Example SMILES Document

Compound	SMILE	MDM2 IC50 (nM)	MDM2 Ki (nM	SJSA-1, IC50	HCT-116 p53	HCT-116 p53-/-, IC50 (uM)
12D	O=C1NC2=CC(Cl)=CC=C2[C@]13C(C)(C)N[C@@H](C(N[C@@H]4CC[C@@H](O)CC4)=O)[C@@H]3C5=CC=CC(Cl)=C5F	151 ± 15	19 ± 2	2.9 ±1.5		
13D	O=C1NC2=CC(Cl)=CC=C2[C@]13C(CC)(CC)N[C@@H](C(N[C@@H]4CC[C@@H](O)CC4)=O)[C@@H]3C5=CC=CC(Cl)=C5F	33 ± 4	3.4 ± 0.5	5.4 ± 2.1		
14D	O=C1NC2=CC(Cl)=CC=C2[C@]13C(CCC)(CCC)N[C@@H](C(N[C@@H]4CC[C@@H](O)CC4)=O)[C@@H]3C5=CC=CC(Cl)=C5F	775 ± 77	105 ± 10	6.9 ± 1.4		
15C	O=C1NC2=CC(Cl)=CC=C2[C@@]13C4(CCC4)N[C@@H](C(N[C@@H]5CC[C@@H](O)CC5)=O)[C@@H]3C6=CC=CC(Cl)=C6F	1719 ± 75	234 ± 10	2.0 ± 0.4		
15D	O=C1NC2=CC(Cl)=CC=C2[C@]13C4(CCC4)N[C@@H](C(N[C@@H]5CC[C@@H](O)CC5)=O)[C@@H]3C6=CC=CC(Cl)=C6F	149 ± 32	19 ± 4	1.6 ± 0.4		
16D	O=C1NC2=CC(Cl)=CC=C2[C@]13C4(CCCC4)N[C@@H](C(N[C@@H]5CC[C@@H](O)CC5)=O)[C@@H]3C6=CC=CC(Cl)=C6F	35 ± 1	3.7 ± 0.1	0.65 ± 0.2		
17D	O=C1NC2=CC(Cl)=CC=C2[C@]13C4(CCCCC4)N[C@@H](C(N[C@@H]5CC[C@@H](O)CC5)=O)[C@@H]3C6=CC=CC(Cl)=C6F	17.2 ± 4.6	2.9 ± 0.8	0.19 ± 0.04	0.32 ± 0.09	>10
18D	O=C1NC2=CC(Cl)=CC=C2[C@]13C4(CCCCCC4)N[C@@H](C(N[C@@H]5CC[C@@H](O)CC5)=O)[C@@H]3C6=CC=CC(Cl)=C6F	15.6 ±2.2	2.8 ± 0.3	2.1 ± 1.9		
20	N[C@@H](C(N[C@@H]1CC[C@@H](O)CC1)=O)[C@H](C2=CC=CC(Cl)=C2F)C(C3=CC=C(Cl)C=C3N4)C4=O	>10000	-	NT		
21D	O=C1NC2=CC(Cl)=CC=C2[C@]13C(CC)(CC)N[C@@H](C(NCCN4CCOCC4)=O)[C@@H]3C5=CC=CC(Cl)=C5F	167 ± 12	22 ± 2	>10		
22C	O=C1NC2=CC(Cl)=CC=C2[C@@]13C4(CCC4)N[C@@H](C(NCCN5CCOCC5)=O)[C@@H]3C6=CC=CC(Cl)=C6F	9516 ±888	1301 ± 121	1.65 ± 0.27		
22D	O=C1NC2=CC(Cl)=CC=C2[C@]13C4(CCC4)N[C@@H](C(NCCN5CCOCC5)=O)[C@@H]3C6=CC=CC(Cl)=C6F	589 ± 84	80 ± 12	2.3 ± 0.28		
23D	O=C1NC2=CC(Cl)=CC=C2[C@]13C4(CCCCC4)N[C@@H](C(NCCN5CCOCC5)=O)[C@@H]3C6=CC=CC(Cl)=C6F	21 ± 5	1.7 ± 0.6	0.30 ± 0.07		
24D	O=C1NC2=CC(Cl)=CC=C2[C@]13C(CC)(CC)N[C@@H](C(NCC[C@H](O)CO)=O)[C@@H]3C4=CC=CC(Cl)=C4F	175 ± 32	23 ± 4.4	>10		
25C	O=C1NC2=CC(Cl)=CC=C2[C@@]13C4(CCC4)N[C@@H](C(NCC[C@H](O)CO)=O)[C@@H]3C5=CC=CC(Cl)=C5F	9058 ± 863	1238 ± 118	1.67 ± 0.35		
25D	O=C1NC2=CC(Cl)=CC=C2[C@]13C4(CCC4)N[C@@H](C(NCC[C@H](O)CO)=O)[C@@H]3C5=CC=CC(Cl)=C5F	494 ± 45	67 ± 6	2.08 ± 0.46		
26D	O=C1NC2=CC(Cl)=CC=C2[C@]13C4(CCCCC4)N[C@@H](C(NCC[C@H](O)CO)=O)[C@@H]3C5=CC=CC(Cl)=C5F	30 ± 6	3.0 ± 0.8	0.20 ± 0.18		
27D	O=C1NC2=CC(Cl)=CC=C2[C@]13C(CC)(CC)N[C@@H](C(N[C@@H]4C[C@@](O)(C)C4)=O)[C@@H]3C5=CC=CC(Cl)=C5F	118 ± 33	15 ± 5	>10		
28C	O=C1NC2=CC(Cl)=CC=C2[C@@]13C4(CCC4)N[C@@H](C(N[C@@H]5C[C@@](O)(C)C5)=O)[C@@H]3C6=CC=CC(Cl)=C6F	7505 ± 928	1026 ± 127	1.46 ± 0.24		
28D	O=C1NC2=CC(Cl)=CC=C2[C@]13C4(CCC4)N[C@@H](C(N[C@@H]5C[C@@](O)(C)C5)=O)[C@@H]3C6=CC=CC(Cl)=C6F	396 ± 49	53 ± 7	1.68 ± 0.14		
29D	O=C1NC2=CC(Cl)=CC=C2[C@]13C4(CCCCC4)N[C@@H](C(N[C@@H]5C[C@@](O)(C)C5)=O)[C@@H]3C6=CC=CC(Cl)=C6F	20 ± 4	1.7 ± 0.6	0.16 ± 0.02		
30	O=C1NC2=CC(Cl)=CC=C2[C@]13C4(CCCCC4)N[C@@H](C(O)=O)[C@@H]3C5=CC=CC(Cl)=C5F					
31	O=C1NC2=CC(Cl)=CC=C2[C@]13C4(CCCCC4)N[C@@H](C(NC5=CC=C(C(O)=O)C=C5)=O)[C@@H]3C6=CC=CC(Cl)=C6F	4.4 ± 1.1	0.16 ± 0.1	0.10 ± 0.03	0.25 ± 0.05	>10