

Table 6: GENSMI Structures, Branching = 2.75, Cyclization = 1.40, Ring Sizes = 5-6

SMILES	Branching	Complexity	Cyclization	Mass	History	ID
	2	6	0	72	S(6).N1(6/1).N1(6/1).N2(6/1).N3(6/1).	5
	2	11	1	70	S(6).N1(6/1).N1(6/1).N2(6/1).N3(6/1).E4-5.	6
	2	6.7	0	86	S(6).N1(6/1).N1(6/1).N2(6/1).N3(6/1).N4(6/1).	7
	2.2	12.4	1	84	S(6).N1(6/1).N1(6/1).N2(6/1).N3(6/1).N4(6/1).E3-6.	8
	2	12.4	1	84	S(6).N1(6/1).N1(6/1).N2(6/1).N3(6/1).N4(6/1).E5-6.	9
	2	7.4	0	100	S(6).N1(6/1).N1(6/1).N2(6/1).N3(6/1).N4(6/1).N5(6/1).	10
	2.17	13.1	1	98	S(6).N1(6/1).N1(6/1).N2(6/1).N3(6/1).N4(6/1).N5(6/1).E2-7.	11
	2.4	25	1.25	166	S(6).N1(6/1).N1(6/1).N2(6/1).N3(6/1).N4(6/1).N5(6/1).N6(6/1).N7(6/1).N8(6/1).N9(6/1).N10(6/1).E1-8.E5-10.	100