31(18-23)45-33/h6-11,18-21,28-29H,12-17H2,1-5H3,(H-,40,41)/p+1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C37H40N2O8S/c1-21-13-27-29-14-22(2)37(43,32(41)20-47-34(42)23-9-8-12-26(15-23)48(44,45)46)36(29,4)18-31(40)33(27)35(3)17-24-19-38-39(30(24)16-28(21)35)25-10-6-5-7-11-25/h5-13,15-16,19,22,27,29,31,33,40,43H,14,17-18,20H2,1-4H3,(H,44,45,46)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C37H40N2O8S/c1-21-13-27-29-14-22(2)37(43,32(41)20-47-34(42)23-9-8-12-26(15-23)48(44,45)46)36(29,4)18-31(40)33(27)35(3)17-24-19-38-39(30(24)16-28(21)35)25-10-6-5-7-11-25/h5-13,15-16,19,22,27,29,31,33,40,43H,14,17-18,20H2,1-4H3,(H,44,45,46)/t22-,27-,29-,31-,33+,35?,36?,37-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C37H40N2O8S/c1-21-13-27-29-14-22(2)37(43,32(41)20-47-34(42)23-9-8-12-26(15-23)48(44,45)46)36(29,4)18-31(40)33(27)35(3)17-24-19-38-39(30(24)16-28(21)35)25-10-6-5-7-11-25/h5-13,15-16,19,22,27,29,31,33,40,43H,14,17-18,20H2,1-4H3,(H,44,45,46)/t22-,27?,29+,31+,33-,35+,36+,37+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C37H40N2O8S/c1-21-13-27-29-14-22(2)37(43,32(41)20-47-34(42)23-9-8-12-26(15-23)48(44,45)46)36(29,4)18-31(40)33(27)35(3)17-24-19-38-39(30(24)16-28(21)35)25-10-6-5-7-11-25/h5-13,15-16,19,22,27,29,31,33,40,43H,14,17-18,20H2,1-4H3,(H,44,45,46)/t22-,27+,29-,31+,33+,35+,36+,37-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C37H40N2O8S/c1-21-13-27-29-14-22(2)37(43,32(41)20-47-34(42)23-9-8-12-26(15-23)48(44,45)46)36(29,4)18-31(40)33(27)35(3)17-24-19-38-39(30(24)16-28(21)35)25-10-6-5-7-11-25/h5-13,15-16,19,22,27,29,31,33,40,43H,14,17-18,20H2,1-4H3,(H,44,45,46)/t22-,27+,29+,31+,33-,35+,36+,37+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C37H40N2O8S/c1-21-13-27-29-14-22(2)37(43,32(41)20-47-34(42)23-9-8-12-26(15-23)48(44,45)46)36(29,4)18-31(40)33(27)35(3)17-24-19-38-39(30(24)16-28(21)35)25-10-6-5-7-11-25/h5-13,15-16,19,22,27,29,31,33,40,43H,14,17-18,20H2,1-4H3,(H,44,45,46)/t22-,27+,29+,31+,33+,35-,36-,37-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C37H42F2N8O4/c1-3-35(26(2)48)47-36(49)46(25-42-47)31-7-5-29(6-8-31)43-14-16-44(17-15-43)30-9-11-32(12-10-30)50-20-27-19-37(51-21-27,22-45-24-40-23-41-45)33-13-4-28(38)18-34(33)39/h4-13,18,23-27,35,48H,3,14-17,19-22H2,1-2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C37H45Cl2N2O2/c1-28(2)43-32-11-6-8-29(24-32)25-35(42)40-19-7-14-37(27-40,31-12-13-33(38)34(39)26-31)18-23-41-20-15-36(16-21-41,17-22-41)30-9-4-3-5-10-30/h3-6,8-13,24,26,28H,7,14-23,25,27H2,1-2H3/q+1/t36?,37-,41-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C37H47NO12/c1-16-11-10-12-17(2)36(46)38-23-15-24(40)26-27(32(23)44)31(43)21(6)34-28(26)35(45)37(8,50-34)48-14-13-25(47-9)18(3)33(49-22(7)39)20(5)30(42)19(4)29(16)41/h10-16,18-20,25,29-30,33,40-44H,1-9H3,(H,38,46)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C37H47NO12/c1-16-11-10-12-17(2)36(46)38-23-15-24(40)26-27(32(23)44)31(43)21(6)34-28(26)35(45)37(8,50-34)48-14-13-25(47-9)18(3)33(49-22(7)39)20(5)30(42)19(4)29(16)41/h10-16,18-20,25,29-30,33,40-44H,1-9H3,(H,38,46)/b11-10-,14-13+,17-12-/t16-,18+,19+,20-,25-	0	(Meng et al., 2021)

,29-,30-,33+,37-/m0/s1	
InChI=1S/C37H47NO12/c1-16-11-10-12-17(2)36(46)38-23-15-24(40)26-27(32(23)44)31(43)21(6)34-28(26)35(45)37(8,50-34)48-14-13-25(47-9)18(3)33(49-22(7)39)20(5)30(42)19(4)29(16)41/h10-16,18-20,25,29-30,33,40-44H,1-9H3,(H,38,46)/b11-10+,14-13+,17-12-/t16-,18-,19-,20-,25-,29-,30-,33+,37-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C37H47NO12/c1-16-11-10-12-17(2)36(46)38-23-15-24(40)26-27(32(23)44)31(43)21(6)34-28(26)35(45)37(8,50-34)48-14-13-25(47-9)18(3)33(49-22(7)39)20(5)30(42)19(4)29(16)41/h10-16,18-20,25,29-30,33,40-44H,1-9H3,(H,38,46)/b11-10+,14-13+,17-12-/t16-,18+,19+,20+,25-,29-,30+,33+,37-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C37H47NO12/c1-16-11-10-12-17(2)36(46)38-23-15-24(40)26-27(32(23)44)31(43)21(6)34-28(26)35(45)37(8,50-34)48-14-13-25(47-9)18(3)33(49-22(7)39)20(5)30(42)19(4)29(16)41/h10-16,18-20,25,29-30,33,40-44H,1-9H3,(H,38,46)/b11-10+,14-13+,17-12+/t16-,18-,19-,20-,25-,29-,30-,33+,37-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C37H47NO12/c1-16-11-10-12-17(2)36(46)38-23-15-24(40)26-27(32(23)44)31(43)21(6)34-28(26)35(45)37(8,50-34)48-14-13-25(47-9)18(3)33(49-22(7)39)20(5)30(42)19(4)29(16)41/h10-16,18-20,25,29-30,33,40-44H,1-9H3,(H,38,46)/t16-,18+,19-,20-,25-,29-,30-,33-,37-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C37H47NO12/c1-16-11-10-12-17(2)36(46)38-23-15-24(40)26-27(32(23)44)31(43)21(6)34-28(26)35(45)37(8,50-34)48-14-13-25(47-9)18(3)33(49-22(7)39)20(5)30(42)19(4)29(16)41/h10-16,18-20,25,29-30,33,40-44H,1-9H3,(H,38,46)/t16-,18+,19+,20+,25-,29-,30+,33+,37-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C37H48N4O5/c1-25(2)34(41-20-12-19-38-37(41)45)36(44)39-30(21-28-15-7-5-8-16-28)23-32(42)31(22-29-17-9-6-10-18-29)40-33(43)24-46-35-26(3)13-11-14-27(35)4/h5-11,13-18,25,30-32,34,42H,12,19-24H2,1-4H3,(H,38,45)(H,39,44)(H,40,43)/t30-,31-,32-,34-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C37H48N6O5S2/c1-24(2)33(42-36(46)43(5)20-29-22-49-35(40-29)25(3)4)34(45)39-28(16-26-12-8-6-9-13-26)18-32(44)31(17-27-14-10-7-11-15-27)41-37(47)48-21-30-19-38-23-50-30/h6-15,19,22-25,28,31-33,44H,16-18,20-21H2,1-5H3,(H,39,45)(H,41,47)(H,42,46)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C37H48N6O5S2/c1-24(2)33(42-36(46)43(5)20-29-22-49-35(40-29)25(3)4)34(45)39-28(16-26-12-8-6-9-13-26)18-32(44)31(17-27-14-10-7-11-15-27)41-37(47)48-21-30-19-38-23-50-30/h6-15,19,22-25,28,31-33,44H,16-18,20-21H2,1-5H3,(H,39,45)(H,41,47)(H,42,46)/t28-,31-,32-,33-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C37H48N6O5S2/c1-24(2)33(42-36(46)43(5)20-29-22-49-35(40-29)25(3)4)34(45)39-28(16-26-12-8-6-9-13-26)18-32(44)31(17-27-14-10-7-11-15-27)41-37(47)48-21-30-19-38-23-50-30/h6-15,19,22-25,28,31-33,44H,16-18,20-21H2,1-5H3,(H,39,45)(H,41,47)(H,42,46)/t28-,31-,32+,33-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C37H49N7O9S/c1-37(2,3)53-36(52)39-16-14-30(45)41-28(19-23-21-40-25-13-9-8-12-24(23)25)34(50)42-26(15-17-54-4)33(49)44-29(20-31(46)47)35(51)43-27(32(38)48)18-22-10-6-5-7-11-22/h5-13,21,26-29,40H,14-20H2,1-4H3,(H2,38,48)(H,39,52)(H,41,45)(H,42,50)(H,43,51)(H,44,49)(H,46,47)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C37H61N2O4/c1-6-20-39(21-12-9-13-22-39)32-24-30-28-15-14-27-23-33(42-26(3)40)31(38-18-10-8-11-19-38)25-37(27,5)29(28)16-17-36(30,4)35(32)43-34(41)7-2/h6,27-33,35H,1,7-25H2,2-5H3/q+1/t27-,28+,29-,30-,31-,32-,33-,35-,36-,37-/m0/s1	0 (Kaupp, 2007)
InChI=1S/C37H66FNO13/c1-14-24-37(10,46)29(42)21(5)28(41)34(7,38)17-35(8,45)31(52-33-26(40)23(39(11)12)15-18(2)48-33)19(3)27(20(4)32(44)50-24)51-25-16-36(9,47-13)30(43)22(6)49-25/h18-27,29-31,33,40,42-43,45-46H,14-17H2,1-13H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C37H66FNO13/c1-14-24-37(10,46)29(42)21(5)28(41)34(7,38)17-35(8,45)31(52-33-26(40)23(39(11)12)15-18(2)48-33)19(3)27(20(4)32(44)50-24)51-25-16-36(9,47-13)30(43)22(6)49-25/h18-27,29-31,33,40,42-43,45-46H,14-17H2,1-13H3/t18-,19?,20-,21+,22-,23-,24-,25+,26-,27-,29-,30-,31-,33-,34?,35?,36?,37-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C37H66FNO13/c1-14-24-37(10,46)29(42)21(5)28(41)34(7,38)17-35(8,45)31(52-33-26(40)23(39(11)12)15-18(2)48-33)19(3)27(20(4)32(44)50-24)51-25-16-36(9,47-13)30(43)22(6)49-25/h18-27,29-31,33,40,42-43,45-46H,14-17H2,1-13H3/t18-,19+,20-	0 (Meng et al., 2021)

,21+,22+,23-,24-,25+,26+,27+,29+,30-,31-,33-,34-,35+,36-,37-/m1/s1 InChI=1S/C37H66FNO13/c1-14-24-37(10,46)29(42)21(5)28(41)34(7,38)17-35(8,45)31(52-33-26(40)23(39(11)12)15-18(2)48-33)19(3)27(20(4)32(44)50-24)51-25-16-36(9,47-13)30(43)22(6)49-25/h18-27,29-31,33,40,42-43,45-46H,14-17H2,1-13H3/t18-,19+,20-,21+,22+,23-,24-,25+,26-,27+,29-,30+,31-,33+,34+,35-,36-,37-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C37H66FNO13/c1-14-24-37(10,46)29(42)21(5)28(41)34(7,38)17-35(8,45)31(52-33-26(40)23(39(11)12)15-18(2)48-33)19(3)27(20(4)32(44)50-24)51-25-16-36(9,47-13)30(43)22(6)49-25/h18-27,29-31,33,40,42-43,45-46H,14-17H2,1-13H3/t18-,19+,20+,21+,22-,23-,24-,25+,26-,27+,29-,30-,31-,33-,34+,35-,36+,37-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C37H67NO12/c1-14-26-20(4)29(40)21(5)28(39)18(2)16-36(9,44)33(50-35-30(41)25(38(11)12)15-19(3)46-35)22(6)31(23(7)34(43)48-26)49-27-17-37(10,45-13)32(42)24(8)47-27/h18-27,29-33,35,40-42,44H,14-17H2,1-13H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C37H67NO12/c1-14-26-20(4)29(40)21(5)28(39)18(2)16-36(9,44)33(50-35-30(41)25(38(11)12)15-19(3)46-35)22(6)31(23(7)34(43)48-26)49-27-17-37(10,45-13)32(42)24(8)47-27/h18-27,29-33,35,40-42,44H,14-17H2,1-13H3/t18-,19-,20?,21+,22?,23-,24-,25-,26-,27+,29-,30-,31-,32-,33-,35-,36?,37?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C37H67NO12/c1-14-26-20(4)29(40)21(5)28(39)18(2)16-36(9,44)33(50-35-30(41)25(38(11)12)15-19(3)46-35)22(6)31(23(7)34(43)48-26)49-27-17-37(10,45-13)32(42)24(8)47-27/h18-27,29-33,35,40-42,44H,14-17H2,1-13H3/t18-,19-,20+,21+,22+,23-,24+,25+,26-,27+,29+,30-,31+,32+,33-,35+,36-,37-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C37H67NO12/c1-14-26-20(4)29(40)21(5)28(39)18(2)16-36(9,44)33(50-35-30(41)25(38(11)12)15-19(3)46-35)22(6)31(23(7)34(43)48-26)49-27-17-37(10,45-13)32(42)24(8)47-27/h18-27,29-33,35,40-42,44H,14-17H2,1-13H3/t18-,19?,20+,21+,22?,23-,24?,25?,26-,27?,29+,30?,31+,32?,33-,35?,36-,37?/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C37H67NO12/c1-14-26-20(4)29(40)21(5)28(39)18(2)16-36(9,44)33(50-35-30(41)25(38(11)12)15-19(3)46-35)22(6)31(23(7)34(43)48-26)49-27-17-37(10,45-13)32(42)24(8)47-27/h18-27,29-33,35,40-42,44H,14-17H2,1-13H3/t18-,19+,20-,21+,22-,23+,24+,25+,26-,27-,29+,30-,31+,32+,33-,35+,36+,37-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C37H67NO12/c1-14-26-20(4)29(40)21(5)28(39)18(2)16-36(9,44)33(50-35-30(41)25(38(11)12)15-19(3)46-35)22(6)31(23(7)34(43)48-26)49-27-17-37(10,45-13)32(42)24(8)47-27/h18-27,29-33,35,40-42,44H,14-17H2,1-13H3/t18-,19+,20+,21-,22-,23+,24-,25+,26+,27-,29+,30-,31-,32+,33+,35+,36-,37+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C37H67NO13/c1-14-25-37(10,45)30(41)20(4)27(39)18(2)16-35(8,44)32(51-34-28(40)24(38(11)12)15-19(3)47-34)21(5)29(22(6)33(43)49-25)50-26-17-36(9,46-13)31(42)23(7)48-26/h18-26,28-32,34,40-42,44-45H,14-17H2,1-13H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C37H67NO13/c1-14-25-37(10,45)30(41)20(4)27(39)18(2)16-35(8,44)32(51-34-28(40)24(38(11)12)15-19(3)47-34)21(5)29(22(6)33(43)49-25)50-26-17-36(9,46-13)31(42)23(7)48-26/h18-26,28-32,34,40-42,44-45H,14-17H2,1-13H3/t18-,19-,20-,21+,22-,23-,24+,25+,26-,28-,29+,30+,31-,32-,34+,35-,36+,37-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C37H67NO13/c1-14-25-37(10,45)30(41)20(4)27(39)18(2)16-35(8,44)32(51-34-28(40)24(38(11)12)15-19(3)47-34)21(5)29(22(6)33(43)49-25)50-26-17-36(9,46-13)31(42)23(7)48-26/h18-26,28-32,34,40-42,44-45H,14-17H2,1-13H3/t18-,19-,20+,21?,22-,23-,24-,25-,26+,28-,29-,30-,31-,32-,34-,35?,36?,37?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C37H67NO13/c1-14-25-37(10,45)30(41)20(4)27(39)18(2)16-35(8,44)32(51-34-28(40)24(38(11)12)15-19(3)47-34)21(5)29(22(6)33(43)49-25)50-26-17-36(9,46-13)31(42)23(7)48-26/h18-26,28-32,34,40-42,44-45H,14-17H2,1-13H3/t18-,19-,20+,21+,22-,23+,24+,25-,26+,28-,29+,30-,31+,32-,34+,35-,36-,37-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C37H67NO13/c1-14-25-37(10,45)30(41)20(4)27(39)18(2)16-35(8,44)32(51-34-28(40)24(38(11)12)15-19(3)47-34)21(5)29(22(6)33(43)49-25)50-26-17-36(9,46-13)31(42)23(7)48-26/h18-26,28-32,34,40-42,44-45H,14-17H2,1-13H3/t18-,19+,20-,21-,22+,23-	0	(Meng et al., 2021)

,24+,25+,26-,28-,29-,30-,31+,32+,34+,35-,36+,37-/m0/s1	
InChI=1S/C37H67NO13/c1-14-25-37(10,45)30(41)20(4)27(39)18(2)16-35(8,44)32(51-34-28(40)24(38(11)12)15-19(3)47-34)21(5)29(22(6)33(43)49-25)50-26-17-36(9,46-13)31(42)23(7)48-26/h18-26,28-32,34,40-42,44-45H,14-17H2,1-13H3/t18-,19+,20-,21+,22-,23+,24-,25+,26+,28+,29+,30+,31-,32-,34+,35-,36-,37-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C37H67NO13/c1-14-25-37(10,45)30(41)20(4)27(39)18(2)16-35(8,44)32(51-34-28(40)24(38(11)12)15-19(3)47-34)21(5)29(22(6)33(43)49-25)50-26-17-36(9,46-13)31(42)23(7)48-26/h18-26,28-32,34,40-42,44-45H,14-17H2,1-13H3/t18-,19+,20+,21+,22-,23+,24-,25-,26+,28+,29+,30-,31+,32-,34-,35-,36-,37-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C38H34N2O10/c1-49-27(41)17-23(25-15-21-9-3-7-19-11-5-13-39(31(19)21)37(25)47)29-33(43)35(45)30(36(46)34(29)44)24(18-28(42)50-2)26-16-22-10-4-8-20-12-6-14-40(32(20)22)38(26)48/h3-4,7-10,15-16,23-24,43,46H,5-6,11-14,17-18H2,1-2H3/t23-,24+	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C38H42N2O6/c1-39(2)15-13-25-20-33(43-5)34-22-28(25)29(39)17-23-7-10-27(11-8-23)45-38-36-26(21-35(44-6)37(38)42)14-16-40(3,4)30(36)18-24-9-12-31(41)32(19-24)46-34/h7-12,19-22,29-30H,13-18H2,1-6H3/p+2/t29-,30+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C38H42N8O6S2/c1-25(45(23-47)21-31-19-41-27(3)43-35(31)39)33(15-17-51-37(49)29-11-7-5-8-12-29)53-54-34(16-18-52-38(50)30-13-9-6-10-14-30)26(2)46(24-48)22-32-20-42-28(4)44-36(32)40/h5-14,19-20,23-24H,15-18,21-22H2,1-4H3,(H2,39,41,43)(H2,40,42,44)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C38H42N8O6S2/c1-25(45(23-47)21-31-19-41-27(3)43-35(31)39)33(15-17-51-37(49)29-11-7-5-8-12-29)53-54-34(16-18-52-38(50)30-13-9-6-10-14-30)26(2)46(24-48)22-32-20-42-28(4)44-36(32)40/h5-14,19-20,23-24H,15-18,21-22H2,1-4H3,(H2,39,41,43)(H2,40,42,44)/b33-25+,34-26+	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C38H50N6O5/c1-38(2,3)43-37(49)32-20-26-14-7-8-15-27(26)22-44(32)23-33(45)30(19-24-11-5-4-6-12-24)41-36(48)31(21-34(39)46)42-35(47)29-18-17-25-13-9-10-16-28(25)40-29/h4-6,9-13,16-18,26-27,30-33,45H,7-8,14-15,19-23H2,1-3H3,(H2,39,46)(H,41,48)(H,42,47)(H,43,49)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C38H50N6O5/c1-38(2,3)43-37(49)32-20-26-14-7-8-15-27(26)22-44(32)23-33(45)30(19-24-11-5-4-6-12-24)41-36(48)31(21-34(39)46)42-35(47)29-18-17-25-13-9-10-16-28(25)40-29/h4-6,9-13,16-18,26-27,30-33,45H,7-8,14-15,19-23H2,1-3H3,(H2,39,46)(H,41,48)(H,42,47)(H,43,49)/t26-,27-,30+,31-,32+,33-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C38H50N6O5/c1-38(2,3)43-37(49)32-20-26-14-7-8-15-27(26)22-44(32)23-33(45)30(19-24-11-5-4-6-12-24)41-36(48)31(21-34(39)46)42-35(47)29-18-17-25-13-9-10-16-28(25)40-29/h4-6,9-13,16-18,26-27,30-33,45H,7-8,14-15,19-23H2,1-3H3,(H2,39,46)(H,41,48)(H,42,47)(H,43,49)/t26-,27+,30-,31-,32-,33-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C38H50N6O5/c1-38(2,3)43-37(49)32-20-26-14-7-8-15-27(26)22-44(32)23-33(45)30(19-24-11-5-4-6-12-24)41-36(48)31(21-34(39)46)42-35(47)29-18-17-25-13-9-10-16-28(25)40-29/h4-6,9-13,16-18,26-27,30-33,45H,7-8,14-15,19-23H2,1-3H3,(H2,39,46)(H,41,48)(H,42,47)(H,43,49)/t26-,27+,30-,31-,32-,33+/m0/s	1 (Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C38H50N6O5/c1-38(2,3)43-37(49)32-20-26-14-7-8-15-27(26)22-44(32)23-33(45)30(19-24-11-5-4-6-12-24)41-36(48)31(21-34(39)46)42-35(47)29-18-17-25-13-9-10-16-28(25)40-29/h4-6,9-13,16-18,26-27,30-33,45H,7-8,14-15,19-23H2,1-3H3,(H2,39,46)(H,41,48)(H,42,47)(H,43,49)/t26-,27+,30-,31-,32-,33+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C38H50N6O5/c1-38(2,3)43-37(49)32-20-26-14-7-8-15-27(26)22-44(32)23-33(45)30(19-24-11-5-4-6-12-24)41-36(48)31(21-34(39)46)42-35(47)29-18-17-25-13-9-10-16-28(25)40-29/h4-6,9-13,16-18,26-27,30-33,45H,7-8,14-15,19-23H2,1-3H3,(H2,39,46)(H,41,48)(H,42,47)(H,43,49)/t26-,27+,30-,31-,32-,33+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C38H51NO4/c1-3-4-5-6-7-8-9-10-11-12-16-19-34(40)42-33-23-21-30-31-26-29-20-22-32(41-27-28-17-14-13-15-18-28)36-35(29)38(30,37(33)43-36)24-25-39(31)2/h13-15,17-18,20-23,30-31,33,37H,3-12,16,19,24-27H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C38H51NO4/c1-3-4-5-6-7-8-9-10-11-12-16-19-34(40)42-33-23-21-30-31-26-29-20-22-32(41-27-28-17-14-13-15-18-28)36-	1 (Meng et al., 2021)

35(29)38(30,37(33)43-36)24-25-39(31)2/h13-15,17-18,20-23,30-31,33,37H,3-12,16,19,24-27H2,1-2H3/t30-,31-,33-,37+,38+/m1/s1 InChI=1S/C38H51NO4/c1-3-4-5-6-7-8-9-10-11-12-16-19-34(40)42-33-23-21-30-31-26-29-20-22-32(41-27-28-17-14-13-15-18-28)36-	1	(Meng et al., 2021)
35(29)38(30,37(33)43-36)24-25-39(31)2/h13-15,17-18,20-23,30-31,33,37H,3-12,16,19,24-27H2,1-2H3/t30-,31?,33+,37-,38?/m1/s1 InChI=1S/C38H51NO4/c1-3-4-5-6-7-8-9-10-11-12-16-19-34(40)42-33-23-21-30-31-26-29-20-22-32(41-27-28-17-14-13-15-18-28)36-	1	(Meng et al., 2021)
35(29)38(30,37(33)43-36)24-25-39(31)2/h13-15,17-18,20-23,30-31,33,37H,3-12,16,19,24-27H2,1-2H3/t30-,31+,33-,37-,38-/m0/s1 InChI=1S/C38H51NO4/c1-3-4-5-6-7-8-9-10-11-12-16-19-34(40)42-33-23-21-30-31-26-29-20-22-32(41-27-28-17-14-13-15-18-28)36-	1	(Meng et al., 2021)
35(29)38(30,37(33)43-36)24-25-39(31)2/h13-15,17-18,20-23,30-31,33,37H,3-12,16,19,24-27H2,1-2H3/t30-,31+,33-,37+,38+/m0/s1 InChI=1S/C38H51NO4/c1-3-4-5-6-7-8-9-10-11-12-16-19-34(40)42-33-23-21-30-31-26-29-20-22-32(41-27-28-17-14-13-15-18-28)36-	1	(Meng et al., 2021)
35(29)38(30,37(33)43-36)24-25-39(31)2/h13-15,17-18,20-23,30-31,33,37H,3-12,16,19,24-27H2,1-2H3/t30-,31+,33?,37-,38-/m0/s1 InChI=1S/C38H52N6O7/c1-37(2,3)31(41-35(48)50-7)33(46)40-29(22-25-14-10-9-11-15-25)30(45)24-44(43-34(47)32(38(4,5)6)42-36(49)51-8)23-	1	(Meng et al., 2021)
26-17-19-27(20-18-26)28-16-12-13-21-39-28/h9-21,29-32,45H,22-24H2,1-8H3,(H,40,46)(H,41,48)(H,42,49)(H,43,47) InChI=1S/C38H52N6O7/c1-37(2,3)31(41-35(48)50-7)33(46)40-29(22-25-14-10-9-11-15-25)30(45)24-44(43-34(47)32(38(4,5)6)42-36(49)51-8)23-	0	(Meng et al., 2021)
26-17-19-27(20-18-26)28-16-12-13-21-39-28/h9-21,29-32,45H,22-24H2,1-8H3,(H,40,46)(H,41,48)(H,42,49)(H,43,47)/t29-,30-,31+,32+/m0/s1 InChI=1S/C38H69NO13/c1-15-26-38(10,45)31(42)21(4)28(40)19(2)17-37(9,47-14)33(52-35-29(41)25(39(11)12)16-20(3)48-	0	(Meng et al., 2021)
35)22(5)30(23(6)34(44)50-26)51-27-18-36(8,46-13)32(43)24(7)49-27/h19-27,29-33,35,41-43,45H,15-18H2,1-14H3 InChI=1S/C38H69NO13/c1-15-26-38(10,45)31(42)21(4)28(40)19(2)17-37(9,47-14)33(52-35-29(41)25(39(11)12)16-20(3)48-	0	(Meng et al., 2021)
35)22(5)30(23(6)34(44)50-26)51-27-18-36(8,46-13)32(43)24(7)49-27/h19-27,29-33,35,41-43,45H,15-18H2,1-14H3/t19-,20-,21-,22+,23-, ,24+,25+,26+,27+,29-,30-,31-,32+,33-,35+,36-,37+,38-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C38H69NO13/c1-15-26-38(10,45)31(42)21(4)28(40)19(2)17-37(9,47-14)33(52-35-29(41)25(39(11)12)16-20(3)48-	0	(Meng et al., 2021)
35)22(5)30(23(6)34(44)50-26)51-27-18-36(8,46-13)32(43)24(7)49-27/h19-27,29-33,35,41-43,45H,15-18H2,1-14H3/t19-,20-,21+,22-,23-,24-,25-, ,26-,27+,29-,30-,31-,32-,33-,35-,36?,37?,38?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C38H69NO13/c1-15-26-38(10,45)31(42)21(4)28(40)19(2)17-37(9,47-14)33(52-35-29(41)25(39(11)12)16-20(3)48-		
35)22(5)30(23(6)34(44)50-26)51-27-18-36(8,46-13)32(43)24(7)49-27/h19-27,29-33,35,41-43,45H,15-18H2,1-14H3/t19-,20-,21+,22+,23-, ,24+,25+,26-,27+,29-,30+,31-,32+,33-,35+,36-,37-,38-/m1/s1		(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C38H69NO13/c1-15-26-38(10,45)31(42)21(4)28(40)19(2)17-37(9,47-14)33(52-35-29(41)25(39(11)12)16-20(3)48-	0	(Meng et al., 2021)
35)22(5)30(23(6)34(44)50-26)51-27-18-36(8,46-13)32(43)24(7)49-27/h19-27,29-33,35,41-43,45H,15-18H2,1-14H3/t19-,20+,21-,22-,23+,24-, ,25+,26+,27-,29-,30-,31-,32+,33+,35+,36+,37+,38-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C38H69NO13/c1-15-26-38(10,45)31(42)21(4)28(40)19(2)17-37(9,47-14)33(52-35-29(41)25(39(11)12)16-20(3)48-	0	(Meng et al., 2021)
35)22(5)30(23(6)34(44)50-26)51-27-18-36(8,46-13)32(43)24(7)49-27/h19-27,29-33,35,41-43,45H,15-18H2,1-14H3/t19-,20+,21-,22+,23-,24-,25-, ,26+,27-,29-,30+,31+,32-,33-,35+,36+,37+,38-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C38H70N2O13/c1-15-26-38(10,46)31(42)21(4)28(39-48-14)19(2)17-36(8,45)33(53-35-29(41)25(40(11)12)16-20(3)49-	0	(Meng et al., 2021)
35)22(5)30(23(6)34(44)51-26)52-27-18-37(9,47-13)32(43)24(7)50-27/h19-27,29-33,35,41-43,45-46H,15-18H2,1-14H3 InChI=1S/C38H70N2O13/c1-15-26-38(10,46)31(42)21(4)28(39-48-14)19(2)17-36(8,45)33(53-35-29(41)25(40(11)12)16-20(3)49-	0	(Meng et al., 2021)
35)22(5)30(23(6)34(44)51-26)52-27-18-37(9,47-13)32(43)24(7)50-27/h19-27,29-33,35,41-43,45-46H,15-18H2,1-14H3/b39-28-/t19-,20-,21-, ,22+,23-,24-,25+,26+,27-,29-,30+,31+,32-,33-,35+,36-,37+,38-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C38H70N2O13/c1-15-26-38(10,46)31(42)21(4)28(39-48-14)19(2)17-36(8,45)33(53-35-29(41)25(40(11)12)16-20(3)49-	0	(Meng et al., 2021)
35)22(5)30(23(6)34(44)51-26)52-27-18-37(9,47-13)32(43)24(7)50-27/h19-27,29-33,35,41-43,45-46H,15-18H2,1-14H3/b39-28-/t19-,20-	0	(Meng et al., 2021)

,21+,22+,23-,24+,25+,26-,27+,29-,30+,31-,32+,33-,35+,36-,37-,38-/m1/s1	
InChI=1S/C38H70N2O13/c1-15-26-38(10,46)31(42)21(4)28(39-48-14)19(2)17-36(8,45)33(53-35-29(41)25(40(11)12)16-20(3)49-35)22(5)30(23(6)34(44)51-26)52-27-18-37(9,47-13)32(43)24(7)50-27/h19-27,29-33,35,41-43,45-46H,15-18H2,1-14H3/b39-28-/t19-,20?,21+,22?,23-,24?,25?,26-,27?,29?,30+,31-,32?,33-,35?,36-,37?,38-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C38H70N2O13/c1-15-26-38(10,46)31(42)21(4)28(39-48-14)19(2)17-36(8,45)33(53-35-29(41)25(40(11)12)16-20(3)49-35)22(5)30(23(6)34(44)51-26)52-27-18-37(9,47-13)32(43)24(7)50-27/h19-27,29-33,35,41-43,45-46H,15-18H2,1-14H3/b39-28+/t19-,20-,21-,22-,23-,24-,25-,26-,27+,29-,30-,31-,32-,33-,35-,36?,37?,38?/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C38H70N2O13/c1-15-26-38(10,46)31(42)21(4)28(39-48-14)19(2)17-36(8,45)33(53-35-29(41)25(40(11)12)16-20(3)49-35)22(5)30(23(6)34(44)51-26)52-27-18-37(9,47-13)32(43)24(7)50-27/h19-27,29-33,35,41-43,45-46H,15-18H2,1-14H3/t19-,20+,21-,22-,23+,24-,25+,26+,27-,29-,30-,31-,32+,33+,35+,36-,37+,38-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C38H72N2O12/c1-15-27-38(10,46)31(42)24(6)40(13)19-20(2)17-36(8,45)33(52-35-29(41)26(39(11)12)16-21(3)48-35)22(4)30(23(5)34(44)50-27)51-28-18-37(9,47-14)32(43)25(7)49-28/h20-33,35,41-43,45-46H,15-19H2,1-14H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C38H72N2O12/c1-15-27-38(10,46)31(42)24(6)40(13)19-20(2)17-36(8,45)33(52-35-29(41)26(39(11)12)16-21(3)48-35)22(4)30(23(5)34(44)50-27)51-28-18-37(9,47-14)32(43)25(7)49-28/h20-33,35,41-43,45-46H,15-19H2,1-14H3/t20-,21-,22-,23+,24-,25+,26+,27-,28-,29-,30-,31?,32+,33+,35+,36-,37-,38+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C38H72N2O12/c1-15-27-38(10,46)31(42)24(6)40(13)19-20(2)17-36(8,45)33(52-35-29(41)26(39(11)12)16-21(3)48-35)22(4)30(23(5)34(44)50-27)51-28-18-37(9,47-14)32(43)25(7)49-28/h20-33,35,41-43,45-46H,15-19H2,1-14H3/t20-,21-,22?,23-,24-,25+,26+,27-,28+,29-,30+,31-,32+,33-,35+,36-,37-,38-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C38H72N2O12/c1-15-27-38(10,46)31(42)24(6)40(13)19-20(2)17-36(8,45)33(52-35-29(41)26(39(11)12)16-21(3)48-35)22(4)30(23(5)34(44)50-27)51-28-18-37(9,47-14)32(43)25(7)49-28/h20-33,35,41-43,45-46H,15-19H2,1-14H3/t20-,21-,22+,23-,24-,25+,26+,27-,28+,29-,30+,31-,32+,33-,35+,36-,37-,38-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C38H72N2O12/c1-15-27-38(10,46)31(42)24(6)40(13)19-20(2)17-36(8,45)33(52-35-29(41)26(39(11)12)16-21(3)48-35)22(4)30(23(5)34(44)50-27)51-28-18-37(9,47-14)32(43)25(7)49-28/h20-33,35,41-43,45-46H,15-19H2,1-14H3/t20-,21+,22-,23+,24-,25-,26+,27-,28-,29-,30-,31-,32+,33+,35+,36-,37+,38-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C38H72N2O12/c1-15-27-38(10,46)31(42)24(6)40(13)19-20(2)17-36(8,45)33(52-35-29(41)26(39(11)12)16-21(3)48-35)22(4)30(23(5)34(44)50-27)51-28-18-37(9,47-14)32(43)25(7)49-28/h20-33,35,41-43,45-46H,15-19H2,1-14H3/t20?,21-,22-,23-,24-,25-,26-,27-,28+,29-,30-,31-,32-,33-,35-,36?,37?,38?/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C39H43N5O12S/c1-37(2)29(36(53)54)44-34(52)25(35(44)57-37)42-33(51)24(16-10-7-6-8-11-16)40-15-41-32(50)23-28(47)26(43(4)5)19-14-18-22(30(48)39(19,56)31(23)49)27(46)21-17(38(18,3)55)12-9-13-20(21)45/h6-13,18-19,24-26,29,35,40,45-46,49,55-56H,14-15H2,1-5H3,(H,41,50)(H,42,51)(H,53,54)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C39H43N5O12S/c1-37(2)29(36(53)54)44-34(52)25(35(44)57-37)42-33(51)24(16-10-7-6-8-11-16)40-15-41-32(50)23-28(47)26(43(4)5)19-14-18-22(30(48)39(19,56)31(23)49)27(46)21-17(38(18,3)55)12-9-13-20(21)45/h6-13,18-19,24-26,29,35,40,45-46,49,55-56H,14-15H2,1-5H3,(H,41,50)(H,42,51)(H,53,54)/t18-,19-,24-,25?,26-,29-,35-,38?,39?/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C39H43N5O12S/c1-37(2)29(36(53)54)44-34(52)25(35(44)57-37)42-33(51)24(16-10-7-6-8-11-16)40-15-41-32(50)23-	0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C3H3N/c1-2-3-4/h2H,1H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C3H4BrF3O/c1-8-3(6,7)2(4)5/h2H,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C3H4BrF3O/c1-8-3(6,7)2(4)5/h2H,1H3/t2-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C3H4Cl2F2O/c1-8-3(6,7)2(4)5/h2H,1H3	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C3H4N2O2/c6-2-1-4-3(7)5-2/h1H2,(H2,4,5,6,7)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C3H4O/c1-2-3-4/h1,4H,3H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C3H5N3O9/c7-4(8)13-1-3(15-6(11)12)2-14-5(9)10/h3H,1-2H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C3H6/c1-2-3-1/h1-3H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C3H6/c1-3-2/h3H,1H2,2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C3H6N2O2/c4-2-1-7-5-3(2)6/h2H,1,4H2,(H,5,6)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C3H6N2O2/c4-2-1-7-5-3(2)6/h2H,1,4H2,(H,5,6)/t2-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C3H6N2O2/c4-2-1-7-5-3(2)6/h2H,1,4H2,(H,5,6)/t2-/m1/s1	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C3H6O/c1-3(2)4/h1-2H3	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C3H6O2/c1-3(4)5-2/h1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C3H6O3/c1-2(4)3(5)6/h2,4H,1H3,(H,5,6)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C3H6O3/c1-2(4)3(5)6/h2,4H,1H3,(H,5,6)/t2-/m0/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C3H7Br/c1-2-3-4/h2-3H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C3H7Br/c1-3(2)4/h3H,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C3H7FN2S/c4-1-2-7-3(5)6/h1-2H2,(H3,5,6)	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C3H7NO2/c1-2-6-3(4)5/h2H2,1H3,(H2,4,5)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C3H7NO2/c1-2(4)3(5)6/h2H,4H2,1H3,(H,5,6)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C3H7O4P/c1-2-3(7-2)8(4,5)6/h2-3H,1H3,(H2,4,5,6)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C3H7O4P/c1-2-3(7-2)8(4,5)6/h2-3H,1H3,(H2,4,5,6)/t2-,3-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C3H7O4P/c1-2-3(7-2)8(4,5)6/h2-3H,1H3,(H2,4,5,6)/t2-,3+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C3H7O4P/c1-2-3(7-2)8(4,5)6/h2-3H,1H3,(H2,4,5,6)/t2-,3+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)

	2023)
InChI=1S/C3H8/c1-3-2/h3H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C3H8O/c1-2-3-4/h4H,2-3H2,1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C3H8O/c1-3(2)4/h3-4H,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C3H8O3/c4-1-3(6)2-5/h3-6H,1-2H2	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C3H8OS2/c4-1-3(6)2-5/h3-6H,1-2H2	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C3H9NO3S/c4-2-1-3-8(5,6)7/h1-4H2,(H,5,6,7)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C40H48N2O6/c1-41(2)17-15-27-22-34(44-6)36-24-30(27)31(41)19-25-9-12-29(13-10-25)47-40-38-28(23-37(45-7)39(40)46-8)16-18-42(3,4)32(38)20-26-11-14-33(43-5)35(21-26)48-36/h9-14,21-24,31-32H,15-20H2,1-8H3/q+2	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C40H53N7O5S2/c1-29(2)38-43-34(27-53-38)25-46(3)39(49)45-36(16-17-47-18-20-51-21-19-47)37(48)42-32(22-30-10-6-4-7-11-30)14-15-33(23-31-12-8-5-9-13-31)44-40(50)52-26-35-24-41-28-54-35/h4-13,24,27-29,32-33,36H,14-23,25-26H2,1-3H3,(H,42,48)(H,44,50)(H,45,49)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C40H56/c1-31(19-13-21-33(3)25-27-37-35(5)23-15-29-39(37,7)8)17-11-12-18-32(2)20-14-22-34(4)26-28-38-36(6)24-16-30-40(38,9)10/h11-14,17-22,25-28H,15-16,23-24,29-30H2,1-10H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C40H56O2/c1-29(17-13-19-31(3)21-23-37-33(5)25-35(41)27-39(37,7)8)15-11-12-16-30(2)18-14-20-32(4)22-24-38-34(6)26-36(42)28-40(38,9)10/h11-25,35-37,41-42H,26-28H2,1-10H3/b12-11+,17-13+,18-14+,23-21+,24-22+,29-15+,30-16+,31-19+,32-20+	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C40H57N5O7/c1-27(2)22-32(36(47)40(5)26-52-40)42-39(50)34(24-30-14-10-7-11-15-30)44-38(49)33(23-28(3)4)43-37(48)31(17-16-29-12-8-6-9-13-29)41-35(46)25-45-18-20-51-21-19-45/h6-15,27-28,31-34H,16-26H2,1-5H3,(H,41,46)(H,42,50)(H,43,48)(H,44,49)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C40H59NO11/c1-19-11-24-5-7-28-20(2)12-26(45-28)9-10-40-17-33-36(51-40)37-38(50-33)39(52-40)35-29(49-37)8-6-25(47-35)13-22(42)14-27-31(16-30(46-24)21(19)3)48-32(34(27)44-4)15-23(43)18-41/h19,23-39,43H,2-3,5-18,41H2,1,4H3/t19-,23+,24+,25?,26+,27+,28+,29+,30-,31+,32-,33-,34-,35+,36+,37+,38-,39+,40+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C40H63N3O4S2/c1-4-5-6-7-8-9-10-11-12-13-14-15-16-22-40(44)47-32-27-34-25-30-42(31-26-34)28-19-29-43-36-20-17-18-21-38(36)48-39-24-23-35(33-37(39)43)49(45,46)41(2)3/h17-18,20-21,23-24,33-34H,4-16,19,22,25-32H2,1-3H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C40H71NO14/c1-15-27-40(11,48)33(44)22(5)30(43)20(3)18-38(9,47)35(55-37-32(53-28(42)16-2)26(41(12)13)17-21(4)50-37)23(6)31(24(7)36(46)52-27)54-29-19-39(10,49-14)34(45)25(8)51-29/h20-27,29,31-35,37,44-45,47-48H,15-19H2,1-14H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C40H71NO14/c1-15-27-40(11,48)33(44)22(5)30(43)20(3)18-38(9,47)35(55-37-32(53-28(42)16-2)26(41(12)13)17-21(4)50-37)23(6)31(24(7)36(46)52-27)54-29-19-39(10,49-14)34(45)25(8)51-29/h20-27,29,31-35,37,44-45,47-48H,15-19H2,1-14H3/t20-,21-,22+,23?,24-,25-,26-,27-,29+,31-,32-,33-,34-,35-,37-,38?,39?,40?/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C40H71NO14/c1-15-27-40(11,48)33(44)22(5)30(43)20(3)18-38(9,47)35(55-37-32(53-28(42)16-2)26(41(12)13)17-21(4)50-37)23(6)31(24(7)36(46)52-27)54-29-19-39(10,49-14)34(45)25(8)51-29/h20-27,29,31-35,37,44-45,47-48H,15-19H2,1-14H3/t20-,21-,22+,23+,24-,25+,26+,27-,29+,31+,32-,33-,34+,35-,37+,38-,39-,40-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C40H71NO14/c1-15-27-40(11,48)33(44)22(5)30(43)20(3)18-38(9,47)35(55-37-32(53-28(42)16-2)26(41(12)13)17-21(4)50-37)23(6)31(24(7)36(46)52-27)54-29-19-39(10,49-14)34(45)25(8)51-29/h20-27,29,31-35,37,44-45,47-48H,15-19H2,1-14H3/t20-,21+,22-,23-,24+,25-,26+,27+,29-,31-,32+,33-,34+,35+,37+,38-,39+,40-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C40H71NO14/c1-15-27-40(11,48)33(44)22(5)30(43)20(3)18-38(9,47)35(55-37-32(53-28(42)16-2)26(41(12)13)17-21(4)50-37)23(6)31(24(7)36(46)52-27)54-29-19-39(10,49-14)34(45)25(8)51-29/h20-27,29,31-35,37,44-45,47-48H,15-19H2,1-14H3/t20-	0 (Meng et al., 2021)

,21+,22+,23+,24+,25+,26-,27-,29+,31-,32+,33-,34+,35-,37-,38+,39-,40-/m0/s1	
InChI=1S/C40H71NO15/c1-15-27-40(11,48)32(43)22(5)29(42)20(3)18-38(9,47)34(56-36-31(55-37(46)50-16-2)26(41(12)13)17-21(4)51-36)23(6)30(24(7)35(45)53-27)54-28-19-39(10,49-14)33(44)25(8)52-28/h20-28,30-34,36,43-44,47-48H,15-19H2,1-14H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C40H71NO15/c1-15-27-40(11,48)32(43)22(5)29(42)20(3)18-38(9,47)34(56-36-31(55-37(46)50-16-2)26(41(12)13)17-21(4)51-36)23(6)30(24(7)35(45)53-27)54-28-19-39(10,49-14)33(44)25(8)52-28/h20-28,30-34,36,43-44,47-48H,15-19H2,1-14H3/t20-,21-,22+,23-,24-,25-,26-,27-,28+,30-,31-,32-,33-,34-,36-,38?,39?,40?/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C40H71NO15/c1-15-27-40(11,48)32(43)22(5)29(42)20(3)18-38(9,47)34(56-36-31(55-37(46)50-16-2)26(41(12)13)17-21(4)51-36)23(6)30(24(7)35(45)53-27)54-28-19-39(10,49-14)33(44)25(8)52-28/h20-28,30-34,36,43-44,47-48H,15-19H2,1-14H3/t20-,21-,22+,23+,24-,25+,26+,27-,28+,30+,31-,32-,33+,34-,36+,38-,39-,40-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C40H71NO15/c1-15-27-40(11,48)32(43)22(5)29(42)20(3)18-38(9,47)34(56-36-31(55-37(46)50-16-2)26(41(12)13)17-21(4)51-36)23(6)30(24(7)35(45)53-27)54-28-19-39(10,49-14)33(44)25(8)52-28/h20-28,30-34,36,43-44,47-48H,15-19H2,1-14H3/t20-,21+,22-,23-,24+,25+,26-,27+,28+,30-,31+,32-,33-,34+,36+,38-,39-,40-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C40H71NO15/c1-15-27-40(11,48)32(43)22(5)29(42)20(3)18-38(9,47)34(56-36-31(55-37(46)50-16-2)26(41(12)13)17-21(4)51-36)23(6)30(24(7)35(45)53-27)54-28-19-39(10,49-14)33(44)25(8)52-28/h20-28,30-34,36,43-44,47-48H,15-19H2,1-14H3/t20-,21-,22-,23-,24-,25+,26-,27-,28+,30-,31+,32-,33+,34-,36-,38+,39-,40-/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C41H44N4O8/c1-9-23-20(2)29-17-34-27-13-10-26(39)49)52-7)38(40(50)53-8)41(27,5)35(45-34)19-30-22(4)24(11-14-36(46)47)32(44-30)18-33-25(12-15-37(48)51-6)21(3)28(43-33)16-31(23)42-29/h9-10,13,17-19,38,42-44H,1,11-12,14-16H2,2-8H3,(H,46,47)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C41H64O13/c1-20-12-25(42)15-34(49-20)53-37-22(3)51-36(18-31(37)44)54-38-21(2)50-35(17-30(38)43)52-26-8-10-39(4)24(14-26)6-7-28-29(39)16-32(45)40(5)27(9-11-41(28,40)47)23-13-33(46)48-19-23/h13,20-22,24-32,34-38,42-45,47H,6-12,14-19H2,1-5H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C41H64O13/c1-20-36(46)29(42)16-34(49-20)53-38-22(3)51-35(18-31(38)44)54-37-21(2)50-33(17-30(37)43)52-25-8-11-39(4)24(15-25)6-7-28-27(39)9-12-40(5)26(10-13-41(28,40)47)23-14-32(45)48-19-23/h14,20-22,24-31,33-38,42-44,46-47H,6-13,15-19H2,1-5H3/t20-,21-,22-,24-,25-,26-,27-,28-,29-,30-,31-,33+,34-,35-,36+,37+,38+,39?,40?,41?/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C41H64O13/c1-20-36(46)29(42)16-34(49-20)53-38-22(3)51-35(18-31(38)44)54-37-21(2)50-33(17-30(37)43)52-25-8-11-39(4)24(15-25)6-7-28-27(39)9-12-40(5)26(10-13-41(28,40)47)23-14-32(45)48-19-23/h14,20-22,24-31,33-38,42-44,46-47H,6-13,15-19H2,1-5H3/t20-,21-,22-,24-,25+,26+,27+,28-,29+,30+,31+,33+,34+,35+,36-,37-,38-,39+,40-,41+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C41H64O14/c1-19-36(47)28(42)15-34(50-19)54-38-21(3)52-35(17-30(38)44)55-37-20(2)51-33(16-29(37)43)53-24-8-10-39(4)23(13-24)6-7-26-27(39)14-31(45)40(5)25(9-11-41(26,40)48)22-12-32(46)49-18-22/h12,19-21,23-31,33-38,42-45,47-48H,6-11,13-18H2,1-5H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C41H64O14/c1-19-36(47)28(42)15-34(50-19)54-38-21(3)52-35(17-30(38)44)55-37-20(2)51-33(16-29(37)43)53-24-8-10-39(4)23(13-24)6-7-26-27(39)14-31(45)40(5)25(9-11-41(26,40)48)22-12-32(46)49-18-22/h12,19-21,23-31,33-38,42-45,47-48H,6-11,13-18H2,1-5H3/t19-,20-,21-,23-,24-,25?,26-,27-,28-,29-,30-,31-,33+,34-,35-,36+,37+,38+,39?,40?,41?/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C41H64O14/c1-19-36(47)28(42)15-34(50-19)54-38-21(3)52-35(17-30(38)44)55-37-20(2)51-33(16-29(37)43)53-24-8-10-39(4)23(13-24)6-7-26-27(39)14-31(45)40(5)25(9-11-41(26,40)48)22-12-32(46)49-18-22/h12,19-21,23-31,33-38,42-45,47-48H,6-11,13-18H2,1-5H3/t19-,20-,21-,23-,24-,25+,26+,27-,28-,29+,30-,31-,33-,34+,35+,36-,37+,38-,39+,40+,41+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C41H64O14/c1-19-36(47)28(42)15-34(50-19)54-38-21(3)52-35(17-30(38)44)55-37-20(2)51-33(16-29(37)43)53-24-8-10-39(4)23(13-24)6-7-26-27(39)14-31(45)40(5)25(9-11-41(26,40)48)22-12-32(46)49-18-22/h12,19-21,23-31,33-38,42-45,47-48H,6-11,13-18H2,1-5H3/t19-,20-,21-,23-,24+,25-,26-,27+,28+,29+,30+,31-,33+,34+,35+,36-,37-,38-,39+,40+,41+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C41H64O14/c1-19-36(47)28(42)15-34(50-19)54-38-21(3)52-35(17-30(38)44)55-37-20(2)51-33(16-29(37)43)53-24-8-10-39(4)23(13-	0 (Meng et al., 2021)

24)6-7-26-27(39)14-31(45)40(5)25(9-11-41(26,40)48)22-12-32(46)49-18-22/h12,19-21,23-31,33-38,42-45,47-48H,6-11,13-18H2,1-5H3/t19-,20-,21-,23-,24+,25?,26-,27+,28+,29+,30+,31-,33+,34+,35+,36-,37-,38-,39+,40+,41+/m1/s1 InChI=1S/C41H64O14/c1-19-36(47)28(42)15-34(50-19)54-38-21(3)52-35(17-30(38)44)55-37-20(2)51-33(16-29(37)43)53-24-8-10-39(4)23(13-24)6-7-26-27(39)14-31(45)40(5)25(9-11-41(26,40)48)22-12-32(46)49-18-22/h12,19-21,23-31,33-38,42-45,47-48H,6-11,13-18H2,1-5H3/t19-,20-,21-,23?,24+,25-,26-,27+,28+,29+,30+,31-,33+,34+,35+,36-,37-,38-,39+,40+,41+/m1/s1 InChI=1S/C41H64O14/c1-19-36(47)28(42)15-34(50-19)54-38-21(3)52-35(17-30(38)44)55-37-20(2)51-33(16-29(37)43)53-24-8-10-39(4)23(13-24)6-7-26-27(39)14-31(45)40(5)25(9-11-41(26,40)48)22-12-32(46)49-18-22/h12,19-21,23-31,33-38,42-45,47-48H,6-11,13-18H2,1-5H3/t19-,20-,21-,23+,24+,25+,26+,27-,28+,29-,30-,31+,33-,34-,35+,36-,37-,38-,39+,40-,41-/m1/s1 InChI=1S/C41H64O8/c1-4-5-6-7-8-9-10-11-12-13-14-15-16-17-18-19-36(45)49-29-37(46)48-28-35(44)41(47)25-23-33-32-21-20-30-26-31(42)22-24-39(30,2)38(32)34(43)27-40(33,41)3/h22,24,26,32-34,38,43,47H,4-21,23,25,27-29H2,1-3H3 InChI=1S/C41H64O8/c1-4-5-6-7-8-9-10-11-12-13-14-15-16-17-18-19-36(45)49-29-37(46)48-28-35(44)41(47)25-23-33-32-21-20-30-26-31(42)22-24-39(30,2)38(32)34(43)27-40(33,41)3/h22,24,26,32-34,38,43,47H,4-21,23,25,27-29H2,1-3H3/t32-,33-,34-,38+,39-,40-,41-/m0/s1 InChI=1S/C41H64O8/c1-4-5-6-7-8-9-10-11-12-13-14-15-16-17-18-19-36(45)49-29-37(46)48-28-35(44)41(47)25-23-33-32-21-20-30-26-31(42)22-24-39(30,2)38(32)34(43)27-40(33,41)3/h22,24,26,32-34,38,43,47H,4-21,23,25,27-29H2,1-3H3/t32-,33-,34-,38+,39+,40+,41+/m0/s1 InChI=1S/C41H64O8/c1-4-5-6-7-8-9-10-11-12-13-14-15-16-17-18-19-36(45)49-29-37(46)48-28-35(44)41(47)25-23-33-32-21-20-30-26-31(42)22-24-39(30,2)38(32)34(43)27-40(33,41)3/h22,24,26,32-34,38,43,47H,4-21,23,25,27-29H2,1-3H3/t32-,33-,34?,38+,39?,40?,41?/m0/s1 InChI=1S/C41H64O8/c1-4-5-6-7-8-9-10-11-12-13-14-15-16-17-18-19-36(45)49-29-37(46)48-28-35(44)41(47)25-23-33-32-21-20-30-26-31(42)22-24-39(30,2)38(32)34(43)27-40(33,41)3/h22,24,26,32-34,38,43,47H,4-21,23,25,27-29H2,1-3H3/t32-,33+,34-,38-,39-,40-,41+/m1/s1 InChI=1S/C41H64O8/c1-4-5-6-7-8-9-10-11-12-13-14-15-16-17-18-19-36(45)49-29-37(46)48-28-35(44)41(47)25-23-33-32-21-20-30-26-31(42)22-24-39(30,2)38(32)34(43)27-40(33,41)3/h22,24,26,32-34,38,43,47H,4-21,23,25,27-29H2,1-3H3/t32?,33?,34-,38?,39-,40-,41-/m0/s1 InChI=1S/C41H67NO15/c1-11-30(45)54-29-21-32(47)51-24(4)16-14-13-15-17-28(44)23(3)20-27(18-19-43)37(38(29)50-10)57-40-35(48)34(42(8)9)36(25(5)53-40)56-33-22-41(7,49)39(26(6)52-33)55-31(46)12-2/h13-15,17,19,23-29,33-40,44,48-49H,11-12,16,18,20-22H2,1-10H3 InChI=1S/C41H67NO15/c1-11-30(45)54-29-21-32(47)51-24(4)16-14-13-15-17-28(44)23(3)20-27(18-19-43)37(38(29)50-10)57-40-35(48)34(42(8)9)36(25(5)53-40)56-33-22-41(7,49)39(26(6)52-33)55-31(46)12-2/h13-15,17,19,23-29,33-40,44,48-49H,11-12,16,18,20-22H2,1-10H3/b14-13+,17-15-/t23-,24-,25-,26-,27+,28+,29-,33-,34-,35-,36+,37-,38-,39-,40-,41?/m0/s1 InChI=1S/C41H67NO15/c1-11-30(45)54-29-21-32(47)51-24(4)16-14-13-15-17-28(44)23(3)20-27(18-19-43)37(38(29)50-10)57-40-35(48)34(42(8)9)36(25(5)53-40)56-33-22-41(7,49)39(26(6)52-33)55-31(46)12-2/h13-15,17,19,23-29,33-40,44,48-49H,11-12,16,18,20-22H2,1-10H3/b14-13+,17-15-/t23-,24+,25-,26+,27+,28+,29+,33+,34+,35+,36+,37-,38-,39+,40+,41+/m0/s1 InChI=1S/C41H67NO15/c1-11-30(45)54-29-21-32(47)51-24(4)16-14-13-15-17-28(44)23(3)20-27(18-19-43)37(38(29)50-10)57-40-35(48)34(42(8)9)36(25(5)53-40)56-33-22-41(7,49)39(26(6)52-33)55-31(46)12-2/h13-15,17,19,23-29,33-40,44,48-49H,11-12,16,18,20-22H2,1-10H3/b14-13+,17-15-/t23?,24?,25-,26-,27?,28?,29?,33+,34-,35-,36-,37?,38?,39-,40+,41-/m1/s1 InChI=1S/C41H67NO15/c1-11-30(45)54-29-21-32(47)51-24(4)16-14-13-15-17-28(44)23(3)20-27(18-19-43)37(38(29)50-10)57-40-35(48)34(42(8)9)36(25(5)53-40)56-33-22-41(7,49)39(26(6)52-33)55-31(46)12-2/h13-15,17,19,23-29,33-40,44,48-49H,11-12,16,18,20-22H2,1-10H3/b14-13+,17-15+/t23-,24-,25?,26-,27+,28+,29-,33-,34-,35-,36+,37-,38-,39-,40-,41?/m0/s1 InChI=1S/C41H67NO15/c1-11-30(45)54-29-21-32(47)51-24(4)16-14-13-15-17-28(44)23(3)20-27(18-19-43)37(38(29)50-10)57-40-35(48)34(42(8)9)36(25(5)53-40)56-33-22-41(7,49)39(26(6)52-33)55-31(46)12-2/h13-15,17,19,23-29,33-40,44,48-49H,11-12,16,18,20-22H2,1-	0 (Meng et al., 2021)
0 (Meng et al., 2021)	
1 (Meng et al., 2021)	
1 (Meng et al., 2021)	
1 (Meng et al., 2021)	
1 (Meng et al., 2021)	
1 (Meng et al., 2021)	
0 (Meng et al., 2021)	
0 (Meng et al., 2021)	
0 (Meng et al., 2021)	
0 (Meng et al., 2021)	
0 (Meng et al., 2021)	

10H3/t23-,24-,25-,26+,27-,28+,29+,33+,34+,35+,36-,37-,38+,39+,40-,41-/m1/s1
InChI=1S/C41H67NO15/c1-11-30(45)54-29-21-32(47)51-24(4)16-14-13-15-17-28(44)23(3)20-27(18-19-43)37(38(29)50-10)57-40-35(48)34(42(8)9)36(25(5)53-40)56-33-22-41(7,49)39(26(6)52-33)55-31(46)12-2/h13-15,17,19,23-29,33-40,44,48-49H,11-12,16,18,20-22H2,1-10H3/t23-,24-,25-,26+,27-,28+,29-,33+,34-,35-,36-,37+,38+,39+,40+,41-/m1/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C41H67NO15/c1-19-17-41(18-49-41)38(46)23(5)34(53-27(9)43)21(3)25(7)52-39(47)24(6)35(56-32-16-31(48-14)36(26(8)51-32)54-28(10)44)22(4)33(19)57-40-37(55-29(11)45)30(42(12)13)15-20(2)50-40/h19-26,30-37,40H,15-18H2,1-14H3
InChI=1S/C41H67NO15/c1-19-17-41(18-49-41)38(46)23(5)34(53-27(9)43)21(3)25(7)52-39(47)24(6)35(56-32-16-31(48-14)36(26(8)51-32)54-28(10)44)22(4)33(19)57-40-37(55-29(11)45)30(42(12)13)15-20(2)50-40/h19-26,30-37,40H,15-18H2,1-14H3/t19-,20-,21-,22-,23-,24-,25-,26-,30-,31-,32+,33-,34-,35-,36-,37-,40-,41-/m0/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C41H67NO15/c1-19-17-41(18-49-41)38(46)23(5)34(53-27(9)43)21(3)25(7)52-39(47)24(6)35(56-32-16-31(48-14)36(26(8)51-32)54-28(10)44)22(4)33(19)57-40-37(55-29(11)45)30(42(12)13)15-20(2)50-40/h19-26,30-37,40H,15-18H2,1-14H3/t19-,20-,21-,22-,23-,24-,25+,26-,30-,31+,32+,33+,34+,35+,36-,37-,40-,41-/m1/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C41H67NO15/c1-19-17-41(18-49-41)38(46)23(5)34(53-27(9)43)21(3)25(7)52-39(47)24(6)35(56-32-16-31(48-14)36(26(8)51-32)54-28(10)44)22(4)33(19)57-40-37(55-29(11)45)30(42(12)13)15-20(2)50-40/h19-26,30-37,40H,15-18H2,1-14H3/t19-,20+,21-,22+,23+,24-,25-,26-,30+,31-,32+,33-,34+,35-,36-,37-,40+,41-/m1/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C41H67NO15/c1-19-17-41(18-49-41)38(46)23(5)34(53-27(9)43)21(3)25(7)52-39(47)24(6)35(56-32-16-31(48-14)36(26(8)51-32)54-28(10)44)22(4)33(19)57-40-37(55-29(11)45)30(42(12)13)15-20(2)50-40/h19-26,30-37,40H,15-18H2,1-14H3/t19-,20+,21-,22+,23+,24+,25+,26-,30-,31-,32-,33-,34-,35-,36-,37+,40-,41+/m0/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C41H69NO14/c1-14-30(43)53-35-22(5)26(9)52-39(47)25(8)36(55-32-17-29(48-13)37(27(10)51-32)54-31(44)15-2)23(6)34(20(3)18-41(19-49-41)38(46)24(35)7)56-40-33(45)28(42(11)12)16-21(4)50-40/h20-29,32-37,40,45H,14-19H2,1-13H3
InChI=1S/C41H69NO14/c1-14-30(43)53-35-22(5)26(9)52-39(47)25(8)36(55-32-17-29(48-13)37(27(10)51-32)54-31(44)15-2)23(6)34(20(3)18-41(19-49-41)38(46)24(35)7)56-40-33(45)28(42(11)12)16-21(4)50-40/h20-29,32-37,40,45H,14-19H2,1-13H3/t20-,21-,22-,23-,24-,25-,26-,27-,28-,29-,32+,33-,34-,35-,36-,37-,40-,41-/m0/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C41H69NO14/c1-14-30(43)53-35-22(5)26(9)52-39(47)25(8)36(55-32-17-29(48-13)37(27(10)51-32)54-31(44)15-2)23(6)34(20(3)18-41(19-49-41)38(46)24(35)7)56-40-33(45)28(42(11)12)16-21(4)50-40/h20-29,32-37,40,45H,14-19H2,1-13H3/t20-,21-,22-,23-,24-,25-,26+,27+,28-,29-,32+,33+,34+,35+,36+,37+,40-,41-/m1/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C41H69NO14/c1-14-30(43)53-35-22(5)26(9)52-39(47)25(8)36(55-32-17-29(48-13)37(27(10)51-32)54-31(44)15-2)23(6)34(20(3)18-41(19-49-41)38(46)24(35)7)56-40-33(45)28(42(11)12)16-21(4)50-40/h20-29,32-37,40,45H,14-19H2,1-13H3/t20-,21+,22-,23+,24-,25+,26-,27+,28+,29+,32+,33-,34+,35+,36+,37+,40+,41-/m1/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C41H76N2O15/c1-15-29-41(10,49)34(45)24(4)31(42-53-21-52-17-16-50-13)22(2)19-39(8,48)36(58-38-32(44)28(43(11)12)18-23(3)54-38)25(5)33(26(6)37(47)56-29)57-30-20-40(9,51-14)35(46)27(7)55-30/h22-30,32-36,38,44-46,48-49H,15-21H2,1-14H3
InChI=1S/C41H76N2O15/c1-15-29-41(10,49)34(45)24(4)31(42-53-21-52-17-16-50-13)22(2)19-39(8,48)36(58-38-32(44)28(43(11)12)18-23(3)54-38)25(5)33(26(6)37(47)56-29)57-30-20-40(9,51-14)35(46)27(7)55-30/h22-30,32-36,38,44-46,48-49H,15-21H2,1-14H3/b42-31-/t22-,23-,24-,25-,26-,27-,28-,29-,30+,32-,33-,34-,35-,36-,38-,39?,40?,41-/m0/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C41H76N2O15/c1-15-29-41(10,49)34(45)24(4)31(42-53-21-52-17-16-50-13)22(2)19-39(8,48)36(58-38-32(44)28(43(11)12)18-23(3)54-38)25(5)33(26(6)37(47)56-29)57-30-20-40(9,51-14)35(46)27(7)55-30/h22-30,32-36,38,44-46,48-49H,15-21H2,1-14H3/b42-31-/t22-,23-,24-,25+,26-,27-,28+,29+,30-,32-,33+,34+,35-,36-,38+,39-,40+,41-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C41H76N2O15/c1-15-29-41(10,49)34(45)24(4)31(42-53-21-52-17-16-50-13)22(2)19-39(8,48)36(58-38-32(44)28(43(11)12)18-23(3)54-38)25(5)33(26(6)37(47)56-29)57-30-20-40(9,51-14)35(46)27(7)55-30/h22-30,32-36,38,44-46,48-49H,15-21H2,1-14H3/b42-31-/t22-,23-,24+,25+,26-,27+,28+,29-,30+,32-,33+,34-,35+,36-,38+,39-,40-,41-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C41H76N2O15/c1-15-29-41(10,49)34(45)24(4)31(42-53-21-52-17-16-50-13)22(2)19-39(8,48)36(58-38-32(44)28(43(11)12)18-23(3)54-38)25(5)33(26(6)37(47)56-29)57-30-20-40(9,51-14)35(46)27(7)55-30/h22-30,32-36,38,44-46,48-49H,15-21H2,1-14H3/b42-31+/t22-,23-,24-,25-,26-,27-,28-,29-,30+,32-,33-,34-,35-,36-,38-,39?,40?,41?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C41H76N2O15/c1-15-29-41(10,49)34(45)24(4)31(42-53-21-52-17-16-50-13)22(2)19-39(8,48)36(58-38-32(44)28(43(11)12)18-23(3)54-38)25(5)33(26(6)37(47)56-29)57-30-20-40(9,51-14)35(46)27(7)55-30/h22-30,32-36,38,44-46,48-49H,15-21H2,1-14H3/b42-31+/t22-,23-,24-,25-,26-,27+,28+,29-,30+,32-,33+,34-,35+,36-,38+,39-,40-,41-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C41H76N2O15/c1-15-29-41(10,49)34(45)24(4)31(42-53-21-52-17-16-50-13)22(2)19-39(8,48)36(58-38-32(44)28(43(11)12)18-23(3)54-38)25(5)33(26(6)37(47)56-29)57-30-20-40(9,51-14)35(46)27(7)55-30/h22-30,32-36,38,44-46,48-49H,15-21H2,1-14H3/t22-,23+,24-,25-,26+,27-,28+,29+,30-,32-,33-,34-,35+,36+,38+,39-,40+,41-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C42H53NO15/c1-8-42(51)17-28(33-22(35(42)41(50)52-7)14-23-34(38(33)49)37(48)32-21(36(23)47)10-9-11-26(32)45)56-30-15-24(43(5)6)39(19(3)54-30)58-31-16-27(46)40(20(4)55-31)57-29-13-12-25(44)18(2)53-29/h9-11,14,18-20,24,27-31,35,39-40,45-46,49,51H,8,12-13,15-17H2,1-7H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C42H53NO15/c1-8-42(51)17-28(33-22(35(42)41(50)52-7)14-23-34(38(33)49)37(48)32-21(36(23)47)10-9-11-26(32)45)56-30-15-24(43(5)6)39(19(3)54-30)58-31-16-27(46)40(20(4)55-31)57-29-13-12-25(44)18(2)53-29/h9-11,14,18-20,24,27-31,35,39-40,45-46,49,51H,8,12-13,15-17H2,1-7H3/t18-,19-,20-,24-,27-,28-,29-,30-,31-,35-,39+,40+,42+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C42H53NO15/c1-8-42(51)17-28(33-22(35(42)41(50)52-7)14-23-34(38(33)49)37(48)32-21(36(23)47)10-9-11-26(32)45)56-30-15-24(43(5)6)39(19(3)54-30)58-31-16-27(46)40(20(4)55-31)57-29-13-12-25(44)18(2)53-29/h9-11,14,18-20,24,27-31,35,39-40,45-46,49,51H,8,12-13,15-17H2,1-7H3/t18-,19-,20-,24+,27-,28+,29-,30-,31-,35-,39-,40-,42+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C42H53NO15/c1-8-42(51)17-28(33-22(35(42)41(50)52-7)14-23-34(38(33)49)37(48)32-21(36(23)47)10-9-11-26(32)45)56-30-15-24(43(5)6)39(19(3)54-30)58-31-16-27(46)40(20(4)55-31)57-29-13-12-25(44)18(2)53-29/h9-11,14,18-20,24,27-31,35,39-40,45-46,49,51H,8,12-13,15-17H2,1-7H3/t18-,19-,20?,24-,27-,28-,29+,30+,31-,35+,39+,40+,42?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C42H53NO15/c1-8-42(51)17-28(33-22(35(42)41(50)52-7)14-23-34(38(33)49)37(48)32-21(36(23)47)10-9-11-26(32)45)56-30-15-24(43(5)6)39(19(3)54-30)58-31-16-27(46)40(20(4)55-31)57-29-13-12-25(44)18(2)53-29/h9-11,14,18-20,24,27-31,35,39-40,45-46,49,51H,8,12-13,15-17H2,1-7H3/t18-,19+,20-,24-,27-,28-,29+,30+,31+,35-,39-,40+,42+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C42H53NO15/c1-8-42(51)17-28(33-22(35(42)41(50)52-7)14-23-34(38(33)49)37(48)32-21(36(23)47)10-9-11-26(32)45)56-30-15-24(43(5)6)39(19(3)54-30)58-31-16-27(46)40(20(4)55-31)57-29-13-12-25(44)18(2)53-29/h9-11,14,18-20,24,27-31,35,39-40,45-46,49,51H,8,12-13,15-17H2,1-7H3/t18?,19?,20?,24?,27?,28-,29?,30?,31?,35-,39?,40?,42+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C42H55N3O11S/c1-12-45(13-2)41-44-30-27-28-34(49)24(8)37-29(27)39(51)42(10,56-37)54-18-17-26(53-11)21(5)36(55-25(9)46)23(7)33(48)22(6)32(47)19(3)15-14-16-20(4)40(52)43-31(35(28)50)38(30)57-41/h14-19,21-23,26,32-33,36,47-50H,12-13H2,1-11H3,(H,43,52)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C42H55N3O11S/c1-12-45(13-2)41-44-30-27-28-34(49)24(8)37-29(27)39(51)42(10,56-37)54-18-17-26(53-11)21(5)36(55-	0	(Meng et al., 2021)

25(9)46)23(7)33(48)22(6)32(47)19(3)15-14-16-20(4)40(52)43-31(35(28)50)38(30)57-41/h14-19,21-23,26,32-33,36,47-50H,12-13H2,1-11H3,(H,43,52)/b15-14+,18-17+,20-16-/t19-,21+,22-,23-,26-,32-,33-,36+,42-/m0/s1
InChI=1S/C42H55N3O11S/c1-12-45(13-2)41-44-30-27-28-34(49)24(8)37-29(27)39(51)42(10,56-37)54-18-17-26(53-11)21(5)36(55-25(9)46)23(7)33(48)22(6)32(47)19(3)15-14-16-20(4)40(52)43-31(35(28)50)38(30)57-41/h14-19,21-23,26,32-33,36,47-50H,12-13H2,1-11H3,(H,43,52)/b15-14+,18-17+,20-16-/t19-,21+,22+,23-,26+,32+,33-,36+,42-/m1/s1 0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C42H55N3O11S/c1-12-45(13-2)41-44-30-27-28-34(49)24(8)37-29(27)39(51)42(10,56-37)54-18-17-26(53-11)21(5)36(55-25(9)46)23(7)33(48)22(6)32(47)19(3)15-14-16-20(4)40(52)43-31(35(28)50)38(30)57-41/h14-19,21-23,26,32-33,36,47-50H,12-13H2,1-11H3,(H,43,52)/b15-14+,18-17+,20-16-/t19-,21+,22+,23+,26-,32-,33+,36+,42-/m0/s1 0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C42H55N3O11S/c1-12-45(13-2)41-44-30-27-28-34(49)24(8)37-29(27)39(51)42(10,56-37)54-18-17-26(53-11)21(5)36(55-25(9)46)23(7)33(48)22(6)32(47)19(3)15-14-16-20(4)40(52)43-31(35(28)50)38(30)57-41/h14-19,21-23,26,32-33,36,47-50H,12-13H2,1-11H3,(H,43,52)/t19-,21+,22-,23-,26-,32-,33-,36-,42-/m0/s1 0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C42H55N3O11S/c1-12-45(13-2)41-44-30-27-28-34(49)24(8)37-29(27)39(51)42(10,56-37)54-18-17-26(53-11)21(5)36(55-25(9)46)23(7)33(48)22(6)32(47)19(3)15-14-16-20(4)40(52)43-31(35(28)50)38(30)57-41/h14-19,21-23,26,32-33,36,47-50H,12-13H2,1-11H3,(H,43,52)/t19-,21+,22+,23+,26-,32-,33+,36+,42-/m0/s1 0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C42H67NO10/c1-11-26-13-12-14-35(53-37-16-15-34(43(6)7)24(4)49-37)23(3)38(45)33-20-31-29(32(33)21-36(44)51-26)17-22(2)28-18-27(19-30(28)31)52-42-41(48-10)40(47-9)39(46-8)25(5)50-42/h17,20,23-32,34-35,37,39-42H,11-16,18-19,21H2,1-10H3 0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C42H69NO15/c1-23(2)19-32(47)56-40-27(6)53-34(22-42(40,8)50)57-37-26(5)54-41(36(49)35(37)43(9)10)58-38-29(17-18-44)20-24(3)30(46)16-14-12-13-15-25(4)52-33(48)21-31(39(38)51-11)55-28(7)45/h12-14,16,18,23-27,29-31,34-41,46,49-50H,15,17,19-22H2,1-11H3 0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C42H69NO15/c1-23(2)19-32(47)56-40-27(6)53-34(22-42(40,8)50)57-37-26(5)54-41(36(49)35(37)43(9)10)58-38-29(17-18-44)20-24(3)30(46)16-14-12-13-15-25(4)52-33(48)21-31(39(38)51-11)55-28(7)45/h12-14,16,18,23-27,29-31,34-41,46,49-50H,15,17,19-22H2,1-11H3/b13-12+,16-14-/t24-,25+,26-,27-,29+,30+,31+,34-,35+,36-,37+,38-,39-,40+,41+,42-/m1/s1 0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C42H69NO15/c1-23(2)19-32(47)56-40-27(6)53-34(22-42(40,8)50)57-37-26(5)54-41(36(49)35(37)43(9)10)58-38-29(17-18-44)20-24(3)30(46)16-14-12-13-15-25(4)52-33(48)21-31(39(38)51-11)55-28(7)45/h12-14,16,18,23-27,29-31,34-41,46,49-50H,15,17,19-22H2,1-11H3/b13-12+,16-14+/t24-,25-,26-,27+,29+,30+,31-,34+,35-,36-,37-,38+,39+,40+,41+,42-/m1/s1 0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C42H69NO15/c1-23(2)19-32(47)56-40-27(6)53-34(22-42(40,8)50)57-37-26(5)54-41(36(49)35(37)43(9)10)58-38-29(17-18-44)20-24(3)30(46)16-14-12-13-15-25(4)52-33(48)21-31(39(38)51-11)55-28(7)45/h12-14,16,18,23-27,29-31,34-41,46,49-50H,15,17,19-22H2,1-11H3/b13-12+,16-14+/t24-,25-,26?,27-,29+,30+,31-,34-,35-,36-,37+,38-,39-,40-,41-,42-/m0/s1 0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C42H69NO15/c1-23(2)19-32(47)56-40-27(6)53-34(22-42(40,8)50)57-37-26(5)54-41(36(49)35(37)43(9)10)58-38-29(17-18-44)20-24(3)30(46)16-14-12-13-15-25(4)52-33(48)21-31(39(38)51-11)55-28(7)45/h12-14,16,18,23-27,29-31,34-41,46,49-50H,15,17,19-22H2,1-11H3/t24-,25-,26-,27+,29-,30+,31-,34+,35+,36+,37-,38-,39+,40+,41-,42-/m1/s1 0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C42H69NO15/c1-23(2)19-32(47)56-40-27(6)53-34(22-42(40,8)50)57-37-26(5)54-41(36(49)35(37)43(9)10)58-38-29(17-18-44)20-24(3)30(46)16-14-12-13-15-25(4)52-33(48)21-31(39(38)51-11)55-28(7)45/h12-14,16,18,23-27,29-31,34-41,46,49-50H,15,17,19-22H2,1-11H3/t24-,25-,26-,27+,29+,30+,31-,34+,35-,36-,37-,38+,39+,40+,41+,42-/m1/s1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C42H69NO15/c1-23(2)19-33(48)58-42(8)22-34(53-27(6)40(42)50)56-37-26(5)54-41(36(49)35(37)43(9)10)57-38-29(17-18-44)20-24(3)30(46)16-14-12-13-15-25(4)52-32(47)21-31(39(38)51-11)55-28(7)45/h12-14,16,18,23-27,29-31,34-41,46,49-50H,15,17,19-22H2,1-11H3 0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C42H78N2O14/c1-15-29-42(10,49)37-24(4)32(43-30(56-37)21-52-17-16-50-13)22(2)19-40(8,48)36(58-39-33(45)28(44(11)12)18-23(3)53-39)25(5)34(26(6)38(47)55-29)57-31-20-41(9,51-14)35(46)27(7)54-31/h22-37,39,43,45-46,48-49H,15-21H2,1-14H3 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C42H78N2O14/c1-15-29-42(10,49)37-24(4)32(43-30(56-37)21-52-17-16-50-13)22(2)19-40(8,48)36(58-39-33(45)28(44(11)12)18-23(3)53-39)25(5)34(26(6)38(47)55-29)57-31-20-41(9,51-14)35(46)27(7)54-31/h22-37,39,43,45-46,48-49H,15-21H2,1-14H3/t22-,23-,24+,25+,26-,27+,28+,29-,30-,31+,32+,33-,34+,35+,36-,37-,39+,40-,41-,42-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C42H78N2O14/c1-15-29-42(10,49)37-24(4)32(43-30(56-37)21-52-17-16-50-13)22(2)19-40(8,48)36(58-39-33(45)28(44(11)12)18-23(3)53-39)25(5)34(26(6)38(47)55-29)57-31-20-41(9,51-14)35(46)27(7)54-31/h22-37,39,43,45-46,48-49H,15-21H2,1-14H3/t22-,23+,24+,25-,26+,27-,28+,29+,30+,31-,32+,33-,34-,35+,36+,37-,39+,40-,41+,42-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C42H78N2O14/c1-15-29-42(10,49)37-24(4)32(43-30(56-37)21-52-17-16-50-13)22(2)19-40(8,48)36(58-39-33(45)28(44(11)12)18-23(3)53-39)25(5)34(26(6)38(47)55-29)57-31-20-41(9,51-14)35(46)27(7)54-31/h22-37,39,43,45-46,48-49H,15-21H2,1-14H3/t22-,23+,24+,25+,26-,27-,28+,29+,30-,31+,32-,33-,34+,35+,36-,37+,39-,40+,41+,42-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C42H78N2O14/c1-15-29-42(10,49)37-24(4)32(43-30(56-37)21-52-17-16-50-13)22(2)19-40(8,48)36(58-39-33(45)28(44(11)12)18-23(3)53-39)25(5)34(26(6)38(47)55-29)57-31-20-41(9,51-14)35(46)27(7)54-31/h22-37,39,43,45-46,48-49H,15-21H2,1-14H3/t22?,23-,24-,25-,26-,27-,28-,29-,30-,31+,32-,33-,34-,35-,36-,37-,39-,40?,41?,42?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C43H49N7O10/c1-4-29-40(56)49-21-12-17-30(49)41(57)48(3)32(23-26-13-7-5-8-14-26)42(58)50-22-19-28(51)24-31(50)37(53)47-35(27-15-9-6-10-16-27)43(59)60-25(2)34(38(54)45-29)46-39(55)36-33(52)18-11-20-44-36/h5-11,13-16,18,20,25,29-32,34-35,52H,4,12,17,19,21-24H2,1-3H3,(H,45,54)(H,46,55)(H,47,53)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C43H49N7O10/c1-4-29-40(56)49-21-12-17-30(49)41(57)48(3)32(23-26-13-7-5-8-14-26)42(58)50-22-19-28(51)24-31(50)37(53)47-35(27-15-9-6-10-16-27)43(59)60-25(2)34(38(54)45-29)46-39(55)36-33(52)18-11-20-44-36/h5-11,13-16,18,20,25,29-32,34-35,52H,4,12,17,19,21-24H2,1-3H3,(H,45,54)(H,46,55)(H,47,53)/t25-,29-,30?,31-,32-,34-,35-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C43H49N7O10/c1-4-29-40(56)49-21-12-17-30(49)41(57)48(3)32(23-26-13-7-5-8-14-26)42(58)50-22-19-28(51)24-31(50)37(53)47-35(27-15-9-6-10-16-27)43(59)60-25(2)34(38(54)45-29)46-39(55)36-33(52)18-11-20-44-36/h5-11,13-16,18,20,25,29-32,34-35,52H,4,12,17,19,21-24H2,1-3H3,(H,45,54)(H,46,55)(H,47,53)/t25-,29-,30+,31+,32-,34-,35+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C43H49N7O10/c1-4-29-40(56)49-21-12-17-30(49)41(57)48(3)32(23-26-13-7-5-8-14-26)42(58)50-22-19-28(51)24-31(50)37(53)47-35(27-15-9-6-10-16-27)43(59)60-25(2)34(38(54)45-29)46-39(55)36-33(52)18-11-20-44-36/h5-11,13-16,18,20,25,29-32,34-35,52H,4,12,17,19,21-24H2,1-3H3,(H,45,54)(H,46,55)(H,47,53)/t25-,29+,30+,31+,32+,34-,35-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C43H50N4O8/c1-8-40-14-11-16-46-17-15-41(35(40)46)28-19-29(32(52-5)20-31(28)45(4)36(41)43(51,39(50)54-7)37(40)55-25(3)48)42(38(49)53-6)21-26-18-24(2)22-47(23-26)33-27-12-9-10-13-30(27)44-34(33)42/h9-14,18-20,26,35-37,44,51H,8,15-17,21-23H2,1-7H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C43H51N3O11/c1-19-14-16-46-28(18-19)44-32-29-30-37(50)25(7)40-31(29)41(52)43(9,57-40)55-17-15-27(54-10)22(4)39(56-26(8)47)24(6)36(49)23(5)35(48)20(2)12-11-13-21(3)42(53)45-33(34(32)46)38(30)51/h11-18,20,22-24,27,35-36,39,48-51H,1-10H3,(H,45,53)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C43H51N3O11/c1-19-14-16-46-28(18-19)44-32-29-30-37(50)25(7)40-31(29)41(52)43(9,57-40)55-17-15-27(54-10)22(4)39(56-26(8)47)24(6)36(49)23(5)35(48)20(2)12-11-13-21(3)42(53)45-33(34(32)46)38(30)51/h11-18,20,22-24,27,35-36,39,48-51H,1-10H3,(H,45,53)/b12-11-,17-15-,21-13-	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C43H51N3O11/c1-19-14-16-46-28(18-19)44-32-29-30-37(50)25(7)40-31(29)41(52)43(9,57-40)55-17-15-27(54-10)22(4)39(56-26(8)47)24(6)36(49)23(5)35(48)20(2)12-11-13-21(3)42(53)45-33(34(32)46)38(30)51/h11-18,20,22-24,27,35-36,39,48-51H,1-10H3,(H,45,53)/b12-11+,17-15-,21-13+/t20-,22-,23-,24+,27-,35+,36-,39+,43-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C43H51N3O11/c1-19-14-16-46-28(18-19)44-32-29-30-37(50)25(7)40-31(29)41(52)43(9,57-40)55-17-15-27(54-10)22(4)39(56-26(8)47)24(6)36(49)23(5)35(48)20(2)12-11-13-21(3)42(53)45-33(34(32)46)38(30)51/h11-18,20,22-24,27,35-36,39,48-51H,1-10H3,(H,45,53)/b12-11+,17-15+,21-13-/t20-,22-,23-,24-,27-,35-,36-,39+,43?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C43H51N3O11/c1-19-14-16-46-28(18-19)44-32-29-30-37(50)25(7)40-31(29)41(52)43(9,57-40)55-17-15-27(54-10)22(4)39(56-26(8)47)24(6)36(49)23(5)35(48)20(2)12-11-13-21(3)42(53)45-33(34(32)46)38(30)51/h11-18,20,22-24,27,35-36,39,48-51H,1-10H3,(H,45,53)/b12-11+,17-15+,21-13-/t20-,22+,23+,24+,27-,35-,36+,39+,43-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C43H51N3O11/c1-19-14-16-46-28(18-19)44-32-29-30-37(50)25(7)40-31(29)41(52)43(9,57-40)55-17-15-27(54-10)22(4)39(56-26(8)47)24(6)36(49)23(5)35(48)20(2)12-11-13-21(3)42(53)45-33(34(32)46)38(30)51/h11-18,20,22-24,27,35-36,39,48-51H,1-10H3,(H,45,53)/t20-,22+,23-,24-,27-,35-,36-,39-,43-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C43H51N3O11/c1-19-14-16-46-28(18-19)44-32-29-30-37(50)25(7)40-31(29)41(52)43(9,57-40)55-17-15-27(54-10)22(4)39(56-26(8)47)24(6)36(49)23(5)35(48)20(2)12-11-13-21(3)42(53)45-33(34(32)46)38(30)51/h11-18,20,22-24,27,35-36,39,48-51H,1-10H3,(H,45,53)/t20-,22+,23+,24+,27-,35-,36+,39+,43-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C43H52N4O5/c1-7-24-15-23-20-43(42(49)52-6)39-27(13-14-47(21-23)40(24)43)29-19-36(50-4)30(17-34(29)45-39)31-16-28-25(8-2)22-46(3)35(37(28)41(48)51-5)18-32-26-11-9-10-12-33(26)44-38(31)32/h8-12,17,19,23-24,28,31,35,37,40,44-45H,7,13-16,18,20-22H2,1-6H3/b25-8-	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C43H53NO14/c1-22-26(55-37(51)32(48)30(24-15-11-9-12-16-24)44-38(52)58-39(3,4)5)20-43(53)35(56-36(50)25-17-13-10-14-18-25)33-41(8,34(49)31(47)29(22)40(43,6)7)27(46)19-28-42(33,21-54-28)57-23(2)45/h9-18,26-28,30-33,35,46-48,53H,19-21H2,1-8H3,(H,44,52)/t26-,27-,28-,30-,31-,32-,33+,35-,41?,42?,43?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C43H53NO14/c1-22-26(55-37(51)32(48)30(24-15-11-9-12-16-24)44-38(52)58-39(3,4)5)20-43(53)35(56-36(50)25-17-13-10-14-18-25)33-41(8,34(49)31(47)29(22)40(43,6)7)27(46)19-28-42(33,21-54-28)57-23(2)45/h9-18,26-28,30-33,35,46-48,53H,19-21H2,1-8H3,(H,44,52)/t26-,27-,28+,30-,31+,32+,33-,35-,41+,42-,43+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C43H53NO14/c1-22-26(55-37(51)32(48)30(24-15-11-9-12-16-24)44-38(52)58-39(3,4)5)20-43(53)35(56-36(50)25-17-13-10-14-18-25)33-41(8,34(49)31(47)29(22)40(43,6)7)27(46)19-28-42(33,21-54-28)57-23(2)45/h9-18,26-28,30-33,35,46-48,53H,19-21H2,1-8H3,(H,44,52)/t26-,27-,28+,30-,31+,32+,33?,35-,41+,42-,43+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C43H53NO14/c1-22-26(55-37(51)32(48)30(24-15-11-9-12-16-24)44-38(52)58-39(3,4)5)20-43(53)35(56-36(50)25-17-13-10-14-18-25)33-41(8,34(49)31(47)29(22)40(43,6)7)27(46)19-28-42(33,21-54-28)57-23(2)45/h9-18,26-28,30-33,35,46-48,53H,19-21H2,1-8H3,(H,44,52)/t26-,27+,28+,30+,31-,32-,33-,35+,41-,42+,43-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C43H55N5O7/c1-6-39(52)21-25-22-42(38(51)55-5,33-27(13-17-47(23-25)24-39)26-11-8-9-12-30(26)45-33)29-19-28-31(20-32(29)54-4)46(3)35-41(28)15-18-48-16-10-14-40(7-2,34(41)48)36(49)43(35,53)37(44)50/h8-12,14,19-20,25,34-36,45,49,52-53H,6-7,13,15-18,21-24H2,1-5H3,(H2,44,50)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C43H55N5O7/c1-6-39(52)21-25-22-42(38(51)55-5,33-27(13-17-47(23-25)24-39)26-11-8-9-12-30(26)45-33)29-19-28-31(20-32(29)54-4)46(3)35-41(28)15-18-48-16-10-14-40(7-2,34(41)48)36(49)43(35,53)37(44)50/h8-12,14,19-20,25,34-36,45,49,52-53H,6-7,13,15-18,21-24H2,1-5H3,(H2,44,50)/t25-,34-,35-,36-,39-,40+,41+,42+,43+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C43H55N5O7/c1-6-39(52)21-25-22-42(38(51)55-5,33-27(13-17-47(23-25)24-39)26-11-8-9-12-30(26)45-33)29-19-28-31(20-32(29)54-4)46(3)35-41(28)15-18-48-16-10-14-40(7-2,34(41)48)36(49)43(35,53)37(44)50/h8-12,14,19-20,25,34-36,45,49,52-53H,6-7,13,15-18,21-24H2,1-5H3,(H2,44,50)/t25-,34-,35+,36+,39?,40?,41?,42?,43?/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C43H55N5O7/c1-6-39(52)21-25-22-42(38(51)55-5,33-27(13-17-47(23-25)24-39)26-11-8-9-12-30(26)45-33)29-19-28-31(20-32(29)54-4)46(3)35-41(28)15-18-48-16-10-14-40(7-2,34(41)48)36(49)43(35,53)37(44)50/h8-12,14,19-20,25,34-36,45,49,52-53H,6-7,13,15-18,21-24H2,1-5H3,(H2,44,50)/t25-,34+,35-,36-,39+,40-,41-,42+,43+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C43H55N5O7/c1-6-39(52)21-25-22-42(38(51)55-5,33-27(13-17-47(23-25)24-39)26-11-8-9-12-30(26)45-33)29-19-28-31(20-32(29)54-4)46(3)35-41(28)15-18-48-16-10-14-40(7-2,34(41)48)36(49)43(35,53)37(44)50/h8-12,14,19-20,25,34-36,45,49,52-53H,6-7,13,15-18,21-24H2,1-5H3,(H2,44,50)/t25-,34+,35-,36+,39+,40+,41-,42-,43-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C43H55NO14/c1-22-26(55-37(51)32(48)30(24-15-11-9-12-16-24)44-38(52)58-39(3,4)5)20-43(53)35(56-36(50)25-17-13-10-14-18-25)33-41(8,34(49)31(47)29(22)40(43,6)7)27(46)19-28-42(33,21-54-28)57-23(2)45/h9-18,22,26-33,35,46-48,53H,19-21H2,1-8H3,(H,44,52)/t22-,26-,27-,28-,29+,30+,31+,32+,33-,35-,41-,42+,43+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C43H58N2O13/c1-12-45(13-2)31(47)20-55-30-19-28-38(51)33-32(30)34-40(26(8)37(33)50)58-43(10,41(34)52)56-18-17-29(54-11)23(5)39(57-27(9)46)25(7)36(49)24(6)35(48)21(3)15-14-16-22(4)42(53)44-28/h14-19,21,23-25,29,35-36,39,48-51H,12-13,20H2,1-11H3,(H,44,53)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C43H58N2O13/c1-12-45(13-2)31(47)20-55-30-19-28-38(51)33-32(30)34-40(26(8)37(33)50)58-43(10,41(34)52)56-18-17-29(54-11)23(5)39(57-27(9)46)25(7)36(49)24(6)35(48)21(3)15-14-16-22(4)42(53)44-28/h14-19,21,23-25,29,35-36,39,48-51H,12-13,20H2,1-11H3,(H,44,53)/b15-14-,18-17+,22-16-/t21-,23-,24+,25+,29+,35+,36-,39+,43+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C43H58N2O13/c1-12-45(13-2)31(47)20-55-30-19-28-38(51)33-32(30)34-40(26(8)37(33)50)58-43(10,41(34)52)56-18-17-29(54-11)23(5)39(57-27(9)46)25(7)36(49)24(6)35(48)21(3)15-14-16-22(4)42(53)44-28/h14-19,21,23-25,29,35-36,39,48-51H,12-13,20H2,1-11H3,(H,44,53)/b15-14+,18-17+,22-16-/t21-,23-,24-,25-,29-,35-,36-,39+,43-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C43H58N2O13/c1-12-45(13-2)31(47)20-55-30-19-28-38(51)33-32(30)34-40(26(8)37(33)50)58-43(10,41(34)52)56-18-17-29(54-11)23(5)39(57-27(9)46)25(7)36(49)24(6)35(48)21(3)15-14-16-22(4)42(53)44-28/h14-19,21,23-25,29,35-36,39,48-51H,12-13,20H2,1-11H3,(H,44,53)/b15-14+,18-17+,22-16-/t21-,23+,24+,25+,29-,35-,36+,39+,43-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C43H58N2O13/c1-12-45(13-2)31(47)20-55-30-19-28-38(51)33-32(30)34-40(26(8)37(33)50)58-43(10,41(34)52)56-18-17-29(54-11)23(5)39(57-27(9)46)25(7)36(49)24(6)35(48)21(3)15-14-16-22(4)42(53)44-28/h14-19,21,23-25,29,35-36,39,48-51H,12-13,20H2,1-11H3,(H,44,53)/t21-,23+,24-,25-,29-,35-,36-,39-,43-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C43H58N4O12/c1-21-12-11-13-22(2)42(55)45-33-28(20-44-47-17-15-46(9)16-18-47)37(52)30-31(38(33)53)36(51)26(6)40-32(30)41(54)43(8,59-40)57-19-14-29(56-10)23(3)39(58-27(7)48)25(5)35(50)24(4)34(21)49/h11-14,19-21,23-25,29,34-35,39,44,49-51,53H,15-18H2,1-10H3,(H,45,55)/b12-11+,19-14+,22-13-,28-20+/t21-,23-,24-,25-,29-,34-,35-,39+,43-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C43H58N4O12/c1-21-12-11-13-22(2)42(55)45-33-28(20-44-47-17-15-46(9)16-18-47)37(52)30-31(38(33)53)36(51)26(6)40-32(30)41(54)43(8,59-40)57-19-14-29(56-10)23(3)39(58-27(7)48)25(5)35(50)24(4)34(21)49/h11-14,19-21,23-25,29,34-35,39,49-53H,15-18H2,1-10H3,(H,45,55)/b12-11-,19-14+,22-13-,44-20+/t21-,23-,24+,25+,29+,34-,35-,39-,43+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C43H58N4O12/c1-21-12-11-13-22(2)42(55)45-33-28(20-44-47-17-15-46(9)16-18-47)37(52)30-31(38(33)53)36(51)26(6)40-32(30)41(54)43(8,59-40)57-19-14-29(56-10)23(3)39(58-27(7)48)25(5)35(50)24(4)34(21)49/h11-14,19-21,23-25,29,34-35,39,49-53H,15-18H2,1-10H3,(H,45,55)/b12-11?,19-14?,22-13?,44-20-/t21-,23+,24+,25+,29-,34-,35+,39+,43-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C43H58N4O12/c1-21-12-11-13-22(2)42(55)45-33-28(20-44-47-17-15-46(9)16-18-47)37(52)30-31(38(33)53)36(51)26(6)40-32(30)41(54)43(8,59-40)57-19-14-29(56-10)23(3)39(58-27(7)48)25(5)35(50)24(4)34(21)49/h11-14,19-21,23-25,29,34-35,39,49-53H,15-18H2,1-10H3,(H,45,55)/b12-11?,19-14?,22-13?,44-20+/t21-,23+,24-,25-,29-,34-,35-,39-,43-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C43H58N4O12/c1-21-12-11-13-22(2)42(55)45-33-28(20-44-47-17-15-46(9)16-18-47)37(52)30-31(38(33)53)36(51)26(6)40-	0	(Meng et al., 2021)

32(30)41(54)43(8,59-40)57-19-14-29(56-10)23(3)39(58-27(7)48)25(5)35(50)24(4)34(21)49/h11-14,19-21,23-25,29,34-35,39,49-53H,15-18H2,1-10H3,(H,45,55)/b12-11+,19-14+,22-13-,44-20+/t21-,23-,24-,25-,29-,34-,35-,39+,43?/m0/s1 InChI=1S/C43H58N4O12/c1-21-12-11-13-22(2)42(55)45-33-28(20-44-47-17-15-46(9)16-18-47)37(52)30-31(38(33)53)36(51)26(6)40-32(30)41(54)43(8,59-40)57-19-14-29(56-10)23(3)39(58-27(7)48)25(5)35(50)24(4)34(21)49/h11-14,19-21,23-25,29,34-35,39,49-53H,15-18H2,1-10H3,(H,45,55)/b12-11+,19-14+,22-13-,44-20+/t21-,23+,24+,25+,29-,34-,35+,39+,43-/m0/s1 InChI=1S/C43H58N4O12/c1-21-12-11-13-22(2)42(55)45-33-28(20-44-47-17-15-46(9)16-18-47)37(52)30-31(38(33)53)36(51)26(6)40-32(30)41(54)43(8,59-40)57-19-14-29(56-10)23(3)39(58-27(7)48)25(5)35(50)24(4)34(21)49/h11-14,19-21,23-25,29,34-35,39,49-53H,15-18H2,1-10H3,(H,45,55)/b12-11+,19-14+,22-13+,44-20+/t21-,23-,24-,25-,29-,34-,35-,39+,43?/m0/s1 InChI=1S/C43H65N5O10/c1-12-33-43(8)37(48(41(53)58-43)19-14-13-18-47-23-31(45-24-47)30-16-15-17-44-22-30)27(4)34(49)25(2)21-42(7,54-11)38(28(5)35(50)29(6)39(52)56-33)57-40-36(51)32(46(9)10)20-26(3)55-40/h15-17,22-29,32-33,36-38,40,51H,12-14,18-21H2,1-11H3/t25-,26-,27-,28-,29-,32+,33-,36-,37+,38+,40-,42+,43+/m0/s1 InChI=1S/C43H65N5O10/c1-12-33-43(8)37(48(41(53)58-43)19-14-13-18-47-23-31(45-24-47)30-16-15-17-44-22-30)27(4)34(49)25(2)21-42(7,54-11)38(28(5)35(50)29(6)39(52)56-33)57-40-36(51)32(46(9)10)20-26(3)55-40/h15-17,22-29,32-33,36-38,40,51H,12-14,18-21H2,1-11H3/t25-,26-,27+,28+,29-,32+,33-,36-,37-,38-,40+,42-,43-/m1/s1 InChI=1S/C43H66N12O12S2/c1-5-22(4)35-42(66)49-26(12-13-32(45)57)38(62)51-29(17-33(46)58)39(63)53-30(20-69-68-19-25(44)36(60)50-28(40(64)54-35)16-23-8-10-24(56)11-9-23)43(67)55-14-6-7-31(55)41(65)52-27(15-21(2)3)37(61)48-18-34(47)59/h8-11,21-22,25-31,35,56H,5-7,12-20,44H2,1-4H3,(H2,45,57)(H2,46,58)(H2,47,59)(H,48,61)(H,49,66)(H,50,60)(H,51,62)(H,52,65)(H,53,63)(H,54,64)/t22-,25-,26-,27-,28-,29-,30-,31-,35-/m0/s1 InChI=1S/C43H66O14/c1-21-38(48)33(54-24(4)44)19-37(51-21)57-40-23(3)53-36(18-32(40)46)56-39-22(2)52-35(17-31(39)45)55-27-9-12-41(5)26(16-27)7-8-30-29(41)10-13-42(6)28(11-14-43(30,42)49)25-15-34(47)50-20-25/h15,21-23,26-33,35-40,45-46,48-49H,7-14,16-20H2,1-6H3/t21-,22-,23-,26-,27+,28-,29+,30-,31+,32+,33+,35+,36+,37+,38-,39-,40-,41+,42-,43+/m1/s1 InChI=1S/C43H74N2O14/c1-24-21-29(19-20-46)39(59-42-37(49)36(45(9)10)38(27(4)56-42)58-35-23-43(6,51)41(50)28(5)55-35)40(52-11)31(47)22-33(48)53-25(2)15-13-12-14-16-32(24)57-34-18-17-30(44(7)8)26(3)54-34/h12-14,16,20,24-32,34-42,47,49-51H,15,17-19,21-23H2,1-11H3 InChI=1S/C43H74N2O14/c1-24-21-29(19-20-46)39(59-42-37(49)36(45(9)10)38(27(4)56-42)58-35-23-43(6,51)41(50)28(5)55-35)40(52-11)31(47)22-33(48)53-25(2)15-13-12-14-16-32(24)57-34-18-17-30(44(7)8)26(3)54-34/h12-14,16,20,24-32,34-42,47,49-51H,15,17-19,21-23H2,1-11H3/b13-12+,16-14+ InChI=1S/C43H74N2O14/c1-24-21-29(19-20-46)39(59-42-37(49)36(45(9)10)38(27(4)56-42)58-35-23-43(6,51)41(50)28(5)55-35)40(52-11)31(47)22-33(48)53-25(2)15-13-12-14-16-32(24)57-34-18-17-30(44(7)8)26(3)54-34/h12-14,16,20,24-32,34-42,47,49-51H,15,17-19,21-23H2,1-11H3/b13-12+,16-14+/t24-,25-,26-,27-,28-,29+,30-,31-,32+,34+,35-,36-,37-,38+,39-,40-,41-,42-,43?/m0/s1 InChI=1S/C43H74N2O14/c1-24-21-29(19-20-46)39(59-42-37(49)36(45(9)10)38(27(4)56-42)58-35-23-43(6,51)41(50)28(5)55-35)40(52-11)31(47)22-33(48)53-25(2)15-13-12-14-16-32(24)57-34-18-17-30(44(7)8)26(3)54-34/h12-14,16,20,24-32,34-42,47,49-51H,15,17-19,21-23H2,1-11H3/b13-12+,16-14+/t24-,25+,26+,27+,28-,29-,30-,31+,32+,34-,35-,36+,37+,38-,39+,40+,41-,42-,43-/m1/s1 InChI=1S/C43H74N2O14/c1-24-21-29(19-20-46)39(59-42-37(49)36(45(9)10)38(27(4)56-42)58-35-23-43(6,51)41(50)28(5)55-35)40(52-11)31(47)22-33(48)53-25(2)15-13-12-14-16-32(24)57-34-18-17-30(44(7)8)26(3)54-34/h12-14,16,20,24-32,34-42,47,49-51H,15,17-19,21-23H2,1-11H3/t24-,25-,26-,27-,28+,29+,30+,31-,32+,34?,35+,36-,37-,38-,39+,40+,41+,42?,43-/m1/s1 InChI=1S/C43H74N2O14/c1-24-21-29(19-20-46)39(59-42-37(49)36(45(9)10)38(27(4)56-42)58-35-23-43(6,51)41(50)28(5)55-35)40(52-	0 (Kaupp, 2007)
	0 (Meng et al., 2021)
	1 (Meng et al., 2021)
	0 (Meng et al., 2021)
	0 (Mazumdar et al., 2023)
	0 (Meng et al., 2021)
	0 (Mazumdar et al., 2023)
	0 (Meng et al., 2021)
	0 (Meng et al., 2021)
	0 (Meng et al., 2021)
	0 (Meng et al., 2021)
	0 (Meng et al., 2021)
	0 (Meng et al., 2021)

11)31(47)22-33(48)53-25(2)15-13-12-14-16-32(24)57-34-18-17-30(44(7)8)26(3)54-34/h12-14,16,20,24-32,34-42,47,49-51H,15,17-19,21-23H2,1-11H3/t24-,25-,26+,27-,28+,29-,30-,31-,32-,34+,35+,36+,37+,38-,39-,40+,41-,42-,43-/m1/s1
InChI=1S/C43H75NO16/c1-15-29-43(11,52)36(48)24(5)33(47)22(3)20-41(9,51)38(25(6)34(26(7)39(50)57-29)59-32-21-42(10,53-14)37(49)27(8)56-32)60-40-35(28(44(12)13)19-23(4)55-40)58-31(46)18-17-30(45)54-16-2/h22-29,32,34-38,40,48-49,51-52H,15-21H2,1-14H3
InChI=1S/C43H75NO16/c1-15-29-43(11,52)36(48)24(5)33(47)22(3)20-41(9,51)38(25(6)34(26(7)39(50)57-29)59-32-21-42(10,53-14)37(49)27(8)56-32)60-40-35(28(44(12)13)19-23(4)55-40)58-31(46)18-17-30(45)54-16-2/h22-29,32,34-38,40,48-49,51-52H,15-21H2,1-14H3/t22-,23-,24+,25-,26-,27-,28-,29-,32+,34-,35-,36-,37-,38-,40-,41?,42?,43?/m0/s1
InChI=1S/C43H75NO16/c1-15-29-43(11,52)36(48)24(5)33(47)22(3)20-41(9,51)38(25(6)34(26(7)39(50)57-29)59-32-21-42(10,53-14)37(49)27(8)56-32)60-40-35(28(44(12)13)19-23(4)55-40)58-31(46)18-17-30(45)54-16-2/h22-29,32,34-38,40,48-49,51-52H,15-21H2,1-14H3/t22-,23-,24+,25-,26-,27-,28+,29+,32-,34+,35-,36+,37-,38-,40+,41-,42+,43+/m1/s1
InChI=1S/C43H75NO16/c1-15-29-43(11,52)36(48)24(5)33(47)22(3)20-41(9,51)38(25(6)34(26(7)39(50)57-29)59-32-21-42(10,53-14)37(49)27(8)56-32)60-40-35(28(44(12)13)19-23(4)55-40)58-31(46)18-17-30(45)54-16-2/h22-29,32,34-38,40,48-49,51-52H,15-21H2,1-14H3/t22-,23-,24+,25+,26-,27+,28+,29-,32+,34+,35-,36-,37+,38-,40+,41-,42-,43-/m1/s1
InChI=1S/C43H75NO16/c1-15-29-43(11,52)36(48)24(5)33(47)22(3)20-41(9,51)38(25(6)34(26(7)39(50)57-29)59-32-21-42(10,53-14)37(49)27(8)56-32)60-40-35(28(44(12)13)19-23(4)55-40)58-31(46)18-17-30(45)54-16-2/h22-29,32,34-38,40,48-49,51-52H,15-21H2,1-14H3/t22-,23+,24-,25-,26+,27+,28-,29+,32+,34-,35+,36-,37-,38+,40+,41-,42-,43-/m1/s1
InChI=1S/C44H32N4O4/c49-29-9-1-5-25(21-29)41-33-13-15-35(45-33)42(26-6-2-10-30(50)22-26)37-17-19-39(47-37)44(28-8-4-12-32(52)24-28)40-20-18-38(48-40)43(36-16-14-34(41)46-36)27-7-3-11-31(51)23-27/h1-17,19,21-24,46-47,49-52H,18,20H2
InChI=1S/C44H50N4O2/c1-3-17-47-19-15-43-35-9-5-7-11-37(35)45-26-34-32-24-40-44(16-20-48(40,18-4-2)28-30(32)14-22-50)36-10-6-8-12-38(36)46(42(34)44)25-33(41(43)45)31(23-39(43)47)29(27-47)13-21-49/h3-14,25-26,31-32,39-42,49-50H,1-2,15-24,27-28H2/q+2/b29-13+,30-14+,33-25?,34-26?/t31-,32+,39-,40+,41-,42+,43-,44-,47-,48+/m0/s1
InChI=1S/C44H52N8O10/c1-25-41(58)51-21-10-13-31(51)42(59)50(5)33(23-27-15-17-29(18-16-27)49(3)4)43(60)52-22-19-30(53)24-32(52)38(55)48-36(28-11-7-6-8-12-28)44(61)62-26(2)35(39(56)46-25)47-40(57)37-34(54)14-9-20-45-37/h6-9,11-12,14-18,20,25-26,31-33,35-36,54H,10,13,19,21-24H2,1-5H3,(H,46,56)(H,47,57)(H,48,55)
InChI=1S/C44H52N8O10/c1-25-41(58)51-21-10-13-31(51)42(59)50(5)33(23-27-15-17-29(18-16-27)49(3)4)43(60)52-22-19-30(53)24-32(52)38(55)48-36(28-11-7-6-8-12-28)44(61)62-26(2)35(39(56)46-25)47-40(57)37-34(54)14-9-20-45-37/h6-9,11-12,14-18,20,25-26,31-33,35-36,54H,10,13,19,21-24H2,1-5H3,(H,46,56)(H,47,57)(H,48,55)/t25-,26-,31-,32-,33-,35-,36-/m0/s1
InChI=1S/C44H52N8O10/c1-25-41(58)51-21-10-13-31(51)42(59)50(5)33(23-27-15-17-29(18-16-27)49(3)4)43(60)52-22-19-30(53)24-32(52)38(55)48-36(28-11-7-6-8-12-28)44(61)62-26(2)35(39(56)46-25)47-40(57)37-34(54)14-9-20-45-37/h6-9,11-12,14-18,20,25-26,31-33,35-36,54H,10,13,19,21-24H2,1-5H3,(H,46,56)(H,47,57)(H,48,55)/t25-,26-,31+,32+,33-,35-,36+/m1/s1
InChI=1S/C44H52N8O10/c1-25-41(58)51-21-10-13-31(51)42(59)50(5)33(23-27-15-17-29(18-16-27)49(3)4)43(60)52-22-19-30(53)24-32(52)38(55)48-36(28-11-7-6-8-12-28)44(61)62-26(2)35(39(56)46-25)47-40(57)37-34(54)14-9-20-45-37/h6-9,11-12,14-18,20,25-26,31-33,35-36,54H,10,13,19,21-24H2,1-5H3,(H,46,56)(H,47,57)(H,48,55)/t25-,26+,31+,32+,33+,35-,36-/m0/s1
InChI=1S/C44H60N4O12/c1-13-48(14-2)27(9)47-45-20-29-34-39(54)32-31(38(29)53)33-41(26(8)37(32)52)60-44(11,42(33)55)58-19-18-30(57-12)23(5)40(59-28(10)49)25(7)36(51)24(6)35(50)21(3)16-15-17-22(4)43(56)46-34/h15-21,23-25,30,35-36,40,50-54H,13-14H2,1-12H3,(H,46,56)
InChI=1S/C44H60N4O12/c1-13-48(14-2)27(9)47-45-20-29-34-39(54)32-31(38(29)53)33-41(26(8)37(32)52)60-44(11,42(33)55)58-19-18-30(57-12)23(5)40(59-28(10)49)25(7)36(51)24(6)35(50)21(3)16-15-17-22(4)43(56)46-34/h15-21,23-25,30,35-36,40,50-54H,13-14H2,1-

12H3,(H,46,56)/b16-15-,19-18+,22-17-,45-20+,47-27-/t21-,23?,24-,25?,30-,35-,36?,40+,44?/m0/s1

InChI=1S/C44H60N4O12/c1-13-48(14-2)27(9)47-45-20-29-34-39(54)32-31(38(29)53)33-41(26(8)37(32)52)60-44(11,42(33)55)58-19-18-30(57-12)23(5)40(59-28(10)49)25(7)36(51)24(6)35(50)21(3)16-15-17-22(4)43(56)46-34/h15-21,23-25,30,35-36,40,50-54H,13-14H2,1-12H3,(H,46,56)/b16-15?,19-18?,22-17-,45-20+,47-27?/t21-,23+,24-,25-,30-,35-,36-,40-,44+/m1/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C44H60N4O12/c1-13-48(14-2)27(9)47-45-20-29-34-39(54)32-31(38(29)53)33-41(26(8)37(32)52)60-44(11,42(33)55)58-19-18-30(57-12)23(5)40(59-28(10)49)25(7)36(51)24(6)35(50)21(3)16-15-17-22(4)43(56)46-34/h15-21,23-25,30,35-36,40,50-54H,13-14H2,1-12H3,(H,46,56)/b16-15?,19-18?,22-17?,45-20+,47-27+/t21-,23+,24+,25+,30-,35-,36+,40+,44-/m0/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C44H60N4O12/c1-13-48(14-2)27(9)47-45-20-29-34-39(54)32-31(38(29)53)33-41(26(8)37(32)52)60-44(11,42(33)55)58-19-18-30(57-12)23(5)40(59-28(10)49)25(7)36(51)24(6)35(50)21(3)16-15-17-22(4)43(56)46-34/h15-21,23-25,30,35-36,40,50-54H,13-14H2,1-12H3,(H,46,56)/b16-15+,19-18+,22-17-,45-20+,47-27+/t21-,23-,24-,25-,30-,35-,36-,40+,44?/m0/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C44H60N4O12/c1-13-48(14-2)27(9)47-45-20-29-34-39(54)32-31(38(29)53)33-41(26(8)37(32)52)60-44(11,42(33)55)58-19-18-30(57-12)23(5)40(59-28(10)49)25(7)36(51)24(6)35(50)21(3)16-15-17-22(4)43(56)46-34/h15-21,23-25,30,35-36,40,50-54H,13-14H2,1-12H3,(H,46,56)/b16-15+,19-18+,22-17+,45-20+,47-27+/t21-,23+,24+,25-,30+,35-,36-,40+,44-/m0/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C44H60N4O12/c1-22-12-11-13-23(2)36(51)25(4)37(52)26(5)41(59-28(7)49)24(3)30(57-10)14-19-58-44(8)43(56)34-32-33(38(53)27(6)42(34)60-44)40(55)35(46-31(50)20-22)29(39(32)54)21-45-48-17-15-47(9)16-18-48/h11-14,19,21,23-26,30,36-37,41,51-55H,15-18,20H2,1-10H3,(H,46,50)/b13-11+,19-14+,22-12-,45-21+/t23-,24-,25-,26+,30+,36?,37+,41-,44+/m1/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C44H69NO12/c1-10-13-31-19-25(2)18-26(3)20-37(54-8)40-38(55-9)22-28(5)44(52,57-40)41(49)42(50)45-17-12-11-14-32(45)43(51)56-39(29(6)34(47)24-35(31)48)27(4)21-30-15-16-33(46)36(23-30)53-7/h10,19,21,26,28-34,36-40,46-47,52H,1,11-18,20,22-24H2,2-9H3 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C44H69NO12/c1-10-13-31-19-25(2)18-26(3)20-37(54-8)40-38(55-9)22-28(5)44(52,57-40)41(49)42(50)45-17-12-11-14-32(45)43(51)56-39(29(6)34(47)24-35(31)48)27(4)21-30-15-16-33(46)36(23-30)53-7/h10,19,21,26,28-34,36-40,46-47,52H,1,11-18,20,22-24H2,2-9H3/b25-19-,27-21+/t26-,28-,29+,30-,31-,32-,33+,34-,36+,37+,38+,39-,40+,44+/m1/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C44H69NO12/c1-10-13-31-19-25(2)18-26(3)20-37(54-8)40-38(55-9)22-28(5)44(52,57-40)41(49)42(50)45-17-12-11-14-32(45)43(51)56-39(29(6)34(47)24-35(31)48)27(4)21-30-15-16-33(46)36(23-30)53-7/h10,19,21,26,28-34,36-40,46-47,52H,1,11-18,20,22-24H2,2-9H3/b25-19?,27-21+/t26-,28+,29+,30-,31+,32-,33+,34-,36+,37-,38-,39+,40+,44+/m0/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C44H69NO12/c1-10-13-31-19-25(2)18-26(3)20-37(54-8)40-38(55-9)22-28(5)44(52,57-40)41(49)42(50)45-17-12-11-14-32(45)43(51)56-39(29(6)34(47)24-35(31)48)27(4)21-30-15-16-33(46)36(23-30)53-7/h10,19,21,26,28-34,36-40,46-47,52H,1,11-18,20,22-24H2,2-9H3/b25-19+,27-21+/t26-,28-,29-,30+,31-,32-,33-,34-,36-,37-,38-,39+,40-,44?/m0/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C44H69NO12/c1-10-13-31-19-25(2)18-26(3)20-37(54-8)40-38(55-9)22-28(5)44(52,57-40)41(49)42(50)45-17-12-11-14-32(45)43(51)56-39(29(6)34(47)24-35(31)48)27(4)21-30-15-16-33(46)36(23-30)53-7/h10,19,21,26,28-34,36-40,46-47,52H,1,11-18,20,22-24H2,2-9H3/b25-19+,27-21+/t26-,28+,29+,30-,31+,32-,33+,34-,36+,37-,38-,39+,40+,44+/m0/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C44H69NO12/c1-10-13-31-19-25(2)18-26(3)20-37(54-8)40-38(55-9)22-28(5)44(52,57-40)41(49)42(50)45-17-12-11-14-32(45)43(51)56-39(29(6)34(47)24-35(31)48)27(4)21-30-15-16-33(46)36(23-30)53-7/h10,19,21,26,28-34,36-40,46-47,52H,1,11-18,20,22-24H2,2-9H3/t26-,28+,29+,30+,31-,32-,33+,34+,36+,37-,38-,39-,40+,44+/m1/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C45H54N4O8/c1-8-27-19-28-22-44(40(51)55-6,36-30(25-48(23-27)24-28)29-13-10-11-14-33(29)46-36)32-20-31-34(21-35(32)54-5)47(4)38-43(31)16-18-49-17-12-15-42(9-2,37(43)49)39(57-26(3)50)45(38,53)41(52)56-7/h10-15,19-21,28,37-39,46,53H,8-9,16-18,22-25H2,1-7H3/t28-,37-,38+,39+,42+,43+,44-,45-/m0/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C45H54N8O10/c1-6-31-42(59)52-22-11-14-32(52)43(60)51(5)34(24-27-16-18-29(19-17-27)50(3)4)44(61)53-23-20-30(54)25-

33(53)39(56)49-37(28-12-8-7-9-13-28)45(62)63-26(2)36(40(57)47-31)48-41(58)38-35(55)15-10-21-46-38/h7-10,12-13,15-19,21,26,31-34,36-37,55H,6,11,14,20,22-25H2,1-5H3,(H,47,57)(H,48,58)(H,49,56) InChI=1S/C45H54N8O10/c1-6-31-42(59)52-22-11-14-32(52)43(60)51(5)34(24-27-16-18-29(19-17-27)50(3)4)44(61)53-23-20-30(54)25-33(53)39(56)49-37(28-12-8-7-9-13-28)45(62)63-26(2)36(40(57)47-31)48-41(58)38-35(55)15-10-21-46-38/h7-10,12-13,15-19,21,26,31-34,36-37,55H,6,11,14,20,22-25H2,1-5H3,(H,47,57)(H,48,58)(H,49,56)/t26-,31-,32-,33-,34-,36-,37-/m0/s1 InChI=1S/C45H54N8O10/c1-6-31-42(59)52-22-11-14-32(52)43(60)51(5)34(24-27-16-18-29(19-17-27)50(3)4)44(61)53-23-20-30(54)25-33(53)39(56)49-37(28-12-8-7-9-13-28)45(62)63-26(2)36(40(57)47-31)48-41(58)38-35(55)15-10-21-46-38/h7-10,12-13,15-19,21,26,31-34,36-37,55H,6,11,14,20,22-25H2,1-5H3,(H,47,57)(H,48,58)(H,49,56)/t26-,31-,32+,33+,34-,36-,37+/m1/s1 InChI=1S/C45H54N8O10/c1-6-31-42(59)52-22-11-14-32(52)43(60)51(5)34(24-27-16-18-29(19-17-27)50(3)4)44(61)53-23-20-30(54)25-33(53)39(56)49-37(28-12-8-7-9-13-28)45(62)63-26(2)36(40(57)47-31)48-41(58)38-35(55)15-10-21-46-38/h7-10,12-13,15-19,21,26,31-34,36-37,55H,6,11,14,20,22-25H2,1-5H3,(H,47,57)(H,48,58)(H,49,56)/t26-,31+,32+,33+,34+,36-,37-/m0/s1 InChI=1S/C46H56N4O10/c1-7-42(55)22-28-23-45(40(53)58-5,36-30(14-18-48(24-28)25-42)29-12-9-10-13-33(29)47-36)32-20-31-34(21-35(32)57-4)50(26-51)38-44(31)16-19-49-17-11-15-43(8-2,37(44)49)39(60-27(3)52)46(38,56)41(54)59-6/h9-13,15,20-21,26,28,37-39,47,55-56H,7-8,14,16-19,22-25H2,1-6H3 InChI=1S/C46H56N4O10/c1-7-42(55)22-28-23-45(40(53)58-5,36-30(14-18-48(24-28)25-42)29-12-9-10-13-33(29)47-36)32-20-31-34(21-35(32)57-4)50(26-51)38-44(31)16-19-49-17-11-15-43(8-2,37(44)49)39(60-27(3)52)46(38,56)41(54)59-6/h9-13,15,20-21,26,28,37-39,47,55-56H,7-8,14,16-19,22-25H2,1-6H3/t28-,37-,38-,39+,42-,43+,44-,45-,46-/m1/s1 InChI=1S/C46H56N4O10/c1-7-42(55)22-28-23-45(40(53)58-5,36-30(14-18-48(24-28)25-42)29-12-9-10-13-33(29)47-36)32-20-31-34(21-35(32)57-4)50(26-51)38-44(31)16-19-49-17-11-15-43(8-2,37(44)49)39(60-27(3)52)46(38,56)41(54)59-6/h9-13,15,20-21,26,28,37-39,47,55-56H,7-8,14,16-19,22-25H2,1-6H3/t28-,37-,38-,39+,42-,43+,44+,45+,46+/m1/s1 InChI=1S/C46H56N4O10/c1-7-42(55)22-28-23-45(40(53)58-5,36-30(14-18-48(24-28)25-42)29-12-9-10-13-33(29)47-36)32-20-31-34(21-35(32)57-4)50(26-51)38-44(31)16-19-49-17-11-15-43(8-2,37(44)49)39(60-27(3)52)46(38,56)41(54)59-6/h9-13,15,20-21,26,28,37-39,47,55-56H,7-8,14,16-19,22-25H2,1-6H3/t28-,37-,38+,39+,42?,43?,44?,45?,46?/m1/s1 InChI=1S/C46H56N4O10/c1-7-42(55)22-28-23-45(40(53)58-5,36-30(14-18-48(24-28)25-42)29-12-9-10-13-33(29)47-36)32-20-31-34(21-35(32)57-4)50(26-51)38-44(31)16-19-49-17-11-15-43(8-2,37(44)49)39(60-27(3)52)46(38,56)41(54)59-6/h9-13,15,20-21,26,28,37-39,47,55-56H,7-8,14,16-19,22-25H2,1-6H3/t28-,37+,38-,39-,42+,43-,44-,45+,46+/m1/s1 InChI=1S/C46H58CIN5O8/c1-5-21-51(22-6-2)46(57)40(48-44(55)34-11-8-7-9-12-34)18-20-42(53)59-29-10-23-49-24-26-50(27-25-49)28-30-60-43(54)32-38-33(3)52(41-19-17-37(58-4)31-39(38)41)45(56)35-13-15-36(47)16-14-35/h7-9,11-17,19,31,40H,5-6,10,18,20-30,32H2,1-4H3,(H,48,55) InChI=1S/C46H58N4O9/c1-8-42(54)23-28-24-45(40(52)57-6,36-30(15-19-49(25-28)26-42)29-13-10-11-14-33(29)47-36)32-21-31-34(22-35(32)56-5)48(4)38-44(31)17-20-50-18-12-16-43(9-2,37(44)50)39(59-27(3)51)46(38,55)41(53)58-7/h10-14,16,21-22,28,37-39,47,54-55H,8-9,15,17-20,23-26H2,1-7H3 InChI=1S/C46H58N4O9/c1-8-42(54)23-28-24-45(40(52)57-6,36-30(15-19-49(25-28)26-42)29-13-10-11-14-33(29)47-36)32-21-31-34(22-35(32)56-5)48(4)38-44(31)17-20-50-18-12-16-43(9-2,37(44)50)39(59-27(3)51)46(38,55)41(53)58-7/h10-14,16,21-22,28,37-39,47,54-55H,8-9,15,17-20,23-26H2,1-7H3/t28-,37-,38-,39+,42-,43+,44-,45-,46-/m1/s1 InChI=1S/C46H58N4O9/c1-8-42(54)23-28-24-45(40(52)57-6,36-30(15-19-49(25-28)26-42)29-13-10-11-14-33(29)47-36)32-21-31-34(22-35(32)56-5)48(4)38-44(31)17-20-50-18-12-16-43(9-2,37(44)50)39(59-27(3)51)46(38,55)41(53)58-7/h10-14,16,21-22,28,37-39,47,54-55H,8-	0	(Meng et al., 2021)
	0	(Meng et al., 2021)
	0	(Meng et al., 2021)
	0	(Meng et al., 2021)
	0	(Meng et al., 2021)
	0	(Meng et al., 2021)
	0	(Meng et al., 2021)
	0	(Meng et al., 2021)
	0	(Meng et al., 2021)
	1	(Meng et al., 2021)
	0	(Meng et al., 2021)
	0	(Meng et al., 2021)

9,15,17-20,23-26H ₂ ,1-7H ₃ /t28-,37-,38-,39+,42-,43+,44+,45+,46+/m1/s1	
InChI=1S/C46H58N4O9/c1-8-42(54)23-28-24-45(40(52)57-6,36-30(15-19-49(25-28)26-42)29-13-10-11-14-33(29)47-36)32-21-31-34(22-35(32)56-5)48(4)38-44(31)17-20-50-18-12-16-43(9-2,37(44)50)39(59-27(3)51)46(38,55)41(53)58-7/h10-14,16,21-22,28,37-39,47,54-55H,8-9,15,17-20,23-26H ₂ ,1-7H ₃ /t28-,37-,38+,39+,42-,43+,44+,45-,46-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C46H58N4O9/c1-8-42(54)23-28-24-45(40(52)57-6,36-30(15-19-49(25-28)26-42)29-13-10-11-14-33(29)47-36)32-21-31-34(22-35(32)56-5)48(4)38-44(31)17-20-50-18-12-16-43(9-2,37(44)50)39(59-27(3)51)46(38,55)41(53)58-7/h10-14,16,21-22,28,37-39,47,54-55H,8-9,15,17-20,23-26H ₂ ,1-7H ₃ /t28-,37-,38+,39+,42?,43?,44?,45?,46?/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C46H58N4O9/c1-8-42(54)23-28-24-45(40(52)57-6,36-30(15-19-49(25-28)26-42)29-13-10-11-14-33(29)47-36)32-21-31-34(22-35(32)56-5)48(4)38-44(31)17-20-50-18-12-16-43(9-2,37(44)50)39(59-27(3)51)46(38,55)41(53)58-7/h10-14,16,21-22,28,37-39,47,54-55H,8-9,15,17-20,23-26H ₂ ,1-7H ₃ /t28-,37?,38?,39+,42+,43+,44+,45+,46-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C46H58N4O9/c1-8-42(54)23-28-24-45(40(52)57-6,36-30(15-19-49(25-28)26-42)29-13-10-11-14-33(29)47-36)32-21-31-34(22-35(32)56-5)48(4)38-44(31)17-20-50-18-12-16-43(9-2,37(44)50)39(59-27(3)51)46(38,55)41(53)58-7/h10-14,16,21-22,28,37-39,47,54-55H,8-9,15,17-20,23-26H ₂ ,1-7H ₃ /t28-,37+,38-,39-,42+,43-,44?,45?,46+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C46H62N4O11/c1-22(2)21-50-18-16-46(17-19-50)48-34-31-32-39(54)28(8)42-33(31)43(56)45(10,61-42)59-20-15-30(58-11)25(5)41(60-29(9)51)27(7)38(53)26(6)37(52)23(3)13-12-14-24(4)44(57)47-36(40(32)55)35(34)49-46/h12-15,20,22-23,25-27,30,37-38,41,48,52-55H,16-19,21H ₂ ,1-11H ₃	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C46H62N4O11/c1-22(2)21-50-18-16-46(17-19-50)48-34-31-32-39(54)28(8)42-33(31)43(56)45(10,61-42)59-20-15-30(58-11)25(5)41(60-29(9)51)27(7)38(53)26(6)37(52)23(3)13-12-14-24(4)44(57)47-36(40(32)55)35(34)49-46/h12-15,20,22-23,25-27,30,37-38,41,48,52-55H,16-19,21H ₂ ,1-11H ₃ /b13-12+,20-15+,24-14-,47-36?/t23-,25+,26+,27+,30-,37-,38+,41+,45-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C46H62N4O11/c1-22(2)21-50-18-16-46(17-19-50)48-34-31-32-39(54)28(8)42-33(31)43(56)45(10,61-42)59-20-15-30(58-11)25(5)41(60-29(9)51)27(7)38(53)26(6)37(52)23(3)13-12-14-24(4)44(57)47-36(40(32)55)35(34)49-46/h12-15,20,22-23,25-27,30,37-38,41,48,52-55H,16-19,21H ₂ ,1-11H ₃ /t23-,25+,26+,27+,30-,37-,38+,41+,45-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C46H62N4O11/c1-22(2)21-50-18-16-46(17-19-50)48-34-31-32-39(54)28(8)42-33(31)43(56)45(10,61-42)59-20-15-30(58-11)25(5)41(60-29(9)51)27(7)38(53)26(6)37(52)23(3)13-12-14-24(4)44(57)47-36(40(32)55)35(34)49-46/h12-15,20,22-23,25-27,30,37-38,41,49,52-54H,16-19,21H ₂ ,1-11H ₃ ,(H,47,57)/b13-12+,20-15+,24-14-/t23-,25-,26-,27-,30-,37-,38-,41+,45?/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C46H62N4O11/c1-22(2)21-50-18-16-46(17-19-50)48-34-31-32-39(54)28(8)42-33(31)43(56)45(10,61-42)59-20-15-30(58-11)25(5)41(60-29(9)51)27(7)38(53)26(6)37(52)23(3)13-12-14-24(4)44(57)47-36(40(32)55)35(34)49-46/h12-15,20,22-23,25-27,30,37-38,41,49,52-54H,16-19,21H ₂ ,1-11H ₃ ,(H,47,57)/t23-,25+,26-,27-,30-,37-,38-,41-,45-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C46H62N4O11/c1-22(2)21-50-18-16-46(17-19-50)48-34-31-32-39(54)28(8)42-33(31)43(56)45(10,61-42)59-20-15-30(58-11)25(5)41(60-29(9)51)27(7)38(53)26(6)37(52)23(3)13-12-14-24(4)44(57)47-36(40(32)55)35(34)49-46/h12-15,20,22-23,25-27,30,37-38,41,52-55H,16-19,21H ₂ ,1-11H ₃ ,(H,47,57)/b13-12+,20-15+,24-14-/t23-,25+,26+,27+,30-,37-,38+,41+,45-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C46H64N14O12S2/c47-35(62)15-14-29-40(67)58-32(22-36(48)63)43(70)59-33(45(72)60-18-5-9-34(60)44(71)56-28(8-4-17-52-46(50)51)39(66)53-23-37(49)64)24-74-73-19-16-38(65)54-30(21-26-10-12-27(61)13-11-26)41(68)57-31(42(69)55-29)20-25-6-2-1-3-7-25/h1-3,6-7,10-13,28-34,61H,4-5,8-9,14-24H ₂ ,(H ₂ ,47,62)(H ₂ ,48,63)(H ₂ ,49,64)(H ₂ ,53,66)(H ₂ ,54,65)(H ₂ ,55,69)(H ₂ ,56,71)(H ₂ ,57,68)(H ₂ ,58,67)(H ₂ ,59,70)(H ₂ ,50,51,52)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C46H64N14O12S2/c47-35(62)15-14-29-40(67)58-32(22-36(48)63)43(70)59-33(45(72)60-18-5-9-34(60)44(71)56-28(8-4-17-52-46(50)51)39(66)53-23-37(49)64)24-74-73-19-16-38(65)54-30(21-26-10-12-27(61)13-11-26)41(68)57-31(42(69)55-29)20-25-6-2-1-3-7-25/h1-3,6-	0 (Meng et al., 2021)

7,10-13,28-34,61H,4-5,8-9,14-
24H2,(H2,47,62)(H2,48,63)(H2,49,64)(H,53,66)(H,54,65)(H,55,69)(H,56,71)(H,57,68)(H,58,67)(H,59,70)(H4,50,51,52)/t28-
,29+,30+,31+,32+,33+,34+/m1/s1
InChI=1S/C46H64N4O11/c1-22(2)21-50-18-16-46(17-19-50)48-34-31-32-39(54)28(8)42-33(31)43(56)45(10,61-42)59-20-15-30(58-
11)25(5)41(60-29(9)51)27(7)38(53)26(6)37(52)23(3)13-12-14-24(4)44(57)47-36(40(32)55)35(34)49-46/h12-15,20,22-23,25-27,30,36-38,41,48-
49,52-54H,16-19,21H2,1-11H3,(H,47,57)/b13-12+,20-15+,24-14+/t23-,25-,26-,27+,30-,36-,37-,38-,41-,45-/m1/s1 0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C46H65N15O12S2/c47-27-22-74-75-23-33(45(73)61-17-5-9-34(61)44(72)56-28(8-4-16-53-46(51)52)39(67)54-21-37(50)65)60-
43(71)32(20-36(49)64)59-40(68)29(14-15-35(48)63)55-41(69)31(18-24-6-2-1-3-7-24)58-42(70)30(57-38(27)66)19-25-10-12-26(62)13-11-25/h1-
3,6-7,10-13,27-34,62H,4-5,8-9,14-
23,47H2,(H2,48,63)(H2,49,64)(H2,50,65)(H,54,67)(H,55,69)(H,56,72)(H,57,66)(H,58,70)(H,59,68)(H,60,71)(H4,51,52,53)/t27-,28-,29-,30-,31-,32-
,33-,34-/m0/s1 0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C47H50FNO14/c1-24-31(61-43(57)36(53)35(27-13-9-7-10-14-27)49-41(55)28-17-19-30(48)20-18-28)22-47(58)40(62-42(56)29-15-11-
8-12-16-29)38-45(6,32(52)21-33-46(38,23-59-33)63-26(3)51)39(54)37(60-25(2)50)34(24)44(47,4)5/h7-20,31-33,35-38,40,52-53,58H,21-23H2,1-
6H3,(H,49,55)/t31-,32-,33+,35-,36+,37+,38-,40-,45+,46-,47+/m0/s1 1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C47H50FNO14/c1-24-31(61-43(57)36(53)35(27-13-9-7-10-14-27)49-41(55)28-17-19-30(48)20-18-28)22-47(58)40(62-42(56)29-15-11-
8-12-16-29)38-45(6,32(52)21-33-46(38,23-59-33)63-26(3)51)39(54)37(60-25(2)50)34(24)44(47,4)5/h7-20,31-33,35-38,40,52-53,58H,21-23H2,1-
6H3,(H,49,55)/t31-,32-,33+,35-,36+,37+,38-,40-,45+,46-,47+/m0/s1 (Mazumdar et al.,
1 2023)
InChI=1S/C47H50FNO14/c1-24-31(61-43(57)36(53)35(27-13-9-7-10-14-27)49-41(55)28-17-19-30(48)20-18-28)22-47(58)40(62-42(56)29-15-11-
8-12-16-29)38-45(6,32(52)21-33-46(38,23-59-33)63-26(3)51)39(54)37(60-25(2)50)34(24)44(47,4)5/h7-20,31-33,35-38,40,52-53,58H,21-23H2,1-
6H3,(H,49,55)/t31-,32-,33+,35-,36-,37+,38-,40+,45-,46-,47+/m0/s1 1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C47H51NO14/c1-25-31(60-43(56)36(52)35(28-16-10-7-11-17-28)48-41(54)29-18-12-8-13-19-29)23-47(57)40(61-42(55)30-20-14-9-15-
21-30)38-45(6,32(51)22-33-46(38,24-58-33)62-27(3)50)39(53)37(59-26(2)49)34(25)44(47,4)5/h7-21,31-33,35-38,40,51-52,57H,22-24H2,1-
6H3,(H,48,54) 1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C47H51NO14/c1-25-31(60-43(56)36(52)35(28-16-10-7-11-17-28)48-41(54)29-18-12-8-13-19-29)23-47(57)40(61-42(55)30-20-14-9-15-
21-30)38-45(6,32(51)22-33-46(38,24-58-33)62-27(3)50)39(53)37(59-26(2)49)34(25)44(47,4)5/h7-21,31-33,35-38,40,51-52,57H,22-24H2,1-
6H3,(H,48,54)/t31-,32-,33-,35-,36-,37-,38+,40-,45?,46?,47?/m0/s1 0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C47H51NO14/c1-25-31(60-43(56)36(52)35(28-16-10-7-11-17-28)48-41(54)29-18-12-8-13-19-29)23-47(57)40(61-42(55)30-20-14-9-15-
21-30)38-45(6,32(51)22-33-46(38,24-58-33)62-27(3)50)39(53)37(59-26(2)49)34(25)44(47,4)5/h7-21,31-33,35-38,40,51-52,57H,22-24H2,1-
6H3,(H,48,54)/t31-,32-,33-,35+,36-,37-,38+,40-,45+,46+,47+/m1/s1 0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C47H51NO14/c1-25-31(60-43(56)36(52)35(28-16-10-7-11-17-28)48-41(54)29-18-12-8-13-19-29)23-47(57)40(61-42(55)30-20-14-9-15-
21-30)38-45(6,32(51)22-33-46(38,24-58-33)62-27(3)50)39(53)37(59-26(2)49)34(25)44(47,4)5/h7-21,31-33,35-38,40,51-52,57H,22-24H2,1-
6H3,(H,48,54)/t31-,32-,33+,35?,36+,37?,38-,40?,45+,46?,47+/m0/s1 1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C47H53NO14/c1-25-31(60-43(56)36(52)35(28-16-10-7-11-17-28)48-41(54)29-18-12-8-13-19-29)23-47(57)40(61-42(55)30-20-14-9-15-
21-30)38-45(6,32(51)22-33-46(38,24-58-33)62-27(3)50)39(53)37(59-26(2)49)34(25)44(47,4)5/h7-21,25,31-38,40,51-52,57H,22-24H2,1- 0 (Meng et al., 2021)

6H3,(H,48,54)/t25-,31-,32-,33-,34+,35+,36+,37-,38+,40+,45-,46-,47+/m1/s1
InChI=1S/C47H64N4O12/c1-24-13-12-14-25(2)46(59)49-37-32(23-48-51-20-18-50(19-21-51)31-15-10-11-16-31)41(56)34-35(42(37)57)40(55)29(6)44-36(34)45(58)47(8,63-44)61-22-17-33(60-9)26(3)43(62-30(7)52)28(5)39(54)27(4)38(24)53/h12-14,17,22-24,26-28,31,33,38-39,43,53-57H,10-11,15-16,18-21H2,1-9H3,(H,49,59) 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C47H64N4O12/c1-24-13-12-14-25(2)46(59)49-37-32(23-48-51-20-18-50(19-21-51)31-15-10-11-16-31)41(56)34-35(42(37)57)40(55)29(6)44-36(34)45(58)47(8,63-44)61-22-17-33(60-9)26(3)43(62-30(7)52)28(5)39(54)27(4)38(24)53/h12-14,17,22-24,26-28,31,33,38-39,43,53-57H,10-11,15-16,18-21H2,1-9H3,(H,49,59)/b13-12-,22-17+,25-14-,48-23+/t24-,26-,27+,28+,33-,38+,39-,43-,47+/m1/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C47H64N4O12/c1-24-13-12-14-25(2)46(59)49-37-32(23-48-51-20-18-50(19-21-51)31-15-10-11-16-31)41(56)34-35(42(37)57)40(55)29(6)44-36(34)45(58)47(8,63-44)61-22-17-33(60-9)26(3)43(62-30(7)52)28(5)39(54)27(4)38(24)53/h12-14,17,22-24,26-28,31,33,38-39,43,53-57H,10-11,15-16,18-21H2,1-9H3,(H,49,59)/b13-12?,22-17?,25-14?,48-23-/t24-,26+,27+,28+,33-,38-,39+,43+,47-/m0/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C47H64N4O12/c1-24-13-12-14-25(2)46(59)49-37-32(23-48-51-20-18-50(19-21-51)31-15-10-11-16-31)41(56)34-35(42(37)57)40(55)29(6)44-36(34)45(58)47(8,63-44)61-22-17-33(60-9)26(3)43(62-30(7)52)28(5)39(54)27(4)38(24)53/h12-14,17,22-24,26-28,31,33,38-39,43,53-57H,10-11,15-16,18-21H2,1-9H3,(H,49,59)/b13-12?,22-17?,25-14?,48-23+/t24-,26+,27-,28-,33-,38-,39-,43-,47-/m0/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C47H64N4O12/c1-24-13-12-14-25(2)46(59)49-37-32(23-48-51-20-18-50(19-21-51)31-15-10-11-16-31)41(56)34-35(42(37)57)40(55)29(6)44-36(34)45(58)47(8,63-44)61-22-17-33(60-9)26(3)43(62-30(7)52)28(5)39(54)27(4)38(24)53/h12-14,17,22-24,26-28,31,33,38-39,43,53-57H,10-11,15-16,18-21H2,1-9H3,(H,49,59)/b13-12?,22-17?,25-14?,48-23+/t24-,26+,27+,28+,33-,38-,39+,43+,47-/m0/s1 0 (Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C47H64N4O12/c1-24-13-12-14-25(2)46(59)49-37-32(23-48-51-20-18-50(19-21-51)31-15-10-11-16-31)41(56)34-35(42(37)57)40(55)29(6)44-36(34)45(58)47(8,63-44)61-22-17-33(60-9)26(3)43(62-30(7)52)28(5)39(54)27(4)38(24)53/h12-14,17,22-24,26-28,31,33,38-39,43,53-57H,10-11,15-16,18-21H2,1-9H3,(H,49,59)/b13-12+,22-17+,25-14-,48-23-/t24-,26+,27+,28+,33-,38-,39+,43+,47-/m0/s1 0 (Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C47H64N4O12/c1-24-13-12-14-25(2)46(59)49-37-32(23-48-51-20-18-50(19-21-51)31-15-10-11-16-31)41(56)34-35(42(37)57)40(55)29(6)44-36(34)45(58)47(8,63-44)61-22-17-33(60-9)26(3)43(62-30(7)52)28(5)39(54)27(4)38(24)53/h12-14,17,22-24,26-28,31,33,38-39,43,53-57H,10-11,15-16,18-21H2,1-9H3,(H,49,59)/b13-12+,22-17+,25-14-,48-23+/t24-,26-,27-,28-,33-,38-,39-,43+,47?/m0/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C47H64N4O12/c1-24-13-12-14-25(2)46(59)49-37-32(23-48-51-20-18-50(19-21-51)31-15-10-11-16-31)41(56)34-35(42(37)57)40(55)29(6)44-36(34)45(58)47(8,63-44)61-22-17-33(60-9)26(3)43(62-30(7)52)28(5)39(54)27(4)38(24)53/h12-14,17,22-24,26-28,31,33,38-39,43,53-57H,10-11,15-16,18-21H2,1-9H3,(H,49,59)/b13-12+,22-17+,25-14-,48-23+/t24-,26+,27+,28+,33-,38-,39+,43+,47-/m0/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C47H72O14/c1-24(2)41-27(5)16-17-46(61-41)22-33-19-32(60-46)15-14-26(4)42(25(3)12-11-13-31-23-54-44-39(48)28(6)18-34(45(50)57-33)47(31,44)51)58-38-21-36(53-10)43(30(8)56-38)59-37-20-35(52-9)40(49)29(7)55-37/h11-14,18,24-25,27,29-30,32-44,48-49,51H,15-17,19-23H2,1-10H3 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C47H72O14/c1-24(2)41-27(5)16-17-46(61-41)22-33-19-32(60-46)15-14-26(4)42(25(3)12-11-13-31-23-54-44-39(48)28(6)18-34(45(50)57-33)47(31,44)51)58-38-21-36(53-10)43(30(8)56-38)59-37-20-35(52-9)40(49)29(7)55-37/h11-14,18,24-25,27,29-30,32-44,48-49,51H,15-17,19-23H2,1-10H3/b12-11+,26-14-,31-13+/t25-,27+,29+,30-,32-,33+,34+,35+,36-,37-,38+,39-,40+,41-,42-,43-,44+,46+,47-/m1/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C47H72O14/c1-24(2)41-27(5)16-17-46(61-41)22-33-19-32(60-46)15-14-26(4)42(25(3)12-11-13-31-23-54-44-39(48)28(6)18-34(45(50)57-33)47(31,44)51)58-38-21-36(53-10)43(30(8)56-38)59-37-20-35(52-9)40(49)29(7)55-37/h11-14,18,24-25,27,29-30,32-44,48-49,51H,15-17,19-23H2,1-10H3/b12-11+,26-14+,31-13+/t25-,27-,29-,30-,32-,33-,34+,35-,36-,37-,38+,39-,40-,41-,42-,43-,44-,46?,47?/m0/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C47H72O14/c1-24(2)41-27(5)16-17-46(61-41)22-33-19-32(60-46)15-14-26(4)42(25(3)12-11-13-31-23-54-44-39(48)28(6)18-34(45(50)57-33)47(31,44)51)58-38-21-36(53-10)43(30(8)56-38)59-37-20-35(52-9)40(49)29(7)55-37/h11-14,18,24-25,27,29-30,32-44,48-49,51H,15-17,19-23H2,1-10H3/t25-,27-,29+,30-,32+,33-,34-,35-,36-,37-,38-,39+,40-,41+,42-,43-,44+,46+,47+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C47H72O14/c1-24(2)41-27(5)16-17-46(61-41)22-33-19-32(60-46)15-14-26(4)42(25(3)12-11-13-31-23-54-44-39(48)28(6)18-34(45(50)57-33)47(31,44)51)58-38-21-36(53-10)43(30(8)56-38)59-37-20-35(52-9)40(49)29(7)55-37/h11-14,18,24-25,27,29-30,32-44,48-49,51H,15-17,19-23H2,1-10H3/t25-,27-,29+,30-,32-,33+,34+,35-,36+,37-,38+,39-,40-,41-,42+,43-,44+,46+,47-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C47H73NO17/c1-27-17-15-13-11-9-7-5-6-8-10-12-14-16-18-34(64-46-44(58)41(48)43(57)30(4)63-46)24-38-40(45(59)60)37(54)26-47(61,65-38)25-33(51)22-36(53)35(52)20-19-31(49)21-32(50)23-39(55)62-29(3)28(2)42(27)56/h5-18,27-38,40-44,46,49-54,56-58,61H,19-26,48H2,1-4H3,(H,59,60)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C47H73NO17/c1-27-17-15-13-11-9-7-5-6-8-10-12-14-16-18-34(64-46-44(58)41(48)43(57)30(4)63-46)24-38-40(45(59)60)37(54)26-47(61,65-38)25-33(51)22-36(53)35(52)20-19-31(49)21-32(50)23-39(55)62-29(3)28(2)42(27)56/h5-18,27-38,40-44,46,49-54,56-58,61H,19-26,48H2,1-4H3,(H,59,60)/b6-5-,9-7-,10-8-,13-11-,14-12-,17-15-,18-16-/t27-,28-,29-,30+,31+,32+,33-,34-,35+,36+,37-,38-,40+,41-,42+,43+,44-,46-,47+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C47H73NO17/c1-27-17-15-13-11-9-7-5-6-8-10-12-14-16-18-34(64-46-44(58)41(48)43(57)30(4)63-46)24-38-40(45(59)60)37(54)26-47(61,65-38)25-33(51)22-36(53)35(52)20-19-31(49)21-32(50)23-39(55)62-29(3)28(2)42(27)56/h5-18,27-38,40-44,46,49-54,56-58,61H,19-26,48H2,1-4H3,(H,59,60)/b6-5-,9-7-,10-8-,13-11-,14-12-,17-15-,18-16-/t27-,28+,29-,30-,31-,32-,33-,34+,35-,36-,37-,38-,40-,41-,42-,43+,44-,46+,47?/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C47H73NO17/c1-27-17-15-13-11-9-7-5-6-8-10-12-14-16-18-34(64-46-44(58)41(48)43(57)30(4)63-46)24-38-40(45(59)60)37(54)26-47(61,65-38)25-33(51)22-36(53)35(52)20-19-31(49)21-32(50)23-39(55)62-29(3)28(2)42(27)56/h5-18,27-38,40-44,46,49-54,56-58,61H,19-26,48H2,1-4H3,(H,59,60)/b6-5+,9-7+,10-8-,13-11+,14-12+,17-15+,18-16+/t27-,28-,29+,30-,31-,32+,33+,34-,35+,36-,37+,38+,40-,41+,42+,43-,44-,46+,47-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C47H73NO17/c1-27-17-15-13-11-9-7-5-6-8-10-12-14-16-18-34(64-46-44(58)41(48)43(57)30(4)63-46)24-38-40(45(59)60)37(54)26-47(61,65-38)25-33(51)22-36(53)35(52)20-19-31(49)21-32(50)23-39(55)62-29(3)28(2)42(27)56/h5-18,27-38,40-44,46,49-54,56-58,61H,19-26,48H2,1-4H3,(H,59,60)/b6-5+,9-7+,10-8+,13-11+,14-12+,17-15+,18-16+/t27-,28-,29-,30+,31+,32+,33-,34-,35+,36+,37-,38-,40+,41-,42+,43+,44-,46-,47+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C47H73NO17/c1-27-17-15-13-11-9-7-5-6-8-10-12-14-16-18-34(64-46-44(58)41(48)43(57)30(4)63-46)24-38-40(45(59)60)37(54)26-47(61,65-38)25-33(51)22-36(53)35(52)20-19-31(49)21-32(50)23-39(55)62-29(3)28(2)42(27)56/h5-18,27-38,40-44,46,49-54,56-58,61H,19-26,48H2,1-4H3,(H,59,60)/t27-,28-,29-,30-,31+,32+,33-,34-,35+,36+,37-,38-,40+,41+,42+,43-,44+,46+,47+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C47H73NO17/c1-27-17-15-13-11-9-7-5-6-8-10-12-14-16-18-34(64-46-44(58)41(48)43(57)30(4)63-46)24-38-40(45(59)60)37(54)26-47(61,65-38)25-33(51)22-36(53)35(52)20-19-31(49)21-32(50)23-39(55)62-29(3)28(2)42(27)56/h5-18,27-38,40-44,46,49-54,56-58,61H,19-26,48H2,1-4H3,(H,59,60)/t27-,28-,29+,30-,31-,32+,33+,34-,35+,36-,37+,38+,40-,41+,42+,43-,44-,46+,47-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C47H73NO17/c1-27-17-15-13-11-9-7-5-6-8-10-12-14-16-18-34(64-46-44(58)41(48)43(57)30(4)63-46)24-38-40(45(59)60)37(54)26-47(61,65-38)25-36(53)35(52)20-19-31(49)21-32(50)22-33(51)23-39(55)62-29(3)28(2)42(27)56/h5-18,27-38,40-44,46,49-54,56-58,61H,19-26,48H2,1-4H3,(H,59,60)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C47H73NO17/c1-27-17-15-13-11-9-7-5-6-8-10-12-14-16-18-34(64-46-44(58)41(48)43(57)30(4)63-46)24-38-40(45(59)60)37(54)26-47(61,65-38)25-36(53)35(52)20-19-31(49)21-32(50)22-33(51)23-39(55)62-29(3)28(2)42(27)56/h5-18,27-38,40-44,46,49-54,56-58,61H,19-26,48H2,1-4H3,(H,59,60)/b6-5+,9-7-,10-8+,13-11+,14-12+,17-15+,18-16-/t27-,28+,29+,30-,31+,32+,33-,34+,35-,36-,37-,38-,40-,41-	0	(Meng et al., 2021)

,42+,43+,44+,46-,47-/m0/s1

InChI=1S/C47H73NO17/c1-27-17-15-13-11-9-7-5-6-8-10-12-14-16-18-34(64-46-44(58)41(48)43(57)30(4)63-46)24-38-40(45(59)60)37(54)26-47(61,65-38)25-36(53)35(52)20-19-31(49)21-32(50)22-33(51)23-39(55)62-29(3)28(2)42(27)56/h5-18,27-38,40-44,46,49-54,56-58,61H,19-26,48H2,1-4H3,(H,59,60)/b6-5+,9-7+,10-8+,13-11+,14-12+,17-15+,18-16+/t27-,28+,29-,30-,31-,32-,33-,34+,35-,36-,37-,38-,40-,41-,42-,43+,44-,46+,47-/m0/s1

0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C47H73NO17/c1-27-17-15-13-11-9-7-5-6-8-10-12-14-16-18-34(64-46-44(58)41(48)43(57)30(4)63-46)24-38-40(45(59)60)37(54)26-47(61,65-38)25-36(53)35(52)20-19-31(49)21-32(50)22-33(51)23-39(55)62-29(3)28(2)42(27)56/h5-18,27-38,40-44,46,49-54,56-58,61H,19-26,48H2,1-4H3,(H,59,60)/t27-,28+,29+,30+,31+,32+,33+,34-,35-,36+,37-,38+,40+,41-,42-,43-,44-,46+,47-/m0/s1

0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C47H73NO18/c1-27-17-15-13-11-9-7-5-6-8-10-12-14-16-20-46(61,66-45-43(58)40(48)42(57)30(4)64-45)26-37-39(44(59)60)36(54)25-47(62,65-37)24-33(51)22-35(53)34(52)19-18-31(49)21-32(50)23-38(55)63-29(3)28(2)41(27)56/h5-17,20,27-37,39-43,45,49-54,56-58,61-62H,18-19,21-26,48H2,1-4H3,(H,59,60)/t27-,28-,29+,30+,31-,32-,33+,34-,35-,36-,37+,39-,40+,41+,42-,43+,45+,46+,47+/m1/s1

0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C47H75NO17/c1-27-17-15-13-11-9-7-5-6-8-10-12-14-16-18-35(65-47-45(60)42(48)44(59)30(4)64-47)26-39(56)41(46(61)62)38(55)24-34(52)23-37(54)36(53)20-19-31(49)21-32(50)22-33(51)25-40(57)63-29(3)28(2)43(27)58/h5-6,8,10-18,27-33,35-39,41-45,47,49-51,53-56,58-60H,7,9,19-26,48H2,1-4H3,(H,61,62)

0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C48H64N2O17/c1-10-48(58)18-30(64-31-15-25(50(8)9)44(21(4)60-31)65-33-17-28-45(22(5)61-33)67-47-29(63-28)16-27(52)19(2)62-47)35-38(46(48)66-32-14-24(49(6)7)39(53)20(3)59-32)43(57)36-37(42(35)56)41(55)34-23(40(36)54)12-11-13-26(34)51/h11-13,19-22,24-25,28-33,39,44-47,51,53,56-58H,10,14-18H2,1-9H3

0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C48H64N2O17/c1-10-48(58)18-30(64-31-15-25(50(8)9)44(21(4)60-31)65-33-17-28-45(22(5)61-33)67-47-29(63-28)16-27(52)19(2)62-47)35-38(46(48)66-32-14-24(49(6)7)39(53)20(3)59-32)43(57)36-37(42(35)56)41(55)34-23(40(36)54)12-11-13-26(34)51/h11-13,19-22,24-25,28-33,39,44-47,51,53,56-58H,10,14-18H2,1-9H3/t19-,20-,21-,22-,24-,25-,28-,29-,30-,31-,32-,33-,39+,44+,45+,46+,47-,48+/m0/s1

0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C48H64N2O17/c1-10-48(58)18-30(64-31-15-25(50(8)9)44(21(4)60-31)65-33-17-28-45(22(5)61-33)67-47-29(63-28)16-27(52)19(2)62-47)35-38(46(48)66-32-14-24(49(6)7)39(53)20(3)59-32)43(57)36-37(42(35)56)41(55)34-23(40(36)54)12-11-13-26(34)51/h11-13,19-22,24-25,28-33,39,44-47,51,53,56-58H,10,14-18H2,1-9H3/t19-,20-,21-,22-,24-,25-,28-,29-,30-,31+,32-,33-,39+,44+,45-,46-,47+,48-/m0/s1

0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C48H64N2O17/c1-10-48(58)18-30(64-31-15-25(50(8)9)44(21(4)60-31)65-33-17-28-45(22(5)61-33)67-47-29(63-28)16-27(52)19(2)62-47)35-38(46(48)66-32-14-24(49(6)7)39(53)20(3)59-32)43(57)36-37(42(35)56)41(55)34-23(40(36)54)12-11-13-26(34)51/h11-13,19-22,24-25,28-33,39,44-47,51,53,56-58H,10,14-18H2,1-9H3/t19-,20-,21-,22-,24+,25+,28+,29-,30+,31-,32-,33-,39+,44-,45-,46+,47-,48+/m0/s1

0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C48H64N2O17/c1-10-48(58)18-30(64-31-15-25(50(8)9)44(21(4)60-31)65-33-17-28-45(22(5)61-33)67-47-29(63-28)16-27(52)19(2)62-47)35-38(46(48)66-32-14-24(49(6)7)39(53)20(3)59-32)43(57)36-37(42(35)56)41(55)34-23(40(36)54)12-11-13-26(34)51/h11-13,19-22,24-25,28-33,39,44-47,51,53,56-58H,10,14-18H2,1-9H3/t19-,20+,21+,22-,24+,25+,28-,29+,30+,31-,32+,33+,39+,44+,45-,46-,47+,48+/m1/s1

0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C48H72O14/c1-11-25(2)43-28(5)17-18-47(62-43)23-34-20-33(61-47)16-15-27(4)42(26(3)13-12-14-32-24-55-45-40(49)29(6)19-35(46(51)58-34)48(32,45)52)59-39-22-37(54-10)44(31(8)57-39)60-38-21-36(53-9)41(50)30(7)56-38/h12-15,17-19,25-26,28,30-31,33-45,49-50,52H,11,16,20-24H2,1-10H3/b13-12+,27-15+,32-14+/t25-,26-,28-,30-,31-,33+,34-,35-,36-,37-,38-,39-,40+,41-,42-,43+,44-,45+,47+,48+/m0/s1

1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C48H74O14.C47H72O14/c1-11-25(2)43-28(5)17-18-47(62-43)23-34-20-33(61-47)16-15-27(4)42(26(3)13-12-14-32-24-55-45-40(49)29(6)19-35(46(51)58-34)48(32,45)52)59-39-22-37(54-10)44(31(8)57-39)60-38-21-36(53-9)41(50)30(7)56-38;1-24(2)41-27(5)16-17-46(61-41)22-33-19-32(60-46)15-14-26(4)42(25(3)12-11-13-31-23-54-44-39(48)28(6)18-34(45(50)57-33)47(31,44)51)58-38-21-36(53-10)43(30(8)56-38)59-37-20-35(52-9)40(49)29(7)55-37/h12-15,19,25-26,28,30-31,33-45,49-50,52H,11,16-18,20-24H2,1-10H3;11-14,18,24-25,27,29-30,32-44,48-49,51H,15-17,19-23H2,1-10H3/b13-12+,27-15+,32-14+;12-11+,26-14+,31-13+/t25?,26-,28-,30-,31-,33+,34?,35-,36-,37-,38?,39-,40+,41-

0 (Meng et al., 2021)

,42-,43+,44-,45+,47+,48+;25-,27-,29-,30-,32+,33?,34-,35-,36-,37?,38-,39+,40-,41+,42-,43-,44+,46+,47+/m00/s1	
InChI=1S/C48H74O14/c1-11-25(2)43-28(5)17-18-47(62-43)23-34-20-33(61-47)16-15-27(4)42(26(3)13-12-14-32-24-55-45-40(49)29(6)19-35(46(51)58-34)48(32,45)52)59-39-22-37(54-10)44(31(8)57-39)60-38-21-36(53-9)41(50)30(7)56-38/h12-15,19,25-26,28,30-31,33-45,49-50,52H,11,16-18,20-24H2,1-10H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C48H74O14/c1-11-25(2)43-28(5)17-18-47(62-43)23-34-20-33(61-47)16-15-27(4)42(26(3)13-12-14-32-24-55-45-40(49)29(6)19-35(46(51)58-34)48(32,45)52)59-39-22-37(54-10)44(31(8)57-39)60-38-21-36(53-9)41(50)30(7)56-38/h12-15,19,25-26,28,30-31,33-45,49-50,52H,11,16-18,20-24H2,1-10H3/t25-,26+,28+,30-,31-,33+,34-,35-,36-,37-,38-,39-,40+,41+,42-,43+,44-,45?,47-,48+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C49H66N10O10S2/c1-28(61)39(25-60)56-48(68)41-27-71-70-26-40(57-43(63)34(51)21-30-13-5-3-6-14-30)47(67)54-37(22-31-15-7-4-8-16-31)45(65)55-38(23-32-24-52-35-18-10-9-17-33(32)35)46(66)53-36(19-11-12-20-50)44(64)59-42(29(2)62)49(69)58-41/h3-10,13-18,24,28-29,34,36-42,52,60-62H,11-12,19-23,25-27,50-51H2,1-2H3,(H,53,66)(H,54,67)(H,55,65)(H,56,68)(H,57,63)(H,58,69)(H,59,64)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C49H74O14/c1-11-24(2)40-28(6)34-22-48(63-45(34)40)21-33-18-32(62-48)16-15-26(4)43(25(3)13-12-14-31-23-56-46-41(50)27(5)17-35(47(52)59-33)49(31,46)53)60-39-20-37(55-10)44(30(8)58-39)61-38-19-36(54-9)42(51)29(7)57-38/h12-15,17,24-25,28-30,32-46,50-51,53H,11,16,18-23H2,1-10H3/b13-12?,26-15-,31-14?/t24-,25+,28-,29+,30+,32+,33+,34-,35-,36-,37-,38+,39-,40+,41+,42+,43+,44+,45-,46-,48+,49-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C4H10N2/c1-2-6-4-3-5-1/h5-6H,1-4H2	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C4H10NO5P/c6-4-5(7)2-1-3-11(8,9)10/h4,7H,1-3H2,(H2,8,9,10)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C4H10O/c1-2-3-4-5/h5H,2-4H2,1H3	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C4H10O/c1-3-5-4-2/h3-4H2,1-2H3	1 (Shin et al., 2021)
InChI=1S/C4H10O/c1-4(2)3-5/h4-5H,3H2,1-2H3	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C4H10O/c1-4(2,3)5/h5H,1-3H3	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C4H11N5/c1-9(2)4(7)8-3(5)6/h1-2H3,(H5,5,6,7,8)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C4H11NO/c1-5(2)3-4-6/h6H,3-4H2,1-2H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C4H11NO3/c5-4(1-6,2-7)3-8/h6-8H,1-3,5H2	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C4H13NO7P2/c5-3-1-2-4(6,13(7,8)9)14(10,11)12/h6H,1-3,5H2,(H2,7,8,9)(H2,10,11,12)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C4H3ClF4O/c1-10-4(9)2(5,6)3(4,7)8/h1H3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C4H3ClF4O/c1-10-4(9)2(5,6)3(4,7)8/h1H3/t2-,4+/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C4H3ClF4O/c1-10-4(9)2(5,6)3(4,7)8/h1H3/t2-,4+/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C4H3F7O/c5-1-12-2(3(6,7)8)4(9,10)11/h2H,1H2	1 (Shin et al., 2021)

InChI=1S/C4H3FN2O2/c5-2-1-6-4(9)7-3(2)8/h1H,(H2,6,7,8,9)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C4H4F2O/c5-1-3-7-4-2-6/h1-4H	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C4H4F2O/c5-1-3-7-4-2-6/h1-4H/b3-1-,4-2+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C4H4F2O/c5-1-3-7-4-2-6/h1-4H/b3-1+,4-2+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C4H4FN3O/c5-2-1-7-4(9)8-3(2)6/h1H,(H3,6,7,8,9)	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C4H4N2O/c7-4-1-2-5-6-3-4/h1-3H,(H,5,7)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C4H5BrClF3/c5-3(6)1-2-4(7,8)9/h3H,1-2H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C4H5F3O/c1-2-8-3-4(5,6)7/h2H,1,3H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C4H6/c1-3-4-2/h3-4H,1-2H2	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C4H6N2/c1-4-2-5-6-3-4/h2-3H,1H3,(H,5,6)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C4H6N2S/c1-6-3-2-5-4(6)7/h2-3H,1H3,(H,5,7)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C4H6N4O12/c9-5(10)17-1-3(19-7(13)14)4(20-8(15)16)2-18-6(11)12/h3-4H,1-2H2	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C4H6N4O3S2/c1-2(9)6-3-7-8-4(12-3)13(5,10)11/h1H3,(H2,5,10,11)(H,6,7,9)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C4H6O/c1-3-5-4-2/h3-4H,1-2H2	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C4H6O4S2/c5-3(6)1(9)2(10)4(7)8/h1-2,9-10H,(H,5,6)(H,7,8)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C4H7Cl3N2O2/c1-8-3(11)9-2(10)4(5,6)7/h2,10H,1H3,(H2,8,9,11)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C4H7Cl3N2O2/c1-8-3(11)9-2(10)4(5,6)7/h2,10H,1H3,(H2,8,9,11)/t2-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C4H7Cl3N2O2/c1-8-3(11)9-2(10)4(5,6)7/h2,10H,1H3,(H2,8,9,11)/t2-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C4H7Cl3O/c1-3(2,8)4(5,6)7/h8H,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C4H7F3O/c1-3(2,8)4(5,6)7/h8H,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C4H8Cl2/c1-4(2-5)3-6/h4H,2-3H2,1H3	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C4H8O/c1-3-4(2)5/h3H2,1-2H3	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C4H8O2/c1-3-6-4(2)5/h3H2,1-2H3	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C4H8O3/c5-3-1-2-4(6)7/h5H,1-3H2,(H,6,7)	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C4H9ClO/c1-2-3-4(5)6/h4,6H,2-3H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C4H9ClO/c1-2-3-4(5)6/h4,6H,2-3H2,1H3/t4-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C50H60N6O16/c1-47(69)21-11-9-13-27(57)29(21)37(59)31-23(47)17-25-35(53(3)4)39(61)33(43(65)49(25,71)41(31)63)45(67)51-19-55(7)15-16-56(8)20-52-46(68)34-40(62)36(54(5)6)26-18-24-32(42(64)50(26,72)44(34)66)38(60)30-22(48(24,2)70)12-10-14-28(30)58/h9-14,23-26,35-36,57-58,61-64,69-72H,15-20H2,1-8H3,(H,51,67)(H,52,68)/t23-,24-,25-,26+,35+,36-,47+,48+,49-,50+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C50H60N6O16/c1-47(69)21-11-9-13-27(57)29(21)37(59)31-23(47)17-25-35(53(3)4)39(61)33(43(65)49(25,71)41(31)63)45(67)51-19-55(7)15-16-56(8)20-52-46(68)34-40(62)36(54(5)6)26-18-24-32(42(64)50(26,72)44(34)66)38(60)30-22(48(24,2)70)12-10-14-28(30)58/h9-14,23-26,35-36,57-58,61-64,69-72H,15-20H2,1-8H3,(H,51,67)(H,52,68)/t23-,24-,25-,26+,35-,36-,47-,48-,49+,50+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C50H60N6O16/c1-47(69)21-11-9-13-27(57)29(21)37(59)31-23(47)17-25-35(53(3)4)39(61)33(43(65)49(25,71)41(31)63)45(67)51-19-55(7)15-16-56(8)20-52-46(68)34-40(62)36(54(5)6)26-18-24-32(42(64)50(26,72)44(34)66)38(60)30-22(48(24,2)70)12-10-14-28(30)58/h9-14,23-26,35-36,57-60,65-66,69-72H,15-20H2,1-8H3,(H,51,67)(H,52,68)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C50H60N6O16/c1-47(69)21-11-9-13-27(57)29(21)37(59)31-23(47)17-25-35(53(3)4)39(61)33(43(65)49(25,71)41(31)63)45(67)51-19-55(7)15-16-56(8)20-52-46(68)34-40(62)36(54(5)6)26-18-24-32(42(64)50(26,72)44(34)66)38(60)30-22(48(24,2)70)12-10-14-28(30)58/h9-14,23-26,35-36,57-60,65-66,69-72H,15-20H2,1-8H3,(H,51,67)(H,52,68)/t23-,24-,25-,26-,35-,36-,47+,48+,49-,50-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C50H70N14O10/c1-3-4-16-35(58-29(2)65)43(67)64-41-25-42(66)54-20-11-10-18-37(49(73)74)60-46(70)39(23-31-26-56-34-17-9-8-15-33(31)34)62-44(68)36(19-12-21-55-50(51)52)59-45(69)38(22-30-13-6-5-7-14-30)61-47(71)40(63-48(41)72)24-32-27-53-28-57-32/h5-9,13-15,17,26-28,33-41,56H,3-4,10-12,16,18-25H2,1-2H3,(H,53,57)(H,54,66)(H,58,65)(H,59,69)(H,60,70)(H,61,71)(H,62,68)(H,63,72)(H,64,67)(H,73,74)(H4,51,52,55)/t33?,34?,35-,36-,37-,38+,39-,40-,41-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C51H79NO13/c1-30-16-12-11-13-17-31(2)42(61-8)28-38-21-19-36(7)51(60,65-38)48(57)49(58)52-23-15-14-18-39(52)50(59)64-43(33(4)26-37-20-22-40(53)44(27-37)62-9)29-41(54)32(3)25-35(6)46(56)47(63-10)45(55)34(5)24-30/h11-13,16-17,25,30,32-34,36-40,42-44,46-47,53,56,60H,14-15,18-24,26-29H2,1-10H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C51H79NO13/c1-30-16-12-11-13-17-31(2)42(61-8)28-38-21-19-36(7)51(60,65-38)48(57)49(58)52-23-15-14-18-39(52)50(59)64-43(33(4)26-37-20-22-40(53)44(27-37)62-9)29-41(54)32(3)25-35(6)46(56)47(63-10)45(55)34(5)24-30/h11-13,16-17,25,30,32-34,36-40,42-44,46-47,53,56,60H,14-15,18-24,26-29H2,1-10H3/b13-11+,16-12+,31-17+,35-25?/t30?,32-,33?,34?,36-,37?,38?,39?,40-,42+,43?,44?,46+,47?,51-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C51H79NO13/c1-30-16-12-11-13-17-31(2)42(61-8)28-38-21-19-36(7)51(60,65-38)48(57)49(58)52-23-15-14-18-39(52)50(59)64-43(33(4)26-37-20-22-40(53)44(27-37)62-9)29-41(54)32(3)25-35(6)46(56)47(63-10)45(55)34(5)24-30/h11-13,16-17,25,30,32-34,36-40,42-44,46-47,53,56,60H,14-15,18-24,26-29H2,1-10H3/b13-11+,16-12+,31-17+,35-25+/t30-,32-,33-,34-,36-,37+,38+,39+,40-,42+,43+,44-,46-,47+,51-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C52H76O24/c1-18-29(72-34-14-30(43(58)21(4)68-34)73-33-13-28(54)42(57)20(3)67-33)12-26-10-25-11-27(49(66-9)48(63)41(56)19(2)53)50(47(62)39(25)46(61)38(26)40(18)55)76-36-16-31(44(59)23(6)70-36)74-35-15-32(45(60)22(5)69-35)75-37-17-52(8,65)51(64)24(7)71-37/h10,12,19-24,27-28,30-37,41-45,49-51,53-61,64-65H,11,13-17H2,1-9H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C52H76O24/c1-18-29(72-34-14-30(43(58)21(4)68-34)73-33-13-28(54)42(57)20(3)67-33)12-26-10-25-11-27(49(66-9)48(63)41(56)19(2)53)50(47(62)39(25)46(61)38(26)40(18)55)76-36-16-31(44(59)23(6)70-36)74-35-15-32(45(60)22(5)69-35)75-37-17-52(8,65)51(64)24(7)71-37/h10,12,19-24,27-28,30-37,41-45,49-51,53-61,64-65H,11,13-17H2,1-9H3/t19-,20-,21-,22-,23-,24-,27+,28-,30-,31-,32-,33+,34+,35+,36?,37+,41+,42-,43+,44-,45-,49+,50+,51-,52+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C52H76O24/c1-18-29(72-34-14-30(43(58)21(4)68-34)73-33-13-28(54)42(57)20(3)67-33)12-26-10-25-11-27(49(66-9)48(63)41(56)19(2)53)50(47(62)39(25)46(61)38(26)40(18)55)76-36-16-31(44(59)23(6)70-36)74-35-15-32(45(60)22(5)69-35)75-37-17-52(8,65)51(64)24(7)71-37/h10,12,19-24,27-28,30-37,41-45,49-51,53-61,64-65H,11,13-17H2,1-9H3/t19-,20-,21-,22-,23-,24-,27+,28-,30-,31-,32-,33+,34+,35+,36+,37+,41+,42-,43-,44-,45-,49+,50+,51-,52+/m1/s1 1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C52H76O24/c1-18-29(72-34-14-30(43(58)21(4)68-34)73-33-13-28(54)42(57)20(3)67-33)12-26-10-25-11-27(49(66-9)48(63)41(56)19(2)53)50(47(62)39(25)46(61)38(26)40(18)55)76-36-16-31(44(59)23(6)70-36)74-35-15-32(45(60)22(5)69-35)75-37-17-52(8,65)51(64)24(7)71-37/h10,12,19-24,27-28,30-37,41-45,49-51,53-61,64-65H,11,13-17H2,1-9H3/t19-,20-,21-,22-,23-,24-,27+,28-,30-,31-,32-,33+,34+,35+,36+,37+,41+,42-,43-,44-,45-,49+,50+,51-,52+/m1/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C52H76O24/c1-18-29(72-34-14-30(43(58)21(4)68-34)73-33-13-28(54)42(57)20(3)67-33)12-26-10-25-11-27(49(66-9)48(63)41(56)19(2)53)50(47(62)39(25)46(61)38(26)40(18)55)76-36-16-31(44(59)23(6)70-36)74-35-15-32(45(60)22(5)69-35)75-37-17-52(8,65)51(64)24(7)71-37/h10,12,19-24,27-28,30-37,41-45,49-51,53-61,64-65H,11,13-17H2,1-9H3/t19-,20-,21-,22-,23-,24-,27+,28-,30-,31-,32-,33+,34+,35+,36+,37+,41+,42-,43-,44-,45-,49+,50+,51-,52+/m1/s1 1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C52H76O24/c1-18-30(72-35-15-31(43(59)21(4)68-35)73-33-13-28(54)42(58)20(3)67-33)12-26-10-25-11-27(49(66-9)47(63)41(57)19(2)53)50(46(62)39(25)45(61)38(26)40(18)56)75-36-16-32(44(60)22(5)69-36)74-34-14-29(55)48(23(6)70-34)76-37-17-52(8,65)51(64)24(7)71-37/h10,12,19-24,27-29,31-37,41-44,48-51,53-61,64-65H,11,13-17H2,1-9H3 1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C52H86N6O18/c1-22(2)34-47(65)71-21-30(16)42(60)54-37(25(7)8)50(68)74-33(19)45(63)57-39(27(11)12)52(70)76-40(28(13)14)46(64)58-38(26(9)10)51(69)75-32(18)44(62)56-35(23(3)4)48(66)72-20-29(15)41(59)53-36(24(5)6)49(67)73-31(17)43(61)55-34/h22-40H,20-21H2,1-19H3,(H,53,59)(H,54,60)(H,55,61)(H,56,62)(H,57,63)(H,58,64) 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C52H86N6O18/c1-22(2)34-47(65)71-21-30(16)42(60)54-37(25(7)8)50(68)74-33(19)45(63)57-39(27(11)12)52(70)76-40(28(13)14)46(64)58-38(26(9)10)51(69)75-32(18)44(62)56-35(23(3)4)48(66)72-20-29(15)41(59)53-36(24(5)6)49(67)73-31(17)43(61)55-34/h22-40H,20-21H2,1-19H3,(H,53,59)(H,54,60)(H,55,61)(H,56,62)(H,57,63)(H,58,64)/t29-,30-,31+,32-,33+,34+,35+,36-,37+,38-,39+,40+/m0/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C52H86N6O18/c1-22(2)34-47(65)71-21-30(16)42(60)54-37(25(7)8)50(68)74-33(19)45(63)57-39(27(11)12)52(70)76-40(28(13)14)46(64)58-38(26(9)10)51(69)75-32(18)44(62)56-35(23(3)4)48(66)72-20-29(15)41(59)53-36(24(5)6)49(67)73-31(17)43(61)55-34/h22-40H,20-21H2,1-19H3,(H,53,59)(H,54,60)(H,55,61)(H,56,62)(H,57,63)(H,58,64)/t29-,30-,31+,32+,33+,34-,35+,36+,37+,38+,39+,40+/m1/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C52H98N16O13/c1-9-29(6)11-10-12-40(71)59-32(13-19-53)47(76)68-42(31(8)70)52(81)64-35(16-22-56)44(73)63-37-18-24-58-51(80)41(30(7)69)67-48(77)36(17-23-57)61-43(72)33(14-20-54)62-49(78)38(25-27(2)3)66-50(79)39(26-28(4)5)65-45(74)34(15-21-55)60-46(37)75/h27-39,41-42,69-70H,9-26,53-57H2,1-8H3,(H,58,80)(H,59,71)(H,60,75)(H,61,72)(H,62,78)(H,63,73)(H,64,81)(H,65,74)(H,66,79)(H,67,77)(H,68,76) 0 (Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C53H72N2O12.2C6H6O3S/c1-54(22-18-38-32-48(62-7)50(64-9)34-40(38)42(54)28-36-14-16-44(58-3)46(30-36)60-5)24-20-52(56)66-26-12-11-13-27-67-53(57)21-25-55(2)23-19-39-33-49(63-8)51(65-10)35-41(39)43(55)29-37-15-17-45(59-4)47(31-37)61-6;2*7-10(8,9)6-4-2-1-3-5-6/h14-17,30-35,42-43H,11-13,18-29H2,1-10H3;2*1-5H,(H,7,8,9)/q+2;;/p-2/t42-,43-,54-,55-;;/m1../s1 0 (Kaupp, 2007)

InChI=1S/C53H72N2O12/c1-54(22-18-38-32-48(62-7)50(64-9)34-40(38)42(54)28-36-14-16-44(58-3)46(30-36)60-5)24-20-52(56)66-26-12-11-13-27-67-53(57)21-25-55(2)23-19-39-33-49(63-8)51(65-10)35-41(39)43(55)29-37-15-17-45(59-4)47(31-37)61-6/h14-17,30-35,42-43H,11-13,18-29H2,1-10H3/q+2/t42-,43-,54-,55-/m0/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C53H83NO14/c1-32-16-12-11-13-17-33(2)44(63-8)30-40-21-19-38(7)53(62,68-40)50(59)51(60)54-23-15-14-18-41(54)52(61)67-45(35(4)28-39-20-22-43(66-25-24-55)46(29-39)64-9)31-42(56)34(3)27-37(6)48(58)49(65-10)47(57)36(5)26-32/h11-13,16-17,27,32,34-36,38-41,43-46,48-49,55,58,62H,14-15,18-26,28-31H2,1-10H3/b13-11+,16-12+,33-17+,37-27?/t32?,34-,35?,36?,38-,39?,40?,41?,43-

,44+,45?,46?,48+,49?,53-/m1/s1	
InChI=1S/C54H90N6O18/c1-22(2)34-49(67)73-31(19)43(61)55-38(26(9)10)53(71)77-41(29(15)16)47(65)59-36(24(5)6)51(69)75-33(21)45(63)57-39(27(11)12)54(72)78-42(30(17)18)48(66)60-35(23(3)4)50(68)74-32(20)44(62)56-37(25(7)8)52(70)76-40(28(13)14)46(64)58-34/h22-42H,1-21H3,(H,55,61)(H,56,62)(H,57,63)(H,58,64)(H,59,65)(H,60,66)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C54H90N6O18/c1-22(2)34-49(67)73-31(19)43(61)55-38(26(9)10)53(71)77-41(29(15)16)47(65)59-36(24(5)6)51(69)75-33(21)45(63)57-39(27(11)12)54(72)78-42(30(17)18)48(66)60-35(23(3)4)50(68)74-32(20)44(62)56-37(25(7)8)52(70)76-40(28(13)14)46(64)58-34/h22-42H,1-21H3,(H,55,61)(H,56,62)(H,57,63)(H,58,64)(H,59,65)(H,60,66)/t31-,32-,33-,34+,35+,36?,37-,38-,39-,40+,41+,42+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C55H75N17O13/c1-29(2)19-38(49(80)67-37(9-5-17-60-55(57)58)54(85)72-18-6-10-43(72)53(84)62-25-44(56)75)66-46(77)26-63-47(78)39(20-30-11-13-33(74)14-12-30)68-52(83)42(27-73)71-50(81)40(21-31-23-61-35-8-4-3-7-34(31)35)69-51(82)41(22-32-24-59-28-64-32)70-48(79)36-15-16-45(76)65-36/h3-4,7-8,11-14,23-24,28-29,36-43,61,73-74H,5-6,9-10,15-22,25-27H2,1-2H3,(H2,56,75)(H,59,64)(H,62,84)(H,63,78)(H,65,76)(H,66,77)(H,67,80)(H,68,83)(H,69,82)(H,70,79)(H,71,81)(H4,57,58,60)/t36-,37-,38-,39-,40-,41-,42-,43-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C56H78N2O16/c1-57(23-19-37-33-45(65-7)53(69-11)55(71-13)49(37)39(57)27-35-29-41(61-3)51(67-9)42(30-35)62-4)21-15-25-73-47(59)17-18-48(60)74-26-16-22-58(2)24-20-38-34-46(66-8)54(70-12)56(72-14)50(38)40(58)28-36-31-43(63-5)52(68-10)44(32-36)64-6/h29-34,39-40H,15-28H2,1-14H3/q+2	0 (Kaupp, 2007)
InChI=1S/C56H87N016/c1-33-17-13-12-14-18-34(2)45(68-9)29-41-22-20-39(7)56(67,73-41)51(63)52(64)57-24-16-15-19-42(57)53(65)71-46(30-43(60)35(3)26-38(6)49(62)50(70-11)48(61)37(5)25-33)36(4)27-40-21-23-44(47(28-40)69-10)72-54(66)55(8,31-58)32-59/h12-14,17-18,26,33,35-37,39-42,44-47,49-50,58-59,62,67H,15-16,19-25,27-32H2,1-11H3/b14-12+,17-13+,34-18+,38-26?/t33?,35-,36?,37?,39-,40?,41?,42?,44+,45+,46?,47?,49+,50?,56-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C57H65F5N10O8/c1-29(77-3)49(67-56(75)79-5)54(73)70-19-7-9-47(70)52-63-41-25-35(37(59)27-43(41)65-52)45-15-16-46(72(45)34-23-39(61)51(40(62)24-34)69-21-17-32(18-22-69)31-11-13-33(58)14-12-31)36-26-42-44(28-38(36)60)66-53(64-42)48-10-8-20-71(48)55(74)50(30(2)78-4)68-57(76)80-6/h11-14,23-30,32,45-50H,7-10,15-22H2,1-6H3,(H,63,65)(H,64,66)(H,67,75)(H,68,76)/t29-,30-,45-,46-,47+,48+,49+,50+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C58H80N2O14/c1-59(25-21-41-35-47(63-3)49(65-5)37-43(41)45(59)29-39-31-51(67-7)57(71-11)52(32-39)68-8)23-17-27-73-55(61)19-15-13-14-16-20-56(62)74-28-18-24-60(2)26-22-42-36-48(64-4)50(66-6)38-44(42)46(60)30-40-33-53(69-9)58(72-12)54(34-40)70-10/h13-14,31-38,45-46H,15-30H2,1-12H3/q+2/b14-13+/t45-,46-,59?,60?/m1/s1	0 (Kaupp, 2007)
InChI=1S/C58H80N2O14/c1-59(25-21-41-35-47(63-3)49(65-5)37-43(41)45(59)29-39-31-51(67-7)57(71-11)52(32-39)68-8)23-17-27-73-55(61)19-15-13-14-16-20-56(62)74-28-18-24-60(2)26-22-42-36-48(64-4)50(66-6)38-44(42)46(60)30-40-33-53(69-9)58(72-12)54(34-40)70-10/h13-14,31-38,45-46H,15-30H2,1-12H3/q+2/b14-13+/t45-,46-,59+,60+/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C58H90N12O10/c1-7-42(51(73)62-40(35-71)23-15-27-59)63-55(77)48-25-18-30-70(48)58(80)47(34-39-21-13-10-14-22-39)68-54(76)45(32-37(5)6)66-53(75)44(24-16-28-60)65-52(74)43(8-2)64-56(78)49-26-17-29-69(49)57(79)46(33-38-19-11-9-12-20-38)67-50(72)41(61)31-36(3)4/h9-14,19-22,35-37,40-49H,7-8,15-18,23-34,59-61H2,1-6H3,(H,62,73)(H,63,77)(H,64,78)(H,65,74)(H,66,75)(H,67,72)(H,68,76)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C58H90N12O10/c1-7-42(51(73)62-40(35-71)23-15-27-59)63-55(77)48-25-18-30-70(48)58(80)47(34-39-21-13-10-14-22-39)68-54(76)45(32-37(5)6)66-53(75)44(24-16-28-60)65-52(74)43(8-2)64-56(78)49-26-17-29-69(49)57(79)46(33-38-19-11-9-12-20-38)67-50(72)41(61)31-36(3)4/h9-14,19-22,35-37,40-49H,7-8,15-18,23-34,59-61H2,1-6H3,(H,62,73)(H,63,77)(H,64,78)(H,65,74)(H,66,75)(H,67,72)(H,68,76)/t40-,41-,42-,43-,44-,45-,46+,47+,48-,49-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C58H90N12O10/c1-7-42(51(73)62-40(35-71)23-15-27-59)63-55(77)48-25-18-30-70(48)58(80)47(34-39-21-13-10-14-22-39)68-54(76)45(32-37(5)6)66-53(75)44(24-16-28-60)65-52(74)43(8-2)64-56(78)49-26-17-29-69(49)57(79)46(33-38-19-11-9-12-20-38)67-50(72)41(61)31-36(3)4/h9-14,19-22,35-37,40-49H,7-8,15-18,23-34,59-61H2,1-6H3,(H,62,73)(H,63,77)(H,64,78)(H,65,74)(H,66,75)(H,67,72)(H,68,76)/t40-,41+,42-,43+,44+,45-,46-,47+,48-,49+/m1/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C58H90N12O10/c1-7-42(51(73)62-40(35-71)23-15-27-59)63-55(77)48-25-18-30-70(48)58(80)47(34-39-21-13-10-14-22-39)68-54(76)45(32-37(5)6)66-53(75)44(24-16-28-60)65-52(74)43(8-2)64-56(78)49-26-17-29-69(49)57(79)46(33-38-19-11-9-12-20-38)67-50(72)41(61)31-36(3)4/h9-14,19-22,35-37,40-49H,7-8,15-18,23-34,59-61H2,1-6H3,(H,62,73)(H,63,77)(H,64,78)(H,65,74)(H,66,75)(H,67,72)(H,68,76)/t40-,41+,42+,43+,44+,45+,46+,47+,48+,49+/m0/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C59H84N16O12/c1-6-63-57(86)48-14-10-22-75(48)58(87)41(13-9-21-64-59(60)61)68-51(80)42(23-32(2)3)69-52(81)43(24-33(4)5)70-53(82)44(25-34-15-17-37(77)18-16-34)71-56(85)47(30-76)74-54(83)45(26-35-28-65-39-12-8-7-11-38(35)39)72-55(84)46(27-36-29-62-31-66-36)73-50(79)40-19-20-49(78)67-40/h7-8,11-12,15-18,28-29,31-33,40-48,65,76-77H,6,9-10,13-14,19-27,30H2,1-5H3,(H,62,66)(H,63,86)(H,67,78)(H,68,80)(H,69,81)(H,70,82)(H,71,85)(H,72,84)(H,73,79)(H,74,83)(H4,60,61,64)/t40-,41-,42-,43+,44-,45-,46-,47-,48-/m0/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C59H84N18O14/c1-31(2)22-40(49(82)68-39(12-8-20-64-57(60)61)56(89)77-21-9-13-46(77)55(88)75-76-58(62)90)69-54(87)45(29-91-59(3,4)5)74-50(83)41(23-32-14-16-35(79)17-15-32)70-53(86)44(28-78)73-51(84)42(24-33-26-65-37-11-7-6-10-36(33)37)71-52(85)43(25-34-27-63-30-66-34)72-48(81)38-18-19-47(80)67-38/h6-7,10-11,14-17,26-27,30-31,38-46,65,78-79H,8-9,12-13,18-25,28-29H2,1-5H3,(H,63,66)(H,67,80)(H,68,82)(H,69,87)(H,70,86)(H,71,85)(H,72,81)(H,73,84)(H,74,83)(H,75,88)(H4,60,61,64)(H3,62,76,90)/t38-,39-,40-,41-,42-,43-,44-,45+,46-/m0/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C59H88N2O20/c1-15-17-19-27-39-58(8,9)53(80-56-45(67)50(74-13)49(35(7)76-56)79-57-51(75-14)44(66)48(73-12)34(6)77-57)52(68)59(71,81-39)36(16-2)54(69)60-29-23-22-25-32(4)46(72-11)33(5)47-43(65)42(64)38(78-47)26-21-18-20-24-31(3)41(63)40-37(62)28-30-61(10)55(40)70/h15,17-28,30,33-36,38-39,42-53,56-57,62,64-68,71H,16,29H2,1-14H3,(H,60,69) 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C59H88N2O20/c1-15-17-19-27-39-58(8,9)53(80-56-45(67)50(74-13)49(35(7)76-56)79-57-51(75-14)44(66)48(73-12)34(6)77-57)52(68)59(71,81-39)36(16-2)54(69)60-29-23-22-25-32(4)46(72-11)33(5)47-43(65)42(64)38(78-47)26-21-18-20-24-31(3)41(63)40-37(62)28-30-61(10)55(40)70/h15,17-28,30,33-36,38-39,42-53,56-57,62,64-68,71H,16,29H2,1-14H3,(H,60,69)/b17-15-,20-18+,23-22+,26-21+,27-19+,31-24+,32-25+/t33-,34+,35-,36-,38-,39+,42+,43+,44-,45-,46-,47?,48+,49-,50+,51-,52-,53+,56+,57+,59-/m1/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C59H88N2O20/c1-15-17-19-27-39-58(8,9)53(80-56-45(67)50(74-13)49(35(7)76-56)79-57-51(75-14)44(66)48(73-12)34(6)77-57)52(68)59(71,81-39)36(16-2)54(69)60-29-23-22-25-32(4)46(72-11)33(5)47-43(65)42(64)38(78-47)26-21-18-20-24-31(3)41(63)40-37(62)28-30-61(10)55(40)70/h15,17-28,30,33-36,38-39,42-53,56-57,62,64-68,71H,16,29H2,1-14H3,(H,60,69)/b17-15+,20-18+,23-22+,26-21?,27-19?,31-24-,32-25-/t33-,34+,35+,36-,38-,39-,42-,43-,44-,45-,46+,47+,48+,49+,50-,51+,52-,53-,56+,57+,59+/m0/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C59H88N2O20/c1-15-17-19-27-39-58(8,9)53(80-56-45(67)50(74-13)49(35(7)76-56)79-57-51(75-14)44(66)48(73-12)34(6)77-57)52(68)59(71,81-39)36(16-2)54(69)60-29-23-22-25-32(4)46(72-11)33(5)47-43(65)42(64)38(78-47)26-21-18-20-24-31(3)41(63)40-37(62)28-30-61(10)55(40)70/h15,17-28,30,33-36,38-39,42-53,56-57,62,64-68,71H,16,29H2,1-14H3,(H,60,69)/b17-15+,20-18+,23-22+,26-21+,27-19+,31-24+,32-25+/t33-,34+,35-,36+,38+,39-,42-,43+,44-,45+,46-,47-,48+,49+,50+,51+,52-,53-,56-,57-,59+/m1/s1 0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C59H90N12O10/c1-8-40-50(72)63-41(23-15-27-60)51(73)65-43(31-35(2)3)53(75)68-46(34-39-21-13-10-14-22-39)59(81)71-30-18-26-48(71)56(78)69-49(37(6)7)57(79)64-42(24-16-28-61)52(74)66-44(32-36(4)5)54(76)67-45(33-38-19-11-9-12-20-38)58(80)70-29-17-25-47(70)55(77)62-40/h9-14,19-22,35-37,40-49H,8,15-18,23-34,60-61H2,1-7H3,(H,62,77)(H,63,72)(H,64,79)(H,65,73)(H,66,74)(H,67,76)(H,68,75)(H,69,78)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C59H90N12O10/c1-8-40-50(72)63-41(23-15-27-60)51(73)65-43(31-35(2)3)53(75)68-46(34-39-21-13-10-14-22-39)59(81)71-30-18-26-48(71)56(78)69-49(37(6)7)57(79)64-42(24-16-28-61)52(74)66-44(32-36(4)5)54(76)67-45(33-38-19-11-9-12-20-38)58(80)70-29-17-25-47(70)55(77)62-40/h9-14,19-22,35-37,40-49H,8,15-18,23-34,60-61H2,1-7H3,(H,62,77)(H,63,72)(H,64,79)(H,65,73)(H,66,74)(H,67,76)(H,68,75)(H,69,78)/t40-,41-,42-,43-,44-,45-,46-,47-,48-,49+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C59H90N12O10/c1-8-40-50(72)63-41(23-15-27-60)51(73)65-43(31-35(2)3)53(75)68-46(34-39-21-13-10-14-22-39)59(81)71-30-18-26-48(71)56(78)69-49(37(6)7)57(79)64-42(24-16-28-61)52(74)66-44(32-36(4)5)54(76)67-45(33-38-19-11-9-12-20-38)58(80)70-29-17-25-47(70)55(77)62-40/h9-14,19-22,35-37,40-49H,8,15-18,23-34,60-61H2,1-7H3,(H,62,77)(H,63,72)(H,64,79)(H,65,73)(H,66,74)(H,67,76)(H,68,75)(H,69,78)/t40-,41-,42-,43-,44-,45+,46+,47-,48-,49-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C59H90N12O10/c1-8-40-50(72)63-41(23-15-27-60)51(73)65-43(31-35(2)3)53(75)68-46(34-39-21-13-10-14-22-39)59(81)71-30-18-26-48(71)56(78)69-49(37(6)7)57(79)64-42(24-16-28-61)52(74)66-44(32-36(4)5)54(76)67-45(33-38-19-11-9-12-20-38)58(80)70-29-17-25-47(70)55(77)62-40/h9-14,19-22,35-37,40-49H,8,15-18,23-34,60-61H2,1-7H3,(H,62,77)(H,63,72)(H,64,79)(H,65,73)(H,66,74)(H,67,76)(H,68,75)(H,69,78)/t40-,41-,42+,43+,44-,45+,46+,47+,48-,49-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C5H10N2O7P2/c8-5(15(9,10)11,16(12,13)14)3-7-2-1-6-4-7/h1-2,4,8H,3H2,(H2,9,10,11)(H2,12,13,14)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C5H10O/c1-3-4-5(2)6/h3-4H2,1-2H3	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C5H10O2/c1-3-4-7-5(2)6/h3-4H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C5H10O2/c1-4(2)7-5(3)6/h4H,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C5H10O5/c6-1-3(8)5(10)4(9)2-7/h1,3-5,7-10H,2H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C5H10O5/c6-2-1-10-5(9)4(8)3(2)7/h2-9H,1H2	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C5H11Cl2N/c1-8(4-2-6)5-3-7/h2-5H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C5H11NO2/c1-2-3-4-5-8-6-7/h2-5H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C5H11NO2S/c1-5(2,9)3(6)4(7)8/h3,9H,6H2,1-2H3,(H,7,8)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C5H11NO4S/c1-5(7)6-3-2-4-11(8,9)10/h2-4H2,1H3,(H,6,7)(H,8,9,10)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C5H12/c1-3-5-4-2/h3-5H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C5H12O/c1-2-3-4-5-6/h6H,2-5H2,1H3	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C5H12O/c1-3-5(2)4-6/h5-6H,3-4H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C5H12O/c1-4-5(2,3)6/h6H,4H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C5H12O/c1-5(2)3-4-6/h5-6H,3-4H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C5H12O/c1-5(2,3)6-4/h1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C5H14NO/c1-6(2,3)4-5-7/h7H,4-5H2,1-3H3/q+1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C5H15N2O3PS/c6-2-1-3-7-4-5-12-11(8,9)10/h7H,1-6H2,(H2,8,9,10)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C5H4Cl6O3/c6-4(7,8)1-13-3(12)14-2-5(9,10)11/h1-2H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C5H4N4O/c10-5-3-1-8-9-4(3)6-2-7-5/h1-2H,(H2,6,7,8,9,10)	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C5H4N4S/c10-5-3-4(7-1-6-3)8-2-9-5/h1-2H,(H2,6,7,8,9,10)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C5H5N3O/c6-5(9)4-3-7-1-2-8-4/h1-3H,(H2,6,9)	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C5H5N5/c6-4-3-5(9-1-7-3)10-2-8-4/h1-2H,(H3,6,7,8,9,10)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C5H5N5S/c6-5-9-3-2(4(11)10-5)7-1-8-3/h1H,(H4,6,7,8,9,10,11)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C5H5NOS/c7-6-4-2-1-3-5(6)8/h1-4,7H	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C5H6ClNS/c6-2-1-5-3-7-4-8-5/h3-4H,1-2H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C5H6N2/c6-5-1-3-7-4-2-5/h1-4H,(H2,6,7)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C5H7NO3/c1-5(2)3(7)6-4(8)9-5/h1-2H3,(H,6,7,8)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C5H8Cl3NO3/c1-2-12-4(11)9-3(10)5(6,7)8/h3,10H,2H2,1H3,(H,9,11)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C5H8Cl3NO3/c1-2-12-4(11)9-3(10)5(6,7)8/h3,10H,2H2,1H3,(H,9,11)/t3-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C5H8Cl3NO3/c1-2-12-4(11)9-3(10)5(6,7)8/h3,10H,2H2,1H3,(H,9,11)/t3-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C5H8N2S/c6-2-1-5-7-3-4-8-5/h3-4H,1-2,6H2	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C5H8N2S/c6-2-1-5-7-3-4-8-5/h3-4H,1-2,6H2/p+1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C5H8N4O12/c10-6(11)18-1-5(2-19-7(12)13,3-20-8(14)15)4-21-9(16)17/h1-4H2	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C5H8N4O3S2/c1-3(10)7-4-9(2)8-5(13-4)14(6,11)12/h1-2H3,(H2,6,11,12)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C5H8N4S/c1-3-2-10-5(8-3)9-4(6)7/h2H,1H3,(H4,6,7,8,9)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C5H8N4S/c1-3-2-8-5(10-3)9-4(6)7/h2H,1H3,(H4,6,7,8,9)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C5H9Cl2N3O2/c6-1-3-8-5(11)10(9-12)4-2-7/h1-4H2,(H,8,11)	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C5H9N3/c6-2-1-5-3-7-4-8-5/h3-4H,1-2,6H2,(H,7,8)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C5H9N3/c6-3-1-5-2-4-7-8-5/h2,4H,1,3,6H2,(H,7,8)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C5H9NO3S/c1-3(10)5(9)6-2-4(7)8/h3,10H,2H2,1H3,(H,6,9)(H,7,8)	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C5H9NO3S/c1-3(7)6-4(2-10)5(8)9/h4,10H,2H2,1H3,(H,6,7)(H,8,9)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C5H9NO3S/c1-3(7)6-4(2-10)5(8)9/h4,10H,2H2,1H3,(H,6,7)(H,8,9)/t4-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C5H9NO4/c6-3(5(9)10)1-2-4(7)8/h3H,1-2,6H2,(H,7,8)(H,9,10)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C5H9NO4S/c6-3(5(9)10)1-11-2-4(7)8/h3H,1-2,6H2,(H,7,8)(H,9,10)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C60H88N2O19/c1-36-19-17-15-13-11-9-7-6-8-10-12-14-16-18-20-50(79-59-55(74)53(61)54(73)38(3)78-59)57-52(58(75)77-5)49(71)35-60(76,81-57)34-47(69)31-45(67)29-43(65)27-42(64)28-44(66)30-46(68)33-51(72)80-56(36)37(2)21-26-41(63)32-48(70)39-22-24-40(62-4)25-23-39/h6-19,22-25,36-38,41-43,45-47,49-50,52-57,59,62-65,67-69,71,73-74,76H,20-21,26-35,61H2,1-5H3/b7-6-,10-8+,11-9-,14-12+,15-13+,18-16+,19-17+/t36?,37?,38-,41?,42?,43?,45?,46?,47?,49?,50?,52?,53+,54-,55+,56?,57?,59?,60?/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C60H92N12O10/c1-35(2)31-43-53(75)67-45(33-39-19-11-9-12-20-39)59(81)71-29-17-25-47(71)55(77)70-50(38(7)8)58(80)64-42(24-16-28-62)52(74)66-44(32-36(3)4)54(76)68-46(34-40-21-13-10-14-22-40)60(82)72-30-18-26-48(72)56(78)69-49(37(5)6)57(79)63-41(23-15-27-61)51(73)65-43/h9-14,19-22,35-38,41-50H,15-18,23-34,61-62H2,1-8H3,(H,63,79)(H,64,80)(H,65,73)(H,66,74)(H,67,75)(H,68,76)(H,69,78)(H,70,77)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C60H92N12O10/c1-35(2)31-43-53(75)67-45(33-39-19-11-9-12-20-39)59(81)71-29-17-25-47(71)55(77)70-50(38(7)8)58(80)64-42(24-16-28-62)52(74)66-44(32-36(3)4)54(76)68-46(34-40-21-13-10-14-22-40)60(82)72-30-18-26-48(72)56(78)69-49(37(5)6)57(79)63-41(23-15-27-61)51(73)65-43/h9-14,19-22,35-38,41-50H,15-18,23-34,61-62H2,1-8H3,(H,63,79)(H,64,80)(H,65,73)(H,66,74)(H,67,75)(H,68,76)(H,69,78)(H,70,77)/t41-,42-,43-,44-,45-,46-,47-,48-,49+,50+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C60H92N12O10/c1-35(2)31-43-53(75)67-45(33-39-19-11-9-12-20-39)59(81)71-29-17-25-47(71)55(77)70-50(38(7)8)58(80)64-42(24-16-28-62)52(74)66-44(32-36(3)4)54(76)68-46(34-40-21-13-10-14-22-40)60(82)72-30-18-26-48(72)56(78)69-49(37(5)6)57(79)63-41(23-15-27-61)51(73)65-43/h9-14,19-22,35-38,41-50H,15-18,23-34,61-62H2,1-8H3,(H,63,79)(H,64,80)(H,65,73)(H,66,74)(H,67,75)(H,68,76)(H,69,78)(H,70,77)/t41-,42-,43-,44-,45+,46+,47-,48-,49-,50-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C60H92N12O10/c1-35(2)31-43-53(75)67-45(33-39-19-11-9-12-20-39)59(81)71-29-17-25-47(71)55(77)70-50(38(7)8)58(80)64-42(24-16-28-62)52(74)66-44(32-36(3)4)54(76)68-46(34-40-21-13-10-14-22-40)60(82)72-30-18-26-48(72)56(78)69-49(37(5)6)57(79)63-41(23-15-27-61)51(73)65-43/h9-14,19-22,35-38,41-50H,15-18,23-34,61-62H2,1-8H3,(H,63,79)(H,64,80)(H,65,73)(H,66,74)(H,67,75)(H,68,76)(H,69,78)(H,70,77)/t41-,42+,43-,44+,45-,46-,47-,48+,49-,50-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C62H111N11O12/c1-25-27-28-40(15)52(75)51-56(79)65-43(26-2)58(81)67(18)33-48(74)68(19)44(29-34(3)4)55(78)66-49(38(11)12)61(84)69(20)45(30-35(5)6)54(77)63-41(16)53(76)64-42(17)57(80)70(21)46(31-36(7)8)59(82)71(22)47(32-37(9)10)60(83)72(23)50(39(13)14)62(85)73(51)24/h25,27,34-47,49-52,75H,26,28-33H2,1-24H3,(H,63,77)(H,64,76)(H,65,79)(H,66,78)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C62H111N11O12/c1-25-27-28-40(15)52(75)51-56(79)65-43(26-2)58(81)67(18)33-48(74)68(19)44(29-34(3)4)55(78)66-49(38(11)12)61(84)69(20)45(30-35(5)6)54(77)63-41(16)53(76)64-42(17)57(80)70(21)46(31-36(7)8)59(82)71(22)47(32-37(9)10)60(83)72(23)50(39(13)14)62(85)73(51)24/h25,27,34-47,49-52,75H,26,28-33H2,1-24H3,(H,63,77)(H,64,76)(H,65,79)(H,66,78)/b27-25+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C62H111N11O12/c1-25-27-28-40(15)52(75)51-56(79)65-43(26-2)58(81)67(18)33-48(74)68(19)44(29-34(3)4)55(78)66-49(38(11)12)61(84)69(20)45(30-35(5)6)54(77)63-41(16)53(76)64-42(17)57(80)70(21)46(31-36(7)8)59(82)71(22)47(32-37(9)10)60(83)72(23)50(39(13)14)62(85)73(51)24/h25,27,34-47,49-52,75H,26,28-33H2,1-24H3,(H,63,77)(H,64,76)(H,65,79)(H,66,78)/b27-25+/t40-,41-,42+,43-,44+,45+,46+,47+,49-,50-,51+,52+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C62H111N11O12/c1-25-27-28-40(15)52(75)51-56(79)65-43(26-2)58(81)67(18)33-48(74)68(19)44(29-34(3)4)55(78)66-49(38(11)12)61(84)69(20)45(30-35(5)6)54(77)63-41(16)53(76)64-42(17)57(80)70(21)46(31-36(7)8)59(82)71(22)47(32-37(9)10)60(83)72(23)50(39(13)14)62(85)73(51)24/h25,27,34-47,49-52,75H,26,28-33H2,1-24H3,(H,63,77)(H,64,76)(H,65,79)(H,66,78)/b27-25+/t40-,41+,42-,43+,44+,45+,46+,47+,49+,50+,51+,52-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C62H111N11O12/c1-25-27-28-40(15)52(75)51-56(79)65-43(26-2)58(81)67(18)33-48(74)68(19)44(29-34(3)4)55(78)66-49(38(11)12)61(84)69(20)45(30-35(5)6)54(77)63-41(16)53(76)64-42(17)57(80)70(21)46(31-36(7)8)59(82)71(22)47(32-37(9)10)60(83)72(23)50(39(13)14)62(85)73(51)24/h25,27,34-47,49-52,75H,26,28-33H2,1-24H3,(H,63,77)(H,64,76)(H,65,79)(H,66,78)/b27-25+/t40-,41+,42+,43-,44-,45-,46-,47-,49+,50+,51+,52-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C62H111N11O12/c1-25-27-40(15)52(75)51-56(79)65-43(26-2)58(81)67(18)33-49(74)68(19)44(28-34(3)4)55(78)66-50(39(13)14)62(85)69(20)45(29-35(5)6)54(77)63-41(16)53(76)64-42(17)57(80)70(21)46(30-36(7)8)59(82)71(22)47(31-37(9)10)60(83)72(23)48(32-38(11)12)61(84)73(51)24/h25,27,34-48,50-52,75H,26,28-33H2,1-24H3,(H,63,77)(H,64,76)(H,65,79)(H,66,78)/b27-25+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C62H111N11O12/c1-25-27-40(15)52(75)51-56(79)65-43(26-2)58(81)67(18)33-49(74)68(19)44(28-34(3)4)55(78)66-50(39(13)14)62(85)69(20)45(29-35(5)6)54(77)63-41(16)53(76)64-42(17)57(80)70(21)46(30-36(7)8)59(82)71(22)47(31-37(9)10)60(83)72(23)48(32-38(11)12)61(84)73(51)24/h25,27,34-48,50-52,75H,26,28-33H2,1-24H3,(H,63,77)(H,64,76)(H,65,79)(H,66,78)/b27-25+/t40-,41-,42-,43-,44-,45-,46-,47-,48-,50-,51-,52-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C62H111N11O12/c1-25-27-40(15)52(75)51-56(79)65-43(26-2)58(81)67(18)33-49(74)68(19)44(28-34(3)4)55(78)66-50(39(13)14)62(85)69(20)45(29-35(5)6)54(77)63-41(16)53(76)64-42(17)57(80)70(21)46(30-36(7)8)59(82)71(22)47(31-37(9)10)60(83)72(23)48(32-38(11)12)61(84)73(51)24/h25,27,34-48,50-52,75H,26,28-33H2,1-24H3,(H,63,77)(H,64,76)(H,65,79)(H,66,78)/b27-25+/t40-,41+,42-,43+,44+,45+,46+,47+,48+,50+,51+,52-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C62H86N12O16/c1-27(2)42-59(84)73-23-17-19-36(73)57(82)69(13)25-38(75)71(15)48(29(5)6)61(86)88-33(11)44(55(80)65-42)67-53(78)35-22-21-31(9)51-46(35)64-47-40(41(63)50(77)32(10)52(47)90-51)54(79)68-45-34(12)89-62(87)49(30(7)8)72(16)39(76)26-70(14)58(83)37-20-18-24-74(37)60(85)43(28(3)4)66-56(45)81/h21-22,27-30,33-34,36-37,42-45,48-49H,17-20,23-26,63H2,1-16H3,(H,65,80)(H,66,81)(H,67,78)(H,68,79)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C62H86N12O16/c1-27(2)42-59(84)73-23-17-19-36(73)57(82)69(13)25-38(75)71(15)48(29(5)6)61(86)88-33(11)44(55(80)65-42)67-53(78)35-22-21-31(9)51-46(35)64-47-40(41(63)50(77)32(10)52(47)90-51)54(79)68-45-34(12)89-62(87)49(30(7)8)72(16)39(76)26-70(14)58(83)37-20-18-24-74(37)60(85)43(28(3)4)66-56(45)81/h21-22,27-30,33-34,36-37,42-45,48-49H,17-20,23-26,63H2,1-16H3,(H,65,80)(H,66,81)(H,67,78)(H,68,79)/t33-,34-,36+,37+,42-,43-,44+,45+,48+,49+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C62H86N12O16/c1-27(2)42-59(84)73-23-17-19-36(73)57(82)69(13)25-38(75)71(15)48(29(5)6)61(86)88-33(11)44(55(80)65-42)67-53(78)35-22-21-31(9)51-46(35)64-47-40(41(63)50(77)32(10)52(47)90-51)54(79)68-45-34(12)89-62(87)49(30(7)8)72(16)39(76)26-70(14)58(83)37-20-18-24-74(37)60(85)43(28(3)4)66-56(45)81/h21-22,27-30,33-34,36-37,42-45,48-49H,17-20,23-26,63H2,1-16H3,(H,65,80)(H,66,81)(H,67,78)(H,68,79)/t33-,34+,36+,37-,42+,43+,44-,45+,48-,49+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C62H88N12O16/c1-27(2)42-59(84)73-23-17-19-36(73)57(82)69(13)25-38(75)71(15)48(29(5)6)61(86)88-33(11)44(55(80)65-42)67-53(78)35-22-21-31(9)51-46(35)64-47-40(41(63)50(77)32(10)52(47)90-51)54(79)68-45-34(12)89-62(87)49(30(7)8)72(16)39(76)26-70(14)58(83)37-20-18-24-74(37)60(85)43(28(3)4)66-56(45)81/h21-22,27-30,32-34,36-37,42-45,48-49,64H,17-20,23-26,63H2,1-16H3,(H,65,80)(H,66,81)(H,67,78)(H,68,79)/t32-,33-,34+,36+,37-,42+,43-,44-,45+,48-,49+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C66H103N17O16S/c1-9-35(6)52(69)66-81-48(32-100-66)63(97)76-43(26-34(4)5)58(92)75-42(22-23-50(85)86)57(91)82-53(36(7)10-	0	(Meng et al., 2021)

2)64(98)71-25-16-15-20-40-55(89)73-41(21-17-24-67)56(90)83-54(37(8)11-3)65(99)80-44(27-38-18-13-12-14-19-38)59(93)77-45(28-39-31-70-33-72-39)60(94)79-47(30-51(87)88)62(96)78-46(29-49(68)84)61(95)74-40/h12-14,18-19,31,33-37,40-48,52-54H,9-11,15-17,20-30,32,67,69H2,1-8H3,(H2,68,84)(H,70,72)(H,71,98)(H,73,89)(H,74,95)(H,75,92)(H,76,97)(H,77,93)(H,78,96)(H,79,94)(H,80,99)(H,82,91)(H,83,90)(H,85,86)(H,87,88)InChI=1S/C66H103N17O16S/c1-9-35(6)52(69)66-81-48(32-100-66)63(97)76-43(26-34(4)5)58(92)75-42(22-23-50(85)86)57(91)82-53(36(7)10-2)64(98)71-25-16-15-20-40-55(89)73-41(21-17-24-67)56(90)83-54(37(8)11-3)65(99)80-44(27-38-18-13-12-14-19-38)59(93)77-45(28-39-31-70-33-72-39)60(94)79-47(30-51(87)88)62(96)78-46(29-49(68)84)61(95)74-40/h12-14,18-19,31,33-37,40-48,52-54H,9-11,15-17,20-30,32,67,69H2,1-8H3,(H2,68,84)(H,70,72)(H,71,98)(H,73,89)(H,74,95)(H,75,92)(H,76,97)(H,77,93)(H,78,96)(H,79,94)(H,80,99)(H,82,91)(H,83,90)(H,85,86)(H,87,88)/t35-,36+,37+,40+,41-,42-,43+,44-,45+,46+,47-,48+,52-,53+,54+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C66H103N17O16S/c1-9-35(6)52(69)66-81-48(32-100-66)63(97)76-43(26-34(4)5)58(92)75-42(22-23-50(85)86)57(91)82-53(36(7)10-2)64(98)71-25-16-15-20-40-55(89)73-41(21-17-24-67)56(90)83-54(37(8)11-3)65(99)80-44(27-38-18-13-12-14-19-38)59(93)77-45(28-39-31-70-33-72-39)60(94)79-47(30-51(87)88)62(96)78-46(29-49(68)84)61(95)74-40/h12-14,18-19,31,33-37,40-48,52-54H,9-11,15-17,20-30,32,67,69H2,1-8H3,(H2,68,84)(H,70,72)(H,71,98)(H,73,89)(H,74,95)(H,75,92)(H,76,97)(H,77,93)(H,78,96)(H,79,94)(H,80,99)(H,82,91)(H,83,90)(H,85,86)(H,87,88)/t35?,36-,37-,40-,41+,42+,43-,44+,45-,46-,47+,48?,52?,53-,54-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C66H105N17O16S/c1-9-35(6)52(69)66-81-48(32-100-66)63(97)76-43(26-34(4)5)58(92)75-42(22-23-50(85)86)57(91)82-53(36(7)10-2)64(98)71-25-16-15-20-40-55(89)73-41(21-17-24-67)56(90)83-54(37(8)11-3)65(99)80-44(27-38-18-13-12-14-19-38)59(93)77-45(28-39-31-70-33-72-39)60(94)79-47(30-51(87)88)62(96)78-46(29-49(68)84)61(95)74-40/h12-14,18-19,31,33-37,40-48,52-54,66,81H,9-11,15-17,20-30,32,67,69H2,1-8H3,(H2,68,84)(H,70,72)(H,71,98)(H,73,89)(H,74,95)(H,75,92)(H,76,97)(H,77,93)(H,78,96)(H,79,94)(H,80,99)(H,82,91)(H,83,90)(H,85,86)(H,87,88)/t35-,36+,37+,40+,41-,42-,43+,44-,45+,46+,47-,48+,52-,53+,54+,66-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C66H75Cl2N9O24/c1-23(2)12-34(71-5)58(88)76-49-51(83)26-7-10-38(32(67)14-26)97-40-16-28-17-41(55(40)101-65-56(54(86)53(85)42(22-78)99-65)100-44-21-66(4,70)57(87)24(3)96-44)98-39-11-8-27(15-33(39)68)52(84)50-63(93)75-48(64(94)95)31-18-29(79)19-37(81)45(31)30-13-25(6-9-36(30)80)46(60(90)77-50)74-61(91)47(28)73-59(89)35(20-43(69)82)72-62(49)92/h6-11,13-19,23-24,34-35,42,44,46-54,56-57,65,71,78-81,83-87H,12,20-22,70H2,1-5H3,(H2,69,82)(H,72,92)(H,73,89)(H,74,91)(H,75,93)(H,76,88)(H,77,90)(H,94,95)/t24-,34-,35-,42-,44-,46-,47-,48+,49+,50+,51-,52-,53-,54-,56+,57+,65+,66+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C66H75Cl2N9O24/c1-23(2)12-34(71-5)58(88)76-49-51(83)26-7-10-38(32(67)14-26)97-40-16-28-17-41(55(40)101-65-56(54(86)53(85)42(22-78)99-65)100-44-21-66(4,70)57(87)24(3)96-44)98-39-11-8-27(15-33(39)68)52(84)50-63(93)75-48(64(94)95)31-18-29(79)19-37(81)45(31)30-13-25(6-9-36(30)80)46(60(90)77-50)74-61(91)47(28)73-59(89)35(20-43(69)82)72-62(49)92/h6-11,13-19,23-24,34-35,42,44,46-54,56-57,65,71,78-81,83-87H,12,20-22,70H2,1-5H3,(H2,69,82)(H,72,92)(H,73,89)(H,74,91)(H,75,93)(H,76,88)(H,77,90)(H,94,95)/t24-,34-,35-,42+,44+,46+,47-,48+,49+,50-,51-,52-,53+,54-,56+,57-,65-,66+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C66H75Cl2N9O24/c1-23(2)12-34(71-5)58(88)76-49-51(83)26-7-10-38(32(67)14-26)97-40-16-28-17-41(55(40)101-65-56(54(86)53(85)42(22-78)99-65)100-44-21-66(4,70)57(87)24(3)96-44)98-39-11-8-27(15-33(39)68)52(84)50-63(93)75-48(64(94)95)31-18-29(79)19-37(81)45(31)30-13-25(6-9-36(30)80)46(60(90)77-50)74-61(91)47(28)73-59(89)35(20-43(69)82)72-62(49)92/h6-11,13-19,23-24,34-35,42,44,46-54,56-57,65,71,78-81,83-87H,12,20-22,70H2,1-5H3,(H2,69,82)(H,72,92)(H,73,89)(H,74,91)(H,75,93)(H,76,88)(H,77,90)(H,94,95)/t24-,34-,35-,42+,44+,46+,47-,48+,49+,50-,51-,52-,53+,54-,56+,57-,65-,66+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C66H75Cl2N9O24/c1-23(2)12-34(71-5)58(88)76-49-51(83)26-7-10-38(32(67)14-26)97-40-16-28-17-41(55(40)101-65-56(54(86)53(85)42(22-78)99-65)		

29(79)19-37(81)45(31)30-13-25(6-9-36(30)80)46(60(90)77-50)74-61(91)47(28)73-59(89)35(20-43(69)82)72-62(49)92/h6-11,13-19,23-24,34-35,42,44,46-54,56-57,65,71,78-81,83-87H,12,20-22,70H2,1-5H3,(H2,69,82)(H,72,92)(H,73,89)(H,74,91)(H,75,93)(H,76,88)(H,77,90)(H,94,95)/t24-,34+,35-,42+,44-,46+,47+,48-,49+,50-,51+,52+,53+,54-,56+,57+,65-,66-/m0/s1 InChI=1S/C66H75Cl2N9O24/c1-23(2)12-34(71-5)58(88)76-49-51(83)26-7-10-38(32(67)14-26)97-40-16-28-17-41(55(40)101-65-56(54(86)53(85)42(22-78)99-65)100-44-21-66(4,70)57(87)24(3)96-44)98-39-11-8-27(15-33(39)68)52(84)50-63(93)75-48(64(94)95)31-18-29(79)19-37(81)45(31)30-13-25(6-9-36(30)80)46(60(90)77-50)74-61(91)47(28)73-59(89)35(20-43(69)82)72-62(49)92/h6-11,13-19,23-24,34-35,42,44,46-54,56-57,65,71,78-81,83-87H,12,20-22,70H2,1-5H3,(H2,69,82)(H,72,92)(H,73,89)(H,74,91)(H,75,93)(H,76,88)(H,77,90)(H,94,95)/t24-,34+,35-,42+,44-,46+,47+,48-,49+,50-,51+,52+,53+,54-,56+,57+,65-,66-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C66H75Cl2N9O24/c1-23(2)12-34(71-5)58(88)76-49-51(83)26-7-10-38(32(67)14-26)97-40-16-28-17-41(55(40)101-65-56(54(86)53(85)42(22-78)99-65)100-44-21-66(4,70)57(87)24(3)96-44)98-39-11-8-27(15-33(39)68)52(84)50-63(93)75-48(64(94)95)31-18-29(79)19-37(81)45(31)30-13-25(6-9-36(30)80)46(60(90)77-50)74-61(91)47(28)73-59(89)35(20-43(69)82)72-62(49)92/h6-11,13-19,23-24,34-35,42,44,46-54,56-57,65,71,78-81,83-87H,12,20-22,70H2,1-5H3,(H2,69,82)(H,72,92)(H,73,89)(H,74,91)(H,75,93)(H,76,88)(H,77,90)(H,94,95)/t24-,34+,35-,42+,44-,46+,47+,48-,49+,50-,51+,52+,53+,54-,56+,57-,65-,66-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C66H75Cl2N9O24/c1-23(2)12-34(71-5)58(88)76-49-51(83)26-7-10-38(32(67)14-26)97-40-16-28-17-41(55(40)101-65-56(54(86)53(85)42(22-78)99-65)100-44-21-66(4,70)57(87)24(3)96-44)98-39-11-8-27(15-33(39)68)52(84)50-63(93)75-48(64(94)95)31-18-29(79)19-37(81)45(31)30-13-25(6-9-36(30)80)46(60(90)77-50)74-61(91)47(28)73-59(89)35(20-43(69)82)72-62(49)92/h6-11,13-19,23-24,34-35,42,44,46-54,56-57,65,71,78-81,83-87H,12,20-22,70H2,1-5H3,(H2,69,82)(H,72,92)(H,73,89)(H,74,91)(H,75,93)(H,76,88)(H,77,90)(H,94,95)/t24-,34+,35+,42-,44+,46-,47+,48+,49-,50-,51-,52+,53+,54-,56+,57+,65-,66+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C67H76Cl2N8O24/c1-24(2)12-36(72-5)61(90)77-52-54(85)28-8-11-42(35(69)15-28)98-44-17-29-16-43(57(44)101-66-58(56(87)55(86)45(23-78)99-66)100-47-22-67(4,71)59(88)25(3)96-47)97-41-10-7-27(14-34(41)68)53(84)33-20-40(82)49(74-63(92)50(29)75-62(91)37(21-46(70)83)73-64(52)93)26-6-9-38(80)31(13-26)48-32(18-30(79)19-39(48)81)51(65(94)95)76-60(33)89/h6-11,13-19,24-25,33,36-37,45,47,49-56,58-59,66,72,78-81,84-88H,12,20-23,71H2,1-5H3,(H2,70,83)(H,73,93)(H,74,92)(H,75,91)(H,76,89)(H,77,90)(H,94,95)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C68H62Cl2N8O24/c1-23-38(84)15-29-17-42(23)100-43-16-25(4-9-37(43)83)48(71)61(90)77-53-56(86)27-6-10-40(34(69)13-27)98-44-18-30-19-45(57(44)87)99-41-11-7-28(14-35(41)70)60(102-68-54(72-24(2)80)59(89)58(88)46(22-79)101-68)55-66(95)76-52(67(96)97-3)33-20-31(81)21-39(85)47(33)32-12-26(5-8-36(32)82)49(62(91)78-55)73-64(93)51(30)74-63(92)50(29)75-65(53)94/h4-21,46,48-56,58-60,68,79,81-89H,22,71H2,1-3H3,(H,72,80)(H,73,93)(H,74,92)(H,75,94)(H,76,95)(H,77,90)(H,78,91)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C68H62Cl2N8O24/c1-23-38(84)15-29-17-42(23)100-43-16-25(4-9-37(43)83)48(71)61(90)77-53-56(86)27-6-10-40(34(69)13-27)98-44-18-30-19-45(57(44)87)99-41-11-7-28(14-35(41)70)60(102-68-54(72-24(2)80)59(89)58(88)46(22-79)101-68)55-66(95)76-52(67(96)97-3)33-20-31(81)21-39(85)47(33)32-12-26(5-8-36(32)82)49(62(91)78-55)73-64(93)51(30)74-63(92)50(29)75-65(53)94/h4-21,46,48-56,58-60,68,79,81-89H,22,71H2,1-3H3,(H,72,80)(H,73,93)(H,74,92)(H,75,94)(H,76,95)(H,77,90)(H,78,91)/t46-,48+,49-,50-,51-,52-,53-,54+,55-,56+,58-,59+,60+,68+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C68H62Cl2N8O24/c1-23-38(84)15-29-17-42(23)100-43-16-25(4-9-37(43)83)48(71)61(90)77-53-56(86)27-6-10-40(34(69)13-27)98-44-18-30-19-45(57(44)87)99-41-11-7-28(14-35(41)70)60(102-68-54(72-24(2)80)59(89)58(88)46(22-79)101-68)55-66(95)76-52(67(96)97-3)33-20-	0	(Meng et al., 2021)

31(81)21-39(85)47(33)32-12-26(5-8-36(32)82)49(62(91)78-55)73-64(93)51(30)74-63(92)50(29)75-65(53)94/h4-21,46,48-56,58-60,68,79,81-89H,22,71H2,1-3H3,(H,72,80)(H,73,93)(H,74,92)(H,75,94)(H,76,95)(H,77,90)(H,78,91)/t46-,48+,49-,50-,51-,52-,53+,54+,55-,56-,58+,59-,60-,68-/m0/s1	
InChI=1S/C6H62Cl2N8O24/c1-23-38(84)15-29-17-42(23)100-43-16-25(4-9-37(43)83)48(71)61(90)77-53-56(86)27-6-10-40(34(69)13-27)98-44-18-30-19-45(57(44)87)99-41-11-7-28(14-35(41)70)60(102-68-54(72-24(2)80)59(89)58(88)46(22-79)101-68)55-66(95)76-52(67(96)97-3)33-20-31(81)21-39(85)47(33)32-12-26(5-8-36(32)82)49(62(91)78-55)73-64(93)51(30)74-63(92)50(29)75-65(53)94/h4-21,46,48-56,58-60,68,79,81-89H,22,71H2,1-3H3,(H,72,80)(H,73,93)(H,74,92)(H,75,94)(H,76,95)(H,77,90)(H,78,91)/t46-,48+,49-,50+,51-,52?,53-,54-,55+,56-,58-,59-,60-,68+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H10N2O2/c7-5(9)4-8-3-1-2-6(8)10/h1-4H2,(H2,7,9)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H10N2O3/c7-5(10)3-8-2-4(9)1-6(8)11/h4,9H,1-3H2,(H2,7,10)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C6H10N2O3/c7-5(10)3-8-2-4(9)1-6(8)11/h4,9H,1-3H2,(H2,7,10)/t4-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C6H10N2O3/c7-5(10)3-8-2-4(9)1-6(8)11/h4,9H,1-3H2,(H2,7,10)/t4-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H10N4/c1-2-4-6-7-8-9-10(6)5-3-1/h1-5H2	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C6H10N4/c7-3-1-4(8)6(10)2-5(3)9/h1-2H,7-10H2	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H10N6O/c1-12(2)11-10-6-4(5(7)13)8-3-9-6/h3H,1-2H3,(H2,7,13)(H,8,9)	1 (Li et al., 2005)
InChI=1S/C6H10O/c1-4-6(3,7)5-2/h1,7H,5H2,2-3H3	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C6H10O/c1-4-6(3,7)5-2/h1,7H,5H2,2-3H3/t6-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H10O/c1-4-6(3,7)5-2/h1,7H,5H2,2-3H3/t6-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C6H10O4/c7-3-1-9-6-4(8)2-10-5(3)6/h3-8H,1-2H2	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H10O6/c7-1-2-3(8)4(9)5(10)6(11)12-2/h2-5,7-10H,1H2	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H11BrN2O2/c1-3(2)4(7)5(10)9-6(8)11/h3-4H,1-2H3,(H3,8,9,10,11)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C6H11BrN2O2/c1-3(2)4(7)5(10)9-6(8)11/h3-4H,1-2H3,(H3,8,9,10,11)/t4-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C6H11BrN2O2/c1-3(2)4(7)5(10)9-6(8)11/h3-4H,1-2H3,(H3,8,9,10,11)/t4-/m1/s1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C6H11NO2/c1-2-5(7)3-4-6(8)9/h2,5H,1,3-4,7H2,(H,8,9)	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C6H11NO2/c1-2-5(7)3-4-6(8)9/h2,5H,1,3-4,7H2,(H,8,9)/t5-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H11NO2/c7-6(5(8)9)3-1-2-4-6/h1-4,7H2,(H,8,9)	1 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C6H11NO2/c7-6(8)5-3-1-2-4-9-5/h5H,1-4H2,(H2,7,8)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C6H11NO2/c7-6(8)5-3-1-2-4-9-5/h5H,1-4H2,(H2,7,8)/t5-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C6H11NO3/c1-10-6(9)3-2-5(8)4-7/h2-4,7H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H12/c1-2-4-6-5-3-1/h1-6H2	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C6H12/c1-6-4-2-3-5-6/h6H,2-5H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H12Br2O4/c7-1-3(9)5(11)6(12)4(10)2-8/h3-6,9-12H,1-2H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H12F2N2O2/c7-4(8)6(10,5(11)12)2-1-3-9/h4H,1-3,9-10H2,(H,11,12)/t6-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C6H12N2O4S2/c7-3(5(9)10)1-13-14-2-4(8)6(11)12/h3-4H,1-2,7-8H2,(H,9,10)(H,11,12)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H12N3PS/c11-10(7-1-2-7,8-3-4-8)9-5-6-9/h1-6H2	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C6H12NO5P/c1-4(3-13(10,11)12)2-5(7)6(8)9/h2,5H,3,7H2,1H3,(H,8,9)(H2,10,11,12)/b4-2+	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C6H12O2/c1-3-4-5-8-6(2)7/h3-5H2,1-2H3	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C6H12O2/c1-5(2)4-8-6(3)7/h5H,4H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H12O3/c1-4-7-5(2)9-6(3)8-4/h4-6H,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C6H13NO2/c1-4(2)3-5(7)6(8)9/h4-5H,3,7H2,1-2H3,(H,8,9)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H13NO2/c1-4(2)3-5(7)6(8)9/h4-5H,3,7H2,1-2H3,(H,8,9)/t5-/m1/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C6H13NO2/c7-5-3-1-2-4-6(8)9/h1-5,7H2,(H,8,9)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H13NO5/c7-3-5(10)4(9)2(1-8)12-6(3)11/h2-6,8-11H,1,7H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H14/c1-3-5-6-4-2/h3-6H2,1-2H3	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C6H14/c1-4-5-6(2)3/h6H,4-5H2,1-3H3	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C6H14/c1-4-6(3)5-2/h6H,4-5H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H14/c1-5-6(2,3)4/h5H2,1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H14FO3P/c1-5(2)9-11(7,8)10-6(3)4/h5-6H,1-4H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C6H14N2/c7-5-3-1-2-4-6(5)8/h5-6H,1-4,7-8H2	0	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C6H14N2O2/c1-8(2,3)4-5-10-6(7)9/h4-5H2,1-3H3,(H-,7,9)/p+1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C6H14O/c1-5-6(2,3)7-4/h5H2,1-4H3	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C6H14O/c1-5-7-6(2,3)4/h5H2,1-4H3	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C6H14O6/c7-1-3(9)5(11)6(12)4(10)2-8/h3-12H,1-2H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H14O6/c7-1-3(9)5(11)6(12)4(10)2-8/h3-12H,1-2H2/t3-,4-,5-,6-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H14O6/c7-1-3(9)5(11)6(12)4(10)2-8/h3-12H,1-2H2/t3-,4-,5-,6-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H14O6/c7-1-3(9)5(11)6(12)4(10)2-8/h3-12H,1-2H2/t3-,4-,5+,6+/m1/s1	0	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C6H14O6/c7-1-3(9)5(11)6(12)4(10)2-8/h3-12H,1-2H2/t3-,4+,5-,6+	0	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C6H14O6S2/c1-13(7,8)11-5-3-4-6-12-14(2,9)10/h3-6H2,1-2H3	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C6H14O8S2/c1-15(9,10)13-3-5(7)6(8)4-14-16(2,11)12/h5-8H,3-4H2,1-2H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C6H18N4/c7-1-3-9-5-6-10-4-2-8/h9-10H,1-8H2	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C6H4O4/c7-4-1-2-10-5(3-4)6(8)9/h1-3H,(H,8,9)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H4O4/c7-5(8)3-4-1-2-6(9)10-4/h1-3H,(H,7,8)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H5NO2/c8-6(9)5-2-1-3-7-4-5/h1-4H,(H,8,9)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H6/c1-2-4-6-5-3-1/h1-6H	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H6Cl2N2O4S2/c7-4-1-3(15(9,11)12)2-5(6(4)8)16(10,13)14/h1-2H,(H2,9,11,12)(H2,10,13,14)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C6H6Cl6/c7-1-2(8)4(10)6(12)5(11)3(1)9/h1-6H	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C6H6N2O/c7-6(9)5-2-1-3-8-4-5/h1-4H,(H2,7,9)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C6H6N2O3/c1-4-2-7-5(6(9)10)3-8(4)11/h2-3H,1H3,(H,9,10)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H6N4O4/c7-6(11)9-8-3-4-1-2-5(14-4)10(12)13/h1-3H,(H3,7,9,11)/b8-3-	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H6N4O4/c7-6(11)9-8-3-4-1-2-5(14-4)10(12)13/h1-3H,(H3,7,9,11)/b8-3+	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C6H6N6O2/c1-11-6(14)12-2-8-3(4(7)13)5(12)9-10-11/h2H,1H3,(H2,7,13)	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C6H6O/c7-6-4-2-1-3-5-6/h1-5,7H	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H7N3O/c7-9-6(10)5-1-3-8-4-2-5/h1-4H,7H2,(H,9,10)	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C6H7NO/c8-5-6-2-1-3-7-4-6/h1-4,8H,5H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H8ClN7O/c7-2-4(9)13-3(8)1(12-2)5(15)14-6(10)11/h(H4,8,9,13)(H4,10,11,14,15)	0	(Nikolic et al., 2013)

InChI=1S/C6H8CINS/c1-5-6(2-3-7)9-4-8-5/h4H,2-3H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H8FN3O2/c7-2-1-4-9-5-3-8-6(9)10(11)12/h3,5H,1-2,4H2	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C6H8FN3O2/c7-2-1-4-9-5-3-8-6(9)10(11)12/h3,5H,1-2,4H2/i7-1	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C6H8FN3O3/c7-3-5(11)4-9-2-1-8-6(9)10(12)13/h1-2,5,11H,3-4H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H8FN3O3/c7-3-5(11)4-9-2-1-8-6(9)10(12)13/h1-2,5,11H,3-4H2/t5-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C6H8N2O/c1-4-3-5(2)7-8-6(4)9/h3H,1-2H3,(H,8,9)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C6H8N2O2/c9-5-3-8-4(7-5)1-2-6(8)10/h4H,1-3H2,(H,7,9)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C6H8N2O2/c9-5-3-8-4(7-5)1-2-6(8)10/h4H,1-3H2,(H,7,9)/t4-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C6H8N2O2/c9-6-4-1-2-7-3-5(4)10-8-6/h7H,1-3H2,(H,8,9)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H8N2O2S/c7-5-1-3-6(4-2-5)11(8,9)10/h1-4H,7H2,(H2,8,9,10)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H8N2O8/c9-7(10)15-3-1-13-6-4(16-8(11)12)2-14-5(3)6/h3-6H,1-2H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H8N2O8/c9-7(10)15-3-1-13-6-4(16-8(11)12)2-14-5(3)6/h3-6H,1-2H2/t3-,4-,5-,6+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H8N2O8/c9-7(10)15-3-1-13-6-4(16-8(11)12)2-14-5(3)6/h3-6H,1-2H2/t3-,4+,5-,6-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H8O6/c7-1-2(8)5-3(9)4(10)6(11)12-5/h2,5,7-10H,1H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C6H8O6/c7-1-2(8)5-3(9)4(10)6(11)12-5/h2,5,7-10H,1H2/t2-,5-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H8O6/c7-1-2(8)5-3(9)4(10)6(11)12-5/h2,5,7-10H,1H2/t2-,5+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H9N3/c1-9(2)6-5-7-3-4-8-6/h3-5H,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C6H9N3O3/c1-5-7-4-6(9(11)12)8(5)2-3-10/h4,10H,2-3H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C6H9NO3/c1-6(2)4(8)7(3)5(9)10-6/h1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C6H9NO6/c8-3-1-11-6-4(13-7(9)10)2-12-5(3)6/h3-6,8H,1-2H2	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C6H9NO6/c8-3-1-11-6-4(13-7(9)10)2-12-5(3)6/h3-6,8H,1-2H2/t3-,4+,5-,6+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C6H9NO6/c8-3-1-11-6-4(13-7(9)10)2-12-5(3)6/h3-6,8H,1-2H2/t3-,4+,5+,6+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C7H10CIF3/c8-6-3-1-5(2-4-6)7(9,10)11/h5-6H,1-4H2	1	(Shin et al., 2021)

InChI=1S/C7H10ClN3O3/c1-5-9-3-7(11(13)14)10(5)4-6(12)2-8/h3,6,12H,2,4H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H10ClN3O3/c1-5-9-3-7(11(13)14)10(5)4-6(12)2-8/h3,6,12H,2,4H2,1H3/t6-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C7H10FN3O4/c8-5-15-4-6(12)3-10-2-1-9-7(10)11(13)14/h1-2,6,12H,3-5H2	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C7H10FN3O4/c8-5-15-4-6(12)3-10-2-1-9-7(10)11(13)14/h1-2,6,12H,3-5H2/t6-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H10N2O2S/c1-3-11-7(10)9-5-4-8(2)6(9)12/h4-5H,3H2,1-2H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H10N2O2S/c8-5-6-1-3-7(4-2-6)12(9,10)11/h1-4H,5,8H2,(H2,9,10,11)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C7H10N2O3/c1-3-7(2)4(10)8-6(12)9-5(7)11/h3H2,1-2H3,(H2,8,9,10,11,12)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H10N2OS/c1-2-3-5-4-6(10)9-7(11)8-5/h4H,2-3H2,1H3,(H2,8,9,10,11)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H10N4O2/c1-10-3-8-5-4(10)6(12)11(2)7(13)9-5/h3-5H,1-2H3,(H,9,13)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H10N4O2/c1-10-3-8-5-4(10)6(12)11(2)7(13)9-5/h4H,3H2,1-2H3,(H,8,9,13)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H10N4O2/c1-10-5-4(8-3-9-5)6(12)11(2)7(10)13/h3-5H,1-2H3,(H,8,9)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H11Cl3O4/c8-7(9,10)5-13-3-6(1-11,2-12)4-14-5/h5,11-12H,1-4H2	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C7H11NO2/c1-3-7(2)4-5(9)8-6(7)10/h3-4H2,1-2H3,(H,8,9,10)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H11NO2/c1-3-7(2)4-5(9)8-6(7)10/h3-4H2,1-2H3,(H,8,9,10)/t7-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H11NO2/c1-3-7(2)4-5(9)8-6(7)10/h3-4H2,1-2H3,(H,8,9,10)/t7-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H11NO3/c1-4-7(2)5(9)8(3)6(10)11-7/h4H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H11NO3/c1-4-7(2)5(9)8(3)6(10)11-7/h4H2,1-3H3/t7-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C7H11NO4S/c1-2-12-7(11)8-4-13-3-5(8)6(9)10/h5H,2-4H2,1H3,(H,9,10)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H11NO4S/c1-2-12-7(11)8-4-13-3-5(8)6(9)10/h5H,2-4H2,1H3,(H,9,10)/t5-/m0/s1	0	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C7H11NO7P2/c9-7(16(10,11)12,17(13,14)15)4-6-2-1-3-8-5-6/h1-3,5,9H,4H2,(H2,10,11,12)(H2,13,14,15)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H12N2O2/c1-3-5(4-2)6(10)9-7(8)11/h3H,4H2,1-2H3,(H3,8,9,10,11)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C7H12N2O2/c1-3-5(4-2)6(10)9-7(8)11/h3H,4H2,1-2H3,(H3,8,9,10,11)/b5-3-	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C7H12N2O2/c1-3-5(4-2)6(10)9-7(8)11/h3H,4H2,1-2H3,(H3,8,9,10,11)/b5-3+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H12N2O4/c1-4(10)9-5(7(12)13)2-3-6(8)11/h5H,2-3H2,1H3,(H2,8,11)(H,9,10)(H,12,13)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C7H12N2O4/c1-4(10)9-5(7(12)13)2-3-6(8)11/h5H,2-3H2,1H3,(H2,8,11)(H,9,10)(H,12,13)/t5-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H12N2O4/c1-4(10)9-5(7(12)13)2-3-6(8)11/h5H,2-3H2,1H3,(H2,8,11)(H,9,10)(H,12,13)/t5-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C7H12N4O2/c1-10-3-8-5-4(10)6(12)9-7(13)11(5)2/h4-5,8H,3H2,1-2H3,(H,9,12,13)	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C7H12O3/c8-6-4-2-1-3-5(6)7(9)10/h5-6,8H,1-4H2,(H,9,10)	0	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C7H13/c1-4-6-7(3)5-2/h6H,3-5H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H13BrN2O2/c1-3-7(8,4-2)5(11)10-6(9)12/h3-4H2,1-2H3,(H3,9,10,11,12)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H14/c1-4-6-7(3)5-2/h3-6H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H14/c1-7-5-3-2-4-6-7/h7H,2-6H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H14BrNO/c1-4-7(8,5(2)3)6(9)10/h5H,4H2,1-3H3,(H2,9,10)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H14BrNO/c1-4-7(8,5(2)3)6(9)10/h5H,4H2,1-3H3,(H2,9,10)/t7-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C7H14NO5P/c9-7(10)6-3-5(1-2-8-6)4-14(11,12)13/h5-6,8H,1-4H2,(H,9,10)(H2,11,12,13)/t5-,6+/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C7H14O2/c1-3-4-5-6-9-7(2)8/h3-6H2,1-2H3	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C7H14O2/c1-6(2)4-5-9-7(3)8/h6H,4-5H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H15Cl2N2O2P/c8-2-4-10-14(12)11(6-3-9)5-1-7-13-14/h1-7H2,(H,10,12)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C7H15Cl2N2O2P/c8-2-5-11(6-3-9)14(12)10-4-1-7-13-14/h1-7H2,(H,10,12)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H15NO2/c1-4-7(3,5-2)10-6(8)9/h4-5H2,1-3H3,(H2,8,9)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C7H15NO3/c1-8(2,3)5-6(9)4-7(10)11/h6,9H,4-5H2,1-3H3/p+1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C7H15NO3/c1-8(2,3)5-6(9)4-7(10)11/h6,9H,4-5H2,1-3H3/t6-/m1/s1	0	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C7H16/c1-3-5-7-6-4-2/h3-7H2,1-2H3	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C7H16/c1-4-5-6-7(2)3/h7H,4-6H2,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H16/c1-4-6-7(3)5-2/h7H,4-6H2,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C7H16/c1-4-6-7(3)5-2/h7H,4-6H2,1-3H3/t7-/m0/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C7H16/c1-4-6-7(3)5-2/h7H,4-6H2,1-3H3/t7-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H16N2/c8-9-6-7-4-2-1-3-5-7/h7,9H,1-6,8H2	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C7H16N2O/c1-2-3-4-5-9-6-7(8)10/h9H,2-6H2,1H3,(H2,8,10)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H16N2O2/c1-6(11-7(8)10)5-9(2,3)4/h6H,5H2,1-4H3,(H-,8,10)/p+1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H16N2O2/c1-6(11-7(8)10)5-9(2,3)4/h6H,5H2,1-4H3,(H-,8,10)/p+1/t6-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C7H16N4O4S2/c12-16(13)3-1-10(5-8-16)7-11-2-4-17(14,15)9-6-11/h8-9H,1-7H2	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C7H16O2Si/c1-6(8)7(10)4-2-3-5-9-7/h6,8H,2-5H2,1,10H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C7H16O4S2/c1-5-12(8,9)7(3,4)13(10,11)6-2/h5-6H2,1-4H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C7H3F12N3/c8-4(9,10)2(5(11,12)13)1(20)21-3(22-2,6(14,15)16)7(17,18)19/h22H,(H2,20,21)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C7H4ClF3/c8-6-3-1-5(2-4-6)7(9,10)11/h1-4H	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H4ClNO2/c8-4-1-2-6-5(3-4)9-7(10)11-6/h1-3H,(H,9,10)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H5BrN2O4/c8-5-2-3(9)1-4(7(11)12)6(5)10(13)14/h1-2H,9H2,(H,11,12)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C7H5NO3S/c9-7-5-3-1-2-4-6(5)12(10,11)8-7/h1-4H,(H,8,9)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C7H6ClN3O4S2/c8-4-1-5-7(2-6(4)16(9,12)13)17(14,15)11-3-10-5/h1-3H,(H,10,11)(H2,9,12,13)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H6N4O2/c8-7-9-11(13)6-4-2-1-3-5(6)10(7)12/h1-4H,(H2,8,9)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H6O3/c8-5-1-2-6-7(3-5)10-4-9-6/h1-3,8H,4H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H6O3/c8-6-4-2-1-3-5(6)7(9)10/h1-4,8H,(H,9,10)	0	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C7H6O4/c8-4-1-2-6(9)5(3-4)7(10)11/h1-3,8-9H,(H,10,11)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H7NO/c8-7(9)6-4-2-1-3-5-6/h1-5H,(H2,8,9)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H7NO2/c8-6-3-1-5(2-4-6)7(9)10/h1-4H,8H2,(H,9,10)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H7NO2/c8-7(10)5-3-1-2-4-6(5)9/h1-4,9H,(H2,8,10)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C7H7NO2/c9-6-3-1-5-2-4-7(10)8(5)6/h1H,2-4H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C7H7NO3/c8-4-1-2-5(7(10)11)6(9)3-4/h1-3,9H,8H2,(H,10,11)	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C7H7NO3/c8-4-1-2-6(9)5(3-4)7(10)11/h1-3,9H,8H2,(H,10,11)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H7NO4S/c8-13(11,12)6-3-1-5(2-4-6)7(9)10/h1-4H,(H,9,10)(H2,8,11,12)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C7H8/c1-7-5-3-2-4-6-7/h2-6H,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H8ClN3O4S2/c8-4-1-5-7(2-6(4)16(9,12)13)17(14,15)11-3-10-5/h1-2,10-11H,3H2,(H2,9,12,13)	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C7H8N2O/c1-9-5-3-2-4-7(9)6-8-10/h2-6H,1H3/p+1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H8N4O2/c1-10-3-8-5-4(10)6(12)11(2)7(13)9-5/h3H,1-2H3,(H,9,13)	1	(Kaupp, 2007)

InChI=1S/C7H8N4O2/c1-10-3-8-5-4(10)6(12)9-7(13)11(5)2/h3H,1-2H3,(H,9,12,13)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H8N4O2/c1-10-5-4(8-3-9-5)6(12)11(2)7(10)13/h3-4H,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H8N4O2/c1-10-5-4(8-3-9-5)6(12)11(2)7(10)13/h3-4H,1-2H3/t4-/m0/s1	1	(Zhu et al., 2018) (Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C7H8N4O2/c1-10-5-4(8-3-9-5)6(12)11(2)7(10)13/h3H,1-2H3,(H,8,9)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C7H8O/c8-6-7-4-2-1-3-5-7/h1-5,8H,6H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C7H8O2/c1-9-7-4-2-6(8)3-5-7/h2-5,8H,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H9ClO/c1-3-7(9,4-2)5-6-8/h1,5-6,9H,4H2,2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H9ClO/c1-3-7(9,4-2)5-6-8/h1,5-6,9H,4H2,2H3/b6-5+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H9ClO/c1-3-7(9,4-2)5-6-8/h1,5-6,9H,4H2,2H3/b6-5+/t7-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021) (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C7H9ClO/c1-3-7(9,4-2)5-6-8/h1,5-6,9H,4H2,2H3/t7-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C7H9ClO6P2S/c8-5-1-3-6(4-2-5)17-7(15(9,10)11)16(12,13)14/h1-4,7H,(H2,9,10,11)(H2,12,13,14)	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C7H9NO2/c1-5-7(10)6(9)3-4-8(5)2/h3-4,10H,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H9NO2/c9-6-3-1-5-2-4-7(10)8(5)6/h5H,1-4H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H9NO3/c1-3-4-8-6(9)5(2)11-7(8)10/h3,5H,1,4H2,2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H9NO3/c1-3-4-8-6(9)5(2)11-7(8)10/h3,5H,1,4H2,2H3/t5-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H9NO3/c1-3-4-8-6(9)5(2)11-7(8)10/h3,5H,1,4H2,2H3/t5-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C7H9NO4S2/c9-7(6-2-1-4-13-6)8-3-5-14(10,11)12/h1-2,4H,3,5H2,(H,8,9)(H,10,11,12)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C88H102Cl2N10O27/c1-39(2)13-10-8-6-7-9-11-14-63(107)94-72-76(111)74(109)61(37-101)125-87(72)127-79-59-31-44-32-60(79)123-56-24-19-43(29-51(56)89)73(108)71-86(120)98-69(81(115)92-25-12-26-100(4)5)49-33-45(103)34-58(124-88-78(113)77(112)75(110)62(38-102)126-88)64(49)48-28-41(17-22-53(48)104)67(83(117)99-71)95-84(118)68(44)96-85(119)70-50-35-47(36-55(106)65(50)90)122-57-30-42(18-23-54(57)105)66(91-3)82(116)93-52(80(114)97-70)27-40-15-20-46(121-59)21-16-40/h15-24,28-36,39,52,61-62,66-78,87-88,91,101-106,108-113H,6-14,25-27,37-38H2,1-5H3,(H,92,115)(H,93,116)(H,94,107)(H,95,118)(H,96,119)(H,97,114)(H,98,120)(H,99,117)/t52-,61-,62-,66-,67-,68-,69+,70+,71+,72-,73-,74-,75-,76-,77+,78+,87+,88+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C88H97Cl2N9O33/c1-3-4-5-6-7-8-9-10-60(108)94-68-74(113)71(110)58(32-101)129-87(68)132-78-55-26-40-27-56(78)126-52-18-14-38(24-47(52)90)77(131-86-67(92-34(2)103)73(112)70(109)57(31-100)128-86)69-84(121)98-66(85(122)123)45-29-42(105)30-54(127-88-76(115)75(114)72(111)59(33-102)130-88)61(45)44-23-37(13-15-49(44)106)63(81(118)99-69)96-83(120)65(40)97-82(119)64-39-21-41(104)28-43(22-39)124-53-25-36(12-16-50(53)107)62(91)80(117)93-48(79(116)95-64)20-35-11-17-51(125-55)46(89)19-35/h11-19,21-30,48,57-59,62-77,86-88,100-102,104-107,109-115H,3-10,20,31-33,91H2,1-2H3,(H,92,103)(H,93,117)(H,94,108)(H,95,116)(H,96,120)(H,97,119)(H,98,121)(H,99,118)(H,122,123)/t48-,57-,58-,59-,62-,63-,64+,65-,66-,67-,68-,69+,70-,71-,72-,73-,74-,75+,76+,77-,86+,87+,88+/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C8BrF17/c9-7(22,23)5(18,19)3(14,15)1(10,11)2(12,13)4(16,17)6(20,21)8(24,25)26	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H10/c1-2-8-6-4-3-5-7-8/h3-7H,2H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H10/c1-7-3-5-8(2)6-4-7/h3-6H,1-2H3	1	(Kaupp, 2007) (Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C8H10/c1-7-4-3-5-8(2)6-7/h3-6H,1-2H3	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C8H10/c1-7-5-3-4-6-8(7)2/h3-6H,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H10BFO3/c1-2-13-7-5-3-4-6(10)8(7)9(11)12/h3-5,11-12H,2H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H10FN3O3S/c9-4-1-12(8(14)11-7(4)10)5-3-16-6(2-13)15-5/h1,5-6,13H,2-3H2,(H2,10,11,14)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H10FN3O3S/c9-4-1-12(8(14)11-7(4)10)5-3-16-6(2-13)15-5/h1,5-6,13H,2-3H2,(H2,10,11,14)/t5-,6+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H10N2O3S/c1-6(11)10-14(12,13)8-4-2-7(9)3-5-8/h2-5H,9H2,1H3,(H,10,11)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H10N2O4/c9-5(8(13)14)3-10-2-1-6(11)7(12)4-10/h1-2,4-5,12H,3,9H2,(H,13,14)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H10N2OS/c11-8-7(9-3-4-10-8)6-2-1-5-12-6/h1-2,5,7,9H,3-4H2,(H,10,11)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H10N2OS/c11-8-7(9-3-4-10-8)6-2-1-5-12-6/h1-2,5,7,9H,3-4H2,(H,10,11)/t7-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H10N2OS/c11-8-7(9-3-4-10-8)6-2-1-5-12-6/h1-2,5,7,9H,3-4H2,(H,10,11)/t7-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H10N2S/c1-2-7-5-6(8(9)11)3-4-10-7/h3-5H,2H2,1H3,(H2,9,11)	1	(Li et al., 2005) (Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C8H10N4O2/c1-10-4-9-6-5(10)7(13)12(3)8(14)11(6)2/h4H,1-3H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H10N4O2/c1-2-3-12-6-5(9-4-10-6)7(13)11-8(12)14/h4H,2-3H2,1H3,(H,9,10)(H,11,13,14)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H10N6S/c1-4-11-2-5(12-4)6-3-15-8(13-6)14-7(9)10/h2-3H,1H3,(H,11,12)(H4,9,10,13,14)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H10O4/c1-5(2)8(11)6(12-3)4-7(9)10/h4H,1H2,2-3H3,(H,9,10)/b6-4-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H10O4/c1-5(2)8(11)6(12-3)4-7(9)10/h4H,1H2,2-3H3,(H,9,10)/b6-4+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H11Cl2N3O2/c9-1-3-13(4-2-10)6-5-11-8(15)12-7(6)14/h5H,1-4H2,(H2,11,12,14,15)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H11Cl3O6/c9-8(10,11)7-16-5-3(14)4(2(13)1-12)15-6(5)17-7/h2-7,12-14H,1H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H11Cl3O6/c9-8(10,11)7-16-5-3(14)4(2(13)1-12)15-6(5)17-7/h2-7,12-14H,1H2/t2-,3-,4-,5-,6-,7-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H11Cl3O6/c9-8(10,11)7-16-5-3(14)4(2(13)1-12)15-6(5)17-7/h2-7,12-14H,1H2/t2-,3-,4-,5-,6+,7+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H11Cl3O6/c9-8(10,11)7-16-5-3(14)4(2(13)1-12)15-6(5)17-7/h2-7,12-14H,1H2/t2-,3+,4-,5-,6?,7-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C8H11Cl3O6/c9-8(10,11)7-16-5-3(14)4(2(13)1-12)15-6(5)17-7/h2-7,12-14H,1H2/t2-,3+,4+,5-,6-,7+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H11Cl3O6/c9-8(10,11)7-16-5-3(14)4(2(13)1-12)15-6(5)17-7/h2-7,12-14H,1H2/t2?,3-,4+,5+,6+,7+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H11ClO6P2/c9-7-3-1-6(2-4-7)5-8(16(10,11)12)17(13,14)15/h1-4,8H,5H2,(H2,10,11,12)(H2,13,14,15)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H11N3O3S/c9-5-1-2-11(8(13)10-5)6-4-15-7(3-12)14-6/h1-2,6-7,12H,3-4H2,(H2,9,10,13)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H11N3O3S/c9-5-1-2-11(8(13)10-5)6-4-15-7(3-12)14-6/h1-2,6-7,12H,3-4H2,(H2,9,10,13)/t6-,7+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H11N5O2/c9-8-10-3-6-7(12-8)13(4-11-6)5-15-2-1-14/h3-4,14H,1-2,5H2,(H2,9,10,12)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H11N5O3/c9-8-11-6-5(7(15)12-8)10-3-13(6)4-16-2-1-14/h3,14H,1-2,4H2,(H3,9,11,12,15)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H11NO2/c1-11-7-4-2-3-6(5-9)8(7)10/h2-4,10H,5,9H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H11NO2/c1-3-9-5-4-7(10)8(11)6(9)2/h4-5,11H,3H2,1-2H3	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C8H11NO2/c9-4-3-6-1-2-7(10)8(11)5-6/h1-2,5,10-11H,3-4,9H2	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C8H11NO2/c9-5-8(11)6-2-1-3-7(10)4-6/h1-4,8,10-11H,5,9H2	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H11NO2/c9-5-8(11)6-2-1-3-7(10)4-6/h1-4,8,10-11H,5,9H2/t8-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H11NO2/c9-5-8(11)6-2-1-3-7(10)4-6/h1-4,8,10-11H,5,9H2/t8-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H11NO3/c1-5-8(12)7(4-11)6(3-10)2-9-5/h2,10-12H,3-4H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H11NO3/c9-4-8(12)5-1-2-6(10)7(11)3-5/h1-3,8,10-12H,4,9H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H11NO3/c9-4-8(12)5-1-2-6(10)7(11)3-5/h1-3,8,10-12H,4,9H2/t8-/m1/s1	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C8H11NO5S/c1-8(2)6(7(11)12)9-4(10)3-5(9)15(8,13)14/h5-6H,3H2,1-2H3,(H,11,12)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H11NO5S/c1-8(2)6(7(11)12)9-4(10)3-5(9)15(8,13)14/h5-6H,3H2,1-2H3,(H,11,12)/t5-,6-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H12N2/c1-5-6(2)10-8(4)7(3)9-5/h1-4H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H12N2/c1-7(10-9)8-5-3-2-4-6-8/h2-7,10H,9H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H12N2/c1-7(10-9)8-5-3-2-4-6-8/h2-7,10H,9H2,1H3/t7-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H12N2/c1-7(10-9)8-5-3-2-4-6-8/h2-7,10H,9H2,1H3/t7-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H12N2/c1-9-7-5-8-4-2-3-6-10-8/h2-4,6,9H,5,7H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H12N2/c1-9-7-5-8-4-2-3-6-10-8/h2-4,6,9H,5,7H2,1H3/p+1	1	(Vilar et al., 2010)

InChI=1S/C8H12N2/c9-10-7-6-8-4-2-1-3-5-8/h1-5,10H,6-7,9H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H12N2O3/c1-3-8(4-2)5(11)9-7(13)10-6(8)12/h3-4H2,1-2H3,(H2,9,10,11,12,13)	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C8H12N2S/c1-9-6-2-3-7-8(4-6)11-5-10-7/h5-6,9H,2-4H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H12N2S/c1-9-6-2-3-7-8(4-6)11-5-10-7/h5-6,9H,2-4H2,1H3/t6-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H12N2S/c1-9-6-2-3-7-8(4-6)11-5-10-7/h5-6,9H,2-4H2,1H3/t6-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H12N4/c1-2-10-8(11-3-1)12-6-4-9-5-7-12/h1-3,9H,4-7H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H12N4O2/c1-10-4-9-6-5(10)7(13)12(3)8(14)11(6)2/h4-6H,1-3H3	1	Chen et al., 2009
InChI=1S/C8H12N4O4/c9-7-10-3-12(8(15)11-7)6-1-4(14)5(2-13)16-6/h3-6,13-14H,1-2H2,(H2,9,11,15)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H12N4O5/c9-6(16)7-10-2-12(11-7)8-5(15)4(14)3(1-13)17-8/h2-5,8,13-15H,1H2,(H2,9,16)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H12N4O5/c9-6(16)7-10-2-12(11-7)8-5(15)4(14)3(1-13)17-8/h2-5,8,13-15H,1H2,(H2,9,16)/t3-,4-,5-,8-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H12N4O5/c9-6(16)7-10-2-12(11-7)8-5(15)4(14)3(1-13)17-8/h2-5,8,13-15H,1H2,(H2,9,16)/t3-,4+,5-,8-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H12N4O5/c9-7-10-2-12(8(16)11-7)6-5(15)4(14)3(1-13)17-6/h2-6,13-15H,1H2,(H2,9,11,16)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H12N4O5/c9-7(16)3-1-10-12(11-3)8-6(15)5(14)4(2-13)17-8/h1,4-6,8,13-15H,2H2,(H2,9,16)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H12N4O5/c9-7(16)3-1-10-12(11-3)8-6(15)5(14)4(2-13)17-8/h1,4-6,8,13-15H,2H2,(H2,9,16)/t4-,5-,6-,8-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H12N4O5/c9-7(16)3-1-10-12(11-3)8-6(15)5(14)4(2-13)17-8/h1,4-6,8,13-15H,2H2,(H2,9,16)/t4-,5-,6-,8+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H12N5O4P/c9-7-6-8(11-3-10-7)13(4-12-6)1-2-17-5-18(14,15)16/h3-4H,1-2,5H2,(H2,9,10,11)(H2,14,15,16)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H13N3O3S/c9-5-1-2-11(8(13)10-5)6-4-15-7(3-12)14-6/h6-7,12H,1-4H2,(H2,9,10,13)/t6-,7-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H13N3O4S/c1-3-16(14,15)5-4-10-7(2)9-6-8(10)11(12)13/h6H,3-5H2,1-2H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C8H13N5O2/c9-8-10-3-6-7(12-8)13(4-11-6)5-15-2-1-14/h4,14H,1-3,5H2,(H3,9,10,12)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H13NO2/c1-3-8(2)4-6(10)9-7(11)5-8/h3-5H2,1-2H3,(H,9,10,11)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H13NO2/c1-9-5-3-4-7(6-9)8(10)11-2/h4H,3,5-6H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H14N2O/c1-10-5-3-4-8(7-10)6-9-11-2/h4,6H,3,5,7H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H14N2O/c1-10-5-3-4-8(7-10)6-9-11-2/h4,6H,3,5,7H2,1-2H3/b9-6-	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H14N2O/c1-10-5-3-4-8(7-10)6-9-11-2/h4,6H,3,5,7H2,1-2H3/b9-6+	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H14N2O2/c1-2-6(8(9)12)10-5-3-4-7(10)11/h6H,2-5H2,1H3,(H2,9,12)	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C8H14N2O2/c1-2-6(8(9)12)10-5-3-4-7(10)11/h6H,2-5H2,1H3,(H2,9,12)/t6-/m0/s1	2023)
InChI=1S/C8H14N2O2/c1-2-6(8(9)12)10-5-3-4-7(10)11/h6H,2-5H2,1H3,(H2,9,12)/t6-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H14N3O6P/c9-7-1-2-11(8(13)10-7)3-6(4-12)17-5-18(14,15)16/h1-2,6,12H,3-5H2,(H2,9,10,13)(H2,14,15,16)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H14N3O6P/c9-7-1-2-11(8(13)10-7)3-6(4-12)17-5-18(14,15)16/h1-2,6,12H,3-5H2,(H2,9,10,13)(H2,14,15,16)/t6-/m0/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H14O2/c1-3-9-7-5-6-8-10-4-2/h3-4H,1-2,5-8H2	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H15Cl3O3/c1-5(4-7(2,3)13)14-6(12)8(9,10)11/h5-6,12-13H,4H2,1-3H3	1 (Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C8H15Cl3O3/c1-5(4-7(2,3)13)14-6(12)8(9,10)11/h5-6,12-13H,4H2,1-3H3/t5-,6-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H15Cl3O3/c1-5(4-7(2,3)13)14-6(12)8(9,10)11/h5-6,12-13H,4H2,1-3H3/t5-,6+/m1/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H15N3O6/c1-11(10-16)8(15)9-4-3-17-5(2-12)7(14)6(4)13/h4-7,12-14H,2-3H2,1H3,(H,9,15)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H15N3O7/c1-11(10-17)8(16)9-4-6(14)5(13)3(2-12)18-7(4)15/h3-7,12-15H,2H2,1H3,(H,9,16)	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H15N3O7/c1-11(10-17)8(16)9-4-6(14)5(13)3(2-12)18-7(4)15/h3-7,12-15H,2H2,1H3,(H,9,16)/t3-,4-,5-,6-,7-/m1/s1	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H15N3O7/c1-11(10-17)8(16)9-4-6(14)5(13)3(2-12)18-7(4)15/h3-7,12-15H,2H2,1H3,(H,9,16)/t3-,4-,5-,6-,7+/m1/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H15N3O7/c1-11(10-17)8(16)9-4-6(14)5(13)3(2-12)18-7(4)15/h3-7,12-15H,2H2,1H3,(H,9,16)/t3-,4+,5+,6-,7-/m0/s1	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H15N7O2S3/c9-6(15-20(12,16)17)1-2-18-3-5-4-19-8(13-5)14-7(10)11/h4H,1-3H2,(H2,9,15)(H2,12,16,17)(H4,10,11,13,14)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H15N7O2S3/c9-6(15-20(12,16)17)1-2-18-3-5-4-19-8(13-5)14-7(10)11/h4H,1-3H2,(H2,9,15)(H2,12,16,17)(H4,10,11,13,14)/p+2	1 (Li et al., 2005)
InChI=1S/C8H15NO2/c1-3-5-6-8(4-2,11-6)7(9)10/h6H,3-5H2,1-2H3,(H2,9,10)	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H15NO2/c1-3-5-6-8(4-2,11-6)7(9)10/h6H,3-5H2,1-2H3,(H2,9,10)/t6-,8-/m0/s1	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H15NO2/c1-3-5-6-8(4-2,11-6)7(9)10/h6H,3-5H2,1-2H3,(H2,9,10)/t6-,8-/m1/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H15NO2/c1-3-5-6-8(4-2,11-6)7(9)10/h6H,3-5H2,1-2H3,(H2,9,10)/t6-,8-/m0/s1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H15NO2/c1-6(10)9-7-2-4-8(11)5-3-7/h7-8,11H,2-5H2,1H3,(H,9,10)	1 Chen et al., 2009
InChI=1S/C8H15NO2/c9-5-6-1-3-7(4-2-6)8(10)11/h6-7H,1-5,9H2,(H,10,11)	1 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H15NO6/c1-4(12)9-5(2-10)7(14)8(15)6(13)3-11/h2,5-8,11,13-15H,3H2,1H3,(H,9,12)	0 (Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H16/c1-2-8-6-4-3-5-7-8/h8H,2-7H2,1H3	1 Chen et al., 2009

InChI=1S/C8H16/c1-3-5-7-8-6-4-2/h3H,1,4-8H2,2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H16/c1-7-3-5-8(2)6-4-7/h7-8H,3-6H2,1-2H3	1	Chen et al., 2009
InChI=1S/C8H16/c1-7-4-3-5-8(2)6-7/h7-8H,3-6H2,1-2H3	1	Chen et al., 2009
InChI=1S/C8H16/c1-7-5-3-4-6-8(7)2/h7-8H,3-6H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H16/c1-7-5-3-4-6-8(7)2/h7-8H,3-6H2,1-2H3/t7-,8-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H16N2O4/c1-4(5(2)13-7(9)11)6(3)14-8(10)12/h4-6H,1-3H3,(H2,9,11)(H2,10,12)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H16N2O4/c1-4(5(2)13-7(9)11)6(3)14-8(10)12/h4-6H,1-3H3,(H2,9,11)(H2,10,12)/t4?,5-,6+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H16N2O4/c1-4(5(2)13-7(9)11)6(3)14-8(10)12/h4-6H,1-3H3,(H2,9,11)(H2,10,12)/t5-,6-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H16NO5P/c1-3-14-8(10)7(9)4-6(2)5-15(11,12)13/h4,7H,3,5,9H2,1-2H3,(H2,11,12,13)/b6-4+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H16O2/c1-3-5-7(6-4-2)8(9)10/h7H,3-6H2,1-2H3,(H,9,10)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H17NO/c1-3-5-7(6-4-2)8(9)10/h7H,3-6H2,1-2H3,(H2,9,10)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H17NO/c1-4-6(3)7(5-2)8(9)10/h6-7H,4-5H2,1-3H3,(H2,9,10)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H17NO/c1-4-6(3)7(5-2)8(9)10/h6-7H,4-5H2,1-3H3,(H2,9,10)/t6-,7-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H17NO/c1-4-6(3)7(5-2)8(9)10/h6-7H,4-5H2,1-3H3,(H2,9,10)/t6-,7+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H17NO/c1-4-6(3)7(5-2)8(9)10/h6-7H,4-5H2,1-3H3,(H2,9,10)/t6?,7-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H17NO2/c1-6(2)3-7(5-9)4-8(10)11/h6-7H,3-5,9H2,1-2H3,(H,10,11)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H17NO2/c1-6(2)3-7(5-9)4-8(10)11/h6-7H,3-5,9H2,1-2H3,(H,10,11)/t7-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H17NO2/c1-6(2)3-7(5-9)4-8(10)11/h6-7H,3-5,9H2,1-2H3,(H,10,11)/t7-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H17NO5/c10-2-1-9-3-6(12)8(14)7(13)5(9)4-11/h5-8,10-14H,1-4H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H17NO5/c10-2-1-9-3-6(12)8(14)7(13)5(9)4-11/h5-8,10-14H,1-4H2/t5-,6+,7-,8-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H18/c1-3-5-7-8-6-4-2/h3-8H2,1-2H3	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C8H18/c1-4-5-6-7-8(2)3/h8H,4-7H2,1-3H3	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C8H18N4/c1-2-10-8(11-3-1)12-6-4-9-5-7-12/h8-11H,1-7H2	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C8H18NO2/c1-7(11-8(2)10)6-9(3,4)5/h7H,6H2,1-5H3/q+1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H18O4S2/c1-5-8(4,13(9,10)6-2)14(11,12)7-3/h5-7H2,1-4H3	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C8H20N2/c1-3-4-5-6-7-8(2)10-9/h8,10H,3-7,9H2,1-2H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H20N2/c1-3-4-5-6-7-8(2)10-9/h8,10H,3-7,9H2,1-2H3/t8-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H20N2/c1-3-4-5-6-7-8(2)10-9/h8,10H,3-7,9H2,1-2H3/t8-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H20NO6P/c1-9(2,3)4-5-14-16(12,13)15-7-8(11)6-10/h8,10-11H,4-7H2,1-3H3/t8-/m1/s1	0	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C8H23N5.C3H5ClO/c9-1-3-11-5-7-13-8-6-12-4-2-10;4-1-3-2-5-3/h11-13H,1-10H2;3H,1-2H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H23N5/c9-1-3-11-5-7-13-8-6-12-4-2-10/h11-13H,1-10H2	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H3Cl2N3O4/c9-2-1-3-5(6(4(2)10)13(16)17)12-8(15)7(14)11-3/h1H,(H,11,14)(H,12,15)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H5F3N2OS/c9-8(10,11)14-4-1-2-5-6(3-4)15-7(12)13-5/h1-3H,(H2,12,13)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H5F6N3O3/c9-7(10,11)6(8(12,13)14)20-4-2-1-3(17(18)19)5(15)16-4/h1-2,6H,(H2,15,16)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H6Cl2O3/c9-5-1-2-7(6(10)3-5)13-4-8(11)12/h1-3H,4H2,(H,11,12)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H6Cl3NO2/c9-8(10,11)7(14)12-5-1-3-6(13)4-2-5/h1-4,13H,(H,12,14)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H6N2O2/c11-7-4-2-1-3-6(7)8-10-9-5-12-8/h1-5,11H	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H6N4O5/c13-6-4-11(8(14)10-6)9-3-5-1-2-7(17-5)12(15)16/h1-3H,4H2,(H,10,13,14)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H6N4O5/c13-6-4-11(8(14)10-6)9-3-5-1-2-7(17-5)12(15)16/h1-3H,4H2,(H,10,13,14)/b9-3-	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H6N4O5/c13-6-4-11(8(14)10-6)9-3-5-1-2-7(17-5)12(15)16/h1-3H,4H2,(H,10,13,14)/b9-3+	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H7ClN2O2S/c1-5-10-7-3-2-6(9)4-8(7)14(12,13)11-5/h2-4H,1H3,(H,10,11)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H7N3O5/c12-8-10(3-4-15-8)9-5-6-1-2-7(16-6)11(13)14/h1-2,5H,3-4H2	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H7N3O5/c12-8-10(3-4-15-8)9-5-6-1-2-7(16-6)11(13)14/h1-2,5H,3-4H2/b9-5-	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H7N3O5/c12-8-10(3-4-15-8)9-5-6-1-2-7(16-6)11(13)14/h1-2,5H,3-4H2/b9-5+	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H8/c1-2-8-6-4-3-5-7-8/h2-7H,1H2	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C8H8BrNO2/c1-4-2-5(9)3-6(7(4)11)8(10)12/h2-3,11H,1H3,(H2,10,12)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H8Cl2N4/c9-6-2-1-3-7(10)5(6)4-13-14-8(11)12/h1-4H,(H4,11,12,14)	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C8H8Cl2N4/c9-6-2-1-3-7(10)5(6)4-13-14-8(11)12/h1-4H,(H4,11,12,14)/b13-4-	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C8H8Cl2N4/c9-6-2-1-3-7(10)5(6)4-13-14-8(11)12/h1-4H,(H4,11,12,14)/b13-4+	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H8Cl3N3O4S2/c9-3-1-4-6(2-5(3)19(12,15)16)20(17,18)14-8(13-4)7(10)11/h1-2,7-8,13-14H,(H2,12,15,16)	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C8H8Cl3N3O4S2/c9-3-1-4-6(2-5(3)19(12,15)16)20(17,18)14-8(13-4)7(10)11/h1-2,7-8,13-14H,(H2,12,15,16)/t8-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H8F3N3O4S2/c9-8(10,11)4-1-5-7(2-6(4)19(12,15)16)20(17,18)14-3-13-5/h1-2,13-14H,3H2,(H2,12,15,16)	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C8H8FNO4S/c1-2(11)3-6(12)10-4(8(13)14)5(9)15-7(3)10/h2-3,7,11H,1H3,(H,13,14)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H8FNO4S/c1-2(11)3-6(12)10-4(8(13)14)5(9)15-7(3)10/h2-3,7,11H,1H3,(H,13,14)/t2-,3-,7-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H8FNO4S/c1-2(11)3-6(12)10-4(8(13)14)5(9)15-7(3)10/h2-3,7,11H,1H3,(H,13,14)/t2-,3-,7+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H8FNO4S/c1-2(11)3-6(12)10-4(8(13)14)5(9)15-7(3)10/h2-3,7,11H,1H3,(H,13,14)/t2-,3?,7-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H8FNO5/c9-8(6(14)15)3-2(11)1-7(10,4(3)8)5(12)13/h3-4H,1,10H2,(H,12,13)(H,14,15)/t3-,4-,7+,8-/m1/s1	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C8H8N2O3S/c9-14(11,12)5-7-6-3-1-2-4-8(6)13-10-7/h1-4H,5H2,(H2,9,11,12)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H8N4/c9-11-8-7-4-2-1-3-6(7)5-10-12-8/h1-5H,9H2,(H,11,12)	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C8H8OS/c1-7(9)4-5-8-3-2-6-10-8/h2-6H,1H3/b5-4+	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H9FN2O3/c9-5-4-11(6-2-1-3-14-6)8(13)10-7(5)12/h4,6H,1-3H2,(H,10,12,13)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H9FO2S/c1-2-12(10,11)8-5-3-7(9)4-6-8/h3-6H,2H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H9N3/c9-5-7-6-11-4-2-1-3-8(11)10-7/h1-4,6H,5,9H2/p+1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H9N3O2/c1-4-3-9-6-5(4)7(12)10-8(13)11(6)2/h3-4H,1-2H3,(H,10,12,13)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H9N3O4/c12-8(7-2-1-3-9-6-7)10-4-5-15-11(13)14/h1-3,6H,4-5H2,(H,10,12)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H9NO/c1-7(10)9-8-5-3-2-4-6-8/h2-6H,1H3,(H,9,10)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H9NO2/c1-6(10)9-7-2-4-8(11)5-3-7/h2-5,11H,1H3,(H,9,10)	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C8H9NO2/c1-6(10)9-7-3-2-4-8(11)5-7/h2-5,11H,1H3,(H,9,10)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C8H9NO3/c1-5-8(12)7(4-11)6(3-10)2-9-5/h2,4,10,12H,3H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C8H9NO5/c10-2-1-4-7(8(12)13)9-5(11)3-6(9)14-4/h1,6-7,10H,2-3H2,(H,12,13)/t6-,7-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C97H139N19O17/c1-51(2)38-71(106-84(120)59(17)104-79(119)49-102-94(130)80(55(9)10)103-50-118)87(123)105-60(18)85(121)114-82(57(13)14)96(132)116-83(58(15)16)97(133)115-81(56(11)12)95(131)113-78(45-64-48-101-70-35-27-24-32-67(64)70)93(129)109-72(39-52(3)4)88(124)110-75(42-61-28-20-19-21-29-61)91(127)107-74(41-54(7)8)90(126)112-77(44-63-47-100-69-34-26-23-31-66(63)69)92(128)108-73(40-53(5)6)89(125)111-76(86(122)98-36-37-117)43-62-46-99-68-33-25-22-30-65(62)68/h19-35,46-48,50-60,71-78,80-83,99-101,117H,36-45,49H2,1-18H3,(H,98,122)(H,102,130)(H,103,118)(H,104,119)(H,105,123)(H,106,120)(H,107,127)(H,108,128)(H,109,129)(H,110,124)(H,111,125)(H,112,126)(H,113,131)(H,114,121)(H,115,133)(H,116,132)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C97H139N19O17/c1-51(2)38-71(106-84(120)59(17)104-79(119)49-102-94(130)80(55(9)10)103-50-118)87(123)105-60(18)85(121)114-	0	(Meng et al., 2021)

82(57(13)14)96(132)116-83(58(15)16)97(133)115-81(56(11)12)95(131)113-78(45-64-48-101-70-35-27-24-32-67(64)70)93(129)109-72(39-52(3)4)88(124)110-75(42-61-28-20-19-21-29-61)91(127)107-74(41-54(7)8)90(126)112-77(44-63-47-100-69-34-26-23-31-66(63)69)92(128)108-73(40-53(5)6)89(125)111-76(86(122)98-36-37-117)43-62-46-99-68-33-25-22-30-65(62)68/h19-35,46-48,50-60,71-78,80-83,99-101,117H,36-45,49H2,1-18H3,(H,98,122)(H,102,130)(H,103,118)(H,104,119)(H,105,123)(H,106,120)(H,107,127)(H,108,128)(H,109,129)(H,110,124)(H,111,125)(H,112,126)(H,113,131)(H,114,121)(H,115,133)(H,116,132)/t59-,60+,71+,72+,73-,74+,75-,76-,77+,78-,80+,81+,82+,83+/m0/s1 InChI=1S/C99H140N2O17/c1-51(2)37-73(109-86(123)59(17)107-81(122)49-105-96(133)82(55(9)10)106-50-121)89(126)108-60(18)87(124)117-84(57(13)14)98(135)119-85(58(15)16)99(136)118-83(56(11)12)97(134)116-80(44-64-48-104-72-34-26-22-30-68(64)72)95(132)112-76(40-54(7)8)92(129)115-79(43-63-47-103-71-33-25-21-29-67(63)71)94(131)111-75(39-53(5)6)91(128)114-78(42-62-46-102-70-32-24-20-28-66(62)70)93(130)110-74(38-52(3)4)90(127)113-77(88(125)100-35-36-120)41-61-45-101-69-31-23-19-27-65(61)69/h19-34,45-48,50-60,73-80,82-85,101-104,120H,35-44,49H2,1-18H3,(H,100,125)(H,105,133)(H,106,121)(H,107,122)(H,108,126)(H,109,123)(H,110,130)(H,111,131)(H,112,132)(H,113,127)(H,114,128)(H,115,129)(H,116,134)(H,117,124)(H,118,136)(H,119,135)/t59-,60-,73+,74+,75+,76+,77-,78-,79-,80-,82-,83+,84+,85-/m0/s1 InChI=1S/C99H140N2O17/c1-51(2)37-73(109-86(123)59(17)107-81(122)49-105-96(133)82(55(9)10)106-50-121)89(126)108-60(18)87(124)117-84(57(13)14)98(135)119-85(58(15)16)99(136)118-83(56(11)12)97(134)116-80(44-64-48-104-72-34-26-22-30-68(64)72)95(132)112-76(40-54(7)8)92(129)115-79(43-63-47-103-71-33-25-21-29-67(63)71)94(131)111-75(39-53(5)6)91(128)114-78(42-62-46-102-70-32-24-20-28-66(62)70)93(130)110-74(38-52(3)4)90(127)113-77(88(125)100-35-36-120)41-61-45-101-69-31-23-19-27-65(61)69/h19-34,45-48,50-60,73-80,82-85,101-104,120H,35-44,49H2,1-18H3,(H,100,125)(H,105,133)(H,106,121)(H,107,122)(H,108,126)(H,109,123)(H,110,130)(H,111,131)(H,112,132)(H,113,127)(H,114,128)(H,115,129)(H,116,134)(H,117,124)(H,118,136)(H,119,135)/t59-,60+,73-,74-,75-,76-,77+,78+,79+,80+,82+,83-,84-,85+/m1/s1 InChI=1S/C9H10ClN3/c1-5-8-6(10)3-2-4-7(8)13-9(11)12-5/h2-5H,1H3,(H3,11,12,13) InChI=1S/C9H10ClN3S/c10-6-1-2-8(7(11)5-6)13-3-4-14-9(13)12/h1-2,5,12H,3-4,11H2 InChI=1S/C9H10FN/c10-7-3-1-6(2-4-7)8-5-9(8)11/h1-4,8-9H,5,11H2/t8-,9+/m0/s1 InChI=1S/C9H10FN/c10-7-3-1-6(2-4-7)8-5-9(8)11/h1-4,8-9H,5,11H2/t8-,9+/m1/s1 InChI=1S/C9H10FN3O4/c10-3-1-13-8-6(5(15)4(2-14)16-8)17-9(13)12-7(3)11/h1,4-6,8,11,14-15H,2H2/t4-,5-,6+,8-/m0/s1 InChI=1S/C9H10N2O2/c10-9(13)11-8(12)6-7-4-2-1-3-5-7/h1-5H,6H2,(H3,10,11,12,13) InChI=1S/C9H10N2O3/c10-7-3-1-6(2-4-7)9(14)11-5-8(12)13/h1-4H,5,10H2,(H,11,14)(H,12,13) InChI=1S/C9H10N4O2S2/c1-6-11-12-9(16-6)13-17(14,15)8-4-2-7(10)3-5-8/h2-5H,10H2,1H3,(H,12,13) InChI=1S/C9H10O4/c1-6(10)13-8-5-3-2-4-7(8)9(11)12/h2-3,5,7H,4H2,1H3,(H,11,12) InChI=1S/C9H11Cl/c1-2-3-8-4-6-9(10)7-5-8/h4-7H,2-3H2,1H3 InChI=1S/C9H11Cl2N3O4S2/c1-14-9(4-10)13-6-2-5(11)7(19(12,15)16)3-8(6)20(14,17)18/h2-3,9,13H,4H2,1H3,(H2,12,15,16) InChI=1S/C9H11Cl2N3O4S2/c1-14-9(4-10)13-6-2-5(11)7(19(12,15)16)3-8(6)20(14,17)18/h2-3,9,13H,4H2,1H3,(H2,12,15,16)/t9-/m0/s1	(Mazumdar et al., 2023)
	0
	0 (Meng et al., 2021)
	1 (Meng et al., 2021)
	1 (Mazumdar et al., 2023)
	1 (Meng et al., 2021)
	1 (Meng et al., 2021)
	1 (Meng et al., 2021)
	1 (Meng et al., 2021)
	0 (Meng et al., 2021)
	0 (Meng et al., 2021)
	1 (Kaupp, 2007)
	0 (Mazumdar et al., 2023)
	0 (Mazumdar et al., 2023)
	0 (Meng et al., 2021)

InChI=1S/C9H11ClO3/c10-7-1-3-9(4-2-7)13-6-8(12)5-11/h1-4,8,11-12H,5-6H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H11ClO3/c10-7-1-3-9(4-2-7)13-6-8(12)5-11/h1-4,8,11-12H,5-6H2/t8-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H11F2N3O4/c10-9(11)6(16)4(3-15)18-7(9)14-2-1-5(12)13-8(14)17/h1-2,4,6-7,15-16H,3H2,(H2,12,13,17)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H11F2N3O4/c10-9(11)6(16)4(3-15)18-7(9)14-2-1-5(12)13-8(14)17/h1-2,4,6-7,15-16H,3H2,(H2,12,13,17)/t4-,6-,7-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H11FN2O4/c10-5-3-8(16-6(5)4-13)12-2-1-7(14)11-9(12)15/h2,5-6,8,13H,1,3-4H2/p+1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H11FN2O5/c10-4-2-12(9(16)11-8(4)15)7-1-5(14)6(3-13)17-7/h2,5-7,13-14H,1,3H2,(H,11,15,16)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H11FN2O5/c10-4-2-12(9(16)11-8(4)15)7-1-5(14)6(3-13)17-7/h2,5-7,13-14H,1,3H2,(H,11,15,16)/t5-,6-,7-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H11FN2O5/c10-4-2-12(9(16)11-8(4)15)7-1-5(14)6(3-13)17-7/h2,5-7,13-14H,1,3H2,(H,11,15,16)/t5-,6+,7+/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H11IN2O5/c10-4-2-12(9(16)11-8(4)15)7-1-5(14)6(3-13)17-7/h2,5-7,13-14H,1,3H2,(H,11,15,16)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H11N/c1-2-4-9-7-10-6-5-8(9)3-1/h1-4,10H,5-7H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H11N/c1-2-6-9-8(4-1)5-3-7-10-9/h1-2,4,6,10H,3,5,7H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H11N/c10-9-6-8(9)7-4-2-1-3-5-7/h1-5,8-9H,6,10H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H11N/c10-9-6-8(9)7-4-2-1-3-5-7/h1-5,8-9H,6,10H2/t8-,9-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H11N/c10-9-6-8(9)7-4-2-1-3-5-7/h1-5,8-9H,6,10H2/t8-,9-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H11N/c10-9-6-8(9)7-4-2-1-3-5-7/h1-5,8-9H,6,10H2/t8-,9+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H11N3/c1-2-4-8(5-3-1)12-9-10-6-7-11-9/h1-5H,6-7H2,(H2,10,11,12)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H11N3/c1-7-2-4-8(5-3-7)9(11)12-6-10/h2-6H,1H3,(H3,10,11,12)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H11N3/c10-5-4-8-7-12-6-2-1-3-9(12)11-8/h1-3,6-7H,4-5,10H2	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C9H11NO/c1-7(10)9(11)8-5-3-2-4-6-8/h2-7H,10H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H11NO/c1-7(10)9(11)8-5-3-2-4-6-8/h2-7H,10H2,1H3/t7-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H11NO/c1-7(10)9(11)8-5-3-2-4-6-8/h2-7H,10H2,1H3/t7-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H11NO/c11-9-6-10-5-7-3-1-2-4-8(7)9/h1-4,9-11H,5-6H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H11NO2.C6H11NO2/c10-8(9(11)12)6-7-4-2-1-3-5-7;1-9-6(8)5-3-2-4-7-5/h1-5,8H,6,10H2,(H,11,12);5,7H,2-4H2,1H3/t8-;5-/m10/s1	1	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C9H11NO2/c1-2-12-8-6-4-3-5-7(8)9(10)11/h3-6H,2H2,1H3,(H2,10,11)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H11NO2/c1-2-12-9(11)7-3-5-8(10)6-4-7/h3-6H,2,10H2,1H3	1	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C9H11NO2/c1-2-9(12)10-7-3-5-8(11)6-4-7/h3-6,11H,2H2,1H3,(H,10,12)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H11NO4/c10-6(9(13)14)3-5-1-2-7(11)8(12)4-5/h1-2,4,6,11-12H,3,10H2,(H,13,14)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H11NO4/c10-6(9(13)14)3-5-1-2-7(11)8(12)4-5/h1-2,4,6,11-12H,3,10H2,(H,13,14)/t6-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H11NO4/c10-6(9(13)14)3-5-1-2-7(11)8(12)4-5/h1-2,4,6,11-12H,3,10H2,(H,13,14)/t6-/m1/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C9H11NO5/c10-7(9(14)15)8(13)4-1-2-5(11)6(12)3-4/h1-3,7-8,11-13H,10H2,(H,14,15)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H12/c1-7-4-5-8(2)9(3)6-7/h4-6H,1-3H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H12BNO4/c11-8(9(12)13)5-6-1-3-7(4-2-6)10(14)15/h1-4,8,14-15H,5,11H2,(H,12,13)/t8-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H12ClNO/c1-5-13-7(10)6(8(14-5)16-2)15-9-11-3-4-12-9/h3-4H2,1-2H3,(H2,11,12,15)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H12ClNO3S/c10-9-3-1-7(2-4-9)8(5-11)6-15(12,13)14/h1-4,8H,5-6,11H2,(H,12,13,14)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H12N2/c1-3-8(7-10-5-1)9-4-2-6-11-9/h1,3,5,7,9,11H,2,4,6H2	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H12N2/c1-3-8(7-10-5-1)9-4-2-6-11-9/h1,3,5,7,9,11H,2,4,6H2/p+1/t9-/m1/s1	1	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C9H12N2/c1-3-8(7-10-5-1)9-4-2-6-11-9/h1,3,5,7,9,11H,2,4,6H2/t9-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H12N2O6/c12-3-4-6(14)7(15)8(17-4)11-2-1-5(13)10-9(11)16/h1-2,4,6-8,12,14-15H,3H2,(H,10,13,16)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H12N2O6/c12-3-4-6(14)7(15)8(17-4)11-2-1-5(13)10-9(11)16/h1-2,4,6-8,12,14-15H,3H2,(H,10,13,16)/t4-,6+,7-,8-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H12N2S/c1-2-3-8-6-7(9(10)12)4-5-11-8/h4-6H,2-3H2,1H3,(H2,10,12)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H12N6/c1-15(2)7-5-6(3-4-11-7)8-12-9(10)14-13-8/h3-5H,1-2H3,(H3,10,12,13,14)	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C9H13ClNO3P/c10-9-3-1-7(2-4-9)8(5-11)6-15(12,13)14/h1-4,8H,5-6,11H2,(H2,12,13,14)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H13N/c1-10-8-7-9-5-3-2-4-6-9/h2-6,10H,7-8H2,1H3	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C9H13N/c1-8(10)7-9-5-3-2-4-6-9/h2-6,8H,7,10H2,1H3	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C9H13N/c1-8(10)7-9-5-3-2-4-6-9/h2-6,8H,7,10H2,1H3/t8-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H13N/c1-8(10)7-9-5-3-2-4-6-9/h2-6,8H,7,10H2,1H3/t8-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H13N2O2/c1-10(2)9(12)13-8-5-4-6-11(3)7-8/h4-7H,1-3H3/q+1	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C9H13N3O/c1-7(2)11-12-9(13)8-3-5-10-6-4-8/h3-7,11H,1-2H3,(H,12,13)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H13N3O3/c10-7-3-4-12(9(14)11-7)8-2-1-6(5-13)15-8/h3-4,6,8,13H,1-2,5H2,(H2,10,11,14)	0	(Meng et al., 2021)

InChI=1S/C9H13N3O3/c10-7-3-4-12(9(14)11-7)8-2-1-6(5-13)15-8/h3-4,6,8,13H,1-2,5H2,(H2,10,11,14)/t6-,8-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H13N3O3/c10-7-3-4-12(9(14)11-7)8-2-1-6(5-13)15-8/h3-4,6,8,13H,1-2,5H2,(H2,10,11,14)/t6-,8-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H13N3O3/c10-7-3-4-12(9(14)11-7)8-2-1-6(5-13)15-8/h3-4,6,8,13H,1-2,5H2,(H2,10,11,14)/t6-,8+/m0/s1	0	(Vilar et al., 2010)
InChI=1S/C9H13N3O5/c10-5-1-2-12(9(16)11-5)8-7(15)6(14)4(3-13)17-8/h1-2,4,6-8,13-15H,3H2,(H2,10,11,16)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H13N3O5/c10-5-1-2-12(9(16)11-5)8-7(15)6(14)4(3-13)17-8/h1-2,4,6-8,13-15H,3H2,(H2,10,11,16)/t4-,6-,7-,8-/m1/s1	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C9H13N3O5/c10-5-1-2-12(9(16)11-5)8-7(15)6(14)4(3-13)17-8/h1-2,4,6-8,13-15H,3H2,(H2,10,11,16)/t4-,6-,7+,8-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H13N3O5/c10-5-1-2-12(9(16)11-5)8-7(15)6(14)4(3-13)17-8/h1-2,4,6-8,13-15H,3H2,(H2,10,11,16)/t4-,6+,7-,8-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H13N3O6/c10-7(16)4-8(17)12(2-11-4)9-6(15)5(14)3(1-13)18-9/h2-3,5-6,9,13-15,17H,1H2,(H2,10,16)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H13N5O3/c10-9-12-7-6(8(17)13-9)11-4-14(7)2-1-5(16)3-15/h4-5,15-16H,1-3H2,(H3,10,12,13,17)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H13N5O3/c10-9-12-7-6(8(17)13-9)11-4-14(7)2-1-5(16)3-15/h4-5,15-16H,1-3H2,(H3,10,12,13,17)/t5-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H13N5O3/c10-9-12-7-6(8(17)13-9)11-4-14(7)2-1-5(16)3-15/h4-5,15-16H,1-3H2,(H3,10,12,13,17)/t5-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H13N5O4/c10-9-12-7-6(8(17)13-9)11-3-14(7)4-18-5(1-15)2-16/h3,5,15-16H,1-2,4H2,(H3,10,12,13,17)	1	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C9H13NO/c1-7(10)6-8-2-4-9(11)5-3-8/h2-5,7,11H,6,10H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H13NO/c1-7(10)6-8-2-4-9(11)5-3-8/h2-5,7,11H,6,10H2,1H3/t7-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H13NO/c1-7(10)6-8-2-4-9(11)5-3-8/h2-5,7,11H,6,10H2,1H3/t7-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H13NO/c1-7(10)9(11)8-5-3-2-4-6-8/h2-7,9,11H,10H2,1H3/t7-,9+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H13NO/c1-8(10-11)7-9-5-3-2-4-6-9/h2-6,8,10-11H,7H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H13NO/c1-8(10-11)7-9-5-3-2-4-6-9/h2-6,8,10-11H,7H2,1H3/t8-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H13NO2/c1-10-6-9(12)7-3-2-4-8(11)5-7/h2-5,9-12H,6H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H13NO2/c1-10-6-9(12)7-3-2-4-8(11)5-7/h2-5,9-12H,6H2,1H3/t9-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H13NO2/c1-2-9(12-8(10)11)6-4-3-5-7-9/h1H,3-7H2,(H2,10,11)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H13NO2/c1-3-7-9(12)8(11)5-6-10(7)4-2/h5-6,12H,3-4H2,1-2H3	1	(Li et al., 2005)

InChI=1S/C9H13NO2/c1-3-9(4-2)7(11)5-6-10-8(9)12/h5-6H,3-4H2,1-2H3,(H,10,12)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H13NO2/c1-6(10)9(12)7-3-2-4-8(11)5-7/h2-6,9,11-12H,10H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H13NO2/c1-6(10)9(12)7-3-2-4-8(11)5-7/h2-6,9,11-12H,10H2,1H3/t6-,9-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H13NO2/c1-6(10)9(12)7-3-2-4-8(11)5-7/h2-6,9,11-12H,10H2,1H3/t6-,9+/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H13NO3/c1-10-5-9(13)6-2-3-7(11)8(12)4-6/h2-4,9-13H,5H2,1H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H13NO3/c1-10-5-9(13)6-2-3-7(11)8(12)4-6/h2-4,9-13H,5H2,1H3/t9-/m0/s1	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C9H13NO3/c1-10-5-9(13)6-2-3-7(11)8(12)4-6/h2-4,9-13H,5H2,1H3/t9-/m1/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H13NO3/c1-2-7-9(13)8(12)3-4-10(7)5-6-11/h3-4,11,13H,2,5-6H2,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H13NO3/c1-7-9(13)8(12)3-5-10(7)4-2-6-11/h3,5,11,13H,2,4,6H2,1H3	0	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C9H14N2/c1-11(2)8-6-9-5-3-4-7-10-9/h3-5,7H,6,8H2,1-2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H14N2/c1-8(11-10)7-9-5-3-2-4-6-9/h2-6,8,11H,7,10H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H14N2/c1-8(11-10)7-9-5-3-2-4-6-9/h2-6,8,11H,7,10H2,1H3/t8-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H14N2O/c1-8(11-10)7-12-9-5-3-2-4-6-9/h2-6,8,11H,7,10H2,1H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H14N2O/c1-8(11-10)7-12-9-5-3-2-4-6-9/h2-6,8,11H,7,10H2,1H3/t8-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H14N2O2/c1-6-7(12)11-9(8(13)10-6)4-2-3-5-9/h6H,2-5H2,1H3,(H,10,13)(H,11,12)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H14N2O2/c1-6-7(12)11-9(8(13)10-6)4-2-3-5-9/h6H,2-5H2,1H3,(H,10,13)(H,11,12)/t6-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H14N2O3/c1-3-5-9(4-2)6(12)10-8(14)11-7(9)13/h3-5H2,1-2H3,(H2,10,11,12,13,14)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H14N2O3/c1-4-9(5-2)6(12)10-8(14)11(3)7(9)13/h4-5H2,1-3H3,(H,10,12,14)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H14N4O/c10-9-11-8(4-7-13(9)14)12-5-2-1-3-6-12/h4,7,10,14H,1-3,5-6H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H14N5O4P/c1-6(18-5-19(15,16)17)2-14-4-13-7-8(10)11-3-12-9(7)14/h3-4,6H,2,5H2,1H3,(H2,10,11,12)(H2,15,16,17)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H14N6/c1-15(2)7-5-6(3-4-11-7)8-12-9(10)14-13-8/h3-5,9,14H,10H2,1-2H3,(H,12,13)/t9-/m0/s1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H14O4/c1-6(10)13-8-5-3-2-4-7(8)9(11)12/h7-8H,2-5H2,1H3,(H,11,12)	1	Chen et al., 2009
InChI=1S/C9H15BrN2O2/c1-9(2,3)11-5-6(13)7-4-8(10)12-14-7/h4,6,11,13H,5H2,1-3H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H15BrN2O3/c1-4-9(10,5-2)7(14)12-8(15)11-6(3)13/h4-5H2,1-3H3,(H2,11,12,13,14,15)	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C9H15N5O/c10-7-6-8(12-9(11)14(7)15)13-4-2-1-3-5-13/h6,10,15H,1-5H2,(H2,11,12)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H15N5O/c10-7-6-8(12-9(11)14(7)15)13-4-2-1-3-5-13/h6,11,15H,1-5,10H2	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H15N5O3/c1-3(15)6(16)4-2-11-7-5(12-4)8(17)14-9(10)13-7/h3-4,6,12,15-16H,2H2,1H3,(H4,10,11,13,14,17)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H15NO3S/c1-6(5-14)8(11)10-4-2-3-7(10)9(12)13/h6-7,14H,2-5H2,1H3,(H,12,13)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H15NO3S/c1-6(5-14)8(11)10-4-2-3-7(10)9(12)13/h6-7,14H,2-5H2,1H3,(H,12,13)/t6-,7+/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H15NO4/c11-7-4-2-1-3-6(7)9(14)10-5-8(12)13/h6-7,11H,1-5H2,(H,10,14)(H,12,13)	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C9H16ClN3O2/c10-6-7-13(12-15)9(14)11-8-4-2-1-3-5-8/h8H,1-7H2,(H,11,14)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H16N2O4/c1-6(12)10-5-3-4-8(9(14)15)11-7(2)13/h8H,3-5H2,1-2H3,(H,10,12)(H,11,13)(H,14,15)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H16N2O4/c1-6(12)10-5-3-4-8(9(14)15)11-7(2)13/h8H,3-5H2,1-2H3,(H,10,12)(H,11,13)(H,14,15)/t8-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H16N2O4/c1-6(12)10-5-3-4-8(9(14)15)11-7(2)13/h8H,3-5H2,1-2H3,(H,10,12)(H,11,13)(H,14,15)/t8-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H16O4/c10-8(11)6-4-2-1-3-5-7-9(12)13/h1-7H2,(H,10,11)(H,12,13)	0	(Wu et al., 2018)
InChI=1S/C9H17NO/c1-4-7-9(5-2,6-3)8(10)11/h4H,1,5-7H2,2-3H3,(H2,10,11)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H17NO/c11-9-6-10-5-7-3-1-2-4-8(7)9/h7-11H,1-6H2	1	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C9H17NO2/c10-7-9(6-8(11)12)4-2-1-3-5-9/h1-7,10H2,(H,11,12)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H17NO3/c1-9(2,3)8(13)10-6-4-5-7(11)12/h4-6H2,1-3H3,(H,10,13)(H,11,12)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H17NO4/c1-7(11)14-8(5-9(12)13)6-10(2,3)4/h8H,5-6H2,1-4H3/p+1/t8-/m1/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H17NO5/c1-9(2,5-11)7(14)8(15)10-4-3-6(12)13/h7,11,14H,3-5H2,1-2H3,(H,10,15)(H,12,13)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H18/c1-3-5-7-9-8-6-4-2/h3H,1,4-9H2,2H3	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H18/c1-7-4-5-8(2)9(3)6-7/h7-9H,4-6H2,1-3H3	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C9H18/c1-7-4-5-8(2)9(3)6-7/h7-9H,4-6H2,1-3H3/t7-,8-,9-/m0/s1	1	(Zhu et al., 2018)
InChI=1S/C9H18Cl3N2O2P/c10-2-6-13-5-1-9-16-17(13,15)14(7-3-11)8-4-12/h1-9H2	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H18Cl3N2O2P/c10-2-6-13-5-1-9-16-17(13,15)14(7-3-11)8-4-12/h1-9H2/t17-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H18N2O2/c1-4-6(3)7(5-2)8(12)11-9(10)13/h6-7H,4-5H2,1-3H3,(H3,10,11,12,13)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H18N2O2/c1-4-6(3)7(5-2)8(12)11-9(10)13/h6-7H,4-5H2,1-3H3,(H3,10,11,12,13)/t6-,7+/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C9H18N2O2/c1-4-6(3)7(5-2)8(12)11-9(10)13/h6-7H,4-5H2,1-3H3,(H3,10,11,12,13)/t6-,7+/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H18N2O2/c1-4-6(3)7(5-2)8(12)11-9(10)13/h6-7H,4-5H2,1-3H3,(H3,10,11,12,13)/t6?,7-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H18N2O4/c1-3-4-9(2,5-14-7(10)12)6-15-8(11)13/h3-6H2,1-2H3,(H2,10,12)(H2,11,13)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H18N4S.CH2N2/c1-8-9(13-7-12-8)5-14-4-3-11-6-10-2;2-1-3/h7,10-11H,3-6H2,1-2H3,(H,12,13);2H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H18N6/c1-13(2)7-10-8(14(3)4)12-9(11-7)15(5)6/h1-6H3	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H19N/c1-8(2)6-5-7-9(3)10-4/h6,9-10H,5,7H2,1-4H3	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H19NO4/c1-9(2,6-12)7(13)8(14)10-4-3-5-11/h7,11-13H,3-6H2,1-2H3,(H,10,14)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H19NO4/c1-9(2,6-12)7(13)8(14)10-4-3-5-11/h7,11-13H,3-6H2,1-2H3,(H,10,14)/t7-/m0/s1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H20/c1-3-5-7-9-8-6-4-2/h3-9H2,1-2H3	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C9H20/c1-4-5-6-7-8-9(2)3/h9H,4-8H2,1-3H3	1	(Li et al., 2005)
InChI=1S/C9H20N2/c1-11(2)8-6-9-5-3-4-7-10-9/h9-10H,3-8H2,1-2H3	0	(Kaupp, 2007)
InChI=1S/C9H21N5O4/c10-9-12-7-6(8(17)13-9)11-3-14(7)4-18-5(1-15)2-16/h5-9,11-13,15-17H,1-4,10H2/t6-,7+,8+,9+/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H21NO6P2/c1-3-4-5-7-10(2)8-6-9(11,17(12)13)18(14,15)16/h11H,3-8H2,1-2H3,(H2-,12,13,14,15,16)/p+1	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H21P/c1-4-7-10(8-5-2)9-6-3/h4-9H2,1-3H3	1	(Muehlbacher et al., 2011)
InChI=1S/C9H23NO3PS/c1-6-12-14(11,13-7-2)15-9-8-10(3,4)5/h6-9H2,1-5H3/q+1	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H23NO7P2/c1-3-4-5-7-10(2)8-6-9(11,18(12,13)14)19(15,16)17/h11H,3-8H2,1-2H3,(H2,12,13,14)(H2,15,16,17)	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H4Cl3IO/c10-6-4-8(12)9(5-7(6)11)14-3-1-2-13/h4-5H,3H2	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H5Cl2NO/c10-6-4-7(11)9(13)8-5(6)2-1-3-12-8/h1-4,13H	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H5ClINO/c10-6-4-7(11)9(13)8-5(6)2-1-3-12-8/h1-4,13H	0	(Zhang et al., 2019)
InChI=1S/C9H5I2NO/c10-6-4-7(11)9(13)8-5(6)2-1-3-12-8/h1-4,13H	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H6BrNS2/c10-7-3-1-6(2-4-7)8-5-13-9(12)11-8/h1-5H,(H,11,12)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H6N2O3/c12-8-4-3-7(11(13)14)6-2-1-5-10-9(6)8/h1-5,12H	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H6O2/c10-9-6-5-7-3-1-2-4-8(7)11-9/h1-6H	0	(Wu et al., 2018)

InChI=1S/C9H7Cl2N5/c10-5-3-1-2-4(6(5)11)7-8(12)14-9(13)16-15-7/h1-3H,(H4,12,13,14,16)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H7N7O2S/c1-15-4-14-7(16(17)18)9(15)19-8-5-6(11-2-10-5)12-3-13-8/h2-4H,1H3,(H,10,11,12,13)	0	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H8Br3N3/c10-5-3-6(11)8(7(12)4-5)15-9-13-1-2-14-9/h3-4H,1-2H2,(H2,13,14,15)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H8BrCl2N3/c10-5-3-6(11)8(7(12)4-5)15-9-13-1-2-14-9/h3-4H,1-2H2,(H2,13,14,15)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H8Cl2N2O/c10-6-2-1-3-7(11)8(6)13-9-12-4-5-14-9/h1-3H,4-5H2,(H,12,13)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H8Cl3N3/c10-5-3-6(11)8(7(12)4-5)15-9-13-1-2-14-9/h3-4H,1-2H2,(H2,13,14,15)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H8ClN5S/c10-5-1-2-6-8(15-16-14-6)7(5)13-9-11-3-4-12-9/h1-2H,3-4H2,(H2,11,12,13)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H8N2O/c12-9-6-7-10-11(9)8-4-2-1-3-5-8/h1-5,7H,6H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H8N2O2/c10-9-11-8(12)7(13-9)6-4-2-1-3-5-6/h1-5,7H,(H2,10,11,12)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H8N2O2/c10-9-11-8(12)7(13-9)6-4-2-1-3-5-6/h1-5,7H,(H2,10,11,12)/t7-/m0/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H8N2O2/c10-9-11-8(12)7(13-9)6-4-2-1-3-5-6/h1-5,7H,(H2,10,11,12)/t7-/m1/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H8N2S.CH6N2/c10-9-11-8(6-12-9)7-4-2-1-3-5-7;2-1-3/h1-6H,(H2,10,11);1-3H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H8O4/c1-6(10)13-8-5-3-2-4-7(8)9(11)12/h2-5H,1H3,(H,11,12)	1	(Shin et al., 2021)
InChI=1S/C9H9Br2N3/c10-6-2-1-3-7(11)8(6)14-9-12-4-5-13-9/h1-3H,4-5H2,(H2,12,13,14)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H9BrFN3/c10-6-2-1-3-7(11)8(6)14-9-12-4-5-13-9/h1-3H,4-5H2,(H2,12,13,14)	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H9Cl2N3/c10-6-1-2-7(11)8(5-6)14-9-12-3-4-13-9/h1-2,5H,3-4H2,(H2,12,13,14)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H9Cl2N3/c10-6-1-2-8(7(11)5-6)14-9-12-3-4-13-9/h1-2,5H,3-4H2,(H2,12,13,14)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H9Cl2N3/c10-6-2-1-3-7(11)8(6)14-9-12-4-5-13-9/h1-3H,4-5H2,(H2,12,13,14)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H9Cl2N3/c10-6-2-1-3-7(11)8(6)14-9-12-4-5-13-9/h1-4,9,13-14H,5H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H9Cl2N3/c10-6-2-1-3-7(11)8(6)14-9-12-4-5-13-9/h1-4,9,13-14H,5H2/t9-/m0/s1	1	(Mazumdar et al., 2023)
InChI=1S/C9H9Cl2N3/c10-6-2-1-3-7(11)8(6)14-9-12-4-5-13-9/h1-4,9,13-14H,5H2/t9-/m1/s1	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H9Cl2N3/c10-7-3-6-5-13-14(2-1-12)9(6)4-8(7)11/h3-5H,1-2,12H2	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H9Cl2N3O/c10-6-2-1-3-7(11)5(6)4-8(15)14-9(12)13/h1-3H,4H2,(H4,12,13,14,15)	1	(Nikolic et al., 2013)
InChI=1S/C9H9Cl2NO2/c1-12(9(14)8(10)11)6-2-4-7(13)5-3-6/h2-5,8,13H,1H3	0	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H9F2N3/c10-6-2-1-3-7(11)8(6)14-9-12-4-5-13-9/h1-3H,4-5H2,(H2,12,13,14)	1	(Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H9N3O2S2/c10-7-1-3-8(4-2-7)16(13,14)12-9-11-5-6-15-9/h1-6H,10H2,(H,11,12)	0	(Mazumdar et al., 2023)

InChI=1S/C9H9N3S.CH6N2/c10-7-3-1-2-6(4-7)8-5-13-9(11)12-8;2-1-3/h1-5H,10H2,(H2,11,12);1-3H2	0 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/C9H9NO/c1-11-8-2-3-9-7(6-8)4-5-10-9/h2-6,10H,1H3	(Mazumdar et al.,
InChI=1S/C9H9NO4/c11-7-4-2-1-3-6(7)9(14)10-5-8(12)13/h1-4,11H,5H2,(H,10,14)(H,12,13)	1 2023)
InChI=1S/CH2Cl2/c2-1-3/h1H2	1 Chen et al., 2009
InChI=1S/CH3O5P/c2-1(3)7(4,5)6/h(H,2,3)(H2,4,5,6)	1 (Shin et al., 2021)
InChI=1S/CH4/h1H4	1 (Li et al., 2005)
InChI=1S/CH4Cl2O6P2/c2-1(3,10(4,5)6)11(7,8)9/h(H2,4,5,6)(H2,7,8,9)	(Muehlbacher et al.,
InChI=1S/CH4N2O/c2-1(3)4/h(H4,2,3,4)	1 2011)
InChI=1S/CH4N2O2/c2-1(4)3-5/h5H,(H3,2,3,4)	(Mazumdar et al.,
InChI=1S/CH4O/c1-2/h2H,1H3	0 2023)
InChI=1S/CH5N3/c2-1(3)4/h(H5,2,3,4)	1 (Muehlbacher et al.,
InChI=1S/CHBr3/c2-1(3)4/h1H	1 2011)
InChI=1S/CHCl3/c2-1(3)4/h1H	1 (Li et al., 2005)
InChI=1S/CS2/c2-1-3	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/F6S/c1-7(2,3,4,5)6	(Mazumdar et al.,
InChI=1S/H2O/h1H2	0 2023)
InChI=1S/H4N2/c1-2/h1-2H2	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/H4N2O/c1-2-3/h2-3H,1H2	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/Kr	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/Li	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/N2/c1-2	(Muehlbacher et al.,
InChI=1S/N2O/c1-2-3	1 2011)
InChI=1S/N2O/c1-2-3/p+1	1 (Meng et al., 2021)
InChI=1S/Ne	1 (Meng et al., 2021)
	(Muehlbacher et al.,
	1 2011)

InChI=1S/Rn

1 (Kaupp, 2007)

InChI=1S/Xe

1 (Meng et al., 2021)

InChi=InChI=1S/C25H31NO/c1-24(2,3)25(27)13-14-26-16-21-19-9-5-4-7-17(19)11-12-18-8-6-10-20(23(18)21)22(26)15-25/h4-10,21-22,27H,11-16H2,1-3H3/t21-,22-,25-/m0/s1

1 (Wu et al., 2018)

