

**Table S1:** Compounds, reference compounds, inhibitory values and docking results [21, 25, 30-32, 35-38, 40, 42, 46, 48, 50, 62, 68, 70-71, 76-78, 82-83, 87, 92].

Compounds	Reference compounds	IC <sub>50</sub> (compounds)	IC <sub>50</sub> (reference compounds)	Lab Test used	Studied Binding Site
1	Donepezil	0.451 ± 0.012 µM	0.711 ± 0.017 µM	Healthy male Balb c mice	PAS & CAS
2	Donepezil	0.466 ± 0.016 µM	0.711 ± 0.017 µM	Healthy male Balb c mice	PAS & CAS
3	Donepezil	0.500 ± 0.018 µM	0.711 ± 0.017 µM	Healthy male Balb c mice	PAS & CAS
4	Donepezil	0.590 ± 0.018 µM	0.711 ± 0.017 µM	Healthy male Balb c mice	PAS & CAS
5	Galantamine	4.41± 0.53 µg/mL	6.27±1.15 µg/mL	Electrophorus electricus	PAS & CAS
6	Galantamine	5.04 ±0.96 µg/mL	6.27±1.15 µg/mL	Electrophorus electricus	PAS & CAS
7	Galantamine	0.420 ± 0.019 µM	1.142 ± 0.027 µM	Electrophorus electricus	PAS & CAS
8	-	22 ± 2.8 µM	-	Electrophorus electricus	PAS & CAS
9	-	31.2 ± 1.8 µM	-	Electrophorus electricus	PAS & CAS
10	-	32 ± 2.4 µM	-	Electrophorus electricus	PAS & CAS
11	-	36.9 ± 5.6 µM	-	Electrophorus electricus	PAS & CAS
12	-	37.6 ± 0.75 µM	-	Electrophorus electricus	PAS & CAS
13	Tacrine	0.590 µM	0.71 µM	Electrophorus electricus	PAS & CAS
14	-	1.66 ± 0.03 µM	-	Electrophorus electricus	PAS & CAS
15	-	pIC <sub>50</sub> 8.092	-	-	PAS & CAS
16	Donepezil	2.95 ± 1.31 µM	0.079 ± 0.05 µM	Electrophorus electricus	PAS & CAS
17	-	33.30 µM	-	-	PAS & CAS
18	Eserine	128.22± 0.17 µM	0.04 ± 0.0001 µM	Electrophorus electricus	PAS & CAS
19	Eserine	16.43±0.48 µM	0.19 ± 0.05µM	Electrophorus electricus	PAS & CAS

20	Eserine	43.36 ±0.29µM	0.19 ± 0.05µM	Electrophorus electricus	PAS & CAS
21	Eserine	11.73±0.49 µM	0.19 ± 0.05µM	Electrophorus electricus	PAS & CAS
22	tacrine	2.75 µM	0.03 µM	Swiss Webster mice	PAS
23	Eserine	5.41 ± 0.24 µM	0.19 ± 0.05µM	hAChE (HUMAN)	PAS & CAS
24	Eserine	14.29± 0.29 µM	0.19 ± 0.05µM	hAChE (HUMAN)	PAS & CAS
25	Eserine	26.75 ± 0.27 µM	0.19 ± 0.05µM	hAChE (HUMAN)	PAS & CAS
26	Eserine	13.47 ± 0.31 µM	0.19 ± 0.05µM	hAChE (HUMAN)	PAS & CAS
27	Rivastigmine	54.2 ± 1.7 %	59.6 ± 2.6 %	Electrophorus electricus	PAS
28	Donepezilb, Galanthamine	4.30 ± 0.3 µM	Don: 0.041 µM Gal: 1.65 µM	Electrophorus electricus	PAS & CAS
29	Donepezilb, Galanthamine	3.89 ± 0.3 µM	Don: 0.041 µM Gal: 1.65 µM	Electrophorus electricus	PAS & CAS
30	Donepezilb, Galanthamine	2.24 ± 0.4 µM	Don: 0.041 µM Gal: 1.65 µM	Electrophorus electricus	PAS & CAS
31	Tacrine	0.099±0.008 µM	0.038±0.007 µM	Electrophorus electricus	PAS & CAS
32	Tacrine	506.62 nM	1116.74 nM	Electrophorus electricus	PAS & CAS
33	Tacrine	397.32 nM	938.63 nM	Electrophorus electricus	PAS & CAS
34	Donepezil	0.044 ± 0.002 µM	0.052± 0.004 µM	Electrophorus electricus	PAS & CAS
35	Donepezil	7.58 ± 0.88 µM	0.052± 0.004 µM	Electrophorus electricus	PAS & CAS
36	Donepezil	4.10 ± 0.04 µM	0.052± 0.004 µM	Electrophorus electricus	PAS & CAS
37	Donepezil	9.71 ± 0.20 µM	0.052± 0.004 µM	Electrophorus electricus	PAS & CAS
38	Donepezil	2.70 ± 0.19 µM	0.052± 0.004 µM	Electrophorus electricus	PAS & CAS

39	Tacrine, Donepezil	$4.17 \pm 0.36 \mu\text{M}$	Tac: $0.30 \pm 0.02 \mu\text{M}$ Don: $0.033 \pm 0.002 \mu\text{M}$	Recombinant human AChE	PAS & CAS
40	Tacrine, Donepezil	$0.73 \pm 0.05 \mu\text{M}$	Tac: $0.30 \pm 0.02 \mu\text{M}$ Don: $0.033 \pm 0.002 \mu\text{M}$	Recombinant human AChE	PAS & CAS
41	Galantamine	$0.86 \pm 0.03 \mu\text{M}$	$1.28 \pm 0.01 \mu\text{M}$	-	PAS & CAS
42	Donepezil	$1.98 \pm 0.004 \mu\text{M}$	$0.59 \pm 0.083 \mu\text{M}$	Electrophorus electricus	PAS & CAS
43	Donepezil	$3.53 \pm 0.42 \mu\text{M}$	$0.59 \pm 0.083 \mu\text{M}$	Electrophorus electricus	PAS & CAS
44	Donepezil	$1.89 \pm 0.28 \mu\text{M}$	$0.59 \pm 0.083 \mu\text{M}$	Electrophorus electricus	PAS & CAS
45	Donepezil	$5.58 \pm 0.72 \mu\text{M}$	$0.59 \pm 0.083 \mu\text{M}$	Electrophorus electricus	PAS & CAS
46	Tacrine, Galanthamine	$0.74 \pm 0.5 \mu\text{M}$	Tac: $0.11 \pm 0.01 \mu\text{M}$ Gal: $0.59 \pm 0.13 \mu\text{M}$	HuAChE	PAS
47	Tacrine, Galanthamine	$1.31 \pm 0.2 \mu\text{M}$	Tac: $0.11 \pm 0.01 \mu\text{M}$ Gal: $0.59 \pm 0.13 \mu\text{M}$	HuAChE	PAS
48	Tacrine, Galanthamine	$0.077 \pm 0.01 \mu\text{M}$	Tac: $0.11 \pm 0.01 \mu\text{M}$ Gal: $0.59 \pm 0.13 \mu\text{M}$	HuAChE	PAS
49	Tacrine	14.142 nM	15.0652 nM	Electrophorus electricus	PAS
50	Galantamine	$0.475 \pm 0.12 \mu\text{M}$	$1.91 \pm 0.11 \mu\text{M}$	Electrophorus electricus	PAS
51	Galantamine	$0.547 \pm 0.34 \mu\text{M}$	$1.91 \pm 0.11 \mu\text{M}$	Electrophorus electricus	PAS