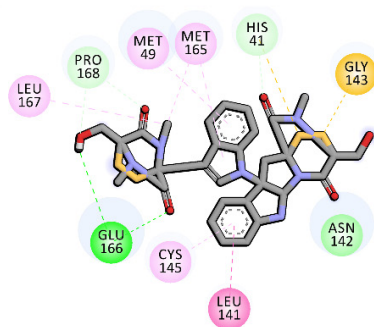
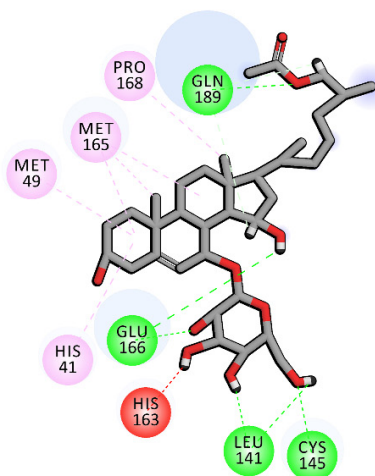


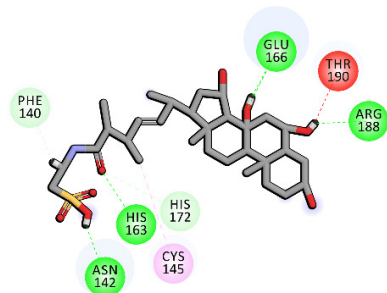
**Figure S1.** The employed grid box in Autodock computations.



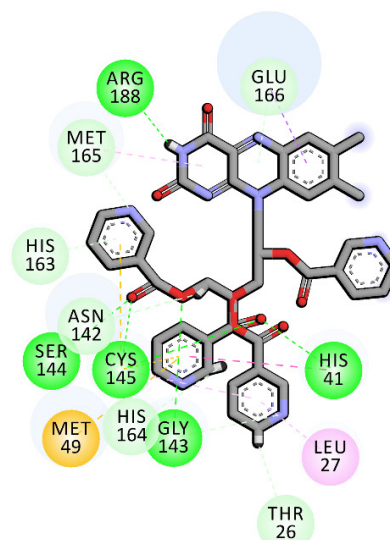
**UMHMNP1403367**



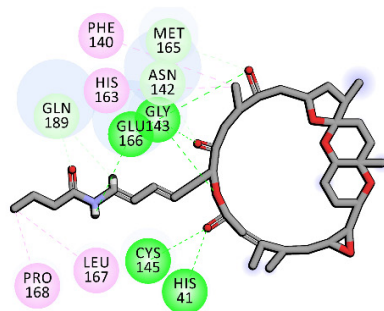
**UMHMNP101691127**



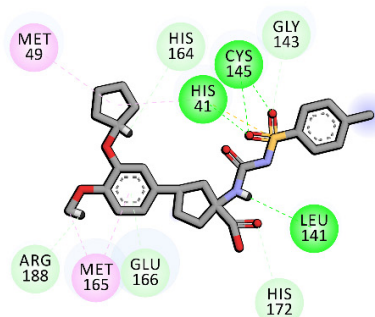
**UMHMNP791849666**



**UMHMNP14984668**

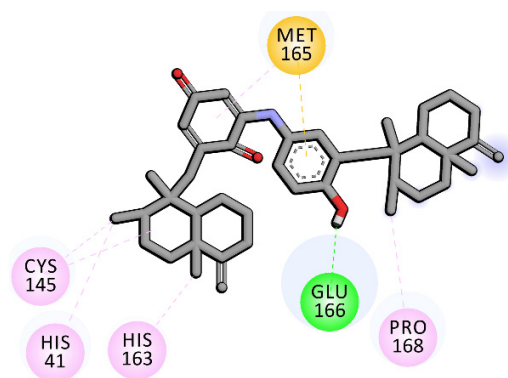


**UMHMNP143621754**

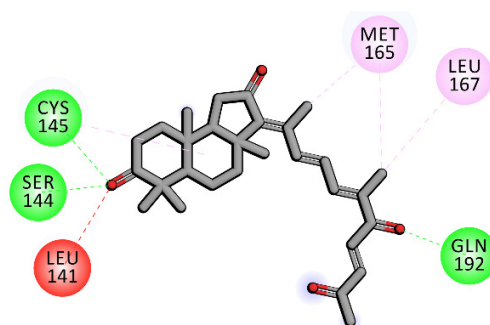


**UMHMNP148839036**

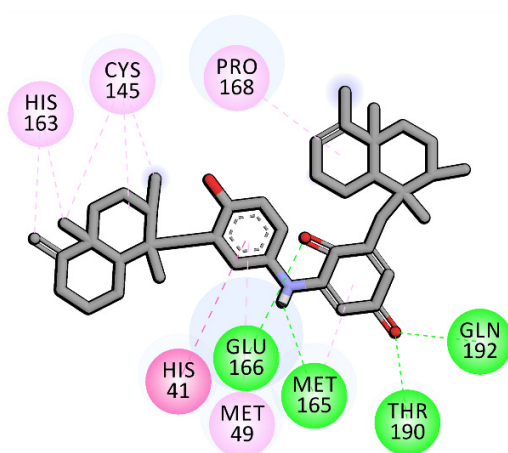
**Figure S2.** 2D representation of binding modes and interactions for top thirteen scoring drugs with the key amino acid residues of the 3CL<sup>PRO</sup> binding pocket.



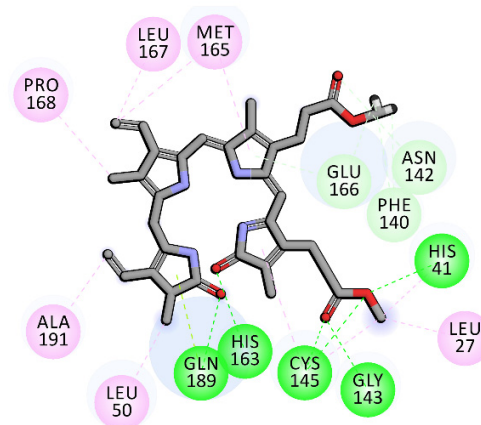
**UMHMNP133056072**



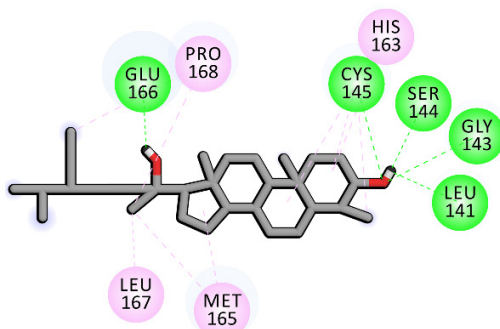
**UMHMNP386274857**



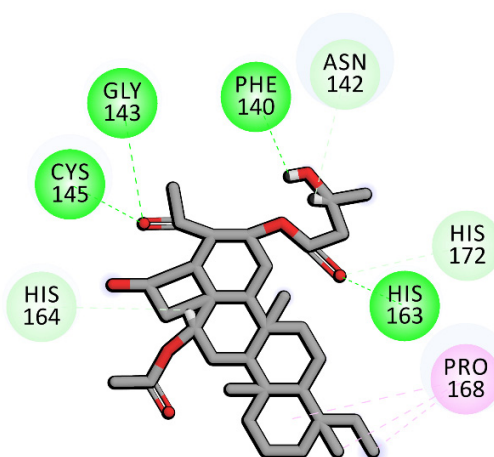
**UMHMNP133056094**



**UMHMNP26195584**

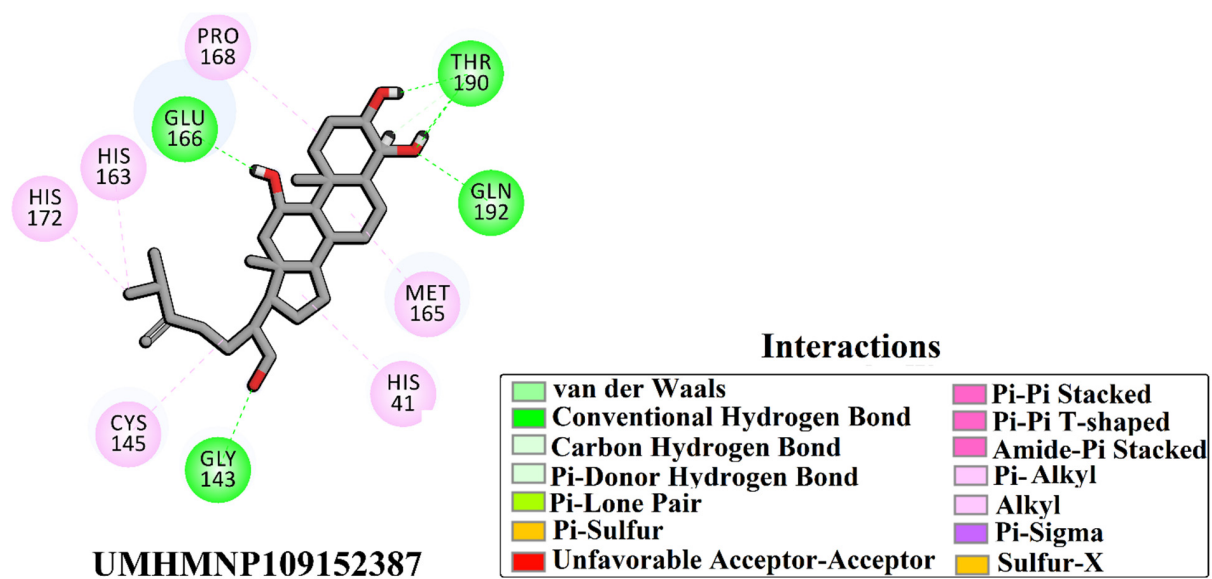


**UMHMNP874383707**

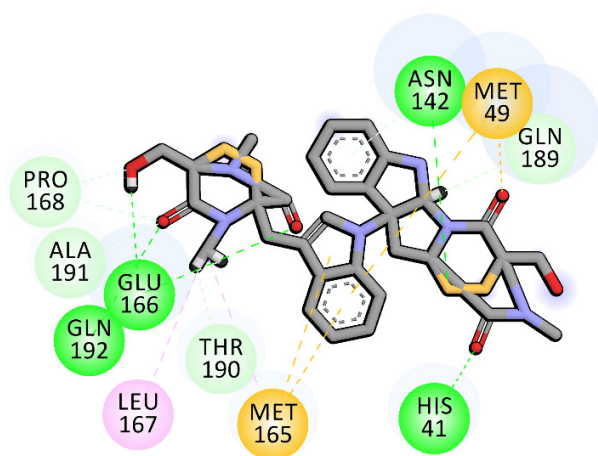


**UMHMNP221163300**

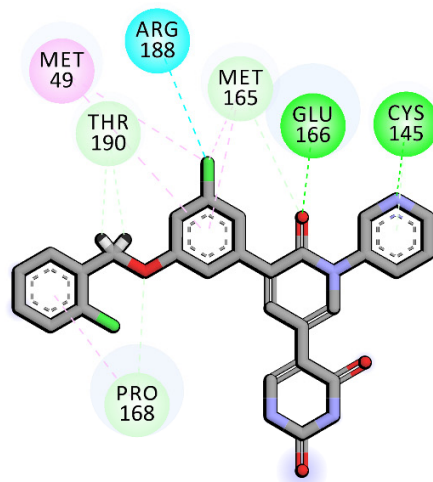
**Figure S2. Continued.**



**Figure S2.** *Continued.*



(a) UMHMNP1403367



(b) XF7

## Interactions

■ Conventional Hydrogen Bond

■ Carbon Hydrogen Bond

■ Pi-Donor Hydrogen Bond

■ Halogen (Cl, Br, I)

■ Pi-Alkyl

■ Alkyl

■ Pi-Sulfur

■ Sulfur-X

**Figure S3.** 2D molecular interaction pattern of binding modes of (a) UMHMNP1403367 and (b) XF7 complexed with 3CL<sup>pro</sup> based on the average structure over a 200 ns MD simulation

**Table S1.** Estimated fast and moderate docking scores (in kcal/mol) for top 2686 MNPs towards 3CL<sup>pro</sup>.<sup>a</sup>

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)	
		Fast	Mod.			Fast	Mod.			Fast	Mod.
	XF7	-8.1	-9.2								
1	UMHMNP1403367	-11.7	-12.2	53	UMHMNP171674923	-8.9	-10.8	105	UMHMNP253195403	-8.6	-10.4
2	UMHMNP101691127	-11.4	-12.1	54	UMHMNP151484785	-9.2	-10.8	106	UMHMNP336825311	-9.4	-10.4
3	UMHMNP791849666	-11.4	-11.9	55	UMHMNP125035838	-9.2	-10.7	107	UMHMNP99528877	-10.4	-10.4
4	UMHMNP14984668	-11.3	-11.7	56	UMHMNP145400573	-10.7	-10.7	108	UMHMNP112663920	-10.4	-10.4
5	UMHMNP143621754	-11.3	-11.7	57	UMHMNP139975589	-9.9	-10.7	109	UMHMNP80981379	-10.4	-10.4
6	UMHMNP148839036	-11.3	-11.6	58	UMHMNP272458330	-10.6	-10.7	110	UMHMNP552839802	-8.1	-10.4
7	UMHMNP133056072	-11.3	-11.6	59	UMHMNP272458341	-8.6	-10.7	111	UMHMNP142755133	-9.8	-10.4
8	UMHMNP386274857	-11.3	-11.6	60	UMHMNP86708329	-10.6	-10.7	112	UMHMNP131727010	-10.8	-10.4
9	UMHMNP133056094	-11.2	-11.5	61	UMHMNP122143902	-8.9	-10.7	113	UMHMNP142796314	-10.3	-10.4
10	UMHMNP26195584	-11.1	-11.5	62	UMHMNP61369275	-8.3	-10.7	114	UMHMNP374819086	-8.0	-10.4
11	UMHMNP874383707	-11.1	-11.5	63	UMHMNP176666834	-9.0	-10.7	115	UMHMNP105404840	-9.2	-10.4
12	UMHMNP221163300	-11.1	-11.4	64	UMHMNP151078921	-8.8	-10.7	116	UMHMNP112953114	-10.9	-10.4
13	UMHMNP109152387	-11.1	-11.4	65	UMHMNP139765370	-8.1	-10.7	117	UMHMNP147395979	-8.1	-10.4
14	UMHMNP156953912	-11.1	-11.4	66	UMHMNP2497747	-10.7	-10.7	118	UMHMNP156953934	-9.5	-10.4
15	UMHMNP5035303	-11.0	-11.4	67	UMHMNP70139569	-10.7	-10.7	119	UMHMNP173792580	-9.9	-10.4
16	UMHMNP706784727	-10.9	-11.3	68	UMHMNP244157946	-10.6	-10.7	120	UMHMNP454476870	-9.6	-10.4
17	UMHMNP100942743	-8.8	-11.2	69	UMHMNP64421201	-9.5	-10.7	121	UMHMNP152845744	-9.5	-10.4
18	UMHMNP125398290	-8.3	-11.2	70	UMHMNP100942754	-9.1	-10.7	122	UMHMNP77944037	-10.1	-10.4
19	UMHMNP147362376	-8.4	-11.2	71	UMHMNP41410586	-8.8	-10.7	123	UMHMNP116477237	-9.2	-10.3
20	UMHMNP149444928	-8.2	-11.2	72	UMHMNP64548169	-9.9	-10.7	124	UMHMNP133613771	-9.8	-10.3
21	UMHMNP149764341	-9.7	-11.2	73	UMHMNP162830231	-8.9	-10.6	125	UMHMNP516869	-8.4	-10.3
22	UMHMNP150050138	-9.9	-11.2	74	UMHMNP351443759	-8.4	-10.6	126	UMHMNP97877695	-10.3	-10.3
23	UMHMNP151484694	-9.3	-11.2	75	UMHMNP852872925	-9.7	-10.6	127	UMHMNP623167715	-9.8	-10.3
24	UMHMNP153212852	-8.4	-11.2	76	UMHMNP152110093	-8.1	-10.6	128	UMHMNP151109545	-8.9	-10.3
25	UMHMNP157207915	-8.3	-11.2	77	UMHMNP159903670	-8.4	-10.6	129	UMHMNP152247922	-8.6	-10.3
26	UMHMNP157622601	-9.5	-11.2	78	UMHMNP74185049	-9.6	-10.6	130	UMHMNP19698669	-9.5	-10.3
27	UMHMNP167172987	-8.1	-11.2	79	UMHMNP161470231	-8.9	-10.6	131	UMHMNP6901606	-10.3	-10.3
28	UMHMNP184885890	-9.5	-11.2	80	UMHMNP165815816	-8.5	-10.6	132	UMHMNP890041675	-9.7	-10.3
29	UMHMNP22033870	-8.7	-11.2	81	UMHMNP143049165	-8.9	-10.6	133	UMHMNP116302386	-10.4	-10.3
30	UMHMNP224577348	-10.8	-11.2	82	UMHMNP124689652	-9.0	-10.5	134	UMHMNP131703156	-10.9	-10.3
31	UMHMNP5035304	-8.7	-11.2	83	UMHMNP22149695	-9.4	-10.5	135	UMHMNP117631502	-8.5	-10.3
32	UMHMNP76915247	-10.9	-11.2	84	UMHMNP129350181	-8.2	-10.5	136	UMHMNP142796303	-10.2	-10.3
33	UMHMNP823808555	-10.9	-11.2	85	UMHMNP153209111	-8.6	-10.5	137	UMHMNP175992991	-10.0	-10.3
34	UMHMNP120685112	-8.5	-11.2	86	UMHMNP110189043	-9.5	-10.5	138	UMHMNP186593839	-9.1	-10.3
35	UMHMNP162830264	-8.3	-11.2	87	UMHMNP244157957	-10.4	-10.5	139	UMHMNP21059154	-8.3	-10.3
36	UMHMNP153212863	-10.6	-11.1	88	UMHMNP77982800	-10.4	-10.5	140	UMHMNP126149904	-8.8	-10.3
37	UMHMNP154205182	-8.8	-11.1	89	UMHMNP150079951	-10.9	-10.5	141	UMHMNP140715851	-10.3	-10.3
38	UMHMNP174630070	-10.9	-11.0	90	UMHMNP175669279	-8.9	-10.5	142	UMHMNP142755144	-9.5	-10.3
39	UMHMNP94203539	-9.9	-11.0	91	UMHMNP54369118	-8.9	-10.5	143	UMHMNP161470253	-10.0	-10.3
40	UMHMNP116407160	-8.2	-11.0	92	UMHMNP566943746	-9.1	-10.5	144	UMHMNP870535129	-9.9	-10.3
41	UMHMNP106231258	-10.0	-11.0	93	UMHMNP868395884	-10.2	-10.5	145	UMHMNP97614647	-10.1	-10.3
42	UMHMNP162465807	-9.7	-11.0	94	UMHMNP221163311	-9.6	-10.5	146	UMHMNP91283919	-10.1	-10.3
43	UMHMNP58670636	-9.5	-11.0	95	UMHMNP70329281	-10.1	-10.5	147	UMHMNP196403926	-8.2	-10.3
44	UMHMNP86748314	-10.8	-10.9	96	UMHMNP18097671	-9.6	-10.5	148	UMHMNP23518981	-8.6	-10.3
45	UMHMNP154466372	-9.5	-10.9	97	UMHMNP290824474	-8.8	-10.5	149	UMHMNP2418453	-10.0	-10.3
46	UMHMNP116303	-8.4	-10.9	98	UMHMNP474395	-10.2	-10.5	150	UMHMNP386274868	-8.9	-10.3
47	UMHMNP890041722	-10.8	-10.9	99	UMHMNP741259858	-10.1	-10.5	151	UMHMNP29782658	-8.8	-10.3
48	UMHMNP664992272	-9.0	-10.9	100	UMHMNP6673683	-10.3	-10.5	152	UMHMNP54028465	-9.0	-10.3
49	UMHMNP6673661	-9.6	-10.9	101	UMHMNP827348072	-10.2	-10.5	153	UMHMNP61843796	-8.5	-10.3
50	UMHMNP444987637	-8.8	-10.8	102	UMHMNP107503093	-10.0	-10.5	154	UMHMNP888041267	-9.3	-10.2
51	UMHMNP131467000	-10.7	-10.8	103	UMHMNP132310908	-9.3	-10.5	155	UMHMNP152130615	-10.5	-10.2
52	UMHMNP757976673	-10.2	-10.8	104	UMHMNP126622648	-8.1	-10.4	156	UMHMNP170894367	-9.3	-10.2

Table S1. Continued.

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)	
		Fast	Mod.			Fast	Mod.			Fast	Mod.
157	UMHMNP6377180	-9.8	-10.2	209	UMHMNP97649042	-10.1	-10.1	261	UMHMNP136781958	-9.0	-10.0
158	UMHMNP72509616	-10.2	-10.2	210	UMHMNP102488584	-10.1	-10.1	262	UMHMNP139765347	-9.7	-10.0
159	UMHMNP870095344	-9.0	-10.2	211	UMHMNP1058613	-9.9	-10.1	263	UMHMNP26195584	-8.7	-10.0
160	UMHMNP82866339	-8.5	-10.2	212	UMHMNP29939977	-8.6	-10.1	264	UMHMNP333723981	-8.7	-10.0
161	UMHMNP862286702	-8.9	-10.2	213	UMHMNP55688432	-9.5	-10.1	265	UMHMNP57874	-8.4	-10.0
162	UMHMNP116972931	-8.3	-10.2	214	UMHMNP676271833	-9.1	-10.1	266	UMHMNP115268434	-9.0	-10.0
163	UMHMNP22260464	-9.3	-10.2	215	UMHMNP72007944	-9.9	-10.1	267	UMHMNP119147125	-8.1	-10.0
164	UMHMNP682808895	-9.6	-10.2	216	UMHMNP81826495	-8.4	-10.1	268	UMHMNP214899215	-8.1	-10.0
165	UMHMNP149355759	-8.1	-10.2	217	UMHMNP858950400	-10.1	-10.1	269	UMHMNP233607711	-9.8	-10.0
166	UMHMNP85733795	-10.1	-10.2	218	UMHMNP91683328	-9.5	-10.1	270	UMHMNP23670942	-10.0	-10.0
167	UMHMNP109152376	-10.1	-10.2	219	UMHMNP94935974	-10.0	-10.1	271	UMHMNP28949668	-9.7	-10.0
168	UMHMNP53216027	-9.2	-10.2	220	UMHMNP102396178	-10.1	-10.1	272	UMHMNP83115440	-9.9	-10.0
169	UMHMNP113592817	-8.9	-10.2	221	UMHMNP134131183	-9.9	-10.1	273	UMHMNP874193610	-9.9	-10.0
170	UMHMNP118574735	-8.3	-10.2	222	UMHMNP140715873	-10.0	-10.1	274	UMHMNP150050127	-8.4	-10.0
171	UMHMNP681227032	-9.8	-10.2	223	UMHMNP151247697	-8.0	-10.1	275	UMHMNP244157980	-8.4	-10.0
172	UMHMNP88191144	-8.8	-10.2	224	UMHMNP253340293	-8.2	-10.1	276	UMHMNP27065958	-8.5	-10.0
173	UMHMNP143380396	-10.1	-10.2	225	UMHMNP133562499	-9.2	-10.1	277	UMHMNP73792935	-9.9	-10.0
174	UMHMNP168569184	-10.9	-10.2	226	UMHMNP189083781	-8.7	-10.1	278	UMHMNP136762942	-9.4	-10.0
175	UMHMNP174630116	-10.3	-10.2	227	UMHMNP50909869	-8.1	-10.1	279	UMHMNP185014599	-8.3	-10.0
176	UMHMNP40446068	-8.7	-10.2	228	UMHMNP69081885	-9.1	-10.1	280	UMHMNP681260093	-9.7	-10.0
177	UMHMNP405095945	-8.7	-10.2	229	UMHMNP80925060	-9.3	-10.1	281	UMHMNP852469375	-9.8	-10.0
178	UMHMNP6891356	-10.1	-10.2	230	UMHMNP137576002	-9.9	-10.0	282	UMHMNP126297390	-9.0	-9.9
179	UMHMNP84025321	-9.4	-10.2	231	UMHMNP54854921	-8.2	-10.0	283	UMHMNP188112858	-8.1	-9.9
180	UMHMNP19254694	-8.9	-10.2	232	UMHMNP80375184	-9.9	-10.0	279	UMHMNP283176136	-8.8	-9.9
181	UMHMNP114127785	-8.9	-10.1	233	UMHMNP83681792	-9.7	-10.0	284	UMHMNP51744559	-8.5	-9.9
182	UMHMNP244157968	-10.2	-10.1	234	UMHMNP57800585	-9.5	-10.0	285	UMHMNP53296836	-9.8	-9.9
183	UMHMNP481141	-8.8	-10.1	235	UMHMNP832723736	-9.6	-10.0	286	UMHMNP121678873	-9.7	-9.9
184	UMHMNP154496874	-10.9	-10.1	236	UMHMNP866025629	-8.6	-10.0	287	UMHMNP135091111	-8.4	-9.9
185	UMHMNP166797746	-8.3	-10.1	237	UMHMNP53822983	-8.5	-10.0	288	UMHMNP139975578	-8.3	-9.9
186	UMHMNP74185129	-8.8	-10.1	238	UMHMNP56525736	-8.7	-10.0	289	UMHMNP143572730	-10.5	-9.9
187	UMHMNP83115473	-9.2	-10.1	239	UMHMNP78342388	-9.4	-10.0	290	UMHMNP151890812	-8.7	-9.9
188	UMHMNP104048171	-9.9	-10.1	240	UMHMNP105064300	-9.5	-10.0	291	UMHMNP213547285	-8.8	-9.9
189	UMHMNP165815849	-8.5	-10.1	241	UMHMNP123165800	-8.1	-10.0	292	UMHMNP32352651	-9.4	-9.9
190	UMHMNP58028232	-8.4	-10.1	242	UMHMNP75605855	-9.8	-10.0	293	UMHMNP3903579	-8.2	-9.9
191	UMHMNP201800615	-8.7	-10.1	243	UMHMNP76094569	-10.0	-10.0	294	UMHMNP851610907	-10.0	-9.9
192	UMHMNP217449199	-8.1	-10.1	244	UMHMNP84223030	-9.7	-10.0	295	UMHMNP123158907	-9.6	-9.9
193	UMHMNP83704103	-8.8	-10.1	245	UMHMNP854203784	-9.9	-10.0	296	UMHMNP150931832	-8.3	-9.9
194	UMHMNP876620245	-9.8	-10.1	246	UMHMNP99617386	-10.0	-10.0	297	UMHMNP871943985	-9.8	-9.9
195	UMHMNP94451215	-9.9	-10.1	247	UMHMNP129623309	-8.4	-10.0	298	UMHMNP102054455	-9.5	-9.9
196	UMHMNP104928305	-10.0	-10.1	248	UMHMNP134128168	-9.5	-10.0	299	UMHMNP143592249	-8.4	-9.9
197	UMHMNP123314216	-8.4	-10.1	249	UMHMNP4298004	-8.8	-10.0	300	UMHMNP199600390	-8.6	-9.9
198	UMHMNP244157979	-10.0	-10.1	250	UMHMNP53296847	-8.3	-10.0	301	UMHMNP2122987	-8.7	-9.9
199	UMHMNP260436279	-8.1	-10.1	251	UMHMNP876756568	-9.9	-10.0	302	UMHMNP479411455	-8.5	-9.9
200	UMHMNP393870332	-9.1	-10.1	252	UMHMNP90108637	-8.9	-10.0	303	UMHMNP62410962	-8.2	-9.9
201	UMHMNP50335030	-10.1	-10.1	253	UMHMNP224576027	-9.2	-10.0	304	UMHMNP693790748	-9.8	-9.9
202	UMHMNP196500784	-9.2	-10.1	254	UMHMNP25747448	-9.7	-10.0	305	UMHMNP753457942	-9.8	-9.9
203	UMHMNP211358666	-9.1	-10.1	255	UMHMNP858950444	-10.0	-10.0	306	UMHMNP85733762	-9.8	-9.9
204	UMHMNP221169762	-8.6	-10.1	256	UMHMNP94806049	-9.9	-10.0	307	UMHMNP14050625	-9.4	-9.9
205	UMHMNP57082367	-9.1	-10.1	257	UMHMNP110012185	-9.9	-10.0	308	UMHMNP160098931	-8.5	-9.9
206	UMHMNP63109193	-9.0	-10.1	258	UMHMNP117675191	-9.0	-10.0	309	UMHMNP200942183	-8.3	-9.9
207	UMHMNP735278281	-10.0	-10.1	259	UMHMNP128229641	-8.6	-10.0	310	UMHMNP34212936	-8.3	-9.9
208	UMHMNP93426905	-10.1	-10.1	260	UMHMNP133883224	-9.8	-10.0	311	UMHMNP474624	-9.8	-9.9

Table S1. Continued.

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)	
		Fast	Mod.			Fast	Mod.			Fast	Mod.
312	UMHMNP810685564	-9.3	-9.9	364	UMHMNP133738484	-9.8	-9.8	416	UMHMNP75197385	-9.5	-9.8
313	UMHMNP97564948	-8.6	-9.9	365	UMHMNP188111708	-8.3	-9.8	417	UMHMNP752211908	-9.7	-9.8
314	UMHMNP103065209	-9.5	-9.9	366	UMHMNP80735064	-8.7	-9.8	418	UMHMNP771534362	-9.7	-9.8
315	UMHMNP125329091	-10.9	-9.9	367	UMHMNP106534445	-8.9	-9.8	419	UMHMNP866403716	-9.6	-9.8
316	UMHMNP142755155	-9.8	-9.9	368	UMHMNP168569151	-8.3	-9.8	420	UMHMNP96363063	-9.3	-9.8
317	UMHMNP151564022	-10.7	-9.9	369	UMHMNP233607697	-9.7	-9.8	421	UMHMNP97190313	-8.8	-9.8
318	UMHMNP168004851	-8.5	-9.9	370	UMHMNP720681630	-9.8	-9.8	422	UMHMNP104196681	-9.7	-9.8
319	UMHMNP208927155	-9.4	-9.9	371	UMHMNP97889560	-9.7	-9.8	423	UMHMNP1247649	-8.5	-9.8
320	UMHMNP211358655	-8.6	-9.9	372	UMHMNP477935969	-9.7	-9.8	424	UMHMNP134887266	-9.7	-9.8
321	UMHMNP272118066	-9.6	-9.9	373	UMHMNP493889	-9.7	-9.8	425	UMHMNP18099246	-8.9	-9.8
322	UMHMNP329050228	-8.5	-9.9	374	UMHMNP78285844	-8.8	-9.8	426	UMHMNP334491257	-8.4	-9.8
323	UMHMNP329050251	-8.1	-9.9	375	UMHMNP123332876	-8.3	-9.8	427	UMHMNP102054466	-8.3	-9.7
324	UMHMNP870535118	-9.8	-9.9	376	UMHMNP149260800	-9.1	-9.8	428	UMHMNP112455842	-9.7	-9.7
325	UMHMNP114216909	-9.2	-9.9	377	UMHMNP168075147	-8.2	-9.8	429	UMHMNP116079539	-8.9	-9.7
326	UMHMNP136762997	-9.7	-9.9	378	UMHMNP172377503	-9.7	-9.8	430	UMHMNP122548032	-8.8	-9.7
327	UMHMNP264624397	-9.8	-9.9	379	UMHMNP185331946	-9.5	-9.8	431	UMHMNP153209122	-8.3	-9.7
328	UMHMNP334491279	-9.3	-9.9	380	UMHMNP2140467	-9.2	-9.8	432	UMHMNP219832378	-8.6	-9.7
329	UMHMNP38636509	-8.7	-9.9	381	UMHMNP4030926	-8.2	-9.8	433	UMHMNP823804837	-9.7	-9.7
330	UMHMNP5371540	-9.3	-9.9	382	UMHMNP102054477	-9.5	-9.8	434	UMHMNP852872936	-8.4	-9.7
331	UMHMNP125127573	-8.3	-9.9	383	UMHMNP144686420	-9.7	-9.8	435	UMHMNP85733739	-8.4	-9.7
332	UMHMNP134887277	-9.8	-9.9	384	UMHMNP151890834	-8.5	-9.8	436	UMHMNP102607761	-9.6	-9.7
333	UMHMNP140389497	-8.4	-9.9	385	UMHMNP155656023	-8.9	-9.8	437	UMHMNP142780436	-8.9	-9.7
334	UMHMNP214483155	-8.7	-9.9	386	UMHMNP179523387	-8.6	-9.8	438	UMHMNP149378563	-9.0	-9.7
335	UMHMNP24778516	-9.7	-9.9	387	UMHMNP2364230	-9.7	-9.8	439	UMHMNP186593862	-8.4	-9.7
336	UMHMNP32450252	-8.7	-9.9	388	UMHMNP4736565	-8.7	-9.8	440	UMHMNP20780410	-8.0	-9.7
337	UMHMNP76758219	-9.7	-9.9	389	UMHMNP55544359	-8.5	-9.8	441	UMHMNP229956472	-9.5	-9.7
338	UMHMNP851610861	-9.7	-9.9	390	UMHMNP80388507	-8.2	-9.8	442	UMHMNP63121062	-9.5	-9.7
339	UMHMNP121714747	-9.5	-9.9	391	UMHMNP858950557	-9.8	-9.8	443	UMHMNP693790737	-9.7	-9.7
340	UMHMNP124561202	-9.3	-9.9	392	UMHMNP196500762	-9.3	-9.8	444	UMHMNP82154210	-9.7	-9.7
341	UMHMNP162232395	-8.2	-9.9	393	UMHMNP19716268	-8.1	-9.8	445	UMHMNP88147197	-8.5	-9.7
342	UMHMNP233607722	-9.9	-9.9	394	UMHMNP37976888	-9.1	-9.8	446	UMHMNP105969640	-8.2	-9.7
343	UMHMNP383859607	-8.1	-9.9	395	UMHMNP473030	-8.6	-9.8	447	UMHMNP200625269	-8.6	-9.7
344	UMHMNP640734878	-9.1	-9.9	396	UMHMNP50909858	-9.9	-9.8	448	UMHMNP264624422	-9.4	-9.7
345	UMHMNP90195418	-8.4	-9.9	397	UMHMNP78183296	-9.7	-9.8	449	UMHMNP71242494	-8.4	-9.7
346	UMHMNP135340000	-9.9	-9.9	398	UMHMNP85617750	-8.9	-9.8	450	UMHMNP85733784	-9.7	-9.7
347	UMHMNP171090792	-8.3	-9.9	399	UMHMNP862587186	-9.0	-9.8	451	UMHMNP863919179	-9.3	-9.7
348	UMHMNP264624400	-9.0	-9.9	400	UMHMNP866025630	-8.1	-9.8	452	UMHMNP97888158	-8.7	-9.7
349	UMHMNP306971120	-8.7	-9.9	401	UMHMNP117417626	-9.8	-9.8	453	UMHMNP115982202	-8.7	-9.7
350	UMHMNP847605769	-9.8	-9.9	402	UMHMNP14908168	-8.9	-9.8	454	UMHMNP131487019	-9.1	-9.7
351	UMHMNP886851269	-8.3	-9.9	403	UMHMNP160666546	-9.5	-9.8	455	UMHMNP141754576	-8.8	-9.7
352	UMHMNP89495476	-9.6	-9.9	404	UMHMNP172854772	-8.2	-9.8	456	UMHMNP149415769	-8.4	-9.7
353	UMHMNP114820290	-8.5	-9.8	405	UMHMNP4680379	-8.8	-9.8	457	UMHMNP197381605	-8.8	-9.7
354	UMHMNP150627364	-8.5	-9.8	406	UMHMNP53296665	-9.6	-9.8	458	UMHMNP21371718	-8.7	-9.7
355	UMHMNP151606405	-9.4	-9.8	407	UMHMNP81387839	-9.8	-9.8	459	UMHMNP219832356	-9.7	-9.7
356	UMHMNP224784489	-9.7	-9.8	408	UMHMNP83115484	-9.3	-9.8	460	UMHMNP221169739	-8.8	-9.7
357	UMHMNP55945749	-8.9	-9.8	409	UMHMNP121994512	-8.8	-9.8	461	UMHMNP34751252	-8.2	-9.7
358	UMHMNP56121427	-8.5	-9.8	410	UMHMNP149260742	-9.0	-9.8	462	UMHMNP75917894	-9.6	-9.7
359	UMHMNP73622238	-9.6	-9.8	411	UMHMNP157459240	-8.6	-9.8	463	UMHMNP10530554	-9.7	-9.7
360	UMHMNP76758208	-9.6	-9.8	412	UMHMNP161776767	-9.3	-9.8	464	UMHMNP131711369	-9.7	-9.7
361	UMHMNP78094005	-8.8	-9.8	413	UMHMNP607388874	-8.7	-9.8	465	UMHMNP151606245	-9.3	-9.7
362	UMHMNP858950466	-9.8	-9.8	414	UMHMNP648428324	-9.5	-9.8	466	UMHMNP160666524	-8.1	-9.7
363	UMHMNP108868957	-8.8	-9.8	415	UMHMNP7273349	-9.4	-9.8	467	UMHMNP194148997	-8.8	-9.7

Table S1. Continued.

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)	
		Fast	Mod.			Fast	Mod.			Fast	Mod.
468	UMHMNP223271770	-9.3	-9.7	520	UMHMNP169387728	-9.6	-9.6	572	UMHMNP232585158	-8.4	-9.6
469	UMHMNP478364180	-9.6	-9.7	521	UMHMNP204716041	-8.3	-9.6	573	UMHMNP368421356	-9.3	-9.6
470	UMHMNP59048872	-9.1	-9.7	522	UMHMNP290353683	-10.3	-9.6	574	UMHMNP433717385	-8.2	-9.6
471	UMHMNP85748125	-9.5	-9.7	523	UMHMNP459832678	-8.1	-9.6	575	UMHMNP477885384	-9.2	-9.6
472	UMHMNP114550753	-8.6	-9.7	524	UMHMNP474679	-9.2	-9.6	576	UMHMNP96603020	-9.5	-9.6
473	UMHMNP114820278	-9.4	-9.7	525	UMHMNP567726	-9.1	-9.6	577	UMHMNP109152398	-9.0	-9.6
474	UMHMNP171784091	-9.5	-9.7	526	UMHMNP61947942	-8.5	-9.6	578	UMHMNP121714769	-8.7	-9.6
475	UMHMNP287965280	-8.9	-9.7	527	UMHMNP78285866	-9.2	-9.6	579	UMHMNP452934951	-8.9	-9.6
476	UMHMNP681240608	-9.2	-9.7	528	UMHMNP83454	-9.4	-9.6	580	UMHMNP55309687	-8.1	-9.6
477	UMHMNP134981785	-9.6	-9.7	529	UMHMNP86105648	-9.5	-9.6	581	UMHMNP71947643	-8.0	-9.6
478	UMHMNP149764329	-8.5	-9.7	530	UMHMNP113597038	-9.1	-9.6	582	UMHMNP73731245	-9.4	-9.6
479	UMHMNP211239417	-8.4	-9.7	531	UMHMNP148371088	-9.6	-9.6	583	UMHMNP78370840	-8.9	-9.6
480	UMHMNP75795890	-9.7	-9.7	532	UMHMNP148717913	-9.1	-9.6	584	UMHMNP80357999	-9.2	-9.6
481	UMHMNP882524916	-9.5	-9.7	533	UMHMNP173681522	-9.4	-9.6	585	UMHMNP107168570	-9.6	-9.5
482	UMHMNP96886123	-9.4	-9.7	534	UMHMNP2643029	-8.2	-9.6	586	UMHMNP107585013	-9.5	-9.5
483	UMHMNP123158952	-8.9	-9.7	535	UMHMNP92264136	-9.1	-9.6	587	UMHMNP114820245	-9.4	-9.5
484	UMHMNP152110082	-8.5	-9.7	536	UMHMNP100942721	-9.1	-9.6	588	UMHMNP120154963	-8.6	-9.5
485	UMHMNP157459251	-9.8	-9.7	537	UMHMNP115982199	-9.4	-9.6	589	UMHMNP12903305	-8.3	-9.5
486	UMHMNP159813679	-8.2	-9.7	538	UMHMNP141344107	-8.9	-9.6	590	UMHMNP172854783	-9.2	-9.5
487	UMHMNP675106226	-9.1	-9.7	539	UMHMNP141754587	-8.2	-9.6	591	UMHMNP184584405	-9.4	-9.5
488	UMHMNP139765336	-8.8	-9.7	540	UMHMNP26040006	-9.6	-9.6	592	UMHMNP3963379	-8.3	-9.5
489	UMHMNP171864805	-9.4	-9.7	541	UMHMNP306997397	-8.8	-9.6	593	UMHMNP54602072	-9.2	-9.5
490	UMHMNP481254	-9.5	-9.7	542	UMHMNP481174	-8.8	-9.6	594	UMHMNP55688443	-9.0	-9.5
491	UMHMNP62541097	-8.1	-9.7	543	UMHMNP76376324	-9.6	-9.6	595	UMHMNP64907240	-8.2	-9.5
492	UMHMNP705279716	-9.5	-9.7	544	UMHMNP145398603	-8.9	-9.6	596	UMHMNP115982326	-8.8	-9.5
493	UMHMNP83198270	-9.6	-9.7	545	UMHMNP178200936	-8.6	-9.6	597	UMHMNP126622615	-8.7	-9.5
494	UMHMNP83681816	-9.6	-9.7	546	UMHMNP193074496	-8.1	-9.6	598	UMHMNP157521090	-8.6	-9.5
495	UMHMNP94806027	-8.8	-9.7	547	UMHMNP202855036	-8.4	-9.6	599	UMHMNP171784104	-8.5	-9.5
496	UMHMNP138530731	-9.8	-9.6	548	UMHMNP244303773	-9.4	-9.6	600	UMHMNP191112193	-9.6	-9.5
497	UMHMNP191212369	-8.6	-9.6	549	UMHMNP33168773	-8.5	-9.6	601	UMHMNP21317817	-8.5	-9.5
498	UMHMNP197381570	-9.6	-9.6	550	UMHMNP521040	-8.3	-9.6	602	UMHMNP246036862	-8.9	-9.5
499	UMHMNP221300001	-8.1	-9.6	551	UMHMNP87168330	-9.1	-9.6	603	UMHMNP393828336	-8.7	-9.5
500	UMHMNP244066055	-9.5	-9.6	552	UMHMNP97614625	-9.6	-9.6	604	UMHMNP474635	-8.9	-9.5
501	UMHMNP473739401	-9.5	-9.6	553	UMHMNP133530253	-9.4	-9.6	605	UMHMNP61586003	-8.8	-9.5
502	UMHMNP508193315	-9.4	-9.6	554	UMHMNP153444872	-9.1	-9.6	606	UMHMNP70165456	-9.5	-9.5
503	UMHMNP61897903	-9.2	-9.6	555	UMHMNP169387740	-9.6	-9.6	607	UMHMNP76836174	-10.1	-9.5
504	UMHMNP62008042	-8.2	-9.6	556	UMHMNP193008274	-9.4	-9.6	608	UMHMNP862200495	-9.2	-9.5
505	UMHMNP77715867	-9.3	-9.6	557	UMHMNP199012867	-8.1	-9.6	609	UMHMNP87532283	-9.5	-9.5
506	UMHMNP122540276	-8.1	-9.6	558	UMHMNP287964867	-8.9	-9.6	610	UMHMNP116407217	-8.4	-9.5
507	UMHMNP151890845	-8.2	-9.6	559	UMHMNP80677765	-9.1	-9.6	611	UMHMNP14729294	-9.5	-9.5
508	UMHMNP158758419	-9.0	-9.6	560	UMHMNP107168581	-8.9	-9.6	612	UMHMNP156953898	-8.8	-9.5
509	UMHMNP33646785	-9.0	-9.6	561	UMHMNP154563798	-8.1	-9.6	613	UMHMNP160014879	-9.0	-9.5
510	UMHMNP50868503	-8.4	-9.6	562	UMHMNP169565779	-9.2	-9.6	614	UMHMNP175170895	-9.5	-9.5
511	UMHMNP58497293	-9.0	-9.6	563	UMHMNP17752168	-8.4	-9.6	615	UMHMNP211555021	-8.0	-9.5
512	UMHMNP745075245	-9.5	-9.6	564	UMHMNP19383870	-8.8	-9.6	616	UMHMNP94444254	-9.4	-9.5
513	UMHMNP866403738	-9.6	-9.6	565	UMHMNP242467534	-9.6	-9.6	617	UMHMNP119108360	-9.9	-9.5
514	UMHMNP94806050	-8.8	-9.6	566	UMHMNP710324962	-9.4	-9.6	618	UMHMNP145398647	-9.0	-9.5
515	UMHMNP96313950	-9.2	-9.6	567	UMHMNP77794811	-8.3	-9.6	619	UMHMNP157207880	-8.1	-9.5
516	UMHMNP119760848	-8.4	-9.6	568	UMHMNP84873143	-8.9	-9.6	620	UMHMNP178115907	-9.5	-9.5
517	UMHMNP121819690	-8.3	-9.6	569	UMHMNP121295098	-9.7	-9.6	621	UMHMNP22350498	-9.3	-9.5
518	UMHMNP132911456	-8.3	-9.6	570	UMHMNP143545908	-9.2	-9.6	622	UMHMNP224576050	-9.4	-9.5
519	UMHMNP160014880	-9.3	-9.6	571	UMHMNP184885072	-10.9	-9.6	623	UMHMNP246037605	-9.5	-9.5

Table S1. Continued.

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)	
		Fast	Mod.			Fast	Mod.			Fast	Mod.
624	UMHMNP452082596	-9.2	-9.5	676	UMHMNP82507253	-9.4	-9.5	728	UMHMNP17696694	-9.2	-9.4
625	UMHMNP53282681	-9.7	-9.5	677	UMHMNP83511846	-9.0	-9.5	729	UMHMNP195259826	-8.3	-9.4
626	UMHMNP82507264	-8.5	-9.5	678	UMHMNP114820267	-8.7	-9.5	730	UMHMNP209167259	-8.9	-9.4
627	UMHMNP97888147	-8.8	-9.5	679	UMHMNP134128157	-10.0	-9.5	731	UMHMNP214483235	-10.0	-9.4
628	UMHMNP109152332	-9.3	-9.5	680	UMHMNP20465901	-8.3	-9.5	732	UMHMNP570898	-8.6	-9.4
629	UMHMNP15146619	-8.9	-9.5	681	UMHMNP23869161	-8.6	-9.5	733	UMHMNP94806038	-9.2	-9.4
630	UMHMNP639512199	-8.8	-9.5	682	UMHMNP243668124	-9.0	-9.5	734	UMHMNP103005205	-9.2	-9.4
631	UMHMNP66082288	-9.5	-9.5	683	UMHMNP26808275	-8.8	-9.5	735	UMHMNP141266060	-8.4	-9.4
632	UMHMNP79703256	-8.5	-9.5	684	UMHMNP58701705	-8.2	-9.5	736	UMHMNP145176858	-9.1	-9.4
633	UMHMNP864514590	-9.5	-9.5	685	UMHMNP61737971	-9.3	-9.5	737	UMHMNP193008263	-8.9	-9.4
634	UMHMNP108675634	-8.0	-9.5	686	UMHMNP76343947	-9.4	-9.5	738	UMHMNP39832310	-9.0	-9.4
635	UMHMNP125282135	-9.8	-9.5	687	UMHMNP80525491	-9.4	-9.5	739	UMHMNP63109171	-9.3	-9.4
636	UMHMNP129829909	-8.2	-9.5	688	UMHMNP81387840	-9.4	-9.5	740	UMHMNP81262966	-9.9	-9.4
637	UMHMNP160632280	-8.2	-9.5	689	UMHMNP85748136	-9.2	-9.5	741	UMHMNP861676575	-9.4	-9.4
638	UMHMNP183593706	-8.8	-9.5	690	UMHMNP149064346	-9.5	-9.4	742	UMHMNP87697992	-8.9	-9.4
639	UMHMNP226716945	-8.4	-9.5	691	UMHMNP150417677	-8.3	-9.4	743	UMHMNP110189065	-8.2	-9.4
640	UMHMNP272458318	-8.6	-9.5	692	UMHMNP172173987	-8.4	-9.4	744	UMHMNP114820256	-9.5	-9.4
641	UMHMNP298196744	-9.8	-9.5	693	UMHMNP180603672	-9.3	-9.4	745	UMHMNP114836872	-8.6	-9.4
642	UMHMNP321847103	-8.2	-9.5	694	UMHMNP196500773	-9.4	-9.4	746	UMHMNP132922873	-9.3	-9.4
643	UMHMNP80358005	-9.2	-9.5	695	UMHMNP264254866	-9.5	-9.4	747	UMHMNP133562524	-8.4	-9.4
644	UMHMNP81306583	-8.5	-9.5	696	UMHMNP41083970	-8.3	-9.4	748	UMHMNP157758742	-10.4	-9.4
645	UMHMNP185331957	-8.7	-9.5	697	UMHMNP76758184	-8.6	-9.4	749	UMHMNP175861800	-9.3	-9.4
646	UMHMNP313042	-8.7	-9.5	698	UMHMNP771534384	-9.4	-9.4	750	UMHMNP189457269	-8.9	-9.4
647	UMHMNP37299084	-8.3	-9.5	699	UMHMNP78418458	-9.0	-9.4	751	UMHMNP34427639	-8.6	-9.4
648	UMHMNP516370	-9.1	-9.5	700	UMHMNP105418777	-9.4	-9.4	752	UMHMNP74799556	-9.4	-9.4
649	UMHMNP52645097	-8.1	-9.5	701	UMHMNP134887255	-8.1	-9.4	753	UMHMNP76898481	-9.2	-9.4
650	UMHMNP57830	-10.0	-9.5	702	UMHMNP168482346	-8.4	-9.4	754	UMHMNP80981664	-9.2	-9.4
651	UMHMNP59176624	-8.8	-9.5	703	UMHMNP215245264	-9.0	-9.4	755	UMHMNP82637056	-9.3	-9.4
652	UMHMNP745075267	-9.4	-9.5	704	UMHMNP337379198	-9.0	-9.4	756	UMHMNP84582627	-9.5	-9.4
653	UMHMNP89411314	-9.5	-9.5	705	UMHMNP55688501	-8.8	-9.4	757	UMHMNP88191064	-9.4	-9.4
654	UMHMNP144398550	-9.5	-9.5	706	UMHMNP651489	-9.4	-9.4	758	UMHMNP103190143	-9.7	-9.4
655	UMHMNP181306741	-8.5	-9.5	707	UMHMNP681240631	-9.1	-9.4	759	UMHMNP114820303	-8.9	-9.4
656	UMHMNP2061645	-8.4	-9.5	708	UMHMNP81275823	-9.4	-9.4	760	UMHMNP134985072	-9.4	-9.4
657	UMHMNP221169751	-10.0	-9.5	709	UMHMNP124596607	-9.0	-9.4	761	UMHMNP140429374	-9.7	-9.4
658	UMHMNP287964856	-9.6	-9.5	710	UMHMNP145038579	-9.4	-9.4	762	UMHMNP144436077	-10.0	-9.4
659	UMHMNP517900582	-9.1	-9.5	711	UMHMNP174286227	-8.5	-9.4	763	UMHMNP194148975	-9.6	-9.4
660	UMHMNP5813650	-8.4	-9.5	712	UMHMNP179936528	-8.2	-9.4	764	UMHMNP53755092	-9.2	-9.4
661	UMHMNP65717886	-8.1	-9.5	713	UMHMNP264624444	-8.4	-9.4	765	UMHMNP77643244	-8.6	-9.4
662	UMHMNP75266250	-9.5	-9.5	714	UMHMNP51630581	-9.0	-9.4	766	UMHMNP78342377	-8.1	-9.4
663	UMHMNP86690144	-9.5	-9.5	715	UMHMNP61973408	-9.5	-9.4	767	UMHMNP83487	-8.8	-9.4
664	UMHMNP86748303	-9.2	-9.5	716	UMHMNP63635438	-9.6	-9.4	768	UMHMNP132214245	-8.3	-9.4
665	UMHMNP102054488	-8.9	-9.5	717	UMHMNP674819466	-9.4	-9.4	769	UMHMNP151484707	-10.9	-9.4
666	UMHMNP119539752	-9.6	-9.5	718	UMHMNP78342402	-8.4	-9.4	770	UMHMNP155645515	-8.4	-9.4
667	UMHMNP133883177	-9.2	-9.5	719	UMHMNP798557989	-9.0	-9.4	771	UMHMNP169564969	-9.0	-9.4
668	UMHMNP135340011	-9.5	-9.5	720	UMHMNP80525479	-9.2	-9.4	772	UMHMNP171440247	-8.4	-9.4
669	UMHMNP143458757	-8.9	-9.5	721	UMHMNP81120743	-9.3	-9.4	773	UMHMNP180633550	-8.1	-9.4
670	UMHMNP144587553	-8.7	-9.5	722	UMHMNP114820289	-10.3	-9.4	774	UMHMNP181034935	-8.4	-9.4
671	UMHMNP158402610	-8.4	-9.5	723	UMHMNP121449943	-8.9	-9.4	775	UMHMNP107900754	-9.4	-9.4
672	UMHMNP165815827	-8.6	-9.5	724	UMHMNP143049154	-9.6	-9.4	776	UMHMNP126596029	-8.2	-9.4
673	UMHMNP681240620	-9.0	-9.5	725	UMHMNP14958668	-9.2	-9.4	777	UMHMNP16826418	-8.3	-9.4
674	UMHMNP72542495	-8.4	-9.5	726	UMHMNP152247944	-9.7	-9.4	778	UMHMNP171114071	-8.8	-9.4
675	UMHMNP75886123	-9.1	-9.5	727	UMHMNP173220978	-8.6	-9.4	779	UMHMNP70214925	-9.4	-9.4

Table S1. Continued.

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)	
		Fast	Mod.			Fast	Mod.			Fast	Mod.
780	UMHMNP71678030	-9.3	-9.4	835	UMHMNP152845755	-10.3	-9.3	890	UMHMNP86105659	-8.9	-9.3
781	UMHMNP745075278	-9.4	-9.4	836	UMHMNP153415351	-8.7	-9.3	891	UMHMNP97719783	-9.1	-9.3
782	UMHMNP78355289	-8.9	-9.4	837	UMHMNP158149543	-8.6	-9.3	892	UMHMNP112515432	-9.1	-9.3
783	UMHMNP1174921	-8.3	-9.4	838	UMHMNP199600378	-8.4	-9.3	893	UMHMNP119212281	-8.2	-9.3
784	UMHMNP13963138	-9.3	-9.4	839	UMHMNP223596723	-9.3	-9.3	894	UMHMNP137350948	-8.6	-9.3
785	UMHMNP173681533	-8.9	-9.4	840	UMHMNP614748628	-8.3	-9.3	895	UMHMNP175992980	-9.2	-9.3
786	UMHMNP433717534	-8.7	-9.4	841	UMHMNP75373625	-9.1	-9.3	896	UMHMNP191789783	-8.3	-9.3
787	UMHMNP65773980	-9.3	-9.4	842	UMHMNP83728818	-8.8	-9.3	897	UMHMNP306967759	-9.2	-9.3
788	UMHMNP67314152	-8.9	-9.4	843	UMHMNP85198216	-9.1	-9.3	898	UMHMNP306997422	-8.8	-9.3
789	UMHMNP70022718	-10.0	-9.4	844	UMHMNP86748278	-9.1	-9.3	899	UMHMNP31893353	-9.4	-9.3
790	UMHMNP77983267	-8.8	-9.4	845	UMHMNP93426927	-9.1	-9.3	900	UMHMNP54448725	-8.9	-9.3
791	UMHMNP78285855	-8.6	-9.4	846	UMHMNP136685295	-9.6	-9.3	901	UMHMNP54602141	-8.2	-9.3
792	UMHMNP882693461	-8.1	-9.4	847	UMHMNP143016868	-8.3	-9.3	902	UMHMNP71932064	-9.2	-9.3
793	UMHMNP109152343	-8.5	-9.3	848	UMHMNP146506414	-8.3	-9.3	903	UMHMNP78518748	-9.2	-9.3
794	UMHMNP196500808	-8.7	-9.3	849	UMHMNP37976899	-8.2	-9.3	904	UMHMNP81853830	-8.8	-9.3
795	UMHMNP199600345	-9.1	-9.3	850	UMHMNP99165169	-8.3	-9.3	905	UMHMNP116747401	-9.8	-9.3
796	UMHMNP286433805	-8.7	-9.3	851	UMHMNP155850887	-8.5	-9.3	906	UMHMNP156352657	-8.3	-9.3
797	UMHMNP81657796	-8.7	-9.3	852	UMHMNP158734248	-9.1	-9.3	907	UMHMNP164081009	-8.6	-9.3
798	UMHMNP862288902	-9.3	-9.3	853	UMHMNP169387773	-9.3	-9.3	908	UMHMNP189818493	-8.1	-9.3
799	UMHMNP100667752	-9.4	-9.3	854	UMHMNP179733143	-9.3	-9.3	909	UMHMNP283605458	-9.4	-9.3
800	UMHMNP121819714	-8.4	-9.3	855	UMHMNP260436291	-10.4	-9.3	910	UMHMNP32450263	-9.3	-9.3
801	UMHMNP121825443	-8.1	-9.3	856	UMHMNP263764018	-8.3	-9.3	911	UMHMNP471534	-8.5	-9.3
802	UMHMNP143682171	-9.3	-9.3	857	UMHMNP37772035	-9.3	-9.3	912	UMHMNP60048900	-8.2	-9.3
803	UMHMNP221160845	-9.6	-9.3	858	UMHMNP41083903	-9.2	-9.3	913	UMHMNP601570	-8.1	-9.3
804	UMHMNP250147194	-9.2	-9.3	859	UMHMNP452082609	-9.0	-9.3	914	UMHMNP71885206	-8.2	-9.3
805	UMHMNP38636496	-8.6	-9.3	860	UMHMNP57885	-10.1	-9.3	915	UMHMNP93426916	-9.5	-9.3
806	UMHMNP448264651	-8.6	-9.3	861	UMHMNP69672680	-9.3	-9.3	917	UMHMNP112515443	-8.8	-9.3
807	UMHMNP636599901	-9.3	-9.3	862	UMHMNP749867230	-9.2	-9.3	918	UMHMNP129620253	-8.6	-9.3
808	UMHMNP675106204	-8.5	-9.3	863	UMHMNP85748147	-9.6	-9.3	919	UMHMNP132410356	-8.7	-9.3
809	UMHMNP75479117	-8.8	-9.3	864	UMHMNP90352208	-8.9	-9.3	920	UMHMNP133883213	-8.3	-9.3
810	UMHMNP81657398	-9.2	-9.3	865	UMHMNP112781234	-8.8	-9.3	921	UMHMNP141859974	-9.8	-9.3
811	UMHMNP148270160	-8.1	-9.3	866	UMHMNP112923407	-9.3	-9.3	922	UMHMNP1452295	-8.1	-9.3
812	UMHMNP155944266	-8.1	-9.3	867	UMHMNP124596629	-8.1	-9.3	923	UMHMNP211358713	-9.1	-9.3
813	UMHMNP174796782	-9.4	-9.3	868	UMHMNP132214234	-8.9	-9.3	924	UMHMNP39832309	-8.6	-9.3
814	UMHMNP183381068	-8.7	-9.3	869	UMHMNP132750482	-8.3	-9.3	925	UMHMNP40772121	-8.7	-9.3
815	UMHMNP188968447	-10.0	-9.3	870	UMHMNP160014868	-8.2	-9.3	926	UMHMNP495380477	-8.5	-9.3
816	UMHMNP395070889	-8.3	-9.3	871	UMHMNP179730360	-9.1	-9.3	927	UMHMNP73538575	-8.2	-9.3
817	UMHMNP74055428	-8.3	-9.3	872	UMHMNP247145397	-8.1	-9.3	928	UMHMNP749216464	-8.5	-9.3
818	UMHMNP85505664	-9.2	-9.3	873	UMHMNP26531715	-8.1	-9.3	929	UMHMNP874221893	-8.4	-9.3
819	UMHMNP86105682	-9.2	-9.3	864	UMHMNP90352208	-8.9	-9.3	930	UMHMNP145038580	-9.0	-9.3
820	UMHMNP94354980	-9.3	-9.3	865	UMHMNP112781234	-8.8	-9.3	931	UMHMNP16408102	-9.1	-9.3
821	UMHMNP107551746	-9.3	-9.3	866	UMHMNP112923407	-9.3	-9.3	932	UMHMNP166038284	-8.4	-9.3
822	UMHMNP109979171	-9.3	-9.3	867	UMHMNP124596629	-8.1	-9.3	933	UMHMNP186803327	-8.2	-9.3
823	UMHMNP147391819	-9.2	-9.3	868	UMHMNP132214234	-8.9	-9.3	934	UMHMNP20817929	-8.7	-9.3
824	UMHMNP156472898	-8.8	-9.3	869	UMHMNP132750482	-8.3	-9.3	935	UMHMNP263764041	-9.6	-9.3
825	UMHMNP161776756	-8.7	-9.3	870	UMHMNP160014868	-8.2	-9.3	936	UMHMNP474577	-8.2	-9.3
826	UMHMNP17991672	-9.3	-9.3	871	UMHMNP179730360	-9.1	-9.3	937	UMHMNP566916	-9.1	-9.3
827	UMHMNP2465114	-9.2	-9.3	872	UMHMNP247145397	-8.1	-9.3	938	UMHMNP64180718	-8.1	-9.3
828	UMHMNP735278270	-9.1	-9.3	873	UMHMNP26531715	-8.1	-9.3	939	UMHMNP68520263	-8.2	-9.3
829	UMHMNP782491785	-9.1	-9.3	884	UMHMNP268735575	-9.9	-9.3	940	UMHMNP72534135	-9.6	-9.3
830	UMHMNP106534434	-9.0	-9.3	885	UMHMNP306967760	-8.5	-9.3	941	UMHMNP91297073	-8.8	-9.3
831	UMHMNP117417717	-9.5	-9.3	886	UMHMNP67463790	-8.6	-9.3	942	UMHMNP95062296	-8.4	-9.3
832	UMHMNP1242019	-8.1	-9.3	887	UMHMNP69511202	-9.0	-9.3	943	UMHMNP100994556	-9.0	-9.3
833	UMHMNP14231335	-9.0	-9.3	888	UMHMNP81575066	-8.4	-9.3	944	UMHMNP124843681	-8.2	-9.3
834	UMHMNP144436066	-8.8	-9.3	889	UMHMNP858950386	-9.2	-9.3	945	UMHMNP130246989	-8.2	-9.3

Table S1. Continued.

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)	
		Fast	Mod.			Fast	Mod.			Fast	Mod.
946	UMHMNP134458007	-9.0	-9.3	1001	UMHMNP333970131	-8.5	-9.3	1056	UMHMNP116972920	-9.5	-9.3
947	UMHMNP137570435	-8.5	-9.3	1002	UMHMNP452929645	-9.8	-9.3	1057	UMHMNP128802175	-8.7	-9.3
948	UMHMNP140866202	-8.7	-9.3	1003	UMHMNP461441429	-9.2	-9.3	1058	UMHMNP142780367	-9.6	-9.3
949	UMHMNP145212391	-10.7	-9.3	1004	UMHMNP478364226	-10.1	-9.3	1059	UMHMNP517900559	-9.8	-9.3
950	UMHMNP162290417	-8.5	-9.3	1005	UMHMNP50335041	-9.1	-9.3	1060	UMHMNP52043013	-8.1	-9.3
951	UMHMNP175669100	-8.6	-9.3	1006	UMHMNP771534373	-8.6	-9.3	1061	UMHMNP6035627	-8.2	-9.3
952	UMHMNP216770295	-10.0	-9.3	1007	UMHMNP99617397	-8.8	-9.3	1062	UMHMNP67230062	-9.2	-9.3
953	UMHMNP62996741	-8.7	-9.3	1008	UMHMNP116302353	-8.2	-9.3	1063	UMHMNP10525221	-9.7	-9.3
954	UMHMNP75246763	-8.2	-9.3	1009	UMHMNP121727273	-8.6	-9.3	1064	UMHMNP1159279	-8.6	-9.3
955	UMHMNP85733773	-8.5	-9.3	1010	UMHMNP142677121	-8.5	-9.3	1065	UMHMNP143007287	-8.9	-9.3
956	UMHMNP93474136	-8.5	-9.3	1011	UMHMNP174063811	-8.4	-9.3	1066	UMHMNP152833608	-8.8	-9.3
957	UMHMNP984849	-8.8	-9.3	1012	UMHMNP24662951	-8.1	-9.3	1067	UMHMNP161776734	-8.9	-9.3
958	UMHMNP106199819	-10.0	-9.3	1013	UMHMNP64687850	-9.0	-9.3	1068	UMHMNP178179992	-8.1	-9.3
959	UMHMNP112693240	-8.1	-9.3	1014	UMHMNP71031588	-9.1	-9.3	1069	UMHMNP17974786	-8.5	-9.3
960	UMHMNP116169290	-8.2	-9.3	1015	UMHMNP73723383	-9.1	-9.3	1070	UMHMNP225662099	-10.0	-9.3
961	UMHMNP133883202	-9.9	-9.3	1016	UMHMNP81474615	-9.3	-9.3	1071	UMHMNP326794176	-8.8	-9.3
962	UMHMNP144335148	-8.3	-9.3	1017	UMHMNP85337151	-10.0	-9.3	1072	UMHMNP55081395	-10.5	-9.3
963	UMHMNP148010406	-8.1	-9.3	1018	UMHMNP862200473	-10.8	-9.3	1073	UMHMNP58560375	-8.2	-9.3
964	UMHMNP1491776	-8.2	-9.3	1019	UMHMNP128855072	-8.8	-9.3	1074	UMHMNP62861158	-9.5	-9.3
965	UMHMNP157403333	-8.4	-9.3	1020	UMHMNP14599485	-8.7	-9.3	1075	UMHMNP68690926	-10.7	-9.3
966	UMHMNP189514485	-8.1	-9.3	1021	UMHMNP16250616	-8.6	-9.3	1076	UMHMNP69297490	-9.1	-9.3
967	UMHMNP24041665	-9.2	-9.3	1022	UMHMNP175413215	-8.2	-9.3	1077	UMHMNP79580282	-9.3	-9.3
968	UMHMNP487016966	-8.9	-9.3	1023	UMHMNP224577382	-9.8	-9.3	1078	UMHMNP98495364	-9.3	-9.3
969	UMHMNP50611864	-8.7	-9.3	1024	UMHMNP3404226	-9.2	-9.3	1079	UMHMNP99499817	-9.3	-9.3
970	UMHMNP57103216	-9.0	-9.3	1025	UMHMNP52936693	-8.4	-9.3	1080	UMHMNP135729452	-8.5	-9.3
971	UMHMNP690253771	-8.1	-9.3	1026	UMHMNP73700295	-8.2	-9.3	1081	UMHMNP139765290	-8.9	-9.3
972	UMHMNP871483351	-8.1	-9.3	1027	UMHMNP81387851	-9.9	-9.3	1082	UMHMNP143049132	-10.5	-9.3
973	UMHMNP104720152	-8.7	-9.3	1028	UMHMNP850145129	-8.4	-9.3	1083	UMHMNP143049143	-8.4	-9.3
974	UMHMNP14956242	-9.4	-9.3	1029	UMHMNP87307286	-9.1	-9.3	1084	UMHMNP156310188	-8.3	-9.3
975	UMHMNP214483199	-8.2	-9.3	1030	UMHMNP96253600	-8.8	-9.3	1085	UMHMNP175702360	-9.0	-9.3
976	UMHMNP517900515	-9.7	-9.3	1031	UMHMNP102054524	-9.3	-9.3	1086	UMHMNP178494821	-9.3	-9.3
977	UMHMNP549520743	-8.3	-9.3	1032	UMHMNP117675135	-8.7	-9.3	1087	UMHMNP184430011	-9.2	-9.3
978	UMHMNP87859981	-9.2	-9.3	1033	UMHMNP141321133	-8.7	-9.3	1088	UMHMNP38819442	-8.3	-9.3
979	UMHMNP139765303	-8.3	-9.3	1034	UMHMNP141859985	-9.5	-9.3	1089	UMHMNP54622514	-8.5	-9.3
980	UMHMNP149260731	-10.2	-9.3	1035	UMHMNP145349946	-9.0	-9.3	1090	UMHMNP99617433	-9.3	-9.3
981	UMHMNP149260753	-9.4	-9.3	1036	UMHMNP158786755	-9.3	-9.3	1091	UMHMNP117021064	-9.4	-9.3
982	UMHMNP22850119	-8.5	-9.3	1037	UMHMNP178064410	-9.3	-9.3	1092	UMHMNP124727077	-8.3	-9.3
983	UMHMNP237755167	-9.4	-9.3	1038	UMHMNP517900504	-9.2	-9.3	1093	UMHMNP132194322	-9.1	-9.1
984	UMHMNP264618215	-8.3	-9.3	1039	UMHMNP518069	-8.3	-9.3	1094	UMHMNP141854695	-8.2	-9.1
985	UMHMNP38788817	-9.2	-9.3	1040	UMHMNP681226415	-9.7	-9.3	1095	UMHMNP158734271	-8.3	-9.1
986	UMHMNP425368598	-9.0	-9.3	1041	UMHMNP745075256	-8.5	-9.3	1096	UMHMNP171784013	-8.6	-9.1
987	UMHMNP446862697	-8.6	-9.3	1042	UMHMNP80525480	-8.3	-9.3	1097	UMHMNP215245286	-9.6	-9.1
988	UMHMNP454476892	-8.7	-9.3	1043	UMHMNP126394749	-10.4	-9.3	1098	UMHMNP473256223	-8.8	-9.1
989	UMHMNP489446573	-9.1	-9.3	1044	UMHMNP133883199	-9.5	-9.3	1099	UMHMNP479067624	-9.4	-9.1
990	UMHMNP781646819	-8.4	-9.3	1045	UMHMNP143049121	-8.2	-9.3	1100	UMHMNP64997520	-8.9	-9.1
991	UMHMNP863684417	-9.8	-9.3	1046	UMHMNP147362398	-8.6	-9.3	1101	UMHMNP70329258	-8.1	-9.1
992	UMHMNP132938126	-8.3	-9.3	1047	UMHMNP156472887	-11.4	-9.3	1102	UMHMNP724462480	-8.2	-9.1
993	UMHMNP147395093	-8.1	-9.3	1048	UMHMNP199600367	-8.4	-9.3	1103	UMHMNP865308607	-9.9	-9.1
994	UMHMNP147641723	-9.1	-9.3	1049	UMHMNP2243096	-8.1	-9.3	1104	UMHMNP105369899	-8.4	-9.1
995	UMHMNP158822765	-8.5	-9.3	1050	UMHMNP31220447	-8.5	-9.3	1105	UMHMNP117857724	-8.9	-9.1
996	UMHMNP163318783	-8.8	-9.3	1051	UMHMNP494862714	-9.9	-9.3	1106	UMHMNP151890823	-10.3	-9.1
997	UMHMNP17181883	-8.1	-9.3	1052	UMHMNP516858	-9.3	-9.3	1107	UMHMNP153698909	-8.3	-9.1
998	UMHMNP188112825	-8.1	-9.3	1053	UMHMNP74799590	-8.3	-9.3	1108	UMHMNP169217452	-8.8	-9.1
999	UMHMNP209408720	-8.1	-9.3	1054	UMHMNP876756557	-8.9	-9.3	1109	UMHMNP2034722	-8.7	-9.1
1000	UMHMNP209408764	-8.7	-9.3	1055	UMHMNP115193152	-9.6	-9.3	1110	UMHMNP2259907	-9.5	-9.1

Table S1. Continued.

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)	
		Fast	Mod.			Fast	Mod.			Fast	Mod.
1111	UMHMNP24041676	-8.9	-9.1	1166	UMHMNP16910320	-9.3	-9.0	1221	UMHMNP694436618	-8.4	-9.0
1112	UMHMNP39533738	-8.8	-9.1	1167	UMHMNP171114059	-9.1	-9.0	1222	UMHMNP80388461	-8.4	-9.0
1113	UMHMNP58514322	-9.8	-9.1	1168	UMHMNP175861822	-8.7	-9.0	1223	UMHMNP876756502	-9.6	-9.0
1114	UMHMNP87164338	-8.3	-9.1	1169	UMHMNP208708230	-8.1	-9.0	1224	UMHMNP115439617	-8.7	-9.0
1115	UMHMNP882400853	-8.3	-9.1	1170	UMHMNP39025279	-8.7	-9.0	1225	UMHMNP12626185	-9.5	-9.0
1116	UMHMNP90195441	-8.5	-9.1	1171	UMHMNP446862722	-8.7	-9.0	1226	UMHMNP140384709	-9.0	-9.0
1117	UMHMNP102054499	-8.5	-9.1	1172	UMHMNP4598678	-9.7	-9.0	1227	UMHMNP143682182	-9.7	-9.0
1118	UMHMNP107551757	-8.4	-9.1	1173	UMHMNP51529125	-8.6	-9.0	1228	UMHMNP149355760	-10.3	-9.0
1119	UMHMNP1106134	-8.2	-9.1	1174	UMHMNP64285854	-8.5	-9.0	1229	UMHMNP162830253	-8.9	-9.0
1120	UMHMNP116302284	-10.4	-9.1	1175	UMHMNP72154337	-8.1	-9.0	1230	UMHMNP175673582	-8.3	-9.0
1121	UMHMNP122540312	-8.7	-9.1	1176	UMHMNP81624035	-9.6	-9.0	1231	UMHMNP209169584	-8.7	-9.0
1122	UMHMNP15313696	-10.9	-9.1	1177	UMHMNP83465	-8.2	-9.0	1232	UMHMNP55688454	-8.4	-9.0
1123	UMHMNP171114093	-9.2	-9.1	1178	UMHMNP85443374	-8.3	-9.0	1233	UMHMNP6758710	-9.6	-9.0
1124	UMHMNP298196733	-8.2	-9.1	1179	UMHMNP89837978	-8.8	-9.0	1234	UMHMNP71801495	-9.1	-9.0
1125	UMHMNP744253483	-9.1	-9.1	1180	UMHMNP128629378	-10.5	-9.0	1235	UMHMNP848132354	-8.2	-9.0
1126	UMHMNP848132376	-8.2	-9.1	1181	UMHMNP129620231	-8.2	-9.0	1236	UMHMNP862522	-9.9	-9.0
1127	UMHMNP88840000	-8.1	-9.1	1182	UMHMNP139765358	-8.4	-9.0	1237	UMHMNP117675168	-9.2	-9.0
1128	UMHMNP96853155	-8.6	-9.1	1183	UMHMNP163136058	-8.6	-9.0	1238	UMHMNP123062431	-8.1	-9.0
1129	UMHMNP1211135000	-9.4	-9.1	1184	UMHMNP175861855	-8.2	-9.0	1239	UMHMNP123165797	-8.4	-9.0
1130	UMHMNP123086817	-8.4	-9.1	1185	UMHMNP238758424	-8.9	-9.0	1240	UMHMNP18499859	-8.3	-9.0
1131	UMHMNP133401113	-8.8	-9.1	1186	UMHMNP250141641	-8.1	-9.0	1241	UMHMNP260390781	-8.6	-9.0
1132	UMHMNP165606699	-8.2	-9.1	1187	UMHMNP395070903	-9.9	-9.0	1242	UMHMNP263764052	-8.6	-9.0
1133	UMHMNP185331935	-8.6	-9.1	1188	UMHMNP425368623	-8.8	-9.0	1243	UMHMNP264624411	-8.1	-9.0
1134	UMHMNP188111695	-8.5	-9.1	1189	UMHMNP52936706	-8.7	-9.0	1244	UMHMNP29560267	-9.3	-9.0
1135	UMHMNP260062882	-8.2	-9.1	1190	UMHMNP54278896	-9.5	-9.0	1245	UMHMNP71486049	-9.6	-9.0
1136	UMHMNP33886747	-8.6	-9.1	1191	UMHMNP63015907	-8.5	-9.0	1246	UMHMNP77965812	-8.3	-9.0
1137	UMHMNP495380488	-8.4	-9.1	1192	UMHMNP815586471	-9.6	-9.0	1247	UMHMNP124609387	-9.4	-9.0
1138	UMHMNP516552	-8.1	-9.1	1193	UMHMNP85066780	-8.6	-9.0	1248	UMHMNP133206390	-8.4	-9.0
1139	UMHMNP516790	-9.0	-9.1	1194	UMHMNP85733717	-8.8	-9.0	1249	UMHMNP142508063	-8.1	-9.0
1140	UMHMNP55051780	-9.2	-9.1	1195	UMHMNP96736311	-9.0	-9.0	1250	UMHMNP159934142	-8.5	-9.0
1141	UMHMNP69672704	-8.4	-9.1	1196	UMHMNP134985083	-8.6	-9.0	1251	UMHMNP172173998	-8.5	-9.0
1142	UMHMNP70214992	-9.9	-9.1	1197	UMHMNP145403254	-8.3	-9.0	1252	UMHMNP200860895	-8.8	-9.0
1143	UMHMNP70406_p0	-10.2	-9.1	1198	UMHMNP146556287	-9.0	-9.0	1253	UMHMNP213547252	-8.2	-9.0
1144	UMHMNP80981631	-8.6	-9.1	1199	UMHMNP155233311	-9.1	-9.0	1254	UMHMNP246037854	-8.7	-9.0
1145	UMHMNP815586493	-9.4	-9.1	1200	UMHMNP160098920	-9.4	-9.0	1255	UMHMNP246037898	-8.7	-9.0
1146	UMHMNP85337128	-9.2	-9.1	1201	UMHMNP175861797	-9.2	-9.0	1256	UMHMNP287965202	-8.5	-9.0
1147	UMHMNP85733808	-8.2	-9.1	1202	UMHMNP175861877	-8.4	-9.0	1257	UMHMNP521039	-9.3	-9.0
1148	UMHMNP99631217	-8.8	-9.1	1203	UMHMNP1981904	-8.9	-9.0	1258	UMHMNP58115314	-9.7	-9.0
1149	UMHMNP117694969	-9.9	-9.1	1204	UMHMNP200497047	-8.5	-9.0	1259	UMHMNP61897890	-8.9	-9.0
1150	UMHMNP118984466	-9.6	-9.1	1205	UMHMNP36011195	-8.9	-9.0	1260	UMHMNP69977260	-8.9	-9.0
1151	UMHMNP148471856	-9.0	-9.1	1206	UMHMNP676271855	-10.3	-9.0	1261	UMHMNP89837956	-9.1	-9.0
1152	UMHMNP151345061	-8.5	-9.1	1207	UMHMNP780755375	-8.2	-9.0	1262	UMHMNP1107591	-8.6	-9.0
1153	UMHMNP20512316	-9.0	-9.1	1208	UMHMNP849752870	-8.4	-9.0	1263	UMHMNP135474101	-8.3	-9.0
1154	UMHMNP25819798	-8.2	-9.1	1209	UMHMNP95062310	-8.3	-9.0	1264	UMHMNP143503202	-8.8	-9.0
1155	UMHMNP3090811	-8.2	-9.1	1210	UMHMNP116079540	-8.1	-9.0	1265	UMHMNP190451060	-8.9	-9.0
1156	UMHMNP313503376	-8.5	-9.1	1211	UMHMNP121135011	-8.9	-9.0	1266	UMHMNP200860908	-9.7	-9.0
1157	UMHMNP383859594	-9.1	-9.1	1212	UMHMNP147641712	-8.9	-9.0	1267	UMHMNP20829554	-8.6	-9.0
1158	UMHMNP65228140	-8.5	-9.1	1213	UMHMNP153585649	-8.7	-9.0	1268	UMHMNP212069482	-8.9	-9.0
1159	UMHMNP77521	-9.4	-9.1	1214	UMHMNP157622576	-9.1	-9.0	1269	UMHMNP2326514	-8.8	-9.0
1160	UMHMNP82660615	-8.3	-9.1	1215	UMHMNP167394823	-8.8	-9.0	1270	UMHMNP28032522	-8.8	-9.0
1161	UMHMNP88840022	-10.1	-9.1	1216	UMHMNP176447964	-8.6	-9.0	1271	UMHMNP52745876	-8.2	-9.0
1162	UMHMNP128364318	-8.3	-9.0	1217	UMHMNP17974775	-9.5	-9.0	1272	UMHMNP74920573	-9.4	-9.0
1163	UMHMNP129602193	-8.2	-9.0	1218	UMHMNP198274258	-9.8	-9.0	1273	UMHMNP749216453	-9.6	-9.0
1164	UMHMNP134515530	-8.1	-9.0	1219	UMHMNP475111785	-9.0	-9.0	1274	UMHMNP751940	-9.2	-9.0
1165	UMHMNP147170089	-8.6	-9.0	1220	UMHMNP54369141	-9.4	-9.0	1275	UMHMNP85482775	-8.3	-9.0

Table S1. Continued.

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)	
		Fast	Mod.			Fast	Mod.			Fast	Mod.
1276	UMHMNP87978312	-8.9	-9.0	1331	UMHMNP122970132	-8.1	-8.9	1386	UMHMNP112781256	-8.6	-8.9
1277	UMHMNP97614658	-10.5	-9.0	1332	UMHMNP15140597	-8.1	-8.9	1387	UMHMNP115982224	-8.6	-8.9
1278	UMHMNP102396156	-8.2	-9.0	1333	UMHMNP178180013	-8.1	-8.9	1388	UMHMNP141859996	-9.8	-8.9
1279	UMHMNP106849369	-8.9	-9.0	1334	UMHMNP186383073	-9.4	-8.9	1389	UMHMNP157878256	-8.0	-8.9
1280	UMHMNP107168592	-10.0	-9.0	1335	UMHMNP23839476	-8.1	-8.9	1390	UMHMNP17757072	-9.0	-8.9
1281	UMHMNP141860006	-8.8	-9.0	1336	UMHMNP517900526	-9.6	-8.9	1391	UMHMNP189514474	-8.3	-8.9
1282	UMHMNP145223650	-9.0	-9.0	1337	UMHMNP517900571	-8.3	-8.9	1392	UMHMNP26033103	-8.1	-8.9
1283	UMHMNP160324925	-8.7	-9.0	1338	UMHMNP80977	-8.4	-8.9	1393	UMHMNP31665302	-8.6	-8.9
1284	UMHMNP177196393	-8.8	-9.0	1339	UMHMNP81306618	-8.6	-8.9	1394	UMHMNP53586519	-8.8	-8.9
1285	UMHMNP22831647	-8.6	-9.0	1340	UMHMNP84871067	-8.2	-8.9	1395	UMHMNP69297514	-8.8	-8.9
1286	UMHMNP241166245	-8.2	-9.0	1341	UMHMNP88840011	-8.4	-8.9	1396	UMHMNP70206870	-8.9	-8.9
1287	UMHMNP265121060	-8.4	-9.0	1342	UMHMNP97484543	-8.7	-8.9	1397	UMHMNP78342399	-9.2	-8.9
1288	UMHMNP306997444	-8.2	-9.0	1343	UMHMNP102054513	-9.0	-8.9	1398	UMHMNP97042201	-8.5	-8.9
1289	UMHMNP516789	-8.9	-9.0	1344	UMHMNP116407182	-9.3	-8.9	1399	UMHMNP121994523	-8.8	-8.9
1290	UMHMNP55081419	-9.1	-9.0	1345	UMHMNP122535653	-9.2	-8.9	1400	UMHMNP122052953	-9.6	-8.9
1291	UMHMNP6120714	-8.2	-9.0	1346	UMHMNP125990207	-9.0	-8.9	1401	UMHMNP13163810	-8.3	-8.9
1292	UMHMNP65745473	-9.0	-9.0	1347	UMHMNP144398254	-8.3	-8.9	1402	UMHMNP133562513	-8.2	-8.9
1293	UMHMNP676132335	-8.5	-9.0	1348	UMHMNP157536351	-9.1	-8.9	1403	UMHMNP156310177	-8.3	-8.9
1294	UMHMNP777940735	-9.0	-9.0	1349	UMHMNP171528033	-9.4	-8.9	1404	UMHMNP161236631	-8.1	-8.9
1295	UMHMNP815586459	-9.6	-9.0	1350	UMHMNP179189027	-8.1	-8.9	1405	UMHMNP161776745	-8.1	-8.9
1296	UMHMNP85735144	-9.1	-9.0	1351	UMHMNP210969521	-8.6	-8.9	1406	UMHMNP165606688	-8.6	-8.9
1297	UMHMNP86126376	-9.1	-9.0	1352	UMHMNP287965291	-8.7	-8.9	1407	UMHMNP201800604	-8.6	-8.9
1298	UMHMNP111036409	-8.1	-9.0	1353	UMHMNP298196722	-8.1	-8.9	1408	UMHMNP385815305	-8.8	-8.9
1299	UMHMNP122771737	-8.5	-9.0	1354	UMHMNP498572900	-8.5	-8.9	1409	UMHMNP68654933	-10.0	-8.9
1300	UMHMNP22343460	-8.3	-9.0	1355	UMHMNP781646820	-8.7	-8.9	1410	UMHMNP72534124	-8.5	-8.9
1301	UMHMNP265121059	-8.6	-9.0	1356	UMHMNP791846827	-9.1	-8.9	1411	UMHMNP75179587	-10.1	-8.9
1302	UMHMNP2665045	-8.8	-9.0	1357	UMHMNP81256588	-8.8	-8.9	1412	UMHMNP852629619	-9.2	-8.9
1303	UMHMNP445471614	-9.2	-9.0	1358	UMHMNP99081795	-8.7	-8.9	1413	UMHMNP86851209	-8.8	-8.9
1304	UMHMNP681240551	-9.4	-9.0	1359	UMHMNP114995721	-9.0	-8.9	1414	UMHMNP110359994	-8.3	-8.9
1305	UMHMNP77674998	-8.4	-9.0	1360	UMHMNP138779892	-9.1	-8.9	1415	UMHMNP112781267	-8.9	-8.9
1306	UMHMNP117859173	-8.3	-8.9	1361	UMHMNP139083139	-8.8	-8.9	1416	UMHMNP132310919	-8.1	-8.9
1307	UMHMNP121940509	-8.9	-8.9	1362	UMHMNP155656001	-8.8	-8.9	1417	UMHMNP134029439	-8.1	-8.9
1308	UMHMNP123853690	-8.1	-8.9	1363	UMHMNP33646774	-8.4	-8.9	1418	UMHMNP139974757	-10.0	-8.9
1309	UMHMNP142060035	-9.1	-8.9	1364	UMHMNP338949090	-8.1	-8.9	1419	UMHMNP157924862	-8.3	-8.9
1310	UMHMNP147170090	-8.9	-8.9	1365	UMHMNP41398725	-8.6	-8.9	1420	UMHMNP211311089	-8.4	-8.9
1311	UMHMNP147641745	-8.9	-8.9	1366	UMHMNP545471	-8.5	-8.9	1421	UMHMNP326794165	-9.0	-8.9
1312	UMHMNP151890801	-8.8	-8.9	1367	UMHMNP61737960	-8.9	-8.9	1422	UMHMNP473739398	-9.5	-8.9
1313	UMHMNP425368645	-8.9	-8.9	1368	UMHMNP65754678	-9.1	-8.9	1423	UMHMNP53527289	-8.8	-8.9
1314	UMHMNP681227532	-8.5	-8.9	1369	UMHMNP77517330	-8.1	-8.9	1424	UMHMNP799808289	-8.2	-8.9
1315	UMHMNP682808908	-8.3	-8.9	1370	UMHMNP782491796	-8.8	-8.9	1425	UMHMNP804531462	-8.7	-8.9
1316	UMHMNP70329269	-9.8	-8.9	1371	UMHMNP849215958	-8.4	-8.9	1426	UMHMNP97530739	-9.1	-8.9
1317	UMHMNP72560373	-8.8	-8.9	1372	UMHMNP863493032	-8.6	-8.9	1427	UMHMNP113269424	-8.2	-8.9
1318	UMHMNP74145703	-8.2	-8.9	1373	UMHMNP95513636	-8.3	-8.9	1428	UMHMNP139975556	-8.3	-8.9
1319	UMHMNP862286713	-8.5	-8.9	1374	UMHMNP99250176	-8.3	-8.9	1429	UMHMNP142780276	-8.7	-8.9
1320	UMHMNP93474147	-8.8	-8.9	1375	UMHMNP149636920	-8.4	-8.9	1430	UMHMNP145075021	-8.3	-8.9
1321	UMHMNP144335159	-9.4	-8.9	1376	UMHMNP155656012	-8.7	-8.9	1431	UMHMNP151345083	-8.2	-8.9
1322	UMHMNP209408753	-9.8	-8.9	1377	UMHMNP23235678	-8.9	-8.9	1432	UMHMNP160316621	-9.1	-8.9
1323	UMHMNP20981593	-8.6	-8.9	1378	UMHMNP2572523	-9.0	-8.9	1433	UMHMNP161470220	-8.3	-8.9
1324	UMHMNP228575244	-8.6	-8.9	1379	UMHMNP346706476	-8.6	-8.9	1434	UMHMNP169387751	-8.4	-8.9
1325	UMHMNP338949103	-8.5	-8.9	1380	UMHMNP53190888	-9.0	-8.9	1435	UMHMNP173693486	-8.6	-8.9
1326	UMHMNP60422880	-8.6	-8.9	1381	UMHMNP681240540	-8.5	-8.9	1436	UMHMNP199165883	-9.9	-8.9
1327	UMHMNP62861136	-8.6	-8.9	1382	UMHMNP70117214	-8.6	-8.9	1437	UMHMNP433264621	-9.6	-8.9
1328	UMHMNP781646795	-8.4	-8.9	1383	UMHMNP74175943	-9.8	-8.9	1438	UMHMNP6277141	-9.0	-8.9
1329	UMHMNP85733706	-8.3	-8.9	1384	UMHMNP102396214	-10.7	-8.9	1439	UMHMNP64190701	-8.6	-8.9
1330	UMHMNP111768162	-9.1	-8.9	1385	UMHMNP104387146	-8.7	-8.9	1440	UMHMNP78518737	-8.2	-8.9

Table S1. Continued.

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)	
		Fast	Mod.			Fast	Mod.			Fast	Mod.
1441	UMHMNP83136883	-8.4	-8.9	1496	UMHMNP5259289	-9.2	-8.8	1551	UMHMNP901564	-9.0	-8.8
1442	UMHMNP88640215	-8.5	-8.9	1497	UMHMNP566267	-8.5	-8.8	1552	UMHMNP92804687	-9.2	-8.8
1443	UMHMNP90375603	-8.3	-8.9	1498	UMHMNP62073794	-9.3	-8.8	1553	UMHMNP113831008	-9.2	-8.8
1444	UMHMNP1042597	-8.9	-8.8	1499	UMHMNP73622216	-8.2	-8.8	1554	UMHMNP11598231	-8.9	-8.8
1445	UMHMNP120963613	-8.0	-8.8	1500	UMHMNP75605866	-8.2	-8.8	1555	UMHMNP150417699	-8.2	-8.8
1446	UMHMNP132278412	-8.4	-8.8	1501	UMHMNP130203677	-10.7	-8.8	1556	UMHMNP190451048	-8.8	-8.8
1447	UMHMNP136762975	-8.4	-8.8	1502	UMHMNP138843206	-9.1	-8.8	1557	UMHMNP23820760	-8.8	-8.8
1448	UMHMNP146471843	-9.5	-8.8	1503	UMHMNP151345107	-8.8	-8.8	1558	UMHMNP27857121	-9.7	-8.8
1449	UMHMNP149298000	-8.5	-8.8	1504	UMHMNP176181865	-8.4	-8.8	1559	UMHMNP306997411	-8.7	-8.8
1450	UMHMNP159518771	-8.6	-8.8	1505	UMHMNP2034744	-8.9	-8.8	1560	UMHMNP5241247	-9.6	-8.8
1451	UMHMNP16649415	-8.9	-8.8	1506	UMHMNP23983439	-9.0	-8.8	1561	UMHMNP561637	-10.9	-8.8
1452	UMHMNP221367904	-8.8	-8.8	1507	UMHMNP267407250	-8.7	-8.8	1562	UMHMNP732296536	-8.3	-8.8
1453	UMHMNP256377681	-9.8	-8.8	1508	UMHMNP50391725	-8.5	-8.8	1563	UMHMNP737006621	-8.8	-8.8
1454	UMHMNP273746397	-9.6	-8.8	1509	UMHMNP59957403	-8.2	-8.8	1564	UMHMNP753001739	-8.9	-8.8
1455	UMHMNP4575740	-8.4	-8.8	1510	UMHMNP65754634	-8.4	-8.8	1565	UMHMNP79849379	-8.3	-8.8
1456	UMHMNP459412056	-8.4	-8.8	1511	UMHMNP73436358	-8.2	-8.8	1566	UMHMNP109872459	-9.9	-8.8
1457	UMHMNP479637064	-8.9	-8.8	1512	UMHMNP750594	-9.6	-8.8	1567	UMHMNP145525333	-9.4	-8.8
1458	UMHMNP51489_p0	-8.4	-8.8	1513	UMHMNP113626769	-8.4	-8.8	1568	UMHMNP146488633	-8.4	-8.8
1459	UMHMNP62073863	-8.7	-8.8	1514	UMHMNP121442248	-8.3	-8.8	1569	UMHMNP154205193	-8.5	-8.8
1460	UMHMNP68671487	-8.6	-8.8	1515	UMHMNP123794309	-9.0	-8.8	1570	UMHMNP168781791	-8.1	-8.8
1461	UMHMNP69081874	-8.8	-8.8	1516	UMHMNP142677109	-10.3	-8.8	1571	UMHMNP171440236	-8.6	-8.8
1462	UMHMNP70214981	-9.2	-8.8	1517	UMHMNP145398625	-8.2	-8.8	1572	UMHMNP29478419	-8.2	-8.8
1463	UMHMNP81657785	-8.5	-8.8	1518	UMHMNP194020412	-9.5	-8.8	1573	UMHMNP36564291	-9.5	-8.8
1464	UMHMNP84323295	-8.3	-8.8	1519	UMHMNP205750250	-8.3	-8.8	1574	UMHMNP4192147	-9.2	-8.8
1465	UMHMNP85733693	-8.7	-8.8	1520	UMHMNP211311103	-9.2	-8.8	1575	UMHMNP433717556	-8.1	-8.8
1466	UMHMNP90195407	-9.9	-8.8	1521	UMHMNP211555032	-8.5	-8.8	1576	UMHMNP474779754	-9.7	-8.8
1467	UMHMNP105969651	-8.7	-8.8	1522	UMHMNP259670843	-8.1	-8.8	1577	UMHMNP60422879	-8.1	-8.8
1468	UMHMNP112514428	-8.2	-8.8	1523	UMHMNP263764029	-9.8	-8.8	1578	UMHMNP7069423	-8.4	-8.8
1469	UMHMNP116102400	-8.4	-8.8	1524	UMHMNP351441184	-9.6	-8.8	1579	UMHMNP97877708	-8.4	-8.8
1470	UMHMNP1236142	-9.3	-8.8	1525	UMHMNP474680	-8.9	-8.8	1580	UMHMNP102054502	-8.8	-8.8
1471	UMHMNP155521203	-8.4	-8.8	1526	UMHMNP54848292	-9.1	-8.8	1581	UMHMNP108675645	-8.2	-8.8
1472	UMHMNP175861786	-9.5	-8.8	1527	UMHMNP55088750	-9.1	-8.8	1582	UMHMNP11052327	-8.3	-8.8
1473	UMHMNP329050217	-9.0	-8.8	1528	UMHMNP63814493	-8.8	-8.8	1583	UMHMNP115982213	-8.3	-8.8
1474	UMHMNP65754623	-8.9	-8.8	1529	UMHMNP663597851	-8.1	-8.8	1584	UMHMNP122535642	-8.8	-8.8
1475	UMHMNP74799589	-9.6	-8.8	1530	UMHMNP708255985	-8.6	-8.8	1585	UMHMNP133625260	-9.4	-8.8
1476	UMHMNP78370851	-9.0	-8.8	1531	UMHMNP794536928	-8.0	-8.8	1586	UMHMNP134981809	-9.5	-8.8
1477	UMHMNP83704147	-8.2	-8.8	1532	UMHMNP80388472	-8.1	-8.8	1587	UMHMNP139083219	-9.7	-8.8
1478	UMHMNP856414567	-9.2	-8.8	1533	UMHMNP85650255	-9.2	-8.8	1588	UMHMNP191212370	-9.4	-8.8
1479	UMHMNP856414603	-8.3	-8.8	1534	UMHMNP862286735	-9.0	-8.8	1589	UMHMNP191803404	-8.3	-8.8
1480	UMHMNP85733728	-9.3	-8.8	1535	UMHMNP87532261	-9.7	-8.8	1590	UMHMNP479201564	-8.1	-8.8
1481	UMHMNP95043188	-8.1	-8.8	1536	UMHMNP94935996	-8.4	-8.8	1591	UMHMNP547988	-8.7	-8.8
1482	UMHMNP984872	-8.1	-8.8	1537	UMHMNP99481535	-8.4	-8.8	1592	UMHMNP55708742	-10.1	-8.8
1483	UMHMNP99081784	-8.1	-8.8	1538	UMHMNP133587163	-8.2	-8.8	1593	UMHMNP56362426	-8.2	-8.8
1484	UMHMNP107748878	-8.7	-8.8	1539	UMHMNP144587564	-8.8	-8.8	1594	UMHMNP63250226	-8.9	-8.8
1485	UMHMNP122052942	-8.5	-8.8	1540	UMHMNP175861866	-9.5	-8.8	1595	UMHMNP681240642	-9.3	-8.8
1486	UMHMNP122353291	-9.0	-8.8	1541	UMHMNP179733154	-8.2	-8.8	1596	UMHMNP92125694	-8.6	-8.8
1487	UMHMNP1256866	-9.8	-8.8	1542	UMHMNP186820553	-8.8	-8.8	1597	UMHMNP116428638	-8.3	-8.8
1488	UMHMNP132410403	-8.1	-8.8	1543	UMHMNP189083792	-8.2	-8.8	1598	UMHMNP118169361	-9.5	-8.8
1489	UMHMNP132774211	-9.0	-8.8	1544	UMHMNP201213027	-8.8	-8.8	1599	UMHMNP156953876	-8.6	-8.8
1490	UMHMNP151029413	-10.7	-8.8	1545	UMHMNP213749816	-8.6	-8.8	1600	UMHMNP1715862	-8.9	-8.8
1491	UMHMNP152213677	-8.7	-8.8	1546	UMHMNP2790321	-8.6	-8.8	1601	UMHMNP182806140	-8.7	-8.8
1492	UMHMNP184348398	-9.1	-8.8	1547	UMHMNP65754690	-8.3	-8.8	1602	UMHMNP185331968	-8.9	-8.8
1493	UMHMNP193619420	-8.7	-8.8	1548	UMHMNP81575782	-9.7	-8.8	1603	UMHMNP28636251	-9.8	-8.8
1494	UMHMNP19633955	-8.3	-8.8	1549	UMHMNP84323284	-9.9	-8.8	1604	UMHMNP387791	-9.2	-8.8
1495	UMHMNP196868005	-8.4	-8.8	1550	UMHMNP87411845	-9.1	-8.8	1605	UMHMNP571176948	-8.6	-8.8

Table S1. Continued.

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)	
		Fast	Mod.			Fast	Mod.			Fast	Mod.
1606	UMHMNP61263830	-8.1	-8.8	1661	UMHMNP93379578	-9.3	-8.7	1716	UMHMNP40517860	-8.4	-8.7
1607	UMHMNP81387873	-9.2	-8.8	1662	UMHMNP100046046	-9.1	-8.7	1717	UMHMNP445471590	-8.3	-8.7
1608	UMHMNP83995044	-8.9	-8.8	1663	UMHMNP104855201	-8.4	-8.7	1718	UMHMNP472877	-8.8	-8.7
1609	UMHMNP856414523	-8.9	-8.8	1664	UMHMNP110271222	-8.8	-8.7	1719	UMHMNP53866367	-9.7	-8.7
1610	UMHMNP90195430	-10.0	-8.8	1665	UMHMNP126723168	-8.6	-8.7	1720	UMHMNP55081420	-9.1	-8.7
1611	UMHMNP90735436	-8.6	-8.8	1666	UMHMNP135048598	-8.7	-8.7	1721	UMHMNP63693185	-9.0	-8.7
1612	UMHMNP10395365	-8.2	-8.7	1667	UMHMNP157469404	-8.1	-8.7	1722	UMHMNP67506198	-9.6	-8.7
1613	UMHMNP105064297	-9.5	-8.7	1668	UMHMNP157622612	-8.1	-8.7	1723	UMHMNP71239651	-8.5	-8.7
1614	UMHMNP122271914	-9.3	-8.7	1669	UMHMNP20224708	-9.2	-8.7	1724	UMHMNP74055439	-8.5	-8.7
1615	UMHMNP122876691	-8.9	-8.7	1670	UMHMNP204716063	-8.6	-8.7	1725	UMHMNP95513647	-10.3	-8.7
1616	UMHMNP1232195	-8.4	-8.7	1671	UMHMNP212069506	-8.4	-8.7	1726	UMHMNP127524598	-8.1	-8.7
1617	UMHMNP128631209	-8.2	-8.7	1672	UMHMNP24041687	-8.4	-8.7	1727	UMHMNP139765381	-9.4	-8.7
1618	UMHMNP131501274	-8.9	-8.7	1673	UMHMNP474417544	-8.2	-8.7	1728	UMHMNP144686419	-9.1	-8.7
1619	UMHMNP1406162	-8.5	-8.7	1674	UMHMNP55303996	-9.2	-8.7	1729	UMHMNP147641734	-9.5	-8.7
1620	UMHMNP186313008	-8.3	-8.7	1675	UMHMNP62858257	-9.2	-8.7	1730	UMHMNP157047580	-10.4	-8.7
1621	UMHMNP34218945	-8.9	-8.7	1676	UMHMNP85650244	-9.2	-8.7	1731	UMHMNP204716030	-8.9	-8.7
1622	UMHMNP446862700	-8.6	-8.7	1677	UMHMNP90038247	-8.5	-8.7	1732	UMHMNP272458329	-9.6	-8.7
1623	UMHMNP52043002	-9.2	-8.7	1678	UMHMNP105815905	-9.9	-8.7	1733	UMHMNP286437749	-8.3	-8.7
1624	UMHMNP648883301	-10.3	-8.7	1679	UMHMNP106521613	-8.9	-8.7	1734	UMHMNP55870014	-8.4	-8.7
1625	UMHMNP79067735	-9.4	-8.7	1680	UMHMNP129369422	-8.1	-8.7	1735	UMHMNP64118747	-9.5	-8.7
1626	UMHMNP862587175	-8.4	-8.7	1681	UMHMNP141544594	-9.0	-8.7	1736	UMHMNP66082313	-8.1	-8.7
1627	UMHMNP100244368	-8.7	-8.7	1682	UMHMNP15073844	-9.3	-8.7	1737	UMHMNP79801	-9.2	-8.7
1628	UMHMNP105708756	-9.1	-8.7	1683	UMHMNP208708241	-8.7	-8.7	1738	UMHMNP85337139	-10.1	-8.7
1629	UMHMNP126622637	-8.0	-8.7	1684	UMHMNP288851310	-9.2	-8.7	1739	UMHMNP86047145	-8.5	-8.7
1630	UMHMNP134779343	-8.2	-8.7	1685	UMHMNP434162	-8.1	-8.7	1740	UMHMNP86766010	-8.6	-8.7
1631	UMHMNP135626561	-9.7	-8.7	1686	UMHMNP55831271	-9.4	-8.7	1741	UMHMNP871117805	-8.2	-8.7
1632	UMHMNP151171185	-9.2	-8.7	1687	UMHMNP78285968	-8.5	-8.7	1742	UMHMNP112058045	-8.6	-8.7
1633	UMHMNP155416345	-8.6	-8.7	1688	UMHMNP81387828	-8.6	-8.7	1743	UMHMNP117823344	-9.0	-8.7
1634	UMHMNP168434137	-8.7	-8.7	1689	UMHMNP889890613	-9.5	-8.7	1744	UMHMNP126026571	-8.7	-8.7
1635	UMHMNP172723352	-10.9	-8.7	1690	UMHMNP95062309	-8.1	-8.7	1745	UMHMNP132410389	-8.8	-8.7
1636	UMHMNP185543924	-10.0	-8.7	1691	UMHMNP95513614	-9.1	-8.7	1746	UMHMNP133738439	-8.8	-8.7
1637	UMHMNP197381638	-9.7	-8.7	1692	UMHMNP99617455	-9.0	-8.7	1747	UMHMNP136763003	-8.5	-8.7
1638	UMHMNP526432	-8.9	-8.7	1693	UMHMNP133401135	-9.2	-8.7	1748	UMHMNP156312071	-8.1	-8.7
1639	UMHMNP54602196	-8.9	-8.7	1694	UMHMNP135529690	-9.4	-8.7	1749	UMHMNP156953843	-9.8	-8.7
1640	UMHMNP56258323	-9.5	-8.7	1695	UMHMNP135574617	-8.8	-8.7	1750	UMHMNP163136047	-8.5	-8.7
1641	UMHMNP63015918	-8.2	-8.7	1696	UMHMNP160522156	-9.7	-8.7	1751	UMHMNP164081032	-8.2	-8.7
1642	UMHMNP76907636	-8.6	-8.7	1697	UMHMNP169340005	-8.6	-8.7	1752	UMHMNP185139315	-8.1	-8.7
1643	UMHMNP83995055	-9.7	-8.7	1698	UMHMNP516881	-8.2	-8.7	1753	UMHMNP220503297	-8.9	-8.7
1644	UMHMNP97614636	-8.1	-8.7	1699	UMHMNP566654	-9.7	-8.7	1754	UMHMNP273202850	-8.4	-8.7
1645	UMHMNP99957263	-8.3	-8.7	1700	UMHMNP79781661	-8.7	-8.7	1755	UMHMNP356566820	-8.6	-8.7
1646	UMHMNP106001381	-8.3	-8.7	1701	UMHMNP847450753	-8.2	-8.7	1756	UMHMNP37717058	-9.2	-8.7
1647	UMHMNP115141474	-8.3	-8.7	1702	UMHMNP90267917	-8.7	-8.7	1757	UMHMNP405274171	-9.2	-8.7
1648	UMHMNP130799370	-9.7	-8.7	1703	UMHMNP99081762	-8.8	-8.7	1758	UMHMNP71841979	-8.2	-8.7
1649	UMHMNP145398716	-8.4	-8.7	1704	UMHMNP100019247	-8.6	-8.7	1759	UMHMNP76758195	-9.0	-8.7
1650	UMHMNP17297788	-10.3	-8.7	1705	UMHMNP112523883	-8.2	-8.7	1760	UMHMNP79664623	-8.7	-8.7
1651	UMHMNP212069493	-9.0	-8.7	1706	UMHMNP114915343	-9.8	-8.7	1761	UMHMNP110612287	-9.0	-8.7
1652	UMHMNP28056191	-8.9	-8.7	1707	UMHMNP126572734	-8.1	-8.7	1762	UMHMNP111427975	-8.3	-8.7
1653	UMHMNP435327063	-8.6	-8.7	1708	UMHMNP133883100	-8.1	-8.7	1763	UMHMNP118964366	-8.1	-8.7
1654	UMHMNP446862711	-8.4	-8.7	1709	UMHMNP134887299	-8.4	-8.7	1764	UMHMNP143007298	-8.2	-8.7
1655	UMHMNP449166001	-10.2	-8.7	1710	UMHMNP156953956	-8.9	-8.7	1765	UMHMNP156352646	-9.4	-8.7
1656	UMHMNP5241225	-8.2	-8.7	1711	UMHMNP158761138	-9.3	-8.7	1766	UMHMNP161099543	-8.9	-8.7
1657	UMHMNP678183932	-8.6	-8.7	1712	UMHMNP169217463	-8.8	-8.7	1767	UMHMNP164672553	-10.1	-8.7
1658	UMHMNP690627555	-8.2	-8.7	1713	UMHMNP181034980	-11.1	-8.7	1768	UMHMNP169387762	-8.2	-8.7
1659	UMHMNP690627566	-8.3	-8.7	1714	UMHMNP34350840	-9.5	-8.7	1769	UMHMNP20780374	-8.4	-8.7
1660	UMHMNP90195394	-9.2	-8.7	1715	UMHMNP365541680	-8.2	-8.7	1770	UMHMNP2130178	-8.4	-8.7

Table S1. Continued.

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)	
		Fast	Mod.			Fast	Mod.			Fast	Mod.
1771	UMHMNP255882098	-9.2	-8.7	1826	UMHMNP171090816	-9.7	-8.6	1881	UMHMNP200437667	-8.3	-8.6
1772	UMHMNP4651483	-8.1	-8.7	1827	UMHMNP174024976	-8.9	-8.6	1882	UMHMNP233607653	-9.0	-8.6
1773	UMHMNP509095209	-8.3	-8.7	1828	UMHMNP188558012	-8.9	-8.6	1883	UMHMNP452934962	-9.2	-8.6
1774	UMHMNP549521280	-8.7	-8.7	1829	UMHMNP188558501	-8.1	-8.6	1884	UMHMNP675106215	-9.1	-8.6
1775	UMHMNP58844614	-9.3	-8.7	1830	UMHMNP207385088	-8.2	-8.6	1885	UMHMNP676348940	-9.2	-8.6
1776	UMHMNP70363870	-8.1	-8.7	1831	UMHMNP22488626	-9.7	-8.6	1886	UMHMNP79405688	-11.0	-8.6
1777	UMHMNP856414501	-9.5	-8.7	1832	UMHMNP343573615	-9.3	-8.6	1887	UMHMNP868395908	-9.4	-8.6
1778	UMHMNP85733751	-8.5	-8.7	1833	UMHMNP351198099	-8.3	-8.6	1888	UMHMNP872721841	-9.3	-8.6
1779	UMHMNP95513625	-8.2	-8.7	1834	UMHMNP465952	-8.5	-8.6	1889	UMHMNP96999358	-8.2	-8.6
1780	UMHMNP10583047	-8.3	-8.6	1835	UMHMNP53190899	-8.6	-8.6	1890	UMHMNP114915321	-8.7	-8.6
1781	UMHMNP106211910	-8.1	-8.6	1836	UMHMNP55486061	-8.6	-8.6	1891	UMHMNP138629897	-8.5	-8.6
1782	UMHMNP117694970	-8.3	-8.6	1837	UMHMNP57291880	-8.6	-8.6	1892	UMHMNP141321122	-9.1	-8.6
1783	UMHMNP131998544	-9.6	-8.6	1838	UMHMNP578745_t0	-8.4	-8.6	1893	UMHMNP158761127	-9.0	-8.6
1784	UMHMNP132410367	-8.3	-8.6	1839	UMHMNP623167704	-9.8	-8.6	1894	UMHMNP164991655	-10.7	-8.6
1785	UMHMNP133607860	-9.2	-8.6	1840	UMHMNP82471156	-8.7	-8.6	1895	UMHMNP176704077	-9.1	-8.6
1786	UMHMNP145940745	-8.7	-8.6	1841	UMHMNP858950364	-9.1	-8.6	1896	UMHMNP181423712	-8.3	-8.6
1787	UMHMNP148000151	-9.2	-8.6	1842	UMHMNP95513578	-8.9	-8.6	1897	UMHMNP197381694	-8.6	-8.6
1788	UMHMNP159898110	-8.1	-8.6	1843	UMHMNP99624109	-8.7	-8.6	1898	UMHMNP39832683	-8.9	-8.6
1789	UMHMNP165815838	-8.4	-8.6	1844	UMHMNP100667741	-8.6	-8.6	1899	UMHMNP466690551	-8.7	-8.6
1790	UMHMNP170473628	-8.5	-8.6	1845	UMHMNP13327792	-8.2	-8.6	1900	UMHMNP55897773	-8.1	-8.6
1791	UMHMNP221169773	-8.3	-8.6	1846	UMHMNP142060002	-8.1	-8.6	1901	UMHMNP64825805	-8.2	-8.6
1792	UMHMNP29953502	-8.1	-8.6	1847	UMHMNP165337804	-9.7	-8.6	1902	UMHMNP866403750	-8.6	-8.6
1793	UMHMNP310396691	-8.5	-8.6	1848	UMHMNP165967000	-8.4	-8.6	1903	UMHMNP92679077	-8.1	-8.6
1794	UMHMNP5258866	-8.9	-8.6	1849	UMHMNP169565780	-8.4	-8.6	1904	UMHMNP97190404	-9.2	-8.6
1795	UMHMNP781646784	-9.0	-8.6	1850	UMHMNP478945652	-8.7	-8.6	1905	UMHMNP114774866	-8.5	-8.6
1796	UMHMNP871117792	-8.1	-8.6	1851	UMHMNP57103205	-9.1	-8.6	1906	UMHMNP123200566	-8.5	-8.6
1797	UMHMNP108695825	-9.3	-8.6	1852	UMHMNP70206869	-8.2	-8.6	1907	UMHMNP129602182	-8.8	-8.6
1798	UMHMNP119105178	-8.1	-8.6	1853	UMHMNP80999	-8.8	-8.6	1908	UMHMNP145398705	-8.7	-8.6
1799	UMHMNP142677096	-10.2	-8.6	1854	UMHMNP81855461	-8.6	-8.6	1909	UMHMNP156848678	-8.1	-8.6
1800	UMHMNP169565871	-9.5	-8.6	1855	UMHMNP82054215	-9.4	-8.6	1910	UMHMNP211118988	-9.9	-8.6
1801	UMHMNP250727016	-8.3	-8.6	1856	UMHMNP876754777	-8.2	-8.6	1911	UMHMNP221012799	-9.4	-8.6
1802	UMHMNP263744736	-9.9	-8.6	1857	UMHMNP133805035	-8.0	-8.6	1912	UMHMNP30674329	-8.2	-8.6
1803	UMHMNP475111796	-8.5	-8.6	1858	UMHMNP154512239	-9.3	-8.6	1913	UMHMNP329050193	-8.3	-8.6
1804	UMHMNP815577436	-8.8	-8.6	1859	UMHMNP168004862	-8.2	-8.6	1914	UMHMNP395070890	-8.3	-8.6
1805	UMHMNP847450731	-8.4	-8.6	1860	UMHMNP171370562	-8.2	-8.6	1915	UMHMNP433717307	-8.6	-8.6
1806	UMHMNP865668571	-9.1	-8.6	1861	UMHMNP196868016	-9.1	-8.6	1916	UMHMNP51847837	-9.3	-8.6
1807	UMHMNP121819703	-8.6	-8.6	1862	UMHMNP220866397	-9.3	-8.6	1917	UMHMNP64907262	-8.1	-8.6
1808	UMHMNP135446843	-9.6	-8.6	1863	UMHMNP247154638	-9.0	-8.6	1918	UMHMNP94773189	-8.4	-8.6
1809	UMHMNP159001975	-8.5	-8.6	1864	UMHMNP74323447	-9.5	-8.6	1919	UMHMNP10245815	-10.1	-8.5
1810	UMHMNP1778025	-8.3	-8.6	1865	UMHMNP74847099	-8.4	-8.6	1920	UMHMNP108695803	-8.8	-8.5
1811	UMHMNP190451059	-8.1	-8.6	1866	UMHMNP813436407	-9.4	-8.6	1921	UMHMNP111621375	-8.8	-8.5
1812	UMHMNP213547263	-8.5	-8.6	1867	UMHMNP83542169	-8.1	-8.6	1922	UMHMNP126060091	-8.2	-8.5
1813	UMHMNP217478734	-9.4	-8.6	1868	UMHMNP90996240	-8.3	-8.6	1923	UMHMNP130799358	-10.9	-8.5
1814	UMHMNP220304552	-8.3	-8.6	1869	UMHMNP114742722	-9.4	-8.6	1924	UMHMNP189748832	-9.4	-8.5
1815	UMHMNP257904942	-9.4	-8.6	1870	UMHMNP13327770	-8.8	-8.6	1925	UMHMNP215854061	-8.8	-8.5
1816	UMHMNP257904953	-8.4	-8.6	1871	UMHMNP221160801	-10.8	-8.6	1926	UMHMNP272118055	-9.6	-8.5
1817	UMHMNP329050240	-8.3	-8.6	1872	UMHMNP661476659	-8.1	-8.6	1927	UMHMNP481196	-8.4	-8.5
1818	UMHMNP439132044	-8.6	-8.6	1873	UMHMNP80387902	-8.4	-8.6	1928	UMHMNP50657313	-9.0	-8.5
1819	UMHMNP67067816	-8.8	-8.6	1874	UMHMNP97190426	-9.0	-8.6	1929	UMHMNP63250215	-8.4	-8.5
1820	UMHMNP81306594	-11.4	-8.6	1875	UMHMNP114250_t0	-8.1	-8.6	1930	UMHMNP74608632	-9.7	-8.5
1821	UMHMNP113830958	-9.7	-8.6	1876	UMHMNP116407262	-8.2	-8.6	1931	UMHMNP79206716	-8.3	-8.5
1822	UMHMNP114582728	-9.4	-8.6	1877	UMHMNP121350990	-8.7	-8.6	1932	UMHMNP848132387	-8.2	-8.5
1823	UMHMNP120314150	-8.4	-8.6	1878	UMHMNP174792020	-9.2	-8.6	1933	UMHMNP89837990	-9.3	-8.5
1824	UMHMNP133943507	-8.7	-8.6	1879	UMHMNP183006793	-8.7	-8.6	1934	UMHMNP90996239	-8.2	-8.5
1825	UMHMNP168113675	-8.7	-8.6	1880	UMHMNP200273661	-9.4	-8.6	1935	UMHMNP95062376	-8.6	-8.5

Table S1. Continued.

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)	
		Fast	Mod.			Fast	Mod.			Fast	Mod.
1936	UMHMNP104855223	-8.3	-8.5	1991	UMHMNP118984477	-8.4	-8.5	2046	UMHMNP104993104	-8.2	-8.5
1937	UMHMNP106009807	-8.0	-8.5	1992	UMHMNP128049149	-8.0	-8.5	2047	UMHMNP110271211	-8.1	-8.5
1938	UMHMNP140866199	-8.2	-8.5	1993	UMHMNP149864700	-8.7	-8.5	2048	UMHMNP143380409	-9.0	-8.5
1939	UMHMNP162830242	-8.5	-8.5	1994	UMHMNP154071702	-8.9	-8.5	2049	UMHMNP151232836	-8.7	-8.5
1940	UMHMNP21321959	-8.1	-8.5	1995	UMHMNP194856423	-8.6	-8.5	2050	UMHMNP157232592	-8.6	-8.5
1941	UMHMNP63216217	-9.4	-8.5	1996	UMHMNP21072639	-9.0	-8.5	2051	UMHMNP174232350	-8.8	-8.5
1942	UMHMNP693790817	-8.9	-8.5	1997	UMHMNP65166021	-8.7	-8.5	2052	UMHMNP182806093	-9.8	-8.5
1943	UMHMNP74145736	-8.9	-8.5	1998	UMHMNP66879865	-8.7	-8.5	2053	UMHMNP18964539	-8.9	-8.5
1944	UMHMNP76520520	-10.4	-8.5	1999	UMHMNP78285957	-8.1	-8.5	2054	UMHMNP676271844	-10.1	-8.5
1945	UMHMNP80246248	-9.9	-8.5	2000	UMHMNP98112415	-8.2	-8.5	2055	UMHMNP6853992	-8.9	-8.5
1946	UMHMNP80860533	-8.4	-8.5	2001	UMHMNP104311708	-8.1	-8.5	2056	UMHMNP73538564	-9.4	-8.5
1947	UMHMNP849904887	-8.7	-8.5	2002	UMHMNP120152003	-8.8	-8.5	2057	UMHMNP89210139	-8.7	-8.5
1948	UMHMNP104992941	-8.3	-8.5	2003	UMHMNP165815792	-8.1	-8.5	2058	UMHMNP97190437	-10.4	-8.5
1949	UMHMNP128364307	-9.9	-8.5	2004	UMHMNP168422397	-9.6	-8.5	2059	UMHMNP116314	-8.2	-8.4
1950	UMHMNP138355074	-8.1	-8.5	2005	UMHMNP215035828	-8.6	-8.5	2060	UMHMNP116339969	-10.3	-8.4
1951	UMHMNP141394710	-8.2	-8.5	2006	UMHMNP221012788	-9.2	-8.5	2061	UMHMNP116407193	-9.3	-8.4
1952	UMHMNP149633567	-9.9	-8.5	2007	UMHMNP359415660	-8.5	-8.5	2062	UMHMNP123314227	-8.9	-8.4
1953	UMHMNP161187786	-10.1	-8.5	2008	UMHMNP39707556	-8.7	-8.5	2063	UMHMNP139083220	-8.8	-8.4
1954	UMHMNP211239495	-8.7	-8.5	2009	UMHMNP471278736	-8.2	-8.5	2064	UMHMNP146471854	-8.4	-8.4
1955	UMHMNP222960896	-8.9	-8.5	2010	UMHMNP475111809	-8.9	-8.5	2065	UMHMNP149155215	-9.0	-8.4
1956	UMHMNP4351557	-9.1	-8.5	2011	UMHMNP625835236	-9.2	-8.5	2066	UMHMNP159934153	-8.5	-8.4
1957	UMHMNP749216475	-8.6	-8.5	2012	UMHMNP109802177	-9.3	-8.5	2067	UMHMNP180603649	-8.7	-8.4
1958	UMHMNP781646875	-8.5	-8.5	2013	UMHMNP123492400	-8.1	-8.5	2068	UMHMNP200273672	-8.3	-8.4
1959	UMHMNP862588816	-8.6	-8.5	2014	UMHMNP136196651	-8.6	-8.5	2069	UMHMNP612089857	-9.6	-8.4
1960	UMHMNP99457984	-8.4	-8.5	2015	UMHMNP139953336	-10.3	-8.5	2070	UMHMNP63814539	-8.9	-8.4
1961	UMHMNP135048587	-8.1	-8.5	2016	UMHMNP141394721	-8.1	-8.5	2071	UMHMNP706784749	-8.3	-8.4
1962	UMHMNP139765289	-8.8	-8.5	2017	UMHMNP155112688	-8.1	-8.5	2072	UMHMNP70941332	-8.3	-8.4
1963	UMHMNP143592250	-8.5	-8.5	2018	UMHMNP199600389	-9.0	-8.5	2073	UMHMNP733753156	-8.1	-8.4
1964	UMHMNP145398614	-9.0	-8.5	2019	UMHMNP23637312	-10.0	-8.5	2074	UMHMNP75266238	-8.2	-8.4
1965	UMHMNP149378585	-11.3	-8.5	2020	UMHMNP366479041	-8.7	-8.5	2075	UMHMNP77209257	-8.4	-8.4
1966	UMHMNP15361407	-8.4	-8.5	2021	UMHMNP53823044	-8.1	-8.5	2076	UMHMNP863116487	-9.2	-8.4
1967	UMHMNP219517483	-9.3	-8.5	2022	UMHMNP60422891	-8.7	-8.5	2077	UMHMNP133883133	-8.1	-8.4
1968	UMHMNP24587415	-8.6	-8.5	2023	UMHMNP648883323	-8.6	-8.5	2078	UMHMNP138264503	-8.4	-8.4
1969	UMHMNP255623375	-8.9	-8.5	2024	UMHMNP681145471	-9.1	-8.5	2079	UMHMNP139765392	-9.7	-8.4
1970	UMHMNP693790806	-8.9	-8.5	2025	UMHMNP73436449	-9.5	-8.5	2080	UMHMNP147217218	-8.5	-8.4
1971	UMHMNP83704114	-8.3	-8.5	2026	UMHMNP111149872	-8.9	-8.5	2081	UMHMNP184430000	-8.4	-8.4
1972	UMHMNP91893833	-8.6	-8.5	2027	UMHMNP111863673	-8.6	-8.5	2082	UMHMNP192187670	-8.3	-8.4
1973	UMHMNP95062387	-9.6	-8.5	2028	UMHMNP120853136	-8.6	-8.5	2083	UMHMNP201800591	-8.7	-8.4
1974	UMHMNP97190346	-8.9	-8.5	2029	UMHMNP136762953	-8.4	-8.5	2084	UMHMNP225779771	-9.1	-8.4
1975	UMHMNP117472976	-9.0	-8.5	2030	UMHMNP139579274	-8.3	-8.5	2085	UMHMNP247115282	-8.3	-8.4
1976	UMHMNP117694992	-8.2	-8.5	2031	UMHMNP142780492	-10.1	-8.5	2086	UMHMNP288858560	-8.8	-8.4
1977	UMHMNP133530242	-9.8	-8.5	2032	UMHMNP142979348	-8.9	-8.5	2087	UMHMNP3633725	-9.9	-8.4
1978	UMHMNP144027781	-8.3	-8.5	2033	UMHMNP143380669	-10.1	-8.5	2088	UMHMNP445430659	-8.8	-8.4
1979	UMHMNP146488644	-9.1	-8.5	2034	UMHMNP143592227	-10.0	-8.5	2089	UMHMNP4657583	-8.4	-8.4
1980	UMHMNP146555820	-8.1	-8.5	2035	UMHMNP16852521	-8.2	-8.5	2090	UMHMNP676154293	-8.1	-8.4
1981	UMHMNP212069517	-8.5	-8.5	2036	UMHMNP205382236	-8.6	-8.5	2091	UMHMNP681145460	-8.7	-8.4
1982	UMHMNP306971108	-8.2	-8.5	2037	UMHMNP237749847	-8.2	-8.5	2092	UMHMNP697299211	-8.2	-8.4
1983	UMHMNP351198088	-8.2	-8.5	2038	UMHMNP334491268	-8.2	-8.5	2093	UMHMNP97190460	-10.0	-8.4
1984	UMHMNP35339710	-8.4	-8.5	2039	UMHMNP614748639	-8.2	-8.5	2094	UMHMNP124689641	-9.2	-8.4
1985	UMHMNP35498670	-8.9	-8.5	2040	UMHMNP62820342	-9.9	-8.5	2095	UMHMNP12771721	-9.0	-8.4
1986	UMHMNP51847826	-9.8	-8.5	2041	UMHMNP664987126	-9.9	-8.5	2096	UMHMNP129704832	-8.8	-8.4
1987	UMHMNP61897889	-8.1	-8.5	2042	UMHMNP69672679	-8.1	-8.5	2097	UMHMNP139579296	-8.6	-8.4
1988	UMHMNP61949675	-9.0	-8.5	2043	UMHMNP75578653	-9.4	-8.5	2098	UMHMNP141672062	-8.6	-8.4
1989	UMHMNP62820331	-9.5	-8.5	2044	UMHMNP81575760	-9.3	-8.5	2099	UMHMNP144967851	-8.9	-8.4
1990	UMHMNP74185094	-9.7	-8.5	2045	UMHMNP876756579	-8.4	-8.5	2100	UMHMNP216770364	-8.6	-8.4

Table S1. Continued.

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)	
		Fast	Mod.			Fast	Mod.			Fast	Mod.
2101	UMHMNP225779748	-8.5	-8.4	2156	UMHMNP105372814	-9.2	-8.4	2211	UMHMNP143572194	-9.5	-8.4
2102	UMHMNP33300026	-8.2	-8.4	2157	UMHMNP133056652	-8.6	-8.4	2212	UMHMNP157000776	-9.5	-8.4
2103	UMHMNP352674330	-8.1	-8.4	2158	UMHMNP134985061	-8.1	-8.4	2213	UMHMNP250147547	-8.7	-8.4
2104	UMHMNP6147439	-10.4	-8.4	2159	UMHMNP151890890	-8.3	-8.4	2214	UMHMNP35454945	-9.7	-8.4
2105	UMHMNP69819825	-8.3	-8.4	2160	UMHMNP157622521	-8.3	-8.4	2215	UMHMNP41336656	-9.3	-8.4
2106	UMHMNP74145725	-8.4	-8.4	2161	UMHMNP158200103	-9.5	-8.4	2216	UMHMNP425381277	-8.3	-8.4
2107	UMHMNP882524927	-8.4	-8.4	2162	UMHMNP287101637	-8.2	-8.4	2217	UMHMNP452956751	-8.8	-8.4
2108	UMHMNP99631239	-8.5	-8.4	2163	UMHMNP52498938	-9.0	-8.4	2218	UMHMNP53402189	-8.9	-8.4
2109	UMHMNP109152401	-9.2	-8.4	2164	UMHMNP58220	-9.2	-8.4	2219	UMHMNP54602163	-9.8	-8.4
2110	UMHMNP123498022	-9.0	-8.4	2165	UMHMNP65556583	-8.6	-8.4	2220	UMHMNP70206916	-8.5	-8.4
2111	UMHMNP138264489	-8.2	-8.4	2166	UMHMNP67528341	-8.6	-8.4	2221	UMHMNP799808369	-8.7	-8.4
2112	UMHMNP147217194	-8.8	-8.4	2167	UMHMNP746655958	-10.2	-8.4	2222	UMHMNP852469240	-9.8	-8.4
2113	UMHMNP149379260	-10.4	-8.4	2168	UMHMNP777859004	-9.2	-8.4	2223	UMHMNP858950546	-9.6	-8.4
2114	UMHMNP178326540	-9.1	-8.4	2169	UMHMNP851369863	-9.8	-8.4	2224	UMHMNP87532330	-10.8	-8.4
2115	UMHMNP194856365	-8.8	-8.4	2170	UMHMNP104900665	-10.0	-8.4	2225	UMHMNP97190302	-8.9	-8.4
2116	UMHMNP202932147	-8.3	-8.4	2171	UMHMNP106001289	-8.2	-8.4	2226	UMHMNP108335042	-8.3	-8.3
2117	UMHMNP211486134	-10.0	-8.4	2172	UMHMNP119770115	-8.5	-8.4	2227	UMHMNP111139696	-8.4	-8.3
2118	UMHMNP220866400	-9.3	-8.4	2173	UMHMNP138039335	-8.2	-8.4	2228	UMHMNP114318217	-8.3	-8.3
2119	UMHMNP246516370	-9.7	-8.4	2174	UMHMNP147318410	-8.3	-8.4	2229	UMHMNP123483205	-9.3	-8.3
2120	UMHMNP338949125	-8.9	-8.4	2175	UMHMNP152517798	-11.1	-8.4	2230	UMHMNP134455939	-9.4	-8.3
2121	UMHMNP719285026	-9.4	-8.4	2176	UMHMNP153660232	-8.1	-8.4	2231	UMHMNP145427709	-8.5	-8.3
2122	UMHMNP78798080	-8.7	-8.4	2177	UMHMNP157403322	-9.0	-8.4	2232	UMHMNP175861811	-8.4	-8.3
2123	UMHMNP81575113	-9.0	-8.4	2178	UMHMNP17942084	-9.0	-8.4	2233	UMHMNP19588375	-8.8	-8.3
2124	UMHMNP84323273	-9.1	-8.4	2179	UMHMNP209969391	-9.5	-8.4	2234	UMHMNP28032544	-8.2	-8.3
2125	UMHMNP117569434	-8.3	-8.4	2180	UMHMNP220924516	-9.1	-8.4	2235	UMHMNP39707545	-8.2	-8.3
2126	UMHMNP132342746	-8.2	-8.4	2181	UMHMNP245511346	-8.5	-8.4	2236	UMHMNP52239686	-8.3	-8.3
2127	UMHMNP134029451	-9.8	-8.4	2182	UMHMNP325691336	-9.0	-8.4	2237	UMHMNP96627359	-8.7	-8.3
2128	UMHMNP135474098	-8.2	-8.4	2183	UMHMNP359415706	-8.3	-8.4	2238	UMHMNP106463756	-9.0	-8.3
2129	UMHMNP144398243	-8.7	-8.4	2184	UMHMNP6094355	-9.8	-8.4	2239	UMHMNP114719572	-9.5	-8.3
2130	UMHMNP163496262	-9.1	-8.4	2185	UMHMNP61515262	-8.4	-8.4	2240	UMHMNP117021053	-8.3	-8.3
2131	UMHMNP179900982	-8.3	-8.4	2186	UMHMNP84473347	-8.9	-8.4	2241	UMHMNP157207891	-8.1	-8.3
2132	UMHMNP22465641	-9.9	-8.4	2187	UMHMNP858950524	-8.1	-8.4	2242	UMHMNP208708229	-9.1	-8.3
2133	UMHMNP25612593	-9.9	-8.4	2188	UMHMNP866403772	-9.6	-8.4	2243	UMHMNP64687838	-8.3	-8.3
2134	UMHMNP329050206	-8.1	-8.4	2189	UMHMNP890028316	-8.8	-8.4	2244	UMHMNP78697560	-8.9	-8.3
2135	UMHMNP3836019	-9.2	-8.4	2190	UMHMNP95513669	-8.8	-8.4	2245	UMHMNP89837989	-9.9	-8.3
2136	UMHMNP38623960	-8.7	-8.4	2191	UMHMNP103538552	-8.5	-8.4	2246	UMHMNP122271414	-9.1	-8.3
2137	UMHMNP51231277	-8.3	-8.4	2192	UMHMNP116079573	-10.4	-8.4	2247	UMHMNP133883097	-8.3	-8.3
2138	UMHMNP566289	-8.2	-8.4	2193	UMHMNP123116030	-8.7	-8.4	2248	UMHMNP145038568	-8.3	-8.3
2139	UMHMNP63015894	-8.3	-8.4	2194	UMHMNP129257938	-10.0	-8.4	2249	UMHMNP149415827	-8.1	-8.3
2140	UMHMNP72241328	-8.4	-8.4	2195	UMHMNP132618689	-9.3	-8.4	2250	UMHMNP174286170	-8.3	-8.3
2141	UMHMNP123231470	-8.7	-8.4	2196	UMHMNP146555819	-8.9	-8.4	2251	UMHMNP216973078	-9.3	-8.3
2142	UMHMNP125034084	-9.5	-8.4	2197	UMHMNP178176755	-8.0	-8.4	2252	UMHMNP267407249	-9.5	-8.3
2143	UMHMNP152833595	-8.3	-8.4	2198	UMHMNP182806128	-9.5	-8.4	2253	UMHMNP302324590	-9.4	-8.3
2144	UMHMNP321847114	-9.7	-8.4	2199	UMHMNP198481991	-8.3	-8.4	2254	UMHMNP5255152	-9.2	-8.3
2145	UMHMNP448264640	-8.4	-8.4	2200	UMHMNP306971062	-8.7	-8.4	2255	UMHMNP592533874	-8.5	-8.3
2146	UMHMNP63555486	-8.4	-8.4	2201	UMHMNP33646796	-8.1	-8.4	2256	UMHMNP66648531	-8.5	-8.3
2147	UMHMNP74364106	-8.4	-8.4	2202	UMHMNP393828325	-8.8	-8.4	2257	UMHMNP70214914	-9.2	-8.3
2148	UMHMNP76343936	-8.3	-8.4	2203	UMHMNP72016332	-8.7	-8.4	2258	UMHMNP98155170	-9.1	-8.3
2149	UMHMNP813436418	-8.5	-8.4	2204	UMHMNP864685949	-8.3	-8.4	2259	UMHMNP107610004	-9.4	-8.3
2150	UMHMNP81575022	-9.2	-8.4	2205	UMHMNP88526732	-8.9	-8.4	2260	UMHMNP160324947	-9.3	-8.3
2151	UMHMNP83481236	-8.5	-8.4	2206	UMHMNP97560708	-8.7	-8.4	2261	UMHMNP182801623	-8.4	-8.3
2152	UMHMNP853236	-8.6	-8.4	2207	UMHMNP102977764	-9.2	-8.4	2262	UMHMNP191480350	-9.6	-8.3
2153	UMHMNP86748290	-8.3	-8.4	2208	UMHMNP120853170	-8.4	-8.4	2263	UMHMNP264618180	-8.6	-8.3
2154	UMHMNP95513603	-10.1	-8.4	2209	UMHMNP121994501	-8.7	-8.4	2264	UMHMNP487016988	-8.9	-8.3
2155	UMHMNP97915907	-8.6	-8.4	2210	UMHMNP134029440	-9.7	-8.4	2265	UMHMNP69672668	-8.3	-8.3

Table S1. Continued.

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)	
		Fast	Mod.			Fast	Mod.			Fast	Mod.
2266	UMHMNP876754766	-8.3	-8.3	2321	UMHMNP112663919	-9.3	-8.3	2376	UMHMNP29478420	-9.0	-8.2
2267	UMHMNP95388048	-10.1	-8.3	2322	UMHMNP115178535	-9.1	-8.3	2377	UMHMNP329025152	-8.3	-8.2
2268	UMHMNP155944277	-9.5	-8.3	2323	UMHMNP121923975	-10.1	-8.3	2378	UMHMNP349147280	-9.3	-8.2
2269	UMHMNP65717897	-8.0	-8.3	2324	UMHMNP125482271	-8.8	-8.3	2379	UMHMNP437651064	-8.4	-8.2
2270	UMHMNP70142880	-8.1	-8.3	2325	UMHMNP139220181	-8.1	-8.3	2380	UMHMNP76958673	-8.3	-8.2
2271	UMHMNP81275812	-8.6	-8.3	2326	UMHMNP139953325	-8.4	-8.3	2381	UMHMNP85733682	-8.9	-8.2
2272	UMHMNP873202176	-8.9	-8.3	2327	UMHMNP142780312	-8.3	-8.3	2382	UMHMNP865668582	-8.1	-8.2
2273	UMHMNP90139201	-9.9	-8.3	2328	UMHMNP148000402	-9.0	-8.3	2383	UMHMNP129744247	-9.0	-8.2
2274	UMHMNP101968745	-9.5	-8.3	2329	UMHMNP169217372	-8.3	-8.3	2384	UMHMNP130221248	-9.1	-8.2
2275	UMHMNP151358473	-8.5	-8.3	2330	UMHMNP186803305	-8.2	-8.3	2385	UMHMNP156953854	-9.2	-8.2
2276	UMHMNP156280921	-10.4	-8.3	2331	UMHMNP199439753	-8.7	-8.3	2386	UMHMNP158734259	-8.9	-8.2
2277	UMHMNP159934164	-8.8	-8.3	2332	UMHMNP217478723	-8.6	-8.3	2387	UMHMNP194020434	-8.1	-8.2
2278	UMHMNP183114887	-8.1	-8.3	2333	UMHMNP32469800	-8.7	-8.3	2388	UMHMNP215440725	-9.6	-8.2
2279	UMHMNP223130618	-8.9	-8.3	2334	UMHMNP385793373	-8.2	-8.3	2389	UMHMNP287965279	-8.5	-8.2
2280	UMHMNP301842580	-8.3	-8.3	2335	UMHMNP62008111	-8.4	-8.3	2390	UMHMNP77761547	-8.9	-8.2
2281	UMHMNP485817616	-9.0	-8.3	2336	UMHMNP70165445	-8.6	-8.3	2391	UMHMNP874359418	-8.1	-8.2
2282	UMHMNP615285319	-8.3	-8.3	2337	UMHMNP71751774	-8.7	-8.3	2392	UMHMNP106009909	-8.6	-8.2
2283	UMHMNP62504614	-8.8	-8.3	2338	UMHMNP73723407	-9.2	-8.3	2393	UMHMNP123941582	-8.4	-8.2
2284	UMHMNP75921903	-8.2	-8.3	2339	UMHMNP77136620	-9.7	-8.3	2394	UMHMNP133293897	-9.8	-8.2
2285	UMHMNP761409249	-8.9	-8.3	2340	UMHMNP84164863	-8.6	-8.3	2395	UMHMNP161897638	-9.2	-8.2
2286	UMHMNP77394026	-9.3	-8.3	2341	UMHMNP89199917	-8.3	-8.3	2396	UMHMNP175861844	-8.6	-8.2
2287	UMHMNP862286724	-8.3	-8.3	2342	UMHMNP102396167	-10.1	-8.2	2397	UMHMNP188558976	-8.7	-8.2
2288	UMHMNP876754788	-9.5	-8.3	2343	UMHMNP109894113	-8.1	-8.2	2398	UMHMNP222960909	-9.0	-8.2
2289	UMHMNP122876486	-9.6	-8.3	2344	UMHMNP118974020	-8.2	-8.2	2399	UMHMNP244295645	-8.6	-8.2
2290	UMHMNP145075010	-8.1	-8.3	2345	UMHMNP137761172	-8.8	-8.2	2400	UMHMNP255830274	-8.2	-8.2
2291	UMHMNP189456040	-8.3	-8.3	2346	UMHMNP186144092	-8.3	-8.2	2401	UMHMNP486992272	-9.1	-8.2
2292	UMHMNP193816716	-8.3	-8.3	2347	UMHMNP215035817	-8.5	-8.2	2402	UMHMNP549502978	-8.7	-8.2
2293	UMHMNP213824307	-11.3	-8.3	2348	UMHMNP329040815	-8.1	-8.2	2403	UMHMNP58735641	-9.4	-8.2
2294	UMHMNP247921820	-8.8	-8.3	2349	UMHMNP49759220	-8.9	-8.2	2404	UMHMNP73723394	-8.1	-8.2
2295	UMHMNP249731348	-8.8	-8.3	2350	UMHMNP65079494	-8.6	-8.2	2405	UMHMNP88514049	-8.4	-8.2
2296	UMHMNP287101648	-8.7	-8.3	2351	UMHMNP67970	-9.6	-8.2	2406	UMHMNP89398130	-10.1	-8.2
2297	UMHMNP539824878	-8.5	-8.3	2352	UMHMNP69809365	-8.8	-8.2	2407	UMHMNP122540298	-8.3	-8.2
2298	UMHMNP77136835	-8.9	-8.3	2353	UMHMNP78835082	-9.2	-8.2	2408	UMHMNP135048576	-8.3	-8.2
2299	UMHMNP781646853	-8.2	-8.3	2354	UMHMNP83995066	-8.4	-8.2	2409	UMHMNP146345735	-8.4	-8.2
2300	UMHMNP105708767	-9.2	-8.3	2355	UMHMNP88428879	-8.8	-8.2	2410	UMHMNP174232418	-9.3	-8.2
2301	UMHMNP181229196	-9.5	-8.3	2356	UMHMNP105880102	-8.8	-8.2	2411	UMHMNP26612486	-9.9	-8.2
2302	UMHMNP314739952	-8.6	-8.3	2357	UMHMNP109894260	-9.5	-8.2	2412	UMHMNP325691461	-10.0	-8.2
2303	UMHMNP403805743	-8.3	-8.3	2358	UMHMNP121295112	-9.5	-8.2	2413	UMHMNP852469284	-8.9	-8.2
2304	UMHMNP54602152	-9.3	-8.3	2359	UMHMNP125282124	-8.3	-8.2	2414	UMHMNP890041697	-8.7	-8.2
2305	UMHMNP62824082	-8.3	-8.3	2360	UMHMNP130799381	-10.8	-8.2	2415	UMHMNP156848689	-8.6	-8.2
2306	UMHMNP705279727	-8.4	-8.3	2361	UMHMNP132911536	-8.1	-8.2	2416	UMHMNP191927147	-9.3	-8.2
2307	UMHMNP78853028	-8.9	-8.3	2362	UMHMNP148101502	-8.7	-8.2	2417	UMHMNP196403937	-8.1	-8.2
2308	UMHMNP100015165	-8.3	-8.3	2363	UMHMNP158930451	-9.9	-8.2	2418	UMHMNP29706965	-8.7	-8.2
2309	UMHMNP108787560	-8.5	-8.3	2364	UMHMNP176181876	-9.0	-8.2	2419	UMHMNP310396704	-8.4	-8.2
2310	UMHMNP121825421	-8.6	-8.3	2365	UMHMNP180001201	-8.7	-8.2	2420	UMHMNP340156185	-8.1	-8.2
2311	UMHMNP125236591	-8.5	-8.3	2366	UMHMNP189514849	-10.1	-8.2	2421	UMHMNP349147291	-9.1	-8.2
2312	UMHMNP135820790	-9.0	-8.3	2367	UMHMNP193411744	-9.4	-8.2	2422	UMHMNP813461200	-9.3	-8.2
2313	UMHMNP142755075	-8.8	-8.3	2368	UMHMNP39707567	-8.5	-8.2	2423	UMHMNP90468738	-8.5	-8.2
2314	UMHMNP166318861	-9.3	-8.3	2369	UMHMNP70497142	-8.6	-8.2	2424	UMHMNP103955755	-9.9	-8.2
2315	UMHMNP247115293	-8.9	-8.3	2370	UMHMNP96845555	-8.6	-8.2	2425	UMHMNP116079562	-8.3	-8.2
2316	UMHMNP481643496	-8.2	-8.3	2371	UMHMNP97764357	-8.5	-8.2	2426	UMHMNP132244383	-8.2	-8.2
2317	UMHMNP648883312	-8.4	-8.3	2372	UMHMNP115890590	-8.7	-8.2	2427	UMHMNP145427732	-8.1	-8.2
2318	UMHMNP80388449	-8.6	-8.3	2373	UMHMNP132541845	-8.4	-8.2	2428	UMHMNP149378574	-9.9	-8.2
2319	UMHMNP111268645	-8.5	-8.3	2374	UMHMNP144676379	-9.1	-8.2	2429	UMHMNP169181344	-8.3	-8.2
2320	UMHMNP112570873	-8.7	-8.3	2375	UMHMNP175861888	-8.3	-8.2	2430	UMHMNP170475135	-9.0	-8.2

Table S1. Continued.

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)	
		Fast	Mod.			Fast	Mod.			Fast	Mod.
2431	UMHMNP244295634	-8.1	-8.2	2486	UMHMNP155885657	-8.2	-8.1	2541	UMHMNP330846929	-8.6	-8.1
2432	UMHMNP5996225	-9.5	-8.2	2487	UMHMNP19369643	-8.5	-8.1	2542	UMHMNP80902358	-8.1	-8.1
2433	UMHMNP74799567	-9.1	-8.2	2488	UMHMNP259194939	-9.1	-8.1	2543	UMHMNP115952255	-8.8	-8.0
2434	UMHMNP871332079	-8.1	-8.2	2489	UMHMNP27975195	-10.3	-8.1	2544	UMHMNP124512454	-10.4	-8.0
2435	UMHMNP100814662	-8.1	-8.2	2490	UMHMNP306971142	-8.2	-8.1	2545	UMHMNP132911503	-9.0	-8.0
2436	UMHMNP129932805	-8.8	-8.2	2491	UMHMNP481643485	-9.0	-8.1	2546	UMHMNP146396249	-8.4	-8.0
2437	UMHMNP145398670	-8.5	-8.2	2492	UMHMNP66082302	-8.4	-8.1	2547	UMHMNP150998995	-9.2	-8.0
2438	UMHMNP15979767	-8.2	-8.2	2493	UMHMNP70546644	-8.9	-8.1	2548	UMHMNP157622598	-9.1	-8.0
2439	UMHMNP167172852	-11.1	-8.2	2494	UMHMNP88514061	-9.0	-8.1	2549	UMHMNP200437689	-9.0	-8.0
2440	UMHMNP171528044	-8.9	-8.2	2495	UMHMNP145398590	-8.5	-8.1	2550	UMHMNP37717025	-8.6	-8.0
2441	UMHMNP174630092	-9.0	-8.2	2496	UMHMNP154554902	-8.3	-8.1	2551	UMHMNP58957	-8.5	-8.0
2442	UMHMNP176328500	-8.1	-8.2	2497	UMHMNP155850901	-8.7	-8.1	2552	UMHMNP74185038	-9.5	-8.0
2443	UMHMNP251907194	-9.2	-8.2	2498	UMHMNP164301308	-8.3	-8.1	2553	UMHMNP74839819	-8.2	-8.0
2444	UMHMNP3148092	-8.5	-8.2	2499	UMHMNP433717716	-8.3	-8.1	2554	UMHMNP80388483	-8.7	-8.0
2445	UMHMNP57765749	-8.7	-8.2	2500	UMHMNP864685961	-8.7	-8.1	2555	UMHMNP112515410	-10.4	-8.0
2446	UMHMNP6055501	-8.3	-8.2	2501	UMHMNP99957252	-8.3	-8.1	2556	UMHMNP113351750	-8.1	-8.0
2447	UMHMNP68835916	-8.1	-8.2	2502	UMHMNP114728073	-8.7	-8.1	2557	UMHMNP125236604	-8.5	-8.0
2448	UMHMNP75088812	-9.7	-8.2	2503	UMHMNP146555831	-8.6	-8.1	2558	UMHMNP129602137	-10.0	-8.0
2449	UMHMNP80322107	-8.3	-8.2	2504	UMHMNP156280943	-8.7	-8.1	2559	UMHMNP184301915	-8.9	-8.0
2450	UMHMNP847450742	-8.6	-8.2	2505	UMHMNP159518793	-8.2	-8.1	2560	UMHMNP282118858	-10.0	-8.0
2451	UMHMNP861434142	-8.4	-8.2	2506	UMHMNP179669331	-8.9	-8.1	2561	UMHMNP282524623	-8.8	-8.0
2452	UMHMNP104387135	-8.8	-8.2	2507	UMHMNP232922235	-10.0	-8.1	2562	UMHMNP33281811	-9.3	-8.0
2453	UMHMNP135048554	-9.0	-8.2	2508	UMHMNP460060224	-9.6	-8.1	2563	UMHMNP108907240	-10.1	-8.0
2454	UMHMNP157799150	-8.8	-8.2	2509	UMHMNP108605512	-8.2	-8.1	2564	UMHMNP901622268	-8.8	-8.0
2455	UMHMNP184305688	-9.9	-8.2	2510	UMHMNP265652991	-8.6	-8.1	2565	UMHMNP102396247	-8.5	-8.0
2456	UMHMNP185839218	-8.7	-8.2	2511	UMHMNP478364248	-9.5	-8.1	2566	UMHMNP325691483	-9.4	-8.0
2457	UMHMNP193411766	-9.2	-8.2	2512	UMHMNP625413356	-8.1	-8.1	2567	UMHMNP331970059	-8.6	-8.0
2458	UMHMNP353796211	-8.3	-8.2	2513	UMHMNP74364117	-9.8	-8.1	2568	UMHMNP124596652	-8.3	-8.0
2459	UMHMNP663154572	-8.4	-8.2	2514	UMHMNP76984913	-8.1	-8.1	2569	UMHMNP132621831	-9.2	-8.0
2460	UMHMNP116302364	-8.5	-8.1	2515	UMHMNP78173883	-8.5	-8.1	2570	UMHMNP88899610	-8.7	-8.0
2461	UMHMNP133401124	-8.6	-8.1	2516	UMHMNP96426925	-8.3	-8.1	2571	UMHMNP141544629	-9.0	-8.0
2462	UMHMNP155210529	-8.9	-8.1	2517	UMHMNP110042289	-8.5	-8.1	2572	UMHMNP55826512	-8.4	-8.0
2463	UMHMNP165171244	-8.5	-8.1	2518	UMHMNP133883086	-8.8	-8.1	2573	UMHMNP59048816	-9.0	-8.0
2464	UMHMNP233607631	-9.6	-8.1	2519	UMHMNP197234198	-8.6	-8.1	2574	UMHMNP132410390	-8.3	-7.9
2465	UMHMNP511262	-8.4	-8.1	2520	UMHMNP199165872	-8.6	-8.1	2575	UMHMNP99102406	-8.2	-7.9
2466	UMHMNP85754707	-8.1	-8.1	2521	UMHMNP31665324	-8.4	-8.1	2576	UMHMNP126026582	-8.1	-7.9
2467	UMHMNP866228946	-8.1	-8.1	2522	UMHMNP62008155	-8.5	-8.1	2577	UMHMNP180001212	-8.3	-7.9
2468	UMHMNP113023715	-8.8	-8.1	2523	UMHMNP690627613	-9.4	-8.1	2578	UMHMNP189580083	-8.9	-7.9
2469	UMHMNP114763518	-10.3	-8.1	2524	UMHMNP94359656	-9.4	-8.1	2579	UMHMNP200437645	-9.4	-7.9
2470	UMHMNP117229411	-8.5	-8.1	2525	UMHMNP120484802	-8.7	-8.1	2580	UMHMNP181034979	-9.4	-7.9
2471	UMHMNP119979769	-8.3	-8.1	2526	UMHMNP128700856	-8.2	-8.1	2581	UMHMNP100046035	-8.8	-7.9
2472	UMHMNP129744156	-8.5	-8.1	2527	UMHMNP145131	-8.5	-8.1	2582	UMHMNP157002409	-8.1	-7.9
2473	UMHMNP135048601	-9.0	-8.1	2528	UMHMNP173485819	-9.4	-8.1	2583	UMHMNP863638102	-9.1	-7.9
2474	UMHMNP137571303	-8.8	-8.1	2529	UMHMNP238431760	-8.9	-8.1	2584	UMHMNP68857443	-8.3	-7.9
2475	UMHMNP137836658	-8.3	-8.1	2530	UMHMNP356566842	-8.7	-8.1	2585	UMHMNP114076516	-8.3	-7.8
2476	UMHMNP192222176	-9.5	-8.1	2531	UMHMNP479201575	-9.6	-8.1	2586	UMHMNP122548043	-10.2	-7.8
2477	UMHMNP207918954	-8.5	-8.1	2532	UMHMNP67240431	-9.0	-8.1	2587	UMHMNP189388827	-8.8	-7.8
2478	UMHMNP252733407	-8.8	-8.1	2533	UMHMNP68042999	-8.4	-8.1	2588	UMHMNP338949114	-8.3	-7.8
2479	UMHMNP73731347	-8.3	-8.1	2534	UMHMNP847450719	-8.9	-8.1	2589	UMHMNP496909763	-9.2	-7.8
2480	UMHMNP80442780	-9.4	-8.1	2535	UMHMNP130322246	-8.6	-8.1	2590	UMHMNP106009727	-8.2	-7.8
2481	UMHMNP81920185	-8.2	-8.1	2536	UMHMNP250686874	-8.1	-8.1	2591	UMHMNP121379484	-8.8	-7.8
2482	UMHMNP890028305	-9.5	-8.1	2537	UMHMNP71302266	-8.8	-8.1	2592	UMHMNP109979160	-8.2	-7.8
2483	UMHMNP132160442	-8.3	-8.1	2538	UMHMNP74804038	-10.0	-8.1	2593	UMHMNP180048106	-8.5	-7.8
2484	UMHMNP132911467	-8.3	-8.1	2539	UMHMNP114094336	-9.4	-8.1	2594	UMHMNP52665744	-9.2	-7.8
2485	UMHMNP136094365	-8.6	-8.1	2540	UMHMNP127875609	-9.1	-8.1	2595	UMHMNP145398681	-8.4	-7.8

Table S1. Continued.

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)	
		Fast	Mod.			Fast	Mod.			Fast	Mod.
2596	UMHMNP405274159	-8.4	-7.8	2626	UMHMNP114216874	-8.1	-7.5	2657	UMHMNP80764198	-8.1	-7.1
2597	UMHMNP164727337	-8.1	-7.8	2627	UMHMNP180965257	-8.8	-7.5	2658	UMHMNP96820132	-9.2	-7.0
2598	UMHMNP620604413	-9.6	-7.8	2628	UMHMNP132564988	-8.2	-7.4	2659	UMHMNP168482380	-9.2	-7.0
2599	UMHMNP95387476	-8.7	-7.8	2629	UMHMNP620604220	-8.6	-7.4	2660	UMHMNP147663783	-9.0	-7.0
2600	UMHMNP405283376	-8.7	-7.8	2630	UMHMNP97730988	-8.5	-7.4	2661	UMHMNP115787967	-8.6	-7.0
2601	UMHMNP1406662	-8.1	-7.7	2632	UMHMNP856414625	-9.4	-7.4	2662	UMHMNP53755569	-8.1	-7.0
2602	UMHMNP174545789	-8.2	-7.7	2633	UMHMNP130829311	-8.6	-7.4	2663	UMHMNP150351238	-8.6	-6.9
2603	UMHMNP13394351	-8.7	-7.7	2634	UMHMNP176226576	-8.7	-7.4	2664	UMHMNP126596041	-8.8	-6.9
2604	UMHMNP139579310	-8.2	-7.7	2635	UMHMNP196874109	-8.6	-7.4	2665	UMHMNP207683703	-8.8	-6.9
2605	UMHMNP90332722	-8.6	-7.7	2636	UMHMNP114216852	-8.3	-7.4	2666	UMHMNP479249304	-9.4	-6.9
2606	UMHMNP81254	-8.8	-7.7	2637	UMHMNP115178524	-8.2	-7.4	2667	UMHMNP161897718	-8.7	-6.8
2607	UMHMNP81575102	-8.8	-7.7	2638	UMHMNP15979712	-8.6	-7.4	2668	UMHMNP107168605	-9.3	-6.8
2608	UMHMNP174232361	-9.0	-7.7	2639	UMHMNP174630081	-8.8	-7.3	2669	UMHMNP152606616	-8.3	-6.8
2609	UMHMNP99458045	-9.3	-7.7	2640	UMHMNP227597435	-8.1	-7.3	2670	UMHMNP70363892	-8.5	-6.7
2610	UMHMNP170661413	-9.4	-7.7	2641	UMHMNP153212841	-8.1	-7.3	2671	UMHMNP681225956	-9.0	-6.6
2611	UMHMNP314740006	-8.1	-7.7	2642	UMHMNP190510862	-9.5	-7.3	2672	UMHMNP115178546	-8.1	-6.6
2612	UMHMNP168434239	-9.3	-7.6	2643	UMHMNP130170079	-10.4	-7.3	2673	UMHMNP109152365	-8.5	-6.5
2613	UMHMNP107585455	-8.8	-7.6	2644	UMHMNP97068309	-8.3	-7.3	2674	UMHMNP799246869	-9.3	-6.4
2614	UMHMNP160581135	-8.2	-7.6	2645	UMHMNP160638120	-8.5	-7.3	2675	UMHMNP212502879	-8.4	-6.4
2615	UMHMNP136734935	-8.2	-7.6	2646	UMHMNP108663770	-8.4	-7.2	2676	UMHMNP77136631	-9.1	-6.4
2616	UMHMNP92279920	-8.3	-7.6	2647	UMHMNP205323144	-8.4	-7.2	2677	UMHMNP856414589	-8.8	-6.3
2617	UMHMNP148022382	-9.1	-7.6	2648	UMHMNP75872683	-8.6	-7.2	2678	UMHMNP383898064	-9.8	-6.3
2618	UMHMNP105064344	-8.9	-7.6	2649	UMHMNP188405187	-8.6	-7.2	2679	UMHMNP266352367	-8.8	-6.2
2619	UMHMNP123167011	-8.3	-7.6	2650	UMHMNP168075136	-9.0	-7.2	2680	UMHMNP102209778	-8.6	-6.1
2620	UMHMNP20298866	-9.0	-7.6	2651	UMHMNP135531805	-8.5	-7.2	2681	UMHMNP126675523	-10.2	-6.0
2621	UMHMNP163318794	-8.5	-7.5	2652	UMHMNP136707692	-9.9	-7.2	2682	UMHMNP168433929	-8.9	-5.3
2622	UMHMNP179985616	-8.1	-7.5	2653	UMHMNP28979295	-8.8	-7.1	2683	UMHMNP189819190	-8.0	-5.3
2623	UMHMNP224784478	-8.6	-7.5	2654	UMHMNP111466672	-9.7	-7.1	2684	UMHMNP681225967	-8.7	-5.0
2624	UMHMNP125111695	-11.2	-7.5	2655	UMHMNP13408565	-8.6	-7.1	2685	UMHMNP697299200	-8.1	-5.0
2625	UMHMNP128269692	-8.9	-7.5	2656	UMHMNP147663794	-8.3	-7.1	2686	UMHMNP73573178	-8.1	-5.0

<sup>a</sup>Data sorted according to stage II docking scores.

**Table S2.** Estimated fast, moderate, and expensive docking scores for XF7 and the top 1092 potent MNP's compounds within the 3CL<sup>pro</sup> binding pocket.

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)			No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		
		Fast	Moderate	Expensive			Fast	Moderate	Expensive
	XF7	-8.1	-9.2	-9.5	55	UMHMNP143049165	-8.9	-10.6	-11.0
1	UMHMNP1403367	-11.7	-12.2	-13.4	56	UMHMNP143049143	-8.4	-9.3	-11.0
2	UMHMNP101691127	-11.4	-12.1	-12.3	57	UMHMNP58670636	-9.5	-11.0	-11.0
3	UMHMNP791849666	-11.4	-11.9	-12.3	58	UMHMNP6673661	-9.6	-10.9	-10.9
4	UMHMNP14984668	-11.3	-11.7	-12.2	59	UMHMNP161470231	-8.9	-10.6	-10.9
5	UMHMNP143621754	-11.3	-11.7	-12.2	60	UMHMNP890041722	-10.8	-10.9	-10.9
6	UMHMNP148839036	-11.3	-11.6	-11.8	61	UMHMNP171674923	-8.9	-10.8	-10.9
7	UMHMNP133056072	-11.3	-11.6	-11.7	62	UMHMNP125329091	-10.9	-9.9	-10.9
8	UMHMNP386274857	-11.3	-11.6	-11.7	63	UMHMNP174630070	-10.9	-11.0	-10.9
9	UMHMNP133056094	-11.2	-11.5	-11.5	64	UMHMNP131467000	-10.7	-10.8	-10.8
10	UMHMNP26195584	-11.1	-11.5	-11.5	65	UMHMNP221163311	-9.6	-10.5	-10.8
11	UMHMNP874383707	-11.1	-11.5	-11.4	66	UMHMNP139765370	-8.1	-10.7	-10.8
12	UMHMNP221163300	-11.1	-11.4	-11.4	67	UMHMNP86708329	-10.6	-10.7	-10.8
13	UMHMNP109152387	-11.1	-11.4	-11.4	68	UMHMNP151606405	-9.4	-9.8	-10.8
14	UMHMNP156953912	-11.1	-11.4	-11.4	69	UMHMNP151078921	-8.8	-10.7	-10.8
15	UMHMNP5035303	-11.0	-11.4	-11.4	70	UMHMNP272458330	-9.2	-9.3	-10.7
16	UMHMNP706784727	-10.9	-11.3	-11.4	71	UMHMNP272458341	-10.0	-10.3	-10.7
17	UMHMNP116407160	-8.7	-9.5	-11.3	72	UMHMNP64421201	-8.8	-9.5	-10.7
18	UMHMNP100942743	-8.8	-11.2	-11.3	73	UMHMNP162830231	-8.8	-9.3	-10.7
19	UMHMNP100942754	-9.1	-10.7	-11.3	74	UMHMNP64548169	-9.3	-9.5	-10.7
20	UMHMNP105404840	-10.0	-10.1	-11.3	75	UMHMNP70139569	-8.2	-9.3	-10.7
21	UMHMNP131466972	-8.2	-9.3	-11.3	76	UMHMNP244157946	-8.6	-9.7	-10.7
22	UMHMNP147362376	-8.3	-9.3	-11.3	77	UMHMNP41410586	-8.4	-9.8	-10.7
23	UMHMNP149444928	-9.1	-9.4	-11.3	78	UMHMNP2497747	-9.3	-9.3	-10.7
24	UMHMNP149764341	-8.9	-9.6	-11.3	79	UMHMNP852872925	-8.4	-9.7	-10.7
25	UMHMNP150050138	-10.7	-10.7	-11.3	80	UMHMNP116302386	-9.4	-9.5	-10.7
26	UMHMNP153212852	-8.4	-9.7	-11.3	81	UMHMNP124689652	-8.9	-9.4	-10.7
27	UMHMNP154205182	-9.9	-11.2	-11.3	82	UMHMNP4030926	-8.8	-9.3	-10.7
28	UMHMNP157207915	-9.2	-10.8	-11.3	83	UMHMNP351443759	-8.8	-9.9	-10.7
29	UMHMNP162830264	-9.5	-10.4	-11.3	84	UMHMNP74185049	-10.0	-10.1	-10.6
30	UMHMNP167172987	-8.4	-9.5	-11.3	85	UMHMNP152110093	-10.2	-9.3	-10.6
31	UMHMNP22033870	-8.6	-9.7	-11.3	86	UMHMNP165815816	-8.6	-9.8	-10.6
32	UMHMNP221169740	-8.4	-9.6	-11.3	87	UMHMNP444987637	-8.3	-9.9	-10.6
33	UMHMNP76915247	-9.6	-9.7	-11.3	88	UMHMNP6673683	-9.5	-9.7	-10.6
34	UMHMNP823808555	-8.4	-10.1	-11.3	89	UMHMNP745075278	-9.9	-10.0	-10.6
35	UMHMNP120685112	-8.2	-11.0	-11.3	90	UMHMNP129350181	-8.1	-9.3	-10.5
36	UMHMNP184885890	-8.2	-9.3	-11.3	91	UMHMNP741259858	-9.1	-9.3	-10.5
37	UMHMNP148010406	-8.9	-10.6	-11.3	92	UMHMNP827348072	-9.7	-9.7	-10.5
38	UMHMNP153212863	-8.2	-11.2	-11.2	93	UMHMNP244157957	-8.7	-11.2	-10.5
39	UMHMNP157622601	-8.5	-9.8	-11.2	94	UMHMNP253195403	-9.4	-9.5	-10.5
40	UMHMNP107503093	-8.2	-9.7	-11.2	95	UMHMNP150079951	-8.7	-9.3	-10.5
41	UMHMNP116303	-9.5	-9.4	-11.2	96	UMHMNP77982800	-10.9	-11.2	-10.5
42	UMHMNP53296836	-9.9	-9.3	-11.2	97	UMHMNP868395884	-9.1	-9.6	-10.5
43	UMHMNP176447964	-9.0	-9.4	-11.2	98	UMHMNP1058613	-9.5	-10.0	-10.5
44	UMHMNP119108360	-8.9	-9.7	-11.1	99	UMHMNP374819086	-8.9	-9.6	-10.5
45	UMHMNP393870332	-8.5	-9.3	-11.0	100	UMHMNP474395	-8.2	-9.9	-10.5
46	UMHMNP94203539	-9.9	-10.0	-11.0	101	UMHMNP70329281	-9.1	-10.1	-10.5
47	UMHMNP54369118	-9.0	-9.4	-11.0	102	UMHMNP142796314	-8.1	-10.7	-10.5
48	UMHMNP260436291	-9.5	-9.7	-11.0	103	UMHMNP290824474	-8.9	-9.5	-10.5
49	UMHMNP61369275	-8.7	-10.0	-11.0	104	UMHMNP552839802	-8.3	-9.3	-10.5
50	UMHMNP757976673	-9.7	-9.8	-11.0	105	UMHMNP862286702	-9.3	-9.7	-10.5
51	UMHMNP106231258	-9.7	-9.7	-11.0	106	UMHMNP2122987	-9.4	-9.4	-10.4
52	UMHMNP54028465	-9.9	-9.8	-11.0	107	UMHMNP73622238	-9.9	-10.1	-10.4
53	UMHMNP664992272	-9.0	-10.1	-11.0	108	UMHMNP386274868	-8.8	-10.3	-10.4
54	UMHMNP86748314	-8.1	-9.3	-11.0	109	UMHMNP745075245	-8.2	-9.3	-10.4

Table S2. Continued.

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)			No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		
		Fast	Moderate	Expensive			Fast	Moderate	Expensive
110	UMHMNP80981379	-9.2	-9.4	-10.4	166	UMHMNP82866339	-10.9	-11.2	-10.0
111	UMHMNP142755133	-8.5	-9.3	-10.4	167	UMHMNP83115473	-8.5	-9.5	-10.0
112	UMHMNP173792580	-8.6	-9.3	-10.4	168	UMHMNP84025321	-8.8	-10.1	-10.0
113	UMHMNP23518981	-8.7	-9.7	-10.4	169	UMHMNP85733795	-9.6	-9.3	-10.0
114	UMHMNP77944037	-9.2	-9.4	-10.4	170	UMHMNP244157968	-9.6	-9.3	-10.0
115	UMHMNP142755144	-9.9	-10.0	-10.4	171	UMHMNP81826495	-8.4	-9.3	-10.0
116	UMHMNP156953934	-10.9	-9.4	-10.4	172	UMHMNP168569184	-8.2	-9.3	-10.0
117	UMHMNP135091111	-8.3	-9.3	-10.4	173	UMHMNP19254694	-9.1	-9.3	-10.0
118	UMHMNP152845744	-9.1	-9.8	-10.4	174	UMHMNP70022718	-9.6	-10.2	-10.0
119	UMHMNP2418453	-8.1	-10.1	-10.4	175	UMHMNP74185129	-8.2	-9.3	-10.0
120	UMHMNP623167715	-8.4	-10.0	-10.4	176	UMHMNP83704103	-9.0	-9.5	-10.0
121	UMHMNP6377180	-8.2	-9.3	-10.4	177	UMHMNP110012185	-8.0	-9.5	-10.0
122	UMHMNP133613771	-8.4	-10.0	-10.4	178	UMHMNP253340293	-10.8	-11.2	-10.0
123	UMHMNP99528877	-10.4	-10.4	-10.4	179	UMHMNP75605855	-9.5	-9.8	-10.0
124	UMHMNP142796303	-9.7	-10.0	-10.4	180	UMHMNP80735064	-9.9	-10.0	-10.0
125	UMHMNP516869	-10.2	-10.5	-10.4	181	UMHMNP122143902	-9.4	-9.3	-10.0
126	UMHMNP109152376	-9.3	-9.3	-10.3	182	UMHMNP143380396	-8.7	-9.3	-10.0
127	UMHMNP126149904	-8.8	-9.8	-10.3	183	UMHMNP166797746	-8.6	-9.3	-10.0
128	UMHMNP890041675	-8.9	-9.3	-10.3	184	UMHMNP481141	-8.3	-9.4	-10.0
129	UMHMNP19698669	-8.8	-9.5	-10.3	185	UMHMNP63109193	-8.2	-9.5	-10.0
130	UMHMNP6901606	-8.9	-9.4	-10.3	186	UMHMNP6891356	-9.2	-9.3	-10.0
131	UMHMNP77643244	-9.6	-9.8	-10.3	187	UMHMNP123314216	-8.1	-10.0	-10.0
132	UMHMNP84223030	-8.8	-9.3	-10.3	188	UMHMNP196500762	-8.9	-9.8	-10.0
133	UMHMNP139765347	-10.0	-9.5	-10.3	189	UMHMNP50335030	-8.6	-9.3	-10.0
134	UMHMNP151109545	-8.6	-9.3	-10.3	190	UMHMNP160666546	-9.5	-10.9	-10.0
135	UMHMNP870095344	-9.8	-9.9	-10.3	191	UMHMNP104048171	-9.5	-9.9	-10.0
136	UMHMNP152130615	-9.0	-9.8	-10.3	192	UMHMNP201800615	-8.1	-9.9	-10.0
137	UMHMNP53216027	-8.9	-9.3	-10.3	193	UMHMNP58028232	-8.2	-10.0	-10.0
138	UMHMNP870535129	-9.9	-10.0	-10.3	194	UMHMNP221169762	-8.3	-9.6	-10.0
139	UMHMNP175992991	-9.3	-9.3	-10.3	195	UMHMNP260436279	-8.5	-9.3	-10.0
140	UMHMNP196500784	-8.5	-9.5	-10.2	196	UMHMNP94451215	-8.8	-9.3	-10.0
141	UMHMNP61843796	-9.1	-10.1	-10.2	197	UMHMNP104928305	-9.9	-10.1	-10.0
142	UMHMNP681227032	-8.2	-9.5	-10.2	198	UMHMNP221169739	-8.7	-10.1	-10.0
143	UMHMNP91283919	-9.9	-11.0	-10.2	199	UMHMNP244157979	-9.6	-10.5	-10.0
144	UMHMNP165815849	-9.5	-11.2	-10.2	200	UMHMNP862200495	-9.8	-9.3	-10.0
145	UMHMNP97614647	-9.3	-9.3	-10.2	201	UMHMNP134128168	-10.8	-10.4	-10.0
146	UMHMNP196403926	-8.9	-9.8	-10.2	202	UMHMNP162232395	-8.3	-9.3	-10.0
147	UMHMNP682808895	-9.0	-10.9	-10.2	203	UMHMNP54854921	-9.2	-9.3	-10.0
148	UMHMNP208927155	-8.9	-9.4	-10.2	204	UMHMNP55688443	-8.4	-9.3	-10.0
149	UMHMNP29782658	-9.5	-9.5	-10.2	205	UMHMNP123165800	-9.9	-9.5	-10.0
150	UMHMNP86105648	-10.8	-9.3	-10.2	206	UMHMNP128229641	-8.1	-9.3	-10.0
151	UMHMNP888041267	-8.9	-9.3	-10.1	207	UMHMNP23670942	-8.7	-9.9	-10.0
152	UMHMNP124727077	-9.7	-9.9	-10.1	208	UMHMNP474679	-8.3	-9.5	-10.0
153	UMHMNP149355759	-9.7	-9.8	-10.1	209	UMHMNP648428324	-8.5	-9.6	-10.0
154	UMHMNP155645515	-8.3	-9.9	-10.1	210	UMHMNP676271833	-9.9	-10.7	-10.0
155	UMHMNP72509616	-8.4	-9.7	-10.1	211	UMHMNP735278281	-9.2	-9.3	-10.0
156	UMHMNP116972931	-8.9	-9.4	-10.1	212	UMHMNP134131183	-8.9	-9.3	-10.0
157	UMHMNP114127785	-9.3	-9.3	-10.1	213	UMHMNP171864805	-8.2	-9.9	-10.0
158	UMHMNP115982202	-10.9	-10.4	-10.1	214	UMHMNP55688432	-8.1	-9.5	-10.0
159	UMHMNP133562499	-8.2	-10.5	-10.1	215	UMHMNP68520263	-9.6	-10.9	-10.0
160	UMHMNP40446068	-8.5	-9.9	-10.0	216	UMHMNP72007944	-9.4	-9.4	-10.0
161	UMHMNP53822983	-8.7	-9.3	-10.0	217	UMHMNP80375184	-8.9	-9.6	-10.0
162	UMHMNP57082367	-8.5	-10.0	-10.0	218	UMHMNP810685564	-9.1	-9.6	-10.0
163	UMHMNP118574735	-8.7	-9.7	-10.0	219	UMHMNP854203784	-8.9	-9.8	-10.0
164	UMHMNP22260464	-8.0	-9.7	-10.0	220	UMHMNP97649042	-8.3	-9.3	-10.0
165	UMHMNP405095945	-8.1	-9.9	-10.0	221	UMHMNP102396178	-10.1	-10.1	-10.0

Table S2. Continued.

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)			No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		
		Fast	Moderate	Expensive			Fast	Moderate	Expensive
222	UMHMNP28949668	-8.4	-10.0	-10.0	278	UMHMNP27065958	-9.4	-9.3	-9.9
223	UMHMNP80925060	-8.2	-9.8	-10.0	279	UMHMNP3903579	-8.8	-9.6	-9.9
224	UMHMNP83681792	-9.4	-9.6	-10.0	280	UMHMNP681260093	-9.5	-9.5	-9.9
225	UMHMNP858950400	-9.5	-9.6	-10.0	281	UMHMNP136762942	-9.2	-10.1	-9.9
226	UMHMNP105064300	-9.7	-9.8	-10.0	282	UMHMNP140429374	-9.7	-9.8	-9.9
227	UMHMNP151247697	-9.2	-9.3	-10.0	283	UMHMNP143572730	-8.7	-9.3	-9.9
228	UMHMNP53296847	-8.5	-9.3	-10.0	284	UMHMNP150050127	-9.0	-9.5	-9.9
229	UMHMNP137576002	-9.2	-9.5	-10.0	285	UMHMNP84582627	-9.4	-10.2	-9.9
230	UMHMNP17666834	-9.2	-9.6	-10.0	286	UMHMNP852469375	-8.4	-9.7	-9.9
231	UMHMNP57800585	-8.9	-9.3	-10.0	287	UMHMNP114820245	-9.5	-10.5	-9.9
232	UMHMNP832723736	-8.5	-10.2	-10.0	288	UMHMNP151890812	-9.6	-9.6	-9.9
233	UMHMNP117675191	-8.6	-9.3	-10.0	289	UMHMNP213547285	-8.7	-9.3	-9.9
234	UMHMNP145398603	-9.8	-9.9	-10.0	290	UMHMNP214483155	-8.8	-9.7	-9.9
235	UMHMNP185014599	-8.6	-9.3	-10.0	291	UMHMNP283176136	-9.6	-9.6	-9.9
236	UMHMNP29939977	-8.1	-9.3	-10.0	292	UMHMNP76758219	-10.2	-10.8	-9.9
237	UMHMNP50909869	-8.7	-9.3	-10.0	293	UMHMNP124561202	-8.6	-9.5	-9.9
238	UMHMNP121714747	-9.8	-9.3	-9.9	294	UMHMNP151564022	-9.1	-9.3	-9.9
239	UMHMNP56525736	-8.3	-10.0	-9.9	295	UMHMNP153209122	-8.4	-9.7	-9.9
240	UMHMNP876756568	-8.8	-10.2	-9.9	296	UMHMNP19716268	-9.2	-9.3	-9.9
241	UMHMNP136762997	-8.4	-9.4	-9.9	297	UMHMNP32352651	-9.6	-9.3	-9.9
242	UMHMNP189083781	-9.3	-9.3	-9.9	298	UMHMNP479411455	-9.2	-9.3	-9.9
243	UMHMNP193008263	-9.3	-9.3	-9.9	299	UMHMNP123158907	-9.0	-10.0	-9.9
244	UMHMNP4298004	-9.4	-10.4	-9.9	300	UMHMNP141321133	-8.4	-9.9	-9.9
245	UMHMNP88147197	-9.3	-10.2	-9.9	301	UMHMNP143049154	-10.3	-10.3	-9.9
246	UMHMNP121678873	-9.2	-10.3	-9.9	302	UMHMNP168004851	-9.1	-9.3	-9.9
247	UMHMNP133883224	-9.7	-9.7	-9.9	303	UMHMNP188111708	-9.2	-9.4	-9.9
248	UMHMNP78342388	-8.4	-9.3	-9.9	304	UMHMNP2364230	-9.2	-9.8	-9.9
249	UMHMNP85617750	-9.8	-9.9	-9.9	305	UMHMNP851610907	-9.8	-10.0	-9.9
250	UMHMNP90108637	-10.1	-10.1	-9.9	306	UMHMNP97564948	-9.7	-9.8	-9.9
251	UMHMNP115268434	-8.8	-9.3	-9.9	307	UMHMNP106534445	-9.4	-9.4	-9.9
252	UMHMNP211358655	-8.8	-9.7	-9.9	308	UMHMNP113592817	-10.1	-10.2	-9.9
253	UMHMNP25747448	-9.8	-9.3	-9.9	309	UMHMNP38636509	-8.6	-10.1	-9.9
254	UMHMNP272118066	-8.6	-9.5	-9.9	310	UMHMNP76758208	-9.8	-10.0	-9.9
255	UMHMNP76094569	-9.5	-9.5	-9.9	311	UMHMNP874193610	-9.9	-10.0	-9.9
256	UMHMNP858950444	-8.9	-9.3	-9.9	312	UMHMNP139765336	-9.8	-10.0	-9.9
257	UMHMNP90195418	-9.5	-9.3	-9.9	313	UMHMNP14050625	-9.7	-9.8	-9.9
258	UMHMNP102054455	-9.5	-9.9	-9.9	314	UMHMNP160098931	-8.7	-9.3	-9.9
259	UMHMNP136781958	-9.8	-10.3	-9.9	315	UMHMNP306971120	-10.7	-10.7	-9.9
260	UMHMNP199600390	-8.4	-9.7	-9.9	316	UMHMNP329050228	-9.8	-9.9	-9.9
261	UMHMNP62410962	-10.1	-9.3	-9.9	317	UMHMNP474624	-9.1	-10.1	-9.9
262	UMHMNP83115440	-9.4	-9.5	-9.9	318	UMHMNP52936706	-8.8	-9.6	-9.9
263	UMHMNP125127573	-8.6	-9.3	-9.9	319	UMHMNP55688454	-9.2	-10.2	-9.9
264	UMHMNP57874	-8.2	-9.3	-9.9	320	UMHMNP693790748	-9.7	-9.3	-9.9
265	UMHMNP78370840	-8.8	-9.8	-9.9	321	UMHMNP753457942	-8.3	-9.3	-9.9
266	UMHMNP94806049	-9.5	-9.6	-9.9	322	UMHMNP85733762	-9.7	-9.7	-9.9
267	UMHMNP113597038	-9.0	-9.6	-9.9	323	UMHMNP134887277	-8.7	-9.3	-9.9
268	UMHMNP119147125	-8.9	-9.7	-9.9	324	UMHMNP150931832	-9.5	-9.5	-9.9
269	UMHMNP233607711	-8.8	-9.9	-9.9	325	UMHMNP329050251	-9.0	-9.9	-9.9
270	UMHMNP73792935	-8.4	-9.5	-9.9	326	UMHMNP870535118	-9.1	-9.3	-9.9
271	UMHMNP83454	-9.9	-10.0	-9.9	327	UMHMNP17752168	-9.3	-10.2	-9.9
272	UMHMNP871943985	-9.8	-10.1	-9.9	328	UMHMNP5371540	-10.1	-10.1	-9.9
273	UMHMNP132911456	-8.1	-10.4	-9.9	329	UMHMNP675106226	-8.1	-9.3	-9.9
274	UMHMNP142755155	-9.3	-9.4	-9.9	330	UMHMNP851610861	-9.1	-9.3	-9.9
275	UMHMNP151890845	-8.9	-9.8	-9.9	331	UMHMNP211239417	-8.8	-9.7	-9.9
276	UMHMNP200942183	-8.1	-9.3	-9.9	332	UMHMNP24778516	-9.3	-9.5	-9.9
277	UMHMNP244157980	-8.8	-9.7	-9.9	333	UMHMNP32450252	-9.5	-9.4	-9.9

Table S2. Continued.

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)			No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		
		Fast	Moderate	Expensive			Fast	Moderate	Expensive
334	UMHMNP4736565	-9.2	-9.3	-9.9	390	UMHMNP105969640	-9.7	-9.3	-9.8
335	UMHMNP78285844	-10.1	-10.4	-9.9	391	UMHMNP144686420	-9.8	-9.3	-9.8
336	UMHMNP140389497	-8.1	-9.4	-9.9	392	UMHMNP53296665	-9.7	-9.8	-9.8
337	UMHMNP150627364	-8.3	-9.3	-9.9	393	UMHMNP83115484	-9.3	-9.4	-9.8
338	UMHMNP473030	-8.6	-9.3	-9.9	394	UMHMNP858950557	-9.4	-9.4	-9.8
339	UMHMNP89495476	-9.5	-10.1	-9.9	395	UMHMNP100942721	-9.1	-9.6	-9.8
340	UMHMNP116407217	-10.3	-9.4	-9.9	396	UMHMNP1247649	-9.5	-9.9	-9.8
341	UMHMNP119212281	-8.2	-9.3	-9.9	397	UMHMNP134887266	-9.3	-10.5	-9.8
342	UMHMNP132310908	-10.4	-9.3	-9.9	398	UMHMNP149260742	-8.8	-9.3	-9.8
343	UMHMNP149260800	-8.7	-9.5	-9.9	399	UMHMNP161776767	-8.1	-9.3	-9.8
344	UMHMNP151890834	-9.5	-9.4	-9.9	400	UMHMNP173681522	-8.3	-11.2	-9.8
345	UMHMNP20780410	-9.6	-9.5	-9.9	401	UMHMNP219832378	-8.6	-9.9	-9.8
346	UMHMNP233607722	-8.7	-9.7	-9.9	402	UMHMNP81387839	-9.3	-9.9	-9.8
347	UMHMNP73731245	-9.6	-9.3	-9.9	403	UMHMNP863919179	-9.6	-9.8	-9.8
348	UMHMNP80388507	-9.2	-9.3	-9.9	404	UMHMNP97888158	-10.0	-10.0	-9.8
349	UMHMNP114820290	-8.8	-9.3	-9.9	405	UMHMNP102054466	-8.3	-9.7	-9.8
350	UMHMNP121714747	-9.8	-9.3	-9.9	406	UMHMNP102607761	-10.1	-10.1	-9.8
351	UMHMNP193008274	-8.5	-9.3	-9.9	407	UMHMNP112923407	-8.5	-9.3	-9.8
352	UMHMNP459832678	-9.3	-9.3	-9.9	408	UMHMNP149378563	-9.0	-9.3	-9.8
353	UMHMNP80525491	-9.2	-9.6	-9.9	409	UMHMNP158149543	-10.5	-10.2	-9.8
354	UMHMNP847605769	-9.7	-10.0	-9.9	410	UMHMNP179523387	-8.1	-9.3	-9.8
355	UMHMNP84873143	-8.9	-9.6	-9.9	411	UMHMNP197381605	-10.9	-9.6	-9.8
356	UMHMNP886851269	-8.4	-9.9	-9.9	412	UMHMNP50868503	-8.9	-9.6	-9.8
357	UMHMNP126297390	-8.8	-9.7	-9.8	413	UMHMNP52936693	-8.8	-10.1	-9.8
358	UMHMNP18099246	-8.9	-9.4	-9.8	414	UMHMNP59048872	-9.0	-9.5	-9.8
359	UMHMNP2140467	-8.1	-9.8	-9.8	415	UMHMNP63121062	-8.8	-9.5	-9.8
360	UMHMNP224784489	-8.7	-9.3	-9.8	416	UMHMNP866403716	-9.2	-9.5	-9.8
361	UMHMNP477935969	-8.2	-9.8	-9.8	417	UMHMNP96363063	-10.1	-10.1	-9.8
362	UMHMNP55945749	-9.6	-9.8	-9.8	418	UMHMNP102054488	-9.5	-9.8	-9.8
363	UMHMNP858950466	-9.2	-9.3	-9.8	419	UMHMNP116079539	-8.9	-10.2	-9.8
364	UMHMNP133738484	-8.2	-9.3	-9.8	420	UMHMNP132214234	-8.8	-10.3	-9.8
365	UMHMNP168075147	-9.3	-9.3	-9.8	421	UMHMNP157459240	-9.3	-9.7	-9.8
366	UMHMNP186593862	-10.0	-10.3	-9.8	422	UMHMNP2137168	-9.5	-10.3	-9.8
367	UMHMNP233607697	-8.5	-9.5	-9.8	423	UMHMNP334491257	-8.1	-9.3	-9.8
368	UMHMNP607388874	-8.5	-9.8	-9.8	424	UMHMNP53282681	-9.1	-9.3	-9.8
369	UMHMNP78094005	-8.6	-9.3	-9.8	425	UMHMNP752211908	-9.4	-9.5	-9.8
370	UMHMNP78183296	-8.6	-9.4	-9.8	426	UMHMNP771534362	-10.0	-10.0	-9.8
371	UMHMNP97889560	-8.8	-9.3	-9.8	427	UMHMNP169565779	-8.1	-9.7	-9.8
372	UMHMNP168569151	-8.2	-9.3	-9.8	428	UMHMNP171784104	-8.7	-9.3	-9.8
373	UMHMNP246036862	-10.0	-9.5	-9.8	429	UMHMNP199012867	-9.5	-9.8	-9.8
374	UMHMNP34751252	-8.6	-10.7	-9.8	430	UMHMNP693790737	-9.1	-10.1	-9.8
375	UMHMNP639512199	-8.7	-9.8	-9.8	431	UMHMNP823804837	-8.7	-9.3	-9.8
376	UMHMNP720681630	-10.1	-10.5	-9.8	432	UMHMNP219832356	-8.4	-9.3	-9.7
377	UMHMNP102054477	-8.3	-9.7	-9.8	433	UMHMNP4680379	-8.1	-9.9	-9.7
378	UMHMNP161470253	-8.1	-9.6	-9.8	434	UMHMNP681240608	-9.4	-9.4	-9.7
379	UMHMNP172377503	-9.7	-11.0	-9.8	435	UMHMNP83198270	-10.2	-10.5	-9.7
380	UMHMNP477885384	-9.0	-9.4	-9.8	436	UMHMNP85733739	-9.7	-9.7	-9.7
381	UMHMNP75197385	-8.5	-9.3	-9.8	437	UMHMNP94806050	-8.8	-9.8	-9.7
382	UMHMNP862587186	-8.6	-10.0	-9.8	438	UMHMNP114550753	-9.9	-10.0	-9.7
383	UMHMNP94806027	-9.3	-9.8	-9.8	439	UMHMNP131487019	-8.3	-9.9	-9.7
384	UMHMNP123332876	-8.2	-9.3	-9.8	440	UMHMNP229956472	-8.0	-9.5	-9.7
385	UMHMNP185331946	-9.0	-9.3	-9.8	441	UMHMNP61947942	-9.0	-9.3	-9.7
386	UMHMNP37976888	-10.3	-9.6	-9.8	442	UMHMNP194148997	-8.1	-9.4	-9.7
387	UMHMNP55544359	-8.3	-9.6	-9.8	443	UMHMNP22149695	-8.0	-9.7	-9.7
388	UMHMNP71242494	-9.8	-9.9	-9.8	444	UMHMNP22350498	-9.4	-9.9	-9.7
389	UMHMNP83728818	-9.7	-10.0	-9.8	445	UMHMNP433717385	-9.0	-9.4	-9.7

Table S2. Continued.

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)			No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		
		Fast	Moderate	Expensive			Fast	Moderate	Expensive
446	UMHMNP481174	-8.8	-10.7	-9.7	502	UMHMNP62008042	-10.0	-9.5	-9.7
447	UMHMNP681240631	-9.3	-9.4	-9.7	503	UMHMNP108868957	-9.6	-9.5	-9.6
448	UMHMNP85733784	-9.2	-9.5	-9.7	504	UMHMNP153444872	-9.2	-9.4	-9.6
449	UMHMNP152110082	-8.2	-9.3	-9.7	505	UMHMNP193074496	-9.3	-9.3	-9.6
450	UMHMNP171784091	-8.9	-9.3	-9.7	506	UMHMNP290353683	-9.4	-9.6	-9.6
451	UMHMNP200625269	-8.3	-9.8	-9.7	507	UMHMNP474635	-8.3	-9.3	-9.6
452	UMHMNP33646785	-8.8	-9.5	-9.7	508	UMHMNP61897903	-8.6	-9.4	-9.6
453	UMHMNP478364180	-8.7	-10.2	-9.7	509	UMHMNP67314152	-9.3	-9.3	-9.6
454	UMHMNP64997520	-9.8	-10.3	-9.7	510	UMHMNP81306583	-9.2	-9.4	-9.6
455	UMHMNP75917894	-8.2	-9.3	-9.7	511	UMHMNP109152332	-8.9	-9.6	-9.6
456	UMHMNP96886123	-8.7	-9.7	-9.7	512	UMHMNP121449943	-8.4	-9.5	-9.6
457	UMHMNP16066524	-8.8	-11.1	-9.7	513	UMHMNP122540276	-9.8	-9.8	-9.6
458	UMHMNP85748125	-10.1	-10.1	-9.7	514	UMHMNP145398647	-9.6	-9.3	-9.6
459	UMHMNP92264136	-9.4	-9.5	-9.7	515	UMHMNP159813679	-8.6	-10.5	-9.6
460	UMHMNP114820278	-9.7	-9.7	-9.7	516	UMHMNP169564969	-8.1	-9.7	-9.6
461	UMHMNP123158952	-8.3	-10.2	-9.7	517	UMHMNP54602072	-8.4	-10.3	-9.6
462	UMHMNP131711369	-9.8	-9.5	-9.7	518	UMHMNP76836174	-9.1	-9.5	-9.6
463	UMHMNP148717913	-10.5	-9.9	-9.7	519	UMHMNP78285866	-8.8	-9.4	-9.6
464	UMHMNP151606245	-8.1	-9.3	-9.7	520	UMHMNP866403738	-10.8	-10.9	-9.6
465	UMHMNP223271770	-8.7	-9.3	-9.7	521	UMHMNP148371088	-8.9	-9.5	-9.6
466	UMHMNP244303773	-8.8	-9.7	-9.7	522	UMHMNP160014880	-8.4	-11.2	-9.6
467	UMHMNP287965280	-10.0	-10.1	-9.7	523	UMHMNP55309687	-8.1	-9.3	-9.6
468	UMHMNP33168773	-9.4	-9.7	-9.7	524	UMHMNP76376324	-9.1	-9.3	-9.6
469	UMHMNP473739401	-8.3	-9.3	-9.7	525	UMHMNP88191064	-9.7	-10.3	-9.6
470	UMHMNP69081885	-9.4	-9.4	-9.7	526	UMHMNP107585013	-9.0	-9.3	-9.6
471	UMHMNP134128157	-9.7	-9.7	-9.7	527	UMHMNP114820303	-10.4	-10.4	-9.6
472	UMHMNP149764329	-9.0	-9.3	-9.7	528	UMHMNP172854783	-8.9	-10.6	-9.6
473	UMHMNP157459251	-9.3	-9.7	-9.7	529	UMHMNP243668124	-9.7	-9.7	-9.6
474	UMHMNP244066055	-8.6	-9.7	-9.7	530	UMHMNP78418458	-8.6	-9.4	-9.6
475	UMHMNP63635438	-8.2	-9.3	-9.7	531	UMHMNP97888147	-10.4	-10.4	-9.6
476	UMHMNP710324962	-9.7	-9.7	-9.7	532	UMHMNP115982199	-9.3	-9.3	-9.6
477	UMHMNP158758419	-8.8	-9.3	-9.7	533	UMHMNP121714769	-9.5	-9.3	-9.6
478	UMHMNP2643029	-9.8	-10.0	-9.7	534	UMHMNP178200936	-8.9	-10.8	-9.6
479	UMHMNP481254	-9.0	-9.3	-9.7	535	UMHMNP521040	-10.1	-9.3	-9.6
480	UMHMNP75795890	-9.5	-9.8	-9.7	536	UMHMNP681240620	-8.1	-9.5	-9.6
481	UMHMNP77715867	-9.7	-9.9	-9.7	537	UMHMNP76758184	-8.8	-9.3	-9.6
482	UMHMNP83681816	-8.8	-9.4	-9.7	538	UMHMNP77794811	-10.1	-9.5	-9.6
483	UMHMNP882524916	-9.6	-9.9	-9.7	539	UMHMNP78342402	-9.7	-9.8	-9.6
484	UMHMNP109152398	-9.5	-9.5	-9.7	540	UMHMNP80358005	-8.9	-9.4	-9.6
485	UMHMNP114836872	-8.1	-9.3	-9.7	541	UMHMNP80677765	-9.2	-9.5	-9.6
486	UMHMNP141344107	-9.9	-9.9	-9.7	542	UMHMNP160632280	-9.1	-9.6	-9.6
487	UMHMNP19383870	-8.2	-9.4	-9.7	543	UMHMNP287964867	-10.2	-10.1	-9.6
488	UMHMNP197381570	-9.4	-9.5	-9.7	544	UMHMNP433717534	-9.2	-9.3	-9.6
489	UMHMNP204716041	-8.9	-9.4	-9.7	545	UMHMNP55688501	-9.7	-9.5	-9.6
490	UMHMNP58497293	-10.5	-9.3	-9.7	546	UMHMNP107168570	-9.9	-10.1	-9.6
491	UMHMNP705279716	-9.1	-9.3	-9.7	547	UMHMNP133883177	-10.7	-10.8	-9.6
492	UMHMNP119760848	-10.4	-10.3	-9.7	548	UMHMNP169387740	-8.2	-9.5	-9.6
493	UMHMNP134981785	-8.3	-9.3	-9.7	549	UMHMNP232585158	-8.7	-9.9	-9.6
494	UMHMNP154563798	-8.3	-9.4	-9.7	550	UMHMNP246037605	-8.6	-10.1	-9.6
495	UMHMNP165815827	-8.6	-9.5	-9.7	551	UMHMNP26040006	-8.4	-9.5	-9.6
496	UMHMNP191212369	-8.6	-9.8	-9.7	552	UMHMNP368421356	-8.7	-9.3	-9.6
497	UMHMNP221300001	-8.4	-9.5	-9.7	553	UMHMNP452934951	-8.0	-10.4	-9.6
498	UMHMNP34212936	-8.6	-9.5	-9.7	554	UMHMNP64907240	-9.5	-9.4	-9.6
499	UMHMNP37772035	-9.7	-10.0	-9.7	555	UMHMNP80357999	-8.4	-9.4	-9.6
500	UMHMNP508193315	-9.8	-9.3	-9.7	556	UMHMNP156472898	-8.9	-9.5	-9.6
501	UMHMNP567726	-9.2	-9.4	-9.7	557	UMHMNP184885072	-9.5	-9.5	-9.6

Table S2. Continued.

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)			No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		
		Fast	Moderate	Expensive			Fast	Moderate	Expensive
558	UMHMNP23869161	-10.0	-9.4	-9.6	614	UMHMNP119539752	-8.2	-9.3	-9.6
559	UMHMNP242467534	-9.7	-9.7	-9.6	615	UMHMNP132214245	-9.0	-9.9	-9.6
560	UMHMNP81262966	-9.3	-10.1	-9.6	616	UMHMNP221169751	-8.3	-9.5	-9.6
561	UMHMNP82507264	-9.7	-9.7	-9.6	617	UMHMNP287964856	-10.4	-10.5	-9.6
562	UMHMNP86105659	-9.2	-9.5	-9.6	618	UMHMNP52645097	-8.5	-9.9	-9.6
563	UMHMNP133530253	-8.3	-9.5	-9.6	619	UMHMNP57830	-9.2	-9.5	-9.6
564	UMHMNP15146619	-8.1	-10.4	-9.6	620	UMHMNP745075267	-9.4	-9.6	-9.6
565	UMHMNP152833608	-9.4	-9.3	-9.6	621	UMHMNP77983267	-9.7	-9.8	-9.6
566	UMHMNP170894367	-9.5	-9.8	-9.6	622	UMHMNP82637056	-9.7	-9.7	-9.6
567	UMHMNP96603020	-9.1	-9.3	-9.6	623	UMHMNP96313950	-10.1	-10.3	-9.6
568	UMHMNP126596030	-8.1	-10.0	-9.6	624	UMHMNP180603672	-9.4	-9.6	-9.6
569	UMHMNP158402610	-8.6	-10.3	-9.6	625	UMHMNP181306741	-8.4	-9.3	-9.6
570	UMHMNP211555021	-9.3	-9.8	-9.6	626	UMHMNP185331957	-9.3	-9.4	-9.6
571	UMHMNP306997422	-8.6	-10.4	-9.6	627	UMHMNP196500773	-8.4	-9.4	-9.6
572	UMHMNP3963379	-9.4	-9.9	-9.6	628	UMHMNP20465901	-8.7	-10.1	-9.6
573	UMHMNP516370	-8.8	-9.8	-9.6	629	UMHMNP41083970	-8.5	-9.3	-9.6
574	UMHMNP120154963	-8.4	-10.9	-9.6	630	UMHMNP517900582	-9.2	-9.6	-9.6
575	UMHMNP184584405	-9.4	-9.3	-9.6	631	UMHMNP75266250	-9.4	-9.4	-9.6
576	UMHMNP313042	-9.6	-9.6	-9.6	632	UMHMNP82507253	-8.8	-9.3	-9.6
577	UMHMNP393828336	-8.8	-9.3	-9.6	633	UMHMNP86690144	-10.2	-10.5	-9.6
578	UMHMNP4936101	-8.2	-9.6	-9.6	634	UMHMNP114820267	-9.7	-9.7	-9.6
579	UMHMNP70165456	-10.7	-9.3	-9.6	635	UMHMNP126596029	-9.6	-9.9	-9.6
580	UMHMNP85748136	-10.0	-10.0	-9.6	636	UMHMNP133562524	-8.6	-9.3	-9.6
581	UMHMNP94444254	-8.4	-9.3	-9.6	637	UMHMNP144398550	-8.8	-9.7	-9.6
582	UMHMNP126622615	-8.4	-10.1	-9.6	638	UMHMNP2061645	-8.1	-9.3	-9.6
583	UMHMNP129829909	-8.5	-9.8	-9.6	639	UMHMNP337379198	-9.9	-9.3	-9.6
584	UMHMNP14729294	-8.9	-9.3	-9.6	640	UMHMNP80525479	-8.5	-9.5	-9.6
585	UMHMNP157521090	-9.4	-9.8	-9.6	641	UMHMNP83511846	-9.6	-10.0	-9.6
586	UMHMNP21317817	-9.2	-10.1	-9.6	642	UMHMNP882400853	-9.5	-9.5	-9.6
587	UMHMNP226716945	-9.1	-10.1	-9.6	643	UMHMNP100994556	-9.0	-9.3	-9.6
588	UMHMNP61586003	-9.1	-10.5	-9.6	644	UMHMNP124596607	-8.5	-11.2	-9.6
589	UMHMNP156953898	-9.3	-11.2	-9.6	645	UMHMNP142780436	-8.3	-9.3	-9.6
590	UMHMNP160014879	-8.3	-9.7	-9.6	646	UMHMNP157758742	-8.1	-10.6	-9.6
591	UMHMNP171440247	-8.9	-10.6	-9.6	647	UMHMNP195259826	-9.6	-10.5	-9.6
592	UMHMNP178115907	-8.8	-9.4	-9.6	648	UMHMNP51630581	-9.2	-9.3	-9.6
593	UMHMNP37299084	-9.6	-9.5	-9.6	649	UMHMNP58701705	-9.5	-10.1	-9.6
594	UMHMNP452082596	-8.4	-10.6	-9.6	650	UMHMNP76343947	-9.8	-9.9	-9.6
595	UMHMNP97614625	-8.8	-9.3	-9.6	651	UMHMNP771534384	-9.6	-9.6	-9.6
596	UMHMNP107168581	-8.2	-9.7	-9.6	652	UMHMNP81387840	-9.3	-9.4	-9.6
597	UMHMNP134887255	-8.3	-9.4	-9.6	653	UMHMNP87532283	-9.2	-9.3	-9.6
598	UMHMNP154496874	-10.9	-10.5	-9.6	654	UMHMNP141266060	-9.4	-9.4	-9.6
599	UMHMNP172173987	-8.5	-9.3	-9.6	655	UMHMNP214483235	-8.1	-9.6	-9.6
600	UMHMNP298196744	-8.1	-9.3	-9.6	656	UMHMNP264254866	-9.7	-9.8	-9.6
601	UMHMNP72542495	-9.3	-9.4	-9.6	657	UMHMNP50909858	-9.6	-10.4	-9.6
602	UMHMNP89411314	-8.8	-9.3	-9.6	658	UMHMNP61973408	-9.5	-10.0	-9.6
603	UMHMNP145176858	-8.5	-9.3	-9.6	659	UMHMNP651489	-8.2	-9.9	-9.6
604	UMHMNP26808275	-9.7	-9.8	-9.6	660	UMHMNP161536249	-8.4	-9.4	-9.6
605	UMHMNP321847103	-8.3	-9.3	-9.6	661	UMHMNP181034935	-9.9	-10.4	-9.6
606	UMHMNP75886123	-9.7	-9.8	-9.6	662	UMHMNP39832310	-9.3	-9.3	-9.6
607	UMHMNP76898481	-9.6	-9.7	-9.6	663	UMHMNP61737971	-9.1	-9.6	-9.6
608	UMHMNP864514590	-9.6	-9.8	-9.6	664	UMHMNP674819466	-8.8	-9.5	-9.6
609	UMHMNP86748303	-9.9	-10.3	-9.6	665	UMHMNP72534135	-8.4	-9.7	-9.6
610	UMHMNP125282135	-8.4	-9.3	-9.6	666	UMHMNP81120743	-8.7	-9.8	-9.6
611	UMHMNP147391819	-8.2	-9.3	-9.6	667	UMHMNP850145129	-9.7	-9.9	-9.6
612	UMHMNP5813650	-8.3	-9.3	-9.6	668	UMHMNP94806038	-9.3	-9.8	-9.6
613	UMHMNP81275823	-10.4	-10.4	-9.6	669	UMHMNP103005205	-9.6	-9.7	-9.6

Table S2. Continued.

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)			No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		
		Fast	Moderate	Expensive			Fast	Moderate	Expensive
670	UMHMNP109152343	-10.0	-10.5	-9.6	726	UMHMNP87307286	-8.9	-9.3	-9.6
671	UMHMNP145038579	-9.5	-9.3	-9.6	727	UMHMNP112781234	-9.3	-9.5	-9.6
672	UMHMNP179936528	-8.6	-9.4	-9.6	728	UMHMNP121825443	-8.3	-10.2	-9.6
673	UMHMNP26531715	-8.6	-10.3	-9.6	729	UMHMNP163318783	-8.3	-11.2	-9.6
674	UMHMNP798557989	-9.4	-10.0	-9.6	730	UMHMNP17991672	-9.2	-9.5	-9.6
675	UMHMNP86105682	-8.9	-10.2	-9.6	731	UMHMNP221160845	-8.6	-9.7	-9.6
676	UMHMNP114820289	-9.1	-9.3	-9.6	732	UMHMNP38636496	-9.8	-9.5	-9.6
677	UMHMNP143049121	-8.4	-9.9	-9.6	733	UMHMNP614748628	-9.1	-9.3	-9.6
678	UMHMNP14958668	-8.1	-9.3	-9.6	734	UMHMNP862522	-9.5	-9.5	-9.6
679	UMHMNP175673582	-8.5	-9.9	-9.6	735	UMHMNP153415351	-9.4	-9.3	-9.6
680	UMHMNP199600345	-8.7	-9.5	-9.6	736	UMHMNP153698909	-8.4	-10.0	-9.6
681	UMHMNP209167259	-9.4	-9.6	-9.6	737	UMHMNP174796782	-8.4	-9.3	-9.6
682	UMHMNP570898	-9.0	-10.3	-9.6	738	UMHMNP175861800	-8.4	-9.4	-9.6
683	UMHMNP75373625	-8.5	-9.3	-9.6	739	UMHMNP183381068	-8.5	-9.4	-9.6
684	UMHMNP858950386	-9.8	-9.8	-9.6	740	UMHMNP199600378	-8.4	-9.7	-9.6
685	UMHMNP861676575	-9.3	-9.3	-9.6	741	UMHMNP250147194	-9.2	-10.0	-9.6
686	UMHMNP862288902	-9.3	-9.7	-9.6	742	UMHMNP306967760	-9.7	-9.9	-9.6
687	UMHMNP87697992	-8.1	-9.4	-9.6	743	UMHMNP395070889	-8.7	-9.5	-9.6
688	UMHMNP108675634	-8.9	-9.8	-9.6	744	UMHMNP425368598	-8.4	-9.8	-9.6
689	UMHMNP114820256	-8.2	-9.4	-9.6	745	UMHMNP81657398	-9.9	-9.3	-9.6
690	UMHMNP132922873	-8.6	-10.0	-9.6	746	UMHMNP81657796	-9.3	-9.3	-9.6
691	UMHMNP141754576	-9.5	-9.5	-9.6	747	UMHMNP85505664	-8.4	-9.7	-9.6
692	UMHMNP189457269	-9.5	-9.5	-9.6	748	UMHMNP93426916	-9.9	-10.1	-9.6
693	UMHMNP196500808	-8.7	-9.3	-9.6	749	UMHMNP109979171	-9.4	-9.4	-9.6
694	UMHMNP34427639	-10.6	-10.7	-9.6	750	UMHMNP156352657	-8.9	-10.3	-9.6
695	UMHMNP63109171	-9.5	-11.0	-9.6	751	UMHMNP161776756	-8.5	-9.3	-9.6
696	UMHMNP71932064	-10.7	-10.7	-9.6	752	UMHMNP188968447	-8.4	-9.6	-9.6
697	UMHMNP83487	-9.3	-9.8	-9.6	753	UMHMNP448264651	-8.2	-9.7	-9.6
698	UMHMNP103190143	-9.2	-9.4	-9.6	754	UMHMNP636599901	-8.1	-9.3	-9.6
699	UMHMNP140384709	-9.0	-9.3	-9.6	755	UMHMNP143016868	-9.9	-10.7	-9.6
700	UMHMNP175669100	-8.1	-11.2	-9.6	756	UMHMNP149064346	-8.4	-9.9	-9.6
701	UMHMNP53755092	-9.1	-9.3	-9.6	757	UMHMNP14908168	-9.3	-9.3	-9.6
702	UMHMNP694436618	-9.8	-10.2	-9.6	758	UMHMNP155850887	-8.8	-10.7	-9.6
703	UMHMNP74799556	-8.3	-9.3	-9.6	759	UMHMNP179730360	-8.4	-9.4	-9.6
704	UMHMNP78285855	-10.4	-10.5	-9.6	760	UMHMNP183593706	-10.9	-11.0	-9.6
705	UMHMNP78342377	-8.8	-9.8	-9.6	761	UMHMNP268735575	-10.0	-10.0	-9.6
706	UMHMNP90352208	-8.5	-9.3	-9.6	762	UMHMNP57885	-8.5	-9.3	-9.6
707	UMHMNP134985072	-8.3	-9.3	-9.6	763	UMHMNP74055428	-9.4	-9.8	-9.6
708	UMHMNP16826418	-8.5	-9.3	-9.6	764	UMHMNP85198216	-9.7	-10.6	-9.6
709	UMHMNP172854772	-8.6	-9.3	-9.6	765	UMHMNP94354980	-10.0	-10.1	-9.6
710	UMHMNP194148975	-9.3	-9.4	-9.6	766	UMHMNP107551746	-10.0	-9.3	-9.6
711	UMHMNP100667752	-9.4	-9.3	-9.6	767	UMHMNP117857724	-8.7	-9.7	-9.6
712	UMHMNP143503224	-8.4	-9.4	-9.6	768	UMHMNP1242019	-9.6	-9.5	-9.6
713	UMHMNP173681533	-8.8	-9.3	-9.6	769	UMHMNP13963138	-9.5	-9.3	-9.6
714	UMHMNP71678030	-9.0	-9.3	-9.6	770	UMHMNP152845755	-8.1	-10.2	-9.6
715	UMHMNP1174921	-9.6	-9.3	-9.6	771	UMHMNP2465114	-9.4	-10.5	-9.6
716	UMHMNP128855072	-9.0	-9.4	-9.6	772	UMHMNP50611864	-9.0	-9.3	-9.6
717	UMHMNP140866202	-9.8	-9.9	-9.6	773	UMHMNP53755105	-8.7	-11.2	-9.6
718	UMHMNP306997397	-9.2	-9.3	-9.6	774	UMHMNP71885206	-10.0	-9.4	-9.6
719	UMHMNP31893353	-8.7	-10.0	-9.6	775	UMHMNP735278270	-8.2	-9.3	-9.6
720	UMHMNP65773980	-9.3	-9.4	-9.6	776	UMHMNP93426927	-9.2	-9.4	-9.6
721	UMHMNP675106204	-9.1	-9.9	-9.6	777	UMHMNP97719783	-9.3	-9.3	-9.6
722	UMHMNP70214925	-10.1	-10.2	-9.6	778	UMHMNP106534434	-9.2	-10.4	-9.6
723	UMHMNP75479117	-9.2	-9.3	-9.6	779	UMHMNP132750482	-8.7	-9.5	-9.6
724	UMHMNP80981631	-8.3	-9.3	-9.6	780	UMHMNP37976899	-8.8	-10.5	-9.6
725	UMHMNP86748278	-9.8	-9.9	-9.6	781	UMHMNP452082609	-9.3	-9.6	-9.6

Table S2. Continued.

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)			No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		
		Fast	Moderate	Expensive			Fast	Moderate	Expensive
782	UMHMNP67463790	-9.6	-9.4	-9.6	838	UMHMNP145038580	-9.0	-9.3	-9.6
783	UMHMNP749867230	-9.8	-10.2	-9.6	839	UMHMNP147641723	-9.6	-9.4	-9.6
784	UMHMNP124596629	-8.8	-10.1	-9.6	840	UMHMNP162290417	-8.3	-9.3	-9.6
785	UMHMNP141859974	-9.7	-9.6	-9.6	841	UMHMNP24041665	-9.0	-9.4	-9.6
786	UMHMNP14231335	-9.4	-10.0	-9.6	842	UMHMNP40772121	-8.5	-9.6	-9.6
787	UMHMNP191789783	-9.0	-10.0	-9.6	843	UMHMNP494862714	-8.7	-9.4	-9.6
788	UMHMNP133883199	-9.1	-9.3	-9.6	844	UMHMNP549520743	-9.7	-9.3	-9.6
789	UMHMNP134515530	-9.1	-9.7	-9.6	845	UMHMNP64180718	-8.3	-10.7	-9.6
790	UMHMNP214483199	-8.9	-9.3	-9.6	846	UMHMNP876620245	-8.5	-9.7	-9.6
791	UMHMNP315209086	-8.8	-9.7	-9.6	847	UMHMNP128802175	-9.3	-9.9	-9.6
792	UMHMNP41083903	-10.4	-9.3	-9.6	848	UMHMNP129620231	-9.0	-10.5	-9.6
793	UMHMNP452929645	-8.7	-10.0	-9.6	849	UMHMNP130246989	-8.5	-9.8	-9.6
794	UMHMNP69511202	-8.3	-9.5	-9.6	850	UMHMNP133738473	-8.2	-9.5	-9.6
795	UMHMNP69672680	-9.0	-9.5	-9.6	851	UMHMNP186803327	-9.0	-10.7	-9.6
796	UMHMNP804531451	-9.1	-9.4	-9.6	852	UMHMNP474577	-8.7	-9.5	-9.6
797	UMHMNP82154210	-9.3	-9.3	-9.6	853	UMHMNP517900504	-8.2	-9.3	-9.6
798	UMHMNP91297073	-9.2	-9.3	-9.6	854	UMHMNP782491785	-8.3	-9.6	-9.6
799	UMHMNP158734248	-9.3	-9.3	-9.6	855	UMHMNP85733773	-10.1	-10.2	-9.6
800	UMHMNP175702360	-9.7	-9.4	-9.6	856	UMHMNP144335148	-8.9	-9.6	-9.6
801	UMHMNP178064410	-8.2	-9.8	-9.6	857	UMHMNP145212391	-9.8	-10.4	-9.6
802	UMHMNP20817929	-8.3	-9.9	-9.6	858	UMHMNP224577382	-8.1	-9.3	-9.6
803	UMHMNP54369141	-8.3	-9.3	-9.6	859	UMHMNP264618215	-9.9	-9.9	-9.6
804	UMHMNP54602141	-9.1	-9.5	-9.6	860	UMHMNP495380477	-8.8	-10.8	-9.6
805	UMHMNP984849	-8.5	-9.9	-9.6	861	UMHMNP54278896	-8.1	-10.1	-9.6
806	UMHMNP116169290	-9.3	-9.3	-9.6	862	UMHMNP57103216	-8.9	-10.5	-9.6
807	UMHMNP122540323	-8.9	-10.1	-9.6	863	UMHMNP690253771	-8.6	-9.3	-9.6
808	UMHMNP129620253	-8.3	-9.4	-9.6	864	UMHMNP73700295	-9.8	-9.8	-9.6
809	UMHMNP175992980	-8.3	-9.3	-9.6	865	UMHMNP75246763	-9.4	-9.4	-9.6
810	UMHMNP2034722	-9.6	-9.6	-9.6	866	UMHMNP871483351	-8.4	-9.3	-9.6
811	UMHMNP306967759	-10.0	-9.3	-9.6	867	UMHMNP104720152	-9.7	-9.4	-9.6
812	UMHMNP32450263	-8.1	-9.3	-9.6	868	UMHMNP106199819	-9.7	-9.7	-9.6
813	UMHMNP54448725	-8.2	-9.6	-9.6	869	UMHMNP133883202	-9.1	-9.7	-9.6
814	UMHMNP73538575	-9.3	-9.3	-9.6	870	UMHMNP1491776	-8.3	-9.3	-9.6
815	UMHMNP78518748	-8.0	-9.6	-9.6	871	UMHMNP14956242	-10.7	-9.3	-9.6
816	UMHMNP122759675	-9.2	-9.6	-9.6	872	UMHMNP189514485	-8.1	-9.3	-9.6
817	UMHMNP127709459	-8.5	-10.3	-9.6	873	UMHMNP237755167	-8.2	-9.3	-9.6
818	UMHMNP132410356	-8.3	-9.8	-9.6	874	UMHMNP487016966	-8.8	-10.0	-9.6
819	UMHMNP153585649	-8.2	-9.4	-9.6	875	UMHMNP70329258	-8.1	-9.3	-9.6
820	UMHMNP157403333	-9.7	-11.2	-9.6	876	UMHMNP123086817	-8.7	-9.3	-9.6
821	UMHMNP17181883	-10.7	-9.9	-9.6	877	UMHMNP139765303	-8.3	-9.3	-9.6
822	UMHMNP17974786	-9.3	-9.8	-9.6	878	UMHMNP16250616	-11.4	-9.3	-9.6
823	UMHMNP211358713	-8.2	-9.8	-9.6	879	UMHMNP189818493	-8.6	-9.6	-9.6
824	UMHMNP39832309	-8.2	-10.3	-9.6	880	UMHMNP263764041	-8.4	-9.6	-9.6
825	UMHMNP566916	-8.7	-9.9	-9.6	881	UMHMNP333970131	-8.4	-9.4	-9.6
826	UMHMNP87859981	-9.3	-9.9	-9.6	882	UMHMNP38788817	-9.2	-9.3	-9.6
827	UMHMNP95062296	-8.3	-9.9	-9.6	883	UMHMNP39025279	-8.7	-9.9	-9.6
828	UMHMNP139765358	-8.8	-9.8	-9.6	884	UMHMNP446862697	-8.6	-9.4	-9.6
829	UMHMNP1452295	-9.5	-10.0	-9.6	885	UMHMNP132938126	-8.7	-9.3	-9.6
830	UMHMNP148270160	-9.5	-10.3	-9.6	886	UMHMNP147395093	-10.5	-9.3	-9.6
831	UMHMNP151345061	-10.1	-10.2	-9.6	887	UMHMNP478364226	-8.7	-10.2	-9.6
832	UMHMNP471534	-8.1	-9.3	-9.6	888	UMHMNP69297490	-8.5	-9.3	-9.6
833	UMHMNP516858	-8.9	-10.3	-9.6	889	UMHMNP71031588	-9.7	-9.7	-9.6
834	UMHMNP749216464	-8.7	-9.8	-9.6	890	UMHMNP771534373	-9.4	-9.5	-9.6
835	UMHMNP78355289	-9.6	-10.6	-9.6	891	UMHMNP80525480	-9.0	-9.4	-9.6
836	UMHMNP874221893	-9.1	-9.3	-9.6	892	UMHMNP102054524	-9.3	-9.3	-9.6
837	UMHMNP137570435	-9.8	-9.8	-9.6	893	UMHMNP141859985	-9.7	-9.9	-9.6

Table S2. Continued.

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)			No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		
		Fast	Moderate	Expensive			Fast	Moderate	Expensive
894	UMHMNP149260731	-9.5	-9.5	-9.6	950	UMHMNP852872936	-10.0	-9.3	-9.6
895	UMHMNP156472887	-8.0	-10.1	-9.6	951	UMHMNP116972920	-8.5	-9.8	-9.6
896	UMHMNP158822765	-10.3	-9.3	-9.6	952	UMHMNP139765290	-9.9	-9.3	-9.6
897	UMHMNP175413215	-8.3	-10.1	-9.6	953	UMHMNP143007287	-8.3	-9.9	-9.6
898	UMHMNP209408764	-9.6	-9.4	-9.6	954	UMHMNP178179992	-8.4	-9.4	-9.6
899	UMHMNP22850119	-9.1	-9.3	-9.6	955	UMHMNP2259907	-8.6	-9.9	-9.6
900	UMHMNP24041676	-10.0	-9.3	-9.6	956	UMHMNP260062882	-10.0	-9.3	-9.6
901	UMHMNP24662951	-9.3	-10.2	-9.6	957	UMHMNP39533738	-8.2	-9.5	-9.6
902	UMHMNP31220447	-9.7	-10.0	-9.6	958	UMHMNP479067624	-8.7	-9.3	-9.6
903	UMHMNP461441429	-8.2	-9.3	-9.6	959	UMHMNP58560375	-8.1	-9.6	-9.6
904	UMHMNP73723383	-10.2	-10.2	-9.6	960	UMHMNP744253483	-9.6	-9.8	-9.6
905	UMHMNP848132376	-9.8	-9.9	-9.6	961	UMHMNP1159279	-9.3	-9.3	-9.6
906	UMHMNP862200473	-9.0	-9.8	-9.6	962	UMHMNP132194322	-8.3	-11.2	-9.6
907	UMHMNP117675135	-9.0	-10.0	-9.6	963	UMHMNP157622576	-8.7	-9.9	-9.6
908	UMHMNP151890823	-9.1	-9.6	-9.6	964	UMHMNP178494821	-8.5	-9.5	-9.6
909	UMHMNP174063811	-9.1	-9.3	-9.6	965	UMHMNP225662099	-8.3	-10.3	-9.6
910	UMHMNP209408720	-8.8	-9.6	-9.6	966	UMHMNP85443374	-8.4	-9.7	-9.6
911	UMHMNP2243096	-8.9	-9.4	-9.6	967	UMHMNP105369899	-8.7	-9.3	-9.6
912	UMHMNP38819442	-8.5	-9.3	-9.6	968	UMHMNP115193152	-8.8	-9.3	-9.6
913	UMHMNP4598678	-9.1	-9.8	-9.6	969	UMHMNP147170089	-10.3	-10.4	-9.6
914	UMHMNP50335041	-9.2	-9.5	-9.6	970	UMHMNP169217452	-8.5	-9.9	-9.6
915	UMHMNP64687850	-8.5	-10.3	-9.6	971	UMHMNP334491279	-8.1	-9.3	-9.6
916	UMHMNP81387851	-9.9	-9.4	-9.6	972	UMHMNP395070903	-9.4	-9.3	-9.6
917	UMHMNP96253600	-9.6	-9.6	-9.6	973	UMHMNP495380488	-8.6	-9.3	-9.6
918	UMHMNP135729452	-9.4	-9.6	-9.6	974	UMHMNP51529125	-8.1	-9.6	-9.6
919	UMHMNP141854695	-9.6	-9.3	-9.6	975	UMHMNP724462480	-9.4	-9.6	-9.6
920	UMHMNP55081395	-9.1	-9.5	-9.6	976	UMHMNP85748147	-9.8	-9.8	-9.6
921	UMHMNP601570	-8.8	-9.4	-9.6	977	UMHMNP865308607	-9.5	-9.5	-9.6
922	UMHMNP6035627	-8.9	-9.8	-9.6	978	UMHMNP96736311	-10.3	-10.3	-9.6
923	UMHMNP72154337	-9.1	-9.3	-9.6	979	UMHMNP102054499	-8.9	-9.5	-9.6
924	UMHMNP83465	-9.2	-10.1	-9.6	980	UMHMNP12626185	-8.9	-10.7	-9.6
925	UMHMNP85337151	-9.2	-9.3	-9.6	981	UMHMNP143049132	-9.7	-9.4	-9.6
926	UMHMNP142780367	-8.9	-9.3	-9.6	982	UMHMNP82660615	-9.7	-9.7	-9.6
927	UMHMNP158786755	-9.5	-10.4	-9.6	983	UMHMNP118984466	-8.8	-9.5	-9.6
928	UMHMNP163136058	-8.1	-9.5	-9.6	984	UMHMNP144436066	-8.8	-9.7	-9.6
929	UMHMNP199600367	-9.1	-10.3	-9.6	985	UMHMNP185331935	-8.9	-10.5	-9.6
930	UMHMNP326794176	-8.3	-9.3	-9.6	986	UMHMNP286433805	-10.6	-10.7	-9.6
931	UMHMNP3404226	-9.6	-9.9	-9.6	987	UMHMNP516790	-8.6	-9.8	-9.6
932	UMHMNP517900515	-9.8	-9.9	-9.6	988	UMHMNP58514322	-8.1	-10.4	-9.6
933	UMHMNP517900559	-8.9	-9.5	-9.6	989	UMHMNP849752870	-8.4	-9.3	-9.6
934	UMHMNP518069	-9.2	-9.6	-9.6	990	UMHMNP96853155	-8.8	-9.5	-9.6
935	UMHMNP65228140	-9.5	-9.3	-9.6	991	UMHMNP107551757	-10	-11.0	-9.6
936	UMHMNP745075256	-9.1	-9.3	-9.6	992	UMHMNP1106134	-8.8	-9.8	-9.6
937	UMHMNP87164338	-9.5	-9.5	-9.6	993	UMHMNP116302284	-9.2	-9.9	-9.6
938	UMHMNP876756557	-9.4	-9.4	-9.6	994	UMHMNP133401113	-8.8	-9.3	-9.6
939	UMHMNP126394749	-8.8	-9.7	-9.6	995	UMHMNP25819798	-9.7	-9.8	-9.6
940	UMHMNP133883213	-10.9	-10.3	-9.6	996	UMHMNP298196733	-9.2	-9.3	-9.6
941	UMHMNP142677121	-8.6	-9.3	-9.6	997	UMHMNP313503376	-8.1	-10.1	-9.6
942	UMHMNP14599485	-8.9	-9.7	-9.6	998	UMHMNP33886747	-8.5	-10.0	-9.6
943	UMHMNP15313696	-9.0	-9.7	-9.6	999	UMHMNP90195441	-9.1	-9.3	-9.6
944	UMHMNP161776734	-8.9	-9.8	-9.6	1000	UMHMNP95062310	-8.6	-9.9	-9.6
945	UMHMNP174630116	-8.5	-10.1	-9.6	1001	UMHMNP122540312	-9.5	-9.3	-9.6
946	UMHMNP52043013	-9.7	-9.8	-9.6	1002	UMHMNP149355760	-9.4	-9.4	-9.6
947	UMHMNP55051780	-9.8	-9.3	-9.6	1003	UMHMNP165606699	-8.4	-9.3	-9.6
948	UMHMNP68690926	-10.3	-10.5	-9.6	1004	UMHMNP16910320	-9.0	-9.5	-9.6
949	UMHMNP74799590	-10.1	-10.5	-9.6	1005	UMHMNP184430011	-10.3	-10.2	-9.6

Table S2. Continued.

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)			No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)		
		Fast	Moderate	Expensive			Fast	Moderate	Expensive
1006	UMHMNP198274258	-8.3	-10.0	-9.6	1050	UMHMNP80388461	-9.0	-9.4	-9.6
1007	UMHMNP238758424	-8.1	-10.0	-9.6	1051	UMHMNP141754587	-8.5	-9.3	-9.6
1008	UMHMNP516552	-8.5	-9.3	-9.6	1052	UMHMNP10525221	-9.7	-9.8	-9.6
1009	UMHMNP69672704	-9.7	-10.0	-9.6	1053	UMHMNP144436077	-8.2	-9.6	-9.6
1010	UMHMNP70214992	-10.3	-10.3	-9.6	1054	UMHMNP146506414	-10.2	-10.3	-9.6
1011	UMHMNP71801495	-9.3	-9.3	-9.6	1055	UMHMNP162830253	-8.8	-9.5	-9.6
1012	UMHMNP77521	-8.6	-9.4	-9.6	1056	UMHMNP166038284	-10.4	-9.4	-9.6
1013	UMHMNP85337128	-9.9	-10.0	-9.6	1057	UMHMNP815586493	-9.8	-9.8	-9.6
1014	UMHMNP117694969	-9.4	-9.6	-9.6	1058	UMHMNP217449199	-8.4	-9.3	-9.6
1015	UMHMNP145403254	-8.9	-9.7	-9.6	1059	UMHMNP85733808	-9.2	-9.3	-9.6
1016	UMHMNP175861855	-10.9	-10.2	-9.6	1060	UMHMNP149260753	-10	-9.4	-9.6
1017	UMHMNP250141641	-8.1	-9.3	-9.6	1061	UMHMNP263764018	-9.5	-9.7	-9.6
1018	UMHMNP3090811	-8.2	-10.1	-9.6	1062	UMHMNP81474615	-9.4	-9.4	-9.6
1019	UMHMNP62861158	-8.4	-9.5	-9.6	1063	UMHMNP81575066	-9.4	-9.5	-9.6
1020	UMHMNP676271855	-9.0	-9.3	-9.6	1064	UMHMNP186593839	-9.2	-9.3	-9.6
1021	UMHMNP85066780	-10.0	-9.9	-9.6	1065	UMHMNP160014868	-8.3	-9.7	-9.6
1022	UMHMNP85733717	-8.5	-9.3	-9.6	1066	UMHMNP62660202	-8.4	-10.1	-9.6
1023	UMHMNP129602193	-8.1	-9.3	-9.6	1067	UMHMNP333723981	-9.4	-9.7	-9.6
1024	UMHMNP148471856	-9.2	-9.6	-9.6	1068	UMHMNP80981664	-9.4	-9.5	-9.6
1025	UMHMNP175861822	-8.3	-9.8	-9.6	1069	UMHMNP446862722	-8.2	-9.7	-9.6
1026	UMHMNP17974775	-9.7	-9.8	-9.6	1070	UMHMNP147641712	-8.4	-9.3	-9.6
1027	UMHMNP1981904	-9.5	-11.2	-9.6	1071	UMHMNP117021064	-8.6	-9.4	-9.6
1028	UMHMNP208708230	-8.9	-10.2	-9.6	1072	UMHMNP283605458	-9.0	-9.5	-9.6
1029	UMHMNP475111785	-8.6	-9.3	-9.6	1073	UMHMNP866025629	-10.6	-10.7	-9.6
1030	UMHMNP56121427	-9.8	-9.9	-9.6	1074	UMHMNP216770295	-9.1	-9.3	-9.6
1031	UMHMNP63015907	-8.2	-9.3	-9.6	1075	UMHMNP89837978	-9.1	-9.6	-9.6
1032	UMHMNP64285854	-8.3	-9.3	-9.6	1076	UMHMNP681226415	-9.5	-9.8	-9.6
1033	UMHMNP780755375	-9.7	-9.8	-9.6	1077	UMHMNP124843681	-8.7	-9.6	-9.6
1034	UMHMNP863684417	-8.1	-9.8	-9.6	1078	UMHMNP103065209	-9.6	-9.7	-9.6
1035	UMHMNP160098920	-10.6	-11.1	-9.6	1079	UMHMNP153209111	-9.0	-9.7	-9.6
1036	UMHMNP175861877	-9.6	-9.6	-9.6	1080	UMHMNP97190313	-8.7	-9.7	-9.6
1037	UMHMNP815586471	-8.5	-9.5	-9.6	1081	UMHMNP425368623	-9.3	-9.9	-9.6
1038	UMHMNP88191144	-10.8	-10.9	-9.6	1082	UMHMNP882693461	-8.9	-10.0	-9.6
1039	UMHMNP116079540	-9.1	-9.6	-9.6	1083	UMHMNP79580282	-8.1	-9.4	-9.6
1040	UMHMNP131727010	-10.9	-9.9	-9.6	1084	UMHMNP20512316	-8.1	-9.3	-9.6
1041	UMHMNP134985083	-9.3	-9.4	-9.6	1085	UMHMNP174286227	-8.5	-10.6	-9.6
1042	UMHMNP175861797	-8.3	-9.4	-9.6	1086	UMHMNP71947643	-9.5	-9.5	-9.6
1043	UMHMNP200497047	-8.2	-9.3	-9.6	1087	UMHMNP65717886	-8.7	-9.3	-9.6
1044	UMHMNP209169584	-8.1	-9.6	-9.6	1088	UMHMNP168482346	-8.4	-10.6	-9.6
1045	UMHMNP36011195	-9.4	-9.3	-9.6	1089	UMHMNP211358666	-8.3	-9.4	-9.6
1046	UMHMNP848132354	-9.5	-9.4	-9.6	1090	UMHMNP866025630	-9.1	-9.3	-9.6
1047	UMHMNP876756502	-8.5	-9.7	-9.6	1091	UMHMNP191112193	-9.3	-9.3	-9.6
1048	UMHMNP473256223	-8.7	-9.9	-9.6	1092	UMHMNP155233311	-8.5	-9.8	-9.6
1049	UMHMNP6758710	-9.5	-10.7	-9.6					

<sup>a</sup>Data sorted according to stage III docking score.

**Table S3.** Estimated fast, moderate, and expensive docking scores and MM-GBSA binding energies (in kcal/mol) over 1 ns implicit water solvent MD simulations for XF7 and the top 111 potent MNPs compounds within the 3CL<sup>pro</sup> binding pocket.<sup>a</sup>

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)			MM-GBSA Binding Energy (kcal/mol)
		Fast	Moderate	Expensive	
	XF7	-8.1	-9.2	-9.5	-40.0
1	UMHMNP26195584	-11.1	-11.5	-11.5	-45.3
2	UMHMNP133056094	-11.2	-11.5	-11.5	-44.9
3	UMHMNP14984668	-11.3	-11.7	-12.2	-44.8
4	UMHMNP148839036	-11.3	-11.6	-11.8	-44.0
5	UMHMNP1403367	-11.7	-12.2	-13.4	-42.5
6	UMHMNP101691127	-11.4	-12.1	-12.3	-42.2
7	UMHMNP791849666	-11.4	-11.9	-12.3	-41.8
8	UMHMNP143621754	-11.3	-11.7	-12.2	-41.5
9	UMHMNP133056072	-11.3	-11.6	-11.7	-41.3
10	UMHMNP386274857	-11.3	-11.6	-11.7	-40.6
11	UMHMNP874383707	-11.1	-11.5	-11.4	-40.5
12	UMHMNP221163300	-11.1	-11.4	-11.4	-40.2
13	UMHMNP109152387	-11.1	-11.4	-11.4	-40.2
14	UMHMNP156953912	-11.1	-11.4	-11.4	-39.7
15	UMHMNP706784727	-10.9	-11.3	-11.4	-39.6
16	UMHMNP5035303	-11.0	-11.4	-11.4	-39.6
17	UMHMNP77982800	-10.9	-11.2	-10.5	-39.5
18	UMHMNP73622238	-9.9	-10.1	-10.4	-39.4
19	UMHMNP64421201	-8.8	-9.5	-10.7	-39.3
20	UMHMNP745075278	-9.9	-10.0	-10.6	-39.1
21	UMHMNP147362376	-8.3	-9.3	-11.3	-38.7
22	UMHMNP852872925	-8.4	-9.7	-10.7	-38.3
23	UMHMNP552839802	-8.3	-9.3	-10.5	-38.1
24	UMHMNP151078921	-8.8	-10.7	-10.8	-38.0
25	UMHMNP64548169	-9.3	-9.5	-10.7	-37.7
26	UMHMNP70329281	-9.1	-10.1	-10.5	-37.5
27	UMHMNP157207915	-9.2	-10.8	-11.3	-37.3
28	UMHMNP151606405	-9.4	-9.8	-10.8	-36.6
29	UMHMNP86708329	-10.6	-10.7	-10.8	-36.5
30	UMHMNP664992272	-9.0	-10.1	-11.0	-36.4
31	UMHMNP106231258	-9.7	-9.7	-11.0	-36.4
32	UMHMNP474395	-8.2	-9.9	-10.5	-36.3
33	UMHMNP244157957	-8.7	-11.2	-10.5	-36.3
34	UMHMNP741259858	-9.1	-9.3	-10.5	-35.9
35	UMHMNP244157946	-8.6	-9.7	-10.7	-35.5
36	UMHMNP70139569	-8.2	-9.3	-10.7	-35.4
37	UMHMNP139765370	-8.1	-10.7	-10.8	-35.4
38	UMHMNP54369118	-9.0	-9.4	-11.0	-35.2
39	UMHMNP116407160	-8.7	-9.5	-11.3	-35.0
40	UMHMNP351443759	-8.8	-9.9	-10.7	-34.9
41	UMHMNP153212863	-8.2	-11.2	-11.2	-34.9
42	UMHMNP221163311	-9.6	-10.5	-10.8	-34.7
43	UMHMNP153212852	-8.4	-9.7	-11.3	-34.4
44	UMHMNP176447964	-9.0	-9.4	-11.2	-34.4
45	UMHMNP868395884	-9.1	-9.6	-10.5	-34.2
46	UMHMNP58670636	-9.5	-11.0	-11.0	-34.2
47	UMHMNP116302386	-9.4	-9.5	-10.7	-34.1
48	UMHMNP6673661	-9.6	-10.9	-10.9	-34.1
49	UMHMNP41410586	-8.4	-9.8	-10.7	-33.9

Table S3. Continued.

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)			MM-GBSA Binding Energy (kcal/mol)
		Fast	Moderate	Expensive	
50	UMHMNP862286702	-9.3	-9.7	-10.5	-33.9
51	UMHMNP148010406	-8.9	-10.6	-11.3	-33.8
52	UMHMNP107503093	-8.2	-9.7	-11.2	-33.6
53	UMHMNP124689652	-8.9	-9.4	-10.7	-33.3
54	UMHMNP150079951	-8.7	-9.3	-10.5	-33.2
55	UMHMNP131467000	-10.7	-10.8	-10.8	-33.0
56	UMHMNP393870332	-8.5	-9.3	-11.0	-32.9
57	UMHMNP253195403	-9.4	-9.5	-10.5	-32.9
58	UMHMNP184885890	-8.2	-9.3	-11.3	-32.8
59	UMHMNP142796314	-8.1	-10.7	-10.5	-32.7
60	UMHMNP174630070	-10.9	-11.0	-10.9	-32.5
61	UMHMNP272458341	-10.0	-10.3	-10.7	-32.5
62	UMHMNP125329091	-10.9	-9.9	-10.9	-32.2
63	UMHMNP86748314	-8.1	-9.3	-11.0	-32.2
64	UMHMNP171674923	-8.9	-10.8	-10.9	-32.1
65	UMHMNP260436291	-9.5	-9.7	-11.0	-32.0
66	UMHMNP757976673	-9.7	-9.8	-11.0	-31.9
67	UMHMNP827348072	-9.7	-9.7	-10.5	-31.9
68	UMHMNP100942743	-8.8	-11.2	-11.3	-31.9
69	UMHMNP142755133	-8.5	-9.3	-10.4	-31.8
70	UMHMNP54028465	-9.9	-9.8	-11.0	-31.7
71	UMHMNP162830264	-9.5	-10.4	-11.3	-31.6
72	UMHMNP745075245	-8.2	-9.3	-10.4	-31.3
73	UMHMNP116303	-9.5	-9.4	-11.2	-31.3
74	UMHMNP74185049	-10.0	-10.1	-10.6	-31.1
75	UMHMNP129350181	-8.1	-9.3	-10.5	-30.8
76	UMHMNP823808555	-8.4	-10.1	-11.3	-30.6
77	UMHMNP4030926	-8.8	-9.3	-10.7	-30.5
78	UMHMNP374819086	-8.9	-9.6	-10.5	-30.3
79	UMHMNP22033870	-8.6	-9.7	-11.3	-30.2
80	UMHMNP152110093	-10.2	-9.3	-10.6	-29.9
81	UMHMNP6673683	-9.5	-9.7	-10.6	-29.8
82	UMHMNP131466972	-8.2	-9.3	-11.3	-29.7
83	UMHMNP150050138	-10.7	-10.7	-11.3	-29.7
84	UMHMNP444987637	-8.3	-9.9	-10.6	-29.6
85	UMHMNP53296836	-9.9	-9.3	-11.2	-29.2
86	UMHMNP890041722	-10.8	-10.9	-10.9	-29.1
87	UMHMNP149764341	-8.9	-9.6	-11.3	-29.1
88	UMHMNP165815816	-8.6	-9.8	-10.6	-28.6
89	UMHMNP272458330	-9.2	-9.3	-10.7	-27.8
90	UMHMNP154205182	-9.9	-11.2	-11.3	-27.3
91	UMHMNP80981379	-9.2	-9.4	-10.4	-27.3
92	UMHMNP290824474	-8.9	-9.5	-10.5	-27.2
93	UMHMNP386274868	-8.8	-10.3	-10.4	-27.1
94	UMHMNP105404840	-10.0	-10.1	-11.3	-26.9
95	UMHMNP119108360	-8.9	-9.7	-11.1	-26.2
96	UMHMNP61369275	-8.7	-10.0	-11.0	-26.0
97	UMHMNP76915247	-9.6	-9.7	-11.3	-25.6
98	UMHMNP221169740	-8.4	-9.6	-11.3	-25.4
99	UMHMNP100942754	-9.1	-10.7	-11.3	-25.2
100	UMHMNP161470231	-8.9	-10.6	-10.9	-24.3
101	UMHMNP99528877	-10.4	-10.4	-10.4	-24.0
102	UMHMNP162830231	-8.8	-9.3	-10.7	-23.0
103	UMHMNP94203539	-9.9	-10.0	-11.0	-21.8
104	UMHMNP149444928	-9.1	-9.4	-11.3	-21.6
105	UMHMNP167172987	-8.4	-9.5	-11.3	-21.5

**Table S3.** *Continued.*

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)			MM-GBSA Binding Energy (kcal/mol)
		Fast	Moderate	Expensive	
106	UMHMNP143049143	-8.4	-9.3	-11.0	-21.4
107	UMHMNP157622601	-8.5	-9.8	-11.2	-16.5
108	UMHMNP143049165	-8.9	-10.6	-11.0	-12.2
109	UMHMNP2122987	-9.4	-9.4	-10.4	-11.9
110	UMHMNP2497747	-9.3	-9.3	-10.7	-11.8

<sup>a</sup>Data sorted according to MM-GBSA binding energy over 1 ns implicit water solvent MD simulation.

**Table S4.** Estimated fast, moderate, and expensive docking scores and MM-GBSA binding energies (in kcal/mol) over 1 ns implicit water solvent and 5 ns explicit water solvent MD simulations for XF7 and the top 13 potent MNPs compounds within the 3CL<sup>pro</sup> binding pocket.<sup>a</sup>

No.	Compound Name/Code	Docking Score (kcal/mol)			MM-GBSA Binding Energy (kcal/mol)	
		Fast	Moderate	Expensive	1 ns	5 ns
	XF7	-8.1	-9.2	-9.5	-40.0	-43.0
1	UMHMNP1403367	-11.7	-12.2	-13.4	-42.5	-55.2
2	UMHMNP101691127	-11.4	-12.1	-12.3	-42.2	-45.7
3	UMHMNP791849666	-11.4	-11.9	-12.3	-41.8	-45.1
4	UMHMNP14984668	-11.3	-11.7	-12.2	-44.8	-44.4
5	UMHMNP143621754	-11.3	-11.7	-12.2	-41.5	-42.4
6	UMHMNP148839036	-11.3	-11.6	-11.8	-44.0	-39.6
7	UMHMNP133056072	-11.3	-11.6	-11.7	-41.3	-38.4
8	UMHMNP386274857	-11.3	-11.6	-11.7	-40.6	-36.3
9	UMHMNP133056094	-11.2	-11.5	-11.5	-44.9	-35.4
10	UMHMNP26195584	-11.1	-11.5	-11.5	-45.3	-32.8
11	UMHMNP874383707	-11.1	-11.5	-11.4	-40.5	-32.5
12	UMHMNP221163300	-11.1	-11.4	-11.4	-40.2	-28.0
13	UMHMNP109152387	-11.1	-11.4	-11.4	-40.2	-27.9

**Table S5.** The estimated MM-GBSA binding energies (in kcal/mol) and relative binding energies ( $\Delta\Delta G_{\text{binding}}$ ) over 25 ns explicit water solvent MD simulations for XF7 and the top 5 potent MNPs compounds within the 3CL<sup>pro</sup> binding pocket.

Compound Name/Code	$\Delta G_{\text{binding}}$ (kcal/mol)	$\Delta\Delta G_{\text{binding}}$ (kcal/mol) <sup>a</sup>
XF7	-45.0	---
UMHMNP1403367	-57.5	-12.5
UMHMNP143621754	-46.8	-1.8
UMHMNP14984668	-45.9	-0.9
UMHMNP791849666	-45.3	-0.3
UMHMNP101691127	-45.2	-0.2

<sup>a</sup>  $\Delta\Delta G_{\text{binding}} = \Delta G_{\text{MNP}} - \Delta G_{\text{XF7}}$