

Supporting Information

Computational Method for Estimating Progression Saturation of Analog Series

Ryo Kunitomo,[#] Tomoyuki Miyao,[#] and Jürgen Bajorath*

Department of Life Science Informatics, B-IT, LIMES Program Unit Chemical Biology and
Medicinal Chemistry, Dahlmannstr. 2, Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität, D-53113
Bonn, Germany.

[#]The contributions of these authors should be considered equal.

Supplementary Table S1

Table S1. Analog series.

Scaffold	AID	Target name	Assayed compound CID list
[R1]C(=O)CSc1nn c(n1c2ccc(cc2)F)C c3cccn3C	485341	Beta-lactamase	5309713 5309573 5308841 5309730 5309409 5308162 3 236178 5309704 5308193 5308021 5308811 5307841 53 08992 5309579 5307849 5309876 5309240 5309173 530 8639 5307438 5309338 5307770 5308646 5307443 5308 984 5309404 5308367 3245868 5308019 5308008 53082 00 3239707 5308194 5308822 5309165 5309064 324448 7 5309865 5307846 5307603 5307604 5308668
[R1]C(=O)C1CCC N(C1)S(=O)(=O)c 2cccc3c2nsn3	686978	Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	9551241 3242612 16020140 16020152 3242967 323566 4 3238706 16020137 17588880 16020128 16000006 955 0281 15995816 3243654 16020113 16001304 3235633 1 6001305 2813340 16020131 6619603 3244329 3241185 15994844 16002895 3238029 16002716 15997305 1602 0082 16020116 15999698 20855732 3240186 16020084 3245391 16001902 6621933 9551219
[R1]OCC(=O)N(C C(C)C)c1c(n(c(=O)[nH]c1=O)Cc2ccc cc2)N	686978	Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	16367558 24982624 24687426 24819798 24980705 249 81307 24687897 24981476 24979540 24980189 249805 71 24983045 24980792 24816708 24687534 24980262 2 4687479 24687932 39903029 24687272 24983183 2468 7195 24687885 24818043 24687736 24978863 2498083 8 24980382 24980784 24983179 24981939 24819811 24 687765 24687362 24687760 7571571 24688013 249827 50 24980195
[R1]C(=O)CS(=O) (=O)Cc1c(oc(n1)c 2cccc(c2)OC)C	686978	Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	5307092 16008061 20860781 5308309 5309818 208607 27 20860783 5307631 3236024 20860750 5308507 5309 531 5309848 20860742 16008083 20860724 20860779 2 0860723 16008079 6622276 5307282 20860755 160080 81 20860749 20860777 16008085 3239528 20860741 16 008053 3240144 20860739
[R1]C(=O)C1(CC N1C(=O)Cc2ccc(c c2)c3ccccc3)C	686978	Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	46943548 49789274 46948072 46943128 49786447 497 78118 49790772 49789561 49792757 49795426 497789 04 49792666 46943611 46944009 49790748 49790223 4 9778478 49795821 49790462 49778247 49795595 4694 8577 49790916 46944051 49791251 46944138 4979261 4 49795187 49790272 49790525 49791129 46948386 49 790339 49795497
[R1]C(=O)C1CCN (CC1)S(=O)(=O)c 2cccc3c2nsn3	686978	Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	3275565 3241070 2328744 2065900 15990608 2328745 3237990 15990871 20853499 15996304 3236745 95512 32 3237437 20853496 20853498 2328743 16001880 159 90873 7437620 15990614 16194383 20853488 3235981 15990881 15990611 3243077 6621654 15990876 95512 33 15990616
[R1]C(=O)C1CCC (CC1)CNS(=O)(=O) c2cccc3c2nsn3	686978	Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	20862426 16008284 6622321 16008337 9551308 20862 343 16008307 20862418 16008339 16194480 20862414 16194457 20862394 16008301 9551310 16008303 2086 2374 9550221 16008309 9551312 16008341 6619612 20 862406 20862411 16008343 3244460 20862417 955131 1 20862379 16008345 20862324 16008331

[R1]N1CCN(CC1)C(c2ccccc2)c3cccc3	686978	Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	1186382 3192043 23724273 885644 16682549 5308036 2877335 663320 993406 2922351 902950 2809697 67533 23724216 5353532 24820040 741176 649238 3237463 2877708 3192041 644490 2910742 2877676 4741586 718736 808806 597354 16189400 661389 3860526 1358608 2324329 1482470
[R1]C(=O)c1ccc2c(c1)oc(n2)Cc3ccc(cc3)OC	686978	Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	23723935 24790874 24791217 24792948 24819459 24819576 24790209 23723980 23724021 24817039 16029812 23723995 24791749 24817377 24790208 23723397 24791026 24790227 24792977 24790494 25381440 24793196 24819192 24793803 16029814 24790186 16029852 23723937 42287872 24816935 16029822
[R1]C(=O)C1CCN(CC1)c2c3c(ncn2)n4c(n3)CCCC4	686978	Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	20912459 24792110 20912508 16021503 16021639 16021505 20912577 16021643 20912608 16034585 16021517 16021817 20912501 16021543 16021539 20912572 16021581 16021819 16021537 16021815 20912571 20912439 20912445 16021509 16021571 16021511 20912435 16021545 16021535 16021577 16021599 16021513 16021575 16021239 20912446 16021579
[R1]C(=O)c1ccc2c(c1)S(=O)(=O)c3cccc3C2=O	686978	Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	4845254 18129737 2085752 18104837 24747282 390891 40118 3451338 2573157 7742116 2335385 2335386 2331605 16196088 24688033 24688097 16196374 2374909 18106605 2124414 4848676 9245722 3389416 2512099 7732724 24677546 4851674 2335416 2443473 24747281 4294847 2419771 8874377 2310768
[R1]C(=O)c1cc(ccc1N2CCOCC2)S(=O)(=O)N3CCCCC3	686978	Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	16250058 3386140 16314658 16314014 2116743 4240912 2433199 4801278 2123938 24686097 2093009 2117968 16578765 24819714 24978907 2998561 16290344 4794726 24980211 24980872 4291700 3689276 16543799 4851275 2641100 24979527 3452399 16279501 16543802 3916428 9503329 24979571 2998382 4849374 24818082 24686348 4822263 2475489 5151913 4834367 25344859 2117883 4849818 2118407
[R1]N(C)CC1C(CN(S(=O)(=O)c2ccc(cc2O1)Br)C(C)CO)C	686978	Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	46903710 46904098 46904207 46903314 46904221 46903354 46903708 46904090 46903707 46904200 46904129 46904101 46904211 46904195 46903355 46904219 46903956 51358901 46903331 46903332 46903704 46904217 46904130 46904215 46904206 46903325 46904066 46904095 46903955 46903313 46904201 46904210 46903953 46904134 46903323 46903327 46904100 46904216 46903705 46903703 46904208 46903328 46903711 46903326 51358859 51358869 46904091

[R1]C(=O)c1ccc(c1)OC2CCN(CC2)C(=O)COC	686978	Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	24816956 24793823 24816958 24790117 24817650 23723862 24790703 24790828 16192278 24790592 24794254 24791057 24793417 24791661 24817411 23723865 24816851 24819188 24793913 24790802 24793942 24791331 24793436 24819466 23723983 24791843 24819310 16188431 24791761 24791234 24791212
[R1]C(=O)C1CCCN(C1)c2c3c(ncn2)n4c(n3)CCCCC4	686978	Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	20912255 16021785 20912293 20912219 20912227 16021789 20912277 20912386 20912433 20912391 20912278 16021813 20912351 20912285 20912373 20912400 16034583 6625875 20912224 16021755 20912316 16021781 16021779 20912307 20912231 20912341 16021811 20912339 20912343 20912294 20912300 16021753 20912398 16021757 20912229 20912239 22334742 20912368 20912426 20912299 20912279 20912267 16034581 20912378 20912399 16021787 16021807 20912305
[R1]C(=O)c1ccc(c1)OC2CCN(CC2)Cc3ccccc3	686978	Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	24791264 16192009 24792946 16191810 16190300 24790747 24790145 24816727 24793188 24790439 16192141 24790773 24794269 24817810 16190034 24794214 24817482 24818967 24791385 24817089 24790505 16188958 44171471 24819449 24792978 16187445 24790465 24817790 24790676 24817125 16190283 24790579 24817093 24790444 24792068 16188421 16187262 16189163 24790165 24819503 24791099
[R1]C(=O)C1CCCN(C1)S(=O)(=O)c2ccccc2n3	686979	Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	9551241 16020128 16020140 16020135 16020152 3242967 3235664 3240096 3239375 17588880 16020137 3242612 16000006 15995816 3243654 16001304 6619603 16001305 2813340 16020131 9551220 16194390 15994844 16002895 3243220 3238029 15997305 16020082 16020116 15999698 9550281 16020084 6621933 16020058
[R1]N(C)CC1C(CN(C(=O)c2c(c3cccc3n2C)-c4ccccc4CO1)C(C)CO)C	686979	Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	46903271 46903274 46903303 46903260 46903281 46903293 46903290 46903258 46903264 46903265 46903280 46903829 46903295 46903267 46903289 46903298 46903287 46903285 46903300 46903273 46903305 46903297 46903299 46903291 46903282 46903302 46903304 46903288 46903262 46903286 46903277 46903259 46903261

[R1]N(C)CC1C(CN(C(=O)CCn2c(cnn2)CO1)C(C)CO)C	686979	Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	44506072 44505186 44492059 44496392 44505590 44505781 44504931 44505737 44494078 44505071 44493584 44506078 44505044 44504950 44505598 44505724 44505181 44505875 44489274 44505466 44496406 44505017 44505932 44505183 44505175 44505774 44505645 44489278 44505612 44505903 44505986 44504972 44505123 44488157 44505957 44504937 44495432 44495434 44505233 44498551 44506074 44506049 44505881 44505189 44505056 44505350 44506092 44505348 44506020 44495437 44505609 44505411 44506076 44505170 44505779 44489280 44505984 44505910 44505651 44495959 44498560 44505232 44505552 44505453 44494076 44505352 44505172 46903250 44485736
[R1]C(=O)c1ccc(c1)OC2CCN(CC2)C(=O)CCOC	686979	Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	24790172 24790451 24792065 24792063 24817383 24817584 24791397 24790730 24793016 24817813 24794212 24790573 24817401 24819396 24819478 45224140 24817393 24790437 24790646 24791988 24791111 23723555 24790430 23723529 24817381 24790520 23723788 24817754 25451404 24793112 24817432 23723353 24791066 24817108
[R1]N1CCN(CC1)C(c2ccccc2)c3ccccc3	686979	Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	1186382 3192043 666380 2442391 5308036 2877335 993406 902950 2809697 67533 1485885 1289403 5353532 24820040 796302 1178067 2809754 2088777 3430107 1358608 2877708 3192041 885644 2910742 644490 2877676 4741586 1547484 808806 597354 16189400 661389 2956553 3860526 20958593 2324329 741176 1076661
[R1]C(=O)c1cc(cc1N2CCOCC2)S(=O)(=O)N3CCCCC3	686979	Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	3452399 2640929 16250058 16314014 4240912 2433199 2640943 4801278 16314658 24686097 2093009 16578765 24819714 24978907 2998561 16290344 2472948 24980211 4834367 3386140 4849723 16543799 4851275 24979527 4794726 16279501 3916428 9503329 24979571 2998382 3689276 24818082 4822263 2475489 2123938 5151913 24980872 25344859 2117883 4849818 2118407
[R1]C(=O)C1c2ccccc2Oc3c1cccc3	686979	Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	1221732 2970994 725576 709846 2862644 669614 6602790 670827 699666 742987 743804 2939606 1246885 1928115 3236180 1984529 2380057 977577 1932603 3151963 214169 1116305 3248763 718111 2905426 717579 1928177 1931819 659939 3137305 24748013 718106 718110

[R1]N(C)CC1C(CN(S(=O)(=O)c2ccc(cc2O1)Br)C(C)CO)C	686979	Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	46903710 46904207 46903314 46904221 46903708 46904196 46903707 46904200 46903318 46904101 46904088 46903316 46903313 46904195 46903355 46904219 46903956 51358901 46903331 46903332 46903711 46903704 46904217 46904130 46904215 46904206 46903320 46904066 46904092 46903334 46903354 46903954 46904210 46903953 46904134 46903336 46903323 46903315 51358859 46903705 46903703 46904208 46904220 46903326 46904205 51358869 46904202
[R1]C(=O)c1c2c3c4cccc3n(c2c(=O)n(n1)c4ccc(cc4)OC)C	686979	Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	15990995 3245156 16020091 5307294 15990993 16020099 16193504 3235918 16020009 16020103 16020062 16020101 6621876 16020072 15990991 15990989 16020064 15991019 16020093 16020036 15991021 15991001 16020047 16020035 16020095 16020019 3236606 16020089 16020011 16020037
[R1]C(=O)C1CCC(N(C1)c2c3c(ncn2)n4c(n3)CCCC4	686979	Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	20912255 16021785 20912293 20912219 16021811 16021789 20912277 20912291 20912286 20912433 20912391 16021813 20912351 20912284 20912285 16034581 16034583 6625875 16021755 20912316 16021779 20912229 20912231 20912341 20912227 20912339 20912300 20912265 20912292 16021753 20912307 15987602 22334742 20912386 20912267 16021783 20912378 20912398 16021787 20912400
[R1]C(=O)C1CCN(CC1)S(=O)(=O)c2ccc3c(c2)CC(N3C(=O)C)C	686979	Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	16021461 20901895 20901945 16019496 20901879 20901920 20901941 16021460 20901908 20901932 20901927 20901877 20901880 20901942 20901921 20901936 20901925 20910594 20901919 20910601 20901890 20910600 20901926 20901884 20901882 20901892 20901897 20901923 20901928 20901873
[R1]C(=O)c1ccc(c1)OC2CCN(CC2)Cc3cccn3	686979	Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	24791264 16192009 24792946 24792068 24817235 24791011 16190300 24790145 24816727 24793188 24790439 16192141 24790773 24817810 16190034 24794214 24817482 24818967 24791385 24817089 24790505 16188958 44171471 24819449 16187445 24790465 24817790 24790676 24817125 16190283 24790579 24817093 16191810 16188421 24792119 16189163 24790165 24819503 24792978

[R1]C(=O)C1CCC N(C1)c2c3c(ncn2) n4c(n3)CCCC4	652104	TAR DNA-binding protein 43	20912255 16021785 20912293 16021811 16021789 209 12277 20912291 20912386 20912286 20912341 209123 91 20912239 20912351 20912399 16021777 20912373 2 0912284 20912346 6625875 20912224 20912374 16021 755 20912316 16021779 20912229 20912231 16034581 20912398 20912339 20912343 20912300 24793629 209 12292 16021753 16021757 20912380 20912394 160218 13 15987602 20912434 20912275 20912299 20912279 2 0912267 6625832 16021783 20912301 20912378 20912 400 20912265 16021787 24792045 16021807 20912305 20912429
[R1]C(=O)CNC(=O) c1c2cccc2c(=O))n(n1)c3ccc(cc3)O C	504467	ATPase family glucagon like peptide 1 receptor	5073112 3427503 11957274 4229929 15994628 422993 1 4229926 22421613 5155222 3423835 5073298 507329 6 4229933 5073289 22421602 16193117 5073286 22421 611 3242338 22421616 22421606 3427500 5073114 507 3115 15992264 16000190 3427505 3239051 16193207 4 229928
[R1]C(=O)c1cc(cc c1N2CCOCC2)S(=O)(=O)N3CCCC C3	504467	ATPase family glucagon like peptide 1 receptor	16250058 2640892 16314014 2116743 2433199 480127 8 16304608 16314658 24686097 2117968 24819714 249 78907 2998561 16290344 4794726 4834367 4291700 16 304609 24978939 16300637 4851275 24979527 345239 9 16279501 16543799 24979571 4849374 4545742 4852 767 2472948 4822263 2475489 2123938 24980872 2118 407
[R1]C(=O)C1CCC N(C1)c2c3c(ncn2) n4c(n3)CCCC4	504467	ATPase family glucagon like peptide 1 receptor	20912255 20912341 20912275 20912227 16021789 209 12222 20912434 20912386 20912286 20912433 209123 51 20912373 20912400 6625875 20912224 20912316 20 912294 20912231 20912323 20912398 20912339 20912 277 20912300 20912265 20912292 20912380 20912394 20912429 22334742 20912368 20912426 20912279 209 12267 20912301 20912378 20912399 24792045 209123 05 20912239
[R1]C(=O)c1cc(nc 2c1cccc2)c3ccc(cc 3)OC	588342	Firefly luciferase	1173898 25163483 757621 1734583 7660311 1124656 2 105177 4314187 1767747 4115109 2933408 2711802 20 91261 2089464 25237306 2977981 2105146 16414808 7 57627 2089466 2259442 2334881 4398374 2092251 122 1201 2302351 25237207 2932435 2357008 757623 3690 908
[R1]C(=O)CNC(=O) c1c2cccc2c(=O))n(n1)c3ccc(cc3)O C	588342	Firefly luciferase	5155219 4229928 5073112 3427503 11957274 4229929 15994628 4229931 4229926 22421614 22421613 51552 22 5073296 3427502 3423835 5073298 22421601 42299 33 4229927 5077853 5073297 22421600 22421602 5155 221 22421607 5073286 22421611 3242338 22421616 32 36326 22421606 3427500 5073114 5155217 5073115 15 992264 16193117 4229924 16000190 3427505 3239051 16193207 5073289

[R1]C(=O)c1ccc2c(c1)oc(n2)Cc3ccc(cc3)OC	588342	Firefly luciferase	24791026 24790874 24791217 24792948 24819459 24819576 23723678 23724079 24790209 24791090 16029816 24790777 24817039 16029812 24791749 24817377 24792977 23723397 23723934 24790079 24790494 24819192 24793803 16029820 16029814 24790186 24791657 16029852 24790208 24816935 16029822
[R1]N(C)CC1C(CN(C(=O)c2cc(cnc2O1)Br)C(C)CO)C	624287	Guanine nucleotide-binding protein G(s) subunit alpha isoforms short	46903902 46903894 46903914 46904243 46903909 46904242 46903812 46903917 46904074 46904254 46904077 46903896 46904258 46904108 46903816 44490305 46903912 46903926 46904071 46904110 46904245 46903911 46904117 46904067 44496831 46903892 46903928 46903811 46904261 46903920 46904120 46904246 46904075 46903904 46904240 46903950 46903905 46904256 46904250 46904070 46903915 46903908 46904119 46903897 46904113 46904260 46904123 46904121 46904241 46903951 46904080 46903895 46904251 46903923 46903919 46903918
[R1]N1CCN(CC1)C(c2ccccc2)c3ccccc3	1461	Neuropeptide S receptor	1186382 3192043 666380 1293145 2442391 2385988 3192040 5308036 2877335 663320 993406 902950 2809697 1485885 1289403 1358608 796302 1178067 2088777 796303 1208293 649238 3237463 808806 3192041 644490 2910742 2877676 1547484 2877708 3244419 789874 597354 16189400 661389 3860526 1076661 3192042
[R1]OCC(=O)Nc1cccc(c1)S(=O)(=O)NC2=NCCCCC2	485367	ATP-dependent 6-phosphofructokinase	16549997 4036552 5997229 16550000 3901789 6177132 5204354 8913492 5042170 3525948 16549995 6048013 4664437 4410458 25162024 4377778 24401253 4603685 25163699 5104961 4262418 16549996 16549998 3982526 3381464 4178437 24819867 25162368 3933895 4591220 24817950 4279458 4258124
[R1]C(=O)C1CCN(CC1)c2c3c(ncn2)n4c(n3)CCCCC4	1479	Thyroid hormone receptor beta	16021503 16021637 16021639 16021541 16021643 16021821 16034585 16021517 16021817 16021573 16021539 16021579 16021581 16021819 16021537 16021815 16021543 16021613 16021611 16021509 16021571 16021511 16021545 16021609 16021535 16021577 16021599 16021513 16021575 16021239
[R1]C(=O)CN(c1ccc(cc1)OCC)S(=O)(=O)c2c(noc2C)C	504444	Nuclear factor erythroid 2-related factor 2	3236341 3239701 5308694 5309294 5308183 20858905 16007611 5307319 5309496 5309129 5308524 4121115 5309344 5308594 5309468 5309688 16007613 20858911 5307744 5307724 5307214 20858912 20858914 20858898 5307973 16007615 5307550 5309870 5308971 5308954

[R1]C(=O)c1cc(cc1N2CCOCC2)S(=O)(=O)N3CCCCC3	504444	Nuclear factor erythroid 2-related factor 2	16250058 2640892 3689276 16314658 4849624 16314014 2116743 4240912 2433199 4801278 16304608 2123938 24819714 24978907 2998561 4367314 4794726 24980211 24980872 4291700 16304609 4849723 16300637 16543799 16290344 4851275 2641100 24979527 3452399 9503329 16543803 4849374 4545742 16279501 2472948 4822263 2475489 4834367 4849818
[R1]N1CCN(CC1)C(c2ccccc2)c3cccc3	624330	Rac GTPase-activating protein 1	1186382 3192043 666380 1293145 23724273 24747020 885644 902950 2385988 16682549 3192040 2809776 1075974 663320 993406 2922351 24820040 1334635 5308036 2809697 4741586 1485885 23724216 1289403 70048 718736 2406292 23724282 1358608 796302 1178067 2809754 2088777 23724265 3430107 796303 1208293 649238 3237463 2877708 3192042 3192041 2442391 2910742 644490 2877335 2877676 6420019 23724260 1547484 808806 3244419 789874 597354 16189400 661389 2956553 3860526 20958593 2324329 1076661 1482470
[R1]N1CCN(CC1)Cc2ccc3c(c2)OCO3	624330	Rac GTPase-activating protein 1	1965646 23724251 670803 773148 24746817 2838447 2905103 16189449 897932 3157432 16195060 16192957 94426 791274 16192596 1245692 783485 670283 1245914 671069 791209 201764 704380 763967 2811112 670796 9549344 714646 2811109 791168 16189425 862174 198798 2992046 24761117 2811605 8129803 3038520 3192010 896230 2454274 3290710 16241437 5308392 3820477 1137490
[R1]C(=O)c1ccc2c(c1)oc(n2)Cc3cccc(c3)OC	624202	Breast cancer type 1 susceptibility protein	23723934 24790874 24791217 24792948 24819459 24819576 23723678 23724079 24790209 24791090 24790777 24791026 16029812 23723995 24791749 24790227 24790208 24817039 23723397 23723935 24790079 24792977 24790494 25381440 24819192 24790186 24791657 23723937 42287872 24816935
[R1]OCC(=O)N(C(COC)c1c(n(c(=O)[nH]c1=O)Cc2cccc2)N	588590	DNA polymerase iota	24687518 24980062 24980548 24982478 24979030 24687740 24819933 24979234 24688044 24983225 24980570 24688003 24818139 24982452 24981984 16347968 24979767 24978636 24688060 24979371 16285149 24979642 24818118 24982462 16276755 24980495 24980523 24979394 24687716 8588737 24687707 24978823 24982795 24818138 24856281 18277682 24687686 24687913 25102503 24980528 24981157 24979337 16369894 24819929 24982055 24981714 25102411 24816732 24980336 24982494 24979142 24982059 25102363 24982955

[R1]Nc1cc(cc2c1ncc2C(C)C)OC(CC)CO	624296	Geminin	44143062 44143101 44143066 44143077 44143094 44143106 44143095 44143093 44143075 44143108 44143060 44143100 44143107 44143085 44143096 44143065 44143070 44143047 44143061 44143064 44143099 44143063 44143053 44143078 44143052 44143102 44143097 44143111 44143112 44143087 44143086
[R1]OCC(=O)Nc1cccc(c1)S(=O)(=O)NC2=NCCCCC2	720504	Serine/threonine-protein kinase PLK1	16549997 4036552 5997229 16550000 4968895 3901789 6177132 5204354 8913492 5042170 24686124 3525948 25163118 16549995 6048013 4410458 25162024 4377778 4262418 24401253 4603685 25163699 5104961 3417627 16549996 16549998 3982526 3381464 4178437 24819867 25162368 3933895 4591220 24817950 4279458 4258124
[R1]C(=O)c1ccc(cc1)OC2CCN(CC2)C(=O)CCOC	720504	Serine/threonine-protein kinase PLK1	24790172 24790451 24792065 24792063 24817383 24817584 24790239 24791397 24791116 24791289 24790730 24793016 24819478 24794212 24790573 24817401 24819396 24817813 45224140 24817393 24790437 24790646 24816923 24791988 24791111 23723555 24790430 23723529 24817381 24790520 23723788 24817754 25451404 24793112 24817432 23723353 24791066 24791229 24817108
[R1]Nc1cc(ccc1N2CCCC2)S(=O)(=O)N3CCOCC3	720504	Serine/threonine-protein kinase PLK1	16282216 4337594 4287235 5207383 4876694 3945324 16315565 16291637 4284114 4797771 18083658 5190535 4337596 4881318 15945364 4881660 4033193 16321430 16316751 3609499 16295580 4269617 4464021 9117152 3898981 24686575 3902670 4411088 16317322 5039304 4831361 16315480 4325672
[R1]C(=O)C1CCN(CC1)S(=O)(=O)c2ccc3c(c2)CC(N3C(=O)C)C	720504	Serine/threonine-protein kinase PLK1	20901888 20901898 20910589 20901947 20901895 20910601 20901896 20901945 20901879 20901899 20901941 20901921 16021460 20901908 20901932 20901875 20901927 20901920 20901877 20901880 20901942 20910597 20901936 20901909 20901925 20910594 20901939 20901923 20910591 20901890 20910600 20901926 20910592 20901916 20901938 20901874 20901882 20901943 20901897 20901919 20901928 20901873
[R1]N1CCN(CC1)S(=O)(=O)c2ccc(c2)OC	504333	Bromodomain adjacent to zinc finger domain protein 2B	24792336 828758 1087315 1078633 843240 717180 756017 753490 660773 858314 17376128 2878303 2456967 6470839 2881103 2595238 1360786 2456928 2955338 1147989 1340106 17366058 797560 17191310 6469828 5300804 676048 2671235 1147613 3674699 17366197
[R1]N1CCN(CC1)S(=O)(=O)c2ccc(c2)NC(=O)C	504333	Bromodomain adjacent to zinc finger domain protein 2B	764494 1151697 1151655 1342572 4240480 1293819 653635 1506084 2815598 1041299 1506085 4122065 1257623 2997304 1341058 2902188 3497946 16192557 2834849 991658 1298827 574577 16192573 991630 1265650 2902955 2842427 1261048 9549441 1147635 2853034 1151669 1235062 2901483 1075639 3161661 1088814

[R1]N1CCN(CC1)C(c2ccccc2)c3ccccc3	504333	Bromodomain adjacent to zinc finger domain protein 2B	1186382 3192043 666380 23724265 23724273 24747020 885644 902950 2385988 16682549 3192040 5308036 1075974 663320 993406 2922351 24820040 2809697 4741586 1485885 1289403 70048 2406292 23724282 1358608 796302 1178067 2809754 2088777 3430107 796303 1208293 1334635 2877708 23724260 3192041 2442391 2910742 644490 2877335 2877676 6420019 718736 808806 3244419 789874 661389 2956553 3860526 20958593 3192042 1076661
[R1]N1CCN(CC1)Cc2ccc3c(c2)OCO3	504333	Bromodomain adjacent to zinc finger domain protein 2B	1965646 23724251 670803 773148 24746817 2838447 2905103 897932 3157432 16192957 94426 791274 16192596 1245692 783485 670283 1245914 671069 791209 201764 704380 763967 2811112 670796 9549344 714646 2811109 16189425 862174 198798 2992046 24761117 2811605 23581808 3192010 3290710 16241437 5308392 3820477 1137490
[R1]N1CCN(CC1)S(=O)(=O)c2ccc(c2)C	504333	Bromodomain adjacent to zinc finger domain protein 2B	6465212 740954 2047038 1148082 2169034 2928101 2427476 269717 777589 2444361 2102315 720863 2673930 17366414 17366248 1272766 703908 6469994 720576 4784720 2822709 77620 976855 16188491 3708238 2167092 740953 787171 849899 735815 873509 717239 2929737 2545623 2106955 654762
[R1]N1CCN(CC1)S(=O)(=O)c2ccc(c2)F	504333	Bromodomain adjacent to zinc finger domain protein 2B	1094976 17377878 9115901 6470268 2460829 1245368 2664136 2207530 655915 4410795 2902800 711091 4820506 846131 719621 2664137 975834 6469364 646142 6467380 1263051 16192571 759033 16322155 2595240 1094979 735816 717938 1151433 1094975 3238483 5300805 2902280 704436 2710694
[R1]C(=O)c1ccc(c1)OC2CCN(CC2)Cc3ccccc3	504333	Bromodomain adjacent to zinc finger domain protein 2B	24791264 16192009 16191810 24791011 16190300 24790145 24816727 24790439 16192141 24790773 24791409 24817810 16190034 24794214 24817482 24791385 24817089 24790505 16188958 24819449 24792978 24792118 16187445 24790465 24817790 24817125 16190283 24790579 24790444 24792068 16188421 24790747 24792119 16189163 24790165 24819503 24791099 24817101
[R1]N1CCN(CC1)S(=O)(=O)c2ccc3ccccc3c2	504339	Lysine-specific demethylase 4A	7997769 2405875 3269686 8194744 2082730 2129377 2437623 2986639 2108800 1094974 2902943 3150874 2470199 18105472 4875634 2901709 2446114 1317131 2242687 6468408 3145547 1151508 973966 3890866 1151521 703957 872090 16283830 1151515 1094973 2235691 16241885 2442477 24747454 2901944

[R1]N1CCN(CC1)S(=O)(=O)c2ccc(c2)OC	504339	Lysine-specific demethylase 4A	2556465 828758 1087315 1078633 24792336 843240 717180 756017 753490 660773 858314 17376128 2878303 897205 2456967 6470839 2881103 2595238 651944 1360786 2456928 2955338 1340106 17366058 797560 17191310 6469828 5300804 676048 2671235 1147613 1122459 3674699 17366197
[R1]N1CCN(CC1)S(=O)(=O)c2ccc(c2)NC(=O)C	504339	Lysine-specific demethylase 4A	764494 6603065 9549441 1151655 1342572 4240480 1293819 653635 1147635 2815598 1041299 1506085 4122065 1257623 2997304 1341058 2902188 3497946 16192557 2834849 991658 1298827 574577 16192573 991630 1265650 2902955 2842427 1261048 6469424 1506084 2853034 1151669 1235062 2901483 1075639 3161661 1088814
[R1]N1CCN(CC1)C(c2ccccc2)c3ccccc3	504339	Lysine-specific demethylase 4A	1186382 3192043 666380 23724265 23724273 24747020 885644 902950 2385988 16682549 3192040 2809776 1075974 663320 2922351 24820040 5308036 2809697 4741586 1485885 23724216 1289403 70048 718736 2406292 23724282 1358608 796302 1178067 2809754 2088777 23724260 3430107 741176 796303 1208293 649238 1334635 2877708 3192042 3192041 2442391 2910742 644490 2877335 2877676 6420019 1547484 808806 3244419 789874 597354 16189400 661389 2956553 3860526 20958593 2324329 1076661 1482470
[R1]N1CCN(CC1)Cc2ccc3c(c2)OCO3	504339	Lysine-specific demethylase 4A	24762036 1965646 23724251 670803 773148 24746817 2838447 2905103 16189449 897932 3157432 16195060 16192957 94426 100984 16192596 1245692 783485 670283 1245914 671069 791209 201764 704380 763967 841695 2811112 670796 9549344 714646 2811109 791168 16189425 862174 198798 2992046 791274 24761117 2811605 8129803 3038520 3192010 896230 2454274 3290710 16241437 5308392 3820477 1137490
[R1]N1CCN(CC1)S(=O)(=O)c2ccc(c2)C	504339	Lysine-specific demethylase 4A	6465212 740954 2047038 1148082 2169034 7535246 2427468 2928101 2427476 269717 777589 2444361 2102315 720863 2673930 17366414 17366248 1272766 703908 6469994 720576 4784720 2822709 77620 976855 16188491 3708238 764400 740953 787171 849899 735815 856931 873509 717239 2929737 2545623 2106955 654762

[R1]C(=O)c1ccc(cc1)OC2CCN(CC2)Cc3cccn3	504339	Lysine-specific demethylase 4A	24791264 16192009 24792946 24792068 24817235 24791011 16190300 24790747 24817790 24790145 24790505 24790439 16192141 24790773 24791409 24794269 24816727 24791294 24794214 24817482 24818967 24791385 24817089 24817810 16188958 24819449 24792978 16187445 24790465 24790488 24790676 24817125 16190283 24790579 24790444 16191810 16188421 16187262 24792119 16190034 24819503 24791099 24817101
[R1]C(=O)c1cc(ccc1N2CCOCC2)S(=O)(=O)N3CCCCC3	624417	Glucagon-like peptide 1 receptor	4849624 3452399 2640929 3386140 2640892 3689276 16314658 16250058 16314014 2116743 4240912 4849723 2433199 2640916 4801278 2123938 24686097 2093009 16578765 24819714 24978907 2998561 2472948 24980211 4834367 4291700 16304609 24978939 16300637 16543799 4851275 24979527 4794726 3916428 9503329 24979571 2998382 4849374 4545742 4852767 4440644 4822263 2475489 24980872 2118407
[R1]C(=O)C1CCCN(C1)c2c3c(ncn2)n4c(n3)CCCCC4	624417	Glucagon-like peptide 1 receptor	20912255 16021785 20912275 20912219 16021811 20912343 20912434 20912286 20912391 20912278 20912351 20912285 16021777 16034583 20912265 6625875 16021755 16021781 16021779 20912229 20912339 20912294 24793629 16021753 16021757 20912380 20912394 15987602 20912299 20912373 20912386 16021783 20912378 20912399 16021787 24792045 16021807 20912305 20912429
[R1]N1CCN(CC1)C(c2ccccc2)c3ccccc3	2551	Nuclear receptor ROR-gamma	1186382 3192043 666380 1293145 23724273 24747020 885644 902950 2385988 16682549 3192040 2809776 1075974 663320 993406 661389 24820040 1334635 5308036 2809697 6726 1485885 1289403 70048 1547484 2406292 23724282 1358608 796302 1178067 2809754 2088777 3430107 796303 1208293 649238 3237463 2877708 23724260 3192041 644490 2910742 718736 2877335 2877676 4741586 5353532 808806 3244419 789874 597354 16189400 2922351 2956553 3860526 20958593 3192042 1482470
[R1]C(=O)COC(=O)c1cc(ccc1N2CCOCC2)[N+](=O)[O-]	624327	Fatty acid synthase	16959066 16959065 16542150 16542089 16959024 16959044 16959042 16542101 16280467 16542151 7404270 16542091 24982449 25162050 7404267 24817951 24982398 24819998 7404282 24687427 24687991 24818124 9111282 16959059 16959045 16542152 16542086 7404239 24818143 24981005 24687295 24980216
[R1]C(=O)COC(=O)c1cc(ccc1N2CCOCC2)[N+](=O)[O-]	624326	Fatty acid synthase	16959066 16959065 16542150 16542089 16959024 16959044 16959042 16542101 16280467 16542151 7404270 16542091 24982449 25162050 7404267 24817951 24982398 24819998 7404282 24687427 24687991 24818124 9111282 16959059 16959045 16542152 16542086 7404239 24818143 24981005 24687295 24980216

[R1]C(=O)CS(=O)(=O)Cc1c(oc(n1)c2cccc(c2)OC)C	485364	Thioredoxin glutathione reductase	5307092 16008061 20860729 20860781 5307967 20860716 20860739 5307631 5308176 20860750 5308507 5309531 5309848 20860742 16008083 20860724 20860779 9550783 16008079 6622276 5307282 6622245 20860748 16008081 16008059 16008085 3240144 16008055 20860719 20860727
[R1]OCC(=O)N(C(C)C)c1c(n(c(=O)[nH]c1=O)Cc2cccc2)N	504332	Euchromatic histone-lysine N-methyltransferase 2	24980189 16367558 24982624 24687426 24980705 25162684 24981307 24687932 24979540 24687940 24980792 24687885 24687534 24980262 24687479 24980207 24983179 24980890 24687195 24983183 24980295 24818043 24687272 24978863 25162355 24687990 24980382 24980784 24981939 24819811 24687765 24687362 7571571 24688013 24982750 24982008 24980195
[R1]N1CCN(CC1)S(=O)(=O)c2ccc(c2)NC(=O)C	504332	Euchromatic histone-lysine N-methyltransferase 2	1342572 1151697 1151655 764494 4240480 16192573 653635 1147635 1041299 1506085 4122065 1257623 1235062 2902188 3497946 16192557 991658 1298827 574577 991630 1265650 2902955 1261048 6469424 1506084 2853034 1151669 1075639 3161661 1088814
[R1]N1CCN(CC1)C(c2cccc2)c3cccc3	504332	Euchromatic histone-lysine N-methyltransferase 2	1186382 3192043 666380 1293145 23724273 24747020 2442391 902950 2385988 16682549 3192040 16189400 2877335 993406 24820040 1334635 6726 1485885 1289403 70048 5353532 23724282 1358608 796302 1178067 2809754 23724265 3430107 796303 1208293 649238 3237463 2877708 3192042 3192041 644490 718736 1482470 1547484 808806 789874 597354 2809776 661389 3860526 20958593 2324329 1076661 5308036
[R1]OCC(=O)N(C(COC)c1c(n(c(=O)[nH]c1=O)Cc2cccc2)N	504332	Euchromatic histone-lysine N-methyltransferase 2	24687518 24980062 24980548 24982237 24979030 24687740 24979234 24983225 24980570 24688003 24818139 24982452 24979767 24978636 24688060 24979371 16285149 24979642 24818118 24982462 24980495 24982478 24687716 8588737 24980523 24982795 24818138 24856281 24981984 24687913 24980336 24980528 24979337 16369894 24819929 24981714 25102411 24979394 24982494 24979142 24982059
[R1]N1CCN(CC1)Cc2ccc3c(c2)OCO3	504332	Euchromatic histone-lysine N-methyltransferase 2	1965646 23724251 671069 773148 2838447 16189449 897932 16195060 16192957 94426 791274 16192596 1245692 670283 1245914 791209 201764 763967 2811112 670796 9549344 714646 198798 791168 16189425 862174 2992046 24761117 2811605 23581808 3192010 896230 2454274 3290710 16241437 5308392 1137490
[R1]N1CCN(CC1)S(=O)(=O)c2ccc(c2)C	504332	Euchromatic histone-lysine N-methyltransferase 2	6465212 740954 2047038 1148082 2169034 2928101 2427476 777589 2444361 2102315 720863 2673930 17366248 703908 720576 4784720 17366414 77620 16188491 3708238 2167092 740953 787171 849899 735815 873509 717239 2929737 2545623 2106955 654762

<chem>[R1]C(=O)Cc1ccc(c(c1)S(=O)(=O)N2CCOCC2)OC</chem>	504332	Euchromatic histone-lysine N-methyltransferase 2	16250199 4800989 24979095 4800230 16196468 2082178 24980235 24982480 4853205 24979233 24686902 24978742 24817797 2093858 24979572 16349495 2079836 4800931 4857205 2085612 2124987 24982034 4827594 2083069 2524276 24979509 2125206 24978894 2125828 2574238
<chem>[R1]N1CCC(CC1)n2c(ccn2)NC(=O)CCCc3ccccc3</chem>	504332	Euchromatic histone-lysine N-methyltransferase 2	24817749 24790076 24790604 24817325 24790124 24791081 24790266 24793228 24790576 24790768 24790158 24790783 24793810 24790765 24791222 24817764 24791400 24793224 24794221 24793152 24794107 24791764 24790157 24819455 24818847 24791135 24817775 24790083 24790152 24790548 24792989 24819540 24791539
<chem>[R1]C(=O)c1ccc(c(c1)OC2CCN(CC2)Cc3cccn3</chem>	504332	Euchromatic histone-lysine N-methyltransferase 2	16192009 24791011 16190300 24816727 24790505 24790439 16192141 24790773 24791409 24817810 24791294 24794214 24817482 24818967 24791385 24790676 16188958 24819449 24792118 24790488 24817125 16190283 24790579 24790444 24792068 24790747 24792119 16189163 16190034 24819503 24792978
<chem>[R1]N1CCN(CC1)S(=O)(=O)c2ccc(c2)C</chem>	540317	Chromobox protein homolog 1	6465212 740954 2047038 1148082 7535246 2427468 2928101 2427476 269717 777589 2444361 2102315 720863 2673930 17366414 17366248 1272766 703908 6469994 720576 4784720 2822709 77620 976855 16188491 2167092 740953 787171 849899 735815 856931 873509 717239 2929737 2545623 2106955 654762

Reported is the composition of all analog series used in our study. The core structure of each series is provided in canonical SMILES representation. AID is the PubCHEM identifier for each assay and CID the PubCHEM identifier of each assayed compound. For each assay, the target name is also provided.