

Supplementary Information Document

1. FASTA sequences: Protein targets

A. CoH3 (Cot H region):

```
>EIE87171.1:213-470 hypothetical protein R03G_11882 [Rhizopus delemar RA 99-880]
DPTQIRERLYSDILHAMGTYANDATMVRLFINNQGFQTFNMLDDITQFSYINAKFYNGKPPATLGPLYDG
ASGADFLYHPGNLDGYSSWVANTANPNGEAYEALDPLCKAWNETTYTDNTAIANFEKMFDLDRFMRFMVI
EYLTADWDGYWMGQTNDGAYRDPDTNNKWFYFLDQDFDGTFGVNLAAPEGNAFLDVSFKDFPSRYPGAVMI
NNLLQNADKKATFEKYLTTETVRVLFNNVTLTNRVLALHNFLLPDLEWD
```

B. Mucoridin:

```
>EIE81863.1 hypothetical protein R03G_06568 [Rhizopus delemar RA 99-880]
MYFEEGRLLFFIKSQFNGRVLDDVEDGSTEDDANIIVYTQKYEDCLNQLWRYENGYFINAKSAKVLDIRGGE
MQPESQIIQYAQKMVEEAANQRWAIDEDGYIFCEARPDLVLDIQGAEDDCVPVILYERREGEVSANQRW
ELVPFEG
```

C. Exo-1,3-beta-glucan synthase:

```
>4M80_1|ChainA|EXO-1,3-BETA-GLUCANASE|Candidaalbicans
GGHNVAWDYDNNVIRGVNLLGGWFVLEPYMTPLSEFPFQNGNDQSGVPVDEYHWTQTLGKEAALRILQKHWSWTEQDFKQISNLGL
NFRVRIPIGYWAFQLLDNDPYVQGGVQYLEKALGWARKNNIRVWIDLHGAPGSQNGFDNSGLRDSYNFQNGDNTQVTLNVLNTIFKKY
GGNEYSADVIGIELLNEPLGPVLNMDKLKQFFLDGYNSLRQTGSVTPVIIHDAFQVFGYWNFLTVAEGQWNVVDHHHYQVFSGGE
LSRNINDHISVACNWGDADKESHWNVAGSWAALTDCAKWLNGVNRGARYEGAYDNAPYIGSCQPLLDISQWSDEHKTDTRRYIEA
QLDAFEYTGWVFWWSKTENAPEWSFQTLTYNGLFPQPVTDRQFPNQCGFH
```

D. RDRP (RVT_1 region):

```
>BAH03542.1:547-807 polyprotein [Rhizopus arrhizus]
IYKKGDPLOPANYRPISLTSVLRKLFELCLQTTLEDTPASLDPVQGGFRHSRSALDQALCLNELCRQHAI
DHHGEPPVLAFLDIKSAYDVTVDRAIIWRALETYISPAALLGLLQCLFDKVSIEVLVSGFTSPAFAWPTGVL
QGSILSPFLYSIYINSLPALLRSVRLPISARYYSSNPQREFDGLWLNCLLYADDVVLIGAPEVMPRLKA
AEEHSFSLGYRWNPAKCVVLNSAFSLGGPQLKLYGDDIPIQSTFNLYLGIPF
```

E. Rhizopuspepsin:

```
>1UH9_1|Chain A|rhizopuspepsin I|Rhizopus microsporus var. chinensis
AGVGTVPMTDYGNDIEYYQVITIGTPGKKFNLDFTGSSDLWIASTLCTNCGSRQTKYDPNQSSYQADGRTWSISYGDGSSASGIL
AKDNVNPLGGLLIKGQTIELAKREAASFASGPNDGLLGLGFDITITVRGVKTPMDNLSQGLISRPIFGVYLGAKNGGGGEYIFGGY
DSTKFKGSLTTVPIDNSRGWGWGITVDRATVGTSTVASSFDGILDGTGTLTLLILPNNIAASVARAYGASDNGDGTYTISCDTSRFKPLV
FSINGASFQVSPDSLVEEFQGCIAFGYGNWDFAIIGDTFLKNYVVFNQGVPEVQIAPVAE
```

F. Lanosterol 14-alpha demethylase:

```
>EIE87079.1 lanosterol 14-alpha demethylase [Rhizopus delemar RA 99-880]
MAVISTLLPTLESIPLYAVLALGVFVIINILSQWFGPKNPKEPPVVFVSWIPFMGNAIEFGINPIAFLQKC
QKKYGDVFTFYMVGKRVTVFLNADGNQFVFNKQNLTSAADAYNHMTKHVFGPEVVYDAPHSVFMEQKRF
IKAGLNSSESFRQHVPIMIVEEVEGFFKNYKKPTGAFTDAYHTLGLIICTASRCLMGKEIRASLDDSVAGLY
YDLQGFQKPINFIFFPNLPLPSYRKRDRVARQKMTDLYSSIIARRKAENDFSNADLLQALMDANYKDGSNVP
DHHIAGMMIAVLFGGQHTSATTSAWTLLELAARPDLIRDLREEQITKLGLSKADLTFDNLKELTLLDSCV
RETLRLHPPFIQMMRRVTANKVVFECTGHEIPKGNFLCAVPGVTQVDSQYFNEPLKYDPLRWINLTDPVH
SMEAGDDSNIDYGFAGVGISSKNPFLPFGAGRHRHCIGEQFGYLQIKTIIATIIIRLFDIELEDGKGVPKSD
YTSMVVVPERPSNIKYTWRE
```

G. Lipase:

```
>6A0W_1|Chain A|Lipase|Rhizopus chinensis
DTETVGGMTLDLPENPPPIPATSTAPSSDSGEVVTATAAQIKELTNYAGVAATAYCRSVVPGTKWDCKQCLKYVPDGKLIKTFTSLL
TDTNGFILRSDAQKTIYVTFRGTSNFRSAITDMVFTFTDYSPVKGAKVHAGFLSSYNQVVKDYFPVVQDQLTAYPDYKVIIVTGHSLG
GAQALLAGMDLYQREKRLSPKNLSIYTVGCPRVGNNAFAYYVDSTGIPFHRVTHKRDIVPHVPPQAFGYLHPGVESWIKEDPADVQI
CTSNIETKQCSNSIVPFTSIADHLTYFGINEGSCLGSSHHHHHH
```

Table S1: List of ligands with respective SMILES line notations used in the study

Ligands	SMILES
Naamine A	<chem>CN1C(=C(N=C1N)CC2=CC=C(C=C2)OC)CC3=CC=C(C=C3)O</chem>
Naamine B	<chem>CN1C(=C(N(C1=N)C)CC2=CC(=C(C=C2)OC)O)CC3=CC=C(C=C3)OC</chem>
Naamine D	<chem>COC1=CC=C(C=C1)CC2=C(N=C(N2)N)CC3=CC=C(C=C3)OC</chem>
Naamine E	<chem>CN1C(=C(N=C1N)CC2=CC=C(C=C2)OC)CC3=CC(=C(C(=C3)O)OC)O</chem>
Naamine F	<chem>CN1C(=C(N=C1N)CC2=CC=C(C=C2)OC)CC3=CC(=C(C(=C3)O)OC)OC</chem>
Naamine G	<chem>CN1C(=C(N=C1N)CC2=CC=C(C=C2)OC)CC3=CC(=C(C(=C3)OC)O)OC</chem>
Naamidine A	<chem>CN1C(=C(N=C1N=C2C(=O)N(C(=O)N2)C)CC3=CC=C(C=C3)OC)CC4=CC=C(C=C4)O</chem>
Naamidine B	<chem>CN1C(=C(N=C1N=C2C(=O)N(C(=O)N2)C)CC3=CC=C(C=C3)OC)CC4=CC(=C(C(=C4)OC)O)O</chem>
*Naamidine C	<chem>CN1C(C(NC1N=C2C(=O)N(C(=O)N2)C)CC3CCC(CC3)OC)CC4CCC(CC4)O</chem>
Hyrtimomine A	<chem>C1=CC2=C(C=C1O)C3=C(N2)OC4=C5C3=NC=CC6=CNC(=C65)C=C4</chem>
Hyrtimomine B	<chem>C1C(NC2=C3C(=CC=C4C3=C1C=N4)OC5=C2C6=C(N5)C=CC(=C6)O)C(=O)O</chem>
Hyrtimomine C	<chem>C1C(=O)C2=CNC3=C2C(=C(C=C3)O)C(=N1)C4=CNC5=C4C=C(C=C5)O</chem>
Hyrtimomine F	<chem>C1=CC2=C(C=C1O)C(=CN2)C(=O)C3C4=C(C=CC5=C4C(=CN5)C(=O)C(=O)N3)O</chem>
Hyrtimomine G	<chem>C1=CC2=C(C=C1O)C(=CN2)C(=O)C(C(C(=O)C3=CNC4=C3C=C(C=C4)O)O)O</chem>
Topsentin	<chem>C1=CC=C2C(=C1)C(=CN2)C3=CN=C(N3)C(=O)C4=CNC5=C4C=CC(=C5)O</chem>
Topsentin A	<chem>C1=CC=C2C(=C1)C(=CN2)C3=CN=C(N3)C(=O)C4=CNC5=CC=CC=C54</chem>
Topsentin D	<chem>C1C(NC(=N1)C(=O)C2=CNC3=CC=CC=C32)C4=CNC5=CC=CC=C54</chem>
Latrunculin A	<chem>CC1CCC2CC(CC(O2)(C3CSC(=O)N3)O)OC(=O)C=C(CCC=CC=C1)C</chem>
Latrunculin B	<chem>CC1CCC2CC(CC(O2)(C3CSC(=O)N3)O)OC(=O)C=C(CCC=C1)C</chem>
Latrunculin S	<chem>CC1CCC(CC(OC(=O)C=C(CCC=CC=C1)C)CC(C2CSC(=O)N2)O)O</chem>
Xestodecalactone A	<chem>CC1CCCC(=O)C2=C(CC(=O)O1)C=C(C=C2O)O</chem>
Xestodecalactone B	<chem>CC1CC(CC(=O)C2=C(CC(=O)O1)C=C(C=C2O)O)O</chem>
Xestodecalactone C	<chem>CC1CC(CC(=O)C2=C(CC(=O)O1)C=C(C=C2O)O)O</chem>
Xestodecalactone D	<chem>CC1CC(CC(=O)C2=C(C(=C(C=C2CC(=O)O1)O)OC)O)O</chem>
Xestodecalactone E	<chem>CCCCOC1CC(OC(=O)CC2=CC(=C(C(=C2C(=O)C1)O)OC)O)C</chem>
Xestodecalactone F	<chem>CCCCOC1CC(OC(=O)CC2=CC(=C(C(=C2C=C1)O)OC)O)C</chem>
(+)-Curcudiol	<chem>CC1=CC(=C(C=C1)C(C)CCCC(C)(C)O)O</chem>
(+)-Curcuphenol	<chem>CC1=CC(=C(C=C1)C(C)CCC=C(C)C)O</chem>
*Tetillapyrone	<chem>CC1CC(C(OC1=O)O)[C@@H]2C[C@H]([C@@H](O2)CO)O</chem>
*Nortetillapyrone	<chem>C1CC(OC(=O)C1[C@@H]2C[C@H]([C@@H](O2)CO)O)O</chem>
Aurantioside I	<chem>CC1C(C(C(O1)OC2COC(C(C2O)O)OC3C(C(COC3N4C(C(=O)C(=C(C=CC=CC=CC=C(C(C)Cl)O)C4=O)CC(=O)N)O)O)OC)O</chem>

Aurantioside K	<chem>CC1C(C(C(O1)OC2COC(C(C2O)O)OC3C(C(COC3N4C(C(=O)C(=C(C=CC=CC=CC=C(C)Cl)O)C4=O)CC(=O)N)O)O)O)O</chem>
Drugs	
Amphotericin B	<chem>CC1C=CC=CC=CC=CC=CC=CC(CC2C(C(CC(O2))(CC(CC(C(CCC(CC(CC(=O)OC(C(C1O)C)C)O)O)O)O)O)O)C(=O)O)OC3C(C(C(C(O3)C)O)N)O</chem>
Isavuconazole	<chem>CC(C1=NC(=CS1)C2=CC=C(C=C2)C#N)C(CN3C=NC=N3)(C4=C(C=CC(=C4)F)F)O</chem>
Posaconazole	<chem>CCC(C@O)N1C(=O)N(C=N1)C2=CC=C(C=C2)N3CCN(CC3)C4=CC=C(C=C4)OCC5CC(OC5)(CN6C=NC=N6)C7=C(C=C(C=C7)F)F</chem>

(*Naamidine C, Tetillapyrone and Nortetillapyrone – Isomeric SMILES from Chemspider database)

Table S2: Ligands information and its chemical classification

Ligand Information			
Ligands	Formulae	Pubchem CID	Class
Naamine A	C ₁₉ H ₂₁ N ₃ O ₂	10019087	Alkaloids
Naamine B	C ₂₁ H ₂₅ N ₃ O ₃	11233956	
Naamine D	C ₁₉ H ₂₁ N ₃ O ₂	482905	
Naamine E	C ₂₀ H ₂₃ N ₃ O ₄	10970661	
Naamine F	C ₂₀ H ₂₃ N ₃ O ₃	21578946	
Naamine G	C ₂₁ H ₂₅ N ₃ O ₄	11153300	
Naamidine A	C ₂₃ H ₂₃ N ₅ O ₄	135455949	
Naamidine B	C ₂₄ H ₂₅ N ₅ O ₅	135511072	
*Naamidine C	C ₂₄ H ₂₅ N ₅ O ₄	10313314	
Hyrtimomine A	C ₁₉ H ₁₁ N ₃ O ₂	71681276	
Hyrtimomine B	C ₂₀ H ₁₃ N ₃ O ₄	136267825	
Hyrtimomine C	C ₁₉ H ₁₃ N ₃ O ₃	136267826	
Hyrtimomine F	C ₂₀ H ₁₃ N ₃ O ₅	73774545	
Hyrtimomine G	C ₂₀ H ₁₆ N ₂ O ₆	73774544	
Topsentin	C ₂₀ H ₁₄ N ₄ O ₂	72457	
Topsentin A	C ₂₀ H ₁₄ N ₄ O	183527	
Topsentin D	C ₂₀ H ₁₆ N ₄ O	12018820	
Latrunculin A	C ₂₂ H ₃₁ NO ₅ S	445420	Macrolides
Latrunculin B	C ₂₀ H ₂₉ NO ₅ S	6436219	
Latrunculin S	C ₂₂ H ₃₃ NO ₅ S	10093792	
Xestodecalactone A	C ₁₄ H ₁₆ O ₅	637028	Bioactive Metabolites
Xestodecalactone B	C ₁₄ H ₁₆ O ₆	9943580	
Xestodecalactone C	C ₁₄ H ₁₆ O ₆	11033245	
Xestodecalactone D	C ₁₅ H ₁₈ O ₇	60154235	
Xestodecalactone E	C ₁₉ H ₂₆ O ₇	60154236	
Xestodecalactone F	C ₁₉ H ₂₆ O ₆	139584779	
(+)-Curcudiol	C ₁₅ H ₂₄ O ₂	184024	Sesquiterpene phenols
(+)-Curcuphenol	C ₁₅ H ₂₂ O	156118	
*Tetillapyrone	C ₁₁ H ₁₄ O ₆	10213954	Hydroxypyran-2-ones
*Nortetillapyrone	C ₁₀ H ₁₂ O ₆	10213956	
Aurantioside I	C ₃₄ H ₄₅ ClN ₂ O ₁₅	54723407	Tetramic acid glycosides
Aurantioside K	C ₃₃ H ₄₃ ClN ₂ O ₁₅	86575300	
Chemspider ID			
Amphotericin B	C ₄₇ H ₇₃ NO ₁₇	10237579	Drugs
Isavuconazole	C ₂₂ H ₁₇ F ₂ N ₅ OS	5293682	
Posaconazole	C ₃₇ H ₄₂ F ₂ N ₈ O ₄	411709	

(*Naamidine C, Tetillapyrone, and nortetillapyrone obtained from Chemspider Database)

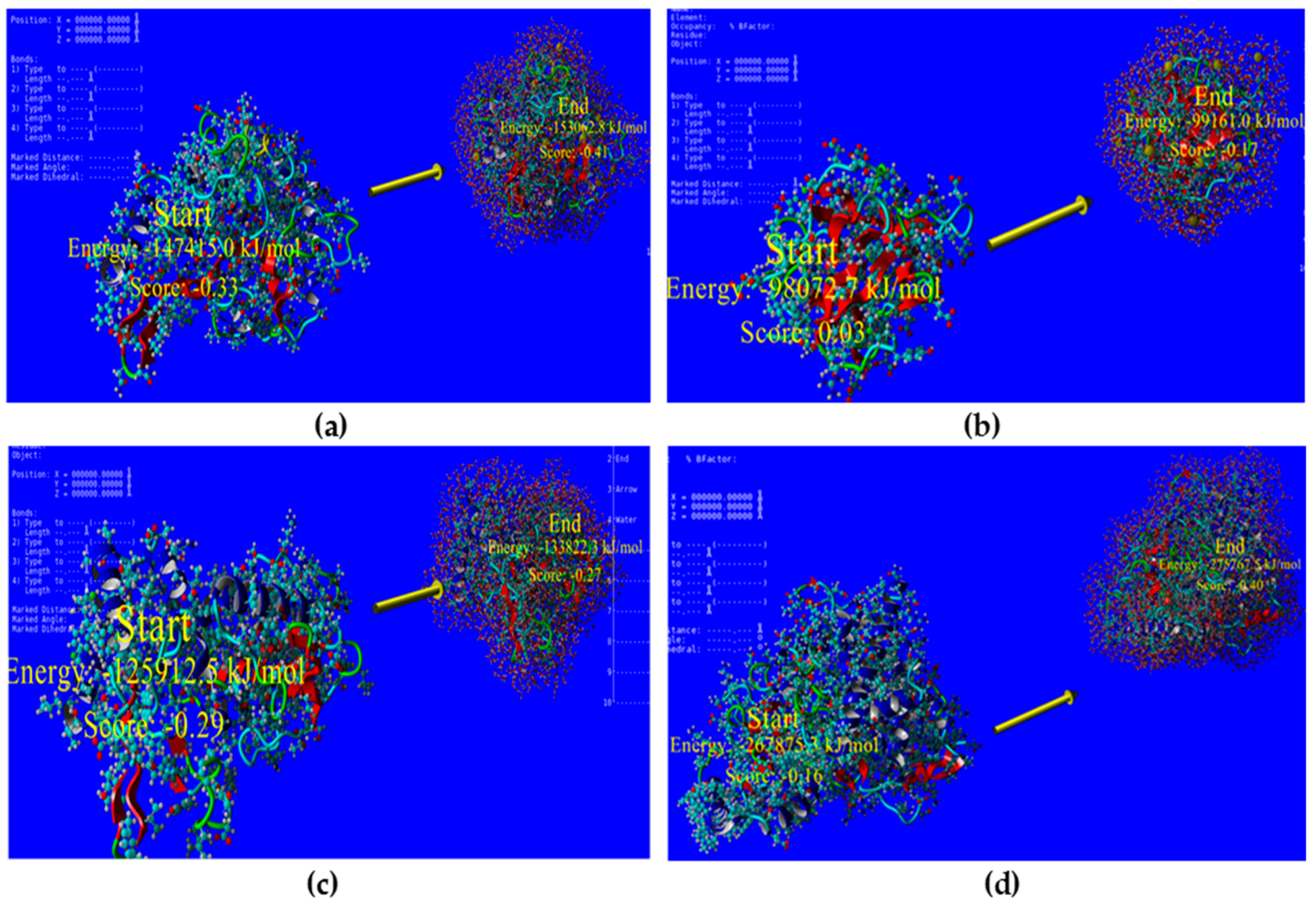


Figure S1. Energy minimized structures in YASARA (a) CotH3; (b) Mucoricin; (c) RdRp; (d) Lanosterol 14 α -demethylase.

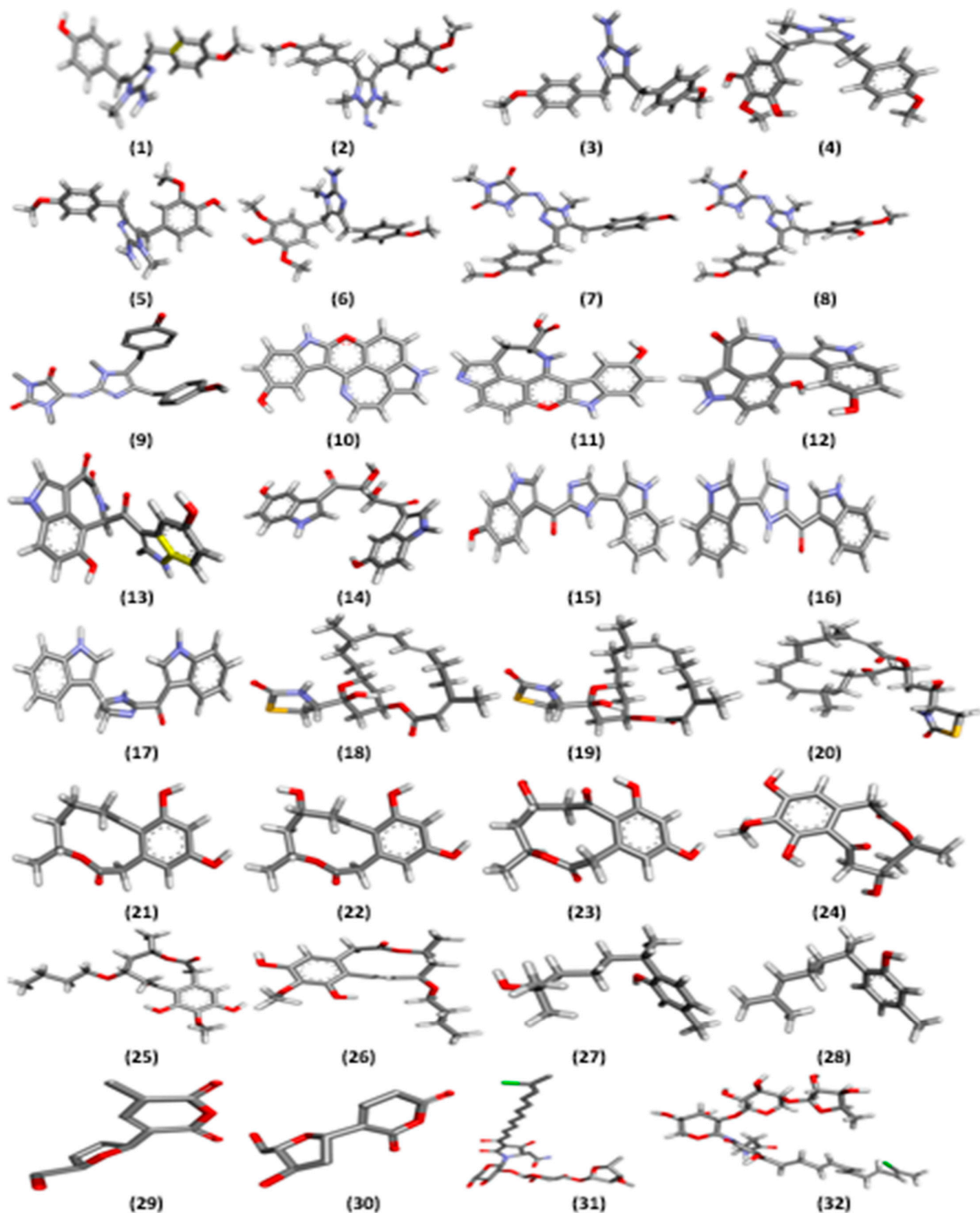


Figure S2. MNPs 3D structures (1) Naamine A, (2) Naamine B, (3) Naamine D, (4) Naamine E, (5) Naamine F, (6) Naamine G, (7) Naamidine A, (8) Naamidine B, (9) Naamidine C, (10) Hyrtimomine A, (11) Hyrtimomine B, (12) Hyrtimomine C, (13) Hyrtimomine F, (14) Hyrtimomine G, (15) Topsentin, (16) Topsentin A, (17) Topsentin D, (18) Latrunculin A, (19) Latrunculin B, (20) Latrunculin S, (21) Xestodecalactone A, (22) Xestodecalactone B, (23) Xestodecalactone C, (24) Xestodecalactone D, (25) Xestodecalactone E, (26) Xestodecalactone F, (27) (+)-Curcudiol, (28) (+)-Curcuphenol, (29) Tetillapyrone, (30) Nortetillapyrone, (31) Aurantioside I, (32) Aurantioside K.

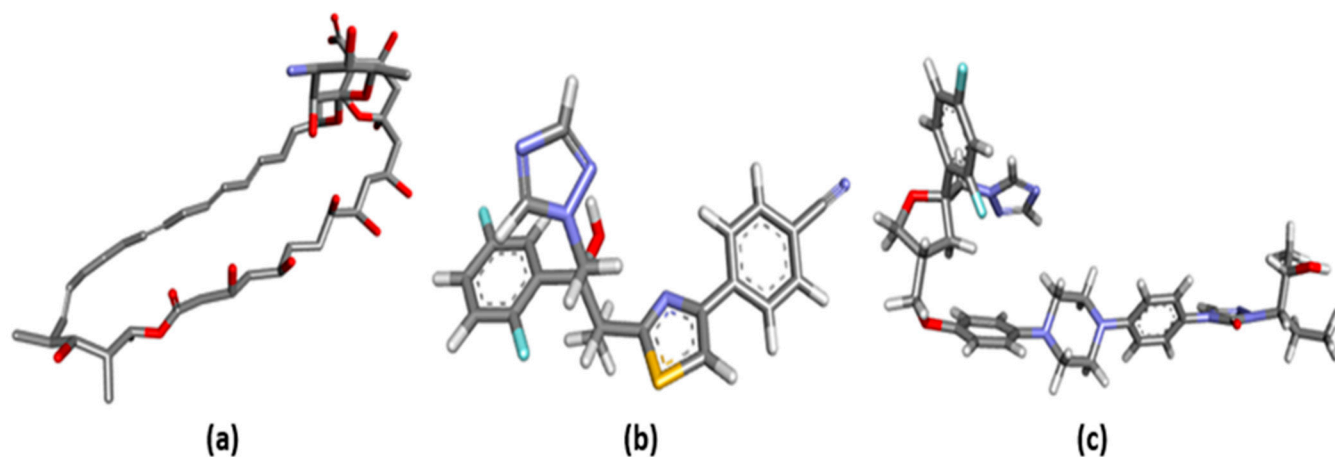


Figure S3: 3D structures of medical drugs (a) Amphotericin B, (b) Isavuconazole, (c) Posaconazole.

Table S3: Molecular docking output for the target CotH3

CotH3					
Ligands	Binding affinity (Kcal/mol-1)	H bond residues	H bonds	C-H bonds	Hydrophobic bonds
Naamine D	-6.7	ASN A: 237, PHE A: 235	2	0	5
Latrunculin A	-7.1	ASN A: 237	1	0	2
Latrunculin B	-7.2	None	0	1	5
Latrunculin S	-6.7	ALA A: 91, SER A: 87	2	0	0
Aurantioside I	-7.3	TRP A: 147, ASP A: 175, ASP A: 177, GLU A: 7, ASN A: 40	5	1	2
Aurantioside K	-7.9	GLN A: 4, THR A: 38, THR A: 3, PRO A: 2, HIS A:248	5	1	6

Table S4: List of all interacting amino acids for CotH3

CotH3	
Ligands	Interacting residues
Naamine A	ASN A: 237, PHE A: 235, PHE A: 180, LEU A: 240, LEU A: 9
Naamine B	LEU A: 9, PHE A: 180, LEU A: 240, LEU A: 193, THR A: 179, ARG A: 6, LEU A: 143
Naamine D	ASN A: 237, PHE A: 235, LEU A: 240, LEU A: 9, PHE A: 180, LEU A: 143, LEU A: 193
Naamine E	SER A: 87, TRP A: 89, LEU A: 83, GLY A: 98, ALA A: 100, ALA A: 91, ASN A: 95
Naamine F	PHE A: 235, ASN A: 237, ARG A: 6, LEU A: 9, VAL A: 244, PHE A: 180, LEU A: 240
Naamine G	LEU A: 240, PHE A: 180, LEU A: 9, THR A: 241, VAL A: 244
Naamidine A	LEU A: 240, PHE A: 180, VAL A: 244, ARG A: 6, THR A: 3, THR A: 144
Naamidine B	PHE A: 235, LEU A: 193, VAL A: 231, PHE A: 180, ARG A: 6, LEU A: 9, LEU A: 240
Naamidine C	PHE A: 235, ASN A: 237, LEU A: 240, PHE A: 180, VAL A: 244
Hyrtimomine A	LEU A: 9, VAL A: 244, ARG A: 6, LEU A: 240
Hyrtimomine B	THR A: 241, LEU A: 9, PHE A: 180, ARG A: 6, VAL A: 244
Hyrtimomine C	LEU A: 143, LEU A: 227, TYR A: 197
Hyrtimomine F	THR A: 241, PHE A: 180, LEU A: 240, VAL A: 244
Hyrtimomine G	LEU A: 143, THR A: 241, VAL A: 231, VAL A: 244, LEU A: 240, PHE A: 180, THR A:144
Topsentin	LEU A: 143, VAL A: 231, LEU A: 240, PHE A: 180, LEU A: 9, ARG A: 6,
Topsentin A	PHE A: 235,PHE A: 110, LEU A: 240, LEU A: 9, ARG A: 6
Topsentin D	PHE A: 180, LEU A: 240, LEU A: 143, LEU A: 9, VAL A: 244, PHE A: 235
Latrunculin A	ASN A: 237, LEU A: 240, LEU A: 9
Latrunculin B	VAL A: 231, LEU A: 143, PHE A: 235, PHE A: 200, LEU A: 193, THR A: 228
Latrunculin S	ALA A: 91, SER A: 87

Xestodecalactone A	GLY A: 98, ASN A: 95, ALA A: 91, ALA A: 100
Xestodecalactone B	ALA A: 91, GLY A: 98, ASP A: 84, ALA A: 100
Xestodecalactone C	PHE A: 192, VAL A: 231, LEU A: 143, PHE A: 235
Xestodecalactone D	LYS A: 109, PRO A: 106, ALA A: 110
Xestodecalactone E	ALA A: 91, ASN A: 95, VAL A: 90, TYR A: 101, ALA A: 100
Xestodecalactone F	THR A: 241, VAL A: 244, PHE A: 180, LEU A: 240
(+)-Curcudiol	PHE A: 235, PHE A: 180, LEU A: 240, LEU A: 9, ARG A: 6
(+)-Curcuphenol	PHE A: 480, LEU A: 240, LEU A: 9, ARG A: 6
Tetillapyrone	ARG A: 6
Nortetillapyrone	TYR A: 10, VAL A: 244, PHE A: 180
Aurantioside K	GLN A: 4, THR A: 38, THR A: 3, PRO A: 2, HIS A:248, ASP A: 258, LEU A: 240, PHE A: 235, VAL A: 244, LEU A: 9, PHE A: 180, ARG A: 6
Aurantioside I	TRP A: 147, ASP A: 175, ASP A: 177, GLU A: 7, ASN A: 40, ASP A: 148, ASP A: 146, GLY A: 178
Drugs	
Amphotericin B	ASP A : 44, GLN A: 4, LEU A: 42, ASP A: 43
Isavuconazole	ASN A: 237, LEU A: 143, PHE A: 180, LEU A: 240, LEU A: 193
Posaconazole	LEU A: 193, THR A: 3, PHE A: 180, LEU A: 240, ARG A: 6, LEU A: 9

Table S5: Molecular docking output for the target Mucorin

Mucorin					
Ligands	Binding affinity (Kcal/mol-1)	H bond residues	H bonds	C-H bonds	Hydrophobic bonds
Naamine D	-7.1	GLU A: 97, PHE A: 3	2	0	3
Naamidine A	-7.9	PHE A: 3, ARG A: 139, GLN A: 14	3	2	5
Naamidine B	-7.8	ARG A: 139, GLN A: 14	2	2	6
Naamidine C	-8.0	GLN A: 14, TRP A: 140	2	1	7
Hyrtimomine A	-7.5	GLU A: 97	1	1	3
Hyrtimomine C	-7.2	ASP A: 96, ARG A: 139, GLN A: 14, GLU : 97	4	1	2
Hyrtimomine F	-7.6	ILE A: 113, ARG A: 130, GLU A: 133, GLU A: 74	4	2	1
Topsentin	-8.4	LEU A: 142, GLU A: 97	2	1	3
Topsentin A	-8.3	GLY A: 97, LEU A: 142	2	1	3
Topsentin D	-8.2	None	0	2	4
Latrunculin S	-6.2	ALA A: 116, ILE A: 113	2	0	1

Table S6: List of all interacting amino acids for Mucoridin

Mucoridin	
Ligands	Interacting residues
Naamine A	LEU A: 142, MET A: 1, GLU A: 97, PHE A: 3, ILE A: 95
Naamine B	PHE A: 3, MET A: 1, ILE A: 95, LEU A: 142, VAL A: 143, TYR A: 2, GLU A: 141, TRP A: 140, GLN A: 14, GLU A: 97
Naamine D	GLU A: 97, PHE A: 3, ILE A: 95, MET A: 1, VAL A: 143
Naamine E	LEU A: 142, PHE A: 3, GLU A: 141, GLU A: 97, MET A: 1, ILE A: 95
Naamine F	GLU A: 141, GLN A: 14, TRP A: 140, MET A: 1, LEU A: 142, ILE A: 95, TYR A: 2
Naamine G	PHE A: 3, GLU A: 97, LEU A: 142, TYR A: 2, ILE A: 95, MET A: 1
Naamidine A	PHE A: 3, ARG A: 139, GLN A: 14, GLU A: 97, TRP A: 140, GLU A: 141, MET A: 1, VAL A: 143, LEU A: 142, ILE A: 95
Naamidine B	ARG A: 139, GLN A: 14, GLU A: 141, MET A: 1, ILE A: 95, VAL A: 143, LEU A: 142, TYR A: 2, TRP A: 140, GLU A: 97
Naamidine C	GLN A: 14, TRP A: 140, GLU A: 97, ARG A: 139, GLU A: 141, MET A: 1, ILE A: 95, VAL A: 143, LEU A: 142, TYR A: 2
Hyrtimomine A	GLU A: 97, LEU A: 142, ILE A: 95, TYR A: 2, MET A: 1
Hyrtimomine B	GLU A: 141, GLU A: 97, VAL A: 143, LEU A: 142, ILE A: 95, MET A: 1
Hyrtimomine C	ASP A: 96, ARG A: 139, GLN A: 14, GLU A: 97, LEU A: 142, ILE A: 95, GLU A: 141
Hyrtimomine F	ILE A: 113, ARG A: 130, GLU A: 133, GLU A: 74, ASP A: 112, SER A: 135, ALA A: 116
Hyrtimomine G	PHE A: 3, ILE A: 95, MET A: 1, GLU A: 97, ALA A: 94, TYR A: 2
Topsentin	LEU A: 142, GLU A: 97, TYR A: 2, ILE A: 95, GLU A: 141, MET A: 1
Topsentin A	GLY A: 97, LEU A: 142, ASP A: 96, TYR A: 2, ILE A: 95, GLU A: 141
Topsentin D	ILE A: 95, TYR A: 2, MET A: 1, GLU A: 141, GLU A: 97, ASP A: 96
Latrunculin A	GLU A: 97, TYR A: 2, ILE A: 95, LEU A: 142
Latrunculin B	GLU A: 5, TYR A: 50, PHE A: 3, ILE A: 95, LEU A: 142
Latrunculin S	ALA A: 116, ILE A: 113, ASP A: 112
Xestodecalactone A	GLU A: 97, MET A: 1, LEU A: 142, ILE A: 95
Xestodecalactone B	MET A: 1, GLY A: 99, ILE A: 95, LEU A: 142
Xestodecalactone C	LEU A: 142, GLU A: 97, ILE A: 95
Xestodecalactone D	LEU A: 142, MET A: 1, GLU A: 141, ILE A: 95
Xestodecalactone E	LEU A: 142, MET A: 1, PHE A: 3, VAL A: 143, ILE A: 95, GLU A: 141
Xestodecalactone F	ILE A: 95, MET A: 1, TYR A: 2, GLU A: 97
(+)-Curcudiol	MET A: 1, ILE A: 95, TYR A: 2
(+)-Curcuphenol	ILE A: 95, TYR A: 2, TYR A: 50, LEU A: 142, PHE A: 2, PHE A: 50
Tetillapyrone	PHE A: 3, LEU A: 142, TRP A: 140, ILE A: 95
Nortetillapyrone	GLN A: 14, PHE A: 3, GLY A: 99, GLU A: 97
Aurantoside K	PHE A: 3, GLU A: 5, ASN A: 52, GLU A: 97, VAL A: 143, LEU A: 142, ILE A: 95, MET A: 1
Aurantoside I	ARG A: 130, SER A: 135, ASN A: 137, ILE A: 125, TYR A: 127, GLU A: 133
Drugs	
Amphotericin B	GLN A: 76, ARG A: 67
Isavuconazole	PHE A: 3, ILE A: 95, ALA A: 94, PHE A: 102, TYR A: 2
Posaconazole	ARG A: 92, GLU A: 104, ASN A: 52, LEU A: 142, GLU A: 141, GLU A: 5, ILE A: 95, TYR A: 50, ASP A: 96, MET A: 1, ALA A: 94, TYR A: 2, GLU A: 97, TRP A: 140, ASP A: 98, GLN A: 14

Table S7: Molecular docking output for the target Exo-1, 3 beta-glucan synthase

Exo-1,3 beta-glucan synthase					
Ligands	Binding affinity (Kcal/mol-1)	H bond residues	H bonds	C-H bonds	Hydrophobic bonds
Naamine A	-9.2	ASP A: 138	1	1	5
Naamine B	-9.1	ARG A: 305, ASN A: 298, ASP A: 138, LEU A: 297	4	2	4
Naamine D	-9.2	ARG A: 305, SER A: 285, ASP A: 138	3	2	5
Naamine E	-9.3	ASN A: 298, TYR A: 248, GLU A: 185	3	0	3
Naamine F	-9.3	ARG A: 305, ASP A: 338, SER A: 285	3	3	5
Naamine G	-8.8	LEU A: 297, ARG A: 305	2	2	6
Naamidine A	-10.6	HIS A: 128, LEU A: 297, ASP A: 138	3	2	4
Naamidine B	-9.7	GLU A: 185, ASN A: 298, ARG A: 302	3	0	6
Naamidine C	-10.7	TYR A: 22, SER A: 285, TYR A: 248, ARG A: 305	4	2	5
Hyrtimomine A	-11.2	GLU A: 185, SER A: 285	2	0	3
Hyrtimomine B	-11.0	TYR A: 248, GLU A: 185	2	0	3
Hyrtimomine C	-10.6	ASN A: 139	1	0	7
Hyrtimomine F	-9.9	ASN A: 139, LEU A: 297, GLY A: 136	3	0	4
Hyrtimomine G	-10.0	GLU A: 185, TYR A: 22, GLU A: 20, ASN A: 139, ASP A: 138	5	1	4
Topsentin	-10.3	LEU A: 297, ASP A: 138, ARG A: 305, GLU A: 185	4	2	2
Topsentin A	-10.1	ASP A: 138, LEU A: 297, GLU A: 185	3	2	2
Topsentin D	-10.1	LEU A: 297, GLU A: 185, GLY A: 136, PHE A: 137	4	0	2
Latrunculin A	-8.9	None	0	0	2
Latrunculin B	-8.8	TYR A: 310	1	1	2
Latrunculin S	-8.3	ARG A: 258	1	0	2
Xestodecalactone A	-8.4	ASN A: 139, ARG A: 305	2	0	3
Xestodecalactone B	-8.3	ASN A: 139, LEU A: 297	2	0	1
Xestodecalactone C	-8.4	ASN A: 139	1	0	3
Xestodecalactone D	-8.7	ASN A: 139, LEU A: 297, ARG A: 305	3	1	3
Xestodecalactone E	-8.0	ASP A: 144, ASP A: 138	2	2	3
Xestodecalactone F	-8.9	ASP A: 138, ASN A: 139	2	2	3

Table S8: List of all interacting amino acids for fungal exo-1, 3-beta-glucan synthase

Exo-1,3-beta-glucan synthase	
Ligands	Interacting residues
Naamine A	ASP A: 138, GLU A: 185, PHE A: 137, PHE A: 251, HIS A: 266, HIS A: 128, TRP A: 356
Naamine B	ARG A: 305, ASN A: 298, ASP A: 138, LEU A: 297, ARG A: 184, GLU A: 185, PHE A: 251, TRP A: 356, HIS A: 128, HIS A: 246
Naamine D	ARG A: 305, SER A: 285, ASP A: 138, PHE A: 137, GLU A: 20, TRP A: 356, HIS A: 246, HIS A: 128, PHE A: 251, GLU A: 185
Naamine E	ASN A: 298, TYR A: 248, GLU A: 185, PHE A: 222, PHE A: 137, PHE A: 251
Naamine F	ARG A: 305, ASP A: 338, SER A: 285, ASN A: 298, TYR A: 310, GLU A: 185, PHE A: 251, PHE A: 137, TRP A: 356, HIS A: 128, HIS A: 246
Naamine G	LEU A: 297, ARG A: 305, ASN A: 298, GLU A: 185, PHE A: 137, PHE A: 222, HIS A: 246, HIS A: 128, PHE A: 251, TRP A: 356
Naamidine A	HIS A: 128, LEU A: 297, ASP A: 138, GLU A: 255, GLY A: 136, TRP A: 356, PHE A: 222, PHE A: 251, ASN A: 298
Naamidine B	GLU A: 185, ASN A: 298, ARG A: 302, TRP A: 356, TRP A: 366, TYR A: 248, PHE A: 251, PHE A: 222, PHE A: 137
Naamidine C	TYR A: 22, SER A: 285, TYR A: 248, ARG A: 305, GLU A: 20, HIS A: 128, TRP A: 356, HIS A: 247, PHE A: 137, GLU A: 185, PHE A: 251
Hyrtimomine A	GLU A: 185, SER A: 285, TRP A: 356, PHE A: 251, PHE A: 137
Hyrtimomine B	TYR A: 248, GLU A: 185, TRP A: 356, PHE A: 251, SER A: 285
Hyrtimomine C	ASN A: 139, TRP A: 356, TYR A: 248, GLU A: 20, PHE A: 251, PHE A: 137, ASP A: 138, GLU A: 185
Hyrtimomine F	ASN A: 139, LEU A: 297, GLY A: 136, ARG A: 305, ARG A: 302, PHE A: 137, ARG A: 143
Hyrtimomine G	GLU A: 185, TYR A: 22, GLU A: 20, ASN A: 139, ASP A: 138, GLY A: 136, TRP A: 356, PHE A: 137, ARG A: 302, PHE A: 251
Topsentin	LEU A: 297, ASP A: 138, ARG A: 305, GLU A: 185, GLY A: 136, PHE A: 137, PHE A: 251, ARG A: 302
Topsentin A	ASP A: 138, LEU A: 297, GLU A: 185, GLY A: 136, PHE A: 137, ARG A: 302, PHE A: 251
Topsentin D	LEU A: 297, GLU A: 185, GLY A: 136, PHE A: 137, ARG A: 302, PHE A: 251
Latrunculin A	PHE A: 251, PHE A: 137
Latrunculin B	TYR A: 310, PHE A: 251, PHE A: 137, ASN A: 298
Latrunculin S	ARG A: 258, PHE A: 222, TRP A: 270
Xestodecalactone A	ASN A: 139, ARG A: 305, TRP A: 356, TYR A: 22, PHE A: 251
Xestodecalactone B	ASN A: 139, LEU A: 297, PHE A: 137
Xestodecalactone C	ASN A: 139, PHE A: 137, PHE A: 251, LEU A: 297
Xestodecalactone D	ASN A: 139, LEU A: 297, ARG A: 305, ASN A: 298, PHE A: 251, PHE A: 137, TYR A: 310
Xestodecalactone E	ASP A: 144, ASP A: 138, ASN A: 135, TYR A: 146, PHE A: 137, PHE A: 251, ARG A: 302
Xestodecalactone F	ASP A: 138, ASN A: 139, ASN A: 298, TYR A: 248, PHE A: 137, TRP A: 356, ARG A: 143
(+)-Curcudiol	LEU A: 297, PHE A: 222, PHE A: 137, PHE A: 251
(+)-Curcuphenol	GLU A: 185, PHE A: 137, PHE A: 251, TRP A: 356, TYR A: 248
Tetillapyrone	ASN A: 139, TRP A: 356, PHE A: 137, PHE A: 251
Nortetillapyrone	TYR A: 248, ASN A: 139, LEU A: 297, TRP A: 356
Aurantioside I	GLN A: 223, HIS A: 247, GLU A: 255, TYR A: 248, ARG A: 258, PHE A: 251, ASN A: 269, HIS A: 246, TRP A: 356, HIS A: 128, PHE A: 222
Aurantioside K	THR A: 248, HIS A: 246, ASP A: 220, HIS A: 247, SER A: 252, PHE A: 251, PHE A: 337
Drugs	
Amphotericin B	HIS A: 246, PHE A: 225, ASP A: 273, ARG A: 258
Isavuconazole	ASN A: 139, HIS A: 246, PHE A: 222, TRP A: 270, PHE A: 137, PHE A: 251, ASP A: 220, PHE A: 225, HIS A: 247
Posaconazole	GLN A: 223, TYR A: 310, VAL A: 224, PHE A: 222, PHE A: 225, HIS A: 247, HIS A: 245, PHE A: 137, PHE A: 251

Table S9: Molecular docking output for the target RdRp

Ligands	Binding affinity (Kcal/mol-1)	RdRp			
		H bond residues	H bonds	C-H bonds	Hydrophobic bonds
Naamine A	-7.3	TRP A: 134	1	1	4
Naamine B	-6.0	PHE A: 148, GLU A: 35	2	2	1
Naamine E	-6.3	GLU A: 35, ALA A: 38	2	1	2
Naamine F	-7.5	TRP A: 134	1	0	6
Naamine G	-6.9	None	0	2	4
Naamidine A	-7.6	TYR A: 13, PRO A: 10	2	0	3
Naamidine B	-7.6	ARG A: 49, SER A: 40, PHE A: 48	3	1	3
Naamidine C	-7.4	None	0	3	3
Hyrtimomine A	-8.1	None	0	2	2
Hyrtimomine B	-8.5	PRO A: 10, ILE A: 121	2	0	3
Hyrtimomine C	-8.1	ASP A: 89	1	2	2
Hyrtimomine F	-8.3	SER A: 151, LEU A: 41, PHE A: 48	3	2	2
Topsentin	-8.6	ARG A: 136	1	0	4
Topsentin A	-8.6	ILE A:121	1	0	5
Topsentin D	-8.5	ARG A: 162	1	2	2
Latrunculin A	-8.6	TRP A: 134	1	0	1
Latrunculin B	-7.7	None	0	0	3
Latrunculin S	-7.7	GLN A: 141	1	1	1
Xestodecalactone A	-7.3	ARG A: 49, SER A: 40, LEU A: 41	3	0	1
Xestodecalactone B	-7.2	PRO A: 39, LEU A: 41, SER A: 40, ARG A: 49	4	0	1
Xestodecalactone C	-6.8	PRO A: 10	1	0	3
Xestodecalactone D	-6.5	SER A: 151, SER A: 40	2	1	3
Xestodecalactone E	-6.7	ASP A: 89, GLY A: 138	2	0	4
Xestodecalactone F	-6.3	SER A: 151	1	0	3
Aurantioside K	-8.3	ILE A: 121, PHE A: 133, ARG A: 136, TYR A: 13	4	0	5
Aurantioside I	-8.3	VAL A: 139, ARG A: 136, GLY A: 138, LYS A: 3	4	1	5

Table S10: List of all interacting amino acids for RNA dependent/directed RNA polymerase

RdRp	
Ligands	Interacting residues
Naamine A	TRP A: 134, ASP A: 89, PRO A: 135, PRO A: 15, TYR A: 13, VAL A: 123
Naamine B	PHE A: 148, GLU A: 35, PRO A: 39, HIS A: 50, LEU A: 41
Naamine D	PRO A: 39, SER A: 40, LEU A: 41, ALA A: 38, ARG A: 49
Naamine E	GLU A: 35, ALA A: 38, GLU A: 35, PHE A: 148, ARG A: 49
Naamine F	TRP A: 134, PRO A: 135, ILE A: 121, VAL A: 139, PRO A: 10, TYR A: 13, VAL A: 123
Naamine G	PRO A: 15, VAL A: 125, VAL A: 123, PRO A: 10, ILE A: 121, LEU A: 8
Naamidine A	TYR A: 13, PRO A: 10, PHE A: 133, VAL A: 123, PRO A: 15
Naamidine B	ARG A: 49, SER A: 40, PHE A: 48, LEU A: 41, ILE A: 152, ALA A: 38, PHE A: 148
Naamidine C	VAL A: 123, PHE A: 133, LEU A: 8, PRO A: 10, VAL A: 125, PRO A: 15
Hyrtimomine A	TYR A: 13, PRO A: 10, VAL A: 123, PRO A: 15
Hyrtimomine B	PRO A: 10, ILE A: 121, ASP A: 89, PRO A: 15, PRO A: 135
Hyrtimomine C	ASP A: 89, ILE A: 121, PRO A: 15, PRO A: 135
Hyrtimomine F	SER A: 151, LEU A: 41, PHE A: 48, PHE A: 148, ARG A: 49, GLU A: 35, SER A: 40
Hyrtimomine G	GLU A: 35, SERA : 151, LEU A: 41, SER A: 40, ARG A: 49
Topsentin	ARG A: 136, PRO A: 10, VAL A: 123, PRO A: 15, PRO A: 135
Topsentin A	ILE A:121, VAL A: 125, PRO A: 10, VAL A: 123, PRO A: 15, PRO A: 135
Topsentin D	ARG A: 162, TRP A: 185, ARG A: 165, LEU A: 166, VAL A: 164
Latrunculin A	TRP A: 134, PRO A: 15
Latrunculin B	PHE A: 133, VAL A: 123, TYR A: 13
Latrunculin S	GLN A: 141, PHE A: 133, LEU A: 140
Xestodecalactone A	ARG A: 49, SER A: 40, LEU A: 41, SER A: 151
Xestodecalactone B	PRO A: 39, LEU A: 41, SER A: 40, ARG A: 49, SER A: 151
Xestodecalactone C	PRO A: 10, VAL A: 123, ILE A: 121, PRO A: 135
Xestodecalactone D	SER A: 151, SER A: 40, PHE A: 148, ALA A: 38, ILE A: 152, LEU A: 41
Xestodecalactone E	ASP A: 89, GLY A: 138, VAL A: 123, PRO A: 10, TYR A: 13, PRO A: 15
Xestodecalactone F	SER A: 151, LEU A: 41, PHE A: 148, PRO A:39
(+)-Curcudiol	PHE A: 133, VAL A: 123,PRO A: 10, VAL A: 125
(+)-Curcuphenol	TYR A: 2, VAL A: 125, PRO A: 10, TYR A: 13, VAL A: 123, PHE A: 133, PRO A: 15, ILE A: 121
Tetillapyrone	ARG A: 165, TRP A: 185, LEU A: 166, VAL A: 164
Nortetillapyrone	HIS A: 50, SER A: 151
Aurantioside K	ILE A: 121, PHE A: 133, ARG A: 136, TYR A: 13, VAL A: 123, PRO A: 10, VAL A: 125, PHE A: 128, GLY A: 138
Aurantioside I	VAL A: 139, ARG A: 136, GLY A: 138, LYS A: 3, ASP A: 89, VAL A: 125, VAL A: 123, PRO A: 10, TYR A: 13, SER A: 86
Drugs	
Amphotericin B	ARG A: 136, ASP A: 89, TRP A: 134, PHE A: 128
Isavuconazole	PRO A: 10, VAL A: 123, PRO A: 15, PRO A: 135, ILE A: 121
Posaconazole	TRP A: 134, VAL A: 123, PRO A: 10, PHE A: 128, PRO A: 15, PRO A: 135, ILE A: 121

Table S11: Molecular docking output for the target Rhizopuspepsin

Rhizopuspepsin					
Ligands	Binding affinity (Kcal/mol-1)	H bond residues	H bonds	C-H bonds	Hydrophobic bonds
Naamine A	-7.6	ASP A: 218	1	0	2
Naamine B	-7.3	ASP A: 79	1	2	3
Naamine E	-7.0	ASP A: 218, ASP A: 79	2	0	2
Naamine F	-7.1	SER A: 76, GLY A: 220, THR A: 221	3	0	4
Naamine G	-6.1	ASP A: 276, VAL A: 277	2	0	3
Naamidine A	-8.5	ASP A: 35, GLY A: 78, ASP A: 79, SER A: 113	4	0	3
Naamidine B	-7.8	ASP A: 218, TRP A: 294, ILE A: 130, SER A: 76	4	2	3
Naamidine C	-7.8	THR A: 221, ARG A: 192, GLY A: 37	3	0	3
Hyrtimomine A	-9.1	GLU A: 16	1	0	6
Hyrtimomine B	-9.3	ASP A: 218, ASP A: 35, THR A: 222, GLU A: 16	4	0	3
Hyrtimomine C	-7.9	GLY A: 37, SER A: 76	2	0	4
Hyrtimomine F	-9.0	GLY A: 37, GLY A: 78	2	2	3
Topsentin	-9.3	ASP A: 79	1	2	3
Topsentin A	-9.5	ASP A: 35, GLY A: 37, GLU A: 16, ASP A: 79, GLY A: 78	5	2	3
Topsentin D	-9.6	GLY A: 220, GLU A: 16, ASP A: 33, SER A: 81	4	0	2
Latrunculin A	-8.3	ASP A: 79	1	0	0
Latrunculin B	-7.9	None	0	0	0
Xestodecalactone A	-6.7	PHE A: 278	1	0	1
Xestodecalactone B	-6.7	ASP A: 274, ASN A: 13, LYS A: 305	3	0	0
Xestodecalactone C	-7.7	ASN A: 13, ASP A: 14, SER A: 275	3	0	2
Xestodecalactone D	-6.9	None	0	1	1
Xestodecalactone E	-7.0	THR A: 222, GLY A: 220	2	0	2
Xestodecalactone F	-7.7	None	0	0	7
(+)-Curcudiol	-6.8	ASP A: 79	1	0	5
Tetillapyrone	-6.4	ASP A: 79, ASP A: 35	2	0	4
Nortetillapyrone	-6.5	ASP A: 79, ASP A: 33	2	0	1
Aurantioside I	-8.8	GLY A: 78, GLY A: 37, ASP A: 33	3	1	7
Aurantioside K	-8.1	GLU A: 16, GLY A: 220	2	2	5

Table S12: List of all interacting amino acids for rhizopuspepsin

Rhizopuspepsin	
Ligands	Interacting residues
Naamine A	ASP A: 218, TYR A: 77, SER A: 39
Naamine B	ASP A: 79, ILE A: 75, TRP A: 194, ASP A: 218, GLY A: 220, GLY A: 78
Naamine D	ASN A: 13, VAL A: 277, ALA A: 161, LYS A: 162, ASP A: 14, GLU A: 280
Naamine E	ASP A: 218, ASP A: 79, ILE A: 298, TYR A: 77
Naamine F	SER A: 76, GLY A: 220, THR A: 221, ILE A: 130, TYR A: 77, ASP A: 218, ILE A: 298
Naamine G	ASP A: 276, VAL A: 277, LYS A: 162, ASP A: 14, LYS A: 305
Naamidine A	ASP A: 35, GLY A: 78, ASP A: 79, SER A: 113, TYR A: 77, LEU A: 223, ILE A: 225
Naamidine B	ASP A: 218, TRP A: 294, ILE A: 130, SER A: 76, GLY A: 220, GLY A: 78, PHE A: 296, TRP A: 194, THR A: 132
Naamidine C	THR A: 221, ARG A: 192, GLY A: 37, ASP A: 218, TRP A: 194, ILE A: 130
Hyrtimomine A	GLU A: 16, ASP A: 33, LEU A: 122, TYR A: 77, ASP A: 79, ASP A: 218, ILE A: 298
Hyrtimomine B	ASP A: 218, ASP A: 35, THR A: 222, GLU A: 16, TYR A: 77, ASP A: 33, LEU A: 122
Hyrtimomine C	GLY A: 37, SER A: 76, ASP A: 218, ASP A: 35, TRP A: 194, ILE A: 130
Hyrtimomine F	GLY A: 37, GLY A: 78, ILE A: 130, TRP A: 194, ASP A: 218
Hyrtimomine G	ASP A: 33, THR A: 222, ILE A: 15, ASP A: 79, ASP A: 35, ASP A: 218, GLU A: 16
Topsentin	ASP A: 79, LEU A: 122, TRP A: 194, ILE A: 130, ASP A: 218, GLY A: 78
Topsentin A	ASP A: 35, GLY A: 37, GLU A: 16, ASP A: 79, GLY A: 78, PHE A: 114, ASP A: 218, ILE A: 298, ASP A: 33, GLY A: 220
Topsentin D	GLY A: 220, GLU A: 16, ASP A: 33, SER A: 81, ASP A: 218, ASP A: 79
Latrunculin A	ASP A: 79
Latrunculin B	No residue interaction (Van der Waals only)
Latrunculin S	ASP A: 79, GLY A: 220, THR A: 222
Xestodecalactone A	PHE A: 278, ASN A: 13
Xestodecalactone B	ASP A: 274, ASN A: 13, LYS A: 305
Xestodecalactone C	ASN A: 13, ASP A: 14, SER A: 275, LYS A: 162, VAL A: 277
Xestodecalactone D	SER A: 38, TRP A: 194
Xestodecalactone E	THR A: 222, GLY A: 220, LEU A: 223, ASP A: 79
Xestodecalactone F	ILE A: 298, TRP A: 194, TRP A: 294, PHE A: 296, ASP A: 79, THR A: 221, THR A: 222
(+)-Curcudiol	ASP A: 79, PHE A: 296, TRP A: 294, ILE A: 298, TRP A: 194, TYR A: 77
(+)-Curcuphenol	ASP A: 218, ASP A: 35, LEU A: 122, ILE A: 216, ILE A: 298, PHE A: 296, TRP A: 194
Tetillapyrone	ASP A: 79, ASP A: 35, TYR A: 77, LEU A: 122, ASP A: 33, GLU A: 16
Nortetillapyrone	ASP A: 79, ASP A: 33, ASP A: 218
Aurantioside K	GLU A: 16, GLY A: 220, TRP A: 294, TRP A: 194, PHE A: 296, ILE A: 216, ILE A: 298, ASP A: 79, SER A: 113
Aurantioside I	GLY A: 78, GLY A: 37, ASP A: 33, TYR A: 77, ASP A: 79, GLU A: 16, PHE A: 278, ILE A: 286, PHE A: 281, LEU A: 223, GLY A: 220
Drugs	
Amphotericin B	GLY A: 220, GLU A: 279, GLY A: 246
Isavuconazole	SER A: 81, SER A: 113, LEU A: 122, ASP A: 33, GLU A: 16
Posaconazole	ARG A: 192, GLY A: 78, GLY A: 37, GLY A: 220, ASP A: 33, ASP A: 79

Table S13: Molecular docking output for the target lanosterol 14 alpha-demethylase

Lanosterol 14 alpha-demethylase					
Ligands	Binding affinity (Kcal/mol-1)	H bond residues	H bonds	C-H bonds	Hydrophobic bonds
Naamine A	-8.7	HIS A: 297, PHE A: 293, HIS A: 453	3	1	8
Naamine B	-8.1	PHE A: 293, HIS A: 297	2	3	9
Naamine D	-6.9	GLN A: 459	1	0	4
Naamine E	-6.9	LYS A: 466	1	0	5
Naamine F	-7.2	SER A: 147	1	1	5
Naamine G	-6.8	None	0	0	6
Naamidine A	-7.8	GLN A: 459, LYS A: 341	2	2	3
Naamidine B	-7.8	LYS A: 341	1	2	3
Naamidine C	-8.1	LYS A: 341, GLN A: 459	2	3	4
Hyrtimomine A	-8.6	None	0	2	6
Hyrtimomine B	-8.7	ASN A: 429, ALA A: 436, LYS A: 142, ILE A: 456	4	0	1
Hyrtimomine C	-9.2	THR A: 492, SER A: 493	2	0	3
Hyrtimomine F	-9.1	ASN A: 146, LYS A: 142, ASN A: 429, ILE A: 456	4	1	3
Hyrtimomine G	-8.9	HIS A: 453	1	3	9
Topsentin	-9.0	ASP A: 417, THR A: 344, LYS A: 466	3	0	4
Topsentin A	-9.2	LYS A: 466, ASP A: 417, THR A: 344	3	0	5
Topsentin D	-8.9	THR A: 344, ASP A: 417, SER A: 147, LYS A: 341	4	0	2
Latrunculin A	-8.4	ALA A: 436	1	1	0
Latrunculin B	-8.7	TYR A: 178, ASP A: 214, GLN A: 215	3	0	4
Latrunculin S	-8.9	ASP A: 214	1	1	0
Xestodecalactone A	-8.4	GLN A: 459, PHE A: 337	2	0	2
Xestodecalactone B	-7.5	TYR A: 127	1	0	5
Xestodecalactone C	-7.7	GLN A: 459, LEU A: 463	2	0	3
Xestodecalactone D	-7.0	ALA A: 290, TRY A: 127	2	1	5
Xestodecalactone E	-8.9	ARG A: 365, ALA A: 290	2	0	8
Xestodecalactone F	-7.0	ASP A: 347	1	4	3
Tetillapyrone	-7.5	TYR A: 113, HIS A: 453	2	0	2
Nortetillapyrone	-6.8	ARG A: 365, TYR A: 127	2	0	3
Aurantoxide I	-8.4	ASP A: 417, LYS A: 341, ASP A: 347, LYS A: 466	4	3	4
Aurantoxide K	-8.3	LYS A: 327, GLU A: 342, GLU A: 323, ASP A: 319	4	1	6

Table S14: List of all interacting amino acids for Lanosterol 14 alpha-demethylase

Lanosterol 14 alpha-demethylase	
Ligands	Interacting residues
Naamine A	HIS A: 297, PHE A: 293, HIS A: 453, TYR A: 113, ILE A: 360, ARG A: 365, CYS A: 455, ALA A: 290, VAL A: 291, ILE A: 456, ILE A: 141, TYR A: 127
Naamine B	PHE A: 293, HIS A: 297, PHE A: 217, TYR A: 113, ARG A: 365, ILE A: 360, MET A: 363, ILE A: 141, VAL A: 291, ALA A: 290, ILE A: 456, CYS : 455, PHE A: 448, TYR A: 127
Naamine D	GLN A: 459, HIS A: 420, LEU A: 463, LYS A: 341, VAL A: 419
Naamine E	LEU A: 463, PHE A: 337, VAL A: 419, PRO A: 418, ASP A: 417, LYS A: 466
Naamine F	VAL A: 419, LEU A: 463, LEU A: 340, LYS A: 341, ASP A: 417 SER A: 147, PHE A: 337
Naamine G	LYS A: 218, VAL A: 497, ASP A: 214, HIS A: 179, HIS A: 297, TYR A: 178
Naamidine A	GLN A: 459, LYS A: 341, ASP A: 417, ASP A: 347, VAL A: 419, LYS A: 466, LYS A: 341
Naamidine B	LYS A: 341, ASP A: 417, ASP A: 347, VAL A: 419, LYS A: 466, HIS A: 420
Naamidine C	LYS A: 341, GLN A: 459, SER A: 147, ASP A:347, ASP A: 417, LYS A: 466, VAL A: 419, PRO A: 418, LYS A: 341
Hyrtimomine A	TYR A: 127, ARG A: 454, CYS A: 455, ILE A: 456, LYS A: 138, VAL A: 126, ALA A: 290, MET A: 494
Hyrtimomine B	ASN A: 429, ALA A: 436, LYS A: 142, ILE A: 456, ARG A: 454
Hyrtimomine C	THR A: 492, SER A: 493, ASP A: 214, VAL A: 497, LYS A: 218
Hyrtimomine F	ASN A: 146, LYS A: 142, ASN A: 429, ILE A: 456, ALA A: 436, PHE A: 434, ARG A: 454, ALA A: 424
Hyrtimomine G	HIS A: 453, LYS A: 138, VAL A: 126, MET A: 494, ILE A: 360, TYR A: 113, ARG A: 365, CYS A: 455, MET A: 363, ILE A: 456, TYR A: 127, ALA A: 290, GLY A: 294
Topsentin	ASP A: 417, THR A: 344, LYS A: 466, PRO A: 418, VAL A: 419, PHE A: 337, LEU A: 463
Topsentin A	LYS A: 466, ASP A: 417, THR A: 344, LEU A: 463, PHE A: 337, VAL A: 419, ASP A: 347, PRO A: 418
Topsentin D	THR A: 344, ASP A: 417, SER A: 147, LYS A: 341, LEUA: 463, PRO A: 418
Latrunculin A	ALA A: 436, HIS A: 420
Latrunculin B	TYR A: 178, ASP A: 214, GLN A: 215, HIS A: 297, VAL A: 497, HIS A: 179, TYR A: 211
Latrunculin S	ASP A: 214, GLN A: 215
Xestodecalactone A	GLN A: 459, PHE A: 337, LYS A: 341, LEU A: 463
Xestodecalactone B	TYR A: 127, ILE A: 360, CYS A: 455, ARG A: 365, PHE A: 217, HIS A: 297
Xestodecalactone C	GLN A: 459, LEU A: 463, LYS A: 341, PHE A: 337, LYS A: 466
Xestodecalactone D	ALA A: 290, TYR A: 127, ILE A: 360, HIS A: 297, VAL A: 495, PHE A: 217, MET A: 494, GLY A: 294
Xestodecalactone E	ARG A: 365, ALA A: 290, TYR A: 127, ILE A: 141, VAL A: 291, HIS A: 297, MET A: 494, PHE A: 217, CYS A: 455, ILE A: 456
Xestodecalactone F	ASP A: 347, ASP A: 417, PHE A: 337, LEU A: 463, PRO A: 418, THR A: 344, LYS A: 341, SER A: 147
(+)-Curcudiol	VAL A: 495, MET A: 494, HIS A: 297, PHE A: 217, TYR A: 127, VAL A: 126, ALA A: 290, PHE A: 121
(+)-Curcuphenol	LYS A: 466, LYS A: 341, LEU A: 463, PHE A: 337
Tetillapyrone	TYR A: 113, HIS A: 453, PHE A: 217, MET A: 494
Nortetillapyrone	ARG A: 365, TYR A: 127, TYR A: 113, HIS A: 453, PHE A: 217
Aurantoxide I	ASP A: 417, LYS A: 341, ASP A: 347, LYS A: 466, PRO A: 418, THR A: 416, LYS A: 341, LEU A: 345, ILE A: 413, LEU A: 463, PHE A: 337
Aurantoxide K	LYS A: 327, GLU A: 342, GLU A: 323, ASP A: 319, LEU A: 463, VAL A: 419, PRO A: 418, TYR A: 462, LYS A: 341, PHE A: 337, ASN A: 414
Drugs	
Amphotericin B	ASP A: 176, ASN A: 503, PRO A: 501, LYS A: 484, ARG A: 500, TYR A: 168
Isavuconazole	LEU A: 340, PHE A: 337, LYS A: 341, LEU A: 463, GLN A: 459, ASP A: 417, PRO A: 418, VAL A: 419
Posaconazole	LYS A: 466, SER A: 147, ILE A: 413, LEU A: 345, ASP A: 417, LYS A: 341, TYR A: 462, VAL A: 419, THR A: 344

Table S15: Molecular docking output for the target lipase

Fungal Lipase					
Ligands	Binding affinity (Kcal/mol-1)	H bond residues	H bonds	C-H bonds	Hydrophobic bonds
Naamine A	-7.5	None	0	0	3
Naamine B	-7.5	None	0	1	4
Naamine D	-6.1	ASP A: 217, ILE A: 221	2	1	5
Naamine E	-6.1	ASN A: 265, SOA : 4401, VAL A: 216, PHE A: 223	4	1	2
Naamine F	-7.1	SER A: 115	1	2	3
Naamine G	-6.2	SER A: 142	1	0	4
Naamidine A	-7.0	VAL A: 121	1	0	3
Naamidine B	-7.9	SER A: 115, ASP A: 119, THR A: 88, THR A: 110	4	1	2
Naamidine C	-7.9	SER A: 198, HIS A: 224, PHE A: 223, SER A: 250	4	1	3
Hyrtimomine A	-7.6	THR A: 88, SER A: 142	2	0	2
Hyrtimomine B	-7.8	GLN A: 187, ASN A:144	2	0	3
Hyrtimomine C	-6.9	GLN A: 187	1	0	4
Hyrtimomine F	-7.2	ASP A: 184	1	1	2
Hyrtimomine G	-7.7	GLN A: 187, ASP A: 184, LEU A: 180, ASN A: 144	4	0	2
Topsentin	-7.6	SER A: 128, ASN A: 144, GLN A: 187, ASP A: 184	4	0	4
Topsentin A	-7.5	ARG A: 188, GLN A: 187, ASN A: 144,	3	0	4
Topsentin D	-7.6	ASP A: 217, THR A: 263	2	1	3
Latrunculin A	-7.5	VAL A: 121, HIS A: 136, THR A: 88	3	0	1
Latrunculin B	-6.9	VAL A: 121	1	1	1
Latrunculin S	-7.3	ASP A: 119	1	0	0
Xestodecalactone A	-7.2	None	0	0	2
Xestodecalactone B	-6.4	None	0	0	5
Xestodecalactone C	-6.2	THR A: 45	1	1	1
Xestodecalactone D	-6.2	SER A: 198, ASP A: 119	2	1	1
Xestodecalactone E	-6.9	THR A: 88, THR A: 110	2	0	5
Xestodecalactone F	-6.1	HIS A: 136, VAL A: 121	2	0	2
Tetillapyrone	-5.9	PHE A: 223, ASP A: 217	2	0	2
Nortetillapyrone	-6.2	ASN A: 265, ASP A: 217, VAL A: 216, PHE A: 223	4	0	1
Aurantioside I	-7.4	SER A: 128, ARG A: 188, LYS A: 148	3	1	3
Aurantioside K	-7.0	ARG A: 188, ASP A: 184, GLN A: 187, ASN A: 144	4	0	2

Table S16: List of all interacting amino acids for fungal lipase

Lipase	
Ligands	Interacting residues
Naamine A	VAL A: 121, ALA A: 116, HIS A: 136
Naamine B	ALA A: 116, THR A: 88, LEU A: 173, PHE A: 139, MET A: 120
Naamine D	ASP A: 217, ILE A: 221, VAL A: 248, PRO A: 222, ASN A: 265, GLY A: 247, PHE A: 223, THR A: 263
Naamine E	ASN A: 265, SOA : 4401, VAL A: 216, PHE A: 223, ILE A: 221, VAL A: 248, PRO A: 222
Naamine F	SER A: 115, LEU A: 173, SER A: 142, PHE A: 139, THR A: 88, ALA A: 116
Naamine G	SER A: 142, ALA A: 116, LEU A: 173, THR A: 88, PHE A: 139
Naamidine A	VAL A: 121, ALA A: 116, THR A: 88, THR A: 110
Naamidine B	SER A: 115, ASP A: 119, THR A: 88, THR A: 110, ALA A: 116, LEU A: 173, ALA A: 137
Naamidine C	SER A: 198, HIS A: 224, PHE A: 223, SER A: 250, ILE A: 261, VAL A: 243, PRO A: 222, TYR A: 200
Hyrtimomine A	THR A: 88, SER A: 142, LEU A: 173, VAL A: 121
Hyrtimomine B	GLN A: 187, ASN A:144, ASP A: 184, TYR A: 127, PRO A: 129
Hyrtimomine C	GLN A: 187, ARG A: 188, ASP A: 184, LEU A: 140, PRO A: 129
Hyrtimomine F	ASP A: 184, PRO A: 129, LEU A: 140
Hyrtimomine G	GLN A: 187, ASP A: 184, LEU A: 180, ASN A: 144, ARG A: 188, PRO A: 129
Topsentin	SER A: 128, ASN A: 144, GLN A: 187, ASP A: 184, VAL A: 147, LYS A: 148, TYR A: 148, TYR A: 127, PRO A: 129
Topsentin A	ARG A: 188, GLN A: 187, ASN A: 144, PRO A: 129, SER A: 128, TYR A: 127, ASP A: 184
Topsentin D	ASP A: 217, THR A: 263, ASN A: 265, VAL A: 248, ILE A: 261, SOA : 4401
Latrunculin A	VAL A: 121, HIS A: 136, THR A: 88, PHE A: 139
Latrunculin B	VAL A: 121, LEU A: 173, GLY A: 138
Latrunculin S	ASP A: 119
Xestodecalactone A	THR A: 88, LEU A: 173
Xestodecalactone B	ALA A: 116, VAL A: 121, LEU A: 173, PHE A: 139, ALA A: 116
Xestodecalactone C	THR A: 45, ILE A: 41, LYS A: 42
Xestodecalactone D	SER A: 115, ASP A: 119, ALA A: 116
Xestodecalactone E	THR A: 88, THR A: 110, PHE A: 139, LEU A: 173, HIS A: 136, VAL A: 121, MET A: 120
Xestodecalactone F	HIS A: 136, VAL A: 121, LEU A: 173, PHE A: 139
(+)-Curcudiol	ASN A: 144, LEU A: 140, TYR A: 127, PRO A: 129, TYR A: 143, LEU A: 180, ASP A: 184
(+)-Curcuphenol	ASN A: 144, ASP A: 184, TYR A: 143, LEU A: 180, TYR A: 127, PRO A: 129
Tetillapyrone	PHE A: 223, ASP A: 217, VAL A: 248, HIS A: 224
Nortetillapyrone	ASN A: 265, ASP A: 217, VAL A: 216, PHE A: 223, HIS A: 224
Aurantioside I	SER A: 128, ARG A: 188, LYS A: 148, PRO A: 129, ASN A: 144, TYR A: 186, TYR A: 215
Aurantioside K	ARG A: 188, ASP A: 184, GLN A: 187, ASN A: 144, LEU A: 140, ALA A: 137
Drugs	
Amphotericin B	GLN A: 100, ASN A: 46, PRO A: 162, ASN A: 196, LYS A: 42
Isavuconazole	ASP A: 217, VAL A: 216, PRO A: 194, PRO A: 222, VAL A: 248, LYS A: 195
Posaconazole	GLN A: 100, TYR A: 78, PRO A: 75, LYS A: 42, LEU A: 44, HIS A: 224, ASN A: 46, GLU A: 48, ALA A: 99, SER A: 250

Table S17: Lipinski and additional parameters to examine drug-likeness

Drug Like Physicochemical Properties						
Ligands	Mol. Weight (g/mol)	Rotatable bonds	H bond donors	H bond acceptors	C Log P	TPSA
	MW \leq 500	RB \leq 10	HBD \leq 5	HBA \leq 10	Log p \leq 5	(Å ²) \leq 140
Naamine A	323.39	5	2	3	2.7	73.30
Naamine B	367.44	6	2	4	2.91	72.4
Naamine E	369.41	6	3	5	2.39	102.76
Naamine F	353.41	6	2	4	2.7	82.53
Naamine G	383.44	7	2	5	2.7	91.76
Naamidine A	433.46	6	2	6	2.53	109.05
Naamidine B	463.49	7	2	7	2.39	118.28
Naamidine C	447.49	6	1	6	2.78	100.26
Hyrtimomine B	359.33	1	4	5	2.02	111.38
Hyrtimomine C	331.32	1	4	4	2.3	101.47
Hyrtimomine F	375.33	2	5	5	1.26	135.28
Hyrtimomine G	380.35	5	6	6	1.15	146.64
Topsentin	342.35	3	4	3	2.89	97.56
Topsentin A	326.35	3	3	2	3.24	77.33
Topsentin D	328.37	3	3	2	2.64	73.04
Latrunculin B	395.51	1	2	5	2.51	110.16
Xestodecalactone A	264.27	0	2	5	1.75	83.83
Xestodecalactone B	280.27	0	3	6	0.89	104.06
Xestodecalactone C	280.27	0	3	6	0.89	104.06
Xestodecalactone D	310.30	1	3	7	0.97	113.29
Xestodecalactone E	366.41	5	2	7	2.42	102.29
Xestodecalactone F	350.41	5	2	6	2.78	85.22
Tetillapyrone	242.23	2	3	6	0.11	100.13
Nortetillapyrone	228.20	2	3	6	-0.25	100.13
Aurantioside K	743.15	12	8	15	-1.11	268.23

Table S18: Swiss-ADME selective parameters

Swiss-ADME analysis				
Ligands	Water solubility	Bioavailability	GI Absorption	BBB Permeant
Naamine A	Moderate	0.55	High	Yes
Naamine B	Moderate	0.55	High	Yes
Naamine E	Moderate	0.55	High	No
Naamine F	Moderate	0.55	High	No
Naamine G	Poor	0.55	High	No
Naamidine A	Poor	0.55	High	No
Naamidine B	Poor	0.55	High	No
Naamidine C	Poor	0.55	High	No
Hyrtimomine A	Poor	0.55	High	No
Hyrtimomine B	Poor	0.56	High	No
Hyrtimomine C	Poor	0.55	High	No
Hyrtimomine F	Moderate	0.55	High	No
Hyrtimomine G	Moderate	0.55	Low	No
Topsentin	Poor	0.55	High	No
Topsentin A	Poor	0.55	High	No
Topsentin D	Poor	0.55	High	Yes
Latrunculin B	Soluble	0.55	High	No
Xestodecalactone A	Soluble	0.55	High	No
Xestodecalactone B	Soluble	0.55	High	No
Xestodecalactone C	Soluble	0.55	High	No
Xestodecalactone D	Soluble	0.55	High	No
Xestodecalactone E	Moderate	0.55	High	No
Xestodecalactone F	Soluble	0.55	High	No
Tetillapyrone	Soluble	0.55	High	No
Nortetillapyrone	Soluble	0.55	High	No
Aurantoside K	Soluble	0.11	Low	No

Table S19: OSIRIS analysis for potential harmful properties and druggability

OSIRIS							
Ligands	Irritant potential	Mutagenic potential	Tumorigenic potential	Reproductive effectivity	Drug Score	Drug likeness	
Risk Level					Score	Yes/No	
Naamine A	Low risk	Low risk	Low risk	Low risk	0.79	3.45	Yes
Naamine B	Low risk	Low risk	Low risk	Low risk	0.82	4.63	Yes
Naamine E	Low risk	Low risk	Low risk	Low risk	0.80	4.13	Yes
Naamine F	Low risk	Low risk	Low risk	Low risk	0.78	3.83	Yes
Naamine G	Low risk	Low risk	Low risk	Low risk	0.76	4.68	Yes
Naamidine A	Low risk	Low risk	Low risk	Low risk	0.74	4.83	Yes
Naamidine B	Low risk	Low risk	Low risk	Low risk	0.71	5.63	Yes
Naamidine C	Low risk	Low risk	Low risk	Low risk	0.74	4.13	Yes
Hyrtimomine B	Low risk	Low risk	Low risk	Low risk	0.65	0.51	Yes
Hyrtimomine C	Low risk	Low risk	Low risk	Low risk	0.58	0.48	Yes
Hyrtimomine F	Low risk	Low risk	High risk	Low risk	0.26	-2.19	No
Hyrtimomine G	Low risk	Low risk	Low risk	Low risk	0.53	-0.75	No
Topsentin	Low risk	Low risk	Low risk	Low risk	0.74	3.72	Yes
Topsentin A	Low risk	Low risk	Low risk	Low risk	0.70	3.2	Yes
Topsentin D	Low risk	Low risk	Low risk	Low risk	0.78	3.82	Yes
Latrunculin B	Low risk	Low risk	Low risk	Low risk	0.34	-10.38	No
Xestodecalactone A	Low risk	Low risk	Low risk	Low risk	0.45	-6.35	No
Xestodecalactone B	Low risk	Low risk	Low risk	Low risk	0.59	-0.93	No
Xestodecalactone C	Low risk	Low risk	Low risk	Low risk	0.59	-0.93	No
Xestodecalactone D	Low risk	Low risk	Low risk	Low risk	0.58	-1.01	No
Xestodecalactone E	High risk	Low risk	Low risk	Low risk	0.24	-6.96	No
Xestodecalactone F	High risk	Low risk	Low risk	Low risk	0.24	-6.99	No
Tetillapyrone	Low risk	Low risk	Low risk	Low risk	0.71	0.03	Yes
Nortetillapyrone	Low risk	Low risk	Low risk	Low risk	0.72	0.04	Yes
Aurantioside K	High Risk	Low risk	Low risk	High Risk	0.15	0.83	Yes

Table S20: Predictions for potential toxicity using ProTox-II and pkCSM servers

Ligands	ProTox-II		PkCSM Toxicity Analysis		
	LD50 value (mg/kg)	Toxicity Class	Hepatotoxicity	<i>T.Pyriformis</i> (log ug/L)	Minnow (log mM)
Naamine A	2000	4	Yes	0.285	0.448
Naamine B	3679	5	Yes	0.286	0.993
Naamine E	3740	5	No	0.285	1.149
Naamine F	2000	4	Yes	0.285	0.695
Naamine G	3740	5	No	0.285	1.04
Naamidine A	3200	5	Yes	0.285	3.248
Naamidine B	3250	5	Yes	0.285	3.593
Naamidine C	3200	5	Yes	0.285	3.136
Hyrtimomine B	2000	4	Yes	0.285	-0.04
Hyrtimomine C	2000	4	Yes	0.287	2.196
Hyrtimomine F	1500	4	Yes	0.286	2.083
Hyrtimomine G	200	3	No	0.292	3.537
Topsentin	1600	4	No	0.285	2.089
Topsentin A	1264	4	No	0.285	1.775
Topsentin D	750	4	Yes	0.299	0.219
Latrunculin B	1000	4	Yes	0.314	2.261
Xestodecalactone A	450	4	No	0.198	2.456
Xestodecalactone B	450	4	No	0.278	3.475
Xestodecalactone C	450	4	No	0.278	3.475
Xestodecalactone D	1500	4	No	0.306	3.789
Xestodecalactone E	1500	4	No	0.322	2.29
Xestodecalactone F	5000	5	No	0.382	1.843
Tetillapyrone	144	3	No	0.319	2.829
Nortetillapyrone	144	3	No	0.289	3.132
Aurantioside K	5000	5	No	0.285	9.573

Table S21: StopTox acute toxicity analysis:

StopTox Acute Toxicity Analysis					
Ligands	Inhalation toxicity	Oral toxicity	Dermal toxicity	Skin sensitization	Irritation and corrosion
Naamine A	No	Yes	No	Yes	Eyes (Yes), Skin (Yes)
Naamine B	No	Yes	No	Yes	Eyes (Yes), Skin (No)
Naamine E	No	Yes	No	Yes	Eyes (Yes), Skin (No)
Naamine F	No	Yes	No	Yes	Eyes (Yes), Skin (No)
Naamine G	No	Yes	No	Yes	Eyes (Yes), Skin (No)
Naamidine A	No	No	No	No	Eyes (Yes), Skin (No)
Naamidine B	No	No	No	No	Eyes (Yes), Skin (No)
Naamidine C	No	Yes	No	No	Eyes (Yes), Skin (No)
Hyrtimomine B	No	No	No	No	Eyes (Yes), Skin (No)
Hyrtimomine C	No	Yes	No	No	Eyes (Yes), Skin (No)
Hyrtimomine F	No	No	No	No	Eyes (Yes), Skin (No)
Hyrtimomine G	No	No	No	No	Eyes (Yes), Skin (No)
Topsentin	No	No	No	No	Eyes (Yes), Skin (No)
Topsentin A	No	Yes	No	No	Eyes (No), Skin (No)
Topsentin D	No	Yes	No	No	Eyes (No), Skin (No)
Latrunculin B	No	No	No	No	Eyes (Yes), Skin (No)
Xestodecalactone A	No	No	Yes	No	Eyes (Yes), Skin (No)
Xestodecalactone B	No	No	Yes	No	Eyes (Yes), Skin (No)
Xestodecalactone C	No	No	Yes	No	Eyes (Yes), Skin (No)
Xestodecalactone D	No	No	Yes	No	Eyes (No), Skin (No)
Xestodecalactone E	No	No	No	Yes	Eyes (No), Skin (No)
Xestodecalactone F	No	No	Yes	Yes	Eyes (No), Skin (No)
Tetillapyrone	No	No	No	No	Eyes (No), Skin (No)
Nortetillapyrone	No	No	No	No	Eyes (No), Skin (No)
Aurantioside K	No	No	No	No	Eyes (Yes), Skin (No)

Table S22: Molinspiration output for potential bioactivity

Molinspiration Prediction						
Ligands	GPCR Ligand	Ion channel Modulator	Kinase Inhibitor	Nuclear receptor Ligand	Protease Inhibitor	Enzyme Inhibitor
Naamine A	0.36	0.10	0.20	-0.05	0.01	0.28
Naamine B	0.06	-0.35	-0.14	-0.23	-0.29	-0.06
Naamine D	0.29	0.13	0.34	-0.14	0.07	0.28
Naamine E	0.29	0.05	0.16	-0.13	-0.03	0.23
Naamine F	0.30	0.05	0.16	-0.11	-0.03	0.24
Naamine G	0.25	0.04	0.15	-0.12	-0.02	0.24
Naamidine A	0.24	-0.13	0.06	-0.27	-0.28	0.04
Naamidine B	0.20	-0.15	0.04	-0.30	-0.30	0.03
Naamidine C	0.24	-0.15	0.01	-0.32	-0.26	0.01
* Hyrtimomine A	0.17	0.09	0.53	-0.13	-0.23	0.30
Hyrtimomine B	0.32	0.09	0.18	0.05	-0.03	0.38
Hyrtimomine C	0.48	0.38	0.10	-0.03	0.01	0.29
Hyrtimomine F	0.19	0.17	-0.01	-0.29	-0.14	0.10
Hyrtimomine G	0.16	0.11	0.13	0.06	0.03	0.12
*Topsentin	0.50	0.16	0.70	0.17	-0.18	0.47
* Topsentin A	0.47	0.12	0.64	0.01	-0.20	0.42
Topsentin D	0.21	0.29	0.08	-0.22	-0.02	0.17
Latrunculin A	0.17	0.14	-0.53	0.55	0.06	0.51
Latrunculin B	0.15	0.11	-0.6	0.54	0.05	0.51
Latrunculin S	0.33	0.07	-0.54	0.50	0.28	0.47
Xestodecalactone A	-0.10	-0.11	-0.49	0.25	-0.19	0.26
Xestodecalactone B	0.12	0.02	-0.35	0.61	0.02	0.53
Xestodecalactone C	0.12	0.02	-0.35	0.61	0.02	0.53
Xestodecalactone D	0.12	-0.01	-0.30	0.40	-0.01	0.43
Xestodecalactone E	0.12	-0.05	-0.34	0.30	0.03	0.32
Xestodecalactone F	0.14	0.04	-0.20	0.34	-0.01	0.46
(+)-Curcudiol	-0.14	-0.01	-0.49	0.32	-0.38	0.01
(+)-Curcuphenol	-0.40	-0.1	-0.73	0.03	-0.67	-0.03
Tetillapyrone	-0.08	-0.66	-0.65	-0.65	0.03	0.59
Nortetillapyrone	-0.10	-0.65	-0.75	-0.78	-0.18	0.58
Aurantioside I	-0.85	-1.92	-1.59	-1.73	-0.49	-0.91
Aurantioside K	-0.70	-1.74	-1.40	-1.56	-0.37	-0.72
Drugs						
Amphotericin B	-3.06	-3.51	-3.54	-3.45	-2.45	-2.95
Isavuconazole	0	-0.07	0	-0.18	-0.07	0

Posaconazole	-0.63	-1.78	-1.40	-1.50	-0.57	-1.20
(* potential to be strong kinase inhibitors – effective against target CotH3)						